

研究论文

头孢类抗生素定量结构-活性关系的密度泛函研究

孙钦超, 冯大诚

山东大学化学与化工学院, 济南 250100

收稿日期 2006-8-7 修回日期 网络版发布日期 2007-4-7 接受日期

摘要 用量子化学密度泛函方法B3LYP对9种头孢类抗生素的电子结构进行了理论计算, 并对它们进行了定量构效关系研究. 建立了头孢类抗生素分子的结构-活性数学模型: 头孢类抗生素的抑菌活性与 Q_{C8} , Q_{C7} 以及偶极距(Dipole)呈正相关关系.

关键词 [头孢类抗生素](#) [量子化学](#) [密度泛函方法](#) [定量构效关系](#)

分类号 [0641](#)

DFT Study and Quantitative Structure-activity Relationship for Cephalosporin Derivatives

SUN Qin-Chao, FENG Da-Cheng*

College of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China

Abstract The molecular structures of nine kinds of cephalosporin derivatives were optimized by using density functional theory(DFT)B3LYP method of quantum chemistry, and the quantitative structure-activity relationship of these cephalosporin derivatives was systematically studied. The structure-activity model of cephalosporin derivatives was found: Q_{C8} , Q_{C7} , dipole had positive correlation on the activities of cephalosporin derivatives.

Key words [Cephalosporin derivative](#) [Quantum chemistry](#) [Density functional method](#) [Quantitative Structure-activity relationship\(QSAR\)](#)

DOI:

通讯作者 冯大诚 fdc@sdu.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(328KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ 本刊中 [包含“头孢类抗生素”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [孙钦超](#)
- [冯大诚](#)