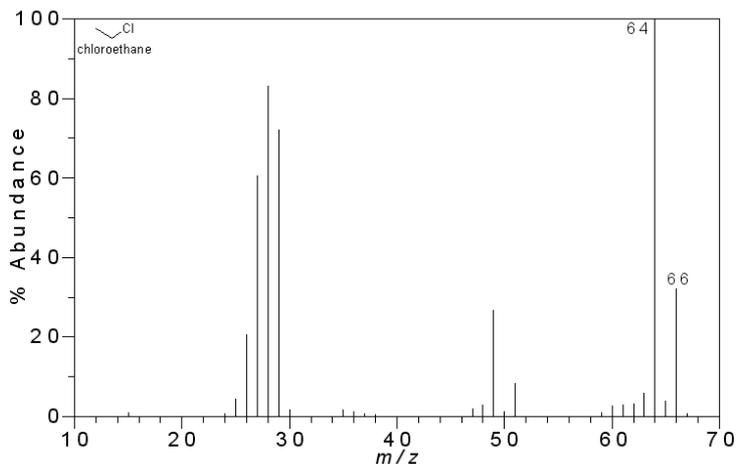


ハロゲン化合物の MS

ハロゲン原子は最安定同位体以外の同位体の存在比が高いので、特徴的なマススペクトルとなる。

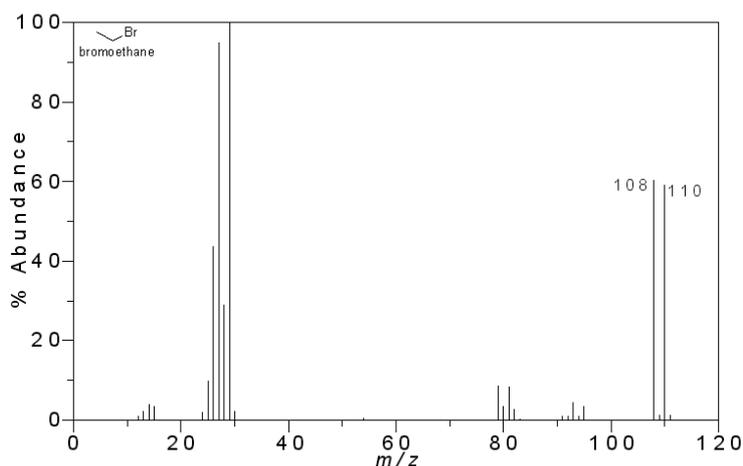
Cl の場合 ^{35}Cl が 75.77%、 ^{37}Cl が 24.23% 含まれる。

例： $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$ (分子量 64) の場合、 $m/z=64$ の約 1/3 の強度で $m/z=66$ のピークも観測される



Br の場合 ^{79}Br が 50.7%、 ^{81}Br が 49.3% 含まれる。

例： $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$ (分子量 108) の場合、 $m/z=108$ と $m/z=110$ のほぼ同じ強度のピークが観測される



また、 R-X からハロゲン X が脱離して生じるフラグメントイオン R^+ が観測される (ハロゲンは脱離

しやすいので、分子イオンが観測されずに $[\text{M}-\text{ハロゲン}]^+$ が最大の m/z となることも多い)。

例

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$ (分子量 64) の場合、64-35、および 66-37 の $m/z=29$

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$ の場合、108-79 および 108-81 の $m/z=29$)

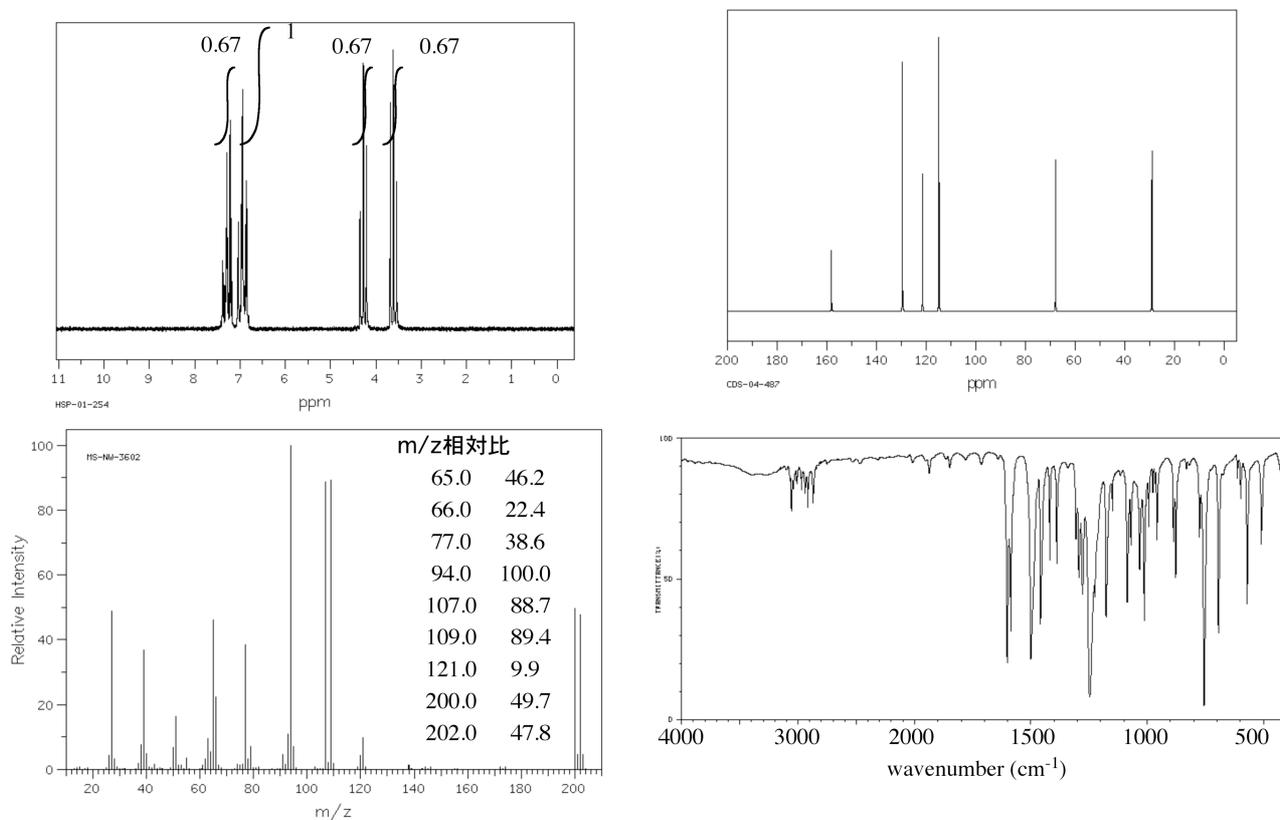
以上より、マススペクトルにおける最大 m/z のピークが分子イオンだった場合は以下に気をつける。

- ・ m/z が奇数であれば窒素が奇数個入っている
- ・ m/z が 2 離れている最大ピークで、小さい側 : 大きい側が 3 : 1 なら Cl、1:1 なら Br が一つ含まれている可能性が高い (Cl、Br が複数有る場合はちょっと複雑。興味のある人は考えてみましょう)

※ 図は以下の URL より拝借

<http://www.chemistry.ccsu.edu/glagovich/teaching/316/ms/brandcl.html>

以下のスペクトルを示す化合物を書け。ただし、この化合物の構成元素となり得るのは C, H, O, N, Cl, Br で、必ずしも全てが含まれるとは限らない (0 個の元素もある可能性がある)。¹H-NMR スペクトルの上部にあるのは積分曲線と積分比を示している。m/z=200 および 202 のピークは分子イオンに由来する。解答にあたっては、1 ページのハロゲン化合物のマススペクトルに関する情報を参考にする。



¹ H	7.1-7.5 ppm	m		¹³ C	158.1 ppm	67.9 ppm
	6.7-7.0 ppm	-			129.6 ppm	29.1 ppm
	4.27 ppm	t			121.5 ppm	
	3.62 ppm	t			114.9 ppm	

¹H-NMR のmはマルチプレット (多重線) を示しており、複雑な分裂の時に使う (6.7-7.0ppm のピークはmのピークが重なっているのでカップリングの情報をしていない)

期末試験について

ノート・教科書・プリント・通信機能がない電卓は持ち込み可 (携帯電話等の使用はオフラインモードなどに関係なく不可)

出題範囲 IR、MS について

NMR、IR、MS からの化合物の同定