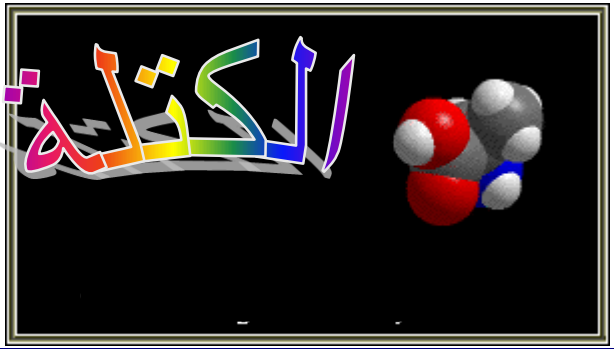


طيف الكتلة

Mass Spectroscopy

Dr Muhannad Amer

ماذا يقوم طيف الكتلة من عمل ؟

- *طيف الكتلة يقوم بانتاج جسيمات مشحونة (ايونات) من المادة الكيميائية والتي يراد تحليلها*
- *ومن ثم يقوم طيف الكتلة باستخدام تيار كهربي مجال ومغناطيسي لقياس (وزن) كتلة الجسيم المشحون .*

ما هي استخدامات طيف الكتلة ؟

- *يستخدم طيف الكتلة في جميع انواع التحاليل الكيميائية والتي تشمل التحاليل البيئية (مثال قياس السموم مثل الديوكسين) والتحاليل الخاصة بمنتجات النفط (مثل قياس وجود كميات من المعادن ومواد حيوية*
- *ويدخل كذلك في الهندسة الجينية*).

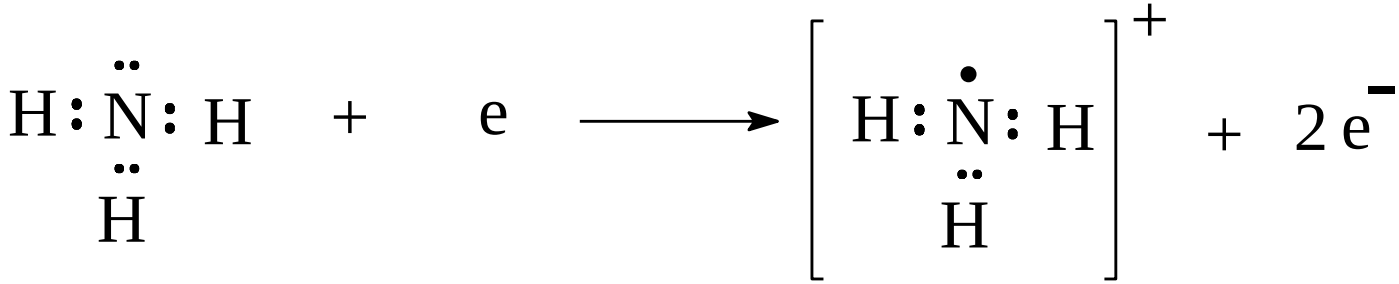
- في مطياف الكتلة تعرض جزيئات غازية تحت ضغط منخفض للقذف بالكترونات ذات طاقة عالية. وتكون طاقة الشعاع الالكتروني عادة 70 eV (الكترون- فولت)،
- ولذلك فهو يستطيع ان يزحزح الكترونا من الجزييء عن موضعه ليكون ايونا موجبا يدعى الايون الجزيئي

$$M + e \longrightarrow [M]^{+\bullet} + 2e$$

ماذا تخبرنا الكتلة المقاسة ؟

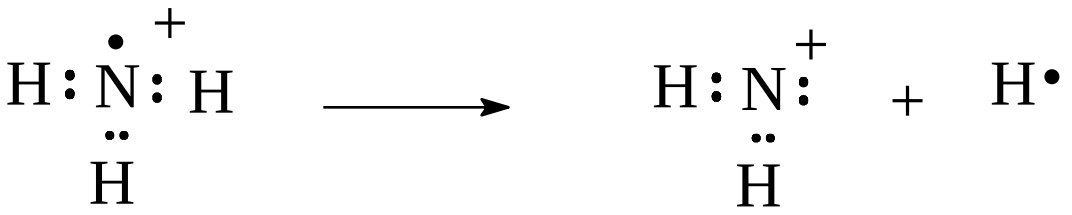
- لنأخذ الماء H_2O (كمثال
- جزيء الماء يحتوي على 2 هيدروجين وواحد اوكسيجين
- الكتلة الكلية للماء هي حاصل جمع كتلة الهيدروجين وكتلة الأوكسيجين
- اي أنها تساوي الوزن الجزيئي للماء
- $2x1H + 1x16O = 18$

- والايون الجزيئي هو جذر حر بالاضافة إلى كونه كاتيونا، وذلك لان به الكترونا مفردا.
- لذلك فهو ينتمي إلى نوع عام يدعى الكاتيونات الجذرية
- فلو فرضنا ان الجزييء المعرض للقذف بالالكترونات هو الامونيا، فان التفاعل التالي يحدث.

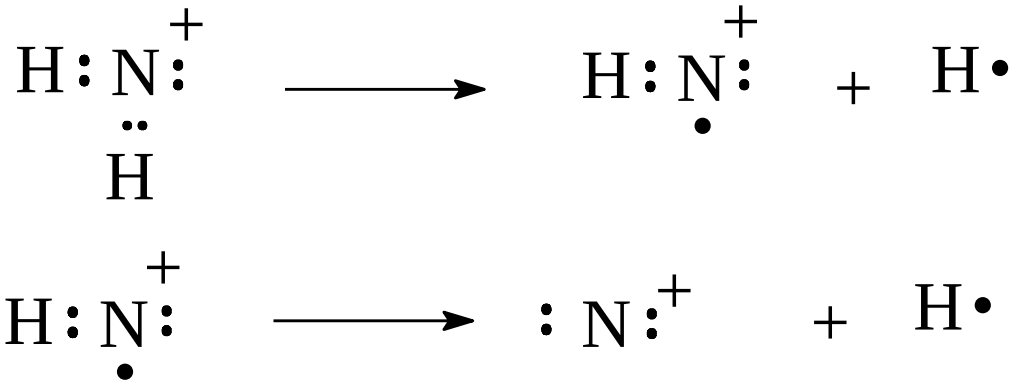


- ونظرا لارتفاع طاقة الشعاع الالكتروني (70 eV أو 1600 كيلوسعر/ مول)، فان الايون الجزيئي يكون مزودا بكمية كبيرة من الطاقة، تفوق في كثير من الاحيان الطاقة اللازمة لكسر الروابط التساهمية (50-100كيلوسعر/ مول). لذلك فان الايونات الجزيئية ما تكاد تتكون حتى تتفتت إلى شظايا (تتشظى).
- ويحدث التشظي بطرق عديدة تعتمد على بناء الايون الجزيئي. وكما سنرى فيما بعد فإن دراسة الشظايا الناتجة تزود الكيميائي بمعلومات عن بناء مركب معقد. وحتي في حالة جزييء بسيط نسبياً كالامونيا، يمكن أن يؤدي التشظي إلى عدة كاتيونات جديدة. فيمكن مثلاً أن يفقد الايون الجزيئي ذرة هيدروجين، ويعطي NH_2^+

مثال



وهذا الكاتيون يستطيع بدوره ان يفقد ذرة هيدروجين ليعطي NH^{+}.، الذي يؤدي بدوره إلى N^{+}



- ويقوم مطياف الكتلة بفرز هذه الكاتيونات على أساس نسبة الكتلة/ الشحنة (m/e)
- وحيث انه من الناحية العملية تكون شحنة جميع الكاتيونات (+1)، فان الفرز يكون في النتيجة فرزا بموجب الكتل. ويقوم المطياف بهذا الفرز بمسارعة الايونات خلال عدة فتحات ثم يدعها تمر في مسار منحن (الشكل) واقع تحت تأثير مجال مغناطيسي .
- ويؤثر المجال المغناطيسي على الايونات تأثيرا يعتمد على شدته، وعلى مقدار النسبة (m/e)، بحيث يجبر الايون على التحرك في مسار منحن .
- ثم خلال فتحة أخرى يسقط بعدها على جامع للايونات، يسجل شدة حزمة الايونات بطريقة الكترونية

- وشدة الحزمة هذه تعبير عن عدد الايونات الواصلة، ويتضح من حساسية بعض مطيافات الكتلة أنها تكشف عن وجود ايون واحد.
- وكما ذكرنا يحصل الفرز في المجال المغناطيسي الذي يؤثر على الايونات المتحركة خلاله ويدفعها للحركة في مسار هو قطعة من دائرة.
- ويعتمد نصف قطر هذا المسار الدائري (cm,r) على قيمة m/e للايونات وعلى شدة المجالى H (غاوس)، وعلى فرق الجهد ν (فولت). وترتبط هذه المتغيرات بالمعادلة التالية

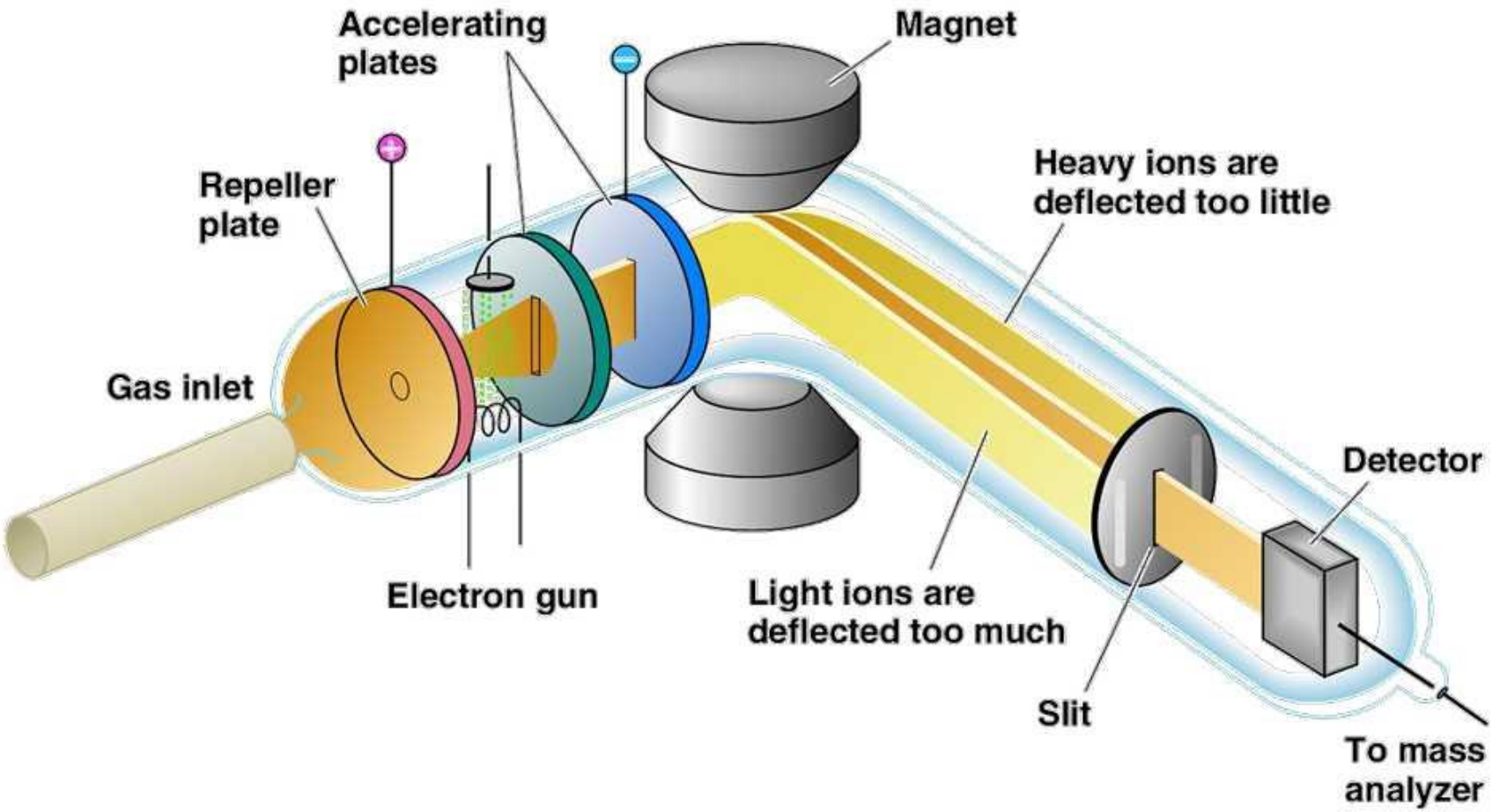
$$\frac{10^{-5} H^2 r^2 x 4.82}{\nu} = \frac{m}{e}$$

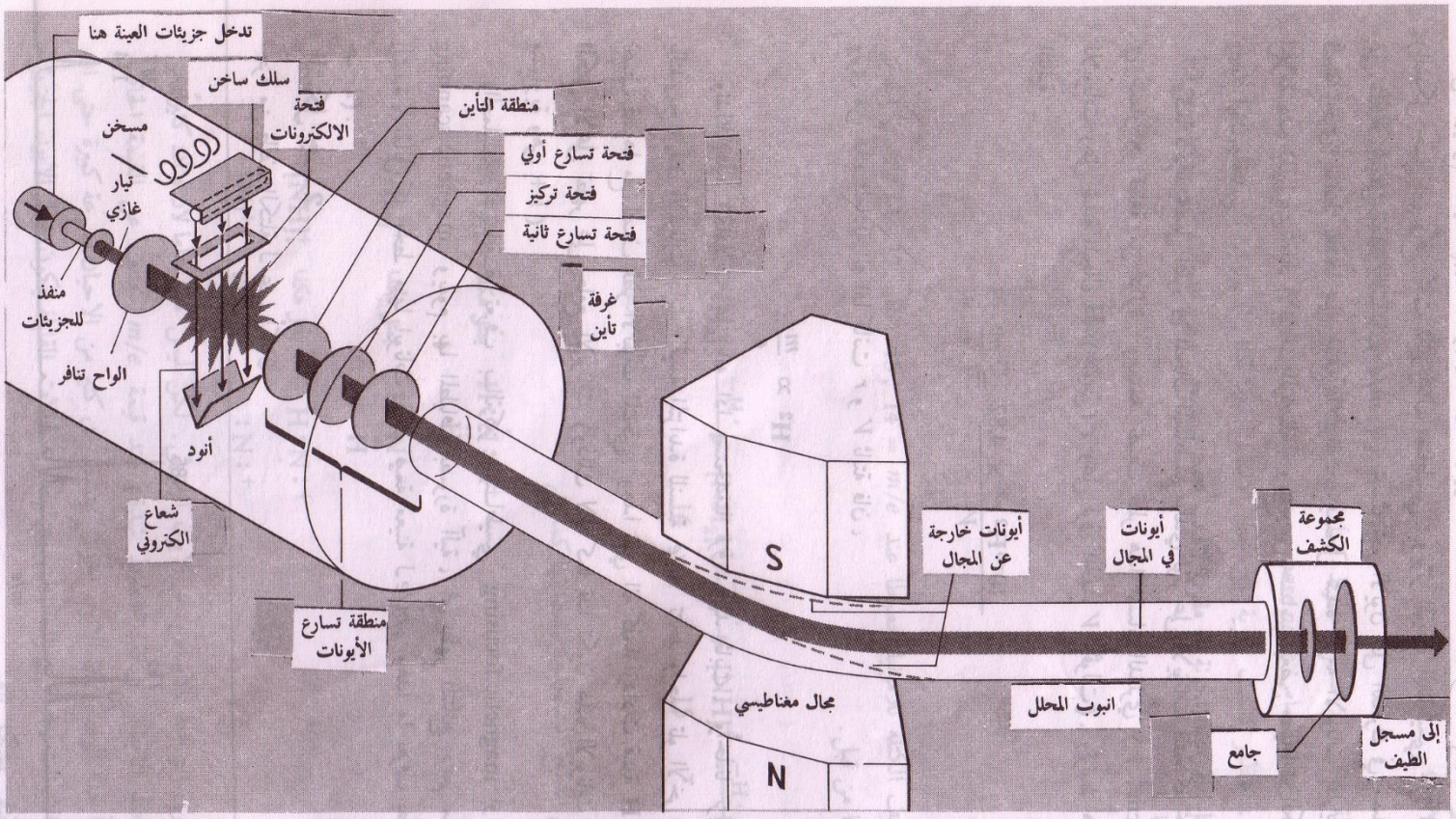
- ونرى من هذه المعادلة انه اذا كانت r و ν ثابتة فان

$$H^2 \alpha \frac{m}{e}$$

- وتدلنا هذه المعادلات على انه اذا استخدمنا فرق جهد ثابت، وأخذنا نزيد من شدة المجال بالتدريج، فان الايونات ذات القيمة المتزايدة للنسبة m/e تتخذ واحدا تلو الآخر مسارات دائرية يتفق نصف قطرها مع نصف قطر الانبوب المنحني. وهذا يعني انه كلما ازدادت قيمة H تبدأ الايونـات ذات الكتل الاعلى تظهر على جامع الايونات (وذلك لانه كما قلنا تكون هذه الايونات جميعها ذات شحنة متساوية وهى+1
- والعملية السابقة تعرف بالتركيز الغناطيسي أو المسمح المغناطيسي. ويقوم بها المطياف بصورة آلية، ثم يظهر النتائج برسم سلسلة خطوط مختلفة الشدة، يقابل كل خط منها ايونات ذات قيمة معينة ل m/e وهذا ما يعرف بطيف الكتلة .

جهاز GC/MS


Accelerating plates
Magnet
Repeller plate
Heavy ions are deflected too little
Gas inlet
Detector
Electron gun
Light ions are deflected too much
Slit
To mass analyzer

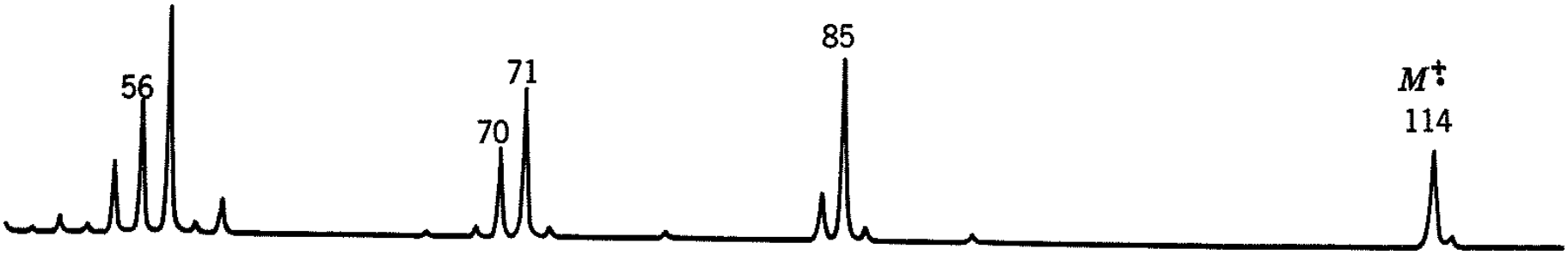


الشكل جـ – 1

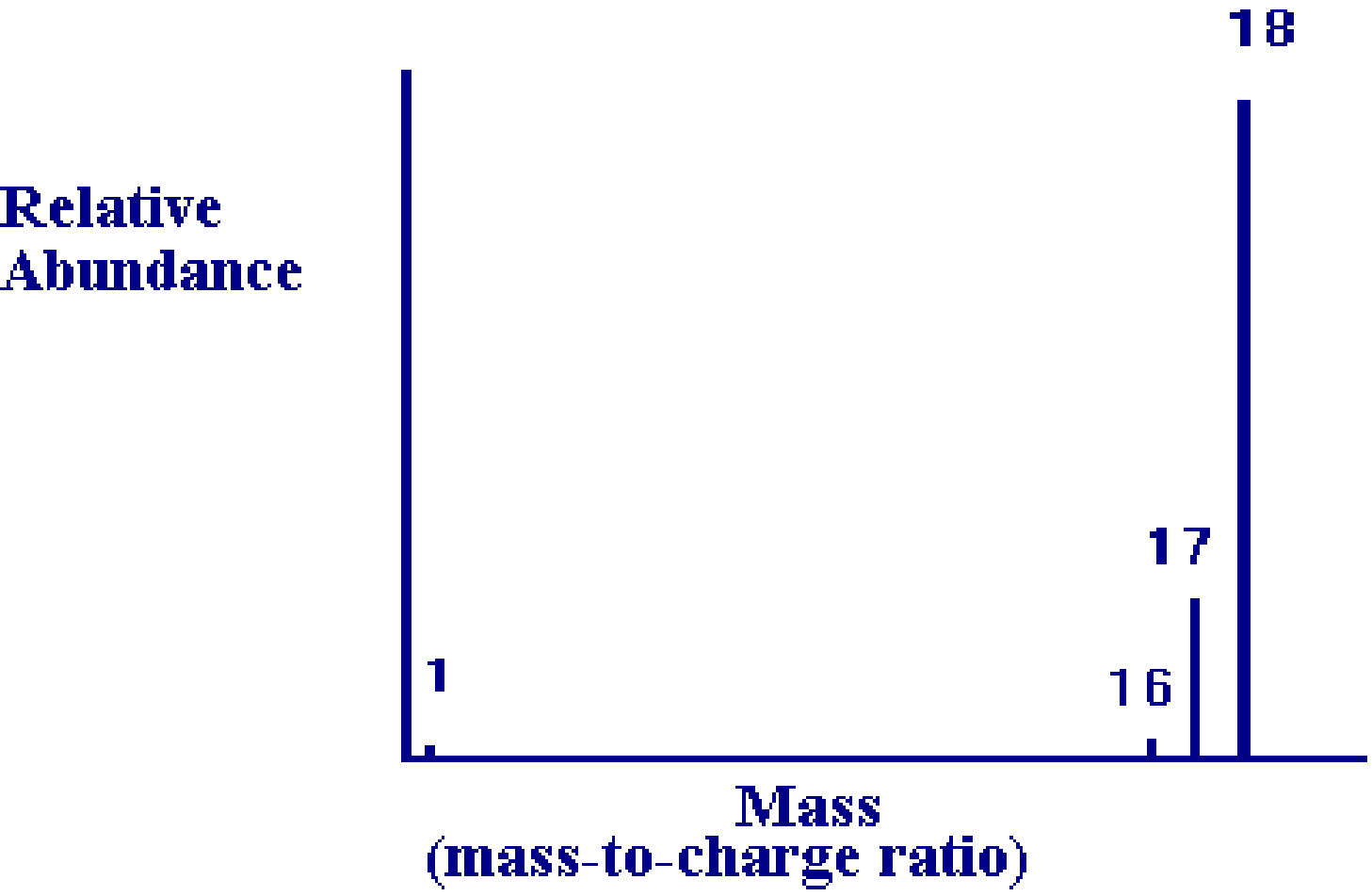
مطياف الكتلة. رسم تخطيطي لجهاز من طراز *CEG model 21-103* المجال المغناطيسي الذي يؤثر على الايونات المختلفة في نسبة كتلتها إلى شحنتها، هذا المجال عمودي على الصفحة.

(مأخوذ من : *John R. Holum,* Organic Chemistry: A Brief Course, *Wiley, New York, 1975. Used with permission*)

جزء من طيف الكتلة للأوكتان



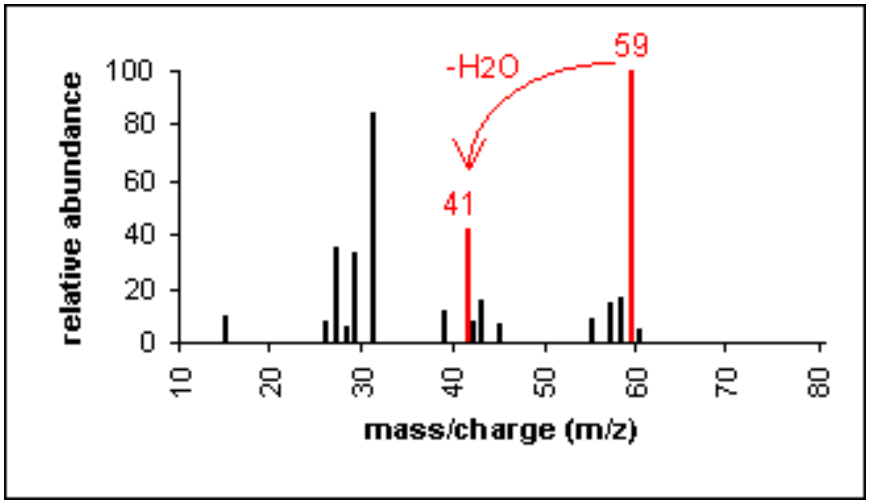
Mass Spectrum of Water



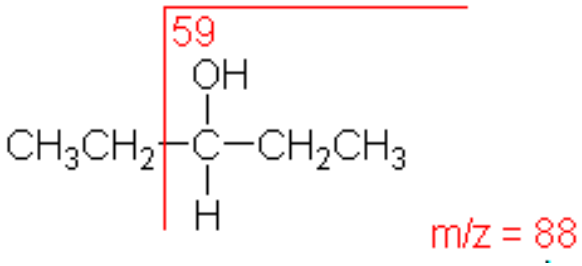
1 = H+
16 = O+
17 = [OH]+
18 = [H2O]+

أمثلة متنوعة

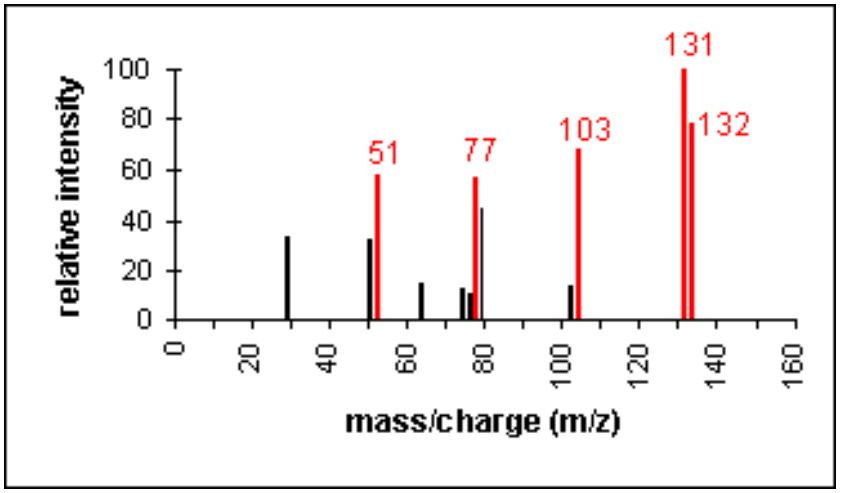
Alcohols



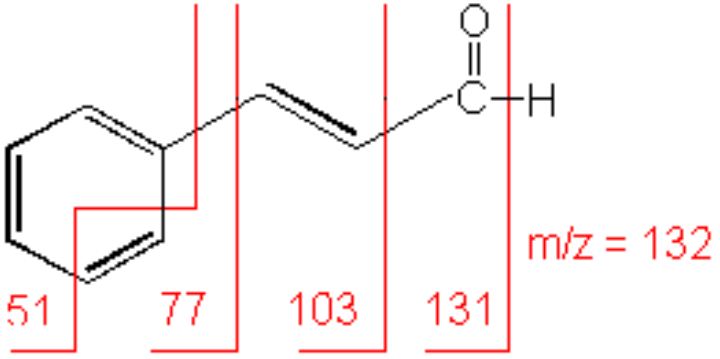
- **3-Pentanol**
  C5H12O
  MW = 88.15



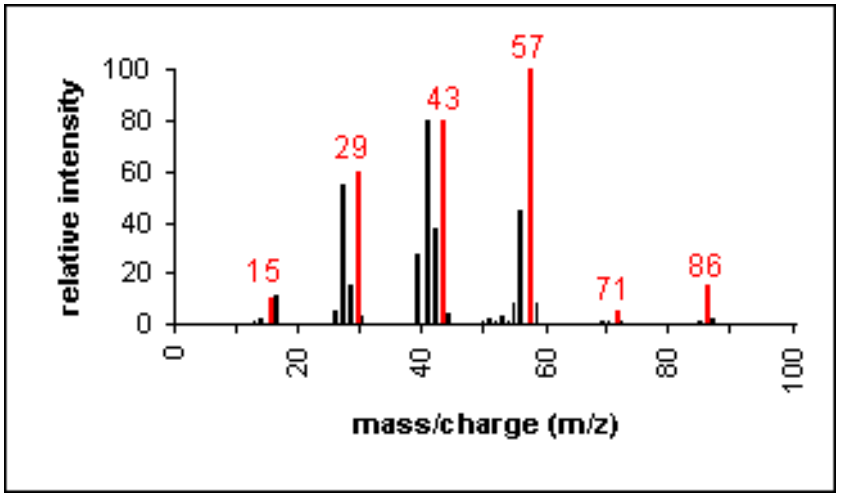
Aldehydes



- **3-Phenyl-2-propenal**
  C9H8O
  MW = 132.16



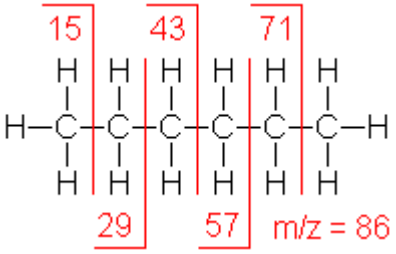
Alkanes



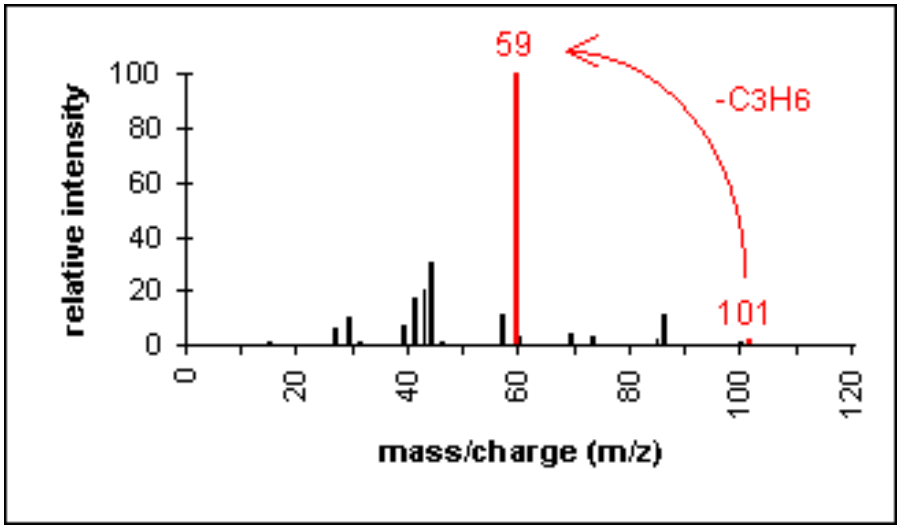
Hexane

C6H14

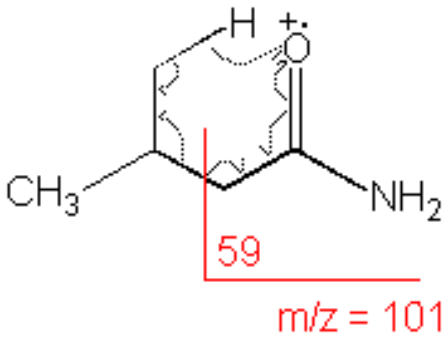
MW = 86.18



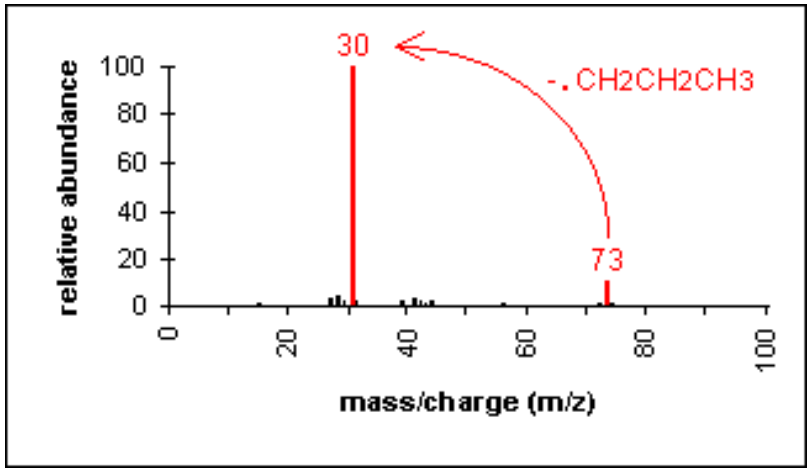
Amides



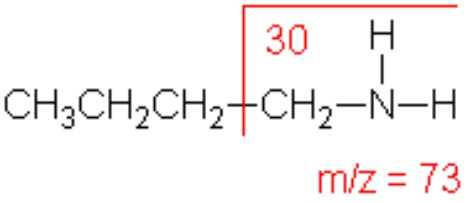
- **3-Methylbutyramide**
  C5H11NO
  MW = 101.15



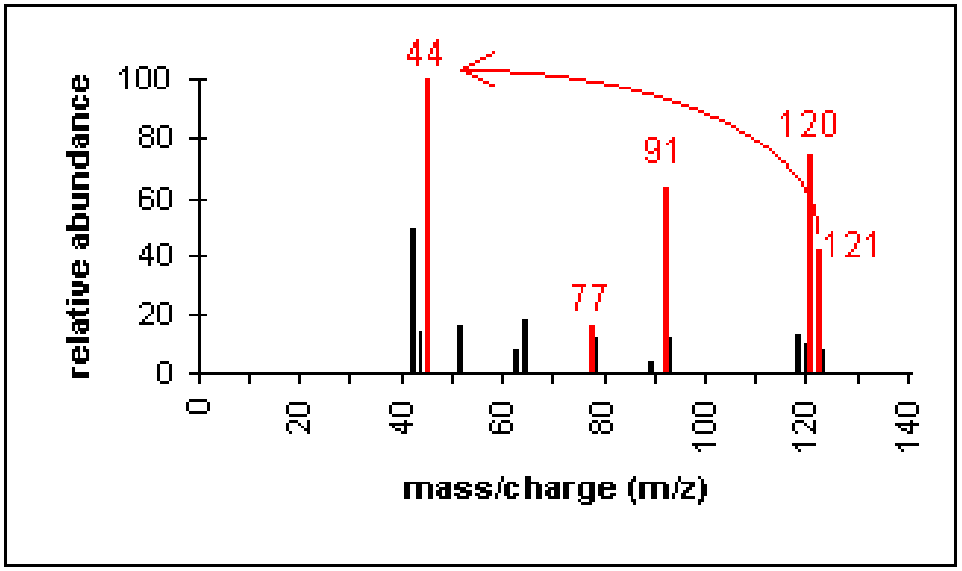
Amines



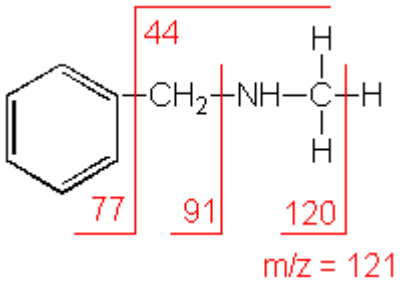
- **n-Butylamine**
  C4H11N
  MW = 73.13



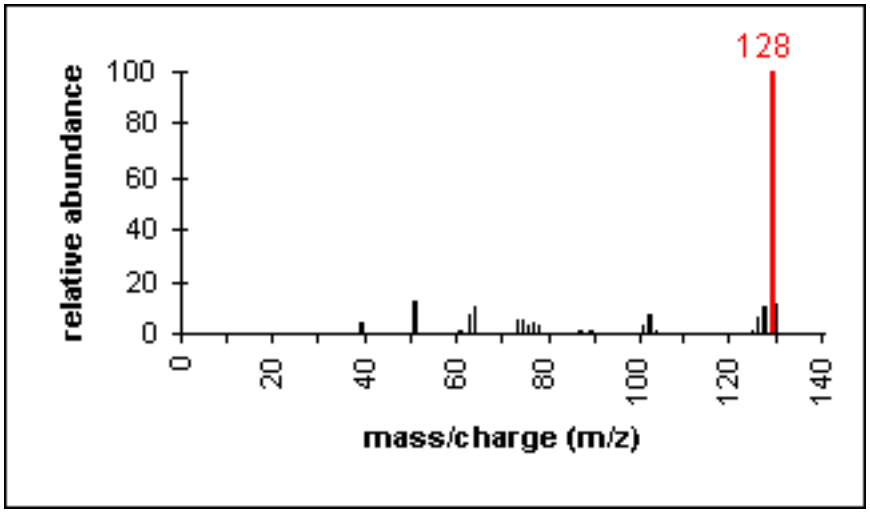
Sec. Amines



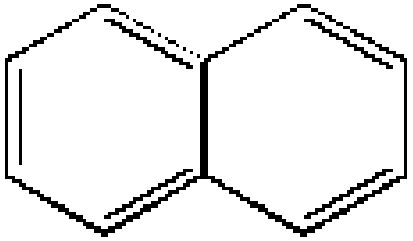
- **n-Methylbenzylamine**
  C8H11N
  MW = 121.18



Aromatics

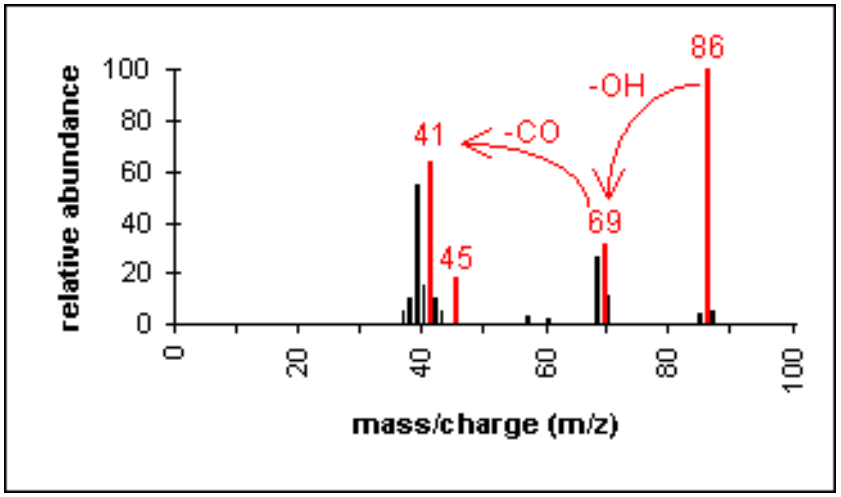


Naphthalene
C10H8
MW = 128.17

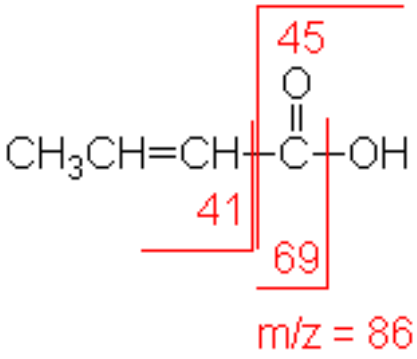


m/z = 128

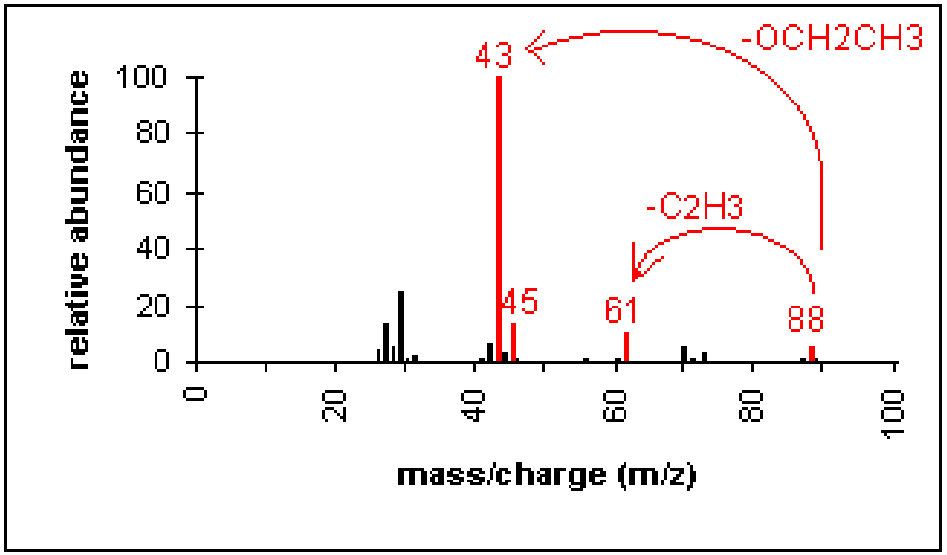
Carboxylic acids



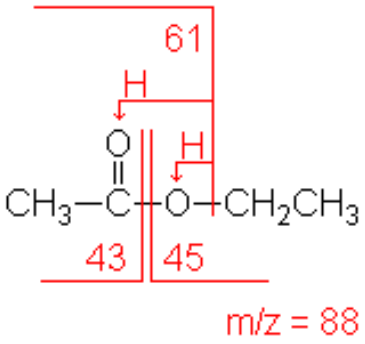
2-Butenoic acid
C4H6O2
MW = 86.09



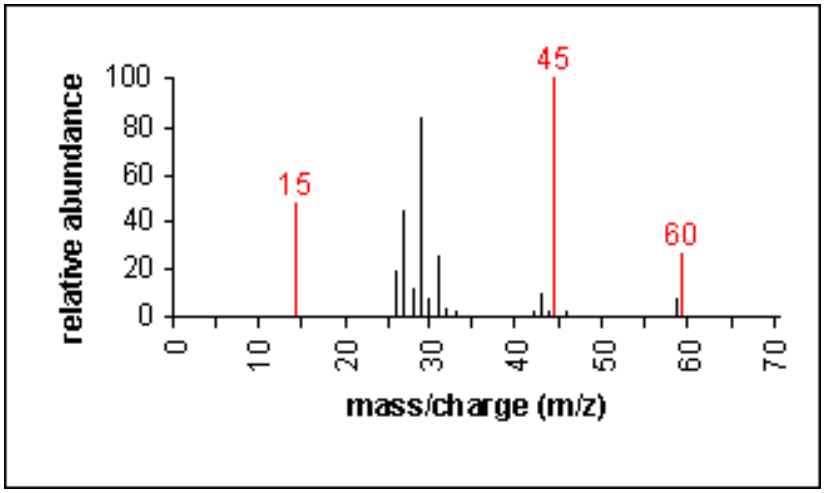
Ester



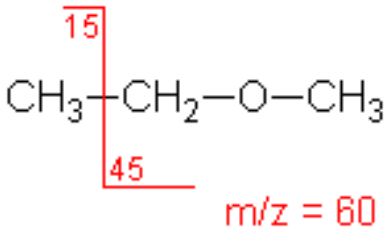
Ethyl acetate
C4H8O2
MW = 88.11



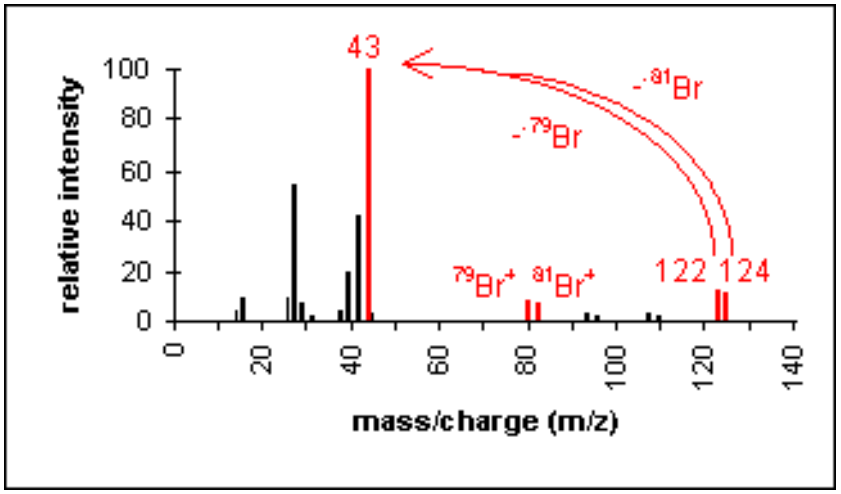
Ethers



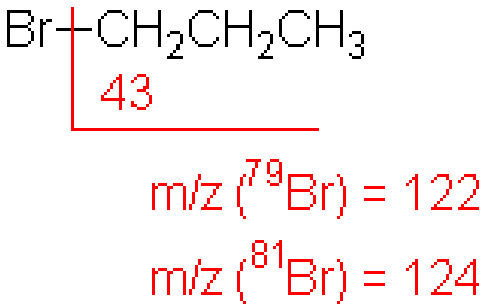
Ethyl methyl ether
C3H8O
MW = 60.10



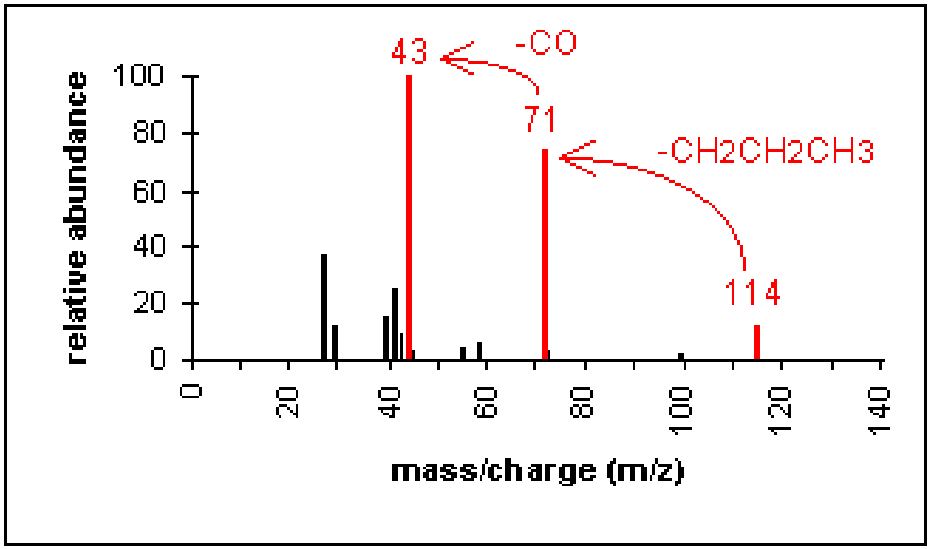
Halide



1-Bromopropane
C3H7Br
MW = 123.00



Ketone



4-Heptanone
C7H14O
MW = 114.19