

# Mass

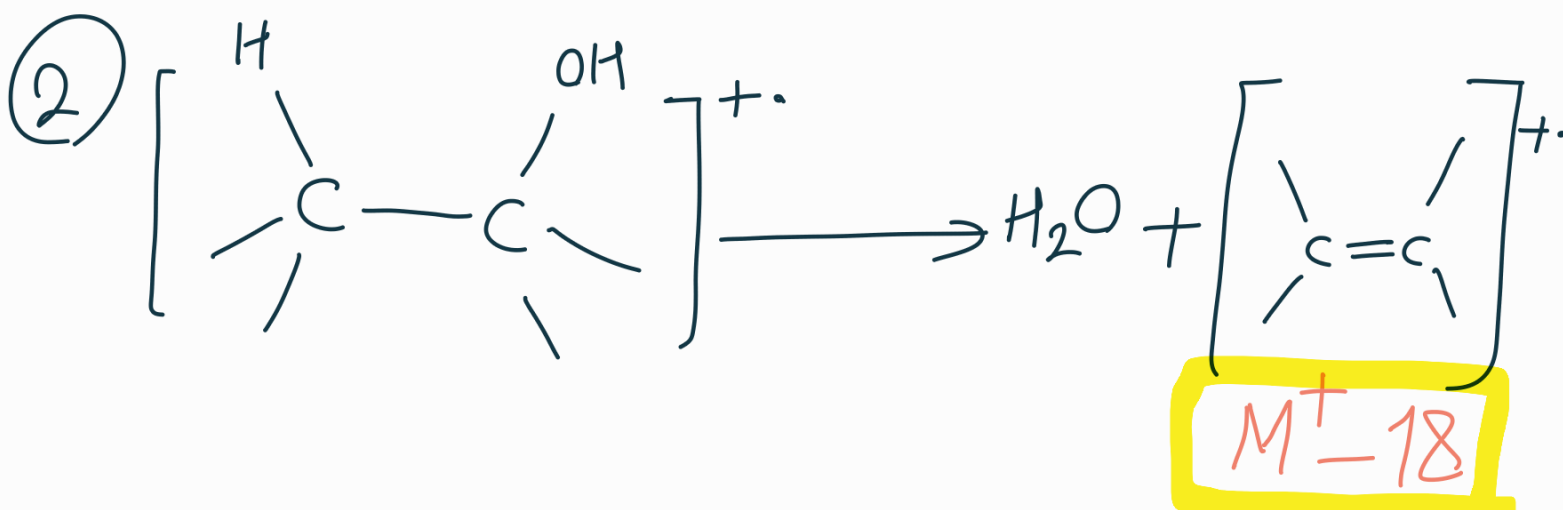
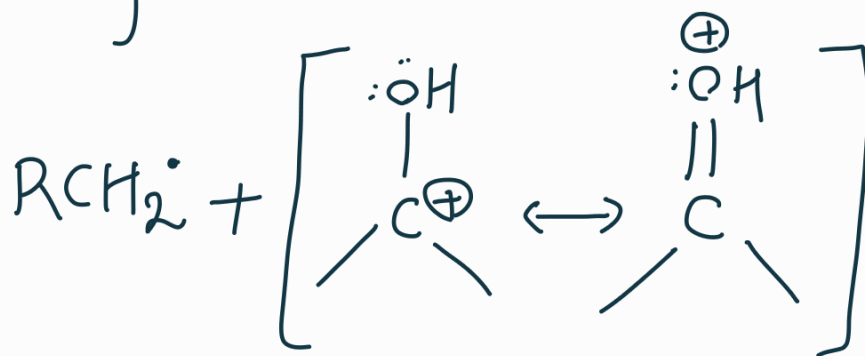
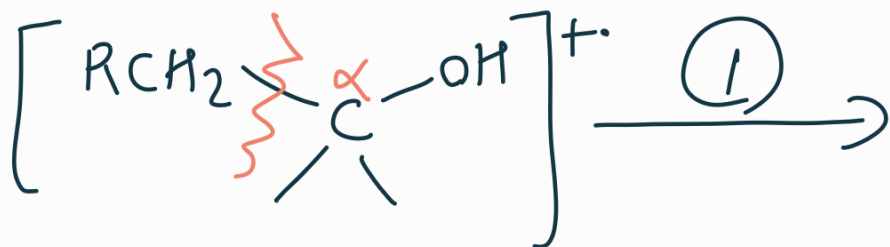
در تئوری اکس ها :

alpha cleavage ①

dehydration ②

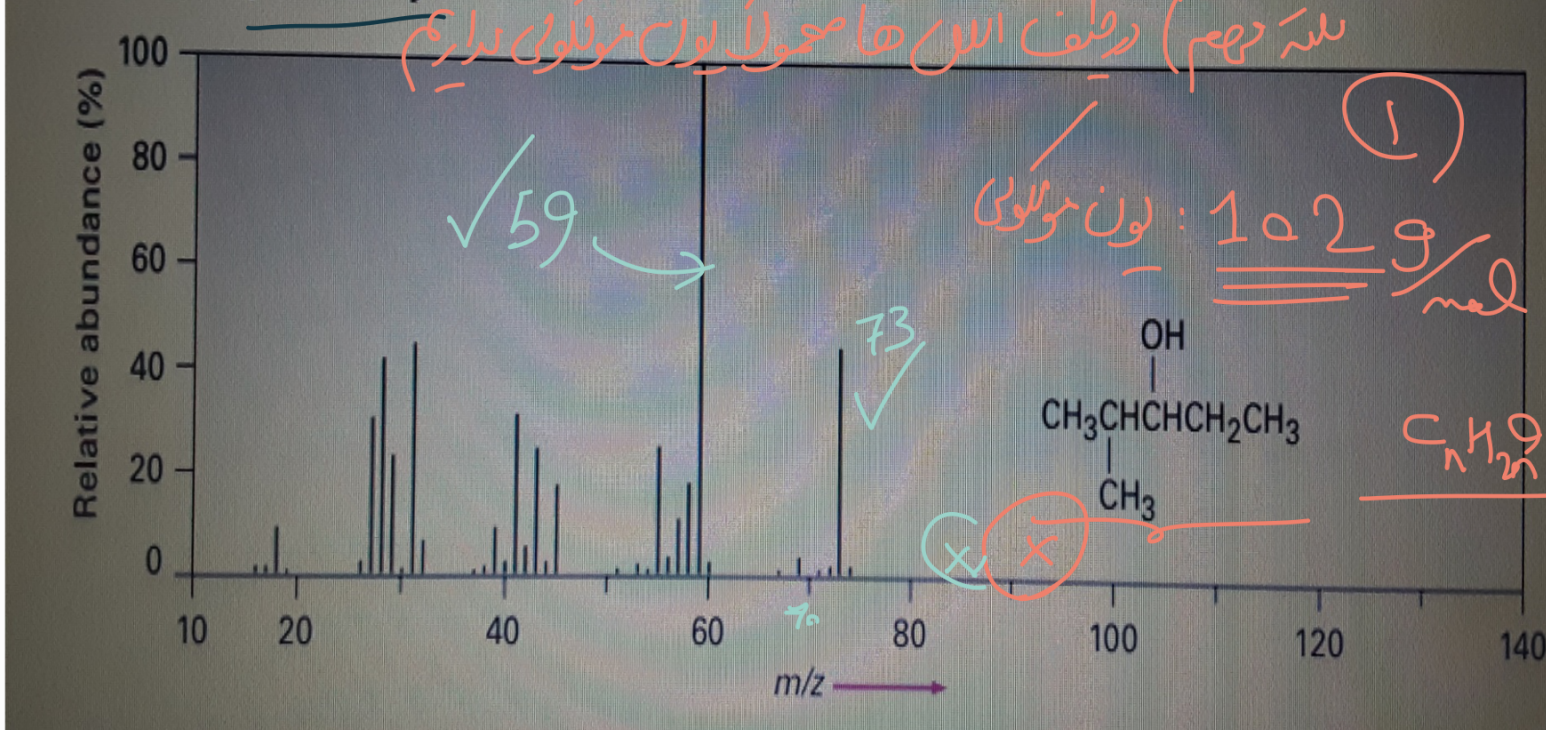
۲ راه فرگمانتاسیون برای این دسته وجود دارد

Alpha cleavage:



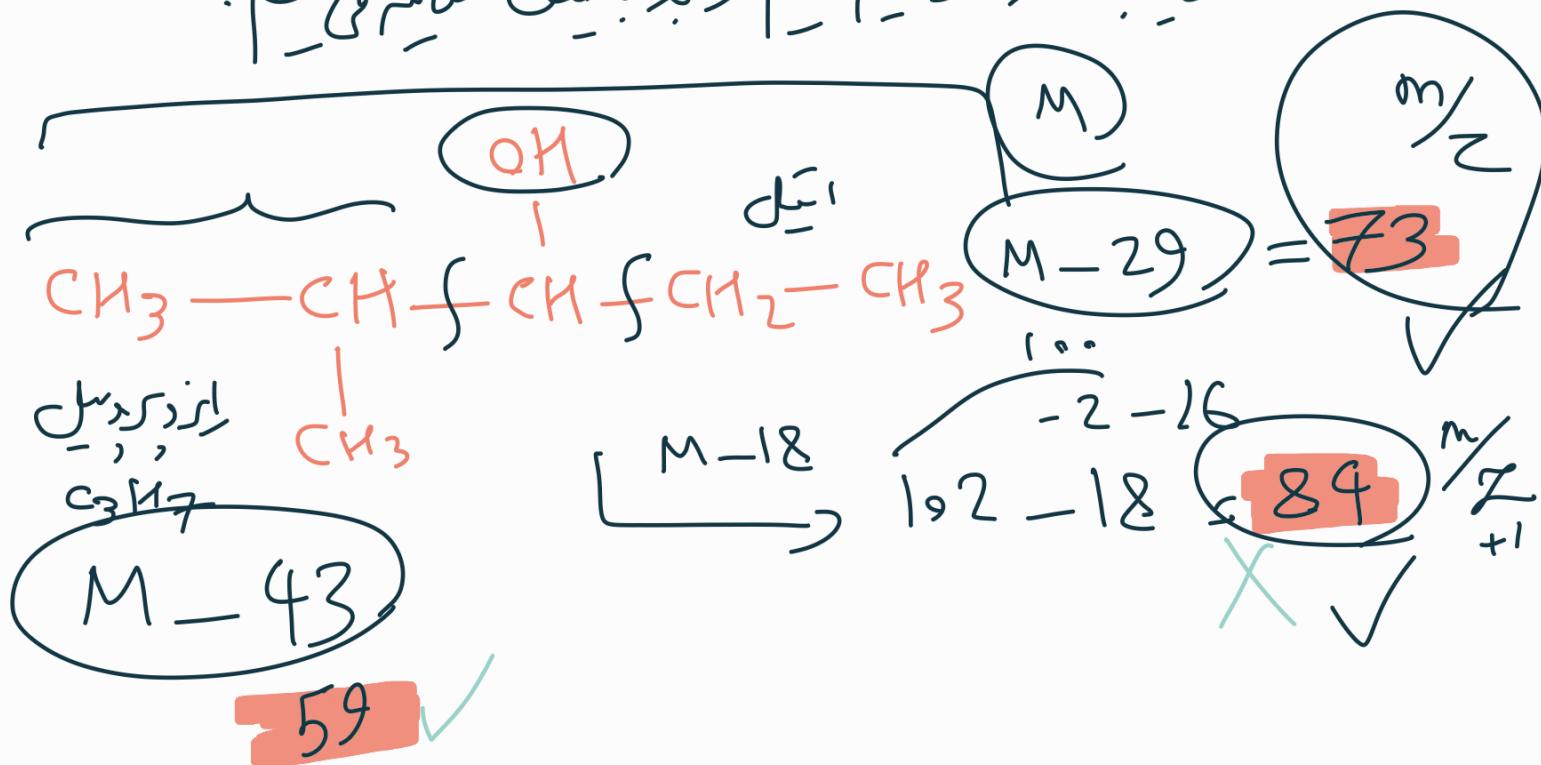


The mass spectrum of 2-methyl-3-pentanol is shown in Figure 12.8. What fragments can you identify?



در این مدل سوال — ابتدا سعی می‌کنیم Molecular weight محاسبه کنیم و با توجه به گروه‌های عاملی الگوهای احتمالی fragmentation

محصولات آن ترکیب را رسم کنیم و بعد با طیف مقایسه می‌کنیم.





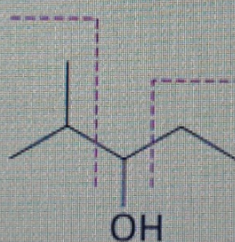
## Solution

2-Methyl-3-pentanol, an open-chain alcohol, has  $M^+ = 102$  and might be expected to fragment by  $\alpha$  cleavage and by dehydration. These processes would lead to fragment ions of  $m/z = 84, 73$ , and  $59$ . Of the three expected fragments, dehydration is not observed (no  $m/z = 84$  peak), but both  $\alpha$  cleavages take place ( $m/z = 73, 59$ ).

Loss of  $C_3H_7$  ( $M^+ - 43$ )  
by alpha cleavage gives  
a peak of mass 59.

Loss of  $C_2H_5$  ( $M^+ - 29$ )  
by alpha cleavage gives  
a peak of mass 73.

$M^+ = 102$



## SPECTRAL ANALYSIS BOX — Alcohols

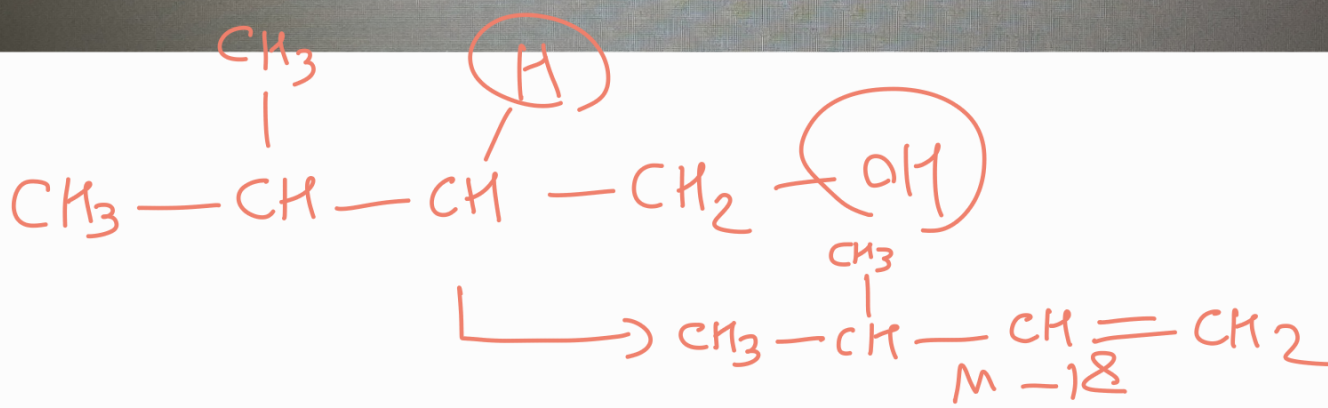
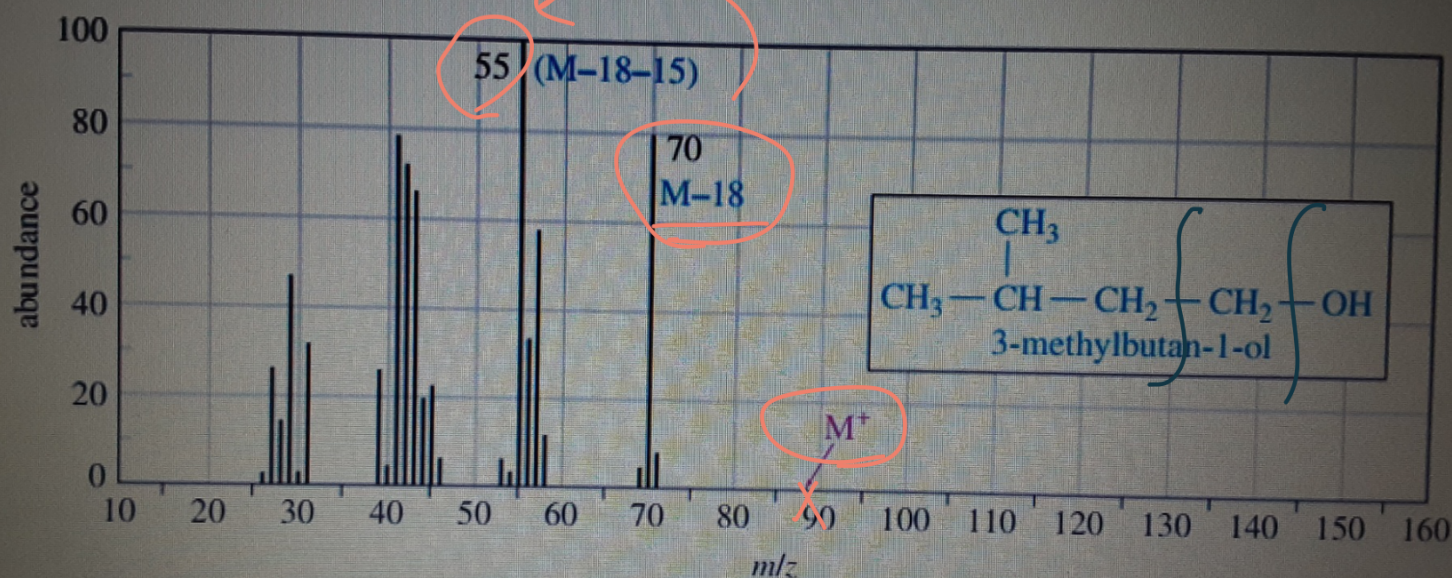
### MOLECULAR ION

$M^+$  weak or absent

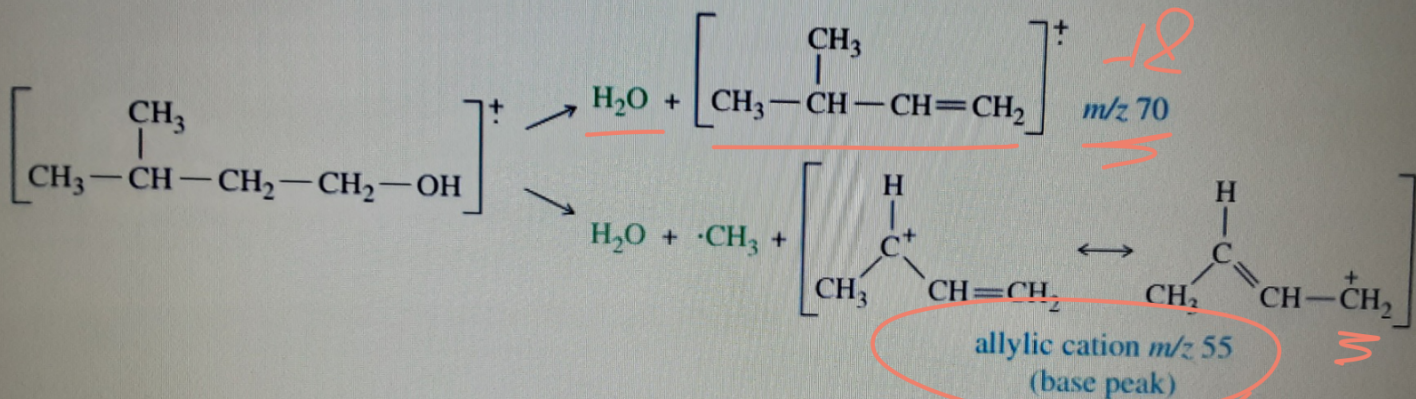
### FRAGMENT IONS

Loss of alkyl group  
 $M - 18$

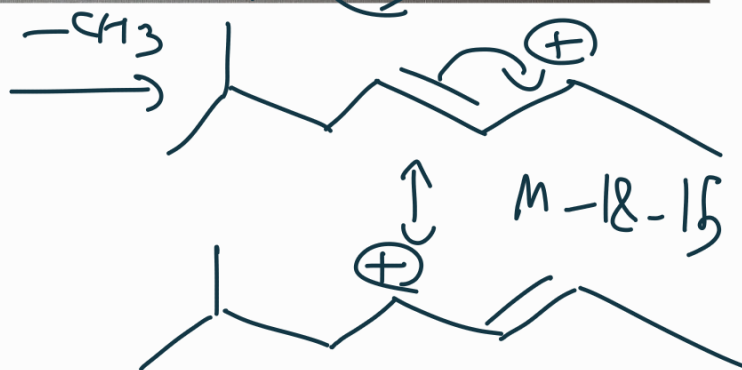
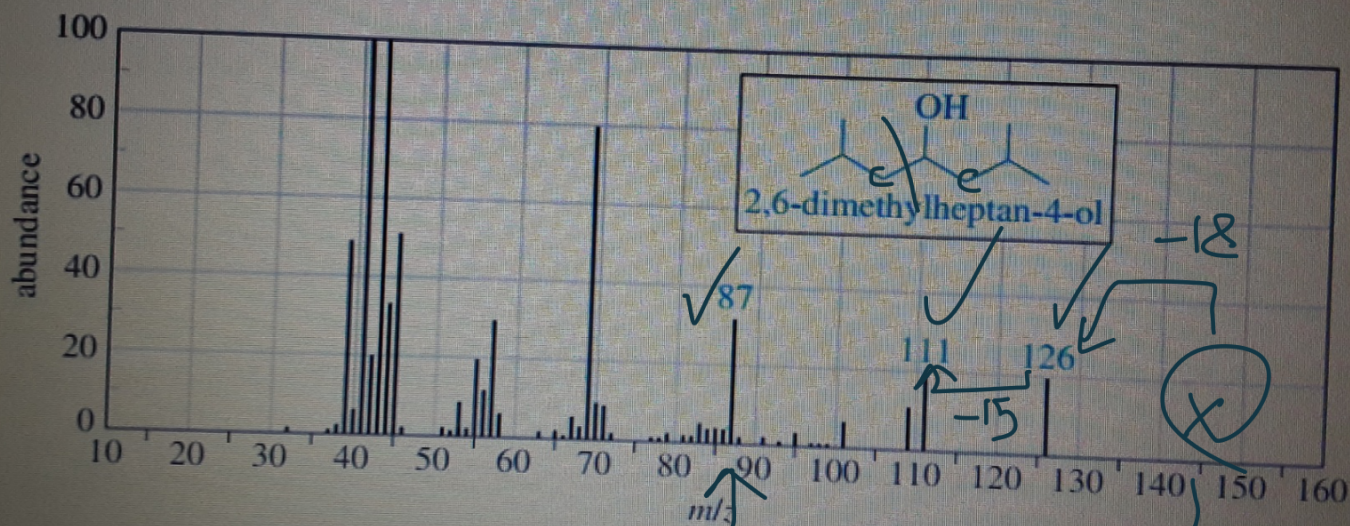
Handwritten notes on the right side of the box:  
-15  
-CH3  
-CH2-15  
-29  
-C3H7-37  
+14  
714



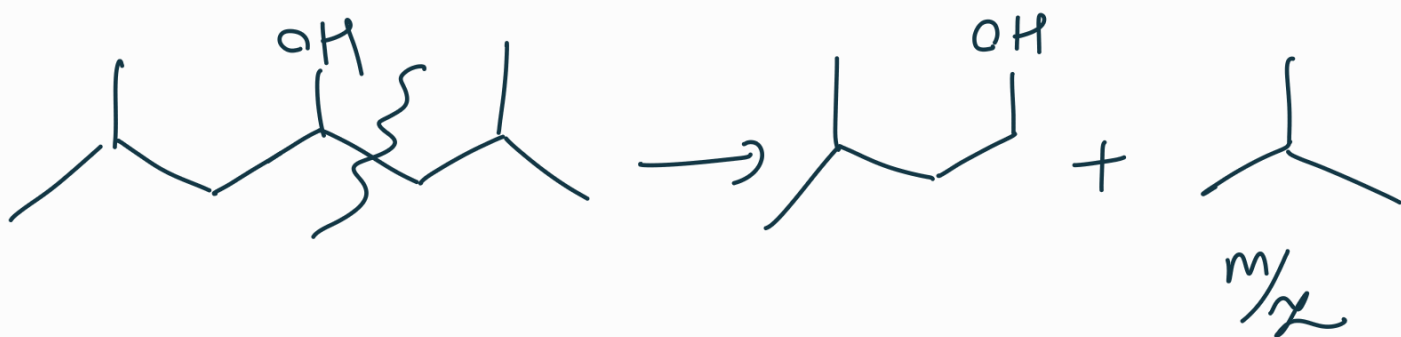




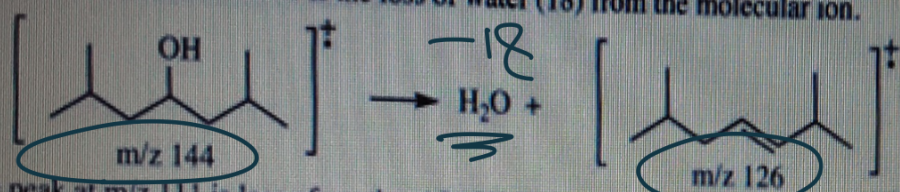
Account for the peaks at  $m/z \ 87, 111,$  and  $126$  in the mass spectrum of 2,6-dimethylheptan-4-ol.



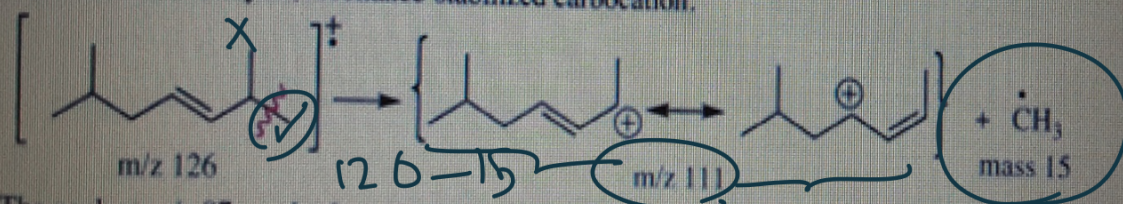




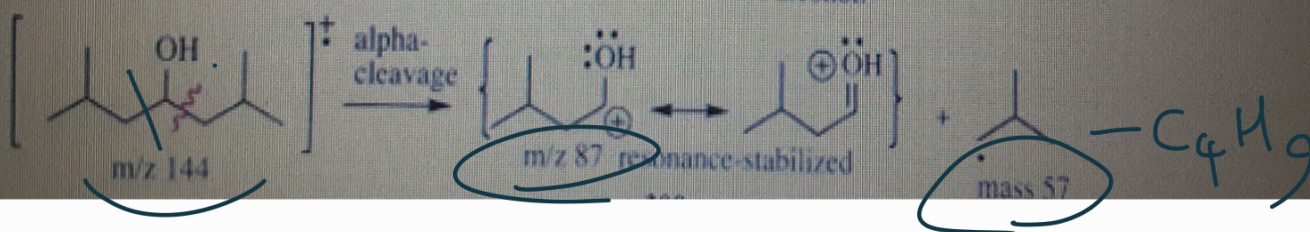
12-11 2,6-Dimethylheptan-4-ol,  $C_9H_{20}O$ , has molecular weight 144. The highest mass peak at 126 is *not* the molecular ion, but rather is the loss of water (18) from the molecular ion.



The peak at m/z 111 is loss of another 15 ( $CH_3$ ) from the fragment of m/z 126. This is called allylic cleavage; it generates a 2°, allylic, resonance-stabilized carbocation.



The peak at m/z 87 results from fragmentation on one side of the alcohol:



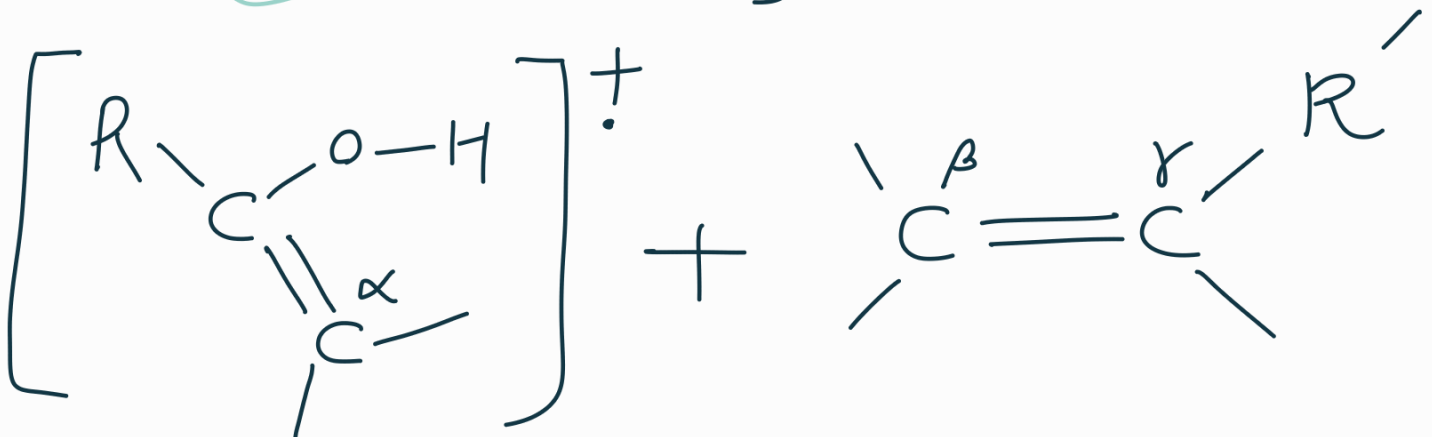
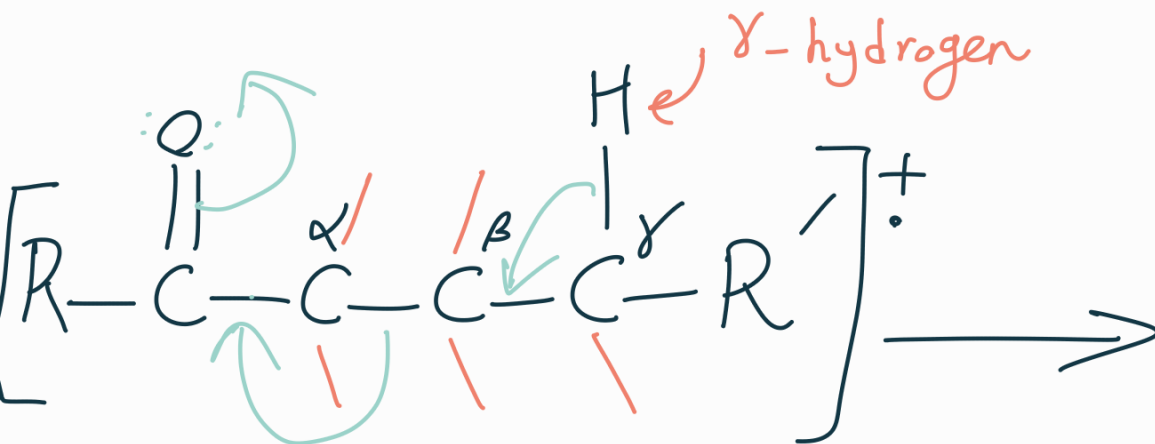
در مورد کربونیل :

ketones & aldehydes



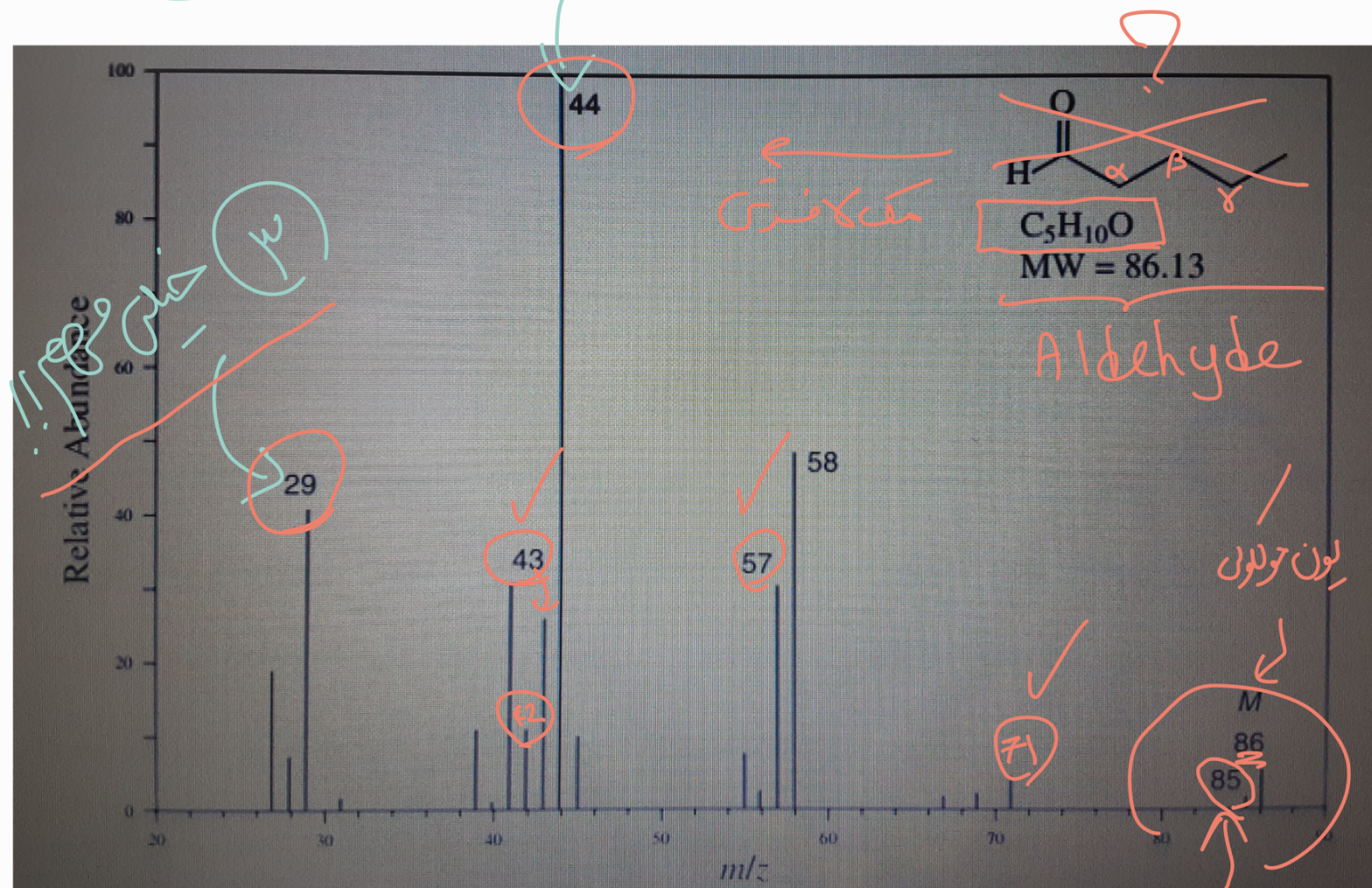
acylium ion

★ McLafferty rearrange ★

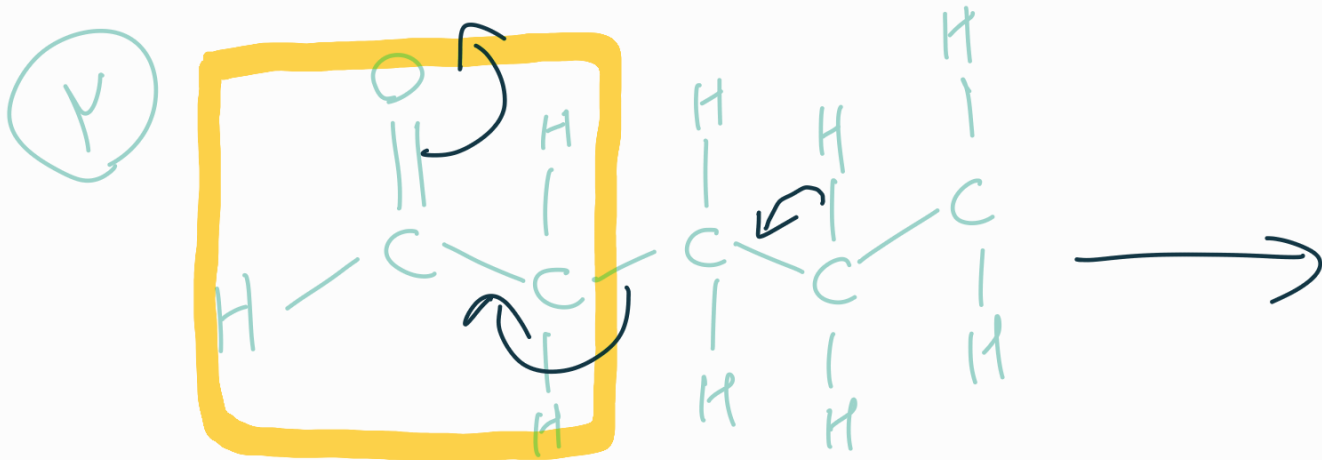
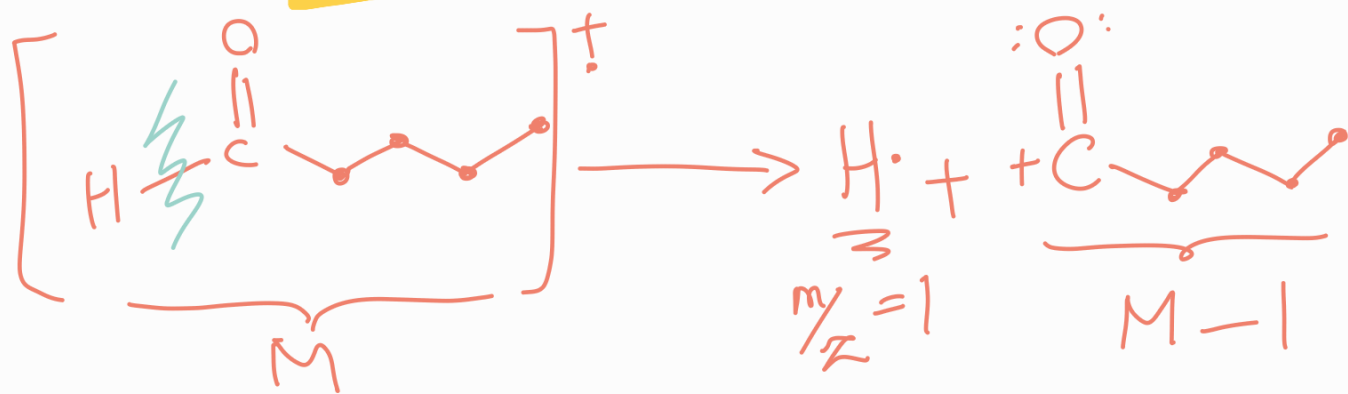


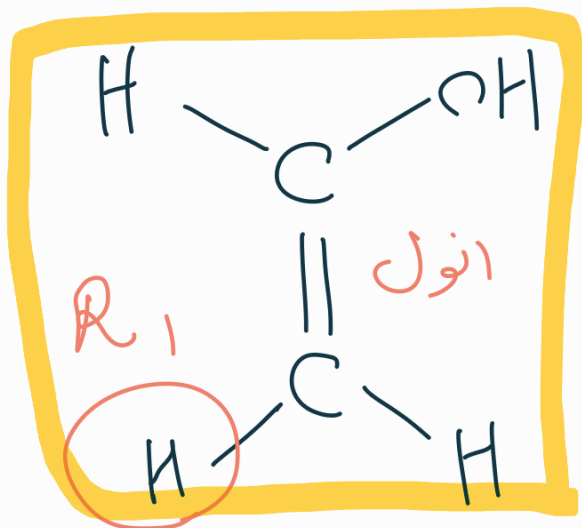


نسبت هم برای آلدهیدها  $m/z = 44$  (۲)

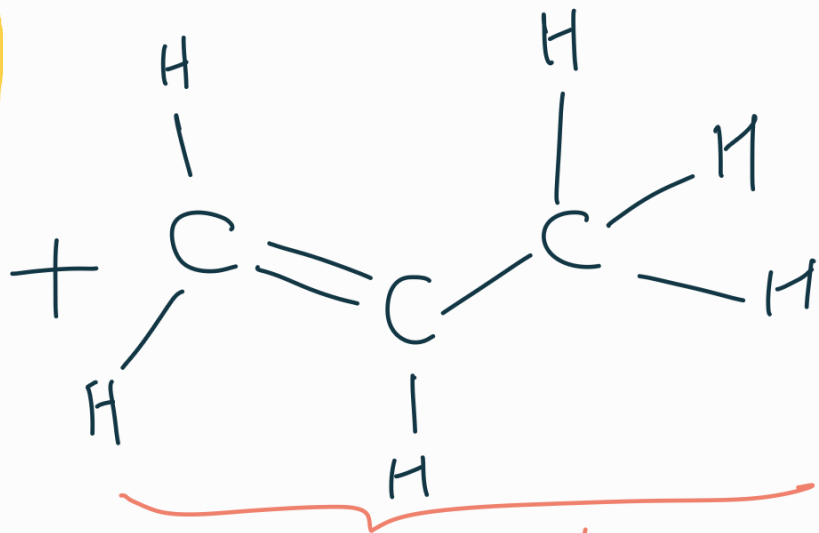


(۱)  $M-1$  (بسیار ضعیف برای آلدهیدهاست)



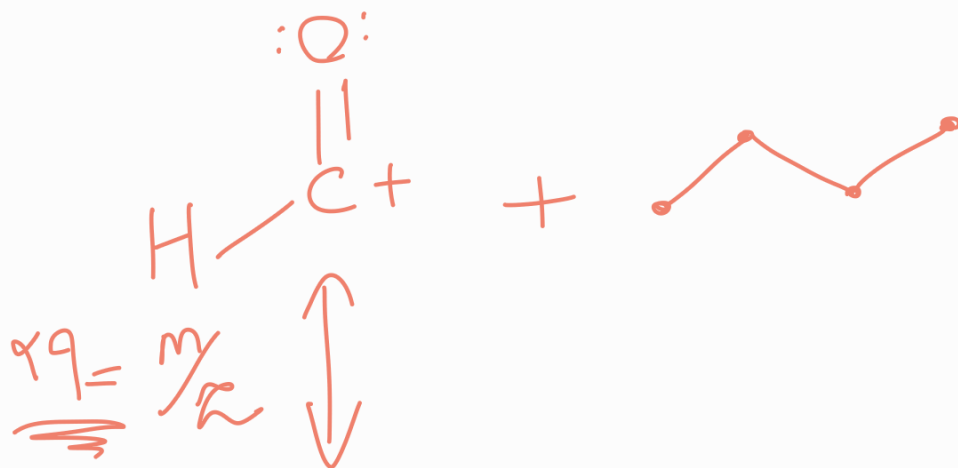
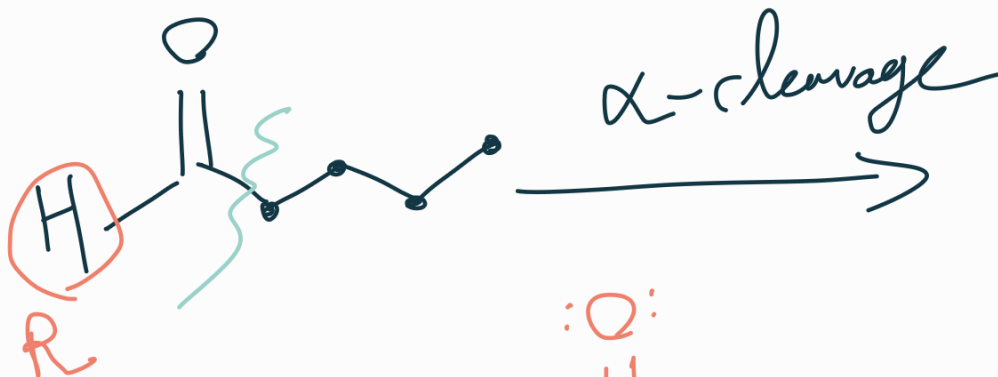


$m/z = 44$

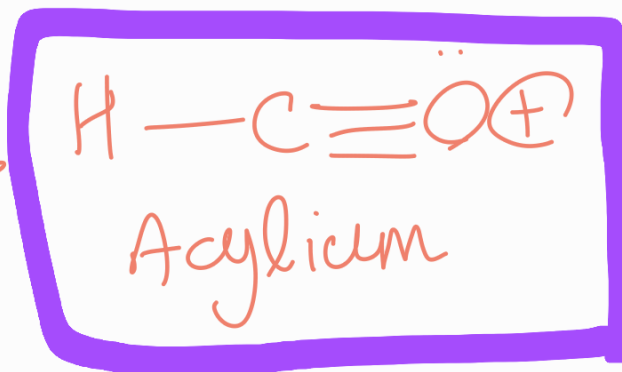


$36 + 6 = 42$

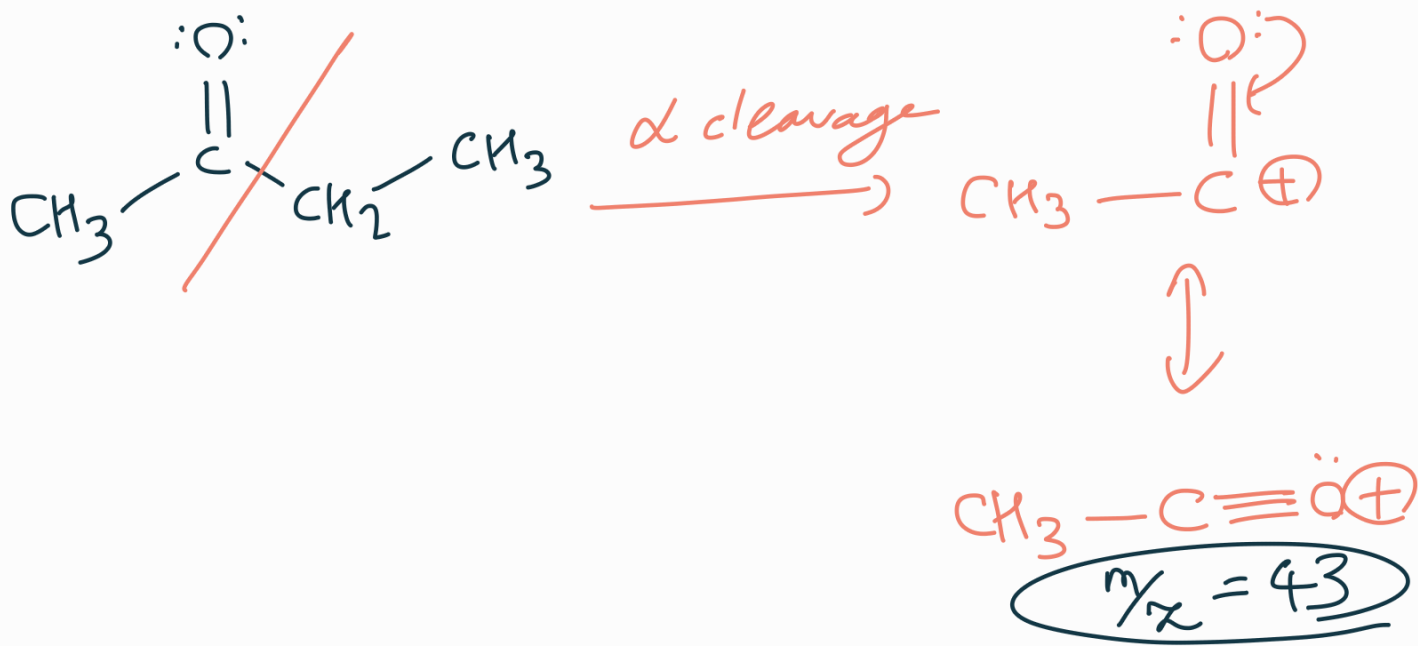
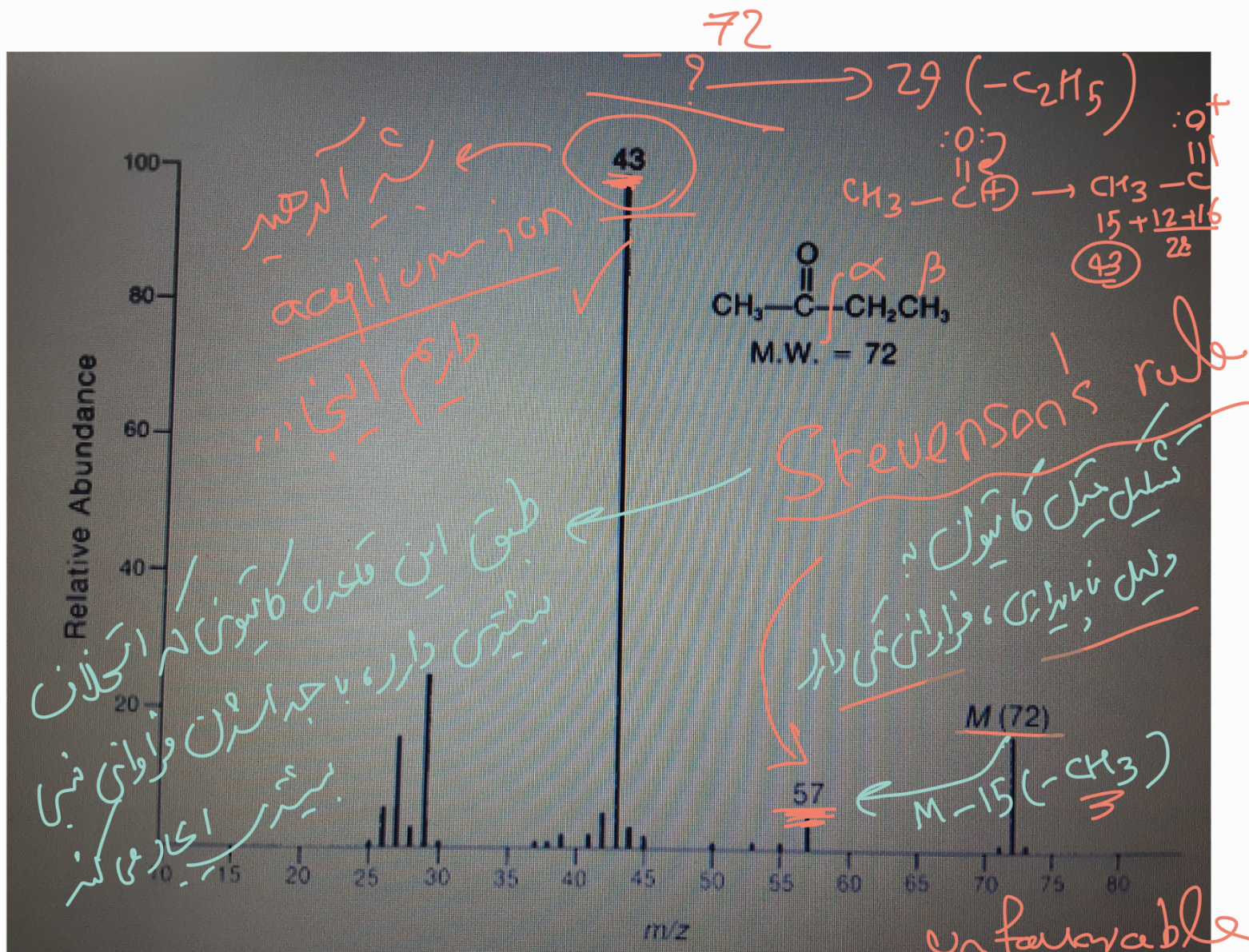
(μ)



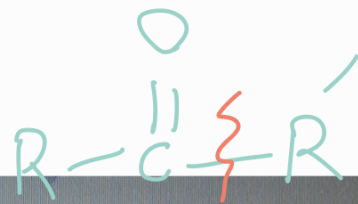
$m/z = 29$



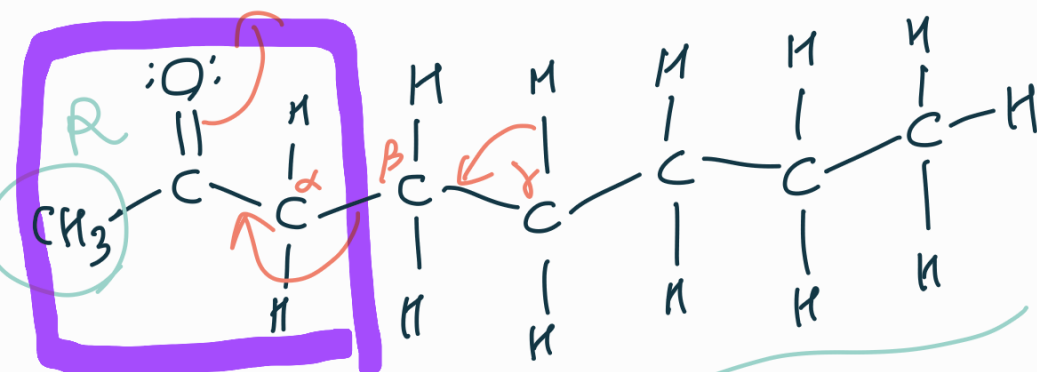
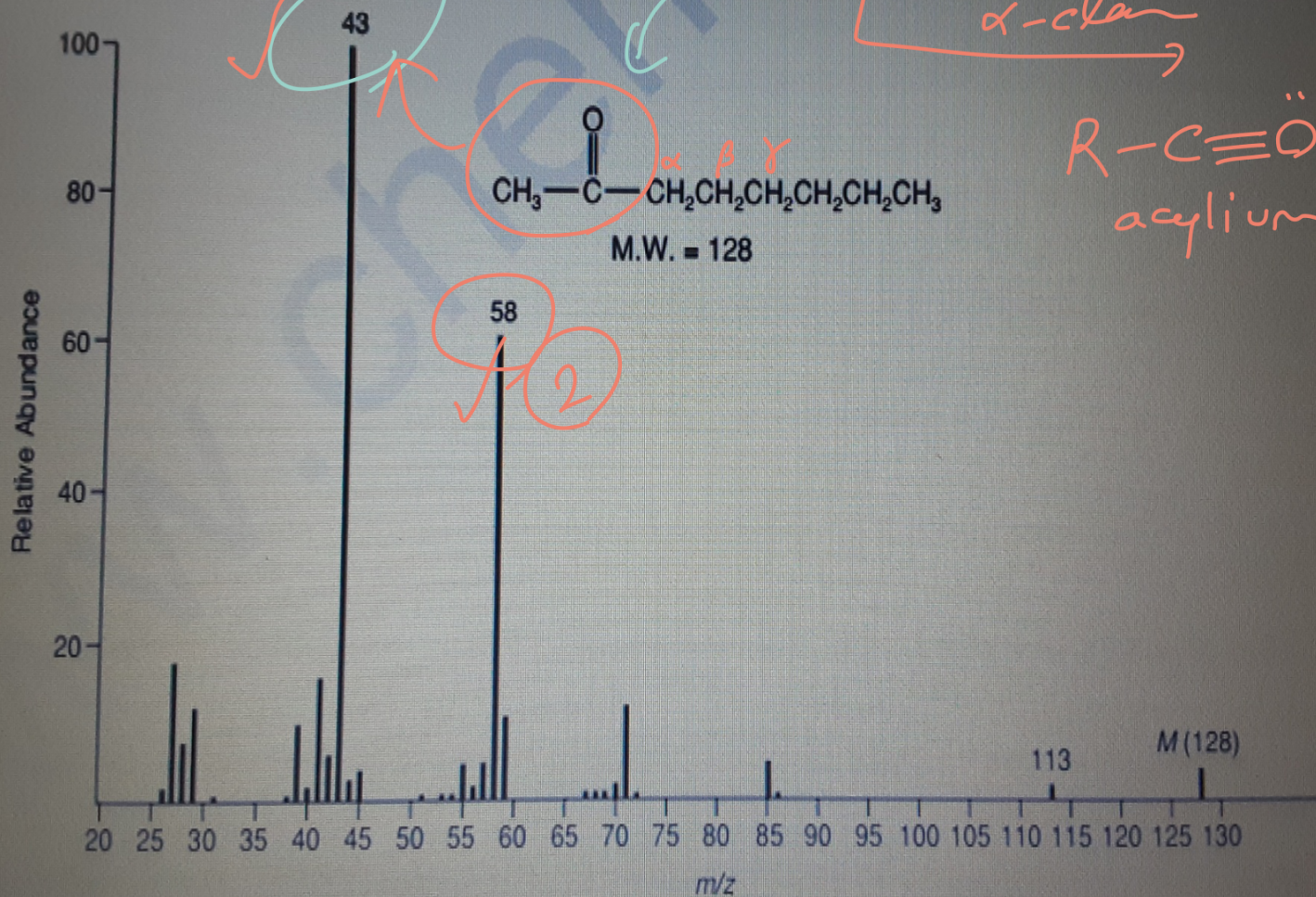
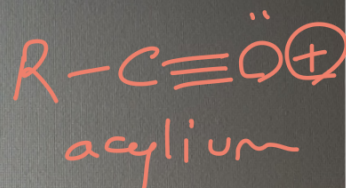




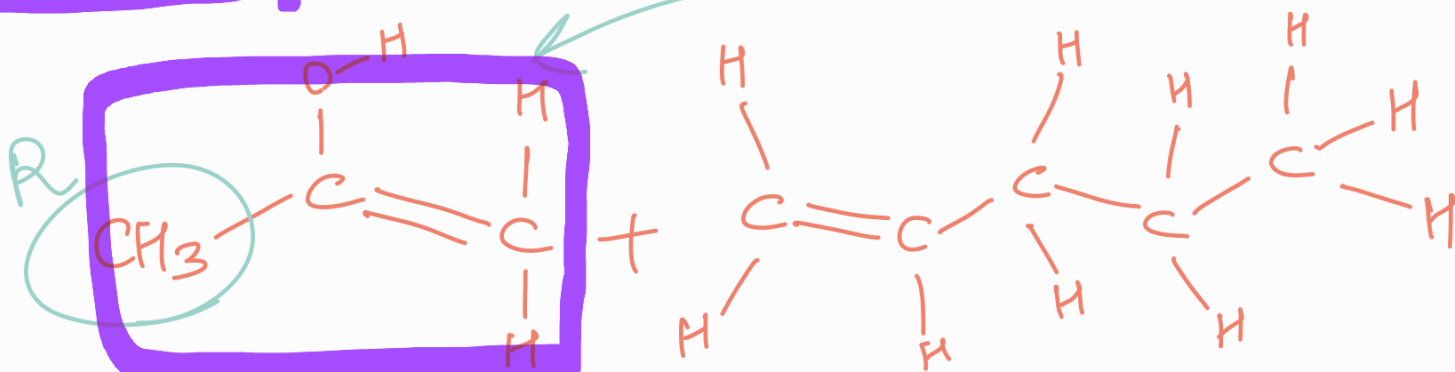




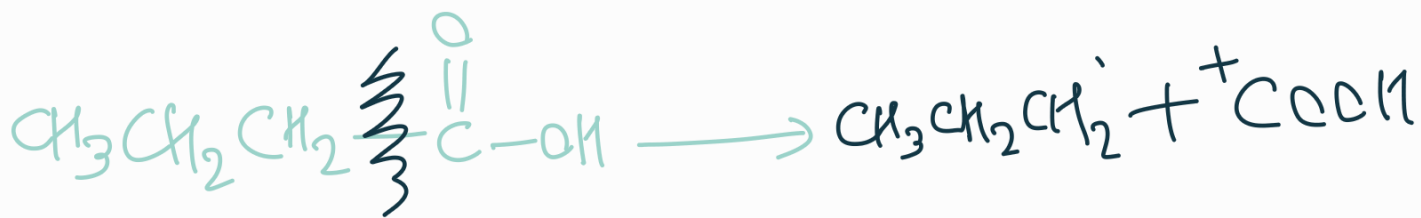
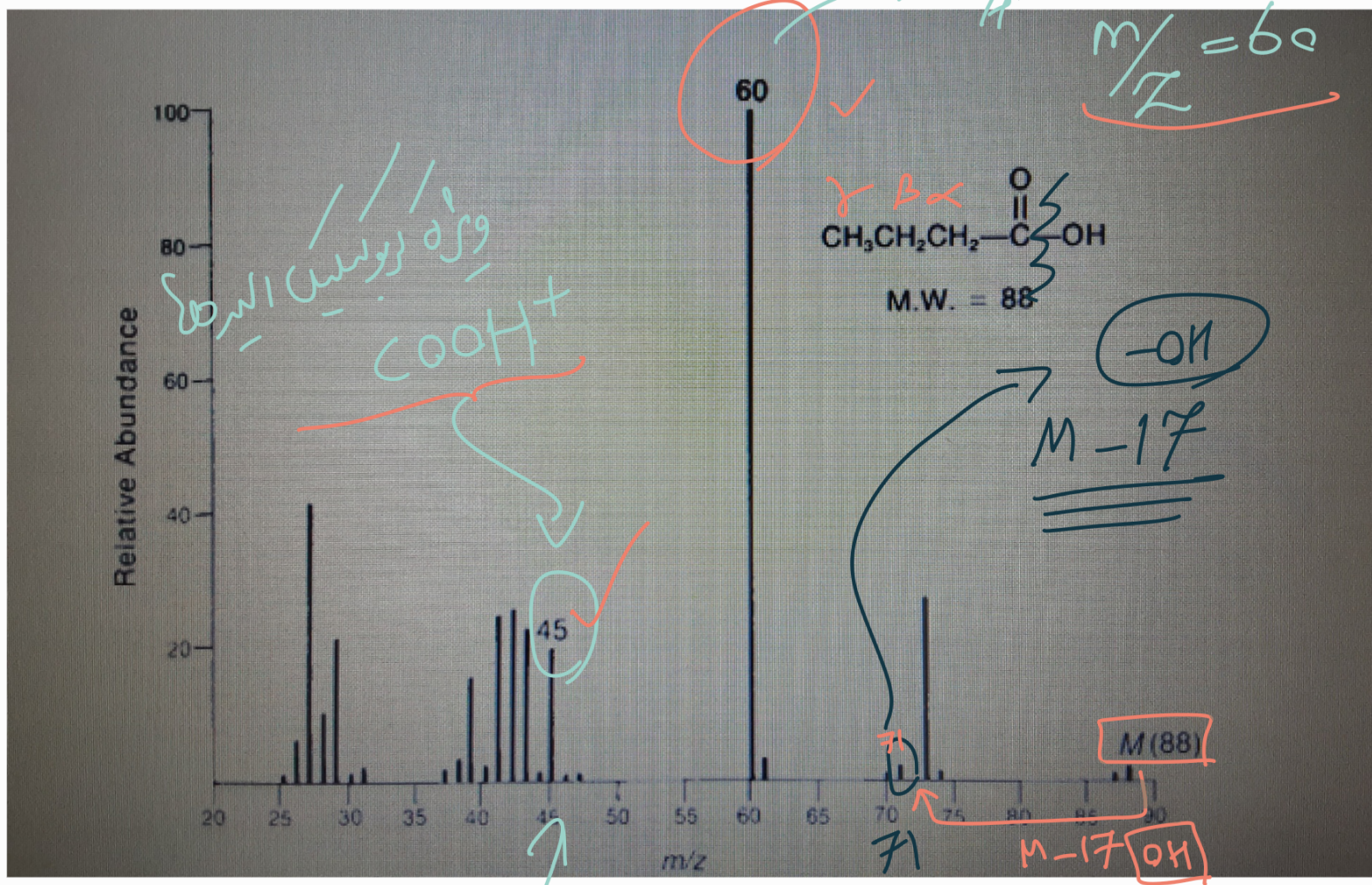
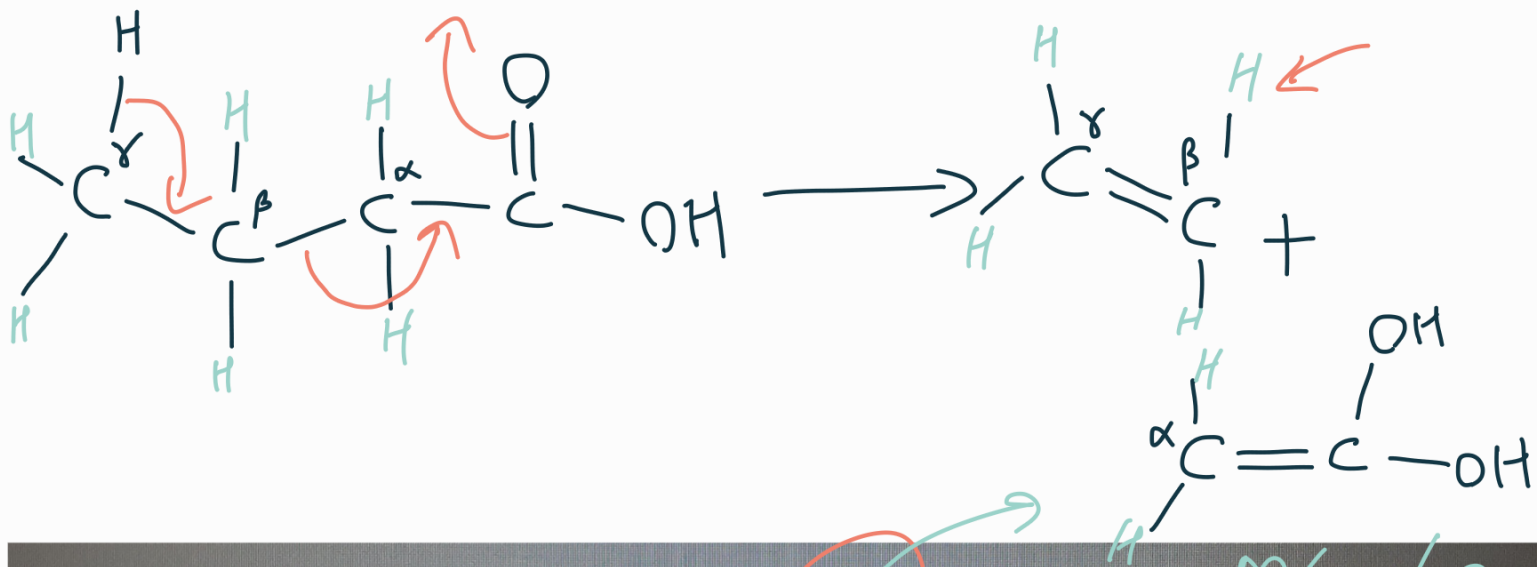
$\alpha$ -chain



$$m/z = 43 + 15 = 58$$



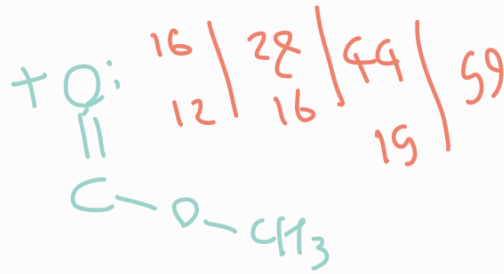






$$m/z = 59$$

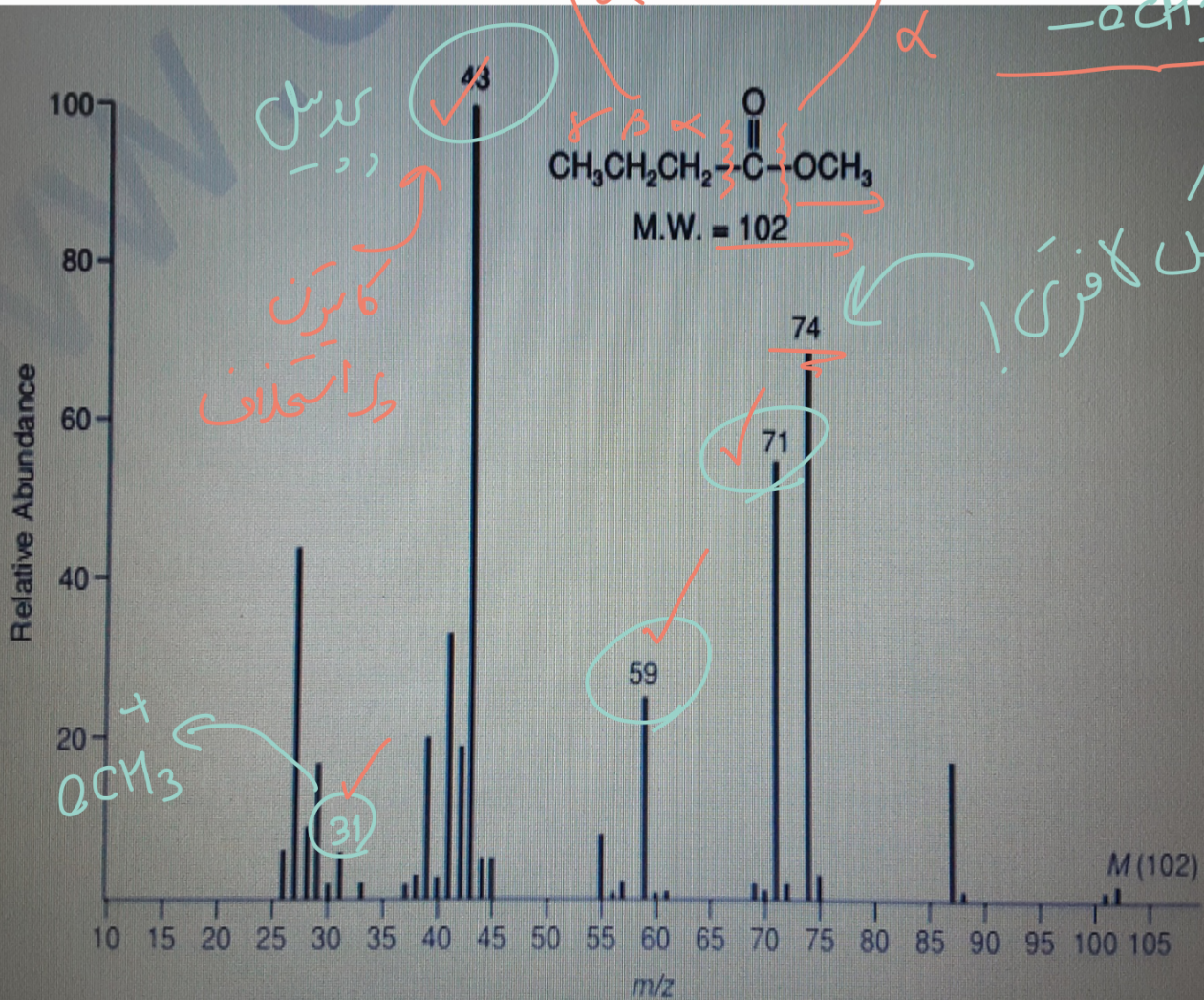
$$m/z = 71$$



M-43

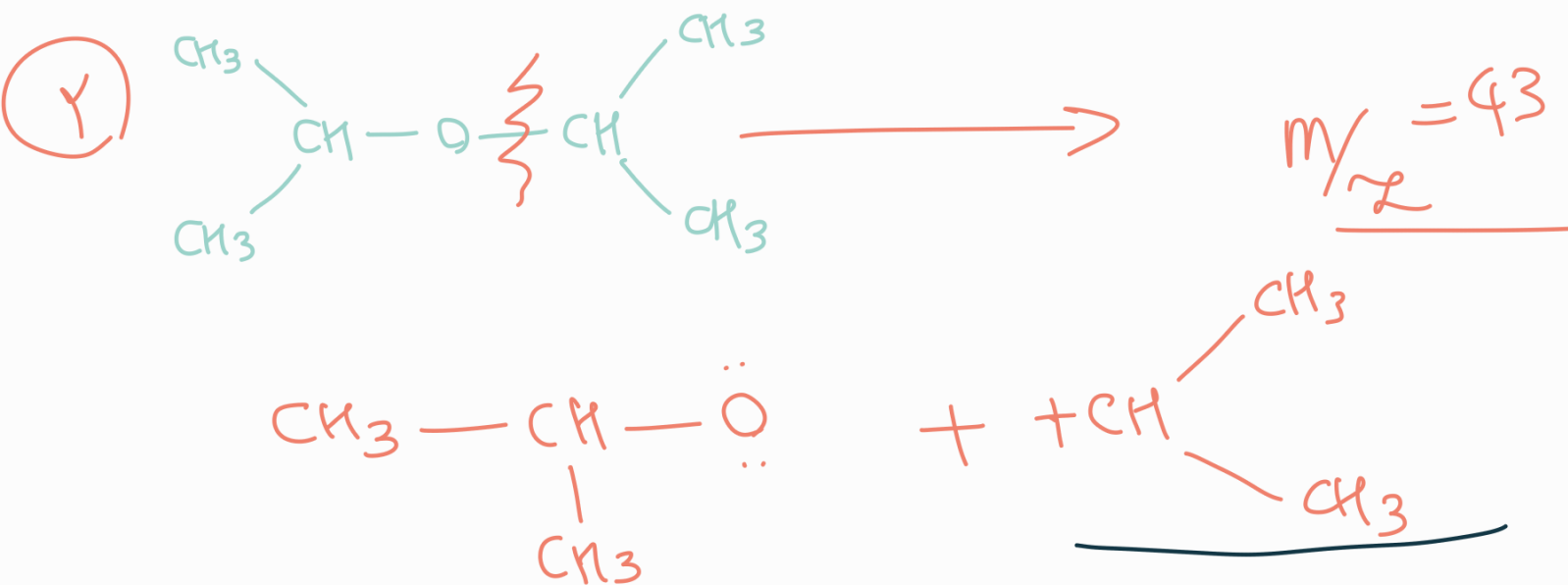
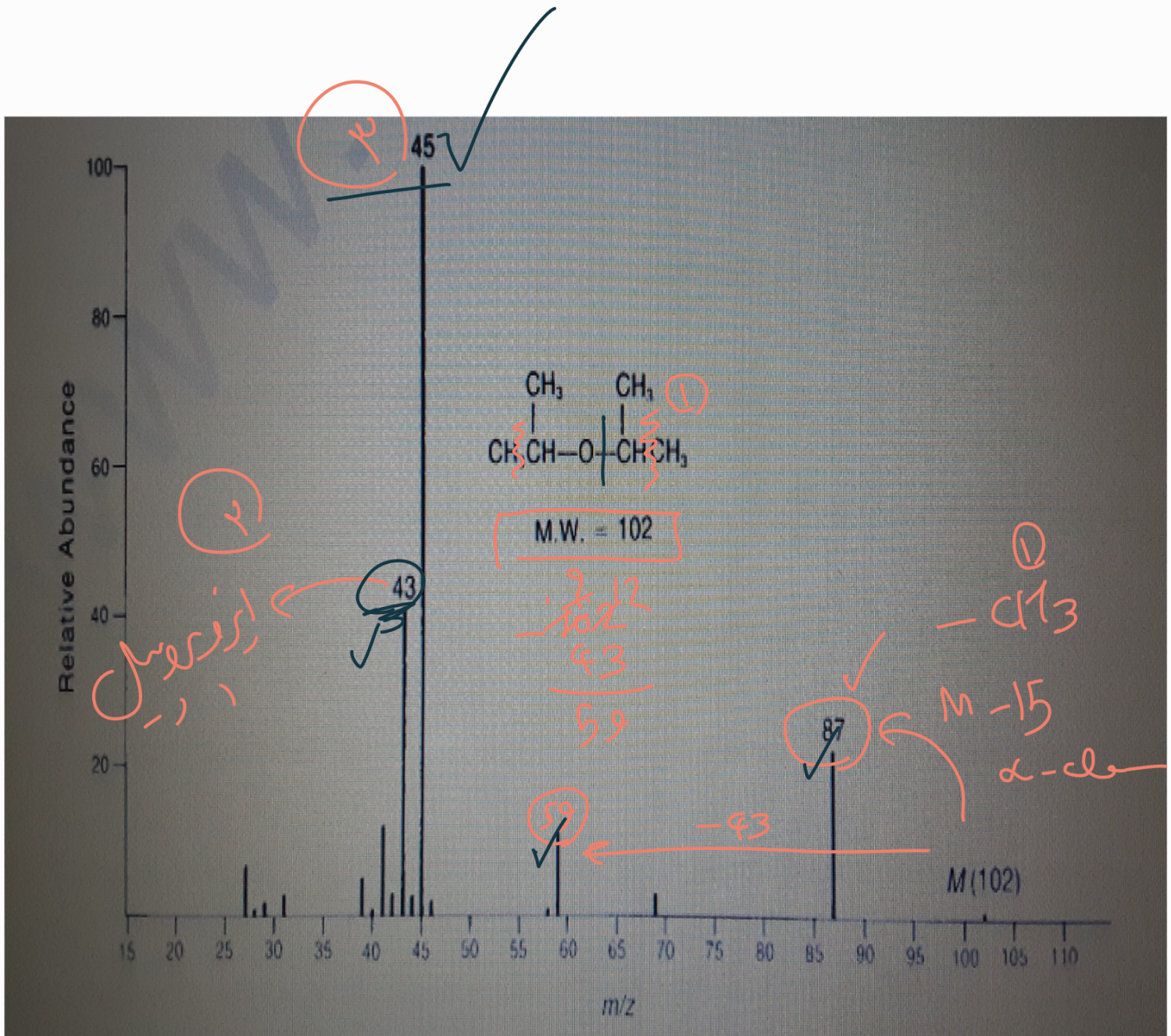
M-31

-OCH<sub>3</sub>



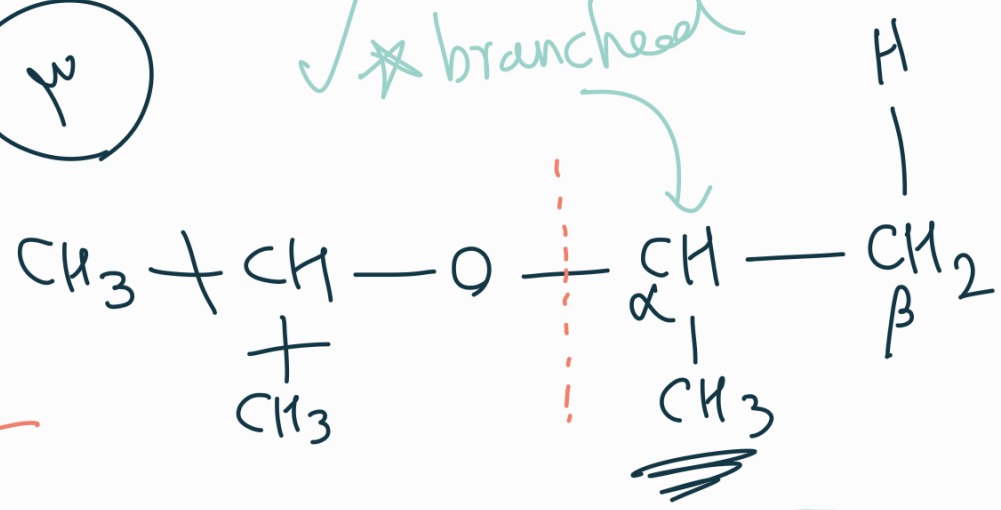


در مورد اتر ها :

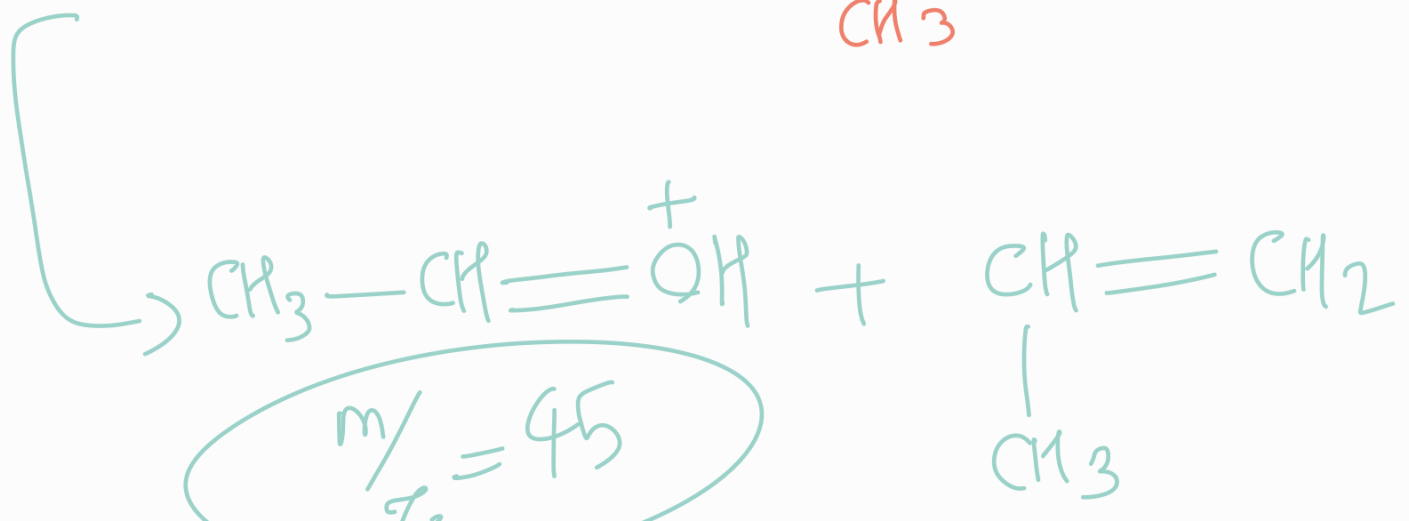
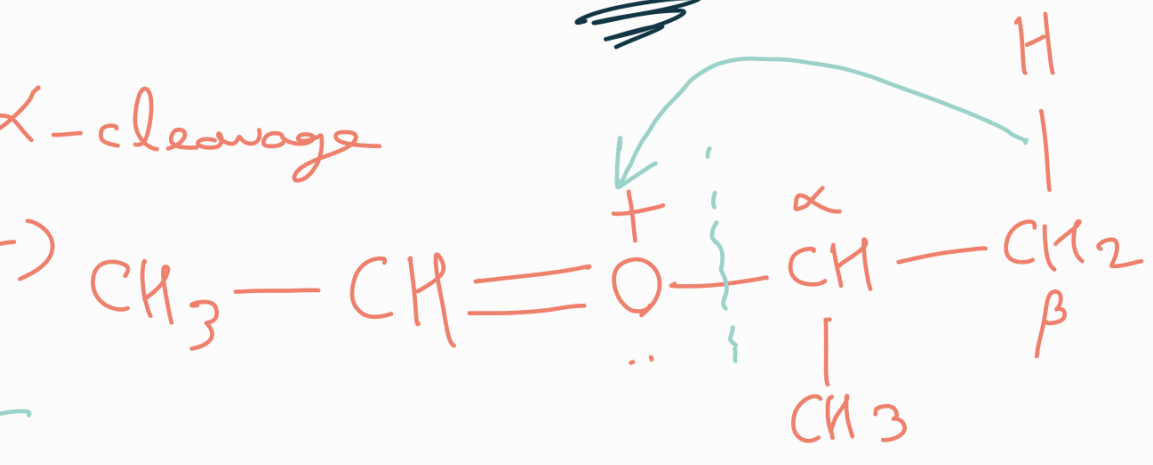


10

✓ branched

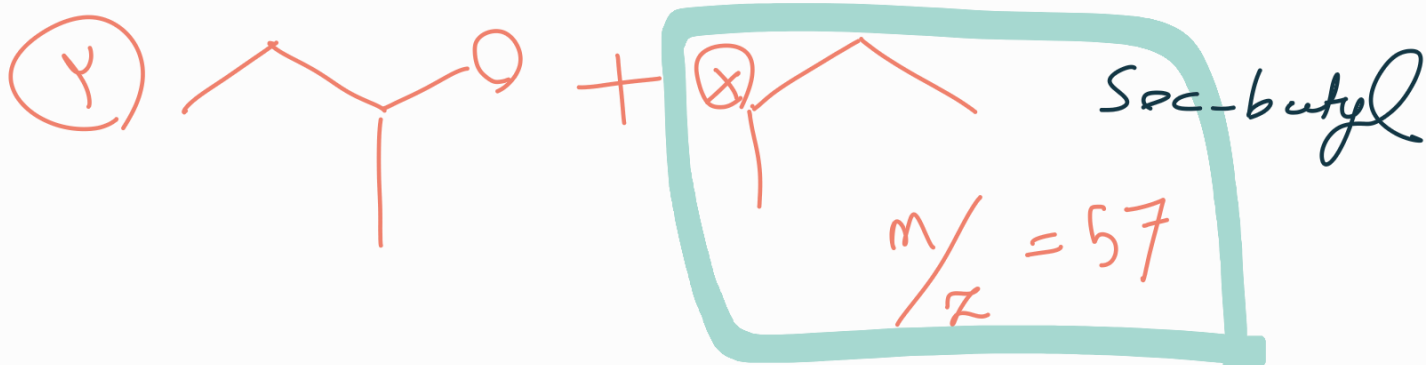
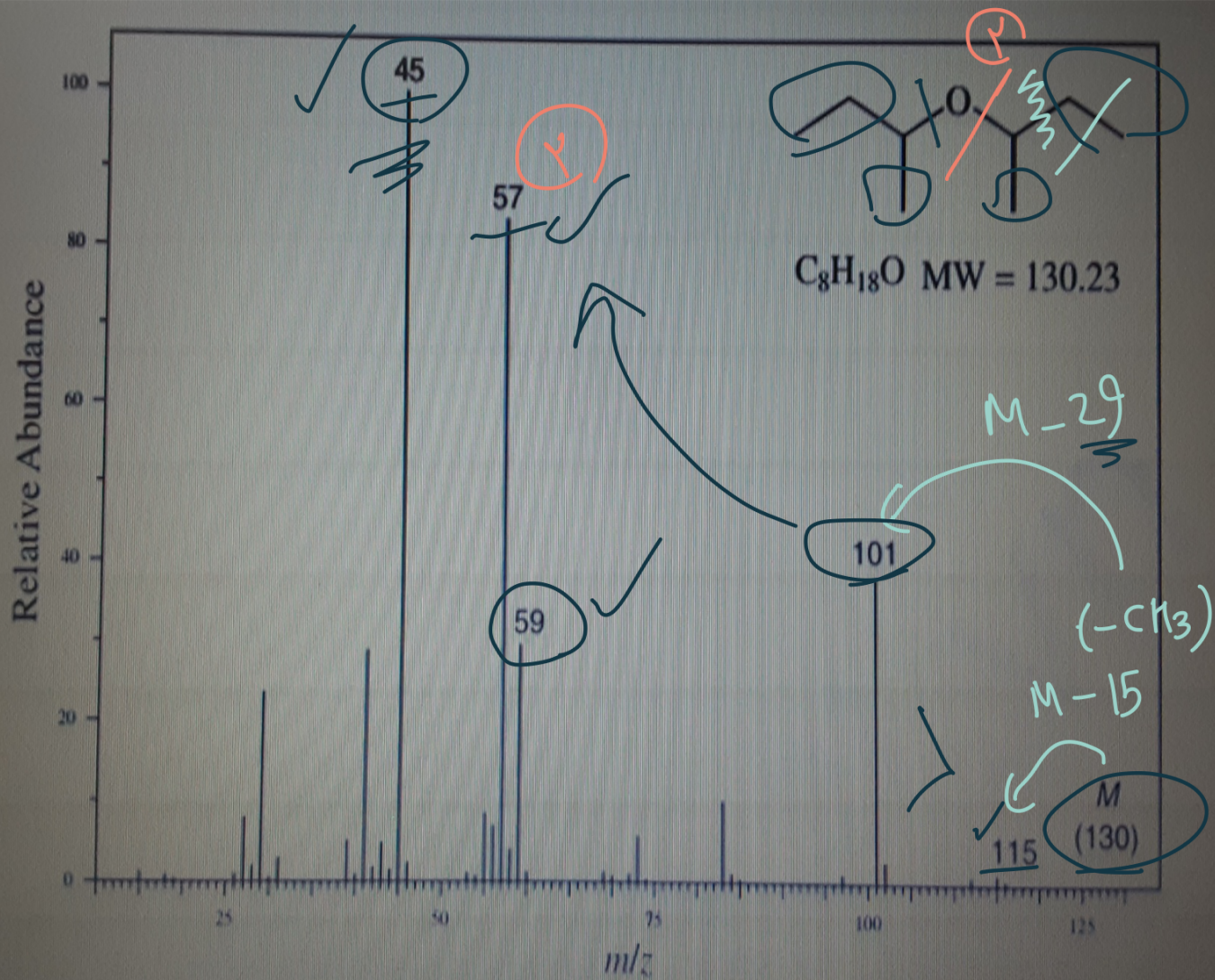


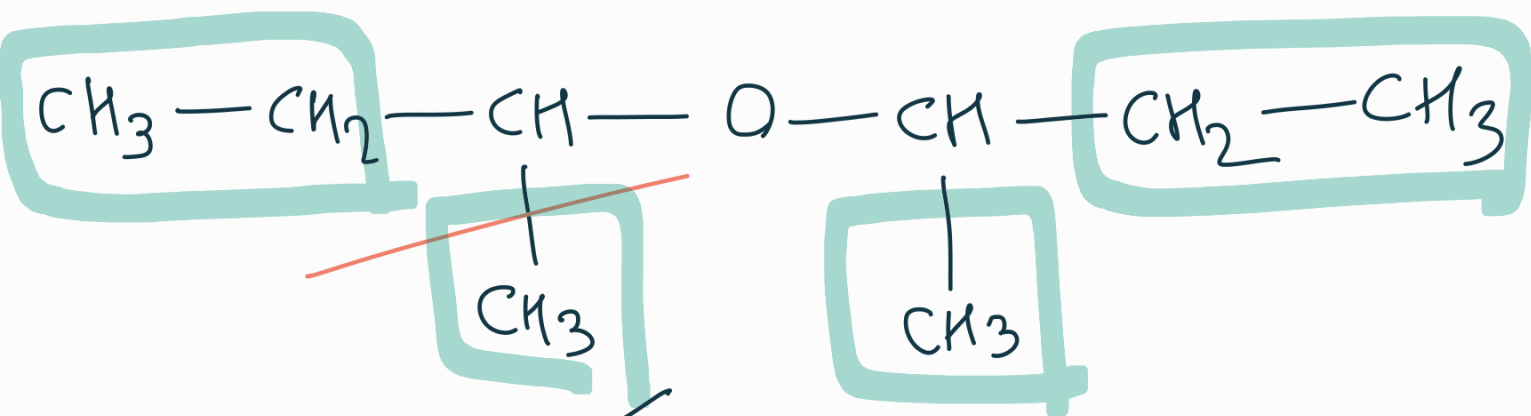
$\alpha$ -cleavage



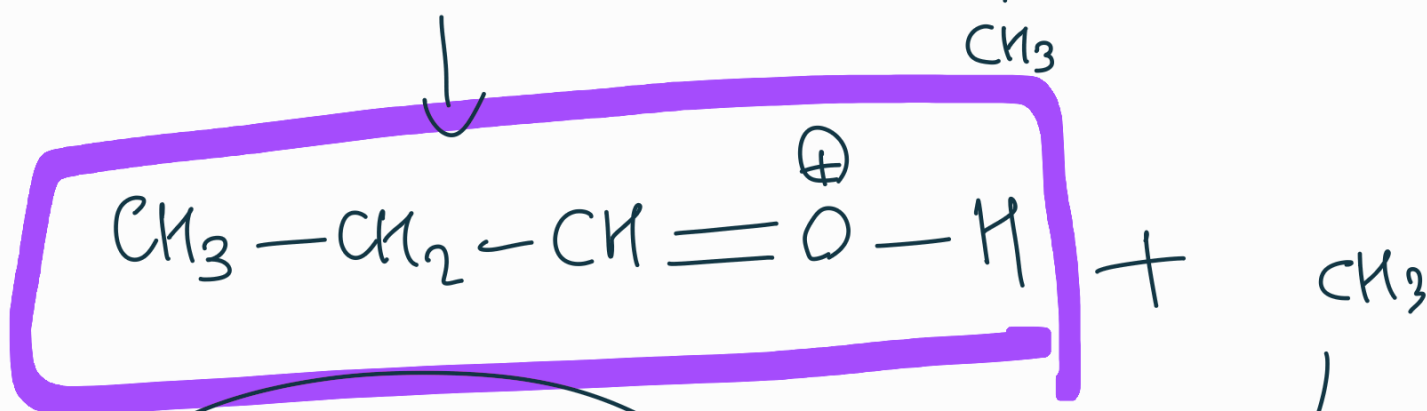
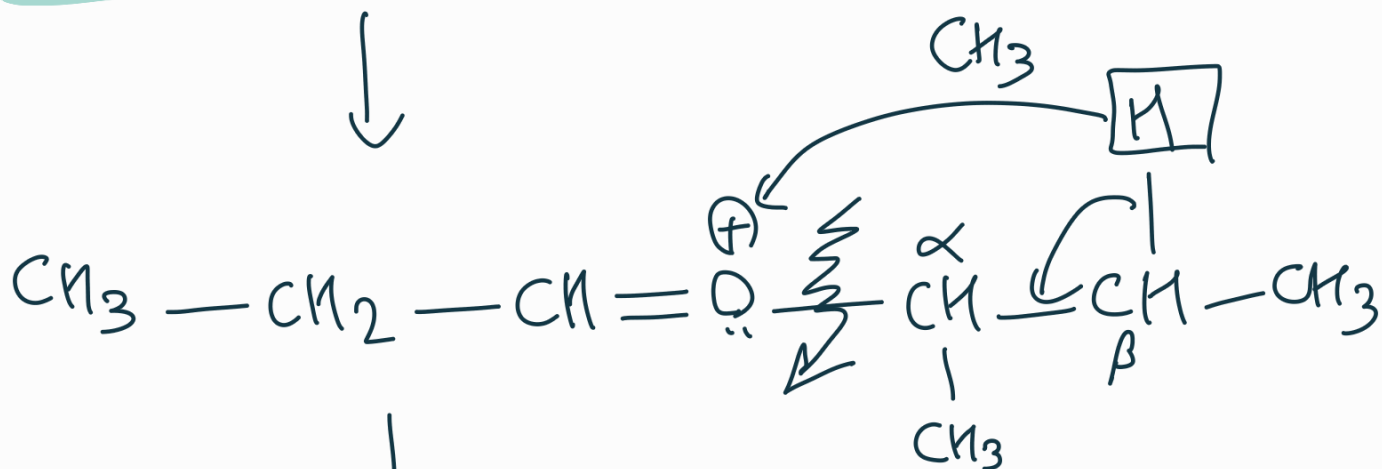
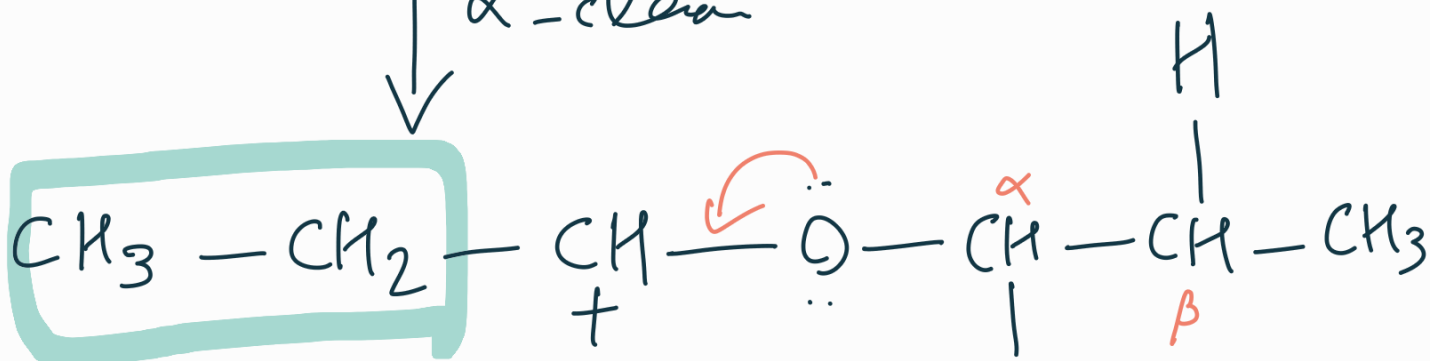
$m/z = 45$



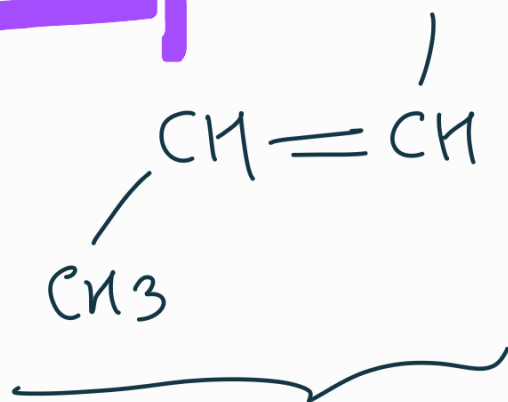


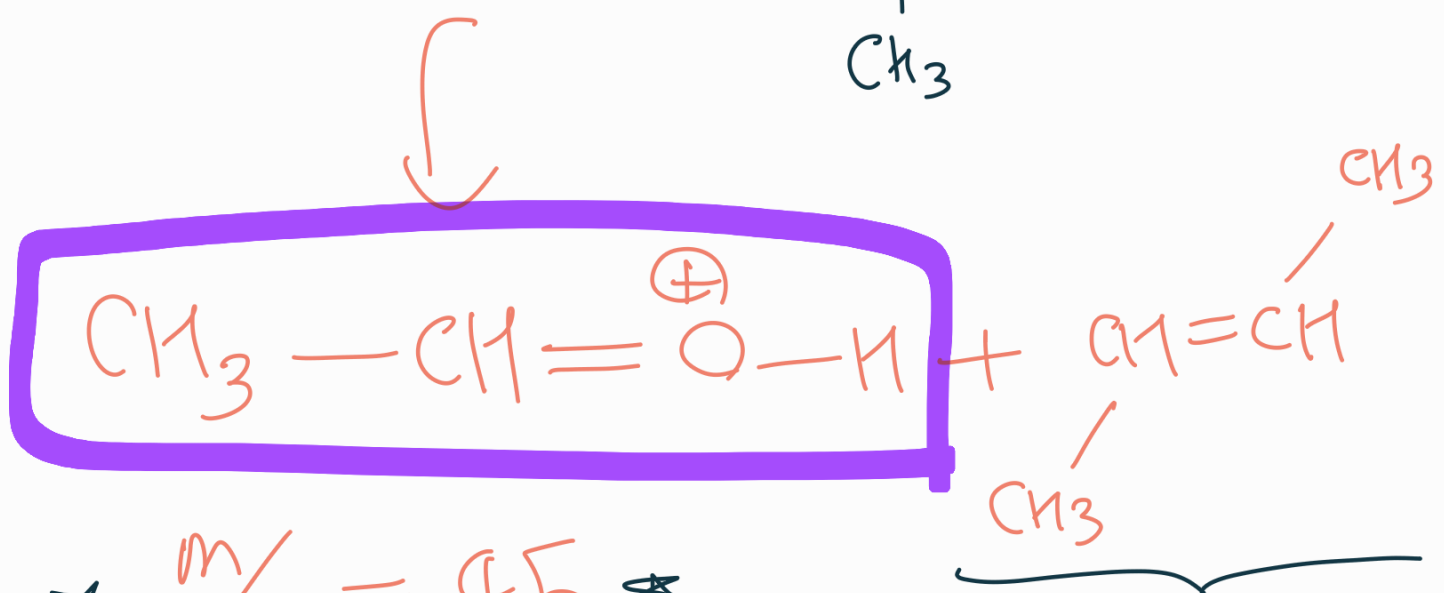
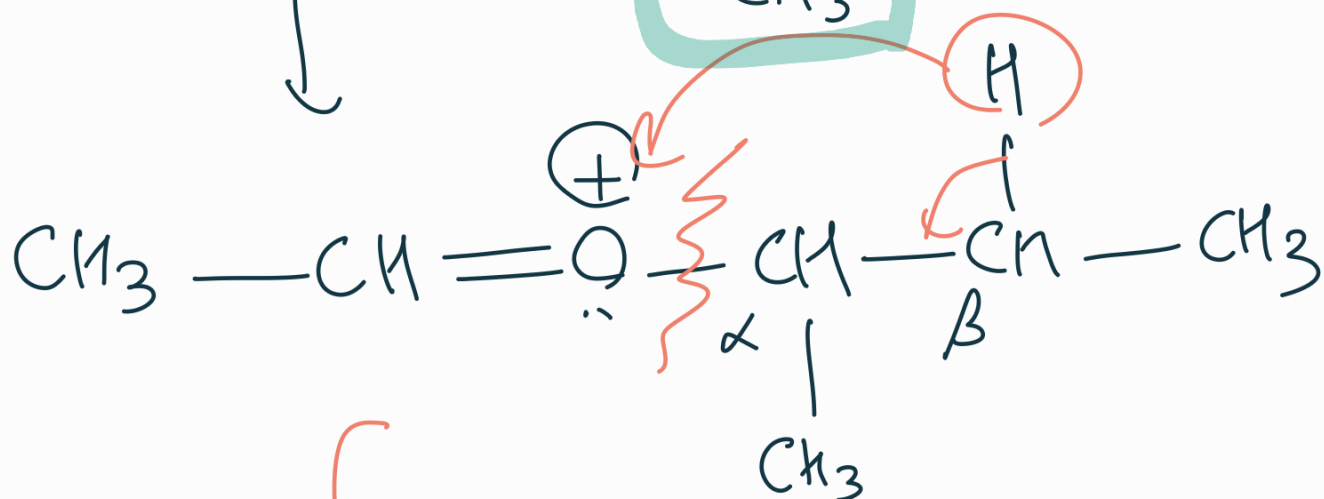
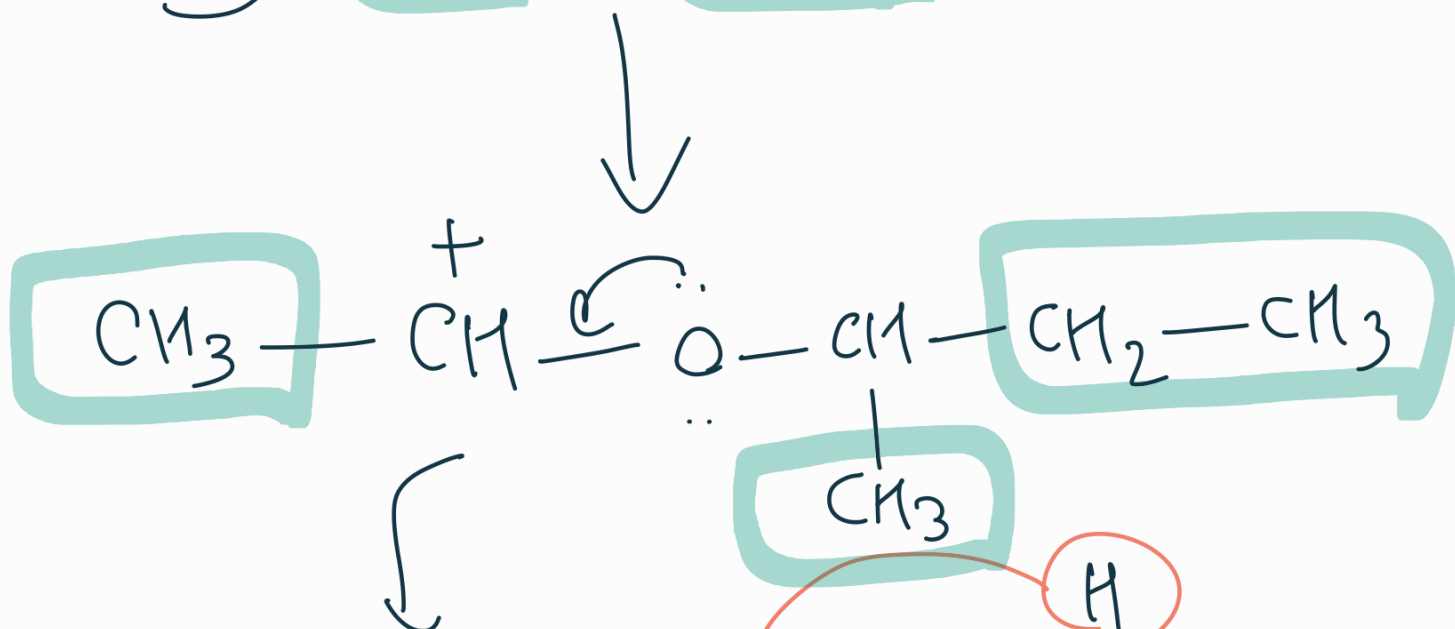


$\alpha$ -cleave



$$\frac{m}{z} = 59$$





$$\star \frac{m}{2} = 45 \star$$



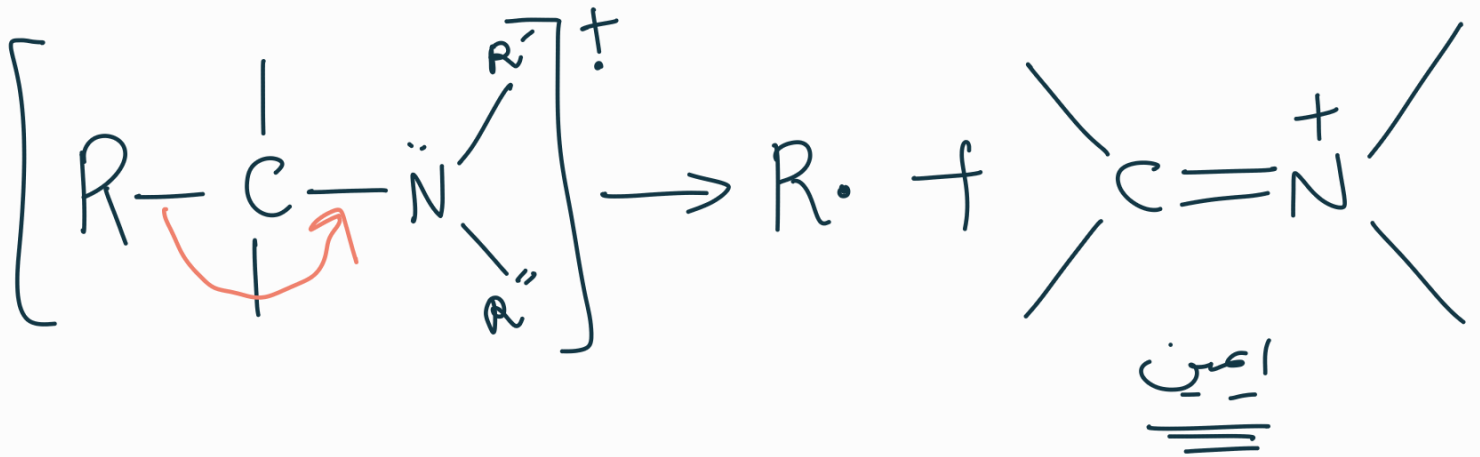
آمین ها :

یون مولکولی

نکته خنثی لهم یون :  $m/z$  آمین ها ( اگر یون نیترورن

دارند با پسند، عددی فرد هست ،

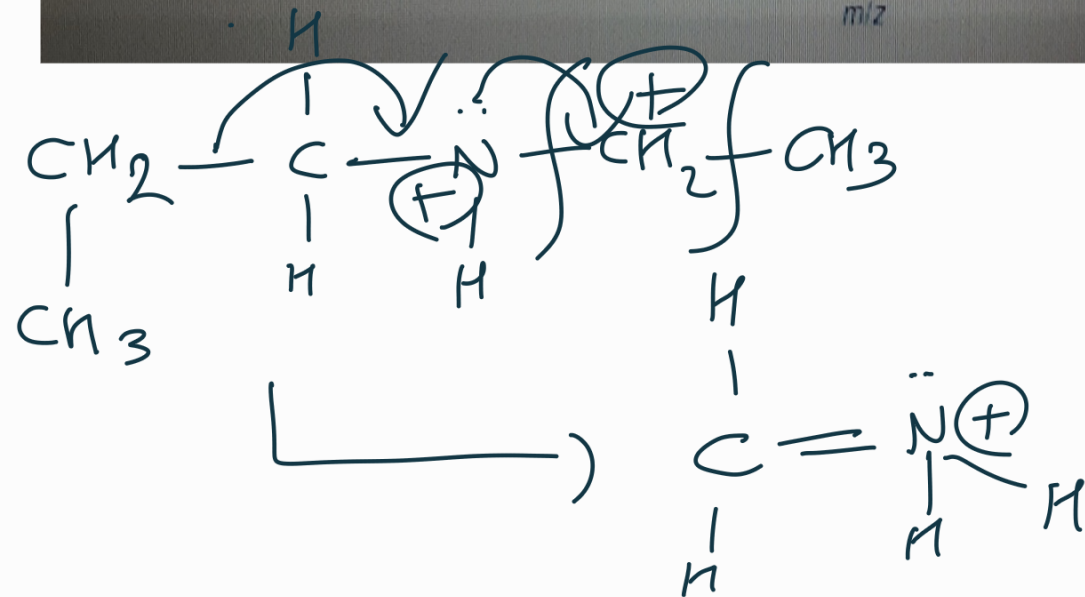
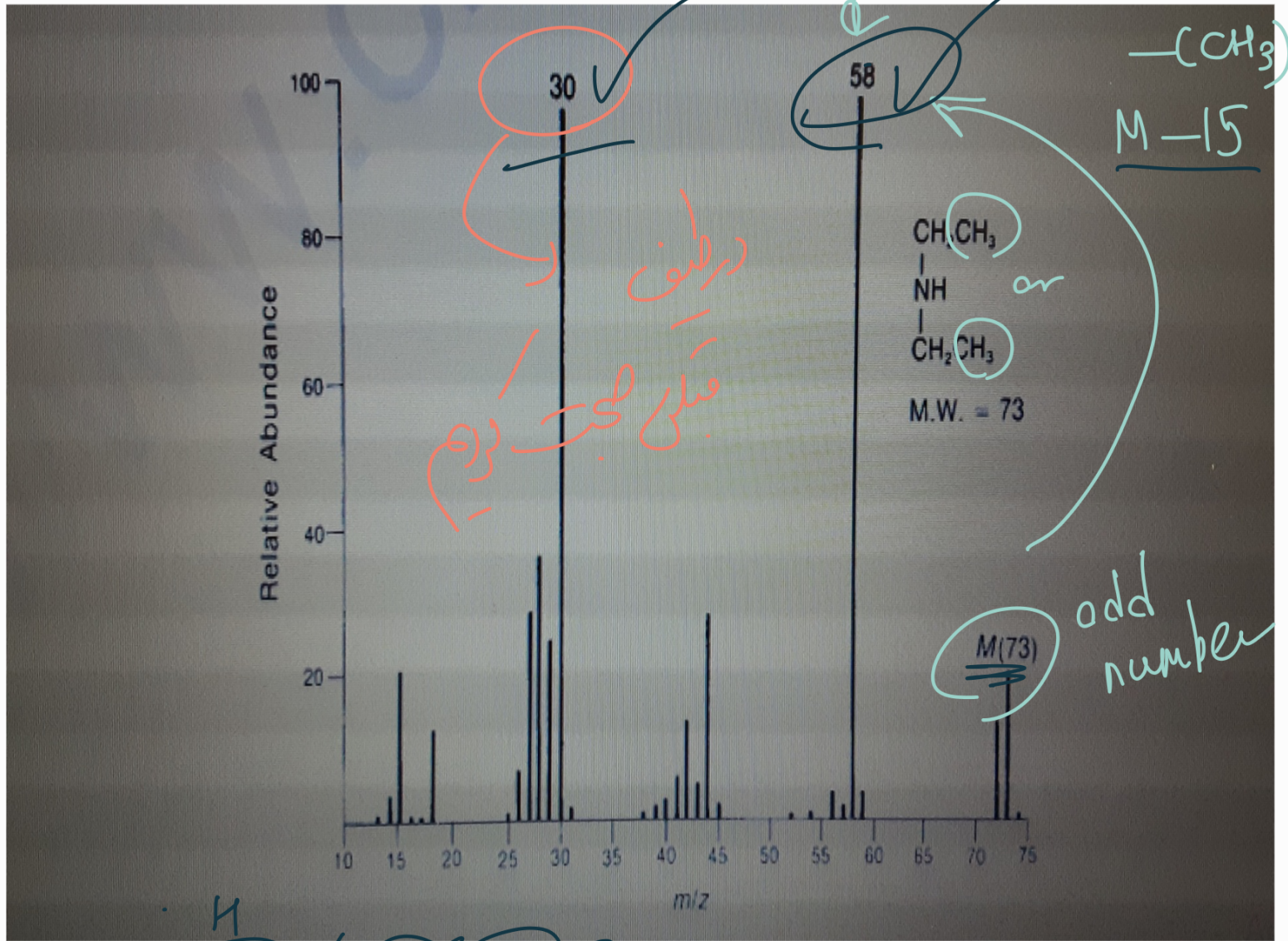
در حالیکه بقیه ترکیبات  $m/z$  یون زوجدار !  
یون مولکولی







معمولاً در آئین‌ها رنج ۲، ۳



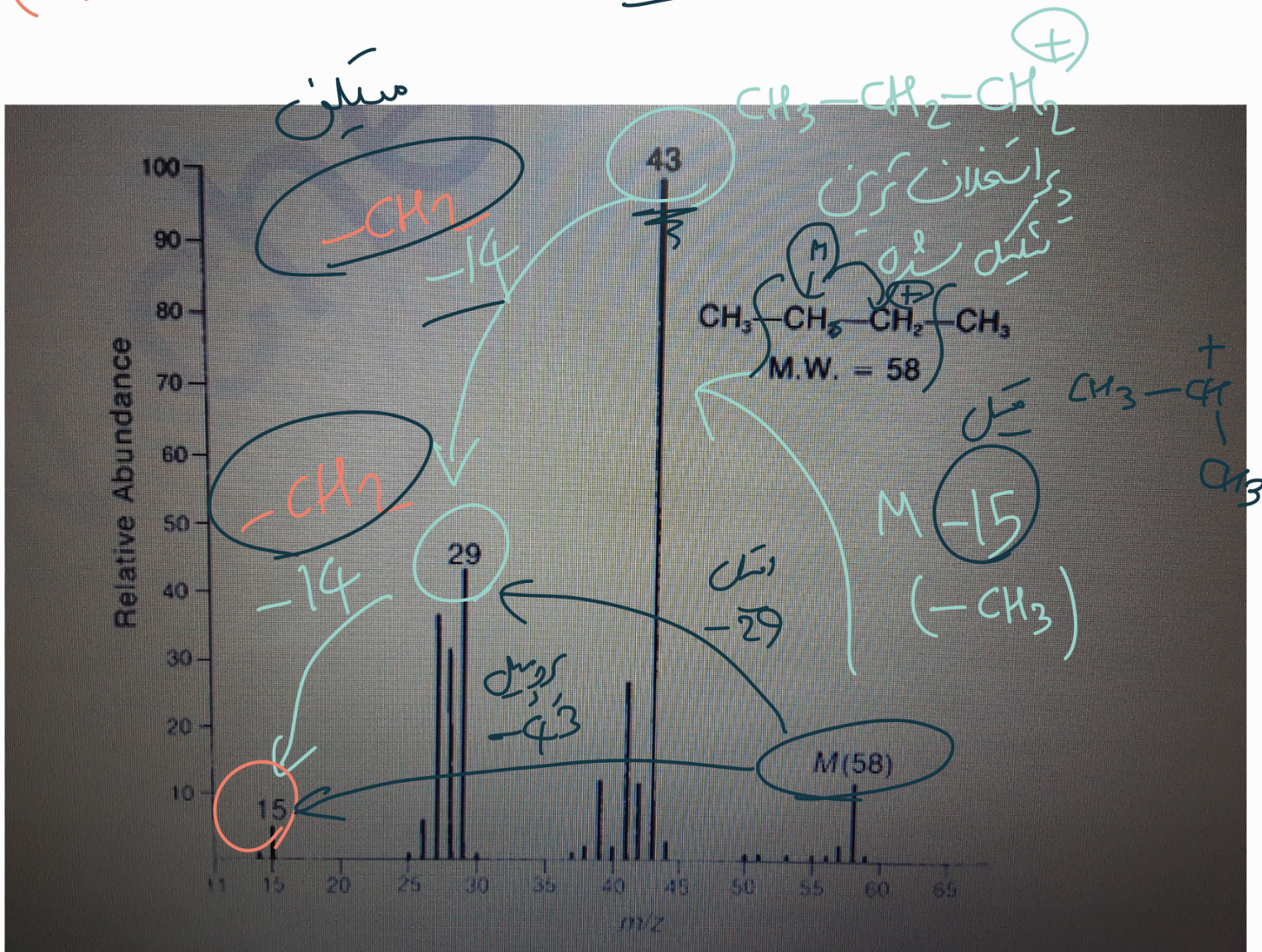


آلکان ها ، آلکن ها و آروماتیک ها :

(بحث مبدائی)

★ در مورد آلکان ها نکته خیلی مهم ، شکستن بین ها :

fragmentation با  $m/z$  14 (M-28, M-14) ...

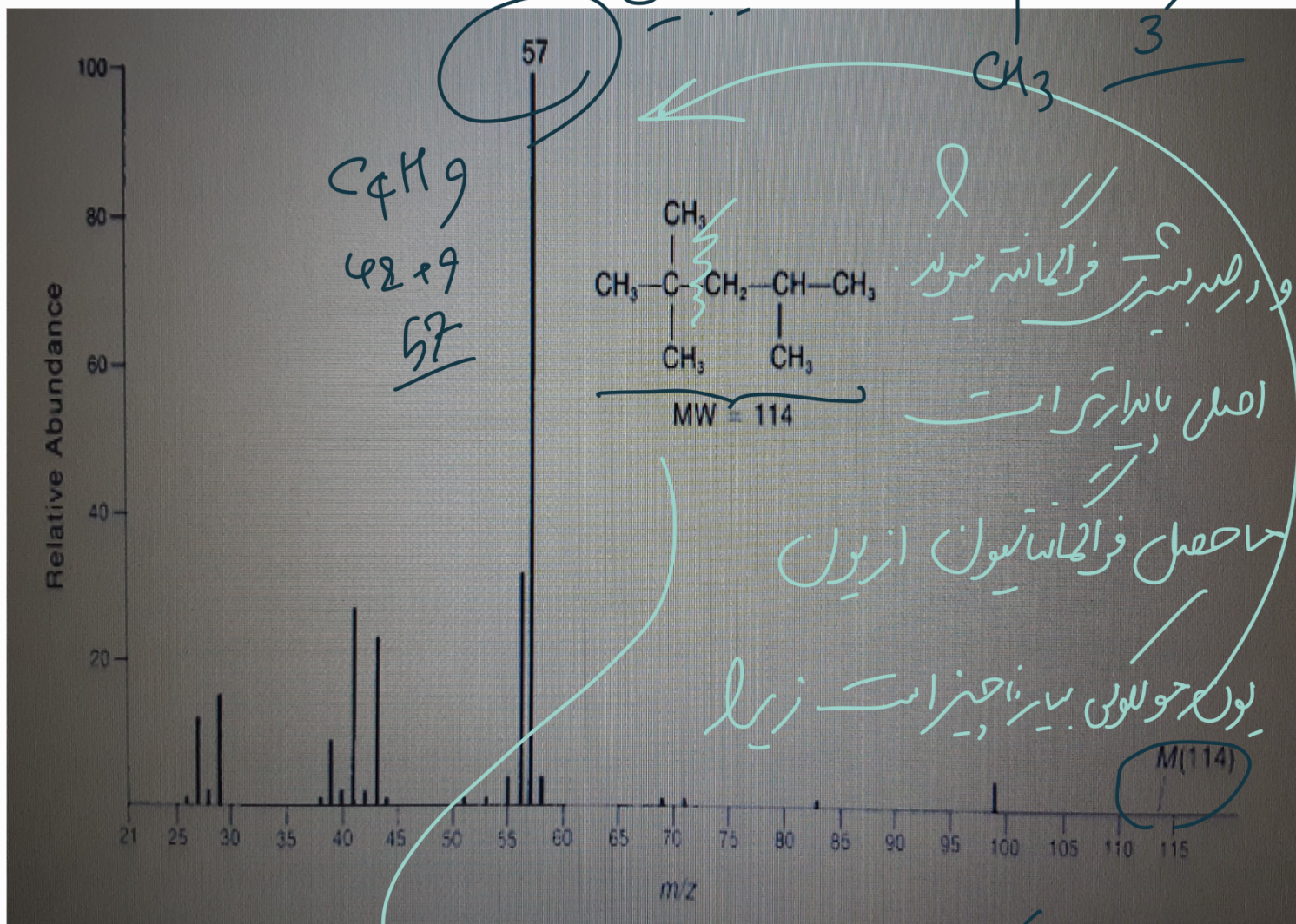
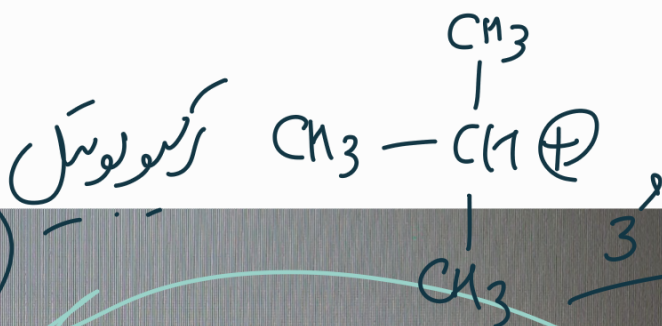


برای آلکان های خطی این مورد صدق می کند

اعداد خاص متیل ، ایل ، پروپیل و بوتیل : 15 , 29 , 43 , 57 , 71 , 85 , ...



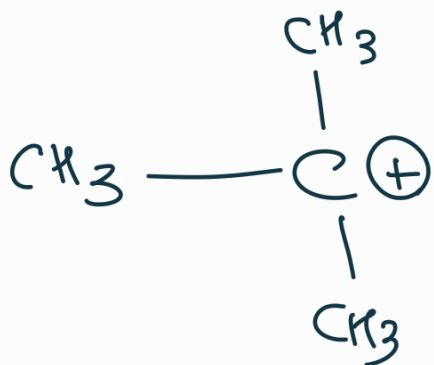
جزر اعوار طرای اکتان  
هائے



در این بخش تشکیل یون کتیو یون

بسیار مایه برتر از یون مکتوبی است زیرا

بیشترین مقدار از این را به خود اختصاص میدهد



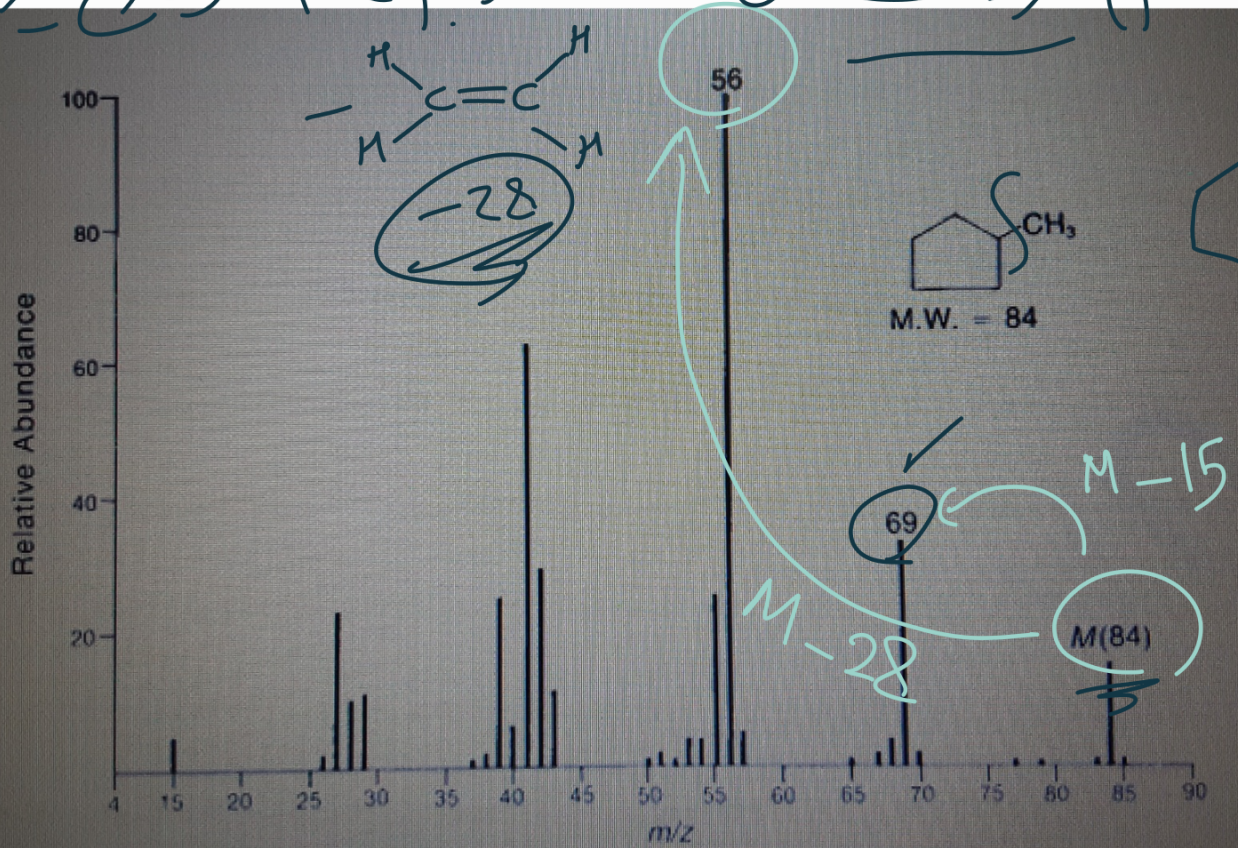
تربو کاتیون نوع سوم



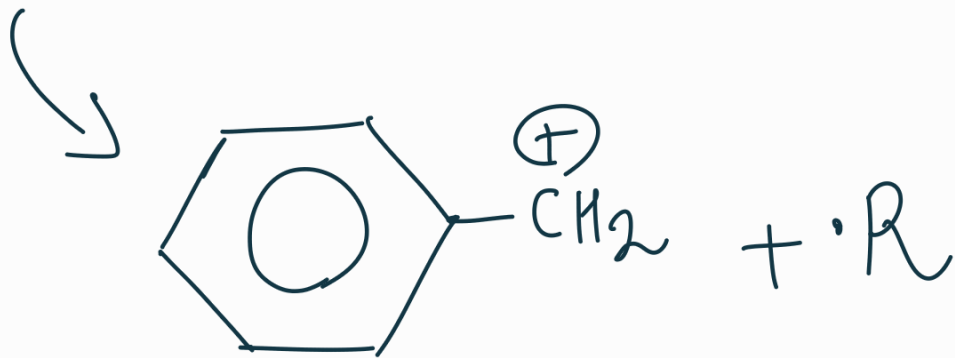
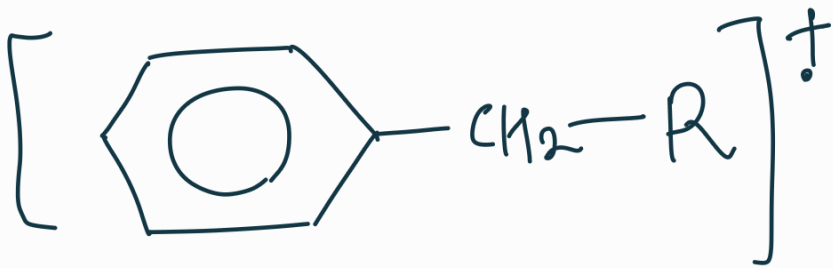
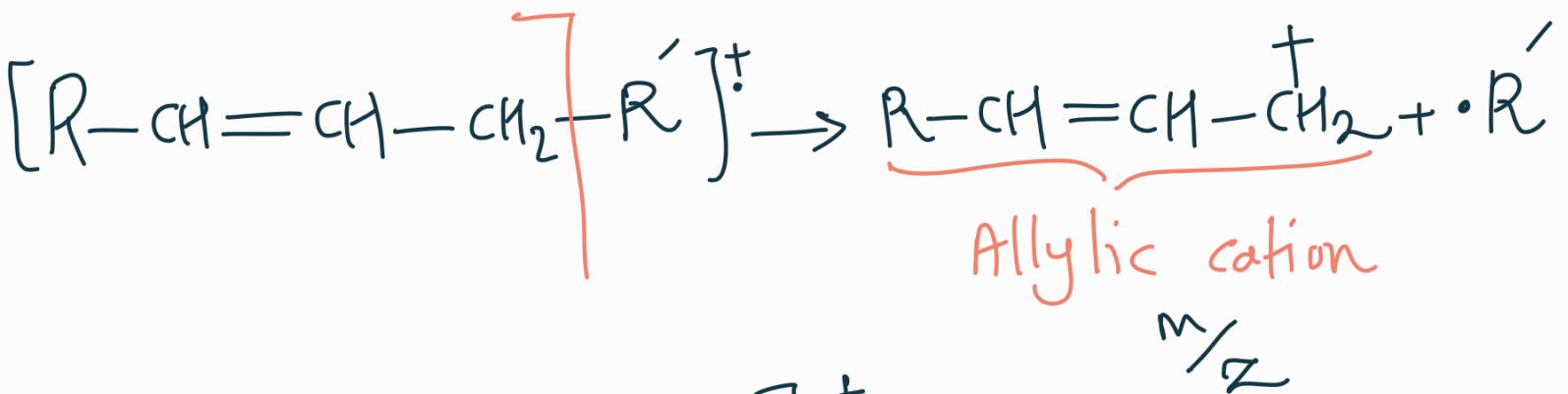
در مورد آلکان حلقوی ها:

نکته اول: یون مولکولی قوی می رهند چون حلقه معیولی دوست ندارند!

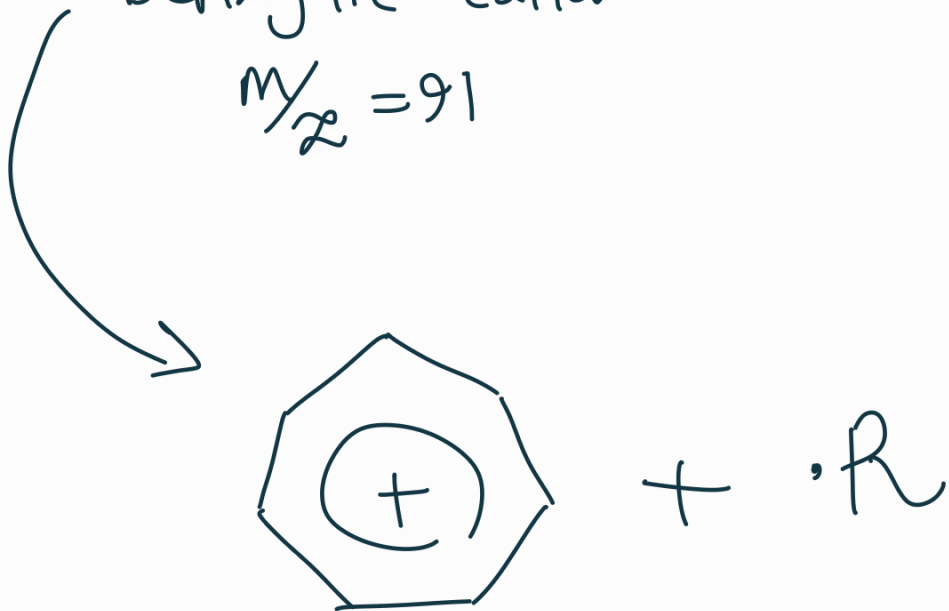
نم // از دست دادن ethene (م 28) معیولی رخ میدهد و خالی می باشد



Alkenes و أروحاتك :  
Alkenes

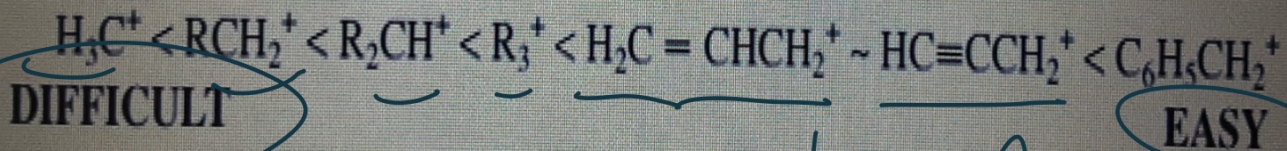


benzylic cation  
 $m/z = 91$



tropylium ion  
 $m/z = 91$

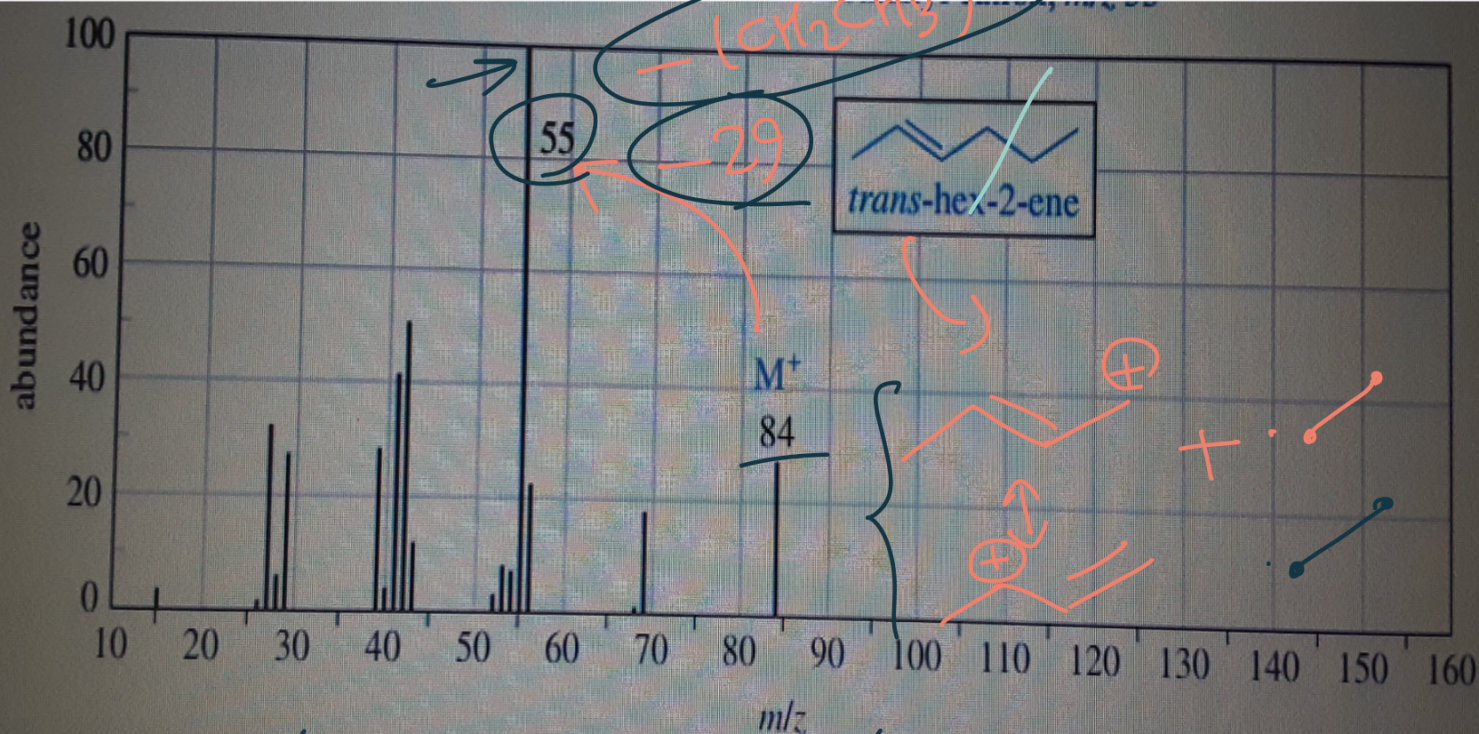




DIFFICULT

EASY

Stevensons rule

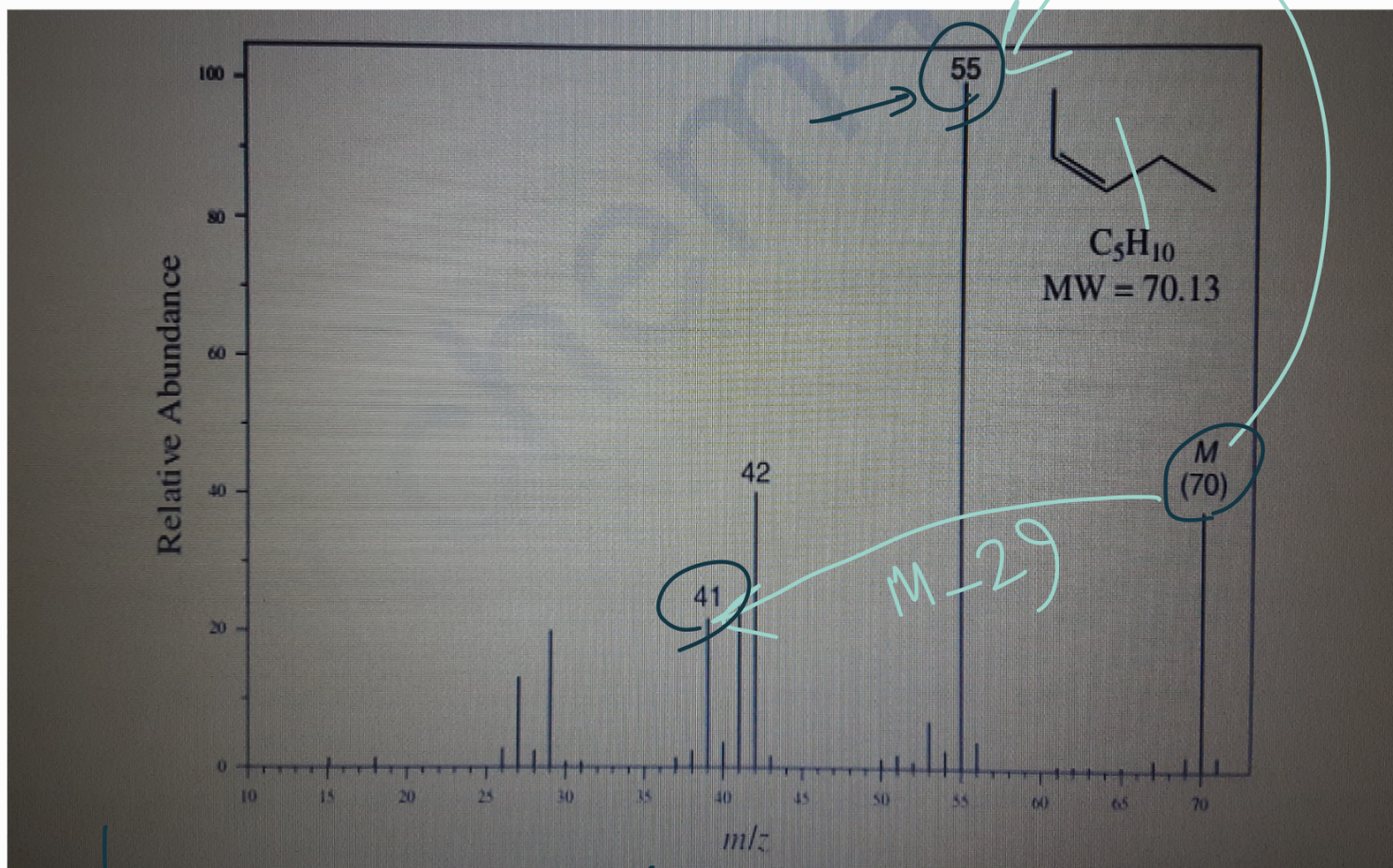


۲۷ رتورالکن ها، محل شکست از جایی است که  
کاتیون allylic تشکیل شود.

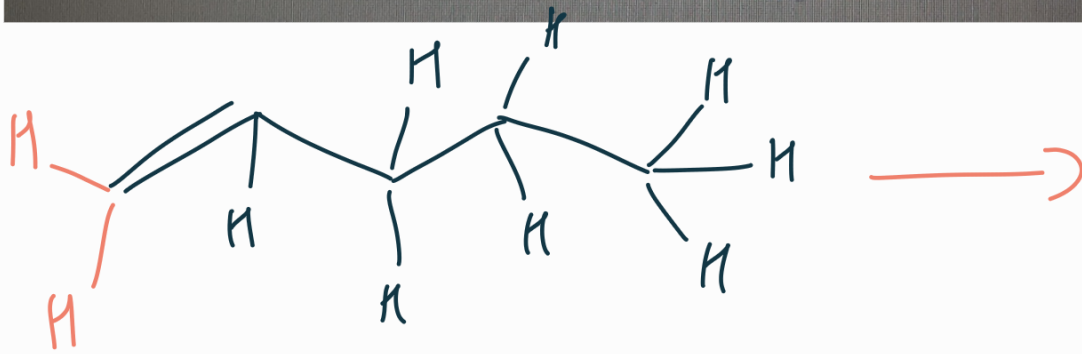
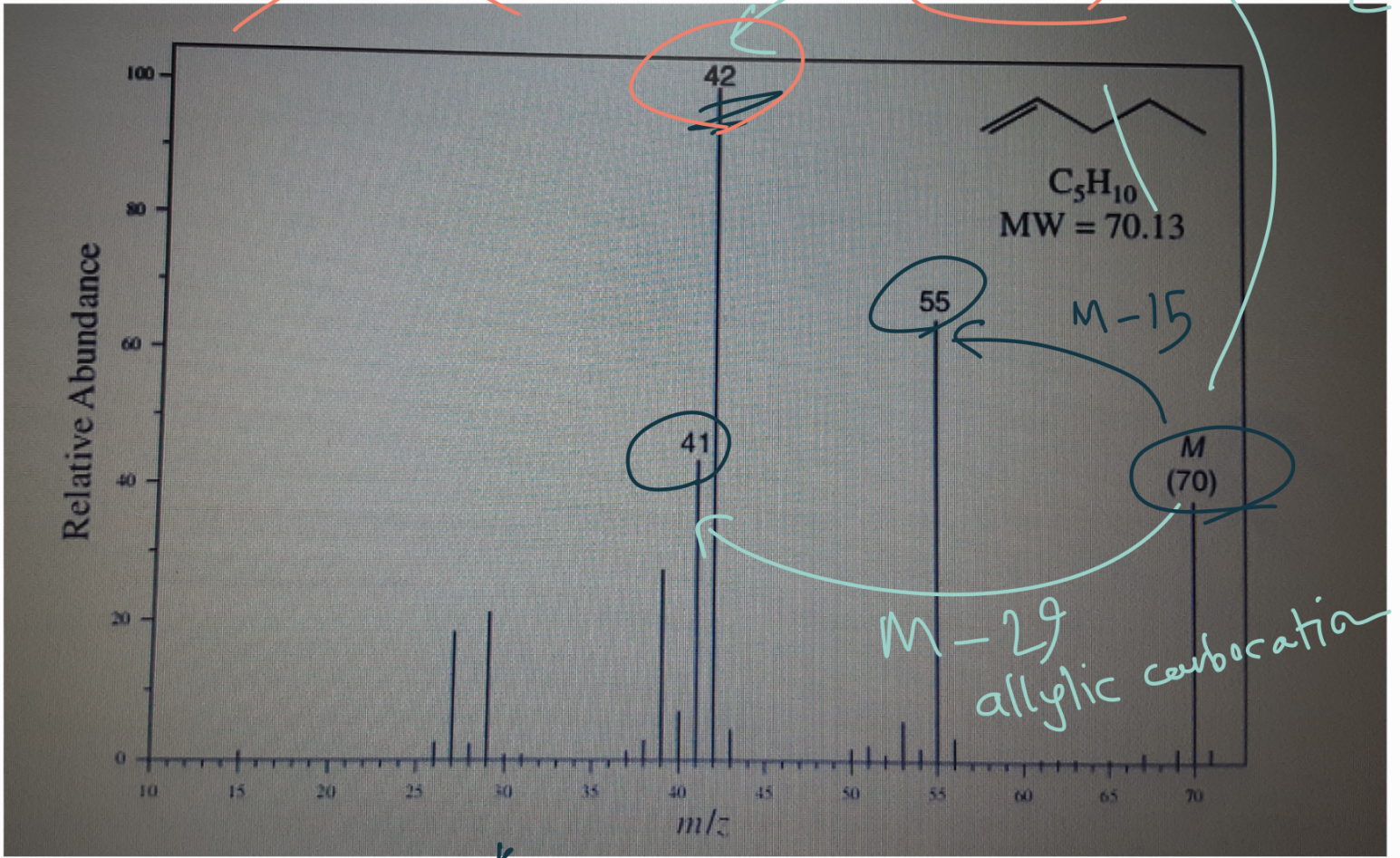
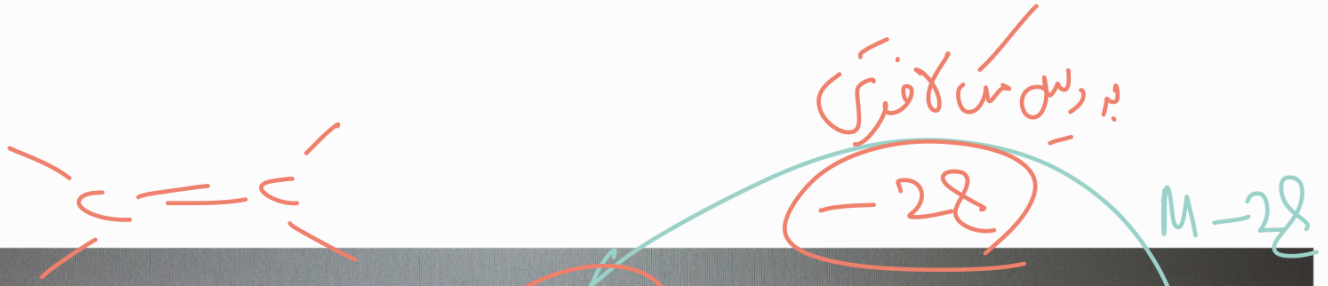


$-(CH_3)$

$M-15$



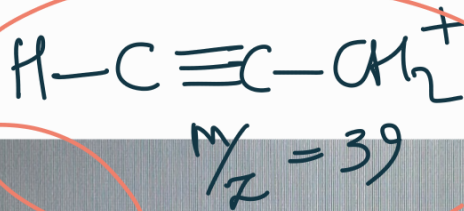




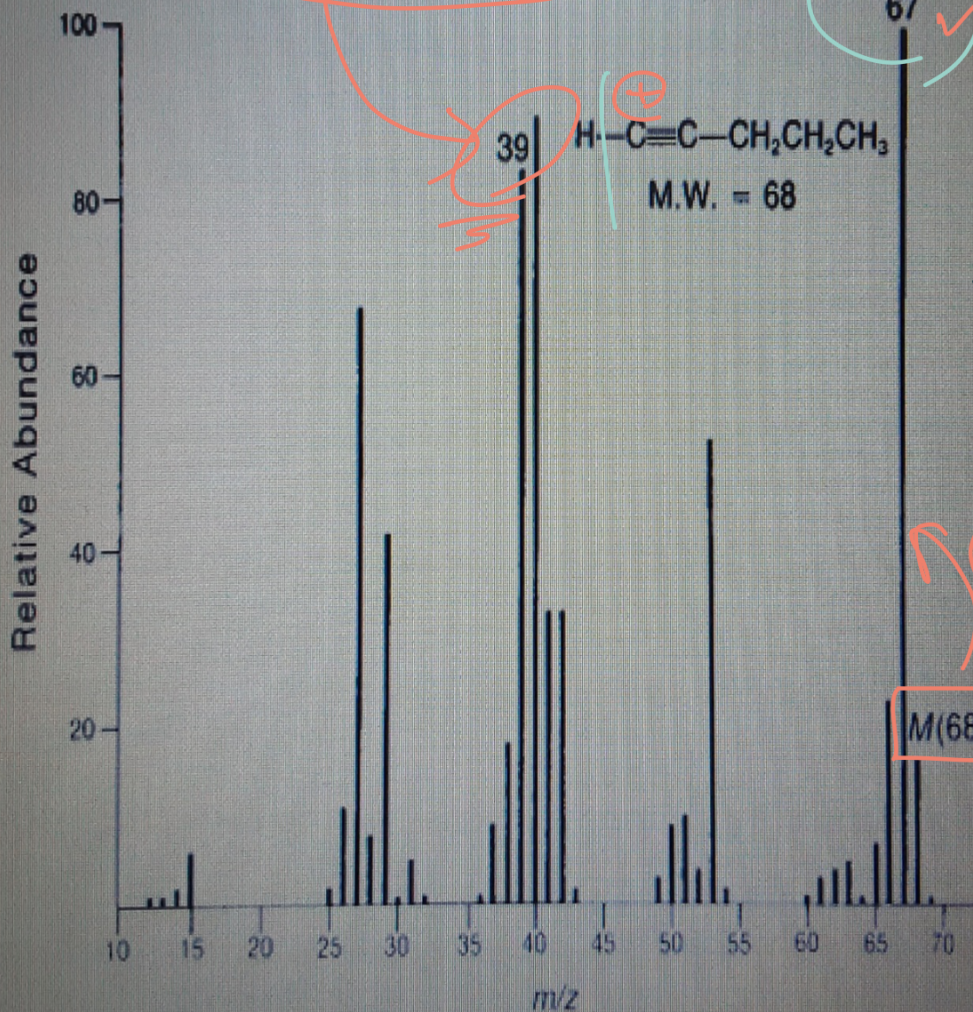


# Alkyne

propargyl  
 یون پروپارگیل



از دست دادن  
 هیدروژن  
 انتهای



اغلب  
 در

Terminal  
 alkyne

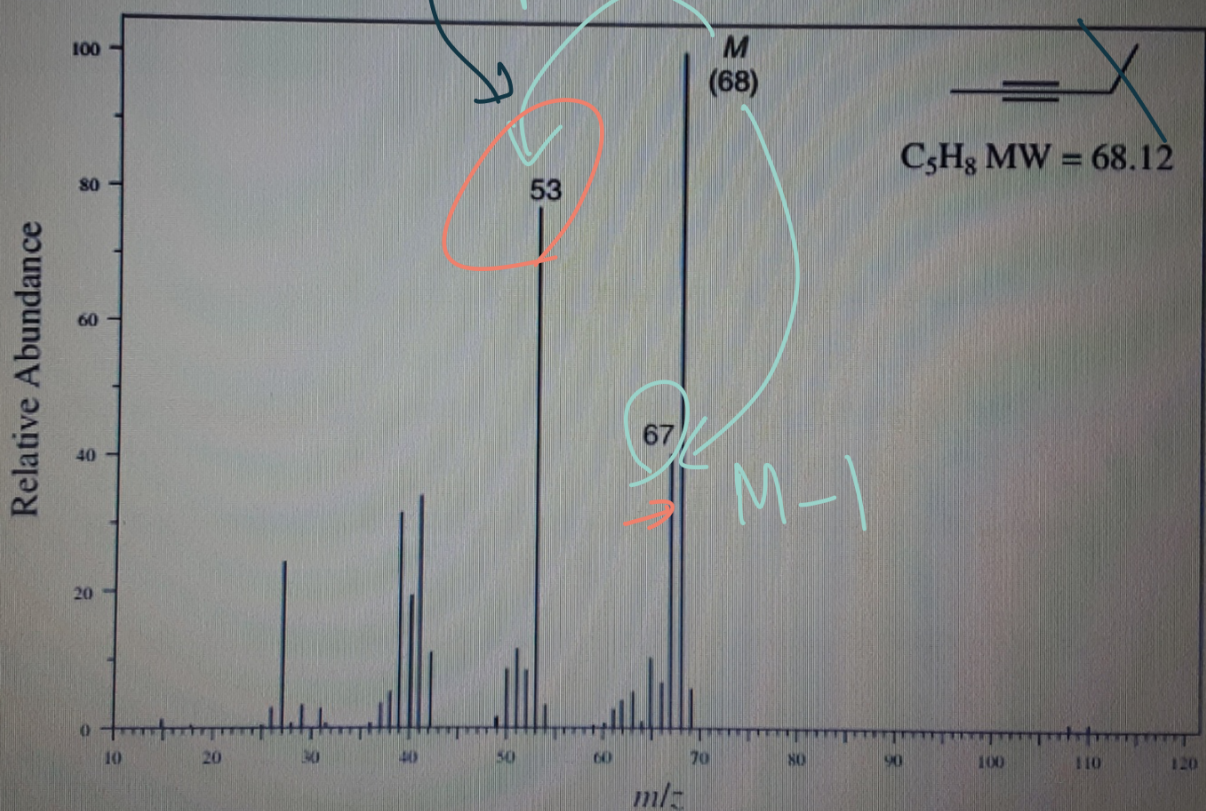
M-1

M(68)



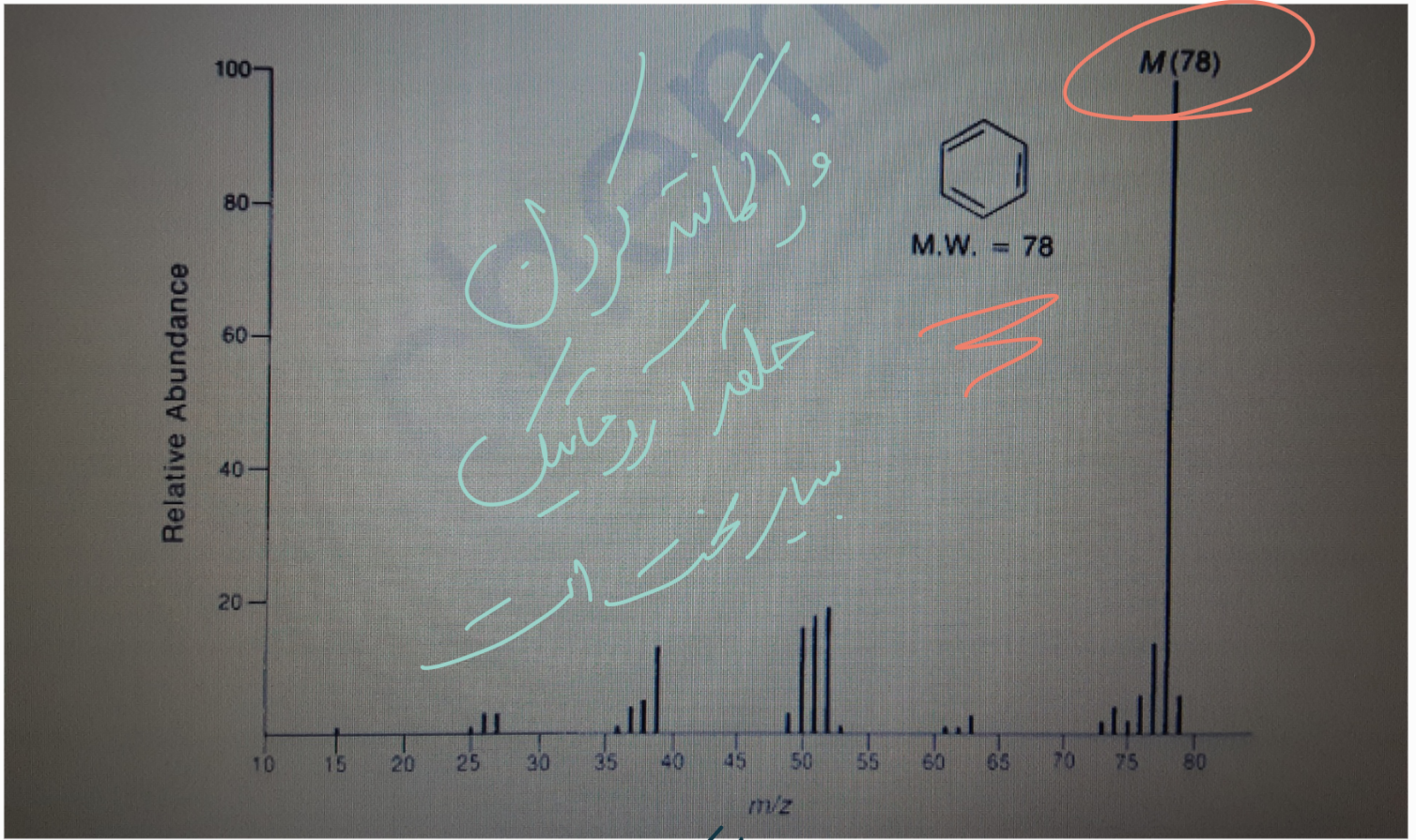
propargylic cation

M-15



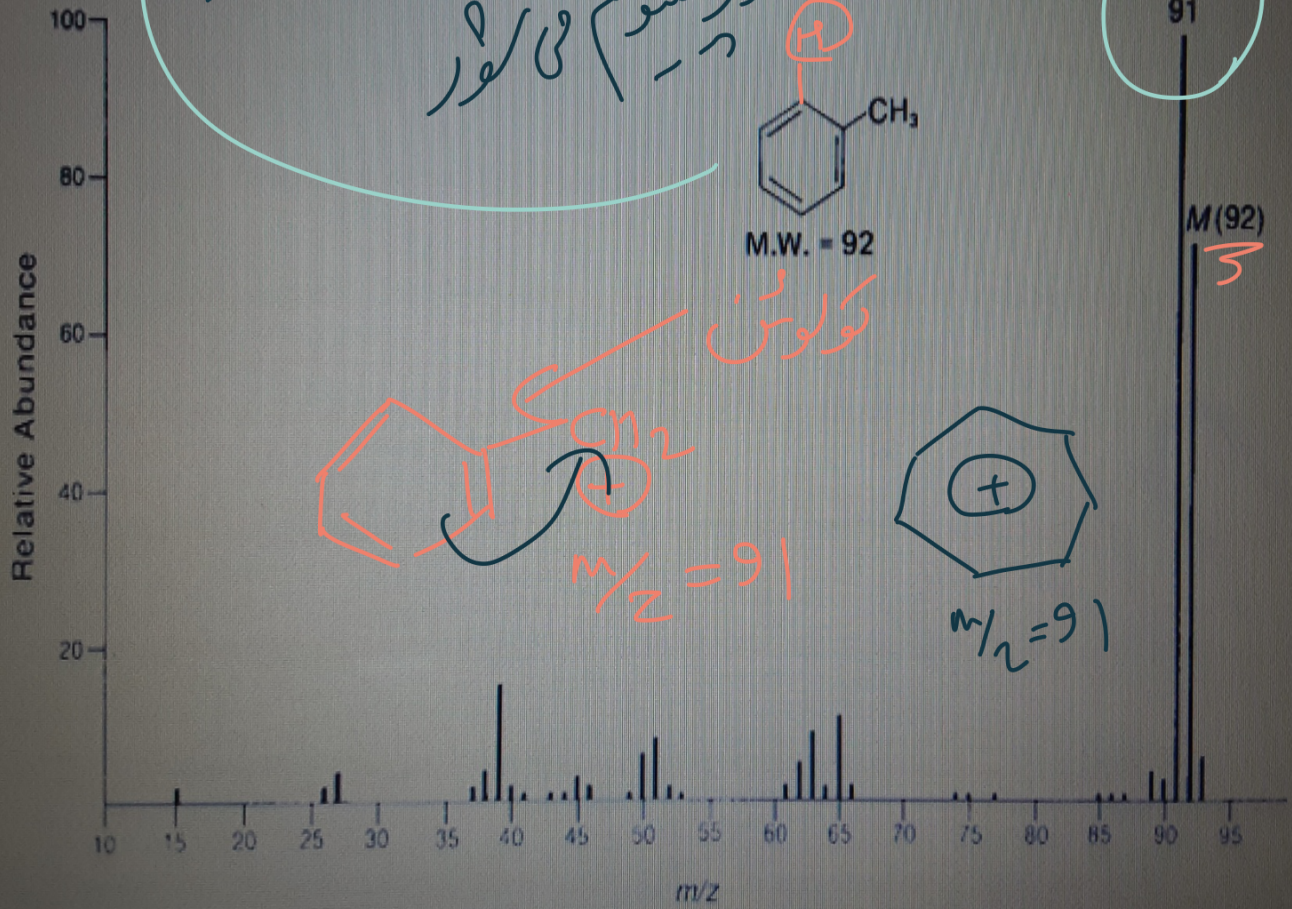


در مورد آروماتیک ها :



☆ بخاطر همین یون مولکولی در پی ایجاری سور و ☆  
فرمانت ها کجک می باشند

می توانیم دلیل از دست دادن  
 اتم هیدروژن یا متیل بنزین کاتین با این  
 که متیل به کرومیلوم می خورد





شکل تروپیلین

