

PROBLEMA NMR n. 1 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_8H_8O_2$ deduciamo che la molecola ha **5 insaturazioni**, infatti se fosse satura avrebbe formula bruta C_8H_{18} , mancano quindi 10 idrogeni, **5 coppie** (gli ossigeni hanno valenza due e non alterano il numero degli idrogeni).

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

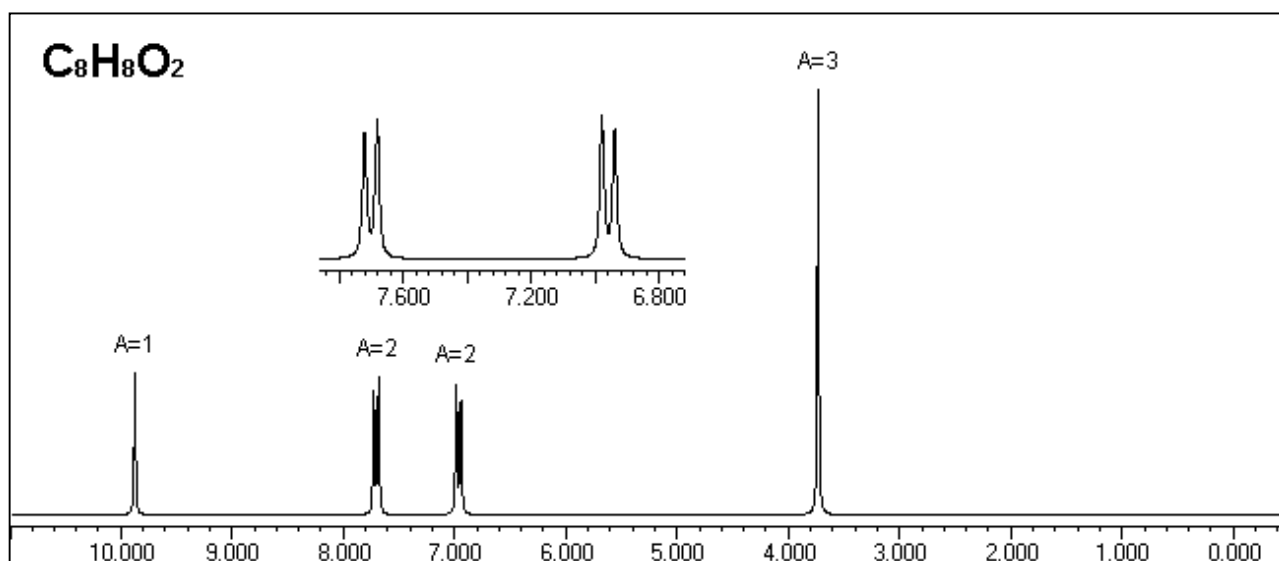
Osservando lo spettro NMR, dal picco a δ **9.87** deduciamo che è un'**aldeide**.

Dai picchi tra δ 7 e 8 sappiamo che contiene un **anello aromatico**.

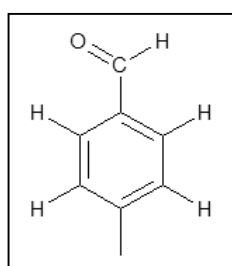
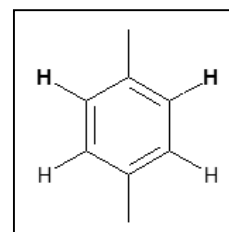
Possiamo concludere che le **cinque** insaturazioni sono dovute: **una** al carbonile e **quattro** all'anello aromatico (4 perchè: 1 per l'anello e 3 per i tre doppi legami dell'anello).

La molecola deve essere quindi un'**aldeide aromatica**.

Il suo spettro NMR è riportato qui di seguito:



L'esame più dettagliato dei segnali a δ **6.96** e δ **7.70** ci fa capire che si tratta di un **anello benzenico para disostituito**. Infatti i due picchi sono dovuti a due coppie di idrogeni identici (hanno area 2) e sono doppietti cioè hanno un solo idrogeno vicino.

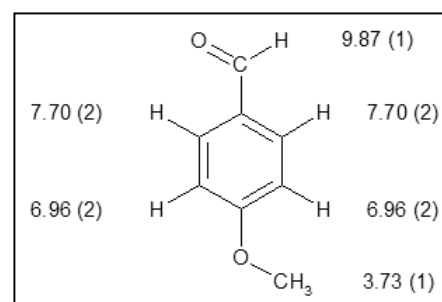


Ad un capo di questa struttura sarà legato il carbonile dell'aldeide il cui idrogeno produce il segnale a δ **9.87**.

Con questo abbiamo assegnato sette carboni, un ossigeno e cinque idrogeni.

Restano ancora da assegnare un ossigeno, un carbonio e tre idrogeni, cioè un ossigeno e il CH_3 che produce il segnale a δ **3.73**. Questo spostamento chimico è tipico degli idrogeni legati a carboni vicini ad atomi elettronegativi. Quindi il CH_3 deve essere legato all'ossigeno (del resto questa è l'unica situazione possibile a questo punto).

La molecola del problema 1 è quindi: **4-metossibenzaldeide**.



4-metossibenzaldeide

A fianco degli idrogeni nella molecola è riportato lo spostamento chimico e, tra parentesi, la molteplicità.

PROBLEMA NMR n. 2 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_8H_8O_2$ deduciamo che la molecola ha **5 insaturazioni**, infatti se fosse satura avrebbe formula bruta C_8H_{18} , mancano quindi 10 idrogeni, **5 coppie** (gli ossigeni hanno valenza due e non alterano il numero degli idrogeni).

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

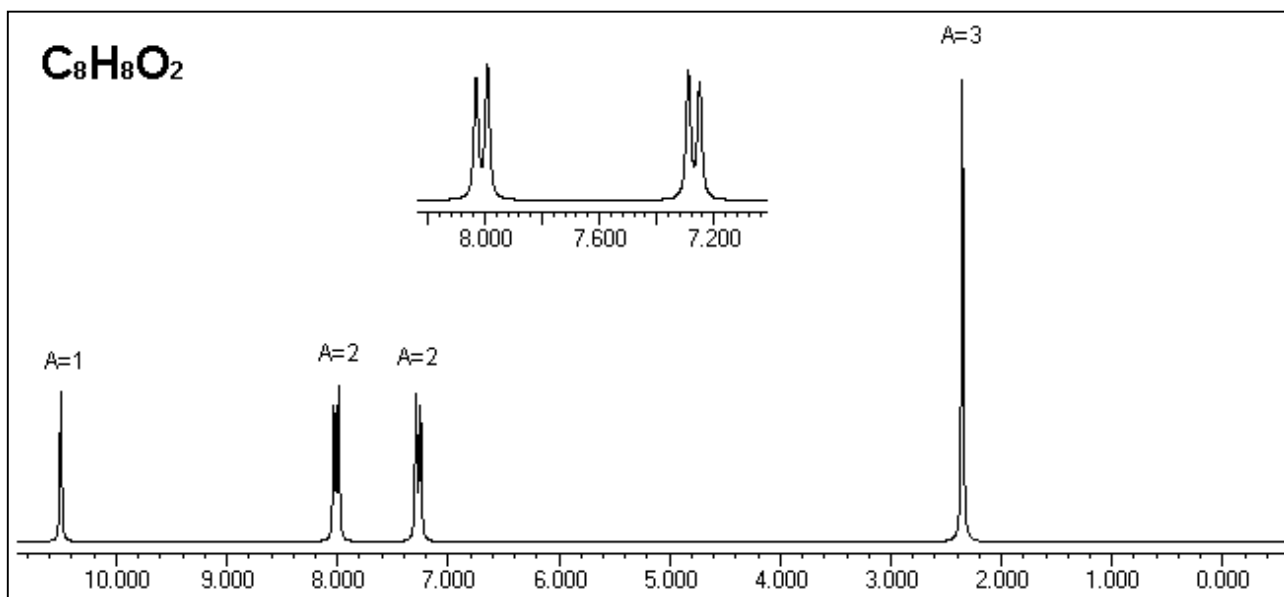
Osservando lo spettro NMR, dal picco a δ **10.50** deduciamo che è un **acido carbossilico**.

Dai picchi tra δ **7 e 8** sappiamo che contiene un **anello aromatico**.

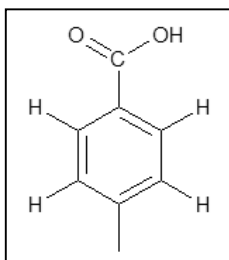
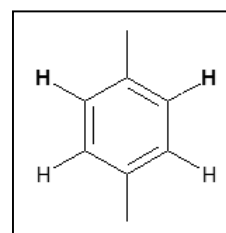
Possiamo concludere che le **cinque** insaturazioni sono dovute: **una** al carbonile e **quattro** all'anello aromatico (**4** perché: **1** per l'anello e **3** per i tre doppi legami dell'anello).

La molecola deve essere quindi un **acido carbossilico aromatico**.

Il suo spettro NMR è riportato qui di seguito:



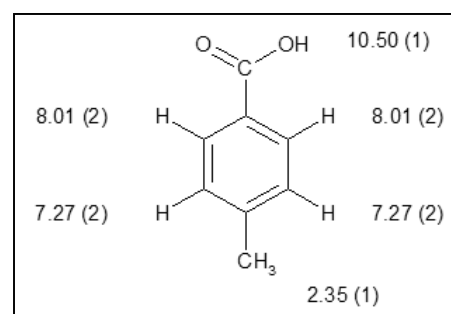
L'esame più dettagliato dei segnali a δ **6.96** e δ **7.70** ci fa capire che si tratta di un **anello benzenico para disostituito**. Infatti i due picchi sono dovuti a due coppie di idrogeni identici (hanno area 2) e sono doppietti cioè hanno un solo idrogeno vicino.



Ad un capo di questa struttura sarà legato il carbossile il cui idrogeno produce il segnale a δ **10.50**.

Con questo abbiamo assegnato sette carboni, due ossigeni e cinque idrogeni.

Restano ancora da assegnare un carbonio e tre idrogeni, cioè il CH_3 che produce il segnale a δ **2.35**. Questo spostamento chimico è tipico degli idrogeni benilici. Quindi il CH_3 deve essere legato all'anello (del resto questa è l'unica situazione possibile a questo punto). La molecola del problema 2 è quindi: **acido 4-metilbenzoico**.



acido 4-metilbenzoico

A fianco degli idrogeni nella molecola è riportato lo spostamento chimico e, tra parentesi, la molteplicità.