

УДК 535.33/34:539.194:547.455

Королевич М.В., д.ф.-м.н., доцент, Андрианов В.М., д.ф.-м.н.,
Шевченко А.А., к.т.н., доцент

*Белорусский государственный аграрный технический университет,
г. Минск*

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОСТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ СЛОЖНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ТЕХНИЧЕСКОГО И МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

При исследовании функциональных свойств практически важных соединений и разработке новых нанотехнологий, в частности, при создании веществ с заданными физическими свойствами или с определенной биологической активностью, по-прежнему, широко востребованы методы молекулярной спектроскопии.

Изучение спектров конкретных классов соединений нуждается в особых методических приемах и подходах, игнорирование которых может привести к значительному обеднению получаемой информации, а зачастую – к недостаточно обоснованным и ошибочным выводам. Решение данной проблемы, на наш взгляд, состоит в создании и использовании специального аналитически-справочного программного обеспечения методов молекулярной спектроскопии. Подобного рода подход реализован в интегрированной компьютерной системе комплексного эмпирического и теоретического компьютерного моделирования ИК спектров сложных органических соединений на основе аналогии фрагментных составов структур и расчетов частот и интенсивностей нормальных колебаний, предназначенной для решения двух видов задач [1-2]:

1. Идентификация и анализ неизвестного соединения.

2. Анализ спектроскопических и структурных свойств конкретного соединения.

Система состоит из двух частей: информационно-поисковой подсистемы, содержащей машинные каталоги спектральной информации, и вычислительной подсистемы, включающей необходимое программное обеспечение.

При анализе неизвестного соединения возможности системы используются в полном объеме. С помощью базы данных по ИК спектрам и структурным формулам ~32000 органических соединений проводится эмпирическое моделирование спектра искомого соединения и

генерирование его возможных структур. Далее для выявленной наиболее вероятной структуры искомого соединения проводится полный теоретический анализ ИК спектра молекул установленного соединения как в изолированном состоянии, так и с учетом молекулярного окружения, включающий расчет: 1) частот, форм, распределений потенциальной энергии нормальных колебаний; 2) декартовых смещений атомов из положений равновесия; 3) электронного строения; 4) абсолютных интегральных интенсивностей ИК полос поглощения.

В системе реализованы два метода полного расчета спектра: классический параметрический, основанный на валентно-оптической теории; нетрадиционный комбинированный, сочетающий расчет частот нормальных колебаний молекул классическим методом с квантово-химическим расчетом абсолютных интенсивностей полос поглощения.

Расчет интенсивностей в рамках оригинального комбинированного метода сводится к вычислению матриц I и II , полученных соответственно квантово-химическим и классическим методами, и к их перемножению ($I \times II$):

$$\left\| \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial Q_i} \right\| = \underbrace{\left(4.8|Z'| - 4.8|R \left| \frac{\partial q}{\partial r} \right| - 7.337|\zeta^{-1} \left| \frac{\partial P}{\partial r} \right| \right)}_I \underbrace{E\tilde{B}}_{II} \left\| L_p \right\|_i$$

Полный вид матриц, входящих в данное выражение, и подробное описание алгоритма расчета приведены в [1].

Метод расчета спектра выбирается в зависимости от сложности структуры соединения и характера его спектра.

Данный программный комплекс дает возможность детально интерпретировать ИК спектры органических соединений различных классов, предсказывать эффекты влияния на них межмолекулярных взаимодействий.

В рамках рассматриваемой системы выполнены полные теоретические расчеты колебательных спектров ряда метил- и эпоксипроизводных моносахаридов медицинского и технического назначения, а также нескольких представителей класса брассиностероидов. На основе полученных результатов в данной работе дана детальная интерпретация характерных спектральных признаков производных моносахаридов. Установлено, что спектроскопические признаки оксиметильных заместителей в глюкопиранозидах сохраняют свою характеристичность при сопряжении пиранозного кольца с оксирановым циклом. Результаты моделирования спектральных кривых поглощения для всех

промежуточных форм эпоксипиранозного цикла могут быть использованы для контроля течения химических реакций с участием ангидросахаров и предсказания конечных продуктов исследуемых реакций.

На основе сопоставления результатов теоретического моделирования спектров молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона с их экспериментальными ИК спектрами впервые дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических ИК полос поглощения в области частот 1500–900 см⁻¹. Показано, что наличие дополнительной группы С2Н₂ в (22S,23S)-28-гомокастастероне сказывается на интенсивности полос поглощения ИК спектра с максимумами 1383 и 1014 см⁻¹.

Полученные результаты имеют большое практическое значение для идентификации и направленного синтеза соединений с заданным комплексом свойств.

Список использованной литературы

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 «Энергосбережение – важнейшее условие инновационного развития АПК», Минск, 23-24 ноября 2017 года, с. 321-323. – Минск: БГАТУ, 2017.

УДК 666.321–033

**Сергиевич¹ О.А., к.т.н., Шевченко² А.А., к.т.н., доцент,
Ткачик¹ М.А.**

*¹Белорусский государственный технологический университет,
г. Минск*

*²Белорусский государственный аграрный технический университет,
г. Минск*

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАОЛИНОВЫХ СУСПЕНЗИЙ БЕЛОРУССКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ «СИТНИЦА»

Самым распространенным глинообразующим силикатным минералом является каолинит, который имеет химическую формулу