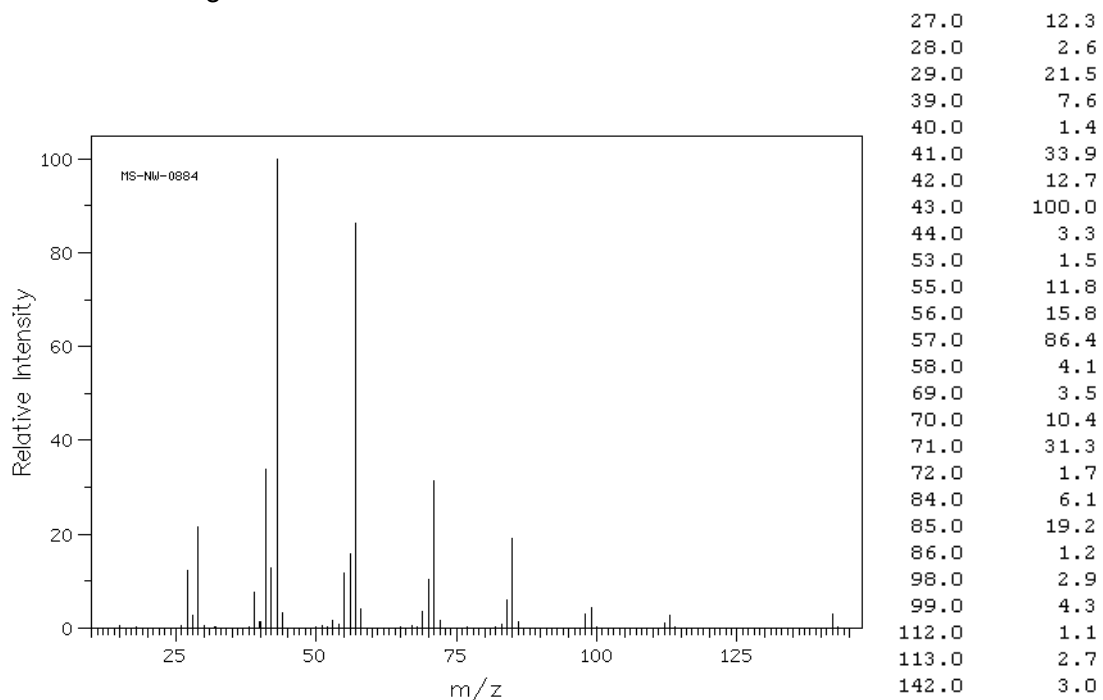


Gymnasium Kirchenfeld

Thema: Übungen zu MS-Spektrenidentifizierung

Übung 1

Eine Flasche mit unleserlichem Etikett wird aufgefunden. Es ist sehr wahrscheinlich, dass es sich um einen Kohlenwasserstoff (Alkan) handelt. Versuchen Sie, anhand des MS-Spektrums eine eindeutige Stoff-Zuordnung vorzunehmen.



- (1) Geben Sie für folgende Fragmente einen Strukturvorschlag an: m/z 142 ; 113 ; 57 ; sowie 43.
- (2) Überlegen Sie, was der Grund sein könnte, dass das Fragment m/z 43 die höchste Intensität zeigt.

Übung 2

Gegeben sind folgende MS-Peakdaten (in Klammern der %-Wert der Signalhöhe/-intensität):

Substanz 1: m/z 86 (25%) ; 71 (18%); 58 (20%); 43 (100%)

Substanz 2: m/z 86 (25%) ; 57 (100%); 29 (70%)

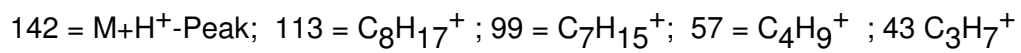
Als Substanzen kommen nur folgende Verbindungen in Frage: Pentan-2-on sowie Pentan 3-on.

Ordnen Sie die entsprechende Verbindungen zu und begründen Sie Ihre Auswahl.

Tip: Beginnen Sie mit dem Aufzeichnen der jeweiligen Lewis-Strukturformel.

Lösung für Übung 1

(1) Die Substanz ist Decan



(2) dieses Fragment scheint am stabilsten zu sein und durchläuft nicht noch weitere Fragmentierungen

Lösung für Übung 2

Substanz 1: Pentan-2-on

Substanz 2: Pentan-3-on