

质谱学英汉术语及符号 (I)

随着质谱技术的不断发展,大量质谱学英文术语及符号出现在文献资料中,由于缺乏统一的解释,已引起某些混淆。为此,本编辑部拟将质谱学各专业常用的英汉术语及符号逐步汇编成册。本期刊登的是有机质谱英汉术语及符号第一部分(初稿由黄知恒同志参照 IUPAC 等推荐的资料编写),敬希读者提出宝贵意见。

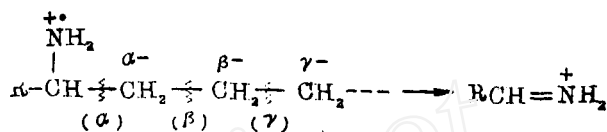
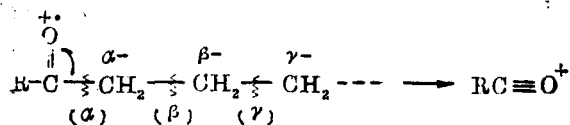
《质谱》编辑部

Electron ionization mass spectrum (EIMS)	电子电离质谱
Field ionization mass spectrum (FIMS)	场电离质谱
Field desorption mass spectrum (FDMS)	场解吸质谱
Chemical ionization mass spectrum (CIMS)	化学电离质谱
Collision activated mass spectrum (CAMS)	碰撞活化质谱
Photo ionization mass spectrum (PIMS)	光电离质谱
Ion kinetic energy spectrum (IKES)	离子动能谱, 为离子束在电场中按各离子的动能—电荷比分离而获得的谱。
Mass analyzed ion kinetic energy spectrum (MIKES)	质量分离离子动能谱。
Multiple peak scanning	多峰扫描, 即多离子监测 (multiple ion

Ionization energy (IE)	电离能, 为分子电离时所需的最小能量, 也可用 $I(M)$ 表示。
Appearance energy (AE)	出峰能量, 指某特定碎片离子生成时所需的最小能量, 也可用 $A(X)^+$ 表示。
Odd-electron ion (OE^+)	奇电子离子
Even-electron ion (EE^+)	偶电子离子
Free radical	游离基
Radical ion	游离基离子, 也可称为奇电子离子。
Cluster ion	簇离子, 由某种化学物质的一个及一个以上分子与另一种粒子结合而生成的离子系列, 如 $[(M_nO)nH]^+$ 为一簇离子 ($n=1, 2, 3, \dots$)。
Adduct ion	加合离子, 由一个离子和一个分子结合而生成的离子, 此新离子包含了相互结合的两个粒子的全部原子, 如 $[M + NH_4]^+$ 。
Isotopic cluster	同位素峰簇或同位素峰群。
Principal ion	主离子, 指在某同位素峰族中, 由含量最高的同位素组成的离子。
Monoisotopic spectrum	单同位素谱, 指本身(或经扣除重同位素峰后)只含主离子的质谱。
Molecular ion	分子离子, 分子中消除一个电子(正离子)或分子上增加一个电子(负离子)的离子。
Protonated molecule	质子化分子, 由分子和质子(后者由其它离子中吸引而来)结合生成的离子, 多发生于化学电离过程: $M + XH^+ \longrightarrow MH^+ + X$ 也可用 $[M + H]^+$ 表示
Parent ion	母离子, 指产生某一碎片的前体离子, 母离子不一定是分子离子。
Daughter ion (Product ion)	子离子, 指由母离子裂解产生的离子, 或称产物离子。
Metastable ion	亚稳离子, 是指离开离子源到达检测器这一过程中分解为子离子及中性碎片的母离子。
Metastable transition	亚稳跃迁。
Neutral fragment	中性碎片。
Fragmentation	碎裂, 指广义上的质谱反应。
Degradation	降解。
Simple cleavage (simple fission)	简单断裂, 指只发生一个单键断裂的过程。

α -cleavage

α -断裂, 断键位置在某一缺电子部位 (或杂原子或官能团) 的邻位, 如:



α -, β -, γ -指链上碳原子的序号。

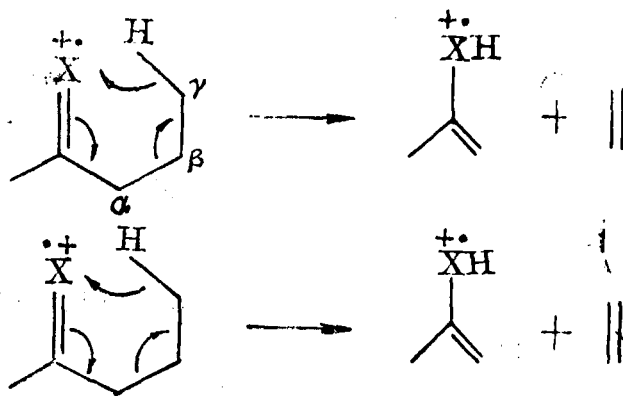
(α), (β), (γ) 指键位置。

β -cleavage

β -断裂, 断键位置在缺电子部位 (杂原子或官能团) 的 β -位。

McLafferty rearrangement

McLafferty 重排, 在不饱和体系中, γ -H 经 6 元环转移而发生的 β -断裂。反应可能经游离基或离子反应方式, 电荷可能定位在任一片段产物上:



Retro Diels-Alder reaction/decomposition (RDA)

逆 Diels-Alder 反应 (分解)。

Reciprocal hydrogen rearrangement

交错氢重排。

Allylic cleavage

烯丙基断裂。

Benzylic cleavage

苄基断裂。

e

电子电荷。

e⁻

电子, 不作 e

m

离子的质量数。

z

离子的电荷数。

m/z

$+ \cdot, - \cdot$

$M^{+\cdot}, [M]^{+\cdot}$

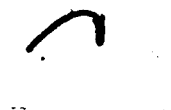
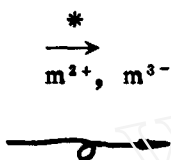
$M^{-\cdot}, [M]^{-\cdot}$

$F^{+\cdot}, [F]^{+\cdot}$

$F^+, [F]^+$

$\gamma^+, \gamma^{+\cdot}$

$m^\bullet$



15% Σ

质荷比, 不作 m/e

游离基离子的荷电表示法, 不作 $\cdot$ 或 $\cdot^-$ 。

分子离子 (正), 不作 M^+ 、 $M^{\cdot+}$ 或 $[M]^{\cdot+}$ 。

分子离子 (负), 不作 M^- 、 $M^{\cdot-}$ 或 $[M]^{\cdot-}$ 。

奇电子离子 (正)。

偶电子离子 (正)。

荷电表示方法, 用于较大的结构式。

表示低分辨率质谱图上出现的亚稳峰, 即亚稳分解过程中, 子离子的表现质量,

$m_1^+ \longrightarrow m_2^+ + (m_1 - m_2)$

$m^* = m_2^2/m_1$, 表示方法: $m^*43 \rightarrow 28$, 计算值 18.2, 实测值 18.2。

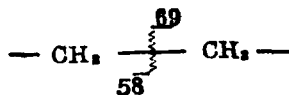
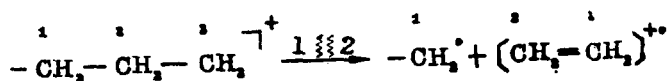
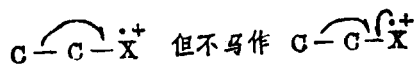
反应过程中观察到亚稳峰。

多电荷离子, 不作 m^{++} 或 m^{-3} 。

骨架重排。

箭头所指表示双电子转移方位。

鱼钩所指表示单电子转移方位, 如:



相对于 $m/z40 \rightarrow M^{+\cdot}$ 间总离子强度的 15%。

参 考 资 料

[1] Org. Mass Spectrom., 2, 249 (1969).

[2] 同上, 14, 1 (1979).

- [3] Pure and Appl. Chem. , 37, 469 (1974) .
[4] 同上, 50, 65 (1978) .
[5] Proposed Recommendations for Nomenclature and Symbolism for Mass Spectrometry, IUPAC, 1981.

欢迎订阅《质 谱》杂志

读者注意:

本刊从 1981 年起定为半年刊, 于每年 6 月和 12 月出版。

读者欲订阅本刊, 请与《质谱》杂志编辑部联系。

自 1982 年起每期定价 1.00 元 (包括邮费)