

SPECTROMÉTRIE DE MASSE (COURS AVEC DIAPOSITIVES)

FICHE N° 454

Période de fabrication : 1975-1999

Fabricant : Université de Poitier ; Université de Poitier ; Université de Poitier

Domaines : Chimie

Sous-domaines : Chimie analytique

Organisme : Fédération des Sciences Chimiques de Marseille

Ville : Marseille

Modèle :

Matériaux :

Description

Présentation de 12 diapositives accompagnées de fiches explicatives. Support matériel à l'enseignement Universitaire de chimie (fiches exercices et diapositives) sur la spectrométrie de masse. La spectrométrie de masse est une technique physique d'analyse permettant de détecter et d'identifier des molécules d'intérêt par mesure de leur masse, et de caractériser leur structure chimique. Programme des cours du premier cycle par J.M Dumas (Université de Poitier).

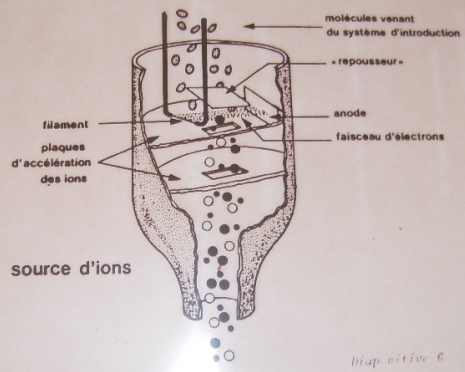
Utilisation

Les objets se trouvent dans une salle du laboratoire de chimie.

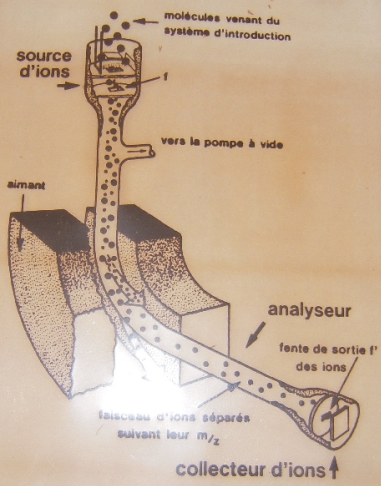
PRÉSERVER
SAUVEGARDER
VALORISER







Diapositive 6



Diapositive 7

- 7- - la faible abondance du pic isotopique (P + 2) élimine la présence d'atome S, Cl ou Br.
 - le pic moléculaire correspondant à une masse impaire, ce composé contient un nombre impair d'atome d'azote.

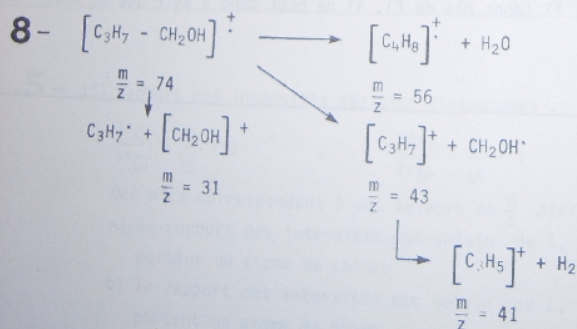
Nous choisirions donc, dans la table correspondante (voir "Handbook" 1er cycle), parmi les formules brutes de masse 73, celles qui possèdent un nombre impair d'atomes d'azote.

formules	P + 1	P + 2
C_3H_7NO	3,77	0,25
$C_4H_{11}N$	4,88	0,10

Valeurs à comparer à celle calculées sur le spectre.

$\frac{m}{z}$	intensité isotopique
73 (P)	100
74 (P + 1)	5,5
75 (P + 2)	0,15

Des 2 formules brutes possibles $C_4H_{11}N$ semble plus probable.



- 7- - la faible abondance du pic isotopique (P + 2) élimine la présence d'atome S, Cl ou Br.
 - le pic moléculaire correspondant à une masse impaire, ce composé contient un nombre impair d'atome d'azote.

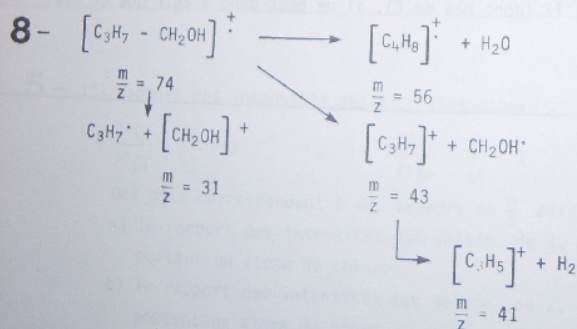
Nous choisirions donc, dans la table correspondante (voir "Handbook" 1er cycle), parmi les formules brutes de masse 73, celles qui possèdent un nombre impair d'atomes d'azote.

formules	P + 1	P + 2
C_3H_7NO	3,77	0,25
$C_4H_{11}N$	4,88	0,10

Valeurs à comparer à celle calculées sur le spectre.

$\frac{m}{z}$	intensité isotopique
73 (P)	100
74 (P + 1)	5,5
75 (P + 2)	0,15

Des 2 formules brutes possibles $C_4H_{11}N$ semble plus probable.



abondance naturelle des isotopes de quelques éléments

Table 2

Cette table est extraite du document de travail "Handbook" 1er cycle, diffusé par le Centre Universitaire de Diffusion de Nouveaux Médias d'Enseignement (CUDNME)

Le pourcentage d'abondance naturelle d'un isotope i d'un élément est défini par $\frac{n_i}{\sum n_i} \times 100$

n_i désigne le nombre d'atomes de l'isotope i présents au sein d'un mélange naturel de tous les isotopes du même élément (le nombre total d'atomes égal, dans ce mélange, à $n_1 + n_2 + \dots + n_i$ soit $\sum n_i$).

éléments	isotopes	pourcentages	éléments	isotopes	pourcentages
hydrogène	1_1^1H	99,985	fluor	19_9^{19}F	100
	2_1^2H	0,015		20_{10}^{20}Ne	90,92
hélium	3_2^3He	0,0001	néon	21_{10}^{21}Ne	0,257
	4_2^4He	~100		22_{10}^{22}Ne	8,82
lithium	6_3^6Li	7,42	sodium	23_{11}^{23}Na	100
	7_3^7Li	92,58		24_{12}^{24}Mg	78,70
béryllium	9_4^9Be	100	magnésium	25_{12}^{25}Mg	10,13
				26_{12}^{26}Mg	11,17
bore	10_5^{10}B	19,78	aluminium	27_{13}^{27}Al	100
	11_5^{11}B	80,22		28_{14}^{28}Si	92,21
carbone	12_6^{12}C	98,93	silicium	29_{14}^{29}Si	4,70
	13_6^{13}C	1,07		30_{14}^{30}Si	3,09
azote	14_7^{14}N	99,62	phosphore	31_{15}^{31}P	100
	15_7^{15}N	0,38		32_{16}^{32}S	95,0
oxygène	16_8^{16}O	99,759	soufre	33_{16}^{33}S	0,76
	17_8^{17}O	0,037		34_{16}^{34}S	4,22
	18_8^{18}O	0,204		36_{16}^{36}S	0,014

"un cas concret"

**recherche de la formule brute
et de la structure
d'un composé inconnu**

Cette table est extraite du document de travail "Handbook" 1er cycle, diffusé par le Centre Universitaire de Diffusion de Nouveaux Médians d'Enseignement (CUDNME).

Intensités relatives (au pic P correspondant à la masse M) des pics isotopiques P+1 et P+2 (masses M+1 et M+2) pour diverses combinaisons de carbone, d'hydrogène, d'azote et d'oxygène (fragments ou molécules de formule $C_W H_X N_Y O_Z$)*

Par convention la valeur 100 est ici donnée à l'intensité du pic P. Les intensités des pics isotopiques P+1 et P+2 sont calculées par rapport à l'intensité de ce pic P.

M	$C_W H_X N_Y O_Z$	P+1	P+2	P+1	P+2	P+1	P+2	P+1	P+2		
12	C	1.08	CH ₂ N	1.49	40	1.84	0.01	D C ₂ H ₄ O	2.30	0.22	
			D C ₂ H ₄	2.23	0.01	CN ₂		C ₂ H ₄ N	2.66	0.02	
13	CH	1.10	29			C ₂ O	0.21				
			N ₂ H	0.76		C ₂ H ₂ N	0.02	47			
			CHO	1.14	0.20	D C ₂ H ₄	3.31	0.04	CH ₂ O ₂	1.21	0.40
14	N	0.38	CH ₂ N	1.51		41			D CH ₂ N ₂ O	1.58	0.21
	CH ₂	1.11	C ₂ H ₂	2.24	0.01	CHN ₂	1.85		CH ₂ N ₂	1.96	0.01
						C ₂ HCO	2.22	0.21	C ₂ H ₂ O	2.31	0.22
15	NH	0.40	30			D C ₂ H ₂ N	0.02				
	CH ₃	1.13	D NO	0.42	0.20	C ₂ H ₂	3.32	0.04	48		
			N ₂ H ₂	0.79					CH ₄ O ₂	1.22	0.40
			D CH ₂ O	1.15	0.20	42			C ₄	4.32	0.07
			CH ₂ N	1.53	0.01	D CH ₂ N ₂ O	1.50	0.21			
			D C ₂ H ₄	2.26	0.01	C ₂ H ₂ O	1.88	0.01	CH ₂ O ₂	1.74	0.40
16	O	0.04	31			D C ₂ H ₂ O	2.23	0.21	C ₂ H ₂	4.34	0.07
	NH ₂	0.41	NOH	0.44	0.20	D C ₂ H ₂	2.61	0.02			
	D CH ₄	1.15	N ₂ H ₂	0.81		D C ₂ H ₄	3.34	0.04	50		
			CH ₂ O	1.17	0.20	43			C ₄ H ₂	4.34	0.07
17	OH	0.06	D CH ₂ N	1.54		D CHNO	1.52	0.21	51		
	D NH ₂	0.43				CH ₂ N ₂	1.89	0.01	C ₄ H ₂	4.37	0.07
	CH ₃	1.16	32			D C ₂ H ₂ O	2.25	0.21			
			O ₂	0.08	0.40	D C ₂ H ₂ N	2.62	0.02	52		
18	D H ₂ O	0.07	NOH ₂	0.45	0.20	C ₂ H ₂	3.35	0.04	D C ₂ N ₂	2.92	0.03
	NH ₄	0.45	N ₂ H ₄	0.83					C ₂ H ₂ N	3.66	0.05
			D CH ₂ O	1.16	0.20	44			D C ₂ H ₄	4.39	0.07
						D N ₂ O	0.80	0.20			
19	H ₂ O	0.09	33			D CO ₂	1.16	0.40			
			NOH ₂	0.47	0.20	CH ₂ NO	1.53	0.21	53		
			N ₂ H ₄	0.84		D CH ₂ N ₂	1.91	0.01	C ₂ H ₂ N ₂	2.94	0.03
			CH ₂ O	1.12		D C ₂ H ₂ O	2.26	0.21	C ₂ HO	3.30	0.24
24	C ₂	2.16	34			C ₂ H ₂ N	2.64	0.02	D C ₂ H ₂ N	3.67	0.05
		0.01	N ₂ H ₄	0.86		D C ₂ H ₄	3.37	0.04	C ₄ H ₂	4.40	0.07
35	C ₂ H	2.18	36			45			54		
		0.01	C ₂	3.24	0.04	HN ₂ O	0.82	0.20	C ₂ NO	2.58	0.22
						CH ₂ O	1.18	0.40	C ₂ H ₂ N ₂	2.96	0.03
26	CN	1.46	37			D CH ₂ NO	1.55	0.21	D C ₂ HO	3.31	0.24
	D C ₂ H ₂	2.19	C ₂ H	3.26	0.04	CH ₂ N	1.92	0.01	C ₂ H ₂ N	3.69	0.05
						C ₂ H ₂ O	2.28	0.21	D C ₂ H ₄	4.42	0.07
						D C ₂ H ₂ N	2.66	0.02			
27	D CH ₂	1.48	38			46			55		
	C ₂ H ₃	2.21	C ₂ N	2.54	0.02	NO	0.46	0.40	C ₂ HNO	2.60	0.22
		0.01	C ₂ H ₂	3.27	0.04	D C ₂ H ₂ O	0.83	0.20	C ₂ H ₂ N ₂	2.97	0.03
						N ₂ H ₂	1.19	0.40	C ₂ HO	3.33	0.24
28	D N ₂	0.76	39			CH ₂ NO	1.57	0.21	D C ₂ H ₂	3.70	0.05
	D CO	1.12	C ₂ H ₂ N	2.56	0.02	D C ₂ H ₂ N ₂	1.94	0.01	C ₂ H ₂	4.43	0.07
		0.20	C ₂ H ₂	3.29	0.04						

* Les combinaisons portant le signe (>) correspondent à des molécules.

** d'après : "Identification spectrométrique des composés organiques", Robert M. SILVERSTEIN et G. GLAYTON BASSLER, Masson, s.a., Editeurs, Paris, 1968, p. 38-46.

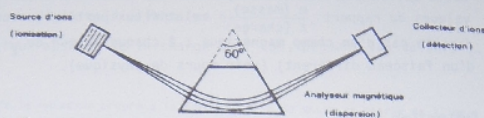
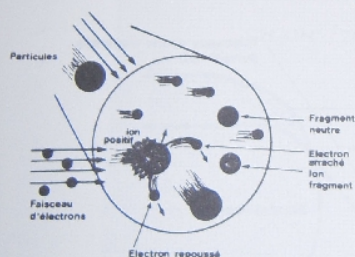


Schéma d'un spectromètre de masse simple à aimant en secteur à 60°.

Après introduction dans la "Chambre d'ionisation" des particules chimiques (atomes ou molécules) à étudier, à l'état gazeux : diapositive 2

1-1 Ionisation



diapositive 3

Bombardement de ces particules par un faisceau d'électrons accélérés (d'énergie suffisante : supérieure au premier potentiel d'ionisation* de la particule P ; en routine, énergie fixée "arbitrairement" à 70 eV).

Ce bombardement entraîne, en particulier, l'extraction d'un ou plusieurs électrons (arrachés) aux particules, d'où l'apparition possible de nouvelles particules chargées (ions).

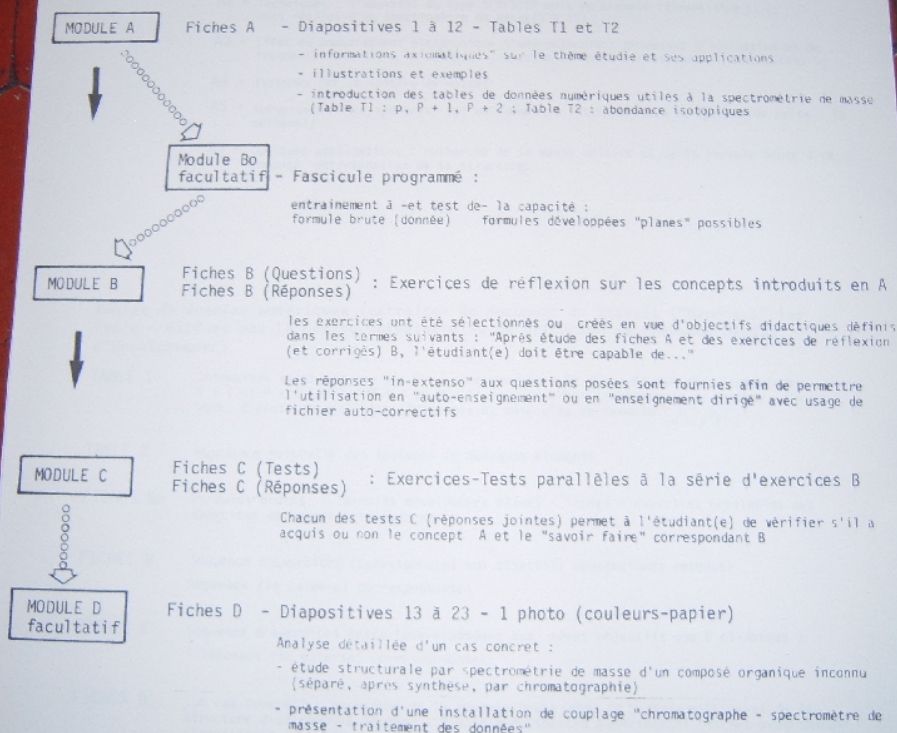
Les ions ainsi formés sont généralement instables. Une certaine proportion d'entre eux se fragmentent aussitôt formés, d'où l'apparition de nouvelles particules ou fragments chargés (ions) ou non (radicaux ou molécules neutres).

N.B. Ces derniers ions étant eux-mêmes instables, un certain nombre d'entre eux, donneront naissance, à une nouvelle fragmentation.

* Premier potentiel d'ionisation : énergie nécessaire pour arracher un électron à la particule P et obtenir le cation correspondant.

SPECTROMÉTRIE DE MASSE

ELEMENTS CONSTITUANT LE DOCUMENT DE TRAVAIL



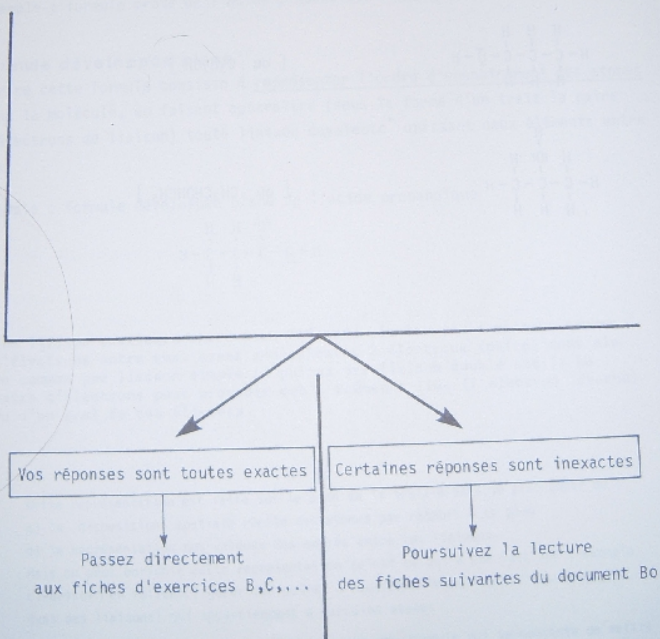
formules brutes formules développées (planes) Bo

chimie moléculaire

test préalable

Après séparation du produit final (moléculaire) d'une réaction chimique, on effectue son analyse de composition. Elle permet de lui attribuer la formule brute C_3H_8O .
Sauriez-vous écrire toutes les formules développées planes compatibles avec cette formule ?

Répondez ci-dessous et contrôlez l'exactitude totale de vos réponses en les comparant au corrigé figurant au verso de cette feuille.



Pour nous citer :

Base de la Mission nationale de sauvegarde et de valorisation du patrimoine scientifique et technique contemporain, PATSTEC, Spectrométrie de masse (cours avec diapositives)
(Université de Poitiers ; Université de Poitiers ; Université de Poitiers),
<https://www.patstec.fr/ressources/objets/detail?id=24599>, consulté le 2026-07-28