

## Opis oddziaływań niekowalencyjnych wybranych penicylin metodami chemii obliczeniowej = Non-covalent interactions description of selected penicillins in the framework of computational chemistry

### Autorzy

Kamil Wojtkowiak

Aneta Jezierska

Jarosław J. Panek

### Rok wydania

2024

### Czasopismo

Chemik

### Numer woluminu

73

### Strony

66-72

### DOI

10.15199/5.2024.1.5

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Polski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

Intra- and intermolecular non-covalent interactions play an important role in modern design of biologically active compounds. In the paper, we discuss the physicochemical features of three selected compounds from penicillin group – Oxacillin, Ampicillin and Penicillin G. Quantum-chemical simulations on the basis of Density Functional Theory (DFT) were carried out for these compounds. The analyses were performed for selected metric parameters as well as electronic structure (QTAIM and NCI index) of the fused rings and the whole molecules. The simulations were done in the gas phase and taking into account the influence of the polar environment – CPCM model and water as a solvent. The last part of the study is devoted to the non-covalent interactions analysis in the binding site of the penicillins. The presented results are in line with the Computer-Aided Drug Design (CADD) philosophy.

Oddziaływania niekowalencyjne wewnątrz- i międzycząsteczkowe mają kluczowe znaczenie w nowoczesnym projektowaniu związków aktywnych biologicznie. W artykule omawiamy właściwości fizykochemiczne trzech wybranych związków z grupy penicylin - oksacyliny, ampicyliny i penicyliny G. Dla tych związków zostały wykonane symulacje kwantowo-chemiczne wykorzystując teorię funkcjonału gęstości (DFT). Analizowane były wybrane parametry metryczne, jak również struktura elektronowa (teoria QTAIM i indeks NCI) skondensowanych pierścieni, jak i całych cząsteczek. Symulacje zostały wykonane w fazie gazowej, jak również z uwzględnieniem polaryzacji otoczenia – model CPCM i wody jako rozpuszczalnika. Ostatni fragment badań stanowi analiza oddziaływań niekowalencyjnych pomiędzy opisywanymi penicylinami a ich miejscem wiążącym. Przedstawione wyniki badań wpisują się w założenia komputerowo wspomaganego projektowania leków.

Słowa kluczowe

---

CADD, penicillins, noncovalent interactions, DFT, QTAIM, NCI

CADD, penicyliny, oddziaływania niekowalencyjne, DFT,  
QTAIM, NCI

Adres publiczny

---

<http://dx.doi.org/10.15199/5.2024.1.5>

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-20 23:04:55

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/ojsViD>.