

کاربرد شبیه‌سازی مولکولی در طراحی دارو

www.ketab.ir

کمال اسمعیلی

یاسمن تمدن

دکتر صمد نژاد ابراهیمی



۱۴۰۰



۷۹۸

مرکز چاپ و انتشارات دانشگاه شهید بهشتی

کاربرد شبیه‌سازی مولکولی در طراحی دارو
کمال اسمری، یاسمن تمدن، دکتر صمد نژادابراهیمی

ویراستار: راضیه شامخ‌نیا

حروف‌نگار و صفحه‌آرا: سمیرا دهقان

طراح جلد: امیرشاهرخ فریوسفی

ناظر چاپ: نوید سیفان

چاپ: ۱۴۰۰

شمارگان: ۵۰۰

قیمت: ۹۴۰.۰۰۰ ریال

کلیه حقوق برای دانشگاه شهید بهشتی محفوظ است.

سرشناسه:	اسمري، کمال، ۱۳۶۵
عنوان و نام پدیدآور:	کاربرد شبیه‌سازی مولکولی در طراحی دارو/ کمال اسمري، یاسمن تمدن، صمد نژادابراهیمی؛ ویراستار راضیه شامخ‌نیا
مشخصات نشر:	تهران: دانشگاه شهید بهشتی، مرکز چاپ و انتشارات، ۱۴۰۰.
مشخصات ظاهری:	ده، ۳۰۴ ص.
فروست:	مرکز چاپ و انتشارات دانشگاه شهید بهشتی؛ ۷۹۸.
شابک:	۹۷۸ ۹۶۴ ۴۵۷ ۵۳۳ ۴
وضعیت فهرست‌نویسی:	فیا
موضوع:	داروها - طراحی؛ Drugs - Design
شناسه افزوده:	داروها - طراحی - داده‌پردازی؛ Drugs -- Design -- Data processing
شناسه افزوده:	تمدن، یاسمن، ۱۳۶۸ -
شناسه افزوده:	نژادابراهیمی، صمد، ۱۳۵۷ -
شناسه افزوده:	دانشگاه شهید بهشتی، مرکز چاپ و انتشارات
شناسه افزوده:	Shahid Beheshti University. Printing & Publishing Center
رده‌بندی کنگره:	QD۴۵۵/۳
رده‌بندی دیویی:	۵۴۱/۰۱۱۳
شماره کتابشناسی ملی:	۸۵۵۶۱۹۹

کد ناشر ۱۰۰۱۷۳۴

www.pub.sbu.ac.ir

unipress@mail.sbu.ac.ir

فهرست مطالب

پیشگفتار..... نه

فصل اول. اصول اولیه داروسازی محاسباتی..... ۱

۱.۱. آشنایی با نرم افزار شرودینگر و مدل سازی مولکولی..... ۱

۲.۱. لزوم شناخت پروتئین ها، آمینواسیدها، پپتیدها در مدل سازی مولکولی..... ۶

۱.۲.۱. وظایف زیستی مولکول های پروتئین در سلول های زنده..... ۹

۲.۲.۱. انواع پپتیدها..... ۹

۳.۲.۱. انواع ساختار پروتئین ها..... ۱۰

۳.۱. استراتژی طراحی..... ۱۳

۱.۳.۱. استیل کولین استراز مثالی در شناخت گام به گام و طراحی بهینه..... ۱۵

۴.۱. شیمی در مدل سازی مولکولی..... ۱۸

۵.۱. طراحی لیگاند..... ۳۱

۶.۱. آشنایی با زینک..... ۳۸

۷.۱. رسم ساختارهای لازم با استفاده از کیم درا..... ۴۰

۸.۱. سایت پروتئین دیتابانک (پی دی بی)..... ۴۴

۹.۱. دراگ بانک..... ۵۰

۱۰.۱. میدان نیرو و انواع آن..... ۵۳

منابع فصل اول..... ۵۷

فصل دوم. فرایند عملی داکینگ..... ۶۱

۱.۲. مقدمات نرم افزار شرودینگر..... ۶۱

۲.۲. آماده سازی پروتئین..... ۷۱

۳.۲. پیش بینی زنجیره های جانبی با الگوریتم های گوناگون..... ۸۲

۴.۲. یافتن سایت فعال / سایت مپ / ایجاد جعبه گرید..... ۸۷

۵.۲. آماده سازی لیگاند..... ۹۸

۶.۲. داکینگ لیگاند و رستور..... ۱۰۷

منابع فصل دوم..... ۱۱۷

پیشگفتار

داروسازی محاسباتی از علوم جدید و پیشرفته در دنیاست که روزه روز بر اهمیت آن افزوده می شود. دردسترس نبودن منابع معتبر در کشور برای یادگیری این علم ما را بر آن داشت تا براساس تجربه چندین ساله تدریس درس شیمی محاسباتی و طراحی دارو در پژوهشکده گیاهان و مواد اولیه دارویی دانشگاه شهید بهشتی، قدمی هرچند کوچک اما کلیدی برای تسهیل یادگیری این مبحث برای دانشجویان و محققان این حوزه برداریم. برای تحقق این هدف، به منظور دسترسی آسان جامعه علمی کشور و به ویژه بدنه فعال آن یعنی دانشگاهیان بر آن شدیم که به توضیح و تفسیر مبنای علمی و عملی داروسازی محاسباتی و معرفی و آموزش جامع نرم افزار شرویدنگر بپردازیم که یکی از جدیدترین بسته ها در عرصه طراحی دارو و مدل سازی مولکولی است.

در این کتاب سعی شده است داروسازی محاسباتی به طور کامل آموزش داده شود. با توجه به اینکه قریب به اتفاق تحصیلاتهای گرامی از مباحث بیوشیمی و بحث سلولی مولکولی و دانشجویان دیگر رشته ها نیز از مباحث شیمی فاصله گرفته اند، مباحث ضروری در هر بخش، از قبیل بیماری ها و پروتئین های دخیل در آن ها، به اختصار و در حد نیاز طرح شده است تا کاربران هنگام کار با نرم افزار درک بهتری از مباحث داشته باشند.

این کتاب علاوه بر آموزش داکینگ، استفاده از تارنماهای پیشرفته و روز دنیا را نیز آموزش می دهد. محققان در سرتاسر جهان از این تارنماها برای پیشرفت کار خود بهره می برند. از این رو، توصیه می شود برای یادگیری بهتر و راحت تر براساس ترتیب مراحل آموزشی سر فصل ها عمل شود. فرصت را غنیمت می شماریم و از زحمات کارکنان محترم انتشارات دانشگاه شهید بهشتی، به ویژه سرکار خانم ونوس قدیمی، تشکر می کنیم که با پیگیری های ایشان کتاب در کوتاه ترین زمان ممکن به چاپ رسید.

در پایان، جمله ای از بقراط تقدیم رهروان علم و حقیقت می شود:

«حاصل من از فضل این شد که بر جهل خود دانا شدم.»

کمال اسمری

یاسمن تمدن

صمد نژاد ابراهیمی، عضو هیئت علمی دانشگاه شهید بهشتی

پاییز ۱۴۰۰