

## Guida alla determinazione delle strutture molecolari a partire da dati spettrometrici

L'unico modo per acquisire esperienza nella determinazione delle strutture molecolari a partire da dati spettrometrici è fare pratica. Un approccio (non l'unico!) che molti studenti trovano utile nel risolvere questo tipo di problemi è il seguente.

- 1) Effettuare tutte le operazioni di routine:
  - (a) Determinare il peso molecolare dalla formula molecolare o dallo spettro di massa.
  - (b) Determinare il grado di insaturazione e vedere se la regola dell'azoto è applicabile.
  - (c) Determinare il numero relativo di protoni nei differenti ambienti dallo spettro NMR protonico.
  - (d) Determinare il numero dei carboni nei differenti ambienti dallo spettro NMR del  $^{13}\text{C}$ . Determinare inoltre il numero dei carboni quaternari (legati a quattro atomi di carbonio), metinici (CH), metilenici ( $\text{CH}_2$ ) e metilici ( $\text{CH}_3$ ).
- 2) Con il supporto delle tabelle fornite, esaminare ogni singolo spettro ed annotare ogni elemento strutturale riconoscibile:
  - (a) Esaminare lo spettro FTIR ed identificare la presenza di gruppi funzionali caratteristici come -OH, - $\text{NH}_2$ ,  $\text{NO}_2$ , -SH,  $-\text{N}_3$ , -CN,  $\text{C}\equiv\text{C-H}$ .
  - (b) Esaminare lo spettro di massa ed identificare la presenza di frammenti tipici ( $\text{PhCH}_2-$ ,  $\text{CH}_3\text{CO}-$ ,  $\text{CH}_3-$  *etc.*).
  - (c) Esaminare lo spettro  $^1\text{H}$  NMR per identificare gruppi tipici come  $\text{CH}_3-\text{CH}_2$ ,  $(\text{CH}_3)_2-\text{CH}$ , alcheni, acidi, alcol, ammine *etc.*
  - (d) Esaminare lo spettro  $^{13}\text{C}$  NMR per identificare carboni tipici come alcheni, acidi, chetoni esteri *etc.*
- 3) Sommare gli atomi di tutti i gruppi funzionali trovati e compararli alla formula molecolare. Se mancano atomi all'appello dovresti avere un altro importante indizio strutturale (per esempio presenza di un ossigeno di un etere?).
- 4) Provare ad assemblare la struttura. Ci saranno sicuramente più modi di assemblare la struttura molecolare a partire dagli elementi trovati. I possibili dubbi si risolvono analizzando lo spostamento chimico dei segnali degli spettri  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  NMR.
- 5) Una volta decisa una struttura rianalizzare tutti gli spettri per cercare inconsistenze.