

COMPITO DI CHIMICA ORGANICA 3i 8-2-2017

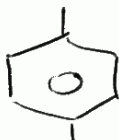
1) SPETTRO NMR C₁₂H₁₆O₂; ANALISI E INTERPRETAZIONE (ha $\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}$)

Analisi delle formule brute

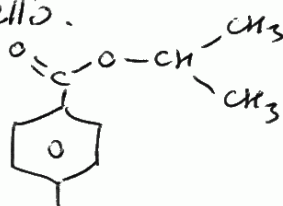
Se la molecola fosse satura sarebbe C₁₂H₂₆O₂. Mancano 10 H → 5 INS

La molecola contiene un anello benzenico (lo vedo anche dai segnali a 7.0 e 7.8 ppm) e contiene un carbonile (dati del problema)

1° due doppietti a 7.0 e 7.8 indicano un benzene para sstituito, tanto con un sstituento attivante (in 7.0) e uno sstituyente (in 7.8 ppm)



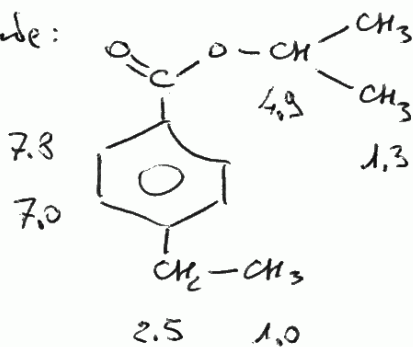
1° il segnale quintetto a 4.9 ppm è di un CH (1.7 + 3.2) quindi è un CH legato all'ossigeno di un estere (spostando di 3 ppm). È accoppiato al doppietto dei due CH₃ a 1.3 ppm quindi costituisce un gruppo isopropile legato all'ossigeno dell'estere. Non si tratta quindi di un quintetto, ma di un epitetto.

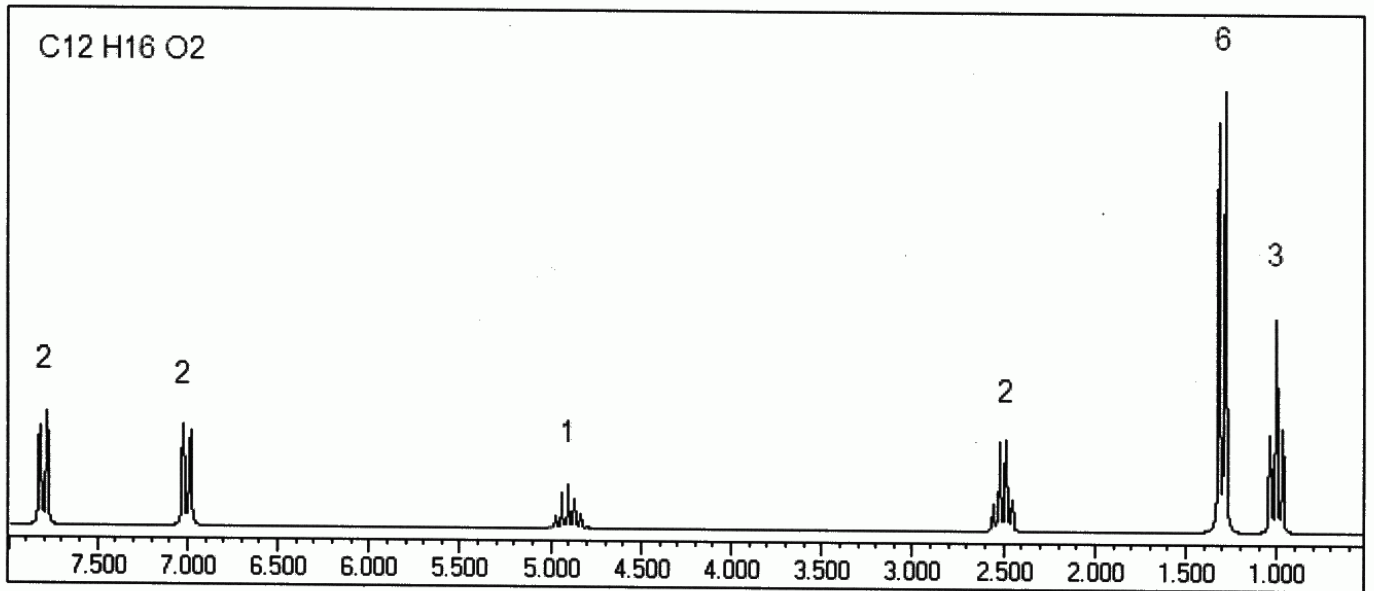


1° il segnale quartetto a 2.5 ppm è un CH₂ (1.3 + 1.2) quindi può essere un CH₂ legato in para all'anello (spostando di 1.5 ppm).

È accoppiato al tripetto del CH₃ a 1.0 ppm. Costituisce quindi un gruppo etile che infatti è leggermente attivante (in 7.0 ppm)

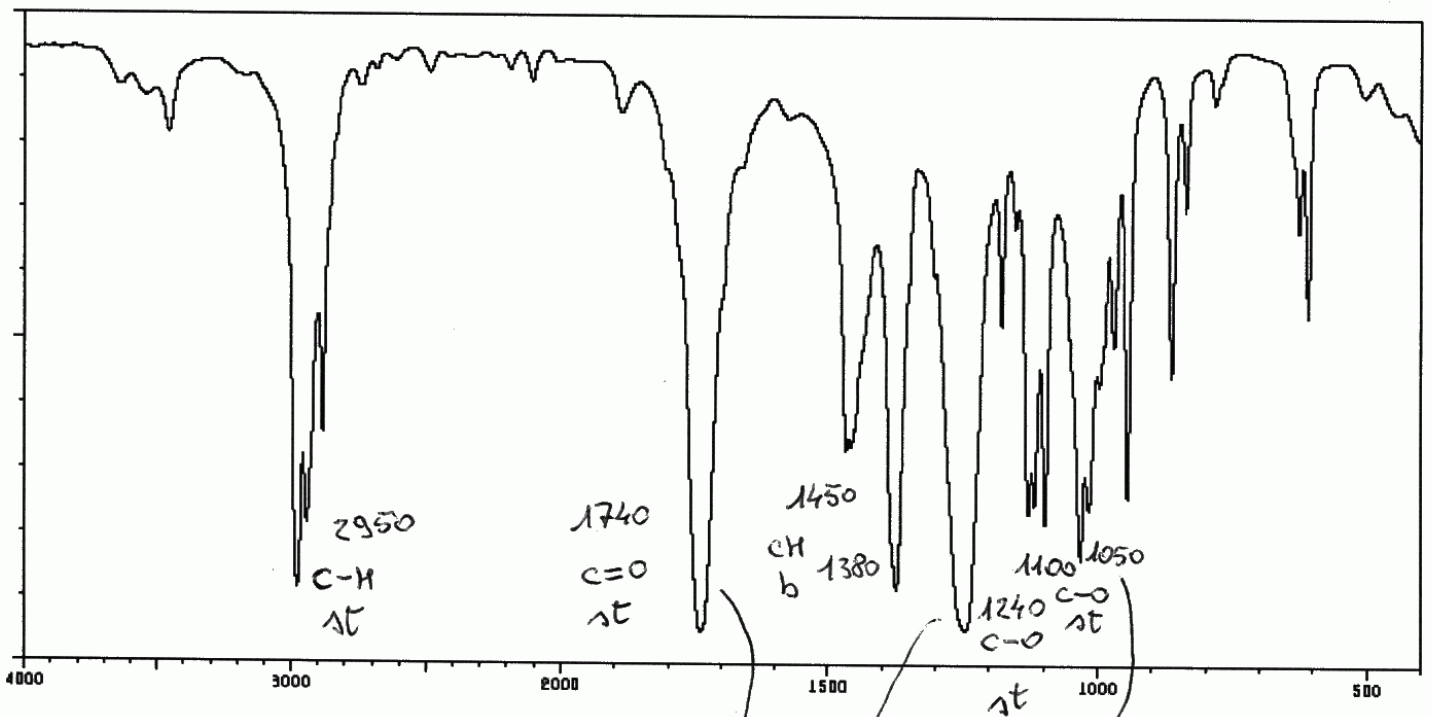
La molecola è la seguente:





SPETTRO NMR ESERCIZIO 1)

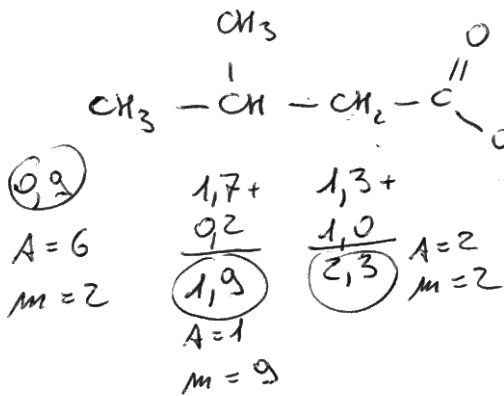
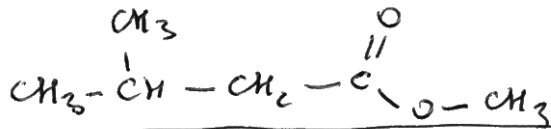
SPETTRO IR ESERCIZIO 2)



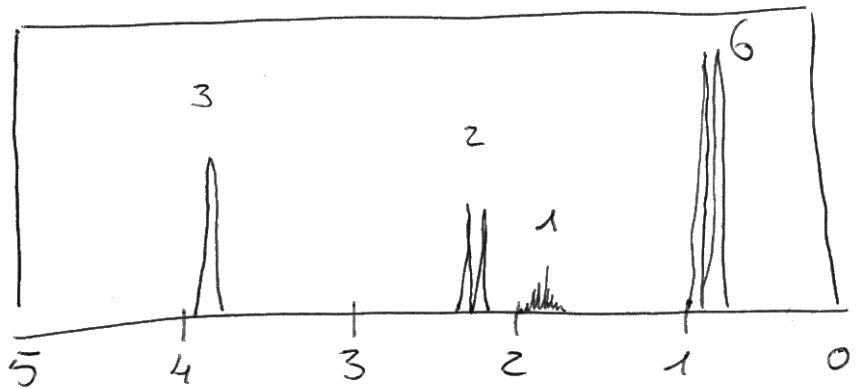
Dato che la molecola contiene i segnali del C=O e su due C-O è un estere
 È saturo perché mancano i segnali
 e 3050 CH (sp²) e 1640 (C=C) e a 2100 (C≡C)

$$R - \overset{\text{O}}{\parallel}{C} - O - R'$$

3) Scrivere lo spettro NMR per la molecola



$0,9 + 3,0 = 3,9$
 $\text{A} = 3$
 $m = 1$



4) Scrivere lo spettro IR per la molecola

