

3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Квантово-химическое моделирование масс-спектров
комплекса гемипорфирина кобальта

Д.А.Вьялкин, И.В.Рыжов, Ю.А.Жабанов, А.В.Ерошин.

Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия, e-mail: vyalkinda@gmail.com

Ранее был зарегистрирован масс-спектр электронного удара гемипорфирина кобальта, полученный при $U_{\text{ion}} = 50$ В. Максимумы с $m/z=494$ и $m/z=247$ соответствуют одно- и двухзарядному молекулярному иону, в то время, как достаточно интенсивные пики с $m/z=467$ и $m/z=185$ относятся к ионам, образовавшимся в результате ионизации с разрывом преимущественно связей с атомами азота, располагающимися между соседними ароматическими фрагментами.

В данной работе мы применили программу QCxMS, которая позволяет моделировать масс-спектры с использованием молекулярной динамики Борна-Оппенгеймера, реализованной в программе xTB. Метод электронной ионизации (EI), реализованный в программе QCxMS, с $U_{\text{ion}}=35$ эВ и $U_{\text{ion}}=50$ эВ при температуре 540К (Рисунок 1(б)) помог смоделировать теоретические масс-спектры. Как видно из рисунка 1(б), молекулярный ион с относительной массой 497 соответствует однозарядному молекулярному иону, полученному в ходе масс-спектрометрического исследования. Как видно из рисунка 1 теоретический масс-спектр качественно описывает экспериментальный, но содержит группу пиков с малыми массами, отсутствующую в экспериментальном масс-спектре.

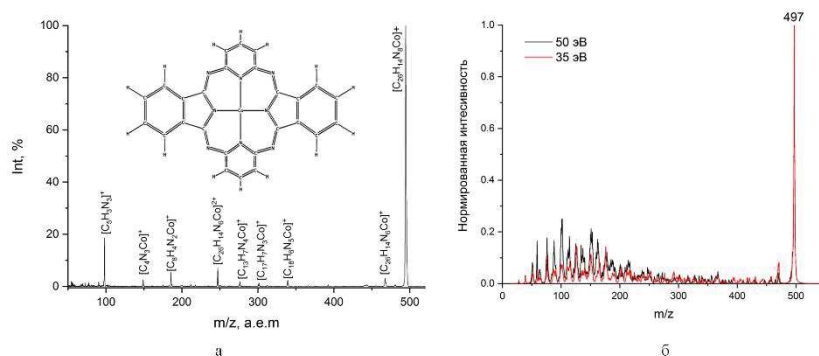


Рисунок 1. а – экспериментальный масс-спектр комплекса гемипорфирина кобальта; б – теоретический масс-спектр гемипорфирина кобальта.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-73-10107