

## Alcani

Stretching C-H:	3000-2840 $\text{cm}^{-1}$ (comunque $<3000 \text{ cm}^{-1}$ )
Bending C-H:	$d_{\text{sim}} \text{CH}_3$ 1375 $\text{cm}^{-1}$ $d_{\text{asim}} \text{CH}_3$ 1450 $\text{cm}^{-1}$ $d_{\text{sci}} \text{CH}_2$ 1465 $\text{cm}^{-1}$ rocking $\text{CH}_2$ 720 $\text{cm}^{-1}$
Stretching C-C	1200-800 $\text{cm}^{-1}$ (deboli, non diagnostiche)
Bending C-C	$<500 \text{ cm}^{-1}$ (fuori dalla regione esaminata)

## Alcheni

Stretching C=C	1670-1640 $\text{cm}^{-1}$ debole o assente in situazioni simmetriche aumenta con la sostituzione
Stretching C-H:	$>3000 \text{ cm}^{-1}$
Bending C-H	fuori dal piano: 1000-650 $\text{cm}^{-1}$ (intensa)

## Dieni coniugati

Stretching C=C-C=C	$n_{\text{as}}$ 1600 $\text{cm}^{-1}$ (più intensa) $n_{\text{s}}$ 1650 $\text{cm}^{-1}$ (più debole o assente)
Stretching C-H:	$>3000 \text{ cm}^{-1}$
Bending C-H fuori dal piano:	1000-650 $\text{cm}^{-1}$ (intensa)

## Alchini

Stretching	2260-2100 $\text{cm}^{-1}$ (banda sottile) intensa in alchini terminale <b>debole o assente in alchini interni con sostituenti simili</b> sempre assente in alchini simmetrici
Stretching C-H:	3330-3270 $\text{cm}^{-1}$ (banda sottile)
Bending C-H	700-610 $\text{cm}^{-1}$ (banda larga)

## Idrocarburi aromatici

Ricorda gli alcheni in:

Stretching C=C	1600-1585 cm <sup>-1</sup>
	1500-1400 cm <sup>-1</sup>
Stretching C-H:	>3000 cm <sup>-1</sup>

Le bande più diagnostiche sono:

**Bending C-H fuori dal piano:** 710-675 cm<sup>-1</sup>

Queste ultime sono bande intense, il loro numero e posizione dipende dal pattern di sostituzione del nucleo aromatico.

## Alcoli

Stretching O-H: 3650-3580 cm<sup>-1</sup> (OH libero, banda stretta)  
3550-3200 cm<sup>-1</sup> (con legami H, banda allargata)

Stretching C-O 1260-1100 cm<sup>-1</sup> (più intenso di un C-C)

la frequenza aumenta con la sostituzione e con la simmetria diminuisce con insaturazioni e ramificazioni in  $\alpha$

Bending O-H 1420-1330 cm<sup>-1</sup> (poco diagnostiche)

## Eteri

Dialchileteri

Stretching asimm. C-O-C 150-1085 cm<sup>-1</sup> (1125 cm<sup>-1</sup>)

Arilalchileteri

Stretching asimm. C-O-C 1275-1200 cm<sup>-1</sup>

Stretching simm. C-O-C 1075-1020 cm<sup>-1</sup>

## Ammine

### Stretching N-H:

Ammine primarie:

Ammine secondarie:

Ammine terziarie:

**3500-3250  $\text{cm}^{-1}$  (bande meno larghe e meno intense che per OH)**

due bande,  $\sim 3500$  e  $\sim 3400 \text{ cm}^{-1}$  (meno se pure)

una banda,  $\sim 3330 \text{ cm}^{-1}$  (meno se pure)

nessun assorbimento

### Bending N-H:

**1650-1580  $\text{cm}^{-1}$  (solo primarie, scissoring)**

**900-650  $\text{cm}^{-1}$  (solo primarie, wagging)**

### Stretching C-N:

ammine alifatiche

ammine aromatiche

**1250-1020  $\text{cm}^{-1}$  (debole)**

**1340-1260  $\text{cm}^{-1}$  (forte)**

# Chetoni (1)

Il valore di base per un chetone alifatico è:

**Stretching C=O:** **1715 cm<sup>-1</sup>**

Inoltre: bending-stretching C-CO-C 1300-1100 cm<sup>-1</sup>  
(più debole di quella degli esteri!)

# Chetoni (2)

- Coniugazione

La coniugazione delocalizza, e quindi indebolisce il legame C=O: la frequenza di assorbimento scende.

**Per un chetone coniugato** (con vinili o fenili):

**Stretching C=O:** **1685-1665 cm<sup>-1</sup>**

La diminuzione della frequenza di assorbimento può essere minore se per motivi sterici non si può ottenere coplanarità. Anche l'assorbimento del C=C diminuisce di frequenza, ma aumenta di intensità, specie se la molecola è in conformazione *s-cis*.

# Aldeidi

**Stretching C=O:** **1740-1720 cm<sup>-1</sup>** (un po' più dei chetoni)

La frequenza di assorbimento è influenzata dagli stessi fattori dei chetoni.

**Stretching CO-H:** **2830-2695 cm<sup>-1</sup>** (un po' meno che negli alcani)

valore tipico: 2720 cm<sup>-1</sup> - a volte appaiono due bande

# Chetoni (3)

- Tensione d'anello

Carbonili in anelli in tensione aumentano la loro frequenza di assorbimento (come i C=C esociclici)

Per chetoni:

Cicloesanone: 1715  $\text{cm}^{-1}$

Ciclopentanone: 1751  $\text{cm}^{-1}$

Ciclobutanone: 1775  $\text{cm}^{-1}$

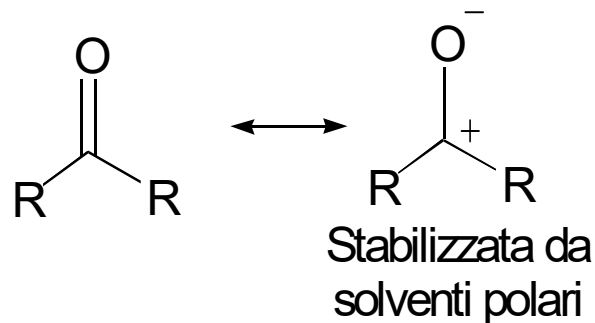
## Chetoni (4)

- Legami idrogeno

La presenza di legami idrogeno fa diminuire la frequenza di assorbimento di un C=O di un valore che va da 10-15  $\text{cm}^{-1}$  (legami idrogeno intermolecolari) fino a 50  $\text{cm}^{-1}$  (dimeri di RCOOH,  $\beta$ -idrossichetoni) e 100  $\text{cm}^{-1}$  (o-idrossiarilchetoni,  $\beta$ -dichetoni)

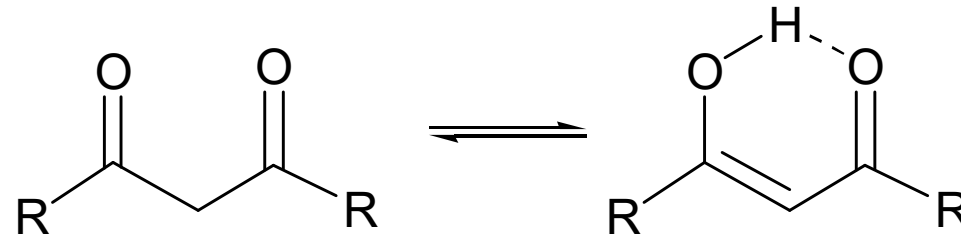
- Solvente

Rispetto al composto puro, solventi apolari aumentano la frequenza di assorbimento, e solventi polari la riducono.



# $\beta$ -Dichetoni

I  $\beta$ -dichetoni esistono in equilibrio con la forma enolica: questa ha una banda di assorbimento estremamente intensa a 1640-1580  $\text{cm}^{-1}$ , che caratterizza lo spettro.



## Aldeidi

**Stretching C=O:** **1740-1720  $\text{cm}^{-1}$**  (un po' più dei chetoni)

La frequenza di assorbimento è influenzata dagli stessi fattori dei chetoni.

**Stretching CO-H:** **2830-2695  $\text{cm}^{-1}$**  (un po' meno che negli alcani)

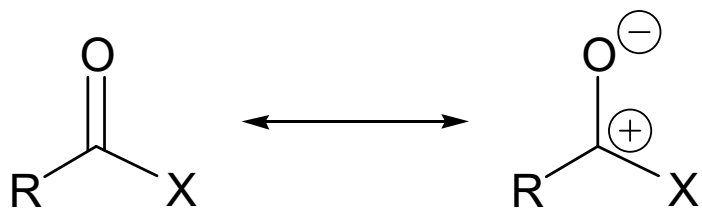
valore tipico: 2720  $\text{cm}^{-1}$  - a volte appaiono due bande

# Derivati degli acidi carbossilici

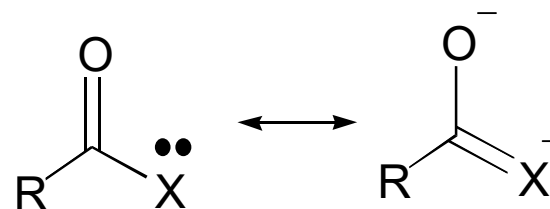
Per acidi carbossilici e derivati sono fondamentali gli effetti elettronici dei sostituenti

Un eteroatomo al posto di un alchile (cioè in acidi carbossilici e derivati) fa variare la frequenza di assorbimento, in due modi:

- l'effetto induttivo (elettron attrattore) rende più rigido il legame C=O, e fa crescere la frequenza di assorbimento
- l'effetto di risonanza rende meno rigido il legame C=O (che assume un maggior carattere di legame singolo), e fa diminuire la frequenza di assorbimento



sfavorita da gruppi  
elettronattrattori



RCOF	1869 cm <sup>-1</sup>
RCOCl	1815-1785 cm <sup>-1</sup>
COBr	1812 cm <sup>-1</sup>
COOH (monomero!)	1760 cm <sup>-1</sup>
COOR	<b>1750-1735 cm<sup>-1</sup></b>

CONH <sub>2</sub>	1695-1650 cm <sup>-1</sup>
COSR	1720-1690 cm <sup>-1</sup>

**Tabella 1. Analisi preliminare per l'interpretazione di uno spettro IR**

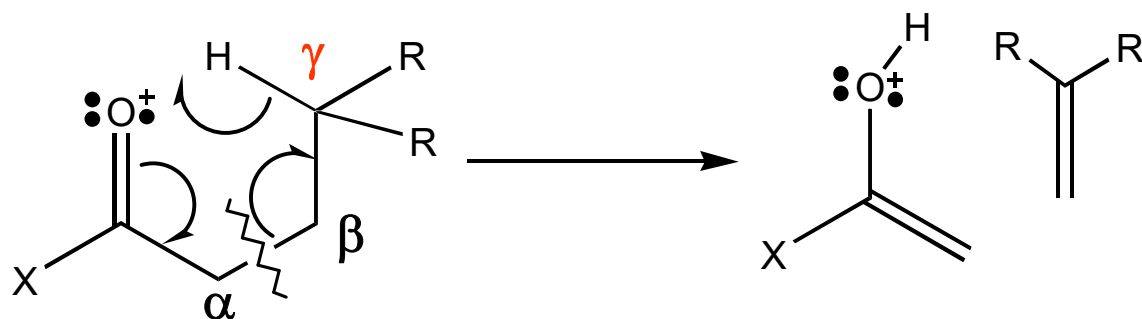
Regione ( $\text{cm}^{-1}$ )	Legami responsabili	Natura del composto
3 700-3 000	—O—H —N—H $\equiv\text{C—H}$	Alcoli, acidi carbossilici Ammine, ammidi Alchini
3 100-3 000	C—H	Alcheni, areni
3 000-2 800	C—H	Gruppi alifatici
2800-2700	C—H	Aldeidi
2700-2400	PO—H S—H P—H	Ossiacidi fosforici Mercaptani Fosfine
2400-2000	$\text{C}\equiv\text{C}$ $\text{C}\equiv\text{N}$	Alchini Nitrili
1 870-1 650	$\text{C}=\text{O}$	Alogenuri degli acidi, aldeidi, ammidi, amminoacidi, anidridi, acidi carbossilici, esteri, chetoni, lattami, lattoni, chinoni ecc.
1 650-1 550	$\text{C}=\text{C}$ $\text{C}=\text{N}$ N—H	Composti insaturi, aromatici Eterociclici insaturi Ammidi, ammine, amminoacidi
1 550-1 200	C—H $\text{NO}_2$	Nitroderivati, alcani, alcheni
1 300-1 000	C—O S=O; P=O	Alcoli, eteri, esteri etc. Composti solforati e fosforati
1 000-650	$=\text{C—H}$ N—H	Alcheni ed areni Ammine
800-650	C—X	Composti alogenati

# Frammentazioni: riarrangiamento

Un altro possibile modo di frammentare è il *riarrangiamento*.

In un riarrangiamento non solo si rompono dei legami, ma se ne formano di nuovi. Anche in questo caso si formano nuovi ioni-radicali a massa pari e molecole neutre.

**Riarrangiamenti:** riarrangiamento di McLafferty, tipico dei composti carbonilici con un idrogeno in  $\gamma$  al carbonile



**riarrangiamento  
di McLafferty**

Perché l'idrogeno deve essere in  $\gamma$  al carbonile?

L'idrogeno deve essere in  $\gamma$  al carbonile perché in questo modo è possibile formare uno *stato di transizione ciclico a sei termini* e quindi piuttosto stabile.

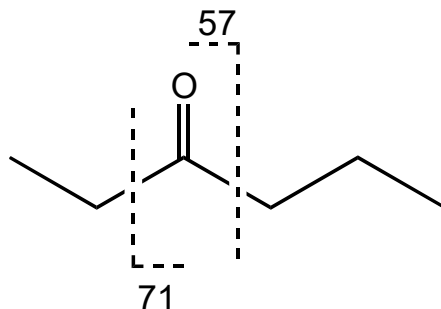
1. Nelle frammentazioni per scissione semplice si generano un catione ed un radicale. Poiché viene rotto un singolo legame semplice, gli ioni ottenuti da queste frammentazioni sono sempre a **massa dispari** (se si parte da molecole con ione molecolare a massa pari, cioè senza azoto o con numero pari di atomi di azoto)

2. In un riarrangiamento non solo si rompono dei legami, ma se ne formano di nuovi. In questo caso si formano nuovi ioni-radicali a **massa pari** e molecole neutre.



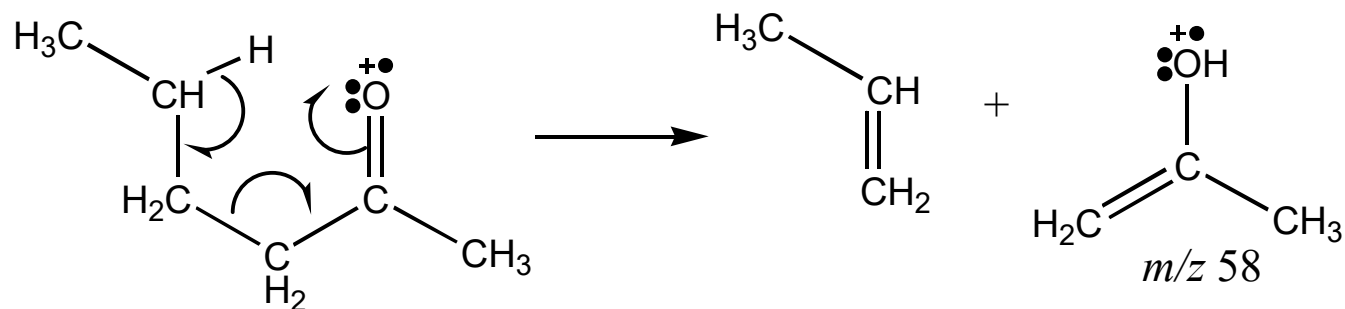
# Chetoni

- predominanza di  $\alpha$ -scissione con produzione di ione acilio



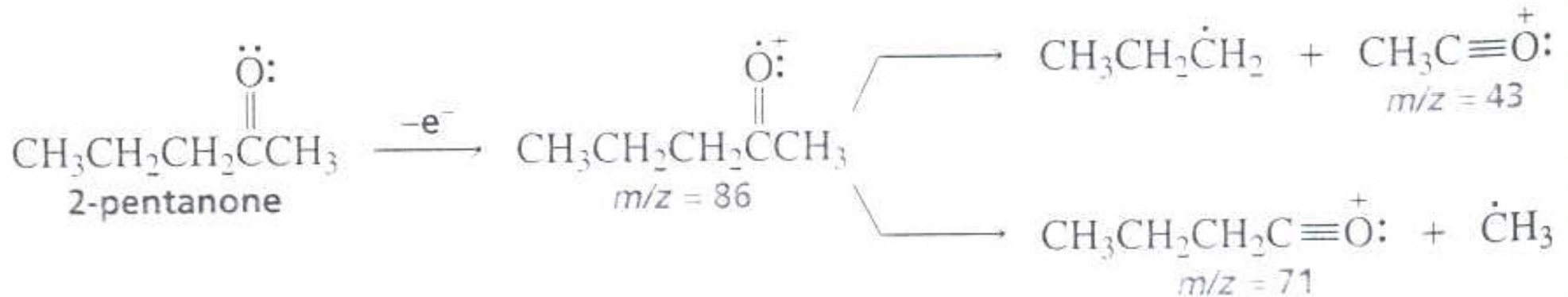
*Il gruppo alchilico che porta al radicale più stabile è quello che si allontana più facilmente.*

- Riarrangiamento di McLafferty:



# Chetoni

- Picco dello ione molecolare è abbastanza pronunciato
- I chetoni si frammentano in maniera omolitica in corrispondenza del legame C-C adiacente all'atomo di ossigeno con la carica che rimane sullo ione acilio stabilizzato per risonanza.



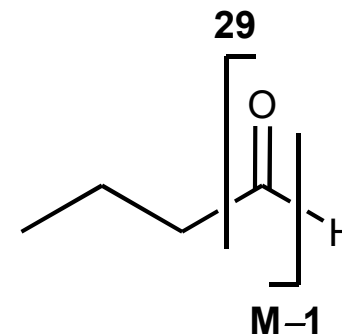
*Il gruppo alchilico che porta al radicale più stabile è quello che si allontana più facilmente.*

- Se uno dei gruppi alchilici legati al carbonio carbonilico ha un idrogeno in  $\gamma$ , può avvenire il riarrangiamento di McLafferty:

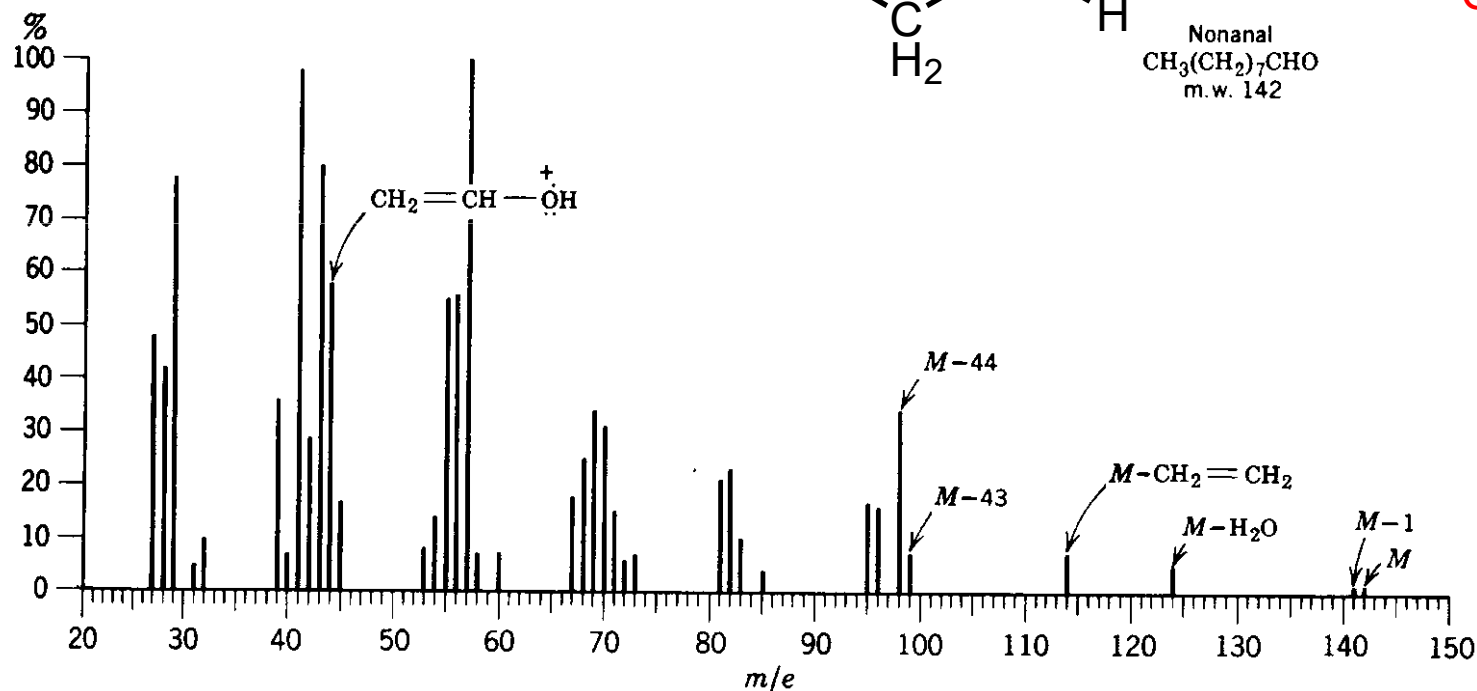
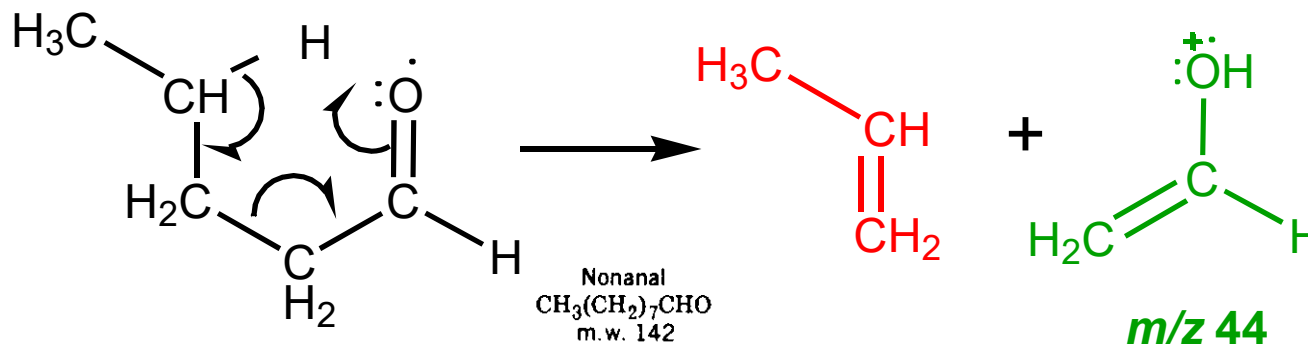


# Aldeidi

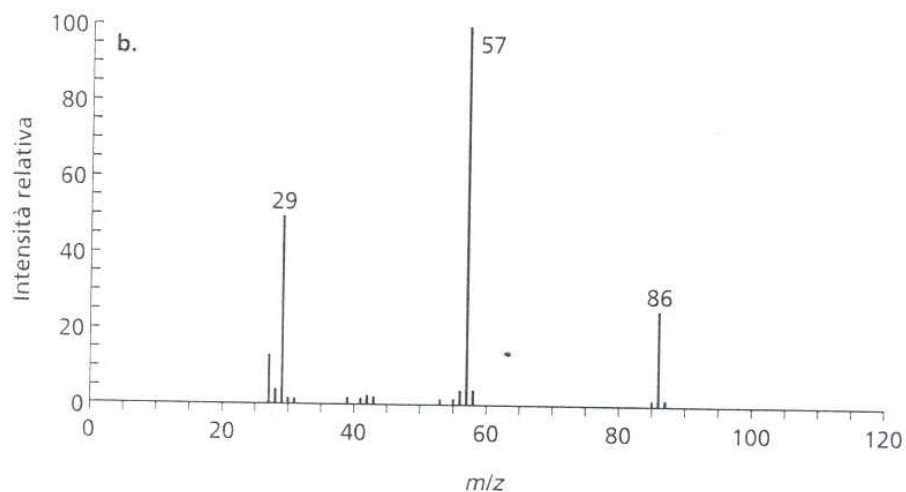
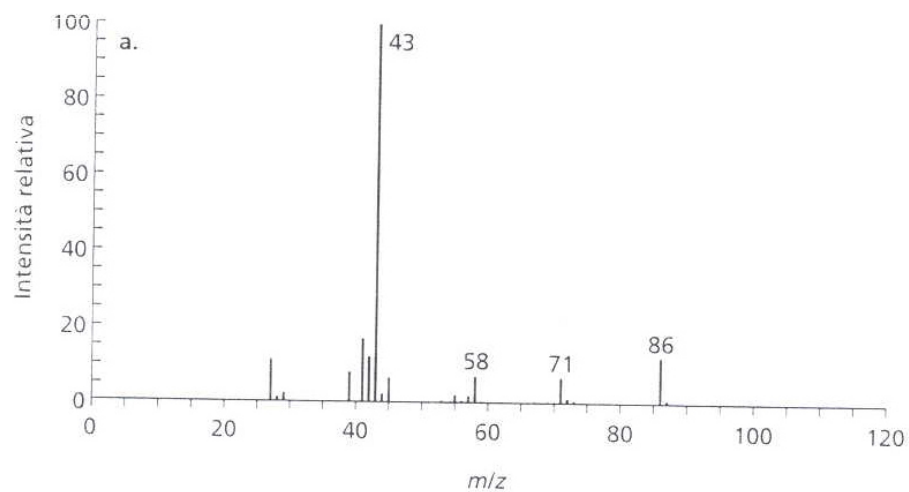
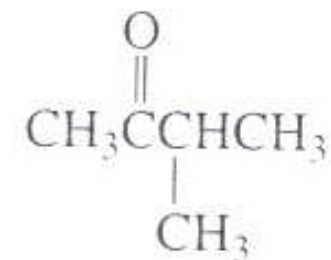
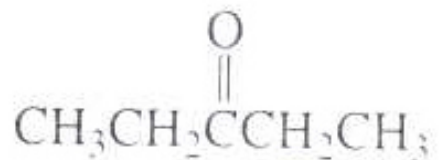
- picco ad  $M-1$  (piuttosto caratteristico), picco a  $m/z$  29 ( $\text{CHO}^+$ ).



- picco ad  $M-1$  (piuttosto caratteristico), picco a  $m/z$  29 ( $\text{CHO}^+$ ).
- altri picchi caratteristici sono  $M-18$  (perdita di acqua),  $M-28$ ,  $M-43$  e  $M-44$ .
- riarrangiamento di McLafferty ( $m/z$  44, se non c'è ramificazione in  $\alpha$ )

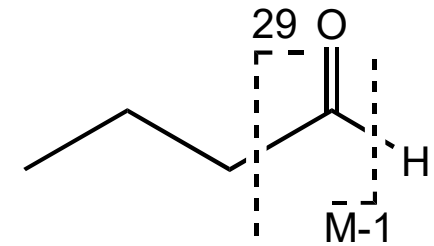


Come possono essere distinti questi composti sulla base del loro spettro di massa? Identificare i chetoni che danno gli spettri di massa a e b.

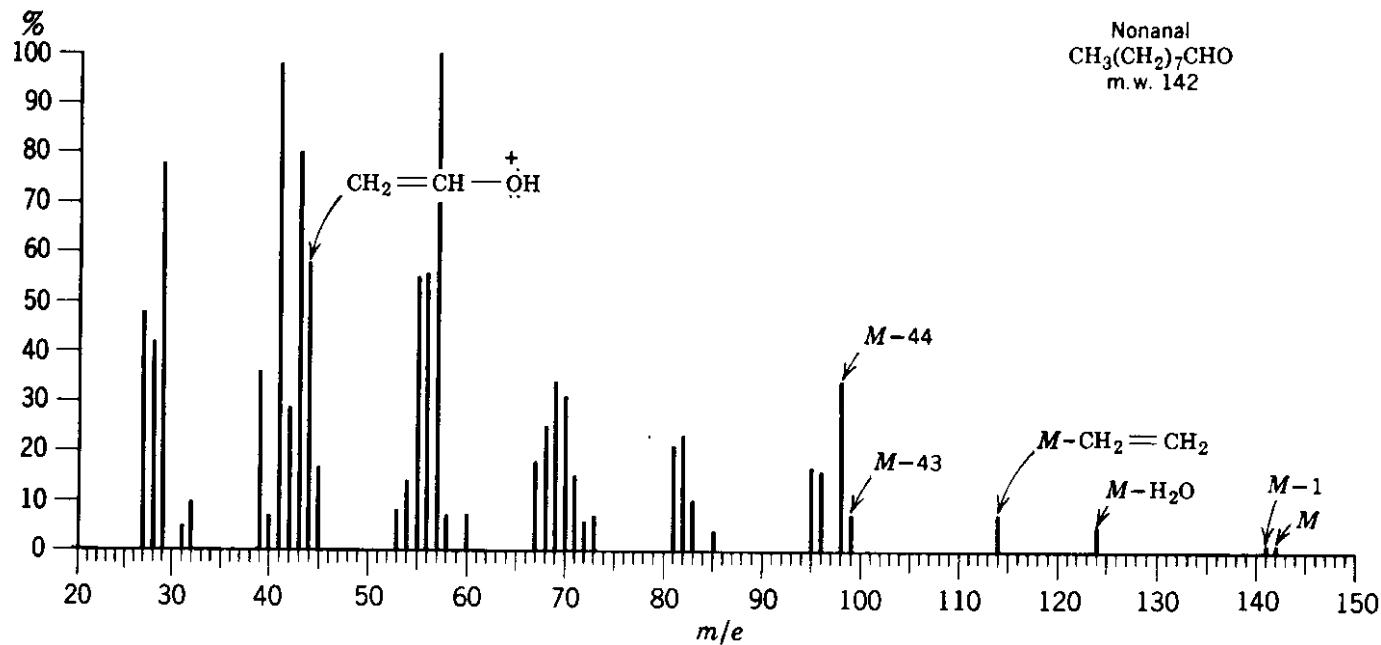
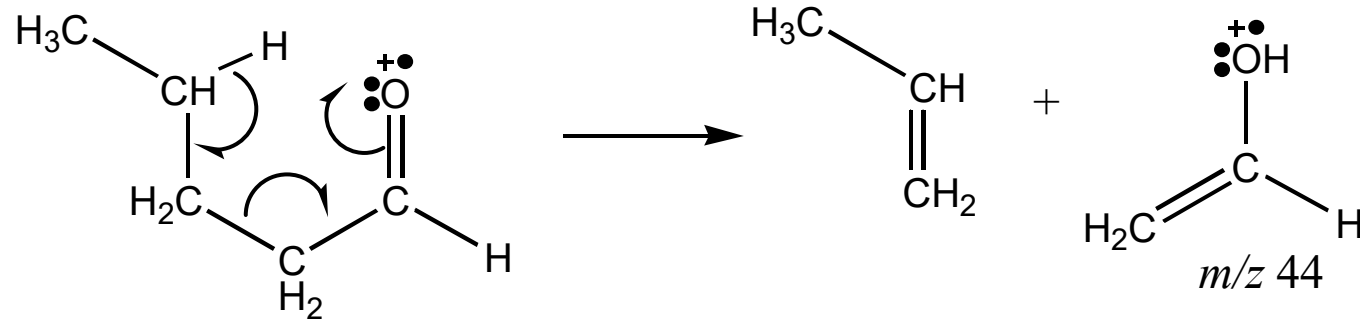


# Aldeidi

- picco ad  $M-1$  (piuttosto caratteristico), picco a  $m/z$  29 ( $\text{CHO}^+$ ).

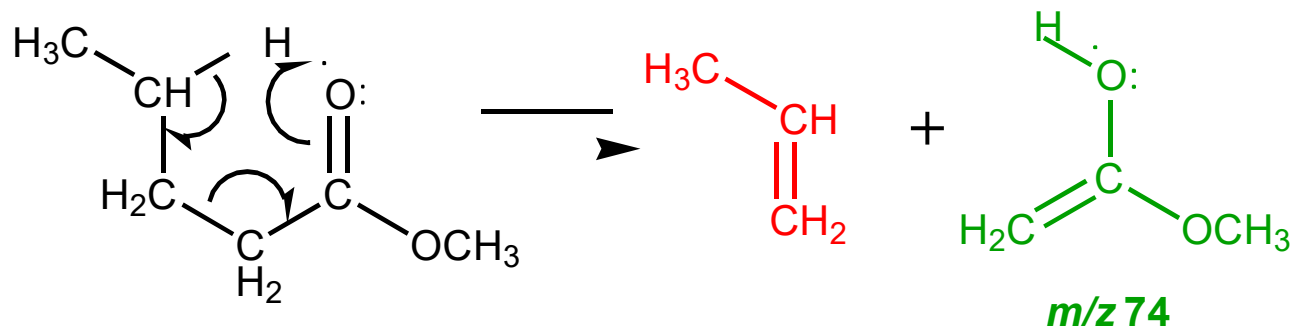


- riarrangiamento di McLafferty ( $m/z$  44, se non c'è ramificazione in  $\alpha$ )

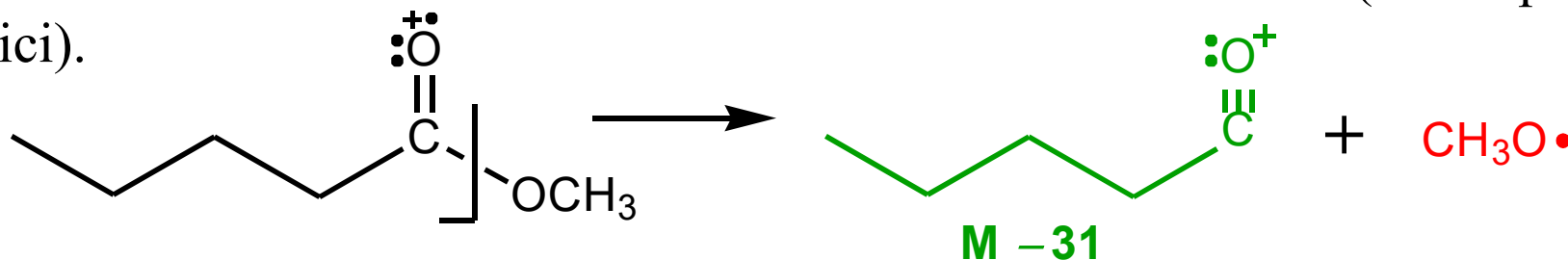


## Esteri (parte acilica dominante, p.e. esteri metilici)

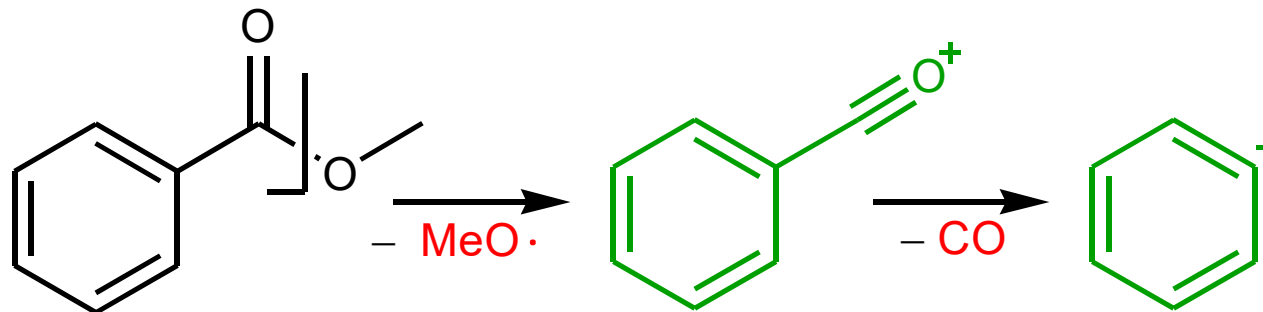
- ione molecolare è sempre visibile
- riarrangiamento di McLafferty ( $m/z$  74 per esteri metilici non ramificati in  $\alpha$ , spesso il picco base).

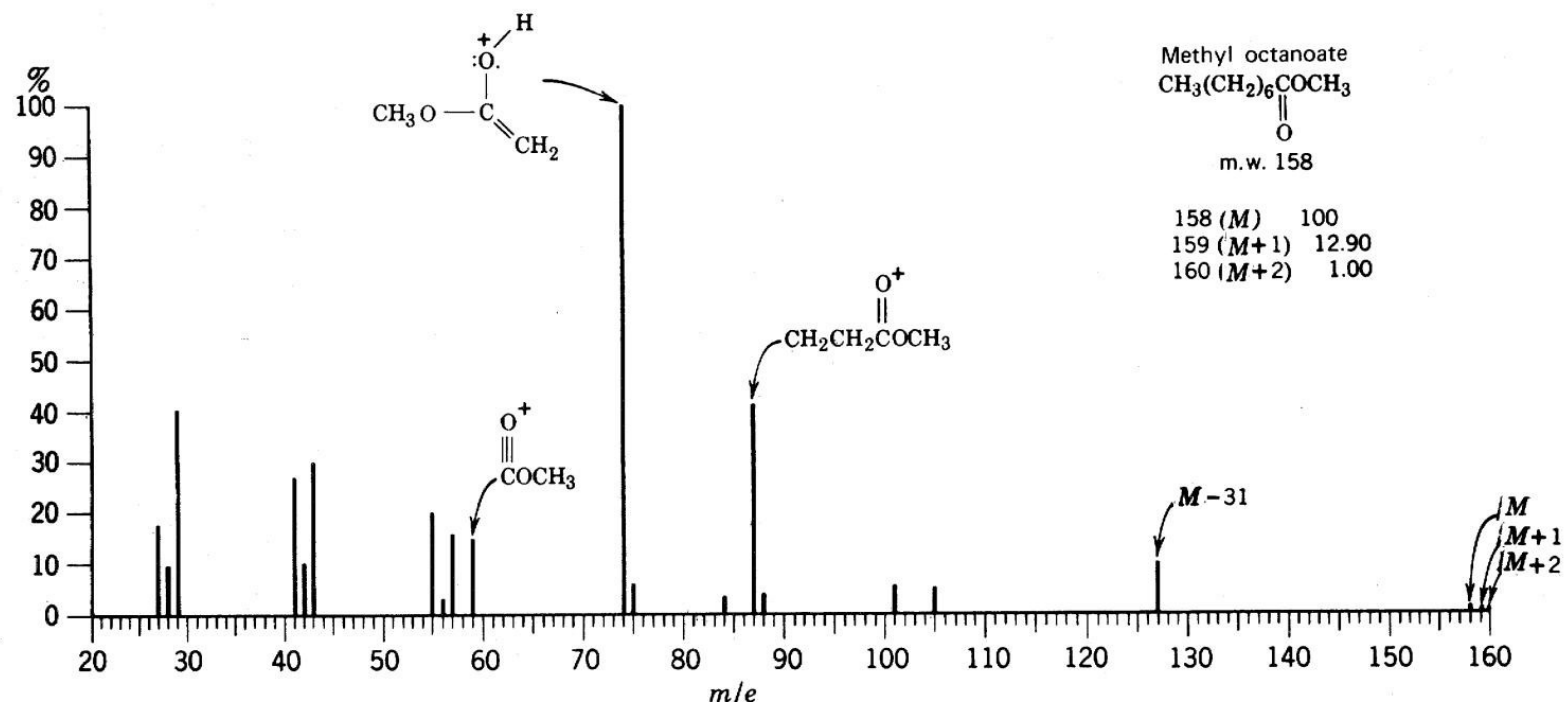


- normali ioni alchilici  $C_nH_{2n-1}^+$  e a ioni  $C_nH_{2n-1}O_2^+$ ).
- perdita del radicale alcossido  $RO\cdot$  e formazione dello ione acilio ( $M-31$  per esteri metilici).



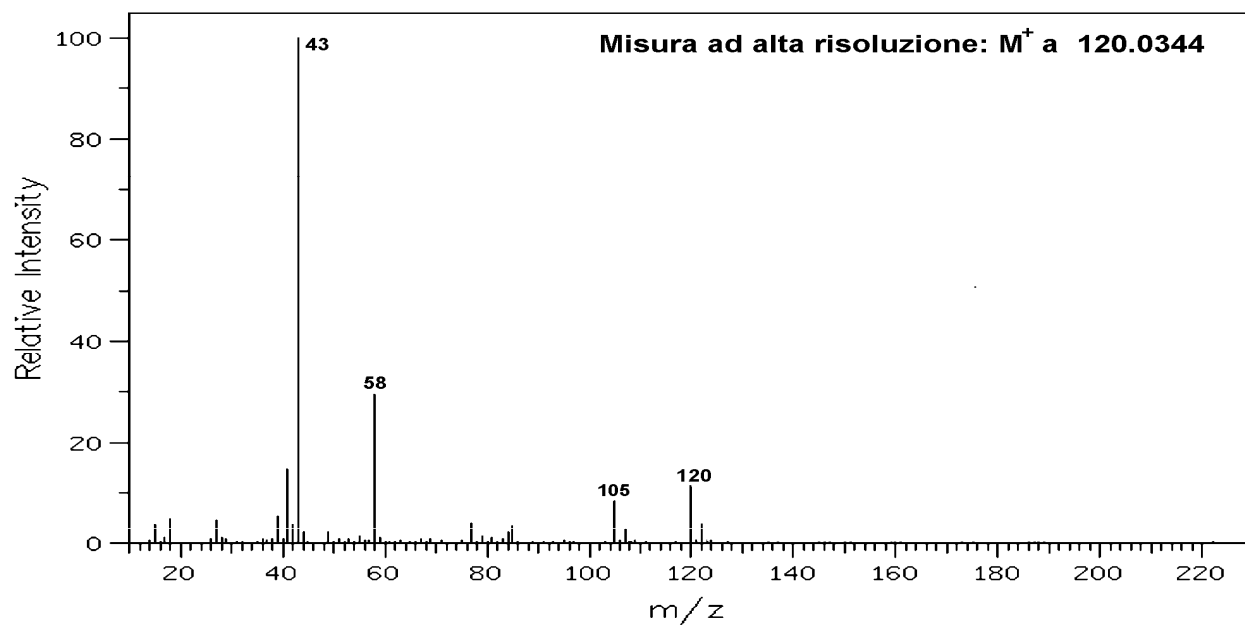
- esteri aromatici: frammentazione molto favorita  $C-CO$  con perdita del radicale alcossido  $RO\cdot$ , e successiva perdita di  $CO$





## Esteri (parte alcolica dominante, p.e. acetati)

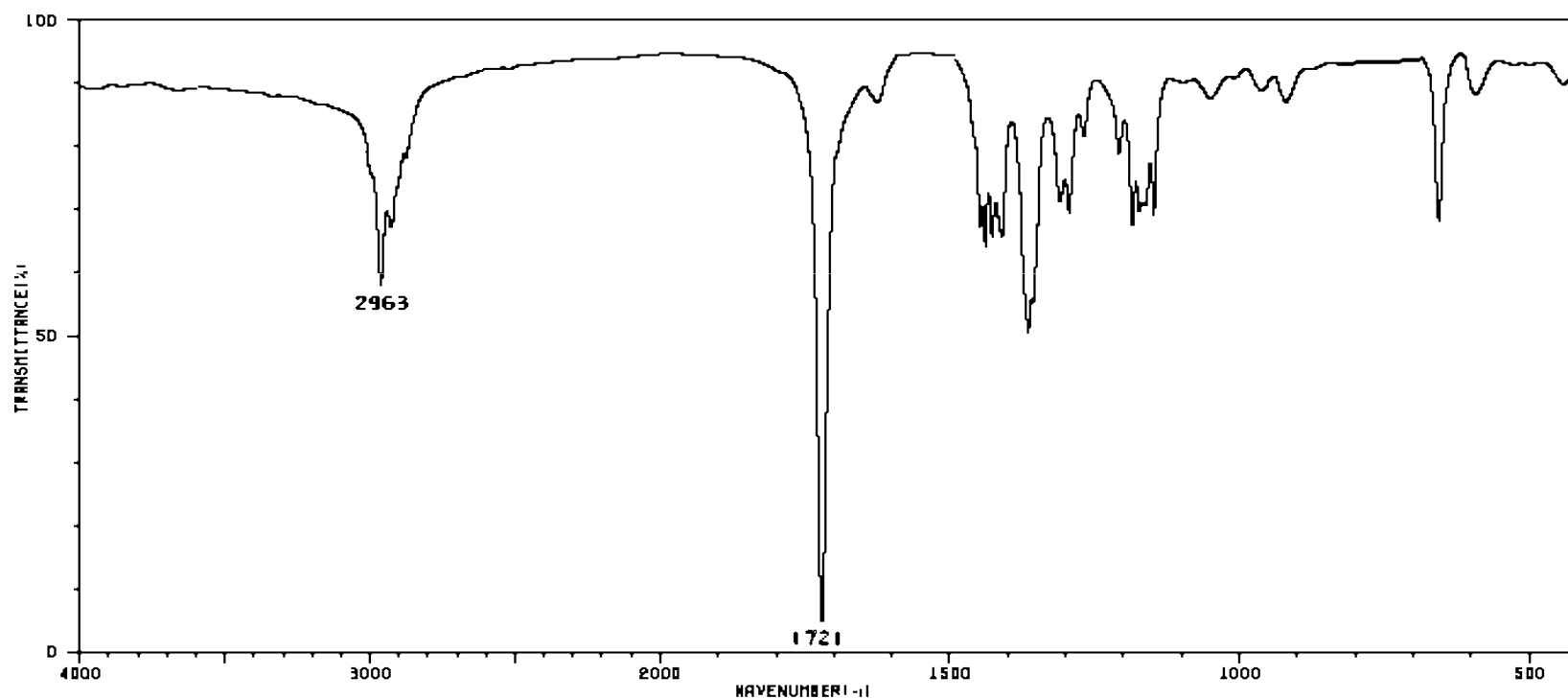
- ione molecolare debole o assente
- frammentazione simile ai relativi alcoli: perdita di acido acetico (M-60) in acetati



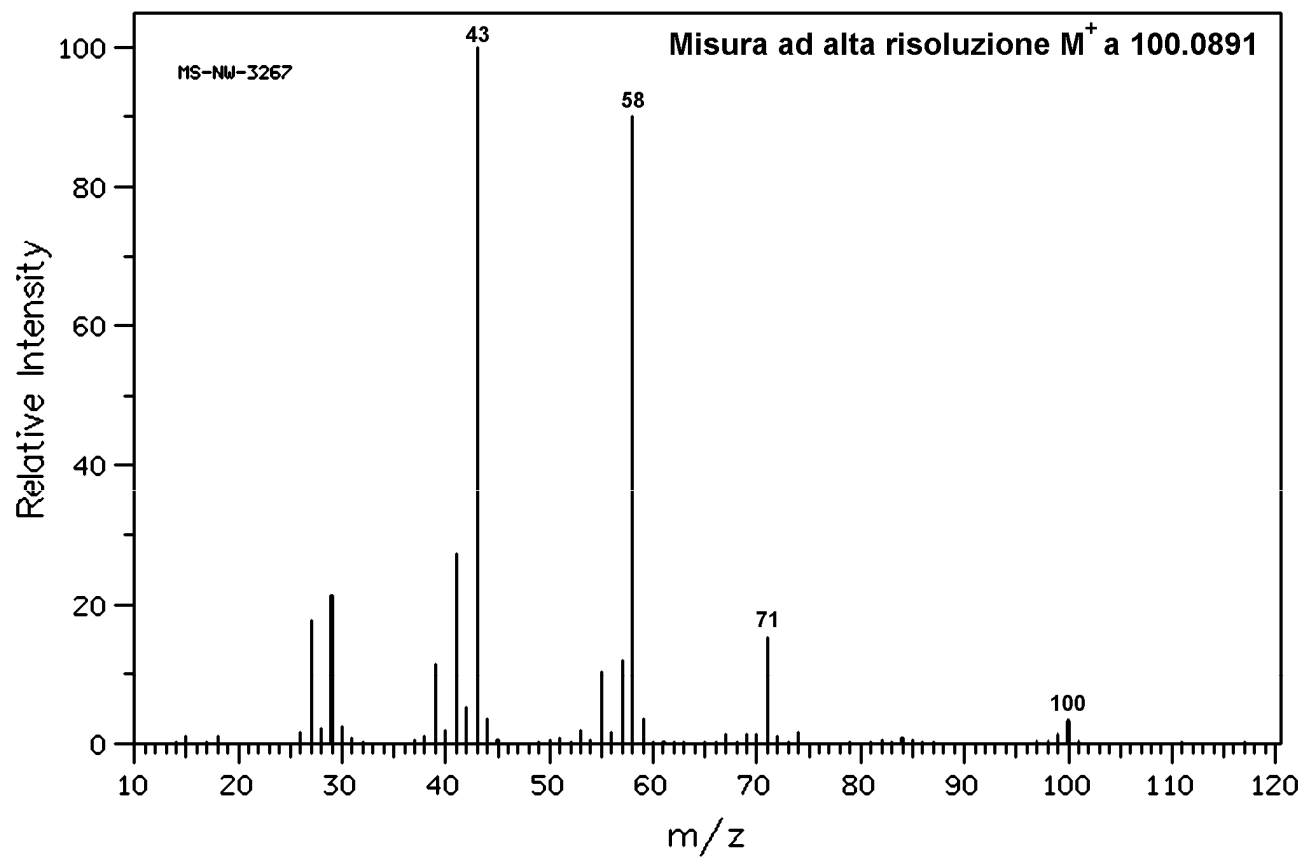
Spettro di massa EI

85  
C3H5N2O 85.0402  
C3H7N3 85.0641  
C4H5O2 85.0289  
C4H7NO 85.0528  
C4H9N2 85.0767  
C5H9O 85.0653  
C5H11N 85.0892  
C6H13 85.1018

Element	Nuclide	Mass	Element	Nuclide	Mass
Hydrogen	<sup>1</sup> H	1.00783	Silicon	<sup>28</sup> Si	27.9769
	D ( <sup>2</sup> H)	2.01410		<sup>29</sup> Si	28.9765
Carbon	<sup>12</sup> C	12.00000 (std)		<sup>30</sup> Si	29.9738
	<sup>13</sup> C	13.00336	Phosphorus	<sup>31</sup> P	30.9738
Nitrogen	<sup>14</sup> N	14.0031		Sulfur	<sup>32</sup> S
	<sup>15</sup> N	15.0001	<sup>33</sup> S		32.9715
Oxygen	<sup>16</sup> O	15.9949	<sup>34</sup> S	33.9679	
	<sup>17</sup> O	16.9991	Chlorine	<sup>35</sup> Cl	34.9689
Fluorine	<sup>18</sup> O	17.9992		<sup>37</sup> Cl	36.9659
	<sup>19</sup> F	18.9984	Bromine	<sup>79</sup> Br	78.9183
		<sup>81</sup> Br		80.9163	
			Iodine	<sup>127</sup> I	126.9045

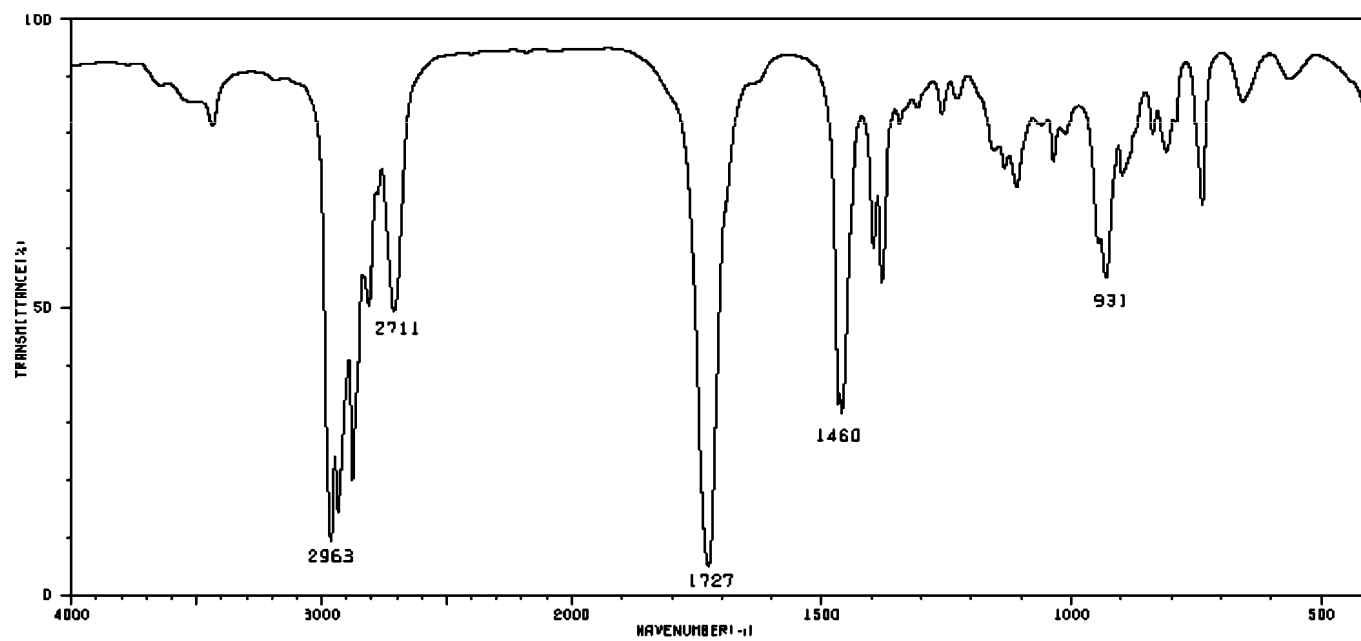


Spettro IR (CCl<sub>4</sub>)

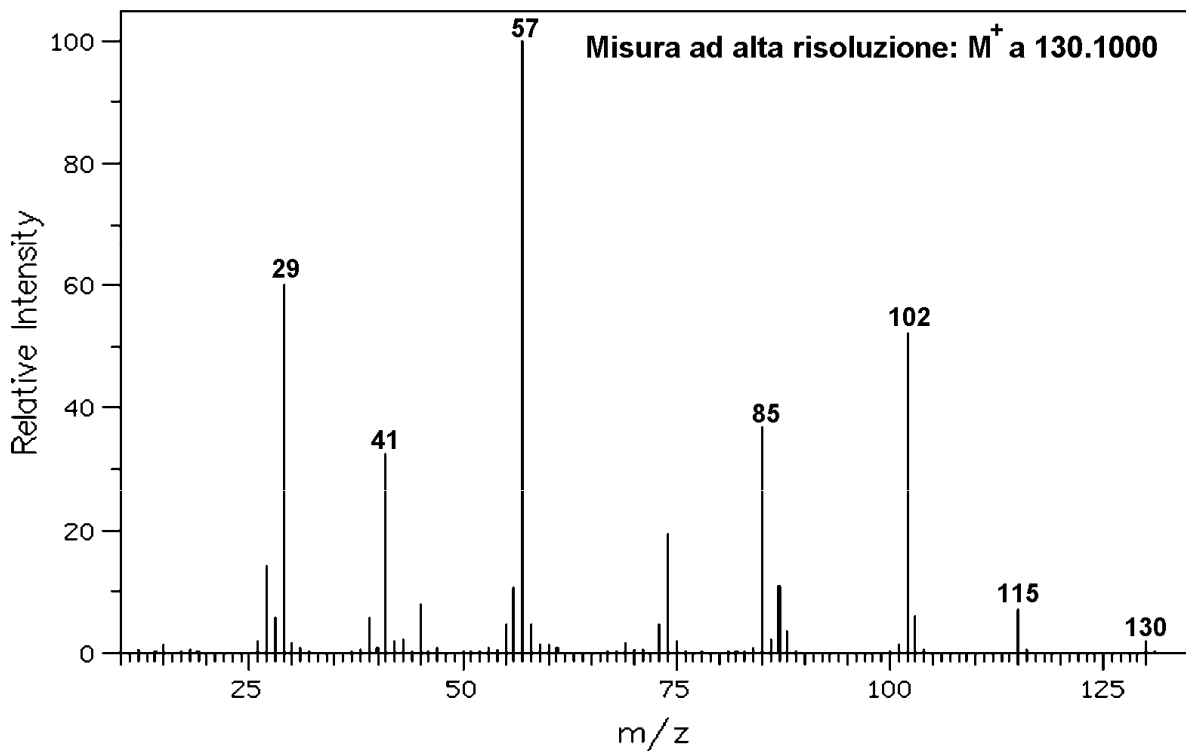


### Spettro di massa EI

$M^+$	$m/z$
<b>100</b>	
$C_2H_4N_4O$	100.0386
$C_3H_4N_2O_2$	100.0273
$C_3H_6N_3O$	100.0511
$C_3H_8N_4$	100.0750
$C_4H_4O_3$	100.0160
$C_4H_6NO_2$	100.0399
$C_4H_8N_2O$	100.0637
$C_4H_{10}N_3$	100.0876
$C_5H_8O_2$	100.0524
$C_5H_{10}NO$	100.0763
$C_5H_{12}N_2$	100.1001
$C_6H_{12}O$	100.0888
$C_6H_{14}N$	100.1127
$C_7H_{16}$	100.1253

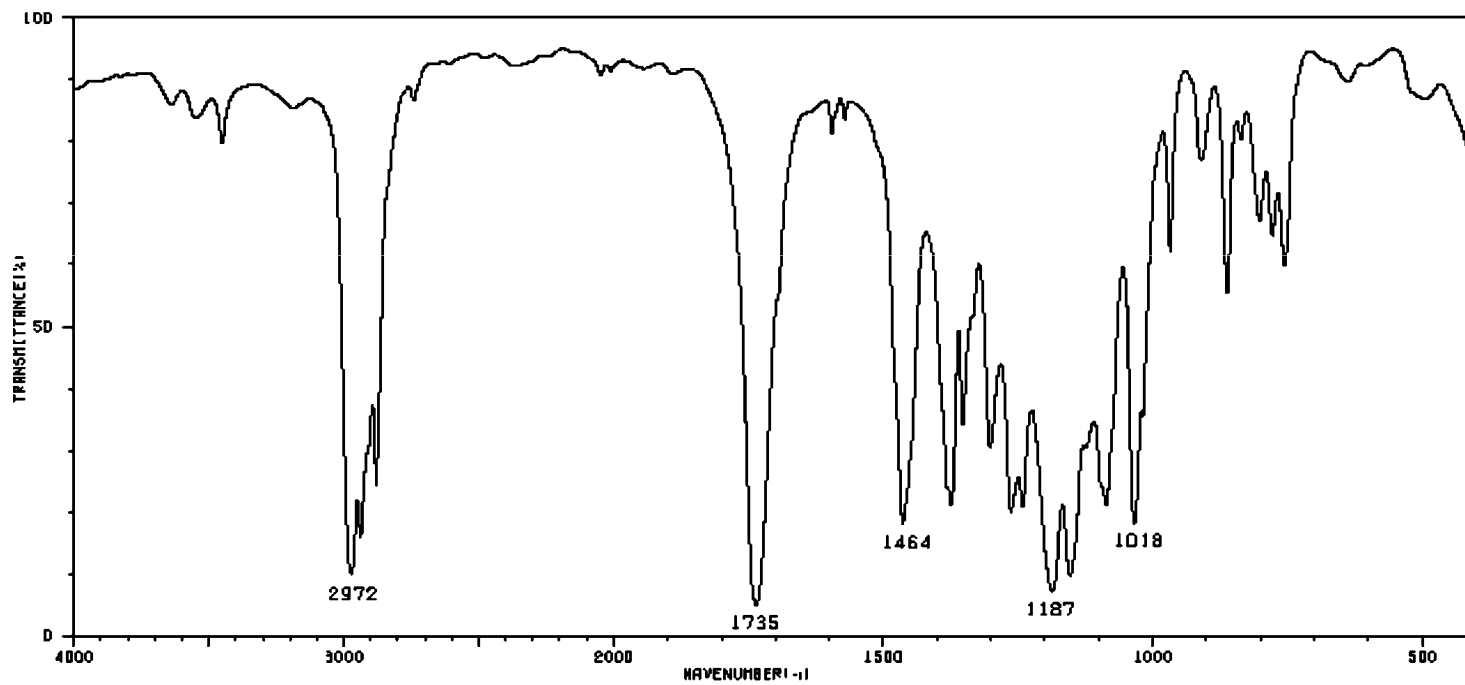


### Spettro IR (composto puro)

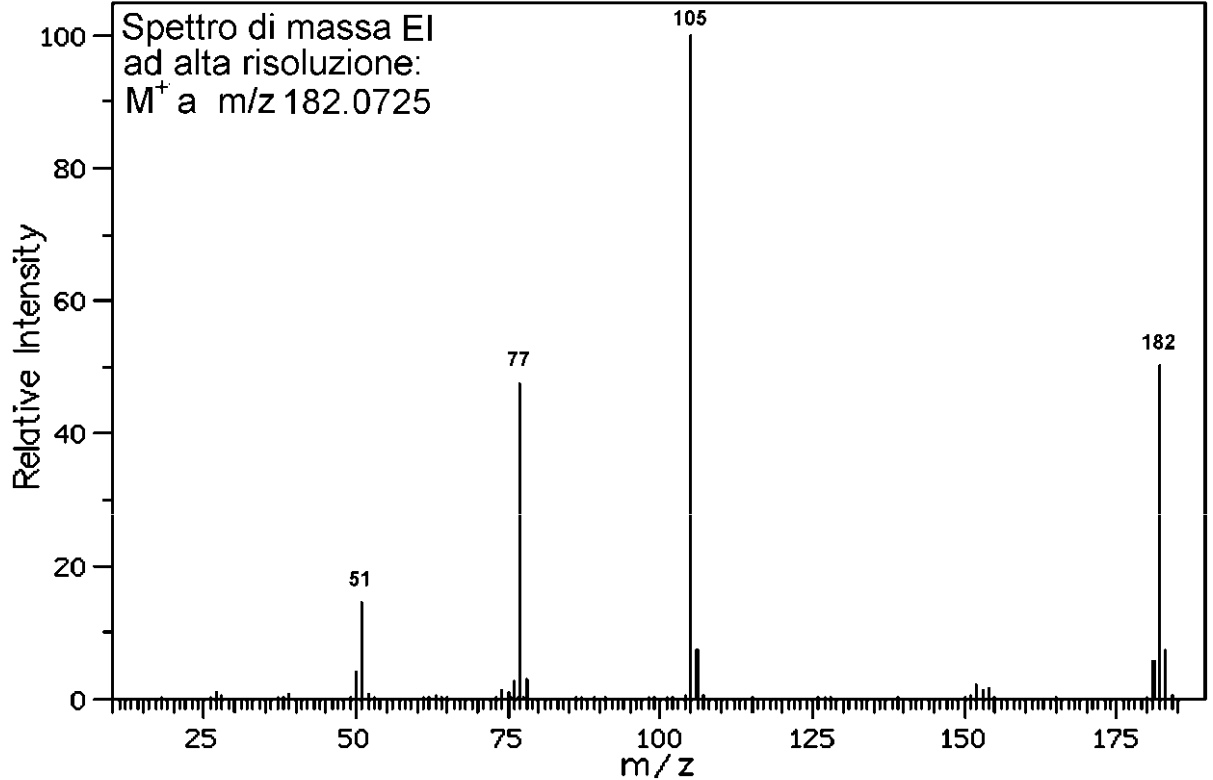


Spettro di massa EI

Formula	m/z
$C_3H_4N_3O_3$	130.0253
$C_3H_6N_4O_2$	130.0491
$C_4H_4NO_4$	130.0140
$C_4H_6N_2O_3$	130.0379
$C_4H_8N_3O_2$	130.0617
$C_4H_{10}N_4O$	130.0856
$C_5H_6O_4$	130.0266
$C_5H_8NO_3$	130.0504
$C_5H_{10}N_2O_2$	130.0743
$C_5H_{12}N_3O$	130.0981
$C_5H_{14}N_4$	130.1220
$C_6H_{10}O_3$	130.0630
$C_6H_{12}NO_2$	130.0868
$C_6H_{14}N_2O$	130.1107
$C_6H_{16}N_3$	130.1346
$C_7H_4N_3$	130.0406
$C_7H_{14}O_2$	130.0994
$C_7H_{16}NO$	130.1233
$C_7H_{18}N_2$	130.1471
$C_8H_6N_2$	130.0532
$C_8H_{18}O$	130.1358
$C_9H_8N$	130.0657
$C_{10}H_{10}$	130.0783

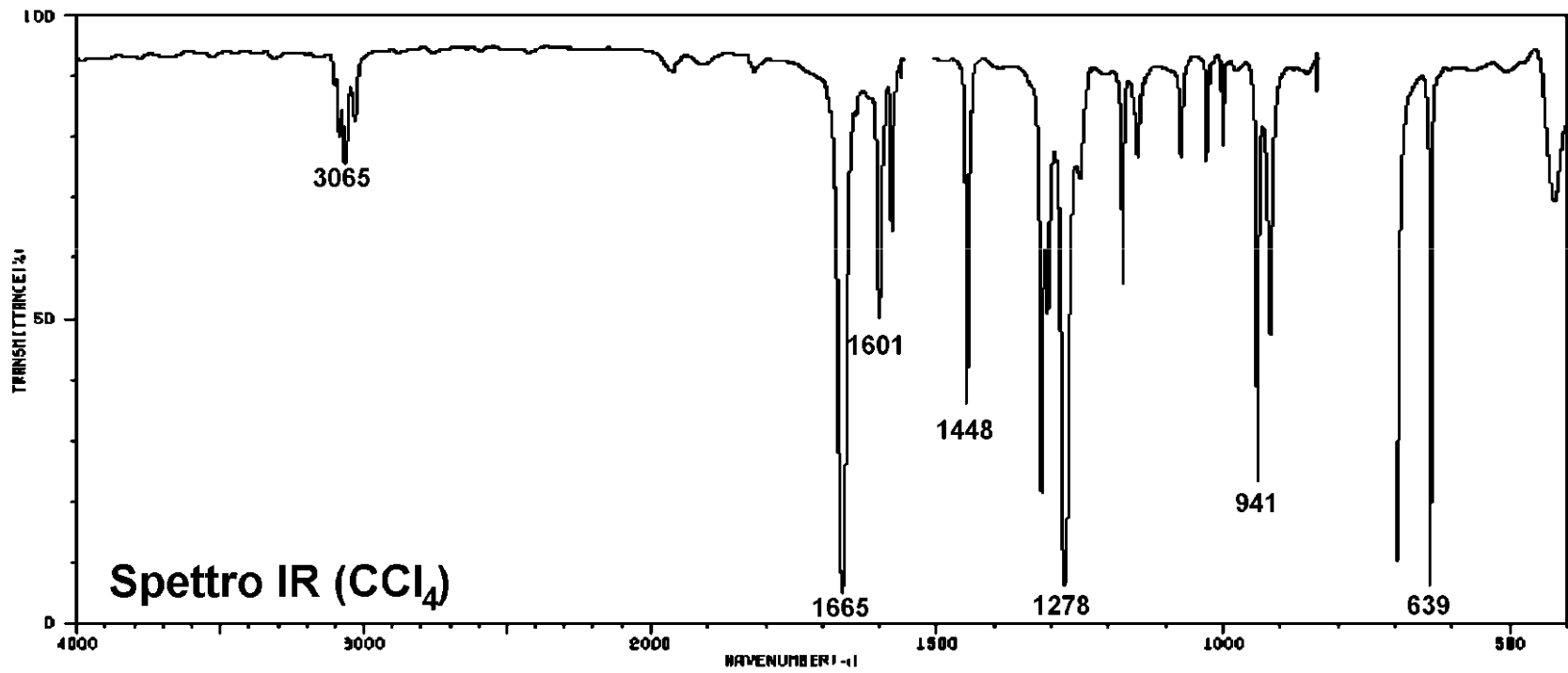


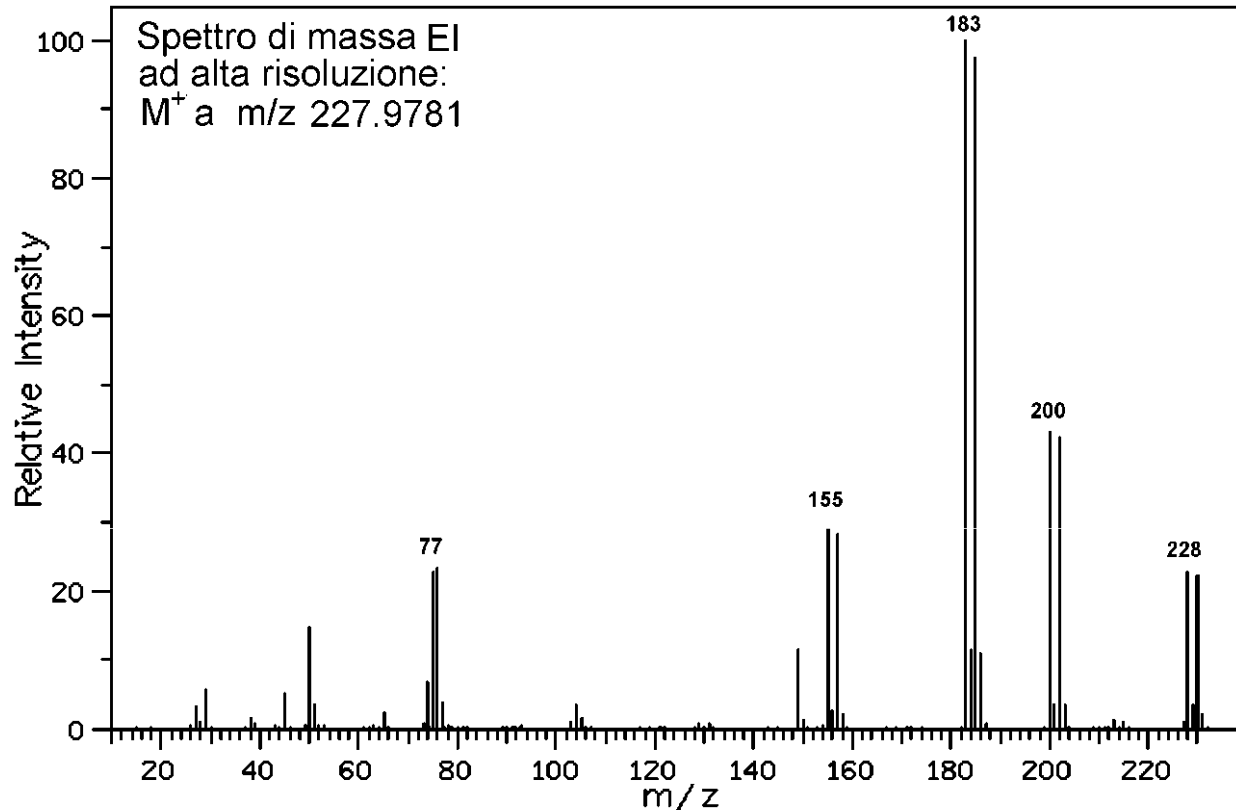
Spettro IR



**182**

C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	182.0328
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	182.0566
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	182.0805
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	182.0453
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	182.0692
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	182.0930
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	182.1169
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	182.0579
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	182.0817
C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	182.1056
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	182.1295
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	182.1533
C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	182.0594
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	182.0943
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	182.1182
C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	182.1420
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	182.1659
C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	182.0719
C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	182.1307
C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> NO	182.1546
C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	182.1784
C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> NO	182.0606
C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	182.0845
C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O	182.1671
C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> N	182.1910
C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O	182.0732
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N	182.0970
C <sub>13</sub> H <sub>26</sub>	182.2036
C <sub>14</sub> H <sub>14</sub>	182.1096



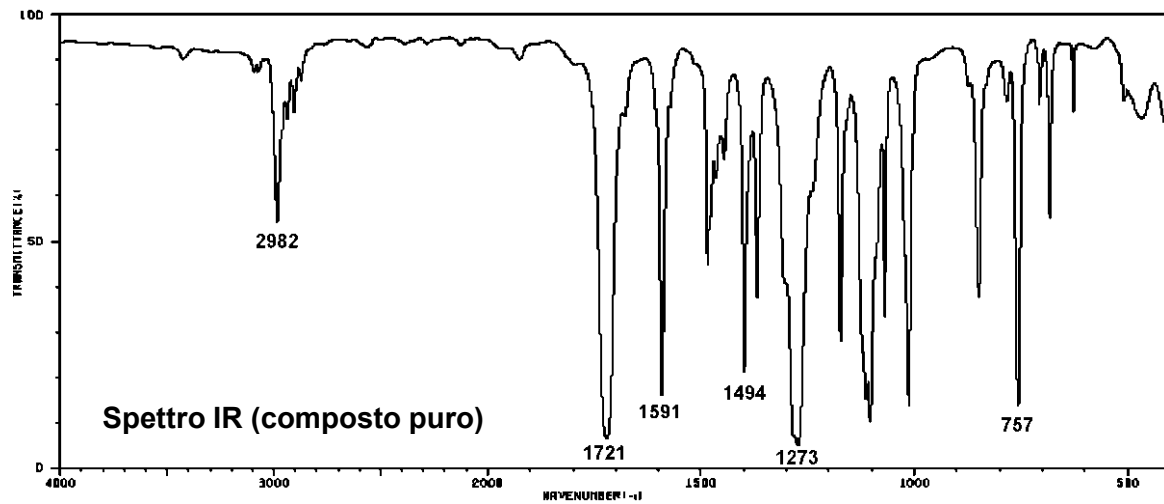


149

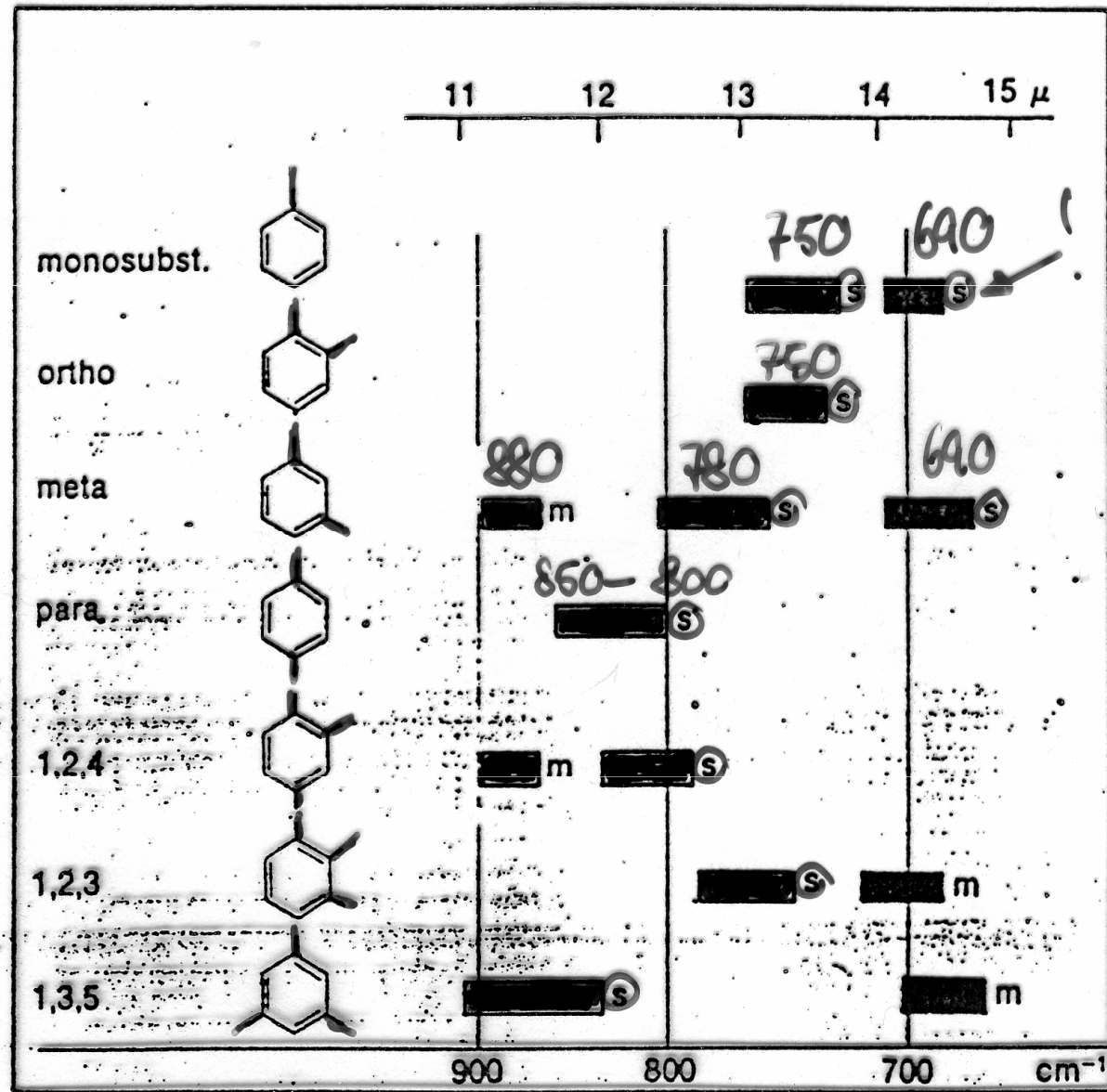
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	149.0563
C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	149.0801
C <sub>4</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	149.1040
C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	149.0688
C <sub>3</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	149.0927
C <sub>5</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	149.1165
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	149.0464
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	149.0814
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	149.1052
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	149.0351
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	149.0590
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	149.0829
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	149.0238
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	149.0477
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	149.0715
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	149.0954
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	149.0603
C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO	149.0841
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	149.1080
C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> O	149.0967
C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N	149.1205
C <sub>11</sub> H <sub>17</sub>	149.1331

Spettro di massa EI

Element	Nuclide	Mass	Element	Nuclide	Mass	Element	Nuclide	Mass
Hydrogen	<sup>1</sup> H	1.00783	Oxygen	<sup>16</sup> O	15.9949	Sulfur	<sup>32</sup> S	31.9721
	D ( <sup>2</sup> H)	2.01410		<sup>17</sup> O	16.9991		<sup>33</sup> S	32.9715
Carbon	<sup>12</sup> C	12.00000 (std)		<sup>18</sup> O	17.9992		<sup>34</sup> S	33.9679
	<sup>13</sup> C	13.00336	Fluorine	<sup>19</sup> F	18.9984	Chlorine	<sup>35</sup> Cl	34.9689
Nitrogen	<sup>14</sup> N	14.0031		Silicon	<sup>~</sup> Si		27.9769	<sup>37</sup> Cl
	<sup>15</sup> N	15.0001	<sup>29</sup> Si		28.9765	Bromine	<sup>79</sup> Br	78.9183
			<sup>30</sup> Si		29.9738		<sup>81</sup> Br	80.9163
			Phosphorus	<sup>31</sup> P	30.9738	Iodine	<sup>127</sup> I	126.9045

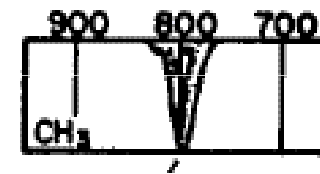
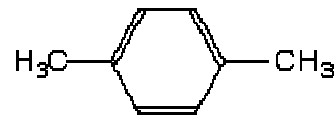
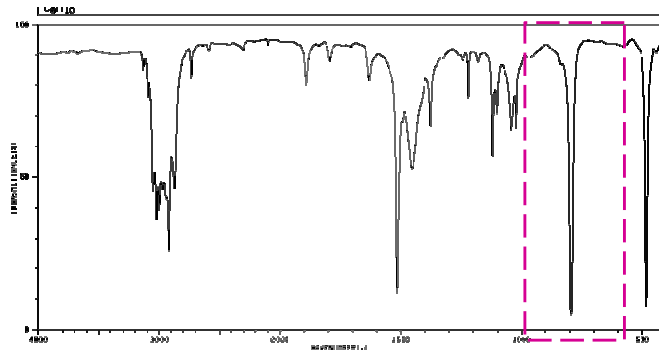


Bending Ar-H

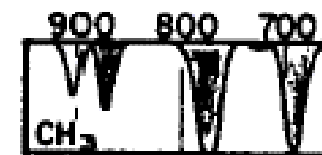
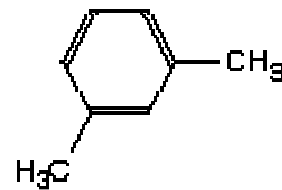
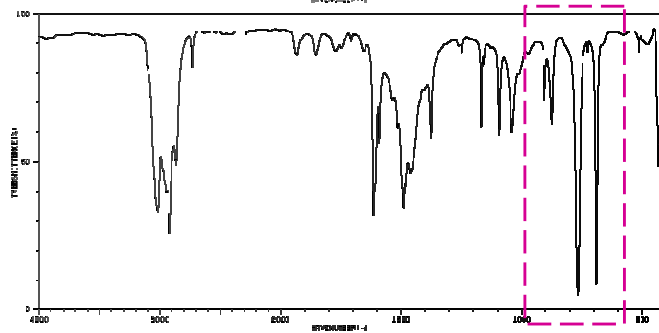


## Bending Ar-H

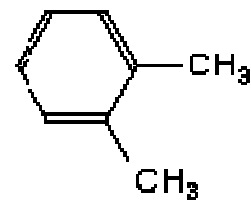
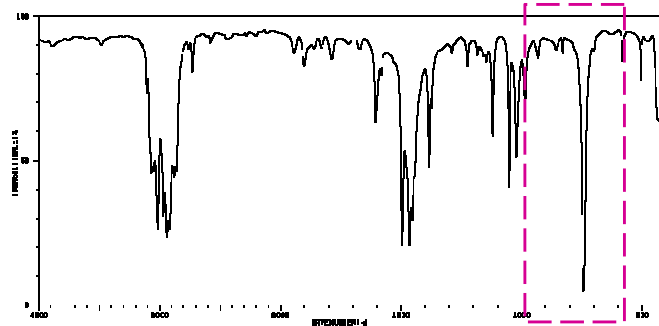
spettri relativi all'o-xilene, m-xilene e p-xilene. Si notino le intense bande presenti tra i 690 e 900  $\text{cm}^{-1}$  dovute al bending fuori dal piano del legame C-H del composto aromatico.



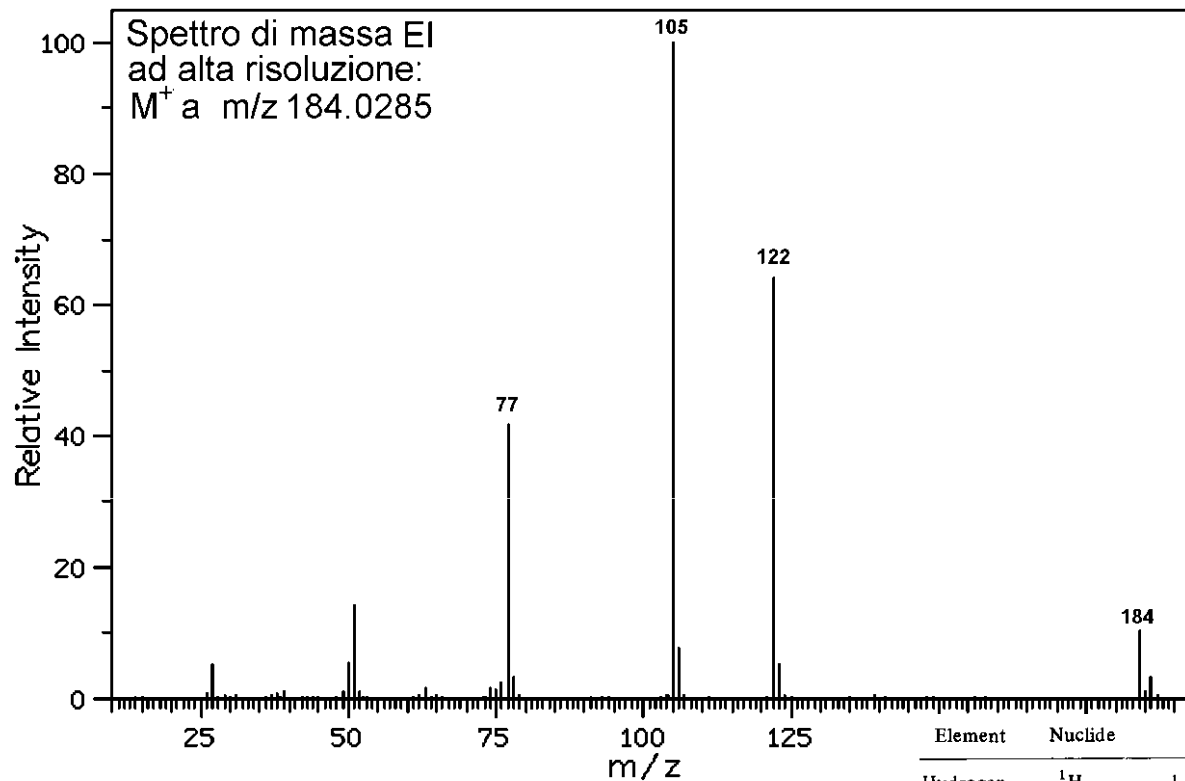
PARA X-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-X



META X-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-X



ORTHO X-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-X

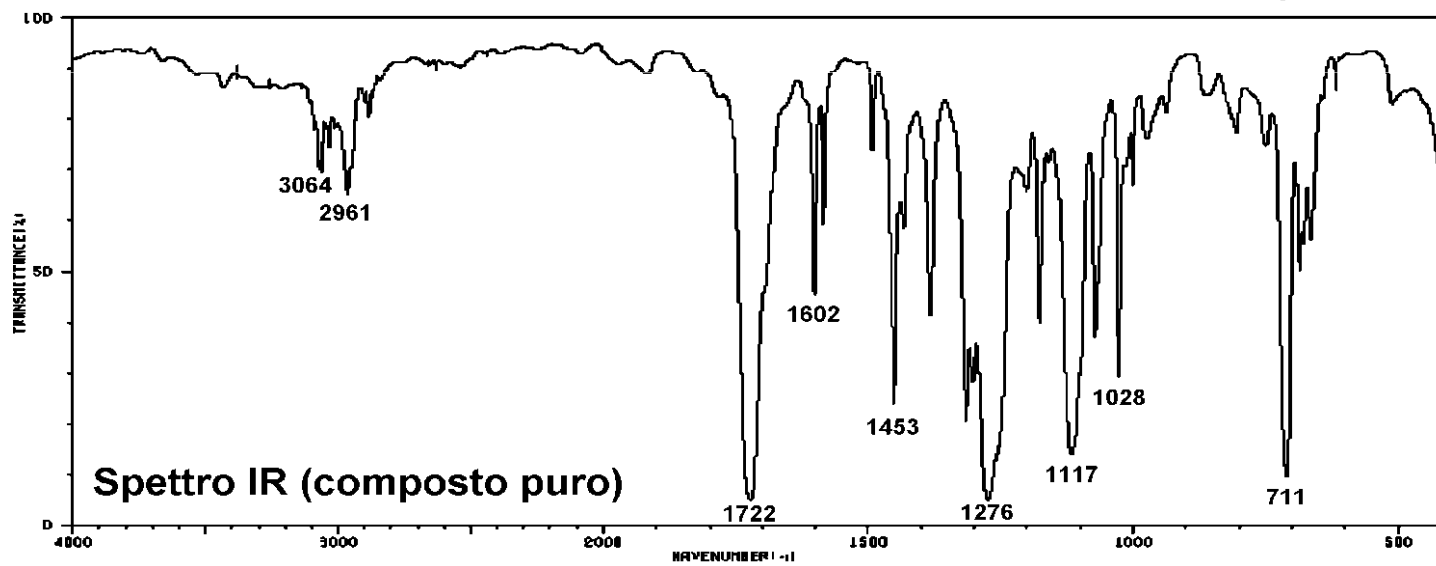


149

C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	149.0563
C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	149.0801
C <sub>4</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	149.1040
C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	149.0688
C <sub>3</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	149.0927
C <sub>3</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	149.1165
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	149.0464
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	149.0814
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	149.1052
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	149.0351
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	149.0590
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	149.0829
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	149.0238
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	149.0477
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	149.0715
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	149.0954
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	149.0603
C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO	149.0841
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	149.1080
C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> O	149.0967
C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N	149.1205
C <sub>11</sub> H <sub>17</sub>	149.1331

## Spettro di massa EI

Element	Nuclide	Mass	Element	Nuclide	Mass	Element	Nuclide	Mass
Hydrogen	<sup>1</sup> H	1.00783	Oxygen	<sup>16</sup> O	15.9949	Sulfur	<sup>32</sup> S	31.9721
	D ( <sup>2</sup> H)	2.01410		<sup>17</sup> O	16.9991		<sup>33</sup> S	32.9715
Carbon	<sup>12</sup> C	12.00000 (std)		<sup>18</sup> O	17.9992		<sup>34</sup> S	33.9679
	<sup>13</sup> C	13.00336	Fluorine	<sup>19</sup> F	18.9984	Chlorine	<sup>35</sup> Cl	34.9689
Nitrogen	<sup>14</sup> N	14.0031	Silicon	<sup>28</sup> Si	27.9769		<sup>37</sup> Cl	36.9659
	<sup>15</sup> N	15.0001		<sup>29</sup> Si	28.9765	Bromine	<sup>79</sup> Br	78.9183
				<sup>30</sup> Si	29.9738		<sup>81</sup> Br	80.9163
			Phosphorus	<sup>31</sup> P	30.9738	Iodine	<sup>127</sup> I	126.9045



# Picchi isotopici ( $M+2$ )

Il picco  $M+2$  è generalmente molto più debole ed è dovuto alla presenza di **ossigeno**, **zolfo**, **cloro** e **bromo**. Le masse dei principali isotopi pesanti sono superiori di due unità a quelle degli isotopi più abbondanti. La presenza di questi elementi è rivelata dai picchi isotopici a  $M+2$ .

# Picchi isotopici ( $M+2$ )

**$M+2$**

**Cl (33% di M)**

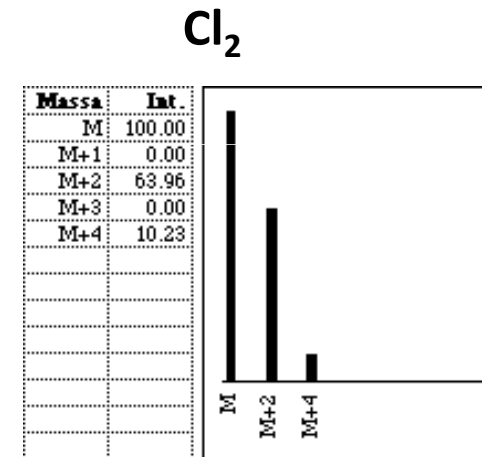
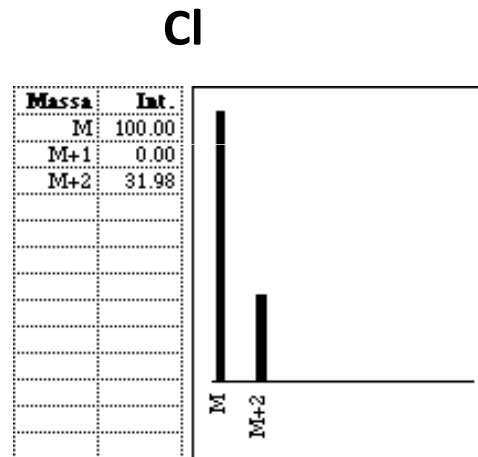
**Br (100% di M)**

**S (4% di M)**

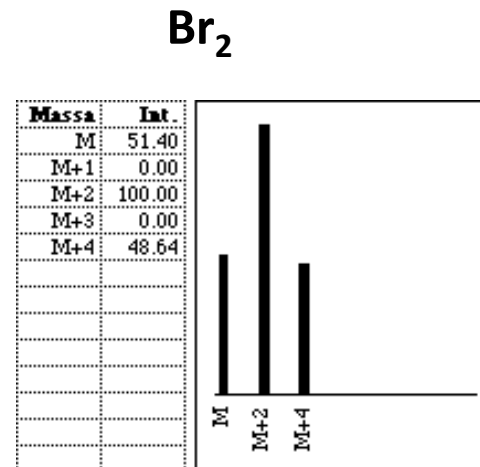
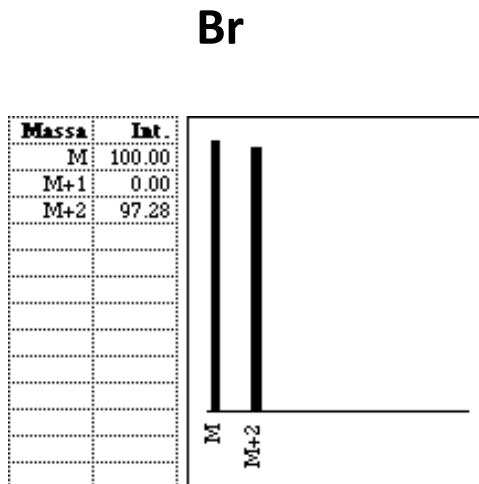
# Picchi isotopici (M+2)

Cloro ( $^{35}\text{Cl}:^{37}\text{Cl}$  circa 3:1) e Bromo ( $^{79}\text{Br}:^{81}\text{Br}$  circa 1:1) danno picchi M+2.

Una molecola che contiene un atomo di cloro presenterà nello spettro di massa un picco M+2 approssimativamente pari a 1/3 dell'intensità del picco dello ione molecolare. Una molecola che contiene due atomi di cloro presenterà tre picchi M, M+2 e M+4.



Una molecola che contiene un atomo di bromo presenterà un picco M+2 quasi uguale, come intensità, al picco dello ione molecolare. Una molecola con due atomi di Br da tre picchi, M, M+2 e M+4 nel rapporto 1:2:1.



L'abbondanza naturale dei due isotopi 79 ed 81 e' circa uguale;