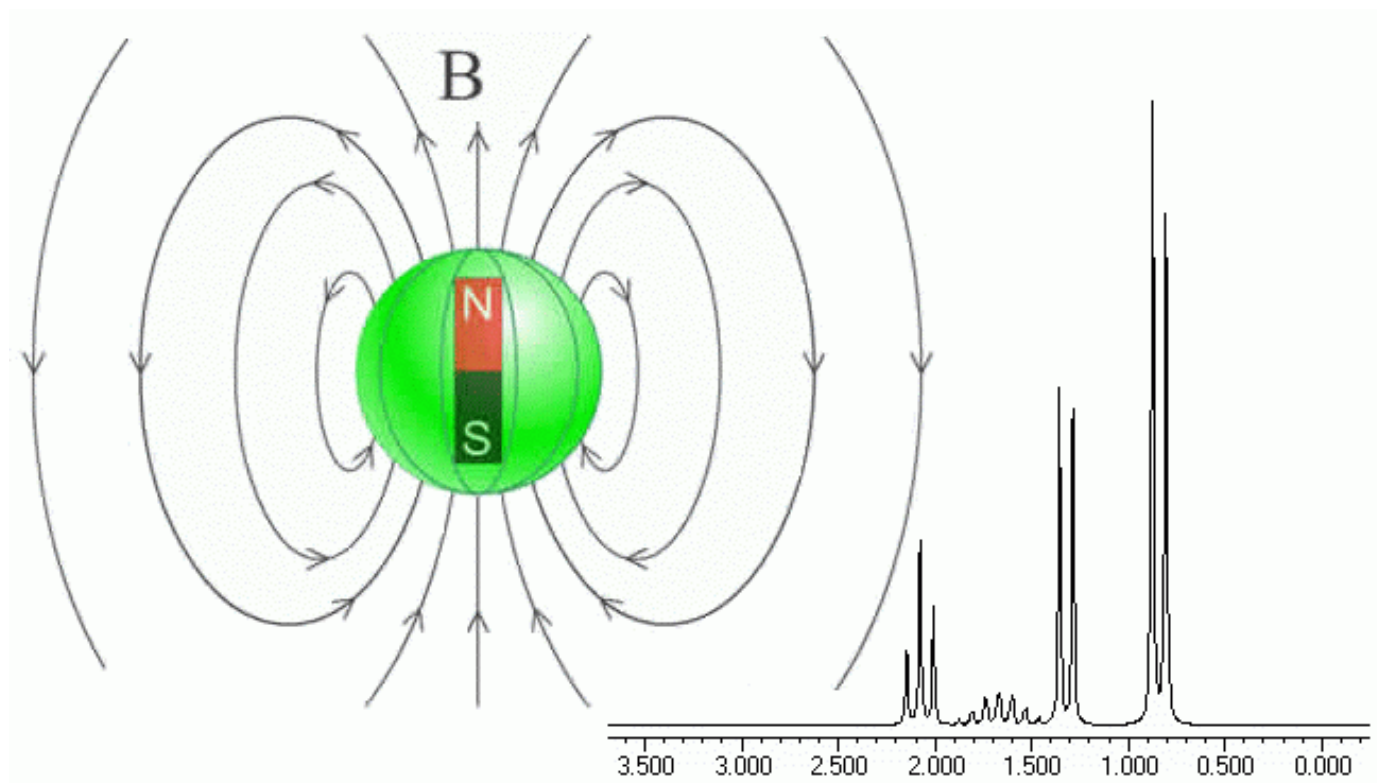


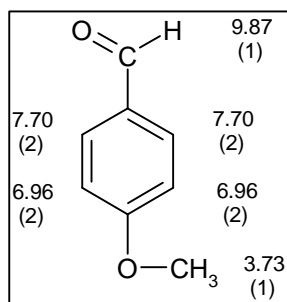
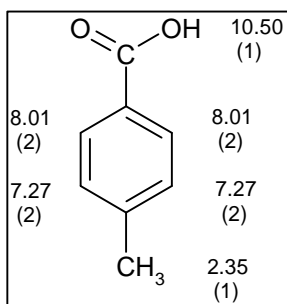
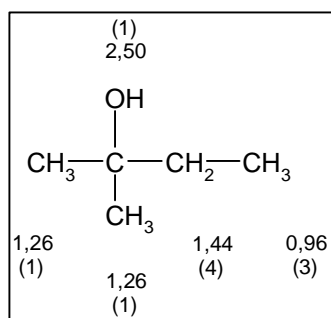
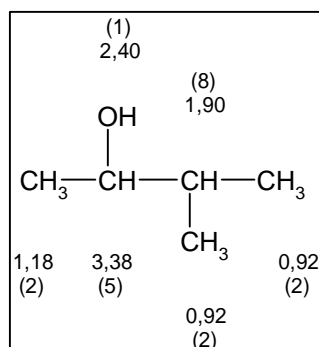
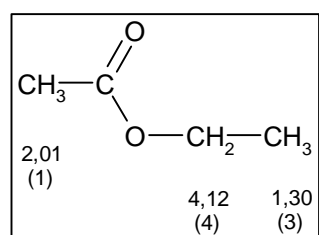
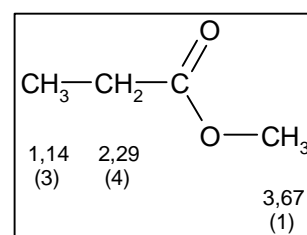
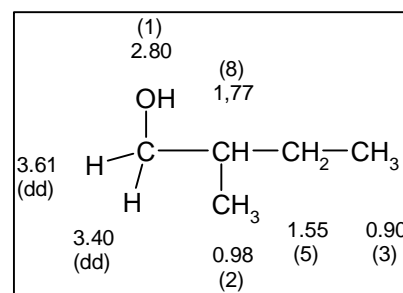
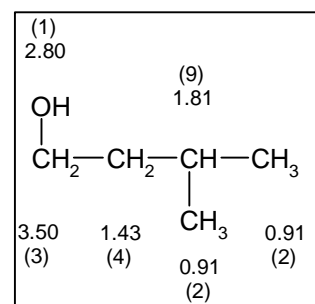
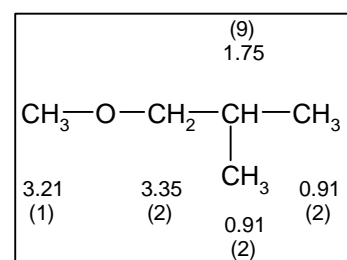
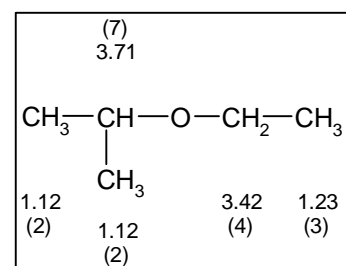
Mauro Tonellato

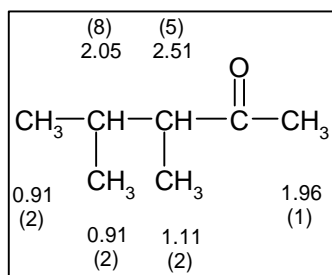
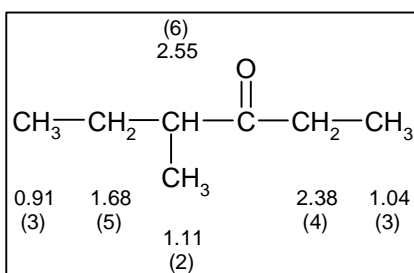
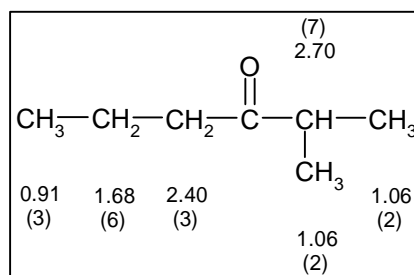
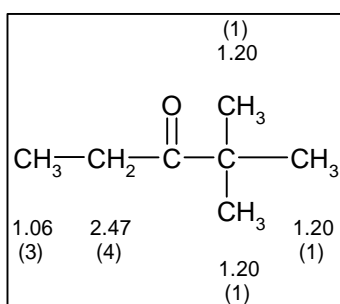
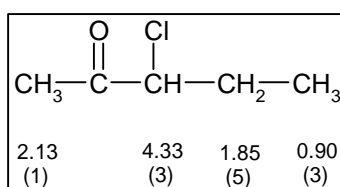
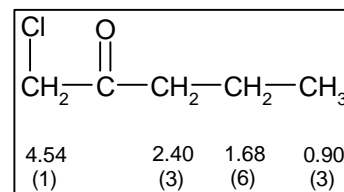
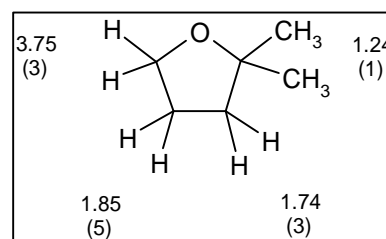
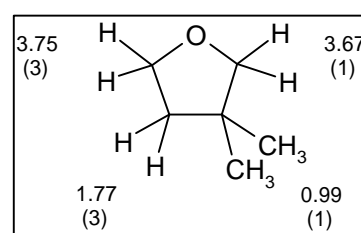
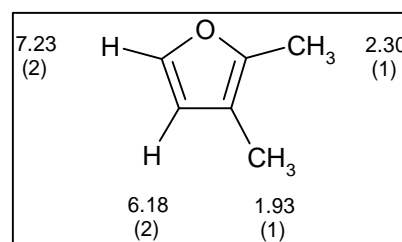
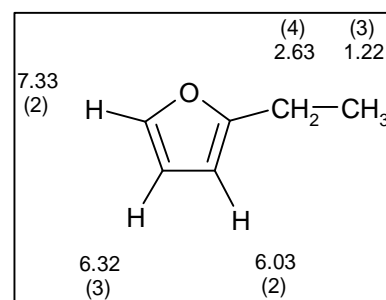
SOLUZIONI DEI
PROBLEMI DI

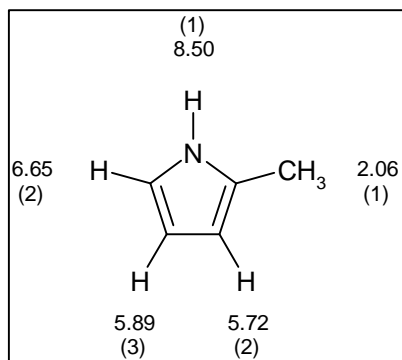
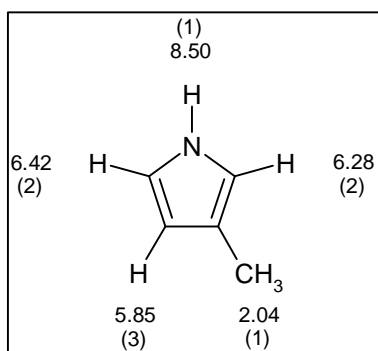
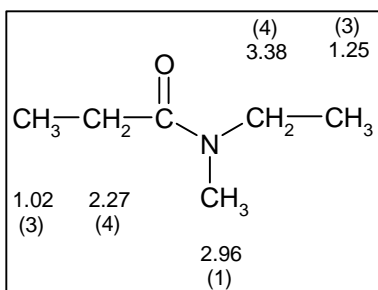
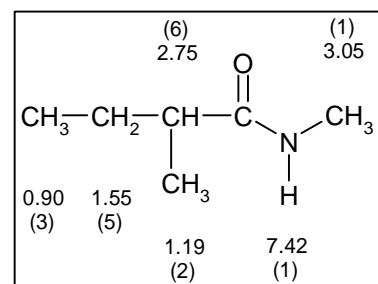
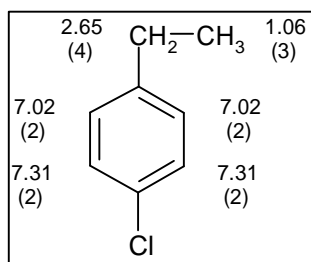
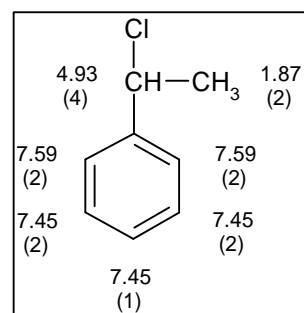
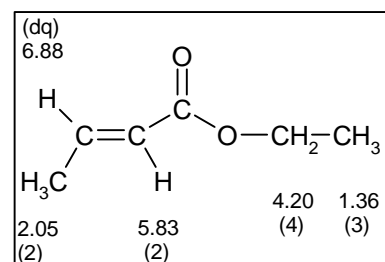
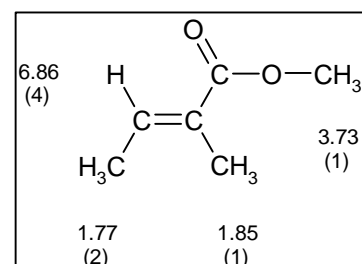
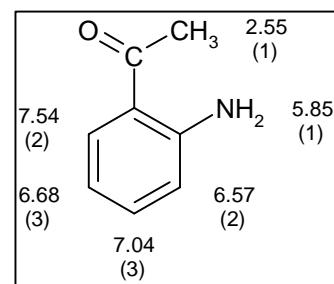
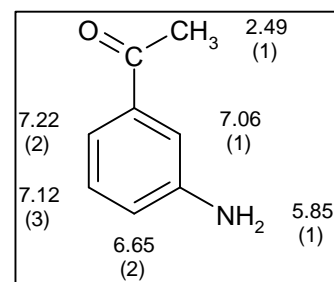
SPETTROSCOPIA ^1H -NMR

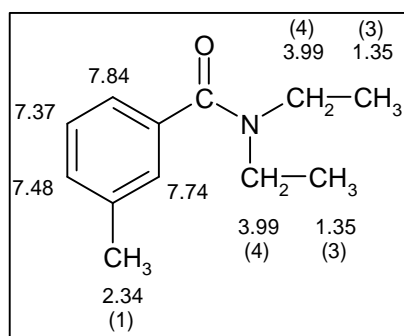
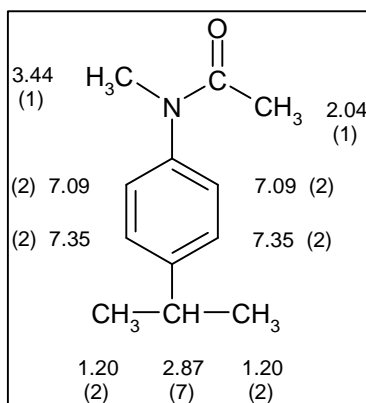
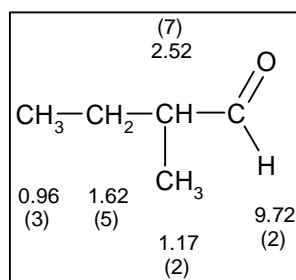
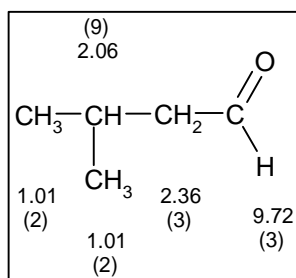
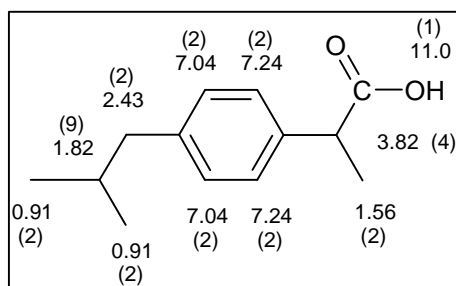
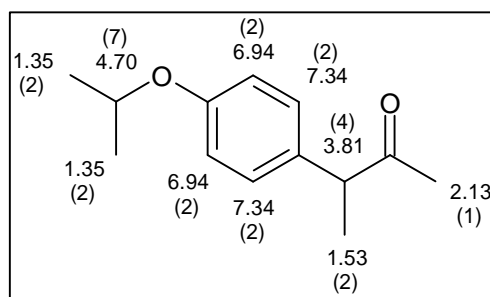


www.PianetaChimica.it

P. 1**C₈H₈O₂****4-metossibenzaldeide****P. 2****C₈H₈O₂****acido 4-metilbenzoico****P. 3****C₅H₁₂O****2-metil-2-butanolo****P. 4****C₅H₁₂O****3-metil-2-butanolo****P. 5****C₄H₈O₂****etil acetato****P. 6****C₄H₈O₂****metil propanoato****P. 7****C₅H₁₂O****2-metil-1-butanolo****P. 8****C₅H₁₂O****3-metil-1-butanolo****P. 9****C₅H₁₂O****isobutil metil etere****P. 10****C₅H₁₂O****isopropil etil etere**

P. 11**C₇H₁₄O****3,4-dimetil-
2-pentanone****P. 12****C₇H₁₄O****4-metil-
3-esanone****P. 13****C₇H₁₄O****2-metil-
3-esanone****P. 14****C₇H₁₄O****2,2-dimetil-
3-pentanone****P. 15****C₅H₉ClO****3-cloro-
2-pentanone****P. 16****C₅H₉ClO****1-cloro-
2-pentanone****P. 17****C₆H₁₂O****2,2-dimetil
tetraidrofurano****P. 18****C₆H₁₂O****3,3-dimetil
tetraidrofurano****P. 19****C₆H₈O****2,3-dimetil
furano****P. 20****C₆H₈O****3-etilfurano**

P. 21**C₅H₇N****2-metilpirrolo****P. 22****C₅H₇N****3-metilpirrolo****P. 23****C₆H₁₃NO****N-etil-N-metilpropanamide****P. 24****C₆H₁₃NO****N,2-dimetilbutanamide****P. 25****C₈H₉Cl****1-cloro-4-etilbenzene****P. 26****C₈H₉Cl****(1-cloroetil)benzene****P. 27****C₆H₁₀O₂****etil 2-butenato****P. 28****C₆H₁₀O₂****metil 2-metil-2-butenato****P. 29****C₈H₉NO****2-amminoacetofenone****P. 30****C₈H₉NO****3-amminoacetofenone**

P. 31**C₁₂H₁₇NO****N,N-diethyl-3-metilbenzamide
(autan)****P. 32****C₁₂H₁₇NO****N-(4-isopropilfenil)-
N-metilacetammide****P. 33****C₅H₁₀O****2-metilbutanale****P. 34****C₅H₁₀O****3-metilbutanale****P. 35****C₁₃H₁₈O₂****acido 2-(4-isobutilfenil)-propanoico
(ibuprofen)****P. 36****C₁₃H₁₈O₂****3-(4-isopropilossifenil)-butan-2-one**

PROBLEMA NMR n. 1 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_8H_8O_2$ deduciamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 8 \cdot 2 + 2 = 18$] quindi ci sono **5 insaturazioni**.

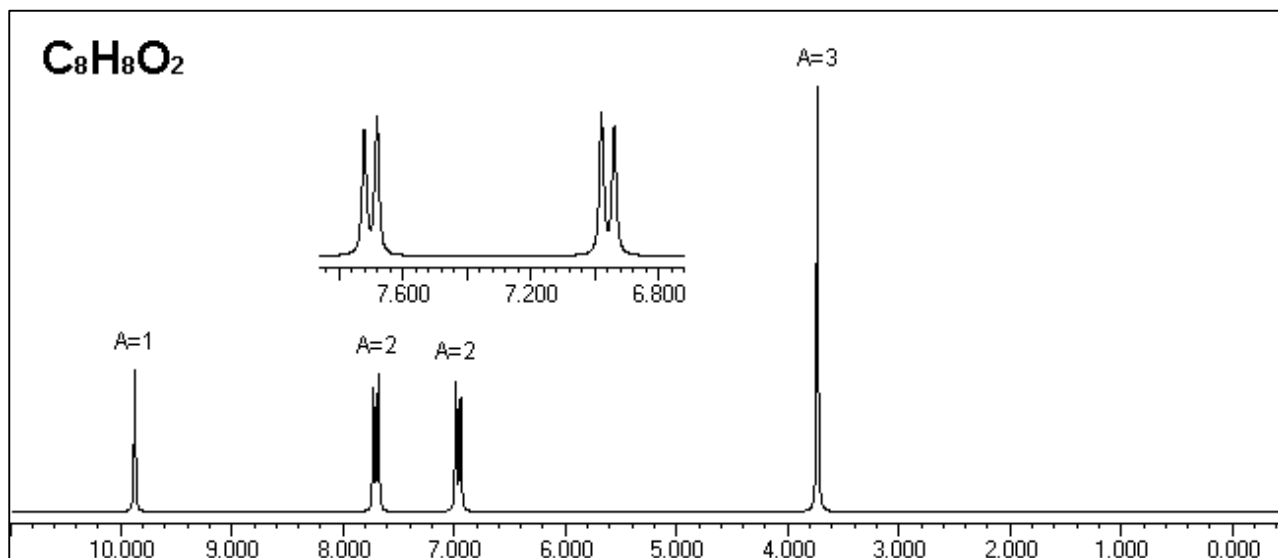
Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Osservando lo spettro NMR qui sotto, dal picco a 9.87 ppm deduciamo che è un'**aldeide**.

Dai picchi tra 7 e 8 ppm sappiamo che contiene un **anello aromatico**.

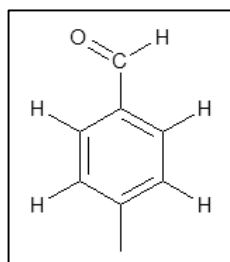
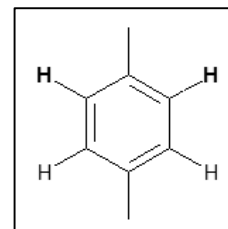
Possiamo concludere di avere individuato le **cinque** insaturazioni: **una** è dovuta al carbonile e **quattro** sono prodotte dall'anello aromatico (3 doppi legami + 1 anello = 4 insaturazioni).

La molecola deve essere quindi **un'aldeide aromatica**.



L'esame più dettagliato dei segnali a **6.96** e **7.70 ppm** ci fa capire che si tratta di un **anello benzenico para disostituito**. Infatti i due picchi sono dovuti a due coppie di idrogeni identici e sono **doppietti** cioè ciascuno ha un idrogeno vicino.

Rispetto agli idrogeni del benzene che assorbono a 7.27 ppm, **i due idrogeni a 7.70 ppm** sono **deschermati** e quindi sono adiacenti ad un sostituito elettroneattrattore (l'aldeide), mentre **i due idrogeni a 6.96 ppm** sono **schermati** e quindi sono vicini ad un sostituito elettrondonatore.



Il carbonile dell'aldeide, il cui idrogeno produce il segnale a **9.87 ppm**, è elettroneattrattore e si trova legato all'anello dalla parte degli idrogeni che danno il segnale a 7.70 ppm.

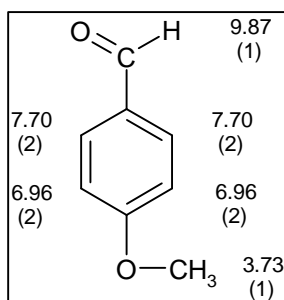
Resta ancora da assegnare un ossigeno e un CH_3 .

Il CH_3 **singoletto** a **3.73 ppm**, è legato all'ossigeno di un etere aromatico [$0.9 (CH_3) + 2.5 (O-Ph) = 3.4$] e si trova nella posizione para dell'anello.

Il gruppo CH_3O è quindi il sostituito elettrondonatore che provoca, per risonanza, la schermatura degli idrogeni dell'anello a 6.96 ppm.

La molecola cercata è quindi **4-metossibenzaldeide**.

4-metossibenzaldeide



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

PROBLEMA NMR n. 2 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_8H_8O_2$ deduciamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 8 \cdot 2 + 2 = 18$] quindi ci sono **5 insaturazioni**.

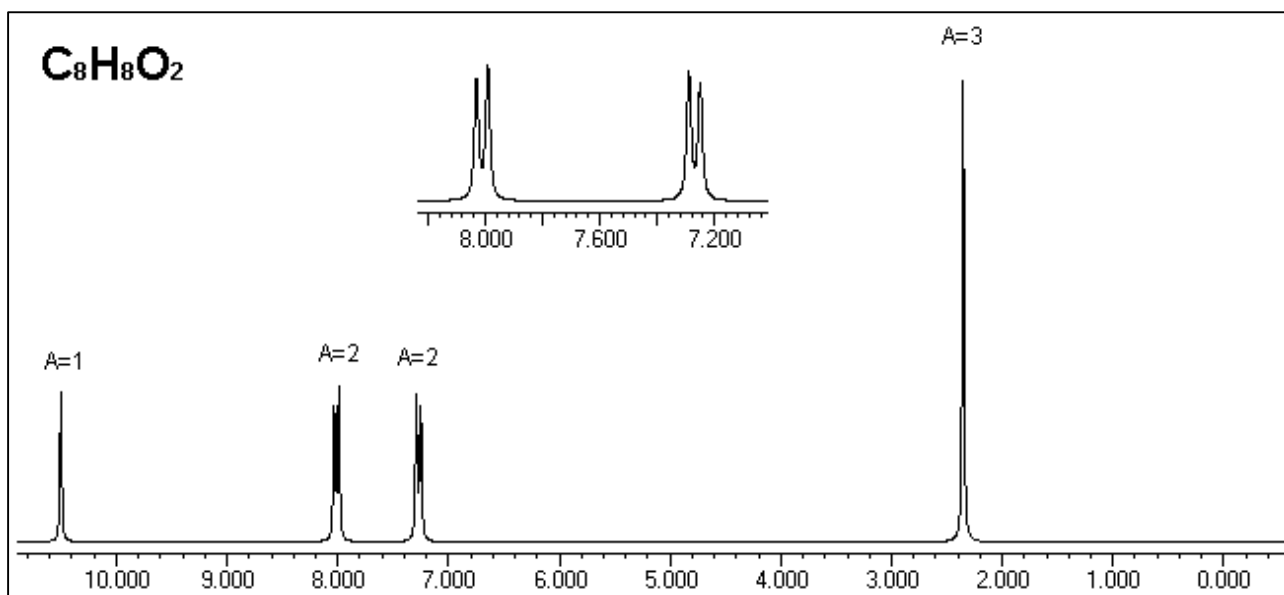
Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Osservando lo spettro NMR qui sotto, dal picco a **10.50 ppm** deduciamo che è un **acido carbossilico**.

Dai picchi tra **7 e 8 ppm** sappiamo che contiene un **anello aromatico**.

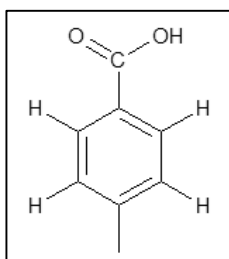
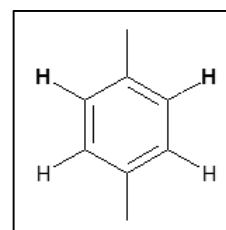
Possiamo concludere di avere individuato le **cinque** insaturazioni: **una** è dovuta al carbonile e **quattro** sono prodotte dall'anello aromatico (3 doppi legami + 1 anello = 4 insaturazioni).

La molecola deve essere quindi un **acido carbossilico aromatico**.



L'esame più dettagliato dei segnali a **8.01 e 7.27 ppm** ci fa capire che si tratta di un **anello benzenico para disostituito**. Infatti i due picchi sono dovuti a due coppie di idrogeni identici e sono **doppietti** cioè ciascuno ha un idrogeno vicino.

Rispetto agli idrogeni del benzene che assorbono a 7.27 ppm, **i due idrogeni a 8.01 ppm** sono **deschermati** e quindi sono adiacenti ad un sostituito elettroneattrattore (il carbossile), mentre **i due idrogeni a 7.27 ppm** sono **uguali** a quelli del benzene quindi sono vicini ad un gruppo debolmente elettrondonatore.

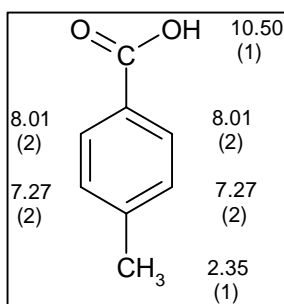


Il carbossile, il cui idrogeno produce il segnale a 10.50 ppm, è elettroneattrattore e si trova legato all'anello dalla parte degli idrogeni che danno il segnale a 8.01 ppm.

Il **CH₃ singoletto a 2.35 ppm**, è legato al benzene [$0.9 (CH_3) + 1.5 (Ph) = 2.4$] in posizione para rispetto al carbossile. Poiché è un gruppo debolmente elettrondonatore, riesce appena a compensare l'effetto elettroneattrattore del carbossile, per questo i due idrogeni in orto rispetto al CH₃ assorbono a 7.27 ppm.

La molecola cercata è quindi **acido 4-metilbenzoico**.

acido 4-metilbenzoico



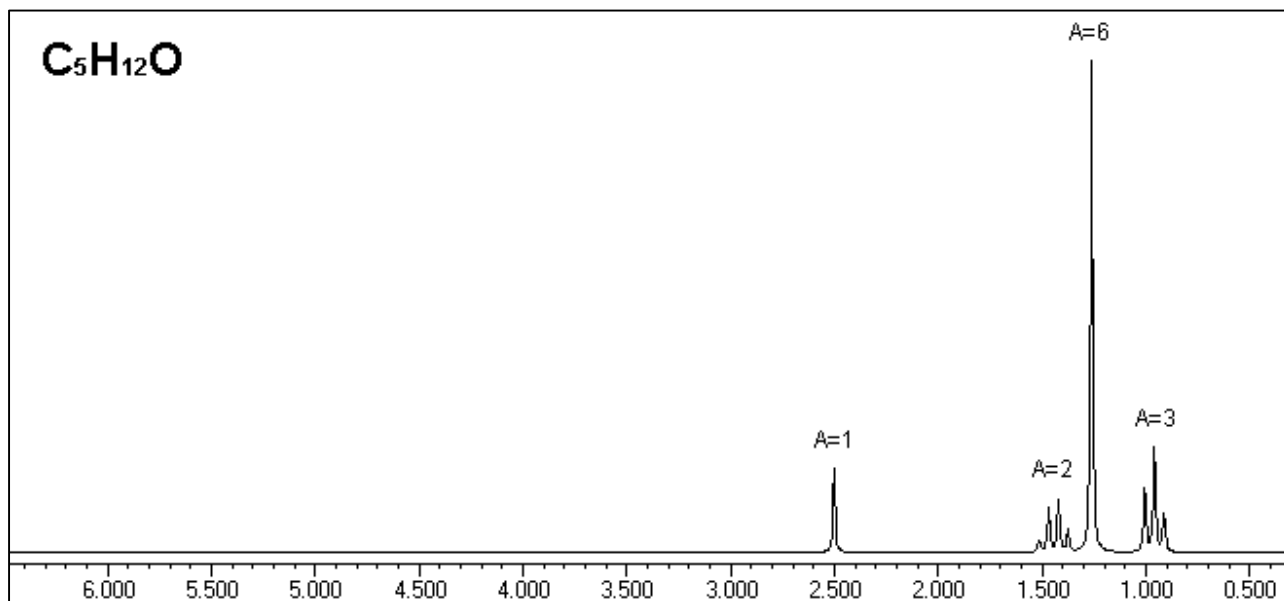
A fianco degli idrogeni nella molecola è riportato lo spostamento chimico e, tra parentesi, la molteplicità.

PROBLEMA NMR n. 3 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola è saturata [$H_{\text{sat}} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi **non ha insaturazioni**.

Il suo spettro IR mostra un picco un po' allargato a 3300 cm^{-1} dovuto allo stretching del legame OH tipico degli **alcoli**.

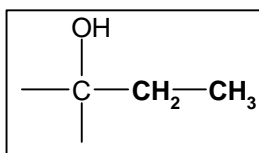
Il suo spettro NMR è il seguente:



Il **singoletto a 2.50 ppm** è attribuibile all'idrogeno alcolico.

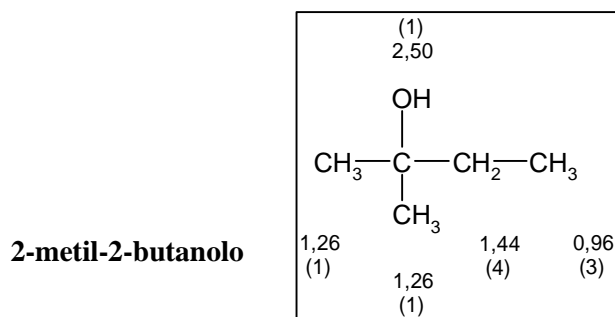
In questo spettro manca il segnale degli idrogeni legati al carbonio che regge l'OH. Questo segnale sarebbe stato intorno a **3.3 ppm** [$1.3 (CH_2) + 2 (O) = 3.3$]. Deduciamo che si tratta di un **alcol terziario**.

Il **CH_2 quartetto a 1.44 ppm** e il **CH_3 tripletto a 0.96 ppm** sono accoppiati tra loro e quindi indicano che si tratta di un **gruppo etilico**, infatti la molteplicità del CH_2 è 4 (3 H vicini) e quella del CH_3 è 3 (2 H vicini). L'assorbimento del CH_2 a 1.44 ppm indica che l'etile è uno dei sostituenti del carbonio terziario dell'alcol, infatti la previsione ci dà: $1,3 (CH_2) + 0,3 (\text{beta O}) = 1,6\text{ ppm}$.



I due CH_3 del singoletto a 1.26 ppm non hanno H vicini (singoletto). Quindi questi due CH_3 sono gli altri due sostituenti del carbonio terziario. [$0.9 (CH_3) + 0.3 (\text{beta O}) = 1.2$]

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



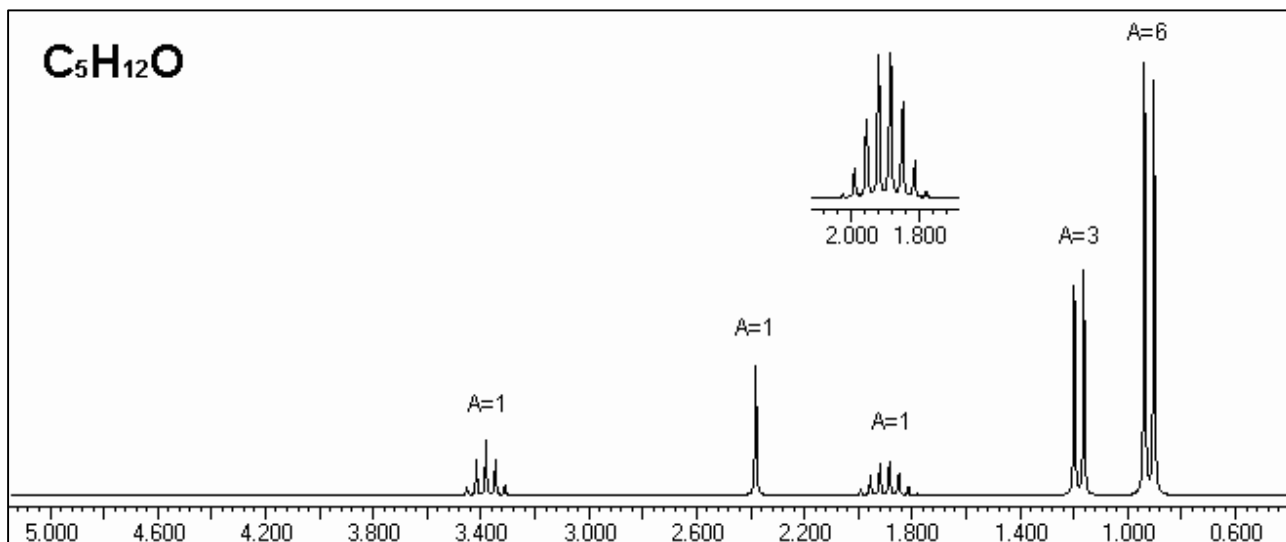
A fianco degli idrogeni nella molecola è riportato lo spostamento chimico e, tra parentesi, la molteplicità.

PROBLEMA NMR n. 4 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola è saturata [$H_{\text{sat}} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi **non ha insaturazioni**.

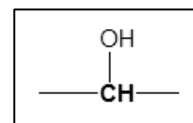
Il suo spettro IR mostra un picco un po' allargato a 3300 cm^{-1} dovuto allo stretching del legame OH tipico degli **alcoli**.

Il suo spettro NMR è il seguente:

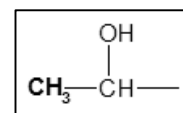


Il singoletto a **2.40 ppm** è attribuibile all'idrogeno alcolico.

Il quintetto a **3.38 ppm** di **area 1** è dovuto al CH che regge il gruppo alcolico OH. Infatti il suo assorbimento è vicino a quello previsto [$1.7\text{ (CH)} + 2\text{ (O)} = 3.7$]. Il fatto che il gruppo OH sia legato ad un CH indica che la molecola è un **alcol secondario**.



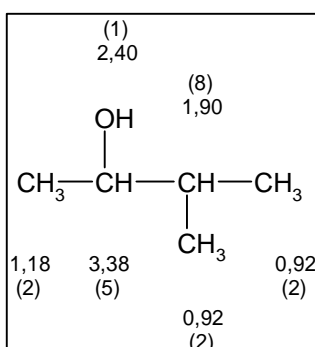
Il segnale del **CH₃** a **1.18 ppm**, è un **doppietto**, quindi è vicino ad un solo idrogeno (quello del CH). Deduciamo che il CH₃ chiude la catena su un lato dell'alcol.



Dall'altro lato della molecola c'è il **CH ottetto a 1.90 ppm** che regge i due CH₃ a **0.92 ppm**, infatti ottetto indica che è vicino a 7 idrogeni: i due CH₃ e il CH che regge l'alcol. Notiamo infine che il segnale dei due CH₃ a 0.92 ppm è un **doppietto**, questo indica che sono vicini ad un CH.

La molecola è così determinata, si tratta di **3-metil-2-butanol**.

3-metil-2-butanol



Notate che l'**OH alcolico** a 2.40 ppm è un **singoletto** perché **non è accoppiato con il CH** adiacente. Quindi anche questo CH (3.38 ppm) non è accoppiato con l'OH alcolico e ha molteplicità 5 (4 H vicini: CH₃ e CH). Da cosa dipende questo strano comportamento dell'H alcolico?

Il mancato accoppiamento di spin è dovuto al fatto che l'idrogeno alcolico, a causa della sua leggera acidità, viene scambiato più volte tra le molecole di alcol, durante il tempo della misura dello spettro NMR, e quindi il suo spin non resta costante in una molecola e il suo contributo al campo magnetico sentito dagli idrogeni vicini si annulla. L'idrogeno alcolico risulta quindi disaccoppiato dagli altri idrogeni della molecola.

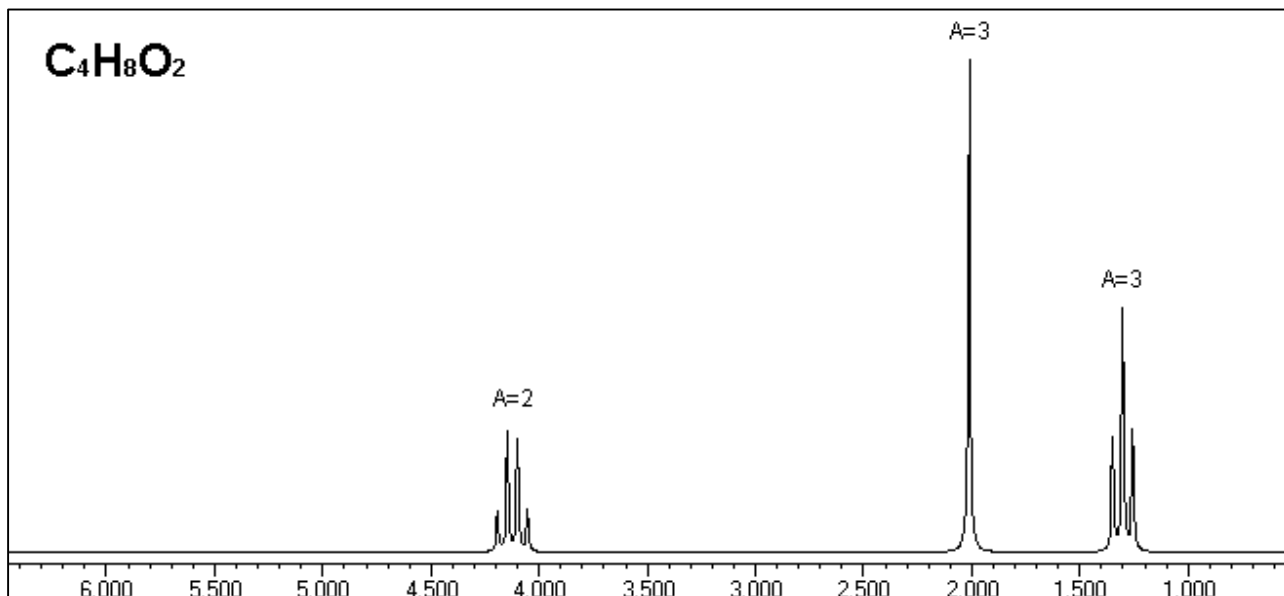
PROBLEMA NMR n. 5 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_4H_8O_2$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 4 \cdot 2 + 2 = 10$] quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che è presente un **carbonile**.

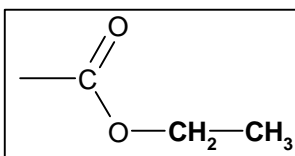
Esaminando lo spettro NMR qui sotto, osserviamo che mancano i segnali degli acidi carbossilici e delle aldeidi a **11** e a **9.5 ppm** rispettivamente.

Deduciamo che probabilmente la molecola è un **estere**.



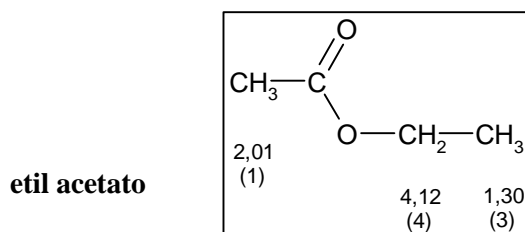
Esaminiamo per primo il picco a delta maggiore. Il **CH₂ quartetto a 4.12 ppm** si trova nella zona dei **CH₂ legati all'ossigeno di un estere** [$1,3 (CH_2) + 3 (O \text{ estere}) = 4,3$].

Questo CH₂ ha 3 idrogeni vicini ($m = 4$) quindi è accoppiato con il **CH₃ tripletto a 1.30 ppm** (un tripletto ha 2 idrogeni vicini). Insieme costituiscono un **gruppo etilico** legato all'ossigeno dell'estere.



Resta da interpretare il **CH₃ singoletto a 2.01 ppm**. Un singoletto non ha idrogeni vicini, quindi è legato al carbonile, infatti il suo assorbimento è vicino a 1.9 ppm [$0.9 (CH_3) + 1 (C=O) = 1.9$].

La molecola è così determinata: si tratta di **etil acetato**.



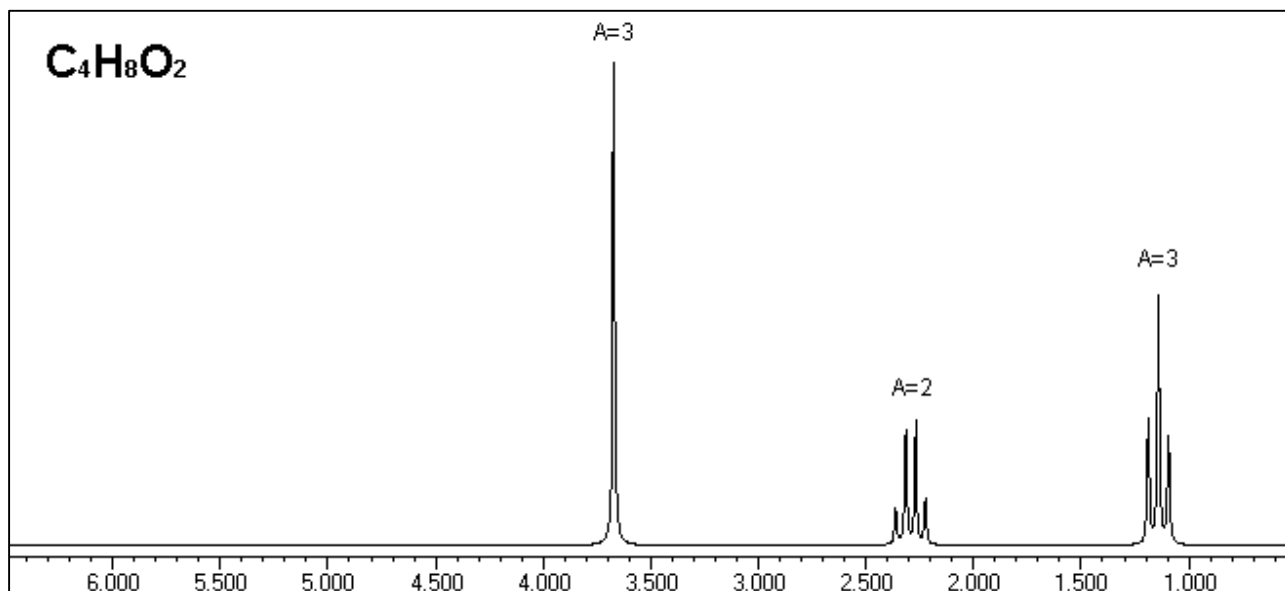
PROBLEMA NMR n. 6 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_4H_8O_2$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 4 \cdot 2 + 2 = 10$] quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che è presente un **carbonile**.

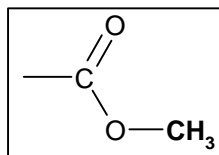
Esaminando lo spettro NMR qui sotto, osserviamo che mancano i segnali degli acidi carbossilici e delle aldeidi a **11** e a **9.5 ppm** rispettivamente.

Deduciamo che probabilmente la molecola è un **estere**.



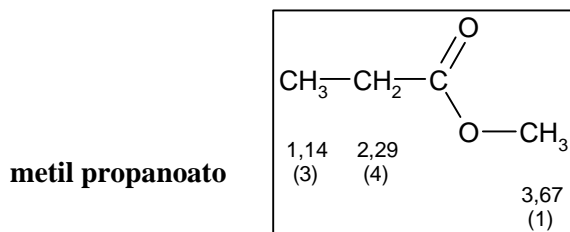
Esaminiamo per primo il picco a delta maggiore. Il **singoletto a 3.67 ppm** si trova nella zona dei **CH₃ legati all'ossigeno di un estere** [$0,9 (CH_3) + 3 (O \text{ estere}) = 3,9$].

Così abbiamo individuato la prima parte della molecola:



Gli altri due segnali di un **CH₂ a 2.29 ppm** e di un **CH₃ a 1.14 ppm** sono chiaramente accoppiati tra loro essendo quartetto e tripletto e indicano un **gruppo etilico**. Il CH₂ a **2.29 ppm** ha lo spostamento chimico di un CH₂ **vicino ad un carbonile** [$1,3 (CH_2) + 1 (C=O) = 2,3$].

Il gruppo etilico legato al carbonile completa quindi la molecola, si tratta di **metil propanoato**.

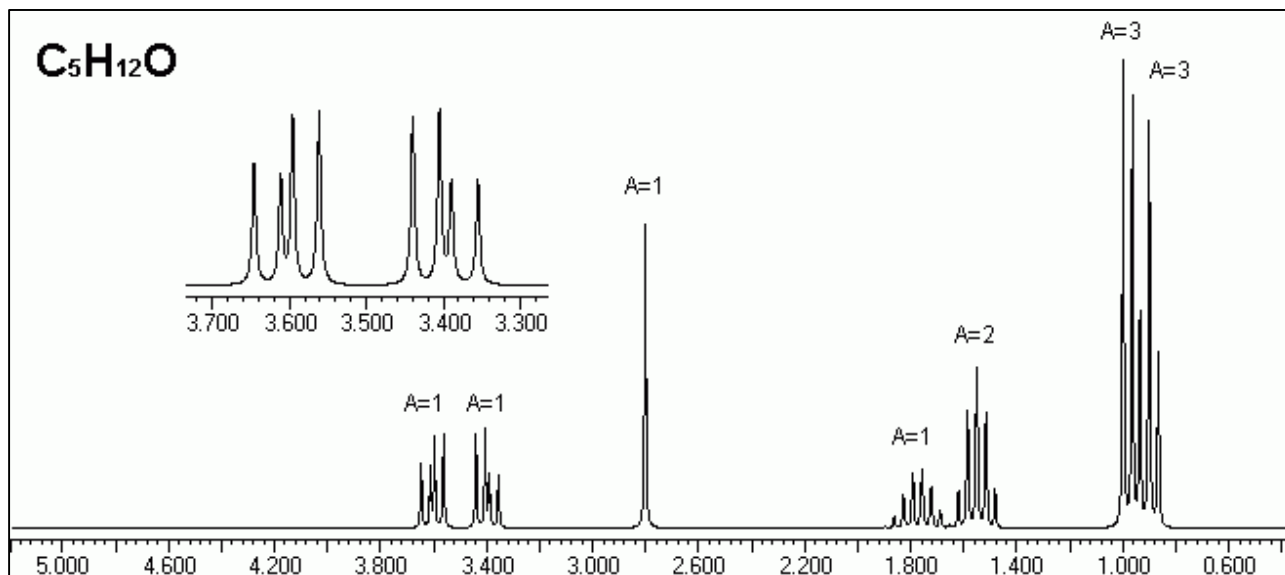


PROBLEMA NMR n. 7 – soluzione

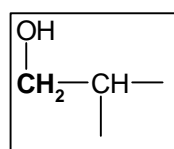
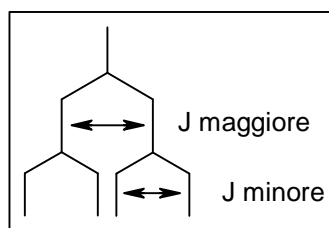
Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola è saturata [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi **non ha insaturazioni**, cioè non ha né doppi legami né anelli.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **gruppo OH alcolico**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, osserviamo che il segnale dell'**OH** è il **singoletto a 2,80 ppm**.



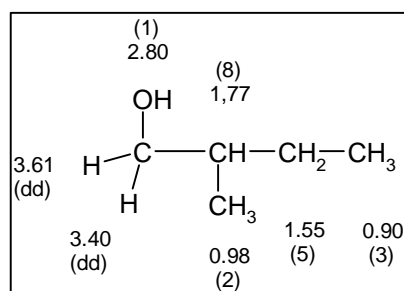
I due segnali a delta maggiore, **3.61 e 3.40 ppm**, indicano idrogeni sul carbonio che regge l'OH. [$1.3 (CH_2) + 2 (OH) = 3.4$]. Si tratta di un **CH₂ che dà due segnali distinti e complessi** (doppietti di doppietti) con due diverse costanti di accoppiamento J. I due idrogeni, quindi, sono accoppiati **tra loro** (doppietto con J maggiore) e **con un altro idrogeno** vicino (doppietto con J minore), l'unico CH possibile è il **CH a 1.77 ppm**. Il fatto che i due idrogeni geminali siano diversi, significa che si trovano **vicini ad un centro chirale** così ognuno dei due vede un lato diverso della molecola chirale asimmetrica.



Perché la molecola dell'alcol sia chirale sul CH a 1.77 ppm è necessario che i due ulteriori sostituenti del CH siano diversi tra loro. Al gruppo CH sono legati infatti il **CH₃ doppietto a 0.98 ppm** e il gruppo etile composto dal **CH₂ quintetto a 1.55 ppm** e **CH₃ tripletto a 0.90 ppm**.

La molecola incognita è così determinata.

2-metil-1-butanol

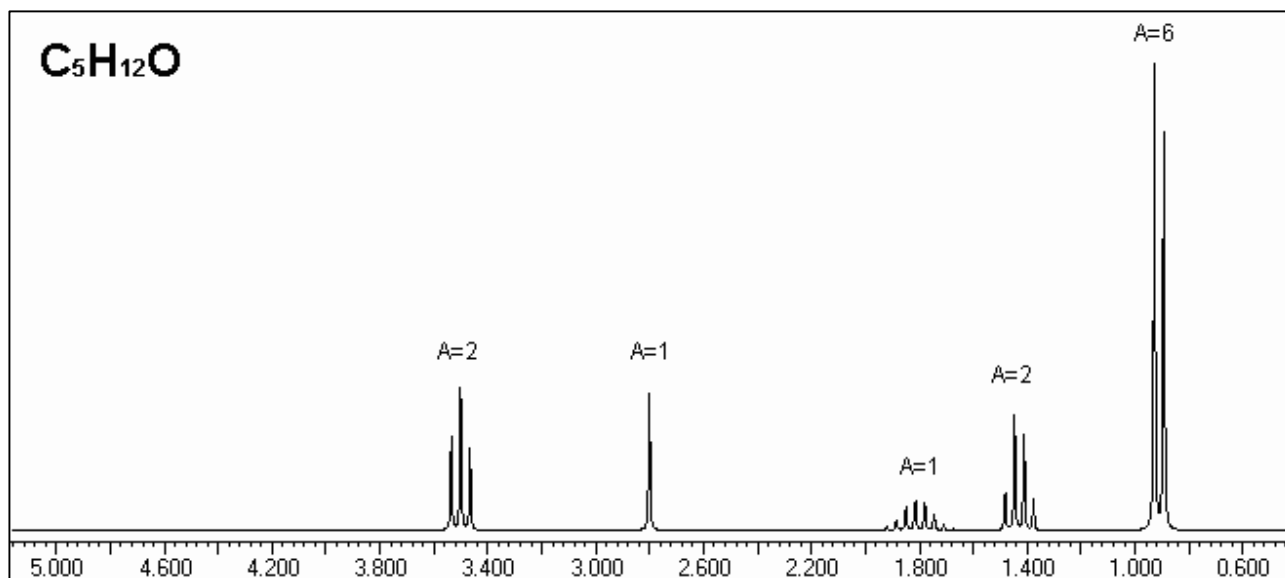


PROBLEMA NMR n. 8 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola è satura [$H_{\text{sat}} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi **non ha insaturazioni**, cioè non ha né doppi legami né anelli.

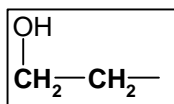
Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **gruppo OH alcolico**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, osserviamo che il segnale dell'**OH** è il **singoletto a 2,80 ppm**.



Il **CH₂ tripletto a 3.50 ppm** è quello che regge l'OH infatti ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 2 (OH) = 3.3$ ppm]. La sua struttura di tripletto indica che è vicino a due idrogeni, quindi è vicino al **CH₂ quartetto a 1.43 ppm**.

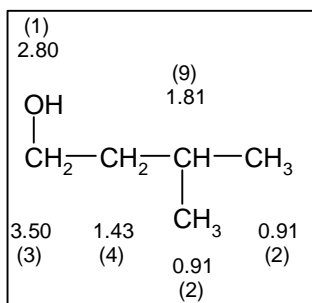
La struttura determinata finora è la seguente:



A questo carbonio, dobbiamo unire il **gruppo isopropilico** individuato dal **CH a 1.81 ppm** e dai **due gruppi CH₃ doppietto a 0.91 ppm**. Notiamo infatti che i due CH₃ sono un doppietto e quindi vicini ad un solo idrogeno, quello del CH.

La molecola incognita è così determinata.

3-metil-1-butanol

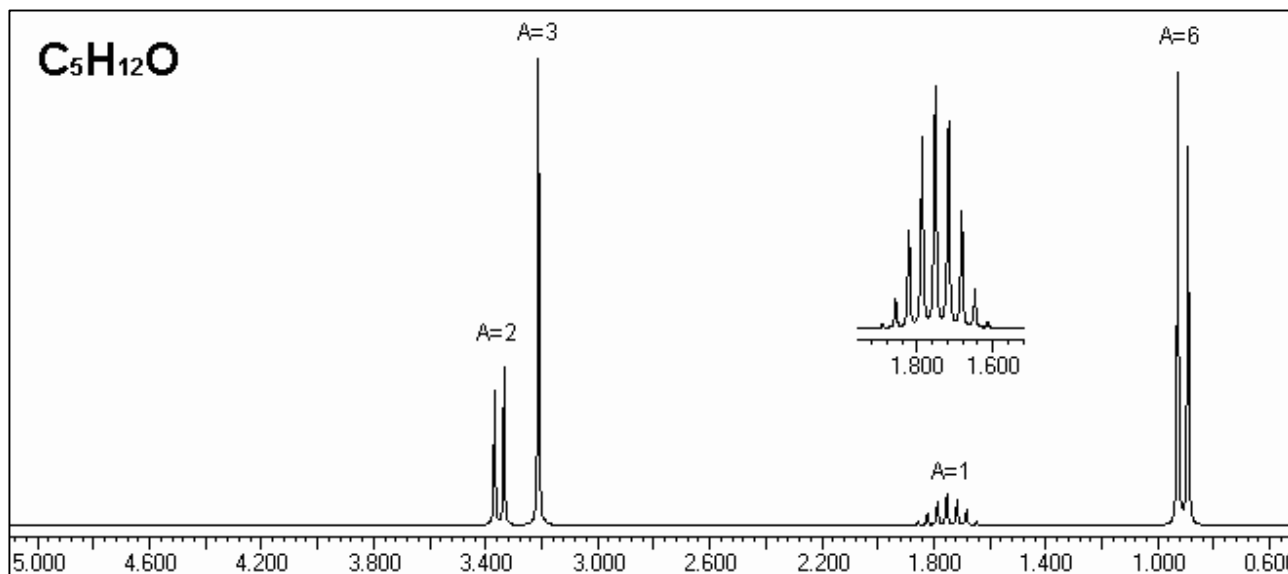


PROBLEMA NMR n. 9 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola è satura [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi **non ha insaturazioni**, cioè non ha né doppi legami né anelli.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola **NON** possiede un gruppo OH alcolico e quindi deve essere un **etere**.

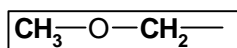
Il suo spettro NMR è il seguente:



I due segnali a delta maggiore si riferiscono ad un CH_2 e ad un CH_3 legati direttamente all'ossigeno.

Il CH_3 **singoletto a 3.21 ppm** chiude la catena su un lato della molecola [$0.9 (CH_3) + 2 (O) = 2.9$ ppm].

Il CH_2 **doppio a 3.35 ppm** è legato sul lato opposto dell'ossigeno [$1.3 (CH_2) + 2 (O) = 3.3$ ppm].



La struttura a doppietto di questo CH_2 ci dice che è vicino ad un idrogeno e quindi al CH a 1.75 ppm.

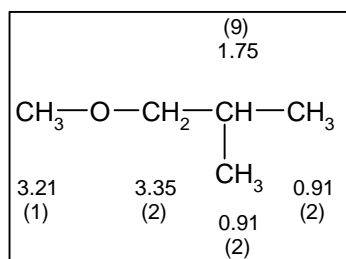
Il CH **multipletto a 1.75 ppm** è accoppiato col doppietto dei **due CH_3 a 0.91 ppm** e insieme costituiscono un **gruppo isopropilico**.

La molteplicità del CH è 9 infatti è vicino a 8 idrogeni, il CH_2 a 3.35 e i due CH_3 a 0.91 ppm.

I due CH_3 sono doppietti infatti sono vicini all'idrogeno del CH a 1.75 ppm.

La molecola incognita è quindi la seguente:

1-metossi-2-metilpropano
 O
isobutil metil etere

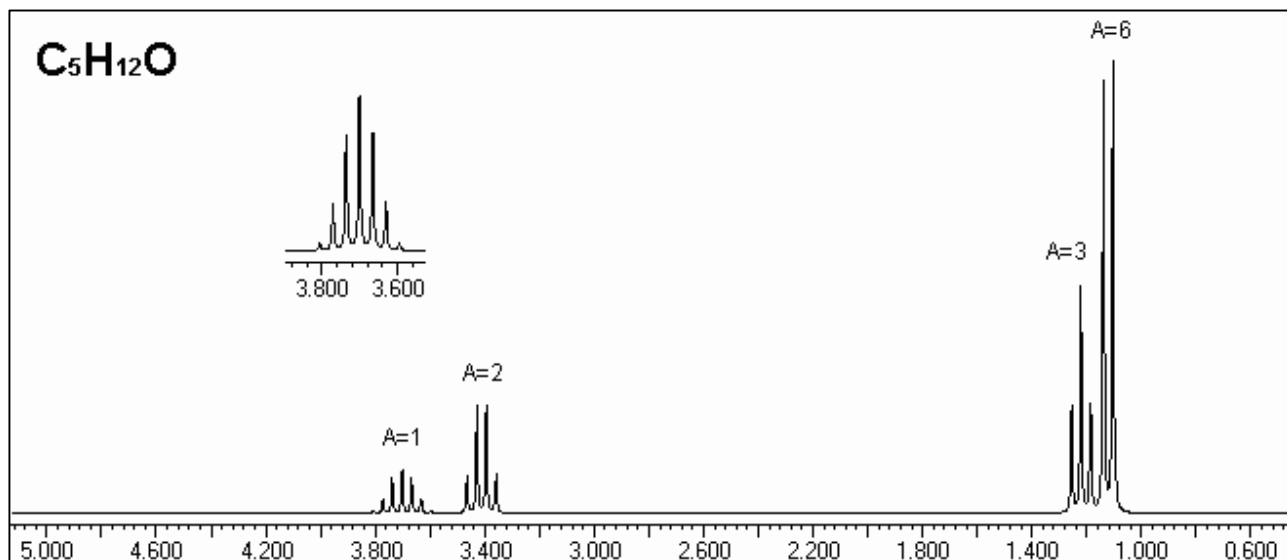


PROBLEMA NMR n. 10 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{12}O$ deduciamo che la molecola è saturata [$H_{\text{sat}} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi **non ha insaturazioni**, cioè non ha né doppi legami né anelli.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola NON possiede un gruppo OH alcolico e quindi deve essere un **etere**.

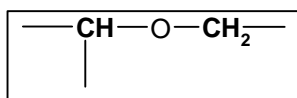
Il suo spettro NMR è il seguente:



I due segnali a delta maggiore si riferiscono ad un CH e ad un CH_2 legati direttamente all'ossigeno.

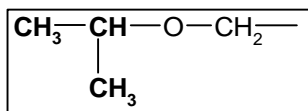
Il **CH septetto a 3.71 ppm** è legato su un lato dell'ossigeno [$1.7 (CH_3) + 2 (O) = 3.7$ ppm].

Il **CH_2 quartetto a 3.42 ppm** è legato sul lato opposto dell'ossigeno [$1.3 (CH_2) + 2 (O) = 3.3$ ppm].



Il CH a 3.71 ppm a sinistra dell'ossigeno è legato **ai due CH_3 a 1.12 ppm** [$0.9 (CH_3) + 0.3 (\text{beta O}) = 1.2$ ppm] e forma un **gruppo isopropilico**.

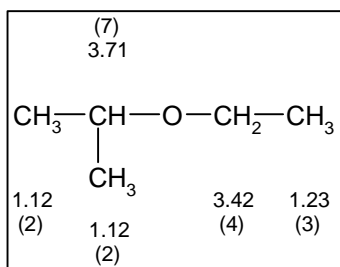
I due CH_3 , infatti sono un **doppietto**, quindi sono vicini all'idrogeno del CH. Del resto questo è un **septetto**, ed è vicino ai 6 idrogeni dei due CH_3 .



Il CH_2 a 3.42 ppm sulla destra dell'ossigeno è legato al **CH_3 tripletto a 1.23 ppm** [$0.9 (CH_3) + 0.3 (\text{beta O}) = 1.2$ ppm] e forma un **gruppo etile**. Infatti il CH_2 è un quartetto ed è vicino ai tre idrogeni del CH_3 e il CH_3 è un tripletto ed è vicino ai due del CH_2 .

La molecola incognita è così determinata.

2-etossi-propano
etil isopropil etere

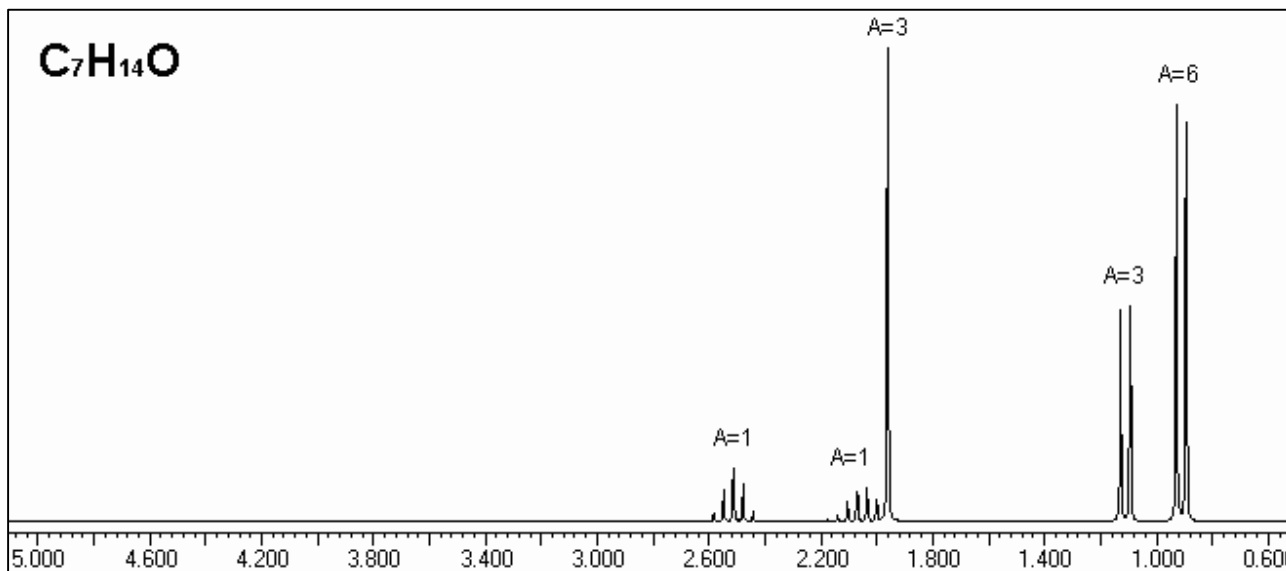


PROBLEMA NMR n. 11 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_7H_{14}O$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 7 \cdot 2 + 2 = 16$] e quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 2.51 ppm, quindi deduciamo che la molecola è un **chetone**.



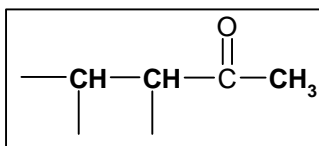
I due gruppi legati al carbonile sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH quintetto a 2.51 ppm** è il primo gruppo **legato al carbonile**, infatti ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.7 (CH) + 1 (C=O) = 2.7$].

Il **CH ottetto a 2.05 ppm non è legato al carbonile** perché, se lo fosse dovrebbe assorbire anch'esso attorno a 2.7 ppm. Potrebbe essere legato al precedente CH e trovarsi quindi in posizione **beta** rispetto al carbonile, infatti $1.7 (CH) + 0.3 (\text{beta } C=O) = 2.0$

Il **CH₃ singoletto a 1.96 ppm** è l'altro gruppo **legato al carbonile**, infatti: $0.9 (CH_3) + 1 (C=O) = 1.9$.

La parte di molecola identificata finora è quindi la seguente:



La molecola è già terminata sul lato destro, mentre a sinistra si chiude con i CH_3 che si trovano a delta

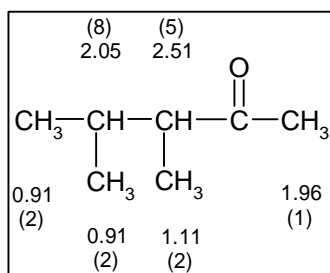
minore nello spettro. I due segnali di questi CH_3 sono doppietti e questo significa che sono legati ai due CH.

Il **CH ottetto a 2.05 ppm** è legato ai **due CH₃ doppietto a 0.91 ppm** formando così un gruppo isopropilico.

Il **CH quintetto a 2.51 ppm** è legato al **CH₃ doppietto a 1.11 ppm**, come è ovvio data la sua molteplicità.

La molecola incognita è così determinata, si tratta di 3,4-dimetilpentan-2-one.

3,4-dimetilpentan-2-one

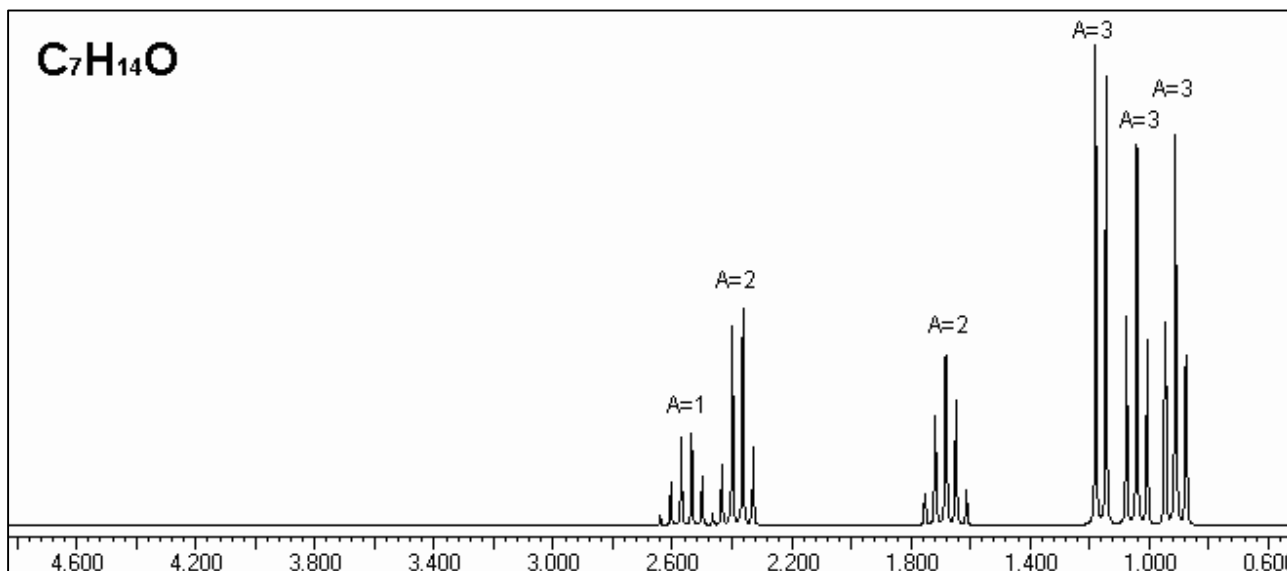


PROBLEMA NMR n. 12 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_7H_{14}O$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 7 \cdot 2 + 2 = 16$] e quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 2.55 ppm, quindi deduciamo che la molecola è un **chetone**.



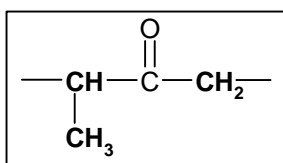
I due gruppi legati al carbonile sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH sestetto a 2.55 ppm** è il primo gruppo **legato al carbonile**, infatti ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.7 (CH) + 1 (C=O) = 2.7$].

Il **CH₂ quartetto a 2.38 ppm** è il secondo gruppo **legato al carbonile**, anche questo ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 1 (C=O) = 2.3$].

Il **CH₃ doppietto a 1.16 ppm** è legato al **CH sestetto a 2.55 ppm**, infatti è l'unico doppietto presente nello spettro e si deve legare all'unico CH. L'assorbimento del CH₃ a 1.16 ppm è vicino a quello previsto [$0.9 (CH_3) + 0.3 (\text{beta } C=O) = 1.2$].

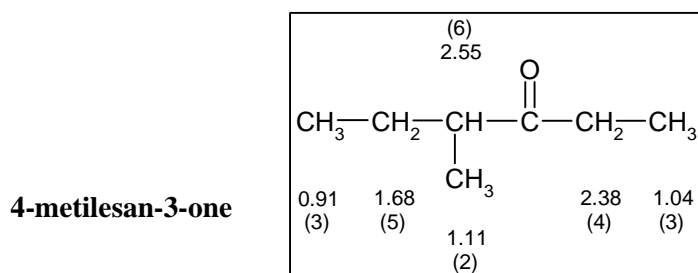
La molecola determinata fino a questo punto è la seguente:



Il **CH₃ tripletto a 1.04 ppm** è legato al CH₂ quartetto a 2.38 ppm (a destra del carbonile) e insieme formano un **gruppo etile** essendo rispettivamente tripletto (vicino al CH₂) e quartetto (vicino al CH₃).

Restano da assegnare il **CH₂ quintetto a 1.68 ppm** e il **CH₃ tripletto a 0.91 ppm**. Questi sono legati tra loro e formano un gruppo etile, la molteplicità del CH₂ è 5, quindi ha 4 idrogeni vicini, infatti si lega sia al CH₃ che al CH sestetto a 2.55 ppm.

La molecola incognita è così determinata, si tratta di 4-metilesan-3-one.

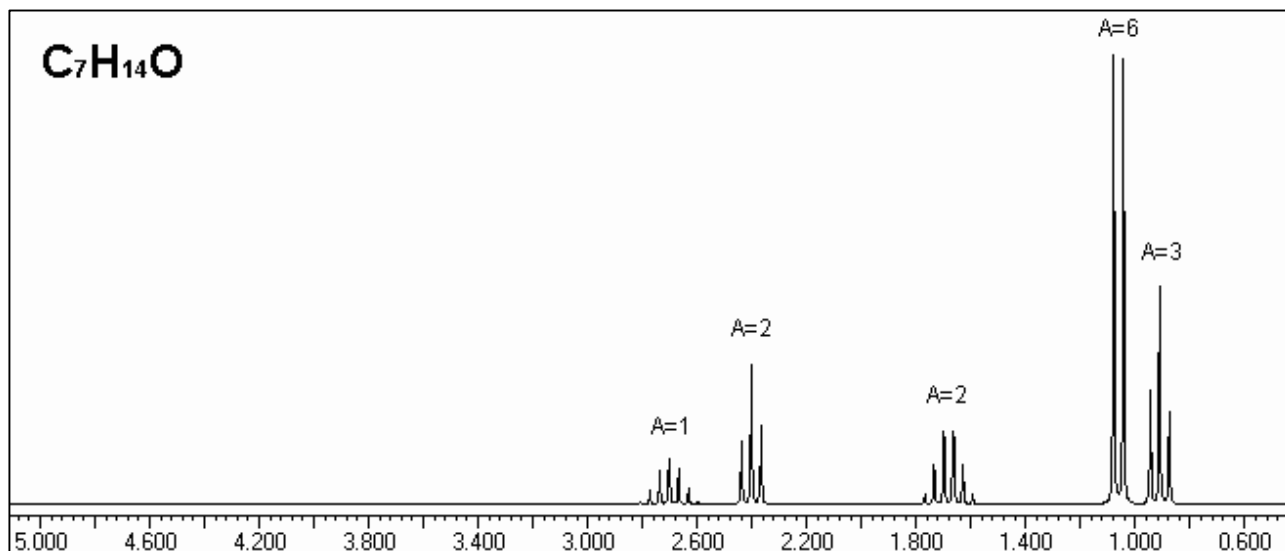


PROBLEMA NMR n. 13 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_7H_{14}O$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 7 \cdot 2 + 2 = 16$] e quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 2.70 ppm, quindi deduciamo che la molecola è un **chetone**.



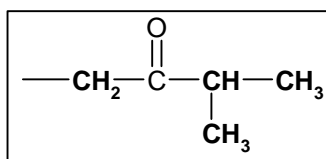
I due gruppi legati al carbonile sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH septetto a 2.70 ppm** è il primo gruppo **legato al carbonile**, infatti ha un assorbimento uguale a quello previsto [$1.7 (CH) + 1 (C=O) = 2.7$].

Il **CH₂ tripletto a 2.40 ppm** è il secondo gruppo **legato al carbonile**, e ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 1 (C=O) = 2.3$].

I due CH₃ del doppietto a 1.06 ppm sono legati al CH septetto a 2.70 ppm, infatti sono l'unico doppietto presente nello spettro e si devono legare all'unico CH. L'assorbimento dei CH₃ a 1.06 ppm è vicino a quello previsto [$0.9 (CH_3) + 0.3 (\text{beta } C=O) = 1.2$].

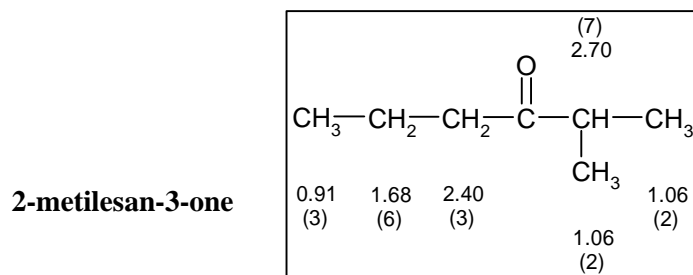
La molecola determinata fino a questo punto è la seguente:



Il **CH₂ a 2.40 ppm** (a sinistra del carbonile) è un **tripletto** quindi ha vicino due idrogeni, quelli del CH₂ a 1.68 ppm

Questo **CH₂ sestetto a 1.68 ppm** si lega ulteriormente con il **CH₃ tripletto a 0.91 ppm** che infatti vuole due idrogeni vicini.

La molecola incognita è così determinata, si tratta di 2-metilesan-3-one.

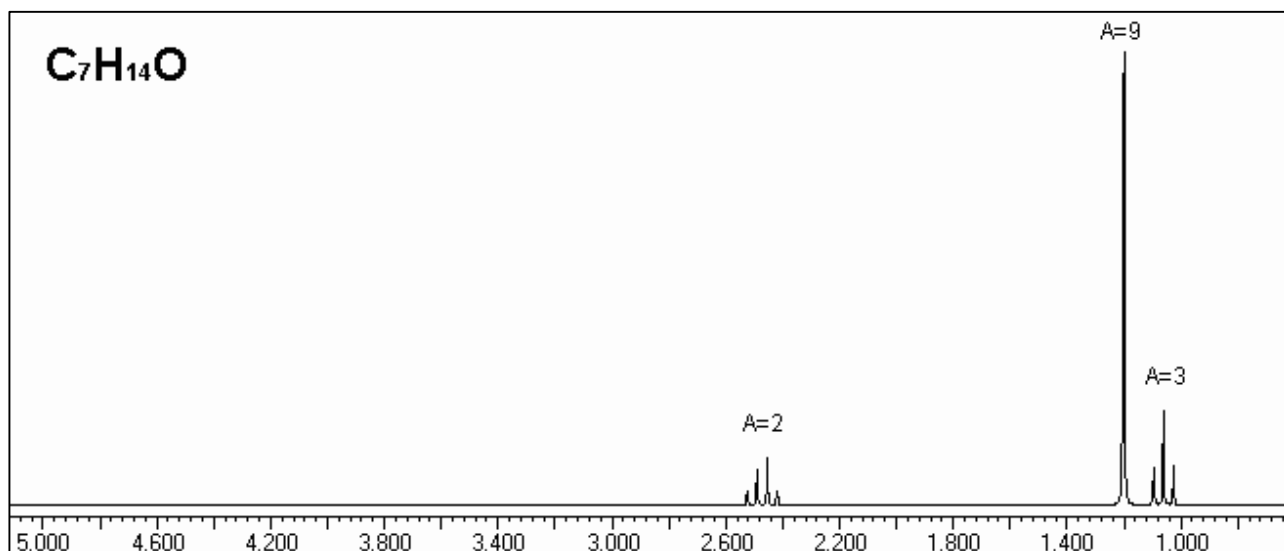


PROBLEMA NMR n. 14 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_7H_{14}O$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{\text{sat}} = 7 \cdot 2 + 2 = 16$] e quindi c'è una **insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 2.55 ppm, quindi deduciamo che la molecola è un **chetone**.



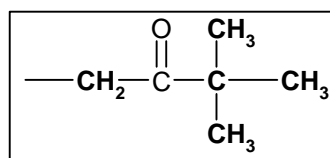
I due gruppi legati al carbonile sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH₂ quartetto a 2.47 ppm** è l'unico gruppo **legato al carbonile** che vediamo nello spettro, ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 1 (C=O) = 2.3$].

Il fatto che manchi il segnale del secondo gruppo legato al carbonile significa che quel carbonio è privo di idrogeni, cioè è un **carbonio quaternario**.

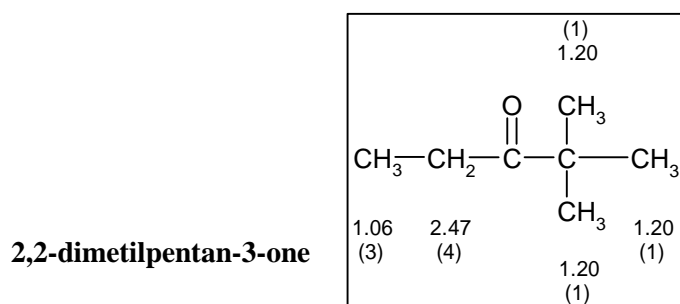
Il segnale dei **tre CH₃ a 1.20 ppm** è un **singoletto** e quindi questi devono essere legati ad un carbonio privo di idrogeni, cioè al carbonio quaternario.

La molecola determinata fino a questo punto è la seguente:



Il **CH₃ tripletto a 1.06 ppm** deve essere vicino a due idrogeni e quindi deve essere legato al **CH₂ quartetto a 2.47 ppm** col quale costituisce un gruppo etilico.

La molecola incognita è quindi la seguente:

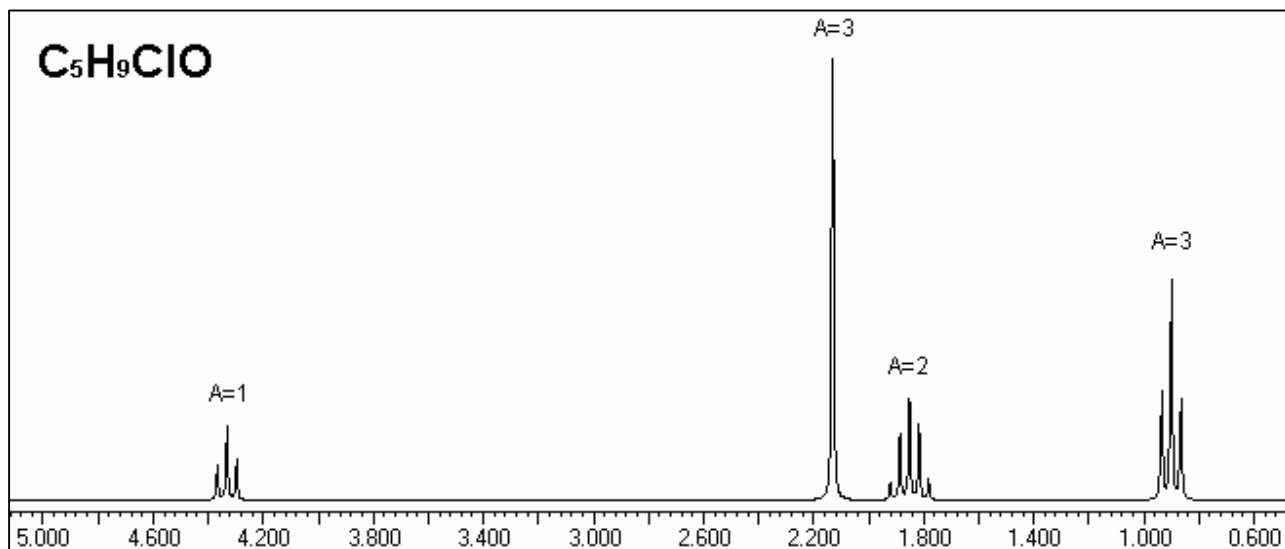


PROBLEMA NMR n. 15 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_5H_9ClO deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 2 - 1 (Cl) = 11$] e quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 4.33 ppm, quindi deduciamo che la molecola è un **chetone**.

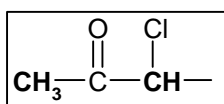


I due gruppi legati al carbonile e quello legato al cloro sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH tripletto a 4.33 ppm** sembra essere **legato al carbonile e anche al cloro** infatti per un tale gruppo l'assorbimento previsto è $1.7 (CH) + 1 (C=O) + 2 (Cl) = 4.7$ ppm.

Il **CH₃ singoletto a 2.13 ppm** è il secondo gruppo **legato al carbonile**, e ha un assorbimento vicino a quello previsto [$0.9 (CH_2) + 1 (C=O) = 1.9$].

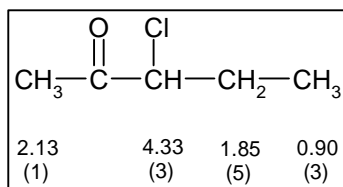
La molecola determinata fino a questo punto è la seguente:



Il **CH₂ quintetto a 1.85 ppm** e il **CH₃ tripletto a 0.90 ppm** sono commessi tra loro e costituiscono un gruppo etile.

Il fatto che il CH₂ a 1.85 ppm sia un quintetto indica che è vicino a 4 idrogeni, quindi è legato sia al CH₃ a 0.90 ppm che al CH a 4.33 ppm che si trova a destra del carbonile.

La molecola incognita è quindi la seguente:



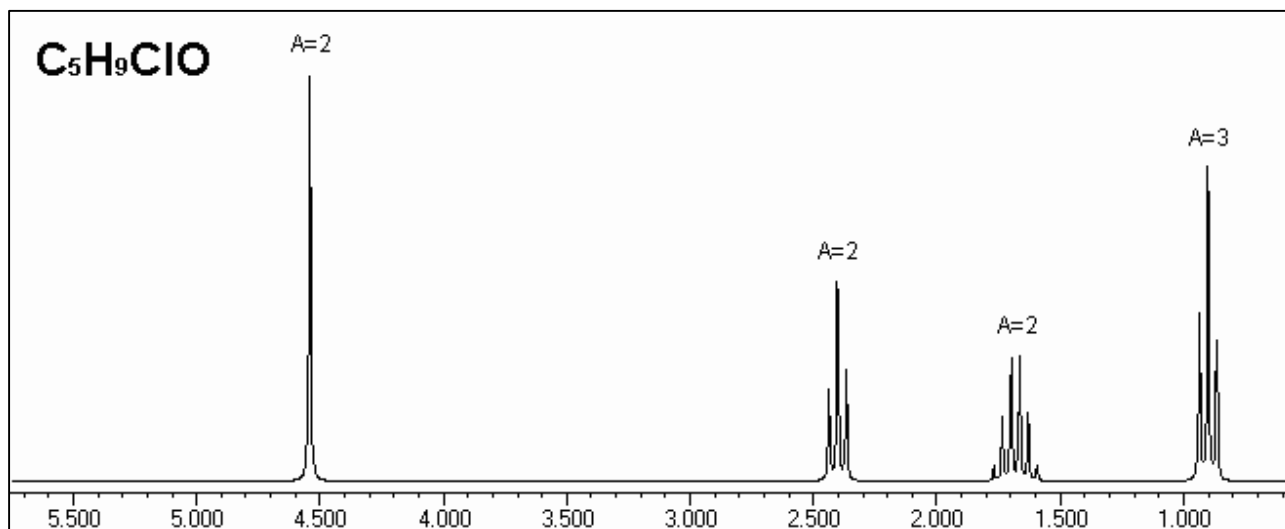
3-cloropentan-2-one

PROBLEMA NMR n. 16 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_5H_9ClO deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 2 - 1 (Cl) = 11$] e quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola possiede un **carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 4.33 ppm, quindi deduciamo che la molecola è un **chetone**.

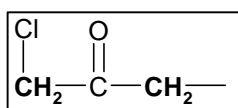


I due gruppi legati al carbonile e quello legato al cloro sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH₂ singoletto a 4.54 ppm** sembra essere **legato al carbonile e anche al cloro** infatti per un tale gruppo l'assorbimento previsto è $1.3 (CH_2) + 1 (C=O) + 2 (Cl) = 4.3$ ppm.

Il **CH₂ tripetto a 2.40 ppm** è il secondo gruppo **legato al carbonile**, infatti ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 1 (C=O) = 2.3$].

La molecola determinata fino a questo punto è la seguente:

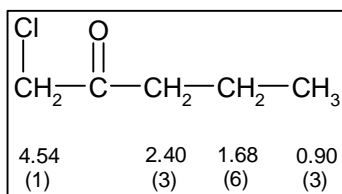


Il **CH₂ sestetto a 1.68 ppm** e il **CH₃ tripetto a 0.90 ppm** sono commessi tra loro e costituiscono un gruppo etile.

Il fatto che il CH₂ a 1.68 ppm sia un sestetto indica che è vicino a 5 idrogeni, quindi è legato sia al CH₃ a 0.90 ppm che al CH₂ a 2.40 ppm che si trova a destra del carbonile.

La molecola incognita è quindi la seguente:

1-cloropentan-2-one



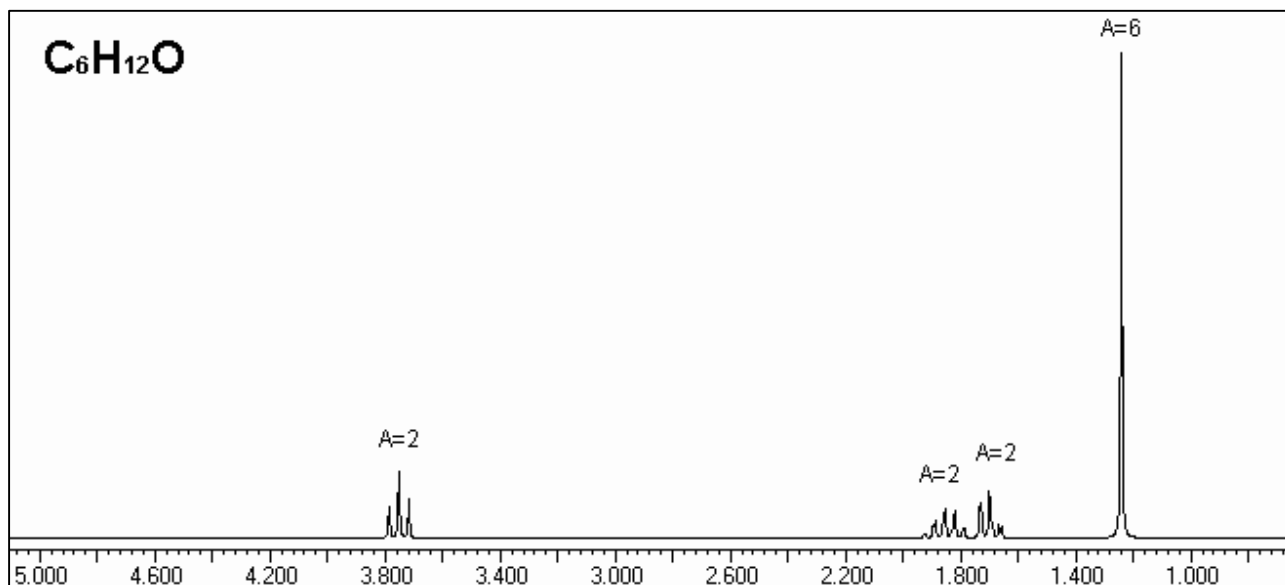
PROBLEMA NMR n. 17 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{12}O$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 6 \cdot 2 + 2 = 14$] e quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola **non possiede un carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 3.75 ppm, quindi deduciamo che la molecola non ha doppi legami $C=C$ e quindi l'insaturazione è dovuta ad un anello.

Dato che è assente il segnale dell'OH alcolico, la molecola deve essere un **etere ciclico**. Dato infine che ci sono due gruppi CH_3 che non possono appartenere all'anello, i rimanenti 4 carboni e l'ossigeno possono formare solo un etere ciclico a cinque atomi, **tetraidrofurano**.



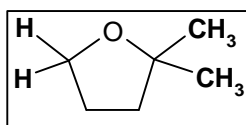
I due gruppi legati all'ossigeno eterico sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH_2 tripletto a 3.75 ppm** è l'unico gruppo legato all'ossigeno che vediamo nello spettro, ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 2 (O) = 3.3$].

Il fatto che manchi il segnale del secondo gruppo legato al carbonile significa che quel carbonio è privo di idrogeni, cioè è un **carbonio quaternario**.

Il segnale dei **due CH_3 a 1.24 ppm** è un **singoletto** e quindi questi devono essere legati ad un carbonio privo di idrogeni, cioè al carbonio quaternario.

La molecola determinata fino a questo punto è la seguente:

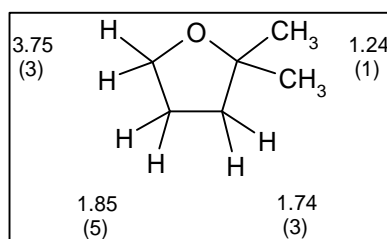


Il **CH_2 a 1.85 ppm** è un **quintetto** e quindi è vicino a quattro idrogeni. Questo CH_2 è dunque quello centrale nei tre CH_2 consecutivi dell'anello.

Il **CH_2 a 1.74 ppm** è un **tripletto** e quindi si trova in basso a destra nell'anello, vicino solo ai due idrogeni del CH_2 centrale.

La molecola incognita è così completamente determinata, si tratta di **2,2-dimetiltetraidrofurano**.

2,2-dimetiltetraidrofurano



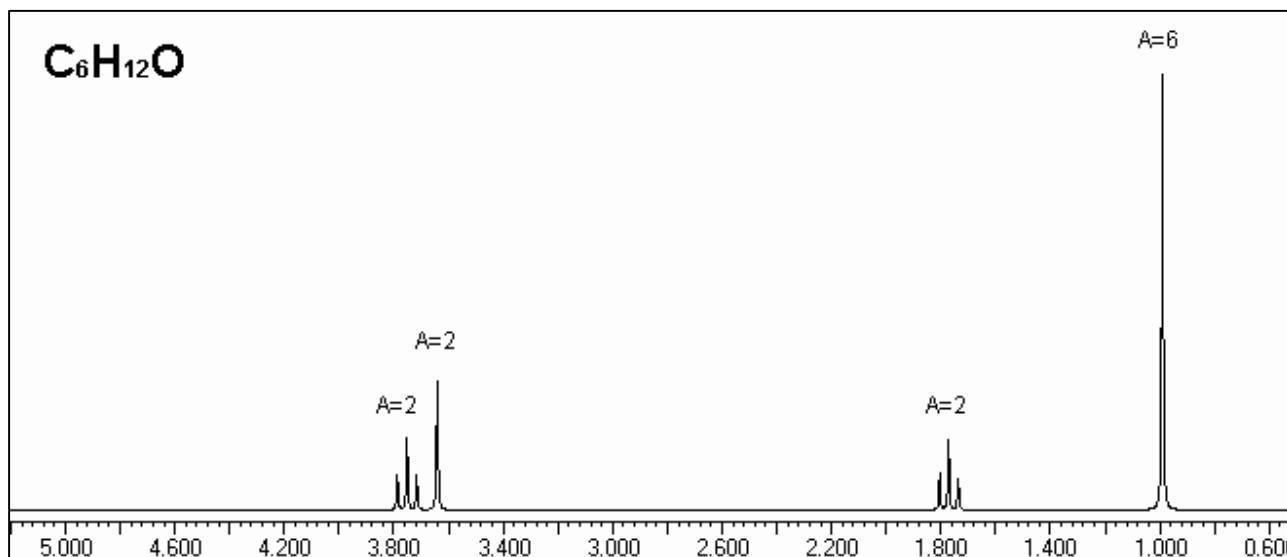
PROBLEMA NMR n. 18 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{12}O$ deduciamo che mancano 2 idrogeni (una coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 6 \cdot 2 + 2 = 14$] e quindi c'è **una insaturazione**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola **non possiede un carbonile**.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 3.75 ppm, quindi deduciamo che la molecola non ha doppi legami $C=C$ e quindi l'insaturazione è dovuta ad un anello.

Dato che è assente il segnale dell'OH alcolico, la molecola deve essere un **etere ciclico**. Dato infine che ci sono due gruppi CH_3 che non possono appartenere all'anello, i rimanenti 4 carboni e l'ossigeno possono formare solo un etere ciclico a cinque atomi, **tetraidrofurano**.

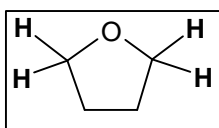


I due gruppi legati all'ossigeno etereo sono da ricercare tra quelli a spostamento chimico maggiore.

Il **CH_2 tripetto a 3.75 ppm** è il primo gruppo **legato all'ossigeno**, ha un assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 2 (O) = 3.3$].

Il **CH_2 singoletto a 3.67 ppm** è l'altro gruppo **legato all'ossigeno**, come è confermato dal suo assorbimento vicino a quello previsto [$1.3 (CH_2) + 2 (O) = 3.3$].

La molecola determinata fino a questo punto è la seguente:

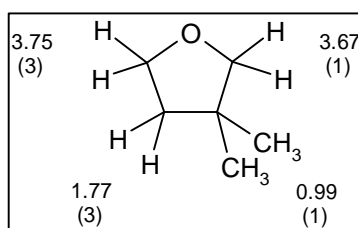


Dato che il **CH_2 a 3.67 ppm è un singoletto**, non ha idrogeni vicini e questo permette di collocare vicino a lui i **due CH_3 identici a 0.99 ppm**. Anche questi CH_3 sono un singoletto infatti sono legati ad un carbonio quaternario.

Il **CH_2 tripetto a 1.77 ppm** si trova nell'ultima posizione rimasta, accoppiato al CH_2 tripetto a 3.75 ppm. Essendo entrambi tripletti sono reciprocamente accoppiati.

La molecola incognita è così completamente determinata, si tratta di 3,3-dimetiltetraidrofurano.

3,3-dimetiltetraidrofurano



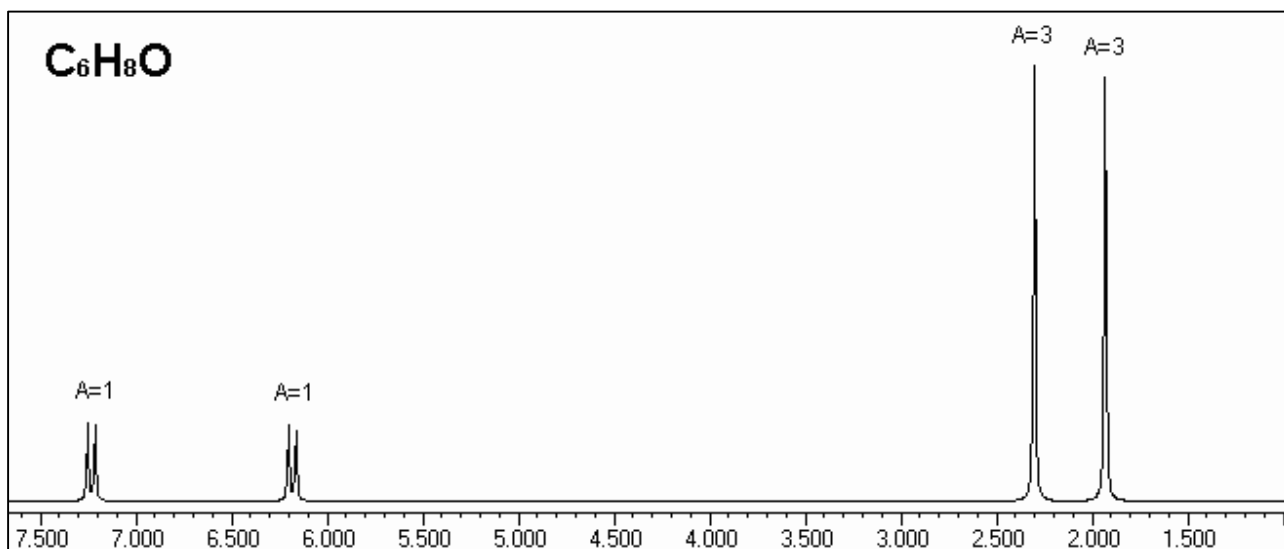
PROBLEMA NMR n. 19 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_6H_8O deduciamo che mancano 6 idrogeni (3 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 6 \cdot 2 + 2 = 14$] e quindi ci sono **3 insaturazioni**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola **non possiede un carbonile**. Quindi deve possedere o tre doppi legami o due doppi legami e un anello, o un doppio e un triplo legame.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 7.23 ppm, nella zona dei composti aromatici.

Dato che è assente il segnale dell'OH alcolico, la molecola deve essere un **etere aromatico**. Dato infine che ci sono due gruppi CH_3 che non possono appartenere all'anello, i rimanenti 4 carboni e l'ossigeno possono formare solo un etere aromatico a cinque atomi, **furano**.



Ricordiamo che nel furano la risonanza con l'ossigeno in anello porta una parziale carica positiva sull'ossigeno e una parziale carica negativa nella posizione 3 dell'anello.



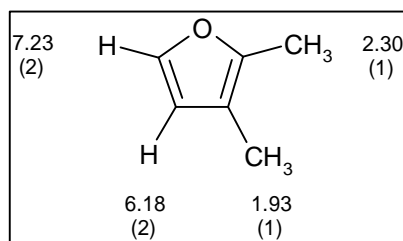
Questo porta ad una maggiore schermatura degli idrogeni in posizione 3 e 4 che assorbono a 6.4 ppm, mentre gli idrogeni vicini all'ossigeno assorbono a 7.4 ppm.

I due doppietti a 7.23 ppm e a 6.18 ppm sono attribuibili a due idrogeni adiacenti (perché sono doppietti) il primo si trova in posizione 2 e l'altro in posizione 3 dell'anello.

I due CH_3 singoletti a 2.30 e 1.93 ppm si trovano nelle altre due posizioni dell'anello col più deschermato (2.30 ppm) più vicino all'ossigeno elettronegativo.

La molecola incognita è così completamente determinata, si tratta di 2,3-dimetilfurano.

2,3-dimetilfurano



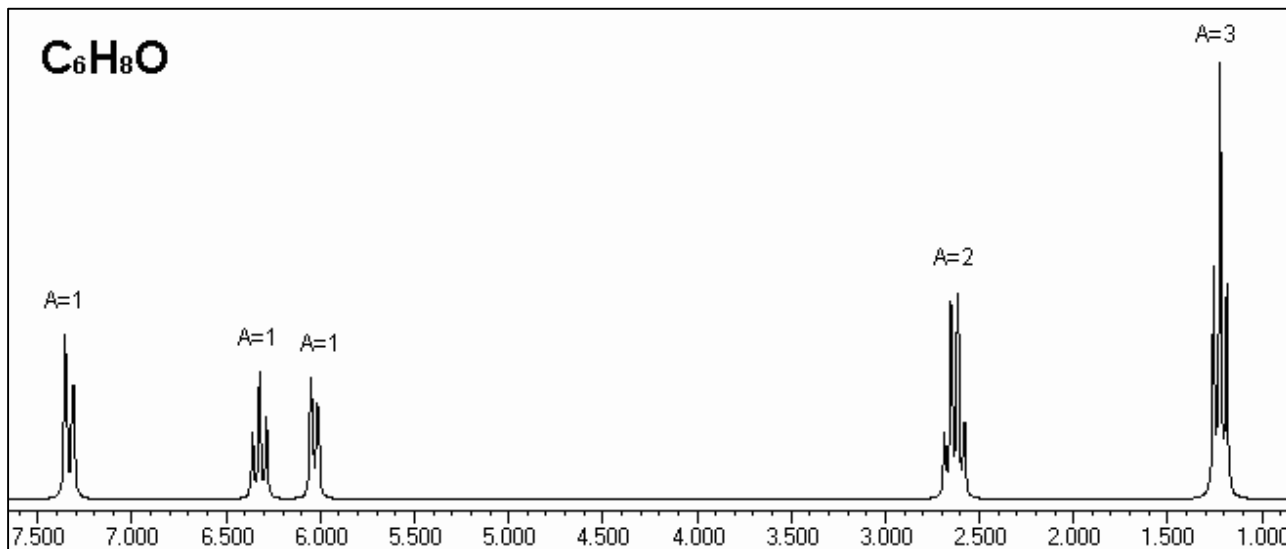
PROBLEMA NMR n. 20 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_6H_8O deduciamo che mancano 6 idrogeni (3 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 6 \cdot 2 + 2 = 14$] e quindi ci sono **3 insaturazioni**.

Dall'analisi dello spettro IR sappiamo che la molecola **non possiede un carbonile**. Quindi deve possedere o tre doppi legami o due doppi legami e un anello, o un doppio e un triplo legame.

Esaminando lo spettro NMR qui sotto, vediamo che lo spostamento chimico maggiore è 7.23 ppm, nella zona dei composti aromatici.

Dato che è assente il segnale dell'OH alcolico, la molecola deve essere un **etere aromatico**. Dato infine che ci sono due gruppi CH_3 che non possono appartenere all'anello, i rimanenti 4 carboni e l'ossigeno possono formare solo un etere aromatico a cinque atomi, **furano**.



Ricordiamo che nel furano la risonanza con l'ossigeno in anello porta una parziale carica positiva sull'ossigeno e una parziale carica negativa nella posizione 3 dell'anello.



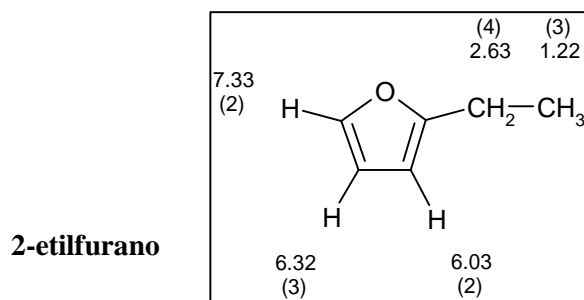
Questo porta ad una maggiore schermatura degli idrogeni in posizione 3 e 4 che assorbono a 6.4 ppm, mentre gli idrogeni vicini all'ossigeno assorbono a 7.4 ppm.

Il **CH doppietto a 7.33 ppm** è l'idrogeno aromatico del furano vicino all'ossigeno infatti assorbe vicino a 7.4 ppm.

Il **CH tripletto a 6.32 ppm** e il **CH doppietto a 6.03 ppm** assorbono nella zona degli idrogeni aromatici lontani dall'ossigeno. Il CH tripletto a 6.32 ppm è quello che occupa la posizione intermedia perché, essendo tripletto, è accoppiato con gli altri due.

Il **CH₂ quartetto a 2.63 ppm** e il **CH₃ tripletto a 1.22 ppm** sono accoppiati tra loro e formano un **gruppo etile** legato nell'ultima posizione disponibile in anello, vicino all'ossigeno.

La molecola incognita è così completamente determinata, si tratta di 2-etilfurano.

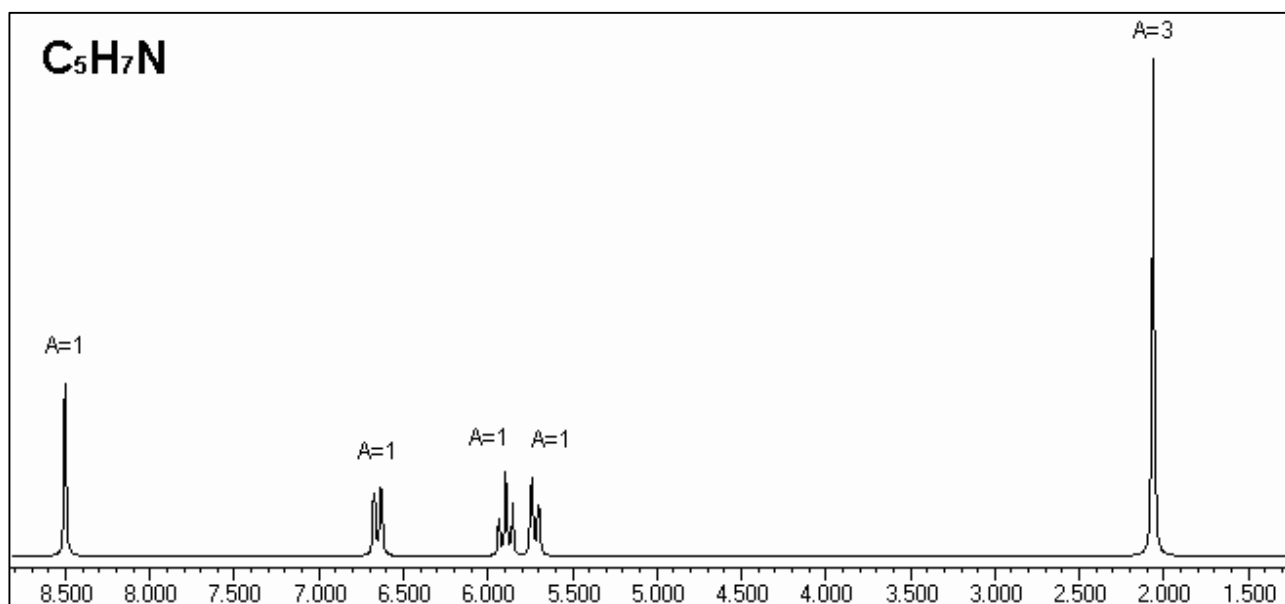


PROBLEMA NMR n. 21 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_5H_7N osserviamo che mancano 6 idrogeni (3 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 2 + 1(N) = 13$] quindi deduciamo che ci sono **tre insaturazioni** che potrebbero essere causate da 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 a **2.06 ppm**, con i restanti 4 carboni non si possono realizzare 3 doppi legami, né ci può essere un legame triplo e uno doppio perché gli idrogeni vinilici avrebbero costanti di accoppiamento diverse che darebbero segnali complessi che non vediamo nello spettro.

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 incognita deve allora essere un **pirrolo metil sostituito**.

Lo spettro NMR è riportato qui sotto:



Il **singoletto a 8.50 ppm** è dovuto all'**NH del pirrolo**, che, a causa della sua acidità, assorbe a delta particolarmente elevati. Questo dipende dalla parziale carica positiva che l'azoto assume per risonanza con l'anello.

I tre idrogeni legati all'anello danno rispettivamente i tre segnali a 6.65, 5.89 e 5.72 ppm. Sono accoppiati tra loro essendo doppietto, tripletto e doppietto, e quindi **sono contigui**.

Il **doppietto a 6.65 ppm** è l'idrogeno più deschermato quindi è vicino all'azoto elettronegativo e parzialmente positivo.

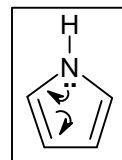
Il **tripletto a 5.89 ppm** è l'idrogeno centrale che è accoppiato con tutti e due gli altri idrogeni.

Il **doppietto a 5.72 ppm** è l'ultimo di questi tre idrogeni consecutivi nell'anello.

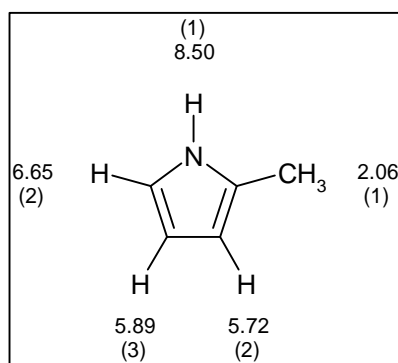
Il CH_3 **singoletto a 2.06 ppm** deve essere quindi nella **posizione 2 dell'anello**.

Si noti che l'**idrogeno sull'azoto** (come negli alcoli) **non risulta accoppiato** con l'idrogeno vicino.

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



2-metilpirrolo

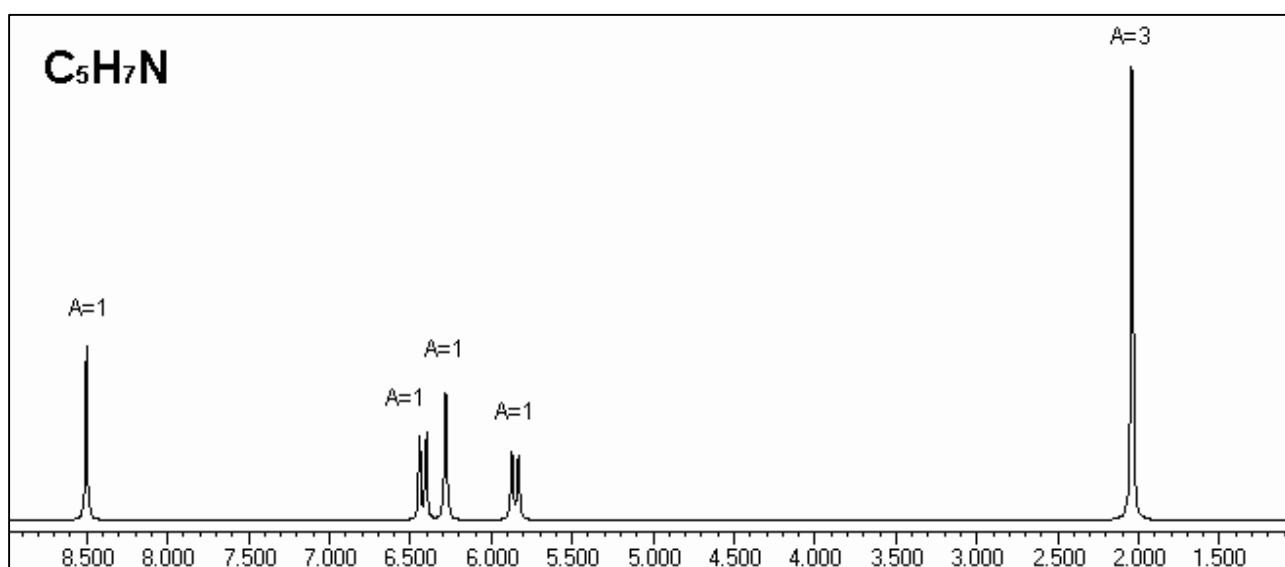


PROBLEMA NMR n. 22 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_5H_7N osserviamo che mancano 6 idrogeni (3 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 1(N) = 13$] quindi deduciamo che ci sono **tre insaturazioni** che potrebbero essere causate da 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 a **2.04 ppm**, con i restanti 4 carboni non si possono realizzare 3 doppi legami, né ci può essere un legame triplo e uno doppio perché gli idrogeni vinilici avrebbero costanti di accoppiamento diverse che darebbero segnali complessi che non vediamo nello spettro.

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 incognita deve allora essere un **pirrolo metil sostituito**.

Lo spettro NMR è riportato qui sotto:



Il **singoletto a 8.50 ppm** è dovuto all'**NH del pirrolo**, che, a causa della sua acidità, assorbe a delta particolarmente elevati. Questo dipende dalla parziale carica positiva che l'azoto assume per risonanza con l'anello.

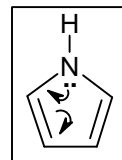
I tre idrogeni legati all'anello danno rispettivamente i tre segnali a 6.42, 6.28 e 5.85 ppm.

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

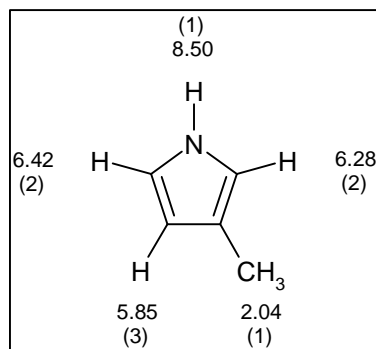
I **due doppietti a 6.42 e 5.85 ppm** si riferiscono a due idrogeni **accoppiati tra loro** che quindi devono essere nelle **posizioni 4 e 5** dell'anello avendo da un lato il metile e dall'altro l'azoto. L'idrogeno più deschermato a 6.42 ppm è quello in posizione 5 vicino all'azoto elettronegativo.

Si noti che l'**idrogeno sull'azoto** (come negli alcoli) **non risulta accoppiato** con gli idrogeni vicini.

La molecola cercata è quindi 3-metilpirrolo:



3-metilpirrolo

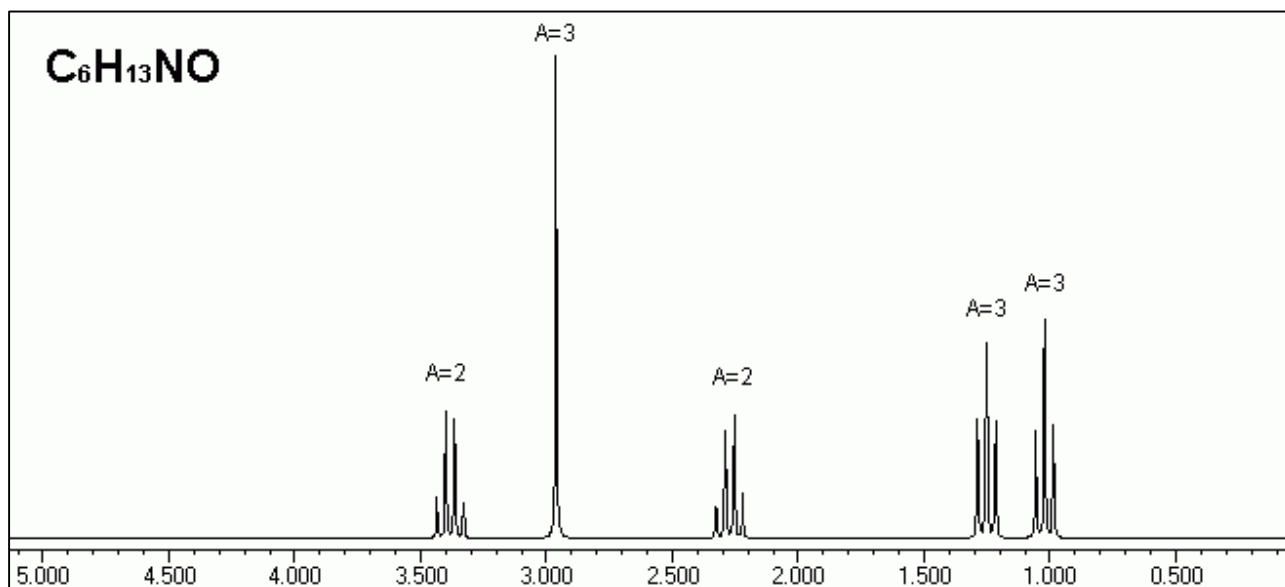


PROBLEMA NMR n. 23 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{13}NO$ osserviamo che mancano 2 idrogeni (1 coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 6 \cdot 2 + 2 + 1(N) = 15$], quindi c'è **una insaturazione**.

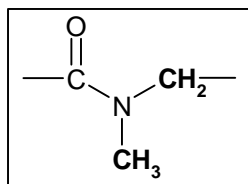
Dai dati IR sappiamo che è presente un **carbonile** (segnale IR intenso a circa 1700 cm^{-1}) quindi l'insaturazione è qui e concludiamo che questo è l'**unico doppio legame presente**.

L'analisi dello spettro NMR mostrato qui sotto indica l'**assenza di idrogeni legati all'azoto**. Si notano invece due gruppi etilici ed un CH_3 , questo obbliga a mettere vicini carbonile ed azoto. La molecola è quindi una ammide N,N disostituita



I gruppi legati all'azoto dell'ammide sono attesi tra 2.9 e 3.7 ppm.

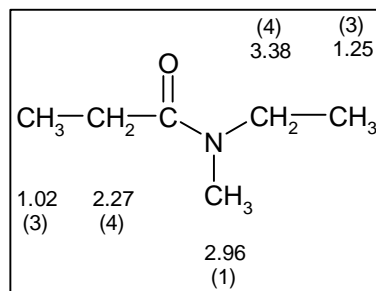
Il CH_2 quartetto a 3.38 ppm e il CH_3 singoletto a 2.96 ppm sono attribuibili ai due gruppi **legati all'azoto dell'ammide** [$1.3 (CH_2) + 2 (N\text{ ammide}) = 3.3$] e [$0.9 (CH_3) + 2 (N\text{ ammide}) = 2.9$].



Il CH_2 quartetto a 2.27 ppm è invece legato al **carbonile** [$1.3 (CH_2) + 1 (C=O) = 2.3$]. Essendo un quartetto, è vicino a tre idrogeni e quindi al **CH_3 tripletto a 1.10 ppm**.

Il CH_3 tripletto a 1.15 ppm chiude invece la catena legandosi al CH_2 a 3.38 ppm sull'azoto. Anche questo etile ha la classica struttura di CH_2 quartetto e CH_3 tripletto.

La molecola incognita è allora:



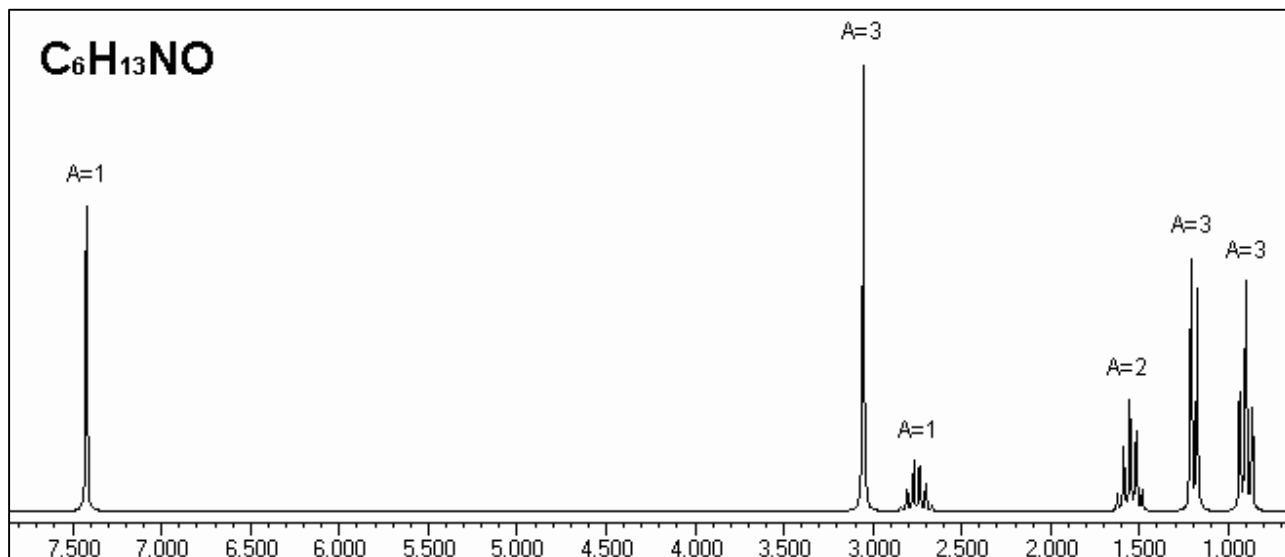
N-etil-N-metilpropanammide

PROBLEMA NMR n. 24 – soluzione

Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{13}NO$ osserviamo che mancano 2 idrogeni (1 coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{\text{sat}} = 6 \cdot 2 + 2 + 1(N) = 15$], quindi c'è **una insaturazione**.

Dai dati IR sappiamo che è presente un **carbonile** (segnale IR intenso a circa 1700 cm^{-1}) quindi l'insaturazione è qui e concludiamo che questo è l'**unico doppio legame presente**.

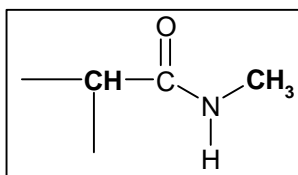
L'analisi dello spettro NMR indica la presenza di un **NH di un'amide** (singoletto a **7.42 ppm**).



Esaminiamo i due segnali attorno a 3 ppm.

Il CH_3 **singoletto a 3.05 ppm** è il segnale a delta maggiore. Si tratta di un CH_3 **legato all'azoto ammidico** come rivela questa semplice previsione [$0.9 (CH_3) + 2 (N \text{ amide}) = 2.9$].

Il CH **sestetto a 2.75 ppm** è invece il CH **legato al carbonile dell'amide** [$1.7 (CH) + 1 (C=O) = 2.7$].

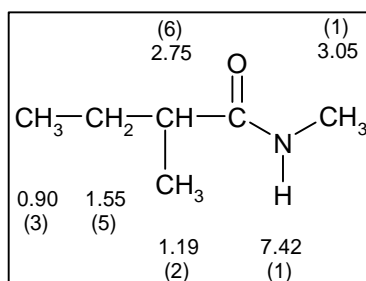


Il CH a 2.75 ppm è legato al CH_3 **doppietto a 1.19 ppm** (doppietto: vicino ad un idrogeno, il CH).

Il CH a 2.75 ppm, infine, è anche legato al CH_2 **quintetto a 1.55 ppm** che a sua volta lega il CH_3 **tripletto a 0.90 ppm** (che deve essere vicino a due idrogeni e quindi al CH_2).

La molecola incognita è allora:

N,2-dimetilbutanamide

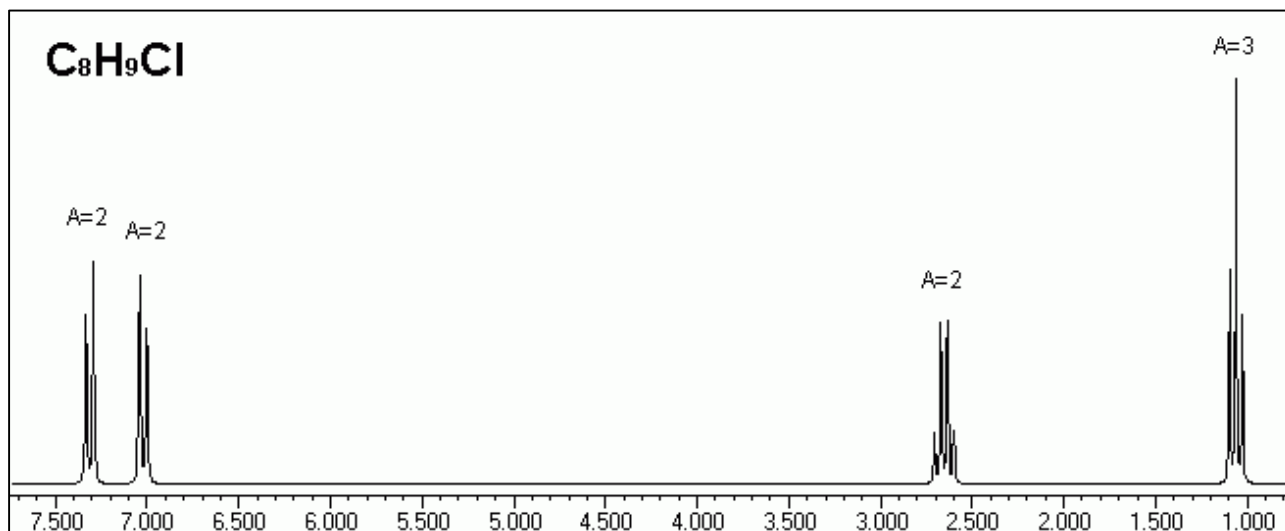


PROBLEMA NMR n. 25 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_8H_9Cl osserviamo che mancano 8 idrogeni rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 8 \cdot 2 + 2 - 1 (Cl) = 17$], quindi ci sono **4 insaturazioni** che fanno pensare ad un **anello benzenico**.

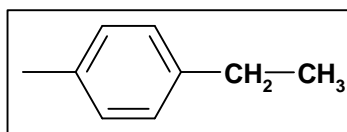
Confermiamo questa deduzione osservando i due **doppietti** a **7.22** e **7.06 ppm** che sono dovuti a due coppie di idrogeni tra loro equivalenti tipici di un **benzene para disostituito**.

Lo spettro NMR è riportato qui sotto:



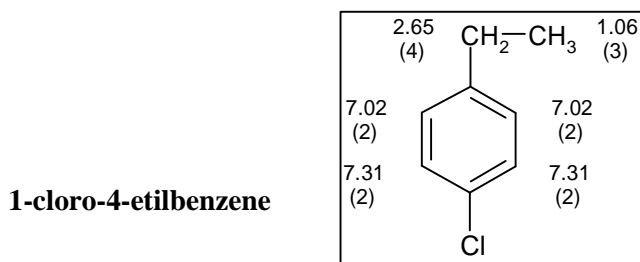
Il **CH₂ quartetto a 2.59 ppm** è legato all'anello benzenico [$1.3 (CH_2) + 1.5 (\text{anello benzenico}) = 2.8$].

Il **CH₃ tripetto a 1.24 ppm** è legato al CH₂ a 2.59 ppm e forma un **gruppo etilico legato all'anello**.



Il cloro deve essere legato nella **posizione para** dell'anello.

I dati fin qui raccolti indicano che la molecola cercata è:



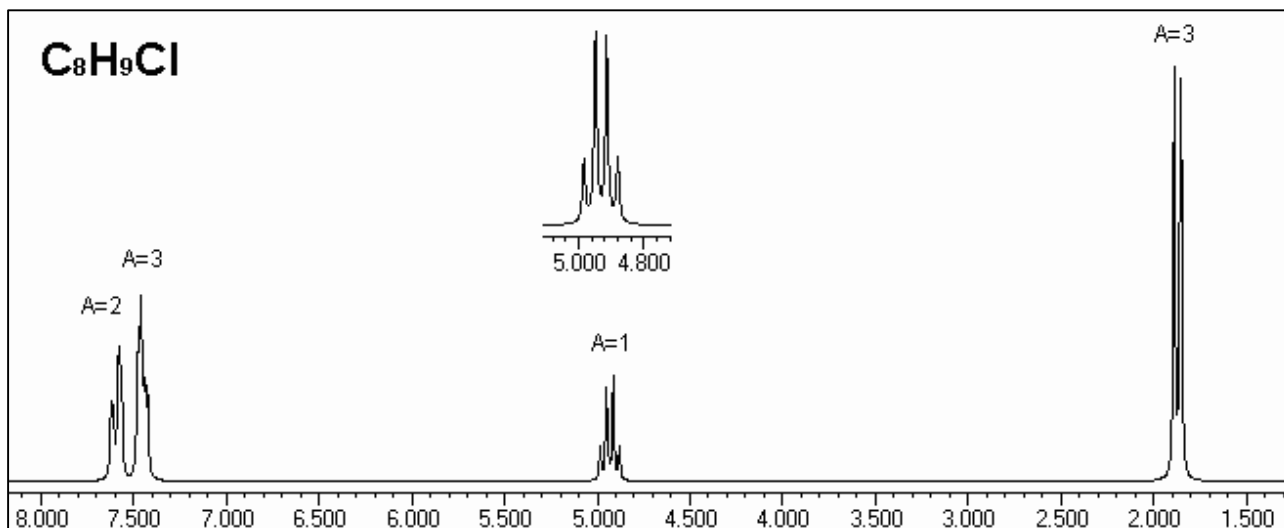
Notate che gli idrogeni nell'anello vicini al gruppo etile sono più schermati (7.06 ppm contro 7.31 ppm) perché si trovano su carboni sono più ricchi di elettroni a causa dell'iperconiugazione del gruppo etile. Infatti è questa la posizione più reattiva dell'anello nelle reazioni di sostituzione elettrofila aromatica.

PROBLEMA NMR n. 26 - soluzione

Dall'analisi della formula bruta C_8H_9Cl osserviamo che mancano 8 idrogeni rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 8 \cdot 2 + 2 - 1 (Cl) = 17$], quindi ci sono **4 insaturazioni** che fanno pensare ad un **anello benzenico**.

Osservando lo spettro NMR riportato qui sotto, possiamo confermare questa deduzione per la presenza dei due segnali a **7.59 e 7.45 ppm** che si trovano nella zona tipica degli idrogeni del benzene.

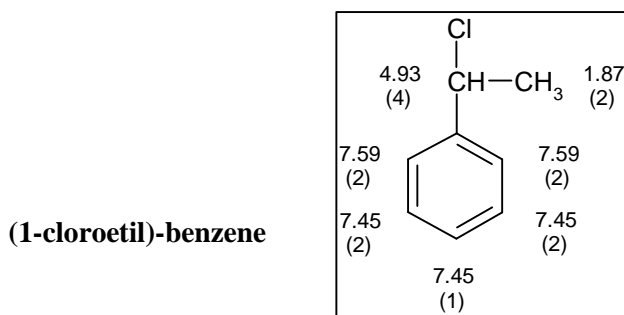
Osservando inoltre che gli idrogeni aromatici sono 5, deduciamo che l'**anello benzenico** è **monosostituito**.



Il **CH quartetto a 4.93 ppm** è legato al **CH₃ doppietto a 1.87 ppm** (che infatti è un doppietto perché è vicino all'idrogeno del CH).

Il **CH quartetto a 4.93 ppm** è legato anche al **benzene e all'atomo di cloro** come si deduce dal suo spostamento chimico particolarmente elevato [$1.7 (CH) + 2 (Cl) + 1.5 (benzene) = 5.2$]

La molecola incognita è quindi (1-cloroetil)-benzene:

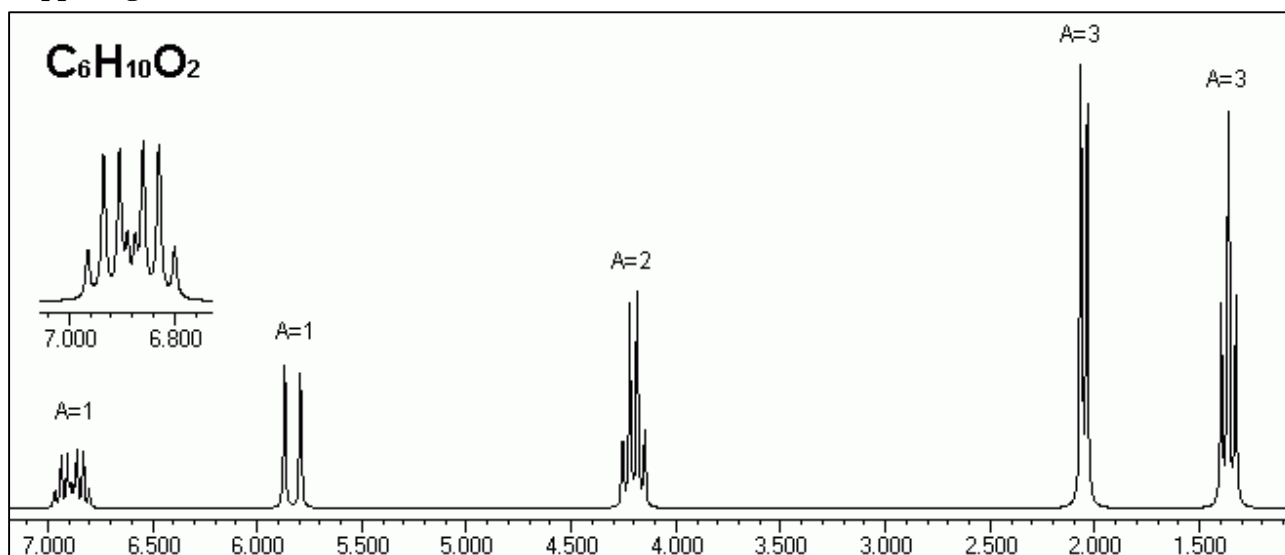


PROBLEMA NMR n. 27 - soluzione

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

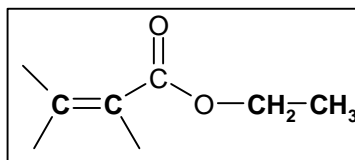
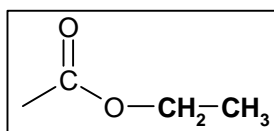
Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{10}O_2$ osserviamo che mancano 4 idrogeni (due coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 6 \cdot 2 + 2 = 14$] e quindi ci sono **due insaturazioni**.

Di queste una è dovuta al carbonile, la seconda potrebbe essere dovuta o ad un doppio legame o ad un anello. Osservando lo spettro NMR qui sotto, notiamo che i picchi a **6.88** e a **5.83 ppm** 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 disostituito**.



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 **CH₂ quartetto a 4.20 ppm** è legato al **CH₃ tripletto a 1.36 ppm** e forma un **gruppo etile legato all'ossigeno di un estere** [1.3 (CH₂) + 3 (O estere) = 4.3]. Da questo deduciamo che la molecola è un **estere etilico**. Inoltre, poiché c'è un doppio legame disostituito, questo deve essere legato col carbonile. Abbiamo così un **estere metilico alfa beta insaturo**.

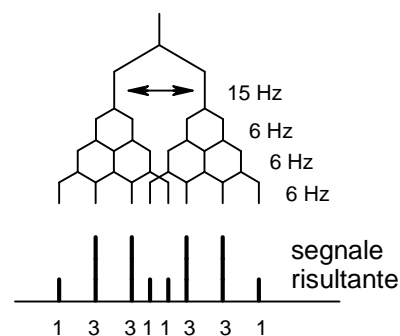
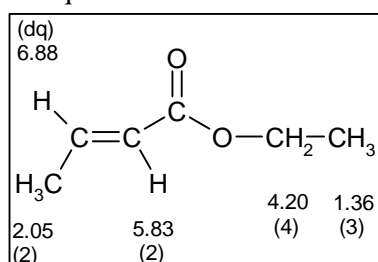


L'altro segnale sulla destra dello spettro, il **CH₃ doppietto a 2.05 ppm**, è legato ai carboni del doppio legame che avevamo indicato disostituito [0.9 (CH₃) + 1 (C=C) = 1.9]. Dato che è un doppietto, è accoppiato con un idrogeno adiacente e questo è il **CH vinilico a 6.88 ppm** che infatti è un **doppietto di quartetti**.

La sua struttura complessa ci racconta un accoppiamento con l'altro idrogeno vinilico, il **CH doppietto a 5.83 ppm** (i cui due picchi mostrano una grande costante di accoppiamento $J = 15$ Hz tipica degli idrogeni **trans**), e anche con il **CH₃ doppietto a 2.05 ppm** (i cui picchi mostrano una costante di accoppiamento minore $J = 6$ Hz). Questo produce un doppietto di quartetti come è facile verificare con la tecnica dell'albero di frazionamento mostrata qui a fianco.

Dall'analisi fatta la molecola incognita è quindi:

trans etil 2-butenato

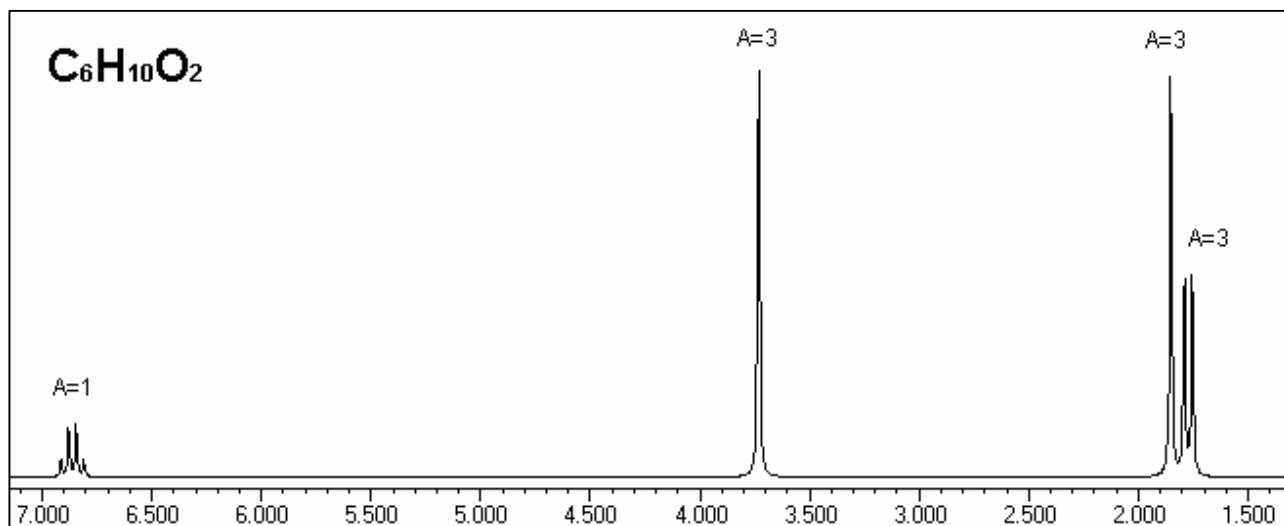


PROBLEMA NMR n. 28 - soluzione

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

Dall'analisi della formula bruta $C_6H_{10}O_2$ osserviamo che mancano 4 idrogeni (due coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 6 \cdot 2 + 2 = 14$] e quindi ci sono **due insaturazioni**.

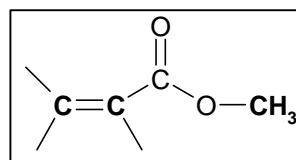
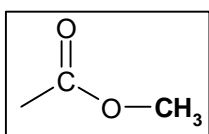
Di queste una è dovuta al carbonile, la seconda potrebbe essere dovuta o ad un doppio legame o ad un anello. Esaminando lo spettro NMR qui sotto, si vede che il **CH quartetto a 6.86 ppm** si trova nella zona degli idrogeni vinilici (5.68 ppm) e, avendo area 1, indica la presenza di un doppio legame con un solo idrogeno vinilico e quindi un **doppio legame trisostituito**.



La molecola possiede un secondo ossigeno oltre a quello del carbonile, ma non ci sono gruppi OH (né alcolici né acidi) dato che nello spettro non se ne osservano i segnali.

Il **CH₃ singoletto a 3.73 ppm**, dato che ha un assorbimento vicino a 3.9 ppm, deve essere legato all'ossigeno di un estere [$0.9 (CH_3) + 3 (O \text{ estere}) = 3.9$]. Quindi la molecola è un **estere metilico**. Inoltre, poiché c'è un doppio legame trisostituito, questo deve essere legato al carbonile.

Abbiamo così un **estere metilico alfa-beta insaturo**.



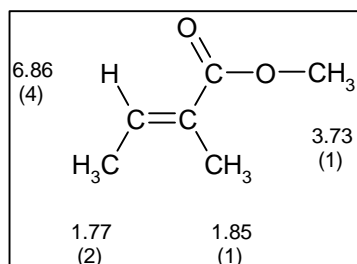
Il **CH₃ a 1.77 ppm, essendo un doppietto**, ha un idrogeno adiacente e questo deve essere l'**idrogeno vinilico a 6.86 ppm** (che infatti ha molteplicità 4). Entrambi, quindi, si devono trovare sull'ultimo carbonio del doppio legame. L'idrogeno vinilico a 6.86 ppm ha un assorbimento particolarmente alto (+ 1 rispetto ad un alchene) quindi va posto **in posizione cis rispetto al carbonile** che con la sua circolazione elettronica lo può deschermare ulteriormente.

Se, invece, l'idrogeno vinilico fosse in posizione trans rispetto al carbonile assorbirebbe a 6.0 ppm (solo + 0.3 rispetto ad un alchene) perché sarebbe deschermato solo per risonanza.

Il **CH₃ singoletto a 1.85 ppm** è legato alla posizione rimanente sul doppio legame.

Dall'analisi fatta la molecola cercata è quindi:

(2E) metil 2-metilbut-2-enoato



PROBLEMA NMR n. 29 - soluzione

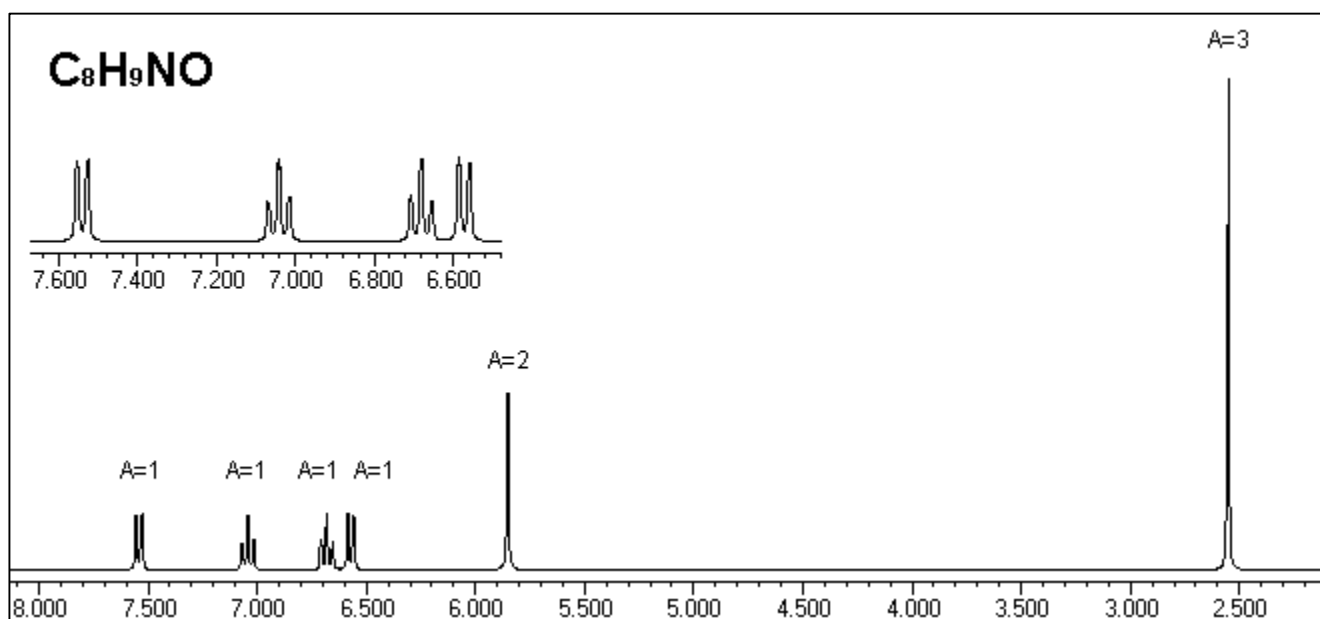
I dati dello spettro IR indicano la presenza di un **carbonile**.

Dall'analisi della formula bruta C_8H_9NO osserviamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 8 \cdot 2 + 2 + 1 (N) = 19$] e quindi ci sono **5 insaturazioni**, una di queste è attribuibile al carbonile, le restanti quattro fanno pensare ad un **anello aromatico**.

Questa ipotesi è confermata dai quattro segnali che si osservano tra **6.5 e 7.5 ppm** nella zona tipica degli idrogeni aromatici.

Osservando le aree di questi picchi deduciamo che nell'anello ci sono 4 idrogeni, quindi si tratta di un **benzene disostituito**.

Lo spettro NMR è riportato qui di seguito:

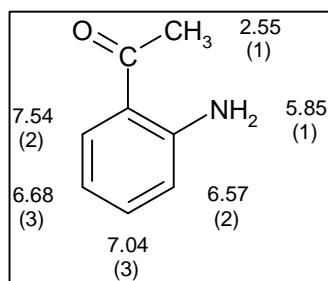


Osservando la porzione ingrandita dello spettro NMR che contiene i segnali dei quattro idrogeni aromatici, possiamo concludere che si tratta di un benzene orto di-sostituito dato che i 4 idrogeni appaiono contigui uno all'altro perché i quattro picchi sono doppietto, tripletto, tripletto, doppietto.

I due idrogeni a **5.85 ppm** appartengono ad un gruppo NH_2 legato direttamente all'anello (se il gruppo NH_2 fosse legato al carbonile per formare una ammide, assorbirebbe intorno a 7.5 ppm).

Il **CH_3 singoletto a 2.55 ppm** deve essere legato al carbonile e forma un gruppo acetile legato all'anello [$0.9 (CH_3) + 1 (C=O) + 0,3 (\text{beta benzene}) = 2.2$].

Dalle osservazioni fatte la molecola risulta essere:



1-(2-amminofenil)etanone
orto amminoacetofenone

Si noti che gli idrogeni in orto e para rispetto al gruppo amminico sono fortemente schermati rispetto al benzene (7.27 ppm) infatti assorbono a 6.57 e 6.68 ppm in accordo con la parziale carica negativa che arriva in anello in orto e para per la donazione di elettroni per risonanza da parte dell'azoto.

PROBLEMA NMR n. 30 - soluzione

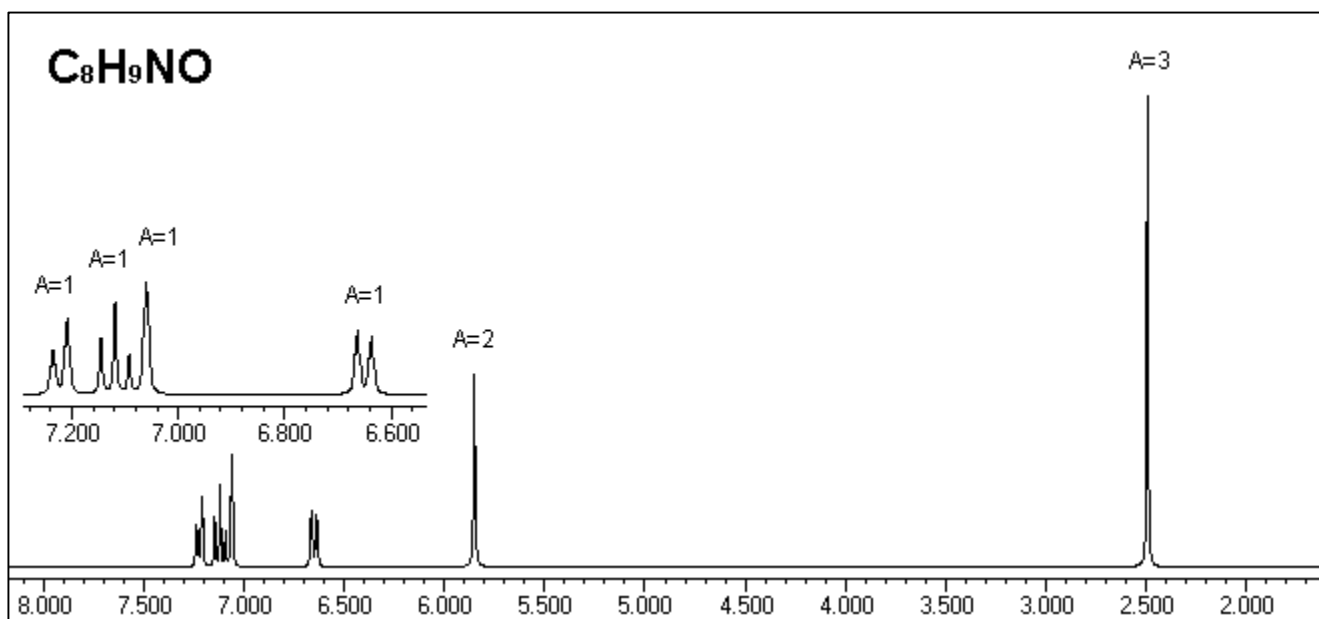
I dati dello spettro IR indicano la presenza di un **carbonile**.

Dall'analisi della formula bruta C_8H_9NO osserviamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 8 \cdot 2 + 2 + 1 (N) = 19$] e quindi ci sono **5 insaturazioni**, una di queste è attribuibile al carbonile, le restanti quattro fanno pensare ad un **anello aromatico**.

Questa ipotesi è confermata dai quattro segnali che si osservano tra **6.5 e 7.5 ppm** nella zona tipica degli idrogeni aromatici.

Osservando le aree di questi picchi deduciamo che all'anello sono legati 4 idrogeni, quindi si tratta di un **benzene disostituito**.

Lo spettro NMR è riportato qui di seguito:

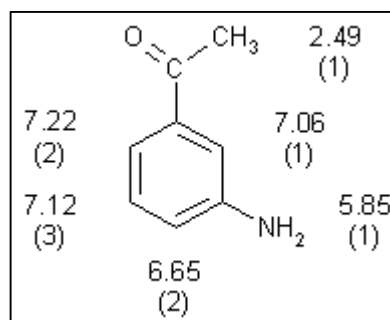


Osservando la porzione dello spettro NMR che contiene i segnali dei quattro idrogeni aromatici, si vede che si tratta di un **benzene meta disostituito** dato che i quattro idrogeni sono distribuiti in due gruppi, tre idrogeni sono contigui uno all'altro mentre il quarto è isolato. Infatti tre picchi sono doppietto (7.22 ppm), tripletto (7.12 ppm), doppietto (6.65 ppm), mentre il quarto è un singoletto (7.06 ppm).

I due idrogeni a **5.85 ppm** appartengono ad un **gruppo NH_2** legato direttamente all'anello (se il gruppo NH_2 fosse legato al carbonile per formare una ammide, assorbirebbe intorno a **7.5 ppm**).

Il **CH_3 singoletto a 2.49 ppm** deve essere invece legato al carbonile, e forma un gruppo acetile legato all'anello [$0.9 (CH_3) + 1 (C=O) + 0,3 (beta \text{ benzene}) = 2.2$].

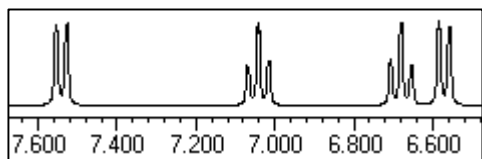
Dalle osservazioni fatte la molecola risulta essere:



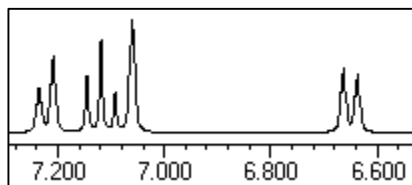
1-(3-amminofenil)etanone
meta amminoacetofenone

Si noti che l'idrogeno aromatico in **orto rispetto al gruppo amminico** assorbe a **6.65 ppm** ed è quindi molto deschermato rispetto a quello in orto al gruppo acetile (7.22 ppm). Questo è la conseguenza della donazione di elettroni all'anello per risonanza del gruppo amminico e indica inoltre la posizione dell'anello più reattiva verso le reazioni di sostituzione elettrofila aromatica.

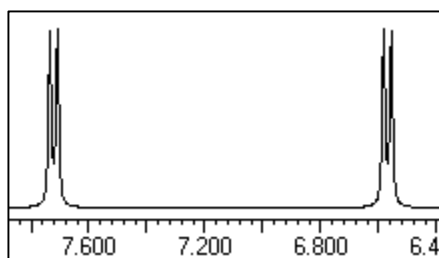
E' interessante riassumere qui il profilo dei segnali degli idrogeni aromatici in anelli orto, meta e para di-sostituiti:



sostituzione **orto**
(4 idrogeni contigui)



sostituzione **meta**
(3 idrogeni contigui, uno isolato, singoletto)



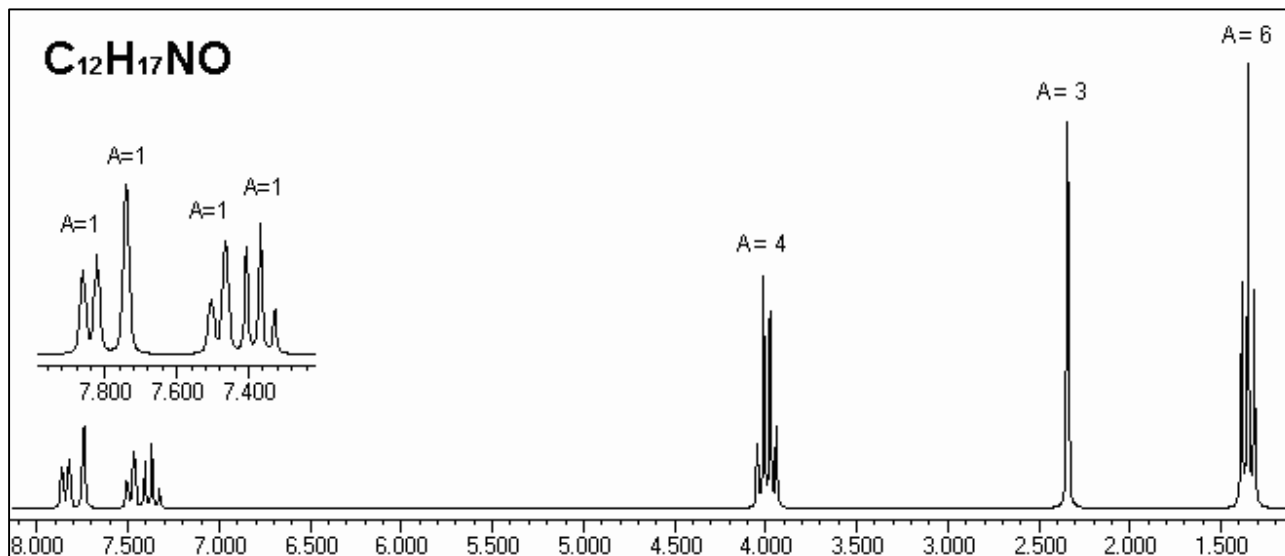
sostituzione **para**
(simmetrica: 2 coppie di idrogeni contigui)

PROBLEMA NMR n. 31 - soluzione

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

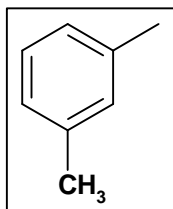
Dall'analisi della formula bruta $C_{12}H_{17}NO$ osserviamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 12 \cdot 2 + 2 + 1 (N) = 27$] e quindi ci sono **5 insaturazioni**, una di queste è attribuibile al carbonile, le restanti quattro fanno pensare ad un **anello aromatico**.

Con lo spettro NMR confermiamo questa ipotesi per la presenza dei segnali tra **7.37 e 7.84 ppm** nella zona tipica degli idrogeni aromatici e dato che questi sono 4, deduciamo che si tratta di un **benzene disostituito**.



Esaminiamo meglio la parte sinistra dello spettro NMR che contiene i segnali dei quattro idrogeni aromatici. Notiamo un **H singoletto a 7.74 ppm**, mentre gli altri tre idrogeni sono vicini tra loro essendo doppietto, tripletto, doppietto. Da questo deduciamo che si tratta di **benzene meta disostituito**.

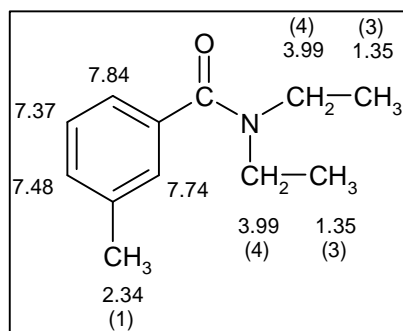
Il **CH₃ singoletto a 2.35 ppm** è attribuibile ad un metile legato all'anello [$0.9 (CH_3) + 1.5$ (anello benzenico) = 2.4 ppm].



L'atomo di azoto è sostituito e non lega idrogeni, infatti mancano i picchi degli idrogeni amminici (intorno a **5.0 ppm**) e ammidici (tra **6.5 e 9.0 ppm**). Osserviamo poi che i due segnali a **3.99 e 1.35 ppm** sono accoppiati tra loro e si riferiscono ai CH₂ e CH₃ di **due gruppi etilici uguali**.

Dallo spostamento chimico dei CH₂ degli etili deduciamo che sono legati ad un **azoto ammidico** che per risonanza è parzialmente positivo e ha un forte effetto deschermante [$1.3 (CH_2) + 2 (N \text{ ammidico}) = 3.3$].

La molecola incognita, quindi è:



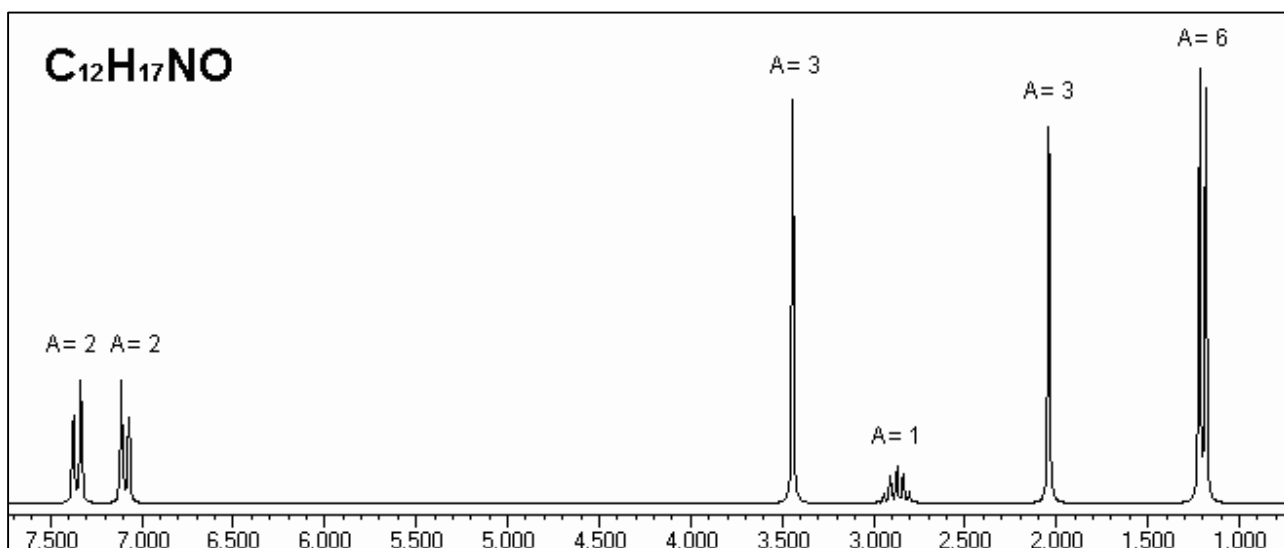
N,N-diethyl-3-metilbenzamide
nome commerciale: Autan

PROBLEMA NMR n. 32 - soluzione

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

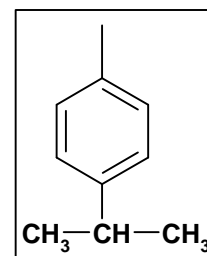
Dall'analisi della formula bruta $C_{12}H_{17}NO$ osserviamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 12 \cdot 2 + 2 + 1 (N) = 27$] e quindi ci sono **5 insaturazioni**, una di queste è attribuibile al carbonile, le restanti quattro fanno pensare ad un **anello aromatico**.

Questa ipotesi è confermata dai due doppietti che si osservano a **7.35 e 7.09 ppm** nella zona tipica degli idrogeni aromatici. Questi picchi deduciamo che all'anello sono legati 4 idrogeni, quindi si tratta di un **benzene disostituito**. I due doppietti simmetrici indicano una disostituzione **para**.



L'azoto è sostituito e non lega idrogeni, infatti mancano i picchi degli idrogeni amminici (intorno a **5.0 ppm**) e ammidici (tra **6.5 e 9.0 ppm**).

Il **CH a 2.87 ppm** e i **due CH₃ a 1.20 ppm** sono accoppiati tra loro e sono un **gruppo isopropilico**: il CH ha molteplicità 7, cioè è vicino a 6 idrogeni, e i due CH₃ hanno molteplicità 2 cioè sono vicini ad un idrogeno. Lo spostamento chimico del CH, **2.87 ppm**, ci fa capire che il gruppo isopropilico è legato all'anello benzenico [$1.7 (CH) + 1.5 (anello benzenico) = 3.2$].



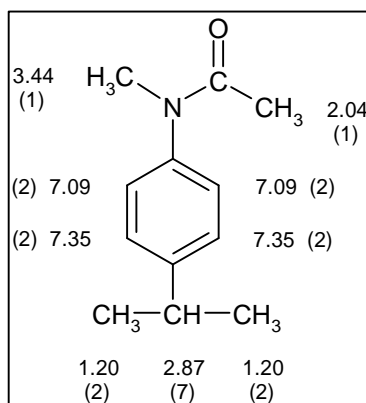
Il **CH₃ singoletto a 3.44 ppm** assorbe a delta così alti che è legato ad un **azoto ammidico** [$0.9 (CH_3) + 2 (N ammidico) = 2.9$], ma un azoto che è anche **in risonanza con l'anello** [$2.9 + 0.5 (risonanza) = 3.4$].

La deduzione che **l'azoto ammidico è legato all'anello** si ottiene anche osservando che una delle coppie di idrogeni aromatici assorbe a **7.09 ppm**, un valore tipico di **benzeni attivati** (il benzene assorbe a 7.27 ppm).

Il **CH₃ singoletto a 2.04 ppm** è invece legato al **carbonile** dell'ammidico [$0.9 (CH_3) + 1 (carbonile) = 1.9$].

La molecola cercata è quindi:

N-(4-isopropilfenil)-N-metilacetammide

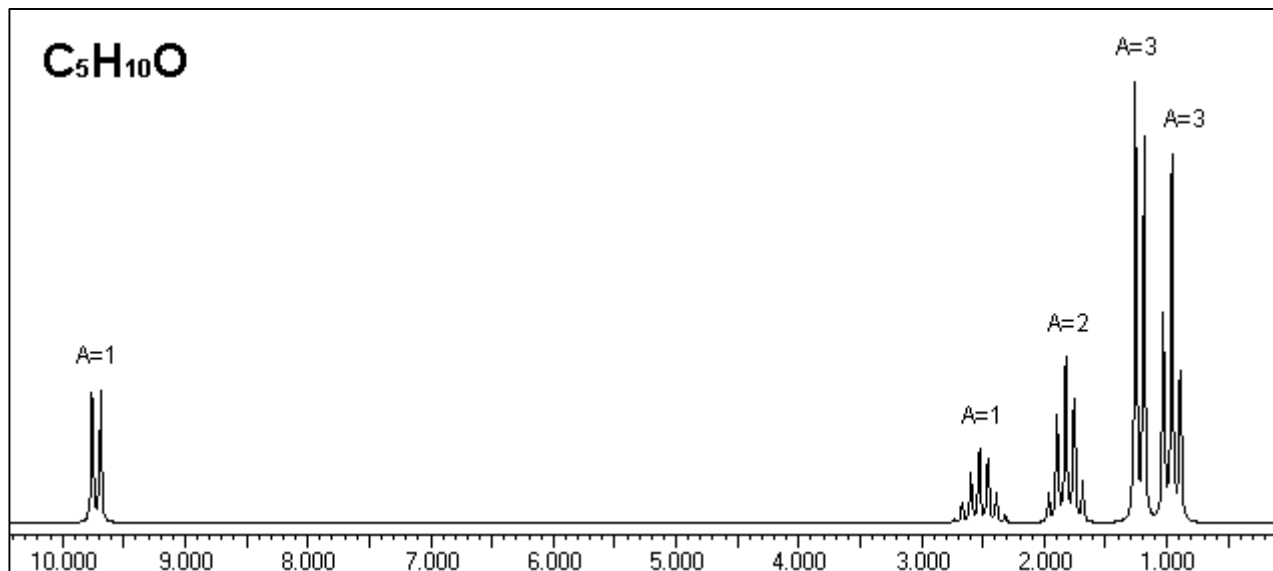


PROBLEMA NMR n. 33 – soluzione

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

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{10}O$ osserviamo che mancano 2 idrogeni (1 coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi c'è **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 **9.72 ppm** indica che si tratta di un' **aldeide**.



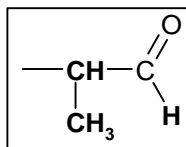
Esaminiamo i segnali dello spettro cominciando da sinistra.

Il **CH doppietto a 9.72 ppm**, è il segnale dell'**H aldeidico** e, in quanto doppietto, è vicino ad un CH.

Il **CH septetto a 2.52 ppm** è dunque quello legato al carbonile [$1.7 (CH) + 1 (C=O) = 2.7$]

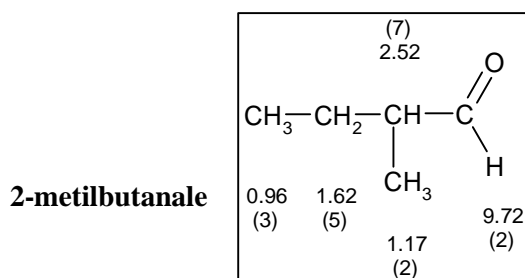
Il **CH₃ doppietto a 1.17 ppm** è legato al CH a 2.52 ppm (doppietto: vicino ad un idrogeno)

La parte di molecola individuata finora è la seguente:



Il **CH₂ quintetto a 1.62 ppm** e il **CH₃ tripletto a 0.96 ppm** sono accoppiati tra loro (tripletto, vicino ad due idrogeni) e costituiscono un **gruppo etile** legato al CH (quintetto: vicino a quattro idrogeni, CH₃ e CH)

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

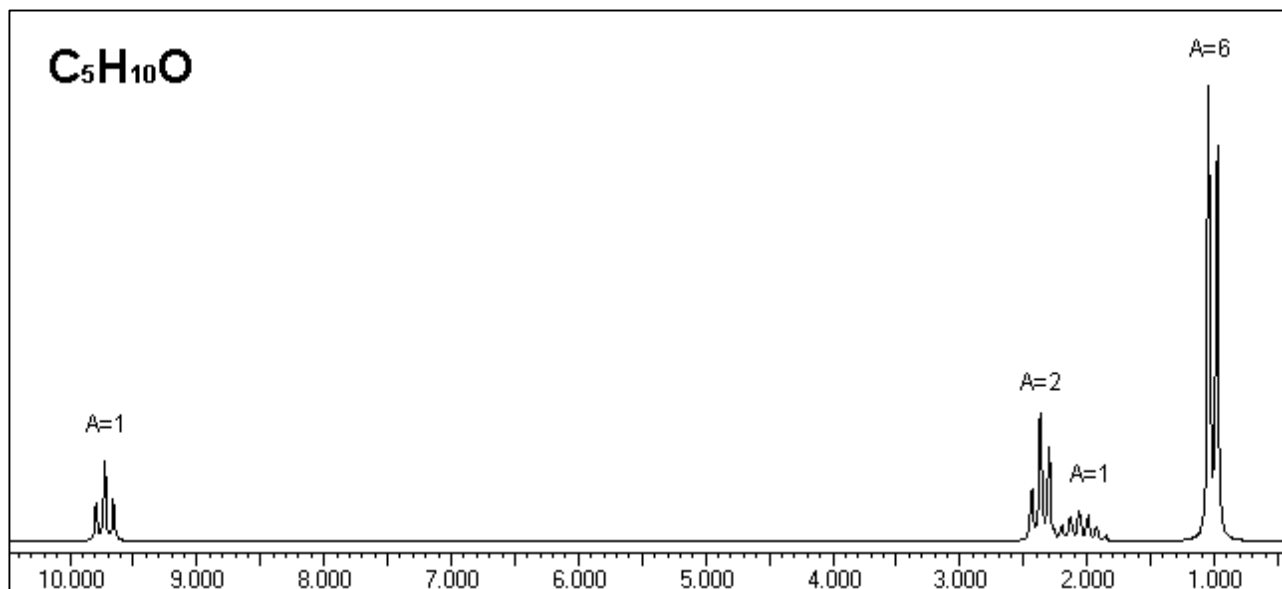


PROBLEMA NMR n. 34 – soluzione

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

Dall'analisi della formula bruta $C_5H_{10}O$ osserviamo che mancano 2 idrogeni (1 coppia) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 5 \cdot 2 + 2 = 12$] e quindi c'è **una sola insaturazione** che quindi deve essere attribuita al carbonile. Nella molecola non ci sono anelli o altri doppi legami.

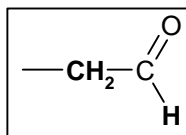
La presenza del segnale a **9.72 ppm** indica che si tratta di un'**aldeide**.



Esaminiamo i segnali dello spettro cominciando da sinistra.

Il **CH tripletto a 9.72 ppm** rappresenta il segnale dell'H aldeidico e, in quanto tripletto, è vicino ad un CH_2 .

Il **CH_2 tripletto a 2.36 ppm** è dunque quello legato al carbonile [$1.3 (CH_2) + 1 (C=O) = 2.3$]

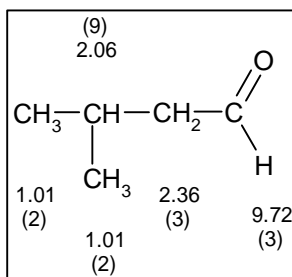


Essendo un tripletto, questo CH_2 è vicino a due idrogeni, Da una parte l'H aldeidico e dall'altra un altro idrogeno, un CH.

Il **CH multipletto a 2.06 ppm** è quindi il prossimo della catena ed è legato ai **due CH_3 del doppietto a 1.01 ppm** (doppietto: vicini ad un CH)

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

3-metilbutanale

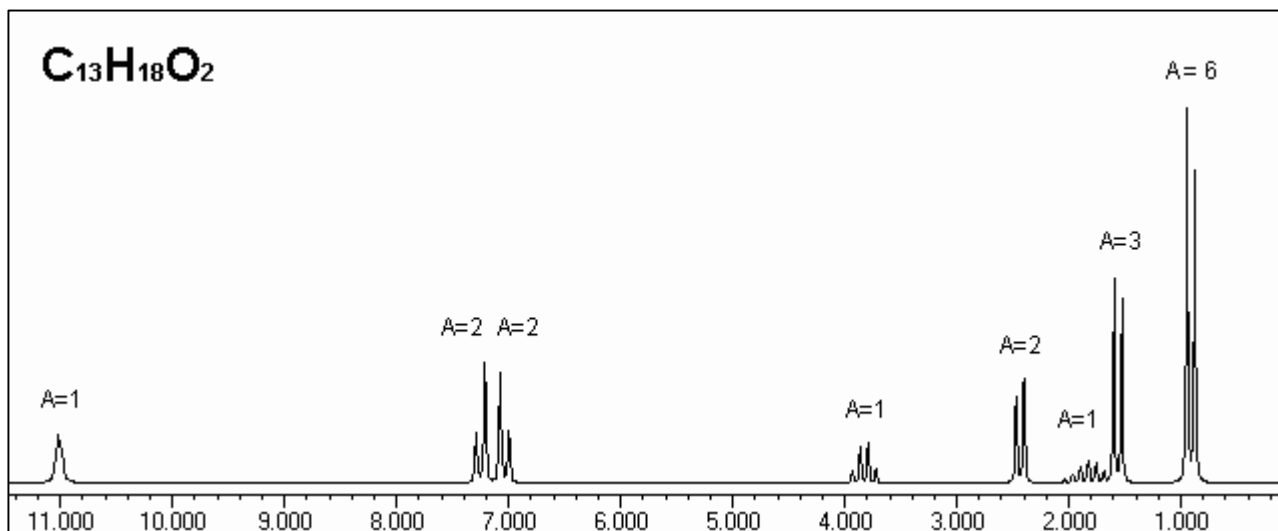


PROBLEMA NMR n. 35 – soluzione

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

Dall'analisi della formula bruta $C_{13}H_{18}O_2$ osserviamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{\text{sat}} = 13 \cdot 2 + 2 = 28$] e quindi ci sono **5 insaturazioni**. Una di queste è attribuibile al carbonile, le restanti quattro fanno pensare ad un **anello aromatico**.

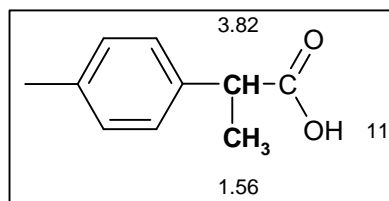
Questa ipotesi è confermata dai due doppietti che si osservano a **7.24 e 7.04 ppm** nella zona tipica degli idrogeni aromatici. Questi picchi deduciamo che all'anello sono legati 4 idrogeni, quindi si tratta di un **benzene disostituito**. I due doppietti simmetrici indicano una disostituzione **para**.



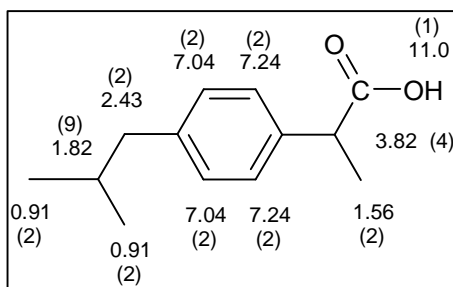
Iniziando a leggere lo spettro da sinistra, **il segnale a 11 ppm** è dovuto all'idrogeno di un acido carbossilico, quindi il carbonile è presente nel **gruppo COOH**.

Il **CH quartetto a 3.82 ppm**, è legato al carbossile [$1.7 (\text{CH}) + 1 (\text{C}=\text{O}) = 2.7$], ma questo non basta per giustificare il suo spostamento chimico e deve essere legato quindi anche all'anello benzenico [$1.7 (\text{CH}) + 1 (\text{C}=\text{O}) + 1.5 (\text{benzene}) = 4.2$]

Questo CH, dato che è quartetto, è vicino ad un CH_3 che deve essere il **CH_3 doppietto a 1.56 ppm** (doppietto: vicino ad un CH). La parte di molecola individuata fin qui è quindi:



Restano da attribuire tre segnali. Il **CH_2 doppietto a 2.43 ppm** è l'unico che può essere legato al benzene [$1.3 (\text{CH}_2) + 1.5 (\text{benzene}) = 2.8$] nella posizione para. Questo CH_2 , essendo un doppietto, è legato al **CH multipletto a 1.82 ppm**. Questo a sua volta lega i **due CH_3 doppietto a 0.91 ppm**. La molecola è così determinata, si tratta di:



acido 2-(4-isobutilfenil)-propanoico.

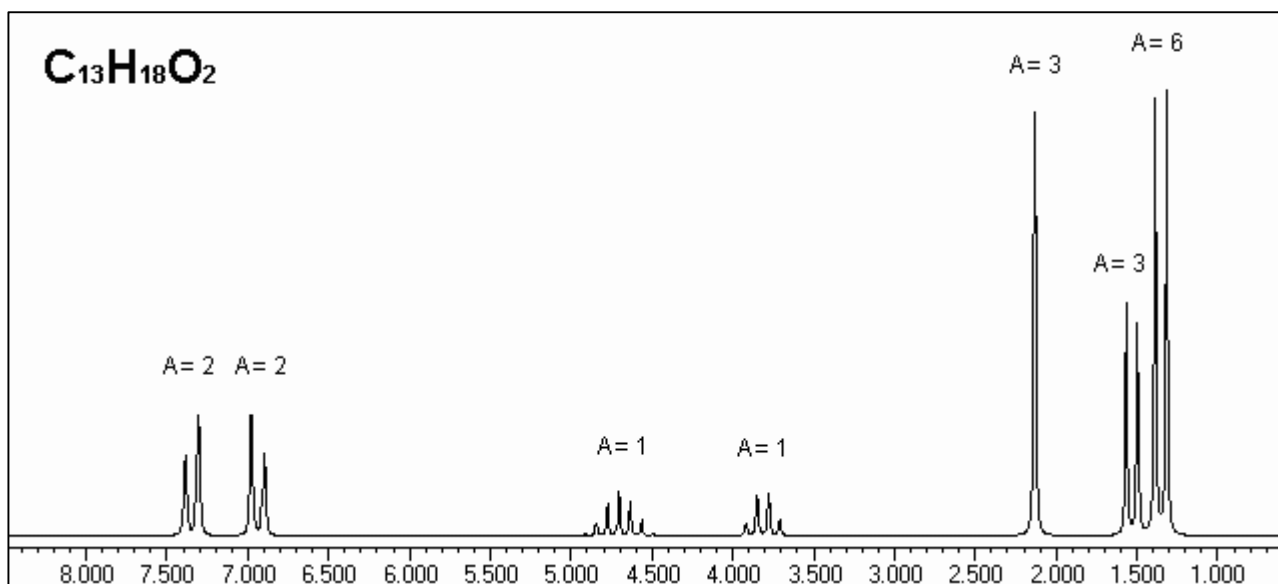
Il suo nome commerciale è **ibuprofen**, una molecola usata come farmaco antiinfiammatorio.

PROBLEMA NMR n. 36 – soluzione

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

Dall'analisi della formula bruta $C_{13}H_{18}O_2$ osserviamo che mancano 10 idrogeni (5 coppie) rispetto ad una molecola satura [$H_{sat} = 13 \cdot 2 + 2 = 28$] e quindi ci sono **5 insaturazioni**. Una di queste è attribuibile al carbonile, le restanti quattro fanno pensare ad un **anello aromatico**.

Questa ipotesi è confermata dai due doppietti che si osservano a **7.34** e **6.94 ppm** nella zona tipica degli idrogeni aromatici. Questi picchi deduciamo che all'anello sono legati 4 idrogeni, quindi si tratta di un **benzene disostituito**. I due doppietti simmetrici indicano una disostituzione **para**.

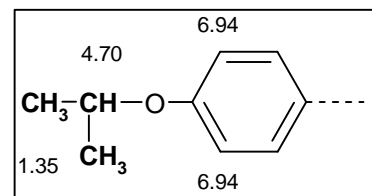


Iniziamo da sinistra, dopo i due doppietti degli idrogeni dell'anello.

Il primo segnale è il **CH septetto a 4.70 ppm** che forma un **gruppo isopropilico** con i **due CH₃ doppietto a 1.35 ppm**.

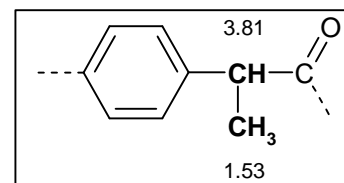
Il CH assorbe a delta così alti che deve essere legato all'ossigeno per formare un fenil etere [$1.7 (CH) + 2.5 (O-Ph) = 4.2$] o un estere [$1.7 (CH) + 3 (O-estere) = 4.7$].

Dato però che due idrogeni dell'anello assorbono a delta insolitamente bassi (**6.94 ppm**), deduciamo che l'anello è ricco di elettroni e quindi è attivato da un **ossigeno legato all'anello** che forma un **fenil etere**.



Il **CH quartetto a 3.81 ppm** è legato al **CH₃ doppietto a 1.53 ppm** come si deduce dalla loro molteplicità.

Il CH, per avere un delta così elevato, deve essere legato tra l'anello e il carbonile [$1.7 (CH) + 1 (C=O) + 1.5 (benzene) = 4.2$].



L'ultimo segnale da attribuire è il **CH₃ singoletto a 2.13 ppm**.

Si tratta di un CH₃ che deve essere legato al carbonile e quindi forma un chetone.

L'assorbimento previsto per il CH₃ è di 1.9 ppm [$0.9 (CH_3) + 1 (C=O) = 1.9$].

La molecola è quindi determinata, si tratta di:

3-(4-isopropilossifenil)-butan-2-one.

