

# ESERCIZI – NMR

## A SPUNTI DI RIFLESSIONE

1. La realizzazione di una tomografia (*imaging*) NMR è più o meno pericolosa per la persona di una tomografia PET?

.....  
.....  
.....

2. Come si spiega il fatto che l'adozione della tecnica a impulsi consenta perfino di valutare la velocità con cui si muove il sangue nelle coronarie?

.....  
.....  
.....

3. La tecnica NMR può essere usata per la determinazione dell'acqua in un campione?

.....  
.....  
.....

4. La tecnica NMR può essere utile per risalire all'origine di un vino?

.....  
.....  
.....

5. Perché l'NMR non è una tecnica molto sensibile per l'analisi chimica?

.....  
.....  
.....

6. Per quale motivo gli idrogeni aromatici assorbono a campi nettamente più bassi dei metili?

.....  
.....  
.....

7. Spiegare perché l'effetto degli elettroni del triplo legame è opposto a quello degli idrogeni del doppio legame.

.....  
.....  
.....

8. Da cosa dipende la complementarità, in chimica organica, fra la spettroscopia NMR del  $^{13}\text{C}$  e la spettroscopia NMR dell' $^1\text{H}$ ?

.....  
.....  
.....

9. Con quali tipi di tecniche si riesce ad ottenere una forte semplificazione dello spettro NMR del  $^{13}\text{C}$ ?

.....  
.....  
.....

10. Spiegare su quale principio si basa la tecnica dello SNIF-NMR.

.....  
.....  
.....

## B PROBLEMI NUMERICI

Fare riferimento anche alle sintetiche Tavole di correlazione riportate in fondo

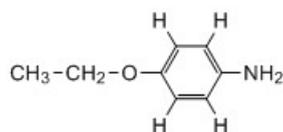
1. La *p*-cloroanilina fornisce uno spettro  $^1\text{H}$ -NMR con un picco singolo a 3,60 ppm, un doppietto a 6,57 ppm e un altro doppietto a 7,05 ppm. Spiegare, tenendo conto che il primo picco scompare per deuteroazione.

.....  
.....

2. L'1,1 dicloroacetato di etile fornisce uno spettro  $^1\text{H}$ -NMR con un tripletto a 1,35 ppm, un quadrupletto a 4,33 ppm e un picco singolo a 5,93 ppm. Spiegare.

.....  
.....

3. La *p*-fenetidina, di formula:



fornisce uno spettro  $^1\text{H}$ -NMR con un tripletto a 1,35 ppm, un picco singolo allargato a 3,30 ppm, un quadrupletto a 3,93 ppm e un doppietto intenso con piccoli picchi adiacenti fra 6,63 e 6,70 ppm. Spiegare.

.....  
.....

4. Il 4-metil-pentin-3-olo, di formula  $\text{HC}=\text{C-CH}(\text{OH})\text{-CH}(\text{CH}_3)_2$  fornisce uno spettro  $^1\text{H}$ -NMR con due picchi singoli, molto vicini (che tendono a sdoppiarsi), a 1,00 e 1,02 ppm, un multipletto a circa 2 ppm, un doppietto a 2,47 ppm, un picco singolo ma allargato a 2,82 ppm e infine un quadrupletto a 4,18 ppm. Spiegare.

.....  
.....

5. Predire in linea di principio gli spettri NMR delle seguenti molecole:

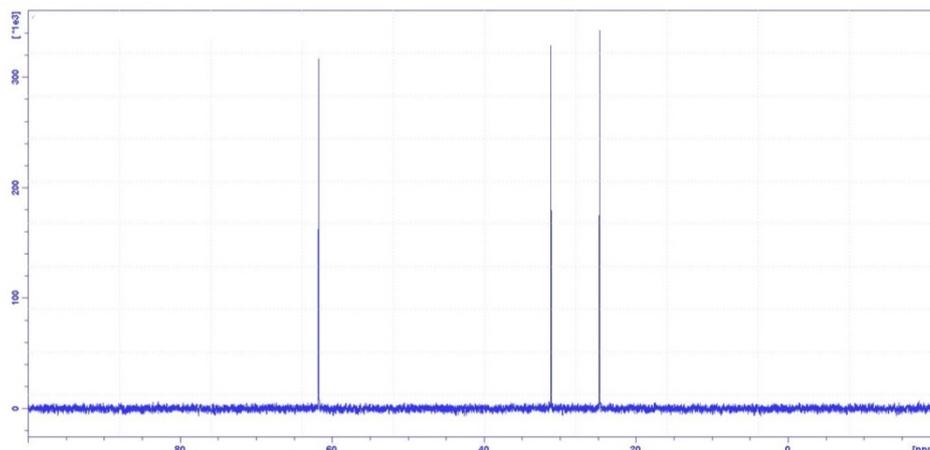
- a) acetofenone
- b) etilbenzene
- c) 2-clorobutano

.....  
.....  
.....



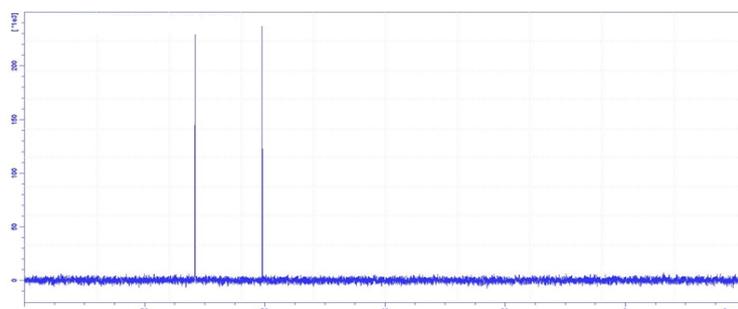
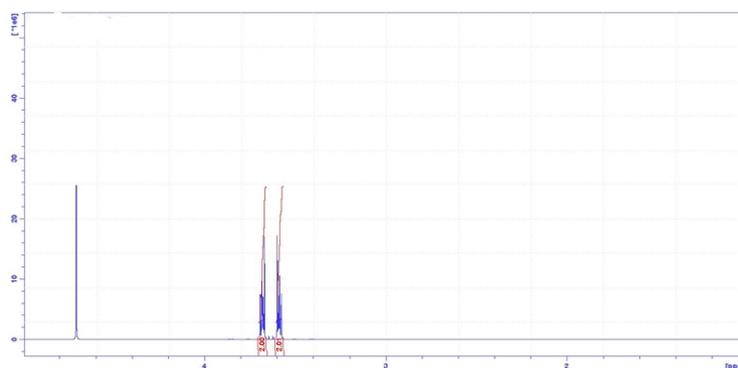


10. Un prodotto industriale, denominato genericamente *glicole esilenico*, ha dato lo spettro  $^{13}\text{C}$  che segue. Qual è la posizione dei due ossidrili?



.....  
.....  
.....  
.....

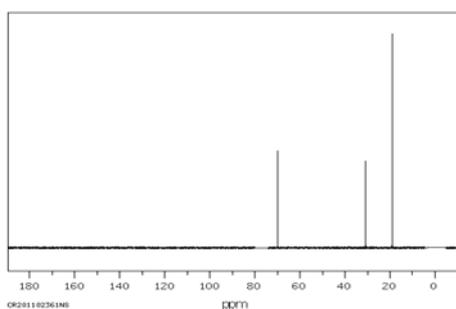
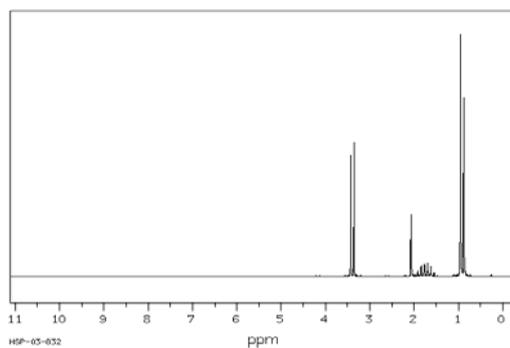
11. Stabilire la struttura della molecola di formula  $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}_3$  che ha dato i seguenti spettri  $^1\text{H}$ -NMR e  $^{13}\text{C}$ -NMR, registrati in  $\text{D}_2\text{O}$  (il segnale degli eventuali ossidrili non comparirebbe, mentre il picco verso i 3,7 ppm è attribuibile a tracce di  $\text{H}_2\text{O}$ ).



.....  
.....  
.....  
.....



**12.** Stabilire la struttura della molecola di formula  $C_4H_{10}O$ , che ha dato il seguente spettro  $^1H$ -NMR in  $CDCl_3$ , tenendo anche conto che il doppietto a campi alti è dovuto a tre idrogeni.



.....

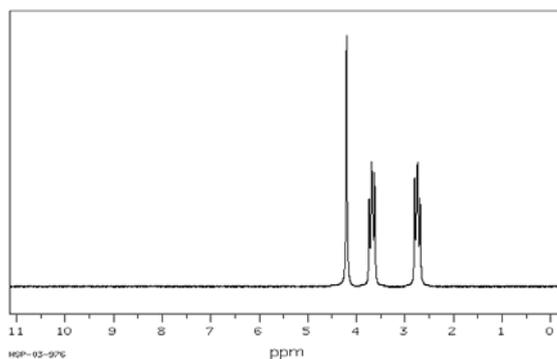
.....

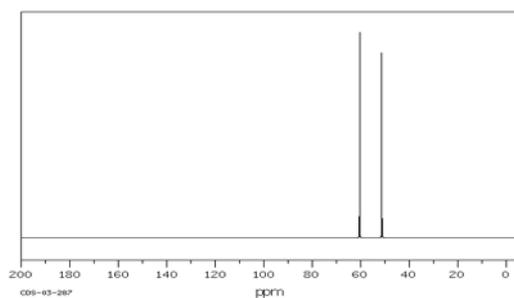
.....

.....

.....

**13.** Stabilire la struttura dell'ammina di formula  $C_4H_{11}NO_2$ , che ha dato i seguenti spettri  $^1H$ -NMR e  $^{13}C$ -NMR, registrati in  $CDCl_3$ , tenendo conto particolarmente della presenza o assenza di insaturazioni.





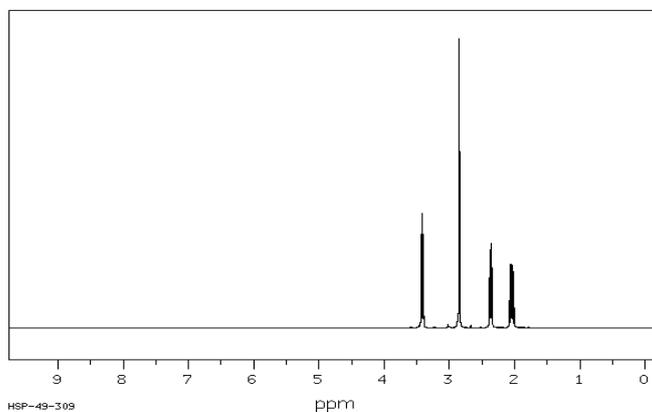
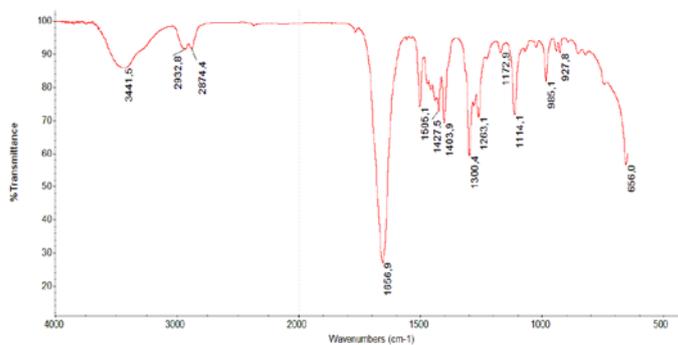
.....

.....

.....

.....

**14.** Stabilire la struttura della molecola di formula  $C_5H_9NO$ , che ha dato lo spettro FT-IR e lo spettro  $^1H$ -NMR registrato a 400 MHz in  $CDCl_3$ , riportati qui di seguito:



.....

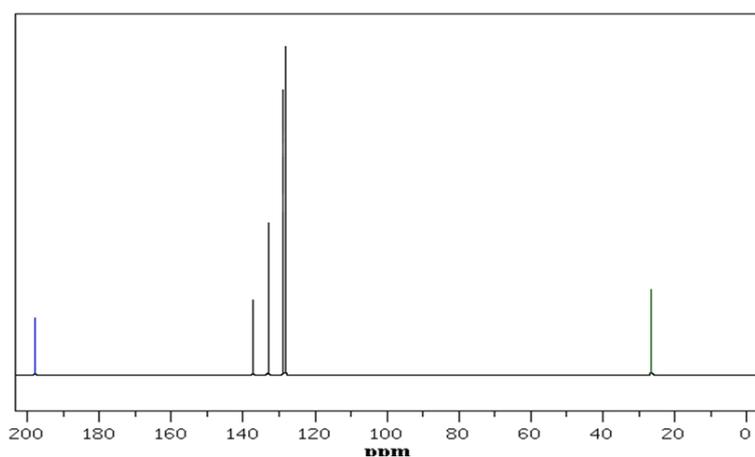
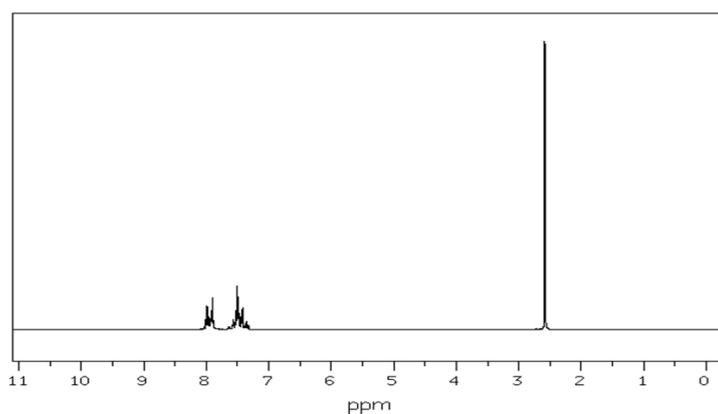
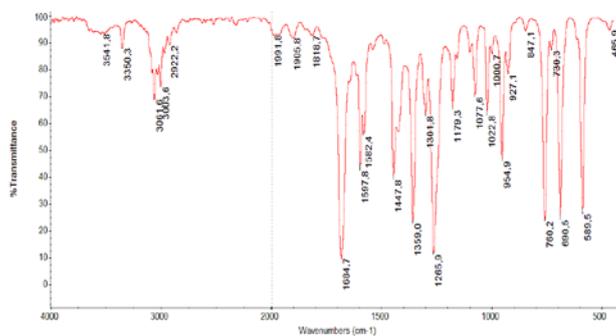
.....

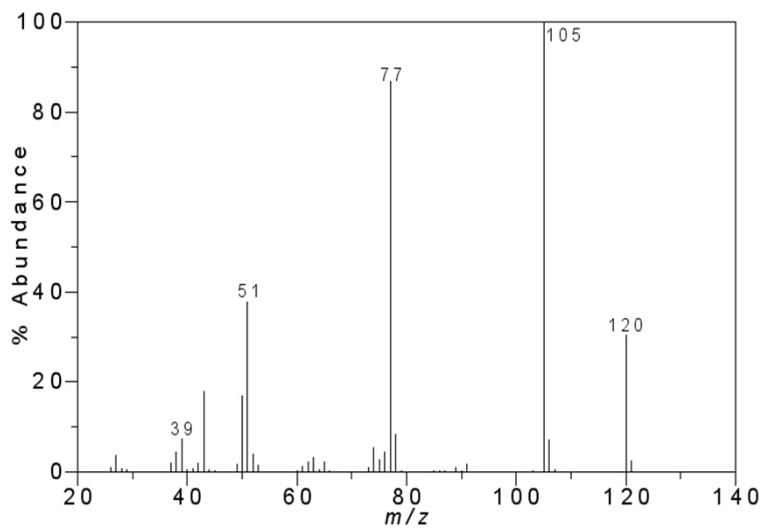
.....

.....

.....

15. Una molecola organica di formula bruta  $C_8H_8O$  ha dato i seguenti spettri FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR e di Massa. Individuare la formula di struttura assegnando i picchi principali.





.....

.....

.....

.....

.....

.....



**<sup>1</sup>H NMR Correlation Table:**  
**Chemical Shift Values for Specific Types of Protons**

	Approximate $\delta$ Value
Alkane	
methyl: (RCH <sub>3</sub> )	0.9
Methylene: (R <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> )	1.3
Methine: (R <sub>3</sub> CH)	1.4
Allylic: (R <sub>2</sub> C=CRCHR <sub>2</sub> )	2
Benzylic: ArCHR <sub>2</sub>	2-3
Ketone: RCOCHR <sub>2</sub>	2.1
Alkyne: RCCH	2.5
$\alpha$ to Nitrogen: R <sub>2</sub> CHNR <sub>2</sub>	2.5-3.0
Halide: R <sub>2</sub> CHX	3-4
$\alpha$ to Oxygen: R <sub>2</sub> CHOR	3-4
Vinyl: R <sub>2</sub> C=CHR	5-6
Benzyl: ArH	7-8
Aldehyde: RCHO	9-10
Carboxylic acid: RCO <sub>2</sub> H	10-12
Amines: R <sub>2</sub> NH	Variable: 1- 4
Alcohols: ROH	Variable: 2- 5
Phenols: ArOH	Variable: 4- 7



**C NMR Correlation Table:  
Chemical Shifts of Selected Types of Carbon Atoms**

Type of Carbon	Approximate $\delta$ Value
Alkane	$\delta$ 0 - 50
Alkyne	$\delta$ 70 - 90
Alkene	$\delta$ 100 - 150
Aromatic	$\delta$ 110 - 150
Nitrile	$\delta$ 115 - 125
Carbonyls:	
Anhydride	$\delta$ 150 - 175
Ester	$\delta$ 160 - 175
Carboxylic acid	$\delta$ 165 - 180
Ketone or Aldehyde	$\delta$ 180 - 220

[Return to McGraw-Hill Student Resource Home Page](http://www.uccs.edu/~amschoff/correlation.htm)

<http://www.uccs.edu/~amschoff/correlation.htm>

