

ՀՏԴ 547

Քիմիա

Վալոդյա ՄԻՐԶՈՅԱՆ

p.գ.թ., ԱրՊՀ պոռֆեսոր

E-mail: volodya mirzoyan@mail.ru

**5-ԱՐԻԼԱԶՈ -և 5-ԱՐԻԼԻԴԵՆ-ԱՄԻՆՈ 2, 4,
6 - ԵՌԱՄԻՆՈՊԻՐԻՄԻԴԻՈՆՆԵՐԻ ԵՎ
ՆՐԱՆԳ 6-ՕՔՍԻԱԾԱՆՅՅԱԼՆԵՐԻ ՄԱՍ-
ՍՊԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ
ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ**

Ուսումնասիրված է 5-արիլազո- և 5-արիլիդեն-ամինո 2, 4, 6 - եռամինոպիրիմիդինների և նրանց 6-օքսիադանցյալների մաս-սպեկտրները և ցույց է տրված տրոհված հիմնական իոնների և մոլեկուլյար իոնների հարաբերության փոխկապվածությունը σ հաստատունների միջև:

Բանալի բառեր՝ մաս-սպեկտրներ, σ հաստատուն, մոլեկուլյար իոններ, իոնների ինտենսիվություն, տեղակալիչներ, փոքկապվածություն, կառուցվածք, մոլեկուլյար իոնների կայունություն:

В. Мирзоян

**МАСС-СПЕКТРОРЫ 5-АРИЛАЗО –И 5-АРИЛИДЕНАМИНО
2,4,6 ТРИАМИНОПИРИМИДИОНОВ И ИХ 6-
ОКСИАНАЛОГОВ**

Изучены масс-спектры 5-арилазо –и 5-арилиденамино 2,4,6 триаминопиримидионов и их 6-оксианалогов. Показана корреляционная связь между соотношением интенсивности основных и молекулярных ионов и σ констант заместителей.

Ключевые слова: масс-спектры, σ констант, молекулярные ионы, интенсивность ионов, заместитель, корреляция, структура, стабильность молекулярных ионов.

V. Mirzoyan

**MASS SPECTROSCOPY OF 5-ARYLAZO – AND 5-ARYLIDENAMINE
2,4,6 TRYAMINOPYRIMIDIONS AND THEIR 6-OXYANALOGS**

The mass spectra of 5-arylazo – and 5-arylidene amino 2,4,6 triaminopyrimidions and their 6 oxyanalogues were studied. The correlation between the intensity ratio of the main and molecular ions and the σ substituent constants is shown.

Key words: mass spectators, σ constants, molecular ions, ion intensity, substituent, correlation, structure, stability of molecular ions.

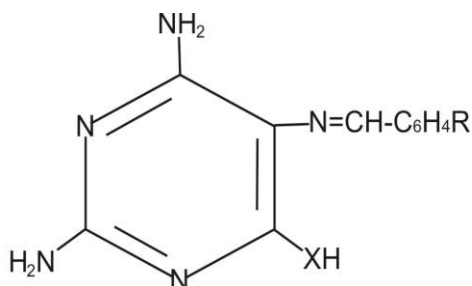
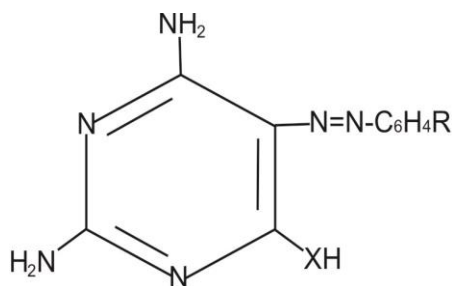
Նախկինում մեր կողմից [1] ուսումնասիրվել են 5-արիլազո

- և 5-արիլիդեն-ամինո 2,4,6-եռամինոպիրիմիդինների և նրանց 6-օքսի ածանցյալների ստացումը, կառուցվածքը և որոշել են մոլեկուլյար իոնների տրոհման օրինաչափությունները էլեկտրոնային հարվածի ժամանակ :

Ներկայացվող աշխատանքի նպատական է օգտագործելով տրոհման հիմնական ուղղությունները և արդյունքում առաջացած իոնների ինտենսիվությունը ,պարզել հիմնական իոնների ինտենսիվության և տեղակալիչների σ հաստատունների փոխկապվածությունը:

Մաս-սպեկտրոմետրական հետազոտություններում փոխկապվածությունը սովորաբար որոշում են ոչ թե իոնների բացարձակ արժեքով այլև տվյալ իոնի և մոլեկուլյար իոնի ինտենսիվությունների հարաբերությամբ [2]:

ՌԻսումնասիրվել են հետևյալ շարքի միացությունները



Աղյուսակ-1

I

1. X= NH , R=պ-NO₂
2. X= NH , R=պ-Cl
3. X= NH , R=H
4. X= NH , R=պ-Me
5. X= NH , R=պ-OMe

II

12. X=O, R=H
13. X=O, պ-CH₃

III

6. X= NH , R=պ-NO₂
7. X= NH , R= մ- NO₂
8. X= NH , R=պ- Cl
9. X= NH , R= մ -OH
10. X= NH , R= H
11. X= NH , R=պ-OMe

IV

14. X=O, R=պ-NO₂
15. X=O, R=պ-Cl
16. X=O, R=H
17. X= 0 , R=պ-OMe

Աղյուսակ 1

միաց. համա- րը	R	σ	M	B ₁	B ₂	A ₁	A ₂	J _{B1/M}	J _{B2/M}	J _{B1/B2}	J _{A1/M}	J _{A2/M}	W _M
1	պ-NO ₂	0,78	100	35	54	-	-	0,35	0,54	0,64	-	-	34,9
2	պ-Cl	0,23	100	36	56	-	-	0,36	0,56	0,64	-	-	31,5
3	H	0	100	30	42	-	-	0,3	0,42	0,71	-	-	43,4
4	պ-Me	-0,17	100	29	45	-	-	0,29	0,45	0,64	-	-	39,5
5	պ-OMe	-0,27	100	24	36	-	-	0,24	0,36	0,66	-	-	42,3
6	H	0	100	47	16	-	--	0,47	0,16	2,9	--	-	36,7
7	պ-CH ₃	-0,17	100	32	8	-	-	0,32	0,08	4	0,22	0,17	27,6
8	պ-NO ₂	0,78	100	14	-	22	17	0,14	-	-	0,18	0,1	22,0
9	մ- NO ₂	0,71	100	50	-	18	10	0,5	-	-	0,33	0,42	43,2
10	պ- Cl	0,23	100	54	-	33	42	0,54	-	-	0,21	0,2	30,5
11	մ- OH	0,13	100	30	-	21	20	0,3	-	-	0,28	0,2	47,6
12	H	0	100	54	-	28	20	0,5	-	-	0,35	0,33	43,8
13	պ-OMe	-0,27	100	32	-	35	33	0,32	-	-	0,26	0,72	33,5
14	պ-NO ₂	0,78	100	27	-	26	72	0,27	-	-	0,23	0,18	22,7
15	պ-Cl	0,23	100	36	-	23	18	0,36	-	-	0,28	0,22	26,0
16	H	0	100	34	-	28	22	0,34	-	-	0,3	0,2	38
17	պ-OMe	-0,27	100	24	-	30	20	0,24	--	-			40,4

R-տեղակալիչներ են

σ -տեղակալիչների էլեկտրոնային հաստատուններն են

M-մոլեկուլյար իոնների ինտենսիվություններն են

B₁-B₂- համապատասխանաբար (M-C₆H₅R) և (M-C₆H₅R₁N₂) իոնների ինտենսիվություններն են A₁ և A₂ -ը համապատասխանաբար (M-1) և (M-2) իոնների ինտենսիվություններն են

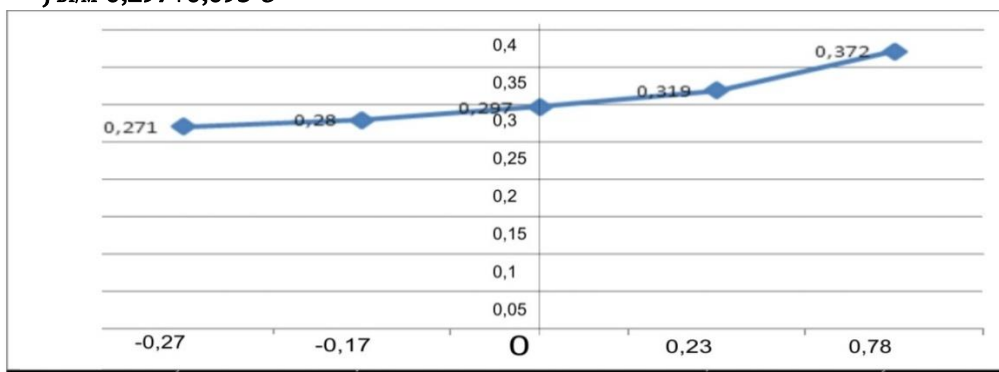
W-մոլեկուլյար իոնների կայունության արժեքներն են:

Ինչպես երևում է աղյուսակ 1-ից բոլոր միացությունների մոտ մոլեկուլյար իոնների ինտենսիվությունները մաքսիմալ են, իսկ նրանց հարաբերական կայունությունը 22-47-ի սահմաններում : Ամենամեծ արժեքը ունի 11 միացությունը , իսկ ամենափոքր արժեքը թիվ 8 միացությունը ,վերջինս հավանաբար պայմանավորված է նիտրո խմբի լրացուցիչ տրոհմամբ:

Մեր նախկին աշխատանքում [1] ցույց է տրված, որ արիլ խմբի տեղակալիչները քիչ են ազդում տրոհման ուղղությունների և նրանց ինտենսիվությունների վրա, սակայն չի ուսումնասիրվել հիմնական իոնների և մոլեկուլյար իոնների հարաբերության կախվածությունը տեղակալիչների σ հաստատուններից: Օգտվելով աղյուսակ 1-ից և կատարելով հաշվարկներ, պարզվել է, որ.

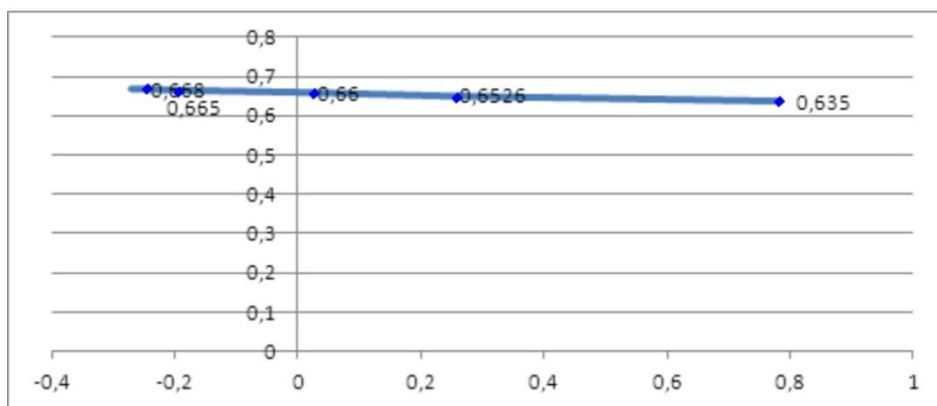
$J_{B1/M}, J_{B1/M}, J_{A1/M}, J_{A2/M}$ -ի ժամանակ կախվածությունը σ հաստատունների հետ որոշվում է գծային հավասարման բանաձևով և այն ունի I միացության դեպքում հետվյալ տեսքը գծ.1

$$J_{B1/M} = 0,297 + 0,095 \sigma$$



Նմանատիպ հաշվարկ կատարելով $J_{B1/B2}$ -ի և σ հաստատունների միջև, պարզվել է, որ այն ունի գծային տեսք որոշվում I միացության համար հետևյալ հավասարման ձևով՝ գծ. 2.

$$J_{B1/B2} = 0,66 - 0,032 \sigma$$



Այսպիսով ուսումնասիրելով 5-արիլազո և 5-արիլիդեն-ամինո 2,4,6-էռամինոպիրիմիդինների և նրանց 6-օքսիածանցյալների մաս-սպեկտրները պարզվել է, որ տրոհման ժամանակ առաջացած հիմնական իոնների և մոլեկուլար իոնների հարաբերության և տեղակալիչների σ հաստատունների միջև կապը գծային է:

Таким образом, при изучении масс-спектром 5-арилазо –и 5-арилиденамино 2,4,6 триаминопиримидионов и их 6-оксианалогов показана корреляционная связь между соотношениями интенсивностью основных и молекулярных ионов и σ констант заместителей.

Գրականություն

1. Ж.В. Белодедова , Н.А.Сморыго, В.С.Мирзоян, Р.Г. Мелик – Оганджаниян, Б.А.Ивин ХГС-1998г. № 5 ст. 659-667
2. L. Yu. Ivanovskaya , M.I Gortinkel ,V.F. Sedova and Z.D.Duvevenko. Organic Mass Spectrometry, 1973, vol.7 pp. 911 to 924.

Հոդվածը տպագրության է երաշխավորվել խմբագրական կոլեգիայի անդամ, ք.գ.թ., Ա.Ն.Աբրահամյանը: