

ЛИТЕРАТУРА

1. Куценко, Г.Ф. Монтаж, эксплуатация и ремонт электроустановок / Г.Ф. Куценко, - Минск: Дизайн ПРО, 2006, – 472с.
2. Грунтович, Н.В. Монтаж, наладка и эксплуатация электрооборудования / Н.В. Грунтович, - Минск: Новое знание; М., ИНФА-М, 2013. – 271с.

Королевич М.В., д.ф.-м.н., доцент, Андрианов В.М., д.ф.-м.н., Чернявский В.В., к.ф.-м.н., доцент, Болодон В.Н., к.биол.н., доцент, Ветрова В.Т., к.т.н., доцент, Быкова С.Л.
УО «Белорусский государственный аграрный технический университет», Минск, Республика Беларусь

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРО-СТРУКТУРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ СЛОЖНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Ключевые слова: ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, нитрозамещенные глюкопиранозиды, целлюлоза.

Аннотация. Представлены результаты разработки и применения оригинального компьютерного метода анализа инфракрасных (ИК) спектров сложных органических соединений. Продемонстрирована эффективность его использования при установлении спектро-структурных корреляций для углеводов медицинского и технического назначения.

Современная наука сосредоточила усиленное внимание на исследовании нанообъектов и разработке нанотехнологий, в частности, на создании веществ с заданными физическими свойствами или с определенной биологической активностью. Для решения этих задач могут быть использованы многие подходы к исследованию молекулярного мира, разработанные в рамках молекулярной спектроскопии.

В работе представлен комплекс программ полного расчета колебательных спектров (частот, распределений потенциальной энергии нормальных колебаний, декартовых смещений атомов, абсо-

плотных интенсивностей ИК полос поглощения) многоатомных молекул (рис. 1). Данный программный комплекс дает возможность детально интерпретировать ИК спектры органических соединений различных классов, предсказывать эффекты влияния на них межмолекулярных взаимодействий.

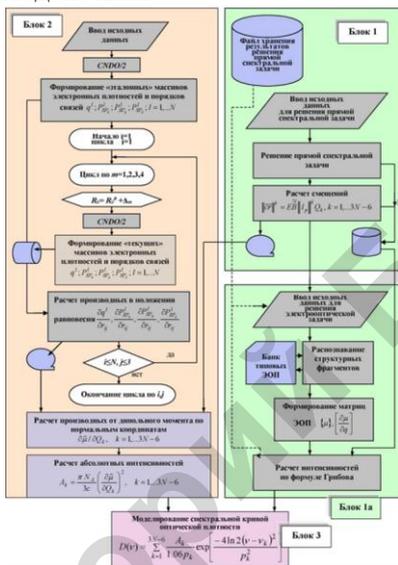


Рисунок 1 – Блок-схема программного комплекса для теоретического анализа ИК спектров сложных молекул

В нем реализованы два метода полного расчета спектра: классический параметрический, основанный на валентно-оптической теории (Блок 1 + Блок 1а); нетрадиционный комбинированный (Блок 1 + Блок 2), сочетающий расчет частот нормальных колебаний молекул классическим методом с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей.

Анализ ИК спектров гидроксиэтилцеллюлозы (ГЭЦ) комбинированным методом показал, что одним из факторов термического гелеобразования в водных растворах простых эфиров целлюлозы является конформационная подвижность боковых сложноэфирных группировок. Различия теоретических спектров молекулярных структурных моделей 2,6-ГЭЦ для 20 и 70⁰С, обусловленные изменением конформаций боковых эфирных групп,

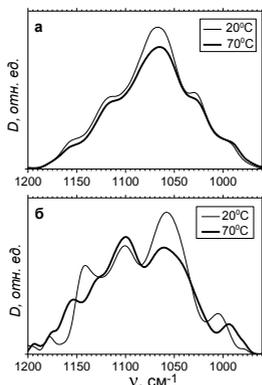
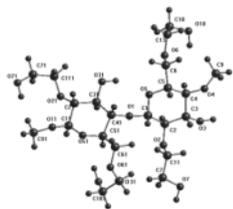


Рисунок 2 – Экспериментальные (а) и теоретические (б) ИК спектры поглощения водного раствора 2,6-ГЭЦ при температурах 20 и 70°C в диапазоне 1200–960 см^{-1}

соответствуют наблюдаемому перераспределению интенсивностей ИК полос поглощения в области 1200 – 900 см^{-1} при повышении температуры (рис.2).

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.

Использование предложенного метода для расчетов ИК спектров метил- и нитропроизводных моносахаридов приводит к результатам, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными, имеют большие предсказательные возможности и позволяют получить необходимые для практики спектро-структурные зависимости.

Использование предложенного метода для расчетов ИК спектров метил- и нитропроизводных моносахаридов приводит к результатам, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными, имеют большие предсказательные возможности и позволяют получить необходимые для практики спектро-структурные зависимости.

**Кротюк Ю.М., к.т.н., доцент, Гривачевский А.Г., к.т.н., доцент
Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси,
Минск**

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИХ КОНСТРУКЦИЙ АГРЕГАТОВ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ПОЧВЫ

Агрегаты для обработки почвы, компьютерное проектирование, инженерный анализ