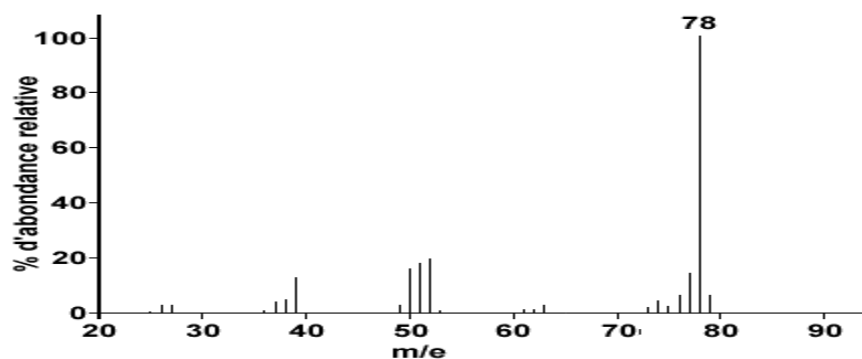


## I-6- 3- Hydrocarbure aromatique et arylalkyles

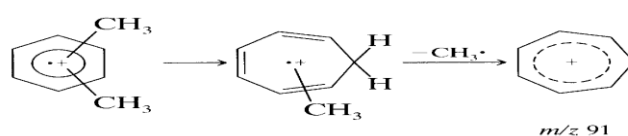
Un cycle aromatique dans une molécule stabilise le pic de l'ion mol. (règle 4).  
habituellement un pic d'ion moléculaire intense car le noyau aromatique est très stable et difficilement fragmentable comme le montre le spectre de masse du benzène.



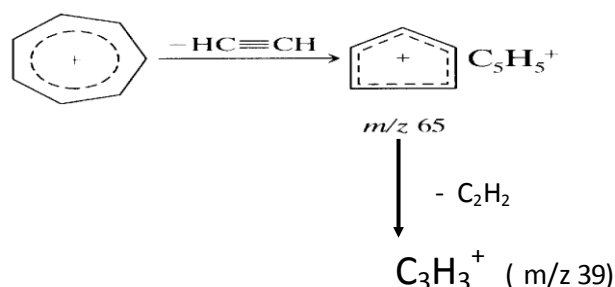
La fragmentation du noyau aromatique est relativement complexe, générant une série de pics ayant  $m/z = 77$  (M-H), 65, 63, etc. Bien que ces pics sont difficiles à décrire en termes simples.

Un pic prédominant (souvent le pic de base) à  $m/z = 91$  ( $C_6H_5CH_2^+$ ), indique un benzène substitué par un alkyle. La ramification sur le carbone  $\alpha$  conduit à des masses supérieures à 91 par incrément de 14.

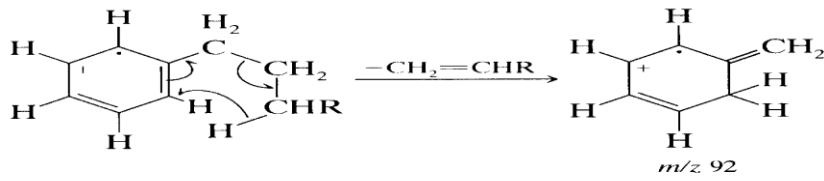
Dans la plus part des cas, l'ion de masse 91 est un cation tropylium plutôt qu'un cation benzylique. Cela explique la perte d'un groupe méthyle à partir des xylènes bien que le toluène ne perde pas facilement son groupe méthyle.



le pic que l'on observe souvent à  $m/z = 65$ , c'est l'élimination de la molécule neutre d'acétylène de l'ion tropylium

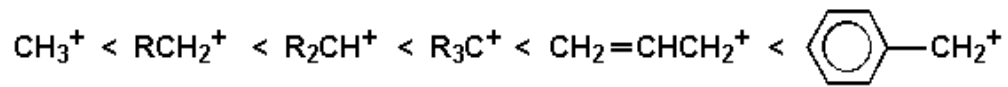


La migration d'hydrogène avec élimination d'une molécule d'alcène neutre rend compte du pic à  $m/z=92$ .



La fragmentation des hydrocarbures linéaires ou ramifiés se fait dans le sens de donner le carbocation le plus stable.

Ordre croissant de stabilité:



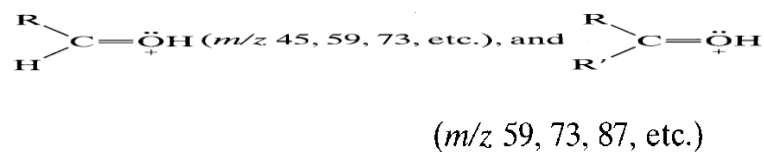
## I-6- 4- LES ALCOOLS

Le pic de l'ion moléculaire des alcools est presque inexistant car ils perdent une molécule d'eau très facilement. Cette perte peut même se produire sous l'effet de la chaleur avant la fragmentation.

Pour les alcools primaire le fragment le plus courant est:

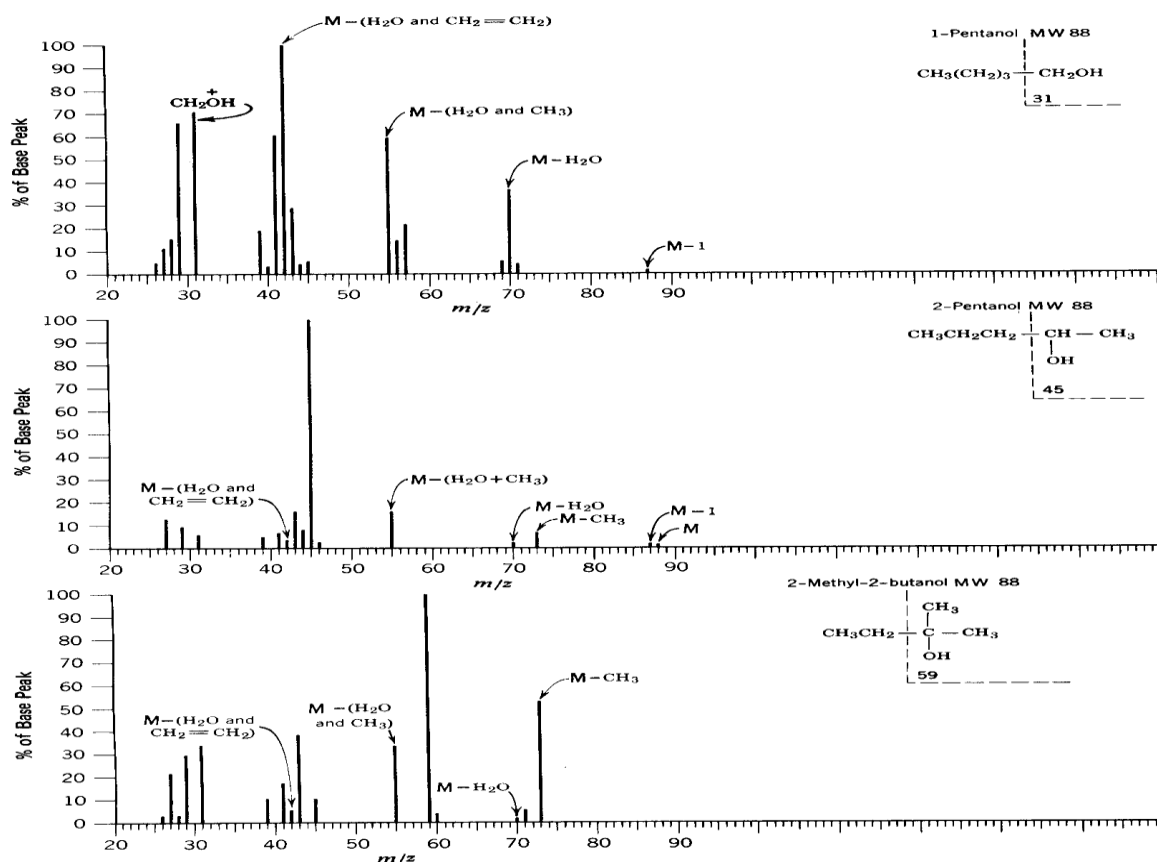


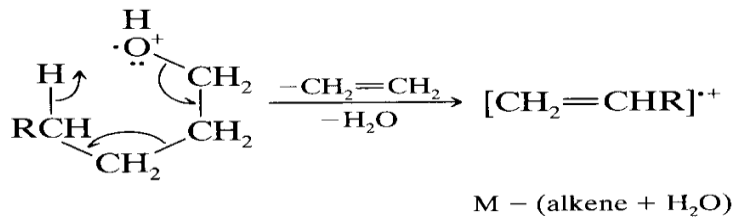
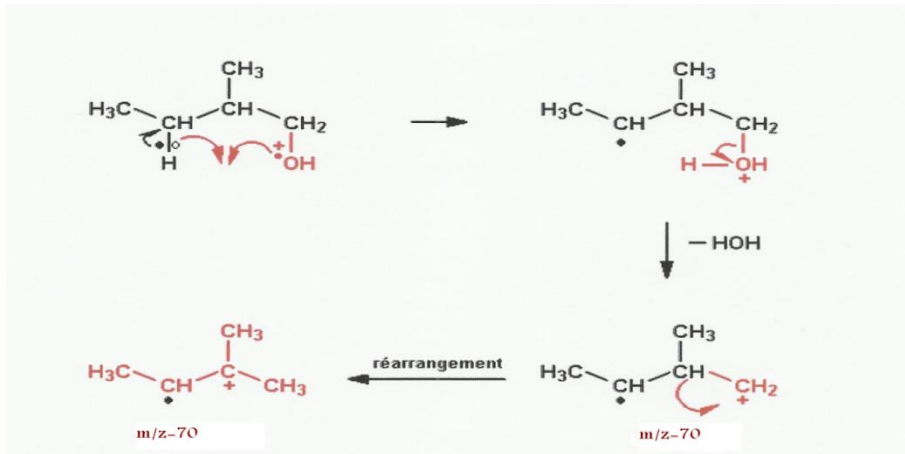
Les alcools secondaires et tertiaires se clivent d'une manière analogue (pic prédominant) pour donner un pic dû respectivement à:



Le cas des alcools ramifiés est plus difficile à analyser.

Si on prend les spectre de masse de trois isomères de pentanol dont la masse molaire = 88 g/mol.

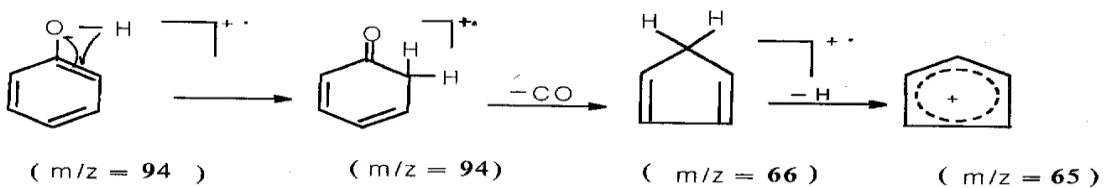
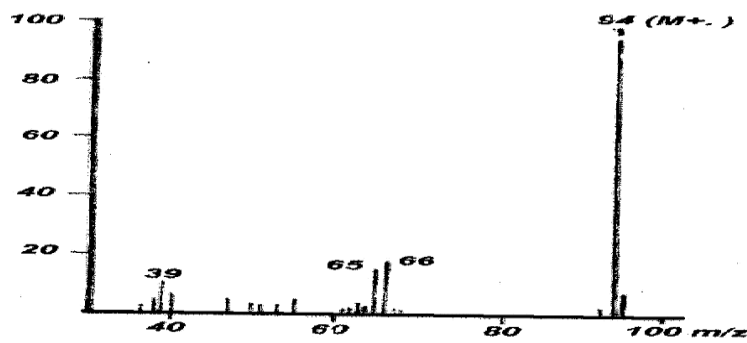




## I-6-5- Les Phénols

L'ion moléculaire est le pic de base du spectre, le pic M-1 généralement est petit.

Dans le spectre du phénol, l'ion mol., représente le pic de base à  $m/z=94$ . On observe également des pics à  $m/z= 66$  (M-28) et  $m/z= 65$  (M-29) résultant la perte de CO et de CHO.

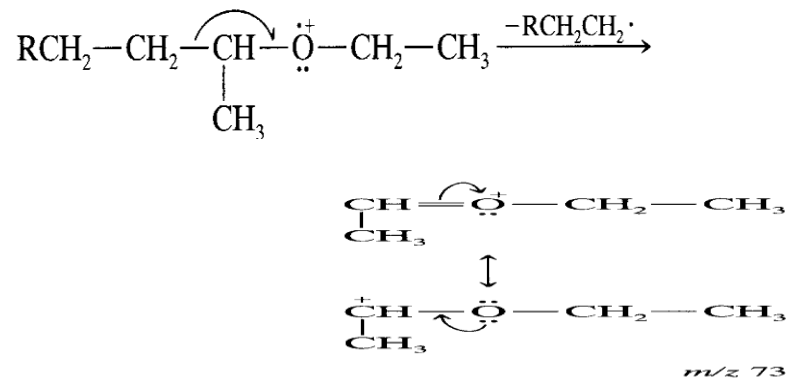


## I-6- 6-LES ÉTHERS

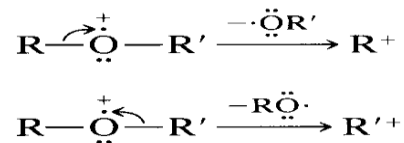
La fragmentation des éthers se fait un peu de la même façon que celle des alcools.

### a) Rupture en $\alpha$

Les liaisons C-C proche d'un hétéroatome sont fréquemment clivées, laissant la charge sur le fragment contenant l'hétéroatome, dont les électrons  $n$  produisent une stabilisation par résonance (règle 8).



### b) Rupture de la bande C-O avec transposition de la charge positive sur le fragment alkyl



### c) Cyclisation avec formation du cycloalcane (dans ce cas particulier) et d'une molécule neutre.

