

**ОБЩЕРОССИЙСКАЯ ОБЩЕСТВЕННАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ
ВСЕРОССИЙСКОЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО**

ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И ЭЛЕКТРОХИМИИ им. А. Н. ФРУМКИНА РАН

ИНСТИТУТ НЕФТЕХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА им. А.В. ТОПЧИЕВА РАН

ДЕСЯТЫЙ СЪЕЗД ВМСО

**IX ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ
УЧАСТИЕМ**

**«МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ
И ЕЕ ПРИКЛАДНЫЕ ПРОБЛЕМЫ»**

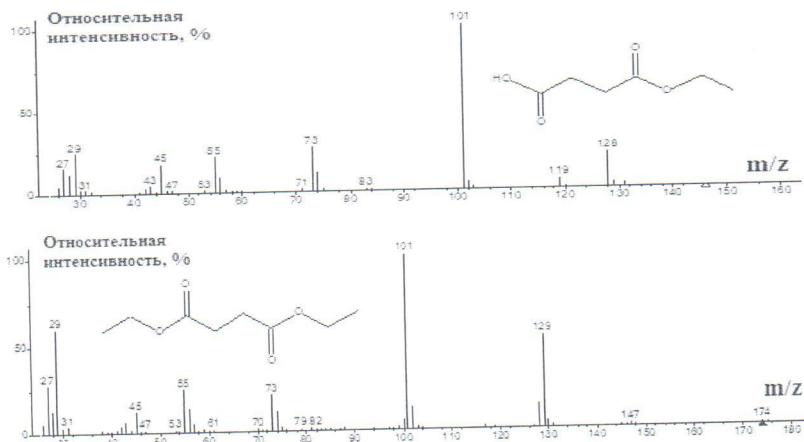
**18 – 22 октября 2021 года
г. Москва**

Хромато-масс-спектрометрическая характеристика соединений, нестабильных в условиях хроматографического разделения. Моноалкилалканоаты

И.Г. Зенкевич*, Е.В. Елисеенков

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии Университетский просп., 26; Санкт-Петербург 198504, Россия
izenkevich@yandex.ru

Нестабильность анализируемых соединений – основная причина неопределенности интерпретации результатов анализа. В подобных случаях невозможно однозначно оценить присутствие или отсутствие не только таких анализаторов в образцах, но и продуктов их разложения. Примером являются широко распространенные в различных объектах моноэфиры дикарбоновых кислот – промежуточные продукты, как этирификации кислот, так и частичного гидролиза соответствующих полных эфиров. Ранее была выявлена термическая нестабильность в условиях газохроматографического разделения моноалкилфталатов. Новые данные получены для моноалкилалканоатов, образованных алкановыми кислотами (щавелевая, малоновая, яблочная, глутаровая, адипиновая и диметилмалоновая) и алканолами (метанол, этанол, 1-пропанол, 1-бутанол, 2-метил-1-пропанол, 1-пентанол, 1-гексанол и 2-пропанол). Единичные масс-спектры некоторых кислых эфиров известны и отличаются значительным сходством с масс-спектрами соответствующих диэфиров (см. Рисунок). Однако не охарактеризованы не только их параметры удерживания (индексы, RI), но и сама возможность их газохроматографического разделения.



Рисунок

Масс-спектры (ИЭ, 70 эВ) моноэтил- (RI 1167, вверху) и диэтил- сукцината (RI 1158, внизу).

Особенности газохроматографического разделения моноалкилалканоатов обусловлены их термической нестабильностью. В отличие от моноалкилфталатов их разложение представляет собой бимолекулярную реакцию (диспропорционирование) с образованием соответствующего диэфира и нелетучей дикарбоновой кислоты:



Для многих реакционных смесей регистрируются специфические профили хроматограмм, подтверждающие деструкцию анализаторов в процессе их разделения.

Хроматографические пики моноалкилалканоатов отличаются высокой асимметрией и, следовательно, сильной зависимостью от дозируемых количеств образцов и большим разбросом индексов удерживания, что целесообразно отражать при записи их значений. Дополнительная сложность идентификации моноэфиров в том, что их параметры удерживания могут быть как меньше, так и больше, чем у диэфиров.