

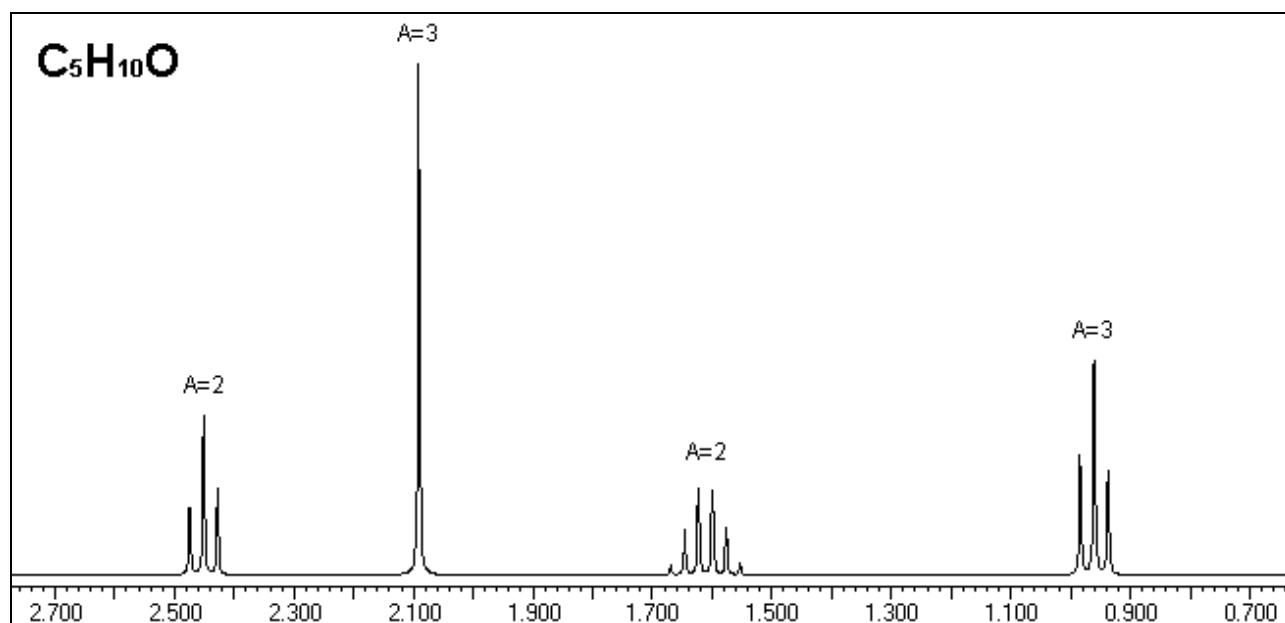
Guida alla interpretazione degli spettri NMR ^1H

Per interpretare uno spettro NMR, conviene seguire la procedura in 7 punti illustrata qui sotto:

- 1) Contare il numero di picchi nello spettro. Corrispondono agli idrogeni fisicamente diversi nella molecola incognita.
- 2) Sommare l'area di ogni picco e confrontarla con il numero di idrogeni presenti nella formula bruta per capire a quanti idrogeni corrisponde ogni picco.
- 3) Analizzare la formula bruta e gli altri dati disponibili per individuare i gruppi funzionali e la eventuale presenza di doppi legami o di anelli.
- 4) Analizzare il chemical shift di ogni picco per capire che tipo di idrogeni sono presenti nella molecola.
- 5) Analizzare la molteplicità m di ogni picco per capire quanti idrogeni ci sono vicino all'idrogeno in questione applicando la formula: n° idrogeni vicini = $m - 1$.
- 6) Utilizzare i dati raccolti per ipotizzare una struttura molecolare.
- 7) Verificare che la formula bruta, i chemical shift, le aree dei picchi e le molteplicità per la molecola proposta siano compatibili con i dati dello spettro incognito.

Proviamo ora ad applicare questa procedura per interpretare lo spettro NMR di una molecola di formula bruta $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ che possiede un carbonile (come si può dedurre dal suo spettro IR).

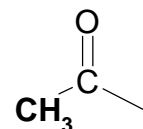
- 1) Nello spettro NMR notiamo che sono presenti 4 picchi distinti, quindi sappiamo che nella molecola ci sono quattro tipi di idrogeni diversi.



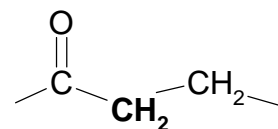
- 2) L'area dei vari picchi dà come somma 10, in linea con la formula bruta $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$, quindi l'area dichiarata in cima ai picchi corrisponde al numero di idrogeni che producono quel segnale.
- 3) La molecola $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ contiene un doppio legame, infatti se fosse satura conterrebbe 12 idrogeni ($2n+2$). Dato che contiene un carbonile, il doppio legame è qui, il resto della molecola è saturo.

4) I due segnali a δ 2,45 e δ 2,09 corrispondono a idrogeni su carboni vicino al carbonile che assorbono nell'intervallo tra δ 2 e δ 3. Gli altri due picchi a δ 0,96 e δ 1,61 corrispondono invece a idrogeni su carboni primari e secondari rispettivamente.

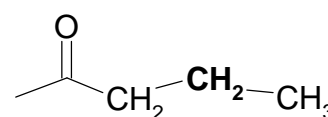
5) Il picco **2** a δ 2,09 ha molteplicità 1 quindi si riferisce a idrogeni che non hanno vicino nessun idrogeno ($1-1 = 0$). Questo conferma la precedente deduzione che il picco è attribuibile ad un CH_3 vicino al carbonile.



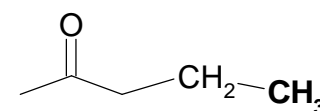
Il picco **1** a δ 2,45 ha molteplicità 3 quindi si riferisce a idrogeni che hanno vicino 2 idrogeni ($3-1 = 2$). Questo conferma la precedente deduzione che il picco è attribuibile ad un CH_2 vicino ad un carbonile, e inoltre suggerisce che vi sia un ulteriore CH_2 legato subito oltre.



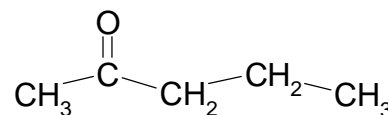
Il picco **3** a δ 1,61 ha molteplicità 6 quindi si riferisce a idrogeni che hanno vicino 5 idrogeni ($6-1 = 5$). Questo conferma la precedente deduzione che il picco è attribuibile ad un CH_2 secondario che ha vicino i due idrogeni del picco **1** e altri tre idrogeni, quelli del CH_3 terminale.



Il picco **4** a δ 0,96 ha molteplicità 3 quindi si riferisce a idrogeni che hanno vicino 2 idrogeni ($3-1 = 2$). Questo conferma la precedente deduzione che il picco è attribuibile al CH_3 terminale della molecola.



6) Le deduzioni finora effettuate ci portano a ipotizzare che lo spettro NMR sia relativo alla molecola 2-pentanone che ha la struttura mostrata qui a lato:



7) Analizzando la molecola del 2-pentanone possiamo confermare l'attribuzione dei picchi sia per il chemical shift, sia per la molteplicità (indicata in figura tra parentesi).

2.09 2.45 1.61 0.96
(1) (3) (6) (3)

2-pentanone