

Universidad Nacional Autónoma de México



Química Orgánica III (1506)

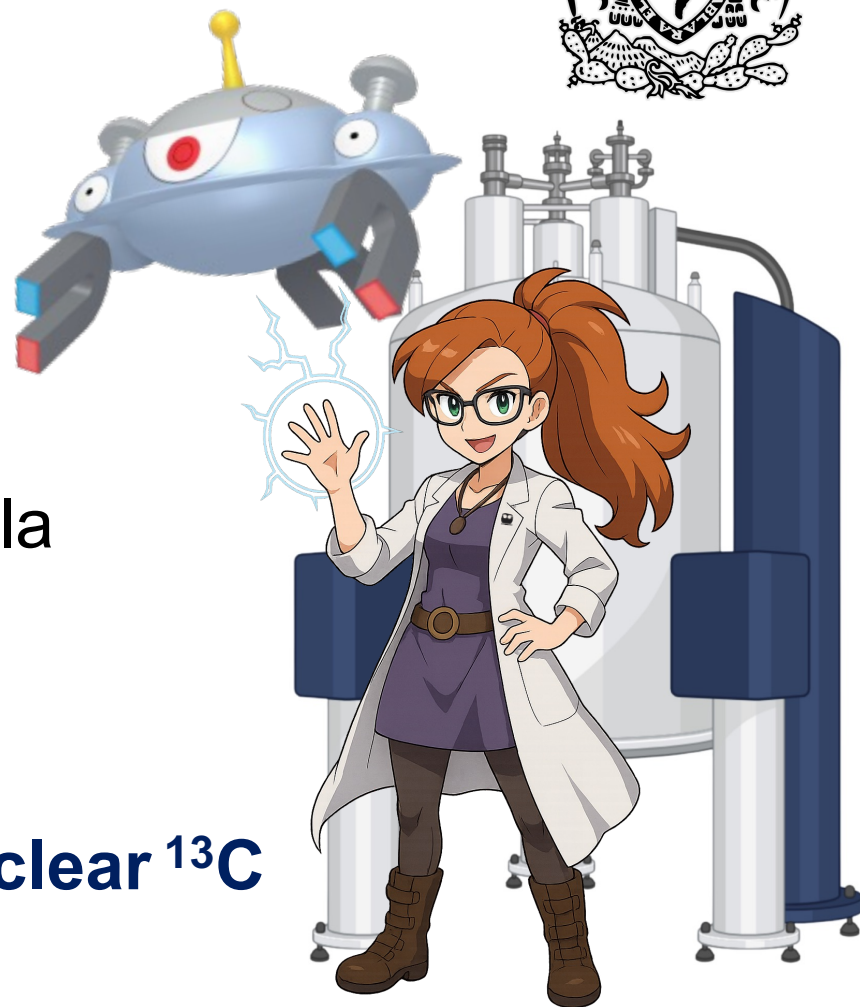
Laboratorio

Semestre 2026 - 2

M. en C. Arturo García Zavala

Taller

**Resonancia Magnética Nuclear ^{13}C
(RMN- ^{13}C)**

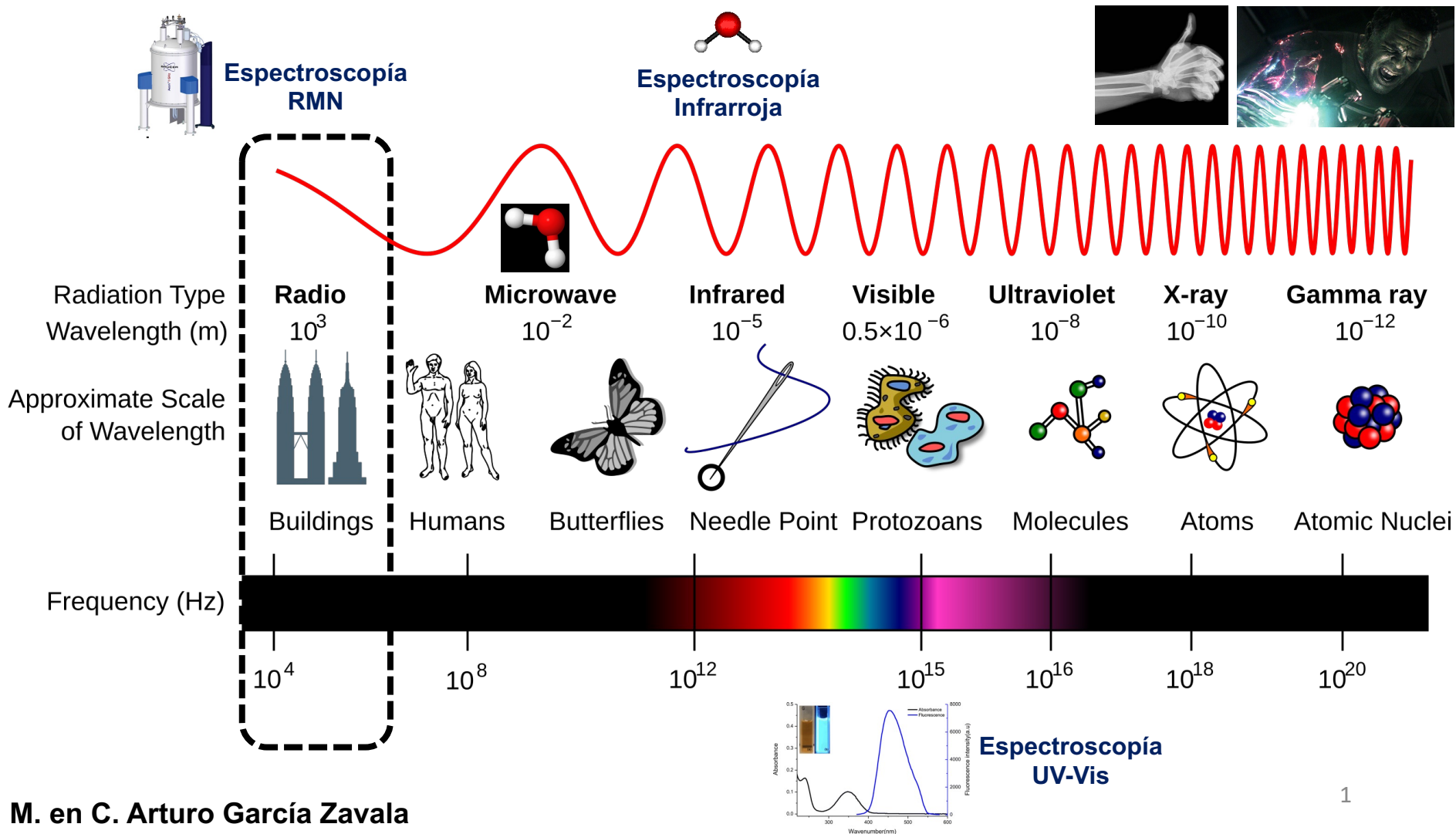


11/02/2026

RMN es una técnica espectroscópica

¿Qué es espectroscopía?

Es el estudio de la interacción de la radiación electromagnética con la materia.



Uno de los dos requerimientos para observar el fenómeno de RMN es el uso de radiofrecuencia.



Espectro electromagnético

Radiation	Wavelength, λ (nm)	Frequency, ν (Hz)	Energy (kJ mol ⁻¹)
Cosmic rays	$<10^{-3}$	$>3 \times 10^{20}$	$>1.2 \times 10^8$
Gamma rays	$10^{-1}-10^{-3}$	$3 \times 10^{18}-3 \times 10^{20}$	$1.2 \times 10^6-1.2 \times 10^8$
X-rays	$10-10^{-1}$	$3 \times 10^{16}-3 \times 10^{18}$	$1.2 \times 10^4-1.2 \times 10^6$
Far ultraviolet	200–10	$1.5 \times 10^{15}-3 \times 10^{16}$	$6 \times 10^2-1.2 \times 10^4$
Ultraviolet	380–200	$8 \times 10^{14}-1.5 \times 10^{15}$	$3.2 \times 10^2-6 \times 10^2$
Visible	780–380	$4 \times 10^{14}-8 \times 10^{14}$	$1.6 \times 10^2-3.2 \times 10^2$
Infrared	$3 \times 10^4-780$	$10^{13}-4 \times 10^{14}$	$4-1.6 \times 10^2$
Far infrared	$3 \times 10^5-3 \times 10^4$	$10^{12}-10^{13}$	0.4–4
Microwaves	$3 \times 10^7-3 \times 10^5$	$10^{10}-10^{12}$	$4 \times 10^{-3}-0.4$
Radio frequency	$10^{11}-3 \times 10^7$	10^6-10^{10}	$4 \times 10^{-7}-4 \times 10^{-3}$

Macomber, R. S. *A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy*; John Wiley & Sons, 1997.

El segundo requerimiento es la presencia de un campo magnético.

Características del campo magnético:

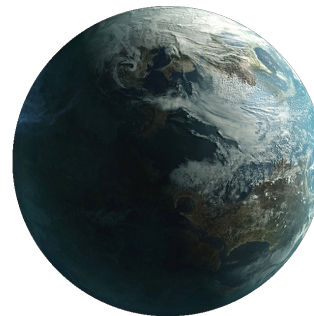
- *Intenso*
- *Homogéneo*
- *Constante*



Equipo de RMN

5 - 16 T

Tierra



0.00006 T

Imán de refrigerador



0.01 T

Composición del núcleo atómico

$$A = Z + N$$

A = Número de masa

Z = Número atómico (número de protones)

N = Número de neutrones

^1H contiene 1 protón y 0 neutrones

^2H contiene 1 protón y 1 neutrón

^{12}C contiene 6 protones y 6 neutrones

^{13}C contiene 6 protones y 7 neutrones

**¡La molécula no tiene!
¡Los átomos no tiene espín!**

¡El núcleo tiene espín! (gracias al p^+ y al n^0)



Número cuántico de espín nuclear: m

Importancia de la paridad de protones y neutrones

Un **espín de protón** solo puede aparearse con (y cancelarse con) **otro espín de protón**, pero no con un **espín de neutrón**, y viceversa. Esta regla nos permite **clasificar cada isótopo en uno de tres grupos**:

- **Grupo 1:** Núcleos con **Z par y N par** (y, por lo tanto, **A par**).
- **Grupo 2:** Núcleos con **Z impar y N impar** (y, por lo tanto, **A par**).
- **Grupo 3:** Núcleos con **Z par y N impar**, o con **Z impar y N par** (en ambos casos, **A impar**).

- **Grupo 1:** Núcleos con **Z par y N par** (y, por lo tanto, **A par**).

En estos núcleos, **todos los espines de los protones están apareados y todos los espines de los neutrones también están apareados**, lo que da como resultado un **espín nuclear neto igual a cero ($I = 0$)**.

Estos núcleos son **invisibles a la RMN**.

Algunos ejemplos incluyen los **isótopos abundantes** ^{12}C , ^{16}O , ^{18}O y ^{32}S .

- **Grupo 2:** Núcleos con **Z impar y N impar** (y, por lo tanto, **A par**).

Estos núcleos deben tener un **número impar de protones no apareados** ($I = 1/2$) y un **número impar de neutrones no apareados** ($I = 1/2$), por lo que el **espín magnético neto** debe ser un **entero distinto de cero** [es decir, un múltiplo entero de $2(1/2)$].

Dichos núcleos son **detectables por RMN**. Algunos ejemplos comunes son:



- **Grupo 3:** Núcleos con **Z par y N impar**, o con **Z impar y N par** (en ambos casos, **A impar**).

Estos núcleos deben tener un **número par de protones** (todos apareados) y un **número impar de neutrones no apareados**, o viceversa.

Por lo tanto, el **espín magnético neto** es un múltiplo impar de $\frac{1}{2}$, y estos núcleos pueden ser **detectados por RMN**.

Algunos ejemplos incluyen:

^1H ($I = \frac{1}{2}$) ^{11}B ($I = \frac{3}{2}$) ^{13}C ($I = \frac{1}{2}$) ^{15}N ($I = \frac{1}{2}$)

^{17}O ($I = \frac{5}{2}$) ^{19}F ($I = \frac{1}{2}$) ^{29}Si ($I = \frac{1}{2}$) ^{31}P ($I = \frac{1}{2}$)

Solo nos enfocaremos en aquellos con espín
magnético $I = 1/2$

^1H ($I = 1/2$)
 ^{13}C ($I = 1/2$)



Esfera
simétrica

^{11}B ($I = 3/2$)



Forma de huevo
No simétrica
(cuadrupolo)

Multiplicidad = $2I + 1$

(Número total de estados de espín)

$m = +1/2$

$m = -1/2$

Cada estado tiene su propio número
cuántico de espín

TABLE 2.1 Magnetic Properties of Selected Particles^a

Isotope	% ^b	Z	N	A	I	γ^c	ν^d	μ^e	Q^f	S^g
n	—	0	1	1	$\frac{1}{2}$	-183.26	29.167	-1.91315	0	0.322
¹ H	99.985	1	0	1	$\frac{1}{2}$	267.512	42.5759	2.79268	0	1.00
² H			1	2	1	41.0648	6.53566	0.857387	2.73×10^{-3}	9.65×10^{-3}
⁷ Li			4	7	$\frac{3}{2}$	103.96	16.546	3.2560	-3×10^{-2}	0.293
¹⁰ B			5	10	3	28.748	4.5754	1.8007	7.4×10^{-2}	1.99×10^{-2}
¹¹ B			6	11	$\frac{3}{2}$	85.828	13.660	2.6880	3.55×10^{-2}	0.165
¹³ C	1.108	6	7	13	$\frac{1}{2}$	67.2640	10.7054	0.702199	0	1.59×10^{-2}
¹⁴ N	99.63	7	7	14	1	19.325	3.0756	0.40347	1.6×10^{-2}	1.01×10^{-3}
¹⁵ N	0.37	7	8	15	$\frac{1}{2}$	-27.107	4.3142	-0.28298	0	1.04×10^{-3}
¹⁷ O	0.037	8	9	17	$\frac{5}{2}$	-36.27	5.772	-1.8930	-2.6×10^{-2}	2.91×10^{-2}
¹⁹ F	100	9	10	19	$\frac{1}{2}$	251.667	40.0541	2.62727	0	0.833
²³ Na	100	11	12	23	$\frac{3}{2}$	70.761	11.262	2.2161	0.14	9.25×10^{-2}
²⁷ Al	100	13	14	27	$\frac{5}{2}$	69.706	11.094	3.6385	0.149	0.206
²⁹ Si	4.70	14	15	29	$\frac{1}{2}$	-53.142	8.4578	-0.55477	0	7.84×10^{-3}
³¹ P	100	15	16	31	$\frac{1}{2}$	108.29	17.235	1.1305	0	6.63×10^{-2}
³³ S	0.76	16	17	33	$\frac{3}{2}$	20.517	3.2654	0.64257	-6.4×10^{-2}	2.26×10^{-3}
³⁵ Cl	75.53	17	18	35	$\frac{3}{2}$	26.212	4.1717	0.82091	-7.89×10^{-2}	4.70×10^{-3}
³⁷ Cl	24.47	17	20	37	$\frac{3}{2}$	21.82	3.472	0.6833	-6.21×10^{-2}	2.71×10^{-3}

^aAbstracted in part from *The 64th CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, Boca Raton, FL, 1984.

^bNatural abundance.

^cMagnetogyric ratio in units of $10^6 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

^dResonance frequency in megahertz in a 1-T field.

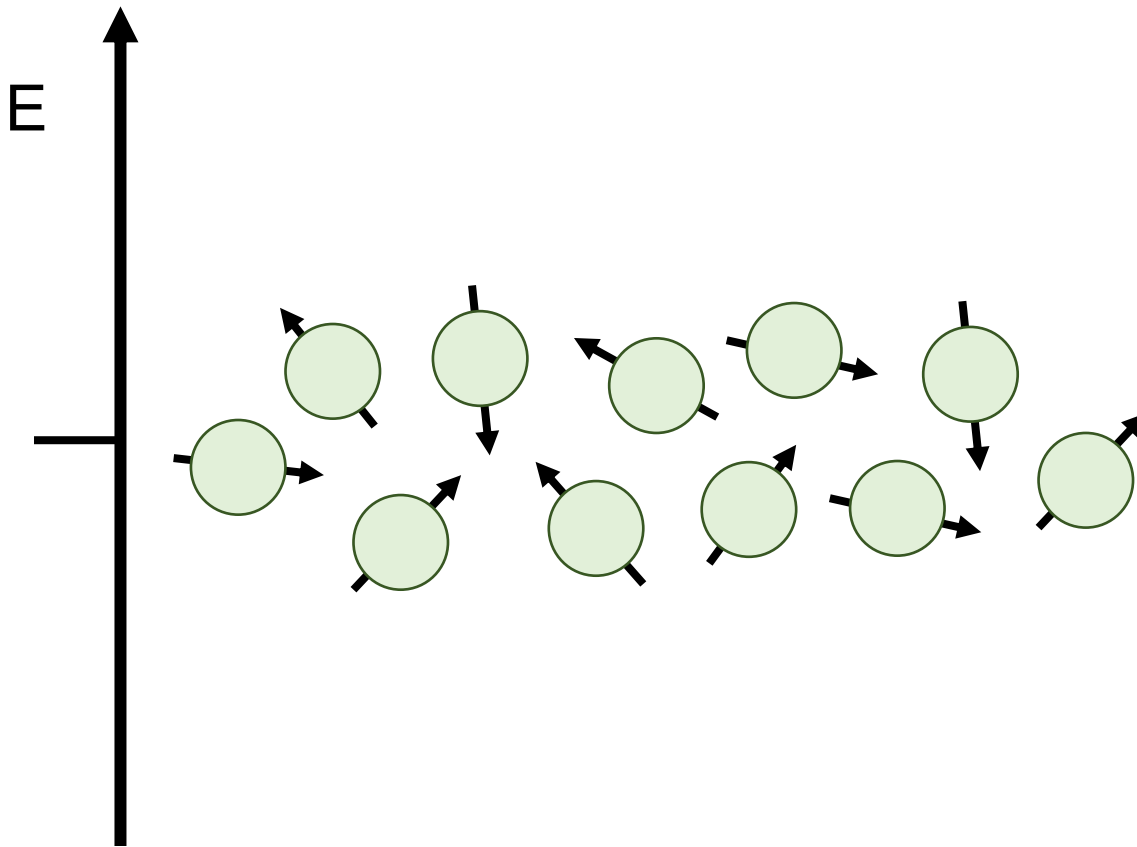
^eMagnetic moment in nuclear magnetons.

^fElectric quadrupole moment in barns.

^gSensitivity (relative to proton) for equal numbers of nuclei at constant field; $S = 7.652 \times 10^{-3} \mu^3 (I + 1)/I^2$.

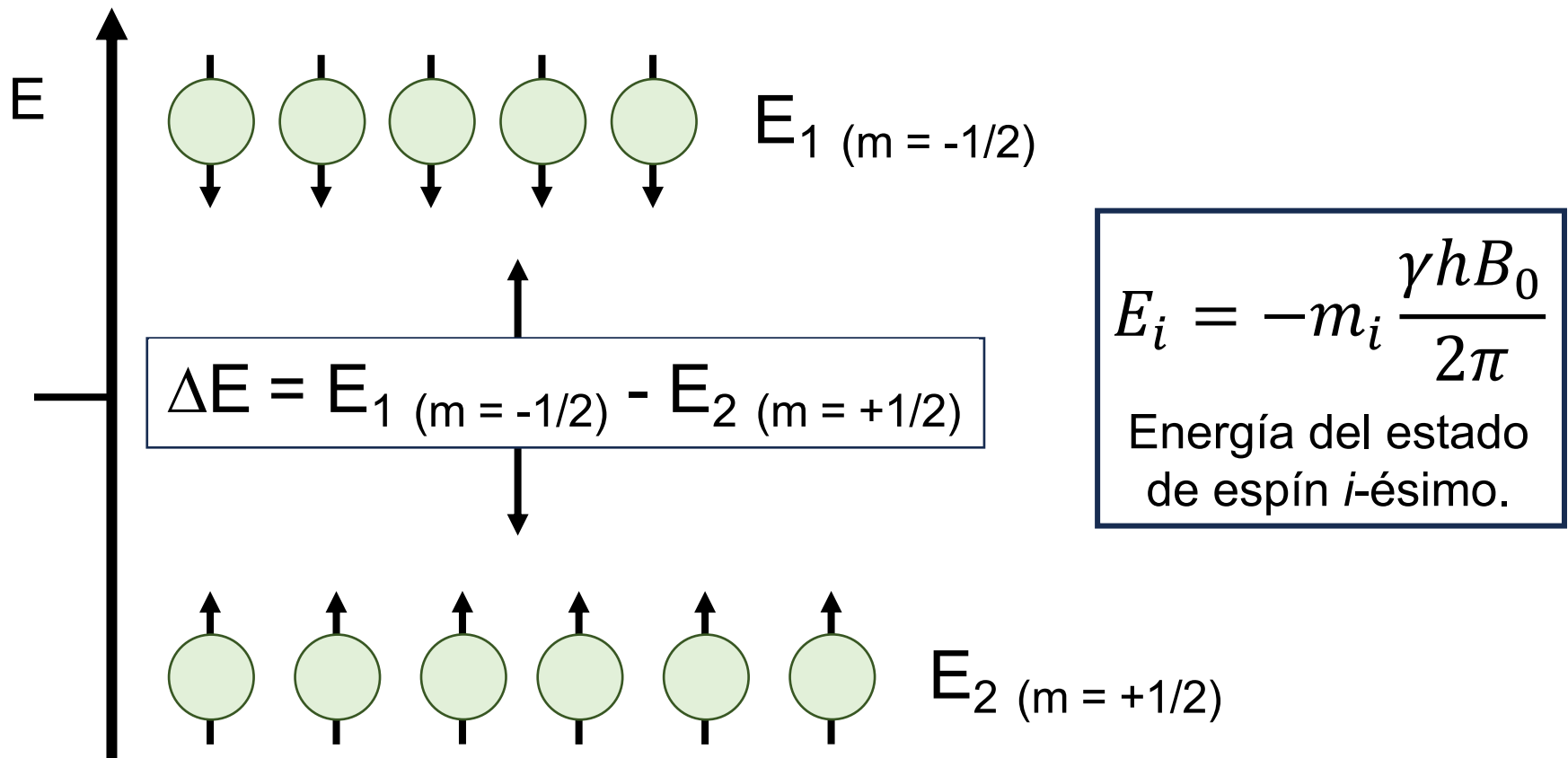
Macomber, R. S. A
*Complete Introduction to
 Modern NMR
 Spectroscopy*; John Wiley &
 Sons, 1997. 11

En ausencia de un campo magnético externo ($B_0 = 0$) ..



.. los vectores de los momentos magnéticos nucleares individuales se cancelan unos con otros.

En presencia de un campo magnético externo ($B_0 \neq 0$)



Cuando un campo magnético externo está presente, se genera una diferencia poblacional acorde con la **distribución de Boltzmann.**

$$\Delta E = E_1 \text{ (m = -1/2)} - E_2 \text{ (m = +1/2)}$$

$$\Delta E = E_1 - E_2 = -\left(-\frac{1}{2}\right)\frac{\gamma h B_0}{2\pi} - -\left(+\frac{1}{2}\right)\frac{\gamma h B_0}{2\pi}$$

$$\Delta E = \frac{\gamma h B_0}{2\pi}$$

$$\Delta E = \frac{\gamma h B_0}{2\pi}$$

γ = Constante giromagnética

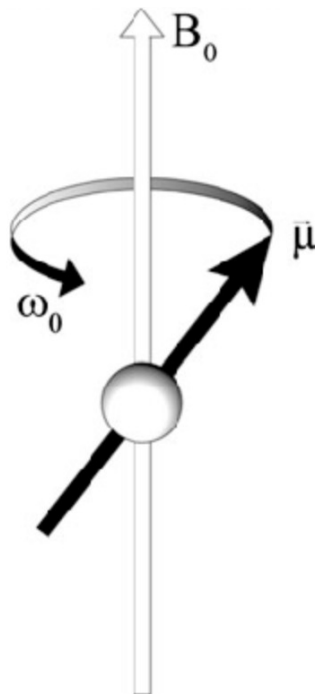
h = Constante de Planck

B_0 = Campo magnético externo

Constante giromagnética (γ), frecuencia de precesión (ν_p) y frecuencia de Larmor (ω)

La suma de todos estos pequeños momentos magnéticos se describen como **un solo vector**: el vector de magnetización (**m**).

$$\omega = \gamma B_0$$



$$\nu_p = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\gamma B_0}{2\pi}$$

$$E_{fotón} = h\nu_p = \frac{h\omega}{2\pi} = \frac{h\gamma B_0}{2\pi}$$

Abundancia isotópica

^1H	99.985	1	0	1
^{13}C	1.108	6	7	13

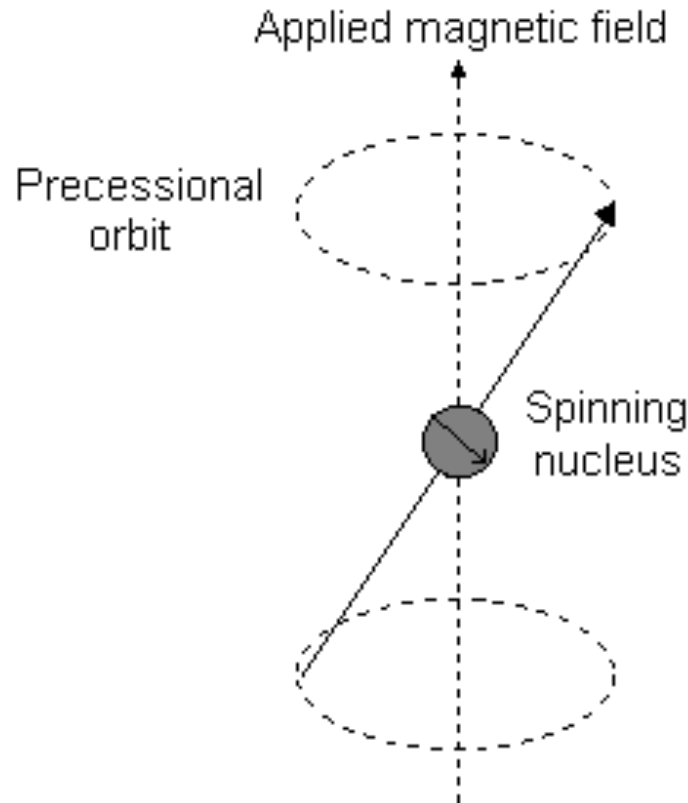
Constante giromagnética

$\frac{2}{1}$	267.512
$\frac{2}{1}$	67.2640

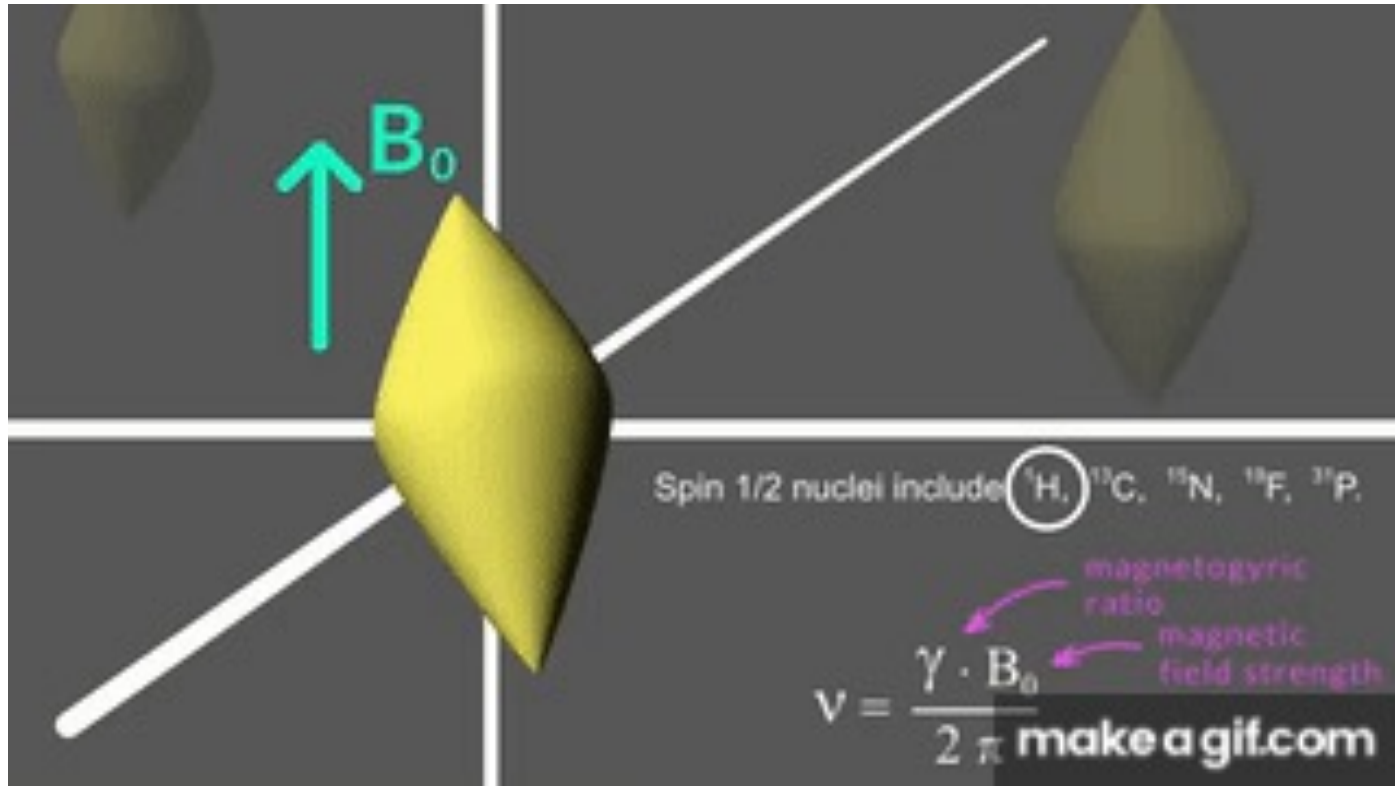
$$\frac{\gamma_{1H}}{\gamma_{13C}} \approx 4$$

^1H

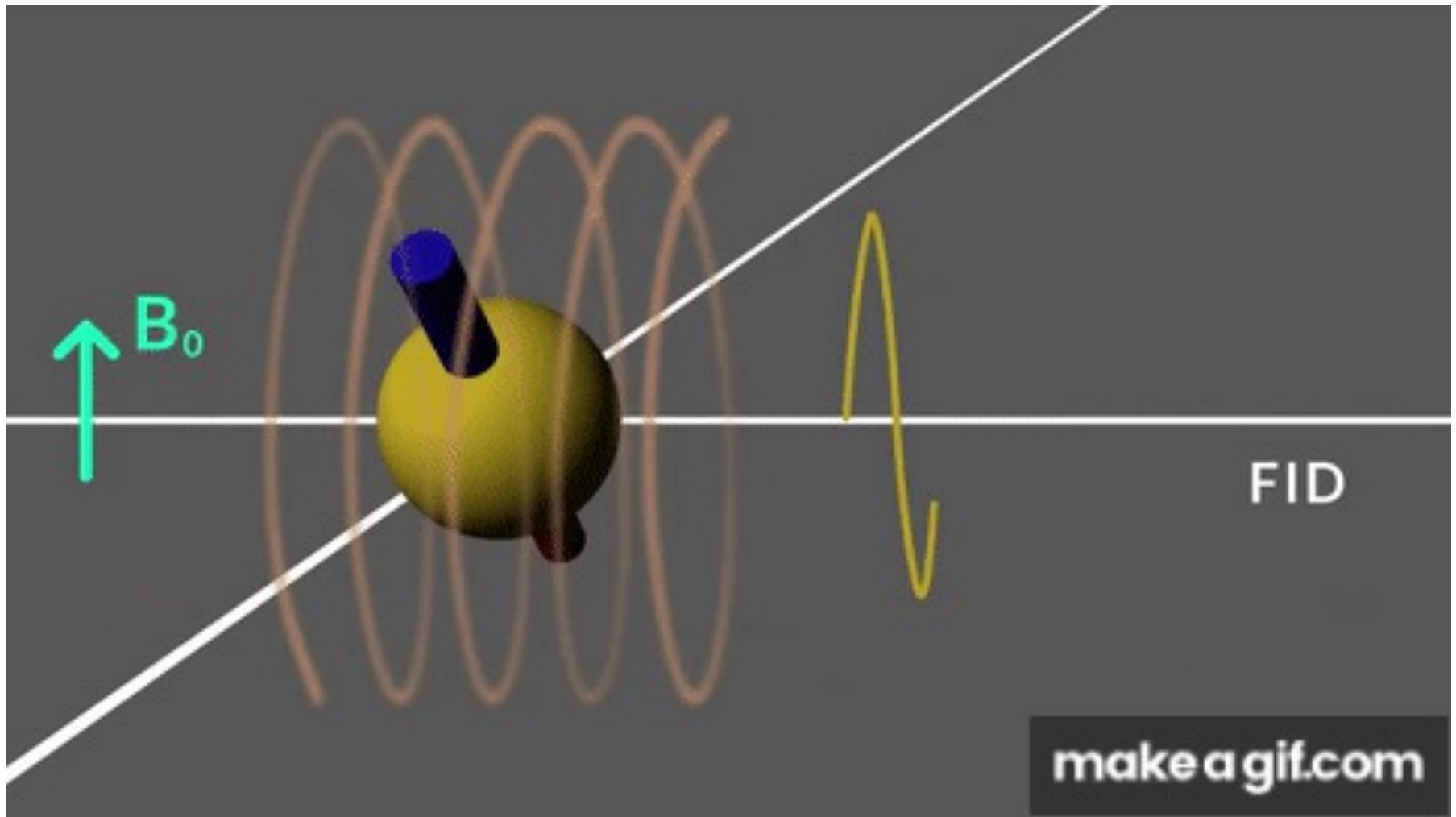
^{13}C

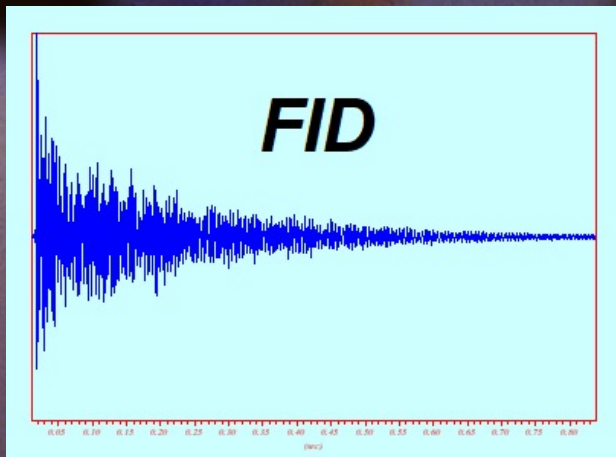


En presencia de un campo magnético externo ($B_0 \neq 0$)



Pulso de radiofrecuencia (excitación) y proceso de relajación





¿Qué es? ¿Qué es?

Transformada de Fourier (FT)

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos \omega t dt + i \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin \omega t dt$$

FID

FT

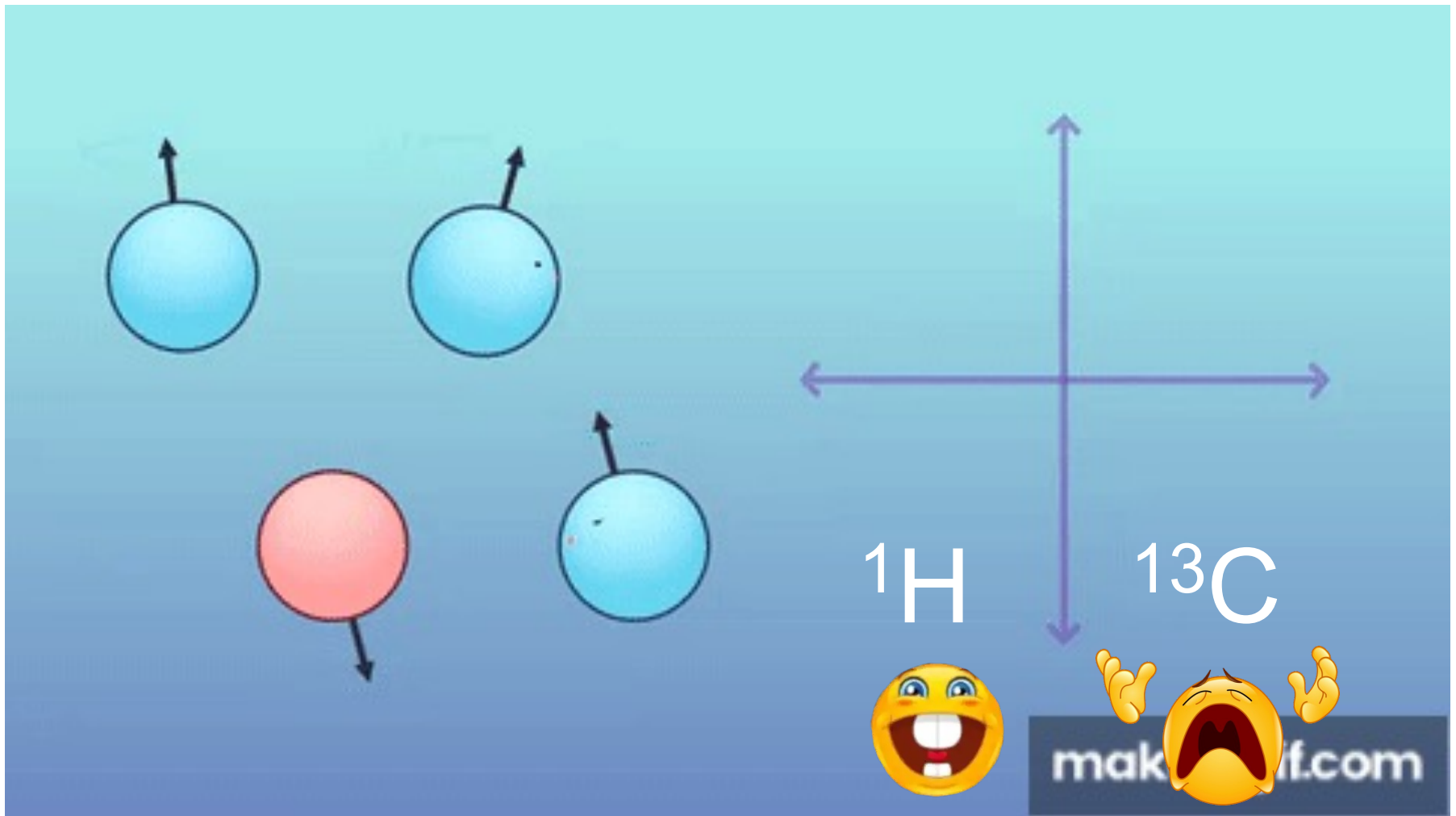
Espectro

Dominio del tiempo



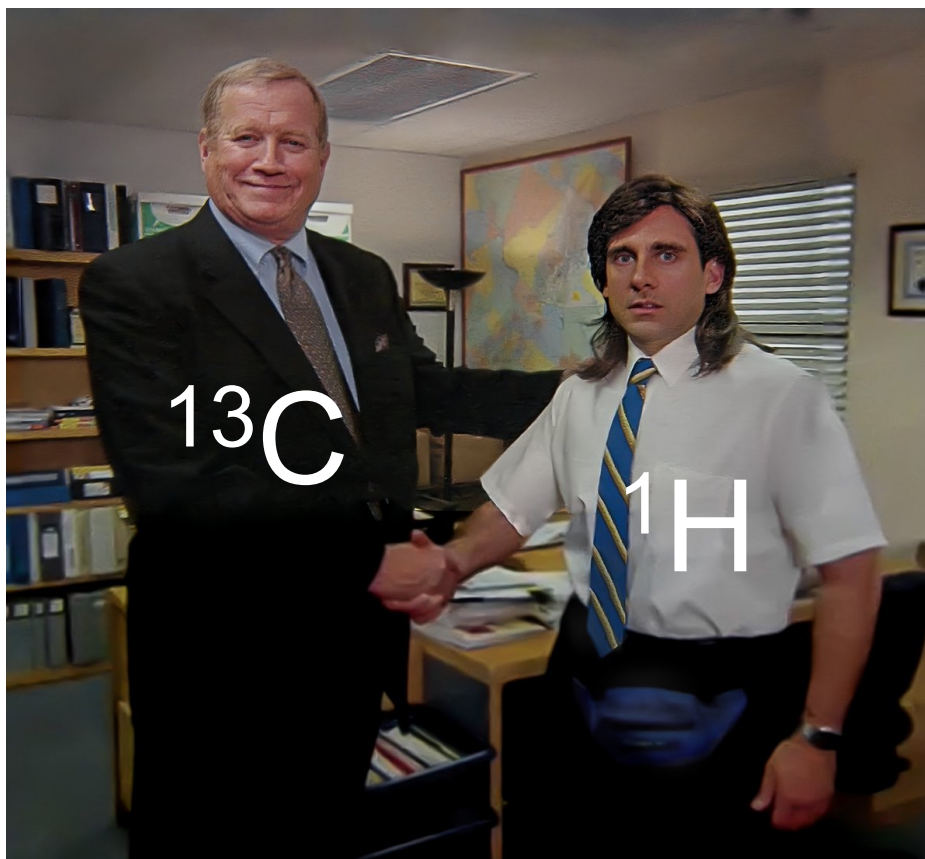
Dominio de la frecuencia

Proceso de relajación



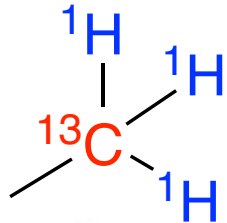
Efecto nuclear Overhousser (NOE)

Transferencia de la polarización de espín nuclear de una población de espines a otra.

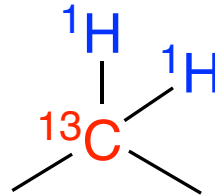


Cuanto más hidrógenos tenga enlazados un carbono, más rápida será la transferencia de polarización y mayor será la intensidad de la señal.

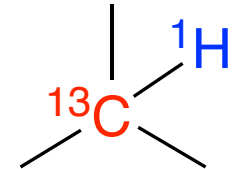
Carbono primario
(metilo CH_3)



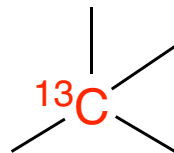
Carbono secundario
(metileno CH_2)



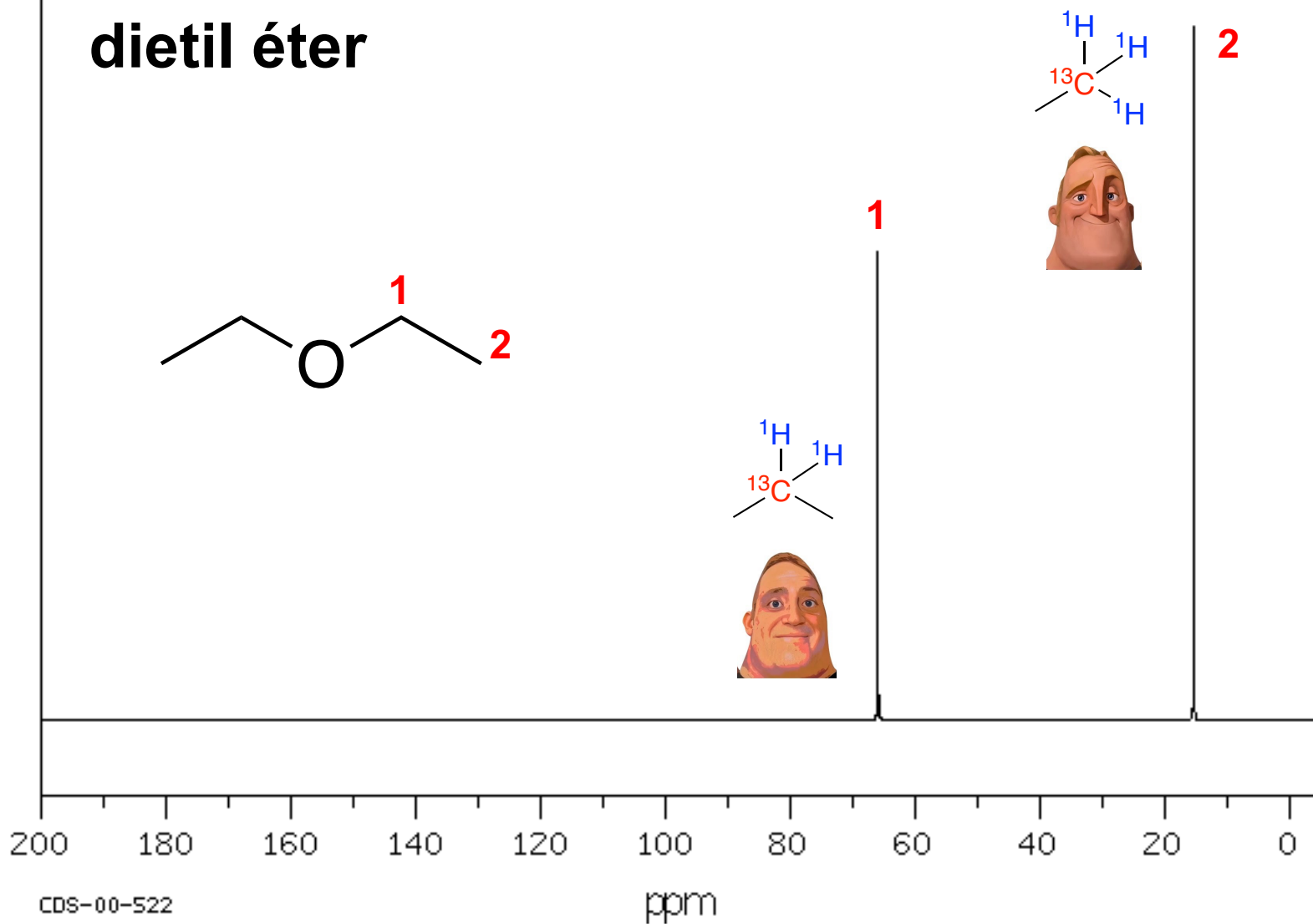
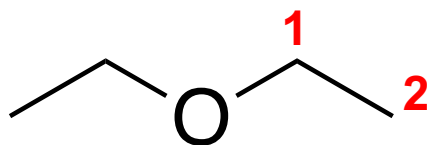
Carbono terciario
(metino CH)



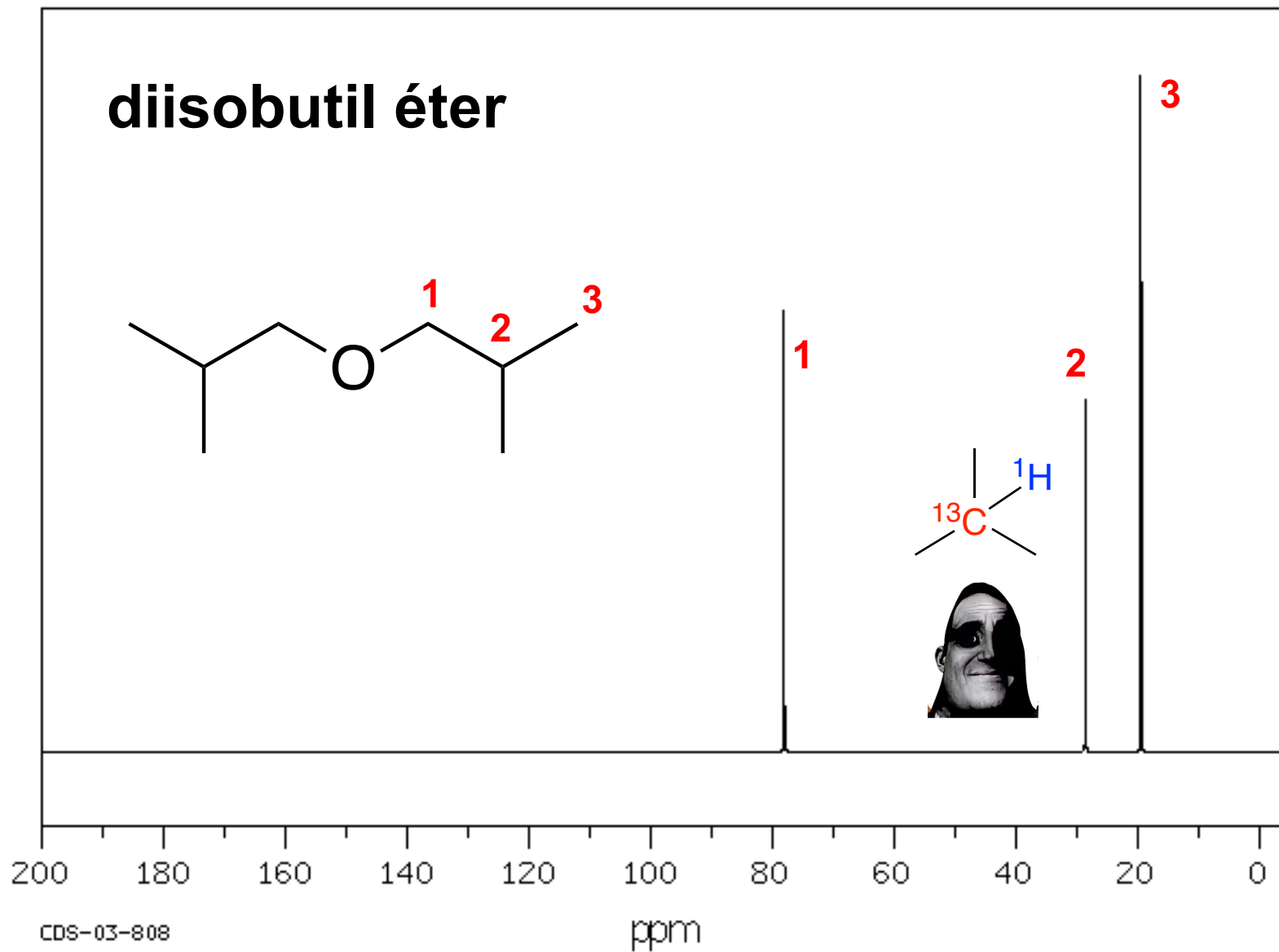
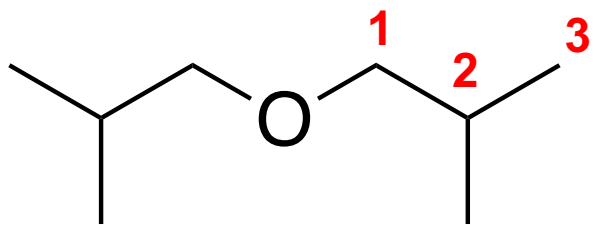
Carbono cuaternario (C)



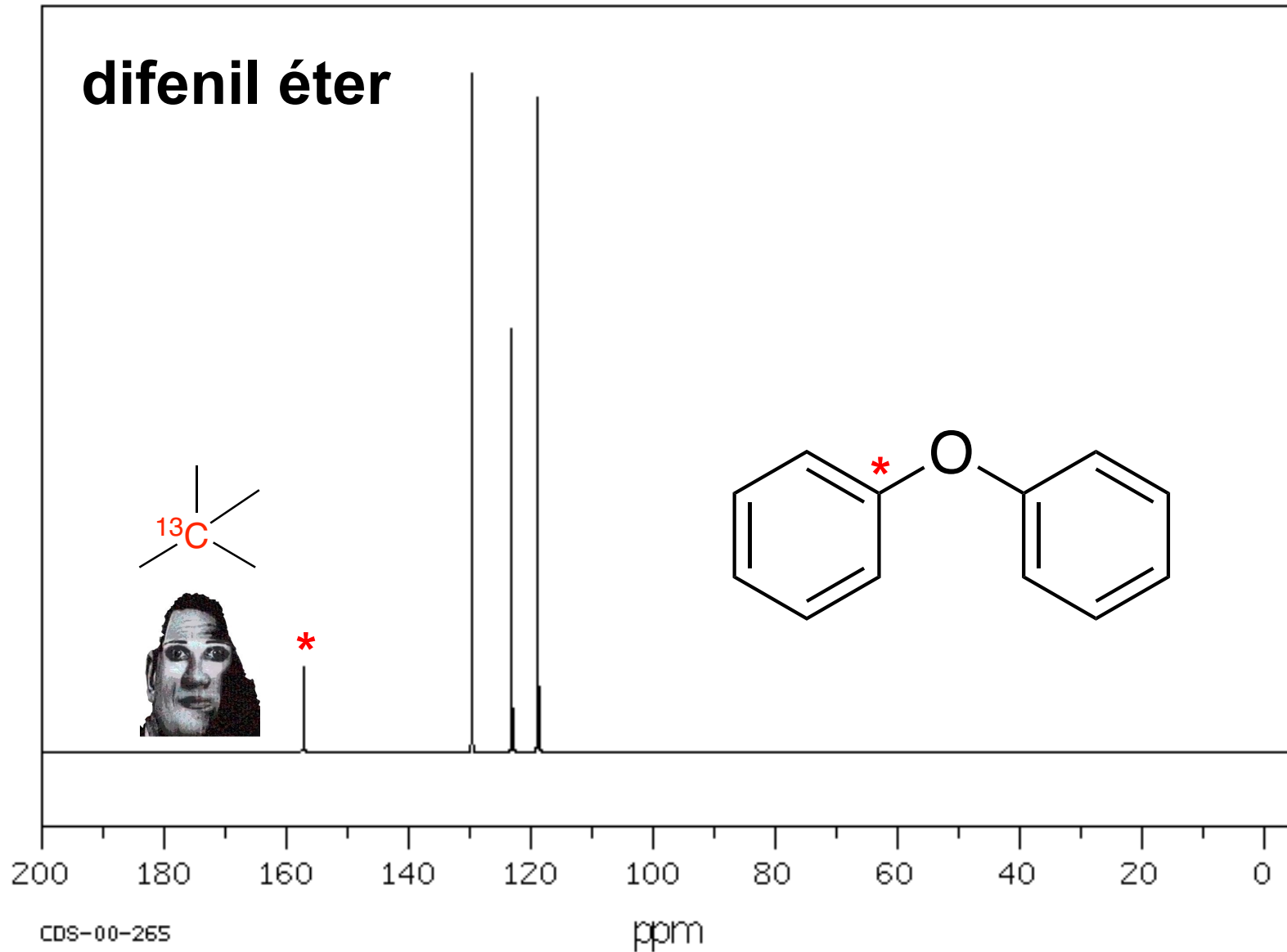
dietil éter



diisobutil éter

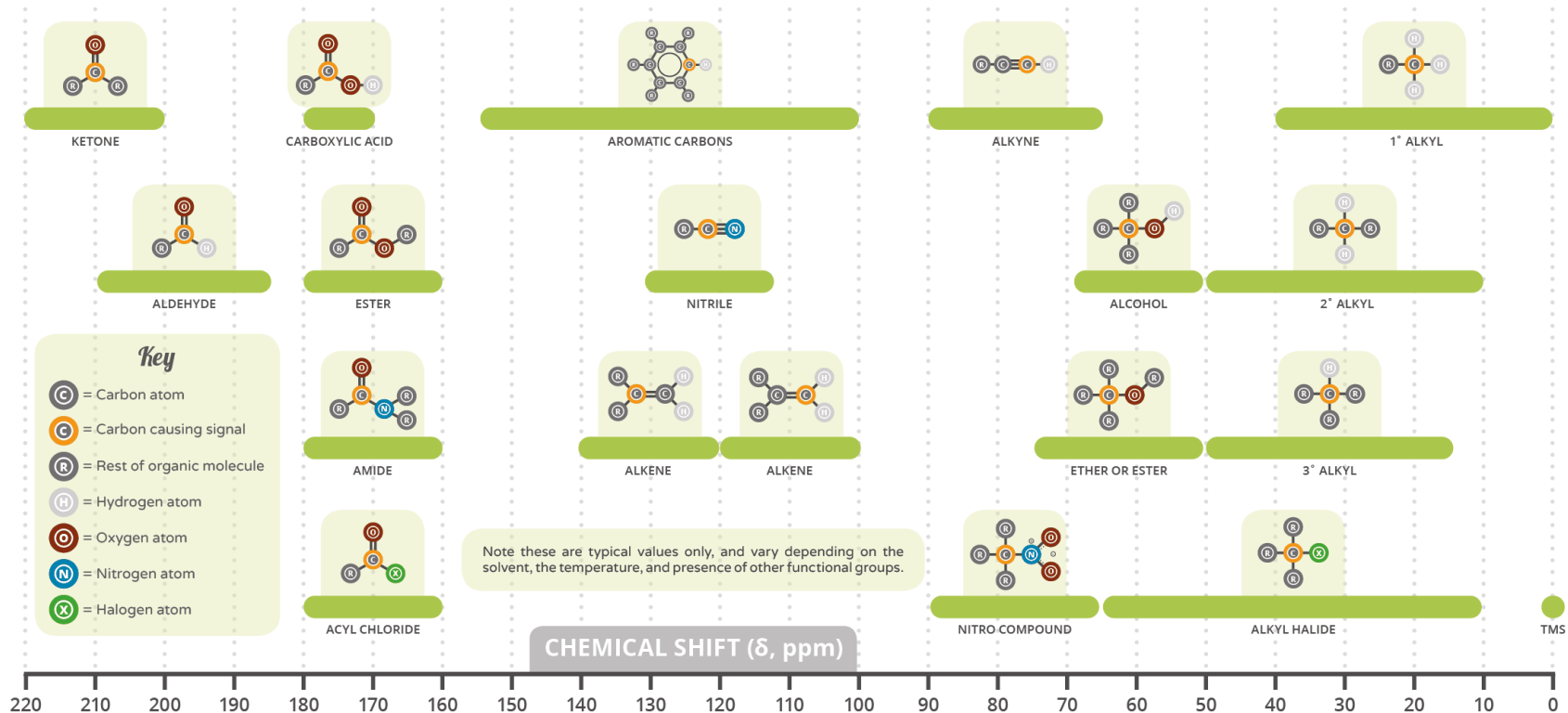


difenil éter



A GUIDE TO ^{13}C NMR CHEMICAL SHIFT VALUES

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) is a commonly used technique for organic compound structure determination. In ^{13}C NMR, applying an external magnetic field causes the nuclei spin to flip. The environment of the carbon atom in the molecule affects where the signal is seen on the resultant spectrum.



^{12}C 99%

^{13}C 1%

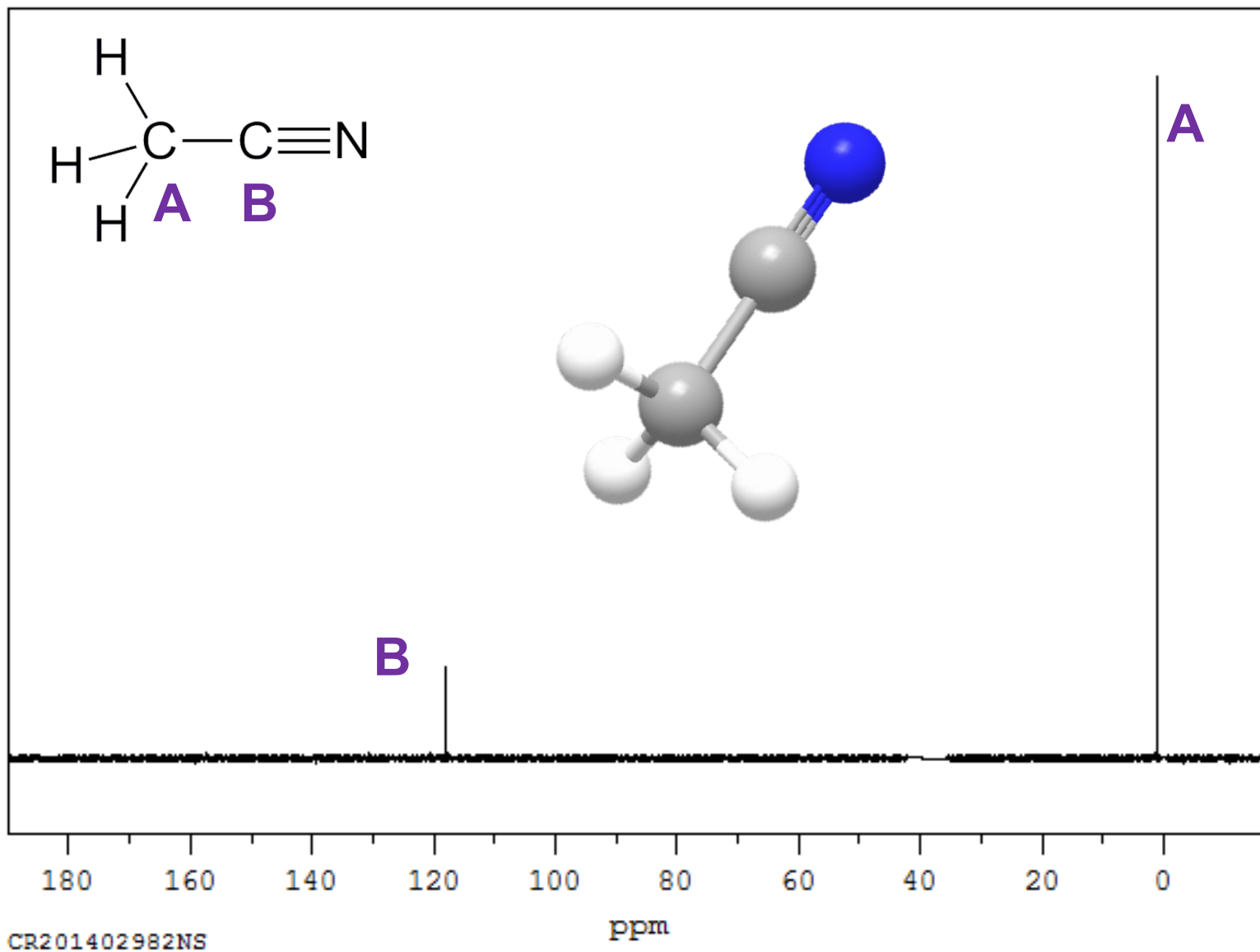
Only 1% of carbon atoms are carbon-13, atoms which have one more neutron than carbon-12. NMR doesn't work for carbon-12, as its nucleus doesn't have a 'spin'. The frequency required to 'flip' a carbon-13 nucleus is around a quarter of that required to flip an hydrogen nucleus in H-NMR. As the probability of two adjacent carbons in a single molecule being carbon-13 atoms is very low, no splitting of peaks is seen, unlike in H-NMR.



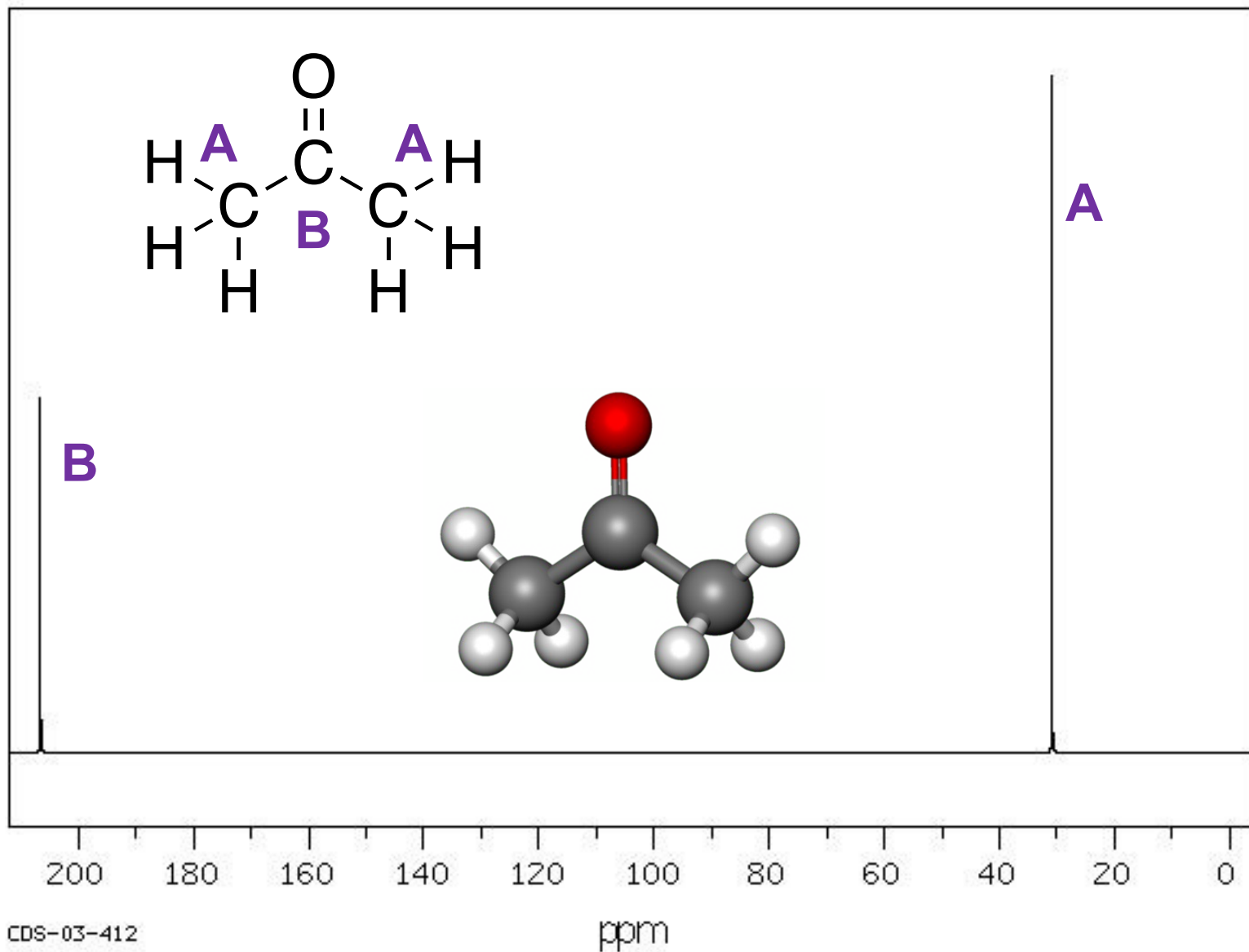
© COMPOUND INTEREST 2015 - WWW.COMPOUNDCHEM.COM | Twitter: @compoundchem | Facebook: www.facebook.com/compoundchem
This graphic is shared under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives licence.

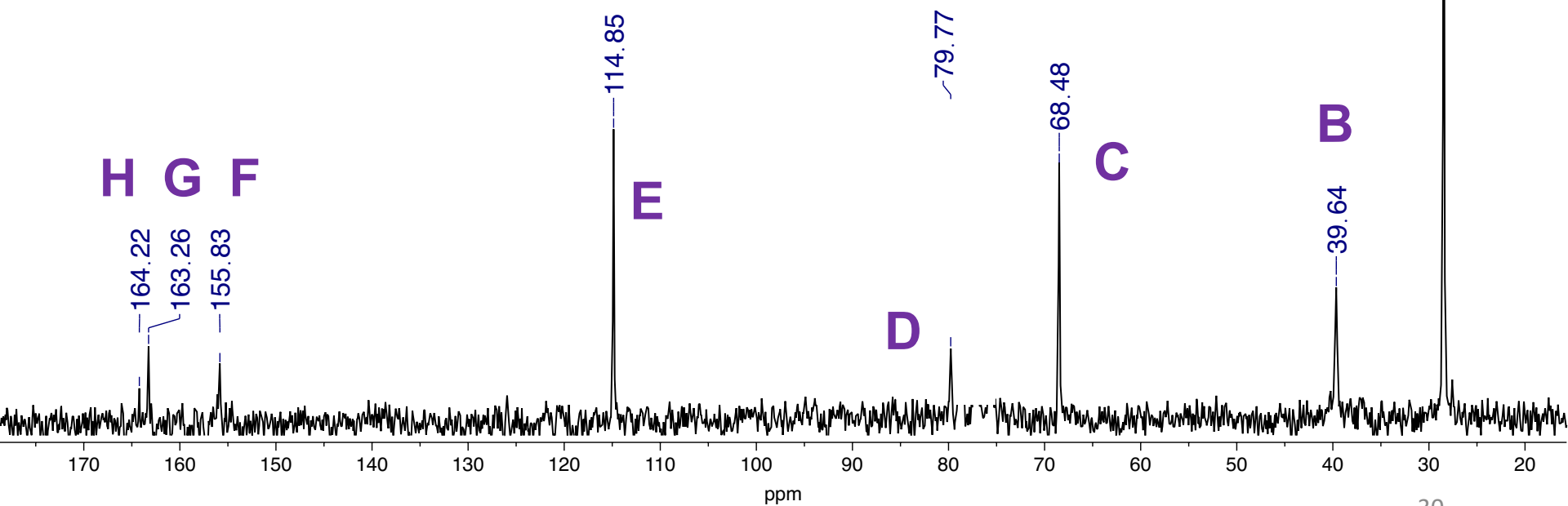
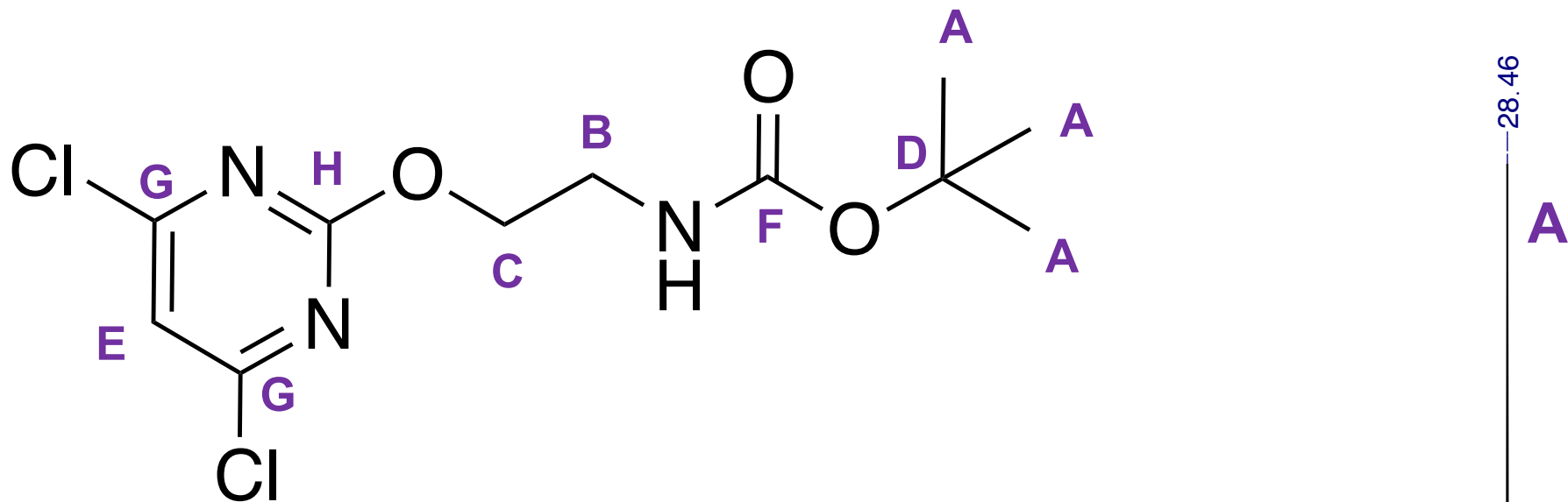


acetonitrilo



acetona

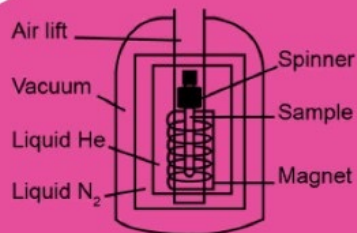




How NMR Works

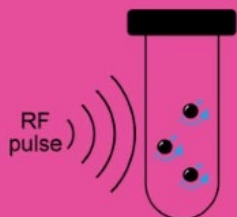
IN 6 STEPS

1



Sample is lowered into a magnet where it is spun and hit with electromagnetic pulses in the radio frequency (RF) range. The RF frequency is tuned to the specific nucleus you are studying (e.g. H-1 or C-13).

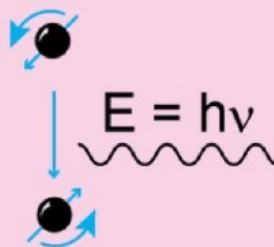
2



Nuclei absorb energy from the pulse and go from a lower energy state to a higher energy state.

3

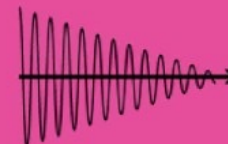
After the pulse, the nuclei relax back to the lower energy level, releasing energy.



4

The instrument repeats the scan multiple times to maximize signal and minimize noise.

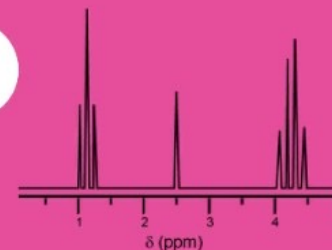
5



Time

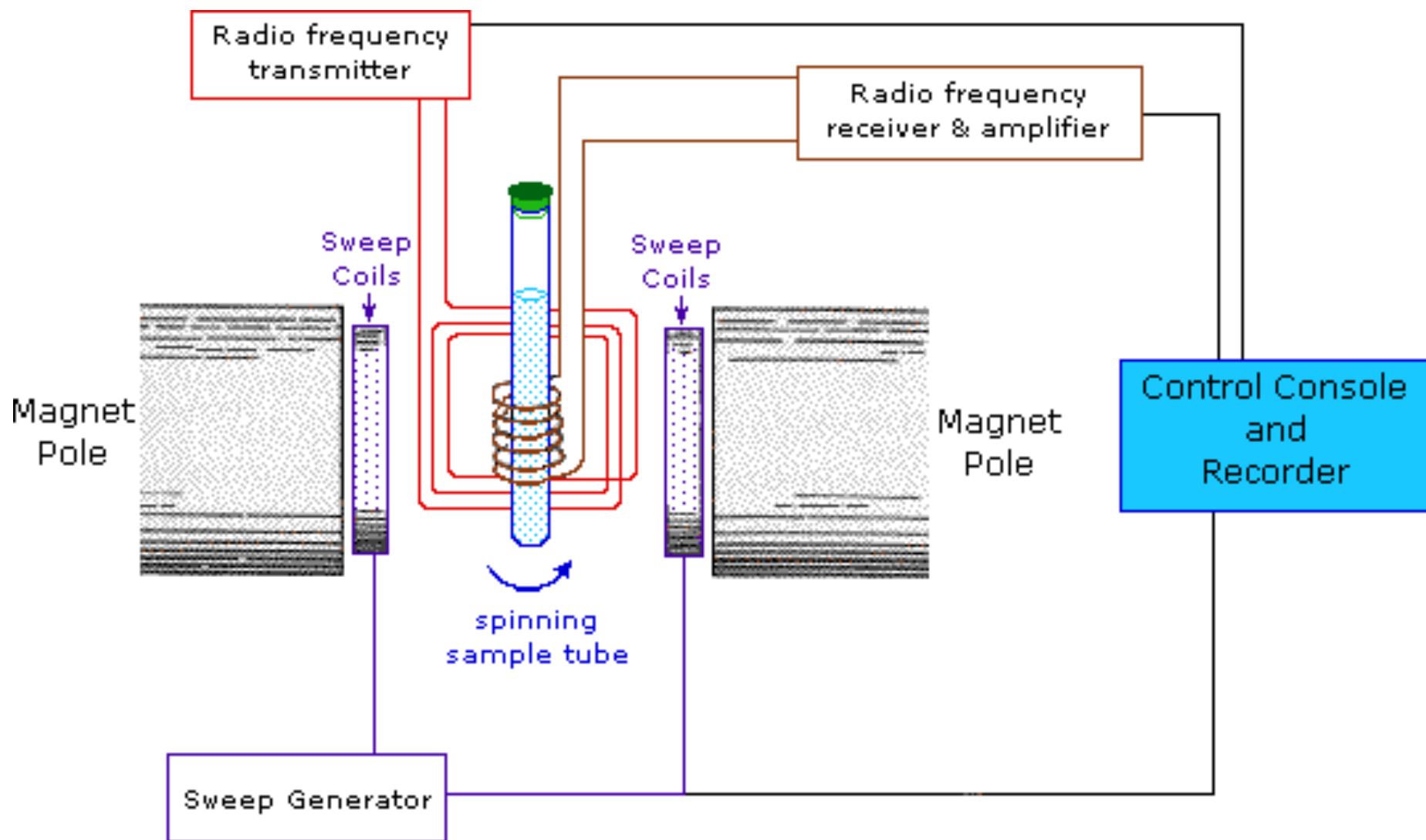
NMR instrument performs a Fourier transform on the signals to show each individual RF frequency that made up the composite signal.

6



The frequencies make up your NMR Spectrum.

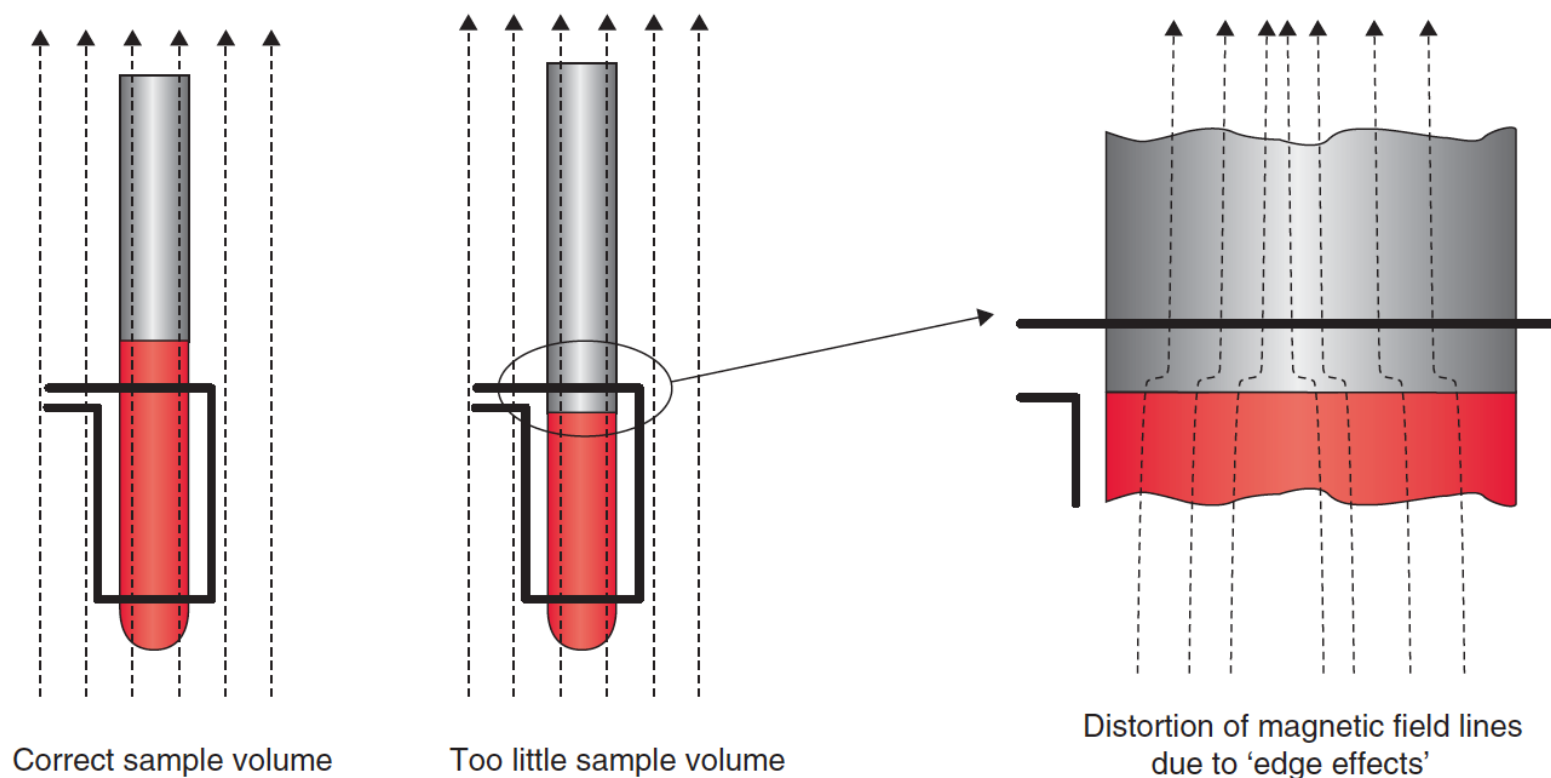
Espectrofotómetro de RMN



Consideraciones experimentales

Pérdida de la homogeneidad del campo = Espectros horrible

Disolvente insuficiente

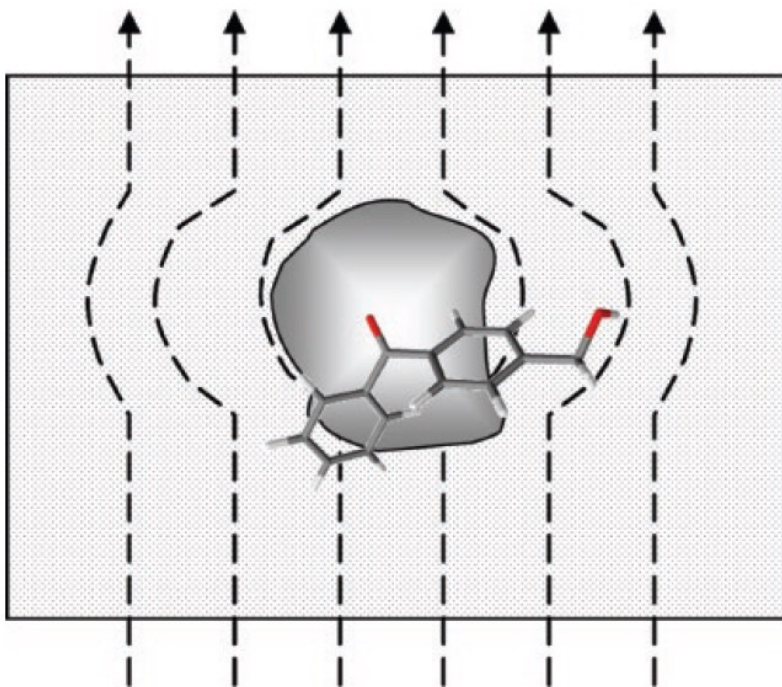


Richards, S. A.; Hollerton, J. C.
Essential Practical NMR for Organic Chemistry; 2010.

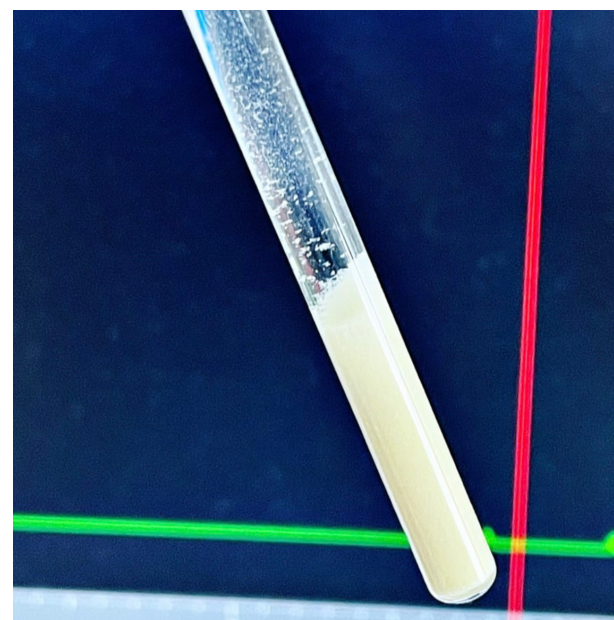
Consideraciones experimentales

Pérdida de la homogeneidad del campo = Espectros horrible

Muestra sin disolver



Undissolved material causing loss of magnetic field homogeneity.



nmr_spectroscopy.

Instagram; disponible en:

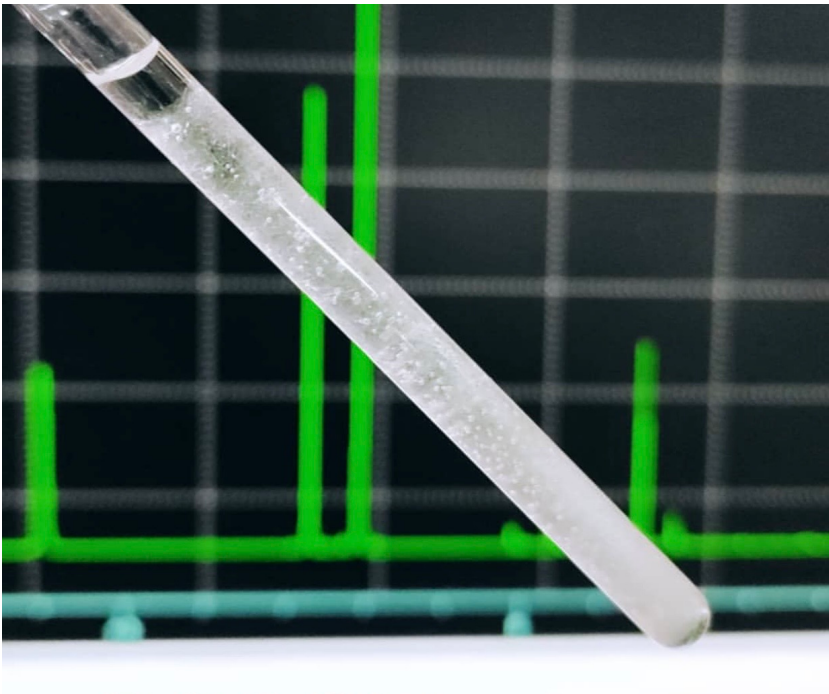
https://www.instagram.com/nmr_spectroscopy/

Richards, S. A.; Hollerton, J. C.
Essential Practical NMR for Organic Chemistry; 2010.

Consideraciones experimentales

Pérdida de la homogeneidad del campo = Espectros horribles

Burbujas



Muestra ferromagnética

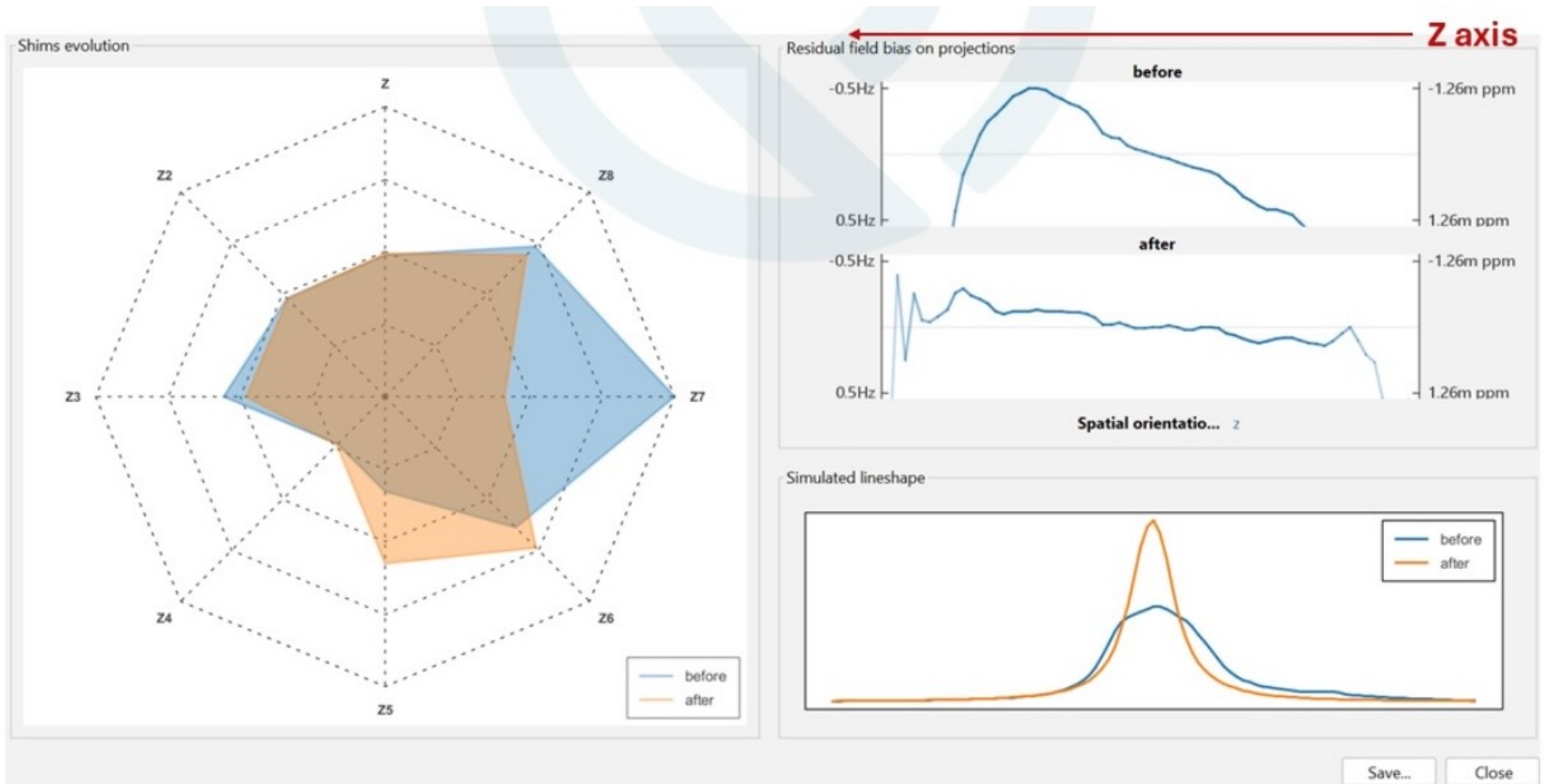


nmr_spectroscopy. *Instagram*; disponible en:
https://www.instagram.com/nmr_spectroscopy/

Consideraciones experimentales

Pérdida de la homogeneidad del campo = Espectros horribles

¡No usar el SHIM!



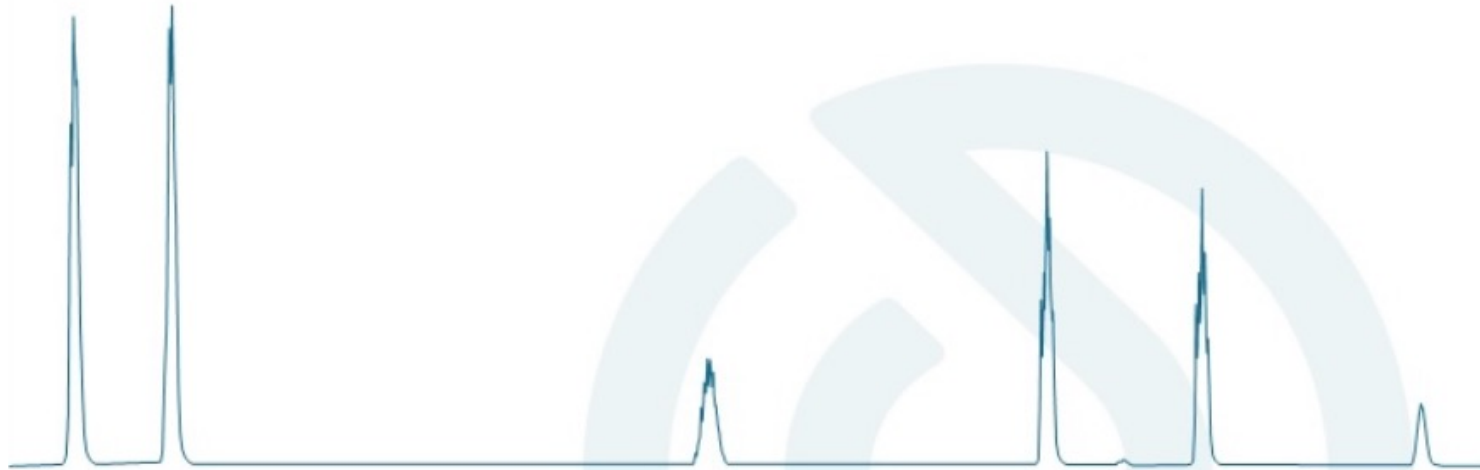
Consideraciones experimentales

Pérdida de la homogeneidad del campo = Espectros horribles

¡No usar el SHIM!

Oxford Magnet
QUAD 2CH Console
QUAD Shim Stack
QUAD probe X,F/H-5 mm

Before shimming



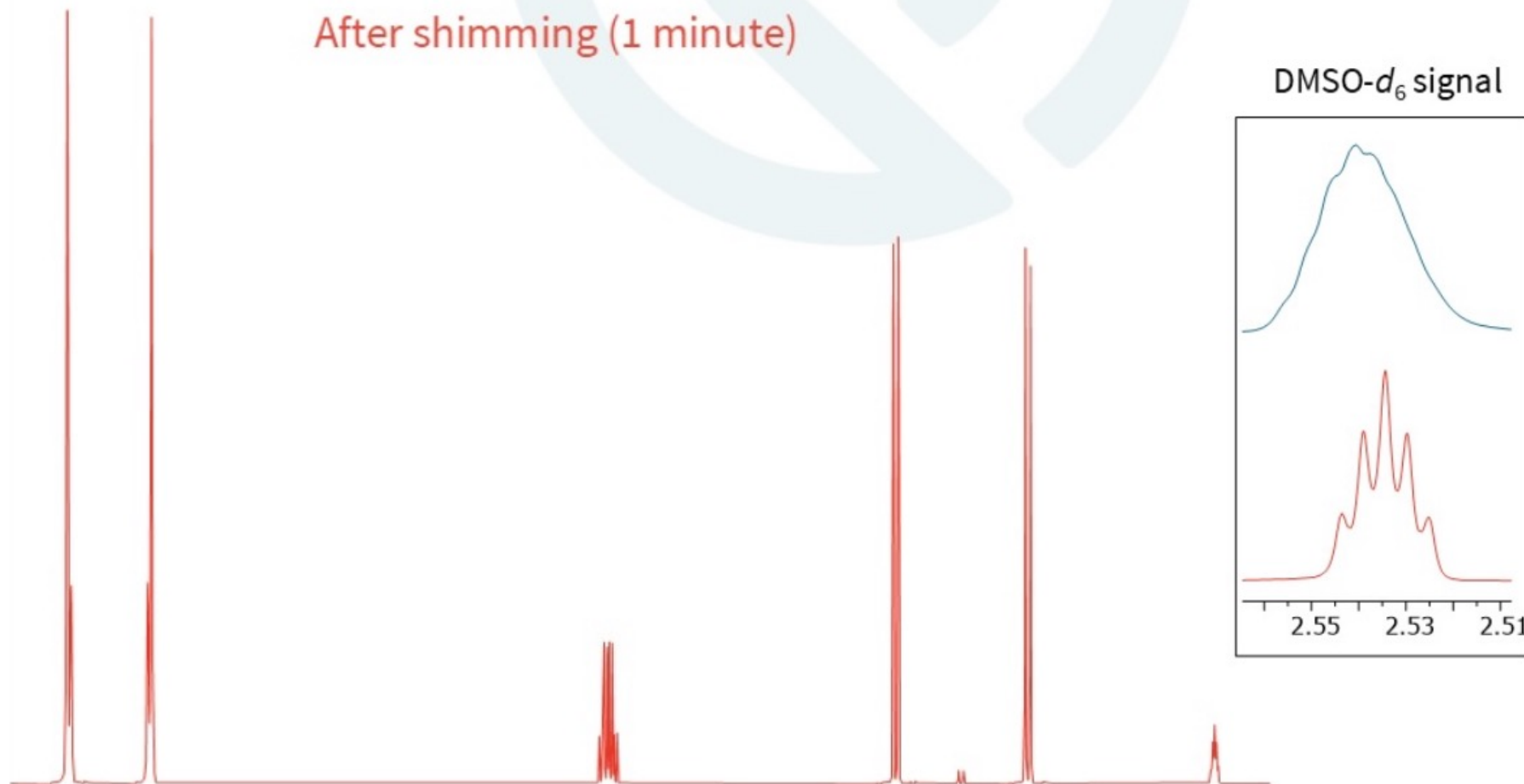
quad_systems: *Instagram*; disponible en:
https://www.instagram.com/quad_systems/

Consideraciones experimentales

Pérdida de la homogeneidad del campo = Espectros horribles

¡No usar el SHIM!

After shimming (1 minute)



RMN- ^{13}C y RMN- ^1H

Características propias de RMN- ^{13}C

- Requiere más muestra y la adquisición del espectro toma más tiempo (debido a su baja abundancia isotópica y su constante giromagnética pequeña).
- No se observan acoplamientos (desacoplado).
- Las señales no se integran (aparecen como señales simples), es decir, como un “bosque”.

Similitudes con RMN- ^1H

- El desplazamiento químico de las señales depende del entorno químico del núcleo en cuestión.

Para ejercicios:

<https://nmr-challenge.uochb.cas.cz/>



NMR-Challenge

NMR-Quiz

Tutorial

About



Basic Simple 1D problems

All difficulties Start random exercise »

Easy (0/72) Start random exercise »

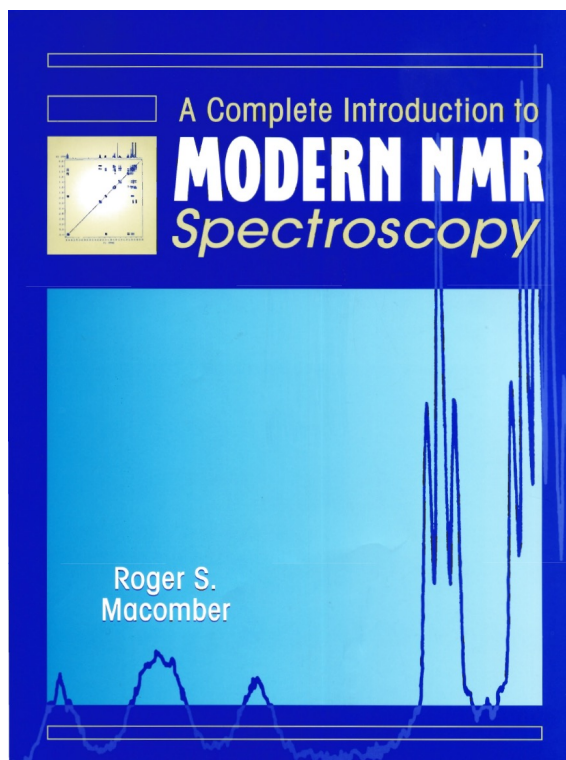
1	2	3	5	8	9	11	12	13	14	18	19	24	25	32	34	35	38
40	41	42	44	48	49	52	56	59	60	62	63	64	66	67	68	69	71
72	73	74	76	77	78	81	82	86	88	89	90	93	96	98	99	104	105
112	113	115	118	122	124	128	129	130	131	136	137	143	144	145	146	147	148

Moderate (0/51) Start random exercise »

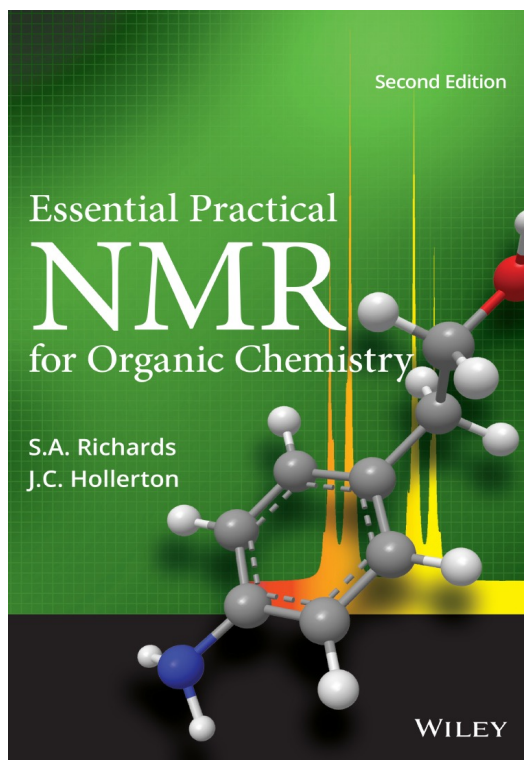
4	7	10	15	16	17	20	21	23	26	27	28	29	30	31	33	36	37
39	46	47	58	61	65	70	75	80	83	84	87	92	95	101	110	111	116

Si está interesado en aprender más acerca de los fundamentos teóricos de RMN o del manejo experimental de la muestra:

Fundamentos teóricos



Manejo experimental



Si está interesado en aprender más acerca de los fundamentos teóricos de RMN o del manejo experimental de la muestra:

Fundamentos teóricos



Manejo experimental

