

## COMUNICACIÓN CORTA

MÉTODO DE ANÁLISIS DE GASES POR  
ESPECTROMETRÍA DE MASAS

R. Roque

Centro Nacional de Investigaciones Científicas. (CNIC)

En las tablas de espectros de masa (1,2) se reportan éstos, con la calibración de intensidades con respecto al n butano siendo el parámetro que define la estandarización.

$$B_i = \frac{H(i)}{H_B}$$

$H(i)$  - Altura del pico base (pico molecular) del compuesto "i".

$H_B$  - Altura del pico de relación carga masa 43 del n butano a la misma presión que se midió el compuesto "i".

Por otra parte la ecuación fundamental para el análisis de gases por espectrometría de masas es (3).

$$H(i) = K_i P_i$$

y como:  $\sum_{i=1}^N P_i = P_{\text{Total}} = P_T$   $P_{\text{Total}}$ : Presión en la fuente de ionización del espectrómetro de masas.

$K_i$  - Constante característica del gas  
 $P_i$  - Presión parcial en la fuente de ionización siendo en particular: -

$$H_B = K_B P_B$$

la correspondiente al n butano.

y de esta forma:  $B_i = \frac{K_i}{K_B}$  ya que por definición  $P_i = P_B$

Las tablas (1) dan para cada gas los 10 picos más intensos reportando la intensidad del pico base como "1000" y las demás como fracciones del pico base.

De esta forma " $\alpha_{ik}$ " es la intensidad del pico "K" de la sustancia "i" tal que  $0 \leq \alpha_{ik} \leq 1000$

En base al principio de superposición la intensidad del pico "k" de un espectro de masas de una mezcla de gases viene dado por

$$H(k) = \sum_{i=1}^N H_i(k)$$

$H_i(k)$  : Intensidad del pico "k" del componente "i" de la mezcla.

N : : Número total de gases que componen la mezcla

Siendo:  $(1 \leq i \leq N)$

P : Número total de Picos ( $1 \leq K \leq P$ )

$$H_1(K) = (K_i) (\alpha_{ik}) (P_i) = (K_B) (B_i) (\alpha_{ik}) (P_i)$$

de donde:

o lo que es lo mismo

$$\sum \frac{P_i}{P_T} = 1$$

donde:  $\frac{P_i}{P_T} = C_i$  fracción en peso

Así como

$$P_i = \frac{X(i)}{K_B}$$

entonces

$$C_i = \frac{X(i)}{K'_B}$$

y como

$$\sum_{i=1}^N C_i = 1$$

Tendremos

$$K'_B = \sum_{i=1}^N X(i)$$

de donde

$$C_i = \frac{X(i)}{\sum_{i=1}^N X(i)}$$

El método se implementó en un programa de FORTRAN IV, y se probó con análisis de mezclas de pureza de  $H_2$  contaminado con  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$  y Ar y de  $CO_2$  contaminado con  $H_2$ ,  $H_2O$  y Ar, siendo los resultados satisfactorios.

### BIBLIOGRAFÍA

- Gorna, A. y R. Massot.  
Compilation of Mass Spectral Data, Heyden and Sons Ltd. (1966).
- Mc Lafferti, F.W.  
Atlas of Mass spectral data. Interscience New York. (1969).
- Dibeler, V.H.  
Mass Spectrometry. Ed. ch. A. Mc Dowell. pág. 334 Mc Graw-Hill, N.Y. (1963).
- Wolberg, J.R.  
Prediction Analysis. D. Van. Nostrand. (1967) pág. 53

Recibido 25-10-82.