

**СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ  
МЕТИЛ-β-D-ГЛЮКОПИРАНОЗИДА И ВОДРОДНАЯ СВЯЗЬ**

**Л.М. Бабков<sup>1</sup>, Е.А. Моисейкина<sup>1</sup>, М.В. Королевич<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов*

<sup>2</sup>*Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск*

В соответствие с результатами моделирования, проведенного авторами ранее, структуры и ИК спектра молекулы метил-β-D-глюкопиранозида валентные колебания связей ОН проявляются в интервале 3552 – 3537 см<sup>-1</sup>. Центр тяжести полосы в области 3300 – 3750 см<sup>-1</sup> измеренного спектра соответствует 3310 см<sup>-1</sup>. Сдвиг полосы, составляющий приблизительно 240 см<sup>-1</sup>, ее аномально большие интенсивность и ширина, сложная форма указывают на наличие в образце комплексов с водородной связью (Н-связь). Как влияет водородная связь на строение на ИК спектр метил-β-D-глюкопиранозида?

Методом функционала плотности (B3LYP) в базисе 6-31+G(d) с использованием комплекса программ Gaussian'03 построены структурно-динамические модели простейших комплексов с Н-связью (Н-комплекс), состоящих из димеров молекул метил-β-D-глюкопиранозида. Минимизированы энергии, оптимизированы структуры, рассчитаны электрооптические параметры, силовые постоянные и частоты нормальных колебаний и распределение интенсивности в ИК спектрах.

Из результатов моделирования следует, что исследуемый образец метил-β-D-глюкопиранозида состоит из Н-комплексов различного строения. Помимо межмолекулярной в некоторых из них образуется внутримолекулярная Н-связь. Энергии образовавшихся Н-связей в простейших Н-комплексах, представленных димерами, находятся в интервале 1,41- 3,89 Ккал/моль. Вполне вероятно образование Н-комплексов более сложного строения, состоящих из большего числа молекул. Все эти Н-комплексы спектрально различимы. Измеренный ИК спектр, имеющий диффузный характер, формируется совокупностью спектров всех возможных комплексов с Н-связью.