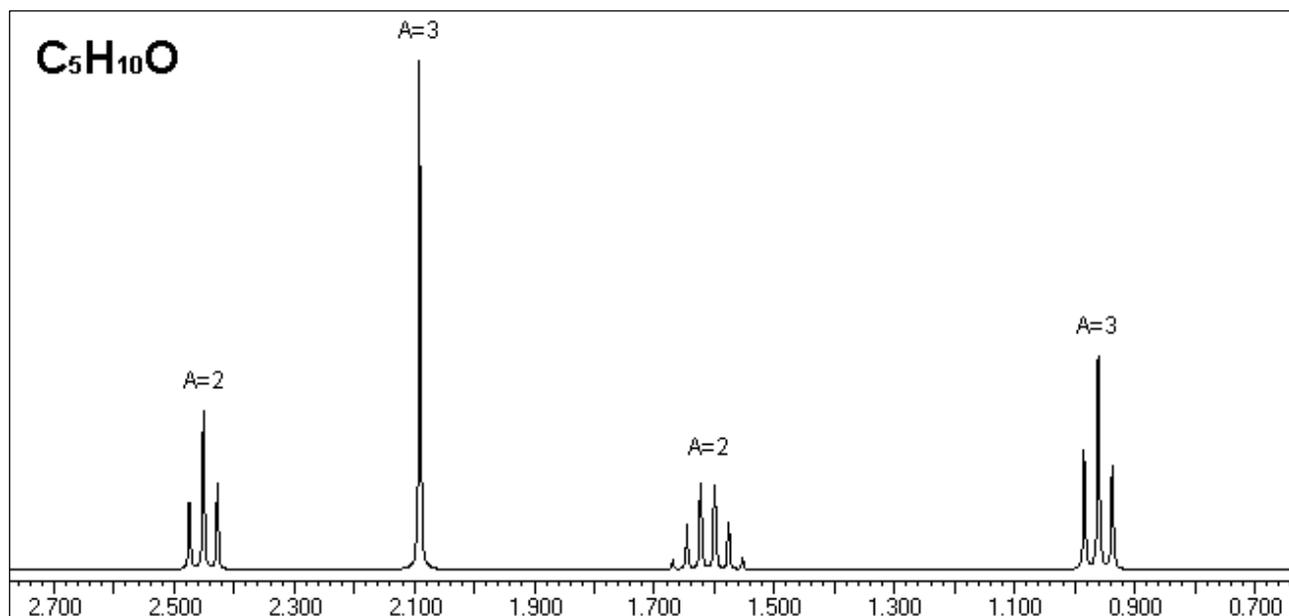


Guida alla interpretazione degli spettri NMR

Per interpretare uno spettro NMR, è opportuno seguire la seguente procedura:

- 1) Contate il numero di picchi nello spettro. Corrispondono agli idrogeni chimicamente diversi nella molecola incognita.
- 2) Sommate l'area di ogni picco e confrontatela con il numero di idrogeni presenti nella formula bruta per capire a quanti idrogeni corrisponde ogni picco.
- 3) Analizzate la formula bruta e gli altri dati disponibili per individuare i gruppi funzionali e la eventuale presenza di doppi legami o di anelli.
- 4) Analizzate i chemical shift di ogni picco per capire che tipo di idrogeni sono presenti nella molecola. Usate le tabelle A e B per aiutarvi nella interpretazione.
- 5) Analizzate la molteplicità m di ogni picco per capire quanti idrogeni sono vicini all'idrogeno in questione applicando la formula: $H \text{ vicini} = m - 1$.
- 6) Cominciate ad analizzare lo spettro da sinistra, cioè dagli idrogeni più deschermati, quelli legati ai gruppi funzionali.
- 7) Scrivete la struttura di ogni piccola porzione di molecola individuata, cominciando dal gruppo funzionale e individuando le sequenze di atomi concatenati sfruttando gli accoppiamenti di spin tra idrogeni vicini.
- 8) Utilizzate i dati raccolti per ipotizzare una struttura molecolare.
- 9) Verificate 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.

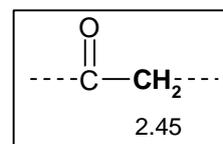
Usiamo questa procedura per interpretare il seguente spettro NMR. E' lo spettro di una molecola di formula bruta $C_5H_{10}O$ che possiede un carbonile come si deduce dal suo spettro IR (non mostrato).



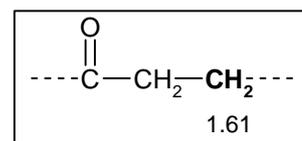
- 1) Nello spettro NMR sono presenti 4 picchi distinti quindi sappiamo che nella molecola ci sono quattro tipi di idrogeni diversi.
- 2) L'area dei picchi dà come somma 10 quindi l'area dichiarata in cima ai picchi corrisponde al numero di idrogeni che producono quel segnale.
- 3) Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{10}O$ osserviamo che, se la molecola fosse satura, dovrebbe avere $(2n+2)$ idrogeni cioè $5+5+2 = 12$ idrogeni. Dato che ne ha 10, mancano 2 idrogeni, 1 coppia, quindi la molecola ha una insaturazione. Poiché è presente un carbonile, l'insaturazione è il doppio legame del carbonile, il resto della molecola è saturo.

4) Dato che la molecola contiene un carbonile, i due segnali a **2,45 e 2,09 ppm** corrispondono agli idrogeni di un CH₂ e di un CH₃ vicini al carbonile che assorbono nell'intervallo tra 2 e 3 ppm. Gli altri due picchi a 1.61 e 0,96 ppm corrispondono invece ad un CH₂ e ad un CH₃ più lontani dal carbonile.

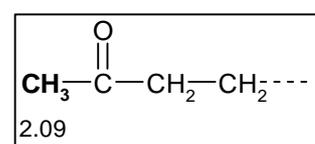
5) Cominciamo ad analizzare lo spettro da sinistra. Il primo segnale è il **tripletto** di area 2 a **2.45 ppm**. E' dovuto ad un CH₂ legato al carbonile. Infatti un CH₂ in quella posizione, secondo i dati in tabella B, dovrebbe assorbire intorno a 2.3 ppm (1.3 CH₂ + 1.0 CO = 2.3 ppm), un valore vicino ai 2.45 ppm osservati.



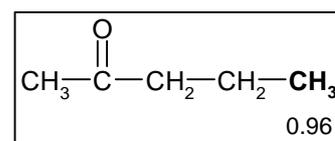
6) Dato che il CH₂ a 2.45 ppm è un **tripletto**, deve avere 2 idrogeni vicini, quindi è legato ad un altro CH₂. L'unico possibile è il CH₂ sestetto a **1.61 ppm**.



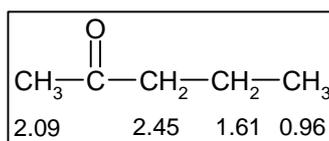
7) Il secondo segnale nello spettro è il **singoletto** di area 3 a **2.09 ppm**. E' dovuto ad un CH₃ legato al carbonile, questo, infatti, per i dati in tabella B, dovrebbe assorbire intorno a 1.9 ppm (0.9 CH₃ + 1.0 CO = 1.9 ppm), un valore vicino ai 2.09 ppm osservati. Il fatto che sia singoletto ci conferma che non ha idrogeni vicini, in accordo con la struttura che abbiamo ipotizzato qui a destra.



8) L'ultimo segnale nello spettro è il **tripletto** di area 3 a **0.96 ppm**. E' dovuto ad un semplice CH₃ lontano dai gruppi funzionali, che, infatti, dovrebbe assorbire a 0.9 ppm, secondo i dati in tabella B. Dato che è un tripletto, ha due idrogeni vicini, quindi è legato al CH₂ a 1.61 ppm.



9) Per confermare la struttura trovata fin qui, verifichiamo che anche la molteplicità del CH₂ a 1.61 ppm sia giustificata. Questo è un sestetto, quindi ha 5 idrogeni vicini. Nella struttura proposta vediamo che è legato ad un CH₂ a sinistra e un CH₃ a destra, quindi ha vicini proprio 5 idrogeni. Questo ci permette di confermare la correttezza della molecola trovata. Si tratta di pentan-2-one



pentan-2-one

* Usate le tabelle A e B per aiutarvi nella interpretazione degli spettri NMR