## 1- Composé organique CxHyOz

Masse molaire = 86 g/mol (d'après le fragment du pic moléculaire),

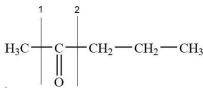
Donc: 86 g/mol – 16 g/mol = 70 g/mol, ceci correspond à 5 atomes de C + 10 atomes d'H.

La formule est donc : C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O ; Nombre d'instaurations = 1 (qui correspond à C=O)

0.75

**SPECTRE 1:** Le pic à m/z = 71 correspond au fragment issu de l'ion moléculaire ayant perdu un CH<sub>3</sub>+.

On peut alors proposer la pentan-2-one pour le spectre 1 :



Le pic à m/z = 86 correspond à l'ion moléculaire

La coupure 1 donne le fragment  $[CH_3-CH_2-CH_2-C\equiv O]^+$  pour lequel m/z = 71 (et  $H_3C^+$  m/z = 15)

La coupure 2 donne les fragments  $[CH_3-C\equiv 0]^+$  et  $[CH_3-CH_2-CH_2]^{-+}$  pour lesquels m/z = 43.

0.75

## **SPECTRE 2:**

L'isomère de position du composé pentan-2-one est le pentanone :

$$H_3C$$
  $\longrightarrow$   $CH_2$   $\longrightarrow$   $CH_2$   $\longrightarrow$   $CH_3$   $\longrightarrow$   $\longrightarrow$   $CH_3$   $\longrightarrow$   $CH_3$   $\longrightarrow$   $CH_3$   $\longrightarrow$   $CH_3$   $\longrightarrow$   $CH_3$   $\longrightarrow$   $CH_3$ 

Les pics à m/z = 29 correspond à l'ion  $[CH_3-CH_2]^+$ .

0.75

Et 86 – 29 = 57 ce pic est caractéristique de la chaine aliphatique [CH<sub>3</sub>—CH<sub>2</sub>—CH<sub>2</sub>—CH<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, mais cela donnerait un nombre de carbone > 5, en plus l'autre fragment doit contenir 1 atome d'oxygène et 3 atomes de carbone.

Ce fragment est [CH<sub>3</sub>—CH<sub>2</sub>—C≡O]<sup>+</sup>

0.75

- 2- Abondance relative : L'intensité du fragment le plus abondant est prise à 100 %, les intensités des autres pics sont calculées par rapport à ce 100 %. Ces pourcentages correspondent alors aux probabilités de présences donc de stabilité des différents fragments.
- 0.75
- 3- Pic de base: Il correspond à l'ion le plus stable, issu de la fragmentation du l'ion parent. Etant donné 0.75 que ce fragment est le plus stable  $\Rightarrow$  il sera le plus abondant.
- - ▶ m/z = 43 pour le spectre 1 :  $[CH_3-C=0]^+$ . Ce cation est stabilisé par résonnance.

$$H_3C-\stackrel{\uparrow}{C}=O\longleftrightarrow H_3C-C\equiv \stackrel{\uparrow}{O}$$

m/z = 57 pour le spectre 2 :  $[CH_3 - CH_2 - C \equiv O]^+$ . Ce cation est stabilisé par résonnance.

$$H_3C-CH_2-\overset{\scriptscriptstyle \bullet}{C}=O$$
  $\longleftrightarrow$   $H_3C-CH_2-C\equiv\overset{\scriptscriptstyle \bullet}{O}$ 

Remarque 1: Dans le spectre 1, les pics à m/z = 28 et m/z = 58 correspondent aux fragments issus du réarrangement de McLafferty, ceci confirme la structure proposée (qui possède un H en y).

<u>Remarque 2</u>: Ces fragments sont formés suite à une coupure en  $\alpha$  des carbonyles (composés cétoniques).

Remarque 3: - Les isomères alcooliques sont à exclure (pas de pic à m/z = 31 et ni 45 et présence du pic M \*+).

- L'isomère aldéhydique est aussi à exclure en raison de l'absence du pic à m/z = 85 qui correspond à (M-1).