

مقدمه ای بر شبیه سازی دینامیک مولکولی در مطالعه برهمکنش های آنزیمی

www.ketab.ir

سرشناسه	: آبی، عباس، ۱۳۷۰
عنوان و نام پدیدآور	: مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در مطالعه برهمکنش‌های آنزیمی/ مولف عباس آبی.
مشخصات نشر	: تهران: سنجش و دانش، ۱۳۹۷.
مشخصات ظاهری	: ۸۹ ص.: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: 978-622-05-0617-1
وضعیت فهرست نویسی	: فیها
یادداشت	: کتابنامه.
موضوع	: دینامیک مولکولی - شبیه‌سازی کامپیوتری
موضوع	: Molecular dynamics - Computer simulation
موضوع	: دینامیک مولکولی - شبیه‌سازی
موضوع	: Molecular dynamics - Simulation methods
موضوع	: مولکول‌ها - الگوها - شبیه‌سازی کامپیوتری
موضوع	: Molecules - Models - Computer simulation
موضوع	: پروتئین - ساختار - شبیه‌سازی کامپیوتری
موضوع	: Proteins - Structure - Computer simulation
موضوع	: آنزیم‌ها - سینتیک
موضوع	: Enzyme kinetics
رده بندی کنگره	: QD۴۵۵/۳ .۰۲۲۱ .۰۱
رده بندی دیویی	: ۵۴۰ .۱۱۲
شماره کتابشناسی ملی	: ۵۴۰ ص ۷

مقدمه ای بر شبیه سازی دینامیک مولکولی، در مطالعه برهمکنش های آنزیمی

مؤلف:	عباس آبی
ناشر:	انتشارات سنجش و دانش
تیراژ:	۵۰ نسخه
نوبت چاپ:	اول ۱۳۹۷
شابک:	۹۷۸-۶۲۲-۰۵-۰۶۱۷-۱

۲۰۰۰ تومان

نشانی: میدان انقلاب - خیابان دانشگاه - تقاطع روانمهر - ساختمان سنجش و دانش
تلفن: ۰۲۱۶۱۲۶

*** کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر محفوظ می باشد. ***

فهرست مطالب

۸	فصل اول: مقدمه
۹	۱-۱ کور کومین
۹	۲-۱-۱ ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی
۱۳	۳-۱-۱ فعالیت‌های فارماکولوژیک
۱۵	۴-۱-۱ موانع جذب و کاربرد درمانی
۱۷	۲-۱ آنزیم: نسبتاً تریچه کوهی
۱۷	۱-۲-۱ مقدمه
۱۸	۲-۲-۱ ساختار اولیه
۱۹	۳-۲-۱ دومین‌ها و ساختار ثانویه
۲۰	۴-۲-۱ جزء کربوهیدرانی آنزیم
۲۱	۵-۲-۱ مراکز اتصال کلسیم
۲۱	۶-۲-۱ گروه پروستتیک HEME
۲۲	۷-۲-۱ ایزو آنزیم‌های براکسیداز ریشه ترب کوهی
۲۳	۸-۲-۱ مکانیسم کانالیزوری HRP
۲۴	۹-۲-۱ محل‌های اتصال لیگاند
۲۴	۱۰-۲-۱ کاربرد تجاری HRP
۲۶	۳-۱ هدف تحقیق
۲۷	فصل دوم: مواد و روش‌ها
۲۸	۱-۱ اداکینگ مولکولی
۲۸	۲-۱-۱ مقدمه
۳۰	۳-۱-۱ جستجوی کنفورماسیون
۳۱	۴-۱-۲ برآورد انرژی اتصال

۳۳	۲-۲ نرم افزار AUTODOCK
۳۴	۳-۲ نرم افزار OPEN BABEL
۳۴	۴-۲ فرآیند داکینگ مولکولی
۳۴	۱-۴-۲ آماده سازی پروتئین
۳۵	۲-۴-۲ ساخت لیگاندها
۳۵	۳-۴-۲ نرم افزار هایپرکم
۳۵	۴-۴-۲ تنظیم کادر محصور کننده (BOUNDING BOX)
۳۶	۵-۴-۲ اجرای راسبه داکینگ
۳۶	۶-۴-۲ تحلیل نتایج
۳۷	۵-۲ انجام داکینگ با برنامه اتوداک
۳۷	۶-۲ ساخت لیگاندها
۳۷	۱-۶-۲ طراحی اولیه
۳۸	۲-۶-۲ بهینه سازی لیگاندها
۴۱	۷-۲ آماده سازی فایل پروتئین توسط برنامه اتوداک
۴۲	۸-۲ دینامیک مولکولی
۴۲	۱-۸-۲ مقدمه
۴۴	۲-۸-۲ معادلات حرکت در مکانیک کلاسیک
۴۵	۳-۸-۲ مفاهیم و اصطلاحات گرومکس
۴۵	۱-۳-۸-۲ PERIODIC BOUNDARY CONDITIONS (PBC)
۴۷	۲-۳-۸-۲ CUT-OFF
۴۸	۳-۳-۸-۲ توپولوژی و میدان نیرو
۵۰	۹-۲ روند انجام شبیه سازی مولکولی در گرومکس
۵۶	۱۰-۲ روند انجام داکینگ مولکولی با نرم افزار اتوداک
۵۸	۱۱-۲ آماده سازی پروتئینها جهت دینامیک مولکولی
۶۱	فصل سوم:

- ۳-۱ هابیر کم ۶۲
- ۳-۲ نتایج داکینگ مولکولی ۶۲
- ۳-۲-۱ نتایج حاصل از اتصال کورکومین ۶۳
- ۳-۲-۲ نتایج حاصل از اتصال دمتوکسی کورکومین ۶۵
- ۳-۲-۳ نتایج حاصل از اتصال بیس دمتوکسی کورکومین ۶۷
- ۳-۳ نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۶۹
- منابع ۸۰

www.ketab.ir