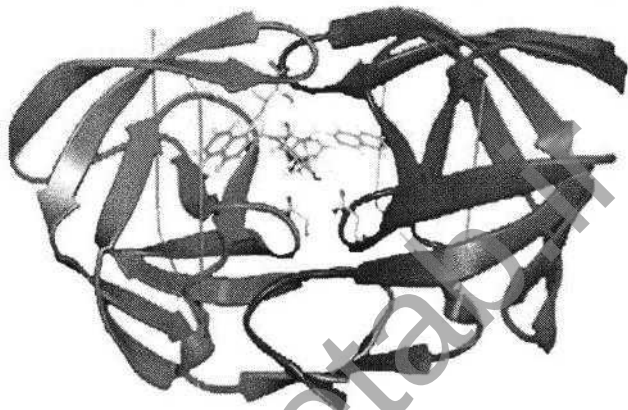


طراحی ماکرومولکولهای زیستی ArgusLab

نرم افزار تحقیقاتی - آموزشی در حوزه بیوانفورماتیک و شیمی



نرم افزاری جامع برای طراحی ساختارهای ماکرومولکولی و بررسی تعامل درون مولکولی

برای دانشجویان رشته های علوم پایه پزشکی، علوم زیستی و شیمی
ترجمه و تالیف:

حجت المولیان حزی

کارشناس ارشد بیوشیمی

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد علوم و تحقیقات کردستان

جواد صفاری چالشری

کارشناس ارشد بیوشیمی

مرکز تحقیقات بیوشیمی بالینی

دانشگاه علوم پزشکی شهرکرد

زیر نظر:

دکتر معود امیری

عضو هیئت علمی دانشگاه علوم پزشکی شهرکرد

سرشناسه	مسفاری چالشتری، جواد، ۱۳۵۹ -
عنوان و نام پدیدآور	طراحی ماکرومولکولهای زیستی ArgusLab : نرم افزار تحقیقاتی - آموزشی در حوزه بیوفورماتیک و شیمی نرم افزاری جامع برای طراحی ساختارهای ماکرومولکولی و بررسی تعامل درون مولکولی برای دانشجوین رشته های علوم پایه پزشکی ، علوم زیستی و شیمی / گردآوری و تألیف جواد مسفاری چالشتری، حجت اله مولویان جزئی ؛ زیر نظر مسعود امیری.
مشخصات نشر	استادآباد؛ نشر دایان، ۱۳۹۲.
مشخصات ظاهری	۱۲۰ ص.؛ ۱۲۰ (رنگی)، جدول (رنگی)، نمودار (رنگی).
شابک	978-600-94301-1-6
وضعیت فهرست نویسی	فایا
عنوان دیگر	نرم افزار تحقیقاتی - آموزشی در حوزه بیوفورماتیک و شیمی.
عنوان دیگر	نرم افزاری جامع برای طراحی ساختارهای ماکرومولکولی و بررسی تعامل درون مولکولی برای دانشجوین رشته های علوم پایه پزشکی ، علوم زیستی و شیمی.
موضوع	نرم افزار آرگوس لب
موضوع	ماکرومولکولها -- ساختار -- نرم افزار
موضوع	ساختار مولکولی -- نرم افزار
شناسه افزوده	مولویان جزئی، حجت اله، ۱۳۵۹ -
شناسه افزوده	امیری، مسعود، ۱۳۲۲ -، ناظر
رده بندی کنگره	۱۳۹۲ ۷۵۲ ۷۲۸/۱ ۵۲۷/۷ ۵۲۷/۷
رده بندی دهی	۵۲۷/۷
شماره کتابشناسی ملی	۲۳۹۶۰۲۵



نشر دایان

مدیر بخش: ۰۹۱۲۴۹۵۲۰۵۷

عنوان	طراحی ماکرومولکولهای زیستی Argus Lab :
ناشر	انتشارات دایان :
ترجمه و تألیف	جواد مسفاری چالشتری، حجت اله مولویان جزئی :
لیتوگرافی	صبا :
چاپ	شادیران :
نوبت چاپ	اول / ۱۳۹۲ :
صفافی	آرمان :
تیراژ	۱۰۰۰۰ نسخه :
شابک	۹۷۸-۶۰۰-۹۴۳۰۱-۱-۶ :
قیمت	۱۳۰۰۰ تومان :

فهرست

۵	 مقدمه
۷	 پیشگفتار
۹	 پیشگفتار سازنده برنامه
۱۱	 ۱- نصب و راه‌اندازی برنامه
۱۴	 ۲- رسم مولکول
۱۹	 ۳- حرکت مولکول
۲۱	 ۴- جعبه ابزار
۲۳	 ۵- ویرایش مولکول
۲۳	 الف- ابزار ویرایش اتم
۲۷	 ب- ابزار ویرایش پیوند
۲۸	 ج- ابزار جانبی
۳۱	 ۶- ساختن پلی‌پپتید
۳۲	 ۷- بهینه‌سازی هندسی
۳۵	 ۸- مشاهده اوربیتال‌های مولکولی
۳۶	 ۸-۱- ایجاد یک اوربیتال مولکولی با استفاده از شبکه داده
۳۸	 ۸-۲- مشاهده اوربیتال‌های مولکولی
۴۱	 ۹- ساختن نقشه توزیع پتانسیل الکتروستاتیکی روی چگالی سطح الکترون
۴۲	 ۹-۱- مراحل ایجاد و نمایش (ESP) پتانسیل الکتروستاتیکی
۴۷	 ۹-۲- مشاهده چگالی جفت الکترون روی اکسیژن
۵۱	 ۱۰- زمانی که یک مولکول نور جذب می‌کند دچار چه تغییراتی می‌شود؟
۵۱	 ۱۰-۱- محاسبه طیف جذب الکترونی
۵۴	 ۱۰-۲- اختلاف چگالی الکترون
۵۷	 ۱۰-۳- اختلاف پتانسیل الکتروستاتیکی
۶۰	 ۱۰-۴- ترسیم اختلاف پتانسیل الکتروستاتیک بر روی چگالی الکترون
۶۴	 ۱۱- ابزار صفحه برش
۶۸	 ۱۲- اتصال مولکولی (مبحث طراحی دارو)
۶۸	 ۱۲-۱- اتصال مهارکننده مولکوی بن‌آمین به پروتئین بتاتریپسین

فهرست

۸۱	 HK263 یک مهارکننده برای آنزیم HIV Protease
۸۸	 ArgusLab مباحثی دیگر از برنامه
۸۸	 ۱-۱۳ تصاویر خروجی برنامه
۸۹	 ۲-۱۳ تنظیمات نمایشی هندسی
۹۰	 ۳-۱۳ استفاده تخصصی از جدول تناوبی
۹۱	 ArgusLab محاسبات
۹۲	 Single-Point Energy محاسبه ۱-۴-۱۳
۹۹	 Electronic Excitation Spectra محاسبه ۲-۴-۱۳
۱۰۷	 Optimizing the Geometry محاسبه ۳-۴-۱۳
۱۱۳	 ArgusLab فایل خروجی ۵-۱۳
۱۱۵	 ArgusLab واحدهای مورد استفاده در ۶-۱۳
۱۱۶	 ۷-۱۳ تنظیمات پیشرفته

نقش سلامت در ارتقای شاخص‌های توسعه انسانی انکارناپذیر است؛ بنابراین مبارزه با عواملی که سلامت را تحت تأثیر قرار داده از اولویت‌های همه افراد درگیر با سلامت جامعه، به ویژه متخصصان علوم زیستی، بهداشتی و پزشکی محسوب می‌شود. با توجه به توسعه روزافزون علم و پیشرفت‌های شگفت‌انگیز در تمامی زمینه‌ها از جمله علوم زیستی و علوم مرتبط با سلامت، نیاز به یادگیری علوم جدیدی مانند بیوانفورماتیک و آگاهی از کاربرد آن در سایر علوم به ویژه شیمی، بیوشیمی، ژنتیک، بیولوژی مولکولی و ... اجتناب‌ناپذیر می‌باشد. از سوی دیگر امروزه نمی‌توان پژوهشی در این زمینه‌ها را بدون استفاده از رایانه تصور نمود. نرم‌افزارهای رایانه‌ای و پایگاه‌های اطلاعاتی بسیار متنوعی با کارآیی‌های گوناگون پدید آمده‌اند که یادگیری نحوه به کارگیری آنان، کمک فراوانی به پژوهشگران می‌نماید.

مرکز تحقیقات عوامل اجتماعی مؤثر بر سلامت دانشگاه علوم پزشکی شهرکرد، در راستای توانمندسازی علمی پژوهشگران، اقدام به نشر یکی از نرم‌افزارهای ارزنده (ArgusLab) در زمینه طراحی ساختارهای مولکولی و بررسی تعامل بین مولکولی نموده است تا با یاری بخشیدن به دانشجویان و پژوهشگران در درک و فهم ساختار فضایی مولکول‌ها، مقدمه‌ای برای آشنایی با سایر نرم‌افزارهای بیوانفورماتیک نیز باشد. امید است که این کتاب بتواند راهنمای مناسبی برای پژوهشگران گرامی باشد.

دکتر محمود امیری

رئیس مرکز تحقیقات عوامل اجتماعی مؤثر بر سلامت

دانشگاه علوم پزشکی شهرکرد