

13-60 Η ένωση A, ένας υδρογονάνθρακας με $M^+ = 96$ στο φάσμα μαζών του, διαθέτει τα φασματοσκοπικά δεδομένα ^{13}C NMR που δίνονται παρακάτω. Κατά την αντίδρασή της με BH_3 ακολουθούμενη από κατεργασία με βασικό διάλυμα H_2O_2 , η A μετατρέπεται στην ένωση B, της οποίας τα φασματοσκοπικά δεδομένα του ^{13}C επίσης δίνονται. Προτείνετε δομές για τις ενώσεις A και B.

Ένωση A

Αποσυζευγμένο φάσμα ευρείας ζώνης ^{13}C NMR: 26,8 - 28,7 - 35,7 - 106,9 - 149,7 δ

DEPT-90: δεν εμφανίζονται κορυφές

DEPT-135: καμία θετική κορυφή και αρνητικές κορυφές στα 26,8 - 28,7 - 35,7 - 106,9 δ

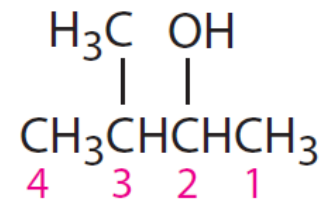
Ένωση B

Αποσυζευγμένο φάσμα ευρείας ζώνης ^{13}C NMR: 26,1 - 26,9 - 29,9 - 40,5 - 68,2 δ

DEPT-90: 40,5 δ

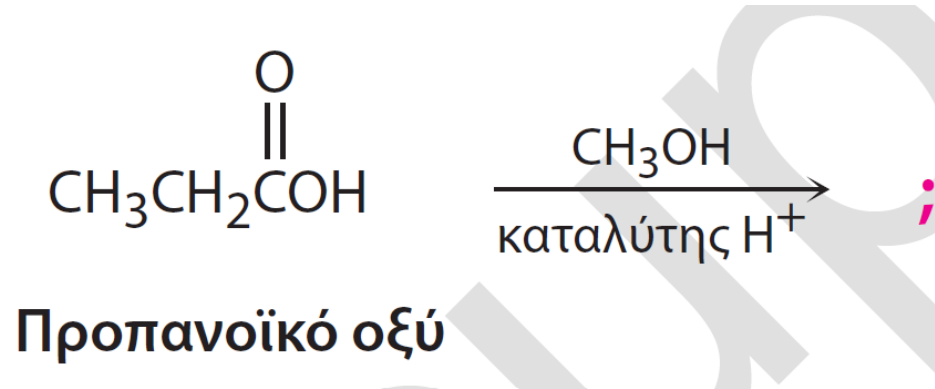
DEPT-135: θετική κορυφή στα 40,5 δ και αρνητικές κορυφές στα 26,1 - 26,9 - 29,9 - 68,2 δ

13-65 Η 3-μεθυλο-2-βουτανόλη εμφανίζει πέντε κορυφές στο φάσμα ^{13}C NMR, στα 17,9 - 18,15 - 20,0 - 35,05 και 72,75 δ. Γιατί τα δύο μεθύλια που συνδέονται στον C3 δεν είναι ισοδύναμα;



3-Μεθυλο-2-βουτανόλη

13-67 Τα καρβοξυλικά οξέα (RCO₂H) αντιδρούν με αλκοόλες (ROH) παρουσία ενός όξινου καταλύτη. Το προϊόν της αντίδρασης του προπανοϊκού οξέος με τη μεθανόλη εμφανίζει τα παρακάτω φασματοσκοπικά δεδομένα. Προτείνετε μια δομή.



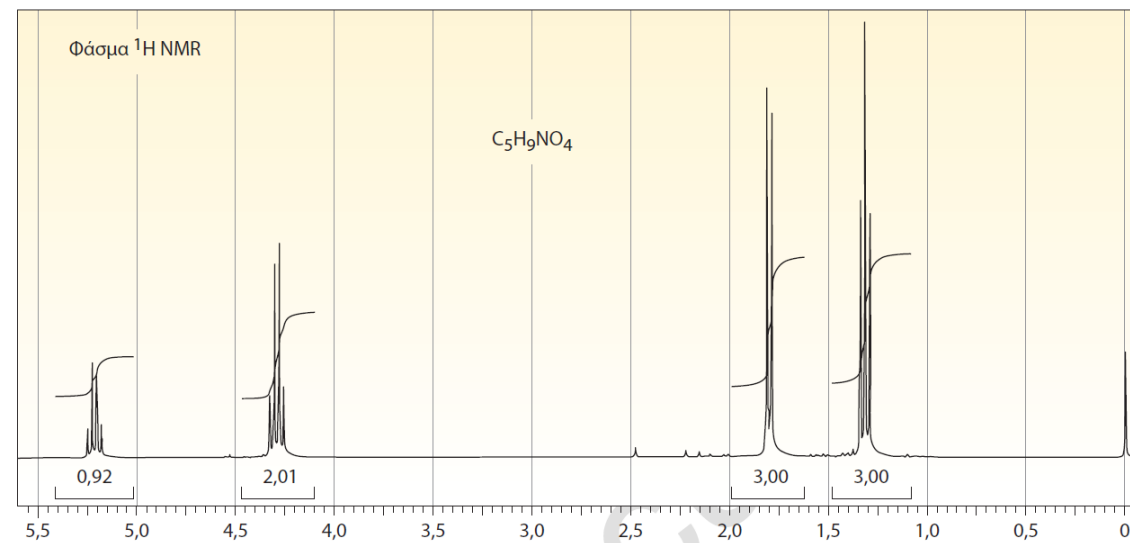
MS: M⁺ = 88

IR: 1.735 cm⁻¹

¹H NMR: 1,11 δ (3 H, τριπλή, J = 7 Hz) - 2,32 δ (2 H, τετραπλή, J = 7 Hz) - 3,65 δ (3 H, απλή)

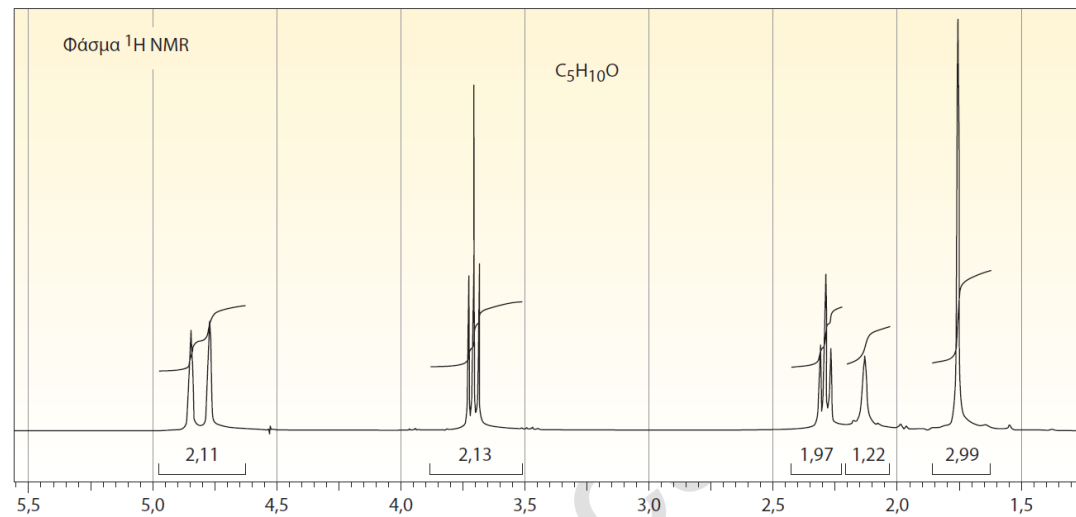
¹³C NMR: 9,3 - 27,6 - 51,4 - 174,6 δ

13-69 Παρακάτω παρατίθεται το φάσμα ^1H NMR για μια ένωση με μοριακό τύπο $\text{C}_5\text{H}_9\text{NO}_4$. Στο φάσμα υπερώθρου υπάρχουν ισχυρές ταινίες απορρόφησης στα 1750 και 1562 cm^{-1} και μία μέσης έντασης στα 1320 cm^{-1} . Τα δεδομένα του φάσματος ^{13}C NMR και των πειραμάτων DEPT παρατίθενται στον πίνακα. Σχεδιάστε τη δομή αυτής της ένωσης.



Απορροφήσεις ^{13}C NMR	DEPT-135	DEPT-90
14 ppm	Θετική κορυφή	Καμία κορυφή
16	Θετική κορυφή	Καμία κορυφή
63	Αρνητική κορυφή	Καμία κορυφή
83	Θετική κορυφή	Θετική κορυφή
165	Καμία κορυφή	Καμία κορυφή

13-70 Παρακάτω παρατίθεται το φάσμα ^1H NMR για μια ένωση με μοριακό τύπο $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$. Τα δεδομένα του φάσματος ^{13}C NMR και των πειραμάτων DEPT παρατίθενται στον πίνακα. Στο φάσμα υπέρυθρου υπάρχει μία ευρεία ταινία απορρόφησης περίπου στα 3.340 cm^{-1} και μία κορυφή μέσης έντασης στα 1.651 cm^{-1} . Σχεδιάστε τη δομή αυτής της ένωσης



Απορροφήσεις ^{13}C NMR	DEPT-135	DEPT-90
22,2 ppm	Θετική κορυφή	Καμία κορυφή
40,9	Αρνητική κορυφή	Καμία κορυφή
60,2	Αρνητική κορυφή	Καμία κορυφή
112,5	Αρνητική κορυφή	Καμία κορυφή
142,3	Καμία κορυφή	Καμία κορυφή