

## Масс-спектры в SDBS

В базе данных SDBS приемы работы с масс-спектрами принципиально не отличаются от приемов работы с ЯМР-спектрами.

Поисковая программа позволяет обнаруживать масс-спектр заданного вещества, а также идентифицировать вещество по известному спектру.

Для поиска вещества по известному масс-спектру на поисковом бланке имеется соответствующая графа:

### MS Peaks and intensities:

Mass and its intensity are a set of data separated by a space, eg. 110 22,..

Правила формулирования запроса в графе *MS Peaks and intensities*:

- Значения  $m/z$  перечисляются через запятую, перед и после запятой не должно быть пробелов.
- Рекомендуется указывать относительную интенсивность пика — в этом случае поиск оказывается более эффективным.
- Относительная интенсивность пика записывается через пробел после значения  $m/z$ .

*Пример.*

По запросу:

**78 100,52 18,39 10**

извлекаются вещества, в масс-спектрах которых имеются, в частности, такие пики:

$m/z=78$  (относительная интенсивность 100),  
 $m/z=52$  (относительная интенсивность 18),  
 $m/z=39$  (относительная интенсивность 10).

В списке результатов поиска масс-спектры находятся в колонке MS

SDBS No	Molecular Formula	Molecular Weight	MS	CNMR	HNMR	IR	Raman	ESR	Compound Name
<a href="#">898</a>	C6H6	78.1	<u>Y</u>	<u>Y</u>	<u>Y</u>	<u>Y</u>	<u>Y</u>	<u>Y</u>	benzene
<a href="#">21952</a>	C5H5N	79.1	N	<u>Y</u>	N	<u>Y</u>	N	N	pyridinium m-nitrobenz

### Контрольное задание.

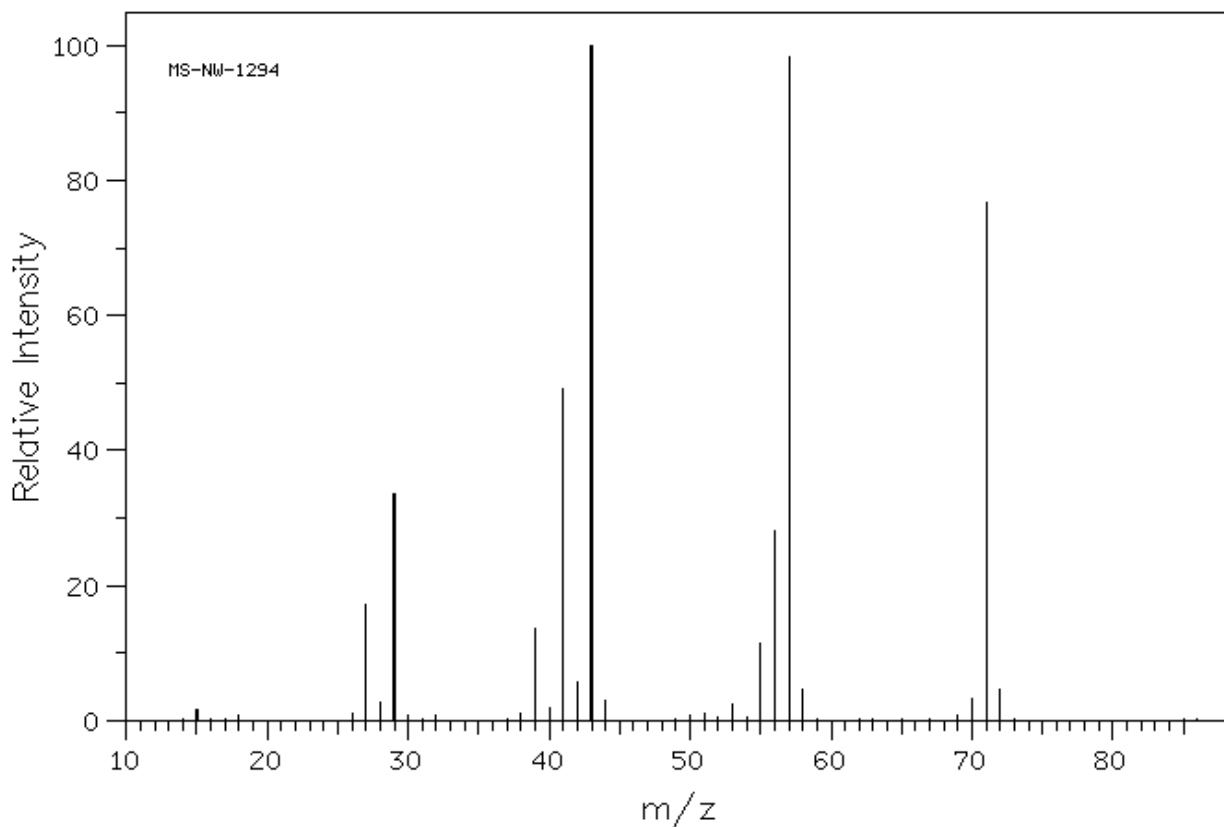
Идентифицируйте вещество по следующим экспериментальным данным (сформулируйте запрос и проведите поиск в SDBS):

#### SDBS-Mass

MS-NW- [REDACTED]

SDBS NO. [REDACTED]

(Mass of molecular ion: [REDACTED])



Source Temperature: 260 °C  
Sample Temperature: 180 °C  
RESERVOIR, 75 eV

m/z      Интенсивность

15.0	1.6
26.0	1.1
27.0	17.2
28.0	2.6
29.0	33.6
38.0	1.0
39.0	13.6
40.0	1.8
41.0	49.1
42.0	5.6
43.0	100.0

m/z      Интенсивность

44.0	3.1
51.0	1.1
53.0	2.5
55.0	11.3
56.0	28.0
57.0	98.3
58.0	4.7
70.0	3.3
71.0	76.7
72.0	4.5