

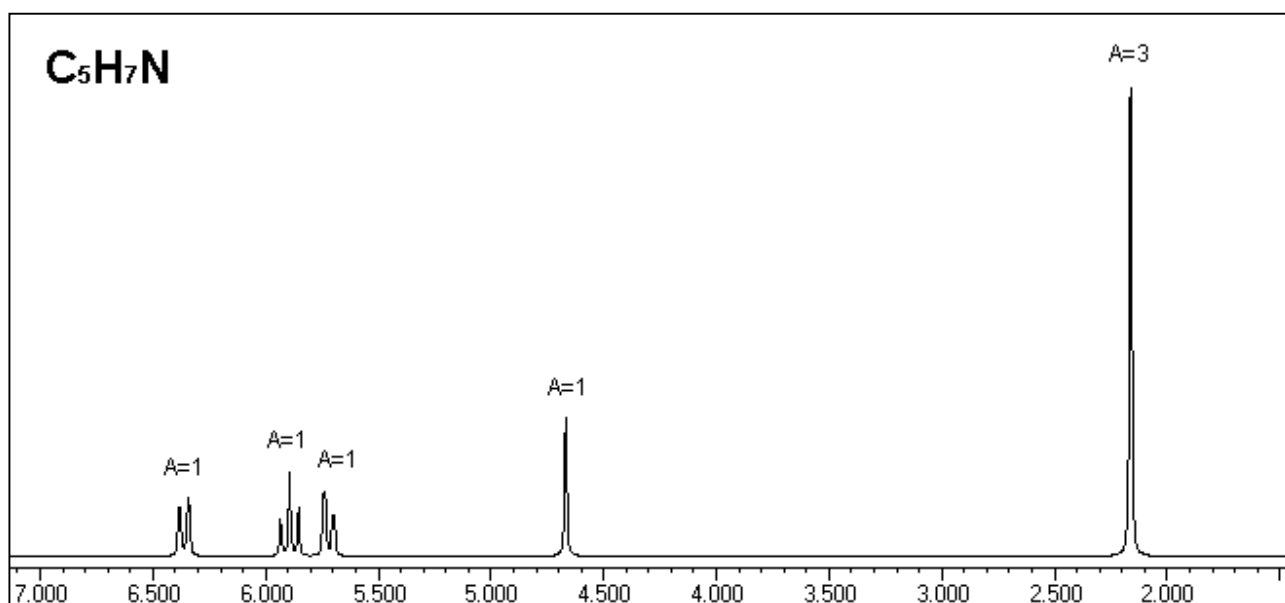
PROBLEMA NMR n. 21 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_5H_7N osserviamo che la molecola ha 6 idrogeni in meno di una ammina satura (che avrebbe formula bruta $C_5H_{13}N$) quindi deduciamo che ha **tre insaturazioni**, potrebbe possedere tre doppi legami o due doppi legami ed un anello o infine un doppio ed un triplo legame.

Dato che nella molecola c'è un CH_3 con δ 2.16, con i restanti 4 carboni non si possono realizzare 3 doppi legami, nè ci può essere un legame triplo dato che manca un segnale attorno a δ 3.

Resta la sola possibilità che la molecola incognita possieda **due doppi legami e un anello**. L'anello deve essere costituito dai 4 carboni e dall'atomo di azoto. Un anello così con due doppi legami è un pirrolo. La molecola del problema 21 deve allora essere un **pirrolo metil sostituito**.

Lo spettro NMR del problema 21 è riportato di seguito:

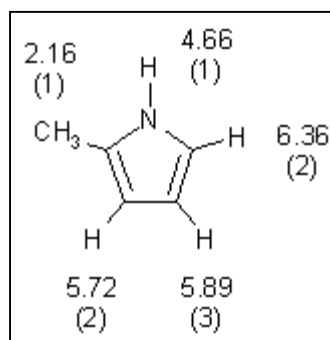


Se il metile fosse legato all'azoto, gli idrogeni in anello darebbero due soli segnali per questioni di simmetria, dato che si osservano invece tre segnali diversi tra δ 5.5 e δ 6.5, concludiamo che **il gruppo metilico deve essere legato all'anello**.

I tre idrogeni legati all'anello danno rispettivamente i tre segnali a δ 6.36, δ 5.89 e δ 5.72 con il segnale di tripletto dovuto all'idrogeno centrale. **Questi idrogeni** sono tutti accoppiati tra loro e quindi **sono contigui**. Deduciamo che **il metile** deve essere in **posizione 2 nell'anello**.

Si noti che **l'idrogeno legato all'azoto** (come negli alcoli) **non risulta accoppiato** con l'idrogeno vicino quindi il segnale a δ 6.36 è solo un doppietto e il segnale a δ 4.66 è un singoletto

La struttura della molecola del problema 21 risulta quindi:



2-metilpirrolo

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

PROBLEMA NMR n. 22 - soluzione

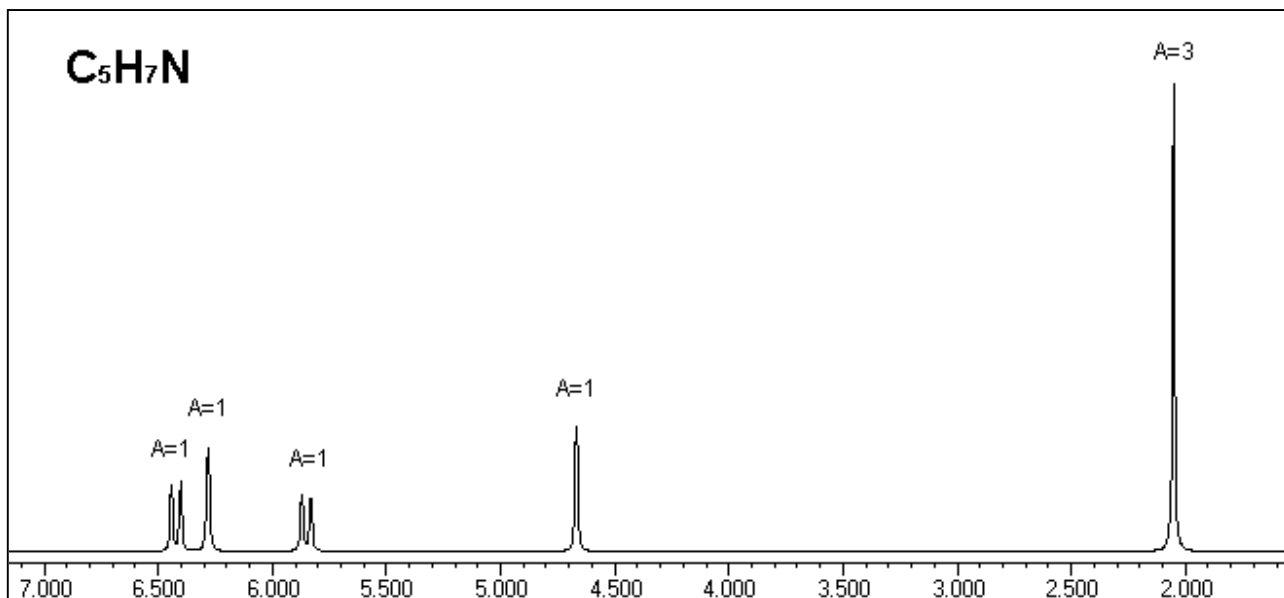
Dall'analisi della formula bruta C_5H_7N osserviamo che la molecola ha 6 idrogeni in meno di un'ammina satura (che avrebbe formula bruta $C_5H_{13}N$) quindi deduciamo che ha **tre insaturazioni**, potrebbe possedere tre doppi legami o due doppi legami ed un anello o infine un doppio e un triplo legame.

Dato che nella molecola c'è un CH_3 con **d 2.05**, con i restanti 4 carboni non si possono realizzare 3 doppi legami, nè ci può essere un legame triplo dato che manca un segnale attorno a δ 3.

Resta la sola possibilità che la molecola incognita possieda **due doppi legami e un anello**. L'anello deve essere costituito dai 4 carboni e dall'atomo di azoto e deve possedere due doppi legami.

La molecola del problema 22 deve allora essere un **pirrolo metil sostituito**.

Lo spettro NMR del problema 22 è riportato di seguito:



Se il metile fosse legato all'azoto, gli idrogeni in anello darebbero due soli segnali per questioni di simmetria, dato che si osservano invece tre segnali diversi tra δ 5.5 e δ 6.5, concludiamo che **il gruppo metilico deve essere legato all'anello**.

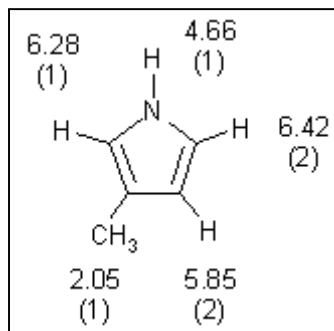
I tre idrogeni legati all'anello danno rispettivamente i tre segnali a δ 6.42, δ 6.28 e δ 5.85.

Il **singoletto a δ 6.28** si riferisce ad un **idrogeno isolato** e quindi per forza in **posizione 2** compreso tra l'azoto e il **gruppo metile** che quindi si trova in **posizione 3**.

I **due doppietti a δ 6.42 e δ 5.85** si riferiscono a due idrogeni **accoppiati tra loro** che quindi devono essere nelle **posizioni 4 e 5** avendo da un lato il metile e dall'altro l'azoto.

Si noti che l'**idrogeno legato all'azoto** (come negli alcoli) **non risulta accoppiato** con gli idrogeni vicini quindi i segnali a δ 6.28 e a δ 4.66 sono dei singoletti, mentre il segnale a δ 6.42 è un doppietto.

La struttura della molecola del problema 22 risulta quindi:



3-metilpirrolo

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