

ESPECTROMETRIA DE MASAS

INTRODUCCION

La espectrometría de masas, es una técnica de análisis cualitativo, de amplia utilización para la determinación de estructuras orgánicas, por si sola o en combinación con otras técnicas de espectrofotometría.

Ante todo, ha de hacerse notar que la espectrometría de masas, tiene muy poco en comun con las técnicas clásicas de espectrofotometría, ya que, en sentido estricto, no es propiamente un metodo espectroscópico (desde el punto de vista clásico, un espectro es una información bidimensional que representa un parámetro relacionado con la emisión o absorción de una radiación con la energía de dicha radiación); en la espectrometría de masas, no se utiliza ningun tipo de radiación, por lo que básicamente, no puede ser considerada como una técnica espectroscópica. Otra diferencia esencial que presenta la espectrometría de masas con las espectroscopías clásicas, es que en estos últimos métodos, los procesos que se originan son puramente físicos, no destrutivos, de forma que la muestra utilizada para la obtención del espectro no se modifica químicamente y se puede volver a recuperar; por contra, en la espectrometría de masas, durante la obtención del espectro tienen lugar procesos químicos, con lo que la muestra utilizada se destruye y no puede recuperarse; este hecho no es un inconveniente grave, ya que la cantidad de muestra necesaria para la obtención de un espectro de masas, es pequeñísima (del orden del μg).

FUNDAMENTOS DE LA TECNICA

La espectrometría de masas está basada en la obtención de iones a partir de moléculas orgánicas en fase gaseosa; una vez obtenidos estos iones, se separan de acuerdo con su masa y su carga, y finalmente se detectan por medio de un dispositivo adecuado.

Un espectro de masas será, en consecuencia, una información bidimensional que representa un parámetro relacionado con la abundancia de los diferentes tipos de iones en función de la relación masa/carga de cada uno de ellos.

Como ya se ha mencionado, los procesos que tienen lugar en un espectrómetro de masas, son de naturaleza química; en consecuencia, la presencia y abundancia en el espectro de determinados tipos de iones, identificables a partir de su masa, será función de la estructura química de cada compuesto; la información ofrecida por un espectro de masas es, de alguna forma, comparable a la obtenida mediante una gran cantidad de reacciones de las utilizadas para la determinación de estructuras por vía química, por lo que la espectrometría de masas puede ofrecer una enorme cantidad de información sobre un compuesto determinado.

INSTRUMENTACION

Esencialmente, el espectrómetro de masas debe ser capaz de desempeñar cuatro funciones:

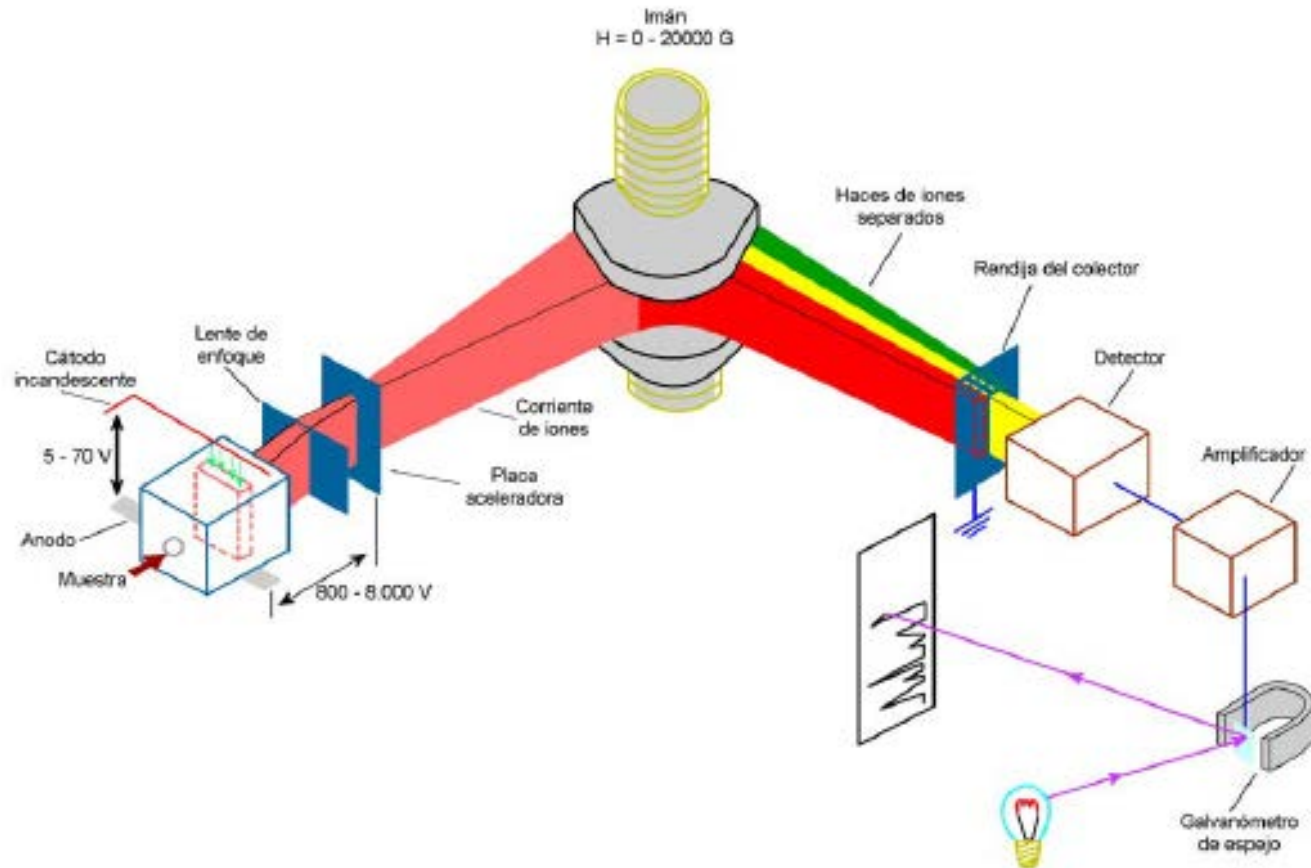
- 1) El espectrómetro de masas debe ser capaz de vaporizar sustancias de volatilidades muy diferentes.
- 2) Una vez volatilizada la muestra, el espectrómetro debe ser capaz de originar iones a partir de las moléculas neutras en fase gaseosa.
- 3) Una vez generados los iones, el espectrómetro debe ser capaz de separarlos en función de su relación masa/carga.
- 4) Una vez separados los iones, el espectrómetro debe ser capaz de detectar los iones formados y registrar la información adecuadamente.

Ya que el espectrómetro debe cumplir estas cuatro funciones, deberá constar de cuatro partes más o menos independientes:

- 1.- Sistema de introducción de muestras.
- 2.- Fuente de iones.
- 3.- Analizador, para la separación de iones.
- 4.- Sistema detector y registrador.

El esquema de un espectrómetro de masas clásico, de separación magnética, es el siguiente:

Ejemplo de dispositivo



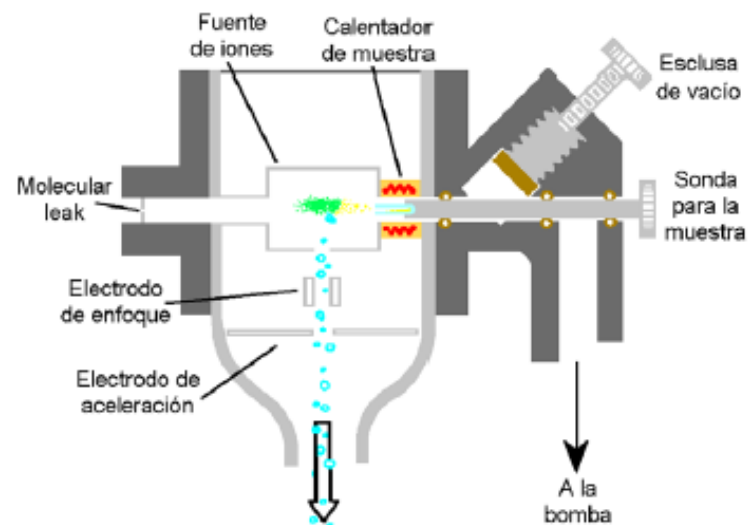


Figura 2. Sistema de introducción de muestras

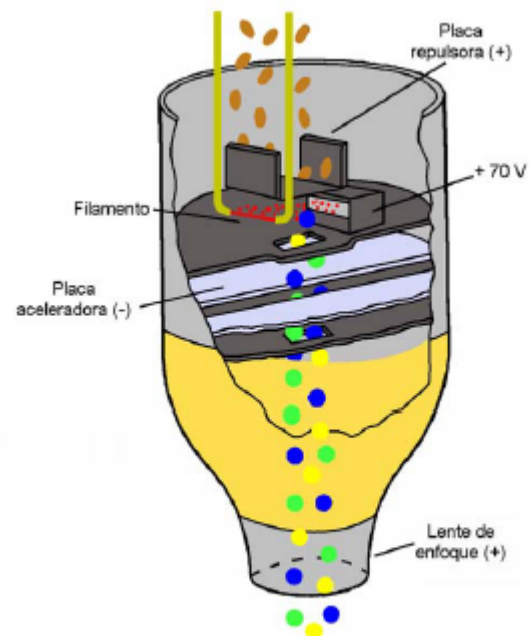


Figura 3. Fuente de iones de impacto electrónico