

$^1\text{H}$  del etanol, donde se representan tanto los Parámetros de desplazamiento químico como de constante de acoplamiento.

En algunos casos las señales del espectro de RMN presentan multiplicidad, las cuales se deben a los acoplamientos de los núcleos e indican el número de átomos con los cuales interacciona un núcleo dado. Esta multiplicidad se encuentra regida por la ecuación 1, donde  $l$  es el espín nuclear de los átomos y  $n$  es el número de átomos equivalentes unidos al núcleo en estudio.

$$\text{No. de señales} = 2nl + 1 \quad (\text{Ec. 1})$$

Así por ejemplo el espectro de RMN de oxígeno-17 del agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), deberá ser una señal triple, ya que  $n=2$  y el espín nuclear para el hidrógeno es  $1/2$ . En la figura 2 se muestra el espectro de RMN de  $^{17}\text{O}$  del  $\text{H}_2\text{O}$ .

Si el ion hidronio existe en solución y los 3 protones son equivalentes se debe esperar una señal cuádruple. Esto se puede observar en la figura 3, trazo a, donde se ve el espectro obtenido para una solución de agua protonada. Adicionalmente para probar que efectivamente la señal cuádruple se debe a un acoplamiento con hidrógeno, se efectúa un experimento en el que se irradia en la frecuencia de protón. Esto hace que se pierdan los acoplamientos con los hidrógenos, lo que conduce a observar una señal simple con lo que se confirma que la multipli-

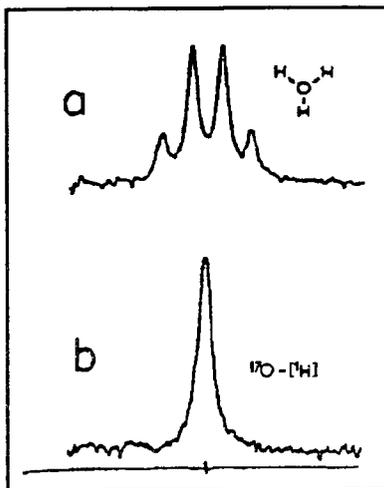


Figura 3. Espectro de RMN de  $^{17}\text{O}$  a) del ion hidronio acoplado b) del ion hidronio irradiado en la frecuencia de protón (señal desacoplada).

cidad de las señales, se debe a que el oxígeno se encuentra unido a tres hidrógenos equivalentes.

Con este ejemplo simple, es posible comprobar que el ion hidronio, se encuentra formado por un átomo de oxígeno unido a 3 átomos de hidrógeno equivalentes.

¿El análisis por RMN de  $^{17}\text{O}$  permitirá establecer si el agua esta totalmente deuterada ( $\text{D}_2\text{O}$ ) o parcialmente deuterada ( $\text{HDO}$ )?

El espectro del agua deuterada se presenta en la figura 4. En esta molécula los protones han sido reemplazados por átomos de deuterio los cuales tienen un número de espín igual a 1. Aplicando la ecuación 1 obtenemos que, para el espectro de RMN de  $^{17}\text{O}$  del agua deuterada ( $\text{OD}_2$ ) Y esperaríamos una señal quintuple, que es lo que en realidad se observa.

Para los casos en los que existen núcleos interaccionando, pero que no son equivalentes, se debe aplicar la ecuación 2, donde  $l$  es el espín nuclear y  $n$  es el número de núcleos acoplados.

$$\text{No. señales} = \frac{(2n_1l_1 + 1)(2n_2l_2 + 1) \dots (2n_kl_k + 1)}{(2n_kl_k + 1)} \quad \text{Ec. 2}$$

En la molécula de agua parcialmente deuterada  $\text{HDO}$  el oxígeno se encuentra unido a un hidrógeno y a un deuterio, es decir, tenemos dos núcleos diferentes por lo que para predecir la multiplicidad de las señales en el espectro de RMN de  $^{17}\text{O}$  debemos aplicar la ecuación 2, donde  $n = 1$ ,  $l = 1/2$  para el hidrógeno y  $n = 1$  e  $l = 1$  para el deuterio, resultando un número de señales = 6.

En la figura 4 se muestra el espectro de RMN de  $^{17}\text{O}$  de la mezcla de agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), agua parcialmente deuterada ( $\text{HDO}$ ) y agua deuterada ( $\text{D}_2\text{O}$ ). En el trazo a se muestra el espectro acoplado

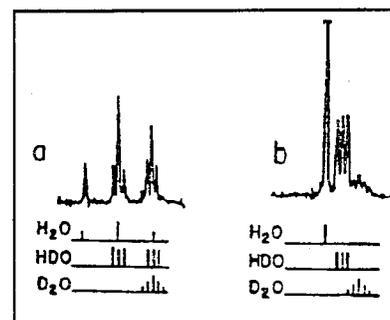


Figura 4. Espectros de RMN de  $^{17}\text{O}$  de agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), parcialmente deuterada ( $\text{HDO}$ ) y de agua deuterada a) bajo irradiación en la frecuencia de protón (sin acoplamiento con hidrógeno).