

Preliminary communication

SPECTROMETRIE DE MASSE D'HETEROCYCLES DES ELEMENTS DU GROUPE IV

VI* . INTERPRETATION AUTOMATIQUE DE SPECTRE DE MASSE DE DERIVES DU SILACYCLOPENTADIENE EN VUE DE L'ELUCIDATION DE LEUR STRUCTURE

C. LAGEOT

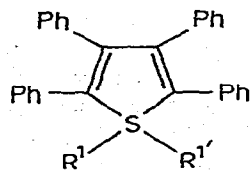
Laboratoire de Chimie Industrielle, Université de Droit, d'Economie et des Sciences, 13397 Marseille-Cedex 4 (France)

(Reçu le 2 octobre 1975)

Summary

The program previously elaborated to interpret automatically mass spectra of heterocyclic Group IV derivatives has been extended for silacyclopentadiene derivatives. In a few seconds their structure can be determined correctly.

Le programme mis au point précédemment [1] a été étendu pour que les spectres de masse des dérivés du silacyclopentadiène puissent être interprétés d'une manière automatique afin d'élucider leur structure (I–V). Nous retrouvons pour ces composés les mêmes fragmentations que pour les dérivés du silacyclopentane et germacyclopentane [2 à 5]; c'est à dire l'expulsion de fragments neutres comportant les carbones C(4) et C(5) ou bien C(2) et C(3) avec leurs substituants, ainsi que la formation d'ion silylénioïde du type $R^1-Si^+-R^{1'}$ conformément au Schéma 1.



(I) $R^1 = Me, R^{1'} = Ph$

(II) $R^1 = Cl, R^{1'} = Me$

(III) $R^1 = Cl, R^{1'} = Ph$

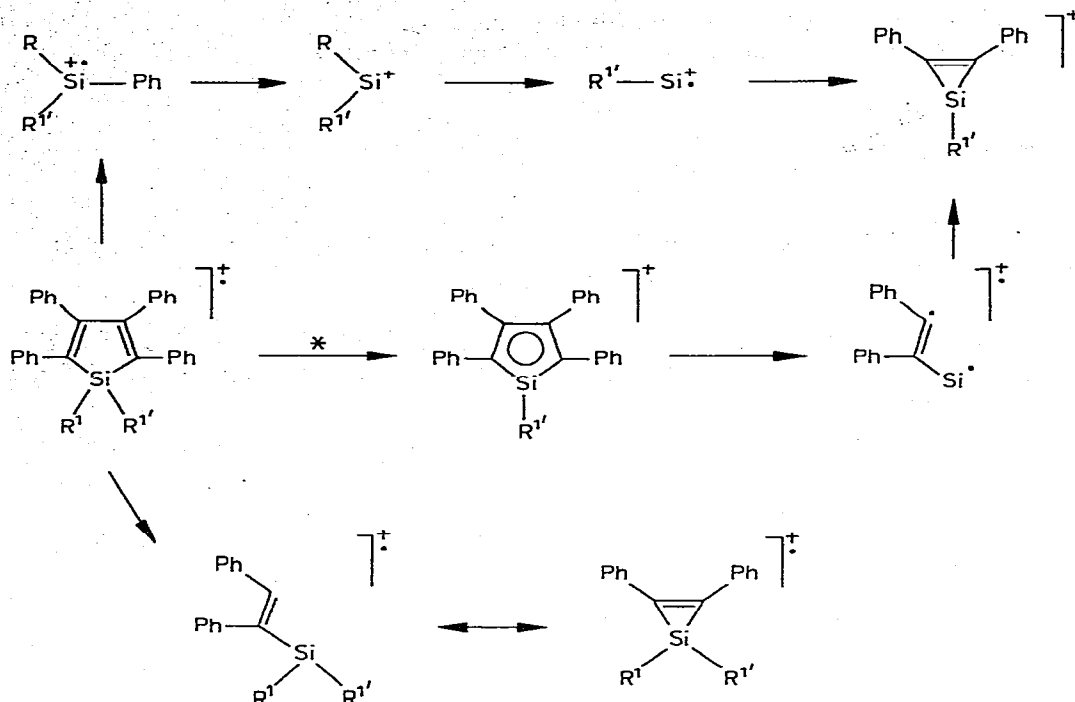
(IV) $R^1 = R^{1'} = PhCH_2$

(V) $R^1 = R^{1'} = C_4H_9$

Outre ces mécanismes, nous détectons de migrations (pour donner les ions

* Pour les articles précédents, se reporter à la ref. 1.

C8



SCHEMA 1

PhSi⁺R¹R^{1'} par exemple) conformes aux mécanismes décelés en spectrométrie de masse pour les silacyclopentadiènes [6].

Grâce donc aux seuls mécanismes communs de fragmentation, nous pouvons étendre notre programme par l'addition de nouvelles données (en particulier en faisant dans I les groupes Ph = 0) permettant l'interprétation de ces spectres de masse pour déterminer la structure des composés analysés.

Pour les silacyclopentadiènes analysés, les résultats corrects ont été donnés en quelques secondes et la structure de ceux ci reconstituée grâce au code topologique précédemment utilisé. Nous envisageons l'extension de ce programme aux complexes métalliques π incluant les dérivés du silacyclopentadiène.

Bibliographie

- 1 C. Lageot, J. Organometal. Chem., 96 (1975) 355.
- 2 C. Lageot, J. Organometal. Chem., 54 (1973) 131.
- 3 C. Lageot, J. Organometal. Chem., 60 (1973) 55.
- 4 A.M. Duffield, P. Mazerolles, J. Dubac et G. Manuel, J. Organometal. Chem., 12 (1968) 123.
- 5 A.M. Duffield, H. Budzinkiewicz et C. Djerassi, J. Amer. Chem. Soc., 87 (1965) 2920.
- 6 R. Maruca, M. Oertel et L. Roseman, J. Organometal. Chem., 35 (1972) 253.