

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA



**ESPECTROMETRIA DE MASAS DE TRANS - 2, 4 - DINITRO
ESTILBENOS (2'), (3') y (4'), MONO SUBSTITUIDOS**

ROSA ZUGAZAGOITIA HERRANZ
QUIMICO

1977



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

AB Tesis 1977
CO M-~~409~~
ALMA _____
ROC 413
• _____



QUÍMICA

ESTA TESIS SE REALIZO EN EL DEPARTAMENTO DE INVESTIGACION
EN ESPECTROMETRIA DE MASAS DEL INSTITUTO DE QUIMICA DE
LA UNAM, BAJO LA DIRECCION DEL DR. EDUARDO CORTES CORTES.

C O N T E N I D O

INTRODUCCION

ANTECEDENTES Y OBJETIVO

PARTE EXPERIMENTAL

PARTE EXPERIMENTAL

DISCUSION DE ESPECTROS

CONCLUSIONES

BIBLIOGRAFIA

INTRODUCCION

INTRODUCCION 1-4

La Espectrometría de Masas constituye una de las técnicas más modernas utilizadas por los químicos orgánicos para el análisis de compuestos tanto desde el punto de vista analítico como estructural.

El principio de la Espectrometría de Masas se puede remontar a 1898, cuando Wien demostró que un rayo de iones positivos podía ser desviado de su trayectoria por medio de campos magnéticos y eléctricos; en 1910, Thomson construyó el primer instrumento capaz de separar y analizar los iones positivos producidos por descargas eléctricas en gases, de acuerdo con su relación de masa a carga (m/e).

Más tarde, Aston y Dempster, separadamente, construyeron espectrógrafos de masas, con los que pudieron medir con gran precisión la masa y la abundancia relativa de los isótopos de los elementos analizados.

Poco a poco estos aparatos se fueron perfeccionando, haciendo variaciones en la distribución de los campos eléctrico y magnético, hasta llegar a los espectrómetros de masas de doble y simple foco, que se conocen actualmente.

Es importante señalar la diferencia en principios de operación y resultados entre espectrógrafo y espectrómetro de masas.

Espectrómetro de masas: la corriente de iones se detecta eléctricamente y la señal se amplifica electrónicamente antes de registrarse.

Espectrógrafo de masas: el rayo de iones se detecta y registra fotográficamente.

Existen diferentes tipos de espectrómetros de masas; las partes básicas de que constan todos ellos son las siguientes:



Sistema introductor.- El sistema utilizado para introducir una muestra al espectrómetro de masas depende de las propiedades de la sustancia.

Fuente de iones o cámara de ionización.- Es la región donde ocurre la ionización de la muestra al bombardearla con electrones energéticos (70 - 75 eV), emitidos por un filamento incandescente de renio o de tungsteno. Los iones salen de esta cámara a través de un "slit" y son acelerados por voltajes variables, hasta la zona de separación y análisis.

Separación de iones.- La separación de iones de acuerdo con su relación de masa a carga (m/e), se lleva a cabo con un campo eléctrico y uno magnético, en un espectrómetro de doble foco, y con un campo magnético en un espectrómetro de simple foco.

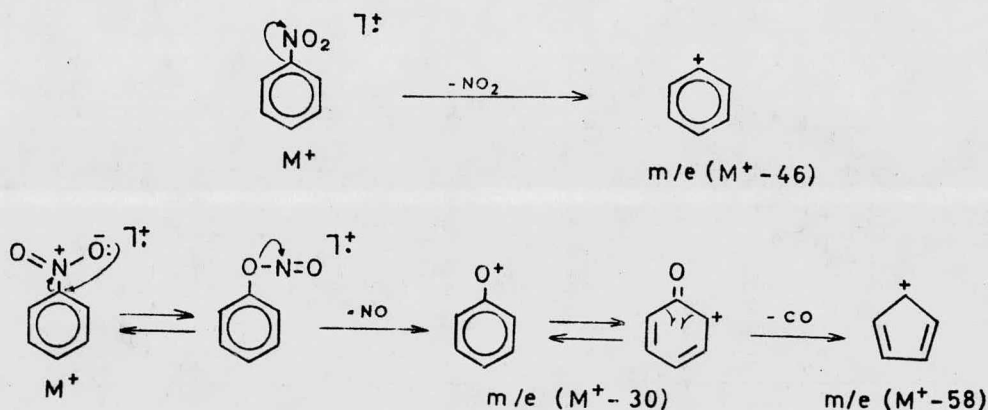
Detección y registro de iones.- Los iones ya separados llegan a un sistema de dinodos, donde se produce una señal eléctrica cuya intensidad es proporcional a la abundancia de los iones. Las señales eléctricas son amplificadas y llevadas al graficador.

El espectro así obtenido se interpreta para caracterizar el compuesto analizado.

ANTECEDENTES Y OBJETIVO

ANTECEDENTES Y OBJETIVO

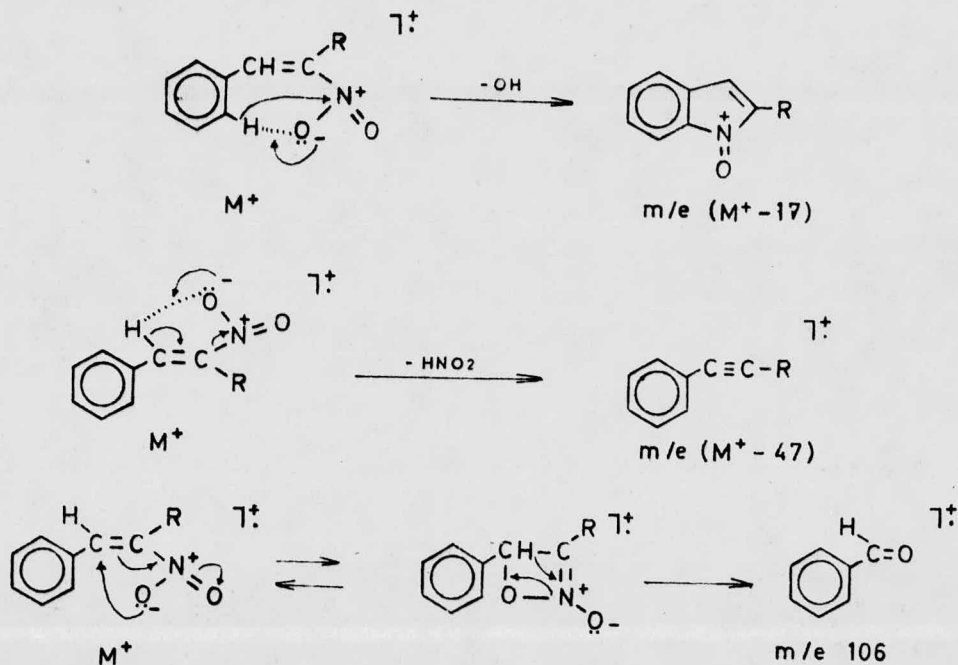
Los espectros de masas de los compuestos nitro-aromáticos^{3,5} presentan como fragmentación característica la pérdida del grupo NO₂ a partir del ion molecular dando lugar a la formación del fragmento de m/e (M⁺ - 46); también es característica la pérdida de NO, que resulta después de un rearrreglo del ion molecular, para formar el ion de m/e (M⁺ - 30) que pierde CO y se origina el fragmento de m/e (M⁺ - 58). Esquema 1.



ESQUEMA 1

En compuestos en los que el grupo nitro puede interactuar con algún protón, como en el caso de los derivados del *p*-nitro-estireno^{5,6}, además de los fragmentos característicos de m/e (M⁺ - 46), m/e (M⁺ - 30) y m/e (M⁺ - 58), se observa la aparición de fragmentos de m/e (M⁺ - 17), m/e (M⁺ - 47), así como la aparición

de un fragmento aldenídico. Esquema 2.



ESQUEMA 2

En un estudio sobre Espectrometría de Masas de *trans*-estilbenos monosustituidos,⁷ se observa que todos los compuestos siguen las fragmentaciones características de los grupos funcionales sustituyentes y del estilbeno, sin embargo, en el caso del 2-nitro-estilbeno aparecen en forma muy poco abundante los fragmentos de $m/e (M^+ - 46)$, $m/e (M^+ - 30)$ y $m/e (M^+ - 58)$ y se observa la formación de $m/e (M^+ - 17)$, $m/e (M^+ - 29)$ y de nuevos fragmentos, para los que se proponen estructuras en las que interviene el grupo nitro.

Considerando que la importancia primordial de la nueva fragmentación estaba

X

guiada por el grupo nitro de la posición 2 del estilbena, se sintetizaron una serie de derivados del trans-2,4-dinitro-estilbena y se hizo su estudio en Espectrometría de Masas para establecer su patrón de fragmentación.

PARTE EXPERIMENTAL

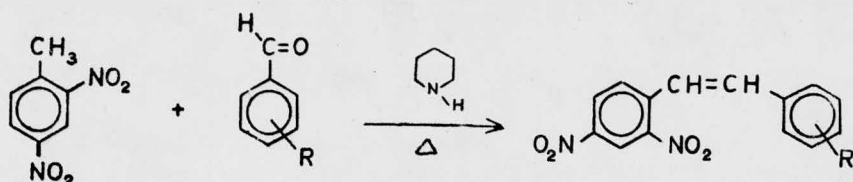
A).- OBTENCION DE COMPUESTOS

B).- ANALISIS

P A R T E E X P E R I M E N T A L

A).- OBTENCIÓN DE COMPUESTOS^{8,9,10}

La síntesis de los compuestos se llevó a cabo según el siguiente esquema general:



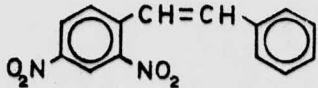
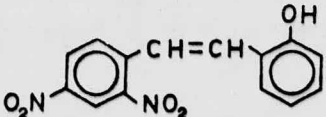
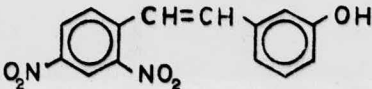
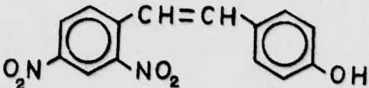
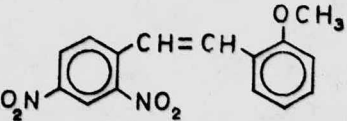
T E C N I C A

En un matraz de bola con un agitador magnético se ponen cantidades equimoleculares de 2,4-dinitrotolueno y del aldehído correspondiente, según el compuesto que se vaya a sintetizar; se agrega benceno y unas gotas de piperidina, se coloca un refrigerante de agua en posición de reflujo y se calienta con canasta hasta la aparición de cristales colcridos.

Tanto la temperatura como el tiempo de reacción y la cantidad de benceno variaron considerablemente de una reacción a otra; para cada una de ellas se buscaron las condiciones óptimas. En los casos en que el aldehído utilizado era líquido, se prescindió de la adición de disolvente.

La mayoría de los productos se purificó por cristalización con benceno y los demás, por cromatografía preparativa, utilizando placas de gel de sílice.

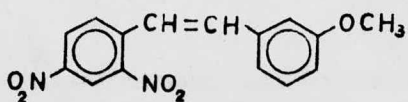
Los productos obtenidos fueron los siguientes:

PRODUCTO	TIEMPO DE REACCION	RENDIMIENTO
 2,4-dinitro-estilbeno	2 horas	36 %
 2,4-dinitro-2'-hidroxi-estilbeno	2.5 horas	24 %
 2,4-dinitro-3'-hidroxi-estilbeno	4.0 horas	56 %
 2,4-dinitro-4'-hidroxi-estilbeno	5.0 horas	10 %
 2,4-dinitro-2'-metoxi-estilbeno	2.0 horas	31 %

PRODUCTO

TIEMPO DE REACCION

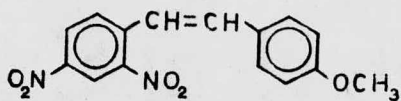
RENDIMIENTO



0.0 horas

40 %

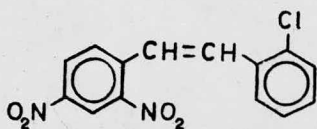
2,4-dinitro-3'-metoxi-estilbeno



1.0 hora

68 %

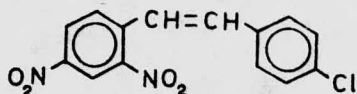
2,4-dinitro-4'-metoxi-estilbeno



1.5 horas

45 %

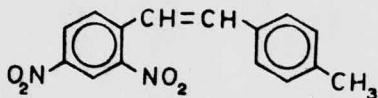
2,4-dinitro-2'-cloro-estilbeno



5.5 horas

28 %

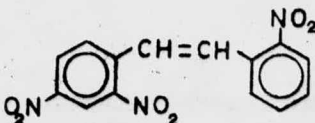
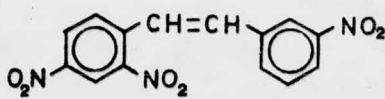
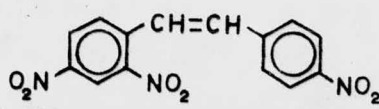
2,4-dinitro-4'-cloro-estilbeno



6.0 horas

32 %

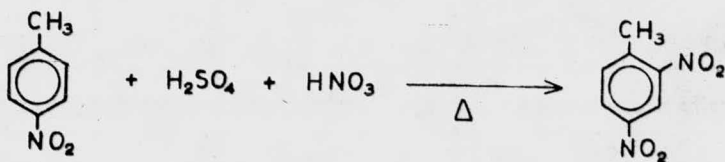
2,4-dinitro-4'-metil-estilbeno

PRODUCTO	TIEMPO DE REACCION	RENDIMIENTO
 2,2',4-trinitro-estilbena	4.5 horas	37 %
 2,3',4-trinitro-estilbena	6.0 horas	23 %
 2,4,4'-trinitro-estilbena	7.5 horas	38 %

Todos los compuestos obtenidos fueron los productos "trans".

OBTENCION DE PRODUCTOS BASE

a).- 2,4-DINITRO-TOLUENO¹¹

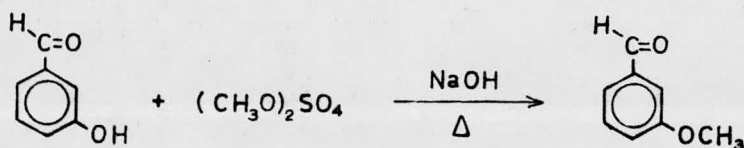


TECNICA

En un matraz de bola con un agitador magnético se ponen 240 gramos de mezcla sulfonítrica, preparada con las siguientes proporciones: 77 % de H_2SO_4 , 11.3 % de HNO_3 y 11.7 % de H_2O . Cuando la temperatura de la mezcla está entre 40 - 45°C, se le agregan 50 gramos de p-nitro-tolueno, se coloca un refrigerante de agua en posición de reflujo y se calienta con canasta, dejando que la temperatura suba a 70°C; se mantiene así durante 30 minutos, después de los cuales se agrega agua a la mezcla de reacción y se filtra y lava el producto formado.

2,4-dinitro-tolueno Rend. 80 %

b).- m-METOXI-BENZALDEHIDO¹²



TECNICA

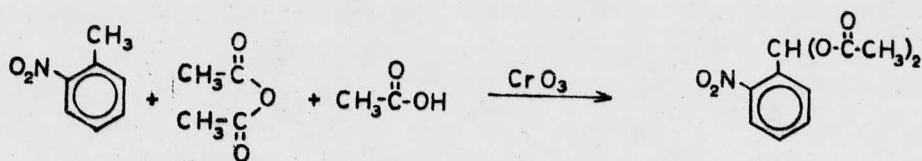
Se disuelve m-hidroxi-benzaldehído en una solución de NaOH aproximadamente 2N, esta solución se coloca en un matraz de bola de tres bocas, equipado con un agitador magnético, un refrigerante de agua en posición de reflujo, un termómetro y un embudo de goteo conteniendo sulfato de metilo, el cual se va agregando poco a poco. Una vez que se ha terminado de adicionar el sulfato de metilo se calienta la mezcla de reacción durante 30 minutos, manteniendo la temperatura a 50°C. Transcurrido el tiempo de reacción se enfría la mezcla y se extrae con eter. La solución etérea se seca con Na_2SO_4 anhidro, se filtra y se concentra;

el residuo se destila a presión reducida.

m-metoxi-benzaldehido Rend. 58 %

c).- o-NITRO-BENZALDEHIDO¹³

1.- DIACETATO DE o-NITROBENZAL

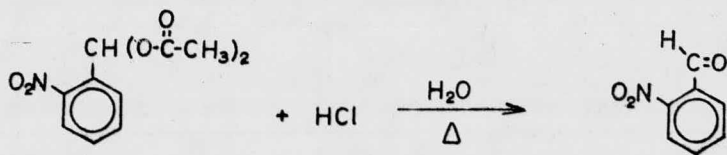


T E C N I C A

En un matraz de bola con un agitador magnético y en un baño de hielo, se pone ácido acético glacial, anhídrido acético y o-nitro-tolueno, a esta solución se le agrega lentamente y con agitación, ácido sulfúrico concentrado; cuando la mezcla se haya enfriado a 5°C, se agrega CrO₃ poco a poco, cuidando que la temperatura no suba de 10°C, en estas condiciones se mantiene la reacción durante 5 horas. La mezcla se vierte en un vaso de precipitados que contenga hielo y se agita hasta que aparece un sólido, el cual se filtra y se lava con una solución de Na₂CO₃ al 2 % y con agua fría.

Diacetato de o-nitrobenzal Rend. 20 %

2.- o-NITRO-BENZALDEHIDO



TECNICA

El producto obtenido por la reacción anterior se disuelve en etanol y se pone en un matraz de bola con un agitador magnético, se le agrega una solución de ácido clorhídrico diluido y se calienta a reflujo durante 1 hora. La mezcla se enfría a 0°C y el sólido formado se filtra y se lava con agua fría.

o-nitro-benzaldehído Rend. 65 %

PARTE EXPERIMENTAL

B).- ANALISIS

Los compuestos obtenidos se analizaron en un Espectrómetro de Masas Hitachi-Perkin-Elmer RMU-7H, utilizando el sistema de introducción directa, a temperaturas entre 100 - 130°C en el sistema introductor y 190°C en la cámara de ionización; con un voltaje de ionización de 70 eV y un voltaje de aceleración de 1.8 Kv.

La cantidad que se utilizó para el análisis de cada muestra fue aproximadamente 1 miligramo.

La estereoquímica de los compuestos se comprobó por análisis en Resonancia Magnética Nuclear.

DISCUSION DE ESPECTROS

DISCUSION DE ESPECTROS

Los espectros de todos los compuestos analizados presentan un gran número de fragmentos iguales o semejantes, la mayoría de los cuales se origina por rearrreglos en los que interviene el grupo nitro de la posición 2. El sustituyente del otro anillo aromático influye en la abundancia relativa de los fragmentos, pero no cambia el patrón general de fragmentación.

A continuación se exponen los mecanismos de fragmentación propuestos para cada uno de los iones que forman parte del patrón general de fragmentación.

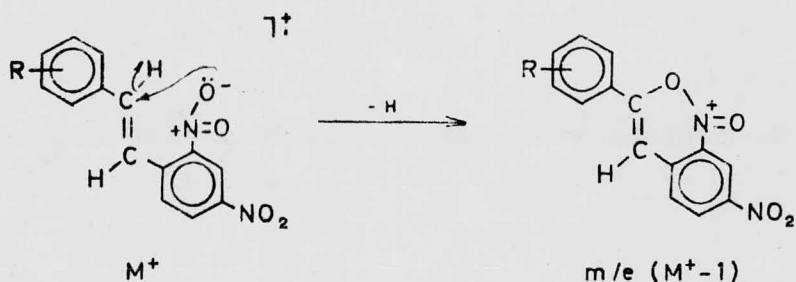
Formación del ion de $m/e (M^+ - 1)$

El ion molecular M^+ puede perder un hidrógeno¹⁴ para formar el fragmento de $m/e (M^+ - 1)$; el hidrógeno lo puede perder de cualquier parte de la molécula, a este fenómeno se lo llama "scrambling" o "randomización" y se presenta tanto en el estilbeno^{15,16} y sus derivados, como en otros compuestos.

Una de las posibilidades para la pérdida de hidrógeno se presenta en el esquema 3, donde la presencia del grupo nitro en la posición 2 es importante, ya que por un ataque de un oxígeno sobre el $C\alpha'$, se pierde el hidrógeno que estaba unido a él, dando una estructura cíclica.

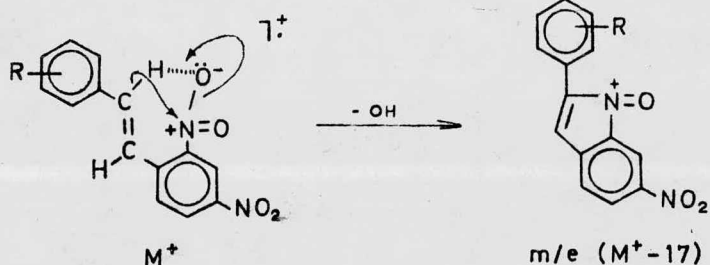
Formación del ion de $m/e (M^+ - 17)$

El ion de $m/e (M^+ - 17)$ se origina por la pérdida de hidroxilo a partir del



ESQUEMA 3

ion molecular, interviniendo un oxígeno del grupo nitro de la posición 2 y el hidrógeno en α' . Esquema 4.

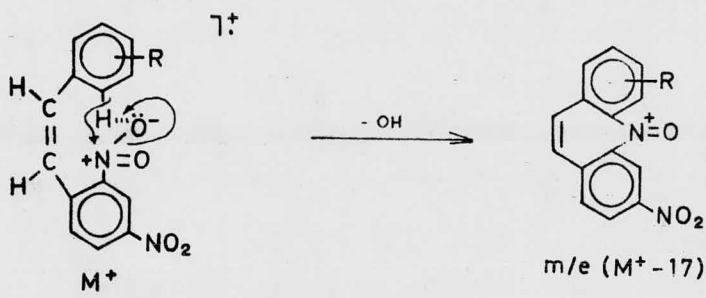


ESQUEMA 4

Otra posibilidad de formación del ion de $m/e (M^+-17)$ es que al entrar a la cámara de ionización, el compuesto pase de la forma trans a la forma cis y la eliminación del hidroxilo se lleva a cabo por la pérdida de un oxígeno del grupo nitro de la posición 2 y un hidrógeno del otro anillo aromático. Esquema 5.

Formación del fragmento de $m/e (M^+-29)$

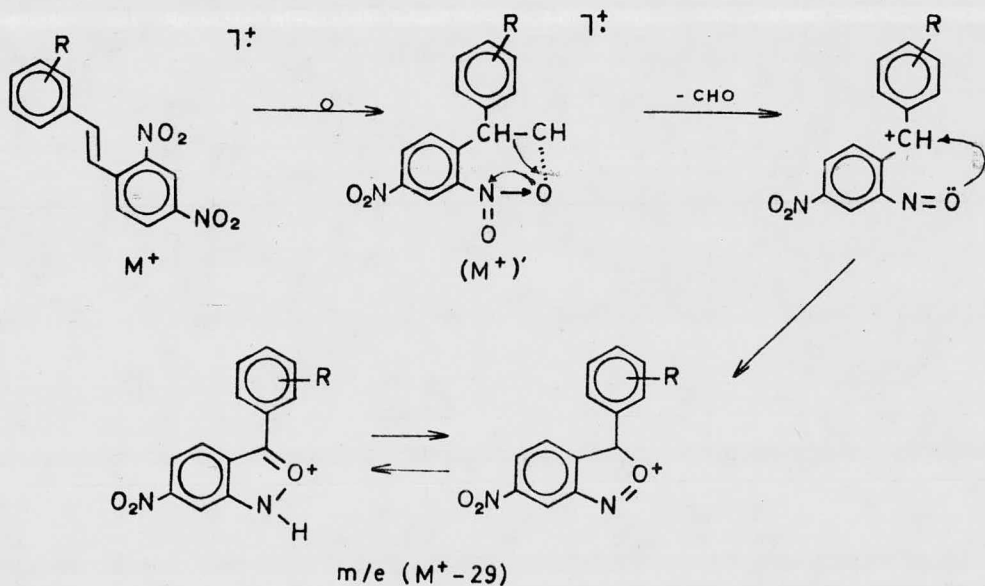
El fragmento de $m/e (M^+-29)$ se origina mediante un rearrreglo del ion mole-



ESQUEMA 5

cular (M^+), para formar un ion del tipo del 1,1-difenil-etileno (M^+)¹, que pierde 29 unidades de masa a partir de un oxígeno del grupo nitro de la posición 2 y el C-2 del ion rearrreglado. Esquema 6.

La pérdida del grupo CHO ha sido comprobada con 2-nitro-estilbeno y 1,1-difenil-etileno deuterados⁷.

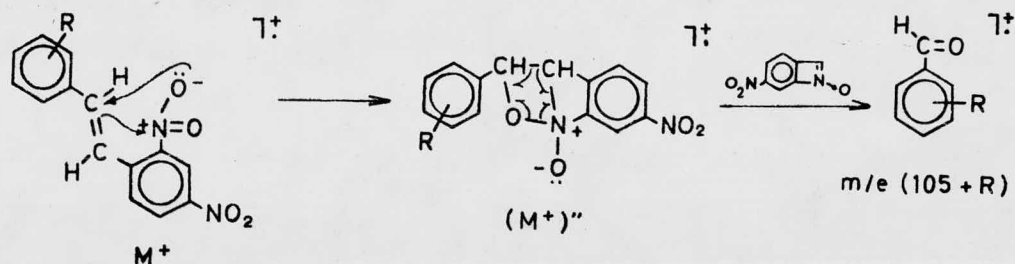


ESQUEMA 6

Formación de los fragmentos de m/e (105 + R), m/e 165 y m/e 164

Estos fragmentos se forman por un rearrreglo del ion molecular, que se lleva a cabo por un ataque del oxígeno del grupo nitro de la posición 2 sobre el C α' del estilbena, abriéndose la doble ligadura y efectuándose un ataque sobre el nitrógeno del mismo grupo nitro, dando el ion molecular (M^+)".

1.- El ion molecular (M^+)" puede perder un fragmento neutro para formar un aldehído, como radical iónico, de m/e (105 + R), siguiendo el mecanismo de fragmentación del esquema 7.



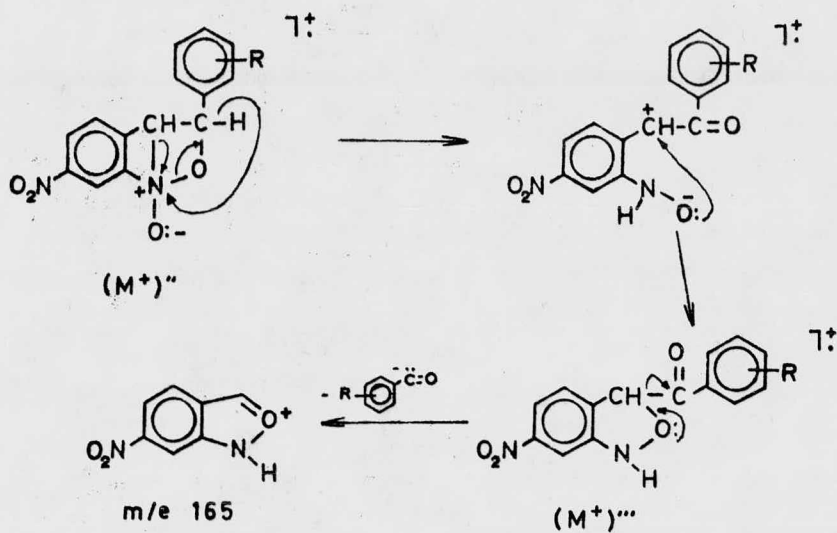
ESQUEMA 7

2.- El ion (M^+)" se puede rearrreglar para dar lugar a la formación de una fenil-cetona (M^+)" y al perder este grupo, se forma el ion de m/e 165, a través del mecanismo del esquema 8.

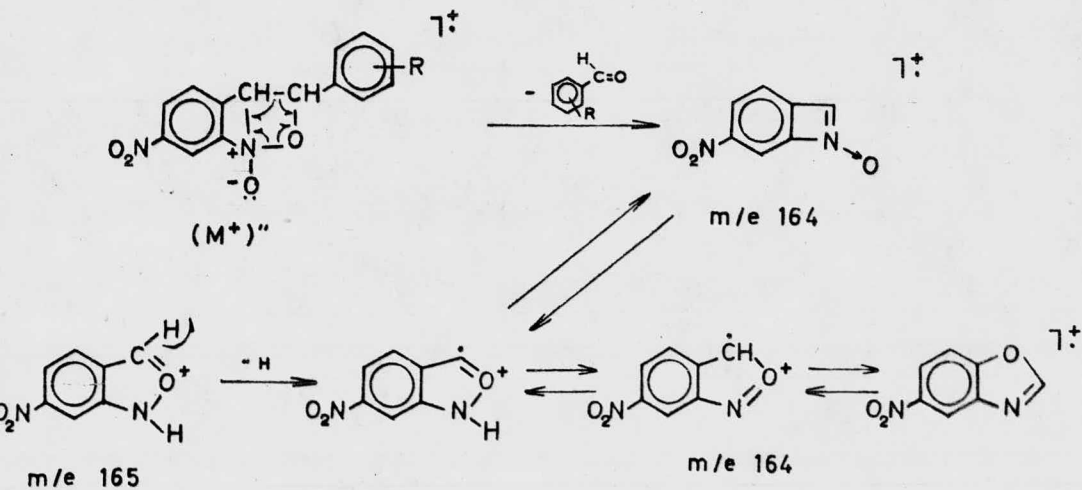
3.- El ion (M^+)" puede perder aldehído como molécula neutra y obtenerse el fragmento de m/e 164, que presenta varias formas; este fragmento también se forma por la pérdida de un hidrógeno a partir del ion de m/e 165. Esquema 9.

Formación del fragmento de m/e (104 + R)

El fragmento de m/e (104 + R) se forma por la pérdida de un fragmento neutro a partir del ion de m/e ($M^+ - 29$)⁷; también se forma por la pérdida de un hidrógeno

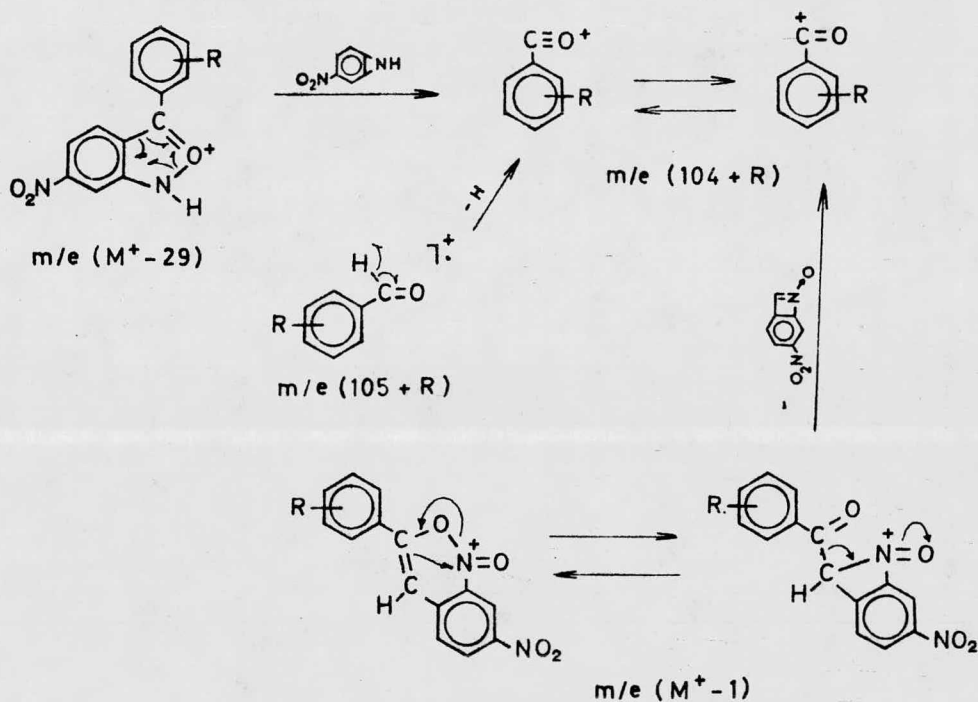


ESQUEMA 8



ESQUEMA 9

a partir del fragmento de m/e ($105 + R$). Otra posibilidad para la formación de este fragmento es a partir del ion de m/e ($M^+ - 1$), que puede perder un fragmento neutro. Esquema 10.

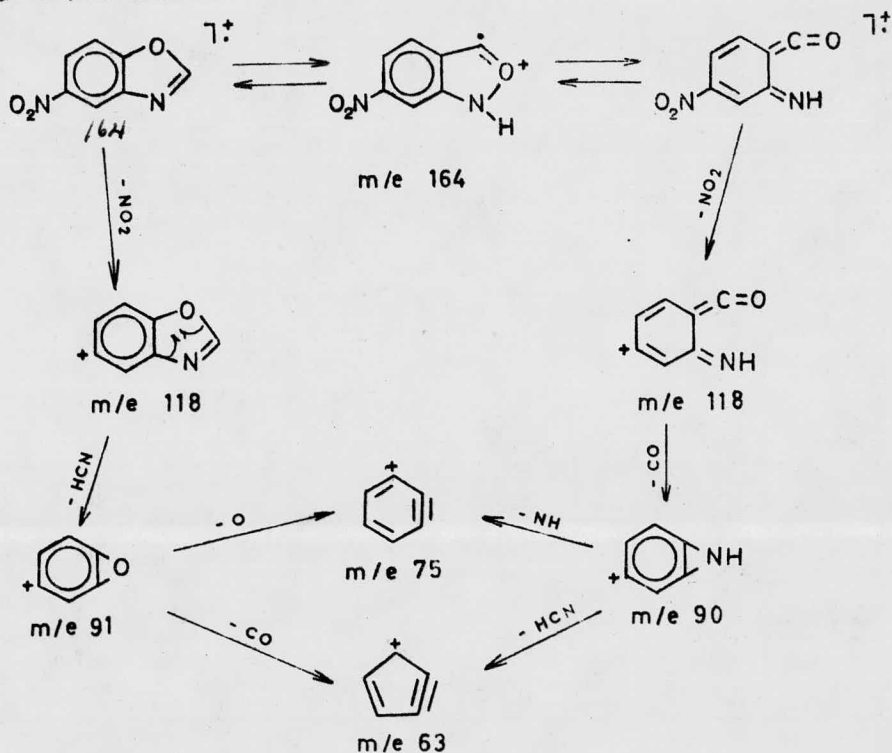


ESQUEMA 10

Formación de los fragmentos de m/e 118, m/e 91, m/e 90, m/e 75 y m/e 63⁷

El fragmento de m/e 118 se forma por la pérdida del grupo nitro del fragmento de m/e 164 y puede perder CO y/o HCN para dar lugar a la formación de los fragmentos de m/e 90 y m/e 91, respectivamente; estos fragmentos, por nuevas pérdidas de NH y O dan origen al ion de m/e 75. También a partir de los fragmen-

tos de m/e 90 y m/e 91, por pérdidas de HCN y CO, se obtiene el fragmento de m/e 63. Esquema 11.

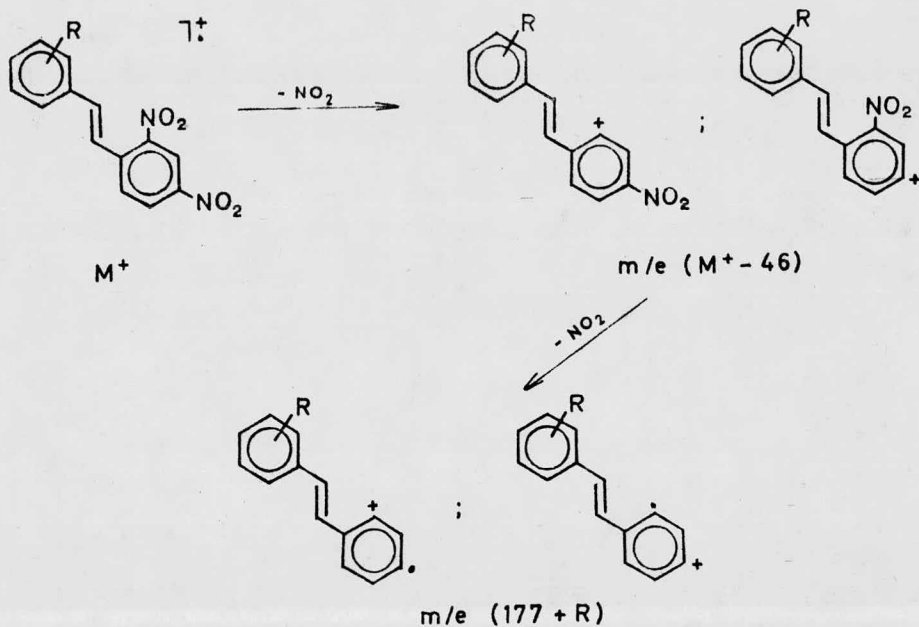


ESQUEMA 11

Pérdida de los grupos nitro

1.- Pérdida del grupo nitro a partir del ion molecular

La pérdida del grupo nitro a partir del ion molecular, para formar el fragmento de m/e ($M^+ - 46$) es característica de los compuestos nitro-aromáticos^{2,3,5}; este fragmento puede sufrir una nueva pérdida de grupo nitro, para formar el ion de m/e ($177 + R$). Esquema 12.



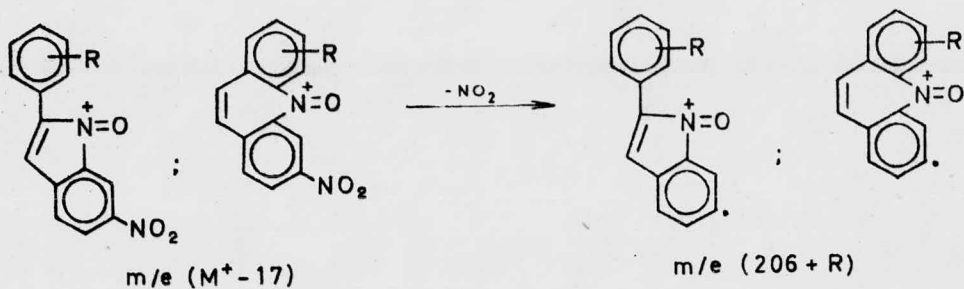
ESQUEMA 12

2.- Pérdida de grupo nitro a partir del fragmento de $m/e (M^+ - 17)$

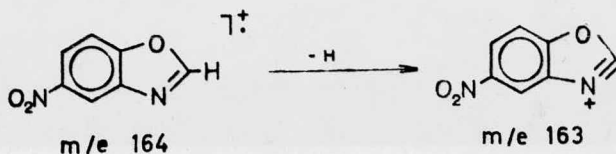
La pérdida del grupo nitro a partir del ion de $m/e (M^+ - 17)$ da lugar a la formación del fragmento de $m/e (206 + R)$. Esquema 13.

Formación del ion de m/e 163

El fragmento de m/e 164 puede perder el hidrógeno que está unido al carbono para formar el ion de m/e 163, en el que hay una triple ligadura entre el nitrógeno y uno de los carbonos vecinos. Esquema 14.



ESQUEMA 13



ESQUEMA 14

Pérdida de CO a partir del fragmento de $m/e (104 + R)$

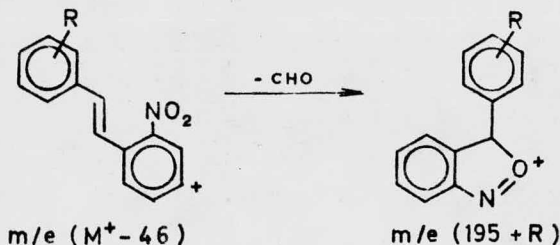
La pérdida de grupo carbonilo a partir del ion de $m/e (104 + R)$ es característica en este tipo de fragmentos⁵ y da lugar a la formación del ion de $m/e (76 - R)$, cuya fragmentación posterior dependerá del grupo R. Esquema 15.



ESQUEMA 15

Formación del fragmento de m/e (195 + R)

A partir del ion de m/e ($M^+ - 46$) se efectúa una pérdida de CHO, siguiendo el mecanismo de fragmentación del esquema 6, dando lugar a la formación del ion de m/e (195 + R). Esquema 16.



ESQUEMA 16

Además de los iones mencionados, en todos los espectros se observa la formación de otros fragmentos, algunos de importante abundancia relativa, que se deben al grupo funcional sustituyente. Para el estudio de estos fragmentos, se hizo una división de los compuestos, según el sustituyente.

2,4-DINITRO-ESTILBENO

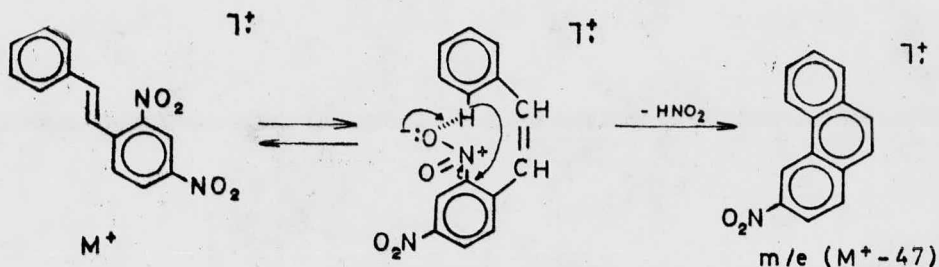
En el espectro de este compuesto (Figura 1) aparecen, además de los fragmentos generales, los fragmentos de m/e ($M^+ - 47$), m/e 177 y m/e 176.

Formación del fragmento de m/e ($M^+ - 47$)

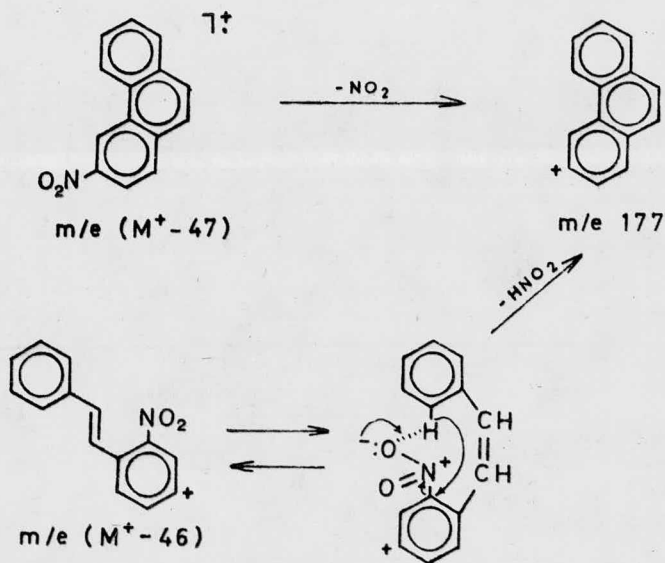
En la cámara de ionización el ion molecular puede pasar de la forma trans a la forma cis y perder HNO_2^6 , como se muestra en el esquema 17.

Formación del ion de m/e 177

Este ion se forma por la pérdida del grupo nitro a partir del fragmento de



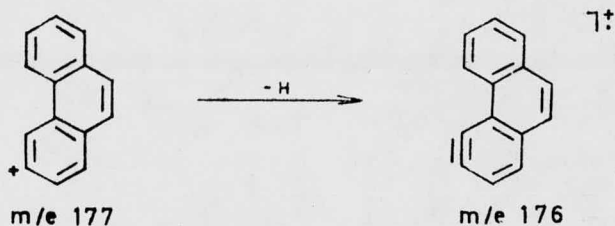
$m/e (M^+ - 47)$, también se forma por la pérdida de HNO_2 a partir del fragmento de $m/e (M^+ - 46)$. Esquema 18.



Formación del fragmento de m/e 176

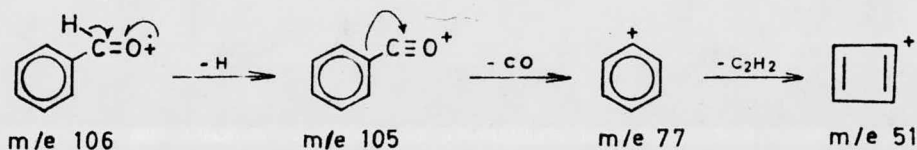
El ion de m/e 177, al perder un hidrógeno, da lugar a la formación del frag-

mento de m/e 176. Esquema 19.



ESQUEMA 19

A partir del ion molecular M^+ , se forma benzaldehído (Esquema 7), que a su vez se fragmenta de manera característica.⁵ Esquema 20.

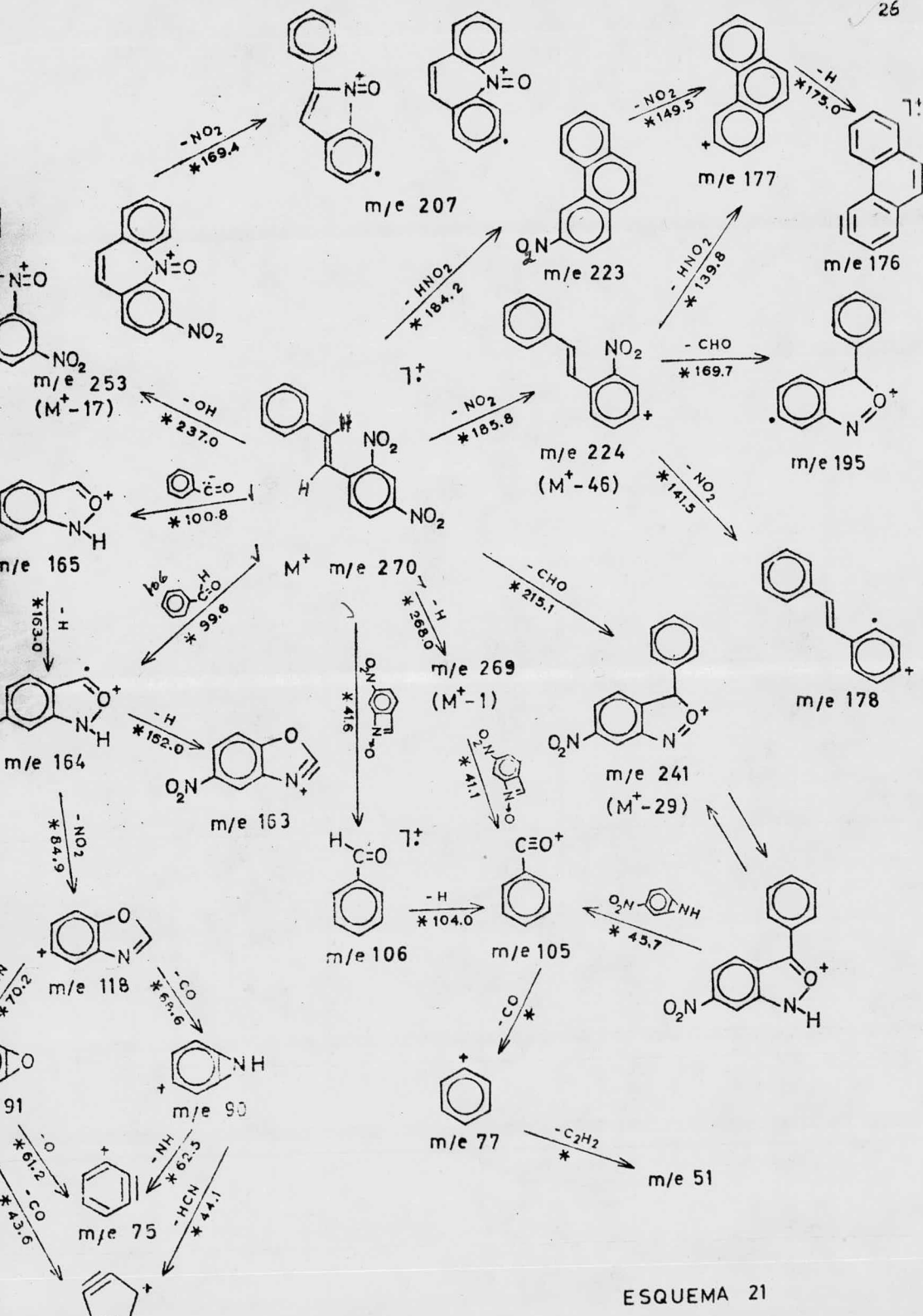


ESQUEMA 20

La fragmentación total del 2,4-dinitro-estilbena se presenta en el esquema 21.

(2'),(3') y (4')- MONOHIDROXI-2,4-DINITRO-ESTILBENO

Los espectros de estos compuestos (Figuras 2, 3 y 4) muestran, además de los fragmentos generales, los que se originan por el hidroxibenzaldehído formado.⁵ Esquema 22.



ESQUEMA 21

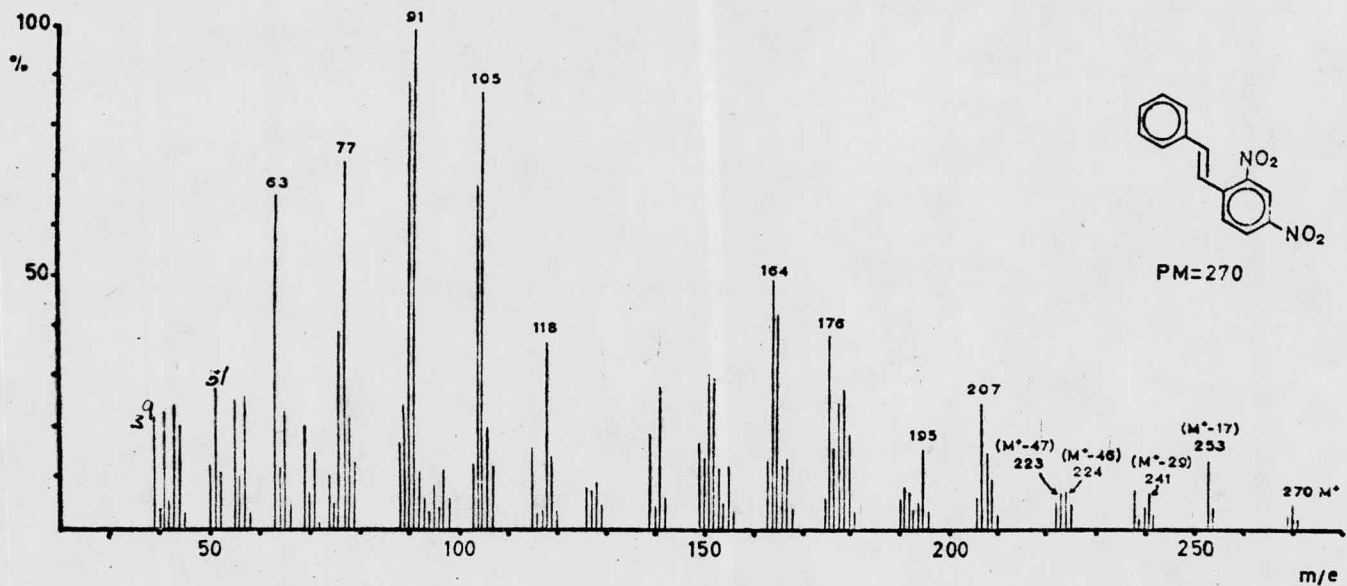
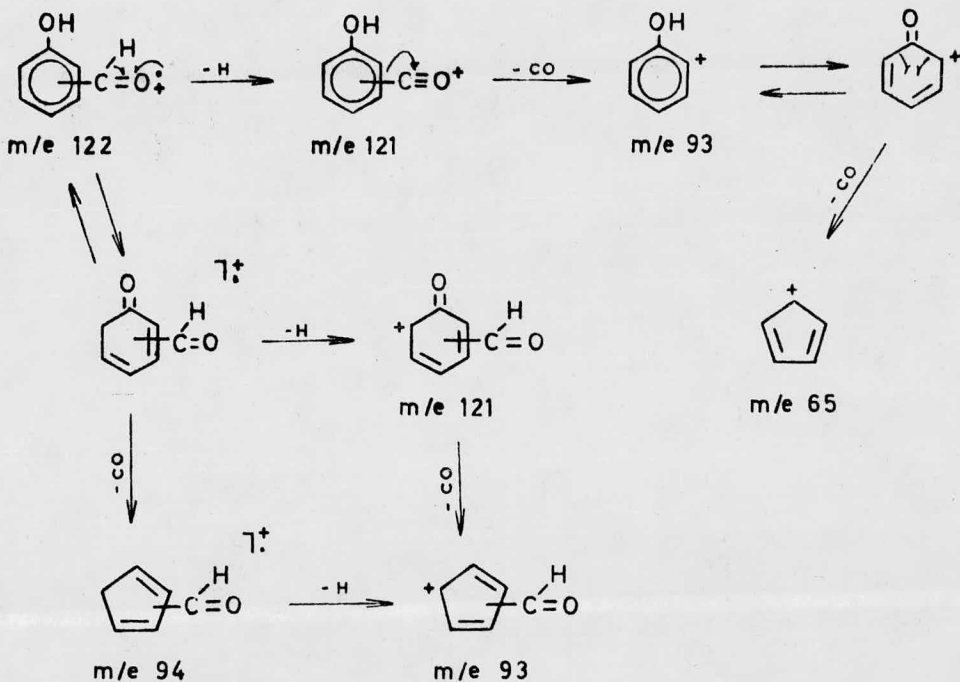


FIGURA 1

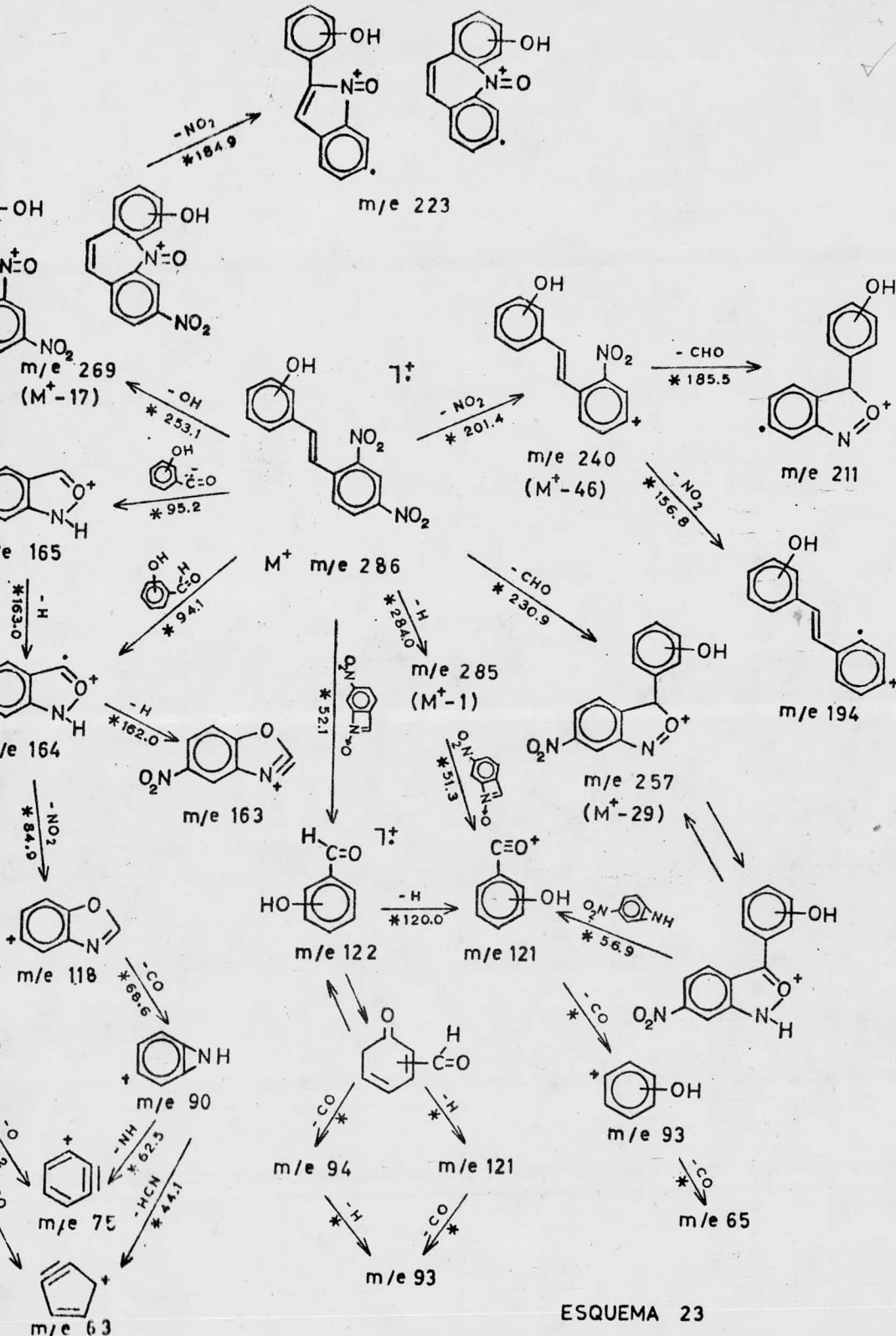


ESQUEMA 22

En el esquema 23 se presenta la fragmentación total de los tres derivados.

(2'), (3') y (4')- MONOMÉTOXI-2,4-DINITRO-ESTILBENO

En los espectros de estos compuestos (Figuras 5, 6 y 7) se observa la aparición del fragmento de m/e 195, que se debe a la pérdida del grupo CH_2O^5 a partir del fragmento de m/e 225. Esquema 24.



ESQUEMA 23

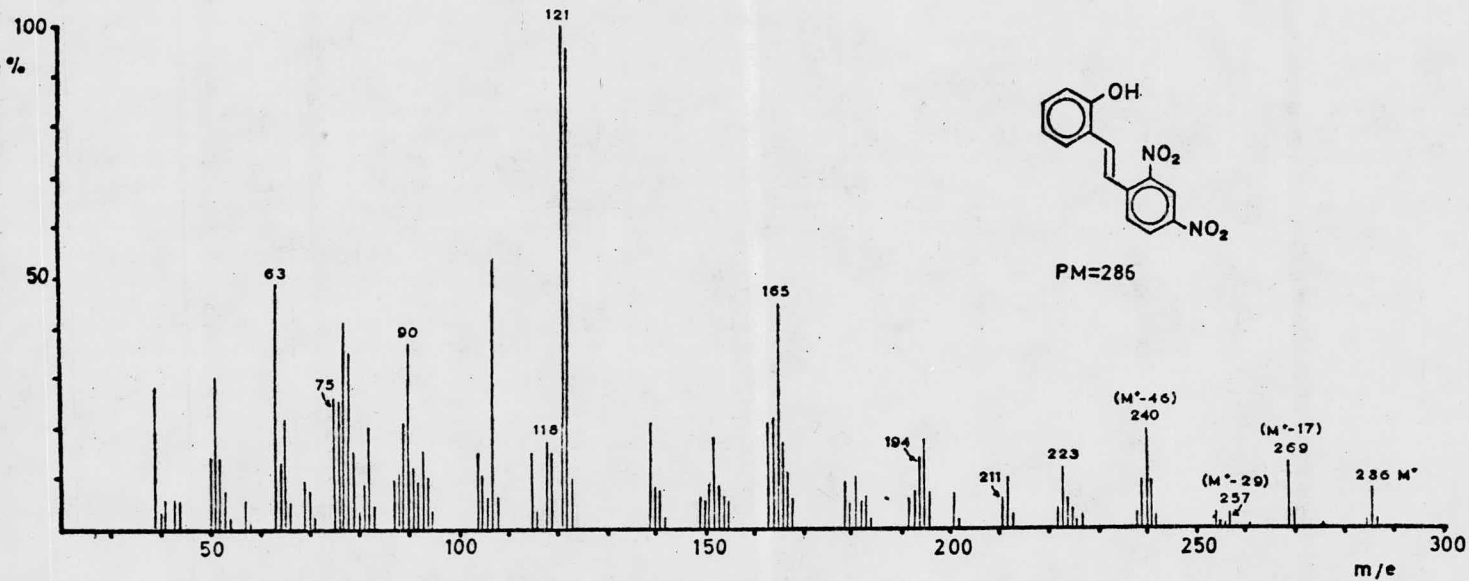


FIGURA 2

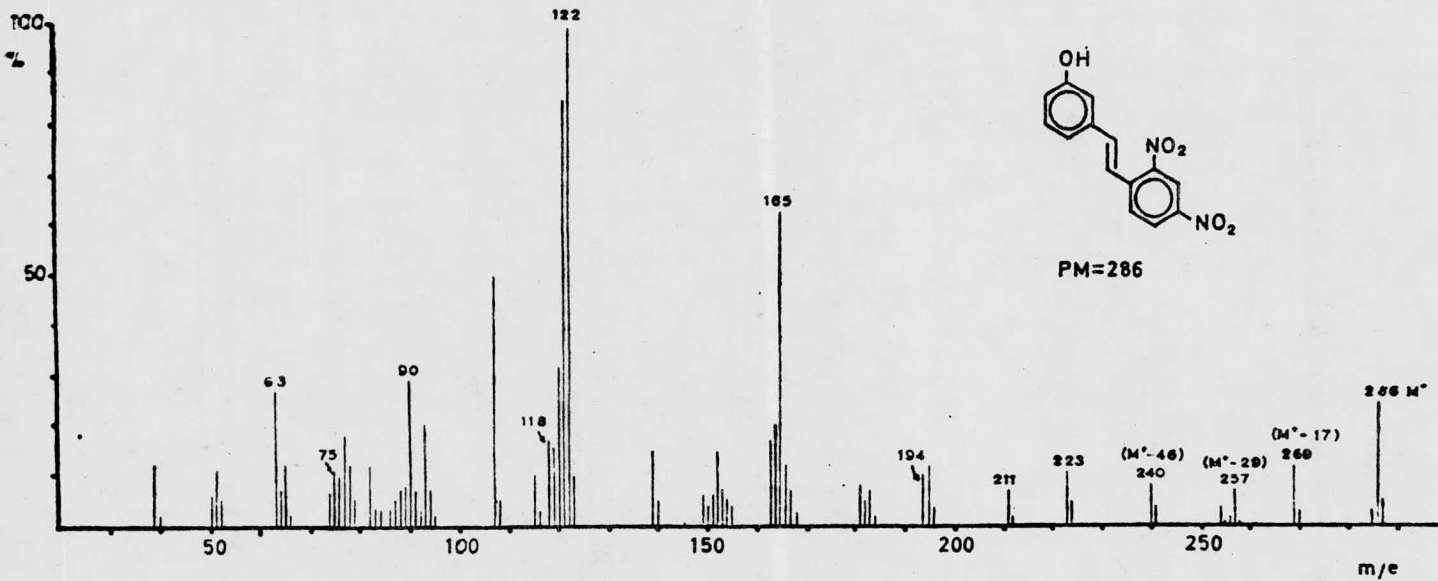


FIGURA 3

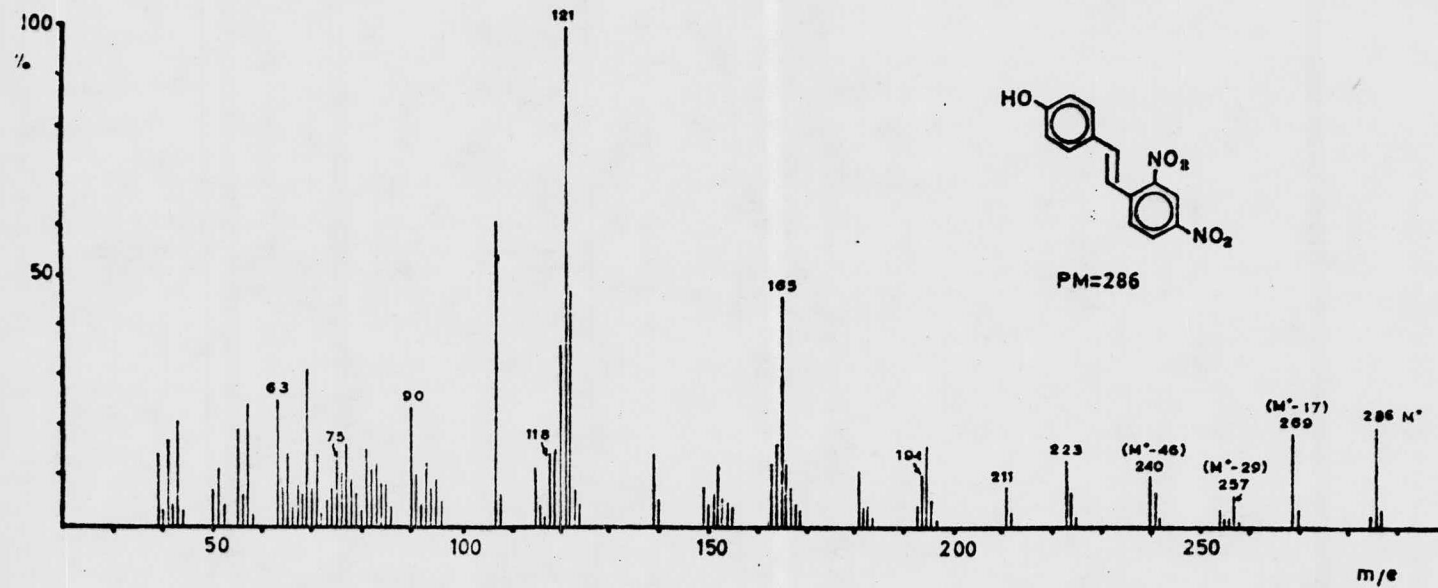
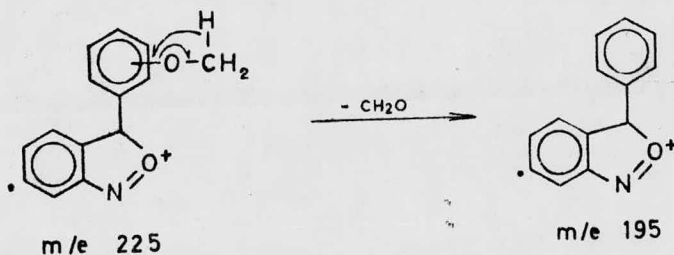
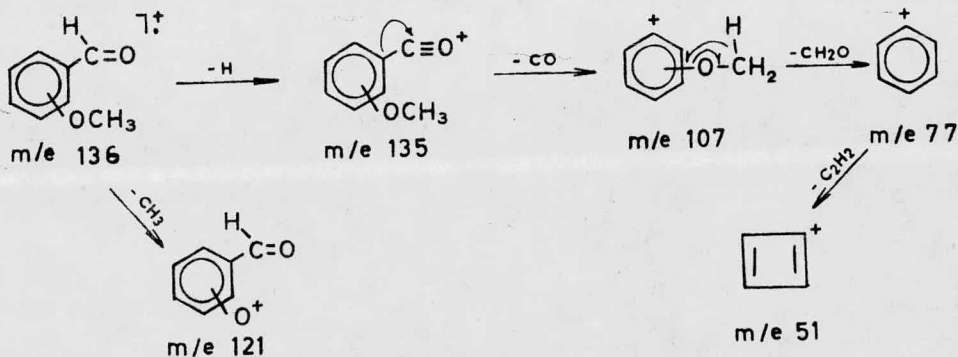


FIGURA 4



ESQUEMA 24

Otros fragmentos que se encuentran en sus espectros son los que se originan por el metoxi-benzaldehído.⁵ Esquema 25.

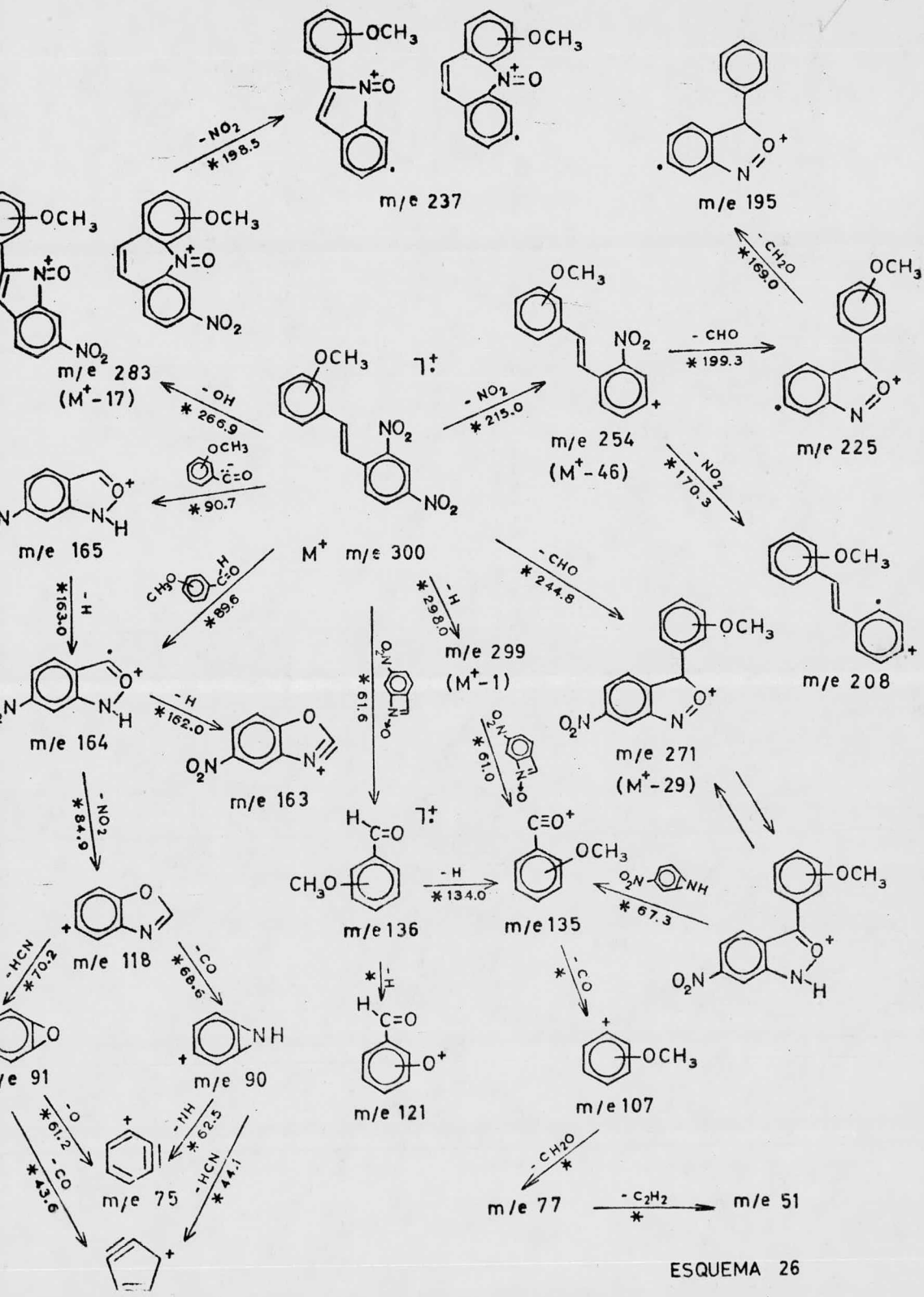


ESQUEMA 25

En el esquema 26 se muestra la fragmentación total para los tres isómeros.

(2') y (4')- MONOCLORO-2,4-DINITRO-ESTILBENO

Para los dos productos (Figuras 8 y 9), aparecen fragmentos originados por el cloro-benzaldehído.^{3,5} Esquema 27. Su fragmentación total, así como sus metaes-
tables se presentan en el esquema 28.



ESQUEMA 26

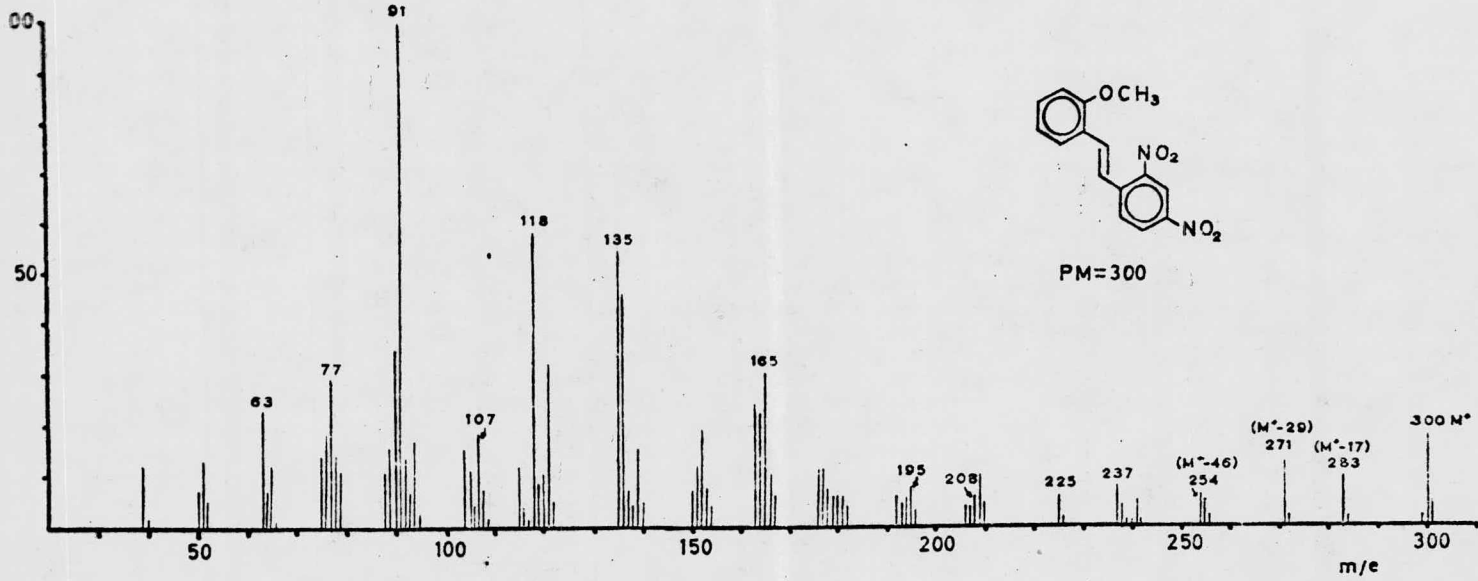


FIGURA 5

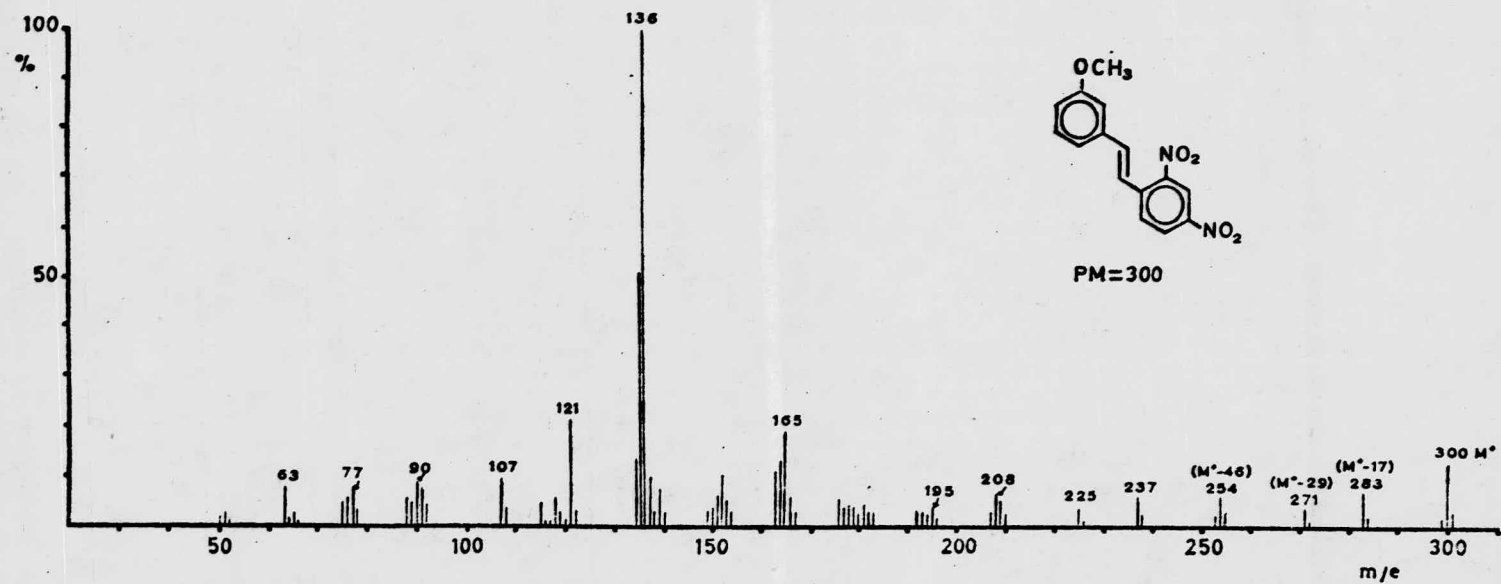


FIGURA 6

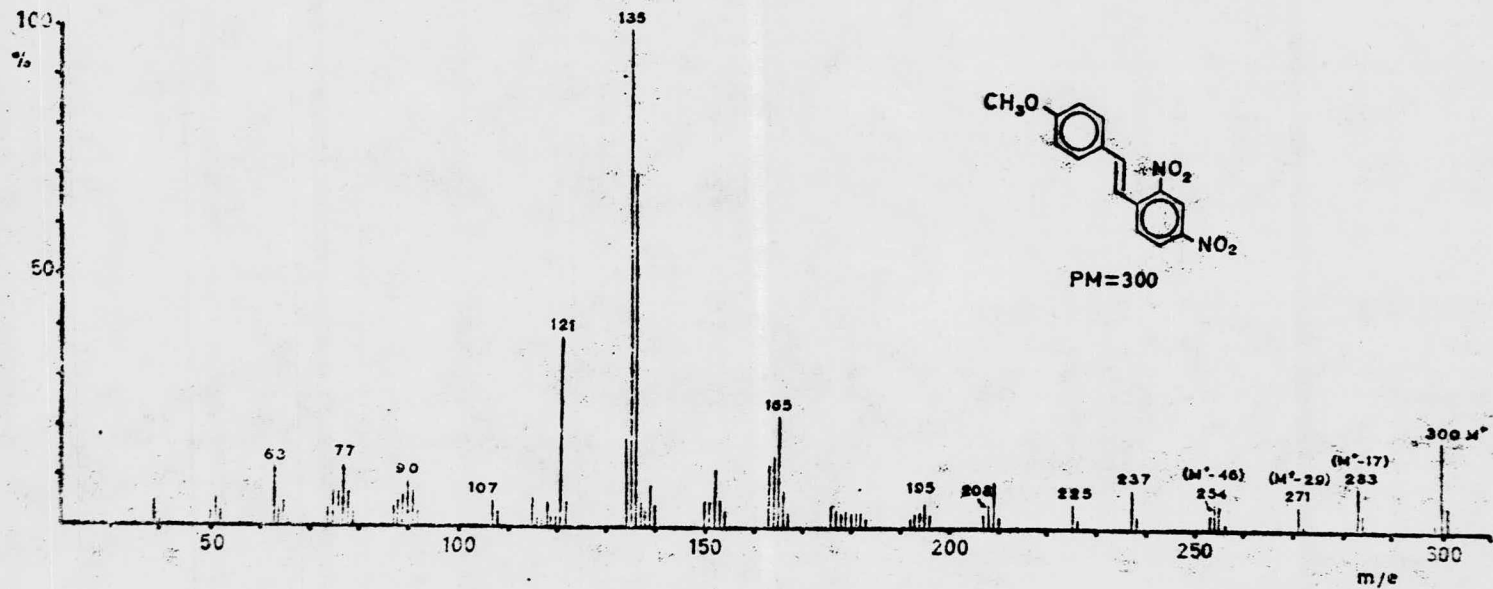
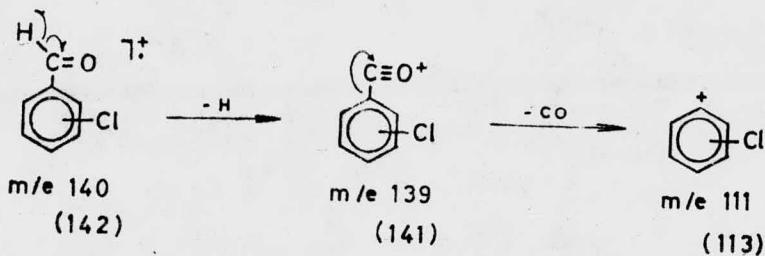


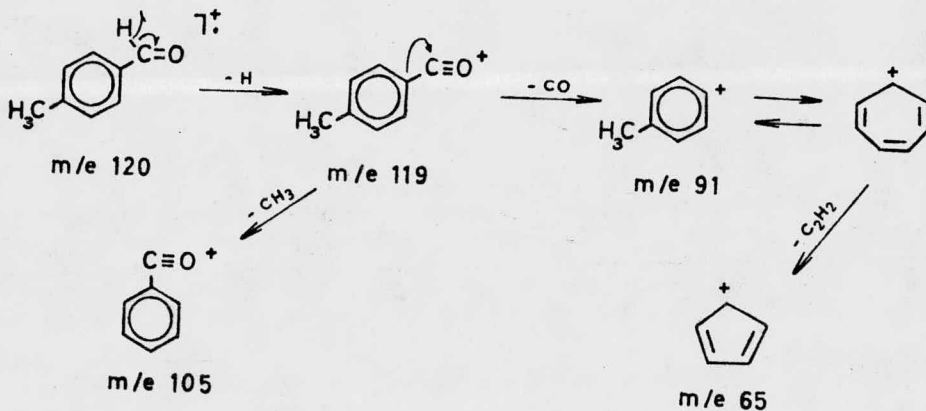
FIGURA 7



ESQUEMA 27

4'-METIL-2,4-DINITRO-ESTILBENO

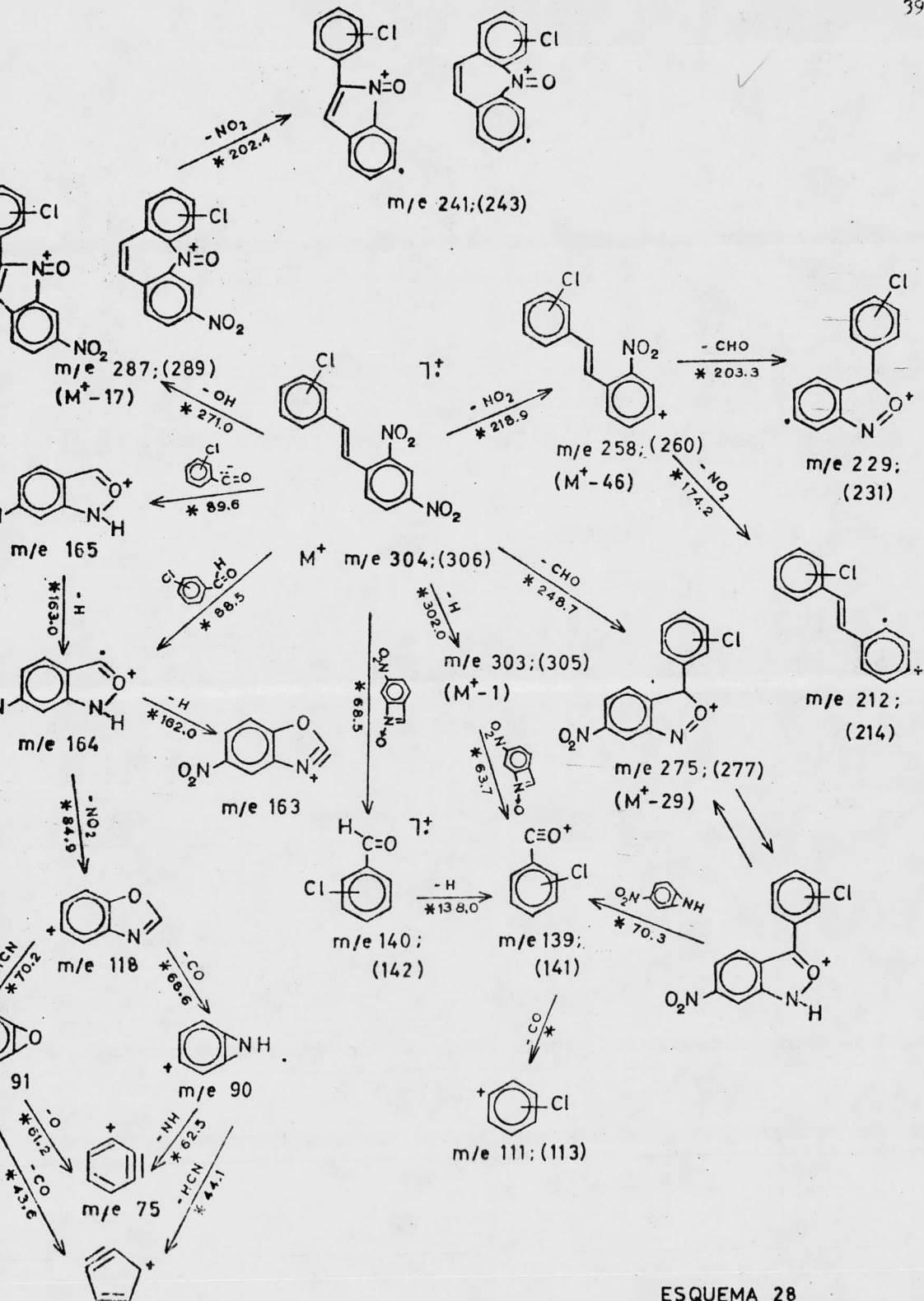
Su fragmentación total se presenta en el esquema 29. En su espectro (Figura 10), además de los fragmentos generales, aparece la fragmentación característica del metil-benzaldehído.^{3,5} Esquema 30.



ESQUEMA 30

(2'), (3') y (4')- MONONITRO-2,4-DINITRO-ESTILBENO

En sus espectros (Figuras 11, 12 y 13), se observan los fragmentos debidos al nitro-benzaldehído formado.^{3,5} Esquema 31.



ESQUEMA 28

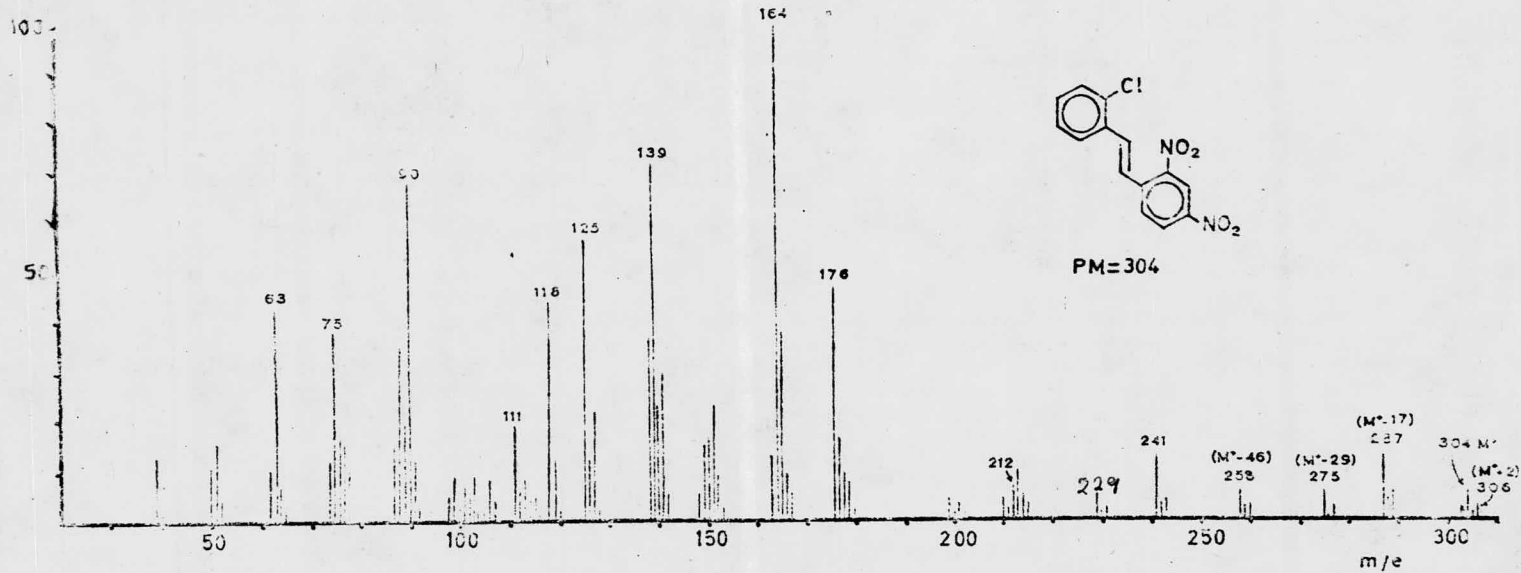


FIGURA 8

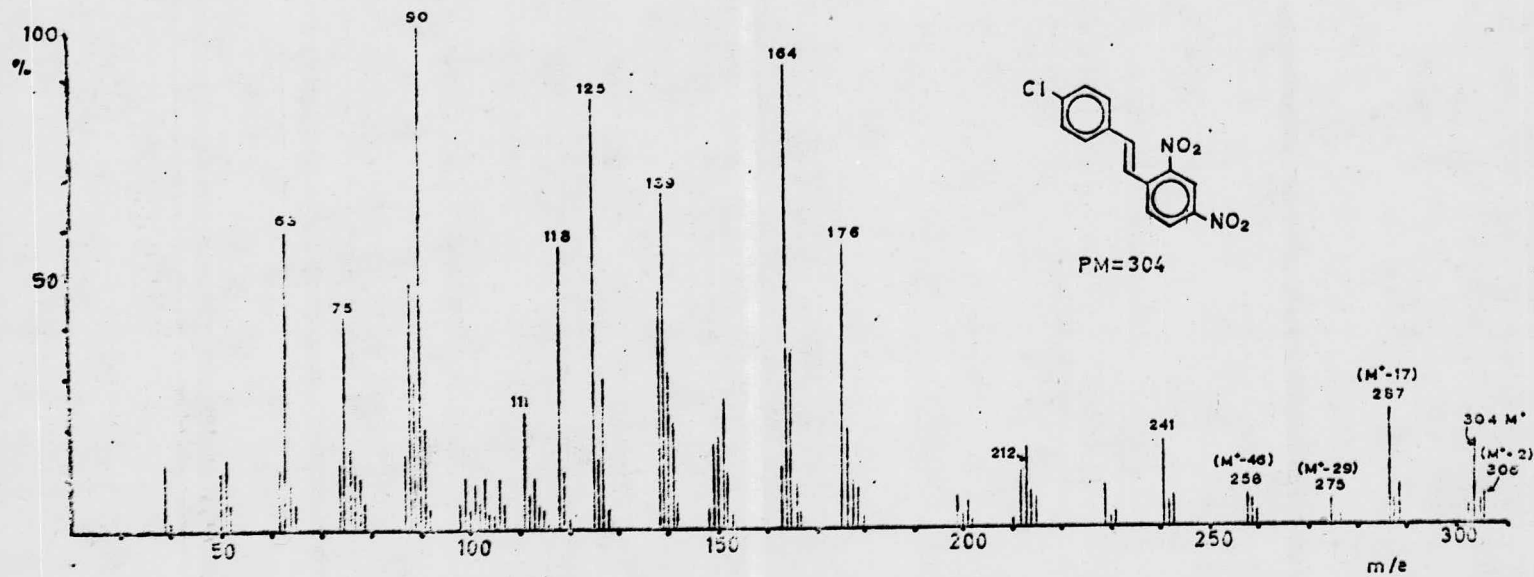
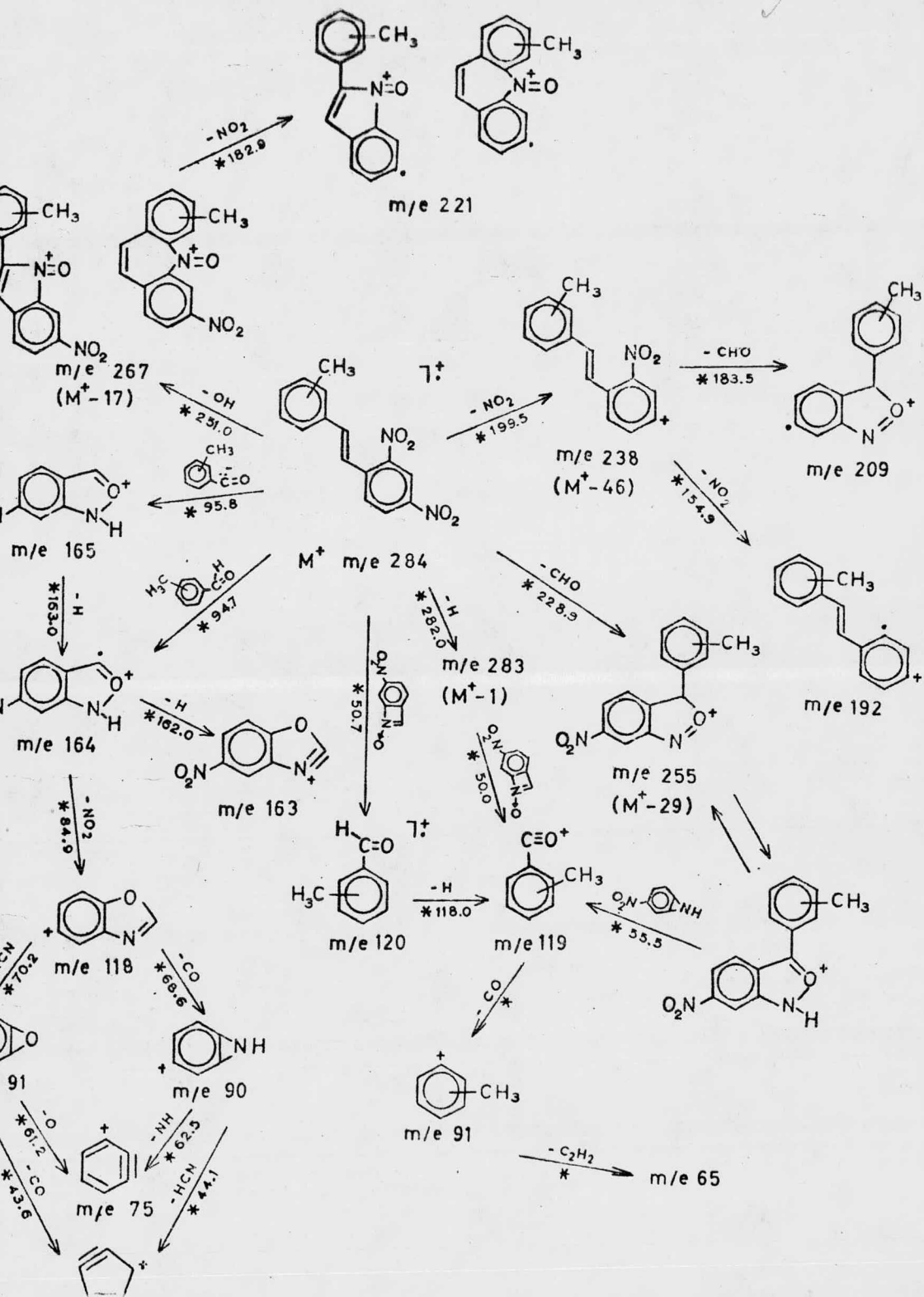


FIGURA 9



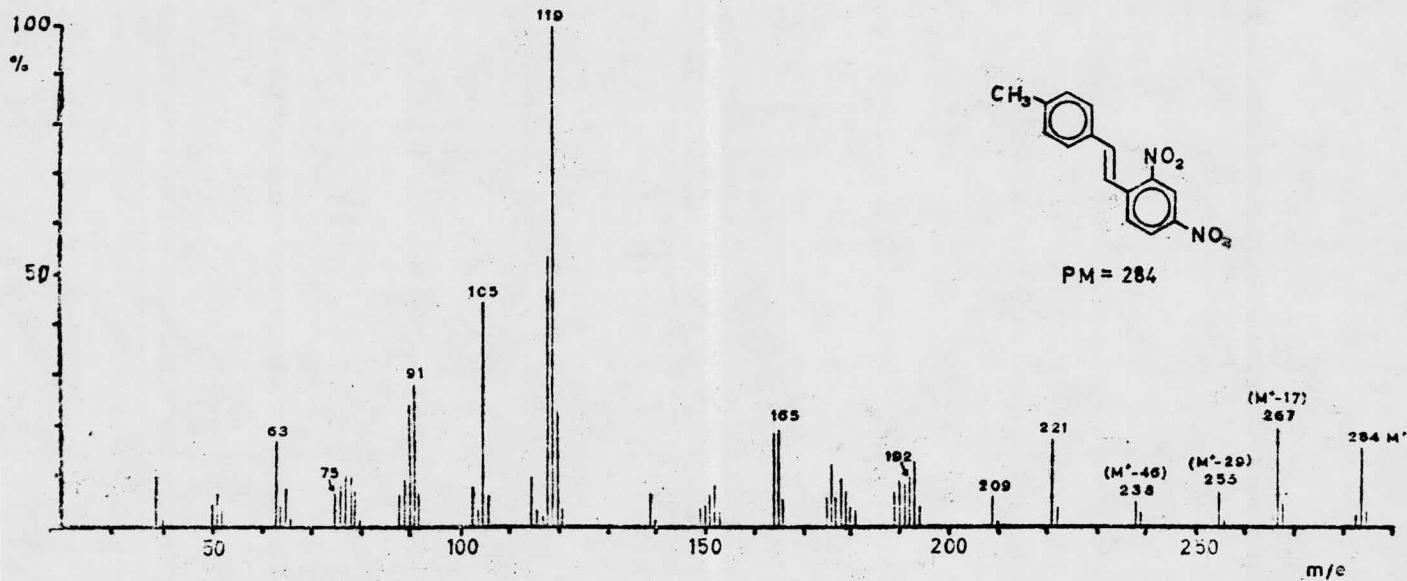
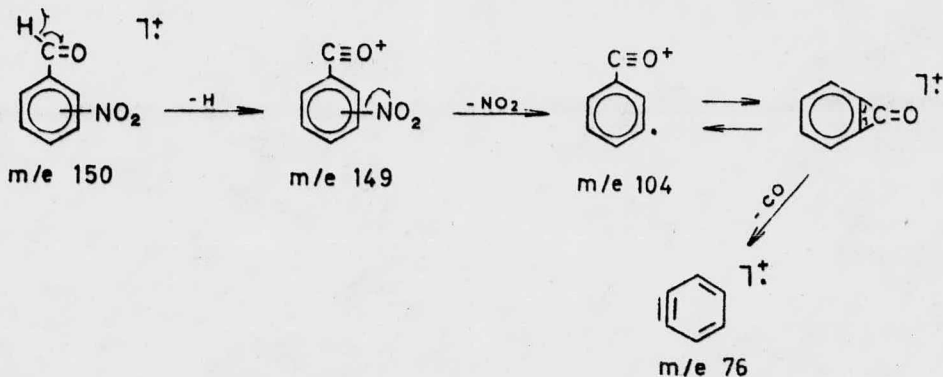
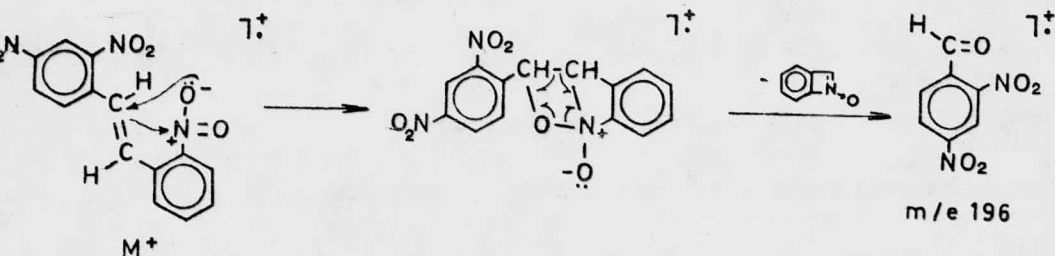


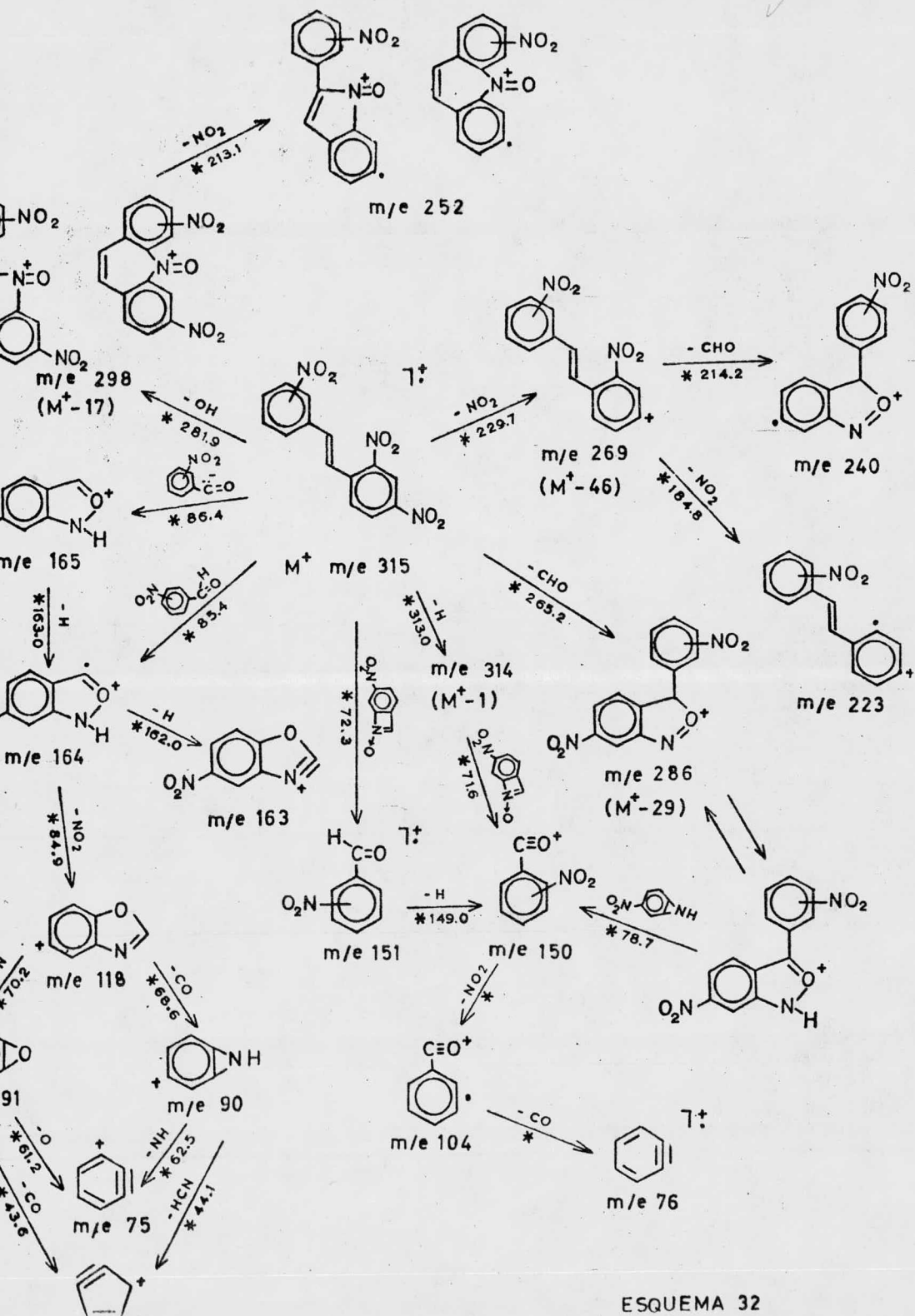
FIGURA 10



La fragmentación para los tres isómeros se muestra en el esquema 32.

El 2,2',4-trinitro-estilbena (Figura 13), merece atención especial ya que los rearrreglos propuestos en los esquemas del 3 al 16, debidos al grupo nitro de la posición 2, los puede efectuar también con el grupo nitro de la posición 2', dando lugar a la formación de fragmentos de gran abundancia relativa.⁷ Entre estos fragmentos se observa la formación de 2,4-dinitro-benzaldehído (m/e 196) y su fragmentación característica,^{3,5} esquema 33, así como la formación del fragmento de m/e 135, a partir del ion molecular, Esquema 34.





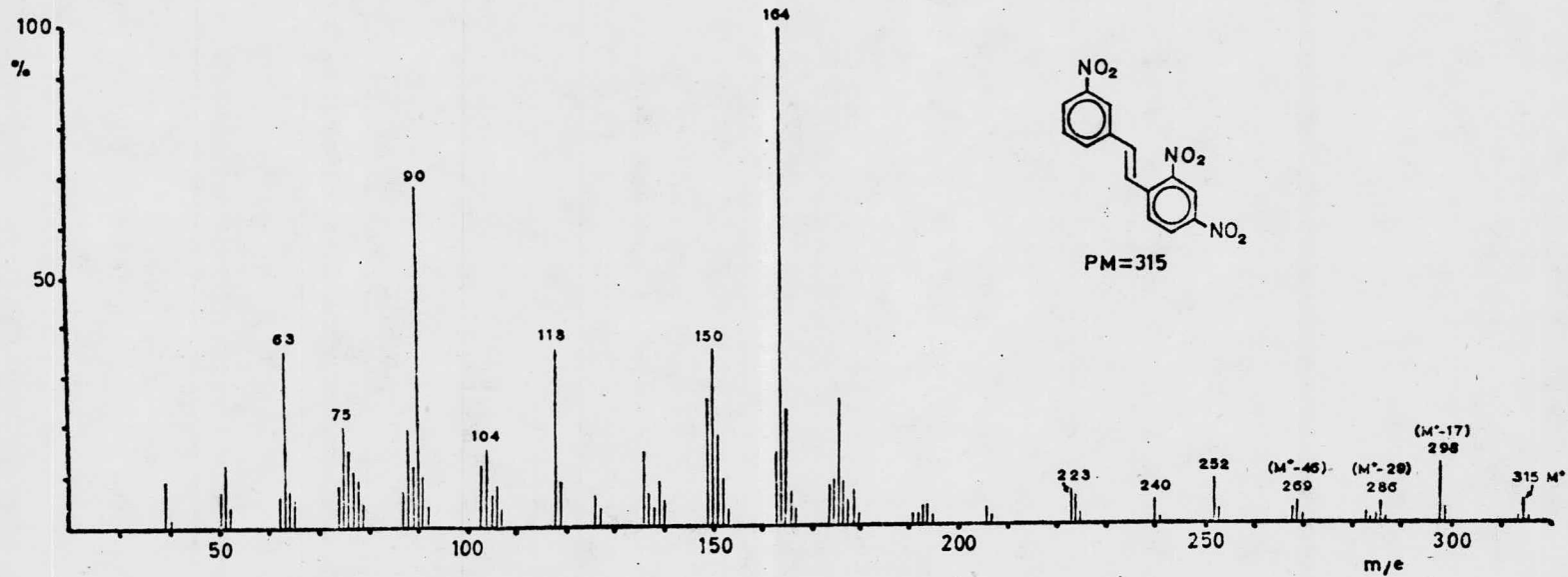


FIGURA 11

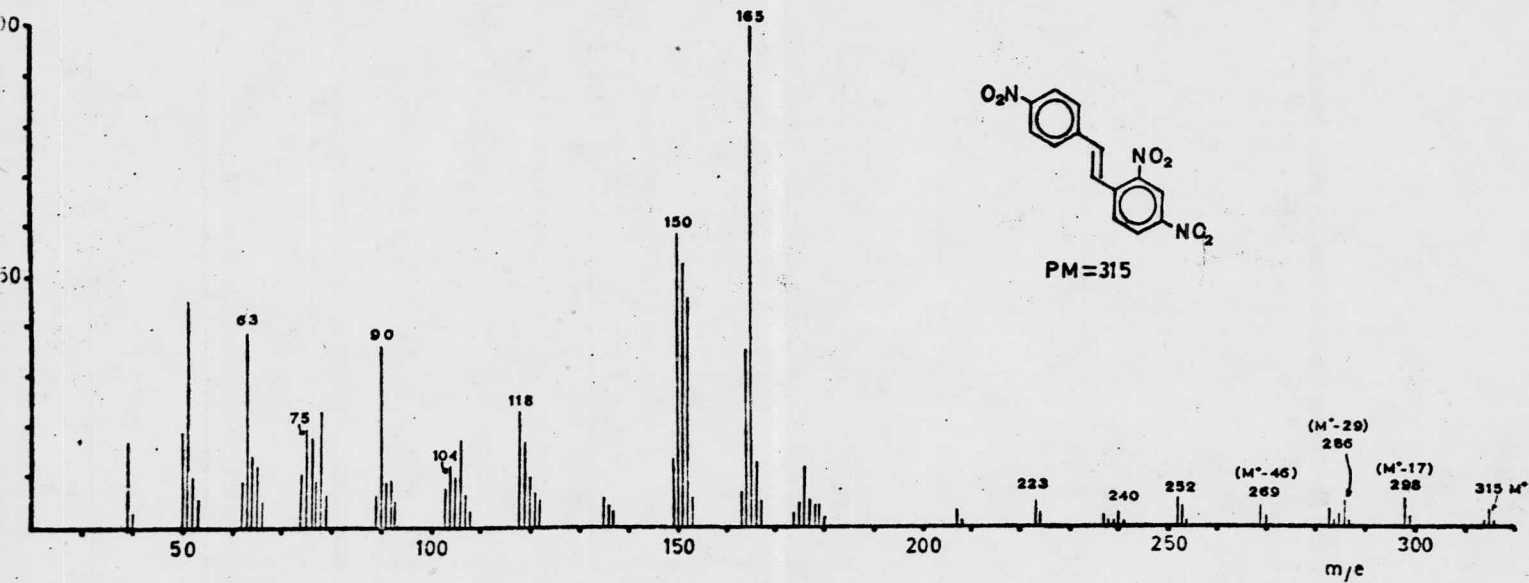
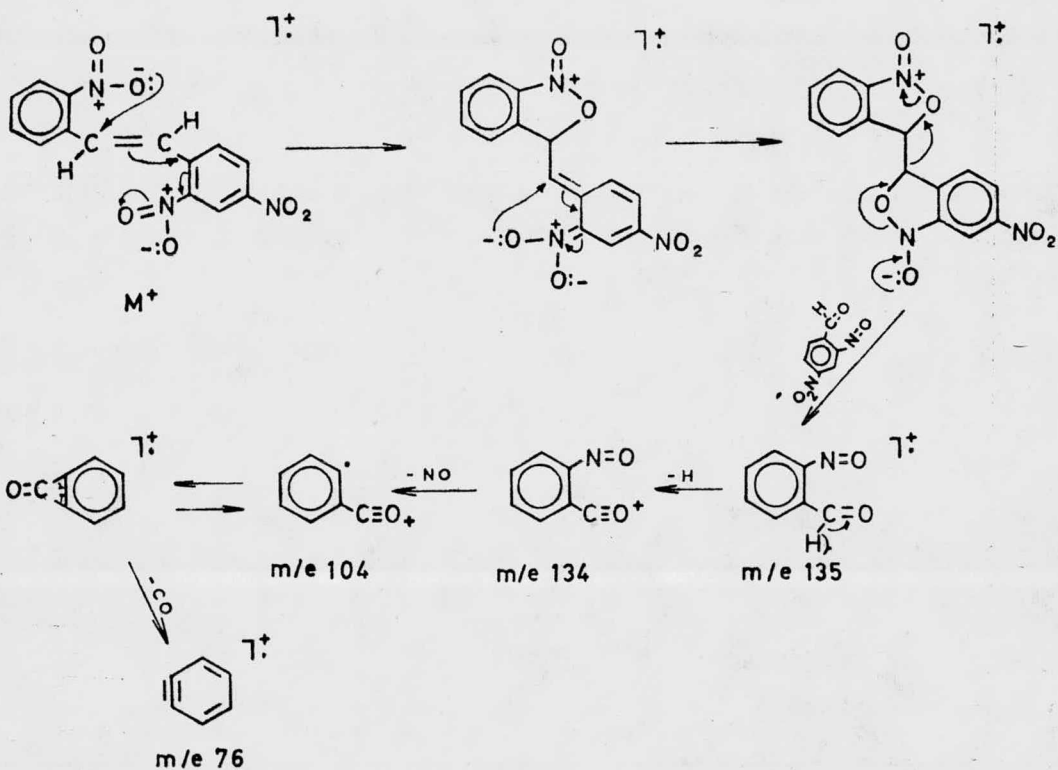
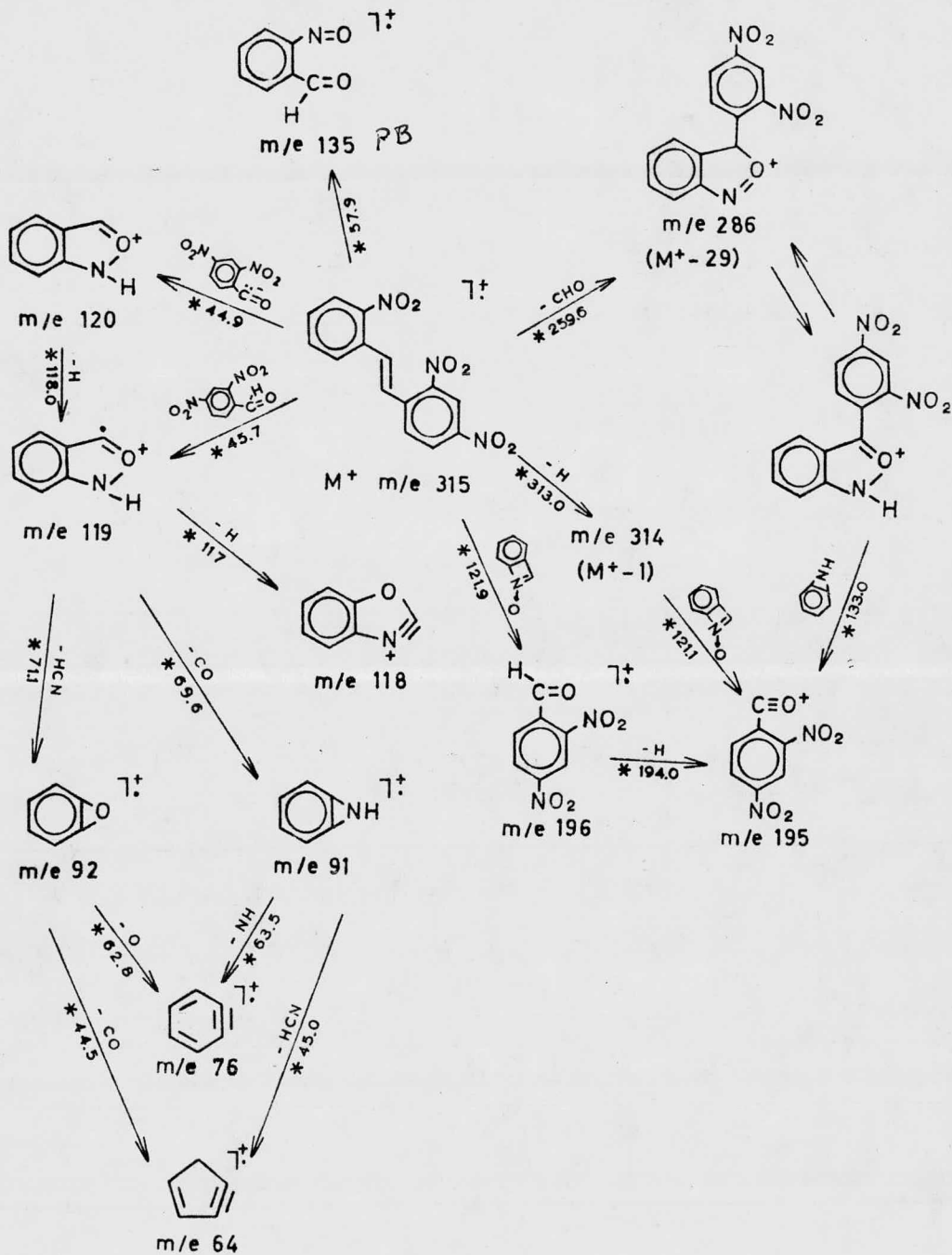


FIGURA 12



ESQUEMA 34

Las fragmentaciones presentadas en los esquemas 32 y 35 muestran la fragmentación total del 2,2',4-trinitro-estilbena.



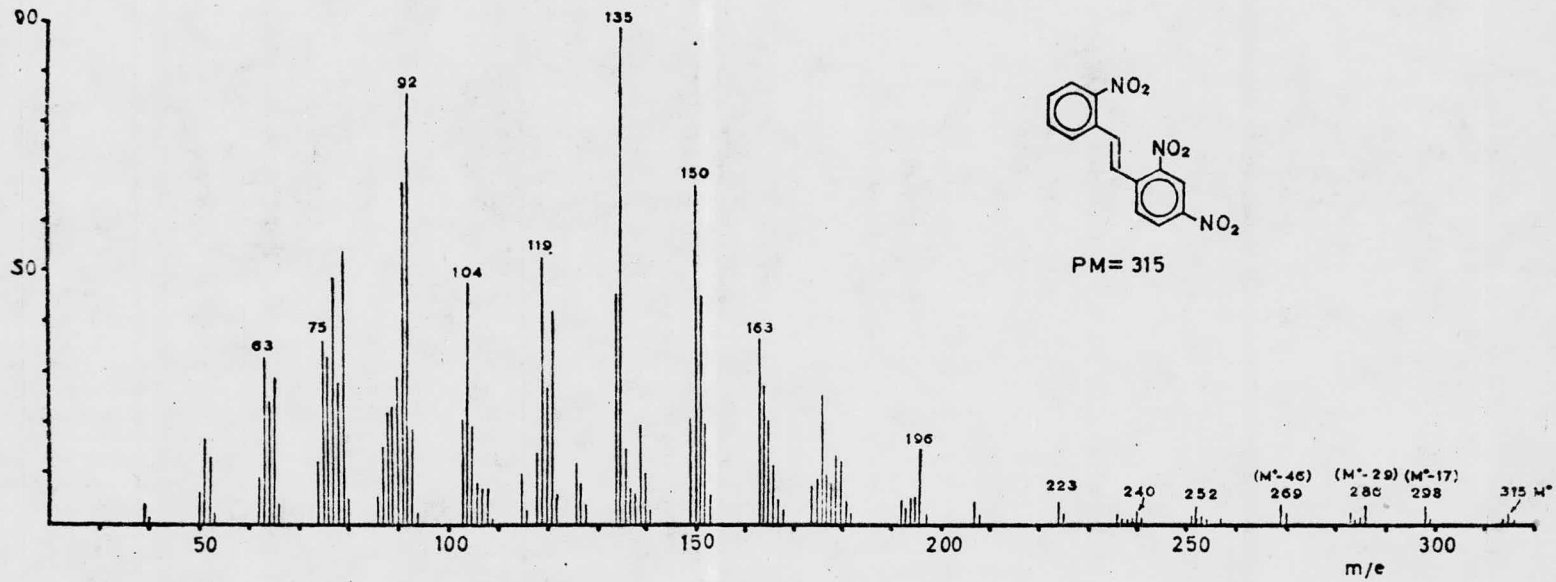


FIGURA 13

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

- 1.- Se proponen y comprueban, por medio de la medición de metaestables, nuevos mecanismos de fragmentación para los compuestos analizados.
- 2.- Se fija el patrón de fragmentación para este tipo de compuestos, quedando establecido que la formación de los principales fragmentos está guiada por el grupo nitro de la posición 2 y/o el de la posición 2'.
- 3.- Los sustituyentes en las posiciones 2', 3' y 4', con excepción del grupo nitro en 2', no cambian el patrón de fragmentación propuesto, pero sí modifican la abundancia relativa de los fragmentos.
- 4.- Se sintetizaron 13 compuestos, de los cuales 4 no se encuentran descritos en la literatura.

BIBLIOGRAFIA

BIBLIOGRAFIA

1.- Beynon, J. H.

Mass Spectrometry and its applications to Organic Chemistry
Elsevier Publishing Company (1960)

2.- Gottlieb, O. R.

Introdução à Espectrometria de Massa das Substâncias Orgânicas
Diretoria de Bibliografia e Documentação da Universidade Federal Rural
do Rio de Janeiro (1970)

3.- Johnstone, R. A. W.

Mass Spectrometry for Organic Chemists
Cambridge University Press (1972)

4.- Reed, R. I.

Mass Spectrometry
Academic Press (1965)

5.- Budzikiewicz, H., Djerassi, C., Williams, D. H.

Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds
Holden-Day, Inc. (1967)

- 6.- Jiménez, M. y Cortés, E. Rev. Lat. Quim. 6, 64 (1975)
- 7.- Güsten, H., Klasinc, L., Kramer, V. and Marsel, J. Org. Mass Spectrom. 8, 323 (1974)
- 8.- Bishop, G. and Brady, O. L. J. Chem. Soc. 121, 2364 (1922)
- 9.- Misbet, H. B. J. Chem. Soc. 129, 2081 (1927)
- 10.- Reed, E. H. Ed.
Chemistry of Carbon Compounds
Vol. 3
Elsevier Publishing Corp. (1956)
- 11.- Gibson, W. H., Duckham, R. and Fairbairn, R. J. Chem. Soc. 121, 270 (1922)
- 12.- Organic Synthesis
Collective Volume III, pag. 564
- 13.- Organic Synthesis
Collective Volume III, pag. 641
- 14.- Güsten, H., Klasinc, L., Marsel, J. and Miliwojević, D. Org. Mass Spectrom. 6, 175 (1972)

- 15.- Donaghue, P. F., Whittle, P. Y., Bowie, J. H., Roney, B. D. and Rodda,
H. J. Org. Mass Spectrom. 2, 1061 (1969)
- 16.- Güsten, H., Klasinc, L., Marsel, J. and Milivojević, D. Org. Mass
Spectrom. 5, 357 (1971)