

Esame di METODI SPETTROSCOPICI IN CHIMICA ORGANICA

1) Determinare **la struttura** della molecola organica caratterizzata dai seguenti dati:

Massa esatta/analisi elementare/ formula molecolare, spettro IR, spettri ^1H NMR e ^{13}C NMR, e spettro di Massa (EI).

In particolare, il corretto svolgimento della prova d esame è subordinato alle seguenti consegne:

- a) Sulla prima pagina dell'elaborato lo studente deve riportare in alto a sinistra: Nome, Cognome e matricola e data.
- b) Assegnare in modo conciso le principali bande IR. **(4 punti)**
- c) Per l'assegnazione dei segnali ^1H e ^{13}C NMR della molecola, si richiede di disegnare in modo chiaro la struttura proposta, di numerare correttamente i protoni e carboni e di indicare per ciascun segnale il chemical shift, l'integrale, eventualmente le costanti d'accoppiamento (se sono leggibili) e l'attribuzione. **Si ricorda** che negli spettri ^1H -NMR **i protoni scambiabili**, legati a eteroatomi, **non sono visibili**, ma sono da considerarsi scambiati con D_2O . **(7 punti)**
- d) Assegnare i carboni aromatici giustificando le scelte con un calcolo empirico del chemical shift. **(3 punti)**
- e) Riportare in uno schema razionale ed ordinato le principali frammentazioni dello spettro di Massa partendo dallo ione molecolare e indicando le perdite ed i frammenti più importanti che contribuiscono al chiarimento della struttura; **(3 punti)**
- f) Determinare la struttura indicando la natura dei sostituenti e il loro punto di sostituzione motivando in modo conciso e razionale come si è giunti alla struttura proposta come soluzione ed anche le ragioni della eventuale esclusione di altre strutture possibili. Per rendere chiara l'assegnazione proposta si consiglia di **NON** discutere in modo separato i gruppi di dati delle diverse tecniche spettroscopiche, ma di rafforzare le ragioni della assegnazione proposta usando nella discussione dati di tecniche diverse che convergono verso la stessa informazione; ad esempio: la presenza di un CO è indicato da una banda IR a 1700 cm^{-1} , e da un segnale NMR ^{13}C con $\delta = 205\text{ ppm}$. **(8 punti)**
- g) Nel caso in cui più strutture sono proponibili, suggerire un esperimento risolutivo per poter determinare la struttura corretta. **(BONUS)**

2) Trascrivere i dati spettroscopici secondo quanto indicato da riviste di Chimica (RSC o ACS)

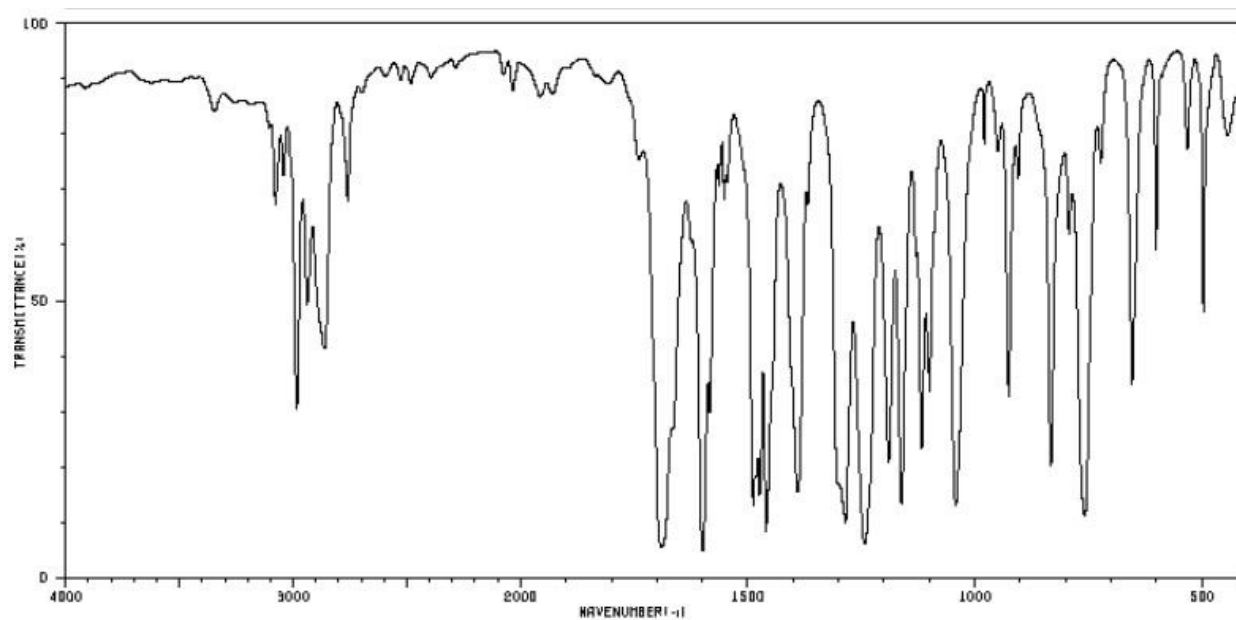
(5 punti)

N.B. : Durante la prova agli studenti è consentito consultare tabelle di correlazione ed usare la calcolatrice. Non è permesso (pena l'annullamento del compito) copiare o usare dispositivi elettronici o telefonici.

Analisi Elementare: C, 71.98; H, 6.71;

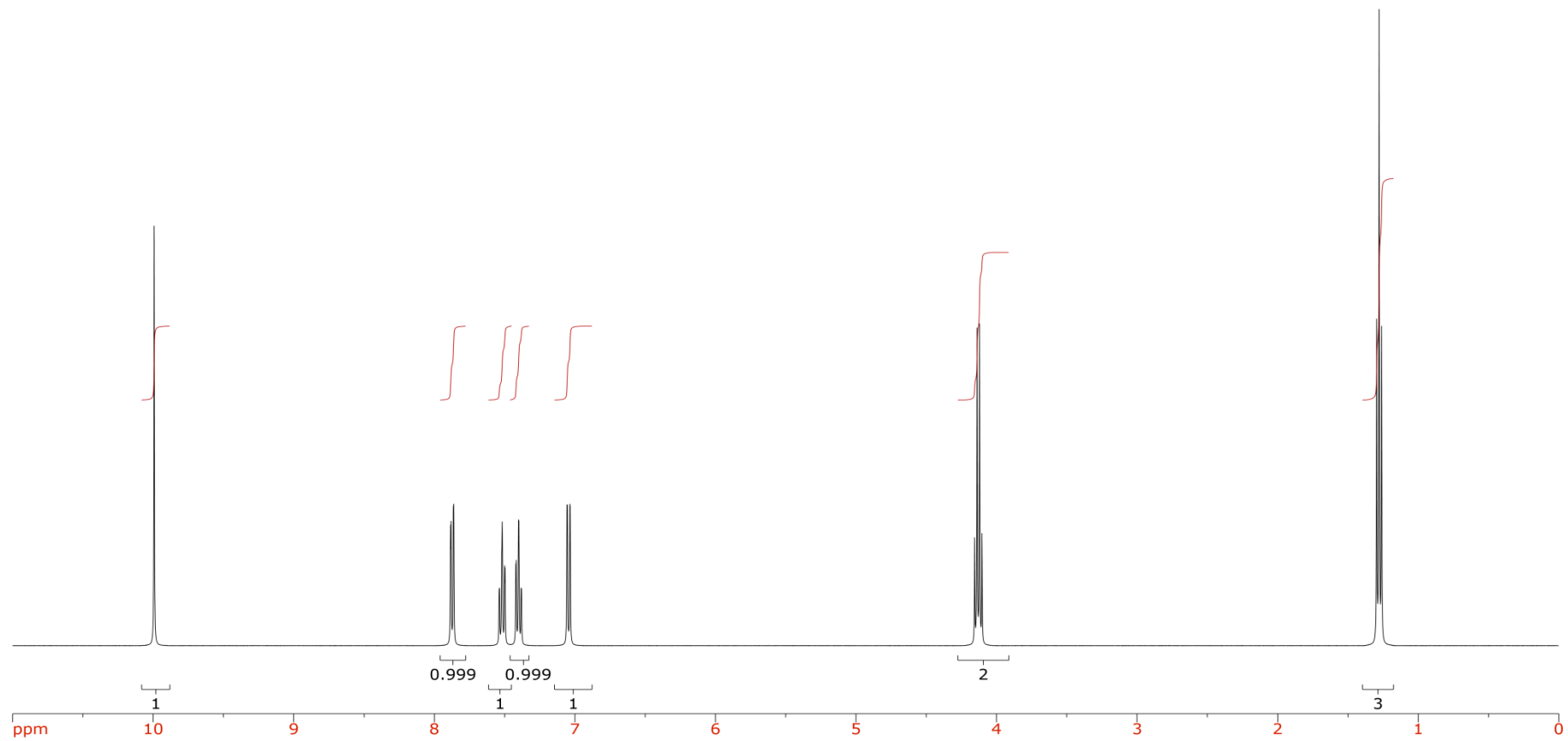
Massa esatta: m/z 150.06808 (100.00%); 151.1028 (9.92%)

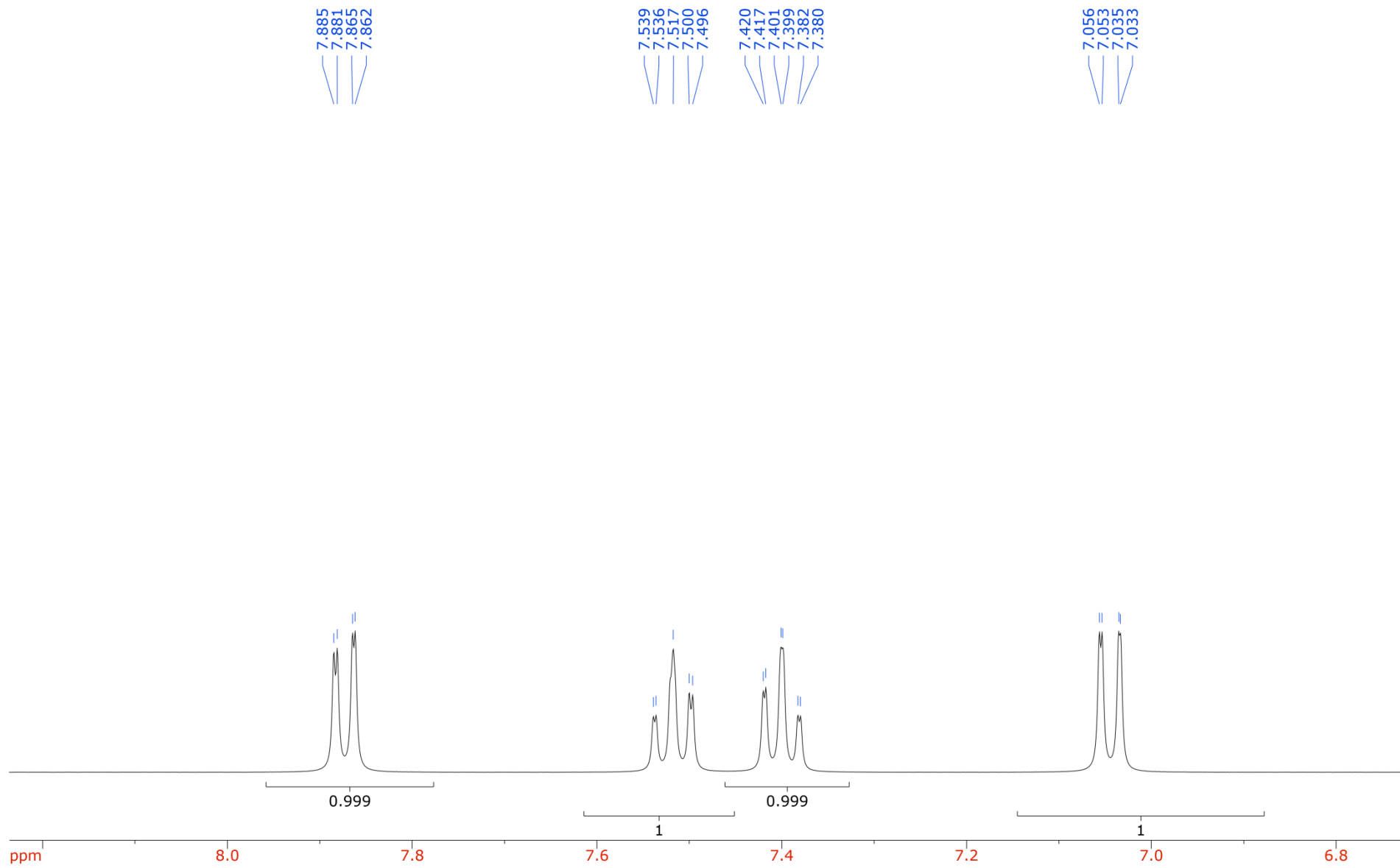
Spettro IR (KBr)



3077	64	1600	4	1474	14	1190	20	833	19
3042	70	1564	28	1460	7	1162	12	793	60
2983	29	1554	68	1390	14	1117	22	759	10
2938	47	1552	68	1368	64	1099	32	723	72
2861	39	1546	68	1299	16	1042	12	654	33
2760	66	1488	12	1285	9	926	31	601	57
1690	6	1482	17	1243	6	906	70	497	46

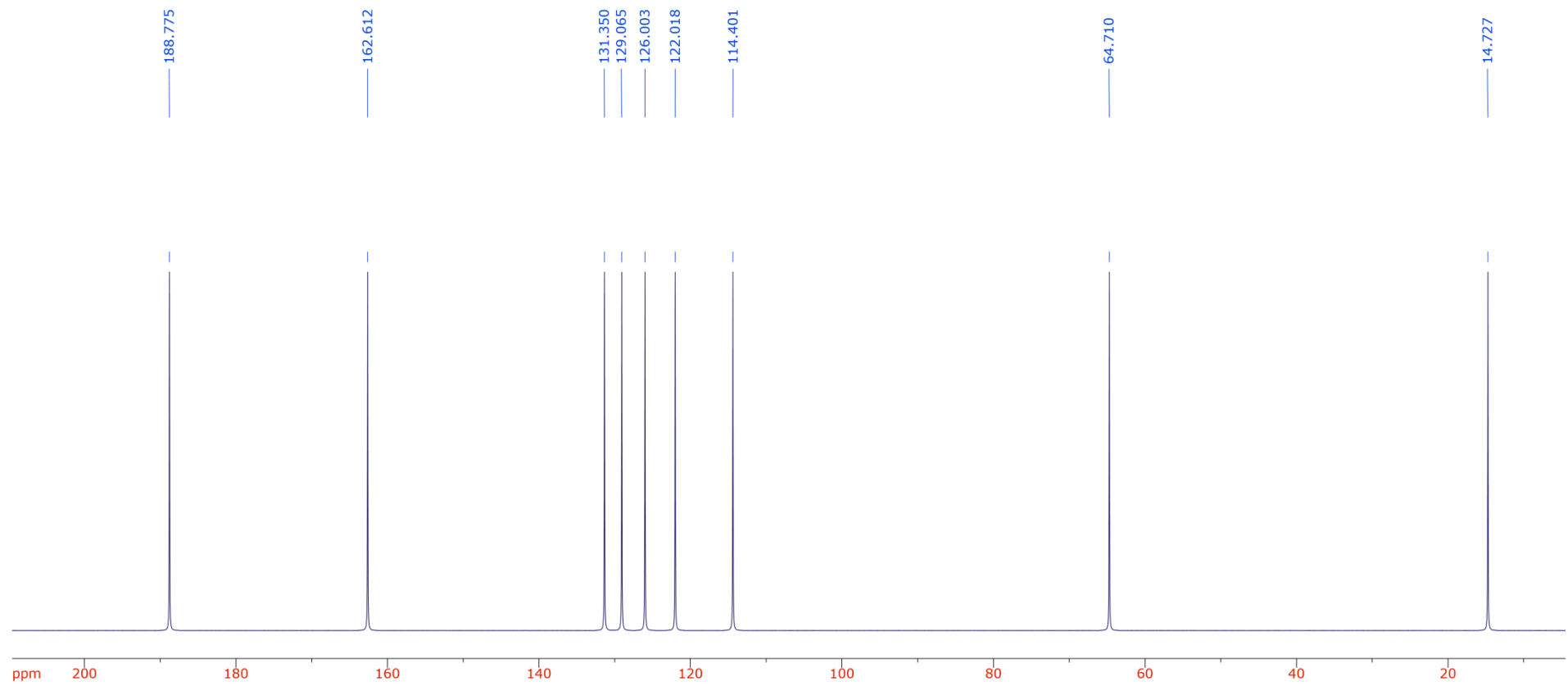
$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3)







^{13}C -NMR (100 MHz, CDCl_3)



MS (EI)

