

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-

родных соединений все еще неизвестна. Отсутствие в этих системах средств прогноза спектров для множества предполагаемых структур не позволяет сделать выбор наиболее правдоподобной структуры, сдерживает развитие самих систем и ограничивает область их использования.

Исследования, проводимые нами совместно с Новосибирским Институтом органической химии СО РАН, привели к созданию ИС «ИК ЭКСПЕРТ» нового поколения, основанной на использовании БД «спектр – фрагментный состав» соединений и согласованном применении взаимодополняющих методов эмпирического и теоретического моделирования ИК спектров сложных соединений.

Уникальность этой системы состоит: во-первых, в наличии в ее базе данных не только большого числа (многих десятков тысяч) спектров органических соединений, но и спектральных признаков большого количества (~110000) структурных фрагментов молекул, которые составляют основу строения огромного числа органических соединений; во-вторых, в разработке оригинальной системы манипулирования этими данными для определения строения веществ по их ИК спектрам и, наоборот, ИК спектра соединения по известному строению молекул. Спектральный поиск по заданному спектру с помощью «ИК ЭКСПЕРТ» позволяет решать не только традиционную задачу идентификации вещества, но и ряд более сложных, например, установление особенностей строения соединения, не представленного своими записями в БД.

Блок-схема системы комплексного эмпирического и теоретического моделирования ИК спектров органических соединений представлена на рисунке 1. Система эмпирического моделирования (путь *A*, рисунок 1) позволяет решать следующие основные задачи: проводить поиск спектральных аналогов; анализировать структуры отбираемых при этом соединений; формировать списки наиболее вероятных структурных фрагментов исследуемого соединения; моделировать ИК спектры гипотетических структур с целью сопоставления со спектром изучаемого соединения. Окончательный выбор структуры среди вероятных (предполагаемых) может быть сделан на основе проверки соответствия моделированных спектров экспериментальному (путь *B*, рисунок 1). Метод расчета спектра выбирают в зависимости от сложности структуры соединения и характера спектра.

Достоинства и результативность созданной ИС будут возрастать с дальнейшим ростом БД типа «ИК спектр – структура соединения». Она найдет практическое применение при изучении строения и свойств соединений, в аналитической практике служб контроля и охраны окружающей среды, контроля технологических процессов, создания новых видов материалов и продуктов медицинских, пищевых, химических производств и т.п.

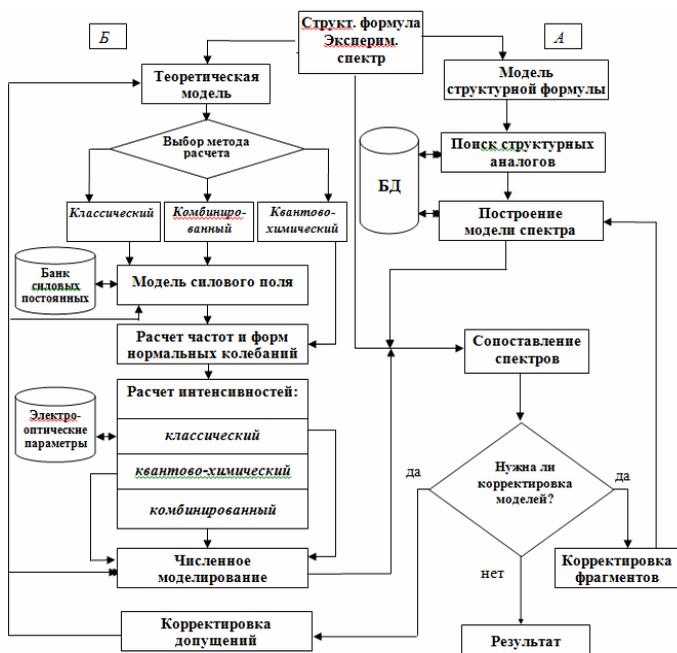


Рисунок 1 – Блок-схема системы комплексного эмпирического и теоретического моделирования ИК спектров органических соединений

Список использованных источников

1. Королевич М.В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов: Дисс. ... д-ра физ.-мат. наук. – Минск, 2009. – 333 с.

**Мисевич А.В., к.ф.-м.н., доцент; Лапко А.Н., ассистент
Учреждение образования «Белорусский государственный
технологический университет»**

**Долгий В.К., к.ф.-м.н., доцент
УО «Белорусский государственный аграрный технический
университет», Минск, Республика Беларусь
ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ
НА ОСНОВЕ ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ И ПЕРИЛЕНА**

В последние годы интенсивно изучаются возможности применения органических материалов и сопутствующих им технологий для создания солнечных элементов, светоизлучающих диодов, химических сенсоров и элементов молекулярной электроники [1–3].