

СОВМЕСТНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ И ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ В ГХ-МС ИДЕНТИФИКАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Зенкевич И.Г., Носова В.Э.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504 Санкт-Петербург, Университетский проспект 26
e-mail: izenkevich@yandex.ru*

При всей информативности современной масс-спектрометрии этот метод недостаточно эффективен при идентификации структурных изомеров. Привлечение одномерных хроматографических параметров (индексов удерживания, RI) компенсирует это ограничение. Однако совместное применение масс-спектрометрических и хроматографических данных требует их представления в единой шкале. Одна из форм — гомологические инкременты индексов удерживания (i_{RI}):

$$i_{RI} = RI - 100x \quad (1)$$

где $x = \text{int}(M/14)$, M — молекулярная масса аналита, int — функция, обозначающая целую часть числа (эквивалентно записи $M = 14x + y_M$), y_M — номер гомологической группы соединения, $y \equiv M(\text{mod}14)$.

Значения i_{RI} применимы на стадии групповой идентификации (отнесения к гомологическим рядам), обладают свойствами критериев полярности органических соединений и позволяют оценивать молекулярные массы соединений, не дающих в масс-спектрах ИЭ надежно регистрируемых сигналов молекулярных ионов. Подстановка выражения $M = 14x + y_M$ в соотношение (1) и решение полученного уравнения относительно M приводит к следующему соотношению:

$$M \approx 0.14(RI - i_{RI}) + y_M \quad (2)$$

Важнейшая особенность результата вычислений состоит в необходимости его округления не до ближайшего целого, а до величины, сравнимой с параметром y_M по модулю 14:

$$M \equiv y_M(\text{mod}14) \quad (3)$$

Пример: В рядах диалкилфосфонатов $(RO)_2PHO$ и триалкилфосфитов $(RO)_3P$ значению $RI = 1103$ могут соответствовать только этилизобутилфосфонат ($1097; M = 167.0 \sim 166$), этилдипропилфосфит ($1097; M = 199.3 \sim 194$) и бутилдиэтилфосфит ($1103; M = 199.3 \sim 194$).