

# Corso per gli Studenti del Dottorato in Scienze Chimiche

## Spettroscopia Interpretativa NMR Organica

### Interpretative Organic NMR Spectroscopy

Antonio Evidente



*Dipartimento di scienze Chimiche, Univerità di Napoli Federico II, Complesso  
Universitario Monte S. Angelo, Via Cintia 4, 80126 Napoli, Italy*

E-mail: [evidente@unina.it](mailto:evidente@unina.it)

giugno 2019

# Spettroscopia NMR interpretativa Organica

## Interpretative Organic NMR Spectroscopy

### Programma dettagliato dell'insegnamento

#### La spettroscopia

Lo spettro elettromagnetico; le caratteristiche fisiche delle radiazioni: le diverse tecniche spettroscopiche e loro applicazioni analitiche generali.

**Cenni sull'importanza e l'uso delle spettroscopie:** IR, UV e MS in Chimica Organica

#### La Risonanza Magnetica Nucleare (NMR)

**Principi fisici:** Il fenomeno della risonanza; lo spostamento chimico ("chemical shift") e correlazione con gli elementi strutturali; l'accoppiamento spin-spin (molteplicità); la costante di accoppiamento. **Spettroscopia dell' $^1\text{H}$ :** chemical shift dell' $^1\text{H}$  e correlazione con gli elementi strutturali; accoppiamenti  $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$  e con altri nuclei; processi di scambio chimico; reagenti di shift. **Spettroscopia del  $^{13}\text{C}$ :** chemical shift del  $^{13}\text{C}$ ; e correlazione con gli elementi strutturali; accoppiamenti  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ . **Spettrometri NMR e registrazione degli spettri:** Preparazione dei campioni; lo schema di uno spettrometro NMR; gli spettrometri ad alto campo; lo spettro ad impulso e la trasformata di Fourier; la registrazione degli spettri; monodimensionali dell' $^1\text{H}$  e del  $^{13}\text{C}$ ; tecniche bidimensionali. **Le sequenze bidimensionali più comuni:** COSY, HSQC, HMBC e NOESY; registrazione e interpretazione di spettri bidimensionali; utilizzazione della spettroscopia NMR per la determinazione della struttura di composti naturali e di sintesi.

#### The Nuclear Magnetic Resonance (NMR)

**Physical principles:** The resonance phenomenon.  **$^1\text{H}$  spectroscopy:** the chemical shift ("chemical shift") and correlation with the structural features; the spin-spin coupling (multiplicity); the coupling constant; the coupling pairs  $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$  and with other nuclei; chemical exchange processes; reagents shift;  **$^{13}\text{C}$  spectroscopy:** chemical shift and correlation with the structural features; coupling  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ ; **NMR spectrometers and recording of spectra:** preparation of samples; a diagram of an NMR spectrometer; spectrometers high field; the pulse spectrum and the Fourier transform; recording of spectra;  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  monodimensional spectra; **The most common two-dimensional sequences:** COsY, HSQC, HMBC and NOESY; recording and interpretation of two-dimensional spectra; **Application of NMR spectroscopy for the determination** of the structure of natural and synthetic compounds.

#### Suggested books:

Hess, Metodi spettroscopici nella chimica organica Edises

S. Berger, D. Sicker, Classic in Spectroscopy, Wiley-VCH;

K. Naganishi. One and Two Dimensional NMR Spectra by Modern Pulse Spectroscopy. University Science Book ;

Rossi et al.: Esercizi di identificazione e caratterizzazione strutturale di composti organici, Edises.

A. Randazzo Guida Pratica alla Interpretazione di Spettrii NMR, Loghia, Napoli