

به نام خدا

شبیه‌سازی فرآیند بارگذاری دارو بر بستر نانولوله کربنی

شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای در حال حاضر به عنوان روشی دقیق در مطالعه جزئیات رفتار سامانه‌های مختلف از جمله سامانه‌های دارورسانی دستیابی به سامانه دارویی مطلوب محسوب می‌شوند. در این دوره آموزشی سعی بر آن است آشنایی با مراحل مختلف شبیه‌سازی فرآیند بارگذاری داروی ضدسرطان بر بستر نانولوله کربنی، به عنوان نانوحامل دارویی موثر جهت رسانش مطلوب دارو صورت پذیرد. بخش نظری این دوره به آشنایی با مفاهیم دارورسانی هدفمند، انواع سامانه‌های دارورسانی و ضرورت توجه به آن‌ها در درمان سرطان اختصاص خواهد یافت. در بخش عملی نیز تهیه ساختار اولیه مولکول‌ها (اجزای سازنده سامانه)، تعریف میدان نیرو و ساخت فایل توپولوژی، ساخت جعبه شبیه‌سازی، آشنایی با فرآیند کمینه‌سازی انرژی و به تعادل‌رسانی سامانه موردنظر و در نهایت اجرای شبیه‌سازی، تولید فایل مسیر تحول سامانه و محاسبه خواص و تجزیه و تحلیل نتایج دنبال خواهد شد. انتظار می‌رود مطالعه جزئیات ساختاری و دینامیکی سامانه شبیه‌سازی شده و بررسی انواع برهم‌کنش‌های موثر میان اجزای تشکیل دهنده آن به صورت "عملی" از نتایج این دوره باشد.