1. Можно ли в разделе 3.1 выразить интенсивности разных кластеров количественно, а не просто «малая интенсивность» ?

Таблица 2.

Интенсивность кластерных ионов и наблюдаемые «магические числа» для изученных солей диазония.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Compound | n | Intensity, abs. | Intensity, % |
| **1a**  C6H5N2+ TfO- | **1** | **16677** | **9.4** |
| 2 | 2383 | 1.3 |
| **3** | **6634** | **3.7** |
| 4 | 4252 | 2.4 |
| 5 | 5736 | 3.2 |
| **6** | **17022** | **9.6** |
| 7 | 705 | 0.4 |
| **1b**  2-NO2C6H4N2+ TfO- | **1** | **318437** | **39.1** |
| 2 | 35066 | 4.3 |
| **3** | **82974** | **10.2** |
| **4** | **94245** | **11.6** |
| 5 | 16912 | 2.1 |
| 6 | 9680 | 1.2 |
| **1c**  3-NO2C6H4N2+ TfO- | **1** | **242321** | **98.1** |
| 2 | 110927 | 44.9 |
| **3** | **198494** | **80.3** |
| 4 | 136849 | 55.4 |
| 5 | 41087 | 16.6 |
| 6 | 3478 | 1.4 |
| **1d**  4-NO2C6H4N2+ TfO- | **1** | **340795** | **19.1** |
| 2 | 95220 | 5.3 |
| **3** | **206412** | **11.6** |
| 4 | 141580 | 7.9 |
| **1e**  4-MeOC6H4N2+ TfO- | **1** | **116628** | **100** |
| 2 | 22493 | 19.3 |
| **3** | **94173** | **80.7** |
| 4 | 54904 | 47.1 |
| 5 | 36505 | 31.3 |
| 6 | 4199 | 3.6 |
| **1f**  2-HCO2C6H4N2+ TfO-  **отщепление HOTf** | 1 | 1325 | 1.3 |
| 2 | 426 | 2.0 |
| 3 | - | - |
| 4 | 332 | 1.6 |
| **5** | **4005** | **18.7** |
| **6** | **5243** | **24.5** |
| 7 | 1193 | 5.6 |
| **8** | **3404** | **15.9** |
| **1g**  4-HCO2C6H4N2+ TfO-  **полимеризация**  **почти нет кластеров** | **1** | **5644** | **11.7** |
| 2 | - | - |
| 3 | 128 | 0.3 |
| **1h**  4-BrC6H4N2+ TfO-  **отщепление HOTf** | **1** | **12809** | **19.8** |
| 2 | 335 | 0.5 |
| **1i**  4-Br-2-HCO2C6H3N2+ TfO-  **отщепление HOTf** | 1 | 2018 | 4.4 |
| 2 | 2600 | 5.6 |
| 3 | 664 | 1.4 |
| **2**  4-NO2C6H4N2+ TsO- | 1 | 205817 | 37.2 |
| **2** | **413793** | **74.4** |
| **3** | **553818** | **100** |
| 4 | 242131 | 43.7 |
| 5 | 99595 | 18.0 |
| **3**  4-NO2C6H4N2+ BF4- | **1** | **24953** | **90.4** |
| 2 | 267 | 1.0 |
| 3 | 115 | 0.4 |
| **4** | **25822** | **93.6** |
| 5 | 5098 | 18.5 |
| 6 | 1935 | 7.0 |
| 7 | 1171 | 4.2 |

2. Ты пишешь «Для тозилатов и трифлатов наиболее часто встречаются 3,6 - что кратно числу атомов кислорода сульфогруппы», но кластеры с n=6 в табл. 2 я увидел только для двух ДС **1a,f**, в то время как n=5 встречается чаще (ДС **1a,e,f, 2**).

Вы правы. Магические числа наиболее выражены для тетрафторбората, в случае трифлатов и тозилатов наблюдается повышенная интенсивность для числа 3. n=6 наблюдается только в случае где нет заместителей **1a**, вероятно наличие заместителей влияет на координацию с анионом, где-то препятствует, или может образовывать водородные связи (например карбоксильные группы). Для n=5 разумного объяснения пока не могу придумать.

3. Ты пишешь «на спектрах присутствуют линии арильных катионов (за исключением трифлата 2-нитрофенилдиазония),….». Однако, в подписи на рис. 2 этот арильный катион присутствует (обозначен В). Как понять ?

Мы обговаривали этот момент, на спектрах **1b** присутствует мало интенсивная линия арильного катиона, но это вероятно связано с небольшой примесью мета и пара замещенной соли. На спектрах MS2 диазониевого катиона линии арильного катиона полностью отсутствуют. Поэтому мы договорились убрать ее, только я забыл убрать обозначение. Переделаю рисунок.

4. В подписях к рис. 6-9 появляются кластеры Dn, а на рис. 8, 9 - En. Ниже ты о них, вроде, говоришь при обсуждении схем 5, 6: «На спектрах соединений 1f, 1h, 1i были обнаружены массы синхронно повторяющиеся в соответствии с массами кластерных ионов. Эти линии соответствуют частицам, которые образуются после отщепления трифторметансульфокислоты от кластерного катиона (уменьшение массы на [HOTf] = 150.0)», но для лучшего понимания нужно бы указать эти сокращения в тексте. Кстати, кластеры Dn есть и для **1g** (рис. 7), но ты эту ДС не указываешь.

Внесу изменения в текст и в подписях к рисункам, для более четкого понимания. Для **1g** процессов отщепления HOTf от кластеров не наблюдается и сами кластеры с очень малой интенсивностью, обозначения Dn некорректное, заменю на Pn, потому что это полимерная цепочка с шагом соответствующим бензин производному. Аналогичная цепочка Pn наблюдается еще для метокси-производного **1e**, правда с очень малой интенсивностью. Моя недоработка.