J. Adv. Mater. Eng., 2025;44(4)109-122. https://doi.org/10.47176/jame.44.4.1113

Journal of ADVANCED MATERIALS IN ENGINEERING

Journal of Advanced Materials in Engineering

Journal homepage: https://jame.iut.ac.ir/?lang=en

ISSN: 2251-600X EISSN: 2423-5733

Research Article

Study of the Chemical Composition of Two-Component Bioactive Glass $50SiO_2$-50CaO on an Atomic Scale Using Molecular Dynamics Simulation for Bone Tissue Engineering Applications

Amirhossein Moghanian* **and Arman Tayyebi**

Department of Materials Engineering, Faculty of Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran
* Corresponding author, Email: moghanian@eng.ikiu.ac.ir

(Received: 18 February 2025; Revised: 3 June 2025; Accepted: 6 June 2025; Available online: 30 July 2025)

ABSTRACT

Introduction: Bioactive glasses, with their unique bioavailability, are a new approach to improve the healing process of bone injuries. In this study, the chemical composition of two-component $50SiO_2$–50CaO bioactive glass on an atomic scale using molecular dynamics simulation was examined.

Materials and Methods: The chemical composition of bioactive glass $50SiO_2$-50CaO synthesized by melting and quenching method was simulated through the molecular dynamics method, lammps software and lennard-jones force field, and its properties on the atomic scale was examined.

Results: According to the results of the study of the radial distribution function and the linkage distribution function, while confirming the presence of local order and irregularity of the composition at atomic intervals before and after 3 Å, the size of the atomic bonds for Si-O, Ca-O, and O-O bonds were reported 1.6, 2.45, and 2.65 (Å), respectively, and the results of the angular distribution function indicated the presence of a 109-degree angle between the O-Si-O bonds. The density of glass at ambient temperature was obtained to be 2.62 g/cc, and the penetration coefficient of SiO_2 and CaO molecules at 1500 K was calculated to be 4×10^{-14} and 1.2×10^{-13} (m^2/s), respectively. These values were obtained to be 16×10^{-13} and 2.2×10^{-12} (m^2/s) at 2000 K, respectively. The stable release of silicon and calcium ions from the sample surface and an increase in the pH of the simulated body fluid (SBF) by 14 days of immersion were reported, along with a 41 percent increase in Q^2.

Conclusion: Using the lennard-jones force field leads to the prediction of the chemical composition characteristics of high-precision bioactive glass at different temperatures, reducing time and increasing the likelihood of success in the study, before conducting experimental methods.

Keywords: Two-component bioactive glass $50SiO_2$-50CaO, Simulation of molecular dynamics, Lennard-jones force field, Penetration coefficient, Bone tissue engineering.

How to Cite: Moghanian A, Tayyebi A. Study of the chemical composition of two-component bioactive glass $50SiO_2$-50CaO on an atomic scale using molecular dynamics simulation for bone tissue engineering applications. J Adv Mater Eng. 2025;44(4):109–122. https://doi.org/10.47176/jame.44.4.1113

Copyright © 2025 Isfahan University of Technology, Published by IUT press.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/). Non-commercial uses of the work are permitted, provided the original work is properly cited.

مواد پیشرفته در مهندسی ۱۴۰۴؛(۴)۴۴:۱۲۲-۱۰۹. https://doi.org/10.47176/jame.44.4.1113

مواد پیشرفته در مهندسی

صفحه خانگی فصلنامه: https://jame.iut.ac.ir/

شاپا:X ۲۲۵۱-۶۰۰ شاپا الکترونیکی: ۲۴۲۳-۵۷۳۳

مقاله پژوهشی

مطالعه ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-$50CaO$ در مقیاس اتمی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به منظور استفاده در مهندسی بافت استخوان

امیرحسین مغنیان* **و آرمان طیبی**

گروه مهندسی مواد و متالورژی، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

* **نویسنده مسئول، پست الکترونیکی: moghanian@eng.ikiu.ac.ir**

(دریافت: ۱۴۰۳/۱۱/۳۰، بازنگری: ۱۴۰۴/۳/۱۳، پذیرش: ۱۴۰۴/۳/۱۶، انتشار: ۱۴۰۴/۵/۸)

چکیده

مقدمه و اهداف: شیشه‌های زیست‌فعال با داشتن قابلیت‌های زیستی منحصربه‌فرد، رویکردی نوین در بهبود روند ترمیم آسیب‌های استخوانی هستند. در این پژوهش، ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-$50CaO$ در مقیاس اتمی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی گردید.

مواد و روش‌ها: ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ سنتزشده به روش ذوب و آبدهی، از طریق روش دینامیک مولکولی، استفاده از نرم‌افزار لمپس و میدان نیروی لنارد–جونز، شبیه‌سازی و ویژگی‌های ترکیب شیمیایی آن در مقیاس اتمی بررسی شد.

یافته‌ها: طبق نتایج حاصل از بررسی تابع توزیع شعاعی و تابع توزیع پیوندی، ضمن تایید وجود نظم موضعی و بی‌نظمی ترکیب در فواصل اتمی قبل و بعد از ۳ Å، اندازه پیوندهای اتمی برای پیوندهای Si-O، Ca-O و O-O به ترتیب ۱/۶ Å، ۲/۴۵ و ۲/۶۵ گزارش گردید و نتایج حاصل از تابع توزیع زاویه‌ای، حاکی از وجود زاویه ۱۰۹ درجه‌ای بین پیوندهای O-Si-O بود. چگالی شیشه در دمای محیط ۲/۶۲ g/cc و ضریب نفوذ مولکول‌های SiO_2 و CaO در دمای ۱۵۰۰ K به ترتیب 4×10^{-14} و $1/2 \times 10^{-13}$ m^2/s و در دمای ۲۰۰۰ K به ترتیب 16×10^{-13} و $2/2 \times 10^{-12}$ m^2/s محاسبه شد. رهایش پایدار یون‌های سیلیسیم و کلسیم از سطح نمونه و افزایش pH محلول شبیه‌سازی‌شده بدن تا روز ۱۴ غوطه‌وری و نیز افزایش میزان Q^2 تا ۴۱ درصد گزارش گردید.

نتیجه‌گیری: استفاده از میدان نیرو لنارد–جونز، منجر به پیش‌بینی ویژگی‌های ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال با دقت بالا در دماهای مختلف، کاهش زمان و افزایش احتمال موفقیت در پژوهش، قبل از انجام روش‌های تجربی می‌گردد.

واژه‌های کلیدی: شیشه زیست‌فعال دو جزیی SiO_2-CaO، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، میدان نیروی لنارد–جونز، ضریب نفوذ، مهندسی بافت استخوان.

حق انتشار این مستند، متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است. ۱۴۰۴ ©.

این مقاله تحت گواهی زیر منتشر شده و هر نوع استفاده غیرتجاری از آن مشروط بر استناد صحیح به مقاله و با رعایت شرایط مندرج در آدرس زیر مجاز است:

Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).

۱- مقدمه

نقایص استخوانی ناشی از عوامل مختلفی نظیر ضربه، افزایش سن، تومور، ناهنجاری‌های مادرزادی و آرتروز، تاثیر مستقیمی بر کاهش کیفیت زندگی بیماران دارد که در مطالعات پیشین، استفاده از پیوندهای استخوانی به منظور ترمیم استخوان آسیب‌دیده پیشنهاد شده است (۱-۳). این درحالی است که وجود مشکلاتی مانند کمبود منابع بافت استخوانی، نیاز به جراحی دوم، تحریک پاسخ ایمنی و به تبع آن به خطر افتادن سلامتی فرد تحت درمان، منجر به محدودیت در استفاده از پیوندهای استخوانی و کاشتنی[۱]های فلزی شده است. از این رو، شیشه‌های زیست‌فعال[۲] به عنوان مواد زیستی با قابلیت‌های زیستی بالقوه نظیر زیست‌سازگاری[۳]، زیست‌تخریب‌پذیری[۴] و استخوان‌زایی[۵]، ضمن عدم نیاز به جراحی دوم، منجر به بهبود کیفیت زندگی بسیاری از بیماران گردیده است که به شکل‌های مختلفی نظیر پوشش میکرو/نانوذرات، سیمان و داربست قابل سنتز هستند (۳و۴). همچنین از زمان سنتز اولین شیشه زیست‌فعال توسط پروفسور هنچ در سال ۱۹۶۹، انواع مختلفی از آن‌ها نظیر شیشه زیست‌فعال 45S5 و S53P4، به منظور استفاده در کاربردهای درمانی مهندسی بافت استخوان[۶]، مانند درمان نقایص استخوانی، همجوشی ستون فقرات[۷]، ترمیم جمجمه، فک و صورت، مورد سنتز و بررسی قرار گرفته است (۳-۵).

حضور مقادیر بالای ۶۰ درصد مولی SiO_2 در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال دو جزیی SiO_2-CaO سنتزشده به روش ذوب[۸] و آبدهی[۹]، به دلیل ایجاد محدودیت در سنتز آن‌ها در دماها ذوب بالا، منجر به کاهش زیست‌فعالی آن‌ها و به تبع آن کاهش پژوهش‌ها بر روی خواص زیستی آن‌ها می‌گردد که کاربرد شیشه‌های زیست‌فعال مذکور را در حوزه پزشکی محدود کرده است (۶-۸). این درحالی است که ضمن بررسی محدود در زمینه پیشرفت فنی و مطالعات روی شیشه‌های زیست‌فعال با استفاده از علوم بنیادین و ارتباط آن با خواص زیست‌فعالی، از روش آزمون و خطا به عنوان یک روش عمومی برای گسترش کاربردهای شیشه‌های زیست‌فعال استفاده شده است (۹).

همچنین تغییر رویکرد در مطالعه، از آزمون و خطای قدیمی به روش‌های جدیدتر با قابلیت پیش‌بینی خواص و عملکرد شیشه‌های زیست‌فعال از طریق علوم و اصول اولیه، نیازمند درک کامل ساختار اتمی و ارتباط آن‌ها با خواص ماکروسکوپی است که امکان ایجاد مدل‌های کمی و دقیق روابط ترکیب-ساختار-خصوصیات مورد نیاز برای توسعه مواد را فراهم می‌سازد (۱۱ و ۱۰). ضمن اینکه استفاده از شبیه‌سازی‌های نظری و محاسباتی در طراحی ترکیب شیمیایی، سنتز، ریزساختار و مشخصه‌یابی شیشه‌های زیست‌فعال به منظور شخصی‌سازی کاربردها درمانی آن‌ها، منجر به افزایش احتمال دستیابی به خواص زیستی بالقوه در آن‌ها نظیر زیست‌فعالی بالا، زیست‌ساگازی بالا، استحکام و چقرمگی بالا، چگالی کم و ریزساختار کنترل‌شده می‌گردد (۱۲ و ۱۱). علاوه‌براین، چالش‌های دیگری در مدل‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال، نظیر پاسخ زیستی بدن پس از قرارگیری کاشتنی بر پایه شیشه‌های زیست‌فعال در محل بافت هدف، توانایی آن‌ها در جذب پروتئین، چسبندگی سلولی، تکثیر سلولی، استخوان‌زایی و قابلیت ضدباکتریایی وجود دارند (۱۲).

این درحالی است که با وجود حجم بالای پژوهش‌ها در زمینه شیشه‌های زیست‌فعال، مطالعات بسیار کمی به طراحی مدل-محور برای سنتز شیشه‌های زیست‌فعال یا پیش‌بینی دقیق خواص آن‌ها پرداخته شده است (۱۱-۱۳). همچنین طبق مطالعات پیشین، افزایش دانش در مورد خواص شیشه‌های زیست‌فعال، داده‌های تجربی، توسعه میدان نیرو و افزایش قدرت محاسباتی، امکان شبیه‌سازی‌های پیچیده برای پیش‌بینی برهم‌کنش‌های سطحی و پاسخ‌های زیستی را فراهم می‌آورد که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی[۱۰] به عنوان یک روش قابل اطمینان، می‌تواند ضمن شبیه‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال چند جزیی با ساختاری بی‌شکل[۱۱]، نمایی منحصربه‌فرد با وضوح بالا از ساختار اتمی آن‌ها را نیز ارائه دهد (۱۴-۱۵ و۱۲). به عبارت دیگر، در روش دینامیک مولکولی با استفاده از میدان نیروی بین اتم‌ها و انتگرال‌گیری از قانون حرکت نیوتون، ضمن محاسبه موقعیت اتم‌ها در هر گام زمانی، موقعیت هر اتم در ساختار نیز به منظور

بررسی ساختار و خواص فیزیکی و شیمیایی آن مشخص می‌شود. ضمن اینکه، به منظور توصیف ساختار و خواص شیشه‌های زیست فعال شبیه‌سازی‌شده، از شرایط مرزی[12] دوره‌ای استفاده می‌شود که در آن خروج و ورود مجدد اتم‌ها از جعبه شبیه‌سازی، منجر به حذف تاثیرات سطحی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و به تبع آن تعمیم نتایج آن به ابعاد بزرگ می‌گردد (۱۶). در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، میدان نیرو نقش مهمی در توصیف برهم‌کنش‌های بین اتم‌ها ایفا می‌کند و شامل اجزای پیوندی مانند کشش پیوند، تغییر زاویه و چرخش دیهدرال و غیرپیوندی نظیر برهم‌کنش‌های واندروالسی و الکترواستاتیکی است. میدان‌های نیرو در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، شامل انواع مختلفی نظیر میدان نیرو امبر[13]، چارم[14]، گروموس[15]، اُپلس[16] و لنارد–جونز[17] است که هر یک بسته به نوع ترکیب مورد مطالعه، کاربرد خاصی دارند (۱۷). میدان نیروهای مذکور با داشتن اجزای پیوندی دقیق، عموماً به منظور مدل‌سازی ترکیبات زیستی یا آلی طراحی شده‌اند که در آن‌ها برهم‌کنش‌های الکترواستاتیکی و تاثیرات کووالانسی نیز مورد بررسی قرار می‌گیرد. یکی از پرکاربردترین پتانسیل‌های مورد استفاده در مدل‌سازی برهم‌کنش‌های غیرپیوندی، پتانسیل لنارد–جونز است که به‌وسیله آن رفتار دافعه در فواصل کوتاه و جاذبه در فواصل بلندتر، به خوبی توصیف می‌گردد. پتانسیل لنارد–جونز به دلیل سادگی در محاسبات ریاضی، تعداد پارامترهای محدود و توانایی بالا در مدل‌سازی برهم‌کنش‌های واندروالسی، کاربرد گسترده‌ای در شبیه‌سازی مواد جامد، به‌ویژه در جامدات مولکولی و شبکه‌هایی با برهم‌کنش‌های واندروالسی دارد (۱۸).

ازاین‌رو در این پژوهش، از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس[18] به منظور مطالعه ترکیب شیمیایی، موقعیت اتم‌ها نسبت به یکدیگر و محاسبه ضریب نفوذ[19] در شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO سنتزشده به روش ذوب و آبدهی، در مقیاس اتمی استفاده گردید و اندازه و زاویه پیوندی، چگالی، ضریب نفوذ و توزیع Q^n با نتایج حاصل از بررسی شیمی یونی، مقادیر گزارش شده از آزمایش‌های تجربی و شبیه‌سازی‌های انجام شده با میدان نیروهای قدرتمندتر و پیچیده‌تر، مقایسه و صحت‌سنجی شد.

۲- مواد و روش تحقیق

۲-۱- میدان نیروی بین‌اتمی

در شبیه‌سازی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، از میدان نیروی بین‌اتمی به صورت نیروهای جفت‌بار جزیی[20]، شامل یک جزء کوتاه‌برد لنارد–جونز و یک جزء بلندبرد کولن[21] استفاده گردید. همچنین، مقادیر مؤلفه‌های مورد استفاده در این نوع نیروی جفت‌بار جزیی، توسط فریتاس و همکاران (۱۹) معرفی شده است که نسبت‌به میدان نیروی باکینگهام[22] قدیمی، ساده‌تر و قابل استفاده‌تر است و معادله کلی میدان نیروی آن، در رابطه (۱) ارائه شده است.

$$V(r_{ij}) = \frac{(z_i z_j e^2)}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} + 4\varepsilon_{ij}\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \qquad (۱)$$

در این رابطه، r_{ij} مخفف فاصله بین دو یون i و j، e بار الکتریکی، ε_0 ثابت گذردهی خلاء، ε_{ij} و σ_{ij} ثوابت میدان نیروی لنارد–جونز هستند.ضمن اینکه، مقادیر ثوابت میدان نیرو و بارهای یونی ارائه شده توسط فریتاس و همکاران (۱۹) در جدول (۱) آورده شده است.

۲-۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی شیشه زیست‌فعال دو جزیی با ترکیب شیمیایی حاوی ۵۰ درصد مولی SiO_2 و ۵۰ درصد مولی CaO، توسط نرم‌افزار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی لمپس نسخه 4Feb,2025 انجام گردید که در آن، از قانون دوم نیوتون به‌منظور محاسبه موقعیت و سرعت حرکت اتم‌ها، تحت نیروهای بلندبرد و کوتاه‌برد استفاده شده است. همچنین، شرایط اولیه با ایجاد جعبه شبیه‌سازی مکعبی شکل، به ابعاد nm ۳ و قرارگیری ۲۸۰ اتم سیلیسیم و کلسیم و نیز ۸۴۰ اتم اکسیژن به صورت تصادفی، به منظور ایجاد ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال بر پایه

جدول ۱- مقادیر ثوابت میدان نیرو و بارهای یونی (۱۹)

	بار الکتریکی اتمی	لنارد-جونز	
پیوند بین‌اتمی	q_i / e	σ_{ij} / Å	ε_{ij} / eV
Si-O	۲٫۴	۱٫۴۹۸۸	۱٫۱۶۶۹۲
Ca-O	۱٫۲	۲٫۴۲۰۳	۰٫۰۸۴۰۴
O-O	−۱٫۲	۳٫۲۵۲۸	۰٫۰۱۴۰۷
Ca-Ca	۱٫۲	۴٫۱۹۷۸	۰٫۰۰۰۱۱
Si-Si	۲٫۴	۰	۰
Si-Ca	−	۰	۰

۵۰ درصد مولی SiO_2 و CaO انجام گردید که در آن از شرایط مرزی متناوب، به منظور دستیابی به نتایج قابل تعمیم به ابعاد بزرگتر استفاده شد. ضمن اینکه، گام زمانی به مقدار fs ۱ برای انتگرال‌گیری عددی از قانون دوم انیشتین و شعاع قطع Å ۱۰ برای میدان نیروی کوتاه‌برد لنارد-جونز، به‌منظور کاهش زمان شبیه‌سازی و حذف محاسبات بیشتر تعیین گردید. علاوه‌براین، برهمکنش‌های بلندبرد کولنی با استفاده از روش ذره-ذره ذره-مش[۲۳] در نرم‌افزار لمپس با خطای نسبی 10^{-5} مورد بررسی قرار گرفت.

همچنین، به‌منظور سنتز شیشه زیست‌فعال دو جزیی مورد بررسی به روش ذوب و آبدهی، جعبه شبیه‌سازی پس از قرارگیری به مدت ps ۵ در دمای K ۳۰۰ تحت هنگرد کانونی (ذرات، حجم و دما ثابت)، به‌صورت ناگهانی تا دمای K ۵۰۰۰ برای دستیابی به فاز ذوب‌شده، گرم گردید. سپس شیشه زیست‌فعال، به‌منظور برهمکنش بیشتر اتم‌ها با یکدیگر، به واسطه انرژی جنبشی بالا و توزیع یکنواخت ترکیب شیمیایی آن، به مدت ps ۱۵۰ در دمای K ۵۰۰۰ قرار گرفت و پس از برقراری تعادل، شیشه زیست‌فعال ذوب‌شده، به سرعت تا دمای اتاق سرد شد که فرآیند سردکردن شامل مراحل زیر است:

۱. سرد کردن تا دمای K ۳۰۰۰ با سرعت K/ps ۱ با هنگرد کانونی؛

۲. اعمال هنگرد کانونی بزرگ (ذرات، فشار و دما ثابت) برای اعمال فشار bar ۱ در دمای ثابت K ۳۰۰۰ به مدت ps ۱۰۰ برای برقراری تعادل در چگالی شیشه زیست‌فعال؛

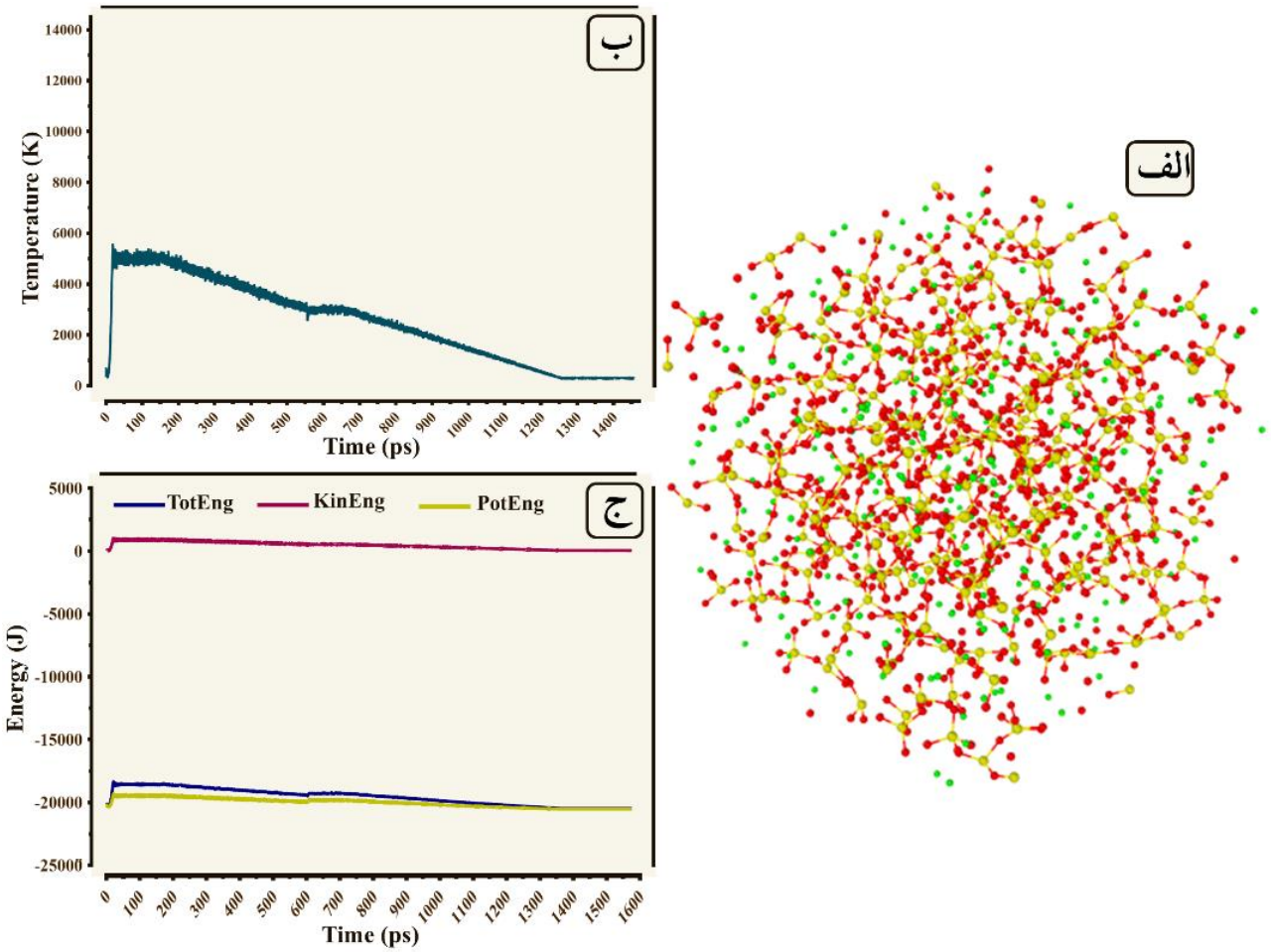
۳. سردکردن با سرعت K/ps ۱ تا دمای اتاق تحت هنگرد کانونی بزرگ با فشار bar ۱؛

۴. اعمال هنگرد کانونی بزرگ در دما و فشار ثابت K ۳۰۰ و bar ۱ ؛

۵. اعمال هنگرد کانونی کوچک (ذرات، حجم و انرژی ثابت) به منظور استراحت، رسیدن به تعادل نهایی و ایجاد ترکیب شیمیایی نهایی شیشه زیست‌فعال برای انجام مشخصه‌یابی‌ها.

۲-۳- مشخصه‌یابی

به‌منظور مطالعه ساختار داخلی، اندازه پیوندها و زوایای بین پیوندهای اتمی در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO شبیه‌سازی‌شده، به ترتیب از تابع توزیع شعاعی[۲۴]، تابع توزیع پیوندی[۲۵] و تابع توزیع زاویه‌ای[۲۶] استفاده گردید. همچنین، مقادیر چگالی شیشه زیست‌فعال در دماهای K ۳۰۰۰-۳۰۰ مورد بررسی قرار گرفت و ضریب نفوذ مولکول‌های SiO_2 و CaO، با محاسبه میانگین مربع جابه‌جایی و تحرکات اتمی از رابطه (۲)، اندازه‌گیری شد که در آن، عبارت درون براکت بیانگر میانگین مربع جابه‌جایی می‌باشد. ضمن اینکه در رابطه مذکور، r برابر با فاصله برحسب متر، t برابر با زمان برحسب ثانیه، t_0 برابر با زمان در لحظه اولیه و D برابر با ضریب نفوذ برحسب (m^2.atom/s) می‌باشد. علاوه‌براین، غلظت یون‌های سیلیسیم و کلسیم و مقدار pH شیشه زیست‌فعال مورد بررسی



شکل ۱- الف) ترکیب شیمیایی شبیه‌سازی‌شده به روش دینامیک مولکولی، ب) تغییرات دما برحسب زمان طی فرآیند ذوب و آبدهی و ج) تغییرات انرژی پتانسیل، انرژی جنبشی و انرژی کل برحسب زمان در شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO.

قبل و پس از ۱۴ روز غوطه‌وری در محلول شبیه‌سازی‌شده بدن مورد بررسی قرار گرفت و توزیع Q^n در نمونه نیز محاسبه گردید.

$$\lim_{t\to\infty}\frac{d\left\langle\left|r(t)-r(t_0)\right|^2\right\rangle}{dt}=6D \qquad (۲)$$

۳- نتایج و بحث

۳-۱- شبیه‌سازی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال

در شکل (۱)، ترکیب شیمیایی شبیه‌سازی‌شده به روش دینامیک مولکولی، تغییرات دما برحسب زمان طی فرآیند ذوب و آبدهی و نیز تغییرات انرژی پتانسیل، انرژی جنبشی و انرژی کل در شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO ارائه شده است. ازاین‌رو، در شکل (۱-الف) اتم‌های اکسیژن، سیلیسیم و کلسیم به ترتیب به رنگ قرمز، زرد و سبز و نیز پیوند بین اتم‌های اکسیژن و سیلیسیم، نمایش داده شده است. همچنین، طبق شکل (۱-ب)، پس از قرارگیری جعبه شبیه‌سازی به مدت ۱۵۰ ps در دمای K ۵۰۰۰، مقادیر نوسانات دمایی کاهش یافت که این امر حاکی از به تعادل رسیدن ترکیب شیمیایی مورد بررسی، در گذر زمان است. ضمن اینکه طبق نتایج حاصل از بررسی تغییرات انرژی جنبشی، انرژی پتانسیل و انرژی کل در شکل (۱-ج) و نیز نوسانات مقادیر انرژی حول مقادیر مشخص، تعادل و پایداری ترکیب شیمیایی مذکور تایید گردید.

۳-۲- تعیین ساختار داخلی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال

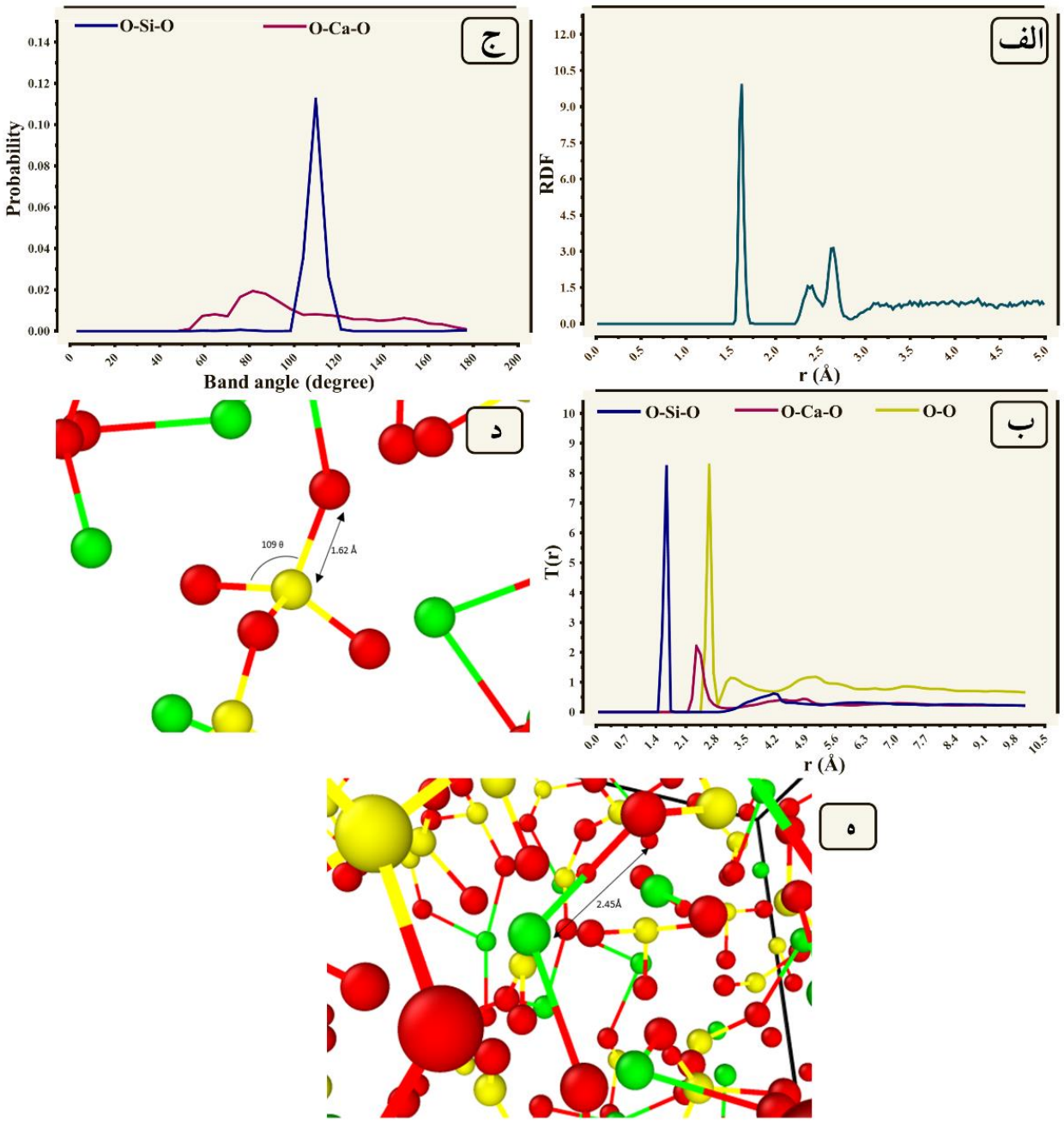
در شکل (۲-الف)، تابع توزیع شعاعی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، به‌منظور بررسی احتمال حضور یک اتم در فاصله‌ای خاص از اتم دیگر آورده شده است. همچنین، طبق نتایج حاصل از بررسی تابع توزیع شعاعی، ضمن عدم حضور اتمی در فواصل اتمی کمتر از حدود Å ۱٫۴، حضور اولین پیک در فاصله اتمی حدود Å ۱٫۶، به عنوان کوتاه‌ترین پیوند اتمی تایید گردید. ضمن اینکه، دو پیک دیگر به ترتیب در فواصل اتمی ۲٫۴۵Å و ۲٫۶۵ مشاهده شد که وجود پیک‌ها در فواصل اتمی کمتر و بیشتر از Å ۳، به ترتیب حاکی از نظم موضعی در اطراف اتم و بی‌نظمی در ساختار ترکیب شیمیایی مورد بررسی است و نتایج مذکور، در تطابق با پژوهش اولدهینینی و همکاران است (۲۰). علاوه‌براین در مطالعه سورانی و همکاران (۲۱)، ساختار بی‌نظم در فواصل اتمی دورتر از Å ۳، با استفاده از تابع توزیع شعاعی گزارش گردید.

۳-۳- تعیین اندازه و زاویه پیوندی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال

در شکل (۲-ب)، تابع توزیع پیوندی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، به‌منظور بررسی احتمال حضور یک اتم خاص (اتم اکسیژن)، در فاصله‌ای خاص از یک اتم مرکزی و اندازه‌گیری پیوند بین اتم‌ها ارائه شده است که طبق آن، حضور سه پیک در فواصل اتمی حدود ۱٫۶۲Å، ۲٫۴۵ و ۲٫۶۵، به ترتیب حاکی از اندازه پیوندهای Si-O، Ca-O و O-O می‌باشند. همچنین، نتایج حاصل از اندازه‌گیری پیوند Si-O در مطالعه کنو و همکاران (۲۲)، برابر با Å ۱٫۶۲ بود که مقدار شبیه‌سازی‌شده در این پژوهش نیز با مقادیر به دست آمده به صورت تجربی بسیار نزدیک هستند. ضمن اینکه در مطالعات مارچین و همکاران (۲۳) و ون هونگ (۲۴)، اندازه پیوند Si-O و O-O حاصل از میدان نیروی پیچیده‌تر، به‌منظور شبیه‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال با ترکیب شیمیایی حاوی SiO_2، برای پیوند Si-O برابر با Å ۱٫۶۲ و برای پیوند O-O برابر با Å ۲٫۶۲ و ۲٫۶۳ گزارش گردید که نتایج حاصل از تابع توزیع پیوندی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO در تطابق با نتایج تجربی حاصل از پژوهش مارچین و همکاران (۲۳)، اندازه پیوند O-O برابر با Å ۲٫۶۲ است. علاوه‌براین، اندازه پیوند Ca-O در مطالعه الحسنی (۲۵)، جیا و همکاران (۲۶) و گیو و همکاران (۲۷)، به ترتیب ۲٫۴Å، ۲٫۴ و ۲٫۳۱ گزارش شد که با نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نمونه مورد بررسی در این پژوهش، مطابقت دارد. همچنین، در مطالعه گریگور و همکاران (۲۸)، اندازه پیوند Si-O در شیشه‌های پایه سیلیکاتی برابر با ۱٫۶۲Å گزارش شد. ضمن اینکه، طبق نتایج حاصل از پژوهش کورمیر و همکاران (۲۹)، اندازه پیوند Ca-O برابر با ۲٫۶۳Å محاسبه شد و در تطابق با مشخصه‌یابی طیف‌سنجی جذب پرتو ایکس بود که نتایج آن‌ها قابل مقایسه با نتایج حاصل از این پژوهش است.

در شکل (۲-ج)، تابع توزیع زاویه‌ای ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، به‌منظور مطالعه احتمال یافتن زاویه بین سه اتم مشخص شده با مقادیر مختلف، آورده شده است که طبق آن بلندترین پیک در زاویه ۱۰۹ درجه مربوط به پیوند O–Si-O و بسیار نزدیک به زوایا در ساختار چهاروجهی می‌باشد. این درحالی است که عدم وجود یک پیک واضح و تیز برای پیوند O–Ca-O، حاکی از عدم نظم زاویه‌ای در اکثر اتم‌های کلسیم در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال است که در شکل (۲-ج)، اکثر پیوندهای O–Ca-O، زاویه‌ای در حدود ۸۰ درجه دارند.

همچنین، نتایج تجربی حاصل از اندازه‌گیری زوایای پیوندهای O–Ca-O و O–Si-O در مطالعه بنمور و همکاران (۳۰)، به ترتیب۸۲-۸۰ و ۱۰۹ درجه گزارش شد که با مقادیر به‌دست آمده در این پژوهش تطابق خوبی دارند. ضمن اینکه اندازه زاویه پیوندO– Si-O در مطالعه مارچین و همکاران (۲۳)، ون هونگ (۲۴) و گیو و همکاران (۲۷)، به ترتیب ۱۰۹، ۱۰۹ و ۱۰۷ درجه گزارش گردید که با نتایج حاصل از این پژوهش در تطابق است. ذکر این نکته حائز اهمیت است که ساختار

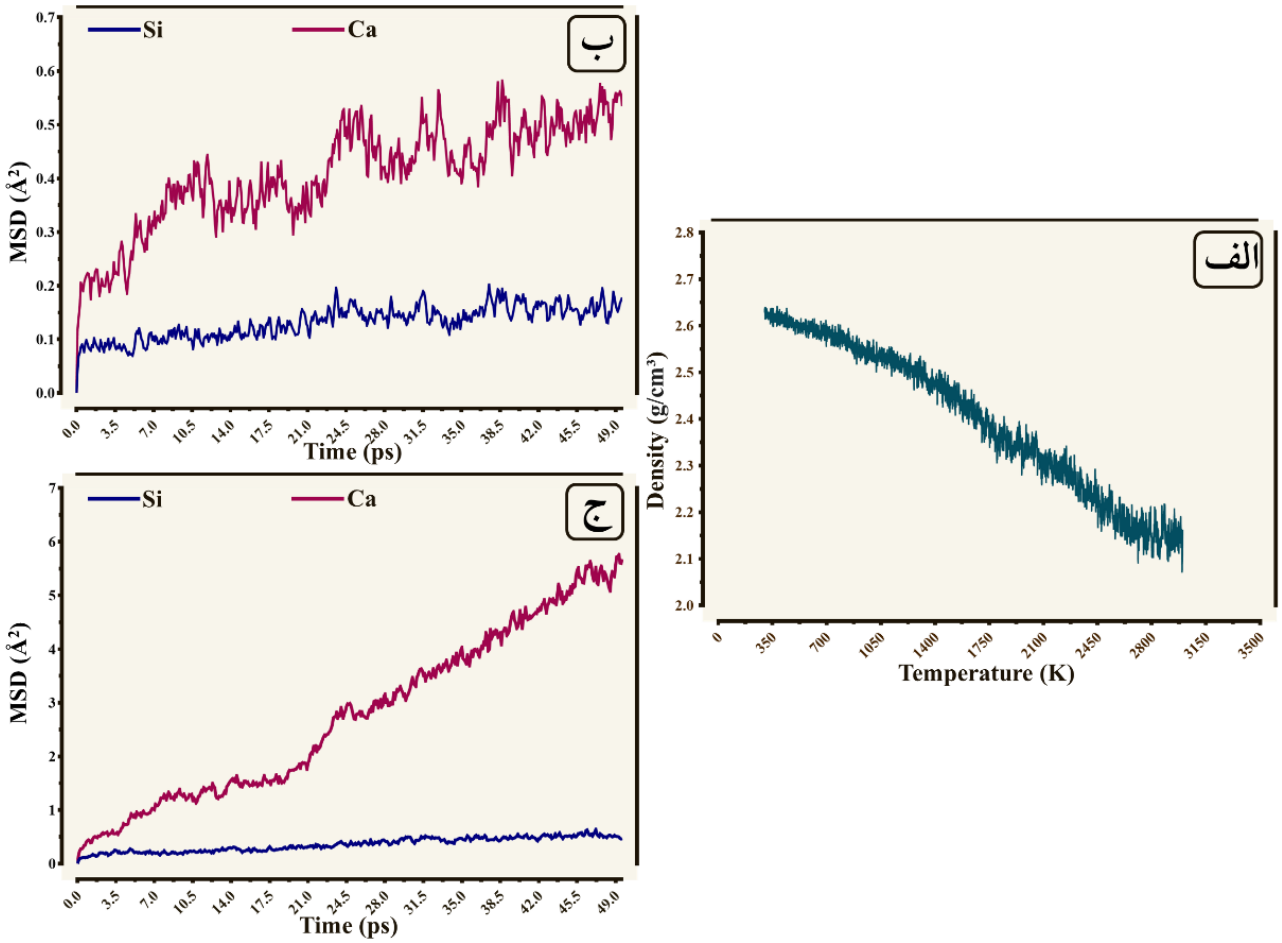


شکل ۲- الف) تابع توزیع شعاعی، ب) تابع توزیع پیوندی، ج) تابع توزیع زاویه‌ای، د) نمایی از اندازه و زاویه پیوند زاویه O–Si-O و ه) اندازه پیوند O–Ca-O در شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO.

چهاروجهی برای SiO_2 توسط مارچین و همکاران نیز تایید شده است که صحت استفاده از میدان نیروی لنارد–جونز مورد استفاده در این پژوهش را نشان می‌دهد (۲۳). علاوه‌براین در تصاویر شکل (۲–د) و (۲–ه)، نمایی از ساختار ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO شبیه‌سازی‌شده به همراه اندازه و زاویه پیوندها نمایش داده شده است که مقدار زاویه پیوند O–Ca-O، به علت پراکنده بودن آن، مشخص نشده است.

۳-۴- تعیین چگالی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال

در شکل (۳–الف)، چگالی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو



شکل ۳- الف) چگالی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، میانگین مربع جابه‌جایی مولکول‌های SiO_2 و CaO در دماهای (K) ۱۵۰۰ (ب) و (K) ۲۰۰۰ (ج).

جزیی $50SiO_2$-50CaO، در دماهای مختلف ارائه شده است که طبق آن چگالی شیشه زیست‌فعال شبیه‌سازی‌شده با افزایش دما، کاهش یافت.

همچنین، چگالی شیشه زیست‌فعال در دمای محیط، حدود ۲٫۶۲ g/cc و در دماهای بالاتر به‌دلیل نوسانات بیشتر اتم‌ها، مقدار دقیق آن مشخص نیست و مقدار آن به‌صورت تقریبی در شکل (۳-الف) قابل مشاهده است. ضمن اینکه در مطالعه جبرویی و همکاران (۳۱)، چگالی شیشه زیست‌فعال در دمای محیط برابر با ۲٫۹ g/cc گزارش گردید که با مقدار چگالی حاصل از این پژوهش، تفاوت قابل‌ملاحظه‌ای نداشت. علاوه‌براین، در شکل (۳) چگالی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO و میانگین مربع جابه‌جایی مولکول‌های SiO_2 و CaO در دماهای (K) ۱۵۰۰ و ۲۰۰۰ آورده شده است.

۳-۵- تعیین ضریب نفوذ و میانگین مربع جابه‌جایی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال

میانگین مربع جابه‌جایی یک ترکیب شیمیایی با بررسی ضریب نفوذ اتم‌های آن قابل محاسبه است که در نمودارهای شکل (۳-ب) و (۳-ج)، میانگین مربع جابه‌جایی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، در دمای ۱۵۰۰K و ۲۰۰۰ برحسب زمان آورده شده است و طبق آن، میزان جابه‌جایی اتم‌های CaO بیشتر از اتم‌های SiO_2 است. همچنین، میزان

جدول ۲- ضریب نفوذ اتم‌های SiO_2 و CaO در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO

	ضریب نفوذ (m^2/s)	
دما (K)	SiO_2	CaO
۱۵۰۰	۴×۱۰^{-۱۴}	$۱٫۲ \times ۱۰^{-۱۳}$
۲۰۰۰	$۱٫۶ \times ۱۰^{-۱۳}$	$۲٫۲ \times ۱۰^{-۱۲}$

جابه‌جایی اتم‌های اکسیژن در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال، به‌دلیل اینکه اتم‌های اکسیژن تابع اتم خاصی نیستند، با اندازه‌گیری میزان جابه‌جایی اتم‌های کلسیم و سیلیسیم، بررسی می‌گردد. ضمن اینکه ضریب نفوذ اتم‌های SiO_2 و CaO در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال مورد بررسی، با استفاده از شیب نمودار در نمودارهای شکل (۳-ب) و (۳-ج) و رابطه (۲)، در دمای ۱۵۰۰K و ۲۰۰۰ محاسبه شد (جدول ۲). علاوه‌براین در مطالعه شیانگ و همکاران (۳۲)، مقدار شیب در نمودار میانگین مربع جابه‌جایی برای اتم‌های سیلیسیم، ۰٫۰۰۰۲ گزارش گردید که ضمن تطابق با نتایج حاصل از شبیه‌سازی ترکیب شیمیایی در این پژوهش، صحت نتایج به‌دست آمده از ضریب نفوذ را تایید می‌کند. در جدول (۲)، ضریب نفوذ اتم‌های SiO_2 و CaO در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، در دمای ۱۵۰۰K و ۲۰۰۰ آورده شده است.

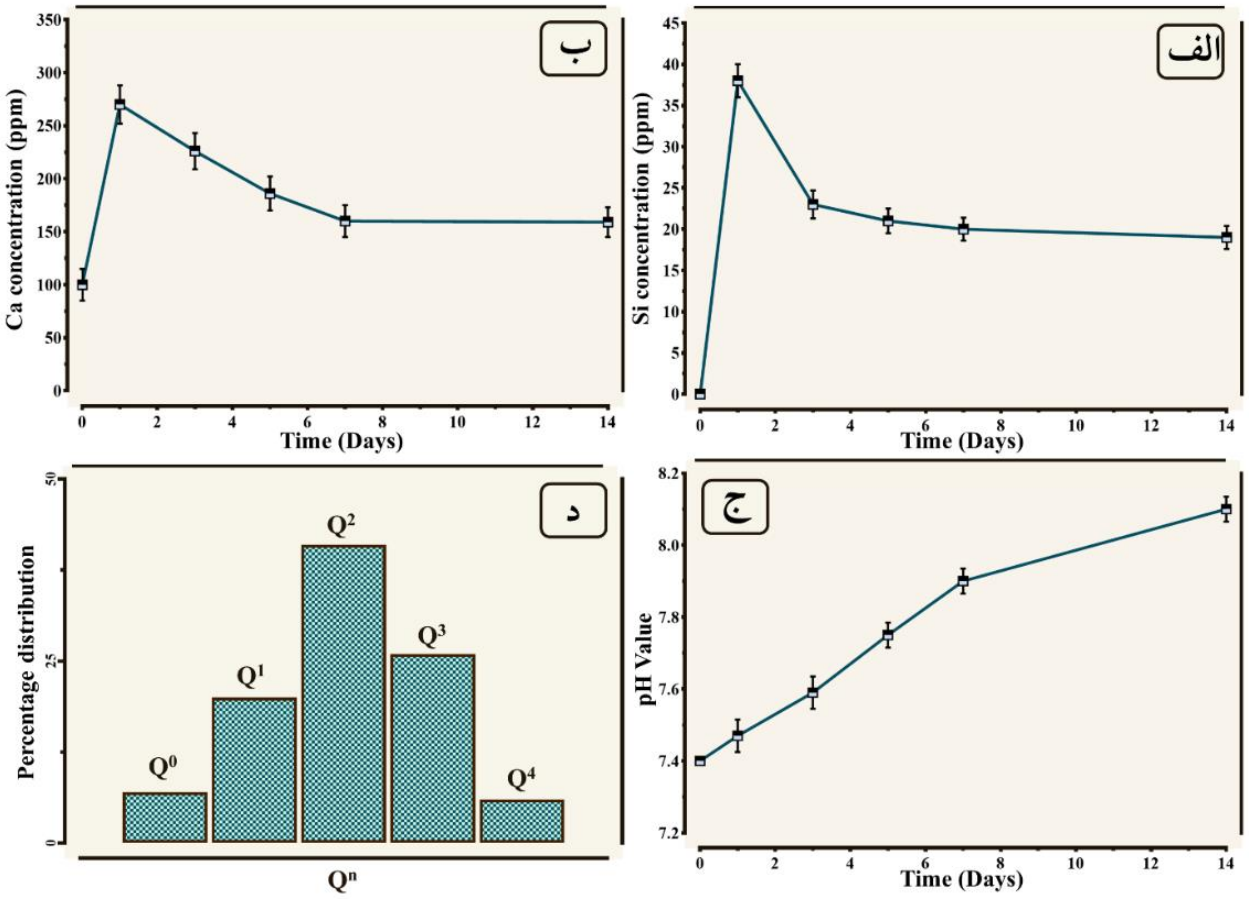
۳-۶- بررسی شیمی یونی و توزیع Q^n

در شکل (۴-الف-ج) غلظت یون‌های سیلیسیم، کلسیم و مقدار pH شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO ارائه شده است. با توجه به شکل (۴-الف)، غلظت یون‌های سیلیسیم تا روز یک غوطه‌وری در محلول شبیه‌سازی‌شده بدن، به دلیل تخریب شبکه شیشه افزایش یافت و پس از آن با تقویت شبکه شیشه کاهش یافت. همچنین طبق شکل (۴-ب)، غلظت یون‌های کلسیم تا روز یک غوطه‌وری در محلول شبیه‌سازی‌شده بدن، به‌دلیل واکنش‌های سطحی بین یون‌های کلسیم از سطح شیشه و یون‌های H^+ از محلول افزایش یافت و پس از آن، با افزایش اتصال شبکه شیشه، غلظت آن با نرخ ثابتی کاهش یافت. ضمن اینکه pH شیشه، به‌دلیل تخریب شبکه و رهایش یون‌ها از سطح آن در محلول شبیه‌سازی‌شده بدن تا روز ۱۴ غوطه‌وری، افزایش یافت که در تطابق با مطالعات پیشین است (شکل ۴-ج) (۳۳ و ۳۴). علاوه‌براین، مقادیر توزیع Q^n در شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO، در شکل (۴-د) ارائه شده است که طبق آن برای n به ترتیب ۰، ۱، ۲، ۳ و ۴ برابر با ۷، ۲۰، ۴۱، ۲۶ و ۶ درصد محاسبه شد.

ذکر این نکته حائز اهمیت است که با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی امکان مطالعه ترکیب شیمیایی، موقعیت اتم‌ها نسبت به یکدیگر و محاسبه ضریب نفوذ در مقیاس اتمی در شیشه‌ها فراهم می‌گردد و با بررسی تاثیر مولفه‌های ساختاری نظیر مقادیر توزیع Q^n بر خواص نهایی شیشه شبیه‌سازی‌شده، میزان زیست‌فعالی شیشه‌ها، به‌عنوان یکی از عوامل مهم در کاربرد آن‌ها به‌منظور مهندسی بافت استخوان ارزیابی می‌گردد. همچنین طبق گزارش تیلوکا (۳۵)، افزایش میزان Q^2 باعث افزایش زیست‌فعالی شیشه‌ها می‌گردد و با توجه به نتایج مذکور، شیشه زیست‌فعال مورد بررسی دارای بیشترین میزان از Q^2 در مقایسه با سایر Q^nها است که با نتایج حاصل از بررسی شیمی یونی مبنی بر رهایش یون‌های سیلیسیم و کلسیم از سطح شیشه پس از غوطه‌وری در محلول شبیه‌سازی‌شده بدن و به تبع آن افزایش مقدار pH محلول، در تطابق است.

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO سنتزشده به روش ذوب و آبدهی، ازطریق دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس و میدان نیروی



شکل ۴- غلظت یون‌های الف) سیلیسیم، ب) کلسیم، ج) مقدار pH و د) توزیع Q^n در شیشه زیست‌فعال دو جزیی $50SiO_2$-50CaO.

لنارد–جونز، شبیه‌سازی شد و ویژگی‌های ترکیب شیمیایی آن در مقیاس اتمی بررسی گردید که می‌توان نتایج زیر را ارائه کرد:

۱. طبق نتایج حاصل از بررسی توابع توزیع زاویه‌ای و پیوندی، اندازه پیوندهای Si-O، Ca-O و O-O به ترتیب Å ۱٫۶۲، ۲٫۴۵ و ۲٫۶۵ و اندازه زوایای O-Si-O و O-Ca-O به ترتیب ۱۰۹ و ۸۰ درجه گزارش گردید.

۲. نتایج حاصل از بررسی توابع توزیع زاویه‌ای و پیوندی با داده‌های تجربی و شبیه‌سازی‌شده ازطریق میدان نیروهای قوی‌تر و پیچیده‌تر، مقایسه و صحت‌سنجی شد و طبق نتایج حاصل از تابع توزیع شعاعی، ساختار بی‌شکل شیشه زیست‌فعال مورد بررسی و نظم موضعی در فواصل اتمی کمتر از Å ۳، در نزدیکی اتم‌ها تایید شد.

۳. چگالی ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال در دمای محیط، حدود g/cc ۲٫۶۲ گزارش شد و در دماهای بالاتر به دلیل نوسانات بیشتر اتم‌ها، مقدار دقیق آن مشخص نگردید.

۴. ضریب نفوذ مولکول‌های SiO_2 و CaO در دمای K ۱۵۰۰، به ترتیب m^2/s $۱۰^{-۱۴} \times ۴$ و $۱۰^{-۱۳} \times ۱/۲$ و در دمای K ۲۰۰۰ به ترتیب m^2/s $۱۰^{-۱۳} \times ۱۶$ و $۱۰^{-۱۲} \times ۲/۲$ محاسبه شد.

۵. افزایش غلظت یون‌های سیلیسیم و کلسیم تا روز یک غوطه‌وری و سپس کاهش آن تا روز ۱۴ غوطه‌وری در محلول شبیه‌سازی‌شده بدن و نیز افزایش مقدار pH تا روز ۱۴ غوطه‌وری در نمونه مورد بررسی، تایید گردید و توزیع Q^n در نمونه برای n به ترتیب ۰، ۱، ۲، ۳ و ۴ برابر با ۷، ۲۰، ۴۱، ۲۶ و ۶ درصد محاسبه شد.

بنابراین، طبق نتایج حاصل ار این پژوهش، میدان نیرو لنارد–جونز، یک روش ساده و بدون پیچیدگی، به‌منظور مطالعه ترکیب

شیمیایی و پیش‌بینی ویژگی‌های ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال، نظیر موقعیت اتم‌ها نسبت به یکدیگر، محاسبه ضریب نفوذ، چگالی و توزیع Q^n، قبل از انجام روش‌های تجربی است که منجر به کاهش زمان لازم برای انجام پژوهش و تسریع و بهبود روند پیشرفت در پژوهش‌ها می‌گردد.

تشکر و سپاسگزاری

این تحقیق حمایت خاصی از مؤسسات عمومی، صنعتی و غیرانتفاعی دریافت نکرده است.

تضاد منافع

نویسندگان مقاله اذعان دارند هیچ نوع تضاد منافعی با شـخص، شرکت یا سازمانی برای این پژوهش ندارند.

سهم نویسندگان

امیرحسین مغنیان: طراحی و ایده‌پردازی مطالعه، جمع‌آوری داده‌ها، تحلیل و تفسیر داده‌ها، اعتبارسنجی نتایج، نوشتن مقاله، مدیریت منابع، راهنمایی پروژه. **آرمان طیبی:** جمع‌آوری داده‌ها، تحلیل و تفسیر داده‌ها.

واژه‌نامه

1. implant
2. bioactive glasses
3. biocompatibility
4. biodegradable
5. osteogenesis
6. bone tissue engineering
7. spinal fusion
8. melt
9. quench
10. molecular dynamics simulation
11. amorphous
12. periodic boundary condition
13. assisted model building with energy refinement (AMBER)
14. chemistry at Harvard macromolecular mechanics (CHARMM)
15. Groningen molecular simulation (GROMOS)
16. optimized potentials for liquid simulations (OPLS)
17. Lennard-Jones potential
18. large-scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS)
19. penetration coefficient
20. partial charge pairwise potentials
21. long-range Coulomb interactions
22. Buckingham potential
23. particle-particle particle-mesh (PPPM)
24. radial distribution function
25. pair distribution function
26. angle distribution function

مراجع

1. Sun H, Zheng K, Zhou T, Boccaccini AR. Incorporation of zinc into binary SiO_2-CaO mesoporous bioactive glass nanoparticles enhances anti-inflammatory and osteogenic activities. Pharm. 2021;13(12):2124. https://doi.org/10.3390/pharmaceutics13122124
2. Zhao C, Liu W, Zhu M, Wu C, Zhu Y. Bioceramic-based scaffolds with antibacterial function for bone tissue engineering: A review. Bioact Mater. 2022;18(2):383–398. https://doi.org/10.1016/j.bioactmat.2022.02.010
3. Ren Z, Tang S, Wang J, Lv S, Zheng K, Xu Y, et al. Bioactive Glasses: Advancing Skin Tissue Repair through Multifunctional Mechanisms and Innovations. Biomater Res. 2025;29(0134):1-20. https://doi.org/10.34133/bmr.0134
4. Ashrafzadeh Shimi R, Moghanian A, Thaghafi Yazdi M, Kolivand N. Study of the biological properties of 68S bioactive glass stabilized at temperatures of 600–800 °C to improve its biocompatibility in bone tissue engineering therapeutic applications. J Adv Mater Eng (Esteghlal) 2024;43(1):67–80. https://doi.org/10.47176/jame.43.1.1053
5. Cannio M, Bellucci D, Roether JA, Boccaccini DN, Cannillo V. Bioactive Glass Applications: A Literature Review of Human Clinical Trials. Mater. 2021;14(18):5440. https://doi.org/10.3390/ma14185440
6. Haris PI, Saravanapavan P, Jones JR, Verrier S, Beilby R, Shirtliff VJ, et al. Binary CaO–SiO_2 gel-glasses for biomedical applications. Biomed Mater Eng. 2004;14(4):467–486. https://doi.org/10.1177/09592989200401400401 3
7. Saravanapavan P, Jones JR, Pryce RS, Hench LL.

Bioactivity of gel-glass powders in the $CaO-SiO_2$ system: A comparison with ternary ($CaO-P_2O_5-SiO_2$) and quaternary glasses ($SiO_2-CaO-P_2O_5-Na_2O$). J Biomed Mater Res A 2003;66(1):110-119. https://doi.org/10.1002/jbm.a.10532
8. Elahpour N, Niesner I, Abdellaoui N, Holzapfel BM, Gritsch L, Jallot E, et al. Antibacterial Therapeutic Ions Incorporation into Bioactive Glasses as a Winning Strategy against Antibiotic Resistance. Adv Mater Interfaces 2024;11(32):2400068. https://doi.org/10.1002/admi.202400068
9. Tilocca A. Structural models of bioactive glasses from molecular dynamics simulations. Proc Math Phys Eng Sci. 2009;465(2104):1003–1027. https://doi.org/10.1098/rspa.2008.0462
10. Pedone A, Cannillo V, Menziani MC. Toward the understanding of crystallization, mechanical properties and reactivity of multicomponent bioactive glasses. Acta Mater. 2021;213(14):116977. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116977
11. Rani S, Shetty DN. Current advances in data-driven modeling and computational tools for novel materials. In: Srivastava HM, Arora G, Shah FA, editors. Advances in computational methods and modeling for science and engineering. India: Morgan Kaufmann; 2025. p. 277-285. https://doi.org/10.1016/B978-0-44-330012-7.00029-1
12. Montazerian M, Zanotto ED, Mauro JC. Model-driven design of bioactive glasses: from molecular dynamics through machine learning. Int Mater Rev. 2020;65(5):297–321. https://doi.org/10.1080/09506608.2019.1694779
13. Montazerian M, Wilkinson C, Mauro JC. Molecular dynamics (MD) simulations of bioactive glasses and glass-ceramics. In: Baino F, Kargozar S, editors. Bioactive glasses and glass-ceramics: fundamentals and applications. America: American Ceramic Society; 2022. p. 375–396. https://doi.org/10.1002/9781119724193.ch16
14. Liu H, Zhao Z, Zhou Q, Chen R, Yang K, Wang Z, et al. Challenges and opportunities in atomistic simulations of glasses: a review. Comptes Rendus Geosci. 2022;354(S1):1-43. https://doi.org/10.5802/crgeos.116
15. Esmaeili R, Dashtbayazi MR. Simulation of mechanical properties of Al-SiC nanocomposite using molecular dynamics method. J Adv Mater Eng. 2022;32(2):43-54 (In Persian). https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.2251600.1392.32.2.4.5
16. Hollingsworth SA, Dror RO. Molecular dynamics simulation for all. Neuron 2018;99(6):1129-43. https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011
17. Harrison JA, Schall JD, Maskey S, Mikulski PT, Knippenberg MT, Morrow BH. Review of force fields and intermolecular potentials used in atomistic computational materials research. Appl Phys Rev. 2018;5(3):31104. https://doi.org/10.1063/1.5020808
18. Lenhard J, Stephan S, Hasse H. On the History of the Lennard-Jones Potential. Ann Phys. 2024;536(6): 2400115. https://doi.org/10.1002/ANDP.202400115
19. Freitas AA, Santos RL, Colaço R, Horta RB, Lopes J C. From lime to silica and alumina: systematic modeling of cement clinkers using a general force-field. Phys Chem Chem Phys. 2015;17(28):18477–18494. https://doi.org/10.1039/C5CP02823J
20. Ouldhnini Y, Atila A, Ouaskit S, Hasnaoui A. Atomistic insights into the structure and elasticity of densified 45S5 bioactive glasses. Phys Chem Chem Phys. 2021;23(28):15292–15301. https://doi.org/10.1039/D1CP02192C
21. Soorani M, Mele E, Christie JK. Structural effects of incorporating Cu^{+} and Cu^{2+} ions into silicate bioactive glasses using molecular dynamics simulations. Mater Adv. 2023;4(9):2078–2087. https://doi.org/10.1039/D2MA00872F
22. Kono Y, Ohara K, Kondo NM, Yamada H, Hiroi S, Noritake F, et al. Experimental evidence of tetrahedral symmetry breaking in SiO2 glass under pressure. Nat Commun. 2022;13(1):1–8. https://doi.org/10.1038/s41467-022-30028-w
23. Marchin N, Du J. Short and medium range structures of binary GeO_2-SiO_2 glasses from molecular dynamic simulations. J Non-Cryst Solids. 2024;640(23):123110. https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2024.123110
24. Van Hong N. Structure and Density Heterogeneities of Silica Glass: Insight from Datamining Techniques. Silicon 2024;16(17):6135–6142. https://doi.org/10.1007/s12633-024-03148-9
25. Al-Hasni B. Effect of Ca/K replacement on the atomic structure of P_2O_5–K_2O–CaO glasses: A molecular dynamics study. Ind J Phys. 2024;98(5):1583–1592. https://doi.org/10.1007/s12648-023-02920-8
26. Jia B, Li M, Yan X, Wang Q, He S. Structure investigation of $CaO-SiO_2-Al_2O_3-Li_2O$ by molecular dynamics simulation and Raman spectroscopy. J Non-Cryst Solids 2019;526(11):119695. https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.119695
27. Guo P, Jiao S, Chen F, Min Y, Liu C. Molecular dynamics analysis of the Mg^{2+} structure behavior in SiO_2–CaO–Al_2O_3–MgO slag system. ISIJ Int. 2025;1–44. https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2024-286
28. Greegor RB, Lytle FW, Kortright J, Fischer-Colbrie A. Determination of the structure of GeO_2-SiO_2 Glasses by EXAFS and X-ray Scattering. J Non-Cryst Solids 1987;89(3):311-25.
29. Cormier L, Creux S, Galoisy L, Calas G, Gaskell PH. Medium range order around cations in silicate glasses. Chem Geol. 1996;128(1-4):77-91. https://doi.org/10.1016/0009-2541(95)00164-6
30. Benmore CJ, Bogle R, Wilke SK, Weber R, Neuefeind J, Costa G. The structure of CaO–MgO–Al_2O_3–SiO_2 melts and glasses doped with FeOX–NiO. J Am Ceram Soc. 2024;107(9):6323–6333.

https://doi.org/10.1111/jace.19856
31. Jabraoui H, Malki M, Hasnaoui A, Badawi M, Ouaskit S, Lebegue S, et al. Thermodynamic and structural properties of binary calcium silicate glasses: insights from molecular dynamics-Physical Chemistry Chemical Physics. Phys Chem Chem Phys. 2017;19(29):19083-19093. https://doi.org/10.1039/C7CP03397D
32. Xiang Y, Du J, Skinner LB, Benmore CJ, Wren AW, Boyd DJ, et al. Structure and diffusion of ZnO–SrO–CaO–Na_2O–SiO_2 bioactive glasses: a combined high energy X-ray diffraction and molecular dynamics simulations study. RSC Adv. 2013;3(17):5966–5978. https://doi.org/10.1039/C3RA23231J
33. Wajda A, Sitarz M. Structural and microstructural comparison of bioactive melt-derived and gel-derived glasses from SiO_2-CaO binary system. Ceram Int. 2018;44(8):8856-8863. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.02.070
34. Lung CY, Abdalla MM, Chu CH, Yin I, Got SR, Matinlinna JP. A multi-element-doped porous bioactive glass coating for implant applications. Mater. 2021;14(4):961. https://doi.org/10.3390/ma14040961
35. Tilocca A. Structural models of bioactive glasses from molecular dynamics simulations. Proc R Soc A Math Phys Eng Sci. 2009;465(2104):1003–27. https://doi.org/10.1098/rspa.2008.0462.