La NMR è utilizzata per determinare la struttura di una molecola. Misura la frequenza di risonanza di un nucleo rispetto a un campo magnetico di riferimento. Funziona solo con nuclei con protoni o neutroni dispari (per avere spin).

Da informazioni riguardanti la **distribuzione elettronica intorno al nucleo** (in questo caso dell’H).

I **protoni ruotano su sé stessi**, **creando un campo magnetico**, gli **elettroni si legano** a uno dei due campi magnetici, se si legano a quelli opposti del protone si ha energia più alta.

Gli elettroni fanno da schermo in base a **quanto campo magnetico** assorbono: per calcolare quanto assorbe (e quindi **fa da scudo**), si calcola prima per una molecola simmetrica standard: TMS.

Lo shift è espresso come ppm: part per million.

* Deshielding: valori di ppm alti indicano zone in cui gli elettroni sono respinti dal nucleo, a causa di gruppi elettronegativi.
* Shielding: valori bassi di ppm indicano zone di schermatura. La densità elettronica intorno al nucleo è alta, quindi gli elettroni creano i loro mini campi magnetici

Sottostima dell’ del gruppo : parlando con Primi ha detto che potrebbe essere perché il gruppo è più elettronegativo rispetto agli altri gruppi dell’etanolo, e quindi è più influenzato dagli effetti del campo elettrico. In più attrae a sè gli elettroni. Quindi in generale il calcolo per l’NMR del gruppo è più complesso.

Quindi ho pensato di includere l’effetto del solvente, col PCM. Infatti, col solvente si modellano le interazioni elettrostatiche e la formazione degli hydrogen bond nel gruppo OH a causa della costante dielettrica.