

ФРАГМЕНТАЦИЯ КРАУН-ЭФИРОВ СОДЕРЖАЩИХ АРОМАТИЧЕСКИЕ ФРАГМЕНТЫ В УСЛОВИЯХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ИОНИЗАЦИЕЙ ЭЛЕКТРОНАМИ

Косюга Ю.В

Научный руководитель – ст. преподаватель каф. «Органические и фармацевтические технологии» Ракипов И. М.

В работе изучена фрагментация краун-соединений в структуре которых присутствует дифенильный фрагмент, а также особенности масс-спектрального поведения соединений такого типа. Для сравнения масс-спектров вводились различные заместители (NO_2 , Br, NH_2). Из сравнения масс-спектров краун-соединений не содержащих заместителей в дифенильном фрагменте и их замещенных аналогов следует, что в большинстве случаев наблюдается увеличение устойчивости молекулярных ионов при введении заместителей, обладающих электронодонорными свойствами. В то же время, введение электроноакцепторной нитрогруппы приводит к снижению интенсивности пиков молекулярных ионов. Такое влияние нельзя объяснить легкостью протекания нитро-нитритной перегруппировки, поскольку пики фрагментных ионов, образующихся в результате такого процесса, имеют низкую интенсивность. Вероятно, в этом случае проявляется общее дестабилизирующее влияние электроноакцепторного заместителя на молекулярные ионы.

Аминогруппы и трет-бутильные заместители, обладающие ярко выраженным электронодонорным эффектом, как отмечалось ранее, приводят к увеличению устойчивости молекулярных ионов и снижает степень их фрагментации. Повышение электронной плотности на ароматической части молекулы способствует увеличению стабильности осколочных ионов содержащих дифенильный фрагмент.

Введение брома в ароматические ядра не изменяет основных направлений распада. В масс-спектрах соединений наблюдаются фрагментные ионы, аналогичные наблюдаемым для незамещенных соединений.

Таким образом электронные свойства заместителей в ароматическом фрагменте оказывают существенное влияние на устойчивость молекулярных ионов рассмотренных соединений.