

۲۰۴۸۳۶

جهان مولکولی

مدلسازی و پیوند مولکولی

د. داورنده :

الف دهر

مترجمین:

دکتر مسعود فریدون نژاد (استادیار گروه شیمی دارویی دانشگاه علوم پزشکی جندی شاپور اهواز)
دکتر حمیدرضا شهسواری (استادیار گروه شیمی معدنی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان)
دکتر سید محمد حسین طبایی (دانشیار گروه شیمی دارویی دانشگاه علوم پزشکی شیراز)
دکتر علیرضا یزدانی کچویی (دکترای حرفه ای داروسازی)

مجموعه کتابخانه تخصصی داروسازی و شیمی دارویی
کتابخانه تخصصی داروسازی و شیمی دارویی
کتابخانه تخصصی داروسازی و شیمی دارویی
کتابخانه تخصصی داروسازی و شیمی دارویی

۹۷۸-۹۶۴-۷۷۷۷-۷
۹۷۸-۹۶۴-۷۷۷۷-۷
۹۷۸-۹۶۴-۷۷۷۷-۷
۹۷۸-۹۶۴-۷۷۷۷-۷

جهان مولکولی، مدل سازی و پیوند مولکولی / ویراستار آئن مور: ترجمه مسعود فریدون نژاد. (و دیگران).

عنوان و نام پدیدآور	تهران: اطمینان راه، ۱۳۹۶.
مشخصات نشر	۲۶۵ ص: مصور (رنگی)، جدول (رنگی)، نمودار (رنگی).
مشخصات ظاهری	978-600-88-8704-1
شابک	فیا
وضعیت فهرست نویسی	عنوان اصلی: Molecular modelling and bonding, c2002.
یادداشت	ترجمه مسعود فریدون نژاد، حمیدرضا شهسواری، سیدمحمدحسین طباطبائی، علیرضا یزدانی کجوی.
یادداشت	واژه نامه
یادداشت	کتابنامه
یادداشت	نماینه
موضوع	مولکول ها -- الگوهای ریاضی
موضوع	Molecules -- Mathematical models
موضوع	پیوندهای شیمیایی
موضوع	Chemical bonds
موضوع	ساختار مولکول
موضوع	Molecular structure
شناسه افزوده	مور، ایلین آء ویراستار
شناسه افزوده	(Moore, Elaine A)
شناسه افزوده	فریدون نژاد، مسعود مترجم
رده بندی کلاس	۱۳۹۶ ۹/۲۸-QD
رده ی دیویی	۳۲/۵۴۱
شماره کتابخانه ملی	۳۹۸۵۲۵

EP
انتشارات اطمینان

نام کتاب	جهان مولکولی، مدل سازی و پیوند مولکولی
تألیف و گردآوری	آئن مور، ایلین آء ویراستار
مترجمین	فریدون نژاد، حمیدرضا شهسواری، سیدمحمدحسین طباطبائی، علیرضا یزدانی کجوی
ناشر	انتشارات اطمینان راه
طراحی و صفحه آرایی	واحد گرافیک انتشارات
توسعه چاپ	ویرایش اول - چاپ اول ۱۳۹۶
تیراژ	۲۶۵ نسخه
چاپ و صفحه آوری	ایستاد گلد
شابک	۹۷۸۰۰۰۸۸۸۷۰۴۱

با ارسال پیامک به شماره ۳۰۰۰۲۵۰۲۵۸۹۳۲۱ در جریان تازه های نشر ما قرار بگیرید.

ارسال عدد ۱	پیوستن به گروه مشترکین
ارسال عدد ۲	دریافت تازه های کلیه کتب ناشران پزشکی، پرستاری، مامایی، پیراپزشکی و دندانپزشکی
ارسال عدد ۳	ارسال تازه های نشر به صورت پست الکترونیکی

WWW.etminanpub.com

توجه: تمامی حقوق مادی و معنوی این اثر برای ناشر محفوظ است.

این کتاب مشمول قانون حمایت از مولفان، مصنفان و هنرمندان مصوب ۱۳۴۸/۱۱/۱۱ و قانون ترجمه و تکثیر کتب، نشریات و آثار صوتی مصوب ۱۳۵۰/۱۰/۶ می باشد.
بازنویسی، خلاصه برداری یا برداشت بخشی از متن، شکل ها یا جدول های کتاب و انتشار آن در قالب کتاب های ترجمه، تالیف، خلاصه، جزوه، تست یا نرم افزار بدون اجازه کتبی از ناشر، غیرقانونی و شرعا حرام بروده و موجب پیگرد قانونی می شود.

آدرس مرکز فروش : ضلع جنوب شرقی میدان انقلاب، پلاک ۲۰، فروشگاه بیات، واحد پزشکی، تلفن: ۶۶۹۶۸۰۶۴
آدرس انتشارات : خیابان جمهوری، خیابان پیروز، پلاک ۴۱، طبقه اول تلفن: ۶۶۹۰۲۰۲۸ - ۶۶۵۶۲۲۴۷

کتاب جهان مولکولی با تلفیق اصول بنیادین شیمی مولکولی و روش‌های مدل‌سازی کامپیوتری بینش جدیدی در حوزه شیمی دارویی به دست داده و بار دیگر از قابلیت بالای علم شیمی برای بهره‌وری در صنعت پرده بر می‌دارد. این کتاب مرتبط با شیمی دارویی و شیمی معدنی است. از این رو دانشجویانی که با اصول اولیه این دو زمینه آشنا هستند، می‌توانند از این کتاب بهره‌جویند.

در این کتاب مؤلف ضمن ارائه منطقی و منسجم اصول شیمی مولکولی و همراه کردن آن با مهارت‌های مدل‌سازی کامپیوتری، رهیافت جدیدی برای صنعت‌سازی علم شیمی پیشنهاد می‌کند. مؤلف سعی بر آن داشته تا اهمیت بالقوه‌ی کاربرد این تلفیق را در زمینه‌های مختلف صنعتی بیش از پیش آشکار نماید. این کتاب در دو بخش عمده تدوین شده است. بخش نخست به مدل‌سازی و کاربرد مولکولی اختصاص یافته و مفاهیم بنیادی و محاسبات کامپیوتری را تشریح می‌کند. این بخش مشتمل بر هشت فصل است. در اصول ابتدایی این بخش کوشش شده تا مخاطب اطلاعاتی را در زمینه مکانیک مولکولی، شیمی کوانتومی اتم‌ها، اوربیتال‌های مولکولی، مولکول‌های چند اتمی، محاسبات تقارن و اوربیتال مولکولی کسب نمایند. فصل هفتم یک بینش بسیار ارزشمند در زمینه مدل‌سازی کامپیوتری برای مدل‌سازی ارائه می‌دهد. در فصل هشتم نیز به بررسی پیوند در جامدات و سم‌شناسی تأثیر آن‌ها بر ظهور خواص مختلف در این مواد پرداخته می‌شود. در تمامی این فصول سؤالاتی مطرح گردیده که در انتهای این بخش به آن‌ها پاسخ داده شده است.

در بخش دوم کتاب، با اتخاذ روش مطالعه موردی، به بررسی مدل‌سازی و طراحی در طراحی منطقی دارو پرداخته شده است. همچنین به عنوان الگو، چند مورد از طراحی دارو به کمک نرم افزار کامپیوتری بررسی و ارائه می‌شود.

شایان ذکر است که این کتاب به همراه یک سی دی تعاملی (آموزشی و عملی) عرضه گردیده که در آن تمامی تمرین‌ها، شکل‌های کامپیوتری و گرافیکی ساختارها گنجانیده شده است. بهره‌گیری از این سی دی علاوه بر تسهیل روند یادگیری، شما را به مهارت‌های کافی در خصوص طراحی دارو مجهز می‌کند.

فهرست مطالب

فصل ۱- مقدمه ۱

فصل ۲- مکانیک مولکولی ۱

فصل ۳- شیمی انتزعی اتمها ۲۳

فصل ۴- اوربیتال های مولکولی ۴۹

فصل ۵- مولکول های چارتمی ۹

فصل ۶- محاسبات تقارن و اوربیتال های مولکولی ۱۰۳

فصل ۷- تمرین کردن محاسبات (محاسبات در مدل ۲۳

فصل ۸- پیوند در جامدات ۲۹

مطالعات موردی: مدل سازی مولکولی در طراحی منطقی دارو

فصل ۱- مقدمه ۶۷

فصل ۲- روش های بر پایه ساختار برای داروهایی با جایگاه فعال ناشناخته ۷۳

فصل ۳- روش هایی برای شناسایی جایگاه های فعال ۷۹

فصل ۴- مثال هایی از طراحی بر پایه ساختار ۸۵

فصل ۵- آینده ۹۷