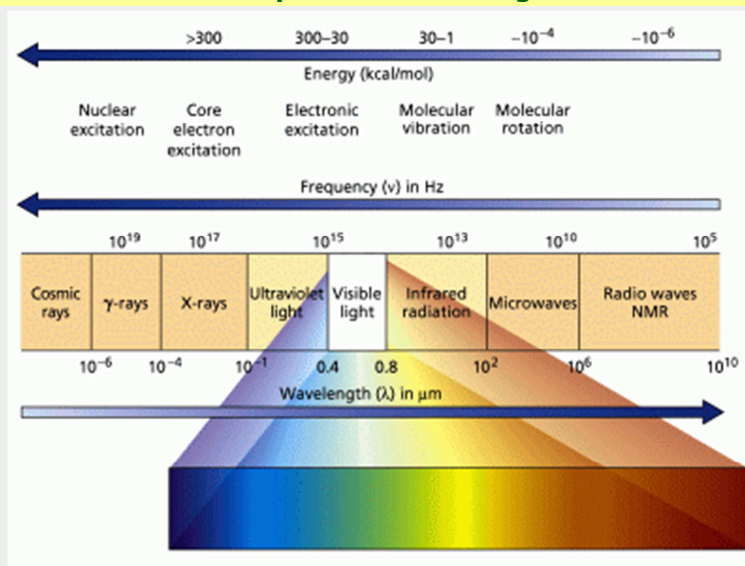
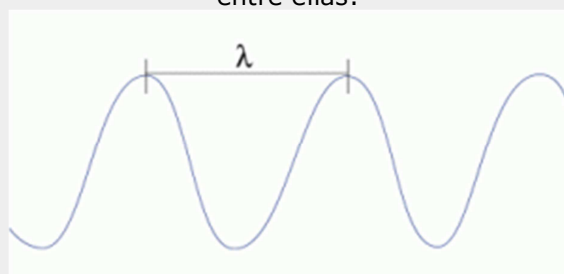


Elucidación estructural: El espectro electromagnético



Toda radiación viene caracterizada por una longitud de onda (λ), una frecuencia (ν) o una energía (E), siendo la relación existente entre ellas:



$$E = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda$$

La primera cuestión a plantearnos es que le ocurre a la materia cuando es sometida a una determinada radiación. Tal y como podemos imaginar dicho efecto dependerá de la energía de dicha radiación. En la figura superior se indican los efectos inmediatos sobre la materia, destacando de mayor a menor energía:

RADIACION	EFECTO
Rayos X y cósmicos	Ionizaciones de las moléculas
UV-Visible	Transiciones electrónicas entre los orbitales atómicos y moleculares
Infrarrojo	Deformación de los enlaces químicos
Microondas	Rotaciones de los enlaces químicos
Radiofrecuencias	Transiciones de espín electrónico o nuclear en los átomos de la molécula.

Cuando la radiación incide sobre una sustancia no toda ella se ve afectada por la misma; al átomo o conjunto de átomos que absorben radiación se le denomina **cromóforo** y para cada técnica espectroscópica será distinto dentro de una misma molécula. En las moléculas existen también átomos o grupos de átomos que no absorben radiación, pero hacen que se modifique alguna de las características de la absorción del cromóforo, se denominan a tales grupos **auxocromos**.

La segunda cuestión es **cómo** podemos utilizar dichos efectos sobre las sustancias para obtener información sobre la estructura de la materia y como utilizar dicha información.

De una manera muy esquemática se pueden indicar como características más importantes de los métodos espectroscópicos las siguientes:

TÉCNICA ESPECTROSCÓPICA	INFORMACIÓN OBTENIDA
Rayos X	Estructura total de la molécula incluida la estereoquímica de la misma a partir de las posiciones relativas de los átomos.
Ultravioleta-Visible	Existencia de cromóforos y/o conjugación en la molécula a partir de las absorciones observadas.
Infrarrojo	Grupos funcionales a partir de las absorciones observadas.
Espectrometría de masas (*)	Fórmula molecular y subestructuras a partir de los iones observados.
Resonancia magnética nuclear	Grupos funcionales, subestructuras, conectividades, estereoquímica, etc... a partir de datos de desplazamiento químico, áreas de los picos y constantes de acoplamiento observadas.

() No es una técnica espectroscópica en el sentido que estamos viendo pues no existe irradiación electromagnética de la sustancia y no se produce absorción de dicha radiación.*

La cuestión de que técnica utilizar o en qué orden, si son varias, para lograr la completa determinación estructural de una sustancia dependerá en gran medida de los objetivos perseguidos. De una manera general podemos indicar como objetivos sucesivos los siguientes:

1. Fórmula molecular.
2. Identidad de los grupos funcionales.
3. Conectividades de los carbonos.
4. Posicionamiento de los sustituyentes y/o los grupos funcionales sobre el esqueleto carbonado (Obtención de subestructuras), y
5. Propiedades estereoquímicas incluyendo tanto los aspectos estáticos como dinámicos.

Expresado de otra manera podemos indicar como objetivos de la Determinación estructural la elucidación de la Estereoquímica de la molécula, **entendiendo por tal la disposición espacial de los átomos que la forman, y que implica el conocimiento sucesivo de:**

- **Composición:** átomos presentes y su proporción en la molécula, lo que se traduce en la obtención de una fórmula molecular.
-
- **Constitución:** Uniones existentes entre los átomos, lo que se traduce en la determinación de los grupos funcionales y subestructuras presentes en la misma.
-
- **Configuración:** disposición espacial de los átomos en la molécula. y
-
- **Conformación:** disposición espacial de la molécula que surge debido a la posibilidad de rotación o giro de los enlaces simples en la misma.

Antes de abordar el tema de la resolución de una determinación estructural concreta a partir de los datos espectroscópicos de la misma te recomiendo que pases a los apartados de las principales características de cada una de las técnicas espectroscópicas.