

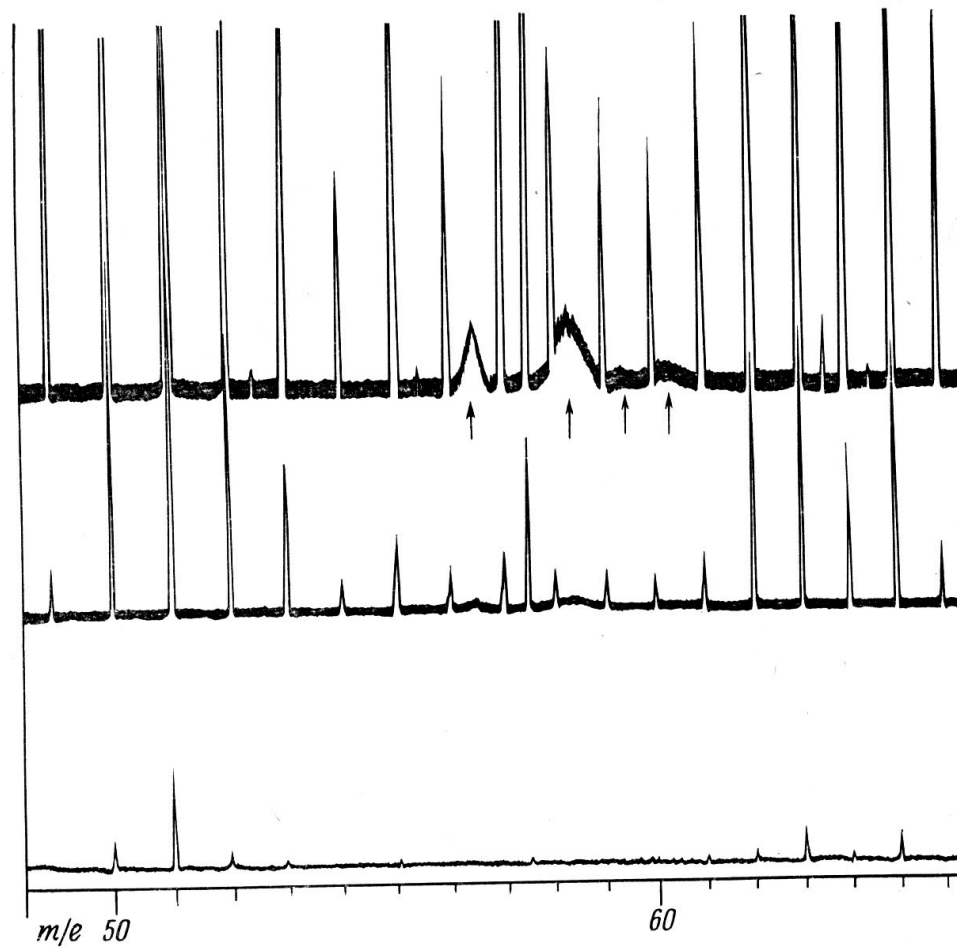


# ВИКОРИСТАННЯ МАС- СПЕКТРОМЕТРІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНИХ СПОЛУК

частина перша

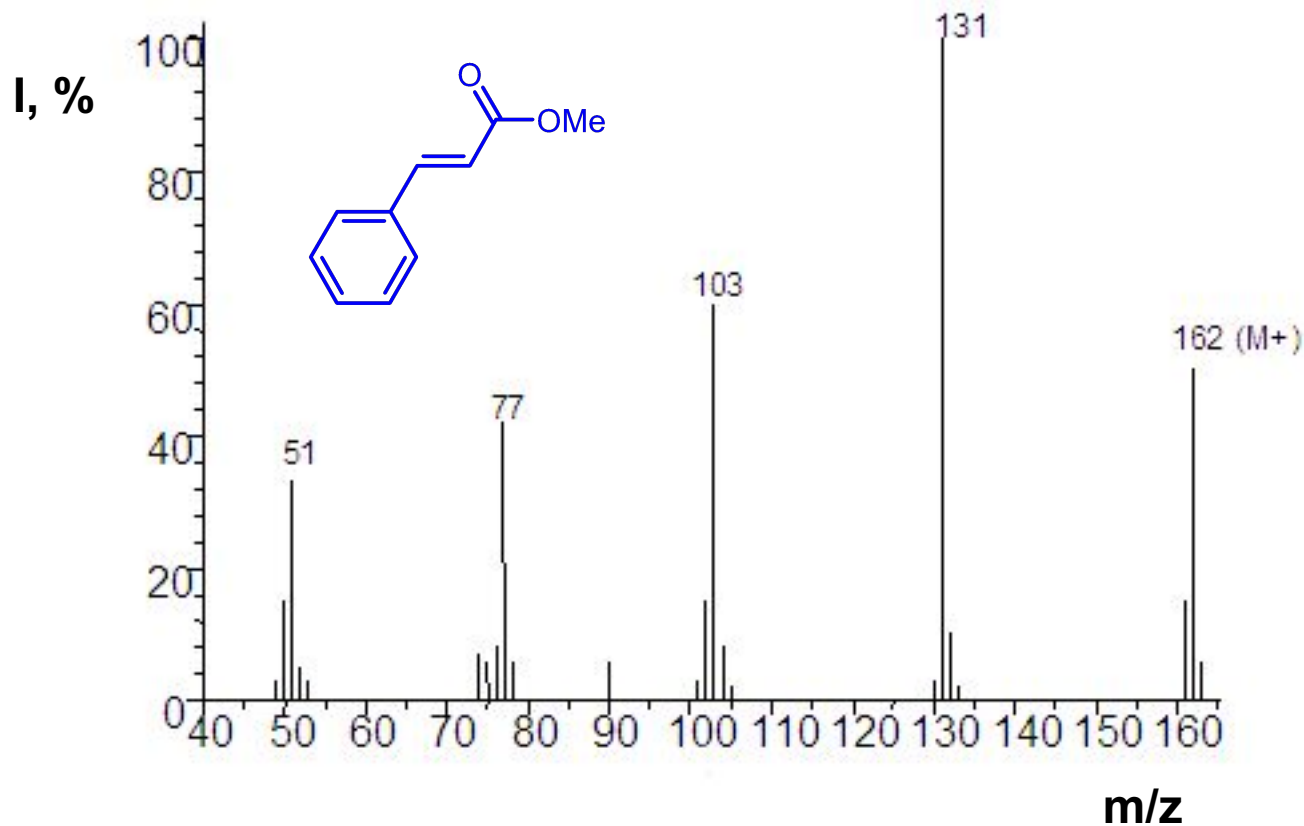


## “НЕОБРОБЛЕНИЙ” МАС-СПЕКТР (йонізація електронним ударом)





## МАС-СПЕКТР (йонізація електронним ударом) ПІСЛЯ КОМП'ЮТЕРНОЇ ОБРОБКИ



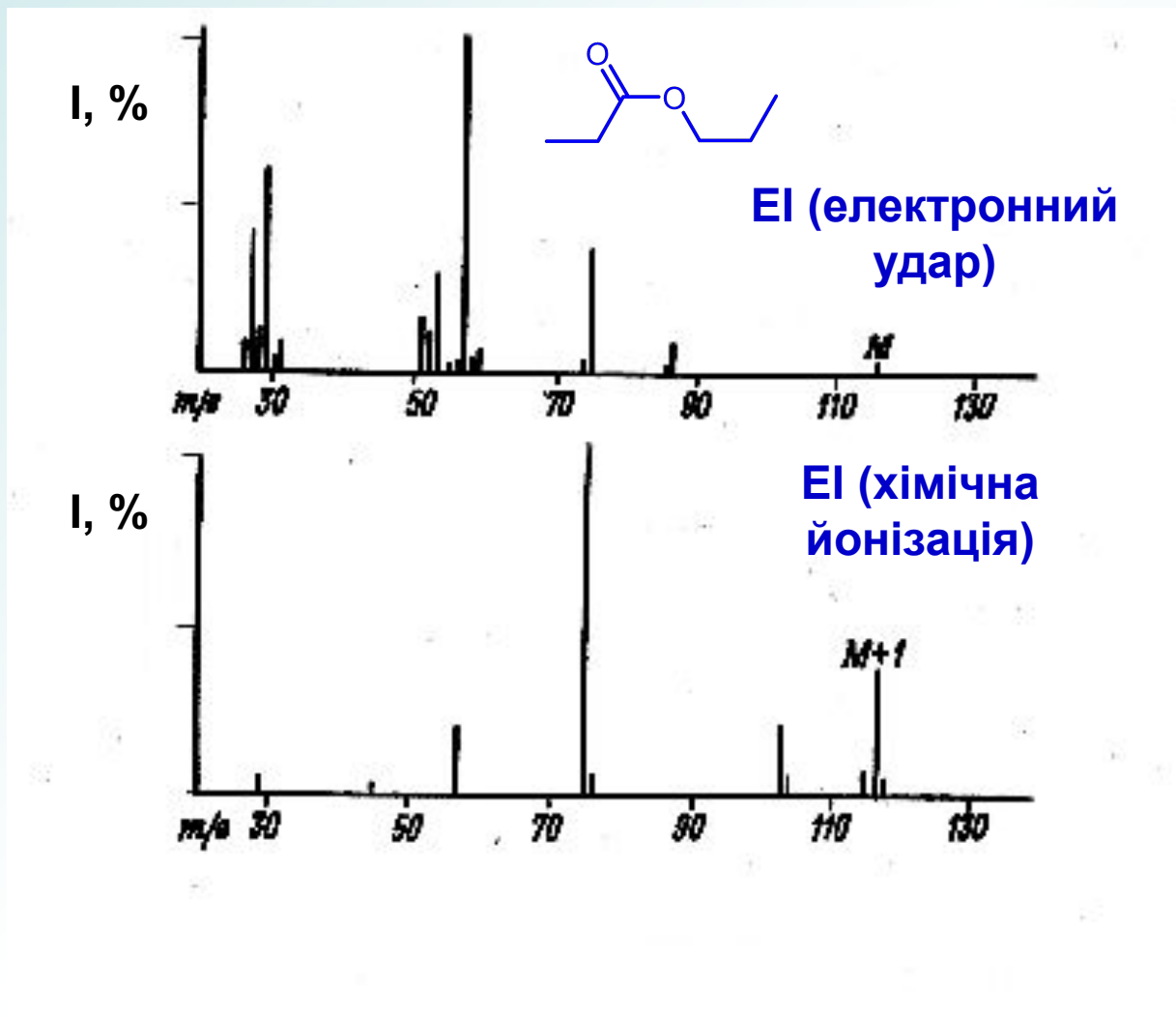
Опис спектра (в статтях, дипломних роботах, дисертаціях):

MS (EI), m/z, %: 162 (55%, M<sup>+</sup>), 131 (100%), 103 (62%), 77 (45%), 51 (36%).



## МАС-СПЕКТР

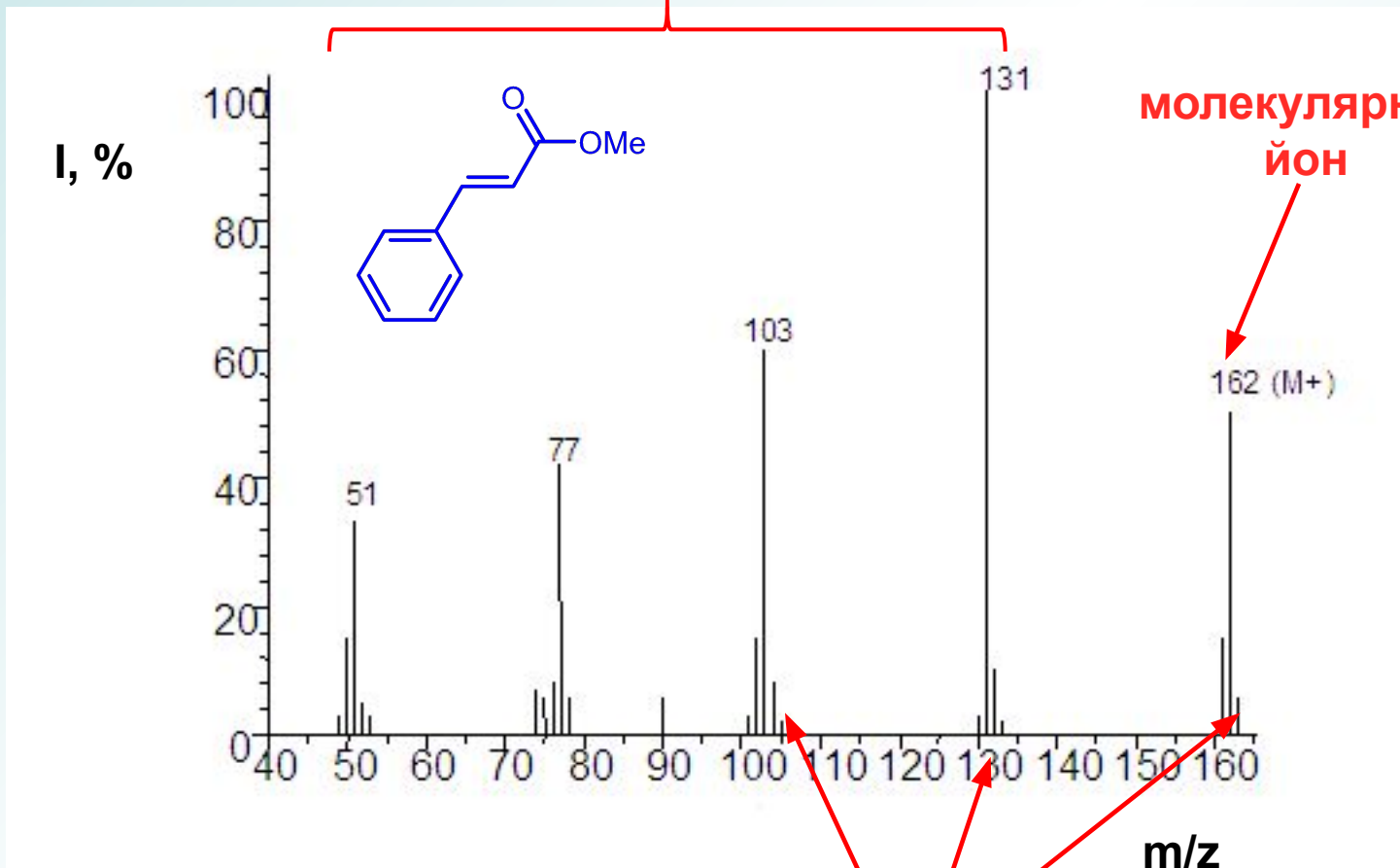
залежність від способу йонізації





# ТИПИ ЙОНІВ У МАС-СПЕКТРІ

осколочні йони





## МОЛЕКУЛЯРНИЙ ЙОН

- **ЙОН З МАСОЮ, ЩО ДОРІВНЮЄ МОЛЕКУЛЯРНІЙ МАСІ**
- **ЯК ПРАВИЛО, НАЙІНТЕНСИВНІШИЙ ЙОН В ПРАВІЙ ЧАСТИНІ СПЕКТРА**
- **ВИЗНАЧИВШИ МОЛЕКУЛЯРНУ МАСУ, МОЖНА ЗРОБИТИ ВИСНОВОК ПРО СКЛАД РЕЧОВИНИ**
  - **ПРИБЛИЗНО (азотне правило: значення молекулярної маси є парним числом, якщо в молекулі немає азоту, або є парна кількість його атомів; молекули з непарною кількістю атомів азоту мають непарну молекулярну масу)**
  - **ТОЧНО: точне значення молекулярної маси можна використати для встановлення бруто-формули**



## МОЛЕКУЛЯРНИЙ ЙОН

- **ТОЧНО:** точне значення молекулярної маси можна використати для встановлення брутто-формули

$^1\text{H}$ : 1.00782506

$^{16}\text{O}$ : 15.99491475

$^{14}\text{N}$ : 14.00307407

$\text{CO}$ : 27.994915

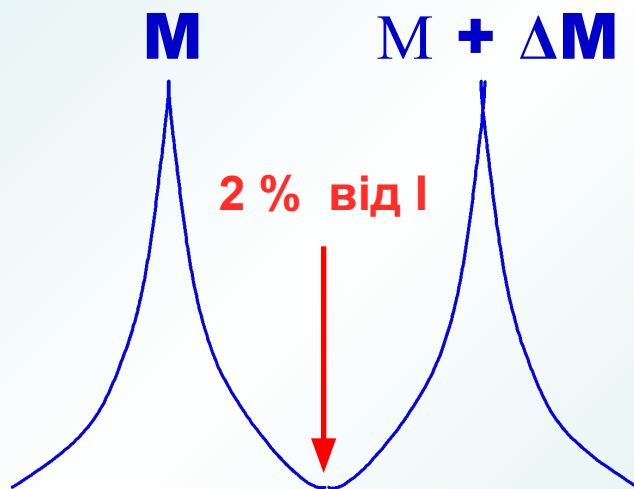
$\text{C}_2\text{H}_4$ : 28.03300

$\text{N}_2$ : 28.006148



## МОЛЕКУЛЯРНИЙ ЙОН

- Важливе значення для встановлення брутто-формули за точним значенням молекулярної маси має **РОЗДІЛЬНА ЗДАТНІСТЬ МАС-СПЕКТРОМЕТРА (R)**

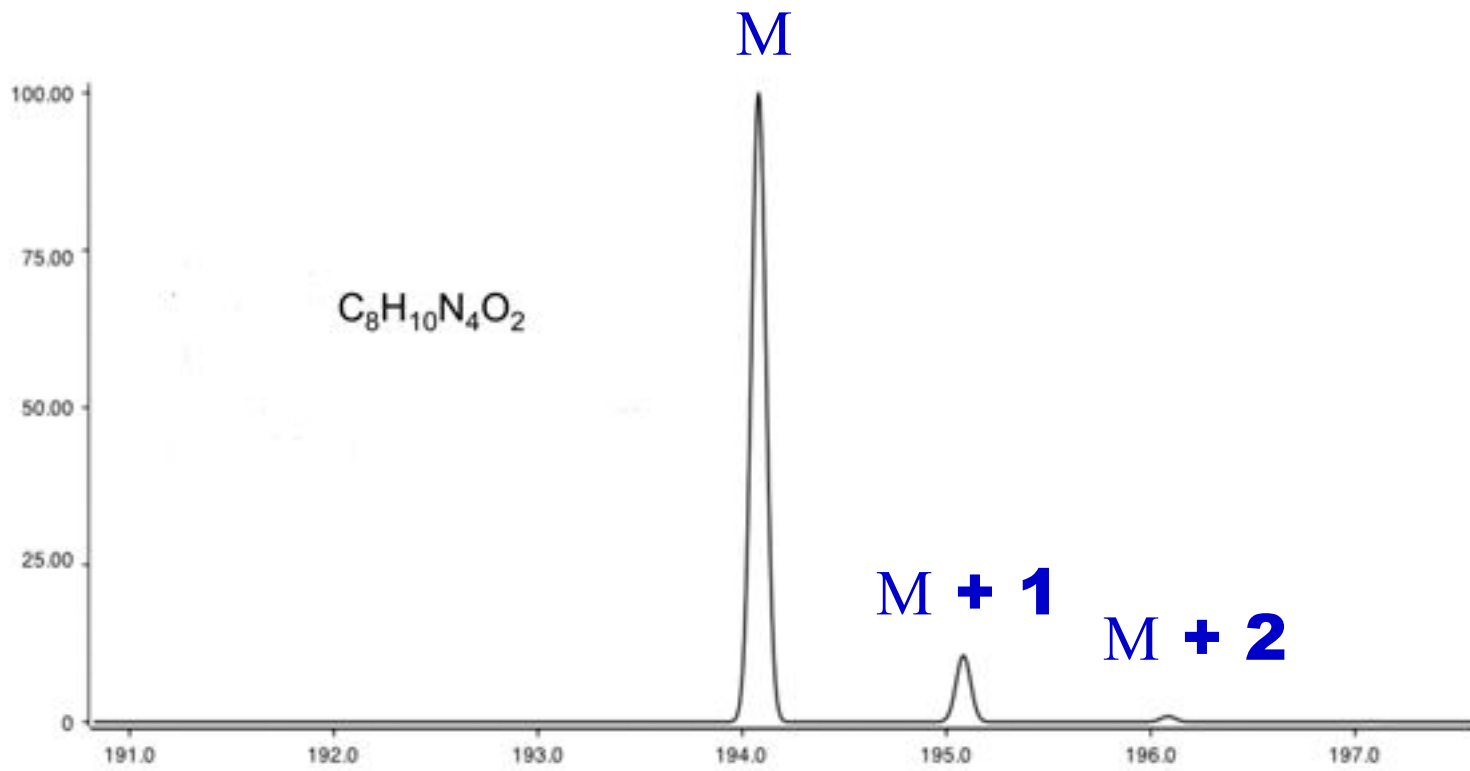


$$R = M / \Delta M$$





# ВСТАНОВЛЕННЯ БРУТТО-ФОРМУЛИ ЗА СПІВВІДНОШЕННЯМ ІНТЕНСИВНОСТЕЙ ПІКІВ ІЗОТОПНИХ САТЕЛІТІВ





## СПІВВІДНОШЕННЯ ІНТЕНСИВНОСТЕЙ ПІКІВ ІЗОТОПНИХ САТЕЛІТІВ

залежить від величин природного вмісту ізотопів елементів, що входять до складу молекул

залежить від складу молекул

Наприклад:

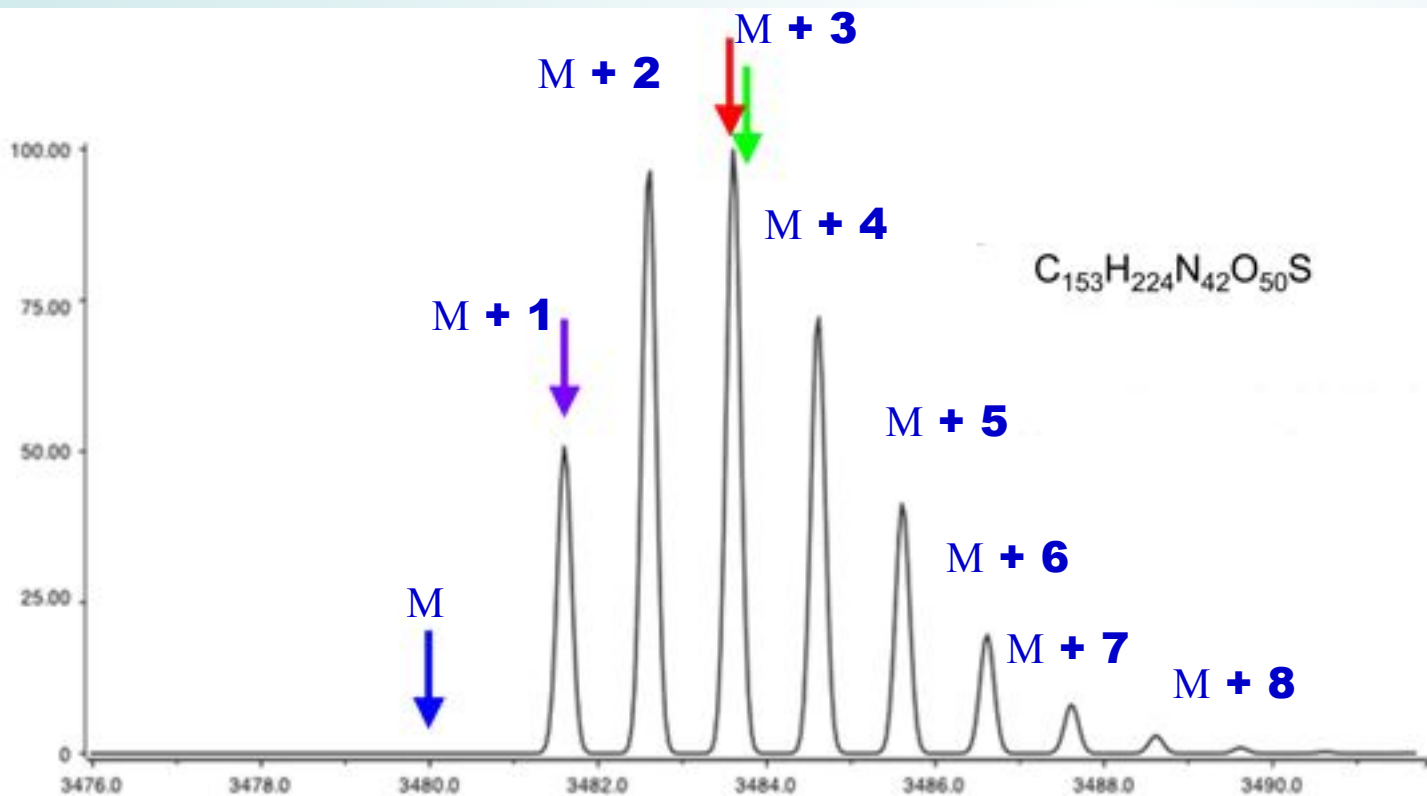
$$\text{для } \text{CH}_4 \quad I(M)/I(M+1) = 98.9$$

(природний вміст  $^{13}\text{C} = 1.1\%$  по відношенню до  $^{12}\text{C}$ )

$$\text{для } \text{C}_2\text{H}_6 \quad I(M)/I(M+1) = 45.4$$



## СПІВВІДНОШЕННЯ ІНТЕНСИВНОСТЕЙ ПІКІВ ІЗОТОПНИХ САТЕЛІТІВ

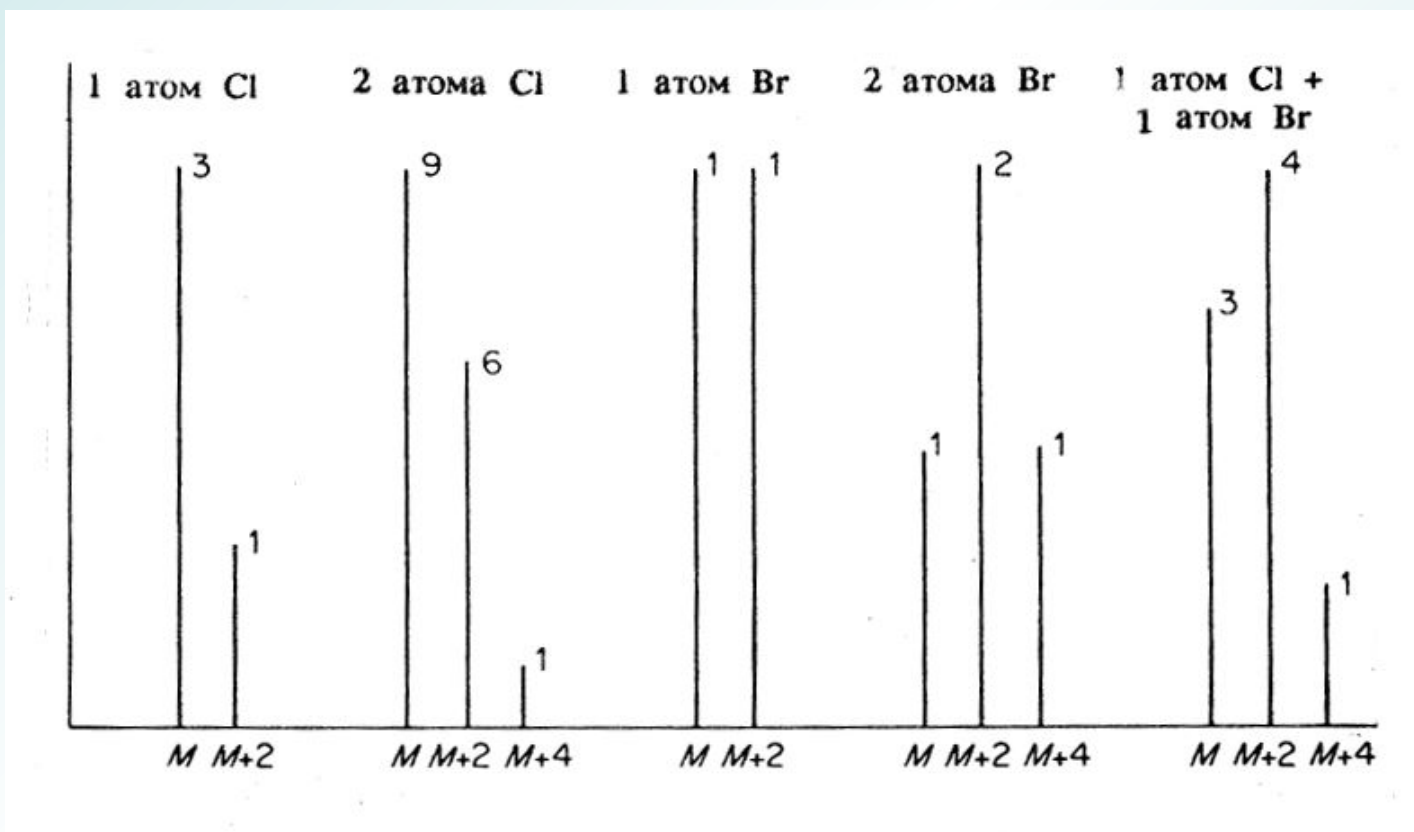




## СПІВВІДНОШЕННЯ ІНТЕНСИВНОСТЕЙ ПІКІВ ІЗОТОПНИХ САТЕЛІТІВ

ВМІСТ  $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl} = 3:1$ ;

$^{79}\text{Br}/^{81}\text{Br} = 1:1$





## ІДЕНТИФІКАЦІЯ

