

عنوان مقاله:

محاسبات ابینیشو رزناس مغناطیس هسته ای در داروی آنتی میکروبیال سولفامرازین و بررسی تغییرات آن با هالوژنهای مختلف

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

خدیجه کلاته

فرخ رویا نیکمرام

سمیه کویایی ملک

خلاصه مقاله:

سولفامرازین، 44-(N-متیل-2-پیریمیدینیل) سولفانیل آمید از واکنش بین 4-استیل آمینو بن - زنسولفونیل کلراید و 2-آمینو 4-متیل پیریمیدین سنتز می شود که سنتز آن به طور معمول به سنتز مشتقاتی از پیریمیدین مربوط می شود. محاسبات و بررسی های رزناس مغناطیسی هسته ای نشان می دهد که با تغییر هالوژن متصل به حلقه محتوی دو نیتروژن، در این ترکیبات جابجایی شیمیایی هیدروژنهای آن حلقه در میدان مغناطیسی 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/71091>

