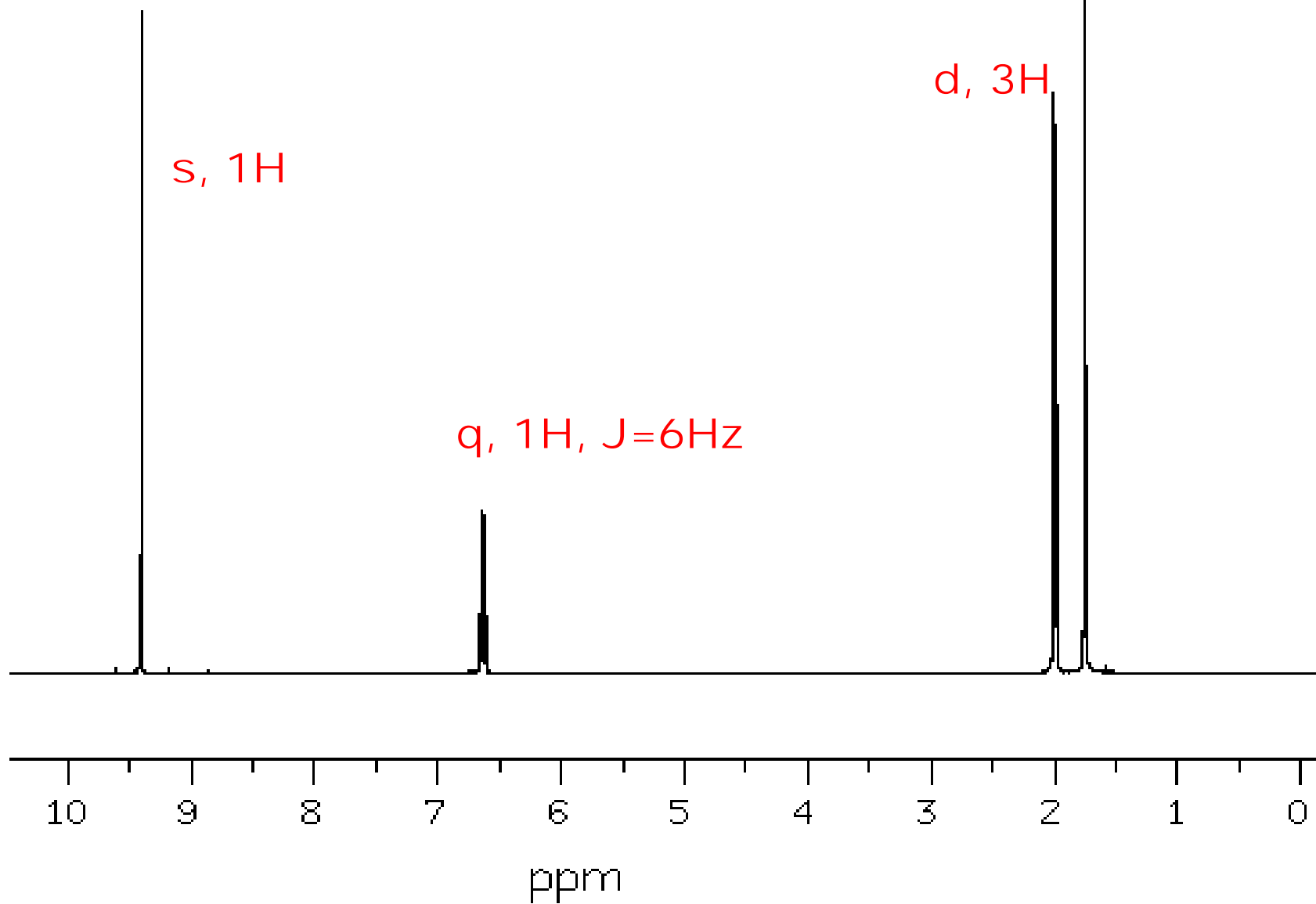


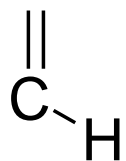
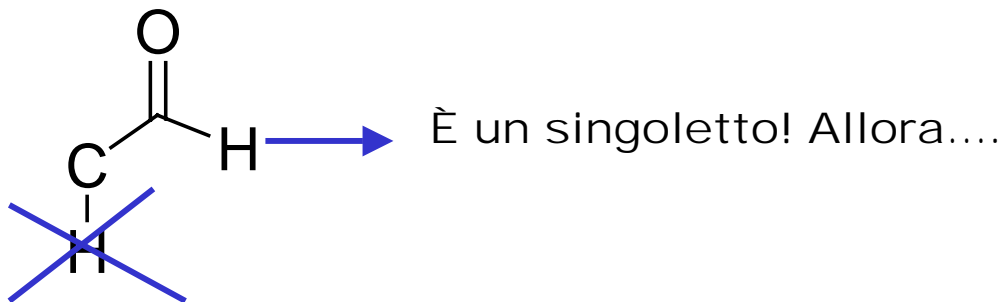
Formula bruta: C_5H_8O
(non si osservano 4J)



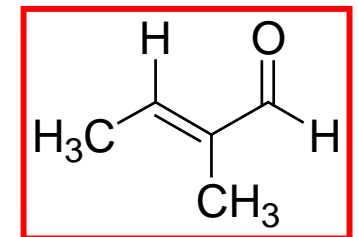
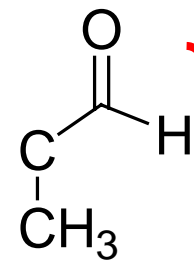
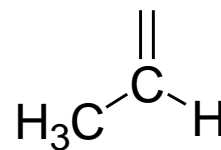
Analisi dello spettro

U=2

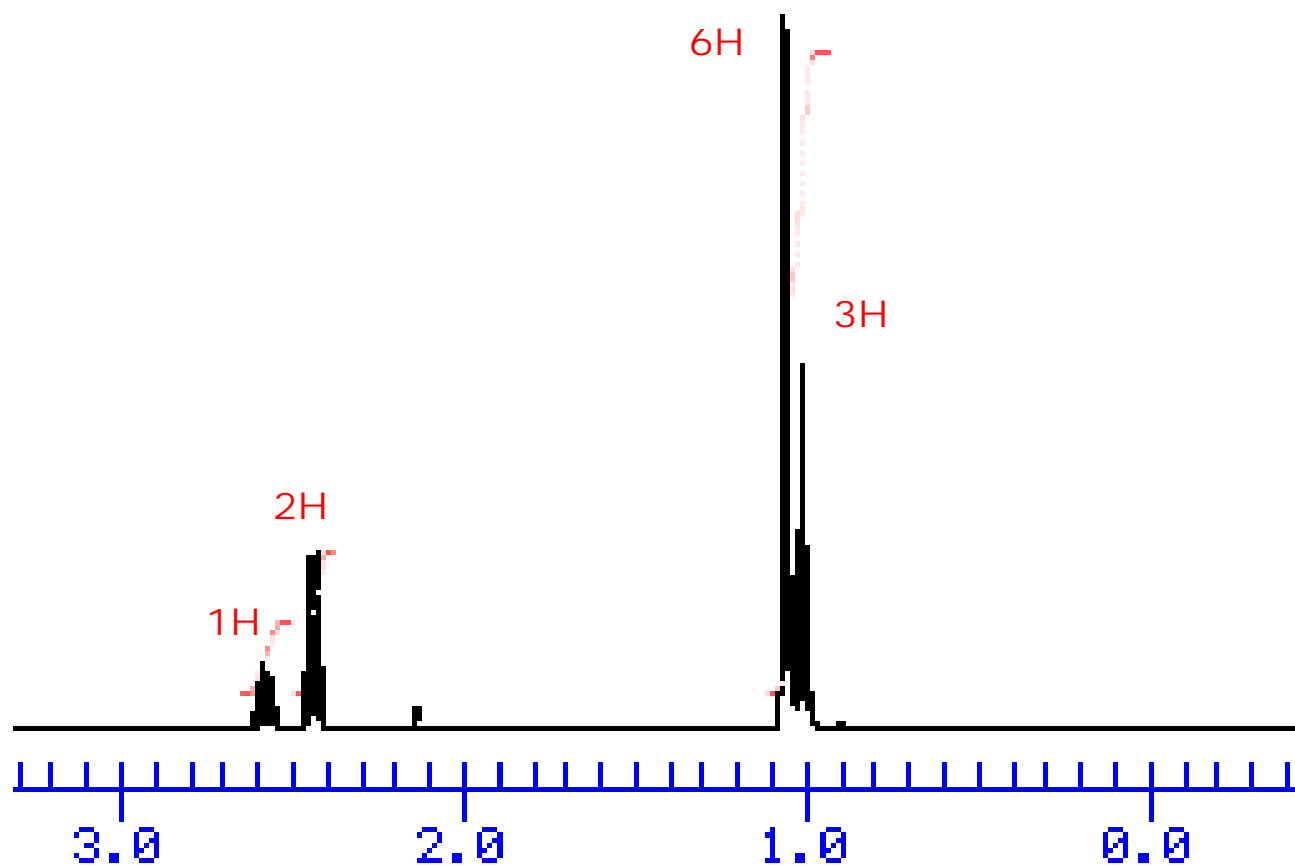
δ , ppm	nH	m	
9,4	1	s	
6,6	1	q	
2,0	3	d	
1,7	3	s	

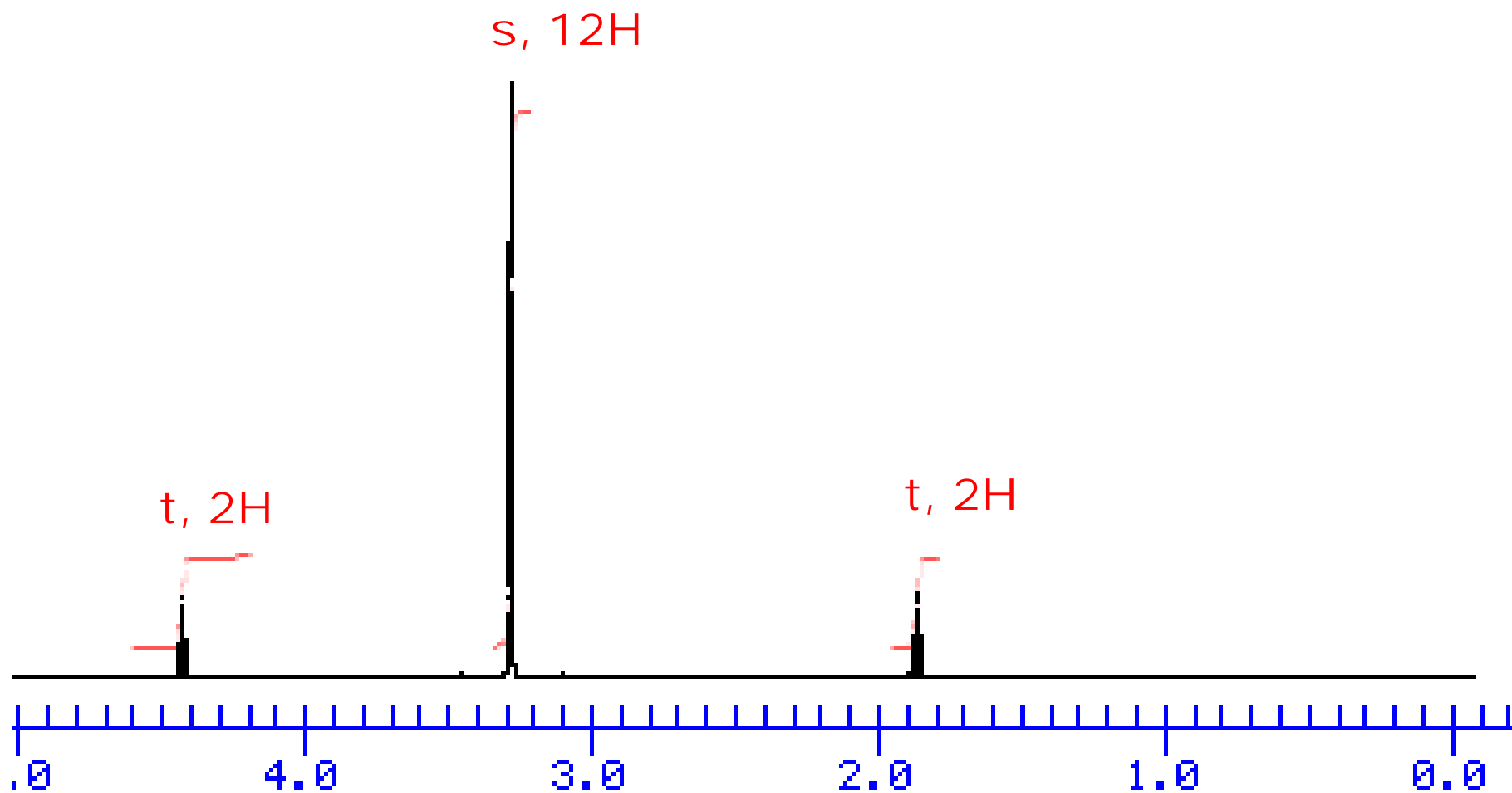
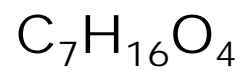


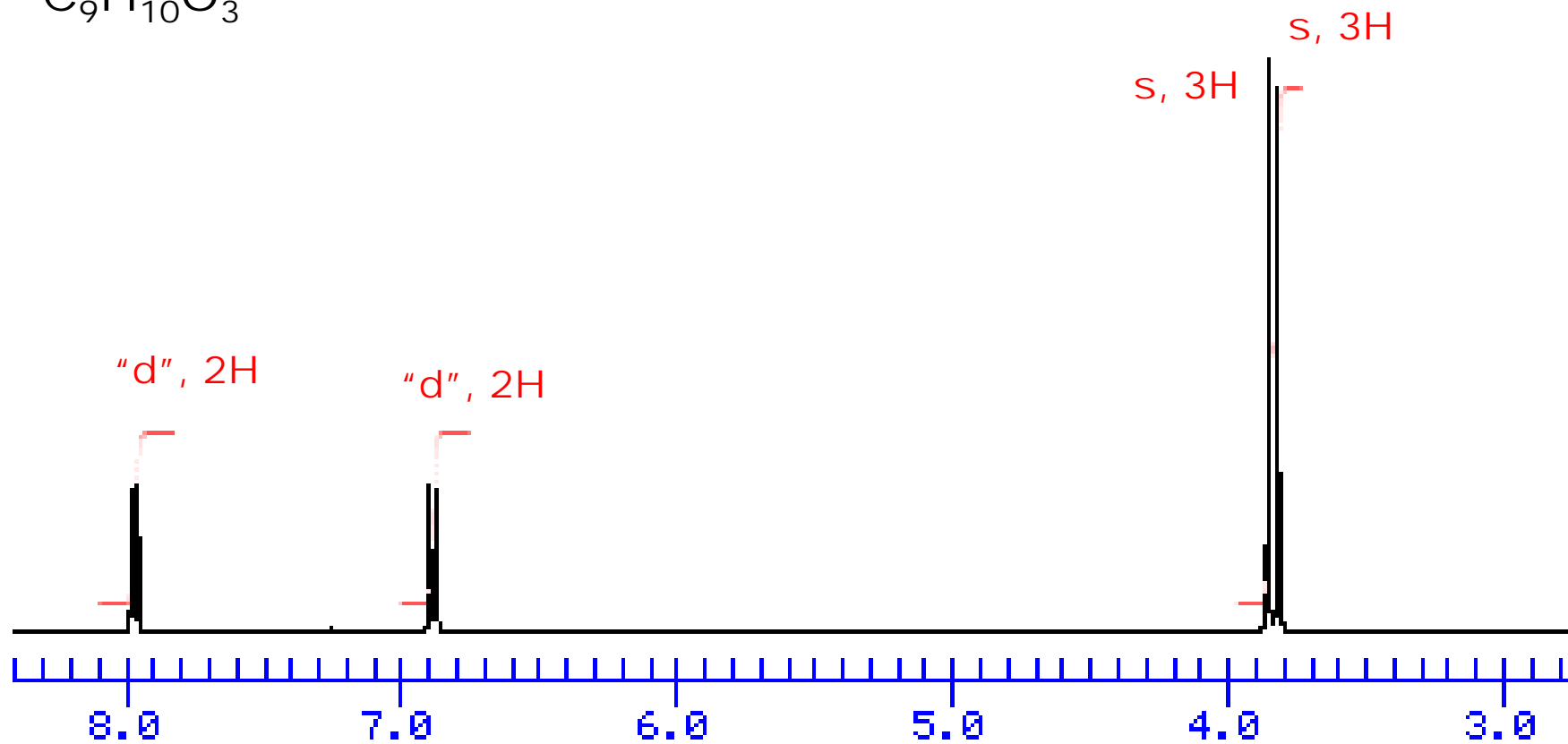
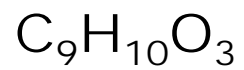
Accoppia con un CH_3 con una costante non molto piccola.....

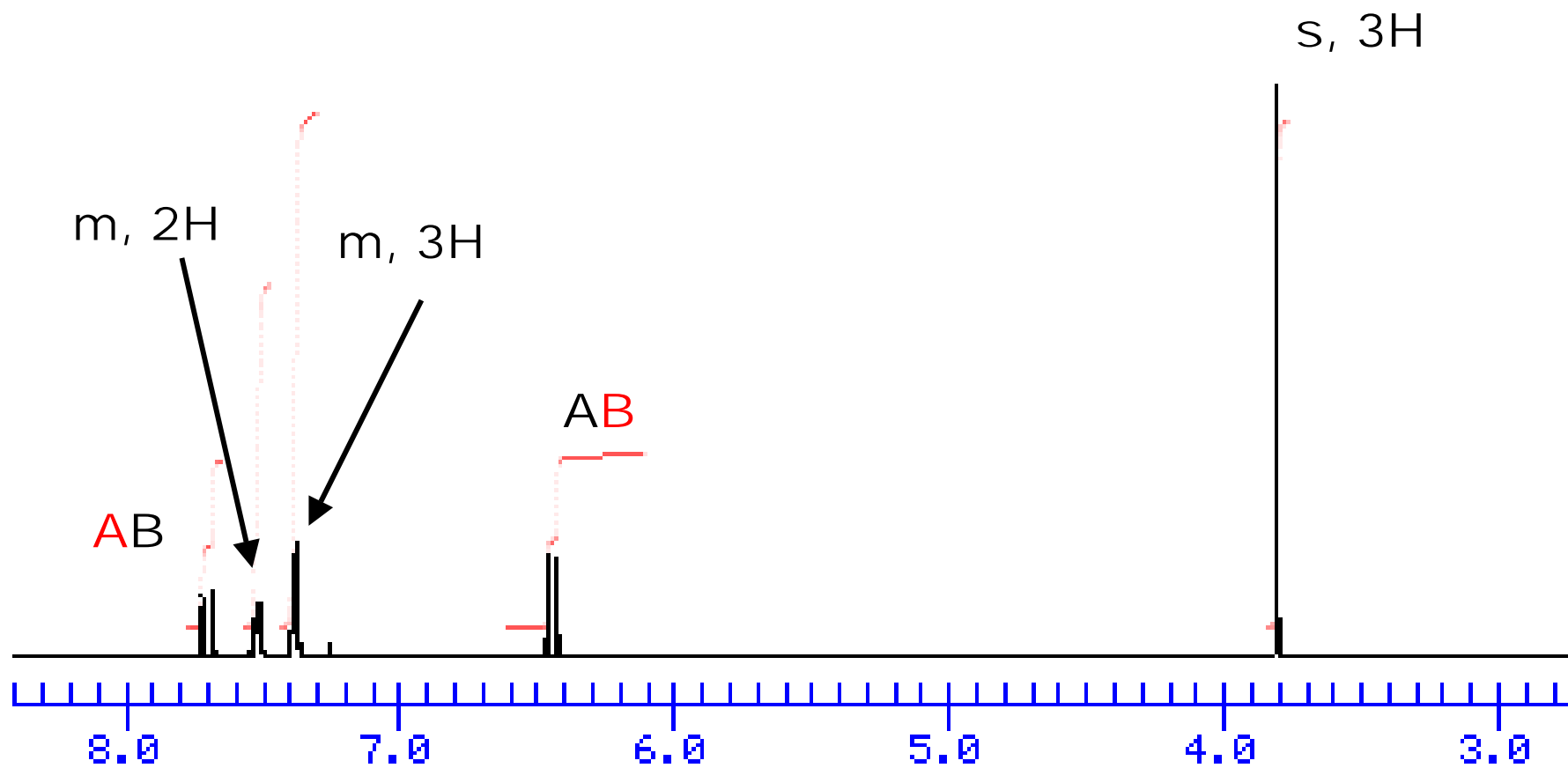
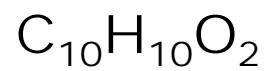


$C_6H_{12}O$: correlare i gruppi di protoni









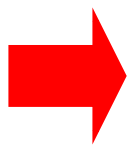
^{13}C -NMR: Caratteristiche del nucleo ^{13}C

Numero quantico di spin (I) = $1/2$

Rapporto magnetogirico (γ) = $7,73 \times 10^7 \text{ T}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (1/4 di ^1H !)

Abbondanza naturale: ca 1%

In ragione del basso valore di γ e della bassa abbondanza naturale la sensibilità nei confronti di questo nucleo è molto bassa!



Non si può usare uno spettrometro in onda continua bisogna usarne uno in trasformata di Fourier ed accumulare molti spettri per migliorare il rapporto segnale/rumore

Perché non ci siamo preoccupati del nucleo ^{13}C studiando ^1H ? Perché le molecole che contengono questo nucleo sono una frazione troppo piccola per essere viste in uno spettro del protone registrato in condizioni normali

Poiché γ di ^{13}C è ca. $1/4$ di quello di ^1H , la frequenza di risonanza di questo nucleo si osserverà a circa $1/4$ di quella di ^1H .
Ad esempio se in un certo strumento il protone risuona a 400 MHz nello stesso strumento ^{13}C andrà in risonanza a 100 MHz!

Cose di cui mi devo e di cui non mi devo preoccupare in uno spettro ^{13}C :

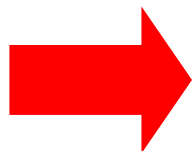
No

- accoppiamento con atomi di carbonio vicini
- accoppiamento con H separati da più di due legami

Si

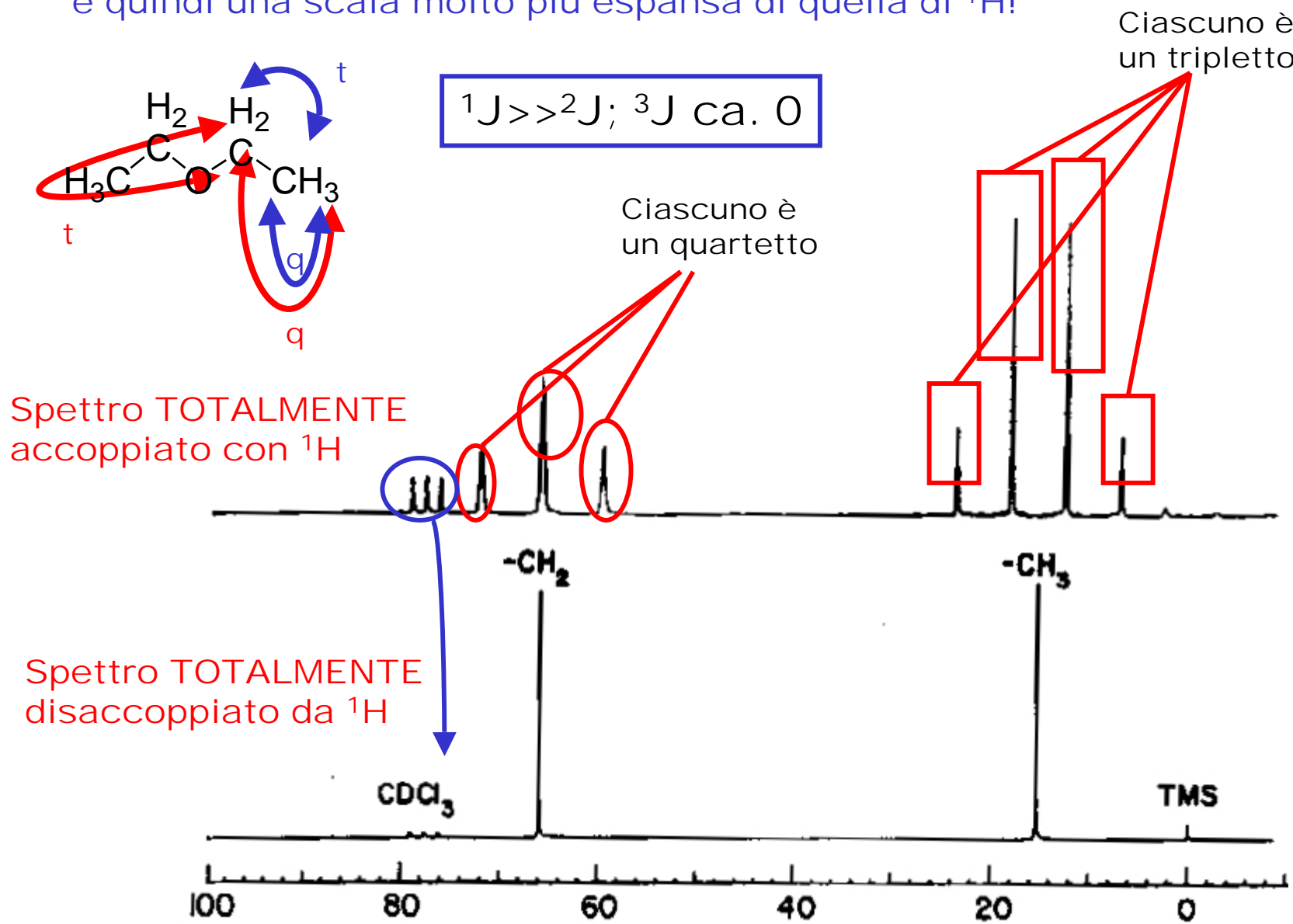
- accoppiamento con H legati allo stesso C o a quello vicino*
- chemical shift

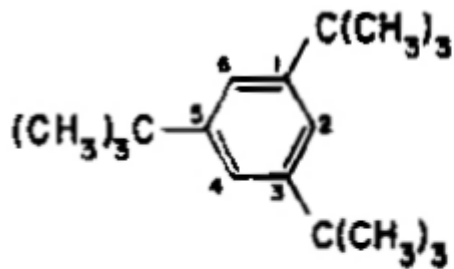
*Tuttavia poiché in condizioni "normali" lo spettro viene registrato in totale disaccoppiamento dai protoni neanche di questo mi devo preoccupare!



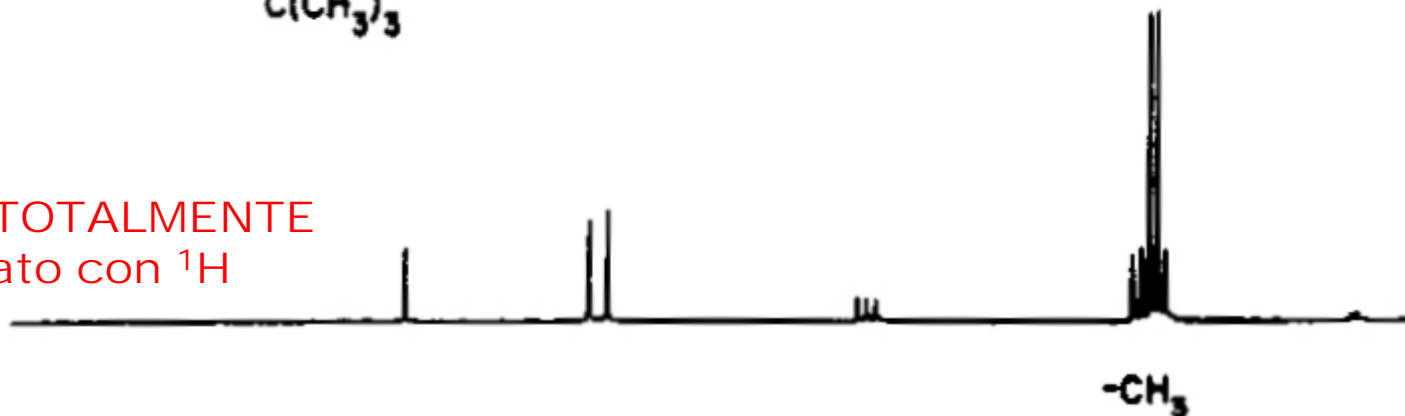
Se disaccoppio i protoni ($\{^1\text{H}\}$ - ^{13}C -NMR) tutti i segnali saranno singoletti

La scala dei δ nello spettro ^{13}C si estende da 0(TMS) a ca. 220 (carbonili):
 è quindi una scala molto più espansa di quella di ^1H !

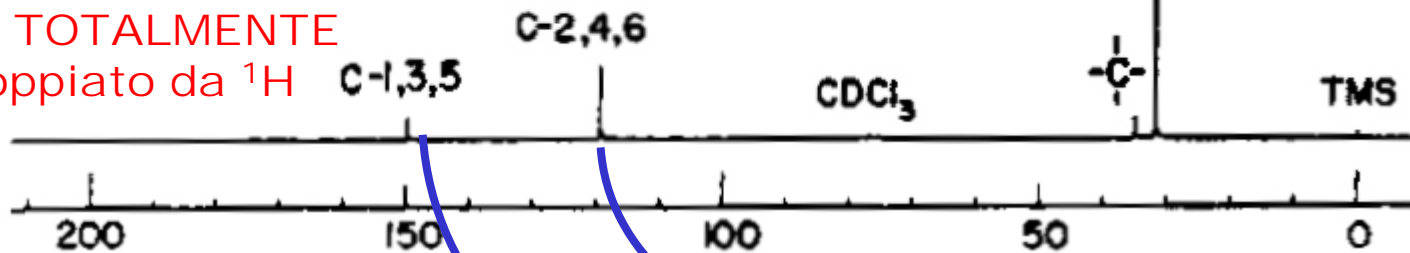




Spettro TOTALMENTE
accoppiato con ^1H



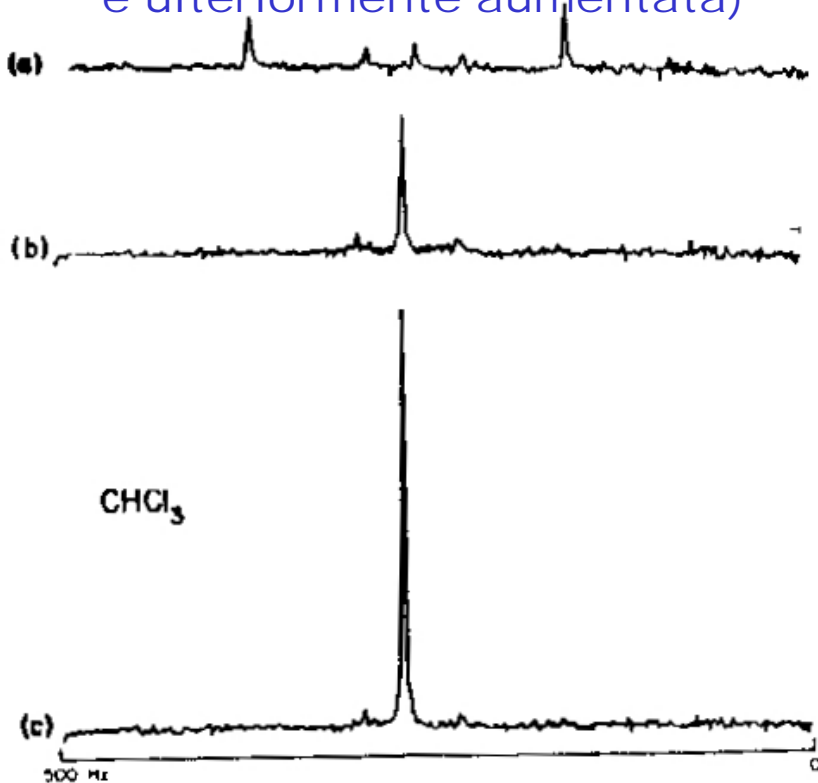
Spettro TOTALMENTE
disaccoppiato da ^1H



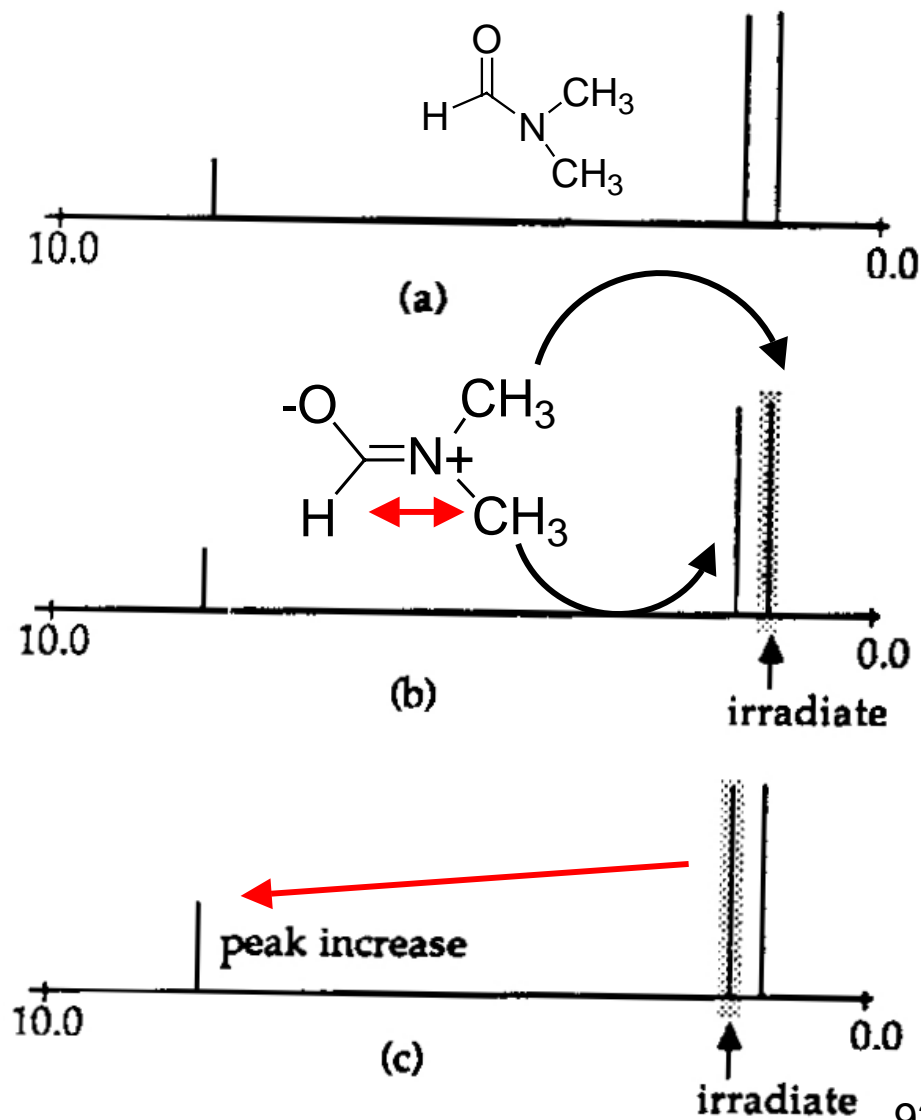
Perché l'altezza è diversa?

Spettro ^{13}C del CHCl_3 :

- a) totalmente accoppiato con ^1H
- b) in assenza di accoppiamento (l'intensità del segnale è doppia rispetto a quella di ciascuna linea del doppietto)
- c) in assenza di accoppiamento e con effetto n.O.e. (l'intensità è ulteriormente aumentata)

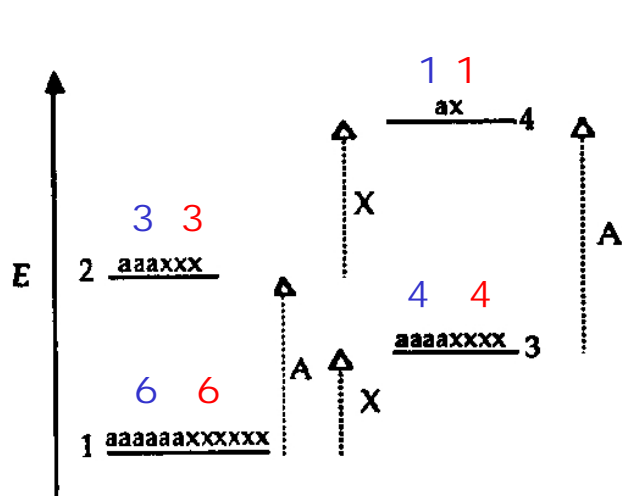
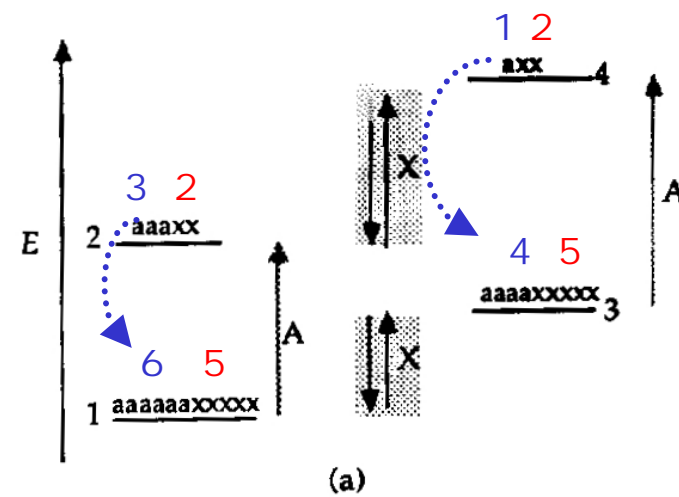
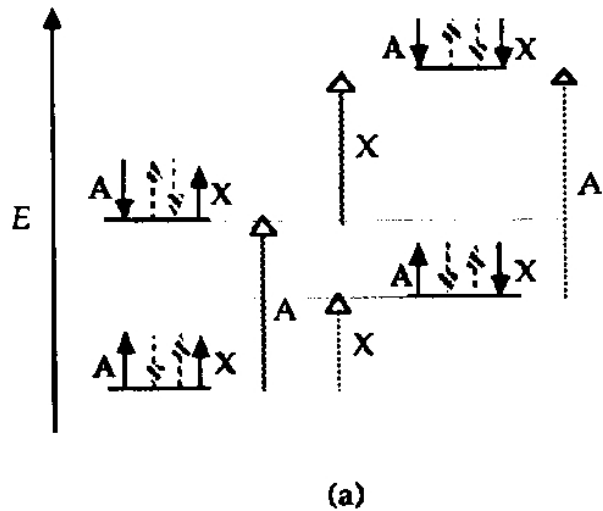


L'effetto n.O.e. si può osservare anche negli spettri protonici!
L'interazione avviene attraverso lo spazio e NON attraverso i legami

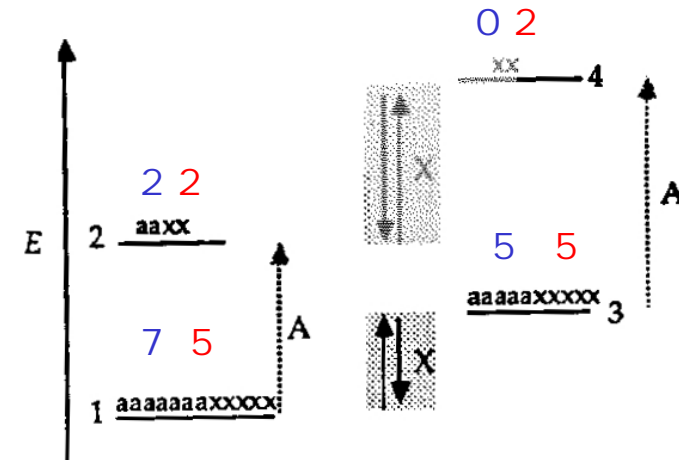


La ragione dell'effetto Overhauser (n.O.e.)

↑ Spin nucleare ↑ Spin elettronico
 Nuclei AX

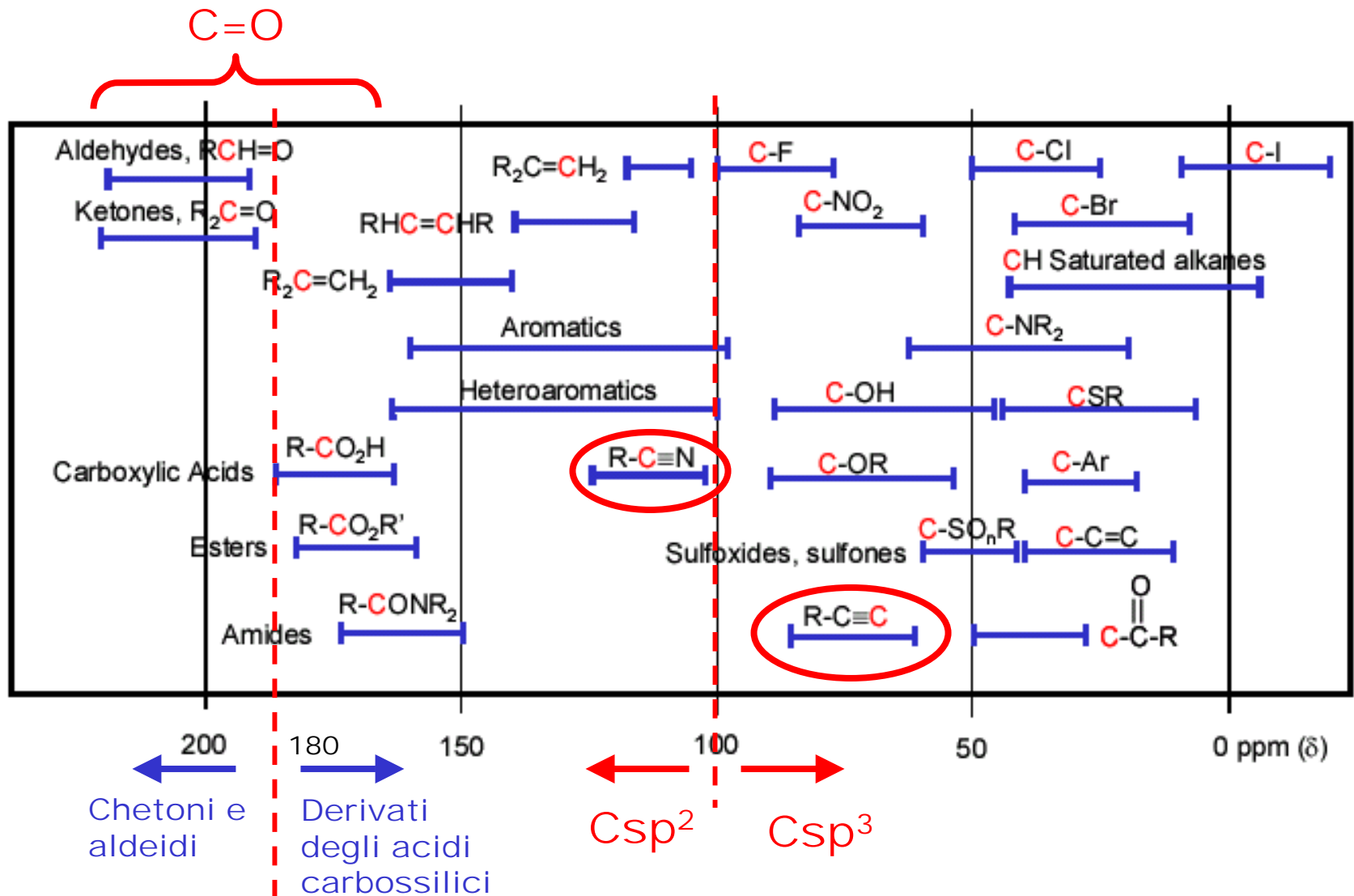


a) transizione di spin per AX
 b) popolazione dei livelli
 (distribuzione di Boltzman)



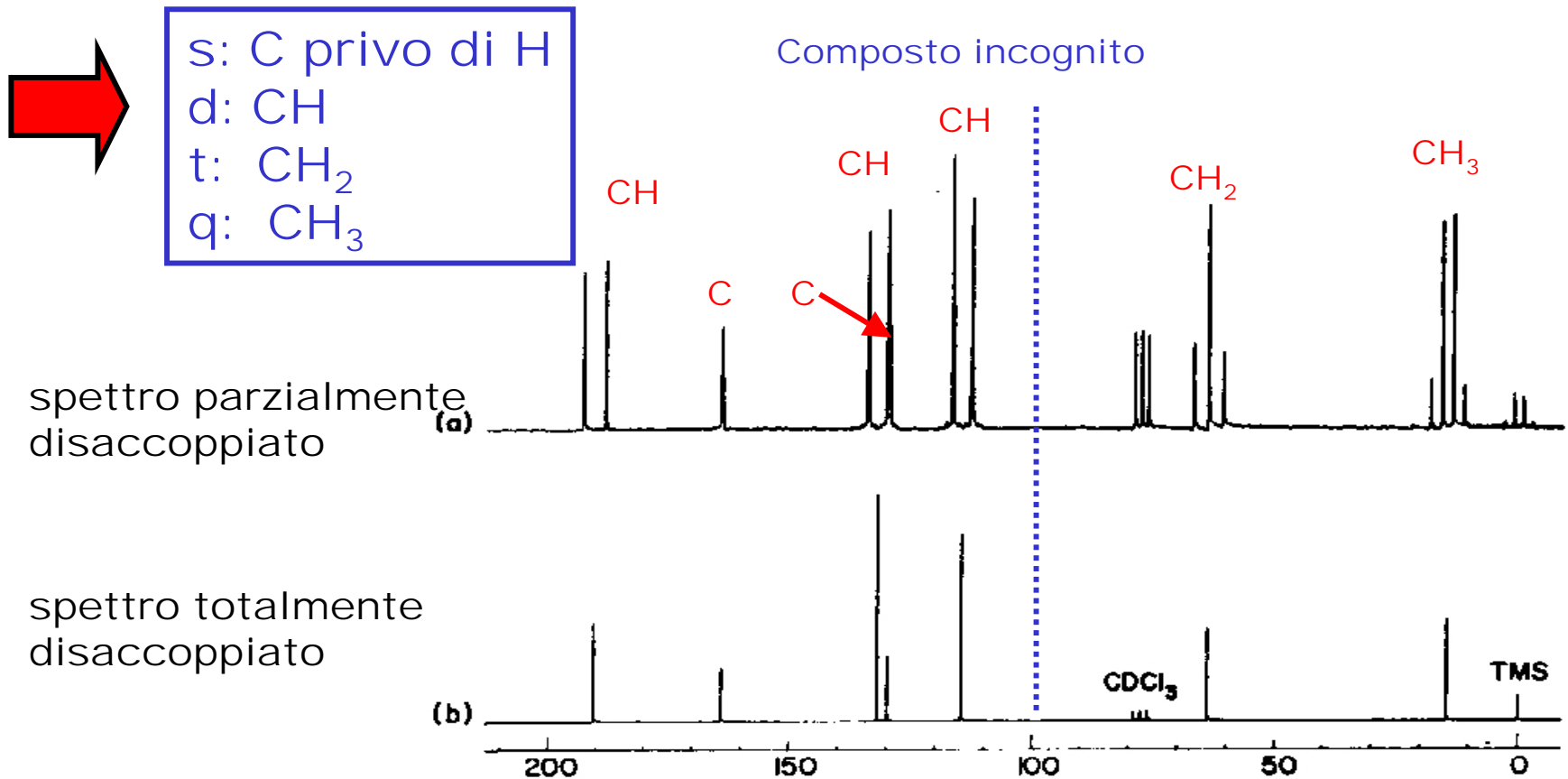
a) irraggiando X i livelli 1-3 e 2-4 hanno la stessa popolazione di X
 b) A risponde diminuendo la sua popolazione nei livelli 2 e 4

CARTA DI CORRELAZIONE PER IL ^{13}C



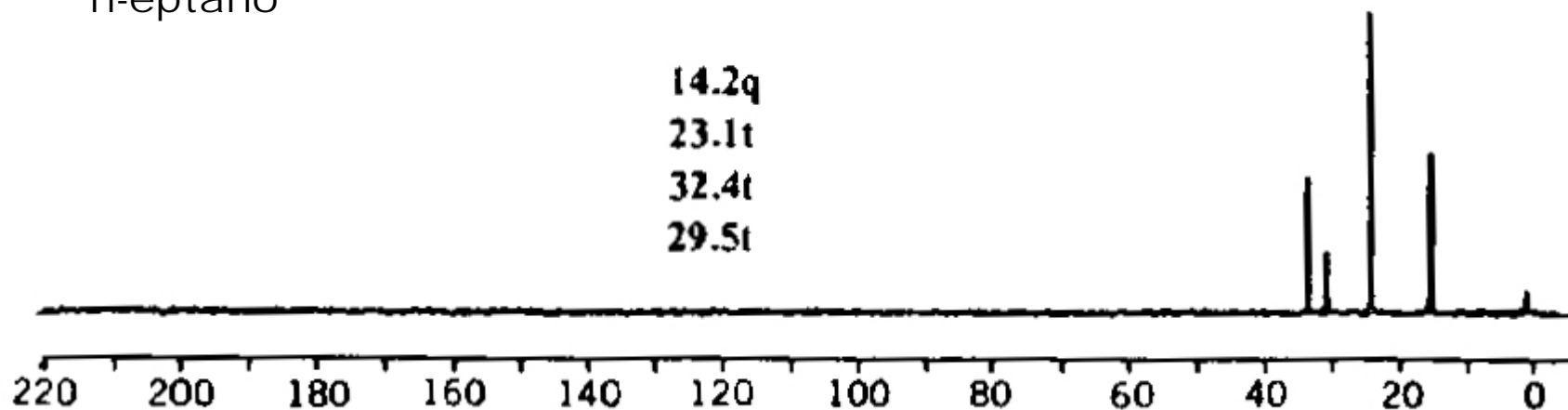
In uno spettro ^{13}C totalmente disaccoppiato contiamo i C con intorno magnetico diverso presenti nella molecola.

E' possibile condurre anche un parziale disaccoppiamento eliminando solamente le costanti di accoppiamento 2J (rimangono le 1J): in questo caso la molteplicità di ciascun segnale ci dirà il numero di H legati a ciascun C (spettri con disaccoppiamento "off resonance").

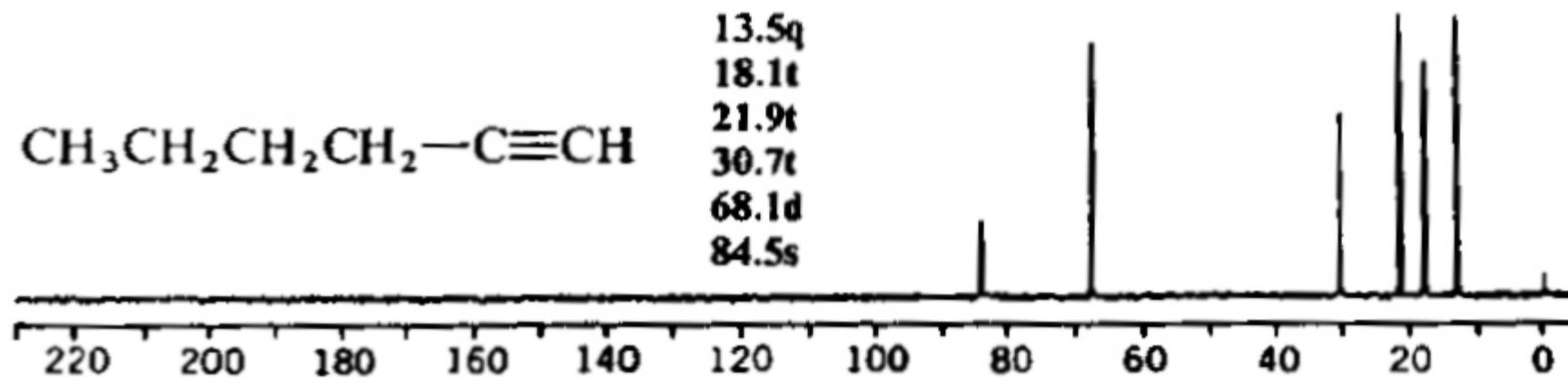


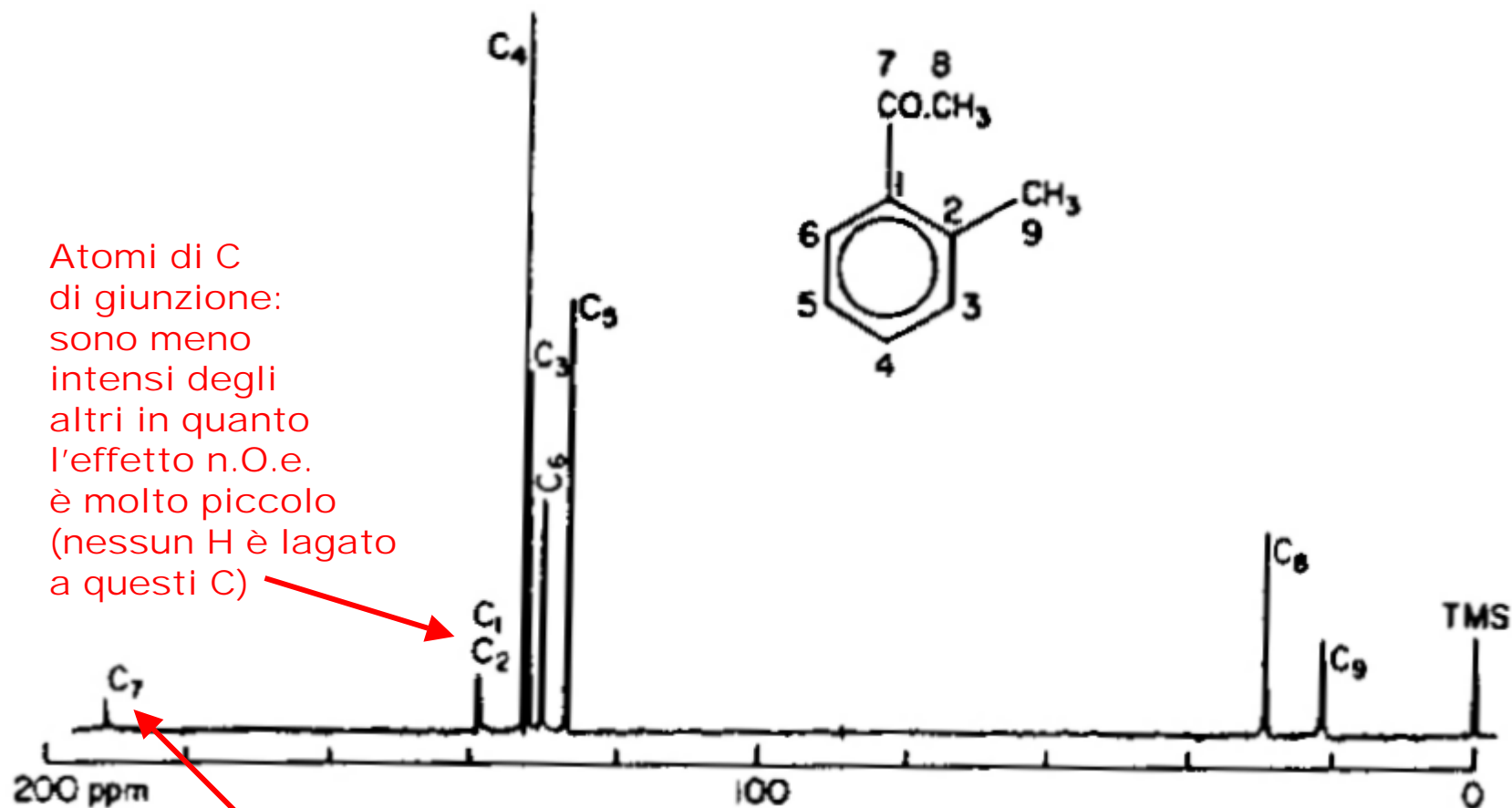
n-eptano

14.2q
23.1t
32.4t
29.5t


 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{CH}$

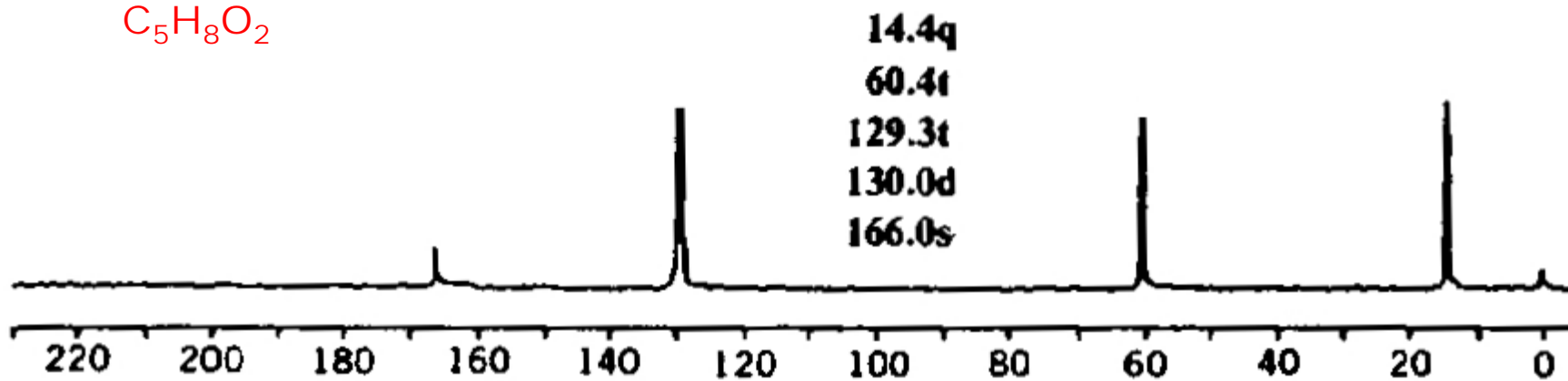
13.5q
18.1t
21.9t
30.7t
68.1d
84.5s



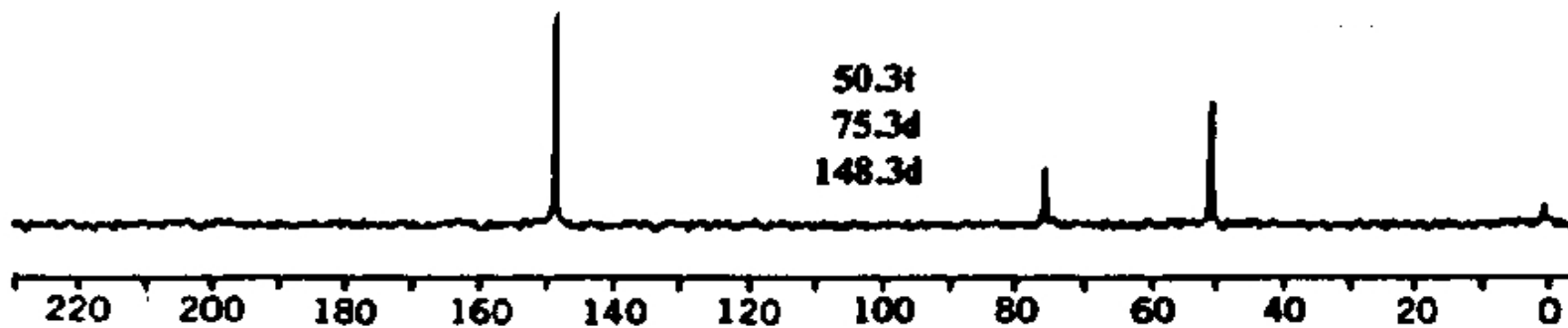
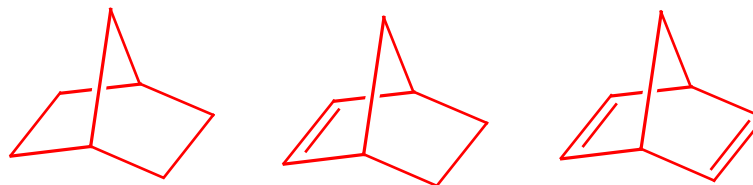
$\{^1\text{H}\}\text{-}^{13}\text{C}\text{-NMR}$ 

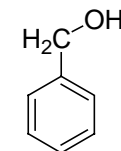
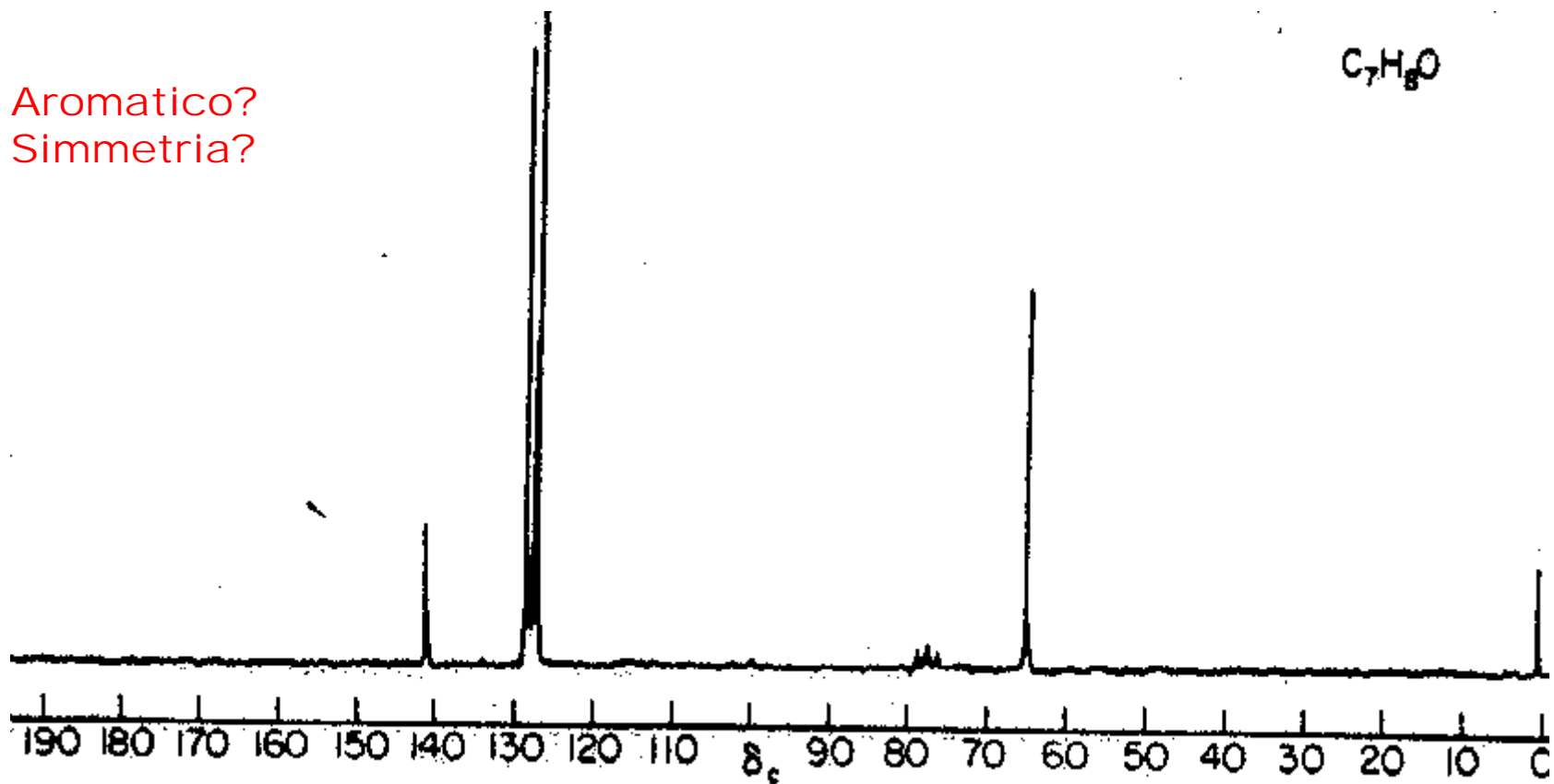
Atomi di C di giunzione: sono meno intensi degli altri in quanto l'effetto n.O.e. è molto piccolo (nessun H è legato a questi C)

Anche questo C è poco intenso in quanto non ha H.

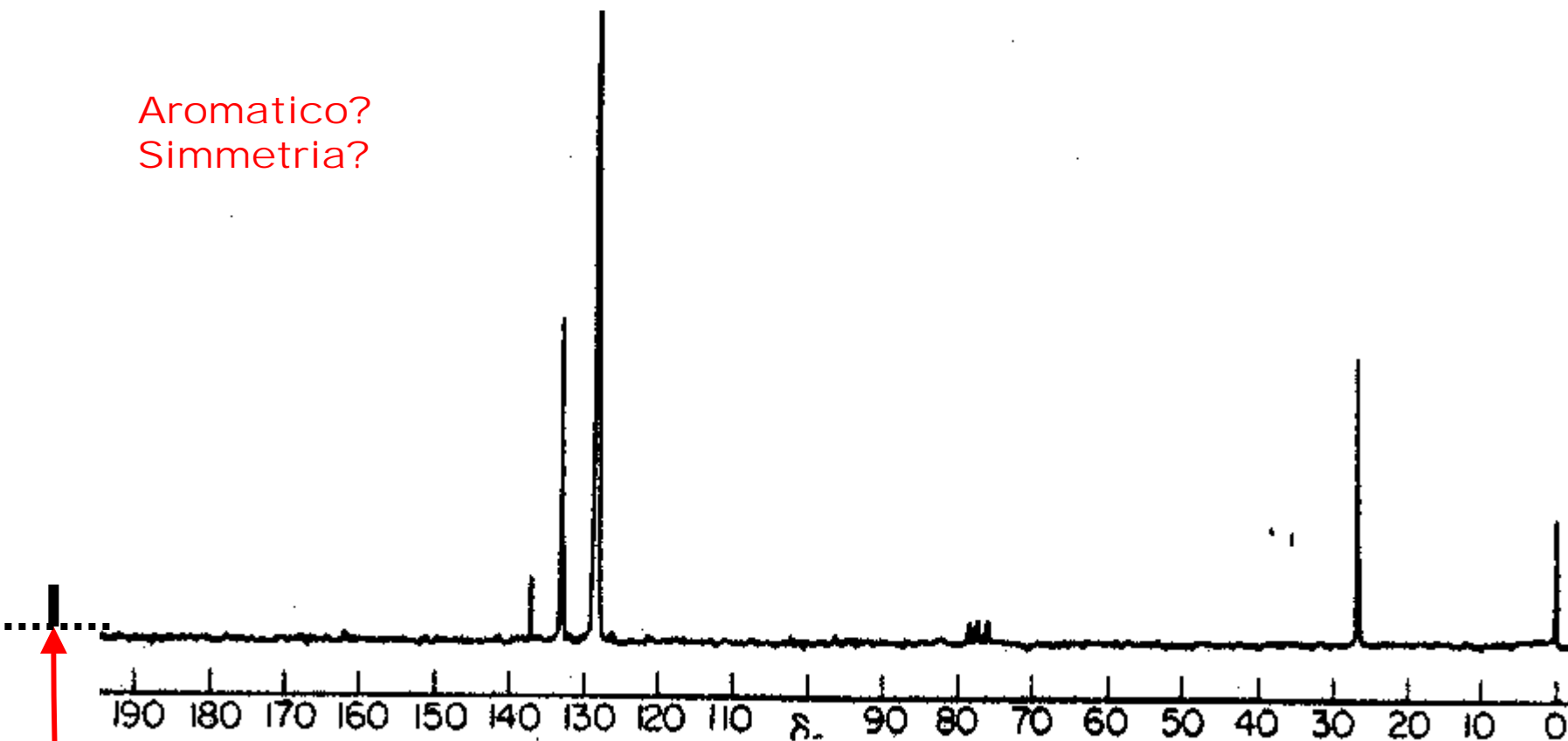


A quale di questi composti si riferisce questo spettro?





Aromatico?
Simmetria?



26.3 q
128.2 d
128.4 d
132.9 d
137.1 s
197.8 s

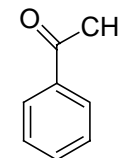
Csp³

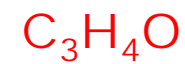
Csp²

C di giunzione

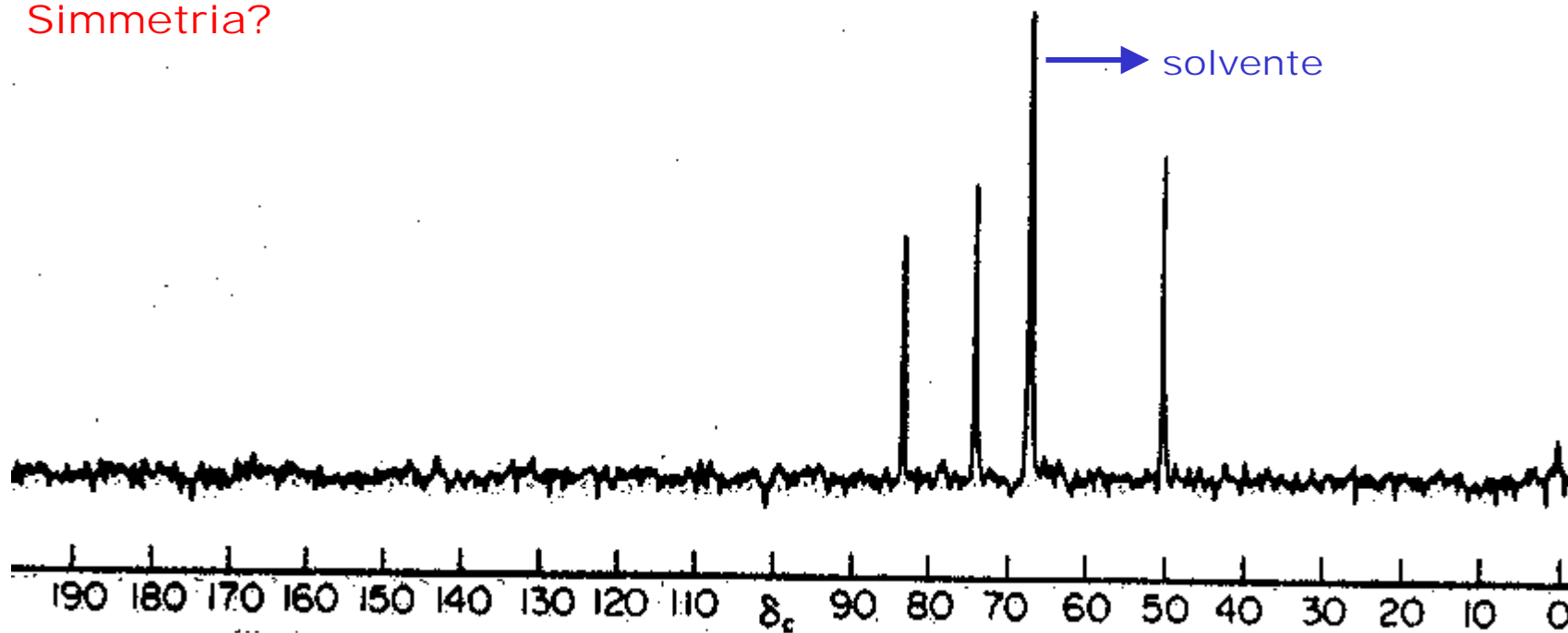
C=O (chetone)

Anello aromatico monosostituito





Simmetria?



50.0 t

73.8 d

83.0 s

tutti Csp³?

CH₂

CH

C

