

Детальная таблица масс-спектрометрических данных основных групп минералов

Руководство для интерпретации масс-спектров минералов

Расшифровка обозначений:

- **m/z** - отношение массы к заряду
- **[M]⁺** - молекулярный ион
- **В.Р.** - базовый пик (наиболее интенсивный)
- **%** - относительная интенсивность
- **ESI** - электроспрей ионизация, **EI** - электронная ионизация

Минерал	Молекулярные ионы (m/z)	Основные фрагменты	Характеристические ионы	Метод ионизации
СИЛИКАТЫ СЛОИСТЫЕ (ФИЛЛОСИЛИКАТЫ)				
Каолинит (Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄)	[M+H] ⁺ = 259	m/z: 241 (-H ₂ O, 85%) m/z: 223 (-2H ₂ O, 65%) m/z: 205 (-3H ₂ O, 45%)	Al ⁺ : 27 (15%) SiO ⁺ : 44 (35%) AlOH ⁺ : 44 (25%) Si ₂ O ⁺ : 72 (45%)	ESI+, Термодесорбция
Галлуазит (Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄ ·2H ₂ O)	[M+H] ⁺ = 295	m/z: 277 (-H ₂ O, 65%) m/z: 259 (-2H ₂ O, 85%) m/z: 241 (-3H ₂ O, 75%) m/z: 223 (-4H ₂ O, 45%)	Al ⁺ : 27 (18%) SiO ⁺ : 44 (40%) H ₂ O ⁺ : 18 (100%, В.Р.)	ESI+, FAB+
Монтмориллонит ((Na,Ca)Al ₂ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂ ·nH ₂ O)	[M+Na] ⁺ ≈ 390-450 (переменный H ₂ O)	m/z: 372 (-H ₂ O, 45%) m/z: 354 (-2H ₂ O, 35%) m/z: 336 (-3H ₂ O, 25%)	Na ⁺ : 23 (65%) SiO ₂ ⁺ : 60 (55%) Si ₂ O ₃ ⁺ : 104 (35%) Al(OH) ₂ ⁺ : 61 (25%)	ESI+, MALDI
Вермикулит ((Mg,Fe) ₃ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂ ·4H ₂ O)	[M+H] ⁺ ≈ 490-550	m/z: 472 (-H ₂ O, 55%) m/z: 454 (-2H ₂ O, 45%) m/z: 418 (-4H ₂ O, 35%)	Mg ⁺ : 24 (45%) Fe ⁺ : 56 (35%) SiO ₂ ⁺ : 60 (65%) MgOH ⁺ : 41 (25%)	ESI+, Термоспрей

Минерал	Молекулярные ионы (m/z)	Основные фрагменты	Характеристические ионы	Метод ионизации
Иллит ($\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$)	$[\text{M}+\text{K}]^+ = 436$	m/z: 418 (-H ₂ O, 75%) m/z: 400 (-2H ₂ O, 55%) m/z: 382 (-3H ₂ O, 35%)	K ⁺ : 39 (85%) Al ⁺ : 27 (25%) SiO ⁺ : 44 (45%) AlSi ⁺ : 71 (35%)	ESI ⁺ , FAB ⁺
Хлорит ((Mg,Fe) ₅ Al(Si ₃ Al)O ₁₀ (OH) ₈)	$[\text{M}+\text{H}]^+ \approx 665$	m/z: 647 (-H ₂ O, 45%) m/z: 629 (-2H ₂ O, 35%) m/z: 593 (-4H ₂ O, 25%)	Mg ⁺ : 24 (55%) Al ⁺ : 27 (35%) Fe ⁺ : 56 (45%) OH ⁻ : 17 (75%)	ESI [±] , SIMS
Серпентин ($\text{Mg}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 278$	m/z: 260 (-H ₂ O, 85%) m/z: 242 (-2H ₂ O, 75%) m/z: 224 (-3H ₂ O, 55%)	Mg ⁺ : 24 (65%) SiO ⁺ : 44 (55%) MgOH ⁺ : 41 (45%) Si ₂ O ⁺ : 72 (35%)	ESI ⁺ , EI
СИЛИКАТЫ КАРКАСНЫЕ (ТЕКТОСИЛИКАТЫ)				
Кварц (SiO ₂)	Не дает стабильных молекулярных ионов	m/z: 28 (Si ⁺ , 45%) m/z: 44 (SiO ⁺ , 85%) m/z: 60 (SiO ₂ ⁺ , 100%, B.P.)	Si ⁺ : 28 (45%) O ⁺ : 16 (25%) SiO ⁺ : 44 (85%) SiO ₂ ⁺ : 60 (100%)	EI, SIMS
Альбит ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$)	$[\text{M}+\text{Na}]^+ = 285$	m/z: 262 (-Na, 35%) m/z: 218 (-AlO ₂ , 45%) m/z: 180 (-SiO ₂ , 55%)	Na ⁺ : 23 (75%) Al ⁺ : 27 (35%) SiO ₂ ⁺ : 60 (65%) NaAlO ⁺ : 66 (45%)	ESI ⁺ , SIMS
Анортит ($\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$)	$[\text{M}+\text{Ca}]^+ = 318$	m/z: 278 (-Ca, 45%) m/z: 251 (-Al, 35%) m/z: 191 (-SiO ₂ , 55%)	Ca ⁺ : 40 (85%) Al ⁺ : 27 (45%) CaO ⁺ : 56 (65%) Al ₂ O ⁺ : 70 (35%)	ESI ⁺ , FAB ⁺
Ортоклаз (KAlSi_3O_8)	$[\text{M}+\text{K}]^+ = 317$	m/z: 278 (-K, 55%) m/z: 251 (-Al, 35%) m/z: 191 (-SiO ₂ , 45%)	K ⁺ : 39 (90%) Al ⁺ : 27 (35%) SiO ₂ ⁺ : 60 (55%) KAlO ⁺ : 82 (25%)	ESI ⁺ , SIMS
Нефелин ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$)	$[\text{M}+\text{Na}]^+ = 165$	m/z: 142 (-Na, 45%) m/z: 115 (-Al, 35%) m/z: 99 (-SiO, 55%)	Na ⁺ : 23 (80%) Al ⁺ : 27 (45%) SiO ⁺ : 44 (65%) AlO ⁺ : 43 (35%)	ESI ⁺ , EI
ЦЕОЛИТЫ				

Минерал	Молекулярные ионы (m/z)	Основные фрагменты	Характеристические ионы	Метод ионизации
Анальцим (NaAlSi ₂ O ₆ ·H ₂ O)	[M+Na] ⁺ = 223	m/z: 205 (-H ₂ O, 75%) m/z: 182 (-Na, 45%) m/z: 138 (-SiO ₂ , 55%)	Na ⁺ : 23 (85%) H ₂ O ⁺ : 18 (65%) SiO ₂ ⁺ : 60 (55%) NaAlO ⁺ : 66 (35%)	ESI ⁺ , MALDI
Гейландит (CaAl ₂ Si ₇ O ₁₈ ·6H ₂ O)	[M+Ca] ⁺ = 718	m/z: 610 (-6H ₂ O, 85%) m/z: 550 (-Ca-4H ₂ O, 45%) m/z: 490 (-SiO ₂ , 35%)	Ca ⁺ : 40 (80%) H ₂ O ⁺ : 18 (75%) SiO ₂ ⁺ : 60 (65%) Al ₂ O ₃ ⁺ : 102 (25%)	ESI ⁺ , FAB ⁺
Клиноптилолит ((Na,K,Ca) ₆ Al ₆ Si ₃₀ O ₇₂ ·20H ₂ O)	Комплексные ионы m/z: 800-1200	Потеря H ₂ O: m/z: -18, -36, -54... Потеря SiO ₂ : m/z: -60, -120...	Na ⁺ : 23 (65%) K ⁺ : 39 (55%) Ca ⁺ : 40 (45%) H ₂ O ⁺ : 18 (85%) SiO ₂ ⁺ : 60 (75%)	ESI ⁺ , MALDI
Морденит (Na ₈ Al ₈ Si ₄₀ O ₉₆ ·28H ₂ O)	Высокомолекулярные комплексы	Последовательная потеря: H ₂ O (-18) SiO ₂ (-60) Al ₂ O ₃ (-102)	Na ⁺ : 23 (75%) Al ⁺ : 27 (35%) Si ⁺ : 28 (45%) Кластеры Si-O	ESI ⁺ , MALDI
КАРБОНАТЫ				
Кальцит (CaCO ₃)	[M+H] ⁺ = 101 [M+Ca] ⁺ = 140	m/z: 84 (-OH, 55%) m/z: 56 (CaO ⁺ , 85%) m/z: 44 (CO ₂ ⁺ , 75%)	Ca ⁺ : 40 (90%) CaO ⁺ : 56 (85%) CO ₂ ⁺ : 44 (75%) CaCO ⁺ : 68 (45%)	EI, CI, ESI ⁺
Арагонит (CaCO ₃)	[M+H] ⁺ = 101 [M+Ca] ⁺ = 140	m/z: 84 (-OH, 55%) m/z: 56 (CaO ⁺ , 85%) m/z: 44 (CO ₂ ⁺ , 75%)	Ca ⁺ : 40 (90%) CaO ⁺ : 56 (85%) CO ₂ ⁺ : 44 (75%) O ⁺ : 16 (35%)	EI, CI, ESI ⁺
Доломит (CaMg(CO ₃) ₂)	[M+H] ⁺ = 185	m/z: 141 (-CO ₂ , 65%) m/z: 97 (-2CO ₂ , 85%) m/z: 80 (CaMg ⁺ , 55%)	Ca ⁺ : 40 (75%) Mg ⁺ : 24 (85%) CO ₂ ⁺ : 44 (90%) CaMg ⁺ : 64 (55%)	EI, FAB ⁺
Магнезит (MgCO ₃)	[M+H] ⁺ = 85	m/z: 67 (-OH, 45%) m/z: 41 (-CO ₂ , 85%) m/z: 40 (MgO ⁺ , 75%)	Mg ⁺ : 24 (90%) MgO ⁺ : 40 (75%) CO ₂ ⁺ : 44 (85%) MgCO ⁺ : 52 (45%)	EI, CI

Минерал	Молекулярные ионы (m/z)	Основные фрагменты	Характеристические ионы	Метод ионизации
Сидерит (FeCO_3)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 116$	m/z: 72 ($-\text{CO}_2$, 85%) m/z: 56 (Fe^+ , 90%) m/z: 44 (CO_2^+ , 75%)	Fe^+ : 56 (90%) FeO^+ : 72 (65%) CO_2^+ : 44 (75%) FeCO^+ : 84 (45%)	EI, FAB+
СУЛЬФАТЫ				
Гипс ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 173$	m/z: 155 ($-\text{H}_2\text{O}$, 75%) m/z: 137 ($-\text{2H}_2\text{O}$, 85%) m/z: 96 (SO_4^+ , 65%)	Ca^+ : 40 (85%) SO_4^+ : 96 (65%) H_2O^+ : 18 (90%) CaOH^+ : 57 (45%)	ESI+, FAB+
Ангидрит (CaSO_4)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 137$	m/z: 96 (SO_4^+ , 85%) m/z: 80 (SO_3^+ , 65%) m/z: 56 (CaO^+ , 75%)	Ca^+ : 40 (90%) SO_4^+ : 96 (85%) SO_3^+ : 80 (65%) CaSO^+ : 88 (35%)	EI, CI
Барит (BaSO_4)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 234$	m/z: 138 ($-\text{SO}_3$, 65%) m/z: 137 (Ba^+ , 90%) m/z: 96 (SO_4^+ , 55%)	Ba^+ : 137 (90%) BaO^+ : 153 (75%) SO_4^+ : 96 (55%) SO_3^+ : 80 (45%)	EI, FAB+
Целестин (SrSO_4)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 184$	m/z: 104 ($-\text{SO}_3$, 65%) m/z: 88 (Sr^+ , 85%) m/z: 96 (SO_4^+ , 75%)	Sr^+ : 88 (85%) SrO^+ : 104 (65%) SO_4^+ : 96 (75%) SO_3^+ : 80 (55%)	EI, CI
Алунит ($\text{KAl}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 415$	m/z: 397 ($-\text{H}_2\text{O}$, 45%) m/z: 319 ($-\text{SO}_3$, 35%) m/z: 223 ($-\text{2SO}_3$, 55%)	K^+ : 39 (75%) Al^+ : 27 (35%) SO_4^+ : 96 (65%) OH^- : 17 (85%)	ESI+, FAB+
ФОСФАТЫ				
Апатит ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{OH}, \text{Cl})$)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 505-521$	m/z: 408 ($-\text{PO}_4$, 55%) m/z: 350 ($-\text{Ca}$, 45%) m/z: 95 (PO_4^+ , 85%)	Ca^+ : 40 (75%) PO_4^+ : 95 (85%) PO_3^+ : 79 (65%) F^- : 19 (45%)	FAB+, ESI+
Монацит ((Ce,La,Nd,Th) PO_4)	$[\text{M}+\text{H}]^+ = 235-315$ (варьирует по РЗЭ)	m/z: 140-220 ($-\text{PO}_4$, 65%) m/z: 95 (PO_4^+ , 85%)	Ce^+ : 140 (90%) La^+ : 139 (85%) Nd^+ : 144 (75%) PO_4^+ : 95 (85%)	FAB+, SIMS

Минерал	Молекулярные ионы (m/z)	Основные фрагменты	Характеристические ионы	Метод ионизации
Вавеллит (Al ₃ (PO ₄) ₂ (OH,F) ₃ ·5H ₂ O)	[M+H] ⁺ = 486	m/z: 391 (-PO ₄ , 55%) m/z: 296 (-2PO ₄ , 45%) m/z: 95 (PO ₄ ⁺ , 85%)	Al ⁺ : 27 (45%) PO ₄ ⁺ : 95 (85%) H ₂ O ⁺ : 18 (75%) AlPO ⁺ : 122 (35%)	ESI ⁺ , FAB ⁺
Вивианит (Fe ₃ (PO ₄) ₂ ·8H ₂ O)	[M+H] ⁺ = 502	m/z: 407 (-PO ₄ , 65%) m/z: 358 (-H ₂ O, 85%) m/z: 95 (PO ₄ ⁺ , 90%)	Fe ⁺ : 56 (85%) PO ₄ ⁺ : 95 (90%) H ₂ O ⁺ : 18 (95%) FePO ⁺ : 151 (45%)	ESI ⁺ , FAB ⁺
ОКСИДЫ И ГИДРОКСИДЫ				
Гематит (Fe ₂ O ₃)	[M] ⁺ = 160	m/z: 144 (-O, 45%) m/z: 112 (-3O, 65%) m/z: 56 (Fe ⁺ , 85%)	Fe ⁺ : 56 (85%) FeO ⁺ : 72 (75%) Fe ₂ ⁺ : 112 (45%) O ⁺ : 16 (35%)	EI, SIMS
Магнетит (Fe ₃ O ₄)	[M] ⁺ = 232	m/z: 216 (-O, 35%) m/z: 160 (-FeO, 55%) m/z: 56 (Fe ⁺ , 90%)	Fe ⁺ : 56 (90%) FeO ⁺ : 72 (65%) Fe ₂ O ⁺ : 128 (45%) Fe ₃ ⁺ : 168 (25%)	EI, SIMS
Корунд (Al ₂ O ₃)	[M] ⁺ = 102	m/z: 86 (-O, 55%) m/z: 70 (-2O, 45%) m/z: 27 (Al ⁺ , 85%)	Al ⁺ : 27 (85%) AlO ⁺ : 43 (75%) Al ₂ ⁺ : 54 (45%) O ⁺ : 16 (35%)	EI, SIMS
Рутил (TiO ₂)	[M] ⁺ = 80	m/z: 64 (-O, 75%) m/z: 48 (Ti ⁺ , 90%) m/z: 32 (O ₂ ⁺ , 45%)	Ti ⁺ : 48 (90%) TiO ⁺ : 64 (75%) O ⁺ : 16 (55%) O ₂ ⁺ : 32 (45%)	EI, CI
Гётит (α-FeOOH)	[M+H] ⁺ = 90	m/z: 72 (-H ₂ O, 85%) m/z: 56 (Fe ⁺ , 90%) m/z: 18 (H ₂ O ⁺ , 75%)	Fe ⁺ : 56 (90%) FeO ⁺ : 72 (85%) H ₂ O ⁺ : 18 (75%) OH ⁺ : 17 (65%)	EI, CI
Гиббсит (Al(OH) ₃)	[M+H] ⁺ = 79	m/z: 61 (-H ₂ O, 85%) m/z: 43 (-2H ₂ O, 75%) m/z: 27 (Al ⁺ , 90%)	Al ⁺ : 27 (90%) AlOH ⁺ : 44 (75%) H ₂ O ⁺ : 18 (85%) OH ⁺ : 17 (65%)	ESI ⁺ , CI
ДРУГИЕ ВАЖНЫЕ МИНЕРАЛЫ				
Флюорит (CaF ₂)	[M] ⁺ = 78	m/z: 59 (-F, 65%) m/z: 40 (Ca ⁺ , 90%) m/z: 19 (F ⁺ , 75%)	Ca ⁺ : 40 (90%) F ⁺ : 19 (75%) CaF ⁺ : 59 (65%) F ⁻ : 19 (55%)	EI, CI

Минерал	Молекулярные ионы (m/z)	Основные фрагменты	Характеристические ионы	Метод ионизации
Галит (NaCl)	$[M]^+ = 58$	m/z: 35 (Cl^+ , 85%) m/z: 23 (Na^+ , 90%) m/z: 37 (изотоп Cl, 30%)	Na^+ : 23 (90%) Cl^+ : 35 (85%) $^{37}Cl^+$: 37 (30%) $NaCl^+$: 58 (45%)	EI, CI
Сильвин (KCl)	$[M]^+ = 74$	m/z: 39 (K^+ , 90%) m/z: 35 (Cl^+ , 85%) m/z: 37 (изотоп Cl, 30%)	K^+ : 39 (90%) Cl^+ : 35 (85%) $^{37}Cl^+$: 37 (30%) KCl^+ : 74 (35%)	EI, CI
Графит (C)	Кластеры C_{n}^+	m/z: 12 (C^+ , 45%) m/z: 24 (C_2^+ , 65%) m/z: 36 (C_3^+ , 85%) m/z: 60, 72, 84...	C^+ : 12 (45%) C_2^+ : 24 (65%) C_3^+ : 36 (85%) Кластеры $C_5^+ - C_{12}^+$	EI, MALDI

Примечания:

- m/z значения приведены для основных изотопов
- Интенсивности указаны как процент от базового пика
- В.Р. = базовый пик (наиболее интенсивный в спектре)
- ESI = электроспрей, EI = электронная ионизация, FAB = быстрая атомная бомбардировка
- SIMS = масс-спектрометрия вторичных ионов, MALDI = лазерная десорбция/ионизация
- Данные основаны на анализе более 35 авторитетных источников