

Structural Analysis, Determination of the Distribution of Bridging and Non-Bridging Oxygens and their Bond with Si and P in Binary Bioactive Glass with a Chemical Composition Based on 50X-50CaO: X=SiO₂, P₂O₅ (mol.%) Using Computer Modeling

Amirhossein Moghanian^{1*}, Niloofar Kolivand², Arman Tayyebi³

¹ Associate Professor, Department of Materials Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran.

² Master of Materials Engineering, Department of Materials Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran.

³ Bachelor of Materials Engineering, Department of Materials Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran.

*Corresponding Author's Email: moghanian@eng.ikiu.ac.ir (Amirhossein Moghanian)

Paper History:

Received: 2025-04-16

Revised: 2025-06-07

Accepted: 2025-08-02

Keywords:

Bioactive Glasses (BGs),
Molecular Dynamic Simulation (MD),
Bridging and Non-Bridging Oxygens,
Pair Distribution Function

Abstract Silicate-based and phosphate-based bioactive glasses (BGs) containing CaO are widely used compounds in tissue engineering (TE) due to their ability to form a strong bond with the host tissue, favorable dissolution rate, their effect on the formation of a hydroxyapatite (HA) layer, stimulation of cell growth, and mechanical behavior. Recently, molecular dynamics (MD) simulation has been used as an efficient method to predict the properties and structure of BGs in addition to experimental methods. Therefore, in this study, the binary BG composition of 50SiO₂-50CaO and 50P₂O₅-50CaO was studied by MD method. Using the bond distribution function and the angular distribution function, the size of the interbond angle and the size of the bonds were investigated, and the distribution of bridging oxygens (BOs) and non-bridging oxygens (NBOs) in two BG compositions was calculated, which in the 50SiO₂-50CaO and 50P₂O₅-50CaO were distributed 34.62% and 32.9% of BOs, respectively. Also, the distribution of Qⁿ values in 50SiO₂-50CaO and 50P₂O₅-50CaO BGs was studied, and in 50SiO₂-50CaO and 50P₂O₅-50CaO BGs, the distribution of Q² as a suitable criterion for their degradability was 42.9% and 59.03%, respectively. Meanwhile, the density values for the 50SiO₂-50CaO and 50P₂O₅-50CaO BG compositions were 2.381 and 2.15 g/cm³, respectively, and a higher concentration of calcium ions and a higher pH were reported in 50P₂O₅-50CaO than in 50SiO₂-50CaO BGs. Therefore, according to the mentioned results, 50P₂O₅-50CaO BG has higher degradability and consequently higher ion release than 50SiO₂-50CaO BG due to its higher NBOs and Q² values.



<https://doi.org/10.30501/jamt.2025.515419.1324>

URL: https://www.jamt.ir/article_226345.html

1. INTRODUCTION

Bioactive glasses (BGs) are one of the most significant biomaterials in the field of tissue engineering (TE), and due to their ability to interact with the body's environment, stimulate cell growth by releasing therapeutic ions, and rapidly form a hydroxyapatite layer on their surface, they have been widely studied and used in the restoration of hard tissues such as bone and teeth ([Agrawal & Patel, 2025](#); [Borhan & Esmailzadeh, 2023](#); [Jafari et al., 2022](#); [Majumdar et al., 2021](#); [Ren et al., 2025](#); [Upadhyay et al., 2024](#)).

In addition, the structure and properties of BGs have been investigated by various methods, such as molecular dynamics (MD) simulation, which provides detailed studies at the atomic scale and the investigation of the BG's properties in different biological conditions ([Cormack & Du, 2001](#); [Hollingsworth & Dror, 2018](#); [Tilocca, 2009a](#)).

Therefore, in this study, short-range, medium-range, and long-range structural differences and their effect on the biological properties of 50SiO₂-50CaO silicate-based BGs and 50P₂O₅-50CaO phosphate-based BGs were investigated using MD simulation.

2. MATERIALS AND METHODS

The force fields used in the simulation of BGs are a combination of the long-range Coulomb force fields and short-range Buckingham force fields. The simulation of the studied samples was performed using the large-scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS) software, and the velocity Verlet algorithm method was used to numerically integrate the equation of motion with a time step of 1 fs.

3. RESULTS AND DISCUSSION

The final structure obtained from the simulation of 50S and 50P BGs is presented in Figure 1. Also, according to the results of the bond distribution function, the average bond length of Si-O, Ca-O, and O-O was calculated to be 1.605, 2.48, and 2.6 (Å), respectively. According to the results of the bond distribution function, the average bond length of Si-BO and Si-NBO was calculated to be 1.62 and 1.58 (Å), respectively, and for P-BO and P-NBO bonds, it was calculated to be 1.655 and 1.476 (Å), respectively.

Also, according to the results of the angular distribution function, reducing the size of the Si-NBO and P-NBO bonds led to a decrease in the distance of

Please cite this article as: Moghanian, A., Kolivand, N. & Tayyebi, A. (2025). Structural analysis, determination of the distribution of bridging and non-bridging oxygens and their bond with Si and P in binary bioactive glass with a chemical composition based on 50X-50CaO: X=SiO₂, P₂O₅ (mol.%) using computer modeling. *Journal of Advanced Materials and Technologies*, Vol. 14, No. 1, 89-102. [In Persian]. <https://doi.org/10.30501/jamt.2025.515419.1324>.



NBOs relative to each other, creating an electrostatic repulsion force between them, and consequently increasing the NBO-Si-NBO and NBO-P-NBO angles relative to BO-Si-BO and BO-P-BO. According to the O-Ca-O bond angle, the presence of two peaks in the range of 60 and 85 degrees in the 50S BG and the presence of a strong peak at an angle of 90 degrees and a weak peak in the range of 60 degrees for the 50P BG was confirmed. Meanwhile, as shown in Figure (2-A), the coordination number of Si and P atoms relative to O atoms in the chemical composition of 50S and 50P BG was calculated to be 4, which is consistent with the O-Si-O and O-P-O bond angles, and the presence of tetrahedral local structures in both BGs compositions was confirmed. In addition, according to Figure (2-B), the distribution of BOs and NBOs in 50S BG was reported to be 34.62 and 65.38 percent, respectively, and

in 50P BG, 32.9 and 67.1 percent, respectively. Also, according to Figure (2-C), in the 50S BG, the Q^n values with n values of 0-4 were calculated to be 4.3, 22.5, 42.9, 23.9 and 6.4%, respectively, and for the 50P BG, they were calculated to be 0.65, 21.29, 59.03, 19.03 and 0.0%. In addition, the densities of the 50S and 50P BGs were reported to be 2.81 and 2.15 g/cm³, respectively).

4. CONCLUSION

According to the results, 50P BG has a higher degradation rate due to higher NBO and Q^2 values, which leads to higher ion release than 50S BG.

5. ACKNOWLEDGEMENT

This research did not receive specific fundings from public, industrial, or non-profit institutions.

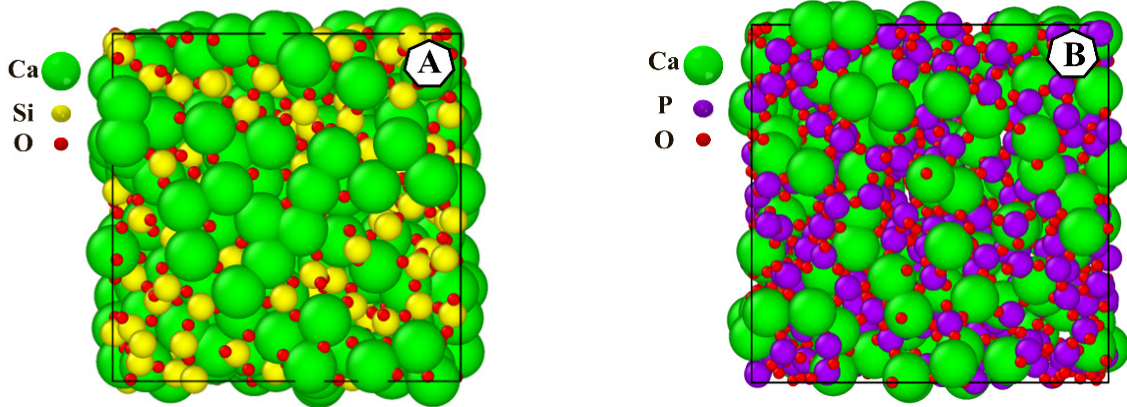


Figure 1. The structure of A. 50S and B. 50P bioactive glasses.

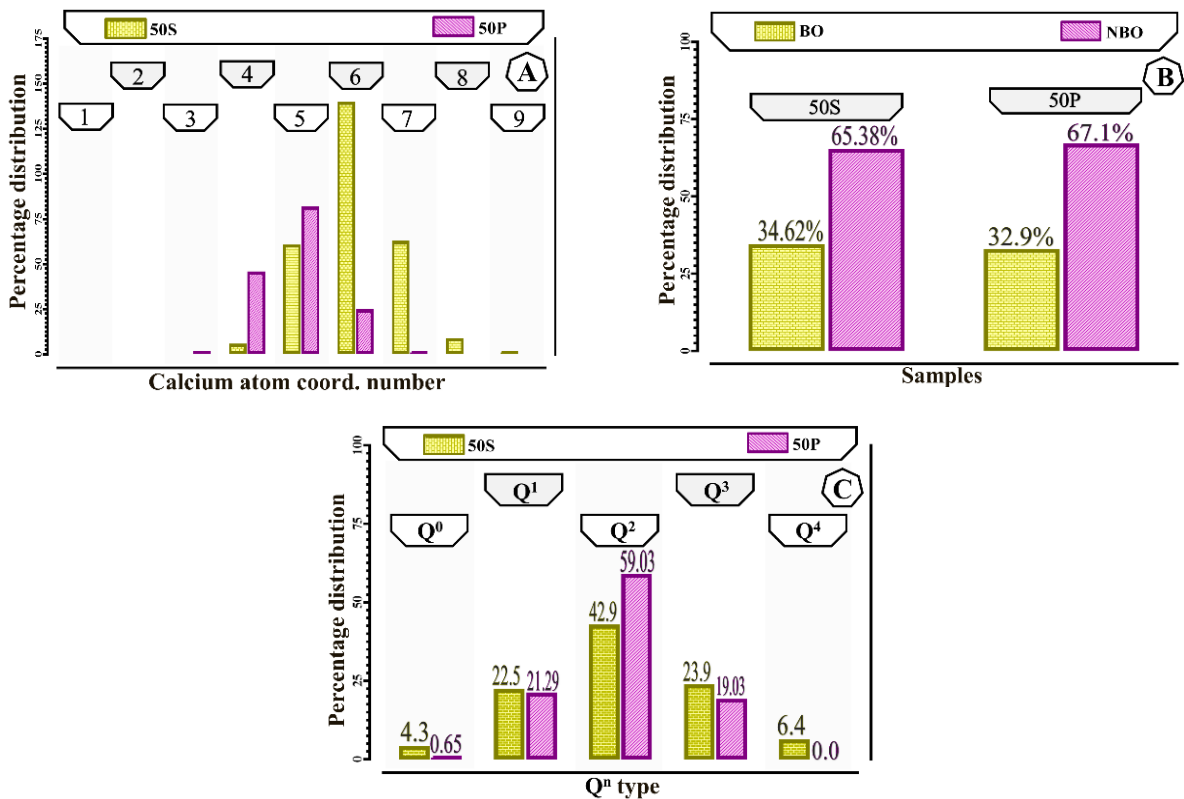


Figure 2. The structure of A. 50S and B. 50P bioactive glasses.

REFERENCES

1. Agrawal, R. P., & Patel, A. S. S. (2025). Applications of bioactive glass: A review. *Multidisciplinary Reviews*, 8(2), 2025038–2025038. <https://doi.org/10.31893/MULTIREV.2025038>
2. Borhan, S., & Esmailzadeh, J. (2023). The Effect of Bioactive Glass Synthesis Method on the Flowability and Structural Stability of the Injectable Pastes Prepared from It, *Advanced Materials and Technologies (JAM)*, 12(1), 1–15. In Persian. <https://doi.org/10.30501/JAMT.2023.376241.1259>
3. Cormack, A. N., & Du, J. (2001). Molecular dynamics simulations of soda–lime–silicate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 293–295(1), 283–289. [https://doi.org/10.1016/S0022-3093\(01\)00831-6](https://doi.org/10.1016/S0022-3093(01)00831-6)
4. Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Molecular Dynamics Simulation for All. *Neuron*, 99(6), 1129–1143. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011>
5. Jafari, N., Habashi, M. S., Hashemi, A., Shirazi, R., Tanideh, N., & Tamadon, A. (2022). Application of bioactive glasses in various dental fields. *Biomaterials Research*, 26(1). <https://doi.org/10.1186/s40824-022-00274-6>
6. Majumdar, S., Gupta, S., & Krishnamurthy, S. (2021). Multifarious applications of bioactive glasses in soft tissue engineering. *Biomaterials Science*, 9(24), 8111–8147. <https://doi.org/10.1039/D1BM01104A>
7. Ren, Z., Tang, S., Wang, J., Lv, S., Zheng, K., Xu, Y., & Li, K. (2025). Bioactive Glasses: Advancing Skin Tissue Repair through Multifunctional Mechanisms and Innovations. *Biomaterials Research*, 29. <https://doi.org/10.34133/BMR.0134>
8. Tilocca, A. (2009a). Structural models of bioactive glasses from molecular dynamics simulations. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 465(2104), 1003–1027. <https://doi.org/10.1098/RSPA.2008.0462>
9. Upadhyay, A., Pradhan, L., Yenurkar, D., Kumar, K., & Mukherjee, S. (2024). Advancement in ceramic biomaterials for dental implants. *International Journal of Applied Ceramic Technology*, 21(4), 2796–2817. <https://doi.org/10.1111/IJAC.14772>



مقاله‌ی کامل پژوهشی

تجزیه و تحلیل ساختاری، تعیین توزیع اکسیژن‌های پل زن و غیر پل زن و پیوند آن‌ها با P و Si در شیشه‌های زیست فعال دوجزئی با ترکیب شیمیایی بر پایه‌ی $50X-50CaO: X=SiO_2, P_2O_5$ (درصد مولی) با استفاده از مدل سازی کامپیوتری

امیرحسین مغنیان^{۱*}، نیلوفر کولیوند^۲، آرمان طیبی^۳

^۱دانشیار، گروه مهندسی مواد، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

^۲کارشناس ارشد مهندسی مواد، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

^۳کارشناس مهندسی مواد، گروه مهندسی مواد، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

چکیده شیشه‌های زیست فعال پایه‌ی سیلیکاتی و پایه‌ی فسفاتی فسفاتی حاوی CaO، به دلیل توانایی خود در تشکیل پیوندی مستحکم با بافت میزبان، نرخ حل‌شوندگی مطلوب و تأثیر آن در تشکیل لایه‌ی هیدروکسی‌آپاتیت، تحریک رشد سلولی و رفتار مکانیکی، ترکیبات پرکاربردی در مهندسی بافت هستند. اخیراً روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌عنوان روشی کارآمد در پیش‌بینی خواص و ساختار شیشه‌های زیست فعال در کنار روش‌های تجربی استفاده شده است. از این رو، در این پژوهش به مطالعه‌ی ترکیب شیشه‌ی زیست فعال دوجزئی $50SiO_2-50CaO$ و $50P_2O_5-50CaO$ به روش دینامیک مولکولی پرداخته شد. با استفاده از تابع توزیع پیوندی و تابع توزیع زاویه‌ای به بررسی اندازه‌ی زاویه‌ی بین پیوندی و اندازه‌ی پیوندها پرداخته شد و توزیع اکسیژن‌های پل زن و غیر پل زن در دو ترکیب شیشه‌ی زیست فعال محاسبه شد که در شیشه‌ی زیست فعال $50SiO_2-50CaO$ و $50P_2O_5-50CaO$ به ترتیب $34/62$ درصد و $32/9$ درصد اکسیژن پل زن توزیع شده است. همچنین، توزیع مقادیر Q^n در دو شیشه‌ی زیست فعال $50SiO_2-50CaO$ و $50P_2O_5-50CaO$ مطالعه شد که در شیشه‌ی زیست فعال $50SiO_2-50CaO$ و $50P_2O_5-50CaO$ توزیع Q^2 به‌عنوان معیاری مناسب برای تخریب‌پذیری آن‌ها، به ترتیب $42/9$ درصد و $59/03$ درصد است. ضمن اینکه، مقادیر چگالی برای دو ترکیب شیشه‌ی زیست فعال $50SiO_2-50CaO$ و $50P_2O_5-50CaO$ به ترتیب مقادیر $2/81 g/cm^3$ و $2/15$ به دست آمد و غلظت بالاتر یون‌های کلسیم و میزان بالاتر pH در شیشه‌ی زیست فعال $50P_2O_5-50CaO$ نسبت به $50SiO_2-50CaO$ گزارش شد. بنابراین، طبق نتایج مذکور، شیشه‌ی زیست فعال $50P_2O_5-50CaO$ به دلیل دارا بودن مقادیر اکسیژن غیر پل زن و Q^2 بالاتر دارای تخریب‌پذیری بالاتر و به تبع آن رهاش یون بیشتری از شیشه‌ی زیست فعال $50SiO_2-50CaO$ است.

تاریخچه‌ی مقاله:

ثبت اولیه: ۱۴۰۴/۰۱/۲۷

بازنگری: ۱۴۰۴/۰۳/۱۷

پذیرش قطعی: ۱۴۰۴/۰۵/۱۱

کلیدواژه‌ها:

شیشه‌های زیست فعال، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، اکسیژن‌های پل زن و غیر پل زن، تابع توزیع پیوندی



<https://doi.org/10.30501/jamt.2025.515419.1324>

URL: https://www.jamt.ir/article_226345.html

۱- مقدمه

[Madival et al., 2025](#); [Majumdar et al., 2021](#); [Brow, 2000](#).

ذکر این نکته حائز اهمیت است که یکی از عوامل مهم در تعیین خواص زیستی شیشه‌های زیست‌فعال نرخ رهایش یون‌های کلسیم از سطح آن‌ها پس از قرارگیری در محلول شبیه‌سازی شده‌ی بدن است که تأثیر مستقیمی در تشکیل لایه‌ی هیدروکسی‌آپاتایت، تحریک رشد سلولی و خواص مکانیکی آن‌ها دارد ([Fredholm et al., 2012](#)). همچنین، آرایش مقادیر مناسبی از اکسید کلسیم در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی سیلیکاتی و فسفاتی به افزایش استحکام پیوند بین ماده‌ی کاشتنی و بافت هدف منجر می‌شود و با افزایش مقادیر اکسید کلسیم، به دلیل شکسته شدن پیوندهای Si-O-Si یا P-O-P شبکه‌ی شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی سیلیکاتی و فسفاتی، نرخ تخریب شبکه‌ی شیشه و زیست‌فعالی آن‌ها افزایش می‌یابد ([Kesse et al., 2020](#); [Coleman et al., 2007](#)). ضمن اینکه شبکه‌ی سیلیکاتی و فسفاتی در ساختار شیشه‌های زیست‌فعال به ترتیب از واحدهای چهاروجهی SiO_4 و PO_4 تشکیل شده‌اند که افزودن CaO به ترکیب شیمیایی آن‌ها به شکست پیوندهای مذکور، کاهش استحکام شبکه‌ی شیشه‌ها و به تبع آن افزایش تخریب‌پذیری آن‌ها منجر می‌شود. علاوه بر این، از میزان توزیع Q^n برای توصیف کمی بهتر واحدهای ساختاری چهاروجهی و شبکه‌ی زیست‌فعال استفاده می‌شود که، در آن، n به معنای تعداد اکسیژن‌هایی است که با چهاروجهی‌های اطراف خود اتصالات Si-O-Si (در شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی سیلیکاتی) و P-O-P (در شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی فسفاتی) برقرار می‌کنند. بنابراین، کاهش توزیع مقدار n در ساختار شیشه‌ی زیست‌فعال حاکی از خواص زیستی مطلوب شیشه است که آن را به گزینه‌ی مناسبی برای استفاده در کاربردهای درمانی مهندسی بافت تبدیل می‌کند ([Du & Cormack, 2022](#)). ضمن اینکه ساختار و خواص شیشه‌های زیست‌فعال، که توسط روش‌های مختلفی نظیر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۶ بررسی شده است، امکان مطالعه‌ی دقیق در مقیاس اتمی و بررسی خواص شیشه‌های زیست‌فعال در شرایط زیستی مختلف

شیشه‌های زیست‌فعال^۱ به‌عنوان یکی از مهم‌ترین مواد زیستی در حوزه‌ی مهندسی بافت^۲ هستند که به دلیل قابلیت برقراری برهم‌کنش با محیط بدن، تحریک رشد سلولی با رهایش یون‌های درمانی و تشکیل سریع لایه‌ی هیدروکسی‌آپاتایت^۳ بر روی سطح خود در ترمیم بافت‌های سخت نظیر استخوان و دندان به‌طور گسترده بررسی و استفاده شده‌اند. همچنین، در دهه‌های اخیر، شیشه‌های زیست‌فعال، علاوه بر کاربرد در مهندسی بافت سخت، در ترمیم بافت‌های نرم نیز استفاده شده‌اند ([Agrawal & Patel, 2025](#); [Borhan & Esmailzadeh, 2023](#); [Jafari et al., 2022](#); [Majumdar et al., 2021](#); [Ren et al., 2025](#); [Upadhyay et al., 2024](#)). ضمن اینکه شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی سیلیکاتی^۴، به دلیل توانایی بالقوه در تشکیل سریع لایه‌ی هیدروکسی‌آپاتایت، پس از قرارگیری در محلول شبیه‌سازی شده‌ی بدن و برقراری پیوندی مستحکم با بافت استخوانی، یکی از گزینه‌های ایمن در کاربردهای درمانی مهندسی بافت استخوان هستند. علاوه بر این، بهبود خواص مکانیکی و کنترل نرخ تخریب شبکه‌ی شیشه‌های زیست‌فعال یکی از چالش‌های مهم در سنتز آن‌ها است که این امر به ایجاد نوآوری در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال به‌منظور ارتقای خواص منحصربه‌فرد آن‌ها منجر شده است ([Jones, 2013](#); [Arango-Ospina & Boccaccini, 2022](#); [Madival et al., 2025](#); [Sabree et al., 2021](#)). این در حالی است که شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی فسفاتی^۵، به دلیل وجود مقادیر بالای اکسید فسفر در ترکیب شیمیایی آن‌ها، نرخ انحلال بالاتری از شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی سیلیکاتی دارند و با داشتن ترکیب شیمیایی مشابه به بافت استخوانی، در کاربردهای مهندسی بافت سخت بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. از این رو، شیشه‌های زیست‌فعال پایه‌ی فسفاتی، با داشتن خواص زیستی مذکور، گزینه‌ی مناسبی برای جایگزینی سریع با بافت بدن هستند. علاوه بر این، ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال امکان کنترل نرخ تخریب و رهایش یون‌ها از سطح آن‌ها را فراهم می‌کند که این امر تأثیر بسزایی در تحریک رشد سلولی و روند ترمیم بافت دارد ([Kasuga, 2022](#); [Upadhyay et al., 2024](#)).

1. Bioactive glasses
2. Tissue engineering
3. Hydroxyapatite
4. Silicate base bioactive glasses
5. Phosphate base bioactive glasses
6. Molecular dynamics simulation

بلندبرد^۲ محاسبه شد. ضمن اینکه معادله‌ی میدان نیروی مذکور در رابطه‌ی ۱ آورده شده است که، طبق آن، جمله‌ی اول مربوط به میدان نیروی بلندبرد کولن و جمله‌ی دوم و سوم مربوط به میدان نیروی باکینگهام کوتاه‌برد است. در این شبیه‌سازی، از ضرایب این میدان نیروی ترکیبی، که در پژوهش‌های اخیر به کار گرفته شد، استفاده شد که در جدول ۱ ارائه شده است (Sun et al., 2024; Du & Xiang, 2012).

$$U_{ij}(r) = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + A_{ij} \exp(-B_{ij} r_{ij}) - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} \quad (1)$$

جدول ۱. ضرایب میدان نیروی مورد استفاده در شبیه‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال

50SiO ₂ -50CaO			
پیوند اتمی	A _{ij} (eV)	B _{ij} (1/Å)	C _{ij} (eV.Å ⁶)
Ca ^{+1.2} -Ca ^{+1.2}	۰/۰	۰/۰	۰/۰
Ca ^{+1.2} -O ^{-1.2}	۷۷۴۷/۱۸۳۴	۳/۹۶	۹۳/۱۰۹
Ca ^{+1.2} -Si ^{+2.4}	۰/۰	۰/۰	۰/۰
O ^{-1.2} -O ^{-1.2}	۲۰۲۹/۲۲۰۴	۲/۹	۱۹۲/۵۸
Si ^{+2.4} -O ^{-1.2}	۱۳۷۰۲/۹۰۵	۵/۱۶	۵۴/۶۸۱
Si ^{+2.4} -Si ^{+2.4}	۰/۰	۰/۰	۰/۰
50P ₂ O ₅ -50CaO			
Ca ⁺² -Ca ⁺²	۳۲۹۱۷/۵۱	۶/۲۵	۴/۳۴
Ca ⁺² -O ⁻²	۷۱۸۰۸۸/۶۳	۶/۰۶	۸/۶۷
Ca ⁺² -P ⁺⁵	۱۶۴۵۸۵/۷۶	۱۲/۵۰	۰/۰
O ⁻² -O ⁻²	۱۴۹۷۵۹۴/۳۲	۵/۸۸	۱۷/۳۵
P ⁺⁵ -O ⁻²	۱۸۴۷/۶۶	۳/۴۵	۰/۰
P ⁺⁵ -P ⁺⁵	۰/۰	۰/۰	۰/۰

۲-۲- روش شبیه‌سازی

شبیه‌سازی دو شیشه‌ی زیست‌فعال پایه‌ی سیلیکاتی 50SiO₂-50CaO و شیشه‌ی زیست‌فعال پایه‌ی فسفاتی 50P₂O₅-50CaO با استفاده از نرم‌افزار لمپس^۸، نسخه‌ی 2 Feb 2025، انجام شد و از روش الگوریتم سرعت ورلت^۹ به‌منظور انتگرال‌گیری عددی معادله‌ی حرکت^{۱۰} با گام زمانی^{۱۱} ۱ (fs) استفاده شد که نام و ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال در جدول ۲ آورده شده است.

را فراهم می‌کند. علاوه‌براین، با استفاده از روش دینامیک مولکولی، تأثیر ترکیب شیمیایی در ساختار شیشه، تغییرات در نرخ انحلال آن‌ها به‌صورت دقیق ارزیابی می‌شود و این روش می‌تواند به‌عنوان ابزاری مناسب در طراحی و بهینه‌سازی ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال برای کاربردهای درمانی مهندسی بافت استفاده شود (Cormack & Du, 2001; Tilocca, 2009a; Hollingsworth & Dror, 2018;). همچنین، طبق مطالعات پیشین، اکثر شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی بر روی شیشه‌ی زیست‌فعال 45S5 و شیشه‌های زیست‌فعال سه‌جزئی پایه‌ی سیلیکاتی انجام شده است و در مطالعات کمی شیشه‌های زیست‌فعال دوجزئی بررسی شده است که، طبق آن، نیاز به مطالعه و مقایسه‌ی خواص ساختاری شیشه‌های زیست‌فعال دوجزئی پایه‌ی سیلیکاتی و فسفاتی بیش‌ازپیش احساس می‌شود (Malavasi et al, 2013; Tilocca, 2009a; Lu et al, 2023; Soorani et al, 2023). از این‌رو، در این پژوهش، به بررسی تفاوت‌های ساختاری کوتاه‌برد، میان‌برد و بلندبرد و نیز تأثیر آن‌ها در خواص زیستی شیشه‌ی زیست‌فعال پایه‌ی سیلیکاتی 50SiO₂-50CaO و شیشه‌ی زیست‌فعال پایه‌ی فسفاتی 50P₂O₅-50CaO با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخته شد و نتایج آن با نتایج تجربی حاصل از بررسی شیمی یونی محلول شبیه‌سازی‌شده‌ی بدن مقایسه و صحت‌سنجی شد.

۲- مواد و روش تحقیق

۲-۱- میدان نیروی مورد استفاده در شبیه‌سازی

استفاده از میدان نیروی مناسب تأثیر بسیاری در صحت نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی شیشه‌های زیست‌فعال نظیر اندازه‌ی پیوند^۲، ساختار و خواص آن‌ها دارد. همچنین، میدان نیروی استفاده‌شده در شبیه‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال مورد بررسی در این پژوهش ترکیب دو نوع میدان نیروی بلندبرد کولن^۳ و نیروی باکینگهام کوتاه‌برد^۴ است که به کمک آن نیروی کوتاه‌برد کووالانسی^۵ و واندروالسی^۶ و میدان نیروی کولن

1. Force field
2. Bond length
3. Long-range coulomb
4. Short-range buckingham
5. Covalent
6. Van der waals
7. Long-range coulomb
8. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Siulation (LAMMPS)
9. Velocity-verlet algorithm
10. Equation of motion
11. Time step

جدول ۲. نام و ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال بر حسب درصد مولی

نام شیشه	ترکیب شیمیایی	SiO ₂	P ₂ O ₅	CaO
50S	50SiO ₂ -50CaO	۵۰	-	۵۰
50P	50P ₂ O ₅ -50CaO	-	۵۰	۵۰

از این رو، اتم‌ها به صورت تصادفی در جعبه‌ی شبیه‌سازی مکعبی با ابعاد ۲/۵ نانومتر قرار گرفتند که تعداد آن‌ها به منظور ایجاد ترکیب شیمیایی شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO در جدول ۳ ارائه شده است. همچنین، برای تطابق خصوصیات حاصل از شبیه‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال به ابعاد بزرگ‌تر، از شرایط مرزی دوره‌ای^۱ استفاده شد. ضمن اینکه شرایط مرزی دوره‌ای به منظور حذف برهم‌کنش‌های سطحی و تطبیق نتایج حاصل برای توصیف نمونه‌ی شیشه‌ی زیست‌فعال به ابعاد بزرگ‌تر استفاده شد. به عبارت دیگر، در صورت خروج یک اتم از جعبه‌ی شبیه‌سازی، همان اتم، از سمت دیگر جعبه، به درون جعبه وارد می‌شود و محاسبه‌ی برهم‌کنش‌های اتم‌های نزدیک به مرزهای جعبه‌ی شبیه‌سازی با سمت دیگر آن به شبیه‌سازی شرایط ساختار درونی شیشه‌های زیست‌فعال منجر می‌شود. علاوه بر این، نیروی بلندبرد کولنی با روش جمع اوالد^۲ و خطای نسبی^۳ ۱۰^{-۶} محاسبه شد.

جدول ۳. تعداد اتم‌ها در جعبه‌ی شبیه‌سازی به منظور ایجاد ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال

ترکیب شیمیایی	P	Si	O	Ca
50SiO ₂ -50CaO	-	۴۰۰	۹۰۰	۱۰۰
50P ₂ O ₅ -50CaO	۳۱۱	-	۹۳۴	۱۵۶

برای مدل‌سازی ترکیب شیمیایی شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO به روش ذوبی-آب‌دهی^۳، ابتدا ساختار اولیه به مدت ۵ (ps) تحت هنگرد کانونی کوچک (ذرات، حجم و انرژی ثابت)^۴ در دمای (K) ۳۰۰ قرار گرفت تا

به تعادل دمایی برسد. سپس، جعبه‌ی شبیه‌سازی با هنگرد کانونی (ذرات، حجم و دما ثابت)^۵ تا دمای (K) ۵۰۰۰ گرم شد تا ترکیب شیمیایی ذوب شود. همچنین، با قرارگیری ترکیب شیمیایی در این دما به مدت (ps) ۱۵۰، ساختار حاصل به منظور رسیدن به شرایط تعادلی، پس از قرارگیری تصادفی اتم‌ها از بین رفت و پس از آن تا دمای (K) ۳۰۰ با سرعت ۱ K/ps سرد شد.

ضمن اینکه جعبه‌ی شبیه‌سازی یک بار در دمای (K) ۳۰۰۰ تحت هنگرد کانونی بزرگ (ذرات، فشار و دما ثابت)^۶ به مدت (ps) ۱۰۰ و یک بار در دمای (K) ۳۰۰ به مدت (ps) ۱۰۰ قرار گرفت تا چگالی تعادلی حاصل شود. علاوه بر این، ترکیب شیمیایی به منظور ایجاد چگالی تعادلی در طول زمان از دمای (K) ۳۰۰۰ تا (K) ۳۰۰ تحت هنگرد کانونی بزرگ سرد شد و سپس جعبه‌ی شبیه‌سازی، به منظور انجام آزمون‌های مشخصه‌یابی‌ها، تحت هنگرد کانونی کوچک به مدت (ps) ۲۰ قرار گرفت.

۲-۳- آزمون‌های مشخصه‌یابی

از تابع توزیع پیوندی^۷ و تابع توزیع زاویه‌ای^۸ برای اندازه‌گیری توزیع پیوندها، زاویه‌ی بین پیوندی^۹ و به تبع آن تعیین ساختار کوتاه‌برد استفاده شد. همچنین، با استفاده از انتگرال تابع توزیع پیوندی، میانگین عدد هم‌آرایی^{۱۰} محاسبه شد. ضمن اینکه، با محاسبه آماری اتم‌ها، عدد هم‌آرایی هر اتم اندازه‌گیری شد و مشخصه‌های ساختاری شامل توزیع اکسیژن‌های پلزن^{۱۱} و غیرپلزن، توزیع Qⁿها و نیز توزیع اتم‌های Ca در همسایگی Qⁿها بررسی شد.

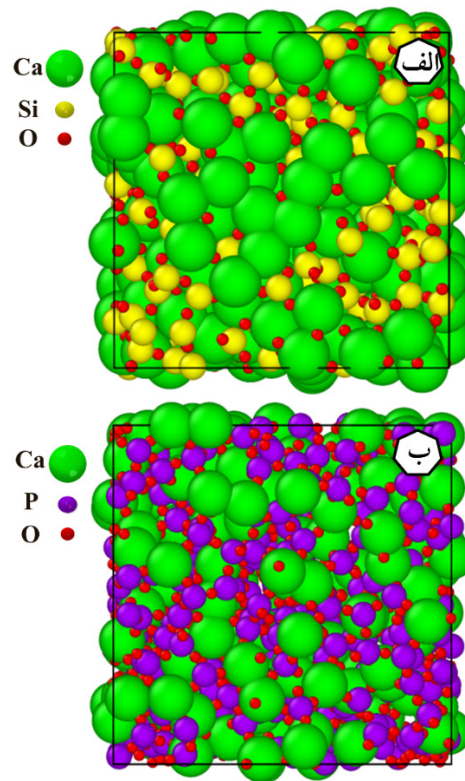
علاوه بر این، چگالی ترکیب شیمیایی شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO محاسبه شد و، پس از صحت‌سنجی مقادیر گزارش شده، ارتباط ساختار و زیست‌فعالی آن‌ها با یکدیگر مقایسه و بررسی شد. همچنین، میزان رهایش یون‌های کلسیم از سطح نمونه‌های شیشه‌ی زیست‌فعال و مقدار pH محلول شبیه‌سازی شده‌ی بدن ارزیابی شد.

1. Periodic boundary condition
2. Ewald summation
3. Melt-Quench
4. Micro-canonical ensemble (NVE)
5. Canonical ensemble (NVT)
6. Isothermal-Isobaric ensemble (NPT)
7. Pair distribution function
8. Angle distribution function
9. Interbond angle
10. Coordination number
11. Bridging oxygen

۳- نتایج و بحث

۳-۱- ساختار کوتاه‌دامنه^۱

ساختار نهایی حاصل از شبیه‌سازی شیشه‌ی زیست‌فعال $50P_2O_5-50CaO$ و $50SiO_2-50CaO$ در شکل ۱ ارائه شده است که، در آن، نسبت اندازه‌ی اتم‌های کلسیم، اکسیژن، سیلیسیم و فسفر به یکدیگر مطابق با اندازه و نسبت واقعی آن‌ها در نظر گرفته شد. همچنین، طبق شکل ۱ اتم‌های کلسیم، اکسیژن، سیلیسیم و فسفر به ترتیب با رنگ‌های سبز، قرمز، زرد و بنفش مشخص شده است.

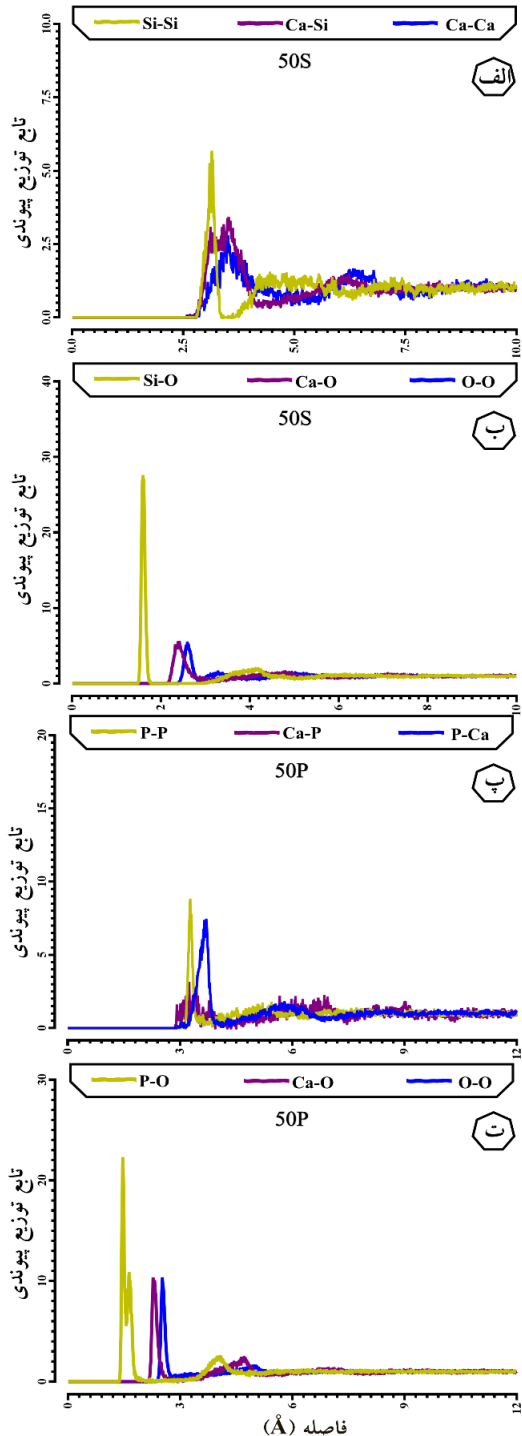


شکل ۱. ساختار شیشه‌ی زیست‌فعال الف) 50S و ب) 50P

از تابع توزیع پیوندی و زاویه‌ای برای محاسبه‌ی اندازه‌ی پیوندها و زوایای بین‌پیوندی در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال استفاده شد که تابع توزیع پیوندی برای پیوندهای $Si-Si$ ، $Ca-Si$ ، $Ca-Ca$ ، $Si-O$ ، $Ca-O$ و $O-O$ در ترکیب شیمیایی شیشه‌ی زیست‌فعال $50SiO_2-50CaO$ و برای پیوندهای $P-P$ ، $P-O$ ، $P-Ca$ ، $Ca-P$ ، $Ca-O$ و $O-O$ در ترکیب شیمیایی شیشه‌ی زیست‌فعال $50P_2O_5-50CaO$ در شکل ۲ آورده شده است.

همچنین، طبق نتایج حاصل از تابع توزیع پیوندی، میانگین اندازه‌ی پیوند $Si-O$ ، $Ca-O$ و $O-O$ به ترتیب (\AA) $1/605$ ، $2/48$ و $2/6$ محاسبه شد. ضمن اینکه توزیع فاصله‌ی اتم‌های کاتیون

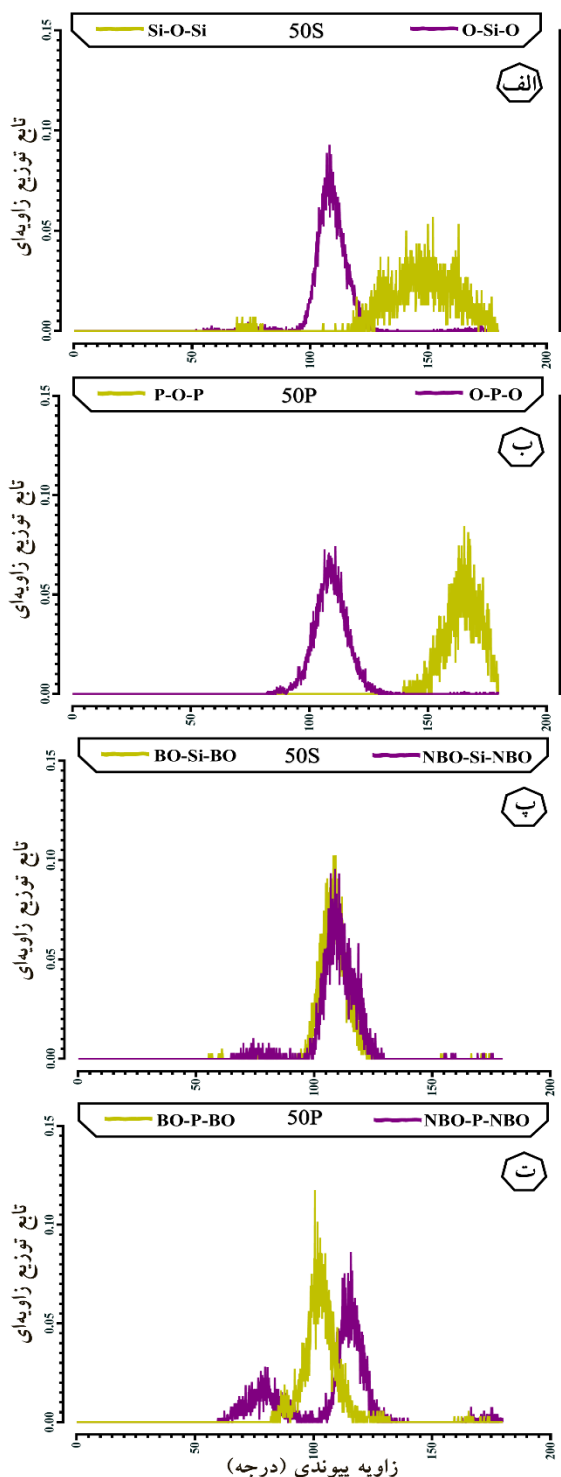
از یکدیگر در شکل ۲ (الف، پ) بررسی شد و برای محاسبه‌ی دقیق‌تر اندازه‌ی پیوندهای $Si-O$ و $P-O$ ، اندازه‌ی پیوند $Si-BO$ ، $Si-NBO$ و $P-BO$ و $P-NBO$ به ترتیب برابر با پیوند سیلیسیم با اکسیژن پل‌زن و غیرپل‌زن و پیوند اتم فسفر با اکسیژن پل‌زن و غیرپل‌زن اندازه‌گیری شد که نتایج حاصل از آن در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل ۲. تابع توزیع پیوندی الف-ب) شیشه‌ی زیست‌فعال 50S

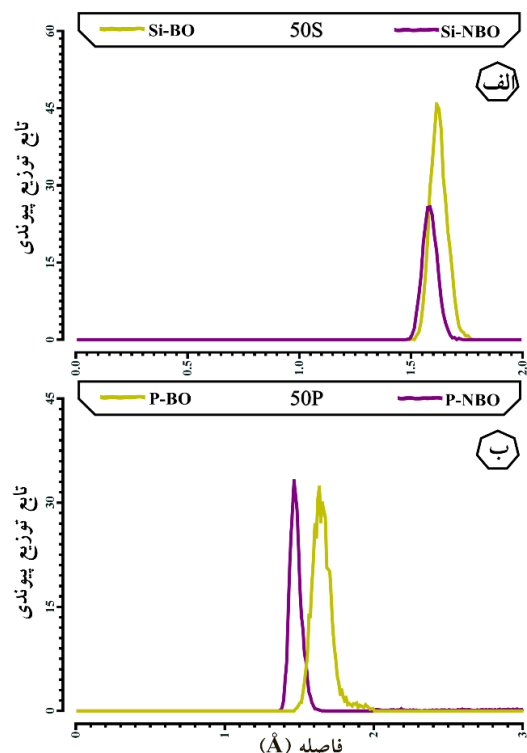
پ-ت) شیشه‌ی زیست‌فعال 50P

این زاویه برابر با ۱۰۹/۰۵ درجه و برای زوایای پیوندی BO-P- NBO و BO نیز به ترتیب برابر با ۱۰۳/۱۴ و ۱۰۶/۳۶ درجه اندازه‌گیری شد.



شکل ۴. تابع توزیع زاویه‌ای الف-پ) شیشه‌ی زیست‌فعال 50S، ب-ت) شیشه‌ی زیست‌فعال 50P

طبق نتایج حاصل از تابع توزیع زاویه‌ای، کاهش اندازه‌ی پیوندهای Si-NBO و P-NBO به کاهش فاصله‌ی اکسیژن‌های غیرپل‌زن نسبت به یکدیگر، ایجاد نیروی دافعه‌ی الکتروستاتیکی

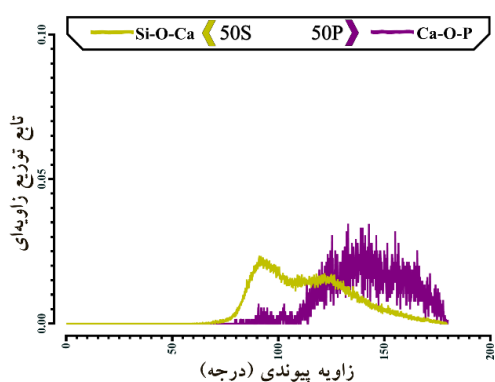


شکل ۳. تابع توزیع پیوندی شیشه‌های زیست‌فعال برای پیوند الف) سیلیسیم و ب) فسفر با اکسیژن پل‌زن و غیرپل‌زن

با توجه به نتایج حاصل از تابع توزیع پیوندی، میانگین اندازه‌ی پیوندهای Si-BO و Si-NBO به ترتیب برابر با ۱/۶۲ و ۱/۵۸ و برای پیوندهای P-BO و P-NBO به ترتیب برابر با ۱/۶۵۵ و ۱/۴۷۶ محاسبه شد. به عبارت دیگر، تأثیر جاذبه‌ی Si-O و P-O به دلیل قرارگیری اکسیژن پل‌زن در بین دو کاتیون کاهش می‌یابد و به تبع آن اندازه‌ی پیوند افزایش می‌یابد. همچنین، پیوند P-NBO، به دلیل وجود یک پیوند دوگانه P=O، بیشتر بوده و در نتیجه پیوند بسیار قوی‌تری از P-NBO دارد که به افزایش اختلاف در اندازه‌ی P-BO و P-NBO در مقایسه با Si-BO و Si-NBO منجر می‌شود. در شکل ۴ (الف) و ۴ (ب)، تابع توزیع زاویه‌ای برای زوایای Si-O-Si، O-Si-O، BO-Si-BO و NBO-Si-NBO در شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO ارائه شده است. همچنین، در شکل ۴ (ب-ت)، تابع توزیع زاویه‌ای برای زوایای P-O-P، O-P-O، BO-P-BO و NBO-P-BO در شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO ارائه شده است. ضمن اینکه، طبق نتایج حاصل از تابع توزیع زاویه‌ای، میانگین اندازه‌ی زاویه‌ی O-Si-O برابر با ۱۰۹/۰۲ درجه و میانگین اندازه‌ی زاویه‌ی BO-Si-BO و NBO-Si-NBO نیز به ترتیب برابر با ۱۰۸/۳۶ و ۱۰۹/۸۲ محاسبه شد. علاوه بر این، با بررسی زوایای پیوندی O-P-O، میانگین اندازه‌ی زاویه‌ی پیوندی

شده است. ضمن اینکه اندازه‌ی پیوند Si-O در مطالعه‌ی تیلوکا و همکاران (Tilocca et al., 2007) در محدوده‌ی (Å) ۱/۵۹ تا ۱/۶۲ گزارش شده است و اندازه‌ی زاویه‌ی پیوندی O-Ca-O محاسبه‌شده در پژوهش آن‌ها نیز با نتایج حاصل از این پژوهش مطابقت دارد.

علاوه‌براین، در پژوهشی دیگر، با استفاده از مکانیک کوانتوم، اندازه‌ی پیوندهای Si-O برابر با (Å) ۱/۶۱ گزارش شد. بنابراین، مقدار اندازه‌ی پیوند P-O در شیشه‌های زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO نیز در تطابق با مطالعات پیشین و نتایج آزمایشگاهی است (Christie et al., 2017; Du et al., 2021; Gamoke et al., 2009).



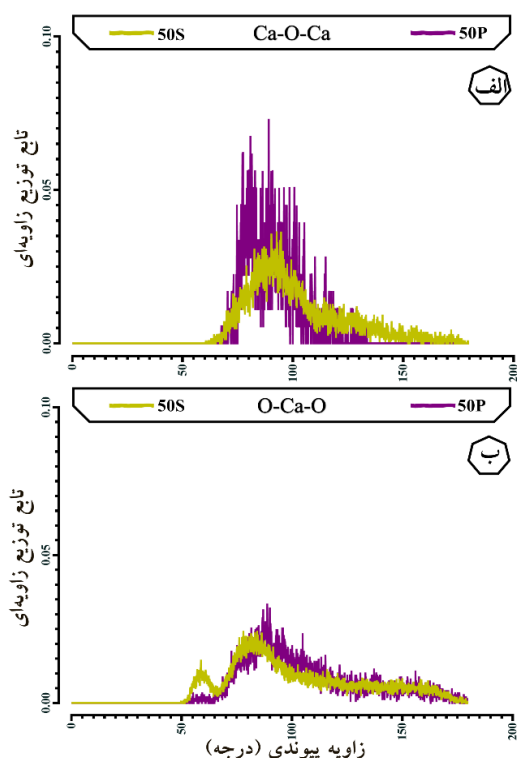
شکل ۶. زاویه‌ی پیوندی Si-O-Ca و P-O-Ca برای شیشه‌های زیست‌فعال 50S و 50P

۳-۱- ساختار میان‌دامنه^۱

۳-۲-۱- تعیین عدد هم‌آرایی

عدد هم‌آرایی اتم‌های Si و P در مقایسه با اتم‌های O در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO برابر با ۴ محاسبه شد که مطابق با زوایای پیوندی O-Si-O و O-P-O است و وجود ساختارهای موضعی چهاروجهی در هر دو ترکیب شیشه‌ی زیست‌فعال تأیید شد. همچنین، توزیع عدد هم‌آرایی اتم‌های Ca در مقایسه با اتم‌های O در شیشه‌های زیست‌فعال در شکل ۷ نشان داده شده است که، طبق آن، بیشترین توزیع در شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO برابر با ۵ و در بازه‌ی ۳-۷ و برای شیشه‌ی زیست‌فعال 50CaO برابر با ۶ و در بازه‌ی ۴-۹ است و این نتایج با نتایج حاصل از مطالعه‌ی تیلوکا و همکاران مطابقت دارد (Tilocca et al., 2007).

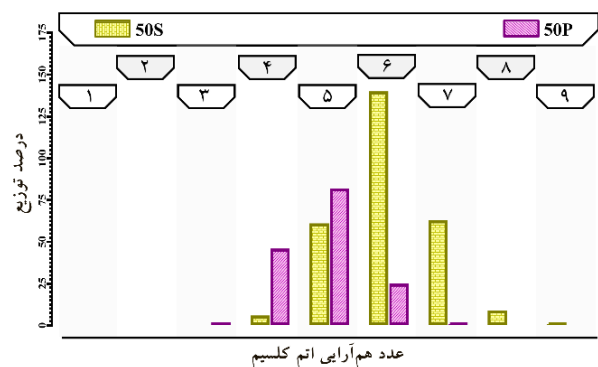
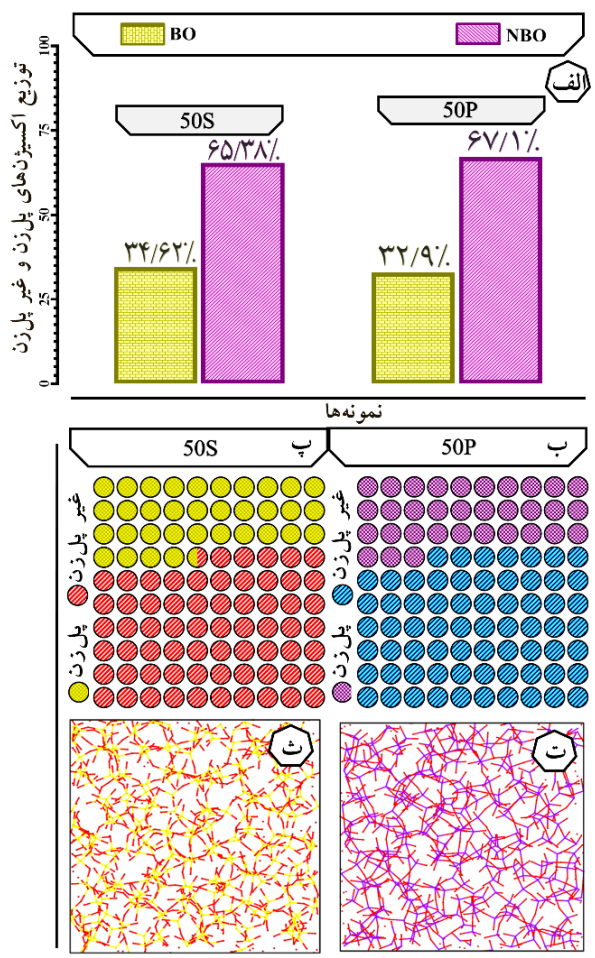
بین آن‌ها و به‌تبع آن افزایش زاویه‌ی NBO-Si-NBO و NBO-P-NBO در مقایسه با BO-Si-BO و BO-P-BO منجر شد. همچنین، میانگین اندازه‌ی زاویه‌ی پیوندی Si-O-Si و P-O-P نیز به‌ترتیب برابر ۱۴۷/۰۵ و ۱۶۴/۶۷ درجه محاسبه شد که بیانگر زاویه‌ی بین پیوندهای کاتیون‌ها با اکسیژن‌های پل‌زن است. ضمن اینکه زاویه‌ی پیوندی Ca-O-Ca و O-Ca-O برای شیشه‌های زیست‌فعال در شکل ۵ آورده شده است که، طبق آن، توزیع اندازه‌ی زاویه‌ی پیوندی Ca-O-Ca در هر دو شیشه‌ی زیست‌فعال در محدوده‌ی ۶۰-۱۸۰ درجه با احتمال حضور بیشتر در زاویه‌ی ۹۰ درجه گزارش شد.



شکل ۵. زاویه‌ی پیوندی الف) Ca-O-Ca و ب) O-Ca-O برای شیشه‌های زیست‌فعال 50S و 50P

طبق اندازه‌ی زاویه‌ی پیوندی O-Ca-O، وجود دو پیک در محدوده‌ی ۶۰ و ۸۵ درجه در شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و وجود یک پیک قوی در زاویه‌ی ۹۰ درجه و پیک ضعیف در محدوده‌ی ۶۰ درجه برای شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO تأیید شد. در شکل ۶، توزیع اندازه‌ی زاویه‌ی پیوندی برای زوایای Si-O-Ca و P-O-Ca در شیشه‌های زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO، به‌منظور بررسی نحوه‌ی قرارگیری Si، P و Ca نسبت به یکدیگر ارائه

۲۳/۹ و ۶/۴ درصد و برای شیشه‌ی زیست‌فعال $50P_2O_5-50CaO$ برابر با ۰/۶۵، ۲۱/۲۹، ۵۹/۰۳، ۱۹/۰۳ و ۰/۰ درصد محاسبه شد.



شکل ۷. توزیع عدد هم‌آرایی اتم‌های Ca در مقایسه با اتم‌های O در شیشه‌های زیست‌فعال 50S و 50P

۳-۲-۲- تعیین توزیع اکسیژن پلزن و غیرپلزن

در شکل ۸ (الف-پ)، توزیع اکسیژن‌های پلزن و غیرپلزن در ترکیب شیمیایی شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2-50CaO$ و $50P_2O_5-50CaO$ ارائه شده است که، طبق آن، توزیع اکسیژن‌های پلزن و غیرپلزن در شیشه‌ی زیست‌فعال 50S به ترتیب برابر با ۳۴/۶۲ و ۶۵/۳۸ درصد و در شیشه‌ی زیست‌فعال 50P به ترتیب برابر با ۳۲/۹ و ۶۷/۱ درصد گزارش شد. همچنین، پیوندهای اکسیژن‌های پلزن با Si و P در شیشه‌ی زیست‌فعال 50S و 50P به ترتیب در شکل ۸ (ت، ث) نشان داده شده است.

ضمن اینکه، طبق نتایج حاصل از توزیع اکسیژن‌های پلزن و غیرپلزن، افزایش اکسیژن‌های غیرپلزن به کاهش شبکه‌سازی در شیشه‌ی زیست‌فعال منجر می‌شود که، به علت انرژی بالاتر از حالت با شبکه‌ی کامل، روند تخریب شبکه‌ی شیشه تسهیل می‌شود (Tilocca, 2009a).

از این رو، پایداری شیمیایی کمتر و قابلیت تخریب‌پذیری بالاتر شیشه‌ی زیست‌فعال $50P_2O_5-50CaO$ در مقایسه با شیشه‌ی زیست‌فعال $50SiO_2-50CaO$ تأیید شد.

۳-۲-۳- تعیین توزیع Q^n

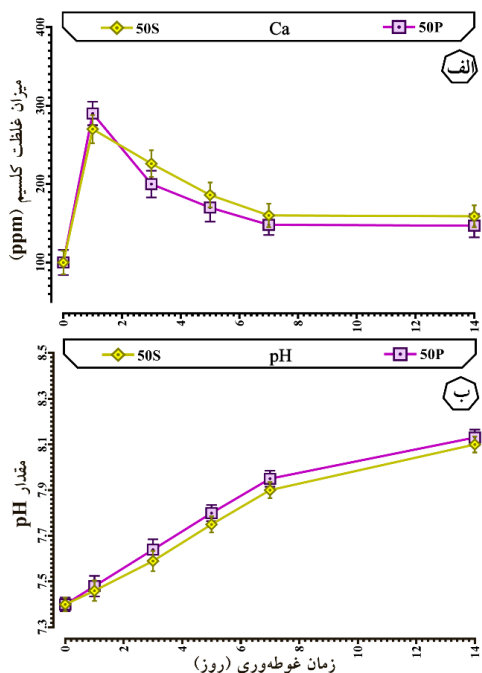
توزیع Q^n حاکی از ساختارهای چندوجهی متصل‌به‌هم از طریق اکسیژن‌های پلزن است که، در آن، n تعداد اکسیژن‌های پلزن متصل به اتم کاتیون شبکه‌ساز است (Du & Cormack, 2019). همچنین، در شکل ۹ (الف)، توزیع Q^n در شیشه‌های زیست‌فعال $50SiO_2-50CaO$ و $50P_2O_5-50CaO$ نشان داده شده است که، طبق آن، در شیشه‌ی زیست‌فعال $50SiO_2-50CaO$ ، Q^n های با مقادیر n به ترتیب از ۴-۰ برابر با ۴/۳، ۲۲/۵، ۴۲/۹،

شکل ۸. الف-پ) توزیع اکسیژن‌های پلزن و غیرپلزن، پیوندهای اکسیژن‌های پلزن با P و Si (ث) و T) در شیشه‌های زیست‌فعال 50S و 50P

ضمن اینکه نبود Q^4 در ترکیب شیمیایی شیشه‌ی زیست‌فعال $50P_2O_5-50CaO$ وجود یک دوگانه بین P و O را نشان می‌دهد که اکسیژن این پیوند با چهاروجهی‌های اطراف خود ارتباط برقرار نمی‌کند. از این رو، چهاروجهی‌ها در ترکیب شیمیایی شیشه‌ی زیست‌فعال $50P_2O_5-50CaO$ و $50SiO_2-50CaO$ و اتصالات آن‌ها با یکدیگر به ترتیب در شکل ۹ (ب)، ارائه شده است.

علاوه بر این، افزایش توزیع Q^2 در شیشه‌های زیست‌فعال به افزایش تخریب‌پذیری و رهایش یون‌ها از سطح شیشه‌ها منجر می‌شود که، طبق نتایج حاصل از این پژوهش، شیشه‌ی زیست‌فعال $50P_2O_5-50CaO$ تخریب‌پذیری و رهایش یون بالاتری دارد (Tilocca, 2009a).

مورد بررسی، به دلیل انحلال و تخریب شبکه‌ی شیشه افزایش یافت و، پس از آن تا روز چهاردهم غوطه‌وری، نرخ رهایش یون‌های کلسیم از سطح نمونه‌ها با تقویت شبکه‌ی شیشه کاهش یافت (O'Donnell et al., 2009). همچنین، مقدار غلظت یون‌های کلسیم در روز یک غوطه‌وری در محلول شبیه‌سازی‌شده‌ی بدن در شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO به ترتیب 270 ± 15 و 290 ± 15 ppm گزارش شد که، طبق نتایج حاصل از توزیع اکسیژن‌های پل زن و غیرپل زن، غلظت بالاتر یون‌های کلسیم در شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO از 50SiO₂-50CaO، به دلیل توزیع بالاتر اکسیژن‌های غیرپل زن در شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO است (Tilocca, 2009a). ضمن اینکه، با توجه به شکل ۱۰ (ب)، میزان pH نمونه‌های شیشه‌ی زیست‌فعال تا روز چهاردهم غوطه‌وری به دلیل واکنش‌های سطحی در سطح نمونه‌ها و رهایش یون‌ها از سطح آن‌ها افزایش یافت (Liu et al., 2016). علاوه‌براین، میزان بالاتری از pH در شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO از 50SiO₂-50CaO گزارش شد که در تطابق با نتایج حاصل از توزیع Qⁿ در نمونه‌های مورد بررسی است و، طبق آن، افزایش توزیع Q² در شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO در مقایسه با 50SiO₂-50CaO حاکی از افزایش نرخ تخریب‌پذیری و رهایش یون‌ها از سطح شیشه‌ی زیست‌فعال است (Tilocca, 2009a).



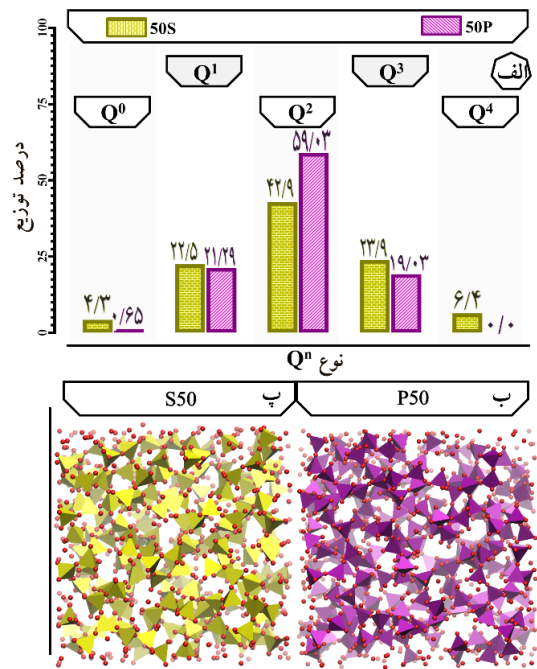
شکل ۱۰. الف) غلظت یون‌های کلسیم و ب) مقدار pH در شیشه‌های زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO

۳-۳- چگالی

با استفاده از هنگرد کانونی بزرگ، چگالی تعادلی شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO محاسبه شد که، طبق آن، چگالی شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO به ترتیب ۲/۸۱ و ۲/۱۵ g/cm³ گزارش شد. همچنین، چگالی پایین‌تر شیشه‌ی زیست‌فعال 50P₂O₅-50CaO در مقایسه با شیشه‌ی زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO، به دلیل وجود پیوند دوگانه P=O است که، طبق نتایج حاصل از توزیع Qⁿ نیز، میزان Q⁴ برابر با صفر گزارش شد. به عبارت دیگر، پایداری کافی اکسیژن پیوندی با پیوند دوگانه و نبود اتمی در شعاع همسایگی خود در سمت دیگر آن به نبود اتم‌ها در محدوده‌ی نزدیک آن منجر می‌شود. بنابراین، قرارگیری اتم‌ها در فضای بازتری در ساختار به افزایش حجم شیشه‌ی زیست‌فعال منجر می‌شود و، با وجود جرم مولی بالاتر P₂O₅ از SiO₂، چگالی کمتری دارد که نتایج مذکور با گزارش دویدار (Doweidar, 2009) تطابق دارد.

۳-۴- شیمی یونی محلول شبیه‌سازی‌شده‌ی بدن

غلظت یون‌های کلسیم و مقدار pH شیشه‌های زیست‌فعال 50SiO₂-50CaO و 50P₂O₅-50CaO در شکل ۱۰ ارائه شده است. طبق شکل ۱۰ (الف)، غلظت یون‌های کلسیم تا روز اول غوطه‌وری در محلول شبیه‌سازی‌شده‌ی بدن در هر دو نمونه‌ی



شکل ۹. الف) توزیع Qⁿ ساختار چهاروجهی‌ها و اتصالات آن‌ها با یکدیگر در شیشه‌ی زیست‌فعال (ب) 50P و (پ) 50S

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با استفاده از نرم‌افزار لمپس، شبیه‌سازی شیشه‌های زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ و $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ به روش ذوبی-آب‌دهی انجام شد. همچنین، اندازه‌ی پیوندهای Si-O، Si-BO و Si-NBO در شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ به ترتیب برابر با 1.605 ، 1.62 و 1.58 Å و اندازه‌ی پیوندهای P-BO و P-NBO در شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ به ترتیب برابر با 1.655 و 1.476 Å گزارش شد. ضمن اینکه اندازه‌ی زاویه‌ی پیوندی در شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ برای زوایای O-Si-O، BO-Si-BO، NBO-Si-NBO و Si-O-Si به ترتیب برابر با $109/02$ ، $108/36$ ، $109/82$ درجه و برای شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ زوایای O-P-O، BO-P-BO و NBO-P-NBO به ترتیب برابر با $103/14$ ، $109/05$ و $106/36$ درجه محاسبه شد. علاوه‌براین، طبق نتایج، کاتیون‌های پیوندی با اکسیژن‌های پل‌زن اندازه‌ی پیوند کوتاه‌تری از کاتیون‌های پیوندی با اکسیژن‌های غیرپل‌زن دارند که این امر به افزایش زاویه‌ی BO-P-BO و BO-Si-BO در مقایسه با NBO-P-NBO و NBO-Si-NBO منجر می‌شود. همچنین، مقادیر عدد هم‌آرایی اتم‌های P و Si در مقایسه با اتم O برابر با ۴ به دست آمد و وجود ساختارهای چهاروجهی به صورت نامنظم در هر دو شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ و $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ با زوایای Si-O-Si و P-O-P در مقایسه با یکدیگر تأیید شد. ضمن اینکه توزیع اکسیژن‌های پل‌زن و غیرپل‌زن در شیشه‌های زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ به ترتیب $34/62$ و $65/38$ درصد و در شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ به ترتیب $32/9$ و $67/1$ درصد گزارش شد. علاوه‌براین، توزیع Q^n ها با مقادیر n به ترتیب از nهای ۴-۰ در شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ برابر با $4/3$ ، $22/5$ ، $42/9$ ، $23/9$ و $6/4$ درصد و برای شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ برابر با $0/65$ ، $21/29$ ، $59/03$ ، $19/03$ و $0/0$ درصد اندازه‌گیری شد. همچنین، مقادیر چگالی دو ترکیب شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ و 50CaO به ترتیب $2/15$ و $2/81$ g/cm³ محاسبه شد. ضمن اینکه نرخ بالاتر رهایش یون‌های کلسیم از سطح شیشه و میزان بالاتر pH محلول شبیه‌سازی‌شده‌ی بدن در شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ تأیید شد. از این رو، طبق نتایج، شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{P}_2\text{O}_5\text{-}50\text{CaO}$ به دلیل داشتن

مقادیر اکسیژن غیرپل‌زن و Q^2 بالاتر، تخریب‌پذیری بیشتری دارد که این امر به رهایش یون بیشتر در مقایسه با شیشه‌ی زیست‌فعال $50\text{SiO}_2\text{-}50\text{CaO}$ منجر می‌شود.

۵- سپاسگزاری

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

مراجع

1. Agrawal, R. P., & Patel, A. S. S. (2025). Applications of bioactive glass: A review. *Multidisciplinary Reviews*, 8(2), 2025038–2025038. <https://doi.org/10.31893/MULTIREV.2025038>
2. Arango-Ospina, M., & Boccaccini, A. R. (2022). Bioactive glasses and ceramics for tissue engineering. *Tissue Engineering Using Ceramics and Polymers*, 111–178. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820508-2.00019-2>
3. Borhan, S., & Esmailzadeh, J. (2023). The Effect of Bioactive Glass Synthesis Method on the Flowability and Structural Stability of the Injectable Pastes Prepared from It. *Advanced Materials and Technologies (JAM)*, 12(1), 1–15. [In Persian]. <https://doi.org/10.30501/JAMT.2023.376241.1259>
4. Brow, R. K. (2000). Review: the structure of simple phosphate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 263–264, 1–28. [https://doi.org/10.1016/S0022-3093\(99\)00620-1](https://doi.org/10.1016/S0022-3093(99)00620-1)
5. Christie, J. K., Ainsworth, R. I., Hernandez, S. E. R., & De Leeuw, N. H. (2017). Structures and properties of phosphate-based bioactive glasses from computer simulation: a review. *Journal of Materials Chemistry B*, 5(27), 5297–5306. <https://doi.org/10.1039/C7TB01236E>
6. Coleman, N. J., Bellantone, M., Nicholson, J. W., & Mendham, A. P. (2007). *Textural and structural properties of bioactive glasses in the system CaO-SiO₂*. http://www.ceramics-silikaty.cz/2007/2007_01_001.htm
7. Cormack, A. N., & Du, J. (2001). Molecular dynamics simulations of soda-lime-silicate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 293–295(1), 283–289. [https://doi.org/10.1016/S0022-3093\(01\)00831-6](https://doi.org/10.1016/S0022-3093(01)00831-6)
8. Doweidar, H. (2009). Density-structure correlations in Na₂O-CaO-P₂O₅-SiO₂ bioactive glasses. *Non-crystalline solids*, 355(9), 577–580. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2009.02.007>
9. Du, J., & Xiang, Y. (2012). Effect of strontium substitution on the structure, ionic diffusion and dynamic properties of 45S5 Bioactive glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 358(8), 1059–1071. <https://doi.org/10.1016/J.JNONCRY SOL.2011.12.114>
10. Du, J., & Cormack, A. N. (2019). Atomistic Simulations of Glasses. *Fundamentals and Applications. Atomistic Computer Simulations of Inorganic Glasses: Methodologies and Applications*, 1–530. <https://doi.org/10.1002/9781118939079>
11. Du, Y., Yuan, Y., Li, L., Long, M., Duan, H., & Chen, D. (2021). Insights into structure and properties of P₂O₅-based binary systems through molecular dynamics simulations. *Journal of Molecular Liquids*, 339, 116818. <https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2021.116818>
12. Du, J., & Cormack, A. N. (2022). Atomistic simulations of glasses. *John Wiley and Sons*. 10(5), 1-29. <https://doi.org/10.1002/9781118939079>
13. Fredholm, Y. C., Karpukhina, N., Brauer, D. S., Jones, J. R., Law, R. V., & Hill, R. G. (2012). Influence of strontium for calcium substitution in bioactive glasses on degradation, ion release and apatite formation. *Journal of The Royal Society Interface*, 9(70), 880–889. <https://doi.org/10.1098/RSIF.2011.0387>
14. Gamoke, B., Neff, D., & Simons, J. (2009). Nature of PO bonds in phosphates. *Physical Chemistry A*, 113(19), 5677–5684. <https://doi.org/10.1021/jp810014s>
15. Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Molecular Dynamics Simulation for All. *Neuron*, 99(6), 1129–1143. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011>

16. Jafari, N., Habashi, M. S., Hashemi, A., Shirazi, R., Tanideh, N., & Tamadon, A. (2022). Application of bioactive glasses in various dental fields. *Biomaterials Research*, 26(1). <https://doi.org/10.1186/s40824-022-00274-6>
17. Jones, J. R. (2013). Review of bioactive glass: from Hench to hybrids. *Acta Biomaterialia*, 9(1), 4457-4486. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2012.08.023>
18. Kasuga, T. (2022). Unique Nature of Phosphate and Borate Bioactive Glasses. *Phosphate and Borate Bioactive Glasses*, 1-9. <https://doi.org/10.1039/9781839164750-00001>
19. Kesse, X., Vichery, C., Jacobs, A., Descamps, S., & Nedelec, J. M. (2020). Unravelling the Impact of Calcium Content on the Bioactivity of Sol-Gel-Derived Bioactive Glass Nanoparticles. *ACS Applied Bio Materials*, 3(2), 1312-1320. <https://doi.org/10.1021/acsbm.0c00036>
20. Liu, J., Rawlinson, S. C., Hill, R. G., & Fortune, F. (2016). Strontium-substituted bioactive glasses *in vitro* osteogenic and antibacterial effects. *Dental Materials*, 32(3), 412-422. <https://doi.org/10.1016/j.dental.2015.12.013>
21. Lu, X., Deng, L., Huntley, C., Ren, M., Kuo, P. H., Thomas, T., & Du, J. (2018). Mixed network former effect on structure, physical properties, and bioactivity of 45S5 bioactive glasses: an integrated experimental and molecular dynamics simulation study. *Physical Chemistry B*, 122(9), 2564-2577. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b12127>
22. Madival, H., Rajiv, A., Muniraju, C., & Reddy, M. S. (2025). Advancements in Bioactive Glasses: A Comparison of Silicate, Borate, and Phosphate Network Based Materials. *Biomedical Materials & Devices* 2025, 1-21. <https://doi.org/10.1007/S44174-025-00297-2>
23. Majumdar, S., Gupta, S., & Krishnamurthy, S. (2021). Multifarious applications of bioactive glasses in soft tissue engineering. *Biomaterials Science*, 9(24), 8111-8147. <https://doi.org/10.1039/D1BM01104A>
24. Malavasi, G., Pedone, A., & Menziani, M. C. (2013). Study of the structural role of gallium and aluminum in 45S5 bioactive glasses by molecular dynamics simulations. *Physical Chemistry B*, 117(15), 4142-4150. <https://doi.org/10.1021/jp400721g>
25. O'Donnell, M. D., Watts, S. J., Hill, R. G., & Law, R. V. (2009). The effect of phosphate content on the bioactivity of soda-lime-phosphosilicate glasses. *Materials Science: Materials in Medicine*, 20(25), 1611-1618. <https://doi.org/10.1007/s10856-009-3732-2>
26. Ren, Z., Tang, S., Wang, J., Lv, S., Zheng, K., Xu, Y., & Li, K. (2025). Bioactive Glasses: Advancing Skin Tissue Repair through Multifunctional Mechanisms and Innovations. *Biomaterials Research*, 29. <https://doi.org/10.34133/BMR.0134>
27. Sabree, I. K., Aswad, M. A., Abd Ali, H. S. (2021). Effect of Additional Zirconia on Fracture Mechanics of Bioactive Glass-ceramics Using Digital Image Correlation. *International Journal of Engineering*, 34(9): 2053-2059. <https://doi.org/10.5829/ije.2021.34.09c.02>
28. Soorani, M., Mele, E., & Christie, J. K. (2023). Structural effects of incorporating Cu⁺ and Cu²⁺ ions into silicate bioactive glasses using molecular dynamics simulations. *Materials Advances*, 4(9), 2078-2087. <https://doi.org/10.1039/D2MA00872F>
29. Sun, H., Yang, J., Zhang, R., & Xu, L. (2024). Insight into the structure and transport properties of CaO-SiO₂-P₂O₅ system during the phosphorus enrichment process: A molecular dynamics simulation. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 627, 122818. <https://doi.org/10.1016/J.JNONCRYSOL.2023.122818>
30. Tilocca, A., Cormack, A. N., & De Leeuw, N. H. (2007). The structure of bioactive silicate glasses: New insight from molecular dynamics simulations. *Chemistry of Materials*, 19(1), 95-103. <https://doi.org/10.1021/cm061631g>
31. Tilocca, A. (2009a). Structural models of bioactive glasses from molecular dynamics simulations. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 465(2104), 1003-1027. <https://doi.org/10.1098/RSPA.2008.0462>
32. Upadhyay, A., Pradhan, L., Yenurkar, D., Kumar, K., & Mukherjee, S. (2024). Advancement in ceramic biomaterials for dental implants. *International Journal of Applied Ceramic Technology*, 21(4), 2796-2817. <https://doi.org/10.1111/IJAC.14772>