

Pracoviště hmotnostní spektrometrie

(oddělení chemické fyziky- skupina hmotnostní spektrometrie)

Kontakt: Mgr. Miroslav Polášek, Ph.D.

Ing. Jiří Kubišta, Ph. D.

tel.: 266053066, miroslav.polasek@jh-inst.cas.cz



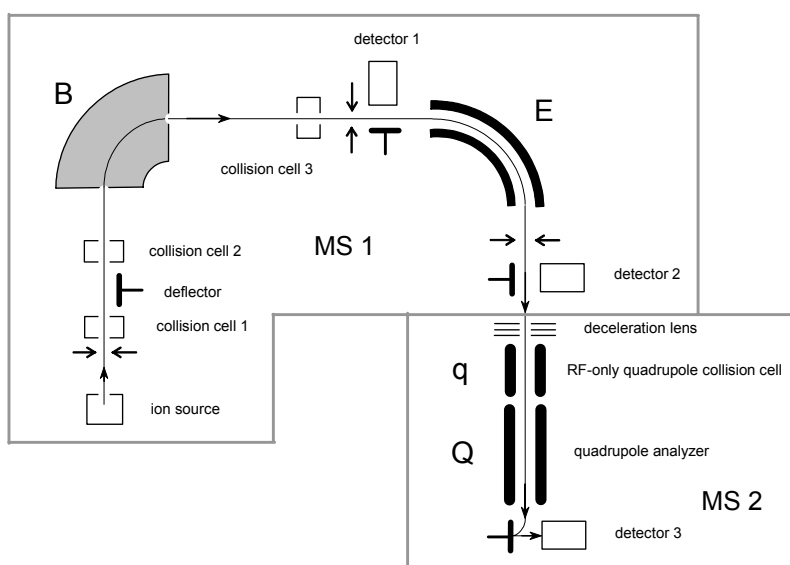
Přístrojové vybavení:

(1) *Hmotnostní spektrometr ZAB2-SEQ.*

Hybridní tandemový hmotnostní spektrometr s geometrií BEqQ; hmotnostní rozsah magnetického sektoru je 2-15000 Th při plném urychlovacím napětí (8 kV); hmotnostní rozsah kvadrupólu je 3000 Th, výrobcem uváděné teoretické rozlišení $R=100\,000$, ionizační techniky: EI, CI, FIB (fast ion bombardment, Cs^+), DCI; experimenty MS: kompletní škála spojených skenů zahrnujících sektory B, E a Q, (skeny B/E, B^2/E , sken neutrálních ztrát, MIKES, QMIKES atd.), CAD při vysokých i nízkých energiích, HRMS; spektrometr byl doplněn o dvě srážkové komory ve FFR1 umožňující provádět experimenty NRMS v kombinaci s B/E skenem; datový systém MASPECII pracující pod Windows XP.

(2) *Hmotnostní spektrometr VG 7070E.*

Sektorový hmotnostní spektrometr s geometrií EB; hmotnostní rozsah magnetického sektoru je 1-3000 Th při plném urychlovacím napětí (6 kV), ionizační techniky: EI, CI, FAB; srážková komora ve FFR1.



Krátký popis zaměření laboratoře:

Výzkum organické a organokovové hmotnostní spektrometrie se

v posledních letech soustředil na objasňování mechanismů reakcí organických iontů a studium jejich struktury metodami tandemové hmotnostní spektrometrie v kombinaci s výpočty ab initio metodami kvantové chemie. Pro experimenty je používán zejména hybridní tandemový hmotnostní spektrometr ZAB2-SEQ.

Zvláštním typem experimentu, který je v laboratoři úspěšně využíván, je tzv. neutralizační reionizační hmotnostní spektrometrie (NRMS). Tato technika je založena na vertikálním přenosu elektronu mezi předem připraveným iontem o známé struktuře a vhodným atomem nebo molekulou při vysokých srážkových energiích. Takto vzniknuvší neutrální species má obvykle dostatek vnitřní energie, a proto se dále rozpadá. Produkty těchto rozpadů jsou kolizně ionizovány a analyzovány hmotnostním spektrometrem. NRMS tak představuje unikátní nástroj pro přípravu a studium obtížně dostupných, nestabilních anebo vysoce reaktivních neutrálních molekul a radikálů jako jsou např. karbény, kumulény, ylidy, biradikály, hypervalentní radikály a pod. Obrovskou výhodou NRMS představuje právě výše uvedený "nechemický" způsob přípravy molekul a radikálů, který se vyhýbá často téměř neřešitelným problémům spojeným s přípravou nestabilních a vysoce reaktivních chemických species klasickou chemickou cestou.

V současnosti je v laboratoři, ve spolupráci s Universitou ve Washingtonu, technika NRMS využívána pro přípravu a studium radikálů odvozených od bázi DNA. Tyto modelové experimenty slouží k objasňování mechanismů primárních chemických procesů spojených s radiolytickým poškozením DNA. Tuto techniku však lze úspěšně využít i pro studium reakčních intermediátů, které hrají nebo mohou hrát významnou roli v chemii atmosféry, spalování a podobně.

Kromě vlastních výzkumných projektů se laboratoř věnuje rovněž servisním hmotnostně spektrometrickým analýzám v rámci spolupráce s jinými výzkumnými laboratořemi v rámci UFCH JH.