

Рисунок 1 – Экспериментальные (а) и теоретические (б) ИК спектры поглощения водного раствора 2,6-ГЭЦ при температурах 20 и 70°С в диапазоне 1200–960 см⁻¹

Заклучение. Результаты расчета позволяют объяснить наблюдаемые спектры биурета наличием в исследуемых образцах двух изомерных форм, а также вычислить термодинамические функции биурета, необходимые для проведения термодинамического анализа промышленно важного процесса аммонолиза биурета.

Показано, что одним из факторов термического гелеобразования в водных растворах простых эфиров целлюлозы является конформационная подвижность боковых сложноэфирных группировок.

Список использованной литературы

1. Королевич М.В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов: Дисс. ... д-ра физ.-мат. наук. – Минск, 2009. – 333 с.

УДК 547.455:535.33/34:539.194

УСТАНОВЛЕНИЕ СПЕКТРО-СТРУКТУРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ИНФРАКРАСНЫХ СПЕКТРАХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ КЛАССА БРАССИНОСТЕРОИДОВ

В.М. Андрианов, д-р физ.-мат. наук

М.В. Королевич, д-р физ.-мат. наук, доцент

УО «Белорусский государственный аграрный технический университет»,

г. Минск, Республика Беларусь

korolevi@dragon.bas-net.by

Аннотация: Проведен согласованный расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний представителей стероидных фитогормонов, обладающих биологиче-

ской активностью – молекул (22S,23S)-24-эпибрассинолида, (22S,23S)-28-гомобрассинолида. Проведена оценка влияния структурных различий в пределах боковой цепи этих молекул на формирование их ИК спектров в области 1500–950 см⁻¹.

Abstract: Coupled calculation of normal vibration frequencies and absolute IR band intensities one of the steroid phytohormones representatives, having the biological activity, (22S,23S)-24-epibrassinolide, (22S,23S)-28-homobrassinolide molecules. The estimation of structural differences influence in the frame of these molecules side chain on the formation of their IR spectrum in the region 1500 - 950 cm⁻¹ are given for the first time.

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

Keywords: IR spectroscopy, normal coordinate analysis, absolute IR intensities, characteristic frequencies, brassinosteroids.

Введение. Брассиностероиды (БС) – класс фитогормонов, проявляющих высокую биологическую активность: наряду с ростостимулирующей активностью они способствуют повышению качества растительной продукции. Важнейшими представителями БС являются брассинолиды и кастастероны.

Одним из самых распространенных методов в установлении закономерностей «структура–свойство» соединений остается колебательная спектроскопия

Сложный характер колебательных спектров этих соединений стимулировал наши исследования по разработке оригинального комбинированного подхода к анализу ИК спектров многоатомных молекул [1].

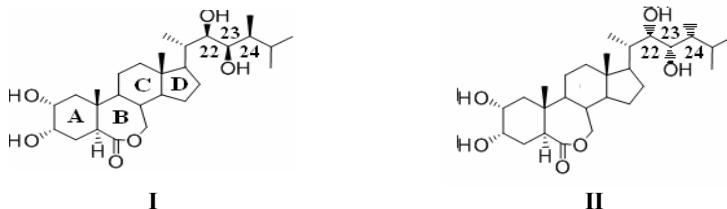


Рисунок 1 - Молекулярная структура (22S,23S)-24-эпибрассинолида (I) и (22S,23S)-28-гомобрассинолида (II)

Основная часть. В рамках подхода [1] в данной работе представлены результаты сравнительного теоретического анализа ИК спектров двух близких по химическому строению молекул брассиностероидов: (22S,23S)-24-эпибрассинолид (I) и (22S,23S)-28-гомобрассинолид (II), структурные различия которых локализованы в пределах боковой цепи: это – природа заместителя в положении 24 (метильный (I) и этильный (II)) и его конфигурация (24R (I) и 24S (II)) (рис. 1).

При значительном подобии спектров данных соединений, как по частотам максимумов, так и по интенсивностям соответствующих полос поглощения, имеют место различия в соотношениях интенсивностей ряда полос, их форме и полуширине (рис.2). Анализ результатов расчета колебательных спектров этих молекул позволил найти связь между их структурными различиями и наблюдаемыми изменениями ИК спектров.

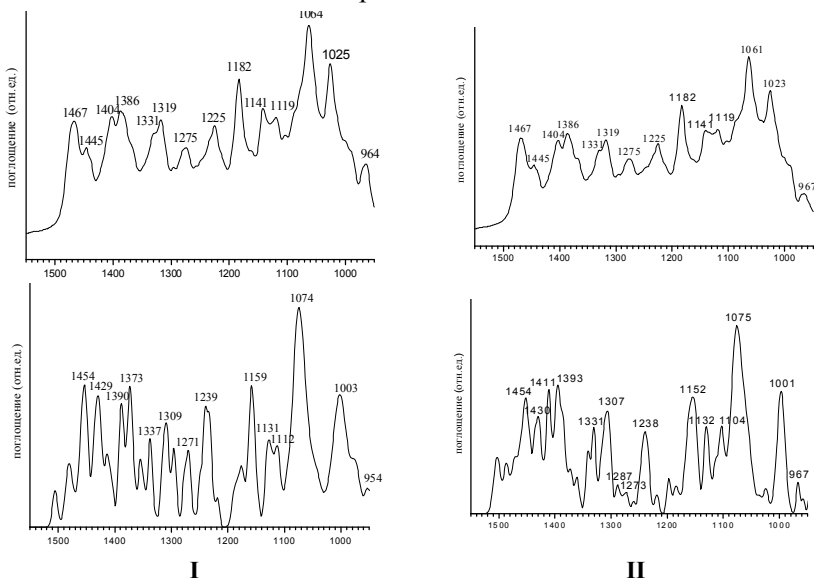


Рисунок 2 - Экспериментальные (вверху) и теоретические (внизу) ИК спектры поглощения (22S,23S)-24-эпибрассинолида (I) и (22S,23S)-гомобрассинолида (II)

В частности, важную роль в формировании полос поглощения с максимумами около 1386, 1182, 1141 и 1025 см^{-1} в молекуле (II) играют нормальные колебания с основным вкладом в РПЭ колебаний атомов в пределах этильной группы боковой цепи, в то время как в молекуле (I) в формировании полос с теми же максимумами участвуют другие группы атомов. Это объясняет характерные различия экспериментальных спектров: уменьшение интегральной интенсивности полос поглощения около 1182, 1141 и 1025 см^{-1} при переходе от молекулы (I) к (II). Различия же конфигурации связи C24-C28 и конформации концевой части боковой цепи в обеих молекулах в большей степени оказывают влияние на интегральные

интенсивности, формы и полуширины полос поглощения с максимумами около 1467, 1445 см⁻¹, 1403 см⁻¹, 1275 и 1225 см⁻¹ их экспериментальных ИК спектров.

Заключение. Проведенный анализ позволил оценить влияние структурных различий в пределах боковой цепи исследуемых молекул на формирование их ИК спектров в области 1500–950 см⁻¹.

Список использованной литературы

1. Королевич М.В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов: Дисс. ... д-ра физ.-мат. наук. – Минск, 2009. – 333 с

УДК 619:636.085.3

АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МИКОТОКСИНОВ ЗЕРНА И КОРМОВ С ЦЕЛЬЮ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА И БЕЗОПАСНОСТИ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОЙ ПРОДУКЦИИ

А.В. Кудина¹, канд. техн. наук, доцент,

Л.Е. Процко¹, ассистент, Е.П. Франко², канд. техн. наук, доцент

¹УО «Белорусский государственный аграрный технический университет;

²Ресурсный центр ЭкоТехноПарк – Волма УО «Республиканский институт профессионального образования», г. Минск, Республика Беларусь

kydina.a.v.sm@bsatu.by

Аннотация: безопасность продукции – важнейший показатель сельскохозяйственного производства. Одним из показателей при контроле безопасности зерновых культур является определение наличия микотоксинов. Проведен анализ современных методов определения микотоксинов с целью их применения по назначению.

Abstract: product safety is the most important indicator of agricultural production. One of the indicators in the control of the safety of grain crops is the determination of the presence of mycotoxins. An analysis of modern methods for the determination of mycotoxins was carried out with the aim of their intended use.

Ключевые слова: сельскохозяйственная продукция, корма, микотоксины, контроль, показатель, качество продукции.

Key words: agricultural products, feed, mycotoxins, control, indicator, product quality.

Введение. В связи с постоянным повышением требований к качеству и безопасности продукции сельского хозяйства происходит усовершенствование и применение современных методов контроля качества и безопасности сельскохозяйственной продукции поставляемых для пищевых и кормовых целей. Безопасность продукции является одним из важнейших показателей для сельскохозяйственного производства.