

УДК 543.51+547.56

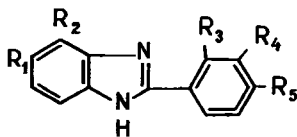
МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ НИТРОПРОИЗВОДНЫХ 2-ФЕНИЛБЕНЗИМИДАЗОЛА

ХМЕЛЬНИЦКИЙ Р. А., ЕФРЕМОВ Ю. А., ФЕДЯЙНОВ Н. В.
(Кафедра физической и коллоидной химии)

В процессе нитрования 2-фенилбензимидазола и его моонитропроизводных с получением динитросоединений возникла необходимость в качественном анализе изомерного состава образующихся нитропродуктов.

Предварительные исследования возможности использования метода газожидкостной хроматографии для разделения искусственной смеси 2-фенилбензимидазола и его нитро- и динитропроизводных показали, что на двух высокотемпературных фазах — нитрилсиликоновом каучуке ХЕ-60 и полиметилфенилсиликоновой жидкости ПФМС-6, нанесенных на хроматон N в количестве соответственно 5 и 10% в стеклянных микронабивных колонках при температуре 290°, не удалось четко разделить смесь изомеров, являющихся основными компонентами продукта нитрования. Кроме того, на полученных хроматограммах пики компонентов выходят с ассиметричной, неудобной для расчета формой¹.

Спектрофотометрический метод в видимой и ультрафиолетовой областях оказался еще менее пригодным для качественного анализа смесей изомеров из-за сходства их спектров в водных растворах этанола, серной кислоты и едкого натра различной концентрации и необходимостью в связи с этим перехода к трудоемкому решению переопределенных систем уравнений². Поэтому изучалась возможность применения масс-спектрометрического метода для решения указанной аналитической задачи. С этой целью были синтезированы нитропроизводные 2-фенилбензимидазола (соединения II—XII), которые принципиально могут получаться при нитровании, и изучено поведение этих соединений при электронном ударе.



- I $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = R_5 = H$, VII $R_2 = R_4 = R_5 = H$; $R_1 = R_3 = NO_2$,
II $R_1 = R_2 = R_4 = H$; $R_3 = NO_2$, VIII $R_2 = R_3 = R_5 = H$; $R_1 = R_4 = NO_2$,
III $R_1 = R_3 = R_4 = R_5 = H$; $R_2 = NO_2$, IX $R_2 = R_3 = R_5 = H$; $R_1 = R_4 = NO_2$,
IV $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = H$; $R_5 = NO_2$, X $R_1 = R_4 = R_5 = H$; $R_2 = R_3 = NO_2$,
V $R_1 = R_3 = R_4 = R_5 = H$; $R_2 = NO_2$, XI $R_1 = R_3 = R_5 = H$; $R_2 = R_4 = NO_2$,
VI $R_2 = R_3 = R_4 = R_5 = H$; $R_1 = NO_2$, XII $R_1 = R_3 = R_4 = H$; $R_2 = R_5 = NO_2$.

¹ Хроматографическое исследование проведено В. Т. Амелчевой.

² Спектрофотометрическое исследование осуществлено В. Ш. Голубчиком и С. А. Агаповой.

Масс-спектр соединения I, полученный нами, практически совпадает с описанным ранее [1]. Масс-спектры соединений II—XII (табл. 1) были получены на приборе МХ-1303 с модифицированной системой запуска образца при температуре 150°, ионизирующем напряжении 30 и 12 эВ, ускоряющем напряжении 2 кВ и токе эмиссии катода 1,5 мА. Соединения II—XII синтезировали из соответствующих о-фенилендиаминов и бензальдегидов по методу Ладенбурга [6, 7]. Соединение II получено по методу Хейна [6] из о-фенилендиамина и бензойной кислоты в среде полифосфорной кислоты. Чистота полученных соединений подтверждалась постоянством и узким интервалом (0,5—1°) точек плавления, результатами элементного анализа и хроматографической однородностью³.

Рассмотрение масс-спектра соединения I показало, что в возбужденном состоянии молекулярный ион распадается с потерей двух молекул HCN. Кроме того, для этого соединения характерно последовательное дегидрирование молекулярного иона с образованием ионов $(M-1)^+$ и $(M-2)^+$. Относительно высокая стабильность молекулы к электронному удару (W_M), равная 40,3, объясняется наличием конденсированной ароматической системы. Метил- и алкилзамещенные бензимидазолы обладают меньшей, но все же значительной величиной W_M [1].

Соединения II—XII, как и следовало ожидать, имеют довольно низкие значения W_M (табл. 2, 3), что обусловлено влиянием сильной электроноакцепторной нитрогруппы, увеличивающей «напряжение» молекулы. Для соединений II—IV величины W_M определяется положением заместителя в фенильной части молекулы. Аналогичные изменения W_M наблюдались в нитрозамещенных бензолах [4]. При введении нитрогруппы в бензимидазольное ядро молекулы (соединения V и VI) стабильность ее к электронному удару уменьшается в несколько меньшей степени, чем в случае соединения I (соответственно $W_M=11,6$ и $W_M=8,1$). Добавление второй нитрогруппы приводит к дальнейшему относительному понижению W_M , однако, как и в случае моонитропроизводных, величина W_M динитропроизводных во многом зависит от положения нитрогруппы в бензимидазольном цикле молекулы. Так, W_M соединений VII—IX, содержащих нитрогруппу в положении 5 бензимидазольного цикла, независимо от положения нитрогруппы в фенильном радикале находится в пределах 2,2—2,7. W_M соединений X—XII, содержащих нитрогруппу в положении 4 бензимидазольного цикла, независимо от положения нитрогруппы в фенильном радикале находится в пределах 6,7—8,2.

Благодаря наличию нитрогруппы осуществляются специфические реакции распада молекулярного иона. Они определяются функциональной группой и протекают при слабом влиянии ароматической или гетероароматической части молекулы. Исследование нитроароматических соединений показало, что одним из основных путей их распада при электронном ударе является элиминирование нитрозогруппы из молекулярного иона, обусловленное наличием нитро-нитритной перегруппировки [2, 3]. Из масс-спектров соединений II—VI также следует, что их диссоциативная ионизация характеризуется двумя конкурирующими направлениями с образованием ионов $(M-NO)^+$ и $(M-NO_2)^+$, масса которых составляет соответственно 209 и 193, это подтверждается и метастабильными переходами. При снижении энергии ионизирующих электронов увеличивается вероятность протекания нитритной перегруппировки.

Последующие стадии распада ионов $(M-NO)^+$ и $(M-NO_2)^+$ моонитрозамещенных соединений аналогичны диссоциативной иониза-

³ Авторы выражают благодарность Т. А. Масленниковой за предоставленные образцы.

Масс-спектры нитрозамещенных 2-фенилбензимидазолов [% от максимального пика в спектре; указаны пики с интенсивностью >10%]

Соединение II. 54 (14,1), 57 (14,9), 60 (25,0), 65 (17,0), 69 (13,7), 77 (15,7), 79 (13,2), 81 (11,6), 83 (12,0), 85 (10,0), 90 (23,2), 91 (59,0), 92 (11,6), 95 (11,6), 97 (15,7), 104 (17,0), 105 (10,7), 125 (23,2), 149 (10,3), 208 (24,0), 209 (74,5), 210 (10,3), 222 (27,0), 239 (100,0)

Соединение III. 51 (14,8), 53 (11,5), 54 (10,3), 55 (66,0), 56 (39,3), 57 (85,6), 58 (12,2), 60 (67,9), 61 (18,2), 63 (19,2), 64 (20,0), 65 (54,5), 66 (10,0), 67 (34,4), 68 (17,8), 69 (71,1), 70 (25,0), 71 (59,0), 73 (45,5), 77 (54,5), 78 (17,8), 79 (18,5), 80 (13,3), 81 (69,3), 82 (35,6), 83 (65,6), 84 (27,0), 85 (49,6), 87 (16,6), 90 (25,1), 91 (22,6), 92 (15,2), 93 (18,2), 95 (34,2), 96 (18,9), 97 (42,2), 98 (12,6), 99 (11,8), 105 (10,7), 109 (19,2), 110 (12,6), 111 (20,4), 113 (10,0), 115 (13,3), 118 (14,1), 119 (11,1), 123 (13,3), 125 (46,2), 126 (10,3), 127 (11,8), 129 (12,2), 135 (12,6), 137 (15,1), 138 (14,8), 139 (38,6), 140 (23,3), 141 (14,1), 143 (17,8), 149 (50,0), 151 (12,2), 152 (12,6), 153 (14,4), 154 (13,0), 155 (13,3), 157 (14,8), 164 (17,0), 165 (26,0), 166 (46,2), 167 (18,5), 181 (22,2), 182 (22,1), 191 (15,2), 192 (48,0), 193 (63,9), 194 (18,5), 208 (14,4), 209 (71,5), 210 (10,3), 238 (13,7), 239 (100,0)

Соединение IV. 51 (20,3), 55 (30,0), 56 (20,7), 57 (38,2), 60 (41,5), 64 (19,0), 65 (23,8), 67 (21,4), 68 (10,3), 69 (36,9), 70 (15,8), 71 (26,2), 73 (15,8), 77 (48,0), 78 (13,7), 81 (20,3), 82 (10,6), 83 (16,2), 85 (13,0), 91 (15,5), 93 (16,2), 95 (19,3), 95 (11,3), 97 (46,6), 99 (12,4), 104 (12,0), 105 (16,5), 107 (11,3), 108 (11,0), 109 (31,4), 110 (15,2), 111 (22,8), 125 (62,0), 126 (10,6), 139 (10,0), 149 (37,6), 151 (11,3), 152 (17,0), 153 (16,2), 166 (11,0), 181 (12,4), 192 (21,4), 198 (42,4), 208 (13,0), 209 (71,7), 210 (11,6), 239 (100,0)

Соединение V. 57 (10,0), 63 (22,8), 77 (32,8), 78 (28,0), 79 (10,4), 90 (25,2), 104 (30,4), 105 (48,4), 106 (18,0), 125 (14,0), 139 (15,2), 140 (15,6), 166 (45,8), 167 (16,4), 181 (25,6), 192 (40,0), 193 (45,8), 194 (25,2), 209 (45,0), 210 (12,0), 239 (100,0)

Соединение VI. 55 (27,8), 56 (18,7), 57 (24,4), 58 (15,1), 60 (14,6), 64 (27,6), 67 (14,2), 69 (19,1), 70 (13,0), 71 (16,7), 73 (13,8), 77 (22,4), 78 (22,5), 79 (13,4), 81 (17,1), 83 (16,2), 85 (11,4), 91 (13,0), 93 (17,1), 95 (15,1), 97 (20,2), 104 (12,6), 105 (24,0), 109 (17,5), 110 (13,4), 111 (13,4), 125 (24,8), 149 (12,2), 156 (11,4), 192 (13,0), 193 (34,6), 209 (47,0), 239 (100,0)

Соединение VII. 51 (13,9), 53 (10,9), 54 (11,6), 55 (52,0), 56 (37,6), 57 (60,0), 58 (11,9), 60 (67,0), 61 (24,6), 63 (11,2), 64 (10,5), 65 (10,9), 67 (28,4), 68 (21,8), 69 (69,0), 70 (34,7), 71 (57,5), 72 (17,9), 73 (63,8), 74 (17,5), 75 (16,1), 76 (10,5), 77 (51,0), 78 (16,8), 79 (25,6), 80 (14,7), 81 (49,0), 82 (27,4), 83 (49,0), 84 (28,0), 85 (35,4), 86 (10,2), 87 (16,1), 91 (22,4), 93 (18,6), 95 (28,0), 96 (21,8), 97 (45,0), 98 (17,5), 99 (13,3), 104 (22,5), 105 (13,3), 109 (14,4), 111 (16,5), 115 (10,9), 119 (10,2), 123 (10,9), 125 (60,7), 127 (10,9), 129 (23,8), 134 (15,8), 137 (11,2), 139 (10,5), 149 (28,4), 208 (30,0), 209 (11,2), 223 (13,9), 224 (53,6), 225 (10,0), 253 (15,1), 254 (100,0), 255 (19,0), 156 (12,9), 284 (58,0)

Соединение VIII. 55 (34,4), 56 (21,2), 57 (43,0), 60 (55,5), 61 (15,6), 67 (15,6), 68 (14,1), 69 (40,0), 70 (21,2), 71 (32,0), 73 (55,5), 79 (11,0), 81 (21,2), 82 (15,6), 83 (31,0), 84 (22,0), 85 (29,0), 87 (15,6), 91 (10,2), 93 (12,5), 95 (18,0), 96 (17,2), 97 (31,0), 98 (21,2), 99 (14,1), 101 (11,8), 109 (10,2), 111 (13,3), 112 (10,2), 115 (11,0), 125 (11,8), 129 (24,2), 149 (24,2), 185 (11,0), 192 (13,3), 200 (10,2), 202 (10,2), 208 (29,8), 224 (47,6), 225 (10,2), 228 (12,5), 138 (21,6), 254 (82,0), 255 (22,0), 256 (24,2), 284 (100,0)

Соединение IX. 54 (16,0), 55 (43,2), 56 (33,8), 57 (48,5), 58 (12,1), 60 (51,0), 61 (19,9), 64 (10,2), 65 (11,0), 67 (27,3), 68 (17,5), 69 (43,6), 70 (30,7), 71 (41,6), 73 (54,1), 77 (41,4), 78 (19,5), 79 (19,3), 80 (11,0), 81 (28,0), 82 (23,7), 83 (40,8), 84 (29,2), 85 (37,4), 87 (17,5), 91 (19,9), 92 (11,0), 93 (18,7), 94 (10,6), 95 (23,0), 96 (23,4), 97 (40,5), 98 (31,9), 99 (19,9), 101 (12,9), 105 (16,8), 107 (11,0), 108 (14,4), 109 (23,0), 110 (20,3), 111 (22,6), 112 (22,2), 113 (16,4), 115 (28,4), 116 (11,0), 119 (13,3), 121 (13,7), 123 (21,8), 124 (21,4), 125 (64,5), 126 (20,3), 127 (28,0), 128 (12,1), 129 (82,0), 130 (19,1), 133 (13,3), 134 (10,6), 135 (21,4), 136 (15,6), 137 (42,5), 138 (41,6), 139 (49,7), 140 (43,6), 141 (55,0), 142 (14,1), 143 (88,0), 144 (20,6), 145 (14,1), 147 (10,2), 149 (69,5), 150 (14,4), 151 (11,7), 152 (12,9), 171 (12,9), 184 (11,0), 185 (17,9), 219 (15,6), 220 (27,7), 221 (10,6), 222 (20,3), 223 (24,5), 224 (100,0), 225 (20,3), 228 (26,1), 242 (10,2), 253 (10,6), 254 (86,0), 255 (19,5), 256 (72,3), 257 (19,1), 284 (25,0)

Соединение X. 51 (27,1), 52 (10,9), 57 (10,9), 58 (10,7), 76 (31,8), 77 (34,6), 78 (13,6), 79 (12,6), 92 (11,8), 104 (81,7), 105 (27,1), 106 (30,0), 120 (16,4), 121 (28,2), 122 (10,0), 134 (50,0), 135 (11,8), 152 (17,3), 179 (10,0), 192 (12,7), 254 (22,7), 267 (37,2), 283 (13,6), 284 (100,0)

Соединение XI. 51 (12,5), 54 (10,7), 55 (28,4), 56 (22,0), 57 (41,5), 60 (31,4), 61 (16,3), 63 (11,0), 64 (15,6), 65 (14,0), 67 (19,9), 68 (13,7), 69 (27,7), 70 (18,0), 71 (29,6), 73 (28,0), 77 (27,7), 78 (12,9), 79 (11,0), 81 (22,4), 82 (24,4), 83 (27,4), 84 (18,4), 85 (24,4), 87 (15,2), 91 (11,4), 92 (12,1), 93 (15,9), 94 (11,0), 95 (19,6), 96 (17,0), 97 (28,0), 98 (16,7), 99 (12,1), 105 (12,9), 109 (14,8), 111 (17,7), 115 (12,1), 120 (10,7), 125 (44,5), 129 (21,0), 143 (10,4), 149 (31,0), 150 (12,5), 157 (10,4), 158 (16,3), 159 (12,5), 160 (19,2), 164 (21,4), 165 (19,9), 171 (11,4),

179 (12,1), 180 (12,1), 184 (11,4), 185 (17,0), 191 (38,9), 192 (40,7), 193 (14,0), 207 (11,4), 208 (29,6), 209 (10,4), 221 (33,3), 222 (11,0), 223 (12,9), 224 (31,4), 226 (17,7), 238 (49,2), 239 (17,7), 254 (51,0), 255 (15,6), 283 (15,6), 284 (100,0)

Соединение XII. 51 (25,4), 55 (30,4), 56 (14,9), 57 (39,4), 60 (24,9), 63 (23,4), 65 (26,9), 67 (14,4), 69 (32,9), 70 (13,4), 71 (26,9), 73 (27,4), 76 (11,4), 77 (41,4), 78 (10,4), 81 (13,9), 82 (11,9), 83 (23,4), 85 (18,4), 90 (20,9), 91 (31,4), 92 (11,9), 93 (11,9), 95 (12,9), 96 (10,0), 97 (26,9), 103 (10,9), 104 (12,4), 105 (10,4), 111 (12,4), 116 (18,4), 117 (12,9), 118 (18,9), 119 (11,4), 125 (52,2), 129 (15,4), 131 (65,6), 132 (13,9), 145 (65,9), 146 (71,6), 147 (18,9), 149 (28,4), 164 (18,4), 165 (13,9), 180 (13,4), 191 (36,4), 192 (62,2), 193 (18,4), 207 (10,9), 208 (26,9), 218 (18,4), 221 (10,9), 224 (18,4), 226 (15,9), 238 (59,6), 239 (12,4), 253 (13,9), 254 (49,7), 284 (100,0)

ции соединения I (табл. 2). В частности, процессы дегидрирования, столь характерные для соединения I, осуществляются с гораздо меньшей вероятностью на первой стадии для соединений II—VI, и элиминирование водорода протекает из осколочных ионов, возникающих после удаления частиц NO_2 и NO (табл. 2).

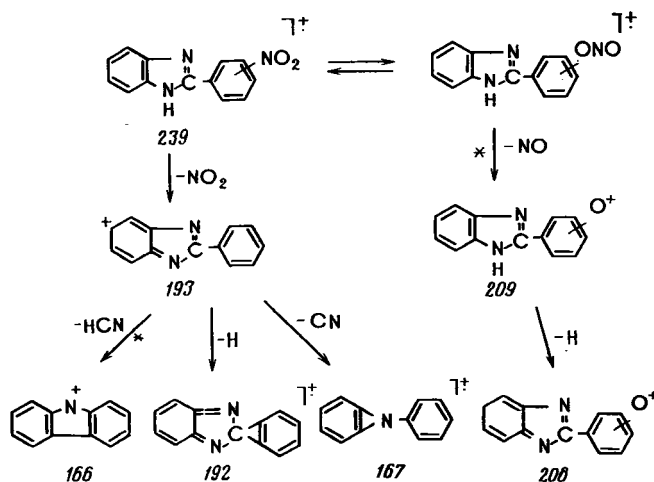
Таблица 2

W_M и относительные интенсивности некоторых характеристических ионов (% от полного ионного тока), образующихся при распаде мононитрозамещенных 2-фенилбензимидазолов (соединения II—VI)

	II	III	IV	V	VI
W_M	3,0	3,6	3,8	11,6	8,0
$(M-OH)^+$	2,0	—	—	0,2	—
$(M-NO)^+$	5,4	2,3	3,1	3,8	3,6
$(M-NO-CO)^+$	0,5	0,7	0,5	2,2	0,5
$(M-NO-H)^+$	1,8	0,5	0,6	0,5	0,5
$(M-NO_2)^+$	0,4	2,0	1,8	5,4	2,6
$(M-NO_2-H)^+$	0,6	1,5	0,9	3,4	1,0
$(M-NO_2-HCN)^+$	0,2	1,5	0,5	3,9	0,1
$(M-NO_2-CN)^+$	0,3	0,6	0,2	1,4	0,2

У ионов $(M-NO_2)^+$ происходит реакция отщепления HCN и CN . При этом отрыв цианистого водорода, сопровождаемый метастабильным переходом с кажущейся массой 142,7, образует пик ионов с массой 166, отвечающий структуре азабифенилена (схема 1).

Отщепление окиси углерода, характерное для ряда нитроароматических соединений при распаде II—VI, происходит с малой вероят-



ностью, за исключением соединения V. Однако на первой стадии диссоциативной ионизации молекулярных ионов соединений II и V протекает процесс элиминирования гидроксила, типичный для ряда о-замещенных нитросоединений [4]. Образование этого иона, вероятно, связано с миграцией атома водорода имидазольного цикла к атому кислорода нитрогруппы; однозначность указанного процесса подтверждается метастабильным переходом с кажущейся массой 206,2.

Вероятность образования характеристических ионов различная, она зависит от положения нитрогруппы в молекуле, и поэтому, несмотря на общность путей распада соединений, удается достаточно надежно идентифицировать их по масс-спектрам. Так, приведенные в табл. 2 данные показывают, что изомер II можно идентифицировать по пику ионов $(M-OH)^+$ с массой 222, интенсивность которого в масс-спектре соединения V в 10 раз меньше, а в масс-спектрах других соединений он отсутствует. Соединения V и VI легко идентифицируются по значению W_M , превосходящему W_M изомеров II—IV примерно вдвое. Различить соединения V и VI, имеющие близкие значения W_M , легко по пику ионов $(M-NO-CO)^+$, интенсивность которого у первого в 4 раза выше (табл. 2).

В некоторых случаях различия между масс-спектрами изомеров появляются особенно четко при использовании отношений аналитических пиков. Так, например, соотношение интенсивности пиков ионов $(M-NO_2)^+$ и $(M-NO_2-C)^+$ для соединения VI составят 26, тогда как для остальных соединений — 1,3—9,0. В то же время соотношение интенсивности пиков ионов $(M-NO)^+$ и $(M-NO_2-HCN)^+$ для соединения IV равно 6,2, а для соединения III — 1,5.

В результате диссоциативной ионизации динитрозамещенных 2-фенилбензимидазолов (соединения VII—XII) происходят распад и отрыв функциональных групп, которые и определяют масс-спектр.

Благодаря наличию второй нитрогруппы в молекуле значительно увеличивается изомеризация одной из групп, которая с максимальной вероятностью протекает в соединении VIII, что способствует образованию пика ионов $(M-NO)^+$ с массой 254 и интенсивностью 4,0% от полного ионного тока. Кроме того, для соединений VII—XII характерна нитро-нитритная изомеризация обеих нитрогрупп, приводящая к одновременному или последовательному отрыву двух нитрогрупп из молекулярного иона. Данный процесс наиболее сильно выражен в изомере IX. В этом случае образовавшийся пик ионов $(M-2NO)^+$ с массой 224 составляет 3,1% от полного ионного тока, что позволяет идентифицировать это соединение в смеси (табл. 3, схема 2).

Характеристические ионы, обнаруженные при рассмотрении масс-спектров соединений VII—XII, позволяют достаточно надежно идентифицировать указанные изомеры. Прежде всего, используя пики молекулярных ионов, можно легко отличить группу изомеров VII—IX от изомеров X—XII, так как значение W_M первой находится в пределах 2,2—2,7, а второй — в пределах 6,7—8,2 (табл. 3). По соотношению интенсивностей пиков ионов $(M-2NO)^+$ и $(M-NO_2)^+$ можно легко идентифицировать изомеры VII, VIII и IX, для которых эти значения соответственно равны 9,0; 2,3 и 31,0. В этой же группе наибольшей интенсивностью обладает изомер с пиком ионов $(M-OH)^+$.

Таблица 3

W_M и относительные интенсивности некоторых характеристических ионов, образующихся при распаде соединений VII—XII (в % от полного ионного тока)

	VII	VIII	IX	X	XI	XII
W_M	2,2	2,7	2,4	8,2	6,7	7,2
$(M-OH)^+$	0,9			2,8		
$(M-NO)^+$	3,3	4,0	2,7	1,7	2,3	2,6
$(M-2NO)^+$	1,8	2,3	3,1	0,5	1,4	0,9
$(M-NO_2)^+$	0,2	1,0	0,1	0,5	2,2	3,1
$(M-2NO_2)^+$	0,2	0,6		1,0	1,8	3,2

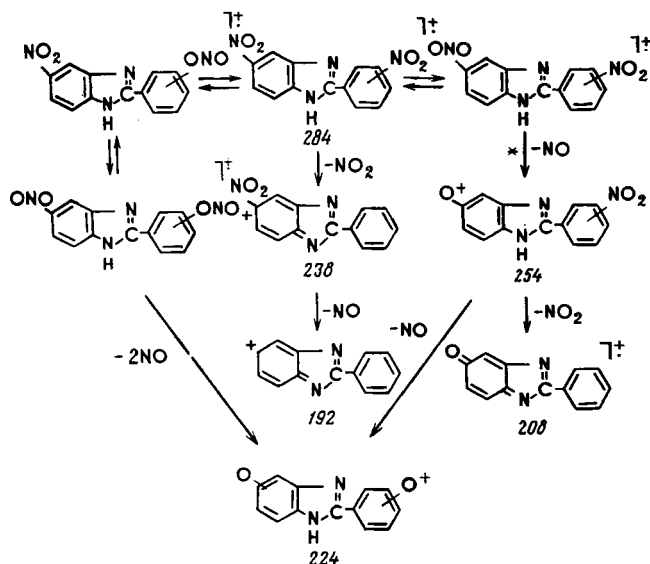


Схема 2.

Во второй группе заметно выделяется изомер X с очень интенсивным пиком ионов $(M - OH)^+$, равным 2,8% от полного ионного тока (табл. 3). Пара изомеров XI и XII легко различается по соотношению интенсивностей пиков ионов $(M - 2NO)^+$ и $(M - 2NO_2)^+$ — 0,77 для XI и 0,28 для XII.

Таким образом, исследованные соединения, распадаясь при электронном ударе по одним и тем же направлениям, позволяют однозначно проводить идентификацию изомеров в их смеси благодаря весьма специфическому распределению интенсивностей по пикам характеристических ионов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хмельницкий Р. А., Кост А. Н., Кондал-Редди К., Высоцкий В. И. Масс-спектры бензимидазола и некоторых метилбензимидазолов. «ЖОРХ», 1969, 5, с. 1153. — 2. Хмельницкий Р. А., Ефремов Ю. А., Дрозд В. Н., Каминский А. Я. Перегруппировочные процессы в нитрофенилсульфонах при электронном ударе. «Иzv. ТСХА», 1975, вып. 1, с. 203. — 3. Хмельницкий Р. А., Ефремов Ю. А., Дрозд В. Н., Камин-

ский А. Я. Изомеризация молекулярных ионов динитродифенилсульфонов при электронном ударе. «Иzv. ТСХА», 1976, вып. 2, с. 191. — 4. Veunon J. H., Saunders R. A., Williams A. E. "Ind. Chim. Belg.", 1964, N 4, p. 311. — 5. Hein D. W., Alheim R. J., Leavitt J. J. "J. Am. Chem. Soc.", 1957, 79, p. 427. — 6. Hoffmann K. Imidazole and its Derivatives, p. 1, New York—London, 1953, p. 267. — 7. Wright J. B. "Chem. Revs", 48, p. 435 (1951).

Статья поступила 1 июля 1977 г.

SUMMARY

Mass spectra of mono- and dinitro substituted 2-phenylbenzimidazoles have been investigated. The first stage fragmentation of the compounds is dependent on nitro-nitrite rearrangement of the molecular ion. As a rule the formation of the fragment ions with the elimination of HCN and CN takes place at the next stage of the fragmentation. Different possibility of the characteristic ion formation permits quite sufficiently to identify the investigated compounds according to their mass spectra.