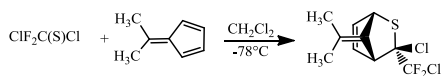


МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА [4+2] ЦИКЛОАДДУКТА 6,6-ДИМЕТИЛФУЛЬВЕНА С ХЛОРДИФТОРТИОАЦЕТИЛХЛОРИДОМ

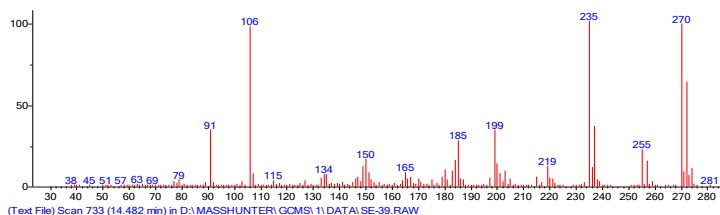
Соловьев Е.А.

Военная академия радиационной, химической и биологической защиты
156015, г. Кострома, ул. Горького, д. 16

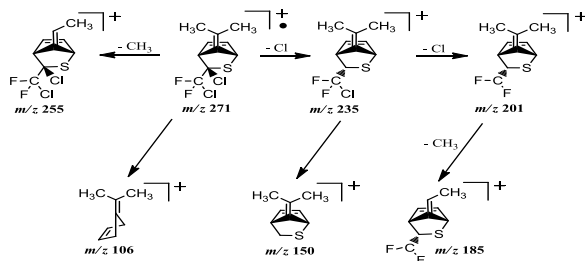
Для изучения путей фрагментации под действием электронного удара был впервые получен 3-хлор-3-(хлордиформетил)-7-(пропан-2-илиден)-2-тиабицикло[2.2.1]гепт-5-ен реакцией Дильса-Альдера с участием тиокарбонильного соединения:



Масс-спектр 3-хлор-3-(хлордиформетил)-7-(пропан-2-илиден)-2-тиабицикло[2.2.1]гепт-5-ен представлен на рисунке:



Предполагаемая нами схема фрагментации представлена на следующем рисунке:



Наличие в исследуемом соединении двух атомов хлора дает хорошую возможность определения образующихся ионов, благодаря характерным изотопным пикам [1].

Предполагается два основных направления масс-фрагментации:
- последовательное элиминирование атомов хлора;

- разрыв связей по обратному направлению реакции Дильса-Альдера.

Интенсивные пики с массой m/z 270, 272 и 274 Да свидетельствуют о наличии в молекуле двух атомов хлора. Последовательное элиминирование атомов хлора приводит к образованию фрагментов молекулы с массами 235 Да и 201 Да соответственно. Отрыв метильного радикала приводит к образованию фрагмента $[C_9H_8Cl_2F_2S]^+$ с массой 255 Да и фрагмента $[C_9H_9F_2S]^+$ с массой 185 Да. Ретродиеновый распад приводит к образованию фрагмента с массой 106 Да.

1. Пискарева С.К. Аналитическая химия. М. : Высш. шк., 1994. 384 с.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ L-КАРНОЗИНА

Тюнина В.В., Краснов А.В., Жабанов Ю.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет
153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7

Биологически активные природные соединения, обладающие антиоксидантными и терапевтическими свойствами, привлекают внимание исследователей. К числу таких соединений относится дипептид L-карнозин (β -аланил-L-гистидин), который широко применяется в медицине и косметологии. В связи с этим, представляло интерес провести термодинамическое и квантово-химическое исследование данного вещества, результаты которого в дальнейшем могут быть использованы при синтезе новых препаратов.

Эффузионным методом Кнудсена с масс-спектрометрическим контролем состава пара изучены процессы сублимации L-карнозина. Установлено, что L-карнозин при нагревании разлагается: об этом свидетельствует его масс-спектр, который не воспроизводится и содержит большей частью легкие ионы.

Пептидные соединения имеют множество вращательных степеней свободы и, как следствие, большое количество близких по энергии конформеров. Поэтому на первом этапе теоретического исследования полуэмпирическим методом AM1 найдены и проанализированы возможные конформеры для L-карнозина, обусловленные торсионным движением ($\angle NCCC$, $\angle OCCC$). В результате определены 32 возможных конформера. Дальнейшие квантово-химические расчеты четырех наиболее низкоэнергетических форм в рамках теории функционала плотности позволили уточнить распределение конформеров по энергиям и определить