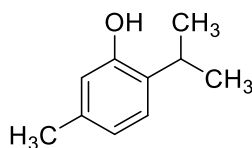


## MOLÈCULA Nº 1: TIMOL



**1. Es tracta d'un producte natural que forma part de diferents olis essencials propis de plantes d'ús comú.**

Les mescles de substàncies que formen part del material amb fragància de les plantes s'anomenen olis essencials (essencial com adjectiu d'essència). El **timol** (2-isopropil-5-metilfenol) és un compost incolor que està present a la natura en els olis essencials de la farigola i l'orenga, entre d'altres.

**2. És un monoterpè present en olis ja utilitzats des de les civilitzacions més antigues com bactericida.**

Amb molta freqüència, el principal component volàtil d'un oli essencial pertany a la família dels terpens. La propietats estructurals que distingeixen als terpens d'altres productes naturals és que aquests estan formats per unitats de cinc àtoms de carboni anomenada isoprè. Durant la biosíntesi dels terpens, les unitats d'isoprè s'uneixen de manera que el cap d'una unitat d'isoprè es connecta amb la cua de la següent (Regla de l'isoprè, proposada per Leopold Ruzicka).



Els terpens es classifiquen un funció del nombre d'unitats d'isoprè que contenen. Així els monoterpens contenen dos unitats (es a dir 10 àtoms de carboni, com el timol), els sesquiterpens 3, els diterpens 4, els triterpens 6, etc.

Els antics egipcis ja empraven l'oli essencial de la farigola en la conservació de les mòmies, ja que el timol té propietats bactericides. A la Grècia Antiga, es cremava la farigola a manera d'encens davant els altars dels déus.

**3. L'espectre infraroig del compost en CCl<sub>4</sub> és el següent:**

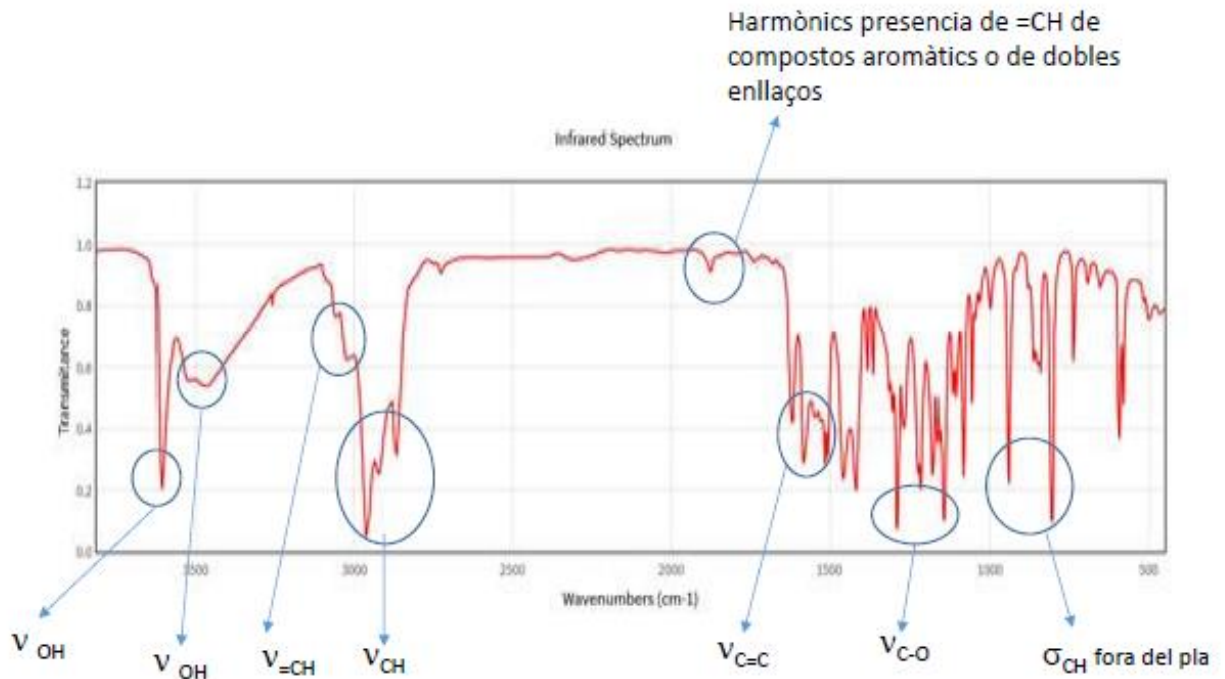
L'espectre infraroig permet descartar molts grups funcionals que no estan presents al timol:

- àcids carboxílics: absència de la banda ampla de  $\nu_{OH}$  centrada a  $3000\text{ cm}^{-1}$  i absència de bandes de tensió del grup carbonil cap a  $1700\text{ cm}^{-1}$ .
- Cetones, aldehids, amides, esters, halurs d'àcid, lactones, lactames, anhídrids poden descartar-se per absència de la banda de  $\nu_{CO}$  (que és molt intensa per la polaritat de l'enllaç que vibra, el C=O) entre  $1650\text{-}1800\text{ cm}^{-1}$ .

L'espectre aporta la següent informació:

- Presència d'un grup hidroxil:
  - o Banda aguda a  $3600\text{ cm}^{-1}$ :  $\nu_{OH}$  lliure
  - o Banda ampla cap a  $3400\text{ cm}^{-1}$ :  $\nu_{OH}$  associat
  - o Bandes intenses cap a  $1200, 1350\text{ cm}^{-1}$ :  $\nu_{C-O}$ . Aquestes bandes que es troben en la zona de les empremtes dactilars (per sota de  $1500\text{ cm}^{-1}$ ) són de difícil assignació per la complexitat de la zona, però en serveixen per confirmar la informació de la zona

dels grups funcionals per damunt de  $1500\text{ cm}^{-1}$ . En aquest cas, com l'enllaç C-O és molt polar, les bandes són molt intenses i fàcilment assignables.

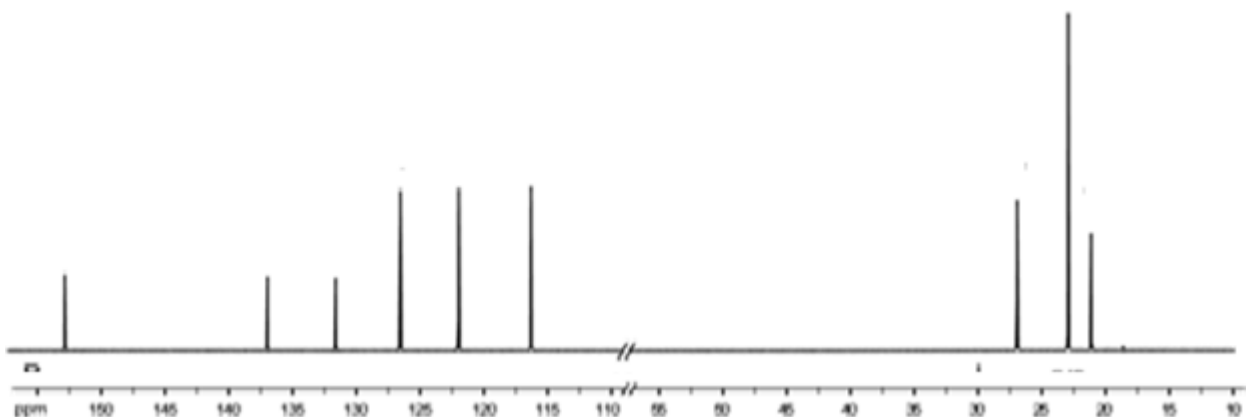


- Presència d'un anell aromàtic
  - Bandes entre  $3080\text{-}3030\text{ cm}^{-1}$ :  $\nu_{\text{=CH}}$  (tensió H-Csp<sup>2</sup>).
  - Bandes d'harmònics entre  $2000\text{-}1700\text{ cm}^{-1}$ .
  - Bandes a  $1600, 1500\text{ cm}^{-1}$ :  $\nu_{\text{C=C}}$  (tensió del doble enllaç C=C).
  - Bandes intenses entre  $900\text{-}700\text{ cm}^{-1}$ :  $\sigma_{\text{CH}}$  (bandes de flexió de l'enllaç C-H aromàtic fora del pla).

La presència d'un anell aromàtic s'ha de confirmar per la presència de bandes en aquestes 4 zones.

- Presència d'una cadena alifàtica
  - Bandes a menys de  $2900\text{ cm}^{-1}$  corresponents a  $\nu_{\text{CH}}$  (tensió H-Csp<sup>3</sup>).

**4. L'espectre de RMN de <sup>13</sup>C (totalment desacoblat) de la mostra dissolta en CDCl<sub>3</sub> és el següent:**



A l'espectre s'observen tres senyals corresponents a carbonis alifàtics a desplaçaments inferiors a 30 ppm. En conjunt a l'espectre només s'aprecien 9 senyals quan la pista 2 confirma que es tracta d'un compost

amb 10 àtoms de carboni. Així doncs, malgrat que en RMN de  $^{13}\text{C}$  la intensitat dels senyals no és proporcional al nombre de carbonis que hi participen, el senyal més intens a aproximadament 23 ppm, ha de correspondre als carbonis dels dos grups metil del grup isopropil, que són químicament equivalents. Els senyals entre 115 i 155 ppm corresponen als 6 carbonis aromàtics, el que ens confirma la presència d'un anell aromàtic, com es constata a l'espectre d'IR.

Degut a l'efecte NOE, els senyals dels carbonis tipus "CH" és superior al dels carbonis tipus "C" (tetrasubstituïts amb grups diferents d'hidrogen). Així doncs, els tres senyals més intensos corresponen als tres CH de l'anell, mentre que els menys intensos corresponen als carbonis de l'anell que estan units a un substituent. Es tracta, per tant, d'un compost amb un anell aromàtic trisubstituït. El senyal a desplaçaments més alts correspon al carboni unit a l'oxigen del fenol, que estarà més desapantallat.

**5. Es troba present en una planta molt aromàtica, àmpliament emprada en gastronomia i que tenim plantada al jardí de la Facultat.**



El timol dona a la farigola la seva aroma distintiva. La farigola és una petita planta llenyosa, que es distingeix dels arbustos en la disposició de les branques arran de terra i la seva altura menor, ja que no sol superar els trenta centímetres d'alçada.