

# TEMA 10

## ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO-13. ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL

### Contenidos

- 10.1. Introducción (págs. 371-372)
- 10.2. Técnicas de desacoplamiento. Efecto NOE (págs 373-378)
  - 10.2.1. Efecto NOE
  - 10.2.2. Desacoplamiento de banda ancha
  - 10.2.3. Desacoplamiento parcial (off-resonance)
- 10.3. Correlaciones desplazamiento-estructura (págs 378-390)
  - 10.3.1. Alcanos
  - 10.3.2. Compuestos alicíclicos
  - 10.3.3. Alquenos y alquinos
  - 10.3.4. Compuestos aromáticos
  - 10.3.5. Compuestos carbonílicos
- 10.4. Constantes de acoplamiento  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  (págs 390-392)
- 10.5. Aplicación de la RMN de carbono-13 a la elucidación estructural (págs 392-397)

### Planteamiento del Tema

Las espectroscopías de protón y carbono-13 son dos técnicas complementarias cuyo conocimiento y aplicaciones conjuntas constituyen la columna vertebral del análisis estructural.

Se inicia el tema exponiendo las ventajas e inconvenientes que presenta la espectroscopía de  $^{13}\text{C}$  frente a la de  $^1\text{H}$ . Entre las ventajas, pueden citarse: a) proporciona una información más directa sobre el esqueleto hidrocarbonado de la molécula; b) el intervalo de aparición de las señales en la escala  $\delta$  es mucho

mayor (>200 ppm), lo que minimiza el problema de la isocronía casual, frecuente en  $^1\text{H}$ -RMN; c) permite el reconocimiento directo de algunos grupos funcionales. Sin embargo, también presenta algunos inconvenientes: a) no permite diferenciar la posición relativa de los carbonos entre sí, pues debido a la baja abundancia del  $^{13}\text{C}$  no se observan acoplamientos entre carbonos; b) no proporciona información segura sobre conformaciones moleculares; c) la intensidad de las señales de  $^{13}\text{C}$  es menor, debido a que la constante giromagnética también lo es, así como la abundancia relativa del isótopo.

A continuación, se explica el efecto nuclear Overhauser (NOE) que está íntimamente relacionado con las técnicas de desacoplamiento que se utilizan para el registro de un espectro de carbono-13.

La técnica de desacoplamiento parcial (off-resonance) permite observar los acoplamientos entre los núcleos de  $^{13}\text{C}$  y los protones unidos directamente a ellos y, por tanto, hace posible diferenciar carbonos cuaternarios (singletes), terciarios (dobletes), secundarios (tripletes) y primarios (cuadrupletes) en base a su multiplicidad. A este respecto, es muy importante que el estudiante examine con detenimiento los espectros del etilbenceno mostrado en la pág. 378.

Un aspecto muy importante de este tema lo constituyen las correlaciones entre el desplazamiento químico de las señales correspondientes a los núcleos de  $^{13}\text{C}$  y la estructura molecular, ya que su conocimiento permite la aplicación práctica a casos concretos de determinación estructural. Estas correlaciones, tomando como base series de alcanos y derivados, compuestos alicíclicos, alquenos, alquinos, compuestos aromáticos y compuestos carbonílicos, serán también objeto de estudio.

Al igual que ocurría en espectroscopía de RMN de  $^1\text{H}$ , junto con los desplazamientos químicos, las constantes de acoplamiento de los átomos de carbono con los de hidrógeno, unidos directamente a ellos o a través de varios enlaces, proporcionan una información muy valiosa tanto desde el punto de vista teórico como del analítico. Por ello, se estudiarán los factores que afectan al valor de las constantes de acoplamiento  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$ .

Finalmente, se estudiarán dos ejemplos prácticos de elucidación estructural en los que se explicarán detalladamente los pasos a seguir para la interpretación de un espectro de  $^{13}\text{C}$ -RMN. Es muy importante que el estudiante lea con detenimiento estos pasos y examine con detenimiento los espectros problema que se muestran en las págs. 393 y 396.

Además de los resultados de aprendizaje generales que se persiguen con el estudio de este Bloque Temático, los resultados de aprendizaje asociados a este Tema son:

- Conocer las principales ventajas e inconvenientes de la Espectroscopía de  $^{13}\text{C}$  frente a la de  $^1\text{H}$ .
- Conocer el tipo de información estructural que proporciona la Espectroscopía de  $^{13}\text{C}$ .
- Comprender el establecimiento de correlaciones espectro-estructura.
- Aplicar de manera práctica los conocimientos adquiridos a la elucidación estructural de moléculas sencillas.