

Determinación estructural: espectroscopia de resonancia magnética nuclear

La **espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN)** es la técnica espectroscópica más valiosa con que cuentan los químicos orgánicos; es el método de determinación estructural al que recurren primero los químicos.

En el capítulo 12 vimos que la espectrometría de masas da una fórmula molecular y que la espectroscopia en el infrarrojo identifica los grupos funcionales de una molécula. La espectroscopia de resonancia magnética nuclear no reemplaza ninguna de estas técnicas; en lugar de eso, las complementa "mapeando" la estructura carbonohidrógeno de una molécula. En conjunto, la espectrometría de masas, el IR y la RMN hacen posible determinar las estructuras de moléculas muy complejas.

Espectrometría de masas
Espectroscopia de infrarrojo
Espectroscopia de RMN

Tamaño y fórmula molecular
Grupos funcionales
Mapa de la estructura carbono-hidrógeno

¿POR QUÉ ESTE CAPÍTULO?

El enunciado de apertura de arriba lo dice todo: la RMN es por mucho la técnica espectroscópica más valiosa para la determinación estructural. Aunque en este capítulo sólo daremos un vistazo general del tema, enfocándonos en las aplicaciones de la RMN para moléculas pequeñas, también se utilizan técnicas más avanzadas de la RMN en la química biológica para el estudio estructural y el plegamiento de las proteínas.

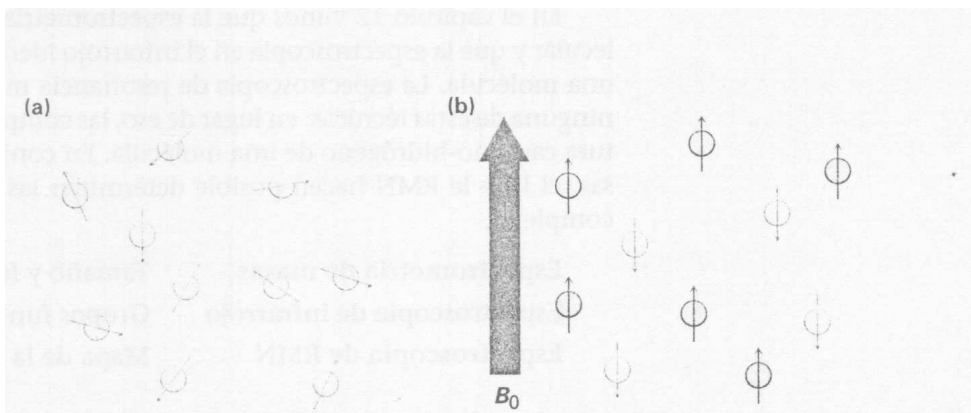
13.1 Espectroscopia de resonancia magnética nuclear

Varios tipos de núcleos atómicos se comportan como si estuvieran girando alrededor de un eje, de manera similar a como la Tierra gira a diario. Debido a que tienen carga positiva, estos núcleos giratorios actúan como pequeños imanes en forma de barra e interactúan con un campo magnético externo, denotado por B_0 .

No todos los núcleos actúan de esta manera, pero afortunadamente para los químicos orgánicos, el protón (^1H) y el núcleo ^{13}C tienen espines. (Hablando acerca de la RMN, con frecuencia las palabras *protón* e *hidrógeno* se utilizan de forma intercambiable.) Veamos cuáles son las consecuencias del espín nuclear y cómo podemos utilizar los resultados.

En ausencia de un campo magnético externo, los espines de los núcleos magnéticos se orientan al azar; sin embargo, cuando se coloca una muestra que contiene estos núcleos entre los polos de un imán poderoso, los núcleos adoptan orientaciones específicas, de manera similar a como la aguja de una brújula se orienta en el campo magnético terrestre. Un núcleo de ^1H o ^{13}C girando puede orientarse de tal manera que su propio campo magnético pequeño se alinea con (paralelo a) o contra (antiparalelo a) el campo externo; sin embargo, las dos orientaciones no tienen la misma energía y probablemente no son iguales. La orientación paralela es ligeramente menor en energía por una cantidad que depende de la fuerza del campo magnético, haciendo que este estado de espín esté muy ligeramente favorecido sobre la orientación antiparalela (figura 13.1).

Figura 13.1 (a) Los espines nucleares se orientan de manera aleatoria en la ausencia de un campo magnético externo, pero (b) tienen una orientación específica en la presencia de un campo externo, B_0 . Algunos de los espines (rojo) están alineados paralelamente al campo externo mientras que otros (azules) están antiparalelos; los estados de espín paralelos son ligeramente menores en energía y por tanto se ven favorecidos.



Si ahora se irradian los núcleos orientados con radiación electromagnética de la frecuencia apropiada, la absorción de energía ocurre y el estado de menor energía "invierte su espín" al estado de mayor energía. Cuando ocurre la inversión del espín, se dice que los núcleos magnéticos están en resonancia con la radiación aplicada —de ahí el nombre de *resonancia magnética nuclear*.

La frecuencia exacta necesaria para la resonancia depende de la fuerza del campo magnético externo y de la identidad de los núcleos. Si se aplica un campo magnético muy fuerte, es mayor la diferencia de energía entre los dos estados de espín y se requiere radiación con mayor frecuencia (mayor energía) para invertir el espín. Si se aplica un campo magnético más débil, se requiere menos energía para efectuar la transición entre los estados de espín nucleares (figura 13.2).

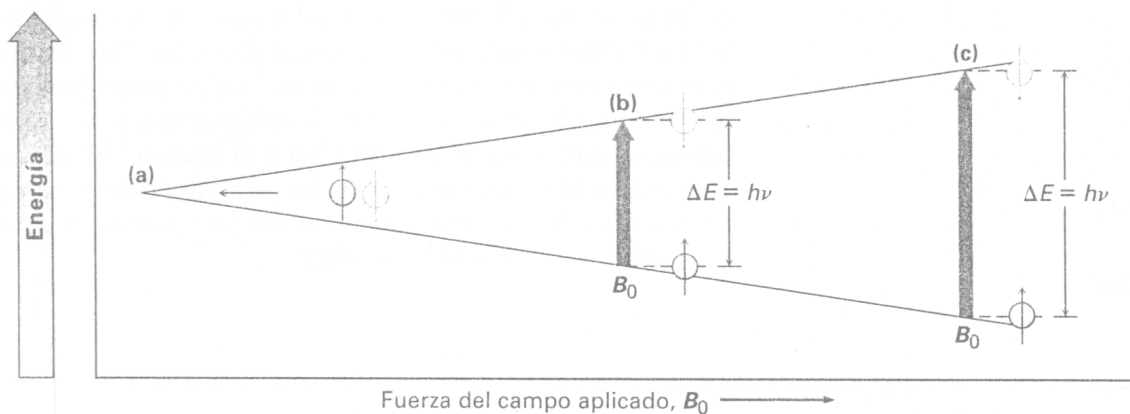


Figura 13.2 La diferencia de energía ΔE entre los estados de espín nucleares depende de la fuerza del campo magnético aplicado. La absorción de energía con frecuencia ν convierte un núcleo de un estado de espín menor a un estado de espín mayor; los estados de espín (a) tienen energías iguales en la ausencia de un campo magnético aplicado pero (b) tienen energías diferentes en la presencia de un campo magnético. En $\nu = 200$ MHz, $\Delta E = 8.0 \times 10^{-5}$ kJ/mol (1.9×10^{-5} kcal/mol). (c) La diferencia de energía entre los estados de espín es mayor en los campos mayores aplicados. En $\nu = 500$ MHz, $\Delta E = 2.0 \times 10^{-4}$ kJ/mol.

En la práctica, algunas veces se utilizan imanes superconductores que producen campos enormemente poderosos de hasta 21.2 tesla (T), pero son más comunes las fuerzas de campo en el intervalo de 4.7 a 7.0 T; en una fuerza de campo magnético de 4.7 T, llamada energía de radiofrecuencia (rf) en el intervalo de los 200 MHz ($1 \text{ MHz} = 10^6 \text{ Hz}$), pone en resonancia un núcleo de ^1H , y una energía de rf de 50 MHz pone en resonancia un núcleo de ^{13}C . Bajo la fuerza de campo más alta actualmente disponible en instrumentos comerciales (21.2 T), se requieren 900 MHz para la espectroscopia de ^1H . Estas energías necesarias para la RMN son mucho más pequeñas que las requeridas para la espectroscopia de IR; 200 MHz de energía de rf corresponden a sólo 8.0×10^{-5} kJ/mol contra 4.8 a 48 kJ/mol necesarios para la espectroscopia de IR.

Tabla 13.1 El comportamiento en la RMN de algunos núcleos comunes

Núcleos magnéticos	Núcleos no magnéticos
^1H	^{12}C
^{13}C	^{16}O
^2H	^{32}S
^{14}N	
^{19}F	
^{31}P	

Los núcleos de ^1H y de ^{13}C no son los únicos en cuanto a su capacidad para exhibir el fenómeno de RMN. Todos los núcleos con un número impar de protones (por ejemplo, ^1H , ^2H , ^{19}P , ^{31}P), y todos los núcleos con un número impar de neutrones (por ejemplo ^{13}C), muestran propiedades magnéticas; sólo los núcleos con número par de protones y neutrones (^{12}C , ^{16}O), no dan lugar a fenómenos magnéticos (tabla 13.1).

Problema 13.1

La cantidad de energía requerida para la inversión del espín de un núcleo depende de la fuerza del campo magnético externo y del núcleo. En una fuerza de campo de 4.7 T, se requiere energía de rf de 200 MHz para poner en resonancia un núcleo de ^1H , pero una energía de sólo 187 MHz pondrá en resonancia un núcleo de ^{19}F . Calcule la cantidad de energía requerida para invertir el espín de un núcleo de ^{19}F . ¿Es esta cantidad mayor o menor que la requerida para la inversión del espín de un núcleo de ^1H ?

Problema 13.2

Calcule la cantidad de energía requerida para invertir el espín de un protón en un espectrómetro que opera a 300 MHz. ¿El aumento de la frecuencia de espectrómetro de 200 a 300 MHz aumenta o disminuye la cantidad de energía necesaria para la resonancia?

13.2 La naturaleza de las absorciones de RMN

De lo descrito hasta ahora, puede esperar que todos los núcleos de ^1H en una molécula absorban energía en la misma frecuencia y que todos los núcleos de ^{13}C absorban en la misma frecuencia. De ser así, observaríamos una sola banda de

absorción de RMN en el espectro de ^1H o ^{13}C de una molécula, una situación que sería de poca utilidad. De hecho, la frecuencia de absorción no es la misma en todos los núcleos de ^1H o en todos los núcleos de ^{13}C .

Todos los núcleos en las moléculas están rodeados por electrones. Cuando se aplica a la molécula un campo magnético externo, los electrones que se mueven alrededor de los núcleos aplican por sí mismos pequeños campos magnéticos locales; estos campos magnéticos locales actúan en oposición al campo aplicado de tal manera que el campo efectivo sentido por el núcleo es un poco más débil que el campo aplicado.

$$B_{\text{efectivo}} = B_{\text{aplicado}} - B_{\text{local}}$$

Al describir este efecto de los campos locales, decimos que los núcleos están protegidos del efecto total del campo aplicado por los electrones que lo rodean. Debido a que cada núcleo específico en una molécula está en un ambiente electrónico ligeramente diferente, cada núcleo está protegido por una magnitud ligeramente diferente y los campos magnéticos efectivos sentidos por cada uno son ligeramente diferentes. Pueden detectarse estas pequeñas diferencias en los campos magnéticos efectivos experimentados por los núcleos diferentes y, por tanto, podemos ver una señal distinta en la RMN para cada uno de los núcleos de ^{13}C o de ^1H químicamente distintos en una molécula. Como resultado, un espectro de RMN mapea efectivamente la estructura carbono-hidrógeno de una molécula orgánica; con la práctica, es posible leer el mapa y obtener información estructural.

La figura 13.3 muestra los espectros de RMN- ^1H y ^{13}C del acetato de metilo, $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{CH}_3$. El eje horizontal muestra la fuerza del campo efectivo sentida por los núcleos, y el eje vertical indica la intensidad de absorción de la energía de rf; cada señal en el espectro de RMN corresponde a un núcleo de ^1H o de ^{13}C químicamente distinto en la molécula. (Nótese que los espectros de RMN están presentados con la línea de cero absorción en la *parte inferior*, mientras que los espectros de IR están presentados con la línea de cero absorción en la *parte superior*; sección 12.5.) También nótese que no pueden observarse simultáneamente en el mismo espectrómetro los espectros de ^1H y de ^{13}C debido a que se requieren diferentes cantidades de energía para invertir el espín de los diferentes tipos de núcleos y los dos espectros deben registrarse por separado.

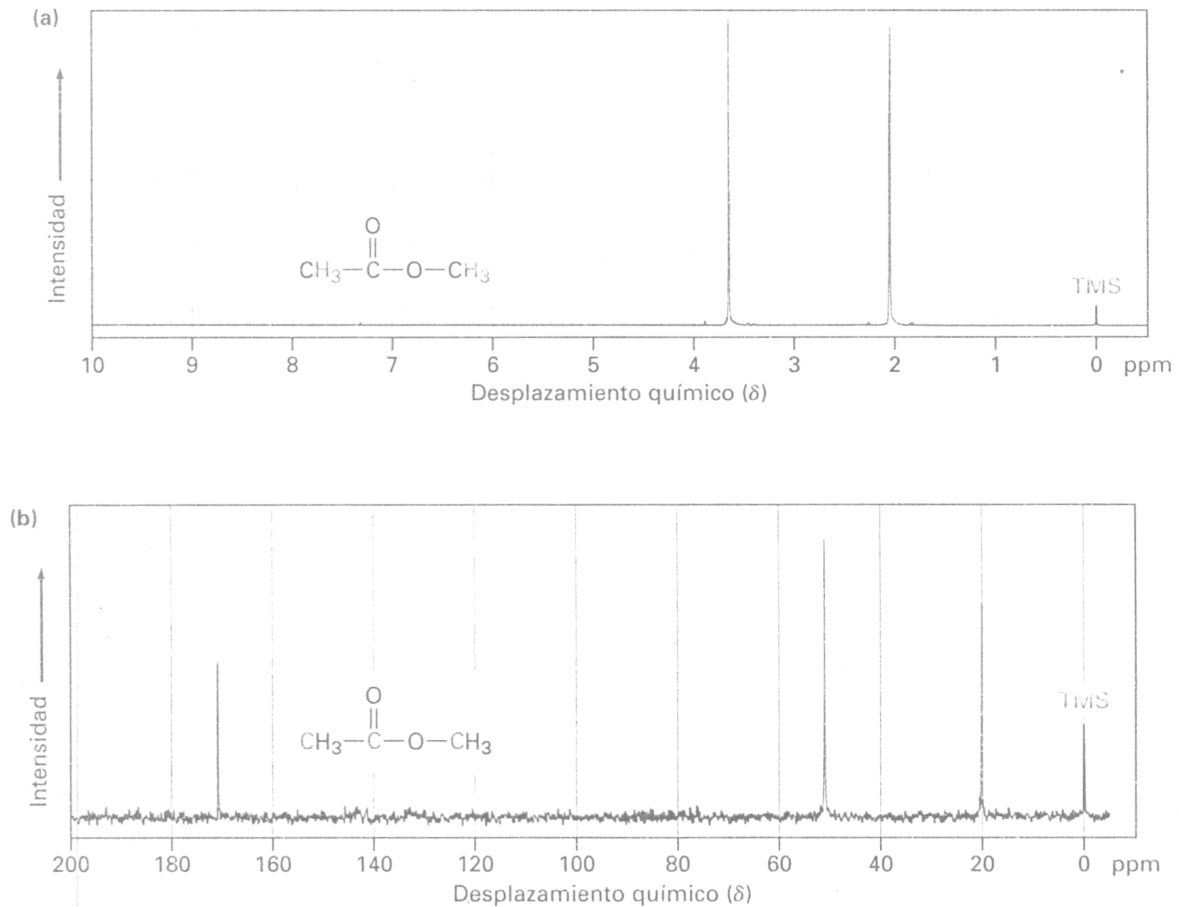


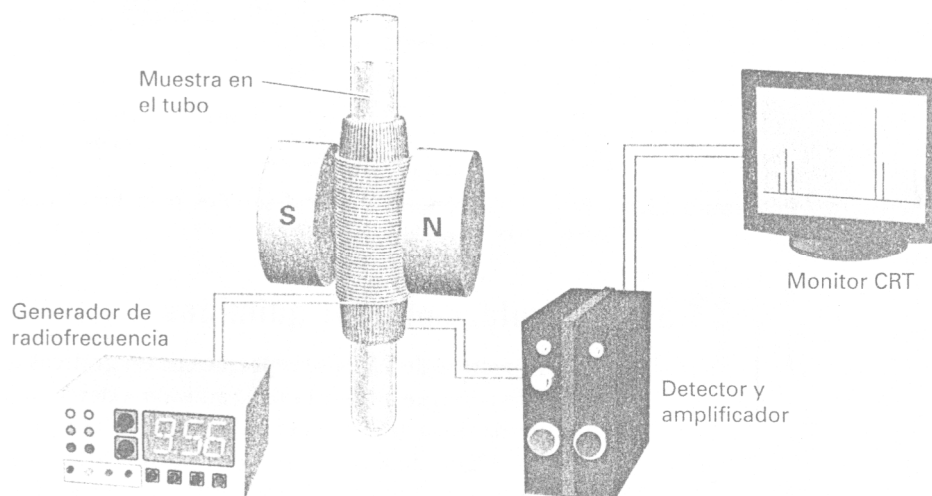
Figura 13.3 (a) El espectro de RMN-¹H y (b) el espectro de RMN-¹³C del acetato de metilo, CH₃CO₂CH₃. El pico pequeño etiquetado "TMS" hasta la derecha del espectro es un pico de calibración, como se explica en la sección 13.3.

El espectro de ¹³C del acetato de metilo en la figura 13.3b muestra tres señales, una para cada uno de los átomos de carbono químicamente distintos en la molécula. Sin embargo, el espectro de RMN-¹H en la figura 13.3a muestra sólo dos señales, aun cuando el acetato de metilo tiene seis hidrógenos; una señal se debe a los hidrógenos del CH₃C=O, y el otro a los hidrógenos del —OCH₃. Debido a que los tres hidrógenos en cada grupo metilo tienen el mismo ambiente electrónico, están protegidos en la misma magnitud y se dice que son *equivalentes*. *Los núcleos químicamente equivalentes siempre muestran una sola absorción*, sin embargo, los dos grupos metilos a su vez no son equivalentes, por lo que los dos grupos de hidrógenos absorben energía a frecuencias diferentes.

En la figura 13.4 se ilustra la operación de un espectrómetro de RMN básico. Se disuelve una muestra orgánica en un disolvente adecuado (por lo general deuteriocloroformo, CDCl₃, el cual no tiene hidrógenos), y se coloca en un tubo de

vidrio delgado entre los polos de un imán. El fuerte campo magnético ocasiona que los núcleos de ^1H y de ^{13}C en la molécula se alineen en una de las dos orientaciones posibles, y se irradia la muestra con energía de rf. Si la frecuencia de la radiación rf se mantiene constante y se varía la fuerza del campo magnético aplicado, cada núcleo se pone en resonancia a una fuerza de campo ligeramente diferente. Un detector sensible monitorea la absorción de la energía de rf, y se amplifica la señal electrónica y se muestra en un monitor como un pico.

Figura 13.4 La operación esquemática de un espectrómetro de RMN. Se coloca un tubo de vidrio delgado que contiene la disolución de la muestra entre los polos de un imán poderoso y se irradia con la energía de rf.

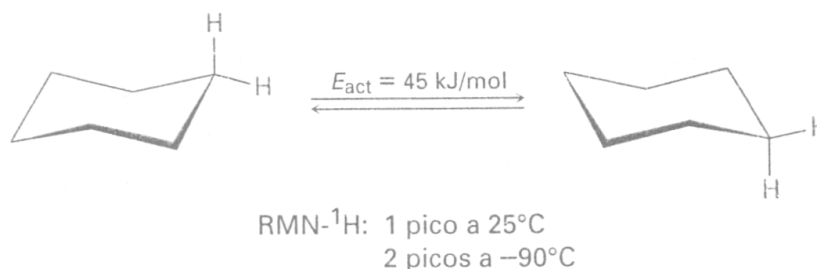


La espectroscopia de RMN difiere de la espectroscopia de IR (secciones 12.6-12.8) en que las escalas de tiempo de las dos técnicas son muy diferentes. La absorción de la energía infrarroja por una molécula que da origen a un cambio en la amplitud vibracional es un proceso esencialmente instantáneo (alrededor de 10^{-13} s), pero el proceso de RMN es mucho más lento (alrededor de 10^{-3} s).

Esta diferencia en las escalas de tiempo entre la espectroscopia de infrarrojo y de RMN es análoga a la diferencia entre cámaras que operan a velocidades de disparo muy lentas o muy rápidas. La cámara rápida (IR) toma una foto instantánea y "congela" la acción. Si se presentan dos especies que

interconvierten rápidamente, la espectroscopia de IR registra el espectro de ambas; sin embargo, la cámara lenta (RMN) toma una foto borrosa de tiempo promedio. Si se presentan en la muestra dos especies que interconvierten más rápido que 10^3 veces por segundo, la RMN únicamente registra un solo espectro promedio, en lugar de espectros separados de las dos especies discretas.

Debido a este efecto de borrosidad, la espectroscopia de RMN puede utilizarse para medir la rapidez y las energías de activación de procesos muy rápidos; por ejemplo, en el ciclohexano el cambio de conformación del anillo (sección 4.6) ocurre tan rápidamente a temperatura ambiente que no pueden distinguirse por RMN los hidrógenos axiales y ecuatoriales; únicamente se ve para el ciclohexano a 25°C una sola absorción promedio de RMN^1H ; sin embargo, a -90°C el cambio de conformación del anillo se hace lo suficientemente lento como para que se vean los dos picos de absorción, uno para los seis hidrógenos axiales y uno para los seis hidrógenos ecuatoriales. Al saber la temperatura y la rapidez a las cuales comienza a ocurrir la distorsión de la señal, es posible calcular que la energía de activación para el cambio de conformación del anillo del ciclohexano es de 45 kJ/mol (10.8 kcal/mol).



Problema 13.3

El 2-cloropropeno muestra señales para tres tipos de protones en su espectro de RMN^1H . Explique.

13.3 Desplazamientos químicos

Los espectros de RMN se representan en gráficas que muestran la fuerza del campo aplicado que aumenta de izquierda a derecha (figura 13.5); por tanto, la parte izquierda de la gráfica es el lado de menor campo o campo bajo, y la parte derecha es el lado de mayor campo o campo alto. Los núcleos que absorben en el lado de campo bajo de la gráfica requieren una fuerza de campo menor para la resonancia, lo que significa que tienen relativamente menos protección. Los

núcleos que absorben en el lado de campo alto requieren una fuerza de campo mayor para la resonancia, lo que significa que tienen relativamente más protección.

Para definir la posición de una absorción, se calibra la gráfica de RMN y se utiliza un punto de referencia; en la práctica, se añade a la muestra una pequeña cantidad de tetrametilsilano [TMS; $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$] de tal manera que se produce un pico de absorción de referencia cuando se ejecuta o corre el espectro. El TMS se utiliza como referencia para las mediciones de ^1H y de ^{13}C , debido a que produce en ambos una sola señal que aparece en un campo más alto que las otras absorciones que se encuentran normalmente en los compuestos orgánicos. Los espectros de ^1H y de ^{13}C del acetato de metilo en la figura 13.3 tienen indicado la misma señal de referencia del TMS.

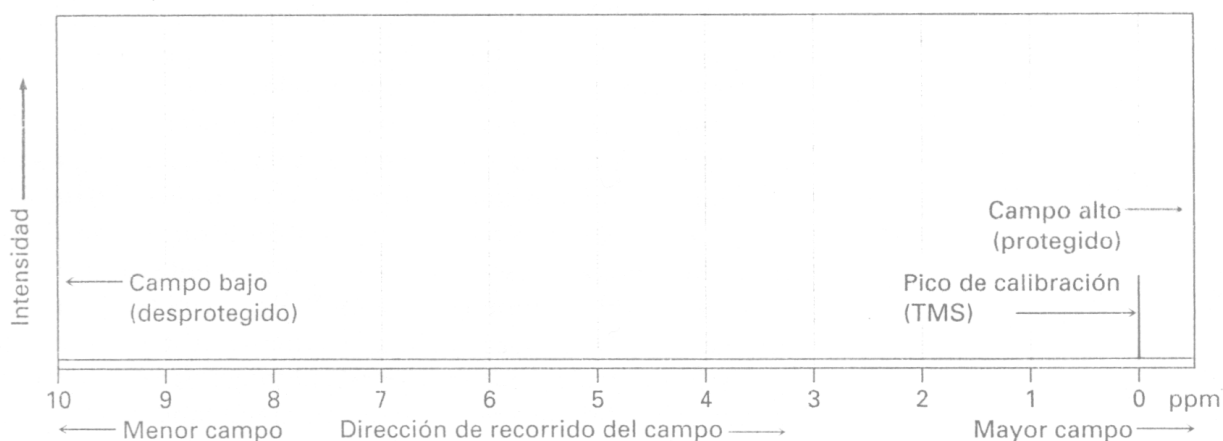


Figura 13.5 La gráfica de RMN. El lado de campo bajo desprotegido está a la izquierda, y el lado de campo alto protegido está a la derecha. Se utiliza como punto de referencia la absorción del tetrametilsilano (TMS).

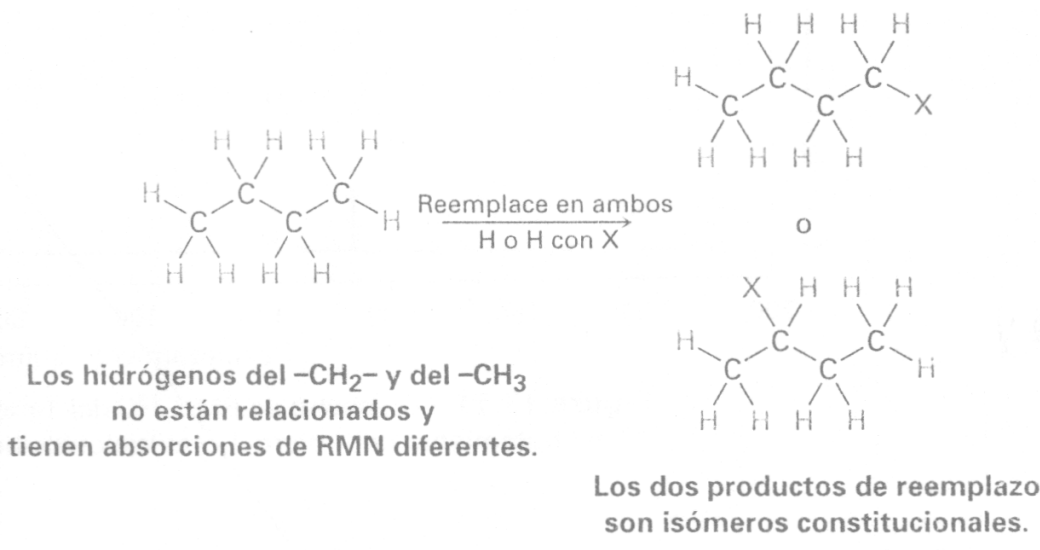
La posición en la gráfica en la cual absorbe un núcleo se llama desplazamiento químico. El desplazamiento químico del TMS se establece como punto cero, y las otras absorciones ocurren por lo general en el campo bajo, al lado izquierdo de la gráfica. Las gráficas de RMN se calibran utilizando una escala arbitraria llamada escala delta (δ), donde 1 δ es igual a 1 parte por millón (1 ppm) de la frecuencia de operación del espectrómetro; por ejemplo, si estuviéramos midiendo el espectro de RMN- ^1H de una muestra utilizando un instrumento que opera a 200 MHz, 1 δ sería de 1 millonésima de 200,000,000 Hz, o 200 Hz.

13.8 Espectroscopia de RMN-1H y equivalencia de protones

Habiendo visto ya los espectros de ¹³C, ahora enfoquémonos a la espectroscopia de RMN-¹H. Debido a que cada hidrógeno electrónicamente distinto en una molécula tiene su propia absorción única, un uso de la RMN-¹H es encontrar cuántos tipos de hidrógenos electrónicamente no equivalentes o diferentes están presentes; por ejemplo, en el espectro de RMN-¹H del acetato de metilo que se mostró previamente en la figura 13.3a hay dos señales, que corresponden a los dos tipos de protones diferentes presentes, protones del CH₃C=O y protones del -OCH₃.

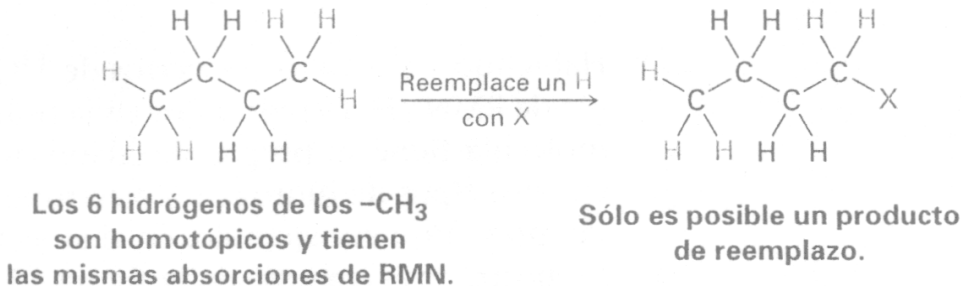
Para moléculas relativamente pequeñas, con frecuencia un rápido vistazo a su estructura es suficiente para decidir cuántos tipos de protones están presentes y, por tanto, cuántas absorciones de RMN pueden aparecer; sin embargo, en caso de duda de la equivalencia o no equivalencia de dos protones, puede determinarse comparando las estructuras que se formarían si se reemplazara cada hidrógeno por un grupo X. Existen cuatro posibilidades.

- Una posibilidad es que los protones no estén químicamente relacionados y, por tanto, no equivalentes. Si es así, los productos formados en el reemplazo de H por X serían isómeros constitucionales diferentes; por ejemplo, en el butano los protones del -CH₃ son diferentes que los protones del -CH₂-, daría productos diferentes en el reemplazo por X, y probablemente mostraría absorciones de RMN diferentes.

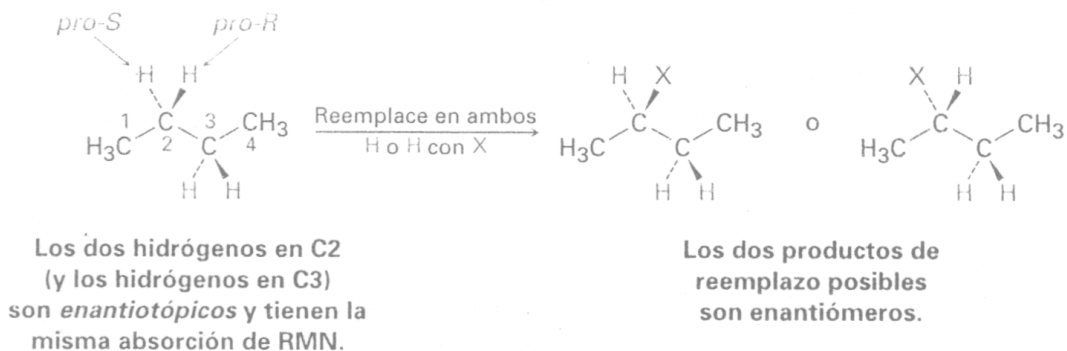


- Una segunda posibilidad es que los protones son idénticos químicamente y, por tanto, equivalentes electrónicamente. Si es así, se formaría el mismo producto independientemente de cuál H se

reemplace por X; por ejemplo, en el butano los seis hidrógenos de los $-CH_3$ en C1 y C4 son idénticos, lo que daría la estructura idéntica en el reemplazo por X, y mostraría la misma absorción de RMN, por lo que se dice que tales protones son homotópicos.

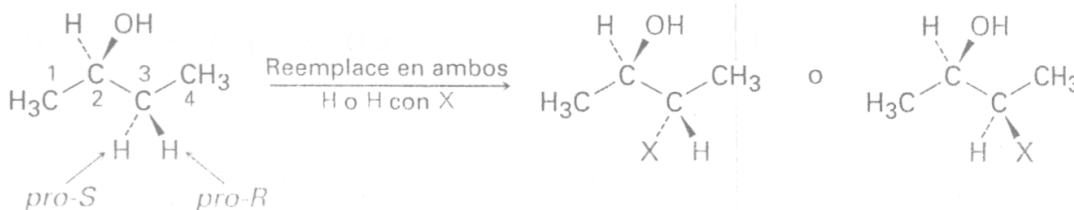


- La tercera posibilidad es un poco sutil, aunque a primera vista parecen homotópicos, de hecho los dos hidrógenos del $-CH_2-$ en C2 en el butano (y los dos hidrógenos del $-CH_2-$ en C3), *no* son idénticos. El reemplazo de un hidrógeno en C2 (o C3) formaría un nuevo centro de quiralidad, por lo que resultarían enantiómeros diferentes (sección 9.1) que depende de si se reemplazara el hidrógeno *pro-R* o *pro-S* (sección 9.13). Se dice que tales hidrógenos, cuyos reemplazos por X conducirían a enantiómeros diferentes, son enantiotópicos. Los hidrógenos enantiotópicos, aun cuando no son idénticos, a pesar de todo son equivalentes electrónicamente y por tanto tienen la misma absorción de RMN.



- La cuarta posibilidad surge en las moléculas quirales; como el (R)-2-butanol; los dos hidrógenos del $-CH_2-$ en C3 no son homotópicos ni enantiotópicos. Dado que el reemplazo de un hidrógeno en C3 formaría un *segundo* centro de quiralidad, resultarían *diastereómeros* diferentes (sección 9.6) dependiendo si se reemplazara el hidrógeno *pro-R* o *pro-S*. Se dice que tales hidrógenos, cuyos reemplazos por X

conducen a diastereómeros diferentes, son diastereotópicos. Los hidrógenos diastereotópicos no son química ni electrónicamente equivalentes, son completamente diferentes y probablemente mostrarían absorciones de RMN diferentes.

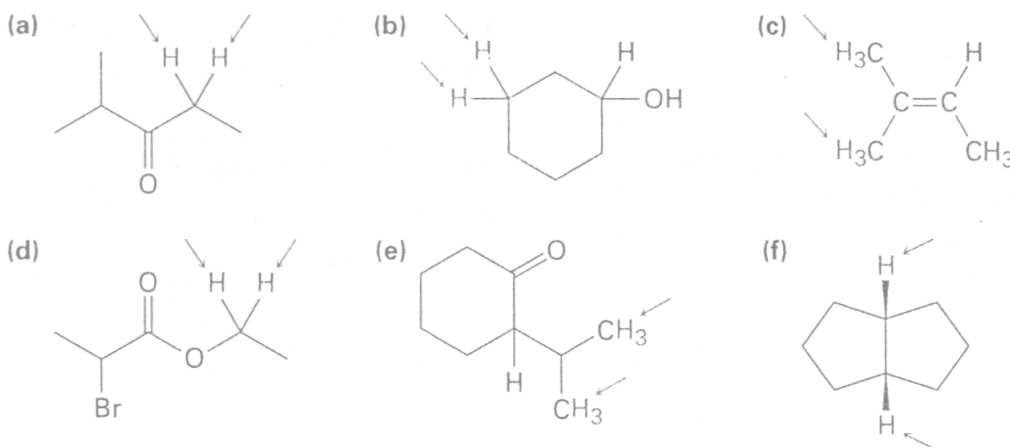


Los dos hidrógenos en C3 son diastereotópicos y tienen absorciones de RMN diferentes.

Los dos productos de reemplazo posibles son diastereómeros.

Problema 13.13

Identifique los conjuntos de protones indicados como no relacionados, homotópicos, enantiotópicos o diastereotópicos:



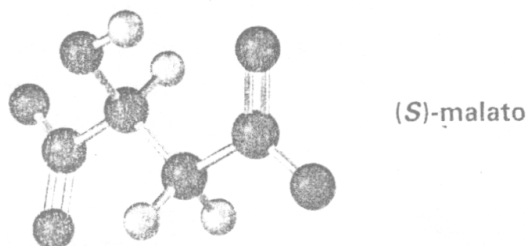
Problema 13.14

¿Cuántos tipos de protones no equivalentes electrónicamente están presentes en cada uno de los siguientes compuestos y, por tanto, cuántas absorciones de RMN puede esperar en cada uno?

- (a) CH₃CH₂Br
- (b) CH₃OCH₂CH(CH₃)₂
- (c) CH₃CH₂CH₂NO₂
- (d) Metilbenceno
- (e) 2-metil-1-buteno
- (f) cis-3-hexeno

Problema 13.15

¿Cuántas absorciones esperarías que tenga el (S)-malato, un intermediario en el metabolismo de carbohidratos, en su espectro de RMN¹H? Explique.

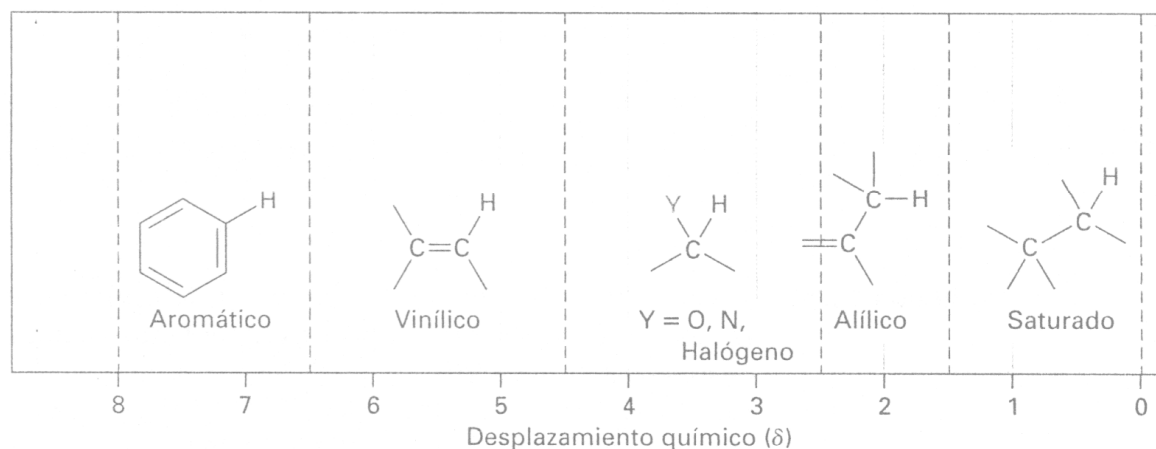


13.9 Desplazamientos químicos en la espectroscopia de RMN-¹H

Previamente mencionamos que las diferencias en los desplazamientos químicos son ocasionadas por los pequeños campos magnéticos locales de los electrones que rodean a los diferentes núcleos. Los núcleos que están más fuertemente protegidos por los electrones requieren de la aplicación de un campo mayor para ponerlos en resonancia y, por lo tanto, absorben en el lado derecho de la gráfica de RMN. Los núcleos que están menos fuertemente protegidos necesitan un menor campo aplicado para la resonancia y, por lo tanto, absorben en el lado izquierdo de la gráfica de RMN.

La mayor parte de los desplazamientos químicos de ¹H quedan en el intervalo de 0 a 10 δ, el cual puede dividirse en las cinco regiones que se muestran en la tabla 13.2. Al recordar las posiciones de estas regiones, con frecuencia es posible decir de un vistazo qué tipos de protones contiene una molécula.

Tabla 13.2 Regiones del espectro de RMN del ^1H



La tabla 13.3 muestra con más detalle la correlación del desplazamiento químico de ^1H con el ambiente electrónico. En general, los protones unidos a los carbonos saturados con hibridación sp^3 absorben en campos mayores, mientras que los protones unidos a los carbonos con hibridación sp^2 absorben en campos menores. Los protones en los carbonos que están unidos a los átomos electronegativos, como N, O o halógeno, también absorben en campos menores.

EJEMPLO RESUELTO 13.3

Pronóstico de los desplazamientos Químicos en los espectros de RMN^1H

El 2,2-dimetilpropanoato de metilo, $(\text{CH}_3)_3\text{CCO}_2\text{CH}_3$, tiene dos señales en su espectro de RMN^1H , ¿cuáles son sus desplazamientos químicos aproximados?

Estrategia Identifique los tipos de hidrógenos en la molécula y nótese si cada uno es de alquilo, vinílico o vecino de un átomo electronegativo. Pronostique dónde absorbe cada uno utilizando si es necesario la tabla 13.3.

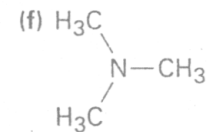
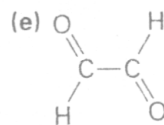
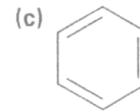
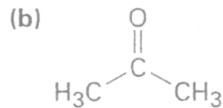
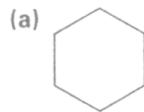
Solución Los protones del $-\text{OCH}_3$ absorben alrededor de 3.5 a 4.0 δ porque están en el carbono unido al oxígeno; los protones del $(\text{CH}_3)_3\text{C}-$ absorben cerca del 1.0 δ porque típicamente son característicos de los alcanos.

Tabla 13.3 | Correlación del desplazamiento químico de ^1H con el ambiente

Tipo de hidrógeno	Desplazamiento químico (δ)	Tipo de hidrógeno	Desplazamiento químico (δ)
Referencia	$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ 0		
Alquilo (primario)	$-\text{CH}_3$ 0.7-1.3	Alcohol	$\begin{array}{c} \\ -\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \end{array}$ 2.5-5.0
Alquilo (secundario)	$-\text{CH}_2-$ 1.2-1.6	Alcohol, éter	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ -\text{C}-\text{O}- \\ \end{array}$ 3.3-4.5
Alquilo (terciario)	$\begin{array}{c} \\ -\text{CH}- \\ \end{array}$ 1.4-1.8	Vinílico	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}=\text{C} \\ \end{array}$ 4.5-6.5
Alílico	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}=\text{C}-\text{C}- \\ \end{array}$ 1.6-2.2	Arilo	$\text{Ar}-\text{H}$
Metal cetona	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$ 2.0-2.4	Aldehído	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{H} \end{array}$ 9.7-10.0
Metilo aromático	$\text{Ar}-\text{CH}_3$ 2.4-2.7	Ácido carboxílico	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{O}-\text{H} \end{array}$ 11.0-12.0
Alquinilo	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ 2.5-3.0		
Haluro de alquilo	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ -\text{C}-\text{Hal} \\ \end{array}$ 2.5-4.0		

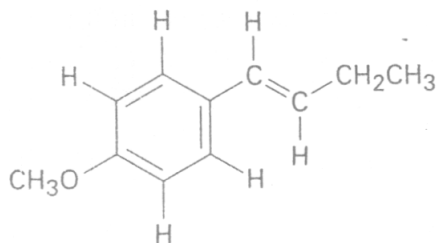
Problema 13.16

Cada uno de los siguientes compuestos tiene una sola señal de RMN^{-1}H , ¿dónde esperaría que absorba aproximadamente cada uno de los compuestos?



Problema 13.17

Identifique los diferentes tipos de protones no equivalentes en las siguientes moléculas y diga dónde esperaría que absorba cada uno:



13.10 Integración de absorciones de RMN¹H: conteo de protones

Observe el espectro de RMN¹H del 2,2-dimetilpropanoato de metilo en la figura 13.12. Hay dos señales que corresponden a los dos tipos de protones, pero las señales no son del mismo tamaño; la señal en 1.2 S debido a los protones del (CH₃)₃C-, es mayor que la señal en 3.7 S debido a los protones del -OCH₃.

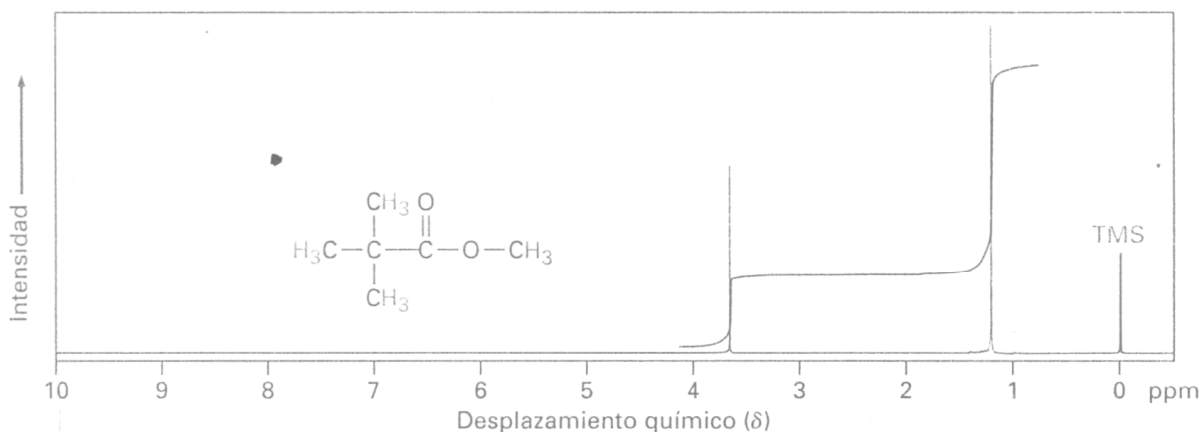


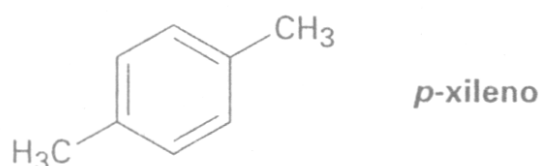
Figura 13.12 El espectro de RMN¹H del 2,2-dimetilpropanoato de metilo. Al integrar los picos en una manera de "etapa escalonada" muestra que tienen una relación 1:3, que corresponde a la relación del número de protones (3:9) responsable de cada señal.

El área bajo cada señal es proporcional al número de protones que ocasionan esa señal; al medir electrónicamente, o al integrar, el área bajo cada señal, es posible medir el número relativo de los diferentes tipos de protones en una molécula. Si se desea, el área de la señal integrada puede superponerse sobre el espectro como una línea de "etapa escalonada", con la altura de cada etapa proporcional al área bajo la señal y, por lo tanto, proporcional al número relativo de protones que ocasionan la señal. Para comparar el tamaño de una señal contra otro, simplemente tome una regla y mida las alturas de las diversas etapas; por ejemplo, las dos etapas para las señales en el 2,2-dimetilpropanoato de metilo tienen una

relación de altura 1:3 (o 3:9) cuando se integran —exactamente lo esperado dado que los tres protones del $-\text{OCH}_3$ son equivalentes y los nueve protones del $(\text{CH}_3)_3\text{C}-$ son equivalentes.

Problema 13.18

¿Cuántas señales esperaría en el espectro de RMN-11-1 del 1,4-dimetilbenceno (para-xileno o p-xileno)? ¿Qué relación de las áreas de las señales esperaría en la integración del espectro? Refiérase a la tabla 13.3 para los desplazamientos químicos aproximados, y dibuje cómo sería el espectro. (Recuérdese de la sección 2.4 que los anillos aromáticos tienen dos formas resonantes.)



13.11 Desdoblamiento espín-espín en los espectros de RMN¹H

En los espectros de RMN¹H que hemos visto hasta ahora, cada uno de los diferentes tipos de protones en una molécula ha originado una sola señal, aunque con frecuencia sucede que la absorción de un protón se desdobra en señales múltiples, llamado multiplete. Por ejemplo, en el espectro de RMN¹H del bromoetano, mostrado en la figura 13.13, los protones del $-\text{CH}_2\text{Br}$ aparecen como cuatro señales (un *cuarteto*) centrados en 3.42 δ y los protones del $-\text{CH}_3$ aparecen como tres señales (un *tripleto*) centrados en 1.68 δ .

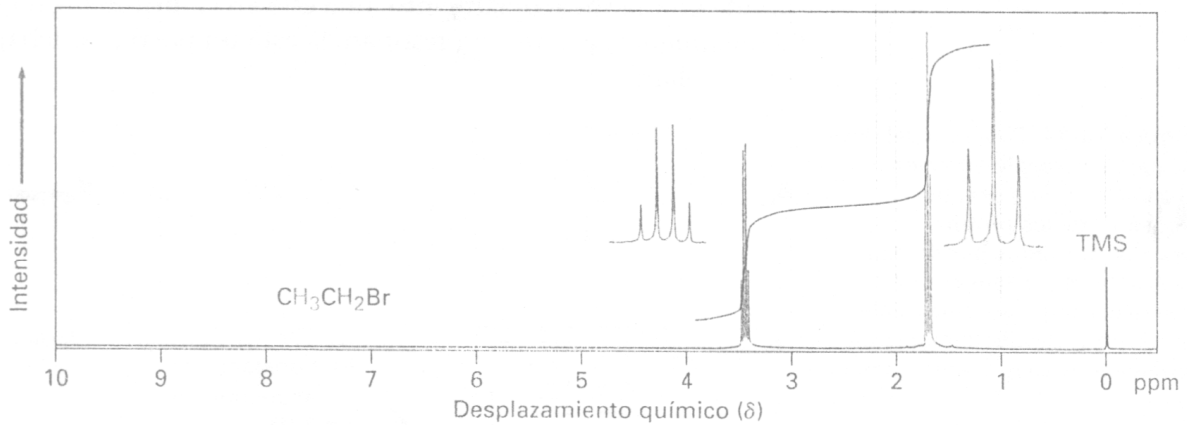


Figura 13.13 El espectro de RMN-¹H del bromoetano, CH₃CH₂Br. Los protones del -CH₂Br aparecen como un cuarteto en 3.42 δ, y los protones del -CH₃ aparecen como un triplete en 1.68 δ.

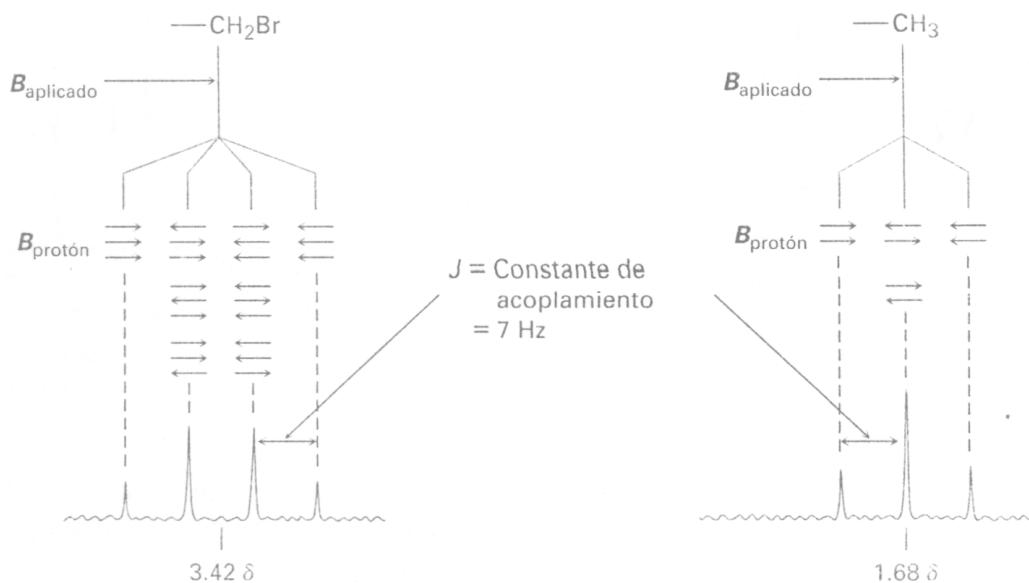
Llamado desdoblamiento espín-espín, las absorciones múltiples de un núcleo son ocasionadas por la interacción, o acoplamiento, de los espines de los núcleos cercanos; en otras palabras, el pequeño campo magnético producido por un núcleo afecta el campo magnético sentido por los núcleos vecinos, por ejemplo, observe los protones del -CH₃ en el bromoetano. Los tres protones equivalentes del -CH₃ son vecinos de otros dos núcleos magnéticos —los dos protones en el grupo -CH₂Br adyacente—. Cada uno de los protones del -CH₂Br vecino tienen su propio espín nuclear, el cual puede alinearse con o contra el campo aplicado, produciendo un pequeño efecto que es sentido por los protones del -CH₃.

Como se muestra en la figura 13.14, existen tres maneras en las que pueden alinearse los espines de los dos protones del -CH₂Br. Si ambos espines de los protones se alinean con el campo aplicado, el campo efectivo total sentido por los protones del -CH₃ vecino es ligeramente mayor de lo que sería en el caso contrario. En consecuencia, el campo aplicado necesario para ocasionar la resonancia se reduce ligeramente. De manera alternativa, si uno de los espines de los protones del -CH₂Br se alinea con el campo y uno se alinea contra el campo, no hay efecto en los protones del -CH₃ vecino. (Hay dos maneras en las que puede ocurrir este arreglo, que dependen de cuál de los espines de los dos protones se alinea de esta manera.) Finalmente, si ambos espines de los protones del -CH₂Br se alinean contra el campo aplicado, el campo efectivo sentido por los protones del -CH₃ es ligeramente menor de lo que sería en el caso contrario y el campo aplicado necesario para la resonancia se incrementa ligeramente.

Cualquier molécula dada tiene únicamente una de las tres alineaciones posibles de los espines del -CH₂Br, pero en una gran colección de moléculas, están representados los tres estados de espín en una relación estadística de 1:2:1; por tanto, podemos encontrar que los protones del -CH₃ vecino se ponen en

resonancia a tres valores ligeramente diferentes del campo aplicado, y en el espectro de RMN vemos un triplete 1:2:1. Una resonancia está un poco por encima de donde estaría sin acoplamiento, una está en el mismo lugar en donde estaría sin acoplamiento, y la tercera resonancia está un poco por debajo de donde estaría sin acoplamiento.

Figura 13.14 El origen del desdoblamiento espín-espín en el bromoetano. Los espines nucleares de los protones vecinos, indicados por flechas horizontales, se alinean con o contra el campo aplicado, ocasionando el desdoblamiento en multipletes de las absorciones.



De la misma manera en que la absorción del -CH_3 del bromoetano se desdobla en un triplete, la absorción del $\text{-CH}_2\text{Br}$ se desdobla en un cuarteto. Los tres espines de los protones del -CH_3 vecino pueden alinearse en cuatro combinaciones posibles: los tres con el campo aplicado, dos con y uno contra (tres maneras), uno con y dos contra (tres maneras), o los tres contra; por tanto, se producen cuatro picos para los protones del $\text{-CH}_2\text{Br}$ en una relación 1:3:3:1.

Como regla general, llamada regla $n + 1$, los protones que tienen n protones vecinos equivalentes muestran $n + 1$ señales en su espectro de RMN; por ejemplo, el espectro del 2-bromopropano en la figura 13.15 muestra un doblete en

1.71 δ y un multiplete de siete líneas, o *septeto*, en 4.28 δ . El septeto es ocasionado por el desdoblamiento de la señal del protón del $-\text{CHBr}-$ por los seis protones vecinos equivalentes en los dos grupos metilo ($n = 6$ conduce a $6 + 1 = 7$ señales). El doblete se debe al desdoblamiento de la señal de los seis protones metilo equivalentes por el único protón del $-\text{CHBr}-$ ($n = 1$ conduce a 2 señales). La integración confirma la relación esperada de 6:1.

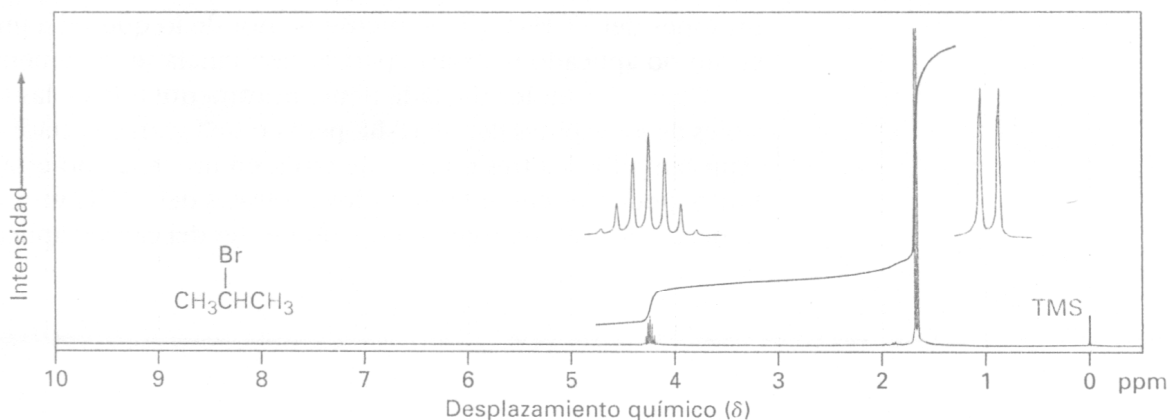


Figura 13.15 El espectro de RMN- ^1H del 2-bromopropano. La señal del protón del $-\text{CH}_3$ en 1.71 δ se desdobra en un doblete, y la señal del protón del $-\text{CHBr}-$ en 4.28 δ se desdobra en un septeto. Nótese que la distancia entre las señales —la *constante de acoplamiento*— es la misma en ambos multipletes, y que las dos señales fuera del septeto son tan pequeños como para casi perderse.

Se llama constante de acoplamiento a la distancia entre las señales en un multiplete, denotada por J . Las constantes de acoplamiento se miden en hertz y por lo general caen en el intervalo de 0 a 18 Hz. El valor exacto de la constante de acoplamiento entre dos protones vecinos depende de la geometría de la molécula, pero un valor típico para un alcano de cadena abierta es $J = 6$ a 8 Hz. Se comparte la misma constante de acoplamiento por ambos grupos de hidrógenos cuyos espines se acoplan y es independiente de la fuerza de campo del espectrómetro; por ejemplo, en el bromoetano los protones del $-\text{CH}_2\text{Br}$ se acoplan a los protones del $-\text{CH}_3$ y aparecen como un cuarteto con $J = 7$ Hz; los protones del $-\text{CH}_3$ aparecen como un triplete con la misma constante de acoplamiento $J = 7$ Hz.

Debido a que el acoplamiento es una interacción recíproca entre dos grupos adyacentes de protones, algunas veces es posible decir cuáles multipletes están relacionados en un espectro de RMN complejo. Si dos multipletes tienen la misma constante de acoplamiento, probablemente están relacionados, y por tanto los protones que ocasionan estos multipletes son adyacentes en la molécula.

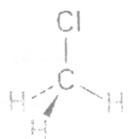
En la tabla 13.4 se listan los patrones de acoplamientos observados más comunes y la intensidad relativa de las líneas en sus multipletes. Nótese que no es posible para un protón dado tener *cinco* protones vecinos equivalentes. (¿Por qué no?) Por tanto, un multiplete con seis líneas, o sexteto, únicamente se encuentra cuando un protón tiene cinco protones vecinos *no equivalentes* que coincidentemente se acoplan con una constante de acoplamiento *J* idéntica.

Tabla 13.4 | Algunas multiplicidades de espín comunes

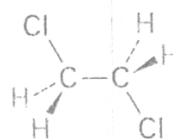
Número de protones adyacentes equivalentes	Multiplete	Relación de intensidades
0	Singulete	1
1	Doblete	1:1
2	Triplete	1:2:1
3	Cuarteto	1:3:3:1
4	Quinteto	1:4:6:4:1
6	Septeto	1:6:15:20:15:6:1

El desdoblamiento espín-espín en la RMN-¹H puede resumirse en tres reglas.

Regla 1 Los protones equivalentes químicamente no muestran desdoblamiento espín-espín. Los protones equivalente pueden estar en el mismo carbono o en carbonos diferentes, pero sus señales no se desdoblan.



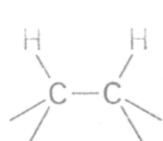
Los tres protones del C-H son equivalentes químicamente; no ocurre desdoblamiento



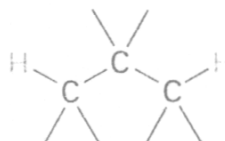
Los cuatro protones del C-H son equivalentes químicamente; no ocurre desdoblamiento.

Regla 2 La señal de un protón que tiene *n* protones vecinos equivalentes se desdobra en un multiplete de *n* + 1 señales con una constante de acoplamiento *J*.

Por lo general, los protones que están separados por dos átomos de carbono no se acoplan, aunque algunas veces muestran un acoplamiento pequeño cuando están separadas por un enlace π .



Desdoblamiento observado



Por lo general no se observa

Regla 3 Dos grupos de protones acoplados entre sí tienen la misma constante de acoplamiento, J .

El espectro de la *para*-metoxipropiofenona en la figura 13.16 ilustra las tres reglas anteriores. Las absorciones hacia el campo bajo en 6.91 y 7.93 δ se deben a los cuatro protones del anillo aromático; hay dos tipos de protones aromáticos, cada uno de los cuales da una señal que se desdobla en un doblete por su vecino, entonces la señal del $-\text{OCH}_3$ no se desdobla y aparece como un singulete bien definido en 3.84 δ . Los protones del $-\text{CH}_2-$ al lado del grupo carbonílico aparecen en 2.93 δ en la región esperada para los protones en el carbono adyacente a un centro insaturado, y su señal se desdobla en un cuarteto por el acoplamiento con los protones del grupo metilo vecino. Los protones del metilo aparecen como un triplete en 1.20 δ en la región hacia el campo alto usual.

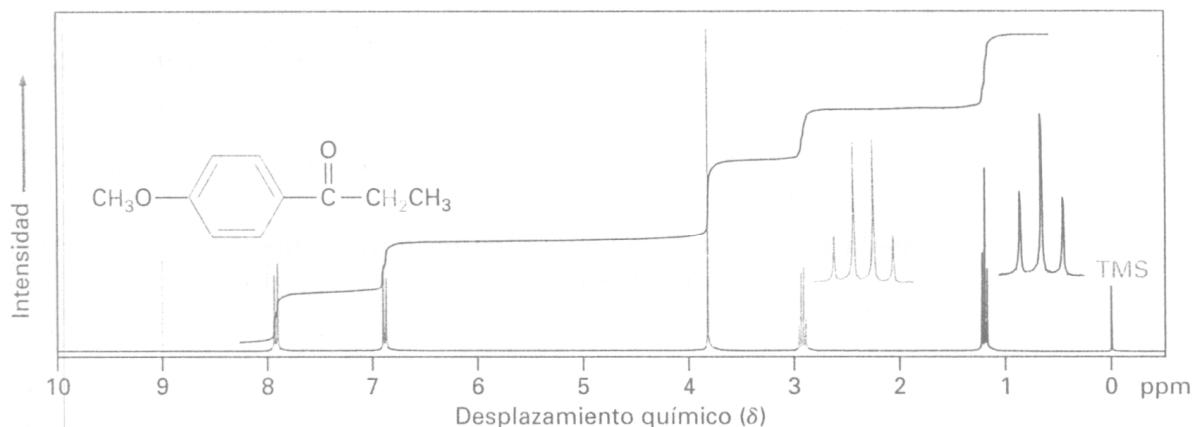


Figura 13.16 El espectro de RMN- ^1H de la *para*-metoxipropiofenona.

Es necesario responder otra pregunta antes de dejar el tema del desdoblamiento espín-espín, ¿por qué el desdoblamiento espín-espín se ve únicamente para la RMN- ^1H ? ¿Por qué no hay desdoblamiento de las señales de *carbono* en multipletes para la RMN- ^{13}C ? Después de todo, puede esperar que el espín de un

núcleo de ^{13}C dado acoplaría con el espín de un núcleo magnético adyacente, ^{13}C o ^1H .

No se ve el acoplamiento de un núcleo de ^{13}C con los *carbonos* cercanos debido a que la abundancia natural baja hace poco probable que dos núcleos de ^{13}C sean adyacentes, tampoco se ve el acoplamiento de un núcleo de ^{13}C con los *hidrógenos* cercanos debido a que por lo general los espectros de ^{13}C , como se notó previamente (sección 13.6), se registran normalmente utilizando desacoplamiento de banda ancha. Al mismo tiempo que se irradia la muestra con un pulso de energía de rf para cubrir las frecuencias de resonancia del *carbono*, también se irradia por una segunda banda de energía de rf que cubre todas las frecuencias de resonancia del *hidrógeno*. Esta segunda irradiación hace que los hidrógenos inviertan su espín tan rápido que sus campos magnéticos locales promedian cero y no ocurre el acoplamiento con los espines del carbono.

EJEMPLO RESUELTO

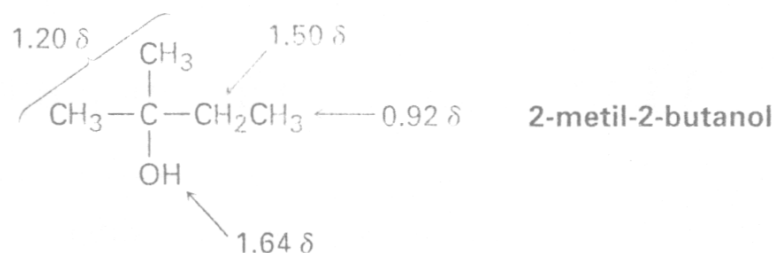
Asignación de una estructura química a partir de un espectro de RMN ^1H

Proponga una estructura para un compuesto, $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$, que se ajuste con los siguientes datos de RMN ^1H : 0.92 δ (3 H, triplete, $J = 7$ Hz), 1.20 δ (6 H, singlete), 1.50 δ (2 H, cuarteto, $J = 7$ Hz), 1.64 δ (1 H, singlete ancho).

Estrategia Como se notó en el ejemplo resuelto 13.2, lo mejor para comenzar a resolver problemas estructurales es calcular un grado de insaturación de la molécula; en el ejemplo presente, una fórmula de $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$ corresponde a una molécula saturada de cadena abierta, un alcohol o un éter.

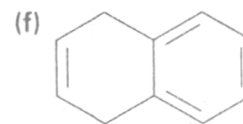
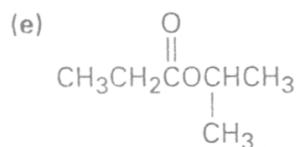
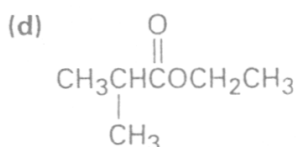
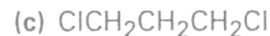
Para interpretar la información de RMN, obsérvese de manera individual cada una de las absorciones. La absorción de tres protones en 0.92 δ se debe a un grupo metilo en un ambiente parecido al de los alcanos, y el patrón de desdoblamiento del triplete implica que el CH_3 es adyacente al CH_2 ; por tanto, nuestra molécula contiene un grupo etilo, CH_3CH_2- . El singlete con seis protones en 1.20 δ se debe a los dos grupos metilo equivalentes parecidos a los alcanos unidos a un carbono sin hidrógenos, $(\text{CH}_3)_2\text{C}$, y el cuarteto de dos protones en 1.50 δ se debe al CH_2 del grupo etilo. Con esto hemos explicado los 5 carbonos y 11 de los 12 hidrógenos de la molécula. El hidrógeno restante, el cual aparece como un singlete ancho de un protón en 1.64 δ , probablemente se debe a un grupo OH, dado que no hay otra manera de explicarlo, y al juntar las piezas obtenemos la estructura.

Solucion



Problema 13.19

Pronostique los patrones de desdoblamiento que esperarías para cada protón en las siguientes moléculas:



Problema 13.20

Dibuje las estructuras para los compuestos que coincidan con las siguientes descripciones:

- (a) $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$; un singulete
- (b) $\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$; un doblete y un septeto
- (c) $\text{C}_4\text{H}_8\text{Cl}_2\text{O}$; dos tripletes
- (d) $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$; un singulete; un triplete y un cuarteto

Problema 13.21

En la figura 13.17 se muestra el espectro integrado de RMN- ^1H de un compuesto de fórmula $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$. Proponga una estructura.

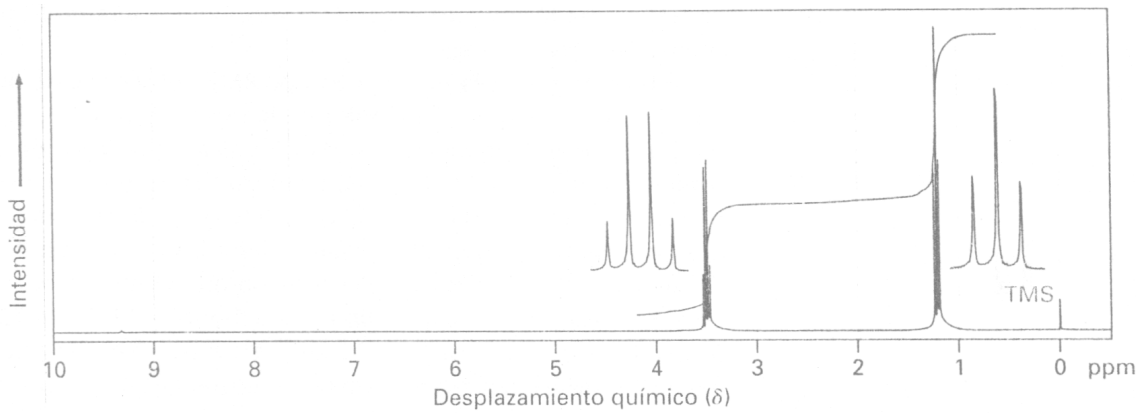


Figura 13.17 Un espectro integrado de RMN-¹H para el problema 13.21.

13.12 Patrones más complejos de desdoblamiento espín-espín

En los espectros de RMN-¹H que hemos visto hasta ahora, los desplazamientos químicos de protones diferentes han sido distintos y los patrones de desdoblamiento espín-espín han sido directos; sin embargo, con frecuencia sucede que los tipos diferentes de hidrógenos en una molécula tienen señales que casualmente se *traslapan*; por ejemplo, el espectro del tolueno (metilbenceno) en la figura 13.18, muestra que cinco protones del anillo aromático da un patrón complejo que se traslapa, aun cuando no todos son equivalentes.

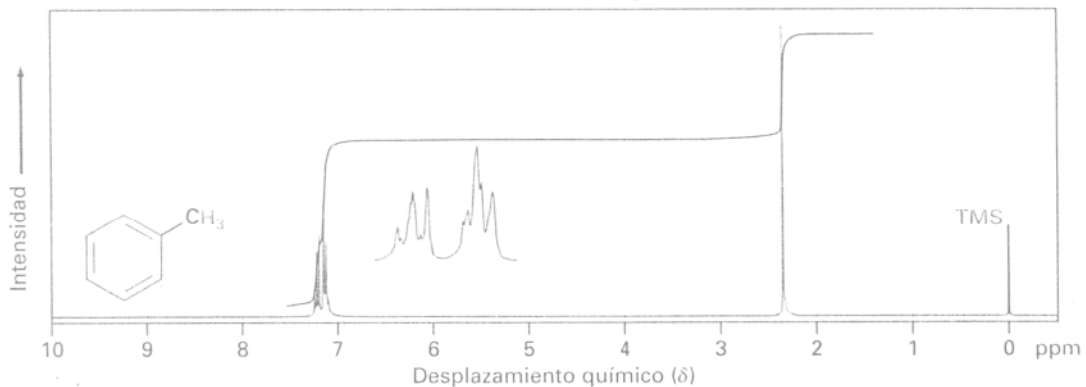


Figura 13.18 El espectro de RMN-¹H del tolueno muestra el traslape de los cinco protones no equivalentes del anillo aromático.

Sin embargo, otra complicación en la espectroscopia de RMN-¹H surge cuando una señal se desdobra por dos o más tipos de protones *no equivalentes*, como es el caso del *trans*-cinamaldehído, aislado a partir del aceite de canela (figura 13.19). Aunque la regla $n + 1$ pronostica el desdoblamiento ocasionado por

protones equivalentes, los desdoblamientos ocasionados por protones no equivalentes son más complejos.

Para comprender el espectro de RMN¹H del *trans*-cinamaldehído, tenemos que aislar las diferentes partes y observar de manera individual la señal de cada protón.

- Los cinco protones del anillo aromático (negro en la figura 13.19) se traslapan en un patrón complejo con un gran pico en 7.42 δ y una absorción ancha en 7.57 δ.

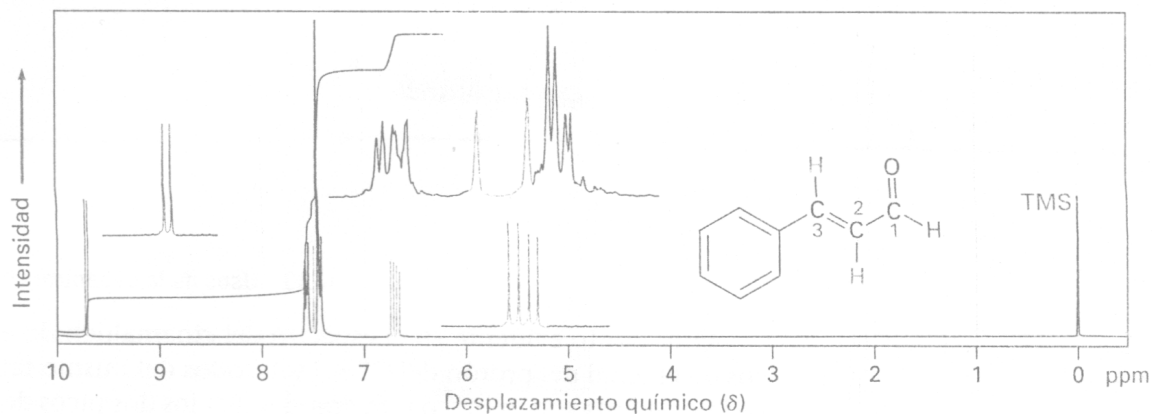


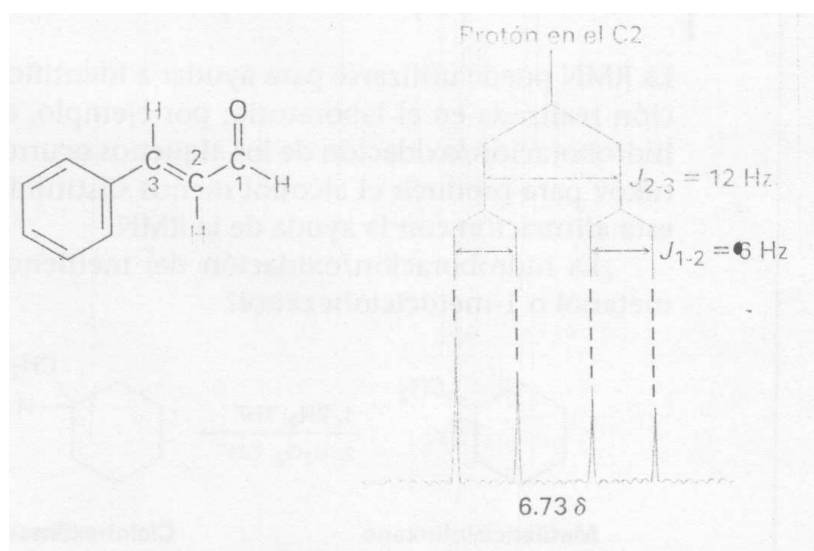
Figura 13.19 El espectro de RMN-¹H del *trans*-cinamaldehído. La señal del protón en C2 (azul) se desdobra en cuatro señales —un doblete de dobletes— por los dos protones vecinos no equivalentes.

- La señal del protón del aldehído en C1 (rojo) aparece en la posición normal hacia el campo bajo en 9.69 ppm y se desdobra en un doblete con $J = 6$ Hz por el protón adyacente en C2.
- El protón vinílico en C3 (verde) está al lado del anillo aromático y por lo tanto se desplaza hacia el campo bajo a partir de la región vinílica normal. Esta señal del protón del C3 aparece como un doblete centrado en 7.49 ppm. Debido a que tiene un protón vecino en C2, su señal se desdobra en un doblete con $J = 12$ Hz.
- La señal del protón vinílico del C2 (azul) aparece en 6.73 ppm y muestra un patrón de absorción de cuatro señales interesante. Se acopla a los dos protones no equivalentes en C1 y C3 con dos constantes de acoplamiento distintas: $J_{1-2} = 6$ Hz y $J_{2-3} = 12$ Hz.

Una buena manera de comprender el efecto del acoplamiento múltiple como el que ocurre para el protón del C2 del *trans*-cinamaldehído es dibujar el *diagrama de*

árbol, como el de la figura 13.20. El diagrama muestra el efecto individual de cada constante de acoplamiento en el patrón general; el acoplamiento con el protón del C3 desdobra la señal del protón del C2 del *trans*-cinamaldehído en un doblete con $J = 12$ Hz. El acoplamiento posterior con el protón del aldehído desdobra cada pico del doblete en dobletes nuevos y, por tanto, observamos un espectro de cuatro señales para el protón del C2.

Figura 13.20 Un diagrama de árbol para el protón del C2 del *trans*-cinamaldehído muestra cómo se acopla con constantes de acoplamiento distintas a los protones del C1 y del C3.

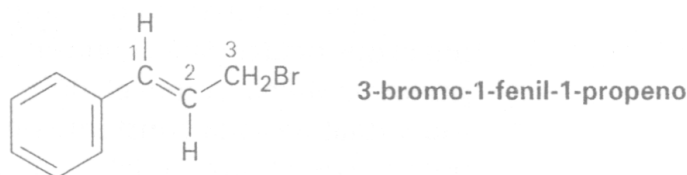


Otro punto evidente en el espectro del cinamaldehído es que los cuatro picos de la señal del protón del C2 no son todos del mismo tamaño; los dos picos de la izquierda son un poco más grandes que los dos picos de la derecha, y tal diferencia de tamaño ocurre siempre que los núcleos acoplados tienen desplazamientos químicos similares —en este caso 7.49δ para el protón del C3 y 6.37δ para el protón del C2—. Los picos cercanos a la señal del patrón acoplado siempre son más grandes, y los picos alejados de la señal del patrón acoplado siempre son más pequeños; por tanto, los picos de la izquierda del multiplete del protón del C2 en 6.73δ están más cercanos a la absorción del protón del C3 en 7.49δ y son más grandes que los picos de la derecha. Al mismo tiempo, el pico de la derecha del doblete del protón del C3 en 7.49δ es más grande que el pico de la izquierda debido a que está más cercano al multiplete del protón del C2 en 6.73δ . Con

frecuencia, este efecto de oblicuidad en los multipletes puede ser útil debido a que dice a dónde mirar en el espectro para encontrar el patrón acoplado: busque en la dirección de los picos más grandes.

Problema 13.22

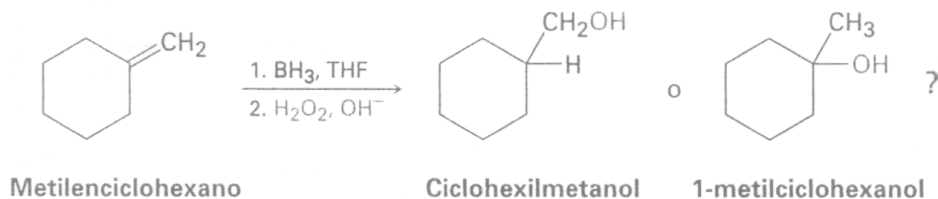
El 3-bromo-1-fenil-1-propeno muestra un espectro de RMN complejo en el que el protón vinílico en el C2 está acoplado con el protón vinílico del C1 ($J = 16$ Hz) y con los protones de metileno del C3 ($J = 8$ Hz). Dibuje el diagrama de árbol para la señal del protón del C2 y explique el hecho de que se observa un multiplete con cinco picos.



13.13 Usos de la espectroscopia de RMN¹H

La RMN puede utilizarse para ayudar a identificar el producto de casi toda reacción realizada en el laboratorio; por ejemplo, en la sección 7.5 dijimos que la hidrobromación/oxidación de los alquenos ocurre con regioquímica anti Markovnikov para producir el alcohol menos sustituido, y ahora podemos comprobar esta afirmación con la ayuda de la RMN.

¿La hidrobromación/oxidación del metilenciclohexano produce ciclohexil metanol o 1-metilciclohexanol?



En la figura 13.21a se muestra el espectro de RMN¹H del producto de la reacción. El espectro muestra una señal para dos protones en 3.40 δ , lo que indica que el producto tiene un grupo $-\text{CH}_2-$ unido a un átomo de oxígeno electronegativo ($-\text{CH}_2\text{OH}$). Además, el espectro *no* muestra el singulete de absorción grande de tres protones cerca de 1 δ , donde esperaríamos que aparezca la señal de un grupo $-\text{CH}_3$.

cuaternario. (La figura 13.21b da el espectro del 1-metilciclohexanol, el producto alternativo.) Por tanto, está claro que el ciclohexilmetanol es el producto de la reacción.

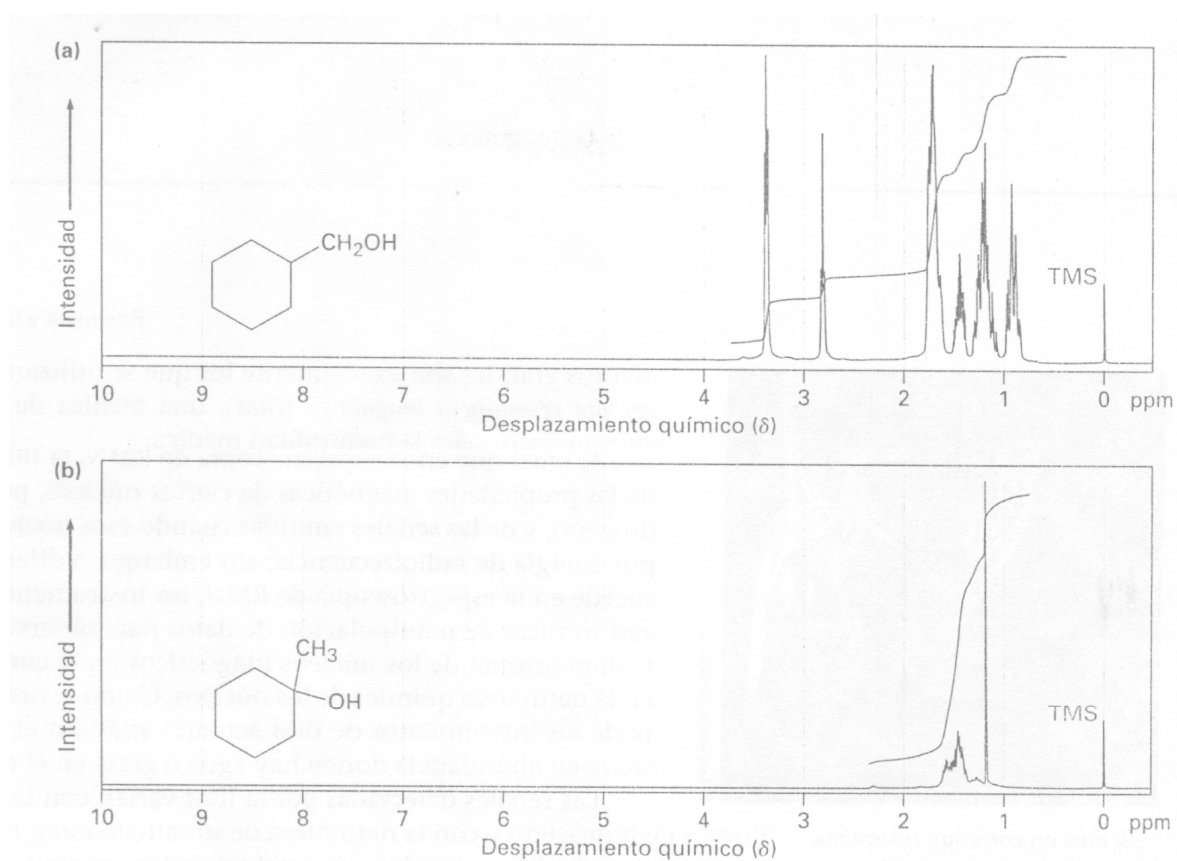


Figura 13.21 (a) El espectro de RMN-¹H del ciclohexilmetanol, el producto de la hidrogenación/oxidación del metilciclohexano, y (b) el espectro de RMN-¹H del 1-metilciclohexanol, el posible producto alternativo de la reacción.

Problema 13.23

¿Cómo puede utilizar la RMN-¹H para determinar la regioquímica de la adición electrofílica para los alquenos? Por ejemplo, ¿la adición de HCl a 1-metilciclohexeno produce 1-cloro-1-metilciclohexano o 1-cloro-2-metilciclohexano?

Enfocado a . . .



Imagen por resonancia magnética (IRM)



Si eres un corredor, realmente no quieres que te suceda esto: la IRM de esta rodilla izquierda muestra la presencia de un quiste en el ganglio.

Según lo practicado por los químicos orgánicos, la espectroscopia de RMN es un método poderoso para la determinación estructural. Una pequeña cantidad de muestra, comúnmente de unos cuantos miligramos o menos, se disuelve en una pequeña cantidad de disolvente, entonces la disolución se coloca en un tubo de cristal delgado, y el tubo se coloca en la abertura estrecha (1-2 cm) entre los polos de un imán potente; sin embargo, imagine que estuviera disponible un instrumento de RMN mucho más grande. En lugar de algunos miligramos, el tamaño de la muestra puede ser decenas de kilogramos; en vez de una abertura estrecha entre los polos magnéticos, la abertura puede ser lo suficientemente grande como para que una persona la escalase de manera que pueda obtenerse un espectro de RMN de las partes del cuerpo. Estos instrumentos grandes son exactamente los que se utilizan para las *imágenes*

por resonancia magnética (IRM), una técnica de diagnóstico de enorme valor para la comunidad médica.

Al igual que en la espectroscopia de RMN, la IRM toma ventaja de las propiedades magnéticas de ciertos núcleos, por lo regular hidrógeno, y de las señales emitidas cuando esos núcleos se estimulan por energía de radiofrecuencia; sin embargo, a diferencia de lo que sucede en la espectroscopia de RMN, los instrumentos de IRM utilizan técnicas de manipulación de datos para observar la localización tridimensional de los núcleos magnéticos en el cuerpo en lugar de en la naturaleza química de los núcleos. Como se notó, la mayor parte de los instrumentos de IRM actuales analizan el hidrógeno, presente en abundancia donde hay agua o grasa en el cuerpo.

Las señales detectadas por la IRM varían con la densidad de los átomos de hidrógeno y con la naturaleza de sus alrededores, lo que permite la identificación de diferentes tipos de tejido e incluso permite la visualización del movimiento. Por

ejemplo, puede medirse el volumen de la sangre que sale del corazón en un solo latido, y observarse el movimiento del corazón; pueden verse claramente también los tejidos blandos que no se muestran bien en los rayos X, lo que permite el diagnóstico de tumores cerebrales, hemorragias y otras condiciones. La técnica también está disponible para diagnosticar lesiones en las rodillas u otras articulaciones y es una alternativa no invasiva para las exploraciones quirúrgicas.

Pueden detectarse por la IRM varios tipos de átomos además del hidrógeno, y se están explorando las aplicaciones de las imágenes basadas en los átomos del ³¹P. Esta técnica guarda una gran promesa para los estudios sobre el metabolismo.