

ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ**1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ТИОНА**Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е.*Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН**г. Уфа, пр. Октября, 151, SN_Tseplina@mail.ru*

Триазолы и их производные обладают высокой и разнообразной биологической активностью. Соединения, относящиеся к 1,2,4-триазольному ряду, являются перспективными противоопухолевыми, антидепрессивными и противотуберкулезными фармакологическими препаратами. Вместе с тем механизм их действия во многом обусловлен их электронным строением.

Получен спектр поглощения 1,2,4-триазол-5-тиона в растворе метанола (Рис. 1). Показано, что молекула 1,2,4-триазол-5-тиона в растворе метанола образует водородный комплекс с двумя молекулами метанола. На основании расчета TDDFT B3LYP/6-311+G(d, p) электронного спектра водородного комплекса установлены электронные конфигурации электронно-возбужденных синглетных состояний 1,2,4-триазол-5-тиона.

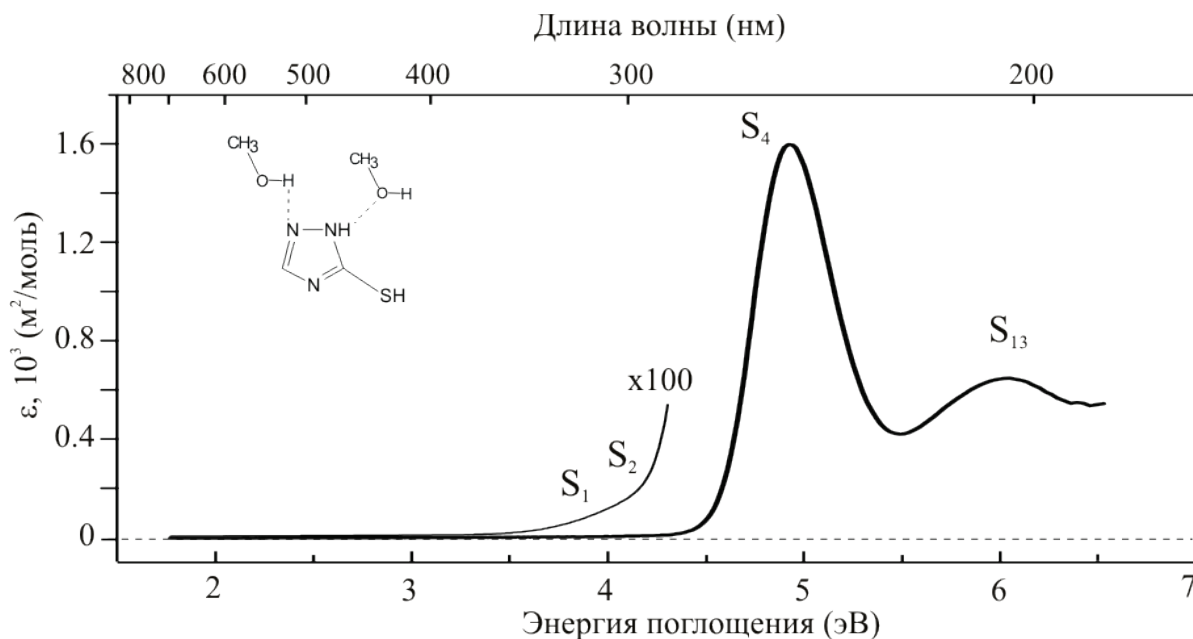


Рис. 1. Спектр поглощения 1H-1,2,4-триазол-5-тиона в растворе метанола.