

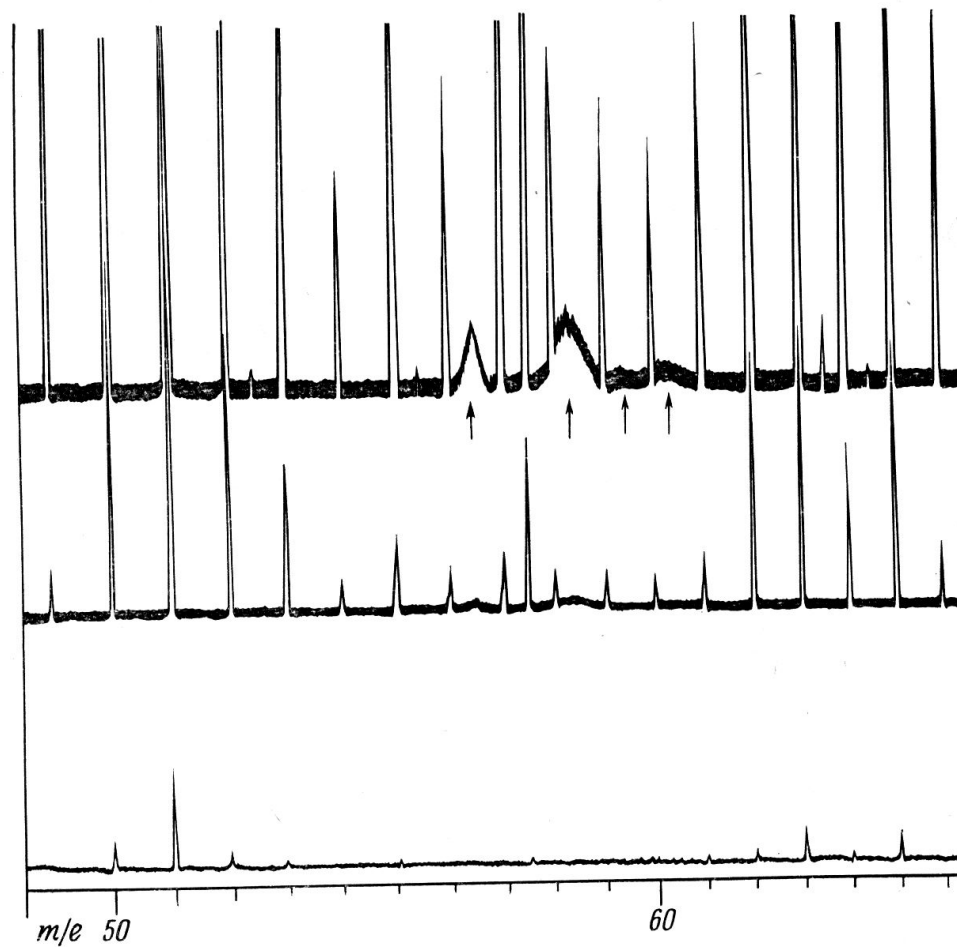


ВИКОРИСТАННЯ МАС- СПЕКТРОМЕТРІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНИХ СПОЛУК

частина перша

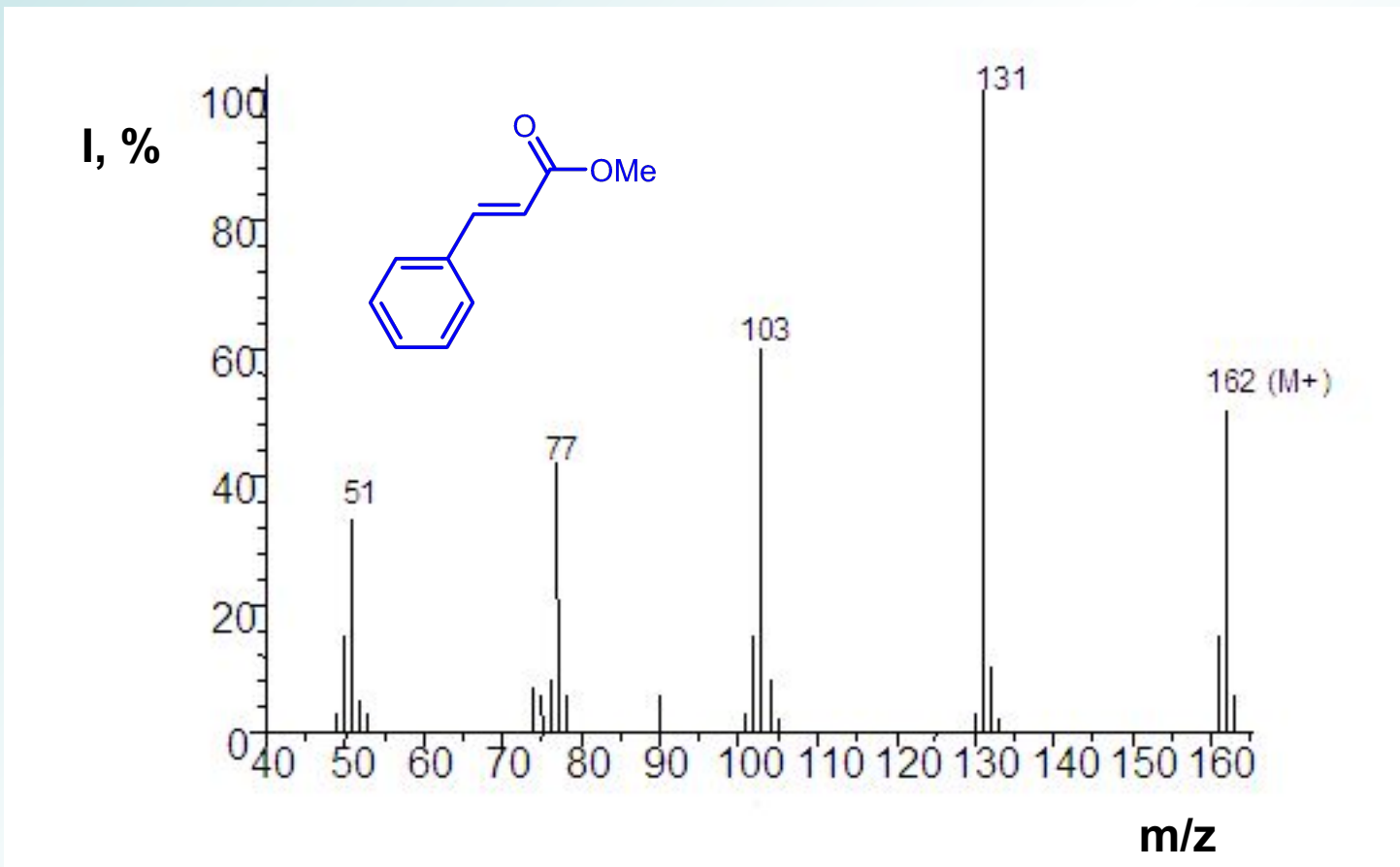


“НЕОБРОБЛЕНИЙ” МАС-СПЕКТР (йонізація електронним ударом)





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



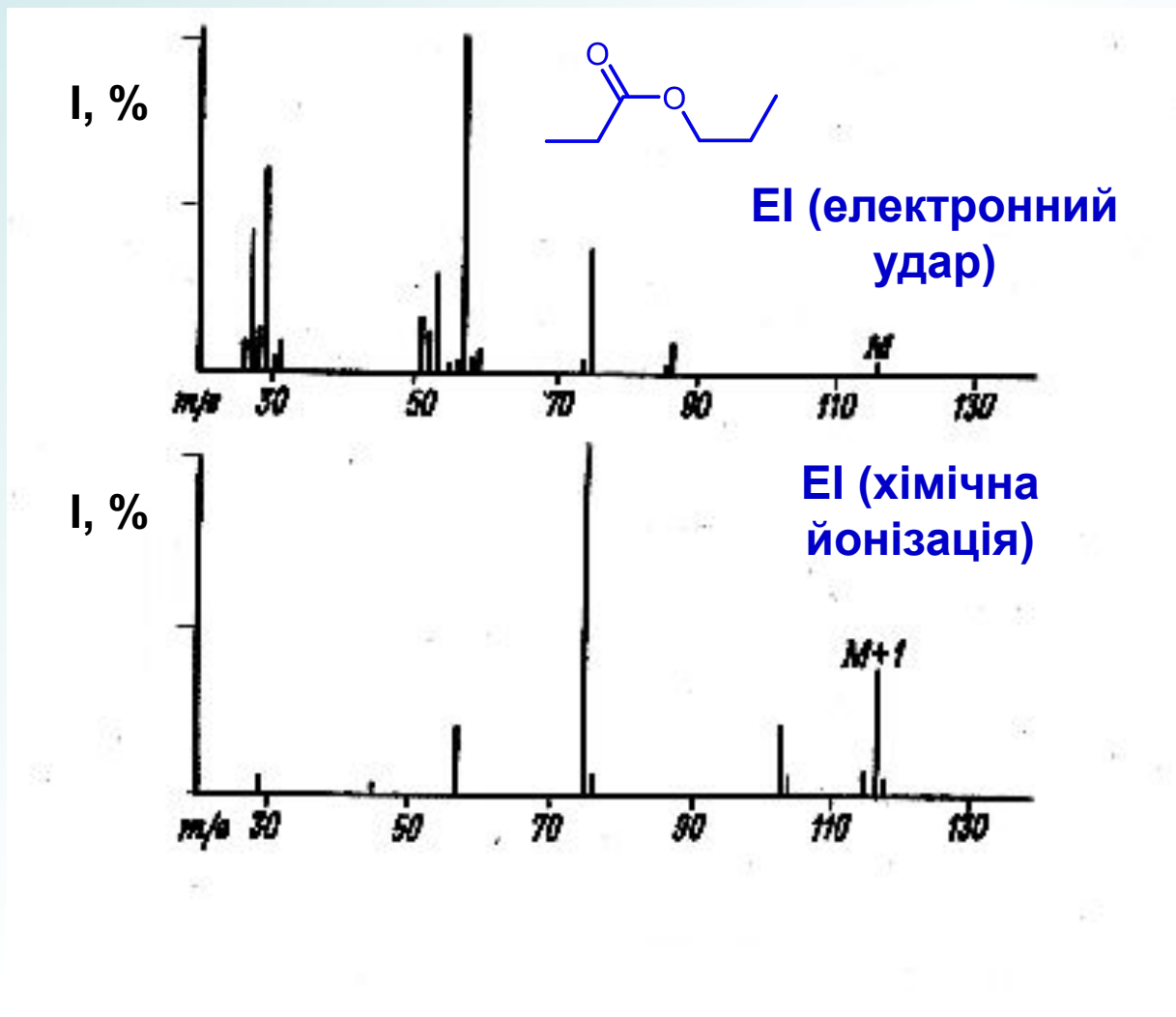
Опис спектра (в статтях, дипломних роботах, дисертаціях):

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



МАС-СПЕКТР

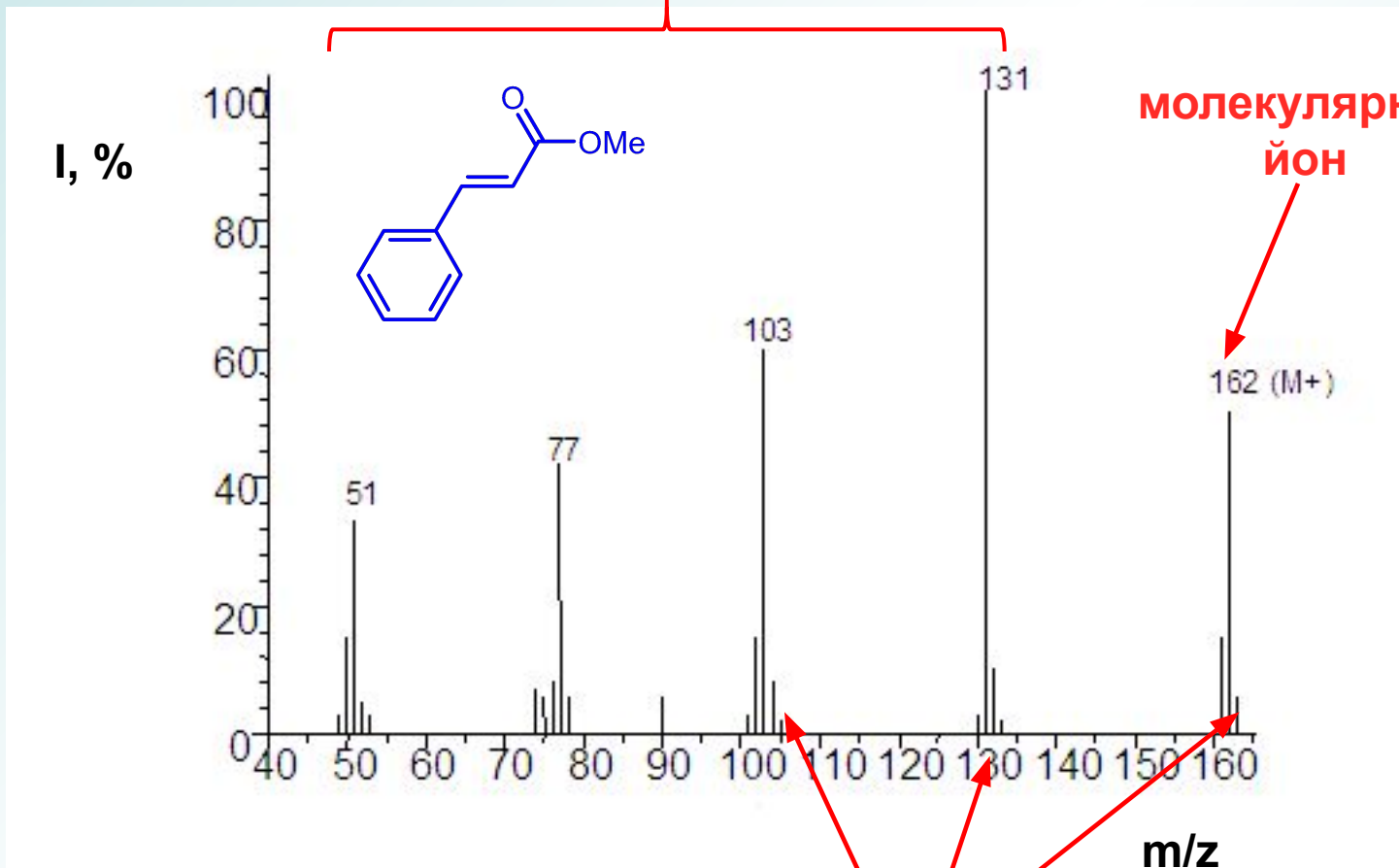
залежність від способу йонізації





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

^1H : 1.00782506

^{16}O : 15.99491475

^{14}N : 14.00307407

CO : 27.994915

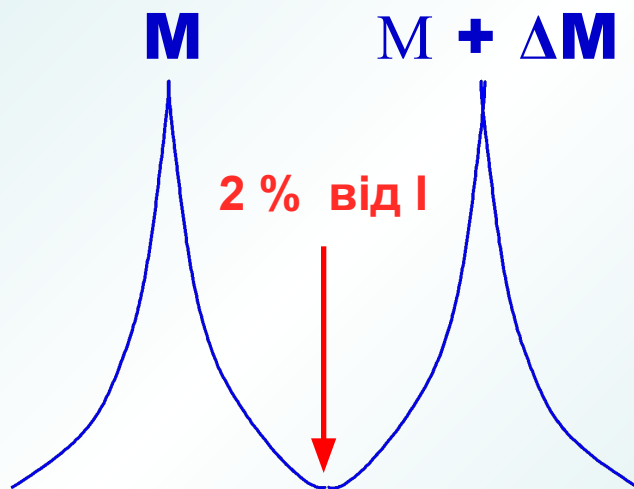
C_2H_4 : 28.03300

N_2 : 28.006148



МОЛЕКУЛЯРНИЙ ЙОН

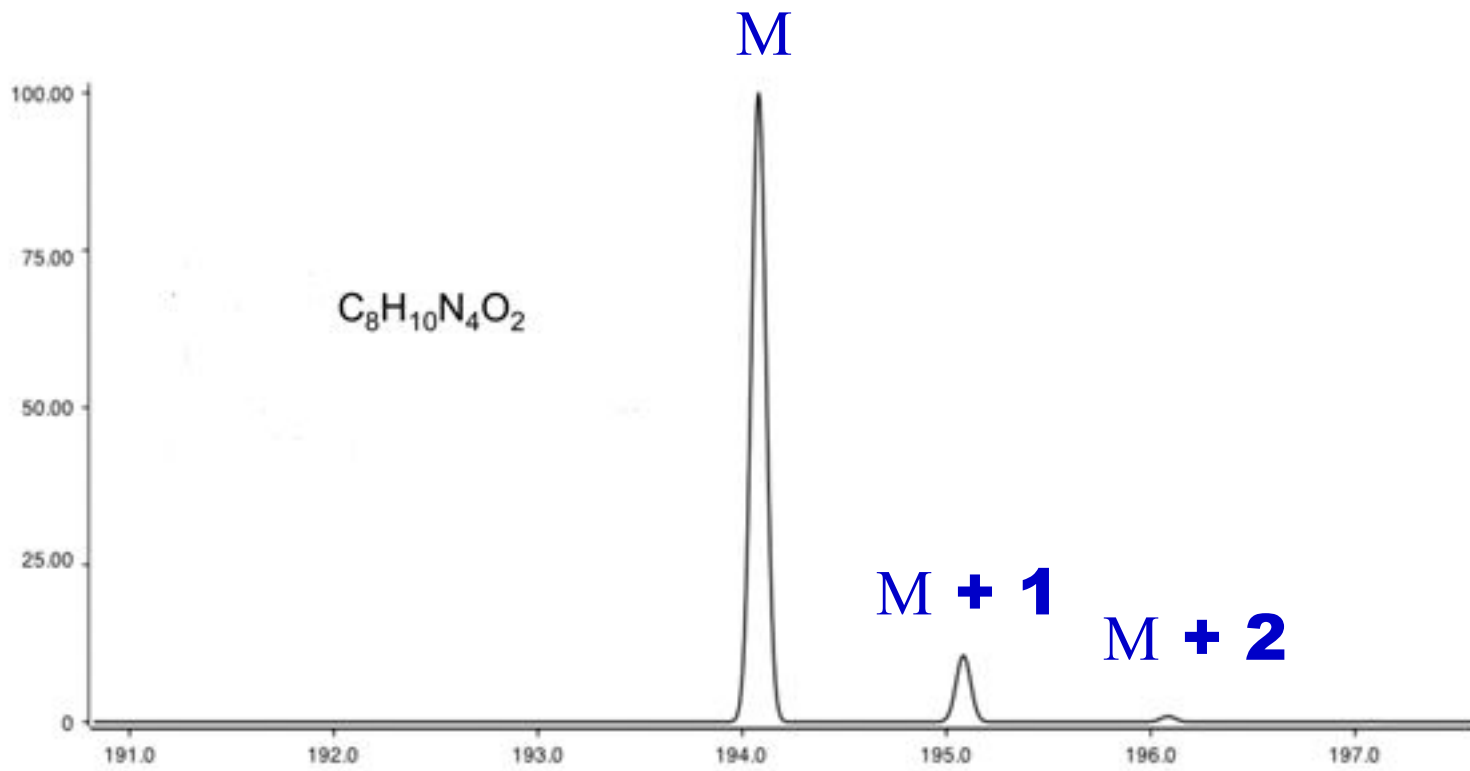
- Важливе значення для встановлення брутто-формули за точним значенням молекулярної маси має **РОЗДІЛЬНА ЗДАТНІСТЬ МАС-СПЕКТРОМЕТРА (R)**



$$R = M / \Delta M$$



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:

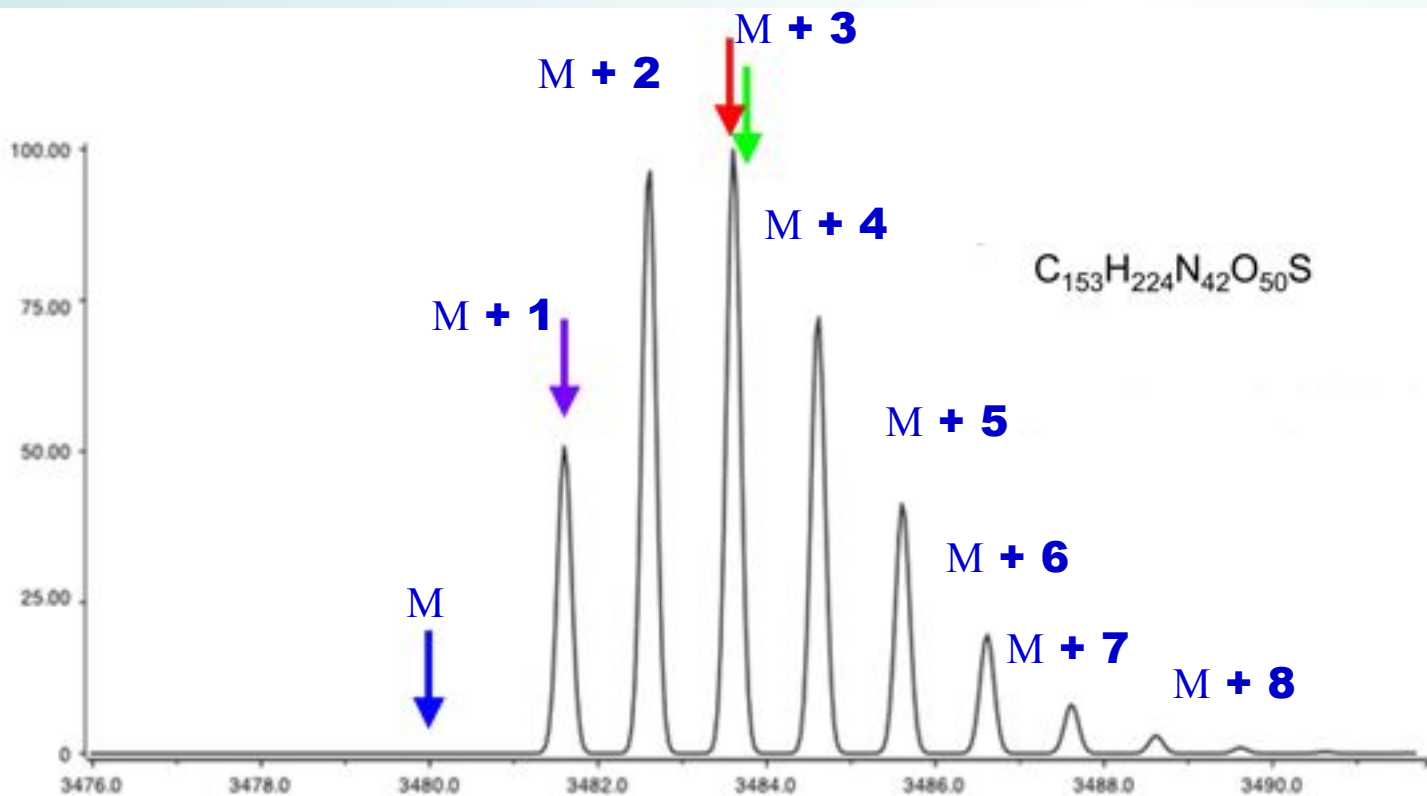
$$\text{для } \text{CH}_4 \quad I(M)/I(M+1) = 98.9$$

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

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



СПІВВІДНОШЕННЯ ІНТЕНСИВНОСТЕЙ ПІКІВ ІЗОТОПНИХ САТЕЛІТІВ

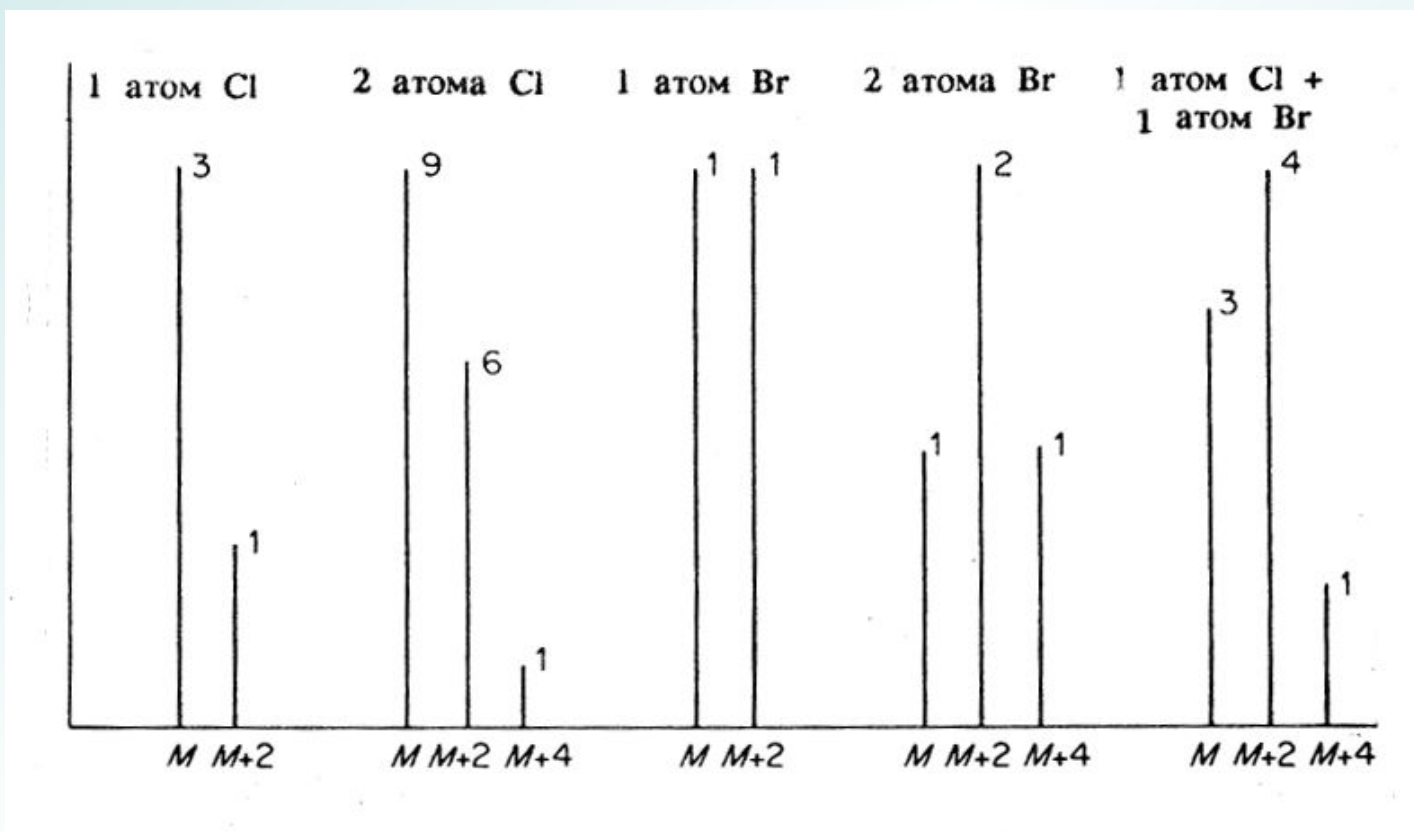




СПІВВІДНОШЕННЯ ІНТЕНСИВНОСТЕЙ ПІКІВ ІЗОТОПНИХ САТЕЛІТІВ

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

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





ІДЕНТИФІКАЦІЯ

