

STRUCTURE POSSIBLE DES DIFFÉRENTS IONS EN SPECTROMETRIE DE MASSE

<http://old-www.u-psud.fr/orsay/formations/maitrisechimie.nsf/massecoursch21.htm!OpenPage>

m/z	Ions (fonctions possibles)
15	CH ₃ ⁺
17	OH ⁺
18	H ₂ O ⁺ , NH ₄ ⁺
19	F ⁺
26	CN ⁺
27	C ₂ H ₃ ⁺
28	C ₂ H ₄ ⁺ , CO ⁺
29	C ₂ H ₅ ⁺ , CHO ⁺
30	CH ₄ N ⁺ (amine)
31	CH ₂ OH ⁺ (alcool, éther)
33	CH ₂ F ⁺
35	³⁵ Cl ⁺ (avec ³⁷ Cl ⁺ à m/z 37)
39	C ₃ H ₃ ⁺ (aromatique)
41	C ₃ H ₅ ⁺ , C ₂ H ₃ N ⁺ (nitrile)
42	C ₃ H ₆ ⁺
43	C ₃ H ₇ ⁺ , CH ₃ CO ⁺ (carbonyle)
44	C ₂ H ₆ N ⁺ (amine), C ₂ H ₄ O ⁺ (Mc Lafferty: aldéhyde),
45	CH ₃ -CH-OH ⁺ (alcool), CH ₃ -O-CH ₂ ⁺ (ether), COOH ⁺ (acide)
49	CH ₂ ³⁵ Cl ⁺
51	CH ₂ F ₂ ⁺ , C ₄ H ₃ ⁺ (aromatiques)
53	C ₄ H ₅ ⁺
54	NC-CH ₂ -CH ₂ ⁺ (nitrile), C ₄ H ₆ ⁺
55	C ₄ H ₇ ⁺ , CH ₂ =CH-CO ⁺ (ester insaturé, cétone cyclique)
56	C ₄ H ₈ ⁺ (cycles)
57	C ₄ H ₉ ⁺ , C ₂ H ₅ -CO ⁺
58	C ₃ H ₆ O ⁺ (Mc Lafferty), C ₃ H ₈ N ⁺ (amines)
59	C ₃ H ₇ O ⁺ (alcool, éther), CH ₃ -OCO ⁺ (ester), C ₂ H ₅ NO ⁺ (amide)
60	CH ₃ COOH ⁺ (Mc Lafferty: acétate)

61	$C_2H_5O_2^+$ (double réarrangement acétate)
65	$C_5H_5^+$ (aromatique)
68	$C_5H_8^+$, $C_4H_6N^+$ (nitrile)
69	$C_5H_9^+$, CF_3^+ , $C_4H_5O^+$
71	$C_5H_{11}^+$, $C_3H_7-CO^+$
72	$C_4H_8O^{+A}$ (Mc Lafferty), $C_4H_{10}N^+$ (amine), $C_3H_6NO^+$
73	$C_4H_9O^+$ (alcool, ether), $C_2H_5-OCO^+$ (ester), $C_3H_7NO^+$
74	$C_3H_6O_2^+$ (Mc Lafferty: ester, acide)
75	$C_3H_7O_2^+$ (double réarrangement propionate)
77	$C_6H_5^+$ (aromatique)
79	$C_6H_7^+$ (aromatique), $^{79}Br^+$ (avec $^{81}Br^+$ à m/z 81)
80	$C_4H_3NHCH_2^+$ (pyrrole)
81	$C_4H_3O-CH_2^+$ (furanne)
82	$C_6H_{11}^+$ (alcène, cyclane), $CH_2^{35}Cl_2^+$
85	$C_6H_{13}^+$, $C_4H_9-CO^+$
86	$C_5H_{10}O^+$, $C_5H_{12}N^+$
87	$C_5H_{11}O^+$ (alcool, éther), $C_3H_7-OCO^+$ (esters), $C_4H_9NO^+$
88	$C_4H_8O_2^+$ (Mc Lafferty: ester, acide)
89	$C_4H_9O_2^+$ (double réarrangement: butanoate)
91	$C_7H_7^+$ (aromatique)
92	$C_7H_8^+$ (Mc Lafferty: aromatique)
93	$CH_2^{79}Br^+$, $C_6H_5O^+$ (phénol), $C_7H_9^+$ (terpène).
94	$C_6H_6O^+$ (Mc Lafferty: phényl-éther)
95	$C_4H_3O-CO^+$ (furanne)
97	$C_7H_{13}^+$
98	$C_6H_{10}O^+$
99	$C_7H_{15}^+$, $C_6H_{11}O^+$
100	$C_6H_{14}N^+$
101	$C_4H_9-OCO^+$
103	$C_6H_5-CH=CH^+$, $C_5H_{10}O_2^+$
104	$C_6H_5-CH=CH_2^+$ (Mc Lafferty: ester et cétone aromatique)
105	$C_6H_5-C_2H_4^+$, $C_6H_5-CO^+$
107	$C_6H_5-OCH_2^+$, $C_6H_5-CH_2-O^+$
108	$C_6H_5-OCH_3^+$, $C_6H_5-CH_2OH^+$ (ester benzylique)

117	$C_6H_5-C_3H_4^+$
119	$C_6H_5-C_3H_6^+$, $C_6H_5-C_2H_2O^+$,
120	$C_7H_4O_2^+$.
121	$C_7H_5O_2^+$, $C_8H_9O^+$, $C_9H_{13}^+$ (terpène).
127	I^+
131	$C_3F_5^+$, $C_6H_5-CH=CH-CO^+$
149	$C_8H_5O_3^+$ (phtalate).
152	$C_6H_4=C_6H_4^+$.
154	$C_6H_5-C_6H_5^+$.

STRUCTURE POSSIBLE DES FRAGMENTS NEUTRES

<http://old-www.u-psud.fr/orsay/formations/maitrisechimie.nsf/massecoursch22.htm!OpenPage>

Les fragments neutres les plus courants sont en **caractères gras**.

Précurseur moins	Fragment neutre éliminé (fonctions possibles)
1	H·
15	CH ₃ ·
17	·OH (acide de faible masse)
18	H ₂ O (alcool, aldéhyde, cétone)
19	F·
20	HF
26	HCCH, ·CN
27	HCN
28	CH ₂ =CH ₂ , CO (aldéhyde)
29	C ₂ H ₅ ·, HCO·
30	NH ₂ CH ₂ ·, CH ₂ =O, NO
31	CH ₃ O·, ·CH ₂ OH, NH ₂ CH ₃
32	CH ₃ OH, S
33	CH ₃ · et H ₂ O (alcool), SH·
34	H ₂ S
35	³⁵ Cl· avec ³⁷ Cl·
36	H ³⁵ Cl avec H ³⁷ Cl
40	CH ₃ CC-H
41	CH ₂ =CH-CH ₂ ·
42	CH ₂ =C=O, CH ₂ =CH-CH ₃
43	CH ₃ -CO·, C ₃ H ₇ ·
44	CO ₂ , CH ₂ =CH OH, N ₂ O, NH ₂ -CO·
45	COOH, C ₂ H ₅ O·, C ₂ H ₅ NH ₂
46	C ₂ H ₅ OH, ·NO ₂
49	CH ₂ ³⁵ Cl
51	CH ₂ F ₂

54	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$
55	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2\cdot$
56	C_4H_8
57	$\text{C}_4\text{H}_9\cdot, \text{C}_2\text{H}_5-\text{CO}\cdot$
58	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$
59	$\text{CH}_3\text{OCO}\cdot, \text{CH}_3\text{COO}\cdot, \text{CH}_3\text{CONH}_2$
60	CH_3COOH (acétate), $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$
63	$^{35}\text{Cl}-\text{CH}_2\text{CH}_2\cdot$
64	SO_2
68	C_5H_8
69	$\text{CF}_3\cdot$
70	C_5H_{10}
71	$\text{C}_5\text{H}_{11}\cdot, \text{C}_3\text{H}_7-\text{CO}\cdot$
73	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{O}-\text{CO}\cdot$
74	$\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}, \text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$
77	$\text{C}_6\text{H}_5\cdot$
78	C_6H_6
79	^{79}Br avec ^{81}Br
80	H^{79}Br
100	$\text{CF}_2=\text{CF}_2$
119	$\text{CF}_3\text{CF}_2\cdot$
122	$\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$
127	$\text{I}\cdot$
128	HI