

شیمی
(داروهای مسکن ضد التهاب)

شهناز هنرور

سرشناسه	هنرور، شهناز، ۱۳۴۹ -
عنوان و نام پدیدآور	شیمی (داروهای مسکن ضد التهاب) / شهناز هنرور.
مشخصات نشر	رشت: نشر بلور، ۱۳۹۴.
مشخصات ظاهری	۹۲ص: مصور، جدول.
شابک	978-600-306-385-3
وضعیت فهرست نویسی	فیفا
موضوع	شیمی دارویی
موضوع	داروهای ضد التهاب غیر استروئیدی
رده بندی کنگره	۱۳۹۴ ش ۹/۴۰۳ RS
رده بندی دیویی	۶۱۵/۱۹
شماره کتابشناسی ملی	۳۸۹۵۰۰۳

شیمی (داروهای مسکن ضد التهاب)

نویسنده:	شهناز هنرور
ناشر:	انتشارات بلور
نوبت چاپ:	اول
سال انتشار:	۱۳۹۴
امور فنی:	موسسه ساقی
چاپ و صحافی:	چاپ زیتون
شمارگان:	۵۰۰
قیمت:	۶۰۰۰ تومان

نشانی: رشت، خیابان امام خمینی، کوچه المیرا، جنب مسجد، انتشارات بلور

تلفن: ۰۱۳-۳۳۲۴۵۵۷۵ - ۰۱۳-۳۳۲۶۲۲۳۲ فکس: ۰۱۳-۳۳۲۵۴۶۱۷

همراه: ۰۹۰۲۱۹۷۵۱۳۳ - SMS: ۵۰۰۰۲۰۶۰۵۰۶۰

Email: boloor_publications@gmail.com
www.boloorbook.com

فهرست مطالب

فصل ۱-۱ داروهای مسکن ضد التهاب غیر استروئیدی

- ۱-۱-۱ مفنامیک اسید..... ۱۳
۱-۱-۱ متوکاربامول..... ۱۴
۱-۱-۳ دیکلوفناک..... ۱۵
۲-۱ استامینوفن..... ۱۶

فصل دوم: شیمی محاسباتی

- ۱-۲ شیمی محاسباتی..... ۱۸
۲-۲ مکانیک مولکولی..... ۱۹
۳-۲ دینامیک مولکولی..... ۲۰
۴-۲ روش ساختار الکترون..... ۲۱
۲-۴-۱ روشهای نیمه تجربی..... ۲۱
۲-۴-۲ روشهای محاسبات آغازین..... ۲۲
۵-۲ روش محاسبات آغازین..... ۲۲
۶-۲ قابلیت‌های دسترسی به پارامتر..... ۲۳
۷-۲ منبع رایانه‌ای..... ۲۳
۸-۲ نرم افزار محاسباتی..... ۲۳
۱-۸-۲ قابلیت نرم افزار گوسین..... ۲۴
۹-۲ تقریب هارتری-فاک..... ۲۴
۱-۹-۲ تقریب روش هارتری فاک محدود شده..... ۲۵

- ۲-۹-۲- تقریب روش هارتری فاک محدود نشده ۲۵
- ۲-۹-۳- تقریب روش هارتری فاک پوسته باز محدود شده ۲۶
- ۲-۱۰-۱- روش تابعی دانستیه ۲۶
- ۲-۱۱-۱- تقریب دانستیه اسپین موضعی ۲۷
- ۲-۱۲-۱- توابع Blyp و B3lyp ۲۷
- ۲-۱۳-۱- مدل مطالعات اربیتال طبیعی پیوند ۲۷
- ۲-۱۴-۱- مدل شیمیایی ۲۸
- ۲-۱۵-۱- اندازه ثابت تعادل ۲۸
- ۲-۱۷-۱- حل دقیق مساله مربوط به الکترون ۳۱

فصل سوم: تعادلات شیمیایی

- ۳-۱-۱- آنتروپی ۳۲
- ۳-۲-۱- آنتروپی و تعادل ۳۳
- ۳-۳-۱- انرژی گیبس و هلمهولتز ۳۳
- ۳-۴-۱- وابستگی های انرژی آزاد گیبس به دما و فشار ۳۵
- ۳-۵-۱- تغییر انرژی آزاد گیبس با دما ۳۶
- ۳-۶-۱- تغییر انرژی آزاد گیبس با فشار ۳۷
- ۳-۷-۱- عوامل موثر بر تعادل شیمیایی ۳۷
- ۳-۷-۱-۱- جابه جا شدن تعادل با غلظت ۳۷
- ۳-۷-۱-۲- کاتالیزور جا به جاشدن تعادل ۳۸
- ۳-۷-۱-۳- تاثیر جا به جاشدن تعادل بر ثابت تعادل ۳۸
- ۳-۸-۱- چگونگی تغییر واکنش با پیشرفت ΔG آن ۳۹
- ۳-۹-۱- چگونگی بستگی ثابت تعادل با دما ۴۱
- ۳-۹-۱- معادله وانتهوف در موقعی که ΔH تابع دما است ۴۳
- ۳-۱۰-۱- تعیین ثابت تفکیک ۴۳
- ۳-۱۰-۱- تعیین ثابت تفکیک اسیدها و بازهای ضعیف ۴۴

فصل چهارم: محاسبات

- ۴-۱- روش کار ۴۵
- ۴-۲- بررسی یونیزاسیون داروها در فاز گاز ۴۸
- ۴-۳- بررسی مولکول داروها در فاز محلول آبی ۶۲
- ۴-۴- بررسی مولکول دارو در حضور KCl به عنوان تنظیم کننده قدرت یونی ۷۵

فصل پنجم: مقایسه داروهای مسکن در فازهای گازی و آبی

- ۵-۱-۱- بحث بر روی داروی مگنامیک اسید ۷۸
- ۵-۱-۲- بحث بر روی داروی متوکاربامول ۷۹
- ۵-۱-۳- بحث بر روی داروی دیکلو فناک ۸۱
- ۵-۱-۴- بحث بر روی داروی استامینوفن ۸۳
- ۵-۲- نتیجه گیری کلی ۸۵

منابع ۸۸

پیشگفتار

تعیین ثابت تفکیک یک رکن اساسی برای دریافتن چگونگی بسیاری از واکنش‌های بنیادی در شیمی است. این ثابت‌ها مراحل پروتون زدایی یا پروتون گیری یک مولکول را در یک حلال خاص بیان می‌کنند. برای تعیین ثابت تفکیک مولکولهایی که غیر قابل سنتزند یا تعیین pK آنها به طریق تجربی بسیار سخت است و یا مولکولهای بزرگی که تغییر محیط موجب تغییر مقدار pK آنها می‌شود از روش تئوری استفاده می‌شود. به همین دلیل هدف اساسی در این پروژه، تعیین ثابت تفکیک برخی از داروهای مسکن ضد التهاب به روش تئوری می‌باشد. این کار با استفاده از روش DFT (تئوری تابعی دانسیته)، تابع هیبریدی B3LYP و سری پایه 6-31G در دمای 298K و فشار 1bar بر روی چهار داروی مسکن ضد التهاب غیر استروئیدی مفنامیک اسید، متوکاربامول، دیکلوفناک و استامینوفن در فاز گازی، محلول آبی و محلول آبی با حضور KCl به عنوان تنظیم کننده قدرت یونی انجام شد. نتایج بدست آمده از مطالعات فرکانس نشان می‌دهند که یونیزاسیون این داروها از جایگاه نیتروژن آمینی در فاز محلول و گاز با ثابت تفکیک بالا انجام می‌شود. ولی بالا بردن قدرت یونی در محلول آبی نقش بازدارندگی در یونیزاسیون نیتروژن آمینی تمام داروهای مورد مطالعه دارد. همچنین مطالعات NBO در

مورد این داروها نشان داد که در تمامی ساختارها اثر فوق رزونانسی بالایی در داروهای یونیزه نشده و اثر فوق رزونانسی کوچکی در داروی یونیزه شده وجود دارد.

www.ketab.ir