

ЗАМІЩЕНІ 1,2,4-ТРИАЗОЛИ: DFT ДОСЛІДЖЕННЯ

Пидипенко О. О.^{1,2}, Оковитий С. І.², Святенко Л. К.¹, Сергєєва Т.², Коваленко С. І.³

¹Донецький національний медичний університет, м. Кропивницький, Україна

²Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, м. Дніпро, Україна

³Запорізький державний медичний університет, м. Запоріжжя, Україна

lksv@online.ua

З використанням азаетероциклічних сполук пов'язані значущі успіхи у сфері лікарських засобів. Поєднання пірольного або індольного гетероциклів з 1,2,4-триазоловою системою у одній молекулі з великою ймовірністю призведе до створення нових біологічно активних речовин.

У даній роботі здійснено квантово-хімічне дослідження структури та енергетичних характеристик нещодавно синтезованих 5-заміщених 3-(2-амінофеніл)-1,2,4-триазолів із замісниками пірол-2-іл та індол-2-іл (рис. 1). Оптимізація геометрії, розрахунок енергій молекулярних орбіталей та моделювання УФ-спектру у метанолі проведено методом SMD/M06-2X/6-311++G(d,p) за допомогою програми Gaussian09.

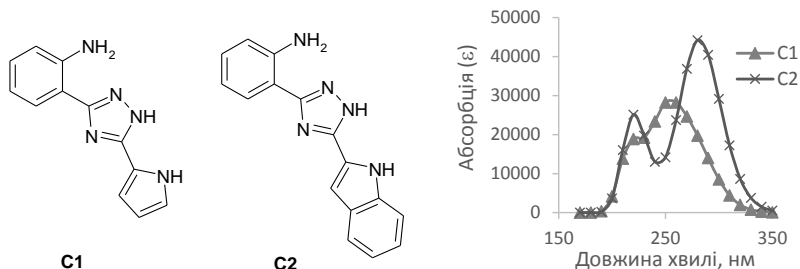


Рис. 1. Структура та змодельовані УФ-спектри заміщених 1,2,4-триазолів

Досліджено вплив замісників на величину енергій молекулярних орбіталей, зарядів атомів та УФ-спектр. Проаналізовано індекси реакційної здатності сполук та відповідність даних сполук правилу п'яти, що визначає залежність біологічних властивостей сполук від молекулярних властивостей.