

1. Prevedere lo spettro  $^1\text{H-NMR}$  dei seguenti composti ed indicare qualitativamente la posizione relativa dei rispettivi segnali.



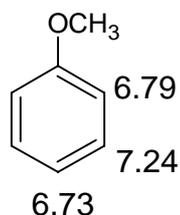
2. Prevedere lo spettro  $^1\text{H-NMR}$  di un campione contenente  $\text{CHCl}_3$  10mM eseguito su uno spettrometro operante ad alto campo.  
Come appare lo spettro  $^{13}\text{C-NMR}$  dello stesso campione?
3. Prevedere lo spettro  $^1\text{H-NMR}$  di un campione di  $\text{C}^2\text{HCl}_3$ .
4. Proporre una struttura per il composto di formula bruta  $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$  che mostra un unico segnale  $^1\text{H-NMR}$  a 2.05 ppm.
5. Data la posizione dei segnali NMR nella seguente molecola



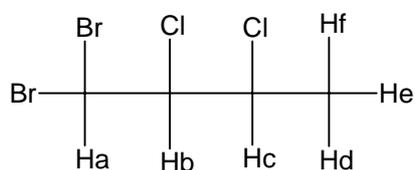
qual'è la posizione attesa per i segnali della seguente molecola?



6. Spiegare il valore di risonanza del metilene in etere vinilico ( $\text{CH}_2=\text{C(H)COCH}_3$ , 4.1 ppm) rispetto alla stessa risonanza in etilene ( $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ , 5.28 ppm).
7. Spiegare i valori di chemical shift protonici riportati per la molecola di anisolo:



8. Data la seguente molecola:



Quali coppie di atomi di idrogeno presentano un accoppiamento scalare rilevabile come splitting delle risonanze?

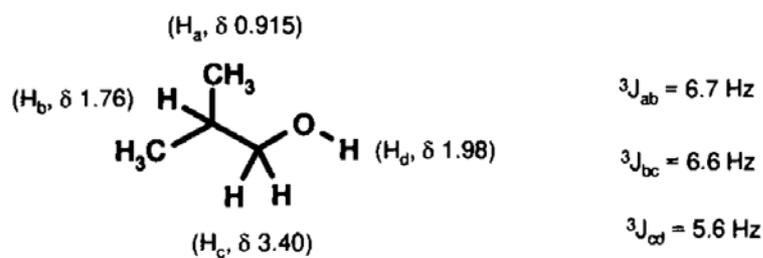
9. Mostrare la struttura fine attesa per il segnale H<sub>b</sub> della molecola in 8) considerando i casi

$${}^3J_{ab} > {}^3J_{bc}; \quad {}^3J_{ab} = {}^3J_{bc}$$

10. Mostrare la struttura fine attesa per il segnale H<sub>c</sub> della molecola in 8) considerando i casi:

$${}^3J_{bc} = {}^3J_{cd}; \quad {}^3J_{bc} > {}^3J_{cd}; \quad {}^3J_{bc} < {}^3J_{cd}$$

11. Dare una previsione dello spettro <sup>1</sup>H-NMR dell'alcol isobutilico utilizzando i parametri spettrali riportati.



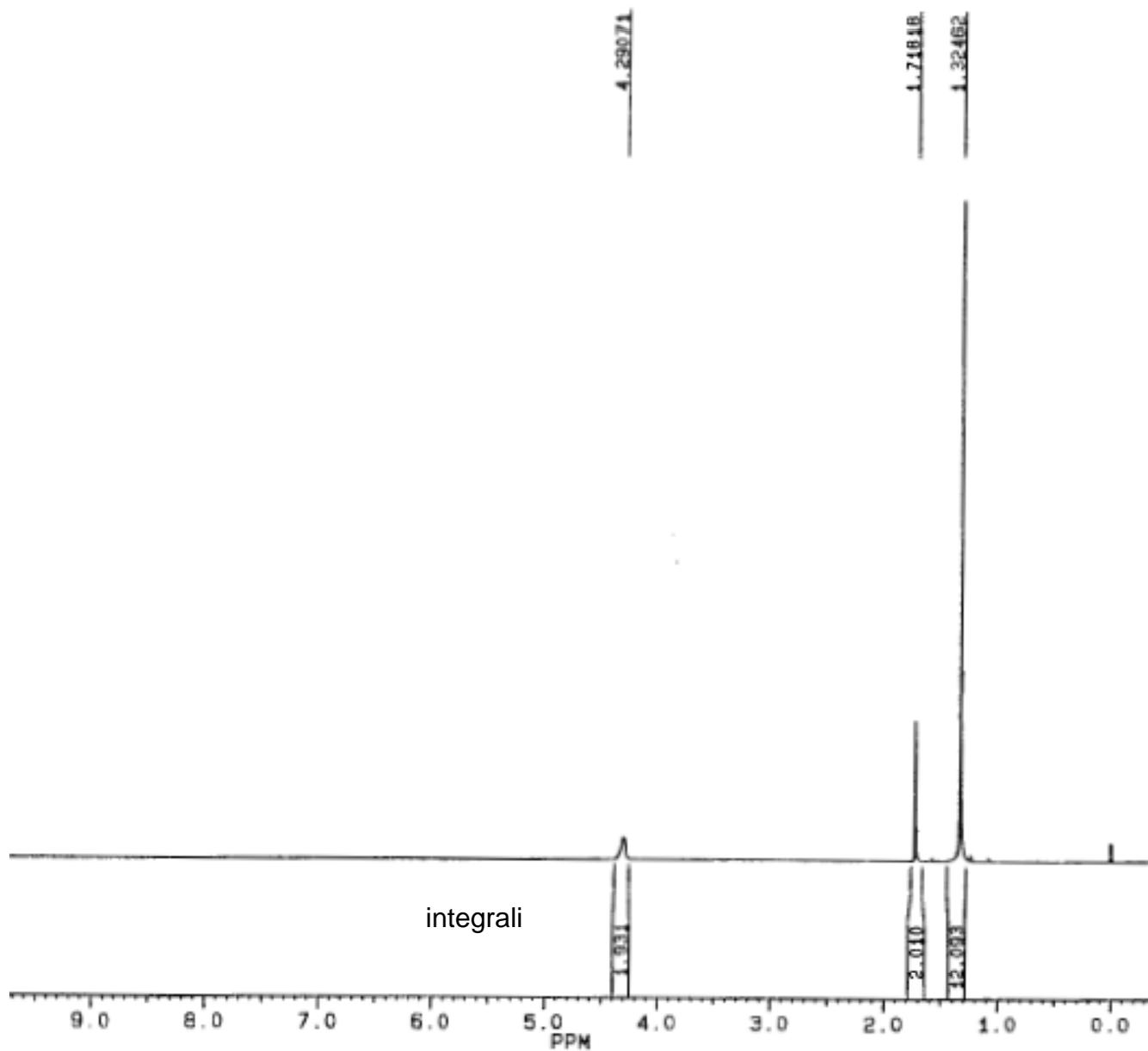
12. Qual è lo spettro <sup>19</sup>F-NMR atteso per CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>?

13. Attribuire i segnali dello Spettro 1 agli atomi di idrogeno del 2,4-dimetil-2,4-pentandiolo. Spiegare i valori degli integrali.

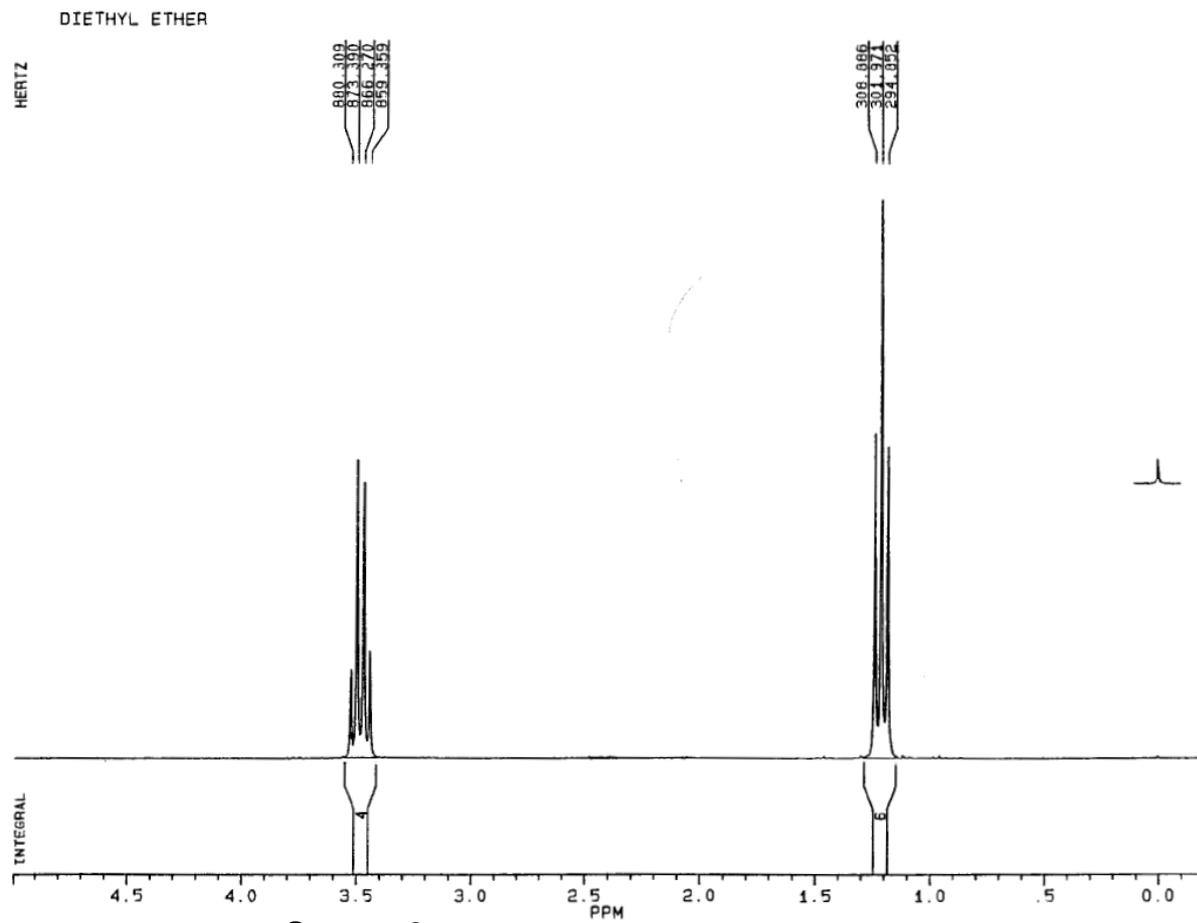
14. Spiegare la struttura fine dello spettro protonico di etere dietilico (Spettro 2).

15. Spiegare lo Spettro 3 di <sup>13</sup>C-NMR.

2, 4-DIMETHYL-2, 4-PENTANEDIOL

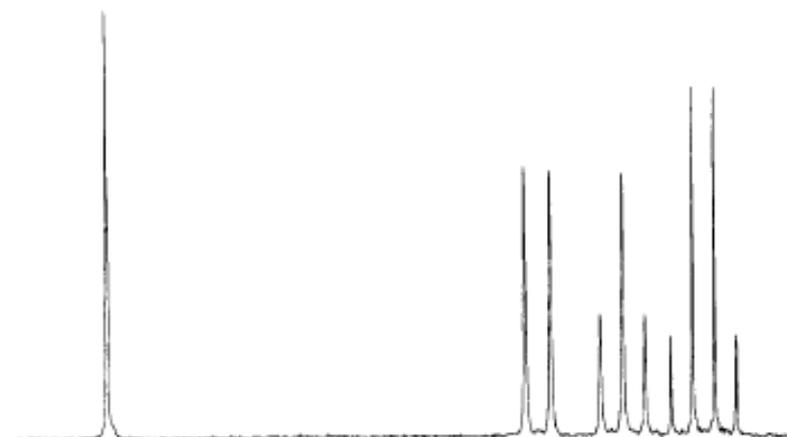


Spettro 1 The 250-MHz  $^1\text{H}$  NMR spectrum of 2,4-dimethyl-2,4-pentanediol.

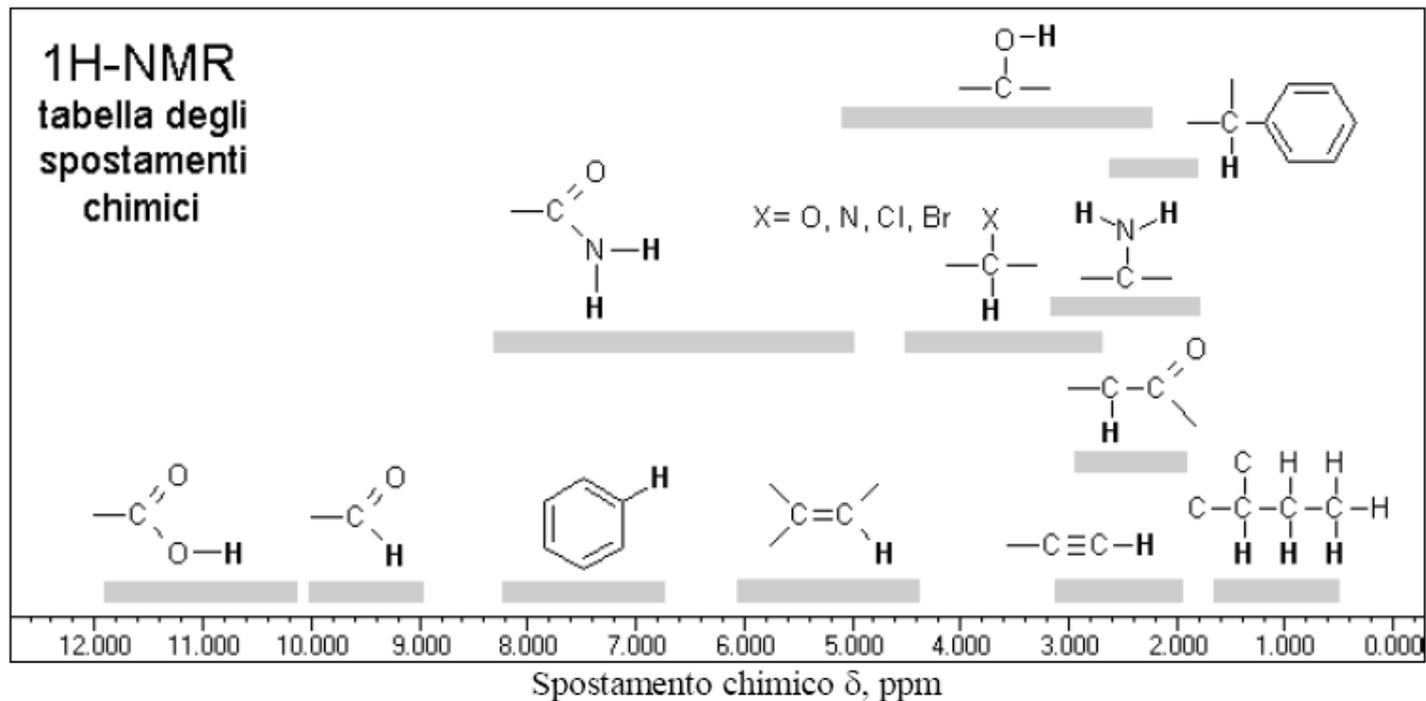


**Spetro 2** The 250-MHz  $^1\text{H}$  spectrum of diethyl ether.

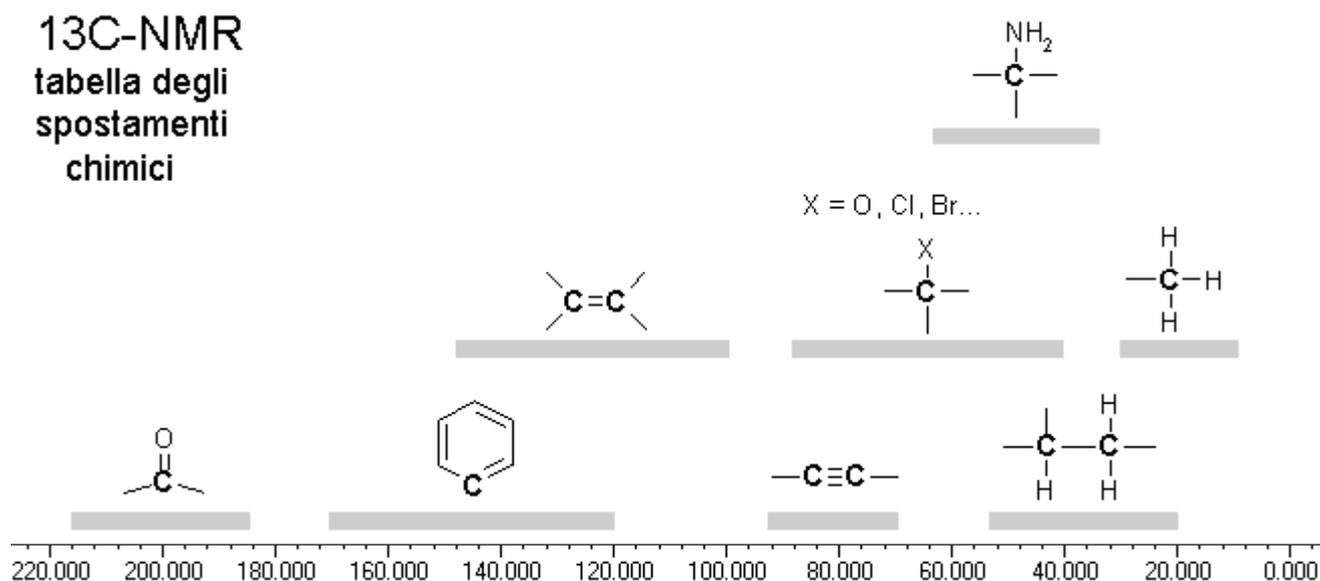
**Spetro 3** Top: The 22.6 MHz  $^{13}\text{C}$  spectrum of 3-hydroxybutyric acid,  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CO}_2\text{H}$ , without solvent. Bottom: The  $^{13}\text{C}$  spectrum of the same compound with proton decoupling.



**1H-NMR**  
tabella degli  
spostamenti  
chimici



**13C-NMR**  
tabella degli  
spostamenti  
chimici



**TABLE 2.1 Magnetic Properties of Selected Particles<sup>a</sup>**

Isotope	% <sup>b</sup>	Z	N	A	I	$\gamma^c$	$\nu^d$	$\mu^e$	$Q^f$	$S^g$
n	—	0	1	1	$\frac{1}{2}$	-183.26	29.167	-1.91315	0	0.322
<sup>1</sup> H	99.985	1	0	1	$\frac{1}{2}$	267.512	42.5759	2.79268	0	1.00
<sup>2</sup> H	0.015	1	1	2	1	41.0648	6.53566	0.857387	$2.73 \times 10^{-3}$	$9.65 \times 10^{-3}$
<sup>7</sup> Li	92.58	3	4	7	$\frac{3}{2}$	103.96	16.546	3.2560	$-3 \times 10^{-2}$	0.293
<sup>10</sup> B	19.58	5	5	10	3	28.748	4.5754	1.8007	$7.4 \times 10^{-2}$	$1.99 \times 10^{-2}$
<sup>11</sup> B	80.42	5	6	11	$\frac{3}{2}$	85.828	13.660	2.6880	$3.55 \times 10^{-2}$	0.165
<sup>13</sup> C	1.108	6	7	13	$\frac{1}{2}$	67.2640	10.7054	0.702199	0	$1.59 \times 10^{-2}$
<sup>14</sup> N	99.63	7	7	14	1	19.325	3.0756	0.40347	$1.6 \times 10^{-2}$	$1.01 \times 10^{-3}$
<sup>15</sup> N	0.37	7	8	15	$\frac{1}{2}$	-27.107	4.3142	-0.28298	0	$1.04 \times 10^{-3}$
<sup>17</sup> O	0.037	8	9	17	$\frac{5}{2}$	-36.27	5.772	-1.8930	$-2.6 \times 10^{-2}$	$2.91 \times 10^{-2}$
<sup>19</sup> F	100	9	10	19	$\frac{1}{2}$	251.667	40.0541	2.62727	0	0.833
<sup>23</sup> Na	100	11	12	23	$\frac{3}{2}$	70.761	11.262	2.2161	0.14	$9.25 \times 10^{-2}$
<sup>27</sup> Al	100	13	14	27	$\frac{5}{2}$	69.706	11.094	3.6385	0.149	0.206
<sup>29</sup> Si	4.70	14	15	29	$\frac{1}{2}$	-53.142	8.4578	-0.55477	0	$7.84 \times 10^{-3}$
<sup>31</sup> P	100	15	16	31	$\frac{1}{2}$	108.29	17.235	1.1305	0	$6.63 \times 10^{-2}$
<sup>33</sup> S	0.76	16	17	33	$\frac{3}{2}$	20.517	3.2654	0.64257	$-6.4 \times 10^{-2}$	$2.26 \times 10^{-3}$
<sup>35</sup> Cl	75.53	17	18	35	$\frac{3}{2}$	26.212	4.1717	0.82091	$-7.89 \times 10^{-2}$	$4.70 \times 10^{-3}$
<sup>37</sup> Cl	24.47	17	20	37	$\frac{3}{2}$	21.82	3.472	0.6833	$-6.21 \times 10^{-2}$	$2.71 \times 10^{-3}$

<sup>a</sup>Abstracted in part from *The 64th CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, Boca Raton, FL, 1984.

<sup>b</sup>Natural abundance.

<sup>c</sup>Magnetogyric ratio in units of  $10^6 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

<sup>d</sup>Resonance frequency in megahertz in a 1-T field.

<sup>e</sup>Magnetic moment in nuclear magnetons.

<sup>f</sup>Electric quadrupole moment in barns.

<sup>g</sup>Sensitivity (relative to proton) for equal numbers of nuclei at constant field;  $S = 7.652 \times 10^{-3} \mu^3 (I + 1)/I^2$ .