

GRNO2(P) №1

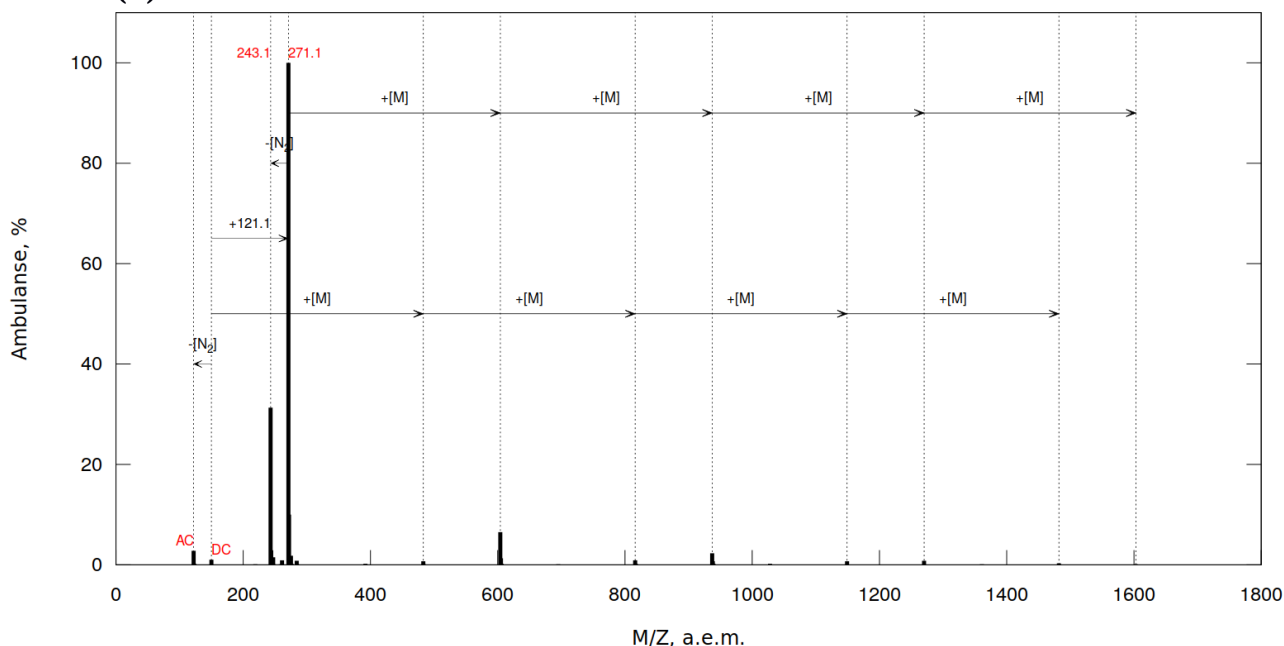


Рис. 1а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

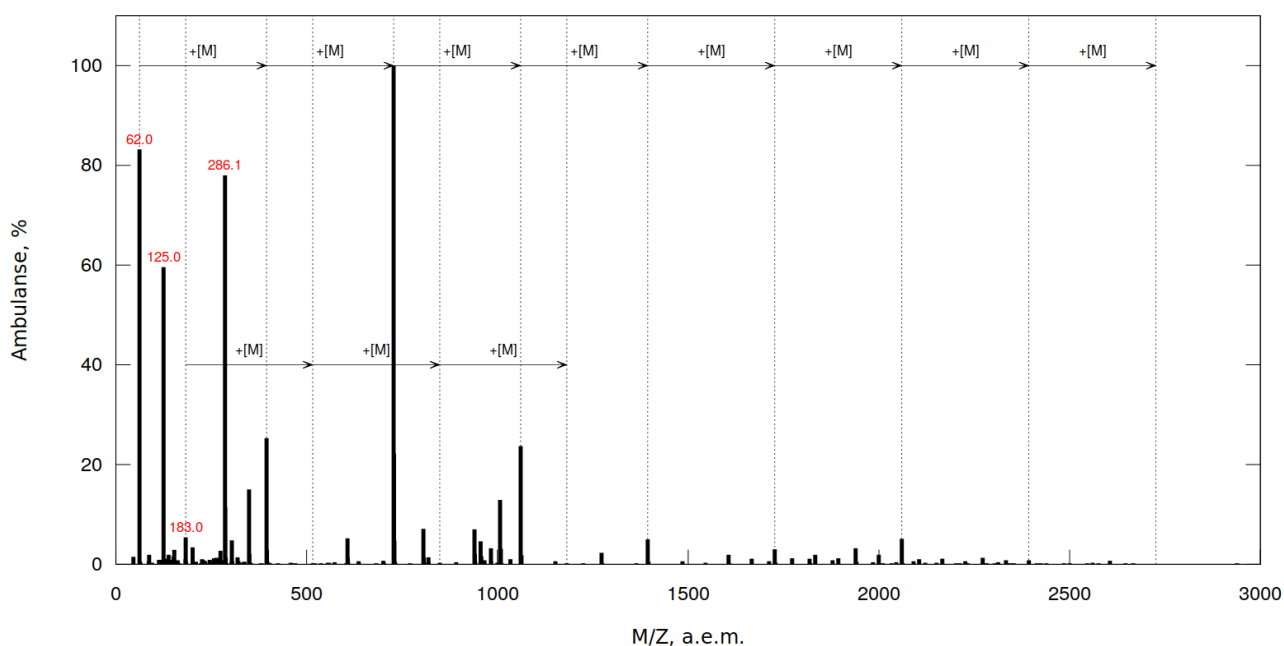


Рис. 1б. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 1а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы, однако их интенсивность меньше, чем для линий 243.1 и 273.1, вероятно катионы с такими массами образуются в результате присоединения бензин производного  $[\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_3]=121.1$  к диазониевому и арильному катионам, причем катион 273.1 способен отщеплять азот. В режиме отрицательной ионизации (рис. 1б) отсутствует катион депротонированного гексафторизопропилового спирта  $[\text{HFIP-H}]=167.0$ , вместо него наблюдается масса соответствующая окисленной форме  $[\text{HFIP-H+O}]=183.0$  и несколько анионов с массами 61.99 (вероятно  $\text{NO}_3$  при фрагментации отщепляет кислород), 125.0, 286.0. Кроме того на спектрах присутствуют кластерные катионы с шагом  $[M]=333.0$  соответствующей брутто формуле  $[\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2^+ \text{CO}_2\text{H}(\text{CF}_3)_2]=[\text{DC+A+O}]$  вероятно DC и окисленная форма аниона являются основными компонентами этой соли.

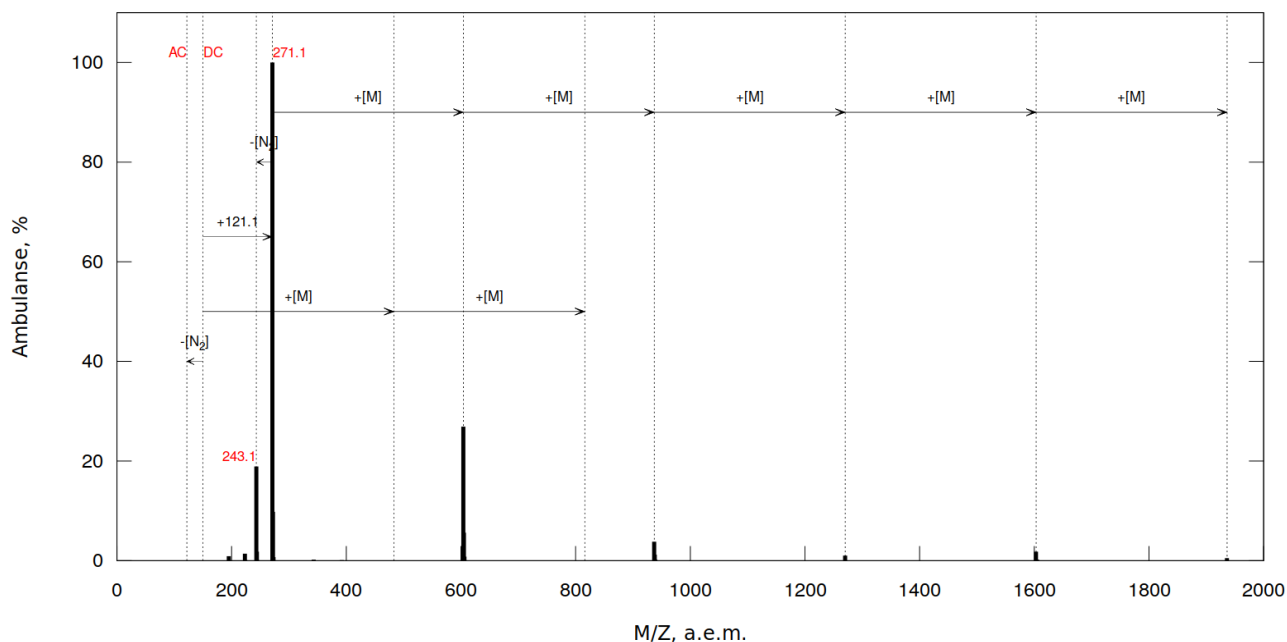
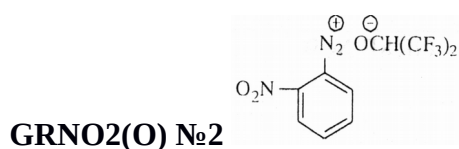


Рис. 2а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

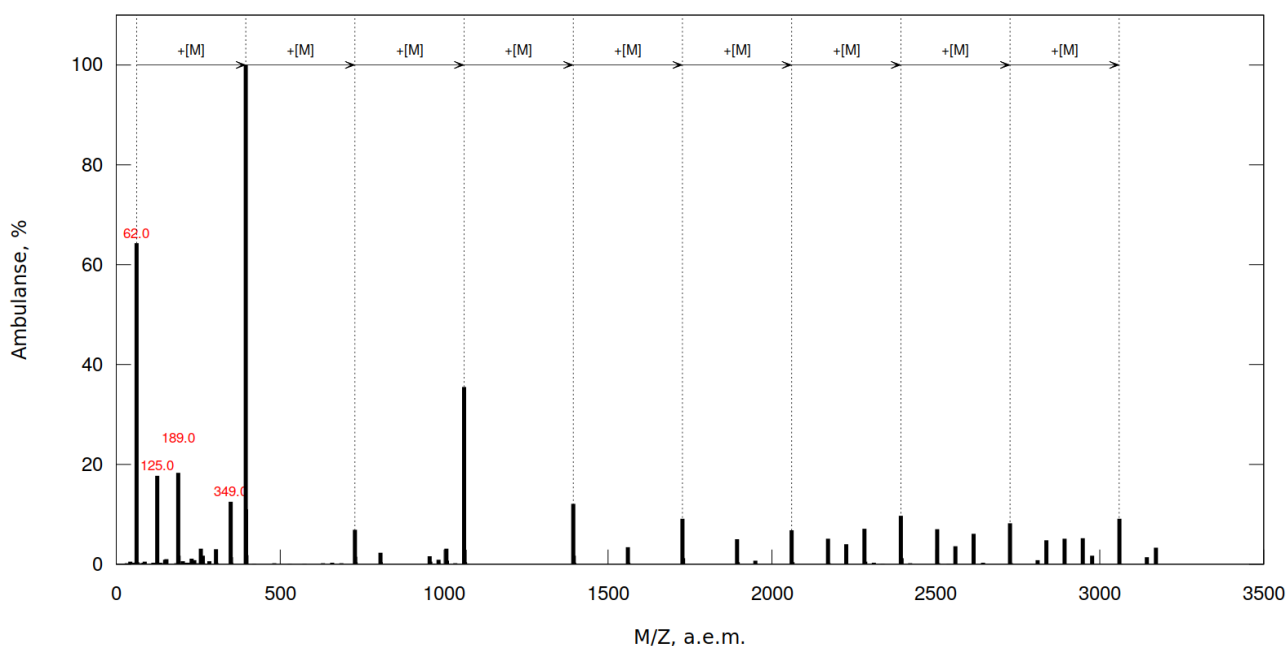


Рис. 2б. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 2а) в положительной ионизации отсутствуют массы предполагаемых диазониевого (DC) и арильного (AC) катионов и основными являются катионы с массами 243.1 и 273.1, вероятно катионы с такими массами образуются в результате присоединения бензин производного  $[\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_3]=121.1$  к диазониевому и арильному катионам, причем катион 273.1 способен отщеплять азот. В режиме отрицательной ионизации (рис. 2б) отсутствует катион депротонированного гексафторизопропилового спирта  $[\text{HFIP-H}]=167.0$ , вместо него наблюдается масса соответствующая окисленной форме  $[\text{HFIP-H+O}]=183.0$  и несколько анионов с массами 61.99 (вероятно  $\text{NO}_3$  при фрагментации отщепляет кислород), 125.0, 189.0, 349.0.

На спектрах присутствуют кластерные катионы с шагом  $[\text{M}]=333.0$  соответствующей брутто формуле  $[\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2^+ \text{CO}_2\text{H}(\text{CF}_3)_2^-]=[\text{DC}+\text{A}+\text{O}]$  вероятно DC и окисленная форма аниона являются основными компонентами этой соли, не смотря на отсутствие этих линий в спектре (орто-нитро замещенный арильный катионы малоустойчив).

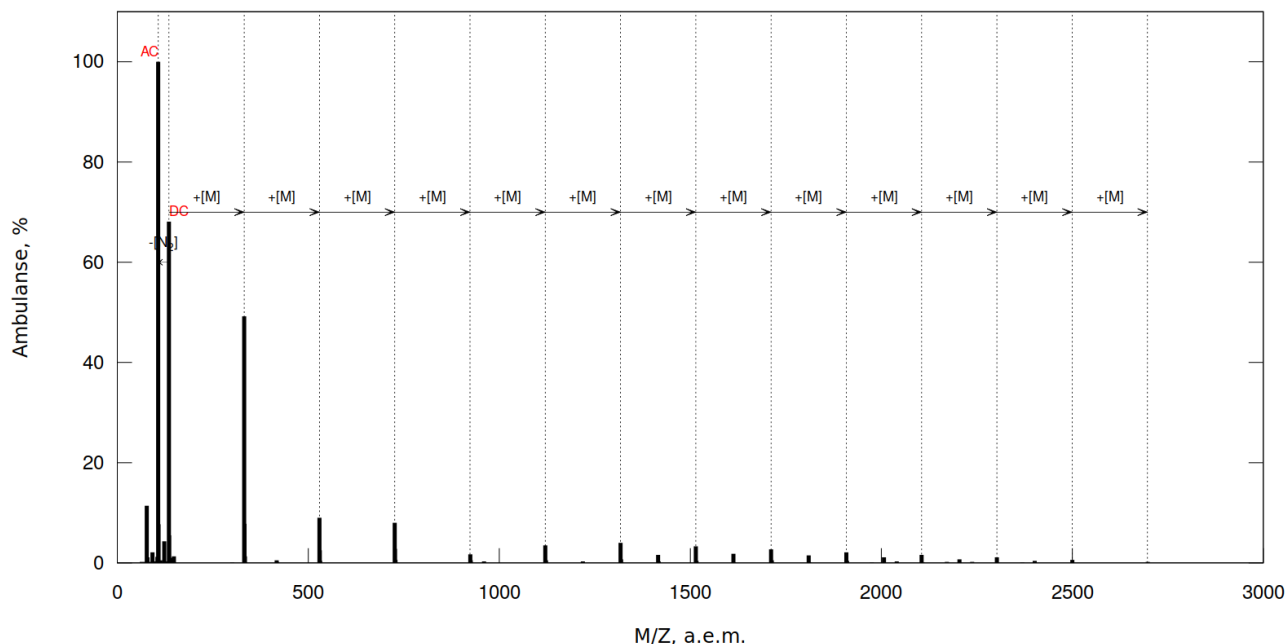
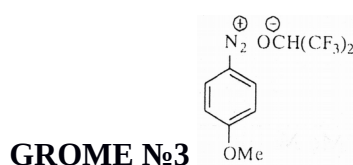


Рис. 3а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

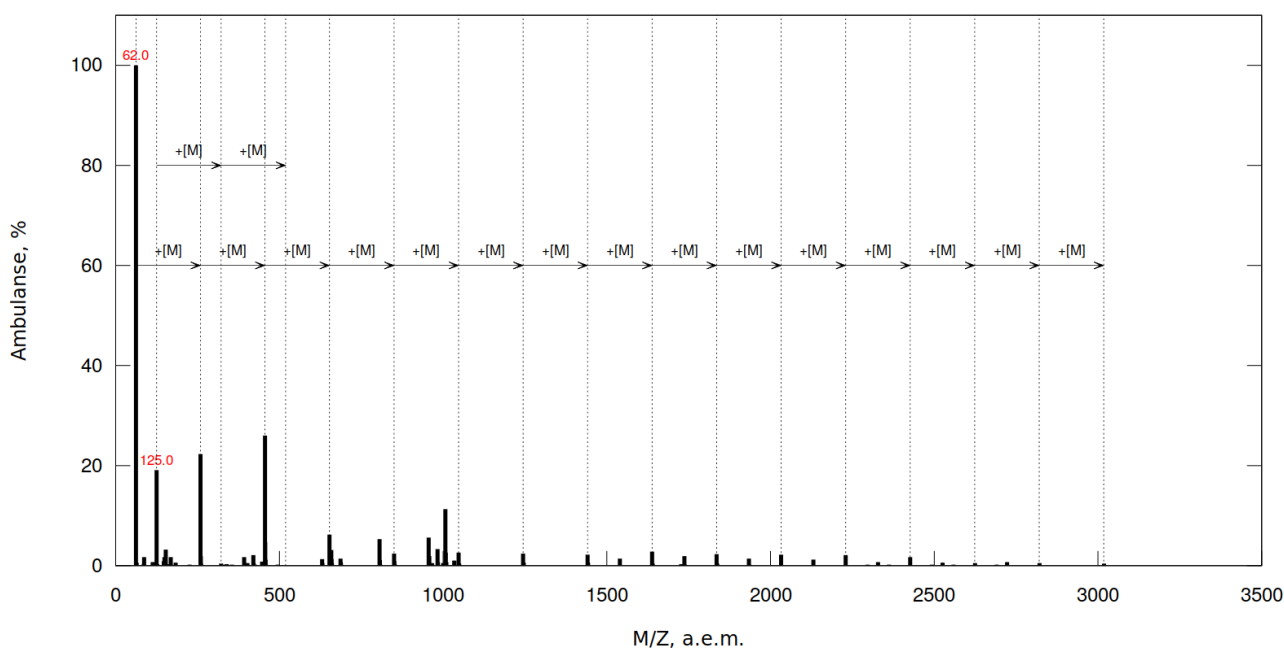


Рис. 3б. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 3а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы. В режиме отрицательной ионизации (рис. 3б) отсутствует катион депротонированного гексафторизопропилового спирта  $[\text{HFIP-H}] = 167.0$ , наблюдается несколько анионов с массами 61.99 (вероятно  $\text{NO}_3$  при фрагментации отщепляет кислород), 124.99 (димер  $\text{NO}_3\text{HNO}_3$ ). Кроме того на спектрах присутствуют кластерные катионы с шагом  $[M] = 227.05 = 61.99 + 135.06$  соответствующей брутто формуле  $[\text{CH}_3\text{OC}_6\text{H}_4\text{N}_2^+ \text{NO}_3^-]$ . Вероятно DC и нитрат ион являются основными компонентами этой соли.

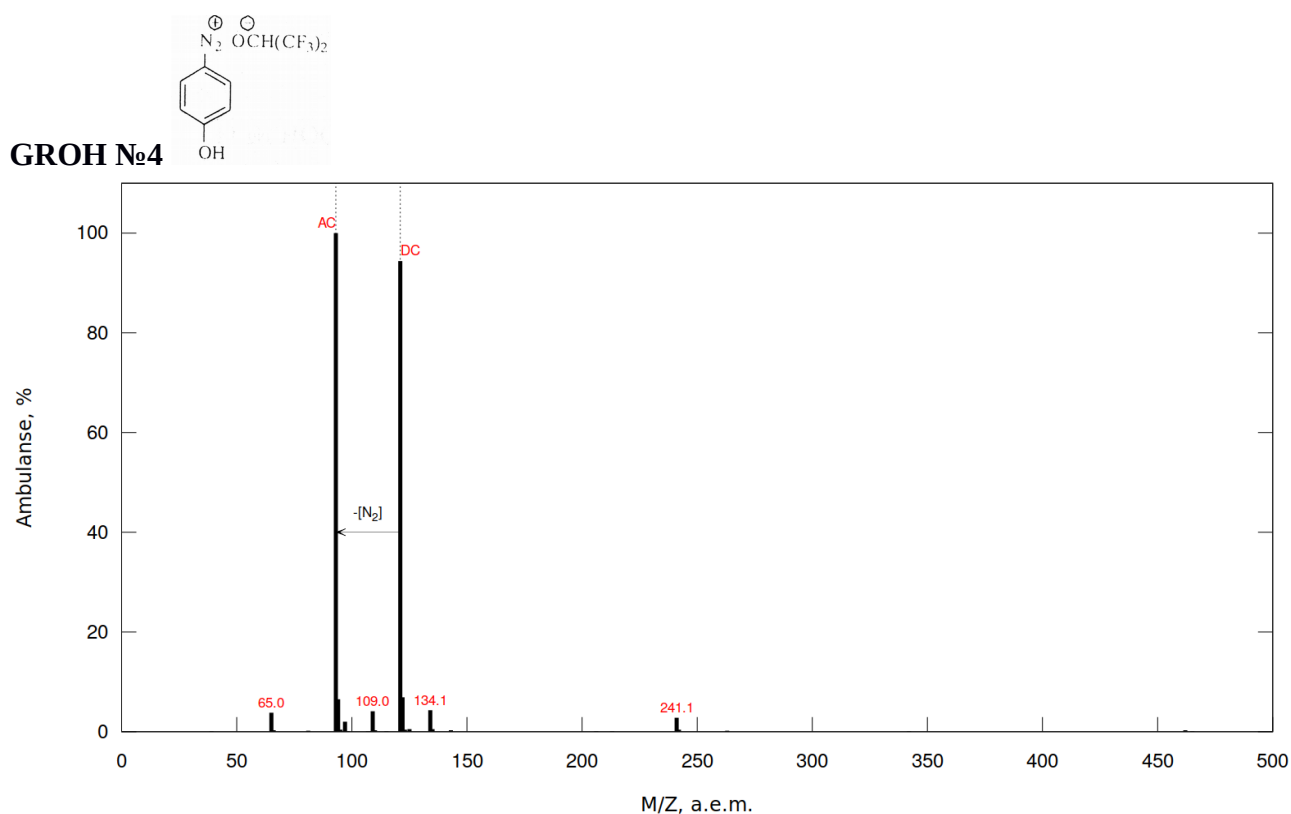


Рис. 4а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

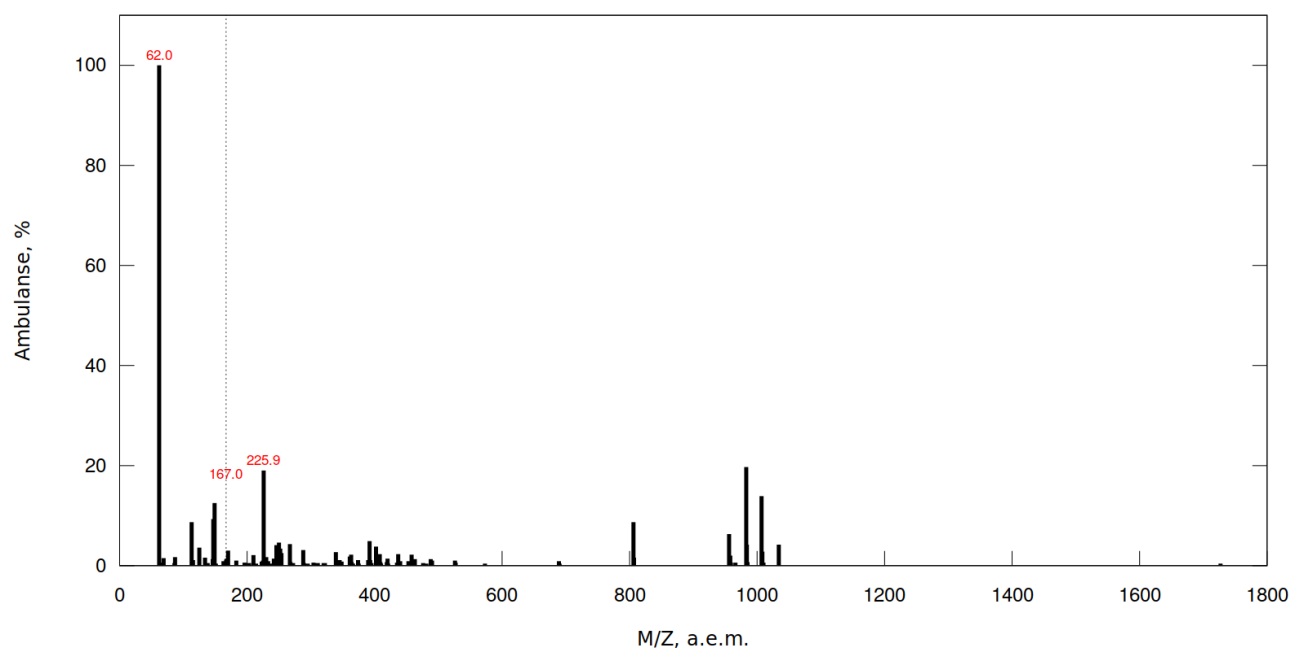
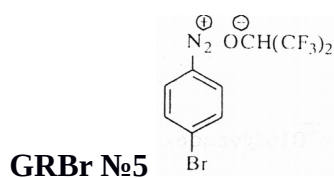


Рис. 4б. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 4а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы. В режиме отрицательной ионизации (рис. 4б) мало интенсивная линия катиона депротонированного гексафторизопропилового спирта [HFIP-H]<sup>-</sup>=167.0, наблюдается несколько анионов с массами 61.99 (вероятно NO<sub>3</sub> при фрагментации отщепляет кислород), 225.93.



GRBr №5

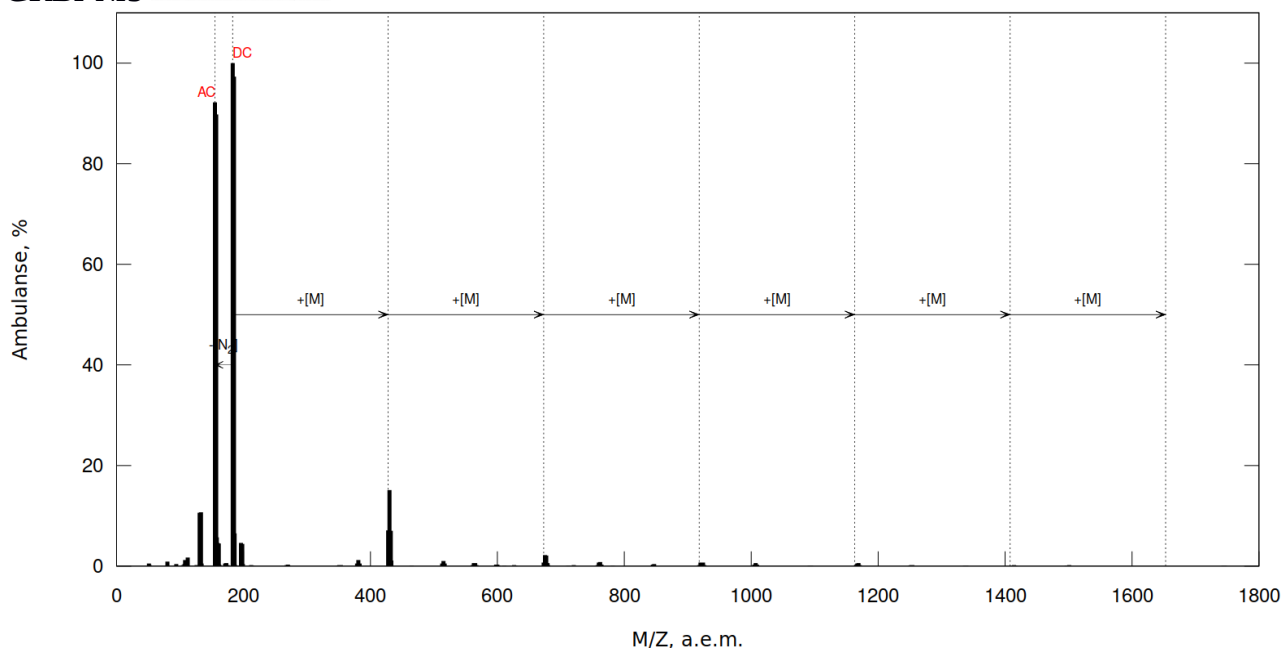


Рис. 5а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

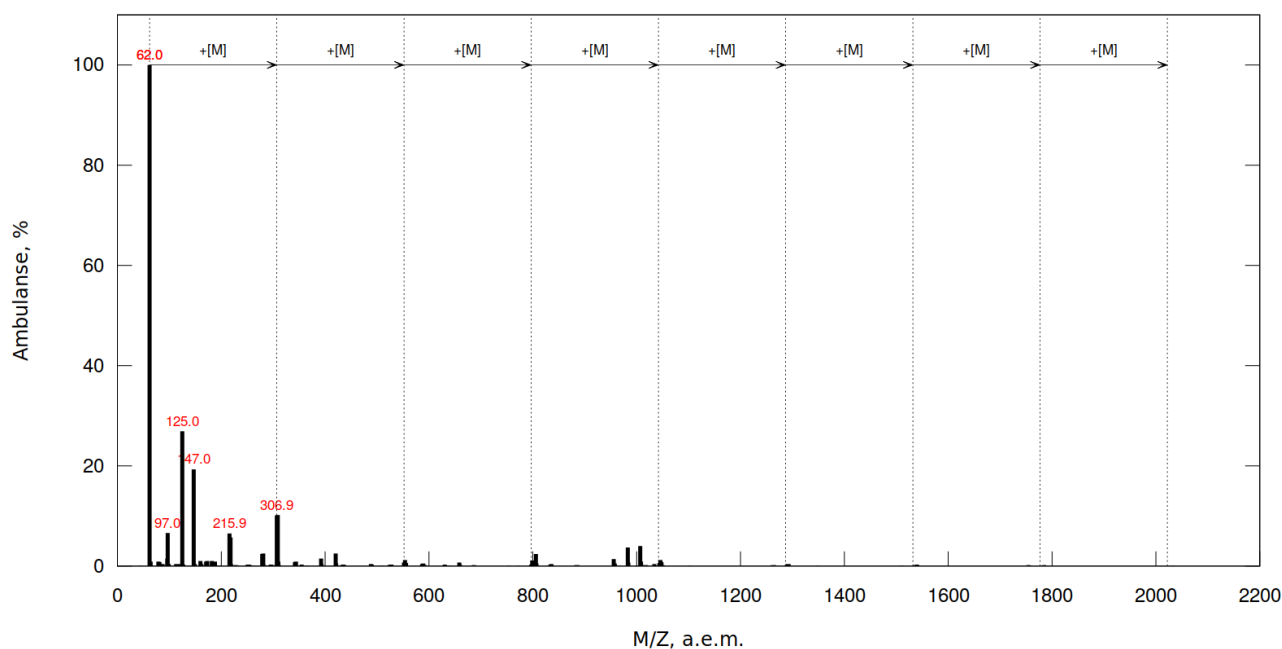


Рис. 5b. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 1а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы. В режиме отрицательной ионизации (рис. 1b) отсутствует катион депротонированного гексафторизопропилового спирта  $[HFIP-H]=167.0$ , на спектре несколько анионов с массами 61.99 (вероятно  $NO_3^-$  при фрагментации отщепляет кислород), 125.0 (димер  $NO_3HNO_3$ ), 286.0. Кроме того на спектрах присутствуют кластерные катионы с шагом  $[M]=245.007$  соответствующей брутто формуле  $[BrC_6H_4N_2^+ NO_3^-]$  вероятно DC и анион с массой 61.99 являются основными компонентами этой соли.

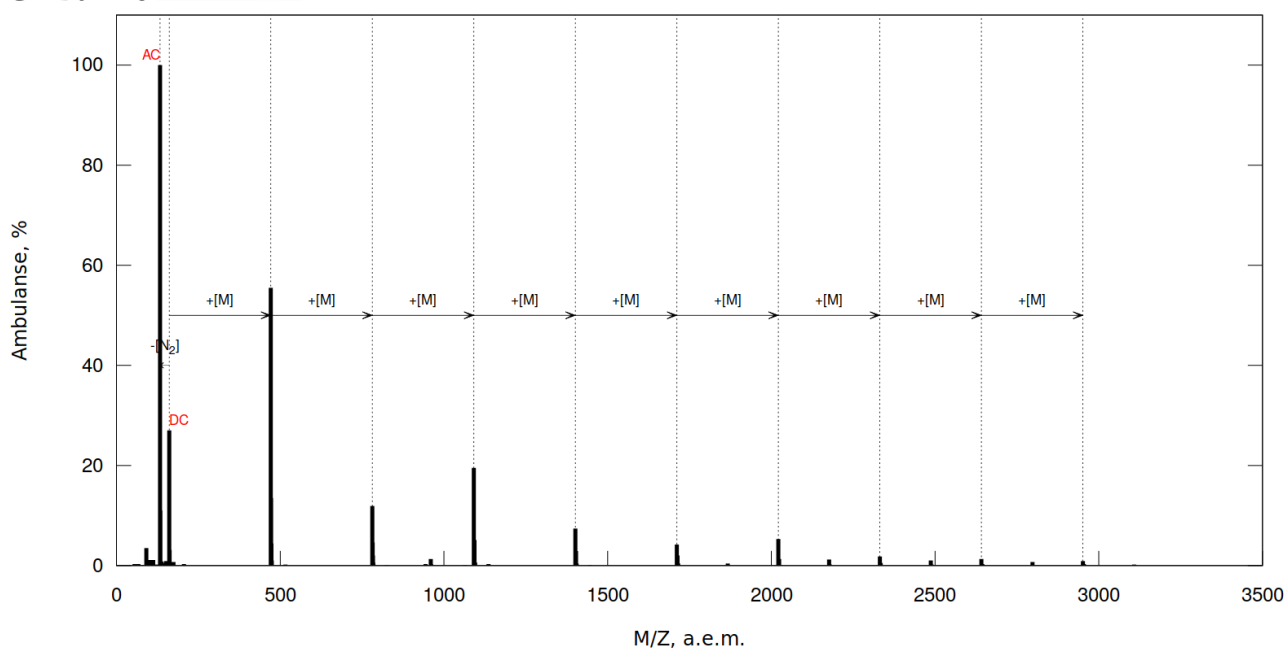
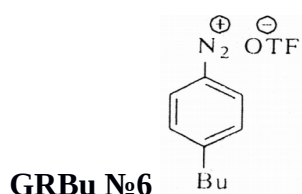


Рис. 6а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

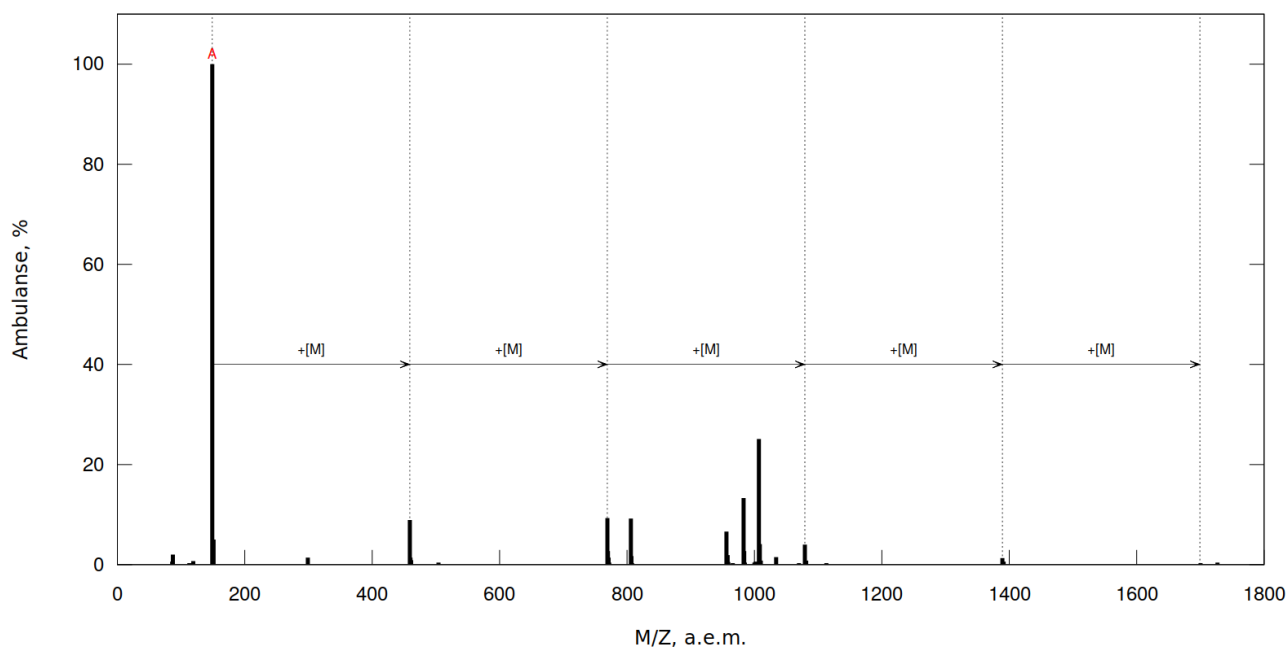


Рис. 6б. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 6а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (**DC**) и арильный (**AC**) катионы. В режиме отрицательной ионизации (рис. 6б) основная линия **A** трифлат-аниона  $[\text{TfO}] = 148.95$ . Кроме того на спектрах присутствуют кластерные ионы с шагом  $[\text{M}] = 310.06$  соответствующей брутто формуле  $[\text{BuC}_6\text{H}_4\text{N}_2^+ \text{TfO}^-]$  вероятно DC и трифлат-анион являются основными компонентами этой соли.

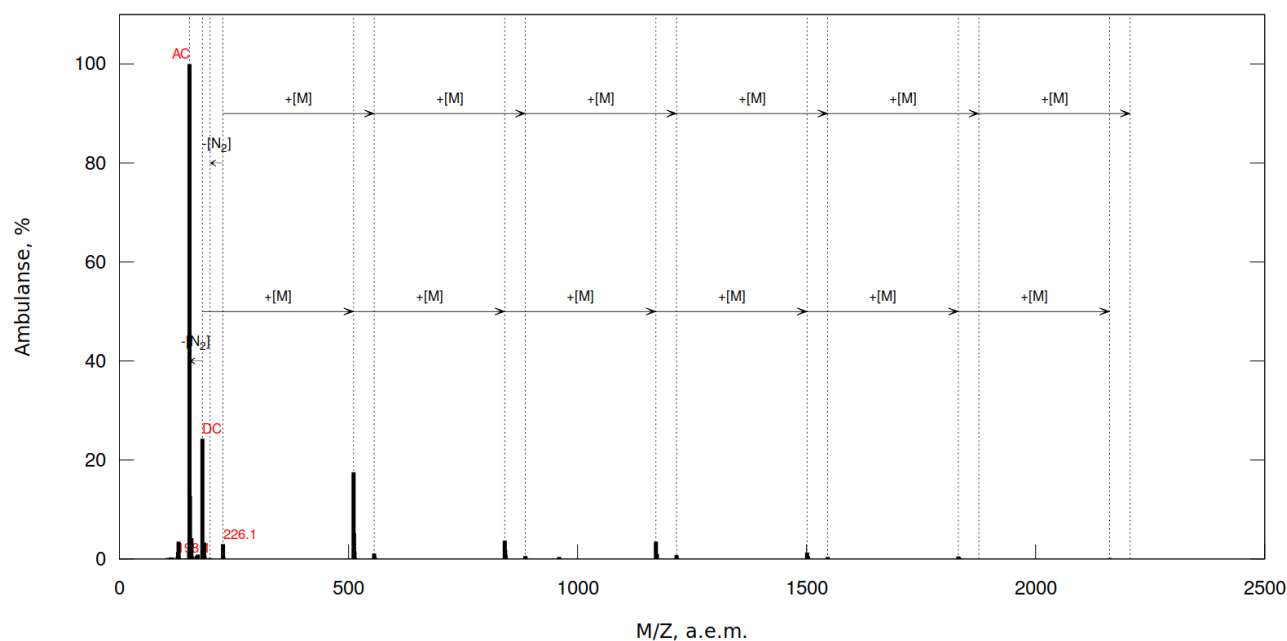
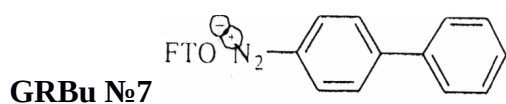


Рис. 7а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

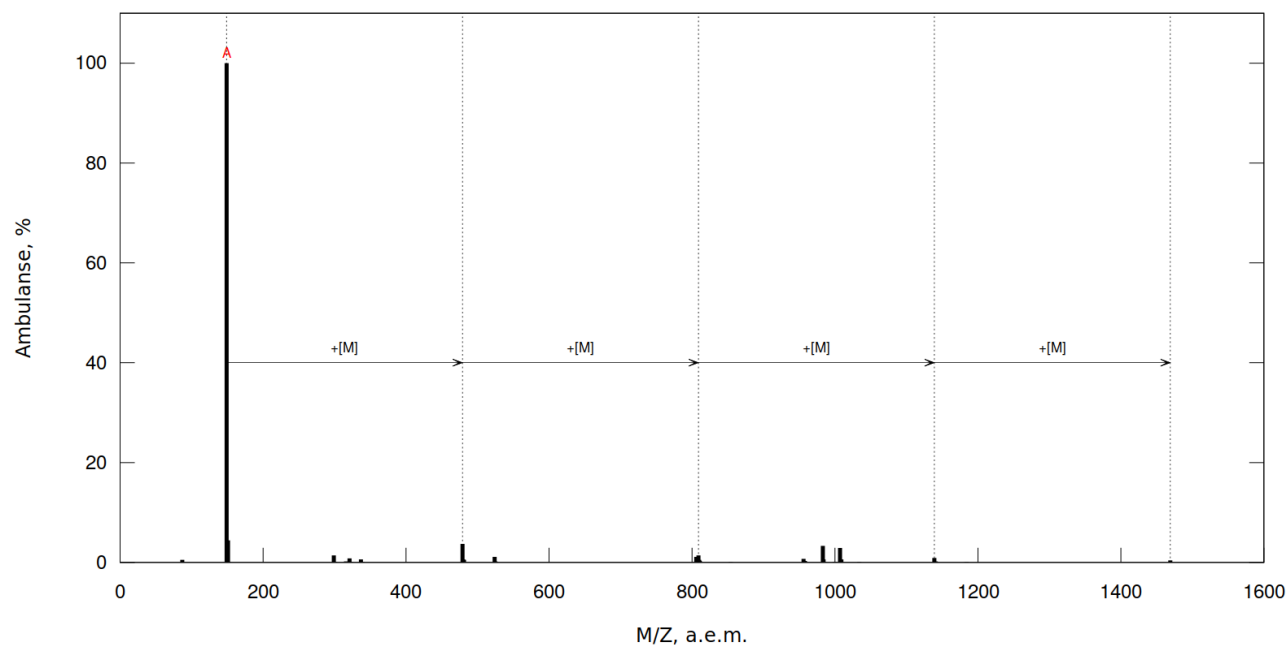
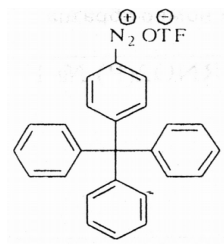


Рис. 7б. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 7а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы и масса 226.10 (со сдвигом на 44.98), также способная отщеплять азот. В режиме отрицательной ионизации (рис. 7б) основная линия А трифлат-аниона  $[\text{TfO}] = 148.95$ . Кроме того на спектрах присутствуют кластерные ионы с шагом  $[M] = 330.03$  соответствующей брутто формуле  $[\text{PhC}_6\text{H}_4\text{N}_2^+ \text{TfO}^-]$ , вероятно DC и трифлат-анион являются основными компонентами этой соли.



GRTRITIL №8

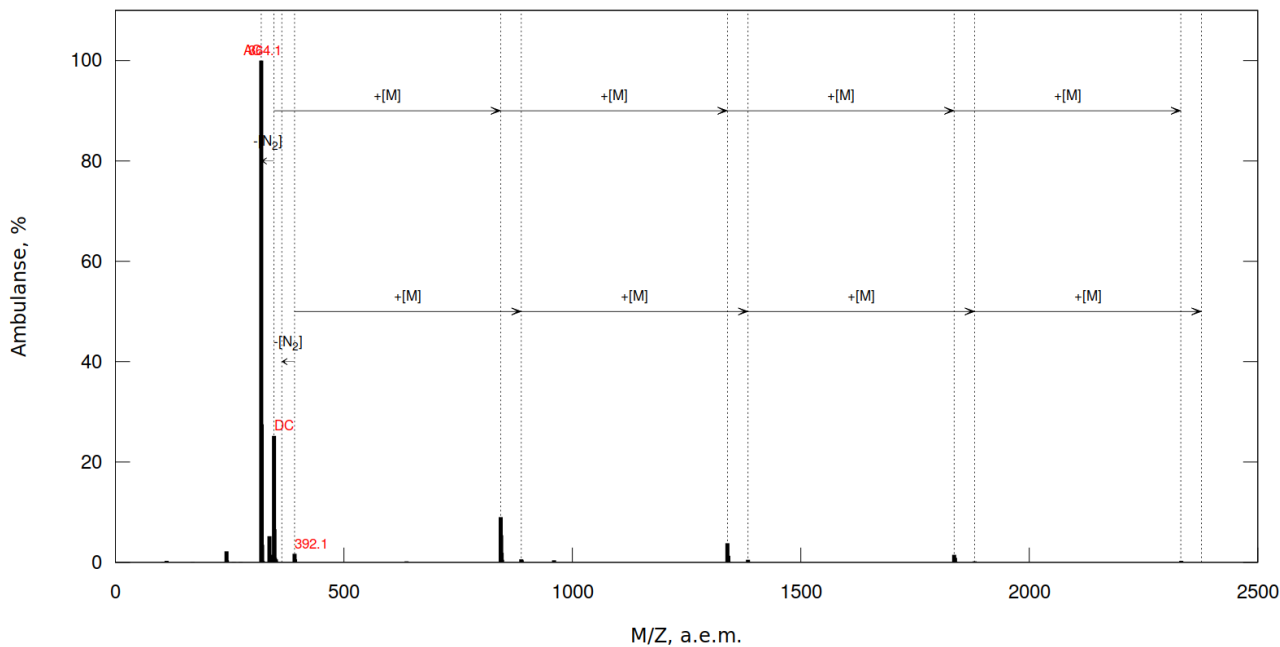


Рис. 8а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

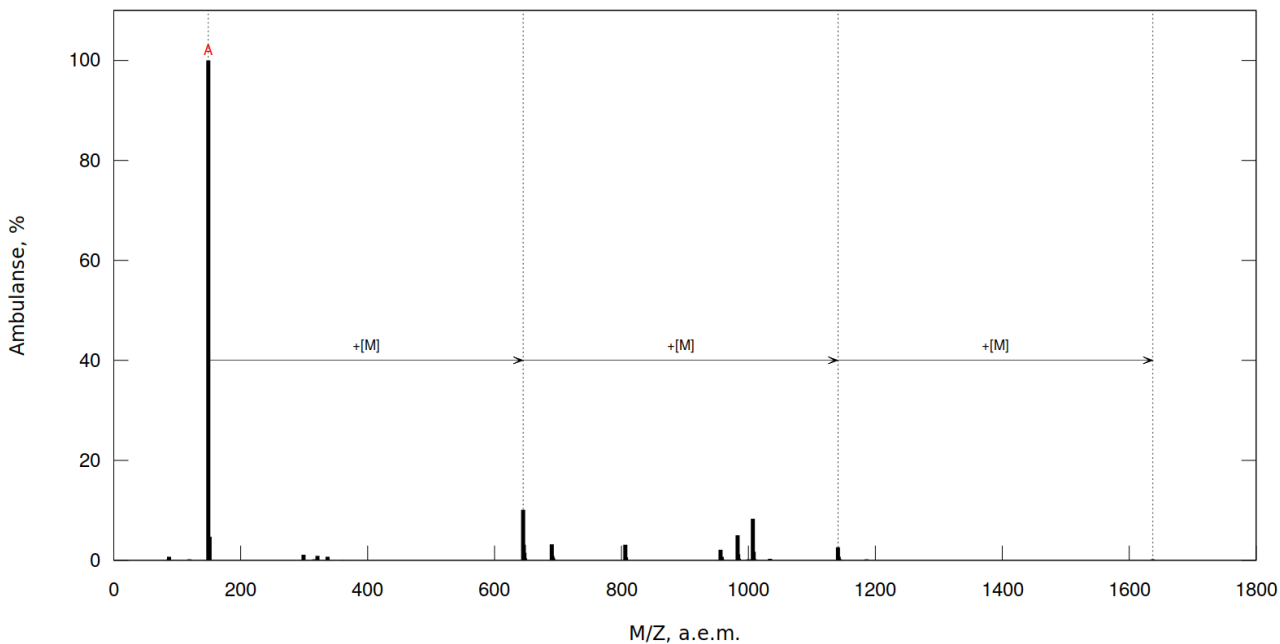


Рис. 8b. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 8а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы и масса 392.10 (со сдвигом на 44.98), также способная отщеплять азот. В режиме отрицательной ионизации (рис. 8b) основная линия А трифлат-аниона  $[TfO]^-$  = 148.95. Кроме того на спектрах присутствуют кластерные ионы с шагом  $[M] = 496.11$  соответствующей брутто формуле  $[(Ph)_3CC_6H_4N_2^+ TfO^-]$ , DC и трифлат-анион являются основными компонентами этой соли.



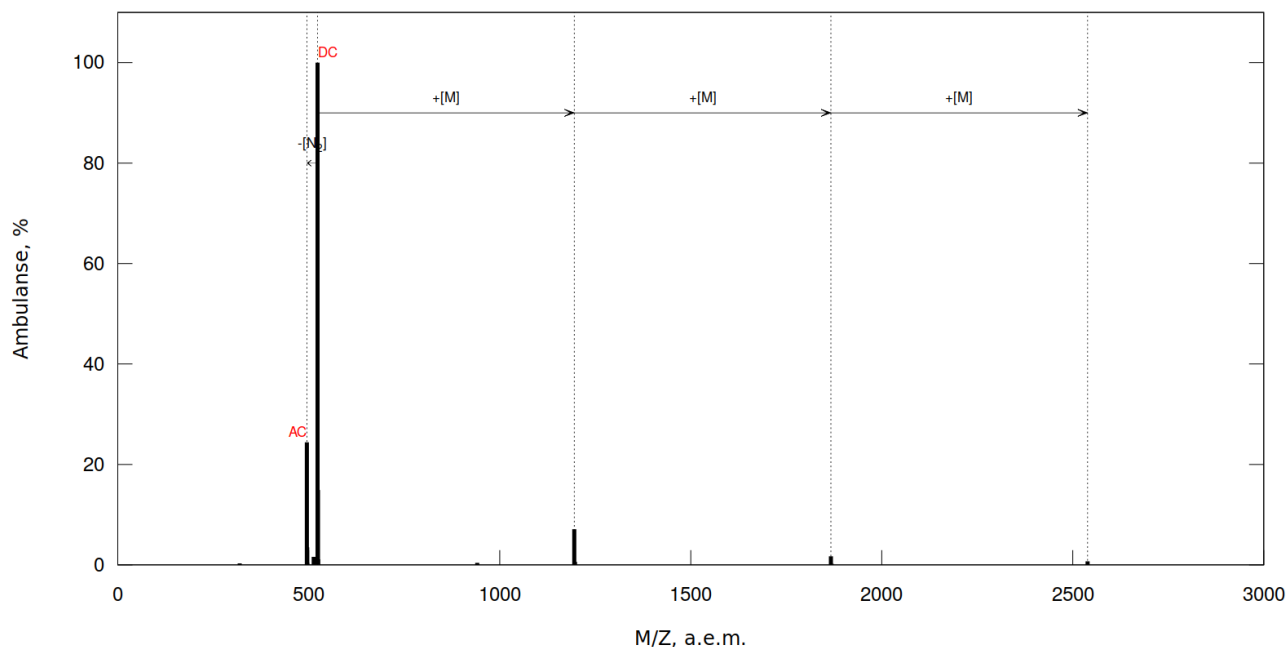
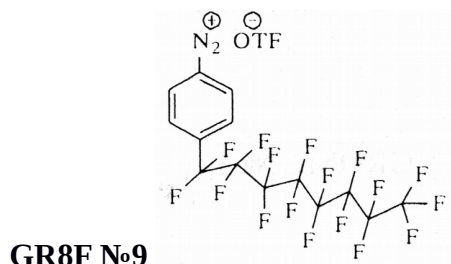


Рис. 9а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

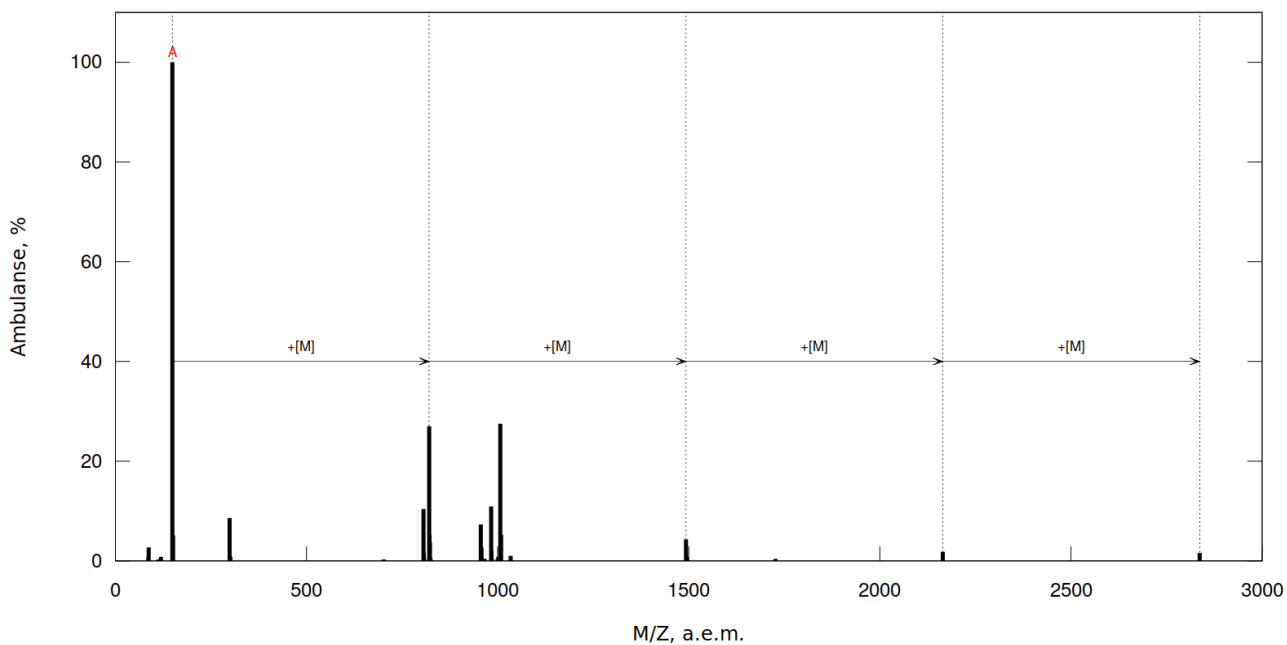
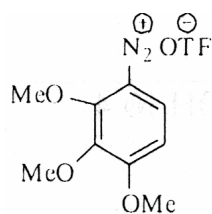


Рис. 9б. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 9а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы. В режиме отрицательной ионизации (рис. 9б) основная линия A трифлат-аниона [TfO]<sup>-</sup>=148.95. Кроме того на спектрах присутствуют кластерные ионы с шагом [M]=671.96 соответствующей брутто формуле [C<sub>8</sub>F<sub>17</sub>CC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub><sup>+</sup> TfO<sup>-</sup>], DC и трифлат-анион являются основными компонентами этой соли.



GR3OMe №10

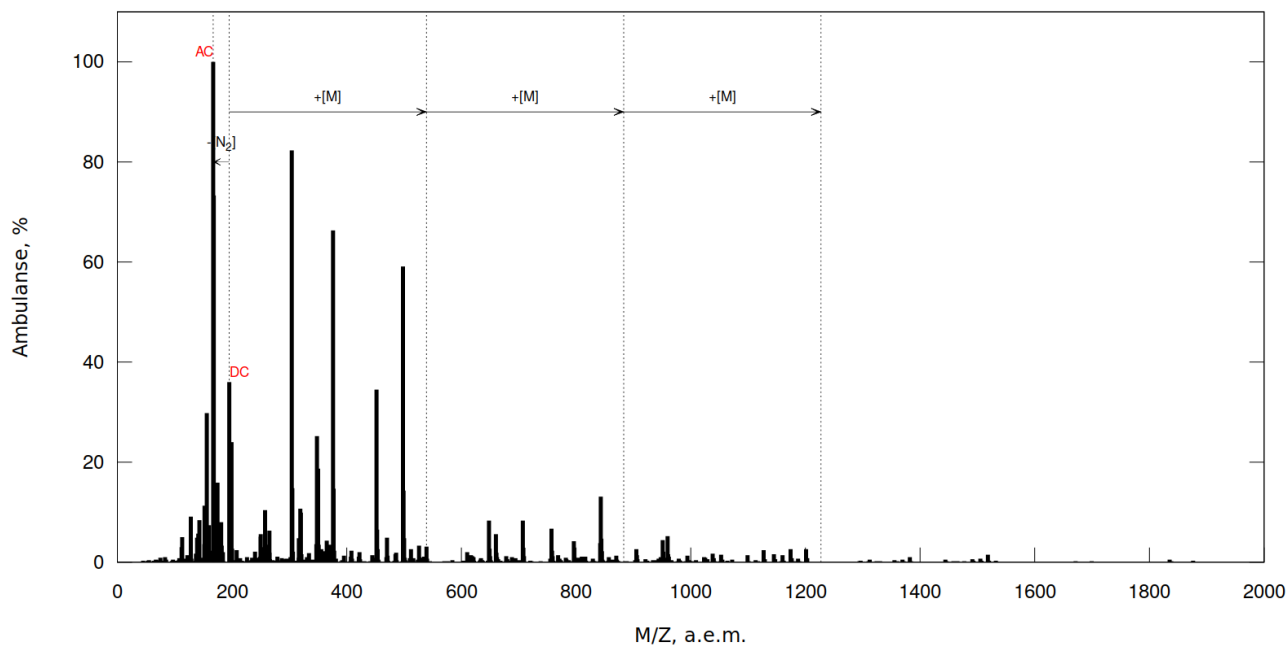


Рис. 10а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

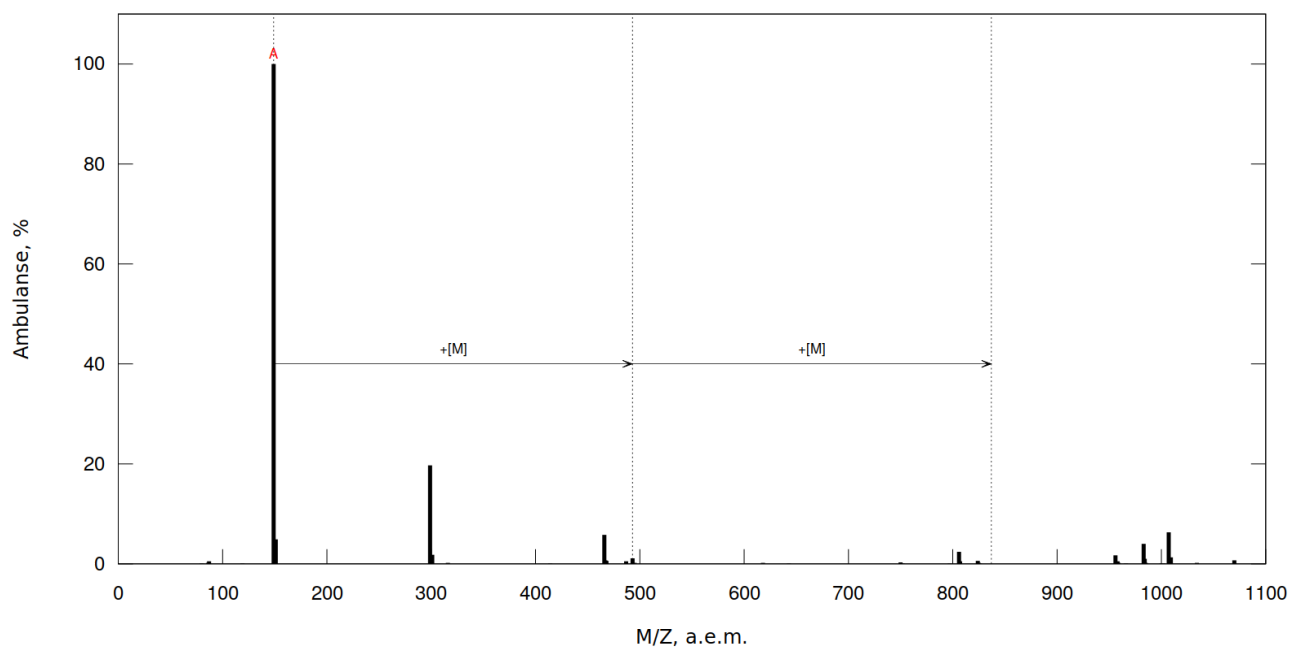


Рис. 10b. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 10а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы. В режиме отрицательной ионизации (рис. 10b) основная линия A трифлат-аниона  $[\text{TfO}] = 148.95$ . Кроме того на спектрах присутствуют кластерные ионы с шагом  $[M] = 344.03$  соответствующей брутто формуле  $[2,3,4\text{-MeOC}_6\text{H}_2\text{N}_2^+ \text{TfO}^-]$ .

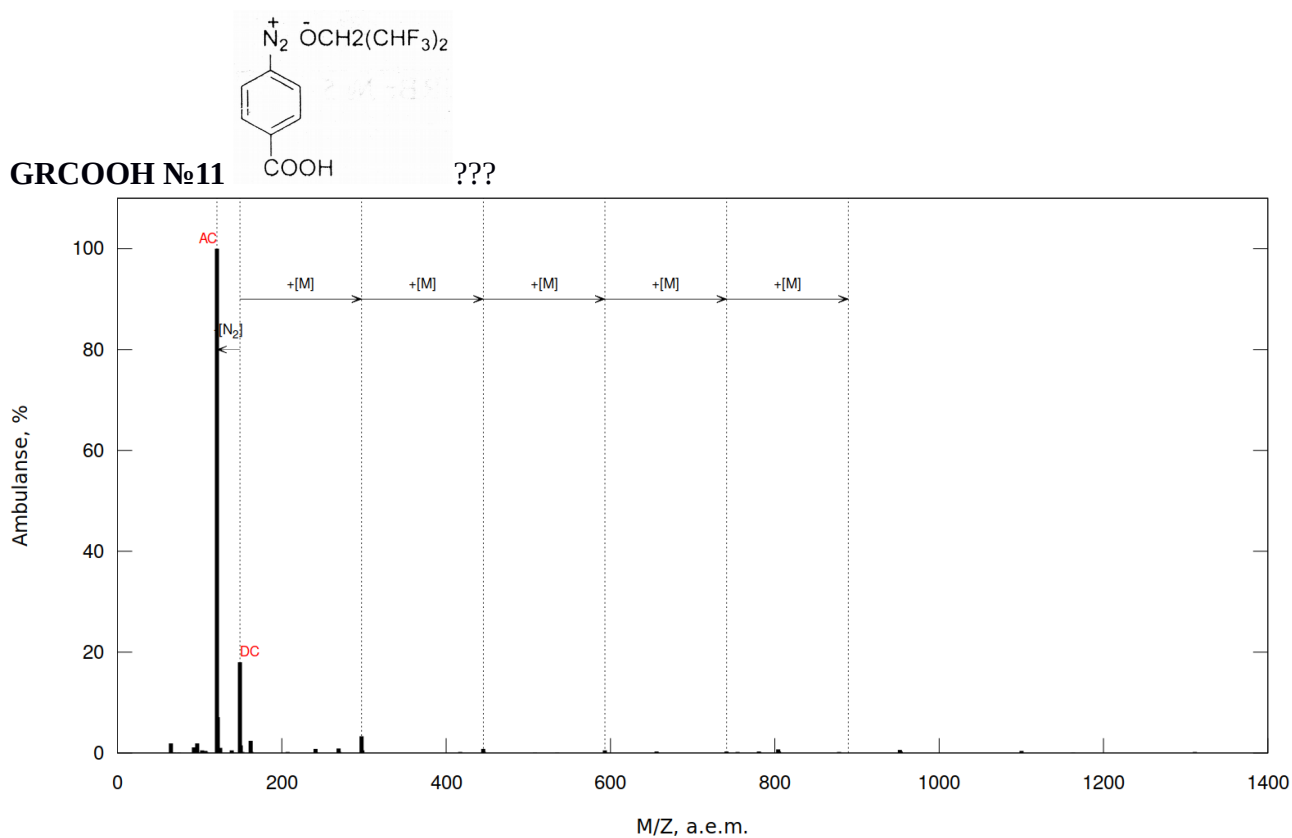


Рис. 11а. Масс спектр в режиме положительной ионизации ESI

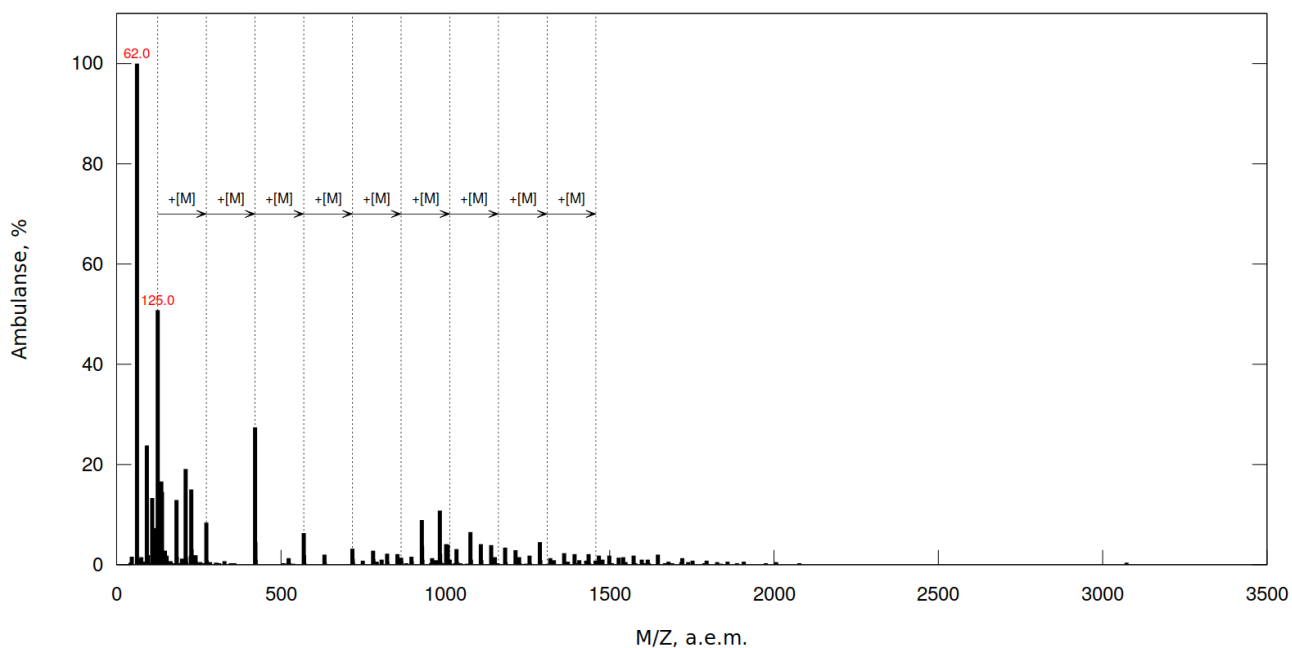


Рис. 11b. Масс спектр в режиме отрицательной ионизации ESI

На спектре (рис. 11а) в положительной ионизации присутствует диазониевый (DC) и арильный (AC) катионы. В режиме отрицательной ионизации (рис. 11b) отсутствует катион депротонированного гексафторизопропилового спирта  $[\text{HFIP-H}] = 167.0$ , наблюдается несколько анионов с массами 61.99 (вероятно  $\text{NO}_3$  при фрагментации отщепляет кислород), 124.99 (димер  $\text{NO}_3\text{HNO}_3$ ). Кроме того на спектрах присутствуют кластерные катионы с шагом  $[\text{M}] = 148.03$  вероятно соответствует брутто формуле  $[\text{OOC}_6\text{H}_4\text{N}_2^+]$ .