

## STRUCTURE POSSIBLE DES DIFFÉRENTS IONS EN SPECTROMETRIE DE MASSE

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

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

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

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	$\text{C}_4\text{H}_8$
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	$\text{CH}_3\text{COOH}$ (acétate), $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$
63	$^{35}\text{Cl}-\text{CH}_2\text{CH}_2\cdot$
64	$\text{SO}_2$
68	$\text{C}_5\text{H}_8$
69	$\text{CF}_3\cdot$
70	$\text{C}_5\text{H}_{10}$
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	$\text{C}_6\text{H}_6$
79	$^{79}\text{Br}$ avec $^{81}\text{Br}$
80	$\text{H}^{79}\text{Br}$
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	$\text{HI}$