

PROBLEMA NMR n. 27 - soluzione

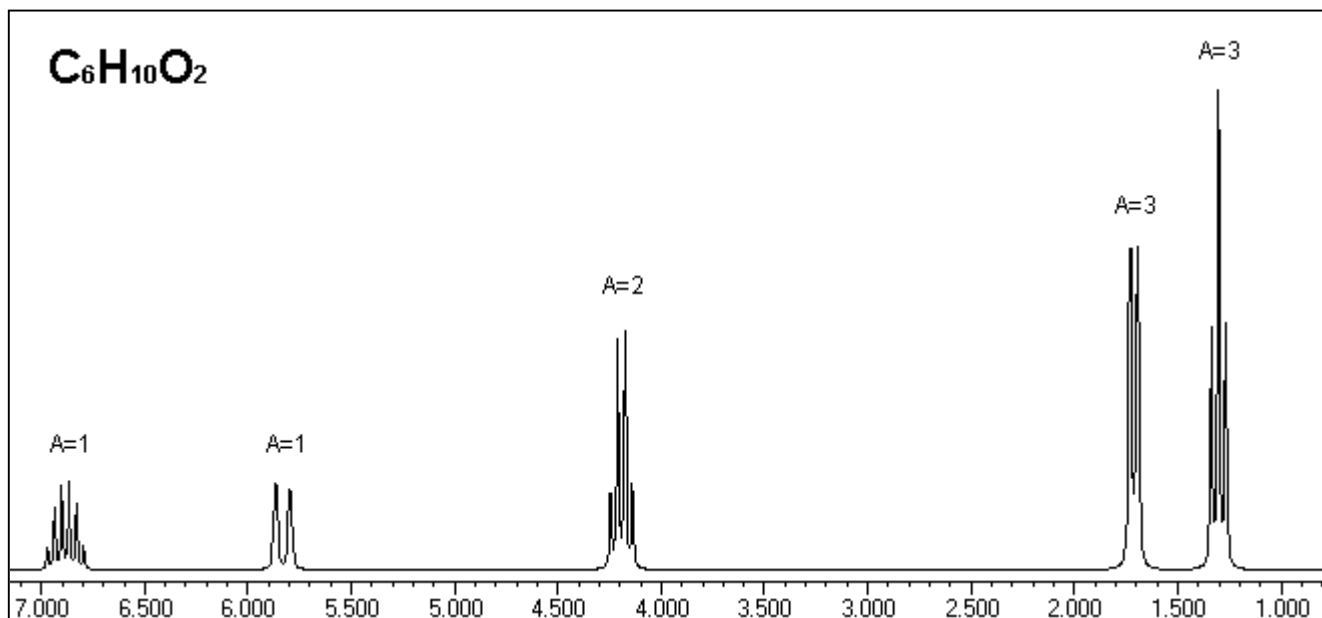
I dati dello spettro IR indicano la presenza di un **carbonile**.

Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{10}O_2$ deduciamo che la molecola ha **due insaturazioni**.

Di queste una è dovuta al carbonile, la seconda potrebbe essere dovuta o ad un doppio legame o ad un anello.

I picchi a δ **6.88** e a δ **5.83** si trovano in una zona tipica degli idrogeni vinilici e indicano la presenza di un doppio legame con due idrogeni vinilici e quindi un **doppio legame di-sostituito**.

Lo spettro NMR del problema 27 è riportato qui di seguito:



La molecola possiede anche un secondo ossigeno, ma siamo certi che non possiede gruppi OH (né alcolici né acidi) dato che nello spettro non se ne osservano i segnali.

Il quadrupletto a δ **4.19** indica un gruppo CH_2 legato all'ossigeno da un lato, e dall'altro lato legato al CH_3 posto a δ **1.30** (molteplicità = 3). Da questo deduciamo che la molecola è un **etil estere**, infatti l'ossigeno deve essere adiacente al carbonile dato che nella molecola mancano altri gruppi CH_2 .

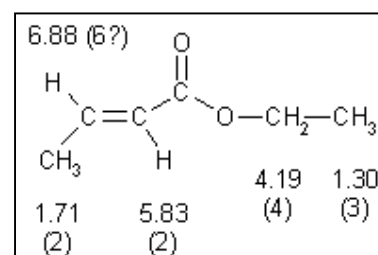
L'altro segnale sulla destra dello spettro, il **doppio** a δ **1.71**, indica un gruppo CH_3 legato ai carboni del doppio legame che avevamo indicato bi-sostituito. In particolare, dato che è un doppio, si rivela accoppiato con un solo idrogeno adiacente e questo deve essere l'idrogeno vinilico a δ **6.88** che infatti ha molteplicità 6.

La sua molteplicità ci racconta un accoppiamento con l'altro idrogeno vinilico a δ **5.83** (che avviene con una grande costante di accoppiamento J), e anche con il metile a δ **1.30** (con il quale ha una minore costante di accoppiamento J). Questo produce un picco dalla forma irregolare con molteplicità 6.

Le due diverse costanti di accoppiamento sono evidenti osservando i due picchi dell'idrogeno vinilico a δ **5.83** che appaiono più distanziati rispetto ai due picchi del metile posto a δ **1.71**.

Dall'analisi fatta la molecola del problema 27 è: **etil 2-butenato**

Qui è rappresentato l'isomero E, ma dai dati in nostro possesso non siamo in grado di decidere se la molecola abbia struttura Z o E, cioè se il doppio legame sia cis o trans.



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

PROBLEMA NMR n. 28 - soluzione

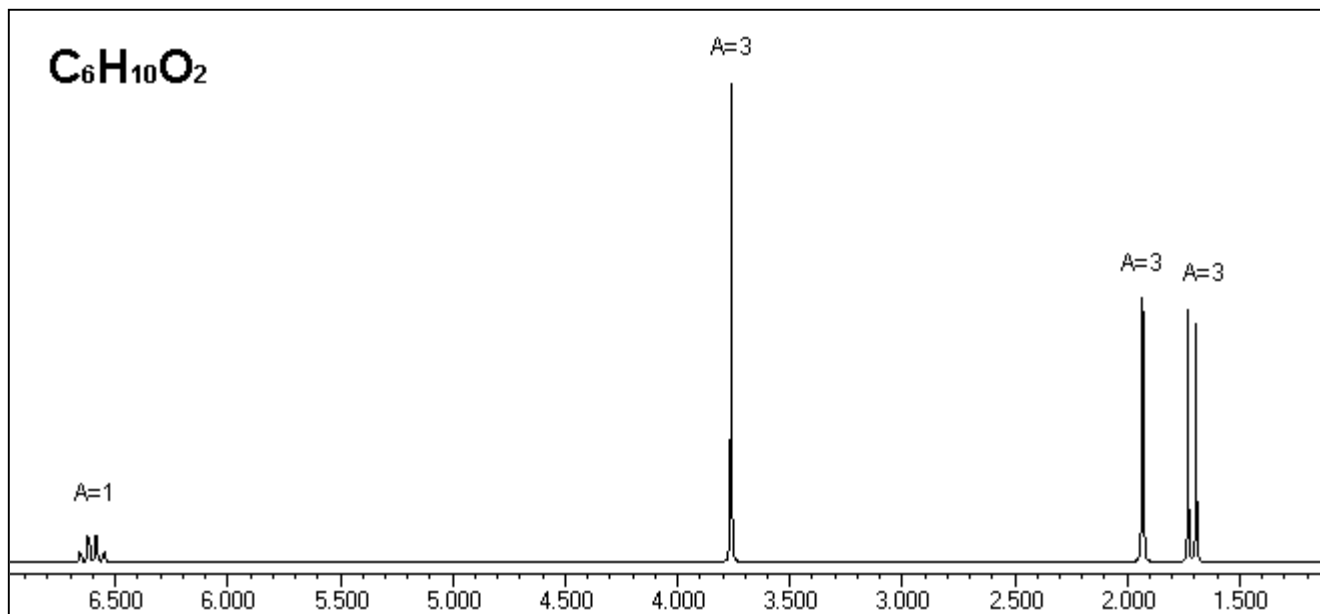
I dati dello spettro IR indicano la presenza di un **carbonile**.

Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{10}O_2$ osserviamo che la molecola ha **due insaturazioni**.

Di queste una è dovuta al carbonile, la seconda potrebbe essere dovuta o ad un doppio legame o ad un anello.

Il picco a δ 6.60 si trova in una zona tipica degli idrogeni vinilici e, avendo area 1, indica la presenza di un doppio legame con un solo idrogeno vinilico e quindi un **doppio legame tri-sostituito**.

Lo spettro NMR del problema 28 è riportato qui di seguito:

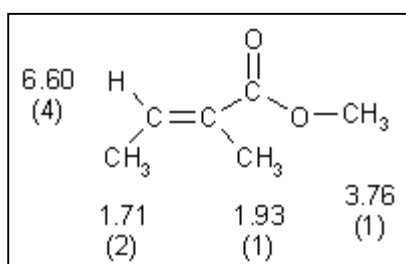


La molecola possiede anche un secondo ossigeno, ma siamo certi che non possiede gruppi OH (né alcolici né acidi) dato che nello spettro non se ne osservano i segnali.

Il **singoletto** a δ 3.76 indica un gruppo CH_3 legato all'ossigeno, da questo deduciamo che la molecola è un **metil estere**. Infatti l'ossigeno deve essere adiacente al carbonile dato che nella molecola mancano gruppi CH_2 .

Gli altri due segnali sulla destra dello spettro indicano i due gruppi CH_3 che sono legati ai carboni del doppio legame che avevamo indicato tri-sostituito. In particolare il doppietto a δ 1.71 si rivela accoppiato con un idrogeno adiacente e questo deve essere l'idrogeno vinilico a δ 6.60 che infatti ha molteplicità 4.

Dall'analisi fatta la molecola del problema 28 è:



metil 2-metil-2-butenoato

Qui è rappresentato l'isomero E, ma dai dati in nostro possesso non siamo in grado di decidere se la molecola abbia struttura Z o E, cioè se il doppio legame sia cis o trans.

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