

УДК 539.194: 535.37

ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ 3,5-ДИБРОМ-1-(ТИЕТАНИЛ-3)-1,2,4-ТРИАЗОЛА

Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: SN_Tseplina@mail.ru

Производные 1,2,4-триазола широко используется в медицине в качестве лекарственных препаратов для лечения грибковых и вирусных инфекций, рака, психических расстройств, заболеваний сердечнососудистой системы. В настоящее

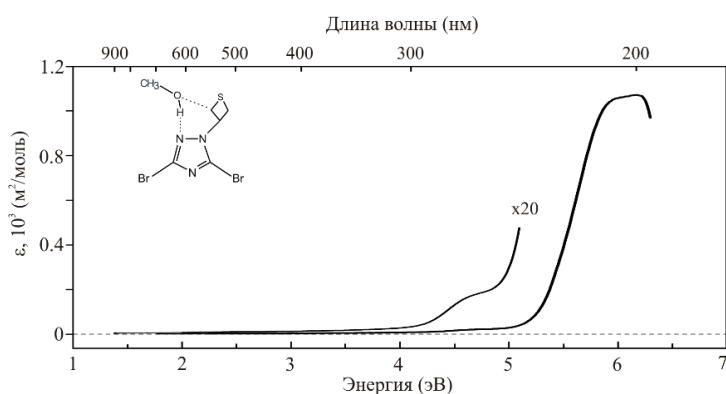


Рис. 1. Спектр поглощения 3,5-дибром-1-(тиетанил-3)-1,2,4-триазола в растворе метанола

время активно продолжается поиск новых лекарственных средств на основе 1,2,4-триазола, которые обладают высокой биологической активностью. Вместе с тем необходимо исследование их электронного строения, так как оно во многом обуславливает механизм их действия.

Получен спектр поглощения недавно синтезированного 3,5-дибром-1-(тиетанил-3)-1,2,4-триазола в растворе метанола (рис. 1). Выполнен расчет TDDFT B3LYP/6-311+G(d,p) электронного спектра водородного комплекса молекулы с молекулой метанола. На основании сопоставления данных расчета и данных спектроскопии поглощения определены энергии и электронные конфигурации электронно-возбужденных синглетных состояний.