فصلنامه سرامیک ایران

تأثیر CaO بر شیشه زیست‌فعال پایه سیلیکاتی شبیه‌سازی‌شده: بررسی ویژگی‌های ساختاری، توزیع Q^n و زیست‌تخریب‌پذیری به روش شیمی محاسباتی

امیرحسین مغنیان

دانشیار، گروه مهندسی مواد، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

نویسنده اول و مسئول:
دکتر امیرحسین مغنیان
دانشیار گروه مهندسی مواد، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره) قزوین
* moghanian@eng.ikiu.ac.ir

نوع مقاله: پژوهشی
صفحه‌های: ۱۸ تا ۳۰
شاپا چاپی: ۳۳۵۱-۱۷۳۵
شاپا الکترونیکی: ۳۰۹۷-۲۷۸۳
زبان نشریه: فارسی
دسترس‌پذیر در نشانی:
www.JICERS.ir

تاریخ دریافت:
۱۴۰۴/۰۱/۰۶
تاریخ پذیرش:
۱۴۰۴/۰۵/۲۸

DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0

چکیده: *شیشه‌های زیست‌فعال به‌عنوان یکی از مواد مهم در کاربردهای پزشکی و مهندسی بافت مورد توجه قرار گرفته‌اند. درک ساختار شیشه‌های زیست‌فعال برای پیش‌بینی خواص آن‌ها بسیار حائز اهمیت است، ازاین‌رو شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک روش مناسب برای بررسی خواص شیشه‌های زیست‌فعال در کنار نتایج تجربی به کار برده می‌شود. بنابراین در این پژوهش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به مطالعه ساختار کوتاه‌برد، میان‌برد و بلندبرد شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ و $60SiO_2$-$40CaO$ و همچنین به مطالعه ضرایب خودنفوذی با استفاده از میانگین مربع جابه‌جایی اتم‌ها پرداخته شد. برای مطالعه ساختار کوتاه‌برد، اندازه پیوندهای Si-O، Ca-O و O-O بررسی شد که برای شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ به ترتیب برابر با ۰/۰۱۰ ± ۱/۶۱۵ Å، ۰/۰۱۰ ± ۲/۳۸۵ و ۰/۰۱۰ ± ۲/۶۲۵ و برای شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-$40CaO$ به ترتیب ۰/۰۱۰ ± ۱/۶۱۵ Å، ۰/۰۱۰ ± ۲/۳۷۵ و ۰/۰۱۰ ± ۲/۶۳۵ گزارش گردید. برای مطالعه ساختار میان‌برد، به بررسی عدد هم‌آرایی اتم‌ها، توزیع اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن و توزیع Q^n پرداخته و ارتباط آن‌ها با زیست‌فعالی بررسی شد و چگالی شیشه‌های زیست‌فعال مورد ارزیابی قرار گرفت که چگالی ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ و $60SiO_2$-$40CaO$ به‌ترتیب برابر با ۶۱/۰۱ ± ۲/۰ و ۰/۰۱ ± ۲/۴۷ g/cm^3 به دست آمد. همچنین ضرایب خودنفوذی اتم‌ها در دماهای ۲۰۰۰ K و ۱۵۰۰ بررسی شد و نتایج نشان داد که با افزایش دما، ضریب خودنفوذی اتم‌ها افزایش می‌یابد. نتایج به دست آمده برای ساختار کوتاه‌برد با استفاده از نتایج پژوهش‌های اخیر مورد صحت‌سنجی قرار گرفت و خواص زیست‌فعالی ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ و $60SiO_2$-$40CaO$ با یکدیگر مقایسه گردید. نتایج نشان داد که شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ تخریب‌پذیری بیش‌تر و شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-$40CaO$ توانایی تشکیل هیدروکسی‌آپاتایت بیش‌تری دارد و با توجه به خواص مذکور در کاربردهای مهندسی بافت استفاده شوند.*

کلمات کلیدی: *شیشه زیست‌فعال، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن، اندازه و زاویه پیوندی، توزیع Qn، ضرایب خودنفوذی.*

۱- مقدمه

شیشه‌های زیست‌فعال[1] به‌عنوان یکی از مواد زیستی نوین و پرکاربرد در حوزه مهندسی بافت و پزشکی بازساختی به دلیل توانایی منحصربه‌فرد خود در برقراری پیوند با بافت‌های زنده و تحریک ترمیم استخوان، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱-۴]. همچنین، این مواد زیستی نخستین‌بار توسط پروفسور هنچ در دهه ۱۹۶۰ میلادی سنتز شدند و تاکنون مطالعات بسیاری به‌منظور انتخاب ترکیب شیمیایی بهینه و بهبود عملکرد آن‌ها انجام گردیده است. ضمن اینکه شیشه‌های زیست‌فعال به دلیل تشکیل لایه

[1] Bioactive glasses (BGs)

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

هیدروکسی‌آپاتایت[1] برروی سطح خود پس از قرارگیری در محلول شبیه‌سازی‌شده بدن[2]، توانایی برقراری پیوندی مستحکم با استخوان و بافت‌های زنده را دارند. علاوه‌بر این ویژگی منحصربه‌فرد مذکور، آن‌ها را به موادی ایده‌آل برای کاربردهای ارتوپدی، دندانپزشکی و ترمیم بافت‌های نرم تبدیل کرده است [۵–۷]. ذکر این نکته حائز اهمیت است که یکی از مهم‌ترین گروه‌های شیشه‌های زیست‌فعال، شیشه‌های زیست‌فعال پایه سیلیکاتی (SiO_2) هستند که به دلیل خواص مکانیکی مناسب، نرخ انحلال قابل کنترل و توانایی بالا در تحریک پاسخ‌های زیستی، به‌طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [۵–۱۰]. همچنین ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال پایه سیلیکاتی، نقش کلیدی در تعیین خصوصیات فیزیکی، مکانیکی و زیستی آن‌ها دارد و ترکیب مقادیر مختلفی از اکسیدهایی مانند SiO_2 و CaO در ترکیب شیمیایی آن‌ها، بر میزان انحلال‌پذیری، تشکیل لایه هیدروکسی‌آپاتایت، استحکام مکانیکی و پاسخ سلولی تاثیرگذار است [۱۱–۱۲]. ضمن اینکه، افزایش میزان SiO_2 در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال، منجر به کاهش نرخ انحلال شبکه شیشه و افزایش پایداری شیمیایی[3] می‌گردد. این در حالی است که افزایش میزان CaO در ترکیب شیمیایی آن‌ها، زیست‌فعالی شیشه‌ها را از طریق تشکیل سریع‌تر هیدروکسی‌آپاتایت بهبود می‌بخشد. بنابراین، انتخاب ترکیب شیمیایی بهینه شیشه زیست‌فعال پایه سیلیکاتی برای دستیابی به کنترل نرخ تخریب کنترل‌شده، استحکام مکانیکی و زیست‌فعالی آن‌ها، یکی از چالش‌های اصلی در توسعه شیشه‌های زیست‌فعال پایه سیلیکاتی است [۱۳–۱۵]. همچنین، روش دینامیک مولکولی[4] به‌عنوان یک ابزار قدرتمند در مقیاس اتمی، امکان بررسی دقیق برهم‌کنش‌های اتمی، تشکیل پیوندها، طول پیوندها، زوایای بین پیوندها و پویایی شبکه[5] را فراهم می‌سازد و شبیه‌سازی رفتار مواد زیستی در شرایط برون‌تنی در محلول شبیه‌سازی بدن و در شرایط درون‌تنی در محلول فیزیولوژی بدن، درک عمیق‌تری از رفتار ساختاری شیشه‌ها را به ارمغان می‌آورد [۱۶، ۱۷]. ضمن اینکه، در بررسی شیشه‌های زیست‌فعال، اکسیژن‌های پل‌زن نشان‌دهنده اکسیژن‌هایی با دو پیوند اتمی و اتصال‌دهنده سایر یون‌ها به یکدیگر بوده و اکسیژن‌های غیرپل‌زن، یک پیوند با اتم‌های سیلیسیم را دارند. علاوه‌بر این در شیشه‌های زیست‌فعال پایه سیلیکاتی، افزایش نسبت اکسیژن‌های پل‌زن به اکسیژن‌های غیر پل‌زن، منجر به افزایش اتصال شبکه شده و نرخ تخریب را در این مواد کاهش می‌دهند [۱۸]. همچنین، مطالعات اخیر دینامیک مولکولی به درک بهتر شیشه‌های زیست‌فعال کمک کرده و نقش کلیدی یون‌های مختلف موثر در تشکیل لایه هیدروکسی‌آپاتیت را در آن بررسی می‌کند [۱۹–۲۰]. هدف از این مطالعه، مقایسه تأثیر ترکیب شیمیایی بر ساختار کوتاه‌برد و میان‌برد، پایداری ساختاری و رفتار دینامیکی شیشه‌های زیست‌فعال پایه سیلیکاتی با ترکیب شیمیایی $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO سنتزشده به روش ذوبی–آب‌دهی[6] می‌باشد. همچنین، یافته‌های این مطالعه می‌تواند با استفاده از شبیه‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال به کمک دینامیک مولکولی، به درک بهتر رابطه میان ترکیب شیمیایی و رفتار زیستی شیشه‌های زیست‌فعال کمک کرده و راه را برای طراحی مواد زیستی پیشرفته با عملکرد بهینه در محیط‌های زیستی هموار سازد.

۲– روش‌های انجام تحقیق

۲–۱– میدان نیرو[7] مورد استفاده در شبیه‌سازی

در این پژوهش، برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دو ترکیب $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO از میدان نیروی ترکیبی لنارد–جونز کوتاه‌برد[8] و میدان نیروی بلندبرد کولن[9] استفاده شد که رابطه (۱) این میدان نیروی ترکیبی ارائه شده است.

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

[1] Hydroxyapatite (HA)
[2] Simulated body fluid (SBF)
[3] Chemical stability
[4] Molecular Dynamics
[5] Network dynamics
[6] Melting-quenching method
[7] Force field
[8] Short-range lennard-jones
[9] Long-range coulomb

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

در این رابطه، جمله اول برابر با میدان نیروی کولن و جمله دوم برابر با میدان نیروی لنارد–جونز می‌باشد. مقادیر e، ε_0، Z_i و Z_j به‌ترتیب برابر با بار الکتریکی[1] و ثابت گذردهی در خلاء[2]، بار الکتریکی جز i و بار الکتریکی جز j می‌باشند. همچنین مقدار ε_{ij} و σ_{ij} ضرایب میدان نیروی لنارد–جونز و r_{ij} فاصله بین دو ذره i و j است. مقادیر ضرایب میدان نیروی ترکیبی ذکرشده در جدول (۱) قابل مشاهده است.

جدول ۱: مقدار ضرایب میدان نیروی ترکیبی

پیوند بین اتمی	لنارد–جونز	
	$\varepsilon_{ij}/_{eV}$	$\sigma_{ij}/_{Å}$
$^{-1/2}\text{-O}^{+2/4}\text{Si}$	۱/۱۶۶۹۲	۱/۴۹۸۸
$^{-1/2}\text{-O}^{+1/2}\text{Ca}$	۰/۰۸۴۰۴	۲/۴۲۰۳
$^{-1/2}\text{-O}^{-1/2}\text{O}$	۰/۰۱۴۰۷	۳/۲۵۲۸
$^{+1/2}\text{-Ca}^{+1/2}\text{Ca}$	۰/۰۰۰۱۱	۴/۱۹۷۸
$^{+2/4}\text{Si}^{+2/4}\text{Si}$	۰	۰
$^{+1/2}\text{-Ca}^{+2/4}\text{Si}$	۰	۰

۲–۲–روش شبیه‌سازی

برای تهیه ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال شبیه‌سازی‌شده $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO از روش ذوبی–آب‌دهی استفاده شد. در این روش، مواد اولیه سنتز شیشه زیست‌فعال در داخل کوره ذوب‌شده و سپس به سرعت سرد می‌شود تا ساختار شیشه‌ای و بی‌شکل حاصل شود. به این منظور ابتدا اتم‌های Si، O و Ca در جعبه شبیه‌سازی[3] قرار داده شد. تعداد هر نوع اتم مطابق با ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال تعیین شد تا ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال به درستی شبیه‌سازی شود که مقادیر و نام شیشه‌ها در جدول (۲) آمده است. پس از آماده‌سازی جعبه شبیه‌سازی، برای محاسبه برهم‌کنش‌های کولنی، از روش ذره–ذره ذره–مش[4] با خطای نسبی 10^{-6} و نیز برای اعمال نتایج شبیه‌سازی به ابعاد بزرگ و حذف اثرات سطحی، از شرایط مرزی متناوب[5] استفاده شد و همچنین گام زمانی[6] ۱ fs برای انجام انتگرال‌گیری عددی استفاده گردید. ضمن اینکه برای کاهش زمان محاسبات نیروهای بین اتمی از شعاع قطع[7] ۱۰ Å استفاده شد. برای انجام شبیه‌سازی فرآیند ذوبی–آب‌دهی به منظور دستیابی به ساختار شیشه زیست‌فعال، جعبه شبیه‌سازی ابتدا بایستی در دمای ۳۰۰ K به تعادل برسد، سپس جعبه شبیه‌سازی در دمای بالا قرار بگیرد تا اتم‌ها در فاز مذاب قرار بگیرند و همچنین تحرکات اتم‌ها سبب حذف اثرات توزیع مصنوعی اتم‌ها شود. در نهایت جعبه شبیه‌سازی تا دمای ۳۰۰ K سرد شد تا ساختار شیشه‌ای حاصل شود. به این منظور ابتدا به مدت ۵ ps در دمای ۳۰۰ K تحت هنگرد کانونی[8] (ذرات، حجم و دما ثابت) قرار گرفت. سپس دمای جعبه شبیه‌سازی تا دمای ۵۰۰۰ K حرارت داده شد تا ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال ذوب شود سپس به مدت ۱۵۰ ps در این دما قرار گرفت. همان‌طور که اشاره شد این کار به‌منظور حذف اثراتی که در نتیجه ایجاد ساختار به‌وسیله قرارگیری تصادفی اتم‌ها انجام شد تا ترکیب کاملا در شرایط حقیقی قرار گیرد. سپس تا دمای ۳۰۰۰ K، جعبه شبیه‌سازی با سرعت ۱ K/ps سرد شد. ازآنجایی‌که تا رسیدن به این وضعیت از هنگرد کانونی استفاده‌شده، حجم شیشه زیست‌فعال ثابت بوده، لذا برای دستیابی به حجم و چگالی تعادلی شیشه زیست‌فعال، از تحت هنگرد

[1] Electrical charge
[2] Vacuum permittivity
[3] Simulation
[4] Partial-Partial Partial-mesh (PPPM)
[5] Periodic boundary
[6] Time step
[7] Cutoff
[8] Canonical ensemble (NVT)

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

کانونی بزرگ[1] (دما، فشار و ذرات ثابت) به مدت ps ۱۰۰ استفاده گردید تا ساختار شیشه به تعادل برسد. به عبارت دیگر، این هنگرد با اعمال فشار ۱ اتمسفر و دمای تعریف‌شده، سبب می‌شود که ساختار شبیه‌سازی شده، به حجم و حالت تعادلی خود برسد. سپس مجدد با سرعت K/ps ۱ تا دمای K ۳۰۰ سرد شده و پس از آن به مدت ps ۱۰۰ در دو مرحله به ترتیب تحت هنگرد کانونی بزرگ (دما، فشار و ذرات ثابت) و هنگرد کانونی کوچک[2] (ذرات، حجم و انرژی ثابت) قرار گرفت تا ساختار تعادلی حاصل شده و مشخصه‌یابی انجام شود.

جدول ۲: مقادیر ترکیب شیمیایی و نام شیشه‌های زیست‌فعال شبیه‌سازی‌شده

نام شیشه زیست‌فعال	ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال	اتم Ca	اتم O	اتم Si	ابعاد جعبه شبیه‌سازی
50-BAD	$50SiO_2$-50CaO	۲۸۰	۸۴۰	۲۸۰	۳۱/۵
60-BAD	$60SiO_2$-40CaO	۲۱۶	۸۶۴	۳۲۴	۳۱/۵

۲-۳- روش مشخصه‌یابی

برای مشخصه‌یابی ساختار شیشه‌های زیست‌فعال شبیه‌سازی‌شده، از تابع توزیع پیوندی[3] و زاویه‌ای[4] برای مطالعه ساختار کوتاه‌برد، از انتگرال تابع توزیع پیوندی برای محاسبه عدد هم‌آرایی اتم‌ها بکار گرفته شد. تعداد اتم‌های اکسیژن پل‌زن[5] و غیرپل‌زن و مقادیر Q^n مورد محاسبه قرار گرفت تا ساختار میان‌برد مشخص شود سپس برای ساختار بلندبرد، چگالی ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال مورد اندازه‌گیری قرار گرفت. ضمن اینکه از روش میانگین مربع جابه‌جایی[6] اتم‌ها در دماهای K ۱۵۰۰ و ۲۰۰۰ استفاده شد که پس از ترسیم نمودار میانگین مربع جابه‌جایی و معادله انیشتین[7]، ضرایب خودنفوذی[8] اتم‌ها تعیین شد.

۳- نتایج و بحث

۳-۱-ساختار کوتاه‌برد

در این پژوهش، برای بررسی ساختار کوتاه‌برد شیشه، از تابع توزیع شعاعی و زاویه‌ای استفاده شد تا اندازه پیوندها و زاویه بین‌پیوندی محاسبه شود و سپس این مقادیر با نتایج سایر پژوهش‌ها مقایسه شد. شکل (۱ (الف-ب)) شیشه زیست‌فعال را نشان می‌دهد که در این شکل، اتم‌های سبز، قرمز و زرد به ترتیب مربوط به اتم‌های کلسیم، اکسیژن و سیلیسیم می‌باشند. همچنین در شکل (۱ (پ-ت))، تابع توزیع پیوندی برای پیوندهای Si-O، Ca-O و O-O برای ترکیب شیشه‌های زیست‌فعال شبیه‌سازی‌شده $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO نمایش داده شده است. مطابق این شکل، می‌توان نتیجه گرفت که میانگین اندازه پیوند Si-O برای هر دو ترکیب Å ۱/۶۱۵/۰۱۰ ± ۱/۰ و برای پیوندهای Ca-O و O-O برای شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO به‌ترتیب برابر با Å ۰/۰۱۰ ± ۲/۳۸۵ و ۰/۰۱۰ ± ۲/۶۲۵ و برای شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO به ترتیب برابر با Å ۳۷۵/۰۱۰ ± ۲/۰ و ۰/۰۱۰ ± ۲/۶۳۵ می‌باشد. ضمن اینکه در جدول (۳)، مقادیر اندازه پیوند را برای شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO ارائه شده است. طبق نتایج حاصل، پیوندهای Si-O نسبت به پیوندهای Ca-O به دلیل نیروی الکترواستاتیک بالاتر وارده‌شده توسط پیوند Si-O، قوی‌تر و طول آن‌ها نیز کوتاه‌تر می‌باشد. به عبارت دیگر، اکسیژن به علت اینکه تحت نیروی جاذبه قوی‌تری از سوی Si قرار می‌گیرد، به این اتم نزدیک‌تر می‌شود و اتم Ca به علت دارابودن الکترون‌های زیادتر و شعاع اتمی بزرگ‌تر نسبت به اتم Si، نیروی دافعه بیش‌تری داشته که این امر منجر به قرارگیری اتم اکسیژن در فاصله بیش‌تری نسبت به اتم

[1] Isothermal-isobaric ensemble (NPT)
[2] Micro-canonical ensemble (NVE)
[3] Pair distribution function
[4] Angle distribution function
[5] Bridging oxygen
[6] Mean square displacement
[7] Einstein equation
[8] Self-Diffusion coefficient

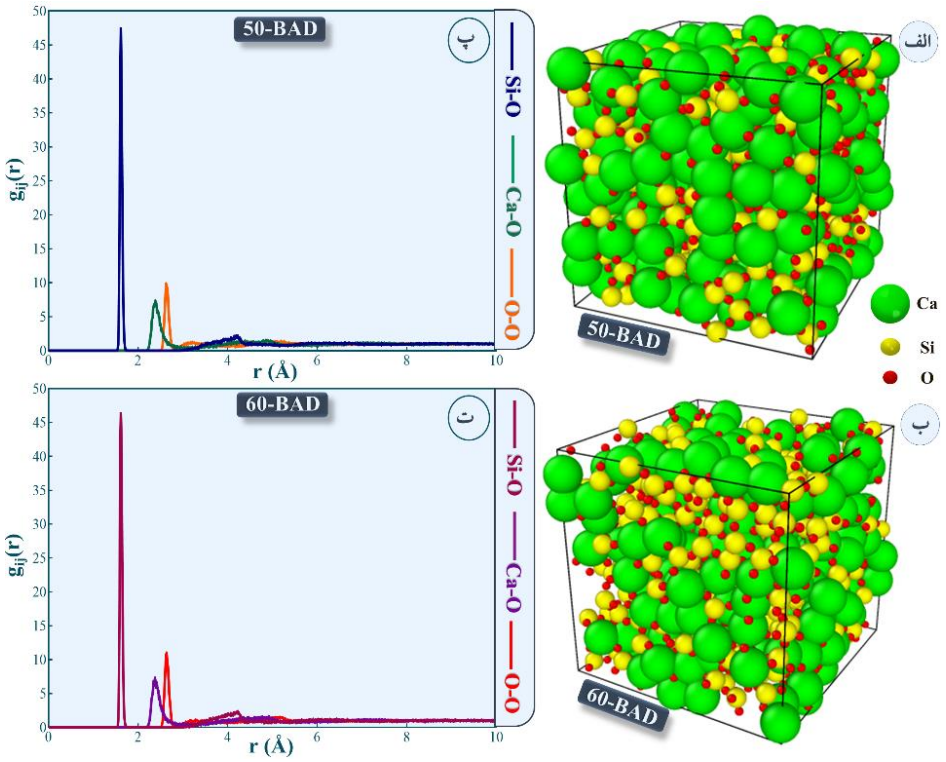
[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

Si می‌شود. نتایج گزارش‌شده توسط پدون[1] و همکاران نشان داد که اندازه پیوند Si-O و Ca-O به ترتیب برابر با ۱/۶۱ Å و ۲/۳۷ می‌باشد [۲۱]. همچنین نتایجی که مالاواسی[2] و همکاران گزارش کردند، نشان داد که با افزایش مقدار CaO در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال دوجزئی SiO_2-CaO، اندازه پیوند Ca-O افزایش می‌یابد. ضمن اینکه اندازه پیوند O-O در پژوهش جبراویی[3] و همکاران، بین ۲/۶۲ Å تا ۲/۷ گزارش شد و همچنین اندازه پیوندهای Si-O و Ca-O در پژوهش جبراویی و همکاران با مقادیر این پژوهش مطابقت دارد [۲۲–۲۳].

جدول ۳: اندازه پیوند شیشه‌های زیست‌فعال

نام شیشه زیست‌فعال	ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال	Si-O (Å)	Ca-O (Å)	O-O (Å)
50-BAD	$50SiO_2$-$50CaO$	۱/۶۱۵	۲/۳۸۵	۲/۶۲۵
60-BAD	$60SiO_2$-$40CaO$	۱/۶۱۵	۲/۳۷۵	۲/۶۳۵



شکل ۱: ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال الف) $50SiO_2$-$50CaO$، ب) $60SiO_2$-$40CaO$، تابع توزیع پیوندی شیشه‌های زیست‌فعال پ) $50SiO_2$-$50CaO$، ت) $60SiO_2$-$40CaO$

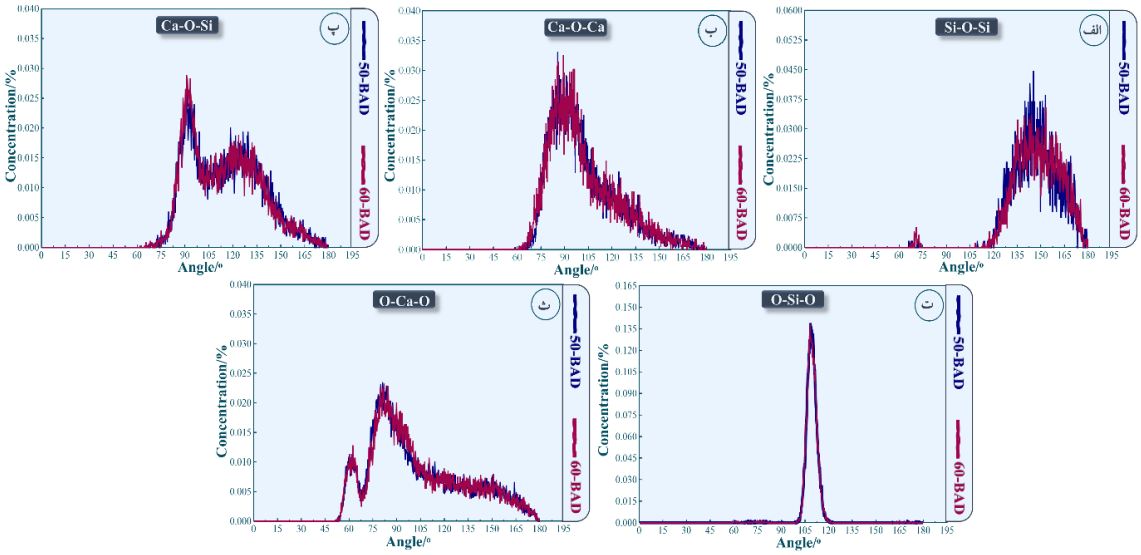
تابع توزیع زاویه‌ای در شکل (۲) قابل مشاهده است که طبق آن، اندازه زاویه O-Si-O (شکل ۲–ت) در ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ و $60SiO_2$-$40CaO$ به‌ترتیب برابر با ۰/۵ ± ۱۰۸/۹ و ۰/۵ ± ۱۰۸/۳ درجه گزارش گردید. همچنین، اندازه زاویه O-Ca-O (شکل ۲–ث) از روی دو پیک در نمودار ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ و $60SiO_2$-$40CaO$، برابر با میانگین زاویه ۶۰ و ۸۱ درجه اندازه‌گیری شد. ضمن اینکه، زوایای Si-O-Si و Ca-O-Ca و Si-O-Ca (شکل ۲–الف–پ) به‌علت ساختار نامنظم شیشه زیست‌فعال، فاقد نظم واضح می‌باشد اما میانگین زاویه Si-O-Si برای شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-$50CaO$ و $60SiO_2$-$40CaO$ به‌ترتیب برابر با ۰/۳ ± ۱۴۷/۴ و ۰/۳ ± ۱۴۷/۸ درجه تعیین شد. علاوه‌بر این زاویه در بازه بین ۱۸۰–۱۱۵ درجه، قابل مشاهده هستند. طبق نتایج مذکور، با افزایش میزان CaO در شیشه‌های زیست‌فعال شبیه‌سازی‌شده، مقدار زاویه Si-O-Si به

[1] Pedone
[2] Malavasi
[3] Jabraoui

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

دلیل وجود پیوندهای Ca-O، کمی افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر، اتم Ca به‌علت بلندتربودن پیوند آن با O، نسبت به Si، اتم‌های O را به سمت Si انتقال می‌دهد و به دلیل عدم کوتاه‌شدن پیوندهای Si-O، اتم Si نسبت به اتم Si دیگر، زاویه بازتری دارد و اثر نیروی ناشی از جانشینی Ca با Si را خنثی می‌کند. میانگین اندازه زاویه Ca-O-Ca برای ترکیبات شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب برابر با ۰/۳ ± ۱۰۲/۳ و ۰/۳ ± ۱۰۱/۵۳ درجه می‌باشد و همچنین برای پیوند Si-O-Ca دو پیک برای شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO در زوایای حدودی ۹۳ و ۱۲۳ درجه و برای شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO در زوایای تقریبی ۹۱ و ۱۲۴ درجه مشاهده گردید. با توجه به نمودار می‌توان استناد کرد که با افزایش مقدار CaO تمایل به برقراری این نوع زاویه در مقدار حدودی ۹۰ درجه افزایش می‌یابد. ضمن اینکه نتایج در مطالعه مالاواسی مقادیر زاویه O-Si-O بین ۱۰۸ تا ۱۰۹ درجه گزارش شد و مقدار گزارش‌شده برای اندازه زاویه Si-O-Si نشان داده است که با افزایش میزان CaO در ترکیب شیشه زیست‌فعال دوجزئی SiO_2-CaO، کاهش می‌یابد. با بررسی بیش‌تر گزارش آن‌ها، مقدار CaO از ۳۰–۱۰ درصد به ترتیب با کاهش اندازه زاویه Si-O-Si در ۱۵۴–۱۴۸ درجه مشاهده شد که نشان می‌دهد در صورت ادامه روند کاهشی، مقادیر این پژوهش از صحت کافی برخوردار است [۲۳]. همچنین در پژوهش دیگر توسط هو[1] و همکاران، مقدار گزارش‌شده برای اندازه زاویه O-Ca-O برابر با ۹۰ و ۶۰ درجه است [۸].



شکل ۲: تابع توزیع زاویه‌ای ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO

۳–۲– ساختار میان‌برد

۳–۲–۱– بررسی توزیع عدد هم‌آرایی اتم‌ها

عدد هم‌آرایی اتم‌های Ca نسبت به O و O نسبت به Si در فواصل شعاعی مختلف در شکل (۳) نمایش داده شده است. برای اتم‌های Ca شعاع قطع ۳/۰ Å و برای اتم‌های O شعاع قطع متناظر با اولین دره در تابع توزیع پیوندی Si-O که در شعاع ۱/۸ Å واقع است در نظر گرفته شد.

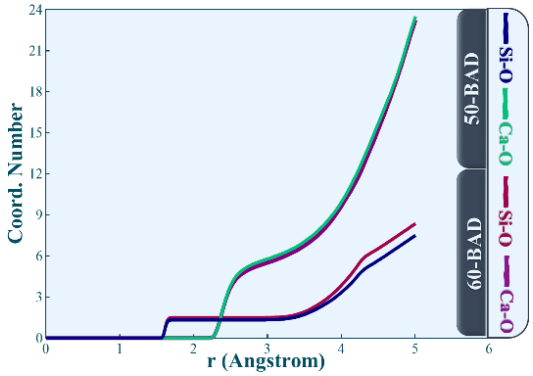
برای ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO، میانگین عدد هم‌آرایی برای اتم Ca نسبت به اتم O برابر با ۵/۷۹ و برای اتم O نسبت به اتم Si برابر با ۱/۳ و به همین ترتیب برای ترکیب شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO برای اتم Ca نسبت به اتم O و برای اتم O نسبت به اتم Si به ترتیب برابر با ۵/۵۲ و ۱/۵ تعیین شد. همچنین عدد هم‌آرایی اتم Si نسبت به O در شعاع قطع ۱/۸ Å برای هر دو ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO برابر با ۴ محاسبه شد که نشان می‌دهد که اتم‌های Si به همراه اتم‌های O شبکه‌های چهارگوش[2] تشکیل می‌دهند. ضمن اینکه مقادیر عدد هم‌آرایی گزارش‌شده در پژوهش

[1] Hou
[2] Tetrahedral

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

مالاواسی و همکاران، برای عدد هم‌آرایی اتم Si نسبت به O را برابر با ۴ تعیین شد. علاوه‌بر این، برای میانگین عدد هم‌آرایی اتم‌های Ca نسبت به اتم O و اتم‌های O نسبت به اتم Si نشان داده که با افزایش مقدار CaO، میانگین عدد هم‌آرایی Ca نسبت به اتم O افزایش و عدد هم‌آرایی O نسبت به اتم Si کاهش می‌یابد [۲۳]. جدول (۴) عدد هم‌آرایی را برای دو ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO نمایش می‌دهد. طبق نتایج توزیع زاویه پیوندی و میانگین عدد هم‌آرایی، ساختار کوتاه‌برد تشکیل‌دهنده شبکه، به دلیل قرارگیری چهار اتم اکسیژن در گوشه‌های چهاروجهی و اتم Si در مرکز چهاروجهی، از نوع چهاروجهی SiO_4 می‌باشد و برای اتم Ca حاکی از ساختار شش‌وجهی برای این اتم می‌باشد که نتایج مذکور مطابقت خوبی با پژوهش‌های اخیر دارد [۲۴–۲۷].



شکل ۳: عدد هم‌آرایی اتم‌های Ca نسبت به O و O نسبت به Si در فواصل شعاعی مختلف در شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO

جدول ۴: عدد هم‌آرایی اتم‌ها

نام شیشه زیست‌فعال	ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال	Si-O	Ca-O	O-Si
50-BAD	$50SiO_2$-50CaO	۴	۵/۷۹	۱/۳۳
60-BAD	$60SiO_2$-40CaO	۴	۵/۵۲	۱/۵

۳–۲–۲–بررسی توزیع اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن

مطابق محاسبات انجام‌شده، توزیع اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن برای ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO به‌ترتیب برابر با ۳۴ و ۶۶ درصد و برای ترکیب شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب برابر با ۵۱ و ۴۹ درصد می‌باشد که این مقادیر در شکل (۴ الف–پ) مشاهده می‌شود. طبق نتایج مذکور، با افزایش مقدار CaO در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال، پیوندهای Si-O-Si شکسته شده و با قرارگیری CaO در ترکیب، به پیوندهای Si-O-Ca-O-Si تبدیل می‌شوند. همچنین ضعیف‌تربودن پیوندهای Ca-O نسبت به پیوند Si-O، منجر به ضعیف‌شدن ساختار شیشه زیست‌فعال می‌شود. ضمن اینکه شبکه سیلیکاتی شیشه زیست‌فعال با اضافه شدن CaO، انسجام خود را از دست می‌دهد و CaO سبب تضیف بیش‌تر ساختار می‌شود. علاوه‌بر این، طبق شبکه سیلیکاتی نشان‌داده‌شده در شکل (۴)، حضور مقادیر بالاتر CaO در ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال، منجر به ایجاد شبکه با فضای خالی بیش‌تری نسبت به شیشه زیست‌فعال با مقدار کم‌تر CaO می‌گردد. براساس نتایج به دست آمده، ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO به علت کم‌تر بودن اکسیژن پل‌زن، از پایداری کم‌تری برخوردار بوده و توانایی تخریب‌پذیری[1] بیش‌تری را دارد. مطابق با گزارش حاصل از پژوهش جبراویی و همکاران، با افزایش مقدار CaO، مقدار اکسیژن‌های غیرپل‌زن افزایش می‌یابد که صحت نتایج حاصل از این پژوهش را تایید می‌کند [۲۲].

۳–۲–۳– بررسی توزیع Q^n و تشکیل شبکه در ساختار

توزیع Q^nها به‌عنوان یکی از مشخصه‌های ساختاری مهم در شیشه‌های زیست‌فعال است که مقدار n برابر است با تعداد اتم اکسیژن

[1] Degradation

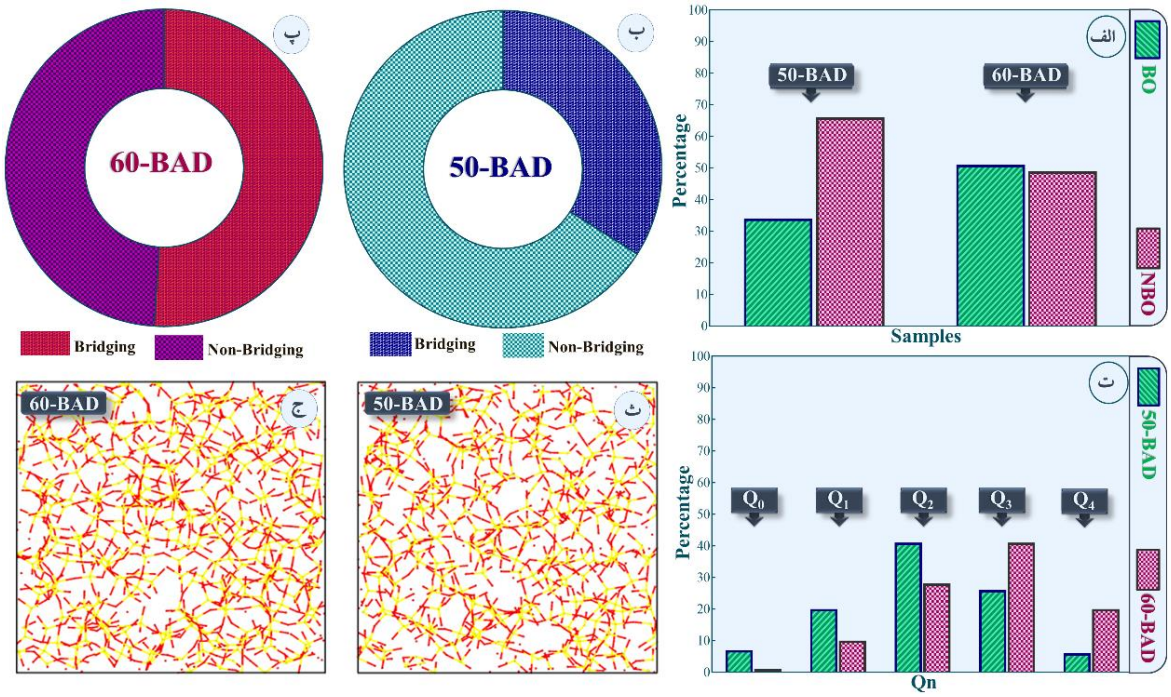
[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

پل‌زن که به اتم Si متصل می‌باشد. همچنین در شکل (۴–ت) توزیع Q^n در ترکیب شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO ارائه شده است که طبق آن با افزایش مقدار CaO در ترکیب شیشه زیست‌فعال دو جزئی پایه سیلیکاتی[1]، میزان توزیع Q^4 و Q^3 کاهش می‌یابد و منجر به افزایش میزان Q^2، Q^1 و Q^0 نیز می‌گردد. ضمن اینکه در این پژوهش با افزایش ۱۰ درصد مولی مقدار CaO، کاهش ۱۴ و ۱۵ درصدی به ترتیب در توزیع Q^4 و Q^3 و افزایش ۱۳، ۱۰ و ۶ درصدی به‌ترتیب در توزیع Q^2، Q^1 و Q^0 گزارش شد که این مقادیر در جدول (۵) نیز آورده شده است.

جدول ۵: درصد توزیع Qn در شیشه زیست‌فعال

نام شیشه زیست‌فعال	ترکیب شیمیایی شیشه زیست‌فعال	Q^0	Q^1	Q^2	Q^3	Q^4
50-BAD	$50SiO_2$-50CaO	۷	۲۰	۴۱	۲۶	۶
60-BAD	$60SiO_2$-40CaO	۱	۱۰	۲۸	۴۱	۲۰



شکل ۴: الف) توزیع اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن و ب) توزیع Qn شیشه‌های زیست‌فعال، پ و ت) درصد اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن، ث و ج) شبکه Si-O در شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO

مطابق نتایج حاصل از پژوهش تیلوکا[2]، با افزایش میزان توزیع Q^2، زیست‌فعالی افزایش می‌یابد که با تعمیم پژوهش تیلوکا به نتایج این پژوهش، می‌توان برداشت کرد که ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO، زیست‌فعالی بیش‌تری از خود نشان می‌دهد [۲۰]. ذکر این نکته حائز اهمیت است که زیست‌فعالی بالاتر شیشه زیست‌فعال با مقادیر بالاتری از Q^2 به دلیل ماهیت زنجیری‌شکل‌بودن آن‌ها است که منجر به عبور یون‌های درمانی مانند Ca^{+2} از میان زنجیره‌های سیلیکاتی می‌گردد. این در حالی است که ساختارهای Q^3 و Q^4، قادر به خروج راحت از ساختار نیستند. همچنین بیش‌تر بودن مقدار Q^0 سبب رهایش سریع‌تر یون‌های Si^{+4} می‌شود زیرا تمام اکسیژن‌های آن از نوع غیرپل‌زن بوده و در نتیجه به علت پیوند ضعیف Ca-O، به راحتی در محیط زیستی تخریب و رهایش می‌یابند که در شیشه زیست‌فعال 50-BAD، توزیع Q^0 بیش‌تر بوده و تخریب‌پذیری و رهایش یون‌های Si^{+4} نیز بیش‌تر می‌باشد. همچنین در شکل (۴–ث–ج) شبکه Si-O در شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO نمایش داده شده است.

[1] Binary silicate Bioactive glasses
[2] Tilocca

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

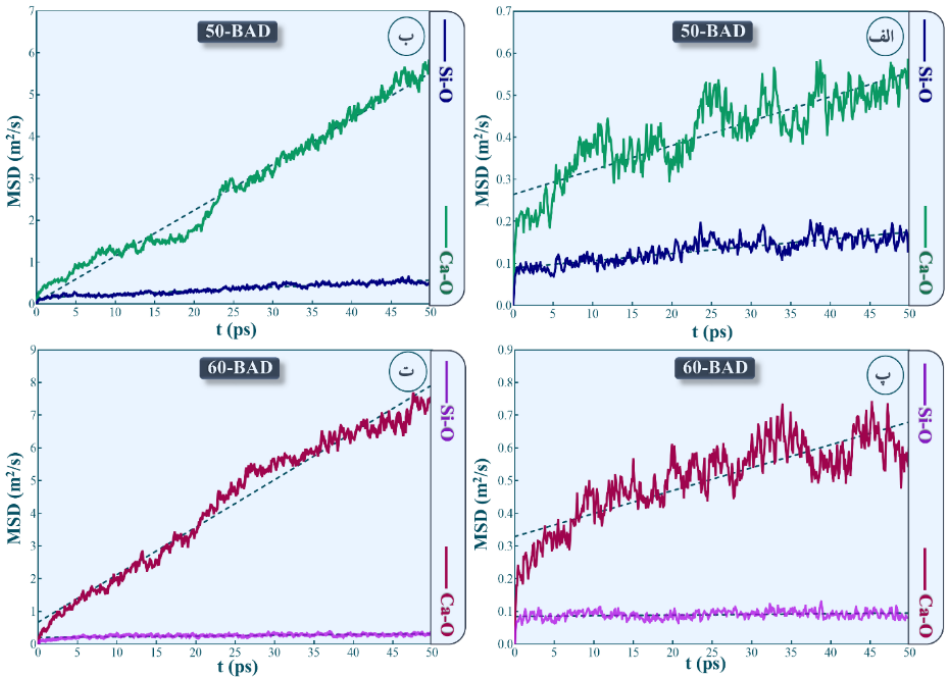
[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

۳-۳- ساختار بلندبرد

شیشه‌های زیست‌فعال فاقد نظم بلنددامنه هستند به همین دلیل تنها مشخصه برای ساختار بلندبرد شیشه‌های زیست‌فعال، چگالی آن‌ها می‌باشد. ازاین‌رو پس از انجام مراحل شبیه‌سازی، چگالی ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب برابر با (g/cm^3) ۲/۰۱ ± ۰/۰۱ و ۶۱/۰ ± ۰/۰۱ ۴۷/۲ محاسبه گردید. طبق نتایج مذکور، افزایش میزان CaO در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال شبیه‌سازی‌شده، به دلیل جرم مولی بالاتر CaO نسبت به SiO_2، منجر به افزایش چگالی شیشه می‌گردد.

۳-۴- تعیین ضرایب خودنفوذی

با استفاده از میانگین مربع جابه‌جایی اتم‌های Ca و Si، می‌توان ضرایب خود نفوذی این اتم‌ها را به‌وسیله معادله انیشتین محاسبه کرد. شکل (۵) میانگین مربع جابه‌جایی اتم‌های Ca و Si را برای ترکیب شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO در دماهای ۲۰۰۰ K و ۱۵۰۰ را نشان می‌دهد.



شکل ۵: میانگین مربع جابه‌جایی اتم‌های Ca و Si برای ترکیب شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO در دمای الف) ۱۵۰۰ K و ب) ۲۰۰۰ K، برای ترکیب شیشه‌های زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO در دمای پ) ۱۵۰۰ K و ت) ۲۰۰۰ K

مطابق معادله انیشتین، با استفاده از شیب نمودارهای میانگین مربع جابه‌جایی برحسب زمان، می‌توان ضرایب نفوذ را محاسبه کرد و این نتایج در جدول (۶) قابل مشاهده است.

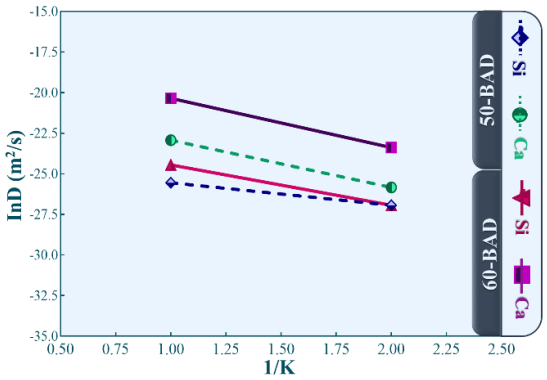
جدول ۶: ضرایب خودنفوذی اتم‌ها در شیشه زیست‌فعال

	D_{Si} (m^2/s)		D_{Ca} (m^2/s)	
دما (K)	۱۵۰۰	۲۰۰۰	۱۵۰۰	۲۰۰۰
$50SiO_2$-50CaO	۴×۱۰^{-۱۴}	$۱/۶\times۱۰^{-۱۳}$	$۱/۲\times۱۰^{-۱۳}$	$۲/۲\times۱۰^{-۱۲}$
$60SiO_2$-40CaO	۴×۱۰^{-۱۴}	$۴/۸\times۱۰^{-۱۳}$	$۱/۴\times۱۰^{-۱۲}$	$۲/۹۰۲\times۱۰^{-۱۱}$

همچنین لگاریتم طبیعی ضرایب خودنفوذی بر حسب معکوس زمان در شکل (۶) نمایش داده شده است. مطابق نتایج به دست آمده، ضرایب خودنفوذی اتم‌ها با افزایش دما، افزایش می‌یابد. همچنین طبق نتایج، ضرایب خودنفوذی اتم Ca نسبت به Si بیش‌تر

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]
[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

است و سریع‌تر در ساختار نفوذ می‌کند. علت نفوذ راحت‌تر و سریع‌تر اتم‌های Ca را می‌توان به ضعیف‌بودن پیوندهای Ca-O مرتبط کرد زیرا که سبب می‌شود در دمای یکسان، نسبت به اتم Si راحت‌تر نوسان داشته باشد و در ساختار نفوذ داشته باشد. ضمن اینکه با کاهش مقدار CaO در ترکیب شیمیایی، ضریب خودنفوذی به ترتیب در دمای K ۱۵۰۰ و ۲۰۰۰ مقدار ۱۱/۶ و ۱۳/۱۹ برابر افزایش یافت. این نتایج نشان می‌دهد که به‌علت کاهش اتم‌های Ca در اطراف اتم‌های هم نوع خود، فضای بازتری برای نفوذ اتم‌های Ca مهیاشده در نتیجه نفوذ آن‌ها تسهیل می‌گردد. همچنین این نتایج نشان می‌دهد که شیشه زیست‌فعال 50-BAD به‌علت وجود ساختارهای Q^0، Q^1 و Q^2 بالاتر نسبت به شیشه زیست‌فعال 60-BAD، دارای شبکه سیلیکاتی ضعیف‌تر بوده و در نتیجه اتم‌های Si با سهولت بیش‌تری در ساختار نفوذ می‌کنند.



شکل ۶: لگاریتم طبیعی ضرایب خودنفوذی شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، به مطالعه خواص ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخته شد. همچنین به این منظور ساختار کوتاه‌برد، میان‌برد و بلندبرد و ضرایب خودنفوذی مطالعه گردید. ازاین‌رو، برای مطالعه ساختار کوتاه‌برد، اندازه پیوندهای بین اتمی و زاویه بین این پیوندها مورد بررسی قرار گرفت که اندازه پیوندهای Si-O، Ca-O و O-O برای شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO به‌ترتیب برابر با ۰/۰۱۰ ± ۱/۶۱۵ Å، ۰/۰۱۰ ± ۲/۳۸۵ و ۰/۰۱۰ ± ۲/۶۲۵ و برای شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب ۰/۰۱ ± ۱/۶۱۵ Å، ۰/۰۱۰ ± ۲/۳۷۵ و ۰/۰۱۰ ± ۲/۶۳۵ گزارش شد. ضمن اینکه، نتایج به دست آمده حاکی از آن است که اندازه پیوند Si-O به ترکیب شیشه زیست‌فعال وابسته نیست اما اندازه پیوند Ca-O به ترکیب شیشه زیست‌فعال وابسته بوده و با افزایش میزان CaO در ترکیب، اندازه پیوند افزایش می‌یابد. علاوه‌بر این، اندازه زاویه O-Si-O برای شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب برابر با ۰/۵ ± ۱۰۸/۹ و ۰/۵ ± ۱۰۸/۳ درجه و برای اندازه زاویه O-Ca-O نیز برای هر دو ترکیب برابر با ۸۱ و ۶۰ درجه محاسبه گردید. همچنین مقادیر اندازه زاویه میانگین Si-O-Si برای شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب برابر با ۰/۳ ± ۱۴۷/۴ و ۰/۳ ± ۱۴۷/۸ درجه اندازه‌گیری شد.

برای مطالعه ساختار میان‌برد، به محاسبه عدد هم‌آرایی اتم‌ها نسبت به اتم O، توزیع اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن و Q^nها در ساختار شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO پرداخته شد که مطابق با نتایج به دست آمده عدد هم‌آرایی اتم Si نسبت به اتم O در هر دو ترکیب شیشه زیست‌فعال برابر با ۴ بود که نشان‌دهنده ساختارهای چهارگوش در شبکه است. همچنین میانگین عدد هم‌آرایی اتم Ca نسبت به اتم O در ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب برابر با ۵/۷۹ و ۵/۵۲ و برای اتم O نسبت به اتم Si به همین صورت برای شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب برابر با ۱/۳۳ و ۱/۵ گزارش شد. ضمن اینکه طبق نتایج، توزیع اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن در ترکیب شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO به‌ترتیب ۳۴ و ۵۱ درصد برای اکسیژن پل‌زن محاسبه شد. علاوه‌بر این توزیع Q^n در ترکیب شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO به ترتیب برای Q^0 تا Q^4 برابر با ۷، ۲۰، ۴۱، ۲۶ و ۶ درصد و برای ترکیب شیشه

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]
[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO به همین صورت برابر با ۱، ۱۰، ۲۸، ۴۱ و ۲۰ درصد اندازه‌گیری شد که نشان‌دهنده این است که شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO به علت کمبود اکسیژن پل‌زن در ساختار خود و داشتن توزیع بیش‌تر Q^2، Q^1 و Q^0، تخریب‌پذیری بیش‌تری از خود نشان می‌دهد.

برای مطالعه ساختار بلندبرد به‌علت ساختار نامنظم شیشه‌های زیست‌فعال، تنها به چگالی آن‌ها پرداخته شد که برای شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO و $60SiO_2$-40CaO در دمای ۳۰۰ K به‌ترتیب برابر با ۲/۰۱ ± ۶۱/۰ g/cm^3 و ۰/۰۱ ± ۴۷/۲ گزارش گردید. بنابراین طبق نتایج حاصل از این پژوهش، ضریب خودنفوذی اتم Ca در شیشه زیست‌فعال $60SiO_2$-40CaO بیش‌تر از شیشه زیست‌فعال $50SiO_2$-50CaO است که این امر منجر به توانایی بالاتر شیشه مذکور در رهایش یون Ca و به تبع آن افزایش نرخ تشکیل هیدروکسی‌آپاتایت بر روی سطح شیشه می‌گردد.

مراجع

[۱]. دبیر مارال، مارقوسیان واهاک. بررسی شیشه‌ها و شیشه-سرامیک‌های بایواکتیو در دندانپزشکی. فصلنامه سرامیک ایران. ۱۳۸۴، ۱ (۴)۲۷: ۳۶-.

[2]. Z. Ren, S. Tang, J. Wang, S. Lv, K. Zheng, Y. Xu, K. Li, “Bioactive Glasses: Advancing Skin Tissue Repair through Multifunctional Mechanisms and Innovations.”, J. Biomaterials Research., 2025, 22 0134.

[3]. LL. Hench, “The story of Bioglass®.”, J. materials science: materials in medicine., 2006, 17 967-78.

[4]. C. Li, C. Wang, AR. Boccaccini, K. Zheng, “Sol-gel processing and characterization of binary P_2O_5-CaO and ternary P_2O_5-CaO-Li_2O mesoporous phosphate bioactive glasses.”, J. Non-Crystalline Solids: X., 2023, 17 100159.

[5]. V. Miguez-Pacheco, LL. Hench, AR. Boccaccini, “Bioactive glasses beyond bone and teeth: Emerging applications in contact with soft tissues”. J. Acta biomaterialia, 2015, 13 1-5.

[6]. J. Liang, X. Lu, X. Zheng, YR. Li, X. Geng, K. Sun, H. Cai, Q. Jia, HB. Jiang, K. Liu, “Modification of titanium orthopedic implants with bioactive glass: A systematic review of in vivo and in vitro studies”. J. Frontiers in bioengineering and biotechnology, 2023, 11 1269223.

[7]. VM. Schatkoski, TL. do Amaral Montanheiro, BR. de Menezes, RM. Pereira, KF. Rodrigues, RG. Ribas, DM. da Silva DM, GP. Thim, “Current advances concerning the most cited metal ions doped bioceramics and silicate-based bioactive glasses for bone tissue engineering”. J. Ceramics International, 2021, 47 [3] 2999-3012.

[8]. D. Hou, T. Zhao, Z. Jin, H. Ma, Z. Li, “Molecular simulation of calcium silicate composites: Structure, dynamics, and mechanical properties”. J. American Ceramic Society, 2015, 98 [3] 758-69.

[9]. H. Doweidar, “Density-structure correlations in silicate glasses”. J. non-crystalline solids, 1999, 249 [2-3] 194-200.

[10]. N. Van Hong, “Structure and Density Heterogeneities of Silica Glass: Insight from Datamining Techniques”. J. Silicon, 2024, 16 [17] 6135-42.

[11]. F. Baino, E. Fiume, M. Miola, E. Verné, “Bioactive sol-gel glasses: processing, properties, and applications”. Int. J. Applied Ceramic Technology, 2018, 15 [4] 841-60.

[12]. E. Fiume, J. Barberi, E. Verné, F. Baino, “Bioactive glasses: from parent 45S5 composition to scaffold-assisted tissue-healing therapies”. J. functional biomaterials, 2018, 9 [1] 24.

[13]. NV. Hong, NV. Huong, MT. Lan, “Glassy network structure of CaO-SiO_2 and CaO-Al_2O_3-SiO_2 systems”. J. Bulletin of Materials Science, 2022, 45 [3] 1-8.

[14]. A. Martinez, I. Izquierdo-Barba, M. Vallet-Regi, “Bioactivity of a CaO−SiO_2 binary glasses system”. J. Chemistry of Materials., 2000, 12 [10] 3080-3088.

[15]. PI. Haris, P. Saravanapavan, JR. Jones, S. Verrier, R. Beilby, VJ. Shirtliff, LL. Hench, JM. Polak, “Binary CaO–SiO_2 gel-glasses for biomedical applications”. J. Bio-Medical Materials and Engineering., 2004, 14 [4] 467-486.

[16]. SA. Hollingsworth, RO. Dror, “Molecular dynamics simulation for all”. J. Neuron., 2018, 99 [6] 1129-1143.

[17]. HA. Filipe, LM. Loura, “Molecular dynamics simulations: advances and applications”. J. Molecules., 2022, 27 [7] 2105.

[18]. AN. Cormack, J. Du, “Molecular dynamics simulations of soda–lime–silicate glasses”. J. non-crystalline solids., 2001, 293-295 [1] 283-289.

[19]. MW. Terban, SJ. Billinge, “Structural analysis of molecular materials using the pair distribution function”. J. Chemical Reviews., 2021, 122 [1] 1208-1272.

[20]. A. Tilocca, “Structural models of bioactive glasses from molecular dynamics simulations”. J. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences., 2009, 465 [2104] 1003-1027.

[21]. A. Pedone, V. Cannillo, MC. Menziani MC, “Toward the understanding of crystallization, mechanical properties and reactivity of multicomponent bioactive glasses”. J. Acta Materialia., 2021, 213 116977.

[22]. H. Jabraoui, M. Malki, A. Hasnaoui, M. Badawi, S. Ouaskit, S. Lebègue, Y. Vaills Y, “Thermodynamic and structural properties of binary calcium silicate glasses: insights from molecular dynamics”. J. Physical Chemistry Chemical Physics., 2017, 19 [29] 19083-93.

[23]. G. Malavasi, L. Menabue, MC. Menziani, A. Pedone, AJ. Salinas, M. Vallet-Regí, “New insights into the

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

bioactivity of SiO_2–CaO and SiO_2–CaO–P_2O_5 sol–gel glasses by molecular dynamics simulations". J. sol-gel science and technology., 2013, 67 [1] 208-219.
[24]. J. Du and A. N. Cormack, "Atomistic Simulations of Glasses: Fundamentals and Applications", J. Atomistic Computer Simulations of Inorganic glasses: Methodologies and Applications., 2019, 10 [4] 1–530.
[25]. H. Liu et al., "Challenges and opportunities in atomistic simulations of glasses: a review", J. Comptes Rendus - Geoscience, 2022, 354 [S1] 1–43.
[26]. A. Atila, Y. Ouldhnini, S. Ouaskit, and A. Hasnaoui, "Atomistic insights into the mixed-alkali effect in phosphosilicate glasses", J. Phys Rev B, 2022, 105 [13] 134101.
[27]. A. Pedone, "Properties calculations of silica-based glasses by atomistic simulations techniques: A review", J. Physical Chemistry C, 2009, 113 [49] 20773–20784.

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]
[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]

Effect of CaO on Simulated Silicate Base Bioactive Glass: An Investigation of Structural Characterization, Q^n Distribution and Biodegradability Using Computational Chemistry Method

Amirhossein Moghanian

Associate Professor, Department of Materials Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran

* moghanian@eng.ikiu.ac.ir

Abstract: Bioactive glasses (BGs) have been considered as one of the important materials in medical and tissue engineering (TE) applications. Understanding the structure of BGs is very important factor for predicting their properties, hence molecular dynamics (MD) simulation is a suitable method to investigate the properties of BGs along with experimental investigations. Therefore, in this study, the short-range, medium-range and long-range structures of $50SiO_2$-50CaO and $60SiO_2$-40CaO bioactive glasses were studied using MD simulation, and the self-diffusion coefficients were also calculate using the mean square displacement (MSD) of atoms. To study the short-range structure, the bond length of Si-O, Ca-O and O-O bonds of $50SiO_2$-50CaO BG were investigated and reported 1.615 ± 0.010, 2.385 ± 0.010 and 2.625 ± 0.010, respectively. Meanwhile, 1.615 ± 0.010, 2.375 ± 0.010 and 2.635 ± 0.010 were reported for $60SiO_2$-40CaO BG, respectively. To study the medium-range structure, the coordination number (CN) of atoms, the distribution of bridging and non-bridging oxygens (NBO), and the distribution of Qn were studied and their relationship with bioactivity was investigated. Additionally, the density of BGs was investigated and 2.47 ± 0.01 g/cm^3 and 2.61 ± 0.01 g/cm^3 were reported for $50SiO_2$-50CaO and $60SiO_2$-40CaO, respectively. Moreover, the self-diffusion coefficients (SDCs) of atoms were investigated at 1500 and 2000 ^{0}K temperatures and results indicated that SDC of atoms increase with increasing the temperature. The results for the short-range structure were validated using the previous reports, and the bioactivity of $50SiO_2$-50CaO and $60SiO_2$-40CaO were compared with each other. It was found that $50SiO_2$ -50CaO BG is more degradable and $60SiO_2$-40CaO had more hydroxyapatite (HA) formation capability. Eventually, considering the aforementioned properties, these two BGs can be used in TE applications.

Keywords: Bioactive glasses (BGs), Molecular dynamics (MD) simulation, Bridging (BO) and non-bridging oxygens (NBO), Bond length and angle, Distribution of Q^n, Self-diffusion coefficients (SDCs).

[Downloaded from jicers.ir on 2025-12-10]

[DOR: 20.1001.1.17353351.1403.20.2.6.0]