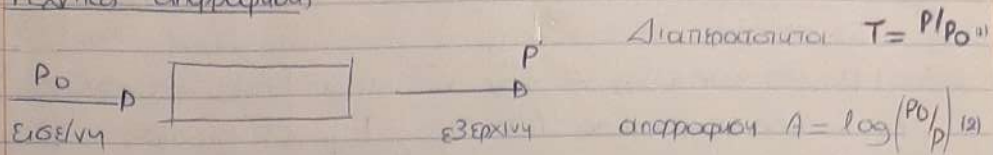


Τεχνικές απορρόφησης

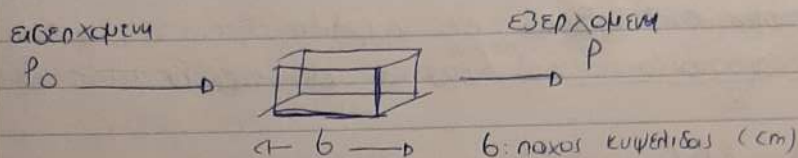


$$P_0 > P$$

χρησιμοποιούμε 2 μετρήσεις, μια για την P_0 και μια για την P

$$A = \log \left(\frac{1}{T} \right) \text{ ή } A = \log T^{-1} \rightarrow A = -\log T$$

Νόμος Lambert - Beer



$$A = \epsilon b c \rightarrow \begin{array}{l} \text{συγκεντρώση} \\ \text{μολιακή απορρόφηση} \end{array} \quad (L/mol \cdot cm)$$

Περιορισμοί

- 1) Μονοχρωματική \rightarrow 1 μήκος κύματος
- 2) Απορρόφηση
- 3) Ομοιομορφος όγκος
- 4) Να μην υπάρχει αλληλεπίδραση με τα μόρια
- 5) Άρατα λύτα

$$A = \epsilon b c$$

b : πάχος κυψελίδας

c : συγκεντρώση

ϵ : απορροφητικότητα

$$L^{-1} \text{ cm}^{-1}$$

$$\frac{L}{\text{mol cm}}$$

γραμμομοριακή

M g/mol

Αδκνέει

- 1) Να βρεθεί η A και η T ενός διαλύματος $0,00240 M$ με χημική απορροφητικότητα (ϵ) $313 \frac{1}{M \cdot cm^{-1}}$ σε κυψέλιδα $2,00 cm$

$\log x$

$x \log 10 = x$

$$A = \epsilon b c \Rightarrow A = 1,5 \quad T = 0,031 \text{ ή } 3,1 \% \\ A = -\log T$$

- 2) α) Το καθαρό εξάνιο εμφανίζει ελάχιστη απορροφητικότητα στο υπεριώδες πάνω από $200 nm$. Ένα δείγμα που περιέχει $25,8 mg$ Βενζολίου (MW $78,11$) σε εξάνιο, το οποίο έχει μέγιστη απορρόφηση στα $256 nm$ αραιώθηκε στα $250 ml$ και έδωσε απορρόφηση $A: 0,266$ σε κυψέλιδα $1 cm$. Να βρεθεί η χημική απορροφητικότητα του Βενζολίου στο συγκεκριμένο μήκος κύματος ϵ

$$A = \epsilon b c \quad b = 1 \\ c = \frac{n}{V} = \frac{\frac{m}{M}}{V} = \frac{25,8 \cdot 10^{-3} g}{78,11 \frac{g}{mol} \cdot 250 \cdot 10^{-3}} = 0,00132 M \text{ ή } mol \cdot L^{-1}$$

$$\text{Άρα} \quad \epsilon = \frac{A}{b c} = \frac{0,266}{1 \cdot 0,00132} = 201,3 M^{-1} cm^{-1}$$

- β) Ένα δείγμα εξανίου που αραιώθηκε με Βενζολίο έχει απορρόφηση $0,070$ στα $256 nm$ σε κυψέλιδα $b = 5,000 cm$. Να βρεθεί η συγκεντρωτική Βενζολίου σε mg/l

$$A = \epsilon \cdot b \cdot c \quad c = 6,95 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-5} M \\ \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \\ 0,070 \quad 201,3 M^{-1} cm \quad 5 cm \\ \text{από α)} \\ c = \frac{n}{V} = \frac{m}{M \cdot V} \\ = 6,95 \cdot 10^{-5} \cdot 78,11 = 5,43 \cdot 10^{-3} g/l = 5,43 mg/l$$

- 3) Μια ~~αλυσίδα~~ ένωση X έχει $\epsilon = 2,45 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ στα 450 nm. Ποιο είναι το Cx που προκαλεί ελάττωση της προβολιζόμενης ακτινοβολίας κατά 25% στα 450 nm σε κυψλίδα $b = 1 \text{ cm}$

$$P = P_0 \cdot 0,75 \quad \text{λόγω ελάττωσης}$$

$$A = \epsilon \cdot b \cdot C \quad \left. \begin{array}{l} \text{1 cm} \\ \end{array} \right\}$$

$$C = 5 \cdot 10^{-5} \text{ M}$$

$$A = \log\left(\frac{P_0}{P}\right) = \log\left(\frac{P_0}{0,75 \cdot P_0}\right) = 0,12$$

- 4) V_L $C_{Fe} = j$ $\epsilon = 1,10 \cdot 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$
 $V_D = 2V_L$
 $b = 1,00 \text{ cm}$
 $AB \text{ Fe} = 55,9$

- Αρα ο όγκος του δείγματος 3 μετατρέπεται αφού μιλάει για τον όγκο του νερού άρα $V = \frac{V_D}{3} = \frac{2V_L}{3} \Rightarrow C_L V_L = C_D \frac{2V_L}{3} \Rightarrow C_D = \frac{C_L}{3}$

$$A = -\log T$$

$$\Rightarrow -\log T_L = \epsilon \cdot b \cdot C_L \quad \left. \begin{array}{l} ? \\ (-) \end{array} \right\} \Rightarrow \log 2 = 1,1 \cdot 10^4 \cdot \frac{2C_L}{3}$$

$$-\log 2/1 = \epsilon \cdot b \cdot \frac{C_L}{3}$$

$$\Rightarrow C_L = \frac{3 \log 2}{2,2 \cdot 10^4} = 4,1 \cdot 10^{-5} \text{ M} = 4,1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$C_L = 4,1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 55,9 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 2,29 \cdot 10^{-3} \frac{\text{g}}{\text{L}} \text{ ή } 2,29 \text{ mg/L}$$

19/11/19

1) Φασματομετρία UV-VIS Μοριακή

Χρωματισμοί σημαίνουν τα μέρη τα οποία είναι υπεύθυνα για την
ανταπόκριση

Το μολύβδι οξειδώνεται το συμπεριφορικό χρώμα της
ακτινοβολίας να απορροφάται

Ενώσεις με αλκοεστιακή δομή

- οργανοπερίοχη
- υπερπύκνωση

Δ[†] πιο εκλεκτική απορριβή

7 δέσμη αλτινινοβολίας και 1 κυψελίδα φασητομετρία σιτηrus δέσμη

2 ————— // 2 — // — // ————— Sindus — //

blank
→ μέγχα

α) φάσματα UV-VIS φθάν. Εντάξεως
δεν μπορεί να κάνει ταυτοποίηση

β) φάσματα UV-VIS μισμάτων
αεριοβιατά συστήματα

~~SOS~~ → Για ποιο λόγο οι ποδοσφαιριστές χάνονται κατά προτίμηση για λ_{max} .

Αν: Για λ_{\max} έχω το \max απορροφούσα για δέσμευση C
και για λ_{\max} έχω 1 σταθεροποιημένη απορροφούσα σε όλη τη
με το λ υπάρχει ένα τιτλοδότη

Απορρόφηση 1% w/v [1g / 100 ml]

Μονοχρωματόρες : επιλογή ουρκερ. λ

Ποσότητες : ένταση απορροφ / εκπομπής

SOS Που μας ενδιαφέρει να διαχωρίσουμε το εύρος μικρών κυμάτων?
στην UV-VIS

ΑΠ: Στην ποσοτική ανάλυση θέλω στενά εύρη μικρών κυμάτων
για διαχωρισμό 1 στοιχείου από 1 άλλο τα οποία μπορεί
να εκπέμπουν / απορροφούν σε κάποια μικρά κυμάτια. Για στενή
επιλογή μικρών κυμάτων η ακτινοβολία εξαθθενίζεται

Άσκηση

Na υπολογιστεί % περιεκτικότητας του χαλβού σε μαγνήσιο

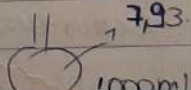
Τυπολογία

$$T = \frac{P}{P_0} \text{ ή } T\% = \frac{[P/P_0]}{100} \%$$

$$A = \log \left(\frac{P_0}{P} \right) = \log \left(\frac{1}{T} \right) = -\log T$$

$$A = \epsilon b c$$

Λύση

0,341 g χαλβού \rightarrow  $7,93 \cdot 10^{-5} \text{ mol Mg}$

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= \log \left(\frac{1}{0,215} \right) = \epsilon b c_x \\ A_2 &= \log \left(\frac{1}{0,46} \right) = \epsilon b \cdot 4 \cdot 10^{-5} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{0,668}{0,337} = \frac{c_x}{4 \cdot 10^{-5}}$$

$$\Rightarrow c_x = 7,93 \cdot 10^{-5} \text{ M}$$

$$m_{\text{Mg}} = n \cdot A_r = 7,93 \cdot 10^{-5} \text{ mol} \cdot 54,99 \text{ g/mol} = 4,36 \text{ mg}$$

$$\% \text{ Mg} = \frac{4,36 \text{ mg}}{342,1 \text{ mg}} \cdot 100 \% = 1,27 \%$$

$$R = v_e r \quad \text{όπου} \quad e_r = (\cos \theta_1 + j \sin \theta_1)$$

$$\Rightarrow v = v_{\cos \theta} + j v_{\sin \theta} \quad e_\theta = (-\sin \theta_1 + j \cos \theta_1)$$

Χαρακτηρισμός Δειγμάτων - Αποτυπώσεις

Το δείγμα δεν πρέπει να θιγέται αρκετά υγρό στην κυψελίδα λόγω διακυμάνσεων θερμοκρασίας και φυσαλίδων. Τα δείγματα ελαφίστατα πρέπει να μεταβληθούν. Σε μικρά δεν γίνεται εύκολο διαχωρισμός από το blank.

Ασκ: Δείγμα φυσιολ. νερού αναμένεται να περιέχει 0,1 ppm Cl. Ποια κυψελίδα θα χρησιμοποιήσουμε για την μέτρηση;

$$0,1 \text{ ppm} = 0,1 \text{ mg/L} = 0,1 \cdot 10^{-3} \text{ g/L} = \frac{0,1 \cdot 10^{-3} \text{ g}}{\frac{L \cdot 59 \text{ g}}{\text{mol}}} = 1,92 \cdot 10^{-6} \text{ M}$$

Εφαρμόζω νόμο L.B για τις 4 διαφορ. κυψελίδες

$$A_1 = 41700 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1} \cdot 1,92 \cdot 10^{-6} \text{ M} \cdot 0,2 \text{ cm} = 0,016$$

$$A_2 = \quad \quad \quad // \quad 0,1 \text{ cm} = 0,08$$

$$A_3 = \quad \quad \quad // \quad 5 \text{ cm} = 0,40$$

$$A_4 = \quad \quad \quad // \quad 10 \text{ cm} = 0,80$$

Βεβαιότητα περίσσειας
απορρόφησης
από εκκένωση
φασματός δείγματος

Ασκ: Από ποια αιώματα αναμένεται καλύτερα αποτελέσματα? Φωτομετρική προσδιορισμός FeCl₃ αλάς K

Δείγμα (g)	K (±0,6)	Συμπένδυση στο τελικό δείγμα mol/L
0,3535	$3,535 \cdot 10^{-3}$	$\frac{3,535 \cdot 10^{-3}}{950 \text{ g/mol} \cdot 0,5 \text{ L}} = 2,8 \cdot 10^{-5} \text{ M}$
1,1821	$1,1821 \cdot 10^{-2}$	ομοία = $1,35 \cdot 10^{-4} \text{ M}$
5,005	$5,005 \cdot 10^{-2}$	-// = $4,4 \cdot 10^{-4} \text{ M}$

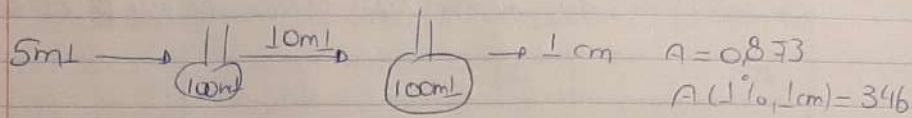
$$\text{Απορρόφηση } A = 3,1 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1} \cdot 1,00 \text{ cm} = 0,087$$

$$\frac{0,417}{1,241}$$

* Βεβαιότητα περίσσειας απορρόφησης για αρχικά δικά (A = 0,2 - 0,8)
ή 0,1 - 1

Ασκηση:

Να υπολογιστεί η περιεκτικότητα του ενεργού δραστικού συστατικού (% w/v)



ΑΤΕΛ

$$\begin{aligned} 0.873 &= \epsilon \cdot 1 \text{ cm} \cdot C_{\text{TEA}} \\ 346 &= \epsilon \cdot 1 \text{ cm} \cdot 1\% \text{ (w/v)} \end{aligned} \quad \left. \begin{aligned} 0.873 &= C_{\text{TEA}} \\ 346 &= 1\% \text{ w/v} \end{aligned} \right\} \Rightarrow C_{\text{TEA}} = 2.523 \cdot 10^{-3} \text{ (w/v)}$$

$$C_{\text{ENG}} = 200 \cdot 2.523 \cdot 10^{-3} = 0.505 \text{ (w/v)}$$

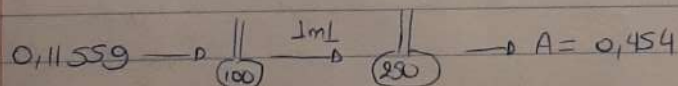
ή

Υπολογίζω Διαδοχικά για κάθε αραίωση
 (N αραίωση)

- 5 $C_{\text{ENG}} = 100 \cdot C_{\text{ENA}} \Rightarrow C_{\text{ENG}} = 20 C_{\text{ENA}}$
- 10 $C_{\text{ENA}} = 100 \cdot C_{\text{TEA}} \Rightarrow C_{\text{ENA}} = 10 C_{\text{TEA}}$

$$\Rightarrow C_{\text{ENG}} = 20 \cdot 10 \cdot C_{\text{TEA}} = 200 C_{\text{TEA}}$$

ΑΓΚ: Από το ΜΒ της αραίωσης



$$C_1 = \frac{0.1155 \text{ g}}{0.1 \text{ L} \cdot 2} = \frac{0.1155}{0.2} \text{ M}$$

$$C_{\text{TEA}} = \frac{0.1155}{250 \cdot 0.1 \text{ M}} \Rightarrow C_{\text{TEA}} = 0.1155 / 25 \text{ M}$$

$$0.454 = 1.25 \cdot 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1} \cdot 1 \text{ cm} \cdot \frac{0.1155}{25 \text{ M}} \Rightarrow M_r = 127.2 \text{ g/mol}$$

$$A = v_{er}$$

ήτοι

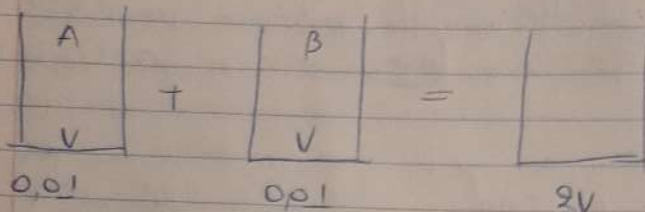
$$e_r = (\cos \theta i + \sin \theta j)$$

$$v = v_{er} + v_{\theta}$$

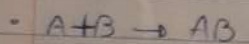
$$e_{\theta} = (-\sin \theta i + \cos \theta j)$$

Ασκηση

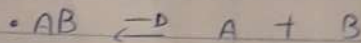
Ποιο θα είναι η A στα 550nm εάν ένας δίσκος που παρακρούεται με συχνότητα 16m συγκιν 0,01 M του A και B σε κυματίζα 1cm



$$\text{Arrhenius: } 0,01 V = C_{\text{TeA}} \cdot 2V \Rightarrow C_{\text{TeA}} = \frac{0,01}{2} \Rightarrow C_{\text{TeA}} = 0,005 M$$



$$0,005 \quad 0,005 \quad 0,005$$



$$0,005 - x \quad x \quad x$$

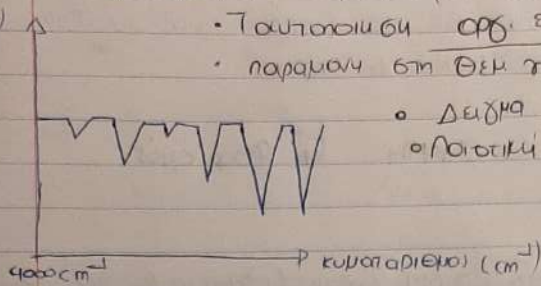
$$6,00 \cdot 10^{-4} = \frac{x^2}{0,005 - x} \Rightarrow x = 1,46 \cdot 10^{-3} M \Rightarrow [AB] = 0,005 - 1,46 \cdot 10^{-3} = 3,54 \cdot 10^{-4} M$$

$$\text{Εφαρμογή LB} \rightarrow A = 450 M^{-1} \cdot cm^{-1} \cdot 1cm \cdot 3,54 \cdot 10^{-4} M = 1,593$$

25/11/2019

Φασματομετρία Υπερωρού (IR) ~~απεικόνιση~~ (μοριακή)

T (απορρόφηση)



• Ταυτοποίηση οργανικών ενώσεων

• παραμονή στη θεμ. κατάσταση

• Δείγμα πριν από το μονοχρωματικό

• Ποιοτική ανάλυση

- περιοχή υδρογόνου $4000-2500 \text{ cm}^{-1}$
- τρίτου δεσμού $2500-2000 \text{ cm}^{-1}$
- διπλού $-C=C-$ $2000-1600 \text{ cm}^{-1}$
- καμπύου ατόμου δεσμού $1500-700 \text{ cm}^{-1}$

- Ταύτιση 2 φασμάτων σημαίνει ίδια ουσία
- Το IR χρησιμοποιείται για ποιοτική ανάλυση
- Δυσκολία ή παραχρηστικά δεδομένων και πολύπλοκο διαγράμμοι
αλλά που δεν χρησιμοποιείται για ποσοτικό προσδιορισμό
- Η ακτινοβολία μπορεί να μετατραπεί σε θερμότητα
Πλεονεκτήματα

- Ταχύτητα
- Ευαισθησία
- Χρεα - στερεά - αέρια (μετάφραση σε δίσκο)

- Άσκηση: Προτεινόμενη μέθοδος προετοιμασίας + ερμηνείας
- χημική ανάλυση αερίων δειγμάτων με φασματομετρία IR

Εφαρμογές

Οργανικά χημικά

Φάρμακα χημικά

Πολυμερή
Πετρέλαια κ.λπ.

$$T = P/P_0 \quad A = -\log T$$

$$\vec{v} = v_{\text{orb}} + v_{\text{rel}}$$

$$e = (-\sin\theta i + \cos\theta j)$$

Φασματομετρία Ατομικής Απορρόφησης AAS (Ατομική)

- Το δείγμα εκτίθεται σε μια ενέργεια για την πλήρη εξάχνωση ώστε διάσπαση των μορίων σε άτομα.
Μετά μπορούν:

↳ Απορρόφηση ↳ Εκπομπή ↳ Φθορισμός

Φασματομετρία

Μοριακή → ανιχνεύει μορίων (ηλεκτρομαγν. ακτινοβολίας)

Ατομική → ατομική (ηλεκτρική / θερμ. ενέργεια) -

• προσδιορ. στοιχεία

Παραλλαγές της AAS:

- με φλόγα (υγρό δείγμα)
- με φάρμα χρωμίου (υγρό/στερεό δείγμα)
- με εκπαιδευτικό υδρίδιου (υγρό δείγμα)

Διεργασίες AAS

1. Εξάχνωση δείτη → εκπαιδευτικό αερίωμα
 2. Διασπάση μορίων σε άτομα
 3. Διεγερση
 4. Εκπομπή
- } ανεπιθύμητη

- Όταν έχω απαίτηση για ποσοδοποιητική ανάλυση δεν είναι καλή η AAS
Αλλά λύσεις → Φασματομετρία Εκπομπής (ICP-OES), M)

~~Αξιολογ.~~

Άσκηση 1:

- α) απαιτείται να μειωθούν οι παρενέργειες και να αυξηθεί η συκέντρωση. Το ίδιο γίνεται και τη γνωστή προσέγγιση γιατί δεν αλλάζουμε το σίγμα
- β) Με άλλη καύση έχουμε μεγαλύτερη θερμότητα από μείωση παρενεργειών

Άσκηση 2:

$$M(Ag) = 107,9 \text{ mg/mol}$$

Καμπύλη αναφοράς Ag 2 ppm - 20 ppm

$$2 \text{ mg/L} - 20 \text{ mg/L}$$

$$\text{Από } 2 \text{ mg/L} \cdot 50 \cdot 10^{-3} \text{ L} \text{ έως } 20 \text{ mg/L} \cdot 50 \cdot 10^{-3} \text{ L}$$

$$0,1 \text{ mg}$$

$$\text{Εως } 1 \text{ mg Ag}$$

$$\frac{0,1}{107,9}$$

$$\cdot 10^{-3} \text{ mol} \quad \text{Εως} \quad \frac{1}{107,9}$$

$$\cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$9,3 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

Εως

$$93 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

$$0,93 \text{ } \mu\text{mol}$$

Εως

$$9,3 \text{ } \mu\text{mol}$$

από αλδελφά

$$\frac{0,93}{2} \text{ } \mu\text{mol}$$

Εως

$$\frac{9,3}{2} \text{ } \mu\text{mol}$$

$$= 0,465$$

Εως

$$4,65$$

$$\mu\text{mol}$$

$$M = \rho \cdot V$$

$$V = \frac{M}{\rho}$$

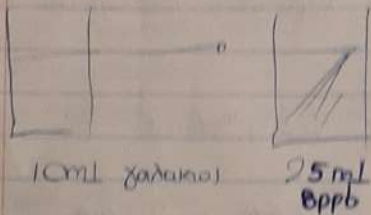
$$\rho = \frac{m}{V}$$

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m}{\frac{M}{\rho}} = \frac{m \cdot \rho}{M}$$

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m}{\frac{M}{\rho}} = \frac{m \cdot \rho}{M}$$

2/12/2019
(11) ICP-MS (νγρ ή σπιντ)

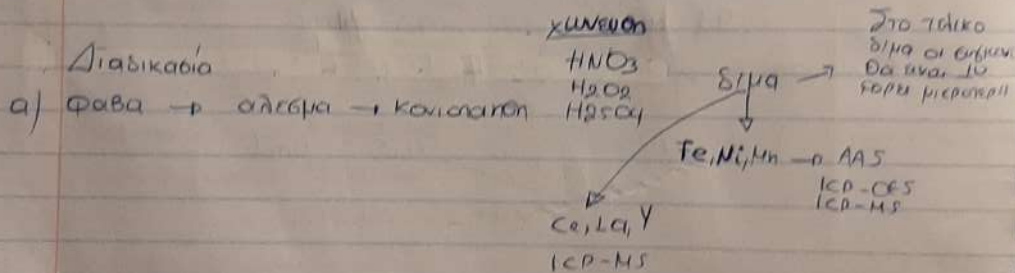
η μεθοδος νγρ Ρ6 με MS και ICP-OES αναλύει
10 mL δείγματα χαλκού



MRL: 0.02 ppm (0.02 mg/L)

Σεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι μεθοδοι
ενδυνάμωσις η ICP-MS και ο φανός γραφική στην MS

Γ) Αγκ. Φαβα Σαντινίς



β) 1^{ος} τρόπος: ανάλυση παραφοια CRH (πιστοποιημένα παραφοια
αλικά αναφορά)

2^{ος} τρόπος: Συγκρίση αποτελεσμάτων με άλλο εργαστήριο

* Λόγω της χώνευσης οι εφκεντρώβη Οι μειωβή σποτε
ετα στοιχεία και εχών < ρρβ θα μειωβη περιεβόατο

Φασματομετρία ακτίνων X (XRD - XRF)

Ακτίνες X

ορατό \rightarrow υπεριώδεις \rightarrow ακτίνες X (μικρο μικρο κύματος)

$$\downarrow \lambda \quad \uparrow E \quad E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

Το λ_{min} αντιστοιχεί σε ορισμένη επιβροδύση

XRD \rightarrow βαθμός κρυσταλλικότητας του υλικού

Ασκ 1 Να υπολογιστεί το ελάχιστο δυναμικό βολτ για ακτίνες X ώστε να ληφθούν οι ακόλ γραμμές εκπομπής

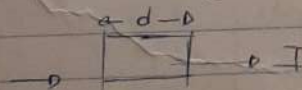
Εφαρμοζών τον τύπο $V_{min} = \frac{12398}{\lambda \rightarrow \text{σε Å}}$
σε volt

α) γραμμή K του Cu (8,064 Å)

$$\text{αρα } V_{min} = \frac{12398}{8,064} = 1537,4 \text{ V}$$

β) $V_{min} = \frac{12398}{9,370} = 1322 \text{ V}$

Ασκ 2: Πλατφόρμα αργαίου σε κυψέλλα φαται Ag.



$$\ln\left(\frac{I_0}{I}\right) = \mu_m \cdot \rho \cdot d \quad \text{όπου } \mu_m \text{ μαζικός συντελεστής απορρόφησης}$$

$$\circ \text{ Θέτουμε } I \geq 0,965 I_0 \Rightarrow \mu_m \cdot \rho \cdot d \leq \ln\left(\frac{I_0}{0,965 I_0}\right)$$

$$= 2,74 \frac{\text{cm}^2}{\text{g}} \cdot 2,70 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \cdot d \leq 0,0356 \Rightarrow d \leq 0,00482 \text{ cm}$$

$$\text{Αρα } d_{min} = 0,00482 \text{ cm} = 4,82 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$$

$$R = r_{ex} \quad \text{or} \quad e_r = (\cos\theta_i + \sin\theta_j) \\ e_\theta = (-\sin\theta_i + \cos\theta_j)$$

$$\vec{v} = v_{\cos\theta} + v_{\sin\theta}$$

ΔΟΚ 5: XRD σχημα χημ. ακτινοβολία X (πρώτο κύμα) 1,315 Å
το πλάσμα εμπ. κορυφή σε θωρία 2θ ίση με 50,5. d = ?

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin\theta \quad \text{n: ταξιν ακτινοβολία}$$

$$\downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$$

$$1 \cdot 1,315 \quad \sin 25,25^\circ$$

$$d = 1,543 \text{ Å}$$

$$2\theta = 25,7, 40,5, 31,38 \text{ με επιβολή } 100/40/35$$

$$E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

$$n \cdot \lambda = 2d \sin\theta$$

09/12/2019

Ατομικά και Μοριακά Μαζα

Μοριακά φάρμακα μαζας

Εξοχ. Ιοντων

Μυριακό

Βασικό

Ερωτήματα

Αναδιάρθρωση

Φαρμοακμετρία Μαζων:

* Αν το ΜΒ είναι περίτιτο \rightarrow ο αριθμός ατόμων αζωτίου περίτιτο!

A6K 1

Μια αγνώστη ένωση έχει μωριακό ιόν $m/z = 107$ με
6K. ένταση 100. Η σχε. ένταση της κορυφής σε $M+1$ είναι 7,8 κ' σε
 $M+2$ είναι 0,3. Ποιος ο τύπος της αγνώστης ένωσης?

β) Προσέγγισε τον τύπο για την ένωση με τα δεδομένα

m/z	ένωση	Πορ/60
78	23,6	($M+1$)
79	0,79	
80	7,55	
81	0,25	

γ) Ένας να παρουσιάζει ιόν με m/z 84 σε ένταση 313. Η σχε.
($M+1$) έχει σχετ. αφθονία 2,06 και η σχε. αφθονία της
ελαφούς $M+2 = 0,08$. Ποιος ο τύπος της ένωσης!

α) (i) Ούτε χαμorio, ούτε βρωμιο αφοι το $M+2$ με 0,30 γραμματα
 ου δει εναι Cl, Br 0,30 + 35,37

m/z	M	εκ. ευλαση
107	M	100
108	M+1	7,80
109	M+2	0,30

(ii) αν κανω N αφοι $M \rightarrow 107$ (περιτιος) N περιτιος

(iii) αρ C $\frac{7,80}{1,00} = 7,80 \approx 7$

$$\begin{array}{ccc} C_7 & N & H_9 = 107 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 7 \cdot 12 = 84 & 14 & 9 \end{array}$$

β) πρεπει να δινει κανονικονισμον δλδ

$$\begin{array}{lcl} M^+ & 78 \rightarrow 23,6 & \rightarrow \text{σποδω το } 100 \text{ ως μέγιστη τιμή} \rightarrow M^+ \\ M+1^+ & 79 \rightarrow 0,79 & \xrightarrow{0,79 \cdot 100 / 23,6} 3,35 \rightarrow M+1 \\ M+2^+ & 80 \rightarrow 1,55 & \xrightarrow{1,55 \cdot 100 / 23,6} 6,57 \rightarrow M+2 \end{array}$$

→ Στο $M+2$ υπάρχει αναλογια με το M 1:1 ή 3:1? Ναι 3:1
 → υπάρχει Cl (αν είχε 1:1 υπαρχ Br)

→ Αριθμος C $\frac{3,35}{1,00} = 3,35 \rightarrow 3$

→ N ατιος αριθμος το M $\Rightarrow N = 0, 2, 4, \dots$

$$\begin{array}{ccc} C_3 & Cl & υπολοιπο 7 \Rightarrow H_7 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 36 & 35 & 7 = 78 \end{array}$$

→ διότι είναι σε μέγιστη αφοι σε σχέση με το 3 Cl

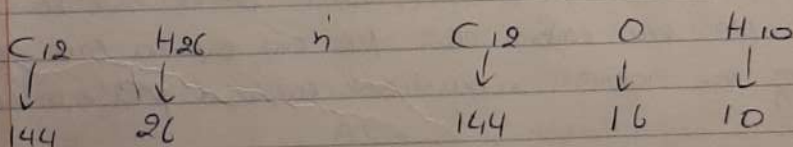
Άσκηση 2

- α) Μια αγνώστη ουσία έχει μοριακό ιόν $m = 170$ με βάση ένταση 100. Η βάση ένταση της κορυφής $m/z = 13,2$ και της $m/z = 1,0$. Πόσος ο μω. τύπος της οργ. ένωσης;
- β) Τιποτεινείτε μ. τύπο χλω. την ένωση με φθ. μάζας

α)

m/z	έντ. (%)
170	100
171	13,20
172	1,00

- γ)
- m/z ένταση 1,00% σε σχέση με το $H = 0$ όχι Cl, Br
Αριθμός ατόμων $C = \frac{13,20}{1,08} = 12,22 \rightarrow 12$ άτομα C
 - $M = 170$ ατομ. $= P \quad N = 0, 2, 4, \dots$



Άσκηση 3

αλκυλίζει συστηματικά το φ.μ. της ακετόνης (CH_3COCH_3) το οποίο δίνει κυρίες κορυφές ~~και~~ με τις αντίστ. έντατες:

- m/z 15,0 (26,1%) ερμηνεύστε την προέλευση των κορυφών
- 43 (100%)
- 58 (65,8%) ποιο το μοριακό ιόν και ποιο το βασικό

Βασικό ιόν \rightarrow αυτό με τη max ένταση άρα το 43
μοριακό \rightarrow 58: ίδιο με το MB της ακετόνης