Эмпирические правила

Азотное правило

Органические соединения, состоящие из основных атомов органогенов C, H, N, S, P, Si, F, Cl, Br, I, имеют <u>чётную молекулярную массу,</u> если в их структуре <u>не содержится атомов азота или число атомов азота чётное</u> (N = 0, 2, 4,…).

<u>Нечётной молекулярной массой</u> обладают соединения с <u>нечётным количеством атомов азота</u> (N = 1, 3, 5,..) в структуре.

А. В. Васильев
в спектроскопию

3. <u>Правило “формальной непредельности” – “число колец + число двойных связей”.</u>

$$X = \frac{2C - H + N}{2} + 1$$

X **– “число колец + число двойных связей” в молекуле**

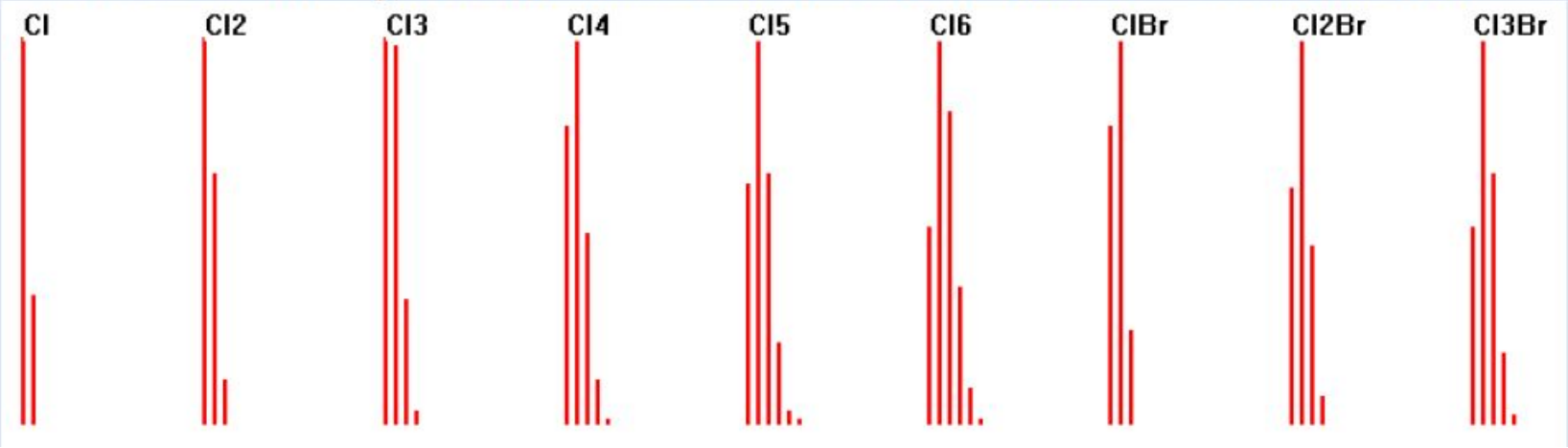
C, H, N **– число углеродных, водородных (или др. одновалентных) и азотных атомов в молекуле**

А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Если интенсивность пика $M^{+}+2$ составляет менее 3% от интенсивности пика M^{+}, исследуемое соединение не содержит атомов хлора, брома, серы и кремния (правило применимо и для рассмотрения состава осколочных ионов).

Несмотря на относительно малую распространенность природного изотопа ^{18}O (примерно 0.2% от основного ^{16}O) возможно делать определенные предположения об числе атомов кислорода в частице: если интенсивность пика иона $(M+2)^{+}$ в спектре образца с небольшим числом атомов углерода в молекуле больше 0.5% от интенсивности M^{+}, можно предположить, что в состав соединения входит 1 или более атомов кислорода. Другими словами – каждый атом кислорода в частице повышает интенсивность сигнала $(M+2)^{+}$ иона на 0.2% от интенсивности сигнала M^{+}.

Хлор, бром, сера и кремний легко детектируются благодаря характерной для каждого элемента мультиплетности сигнала, зависящей от природной распространенности изотопов соответствующих элементов, т.е. можно сразу сказать, какое количество атомов указанных галогенов находится в соединении



Потери из M^+ от 5 до 14 или от 21 до 25 а.е.м., приводящие
к возникновению интенсивных пиков ионов,
крайне маловероятны!