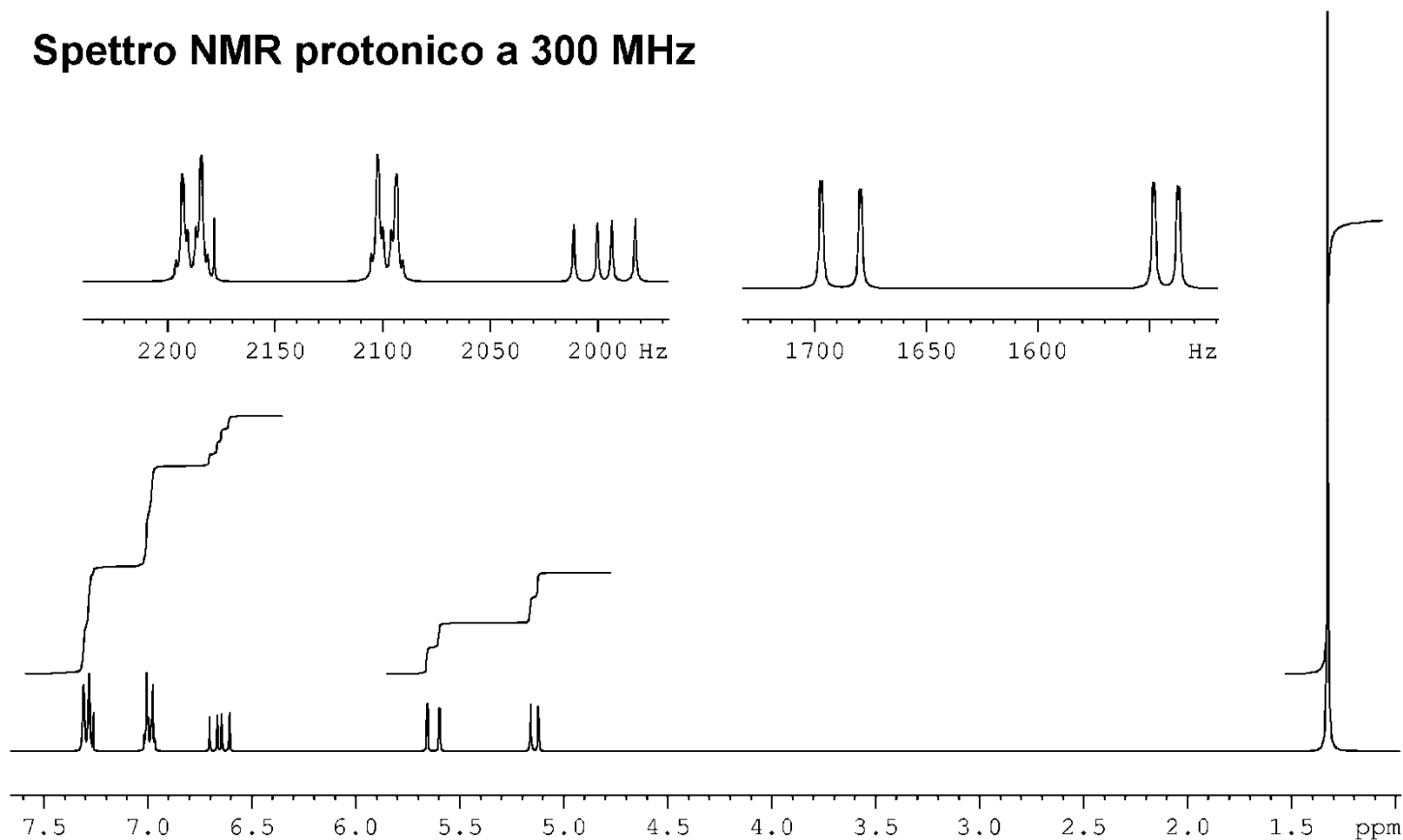


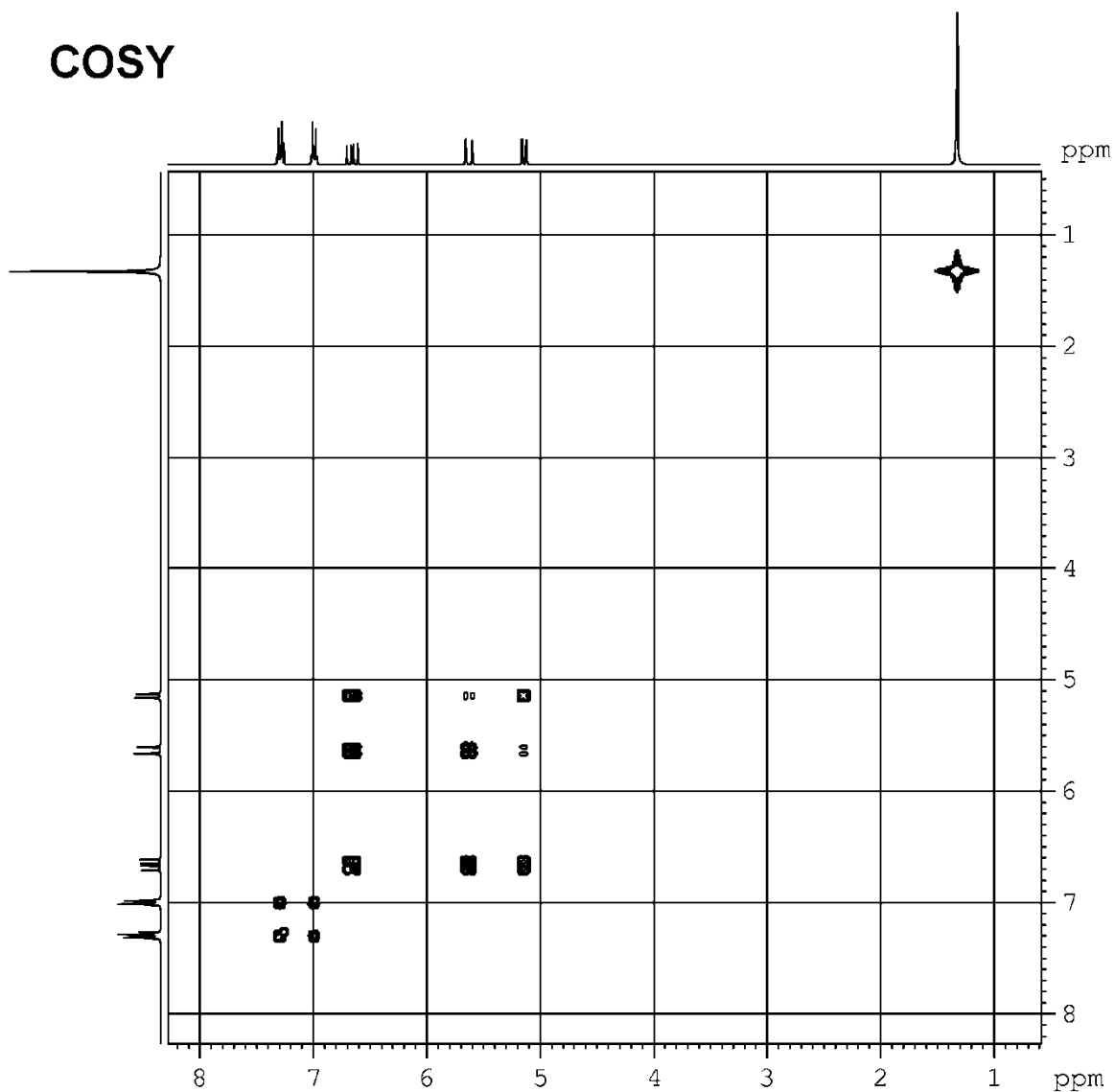
Corso di Metodi Spettroscopici in Chimica Organica
Esame del 16/09/2014

1. *a.* Stabilire la struttura del composto di cui sono forniti gli spettri.
- b.* Spiegare estesamente il ragionamento seguito, indicando le informazioni più significative fornite dai vari spettri.
- c.* Attribuire i segnali degli spettri NMR ^1H e ^{13}C ai rispettivi protoni o carboni: numerare la molecola e scrivere i numeri relativi ad ogni idrogeno o carbonio vicino al rispettivo segnale.

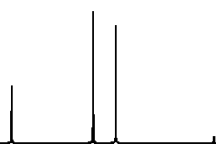
Spettro NMR protonico a 300 MHz



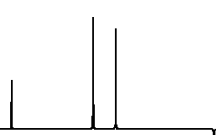
COSY



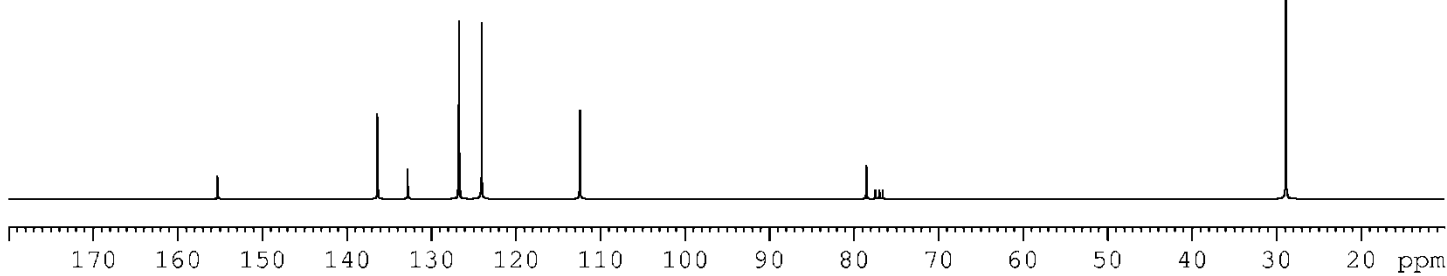
DEPT90



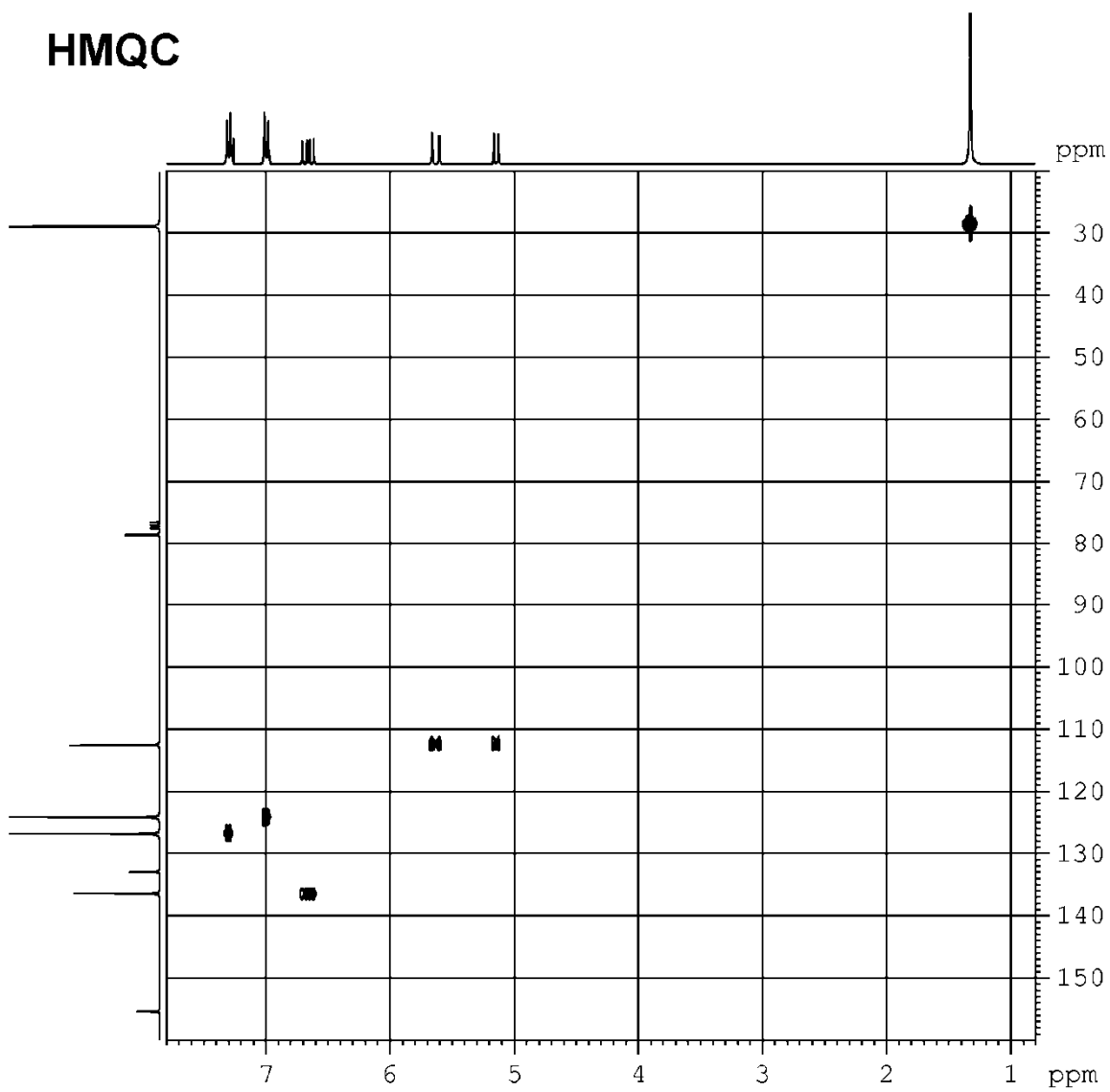
DEPT135

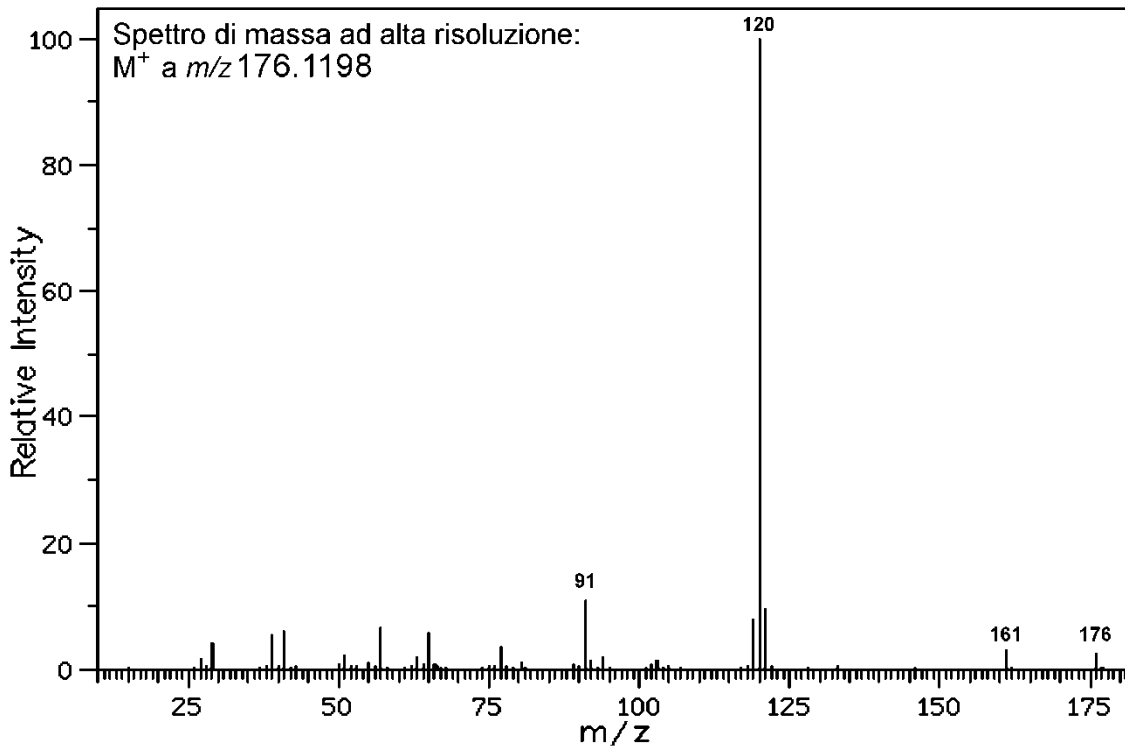


Spettro ^{13}C NMR



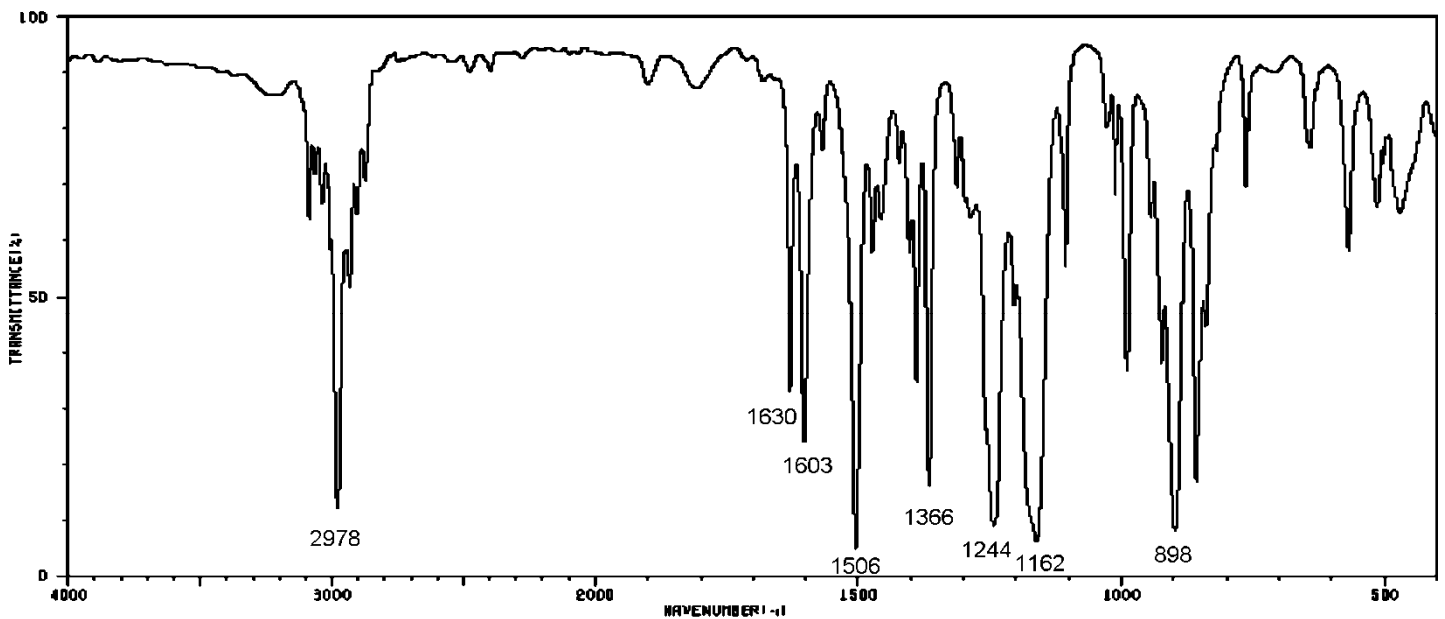
HMQC





176		
C ₆ H ₁₂ N ₂ O ₄	176.0797	
C ₆ H ₁₄ N ₃ O ₃	176.1036	
C ₆ H ₁₆ N ₄ O ₂	176.1275	
C ₇ H ₁₄ NO ₄	176.0923	
C ₇ H ₁₆ N ₂ O ₃	176.1162	
C ₇ H ₁₈ N ₃ O ₂	176.1400	
C ₇ H ₂₀ N ₄ O	176.1639	
C ₈ H ₆ N ₃ O ₂	176.0460	
C ₈ H ₈ N ₄ O	176.0699	
C ₈ H ₁₆ O ₄	176.1049	
C ₈ H ₁₈ NO ₃	176.1287	
C ₈ H ₂₀ N ₂ O ₂	176.1526	
C ₉ H ₆ NO ₃	176.0348	
C ₉ H ₈ N ₂ O ₂	176.0586	
C ₉ H ₁₀ N ₃ O	176.0825	
C ₉ H ₁₂ N ₄	176.1063	
C ₉ H ₂₀ O ₃	176.1413	
C ₁₀ H ₈ O ₃	176.0473	
C ₁₀ H ₁₀ NO ₂	176.0712	
C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O	176.0950	
C ₁₀ H ₁₄ N ₃	176.1189	
C ₁₁ H ₁₂ O ₂	176.0837	
C ₁₁ H ₁₄ NO	176.1076	
C ₁₁ H ₁₆ N ₂	176.1315	
C ₁₂ H ₁₆ O	176.1202	
C ₁₂ H ₁₈ N	176.1440	
C ₁₃ H ₂₀	176.1566	

Spettro di massa EI

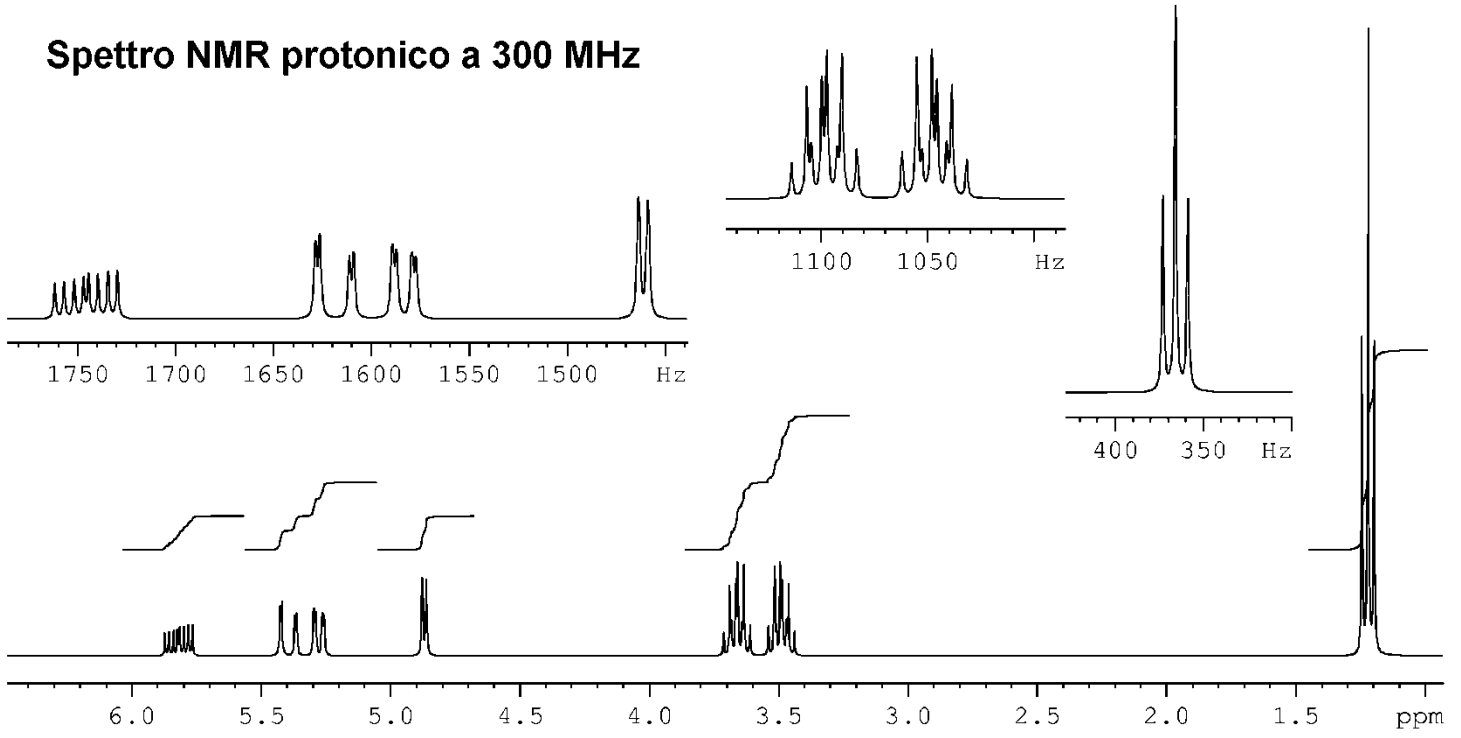


Spettro IR (composto puro)

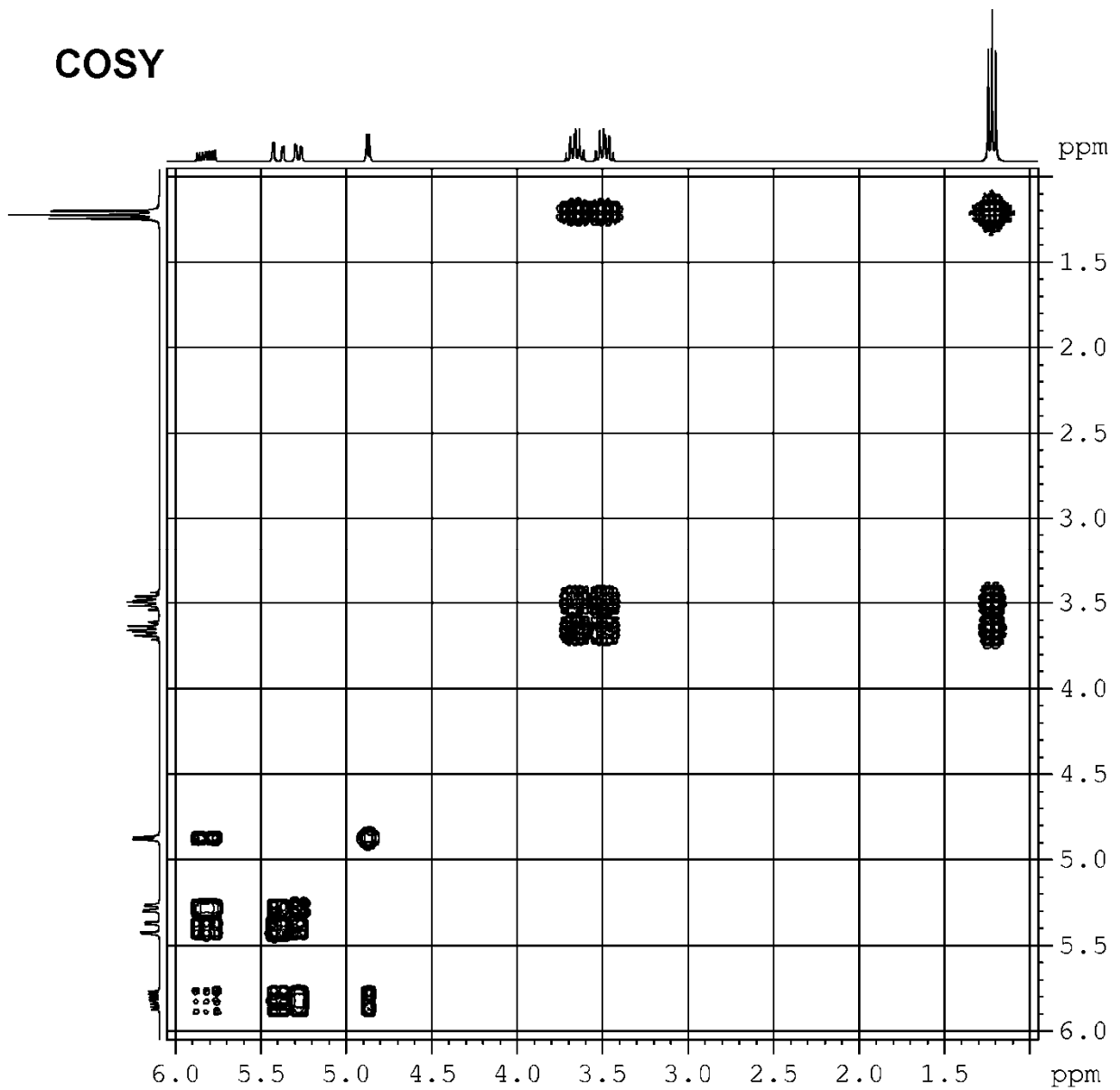
Corso di Metodi Spettroscopici in Chimica Organica
Esame del 16/09/2014

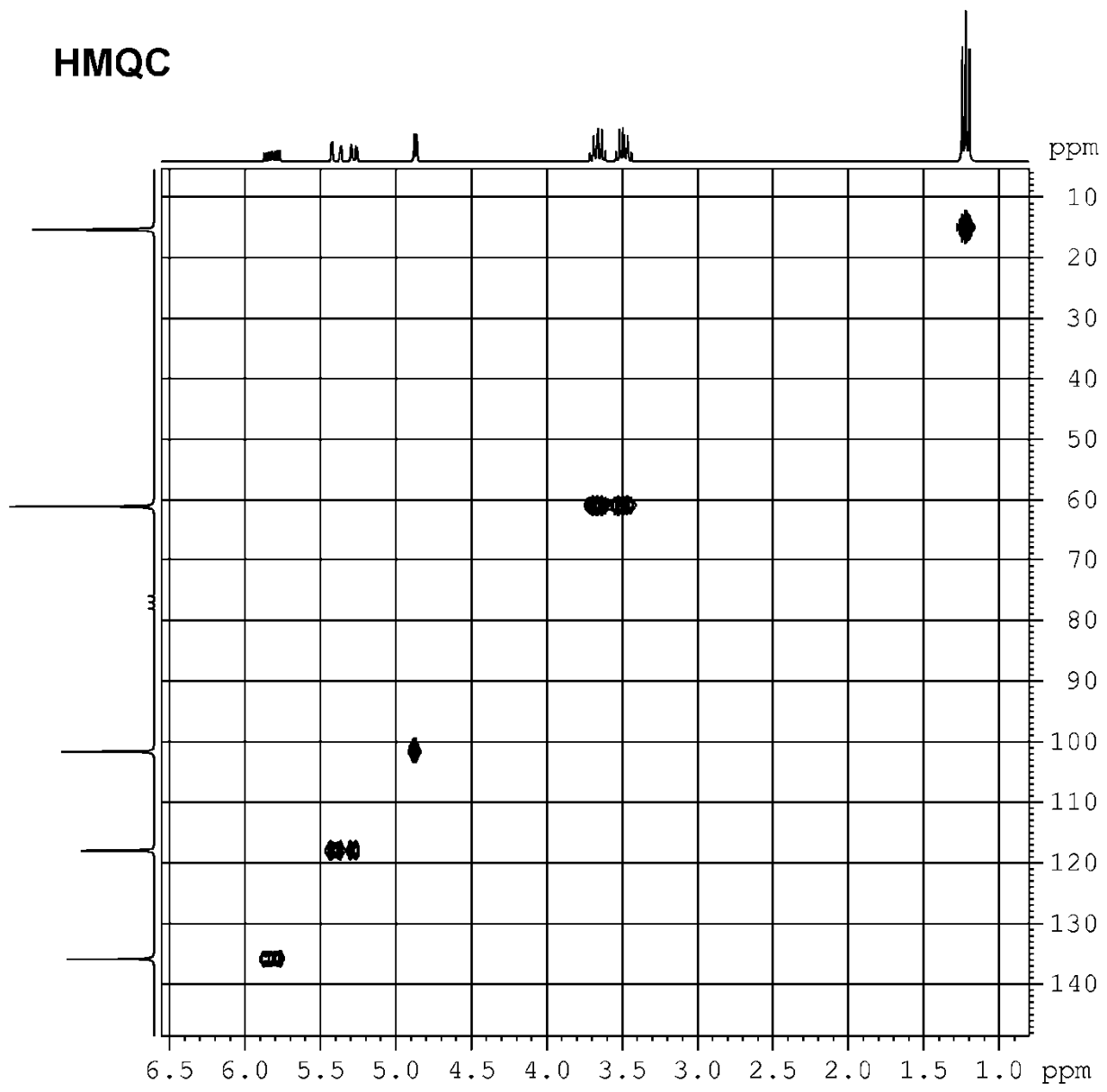
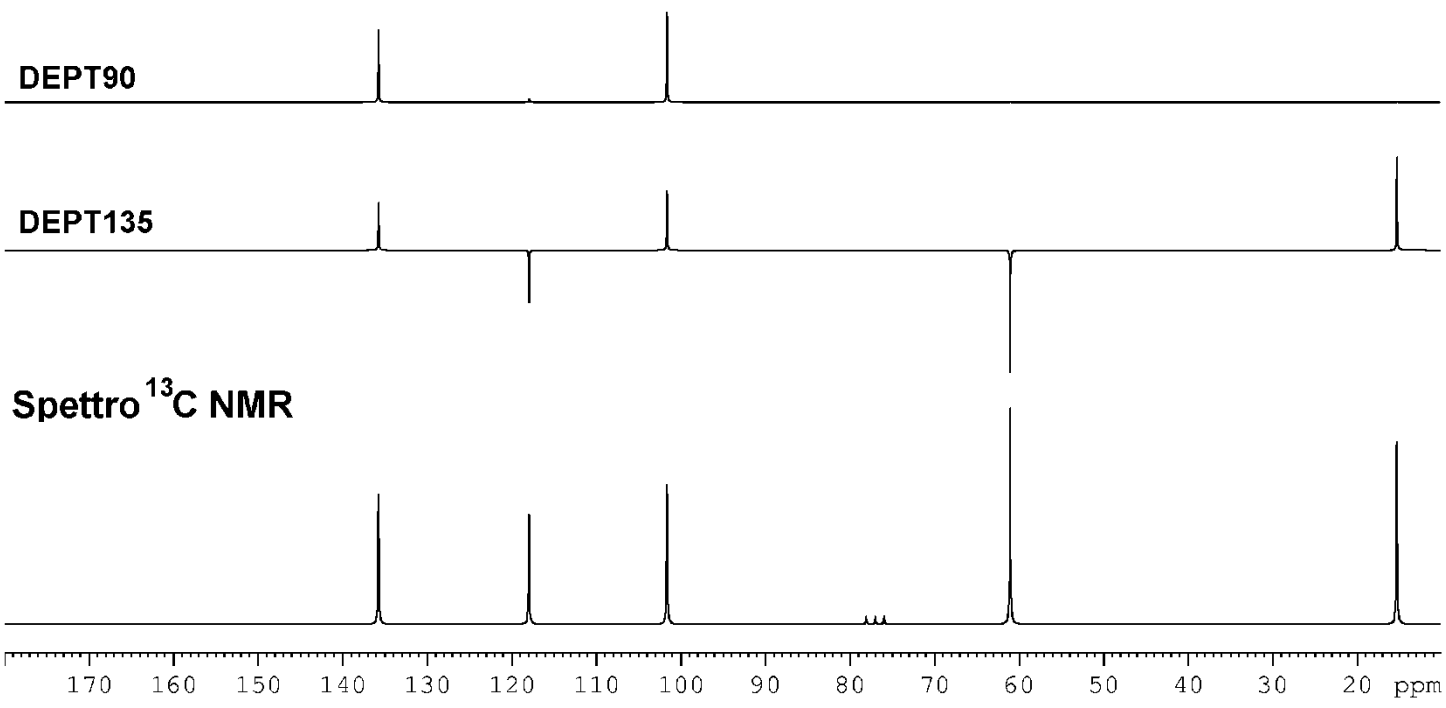
1. *a.* Stabilire la struttura del composto di cui sono forniti gli spettri.
- b.* Spiegare estesamente il ragionamento seguito, indicando le informazioni più significative fornite dai vari spettri.
- c.* Attribuire i segnali degli spettri NMR ^1H e ^{13}C ai rispettivi protoni o carboni: numerare la molecola e scrivere i numeri relativi ad ogni idrogeno o carbonio vicino al rispettivo segnale.

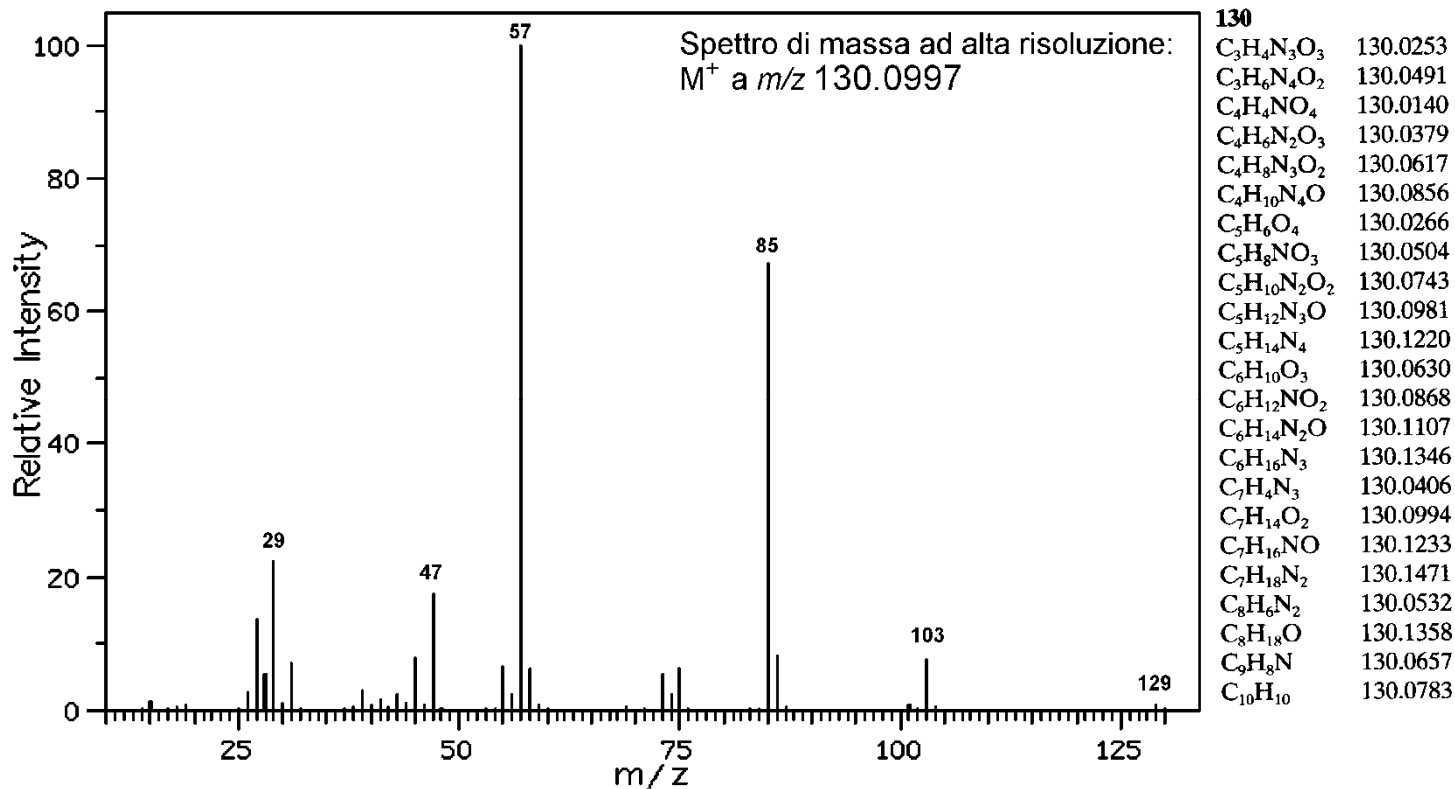
Spettro NMR protonico a 300 MHz



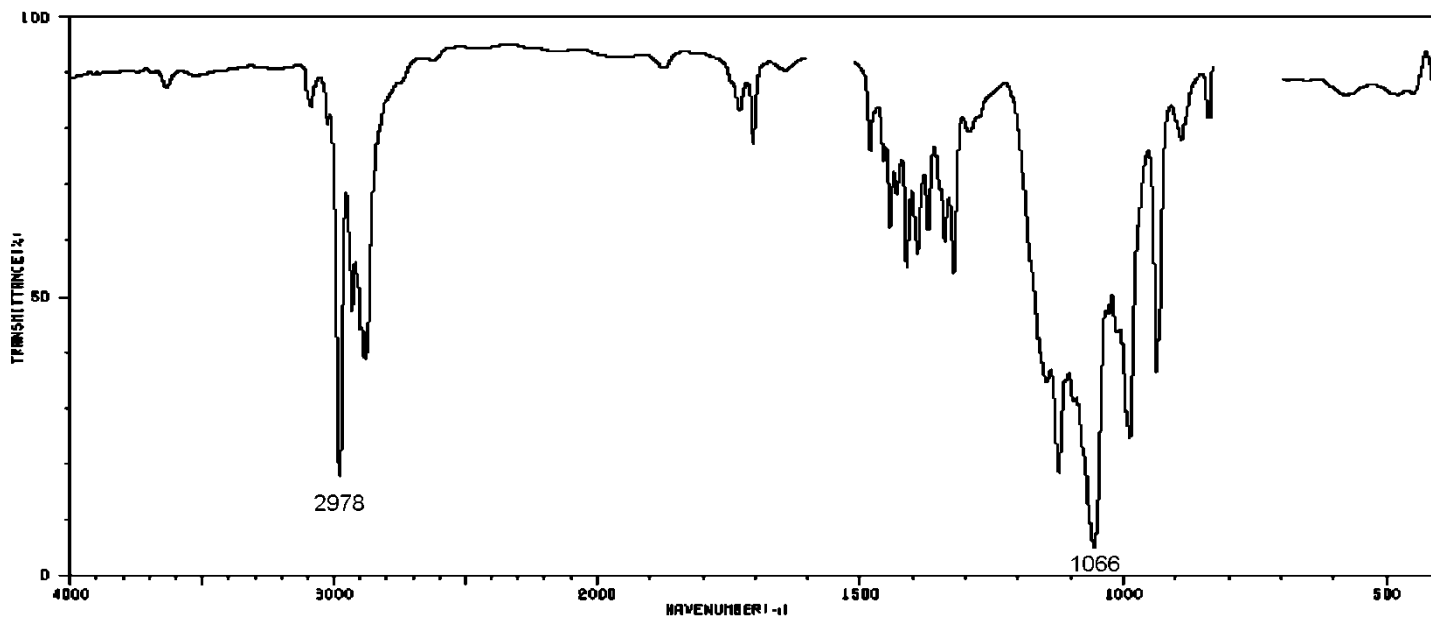
COSY







Spettro di massa EI



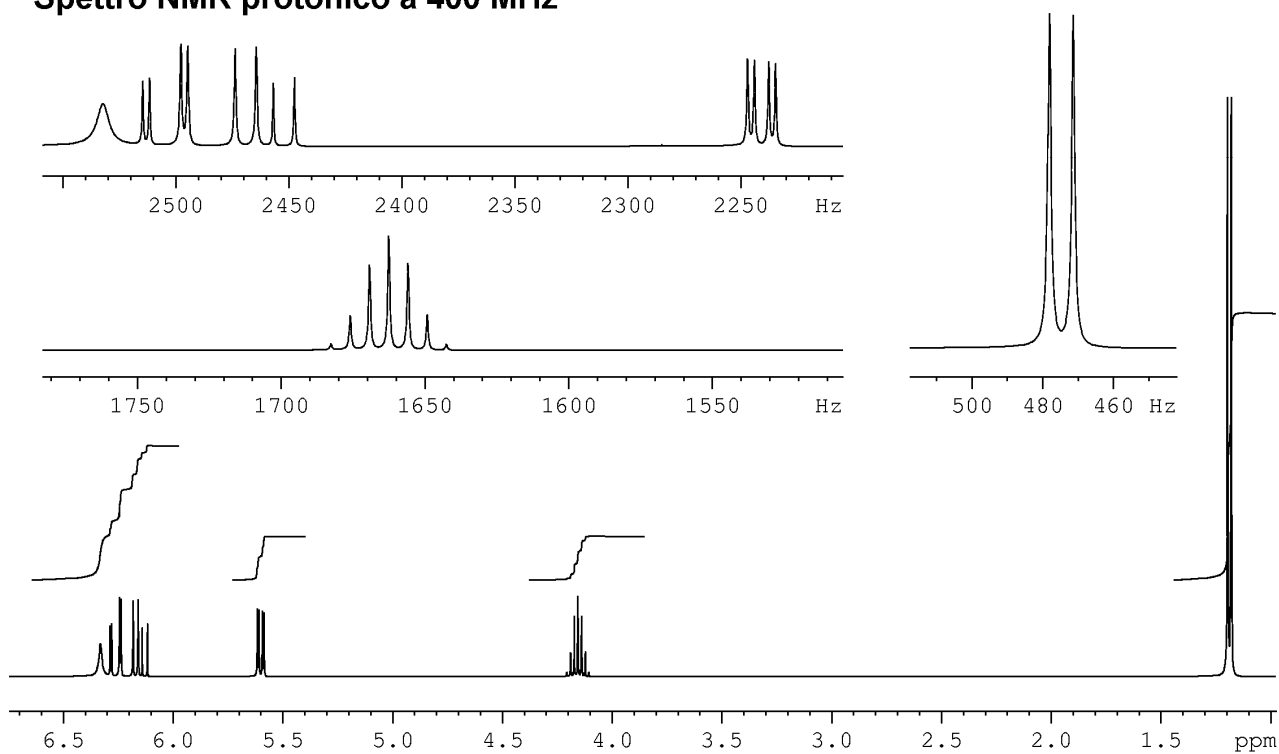
Spettro IR (CCl₄)

Corso di Metodi spettroscopici in Chimica Organica
Esame del 17/01/2014

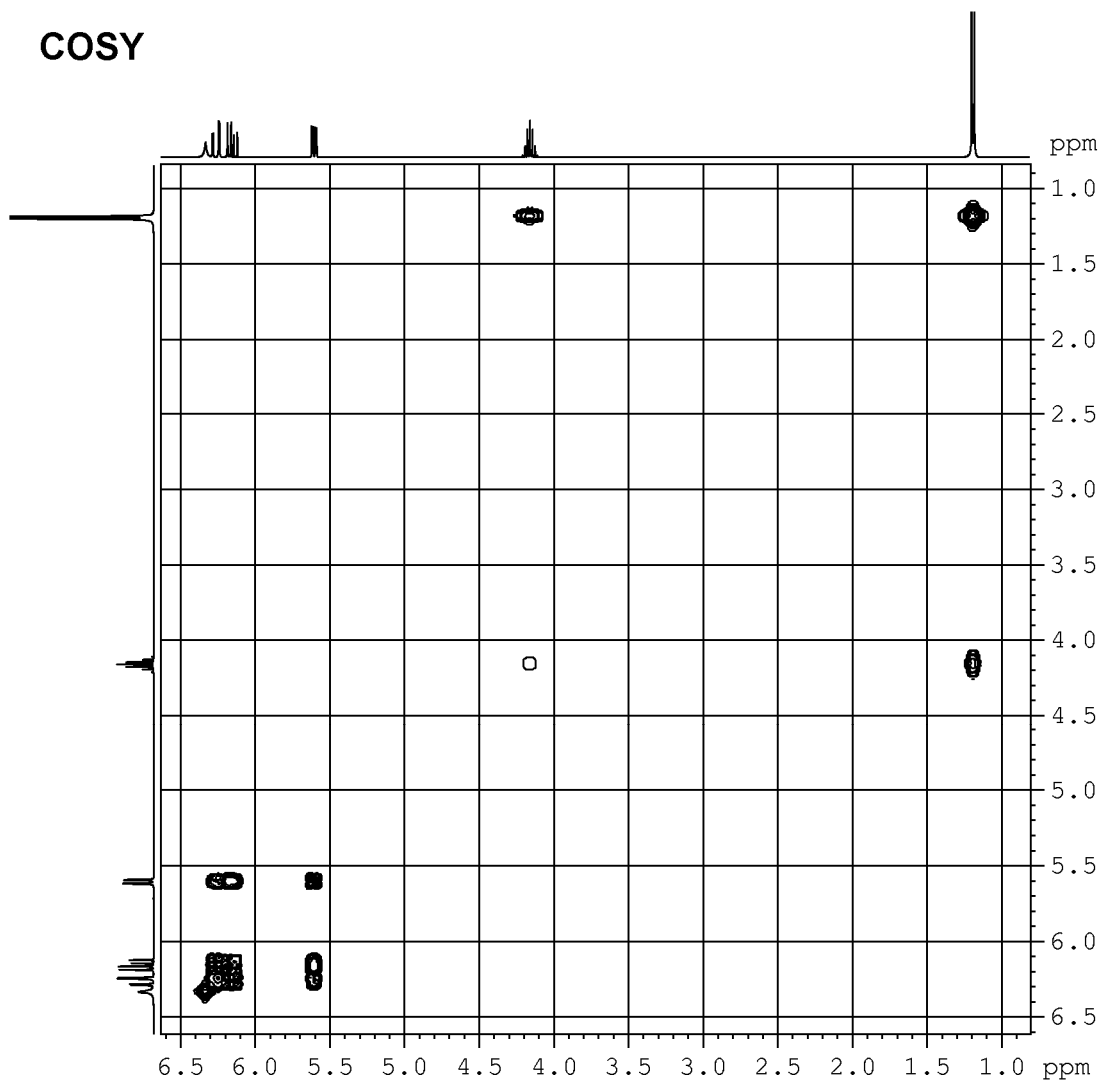
1. *a.* Stabilire la struttura del composto di cui sono forniti gli spettri.

- b.* Spiegare estesamente il ragionamento seguito, indicando le informazioni più significative fornite dai vari spettri.
- c.* Attribuire i segnali degli spettri NMR ^1H e ^{13}C ai rispettivi protoni o carboni: numerare la molecola e scrivere i numeri relativi ad ogni idrogeno o carbonio vicino al rispettivo segnale.

Spettro NMR protonico a 400 MHz



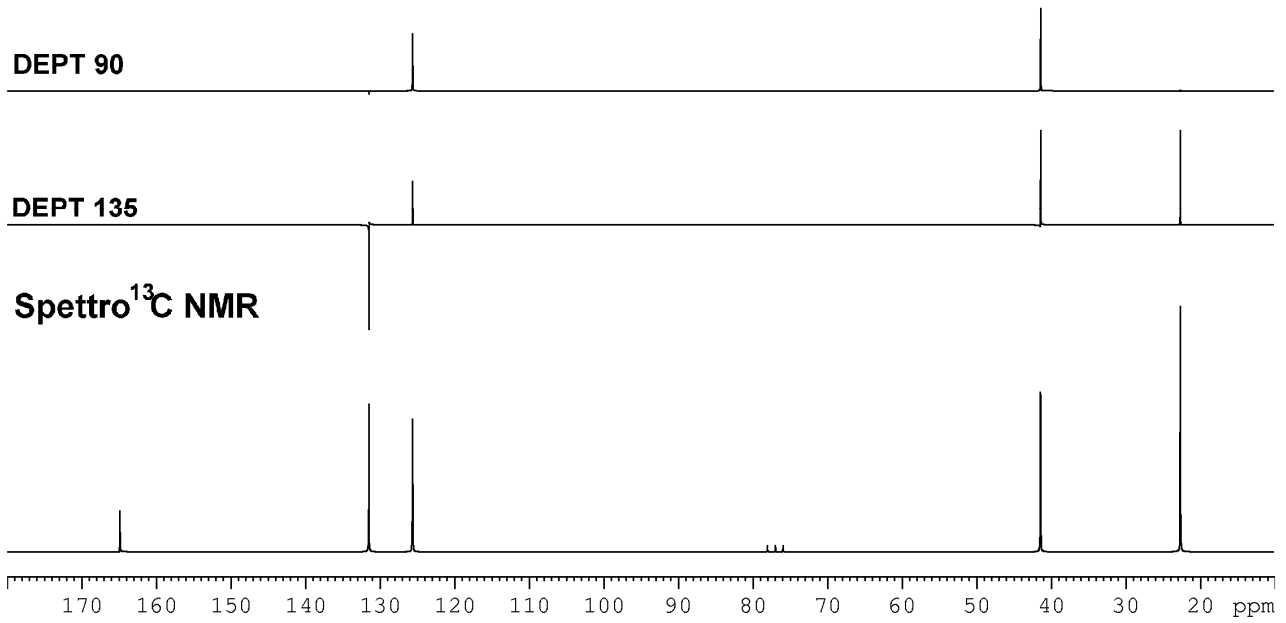
COSY



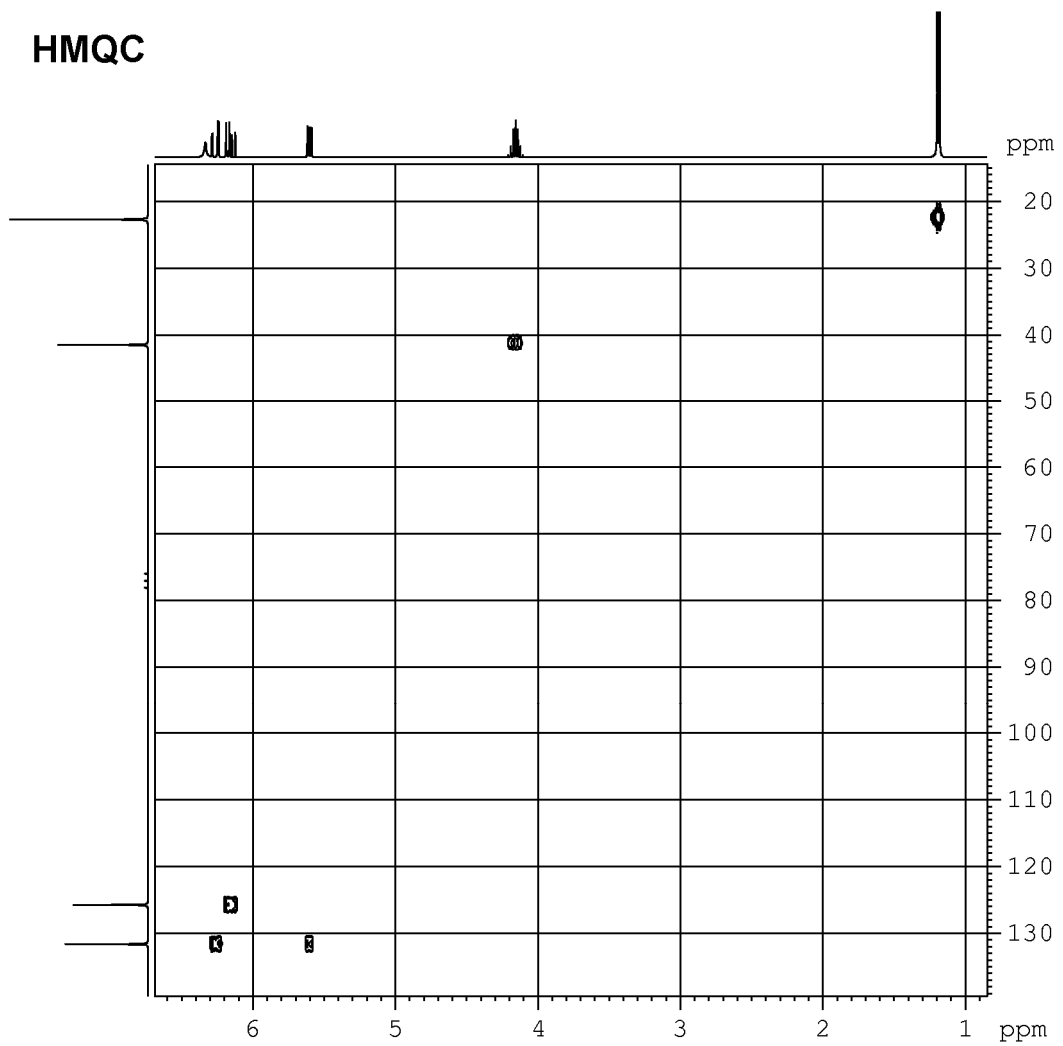
DEPT 90

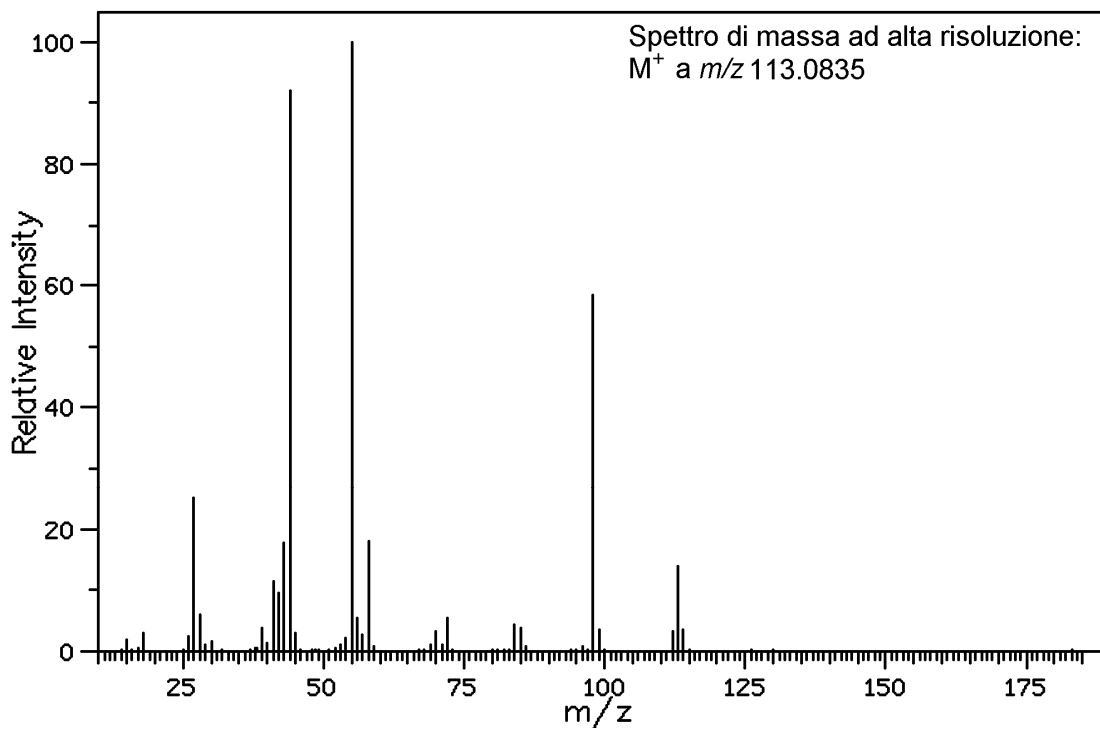
DEPT 135

Spettro ^{13}C NMR



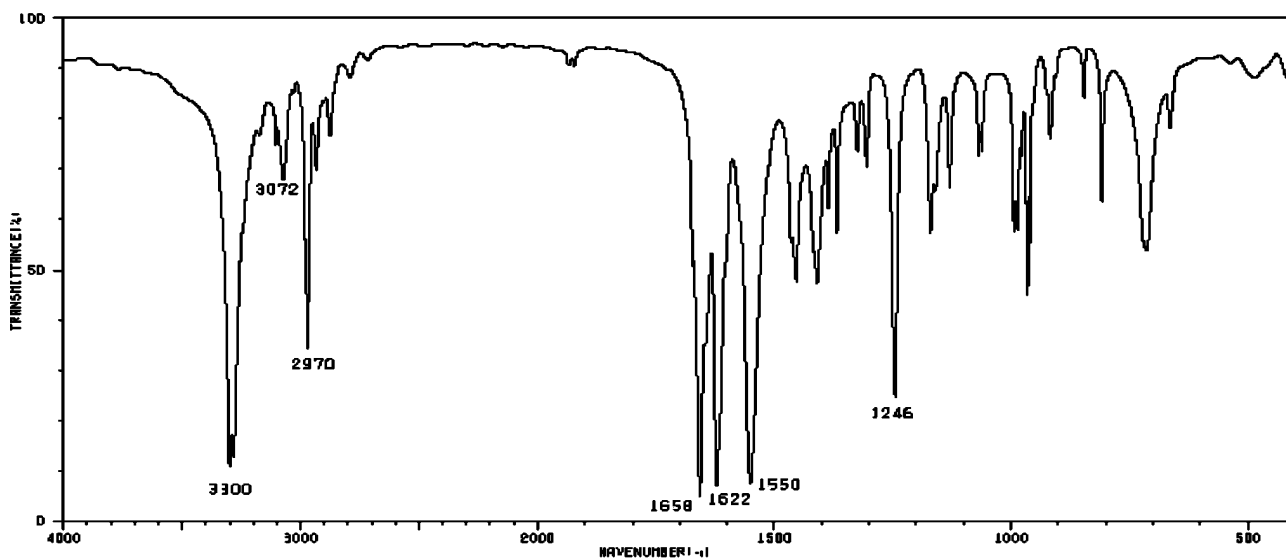
HMQC





113	
C ₃ H ₅ N ₄ O	113.0464
C ₄ H ₅ N ₂ O ₂	113.0351
C ₄ H ₇ N ₃ O	113.0590
C ₄ H ₉ N ₄	113.0829
C ₅ H ₅ O ₃	113.0238
C ₅ H ₇ NO ₂	113.0477
C ₅ H ₉ N ₂ O	113.0715
C ₅ H ₁₁ N ₃	113.0954
C ₆ H ₉ O ₂	113.0603
C ₆ H ₁₁ NO	113.0841
C ₆ H ₁₃ N ₂	113.1080
C ₇ H ₁₃ O	113.0967
C ₇ H ₁₅ N	113.1205
C ₈ H ₁₇	113.1331

Spettro di massa EI

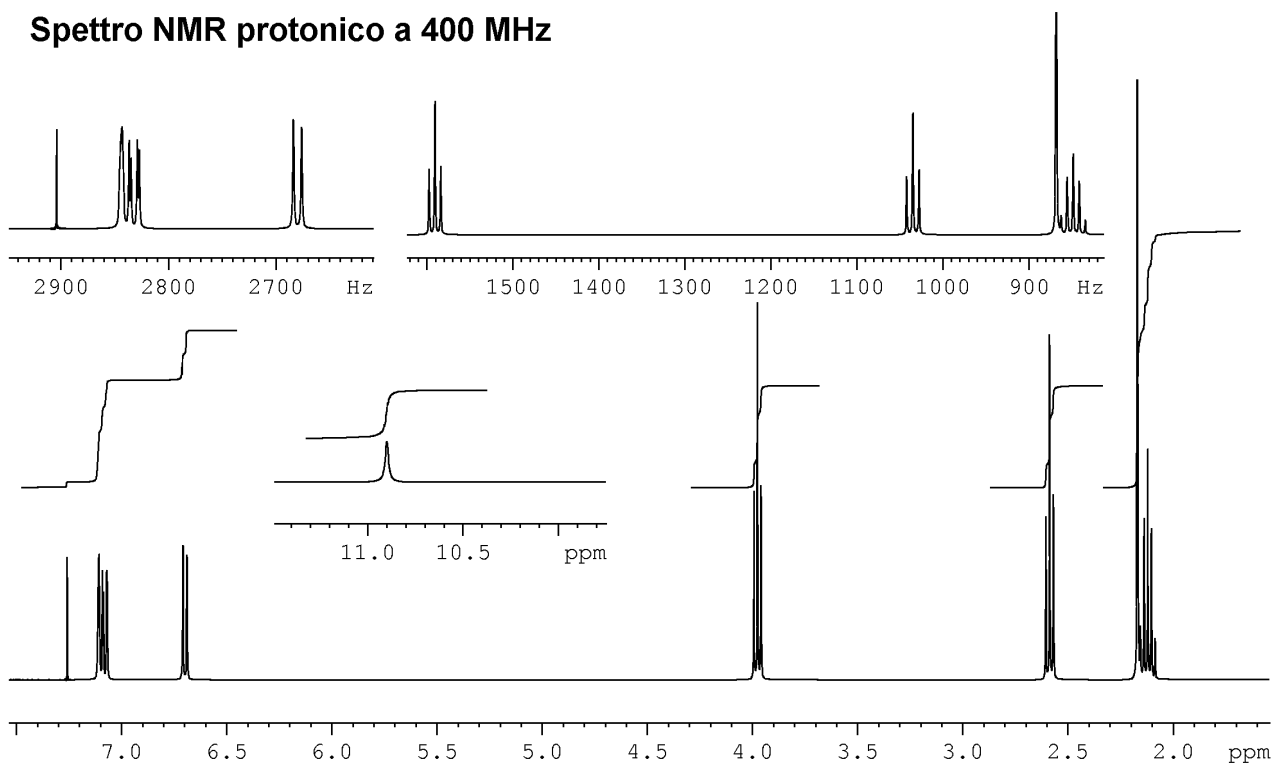


Spettro IR (composto puro)

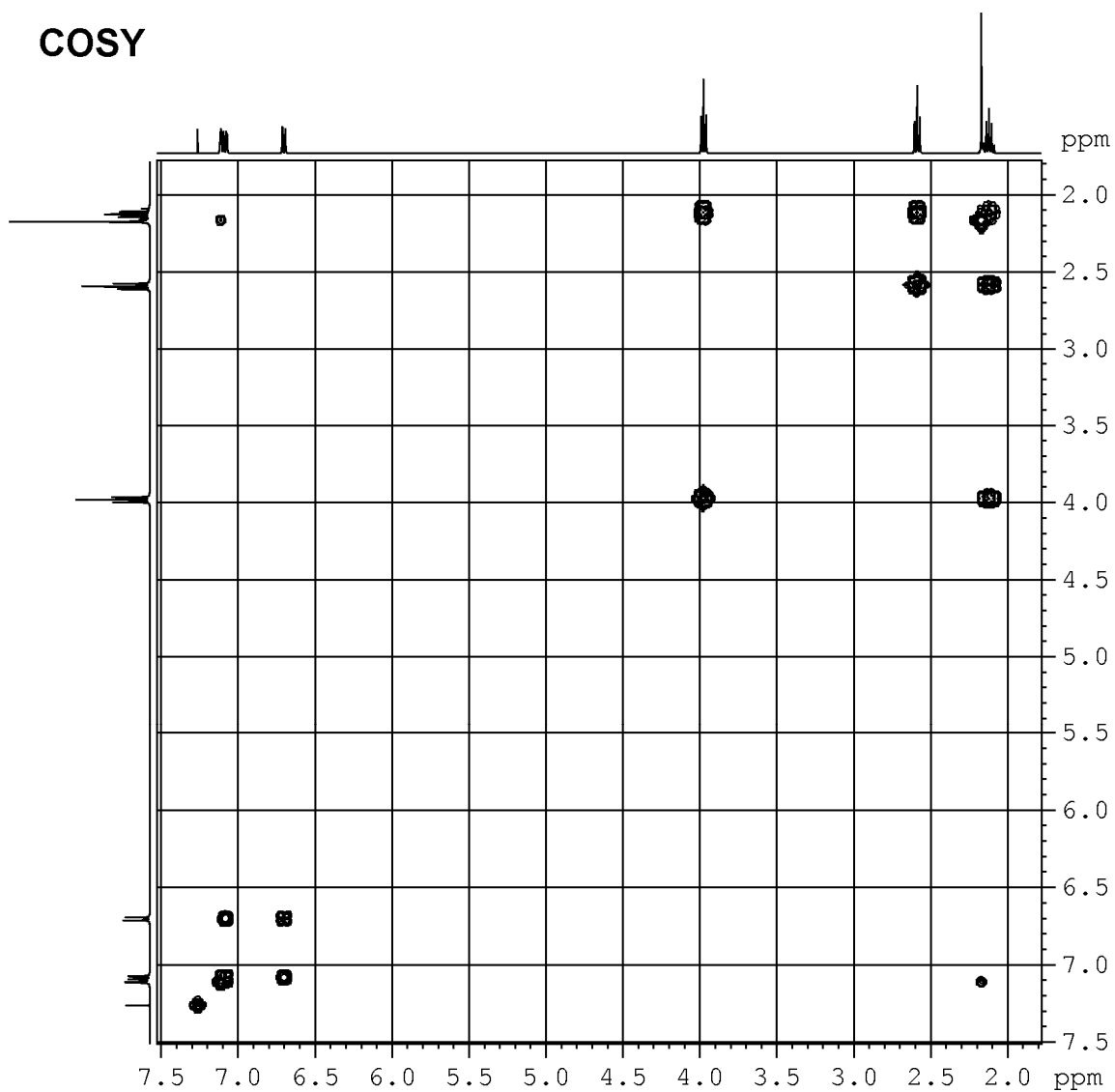
Corso di Metodi Spettroscopici in Chimica Organica
Esame del 20/02/2014

1. *a.* Stabilire la struttura del composto di cui sono forniti gli spettri.
- b.* Spiegare estesamente il ragionamento seguito, indicando le informazioni più significative fornite dai vari spettri.
- c.* Attribuire i segnali degli spettri NMR ^1H e ^{13}C ai rispettivi protoni o carboni: numerare la molecola e scrivere i numeri relativi ad ogni idrogeno o carbonio vicino al rispettivo segnale.

Spettro NMR protonico a 400 MHz



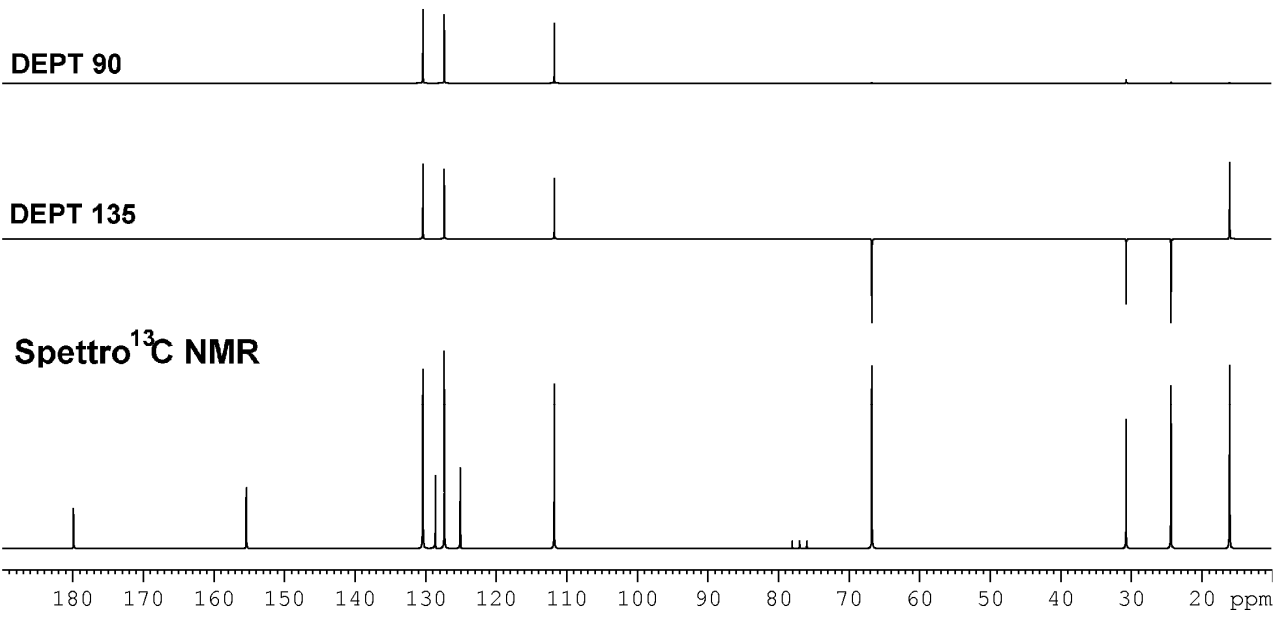
COSY



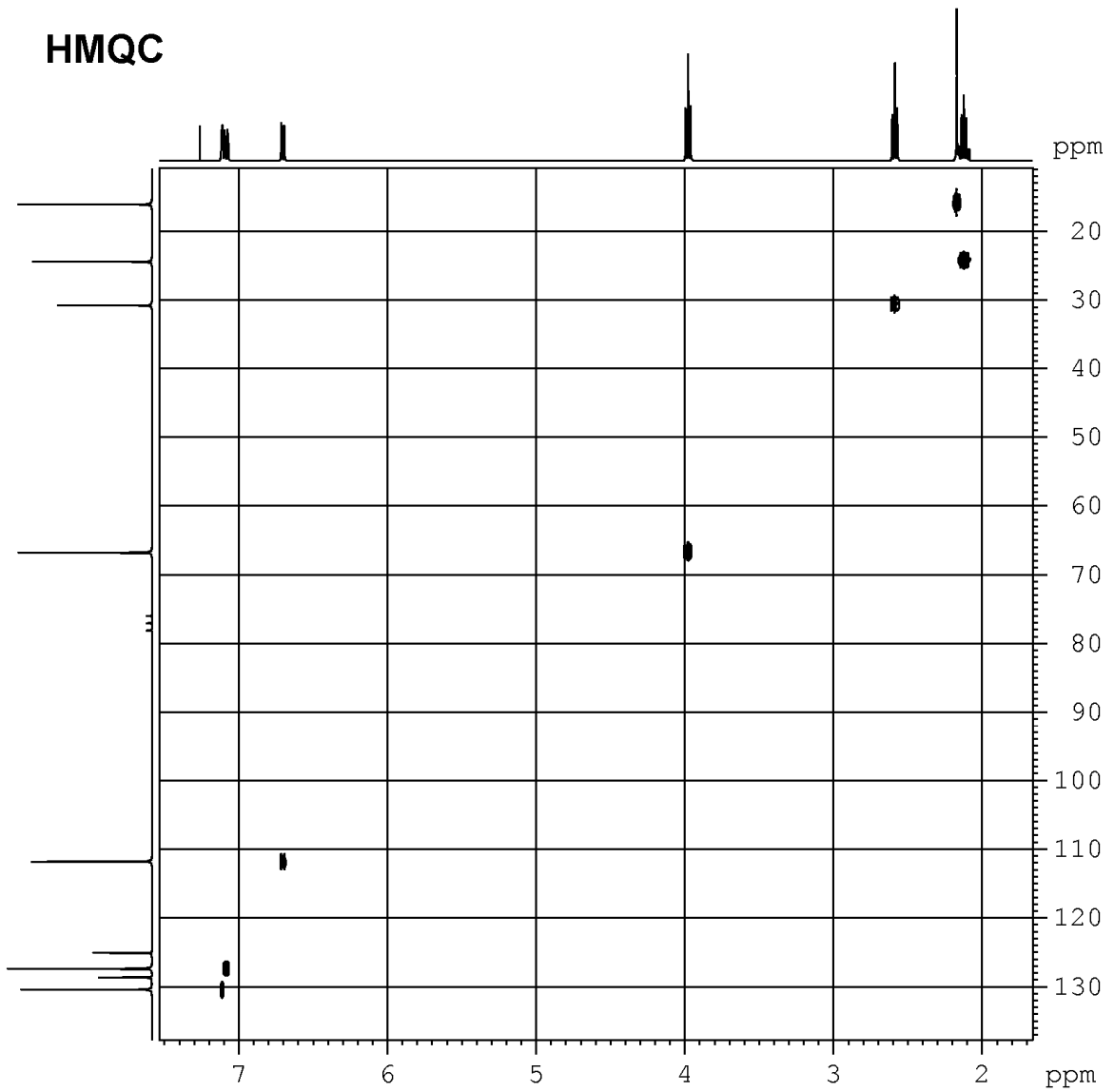
DEPT 90

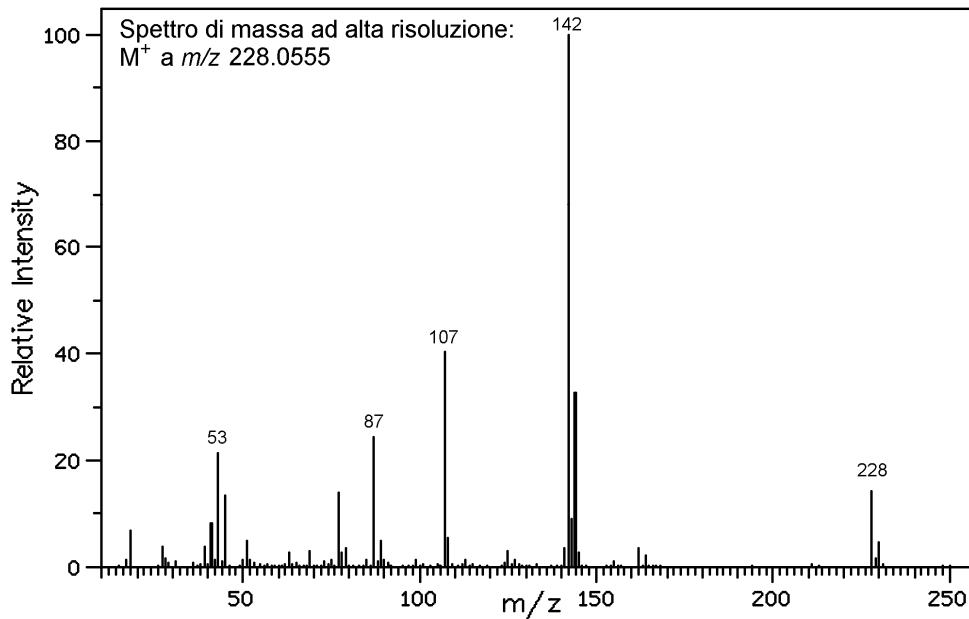
DEPT 135

Spettro ^{13}C NMR



HMQC



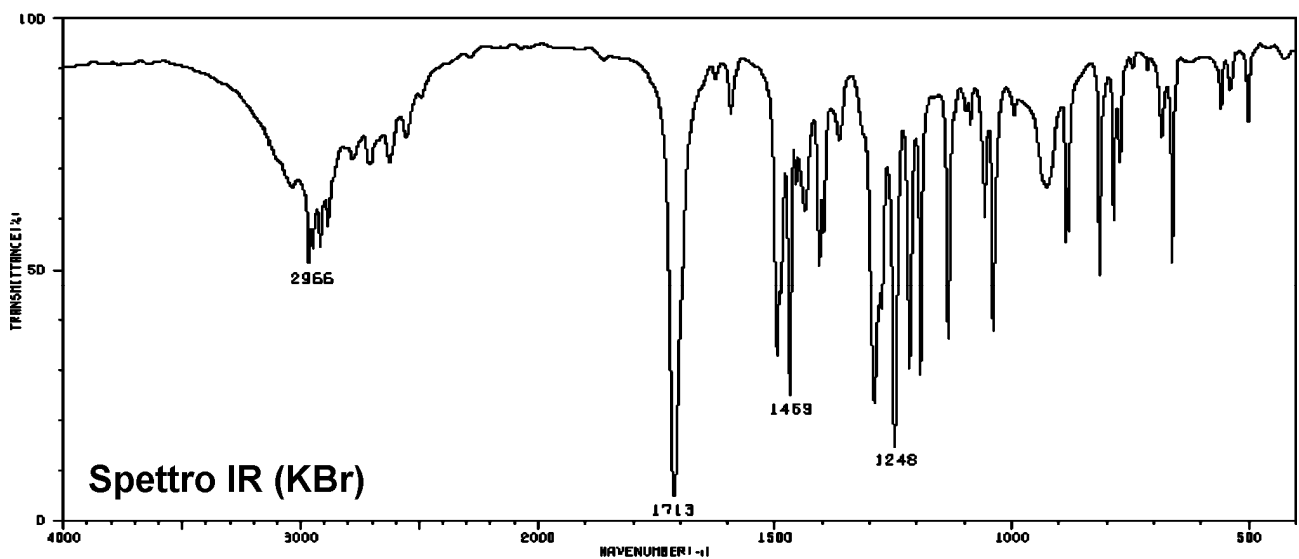


193

C ₇ H ₁₇ N ₂ O ₄	193.1189
C ₇ H ₁₉ N ₃ O ₃	193.1427
C ₈ H ₇ N ₃ O ₃	193.0488
C ₈ H ₉ N ₄ O ₂	193.0726
C ₈ H ₁₉ NO ₄	193.1315
C ₉ H ₇ NO ₄	193.0375
C ₉ H ₉ N ₂ O ₃	193.0614
C ₉ H ₁₁ N ₃ O ₂	193.0852
C ₉ H ₁₃ N ₄ O	193.1091
C ₁₀ H ₉ O ₄	193.0501
C ₁₀ H ₁₁ NO ₃	193.0739
C ₁₀ H ₁₃ N ₂ O ₂	193.0978
C ₁₀ H ₁₅ N ₃ O	193.1216
C ₁₀ H ₁₇ N ₄	193.1455
C ₁₁ H ₁₃ O ₃	193.0865
C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	193.1103
C ₁₁ H ₁₇ N ₂ O	193.1342
C ₁₁ H ₁₉ N ₃	193.1580
C ₁₂ H ₁₇ O ₂	193.1229
C ₁₂ H ₁₉ NO	193.1467
C ₁₂ H ₂₁ N ₂	193.1706
C ₁₃ H ₉ N ₂	193.0767
C ₁₃ H ₂₁ O	193.1593
C ₁₃ H ₂₃ N	193.1832
C ₁₄ H ₉ O	193.0653
C ₁₄ H ₁₁ N	193.0892
C ₁₄ H ₂₅	193.1957
C ₁₅ H ₁₃	193.1018

Spettro di massa EI

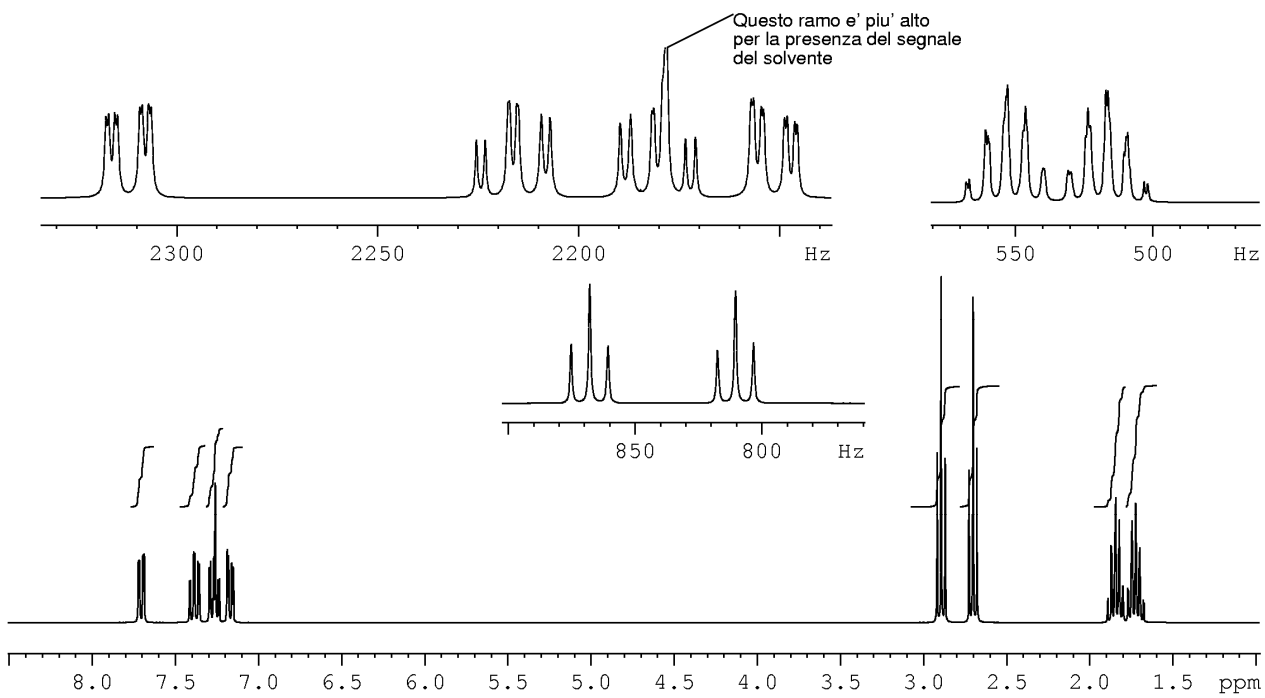
Element	Nuclide	Mass	Element	Nuclide	Mass	Element	Nuclide	Mass
Hydrogen	¹ H	1.00783	Oxygen	¹⁶ O	15.9949	Sulfur	³² S	31.9721
	D (² H)	2.01410		¹⁷ O	16.9991		³³ S	32.9715
Carbon	¹² C	12.00000 (std)		¹⁸ O	17.9992		³⁴ S	33.9679
	¹³ C	13.00336	Fluorine	¹⁹ F	18.9984	Chlorine	³⁵ Cl	34.9689
Nitrogen	¹⁴ N	14.0031		Silicon	²⁸ Si		27.9769	³⁷ Cl
	¹⁵ N	15.0001	²⁹ Si		28.9765	Bromine	⁷⁹ Br	78.9183
		³⁰ Si	29.9738		⁸¹ Br		80.9163	
			Phosphorus	³¹ P	30.9738	Iodine	¹²⁷ I	126.9045



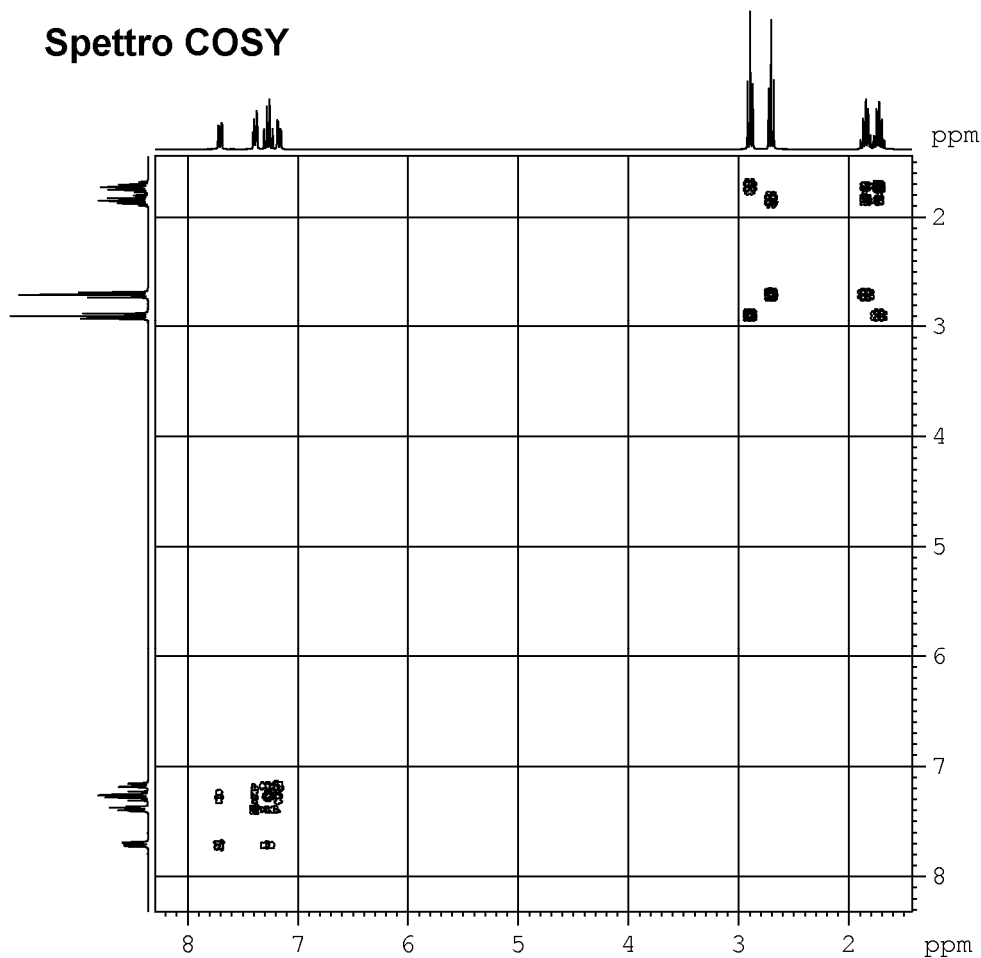
Corso di Metodi Fisici in Chimica Organica
Prova intercorso del 19/12/2013

1. *a.* Stabilire la struttura del composto di cui sono forniti gli spettri.
- b.* Spiegare estesamente il ragionamento seguito, indicando le informazioni più significative fornite dai vari spettri.
- c.* Attribuire i segnali degli spettri NMR ^1H e ^{13}C ai rispettivi protoni o carboni: numerare la molecola e scrivere i numeri relativi ad ogni idrogeno o carbonio vicino al rispettivo segnale.

Spettro NMR protonico a 300 MHz



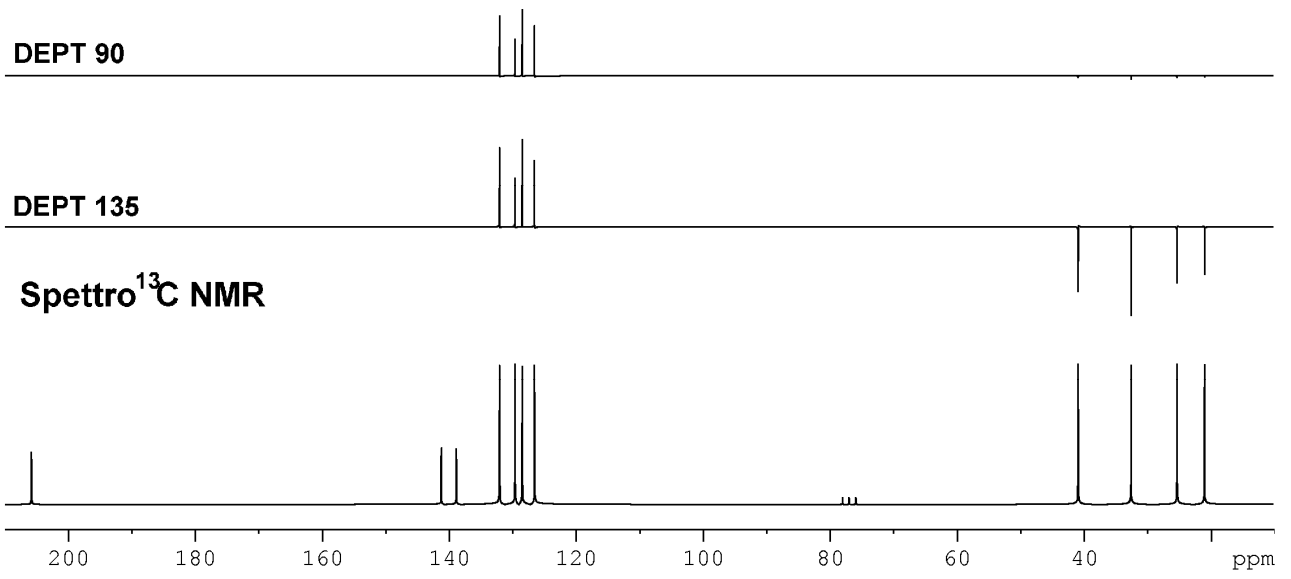
Spettro COSY



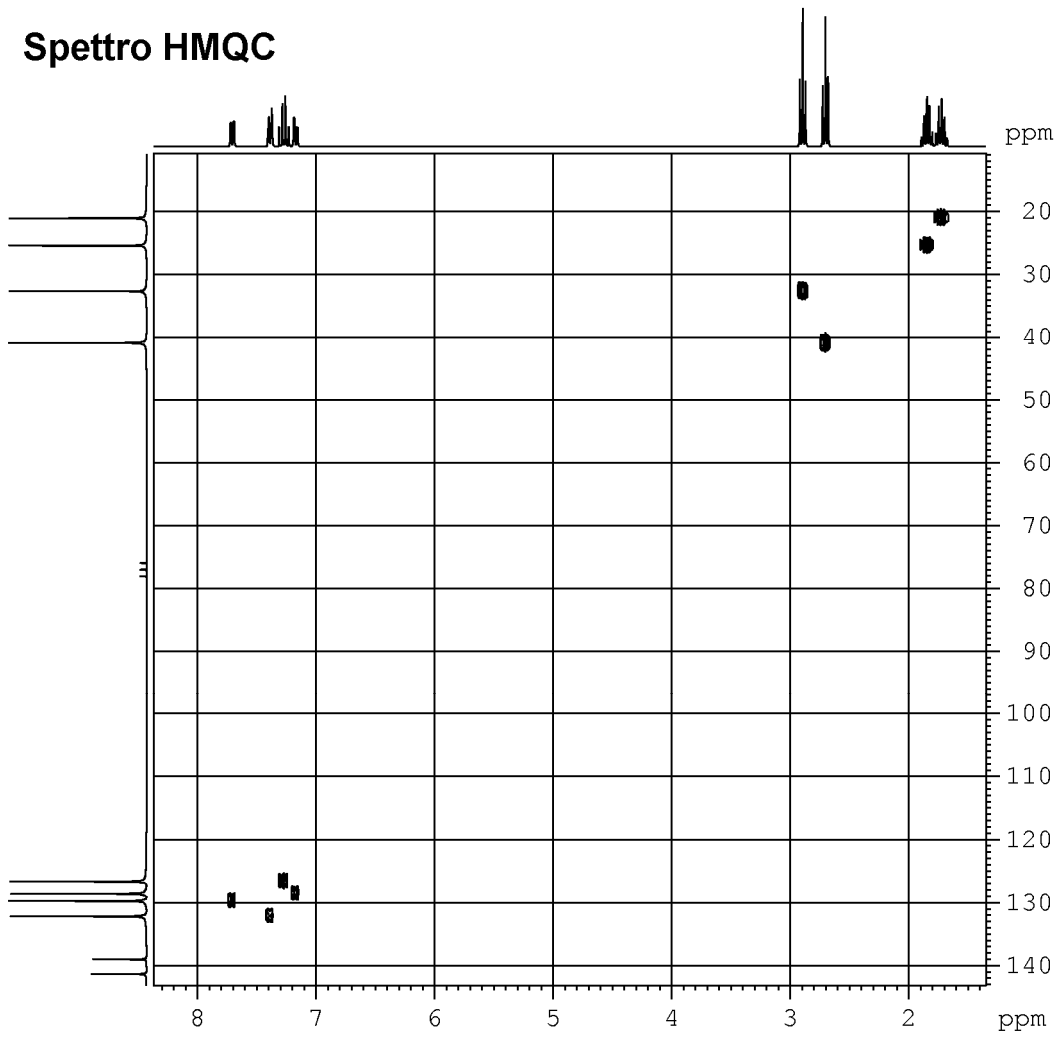
DEPT 90

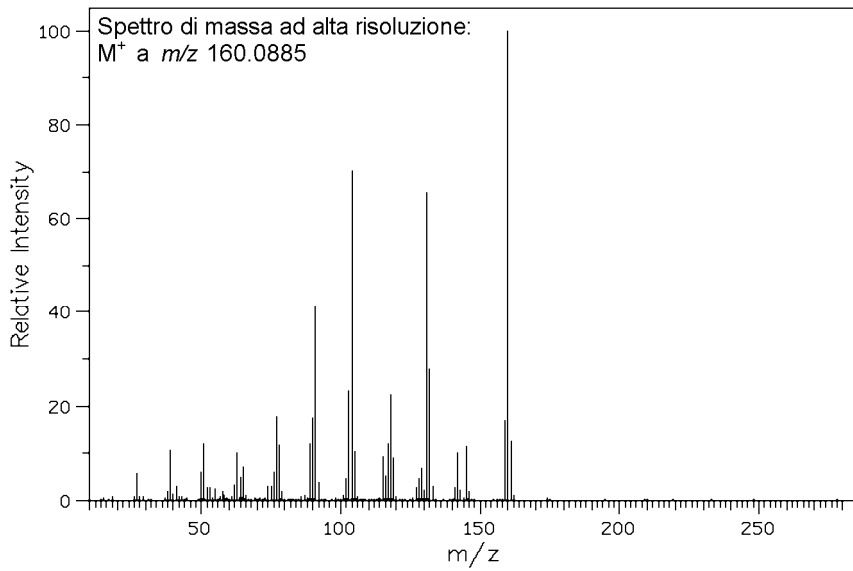
DEPT 135

Spettro ^{13}C NMR



Spettro HMQC

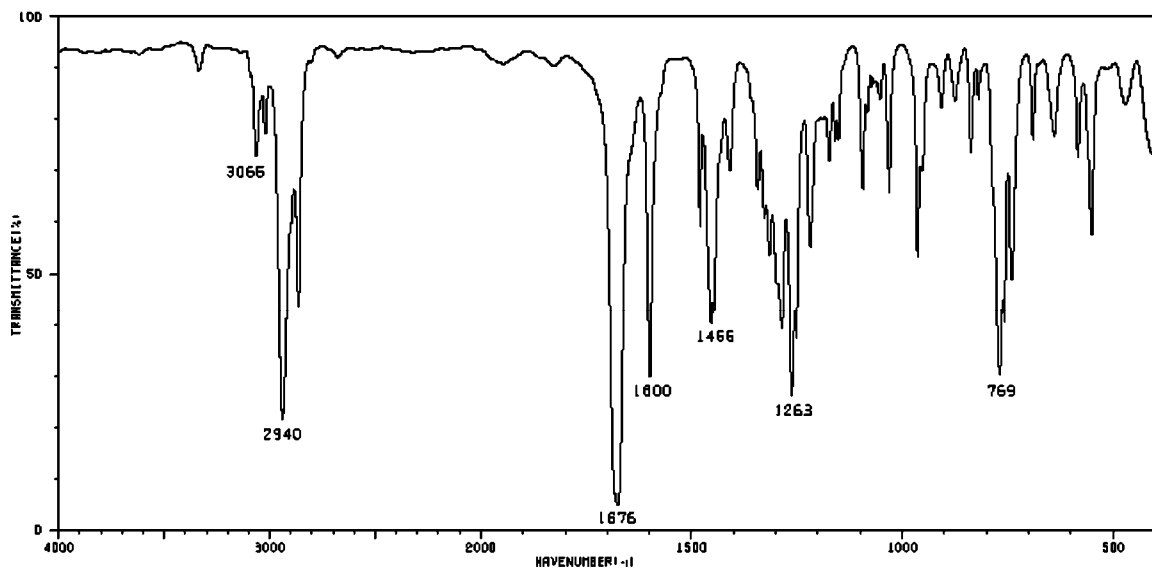




Spettro di massa EI

160

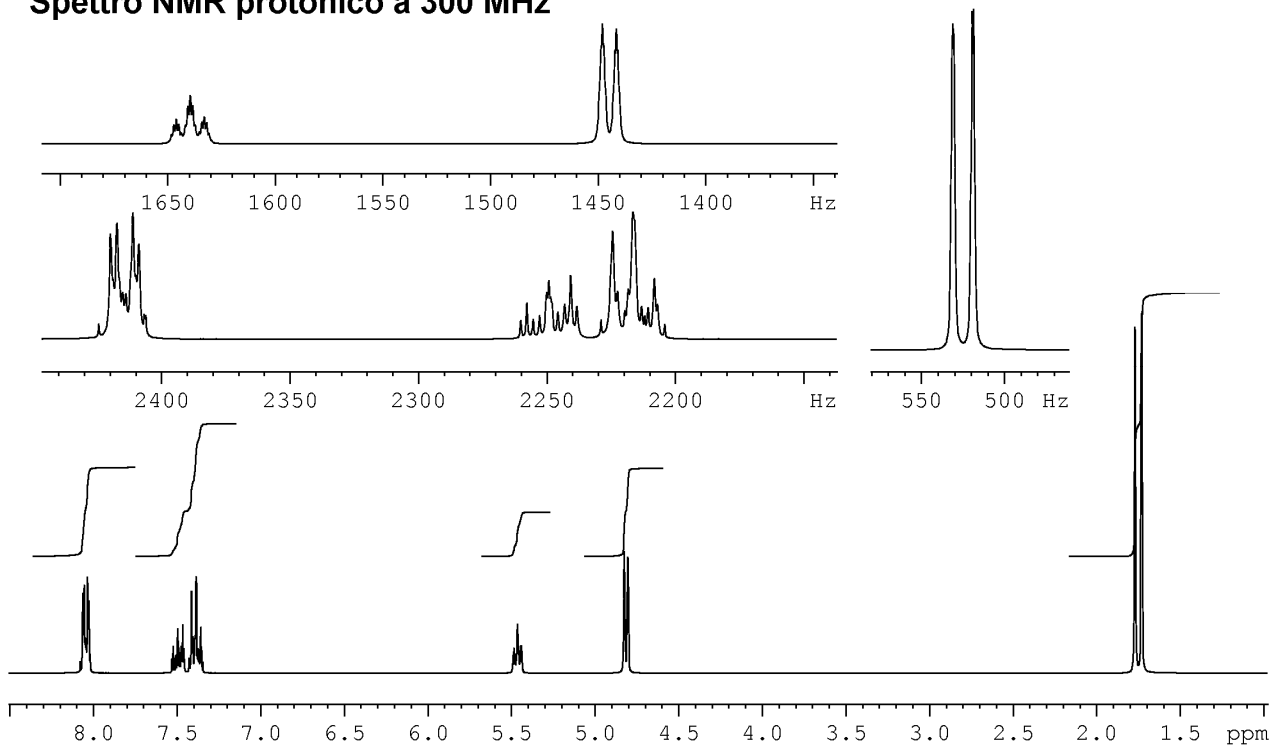
C ₅ H ₈ N ₂ O ₄	160.0484
C ₅ H ₁₀ N ₃ O ₃	160.0723
C ₅ H ₁₂ N ₄ O ₂	160.0961
C ₆ H ₁₀ NO ₄	160.0610
C ₆ H ₁₂ N ₂ O ₃	160.0848
C ₆ H ₁₄ N ₃ O ₂	160.1087
C ₆ H ₁₆ N ₄ O	160.1325
C ₇ H ₁₂ O ₄	160.0735
C ₇ H ₁₄ NO ₃	160.0974
C ₇ H ₁₆ N ₂ O ₂	160.1213
C ₇ H ₁₈ N ₃ O	160.1451
C ₇ H ₂₀ N ₄	160.1690
C ₈ H ₆ N ₃ O	160.0511
C ₈ H ₈ N ₄	160.0750
C ₈ H ₁₆ O ₃	160.1100
C ₈ H ₁₈ NO ₂	160.1338
C ₈ H ₂₀ N ₂ O	160.1577
C ₉ H ₆ NO ₂	160.0399
C ₉ H ₈ N ₂ O	160.0637
C ₉ H ₁₀ N ₃	160.0876
C ₉ H ₂₀ O ₂	160.1464
C ₁₀ H ₈ O ₂	160.0524
C ₁₀ H ₁₀ NO	160.0763
C ₁₀ H ₁₂ N ₂	160.1001
C ₁₁ H ₁₂ O	160.0888
C ₁₁ H ₁₄ N	160.1127
C ₁₂ H ₁₆	160.1253



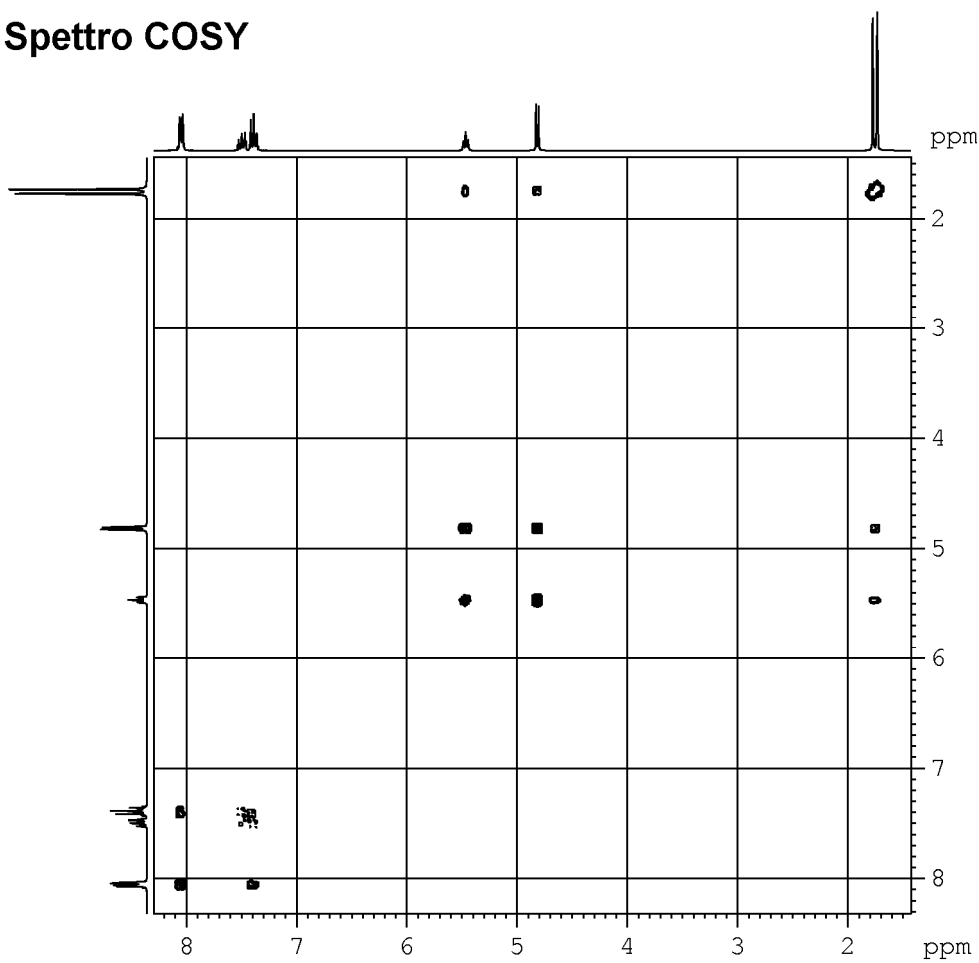
Spettro IR (composto puro)

- 1) Stabilire la struttura del composto di cui sono forniti gli spettri.
 - b.* Spiegare estesamente il ragionamento seguito, indicando le informazioni più significative fornite dai vari spettri.
 - c.* Attribuire i segnali degli spettri NMR ^1H e ^{13}C ai rispettivi protoni o carboni: numerare la molecola e scrivere i numeri relativi ad ogni idrogeno o carbonio vicino al rispettivo segnale.

Spettro NMR protonico a 300 MHz



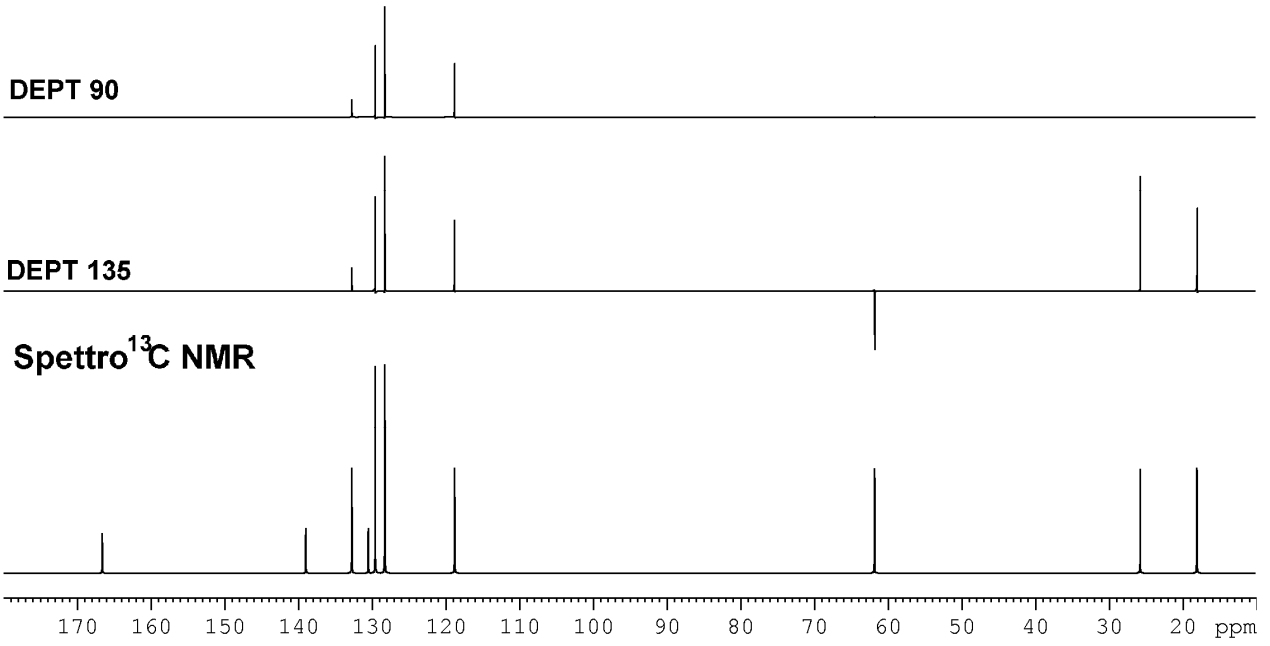
Spettro COSY



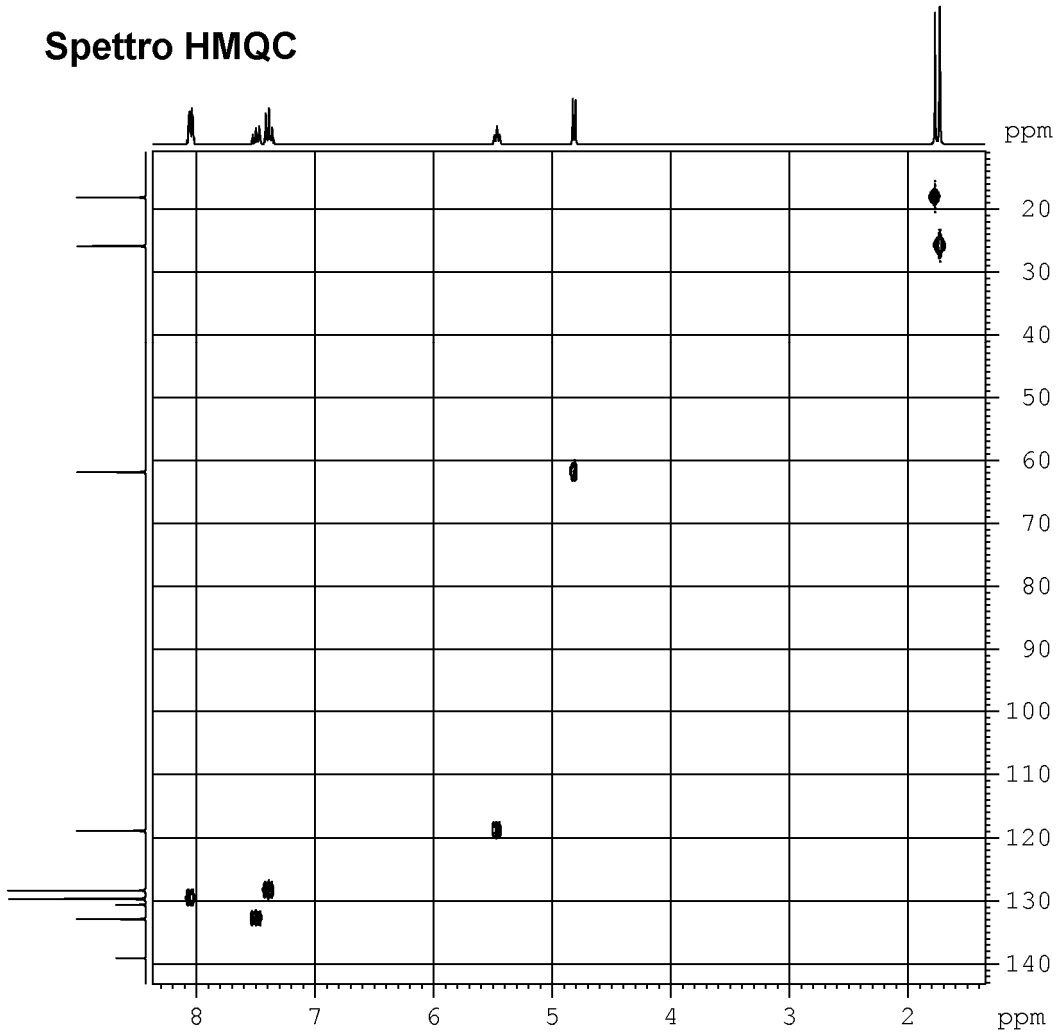
DEPT 90

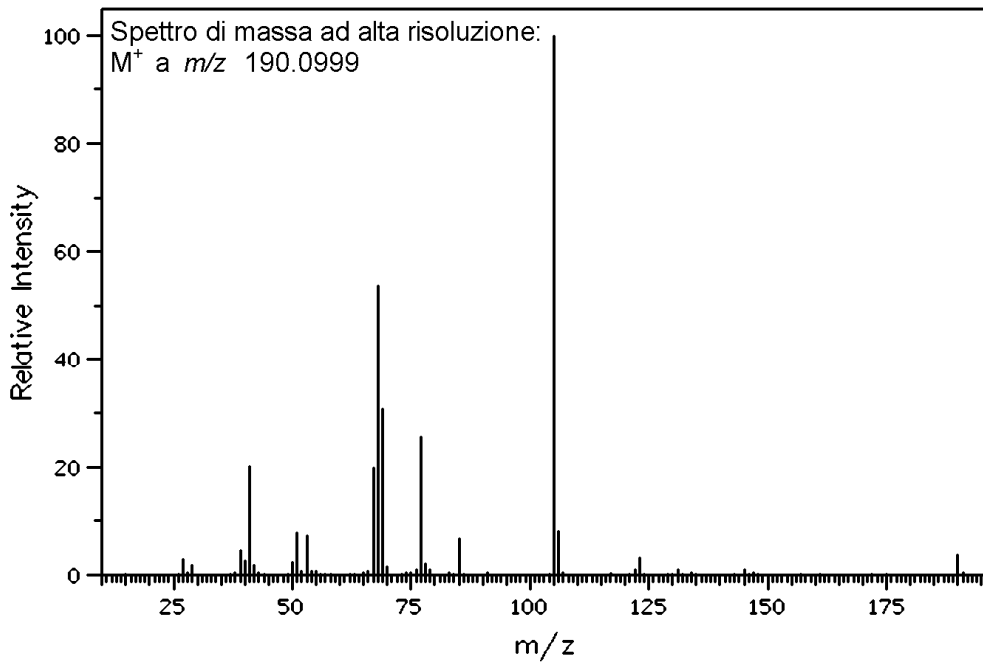
DEPT 135

Spettro ^{13}C NMR



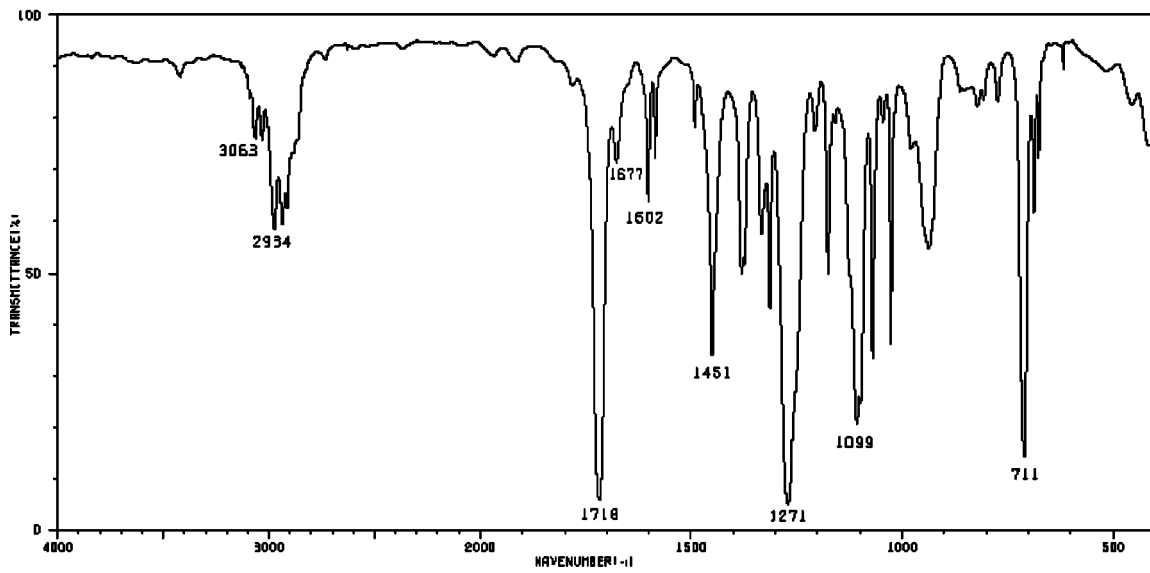
Spettro HMQC





Spettro di massa EI

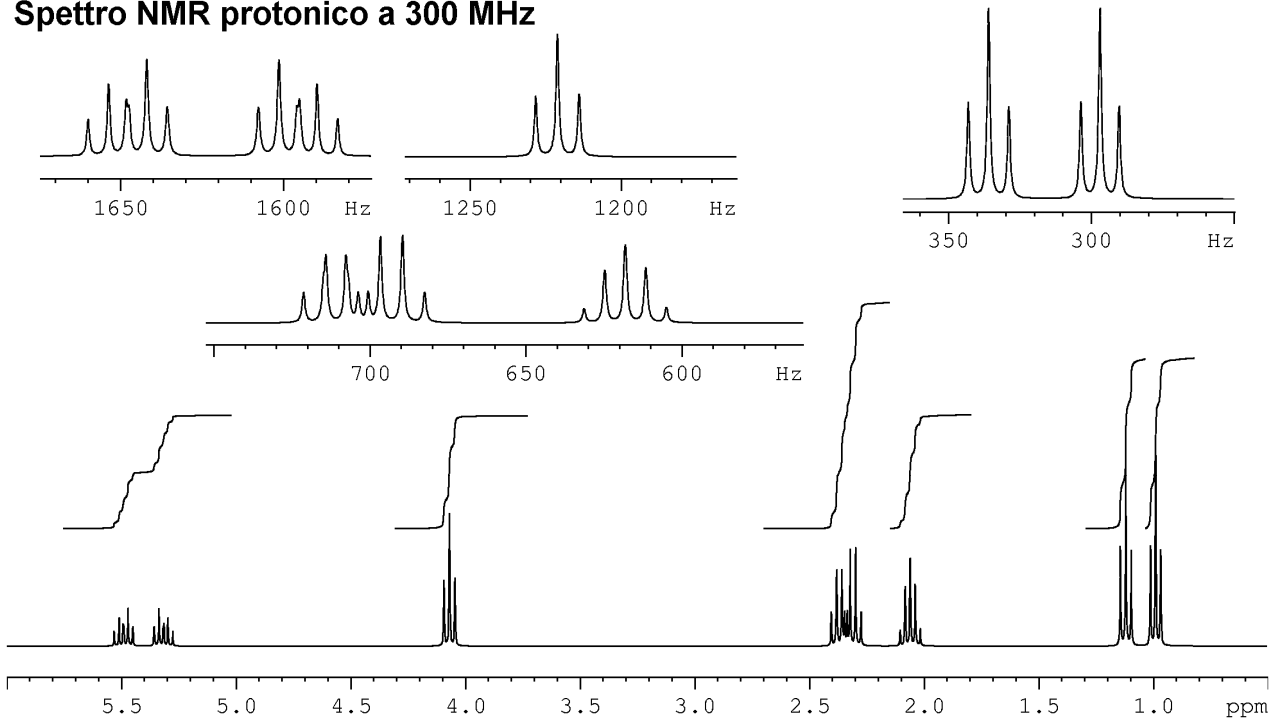
190	
C ₇ H ₁₄ N ₂ O ₄	190.0954
C ₇ H ₁₆ N ₃ O ₃	190.1193
C ₇ H ₁₈ N ₄ O ₂	190.1431
C ₈ H ₆ N ₄ O ₂	190.0491
C ₈ H ₁₆ NO ₄	190.1080
C ₈ H ₁₈ N ₂ O ₃	190.1318
C ₈ H ₂₀ N ₃ O ₂	190.1557
C ₈ H ₂₂ N ₄ O	190.1795
C ₉ H ₈ N ₃ O ₂	190.0617
C ₉ H ₁₀ N ₄ O	190.0856
C ₉ H ₁₈ O ₄	190.1205
C ₉ H ₂₀ NO ₃	190.1444
C ₉ H ₂₂ N ₂ O ₂	190.1682
C ₁₀ H ₈ NO ₃	190.0504
C ₁₀ H ₁₀ N ₂ O ₂	190.0743
C ₁₀ H ₁₂ N ₃ O	190.0981
C ₁₀ H ₁₄ N ₄	190.1220
C ₁₀ H ₂₂ O ₃	190.1569
C ₁₁ H ₁₀ O ₃	190.0630
C ₁₁ H ₁₂ NO ₂	190.0868
C ₁₁ H ₁₄ N ₂ O	190.1107
C ₁₁ H ₁₆ N ₃	190.1346
C ₁₂ H ₁₄ O ₂	190.0994
C ₁₂ H ₁₆ NO	190.1233
C ₁₂ H ₁₈ N ₂	190.1471
C ₁₃ H ₁₈ O	190.1358
C ₁₃ H ₂₀ N	190.1597
C ₁₄ H ₂₂	190.1722
C ₁₅ H ₁₀	190.0783



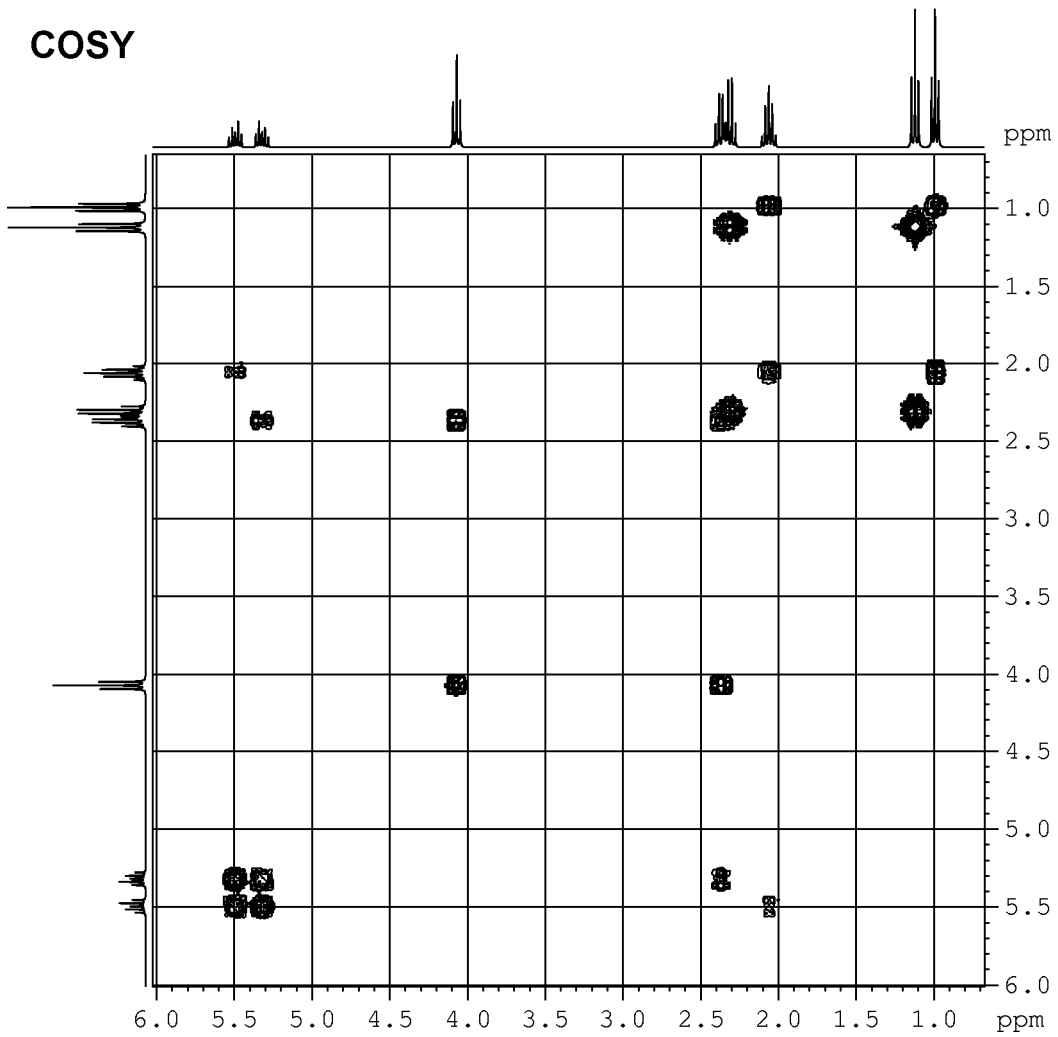
Spettro IR

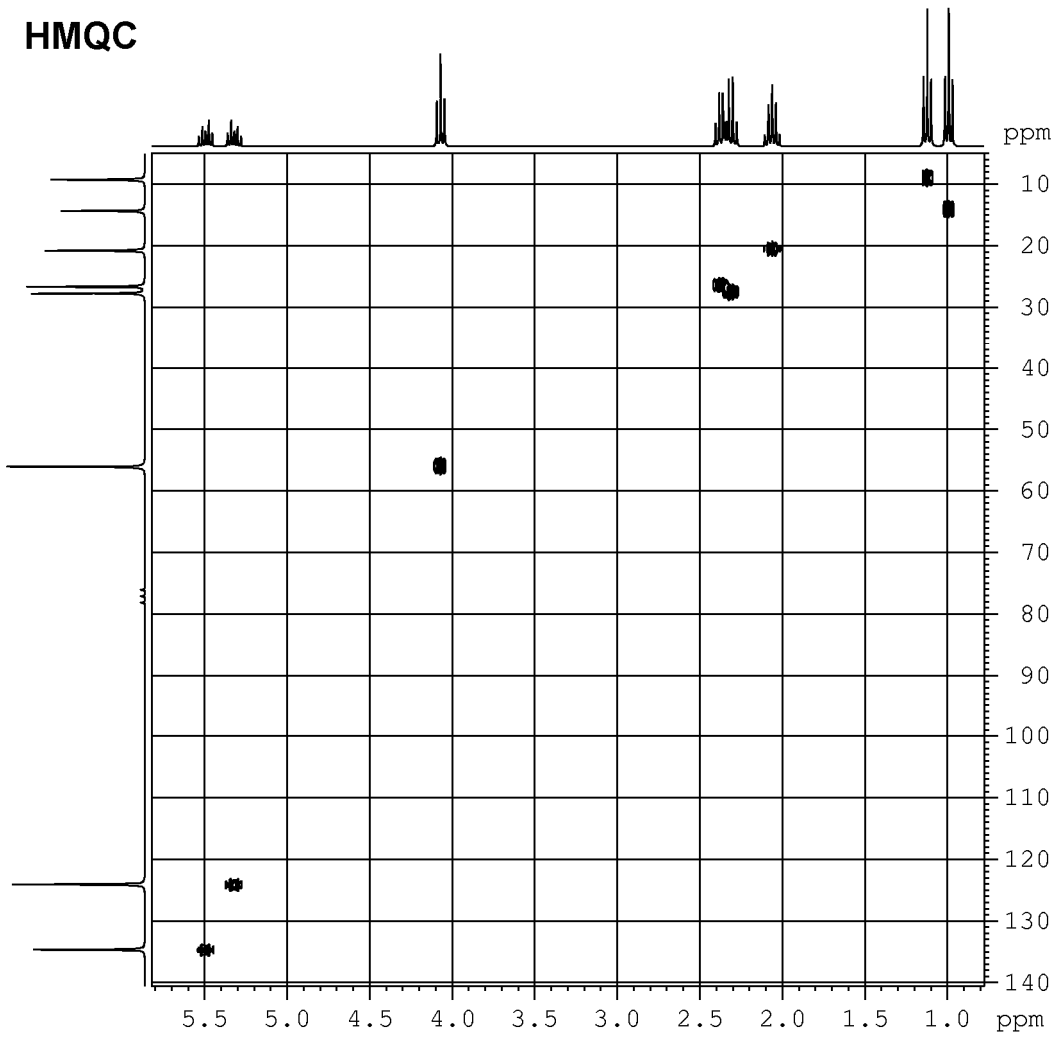
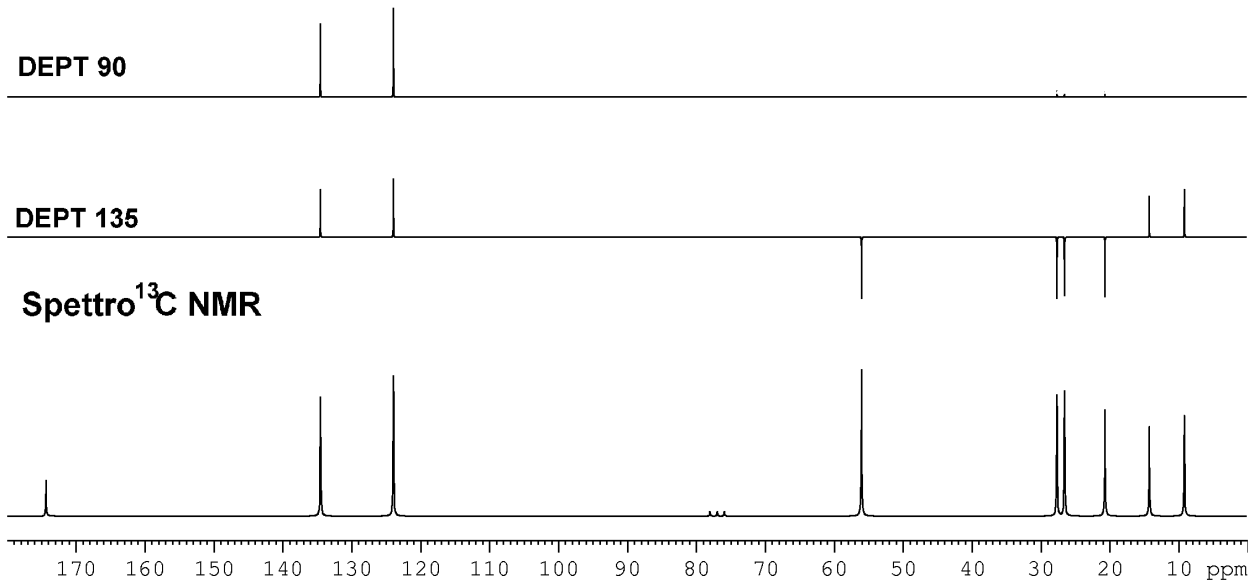
- a.* Stabilire la struttura del composto di cui sono forniti gli spettri.
- b.* Spiegare estesamente il ragionamento seguito, indicando le informazioni più significative fornite dai vari spettri.
- c.* Attribuire i segnali degli spettri NMR ^1H e ^{13}C ai rispettivi protoni o carboni: numerare la molecola e scrivere i numeri relativi ad ogni idrogeno o carbonio vicino al rispettivo segnale.

Spettro NMR protonico a 300 MHz



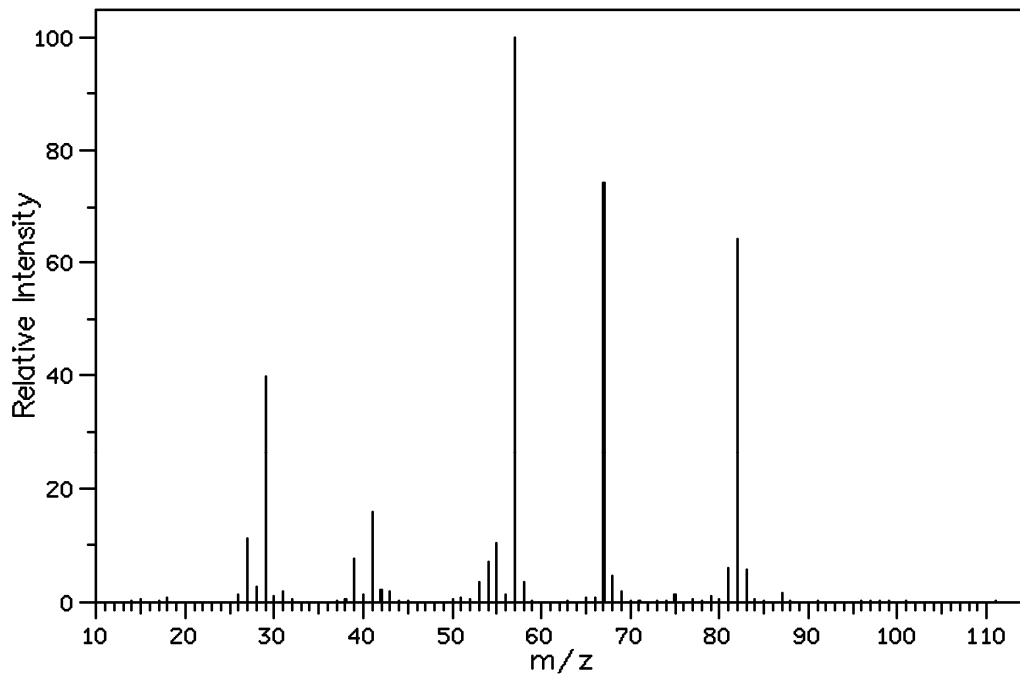
COSY





Spettro di massa CI:

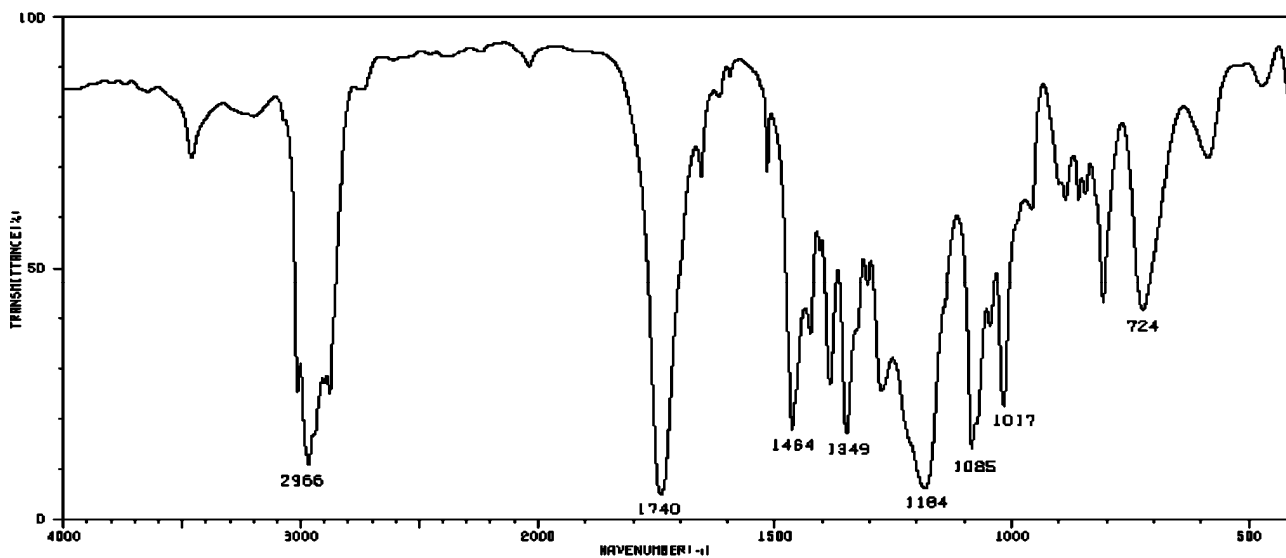
$[M+H]^+$ a m/z 157.1234



Spettro di massa EI

157

$C_5H_5N_2O_4$	157.0249
$C_5H_7N_3O_3$	157.0488
$C_5H_9N_4O_2$	157.0726
$C_6H_7NO_4$	157.0375
$C_6H_9N_2O_3$	157.0614
$C_6H_{11}N_3O_2$	157.0852
$C_6H_{13}N_4O$	157.1091
$C_7H_9O_4$	157.0501
$C_7H_{11}NO_3$	157.0739
$C_7H_{13}N_2O_2$	157.0978
$C_7H_{15}N_3O$	157.1216
$C_7H_{17}N_4$	157.1455
$C_8H_5N_4$	157.0515
$C_8H_{13}O_3$	157.0865
$C_8H_{15}NO_2$	157.1103
$C_8H_{17}N_2O$	157.1342
$C_8H_{19}N_3$	157.1580
$C_9H_5N_2O$	157.0402
$C_9H_7N_3$	157.0641
$C_9H_{17}O_2$	157.1229
$C_9H_{19}NO$	157.1467
$C_9H_{21}N_2$	157.1706
$C_{10}H_7NO$	157.0528
$C_{10}H_9N_2$	157.0767
$C_{10}H_{21}O$	157.1593
$C_{10}H_{23}N$	157.1832
$C_{11}H_9O$	157.0653
$C_{11}H_{11}N$	157.0892
$C_{12}H_{13}$	157.1018



Spettro IR (composto puro)