

Estructura-6

Cuestiones:

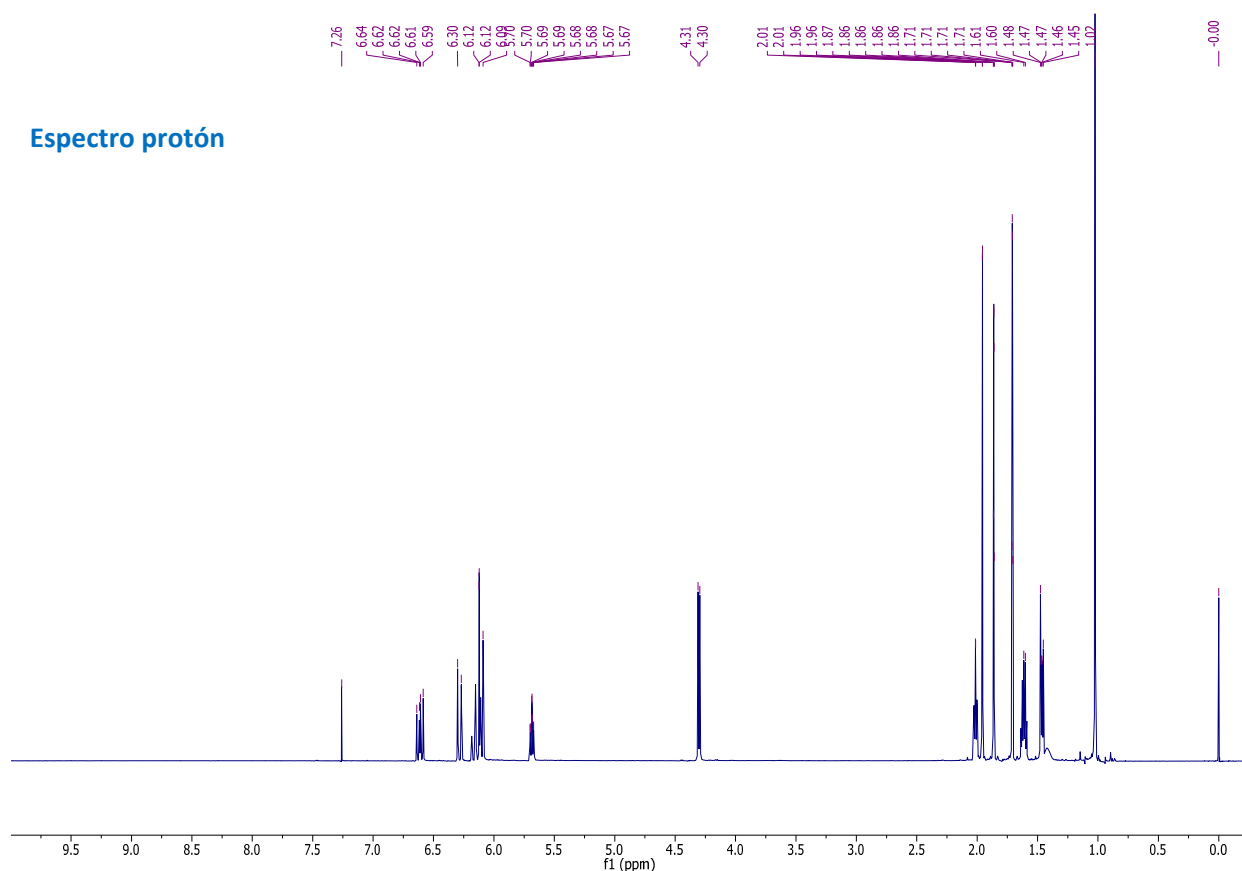
- Mediante los espectros de RMN adjuntos se ha propuesto que el compuesto con fórmula empírica: $C_{20}H_{30}O$ tiene una estructura correspondiente a la vitamina **A**.
- Comprobar esta determinación y realizar la asignación detallada los espectros de 1D y los experimentos 2D.
- Indicar que información relevante pueden aportar los experimentos de HMBC y NOESY. En el caso que se considere que estos experimentos no proporcionan los resultados esperados, indicar que parámetros deberían reajustarse y porque

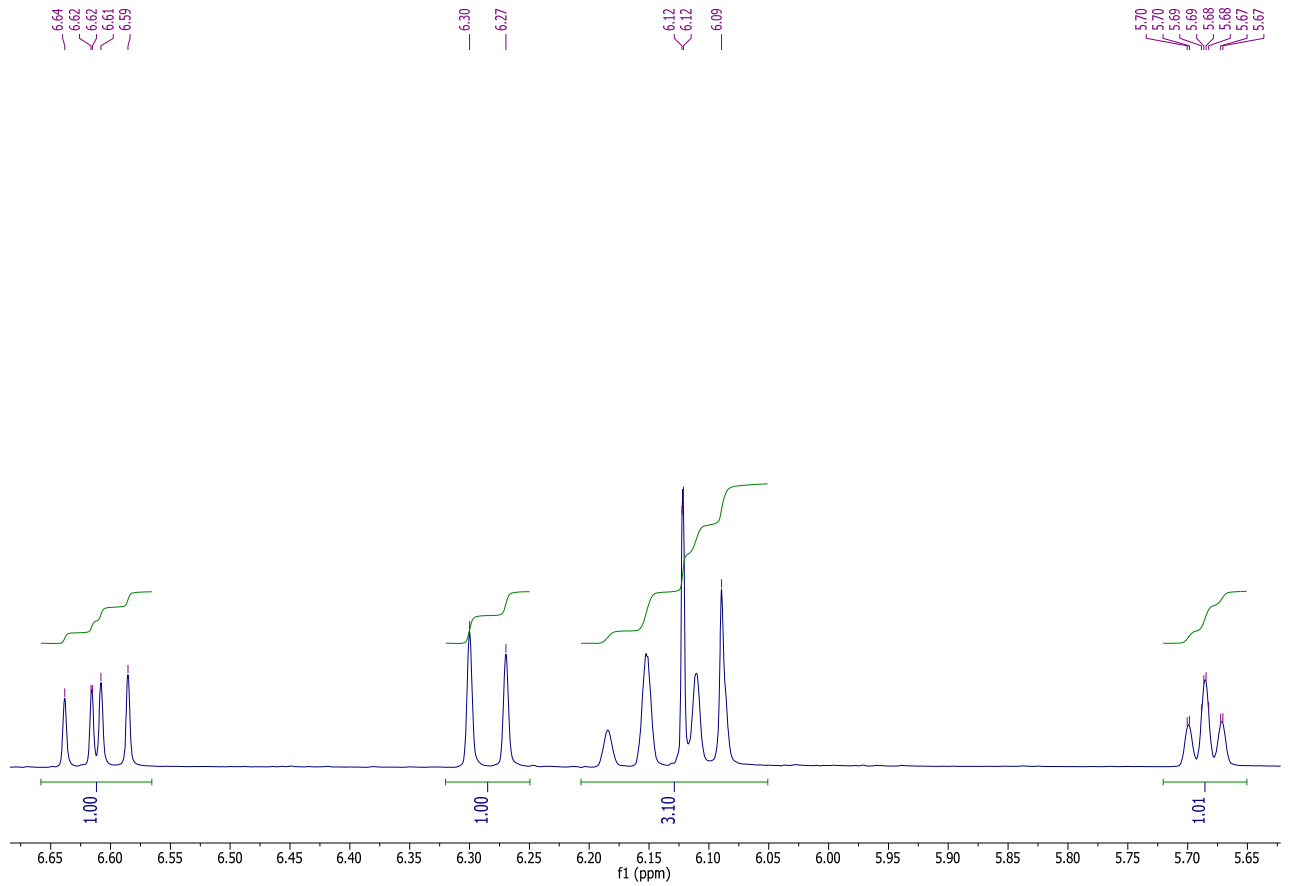
Información:

- Experimentos de RMN realizados con $cdcl_3$ como disolvente. (disolvente $CDCl_3$).
- En las paginas finales se pueden encontrar los listados de los espectros de carbono trece, protón. Así como los valores de las zonas de integración del espectro de protón
- En la carpeta adjunta (Espectros E6) se disponen de los FID's de los experimentos de Protón, Carbono-trece, DEPT-gHSQC, gHMBC. y NOESY.

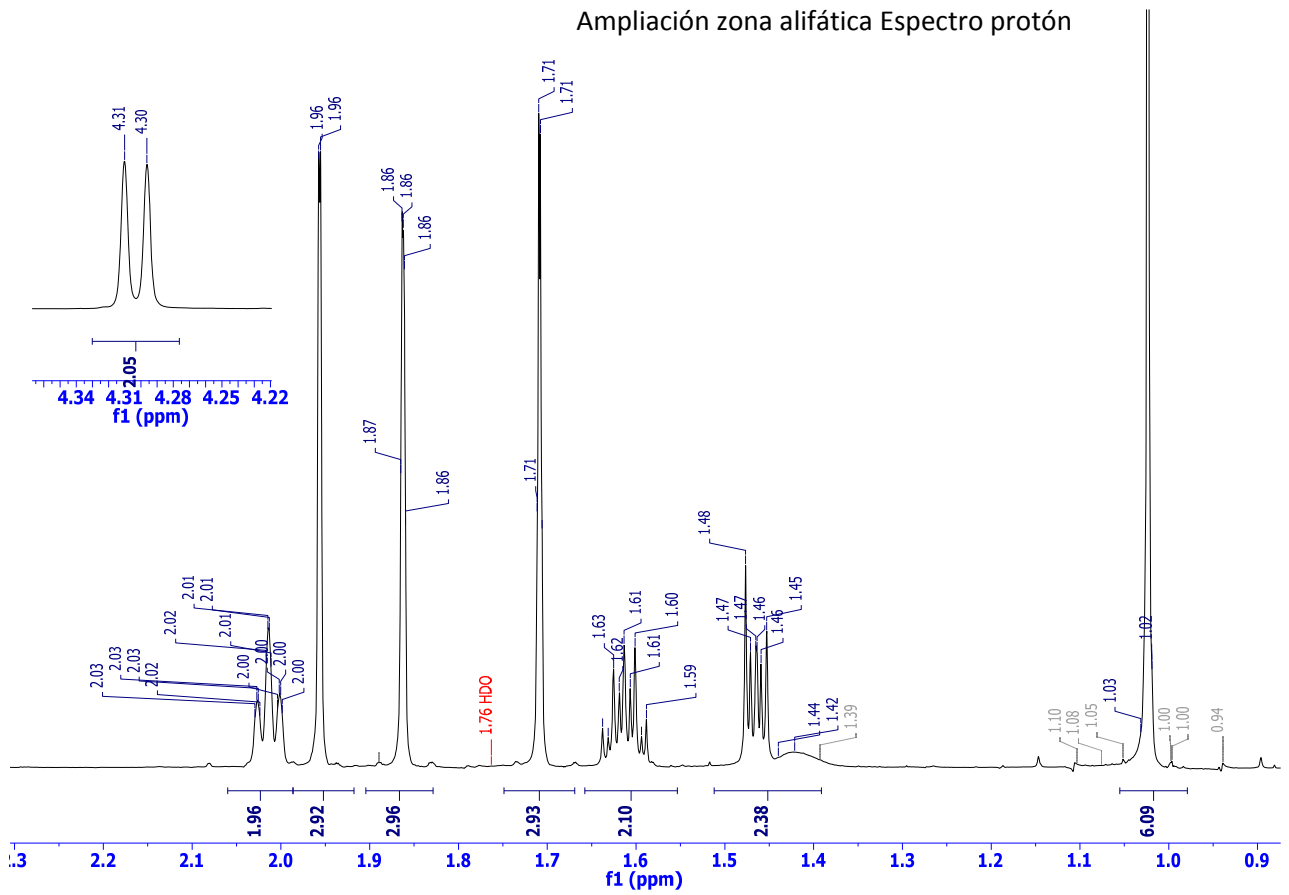
En caso necesario se pueden procesar los espectros para para poder disponer de ampliaciones, para determinar los desplazamientos químicos y las constantes de acoplamiento.

Espectro protón

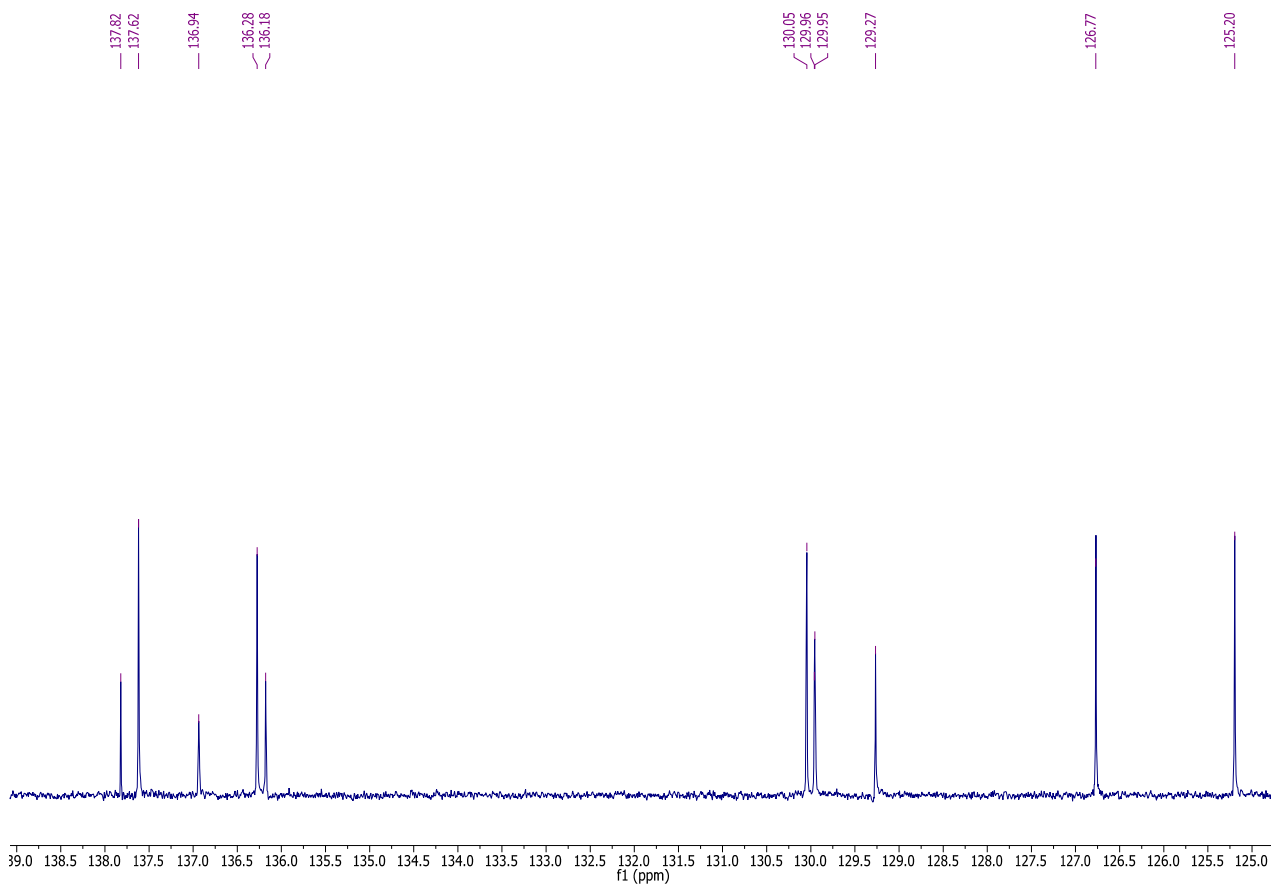
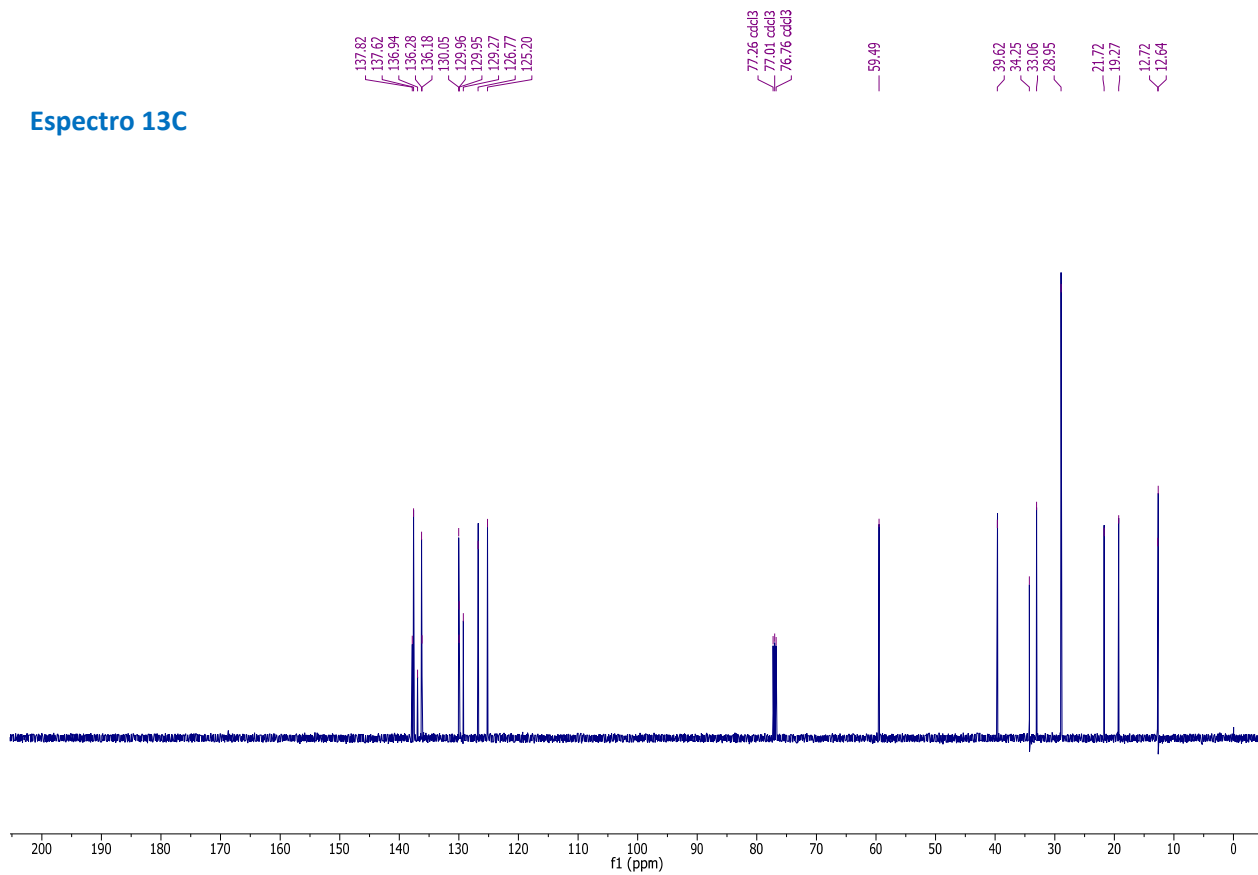


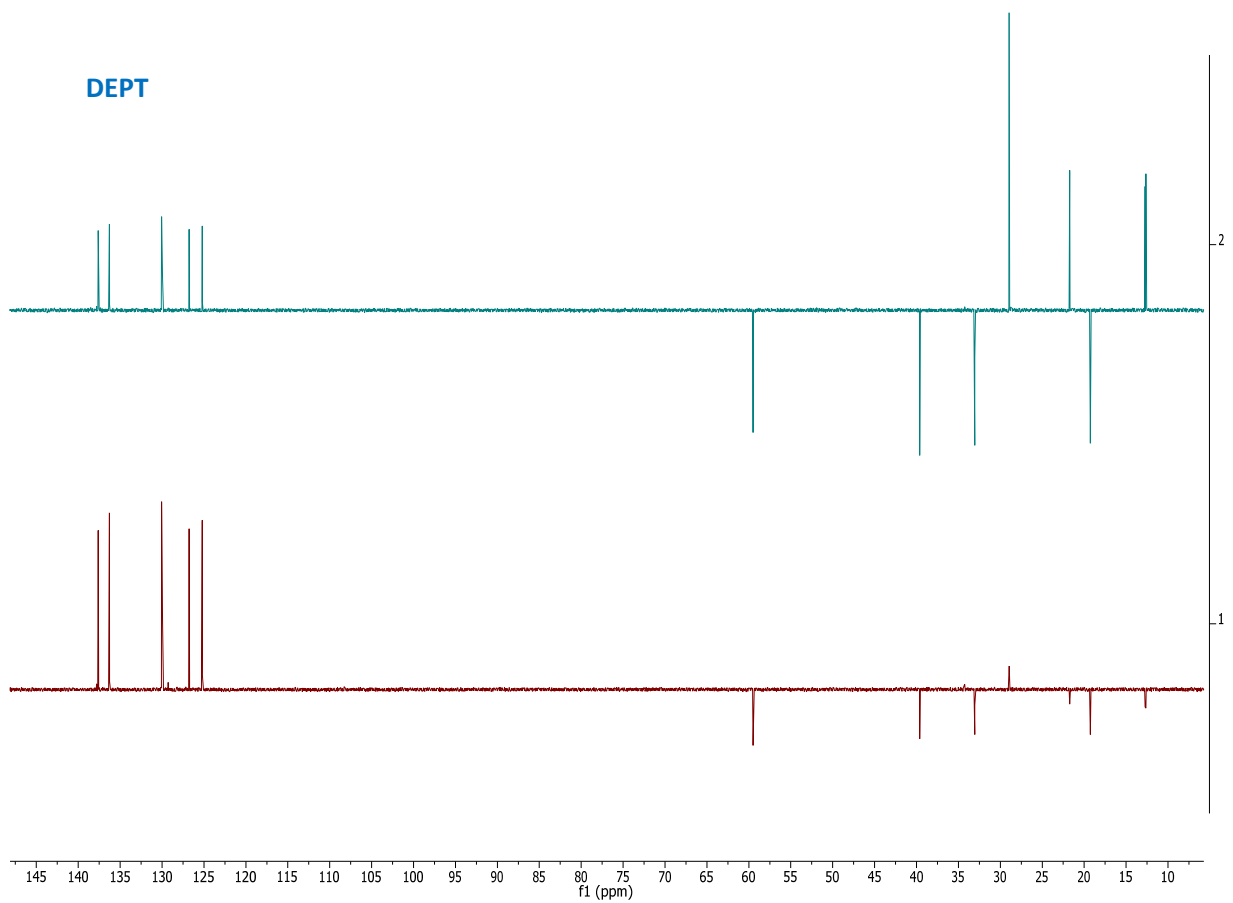
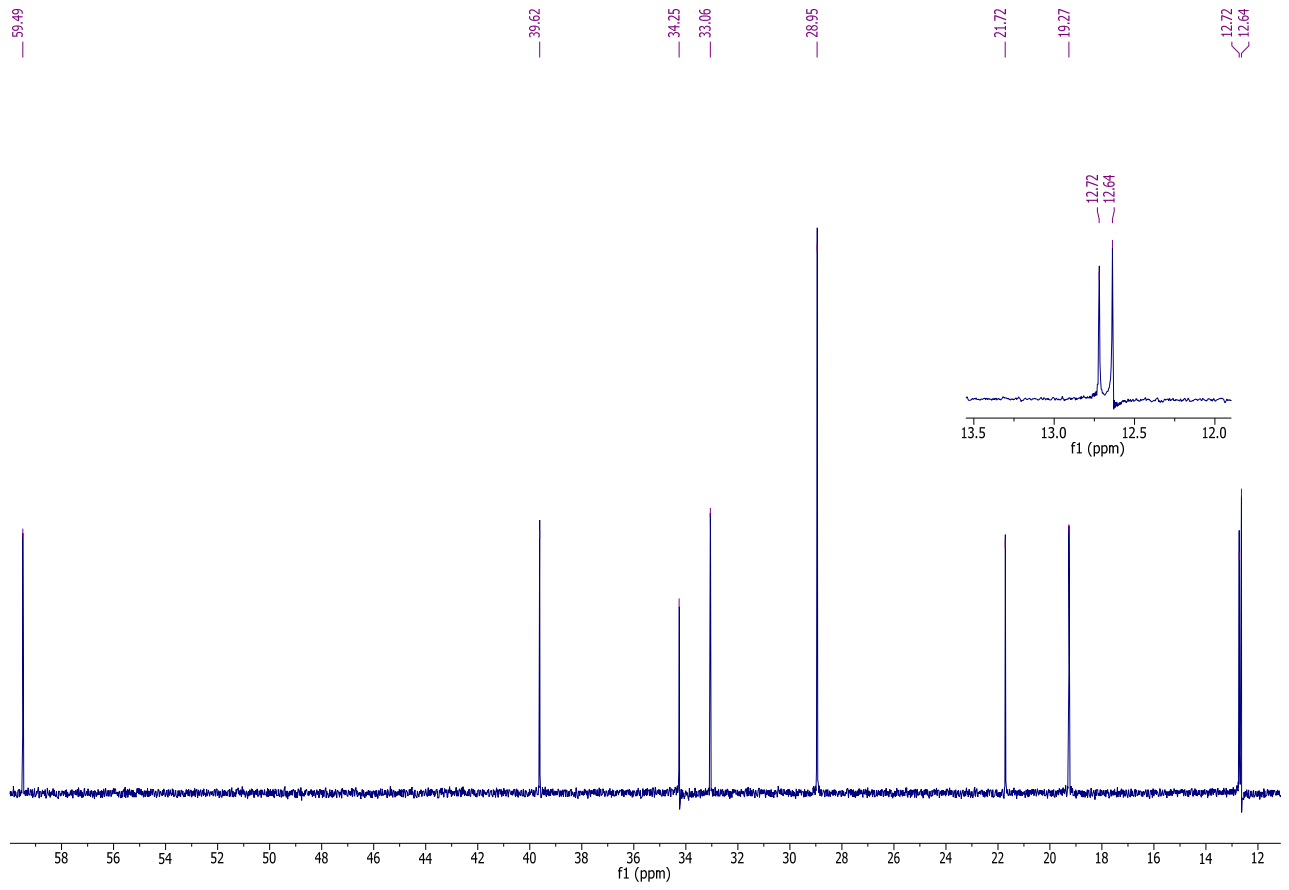


Ampliación zona alifática Espectro protón

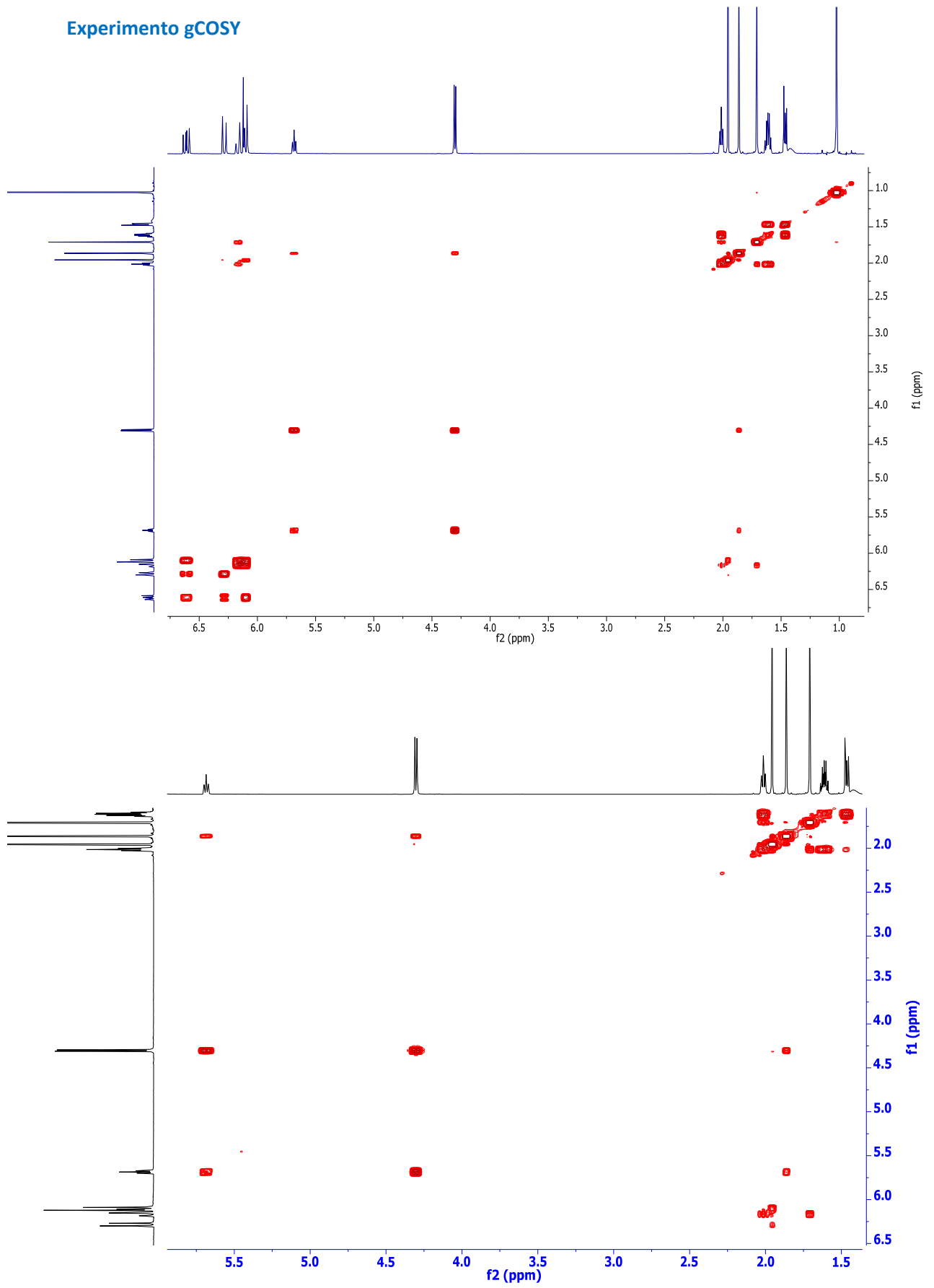


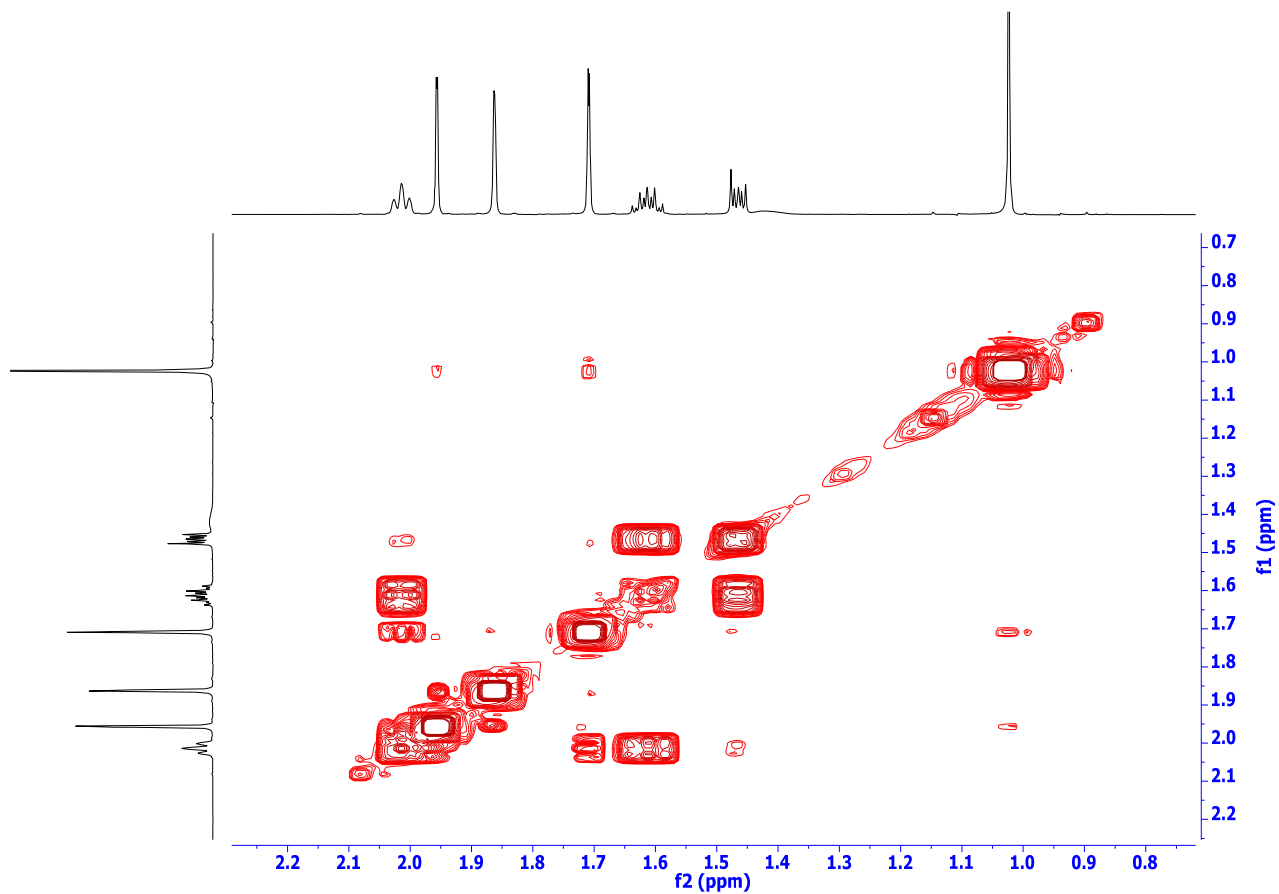
Espectro 13C



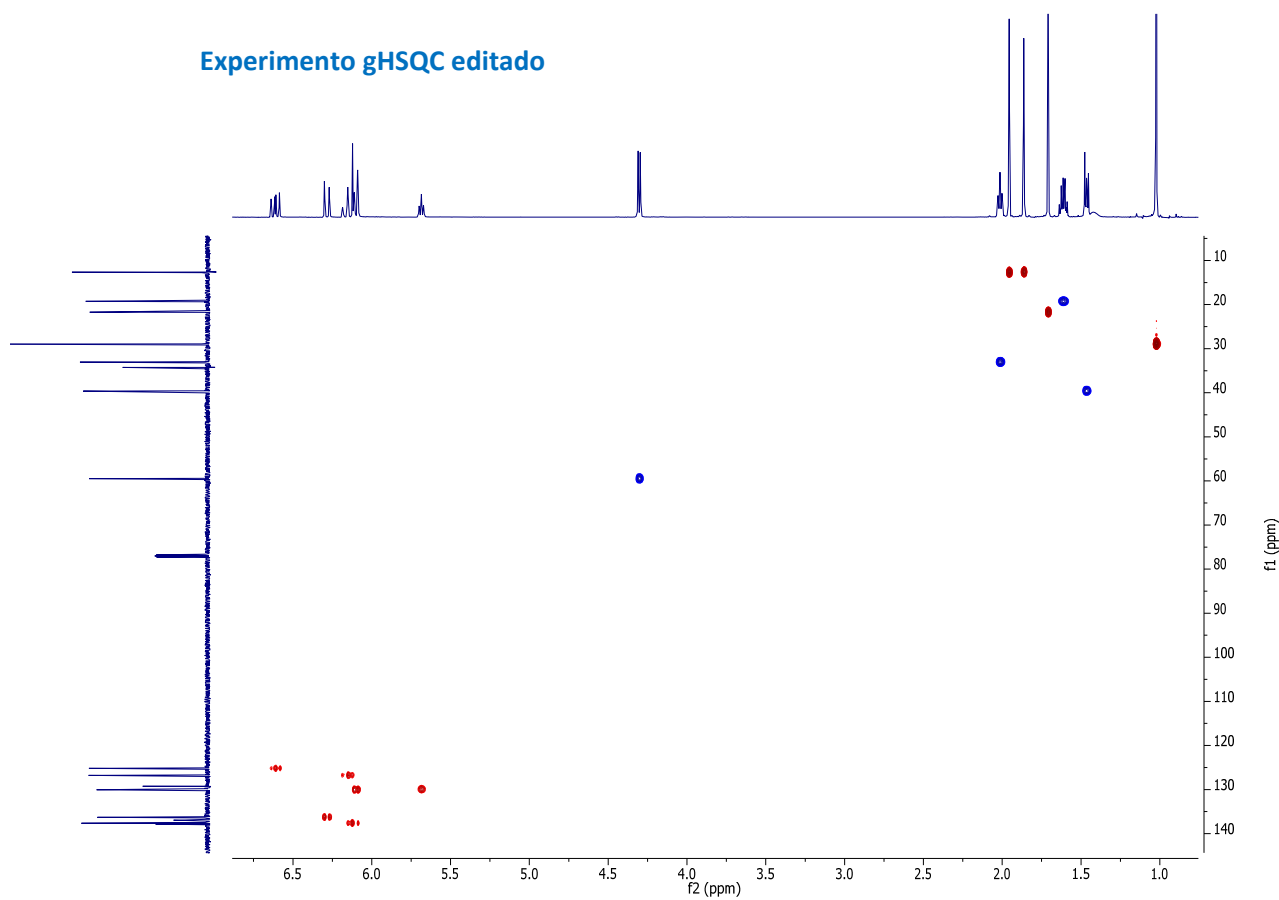


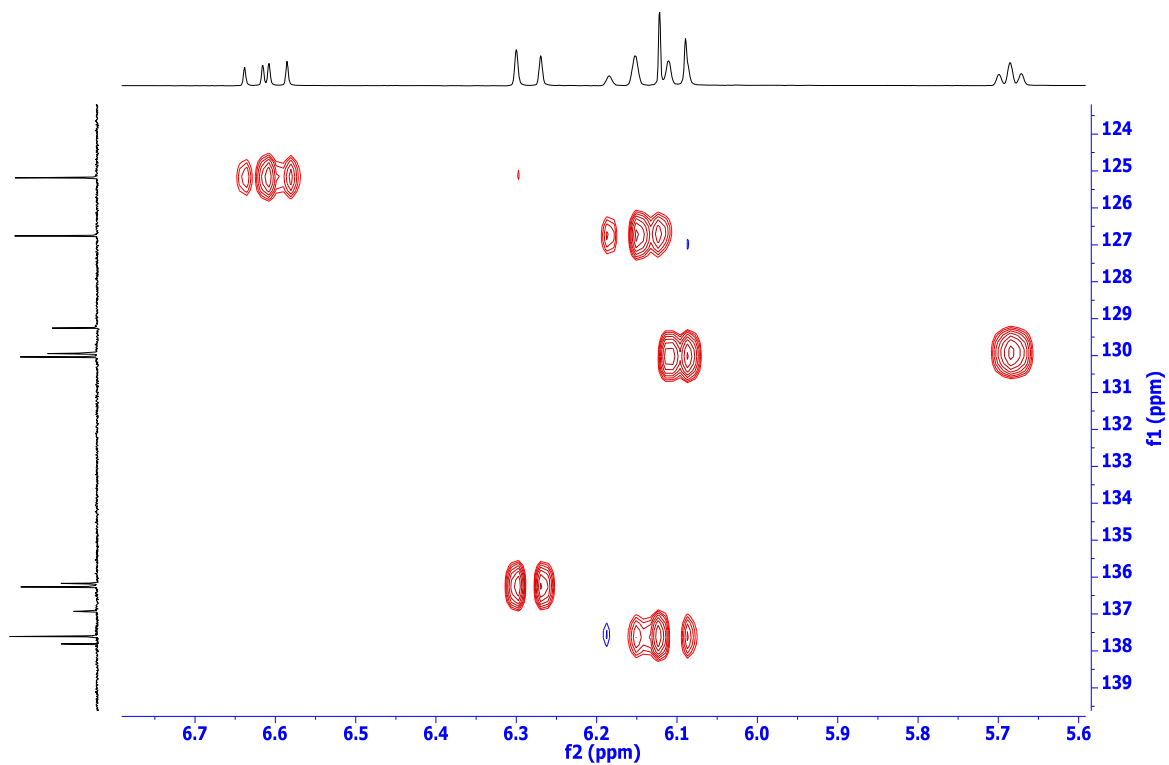
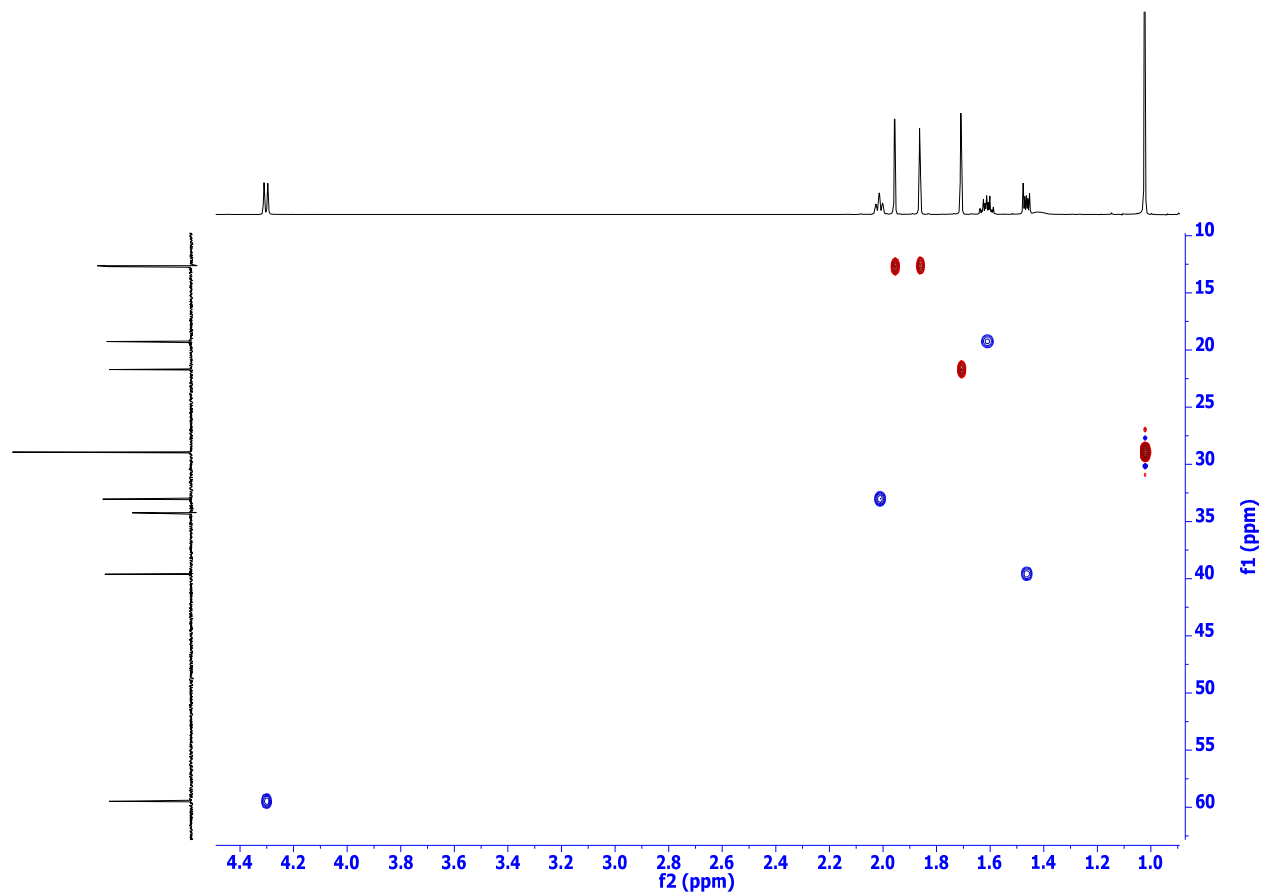
Experimento gCOSY



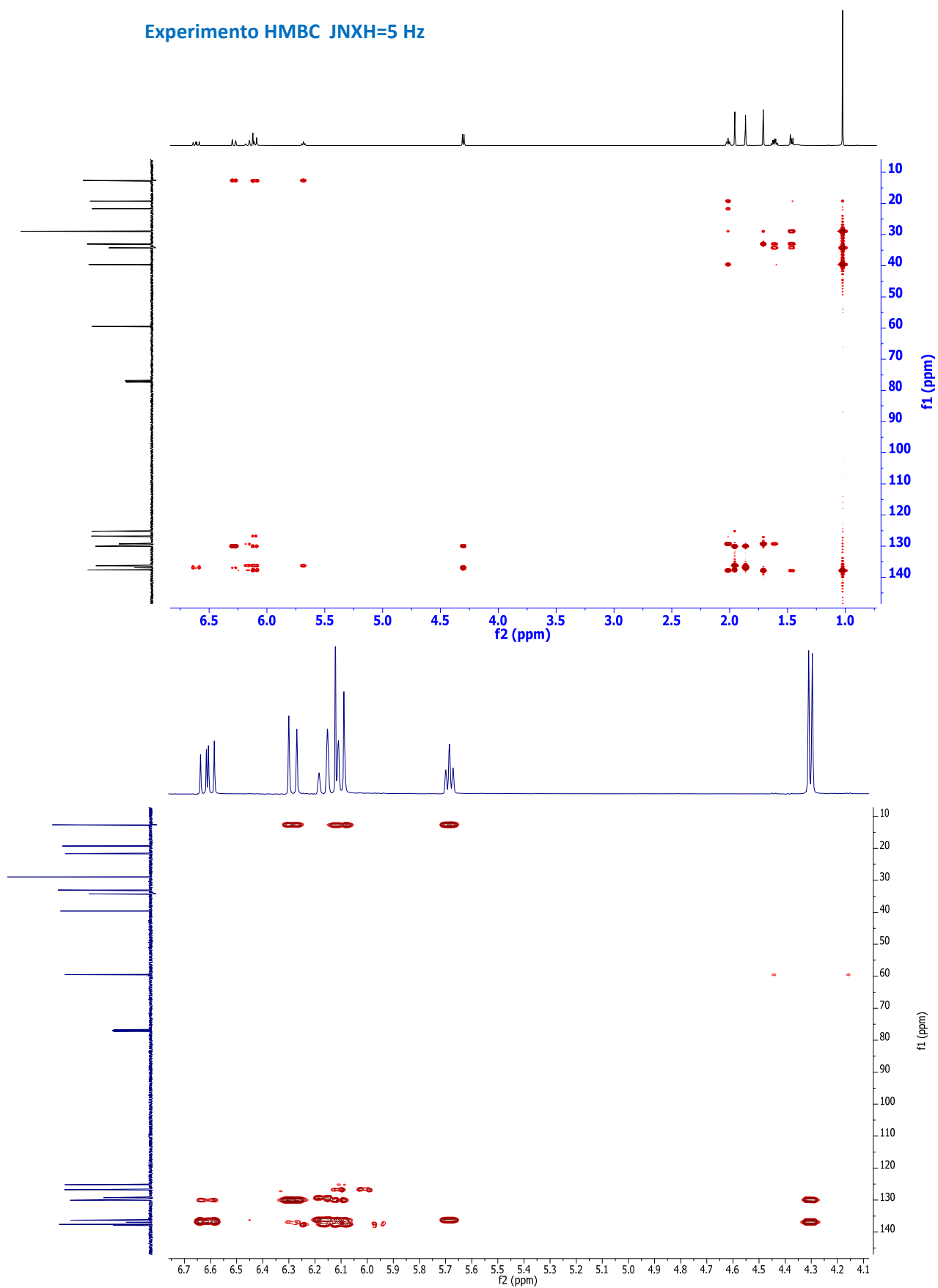


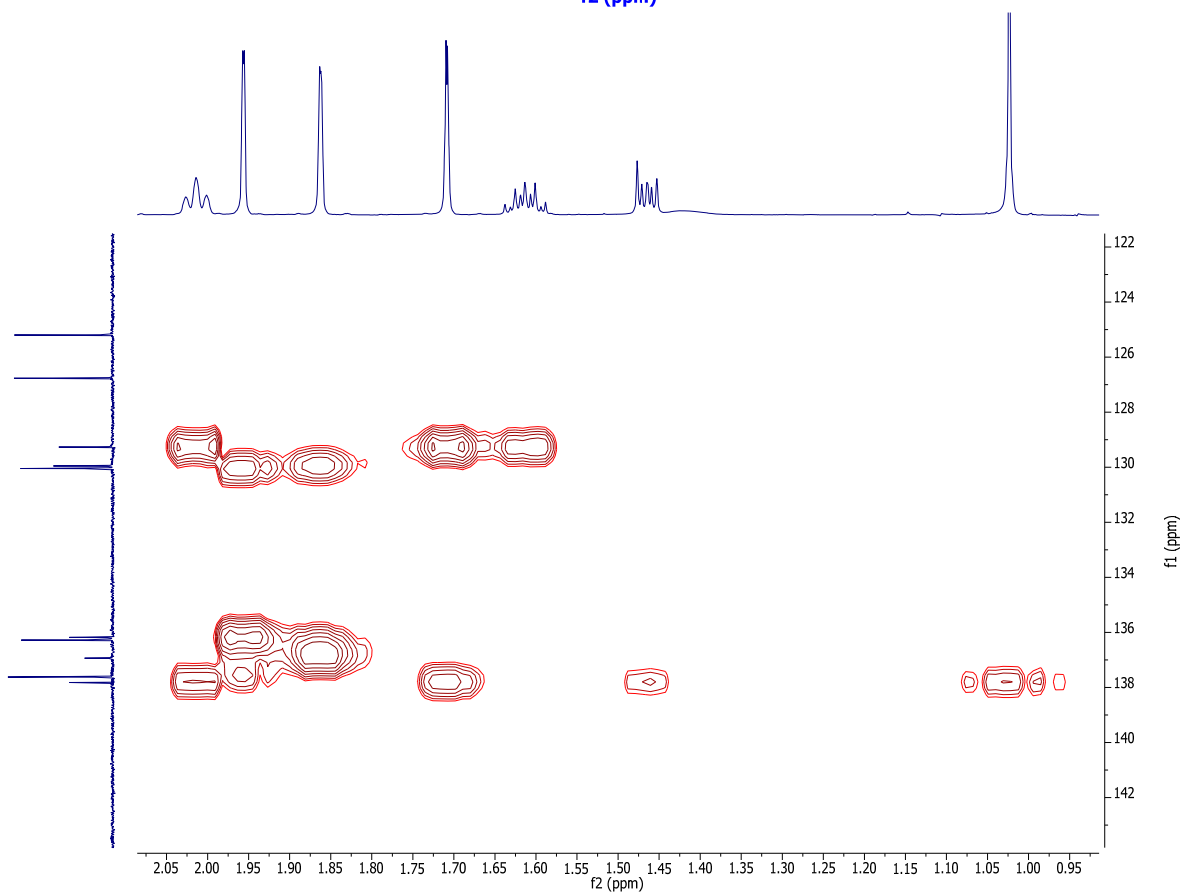
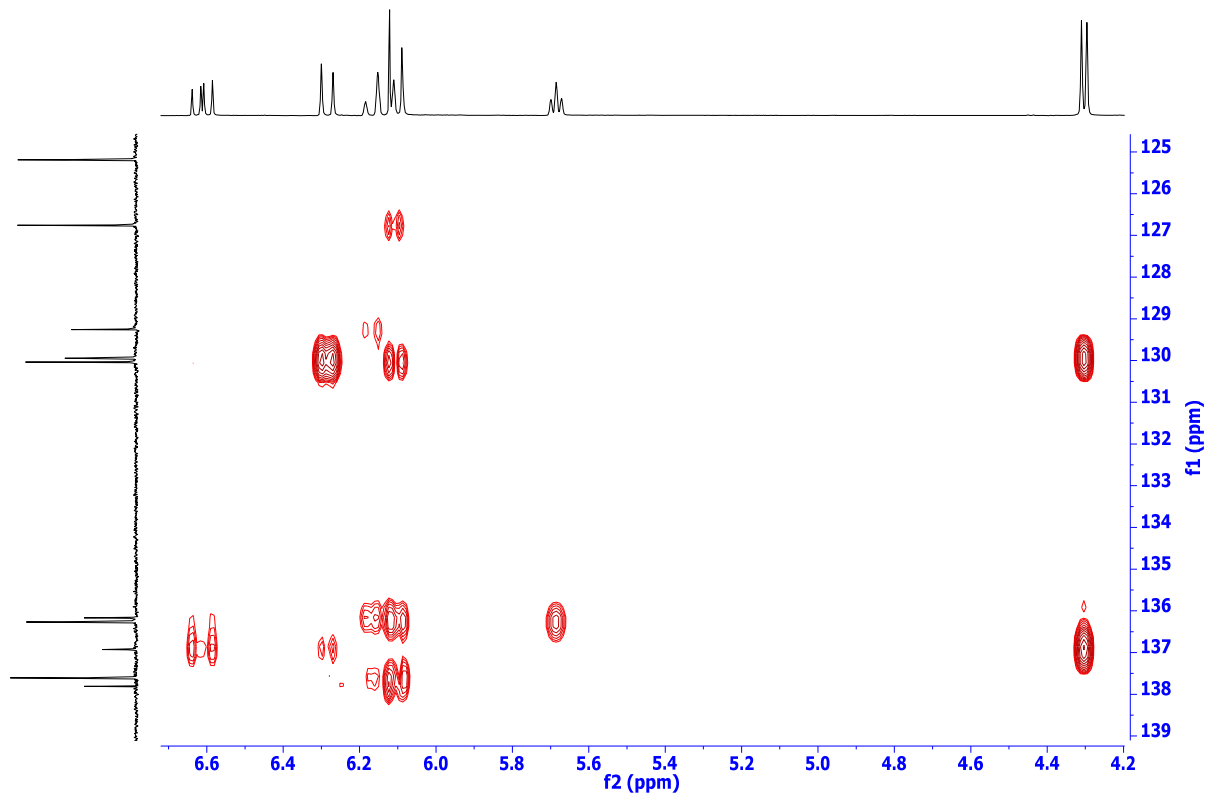
Experimento gHSQC editado

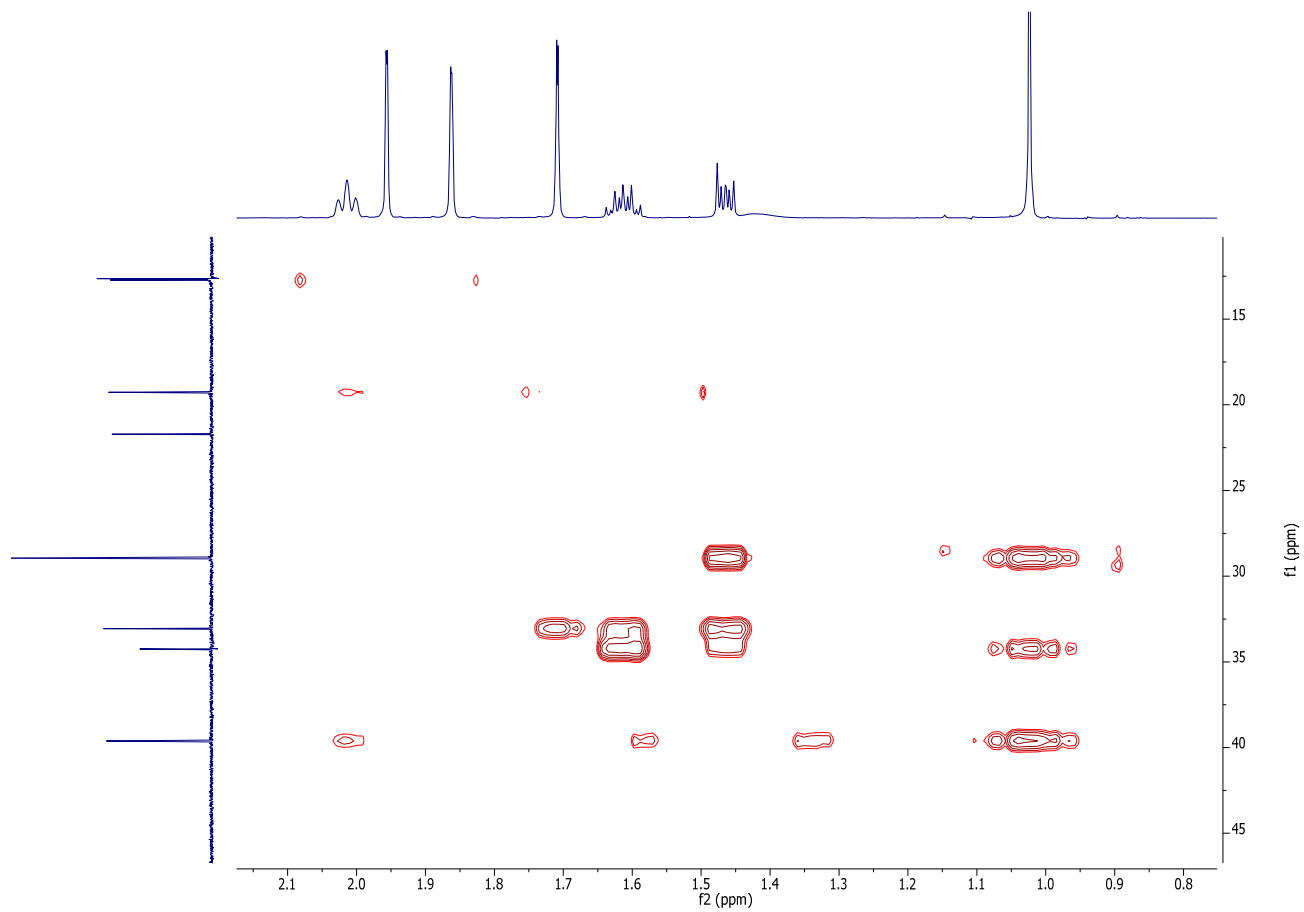




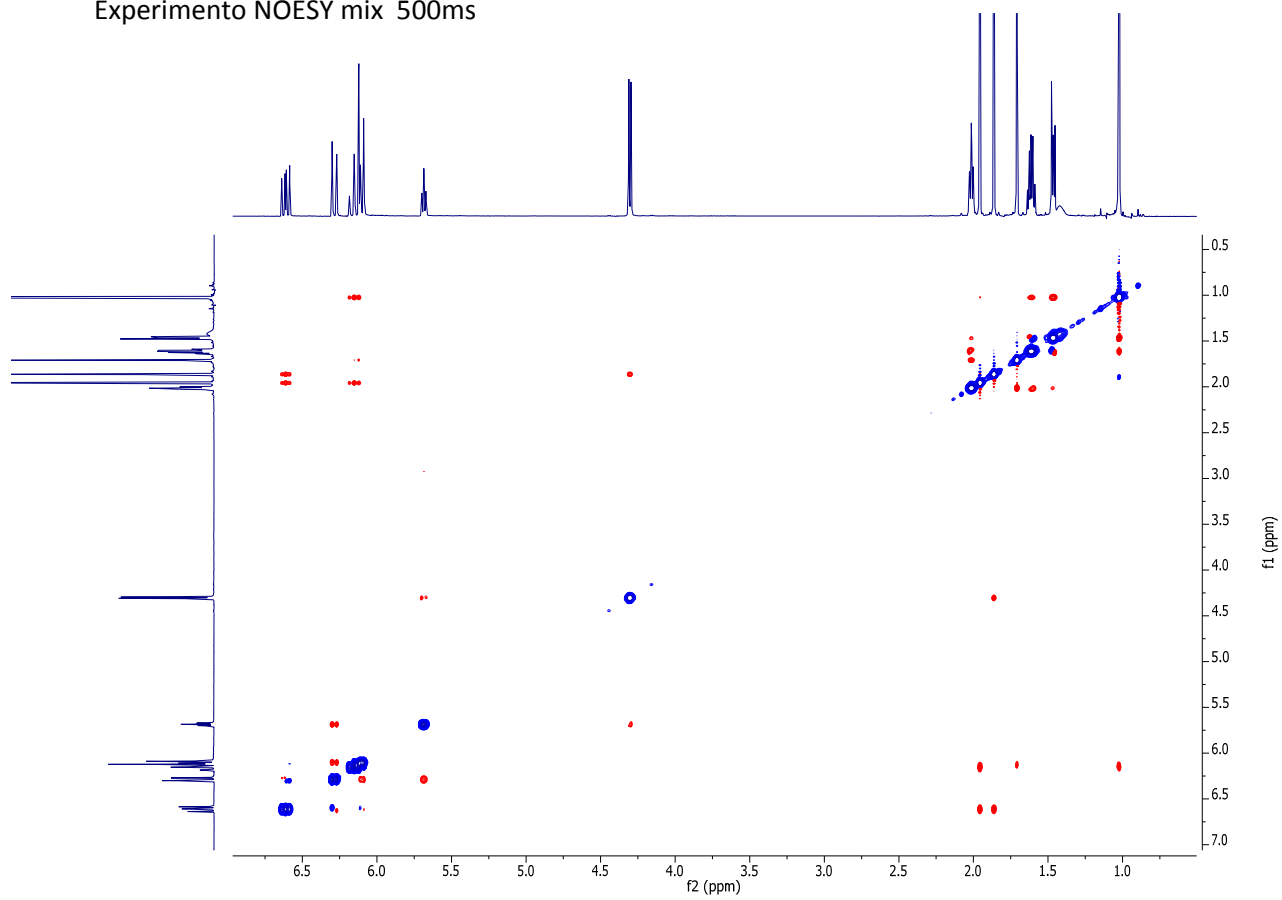
Experimento HMBC JNXH=5 Hz

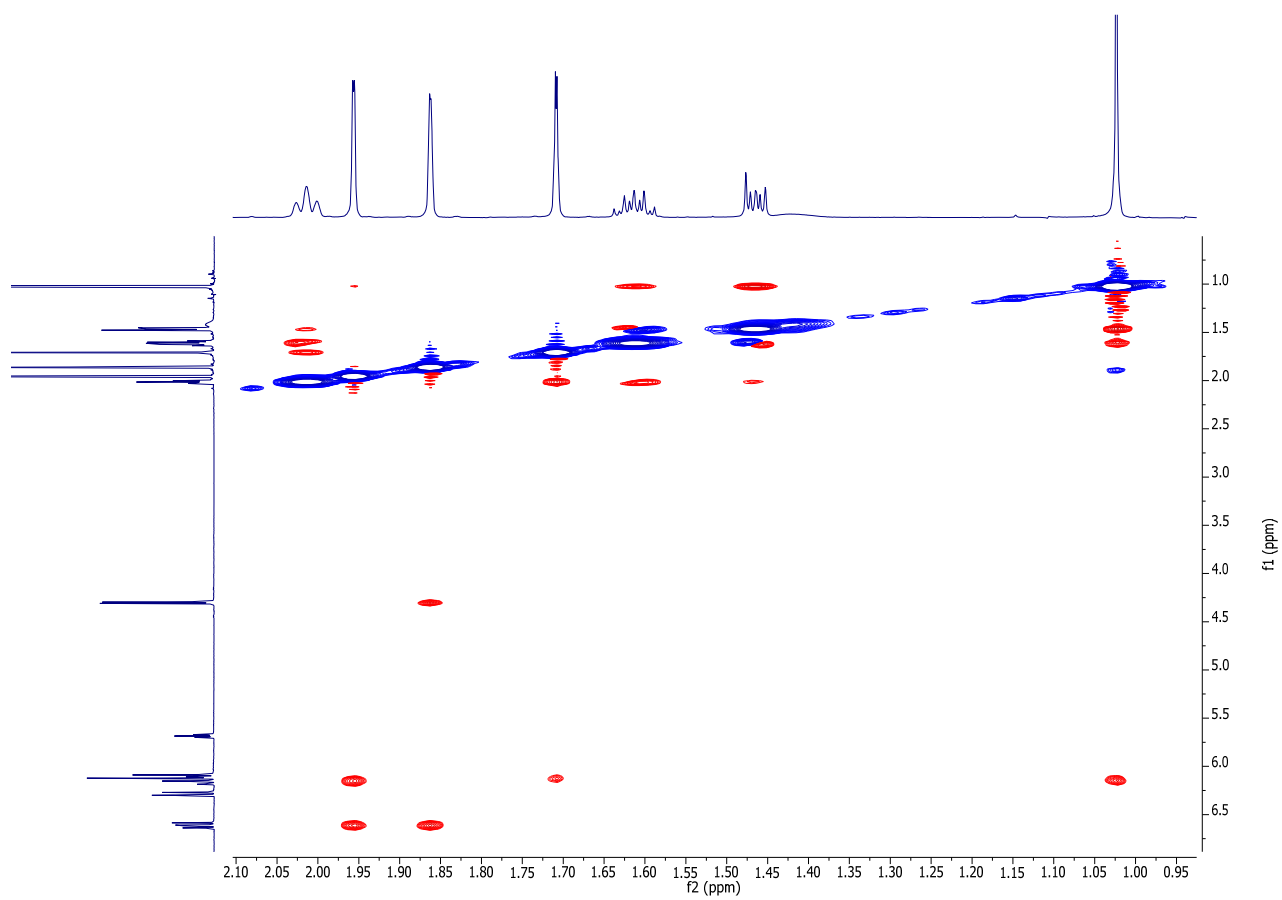
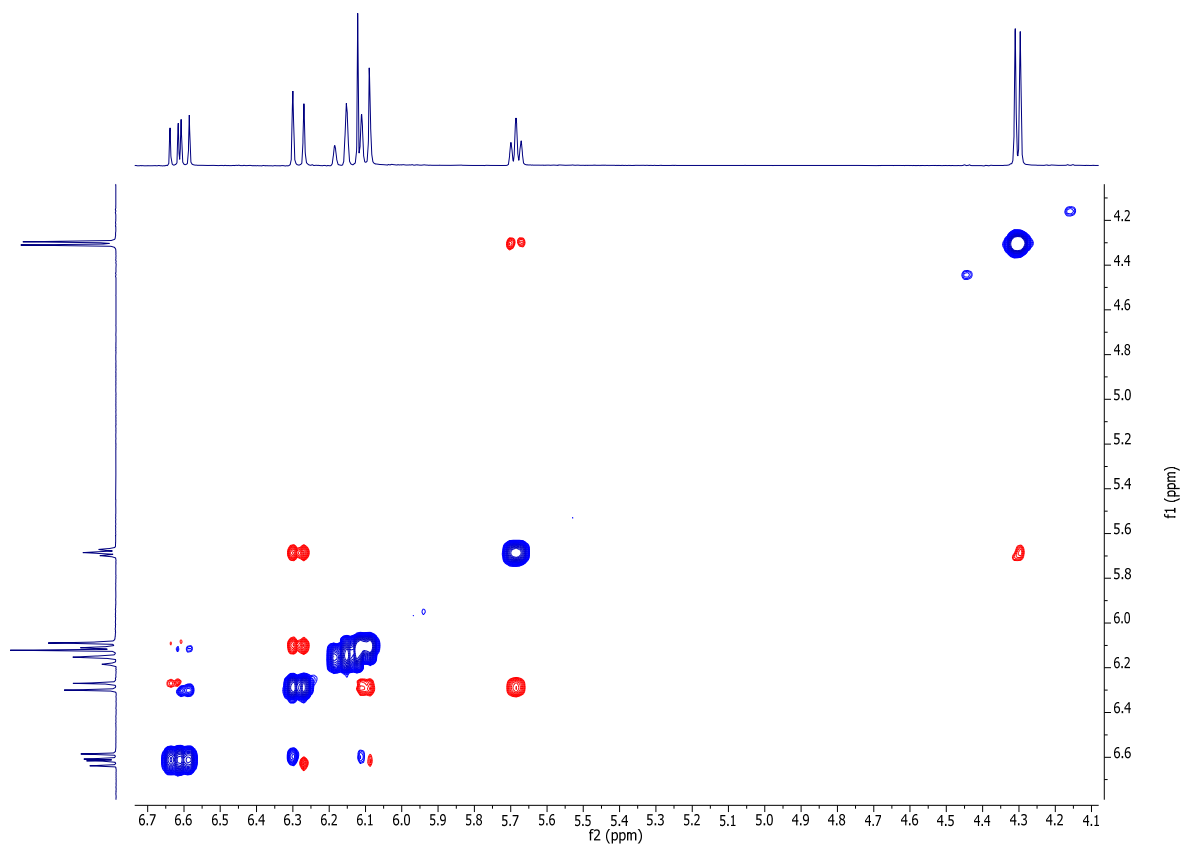


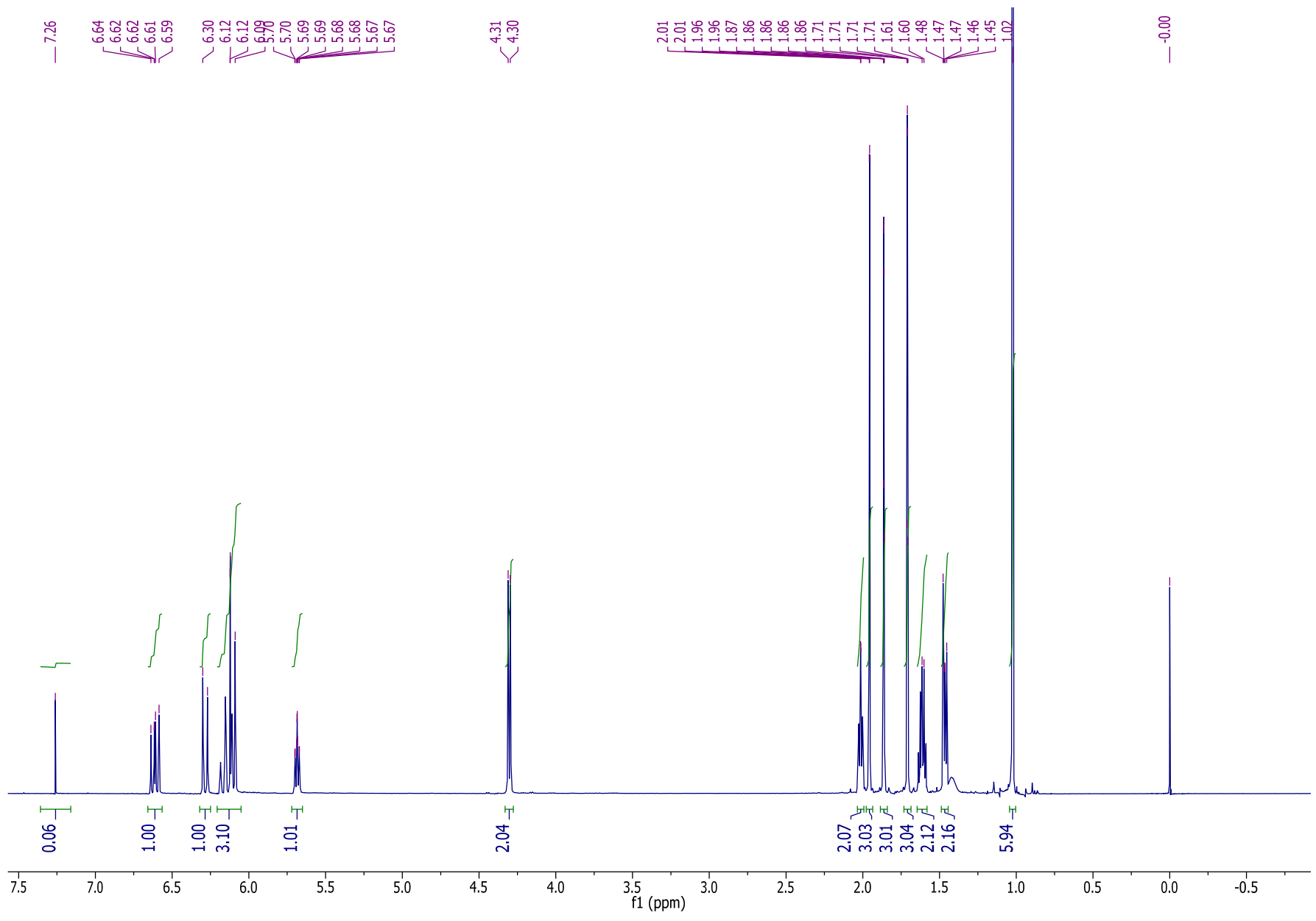


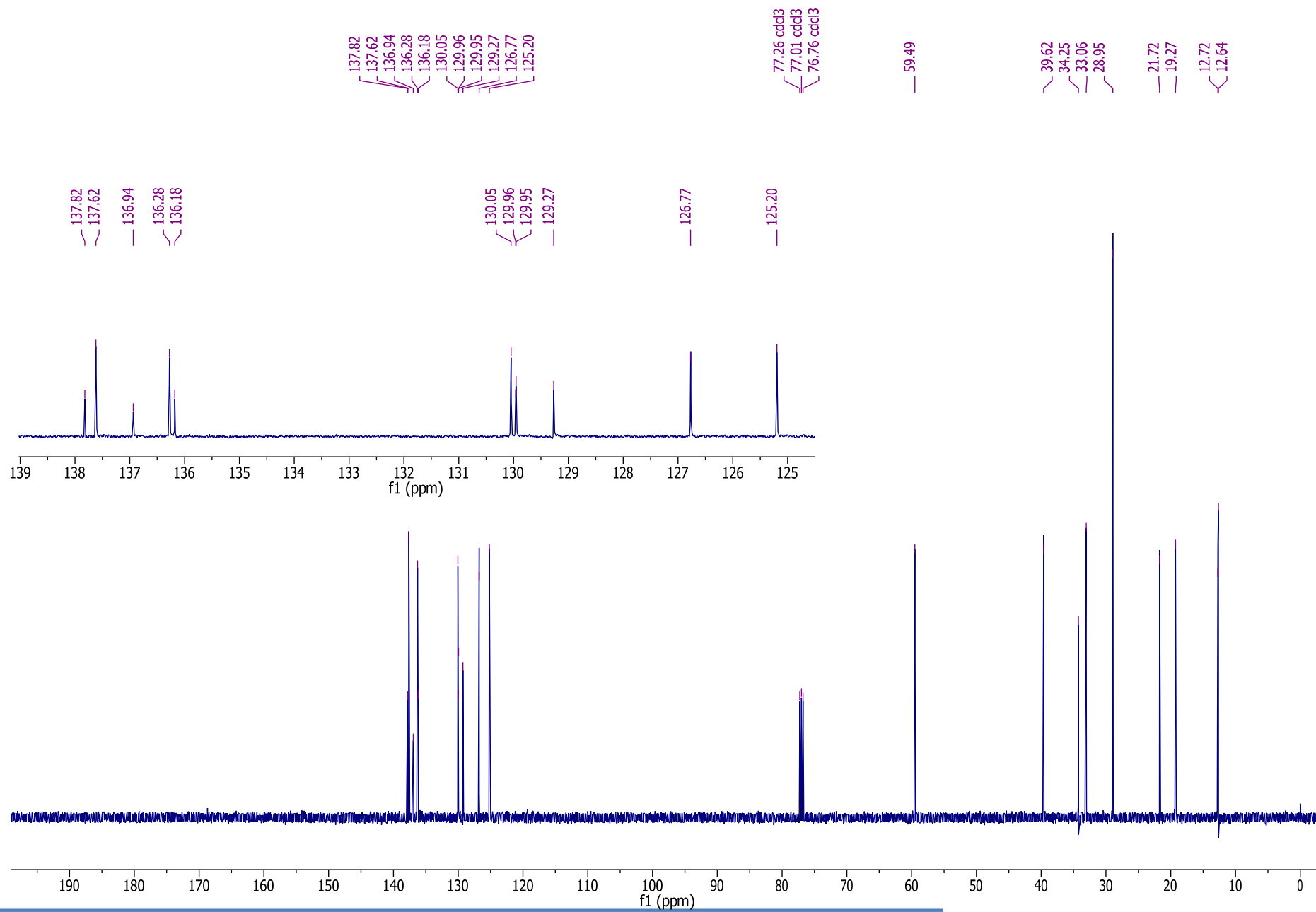


Experimento NOESY mix 500ms









Espectro carbono trece							
	ppm	Intensidad	Anchura	Área	Tipo	Marcas	Impureza/Compuesto
1	137.82	130.7	0.67	294.58	Compound	Ninguno	
2	137.62	393.3	1.00	1232.57	Compound	Ninguno	
3	136.94	85.4	1.61	411.69	Compound	Ninguno	
4	136.28	273.0	1.16	1017.47	Compound	Ninguno	
5	136.18	132.2	1.05	428.04	Compound	Ninguno	
6	130.05	268.5	0.86	740.73	Compound	Ninguno	
7	129.96	18.8	1.10	59.60	Compound	Ninguno	
8	129.95	185.8	1.87	1010.92	Compound	Ninguno	
9	129.27	162.3	0.86	413.97	Compound	Ninguno	
10	126.77	281.2	0.95	853.97	Compound	Ninguno	
11	125.20	292.5	1.09	1019.67	Compound	Ninguno	
12	77.26	130.2	2.43	1000.01	Solvent	Ninguno	cdcl3
13	77.01	130.7	2.36	990.33	Solvent	Ninguno	cdcl3
14	76.76	130.1	2.47	1030.32	Solvent	Ninguno	cdcl3
15	59.49	304.1	1.17	1143.85	Compound	Ninguno	
16	39.62	298.3	1.20	1117.83	Compound	Ninguno	
17	34.25	214.2	0.54	369.18	Compound	Ninguno	
18	33.06	177.1	1.86	905.46	Compound	Ninguno	
19	28.95	745.0	1.03	2475.82	Compound	Ninguno	
20	21.72	288.1	0.74	683.12	Compound	Ninguno	
21	19.27	303.1	1.17	1111.71	Compound	Ninguno	
22	12.72	301.3	0.75	658.42	Compound	Ninguno	
23	12.64	331.9	0.80	855.66	Compound	Ninguno	

Espectro protón					ppm	Intensidad	Anchura	Área	
	ppm	Intensidad	Anchura	Área					
1	7.26	27.1	0.55	141.09	23	2.01	34.1	1.56	688.59
2	6.64	30.1	1.51	537.06	24	1.96	261.5	1.16	3414.99
3	6.62	20.8	1.16	309.85	25	1.96	271.0	1.15	3622.10
4	6.62	20.3	1.18	297.35	26	1.87	53.9	0.72	413.26
5	6.61	36.2	1.56	636.54	27	1.86	228.4	1.15	3260.89
6	6.59	39.8	1.40	647.69	28	1.86	123.7	0.91	1439.58
7	6.30	57.8	2.12	1335.12	29	1.86	174.1	0.94	2011.13
8	6.27	48.1	1.94	1028.25	30	1.86	46.1	0.53	314.23
9	6.12	72.6	0.89	756.07	31	1.71	68.2	0.70	609.61
10	6.12	92.4	1.01	1159.57	32	1.71	293.2	0.91	3411.41
11	6.09	72.7	1.75	1632.83	33	1.71	280.8	0.80	2884.01
12	5.70	10.0	1.60	195.65	34	1.71	73.0	0.66	619.79
13	5.70	11.3	1.71	247.91	35	1.61	59.2	1.77	1196.11
14	5.69	9.2	1.45	170.28	36	1.60	59.9	1.39	1046.60
15	5.69	20.2	1.73	443.96	37	1.48	103.6	1.13	1448.34
16	5.68	23.9	1.90	566.37	38	1.47	55.2	1.17	799.24
17	5.68	10.6	1.64	224.18	39	1.47	42.4	1.15	628.43
18	5.67	10.3	1.92	257.65	40	1.46	42.1	1.22	631.91
19	5.67	11.3	1.97	279.30	41	1.45	68.7	1.22	1079.71
20	4.31	104.7	2.08	2296.31	42	1.02	1308.5	0.86	13894.88
21	4.30	103.7	1.93	2572.87	43	-0.00	104.1	0.32	404.49
22	2.01	38.8	1.79	893.70					

Integraciones	Rango	Normalizado	Absoluto
1	1.49 .. 1.44	2.16	4985.13
2	1.04 .. 1.00	5.94	13683.46
3	6.66 .. 6.57	1.00	2304.30
4	6.32 .. 6.25	1.00	2308.96

5	6.21 .. 6.05	3.10	7140.08
6	5.72 .. 5.65	1.01	2324.28
7	4.33 .. 4.28	2.04	4689.45
8	2.03 .. 1.99	2.07	4771.64
9	1.98 .. 1.94	3.03	6992.03
10	1.89 .. 1.84	3.01	6927.52
11	1.73 .. 1.69	3.04	6998.82
12	1.65 .. 1.58	2.12	4884.46
13	7.36 .. 7.16	0.06	142.80