

PROBLEMA NMR n. 5 – soluzione

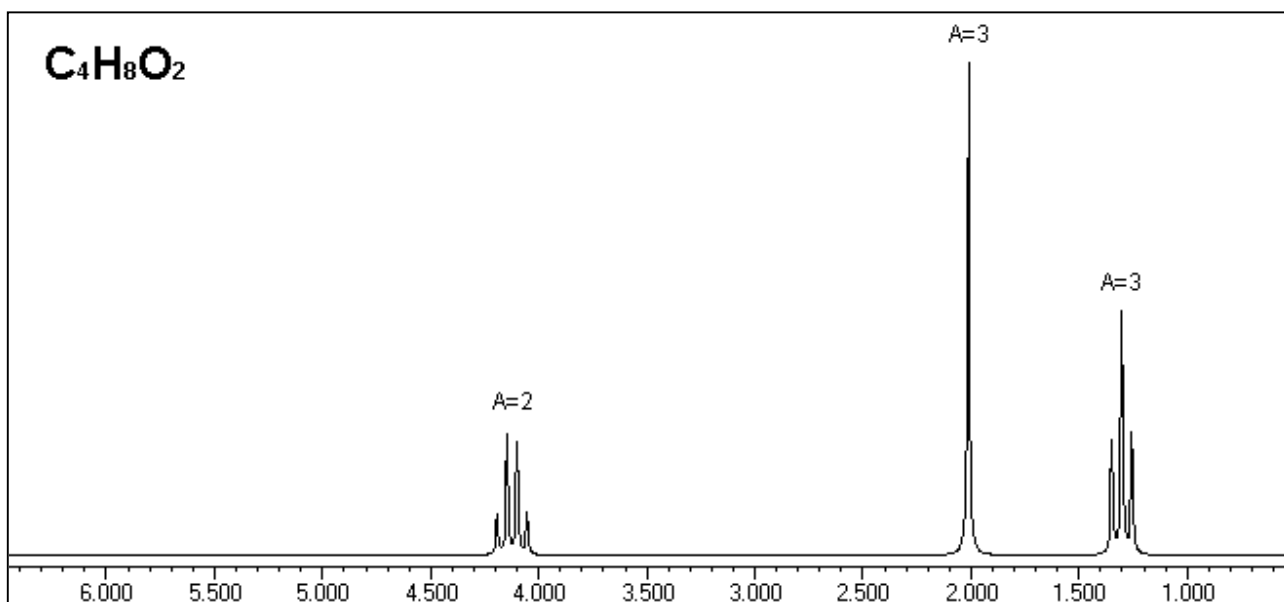
Dall'analisi della formula bruta $C_4H_8O_2$ osserviamo che la molecola ha **una insaturazione**.

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

Esaminando lo spettro NMR, osserviamo che mancano i segnali degli acidi carbossilici e degli alcoli a δ 11 e a δ 2.5 rispettivamente.

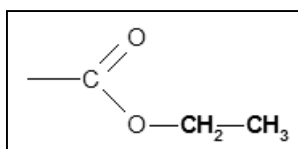
Deduciamo che probabilmente la molecola è un **estere**.

Il suo spettro NMR è il seguente:



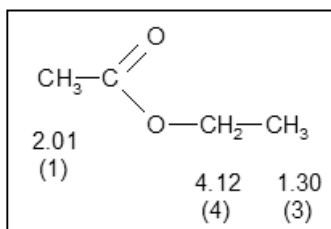
Esaminiamo per primo il picco a δ maggiore, il quartetto a δ 4.12 che si trova nella zona degli idrogeni di carboni legati ad atomi elettronegativi. Si tratta dunque di un CH_2 legato **direttamente all'ossigeno**.

Questo CH_2 ha 3 idrogeni vicini ($m = 4$) quindi è accoppiato con il CH_3 che dà il segnale di tripletto a δ 1.30 ($m = 3$). Insieme costituiscono un **gruppo etilico** legato direttamente all'ossigeno dell'estere.



Resta da interpretare il picco a δ 2.01, si tratta di un CH_3 **singoletto**, senza idrogeni vicini, nella zona degli idrogeni di carboni legati ad un carbonile. D'altra parte, questo è il solo posto dove lo possiamo legare.

La struttura della molecola risulta così determinata: si tratta di **etil acetato**.



etil acetato

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

PROBLEMA NMR n. 6 – soluzione

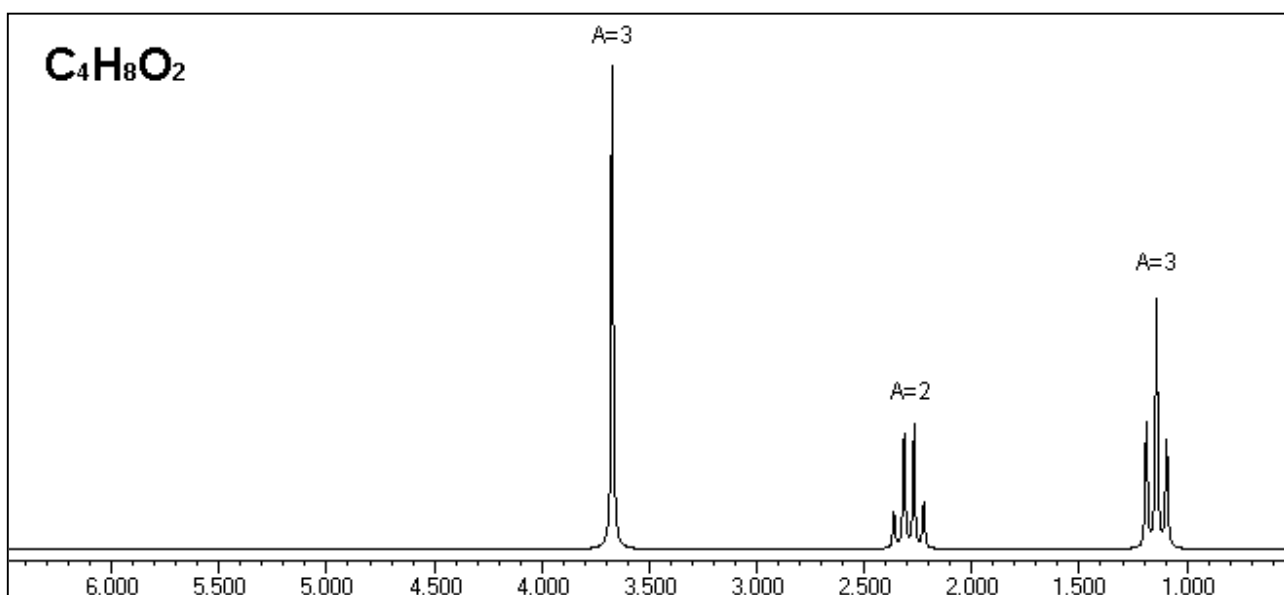
Dall'analisi della formula bruta $C_4H_8O_2$ osserviamo che la molecola ha **una insaturazione**.

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

Esaminando lo spettro NMR, osserviamo che mancano i segnali degli acidi carbossilici e degli alcoli a δ 11 e a δ 2.5 rispettivamente.

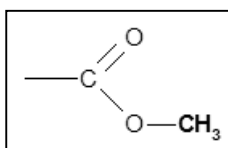
Deduciamo che probabilmente la molecola è un **estere**.

Il suo spettro NMR è il seguente:



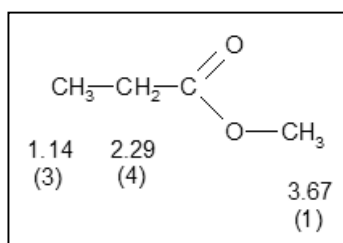
Esaminiamo per primo il picco a delta maggiore, il **singoletto** a δ 3.67 che si trova nella zona degli idrogeni di carboni legati ad atomi elettronegativi.

Si tratta dunque di un CH_3 legato **direttamente all'ossigeno dell'estere**.



Gli altri due segnali sono chiaramente accoppiati tra loro. Il CH_2 a δ 2.29 ha un chemical shift che ci dice che è vicino ad un carbonile. Questo CH_2 ha **molteplicità 4**, quindi ha 3 idrogeni vicini, è accoppiato con il CH_3 a δ 1.14 che infatti è un **tripletto**. Insieme costituiscono un gruppo etilico legato al carbonile.

La molecola del problema 6 è quindi **metil propanoato**.



metil propanoato

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