

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA
ESCUELA DE QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA
CURSO: QUÍMICA ORGÁNICA V

Federico Tzunux Tzoc - 201604214
Jr Saul Rafael Aguilar Alva - 201322406
Axel G. Juárez Betancourth - 201214375
Christa Melisa Lemus Lucas - 201712593

Fecha: 01/10/2020

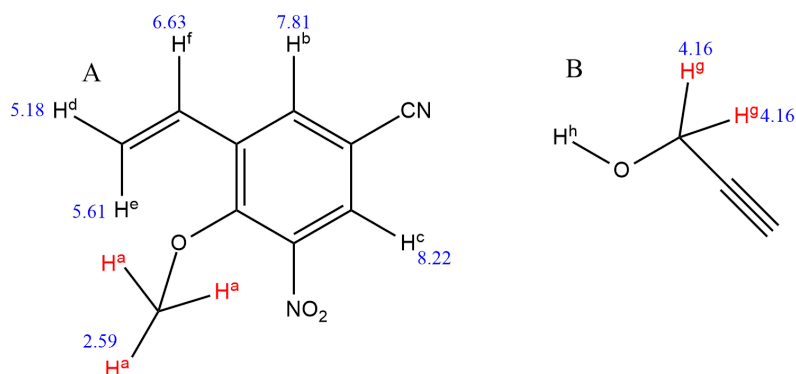
Tarea laboratorio teórico RMN 1

Instrucciones:

Esta es una tarea ejercicio de laboratorio teórico, que se deberá desarrollar en los grupos establecidos, atienda las instrucciones de cada problema a realizar, hay un total de dos problemas con varios ítems cada uno. Como principal objetivo quisiera que no se dividan el trabajo entre los integrantes, sino que lo vayan haciendo juntos para que, si uno entiende algo y otro no, en ese momento puede resarcir su duda. No coloque ningún espectro.

Entregar en PDF con el primer nombre de cada uno, seguido de tarea RMN1.

1. A continuación, se presentan dos estructuras moleculares orgánicas, de las cuales deberán realizar lo siguiente (para RMN de ^1H):

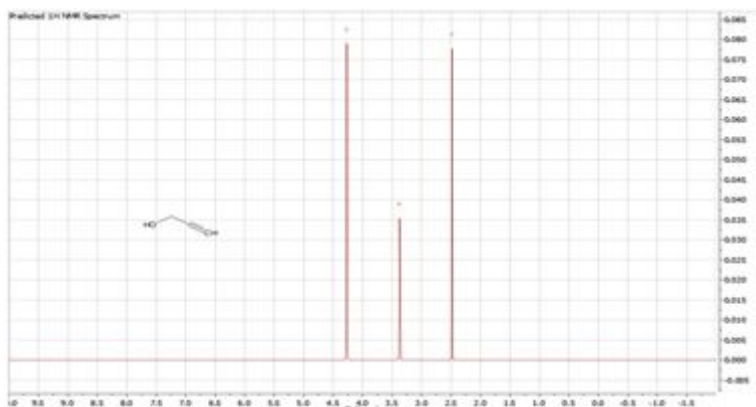
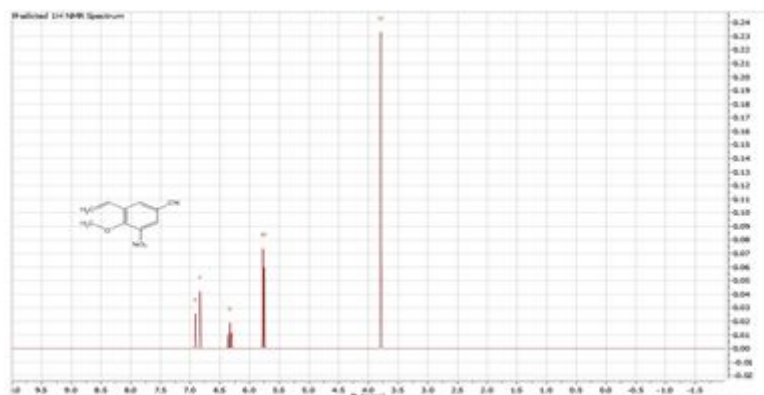


- a. Para cada compuesto (A y B) etiquetar o identificar cada grupo de H equivalentes.
Para el compuesto A y B, los H químicamente equivalentes son los mostrados en rojo.

- b. Con cada núcleo etiquetado, calcular los desplazamientos según la regla de Shollery.

Los valores calculados para cada H se indican en cada estructura correspondiente.

- c. Luego predigan el espectro utilizando el software de RMN.



- d. Hagan una tabla comparando las diferencias.

	Calculado con reglas de Shoolery	Calculados con MestReNova
Estructura A		
H ^a	2.59	3.80
H ^b	7.81	6.90
H ^c	8.22	6.80
H ^d	5.18	5.77
H ^e	5.61	5.77
Estructura B		
H ^g	4.16	4.25

- e. Expliquen cada desdoblamiento, ¿Por qué se da?

El desdoblamiento entre H^f y H^d en la molécula A se da debido a que los espines magnéticos de estos hidrógenos interactúan.

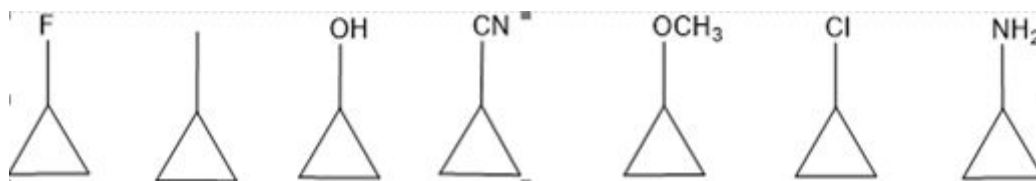
El desdoblamiento entre H^h y H^g en la molécula B se da debido a que los espines magnéticos de estos hidrógenos interactúan.

- f. Calcule las constantes de acoplamiento donde aplique para cada señal de H.

$$J_{df}=J_{fd}=9 \text{ Hz}$$

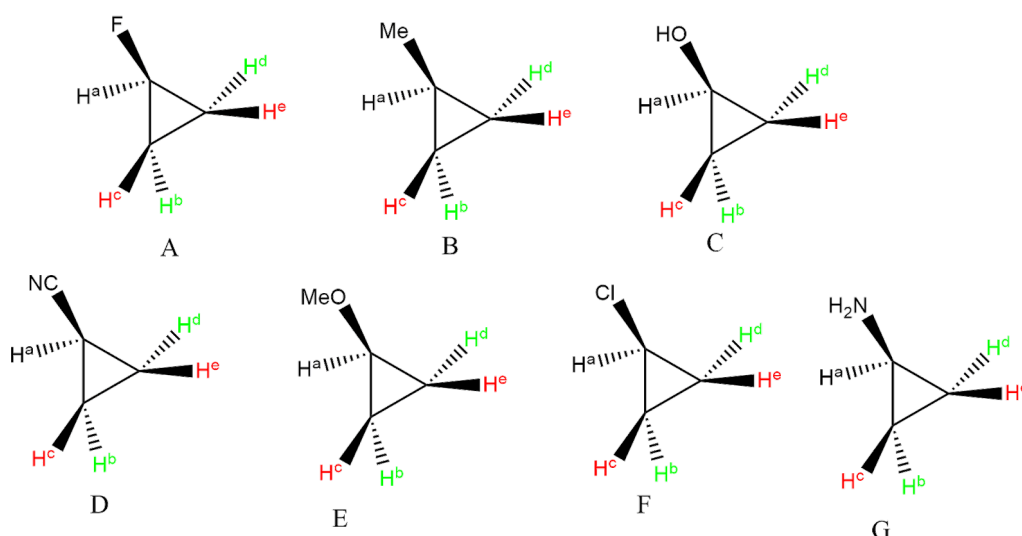
$$J_{gh}=J_{hg}=3 \text{ Hz}$$

2. Para el siguiente problema, considere la siguiente serie de compuestos derivado de ciclopropano, de los cuales deberán hacer lo que se pide a continuación, con respecto a RMN de ^1H :



- a. Etiqueten cada compuesto para poder identificarlo posteriormente y etiqueten o numeren cada tipo de protón equivalente.

Los protones equivalentes para cada estructura se muestran del mismo color en la figura siguiente.



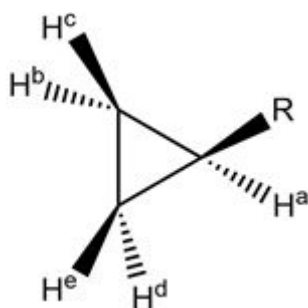
b) Busquen en tablas los valores para cada derivado de ciclopropano para cada señal de ciclopropano, de los cuales deberán hacer lo que se pide a continuación, con respecto a RMN de ^1H :

Los datos encontrados se muestran en la columna 2.

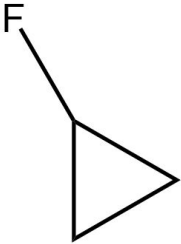





c) Generen o predigan los valores para cada derivado de ciclopropano, utilizando software de RMN.


Los datos generados se muestran en la columna 3.

d) Realicen una tabla, en la primera columna agregan cada ciclopropano (uno en cada fila), en la segunda columna colocan los datos de tablas, en la tercera columna colocan los datos generados por el software, en la cuarta columna agreguen la diferencia entre el calculado por tablas y el generado por software, indicar también si cada señal es señal simple, doble, triple, doble de dobles, etc.



Compuesto	Tabla(T)	Software(S)	Diferencia (S-T)	Tipo de señal
A	$\text{H}^a=4.32$	$\text{H}^a=4.34$	$\Delta=0.02$	$\text{H}^a=\text{quintuplete}$

	$H^{b,d}=0.69$ $H^{c,e}=0.27$ $H^R=--$	$H^{b,d}=0.50$ $H^{c,e}=0.50$ $H^R=$	$\Delta=-0.19$ $\Delta=0.23$ $\Delta=--$	$H^{b,d}$ =cuatriplete $H^{c,e}$ =cuatriplete $H^R=--$
<p>B</p> 	$H^a=1.00$ $H^{b,d}=0.35$ $H^{c,e}=0.15$ $H^R=--$	$H^a=1.66$ $H^{b,d}=0.70$ $H^{c,e}=0.80$ $H^R=0.91$	$\Delta=0.66$ $\Delta=0.35$ $\Delta=0.65$	H^a = señal múltiple $H^{b,d}$ = cuatriplete $H^{c,e}$ = cuatriplete H^R =doble
<p>C</p> 	$H^a=3.35$ $H^{b,d}=0.40$ $H^{c,e}=0.48$ $H^R=--$	$H^a=4.00$ $H^{b,d}=0.65$ $H^{c,e}=0.65$ $H^R=3.26$	$\Delta=0.65$ $\Delta=0.25$ $\Delta=0.17$	H^a = quintuplete $H^{b,d}$ = cuatriplete $H^{c,e}$ = cuatriplete H^R =doble
<p>D</p> 	$H^a=1.29$ $H^{b,d}=0.96$ $H^{c,e}=1.04$ $H^R=--$	$H^a=1.7$ $H^{b,d}=0.7$ $H^{c,e}=0.8$ $H^R=--$	$\Delta=0.41$ $\Delta=-0.26$ $\Delta=-0.24$	H^a =quintuplete $H^{b,d}$ =cuatriplete $H^{c,e}$ =cuatriplete $H^R=--$
<p>E</p> 	$H^a=1.57$ $H^{b,d}=0.47$ $H^{c,e}=0.22$ $H^R=--$	$H^a=2.85$ $H^{b,d}=1.4$ $H^{c,e}=1.2$ $H^R=3.3$	$\Delta=1.28$ $\Delta=0.93$ $\Delta=0.98$	H^a =quintuplete $H^{b,d}$ =cuatriplete $H^{c,e}$ =cuatriplete H^R =simple
<p>F</p> 	$H^a=2.55$ $H^{b,d}=0.87$ $H^{c,e}=0.74$ $H^R=--$	$H^a=4.25$ $H^{b,d}=1.25$ $H^{c,e}=1.25$ $H^R=$	$\Delta=1.7$ $\Delta=0.38$ $\Delta=0.51$	H^a =quintuplete $H^{b,d}$ =cuatriplete $H^{c,e}$ =cuatriplete $H^R=--$

<p>G</p> 	$H^a=2.23$	$H^a=2.75$	$\Delta=0.52$	$H^a=\text{quintuplete}$
	$H^{b,d}=0.32$	$H^{b,d}=0.9$	$\Delta=0.58$	$H^{b,d}=\text{doblete}$
	$H^{c,e}=0.20$	$H^{c,e}=0.9$	$\Delta=0.7$	$H^{c,e}=\text{doblete}$
	$H^R=--$	$H^R=1.56$		$H^R=\text{simple}$

e) ¿Hay H diasterotópicos? Explique.

Sí hay H diasterotópicos, como se puede observar en la figura siguiente para el caso de la ciclopropilamina. Donde el par rojo-rojo y negro-negro son entiómeros entre sí, mientras que los pares rojo-negro son diaterómeros entre sí.

