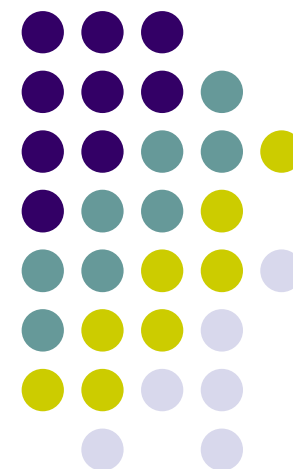
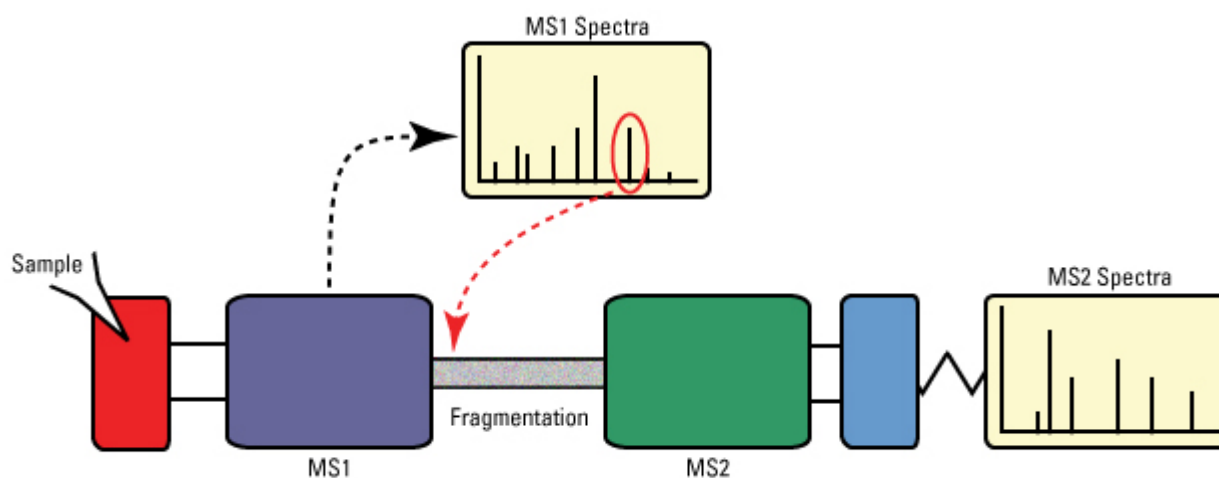


Анализа на масени спектри



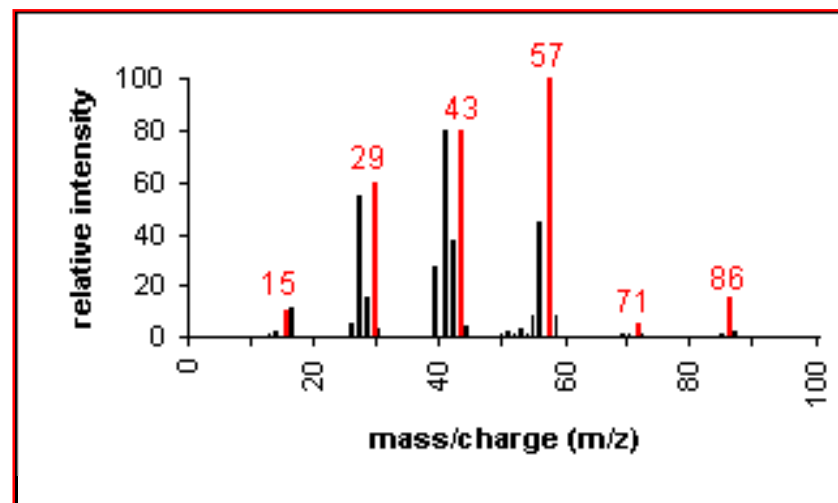
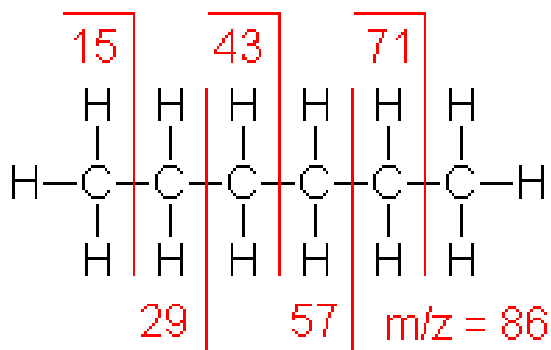
Асс. д-р Ясмина Петреска Станоева



АЛКАНИ

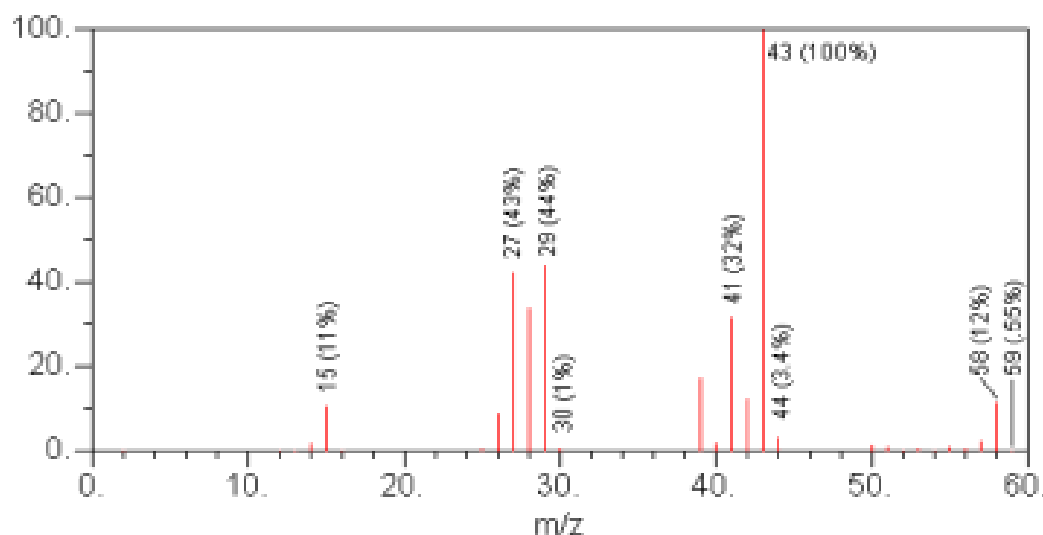


- Молекулскиот јон на алканите е со мал интензитет
- Кај нив се забележува серија на загуби од 14 единици за маса



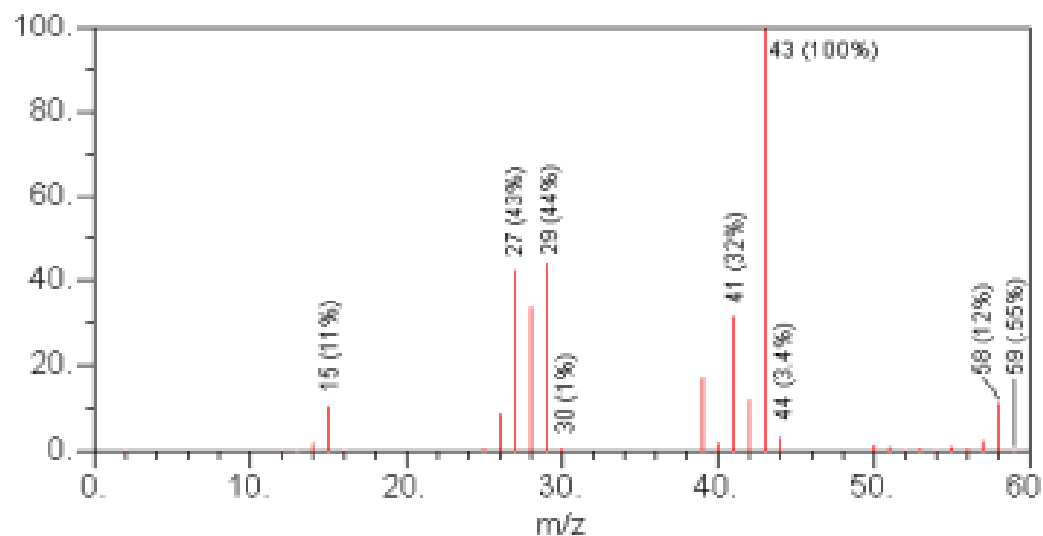
Масен спектар на хексан, C_6H_{14} ,
MW = 86,18

1. Молекулскиот јон во следниот спектар има маса 58. На која алкил група настанала загуба за да се добие најинтензивниот фрагмент со m/z 43?



- а) метил (CH_3)
- б) етил (CH_3CH_2)
- в) пропил ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2$)

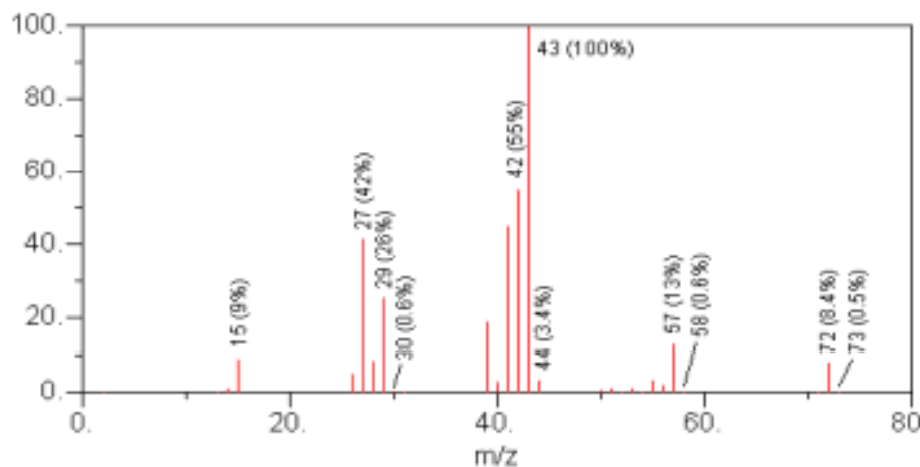
2. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.



- а) 2-метил бутан
- б) бутан
- в) пентан
- г) циклобутан
- д) 1-бутен

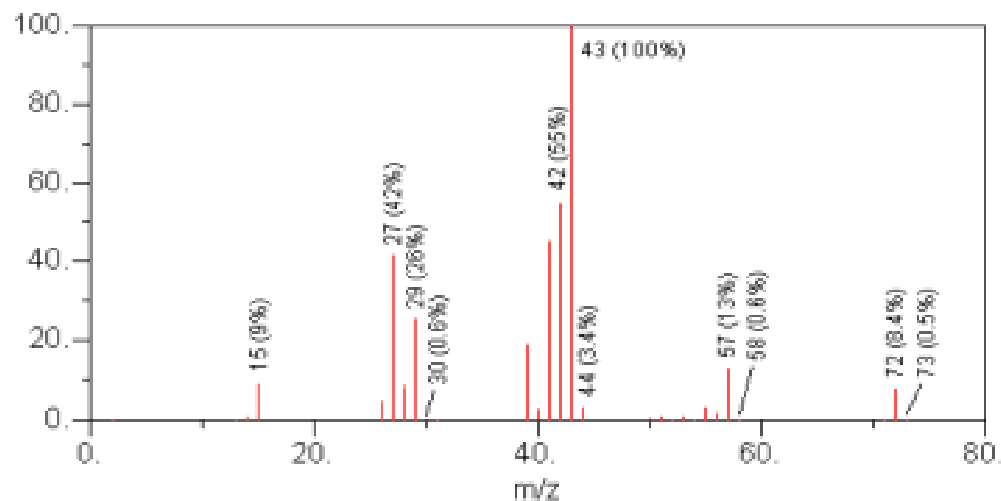
3. Најинтензивниот пик во спектарот може да е пик на молекулскиот јон или пик на негов изотоп.

Во спектарот подолу колку јаглеродни атоми се прикажани со молекулскиот пик 72 и со неговиот изотопски пик 73?



- а) 2
- б) 3
- в) 4
- г) 5
- д) 6

4. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.

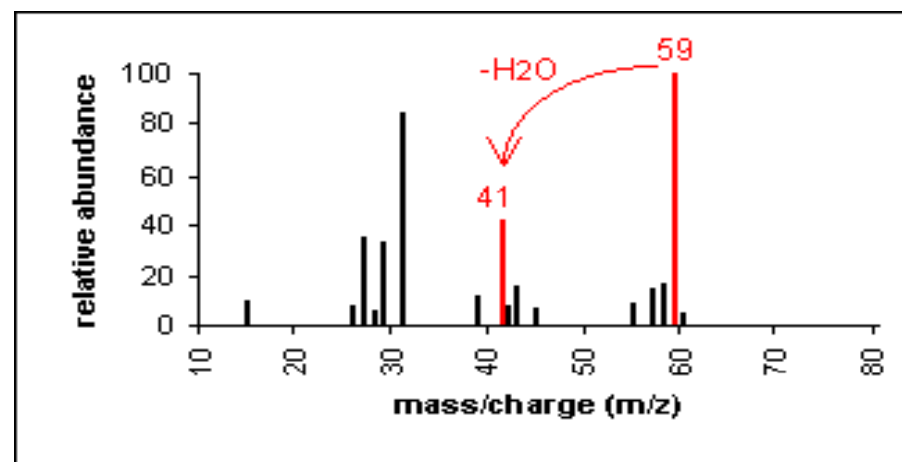
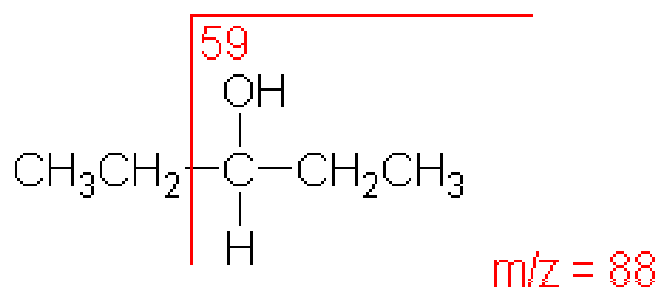


- а) хексан
- б) 1-пентен
- в) 2-метил пентан
- г) 2,2-диметил пропан
- д) пентан

АЛКОХОЛИ



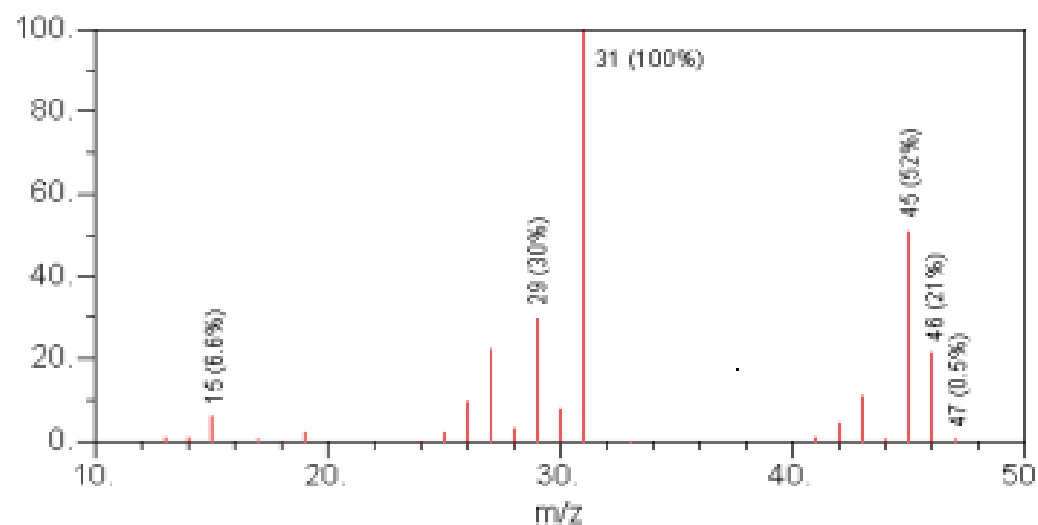
- ⊙ Молекулскиот јон на алкохолите е многу мал, а понекогаш воопшто и не постои.
- ⊙ Најверојатна е фрагментација на C-C врската која се наоѓа веднаш до кислородот.
- ⊙ Често може да се забележи загуба на вода.



Масен спектар на 3-пентанол, $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$,
MW = 88,15



1. Идентификувајте го молекулскиот јон на следниот спектар.

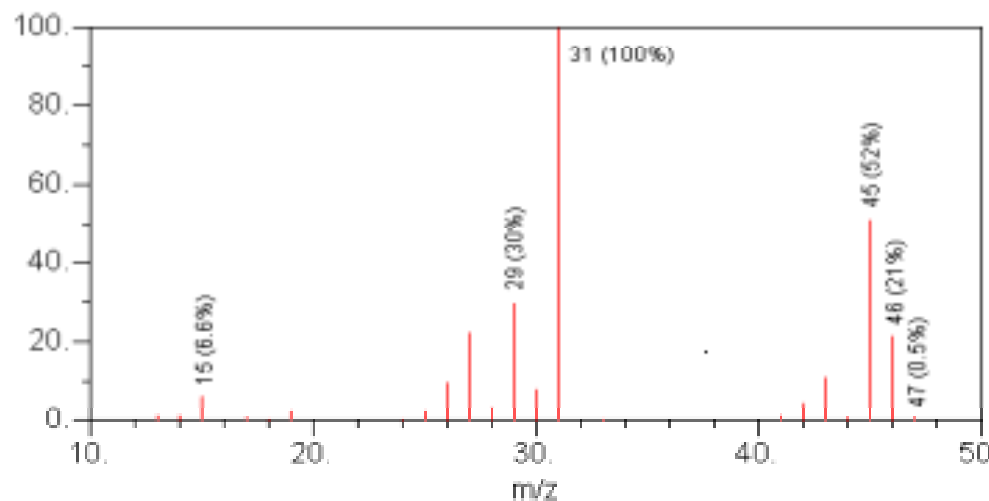


а) 45

б) 46

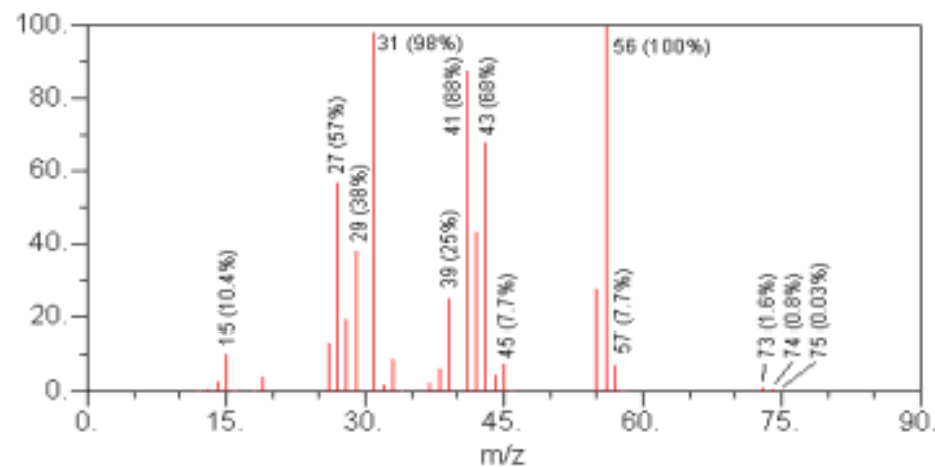
в) 47

2. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.



- а) мравска киселина
- б) 1-пропанол
- в) етанол
- г) метанол
- д) изопропил алкохол

3. На спектарот подолу, најдете ги фрагментите на алкилната јонска серија.

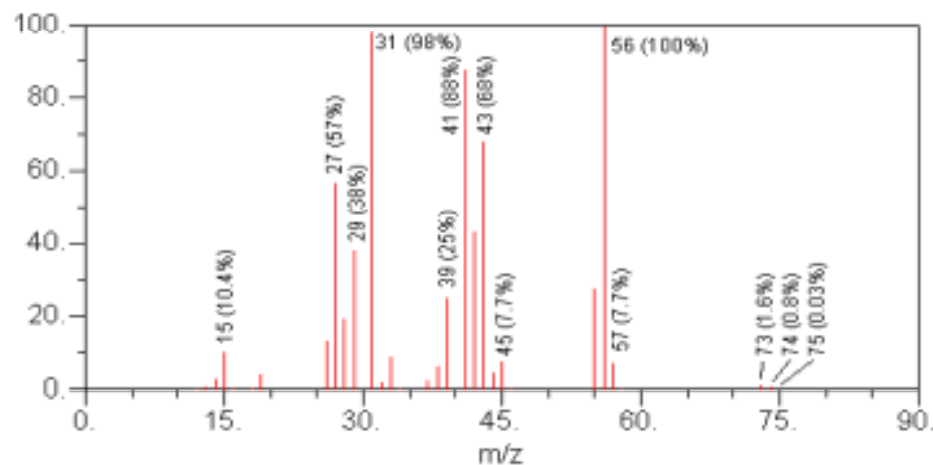


а) 15, 29, 43, 57

б) 31, 45

в) нема

4. Изберете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.

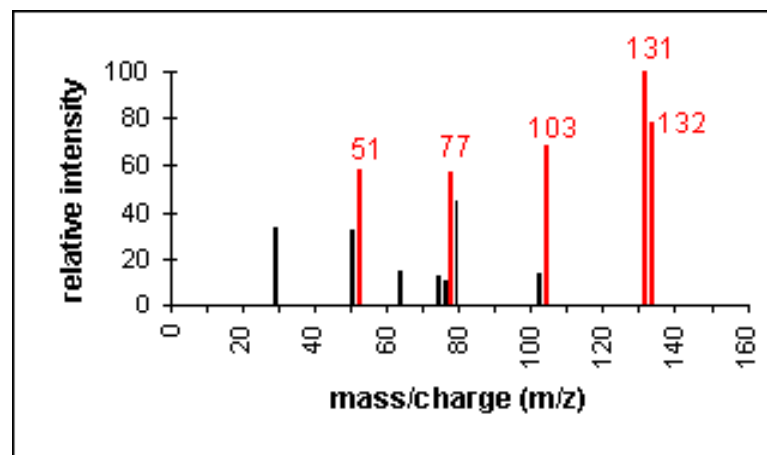
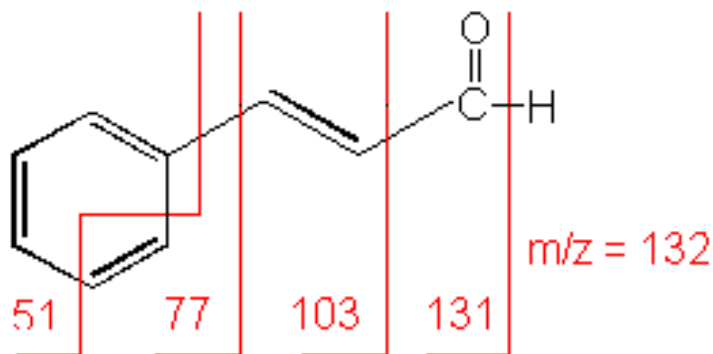


- а) 2-метил-2-пропанол
- б) 1-бутанол
- в) 2-бутанол
- г) 1-пентанол
- д) 2-метил-1-пропанол

АЛДЕХИДИ



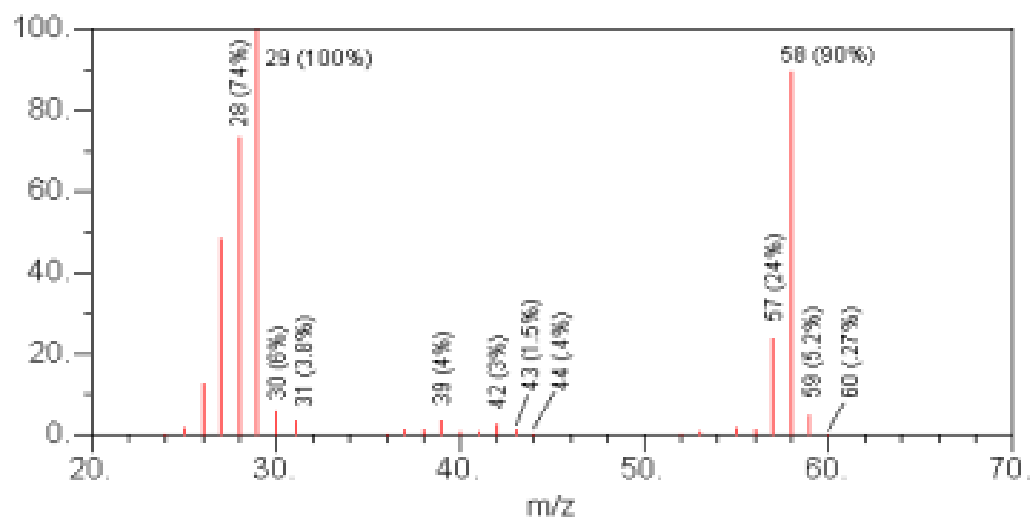
- ⊙ За алдехидите е карактеристична **загуба на водородот** (при што се добива пик со маса за еден помала од масата на молекулскиот пик)
- ⊙ **или загуба на CHO** (загуба од 29)



Масен спектар на
3-фенил-2-пропенал, C_9H_8O , MW
= 132,16



1. Колку кислороди содржи компонентата, која може да се прикаже со следниот масен спектар?

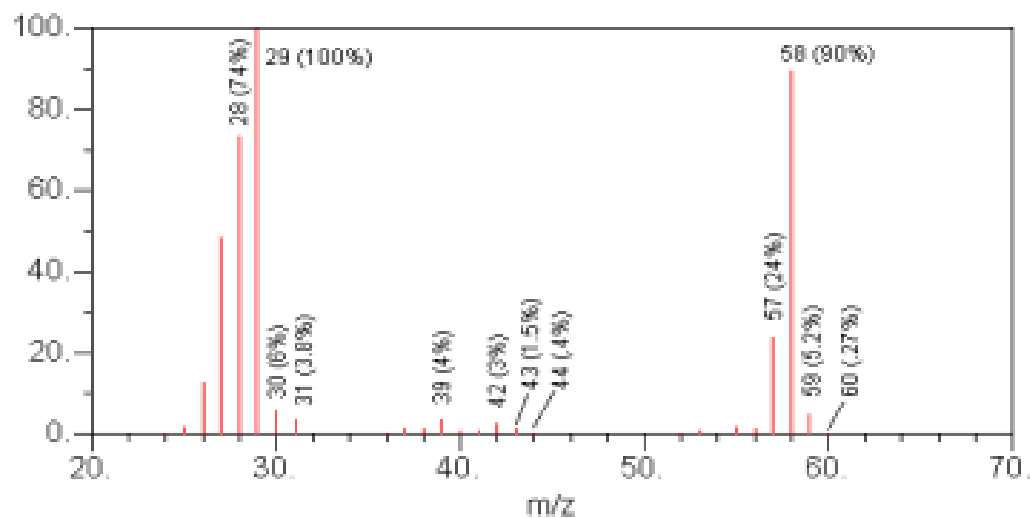


a) 0

b) 1

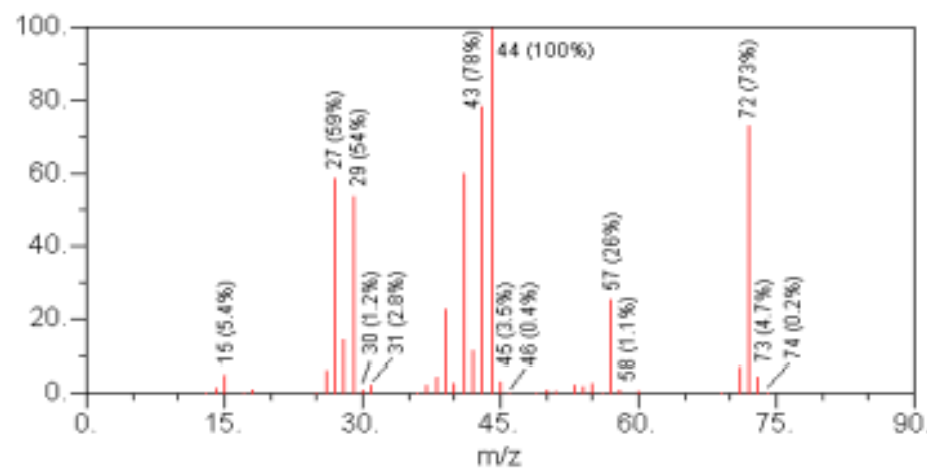
c) 2

2. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.



- а) бутанал
- б) пропанал
- в) 2-пропенал
- г) метокси етен
- д) етандиол

3. Најдете кои фрагменти се должат на алкилна серија во следниот спектар.

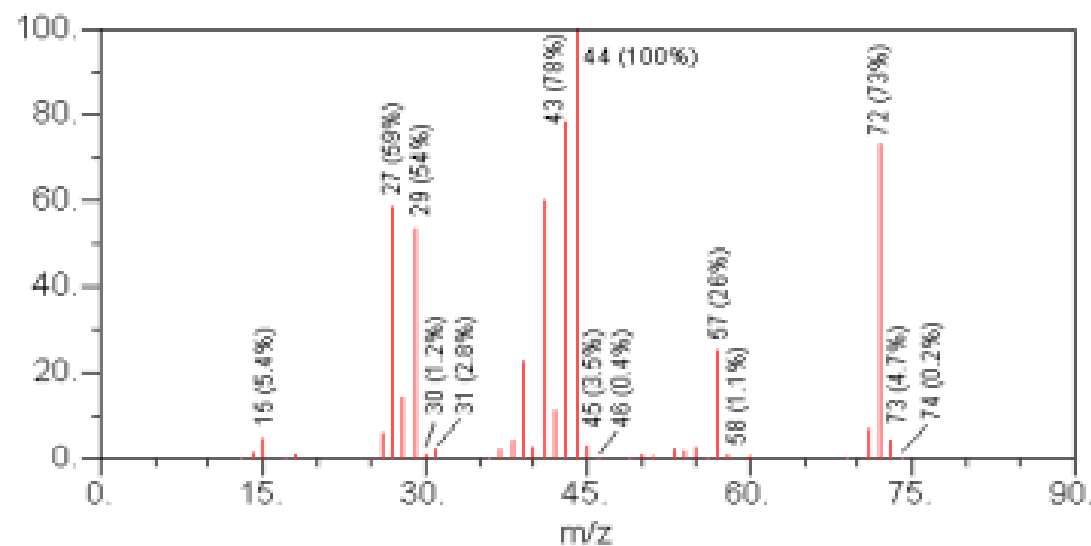


а) 15, 29, 43

б) 29, 43, 57

в) нема

4. Најдете ги загубите на алкилната серија.

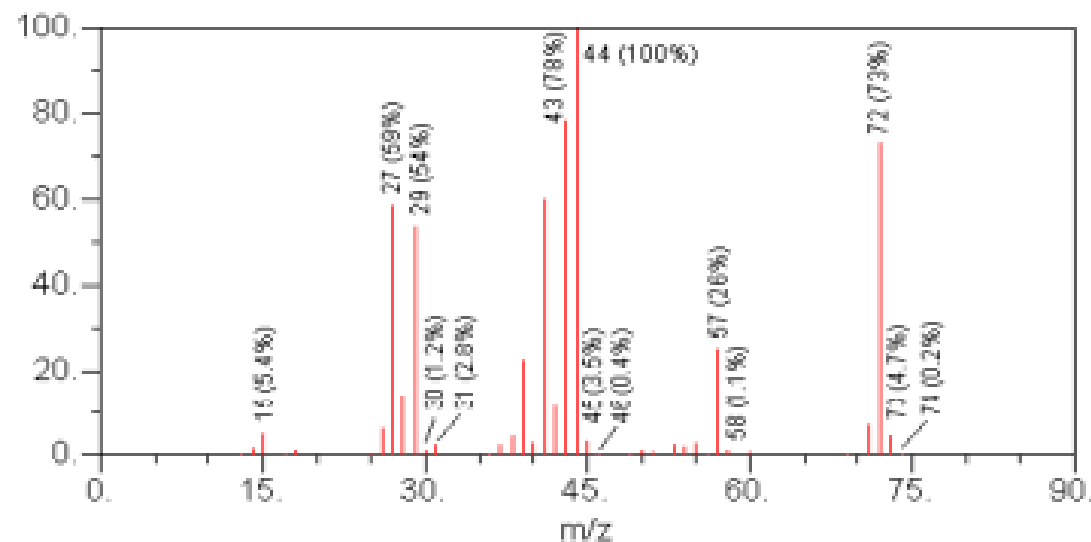


а) 15, 29, 43

б) 29, 43, 57

в) нема

5. Определте ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.

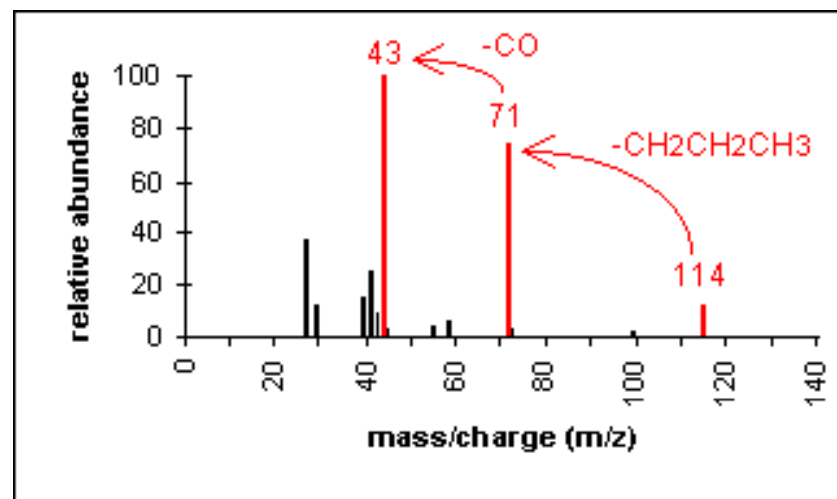
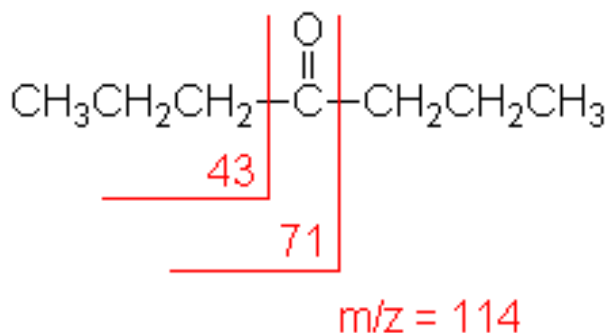


- а) 2-пропенал
- б) 2-метил пропанал
- в) пентанал
- г) 2-оксо-пропанал
- д) бутанал

КЕТОНИ

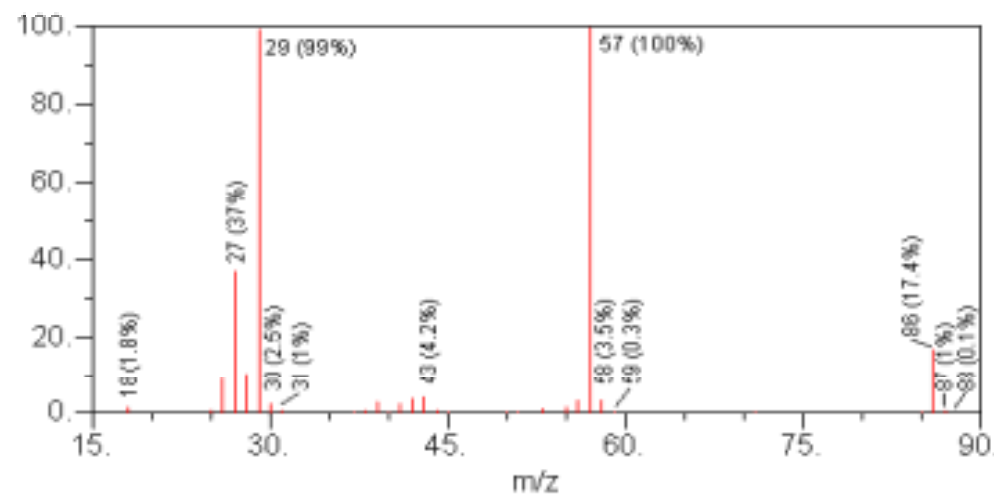


- Главно настанува фрагментацијата на C-C врската меѓу јаглеродот од карбонилната група и соседниот



Масен спектар на 4-хептанон,
 $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$ MW = 114,19

1. Најдете кои фрагменти се должат на алкилна
серија во следниот спектар

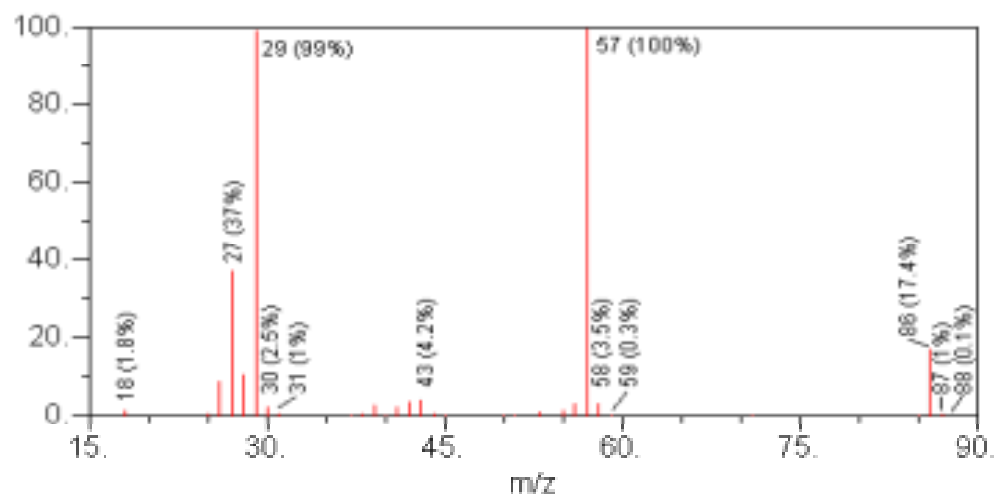


а) 29, 43

б) 43, 57

в) нема

2. Најдете ги загубите на алкилната серија

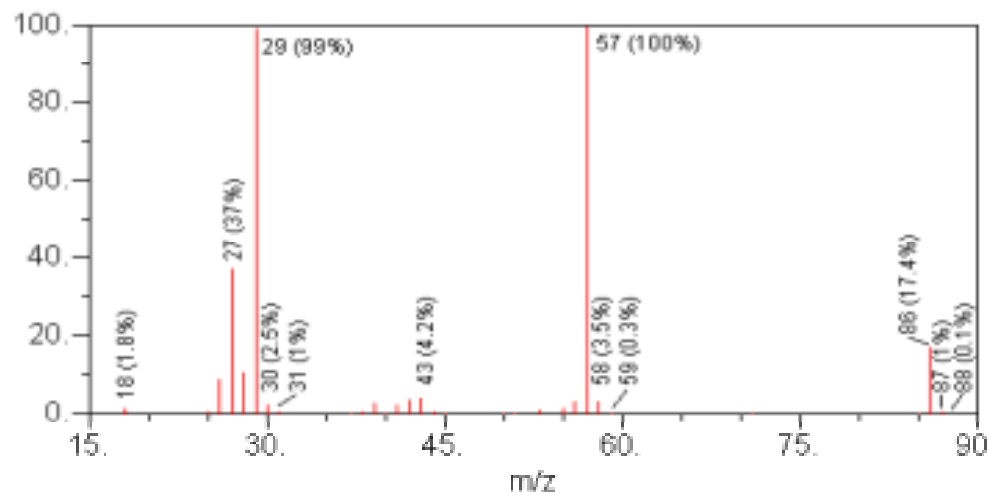


а) 29, 43

б) 43, 57

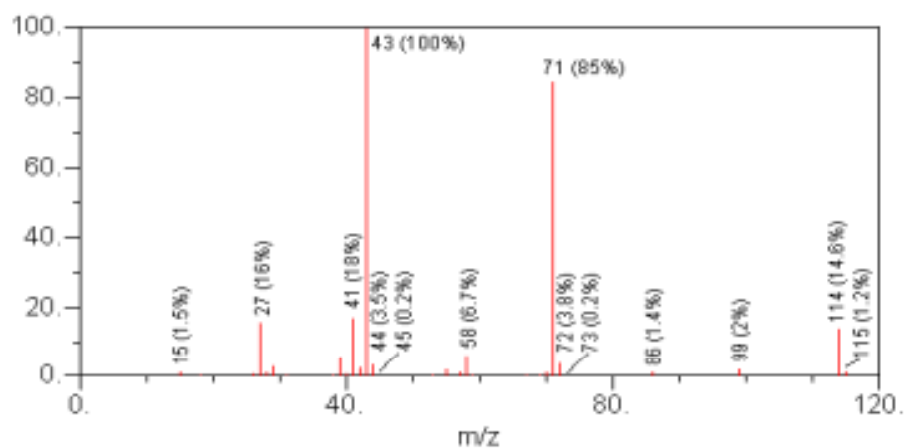
в) нема

3. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.



- а) 4-хептанон
- б) 3-метил-2-бутанон
- в) 3-пентанон
- г) 2-бутанон
- д) 2-пентанон

4. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.

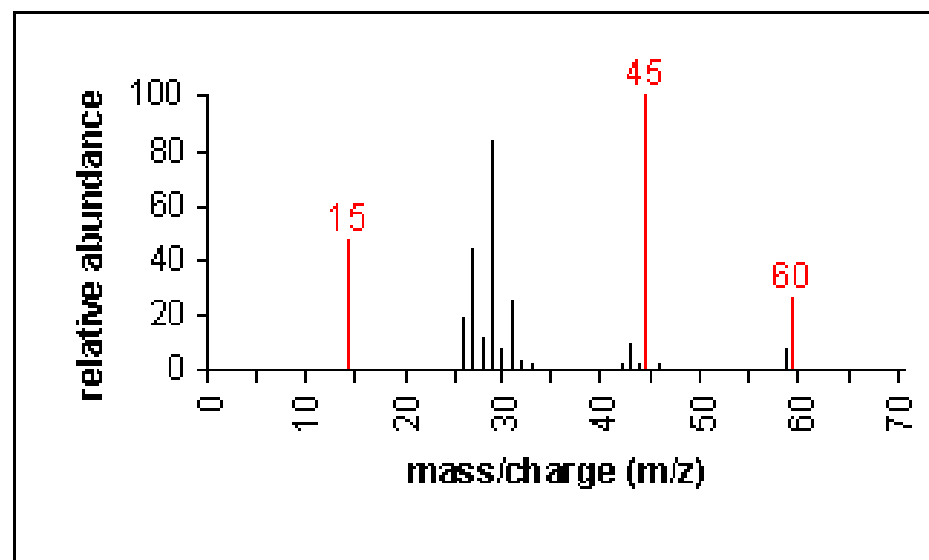
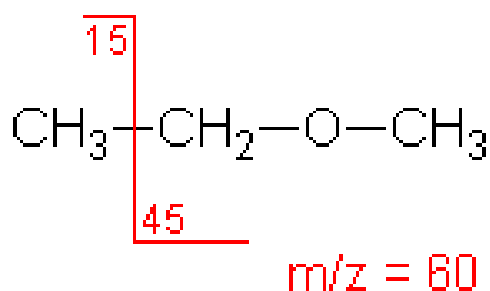


- а) 2-хептанон
- б) 4-хептанон
- в) 3-пентанон
- г) 4-метил-2-хептанон
- д) 2,4-диметил-3-пентанон

ЕТЕРИ

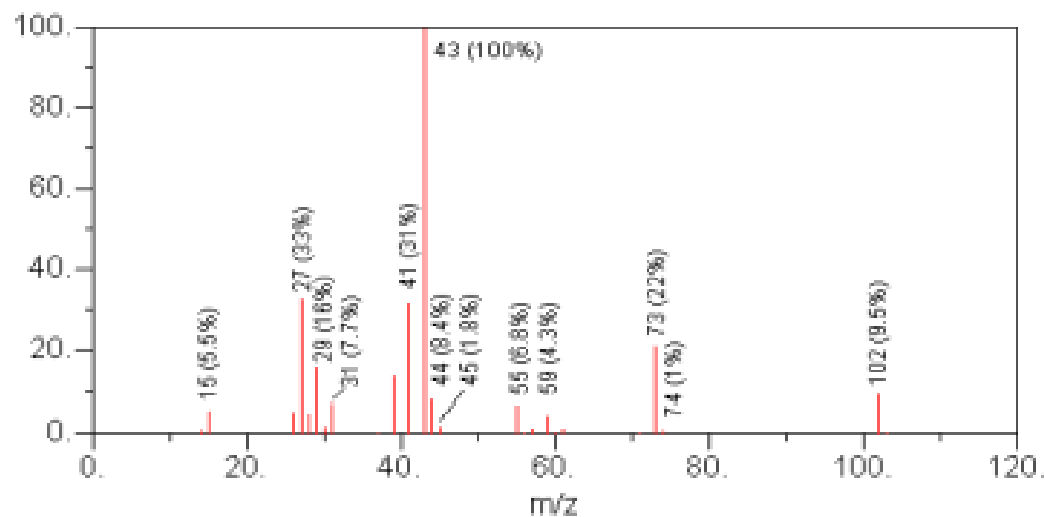


- ⊙ Најверојатна е фрагментацијата на првата C-C врска после кислородот.



Масен спектар на етил метил
етер, $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$, MW = 60,10

1. Најдете кои фрагменти се должат на алкилна серија во следниот спектар.

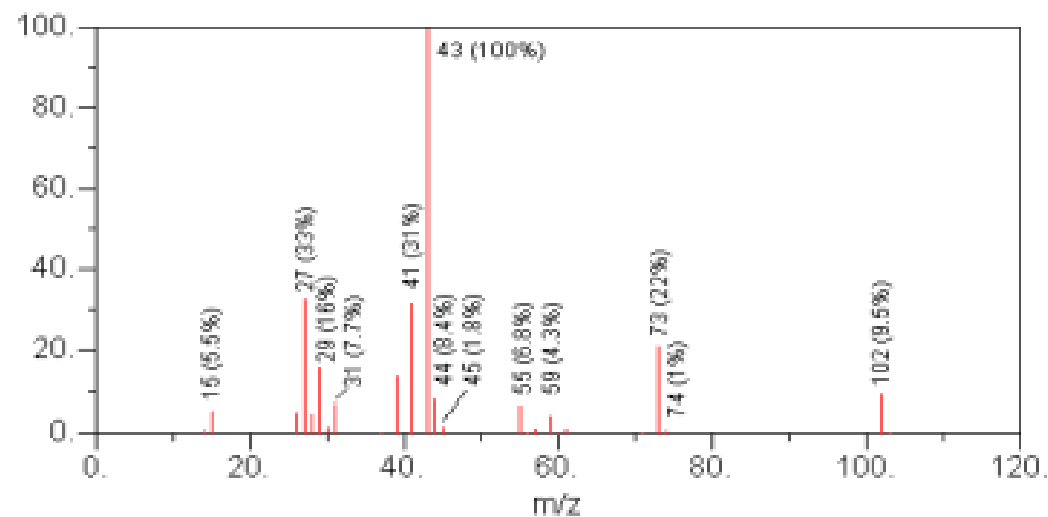


а) 29, 43

б) 59, 73

в) нема

2. Најдете ги загубите на алкилната серија.

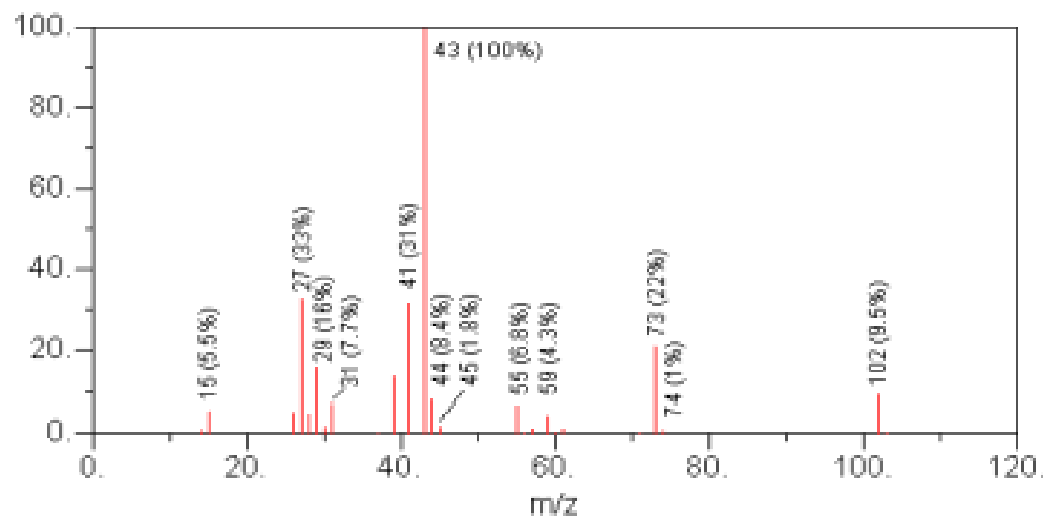


а) 29, 43

б) 59, 73

в) нема

3. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.

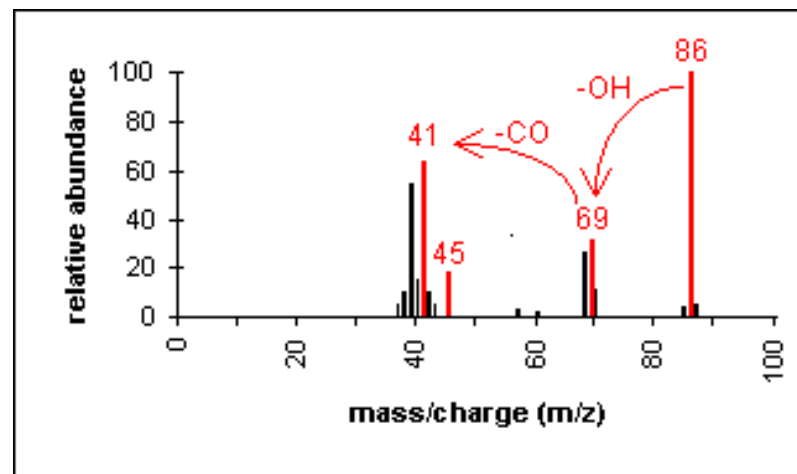
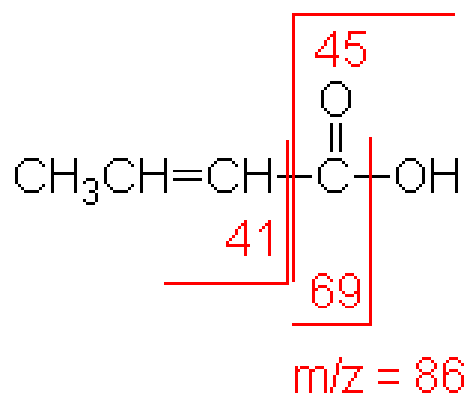


- а) етилен оксалат
- б) изобутил метил етер
- в) 1-етокси-2-метил пропан
- г) дипропил етер
- д) диизопропил етер

КАРБОКСИЛНИ КИСЕЛИНИ

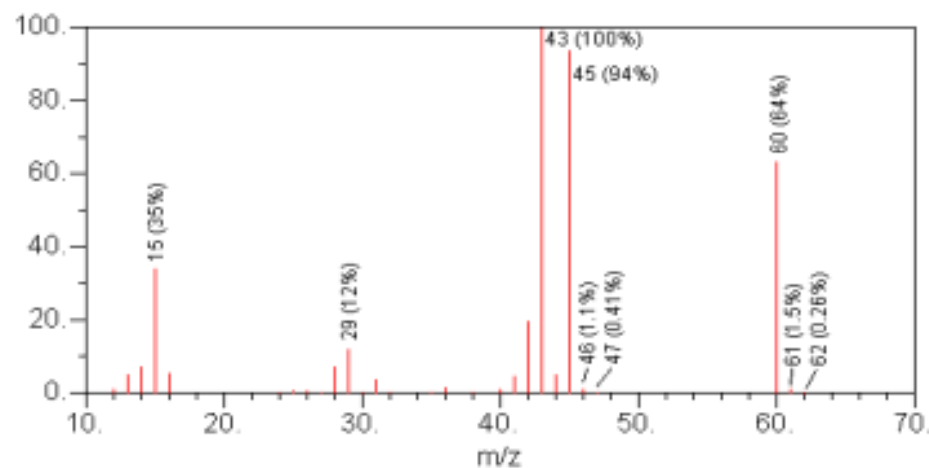


- ⊙ При фрагментација на карбоксилните киселини, најверојатна е **загуба на ОН група**
 - **маса на молекуларен јон - 17**
- ⊙ потоа **загуба на COOH група**
 - **маса на молекуларен јон - 45**
- ⊙ а потоа настанува **кинење на C-C врската која се наоѓа веднаш после карбоксилната група.**



2-пропенска киселина $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$,
MW = 86,09

1. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.

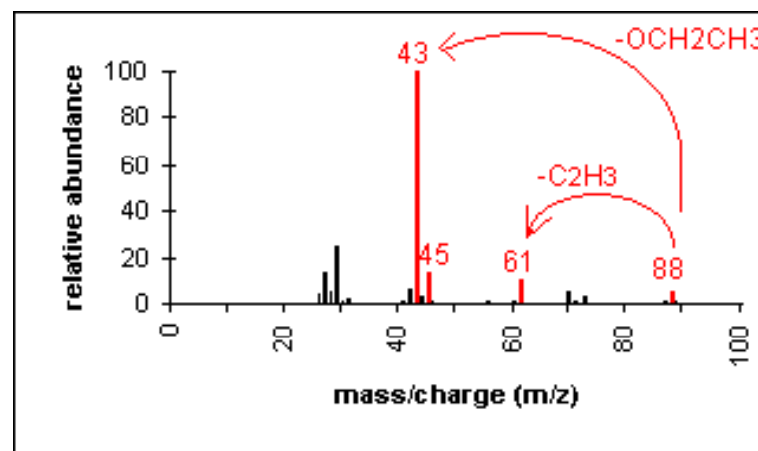
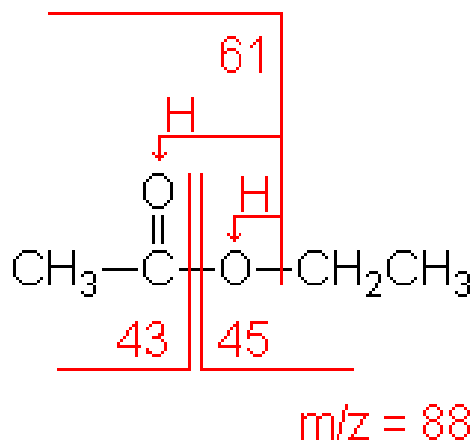


- а) метил формат
- б) оцетна киселина
- в) хидрокси ацетонитрил
- г) 2-пропионска киселина
- д) 2-пропионска киселина

ЕСТЕРИ

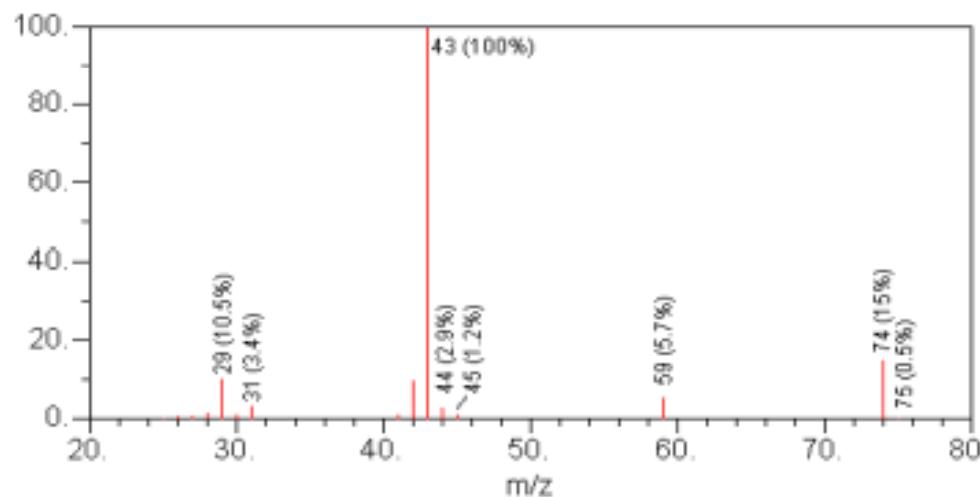


- ⊙ За естерите е карактеристично кинење на врската помеѓу C (од C=O) и O.
- ⊙ Карактеристични се загубите на CO групата или на OR. За нив се карактеристични и преуредувања на водородните атоми.



Масен спектар на етил ацетат,
 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$, MW = 88,11

1. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.



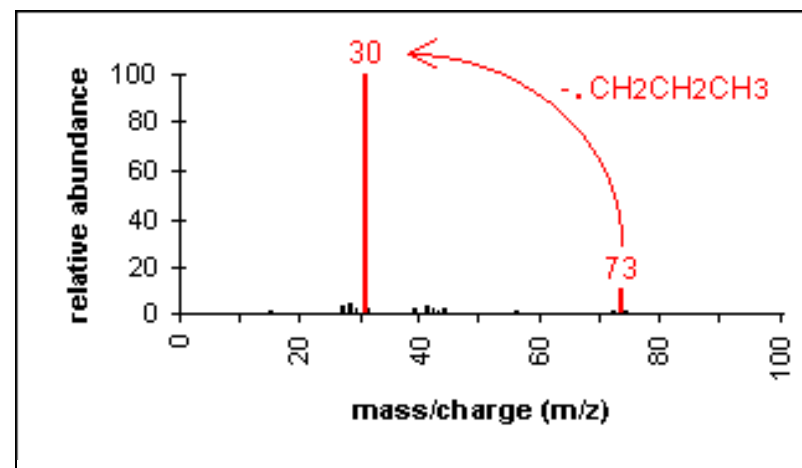
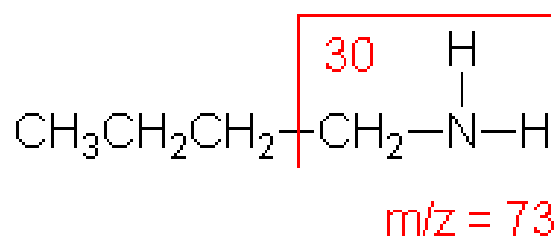
- а) етил метаноат
- б) метил етаноат
- в) пропионска киселина
- г) етил етаноат
- д) 2-приопионска киселина

АМИНИ



1. Примарни амини:

- Најверојатно е раскинување на C-C врската која се наоѓа после атомот на азот.



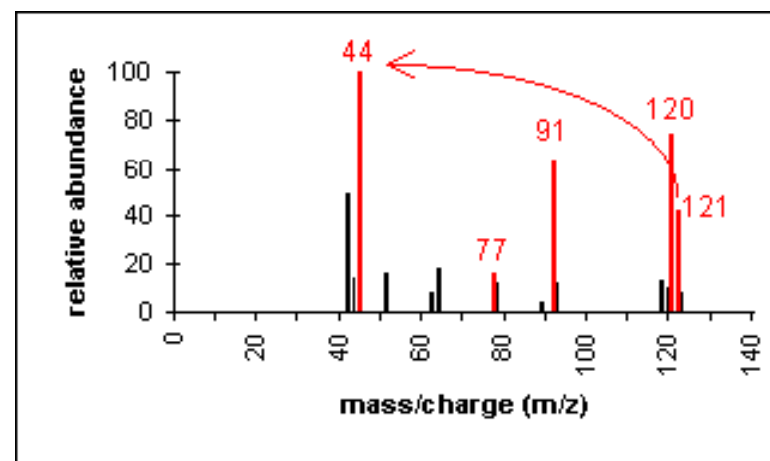
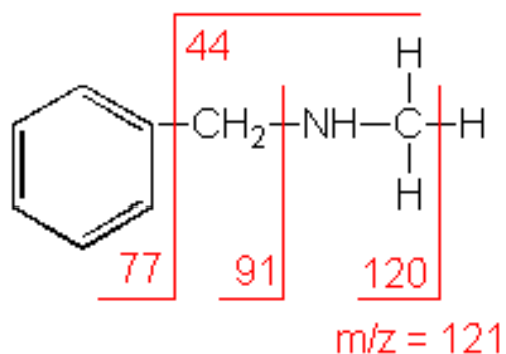
Масен спектар на *n*-бутиламин,
C₄H₁₁N, MW = 71,13

АМИНИ



2. Секундарни амини:

- Настанува раскинување на C-N врската



Масен спектар на
N-метилбензил амин, $\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N}$,
MW = 121,18

1. Компонентата содржи атоми на С, Н, О кои имаат молекулска маса која е парен број.

Ако на компонентата и се додаде еден атом на азот, молекулската маса на компонентата ќе биде непарен број.

Проверете го ова со пресметување на молекулската маса на етиламин ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$).

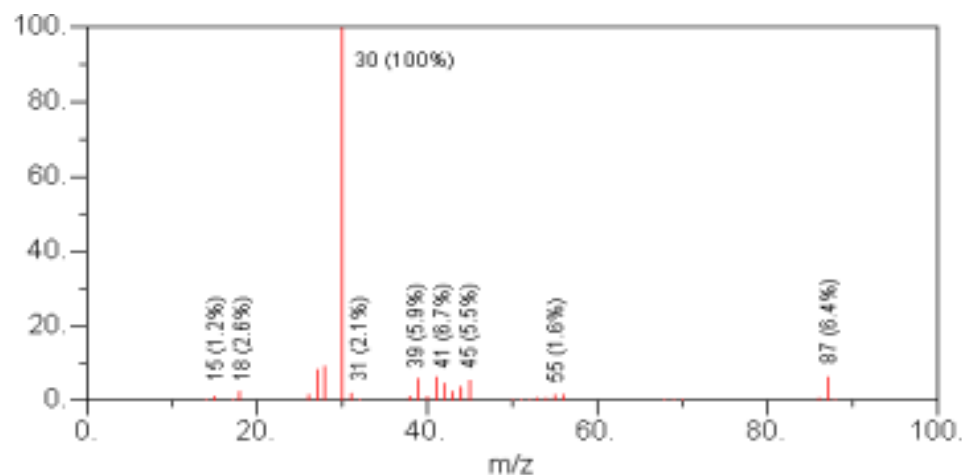
а) 44

б) 45

в) 46



2. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.

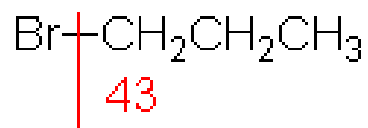


- а) 1-хексанамин
- б) 1-пентанамин
- в) N-метил-1-бутанамин
- г) 2-метил-2-бутанамин
- д) 1-бутанамин

ХАЛИДИ

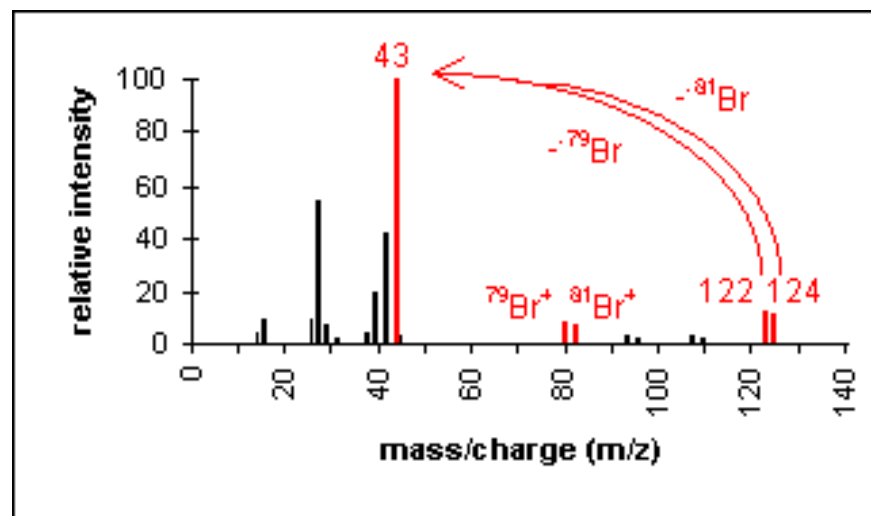


- ⊙ Молекулскиот јон е со мал интензитет.
- ⊙ Се забележува серија на загуба од 14 единици за маса.



$$m/z (^{79}\text{Br}) = 122$$

$$m/z (^{81}\text{Br}) = 124$$



Масен спектар на
1-бромпропан, $\text{C}_3\text{H}_7\text{Br}$, MW = 123,00



1. Масата на атомите која се наоѓа во периодниот систем е просечна вредност од масите на неговите изотопи.

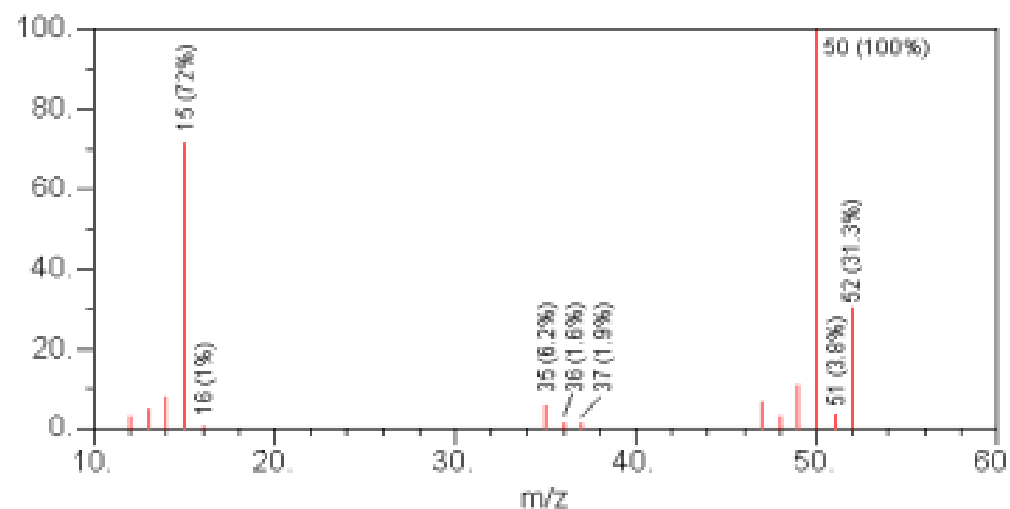
На пример, хлорот има два изотопи, ^{35}Cl и ^{37}Cl , но неговата маса во периодниот систем е 35,45.

Во масениот спектрометар застапени се сите изотопи.

Кои молекуларни пикови можат да се забележат во масениот спектар на $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$?

- а) 78
- б) 79
- в) 80
- г) 78, 79
- д) 78, 80

2. Определете ја компонентата на која сметате дека се однесува масениот спектар.



- а) хлорометан
- б) дифлуорометан
- в) метилен хлорид
- г) хлороводород
- д) дифлуороамин



Релативна застапеност на некои изотопи

Елемент	Изотоп	Релативна застапеност	Изотоп	Релативна застапеност	Изотоп	Релативна застапеност
јаглерод	^{12}C	100	^{13}C	1,11		
водород	^1H	100	^2H	0,016		
азот	^{14}N	100	^{15}N	0,38		
кислород	^{16}O	100	^{17}O	0,04	^{18}O	0,20
сулфур	^{32}S	100	^{33}S	0,78	^{34}S	4,40
хлор	^{35}Cl	100			^{37}Cl	32,5
бром	^{79}Br	100			^{81}Br	98,0



Ионски серии						
Група	Формула	m/z				
Нитрили	$C_n H_{2n-2} N^+$	40	54	68	82	
Алкенил, циклоалкил	$C_n H_{2n-1}^+$	27	41	55	69	83
Алкил, циклоалкенил	$C_n H_{2n}^{+\cdot}$	28	42	56	70	84
Алкил	$C_n H_{2n+1}^+$	15	29	43	57	71 85
Алдехиди, кетони	$C_n H_{2n-1} O^+$	29	43	57	71	85
Амини	$C_n H_{2n+2} N^+$	30	44	58	72	86
Алкохоли, етери	$C_n H_{2n+1} O^+$	31	45	59	73	87
Киселини, естери	$C_n H_{2n-1} O_2^+$		45	59	73	87
Тиоли, сулфиди	$C_n H_{2n+1} S^+$	33	47	61	75	89
Хлороалкил	$C_n H_{2n} Cl^{+\cdot}$	35	49	63	77	91

Web-test:

http://wps.pearsoned.co.uk/ema_uk_he_housecroft_chemistry_3/36/9308/2383067.cw/index.html



MS tutorial (објаснет редослед на чекори при решавање):

http://www.chem.ucla.edu/harding/ec_tutorials/tutorial59.pdf