

### Αλκοόλες.

Η ένταση του  $M^+$  για  $RCH_2OH$  ή  $RR'CHOH$  είναι πολύ μικρή, ενώ στις  $RR'R''COH$  συνήθως το  $M^+$  δεν φαίνεται. Η απόσπαση  $H_2O$  γίνεται είτε από γειτονικές θέσεις είτε μετά από μετάθεση McLafferty. Απόσπαση  $R'$  γίνεται συνήθως με  $\beta$ -διάσπαση.

#### SPECTRAL ANALYSIS BOX — Alcohols

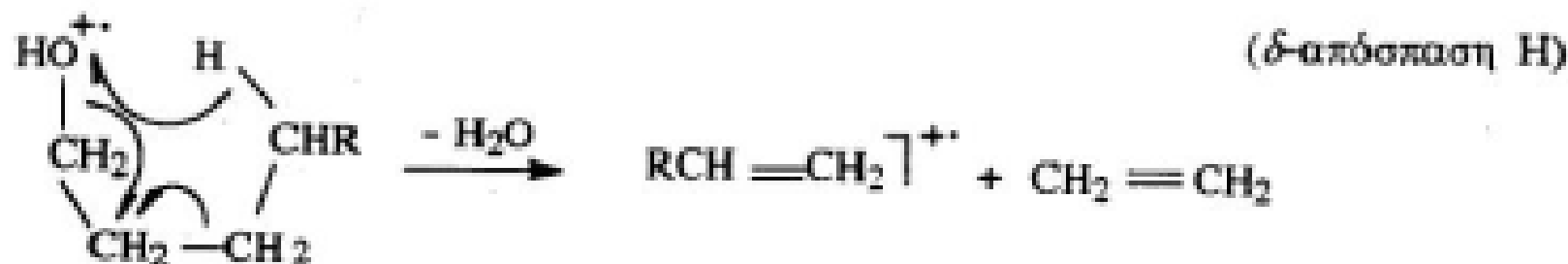
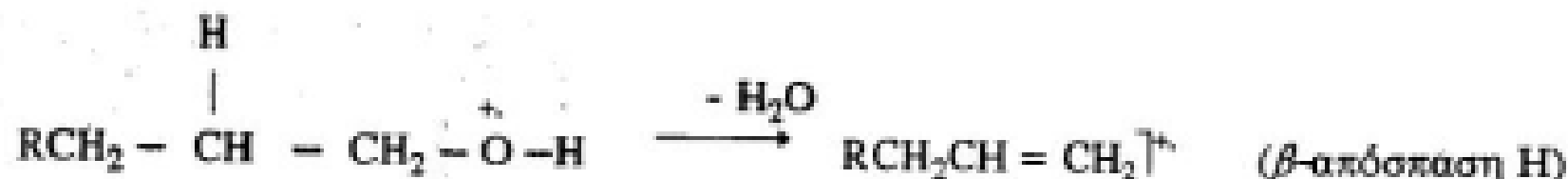
##### MOLECULAR ION

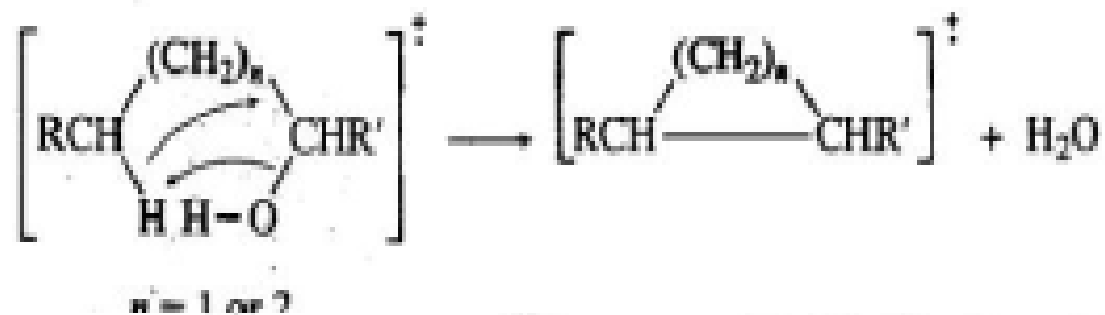
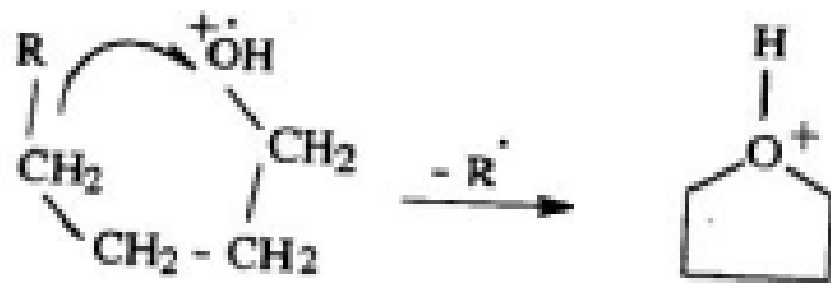
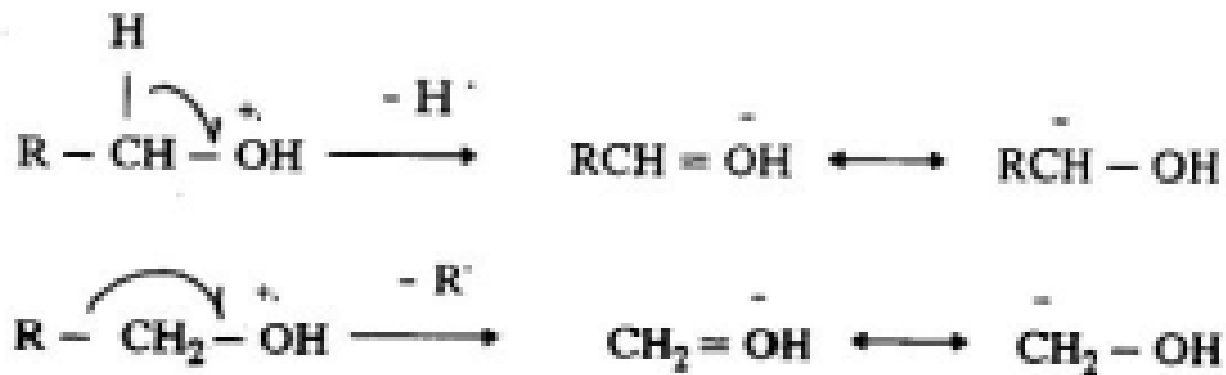
$M^+$  weak or absent

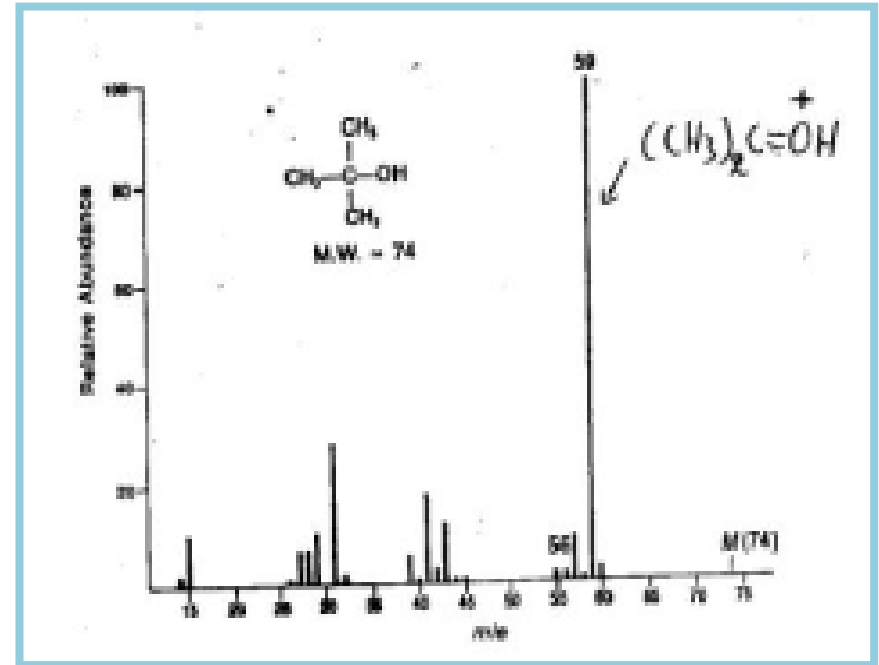
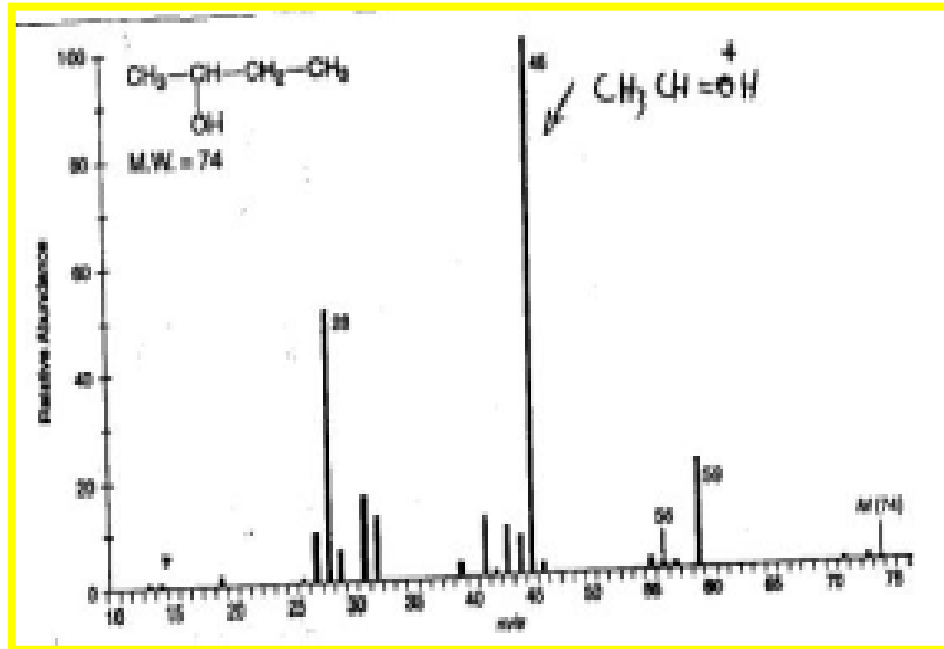
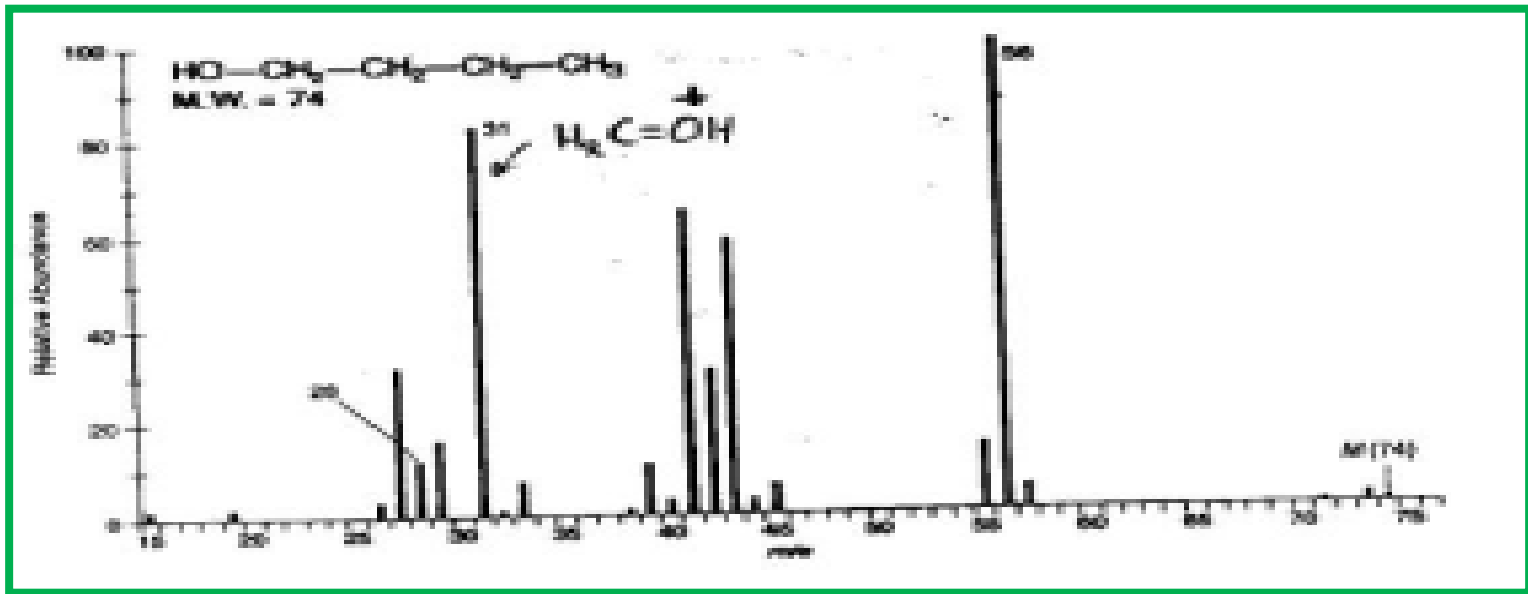
##### FRAGMENT IONS

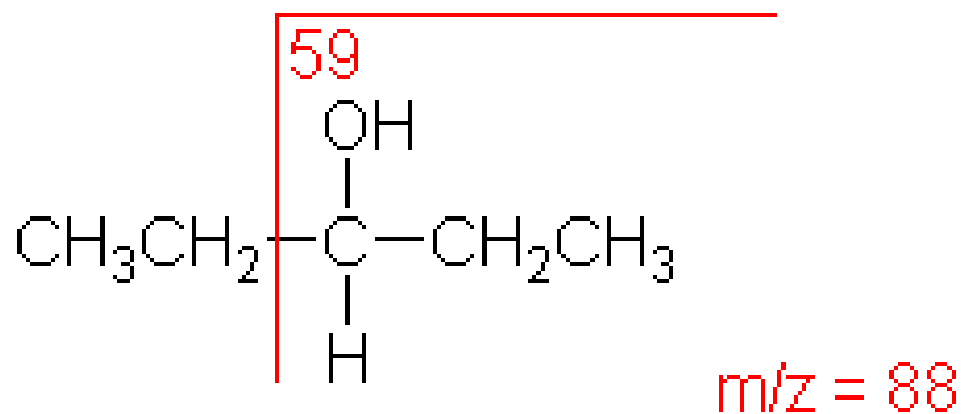
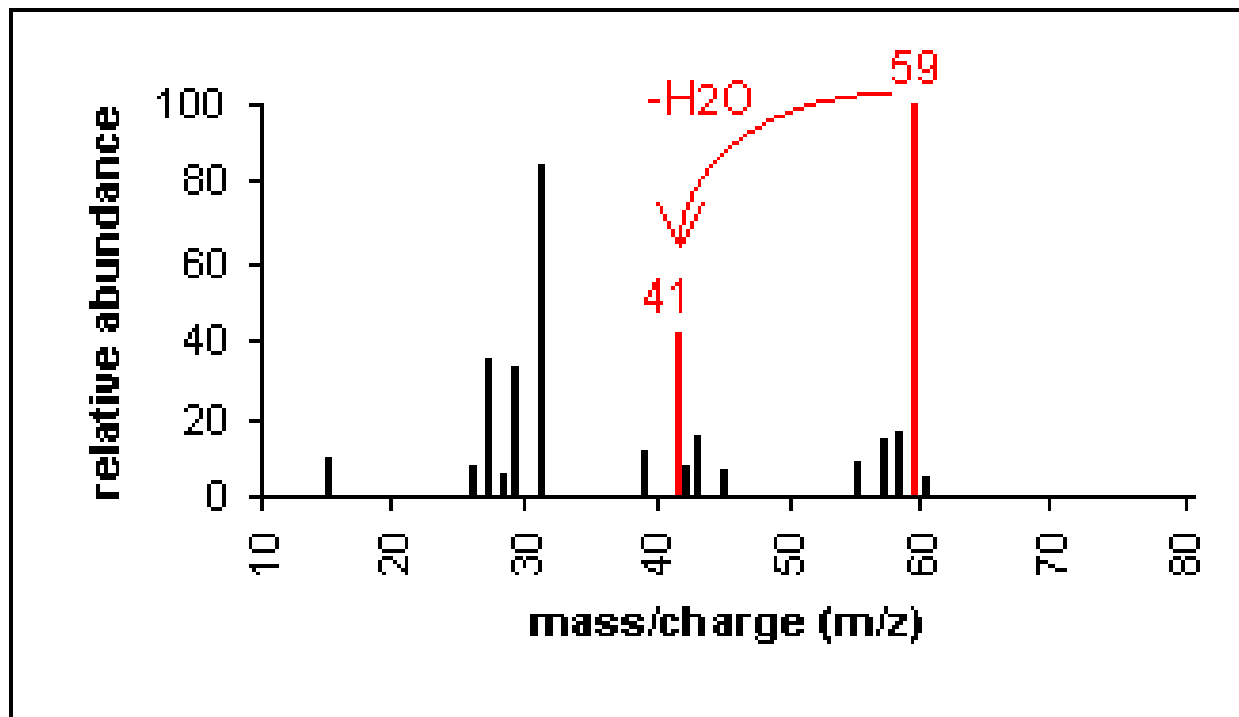
Loss of alkyl group

$M - 18$

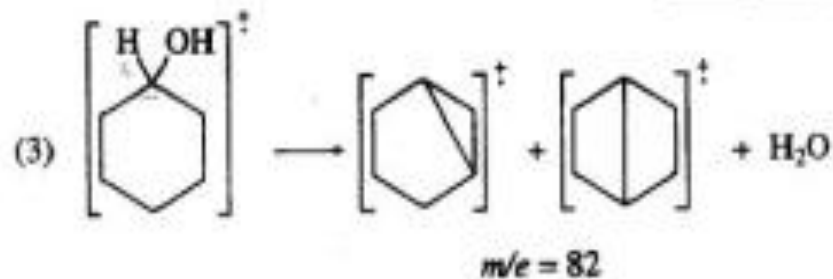
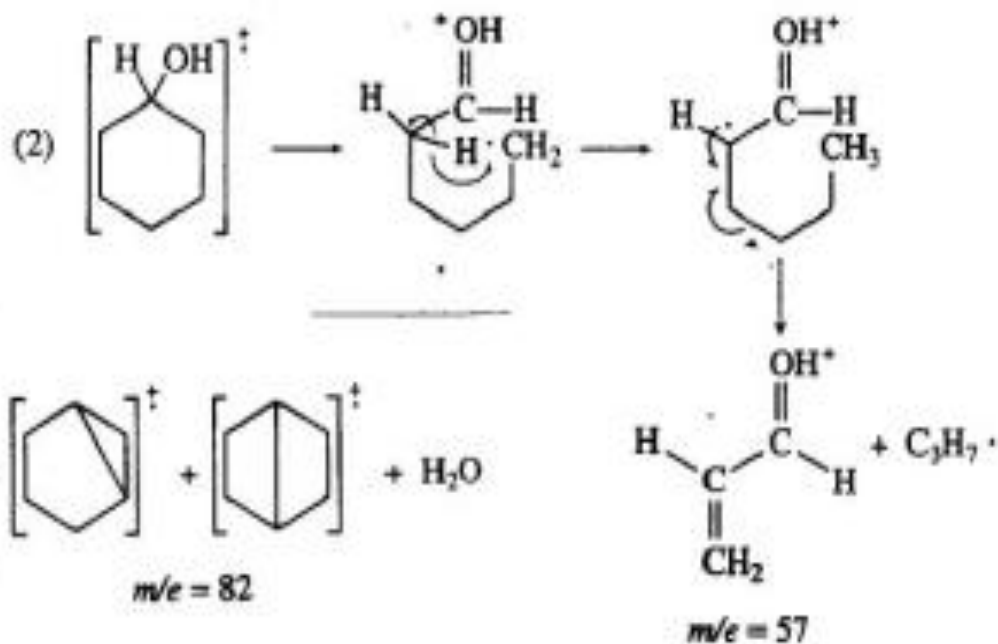
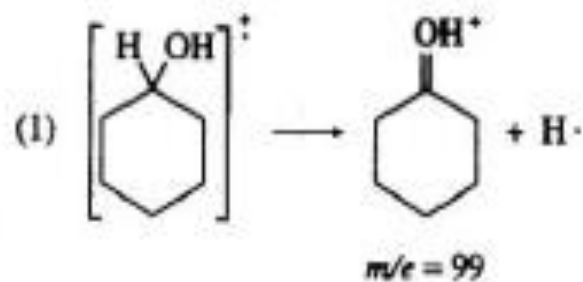


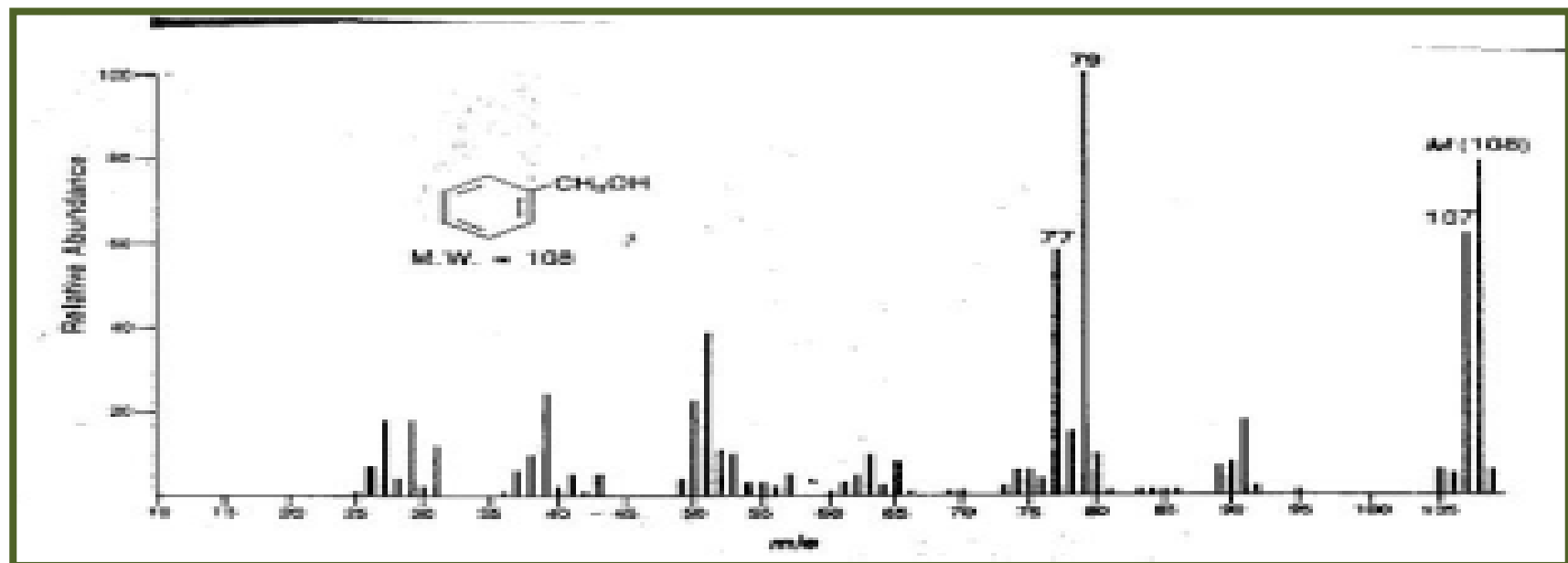
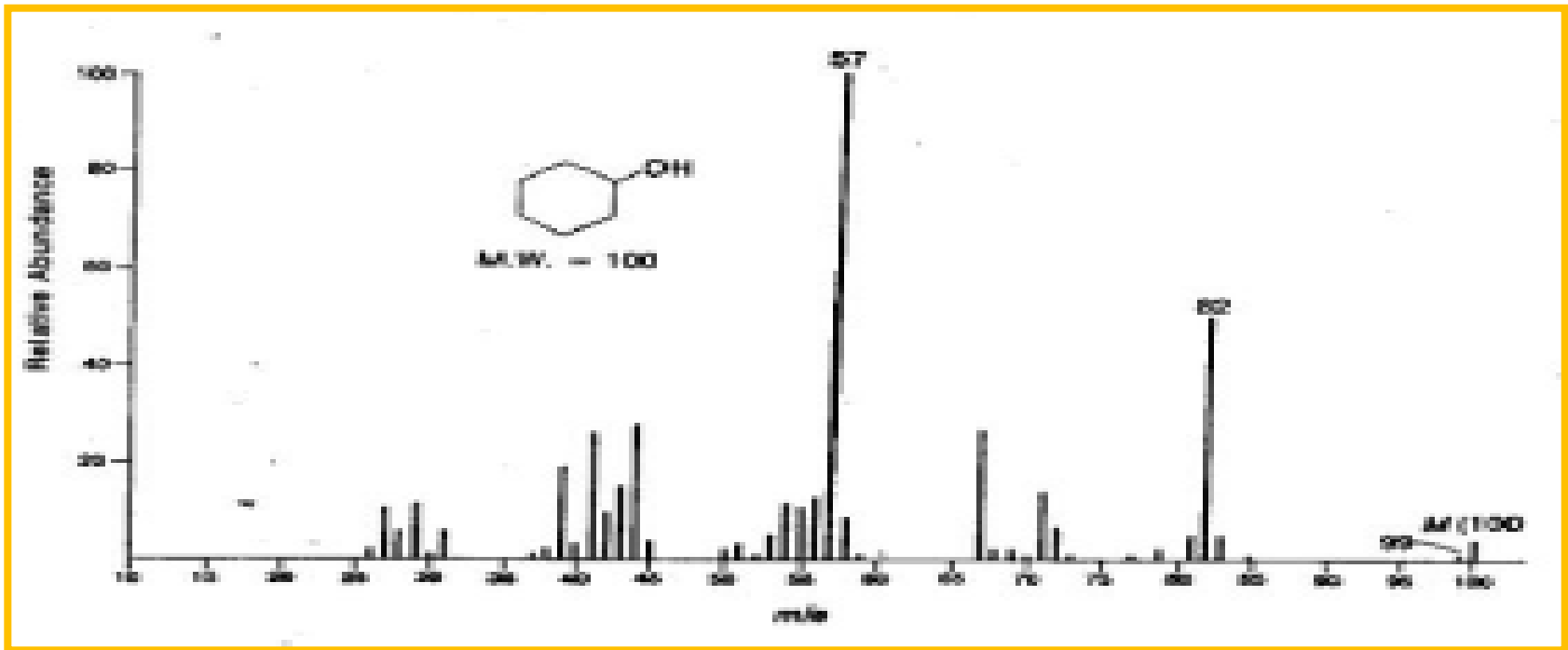


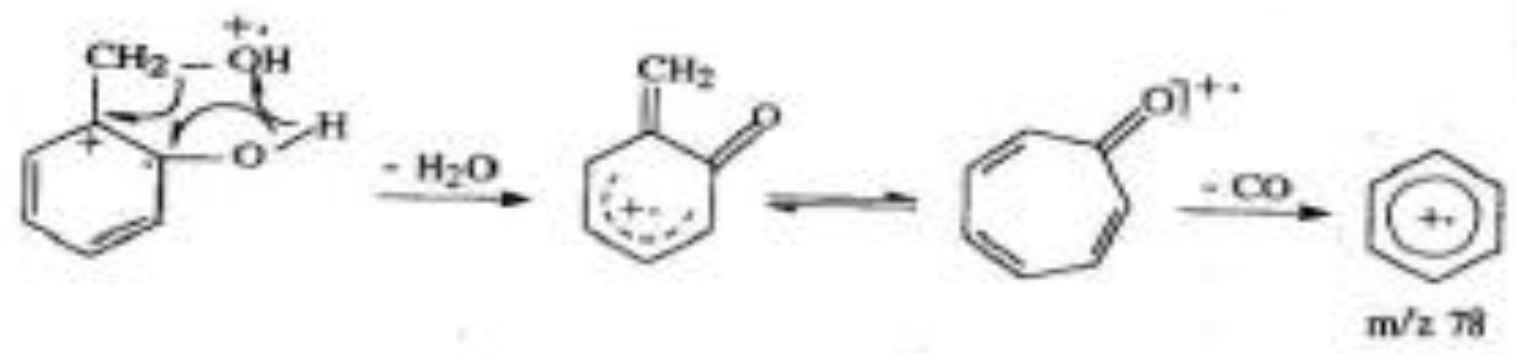
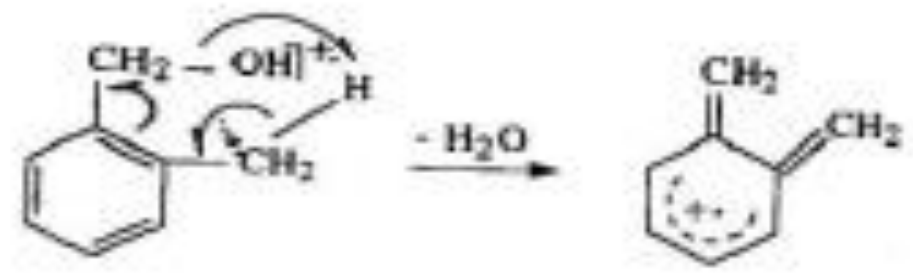
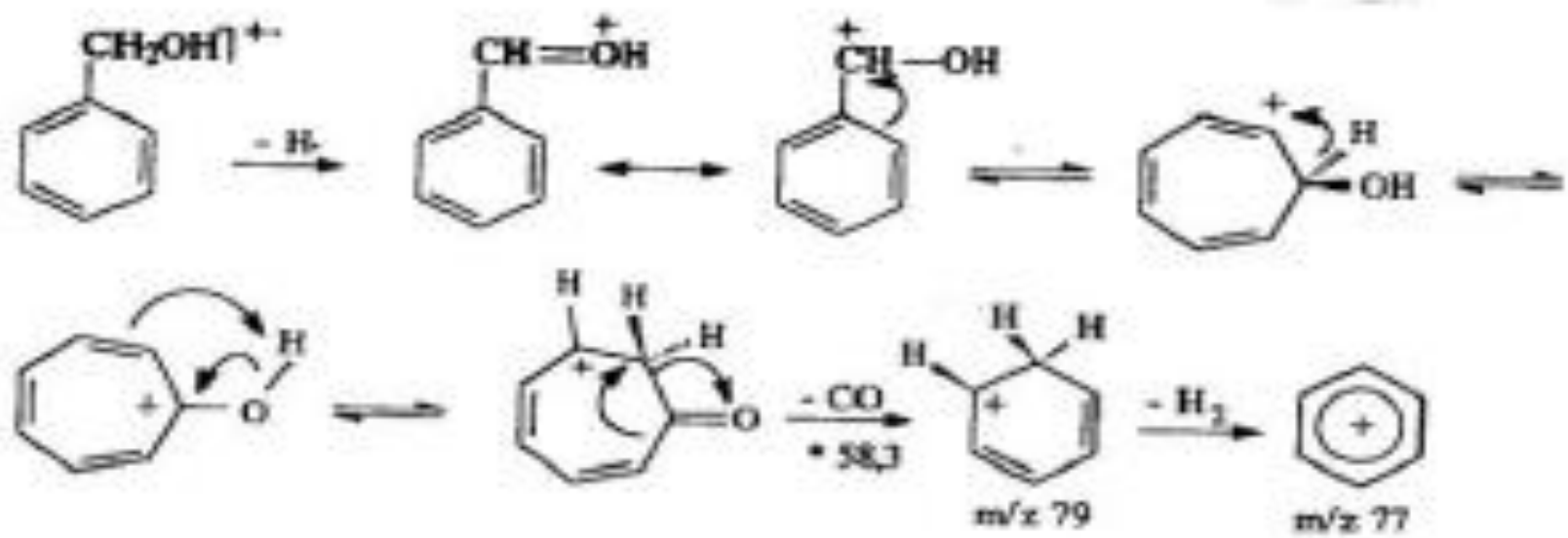


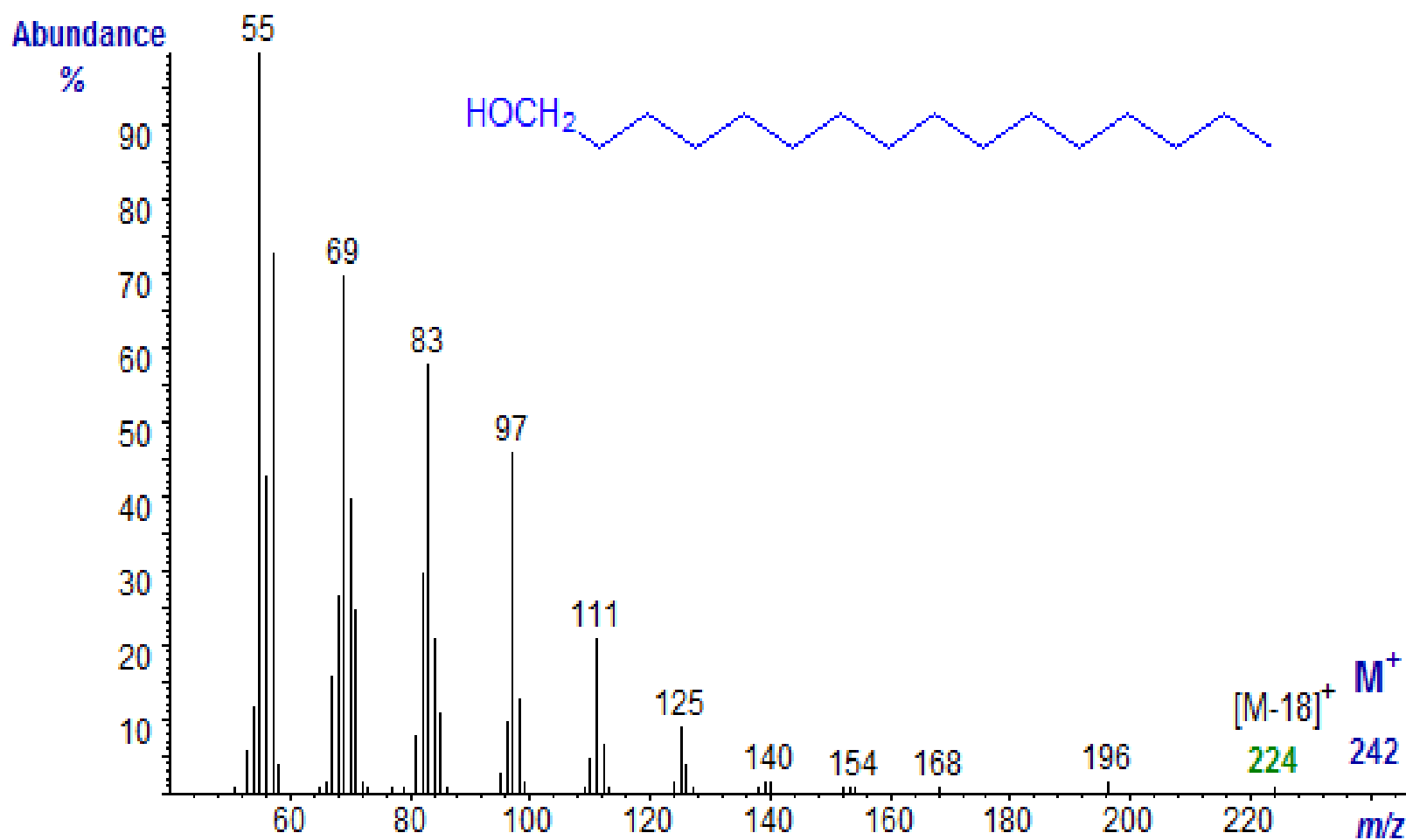


Οι κυκλικές αλκοόλες μπορούν να υποστούν διάσπαση με τρεις τρόπους. Οι βενζυλικές αλκοόλες χάνουν  $H^+$  και  $CO$ , ενώ οι ο-αλκυλοϋποκατεστημένες χάνουν  $H_2O$ .





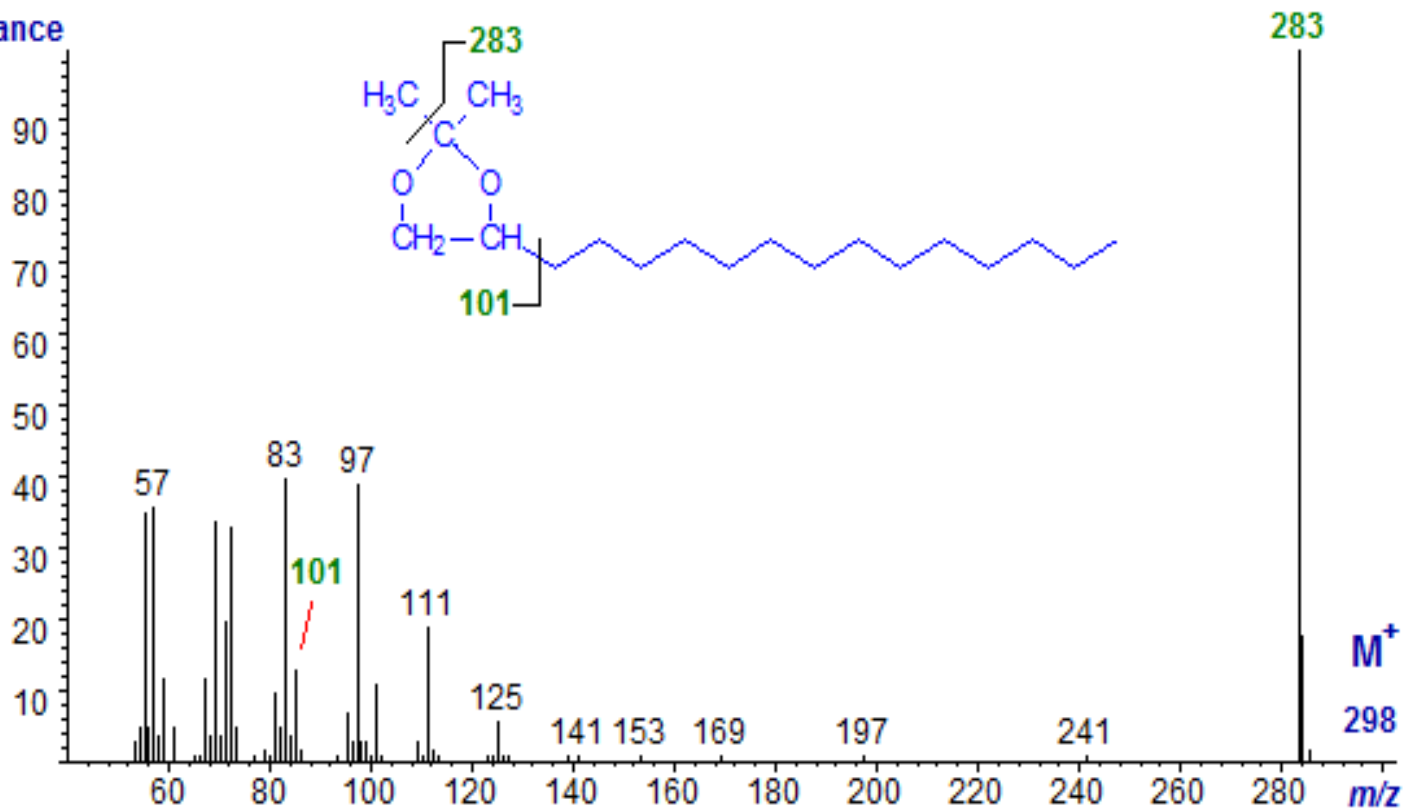






Abundance

%



## Φαινόλες.

Υφίστανται μετάθεση H<sup>•</sup> και στη συνέχεια χάνουν CO και H<sup>•</sup>. Οι κρεσόλες εμφανίζουν αυτά τα θραύσματα σαν ασθενείς κορυφές.

### SPECTRAL ANALYSIS BOX—Phenols

#### **MOLECULAR ION**

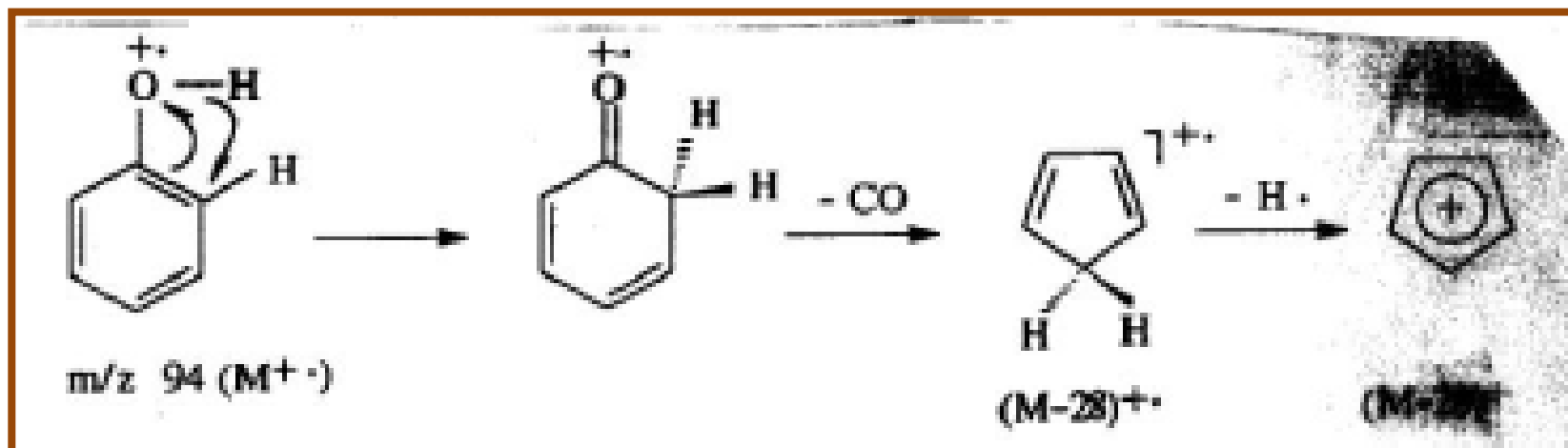
$M^+$  strong

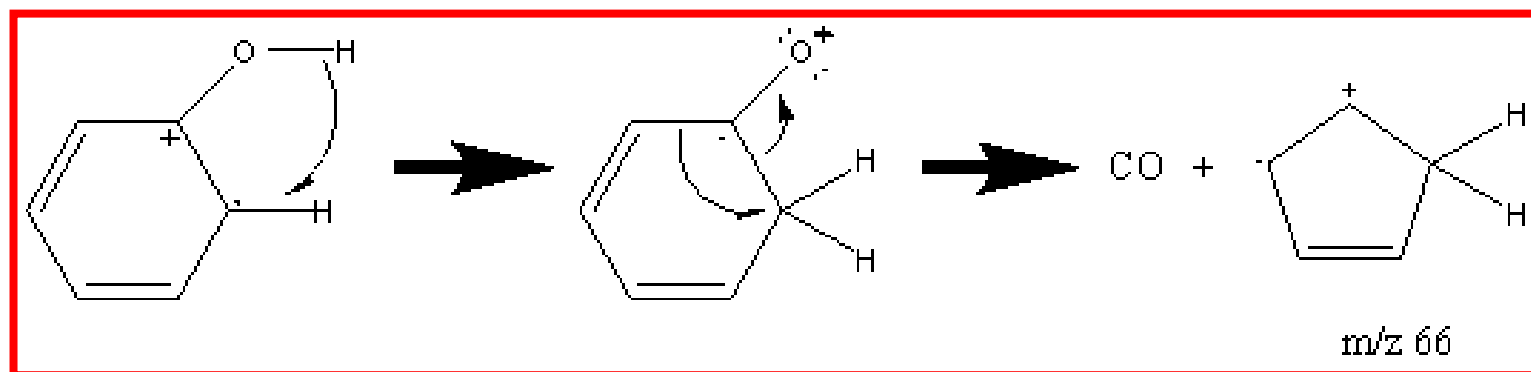
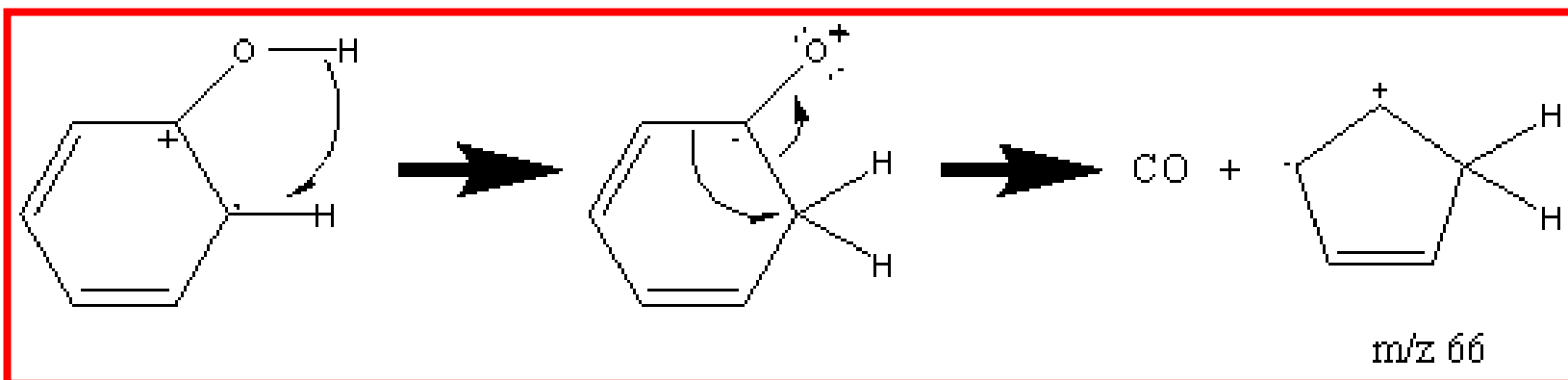
#### **FRAGMENT IONS**

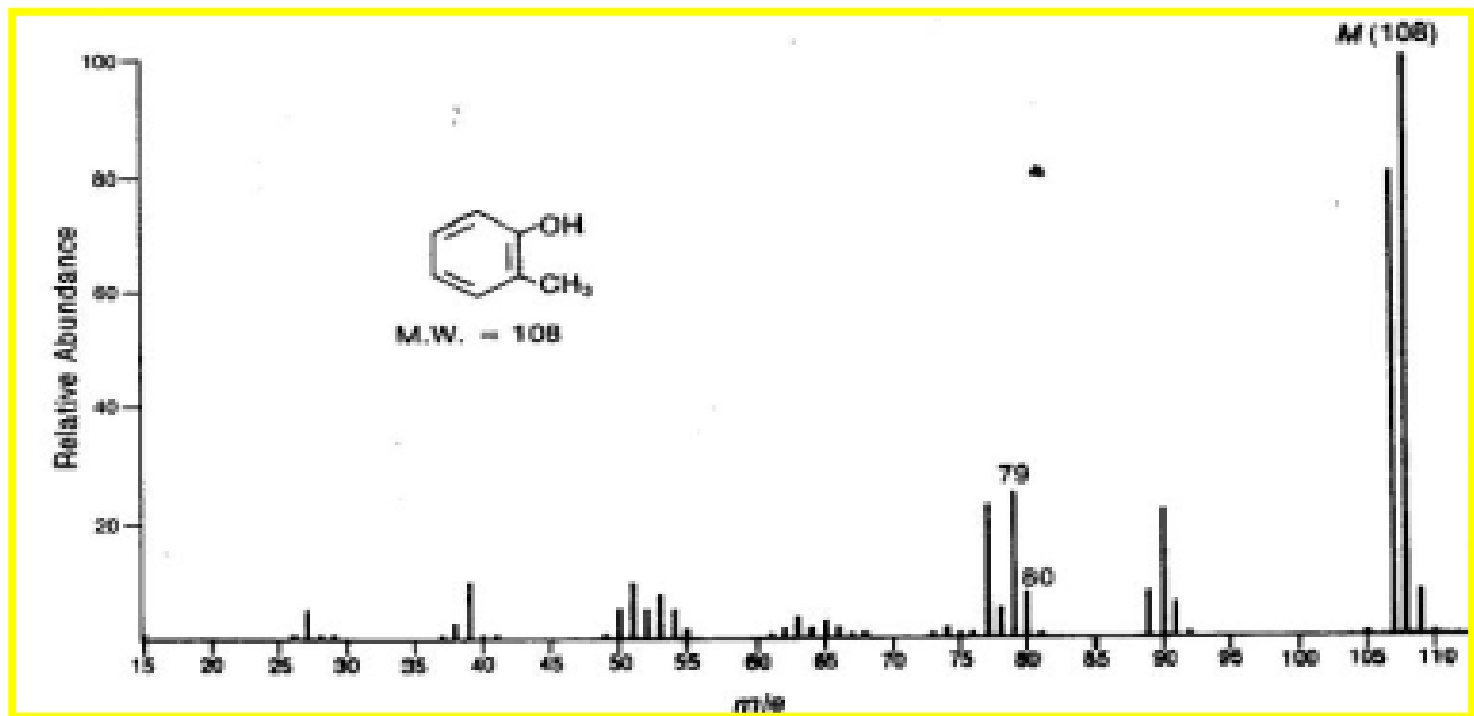
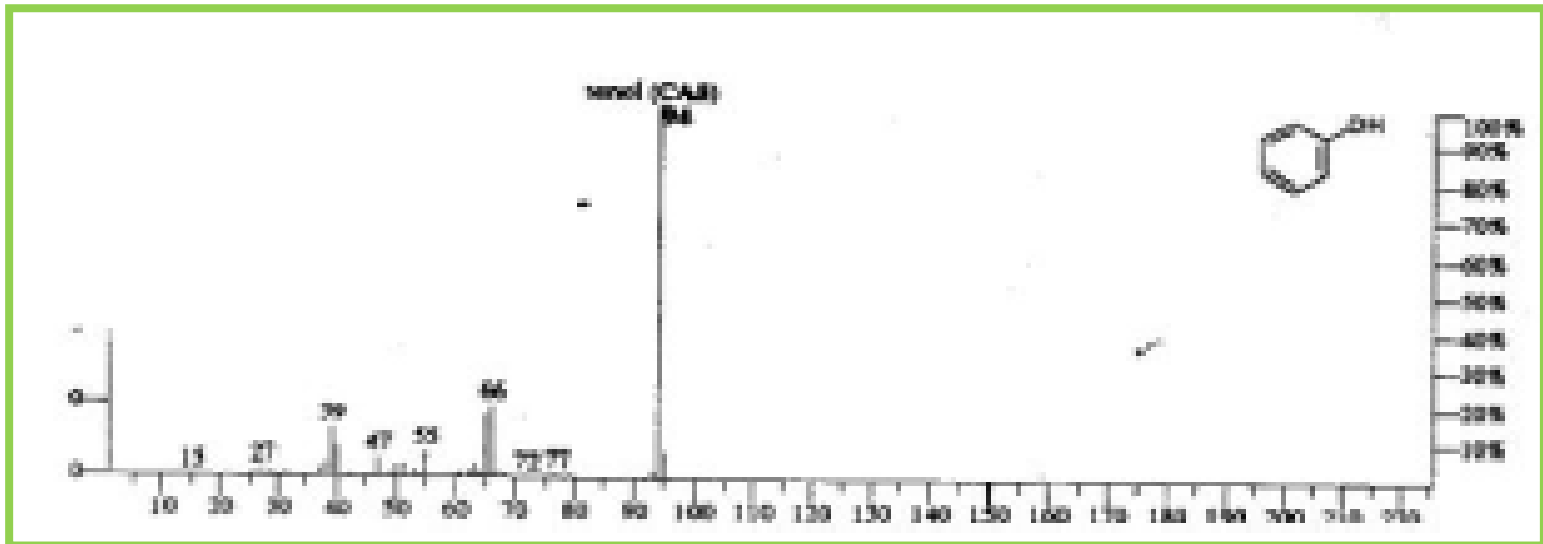
$M - 1$

$M - 28$

$M - 29$







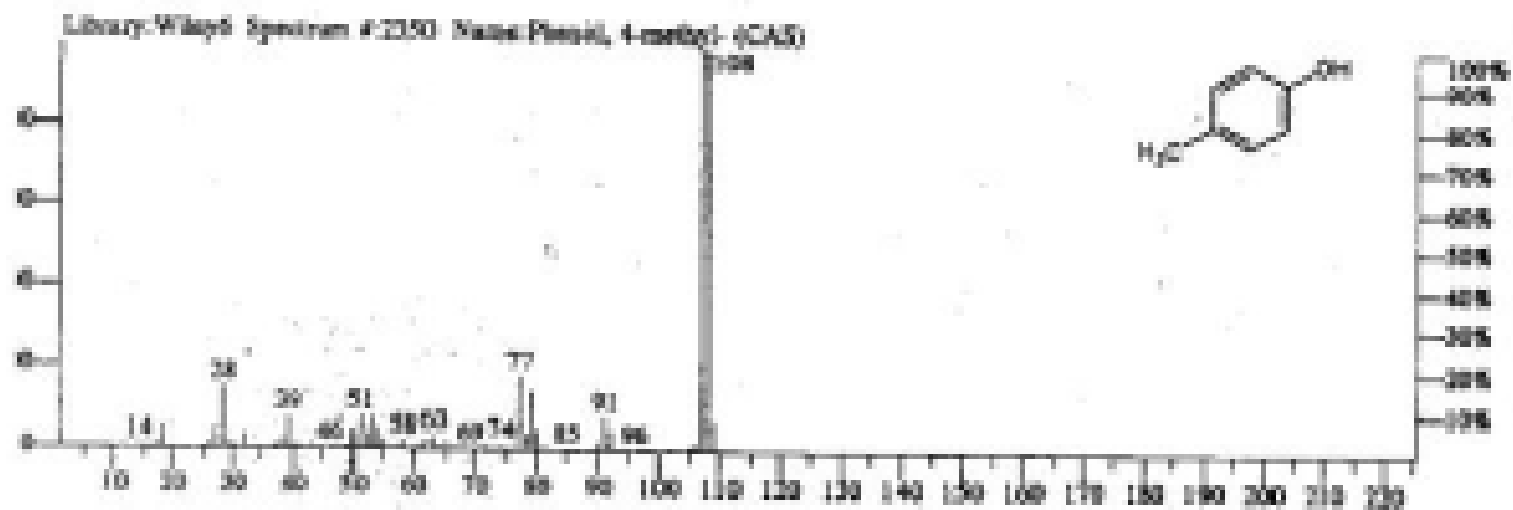
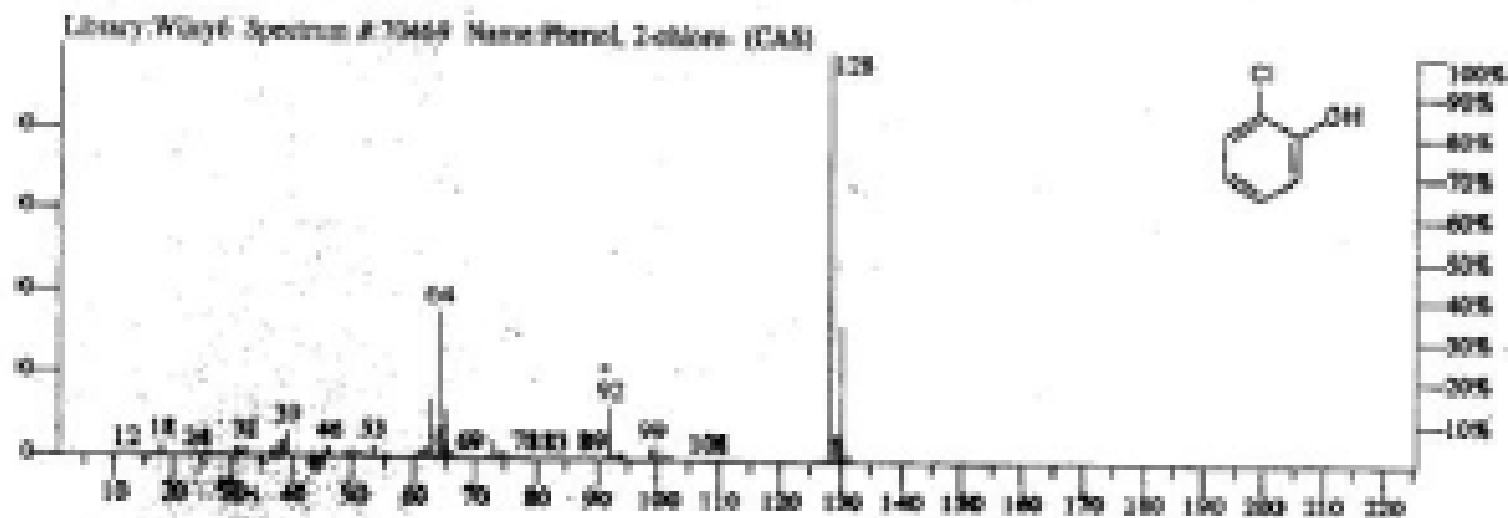


Fig. 3.72 p-Cresol  $C_7H_8O$ , M: 108, CAS Reg. No.: 106-44-5



## Αιθέρες.

Δίνουν μικρής έντασης  $M^+$ . Δίνουν παρόμοιες διασπάσεις με τις αλκοόλες. Οι αρωματικοί αιθέρες χάνουν  $R$ ,  $CO$  ή και  $RO$ .

### SPECTRAL ANALYSIS BOX — Ethers

#### MOLECULAR ION

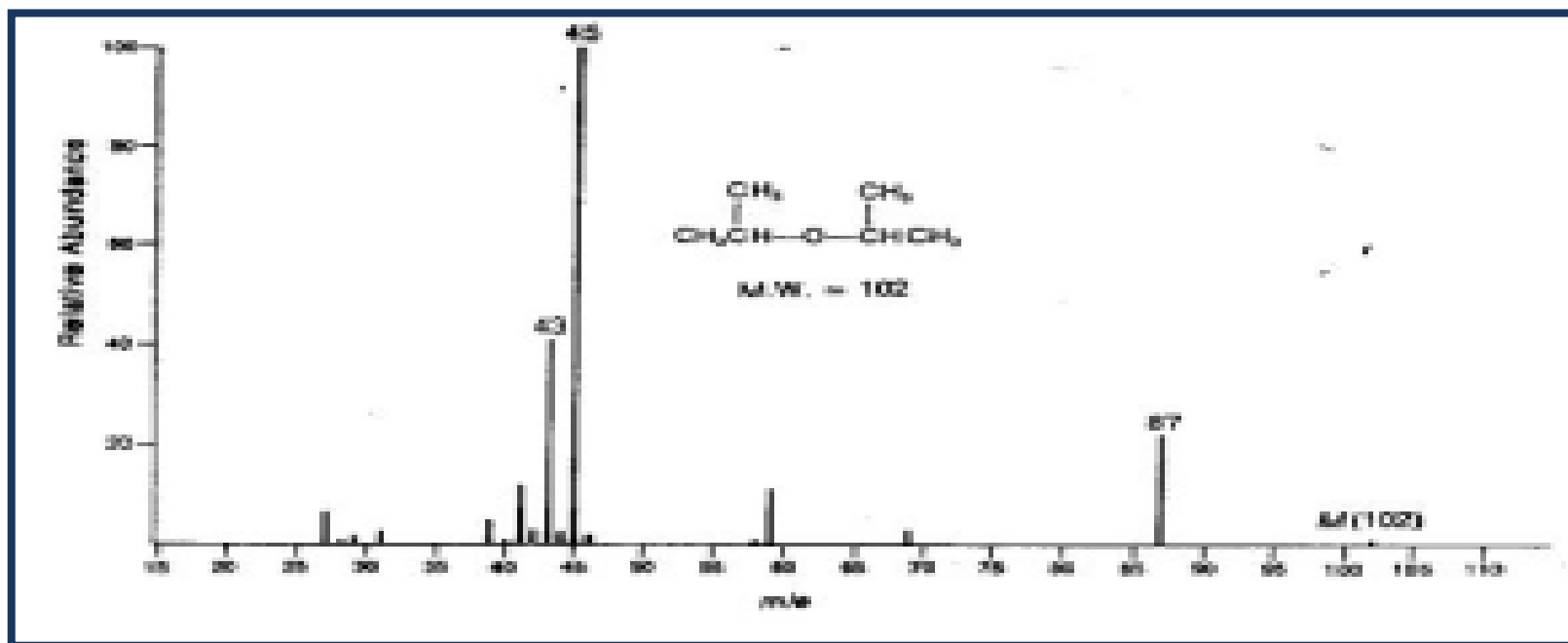
$M^+$  weak, but observable

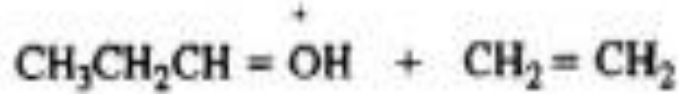
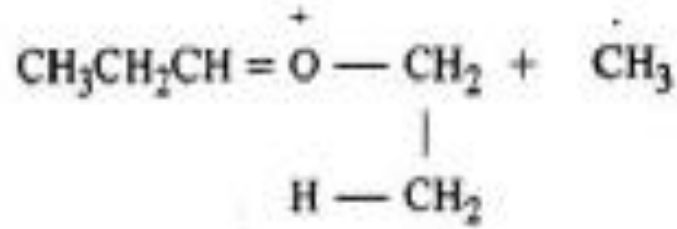
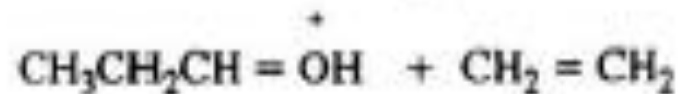
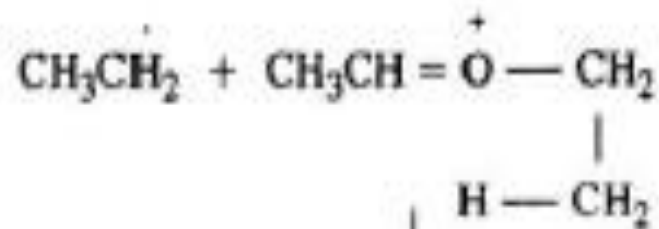
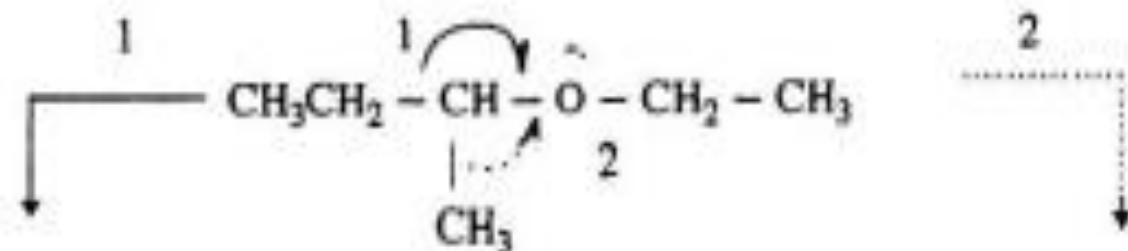
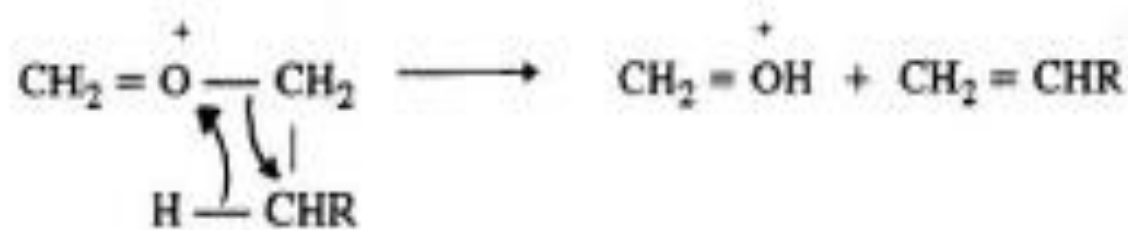
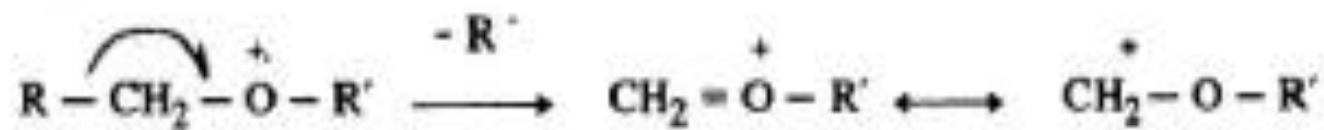
#### FRAGMENT IONS

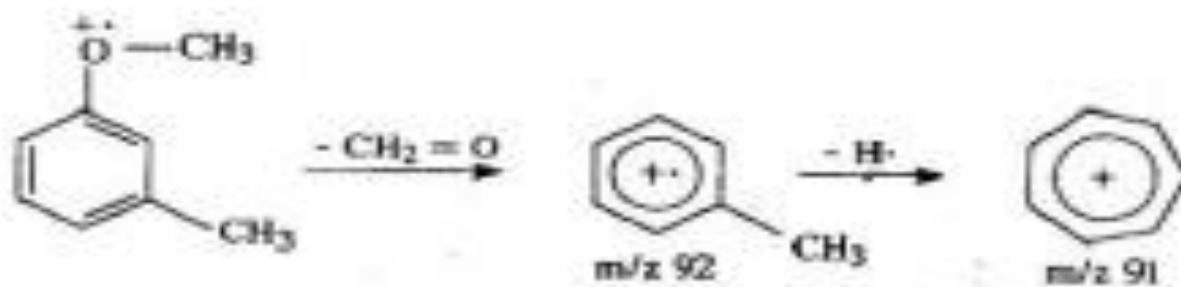
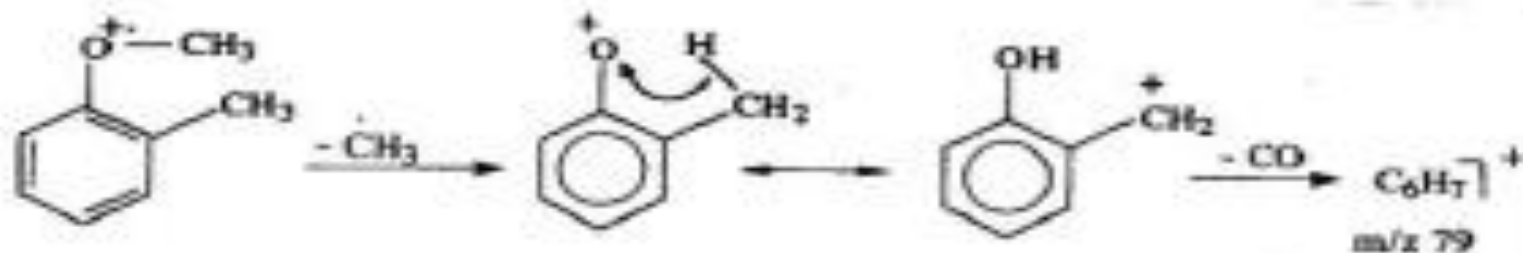
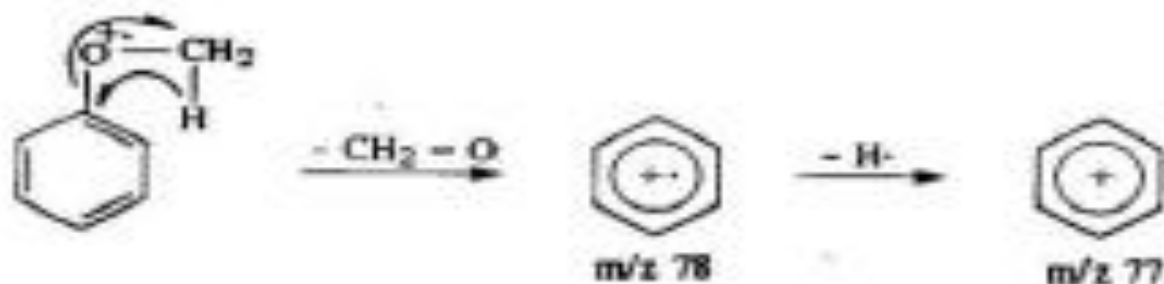
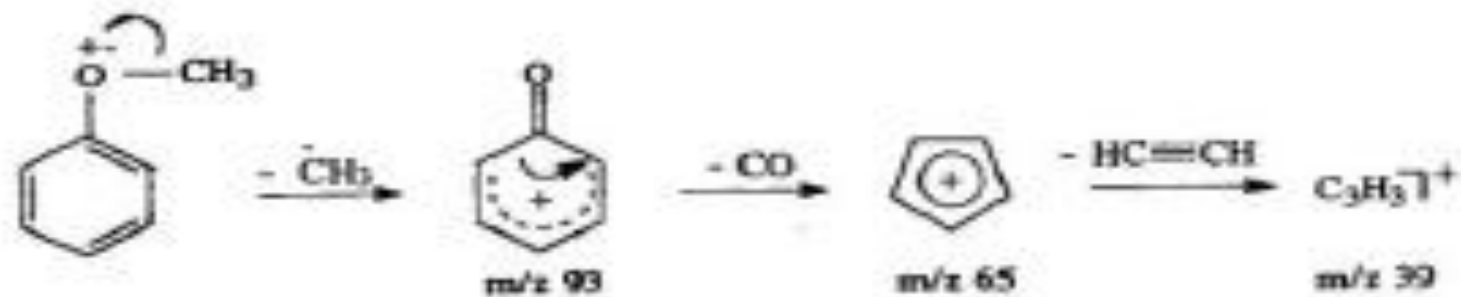
$\alpha$ -Cleavage

$m/e = 43, 59, 73, \text{ etc.}$

$M - 31, M - 45, M - 59, \text{ etc.}$



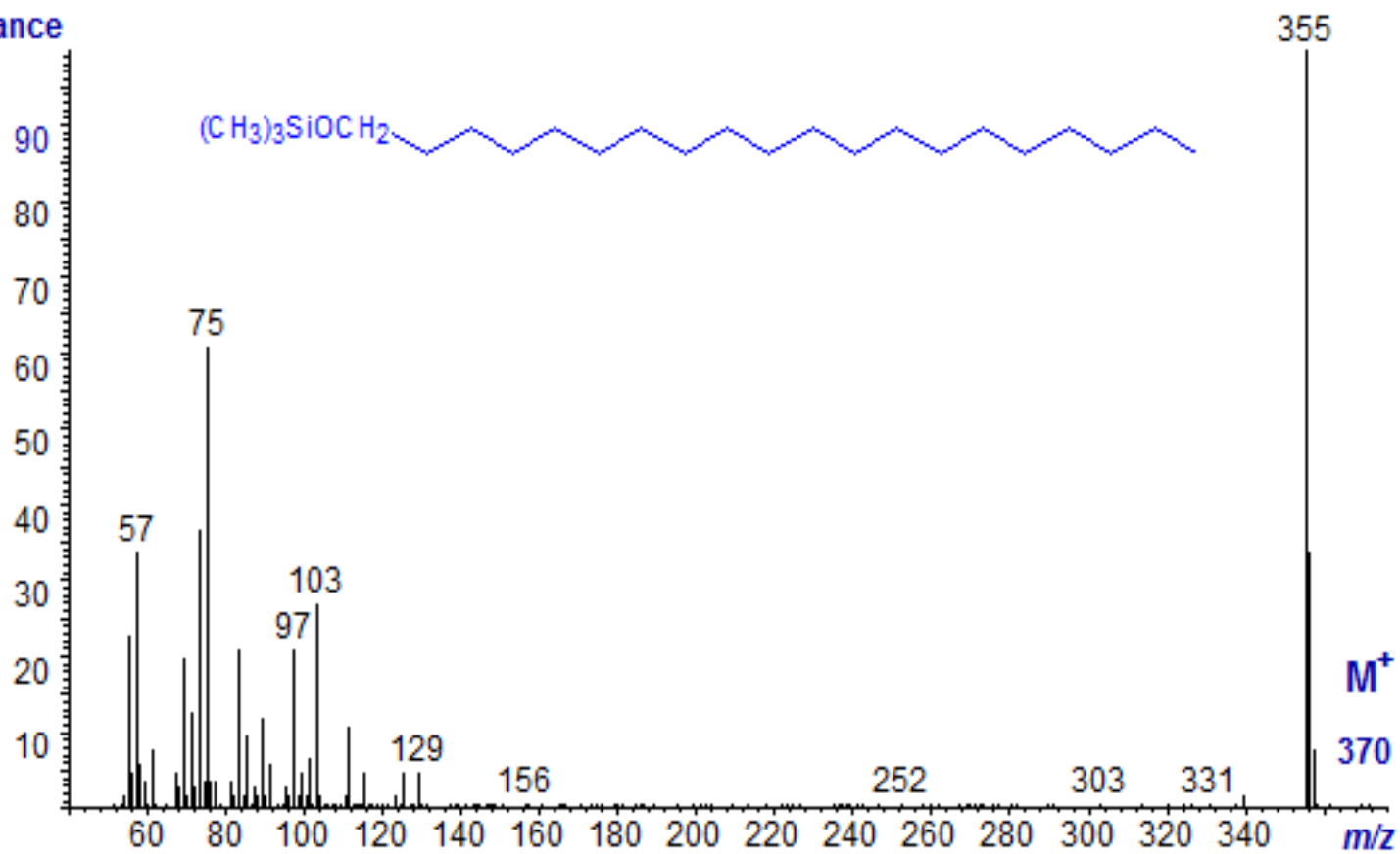






Abundance

%

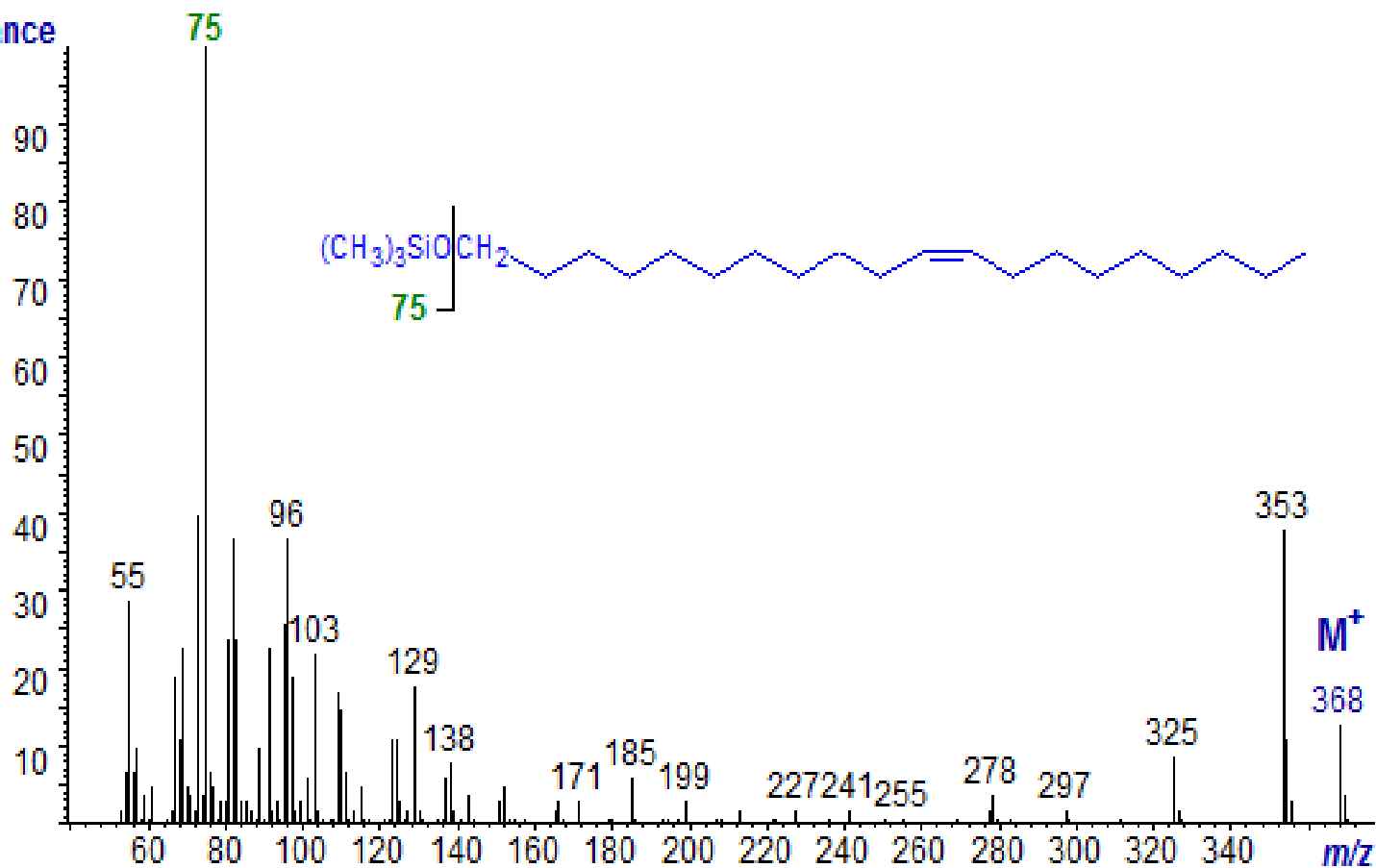


M<sup>+</sup>

370

m/z

Abundance  
%



## Οξέα – Αλειφατικά Οξέα.

Τα αλειφατικά οξέα γενικά δίνουν ασθενή  $M^+$ . Εμφανίζονται απόσπασση  $-COOH$  και θραύσμα  $O=C=O^+H$ . Οξέα με  $\gamma$ -H δίνουν σαν βασική κορυφή την κορυφή από μετάθεση McLafferty.

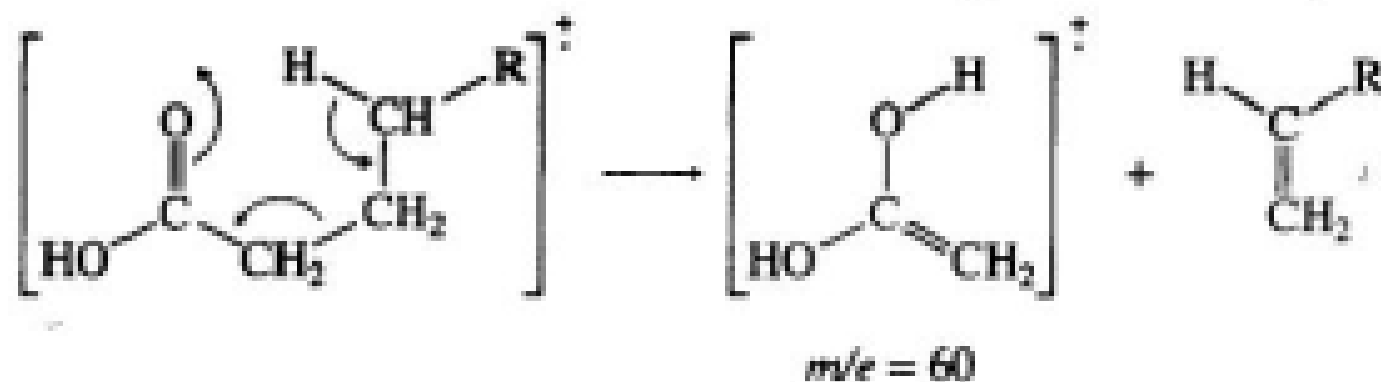
### SPECTRAL ANALYSIS BOX — Carboxylic Acids

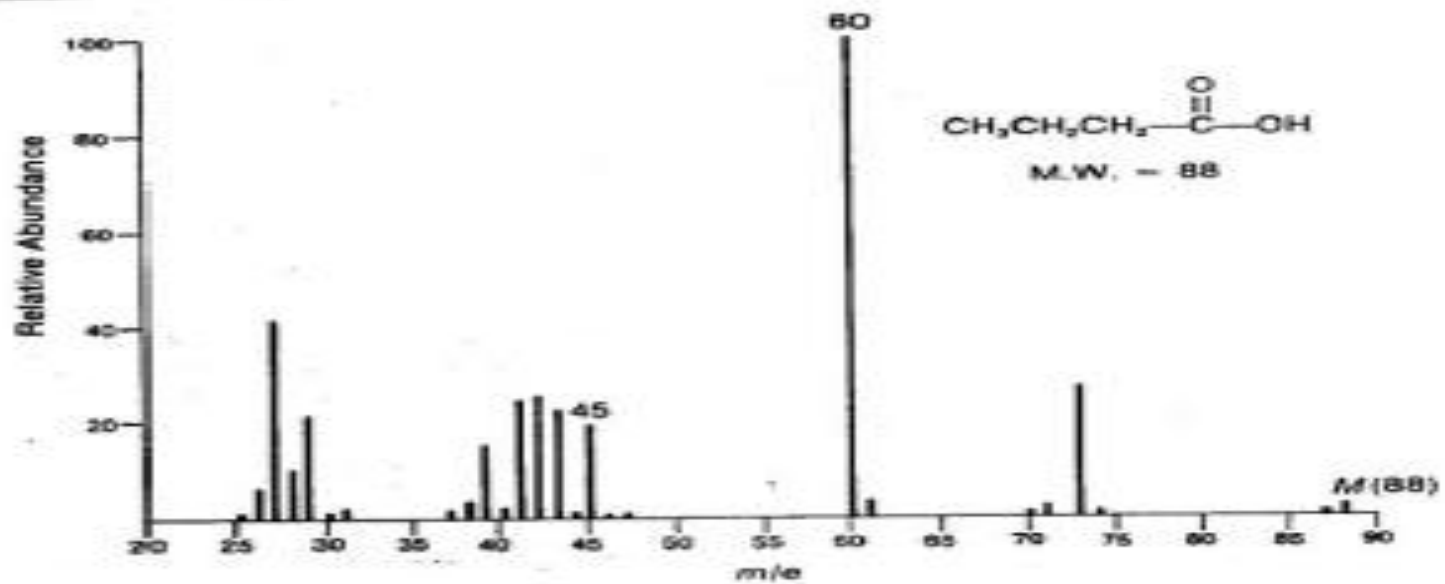
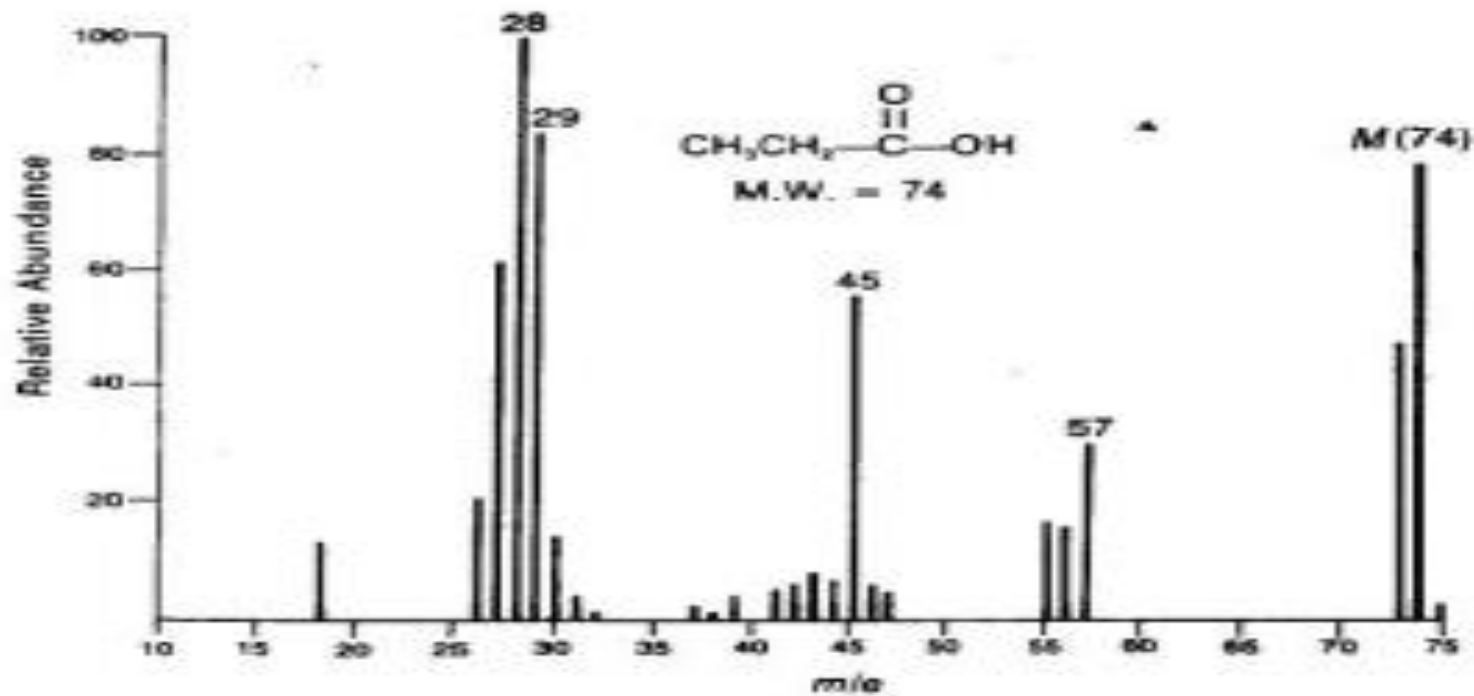
#### MOLECULAR ION

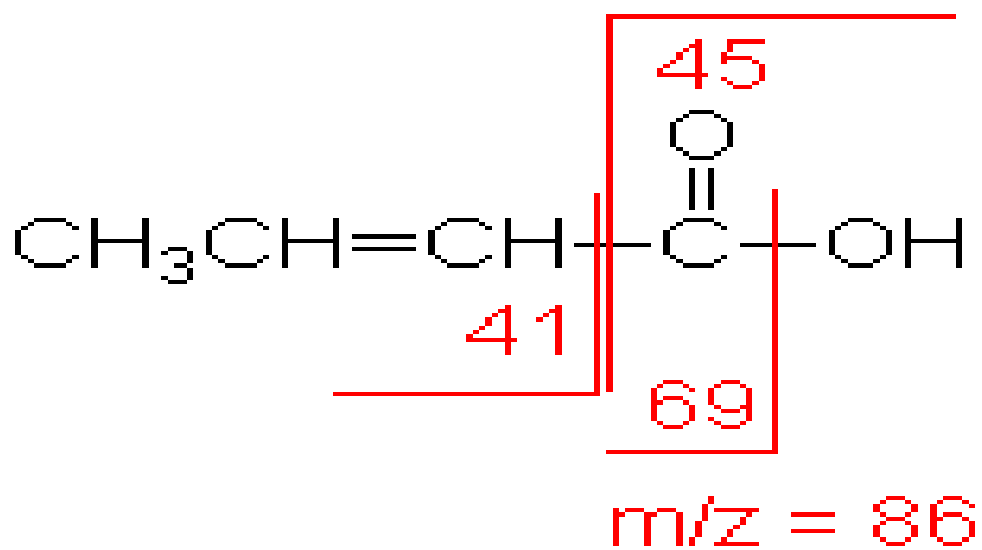
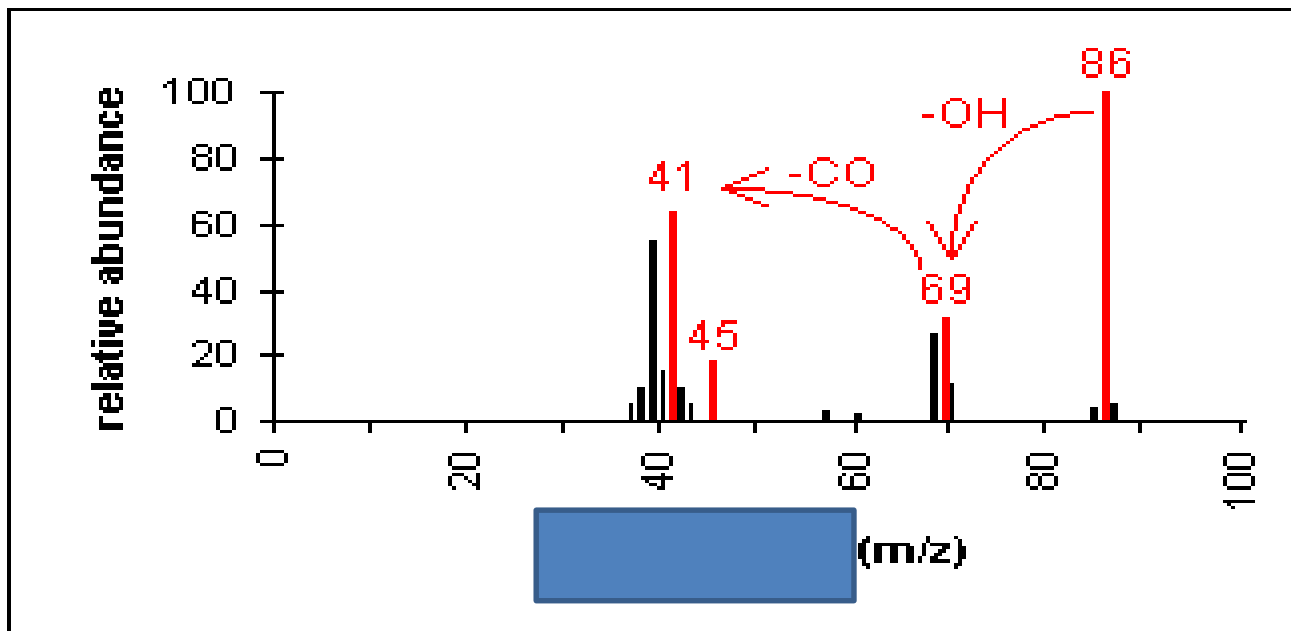
Aliphatic carboxylic acids:  
 $M^+$  weak, but observable

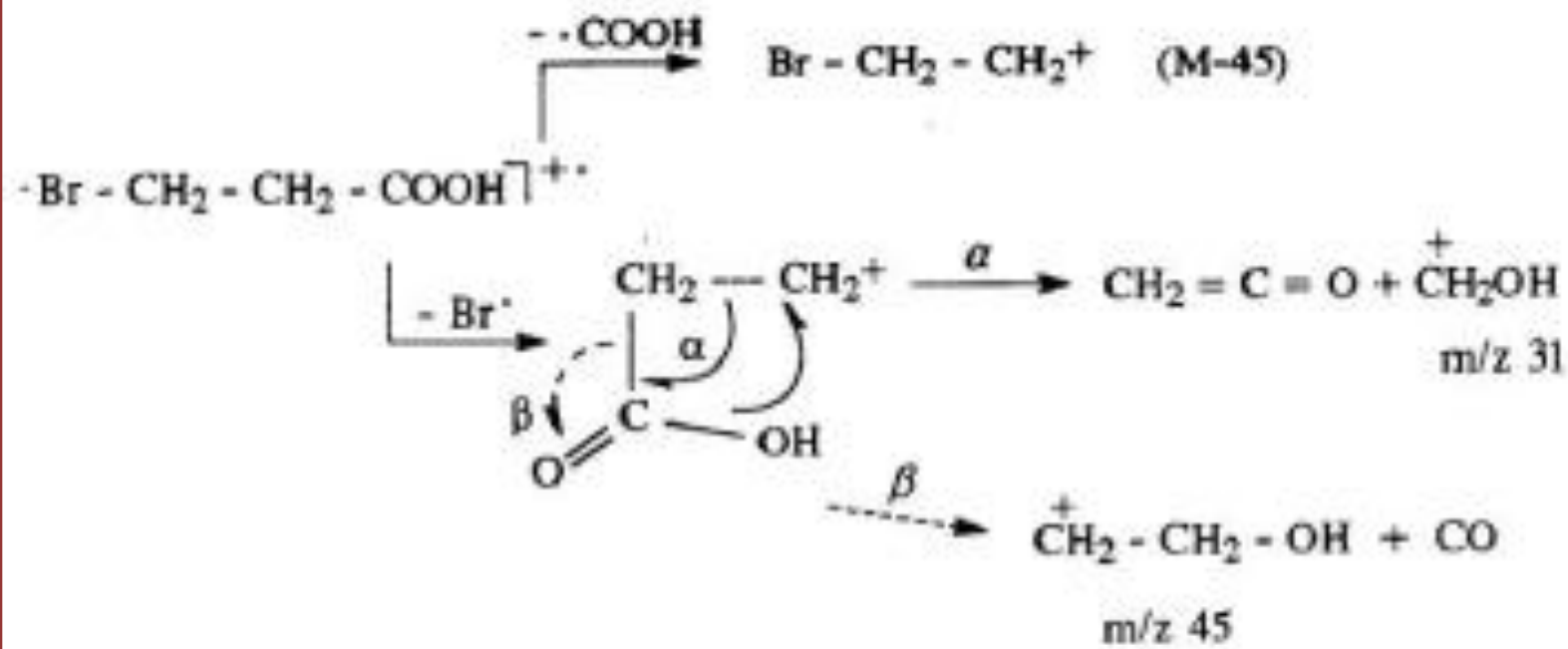
#### FRAGMENT IONS

Aliphatic carboxylic acids:  
 $M - 17, M - 45$   
 $m/e = 45, 60$









ρόποι διάσπασης του β-βρωμοπροπιονικού οξέος.

## Αρωματικά Οξέα.

Δίνουν ισχυρό  $M^+$ . Χάνουν  $\cdot OH$  προς το ισχυρό ιόν  $PhCO^+$ , που στη συνέχεια χάνει  $CO$  προς ιόν  $C_6H_5^+$ . Στα ο-αλκυλο-, υδροξυ-, αμινο-υποκατεστημένα βενζοϊκά οξέα απώσπεται  $H_2O$ .

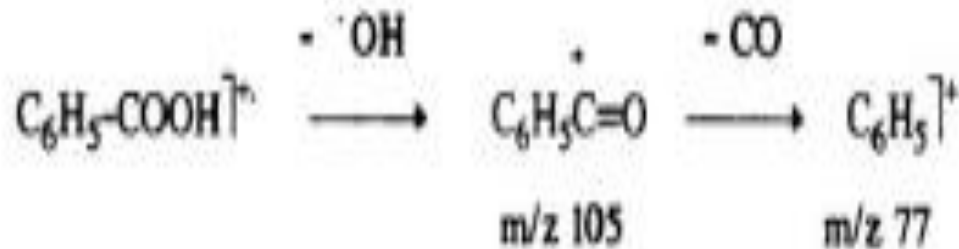
Aromatic carboxylic acids:

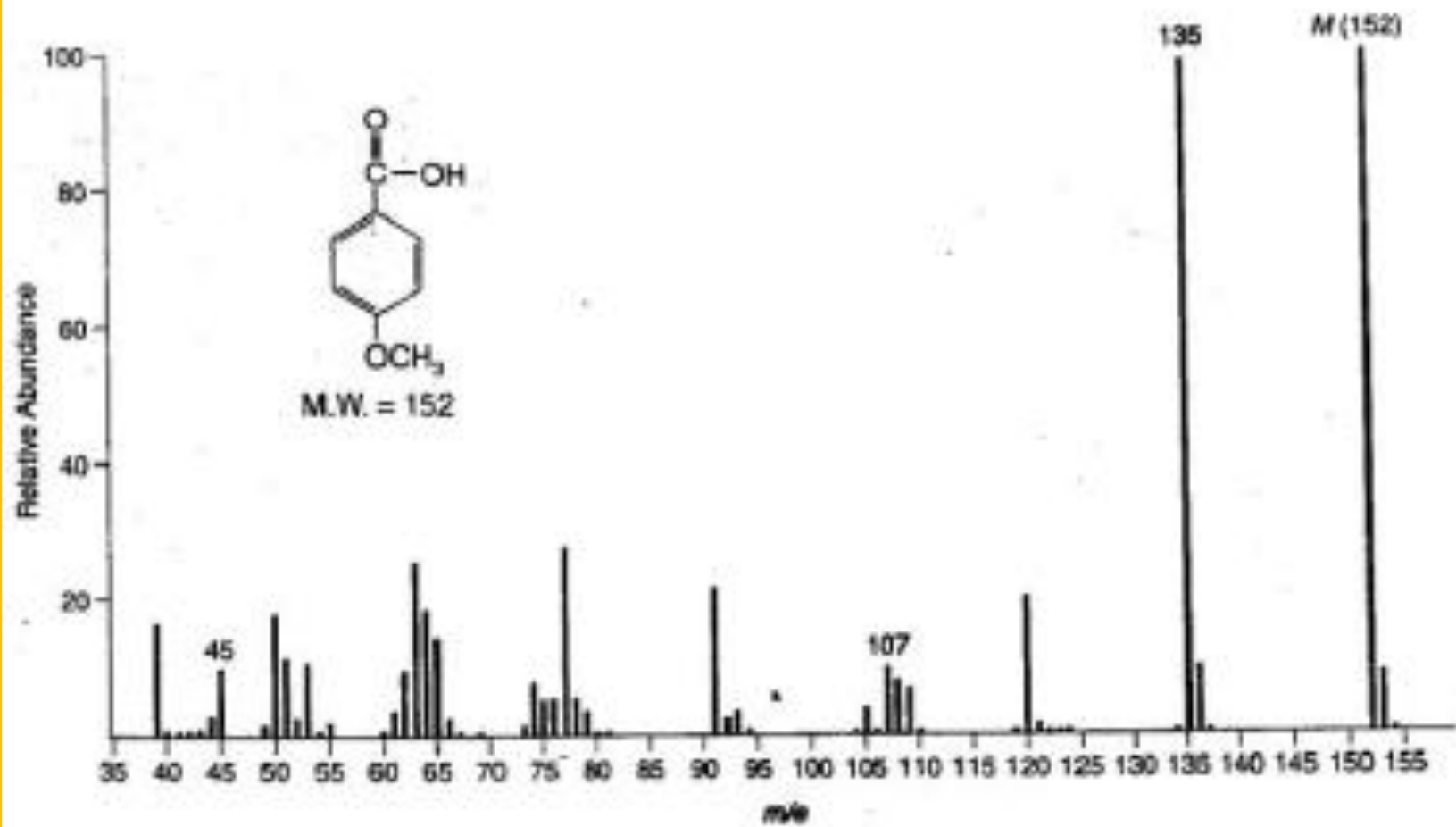
$M^+$  strong

Aromatic carboxylic acids:

$M - 17, M - 45$

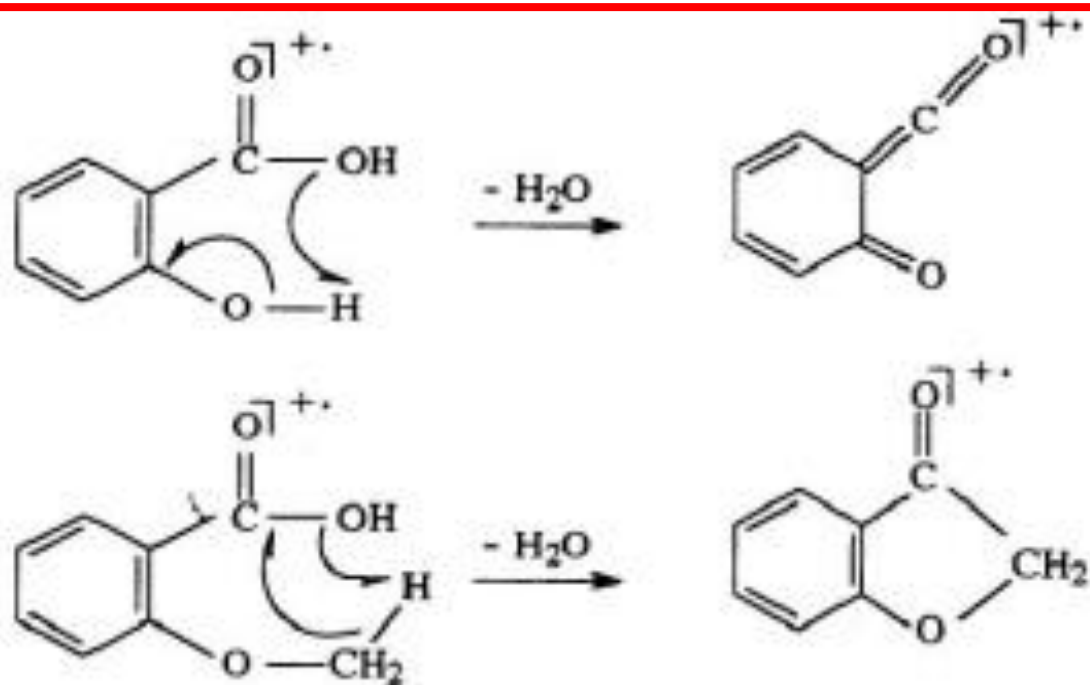
$M - 18$



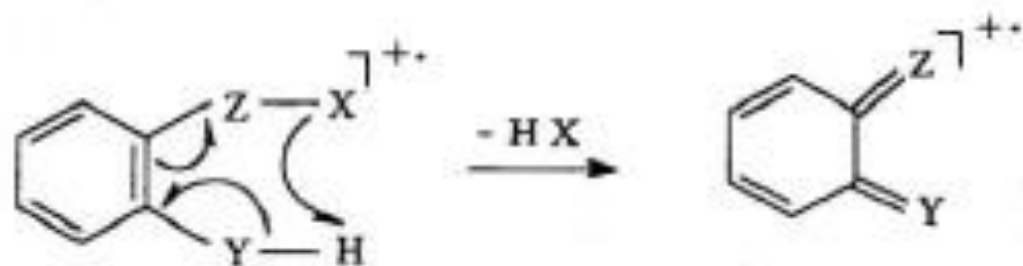


Mass spectrum of *para*-anisic acid.





**Σχήμα 16.14** Πιθανός τρόπος διάσπασης ο-υποκαταστημένων βενζοϊκών οξέων.



**Σχήμα 16.15** Πιθανός τρόπος γενικής διάσπασης ο-υποκαταστημένων αρωματικών παραγώγων.

## Εστέρες.

Οι αλειφατικοί εμφανίζουν πολύ ασθενές  $M^+$ . Υφίστανται α-απόσπαση  $RO^+$  ομάδας και στη συνέχεια απόσπαση  $CO$ . Ακόμη αποσπάται  $R^+$  δίνοντας κατιόν ακυλίου  $R^+OCO^+$ . Όταν υπάρχει  $\gamma$ -H από οποιαδήποτε πλευρά υφίστανται μετάθεση McLafferty. Στους βενζυλεστέρες αποσπάται κετόνη. Οι βενζοϊκοί αλκυλεστέρες χάνουν  $RO^+$  ομάδα προς  $PhCO^+$ . Οι αρωματικοί ο-αλκυλεστέρες χάνουν με μετάθεση  $ROH$ .

### SPECTRAL ANALYSIS BOX—Esters

#### **MOLECULAR ION**

$M^+$  weak, but generally observable

#### **FRAGMENT IONS**

Methyl esters:  
 $M - 31$   
 $m/e = 59, 74$

#### Higher esters:

$M - 45, M - 59, M - 73$   
 $m/e = 73, 87, 101$   
 $m/e = 88, 102, 116$   
 $m/e = 61, 75, 89$   
 $m/e = 77, 105, 108$   
 $M - 32, M - 46, M - 60$

