

Исследование природы водородных связей в 3,5-диметилпиразоле

© Волкова^{1*} Татьяна Геннадьевна, Чичерин¹ Константин Алексеевич
и Таланова²⁺ Ирина Олеговна

¹ Кафедра органической и физической химии. Ивановский государственный университет.
ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: 8 (4932) 37-37-03. E-mail: tgvolkova@yandex.ru.

² Кафедра биохимии. Ивановская государственная медицинская академия. Шереметевский пр., 8.
г. Иваново, 153012. Россия. Тел.: 8 (908) 569-72-43. E-mail: i75@list.ru.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пиразол, водородносвязанные мотивы, водородные связи, надмолекулярная структура.

Аннотация

Соединения, содержащие в своей структуре пиразольный фрагмент, входят в состав многих лекарственных средств и обладают широким спектром проявляемой биоактивности (например, антимикробной, противотуберкулезной и другие), а также успешно применяются для разработки различных синтетических противоопухолевых средств. Интерес к ним вызван и наличием водородных связей, которые являются основным мотивом при самоорганизации молекул. Проведено теоретическое исследование природы водородных связей в различных водородносвязанных мотивах в 3,5-диметилпиразоле методом DFT/B3LYP/6-31G(d,p). Полученные результаты свидетельствуют о возможном существовании димерной, тримерной и тетрамерной циклических форм. Определены геометрические и энергетические параметры водородных связей N-H \cdots N и рассчитаны энергии донорно-акцепторного взаимодействия в возможных формах самоорганизации молекул исследуемого соединения. Установлено: водородная связь (H-связь) является результатом взаимодействия гибридной неподеленной пары атома азота одной молекулы и разрыхляющей натуральной орбитали между атомами азота одной молекулы и водорода другой молекулы (σ^* N-H). Образование связывающей σ -орбитали H-связи свидетельствует о преобладании в водородной связи ковалентного взаимодействия. Проведенное исследование и анализ полученных результатов показали, что при образовании супрамолекулярных систем 3,5-диметилпиразола наиболее вероятными структурами являются тримеры и тетрамеры.