

Список использованных источников

1. Бобрович, О.Г. Морфология и свойства поверхности сплава АМг2М, модифицированного осаждением титана в условиях ионного ассистирования / О.Г. Бобрович, В.В. Яскельчик // Труды БГТУ. – №2 (224): Физ.-мат. науки и информатика. – 2019. – С. 113–117.

2. Морфология и смачиваемость поверхности структур пленка Мо, Al, Al+1ат.%Cr/стекло, сформированных ионно-ассистированным осаждением / Михалкович О.М. [и др] // Материалы 11-я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом», Минск, Беларусь, 23–25 сентября 2015 г., Минск: Изд. центр БГУ, 2015. – С. 248–250.

**Королевич М.В., д.ф.-м.н., доцент, Андрианов В.М., д.ф.-м.н.
УО «Белорусский государственный аграрный технический
университет», Минск, Республика Беларусь**

**СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ
МОНОСАХАРИДОВ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОГО,
ТЕХНИЧЕСКОГО И МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ**

Практически ценные свойства высокомолекулярных соединений, в частности, материалов на основе углеводов, в значительной степени определяются особенностями их физической структуры на молекулярном уровне – распределением определенных связей и структурных фрагментов молекул, их пространственной ориентацией, поворотной изомерией, системой внутри- и межмолекулярных взаимодействий. Именно эти тонкие детали строения молекулярных соединений наиболее отчетливо и избирательно проявляются в колебательных спектрах. Колебательный спектр в инфракрасной (ИК) области представляет собой своеобразную фотографию вещества, несет уникальную информацию о его строении и свойствах.

Исследования, связанные с изучением физической структуры и свойств производных моносахаридов и выработкой рекомендаций по их использованию в процессах получения промышленных изделий с требуемыми техническими характеристиками, немислимы без применения современных возможностей молекулярной спектроскопии. Методы молекулярного спектрального анализа позволяют без

разложения веществ, в их естественном виде, проводить одновременный высокоизбирательный и экспрессный анализ как их химического строения, так и физической структуры.

Наиболее полная и достоверная расшифровка наблюдаемых ИК спектров сложных органических соединений возможна лишь при тесном сочетании экспериментальных и теоретических методов колебательной спектроскопии, молекулярного моделирования и математической обработки экспериментальных спектров.

Надежное моделирование ИК спектров производных целлюлозы и эпоксисахаридов, анализ и интерпретация результата, основанные на комплексном использовании эмпирических и расчетных методов, явились целью данного исследования. Эпоксисахариды как промежуточные соединения присутствуют в химических реакциях, лежащих в основе синтеза многих углеводов сельскохозяйственного, медицинского и технического назначения. Детальная интерпретация характерных спектральных признаков исследованных объектов имеет большое практическое значение, поскольку непосредственно связана с идентификацией соединений и направленным изменением их практически ценных свойств.

В предыдущем сообщении была продемонстрирована эффективность совместного использования теоретической колебательной спектроскопии и квантовой химии при установлении структурных корреляций для нитро- и метилпроизводных глюкопиранозидов [1]. В данной работе проведена детальная интерпретация ИК спектров 2,3-ангидро-4-деокси- α -D-рибогексопиранозида, метил 3,4-ангидро- α -D-галогексопиранозида и нескольких модельных нитроцеллюлозе и гидроксипроцеллюлозе соединений на основе результатов полного расчета частот, распределений потенциальной энергии, абсолютных интенсивностей нормальных колебаний молекул и сопоставления теоретических результатов с соответствующими экспериментальными данными. Для теоретических расчетов спектров использован оригинальный комплекс программ [2].

Проанализировано проявление эпокси- и оксиметильной групп в ИК спектрах эпоксисахаридов и установлено влияние эпоксигруппы на полосы, характерные для пиранозного кольца. Экспериментальная и теоретическая спектральные кривые поглощения эпоксисахаарида метил 3,4-ангидро- α -D-галогексопиранозида изображены на рисунке 1.

В ИК спектрах гидроксипроцеллюлозы выявлены полосы поглощения, по изменению интенсивностей которых можно анализировать и контролировать процесс термического гелеобразования водных растворов простых эфиров целлюлозы, происходящий при нагревании растворов.

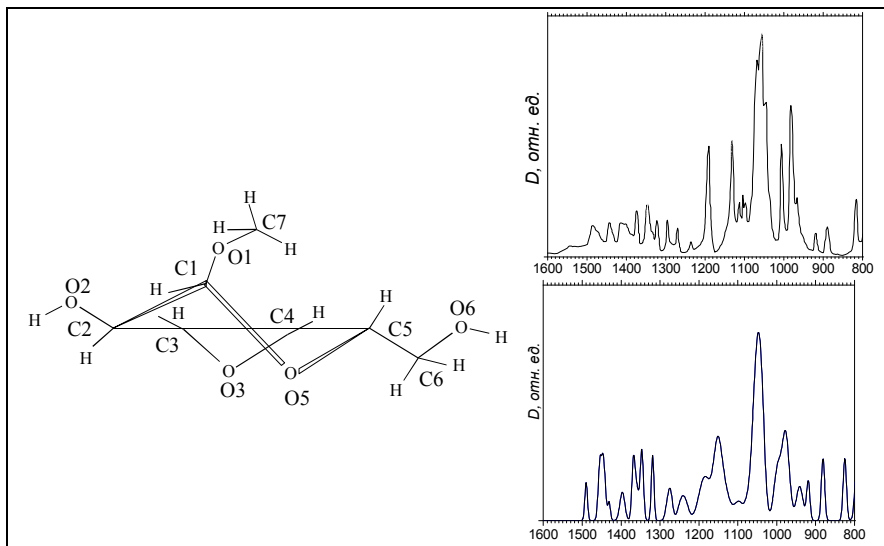


Рисунок 1 – Структура, экспериментальный (вверху) и теоретический (внизу) ИК спектры поглощения метил 3,4-ангидро- α -D-галактопиранозида в области 1600 – 800 см^{-1}

Практическая значимость данного исследования состоит в разработке рекомендаций по установлению взаимосвязи «спектр – структура – свойство» при проведении анализов структурных и химических превращений соединений эпоксисахаридов и целлюлозы сельскохозяйственного и технического назначения.

Список использованных источников

1 Королевич М.В. Структура и спектроскопические свойства метил- и нитропроизводных кристаллических глюкопиранозидов // Материалы международной научно-технической конференции «Энергосбережение – важнейшее условие инновационного развития

АПК», Минск, 19–20 декабря 2019 года, с. 273–275. – Минск: БГАТУ, 2019.

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

УДК 546.723+846.87

**Лубинский Н.Н., к.х.н., Слонская С.В., к.х.н., доцент
УО «Белорусский государственный аграрный технический
университет», Минск, Республика Беларусь
Глинская А.А., к.х.н., Петров Г.С., к.х.н., доцент
УО «Белорусский государственный технологический
университет», Минск, Республика Беларусь
ФЕРРИТЫ ВИСМУТА, ЛЕГИРОВАННЫЕ ЛАНТАНОМ,
ТИТАНОМ И КОБАЛЬТОМ КАК МАТЕРИАЛЫ
ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ ГАЗОВ**

В настоящее время во всех сферах производственной деятельности человека используется разнообразное количество опасных жидкостей, которые при неправильном и халатном обращении могут нанести вред здоровью человека, окружающей среде и материальный ущерб в случае производственной аварии. Исходя из этого, большой интерес представляет изучение материалов, которые могут применяться как газочувствительные слои химических сенсоров, для дальнейшего использования их в составе газоанализаторов, которые могут обнаруживать в воздухе содержание пожаровзрывоопасных паров при незначительных концентрациях.

Одним из самых интересных соединений, на основе которого создают новые магнитоэлектрические материалы, является феррит висмута $Bi_2Fe_4O_9$.

Целью данной работы являлось установление закономерностей влияния замещения ионов висмута Bi^{3+} ионами лантана La^{3+} , а также ионов железа Fe^{3+} ионами титана Ti^{4+} и кобальта Co^{2+} на электрические и сенсорные свойства твердых растворов на основе феррита висмута $Bi_2Fe_4O_9$ как перспективных материалов для создания химических сенсоров газов.

Исследование сенсорных свойств на присутствие в воздухе паров жидкостей бензина АИ-92, бутанола, этанола, бензола, четырёххло-