

عنوان مقاله:

بررسی کوانتوم مکانیکی جریان حلقه و جابجایی شیمیایی در آنتی بیوتیکهای بتا لاکتام

محل انتشار:

همایش ملی یافته های نوین شیمی در صنعت پزشکی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 3

نویسندگان:

رویا احمدی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهر ری

سید علی اکبر سالاری

الهام برزگر

لیلا کیوانفر

خلاصه مقاله:

در آنتی بیوتیکها بتالاکتام Oxacillin, Cloxacillin, Dicloxacillin. یک حلقه آروماتیک وجود دارد تفاوت آنها در تعداد هالوژن های روی این حلقه است. محاسبات و بررسی ها نشان می دهد که میزان آروماتیسیته در Dicloxacillin بیشترین مقدار را دارد و با کم شدن تعداد کلر در کاهش می یابد. همچنین با افزایش کلر در Cloxacillin و Oxacillin این ترکیبات جابجایی شیمیایی هیدروژنهای حلقه به سمت میدان مغناطیسی بالا جابجا می شود. همه محاسبات در فاز گازی انجام شده است. محاسبات برای اتمها در سری پایه 6 - 31G* با روش هارتری فاک و با برنامه گوسین 98 انجام شده است.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/71090>

