

بیوانفورماتیک کاربردی

(مبحث پروتئین)

نویسندگان

دکتر فرزاد بادمستی

دکتر سپیده فرشته

نگین بلورچی

دکتر امین سپهر



ناشر: کتب علوم پزشکی

عنوان و نام پدیدآور	بیوانفورماتیک کاربردی (مبحث پروتئین) / نویسندگان فرزاد بادمستی... (و دیگران).
مشخصات نشر	تهران: نشر حیدری، ۱۴۰۰.
مشخصات ظاهری	۳۲۰ص: مسوره جدول، نمودار.
شابک	978-600-489-534-7
وضعیت فهرست نویسی	فیا
یادداشت	نویسندگان فرزاد بادمستی، سیده فرشته، نگین بلورچی، امین سپهر.
یادداشت	کتابنامه: ص. [۳۲۰].
موضوع	زیست‌انفورماتیک Bioinformatics
موضوع	پروتئین -- تجزیه و آزمایش -- داده‌پردازی Proteins -- Analysis -- Data processing
شماره افزوده	بادمستی، فرزاد، ۱۳۶۴ -
رده بندی کنگره	QH۳۳۴/۲
رده بندی دیویی	۸۰۲۸۵/۵۷۲
شماره کتابشناسی ملی	۸۵۳۳۳۱۲
اطلاعات رکورد کتابشناسی	فیا

این اثر، مشمول ققون حمایت از مؤلفان و مصنفان و هنرمندان مصوب ۱۳۴۸ است. هرکس تمام یا قسمتی از این اثر را بدون اجازه مؤلف (نشر) منتشر یا پخش کند مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

09124220885

www.heydaripub.com

عنوان	بیوانفورماتیک کاربردی (مبحث پروتئین)
نویسندگان	دکتر فرزاد بادمستی - دکتر سیده فرشته - نگین بلورچی - دکتر امین سپهر
مدیر اجرایی	سیده مریم حیدری
نوبت و سال چاپ	اول / ۱۴۰۰
شمارگان	۱۰۰ نسخه
چاپ و صحافی	غزال
بهاء	۱۳۰۰۰ تومان
شابک	۹۷۸-۶۰۰-۴۸۹-۵۳۴-۷



ناشر کتب علوم پزشکی

مراکز پخش

نشانی دفتر مرکزی: خیابان انقلاب، خیابان ۱۲ فروردین، خیابان شهدای ژاندارمری غربی، روبروی اداره پست، پلاک ۱۲۲، طبقه اول، واحد ۲ تلفن: ۶۶۹۷۶۴۷۸-۶۶۹۷۶۴۹۹

فروشگاه ۱: خیابان انقلاب، روبروی دانشگاه، پاساژ فروزنده، طبقه همکف، پلاک ۳۳۳ تلفن: ۶۶۳۷۸۹۴۷-۶۶۳۹۲۷۸۶

فروشگاه ۲: خیابان انقلاب، بین خیابان منیری جاوید و ۱۲ فروردین، پاساژ اندیشه، پلاک ۸۵ تلفن: ۶۶۴۹۹۲۱۴

فروشگاه ۳: قلهک، خیابان زرکنده، دانشگاه آزاد اسلامی، کتابفروشی دانشگاه تلفن: ۲۲۶۲۲۶۰۵

فروشگاه ۴: اراک، میدان سرداران، جنب بیمارستان ولی عصر مجتمع پارس، فروشگاه کتاب ونوس - تلفن: ۰۸۳۳-۲۲۴۶۳۵۷

فروشگاه ۵: بجنورد، خیابان ۱۷ شهریور جنوبی، ابتدای خیابان میرزا کوچک خان، فروشگاه نشر حیدری، تلفن: ۰۵۸-۳۲۲۵۱۸۳۳

فروشگاه ۶: خرم‌آباد، دانشگاه علوم پزشکی کمالوند، فروشگاه نشر حیدری، تلفن: ۰۸۳۳-۲۲۳۴۸۸۳

و کتابفروشی‌های معتبر سراسر کشور

مقدمه

خدای بزرگ را سپاس که به ما فرصت داد این کتاب را به رشته تحریر درآوریم. هر چند مفاهیم بنیادی برای موضوعات علمی از اهمیت زیادی برخوردار است اما وجود کتب متعدد در مورد مفاهیم پایه‌ای علم بیوانفورماتیک، ما را بر آن داشت که در قالب مثال‌های کاربردی اهمیت هر قسمت از این علم نوپا را به تصویر بکشیم. دنیای امروز به سرعت به سمت محاسبه، احتمال و آمار پیش می‌رود. ورود این پارامترها به مبحث علم بیولوژی نویددهنده راهی است که با صرف کمترین زمان، محاسبات پیچیده‌ای انجام شود که منجر به دستاوردهای قابل توجه‌ای در آزمایشگاه گردد. کاربرد علم بیوانفورماتیک در تمام رشته‌های مرتبط با بیولوژی انکار ناپذیر است. پیش‌بینی می‌گردد که در آینده نزدیک این علم نقش موثری در شروع، ادامه و حتی ختم یک پروژه تحقیقاتی ایفا کند. به صورت پیوسته‌ای الگوریتم‌ها و دیتابیس‌های دقیق‌تری برای انجام محاسبات و به دست آوردن نتایج درست‌تر توسط محققان علم بیوانفورماتیک ارایه می‌شود. تعیین دقیق ساختارهای سه بعدی پروتئین‌ها و انجام دقیق‌تر داکینگ و توسعه اسکانسینگ ژنوم موجودات زنده، عملاً دانشمندان علم بیولوژی را با مجموعه‌ای بزرگی از اطلاعات روبه رو ساخته که در صورت بکارگیری درست علم بیوانفورماتیک بر روی این اطلاعات منجر به تولید نتایج درخشانی می‌شود که در خدمت سلامت بشریت و تضمین کیفیت زندگی انسانها بر روی کره آبی رنگ زمین می‌گردد. در پایان از دوستان عزیزم جناب آقای دکتر مهدی روحانی و جناب آقای دکتر امید عزیزی برای راهنمایی‌ها و توصیه هایشان سپاسگزاری می‌کنم و از تیم تحقیقاتی خود برای گردآوری مقالات و ویرایش این اثر تشکر می‌نمایم. از خوانندگان محترم تقاضا می‌شود پیشنهادات و انتقادات سازنده‌ی خود را به نشانی fbadmasti2008@gmail.com ارسال فرمایند.

دکتر فرزاد بادمستی

استادیار باکتری‌شناسی انستیتو پاستور ایران

فهرست مطالب

۳	 مقدمه
۹	 فصل اول: تاریخچه علم بیوانفورماتیک
۱۳	 فصل دوم: آشنایی با علم بیوانفورماتیک
۱۳	 علم بیوانفورماتیک
۱۴	 هدف علم بیوانفورماتیک
۱۴	 محدوده‌ی علم بیوانفورماتیک
۱۶	 کاربرد علم بیوانفورماتیک
۱۷	 محدودیت‌های علم بیوانفورماتیک
۱۸	 آینده علم بیوانفورماتیک
۱۹	 فصل سوم: آشنایی با پایگاه‌های داده
۱۹	 تعریف پایگاه داده
۲۰	 مفهوم پایگاه داده اولیه
۲۰	 مفهوم پایگاه داده ثانویه
۲۳	 فصل چهارم: کاربرد بیوانفورماتیک در مطالعه‌ی پروتئین‌ها
۲۳	 معرفی پایگاه‌های داده اولیه
۲۳	 ۱. NCBI
۲۷	 ۲. UniProt
۳۲	 ۳. پایگاه داده UniProtKB/TrEMBL
۳۲	 ۴. پایگاه داده UniParc
۳۲	 ۵. پایگاه داده UniRef
۳۳	 ۶. PDB
۳۶	 ۷. سایر پایگاه‌های داده ثانویه
۳۷	 معرفی پایگاه‌های داده ثانویه در مطالعه‌ی پروتئین‌ها
۳۷	 پایگاه‌های داده برای بررسی خواص فیزیکی شیمیایی
۳۷	 ProtParam
۴۱	 پایگاه‌های داده موتیف‌ها، دومین‌ها و خانواده‌های پروتئینی
۴۱	 ۱. Pfam
۴۳	 ۲. CDD
۴۶	 ۳. InterProscan
۴۸	 ۴. SMART
۵۰	 ۵. PROSITE
۵۲	 ۶. TransportDB
۵۴	 پایگاه‌های داده مسیرهای متابولیک

۹۶	Jalview	۱
۹۸	Chimera	۲
۹۹	PDB editor	۳
۱۰۱	فصل پنجم: هم ردیفی توالی ها و رسم درخت فیلوژنی	
۱۰۲	بررسی شباهت بین پروتئین ها	
۱۰۲	UniProt	۱
۱۰۴	NCBI	۲
۱۰۷	هم ردیفی چندین توالی پروتئینی	
۱۰۷	Clustal Omega	۱
۱۰۹	T-Coffee	۲
۱۱۱	MAFFT	۳
۱۱۲	هم ردیفی ساختاری	
۱۱۳	TM-align	
۱۱۴	مفهوم هم ردیفی موضعی و هم ردیفی کلی	
۱۱۵	رسم درخت فیلوژنیک	
۱۱۶	انواع درخت فیلوژنی	
۱۱۹	Bootstrap	آنالیز
۱۲۰	مصورسازی درخت های فیلوژنیک	
۱۲۱	iTOL	
۱۲۲	معرفی نرم افزارهای هم ردیفی و آنالیز فیلوژنیک	
۱۲۵	فصل ششم: واکسن شناسی معکوس	
۱۳۰	پایگاه های داده مورد استفاده در واکسن شناسی معکوس	
۱۳۰	۱. تعیین هدف	
۱۳۰	Vaxign	۱
۱۳۵	Vaxigen2	۲
۱۳۶	۲. اندازه گیری خاصیت آنتی ژنی	
۱۳۷	VaxiJen	۱
۱۳۹	Immunomedicine Group	۲
۱۴۱	۳. بررسی آلرژی زایی کاندیدا واکسن مورد مطالعه	
۱۴۱	AlgPred	
۱۴۳	۴. بررسی توکسین زایی کاندیدا واکسن مورد مطالعه	
۱۴۳	BTXpred	
۱۴۵	۵. تعیین محل اتصال MHC	
۱۴۵	IEDB	۱

۱۴۹	۲. MHCPred
۱۵۲	۶. شناسایی اپی توپ‌های خطی و فضائی سلول های B
۱۵۲	۱. IEDB
۱۵۵	۲. DiscoTope-2.0
۱۵۷	۳. BepiPred-2.0
۱۶۰	۷. بررسی شبکه‌های بین پروتئینی
۱۶۰	جست و جو در پایگاه داده STRING
۱۷۱	فصل هفتم: آشنایی با طراحی داده
۱۷۱	تاریخچه‌ی طراحی و کشف دارو
۱۷۲	انواع روش‌های طراحی دارو
۱۷۴	غریبالگری مجازی
۱۷۵	مراحل طراحی SBVS
۱۷۷	۱. آماده سازی کتابخانه‌ی ترکیبات
۱۷۸	۱. پایگاه داده DrugBank
۱۸۰	۲. پایگاه داده ZINC15
۱۸۵	۲. ایجاد مختصات سه بعدی ترکیبات (لیگندها)
۱۸۷	۳. انتخاب و آماده سازی پروتئین هدف
۱۸۹	۴. شناسایی و بررسی جایگاه اتصال
۱۹۱	۵. داکینگ مولکولی
۱۹۴	استفاده از نرم افزار Molegro Virtual Docker در داکینگ مولکولی
۲۰۱	نحوه‌ی آماده سازی لیگاند و پروتئین
۲۰۳	فرایند داکینگ
۲۱۰	۶. ارزیابی عملکرد پروتکل‌های VS
۲۱۱	۷. بررسی ADME داروی پیشنهادی
۲۱۵	دو مثال موفق اخیر
۲۱۷	چالش‌ها و چشم‌اندازها
۲۱۹	منابع