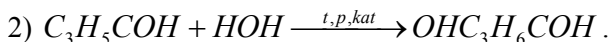
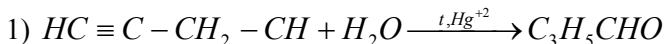


РОЗПІЗНАВАННЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК ЗА ДОПОМОГОЮ М'ЯКОІОНІЗАЦІЙНОЇ МАС- СПЕКТРОМЕТРІЇ

Данильченко П.С., студент; СумДУ, гр. ЕЛ-41

Розпізнавання нових органічних сполук з великою кількістю функціональних груп (-СОН, -ОН, -СООН, -СО-, -СОО-, -NH₂, і т. д.) є актуальною задачею хіміків усього світу. При цьому одна молекула може мати декілька функціональних груп. Абстрактним прикладом, може слугувати така речовина: НОС - C₃H₆ - ОН, яка в собі містить декілька функціональних груп. Про можливість її існування можна не сумніватися, адже відомі такі реакції, що можуть призводити до її утворення:



Щоб ідентифікувати цю речовину (або їй подібні) необхідно провести такі хімічні реакції: заміщення (+ Br₂, + Na(K)), окиснення (+ [O]), дегідратація (kat = H₂SO₄) і т. д. Для швидкого аналізу потрібно провести дослідження за допомогою м'якоіонізаційної мас-спектрометрії, що не пошкоджує функціональні групи і дає значення маси всієї молекули та її фрагментів.

Мас-спектрометрія - метод визначення хімічного, фазового складу і молекулярної структури речовини, оснований на реєстрації спектра мас іонів, утворених у результаті іонізації. За спектром мас (сукупність значень залежності маси до заряду відносних змістів відповідних іонів) визначають відносний вміст елементів, ізотопів певного елемента, концентрацію і структуру хімічних сполук у пробі.

Для збереження цілісності молекулярного іону необхідно застосовувати м'яку іонізацію. Для даного приладу слід вибрати динамічну, часопролітну дисперигуючу систему, в основу роботи якої покладено різний час прольоту фіксованої відстані іонами з різними масами, що прискорюються одним і тим же потенціалом Δφ. Часопролітний аналізатор диспергує по масам, адже у важчої

частинки швидкість буде менше: $\frac{mv^2}{2} = q\Delta\varphi$. Спочатку можна

прискорити позитивні, потім негативні іони, змінюючи знак прискорюючого потенціалу. В результаті можна отримати два мас-спектри – позитивний і негативний.

Розглянемо більш детально обраний приклад речовини: *НОС – C₃H₆ – ОН*. Для вводу зразка потрібно використати газ-носії *He*. Визначимо що найбільш доцільним буде використання фотоіонізації зі змінним значенням довжини хвилі, яке буде постійно зменшуватись, адже нам необхідна послідовна іонізація з розривом від найслабших зв'язків до найсильніших. Довжини хвиль опромінення, які розраховуються з довідкових значень енергій зв'язку, відповідають ультрафіолету. Часопролітна диспергуюча система дозволяє фіксувати окремо позитивні і окремо негативні частинки при зміні прискорюючого потенціалу. У таблиці наведено очікувану залежність мас-спектру від енергії іонізації.

Довжина хвилі іонізуючого опромінення, м	Енергія опромінення	Очікуванні маси	Молекулярні фрагменти
$9 \cdot 10^{-8}$	13,6 еВ	1, 87	H^+ , $OC_3H_6CHO^-$
$1,78 \cdot 10^{-8}$	70 еВ	29, 58	COH^+ , $[OC_3H_6]^2-$

Слід зазначити, що запропонована мас-спектрометрична система може використовуватися для розпізнавання різних органічних сполук, які можуть включати різні функціональні групи, а також неорганічні комплексні солі.

1. Н.А. Понькин „Что в имени твоём, масс-спектрометрия?” сайт Всероссийского масс-спектрометрического общества с.7-10.
2. П.П. Попель, Л.С. Крикля „Хімія 11 клас” с.318-325.
3. Г.Г. Юінг „Інструментальний метод хімічного аналізу”, Москва, „Мир” с.449-484

Керівник: Проценко І.Ю., *професор*