

MS-pajan tehtävien vastaukset

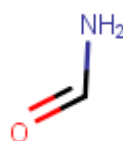
1. Yhdistä seuraavat molekyyli-ionin massat ja yhdiste.

Tehtävä ratkaistaan laskemalla yhdisteiden moolimassa, joka vastaa molekyyli-ionin massaa M^+ .

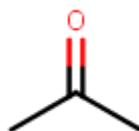
a) $M^+=32$ iv) Metanoli



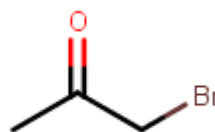
b) $M^+=45$ ii) Formamidi



c) $M^+=58$ i) Asetoni



d) $M^+=136$ iii) Bromiasetoni

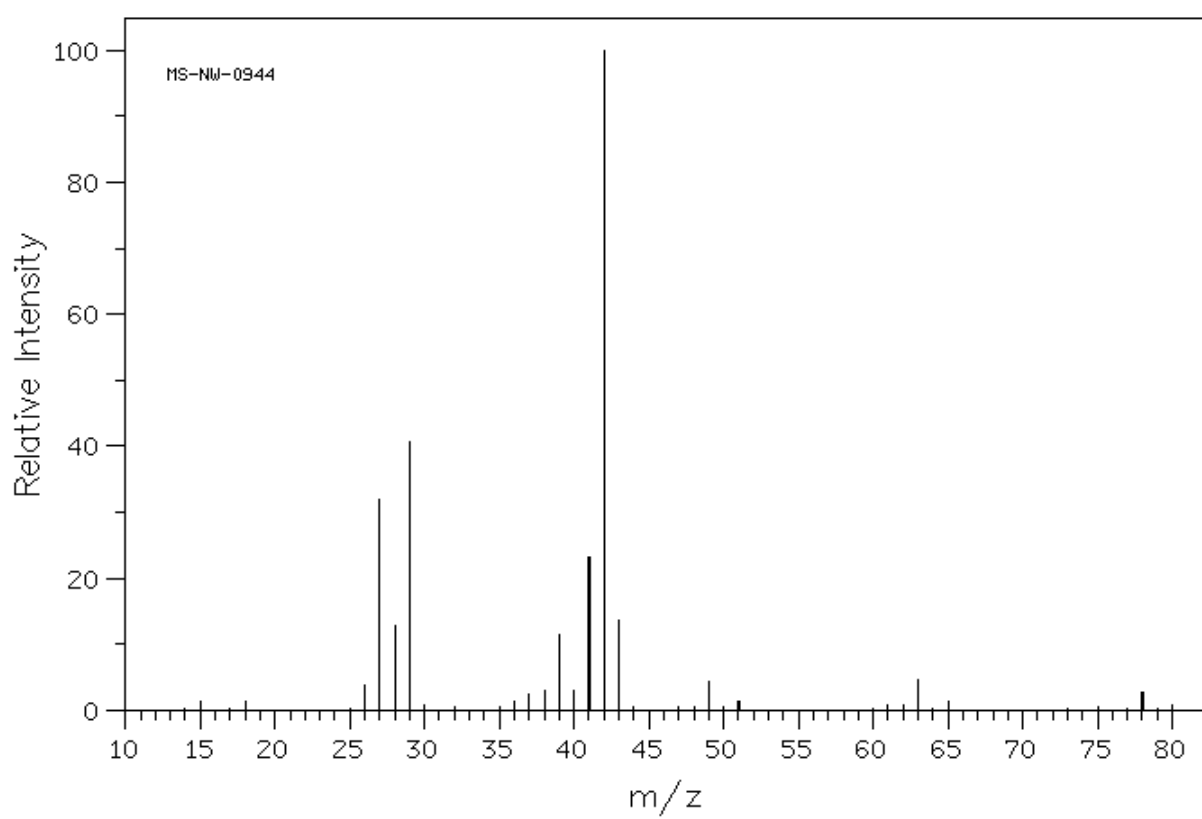


2. Yhdistä seuraavat yhdisteet oikeihin MS-spektreihin.

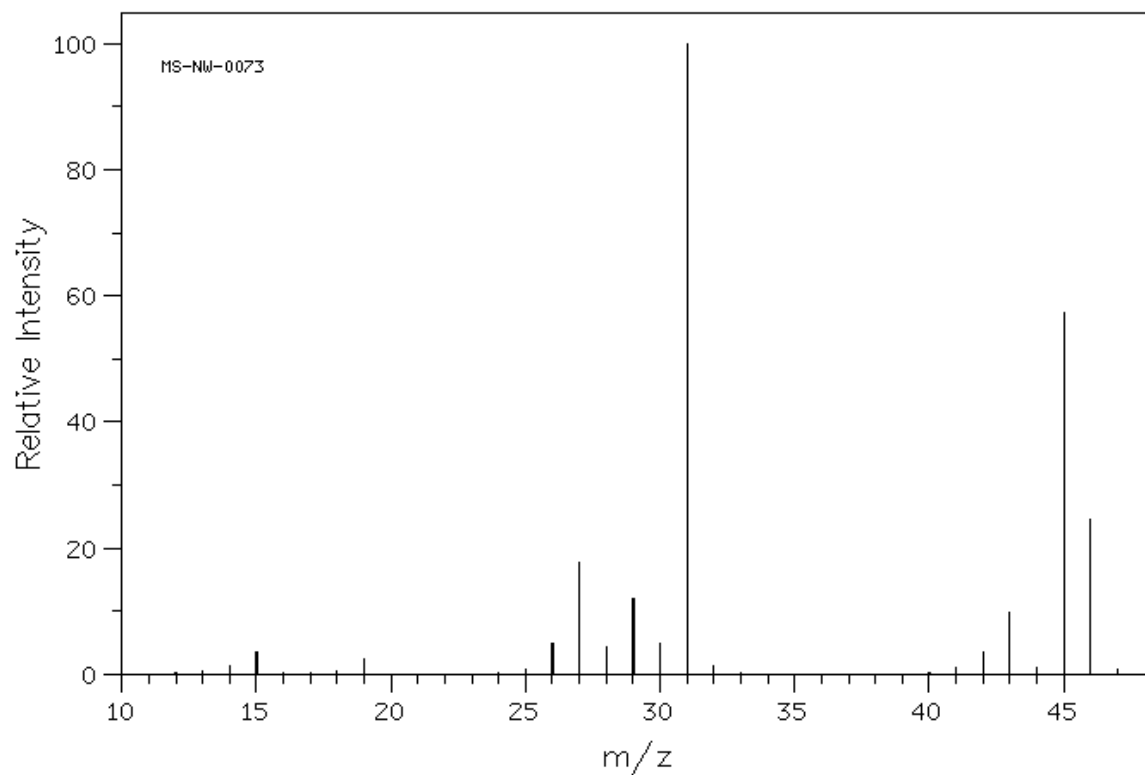
Tehtävä ratkaistaan laskemalla ensin yhdisteiden moolimassat ja vertaamalla näitä spektreihin. Etanolin ja propanolin spektrit voidaan tunnistaa heti tämän perusteella. Huomataan kuitenkin, että o-metoksitolueenilla on sama moolimassa kuin 1-bromipropaanilla. Spektrien tunnistamisessa tulee hyödyntää tietoa bromin isotoopeista, jotka aiheuttavat spektriin 1:1 piikit kahden massayksikön päähän toisistaan. Klooripropaanin ja bentseenin spektrien erottaminen tapahtuu samalla tavalla.

Spektrit:

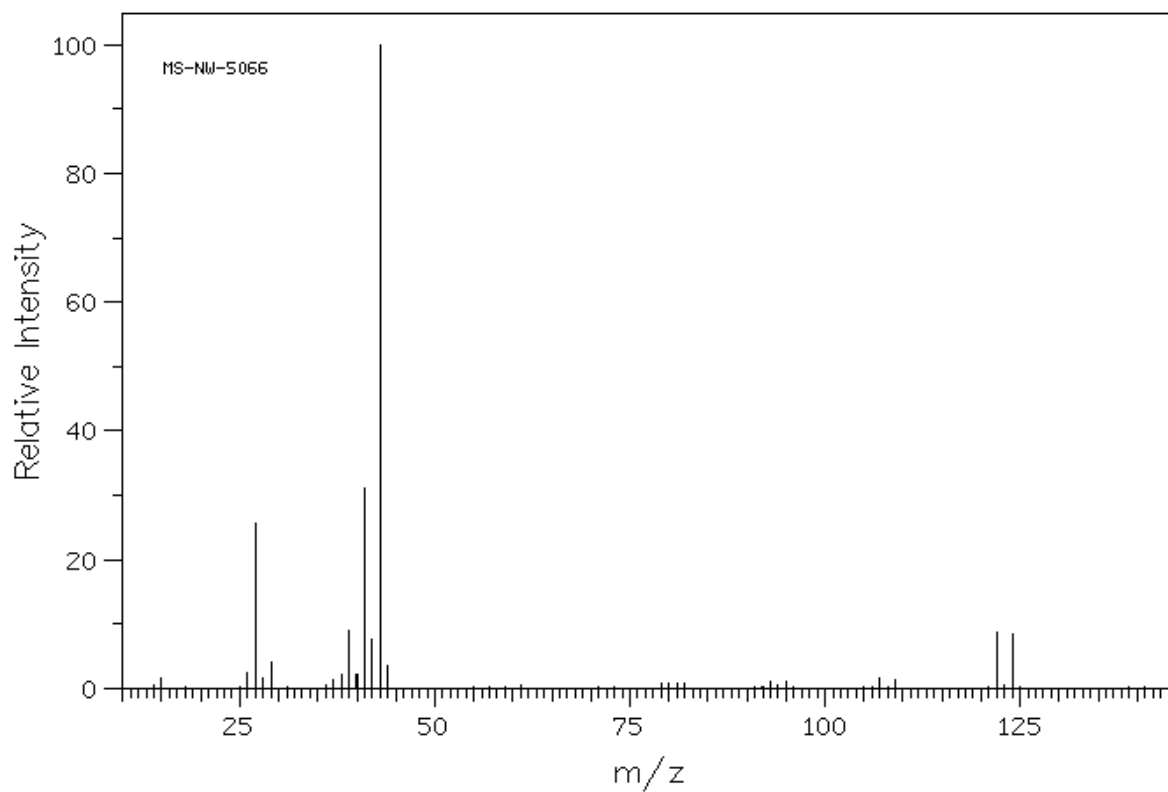
1) e) 1-klooripropaani



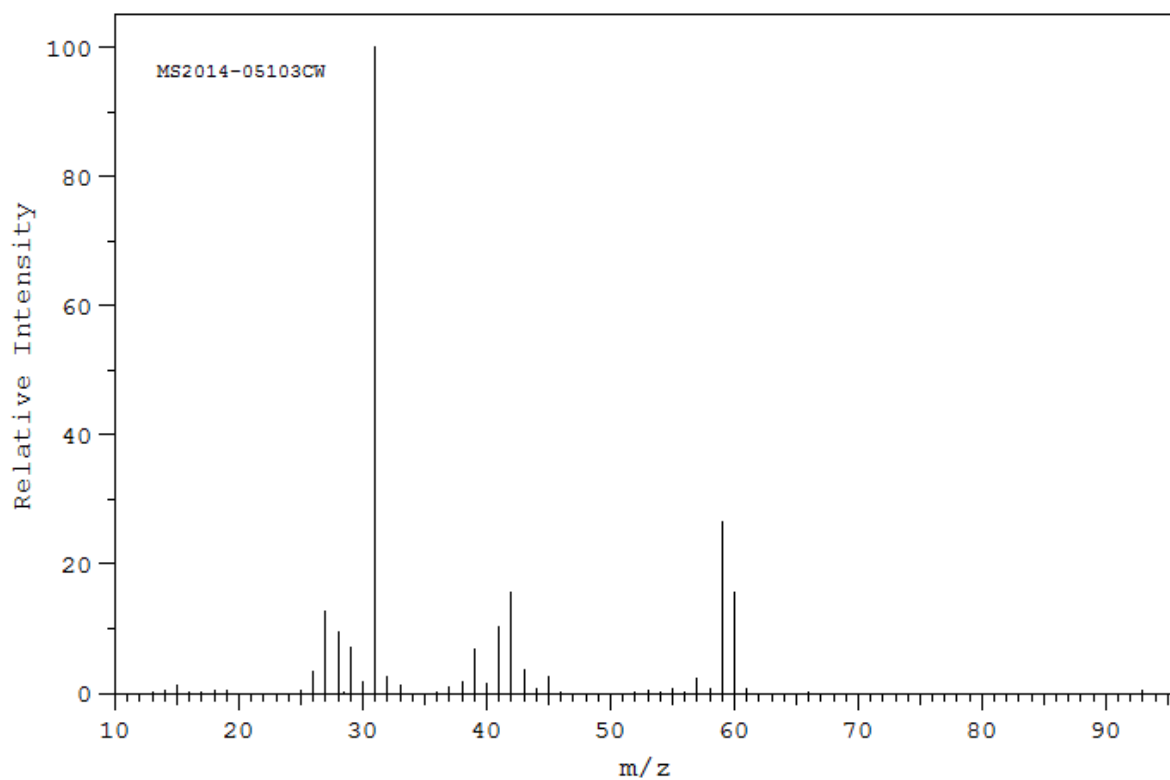
2) a) Etanoli



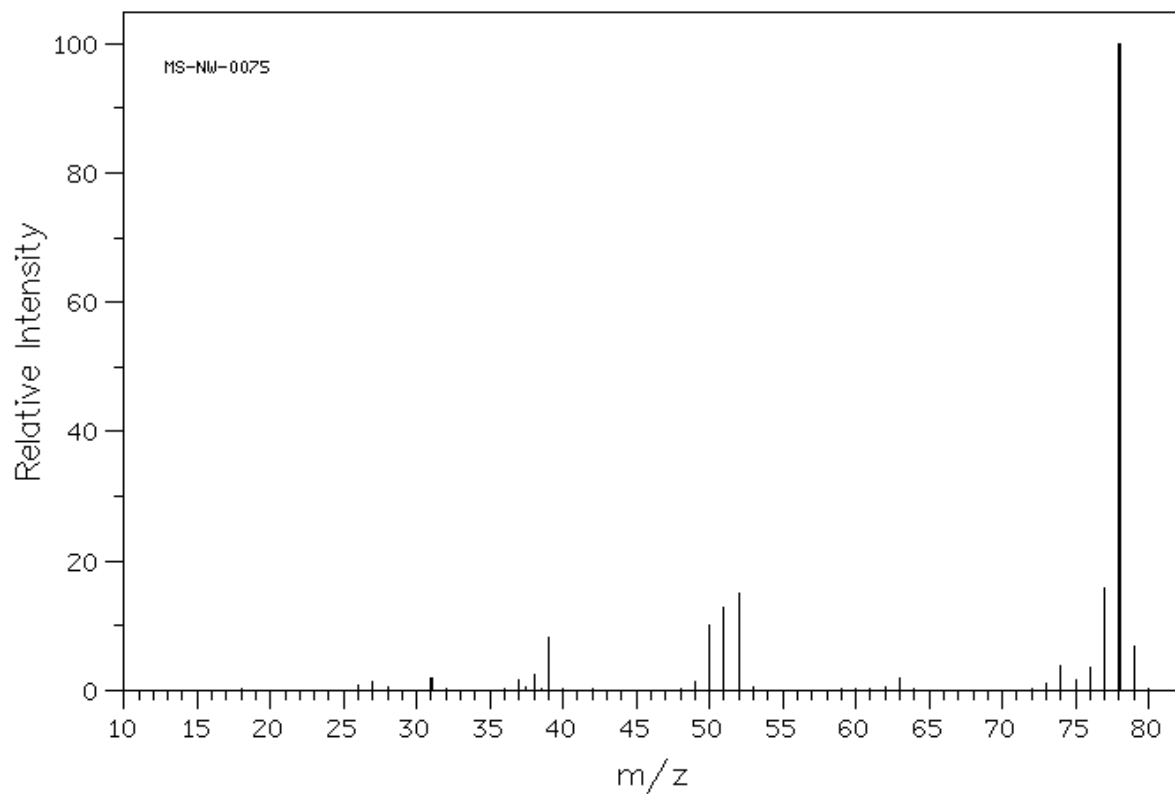
3) f) 1-bromipropaani



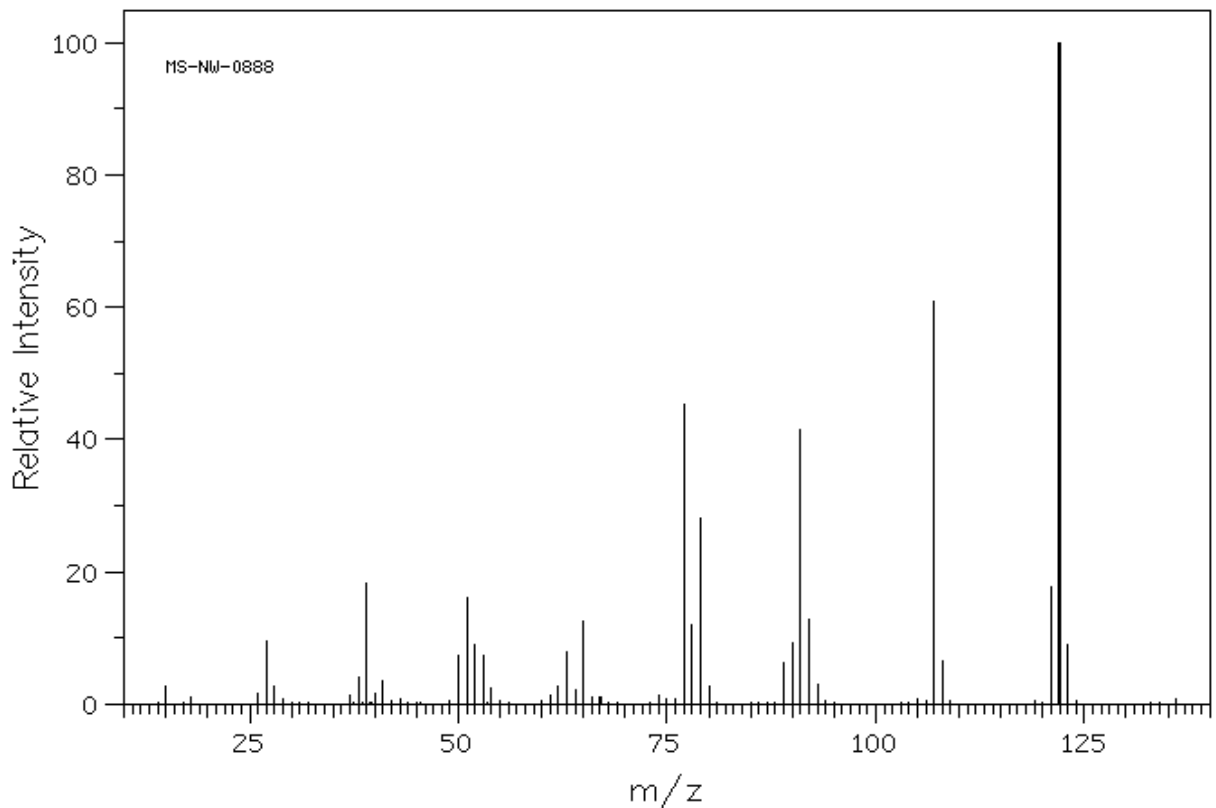
4) b) Propanoli



5) c) Bentseeni



6) d) o-metoksitolueeni



3. Muodosta yksi vaihtoehto yhdisteen bruttokaavasta, kun tiedetään, että $M^+=201$ ja $^1\text{HNMR}$:stä saadaan H_4 .

Huomataan heti, että molekyyli-ionin massa on pariton, joten voidaan olettaa yhdisteen sisältävän yhden typen. Lisäksi MS-spektristä huomataan, että kaksi piikkiä kahden m/z-arvon päässä toisistaan ovat 1:1 korkeita, joten voidaan olettaa yhdisteen sisältävän yhden bromin. Vähennetään nämä kaikki M^+ :sta.

$$201 - 4(\text{vedyt}) - 14(\text{typpi}) - 79(\text{bromi}) = 104$$

Kokeillaan onko saatu luku jaollinen 12:ta.

$$104/12 = 8,666... \rightarrow \text{ei ole eli vähennetään yksi happi (16)}$$

$$104-16=88$$

Kokeillaan onko luku nyt jaollinen 12:ta.

$$88/12=7,333... \rightarrow \text{ei ole vähennetään taas yksi happi}$$

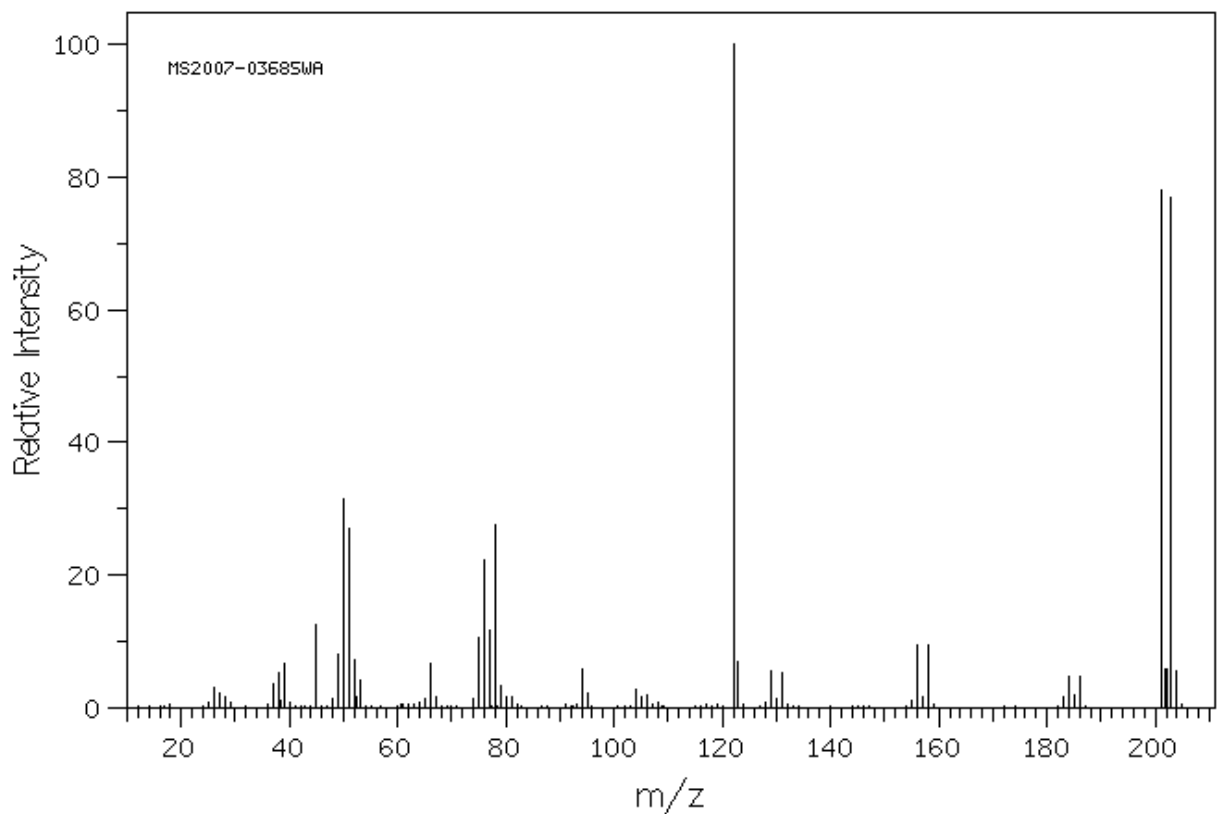
$$88-16=72$$

Kokeillaan onko luku nyt jaollinen 12:ta.

$$72/12=6 \rightarrow \text{eli yhdiste sisältää kaksi happea ja kuusi hiiltä.}$$

Yhdisteen mahdolliseksi bruttokaavaksi saadaan $C_6H_4O_2NBr$.

Yhdisteen MS-spektri:



Kaikki tehtävissä käytetyt spektrit on otettu Spectral Database sivustolta, SDBSWeb : <https://sdfs.db.aist.go.jp>
(National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, 8.5.2020)