

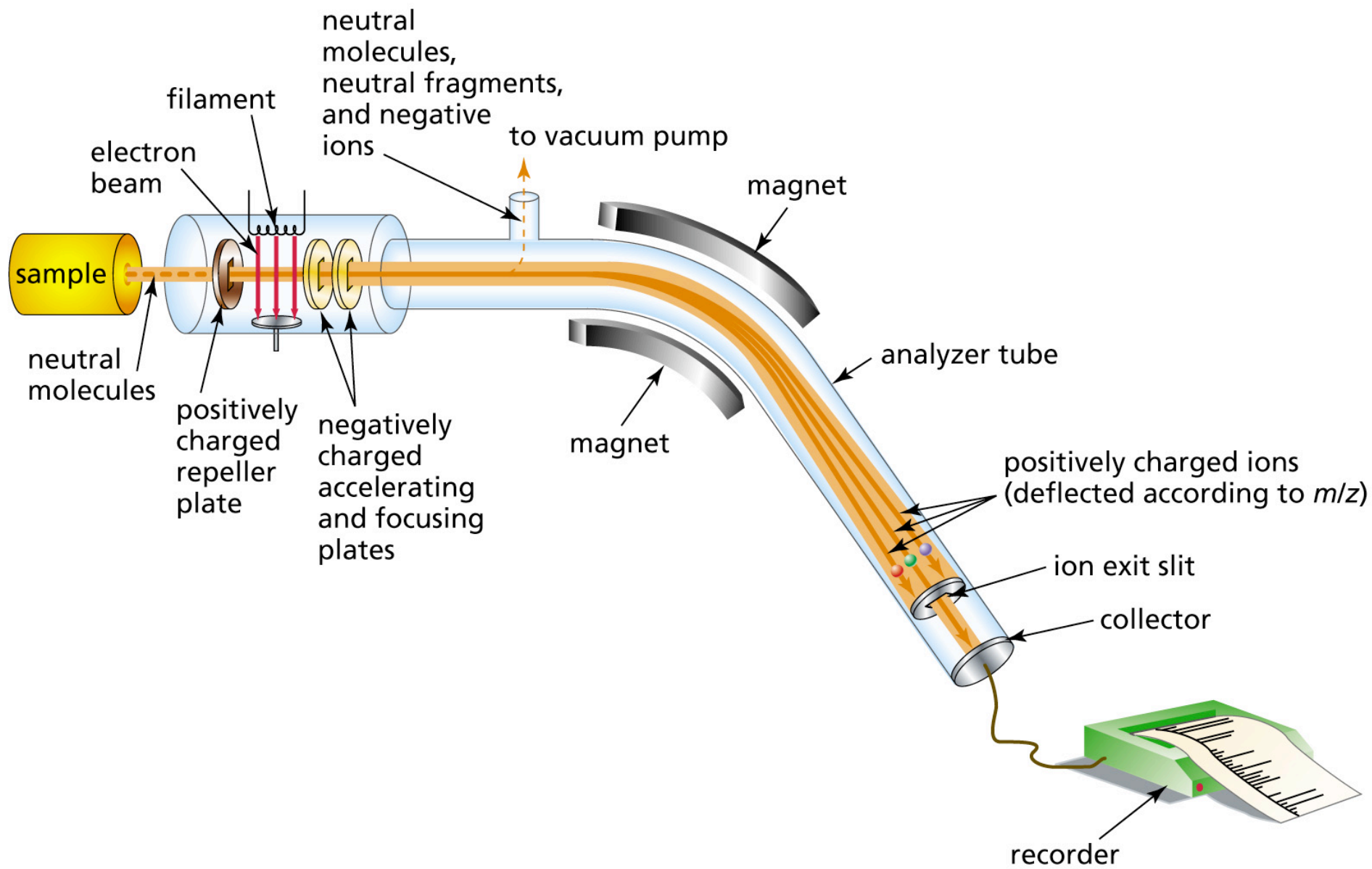
MASA ESPEKTROMETRIA

Masa espektroskopia (ME) erabiliz molekula baten masa ezagutu dezakegu. Gainera konposatuaren formulari buruzko datu ugari atera leike, kantitate oso txikiak erabilia.

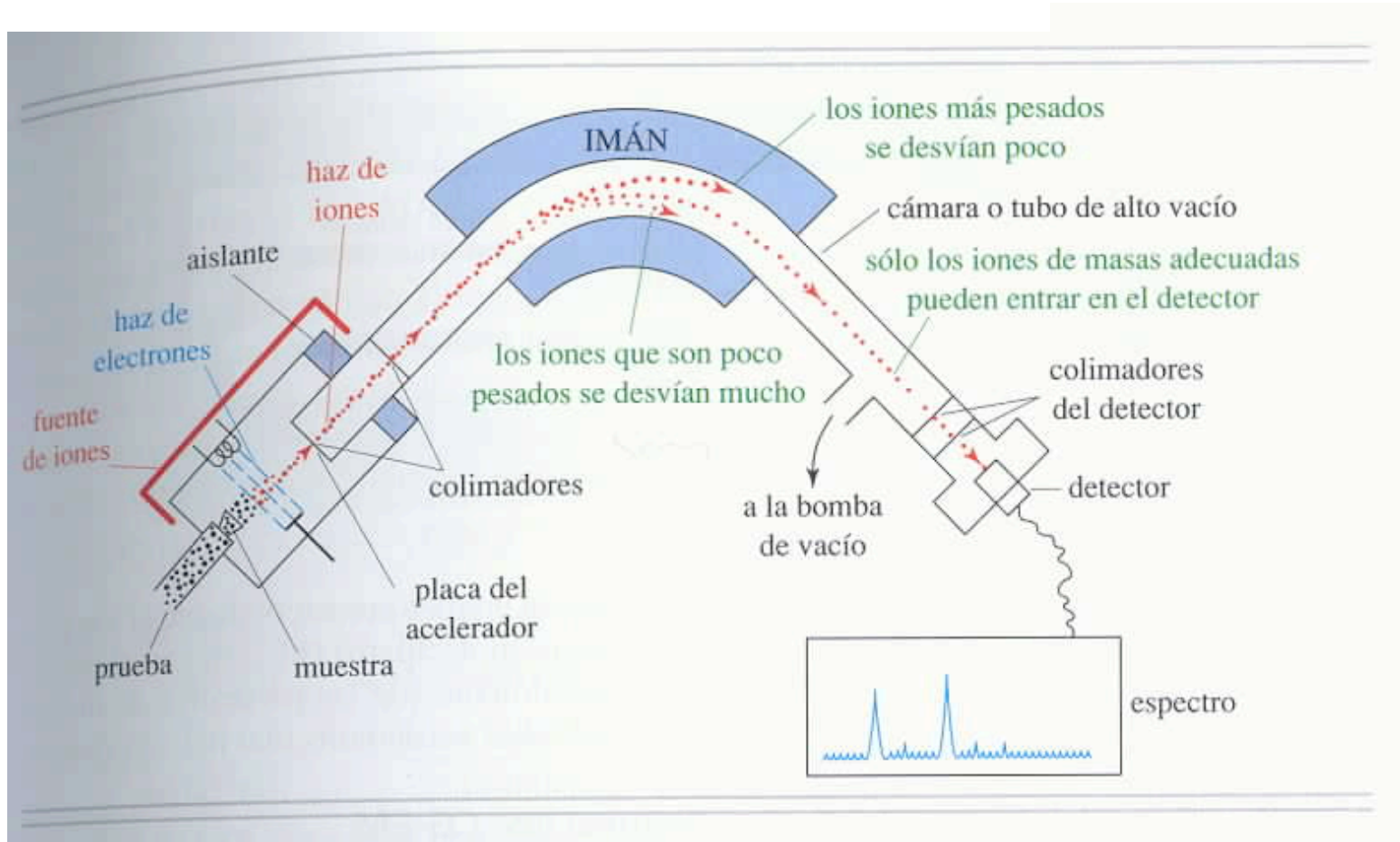
Espektroskopia eta *espektrometria* antzekoak izanda ere ez dira berdin berdinak Espektroskopian, gure konposatuak xurgatzen duen edo ixuritzen duen argia neurtzen degu. ME-n berriz,elektroiak (edo beste kasu batzuetan energia karriatzeko beste partikula batzuek) erabiltzen dira muestrari erasotzeko. Emandako energia, konposatuaren loturak ezabatzeko behar dutena baina askoz ere haundiagoa da. Molekula zatitu egiten da eta zati bakoitzaren pisua neurtzeko gai gera. Apurketa hori ez da nolana gertatzen, beti lotura ahulenak apurtzen dira lehendabizi, eta horrek egiturari buruzko informazioa ematen digu.

Masa espektrometroa

Masa espektrometroak hutsune haundiko ganbara baten sortzen ditu ioiak, ondoren masaren arabera banatu eta ioi bakoitzaren kopurua zehaztu. Ondoren masa/karga erlazioaren eta kopuruaren arabera ioi horien pozentaiak marrazten dizkigu. Molekulak apurtu eta ioiek banatzeko modu ezberdinak ditugu eta honen arabera aparailu ezberdinak atera dituzte merkatura. Guk sistema orokorrenak ikusiko ditugu, alde batetik *elektroi talka* ioiak sortu arazteko eta bestetik *eremu magnetikoen desbideratzea* sortutako ioiak masaren arabera banatzeko.

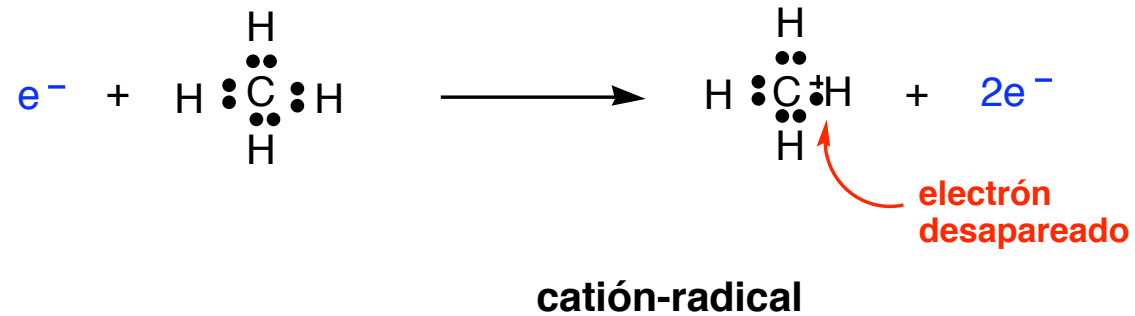
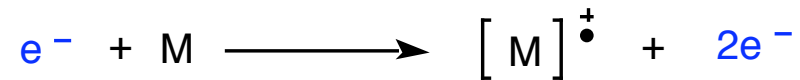


Masa espektrometro baten irudi laburra



Elektroi talka bidezko ionizazioa

Ioien iturri edo sorburuan gure laginak talka egiten du energi haundiko elektroiekin. Elektroi horietako batek molekula neutro bati eragiten dionean, ionizatu egin liteke, elektroi bat ixuriz.



Masa ezberdinak dituzten ioien banaketa

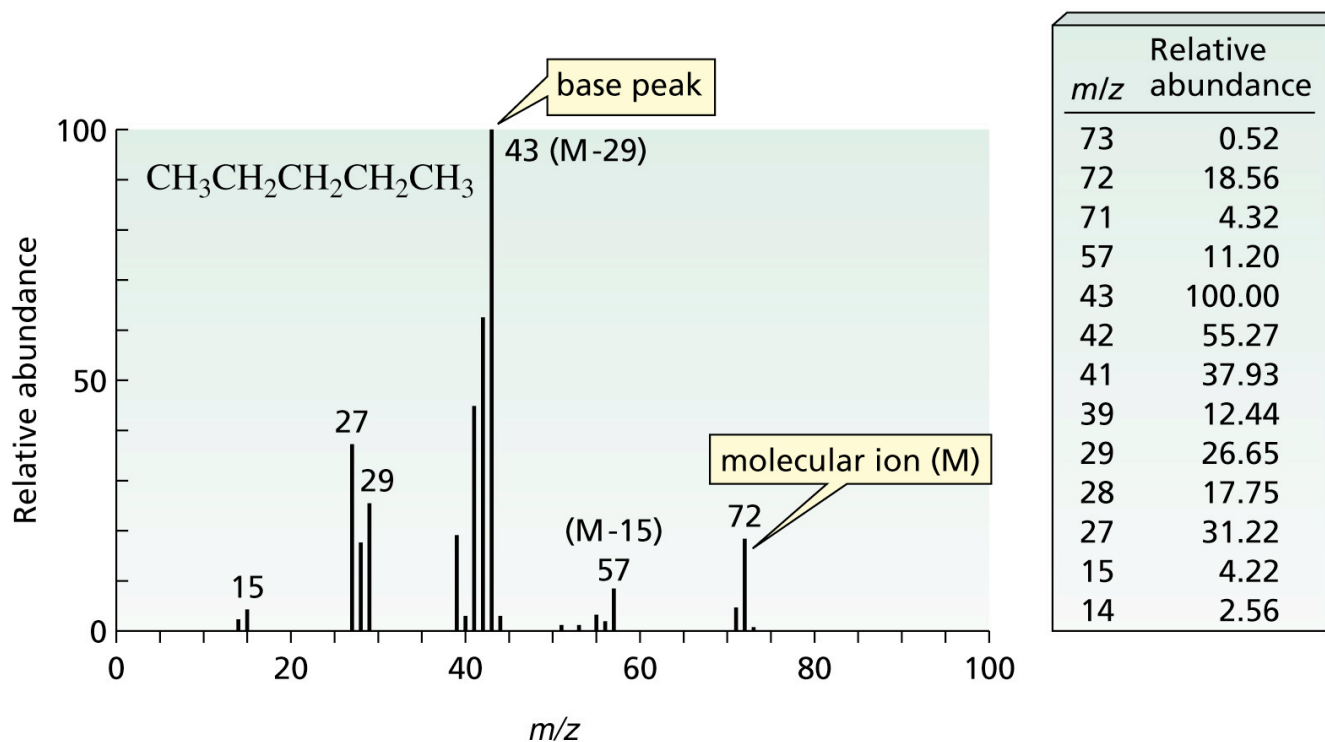
Molekula zatitu ondoren sortutako ioi multzoa banatu egin behar degu eta ondoren detektatu. Masa espektrometro gehienetan hau eremu magnetiko baten bidez egiten da.

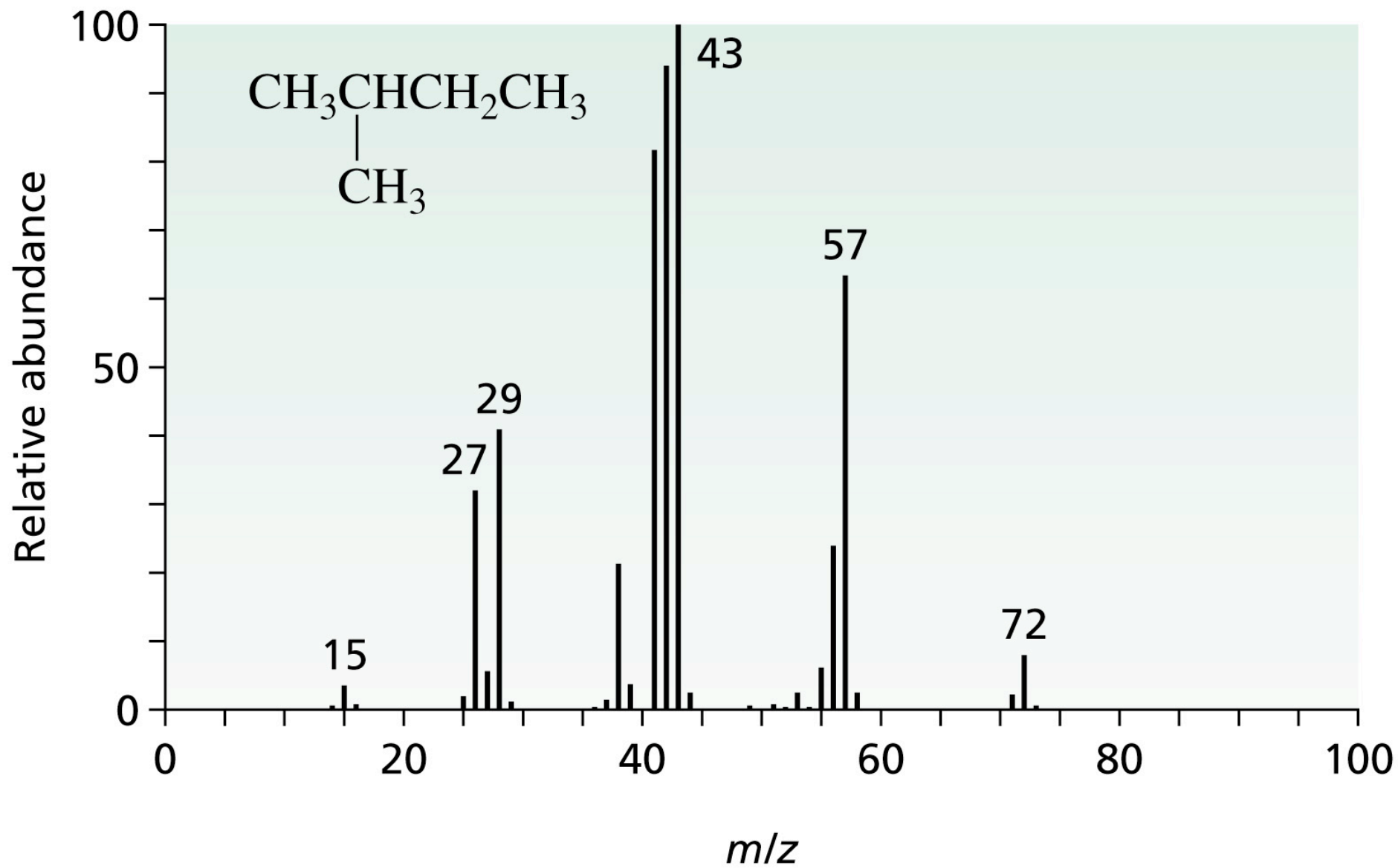
Ionizatu ondoren ioien abiadura haunditu egin behar da, sisteman zehar ibil daitezen. Lehendabiziko ze ioi mota, positiboak ala negatiboak, azeleratu behar ditugunaren aukera egin behar degu, gehienetan positiboak aukeratzen dira, erabiltzen eta sortzen errazagoak direlako. Ondoren negatiboki kargatutako xafla zulatu batzuen bidez azeleratu egiten ditugu. Ioi fluxua kamara batetik pasa arazten dugu eta hor barruan iman baten bi poloen tartetik, imana okertuta dago. Barruan bi eragin jasaten ditu, bata energia zinetikoa, masaren arabera, eta bestea eremu magnetikoaren indarra.

Egiten duen ibilbidea kurboa da eta alde batetik karga/masa eralazioak bultzatzen du (m/z) eta bestalde eremu magnetikoak. Eremu magnetikoa konstantea denez eta ioi gehien karga +1 denez, ibilbidearen okertzeak masarekiko erlazio zuzena du.

Masa espektroa

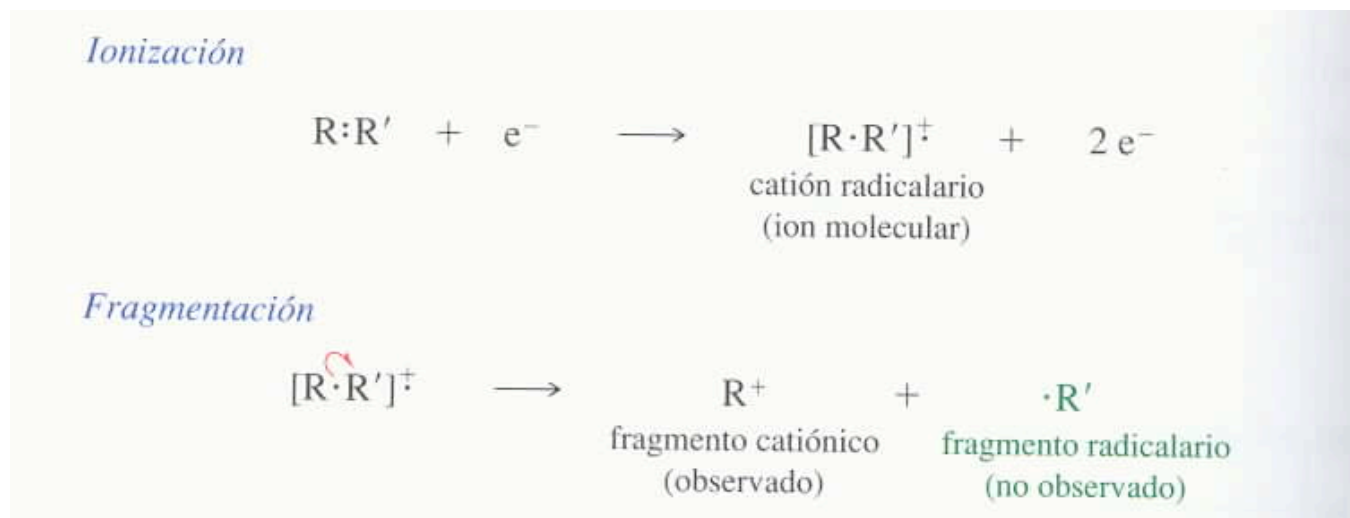
Masa espektroak grafika moduan ateratzen dira edo taula bat bezela ere jaso leizke. Masak zehatzak izan litezke ala borobilduta egon, hori aparatuaren zehaztasunaren arabera egongo da. Marra bakoitzaren inguruan dagoen zenbakiak aberastasun erlatiboa agertzen ditu, gehiengo balorea duenari **piko basea** deitzen zaio, eta ez dagokio konposatuaren masari nahasteko ioi aberatsenari baizik.





Molekulen fragmentazio ereduak

Pisu molekularraz aparte masa espektroak egiturari buruzko informazioa ematen digu. Erabiltzen diren elektroien energia 70 eV ingurukoa da (1610 kcal/mol edo 6740 kJ/mol). Talka egin ondoren ioi erradikal bat sortzen da eta ondoren lotura aurtzen da bi espezie emanez katioia eta erradikala. El impacto forma el catión-radical y con frecuencia rompe un enlace para dar lugar a dos especies: un catión y un radical. Katoiaren masa neurtu leike baina erradikalarena, karga formalik ez duenez, ez. Bere masa diferentzia bidez igarri dezakegu



Isotopo aztunen masaren erabilpena

Elementu gehienek isotopo ezberdinez osatuta daude. Isotopo horiek ere bereiztu leizke ME-n, eta porzentaiaren arabera asaldu litezke piko txiki batzuek espektroan. Piko horiek masa molekularren M^+ gaineratik agertzen dira. M^+ baino masa unitate bat gehiago dutenean $M+1$ esaten zaie, bi baditu $M+2$, etab.

Elemento	M+	M+1	M+2
hidrógeno	^1H 100%		
carbono	^{12}C 98.9%	^{13}C 1.1%	
nitrógeno	^{14}N 99.6%	^{15}N 0.4%	
oxígeno	^{16}O 99.8%		^{18}O 0.2%
azufre	^{32}S 95.0%	^{33}S 0.8%	
cloro	^{35}Cl 75.5%		^{37}Cl 24.5%
bromo	^{79}Br 50.5%		^{81}Br 49.5%
yodo	^{127}I 100%		

Masa espektro bidez ezagutu ditzakegun elementuak

Br	M+2 eta ia M ⁺ ainakoa
Cl	M+2 eta M ⁺ -ren heren bat
I	I ⁺ 127-ra; M ⁺ - 127 zatia agertzen zaigu
N	M ⁺ ezparea
S	M+2 M ⁺ baina %4 haundiagoa

