

## СПОСОБЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ МАСС-СПЕКТРОВ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ<sup>1</sup>

Легков М.А.<sup>а</sup>, Дьячков А.В.<sup>а</sup>, Хатымов Р.В.<sup>б</sup>

<sup>а</sup>*ВА РХБЗ, г. Кострома, ул. Горького, 16, dsl\_8@mail.ru*

<sup>б</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН.*

Прогнозирование масс-спектров органических соединений является важной и актуальной задачей. Такая возможность позволяет создавать базы данных масс-спектров соединений без их синтеза. Наличие баз данных масс-спектров значительно ускоряет процесс идентификации, повышает его надежность и достоверность.

При прогнозировании масс-спектров положительных ионов электронной ионизации исследователям приходится учитывать множество факторов, влияющих на процесс фрагментации. Критерием качества прогнозных масс-спектров является величина сходимости по прямому и обратному поиску между рассчитанным и экспериментальным масс-спектром, вычисленная по алгоритмам NIST. В настоящее время для известных алгоритмов и программ прогнозирования величина сходимости с экспериментальными масс-спектрами положительных ионов не превышает 600 ед.

Авторами для ряда фосфорсодержащих соединений проведено теоретическое прогнозирование экспериментальных масс-спектров отрицательных ионов, полученных с помощью ГХ-МС. Спрогнозированные масс-спектры компоновались двумя способами: обобщением экспериментальных данных и на основании проведенных квантово-химических расчетов. Величина сходимости рассчитанных масс-спектров составила более 800 ед., что показывает высокую надежность предложенных способов прогнозирования.

---

<sup>1</sup> Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант 14-02-97028\_p\_Поволжье\_a).