

RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS ESTRUCTURALES POR COMBINACIÓN DE MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS.

Para elucidar la estructura por combinación de métodos espectroscópicos se debe de proceder de la siguiente manera:

1. Determinar el peso molecular a partir del espectro de Masas.
2. Determinar el número relativo de protones diferentes en el espectro de ^1H RMN.
3. Determinar el número de carbonos diferentes e identificar los carbonos cuaternarios, grupos metínicos, grupos metilénicos y grupos metilo
5. Examinar y determinar la formula molecular y el grado de insaturaciones.

Una vez realizadas estas operaciones se examinarán en detalle los diferentes espectros:

1. Estudiar el espectro IR para identificar la presencia o ausencia de grupos funcionales como por ejemplo grupos carbonílicos $\text{C}=\text{O}$; grupos hidroxilo $\text{HO}-$; grupos amino NH ; grupos alquino $\text{C}\equiv\text{C}$ o grupos nitrilo $\text{C}\equiv\text{N}$; etc.
2. Examinar las fragmentaciones típicas del espectro de Masas como por ejemplo: $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2$; $\text{CH}_3\text{CO}-$; CH_3- ; etc.
3. Examinar el espectro de ^1H RMN para identificar los grupos CH_3- ; los grupos CH_2CH_3 , los protones aromáticos; los grupos $-\text{CH}_n\text{X}$; los protones intercambiables; etc.

Posteriormente con la información obtenida de los análisis anteriores se debe proceder como sigue:

1. Escribir los elementos estructurales que hemos determinado. Se ha de considerar que si la estructura es mono funcional, este debe localizarse al final de las cadenas carbonadas como $-\text{CH}_3-$; $-\text{C}\equiv\text{N}$; NO_2 . También puede ser bifuncional como $-\text{CO}-$; $-\text{CH}_2-$; $-\text{COO}-$ ó trifuncional como CH ; N .

Se anclan todos los grupos funcionales en la cadena y se compara con la formula molecular obtenida. Si existen diferencias con la formula molecular puede ser debido a la presencia de elementos distintos al carbono como el Oxígeno..

2. Una vez identificados los elementos estructurales estos pueden estar relacionados entre si de diferentes maneras, para lo que es importante analizar los acoplamientos espin-espin que nos dan una idea de la conectividad.
3. Se vuelven a analizar los diferentes espectros: IR; Masas; ^1H RMN y ^{13}C RMN y se comprueba que están todos los datos de acuerdo y son consistente con la estructura propuesta.