

УДК: 547.455:535.33/34:539.194

В. М. Андрианов, М. В. Королевич, А. А. Шевченко
Белорусский государственный аграрный технический университет

**ПОЛНЫЙ РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА
МОЛЕКУЛЫ 28-ГОМОКАСТАСТЕРОНА (RR - КОНФИГУРАЦИЯ)
В ВОЗМОЖНЫХ КОНФОРМАЦИЯХ**

В рамках оригинального комбинированного подхода, сочетающего классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, проведен согласованный расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний одного из представителей стероидных фитогормонов, обладающего биологической активностью, – молекулы 28-гомокастастерона. На основе сопоставления экспериментальной и теоретической спектральных кривых поглощения дана интерпретация полос поглощения ИК спектров и изучено влияние структурных различий в пределах боковой цепи конформеров этой молекулы на формирование ИК спектра в области 1500–950 см⁻¹.

Ключевые слова: ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, характеристические частоты, интерпретация ИК спектра, брассиностероиды.

Для цитирования: Андрианов В. М., Королевич М. В., Шевченко А. А. Полный расчет колебательного спектра молекулы 28-гомокастастерона (RR-конфигурация) в возможных конформациях // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 32–38. DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-5.

V. M. Andrianov, M. V. Korolevich, A. A. Shevchenok
Belarusian State Agrarian Technical University

**COMPLETE CALCULATION OF THE VIBRATIONAL SPECTRUM
OF THE 28-HOMOCASTASTERONE MOLECULE (RR-CONFIGURATION)
IN POSSIBLE CONFORMATIONS**

Within the framework of the original combined approach, combining the classical analysis of normal vibrations by the method of molecular mechanics with a quantum-chemical estimation of absolute intensities, a consistent calculation of the frequencies and intensities of normal vibrations of one of the representatives of steroidal phytohormones with biological activity, the 28-homocastasterone molecule, was carried out. Based on a comparison of the experimental and theoretical spectral absorption curves, an interpretation of the absorption bands of the IR spectra is given and the influence of structural differences within the side chain of the conformers of this molecule on the formation of the IR spectrum in the region of 1500 – 950 cm⁻¹ is studied.

Keywords: IR spectroscopy, normal coordinate analysis, absolute IR intensities, characteristic frequencies, interpretation of the IR spectrum, brassinosteroids.

For citation: Andrianov V. M., Korolevich M. V., Shevchenok A. A. Complete calculation of the vibrational spectrum of the 28-homocastasterone molecule (RR-configuration) in possible conformations. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 32–38 (In Russian). DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-5.

Введение. Брассиностероиды (БС) представляют собой уникальный класс растительных гормонов, структурно родственных стероидным гормонам животных и насекомых. Они являются регуляторами роста растений, влияют на активность системы путей метаболизма, способствуют регулированию деления клетки, стимулируют вегетативный рост и прорастание семян, взаимодействуют на эндогенном уровне с другими гормонами, регулируют экспрессию генов и обладают антистрессовой активностью [1]. Важнейшими представителями этого класса соединений являются брассинолиды и кастастероны. Для брассинолида характерно наличие в стероидном скелете семичленного

цикла, в который входит карбонильная группа С=О и эфирная С–О–С связь, в то время как для кастастерона – шестичленного цикла с карбонильной группой.

Изучение взаимосвязи структура – активность брассиностероидов выявило ряд специфических структурных характеристик, необходимых для их высокой биологической активности. Это – наличие смежных гидроксильных групп в цикле А у С_{2α} и С_{3α}, транс-сочленение циклов А/В, присутствие 6-кето- или 7-окса-6-кетогруппы в цикле В, существование диольной системы в положениях 22 и 23 с конфигурацией RR или SS и наличие метильной или этильной

группы в положении 24 боковой цепи [2]. Для выявления механизмов проявления высокой биологической активности и объяснения ее взаимосвязи со структурными особенностями брасиностероидов в ряде работ [3–6] в качестве предположения рассматривается роль молекулярных орбиталей в селективной активности этих соединений. Показана важная роль атомов кислорода, в частности, и боковой цепи, в их биологической активности и, следовательно, их пространственной ориентации. Высокая биологическая активность связана с 22R, 23R-диольной структурой в стероидной боковой цепи. Синтетические аналоги с 22S, 23S-гидроксильными группами менее активны [7]. В то же время в природной 22R, 23R-конфигурации БС соединения с 24S-метил- или этилгруппой показывают большую биоактивность, чем соответствующие гормоны с 24R-алкил функцией [2], отражая значимость стереохимии также и у этого асимметрического центра. В связи с этим актуален вопрос о связи биоактивности БС со структурой и конформационным поведением в растворе их боковой цепи.

ИК спектроскопия обладает высокой информативностью о структуре молекул и может быть успешно использована для установления корреляций между биологическими свойствами и особенностями ИК спектров этих молекул.

Для детальной интерпретации экспериментально регистрируемых ИК спектров и установления достаточно надежных структурных корреляций молекул класса брасиностероидов необходимо проведение теоретических исследований.

Цель работы – установление структурных аспектов биологической активности БС на основе молекулярного моделирования, моделирования инфракрасных спектров и их сопоставления с экспериментом для анализа, предсказания и направленной модификации структуры этих соединений при разработке новых препаратов медицинского и сельскохозяйственного назначения.

Основная часть. Для решения поставленной задачи применен оригинальный комбини-

рованный подход к анализу ИК спектров сложных органических соединений, разработанный и реализованный в виде комплекса программ при исследовании спектров углеводов [8, 9]. Он сочетает классический анализ нормальных колебаний многоатомных молекул с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, соответствующих интегральным интенсивностям ИК полос поглощения [8].

Расчет частот, форм, распределения потенциальной энергии (РПЭ) нормальных колебаний, смещений атомов в декартовых координатах в каждом нормальном колебании для расчета абсолютных интенсивностей ИК полос поглощения проведен в рамках метода молекулярной механики (ММ).

Теоретическая спектральная кривая оптической плотности в расчете на один моль вещества и единицу оптического пути моделировалась как сумма полос гауссовой формы по теоретически рассчитанным абсолютным интенсивностям и заданным полуширинам, которые оцениваются на основании экспериментального спектра [8]. Полуширины полос полагались равными 15 см^{-1} , некоторые из них принимали значения от 8 до 20 см^{-1} .

Интерпретация наблюдаемого ИК спектра выполнена на основе сопоставления экспериментальных значений частот $\nu_{\text{эксп}}$ и интегральных интенсивностей полос поглощения с рассчитанными частотами $\nu_{\text{расч}}$ и абсолютными интенсивностями нормальных колебаний. Анализируемый ИК спектр регистрировался ИК-фурье-спектрометром NEXUS и представлен на рис. 1. Синтезированное вещество растиралось с обезвоженным мелкодисперсным KBr, приготовленный порошок прессовался в вакууме по стандартной методике.

Ранее нами были проведены полные расчеты колебательных спектров и моделирование спектральных кривых оптической плотности ряда биологически активных молекул брасинолидов, относящихся к классу фитогормональных стероидов (ФС) [10, 11].

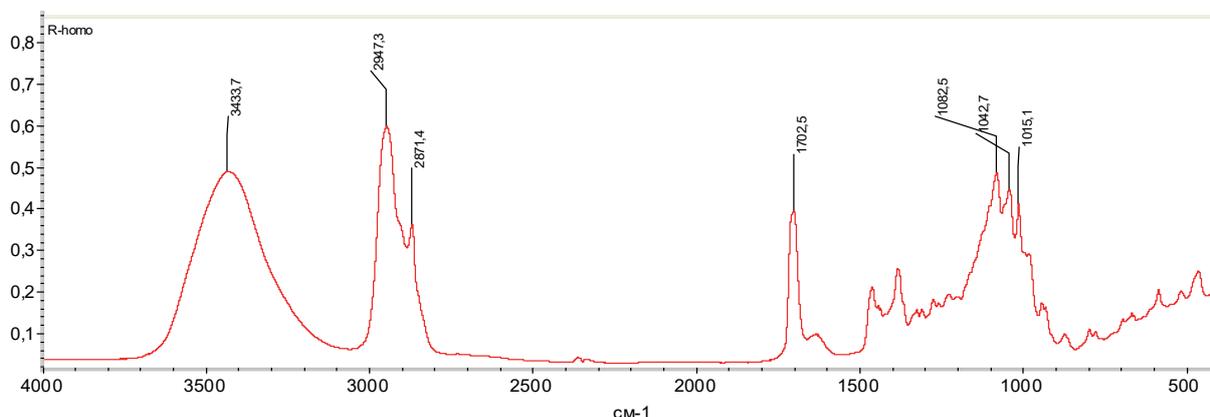


Рис. 1. ИК-фурье спектры поглощения 28-гомокастастерона (RR-конфигурация)

Цель данной работы заключалась в детальной интерпретации ИК спектра биологически активной молекулы 28-гомокастастерона на основе полного расчета частот и интенсивностей нормальных колебаний этой молекулы в возможных конформациях боковой цепи и моделирования спектральной кривой оптической плотности.

Для получения структурных параметров и декартовых координат атомов молекулы 28-гомокастастерона использован современный пакет программ для молекулярного моделирования "HyperChem 7.5". Конформационный анализ боковой цепи проведен методом ММ, а оптимизация геометрии каждого конформера – квантово-химическим методом РМ3. В качестве исходных параметров использованы данные РСА о кристаллической и молекулярной структуре молекулы 24-эпибрассинолида [12]. В результате проведенного конформационного анализа получено 20 конформеров боковой цепи молекулы 28-гомокастастерона, два из которых по энергетическому критерию, как показано в табл. 1, могут реализоваться в растворе.

На основе полученных данных нами построены молекулярные структуры gcR1 и gcR2, схематическое изображение которых представлено на рис. 2, и определены декартовы координаты атомов этих конформеров исследуемой молекулы (энергетический зазор между ними составляет 0,267 ккал/моль) для проведения расчета их колебательных спектров.

Таблица 1
Конформации боковой цепи и относительные энергии напряжения конформеров ΔU (ккал/моль), полученные методом ММ и оптимизированные методом РМ3 исследуемой молекулы

Молекула	Конформеры	ΔU	Конформация боковой цепи
(22R, 23R)-28-гомокастастерон	gcR1	0	$g^+g_1^-g_2^+g^+g_1^+g_2^-g_1^-g^+$
	gcR2	0.287	$g^+t g^+t t g^-g_1^+g^+$
	gcR3	1.420	$g^+g^+g_1^+g^-t g^-g_1^-g_2^+$

Примечание. В графе «Конформация боковой цепи» буквами g^+ g^- t обозначены гош+, гош- и транс-конформации, соответственно, вокруг последовательности связей С-С боковой цепи: C17-C20, C20-C22, C22-C23, C23-C24, C24-C25 и C24-C28.

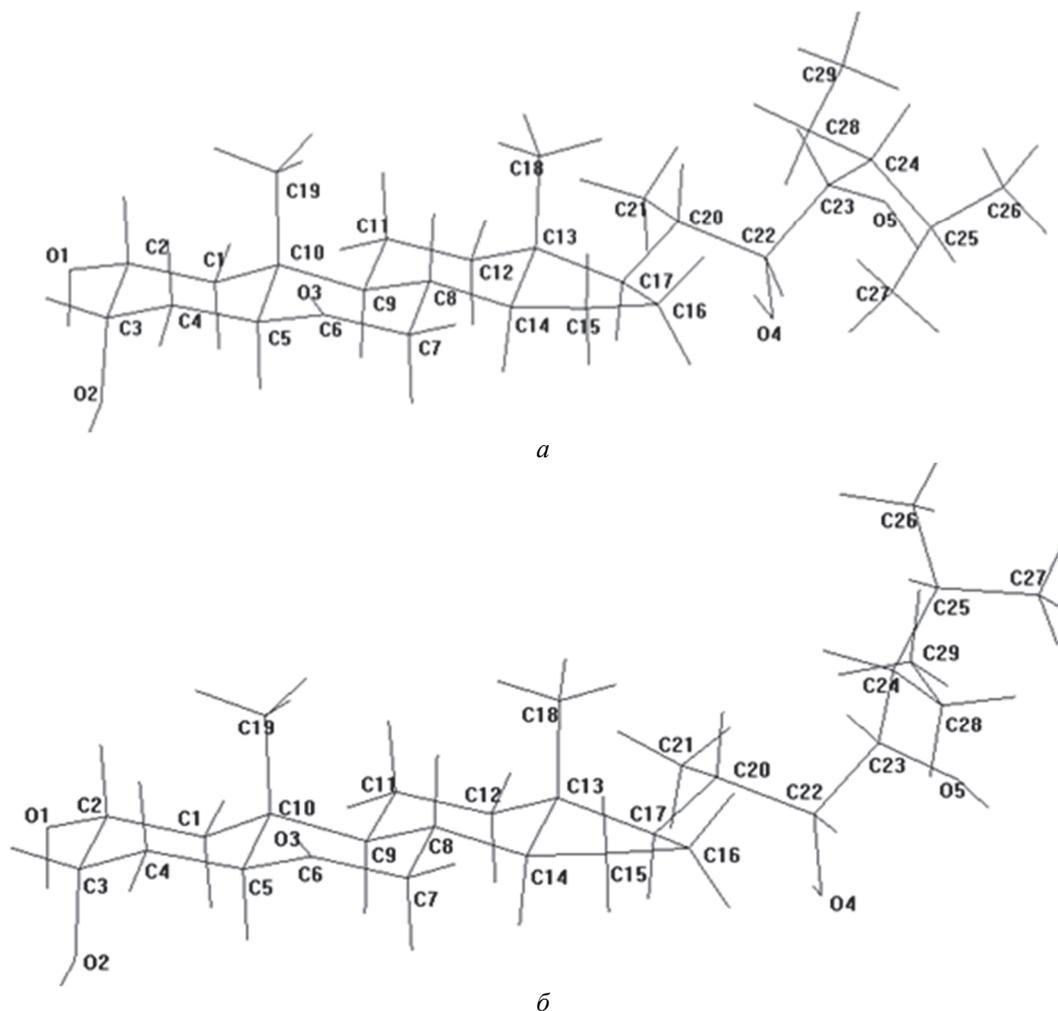


Рис. 2. Молекулярная структура конформеров gcR1 (а) и gcR2 (б) 28-гомокастастерона

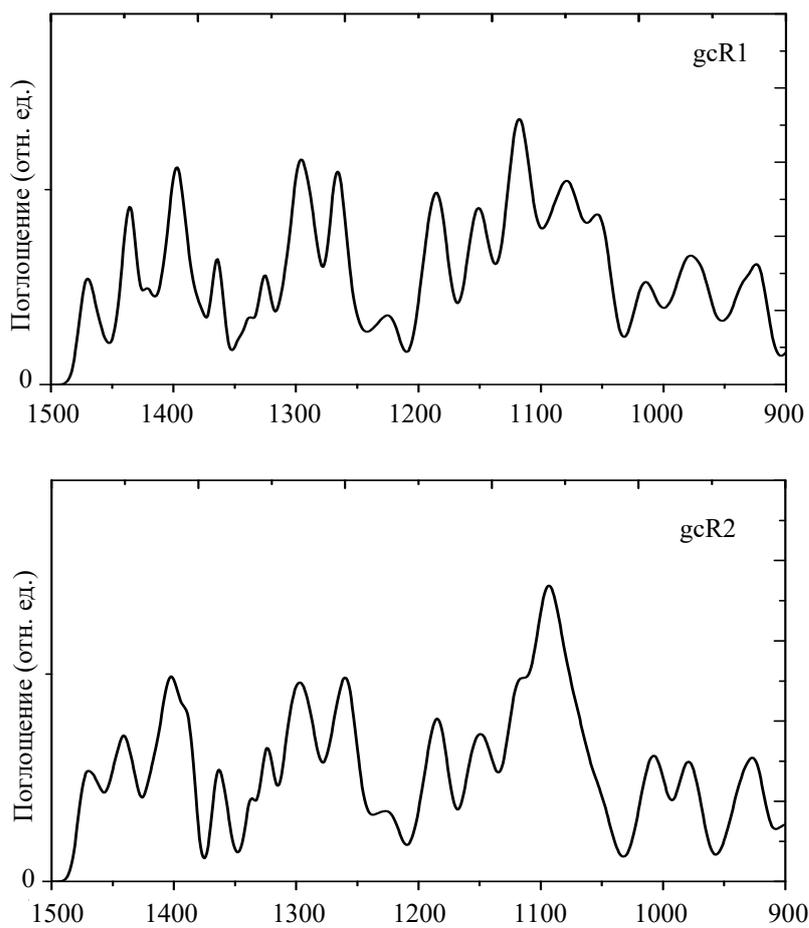


Рис. 3. Теоретические ИК спектры поглощения конформеров gcR1 и gcR2 28-гомокастастерона в диапазоне частот 1550–900 см^{-1}

Расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний исследуемой молекулы в двух конформациях боковой цепи выполнен в рамках оригинального комбинированного подхода, сочетающего классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики с квантово-химической оценкой интенсивностей методом CNDO/2. По этим данным смоделированы спектральные кривые оптической плотности исследуемой молекулы, представленные на рис. 3

Теоретический спектр удовлетворительно описывает основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения экспериментального спектра 28-гомокастастерона в спектральном диапазоне 1500–900 см^{-1} .

Отнесение экспериментальных полос и интерпретация наблюдаемого ИК спектра этой молекулы выполнены на основе сопоставления наблюдаемых частот $\nu_{\text{экс}}$ с частотами нормальных колебаний $\nu_{\text{рас}}$ и интегральных интенсивностей наблюдаемых полос поглощения с рассчитанными абсолютными интенсивностями. В табл. 2 дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических полос поглощения ИК спектра исследуемой молекулы в области 1500–900 см^{-1} .

Сопоставительный анализ результатов расчета колебательных спектров двух конформеров молекулы 28-гомокастастерона в рассматриваемом диапазоне частот 1500–900 см^{-1} показал, что различия конформации боковой цепи приводят к изменениям формы колебания в ряде нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения.

Расчет показал, что различия конформации боковой цепи приводят к изменениям формы ряда нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения. Поскольку каждая полоса экспериментального спектра имеет сложное происхождение и представляет собой наложение полос разной интенсивности (в теоретическом спектре – сумма полос гауссовой формы по теоретически рассчитанным абсолютным интенсивностям и полуширинам, заданным от 8 до 20 см^{-1}), то перераспределение интенсивностей составляющих полос при переходе от одного конформера к другому приводит к изменению интенсивности суммарных полос поглощения.

Таблица 2

Экспериментальные (ИК) характеристические ($\nu_{\text{экс}}$) и рассчитанные ($\nu_{\text{рас}}$) частоты (см^{-1}), абсолютные интенсивности A ($10^{16} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$) и РПЭ (%) нормальных колебаний двух конформеров (gcR1 (I), gcR2 (II)) молекулы 28-гомокастестерона в спектральной области 1500–900 см^{-1}

$\nu_{\text{экс}}$	$\nu_{\text{рас}}$ I	$\nu_{\text{рас}}$ II	A I	A II	РПЭ	
					I	II
1463	1479	1475	6	2	HC21H 32 C20C21H 20 CC12H 8 HC12H 6	HC19H 20 CC19H 18 HC4H 10 CC4H 9 C13C18H 7 HC18H 7
	1475	1472	3	15	HC19H 22 C10C19H 20 HC4H 11 C3C4H 10	HC18H 18 C13C18H 16 HC11H 8 CC11H 7 HC4H 5 CC4H 5
	1472	1471	12	1	HC18H 19 CC18H 17 HC11H 12 CC11H 10	HC21H 22 C20C21H 14 HC12H 9 CC12H 8 HC11H 8 CC11H 6
	1465	1465	13	13	HC4H 18 HC19H 18 C10C19H 17 CC4H 16	HC19H 19 HC4H 18 C10C19H 17 CC4H 16
	1459	1459	6	1	HC18H 17 CC18H 15 HC11H 11 CC11H 9	HC18H 16 CC18H 14 HC11H 12 CC11H 10 CC21H 6 HC21H 6
1445	1455	1455	2	1	HC12H 16 CC12H 14 HC1H 12 CC1H 10 HC11H 6	HC12H 17 CC12H 15 HC1H 11 CC1H 9 HC11H 6 CC21H 5
	1453	1453	3	15	HC28H 27 C29C28H 12 CC28H 11 HC29H 8 CC29H 7	HC1H 19 CC1H 16 HC12H 9 CC12H 8 CC11H 6 HC11H 6
	1453	1449	2	12	HC1H 17 CC1H 14 HC12H 9 HC11H 7 CC12H 7	HC28H 25 C29C28H 11 CC28H 9 C28C29H 9 HC29H 9 CC27H 7
1438	1438	1445	8	10	HC27H 20 CC27H 18 HC26H 11 CC26H 10 HC29H 12	HC27H 24 CC27H 22 HC29H 19 HC28H 8 CC28H 6 CC29H 6
	1437	1438	6	1	HC19H 35 CC19H 9 HC18H 6 HC4H 5	HC26H 2 39 C25C26H 36
	1435	1437	4	5	HC26H 26 CC26H 24 HC27H 11 CC27H 10	HC19H 36 CC19H 10 HC18H 8 HC4H 5
	1433	1433	0	12	HC18H 26 HC15H 12 CC15H 12 HC19H 5 CC18H 5	HC18H 26 HC15H 13 CC15H 12 HC19H 6 CC14H 5 CC18H 5
1385	1403	1401	5	7	HC19H 46 CC19H 13	HC27H 15 CC14H 8 CC23H 6 C22O4H 5 C25C24H 5 C23O5H 4
	1400	1400	3	3	HC26H 18 CC14H 15 HC27H 7	CC14H 18 HC27H 5 HC15H 4 HC16H 4
	1399	1497	6	15	CC14H 15 HC26H 2 14 HC27H 6	CC1H 18 C2O1H 14 CC11H 8 CC2H 5
	1394	1495	18	33	CC24H 10 HC26H 10 HC27H 8 CC20H 7 CO4H 6	HC26H 25 C22O4H 10 HC27H 8 CC26H 5 C23O5H 4
	1391	1391	3	1	HC27H 20 CC11H 6 C22O4H 5 C25C27H 5	HC27H 38 HC26H 18 CC27H 7 HC29H 7
	1387	1387	6	3	CC11H 15 CC12H 8 CC1H 6	CC11H 17 CC12H 9 CC9H 6 HC21H 6 HC29H 5
	1387	1387	1	2	HC29H 35 CC29H 6 CC24H 6 CC28H 5	CC29H 26 CC28H 8 CC11H 7
	1379	1379	2	2	CC20H 7 CC22H 7 CC25H 7 CC24H 6 HC27H 5	HC21H 29 CC11H 6 C20C21H 6
	1375	1375	3	1	HC21H 28 CC1H 6 CC11H 6 CC21H 5	CC25H 13 CC28H 13 HC29H 9 HC27H 7 CC24H 5 CC29H 5
1326	1332	1331	2	5	CC25H 12 CC23H 9 CC28H 9 C23O5H 5	CC4H 21 CC1H 12 C4C5H 12 CC3H 8 CC7H 7
	1331	1330	6	1	CC4H 21 CC5H 13 CC1H 12 CC3H 9 CC7H 7	CC23H 13 CC20H 7 CC25H 7 CC22H 6
	1327	1327	3	5	CC7H 12 CC12H 12 CC11H 8	CC12H 11 CC7H 9 CC11H 8
	1319	1321	1	2	CC5H 10 CC2H 7 CC3H 5 CC8H 5 CC12H 5	CC5H 10 O1C2H 5 CC3H 5 CC2H 5 CC8H 5 CC12H 5
1311	1314	1318	2	11	CC23H 10 CC28H 9 CC20H 6 CC25H 6 CC16H 5	CC20H 8 CC7H 6 CC24H 6 C22C23H 5 O5C23H 5 CC25H 5
	1313	1311	3	14	CC7H 9 CC14H 6 CC15H 6 CC17H 5 CC20H 5	CC7H 9 CC14H 7 CC15H 7 CC16H 7 CC23H 5
	1304	1303	2	8	CC16H 12 CC20H 10 CC15H 8 CC17H 5 CC22H 5	CC2H 10 CC9H 7 CC11H 7 CC12H 7
1083	1096	1094	11	16	CC7H 12 CC16H 10 CC12H 6	CC4H 9 CC16H 9 CC1H 5 CCC 5
	1092	1090	3	1	CC7H 8 CC15H 5	CC7H 10 CC16H 8 CC15H 5
	1088	1086	3	1	CC12H 13 CCC 12 CC16H 5	CC12H 14 CCC 8 CC4H 6 CC15H 5 CC16H 5
	1080	1084	5	2	CC4H 9 CC12H 8 CC1H 7 CCC 6 C2O1H 5	CC 8 CCC 8 CC26H 7 CC29H 6 CC23H 6 CC28H 5 CC27H 5
	078	1076	27	8	CC4H 17 CCC 7 CC1H 6 CC2H 5	CC4H 16 CCC 8 CC1H 6
1043	1053	1057	8	3	CC15H 14 CC16H 5 CCC 5	CCC 9 CC16H 6 CC21H 5 CC18H 5 CC15H 5
	1048	1048	0	8	CC15H 26 CC16H 5 CCC 5	CC15H 18 CC27H 8 CC26H 7 CCC 5
	1047	1047	4	1	CC27H 9 CCC 9 CC26H 8 CC21H 5	CC15H 18 CC27H 7 CC26H 7 CCC 5
	1023	1025	0	1	CC27H 7 CC26H 7 CC29H 7 CC15H 5	CC27H 11 CC26H 10 CC29H 10
1015	1022	1022	0	0	CC15H 7 CC27H 5 CC18H 5 CC26H 5 CC29H 5	CCC 11 CC15H 10 CC18H 7 CC16H 5
	1016	1015	0	1	CC19H 6 CC11H 5 CC29H 5	CC19H 7 CC11H 7 CCC 5
	1013	1004	5	4	CC21H 6 CC29H 5	CC29H 13 CC27H 8 CC21H 7 CCC 7 CC28H 5 CC26H 5

Так, например, из представленных в табл. 2 результатов следует, что интенсивная полоса с максимумом 1463 см^{-1} в экспериментальном спектре состоит из пяти составляющих полос, основной вклад в которые вносят деформационные колебания метильных (HC18H, HC19H, HC21H, CC18H, CC19H, CC21H) и метиленовых (HC4H, HC12H, HC11H) групп, входящих в

состав шестичленных циклов А и С остова молекулы. Вторая интенсивная полоса этого спектрального диапазона с максимумом 1385 см^{-1} в экспериментальном спектре, согласно расчету, состоит из девяти составляющих полос, обусловленных главным образом деформационными колебаниями СН всех метильных групп, деформационными колебаниями ССН метиновых групп С14Н

и C17H, расположенных на стыке циклов С и D и цикла D с боковой цепью, а также деформационными колебаниями СОН гидроксильных О1Н и О4Н. Что же касается интенсивных характеристических полос с максимумами 1083, 1043 и 1015 см^{-1} в экспериментальном спектре, то, по данным расчета (полосы в теоретическом спектре, представленном на рис. 3, с максимумами 1100, 1060 и 1027 см^{-1}), основной вклад в формирование этих полос, вносят деформационные колебания ССН метиленовых и метильных групп, в меньшей степени – деформационные колебания ССС боковой цепи и валентные колебания связей С–С.

Заключение. Таким образом, в результате проведенных теоретических исследований смоделирована молекулярная структура 28-гомокастастерона с различными конформациями боковой цепи. Выполнены полный расчет колебательного спектра и моделирование спектральной кривой оптической плотности двух конформеров этой молекулы. На основе сопоставления экспериментального ИК спектра и рассчитанной спектральной кривой поглощения молекулы 28-гомокастастерона впервые дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических ИК полос поглощения в области 1500–900 см^{-1} .

Список литературы

1. Sasse J. M. Physiological Actions of Brassinosteroids: An Update // *J. Plant Growth Regul.* 2003. Vol. 22. P. 276–288.
2. Yokota T., Mori K. Molecular structure and biological activity of brassinolide and related brassinosteroids // *In Molecular Structure and Biological Activity of Steroids.* CRC Press, Boca Raton, FL, 1992. P. 317–340.
3. New synthetic brassinosteroids: a 5 α -hydroxy-6-ketone analog with strong plant growth promoting activity / Brosa C. [et al.] // *Tetrahedron.* 1998. Vol. 54. P. 12337–12348.
4. A novel in-silico approach for QSAR studies of anabolic and androgenic activities in the 17 (3-hydroxy-5 α -androstane) steroid family / Y. M. Alvarez-Ginarte [et al.] // *QSAR Comb. Sci.* 2005. Vol. 24. P. 218–226.
5. Quantitative Structure – Activity Relationship of the 4,5 α -Dihydrotestosterone Steroid Family / Y. M. Alvarez-Ginarte [et al.] // *QSAR Comb. Sci.* 2006. Vol. 25. P. 881–894.
6. Validation of performances of some semiempirical Hamiltonians for predicting molecular structure calculation of natural brassinosteroids: Towards understanding their biological activity by electron exchange effects / Morera-Boado C. // *J. Mol. Struct.: THEOCHEM* 2007. Vol. 819. P. 109–120.
7. Synthesis of Brassinosteroids of Varying Acyl Side Chains and Evaluation of Their Brassinolide-like Activity / S. Uesusuki [et al.] // *Biosci Biotechnol Biochem.* 2004. Vol. 68. P. 1097–1105.
8. Королевич М. В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов: дис. ... д-ра физико-математических наук. Минск: 2009. 333 л.
9. Korolevich M. V., Zhbakov R. G. Theoretical vibrational spectroscopy of saccharides: software, perspectives, results // *Spectroscopy of Biological Molecules: Modern Trends: Proc. 7-th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules.* Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1997. P. 569–570.
10. Андрианов В. М., Королевич М. В. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров гомобрасинолида и (22S, 23S)-гомобрасинолида // *Журн. прикл. спектр.* 2015. Т. 82, № 4. С. 485–496.
11. Андрианов В. М., Королевич М. В., Вельченко А. А. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров гомобрасинолида и (22S,23S)-24-эпибрасинолида // *Журн. прикл. спектр.* 2019. Т. 86. № 6. С. 847–858.
12. Voigt B., Porzel A., Wagner C., Merzweiler K. Private Communication to the Cambridge Structural Database, deposition number CCDC 119112 (2001).

References

1. Sasse J. M. Physiological Actions of Brassinosteroids: An Update. *J. Plant Growth Regul.* 2003, vol. 22, pp. 276–288.
2. Yokota T., Mori K. Molecular structure and biological activity of brassinolide and related brassinosteroids. *In Molecular Structure and Biological Activity of Steroids.* CRC Press, Boca Raton, FL, 1992, pp. 317–340.
3. Brosa C. [et al.]. New synthetic brassinosteroids: a 5 α -hydroxy-6-ketone analog with strong plant growth promoting activity. *Tetrahedron*, 1998, vol. 54, pp. 12337–12348.
4. Alvarez-Ginarte Y. M. [et al.]. A novel in-silico approach for QSAR studies of anabolic and androgenic activities in the 17 (3-hydroxy-5 α -androstane) steroid family. *QSAR Comb. Sci.*, 2005, vol. 24, pp. 218–226.
5. Alvarez-Ginarte Y. M. [et al.]. Quantitative Structure – Activity Relationship of the 4,5 α -Dihydrotestosterone Steroid Family. *QSAR Comb. Sci.*, 2006, vol. 25, pp. 881–894.
6. Morera-Boado C. Validation of performances of some semiempirical Hamiltonians for predicting molecular structure calculation of natural brassinosteroids: Towards understanding their biological activity by electron exchange effects. *J. Mol. Struct.: THEOCHEM*, 2007, vol. 819, pp. 109–120.

7. Uesusuki S. [et al.]. Synthesis of Brassinosteroids of Varying Acyl Side Chains and Evaluation of Their Brassinolide-like Activity. *Biosci Biotechnol Biochem*, 2004, vol. 68, pp. 1097–1105.

8. Korolevich M. V. *Analiticheskaya infrakrasnaya spektroskopiya sakharidov. Dissertatsiya doktora fiziko-matematicheskikh nauk* [Analytical infrared spectroscopy of saccharides. Dissertation DSc (Physics and Mathematics)]. Minsk, 2009. 333 p. (In Russian).

9. Korolevich M. V., Zhbankov R. G. Theoretical vibrational spectroscopy of saccharides: software, perspectives, results. *Spectroscopy of Biological Molecules: Modern Trends: Proc. 7-th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules*. Dordrecht, 1997, pp. 569–570.

10. Andrianov V. M., Korolevich M. V. Calculation and comparative analysis of IR spectra of homobrassinolide and (22S,23S)-homobrassinolide. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2015, vol. 82, no. 4, pp. 485–496 (In Russian).

11. Andrianov V. M., Korolevich M. V., Velcheanko A. A. Calculation and comparative analysis of IR spectra of homobrassinolide and (22S, 23S)-24-epibrassinolide. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2019, vol. 86, no. 6, pp. 847–858 (In Russian).

12. Voigt B., Porzel A., Wagner C., Merzweiler K. Private Communication to the Cambridge Structural Database, deposition number CCDC 119112 (2001).

Информация об авторах

Андрианов Виктор Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры электроснабжения и электротехники. Белорусский государственный аграрный технический университет (220023, Минск, пр. Независимости, 99/1, Республика Беларусь). E-mail: v.andrianov71@gmail.com

Королевич Майя Васильевна – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры естественнонаучных дисциплин. Белорусский государственный аграрный технический университет (220023, Минск, пр. Независимости, 99/1, Республика Беларусь). E-mail: korolevi@dragon.bas-net.by

Шевченко Александр Аркадьевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры естественнонаучных дисциплин. Белорусский государственный аграрный технический университет (220023, Минск, пр. Независимости, 99/1, Республика Беларусь). E-mail: alexshev56@mail.ru

Information about the authors

Andrianov Viktor Mikhailovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, the Department of Power Supply and Electrical Engineering. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.andrianov71@gmail.com

Korolevich Maya Vasilievna – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, the Department of Natural Sciences. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: korolevi@dragon.bas-net.by

Shevchenok Aleksander Arkadievich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Natural Sciences. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alexshev56@mail.ru

Поступила 29.08.2023