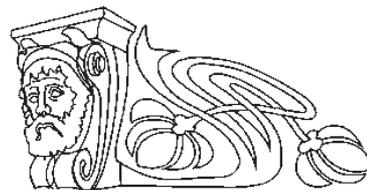




УДК 539.194; 539.196.3

## РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И ИК СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ 2,3-ДИ-О-НИТРО-МЕТИЛ- $\beta$ -D-ГЛЮКОПИРАНОЗИДА МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ



Л. М. Бабков<sup>1</sup>, И. В. Ивлиева<sup>1</sup>, М. В. Королевич<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет  
E-mail: babkov@sgu.ru

<sup>2</sup>Институт физики НАН Беларуси, Минск

Методом функционала плотности (B3LYP) в базисе 6-31G(d) построена структурно-динамическая модель молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозид. Минимизирована энергия, рассчитаны структуры, дипольный момент, поляризуемость, частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении и распределение интенсивности в ИК спектре молекулы. Дана интерпретация ИК спектра 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозид, измеренного в диапазоне 600–3700  $\text{cm}^{-1}$  при комнатной температуре. Обсуждены преимущества построенной модели в сравнении с моделью, основанной на использовании метода валентно-силового поля и валентно-оптической теории.

**Ключевые слова:** 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозид, молекулярное моделирование, метод функционала плотности, метод валентно-силового поля, валентно-оптическая теория, электрооптические параметры, механические параметры, нормальные колебания, ИК спектр, частота, интенсивность.

### Calculation of Structure and IR Spectrum of the 2,3-di-O-nitro-methyl- $\beta$ -D-Glucopyranoside Molecule by Density Functional Method

L. M. Babkov, I. V. Ivlieva, M. V. Korolevich

Structural-dynamic models of the 2,3-di-O-nitro-methyl- $\beta$ -D-glucopyranoside molecule are constructed by density functional method in basis 6-31G(d). Energies, structures, dipole moments, polarizabilities, frequencies of normal modes in harmonic approximation and IR intensities have been calculated. Interpretation of IR absorption spectrum is presented in range 600–3700  $\text{cm}^{-1}$ . Advantages of model, which was constructed, compared with model, which bases on using valence-force field method and valency-optical theory, are discussed.

**Key words:** 2,3-di-O-nitro-methyl- $\beta$ -D-glucopyranoside, molecular modeling, density functional method, valence-force field method, valence-optical theory, electro-optical parameters, mechanical parameters, normal modes, IR spectrum, frequencies, intensity.

### Введение

Моделирование структуры молекулярных систем (многоатомные молекулы, их молекулярные комплексы) методом теории функционала плотности (ТФП) [1, 2], как показала практика, дает приемлемые результаты, которые вполне могут быть использованы в расчетах их колебательных спектров. Абсолютная ошибка при вычислении частот нормальных колебаний не превосходит

4–5% в высокочастотной области колебательного спектра (2850–3750  $\text{cm}^{-1}$ ), в средней и низкочастотной областях спектра она уменьшается вдвое. Для ее устранения можно использовать процедуру масштабирования частот и силовых постоянных. Можно выйти за рамки гармонического приближения, что пока случается нечасто, по двум причинам: учет механического ангармонизма требует значительных затрат машинного времени при использовании стандартного пакета программ Gaussian'03 [3], в котором реализован метод ТФП; получаемые результаты для молекулярной системы с числом атомов больше 12 или комплекса с водородной связью не всегда удовлетворительны. Но чаще всего исследователи имеют дело именно с такими объектами: громоздкими, но интересными с точек зрения фундаментальной науки и практических приложений. Построение структурно-динамических моделей таких систем на основе квантово-механических методов становится необходимым элементом в исследованиях структуры, оптических спектров и свойств вещества.

В данной работе объектом исследования методом ТФП стали структура и ИК спектр молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозид. Это соединение принадлежит к классу углеводов (моносахаридов), в которых строение, внутри- и межмолекулярные взаимодействия теснейшим образом связаны и определяют свойства веществ. Уникальность свойств обеспечивает постоянный интерес к этим соединениям и широкое их использование. ИК спектры моносахаридов структурированы нечетко, имеют диффузный вид, что является следствием перекрывания большого числа близкорасположенных полос поглощения. Экспериментальное отнесение большинства частот затруднено даже при использовании избирательного дейтерирования и охлаждения образцов до температуры кипения жидкого гелия. Интерпретация таких спектров – чрезвычайно сложная задача. Она требует основательного



теоретического анализа, результатом которого является построение спектральных кривых, сопоставимых с экспериментальными, который вполне реален, и, тем не менее, до настоящего времени эта задача в приложении к моносахаридам не решена полностью.

Ранее, в работах [4–9] при исследовании ИК спектров моносахаридов использовались результаты их расчетов, не выходящих за рамки комбинированного подхода с использованием методов CNDO/2 и классического валентно-силового. В некоторых из них влияние водородной связи на спектр оценивалось на основе модели квазиизолированной молекулы. В работе [4] теоретический анализ колебательного спектра 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида был проведен на основе расчета частот и форм нормальных колебаний классическим полумпирическим методом в приближении валентно-силового поля. Геометрия молекулы была взята из работы [10], в которой методом рентгеноструктурного анализа (РСА) определены длины связей и углы родственного соединения – тетранитрата метил-β-D-глюкопиранозида. При построении валентно-силового поля использовались силовые постоянные его молекулы и молекулы β-D-глюкозы для гидроксильных групп. На основе полученных результатов был интерпретирован экспериментальный ИК спектр 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида в области 400–1700 см<sup>-1</sup>. Общий вид его ИК спектра существенным образом определен гидроксилами пиранозных циклов и нитратными группами. Установлены типичные спектроскопические признаки замещения гидроксильной группы у второго и третьего атомов углерода пиранозного цикла и закономерности формирования структуры резко выделяющейся по интенсивности сложной полосы в диапазоне частот 1600–1700 см<sup>-1</sup>, которые объясняют характерные изменения в спектре при переходе от метил-β-D-глюкопиранозида к 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозиду.

Цель данной работы – построение структурно-динамической модели молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида методом ТФП с использованием функционала V3LYP, реализованного в комплексе программ GAUSSIAN-03 для Windows [3]. Метод ТФП в приложении к моносахаридам впервые использован авторами в исследованиях структуры и колебательного ИК спектра метил-β-D-глюкопиранозида [11–14]. Результат оказался удачным. Преимущества метода ТФП перед

методом валентно-силового поля и валентно-оптической теории проявились на результатах расчета интенсивностей валентных колебаний полярных групп. Это стимулировало дальнейшее использование этого метода в аналогичном исследовании более сложного объекта – 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида. Авторы работы [4] констатируют, что природа расщепления полос, отнесенных к колебаниям нитрогрупп в его спектре ИК поглощения, до конца не изучена. Это стало одним из стимулов к проведению исследований, результаты которых обсуждаются в данной работе. Кроме того, полученные результаты станут в дальнейшем основой более полного теоретического изучения и описания структуры и ИК спектра этого вещества с учетом влияния на них водородной связи.

### Моделирование

Моделирование проведено методом ТФП с использованием функционала V3LYP в базисах 6-31G и 6-31G(d), описание которых можно найти [1, 2]. Базис 6-31G включает одну базисную функцию для внутренней оболочки, сгруппированную из шести гауссовых функций, и набор из внутренней функции, сгруппированный из трех гауссовых и внешней не сгруппированной гауссовой функции для валентной оболочки каждого атома [2]. Базис 6-31G(d) включает дополнительно по одному набору несгруппированных функций на каждый тяжелый атом.

Построена структурно-динамическая модель изолированной молекулы: минимизирована энергия, рассчитаны структура, дипольный момент, поляризуемость, частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении и распределение интенсивности по ним в ИК спектре свободной молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида.

### Обсуждение результатов

Минимизированная энергия молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида равна –1135.374277 Хартри (–4.950232·10<sup>-15</sup> Дж) и существенно превосходит энергию молекулы метил-β-D-глюкопиранозида (–726.45 Хартри) [11].

Строение молекулы приведено на рис. 1. Длины связей C–H и C–C и углы, рассчитанные в обоих базисах, близки. Длины связей пиранозного цикла молекулы, рассчитанные в базисе 6-31G(d), оказались ближе к длинам, определенным методом РСА в молекуле тетранитрата метил-β-D-глюкопиранозида. Длины полярных связей N=O,



O-N, C-O, O-H, рассчитанные в базе 6-31G, значительно завышены по сравнению с рассчитанными в базе 6-31G (*d*). Последние оказались ближе к длинам, определенным методом PCA [10]. На основе анализа результатов квантово-химических расчетов предпочтение было отдано результатам, полученным в базе 6-31G (*d*): они были использованы в моделировании и анализе ИК спектра молекулы 2,3-ди-O-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида и будут использованы в дальнейшем при более полном анализе структуры и ИК спектра его образца при учете влияния на них водородной связи.

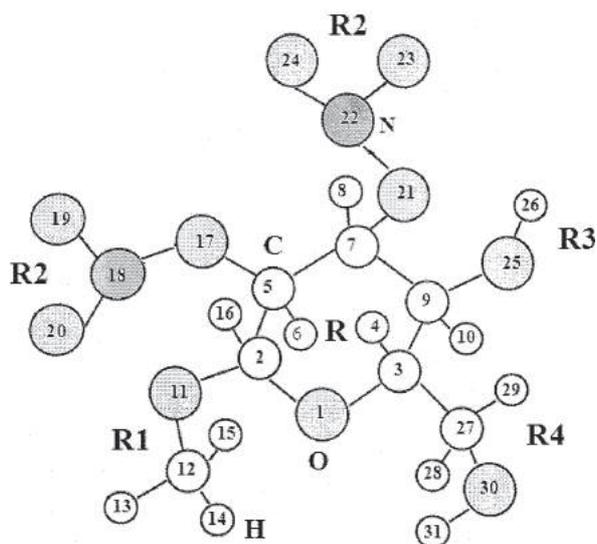


Рис. 1. Строение молекулы 2,3-ди-O-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида

Для удобства анализа полученных результатов введены обозначения: R – для атомов шестичленного кольца, R1 – для атомов группы O-CH<sub>3</sub>, R2 – для атомов нитрогруппы O-NO<sub>2</sub>, R3 – для атомов гидроксильной группы O-H; R4 – для атомов группы CH<sub>2</sub>-OH. В табл. 1 сравниваются рассчитанные и определенные методом PCA длины связей пиранозного кольца и нитрогрупп в моносахаридах, в табл. 2 приведены остальные рассчитанные геометрические параметры молекулы 2,3-ди-O-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида. Молекула не обладает симметрией. Неплоское пиранозное кольцо имеет конформацию «кресло». Его связи C-C немного длиннее соответствующих связей пиранозных колец в молекулах метил-β-D-глюкопиранозида [4] и тетранитрата метил-β-D-глюкопиранозида [10]. Превышение не превосходит 0.03 Å, откуда следует вывод о незначительном изменении геометрии пиранозного цикла в моносахаридах при замещении атома водорода гидроксила на нитрогруппу.

Общий дипольный момент и его проекции на оси координат составили  $\mu_o = 3.697$  D, что на треть больше дипольного момента молекулы метил-β-D-глюкопиранозида ( $\mu_o = 2.807$  D [11]),  $\mu_x = -0.949$  D;  $\mu_y = -1.706$  D;  $\mu_z = 3.139$  D, (D-Дебай).

На рис. 2 приведены измеренный ИК спектр 2,3-ди-O-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида (кривая 1) и рассчитанный ИК спектр его молекулы (кривая 2). В табл. 3 приведены рас-

Таблица 1

Длины связей пиранозного цикла и нитрогрупп в моносахаридах:  
 I – тетранитрат метил-β-D-глюкопиранозида, II – метил-β-D-глюкопиранозида,  
 III – 2,3-ди-O-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида

Связь, Å	I, PCA, [10]	II, 6-31G ( <i>d</i> ) [11]	III, 6-31G ( <i>d</i> )	III, 6-31G
C <sub>2</sub> -C <sub>5</sub>	1.52	1.54	1.56	1.55
C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub>	1.52	1.52	1.55	1.55
C <sub>7</sub> -C <sub>9</sub>	1.51	1.53	1.54	1.54
C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub>	1.54	1.54	1.53	1.53
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.43	1.44	1.44	1.48
O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.42	1.42	1.40	1.44
O <sub>21</sub> -N <sub>22</sub>	1.42	–	1.43	1.49
O <sub>17</sub> -N <sub>18</sub>	1.41	–	1.42	1.49
N <sub>18</sub> =O <sub>20</sub>	1.20	–	1.21	1.24
N <sub>23</sub> =O <sub>24</sub>	1.20	–	1.21	1.23
N <sub>22</sub> =O <sub>23</sub>	1.19	–	1.20	1.24
N <sub>18</sub> =O <sub>19</sub>	1.20	–	1.20	1.23



Таблица 2

## Рассчитанные геометрические параметры молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D- глюкопиранозид

Связь, Å	6-31G (d)	6-31G	Связь, Å	6-31G (d)	6-31G
C <sub>3</sub> -C <sub>27</sub>	1.54	1.54	C <sub>27</sub> -H <sub>28</sub>	1.10	1.10
C <sub>7</sub> -O <sub>21</sub>	1.46	1.50	C <sub>2</sub> -H <sub>16</sub>	1.10	1.10
C <sub>5</sub> -O <sub>17</sub>	1.45	1.48	C <sub>12</sub> -H <sub>15</sub>	1.10	1.09
O <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	1.43	1.46	C <sub>27</sub> -H <sub>29</sub>	1.09	1.09
C <sub>9</sub> -O <sub>25</sub>	1.42	1.45	C <sub>12</sub> -H <sub>13</sub>	1.09	1.09
C <sub>27</sub> -O <sub>30</sub>	1.42	1.45	C <sub>7</sub> -H <sub>8</sub>	1.09	1.09
C <sub>2</sub> -O <sub>11</sub>	1.41	1.44	C <sub>5</sub> -H <sub>6</sub>	1.09	1.09
O <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	1.43	1.46	C <sub>9</sub> -H <sub>10</sub>	1.09	1.09
C <sub>3</sub> -H <sub>4</sub>	1.10	1.10	O <sub>25</sub> -H <sub>26</sub>	0.97	0.98
C <sub>12</sub> -H <sub>14</sub>	1.10	1.10	O <sub>30</sub> -H <sub>31</sub>	0.97	0.98
Углы, град	6-31G (d)	6-31G	Углы, град	6-31G (d)	6-31G
O <sub>23</sub> =N <sub>22</sub> =O <sub>24</sub>	130.6	130.9	H <sub>8</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>5</sub>	110.3	110.6
O <sub>19</sub> =N <sub>18</sub> =O <sub>20</sub>	130.1	130.4	H <sub>13</sub> -C <sub>12</sub> -H <sub>15</sub>	109.8	110.4
O <sub>17</sub> -N <sub>18</sub> =O <sub>20</sub>	117.7	117.5	C <sub>5</sub> -C <sub>2</sub> -H <sub>16</sub>	109.5	110.5
O <sub>21</sub> -N <sub>22</sub> =O <sub>24</sub>	117.4	117	H <sub>13</sub> -C <sub>12</sub> -H <sub>14</sub>	109.3	109.9
C <sub>5</sub> -O <sub>17</sub> -N <sub>18</sub>	117.2	117.4	O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -H <sub>4</sub>	109.2	108.3
C <sub>2</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub>	116.2	116.6	O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>27</sub>	109.2	108.7
O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>5</sub>	115.6	115.4	H <sub>4</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>27</sub>	108.9	110.4
C <sub>7</sub> -O <sub>21</sub> -N <sub>22</sub>	115.5	115.0	H <sub>14</sub> -C <sub>12</sub> -H <sub>15</sub>	108.9	109.5
C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>9</sub>	114.8	115.5	C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> -O <sub>21</sub>	108.6	108.1
C <sub>2</sub> -O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	114.6	114.4	H <sub>8</sub> -C <sub>7</sub> -O <sub>21</sub>	108.4	107.9
O <sub>30</sub> -C <sub>27</sub> -C <sub>3</sub>	114.1	113.6	C <sub>3</sub> -C <sub>27</sub> -H <sub>28</sub>	108.3	108.9
C <sub>7</sub> -C <sub>5</sub> -O <sub>17</sub>	113.8	113.7	C <sub>3</sub> -C <sub>27</sub> -H <sub>29</sub>	108.3	108.6
C <sub>2</sub> -O <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	113.7	114.5	H <sub>28</sub> -C <sub>27</sub> -H <sub>29</sub>	107.9	108.6
C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub> -O <sub>25</sub>	113.5	112.1	C <sub>9</sub> -O <sub>25</sub> -H <sub>26</sub>	107.7	109.8
C <sub>2</sub> -C <sub>5</sub> -O <sub>17</sub>	112.9	112.1	H <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub>	107.4	108.2
O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -O <sub>11</sub>	112.3	111.8	H <sub>29</sub> -C <sub>27</sub> -O <sub>30</sub>	106.9	106.2
O <sub>17</sub> -N <sub>18</sub> =O <sub>19</sub>	112.3	112.1	H <sub>10</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>3</sub>	106.5	107.1
O <sub>21</sub> -N <sub>22</sub> =O <sub>23</sub>	112	112.1	O <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -H <sub>13</sub>	106.4	105.5
C <sub>7</sub> -C <sub>9</sub> -O <sub>25</sub>	111.9	111.6	O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub>	106.3	105.6
C <sub>27</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub>	111.8	112	C <sub>27</sub> -O <sub>30</sub> -H <sub>31</sub>	106.3	108.3
O <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -H <sub>15</sub>	111.6	111	H <sub>10</sub> -C <sub>9</sub> -O <sub>25</sub>	106.1	105.5
H <sub>4</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub>	111.3	111.7	C <sub>2</sub> -C <sub>5</sub> -H <sub>6</sub>	105.6	105.8
H <sub>28</sub> -C <sub>27</sub> -O <sub>30</sub>	111.2	110.7	O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -H <sub>16</sub>	104.7	104.4
H <sub>8</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>9</sub>	111.2	111.5	C <sub>5</sub> -C <sub>2</sub> -O <sub>11</sub>	104.4	103.9
O <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -H <sub>14</sub>	110.8	110.4	C <sub>9</sub> -C <sub>7</sub> -O <sub>21</sub>	103.1	102.6
C <sub>7</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>3</sub>	110.5	111.3	H <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -O <sub>17</sub>	98.9	98.3
O <sub>11</sub> -C <sub>2</sub> -H <sub>16</sub>	110.4	110.9	-	-	-

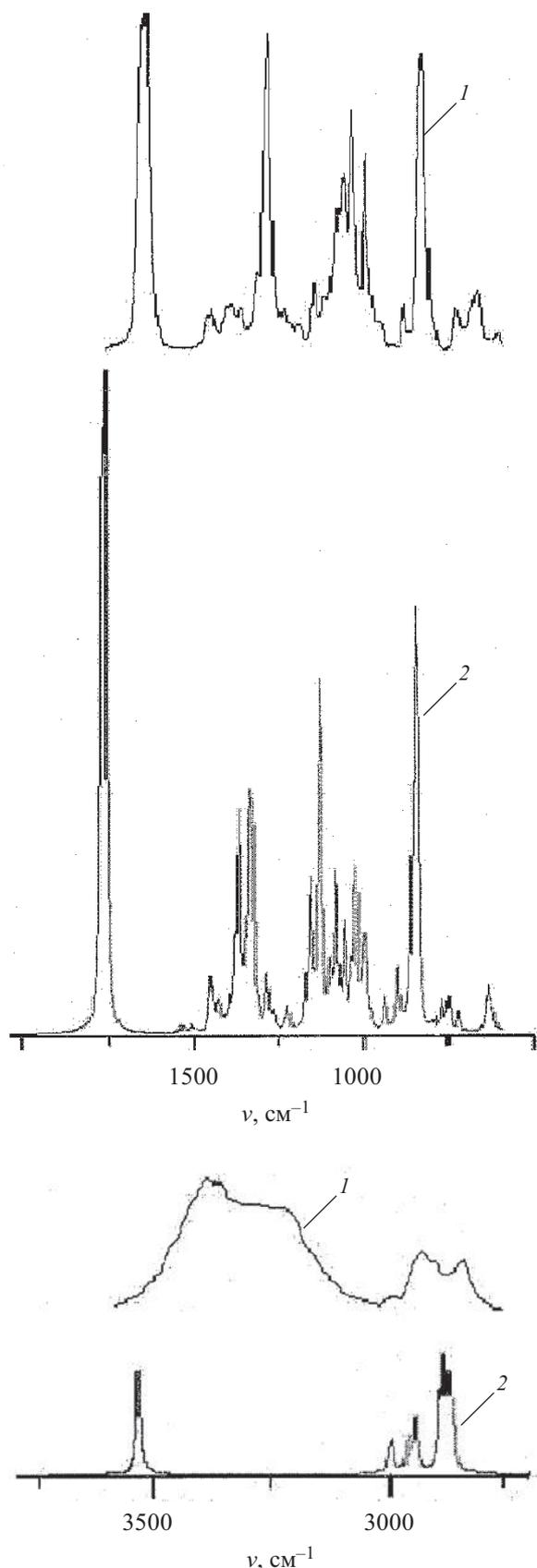


Рис.2. Спектры молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида: эксперимент (1), теория (2)

считанные частоты нормальных колебаний, их пиковые интенсивности в ИК спектре исследуемой молекулы, дано отнесение наблюдаемых полос.

Из-за отсутствия экспериментальных данных предметно обсудить и оценить результаты в области 30–600 см<sup>-1</sup> ИК спектра не представляется возможным.

В области 600–1800 см<sup>-1</sup> в целом имеет место удовлетворительное согласие рассчитанных и измеренных частот, их масштабирование не проводилось. Из табл. 3 видно, что нормальные колебания молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида в этой области сильно делокализованы: в них активно участвуют метильная и гидроксильная группы, группа CH<sub>2</sub>-OH и пиранозное кольцо. Поэтому в экспериментальном спектре в этой области сложно произвести однозначное отнесение некоторых полос поглощения к колебаниям определенных структурных элементов молекулы. Тем не менее, представляется важным выяснить поведение отдельных полос ИК спектра (так называемых структурно-спектральных характеристик) при переходе от β-D-глюкозы к ее замещенным. Рассчитанные колебания с частотами  $\nu_{44} = 1036$  и  $\nu_{53} = 1224$  см<sup>-1</sup> соответствуют измеренным полосам с максимумами 1030 и 1022 см<sup>-1</sup>, которые возникают при переходе от β-D-глюкозы к метил-β-D-глюкопиранозиду [11] и далее к 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозиду. Их появление обусловлено замещением гидроксильного водорода у атома C<sub>2</sub> в β-D-глюкозе метильной группой CH<sub>3</sub>. При переходе от метил-β-D-глюкопиранозида к 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозиду эти частоты не изменяются, интенсивность колебания  $\nu_{44}$  увеличивается вдвое, а колебания  $\nu_{53}$  уменьшаются вдвое. Из анализа коэффициентов форм этих двух колебаний следует, что при переходе от метил-β-D-глюкопиранозида к 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозиду к нормальному колебанию  $\nu_{44}$  примешиваются колебания нитрогрупп и других структурных элементов. Колебание  $\nu_{53}$  относится в основном к метильной группе и отчасти пиранозному кольцу. Колебание  $\nu_{65}$  с частотой 1410 см<sup>-1</sup> при переходе от метил-β-D-глюкопиранозида к 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозиду в соответствии с расчетом по частоте изменяется незначительно, а по интенсивности уменьшается вдвое.



Таблица 3

**Измеренные и рассчитанные частоты и интенсивности фундаментальных колебаний ИК спектра молекулы  
2,3-ди-О-нитро-метил-β-D- глюкопиранозид**

№	$\nu_{\text{теор}}^*$ см <sup>-1</sup> [4]	$\nu_{\text{эксп}}^*$ см <sup>-1</sup> [4]	$\nu_{\text{теор}}^*$ см <sup>-1</sup>	I, км/моль	Форма колебания
28	622	622(сл.)	626	14,8	$\gamma_{R R 1}(\text{OCO}), \chi_R(\text{OCCC}), \chi_R(\text{COCC}), Q_{R 2}(\text{O-N}),$ $\chi_R(\text{OCCH}), \chi_{R R 1}(\text{COCH}), \gamma_{R 2}(\text{O-N=O}),$ $\chi_R(\text{COCH}), \chi_{R R 4}(\text{COCC}), \gamma_{R R 1}(\text{COC}), \chi_R(\text{CCCC}),$ $Q_{R 1}(\text{CO}), \chi_{R R 2}(\text{OCCO})$
29			637	27	$Q_{R 2}(\text{O-N}), \chi_{R 4}(\text{HCOH}), \gamma_{R R 4}(\text{CCO}), \chi_{R R 4}(\text{CCOH}),$ $\gamma_{R 2}(\text{O-N=O}), \chi_{R R 3}(\text{CCOH}), Q_R(\text{CC})$
30	674	666(сл.)	646	20,5	$\chi_{R R 2}(\text{CCCO}), Q_{R 2}(\text{O-N}), \chi_R(\text{HCCC}), \chi_{R 4}(\text{HCOH}),$ $\chi_{R R 3}(\text{CCOH}), \chi_{R R 3}(\text{HCOH}), \chi_R(\text{CCCC}), \gamma_{R R 4}(\text{CCO}),$ $\chi_{R R 1}(\text{HCCO}), \chi_{R R 2}(\text{HCCO})$
31	716	711	727	16,1	$Q_{R 2}(\text{O-N}), \gamma_{R R 2}(\text{CON}), \chi_{R R 2}(\text{CCCO}), Q_R(\text{CC}),$ $\gamma_{R R 2}(\text{CCO}), \chi_{R R 3}(\text{OCCO}), \chi_{R 2 R R 2}(\text{OCCO}),$ $\chi_{R R 2}(\text{HCON}), \gamma_R(\text{COC}), \chi_{R R 3}(\text{HCCO}),$ $\gamma_{R R 2}(\text{O=N=O})$
32	726	737(сл.)	755	18	$\chi_{R R 2}(\text{CONO})$
33	741		759	11,5	$\chi_{R R 2}(\text{CONO})$
34	–	752	776	24,1	$\chi_{R R 2}(\text{HCCO}), \gamma_{R R 2}(\text{CON}), \chi_{R 2 R R 2}(\text{OCCO}),$ $\chi_R(\text{HCCH}), \chi_{R R 2}(\text{HCON}), Q_R(\text{CC}), \chi_R(\text{CCCC}),$ $\chi_{R R 1}(\text{CCCO}), \chi_{R R 2}(\text{OCCO}), \chi_{R R 2}(\text{CCON}),$ $Q_{R R 2}(\text{CO}), \gamma_{R R 2}(\text{CCO}), \gamma_{R 2}(\text{O-N=O}), \chi_R(\text{HCCC}),$ $\chi_R(\text{OCCH}), \chi_{R R 2}(\text{CONO}), \gamma_{R 2}(\text{O=N=O}), \beta_R(\text{CCH}), \chi_R(\text{COCH}), \chi_{R R 1}$ $(\text{OCOC}), \chi_{R R 1}(\text{HCOC}), Q_{R 2}(\text{N-O})$
35	793	–	797	5,8	$Q_{R R 4}(\text{CC}), \chi_{R R 2}(\text{CCCO}), \gamma_R(\text{CCC}), \chi_{R R 1}(\text{CCCO}), \chi_{R R 2}(\text{CCON}), \chi_{R R 2}$ $(\text{OCCO})$
36	–	840(о.с.)	846	178,1	$\chi_{R 4}(\text{HCOH}), \chi_{R R 4}(\text{CCCH}), Q_{R 2}(\text{O-N}),$ $\gamma_{R R 2}(\text{O=N=O}), Q_R(\text{OC}), \beta_{R R 4}(\text{CCH}),$ $\chi_R(\text{CCCH}), \chi_{R R 4}(\text{HCCH}), \chi_R(\text{OCCC})$
37	870	850(о.с.)	853	249,4	$Q_{R 2}(\text{O-N}), \chi_{R 4}(\text{HCOH}), \gamma_{R R 2}(\text{O=N=O}),$ $\chi_{R R 4}(\text{CCCH}), Q_{R R 2}(\text{CO})$
38	879	–	864	125	$Q_{R 2}(\text{O-N}), \gamma_{R R 2}(\text{O=N=O}),$
39	908	892(сл.)	902	44,7	$\chi_{R R 4}(\text{OCCH}), \chi_{R R 2}(\text{HCCO}), \chi_R(\text{COCC}), \chi_R(\text{HCCH}),$ $Q_R(\text{CC}), Q_R(\text{CO}), \chi_{R 4 R R 3}(\text{CCCO}), \chi_{R R 3}(\text{HCOH}),$ $\chi_{R R 3}(\text{CCOH}), \chi_{R 4}(\text{HCOH}), Q_{R R 2}(\text{CO}), \beta_R(\text{HCC}),$ $\beta_{R R 4}(\text{CCH}), \chi_{R R 2}(\text{HCON}), \chi_R(\text{OCCC}), \gamma_{R R 4}(\text{CCC}),$ $\chi_{R R 1}(\text{COCO}), \chi_{R R 4}(\text{HCCH}), \chi_{R R 4}(\text{HCCC}),$ $\chi_R(\text{COCH}), Q_{R 4}(\text{OC}), \chi_{R R 3}(\text{CCCO}), \chi_{R R 2}(\text{CCCO})$
40	931	930	941	26,3	$Q_{R R 1}(\text{OC}), Q_R(\text{CC}), Q_{R 1}(\text{OC}), \gamma_R(\text{OCC})$
41	980	962(ср)	986	10,7	$Q_{R R 2}(\text{CO}), \chi_R(\text{CCCH}), \chi_R(\text{HCCH}), Q_{R R 1}(\text{CO})$
42	985	998	1003	66,8	$Q_{R R 2}(\text{CO}), Q_{R 4}(\text{CO}), \chi_R(\text{COCH}), \chi_R(\text{HCCH}),$ $Q_{R R 4}(\text{CC}), Q_R(\text{CC}), Q_{R R 1}(\text{CO}), Q_{R 1}(\text{CO})$
43	1010	1048(с.)	1023	114,8	$Q_{R R 2}(\text{CO}), Q_R(\text{CO}), Q_{R 4}(\text{CO})$
44	1047		1036	38,8	$\chi_R(\text{CCCC}), \chi_R(\text{OCCC}), Q_{R R 2}(\text{CO}), \chi_R(\text{COCC}),$ $\chi_{R R 4}(\text{HCCH}), \chi_{R R 4}(\text{CCCH}), \chi_{R R 2}(\text{CCCO}), Q_R(\text{CC}),$ $Q_{R R 1}(\text{CO}), \beta_{R 4}(\text{HCO}), \chi_R(\text{HCCC}), \chi_{R 4}(\text{HCOH})$



Продолжение табл. 3

№	$\nu_{\text{теор}}^*$ см <sup>-1</sup> [4]	$\nu_{\text{эксп}}^*$ см <sup>-1</sup> [4]	$\nu_{\text{теор}}^*$ см <sup>-1</sup>	I, км/моль	Форма колебания
45	1051	1072(с.)	1059	75,6	$\chi_{R R 4}$ (OCCH), $\chi_{R R 4}$ (HCCH), $Q_R$ (OC), $\chi_{R R 4}$ (CCCO), $\chi_R$ (CCCH), $\chi_R$ (CCCC), $\chi_{R 4 R R 3}$ (CCCO), $\beta_{R 4}$ (HCO), $\beta_{R 4}$ (COH), $\chi_R$ (CCCO), $\chi_{R R 4}$ (CCOH)
46	1079	1087(с.)	1083	113,4	$Q_R$ (CO), $Q_{R 1}$ (OC), $\chi_{R R 2}$ (HCON), $\chi_R$ (HCCH), $Q_R$ (CC), $\chi_{R R 1}$ (HCOC), $\chi_{R R 2}$ (HCCO), $\beta_R$ (CCH), $\chi_R$ (CCCH), $\chi_{R R 1}$ (COCO), $\beta_{R 4}$ (COH), $\chi_{R R 4}$ (HCCH)
47	1091	1105	1101	41,9	$Q_{R R 3}$ (CO), $\beta_{R R 3}$ (COH)
48	1115	1125(сл.)	1131	259,5	$Q_{R 1}$ (OC), $Q_{R R 1}$ (CO), $Q_{R R 3}$ (CO), $Q_{R 4}$ (CO), $\beta_{R 4}$ (COH)
49	1120		1137	15,3	$Q_{R 4}$ (CO), $Q_R$ (CC), $Q_{R R 4}$ (CC)
50	1140, 1142	1155(сл.)	1158	102,4	$Q_R$ (CC), $Q_R$ (OC), $Q_{R 1}$ (OC), $Q_{R R 1}$ (CO), $\chi_R$ (COCH)
51	1159		1168	26,6	$Q_R$ (CC), $Q_R$ (OC), $Q_{R R 4}$ (CC), $Q_{R R 3}$ (CO)
52	1194	1197(сл.)	1188	1,8	$\beta_{R 1}$ (OCH)
53	1219	1238(сл.)	1224	20,4	$\beta_{R 1}$ (OCH), $\chi_{R R 1}$ (COCH)
54	1251		1235	7,4	$\chi_{R R 4}$ (HCCH), $\beta_{R R 4}$ (CCH), $\beta_{R 4}$ (COH), $\beta_{R 4}$ (HCO), $\chi_{R R 4}$ (HCCO), $\chi_R$ (COCH), $\beta_R$ (CCH), $\chi_{R R 2}$ (HCON), $\chi_{R 4}$ (HCOH), $\chi_R$ (HCCH)
55	1269	–	1269	12,9	$\beta_{R R 3}$ (COH), $\chi_{R R 2}$ (HCCO), $\chi_R$ (CCCH), $\beta_R$ (CCH), $\chi_R$ (HCCH), $\beta_{R R 3}$ (HCO), $\beta_{R R 4}$ (CCH), $\beta_{R 4}$ (COH), $\chi_{R R 4}$ (HCCC)
56	1274	1270(о.с.)	1285	39,9	$\chi_R$ (HCCH), $\beta_R$ (CCH), $\chi_{R R 2}$ (HCON), $\chi_{R R 2}$ (HCCO), $\chi_R$ (HCCC), $\beta_{R R 3}$ (COH)
57	1284		1312	11,6	$\beta_R$ (CCH), $\chi_R$ (HCCH), $\chi_{R R 3}$ (HCOH), $\chi_{R R 4}$ (HCCC), $\chi_R$ (OCCH), $\chi_R$ (COCH)
58	1301, 1305	1283(сл.)	1330	129,5	$\chi_{R R 2}$ (HCCO), $\chi_R$ (CCCH), $\beta_R$ (CCH), $\beta_{R R 2}$ (HCO), $\chi_{R R 2}$ (HCON)
59	1322, 1332	1310	1337	131,6	$\chi_R$ (HCCH), $\chi_R$ (HCCC), $\chi_{R R 3}$ (HCCO), $\beta_R$ (CCH), $\beta_{R R 2}$ (HCO), $\chi_{R R 2}$ (HCON), $\chi_R$ (HCOC)
60	1352	1365(сл.)	1348	33,5	$\chi_R$ (HCCH), $\beta_R$ (CCH), $\chi_R$ (OCCH), $\chi_{R R 1}$ (HCCO), $\beta_{R R 2}$ (HCO), $\chi_{R R 2}$ (HCON)
61	1367		1367	154,5	$\chi_{R R 1}$ (HCCO), $\chi_R$ (OCCH), $\beta_{R R 2}$ (HCO), $\chi_R$ (HCCH), $\beta_R$ (CCH), $\chi_R$ (HCOC), $\chi_{R R 1}$ (HCOC), $Q_{R 2}$ (O=N), $\chi_{R R 2}$ (HCCO), $\chi_{R R 3}$ (HCCO), $\chi_R$ (CCCH), $Q_{R 2}$ (O-N), $\beta_{R R 1}$ (HCO)
62	–		1380	51,7	$\chi_R$ (HCCC), $\beta_R$ (OCH), $\chi_R$ (HCCH), $\chi_{R R 3}$ (HCCO), $\chi_{R R 4}$ (HCCH), $\chi_{R R 4}$ (HCCO), $\beta_{R R 4}$ (HCC)
63	–	1387(сл.)	1391	7,2	$\chi_{R R 2}$ (HCCO), $\chi_{R R 1}$ (HCOC), $\chi_R$ (HCCH), $\beta_R$ (OCH), $\chi_{R R 3}$ (HCCO), $\chi_R$ (HCCC), $\beta_{R R 2}$ (HCO), $\beta_R$ (CCH), $\beta_{R R 4}$ (HCC), $\chi_{R R 4}$ (HCCH)
64	1399	–	1401	21,4	$\chi_{R R 2}$ (HCCO), $\chi_R$ (HCCC), $\beta_{R 1}$ (OCH), $\chi_R$ (HCCH), $\beta_R$ (OCH), $\chi_{R R 3}$ (HCCO), $\chi_R$ (HCOC)



№	$\nu_{\text{теор}}^*$ см <sup>-1</sup> [4]	$\nu_{\text{эксп}}^*$ см <sup>-1</sup> [4]	$\nu_{\text{теор}}^*$ см <sup>-1</sup>	I, км/моль	Форма колебания
65	1407	1410(сл.)	1414	4,5	$\chi_R$ (HCCH), $\beta_{R R1}$ (HCO), $\beta_{R R4}$ (CCH), $\beta_{R R2}$ (HCO), $\chi_R$ (COCH), $\chi_{R R2}$ (HCCO), $\beta_R$ (CCH)
66	1425	–	1425	5	$\chi_{R R1}$ (HCOC), $\beta_R$ (OCH), $\beta_R$ (CCH), $\chi_R$ (HCCH), $\chi_{R R1}$ (HCCO), $\chi_R$ (OCCH), $\chi_{R R3}$ (HCCO), $\beta_{R R2}$ (HCO), $\beta_{R4}$ (CCH), $\chi_R$ (CCCH), $\chi_{R R2}$ (HCCO), $\beta_{R4}$ (HCO)
67	1430	1445(сл.)	1430	18,7	$\beta_{R4}$ (COH), $\chi_{R R4}$ (HCCH), $\beta_{R4}$ (CCH)
68	1458		1445	22,4	$\beta_{R R4}$ (CCH), $\beta_{R4}$ (HCO), $\chi_R$ (COCH), $\beta_R$ (HCC), $\beta_{R4}$ (COH), $\chi_{R R4}$ (HCCO), $\chi_{R4}$ (HCOH), $\chi_{R R4}$ (OCCH), $\beta_{R R4}$ (HCC), $\chi_{R R4}$ (HCCH), $\chi_{R R3}$ (HCOH), $\chi_{R R4}$ (CCCH)
69	1462	1466(сл.)	1454	37,1	$\beta_{R R3}$ (HCO), $\chi_R$ (HCCH), $\chi_R$ (OCCH), $\chi_R$ (CCCH), $\chi_{R R4}$ (HCCC), $\chi_{R R2}$ (HCCO), $\beta_{R R3}$ (COH)
70	1473	–	1498	2	$\alpha_{R1}$ (HCH), $\beta_{R1}$ (OCH)
71	1502	–	1513	1,9	$\alpha_{R1}$ (HCH), $\chi_{R R1}$ (COCH)
72	–	–	1515	5	$\alpha_{R4}$ (HCH), $\chi_{R R4}$ (OCCH), $\chi_{R R4}$ (HCCH), $\chi_{R R4}$ (CCCH)
73	–	–	1539	6,9	$\alpha_{R1}$ (HCH), $\chi_{R R1}$ (COCH)
74	1662	1643(о.с.)	1766	415,6	$Q_{R2}$ (O=N)
75	1682	1658(о.с.)	1775	350,7	$Q_{R2}$ (O=N)
76	–	2838(ср.)	2868	14,8	$q_{R4}$ (CH), $q_R$ (CH)
77	–	2862(ср.)	2874	47,2	$q_{R1}$ (CH)
78	–		2886	59	$q_R$ (CH), $q_{R4}$ (CH)
79	–	2885(ср.)	2897	39,3	$q_R$ (CH)
80	–	2900(ср.)	2947	33	$q_{R1}$ (CH)
81	–	2928 (ср.)	2962	20,5	$q_{R4}$ (CH)
82	–	2938 (ср.)	2979	1,9	$q_R$ (CH)
83	–	2985(сл.)	2985	0,2	$q_R$ (CH)
84	–	2993(сл.)	3002	20,5	$q_{R1}$ (CH)
85	–	3005(сл.)	3010	1,3	$q_R$ (CH)
86	–	~3220(о.с.)	3538	40,1	$q_{R4}$ (OH)
87	–	~3400(о.с.)	3540	25,7	$q_{R3}$ (OH)

Примечание. Используются общепринятые обозначения координат: валентные колебания связей –  $q$ ,  $Q$ , плоские деформационные колебания –  $\gamma$ ,  $\beta$  – с участием одного атома Н,  $\alpha$  =  $\alpha$ (HCH), неплоские деформационные колебания –  $\chi$ .

Нитрогруппа оказывает еще более существенное влияние на область спектра 600–1800 см<sup>-1</sup>, проявляясь почти во всех нормальных колебаниях в этой области. Кроме этого, она активизирует влияние пиранозного кольца на большинство нормальных колебаний в этой области,

по сравнению с метил- $\beta$ -D-глюкопиранозидом [11], в котором указанные колебания в большей степени локализованы на соответствующих структурных элементах молекулы.

Рассчитанные частоты  $\nu_{32} = 755$  и  $\nu_{33} = 759$  см<sup>-1</sup> соответствуют неплоским колебаниям



нитрогрупп. Из-за малой интенсивности соответствующих им полос измеренного спектра их использование в качестве распознавательного признака нитрогрупп нецелесообразно.

В соответствии с результатами проведенных расчетов, нашего и [4], в диапазонах  $850\text{--}890\text{ см}^{-1}$  и  $1260\text{--}1290\text{ см}^{-1}$  проявляются колебания структурных элементов молекулы, непосредственно связанных с нитрогруппой, которые вполне могут быть рассмотрены как характерные спектральные признаки наличия в соединении нитрогрупп. Рассчитанные нами значения частот в этой области согласуются с данными работы [4], в которой они отнесены к нормальным колебаниям валентных координат  $Q(\text{O}-\text{N})$  и плоских деформационных координат  $\gamma(\text{O}-\text{N}=\text{O})$ , к которым примешивается колебание  $Q(\text{N}=\text{O})$  ( $1260\text{--}1290\text{ см}^{-1}$ ). Анализ их форм указывает на значительную делокализацию этих колебаний по координатам пиранозного кольца и нитрогрупп.

Наиболее характерным спектрально-структурным признаком наличия нитрогрупп в молекуле 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозида является присутствие интенсивных пиков в области  $1620\text{--}1700\text{ см}^{-1}$ . Измеренному интенсивному дублету частот  $1635, 1650\text{ см}^{-1}$  соответствуют в нашем расчете валентные колебания  $Q(\text{N}=\text{O})$  нитрогрупп с частотами  $\nu_{74}=1766$  и  $\nu_{75}=1775\text{ см}^{-1}$ . По сравнению с данными работы [4] их значения оказались завышенными, что может быть объяснено ограниченностью моделей гармонического приближения и изолированной молекулы.

Ограниченность модели изолированной молекулы сказывается и на результатах расчета частот, форм и интенсивностей валентных колебаний  $q(\text{O}-\text{H})$  гидроксильных групп, проявляющихся в высокочастотной области. В этой области ИК спектра ( $2850\text{--}3700\text{ см}^{-1}$ ) рассчитанные частоты валентных колебаний связей  $q(\text{C}-\text{H})$  и  $q(\text{O}-\text{H})$  завышены по сравнению с экспериментальными. Для валентных колебаний  $q(\text{C}-\text{H})$  превышение, составляющее  $4\text{--}5\%$ , обусловлено ограниченностью модели гармонического приближения. Оно устранено масштабированием частот в этой области спектра. Сказанное отчасти справедливо и для валентных колебаний  $q(\text{O}-\text{H})$  свободной молекулы ( $\nu_{86}=3538$  и  $\nu_{87}=3540\text{ см}^{-1}$ ), частоты которых также масштабированы. Тем не менее, широкая полоса сложной формы с аномально большой интенсивностью, с явно выраженным пиком ( $\sim 3400\text{ см}^{-1}$ ) и менее явным «плечом» ( $\sim 3220\text{ см}^{-1}$ ), центр тяжести которой

смещен в низкочастотную сторону в измеренном спектре на величину значительно большую, чем  $4\text{--}5\%$ , указывает на наличие водородных связей в образце. Построенная нами структурно-динамическая модель изолированной молекулы не учитывает наличие водородных связей в образце, которые существенно влияют на его структуру и спектр, в первую очередь в области  $3150\text{--}3600\text{ см}^{-1}$ , из-за чего затруднена ее интерпретация. Анализ этой области спектра и её интерпретация возможны на основе результатов моделирования для комплексов молекул 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозида с водородной связью, но это другая, более масштабная задача. Она может быть решена только на основе использованного в данной работе метода ТФП (в этом еще одно его преимущество перед методом валентно-силового поля). Ее решение и обсуждение результатов выходит за рамки данной статьи и явится основным содержанием следующей.

#### Заключение

На основе построения структурно-динамической модели молекулы 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозида установлено, что ее неплоское пиранозное кольцо имеет конформацию «кресло», как и в молекулах  $\beta$ -D-глюкозы, метил- $\beta$ -D-глюкопиранозида. Из анализа результатов квантово-химических расчетов следует вывод о незначительном изменении его геометрии в моносахаридах при переходе от  $\beta$ -D-глюкозы к метил- $\beta$ -D-глюкопиранозиду и далее к 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозиду.

Дан анализ спектрально-структурных признаков наличия метильной группы. Соответствующие ей полосы поглощения в ИК спектре при переходе от молекулы метил- $\beta$ -D-глюкопиранозида к молекуле 2,3-ди-О-нитро-метил- $\beta$ -D-глюкопиранозида не изменяют своих частотных положений, в то время как интенсивности изменяются в два раза.

Выявлены спектрально-структурные признаки наличия нитрогрупп. Наличие нитрогрупп связано с проявлением новых полос в ИК спектре и существенно влияет на значительную часть нормальных колебаний. Анализ частотных положений полос, отнесенных к валентным колебаниям связей  $Q(\text{N}=\text{O})$  нитрогрупп, указывает на возможное влияние на них специфических межмолекулярных взаимодействий. Последнее требует дополнительной проверки.

Наблюдаемый сдвиг полосы экспериментального спектра в области валентных колебаний



связей Q(O–H) относительно рассчитанного ИК спектра в низкочастотную сторону обусловлен влиянием водородной связи, образующейся в 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозиде.

Последовательный учет влияния водородной связи в рамках метода ТФП станет предметом нашего обсуждения в следующей статье.

### Список литературы

1. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 336–348.
2. Попл Дж. Квантово-химические модели // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 349–356.
3. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 03 // Revision B.03, Gaussian Inc. Pittsburgh, 2003. 302 p.
4. Королевич М. В., Жбанков Р. Г. Расчет и анализ частот нормальных колебаний 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозиде // Журн. прикл. спектр. 1997. Т. 64, № 6. С. 724–728.
5. Королевич М. В., Жбанков Р. Г., Сивчик В. В., Марченко Г. Н., Забелин Л. В. Анализ межмолекулярных воздействий нитратных групп в кристалле тетранитрата метил-β-D-глюкопиранозиде на основе полного расчета частот и интенсивностей полос в ИК спектре // Докл. АН СССР. 1987. Т. 294, № 3. С. 629–633.
6. Королевич М. В., Жбанков Р. Г. Квантовохимический расчет интенсивностей полос поглощения и интерпретация ИК спектра тетранитрата метил-β-D-глюкопиранозиде // Журн. прикл. спектр. 1989. Т. 50, № 6. С. 945–951.
7. Korolevich M. V., Zhabankov R. G., Sivchik V. V. Calculation of absorption band frequencies and intensities in the IR spectrum of α-D-glucose in a cluster // J. Mol. Structure. 1990. Vol. 220. P. 301–313.
8. Королевич М. В., Жбанков Р. Г., Сивчик В. В., Марченко Г. Н., Забелин Л. В. Интерпретация ИК спектров α-D-галактозы на основе согласованного расчета колебательных частот и интенсивностей полос поглощения // Журн. прикл. спектр. 1992. Т. 56, № 3. С. 373–380.
9. Korolevich M. V. Some results obtained using the CNDO/2 technique in the calculations of the IR spectra of polyatomic molecules. Part 2. A theoretical study of the vibrational spectrum of β-D-glucose // J. Mol. Structure. 1994. Vol. 306. P. 261–268.
10. Никитин А. В., Мясникова Р. М., Андрианов В. И., Молчанов В. П., Усов А. И., Фирганг С. И., Перцин А. И. Кристаллическая и молекулярная структура тетранитрата метил-β-D-глюкопиранозиде // Кристаллография. 1984. Т. 29, № 3. С. 489–493.
11. Бабков Л. М., Королевич М. В., Моисейкина Е. А. Расчет структуры и ИК спектра молекулы метил-β-D-глюкопиранозиде методом функционала плотности // Журн. прикл. спектр. 2010. Т. 77, № 2. С. 179–187.
12. Бабков Л. М., Королевич М. В., Моисейкина Е. А. ИК спектр метил-β-D-глюкопиранозиде и его интерпретация на основе построения структурно-динамической модели молекулы // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. 2009. Т. 9. Сер. Физика, вып. 2. С. 13–19.
13. Бабков Л. М., Королевич М. В., Моисейкина Е. А. Расчет структуры и ИК спектра метил-β-D-глюкопиранозиде методом функционала плотности с учетом водородной связи // Журн. прикл. спектр. 2011. Т. 78, № 2. С. 223–228.
14. Бабков Л. М., Королевич М. В., Моисейкина Е. А. Водородная связь, ИК спектры и строение метил-β-D-глюкопиранозиде // Журн. структур. химии. 2012. Т. 53, № 1. С. 28–35.