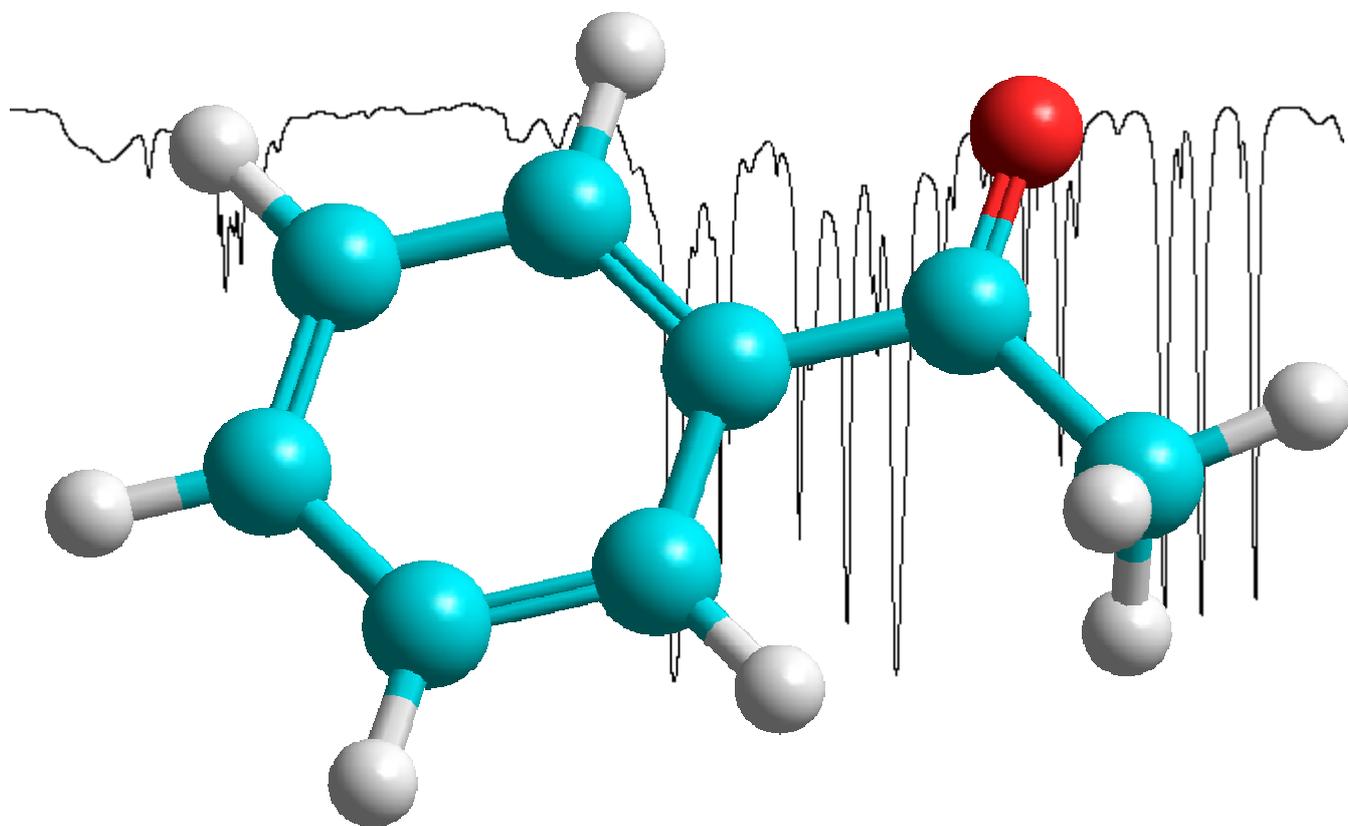


Mauro Tonellato

20 problemi di Spettroscopia IR – NMR



Premessa

Questa è una raccolta di 20 problemi di identificazione di molecole incognite, a partire dalla formula bruta e dagli spettri IR e NMR.

Prima di tentare di risolvere questi problemi, vi consiglio di leggere le due dispense che spiegano le basi della spettroscopia IR ed NMR che trovate nel sito pianetachimica:

Interpretare gli spettri IR e Spettroscopia NMR

Questi problemi riguardano molecole molto semplici che però metteranno alla prova la vostra abilità nella interpretazione dei dati.

Per ogni molecola troverete: la formula bruta, lo spettro IR, lo spettro C-NMR, lo spettro H-NMR.

- 1) dalla **formula bruta** potete individuare gli atomi componenti e il grado di insaturazione della molecola
- 2) dallo **spettro IR** potete identificare i gruppi funzionali della molecola
- 3) dallo **spettro C-NMR** potete identificare quanti tipi di carboni diversi sono presenti e stabilire se sono semplici carboni alchilici (primari, secondari o terziari), se sono legati ad atomi elettronegativi, se sono insaturi, se appartengono a carbonili ecc.
- 4) dallo **spettro H-NMR** potete capire quanti idrogeni sono presenti in ogni punto della molecola, se sono legati a carboni alchilici (primari, secondari o terziari), se sono legati ad atomi elettronegativi, se appartengono a doppi legami, ad anelli aromatici, a gruppi aldeidici, a carbossili. Inoltre per ciascun gruppo di idrogeni potete scoprire quanti idrogeni ci sono nelle immediate vicinanze. Questo permette di indagare a fondo la struttura della molecola.

Gli spettri IR e C-NMR sono stati ottenuti dallo Spectral Database for Organic Compounds, SDBS gestito dal National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan.

Gli spettri H-NMR sono stati disegnati col programma gNMR a partire dai dati sperimentali dello Spectral Database for Organic Compounds, SDBS dell'AIST, Japan.

Nel sito pianetachimica.it trovate anche una dispensa con le **soluzioni guidate** di ognuno di questi problemi che descrive, passo passo, come vanno letti gli spettri per arrivare alla determinazione della struttura incognita.

Per cominciare, provate a risolvere i problemi senza aiuti, e solo poi confrontate la vostra soluzione con quella che vi suggerisco, vi accorgete che questi esercizi sono un'ottima palestra per imparare a leggere con disinvoltura gli spettri IR ed NMR.

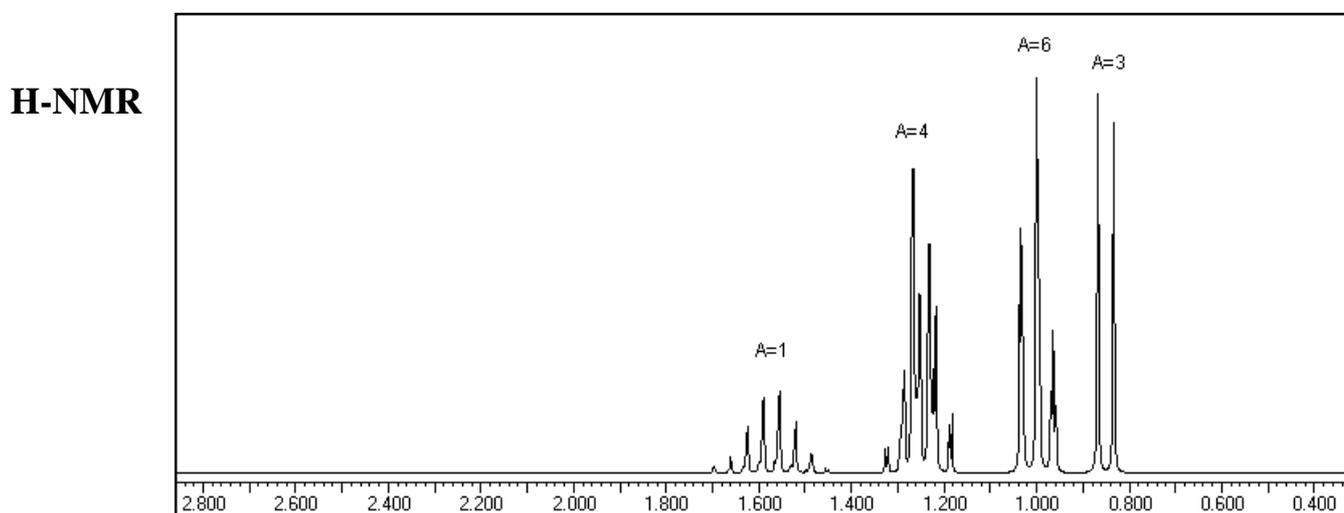
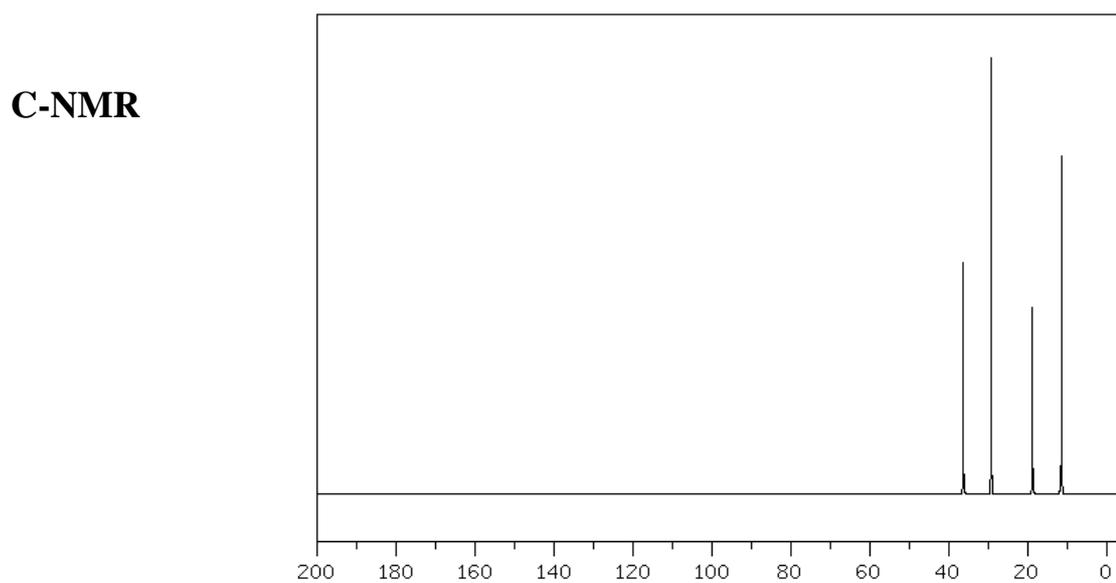
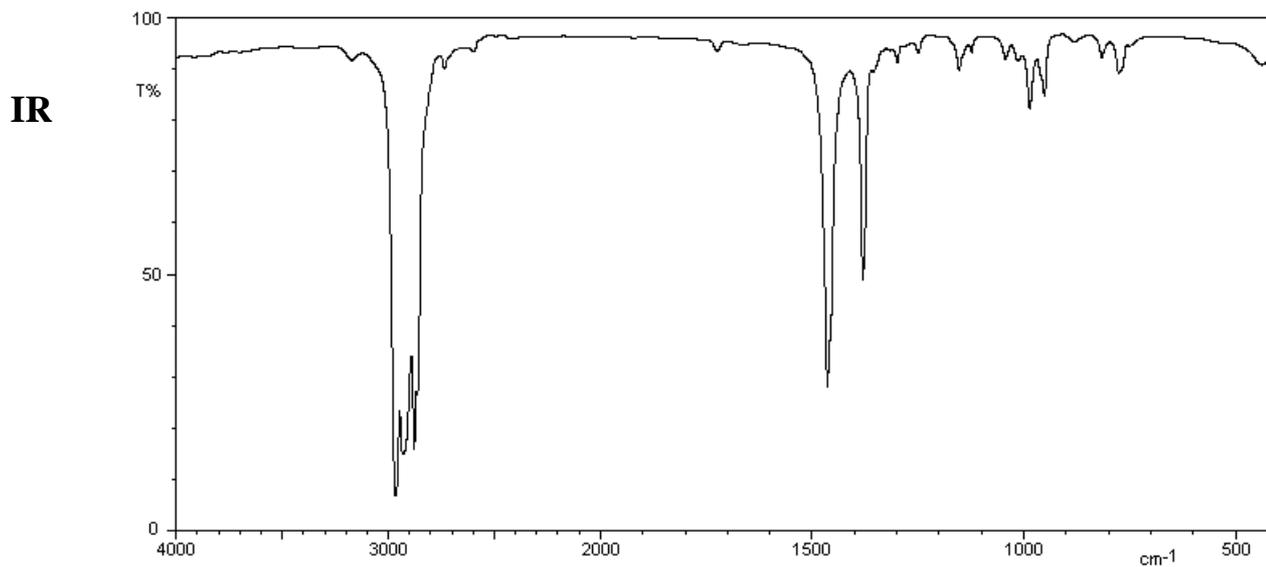
In fondo a questa dispensa ci sono le tabelle riassuntive degli assorbimenti IR ed NMR.

Iniziate, quindi, questa avventura e in bocca al lupo!

Prof Mauro Tonellato
22 gen 2023

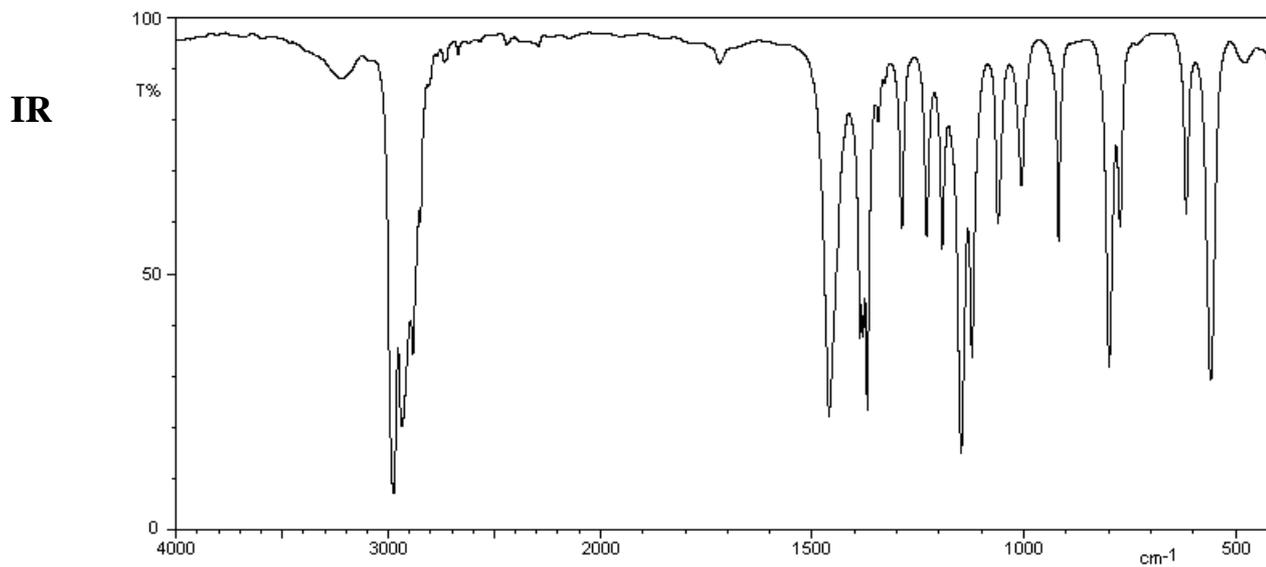
Problema 1

Determinare la struttura della molecola di formula bruta C_6H_{14} usando i seguenti spettri:

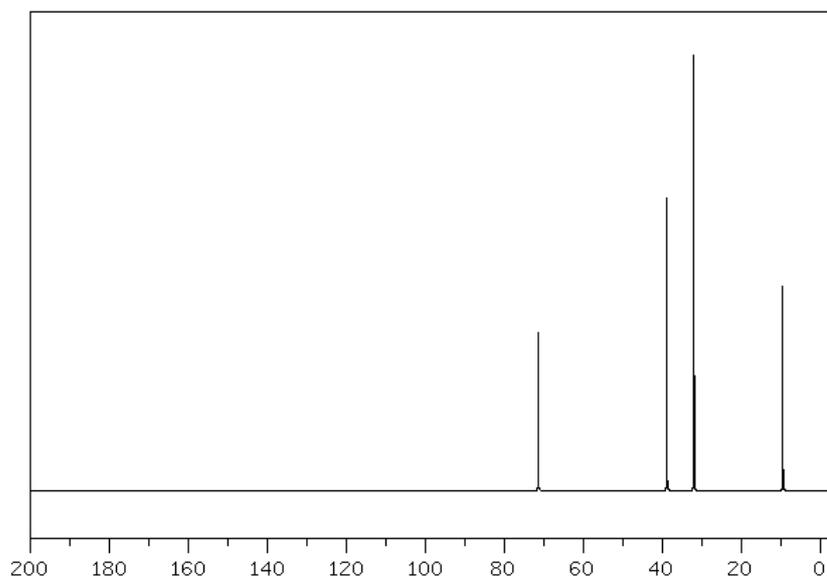


Problema 2

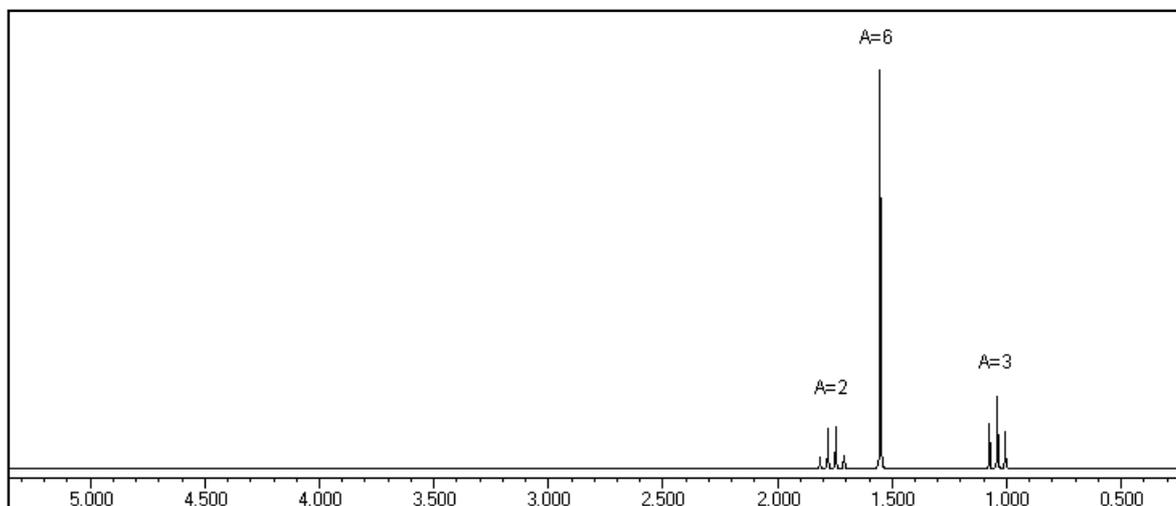
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_5H_{11}Cl$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

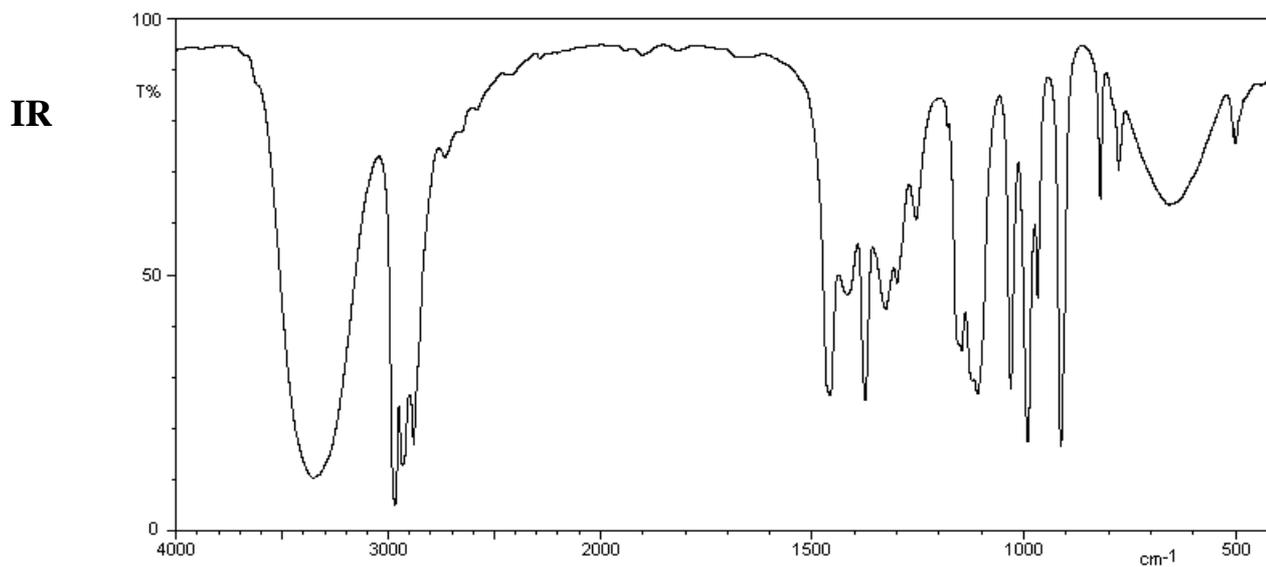


H-NMR

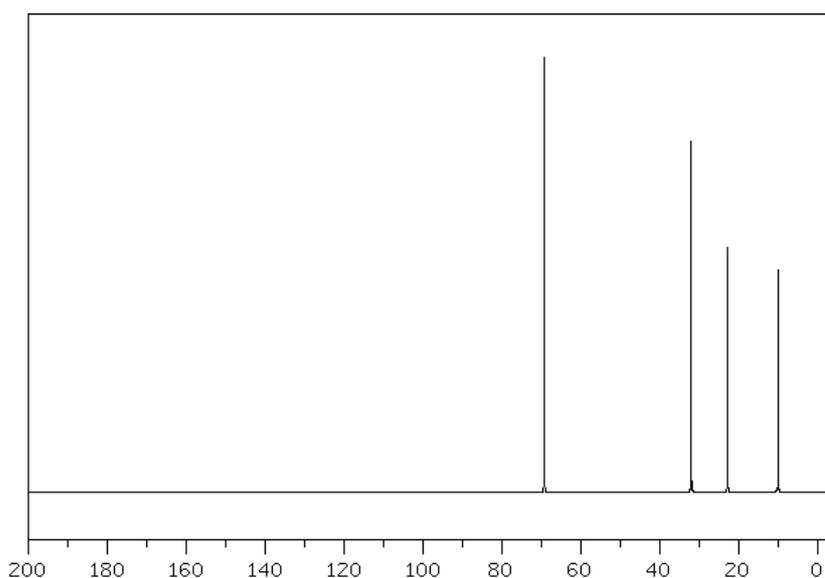


Problema 3

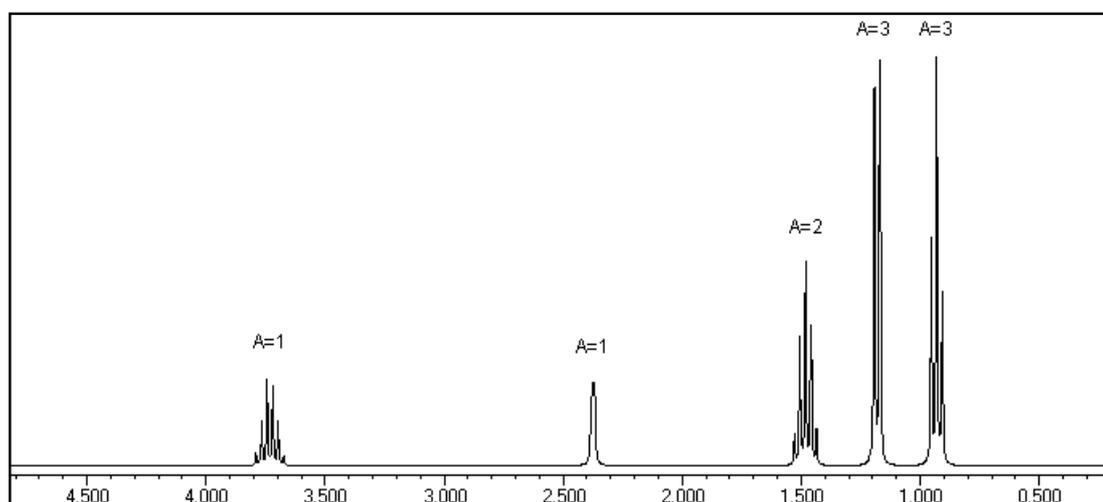
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_4H_{10}O$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

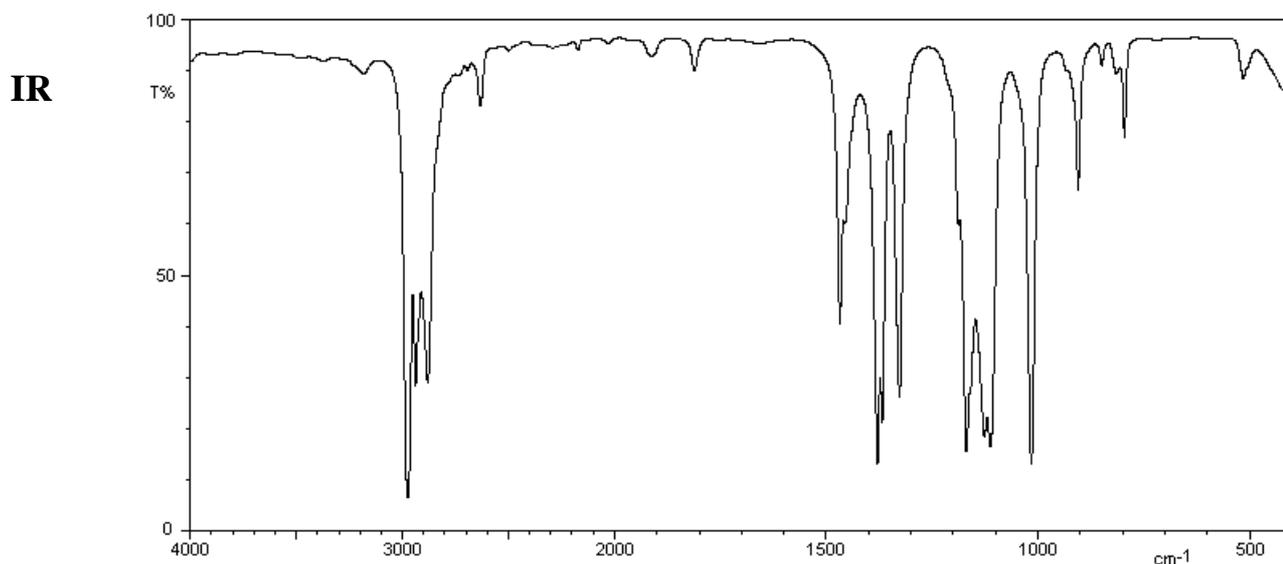


H-NMR

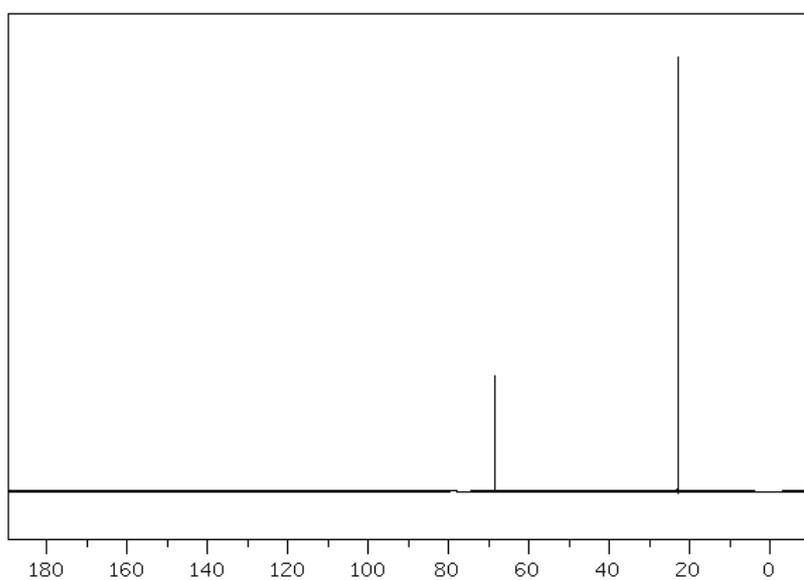


Problema 4

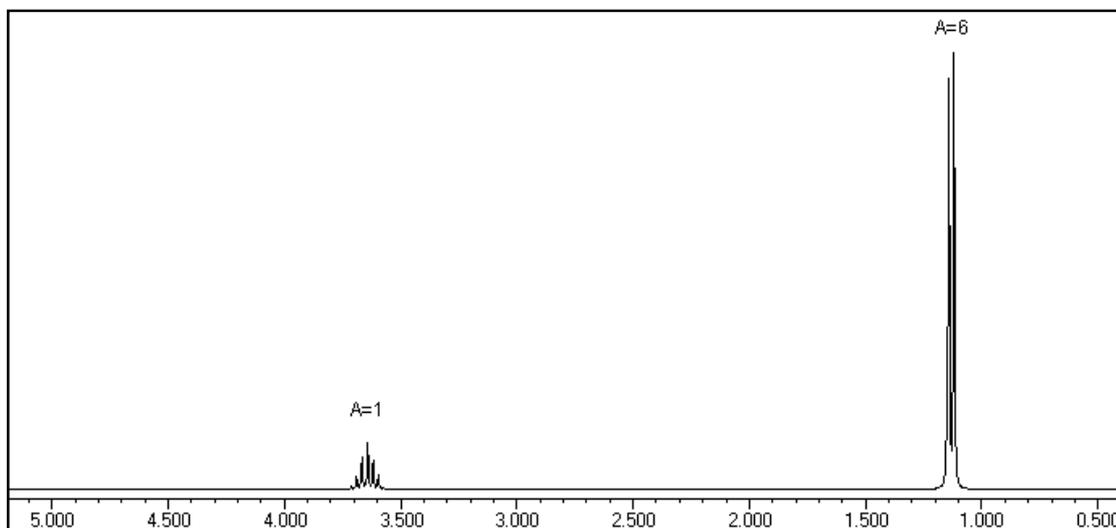
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_6H_{14}O$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

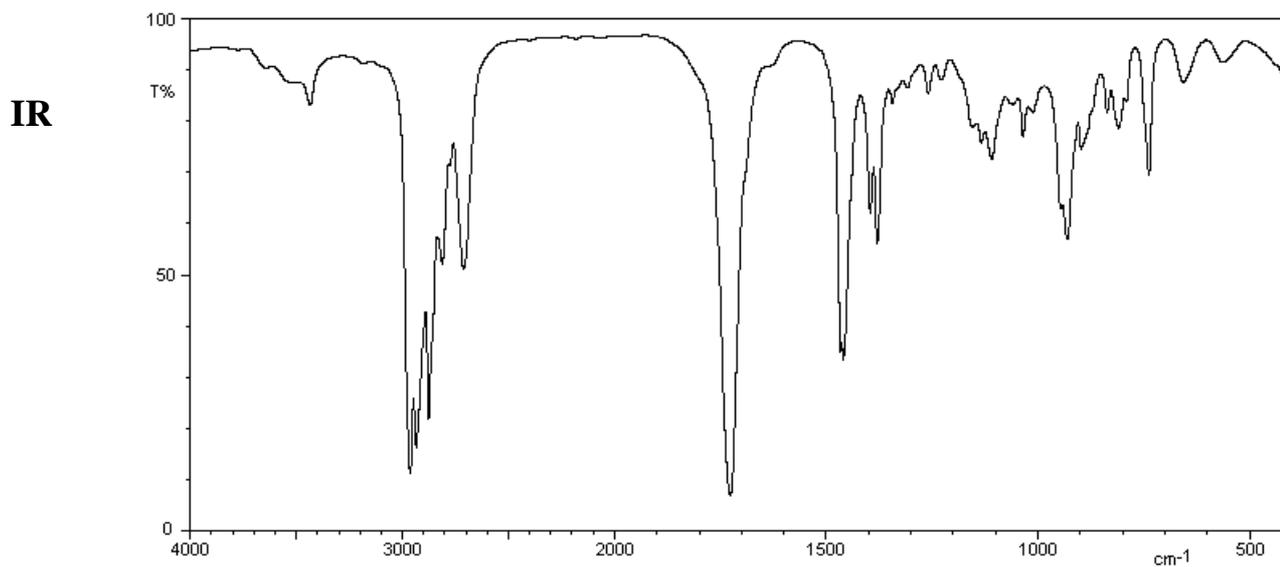


H-NMR

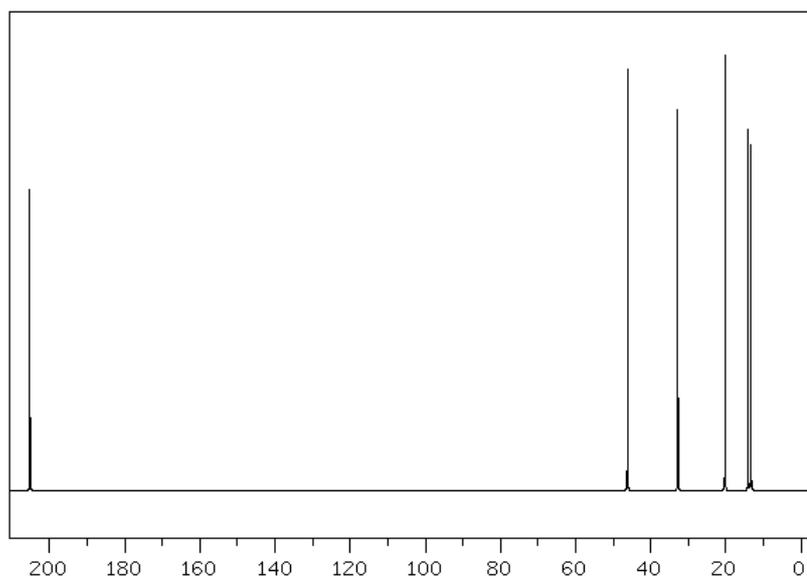


Problema 5

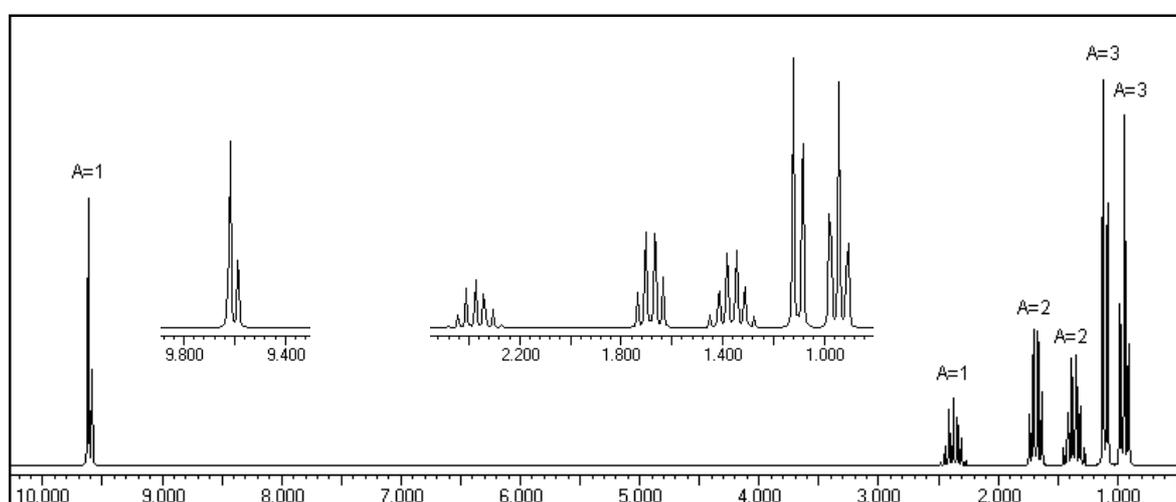
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_6H_{12}O$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

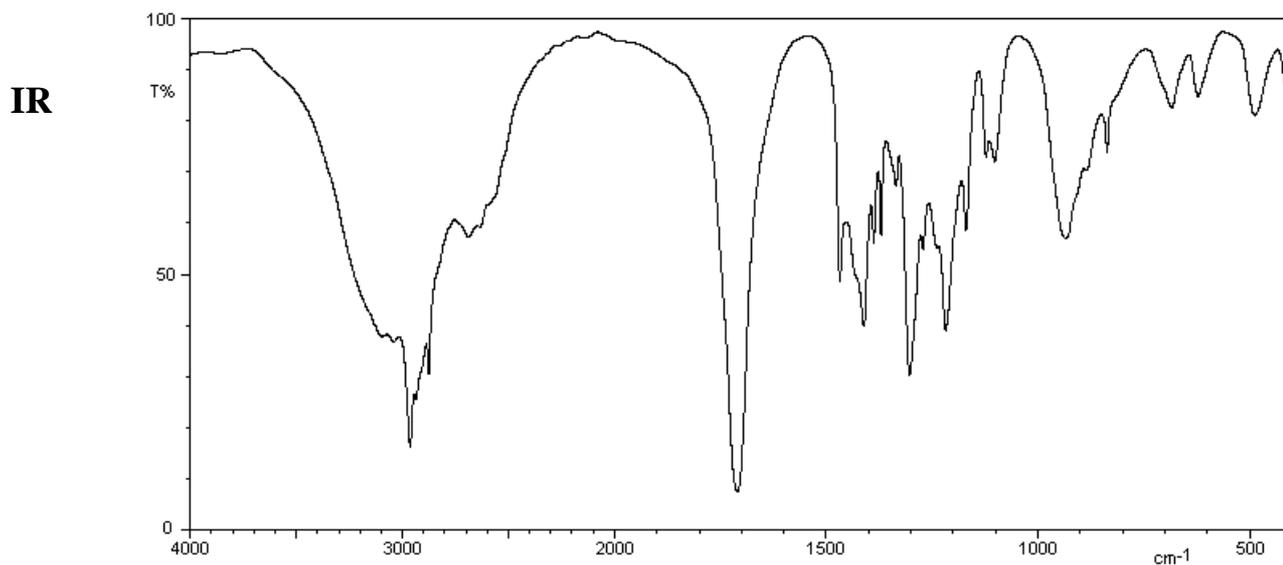


H-NMR

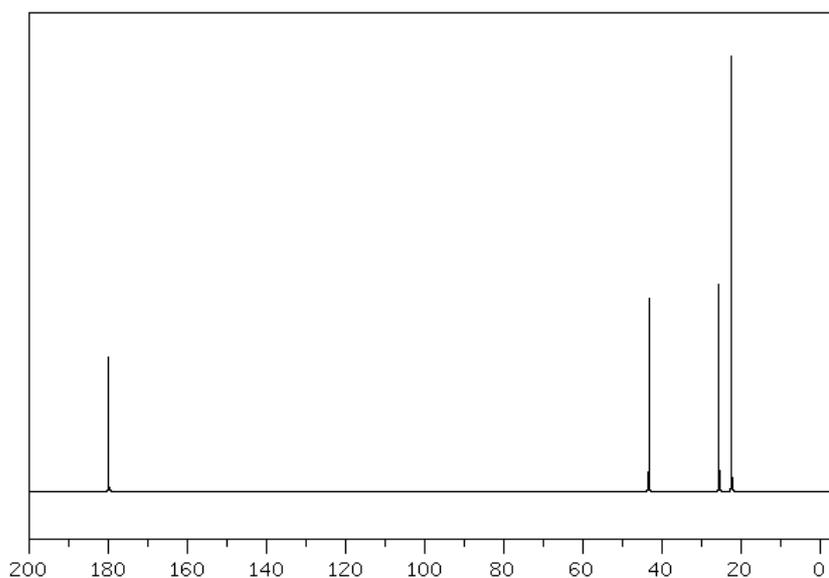


Problema 6

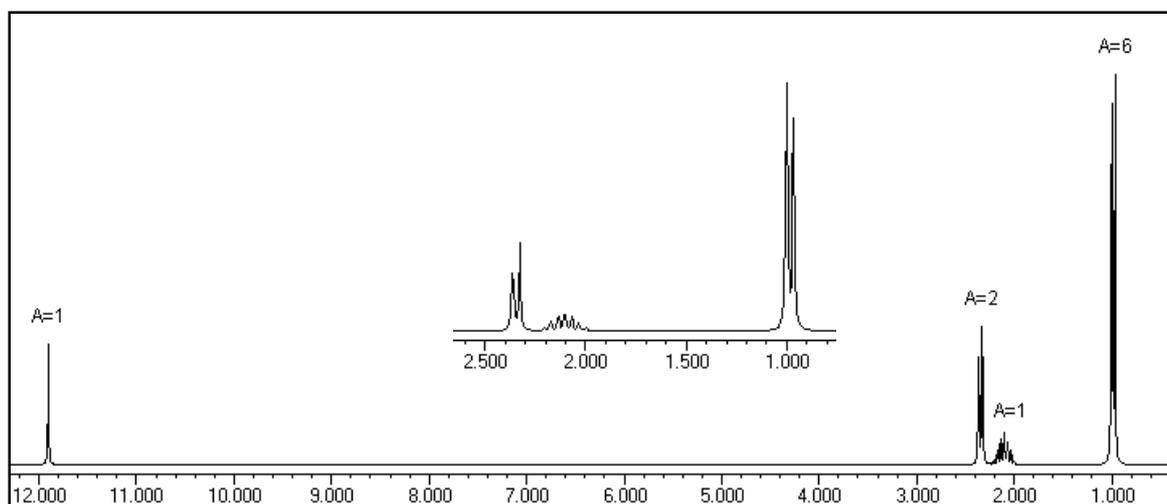
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_5H_{10}O_2$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

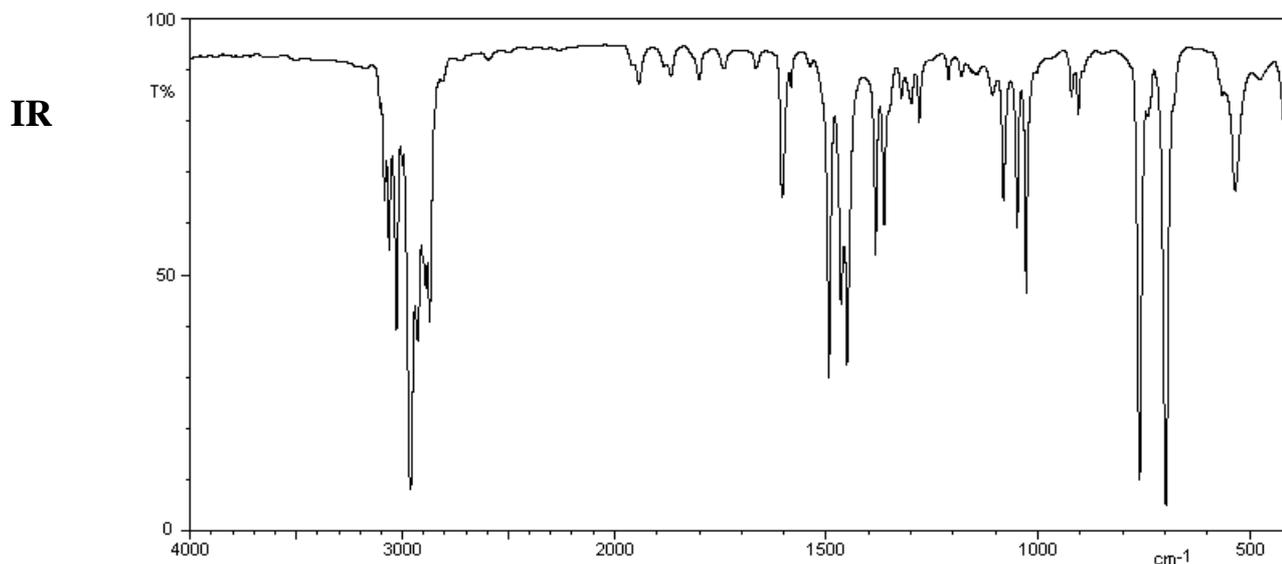


H-NMR

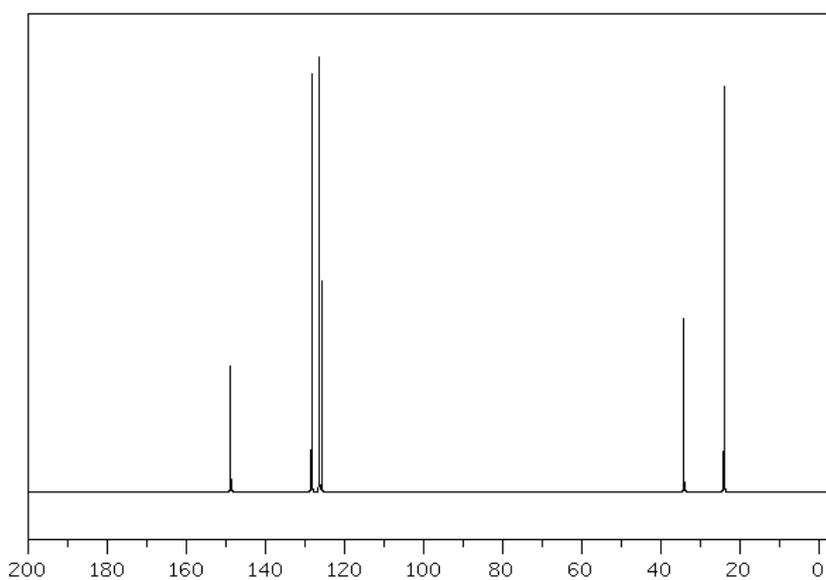


Problema 7

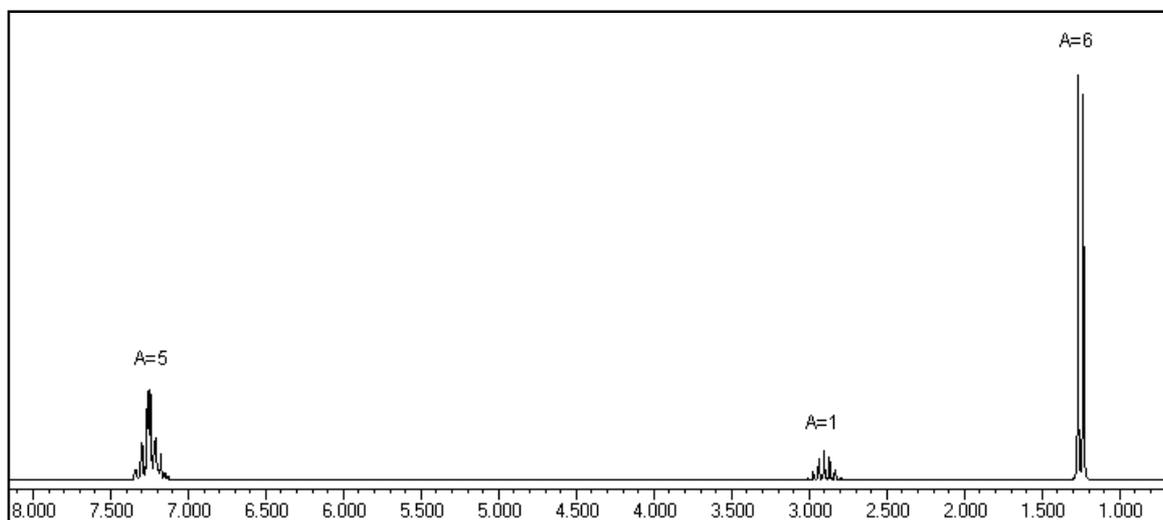
Determinare la struttura della molecola di formula bruta C_9H_{12} usando i seguenti spettri:



C-NMR

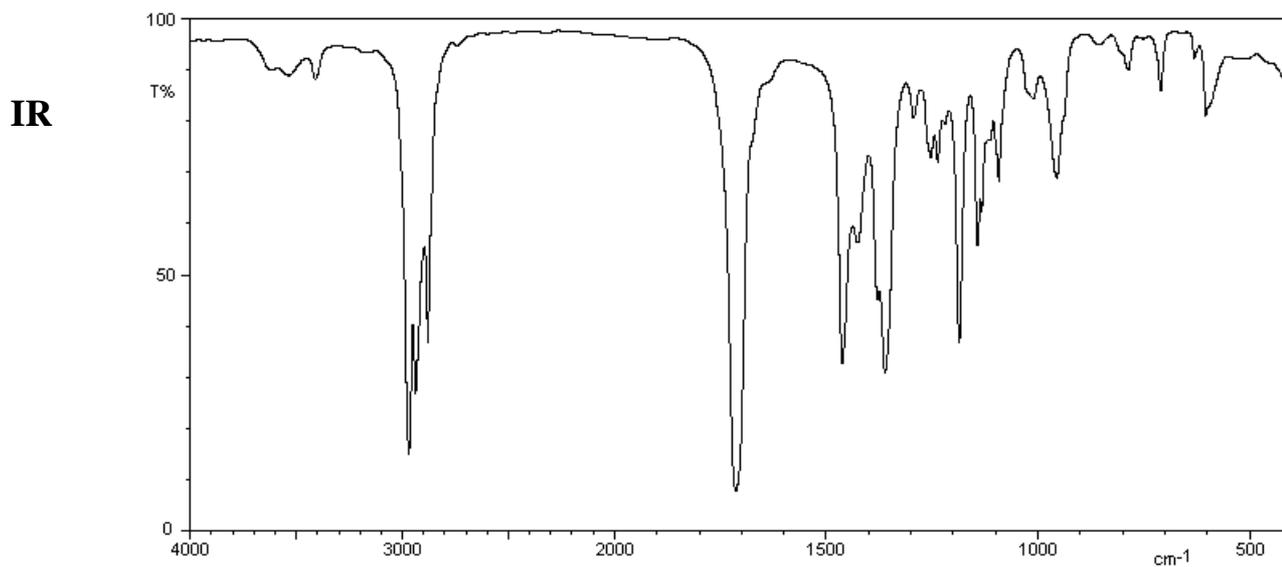


H-NMR

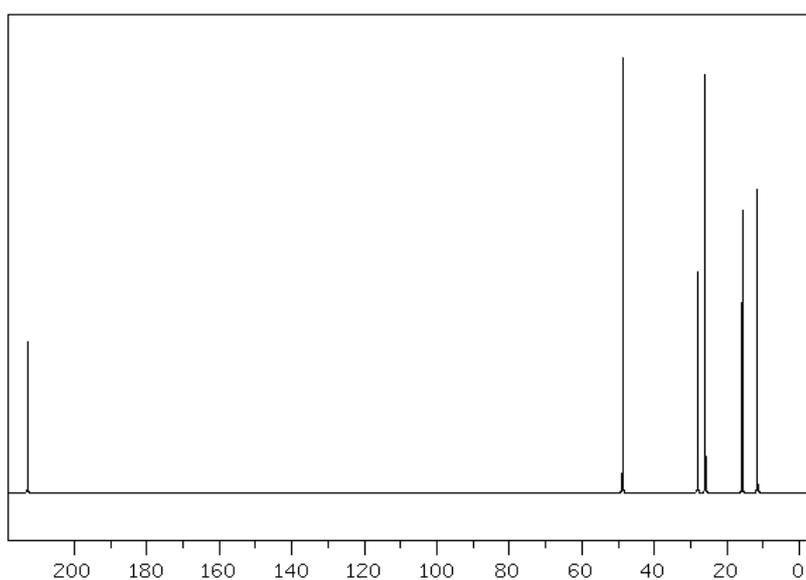


Problema 8

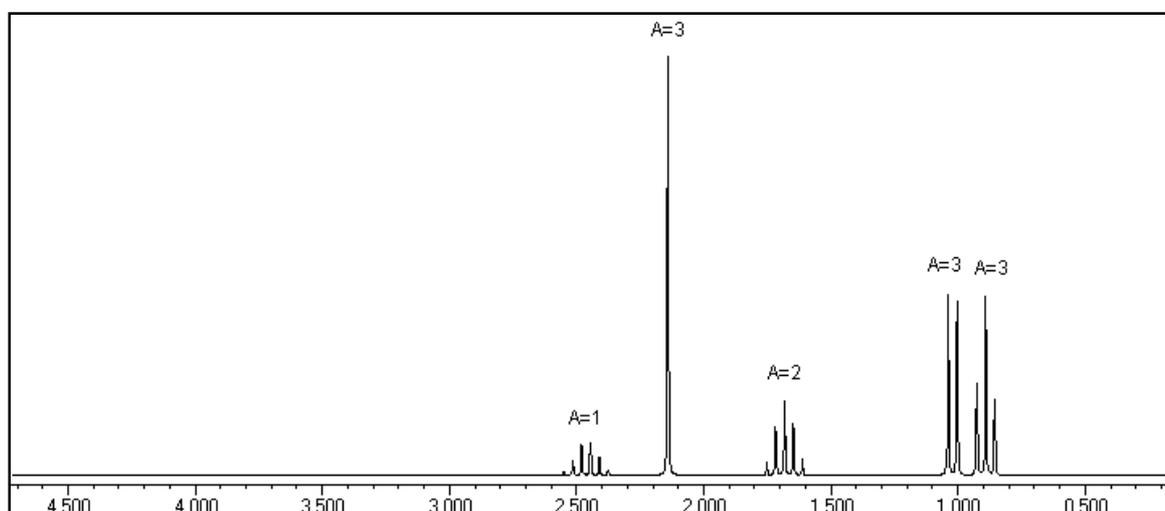
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_6H_{12}O$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

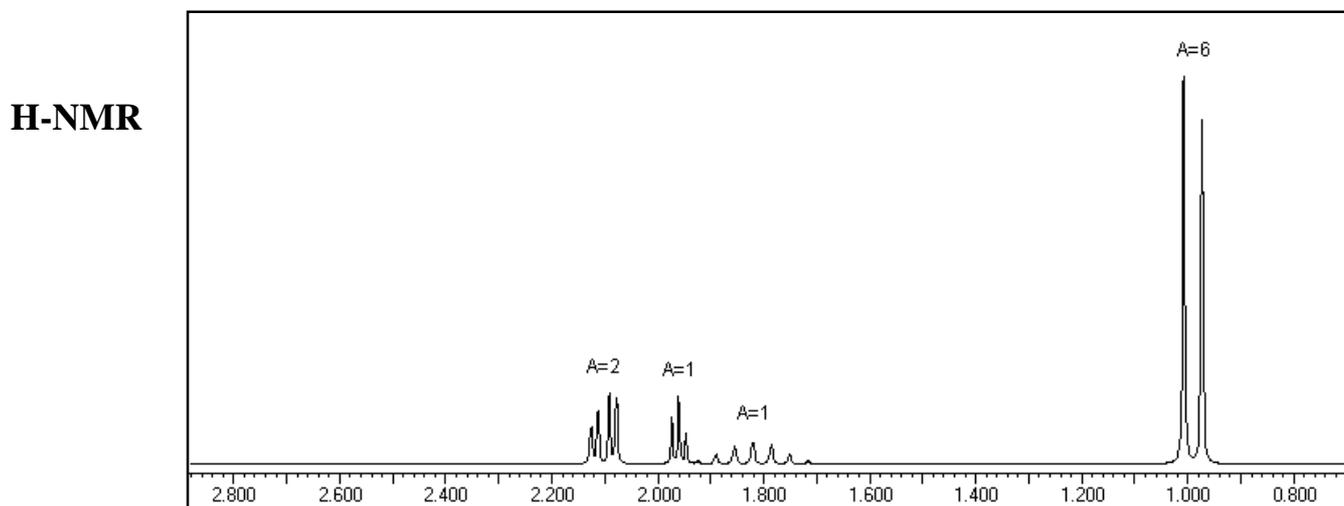
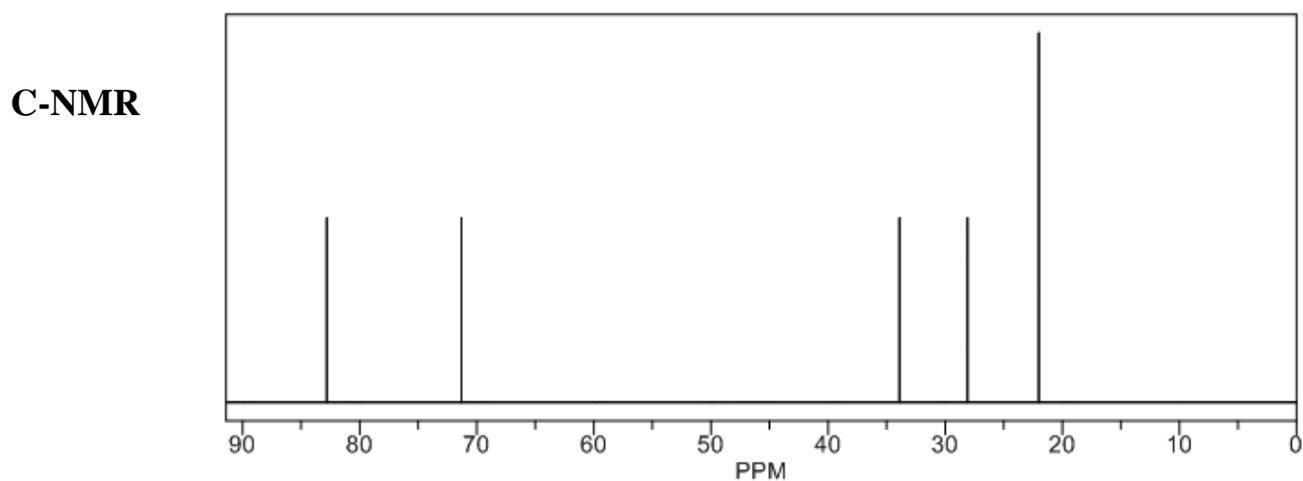
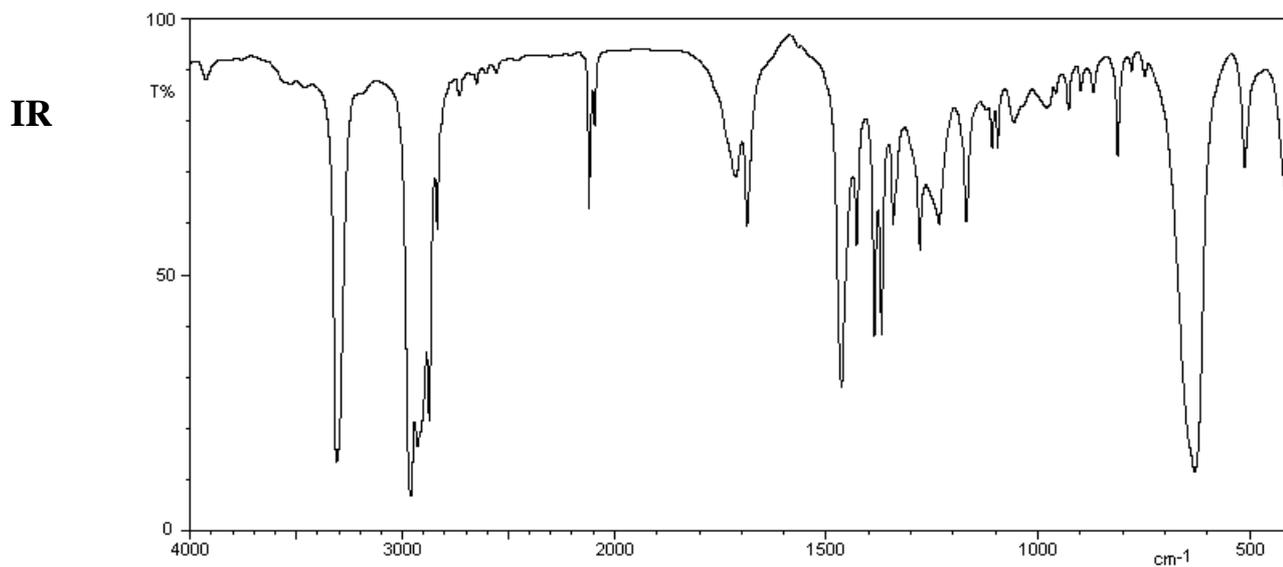


H-NMR



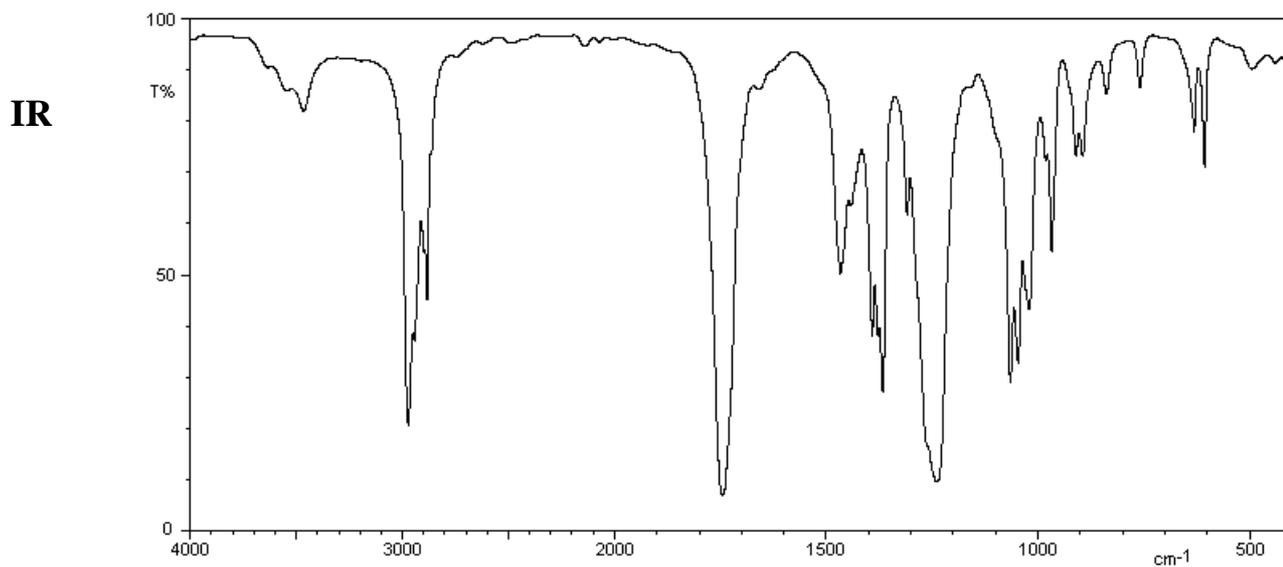
Problema 9

Determinare la struttura della molecola di formula bruta C_6H_{10} usando i seguenti spettri:

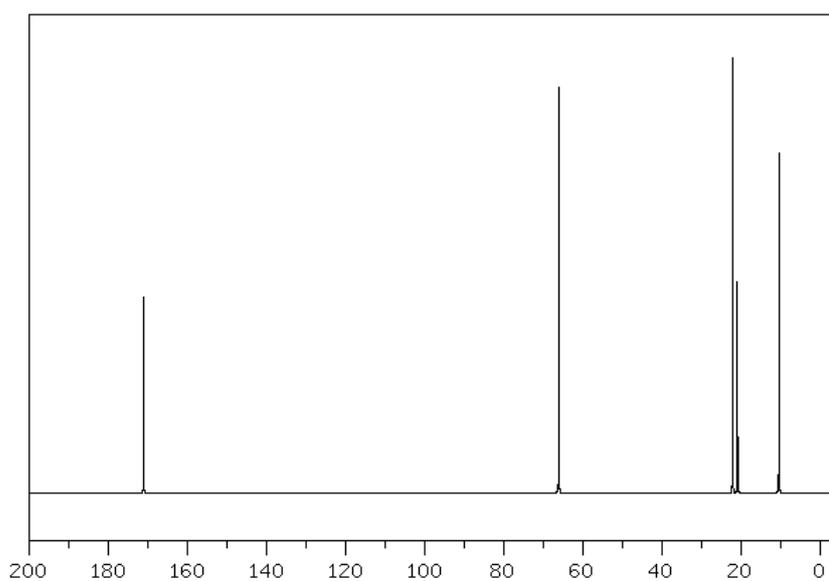


Problema 10

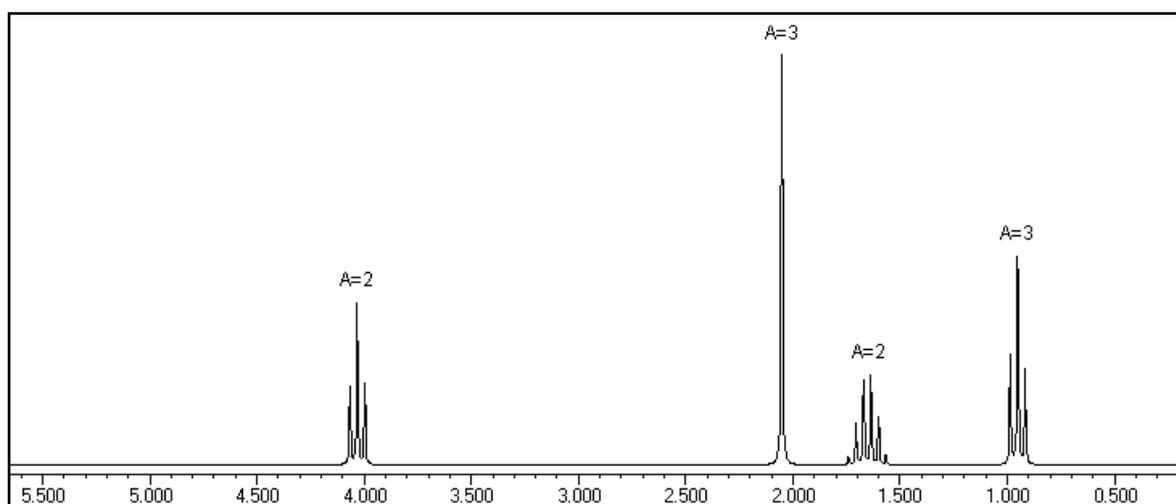
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_5H_{10}O_2$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

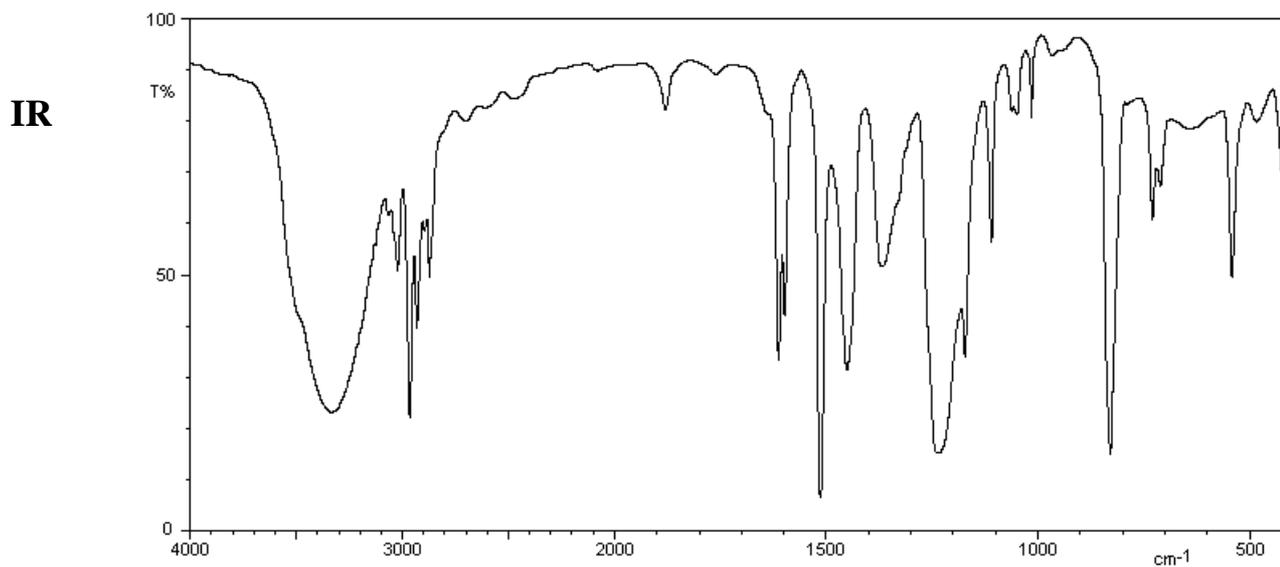


H-NMR

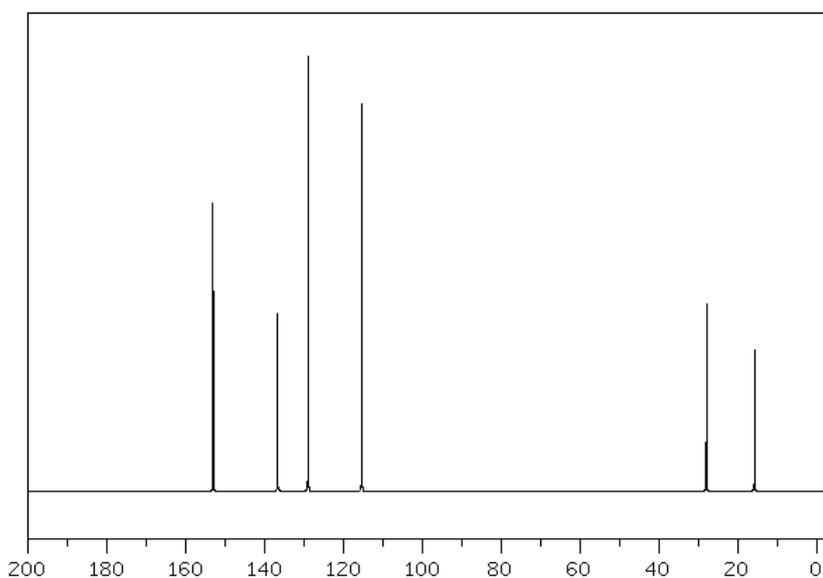


Problema 11

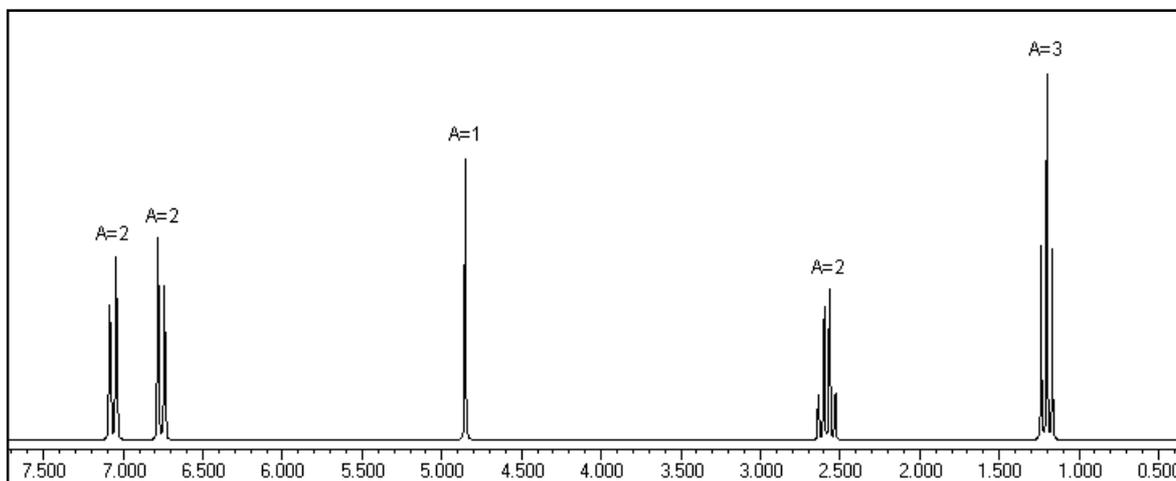
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_8H_{10}O$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

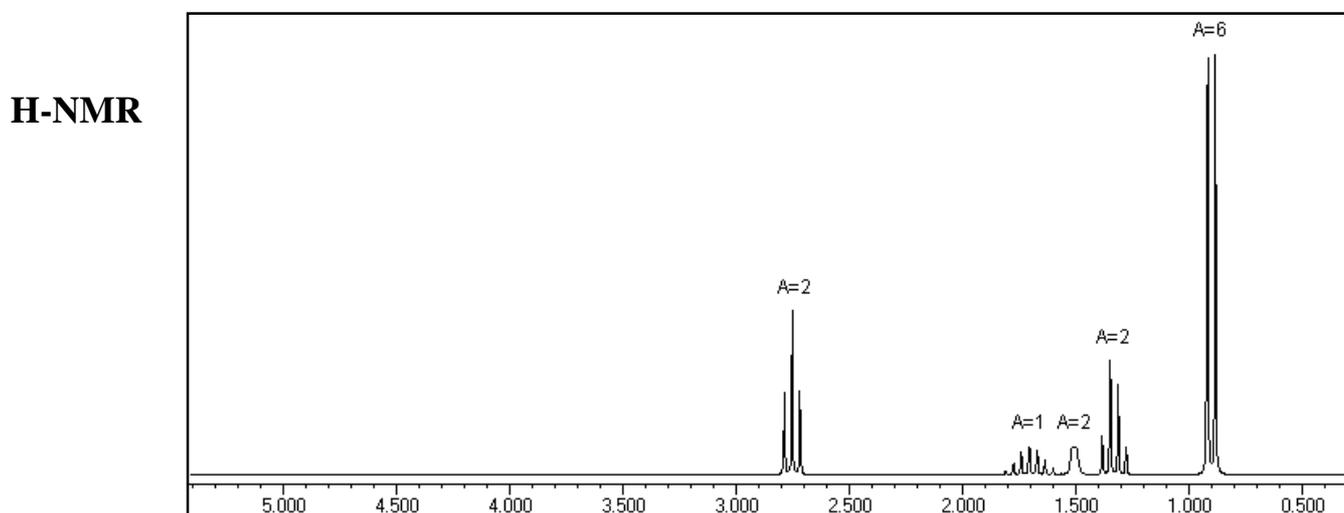
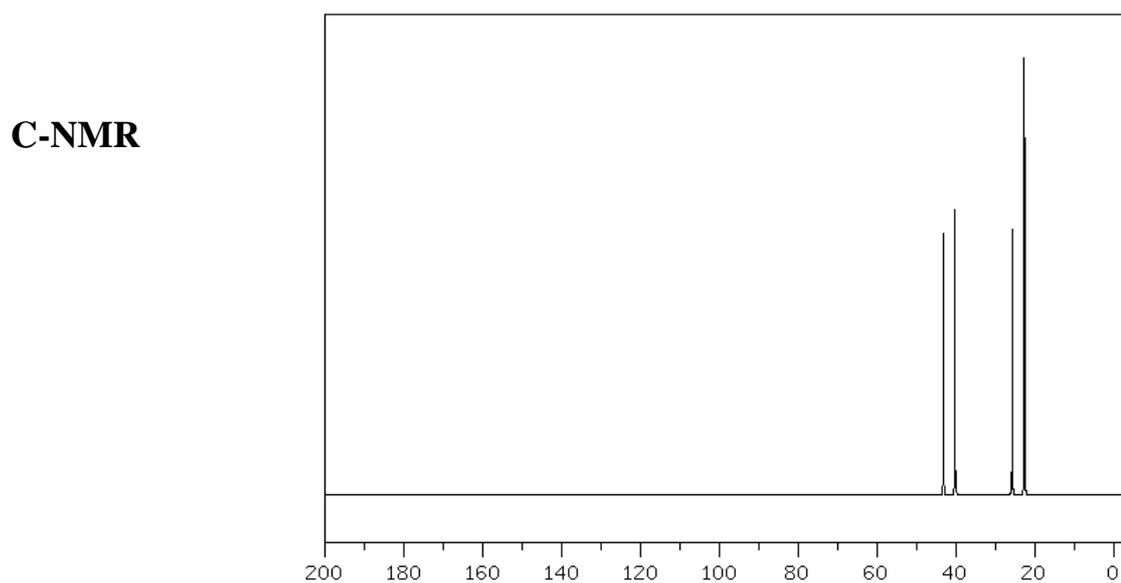
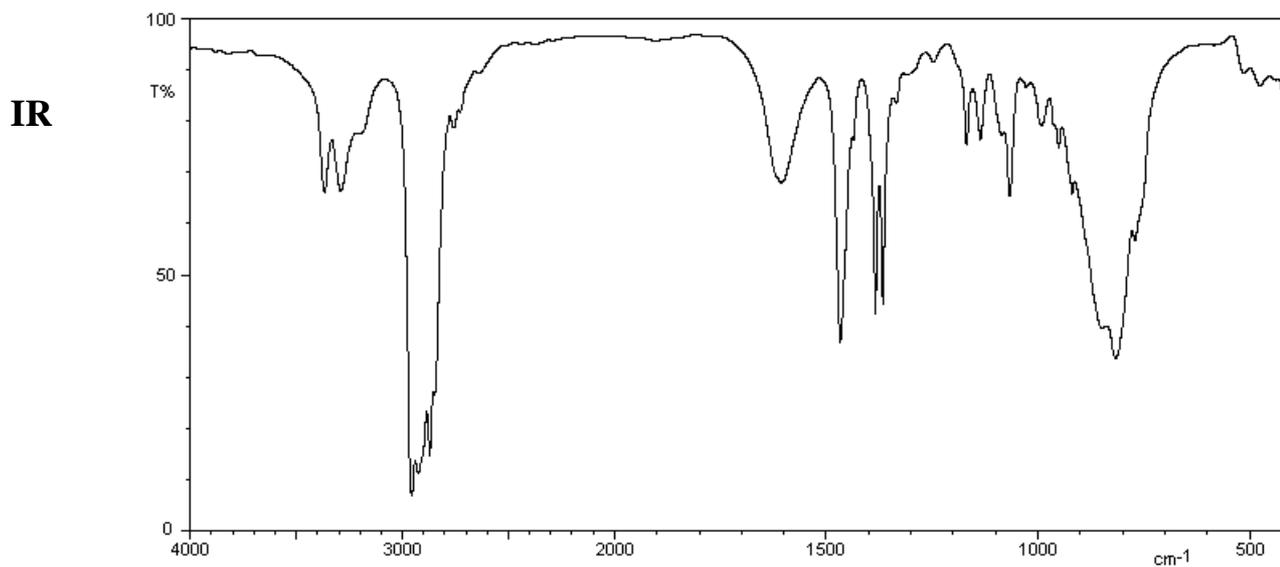


H-NMR



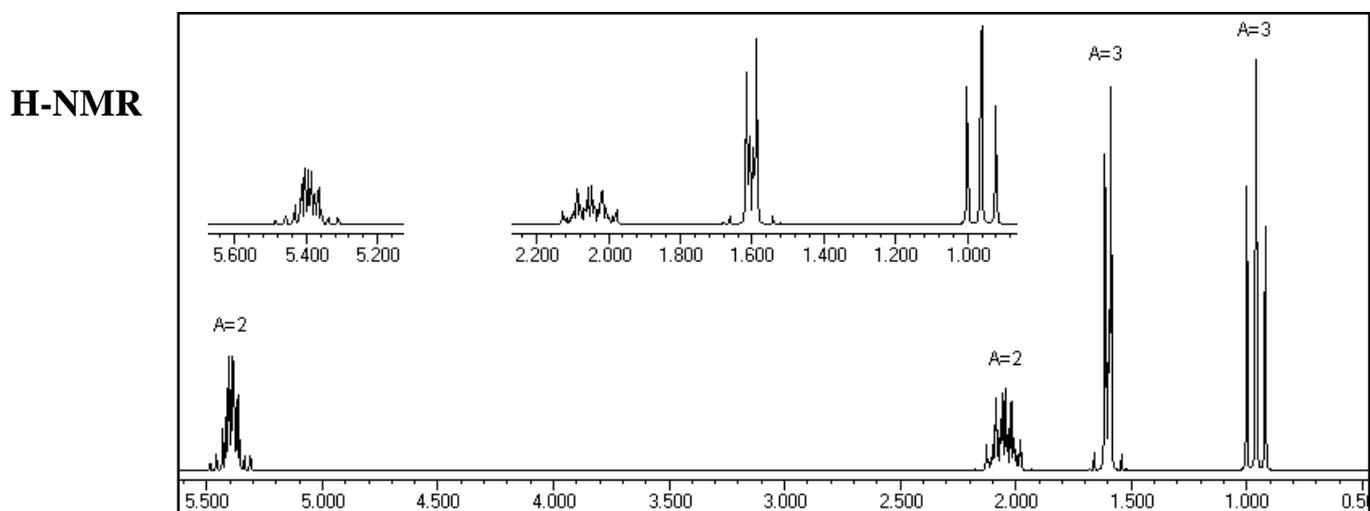
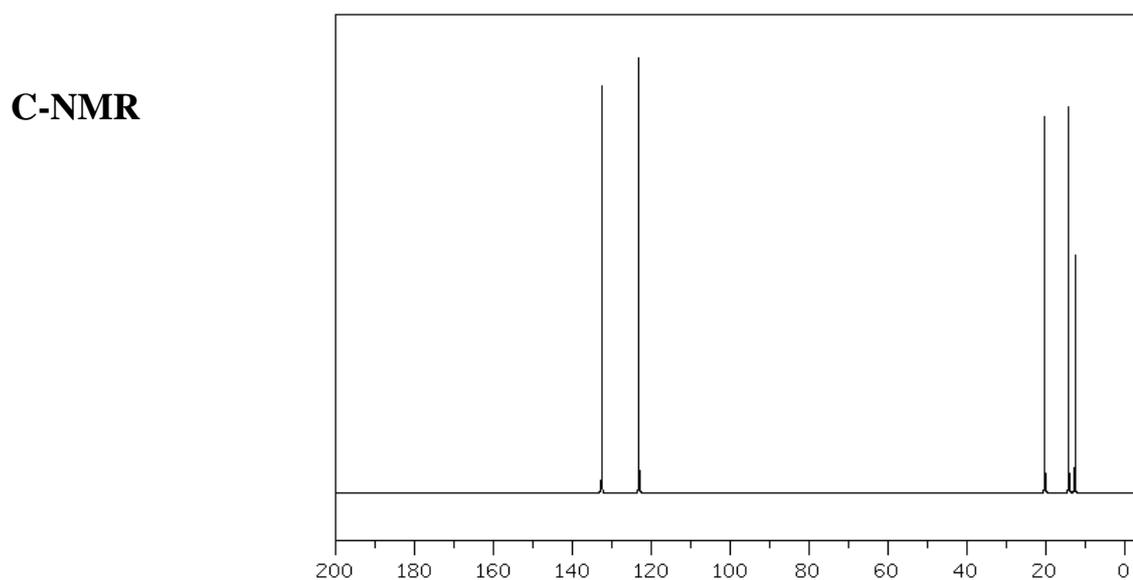
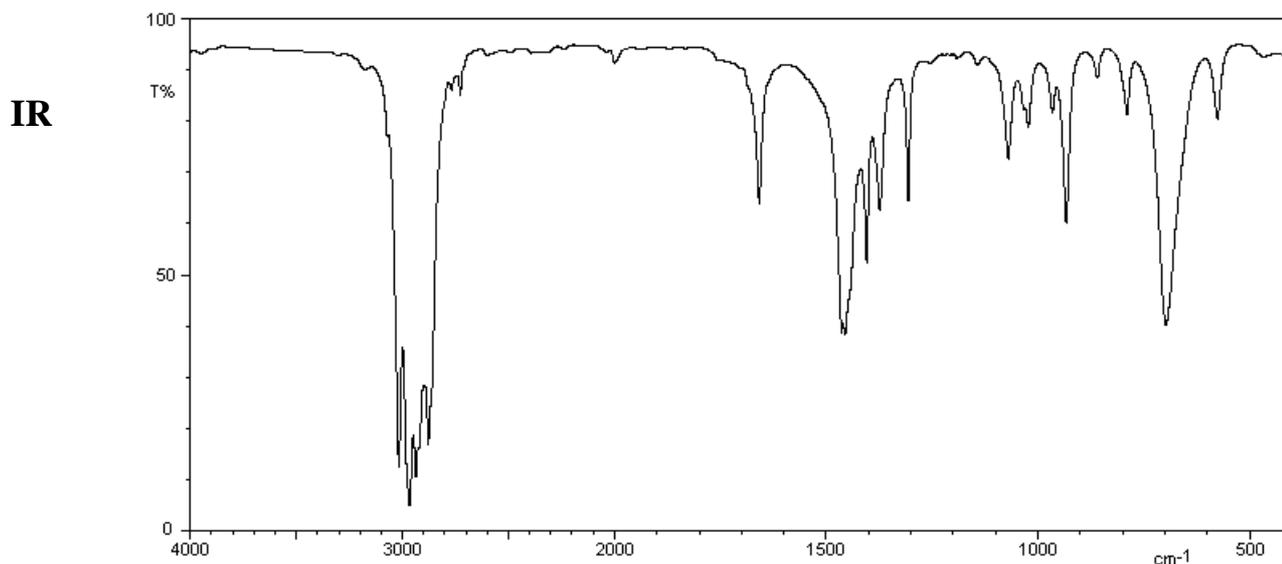
Problema 12

Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_5H_{13}N$ usando i seguenti spettri:



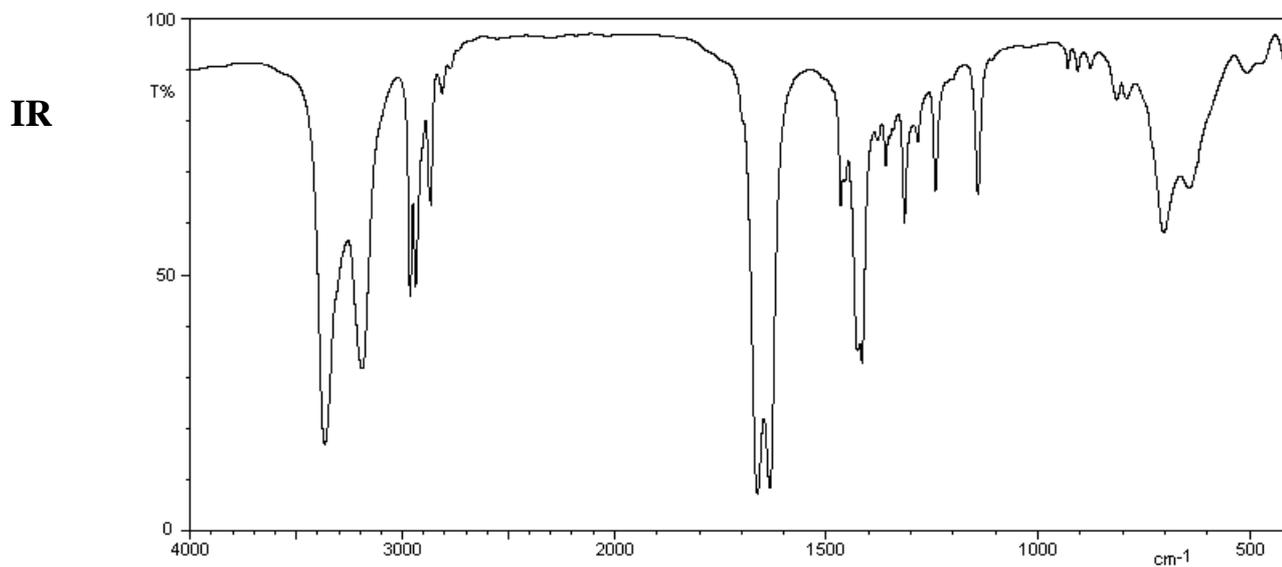
Problema 13

Determinare la struttura della molecola di formula bruta C_5H_{10} usando i seguenti spettri:

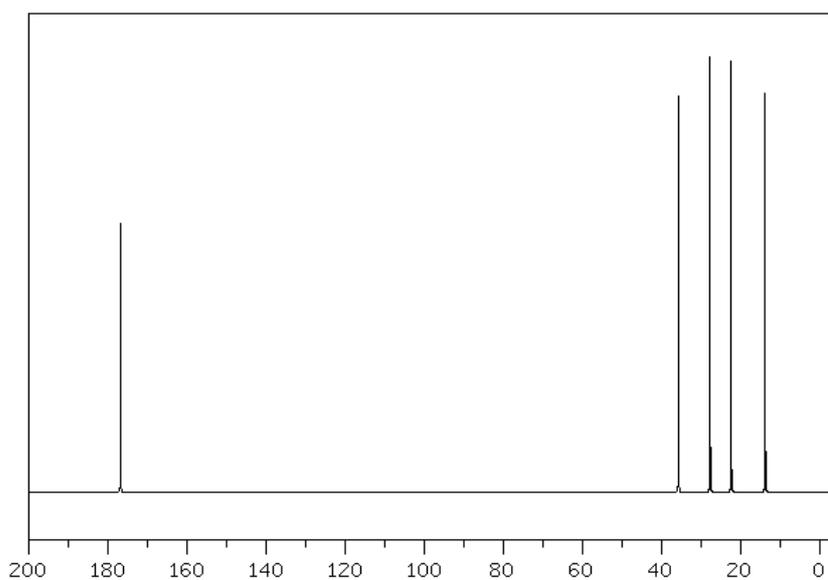


Problema 14

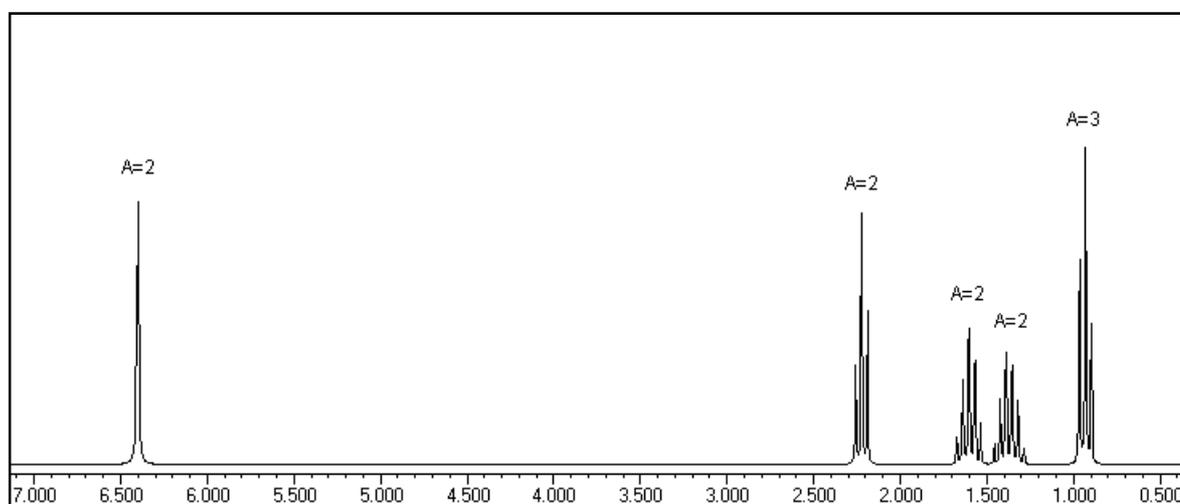
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_5H_{11}NO$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

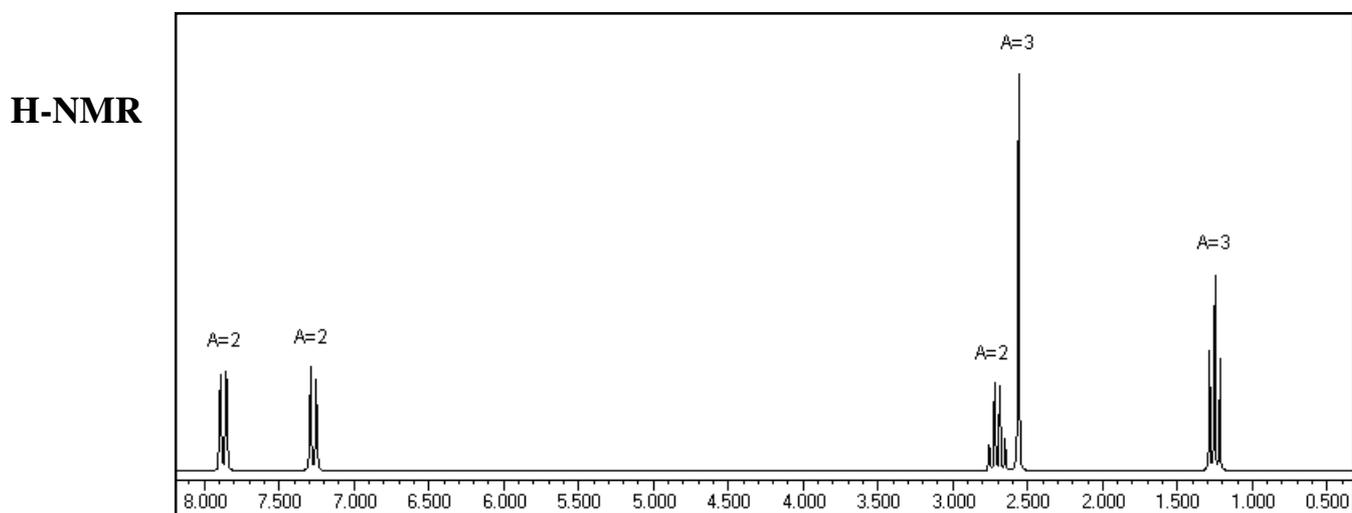
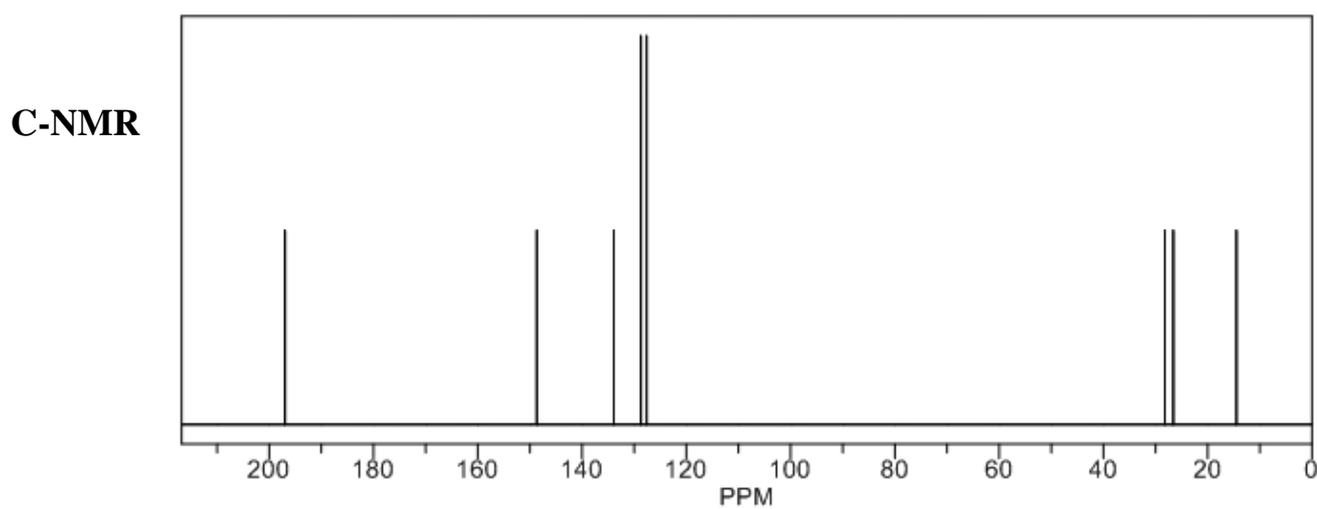
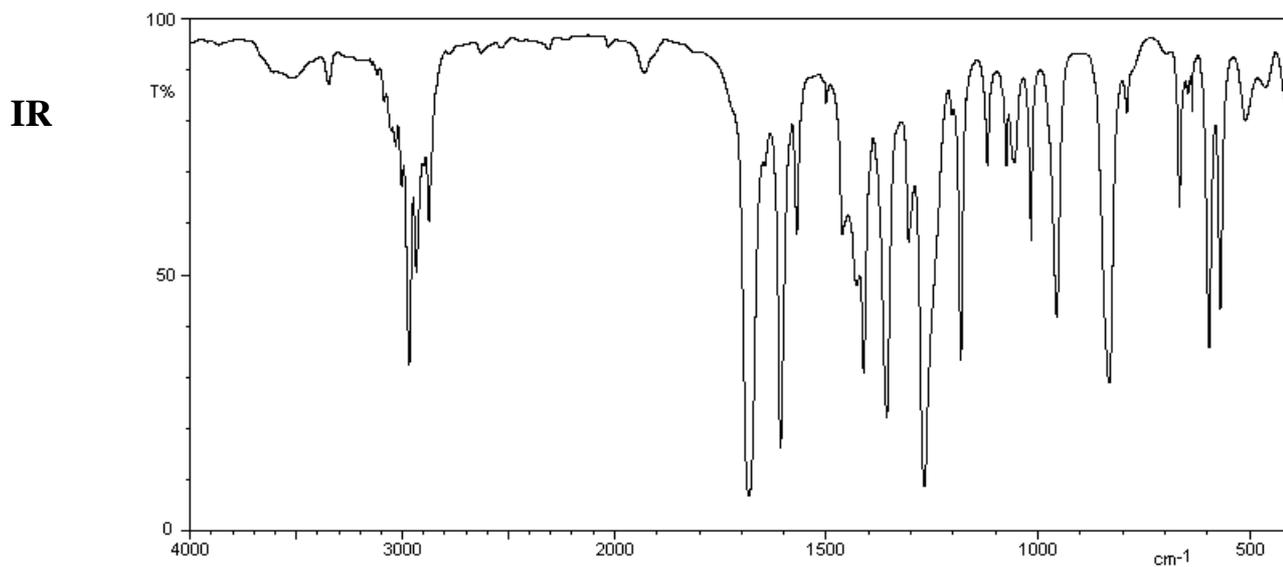


H-NMR



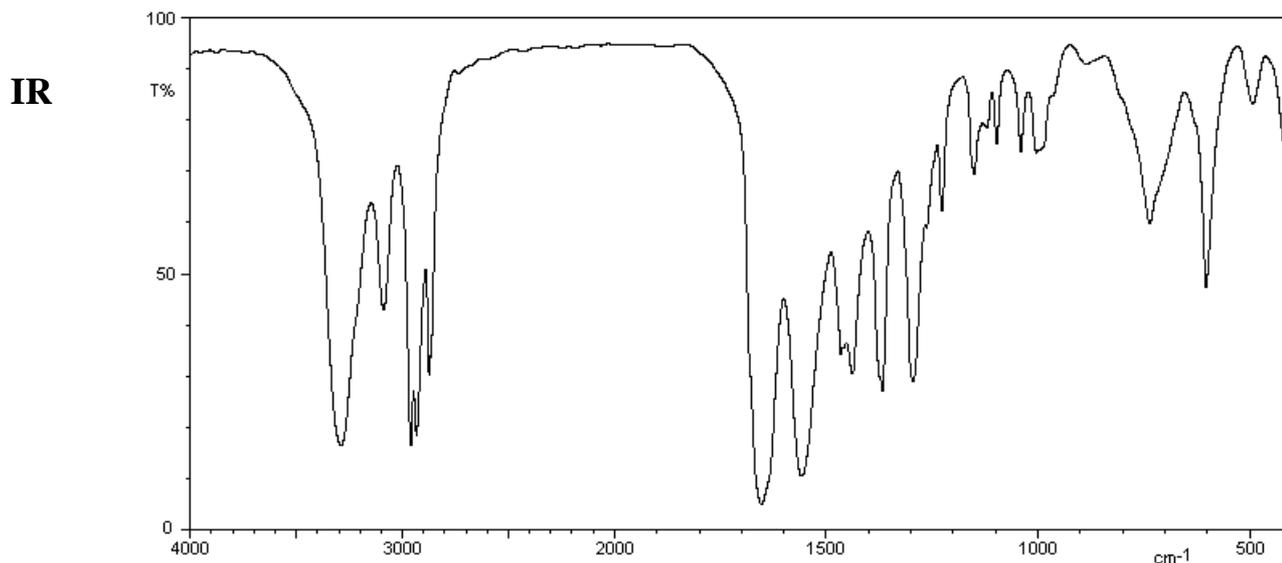
Problema 15

Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_{10}H_{12}O$ usando i seguenti spettri:

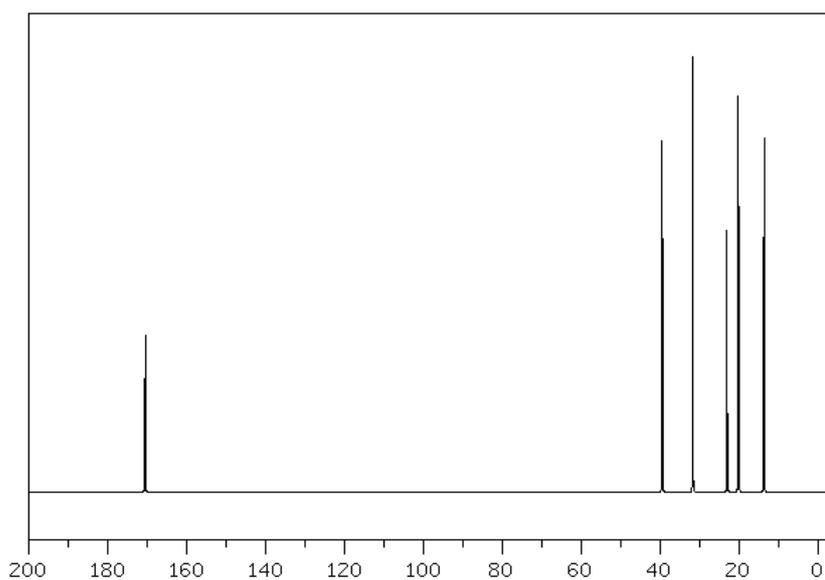


Problema 16

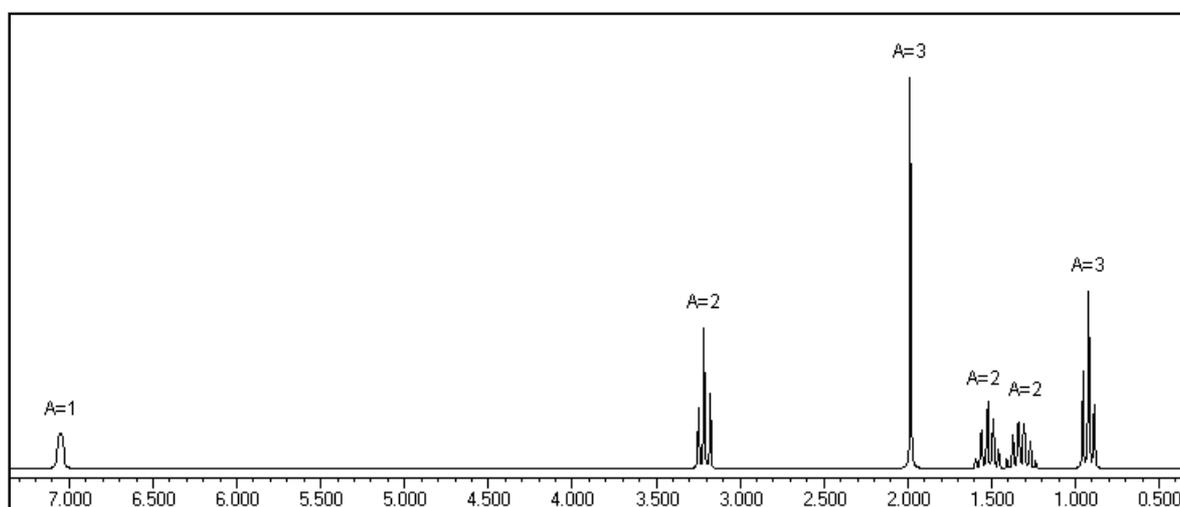
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_6H_{13}NO$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

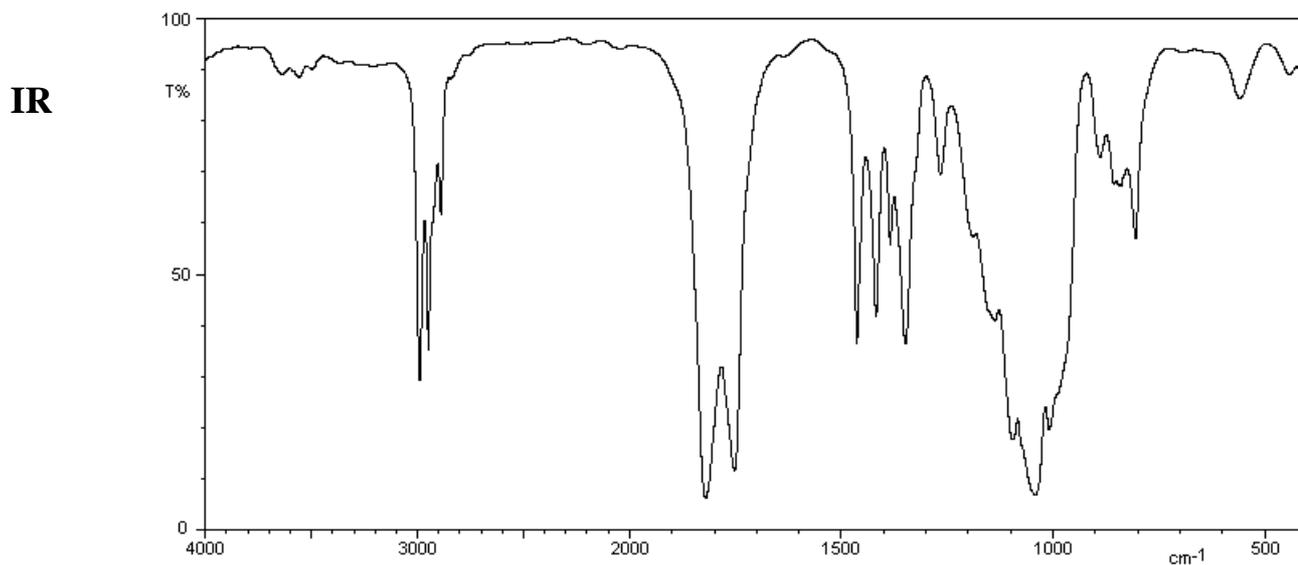


H-NMR

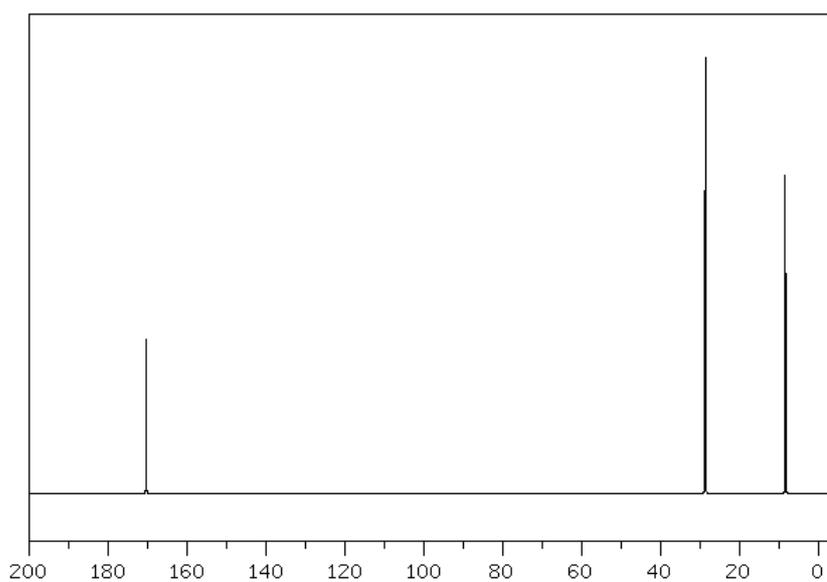


Problema 17

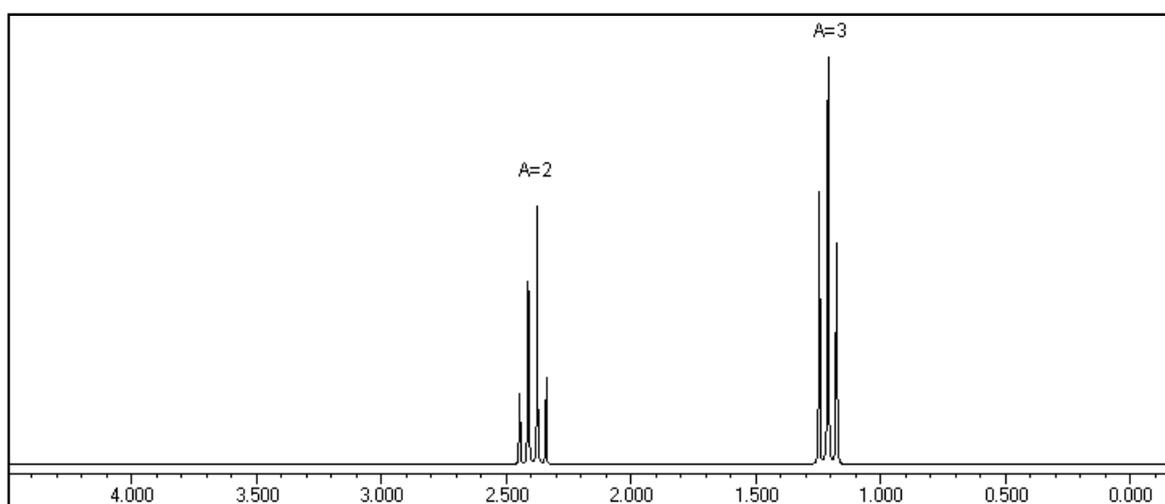
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_6H_{10}O_3$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

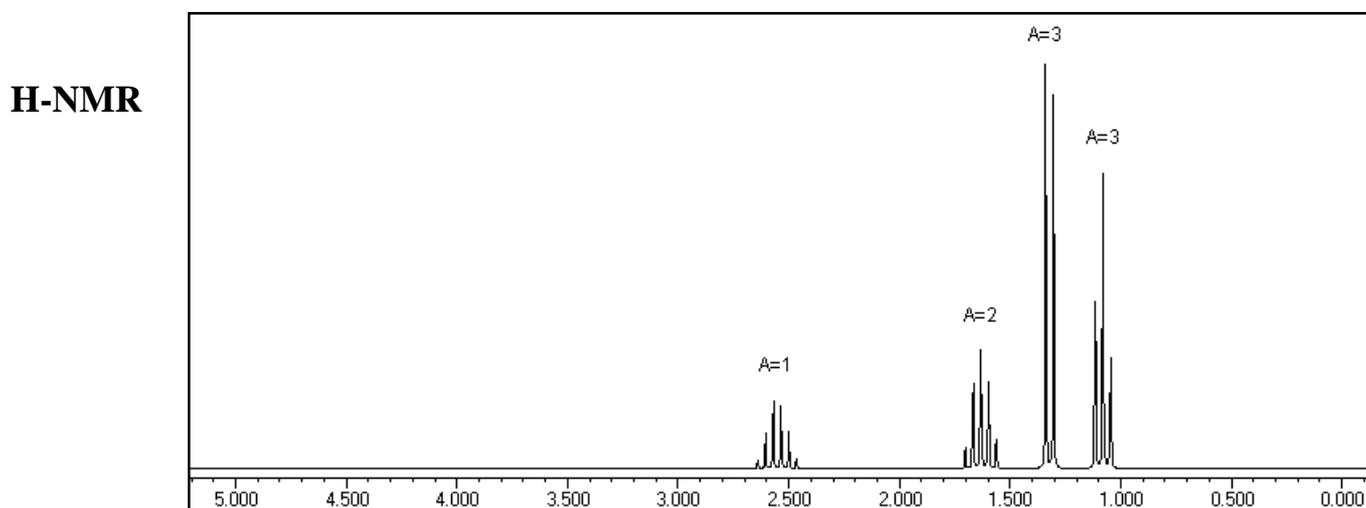
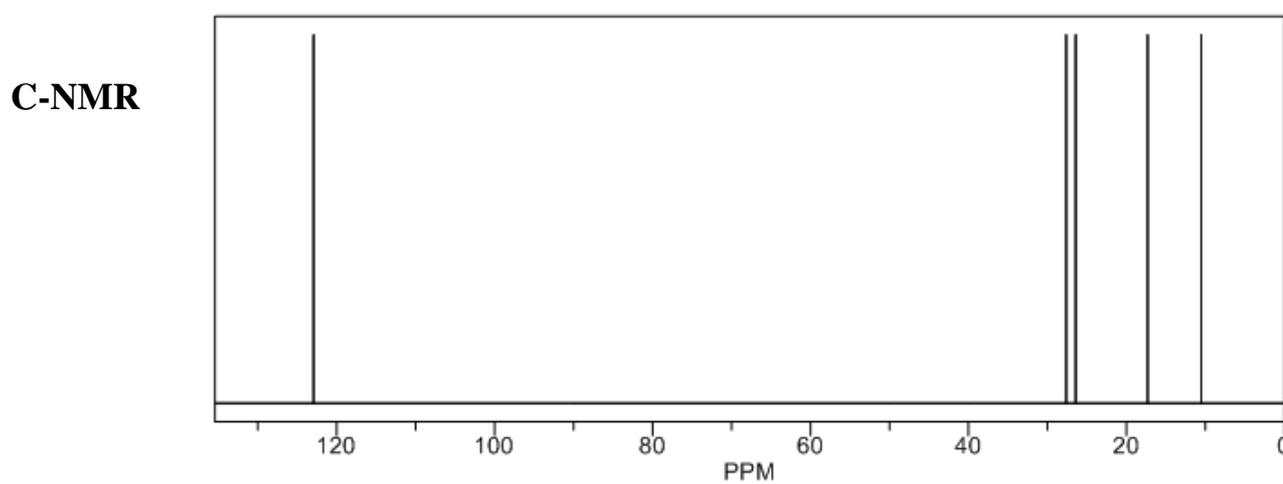
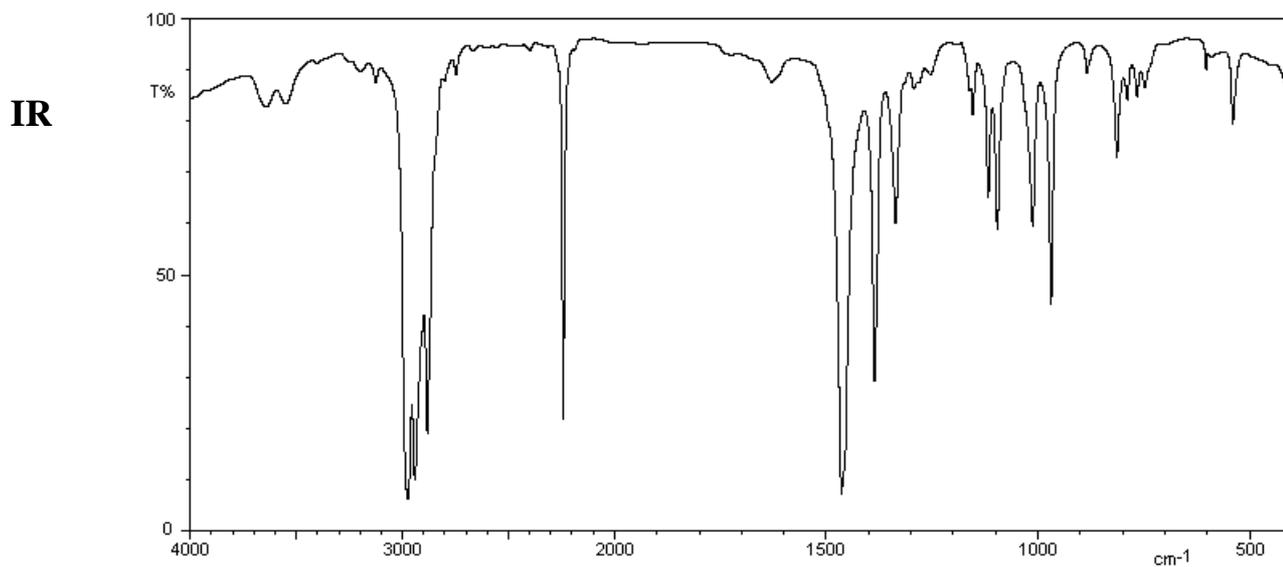


H-NMR



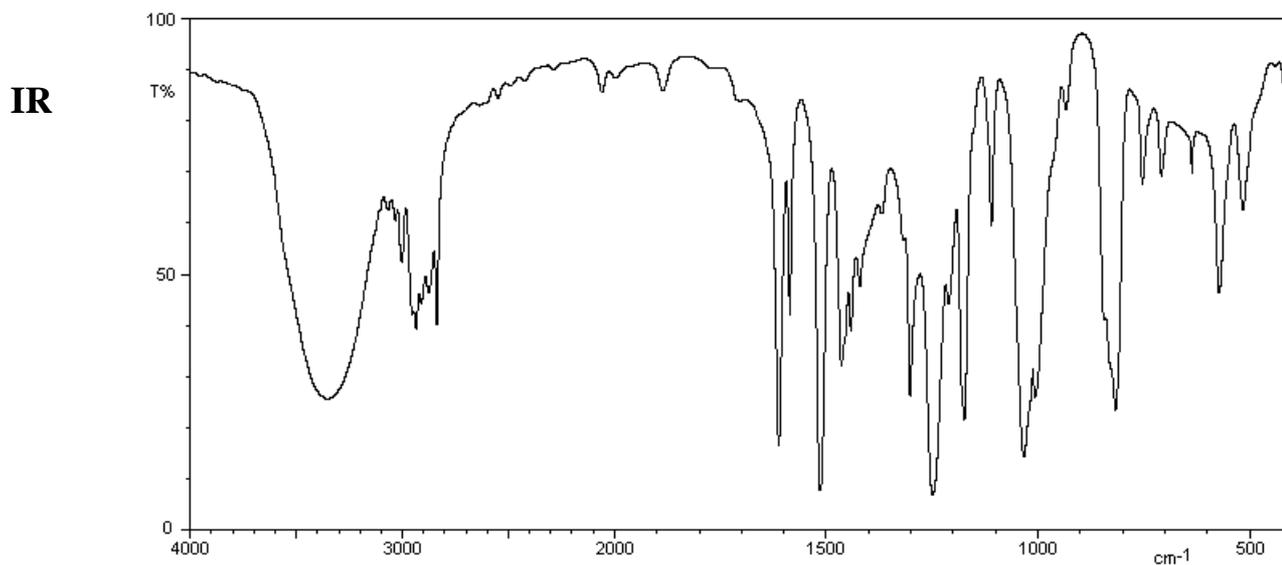
Problema 18

Determinare la struttura della molecola di formula bruta C_5H_9N usando i seguenti spettri:

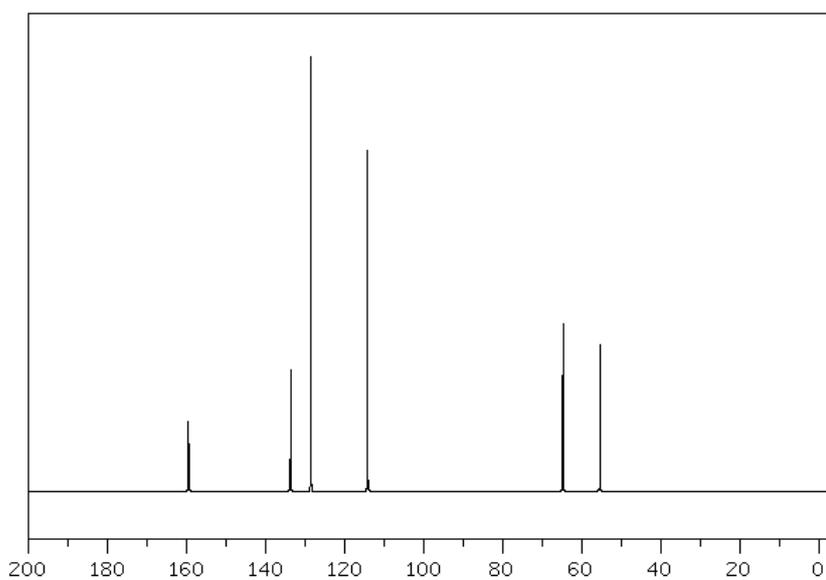


Problema 19

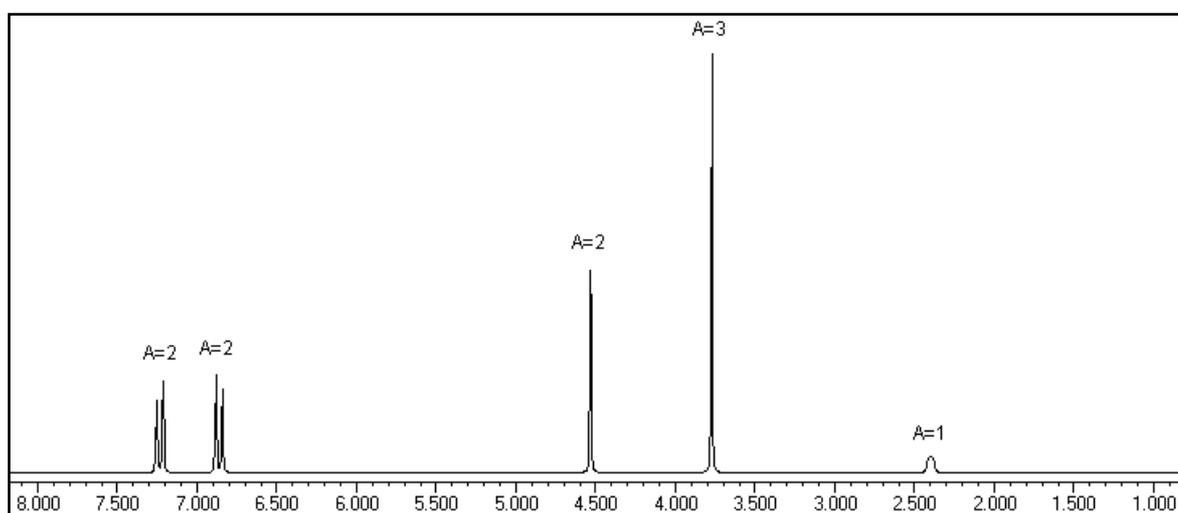
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_8H_{10}O_2$ usando i seguenti spettri:



C-NMR

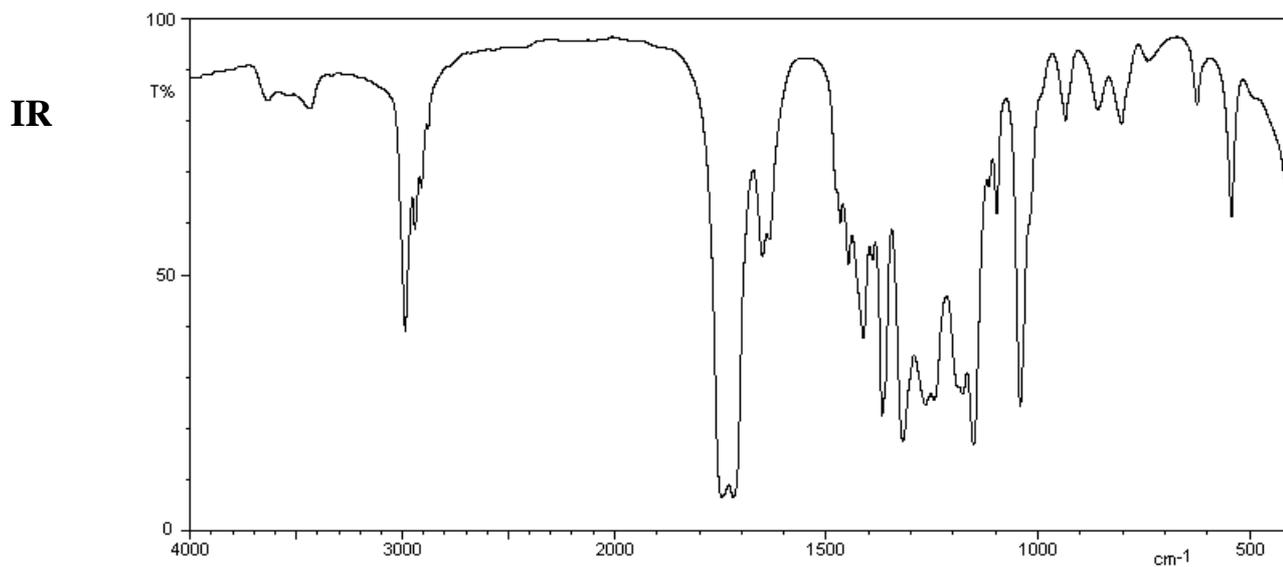


H-NMR

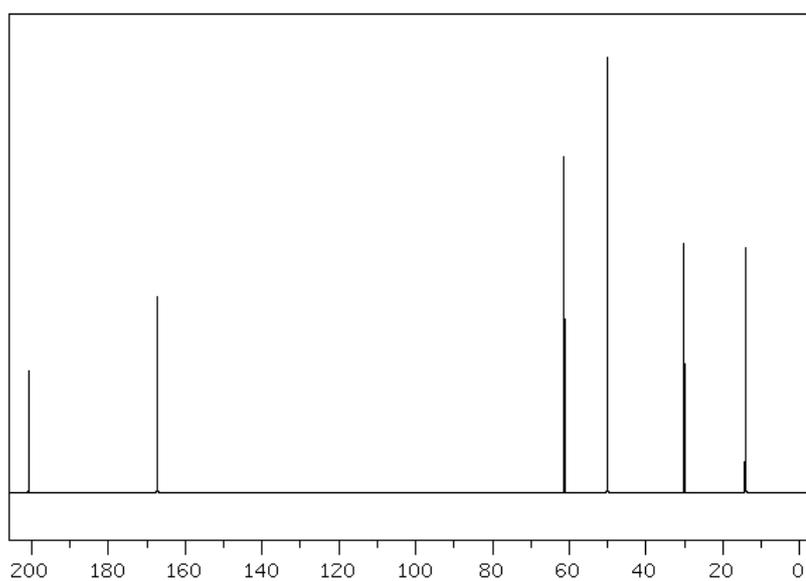


Problema 20

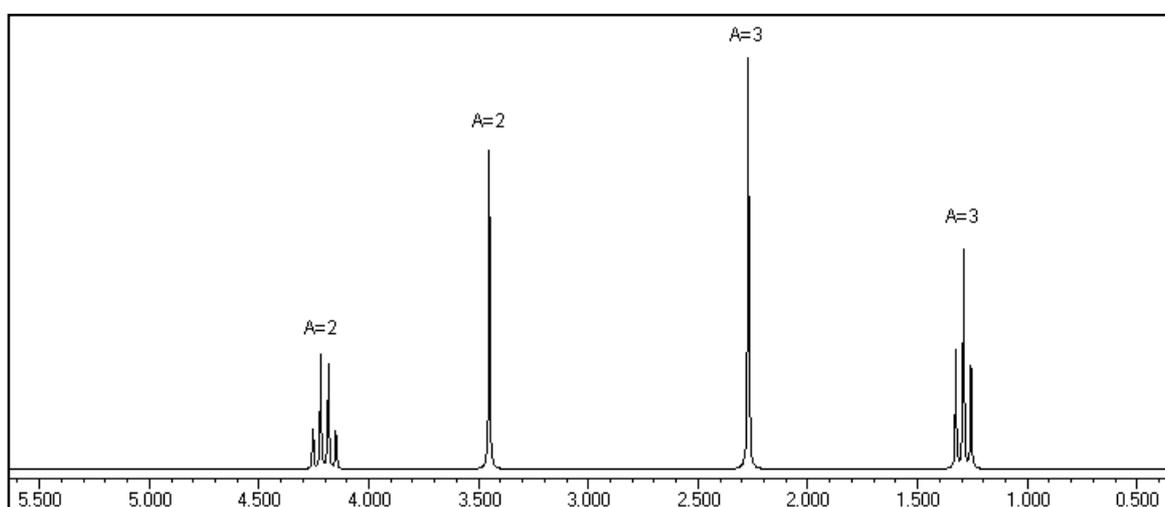
Determinare la struttura della molecola di formula bruta $C_6H_{10}O_3$ usando i seguenti spettri:



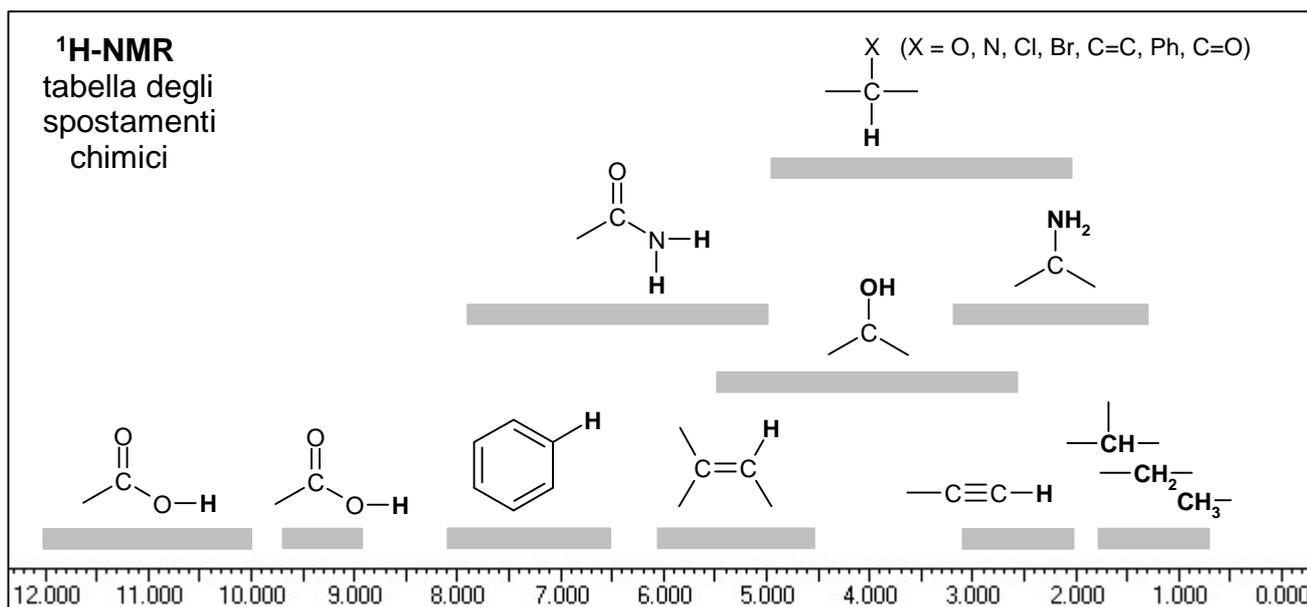
C-NMR



H-NMR



¹H-NMR - Tabella A



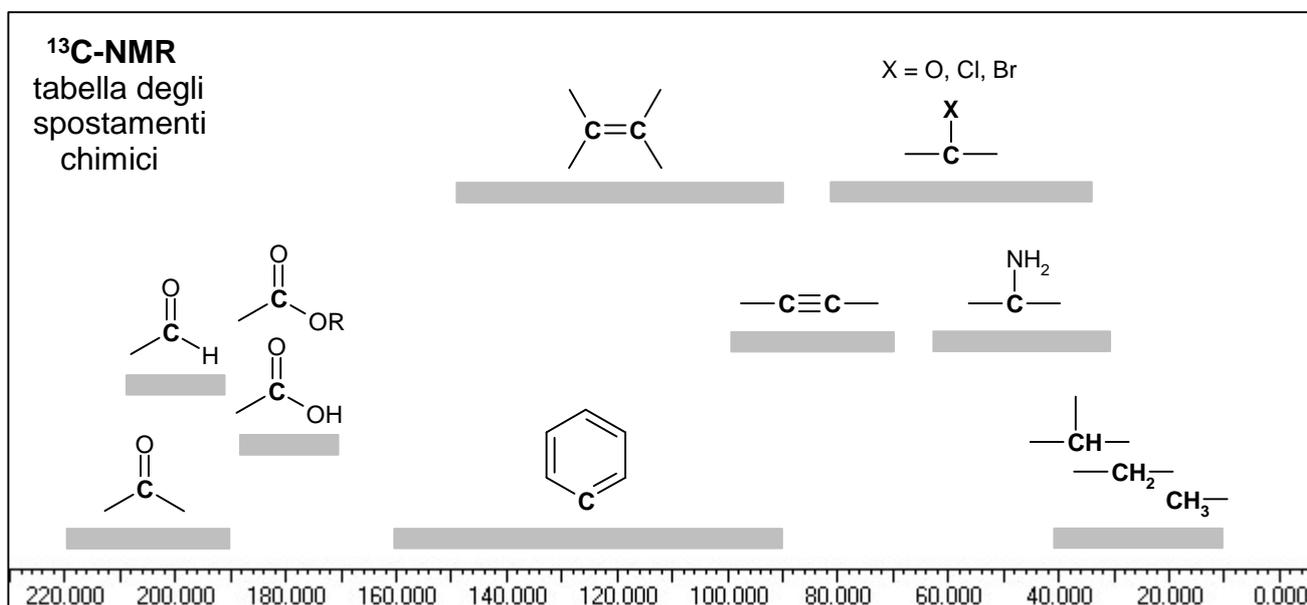
1. Gli idrogeni legati ad atomi elettronegativi sono deschermati, quindi risentono di un campo magnetico più forte e hanno spostamenti chimici più alti.

2. Gli elettroni π di alcheni, anelli aromatici e carbonili, portano ad un aumento del campo magnetico in corrispondenza degli idrogeni legati intorno. Quindi si osservano spostamenti chimici maggiori rispetto a quelli degli idrogeni legati ad atomi solo elettronegativi.

3. Dalla molteplicità m di un segnale si può risalire al numero di idrogeni vicini all'idrogeno in questione applicando la regola $H_{\text{vicini}} = m - 1$. Gli idrogeni alcolici, amminici e tiolici possono non accoppiarsi con gli H vicini.

4. Gli idrogeni legati direttamente a ossigeno, azoto e zolfo possono formare legami idrogeno e vengono scambiati tra le molecole. Questo scambio è influenzato dalla diluizione, dalla temperatura e dall'ingombro sterico. Questi idrogeni possono avere o non avere accoppiamento di spin con gli idrogeni vicini e il loro segnale NMR può essere allargato e variabile.

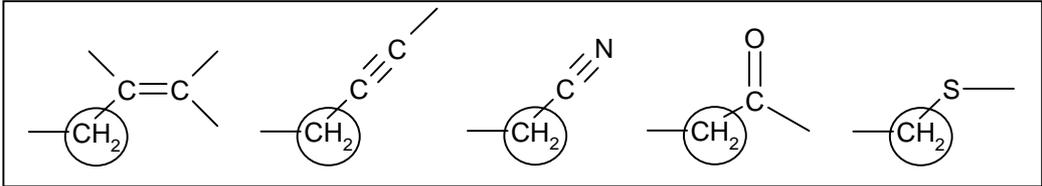
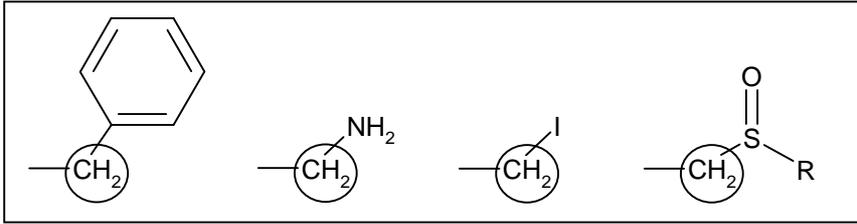
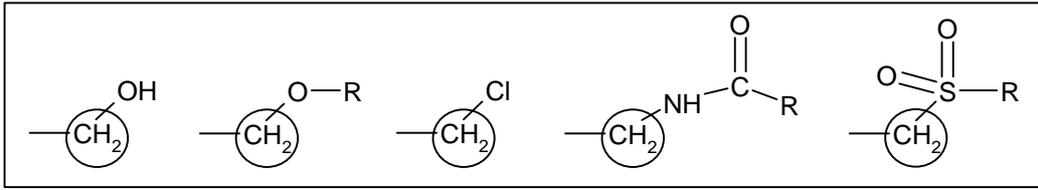
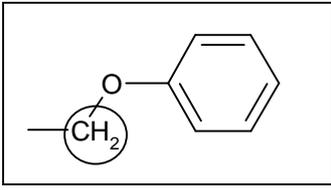
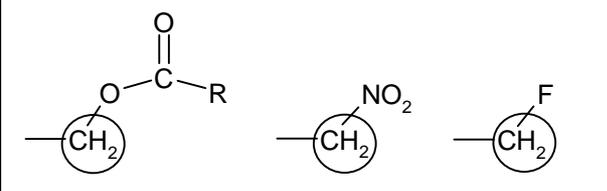
¹³C-NMR - Tabella A



¹H-NMR - Tabella B

Calcolo degli spostamenti chimici

Gli spostamenti della tabella B vanno **sommati** ai valori base di 0,9 per i CH₃, 1,3 per i CH₂, 1,7 per i CH.

spostamento di 1 ppm ←	
	<p>achene alchino nitrile carbonile aldeidi, chetoni acidi e derivati solfuro o tiolo</p>
1,5 ppm ←	
	<p>anello aromatico ammina ioduro solfossido</p>
2 ppm ←	
	<p>alcol etere cloruro o bromuro ammide solfone</p>
2,5 ppm ←	
	<p>etere aromatico</p>
3 ppm ←	
	<p>estere nitro fluoruro</p>

Gli assorbimenti previsti sulla base di questo semplice schema non possono essere molto precisi, ma sono comunque una **buona stima del valore sperimentale**. Si ricordi inoltre che gli assorbimenti **sono additivi**. Il seguente esempio con l'estere acetacetico mostra come si applica il metodo.

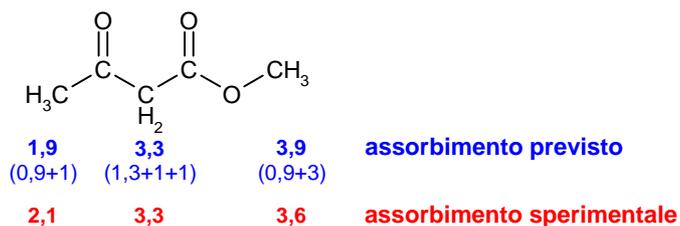


Tabella degli assorbimenti IR

