

Эмпирические правила

Азотное правило

Органические соединения, состоящие из основных атомов органоенов C, H, N, S, P, Si, F, Cl, Br, I, имеют чётную молекулярную массу, если в их структуре не содержится атомов азота или число атомов азота чётное ($N = 0, 2, 4, \dots$).

Нечётной молекулярной массой обладают соединения с нечётным количеством атомов азота ($N = 1, 3, 5, \dots$) в структуре.

3. Правило “формальной неопределенности” –
“число колец + число двойных связей”.

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

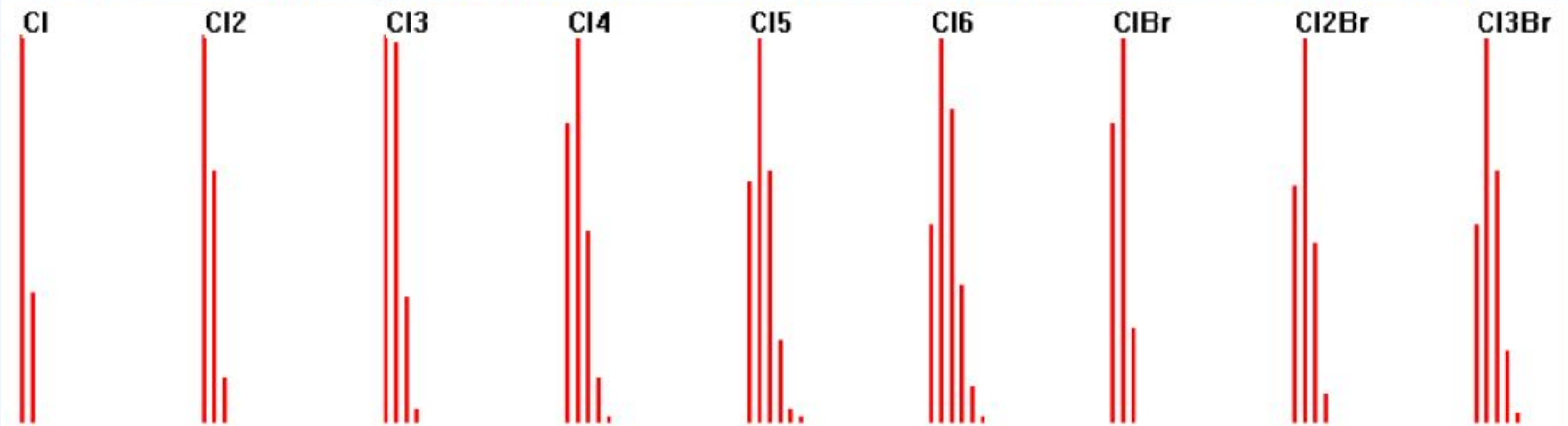
X – “число колец + число двойных связей” в молекуле

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

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!