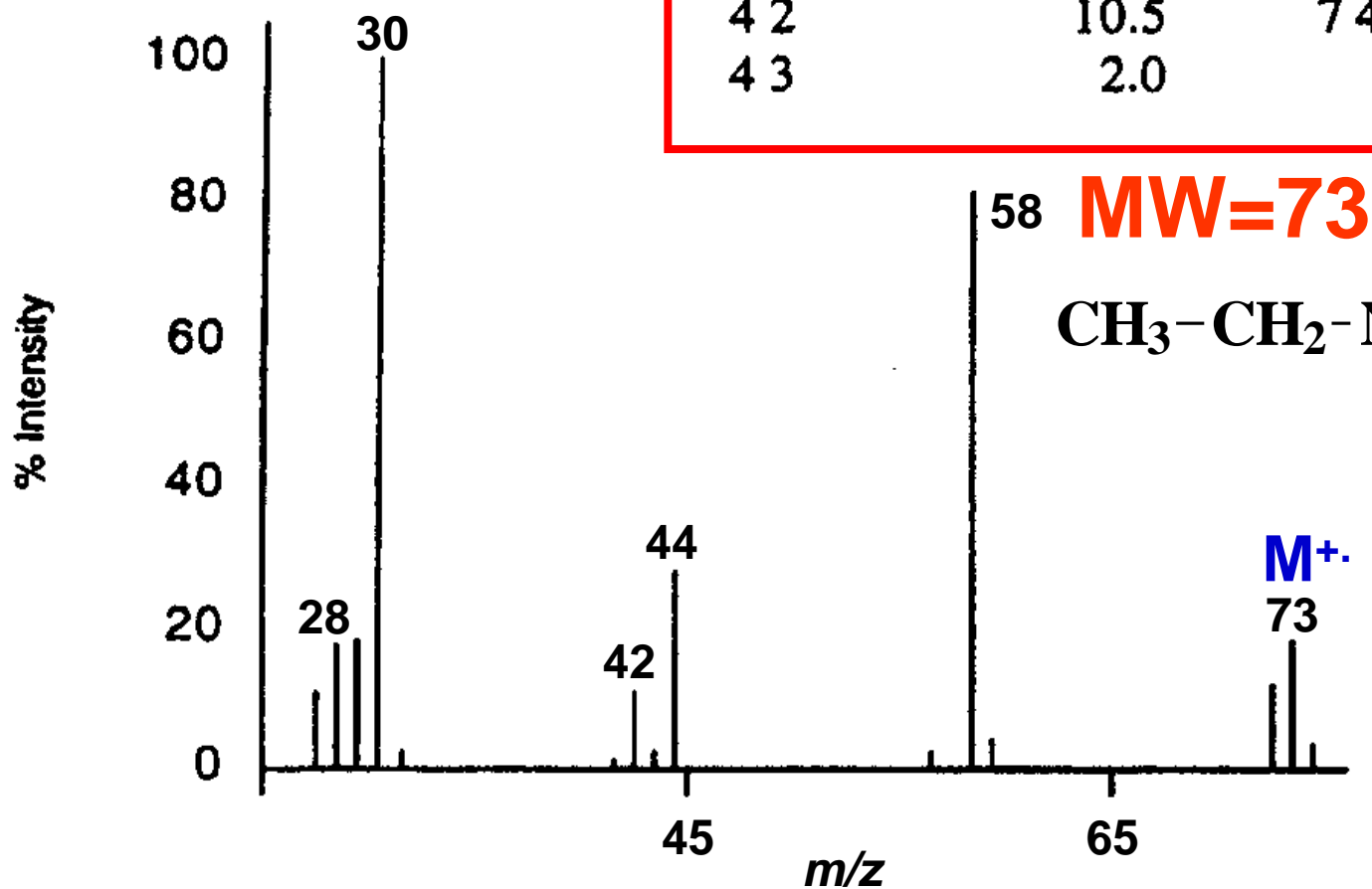


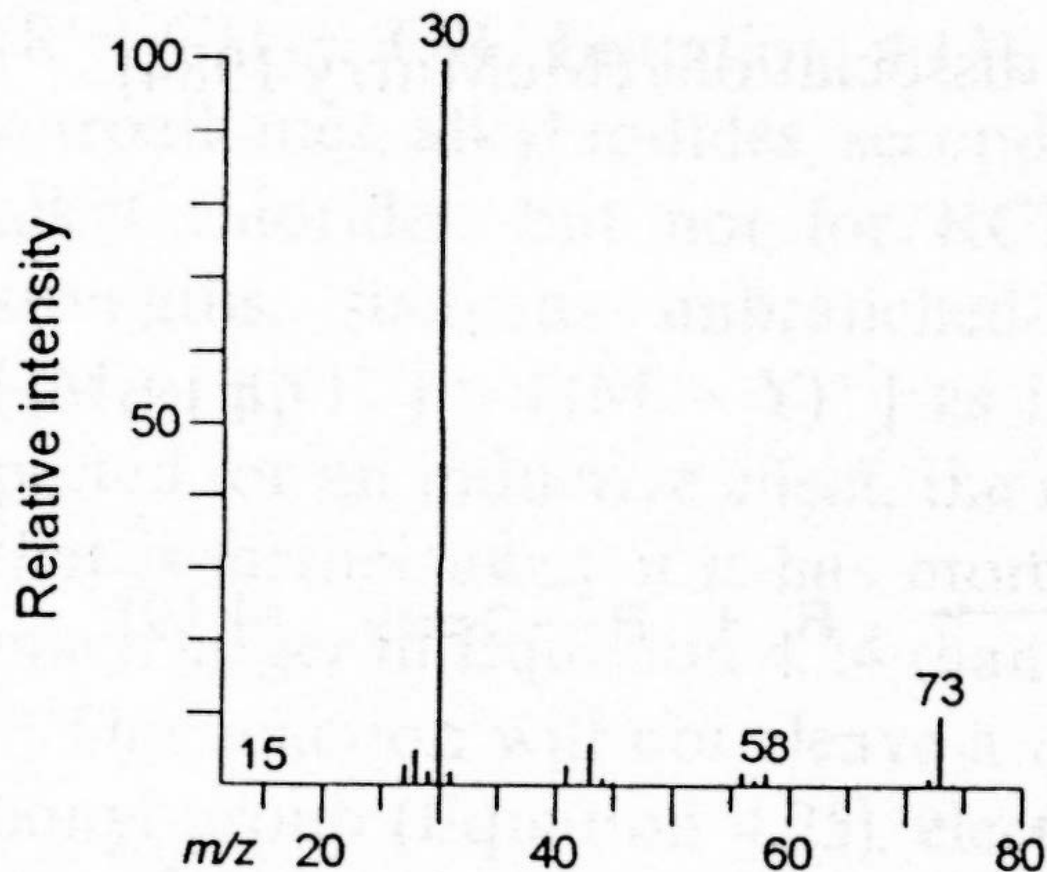
No. 21

<u><i>m/z</i></u>	<u>%</u>	<u><i>m/z</i></u>	<u>%</u>
27	10.5	44	27.6
28	17.1	56	2.0
29	17.8	58	80.9
30	100.0	59	4.0
31	2.0	72	11.8
41	1.3	73	17.8
42	10.5	74	3.3
43	2.0		



Spektrum č. 21B

<u>m/z</u>	<u>Int.</u>
15	0.5
27	2.7
28	5.1
29	2.2
30	100.
31	2.2
39	0.2
40	0.5
41	2.8
42	0.4
43	5.8
44	1.3
45	1.6
56	2.1
57	1.1
58	1.9
59	0.1
71	0.0
72	1.3
73	10.
74	0.5



Spektrum č. 21B - interpretace

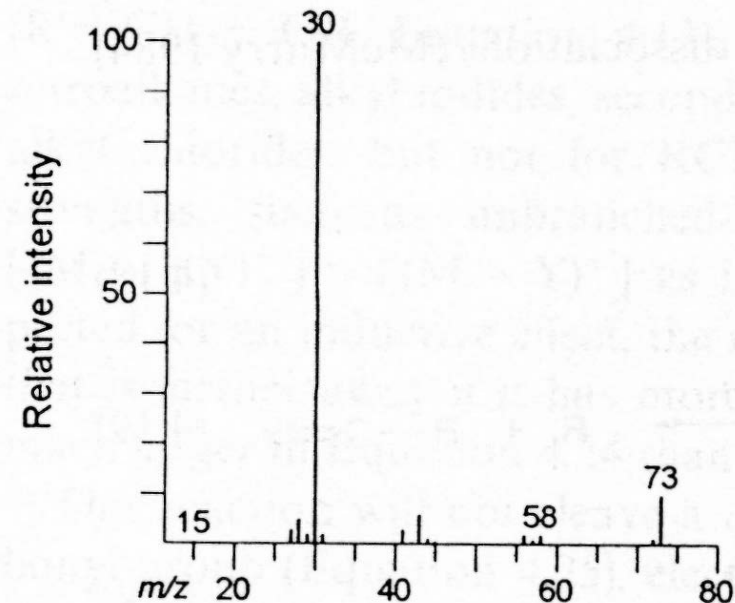
1/ $M_R = 73$. Podmínky platné pro molekulární ion $M^{+\bullet}$ jsou splněny: jedná se o ion s nevyšší hodnotou m/z ve spektru, jsou pozorovány logické ztráty z molekulárního iontu (15, 29) a jde o ion s lichým počtem elektronů. Molekulární ion má lichou hmotu a všechny ostatní důležité ionty ve spektru mají sudou hmotnost a tedy sudý počet elektronů za podmínky, že všechny diskutované ionty ve spektru mají lichý počet dusíků, tedy 1.

2/ Lichá $M_R =$ lichý počet dusíků v molekule, nejspíše jeden kvůli nízké M_R .

3/ Alifatická série pozorována, aromatika vyloučena kvůli molekulové hmotnosti, $M+2$ prvky nejsou přítomny.

4/ Na základě pozorované alifatické série lišící se o 14 jednotek lze očekávat alkyl, při výpočtu počtu míst nenasycenosti vychází alkylamin sumárního vzorce $C_4H_{11}N$.

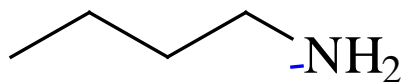
5/ Rozlišení mezi polohovými izomery C_4 aminů – celkem 8 potenciálních možností.



Spektrum č. 21B – interpretace pokračování

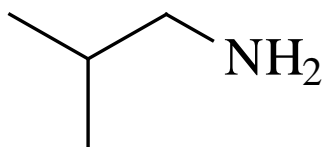
8 potenciálních struktur aminů $C_4H_{11}N$

A



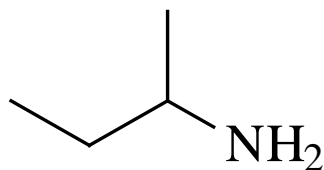
butan-1-amin

B



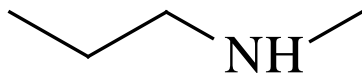
2-methylpropan-1-amin

C



butan-2-amin

D



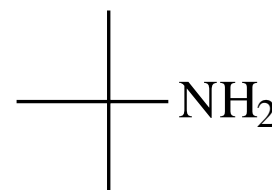
N-methylpropan-1-amin

E



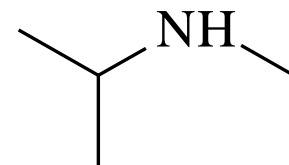
diethylamin

F



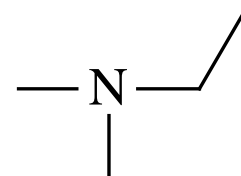
2-methylpropan-2-amin

G



N-methylpropan-2-amin

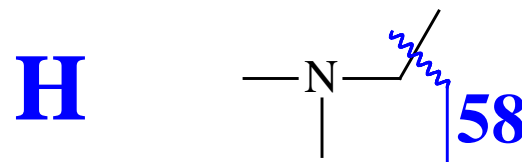
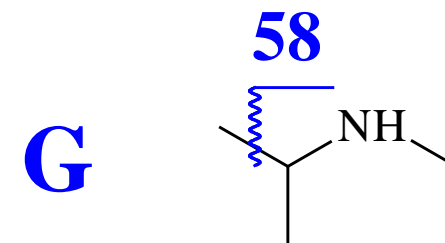
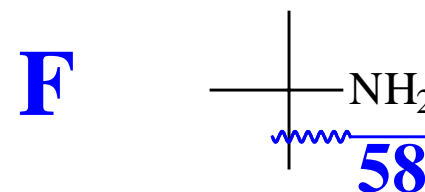
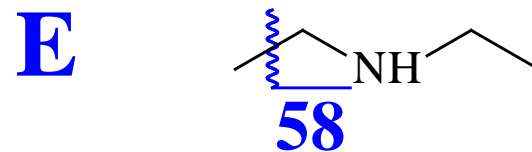
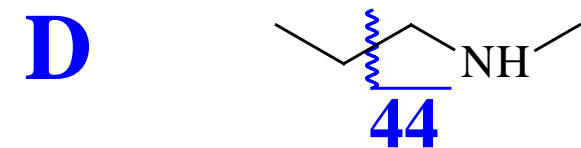
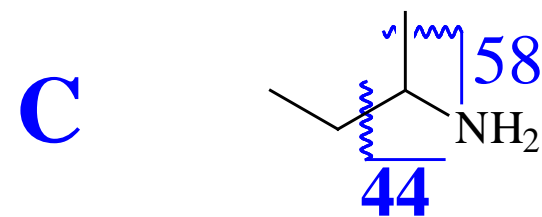
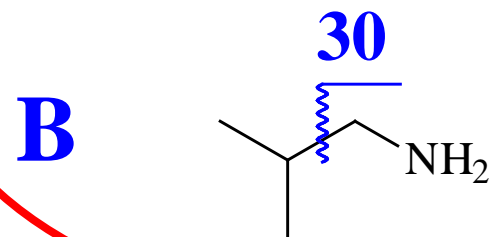
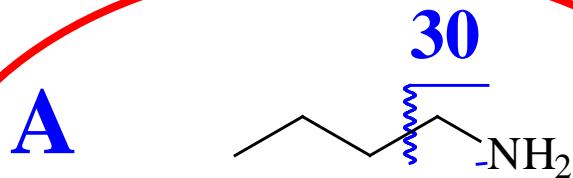
H



N,N-dimethylethanamin

Spektrum č. 21B – interpretace pokračování

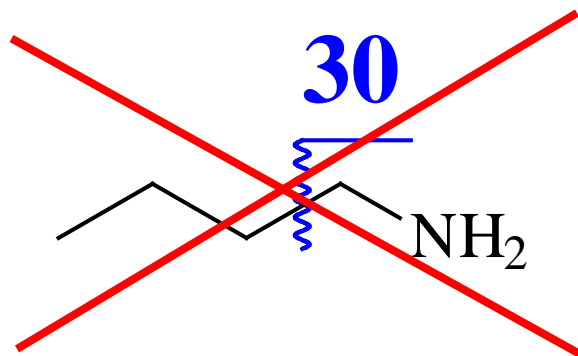
Produkty α -štěpení vedou k základním píkům spektra



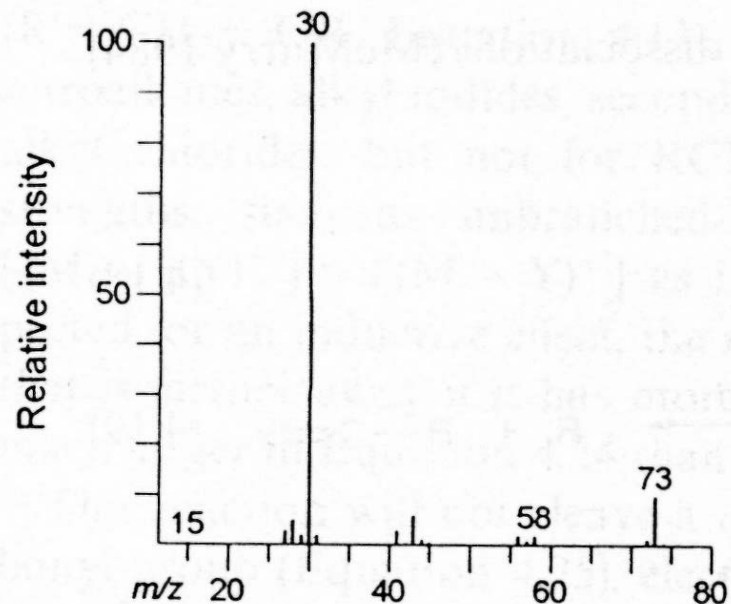
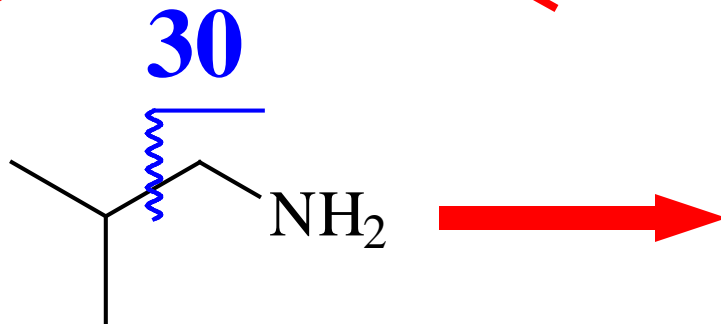
Spektrum č. 21B – interpretace pokračování

Rozlišení mezi strukturami A a B

A



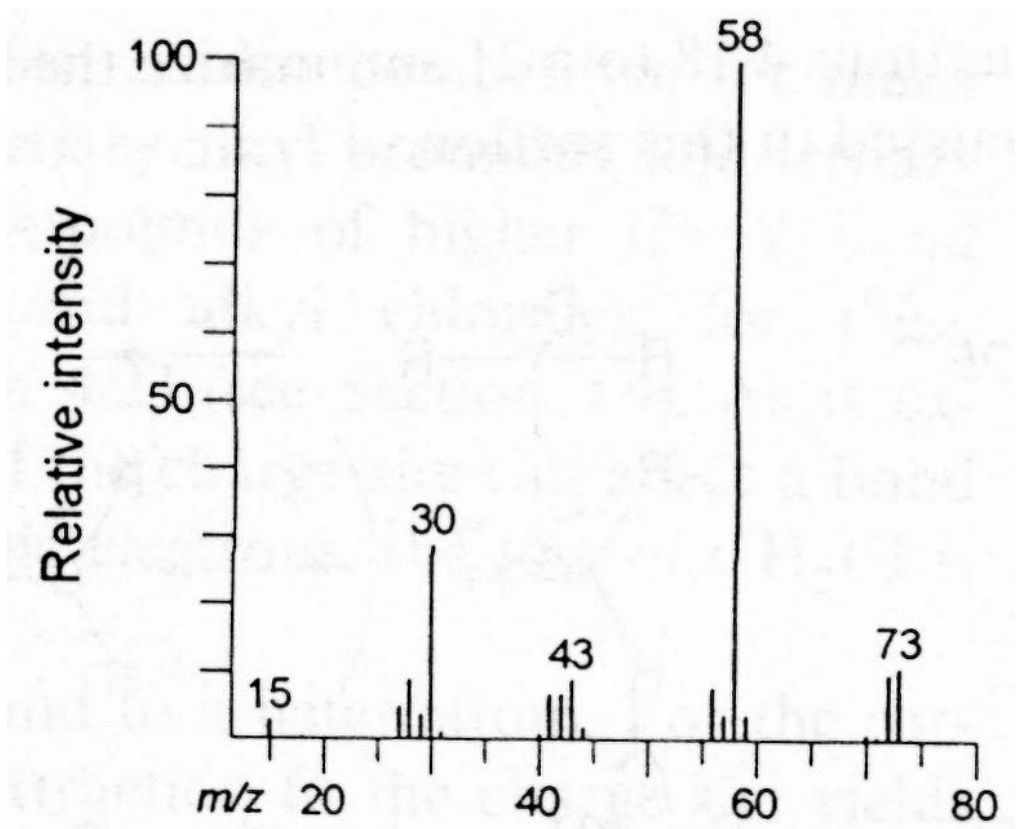
B



**intenzivnější ion
[M-CH₃]⁺ oproti A**

Intenzita [M-CH₃]⁺ exp.: A (0.3%) vs. B (1.9%)

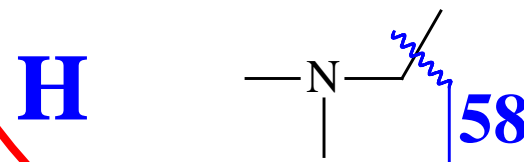
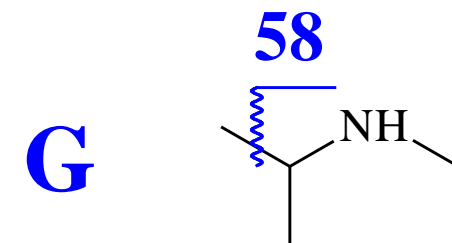
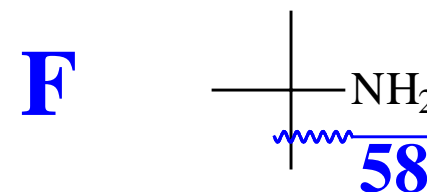
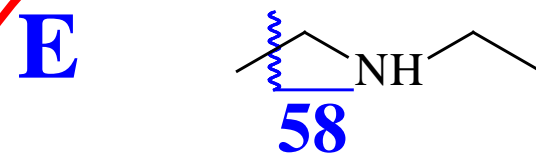
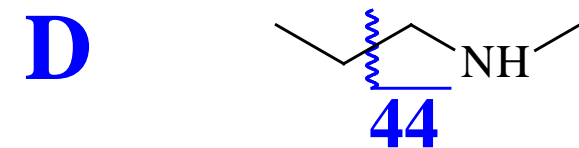
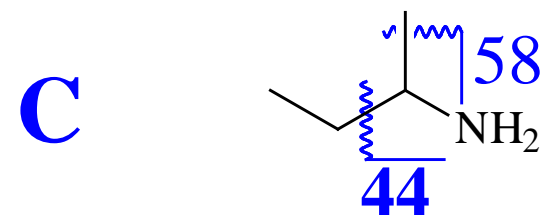
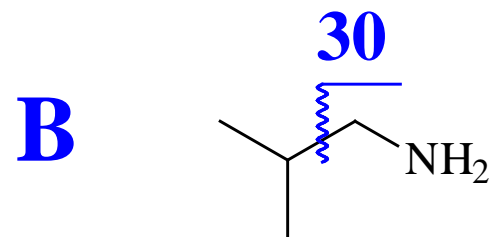
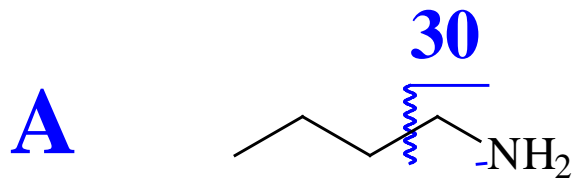
Spektrum č. 21C



<u>m/z</u>	<u>Int</u>
15	3.1
27	4.6
28	9.1
29	3.6
30	29.
31	1.3
39	4.2
40	1.1
41	7.4
42	7.4
43	8.8
44	1.6
45	0.2
56	8.1
57	4.2
58	100.
59	3.9
71	0.6
72	9.6
73	11.
74	-1.3

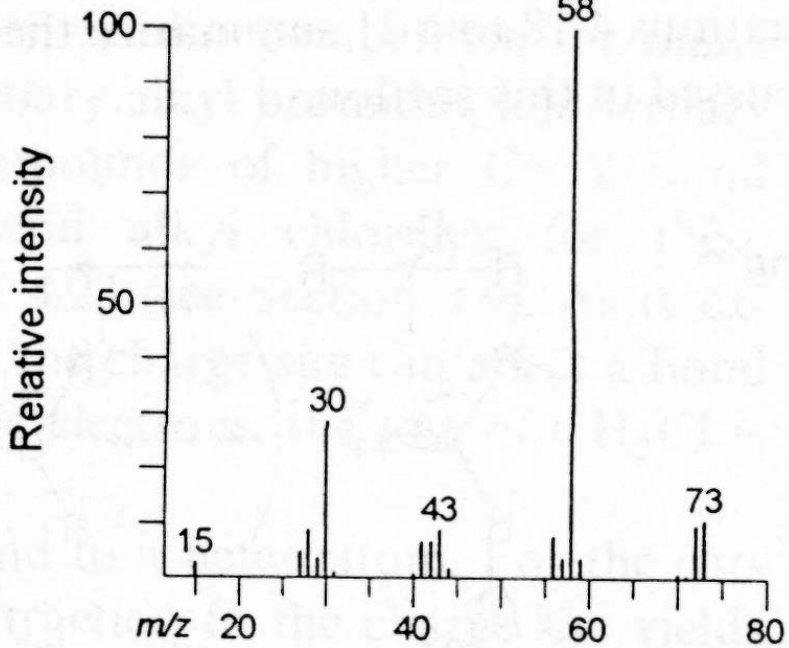
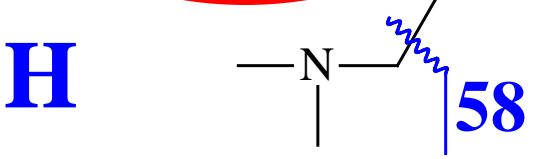
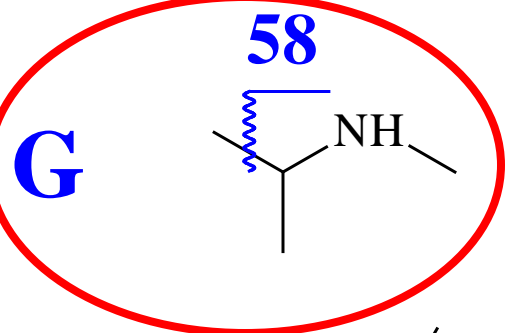
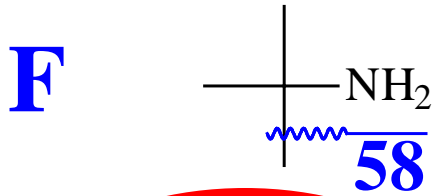
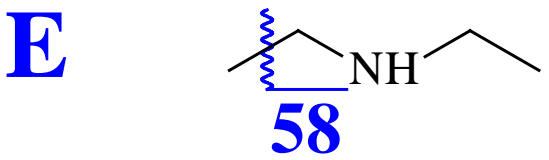
Spektrum č. 21C - interpretace

Produkty α -štěpení vedou k základním píkům spektra



Spektrum č. 21C - interpretac

Rozlišení mezi E, F, G, H



Chybí molekulární ion, vysoká intenzita 58 (terciální ion)

Zvýšená intenzita $[CH_3CHCH_3]^+$ - sekundární ion, ve srovnání s E výraznější stabilizace $[M-CH_3]^+$ (sekundární ion pro G oproti E)

Nízká intenzita m/z 30 (terciální amin), vyšší intenzita $[M-CH_2=CH_2]^+$ (m/z 44)