

STRUCTURE POSSIBLE DES DIFFÉRENTS IONS

Il est très utile de connaître les structures (ou tout au moins les formules brutes) des ions fragments de masse donnée. La liste suivante n'est pas exhaustive, mais elle peut être utilisée pour interpréter les spectres de masse de molécules contenant les éléments suivants: C, H, O, N et les halogènes.

m/z	Ions (fonctions possibles)
15	CH_3^+
17	OH^+
18	H_2O^+ , NH_4^+
19	F^+
26	CN^+
27	C_2H_3^+
28	C_2H_4^+ , CO^+ .
29	C_2H_5^+ , CHO^+
30	CH_4N^+ (amine)
31	CH_2OH^+ (alcool, ether)
33	CH_2F^+
35	$^{35}\text{Cl}^+$ (avec $^{37}\text{Cl}^+$ à m/z 37)
39	C_3H_3^+ (aromatique)
41	C_3H_5^+ , $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}^+$ (nitrile)
42	C_3H_6^+
43	C_3H_7^+ , CH_3CO^+ (carbonyle)
44	$\text{C}_2\text{H}_6\text{N}^+$ (amine), $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}^+$ (Mc Lafferty: aldéhyde),
45	$\text{CH}_3\text{-CH-OH}^+$ (alcool), $\text{CH}_3\text{-O-CH}_2^+$ (ether), COOH^+ (acide)
49	$\text{CH}_2^{35}\text{Cl}^+$
51	CH_2F_2^+ , C_4H_3^+ (aromatiques)
53	C_4H_5^+
54	$\text{NC-CH}_2\text{-CH}_2^+$ (nitrile), C_4H_6^+
55	C_4H_7^+ , $\text{CH}_2=\text{CH-CO}^+$ (ester insaturé, cétone cyclique)
56	C_4H_8^+ (cycles)
57	C_4H_9^+ , $\text{C}_2\text{H}_5\text{-CO}^+$
58	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}^+$ (Mc Laff), $\text{C}_3\text{H}_8\text{N}^+$ (amines)
59	$\text{C}_3\text{H}_7\text{O}^+$ (alcool, ether), $\text{CH}_3\text{-OCO}^+$ (ester), $\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}^+$. (amide)
60	CH_3COOH^+ (Mc Lafferty: acétate)
61	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2^+$ (double réarrangement acétate)
65	C_5H_5^+ (aromatique)
68	C_5H_8^+ , $\text{C}_4\text{H}_6\text{N}^+$ (nitrile)
69	C_5H_9^+ , CF_3^+ , $\text{C}_4\text{H}_5\text{O}^+$

71	$C_3H_7^+$, $C_3H_7-CO^+$
72	$C_4H_8O^+$ (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, ether), $C_3H_7-OCO^+$ (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	$CH_2^{79}Br^+$, $C_6H_5O^+$ (phenol), $C_7H_9^+$ (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	$C_3F_5^+$, $C_6H_5-CH=CH-CO^+$

STRUCTURE POSSIBLE DES FRAGMENTS NEUTRES

Pour interpréter une fragmentation, il est important de connaître la structure du fragment neutre éliminé au cours de la réaction.

La liste qui suit n'est pas exhaustive, mais elle peut être utilisée pour interpréter les spectres de masse de molécules contenant les éléments suivants: C, H, O, N, S et les halogènes.

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	CH ₂ =CH-CH=CH ₂
55	CH ₂ =CH-CH ₂ -CH ₂ [•]

56	C_4H_8
57	C_4H_9 , C_2H_5-CO
58	C_3H_6O
59	CH_3OCO , CH_3COO , CH_3CONH_2
60	CH_3COOH (acétate), C_3H_7OH
63	$^{35}Cl-CH_2CH_2$
64	SO_2
68	C_3H_8
69	CF_3
70	C_5H_{10}
71	C_3H_{11} , C_3H_7-CO
73	CH_3CH_2-O-CO
74	C_4H_9OH , CH_3CH_2COOH
77	C_6H_5
78	C_6H_6
79	^{79}Br avec ^{81}Br
80	$H^{79}Br$
100	$CF_2=CF_2$
119	CF_3CF_2
122	C_6H_5COOH
127	I
128	HI