

ЕҢБЕК ҚЫЗЫЛ ТУ ОРДЕНДІ
«Ә. Б. БЕКТҰРОВ АТЫНДАҒЫ
ХИМИЯ ҒЫЛЫМДАРЫ ИНСТИТУТЫ»
АКЦИОНЕРЛІК ҚОҒАМЫ

ҚАЗАҚСТАННЫҢ ХИМИЯ ЖУРНАЛЫ

ХИМИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ КАЗАХСТАНА

CHEMICAL JOURNAL of KAZAKHSTAN

АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО
ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
«ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКИХ НАУК
им. А. Б. БЕКТУРОВА»

4 (64)

ОКТЯБРЬ – ДЕКАБРЬ 2018 г.
ИЗДАЕТСЯ С ОКТЯБРЯ 2003 ГОДА
ВЫХОДИТ 4 РАЗА В ГОД

АЛМАТЫ
2018

Т. В. ХАРЛАМОВА, С. Ж. ЖУМАГАЛИЕВ

АО «Институт химических наук им. А. Б. Бектурова, Алматы, Республика Казахстан

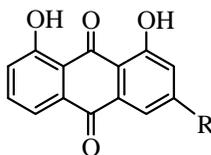
ОСОБЕННОСТИ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО РАСПАДА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ХРИЗАЗИНА

Аннотация. В статье представлен анализ масс-спектрометрической фрагментации молекулярных ионов некоторых производных 1,8-дигидрокси-9,10-антрахинона (хризазина) (1), содержащих в 3 положении антрахиноновой системы метил, гидроксиметил и карбоксигруппу (2-4) и рассматриваются основные направления распада молекулярных ионов (МИ) соединений при электронной ионизации, а также сравнение особенностей механизма фрагментации в зависимости от химической природы заместителя. Показано, что рассматриваемая группа соединений характеризуется интенсивным пиком молекулярного иона (МИ) ($I = 100\%$), а его стабильность изменяется в пределах $W_{mi} = 33,3-50,2\%$. Предложены схемы масс-спектрометрической фрагментации производных и показано, что первоначальное элиминирование двух молекул CO характерно для МИ хризазина, хризофанола и реина.

Ключевые слова: масс-спектр, молекулярный ион, фрагментация, ионизация электронами, элиминирование, производные 9,10-антрахинона.

Производные 1,8-дигидрокси-9,10-антрахинона (хризазина) (1) представляют достаточно большую группу природных хинонов, которые выявлены в растениях семейств крушиновые (Rhamnaceae), гречишные (Polygonaceae), бобовые (Fabaceae), лилейные (Liliaceae), зверобойные (Nuragisaceae) и др. Особенно широко в этой группе представлены соединения, содержащие в качестве заместителей гидрокси-, метокси-, гидроксиметильные группы, углеводные заместители [1,2]. Особое значение этой группы лекарственных растений, содержащих производные антрахинона, таких как алоэ, крушина, жостер, ремень, щавель, марена, связано с их биологической активностью, а также с тем, что их использование длительно опробовано народной медициной и описано в большинстве руководств по применению лекарственных растений. Следует отметить, что производные хризазина входят в состав разнообразных комплексных препаратов, применяемых в медицинской практике [3-5].

В продолжение работ по исследованию масс-спектральной фрагментации производных антрахинона [6-9], в данной статье рассматриваются масс-спектры некоторых производных 1,8-дигидрокси-9,10-антрахинона (хризазина) (1), содержащих в 3 положении антрахиноновой системы метил-, гидроксиметил- и карбоксигруппу (2-4) с целью выявления основных направлений распада молекулярных ионов (МИ) соединений при электронной ионизации (ЭИ), а также сравнения особенностей механизма фрагментации в зависимости от химической природы заместителя. Структурные формулы рассматриваемых молекул приведены ниже:



1-4

R-H (1), R-CH₃ (2), R-CH₂OH (3), R-COOH (4)

В таблице 1 представлены пики молекулярных ионов производных антрахинона (1-4) и наиболее характерные пики в масс-спектрах производных. Стабильность МИ к электронной ионизации ($W_{ми}$), а также интенсивности основных фрагментных ионов (F_1-F_7) от полного ионного тока представлены в таблице 2. Из таблицы 1 видно, что интенсивность МИ рассматриваемых соединений (1-4) составляет 100%, а величина стабильности МИ к ЭИ ($W_{ми}$) (таблица 2) находится в пределах 33,3-50,2%.

1,8-Дигидрокси-9,10-антрахинон (хризазин) (1). Как было показано ранее [10], в масс-спектре 9,10-антрахинона имеется четыре интенсивных пика, которые соответствуют МИ (M^{++} 208), фрагментным ионам $[M-CO]^+$ (m/z 180) и $[M-CO-CO]^+$ (m/z 152), образование которых происходит после последовательного элиминирования двух молекул оксида углерода, и пик

Таблица 1 – Масс-спектры производных 9,10-антрахинона (1-4)

| № | Название соединения | Масс-спектр: M^{++} , m/z ($I_{отн}$ в %)* |
|--|---|--|
| 1 | 1,8-Дигидрокси-9,10-антрахинон | 241 (15), M^{++} 240 (100), 239 (4), 223 (7), 222 (3), 212 (15), 211 (4), 184 (16), 183 (3), 155 (7), 139 (3), 138 (12), 137 (3), 128 (9), 127 (7), 120 (5), 102 (4), 92 (13), 77 (5), 75 (6), 128 (9), 127 (7), 120 (5), 102 (4), 92 (13), 77 (5), 75 (6), 74 (4), 69 (4), 64 (7), 63 (14), 62 (6), 51 (5). |
| 2 | 1,8-Дигидрокси-3-метил-9,10-антрахинон (хризифанол) | 255 (16), M^{++} 254 (100), 239 (3), 237 (4), 226 (11), 225 (5), 211 (1), 209 (1), 198 (6), 197 (6), 181 (2), 180 (2), 169 (2), 152 (6), 151 (3), 141 (3), 139 (2), 127 (3), 115 (4), 77 (3), 76 (4), 75 (3), 63 (5), 62 (2), 53 (2), 51 (3), 39 (3). |
| 3 | 1,8-Дигидрокси-3-гидрокси-метил-9,10-антрахинон (алоэ-эмодин) | 271 (20), M^{++} 270 (100), 253 (6), 252 (7), 242 (5), 241 (28), 226 (13), 224 (11), 213 (20), 197 (9), 196 (6), 185 (6), 183 (3), 168 (12), 157 (6), 154 (9), 139 (25), 121 (27), 92 (21), 91 (25). |
| 4 | 1,8-Дигидрокси-3-карбокси-9,10-антрахинон (реин) | 286 (25), M^{++} 284 (100), 267 (12), 266 (2), 256 (14), 254 (3), 241 (9), 240 (15), 228 (4), 212 (4), 210 (12), 200 (1), 199 (5), 184 (5), 183 (7), 182 (2), 172 (3), 171 (1), 165 (2), 155 (9), 128 (2), 127 (10), 126 (15), 92 (10), 91 (7). |
| * Пики молекулярного иона (МИ) и наиболее интенсивных фрагментных ионов. | | |

Таблица 2 – Стабильность молекулярных ионов ($W_{ми}$) и характеристических ионов (F_1 - F_7) ($W_{ф}$) от полного ионного тока производных 9,10-антрахинона (1-4)

| № | $W_{ми}, \%$ | $m/z (W_{ф})$ | | | | | | |
|---|--------------|------------------------|---|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| | | F_1 | F_2 | F_3 | F_4 | F_5 | F_6 | F_7 |
| 1 | 37,0 | 212 (4,9) | 184 (3,6) | 155 (1,2) | 239 (9,8) | 211 (1,6) | 183 (2,8) | 223 (0,3) |
| 2 | 50,2 | 239 (1,4) 211 (0,4) | 237 (1,7) 209 (0,5) | 226 (4,9) 198 (2,4) | 180 (1,0) 152 (2,4) | 225 (2,0) 197 (2,4) | 169 (1,0) 141 (1,3) | 151 (1,7) |
| 3 | 33,3 | 253 (1,7) | 252 (2,0) 224 (3,0) 196 (1,7) 168 (3,4) 139 (6,9) | 242 (1,5) | 241 (7,8) 213 (5,5) | 226 (3,6) 197 (2,5) | 185 (1,7) | 157 (1,7) |
| 4 | 35,1 | 256 (4,9) | 228 (2,9) | 210 (4,1) 199 (1,8) | 267 (4,1) | 241 (3,3) | 240 (5,1) | 212 (1,4) 184 (1,7) |

иона 1,2-дегидробензола с m/z 76. Наличие в структуре 9,10-антрахинона заместителей приводит к изменению масс-спектральной фрагментации и наряду с последовательным отрывом CO групп в спектрах наблюдаются дополнительные каналы распада МИ с появлением других характеристических ионов. Масс-спектрометрическая фрагментация 1,8-дигидроксиантрахинона (1) также связана с последовательным элиминированием двух молекул оксида углерода. После отрыва первой молекулы CO образуется катион-радикал дигидроксифлуоренона $F_1 [M-CO]^{+*}$ с m/z 212 ($I=15\%$), а после отщепления второй молекулы CO – ион дигидроксибифенилена $F_2 [M-CO-CO]^{+*}$ с m/z 184 ($I=16\%$) (схема 1). Последующая фрагментация связана с элиминированием из иона F_2 группы атомов HCO, которая приводит к образованию иона $F_3 [M-CO-CO-HCO]^{+*}$ с m/z 155, с интенсивностью $I=7\%$. Следует отметить, что катион-радикал F_1 с m/z 212 похож на МИ дигидроксифлуоренона и пики со значениями m/z 184, 183, 155, 128, 102 соответствуют его фрагментации.

В спектре имеются также слабоинтенсивные пики ионов со значением m/z 239 ($I=4\%$), m/z 211 ($I=4\%$) и m/z 183 ($I=3\%$) (таблица 1). Первый ион $F_4 [M-H]^+$ отвечает потере атома водорода. При фрагментации ион-фрагмента $F_4 [M-H]^+$ в масс-спектре наблюдается пик иона $F_5 [M-H-CO]^+$ с m/z 211, который может образоваться и при элиминировании группы атомов HCO из МИ. Последующая потеря молекулы CO приводит к образованию фрагментного иона $F_6 [M-H-CO-CO]^+$ с m/z 183.

Следует также отметить, что среди первичных актов распада молекулярного иона в спектре имеется малоинтенсивный пик, который отвечает ион-фрагменту $F_7 [M-OH]^+$ с m/z 223 ($I=7\%$).

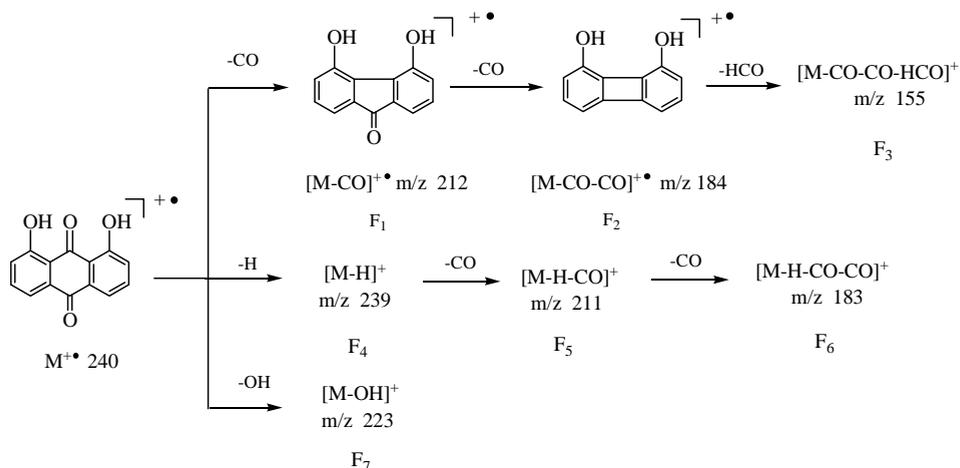


Схема 1 – Фрагментация молекулярного иона
1,8-дигидрокси-9,10-антрахинона (1)

1,8-Дигидрокси-3-метил-9,10-антрахинон (хризифанол) (2). Введение метильной группы в 3 положение молекулы хризазина приводит к резкому увеличению стабильности МИ, которое для хризифанола (2) составляет $W_{\text{ми}}=50,2\%$ (таблица 2) и появлению новых направлений фрагментации. Распад МИ хризифанола (2) начинается с отщепления метильного радикала, с образованием иона F₁ $[M-CH_3]^+$ с m/z 239 и отрыва OH, приводящего к формированию ион-фрагмента F₂ $[M-OH]^+$ с m/z 237. Интенсивность образующихся ионов F₁ и F₂ составляет I=3% и I=4% соответственно. Элиминирование оксида углерода из этих ионов приводит к образованию ионов F₁' $[M-CH_3-CO]^+$ с m/z 211 (I=9%) и F₂' $[M-OH-CO]^+$ с m/z 209 (I=1%) (схема 2).

«Антрахиноновый путь» распада МИ хризифанола, связанный с последовательным элиминированием молекул оксида углерода из кольца В, приводит к формированию иона 1,8-дигидрокси-3-метил-флуоренена F₃ $[M-CO]^+$ с m/z 225 (I=11%) и иона 1,8-дигидрокси-3-метил-бифенилена F₃' $[M-CO-CO]^{+\bullet}$ с m/z 198 (I=6%). Далее, из иона F₃' $[M-CO-CO]^{+\bullet}$ происходит выброс молекулы воды с образованием слабоинтенсивного иона F₄ $[M-CO-CO-H_2O]^+$, из которого после отщепления молекулы CO идет образование иона F₄' $[M-CO-CO-H_2O]^+$ с m/z 152 (I=6%).

Еще одно направление распада молекулы хризифанола связано с выбросом группы атомов СОН из МИ с образованием слабоинтенсивного пика ион-фрагмента F₅ $[M-COH]^+$ с m/z 225 (I=5%). Элиминирование из иона F₅ молекулы оксида углерода приводит к более интенсивному иону F₅' $[M-COH-CO]^+$ с m/z 197, а при последовательном отщеплении от него молекул CO и H₂O образуются фрагментные ионы F₆ $[M-COH-CO-CO]^+$ с m/z 169, F₆' $[M-COH-CO-CO-CO]^+$ с m/z 141 и F₇' $[M-COH-2CO-H_2O]^+$ с m/z 151, интенсивность которых составляет I=3%.

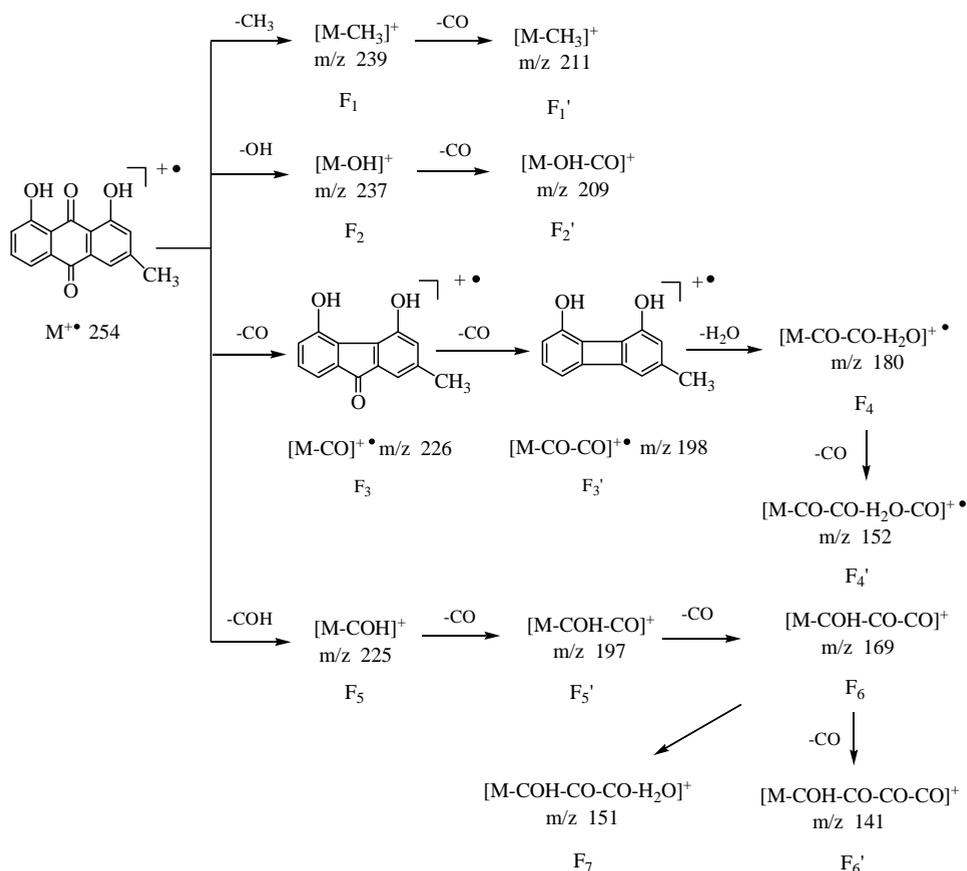


Схема 2 – Фрагментация молекулярного иона 1,8-дигидрокси-3-метил-9,10-антрахинона (2)

1,8-Дигидрокси-3-гидроксиметил-9,10-антрахинон (алоэ-эмодин) (3). Пик молекулярного иона соединения (3) является самым интенсивным в масс-спектре с $I=100\%$, а его распад происходит в пяти направлениях, и начинается с выброса OH, молекулы воды и оксида углерода, частиц COH и молекулы CO₂. В результате в спектре наблюдаются ионы F₁ [M-OH]⁺ с m/z 253, F₂ [M-H₂O]⁺ с m/z 252, F₃ [M-CO]⁺ с m/z 256, F₄ [M-COH]⁺ с m/z 241 и F₅ [M-CO₂]⁺ с m/z 226. Наиболее интенсивный пик в масс-спектре отвечает иону F₄ с $I=28\%$, который возникает в результате элиминирования группы атомов COH непосредственно из молекулярного иона, несколько менее интенсивный ион - F₅ [M-CO₂]⁺ ($I=13\%$), а для ионов F₁-F₃ интенсивность составляет 5-7% (таблица 1). Далее, из первоначально образующихся ионов происходит элиминирование в различной последовательности CO или COH (схема 3).

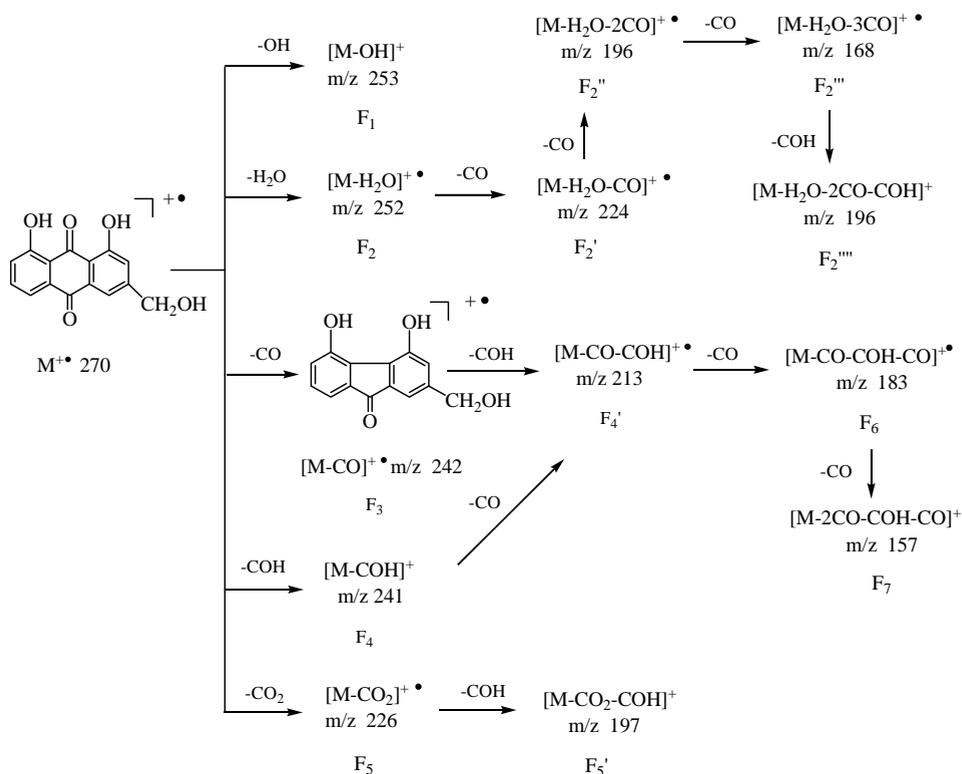


Схема 3 – Фрагментация молекулярного иона
1,8-дигидрокси-3-гидроксиметил-9,10-антрахинона (3)

Фрагмент F_4 , являясь началом основного направления фрагментации МИ, последовательно выбрасывает две молекулы CO с образованием ионов F_6 $[M-COH-CO-CO]^+$ с m/z 183 (I=20%) и F_7 $[M-COH-3CO]^+$ с m/z 157 (I=6%).

Другое направление фрагментации, связанное с элиминированием из молекулярного иона молекулы CO, приводит к слабоинтенсивному иону F_3 $[M-CO]^{+\bullet}$, из которого происходит образование иона F_6 $[M-CO-COH]^+$ с m/z 157 за счет выброса группы атомов COH. Если в случае β -гидрокси-метилантрахинона интенсивность пика $[M-CO]^{+\bullet}$ составляет I=26%, а иона $[M-COH]^+$ I=100% [3], то для молекулы (3) интенсивность ионов F_3 $[M-CO]^{+\bullet}$ и F_4 $[M-COH]^+$ - I=5% и 28% соответственно.

1,8-Дигидрокси-3-карбокси-9,10-антрахинон (реин) (4). Замена гидроксиметильной группы в 3 положении антрахиноновой системы на карбоксигруппу не оказывает существенного влияния на стабильность МИ, и для молекулы реина $W_{ми}=35,1\%$ (таблица 2). Основным направлением фрагментации МИ (4) является последовательное элиминирование двух молекул CO и молекулы воды с образованием катион-радикалов F_1 $[M-CO]^{+\bullet}$ с m/z 256 (I=14%), F_2 $[M-CO-CO]^{+\bullet}$ с m/z 228 (I=4%) и F_3 $[M-CO-CO-H_2O]^{+\bullet}$ с m/z 210

(I=12%) (схема 4). Наряду с этими ионами в спектре наблюдаются заметные пики ионов F₄ [M-OH]⁺ с m/z 267 (I=12%) и F₆ [M-CO₂]⁺ с m/z 240 (I=15%), которые характерны для масс-спектрального распада ароматических карбоновых кислот.

В отличие от масс-спектрального распада β-карбоксихантрахинона, в котором из ионов [M-OH]⁺ и [M-CO₂]⁺ последовательно происходит элиминирование двух молекул оксида углерода [3], в масс-спектре соединения (4) данной фрагментации не наблюдается. В спектре имеется слабоинтенсивный пик иона F₇ [M-CO₂-CO]⁺ с m/z 212 (I=4%), который возникает при отщеплении молекулы оксида углерода из иона F₆ [M-CO₂]⁺.

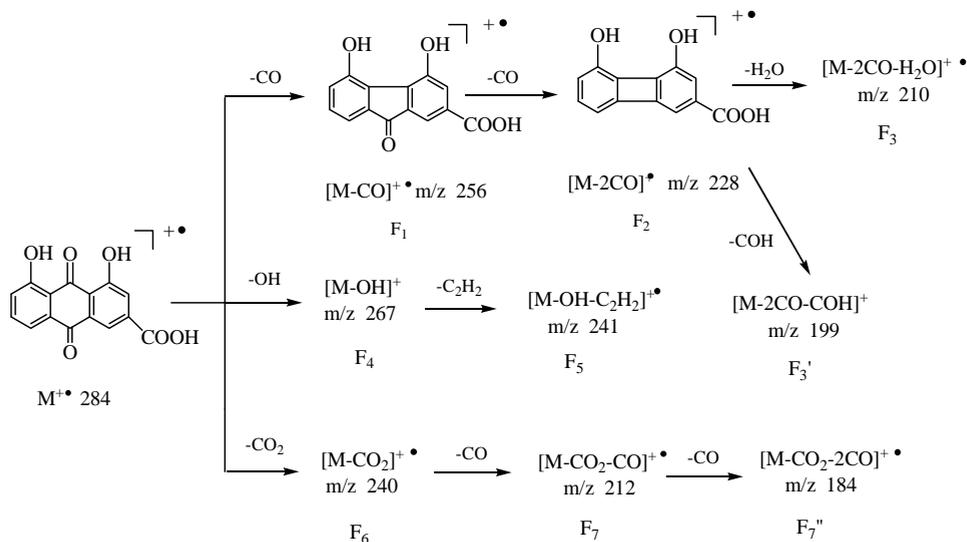


Схема 4 – Фрагментация молекулярного иона 1,8-дигидрокси-3-карбокси-9,10-антрахинона (4)

Таким образом, анализ масс-спектральной фрагментации МИ рассмотренной группы производных показал, что если распад 1,8-дигидроксиантрахинона (1) связан с последовательным элиминированием двух молекул оксида углерода с образованием катион-радикал дигидрокси-флуоренона F₁ [M-CO]⁺ с m/z 212 (I=15%) и дигидроксибифенилена F₂ [M-CO-CO]⁺ с m/z 184 (I=16%), то для соединений (2-6) на характер фрагментации оказывает влияние заместитель в 3 положении антрахиноновой системы.

«Антрахиноновый путь» распада МИ, связанный с первоначальным последовательным элиминированием двух молекул оксида углерода из МИ, наблюдается в масс-спектре хризофанолола (2) и реина (4). В случае хризофанолола (3) это приводит к формированию иона 1,8-дигидрокси-3-метилфлуоренона F₃ [M-CO]⁺ с m/z 225 (I=11%) и иона 1,8-дигидрокси-3-метил-

бифенилена F_3' $[M-CO-CO]^+$ с m/z 198 ($I=6\%$). Параллельно с этим процессом в спектре наблюдается образование слабоинтенсивных ион-фрагментов F_1 $[M-CH_3]^+$, F_2 $[M-OH]^+$ и F_5 $[M-COH]^+$, из которых в дальнейшем происходит элиминирование CO. В случае масс-спектрометрического распада молекулы реина (4) при элиминировании двух молекул CO образуются катион-радикалы 1,8-дигидрокси-3-карбоксивфлуоренона F_1 $[M-CO]^+$ с m/z 256 ($I=14\%$) и 1,8-дигидрокси-3-карбоксивбифенилена F_2 $[M-CO-CO]^+$ с m/z 228 ($I=4\%$). Наряду с этими ионами в спектре наблюдаются заметные пики ионов $[M-OH]^+$ и $[M-CO_2]^+$. Наличие гидроксиметильной группы в молекуле алое-эмодина (3) приводит к тому, что масс-спектр МИ распадается в пяти направлениях с образованием ионов F_1 $[M-OH]^+$, F_2 $[M-H_2O]^+$, F_3 $[M-CO]^+$, F_4 $[M-COH]^+$ и F_5 $[M-CO_2]^+$, из которых происходит элиминирование CO или COH.

Работа поддержана Министерством образования и науки Республики Казахстан и выполнена по научно-технической программе № BR05234667 по теме: «Физико-химические основы создания неорганических, органических, полимерных соединений, систем и материалов с заранее заданными свойствами».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Thomson R.H. Naturally Occuring Quinones III. New York: Chapman & Hall, 1987. P. 345-524.
- [2] Карпук В.В. Фармакогнозия: Учеб. пособие. – Минск: БГУ, 2011. – 340 с.
- [3] Меньшикова З.А., Меньшикова И.Б., Попова В.Б. Энциклопедия лекарственных растений. – М.: Эксмо, 2007. – 496 с.
- [4] Mashkovskij M.D. Лекарственные средства. – М.: РИА «Новая волна», 2007. – 1206 с.
- [5] Регистр лекарственных средств. Энциклопедия лекарств. – М.: РЛС, 2000. – 1520 с.
- [6] Харламова Т.В., Жумагалиев С.Ж., Пралиев К.Д. Сравнительный анализ масс-спектров некоторых монозамещенных производных 9,10-антрахинона // Химический журнал Казахстана. – 2017. – № 1. – С. 73-92.
- [7] Харламова Т.В., Жумагалиев С.Ж. Масс-спектры и характеристика фрагментации молекулярных ионов некоторых дизамещенных производных 9,10-антрахинона. Сообщение 1 // Химический журнал Казахстана. – 2017. – № 2. – С. 179-190.
- [8] Харламова Т.В., Жумагалиев С.Ж. Масс-спектры и характеристика фрагментации молекулярных ионов некоторых дизамещенных производных 9,10-антрахинона. Сообщение 2 // Химический журнал Казахстана. – 2017. – № 3. – С. 15-27.
- [9] Харламова Т.В., Жумагалиев С.Ж. Масс-спектры и характеристика фрагментации молекулярных ионов некоторых дизамещенных производных 9,10-антрахинона. Сообщение 3 // Химический журнал Казахстана. – 2017. – № 3. – С. 73-88.
- [10] Будзикевич Г.Б., Джерасси К., Уильямс Д. Интерпретация масс-спектров органических соединений. – М.: Мир, 1966. – С. 248-250.

REFERENCES

- [1] Thomson R.H. Naturally Occuring Quinones III. New York: Chapman & Hall, 1987. P. 345-524.
- [2] Karpuk V.V. Farmakognozija: Ucheb. posobie. Minsk: BGU, 2011. 340 p.
- [3] Men'shikova Z.A., Men'shikova I.B., Popova V.B. Jenciklopedija lekarstvennyh rastenij. M.: Jeksmo, 2007. 496 p.
- [4] Mashkovskij M.D. Lekarstvennye sredstva. M.: RIA «Novaja volna», 2007. 1206 p.

- [5] Registr lekarstvennyh sredstv. Jenciklopedija lekarstv. M.: RLS, 2000. 1520 p.
- [6] Harlamova T.V., Zhumagaliev S.Zh., Praliev K.D. Sravnitel'nyj analiz mass-spektrov nekotoryh monozameshennyh proizvodnyh 9,10-antrahinona // Himicheskij zhurnal Kazahstana. 2017. N 1. P. 73-92.
- [7] Harlamova T.V., Zhumagaliev S.Zh. Mass-spektry i harakteristika fragmentacii molekulyarnykh ionov nekotorykh dizameshennyh proizvodnyh 9,10-antrahinona. Soobshhenie 1 // Himicheskij zhurnal Kazahstana. 2017. N 2. P. 179-190.
- [8] Harlamova T.V., Zhumagaliev S.Zh. Mass-spektry i harakteristika fragmentacii molekulyarnykh ionov nekotorykh dizameshennyh proizvodnyh 9,10-antrahinona. Soobshhenie 2 // Himicheskij zhurnal Kazahstana. 2017. N 3. P. 15-27.
- [9] Harlamova T.V., Zhumagaliev S.Zh. Mass-spektry i harakteristika fragmentacii molekulyarnykh ionov nekotorykh dizameshennyh proizvodnyh 9,10-antrahinona. Soobshhenie 3 // Himicheskij zhurnal Kazahstana. 2017. N 3. P. 73-88.
- [10] Budzikevich G.B., Dzherassi K., Uil'jams D. Interpretacija mass-spektrov organicheskikh soedinenij. M.: Mir, 1966. P. 248-250.

Резюме

Т. В. Харламова, С. Ж. Жұмағалиев

ХРИЗАЗИННІҢ КЕЙБІР ТУЫНДЫЛАРЫНЫҢ МОЛЕКУЛАРЛЫҚ ИОНДАРЫНЫҢ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯЛЫҚ ҰДЫРУ ЕРЕКШІЛІКТЕРІ

Мақалада 1,8-екігидрокси-9,10-антрахинонның 3 жағдайында метил-, гидроксиметил- және карбоксил ұтаған кейбір туындыларының молекулалық иондарының масс-спектрометриялық фрагментация сараптамасы көрсетілген. Олардың молекулалық иондарының электронды ионизациялау кезіндегі негізгі ұдырау бағыттарын анықтау мақсаты қойылған. Сонымен қатар орынбасарлардың химиялық табиғатына байланысты фрагментация механизмдерінің ерекшеліктері талданған. Қарастырылған қосылыстар тыбының МИ қарқынды шық ($I=100\%$) сипатты. Туындылардың масс-спектрометриялық фрагментация схемасы ұсынылған. CO екі молекуласының бастапқы элиминирленді хризазин, хризофанол және реин МИ сипаттылығы көрсетілген.

Түйін сөздер: масс-спектр, молекулалық ион, фрагментациялау, ионизациялау электрондармен, элиминирлеу, 9,10-антрахинон туындылары.

Summary

T. V. Kharlamova, S. Zh. Zhumagaliyev

PECULIARITIES OF MASS-SPECTROMETRIC DECAY MOLECULAR IONS OF SOME DERIVATIVES OF CHRYSAZIN

The paper presents an analysis of the mass-spectrometric fragmentation of molecular ions of certain derivatives of 1,8-dihydroxy-9,10-anthraquinone (chryszazin) (1) containing the methyl, hydroxymethyl and carboxy group (2-4) in the 3 position of the anthraquinone system revealing the main directions of the decay of molecular ions (MI) of compounds in electron ionization, and also comparing the features of the fragmentation mechanism depending on the chemical nature of the substituent. It is shown that the considered group of compounds is characterized by an intense MI peak ($I=100\%$), and its stability varies within $W_{mi} = 33.3\div 50.2\%$. Schemes of mass spectrometric fragmentation of derivatives are proposed and it is shown that the initial elimination of two CO molecules is characteristic for MI of chrysziazin, chrysofanol and rhein.

Key words: mass spectrum, molecular ion, fragmentation, electron ionization, elimination, derivatives of 9,10-anthraquinone.