

# روش های طراحی آنالوگ دارو

مؤلفان

عارفه سادات خدائی

نیما شیرمحمدی

زهرا قاسمی نژاد



|                         |                                                                                            |
|-------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| سرشناسه                 | : خدایی، عارفه سادات، ۱۳۷۵-                                                                |
| عنوان و نام پدید آور    | : روش های طراحی آنالوگ دارو/ نویسندگان عارفه سادات خدائی، نیما شیرمحمدی و زهرا قاسمی نژاد. |
| مشخصات نشر              | : تهران : گنجور، ۱۴۰۰.                                                                     |
| مشخصات ظاهری            | : ۶۹ ص.                                                                                    |
| شابک                    | : ۹۷۸-۶۲۲-۷۸۵۴-۵۳-۴                                                                        |
| وضعیت فهرست نویسی       | : فیپا                                                                                     |
| موضوع                   | : داروها -- طراحی                                                                          |
| موضوع                   | Drugs -- Design                                                                            |
| موضوع                   | : داروها -- طراحی -- الگوهای ریاضی                                                         |
| موضوع                   | Drugs -- Design -- Mathematical                                                            |
| modelsmeasures          |                                                                                            |
| موضوع                   | : داروها -- ساختار شیمیایی و فعالیت زیست شناسی                                             |
| موضوع                   | Drugs -- Structure-activity relationships                                                  |
| شناسه افزوده            | : شیرمحمدی، نیما، ۱۳۷۶-                                                                    |
| شناسه افزوده            | : قاسمی نژاد، زهرا، ۱۳۷۶-                                                                  |
| رده بندی کنگره          | : RS ۲۰۰                                                                                   |
| رده بندی دیویی          | : ۶۱۵/۱۹                                                                                   |
| شماره کتابشناسی ملی     | : ۸۵۰۰۵۳۶                                                                                  |
| اطلاعات رکورد کتابشناسی | : فیپا                                                                                     |

## روش های طراحی آنالوگ دارو

■ نویسندگان : عارفه سادات خدائی، نیما شیرمحمدی و زهرا قاسمی نژاد

■ ناشر : گنجور

■ سال و نوبت چاپ : ۱۴۰۰

■ شمارگان : ۵۰۰ نسخه

■ قیمت : ۳۰۰۰ تومان

---

شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۷۸۵۴-۵۳-۴

---

آدرس: تهران. میدان انقلاب. ابتدای کارگر جنوبی. کوچه شهدای ژاندارمری. پلاک ۱۲۷

تلفن: ۰۹۱۲۰۶۱۷۲۸۳ - ۰۹۹۰۱۹۱۰۲۰۸ - ۰۲۱۶۶۴۹۱۰۵۶

سایت انتشارات: [www.ganjoorpub.ir](http://www.ganjoorpub.ir)

# فهرست

|                                                                     |    |
|---------------------------------------------------------------------|----|
| مقدمه.....                                                          | ۹  |
| آشنایی با طراحی دارو مبتنی بر ساختار، ( SBDD )، انواع روش SBDD..... | ۱۱ |
| آشنایی با اصطلاحات.....                                             | ۱۳ |
| روش های آنالوگ سازی.....                                            | ۱۷ |
| جوانب مثبت و منفی طراحی دارو با روش آنالوگ سازی.....                | ۳۳ |
| طراحی آنالوگ به عنوان وسیله های برای کشف مواد مخدر جدید.....        | ۳۶ |
| برنامه های تحقیقاتی مبتنی بر بهره برداری از اثرات جانبی.....        | ۴۰ |
| رهنمودهای جدید داروهای قدیمی.....                                   | ۴۱ |
| روش کمورنومیک.....                                                  | ۴۷ |
| داروهای طراحی شده با بهره گیری از عوارض جانبی.....                  | ۴۸ |
| آگونیست ها و آنتاگونیست ها.....                                     | ۴۹ |
| فعالیت دارو در گروه های هدف.....                                    | ۵۶ |
| لیگاند های GPCR.....                                                | ۵۸ |

|    |                                  |
|----|----------------------------------|
| ۶۰ | ..... لیگاندهای گیرندهی هسته‌های |
| ۶۱ | ..... لیگاندهای اینتگرین         |
| ۶۲ | ..... مهارکننده‌های کیناز        |
| ۶۵ | ..... REFERENCES                 |

## مقدمه

طراحی دارو امری زمان‌بر و نیازمند دقت و تجربه فراوان می‌باشد که متخصصان علوم مختلف داروسازی، شیمی و زیست می‌توانند در این زمینه فعالیت داشته باشند. گذشت زمان سبب شده تا روش‌هایی مدرن و بروز باعث تسهیل این فرایند مشکل و حتی بهبود فراورده نهایی بشوند. تلاش ما بر این بوده که این روش‌ها بطور خلاصه در این کتاب ذکر شوند و با روش‌های گذشته مقایسه و مزایای هر یک مشخص بشود. بروز بودن در علم طراحی دارو کمک فراوانی به متخصص می‌کند و از اتلاف وقت، هزینه و سرمایه جلوگیری خواهد کرد. امید است این کتاب بتواند گامی کوچک در ترفیع سطح هنر طراحی دارو در کشور بردارد و شاهد پیشرفت روز افزون این علم و ابداع روش‌های مدرن‌تر و بهینه‌تر باشیم