

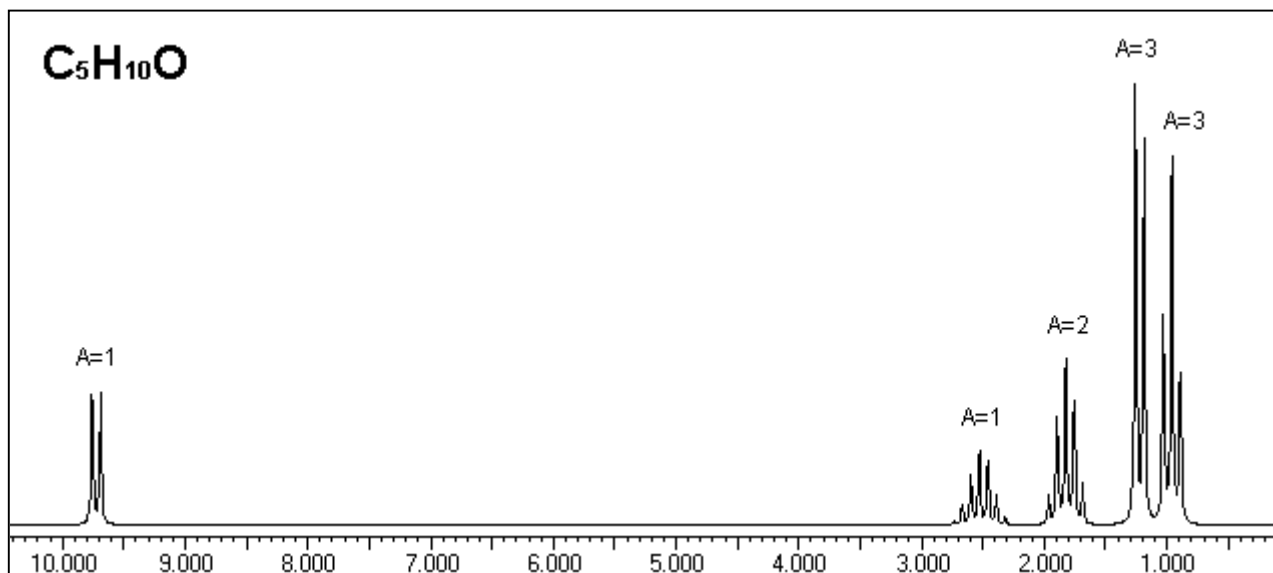
## PROBLEMA NMR n. 33 – soluzione

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

Dall'analisi della formula bruta  $C_5H_{10}O$  osserviamo che la molecola ha **una sola insaturazione** che quindi deve essere attribuita al carbonile. Nella molecola non ci sono anelli o altri doppi legami.

La presenza del segnale a  $\delta$  9.72 indica che si tratta di una **aldeide**.

Lo spettro NMR del problema 33 è riportato qui di seguito:



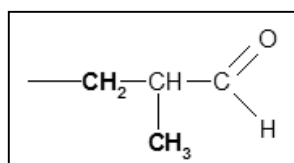
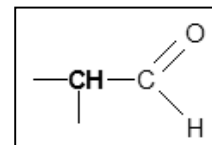
Esaminiamo gli spostamenti chimici dei picchi cominciando da sinistra. Il primo picco, a  $\delta$  9.72, rappresenta il segnale dell'H aldeidico; a  $\delta$  2.52 abbiamo gli idrogeni in alfa al carbonile; infine a  $\delta$  1.62, 1.17, 0.96, abbiamo i segnali dei normali idrogeni alchilici secondari e primari.

Ricordiamo che la molteplicità **m** di un picco è legata al numero di idrogeni vicini **H** per mezzo della relazione: **H = m-1**

Osserviamo che il segnale dell'aldeide a  $\delta$  9.72 è un **doppietto**. Sappiamo che l'idrogeno aldeidico si accoppia con gli idrogeni in alfa dell'aldeide.

Il doppietto ( $m = 2$ ) indica quindi che c'è **un solo idrogeno in alfa** ( $m-1 = 2-1 = 1$ ).

Nella posizione alfa ci deve essere quindi una **ramificazione**.



L'idrogeno alfa in questione è quello che dà il segnale a  $\delta$  2.52, si tratta di un multipletto con molteplicità 7.

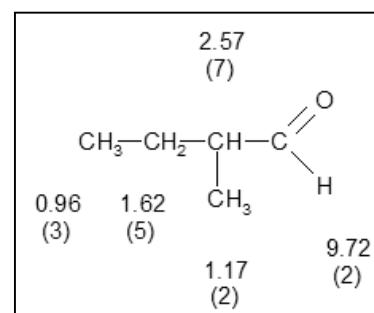
Quindi questo idrogeno ha **6 H** vicini ( $7-1 = 6$ ): **1 H** aldeidico e altri **5 H**, probabilmente un CH<sub>3</sub> e un CH<sub>2</sub>.

Il CH<sub>3</sub> in questione è quello a  $\delta$  1.17, infatti è un **doppietto** e quindi è accoppiato al solo idrogeno in alfa.

I due picchi rimasti, il CH<sub>2</sub> a  $\delta$  1.62 e il CH<sub>3</sub> a  $\delta$  0.96, sono accoppiati tra loro e costituiscono quindi un **gruppo etilico**.

Notiamo infatti che il CH<sub>3</sub> a  $\delta$  0.96 è un **tripletto** quindi è vicino al CH<sub>2</sub>.

La molecola è così determinata, si tratta di **2-metilbutanale**.



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

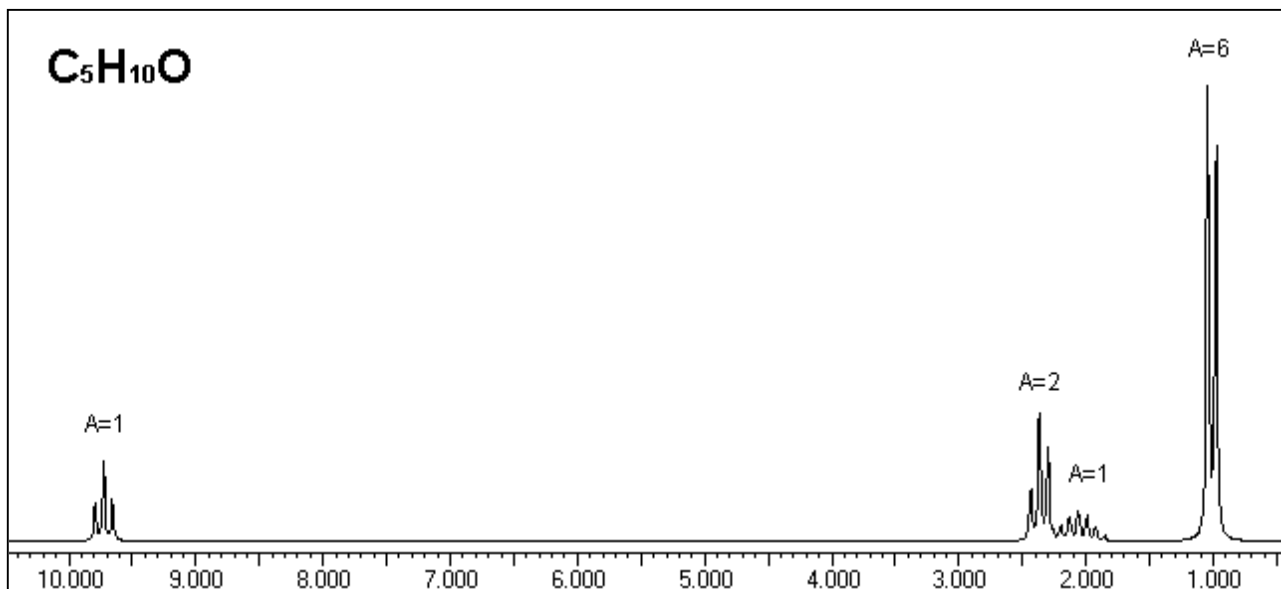
## PROBLEMA NMR n. 34 – soluzione

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

Dall'analisi della formula bruta  $C_5H_{10}O$  osserviamo che la molecola ha **una sola insaturazione** che quindi deve essere attribuita al carbonile. Nella molecola non ci sono anelli o altri doppi legami.

La presenza del segnale a  $\delta$  **9.72** indica che si tratta di una **aldeide**.

Lo spettro NMR del problema 34 è riportato qui di seguito:

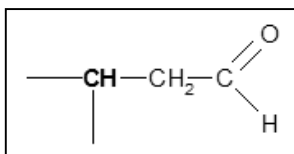
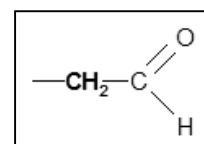


Esaminiamo gli spostamenti chimici dei picchi cominciando da sinistra. Il primo picco, a  $\delta$  **9.72**, rappresenta il segnale dell'H aldeidico; a  $\delta$  **2.36** abbiamo gli idrogeni in alfa al carbonile; infine a

$\delta$  **2.06** e **1.01** abbiamo i segnali dei normali idrogeni alchilici terziari, secondari e primari.

Ricordiamo che la molteplicità **m** di un picco è legata al numero di idrogeni vicini **H** per mezzo della relazione: **H = m-1**

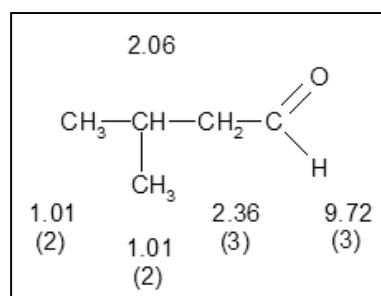
Osserviamo che il segnale dell'aldeide a  $\delta$  **9.72** è un **tripletto**. Sappiamo che l'idrogeno aldeidico si accoppia con gli idrogeni in alfa dell'aldeide. Il tripletto ( $m=3$ ) indica che ci sono **due idrogeni in alfa** ( $m-1 = 3-1 = 2$ ). Nella posizione alfa c'è quindi un **CH<sub>2</sub>**.



Gli idrogeni in alfa danno il segnale a  $\delta$  **2.36** che ha molteplicità 3. Quindi questi idrogeni hanno **2 H** vicini ( $3-1 = 2$ ): **1 H** aldeidico più **1 H** a valle attribuibile ad un **CH terziario** che ha il segnale multipletto a  $\delta$  **2.06**.

Resta solo l'ultimo segnale da interpretare, il **doppietto** a  $\delta$  **1.01** attribuibile a due  $\text{CH}_3$  identici legati al CH terziario.

La molecola è così determinata. Si tratta di **3-metilbutanale**.



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