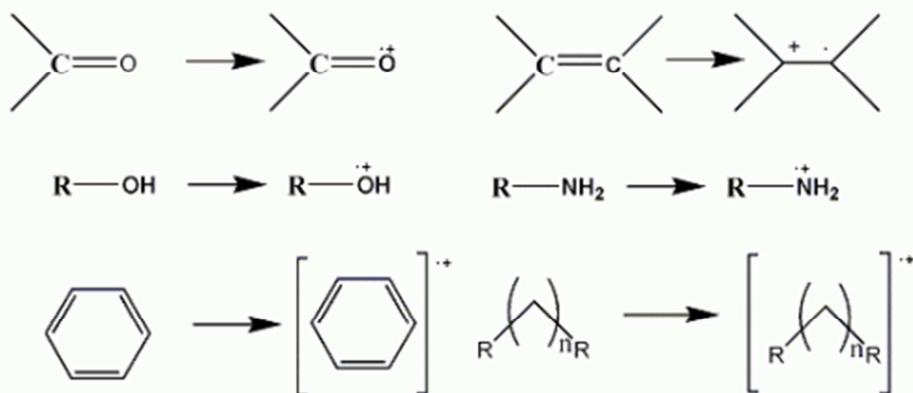


**Elucidación estructural: espectrometría de masas**  
**(Propiedades del ión molecular)**

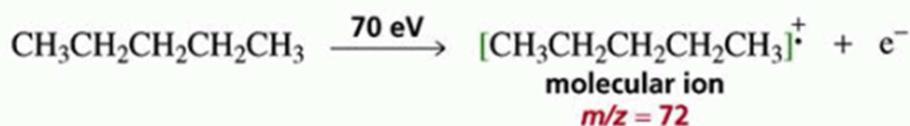
Como se ha indicado anteriormente cuando se introduce una molécula en la cámara de ionización y se bombardea con una corriente de electrones esta sufre la ionización, es decir pierde un electrón dando lugar a la formación de un ión-radical:



Lógicamente, el electrón que se pierde debe ser el que tenga un menor potencial de ionización; así se obtendrán unas estructuras como las que se muestran:



Así por ejemplo:



Entre otras el ión molecular debe poseer las siguientes características:

- Debe ser el ión con mayor masa de los que aparecen en el espectro.
- Debe contener todos los elementos presentes en sus fragmentos.
- Debe corresponder al ión con el potencial de ionización más bajo.
- Su relación m/e debe ser par cuando no posee Nitrógeno o posee un número par de él; por la misma razón debe ser impar cuando posee un número impar de átomos de Nitrógeno.
- Las diferencias de masa entre dicho ión molecular y los fragmentos que aparecen en el espectro deben ser químicamente lógicas.
- Su abundancia relativa depende en gran medida de la naturaleza química del producto, así existe una serie que relaciona, de una manera cualitativa y aproximada, la intensidad de dicho ión con el

grupo principal presente en la molécula y de mayor a menor sería:  
 Compuestos aromáticos > olefinas conjugadas > compuestos alicíclicos > sulfuros > hidrocarburos lineales > mercaptanos > cetonas > aminas > ésteres > éteres > ácidos carboxílicos > hidrocarburos ramificados > alcoholes

- Tal y como se indica en el [tutorial para la resolución de problemas](#) se puede utilizar el ión molecular para la determinación de la fórmula molecular de la sustancia.
- Cuando se obtiene un espectro de masas de alta resolución (HR-EM) es posible distinguir entre fórmulas de igual masa, debido a que los elementos tienen un peso atómico que permite distinguir entre ellas. En la siguiente tabla se muestran algunas diferencias de masas de combinaciones atómicas para el pico de masa 43.

Combinación atómica	Masa exacta
CHNO	43.0058
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O	43.0184
CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	43.0269
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N	43.0421
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	43.0547

- En esta siguiente tabla se muestra la causa de tales diferencias, que no es otra que la masa exacta de los elementos debido a la distribución isotópica de los mismos.

Elemento	Peso Atómico	Isótopos	Abundancia relativa (%)	Masa atómica
Hidrógeno	1.00794	<sup>1</sup> H	100	1.00783
		<sup>2</sup> H	0.015	2.01410
Carbono	12.01115	<sup>12</sup> C	100	12.00000
		<sup>13</sup> C	1.12	13.00336
Nitrógeno	14.0067	<sup>14</sup> N	100	14.0031
		<sup>15</sup> N	0.366	15.0001
Oxígeno	15.9994	<sup>16</sup> O	100	15.9949
		<sup>17</sup> O	0.037	16.9991
		<sup>18</sup> O	0.240	17.9992
Fluor	18.9984	<sup>19</sup> F	100	18.9984
Silicio	28.0855	<sup>28</sup> Si	100	27.9769

		<sup>29</sup> Si	5.110	28.97.65
		<sup>30</sup> Si	3.38.5	29.9738
Fósforo	30.9738	<sup>31</sup> P	100	30.9738
Azufre	32.066	<sup>32</sup> S	100	31.9721
		<sup>33</sup> S	0.789	32.9715
		<sup>34</sup> S	4.438	33.9669
		<sup>36</sup> S	0.018	35.9677
Cloro	35.4527	<sup>35</sup> Cl	100	34.9689
		<sup>37</sup> Cl	32.399	36.9659
Bromo	79.9094	<sup>79</sup> Br	100	78.9183
		<sup>81</sup> Br	97.940	80.9163
Iodo	126.9045	<sup>127</sup> I	100	126.9045