

УДК 621.384.833:544.15

ДИССОЦИАТИВНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ ГУМИНОВЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ¹

Асфандиаров Н.Л., Пшеничнюк С.А., Нафикова Е.П., Рахмеев Р.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: n.asfandiarov@gmail.com*

Гуминовые вещества (ГВ) природного происхождения являются продуктами разложения органики в живой природе и имеют огромное значение для сельского хозяйства, почвоведения, ботаники и агрономии. Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов (ОИ) исследованы молекулы 2,5- и 2,6-дигидроксиацетофенона относящиеся к модельным соединениям ГВ. Из данных о временах жизни молекулярных ОИ оценена величина адиабатического сродства к электрону. Анализ каналов распада молекулярных ОИ на стабильные фрагменты, использованием результатов квантово-химических расчетов в приближении ТФП, позволил определить наиболее вероятные структуры осколочных ионов и соответствующих им нейтральных фрагментов. Структуры исследованных молекул приведены на рис. 1-2.

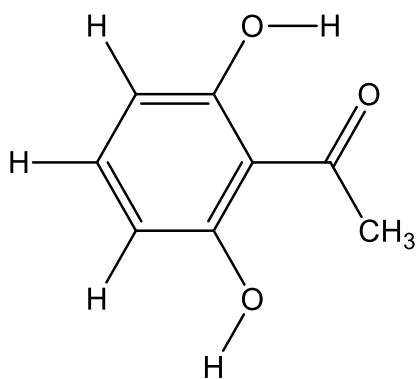


Рис. 1. 2,6-дигидроксиацетофенон

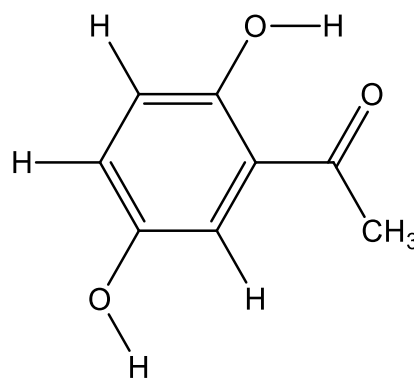


Рис. 2. 2,5-дигидроксиацетофенон

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда, проект № 18-03-00179