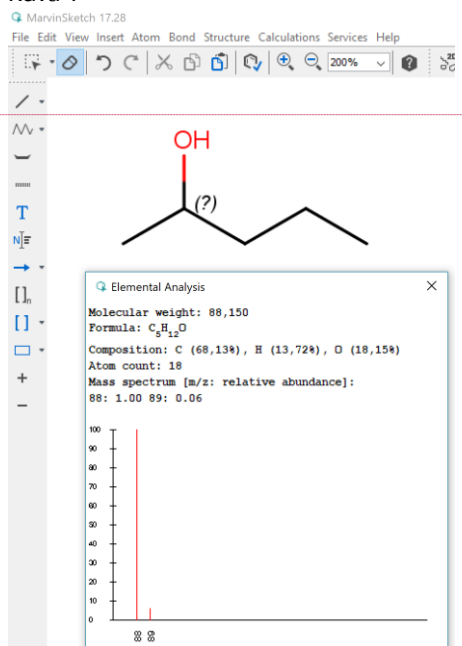


MarvinSketch 9 – MarvinSketch ja massaspektrometria

16.3.2019

Massaspektrometriaa käytetään mm. eri isotooppien määrittämisessä (tutustu massaspektrometrian perusteisiin). MarvinSketch -ohjelmassa massaspektrejä tuotetaan **Calculations** | **Elemental Analysis** -kohdassa.

Kuva 1

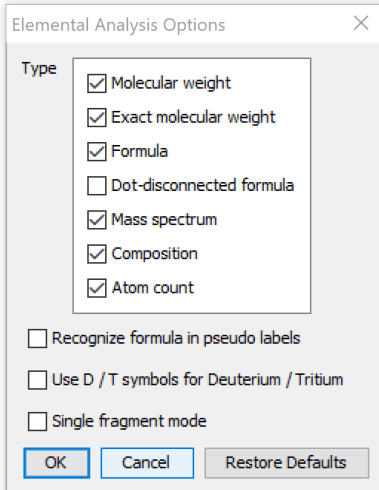


Kommentoimut [AM1]:

Massaspektrin saa valitsemalla kyseisen kohdan **Elemental Analysis Options** -ikkunassa.

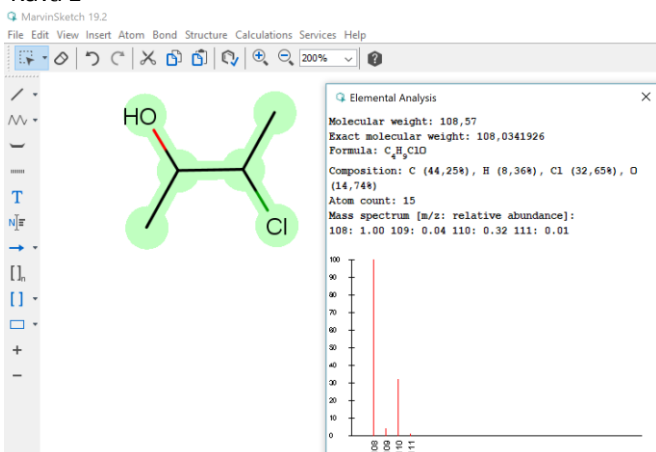
Samassa kohtaa voidaan valita myös molekyylin massa (moolimassa) ja myös tarkka tieto molekyylin massa. Tässä on huomioitu luonnossa esiintyvien isotooppien vaikutus.

Moolimassa-tiedon saa ensimmäisestä valinnasta. Massaspektri voi antaa myös muita piikkejä kuin ko. kokonaisluvun mukaisen piikin. Siinä on kysymys alkuaineen eri isotooppien vaikutuksesta.



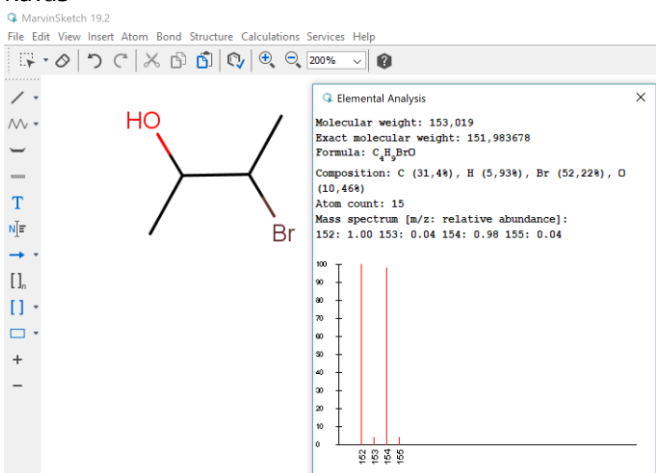
Kloorin ja Bromin yhdisteiden massaspektreissä näkyvät selkeästi isotooppien vaikutukset. Seuraavassa on listattu muutaman alkuaineen isotooppijakaumat (merkittävät).

Kuva 2



Kloori 35/37 →
 Kloori 35 75,77%
 Kloori 37 24,24%

Kuva3



Bromi 79/81 →
 Bromi 79 50,5%
 Bromi 81 49,5%

Hiilen tapauksessa

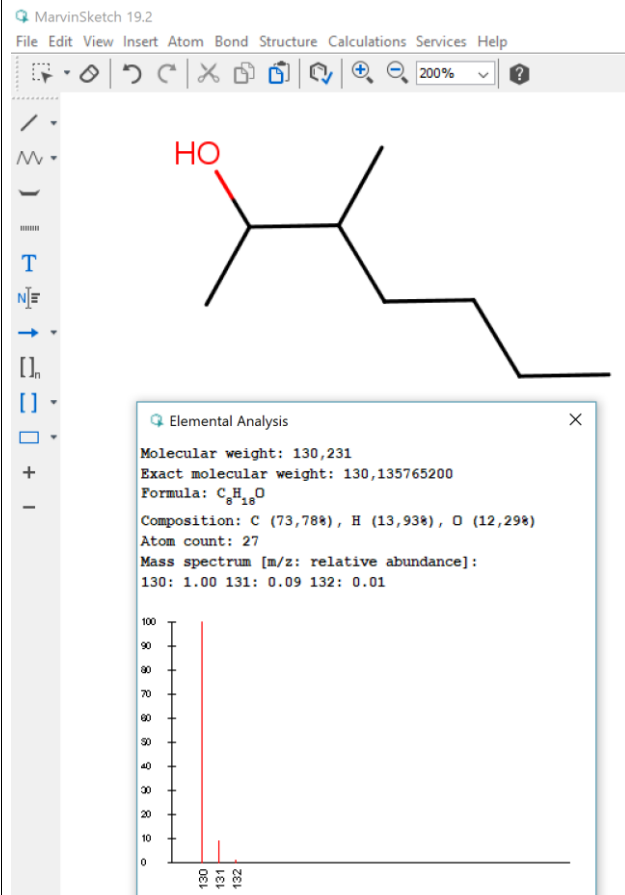
Erään pentanolin massaspektrissä näkyy moolimassaa kuvaavan spektriipiikin (130) lisäksi kaksi isotooppipiikkiä (M+1 ja M+2). Mitä **enemmän molekyylissä on hiiliatomeja**, sitä suurempi mahdollisuus muiden isotooppien esiintymiselle on olemassa.

Hiilen isotooppien esiintyminen:

Hiili 12 98,9%

Hiili 13 1,1%.

Kuva 4



Massaspektrit todellisuudessa ovat erilaisia kuin tässä esitetyt. Niistä enemmän kirjassa ja oppikirjoissa.