

ПОЛНЫЙ РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ (22S,23S)-28-ГОМОБРАССИНОЛИДА В ДВУХ ВОЗМОЖНЫХ КОНФОРМАЦИЯХ.

В.М. Андрианов, М.В. Королевич

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Брассиностероиды (БС) – новый класс стероидных фитогормонов, проявляющих высокую биологическую активность. Она, в частности, связана с 22S,23S-диольной структурой в стероидной боковой цепи. Наличие объемной боковой цепи с длинной цепочкой связей С–С в структуре БС предполагает большие возможности для конформационных переходов в пределах этой цепи при переходе из кристаллического состояния в раствор. В связи с этим актуален вопрос о связи биоактивности БС со структурой боковой цепи и ее проявлением в ИК спектрах. **Цель работы** заключалась в определении оптимальной структуры боковой цепи в растворе (22S,23S)-28-гомобрассинолида и интерпретации ИК спектра этой молекулы в двух конформациях боковой цепи (кристаллическое состояние и раствор) на основе полного расчета частот и интенсивностей нормальных колебаний и моделирования спектральной кривой оптической плотности.

Для решения этих задач нами использовался классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики (ММ) в сочетании с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, соответствующих интегральным интенсивностям ИК полос поглощения. Конформационный анализ боковой цепи проведен методом ММ, а оптимизация геометрии каждого конформера – квантово-химическим методом РМЗ. В результате получен набор конформеров, из которых для решения колебательной задачи отобран наиболее стабильный, а также реализующийся в кристалле. Сопоставительный анализ результатов расчета колебательных спектров двух конформеров молекулы (22S,23S)-28-гомобрассинолида (наиболее интенсивных характеристических полос поглощения ИК спектров этой молекулы в области $1500\text{--}900\text{ см}^{-1}$) показал, что различия конформации боковой цепи приводят к изменениям форм ряда нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (грант № Ф09-088).