

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЯДОХИМИКАТОВ НА СТРУКТУРУ И СПЕКТРЫ БИМОЛЕКУЛ КАРТОФЕЛЯ

Калимбетова А.Г.

Калимбетова Айнагуль Гимрановна – студент,  
физико-технический факультет,  
Астраханский государственный университет, г. Астрахань

**Аннотация:** одним из распространённых методов борьбы с насекомыми-вредителями сельскохозяйственной растительности является применение различных пестицидов. При этом остается неизученным вопрос о влиянии на структуру молекул и на экосистему. Данная работа посвящается выявлению такого влияния методами ИК-спектроскопии. При этом были построены структурно-динамические молекулы, подвергшиеся влиянию методами квантово-механических расчетов с применением программы «Gaussian 98» [5], рассчитаны фундаментальные частоты и интенсивность в ИК-спектрах частей растений и ядохимиката.

**Ключевые слова:** пестициды, насекомые-вредители, ИК-спектроскопия, квантово-механические методы расчета.

## Введение

В настоящий момент в сельскохозяйственной отрасли для обработки растений используют различные ядохимикаты, в частности, «Максим» (химический компонент - флудиоксонил). При этом остается неисследованным вопрос о влиянии данного ядохимиката на структуру и свойства биомолекул обрабатываемым им растением [3]. В данной работе была поставлена и решена задача обнаружения такого влияния на основе применения методов ИК-спектроскопии.

## Цели и задачи.

В качестве исследуемого растения был выбран картофель. Для данной работы было посажено 10 образцов исследуемого вида, 5 из которых были обработаны ядохимикатом. Клубни картофеля были посажены ранней весной, на глубину от 5 до 10 см при температуре почвы 12°C и температуре воздуха 18°C. Полив производился по мере необходимости, наиболее интенсивно полив производился во время цветения и образование клубней. Спустя 10 дней появились первые ростки. Через 20 дней началось цветение (цветы белые). После появления первых ростков производилась первая и последующая обработка ядохимикатом (ядохимикат разводился, из расчета 5мл на 10 литров воды).

До посадки клубней картофеля был сняты спектры ткани клубня картофеля и ядохимиката. Спустя 14 дней после обработки ядохимикатом сняли снова спектры с листьев картофеля. При этом были обнаружены новые группы (сложные эфиры, кислоты COOH, алканы  $CH_3$ ). Спустя 4 недели мы снова сняли спектры с выращенного картофеля, и обнаружили новые группы (кислоты COOH и N оксид).

Анализ полученных спектров тканей клубней картофеля и ядохимиката, спектров листьев и выращенного картофеля представлены в таблице 1.

Исходя из химических формул веществ входящих в состав картофеля (крахмал, вода, витамины B1, B2, B3, B6, B9, C, K) и исследуемого ядохимиката (флудиоксонил) были предложены структурные молекулы и матрицы значений, предложены и выполнены расчеты из полученных матриц значений. Структурные молекулы и матрицы мы построили и получили при помощи программы Chem Craft. Расчеты производились в программе Gaussian 98, некоторые из них представлены в таблице 2-4.

Таблица 1. Анализ полученных спектров

Картофель						
вещества	анализ картофеля	анализ яда «Максим»	1 анализ		2 анализ	
			лист без яда	лист с ядом	картофель без яда	картофель с ядом
Полимеры	3271	3335	3343	3334	3282	3288
Кислоты -COOH	--	--	2918	2917	2932	--
Алканы CH <sub>3</sub>	--	--	2850	2850	--	--
Аром.тиоционат	2163	--	--	--	--	--

Сложные эфиры	--	--	1732	1732	--	--
Полиены	1635	1639	1634	1635	1635	1635
Алканы СН <sub>3</sub>	1360	1479	1442	1441	1336	1336
Простые аром. и вин. эфиры =C-O-C	1149	1213	1241	1239	--	--
Простые алиф. и цикл. эфиры C-O-C	1077	--	--	--	1077	1151/1077
Простые аром. и вин. эфиры =C-O-C	1011	1084/1037	1016	1016	1007	1012
N-оксид	928	--	--	--	928	--
Двуокись углерода O=C=O	--	--	--	--	--	--
Нитрит O-N=O	674	--	--	--	--	--

Таблица 2. Анализ частот по расчетам яда «Максим»

Рассчитанные частоты, см-1	Спектральные частоты, см-1
1629	1639
1463	1479
1203	1213
1096	1084

Таблица 3. Анализ частот по расчетам Крахмала

Рассчитанные частоты, см-1	Спектральные частоты, см-1
1006	1001
1073	1077
1364	1360
1636	1635

Таблица 4. Анализ частот по расчетам Воды

Рассчитанные частоты, см-1	Спектральные частоты, см-1
2161	2163
1354	1360
936	928
683	674

### Вывод

На основании анализа ИК спектров веществ, входящих в состав картофеля на различных стадиях вегетативного периода и их сравнении со спектром используемого ядохимиката можно сделать вывод о том, что непосредственное влияние заключается в ускорении метаболизма, что является, вероятно, следствием перенесенного растением стресса.

### Список литературы

1. Айрапетян В.С. Введение в атомную и молекулярную спектроскопию. Новосибирск: СГГА, 2009. 45 с.
2. Вильсон Е., Дешиус Дж., Кросс П. Теория колебательных спектров молекул. М.: ИЛ, 1960. 354 с.
3. Грибов Л.А., Баранов В.И., Зеленцов Д.Ю. Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул. Теория и методы расчета. Наука. Москва, 1997. 475 с.
4. Кривохижина Т. Квантово-механическое исследование колебательных спектров производных антроцена и комплексных соединений корола. Саратов, 2006. 17 с.
5. Серба П.В., Мирошиченко С.П., Блинов Ю.Ф. Квантово-химические расчеты в программе Gaussian учебное пособие по курсу «физика низкоразмерных структур». ФЭП. Таганрог, 2005. 99 с.