

TEMA 9

ESPECTROSCOPÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR: ACOPLAMIENTOS PROTÓN-PROTÓN Y SISTEMAS DE ESPINES

Contenidos

- 9.3. Multiplicidad de las señales (págs. 235-240)
- 9.4. Constante de acoplamiento (págs. 241-242)
 - 9.4.1. Constante de acoplamiento ^1H - ^1H geminal (2J) (págs. 300-302)
 - 9.4.2. Constante de acoplamiento ^1H - ^1H vecinal (3J) (págs. 302-310)
- 9.5. Interacción espín-espín. Núcleos equivalentes (págs. 263-267)
- 9.6. Espectros de primer orden (págs. 267-271)
- 9.7. Sistemas de dos o más espines (págs. 271-284)
- 9.8. Aplicación de la RMN de protón a la elucidación estructural (págs. 346-351)

Planteamiento del Tema

En este tema, se estudiará otro aspecto muy importante para la elucidación de la estructura de una molécula: la multiplicidad de las señales. En la mayoría de los espectros RMN las señales no salen como singletes, sino como multipletes, es decir, desdobladas. Este desdoblamiento se origina por interacción de los estados de espín de un tipo de protones con los de otros y viceversa (interacciones espín-espín), de manera que la separación entre los picos de una señal se llama constante de acoplamiento, se representa por J y es independiente del campo aplicado. Así pues, se estudiará: la constante de acoplamiento geminal y vecinal entre protones; la equivalencia de núcleos; los espectros de primer orden; y los sistemas de dos o más espines. Para una mejor comprensión de estos conceptos es imprescindible que el estudiante examine con detenimiento (y lea las explicaciones dadas en el texto para ellos) los

espectros RMN que se muestran como ejemplos en las págs. 236 (etanol), 274 (5-metilfurfural), 277 (fenilacetaldehído), 279 (óxido de estireno), 281 (ácido 2,3-dicloropropiónico) y 283 (*p*-metoxiacetofenona).

Finalmente, en el apartado 9.8. se presentan dos ejemplos prácticos de aplicación de la ^1H -RMN a la elucidación estructural. El estudiante deberá examinar con detalle los espectros problema que se muestran en las páginas 347 y 349 y leer con detenimiento el procedimiento de análisis de éstos (asignación de señales en base a desplazamiento químico y multiplicidad, relación de protones dada por la integral, cálculo teórico del desplazamiento químico de acuerdo con las tablas, etc.) con objeto de aprender a extraer la máxima información posible de ellos para poder elucidar la estructura de las moléculas estudiadas.