

УДК 543.51-044.967:547.288.3]-047.23

Б. О. Варинський¹, А. Г. Каплаушенко¹, М. М. Малецький¹, Ю. В. Тимошик²¹ Запорізький державний медичний університет² Національний університет біоресурсів і природокористування України

ВИВЧЕННЯ ЗАКОНОМІРНОСТЕЙ МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНОГО РОЗПАДУ ГІДРАЗИДІВ ДЕЯКИХ ОРГАНІЧНИХ КИСЛОТ ТА ЇХ ВІДПОВІДНИХ ГІДРАЗИНОКАРБОТІОАМІДІВ

Досліджено фрагментацію в іонному джерелі (іонізація електророзпиленням) у ряду гідрозидів та гідрозинокарботіоамідів кислот, вихідних речовин при синтезі солей 1,2,4-триазолітїооцтових кислот – субстанцій потенційних лікарських препаратів при ВЕРХ-МС при 100 В та 200 В. Проаналізовані мас-спектри відповідних сполук. Отримані закономірності розпаду цих сполук.

Ключові слова: мас-спектрометрія; високоефективна рідинна хроматографія; іонізація в електроспреї; гідрозиди та гідрозинокарботіоаміди кислот

ВСТУП

Гетероциклічні системи на основі 1,2,4-триазолу становлять значний інтерес у сучасній фармацевтичній хімії. Вони чинять антиоксидантну, гепатопротекторну та інші види активності, при цьому деякі вже зареєстровані і використовуються в сучасній ветеринарії (трифузол, авестим), деякі (тіокс) знаходяться на стадії реєстрації і впровадження у виробництво.

Таким чином, дослідження методів одержання та контролю якості на всіх стадіях отримання і виробництва вищезазначених сполук, а також напівпродуктів їх синтезу є актуальним завданням сучасної фармацевтичної науки, становить науковий інтерес і практичну значимість.

Одним з головних методів, які можуть використовуватися для надійної та достовірної ідентифікації і кількісного визначення цільових продуктів органічного синтезу та домішок, є хроматомас-спектрометрія. Це класичні методи, засновані на поєднанні мас-спектрометрії (з електронною іонізацією (EI), хімічною іонізацією (XI)), з газовою чи рідинною хроматографією. При цьому газова хроматографія не завжди знаходить своє застосування для дослідження вищезазначених речовин, що пояснюється їх високою температурою плавлення. Найбільш відповідними для аналітичних цілей є поєднання високоефективної рідинної хроматографії і мас-спектрометрії з

іонізацією при атмосферному тиску, в електроспреї (ESI), хімічною іонізацією при атмосферному тиску (XIAT), фотохімічною іонізацією при атмосферному тиску (ФХІАТ). На першому етапі перед дослідниками стоїть завдання оптимізації умов мас-спектрометричного детектування [1], на другому етапі проводять дослідження хроматографічної поведінки аналітів [2], а на завершальному – підтвердження їх будови за допомогою фрагментації в мас-спектрометрії, що і стало метою нашої роботи.

У даній роботі використана іонізація електророзпиленням, тобто іонізація в електроспреї, що є найкращою [3] для аналізу полярних нелетких сполук, якими є досліджувані аналіти.

Існує декілька робіт, в яких наводиться інформація щодо фрагментації ізоніазиду при мас-спектрометрії в комірці зіткнення потрійного квадруполя з іонізацією електророзпиленням [4-8]. При низькому значенні енергії зіткнення (18-25 eV) головним іонним фрагментом є іон з m/z , створений втратою молекули NH_3 [4, 5]: m/z 138 \rightarrow 121, а також наводиться положення розриву зв'язку, але не наводиться структура іона з $m/z = 121$.

Метою нашої роботи було дослідження мас-спектрів та пропонування передбачуваних реакцій фрагментації ряду сполук, гідрозидів та гідрозинокарботіоамідів органічних кислот, вихідних речовин при синтезі солей 1,2,4-триазолітїооцтових кислот – субстанцій потенційних лікарських препаратів та порівняння запропонованої схеми фрагментації з розрахованою енергією зв'язку для гідрозидів кислот.

© Варинський Б. О., Каплаушенко А. Г., Малецький М. М., Тимошик Ю. В., 2015

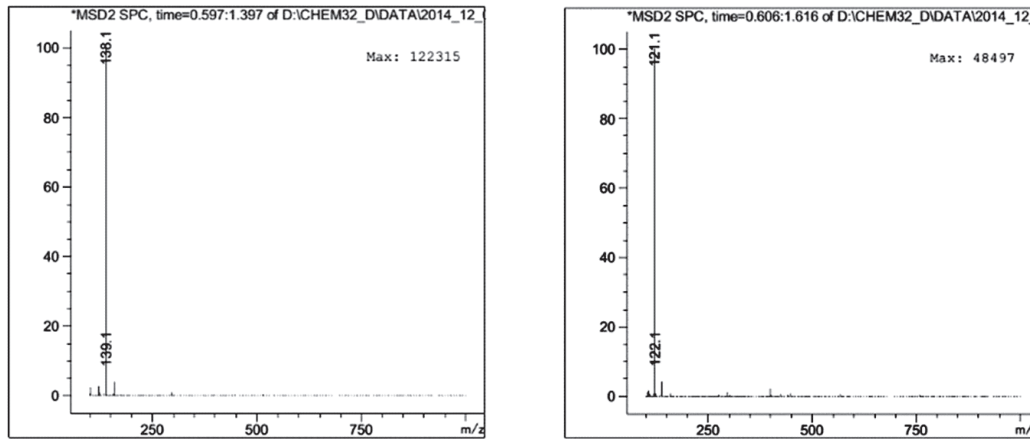


Рис. 1. Мас-спектри ізоніазиду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

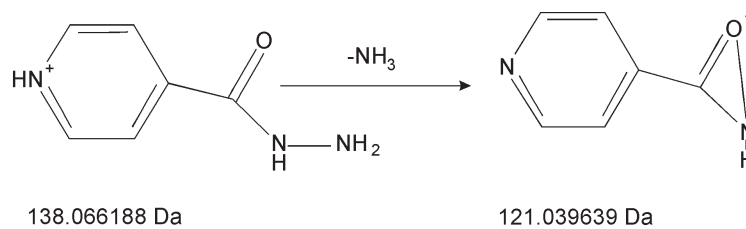


Рис. 2. Фрагментація ізоніазиду та моноізотопні маси іонів.

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ

Прилад LC MS: Agilent 1260 Infinity HPLC System (дегазатор, бінарний насос, автосамплер; одноквадрупольний мас-спектрометр Agilent 6120 з іонізацією в електроспрей (ESI);

Сполуки. Субстанцію ізоніазиду (1) кваліфікації ХЧ було придбано в компанії «Укроргсинтез». Використовувались субстанції сполук, які були синтезовані в Запорізькому державному медичному університеті на кафедрах токсикологічної і неорганічної хімії та фізколоїдної хімії, склад яких було доведено за допомогою ПМР-, ІЧ-, хромато-мас-спектрометричного аналізу: фуран-2-карбогідрозид (2), 2-морфоліноацетогідрозид (3), 2-метоксибензогідрозид (4), 2-ізонікотиноіл-N-(2-метоксифеніл)гідрозин-1-карботіоамід (5), 2-(фуран-2-карбоніл)-N-фенілгідрозин-1-карботіоамід (6), 2-(2-морфоліноацетил)-N-фенілгідрозин-1-карботіоамід (7), 2-(2-морфоліноацетил)-N-фенілгідрозин-1-карботіоамід (8), 2-(2-метоксибензоіл)гідрозин-1-карботіоамід (9).

Ацетонітрил кваліфікації для ВЕРХ, MerckKGaA (Darmstadt, Germany), формиатна кислота (100 %), MerckKGaA (Darmstadt, Germany). Високоочищена вода (18 МΩ при 25 °С) була виготовлена з використанням системи очищення води Direct Q 3UV Millipore (Molsheim, France).

Наважку речовини масою 1 мг розчиняли в 1 мл 50 % ацетонітрилу.

Програмне забезпечення. Програмний комплекс OpenLAB CDS.

Програмний комплекс ChemBioOffice 2012.

Умови проведення ВЕРХ-МС дослідження: 1) ізократичний режим з використанням буферного розчину: А – H_2O (HCOOH 0,1 %) та розчину органічного модифікатора: В – CH_3CN (HCOOH 0,1 %) – від 50 % В; 2) колонка Zorbax SB-C18, 30 × 4,6 мм, 1,8 мкм; 3) температура колонки: 40 °С 2) швидкість потоку елюенту 0,4 мл/хв; 3) джерело іонів: електроспрей (API-ES); 4) SCAN режим реєстрації іонів 100-1000 m/z; 5) позитивна полярність; 6) швидкість газу-осушувача (азоту) – 10 л/хв; 7) напруга на капілярі 4000 В. Попередніми дослідженнями були визначені оптимальні умови роботи джерела іонізації.

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Подібно до мас-спектрів, отриманих у комірці зіткненням потрійного квадруполя, нами були визначені мас-спектри ізоніазиду в зоні дисоціації, індукованої зіткненням. Мас-спектри носять аналогічний характер.

Ізоніазид. На мас-спектрі ізоніазиду при напрузі на фрагментаторі 100 В спостерігаються піки з m/z 138,1 (основний – квазімолекулярний, протонувана молекула MH^+) та 139,1 (слабкий – ізотопний). При напрузі 200 В утворюється фрагментний іон з m/z 121,1 (основний) та 122,1 (ізотопний). Передбачувану реакцію фрагментації ізоніазиду наведено на рис. 2. При гетеролітичному розриву N-N зв'язку позитивний заряд залишається на амідному атомі нітрогену (вакантна орбіталь), який може створити ко-

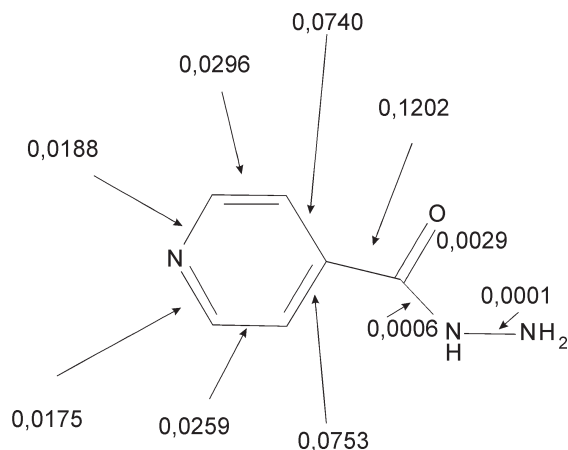


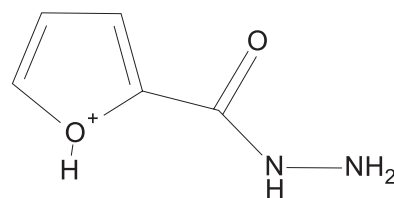
Рис. 3. Енергії зв'язків ізоніазиду (ккал/моль), розраховані за методом ММ2.

валентний зв'язок по донорно-акцепторному механізму з атомом кисню карбонілу, що містить неподілену електронну пару. Негативний заряд, що залишається на атомі нітрогену, який відривається, дозволяє утворити молекулу аміаку по реакції з протоном (рис. 1, 2).

На підставі аналізу результатів розрахунку по методу ММ2 енергій зв'язку спостерігаємо, що найслабшим є зв'язок між нітрогенами гідрозидної групи, що відповідає наведеній схемі фрагментації (рис. 3).

Фуран-2-карбогідразид. При напрузі на фрагментаторі 100 В утворюється квазімолекулярний (протонована молекула) іон з m/z 127,1 та іон з m/z 128,1 (ізотопний). При збільшенні напруги на фрагментаторі від 100 до 200 В інтенсивність сигналу знижується майже в 60 разів, тому ми можемо припустити, що квазімолекулярний іон значно руйнується, але при цьому інтерпретувати мас-спектр не уявляється доцільним (рис. 4, 5).

Порівнюючи з ізоніазидом, ми бачимо, що енергії зв'язків фуранового циклу фуран-2-карбогідрази-



127.050204 Da

Рис. 5. Структура моноіотопної маси квазімолекулярного іона фуран-2-карбогідразида.

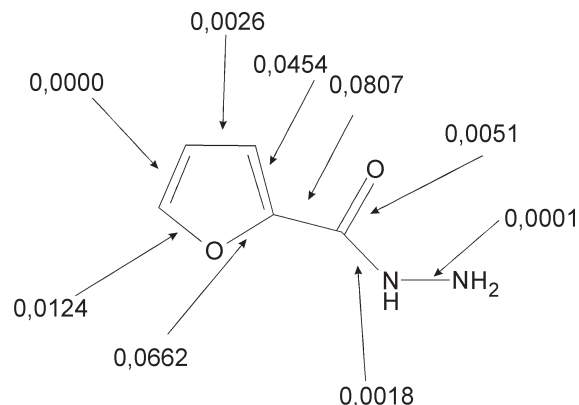


Рис. 6. Енергії зв'язків фуран-2-карбогідразида (ккал/моль), розраховані за методом ММ2.

ду значно менше, тому спостерігається руйнування цього циклу при 200 В (рис. 6).

2-Морфоліноацетогідразид. У мас-спектрі при напрузі на фрагментаторі 100 В спостерігається основний іон з m/z 160,1 (квазімолекулярний іон – протонована молекула). При напрузі на фрагментаторі 200 В цей пік значно зменшується, але утворюється фрагментований іон з m/z 100,2 (основний) та незначно інтенсивний іон з m/z 101,1 (ізотопний). Таким чином, відбувається руйнування зв'язку між карбонільним та метиленовим атомами карбону. На метиленовому атомі карбону залишається вільна ор-

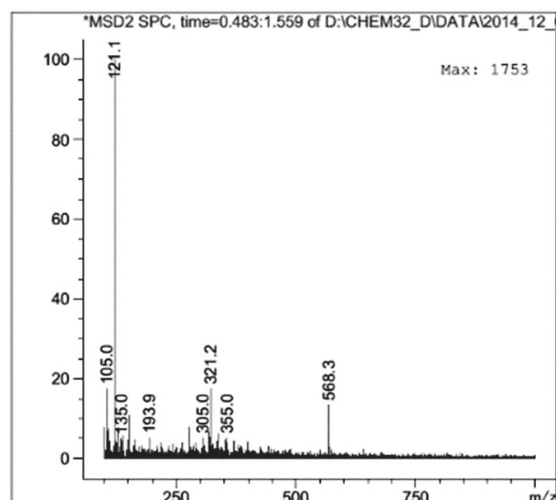
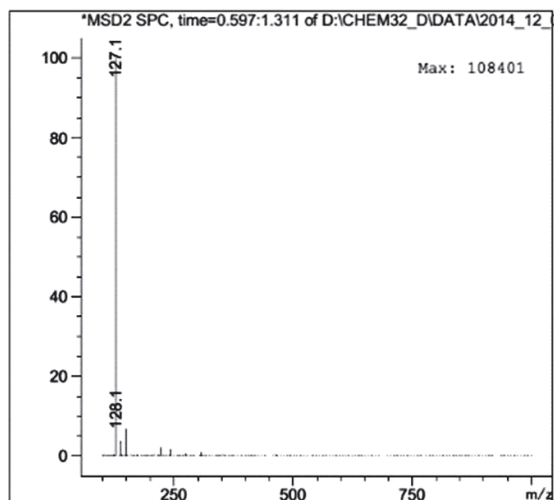


Рис. 4. Мас-спектри фуран-2-карбогідразида при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

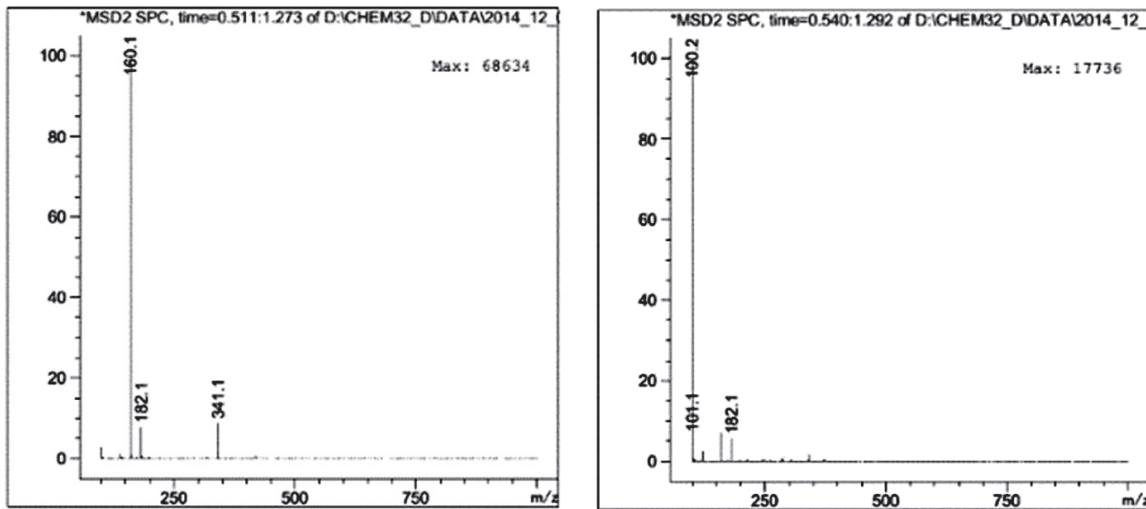


Рис. 7. Мас-спектри 2-морфоліноацетогідрозиду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

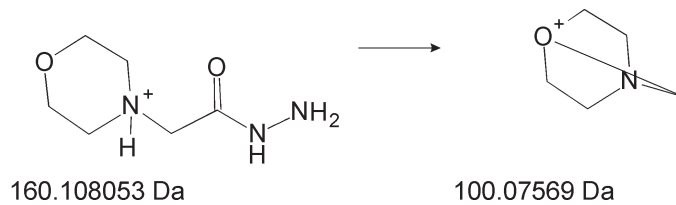


Рис. 8. Фрагментація 2-морфоліноацетогідрозиду та моноізотопні маси іонів.

біталь, тому він може створити ковалентний зв'язок із гетероциклічним атомом оксигену завдяки неподільній парі електронів за рахунок донорно-акцепторного механізму (рис. 7, 8).

Розрахунки енергій зв'язків показують, що зв'язки між гідрозидними нітрогенами, нітрогеном та карбоном карбонільної групи та між карбоном та оксигеном карбонільної групи слабші, тому відбувається руйнування цих зв'язків; і навпаки зв'язок між карбоном метиленової групи та нітрогеном морфолінового циклу дуже міцний, що відповідає збереженню цього зв'язку при напрузі 200 В (рис. 9).

2-Метоксибензогідрозид. На мас-спектрі при напрузі 100 В присутній квазімолекулярний іон MH^+ з m/z 167,1, а також іон з m/z 153,1, що створюється при деметилюванні квазімолекулярного іона. При напрузі 200 В квазімолекулярний іон повністю руйнується, що призводить до втрати гідрозидної групи та утворення іона з m/z 135,1, який, у свою чергу, при деметилюванні утворює іон з m/z 105,1 (рис. 10, 11).

При аналізі розрахунків енергії зв'язку можна стверджувати, що найслабшими є зв'язки між нітрогенами гідрозидної групи та нітрогеном і карбоном карбонілу, тому вони повинні руйнуватися в першу чергу. Це відповідає запропонованій схемі. Бензольний цикл повинен стабілізуватися за рахунок мезомерного ефекту бп-електронної хмари (рис. 12).

2-Ізонікотиніол-N-(2-метоксифеніл)гідрозин-1-карботіоамід. При напрузі на фрагментаторі 100 В

спостерігається квазімолекулярний іон з m/z 303,1 самої сполуки, а також квазімолекулярний іон 4-(2-метоксифенілу)-5-(піридин-4-іл)-2,4-дигідро-3H-1,2,4-триазол-3-тіону, який утворюється в результаті циклізації карботіоаміду з m/z 285,1. Крім того, спостерігається пік димерного іона з m/z 605,1. При напрузі 200 В з'являються декілька іонів. Пара іонів створюється при розриві зв'язку N-N з m/z 121,1 (утворення такого іона пояснено при опису фрагментації ізоніазиду) та з m/z 180,0. При розриві зв'язку між атомом нітрогену та атомом карбону тіоамідної групи утворюється іон з m/z 138,1 – квазімолекулярний іон, протонувана молекула ізоніазиду. З 1,2,4-три-

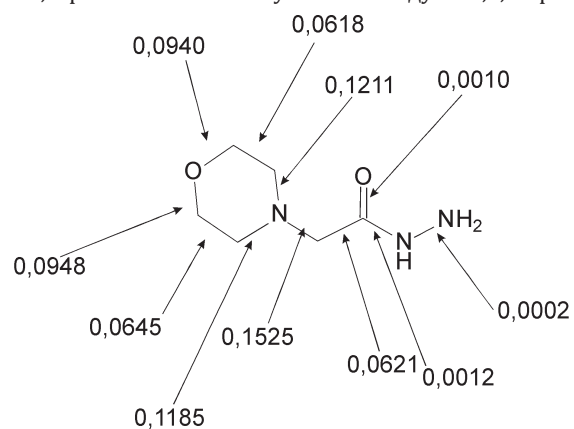


Рис. 9. Енергії зв'язків 2-морфоліноацетогідрозиду (ккал/моль), розраховані за методом MM2.

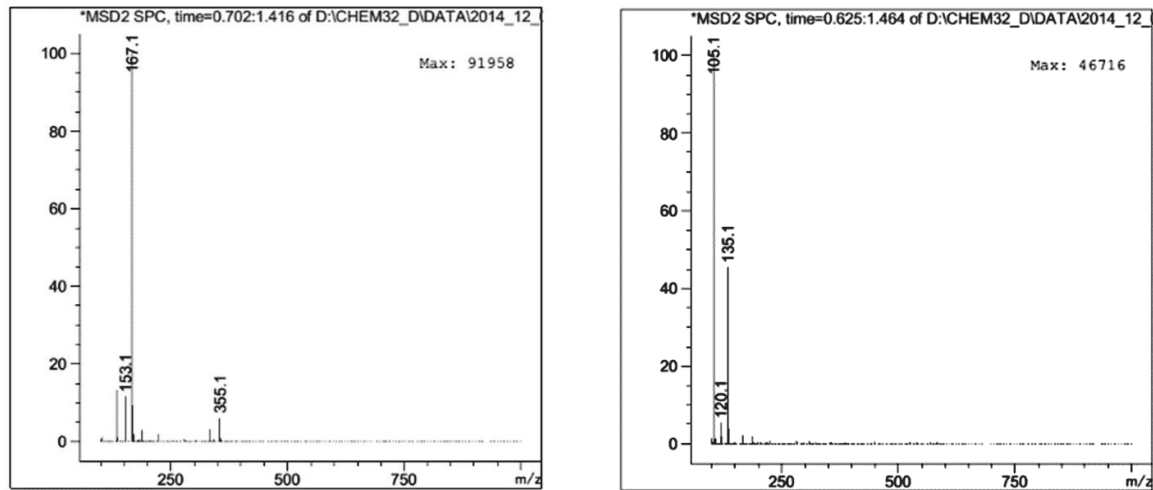


Рис. 10. Мас-спектри 2-метоксибензогідразиду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

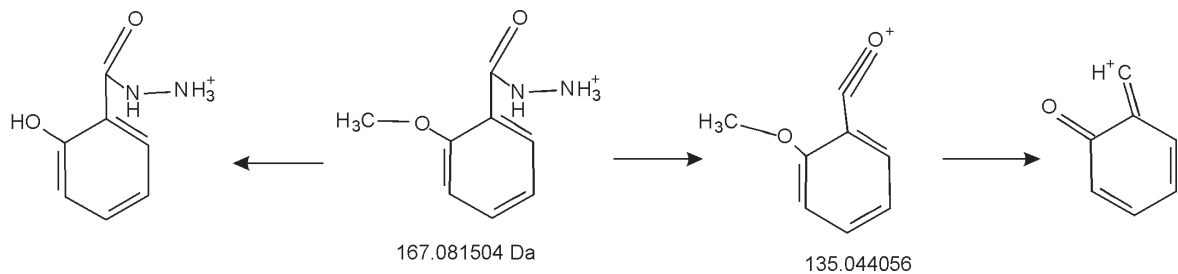


Рис. 11. Фрагментація 2-метоксибензогідразиду та моноізоотопні маси іонів.

азол-3-тіону утворюється іон з m/z 269,0 в результаті деметилювання, втрати гідрид-іона атомом сульфуру та можливого утворення циклу за рахунок донорно-акцепторного зв'язування сульфуру та нітрогену (рис. 13, 14).

При розгляді енергій зв'язків спостерігаємо, що найслабшими є зв'язок між нітрогенами гідрозидної групи, а також зв'язки в середині карбонілу та карботіоаміду. Тому насамперед відбувається руйнування зв'язків між нітрогенами та циклізація за рахунок створення зв'язків між нітрогеном гідрозидної гру-

пи та киснем карбонільної групи, а також між нітрогеном та сульфуром карботіоаміду (рис. 15).

2-(Фуран-2-карбоніл)-N-фенілгідрозин-1-карботіоамід. При 100 В спостерігаються квазімолекулярний іон з m/z 262,1 та іон з m/z 127,1 (протонована молекула фуран-2-карбогідразиду), які утворюються в результаті розриву зв'язку між нітрогеном та тіоамідним карбоном. Також утворюється димерний іон з m/z 523,1. При 200 В спостерігається продукт фрагментації з m/z 136,0. Крім того, з'являється тримерний іон з m/z 784,1 (рис. 16, 17).

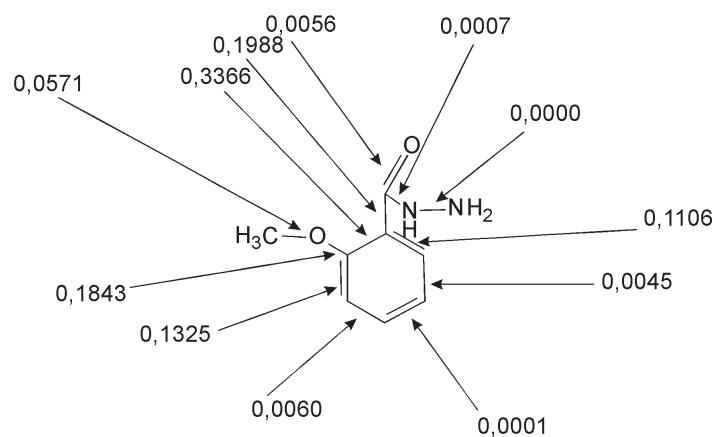


Рис. 12. Енергії зв'язків 2-метоксибензогідразиду (ккал/моль), розраховані за методом ММ2.

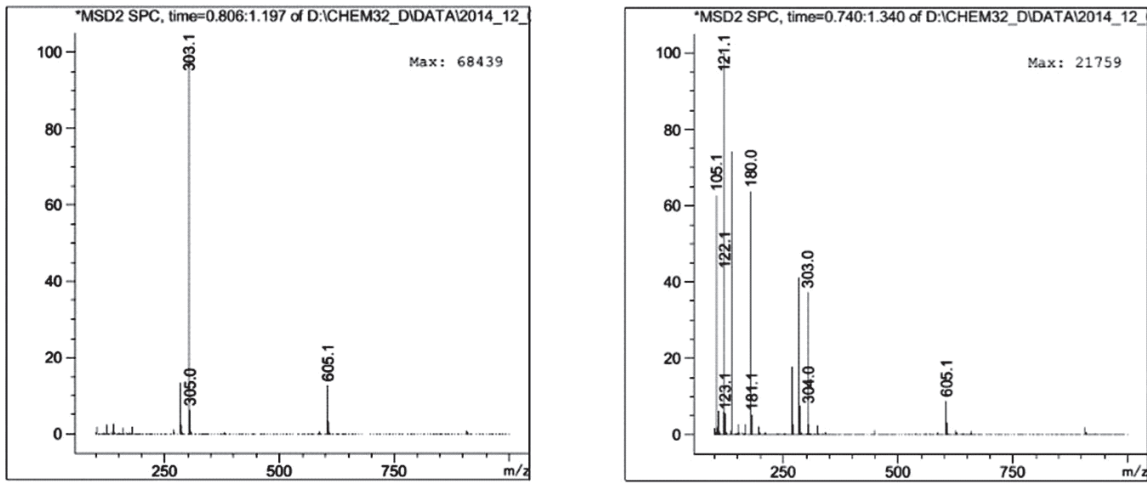


Рис. 13. Мас-спектри 2-ізонікотиноїл-N-(2-метоксифеніл)гідрозин-1-карботіоаміду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

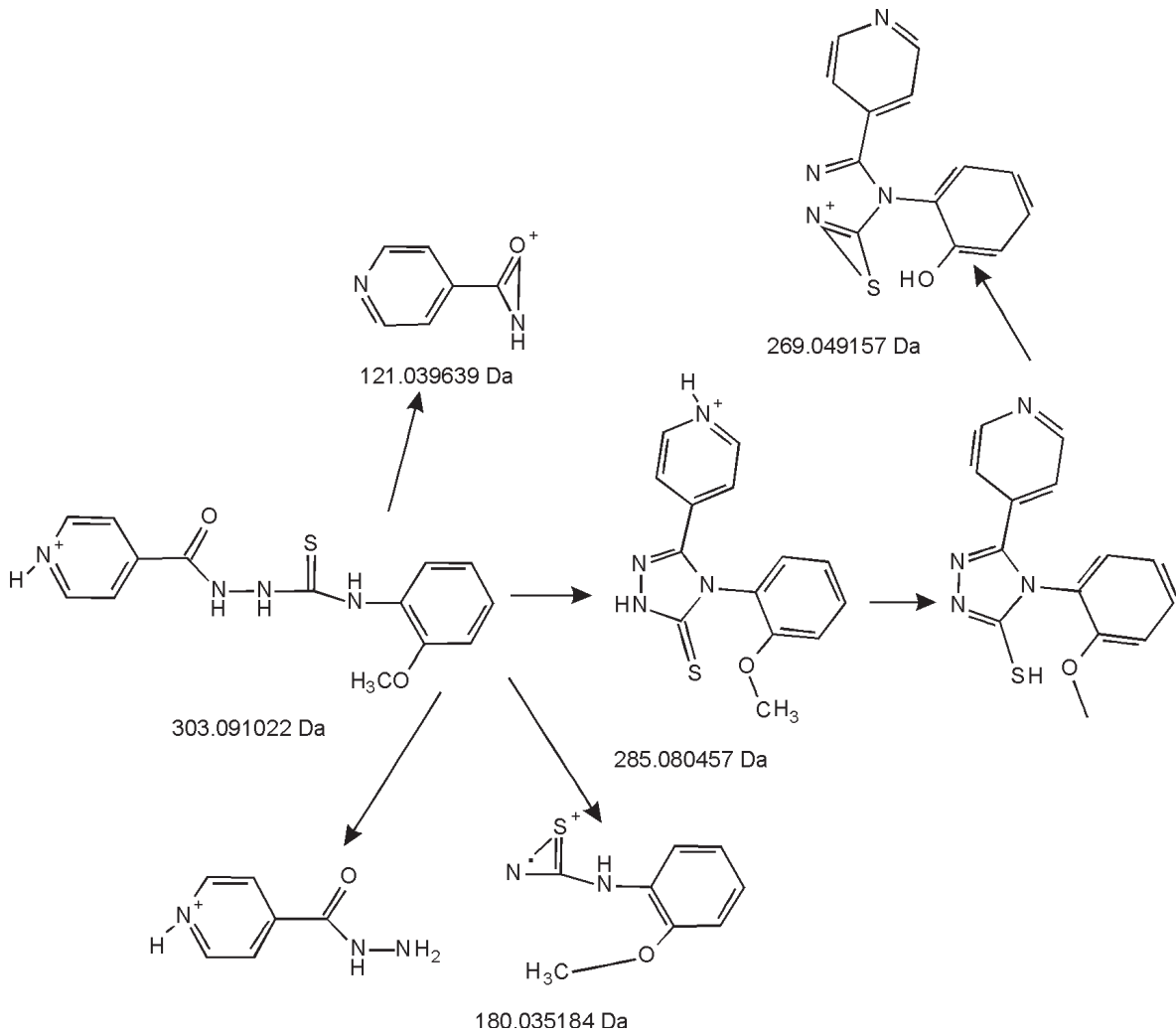


Рис. 14. Фрагментація 2-ізонікотиноїл-N-(2-метоксифеніл)гідрозин-1-карботіоаміду та моноіотопні маси іонів.

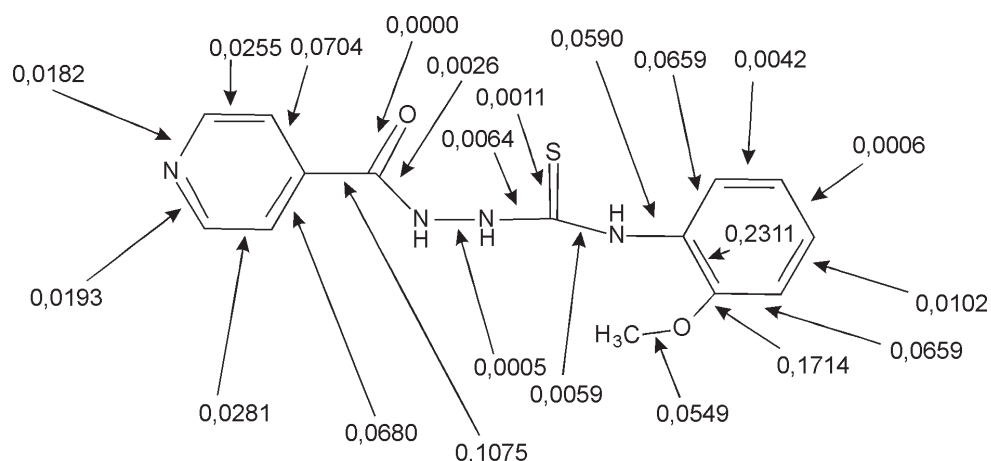


Рис. 15. Енергії зв'язків 2-ізонікотиноїл-*N*-(2-метоксифеніл)гідразин-1-карботіоаміду (ккал/моль), розраховані за методом MM2.

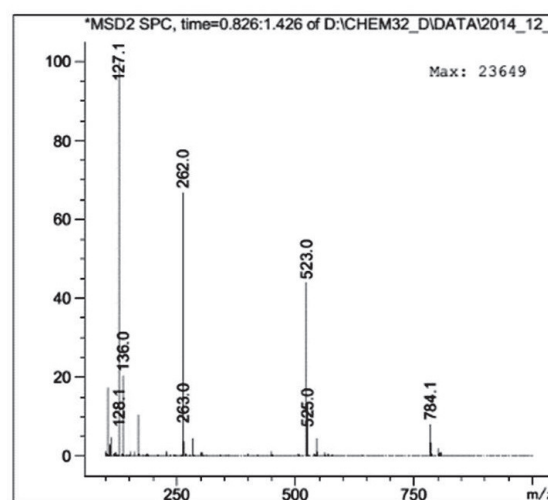
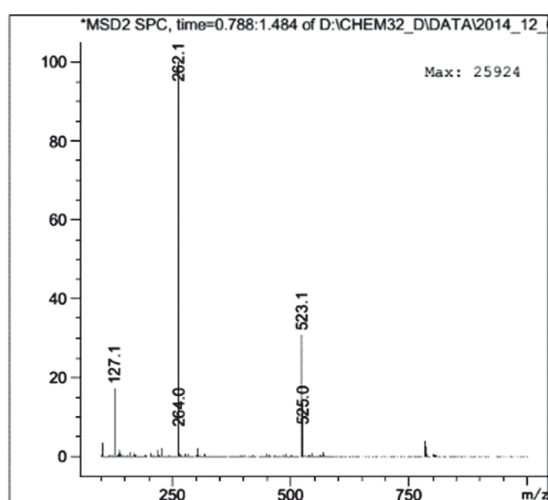


Рис. 16. Мас-спектри 2-(фуран-2-карбоніл)-*N*-фенілгідразин-1-карботіоаміду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

Руйнування зв'язків фуран-2-карбогідразидної частки молекули виникає, в першу чергу, тому, що вони найслабші (рис. 18).

2-(2-Морфоліноацетил)-*N*-фенілгідразин-1-карботіоамід. При 100 В утворюється квазімолекуляр-

ний іон речовини MH^+ з m/z 295,1, а також квазімолекулярний іон продукту циклізації речовини – 5-(морфолін-4-ілметил)-4-феніл-2,4-дигідро-3Н-1,2,4-триазол-3-тіону. Крім того, створюється димерний іон з m/z 589,2. При 200 В з'являються продукти розпаду

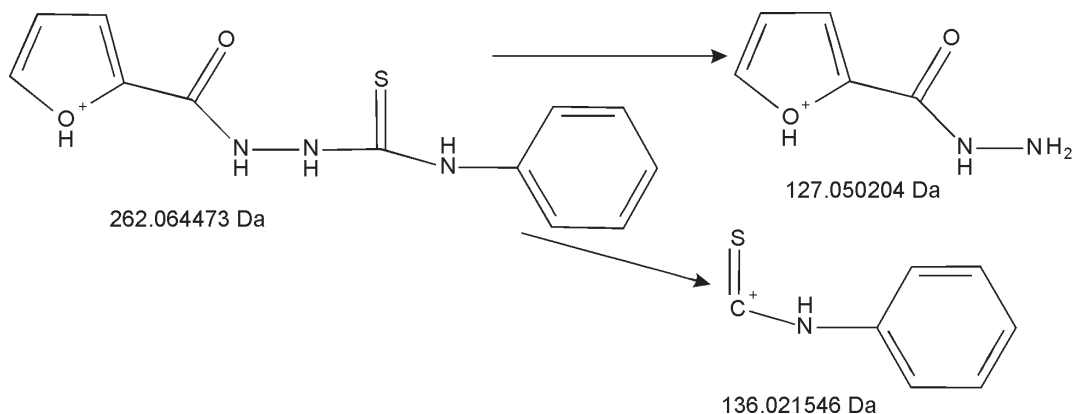


Рис. 17. Фрагментація 2-(фуран-2-карбоніл)-*N*-фенілгідразин-1-карботіоаміду та моноізотопні маси іонів.

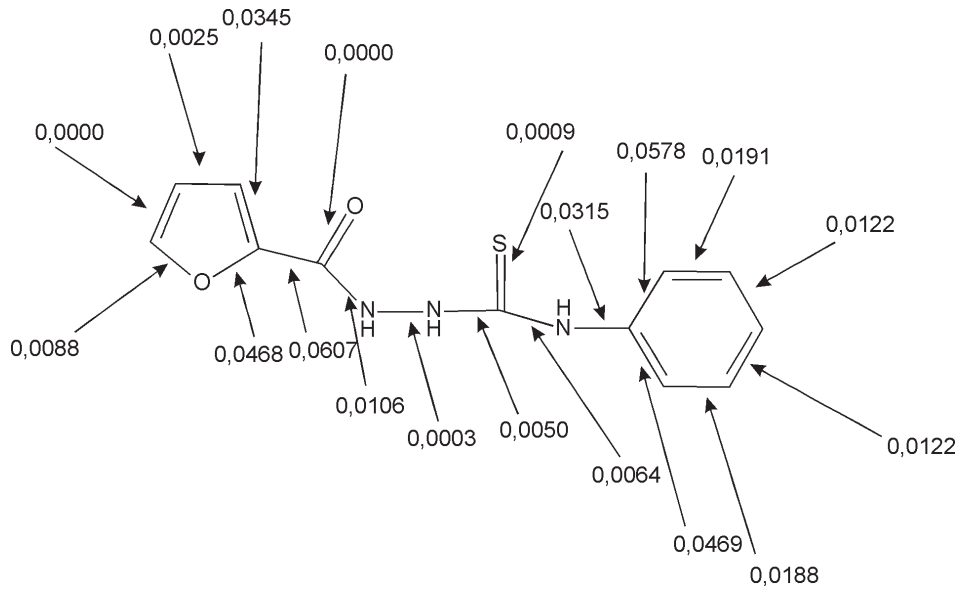


Рис. 18. Енергії зв'язків (ккал/моль) 2-(фуран-2-карбоніл)-N-фенілгідразин-1-карботіоаміду, розраховані за методом MM2.

квазімолекулярного іона. При розриву зв'язку між феніламідним нітрогеном та атомом сульфуру створюється іон з m/z 202,1. При розриву зв'язку між гідрозидним нітрогеном та атомом сульфуру формується іон з m/z 160,1 (квазімолекулярний іон 2-морфоліноацетогідрозиду), який частково руйнується зі створенням m/z 100,1 (рис. 19, 20) (утворення такого іона пояснено при опису фрагментації 2-морфоліноацетогідрозиду).

Енергія зв'язків карбогідрозидної, карботіоамідної груп найменша, тому руйнуються насамперед ці групи.

N-Метил-2-(2-морфоліноацетил)гідразин-1-карботіоамід. При напрузі 100 В спостерігається пік з m/z 233,1 (квазімолекулярний іон MH^+). Цей іон ство-

рює квазімолекулярний іон 2-морфоліноацетогідрозиду з m/z 160,1, який при 200 В утворює іон з m/z 100,1 (рис. 22, 23) (утворення такого іона розглянуто при поясненні фрагментації 2-морфоліноацетогідрозиду).

Аналогічно попередньому морфолінацетилгідразинкарботіоаміду спостерігається, що зв'язки карботіоамідної та карбогідрозидної груп характеризуються меншою стійкістю, ніж зв'язки в морфоліновому циклі. Тому вони руйнуються у відмінності від морфолінового фрагменту.

2-(2-Метоксибензоіл)гідразин-1-карботіоамід (рис. 25, 26). При напрузі 100 В спостерігається квазімолекулярний іон MH^+ з m/z 226,1, який утворює іон з m/z 134,9 в результаті розриву зв'язку між карбонільним атомом карбону та гідрозидним нітроге-

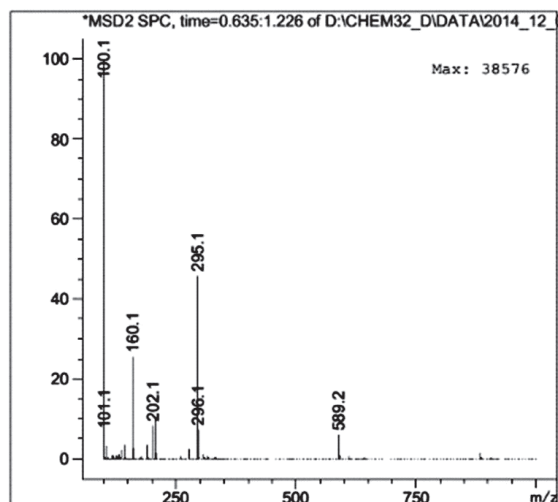
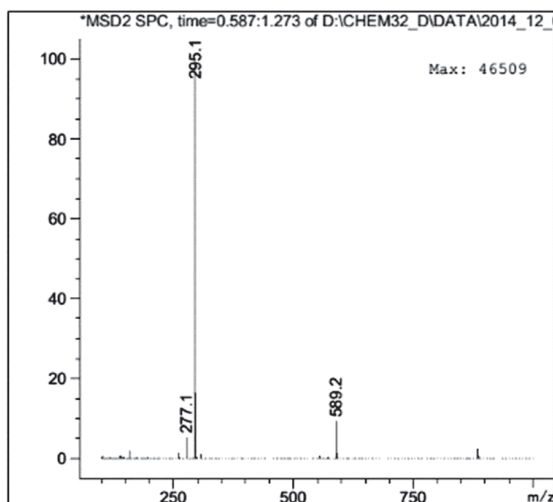


Рис. 19. Мас-спектри 2-(2-морфоліноацетил)-N-фенілгідразин-1-карботіоаміду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

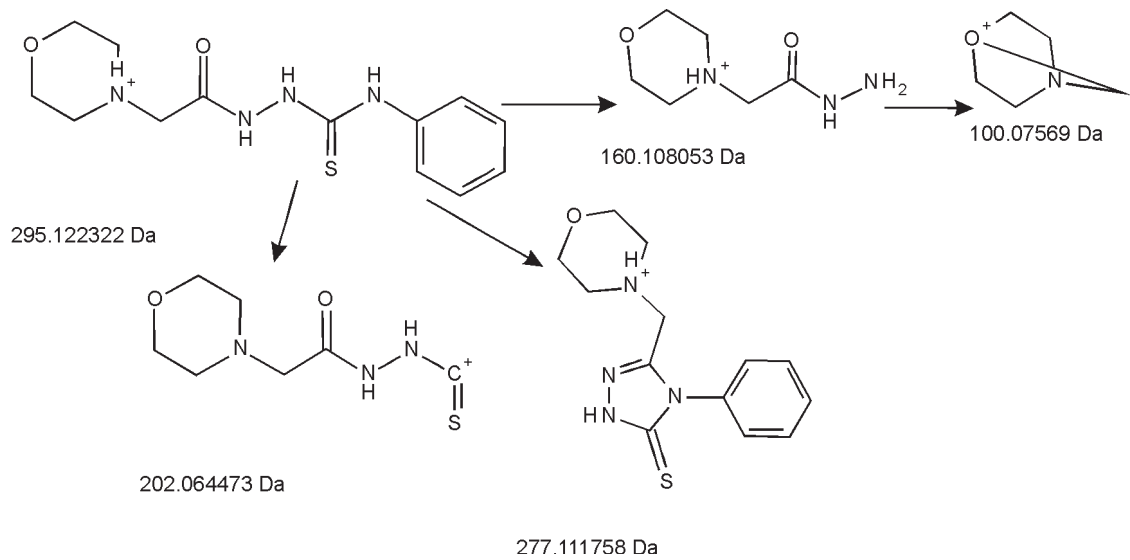


Рис. 20. Фрагментація 2-(2-морфоліноацетил)-*N*-фенілгідразин-1-карботіоаміду та моноізотопні маси іонів.

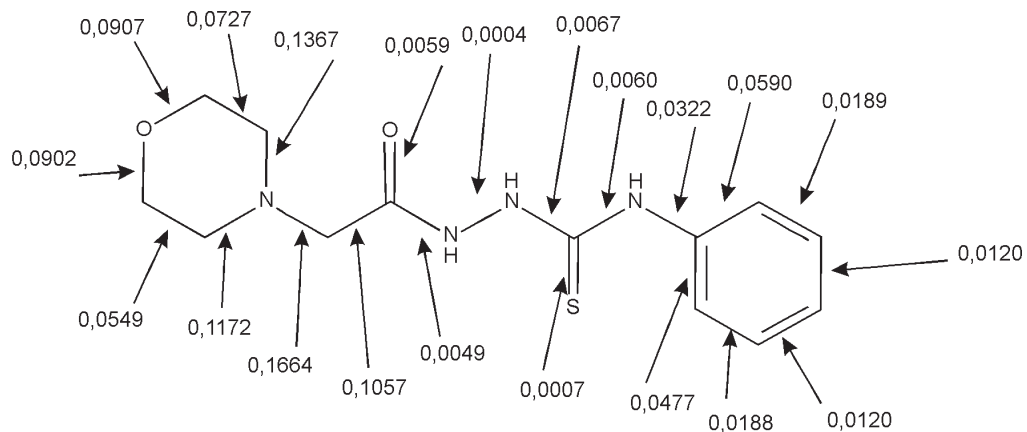


Рис. 21. Енергії зв'язків (ккал/моль) 2-(2-морфоліноацетил)-*N*-фенілгідразин-1-карботіоаміду, розраховані за методом MM2.

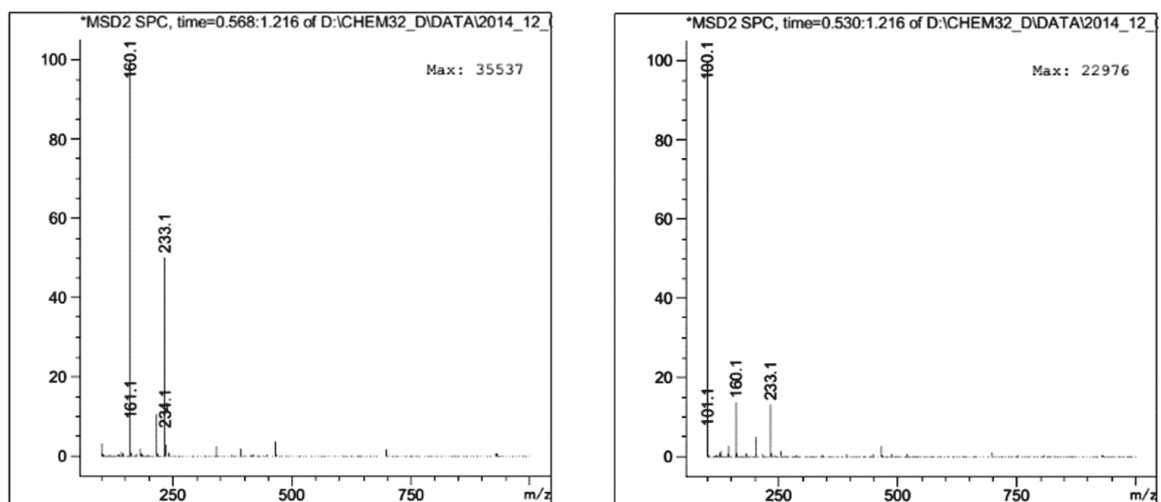


Рис. 22. Мас-спектри *N*-метил-2-(2-морфоліноацетил)гідразин-1-карботіоаміду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

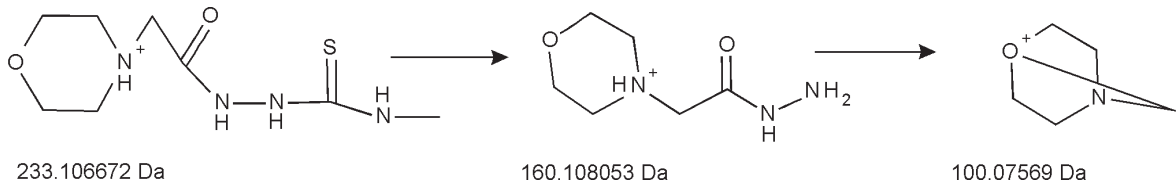


Рис. 23. Фрагментація *N*-метил-2-(2-морфоліноацетил)гідразин-1-карботіоаміду та моноізотопні маси іонів.

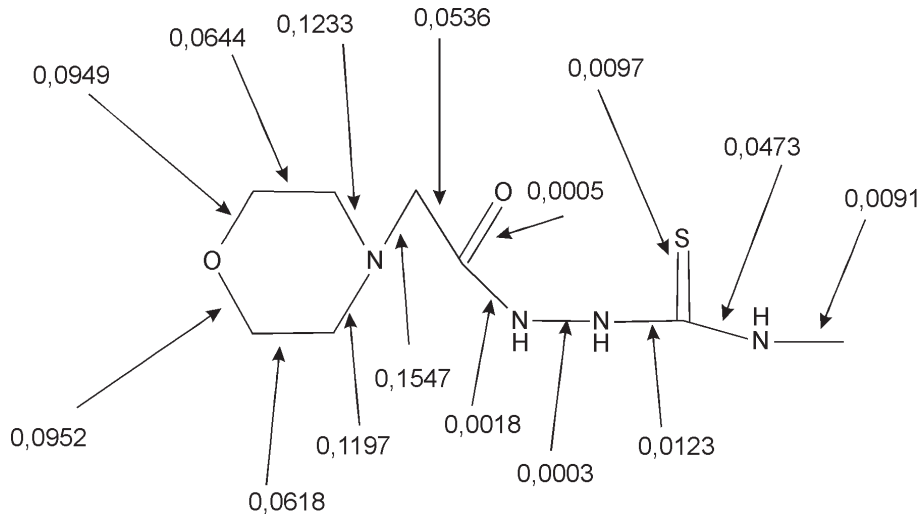


Рис. 24. Енергії зв'язків (ккал/моль) *N*-метил-2-(2-морфоліноацетил)гідразин-1-карботіоаміду, розраховані за методом ММ2.

ном. Іон з m/z 267,0 вважаємо аддуктом протонованої молекули з ацетонітрилом. Крім того, утворюється димерний іон з m/z 451,1, а також тримерний іон з m/z 678,0. При напрузі 200 В зникає іон аддук-

ту з ацетонітрилом, відрізняється також тримерний іон – його $m/z = 676,1$.

Зв'язки бензольного циклу стабілізуються за рахунок бп-електронного супряження, зв'язки карбо-

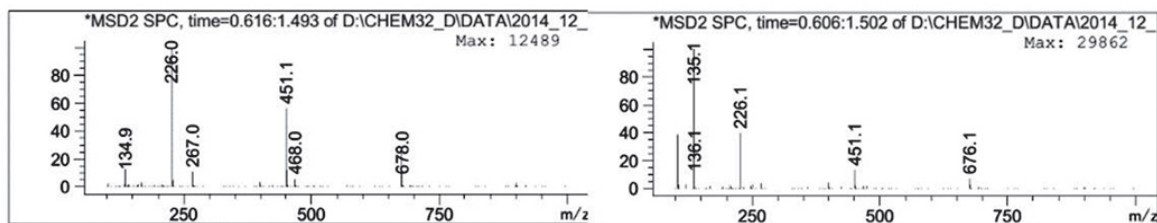


Рис. 25. Мас-спектри 2-(2-метоксибензоїл)гідразин-1-карботіоаміду при різних умовах фрагментації (100, 200 В).

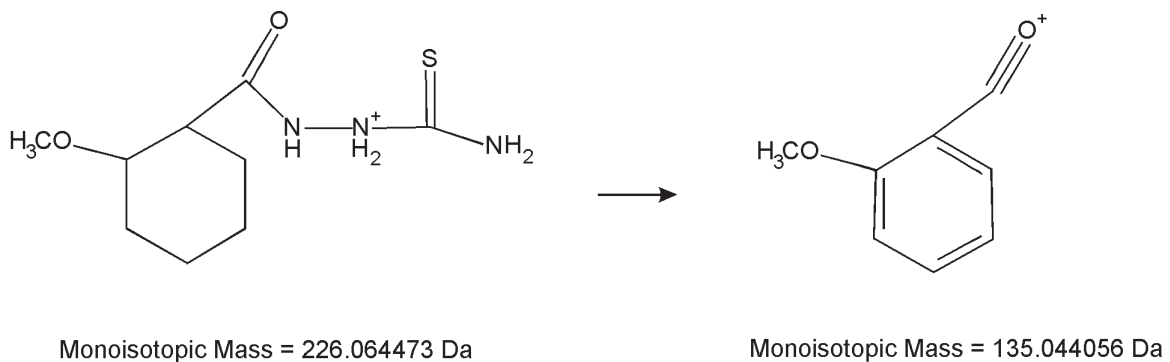


Рис. 26. Фрагментація 2-(2-метоксибензоїл)гідразин-1-карботіоаміду.

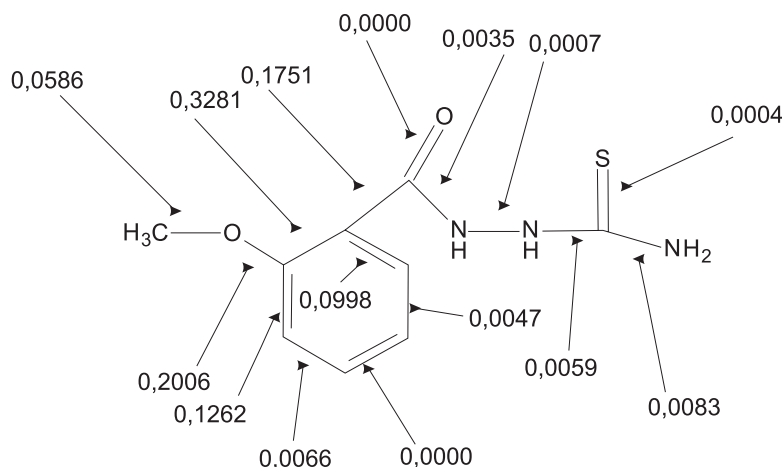


Рис. 27. Енергії зв'язків (ккал/моль) 2-(2-метоксибензоїл)гідразин-1-карботіоаміду, розраховані за методом ММ2.

гідразидної та карботіоамідної груп є менш стійкими, що відповідає схемі фрагментації (рис. 27).

ВИСНОВКИ

1. Вперше інтерпретовані мас-спектри ЕСІ ряду гідразидів та карботіоамідів кислот, попередників у синтезі субстанцій потенційних лікарських засобів з 1,2,4-триазоловим фрагментом.
2. У результаті мас-спектрометричних досліджень встановлені загальні та характерні шляхи дисоціації розглянутих сполук, запропоновані та обговорені реакції утворення характеристичних іонів.
3. Вироблено співвідношення мас-спектрів вивчених сполук з їх будовою.
4. Таким чином, взагалі карботіоаміди розпадаються до гідразидів та продуктів розпаду гідразидів. Крім того, існують специфічні для кожного карботіоаміду шляхи фрагментації.
5. Енергії зв'язків карбогідразидних та карботіоамідних груп характеризуються найменшими значеннями, тому вони руйнуються в першу чергу.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ ІНФОРМАЦІЇ

1. Варинський Б. О. Оптимізація умов детектування ряду 1,2,4-триазол-3-іл-тіоацетатних кислот та їх солей методом ВЕРХ-ЕСІ-МС / Б. О. Варинський // Одеський мед. журн. – 2015. – № 4. – С. 17-21.
2. Варинський Б. О. Дослідження характеристик утримування ряду гідразидів карбонових кислот і гідразинокарботіоамідів, вихідних речовин при синтезі субстанцій для виготовлення лікарських засобів методом ВЕРХ-УФ-ЕСІ-МС / Б. О. Варинський // Проблеми військової охорони здоров'я. Зб. наук. праць Української військово-медичної академії. – 2015. – № 43. – С. 320-330.
3. Варинський Б. О. Розвиток ВЕРХ-МС як методу оцінювання чистоти і підтвердження молекулярної маси нових біоактивних речовин / Б. О. Варинський // Актуальні питання фармац. і мед. науки та практики. – 2014. – № 2. – С. 85-88.
4. Agbokponto J. E. Sensitive liquid chromatography-mass spectrometry determination of isoniazid: elimination of matrix effects / [J. E. Agbokponto, C. Gong, A. G. Assanhou et al.] // Afr. J. Pharm. Pharmacol. – 2014. – № 8. – P. 1228-1234.
5. Chen X. A liquid chromatography/tandem mass spectrometry method for the simultaneous quantification of isoniazid and ethambutol in human plasma / [X. Chen, B. Song, H. Jiang et al.] // Rapid Commun. Mass Spectrom. – 2005. – № 19. – P. 2591-2596.
6. Huang L. Development and validation of a hydrophilic interaction liquid chromatography-tandem mass spectrometry method for determination of isoniazid in human plasma / [L. Huang, F. Marzan, A. L. Jayewardene et al.] // J. of Chromatography B. – 2009. – № 877. – P. 285-290.
7. Li A. C. Direct injection of solid-phase extraction eluents onto silica columns for the analysis of polar compounds isoniazid and cetirizine in plasma using hydrophilic interaction chromatography with tandem mass spectrometry / [A. C. Li, H. Junga, W. Z. Shou et al.] // Rapid Commun. Mass Spectrom. – 2004. – № 18. – P. 2343-2350.
8. Song S. H. Simultaneous determination of first-line anti-tuberculosis drugs and their major metabolic ratios by liquid chromatography/tandem mass spectrometry / [S. H. Song, S. H. Jun, U. K. Park et al.] // Rapid Commun. Mass Spectrom. – 2007. – № 21. – P. 1331-1338.

УДК 543.51-044.967:547.288.3]-047.23**Б. А. Варинский, А. Г. Каплаушенко, Н. Н. Малецкий, Ю. В. Тимошик****ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО РАСПАДА ГИДРАЗИДОВ НЕКОТОРЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ И ИХ СООТВЕТСТВУЮЩИХ ГИДРАЗИНОКАРБОТИОАМИДОВ**

Исследована фрагментация в ионном источнике (ионизация электрораспылением) в ряду гидразидов и гидразинокарботиоамидов кислот, исходных веществ при синтезе солей 1,2,4-триазолилтиоацетатных кислот – субстанций потенциальных лекарственных препаратов при ВЭЖХ-МС при 100 В и 200 В. Проанализированы масс-спектры соответствующих соединений. Предложены закономерности распада этих соединений.

Ключевые слова: масс-спектрометрия; высокоэффективная жидкостная хроматография; ионизация в электроспрее; гидразиды и гидразинокарботиоамиды кислот

UDC 543.51-044.967:547.288.3]-047.23**B. O. Varynskyi, A. G. Kaplaushenko, M. M. Maletskyi, Yu. V. Timoshyk****STUDY PATTERNS OF MASS SPECTROMETRIC DECAY HYDRAZIDE CERTAIN ORGANIC ACIDS AND THEIR CORRESPONDING HYDRAZINECARBOTHIAMIDS**

The fragmentation among hydrazides of acids hydrazinecarbotioamids, starting materials in the synthesis of salts of 1,2,4-triazolythioacetate acids – substances of potential drugs in HPLC-MS at 100 V and 200 V was investigated in the ion source (electrospray ionization). The mass spectra of corresponding compounds was analyzed. The pattern of these compounds decay was suggested.

Key words: mass spectrometry; high performance liquid chromatography; ionization in electrosprey; hydrazides and hydrazinecarbothioamids of acids

Адреса для листування:
03041, м. Київ, вул. Героїв Оборони, 15.
Національний університет біоресурсів
і природокористування України

Надійшла до редакції 21.10.2015 р.