



Massenzahl	Mögliche Formel	Hinweis auf Schlüssel-Ion
30	$\text{CH}_2=\text{NH}_2$; NO^+	Amine, Nitroverbindungen
31	$\text{CH}_2=\text{OH}^+$	Alkohole, Ether
35	Cl^+	chlorhaltige Verbindungen
39	C_3H_3^+	Aromaten, Heterocyclen
43	CH_3-CO^+	Acetylverbindungen
44	CH_2NO^+ ; $\text{C}_2\text{H}_6\text{N}^+$	Carbonsäureamide, Amine
45	COOH^+ oder $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}^+$	Carbonsäuren, Alkohole, Methylether
47	C^{35}Cl^+	Chlorverbindungen
51	C_4H_3^+	Aromaten, Heterocyclen
58	$\text{CH}_2=\text{C}(\text{OH})-\text{OH}_3^+$	Ketone
58	$\text{C}_3\text{H}_8\text{N}^+$	Amine
59	$\text{C}_3\text{H}_7\text{O}^+$; $\text{CH}_3-\text{O}-\text{C}=\text{O}^+$	Alkohole, Ether, Methylester
60	$\text{CH}_2=\text{C}(\text{OH})_2^+$	Carbonsäuren
65	C_5H_5^+	Benzylverbindungen
73	$\text{C}_4\text{H}_9\text{O}^+$	Alkohole, Ether, Carbonsäuren
74	$[\text{CH}_2=\text{C}(\text{OH})-\text{O}-\text{CH}_3]^+$	Methylester
78	C_6H_6^+	Benzolverbindungen
79	Br^+	Bromverbindungen
91	C_7H_7^+	Benzylverbindungen
105	$\text{C}_6\text{H}_5-\text{C}\equiv\text{O}^+$	Benzolverbindungen
127	I^+	Iodverbindungen
135	$\text{C}_4\text{H}_8\text{Br}^+$	Bromverbindungen

ΔMZ	Mögliche Formel	Hinweis auf
1–4	H, H_2 , ...	–
15	CH_3	Methylgruppe
16	NH_2 ; O	Amine, aromatische Säureamide, Sauerstoff
17	OH; NH_3	Alkohole, Carbonsäuren, Amine
18	H_2O	Alkohole, Phenole, Aldehyde
20	HF	Fluorverbindungen
26	C_2H_2 ; CN	kond. Aromaten, Stickstoffverbindung
27	HCN	N-Heterocyclen, aromatische Amine
28	HCN + H	N-Heterocyclen, aromatische Amine
29	CHO	aromatische Aldehyde, Phenole, Chinone
29	C_2H_5	Ethylgruppe
30	CH_2O	aromatischer Ether, Ester
30	NO	aromatische Nitroverbindungen
31	CH_3O	Methylacetale, Methylester
36	H^{35}Cl	Chlorverbindungen
43	CH_3CO	Acetylverbindungen
44	CH_3CHO	aliphatische Aldehyde
45	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$	Ethylacetale, Ethylester
46	NO_2	Nitroverbindungen
59	CH_3COO	Methylester
64	SO_2	Sulfonamide
80	HBr	Bromverbindungen

Massenzahldifferenzen ΔMZ zwischen Molekülpeak und Fragmentpeak