

## TEMA 8

# ESPECTROSCOPÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR: FUNDAMENTOS FÍSICOS Y DESPLAZAMIENTOS QUÍMICOS DE PROTÓN

### Contenidos

- 8.1. Introducción (págs. 205-206)
- 8.2. El fenómeno de la resonancia magnética nuclear (págs. 206-214)
  - 8.2.1. Fundamentos físicos
  - 8.2.2. Espín nuclear y momento magnético
- 8.3. Espectrómetro de RMN (págs. 214-216)
- 8.4. Metodología de pulsos y transformada de Fourier (págs. 327-331)
  - 8.4.1. Resonancia de una muestra macroscópica. Adquisición y procesamiento de datos.
- 8.5. Desplazamiento químico (págs. 220-227)
  - 8.5.1. Factores que afectan al desplazamiento químico
- 8.6. Desplazamientos químicos de protón y estructura (págs. 227-235)

### Planteamiento del Tema

La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una de las técnicas de análisis más moderna y que más información proporciona. Constituye la más potente herramienta de que dispone el químico a la hora de elucidar la estructura de una molécula. El principal objetivo de este tema será estudiar el fenómeno de la RMN. Concretamente, se estudiará el fundamento físico y se relacionará el fenómeno de la resonancia con el momento magnético de los núcleos, así como con el número cuántico de espín nuclear, presente únicamente en aquellos núcleos que posean número atómico ( $Z$ ) y número

másico (A) impares o bien uno de ellos. Sólo los núcleos que cumplan esta condición presentarán el fenómeno de la Resonancia Magnética Nuclear.

El objetivo más importante que se persigue con el estudio de esta técnica es que los estudiantes sean capaces de extraer e interpretar la valiosa información que proporciona, a la vista de los espectros. Aunque no es de estudio obligado, se recomienda que lean el apartado 8.3, donde se esquematiza el espectrómetro de RMN. Es de destacar que en la actualidad, y dado el espectacular desarrollo de esta técnica, todos los equipos que se utilizan están constituidos por imanes superconductores, que proporcionan campos magnéticos muy intensos, habiendo quedado obsoletos los espectrómetros de imanes permanentes o electroimanes, muy limitados en cuanto a la intensidad del campo.

Debido también al espectacular desarrollo que han experimentado la electrónica y la informática en las dos últimas décadas, todos los espectrómetros de RMN en la actualidad son del tipo de transformada de Fourier y utilizan generadores de pulsos de radiofrecuencia de elevada intensidad con objeto de excitar simultáneamente todos los núcleos y abarcar todas sus frecuencias de resonancia. La adquisición de datos se lleva a cabo aplicando la transformada de Fourier al espectro inicial, dependiente del tiempo (FID = free induction decay), cuya señal analógica se digitaliza y almacena en un computador. Por medio de la transformada de Fourier se interconvierten los datos dependientes del tiempo al dominio de las frecuencias, registrándose así el típico espectro RMN. Estos conceptos serán objeto de estudio en el apartado 8.4.

Una vez estudiados el fundamento físico de la RMN y el proceso de adquisición de datos y registro del espectro, el tema continua con el primer parámetro importante para la interpretación de un espectro de RMN, el desplazamiento químico. Este se define como la posición de una señal en el espectro, expresada en función de una sustancia patrón tomada como referencia.

La frecuencia de resonancia de un núcleo aislado depende de la envoltura electrónica, es decir, de la estructura en que se halla inserto. Por

tanto, es obvio que, como dicha frecuencia viene expresada por el desplazamiento químico, éste se verá afectado por diversos factores. Aquí se considerarán solamente los más importantes: a) efectos inductivos, b) sustitución e hibridación y c) enlaces de hidrógeno.

La asignación de estructuras a partir de un espectro RMN requiere el conocimiento de la relación entre el desplazamiento químico de un determinado tipo de núcleos (por ejemplo, protones) y el grupo o grupos funcionales en los que se hallan insertos o a los que están unidos. Al final de tema se estudian estas relaciones, donde se analizará brevemente el efecto de la funcionalidad sobre diferentes tipos de protones.

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:

- Comprender el fenómeno físico y fundamento teórico de la Resonancia Magnética Nuclear.
- Conocer qué tipo de núcleos experimentarán el fenómeno de la RMN en función de su número cuántico de spin y, por tanto, de sus números atómico y másico.
- Conocer el procedimiento de adquisición de datos y registro de un espectro en el dominio de las frecuencias, por aplicación de la transformada de Fourier.
- Conocer el tipo de información que suministra un espectro RMN.
- Conocer el concepto de desplazamiento químico, los factores electrónicos y estructurales que afectan a su valor.
- Relacionar los valores de los desplazamientos químicos de los núcleos de protón con la estructura de la molécula.