



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Конформационный анализ и расчет колебательного спектра
молекулы 28-гомокастастерона в возможных конформациях**

В.М.Андрианов, М.В.Королевич

*УО «Белорусский государственный аграрный технический университет»,
Проспект Независимости 99, г. Минск, Беларусь
e-mail: v.andrianov71@gmail.com*

Брассиностероиды (БС) - класс растительных фитогормонов, проявляющих высокую биологическую активность. Они известны своей ростостимулирующей способностью, а также рассматриваются как потенциальные антиканцерогенные фармакологические средства.

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 (RR конфигурация).

В результате проведенного конформационного анализа получено 20 конформеров боковой цепи молекулы 28-гомокастастерона, два из которых по энергетическому критерию могут реализоваться в растворе. Проведен расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний исследуемой молекулы в двух конформациях боковой цепи. По этим данным смоделированы спектральные кривые оптической плотности исследуемой молекулы. Теоретический спектр удовлетворительно описывает основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения экспериментального спектра 28-гомокастастерона в спектральном диапазоне 1500–900 см⁻¹.

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. Сопоставительный анализ результатов расчета колебательных спектров двух конформеров молекулы 28-гомокастастерона в рассматриваемом диапазоне частот 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.