

# TEMA 11

## ESPECTROMETRÍA DE MASAS: FUNDAMENTOS Y TIPOS DE FRAGMENTOS

### Contenidos

- 11.1. Introducción, fundamentos y desarrollo histórico (págs. 419-423)
- 11.2. Registro del espectro y tipo de información que suministra el espectro de masas (págs. 442-444)
- 11.3. Tipos de fragmentos
  - 11.3.1. Iones positivos y negativos (págs. 449-452)
  - 11.3.2. Iones moleculares (págs. 455-458)
  - 11.3.3. Picos isotópicos (págs. 459-467)
  - 11.3.4. Fragmentos neutros (págs. 475-476)
- 11.4. Tipos de reacciones de fragmentación (págs. 476-482)
  - 11.4.1. Roturas de enlace C-C
  - 11.4.2. Roturas de enlace C-heteroátomo
  - 11.4.3. Fragmentaciones concertadas
  - 11.4.4. Fragmentaciones con transposición

### Planteamiento del Tema

La Espectrometría de Masas (EM) es un método analítico consistente en la separación y medida de las masas de los iones resultantes de la fragmentación de una molécula neutra a la que se ha suministrado energía. Quizá uno de los datos más valiosos de que puede disponer el químico cuando elucida la estructura de un compuesto es el peso molecular del mismo. Así, un examen previo del espectro de masas facilita considerablemente el análisis del resto de los espectros.

El estudio de este Tema comienza con la introducción a la técnica, sus fundamentos y desarrollo histórico.

A continuación se estudia el registro de un espectro de masas mediante la técnica de impacto electrónico y el tipo de información que proporciona el espectro de masas.

Posteriormente se dedica un apartado al estudio de los diferentes tipos de iones que pueden generarse a partir de los iones moleculares formados por interacción de moléculas neutras con radiación ionizante. Toda molécula orgánica posee número par de electrones, de manera que dicha radiación puede dar lugar a la emisión de un electrón, generándose un ión molecular positivo, o a la captación de un electrón, formándose un ión molecular negativo, ambos con número impar de electrones (se trata de iones-radicales). Dichos iones moleculares, si poseen un exceso de energía suficiente, sufren posteriores reacciones de fragmentación eliminando un radical y transformándose en un ion, o bien una molécula neutra, transformándose en un nuevo radical- catión o anión. En este curso sólo se estudiarán iones positivos. Los iones moleculares y sus características también se revisarán. El conocimiento de estos aspectos es fundamental a la hora de interpretar espectros de masas.

El análisis de conjuntos de picos isotópicos es de importancia fundamental en EM, ya que permite reconocer la presencia de determinados elementos y el número de átomos de éstos en una molécula orgánica (ejemplos muy típicos son los halógenos Cl y Br y el azufre). Por ello, el apartado dedicados a ellos debe estudiarse con especial atención.

Otra asignación importante, cuando se estudia un espectro de masas, es la determinación de especies neutras eliminadas por fragmentación del ión molecular, sobre todo aquellas de pequeña masa como M-15 (pérdida de metilo), M-18 (pérdida de agua), M-28 (pérdida de CO, H<sub>2</sub>C=CH<sub>2</sub> ó N<sub>2</sub>), etc. Ello será objeto de estudio en el apartado 11.7.

Al final del tema se dedicará un apartado al estudio de los diferentes y más comunes tipos de fragmentación que experimentan los iones moleculares, tales como roturas de enlaces C-C, de C-heteroátomo, fragmentaciones concertadas y fragmentaciones con transposición.

Además de los resultados de aprendizaje generales que se persiguen con el estudio de este Bloque Temático, los resultados de aprendizaje asociados a este Tema son:

- Conocer los fundamentos de la Espectrometría de masas y el tipo de información que suministra.
- Conocer el tipo de iones y fragmentos que se forman por ionización de una molécula.
- Conocer el significado y utilidad de los picos isotópicos.
- Conocer los principales tipos de reacciones de fragmentación.