4. Павленко В. Н., Павленко В. И. Совершенствование технологии возделывания сои и нута в Нижнем Поволжье // Научно-агрономический журнал. 2016. №2 (99). С. 46–47.

5. Семененко А. С. Приемы возделывания нута в сухостепной зоне каштановых почв Нижнего Поволжья // Аграрный научный журнал. 2017. №9. С. 32–37.

УДК 539.194:547.455

МЕТОД И РЕЗУЛЬТАТЫ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПРАКТИЧЕСКИ ВАЖНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОГО И ТЕХНИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

М.В. Королевич, д-р физ.-мат. наук, доцент,
В.М. Андрианов, д-р физ.-мат. Наук,
А.А. Шевченок, канд. техн. наук, доцент

УО «Белорусский государственный аграрный технический университет», г. Минск, Республика Беларусь
korolevi@dragon.bas-net.by

Аннотация: Выполнены согласованные расчеты частот и интенсивностей нормальных колебаний молекул биурета, моноэтаноламина и гидроксиэтилцеллюлозы. Установлены спектро-структурные корреляции, проявляющиеся в ИК спектрах поглощения изучаемых объектов, и закономерности формирования структуры сложных аналитически важных полос поглощения.

Abstract: Consistent calculations of the frequencies and intensities of normal vibrations of biuret, monoethanolamine, and hydroxyethylcellulose molecules were carried out. Spectrostructural correlations, which are manifested in the IR absorption spectra of the objects under study, and regularities in the formation of the structure of complex analytically important absorption bands were established.

Ключевые слова: анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, гидроксиэтилцеллюлоза.

*Keywords*s: normal coordinate analysis, absolute IR intensities, hydroxyethyl cellulose.

Введение. При разработке новых нанотехнологий производства продукции растениеводства с требуемыми техническими характеристиками широко применяются современные методы колебательной спектроскопии для исследования структуры и свойств сложных молекулярных соединений и выработки рекомендаций по их использованию.

Колебания молекул – одна из наиболее фундаментальных характеристик строения и свойств химических соединений. Они определяются строением молекул, их составом, химическими связями

и пространственным расположением атомов, системой внутри- и межмолекулярных взаимодействий. Именно эти параметры определяют все основные физические, химические, биологические и технически ценные свойства молекулярных объектов.

В данной работе представлены результаты применения оригинального комбинированного подхода [1] к анализу ИК спектров относительно простых соединений биурета, моноэтаноламина, а также сложного полисахарида гидроксиэтилцеллюлозы (ГЭЦ).

Основная часть. Оригинальный метод согласованного расчета частот и интенсивностей нормальных колебаний многоатомных молекул, названный комбинированным [1], сочетает классический анализ нормальных колебаний с квантово-химическим расчетом абсолютных интенсивностей полос поглощения. Расчет интенсивностей в рамках данного метода сводится к вычислению матриц *I* и *II*, полученных соответственно квантово-химическим и классическим методами, и к их перемножению (*I*×*II*):

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

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

Результаты анализа нормальных колебаний молекул биурета и моноэтаноламина явились составной частью исследований термодинамической устойчивости конформеров и таутомеров для ряда аминов и амидов. Прогнозирование термодинамических свойств биурета на основе данных анализа нормальных колебаний позволило обосновать оптимальные режимы осуществления химико-технологического процесса синтеза аммиака в присутствии биурета.

Различия теоретических спектров построенных молекулярных структурных моделей 2,6-ГЭЦ для 20 и 70^0С, обусловленные изменением конформаций боковых эфирных групп, соответствуют наблюдаемому перераспределению интенсивностей ИК полос поглощения в области 1200–900 $см^{-1}$ при повышении температуры (рис. 1).

Следовательно, по изменению интенсивностей полосы поглощения в области 1200–900 $см^{-1}$ можно анализировать и контролировать процесс термического гелеобразования водных растворов простых эфиров целлюлозы, происходящий при нагревании растворов.

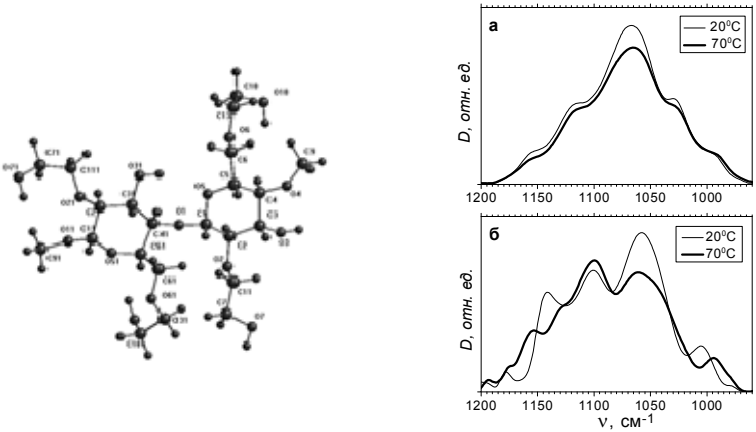

Рисунок 1 – Экспериментальные (а) и теоретические (б) ИК спектры поглощения водного раствора 2,6-ГЭЦ при температурах 20 и 70°С в диапазоне 1200–960 см$^{-1}$

Заключение. Результаты расчета позволяют объяснить наблюдаемые спектры биурета наличием в исследуемых образцах двух изомерных форм, а также вычислить термодинамические функции биурета, необходимые для проведения термодинамического анализа промышленно важного процесса аммонолиза биурета.

Показано, что одним из факторов термического гелеобразования в водных растворах простых эфиров целлюлозы является конформационная подвижность боковых сложноэфирных группировок.

Список использованной литературы

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

УДК 547.455:535.33/34:539.194

УСТАНОВЛЕНИЕ СПЕКТРО-СТРУКТУРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ИНФРАКРАСНЫХ СПЕКТРАХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ КЛАССА БРАССИНОСТЕРОИДОВ

В.М. Андрианов, д-р физ.-мат. наук

М.В. Королевич, д-р физ.-мат. наук, доцент

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

korolevi@dragon.bas-net.by

Аннотация: Проведен согласованный расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний представителей стероидных фитогормонов, обладающих биологиче-