

# 질량분광법

# 목 차

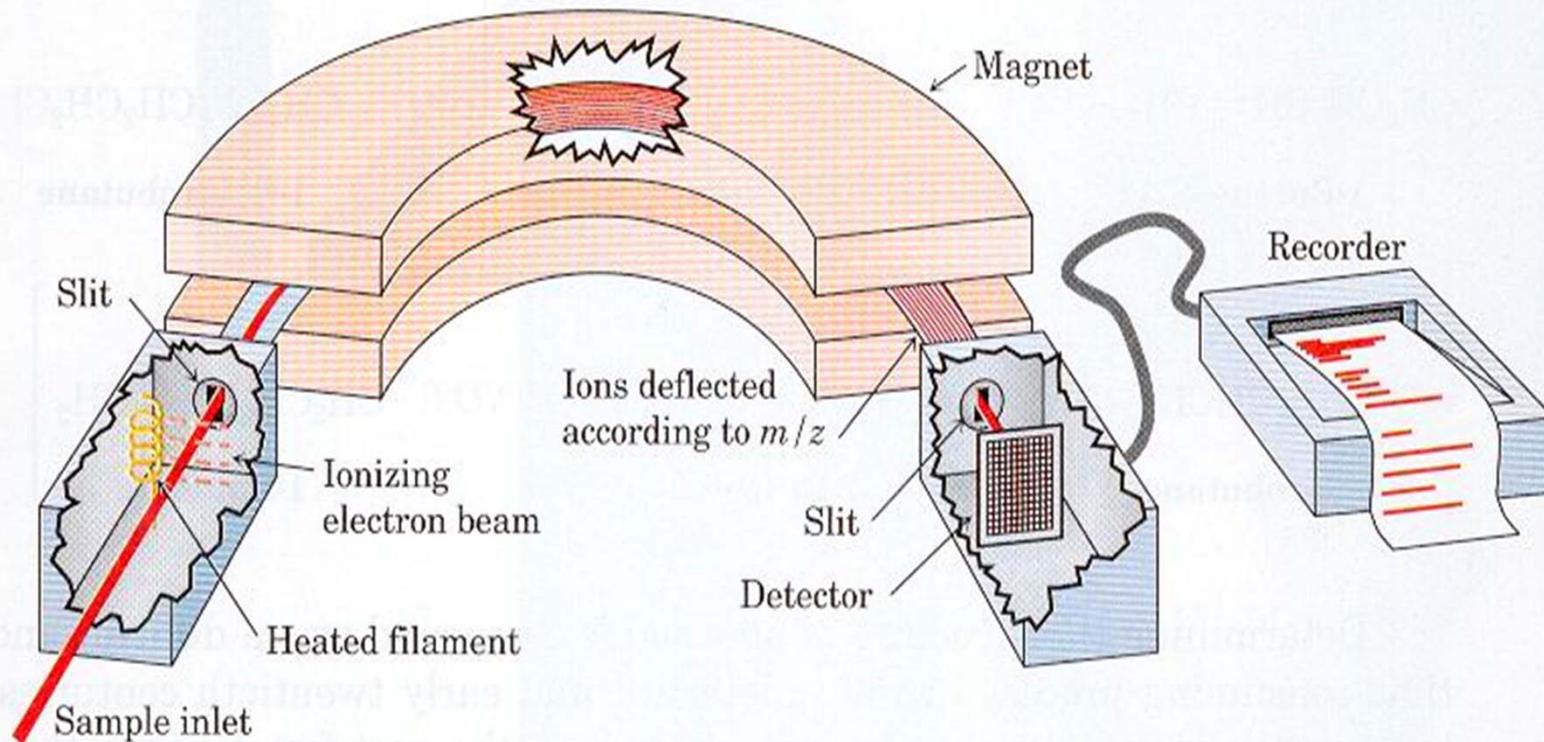
- 질량 분광법
- 질량 스펙트럼의 해석
- 질량 스펙트럼에서 토막내기 방식의 해석
- 몇가지 일반적인 작용기의 질량-스펙트럼

# 질량분광법

## 1. 질량분광법(mass spectrometry) 의 정의

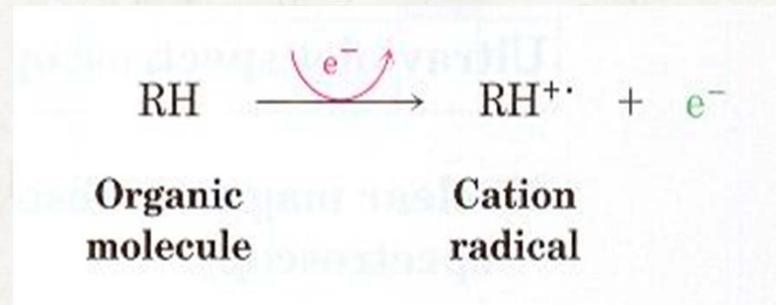
- 분자 질량과 분자량(MW)을 결정하는 기술
- 분자구조 결정에 도움

## 2. 전자-이온화, 자기-부채꼴 질량분석기(1)



## 2. 전자-이온화, 자기-부채꼴 질량분석기(2)

- 높은 에너지의 전자가 유기분자를 때려 양이온 라디칼을 형성시키며 전자를 떼어냄



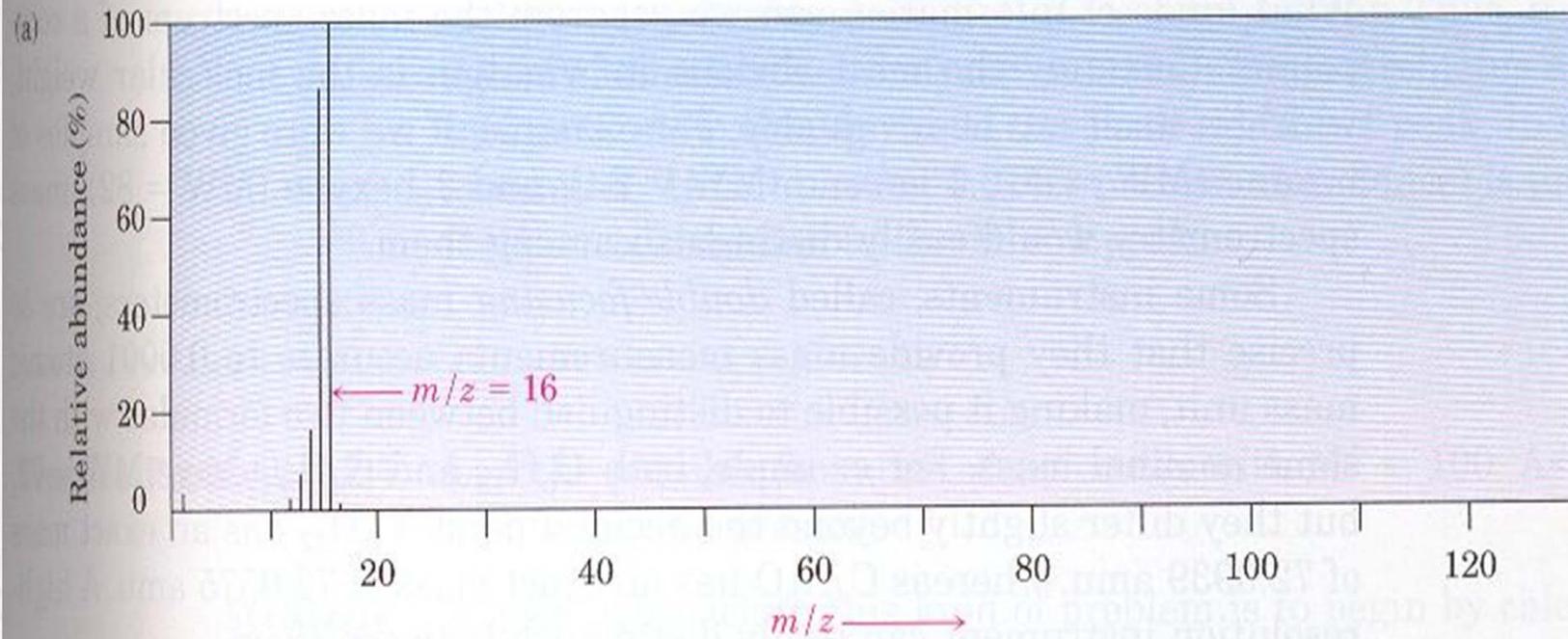
- 양이온 라디칼이 형성된 후 토막으로 됨
- 양이온은 해당  $m/z$ 에서 봉우리로 기록
- 보통  $z=1$ 이므로  $m/z$ 는  $m$

### 3. 질량 스펙트럼(1)

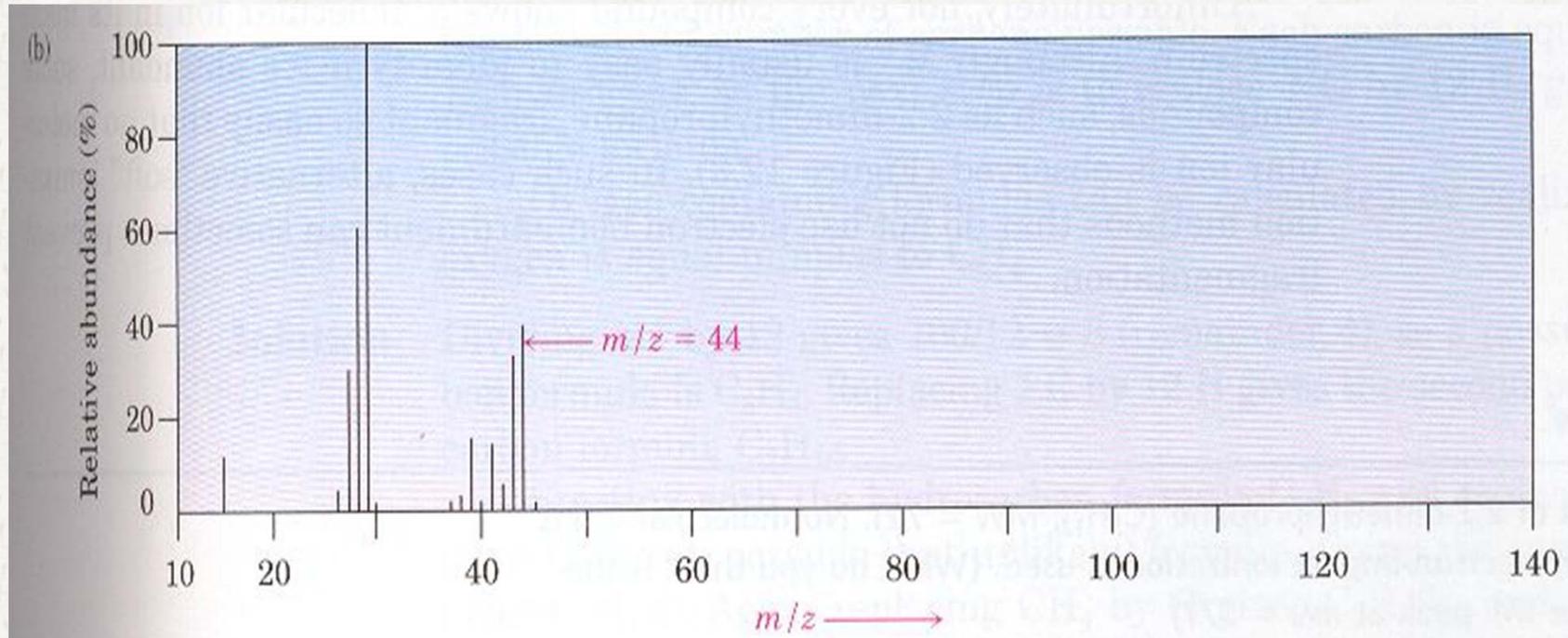
- x-축 :  $m/z$
- y-축 : 세기
- 가장 커다란 봉우리 : 주봉우리  
주봉우리의 세기를 100%로 배정
- 토막나지 않은 양이온-라디칼의 봉우리를  
어미 봉우리 or 분자이온 이라고 함

### 3. 질량 스펙트럼(2)

Mass spectra of (a) methane ( $\text{CH}_4$ ; MW = 16) and (b) propane ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ; MW = 44).



### 3. 질량 스펙트럼(3)



# 질량 스펙트럼의 해석(1)

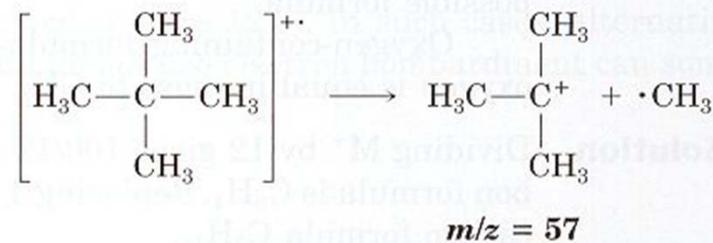
- 질량 스펙트럼으로 알 수 있는 정보  
분자량(molecular weight)
- 이중 집중 질량 분석계  
질량을 0.0001원자질량단위(amu)까지  
정밀하게 결정
- 질량스펙트럼에 분자이온이 나타나지 않는  
경우는 부드러운 이온화 방법으로 토막내기 방지

## 질량 스펙트럼의 해석(2)

- 미지의 화합물의 분자량을 알 경우 소수의 분자식을 선택할 수 있게 범위가 줄어듦
- 작은량의  $^{13}\text{C}$ 과  $^2\text{H}$ 로 인해  $M+1$ 에 작은봉우리 형성

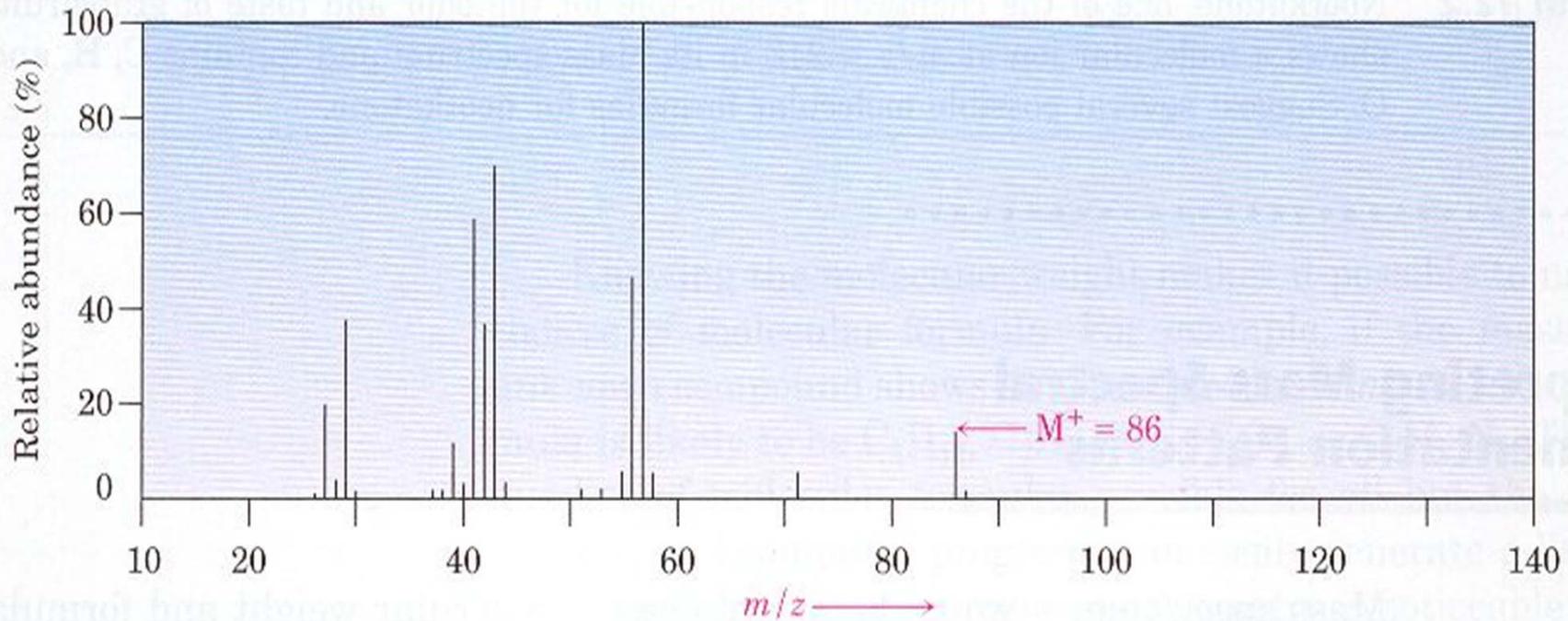
# 질량 스펙트럼에서 토막내기 방식의 해석(1)

- 질량 스펙트럼은 어느 화합물의 분자지문
- 토막내기 방식을 조사하여 분자구조를 알아냄
- 토막내는 동안 안정한 카르보 양이온 형성

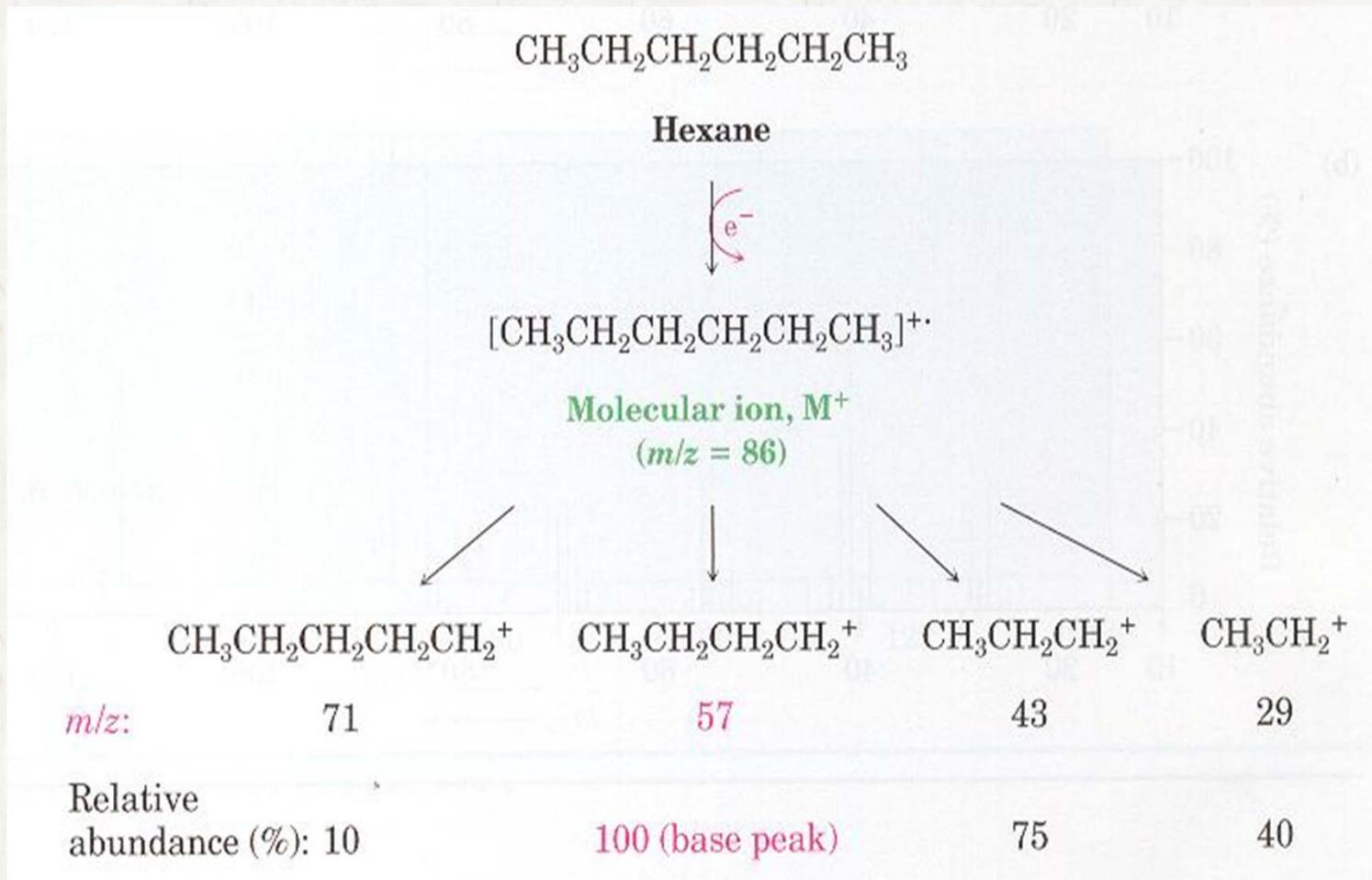


# 질량 스펙트럼에서 토막내기 방식의 해석(2)

Mass spectrum of hexane ( $C_6H_{14}$ ; MW = 86). The base peak is at  $m/z = 57$ , and numerous other ions are present.

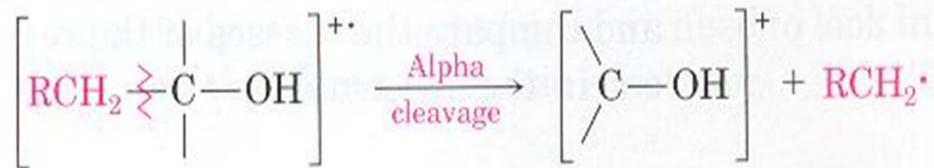


# 질량 스펙트럼에서 토막내기 방식의 해석(3)

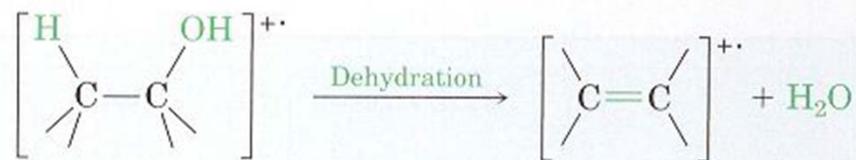


# 몇가지 일반적인 작용기의 질량-스펙트럼(1)

- 알코올  
알파분해

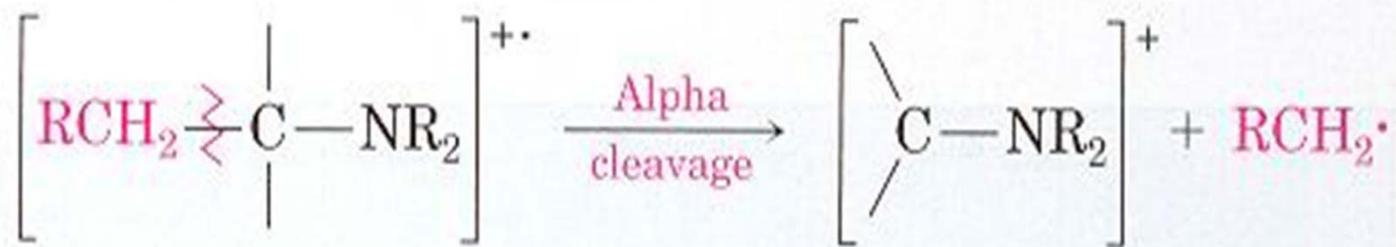


탈수분해



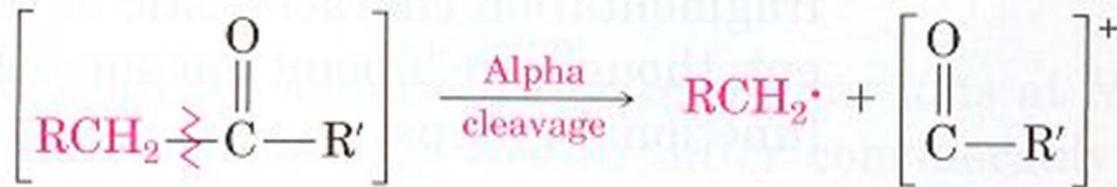
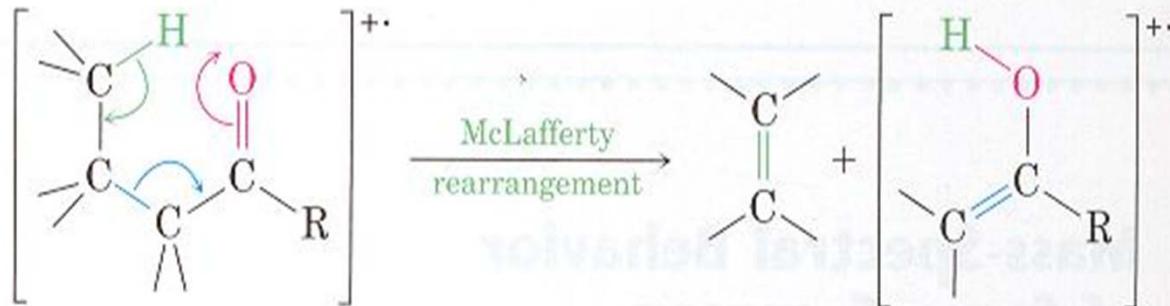
## 몇가지 일반적인 작용기의 질량-스펙트럼(2)

### ● 아민



# 몇가지 일반적인 작용기의 질량-스펙트럼(3)

## ● 카보닐 화합물



# 결론

- 질량분광법은 질량스펙트럼과 토막내기 방식으로 분자의 질량과 분자의 종류 분자의 구조등을 알아낼 수 있는 분광법이다