

Esercitazione n. 9 Risonanza magnetica nucleare (NMR)

1. Dare una definizione dei seguenti termini:

TMS → tetrametilsilano, $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$ usato come standard per lo 0 della scala di δ , sia per ^1H che per ^{13}C .

ppm → parti per milione: per rendere indipendenti dallo strumento i valori dei chemical shifts.

δ → scala in ppm dei chemical shift, cresce da destra (TMS a 0) verso sinistra

doppietto → Segnale di un protone suddiviso in due dall' accoppiamento con **UN** H su un atomo adiacente.

tripletto → Segnale di un protone suddiviso in **tre** dall' accoppiamento con **DUE** H *equivalenti* su un atomo adiacente.

area del segnale → Area del picco, misurata dall' integratore e indicata da uno scalino su una linea, proporzionale al n° di H che hanno prodotto quel segnale

accoppiamento spin-spin → suddivisione di un segnale per interazione nuclei magneticamente attivi su atomi adiacenti

chemical shift → Spostamento chimico di un segnale (rispetto al TMS) dovuto al diverso campo magnetico "sentito" da nuclei con densità elettronica diversa

- campo alto** → parte destra dello spettro NMR, dove risuonano i nuclei più schermati
- multipletto** → Segnale complesso dovuto all' accoppiamento con protoni adiacenti di tipo diverso
- quartetto** → Segnale di un protone suddiviso in **quattro** dall' accoppiamento con **TRE H equivalenti** su un atomo adiacente.




2. Quando un campo magnetico molecolare indotto va nella stessa direzione del campo applicato, il nucleo di un protone influenzato da questo campo è schermato o deschermato? E' spostato verso un campo più alto o più basso? Si trova a destra o a sinistra nello spettro NMR?



Se il campo magnetico molecolare indotto va nella stessa direzione del campo applicato, il nucleo RAGGIUNGE PRIMA la combinazione campo/radiofrequenza che lo fa risuonare

DESCHERMATO → **campo più basso** → **a sinistra**

3. Indicare quante righe ha e in che rapporto sono un multipletto proveniente dalla suddivisione provocata da:

- a) cinque protoni equivalenti  **6, in rapporto 1:5:10:10:5:1**
- b) sei protoni equivalenti  **7, in rapporto 1:6:15:20:15:6:1**
- c) quattro protoni equivalenti  **5, in rapporto 1:4:6:4:1**

4. Perché è difficile individuare le righe all'estremità dell'eptupletto con cui risuona un protone adiacente a sei protoni equivalenti?

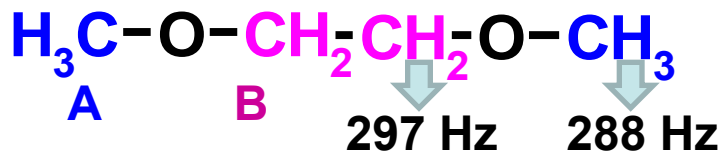
Perché, essendo il rapporto 1:6:15:20:15:6:1, sono molto piccoli e spariscono nel rumore di fondo

5. Se si usa uno strumento a 300 MHz, a quanti Hz a campo più basso del TMS (cioè a sinistra del TMS si trova un segnale con chemical shift 7.5 ppm?

$$\delta_i = \frac{\nu_i - \nu_{\text{TMS}}}{\nu_0} \times 10^6 \quad \img alt="blue arrow" data-bbox="395 835 462 880" \quad 7.5 = \frac{\nu_i}{60 \times 10^6} \times 10^6$$

$\nu_i = 450 \text{ Hz}$

6. I due segnali dello spettro ^1H NMR dell' 1,2-dimetossietano distano dal TMS 288 Hz e 297 Hz quando si usa uno spettrometro a 90 MHz. Quale è il loro chemical shift? Quanti Hz disterebbero dal TMS se lo spettro fosse stato registrato con uno strumento a 100 MHz? E con uno a 400 MHz?



$$\delta_i = \frac{\nu_i - \nu_{\text{TMS}}}{\nu_0} \times 10^6$$

$$\delta_A = \frac{288 \text{ Hz}}{90 \times 10^6} \times 10^6 = 3.20 \text{ ppm}$$

$$\delta_B = \frac{297 \text{ Hz}}{90 \times 10^6} \times 10^6 = 3.30 \text{ ppm}$$

a 100 MHz

$$3.20 = \frac{\nu_i}{100 \times 10^6} \times 10^6 = 320 \text{ Hz}$$

$$3.30 = \frac{\nu_i}{100 \times 10^6} \times 10^6 = 330 \text{ Hz}$$

a 400 MHz

$$3.20 = \frac{\nu_i}{400 \times 10^6} \times 10^6 = 1280 \text{ Hz}$$

$$3.30 = \frac{\nu_i}{400 \times 10^6} \times 10^6 = 1320 \text{ Hz}$$