

# Tömegspektrometria (MS) 2018. V. 3.

Kémiai analízis

mindig a.: összetevők fajtaja

menyiségi a.: összetevők menyisége, aránya

atomok  
izotopok

ion (monatomos, poliatomos)

molekulák, molekuláriszék (fragmentumok)

Mi a tömeg?

"gravitációs tömeg"

- a tömeg maga gravitációs erőt hoz létre
- a tömeg kölcsönhatásba lép a gravitációs mezővel

$$F_g = g \cdot \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

$$F_{\text{szily}} = g \cdot m$$

felhasználás: hosszúság  
menyiségi analízis

gravimetria =  
szilánkos

medvetűzépítés

menyiség

meghatározása

pl.  $\text{Ba}^{2+}$  ionok meghat.

hosszúság mértékeit  
közül a legfontosabb

"teljesítő tömeg"

(inercia)

- a tömeg "ellenáll" a gyorsításnak
- Newton II.

$$\sum F = m \cdot a$$

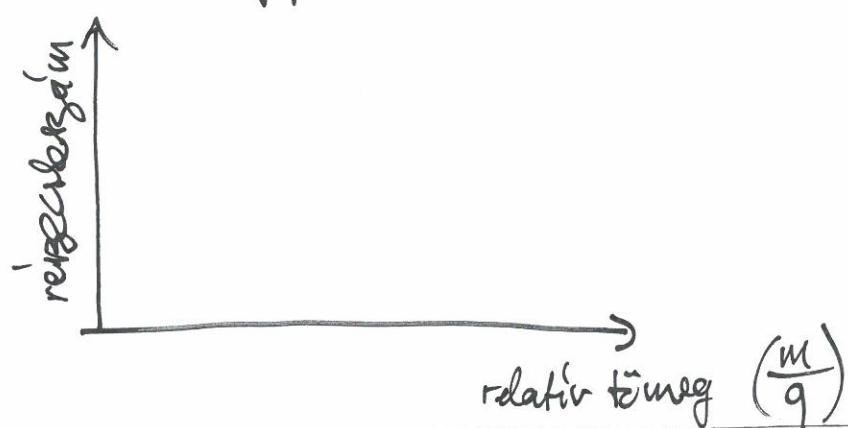
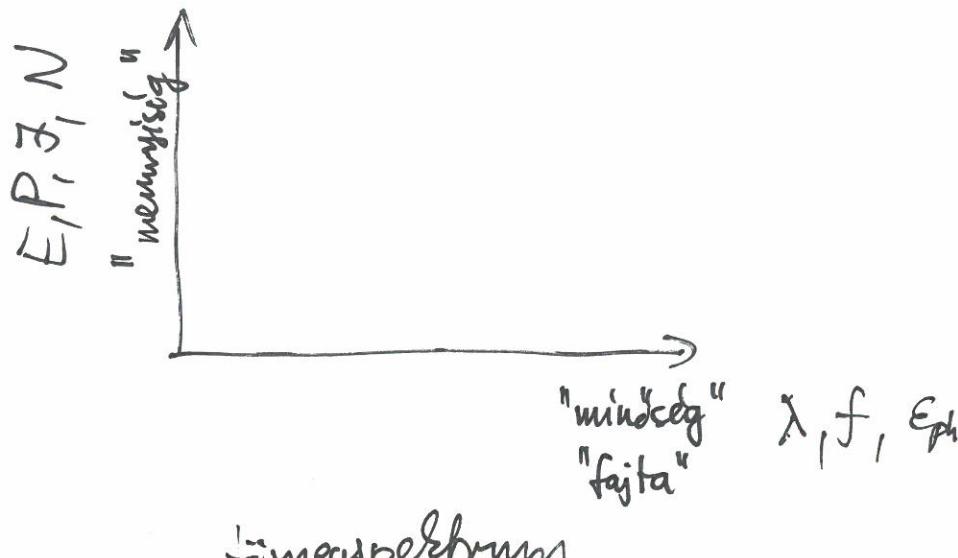
felhasználás: tömegspektrometria

microelektromos

minőségi és menyiségi  
analízis

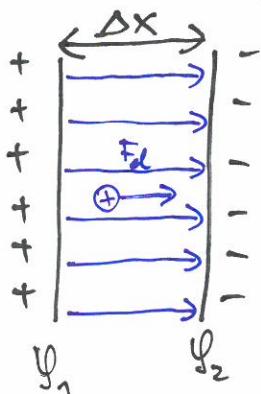
Mi a spektrum?

- egyfajta gyakoriságnak függeléky



Alapvető kölcsönhatások

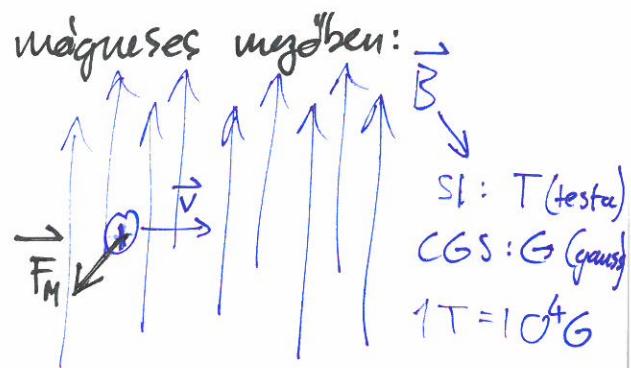
elektromos mezőben:



$$E = \frac{F_d}{q} = \frac{\Delta \Phi}{\Delta x}$$

$$\vec{F}_{el} = q \cdot \vec{E}$$

hatás: lineáris gyorsítás  
(V/n)



B a vektorral nem párhuzamosan mosó töréscére hat

$$\vec{F}_M = q \cdot \vec{v} \times \vec{B}$$

hatás: centripetális gyorsítás

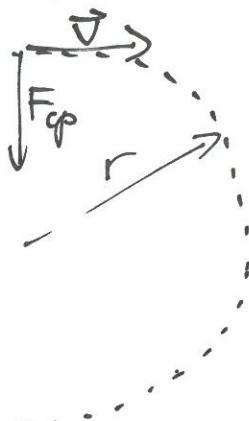
v irányba változik  
(V/ állandó)

## Körmozgás

- akkor lep fel, ha sugáríratlanú, mozgásra mereleges gyorsító erő van jobb  $\vec{a} \perp \vec{v}$

$$F_{cp} = m \cdot a_{cp}$$

$$a_{cp} = \frac{v^2}{r}$$



## A tömegspektrometria származtatása

minta  
bevitel

- atomizáció
- ionizáció
- fragmentáció

tömeg-  
analizátor

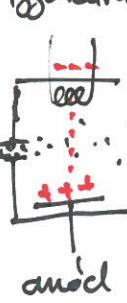
detektor

vákuum

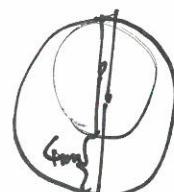
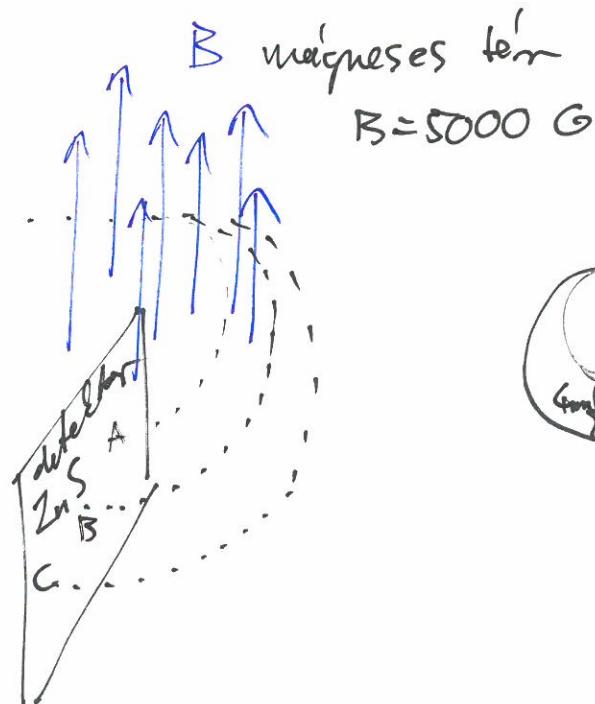
- atomizáció: a mintarézecsek fizikai "aprítása", méretcsökkenése
- ionizáció: semleges részecsek ellátása elektronos töltéssel (jelenleg kationok lévnek)
- fragmentáció: kémiai méretcsökkenés: nagyobb molekulák részibb darabszövek földelése

"e⁻ ágyú"  
izzókatód

minta  
bevitel



"e⁻ crappa"  
gyorsítás  
electronos  
fűrész



- gyorsítás elektronos mezeivel:

$$E_{el} \rightarrow E_{kin}$$

$$q \cdot U = \frac{m}{2} \cdot v^2$$

$$v = \sqrt{\frac{q \cdot U \cdot 2}{m}} \quad \#1$$

- gyorsítás mágneses mezeivel:

$$|F_m| = q \cdot v \cdot B$$

$$F_m = F_{cp}$$

$$q \cdot v \cdot B = m \cdot \frac{v^2}{r}$$

$$r = \frac{m \cdot v^2}{q \cdot v \cdot B} = \frac{m \cdot v}{q \cdot B} \quad \#2$$

- a belső egység:

$$r = \frac{m \cdot \sqrt{\frac{q \cdot U \cdot 2}{m}}}{q \cdot B} = \frac{1}{B} \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \frac{q \cdot U \cdot 2}{m}}{q^2}} = \frac{1}{B} \sqrt{\frac{m \cdot U \cdot 2}{q}}$$

$$^{98}\text{Mo}^+ : 1,633 \times 10^{-25} \text{ kg}$$

$$q = +1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$^{100}\text{Mo}^+ : 1,667 \times 10^{-25} \text{ kg}$$

$$\text{beállítások: } U = 10^4 \text{ V} \\ B = 5000 \text{ G} = 0,5 \text{ T}$$

$$\begin{aligned} r(^{98}\text{Mo}^+) &= 0,2857 \text{ m} \\ r(^{100}\text{Mo}^+) &= 0,2887 \text{ m} \end{aligned} \quad \left\{ \approx 0,002 \text{ m} = 2 \text{ mm} \right.$$

## Ioniizációk

### 1.) Elektronionizáció (EI)

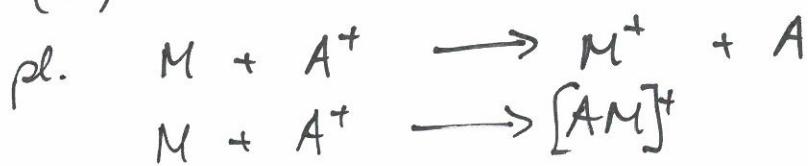
- katód és anód közötti felületsugárzásról
- Személyi ionizáció: nagyban a fragmentáció

### 2.) Kémiai ionizáció (CI)

- egy inert (semleges) vegyületet juttatunk az ionizálóhoz (A) (pl. fahéjsav)

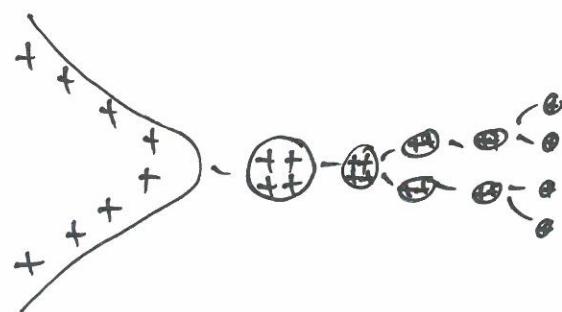


- ezután bejuttatjuk a mintát és a  $A^+$ -val tökésenül a mintára (M)



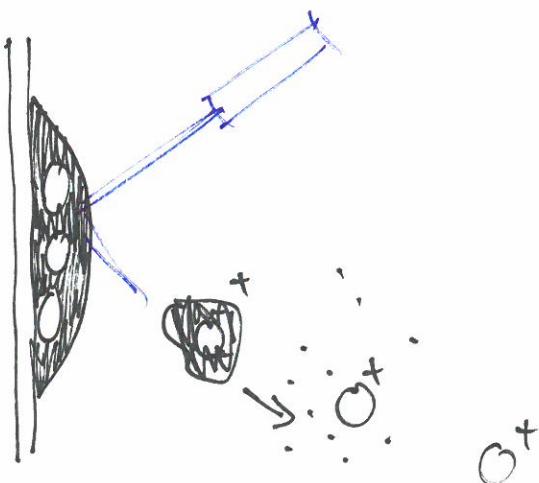
### 3.) Electrospray ionizáció (ESI)

folyadékállapotú minta



### 4.) Mínusz-assistált lézer deszorpció és ionizáció (MALDI)

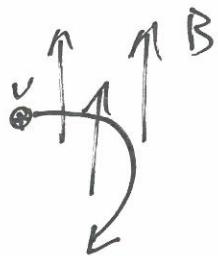
felülről levalható



2, 3, 4: Légy ionizáció

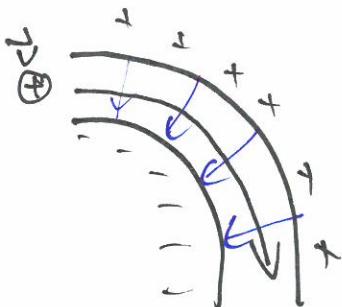
# Tömeganalizátorok

1.) Mágneses szektor



2. Elektromos szektor

-ives lapkondenzátorok  
közé juttatjuk az  
ionokat

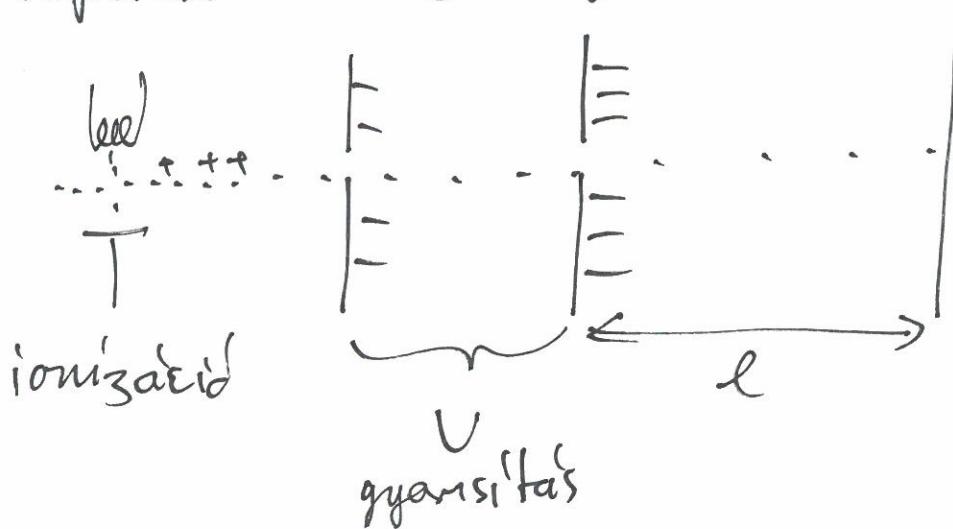


$$F_{el} = F_{cp}$$

$$E \cdot q = m \frac{v^2}{r}$$

$$r = \frac{m v^2}{E \cdot q}$$

3 Repülési idő (TOF)



$$v = \frac{l}{\Delta t} \leftarrow \text{mérém}$$

$$v = \sqrt{\frac{q \cdot V \cdot z}{m}}$$