

TEMA 10.

ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

1. Fundamentos físicos de la espectroscopia de RMN.
2. El espectrómetro de resonancia magnética nuclear.
3. Resonancia magnética nuclear de ^1H . *Apantallamiento* o protección magnética por los electrones.
4. El espectro de RMN de ^1H .
 - 4.1. Curvas de integración.
 - 4.2 Desacoplamiento espín-espín.
 - 4.3. Constantes de acoplamiento.
5. Interpretación de los espectros de resonancia magnética nuclear de ^1H .
6. Espectroscopia de resonancia magnética nuclear de ^{13}C

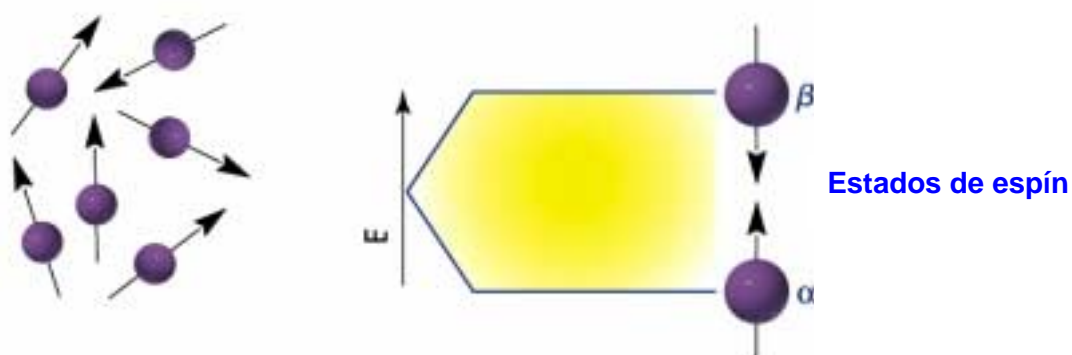
Tema 10. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear.

1. Fundamentos físicos de la espectroscopia de RMN. 2. El espectrómetro de resonancia magnética nuclear. 3. Resonancia magnética nuclear de ^1H . *Apantallamiento* o protección magnética por los electrones. 4. El espectro de RMN de ^1H . 4.1. Curvas de integración. 4.2 Desacoplamiento espín-espín. 4.3. Constantes de acoplamiento. 5. Interpretación de los espectros de resonancia magnética nuclear de ^1H . 6. Espectroscopia de resonancia magnética nuclear de ^{13}C

1. Fundamentos físicos la espectroscopia de RMN

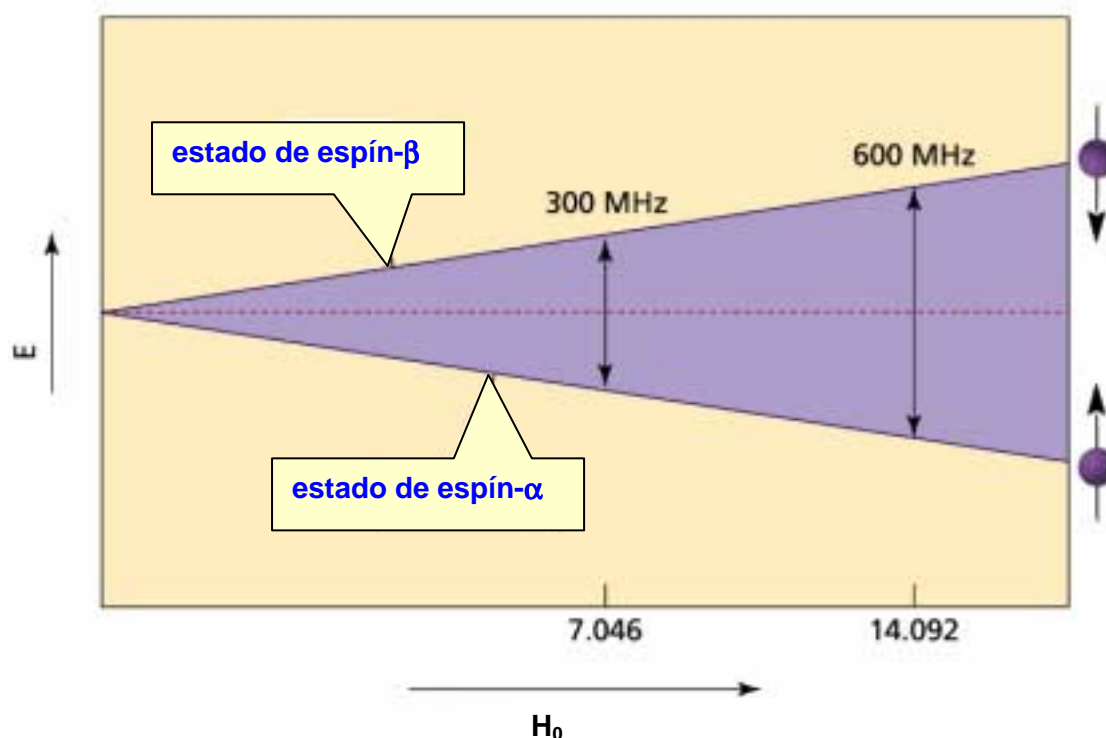
La espectroscopia de RMN fue desarrollada a finales de los años cuarenta para estudiar los núcleos atómicos. En 1951, los químicos descubrieron que la espectroscopia de resonancia magnética nuclear podía ser utilizada para determinar las estructuras de los compuestos orgánicos. Esta técnica espectroscópica puede utilizarse sólo para estudiar núcleos atómicos con un número impar de protones o neutrones (o de ambos). Esta situación se da en los átomos de ^1H , ^{13}C , ^{19}F y ^{31}P . Este tipo de núcleos son magnéticamente activos, es decir poseen espín, igual que los electrones, ya que los núcleos poseen carga positiva y poseen un movimiento de rotación sobre un eje que hace que se comporten como si fueran pequeños imanes.

En ausencia de campo magnético, los espines nucleares se orientan al azar. Sin embargo cuando una muestra se coloca en un campo magnético, tal y como se muestra en la siguiente figura, los núcleos con espín positivo se orientan en la misma dirección del campo, en un estado de mínima energía denominado estado de espín α , mientras que los núcleos con espín negativo se orientan en dirección opuesta a la del campo magnético, en un estado de mayor energía denominado estado de espín β .



Existen más núcleos en el estado de espín α que en el β pero aunque la diferencia de población no es enorme sí que es suficiente para establecer las bases de la espectroscopia de RMN.

La diferencia de energía entre los dos estados de espín α y β , depende de la fuerza del campo magnético aplicado H_0 . Cuanto mayor sea el campo magnético, mayor diferencia energética habrá entre los dos estados de espín. En la siguiente gráfica se representa el aumento de la diferencia energética entre los estados de espín con el aumento de la fuerza del campo magnético.



Cuando una muestra que contiene un compuesto orgánico es irradiada brevemente por un pulso intenso de radiación, los núcleos en el estado de espín α son promovidos al estado de espín β . Esta radiación se encuentra en la región de las radiofrecuencias (**rf**) del espectro electromagnético por eso se le denomina radiación rf. Cuando los núcleos vuelven a su estado inicial emiten señales cuya frecuencia depende de la diferencia de energía (ΔE) entre los estados de espín α y β . El espectrómetro de RMN detecta estas señales y las registra como una gráfica de frecuencias frente a intensidad, que es el llamado espectro de RMN. El término resonancia magnética nuclear procede del hecho de que los núcleos están en resonancia con la radiofrecuencia o la radiación rf. Es decir, los núcleos pasan de un estado de espín a otro como respuesta a la radiación rf a la que son sometidos. La

siguiente ecuación muestra la dependencia entre la frecuencia de la señal y la fuerza del campo magnético H_0 (medida en Teslas, T).

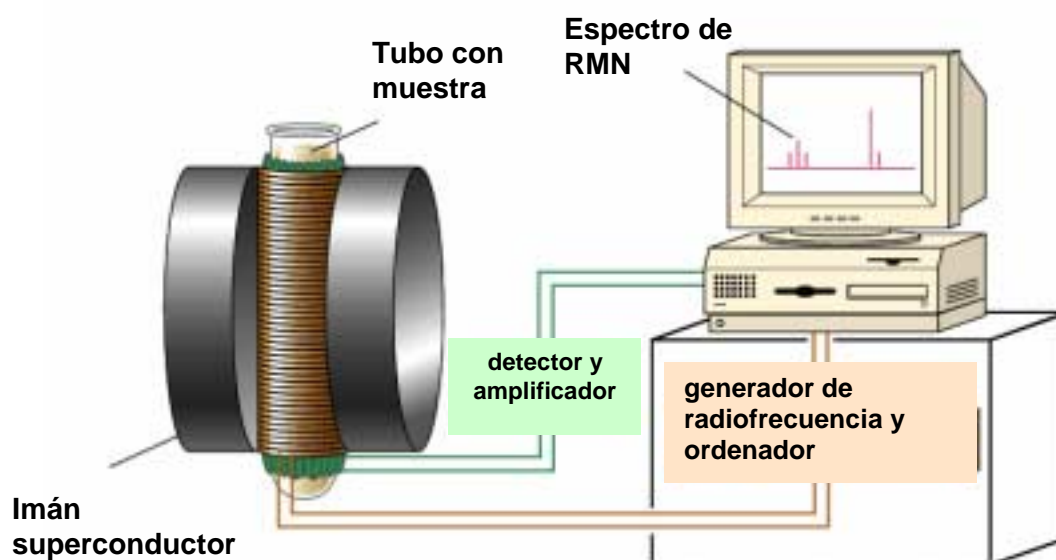
$$\Delta E = h \nu = h \frac{\gamma}{2\pi} H_0 \quad \text{donde } \gamma = \text{radio giromagnético}$$

El valor del radio giromagnético depende del tipo de núcleo que se está irradiando; en el caso del ^1H es de $2.675 \times 10^8 \text{ T}^{-1}\text{s}^{-1}$. Si espectrómetro de RMN posee un imán potente, éste debe trabajar a una mayor frecuencia puesto que el campo magnético es proporcional a dicha frecuencia. Así por ejemplo, un campo magnético de 14.092 T requiere una frecuencia de trabajo de 600 MHz.

Hoy en día los espectrómetros de RMN trabajan a 200,300, 400, 500 y 600 MHz.

2. El espectrómetro de resonancia magnética nuclear

A continuación, se muestra de forma esquemática los principales componentes de un equipo para medidas de resonancia magnética nuclear.



Como se observa, el espectrómetro de RMN consta de cuatro partes:

1. Un imán estable, con un controlador que produce un campo magnético preciso.
2. Un transmisor de radiofrecuencias, capaz de emitir frecuencias precisas.
3. Un detector para medir la absorción de energía de radiofrecuencia de la muestra.
4. Un ordenador y un registrador para realizar las gráficas que constituyen el espectro de RMN.

Para obtener un espectro de RMN, se coloca una pequeña cantidad del compuesto orgánico disuelto en medio mililitro de disolvente en un tubo de vidrio largo que se sitúa dentro del campo magnético del aparato. El tubo con la muestra se hace girar alrededor de su eje vertical.

En los aparatos modernos el campo magnético se mantiene constante mientras un breve pulso de radiación rf excita a todos los núcleos simultáneamente. Como el corto pulso de radiofrecuencia cubre un amplio rango de frecuencias los protones individualmente absorben la radiación de frecuencia necesaria para entrar en resonancia (cambiar de estado de espín). A medida que dichos núcleos vuelven a su posición inicial emiten una radiación de frecuencia igual a la diferencia de energía entre estados de espín. La intensidad de esta frecuencia disminuye con el tiempo a medida que todos los núcleos vuelven a su estado inicial.

Un ordenador recoge la intensidad respecto al tiempo y convierte dichos datos en intensidad respecto a frecuencia, esto es lo que se conoce con el nombre de transformada de Fourier (FT-RMN). Un espectro FT-RMN puede registrarse en 2 segundos utilizando menos de 5 mg de muestra.

3. Resonancia magnética nuclear de ^1H . **Apantallamiento o protección magnética por los electrones.**

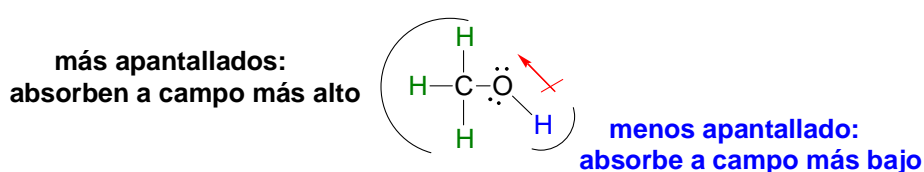
Hasta ahora se ha descrito el concepto de resonancia de un núcleo aislado dentro de un campo magnético, pero en realidad los núcleos, como pueden ser los protones o los carbonos que forman las moléculas orgánicas, no se encuentran aislados sino que están rodeados de electrones que los protegen parcialmente del campo magnético externo al que se ven sometidos. Los electrones se mueven generando un pequeño campo magnético inducido que se opone al campo magnético externo.

En cualquier molécula la nube electrónica que existe alrededor de cada núcleo actúa como una corriente eléctrica en movimiento que, como respuesta al campo magnético externo, genera una pequeña corriente inducida que se opone a dicho campo. El resultado de este hecho es que el campo magnético que realmente llega al núcleo es más débil que el campo externo, por tanto, se dice que el núcleo está protegido o apantallado. Este **apantallamiento** es muy importante desde el punto de vista experimental ya que el campo magnético efectivo (H_{ef}) que siente un protón dentro de una molécula es siempre menor que el campo externo, y por lo tanto, para que el núcleo entre en resonancia dicho campo externo debe ser mayor.

$$H_{\text{ef}} = H_0 - H_{\text{loc}}$$

Si todos los protones (^1H) de una molécula orgánica estuvieran apantallados de igual forma, todos entrarían en resonancia con la misma combinación de frecuencia y campo magnético. Sin embargo, los protones se hallan dentro de entornos electrónicos diferentes y, por tanto, se encuentran diferentemente protegidos o apantallados.

Por ejemplo, en el metanol el átomo de oxígeno retira densidad electrónica del entorno electrónico que rodea al protón del grupo hidroxilo, quedando este átomo de hidrógeno menos protegido que los protones del grupo metilo. La consecuencia es que el protón del grupo hidroxilo resuena a un campo magnético menor que los protones del grupo metilo.



Por lo general, los efectos de protección, o apantallamiento, de las nubes electrónicas que rodean a cada protón son diferentes, lo que provoca diferentes frecuencias de emisión. El resultado es un espectro de diversas frecuencias donde cada conjunto de núcleos específicos da origen a una señal única de RMN. Así pues, un espectro de RMN es una gráfica de la intensidad de señal en función de la frecuencia de la energía electromagnética que liberan los diversos núcleos de una muestra.

Las variaciones en las frecuencias de absorción de resonancia magnética nuclear, que tienen lugar debido al distinto apantallamiento de los núcleos, reciben el nombre de **desplazamientos químicos** (unidades δ ó ppm).


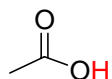
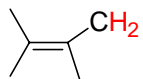
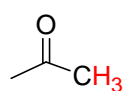
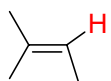
En la práctica es difícil medir el campo magnético al que un protón absorbe con suficiente exactitud para distinguir protones individuales ya que las absorciones sólo varían en unas pocas milésimas. Un método más exacto para expresar desplazamientos químicos es determinar el valor respecto a un compuesto de referencia que se añade a la muestra. La diferencia en la intensidad del campo magnético necesario para la resonancia de los protones de la muestra y de los protones de referencia se puede medir, ahora sí, con mucha exactitud.

$$\delta \text{ (ppm)} = \frac{\nu_{\text{muestra}} - \nu_{\text{referencia}}}{\nu_{\text{referencia}}} \times 10^6$$

El compuesto de referencia más común en resonancia magnética nuclear es el tetrametilsilano (TMS, $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$). Como el silicio es menos electronegativo que el carbono, los grupos metilo del TMS son relativamente ricos en electrones, es decir, sus protones están fuertemente apantallados. Como consecuencia de este apantallamiento, estos protones absorben a una intensidad de campo mayor que el resto de protones enlazados al carbono o a otros elementos, de manera que casi todas las señales de resonancia magnética nuclear aparecen a campos más bajos (hacia la izquierda de la señal del TMS). Además todos los protones del TMS absorben con el mismo desplazamiento químico dando una única absorción intensa.

Las escala más común de desplazamiento químico es la escala δ (delta) en la que la absorción del tetrametilsilano (TMS) se define como 0.00 δ . La mayor parte de los protones absorben a campos menores que el TMS, de modo que la escala δ aumenta hacia los campos menores. La mayoría de las señales de protones (^1H) varían entre 0 y 12 δ , mientras que las señales del ^{13}C varían del 0 a 250 δ .

Como el desplazamiento químico de un protón está determinado por su entorno se han construido tablas con valores representativos:

tipo de protón	Despl.químico (δ)	tipo de protón	Despl.químico (δ)
$-\text{CH}_3$	0.7-1.3		9.5-10.0
$-\text{CH}_2-$	1.2-1.4		10.0-12.0
$-\overset{ }{\text{C}}\text{H}$	1.4-1.7	$-\overset{ }{\text{C}}-\text{OH}$	1.0-6.0
	1.5-2.5	$\text{O}-\overset{ }{\text{C}}-\text{H}$	3.3-4.0
	2.1-2.6	$-\overset{ }{\text{C}}-\text{NH}_2$	1.5-4.0
$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	2.5-3.1	$\text{Cl}-\overset{ }{\text{C}}-\text{H}$	3.0-4.0
$\text{Ar}-\text{H}$	6.0-9.0	$\text{Br}-\overset{ }{\text{C}}-\text{H}$	2.5-4.0
	4.5-6.5	$\text{I}-\overset{ }{\text{C}}-\text{H}$	2.0-4.0

La tabla anterior muestra que los dobles enlaces y los anillos aromáticos producen grandes efectos desprotectores o desapantallantes en sus protones vinílicos y aromáticos respectivamente. En el caso de los derivados aromáticos, el campo magnético externo induce una corriente en el anillo aromático que se opone a dicho campo magnético. Sin embargo, estas líneas de campo inducido se curvan y en la parte exterior del anillo se suma al campo externo, tal y como se ve en la siguiente figura:



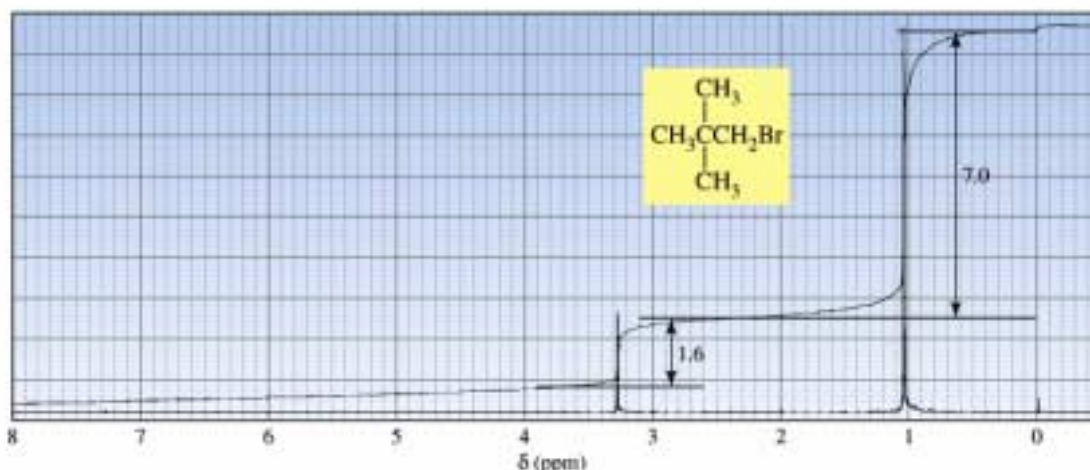
Como resultado, los protones aromáticos están desapantallados y absorben a valores bajos del campo magnético aplicado, de ahí que la mayor parte de los protones aromáticos absorben en el rango de 7-8 δ .

Por otro lado, los protones vinílicos de un alqueno están desprotegidos o desapantallados por los electrones π del mismo modo que se desapantallan los protones aromáticos. Sin embargo, este efecto no es tan grande en el caso del alqueno, ya que no existe el anillo tan efectivo de electrones que hay en los derivados del benceno. Una vez más, en los alquenos, el movimiento de los electrones π genera un campo magnético inducido que se opone al campo magnético externo en la parte media del doble enlace. No obstante, los protones vinílicos están en la periferia de este campo, donde el campo inducido no se opone sino que refuerza el campo externo. Como resultado de este efecto desapantallante, la mayor parte de los protones del vinilo absorben entre 5-6 δ .

Por otra parte, los protones acetilénicos absorben entre 2.5-3 δ . Esto es debido a que la densidad electrónica de un triple enlace forma un cilindro que rodea al enlace σ C-C, de manera que el protón acetilénico queda situado a lo largo del eje de dicho campo inducido quedando, pues, completamente apantallado, de ahí que este protón se encuentre a valores de desplazamiento químico mucho menores que en el caso de un protón vinílico.

4. El espectro de RMN de ^1H

La gráfica que aparece a continuación corresponde al espectro de resonancia magnética nuclear del 1-bromo-2,2-dimetilpropano. Se puede observar la presencia de dos señales de distinta intensidad. La señal a 3.28 δ corresponde a los dos protones del grupo metileno, que por estar cerca del átomo de bromo electrón-atrayente experimentan un efecto de desapantallamiento. La señal más intensa a 1.05 δ corresponde a los 9 protones de los grupos metilo.



4.1. Curva de integración. La intensidad relativa de una señal en la espectroscopia de RMN protón es proporcional al número de protones que contribuyen a la señal. La curva superpuesta a las señales del espectro, que se puede observar en la figura anterior, es la llamada curva de integración. La altura del escalón permite calcular el número de átomos de hidrógeno que dan origen a cada señal. Así, en la figura del espectro anterior se mide una altura para cada escalón 7.0 cm y 1.6 cm. Para calcular el número de átomos de hidrógeno que originan cada señal se procede del siguiente modo:

1°. Se suman las dos integraciones y se divide por el número total de hidrógenos de la estructura:

$$7.0 \text{ cm} + 1.6 \text{ cm} = 8.6 \text{ cm}$$

$$\text{n}^\circ \text{ de hidrógenos del 1-bromo-2,2-dimetilpropano} = 11 \text{ H}$$

$$\text{por tanto: } \frac{11 \text{ H}}{8.6 \text{ cm}} = 1.28 \text{ H/cm}$$

2º. Para saber el número de hidrógenos de cada señal se multiplica su integración por el valor anterior

$$7.0 \text{ cm} \times 1.28 \text{ H/cm} = 9 \text{ H}$$

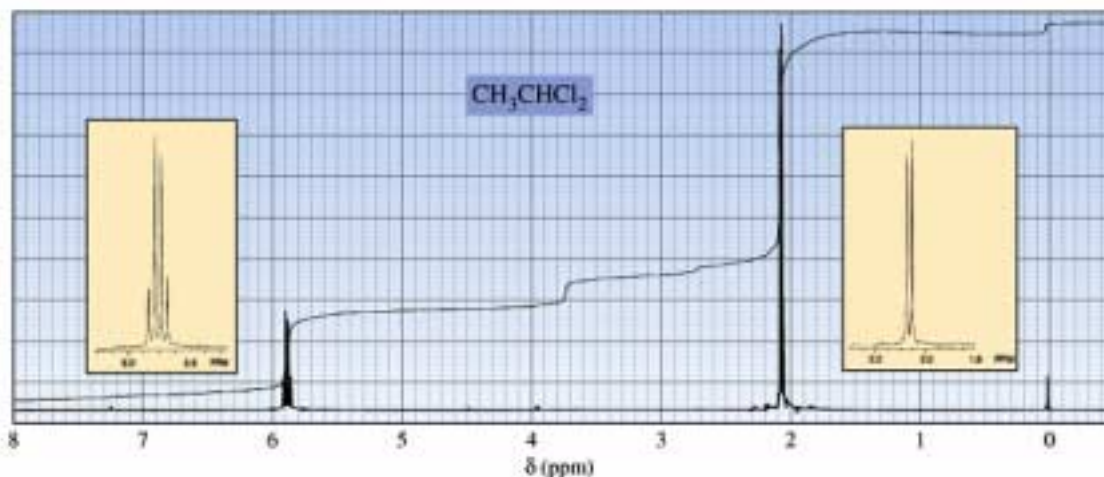
$$1.6 \text{ cm} \times 1.28 \text{ H/cm} = 2 \text{ H}$$

Así pues, la señal más intensa se debe a 9 protones (tres metilos de la estructura) mientras que la menos intensa se debe a tan sólo dos protones (metileno).

4.2. Desacoplamiento espín-espín.

Como ya se indicado anteriormente un protón en un espectro de resonancia magnética nuclear está sujeto tanto al campo magnético externo como al campo inducido por los electrones que lo rodean. Pero, además, si en su entorno hay otros protones, sus campos magnéticos, aunque sean pequeños afectan a la frecuencia de absorción del protón que se está observando.

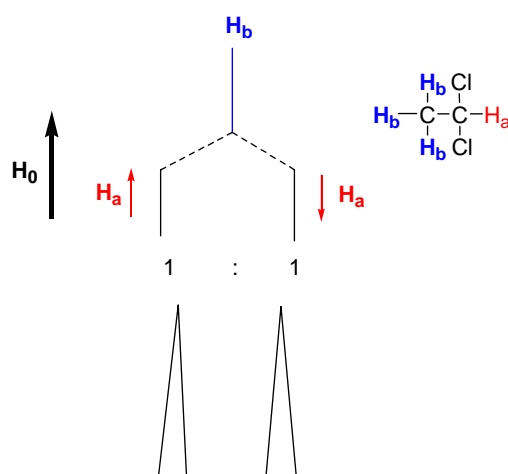
En la siguiente figura se muestra el espectro del 1,1-dicloroetano:



Como se observa en el espectro del 1,1-dicloroetano ($\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$) aparecen dos señales cuyas áreas están en relación 1:3. La señal más pequeña (H_a) se debe al protón del carbono unido a los dos átomos de cloro (CH_3CHCl_2) y aparece a 5.85 δ . Este desplazamiento a campo bajo es debido al desapantallamiento que provocan los dos átomos adyacentes de cloro. Además, esta señal no es tan simple como las señales que se observan en el espectro del 1-bromo-2,2-dimetilpropano, que están constituidas por una sola línea. En el espectro del 1,1-dicloroetano la señal a 5.85 δ está formada en realidad por un conjunto de cuatro señales, que en RMN se denomina cuádruplete (cuatro picos). La señal de mayor intensidad, que aparece a 2.1 δ , está formada por dos líneas y se denomina doblete (dos picos). Esta señal corresponde a los tres átomos de hidrógeno del grupo metilo (CH_3CHCl_2).

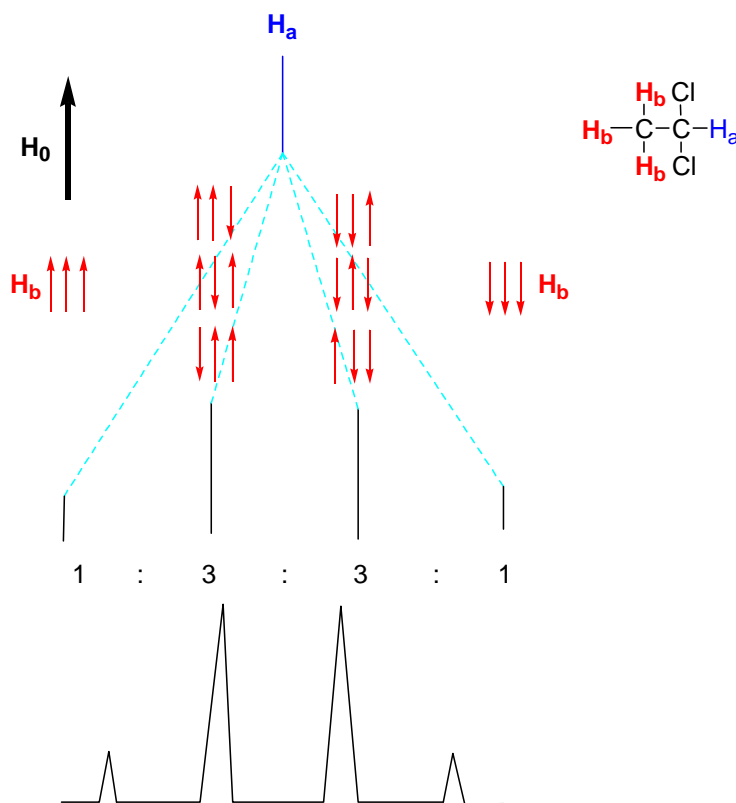
Este desdoblamiento de señales en multipletes, denominado desdoblamiento de espín, se origina cuando los espines magnéticos de dos tipos diferentes de protones interactúan. Cuando esta interacción ocurre se dice que los protones están acoplados magnéticamente.

El desdoblamiento de espín-espín se explica teniendo en cuenta todos los posibles espines individuales de los protones. En el 1,1-dicloroetano los protones del grupo metilo (CH_3CHCl_2) se encuentran bajo la influencia de un pequeño campo magnético generado por el protón adyacente. En algunas moléculas el campo magnético que incide en algunos protones del grupo CH_3 está alineado con el campo magnético externo, y en otras se alinea contra el campo, tal y como se muestra en la siguiente figura:



Cuando el protón H_a está alineado con el campo externo, los protones H_b se ven afectados por un campo magnético externo ligeramente más intenso, es decir, se ven desapantallados y absorben a un campo menor. Por otro lado, cuando el campo de H_a está alineado en contra al campo magnético externo, los protones H_b se encuentran apantallados o protegidos, ya que sienten la presencia de un campo magnético menor al externo y, por tanto, absorben a campo más alto. Aproximadamente, el 50% de moléculas de 1,1-dicloroetano tienen a los protones H_a alineados con el campo externo y el otro 50% de moléculas tienen a los protones H_a alineados en contra de él. La consecuencia es que los protones H_b presentan dos absorciones que dan lugar a dos señales, de idéntica área, que son las que forman el doblete del espectro.

El desdoblamiento de espín es una propiedad recíproca, es decir, si un protón desdobla a otro, el segundo protón debe desdoblar al primero. Así, en el caso anterior el protón H_a genera una señal cuadruplete porque acopla con los tres protones H_b . Este cuadruplete se genera porque hay ocho permutaciones de los espines de los tres protones H_b , tal y como se muestra en la siguiente figura:



De las permutaciones de espines resultan cuatro señales, siendo las dos del centro tres veces mayores que las de los extremos ya que corresponden a tres permutaciones posibles de espín equivalentes (absorben a la misma frecuencia).

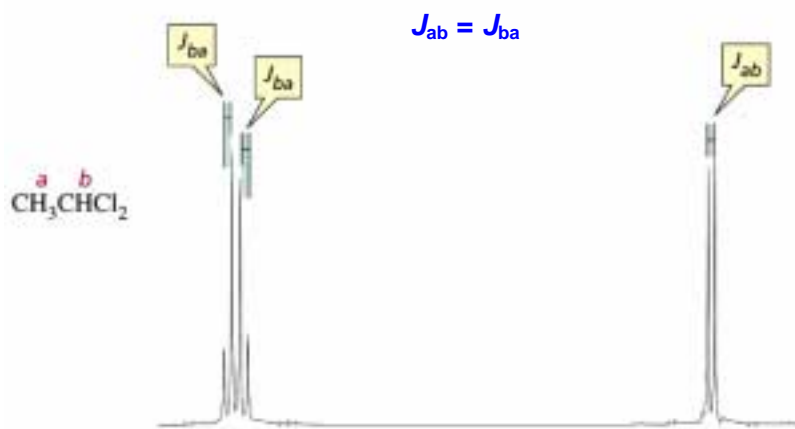
Este tipo de análisis que se ha descrito para averiguar el desdoblamiento de espín-espín del 1,1-dicloroetano se puede ampliar para sistemas más complejos. En general, la multiplicidad o número de picos de una señal, viene dada por la regla **N+1**, donde N es el número de protones equivalentes que desdoblan una señal.

Las áreas relativas del multiplete N+1 vienen dadas por el llamado triángulo de Pascal:

N. protones equivalentes	Número de picos (multiplicidad)	Relaciones de área (triángulo de Pascal)
0	1 (singulete)	1
1	2 (doblete)	1 1
2	3 (triplete)	1 2 1
3	4 (cuadruplete)	1 3 3 1
4	5 (quintuplete)	1 4 6 4 1
5	6 (sextuplete)	1 5 10 10 5 1

4.3. Constantes de acoplamiento.

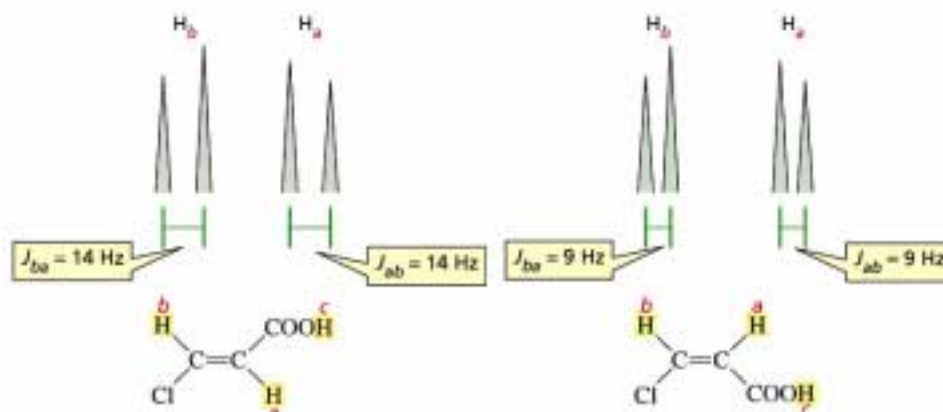
Las distancias entre picos de los multipletes dan mucha información estructural. A la distancia entre los picos de un multiplete (medida en Herzios) se le llama **constante de acoplamiento** entre los protones magnéticamente acoplados. Se simboliza como J_{ab} donde H_a y H_b son los protones que acoplan entre sí. En la siguiente figura se muestran las constantes de acoplamiento para el 1,1-dicloroetano:



La siguiente tabla muestra algunos valores típicos de constantes de acoplamiento:

Estructura							
J (Hz)	7	15	10	2	6	8	2

Como se observa en la tabla anterior, las constantes de acoplamiento ayudan a distinguir entre los posibles isómeros de un compuesto, como en el caso del ácido 3-cloropropenoico. Este compuesto presenta dos isómeros geométricos, el ácido *Z*-3-cloropropenoico y el ácido *E*-3-cloropropenoico. Estos dos isómeros pueden distinguirse por RMN debido a las constantes de acoplamiento que presentan las señales debidas a los protones H_a y H_b tal y como muestra la siguiente figura:



Como se observa, el isómero E presenta mayor constante de acoplamiento entre H_a y H_b que el isómero Z.

5. Interpretación de los espectros de resonancia magnética nuclear de ^1H .

La rápida y correcta interpretación de los espectros de resonancia magnética nuclear de protones requiere de mucha práctica. A continuación se citan los pasos a seguir para llevar a cabo el análisis espectral de forma correcta:

1. A partir de la fórmula molecular:
 - a. Calcular el número de insaturaciones que posee el compuesto cuya estructura se quiere elucidar. Este número de insaturaciones puede indicar la presencia de anillos, dobles o triples enlaces. El número de insaturaciones se calcula según la siguiente expresión:

$$g = \text{N}^\circ \text{ átomos de C} + 1 - \frac{\text{n}^\circ \text{ átomos H} + \text{n}^\circ \text{ átomos halógeno} - \text{n}^\circ \text{ átomos N}}{2}$$
 - b. Relacionar las áreas de integración de los picos con el número de totales de protones de la estructura para obtener el número de protones que representa cada pico individual.
2. La presencia de un singulete ancho en el espectro podría deberse a protones de $-\text{NH}$ o $-\text{OH}$. Si el singulete ancho se encuentra más allá de 10 ppm es probable que se trate de un $-\text{OH}$ de ácido.

3. Las señales entre 10 y 9 δ son indicativas de la presencia de un aldehído.
4. Las señales que aparecen entre 8 y 7 δ indican la presencia de un anillo aromático.
5. Las señales entre 6 y 5 δ indican la presencia de protones olefínicos. Mediante el valor de la constante de acoplamiento se puede deducir si la olefina es *cis* o *trans*.
6. Las señales entre 4 y 3 δ indican que hay protones en un carbono unido a un grupo electronegativo como es el oxígeno o un halógeno.
7. La presencia de una señal alrededor de 2.5 δ se debe al protón de un alquino terminal.
8. Las señales que aparecen entre 2.5 y 2.1 δ pueden indicar la presencia de protones adyacentes a un grupo carbonilo.

6. Espectroscopia de resonancia magnética nuclear de ^{13}C

La resonancia magnética nuclear de ^{13}C es complementaria a la de ^1H . Esta última técnica se utiliza para deducir la estructura del esqueleto carbonado observando los entornos magnéticos de los átomos de hidrógeno, mientras que la espectroscopia de RMN de ^{13}C determina el entorno magnético de los átomos de carbono.


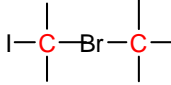






Aproximadamente el 99% de los átomos de carbono en una muestra natural son del isótopo ^{12}C . Este isótopo posee un número par de protones y un número par de neutrones, por tanto, no tiene espín magnético y no puede dar lugar a señales de resonancia magnética nuclear. El isótopo de ^{13}C menos abundante tiene un número impar de neutrones, lo que le confiere un espín magnético de 1/2, igual al del protón. La espectroscopia de resonancia magnética nuclear de ^{13}C es menos sensible que la de ^1H debido a que sólo el 1% de los átomos de carbono posee espín y a que, además, la frecuencia de resonancia del ^{13}C , para un campo magnético dado, es la cuarta parte de la que se da en la RMN de ^1H .

Los desplazamientos químicos del carbono son de 15 a 20 veces mayores que los del hidrógeno debido a que el carbono está directamente unido a los átomos que resultan ser bien apantallantes o desapantallantes. Por ejemplo, el protón de un aldehído absorbe a 9.4 ppm en el espectro de ^1H mientras que el carbono de carbonilo absorbe a 180 ppm en el espectro de ^{13}C .

Además, las señales en el espectro de ^{13}C son líneas verticales, es decir, no hay desdoblamientos de espín-espín. Esto se debe a que sólo el 1% de los átomos de carbono entran en resonancia, y por tanto, existe una probabilidad muy pequeña de que un núcleo de ^{13}C esté adyacente a otro núcleo de ^{13}C .

A continuación se da una tabla de valores aproximados de desplazamientos químicos en un espectro de resonancia magnética nuclear de ^{13}C :

Estructura	$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	$\text{R}-\text{CH}_3$	$\text{R}-\text{CH}_2-\text{R}$	$\text{R}-\overset{\text{R}}{\underset{\text{R}}{\text{C}}}-\text{H}$	$\text{R}-\overset{\text{R}}{\underset{\text{R}}{\text{C}}}-\text{R}$	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	$\text{C}=\text{C}$
J (Hz)	0	8-35	15-20	20-60	30-40	65-85	100-150

Estructura									
J (Hz)	110-170	0-40	25-65	35-80	40-60	50-80	165-185	175-185	190-200