

## 有機構造解析学（2025 年度）後半・課題 6

学生番号：\_\_\_\_\_ 氏名：\_\_\_\_\_

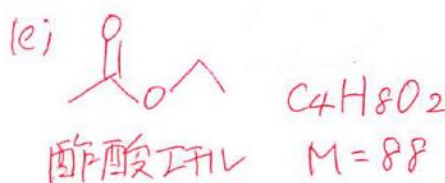
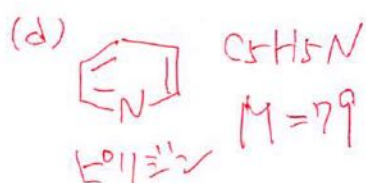
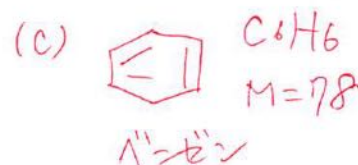
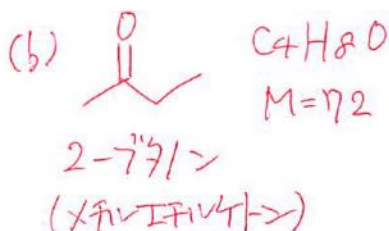
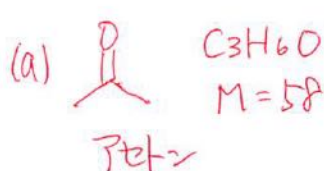
1. 危険物（第四類第一石油類）に分類される引火性液体 6 種について、EI マススペクトルデータを以下に示す（括弧内はピーク強度の相対値）。次の問いに答えよ。

&lt;解答例&gt;

- (a)  $m/z$  15 (23), 43 (100), 58 (64,  $M^+$ )  
 (b)  $m/z$  28 (12), 29 (13), 43 (100), 72 (34,  $M^+$ )  
 (c)  $m/z$  39 (8), 50 (10), 51 (13), 52 (15), 77 (16), 78 (100,  $M^+$ ), 79 (7)  
 (d)  $m/z$  50 (14), 51 (22), 52 (56), 78 (11), 79 (100,  $M^+$ ), 80 (6)  
 (e)  $m/z$  29 (14), 43 (100), 45 (15), 61 (15), 70 (10), 73 (5), 88 (5,  $M^+$ )  
 (f)  $m/z$  39 (11), 51 (7), 65 (12), 91 (100), 92 (78,  $M^+$ ), 93 (6)

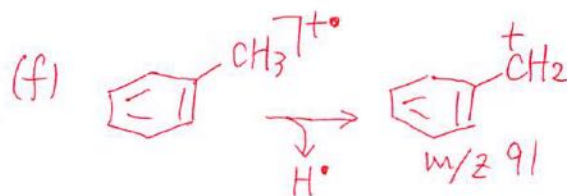
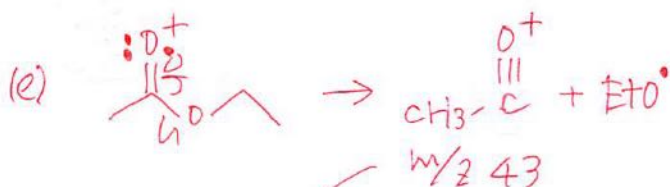
 $M$  の値が全て異なるので、区別できるa) b) c) 1 =  $m/z$  43 が共通d) のみ奇数の  $M \rightarrow$  窒素原子の存在

- (1) 6 種の引火性液体について、構造式、名称、分子式、分子量を示せ。また、それぞれスペクトル (a)~(g) のどれに該当するか示せ。



汎用性が高い有機溶剤なので、構造式や諸性質を  
 まとめておくといざしよう。

- (2) スペクトル (e) および (f) について、下線部のフラグメントイオンが生じる機構を示せ。



講義に対する質問・要望など、自由に書いてください。

アセトン、2-ブタノンにも  
 同じ部分構造がある  
 ことを示すように。

ベンジルカチオンと  
 トロピウムイオンが  
 平衡になり強く  
 観測される。

