

Анализ ИК спектров водорастворимых эфиров целлюлозы с применением математических методов обработки спектральных данных

УО «Белорусский государственный медицинский университет»,
Минск, Республика Беларусь

Целлюлоза и ее производные широко используются в медицине и в фармацевтике для создания разнообразных лекарственных средств.

При исследовании структуры производных целлюлозы наиболее информативными являются методы спектрального анализа, в частности, метод инфракрасной (ИК) спектроскопии. ИК спектры полисахаридов состоят из большого числа близкорасположенных перекрывающихся полос, в результате этого число видимых максимумов поглощения в спектре значительно меньше истинного количества частот нормальных колебаний. Данный факт существенно затрудняет проведение детальной интерпретации спектров этих соединений. Применение математических методов обработки спектральной информации позволяет выделять ранее неразрешенные полосы в спектрах сложных соединений и извлекать более детальную информацию об их структуре и конформационных изменениях.

Целью данной работы являлось изучение ИК спектров водорастворимых эфиров целлюлозы с различными видами заместителей (метил-, карбоксиметил-, гидроксиэтил- и карбоксиметилгидроксиэтилцеллюлоза) с применением математических методов обработки спектральных данных (деконволюции и численного дифференцирования) для установления характерных спектральных различий исследуемых соединений.

Результаты. В результате применения математических методов получены тонкоструктурные экспериментальные ИК спектры водорастворимых эфиров целлюлозы, выявлены новые, ранее не разрешенные компоненты. Проведен сравнительный анализ обычных и тонкоструктурных спектров данных соединений.

Обнаружено расщепление полос поглощения, связанное с введением в полимерную цепь целлюлозы объемных заместителей. Так, в спектральном диапазоне $970\text{--}800\text{ см}^{-1}$ все исследуемые производные целлюлозы характеризуются значительным увеличением числа полос поглощения по сравнению с природной целлюлозой. Появление новых

полос может быть главным образом обусловлено колебаниями атомных групп заместителей.

Проведен анализ ИК спектров водных растворов и пленок эфиров целлюлозы (метил-, гидроксиэтил-, карбоксиметилцеллюлоза). На основе применения математических методов улучшения разрешения установлено, что в метилцеллюлозе преобладают внутримолекулярные водородные связи, тогда как гидроксиэтил- и карбоксиметилцеллюлоза характеризуются широким набором внутри- и межмолекулярных водородных связей.

В ИК спектрах исследуемых эфиров целлюлозы выделена тонкая структура сложной полосы поглощения, обусловленной валентными колебаниями связей С-О. Показано, что растворение производных целлюлозы в воде приводит к изменению числа и относительных интенсивностей индивидуальных составляющих сложных полос поглощения в их спектрах, что свидетельствует об изменении конформаций этих соединений.

Сопоставительный анализ тонкоструктурных ИК спектров эфиров целлюлозы свидетельствует, что наиболее перспективным для проведения конформационного анализа объемных боковых заместителей молекул исследуемых эфиров целлюлозы является спектральный интервал $970-800\text{ см}^{-1}$.

Заключение. Полученные результаты могут быть использованы для более детальной интерпретации ИК спектров водорастворимых эфиров целлюлозы. Установленные в работе спектральные характеристики производных целлюлозы имеют практическое значение для анализа их структурных модификаций с целью создания новых соединений медицинского назначения.