



**2-й Международный семинар по спектроскопии
и фотохимии макрогетероциклических
соединений 18–19 октября 2022 г.**

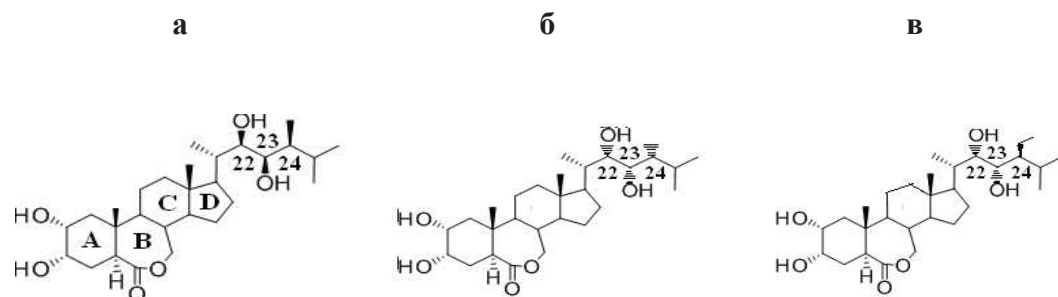
Минск, БЕЛАРУСЬ

**Расчет и сравнительный анализ ИК спектров ряда
биологически активных молекул класса brassinosterоидов**

В.М. Андрианов, М.В. Королевич

*УО «Белорусский государственный аграрный технический университет»,
проспект Независимости 99, г. Минск, Беларусь
e-mail: korolevi@dragon.bas-net.by*

В результате проведенных теоретических исследований выполнены полный расчет колебательных спектров и моделирование спектральных кривых оптической плотности молекул (22S,23S)-24-эпибрассинолида (а), (22S,23S)-гомобрассинолида (б) и гомобрассинолида (в), которые удовлетворительно



описывают полосы поглощения экспериментальных спектров данных соединений в области 1500–950 cm^{-1} . На основе сопоставления экспериментальных и теоретических ИК спектров дана интерпретация полос поглощения исследуемых молекул в этой спектральной области.

Анализ результатов расчета позволил найти связь между структурными различиями исследуемых соединений и наблюдаемыми изменениями ИК спектров. Установлено, что небольшие различия в химическом строении приводят либо к изменениям форм ряда нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, либо к смещению частот ряда нормальных колебаний с близкими формами колебаний, следствием чего является изменение интегральных интенсивностей, форм и полуширин соответствующих полос поглощения.