

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ИК СПЕКТРОВ НИТРАТОВ МОНОСАХАРИДОВ

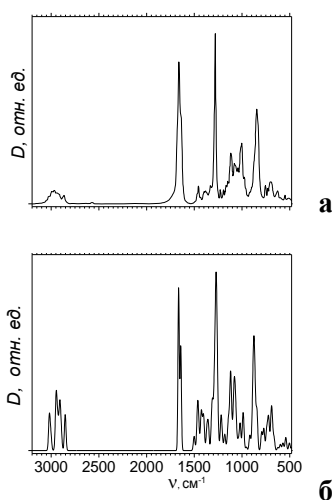
**М. В. Королевич<sup>а,б</sup>, В. М. Андрианов<sup>а</sup>, Е. П. Чеченина<sup>б</sup>**

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

<sup>б</sup> *Белорусский государственный аграрный технический университет, Минск*

Представлены результаты применения комбинированного метода теоретического анализа ИК спектров [1], сочетающего классический расчет частот нормальных колебаний в приближении валентного силового поля молекулы с квантово-химической оценкой интенсивностей, для изучения структуры нитратов моносахаридов. На основе систематического исследования в рамках данного метода большого ряда соединений нитрогликозидов с постепенно усложняющейся структурой молекул (избирательно замещенные ди- и тринитраты, содержащие метильную группу у атома  $C_{(1)}$ , а также ди- и тринитраты с двумя метильными группами у  $C_{(1)}$  и  $C_{(4)}$ ) определен конкретный характер взаимосвязи нитратных заместителей со структурой контура сложных полос поглощения, обусловленных колебаниями этих групп. Выявлены спектро-аналитические возможности практического использования установленных спектро-структурных корреляций.

Также, в частности, в диапазоне  $1280 - 1260 \text{ см}^{-1}$ , характерном для проявления симметричных валентных колебаний  $\nu_s(\text{ONO}_2)$  связей  $\text{N}=\text{O}$ , выделена ком-



Экспериментальный (а) и расчетный (б) ИК спектры 4-О-метил-2,3,6-три-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида

понента сложной полосы около  $\sim 1280 \text{ см}^{-1}$  в спектрах нитратов глюкопиранозида, обусловленная деформационным колебанием  $\nu(\text{OCH})_{(6)}$ , которая может быть использована как аналитическая при изучении избирательности нитрозамещения гидроксильных групп в β-D-глюкозе.

Выполнен теоретический анализ ИК спектра тринитрата (рисунок), который максимально приближается по структуре к мономерному звену нитрата целлюлозы.