



A TÖMEGSPEKTROMETRIA ALAPJAI

*web.inc.bme.hu/csonka/csg/oktat/tomegsp.doc
alapján*

tömeg-töltés arány szerinti szétválasztás

a legérzékenyebb módszerek közé tartozik (Nagyon kis anyagmennyiség kimutatására alkalmas.)

felbontás:

$$\frac{M}{\Delta M}$$

, ahol M a vizsgálat ion móltömege, ΔM az éppen még felbontott két csúcs közötti tömegszámkülönbség.



EGYSZERES FÓKUSZÁLÁSÚ KÉSZÜLÉK MŰKÖDÉSI ELVE

- az ionokat először elektromos térben gyorsítják, majd mágneses térben elválasztják.
- egy részecske tömege m , elektromos töltése e

$$\frac{1}{2}mv^2 = eU$$

- Az elektromos térben U feszültséggel gyorsítjuk, ennek hatására kinetikus energiára tesz szert. Ebből

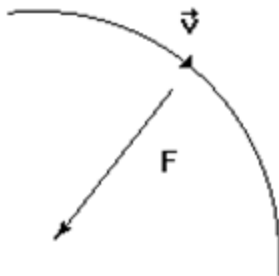
$$v^2 = \frac{2eU}{m}$$

- Ezt követően a v sebességgel mozgó töltés olyan homogén mágneses térbe kerül, amelyben a mágneses indukció iránya merőleges a belépő töltés mozgásának irányára.



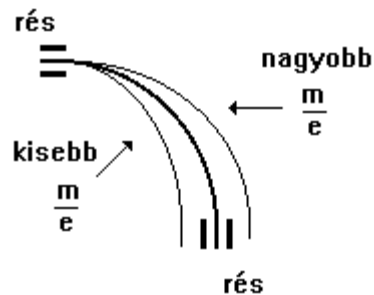
- A töltés mozgását a mágneses térben a Lorentz-erő szabja meg, amelynek kifejezése:

$$F = e \cdot \vec{v} \times \vec{B}$$



- B : merőleges a papír síkjára
 $\vec{E} \rightarrow D$.
- Az irányok meghatározásánál a jobb-kéz szabályt alkalmazzuk: hüvelykujj az áram irányába mutat, a többi kinyújtott ujj pedig a mágneses tér irányába. Tenyerünk így az erő irányába mutat.

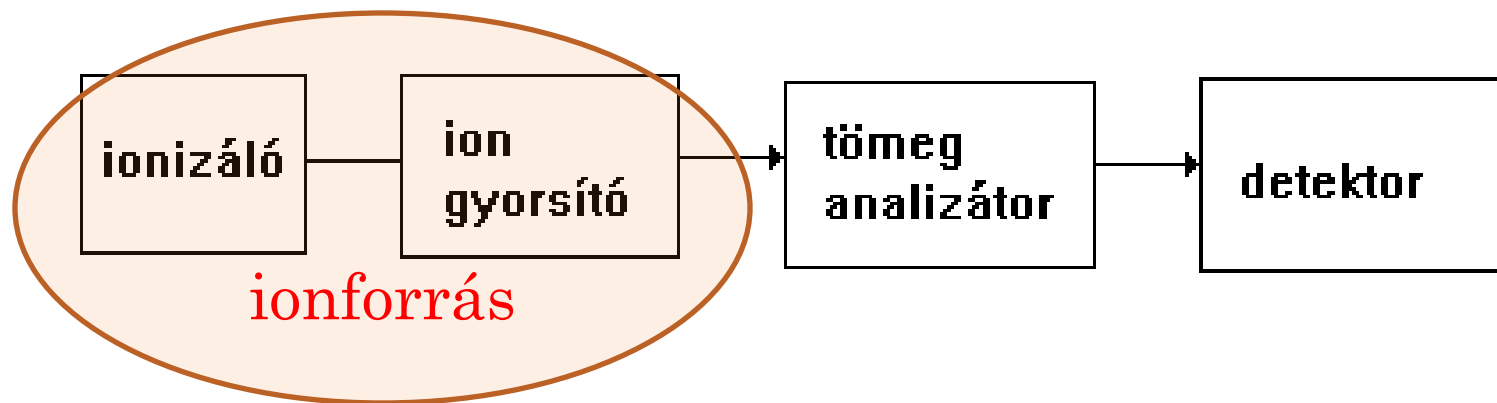




- Az elektromos gyorsítóból kilépő részecskék, ha nem hatna rájuk erő, egyenes mentén haladnának. A Lorentz-erő hatására azonban elhajlanak
- a vizsgált ionokat ez elektromos térrel történő gyorsítás után a homogén mágneses tér a fajlagos tömegük alapján szétválasztja, és az azonosakat egy helyre fókuszálja



A TÖMEGSPEKTROMÉTER FŐ RÉSZEI



- Mindegyik egység nagy vákuumban van (10^{-4} - 10^{-6} Pa), ami azért szükséges, hogy az ionok egymás mozgását ne zavarják, ne ütközzenek



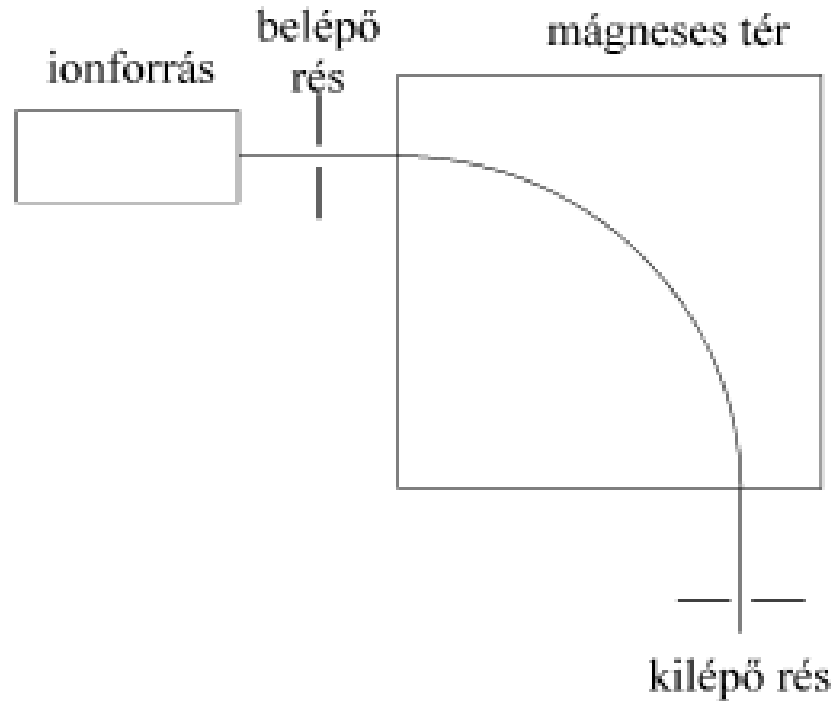
AZ IONIZÁCIÓ MÓDSZEREI

- Elektronütközéses ionizáció
- Kémiai ionizáció
- Szekunder ion tömegspektrometria (SIMS, Secondary Ion Mass Spectrometry)
- Bombázás gyors atomokkal (Fast Atomic Bombardment, FAB)

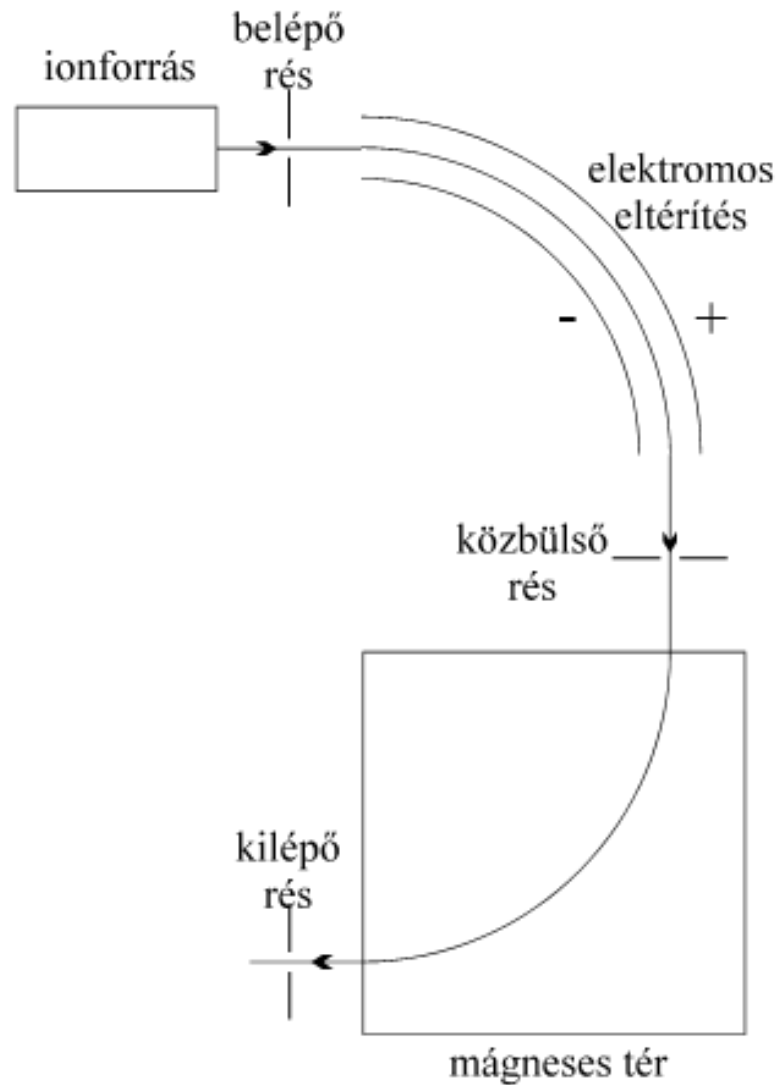


TÖMEGSPEKTROMETRIÁS KÉSZÜLÉKEK

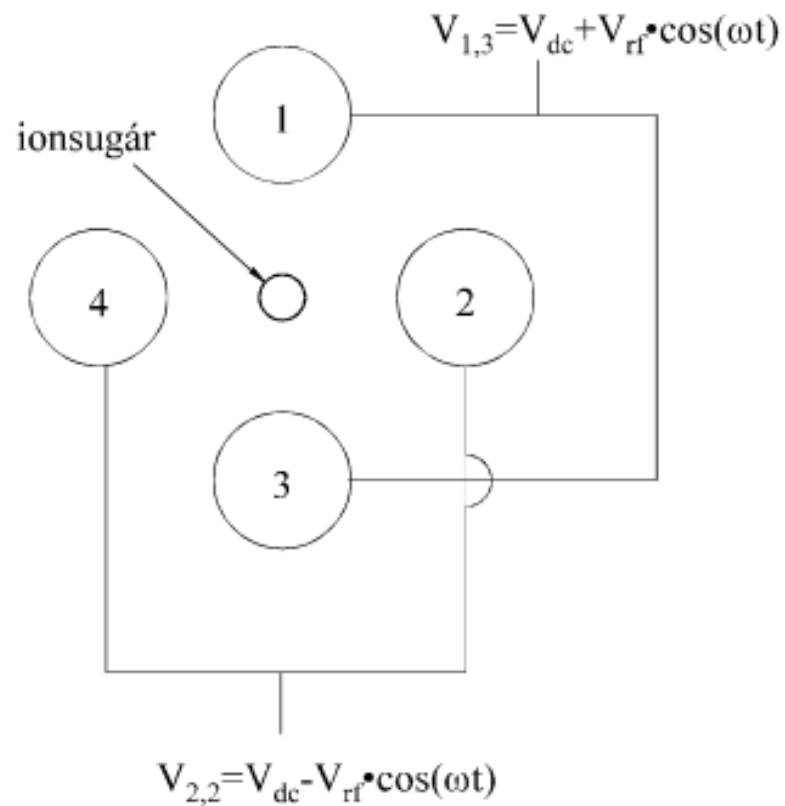
- Egyszeres fókuszálású
készülék



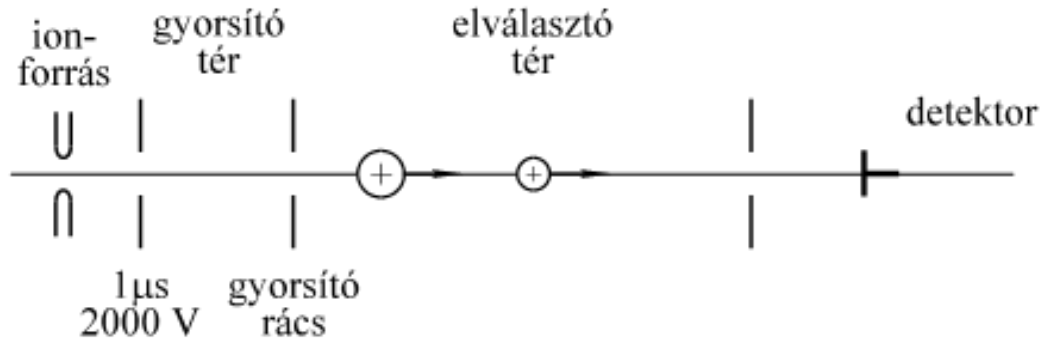
- Kettős fókuszálású tömegspektrométer



- Kvadrupol tömegspektrométer



- Repülési idő tömegspektrométer
(TOF, time of flight)



ANALITIKAI ALKALMAZÁS

- Móltömegek meghatározása
- Gázkeverékek kvantitatív analízise. A csúcsok intenzitása arányos a gázkomponens parciális nyomásával. Figyelembe kell venni a fragmentálódást is.
- Nyomelemzés: a nagy érzékenység lehetővé teszi kismennyiségű komponensek kimutatását.
- Izotóparány-mérés: jellegzetesen tömegspektrometriás feladat. Célszerű 2 vagy több kollektort felszerelni, a mérési idő lerövidül.
- Elemanalízis: az erre a célra készített berendezésekben gyorsan lehet teljes elemanalízist végezni.
- Nagyfelbontású berendezésekben a csúcsok pontos tömege ismeretében a számítógép kiadja a lehetséges elemösszetételt is.
- GC-MS: Az egyes gázkromatográfiás csúcsokat egyenként analizáljuk. Gázkromatográf szempontjából detektor. Tömegspektroszkópia szempontjából: minta-előkészítés.



SZERVES MOLEKULÁK

SZERKEZETVIZSGÁLATA

- A csúcsok legfontosabb típusai:
- a) Molekulacsúcs: a molekulaionnak felel meg (móltömeg meghatározása ebből)
- b) Fragmens csúcsok: a disszociált molekulaion ionizált töredékeit jelentik:



Gyakran olyan fragmens ionok is megjelennek, amelyek eredetileg nem szerepeltek a molekulában (átrendeződési reakciók).

- c) Többszörös töltésű csúcsok: többszörösen ionizált molekulának vagy fragmensnek felelnek meg (kisebb intenzitású), stb. helyen.
- d) Metastabil csúcsok: diffúz formában kiszélesedett alakban, kis intenzitással jelennek meg. Olyan ionok okozzák, amelyeknek az élettartama kisebb, mint az az idő, amely alatt az ionforrás-detektor távolságot be tudnák futni.

Miután egy molekulát ionizálnak, a fragmentáció során többnyire olyan semleges vagy töltéssel rendelkező részekre esik szét, amelyek valamilyen kémiai is értelmezhető reakció révén jönnek létre.

Tehát stabil, ismert szerkezetű töredék fellepte a legvalószínűbb.



FIZIKAI KÉMIAI FELHASZNÁLÁS

- Ionizációs energia (potenciál) meghatározása
- Ionok, gyökök képződéshője
- Kötési energiák
- Reakciókinetikai vizsgálatok

