

Королевич М.В., д.ф.-м.н., доцент
УО «Белорусский государственный аграрный технический
университет», Минск, Республика Беларусь
СТРУКТУРА И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТИЛ-
И НИТРОПРОИЗВОДНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
ГЛЮКОПИРАНОЗИДОВ

Ключевые слова: ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, метил- и нитропроизводные глюкопиранозидов.

Работа демонстрирует эффективность использования теоретической колебательной спектроскопии и квантовой химии при установлении спектро-структурных корреляций для нитро- и метил- производных кристаллических глюкопиранозидов. Результаты расчетов позволили выявить спектроскопические признаки заместителей гидроксильных групп и оценить их характеричность. Выяснены спектро-аналитические возможности использования этих признаков.

Систематическое исследование в рамках одного метода большого ряда соединений одного класса с постепенно усложняющейся структурой молекул является весьма эффективным средством установления закономерностей, связывающих колебательные спектры со строением молекул. Такие исследования, проводимые на основе корректно построенной теоретической модели, приводят не только к адекватной интерпретации имеющихся экспериментальных данных, но и позволяют предсказывать спектро-структурные свойства соединений.

В данной работе представлены результаты исследования, нацеленного на установление природы спектроскопических признаков оксиметильных групп в ИК спектрах практически важных соединений метил-β-D-глюкопиранозидов и нитратов β-D-глюкопиранозидов и выяснение спектроаналитических возможностей использования этих признаков при исследовании структуры производных моносахаридов.

Поставленная задача состояла в последовательном проведении полных расчетов ИК спектров следующих объектов с постепенно усложняющейся структурой: метил-β-D-глюкопиранозид (1Me), 4-O-метил-β-метил-D-глюкопиранозид (4Me1Me), 4-O-метил-2,3-ди-O-нитро-метил-β-D-глюкопиранозид (4Me2,3диНМГ), 4-O-метил-2,3,6-три-O-нитро-метил-β-D-глюкопиранозид (4Me2,3,6триНМГ). Для расчетов использован оригинальный программный комплекс [1], комбинирующий классический анализ частот нормальных колебаний с квантово-химическим вычислением абсолютных интенсивностей ИК полос поглощения. При выполнении поставленной задачи анализировались экспериментальные ИК спектры кристаллических образцов β-D-глюкозы, 1Me, 2,3диНМГ и 4Me2,3,6триНМГ [2]. Теоретиче-

ские спектры исследуемых соединений получены путем моделирования и сложения контуров индивидуальных полос, описываемых функцией Гаусса.

На основе сопоставления результатов согласованных расчетов частот нормальных колебаний и интенсивностей ИК полос поглощения с соответствующими экспериментальными данными для исследуемого ряда избирательно замещенных глюкопиранозидов выявлены спектроскопические признаки оксиметильной группы у атома $C_{(1)}$ в 1Me и установлена их характеристичность при введении дополнительного оксиметильного заместителя.

Детально изучены валентные колебания метильных CH_3 , метиленовых CH_2 и метинных CH групп 1Me, 4Me1Me, 2,3,диНМГ, 2,3,6триНМГ и 4Me2,3,6триНМГ и объяснены спектральные изменения в области проявления этих колебаний $3020-2800\text{ см}^{-1}$ при избирательном метил- и нитрозамещении в β -D-глюкозе. Показано, что в спектрах производных глюкопиранозидов при переходе от одного соединения к другому наблюдаемые в области $3020-2880\text{ см}^{-1}$ частотные сдвиги сложных полос, обусловленные высоко характеристичными по частоте и форме валентными CH колебаниями, могут быть связаны с изменением интенсивностей колебаний при постоянстве их частот (рисунок 1). Неизменной по расположению при избирательном замещении остается полоса симметричных валентных CH колебаний метильных групп при 2853 см^{-1} , интенсивность которой аддитивно возрастает с увеличением количества метильных заместителей.

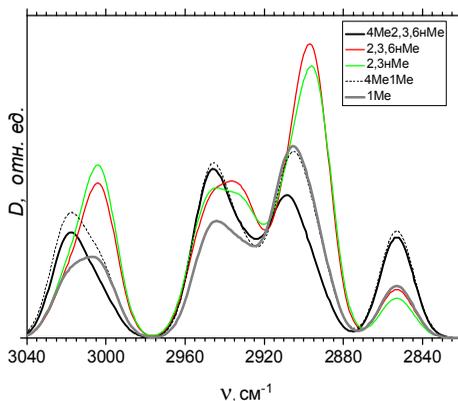


Рисунок 1 – Теоретические ИК спектры поглощения 4Me2,3,6нMe, 2,3,6нMe, 2,3нMe, 4Me1Me и 1Me в диапазоне $3040-2820\text{ см}^{-1}$

Детальная интерпретация характерных спектральных признаков производных глюкопиранозидов имеет большое практическое значение, поскольку непосредственно связана с идентификацией соединений и направленным изменением их практически ценных свойств.

Список использованных источников

1. Королевич М.В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов: Дисс. ... д-ра физ.-мат. наук. – Минск, 2009. – 333 с.
2. Королевич М.В., Андрианов В.М., Чернявский В.В., Болодон В.Н., Ветрова В.Т., Быкова С.Л. Автоматизированный компьютерный анализ спектро-структурных корреляций сложных органических соединений // Материалы международной научно-технической конференции «Энерго-сбережение – важнейшее условие инновационного развития АПК», Минск, 23-24 ноября 2017 года, с. 321-323. – Минск: БГАТУ, 2017.

**Королевич М.В., д.ф.-м.н., доцент, Андрианов В.М., д.ф.-м.н.,
Болодон В.Н., к.биол.н., доцент, Быкова С.Л.,
Дымонт В.П., к.ф.-м.н., доцент**

***УО «Белорусский государственный аграрный технический
университет», Минск, Республика Беларусь***

КОМПЛЕКСНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БАЗ ДАННЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИК СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ СТРОЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Ключевые слова: ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, структура сложных органических соединений.

Представлена методика комплексного эмпирического и теоретического компьютерного моделирования ИК спектров сложных органических соединений на основе аналогии фрагментных составов структур и расчетов частот и интенсивностей нормальных колебаний, заложившая основы спектроскопической информационной системы нового поколения, позволяющей эффективно решать задачи прогноза строения соединения и его спектральных свойств с аргументированной интерпретацией получаемого результата.

Данная работа иллюстрирует возможность практического использования разработанных методов теоретического моделирования спектров [1] в интегрированной компьютерной информационной системе (ИС) для решения прямых и обратных задач по ИК спектроскопии.

В последнее время для диагностики веществ наряду с традиционными приемами, основанными на корреляционных таблицах, все шире применяются компьютерные спектроскопические системы, содержащие крупномасштабные базы данных (БД) о спектрах соединений. Они позволяют идентифицировать анализируемое вещество, если его спектр есть в БД. Однако число существующих органических соединений намного больше (на несколько порядков) объема имеющихся БД, а структура многих при-