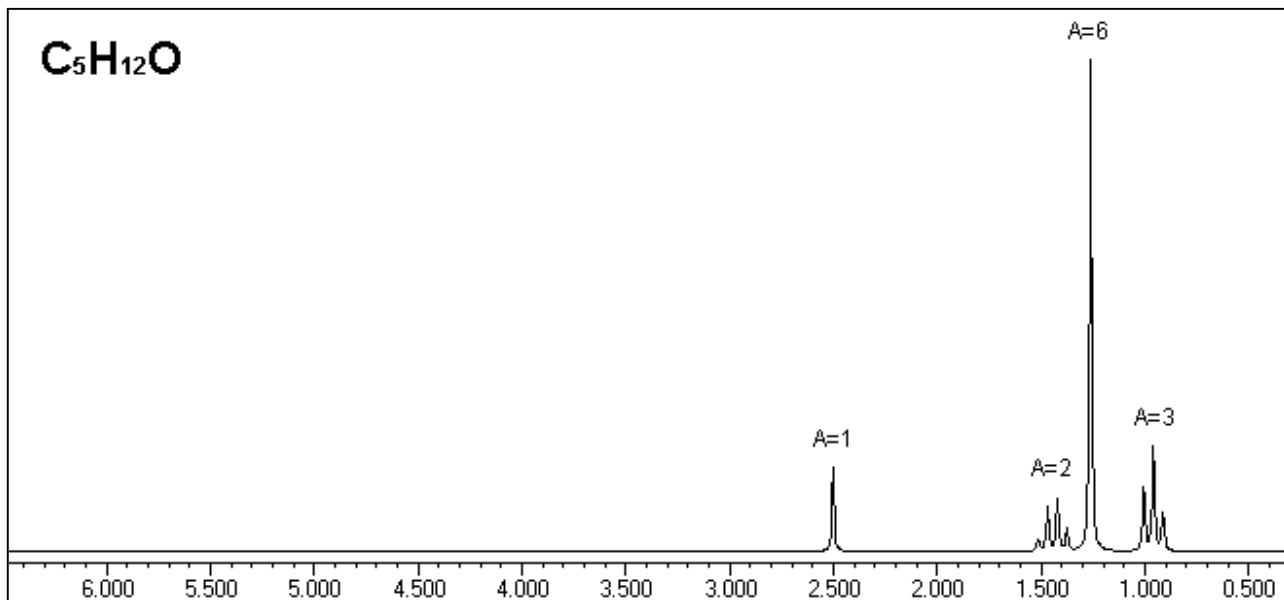


PROBLEMA NMR n. 3 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola **non ha insaturazioni**.

Il suo spettro IR mostra un picco un po' allargato a 3300 cm^{-1} dovuto allo stretching del legame OH tipico degli **alcoli**.

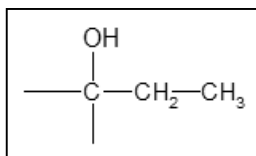
Il suo spettro NMR è il seguente:



Il picco a δ 2.50 tipico dell'idrogeno alcolico conferma che la molecola è un **alcol** (per la verità questo picco avrebbe dovuto essere più basso e allargato)

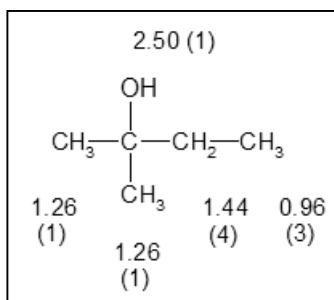
In questo spettro manca il segnale di idrogeni legati sul carbonio che regge l'OH. Questo segnale sarebbe stato intorno a δ 3.5. Deduciamo che si tratta di un **alcol terziario**.

Osserviamo poi che i segnali del CH_2 e del CH_3 a δ 1.44 e δ 0.96 sono accoppiati tra loro e quindi indicano che si tratta di un **gruppo etilico**, infatti la molteplicità del CH_2 è 4 (3 H vicini) e quella del CH_3 è 3 (2 H vicini). Questo etile è uno dei sostituenti del carbonio terziario dell'alcol.



Esaminiamo infine il singoletto a δ 1.26: è dovuto a due CH_3 equivalenti che non hanno H vicini. Questi due CH_3 sono gli altri due sostituenti del carbonio terziario.

La struttura della molecola del problema 3 è così determinata, si tratta di **2-metil-2-butanol**.



2-metil-2-butanol

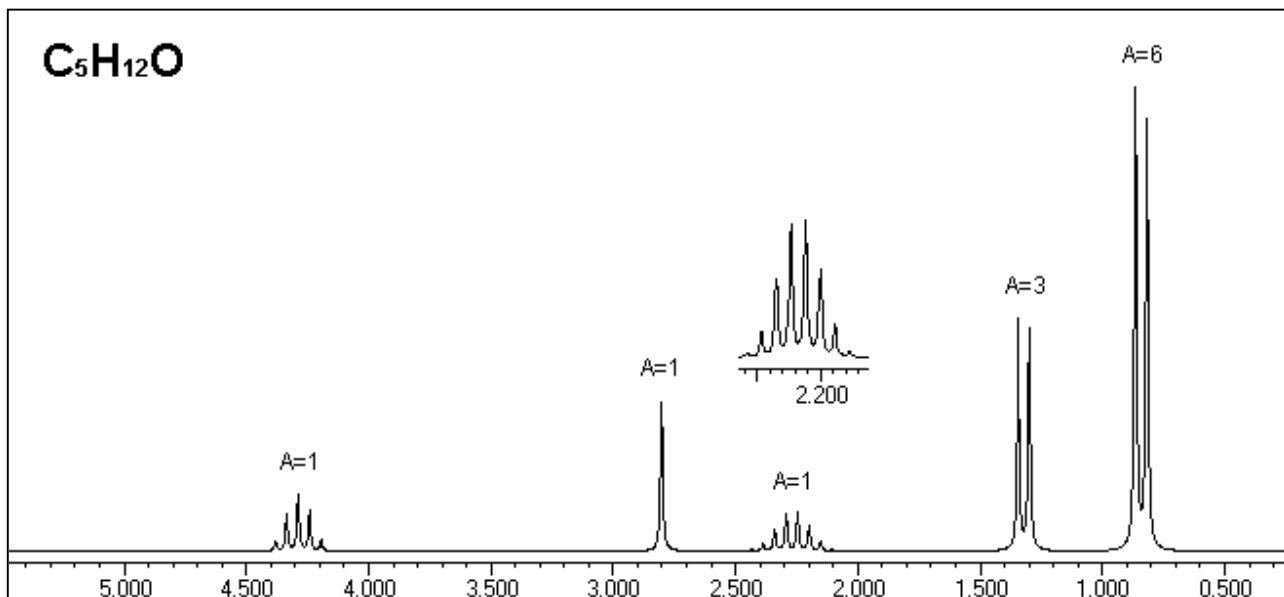
A fianco degli idrogeni nella molecola è riportato lo spostamento chimico e, tra parentesi, la molteplicità.

PROBLEMA NMR n. 4 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola **non ha insaturazioni**.

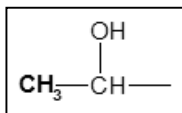
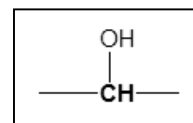
Il suo spettro IR mostra un picco un po' allargato a 3300 cm^{-1} dovuto allo stretching del legame OH tipico degli **alcoli**.

Il suo spettro NMR è il seguente:



Il picco a δ 2.80 tipico dell'idrogeno alcolico conferma che la molecola è un **alcol** (per la verità questo picco avrebbe dovuto essere più basso e allargato).

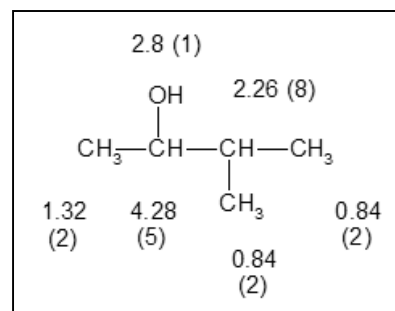
Consideriamo ora il segnale a δ 4.28, dovuto all'idrogeno del CH che regge il gruppo alcolico OH. Dato che ha **area 1** (un solo H), deduciamo che l'**alcol è secondario**.



Osserviamo ora il segnale del CH_3 a δ 1.32, è un **doppietto**, quindi è vicino ad un solo idrogeno. Sembra l'unico candidato per chiudere la catena su un lato dell'alcol.

Dall'altro lato della molecola c'è il CH del segnale a δ 2.26 che regge i due CH_3 del segnale a δ 0.84. Notiamo infatti che il segnale dei due CH_3 è un **doppietto**, questo indica che sono vicini ad un solo idrogeno.

La molecola del problema 4 è quindi **3-metil-2-butanol**.



3-metil-2-butanol

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

Notate che l'H dell'**OH alcolico** (δ 2.80) è un **singoletto** perché **non è accoppiato** con l'H sul carbonio adiacente. Quindi anche questo H (δ 4.28) non è accoppiato con l'OH alcolico e ha molteplicità 5 (4 H con cui si accoppia e non 5 escludendo l'OH).

Da cosa dipende questo strano comportamento dell'H alcolico? Perché non dà accoppiamento di spin?

Il gruppo OH degli alcoli può formare legami a ponte idrogeno con gli ossidrili delle molecole vicine.

La lunghezza del legame OH non è uguale in tutte le molecole a causa del legame idrogeno e anche lo spostamento chimico risulta leggermente allargato, quindi l'**accoppiamento di spin** avviene a frequenze lievemente diverse e **non risulta visibile**.