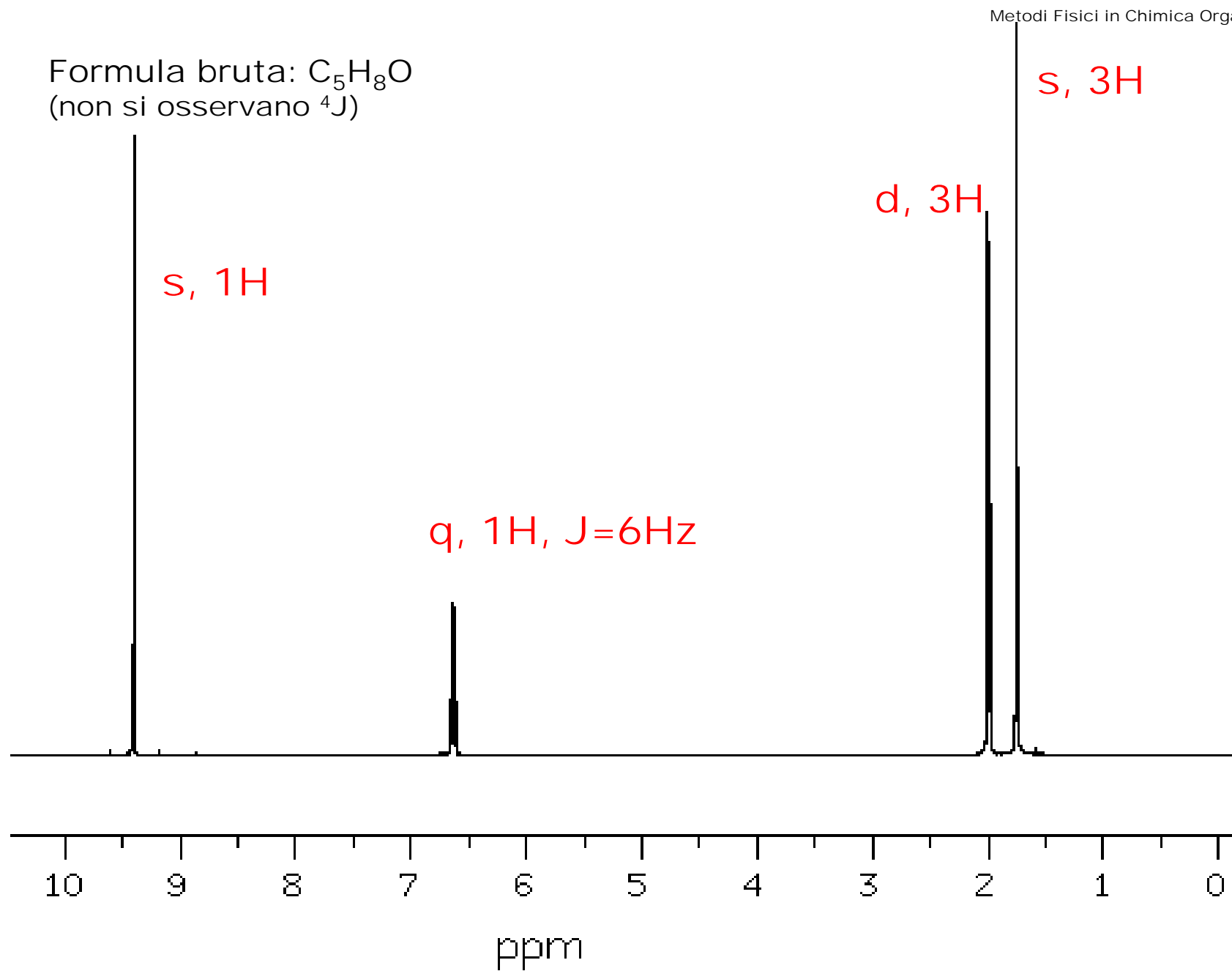


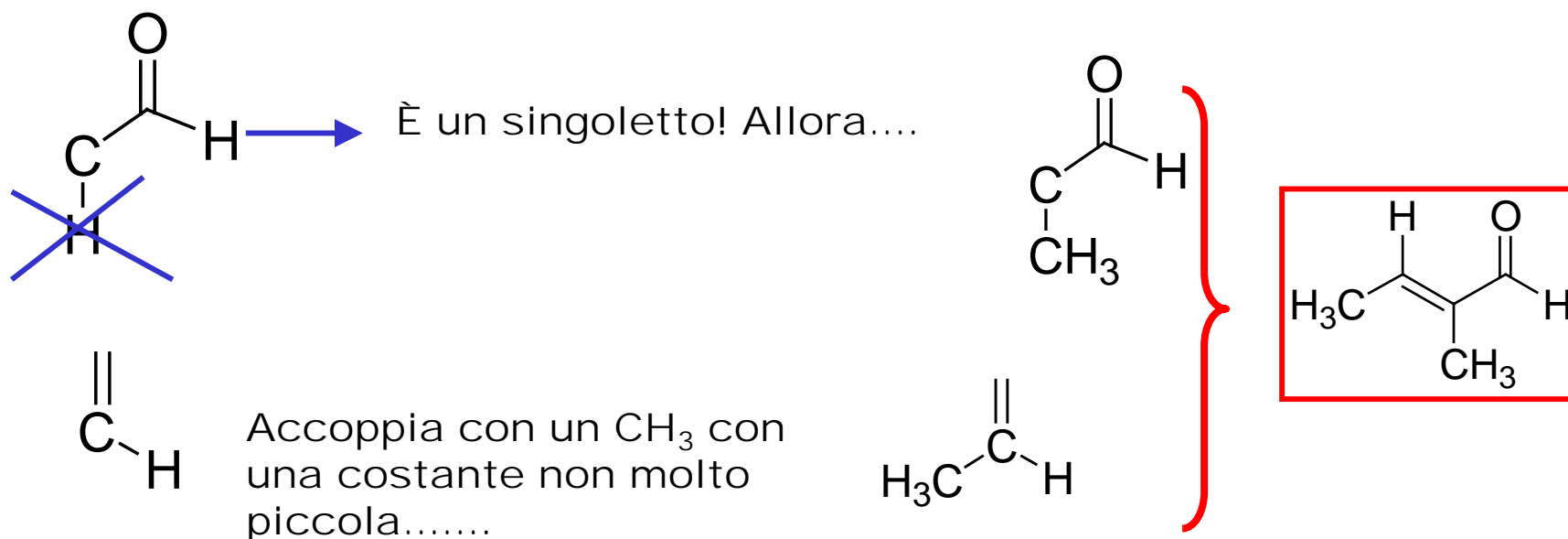
Formula bruta: C_5H_8O
(non si osservano 4J)



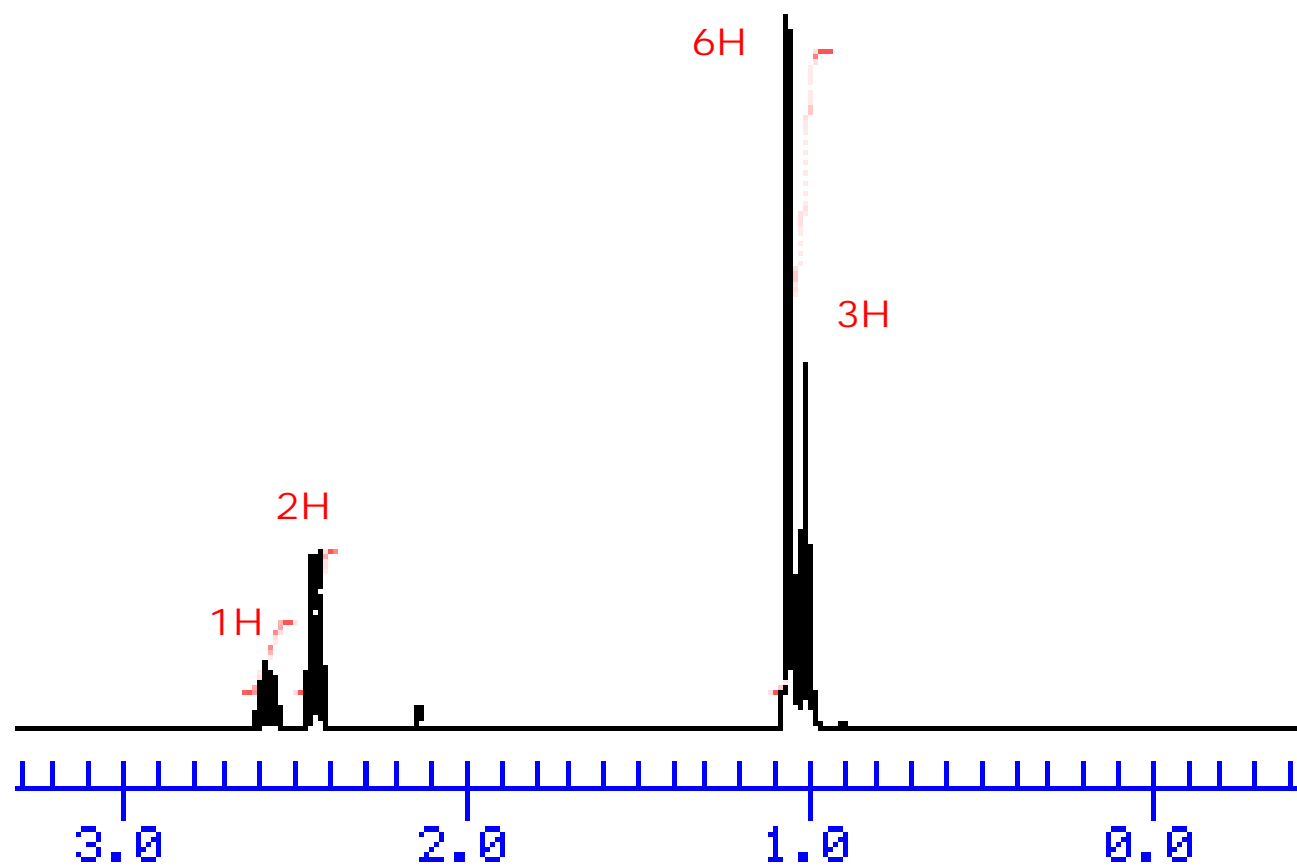
Analisi dello spettro

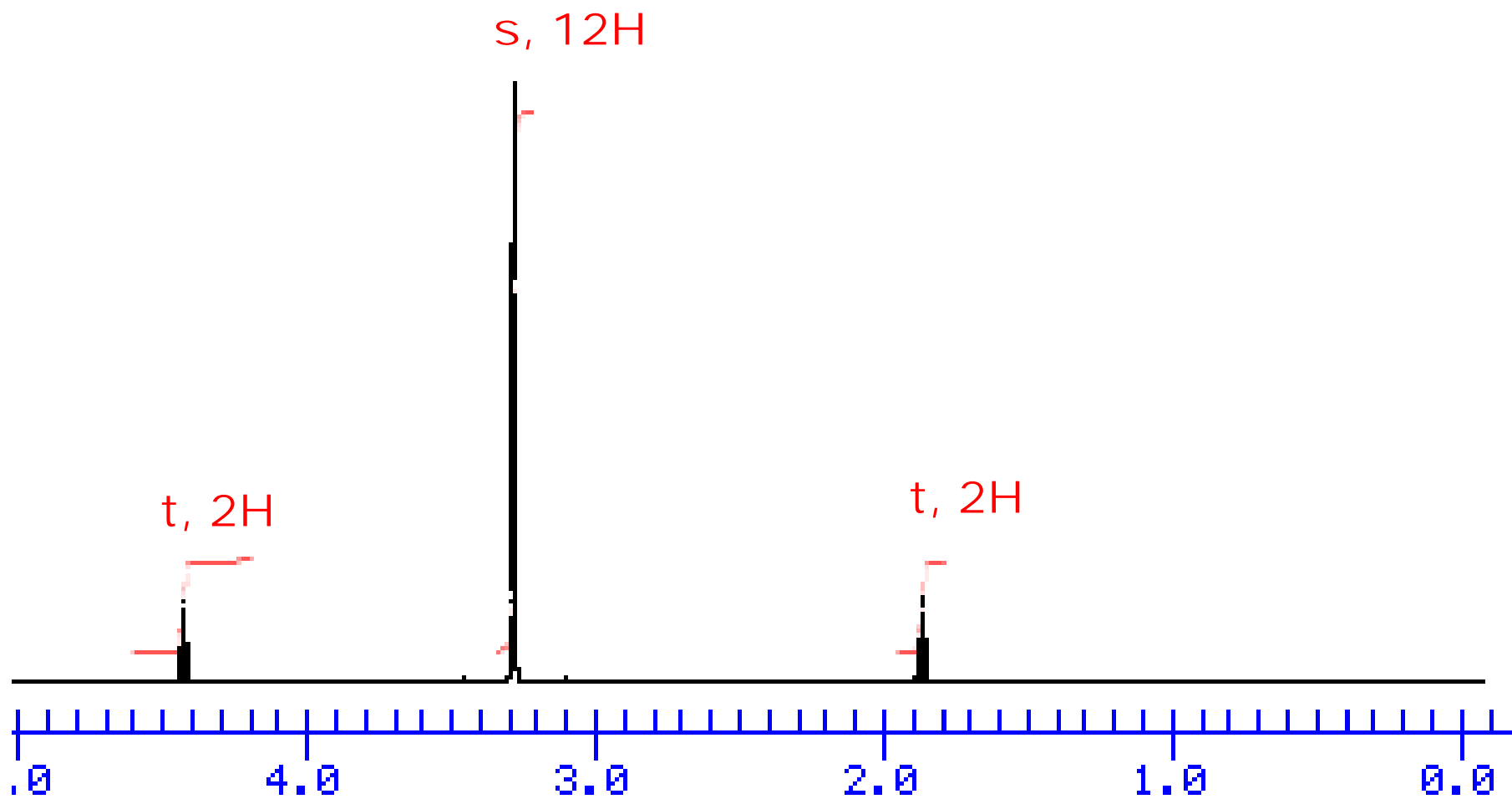
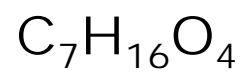
U=2

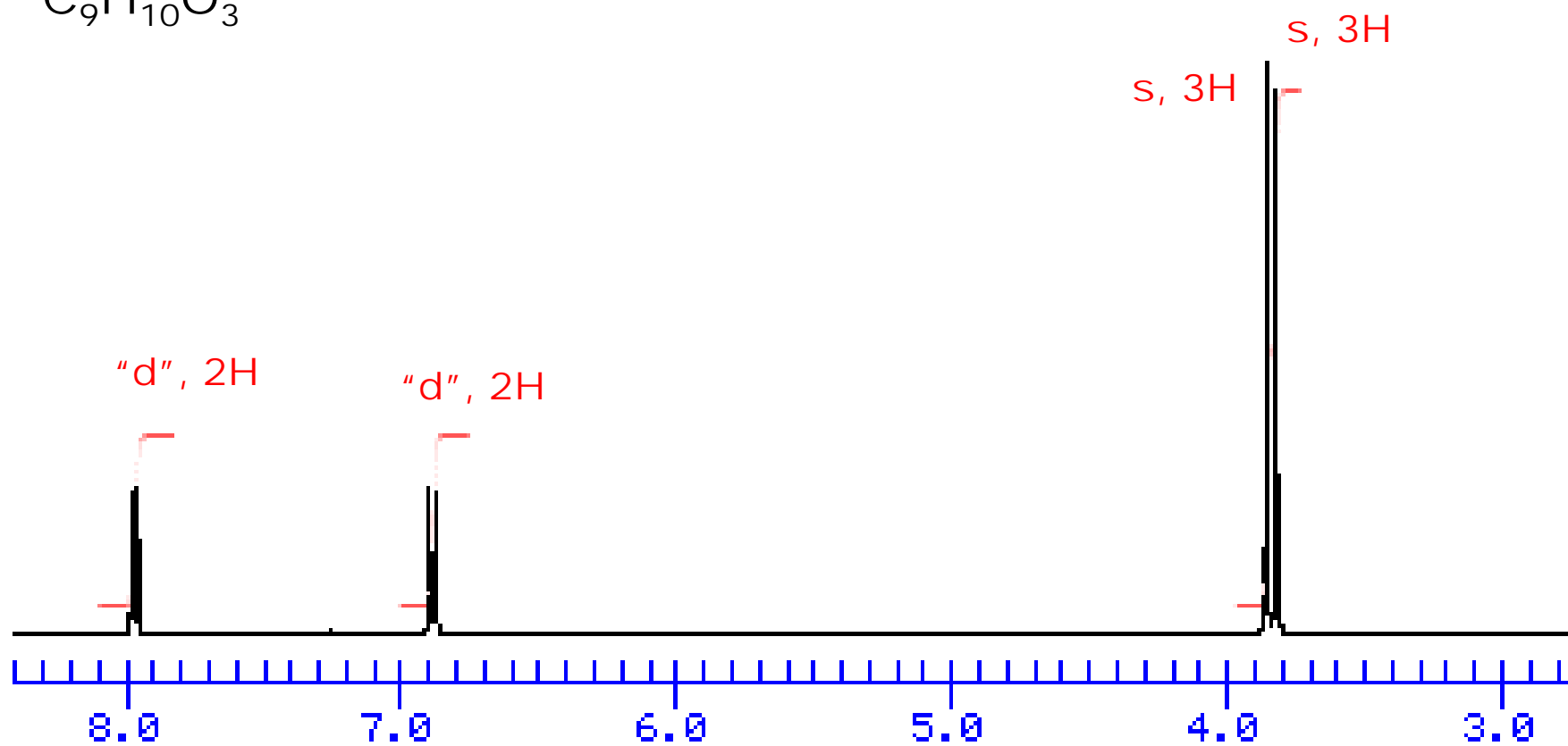
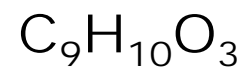
δ , ppm	nH	m	
9,4	1	s	
6,6	1	q	
2,0	3	d	
1,7	3	s	

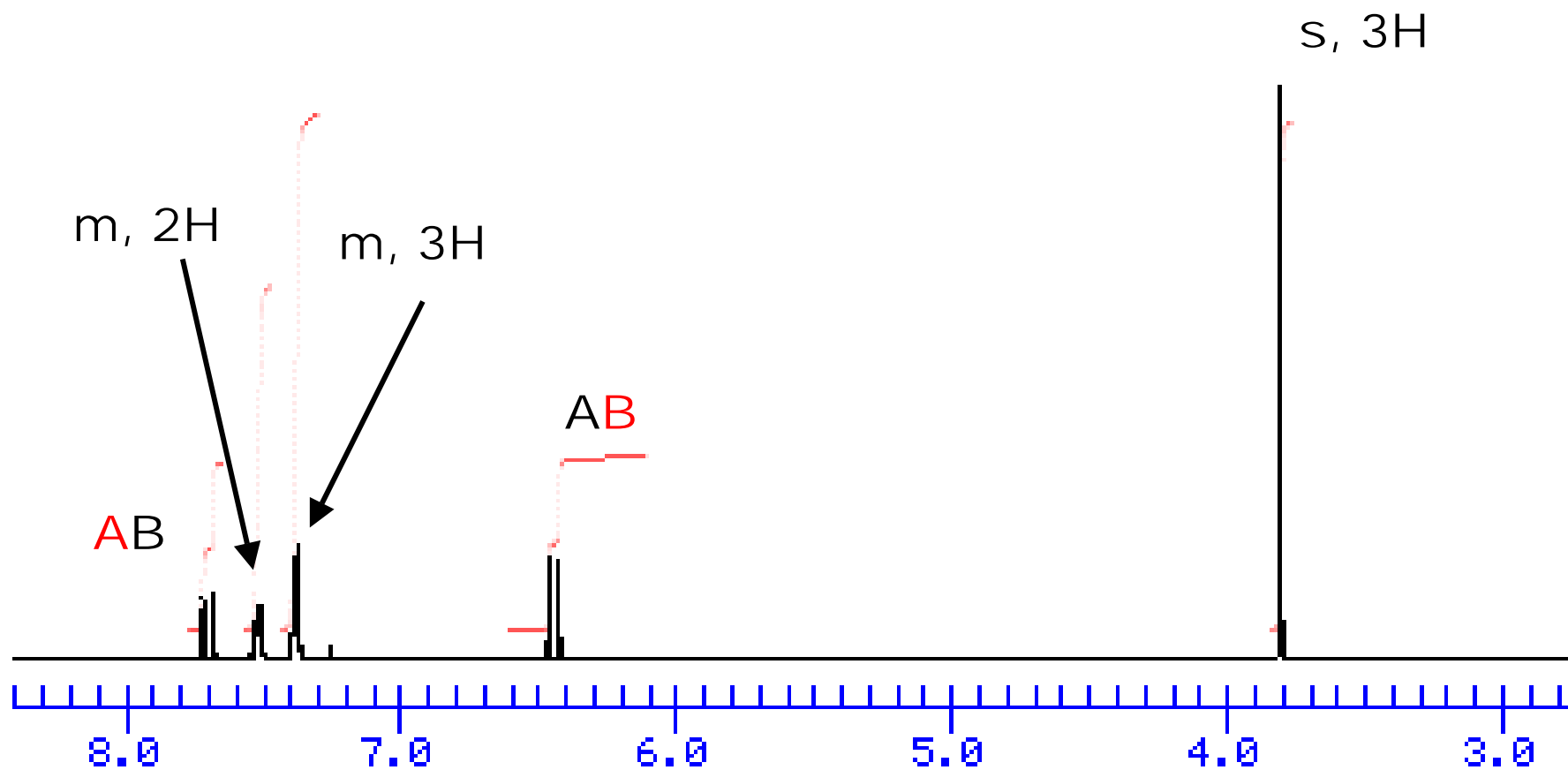
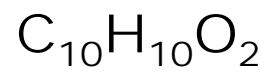


$C_6H_{12}O$: correlare i gruppi di protoni









^{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 :

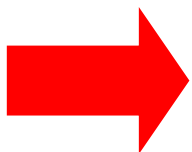
No

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

Si

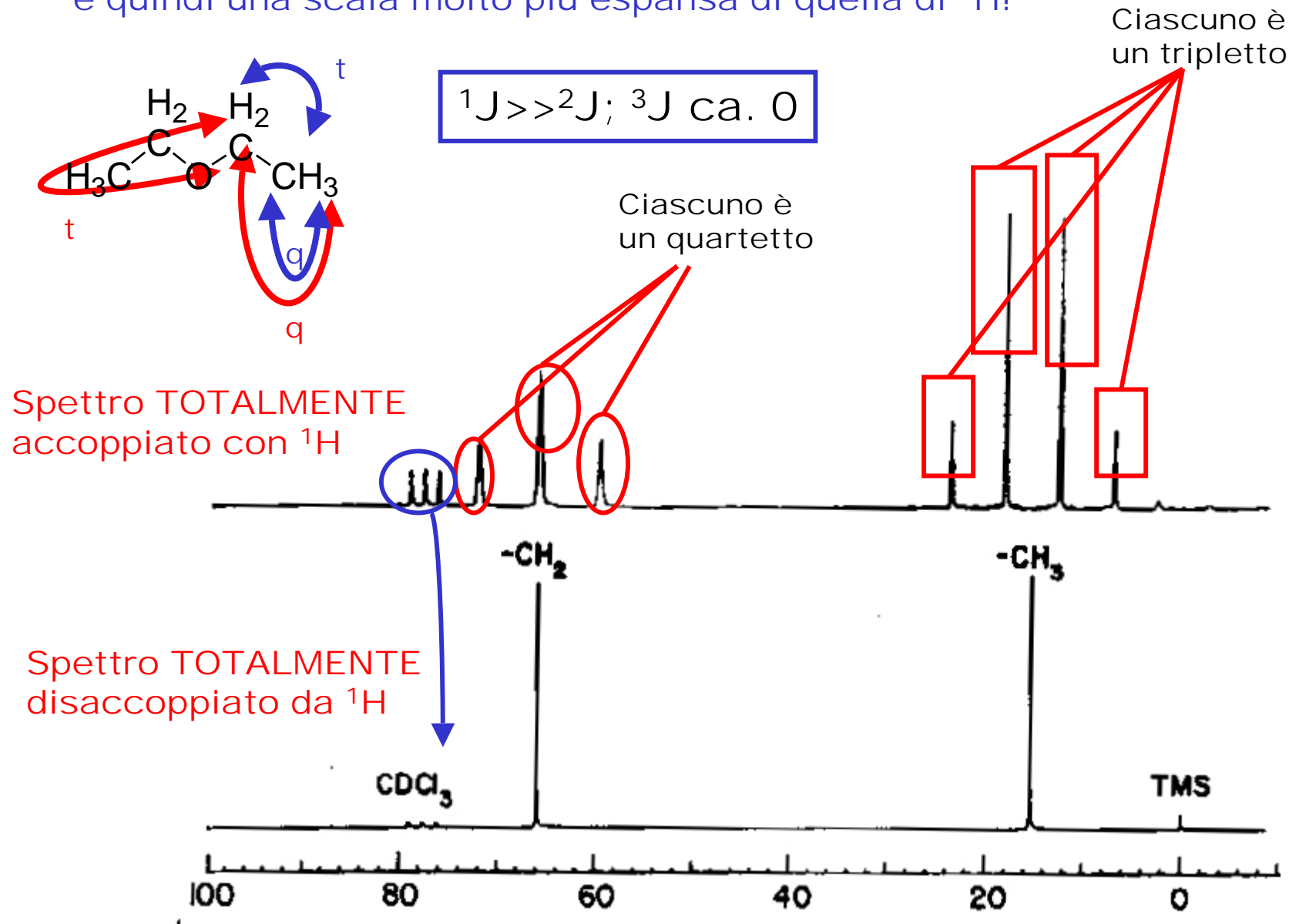
- accoppiamento con H legati allo stesso C o a quello vicino*
- chemical shift

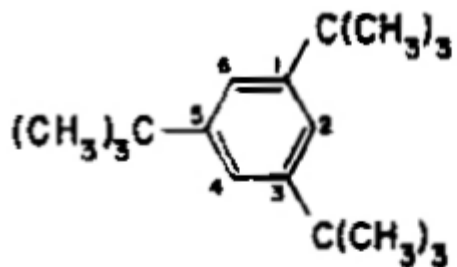
*Tuttavia poiché in condizioni "normali" lo spettro viene registrato in totale disaccoppiamento dai protoni neanche di questo mi devo preoccupare!



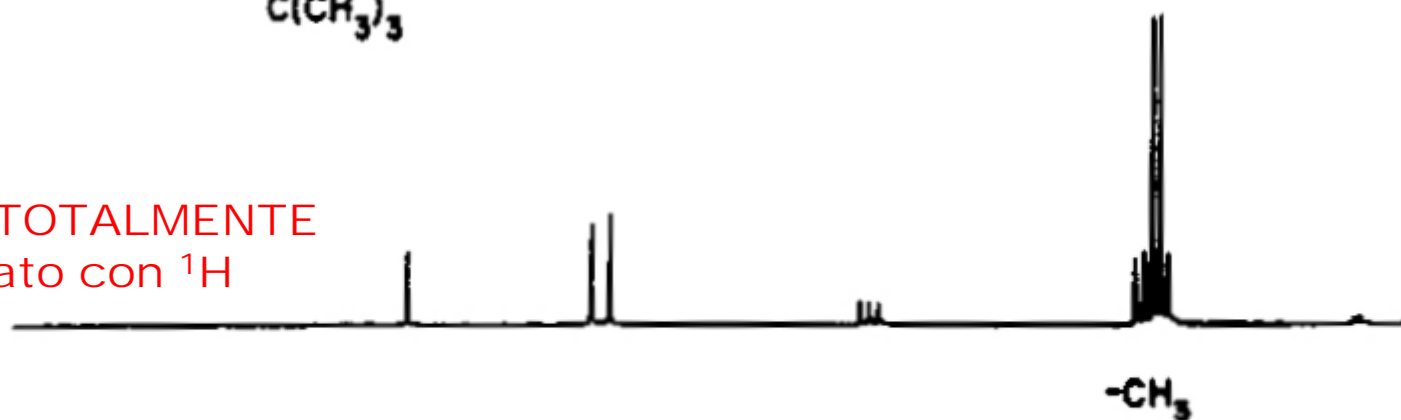
Se disaccoppio i protoni ($\{^1\text{H}\}$ - ^{13}C -NMR) tutti i segnali saranno singoletti

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 !

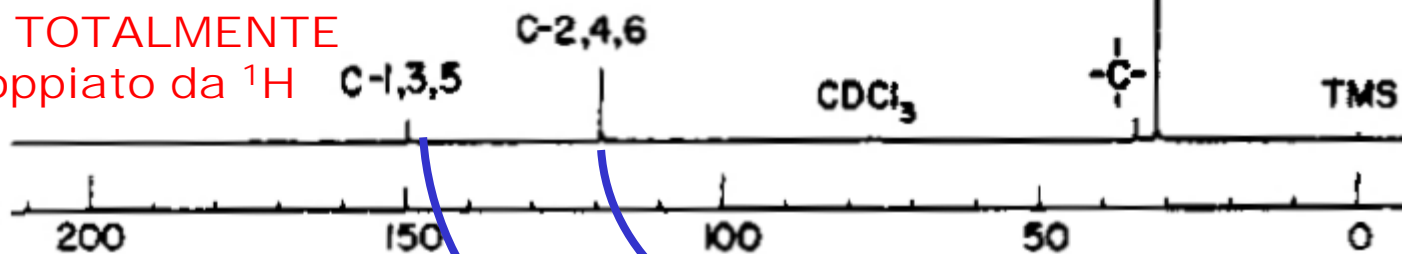




Spettro TOTALMENTE
accoppiato con ^1H



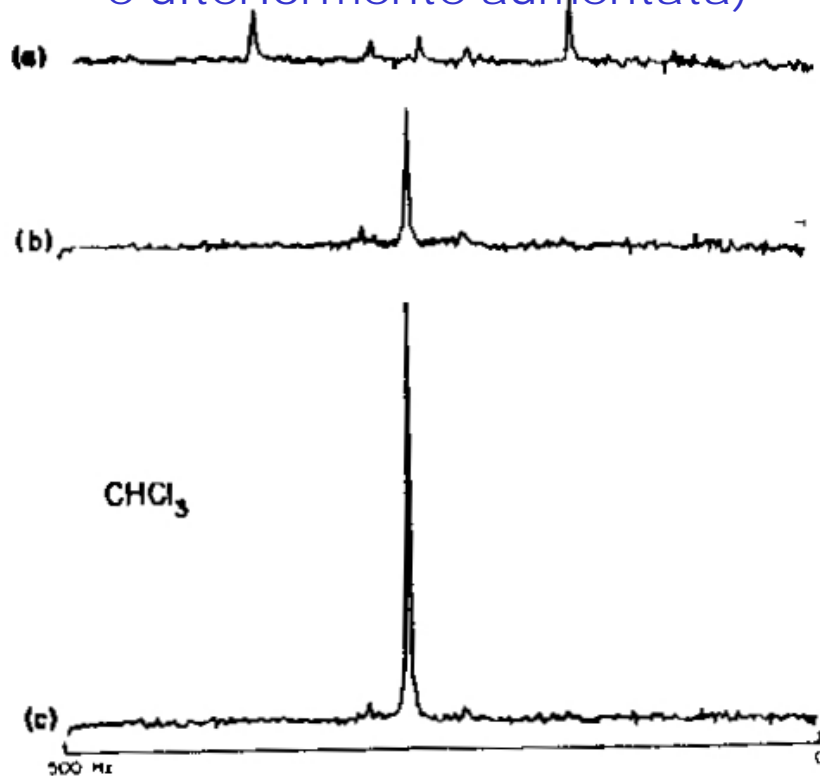
Spettro TOTALMENTE
disaccoppiato da ^1H



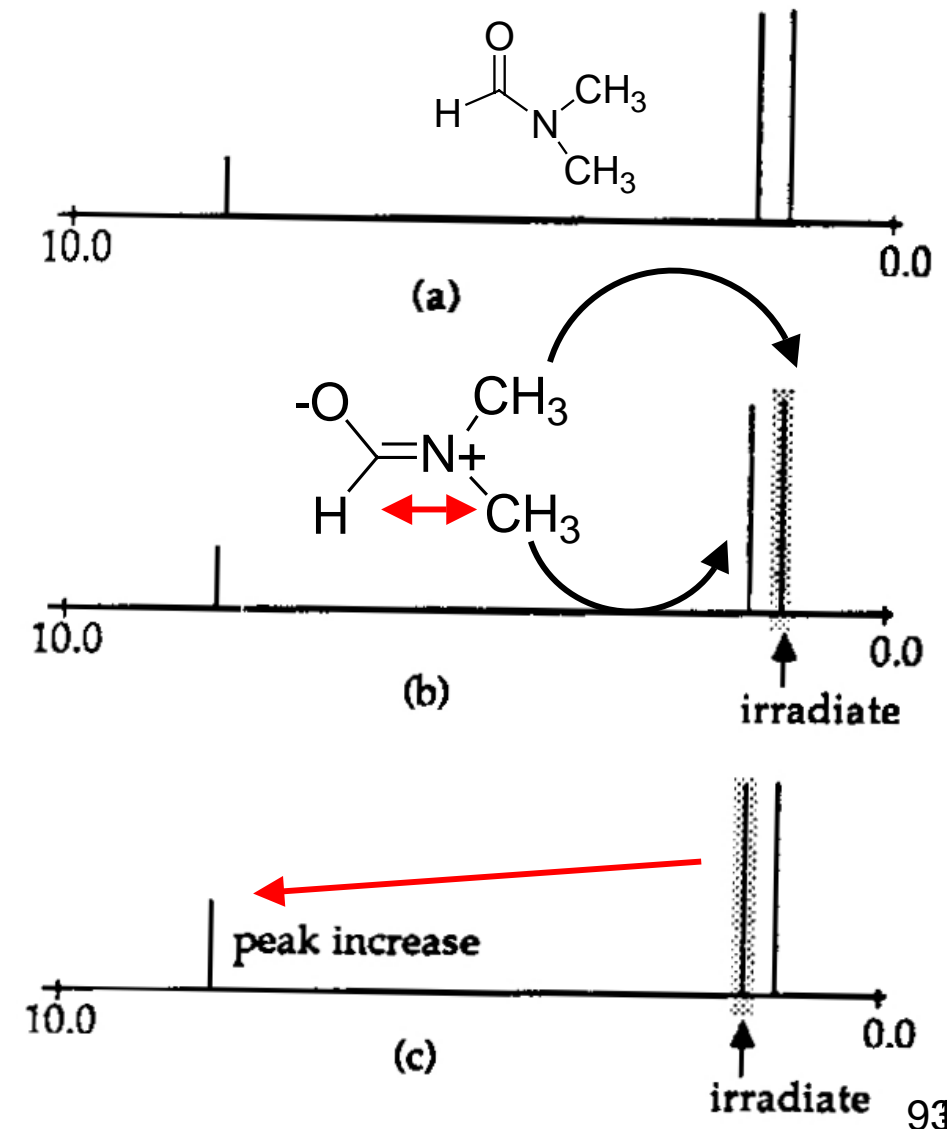
Perché l'altezza è diversa?

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)

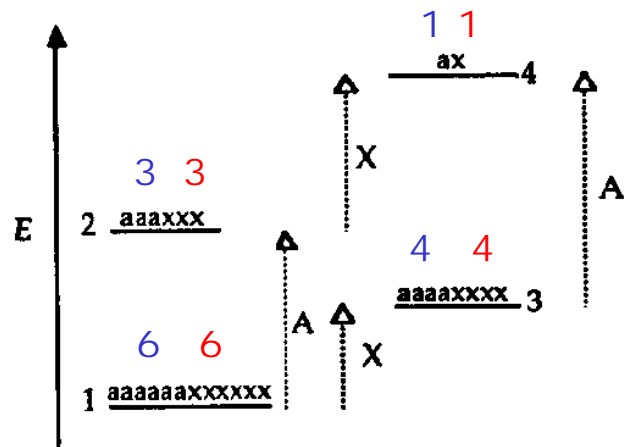
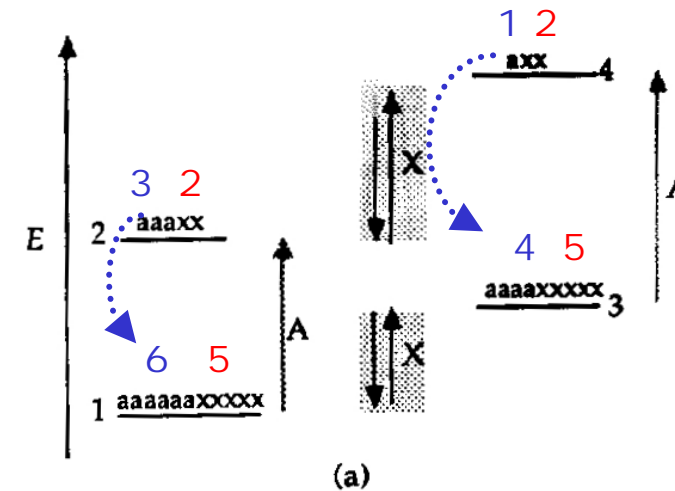
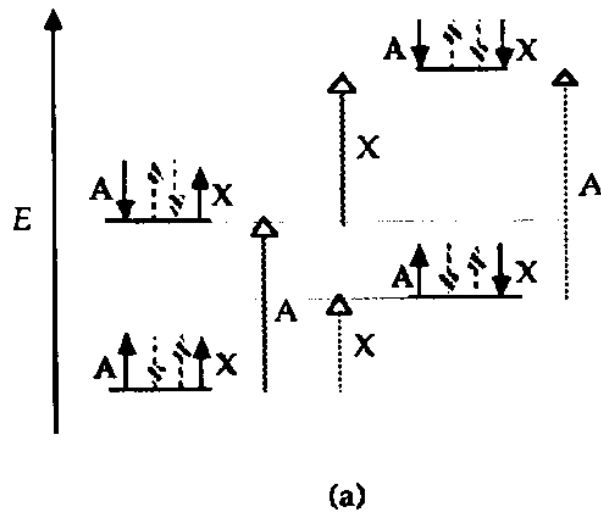


L'effetto n.O.e. si può osservare anche negli spettri protonici!
L'interazione avviene attraverso lo spazio e NON attraverso i legami

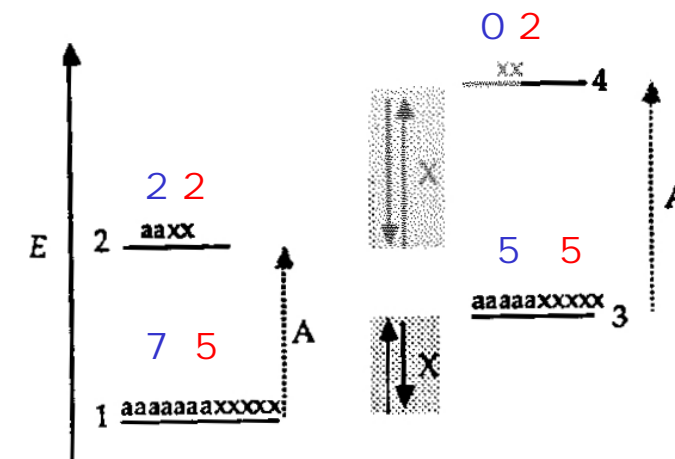


La ragione dell'effetto Overhauser (n.O.e.)

 Spin nucleare
  Spin elettronico
 Nuclei AX

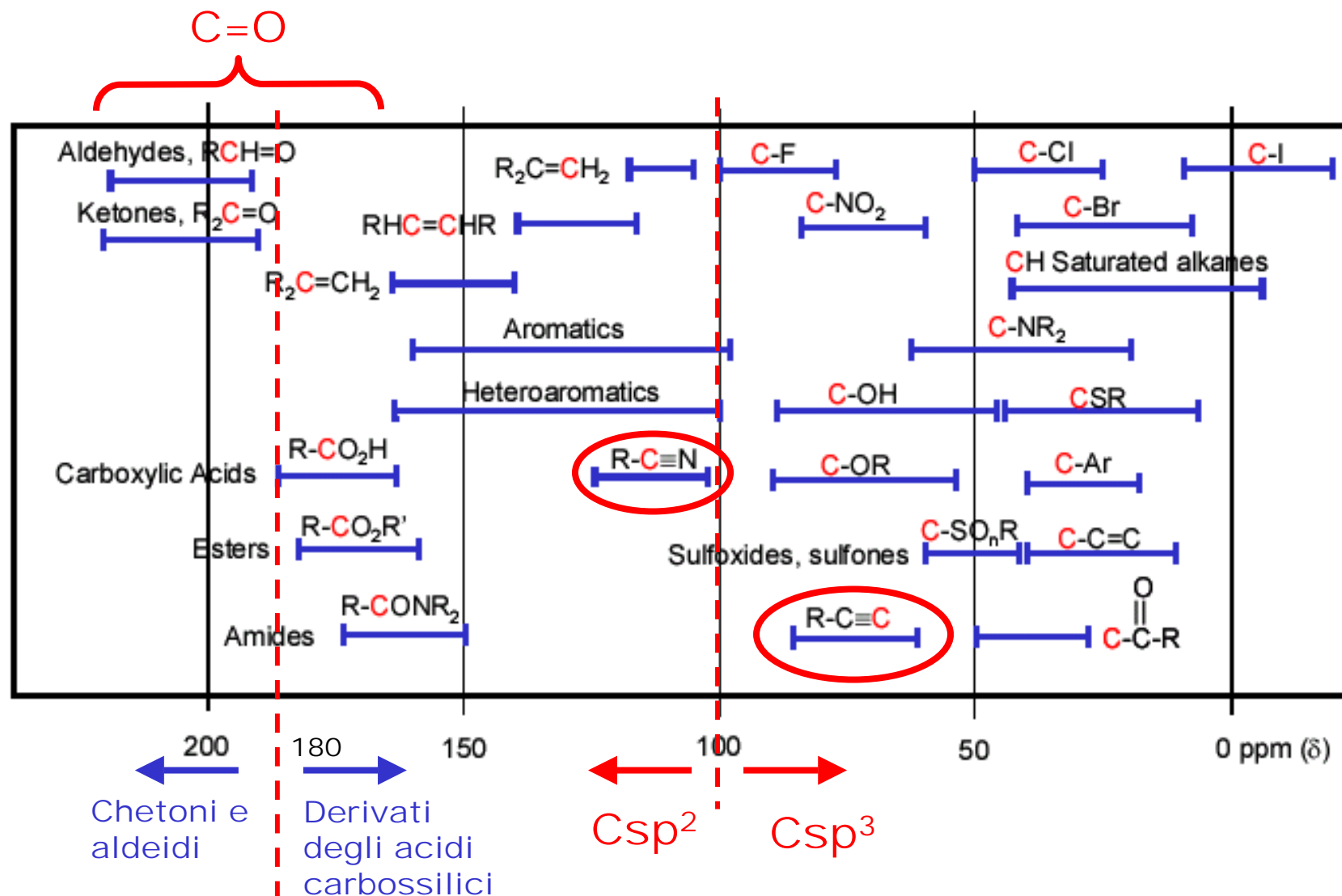


- a) transizione di spin per AX
 b) popolazione dei livelli
 (distribuzione di Boltzman)



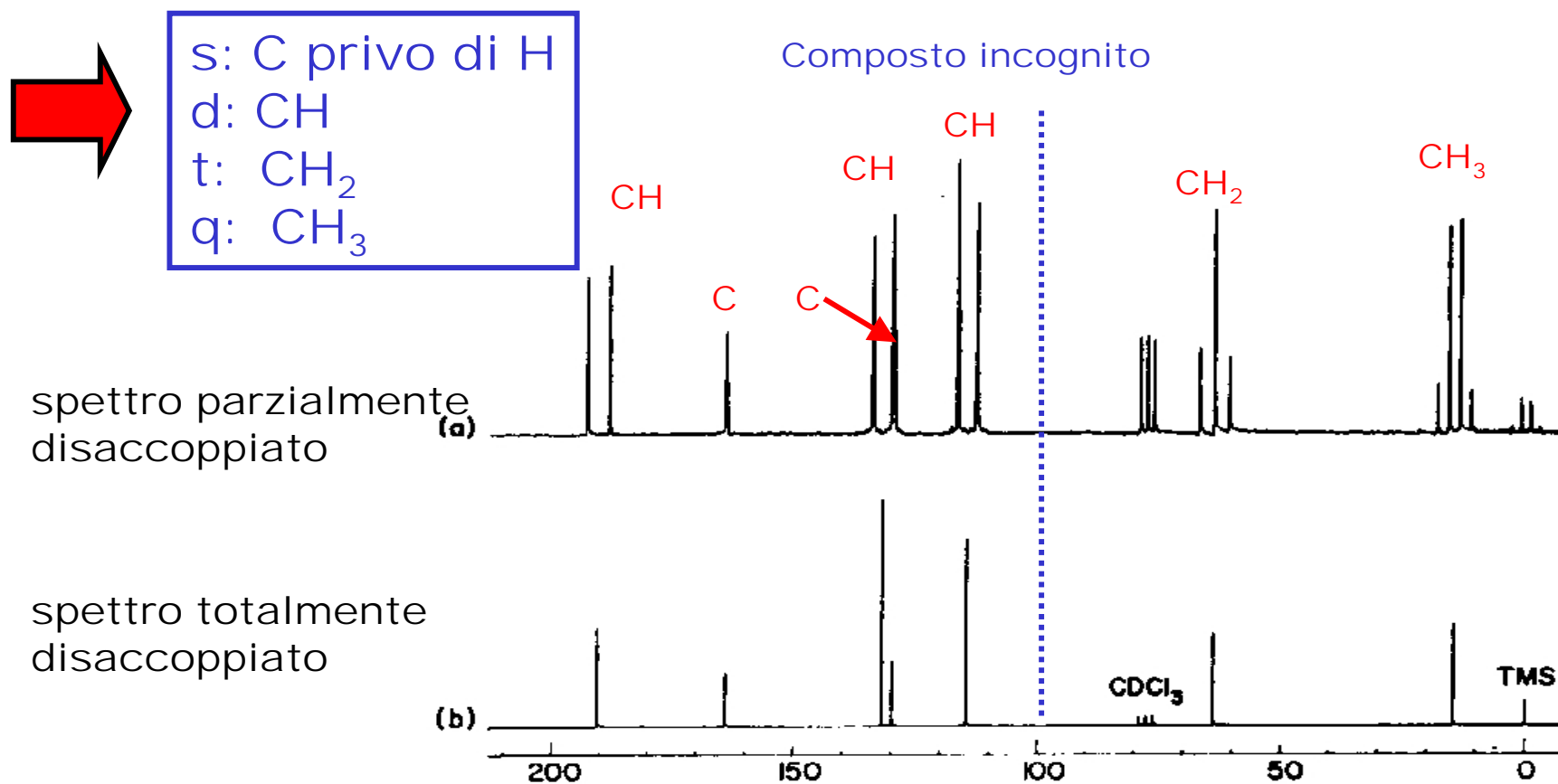
- a) irraggiando X i livelli 1-3 e 2-4 hanno la stessa popolazione di X
 b) A risponde diminuendo la sua popolazione nei livelli 2 e 4

CARTA DI CORRELAZIONE PER IL ^{13}C

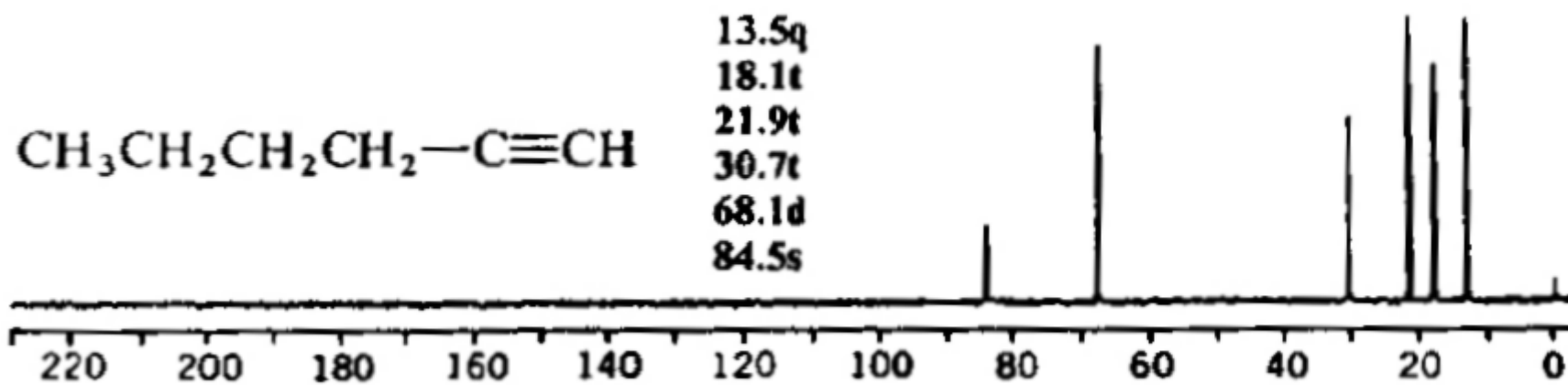
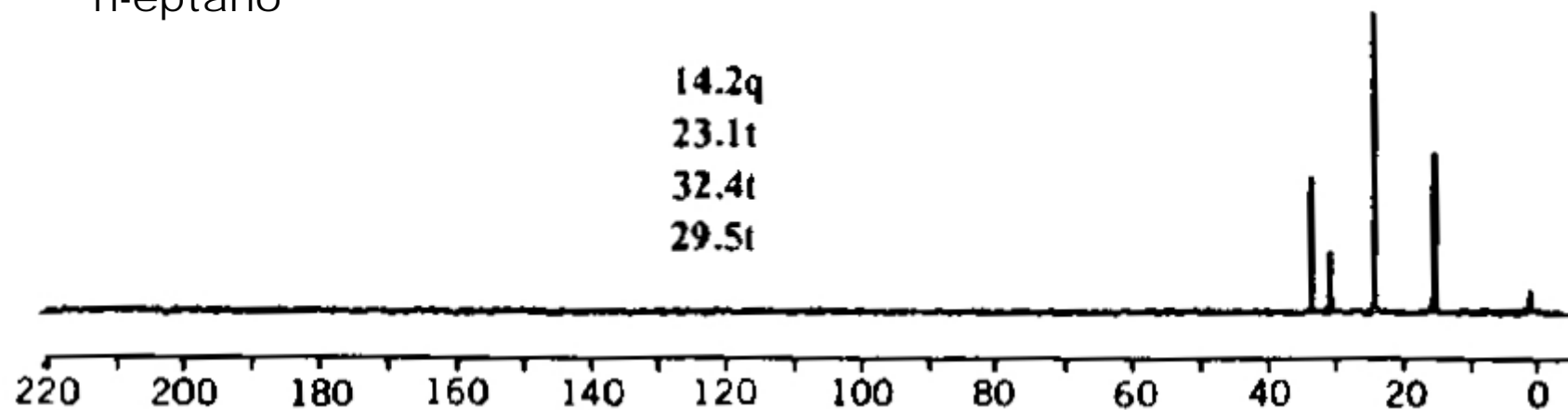


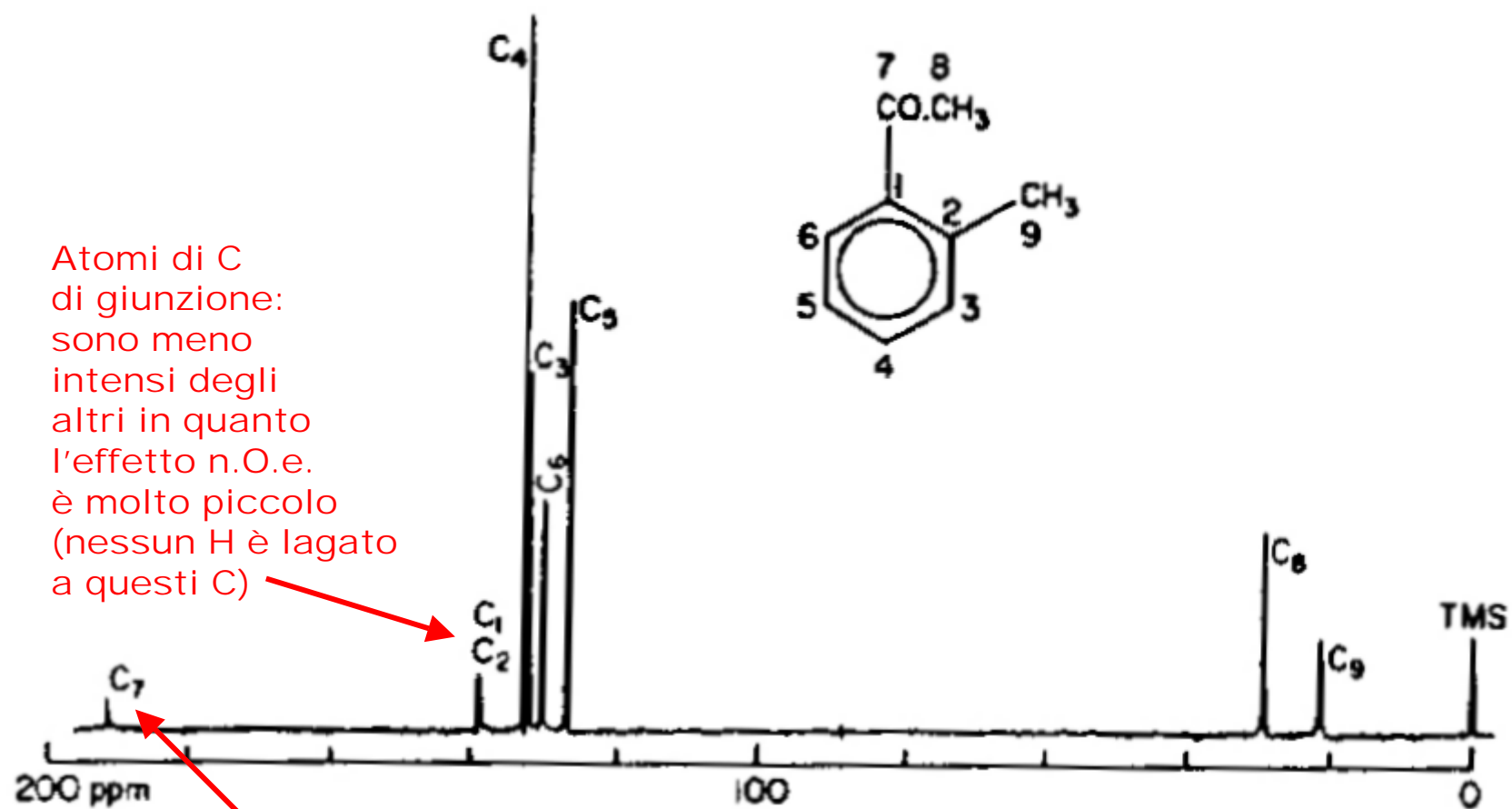
In uno spettro ^{13}C totalmente disaccoppiato contiamo i C con intorno magnetico diverso presenti nella molecola.

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").



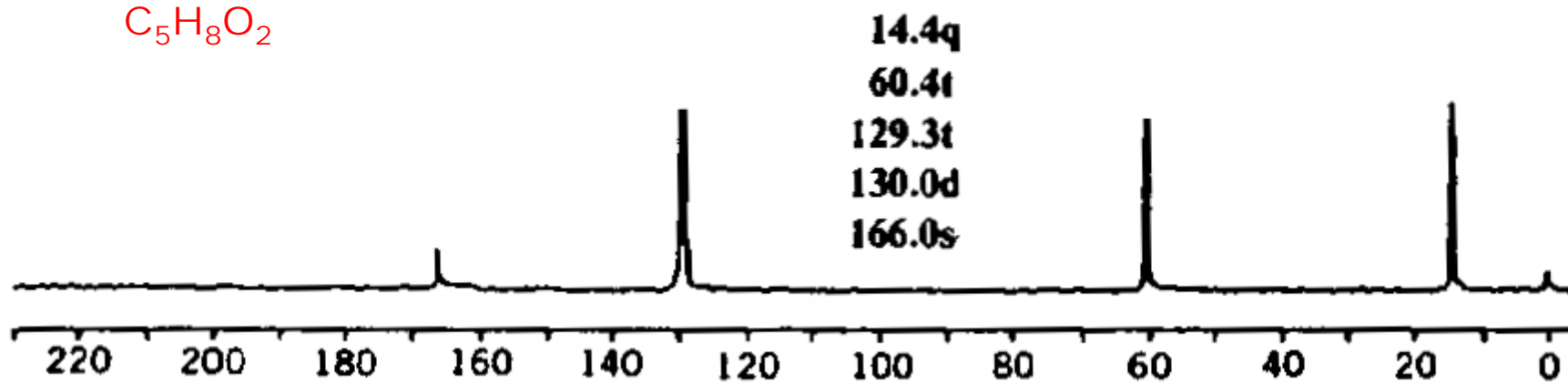
n-eptano



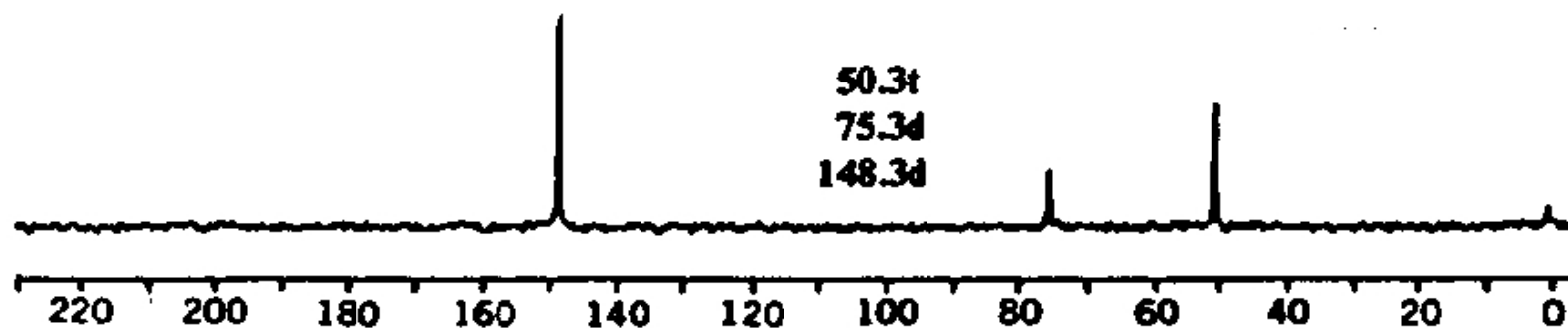
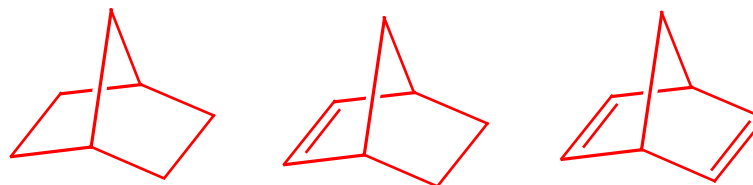
$\{^1\text{H}\}\text{-}^{13}\text{C}\text{-NMR}$ 

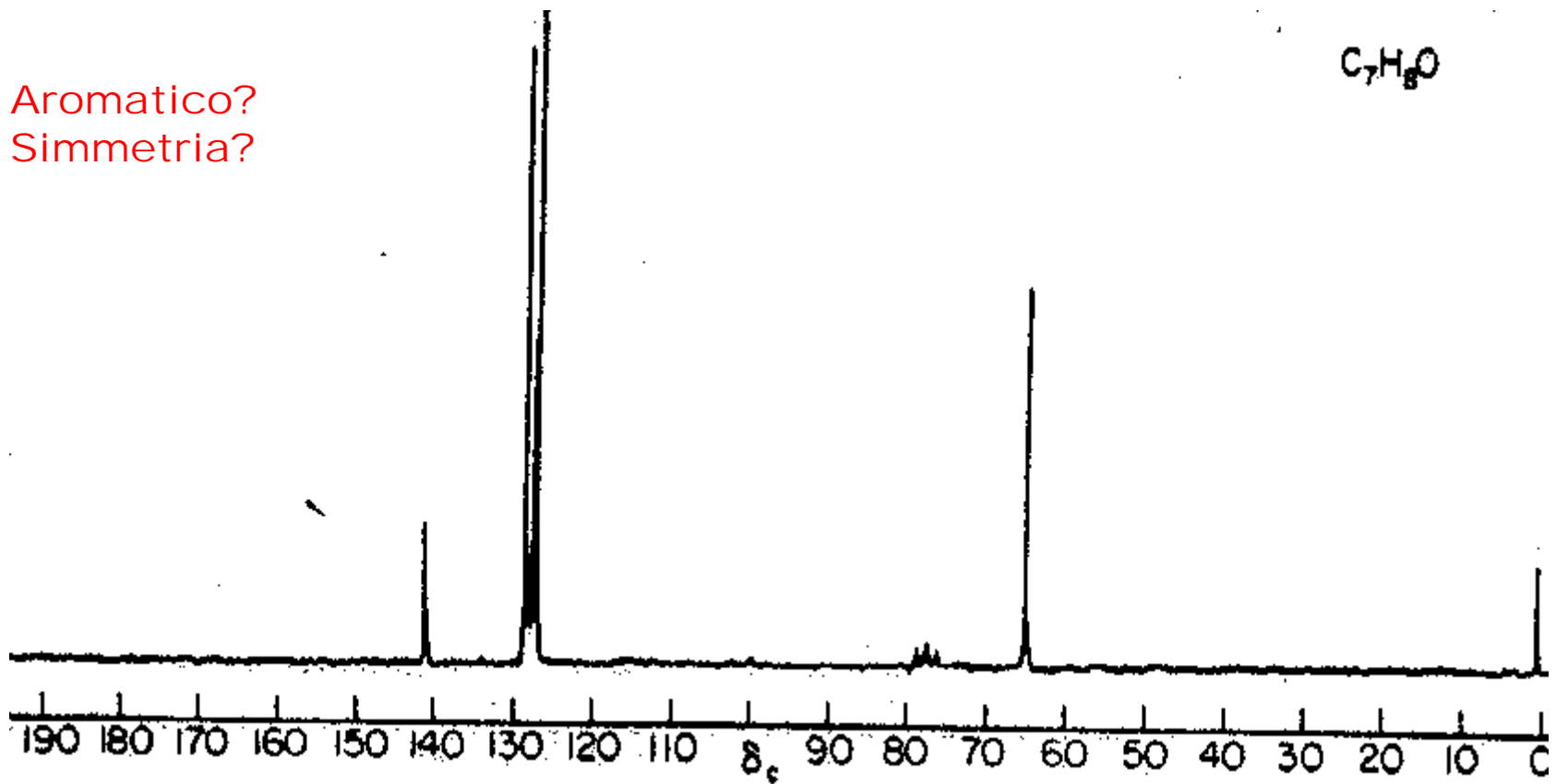
Atomi di C di giunzione: sono meno intensi degli altri in quanto l'effetto n.O.e. è molto piccolo (nessun H è legato a questi C)

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



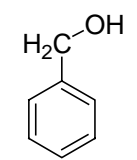
A quale di questi composti
si riferisce questo spettro?

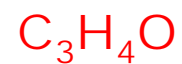




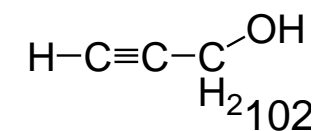
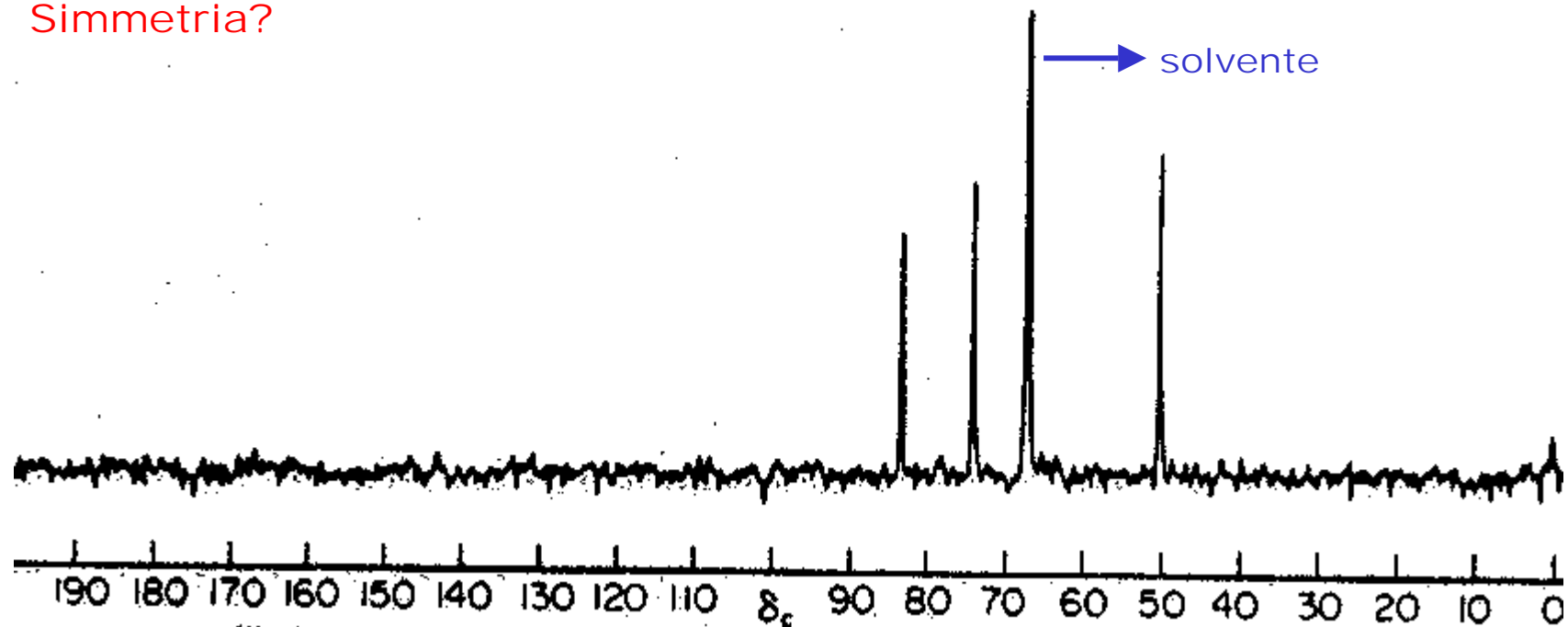
Aromatico?
Simmetria?

64.5 t	Csp ³	} Anello aromatico monosostituito
126.8 d	Csp ²	
127.2 d		
128.2 d		
140.8 s		





Simmetria?



Simmetria?

