جامعة تكريت
كلية التربية للبنات
قسم الكيمياء

التشخيص العضوي

المحاضرة (1)

مطيافية الكتلة

أعـداد

أ.د. سلوى عبد الستار جبار

s.abd@tu.edu.iq

The Mass Spectrum طيف الكتلة

The Mass Spectrometer

- يمكن تلخيص عمل جهاز طيف الكتلة بشكل مبسط:-

أولاً يتم قذف الجزيئات العضوية molecules وهي على شكل بخار بسيل من الالكترونات ذات طاقة عالية تقدر بحوالي ٧٠ الكترون فولت داخل غرفة مفرغة من الهواء تسمى غرفة التأين Ionization Chamber فتتحول هذه الجزيئات الى ايونات جزيئية موجبة الشحنة وذلك بفقدها الكترون

$$M \xrightarrow[\text{تيار الكتروني}]{-e} M^{+\cdot}$$

$$\underset{\text{molecule}}{M} \xrightarrow[\text{تيار الكتروني}]{-e} \underset{\text{molecular ion}}{M^{+\cdot}}$$

$$\underset{\text{molecule}}{M} \xrightarrow[(70\ eV)]{-e} \underset{\text{radical-cation}}{M^{+\cdot}}$$

جزيئة عضوية متعادلة تحتوي على عدد زوجي من الالكترونات

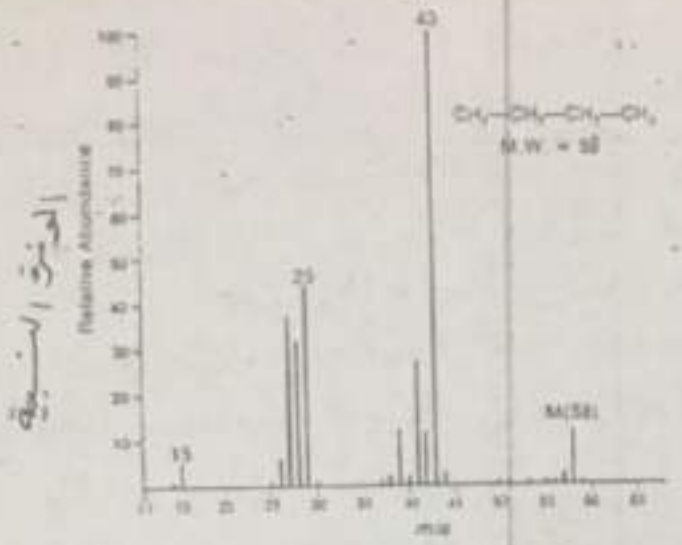
ايون جزيئي موجب يحتوي على عدد مفرد من الالكترونات

radical-cation

ثم تسرع حركة هذه الايونات باتجاه محلل الكتلة mass analyzer الذي يقوم بفصل هذه الايونات حسب نسبة كتلة كل ايون الى شحنته m/e وبفعل مجال مغناطيسي أو كهربائي. وأخيراً تتجه هذه الايونات الى الكاشف Detector الذي يقوم بتحسب عدد أو وفرة الايونات مقارنة مع نسبة الكتلة الى الشحنة m/e وارسالها الى جهاز تسجيل Recorder ليرسمها على شكل كراف يمثل نسبة وفرة الايونات Relative abundance على المحور الصادي ونسبة الكتلة الى الشحنة m/e على المحور السيني كما في رسم طيف كتلة البيوتان شكل (1)

$CH_3CH_2CH_2CH_3$

m.w = 58



Mass Spectrum of Butane

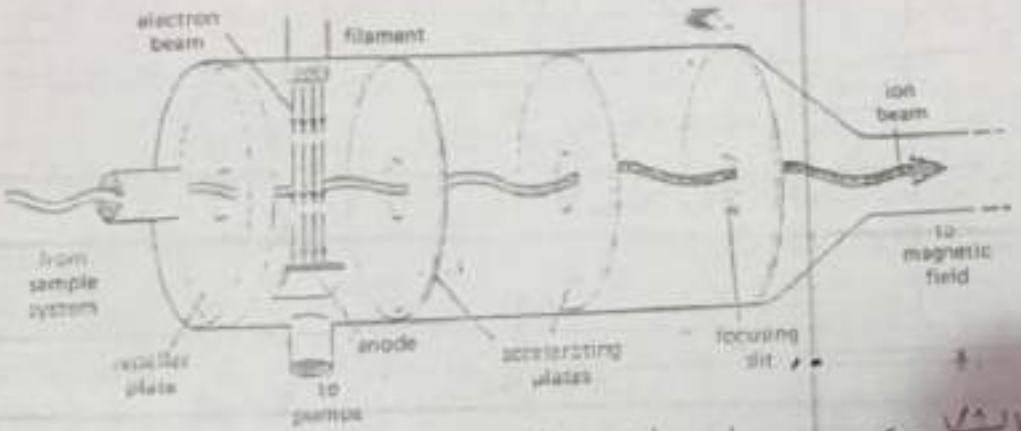
الشكل -١-

حيث نلاحظ القمة الى جهة اليمين تمثل الايون الجزيئي الناشئ من فقد الكترون واحد ويرمز له M وعند m/e = 58 على المحور السيني وشدته حوالي ١٠٪ على المحور الصادي . هنا وزن الالكترون (e) صغير جداً لذا تكون m/e مساوية تقريباً الى M . ان الجزيئ الايوني يكون أصغر من الجزيئة المتعادلة فقط بالكترون واحد لذا فان هذا الجزيئ الايوني يمثل الوزن الجزيئي للجزيئة حيث نلاحظ من مثال البيوتان ان الوزن الجزيئي M.W = 58 ووزن الجزيئ الايوني كذلك M = 58 .

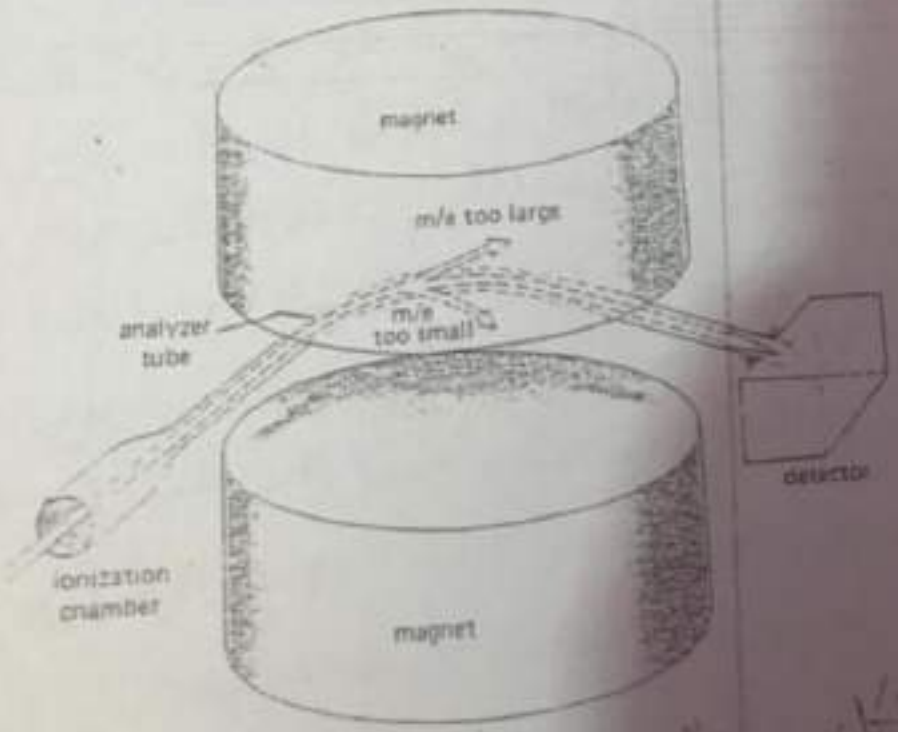
* يمكن تفهيم عمل الجهاز بشكل مفصل . تحول المواد الصلبة والسائلة الى الحالة البخارية وتدفع الى غرفة التأين Ionization Chamber وهناك تقذف جزيئات المركبات التي هي في حالة بخار الى هذه الغرفة بحزمة من الالكترونات ذات طاقة عالية تقدر بـ ٧٠ الكترون فولت فتتحول هذه الجزيئات الى ايونات يقوم بتعجيل سيرها مجال مغناطيسي . ان حزمة الالكترونات ذات الطاقة العالية تتولد من مثل سلك معدني الى حرارة عالية . عندما تقذف الجزيئات المتعادلة بواسطة الالكترونات تتحول الى ايونات [illegible] الكترون [illegible] تعجيل سيرها [illegible]

وتشحنها على شكل تيار من الايونات الموجبة . اما الجزيئات الخير متأينة فانها تسحب بواسطة pumps مرتبط بغرفة التأين . ان قسم من هذه الجزيئات يتحول الى ايونات سالبة لاستقطابها الكترونات حيث تمتص من قبل صفائح محاكية للشحنة وقسم من الجزيئات تتحول الى ايونات موجبة تماثلية الشحنة . ان الطاقة اللازمة لعملية التأين تدعى جهد التأين لجزيئة الجزيئية .

تخرج الايونات من غرفة التأين فتذهب الى جهاز محلل الكتلة mass analyzer فيحلل الايونات حسب كتلة كل ايون الى شحنته كما في الشكل (٧) الذي يمثل غرفة التأين والشكل (٧) الذي يمثل جهاز محلل الكتلة . الذي يتألف من انبوبة تمر من خلالها الايونات عبر مجال مغناطيسي فيقوم بفصل الايونات حسب كتلتها وارسالها الى الكشاف detector .



Ionization Chamber -٧- الشكل



Mass Analyzer -٨- الشكل

الطاقة الحركية للايونات يمكن تمثيلها بالمعادلة $\frac{1}{2}mV^2 = eV$

m تمثل كتلة الايون ، V تمثل سرعة الايون ، e تمثل شحنة الايون و V تمثل فرق الجهد على الصفائح المعجلة. عند مرور الايونات في المجال المغناطيسي فانها تسير بشكل قوس ونصف قطره يمثل بالمعادلة $r = \frac{mV}{eH}$ حيث H تمثل شدة المجال المغناطيسي .

من المعادلتين السابقتين

$$m/e = \frac{H^2 r^2}{2V}$$

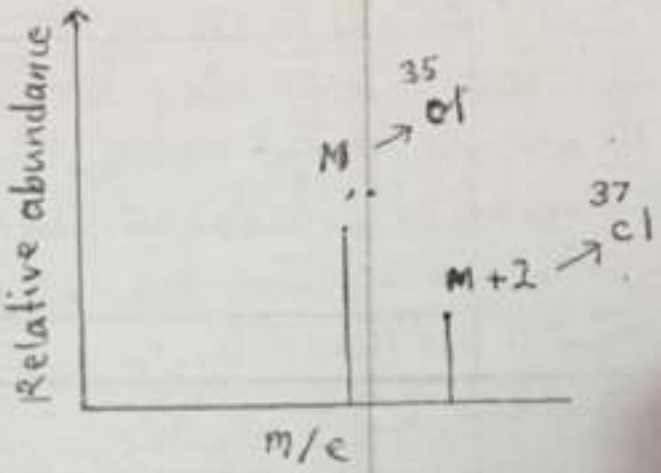
هذه المعادلة الاخيرة مهمة لانها توضح سلوك الايون في غرفة التأيين . وعندها يمكن ضبط شدة المجال H والفولتية V بحيث جميع الايونات m/e تنفذ الى الكاشف وتسجل على شكل كراف يمثل عدد الايونات مقابل قيمة m/e عندما تفقد الجزيئة الكترون وتتحول الى ايون موجب

$$M \xrightarrow{-e} M^+$$

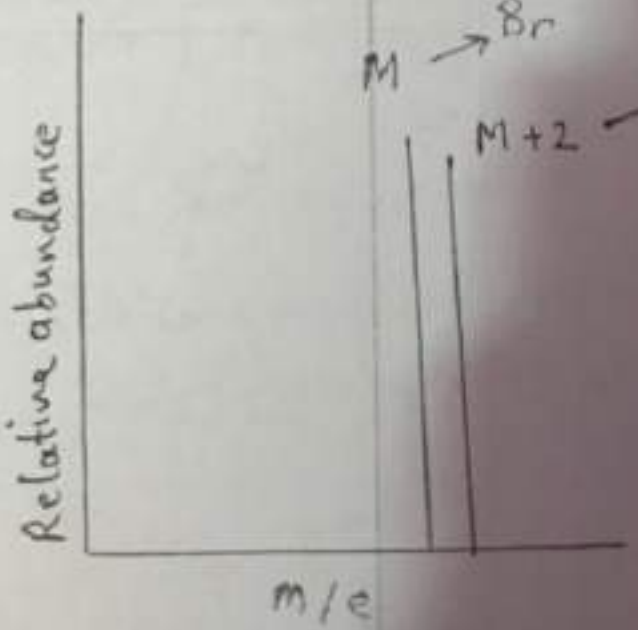
ايون موجب ، جزيئة

فان نسبة $\frac{M^+}{e}$ هي بالحقيقة تمثل وزن الجزيئة المتبقية M لان وزن الالكترون صغير جدا . ان الايون M^+ يدعى الايون الجزيئي Molecular ion وتكون القمة التي يرسمها بالطيف هي اعلى قيمة من بقية القمم . كذلك يمكن مشاهدة قمم تمثل الايون الجزيئي الذي يحتوي نظائر العناصر فمثلاً الكاربون الاعتيادي ^{12}C والنظير الاثقل ^{13}C والهيدروجين ^1H والنظير الاثقل ^2H لذلك نشاهد هنا ايونات جزيئية بالاضافة الى الايون الجزيئي M وهي $M+1$ و $M+2$ بالاضافة الى الايون الجزيئي فان الالكترونات المسلطة في غرفة التأيين تؤدي الى كسر الاواصر في الجزيئة [illegible]

⑤ m/e تختلف عن الايون الاصل فتعطي عليها fragmentions . عندما يحتوي الجزيئ العضوي على ذرة كلور Cl وعند نعرف بان الكلور له نظيرين وهما ^{35}Cl والاخر ^{37}Cl وان نسبة ^{37}Cl تعادل 32.5% من ^{35}Cl اي أن واحد الثلاثة من الثاني لذلك نشاهد في طيف الكتلة قمتين للايون الجزيئي بنسبة 100% لـ ^{35}Cl و 32.5% لـ ^{37}Cl اي M للايون الجزيئي الحاوي على ^{35}Cl و M+2 للايون الحاوي على ^{37}Cl



وكذلك البروم له نظيرين ^{81}Br الذي يشكل 98.0% من ^{79}Br وطيف الكتلة يبين قمتين للايونات الجزيئية



٦) fragment ions أطلق على بعض الايونات الجزيئية الصغيرة الناتجة من انشطار الجزيئة العضوية.

عندما يتم قصف بخار الجزيئة العضوية داخل غرفة التأين بواسطة الكترونات ذات طاقة عالية فانه تتحول الى ايون موجب وذلك بفقد الكترون

$$M \xrightarrow{-e} M^{+\cdot}$$

جزيئة عضوية molecule — ايون جزيئي molecular ion

وان الايون الناتج يكتسب طاقة اضافية نتيجة التصادم مع ايونات اخرى وكذلك التصادم مع الالكترونات المسلطة لذا فانه يعاني من انشطارات اخرى الى ايونات جزيئية أصغر وان جهاز طيف الكتلة سوف يقوم برسم خطوط او قمم تمثل كتلة هذه الايونات الصغيرة الناتجة.

ان كل مصنف من المركبات العضوية سوف يكون له طيف كتلة يتميز بالايون الجزيئي $M^{+\cdot}$ وايونات جزيئية صغيرة للاجزاء الناتجة. ان الايون الجزيئي له شحنة موجبة لانه يفقد الكترون ولكنه يحتوي على الكترون مفرد او ان عدد الالكترونات مفردة لذلك يعتبر جذر ايوني هو عبارة عن radical-cation.

$$R-CH_3 \xrightarrow{-e} [R-CH_3]^{+\cdot}$$

جزيئة عضوية — عدد زوجي من الالكترونات

جذر ايوني — عدد فردي من الالكترونات

عندما يتجزأ الايون الجزيئي الى عدد من الاجزاء نتيجة الطاقة العالية فان هذه الاجزاء يكون قسم منها عديم الشحنة ولا تظهر في الطيف

$$[R-CH_3]^{+\cdot} \xrightarrow{\text{طاقة انشطار}} R^+ + \cdot CH_3$$

أيون جزيئي — ايون جزيئي كتلته تساوي 15 — جذر الميثيل (متعادل) كتلته تساوي 15 لذا يظهر في الطيف

(٧)

مثال: إذا طلب $R-CH_3$ عبارة عن جذيلة البيوتان $CH_3CH_2CH_2CH_3$

وزنها الجزيئي $M.W = 58$ فعندما تتجزأ فإنها تعطي جذر الميثيل الذي كتلته تساوي 15 وان كتلة الايون الموجب الجديد $CH_3CH_2CH_2^+$ تساوي $58-15=43$ لذلك نلاحظ في جهاز الطيف ظهور عند قيمة $m/e=58$ للايون الجزيئي (M) وظهور عند $m/e=43$ للايون الموجب $CH_3CH_2\overset{+}{C}H_2$ كما في الشكل -١-

$$CH_3CH_2CH_2CH_3 \xrightarrow[-e]{\text{طاقة}} \left[CH_3CH_2CH_2CH_3\right]^{+\cdot} \xrightarrow{\text{انشطار}} CH_3CH_2\overset{+}{C}H_2 + {}^{\cdot}CH_3$$

جزيئة $M.W=58$ — ايون جزيئي $M=58$ مماثل كتلة الجزيئة — ايون جديد موجب $M=43$

امثلة اخرى على عملية الانشطار

$$R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-R' \xrightarrow[\text{طاقة الكترونية}]{-e} \left[R\overset{O}{\overset{\|}{C}}-R'\right]^{+\cdot} \xrightarrow[\text{انشطار}]{\text{طاقة}} \oplus C-R' + R^{\cdot}$$

M جزيئية — ايون جزيئي — أيون موجب — جذر

$$R-X \xrightarrow[\text{طاقة}]{-e} \left[R-X\right]^{+\cdot} \longrightarrow R^+ + X^{\cdot}$$

انكسار

$X = halogen, OR, SR, NR_2$, $R = alkyl$ or $aryl$.

هنا نلاحظ انكسار آصرة واحدة

$$R-\underset{H}{\overset{H}{CH}}-\underset{OH}{\overset{OH}{CHR'}} \xrightarrow{-e} \left[R-\overset{H}{\underset{|}{CH}}-\overset{OH}{\underset{|}{CHR'}}\right]^{+\cdot} \xrightarrow[\text{انشطار}]{\text{طاقة}} \left[RCH=CHR'\right]^{+\cdot} + H_2O$$

M — انكسار الكترون آصرة — فقد جزيئة ماء

لاحظ في المثال السابق ان حيث الكتلة يعطي فط يمثل كتلة الايون الجزيئي الاصل وفط آخر يمثل كتلة الايون الثاني الجديد وهو ينقص عن الاصل بمقدار (18) وهو كتلة جزيئة الماء

مثال آخر

$$\left[R-\overset{+}{C}H-CH_2-CH_2 \right]^{+} \longrightarrow \left[R-CH=CH_2 \right]^{+\cdot} + CH_2=CH_2$$

الايون الاصل اكبر من الايون الثاني بمقدار وزن جزيئة اثيلين

$CH_2=CH_2$ (28)

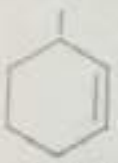
$C = 2 \times 12 = 24$
$H = 4 \times 1 = 4$
المجموع = 28

في الجدول التالي امثلة على مختلف الايونات الناتجة من الانشطار وكتلة كل واحد منها

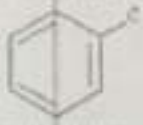
m/e	Ions	m/e	Ions
14	CH_2	41	CH_3CHOH
15	CH_3		CH_3CH_2OH
16	O		CH_3OCH_3
17	OH		O ‖ C–OH
18	H_2O		$CH_3CH=O^+ - H$
	NH_4		
19	F	46	NO_2
	H_3O	47	CH_2SH
26	CeN		CH_3S
27	C_2H_3	48	$CH_3S^+ - H$
28	C_2H_4	49	CH_2Cl
	CO	51	CHF_2
	N_2 (air)	53	C_4H_5
	$CH_2=NH$	54	CH_2CH_2CeN
29	C_2H_5	55	C_4H_7
	CHO		$CH_2=CHC=O$
30	CH_2NH_2	56	C_4H_8
	NO	57	C_4H_9
31	CH_2OH		$C_2H_5C=O$
	OCH_3	58	$CH_3-C=O$ ‖ $CH_2 - H$
32	O_2 (air)		
33	SH		$C_2H_5CHNH_2$
	CH_2F		$(CH_3)_2NHCH_2$
34	H_2S		$C_3H_7NHCH_2$
35	Cl		C_4H_9S
36	HCl		
39	C_3H_3	59	$(CH_3)_2COH$
40	CH_2CeN		$CH_3OC_2H_5$
41	C_3H_5		O ‖ C–OCH_3
	$CH_2CeN - H$		$NH_2C=O$ ‖ $CH_2 - H$
	C_2H_3NH		
42	C_3H_6		CH_3OCHOH
43	C_3H_7		CH_3CHCH_2OH
	$CH_3C=O$		
	C_2H_5N	60	$CH_2C=O$ ‖ $CH_2 - H$
44	$CH_3CH=O^+ - H$		
	CH_2CH_2OH		
	CO_2		

(9)

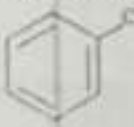
m/e	Ions
63	(ion $C_5H_3^+$)
66	(ion $C_5H_6^+$)
67	$C_5H_7^+$
68	$CH_2CH_2CH_2CH_2CN^+$
69	$C_4H_5^+$ CF_3^+ $CH_3CH{=}CHC{\equiv}O^+$ $CH_3{-}COCH_2C{=}O^+$
70	$C_5H_{10}^+$
71	$C_5H_{11}^+$ $C_3H_7C{=}O^+$
72	$C_2H_5\overset{O}{\overset{\|}{C}}{-}CH_3^+$ $C_3H_7CHNH_2^+$ $(CH_3)_2CH{-}C{=}O^+$ $C_3H_7NHCHCH_3^+$ and isomers
73	Homologs of 59
74	$CH_3{-}\overset{O}{\overset{\|}{C}}{-}OCH_3 + H^+$
75	$\overset{O}{\overset{\|}{C}}{-}OC_2H_5 + 2H^+$ $CH_2SC_2H_5^+$ $(CH_3)_2CSH^+$ $(CH_3)_2CH^+$
77	$C_6H_5^+$
78	$C_5H_5^+ + H^+$
79	$C_6H_7^+ + 2H^+$ Br
80	$CH_2SS + H^+$
81	$C_6H_9^+$



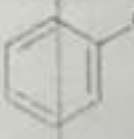
m/e	Ions
82	$CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CN^+$ CCl_2^+ $C_6H_{10}^+$
83	$C_6H_{11}^+$ $CHCl_2^+$
84	$C_5H_8C{=}O^+$ CCl_3^+
86	$C_4H_9\overset{O}{\overset{\|}{C}}{-}CH_3 + H^+$ $C_4H_9CHNH_2^+$ and isomers
87	$C_4H_7\overset{O}{\overset{\|}{C}}{-}CO^+$ Homologs of 73 $CH_3CH_2COCH_2^+$ $\overset{O}{\overset{\|}{C}}$
88	$CH_3{-}\overset{O}{\overset{\|}{C}}{-}OC_2H_5 + H^+$
89	$\overset{O}{\overset{\|}{C}}{-}OC_2H_5 + 2H^+$

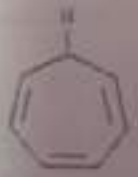


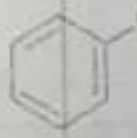
m/e	Ions
90	$CH_2CHONO_2^+$

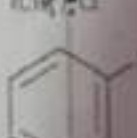


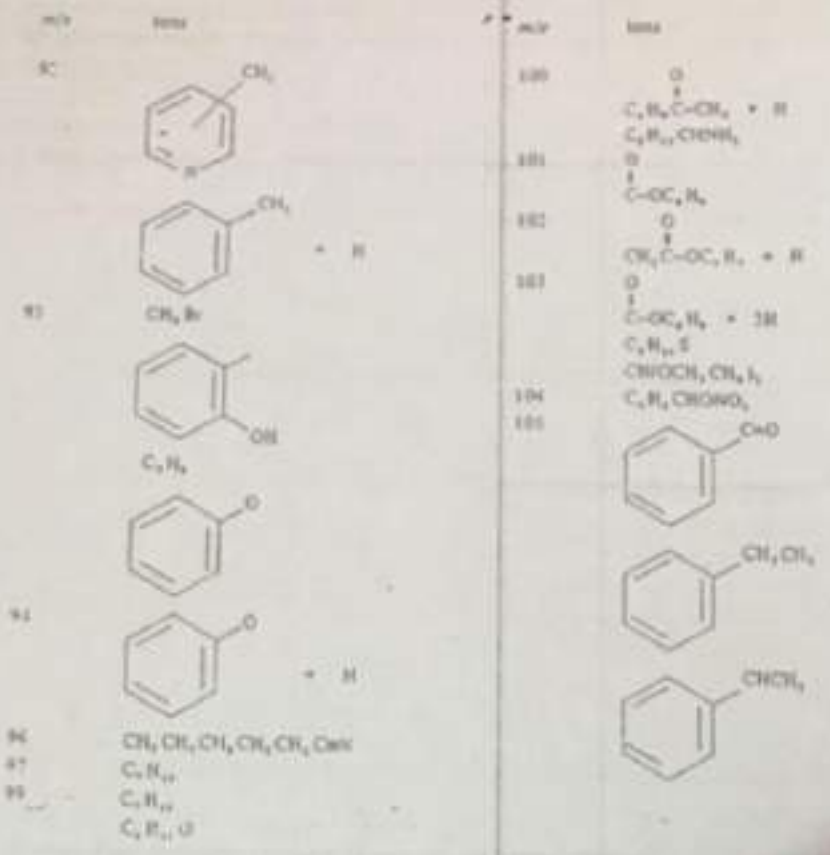
m/e	Ions
91	











أمثلة على رسوم طيف كتلة المركبات العضوية

١- الالكانات مثال البيوتان الشكل -١-

المعادلات التالية توضح تكون الايون الجزيئي والذي يمثل كتلة جزيئة البيوتان وتحول هذا الايون الى ايونات اصغر موجبة الشحنة لها كتل مختلفة جميعها في رسم الطيف.

$CH_3CH_2CH_2CH_3 \xrightarrow[\text{طاقة}]{-e} \left[CH_3CH_2CH_2CH_3\right]^{+\cdot} \xrightarrow{\text{التكسر}} CH_3\overset{+}{C}H_2CH_2 + {}^{\cdot}CH_3$

$CH_3CH_2CH_2CH_3$
جزيئة البيوتان
M.W = 58

ايون جزيئي
M = 58

propyl carbonium ion
M = 43

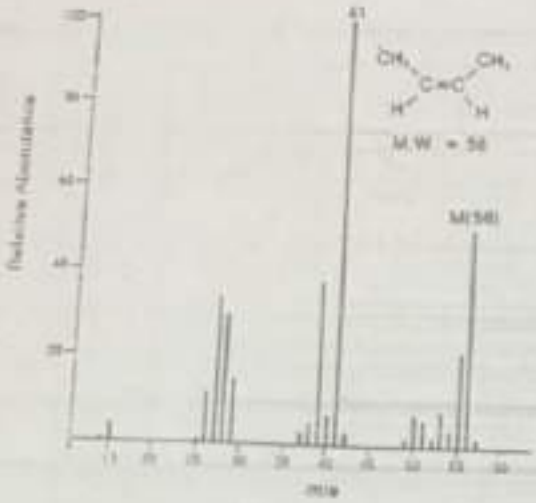
$CH_3-\overset{+}{C}H_2 + CH_2$
M = 14

$CH_3\overset{+}{C}H_2 + CH_3\dot{C}H_2$

ethyl carbonium ion
M = 29

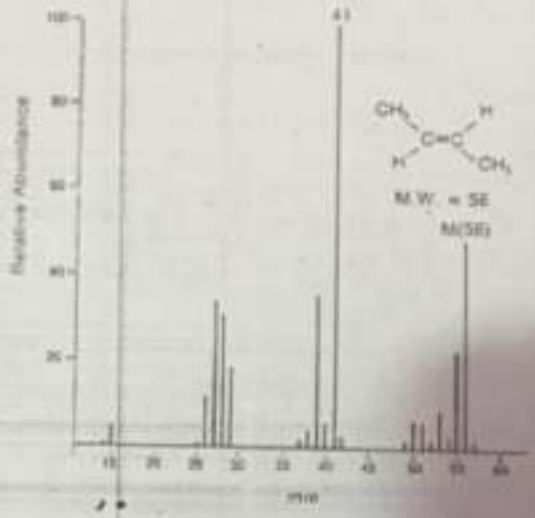
جذر الاثيل لا يظهر في الطيف

الالكانات تميل الى فقد مجموعة CH_2 كتلتها 14 أو ذرتين هيدروجين كتلة 2 وان اهم ما نلاحظه في الطيف اعلى كتلة والتي تعود للايون الجزيئي الاول وهو يمثل كتلة الجزيئة الاساسية وفي الالكانات المتفرعة يكون هذا الايون غير ظاهر بشكل واضح وأما الايزومرات فانها تعطي نفس طيف الكتلة كما في الاشكال التالية



Mass Spectrum of cis-2-Butene

الشكل -٥-



Mass Spectrum of trans-2-Butene

الشكل -٤-

٢- الالكينات مثال طيف الكتلة لـ 1-Butene الشكل -١-

$$CH_3CH_2CH=CH_2 \xrightarrow[-e]{\text{طاقة}} \left[CH_3CH_2CH=CH_2\right]^{+\cdot} \longrightarrow {}^{\cdot}CH_3 +$$

M.W = 56

molecular ion

M = 56

جذر الميثيل

$$\left[{}^{+}CH_2-CH=CH_2 \longleftrightarrow CH_2=CH-{}^{+}CH_2\right]$$

allyl carbonium ion

مستقر

M = 41

الألكانيات :

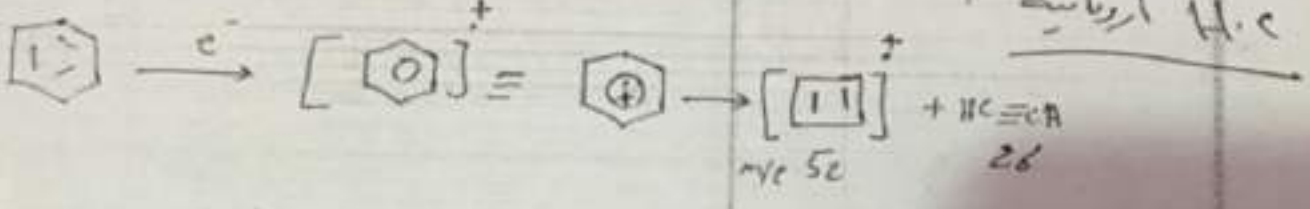
$$R + [CH_2-C\equiv C-H]^{\cdot+} \longrightarrow R^{\cdot} + CH_2-C\equiv C-H$$

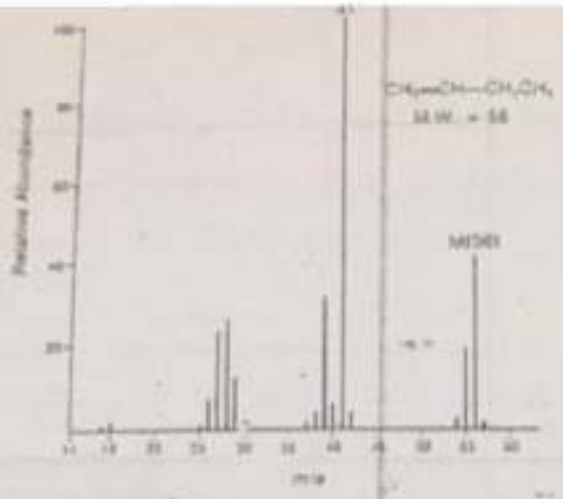
Ve = ?

$$CH_2-C\equiv C-H \longleftrightarrow CH=C=C-H$$

Ve 12 مرنين

H.C الأروماتية :

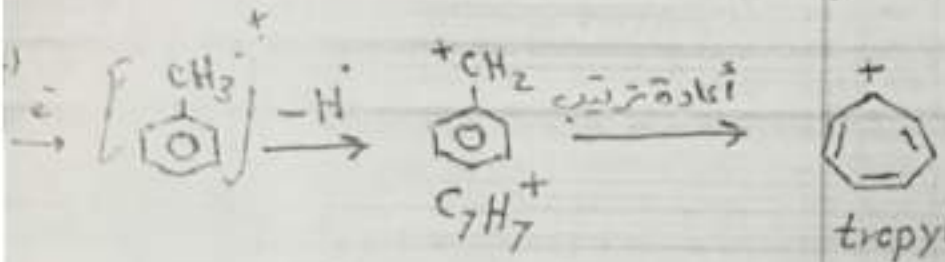




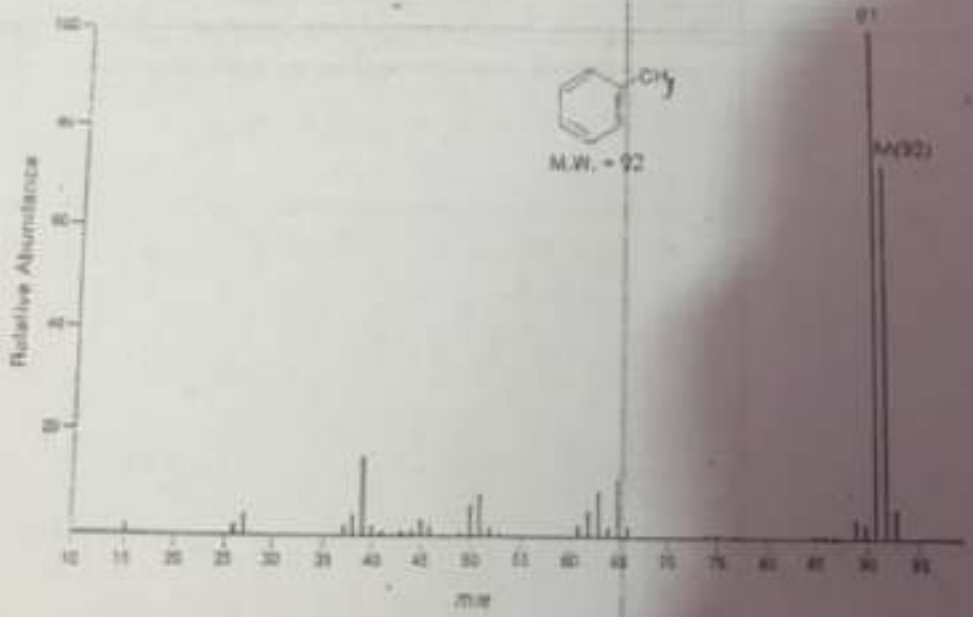
Mass Spectrum of 1-Butene الشكل -٦-

٧- الهيدروكاربونات العطرية Aromatic Hydrocarbon

مثال التولوين كما في الشكل -٧-



M.W = 92 المستوى M = 91 M = 91

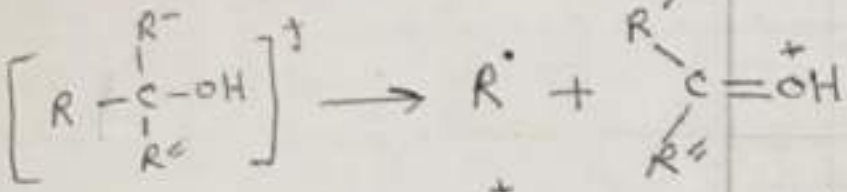


Mass Spectrum of Toluene الشكل -٧-

٤ - الكحولات والفينولات

Alcohols and phenols

الانشطارات التي تحدث في الكحول تحدث فيها فقدان اكبر مجموعة الكيل مصورة اسرع. وفي مثال مركب كتلة 1-Butanol كما في الشكل ٨٠ - الذي يبدو فيه كتلة الايون $H_2C=\overset{+}{O}H$ في $m/e=31$

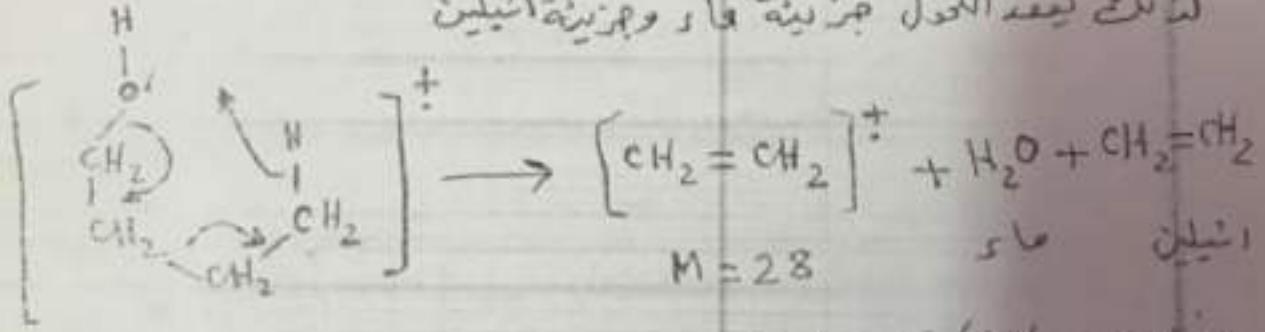


$$\left[CH_3CH_2CH_2CH_2OH\right]^{+\cdot} \longrightarrow H_2C=\overset{+}{O}H + CH_3CH_2\dot{C}H_2$$

propyl group

$M = 74$ $\qquad$ $M = 31$

كذلك يفقد الكحول جزيئة ماء وجزيئة أثيلين

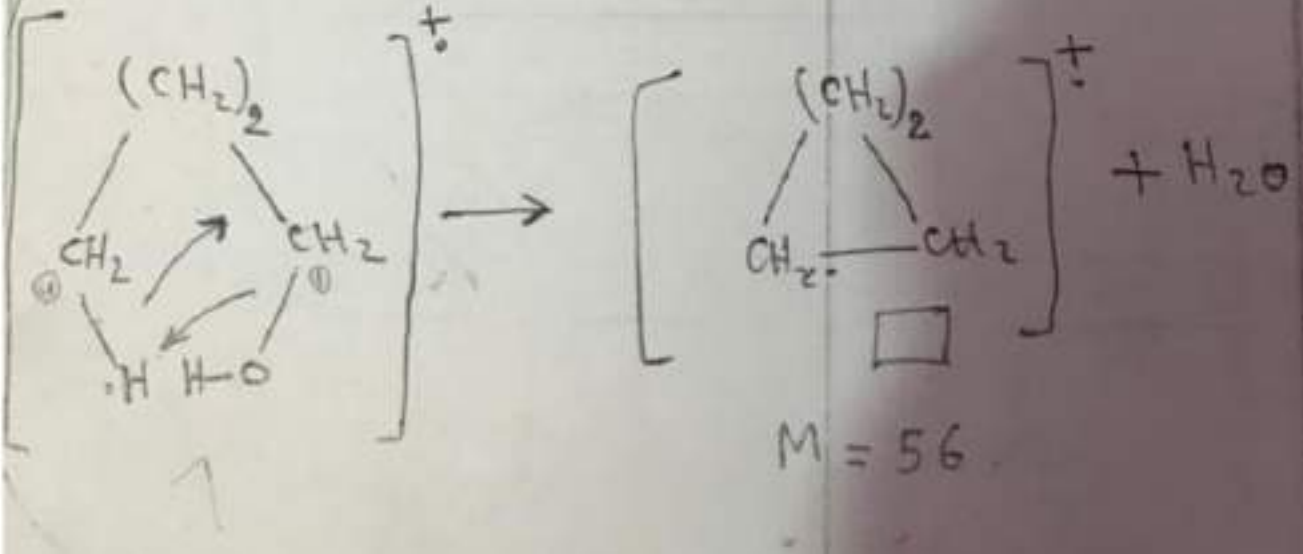


$$\left[CH_2=CH_2\right]^{+\cdot} + H_2O + CH_2=CH_2$$

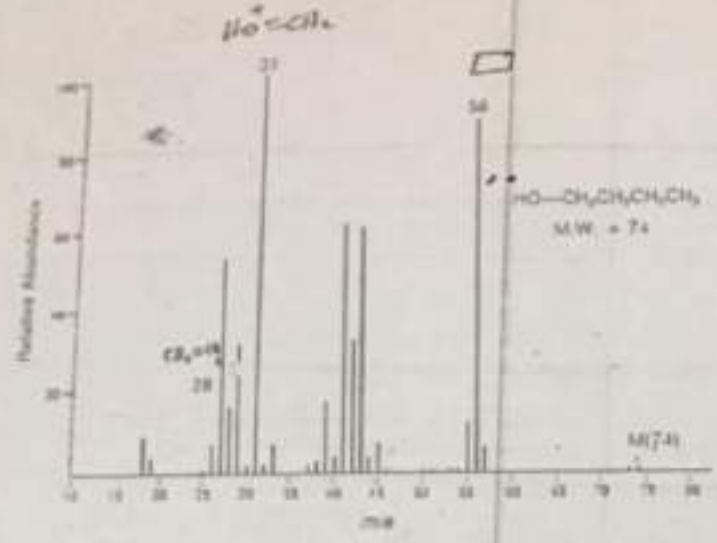
$M = 28$ $\qquad$ اثيلين $\qquad$ ماء

هناك ميكانيكية اخرى لفقد جزيئة الماء وهي ميكانيكية

* 1,4-elemination of water via acyclic mechanism



$M = 56$

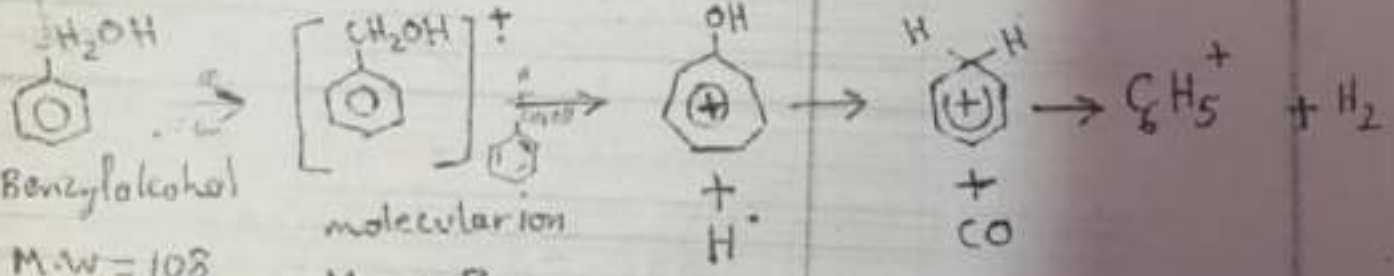


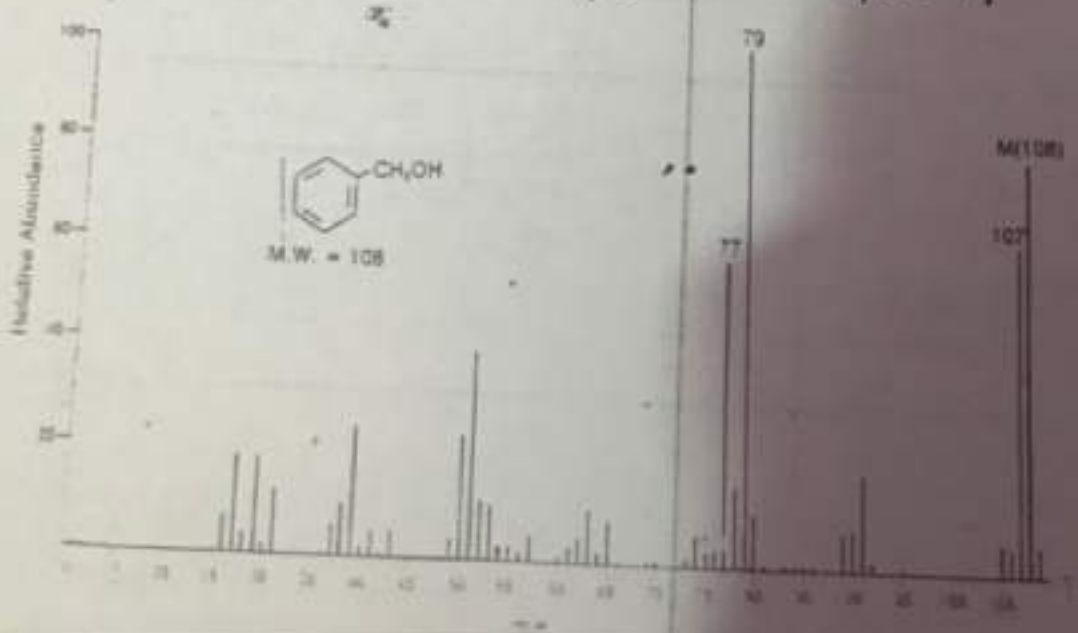
Mass Spectrum of 1-Butanol

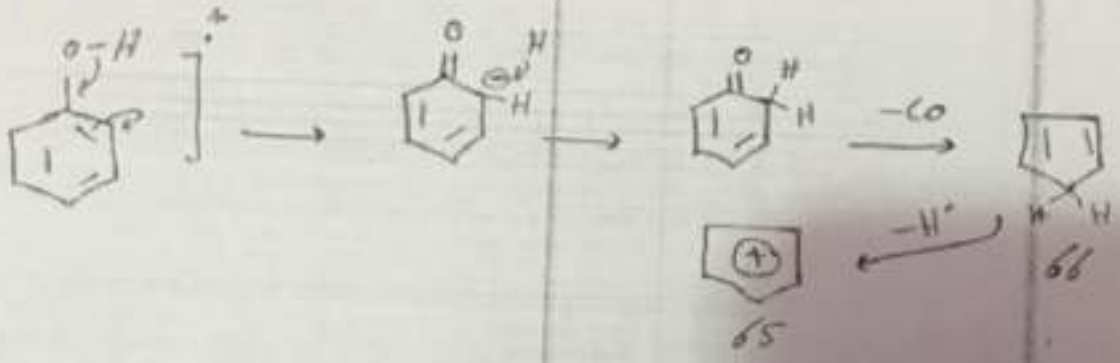
الشكل -٨-

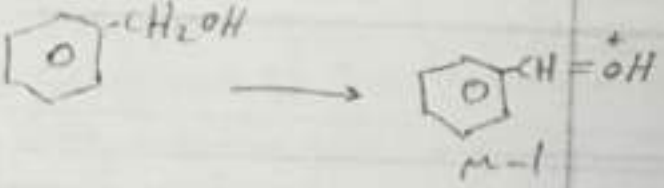
مثال الكحول البنزيلي الشكل -٩-

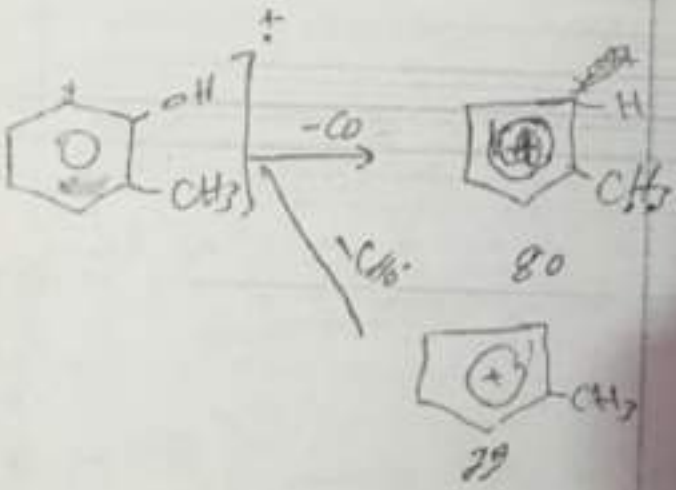
المعادلة التالية ترضح الأيونات الناتجة من عملية التشظي



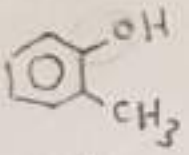



-CO
-H·
65
66


-CH2OH
CH=OH
M-1


OH
CH3
-CO
H
CH3
80
-CH3·
CH3
29

(5)



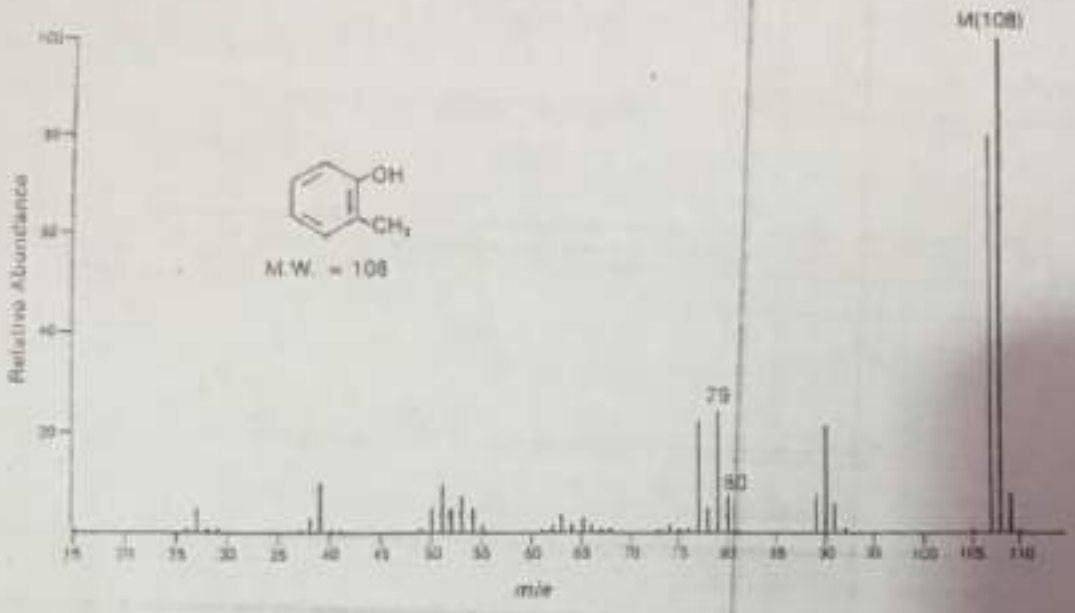
2-Methylphenol

الفينول

M.W = 108

في عملية التشظي يفقد الأيون الجزيئي جزيئة CO الكتلة 28 لينتج ايون كتلته 80 وكذلك يفقد جزيئة $HCO^{\cdot}$ (29) لينتج ايون آخر كتلته 79

كما في الشكل -١٠-



Mass Spectrum of 2-Methylphenol (o-Cresol)

الشكل -١٠-

(18)

الكيتونات مثال 2-butanone كما في $CH_3-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_2CH_3$

$M.W = 72$

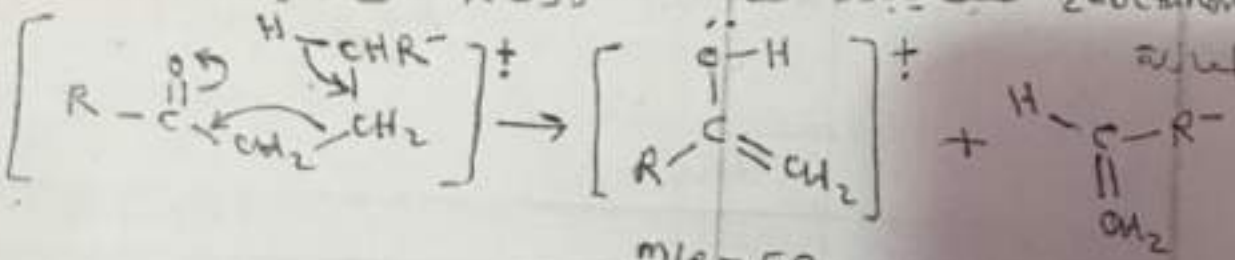
شكل -١٤-

الخط عند $m/e = 43$ يعود للأيون $CH_3-\overset{O}{\overset{\|}{C}}^+$ اي نتيجة لفقد مجموعة CH_2CH_3 من الايون الجزيئي .

والخط عند $m/e = 57$ يعود للايون $^+\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_2CH_3$ نتيجة لفقد مجموعة CH_3

الخط عند $m/e = 72$ يعود للايون الجزيئي الذي يمثل كتلة الجزيئة

هنالك ايونات فوجية تتكون نتيجة النشطي والمادة ترتيب ولافيرتي فمثلا تتكون عدة ذرات الهايدروجين ٧ او اكثر كما في 2-octanone حيث يبدو الخط عند $m/e = 58$ وهو يعود للايون الموضح في المعادلة



$m/e = 58$

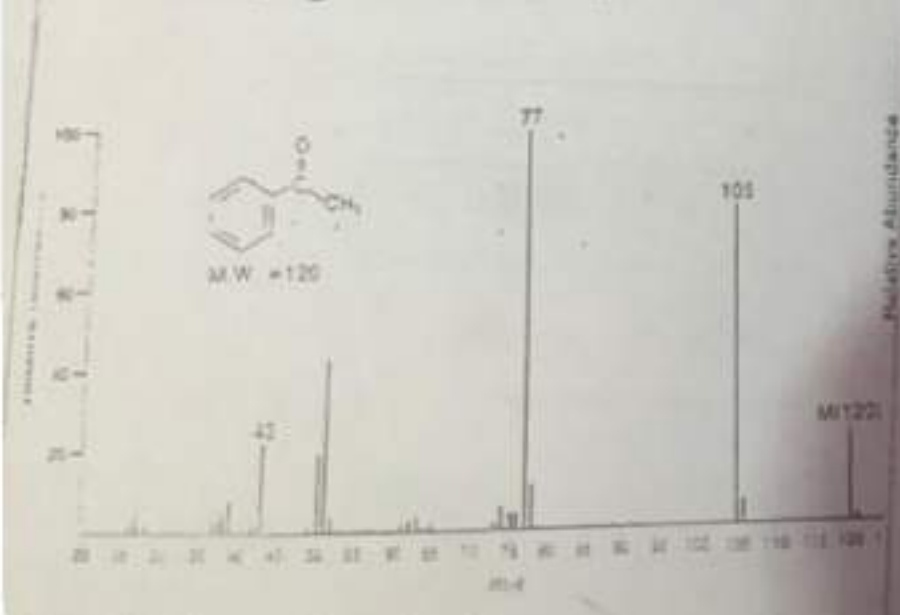
$R = CH_3$

الكيتونات العطرية مثال الاسيتوفينون $C_6H_5-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_3$ كما في

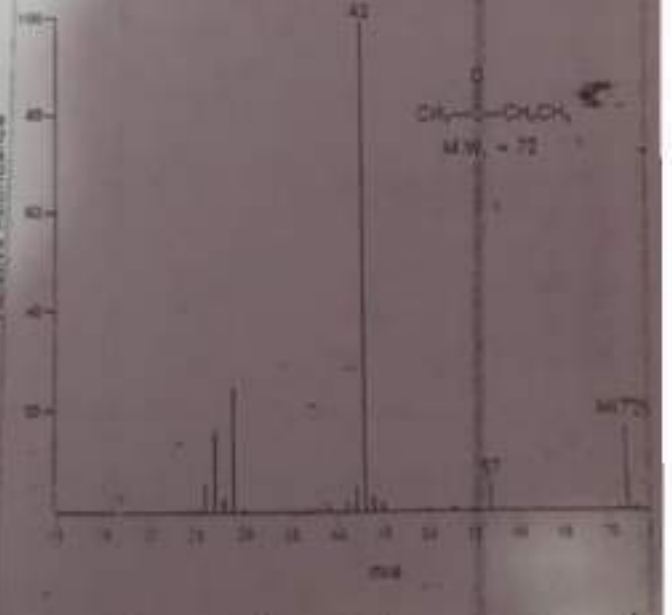
$M.W = 120$

شكل -١٥-

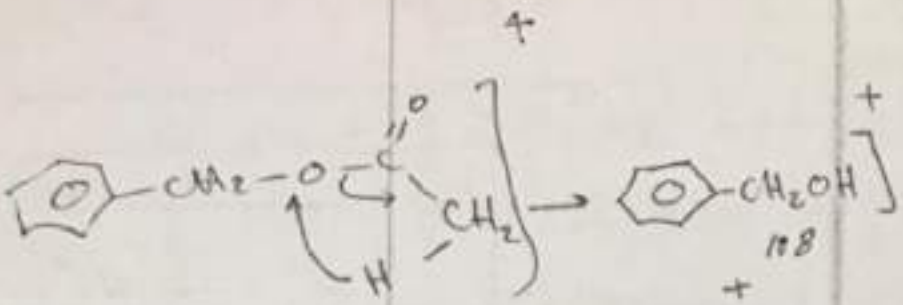
الخط عند $m/e = 120$ يمثل الايون الجزيئي او الجزيئة الام ، الخط عند $m/e = 105$ يمثل الايون $C_6H_5CO^+$ والخط عند $m/e = 77$ يمثل الايون $C_6H_5^+$

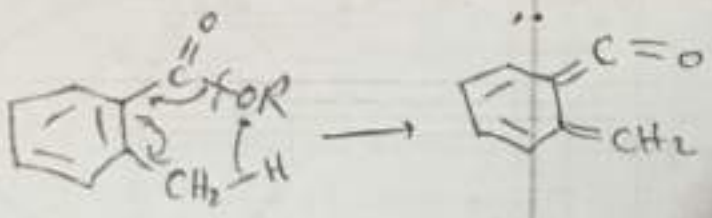


Mass Spectrum of Acetophenone -١٥- شكل



Mass Spectrum of 2-Butanone -١٤- شكل





if R = CH_3 ---- $CH_3 \cdot COOH$

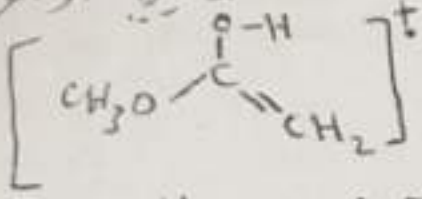
R = H ---- $H\,COOH$

Esters

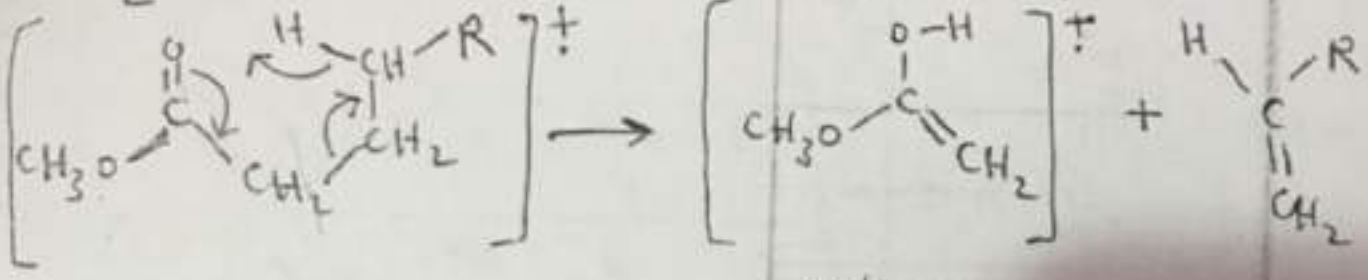
(19) $CH_3CH_2CH_2-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-OCH_3$ methyl Butyrate

M.W = 102

يظهر الخط عند m/e = 102 الذي يمثل الايون الجزيئي أو الوزن الجزيئي الناتج



الخط عند m/e = 74 يمثل الايون من اعادة ترتيب مكلافيرتي ..



m/e = 74

القمة عند m/e = 71 تمثل الأيون $CH_3CH_2CH_2CO^+$

القمة عند m/e = 59 تمثل الايون $CH_3O-C=O^+$

القمة عند m/e = 43 تمثل كتلة الايون CH_3CO^+ أيون الاسيليوم

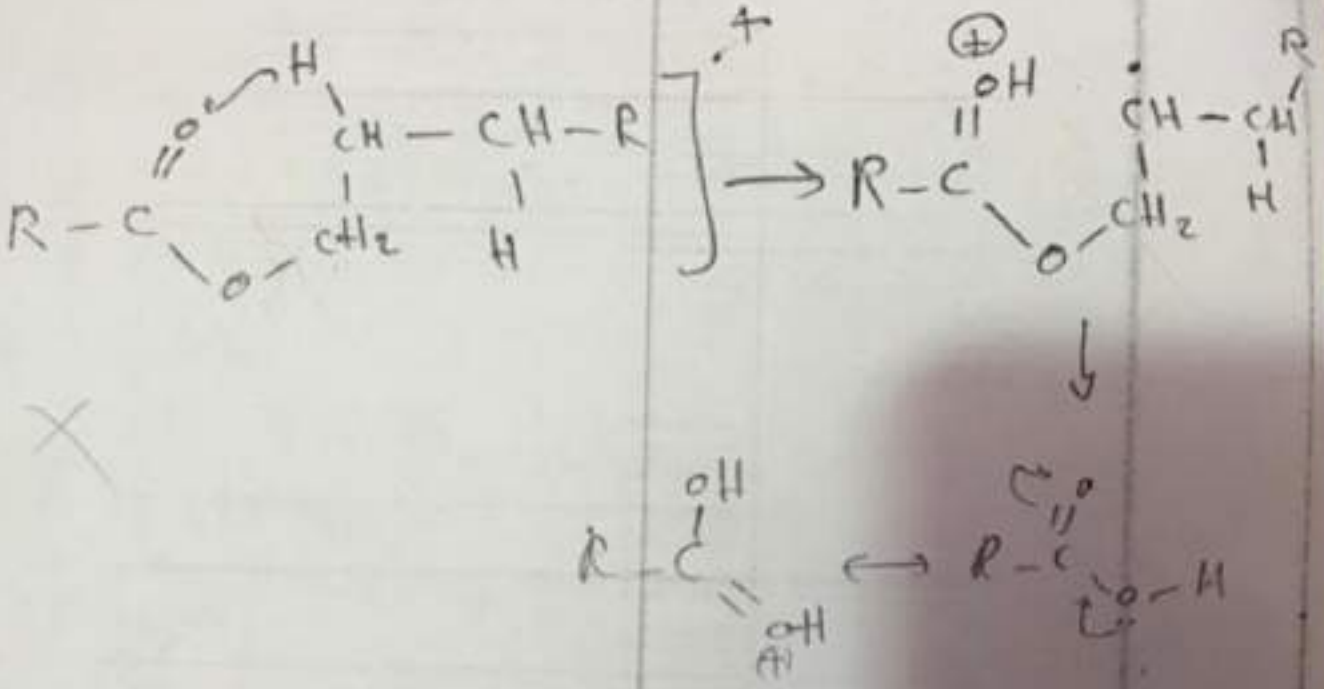
القمة عند m/e = 87 تمثل كتلة الايون $CH_3CH_2CH_2\overset{O}{\overset{\|}{C}}-O^+$

mass Spectrum of Methyl Butyrate

الشكل -١٦-

ⓒ :

تحت الترتيب لا يتم هذا الاستراف ذات الكحول الأولي
الذي له ٢ بحيل الشكل H في موضع كما في ذرة
الأوكسجين للاستريك بالأسفل



الحوامض الكاربوكسيلية carboxylic acids

مثال - حامض Propionic Acid $CH_3CH_2-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-OH$ كما في الشكل.

M.W = 74

الخط عند m/e=74 يمثل كتلة الايون الجزيئي

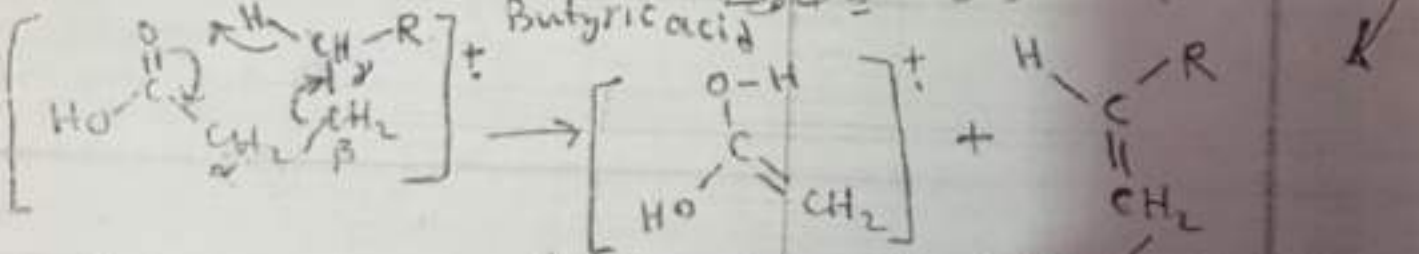
الخط عند m/e=57 يمثل كتلة الايون الجزيئي ناقص مجموعة OH اي $CH_3CH_2\overset{O}{\overset{\|}{C}}^+$

الخط عند m/e=45 يمثل كتلة الايون $COOH^+$ وهذا الايون مميز في الحوامض الكاربوكسيلية.

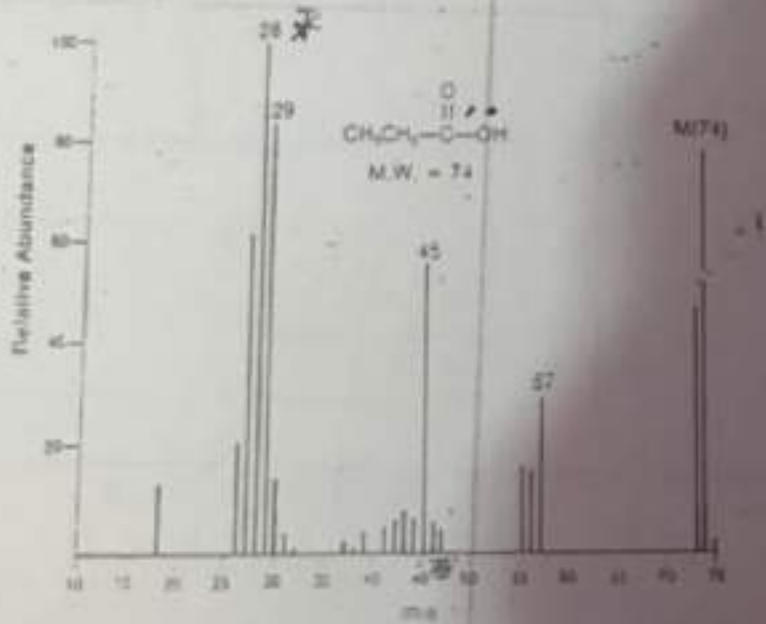
الخط عند m/e=29 يعود ال الايون الموجب $CH_3CH_2^+$ نتيجة لفقد COOH من الحامض

الخط عند m/e=28 يعود ال الايون $CH_2=CH_2^+$ *

الخط عند m/e=60 يعود ال الايون $\left[HO-\overset{O-H}{\overset{|}{C}}=CH_2\right]^{+\cdot}$ الذي ينتج من اعادة ترتيب مكلافيرتي كما في حامض Butyric acid



الحوامض الكاربوكسيلية الأروماتية تعطي الايون $C_6H_5CO^+$ عند m/e=105 ثم $C_6H_5^+$



Mass Spectrum of Propionic Acid

Amines

مثال ethylamine $CH_3CH_2-NH_2$

M.W = 45

-١٨- الشكل

$$\left[CH_3CH_2-NH_2\right] \longrightarrow \left[CH_3\overset{\beta}{\{}CH_2\overset{\alpha}{\}}-NH_2\right]^{+\cdot} \longrightarrow CH_2=\overset{+}{N}H_2 + CH_3^{\cdot}$$

M.W = 45

Ethylamine

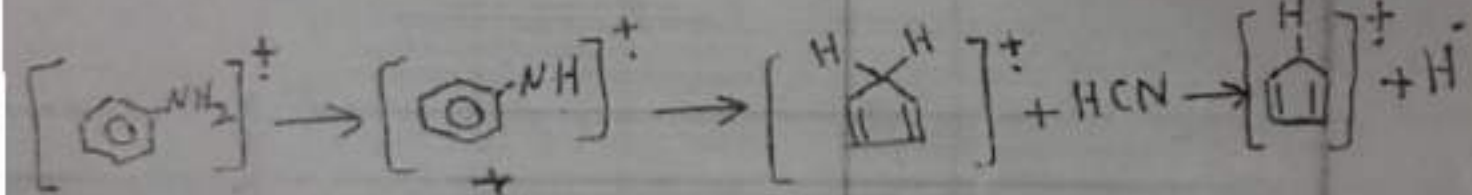
β-Cleavage

molecular ion

القمة عند m/e = 45 تعود الى الايون الجزيئي الذي يمثل كتلة الامين

القمة عند m/e = 30 تعود الى الايون الهوبي $CH_2=\overset{+}{N}H_2$

اما الدقيق الدوماتي مثل الدنلين فان الاجزاء الناتجة من التشظي يمكن تمثيلها بالمعادلة التالية :-

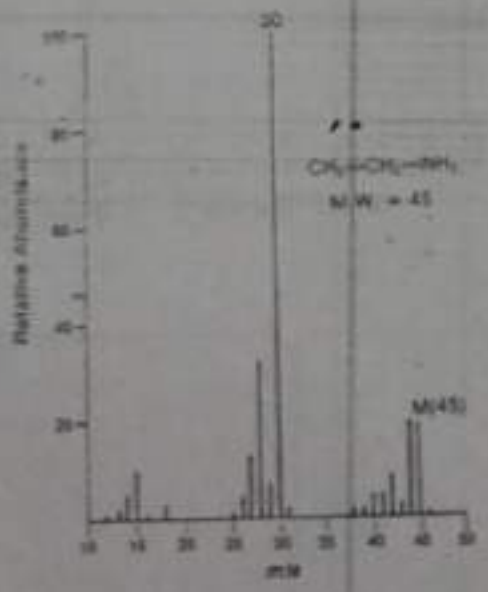


molecular ion m/e = 93

m/e = 92

m/e = 66

m/e = 65

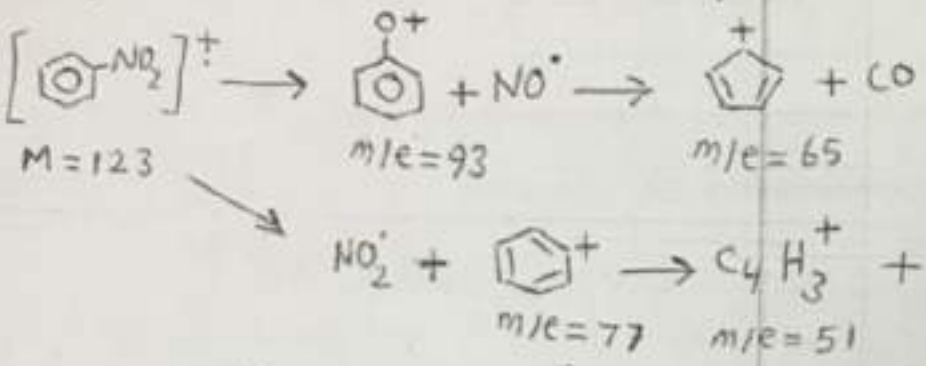


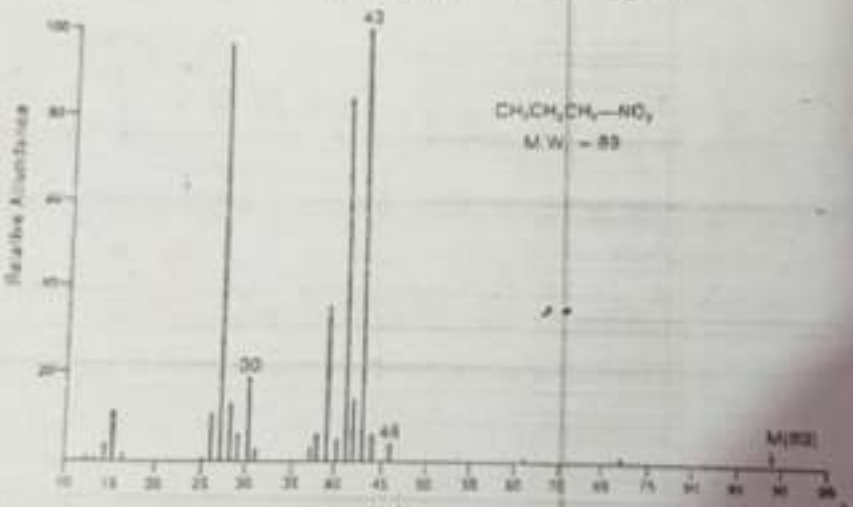
mass Spectrum of Ethylamine

الشكل -١٨-

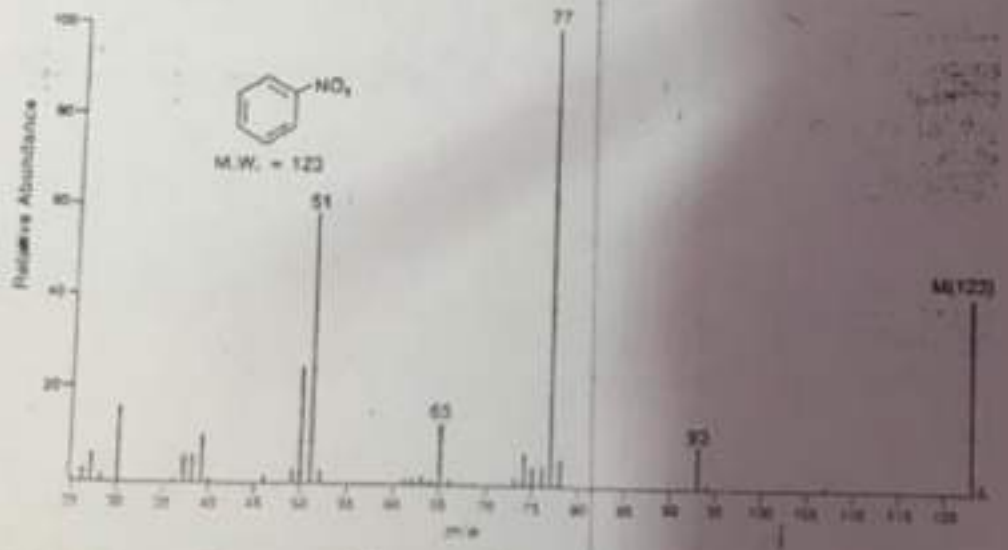
(22) مركبات النترو Nitro compounds . مثال طيف كتلة 1-Nitropropane ($CH_3CH_2CH_2NO_2$) (M.W=89) كما في الشكل -١٩- حيث يبد الايون الجزيئي غيضا قمي عند m/e=89 والأيون NO_2^+ عند m/e=46 والأيون $C_3H_7^+$ عند m/e=43 والايون NO^+ عند m/e=30 .

مثال آخر Nitrobenzene ($C_6H_5NO_2$) (M.W=123) كما في الشكل -٢٠- الذي تبدو فيه قمم الايونات الناتجة الموضحة في معادلة التفكك التالية :-





Mass Spectrum of 1-Nitropropane الشكل -١٩-



Mass Spectrum of Nitrobenzene الشكل -٢٠-