

SISTEMAS PROTÓNICOS EN RESONANCIA MAGNÉTICO NUCLEAR DE ^1H

- Fernando de J. Amézquita L.
 - Diana Mendoza O.



Universidad de Guanajuato

TABLE 6-1

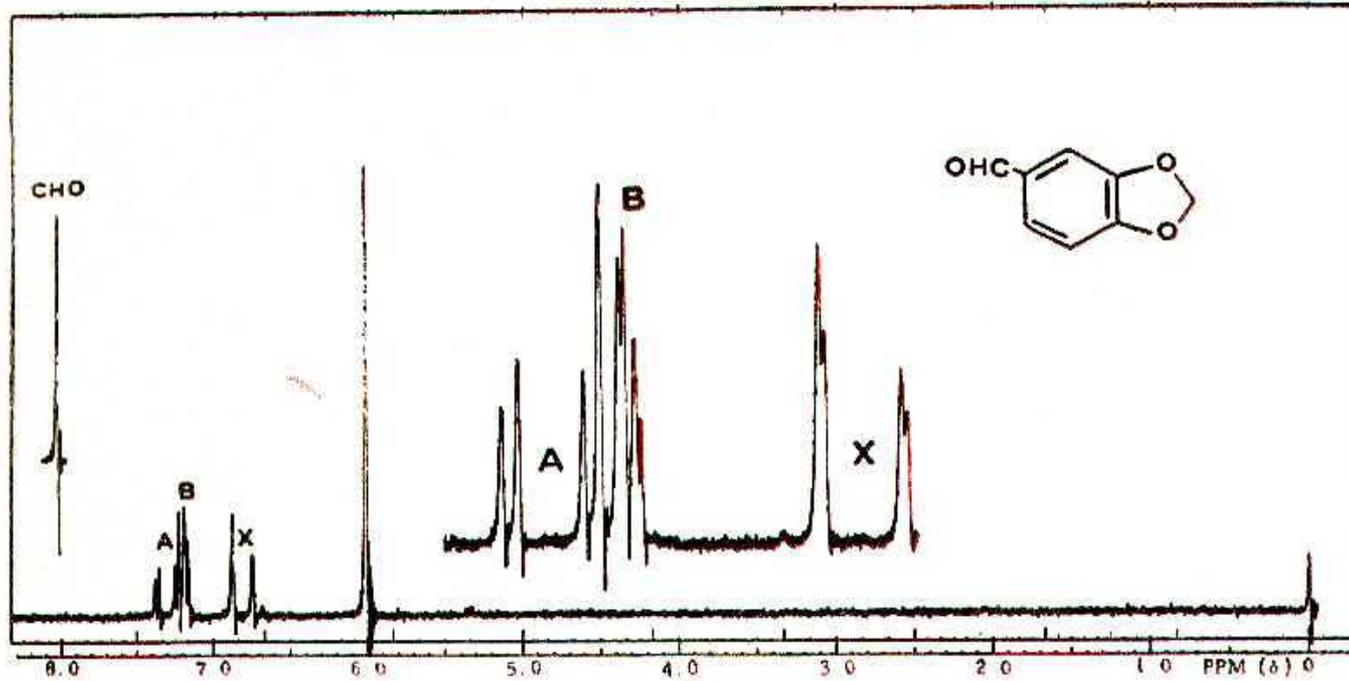
Analysis of Spin Patterns from Their Characteristics

Number of protons from integration	Number of peaks n	Spacing of peaks	Relative intensities of peaks*	Possible systems†
1	2 to 9	Equal	Binomial	$\underline{A}X_{n-1}$
	2		Slanting	$\underline{A}B$
	3	Equal		\underline{ABX} ; $J_{AX} = J_{AX} $ or J_{AB} $\gg \Delta\nu_{AB} + \frac{1}{2}(J_{AX} - J_{BX})$
	4 (or 4 + 2 weak)	Symmetrical about center of band		\underline{ABX}
	4	Unequal	Slanting	\underline{AB}_2
2	2 to 9	Equal	Binomial	\underline{A}_2X_{n-1}
	Complex: strong doublet + 2 quartets	Symmetrical about center of band; also mirror image of another 2-proton band		$\underline{A}_2X'_1$
	Complex: as many as 12 peaks	Not symmetrical about center of band but mirror image of another 2-proton band		\underline{A}_2B_1 or $\underline{A}'_2B'_1$
	2 quartets (may be superimposed)	One spacing occurs 4 times	Like 2 AB systems	\underline{ABX}
	2 doublets (may have one other weak peak)	One doublet separated less than other	Slanting	\underline{A}_2B
3	2 or 3	Equal	Binomial	\underline{A}_3X_{n-1}
	2 unresolved bands		Slanting	\underline{A}_3B
	Complex	Complex	Complex	\underline{ABC}
	8 to 9 (4 peaks + 2 unequally spaced doublets + possible extra peak)	Unequal	Slanting	\underline{A}_2B
4	Complex	Symmetrical about center of band		\underline{A}_2B_2 or $\underline{A}'_2B'_2$
5	Complex	Complex	Complex	\underline{A}_2B_2C (monosubstituted phenyl, for example)
<p>*Binomial intensities: 1:1 1:2:1 1:3:3:1 1:4:6:4:1 1:5:10:10:5:1 1:6:15:20:15:6:1</p> <p>†Slanting* means general increase in intensities in direction of other part of pattern. †The primed systems are those in which each A is not coupled equally to each B or X.</p>				

Clasificación de los sistemas protónicos

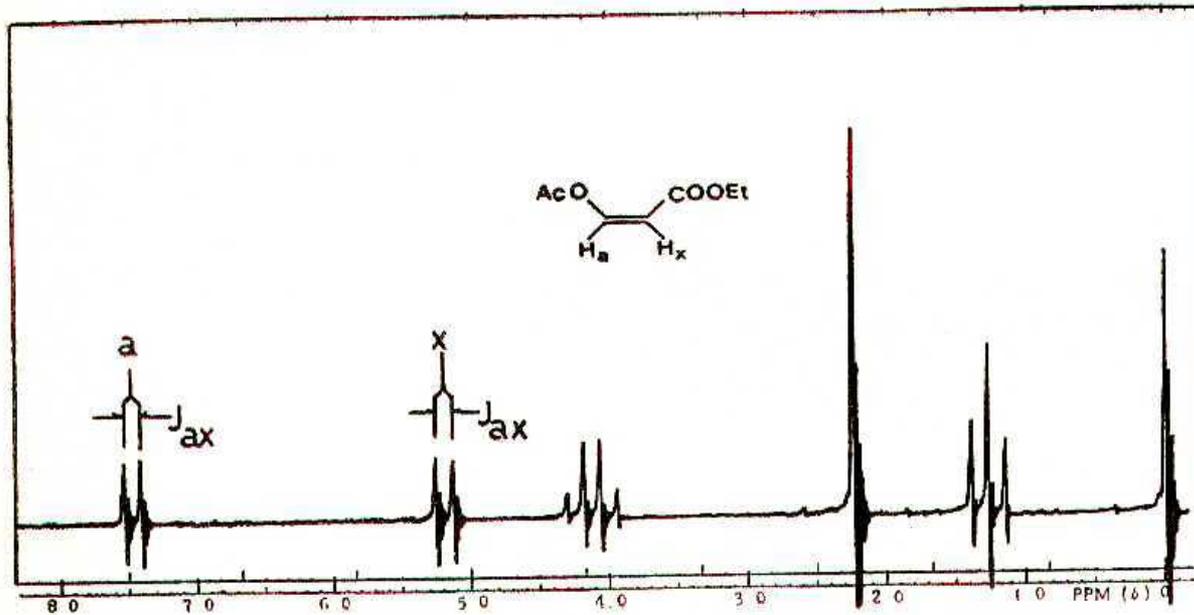
A					
A_2	AB	AX			
A_3	A_2B	A_2X	ABC	ABX	AMX
	$A_2'B'$	$A_2'X'$			
A_4	A_3B	A_3X	A_2B_2	A_2X_2	
	$A_3'B'$	$A_3'X'$	$A_2'B_2'$	$A_2'X_2'$	
A_5	A_2B_3	A_2X_3	ABC_3	ABX_3	
	$A_2'B_3'$	$A_2'X_3'$			

Sistema A₂



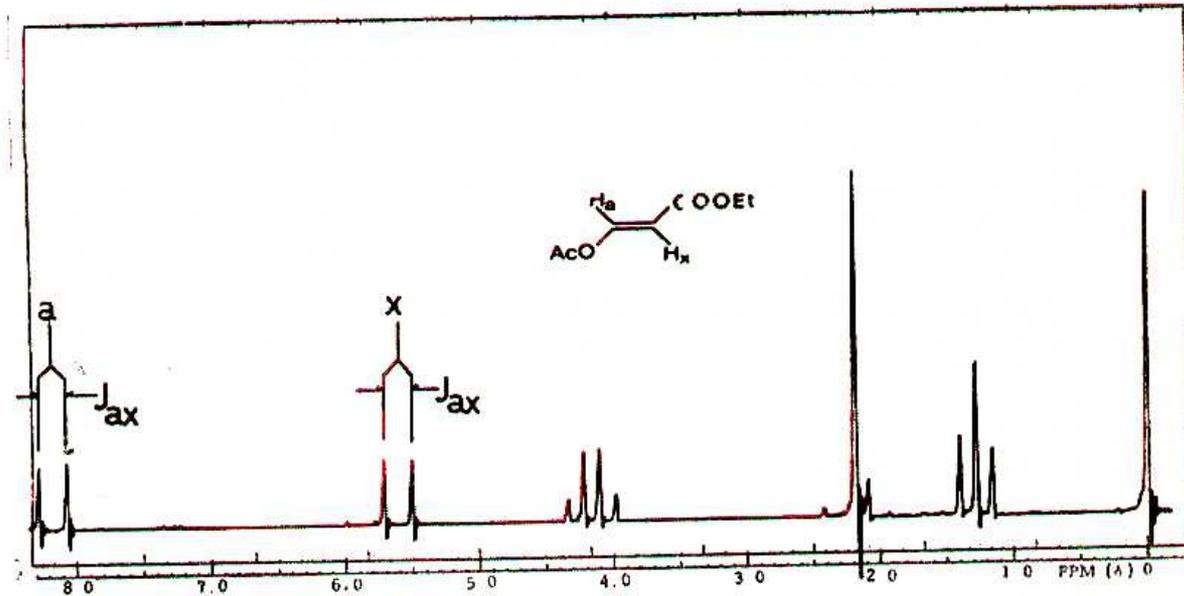
Espectro de RMP del piperonal
(en CCl₄)

Sistema AX

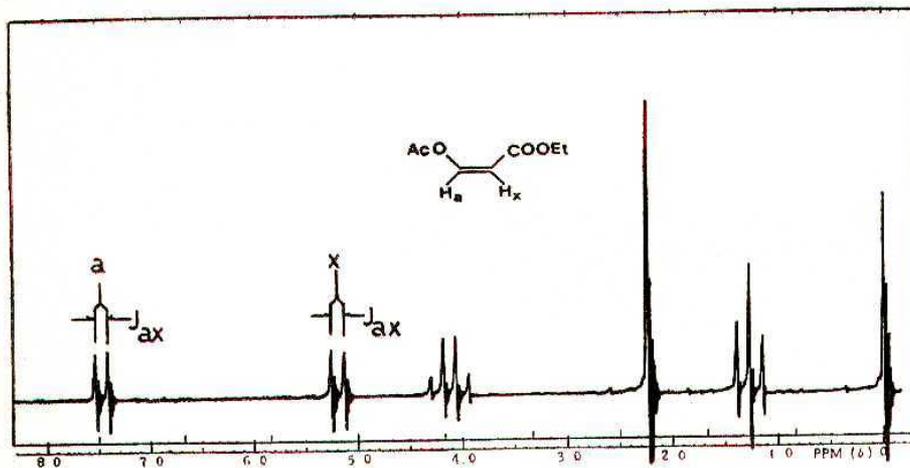


Espectro de RMP del *cis*-3, acetoxiacrilato de etilo³
(en CCl_4)

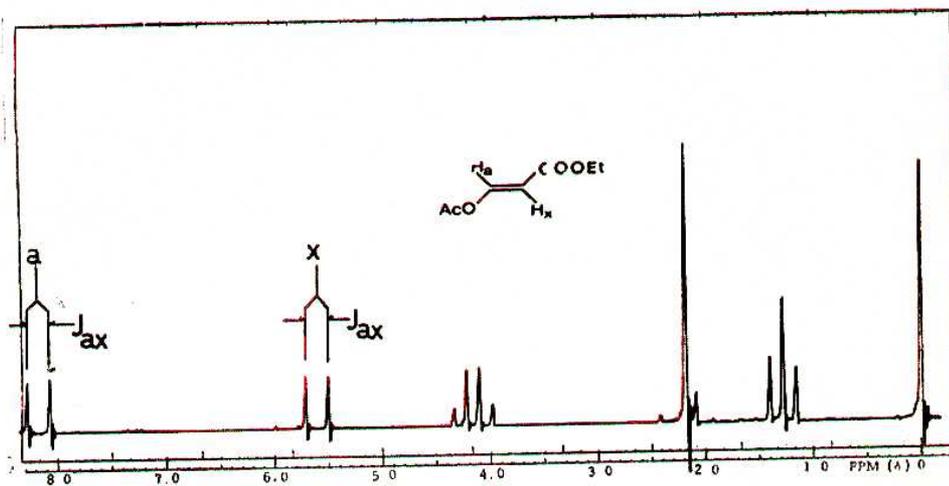
Sistema AX



Espectro de RMP de *trans*-3, acetoxiacrilato de etilo³
(en CCl_4)

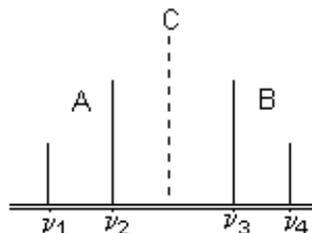


Espectro de RMP del *cis*-3, acetoxiacrilato de etilo³
(en CCl_4)



Espectro de RMP de *trans*-3, acetoxiacrilato de etilo³
(en CCl_4)

Sistema AB



$$J_{AB} = \nu_1 - \nu_2 = \nu_3 - \nu_4$$

$$\Delta\nu_{AB} = \sqrt{(\nu_1 - \nu_4)(\nu_2 - \nu_3)}$$

La intensidad relativa de los multipletes:

$$\frac{i_2}{i_1} = \frac{i_3}{i_4} = \frac{\nu_1 - \nu_4}{\nu_2 - \nu_3}$$

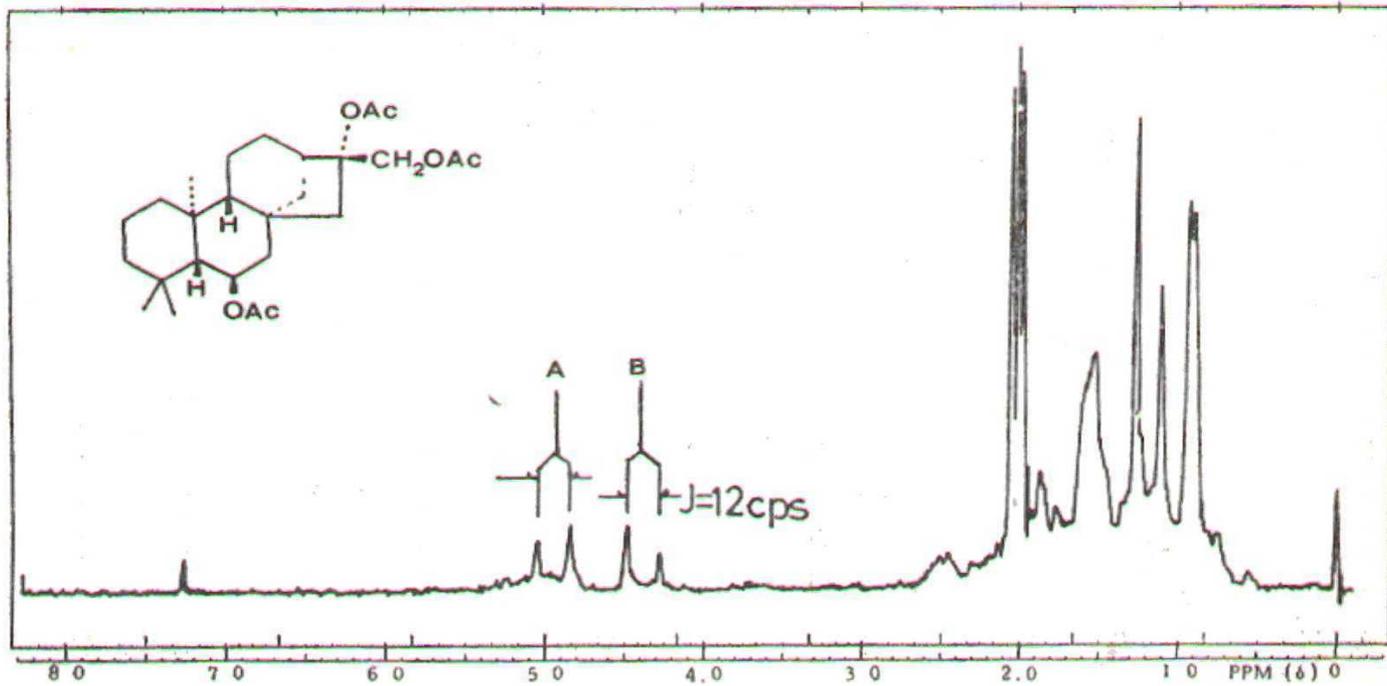
Lo que significa que la intensidad es inversamente proporcional al espaciamento de los subpicos.

Para el patrón espectral AB, una vez que se ha determinado $\Delta\nu_{AB}$ pueden encontrarse fácilmente los desplazamientos químicos para A y B:

$$\delta_A = \nu_1 - \frac{(\nu_1 - \nu_4) - \Delta\nu_{AB}}{2}$$

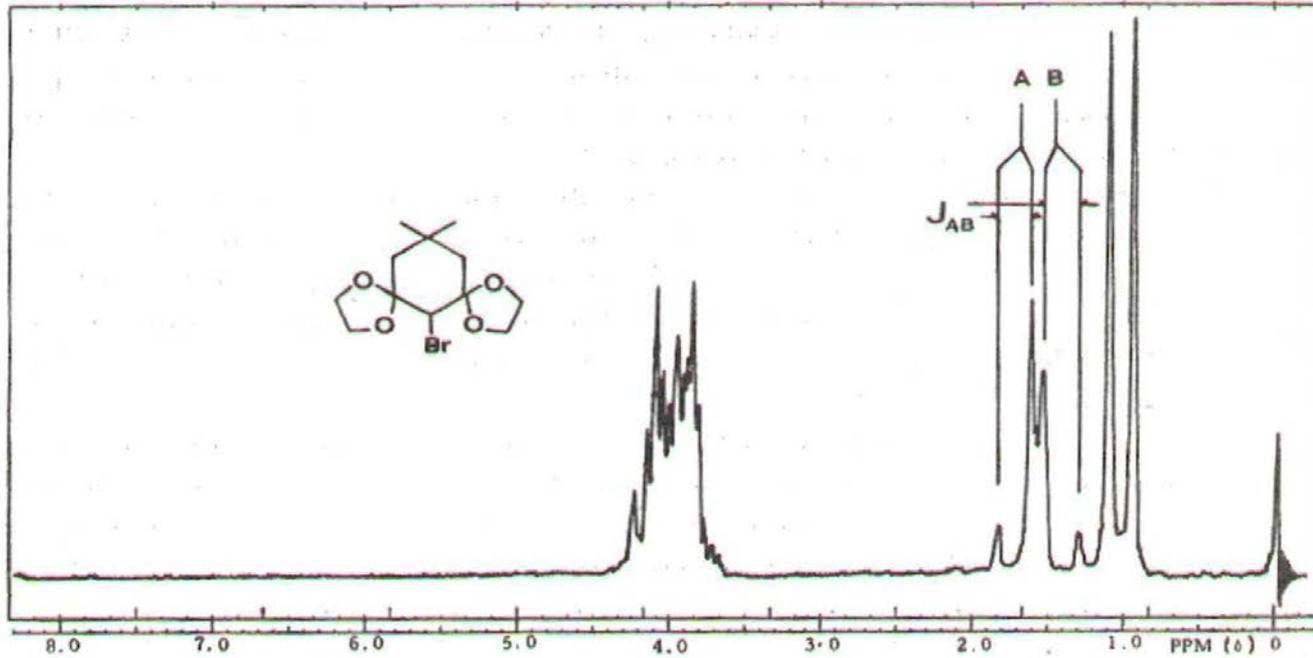
$$\delta_B = \delta_A - \Delta\nu_{AB}$$

Sistema AB



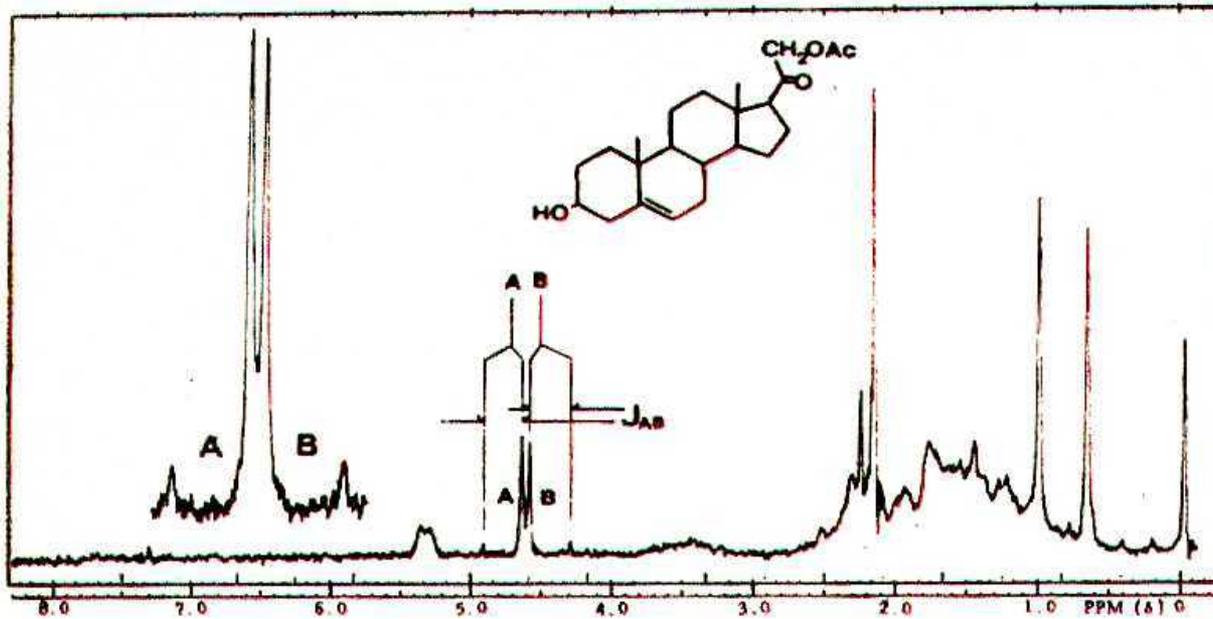
Espectro de RMP del triacetato de corimbol⁵

Sistema AB



Espectro de RMP de la dietilendioxi, 2-bromodimedona
(en CCl_2)^e

Sistema AB

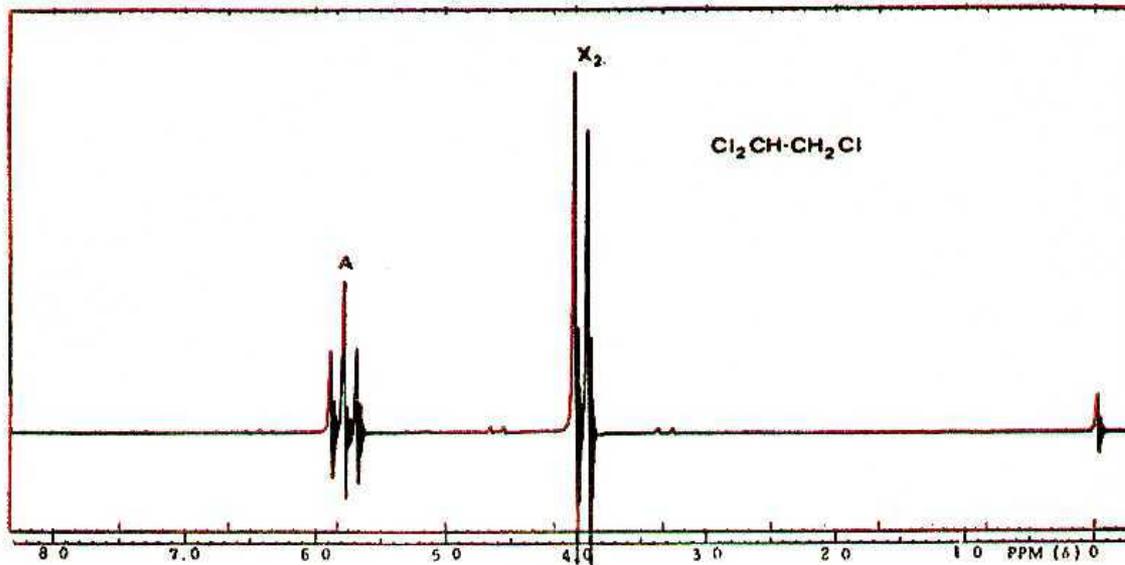


Espectro de RMP del 21-acetato de la Δ^5 pregnen-3 β , 21-diol-20 ona

Tres protones que interaccionan

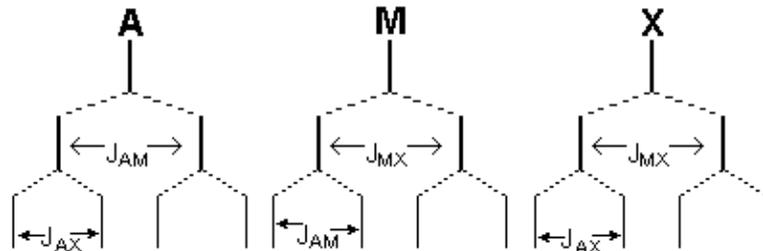
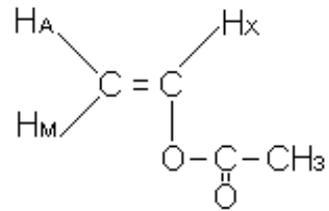
Sistemas; A_3 , AX_2 (ó A_2X), AMX , ABX , ABC , AB_2 (ó A_2B)

Sistema AX_2



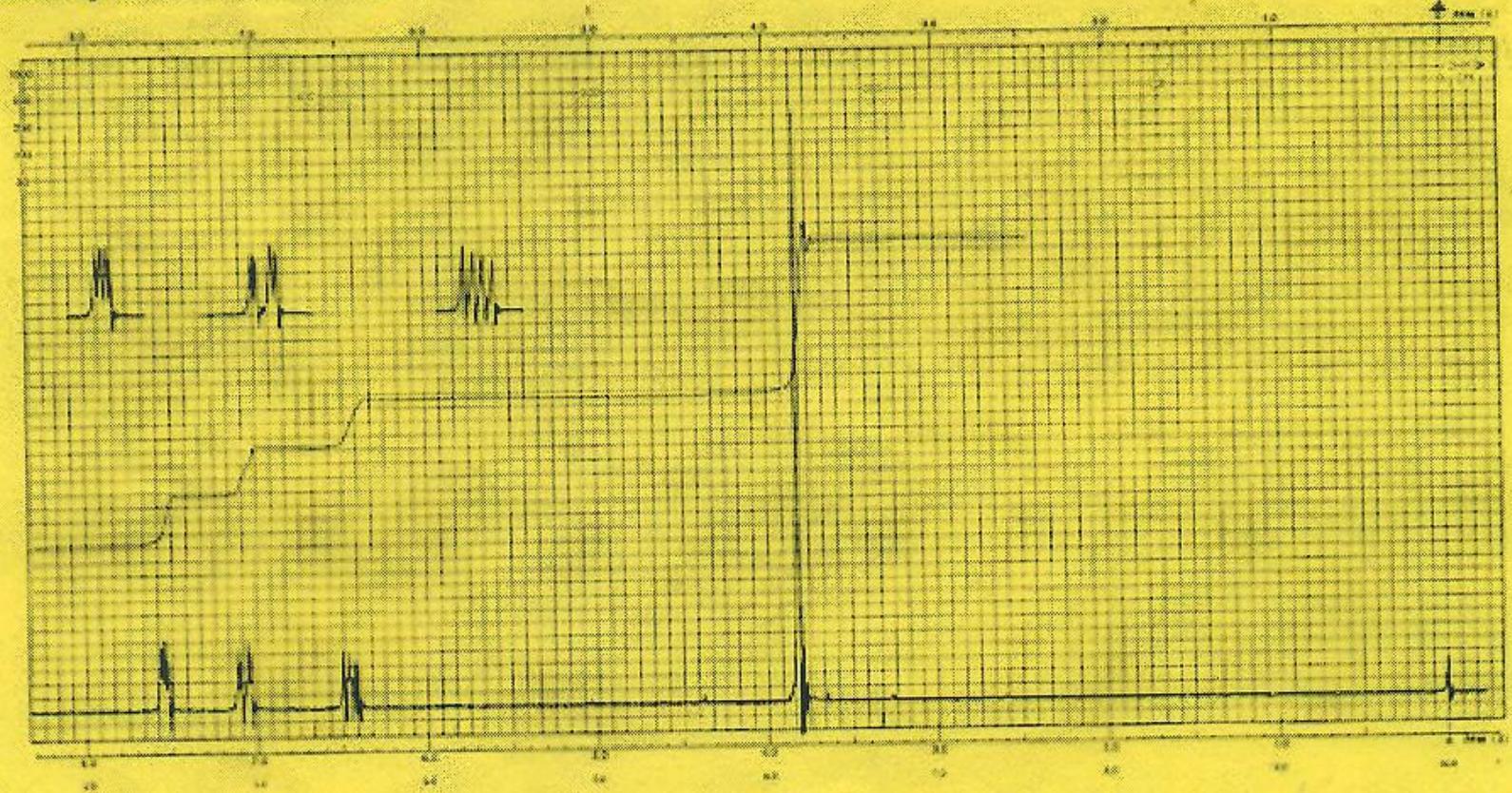
Espectro de RMP del 1,1,2-tricloroetano
(en CCl_4)

Sistema AMX



Sistema AMX

NMR Spectrum (Solvent CCl_4)



SDBS-¹H NMR

SDBS No. 556

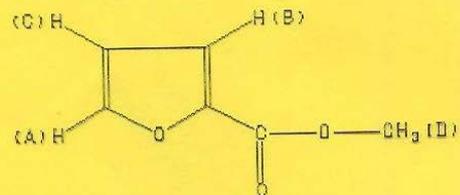
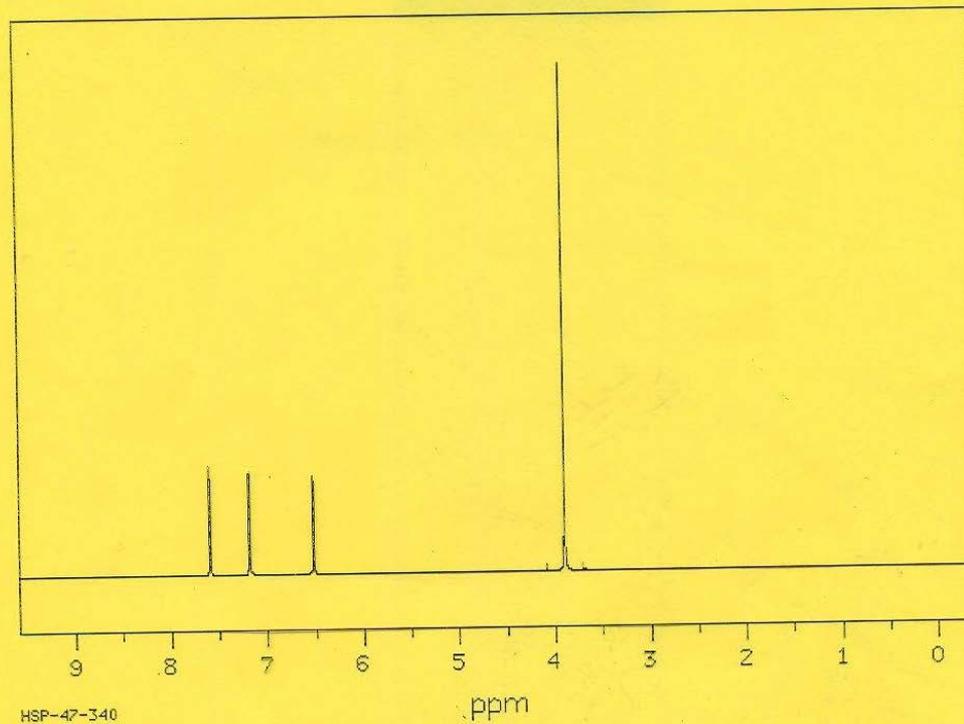
HSP-47-340

399.65 MHz

C₆H₆O₃

0.05 ml : 0.5 ml CDCl₃

methyl 2-furoate



Assign.	Shift (ppm)
A	7.596
B	7.187
C	6.518
D	3.897

SDBS-¹³C NMR

C₆H₆O₃

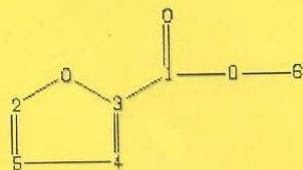
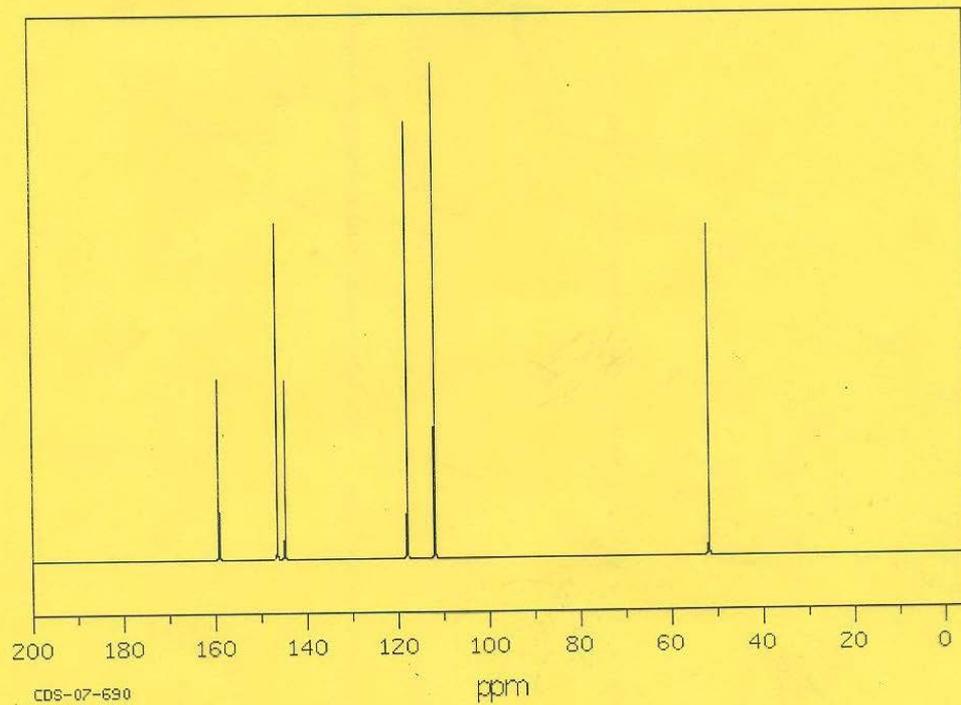
methyl 2-furoate

SDBS No. 556

CDS-07-690

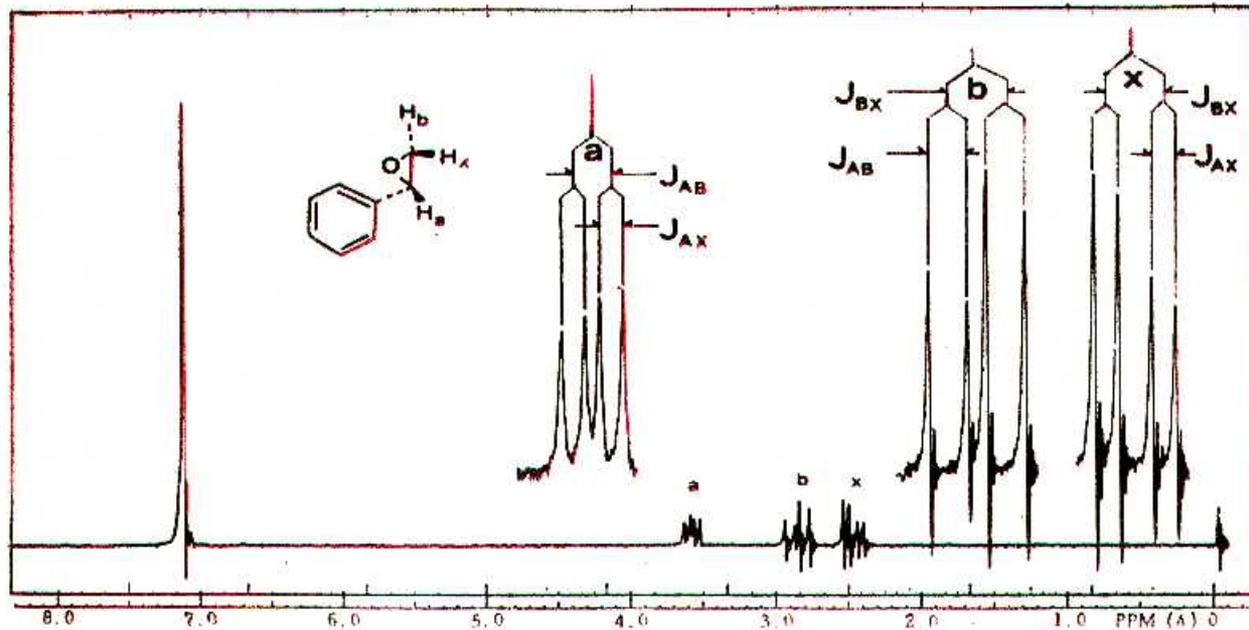
25.16 MHz

0.5 ml : 1.5 ml CDCl₃



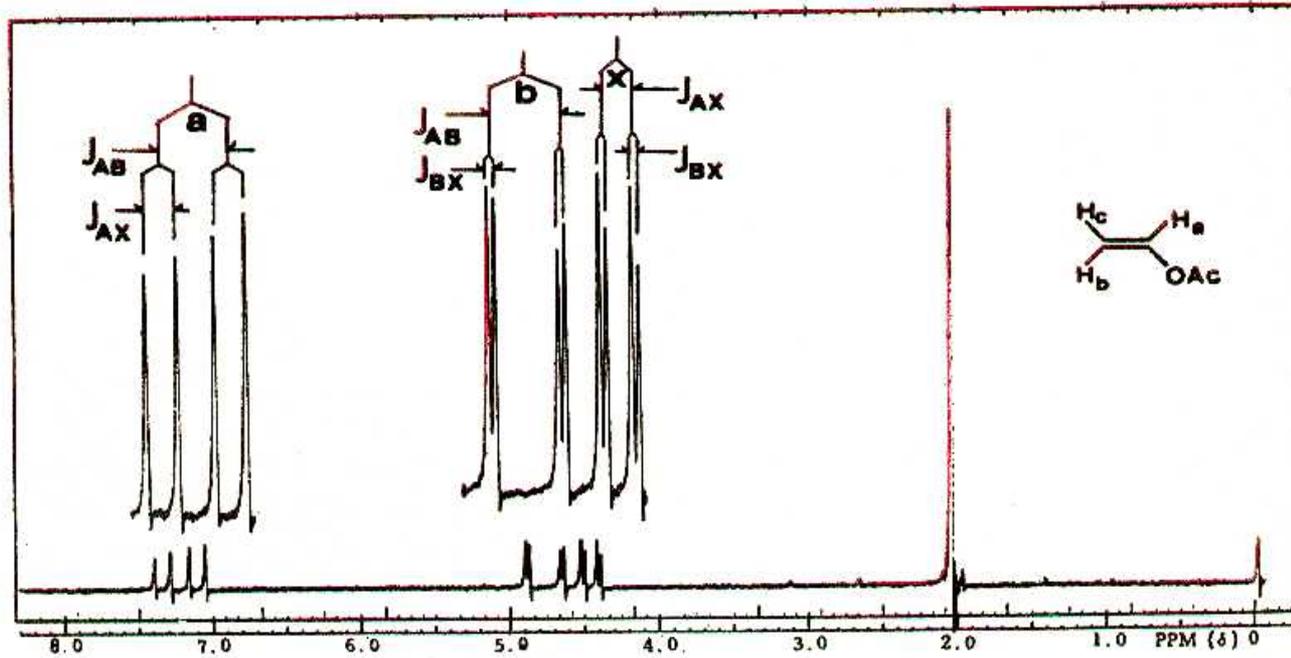
ppm	Int.	Assign.
159.16	363	1
146.46	677	2
144.77	358	3
117.98	881	4
111.93	1000	5
51.84	667	6

Sistema ABX



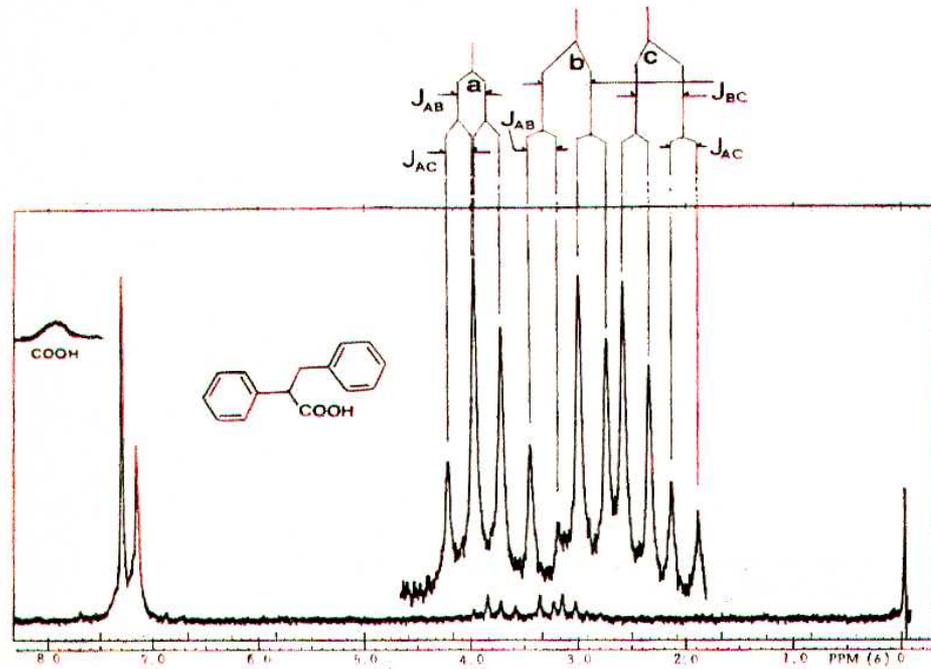
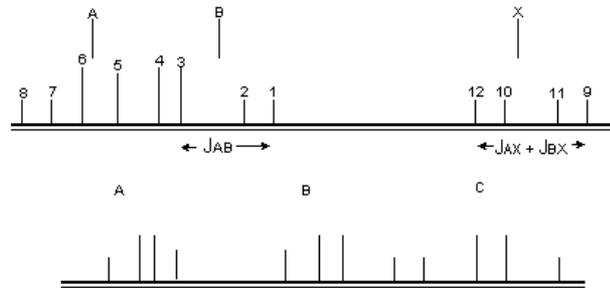
Espectro de RMP del óxido de estireno^s
(en CCl_4)

Sistema ABX



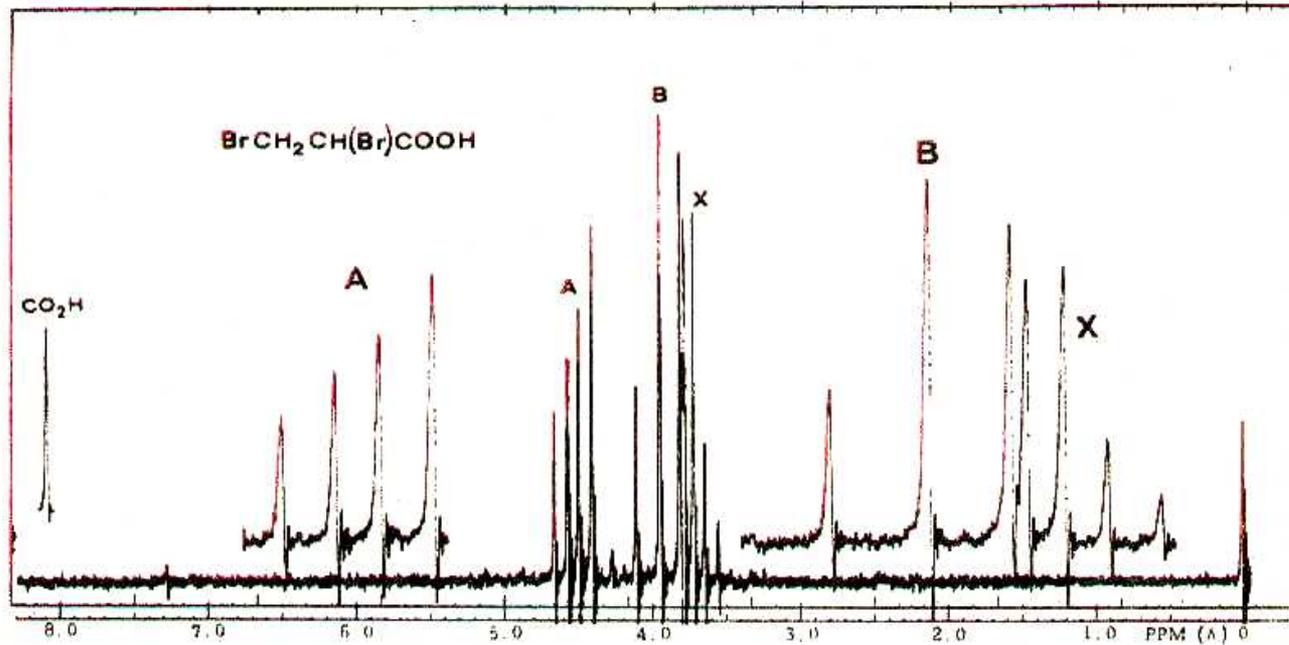
Espectro de RMP del acetato de vinilo¹⁰

Sistema ABC



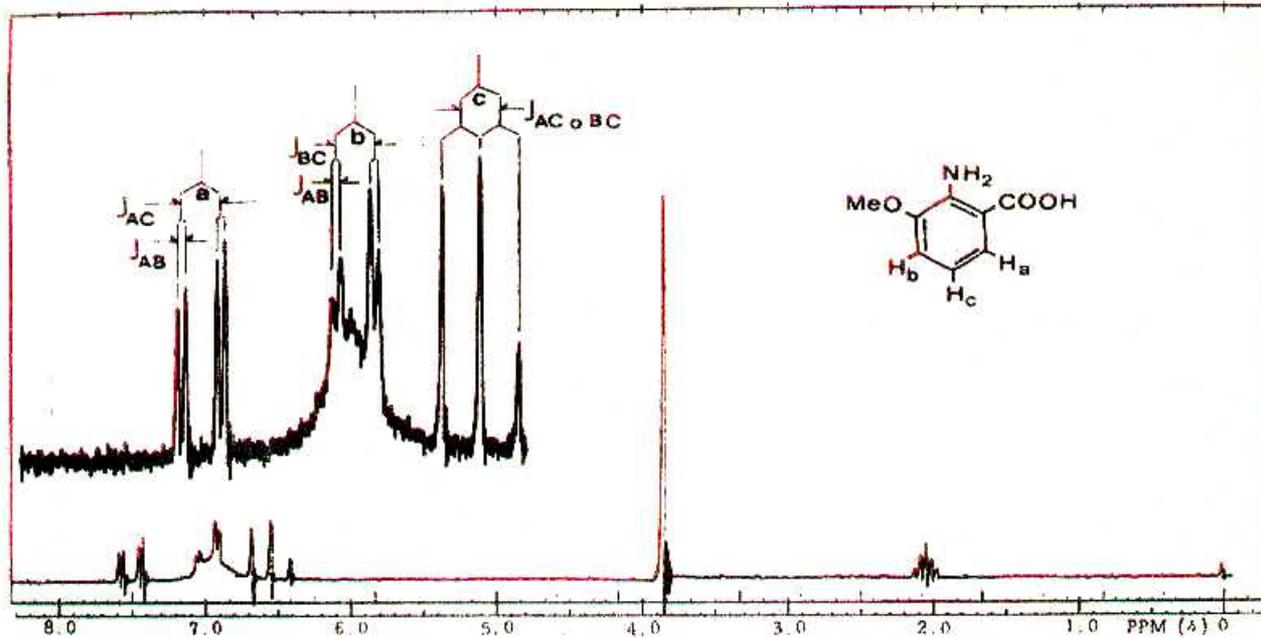
Espectro de RMP del ácido 2,3-difenilpropiónico

Sistema ABX



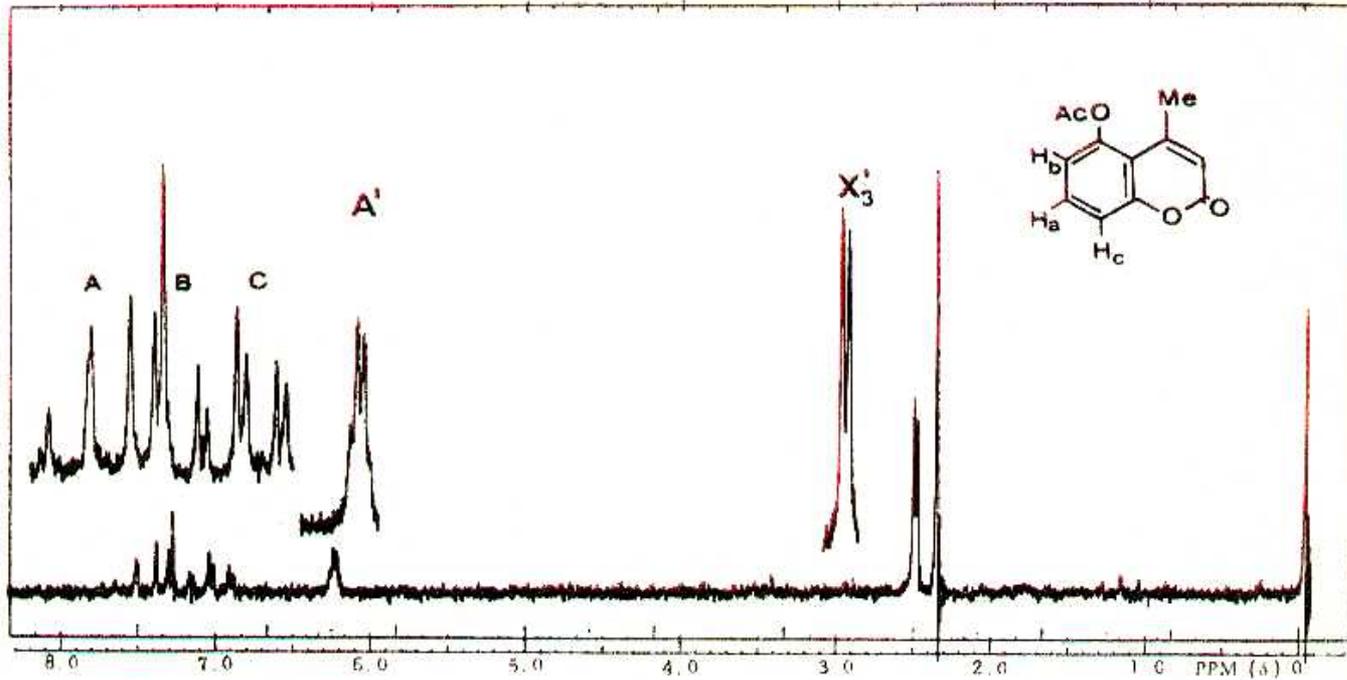
Espectro de RMP del ácido α, β -dibromopropiónico⁹

Sistema ABC



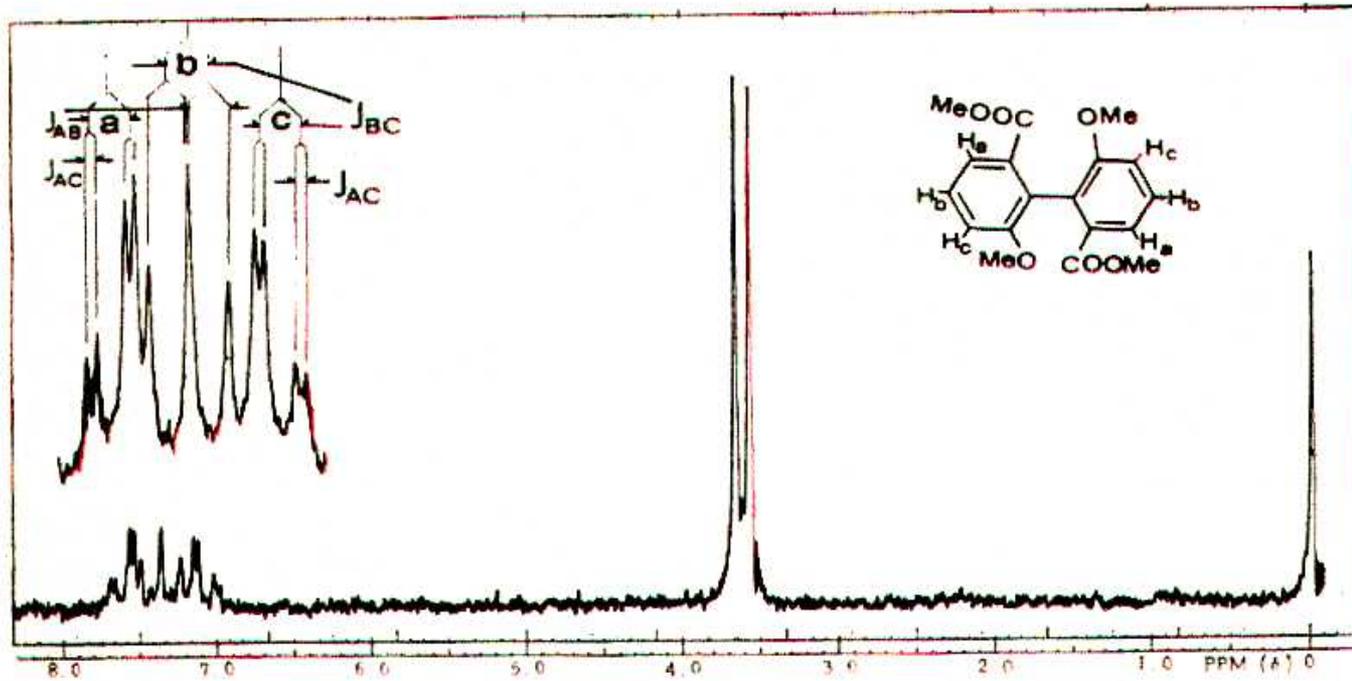
Espectro de RMP del ácido 2-amino, 3-metoxibenzoico
(el protón del CO₂H no es mostrado)
(en Me₂CO-d₆)

Sistema ABC



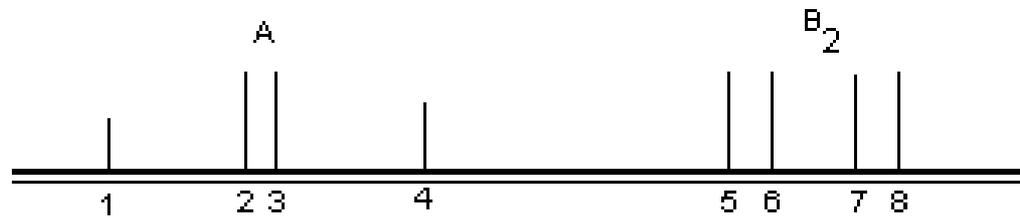
Espectro de RMP de la 4-metil, 5-acetoxi-cumarina

Sistema ABC

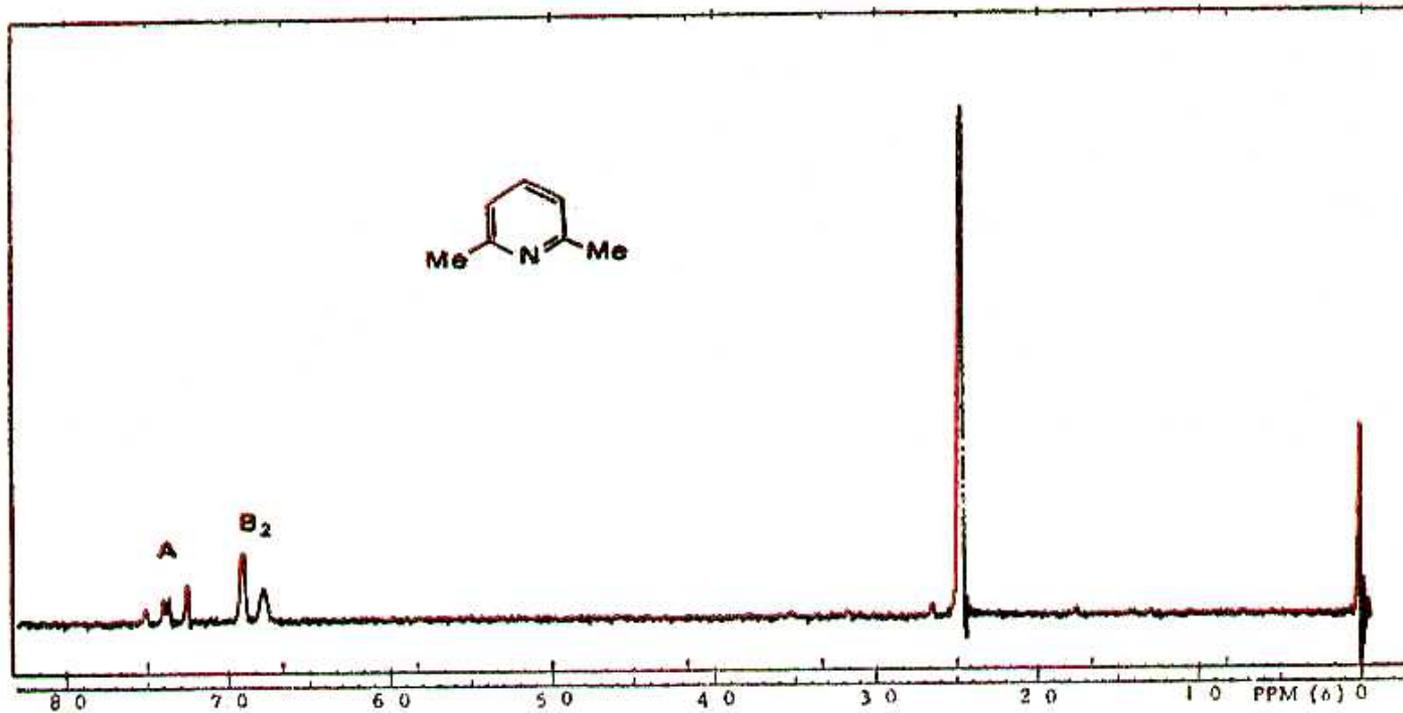


Espectro de RMP del 2,2'-dicarboximetil-6,6'-dimetoxi-difenilo

Sistema AB_2



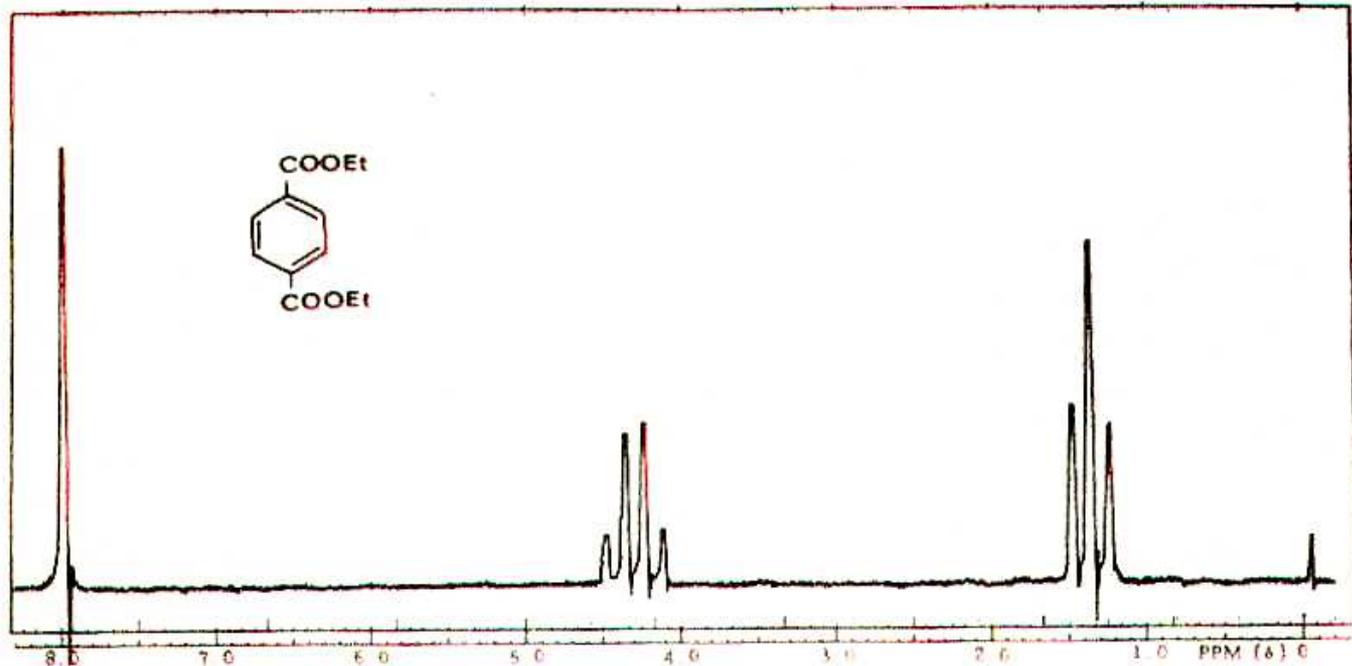
Sistema AB₂



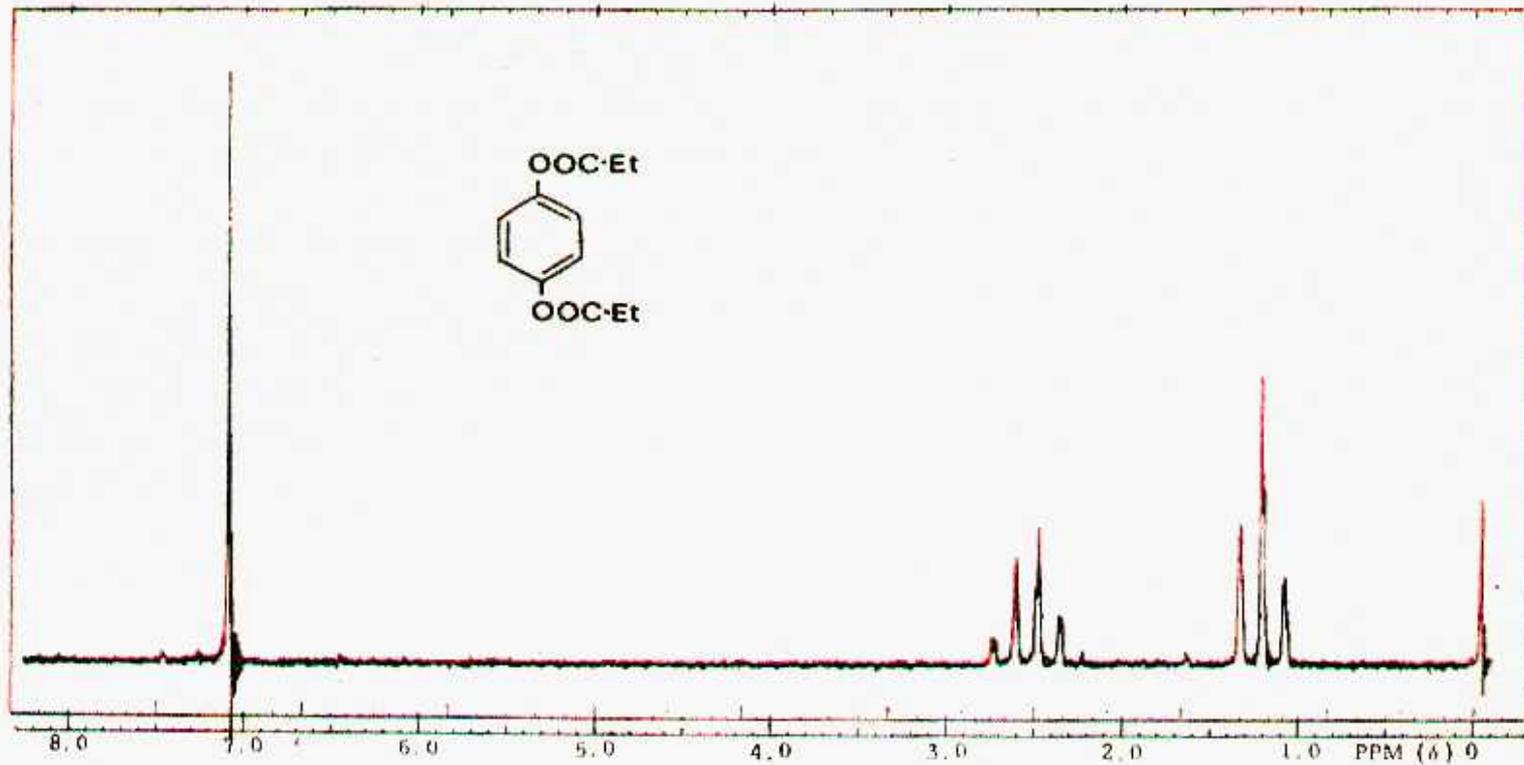
Espectro de RMP de la 2,6-lutidina
(en CCl₄)

Sistemas con mas de tres núcleos interaccionantes

Sistema A₄



Espectro de RMP del diéster etílico del ácido *terre*-ftálico



Espectro de RMP del dipropionato de hidroquinona

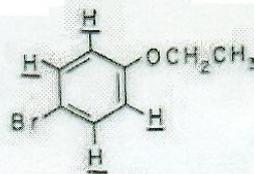
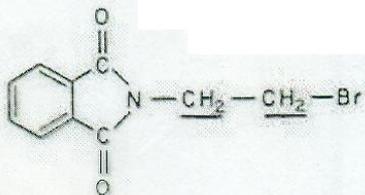
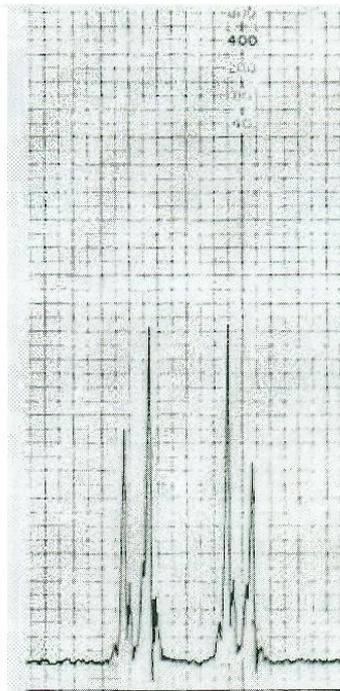
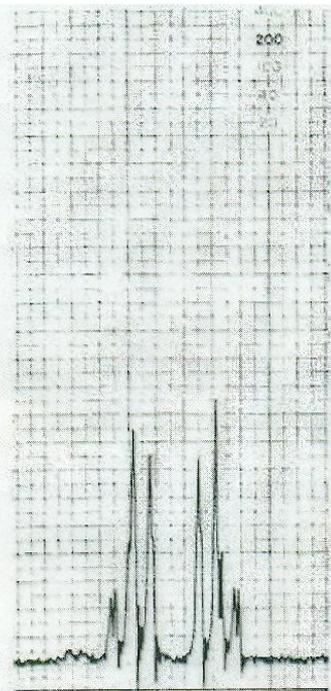
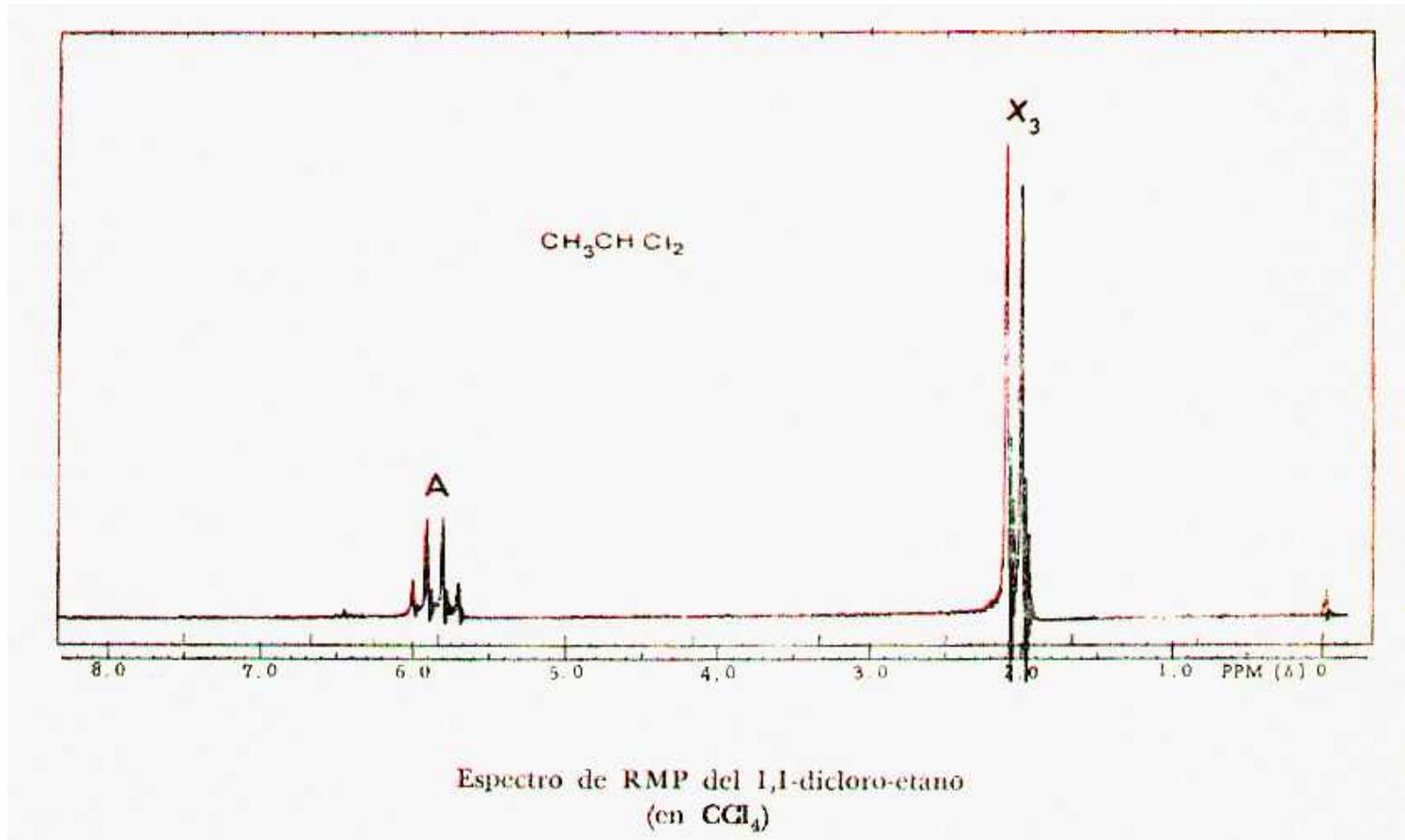
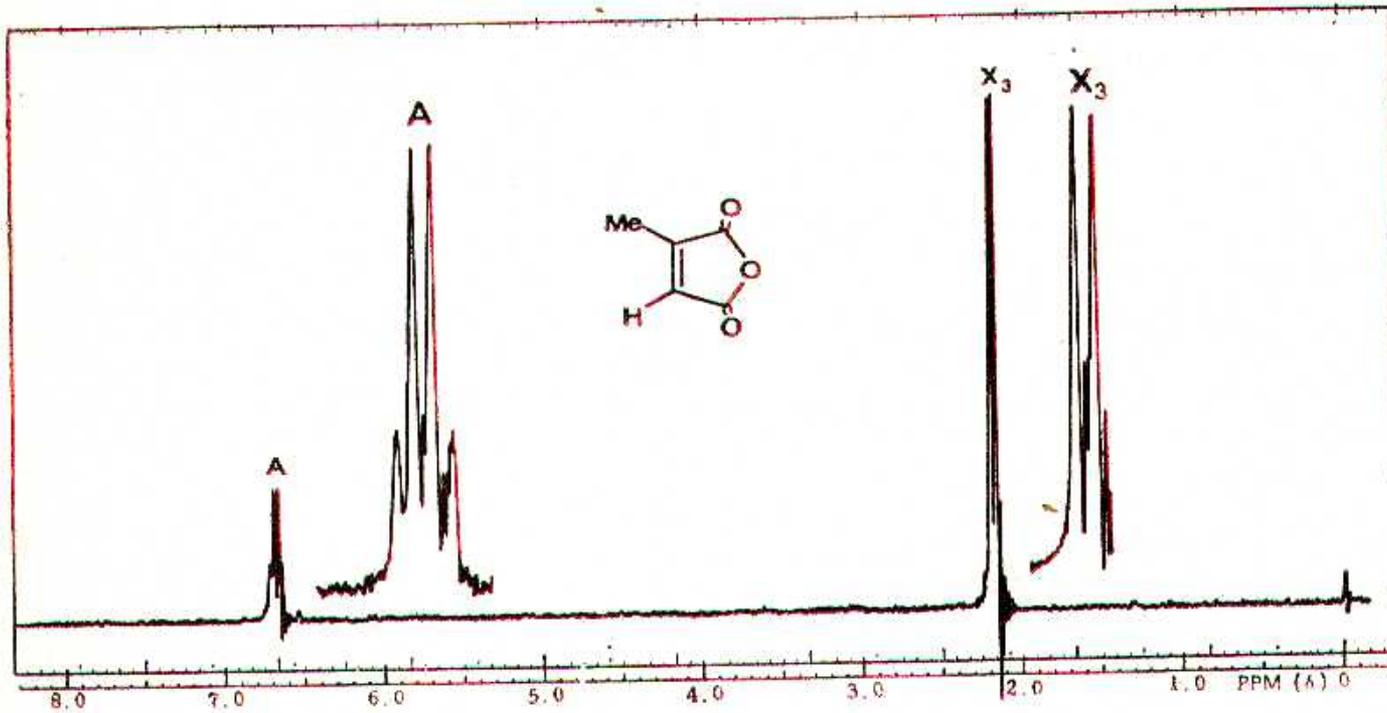


Fig. 4-2. Comparison of an A_2B_2 (left) and $A_2'B_2'$ (right) system. Reproduced by permission of the copyright holder, Varian Associates.

Sistemas AX₃

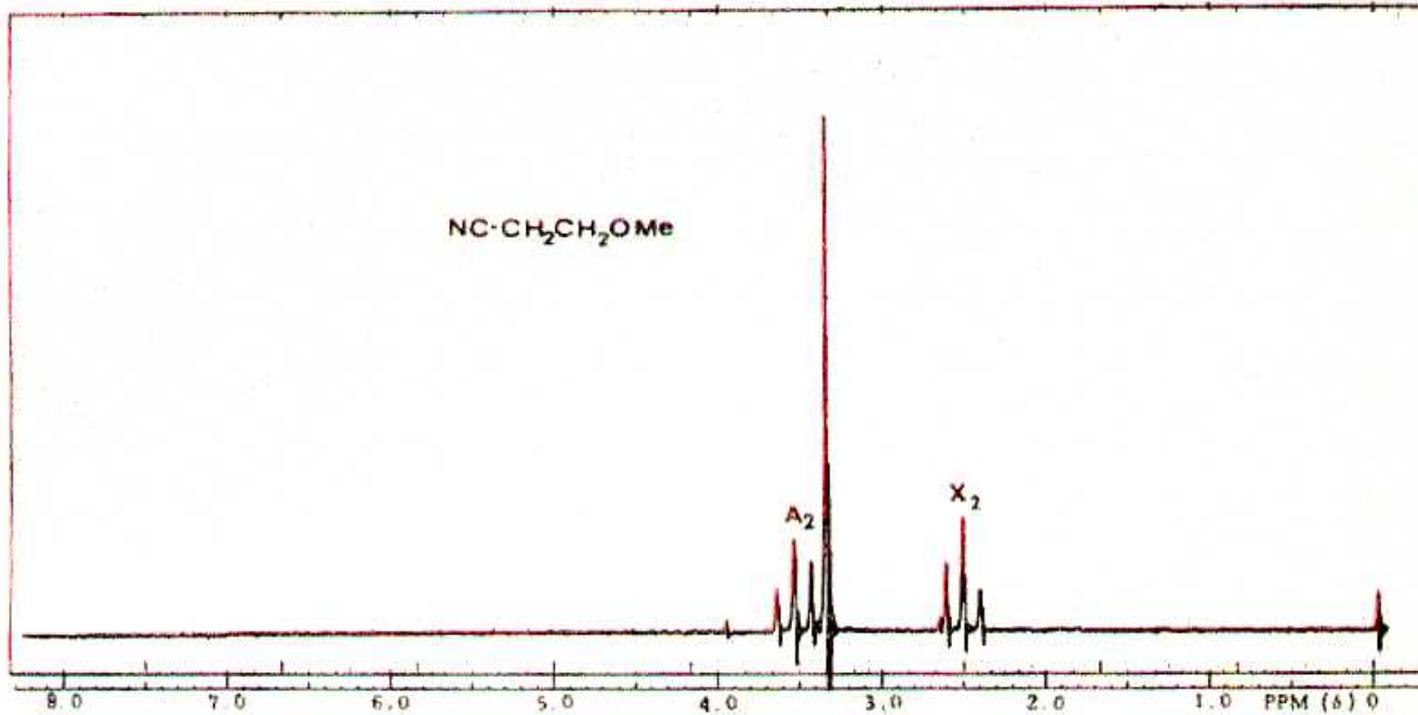


Sistemas AX₃

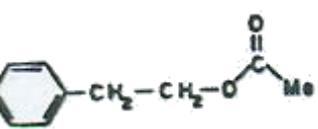
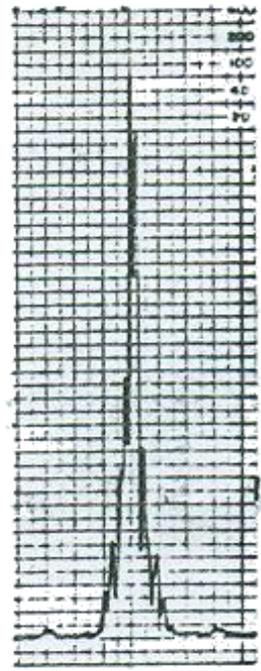
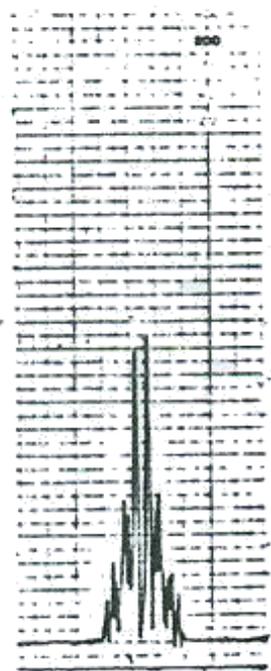
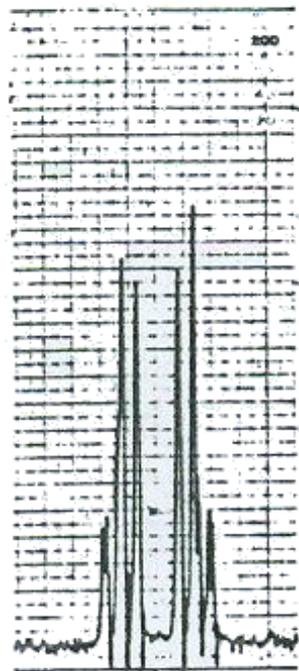
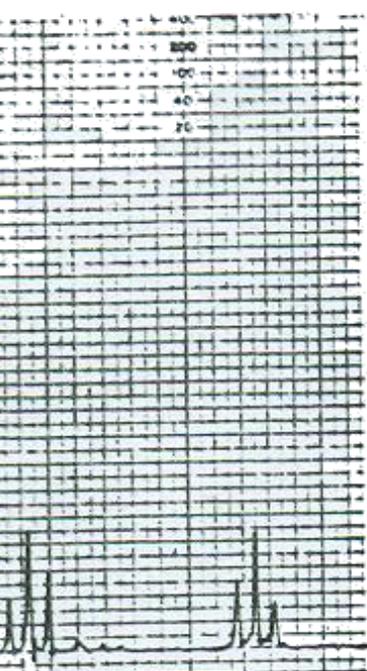


Espectro de RMP del anhídrido metil maleico
(en CCl₄)

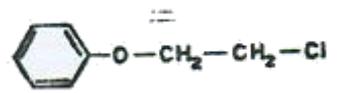
Sistemas A_2X_2



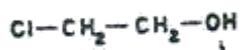
Espectro de RMP del 1-metoxi,2-ciano-etano
(en CCl_4)



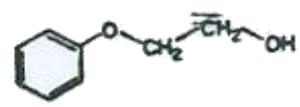
a



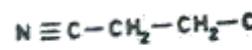
b



c



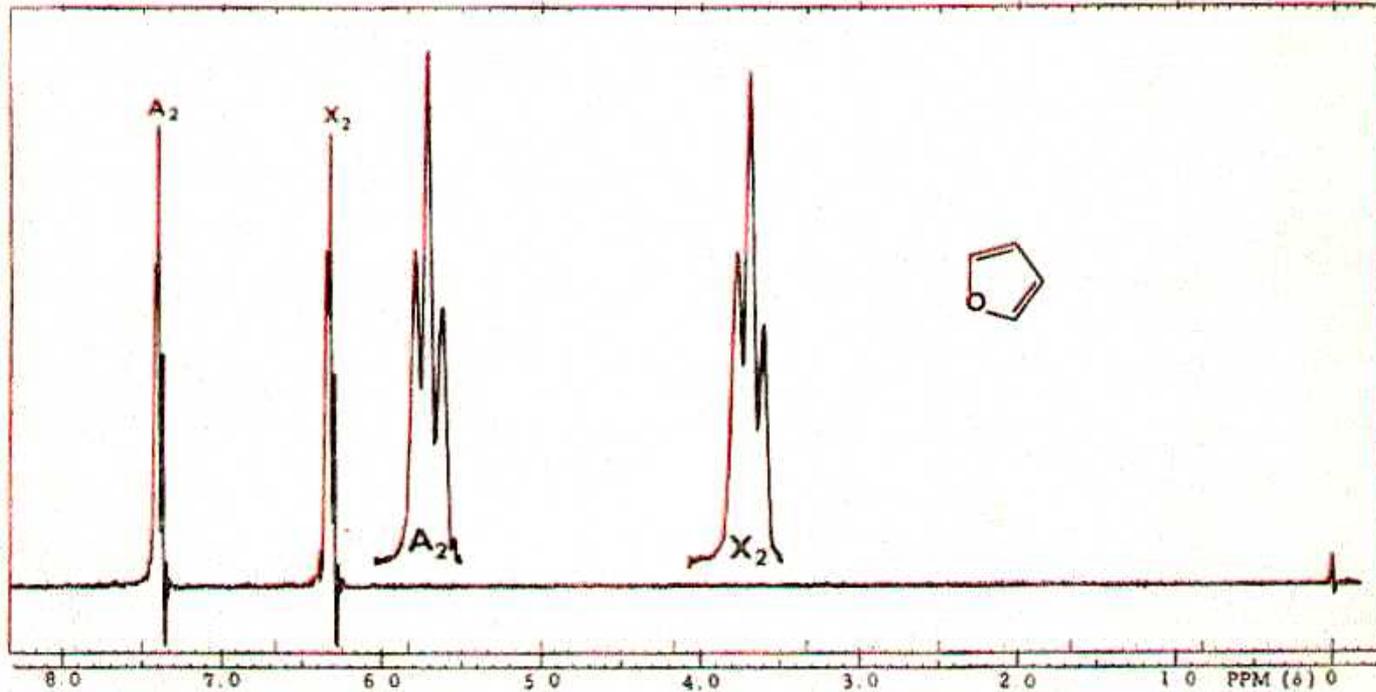
d



e

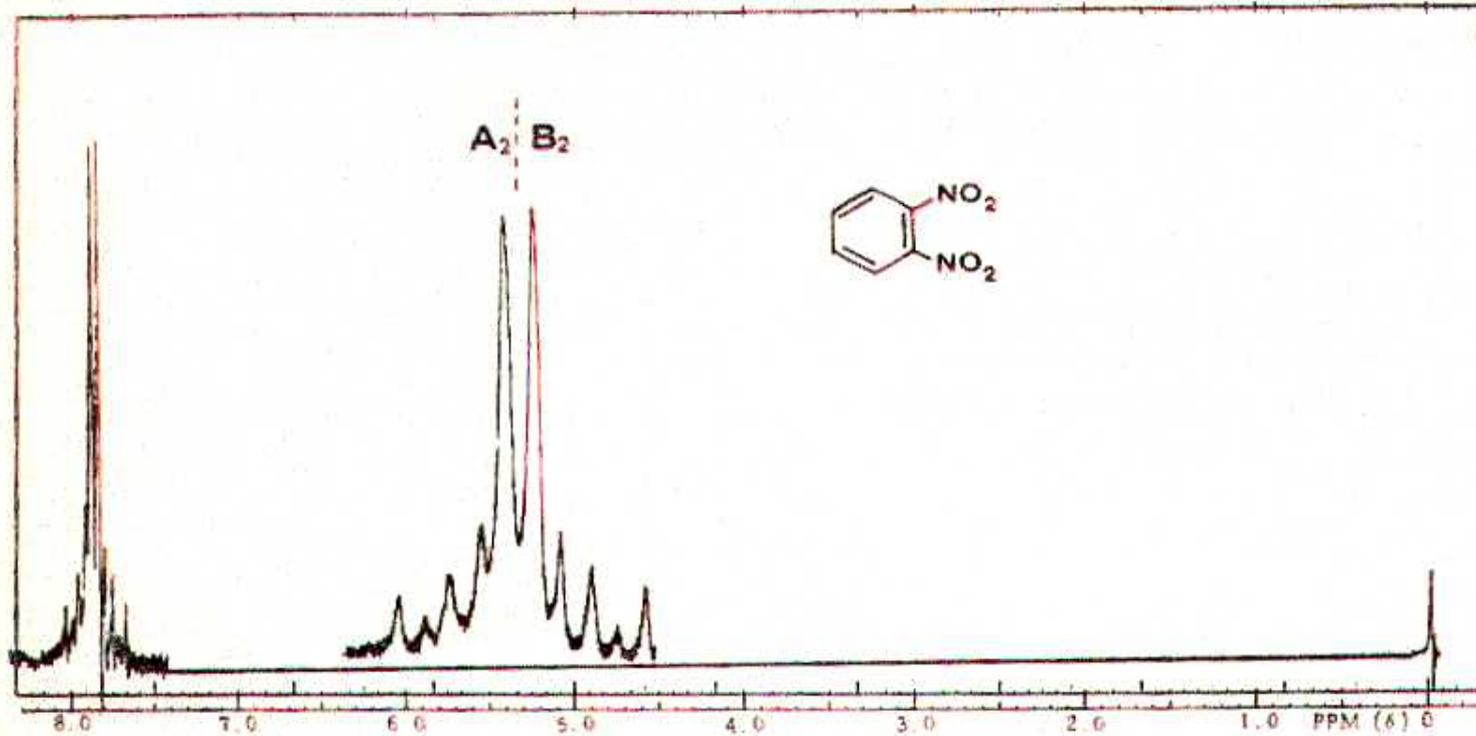
4-1. Effect of decreasing $\Delta\nu_{AB}/J_{AB}$ on the spin multiplet due to an A_2X_2 system. These patterns range from A_2X_2 in (a) to A_2B_2 in (e). Although patterns b, c, and d are approximately of the A_2B_2 type, detailed study would be required to determine whether these are actually A_2B_2 or $A_2'B_2'$ patterns. See the discussion on p. 80. The chemical shifts can be determined by inspection only in the first-order patterns, (a) and (e). The coupling constant can also be measured in (a). However, neither $\Delta\nu_{AB}$ nor J_{AB} can be determined by inspection of the higher-order patterns, b, c, and d. All of these patterns are reprinted from the Varian NMR Log [7,8] by permission of the copyright holder, Varian Associates.

Sistemas A_2B_2



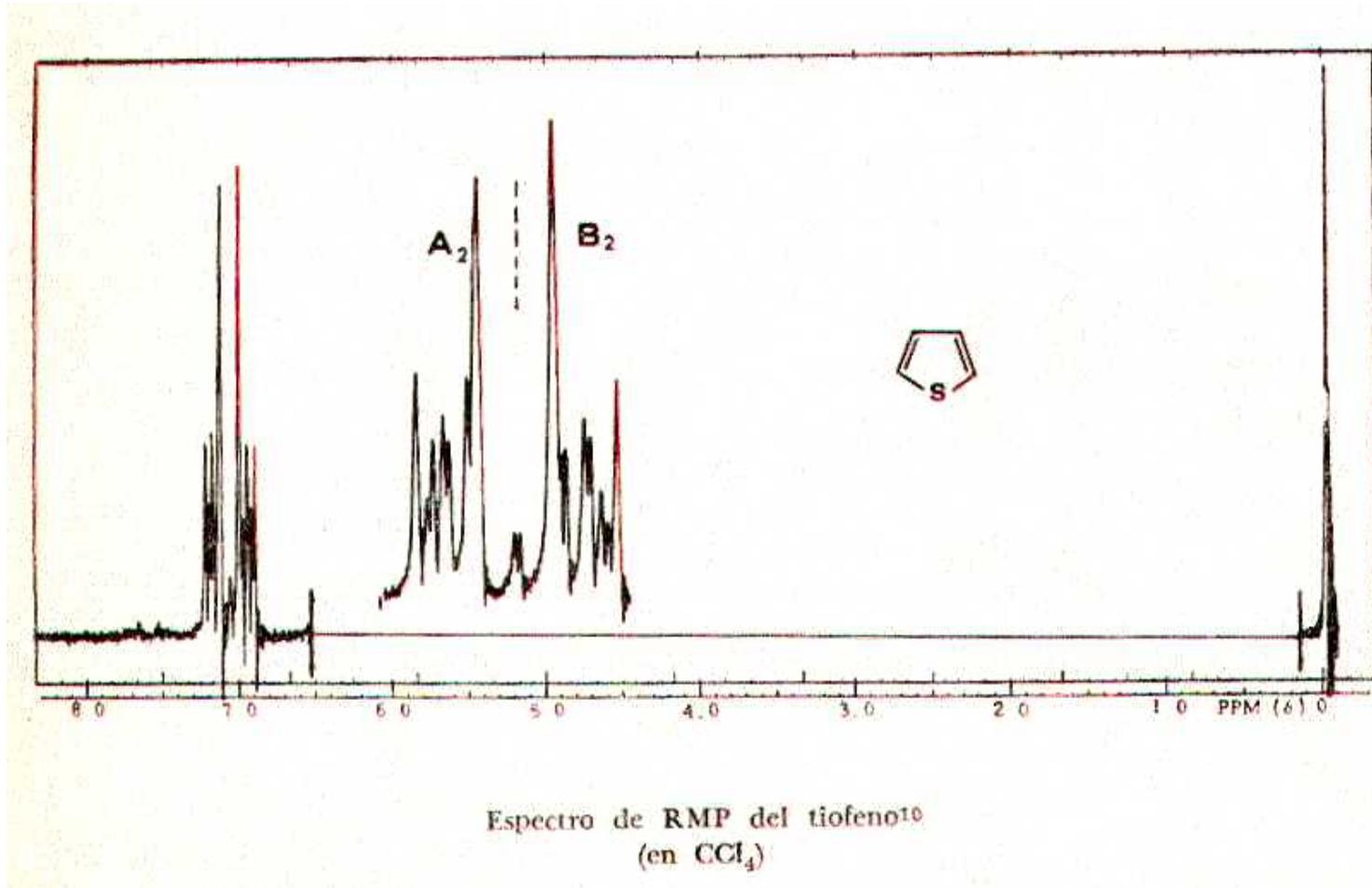
Espectro de RMP del furano¹⁰
(en CCl_4)

Sistemas A_2B_2

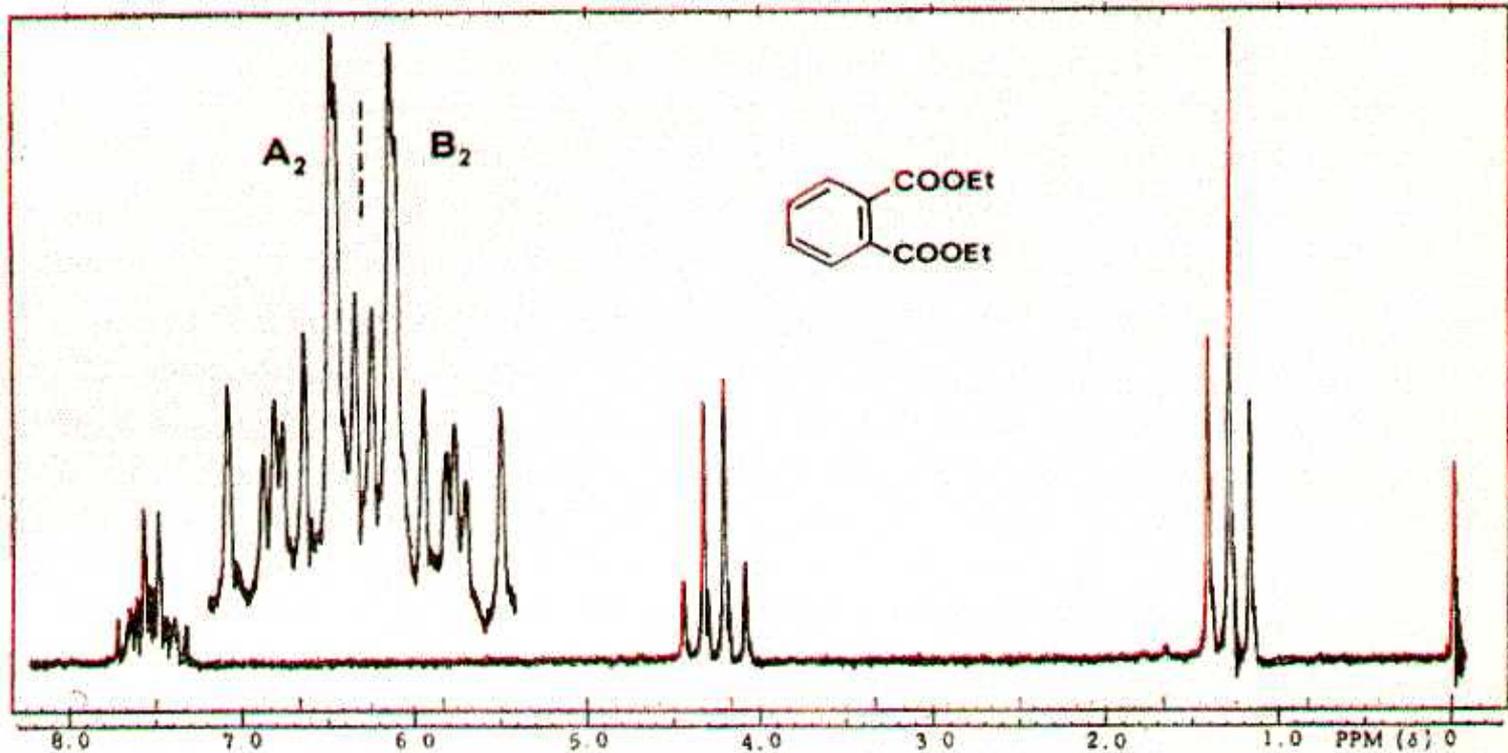


Espectro de RMP del *o*-dinitrobenzeno

Sistemas A_2B_2

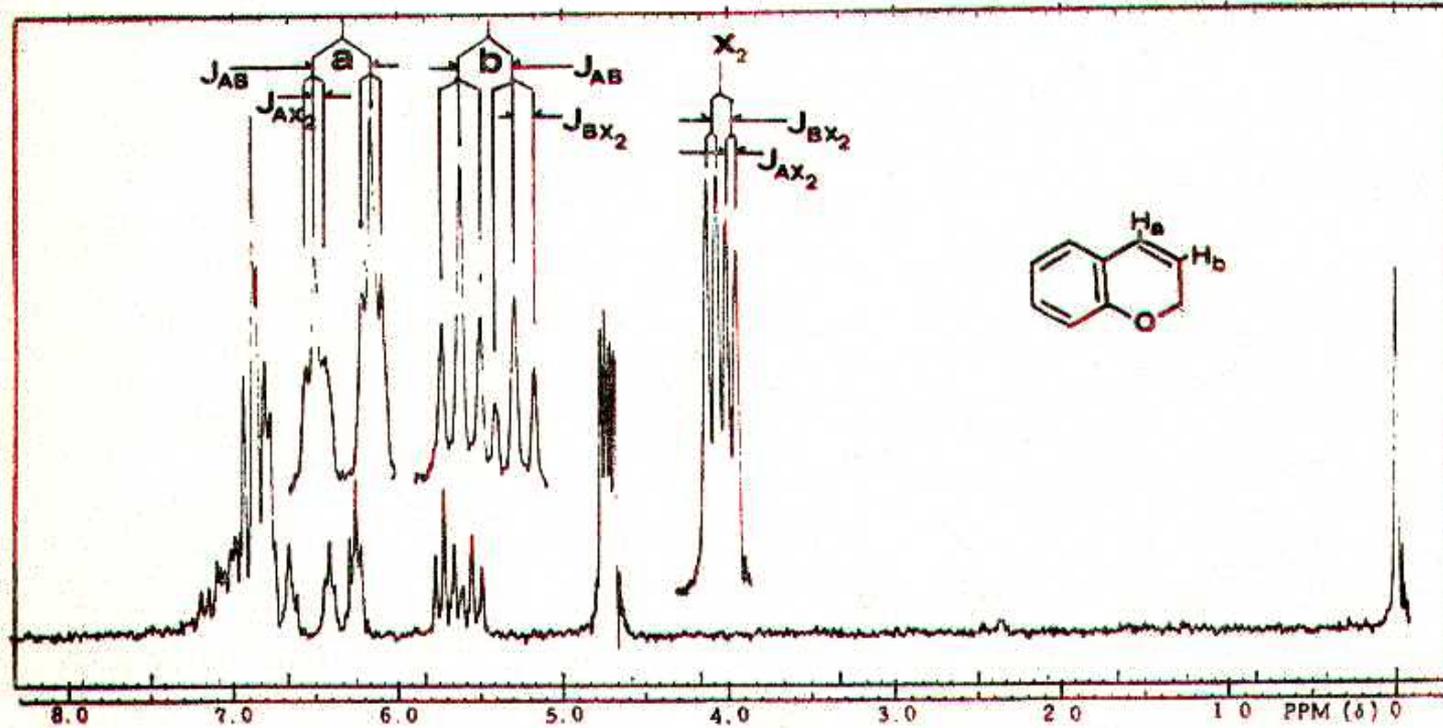


Sistemas A_2B_2



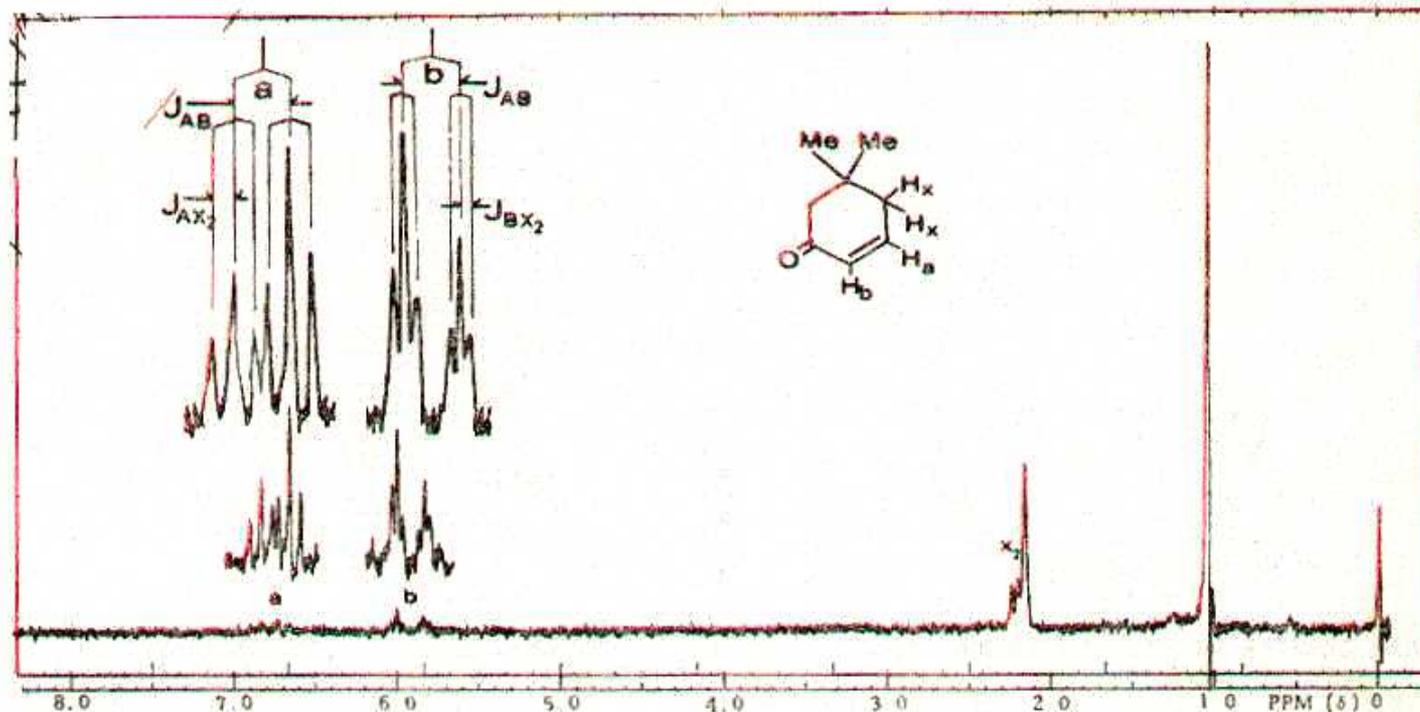
Espectro de RMP del ftalato de dietilo
(en CCl_4)

Sistema ABX₂



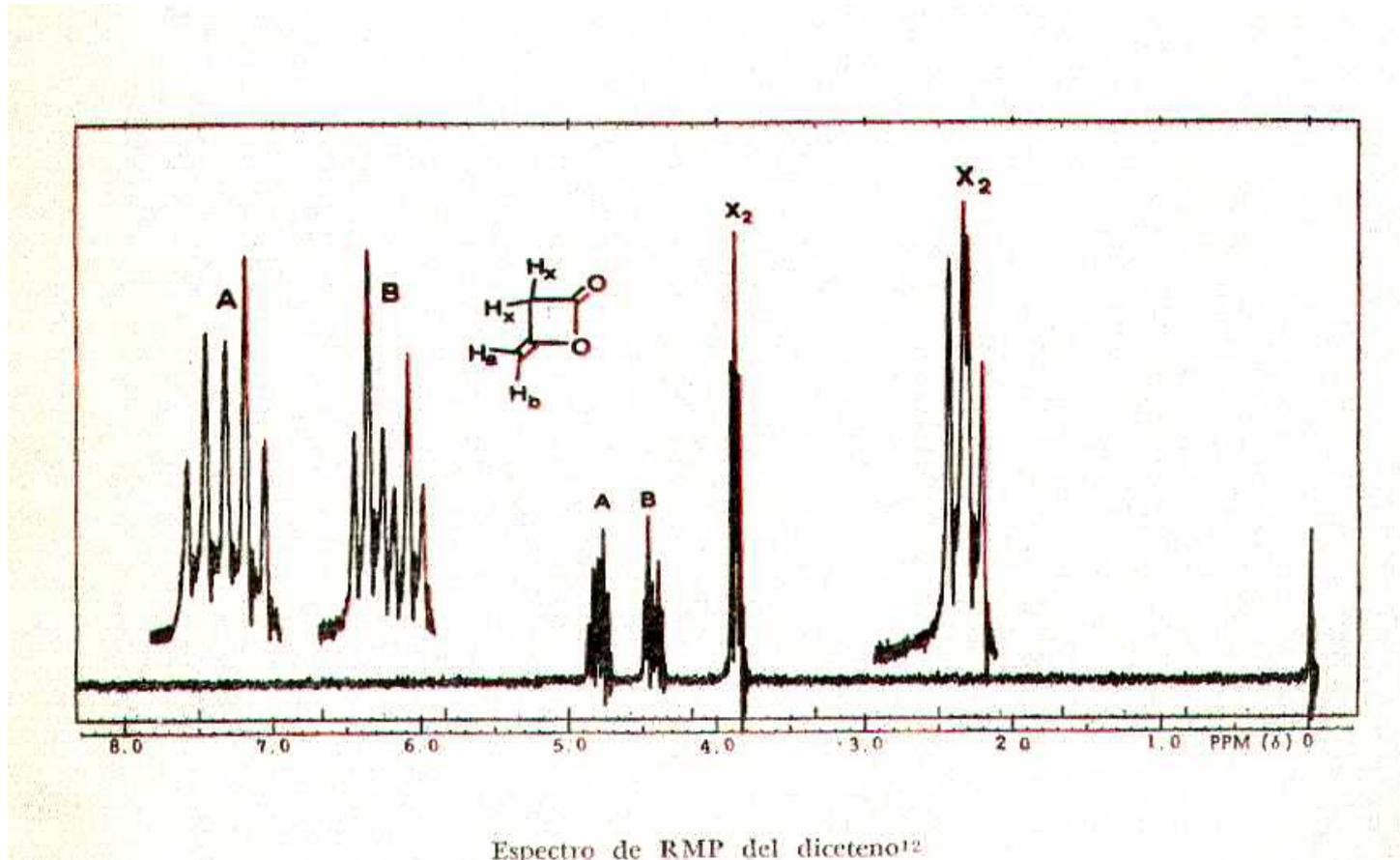
Espectro de RMP del 2H-cromeno

Sistema ABX₂

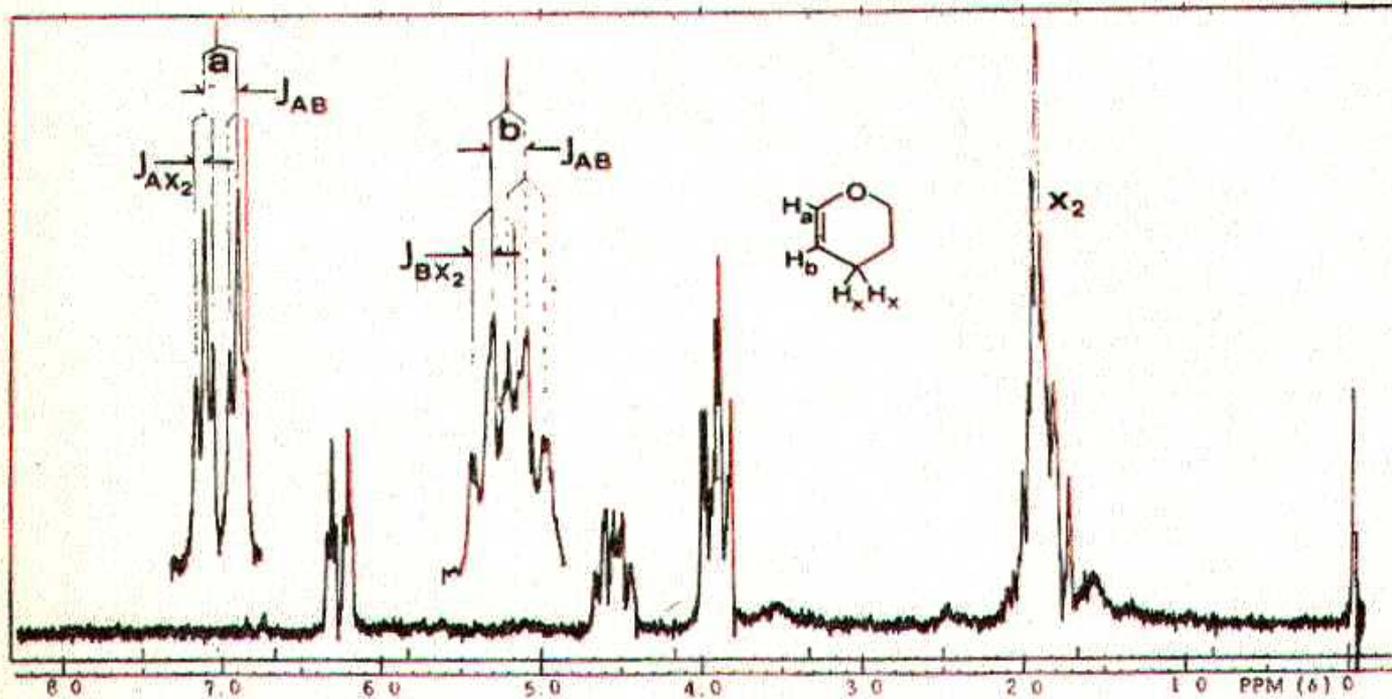


Espectro de RMP de la 5,5-dimetil-ciclohex-2-en-ona^o
(en CCl₄)

Sistema ABX₂

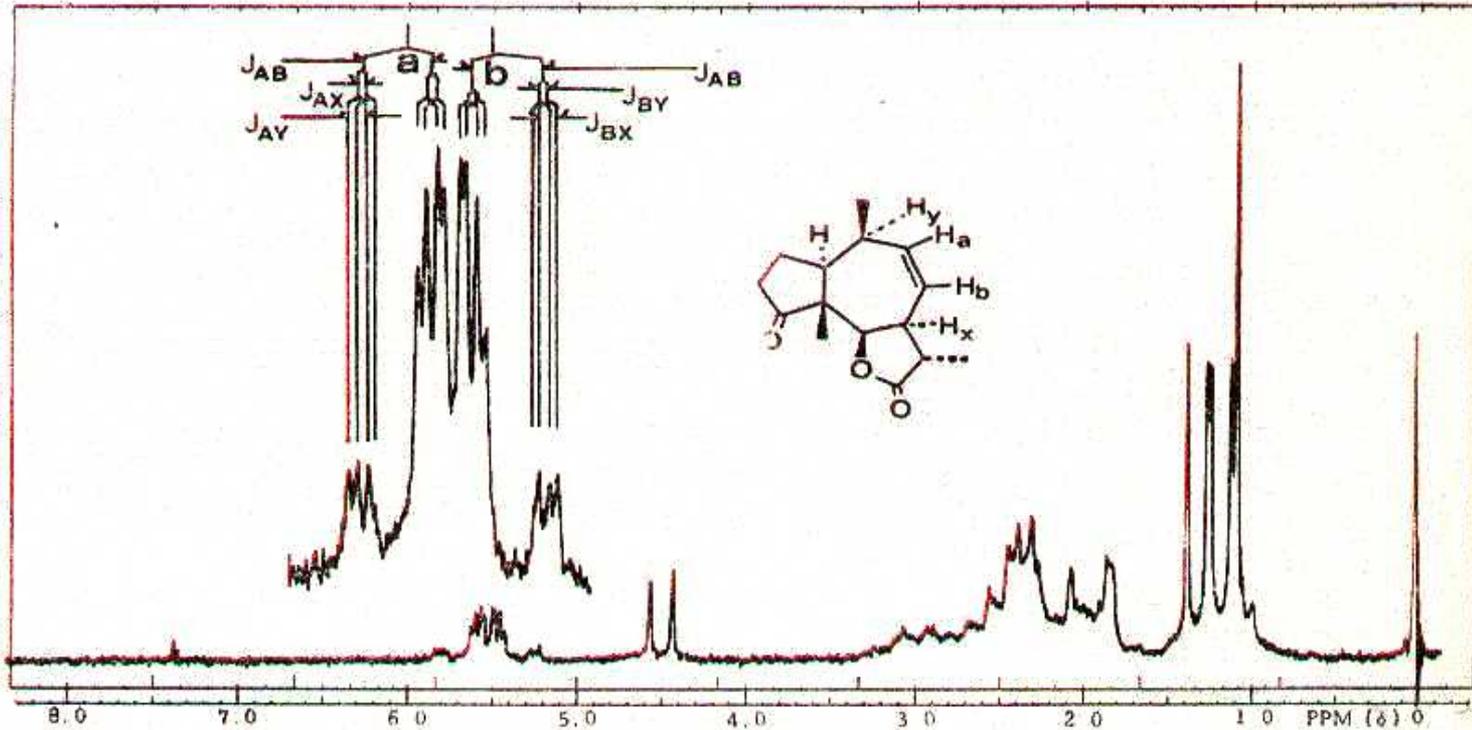


Sistema ABX₂



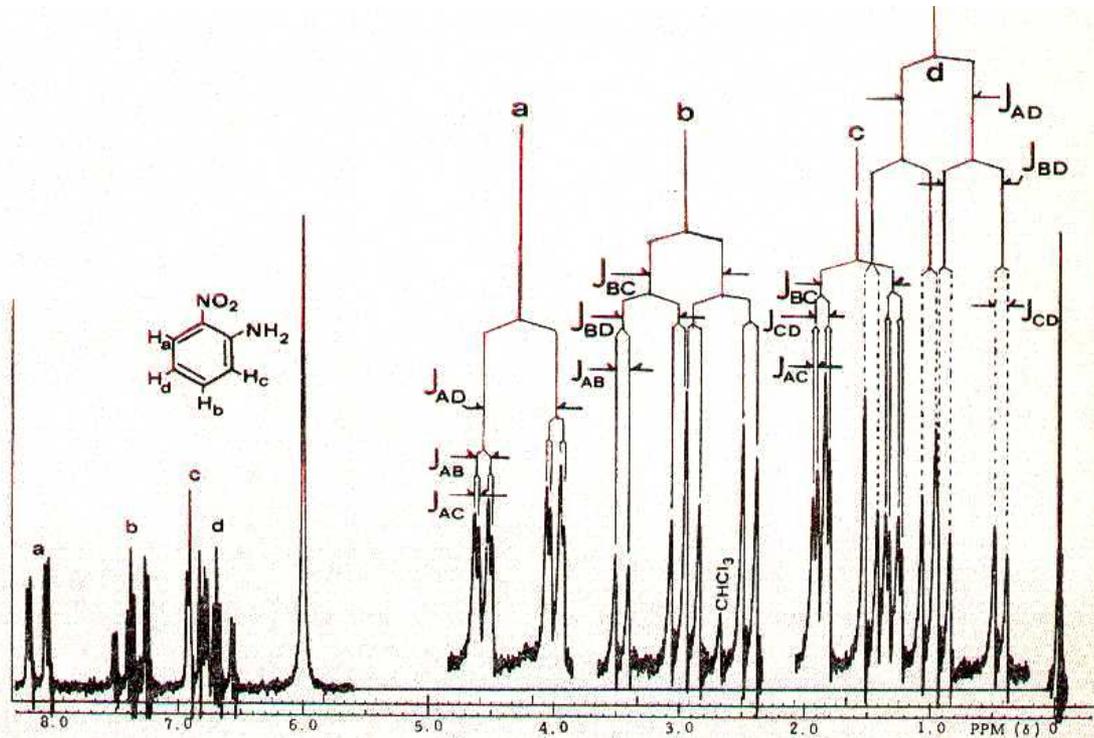
Espectro de RMP del dihidropirano
(en CCl₄)

Sistemas ABXY y ABCD



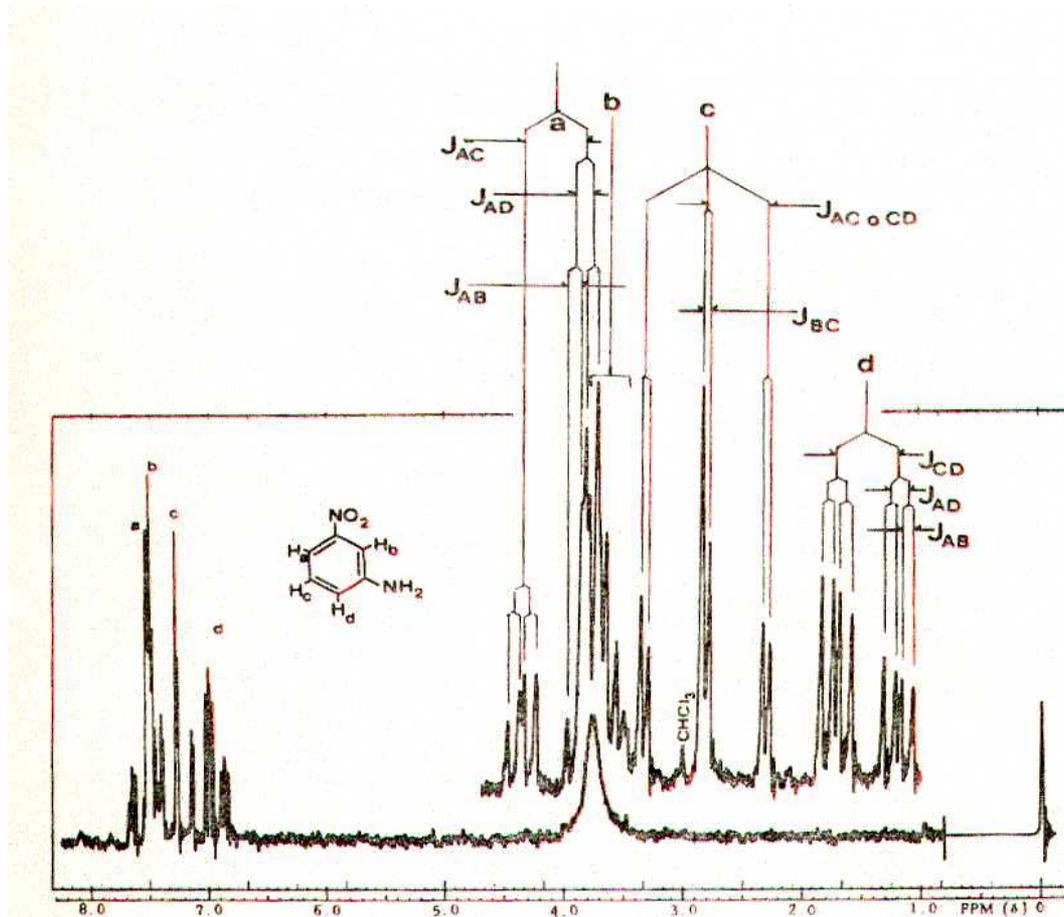
Espectro de RMP de la dehidroanhydrodesacetil-
confertiflorina¹³

Sistema ABCD



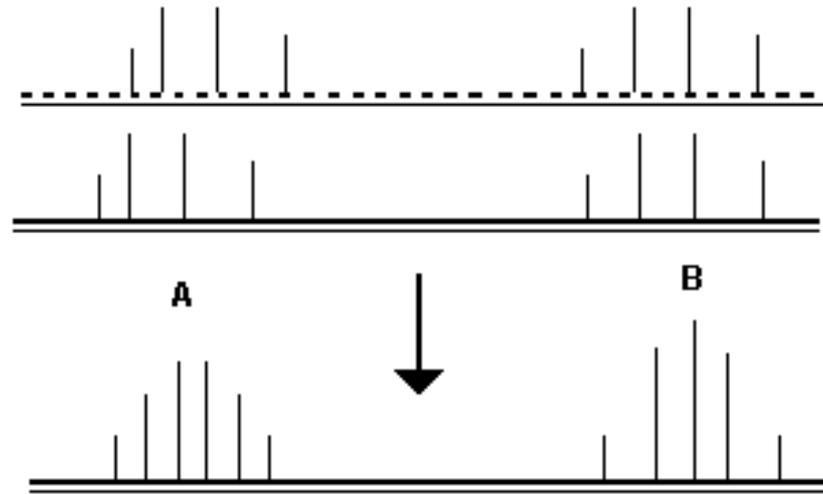
Espectro de RMP de la *o*-nitroanilina

Sistema ABCD



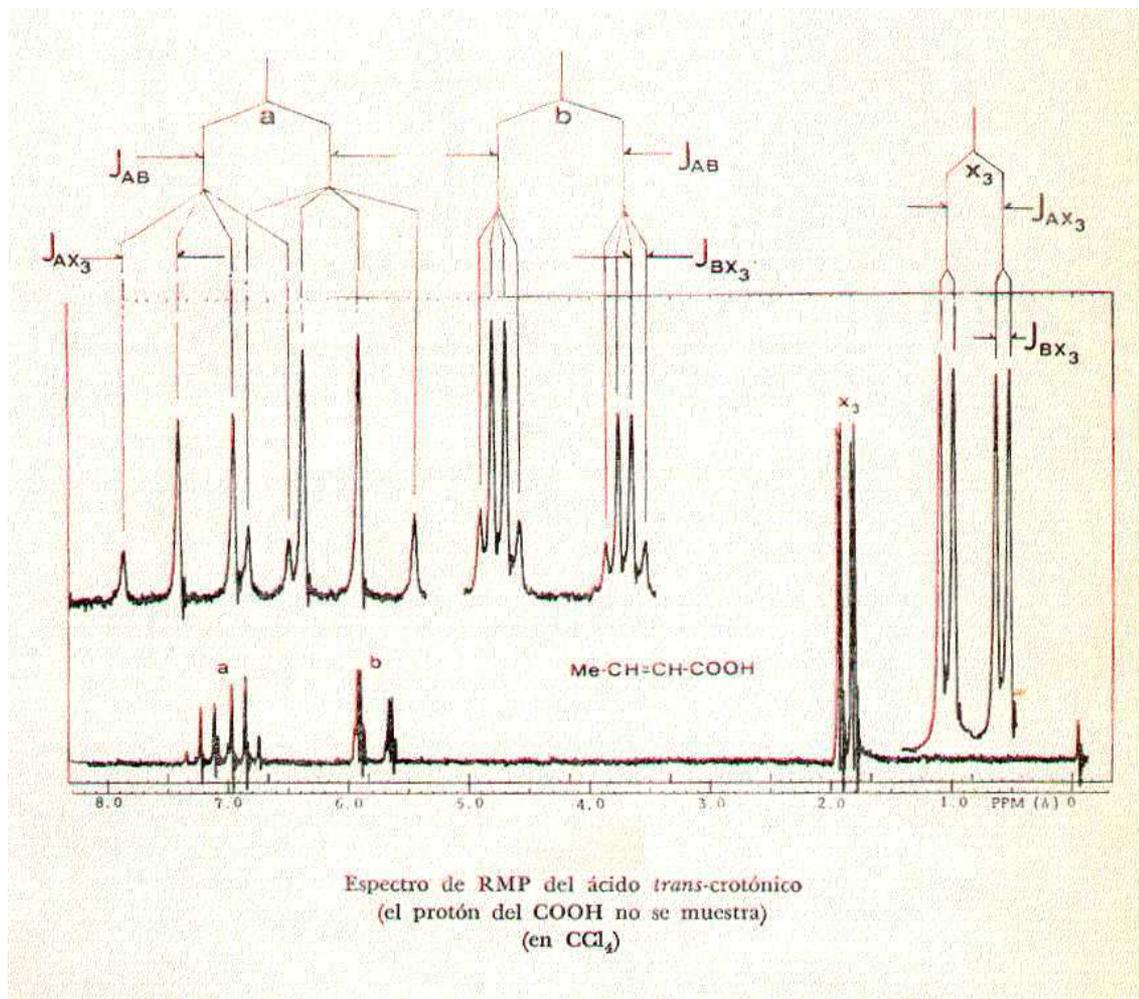
Espectro de RMP de la *m*-nitroanilina

Sistema ABX₃

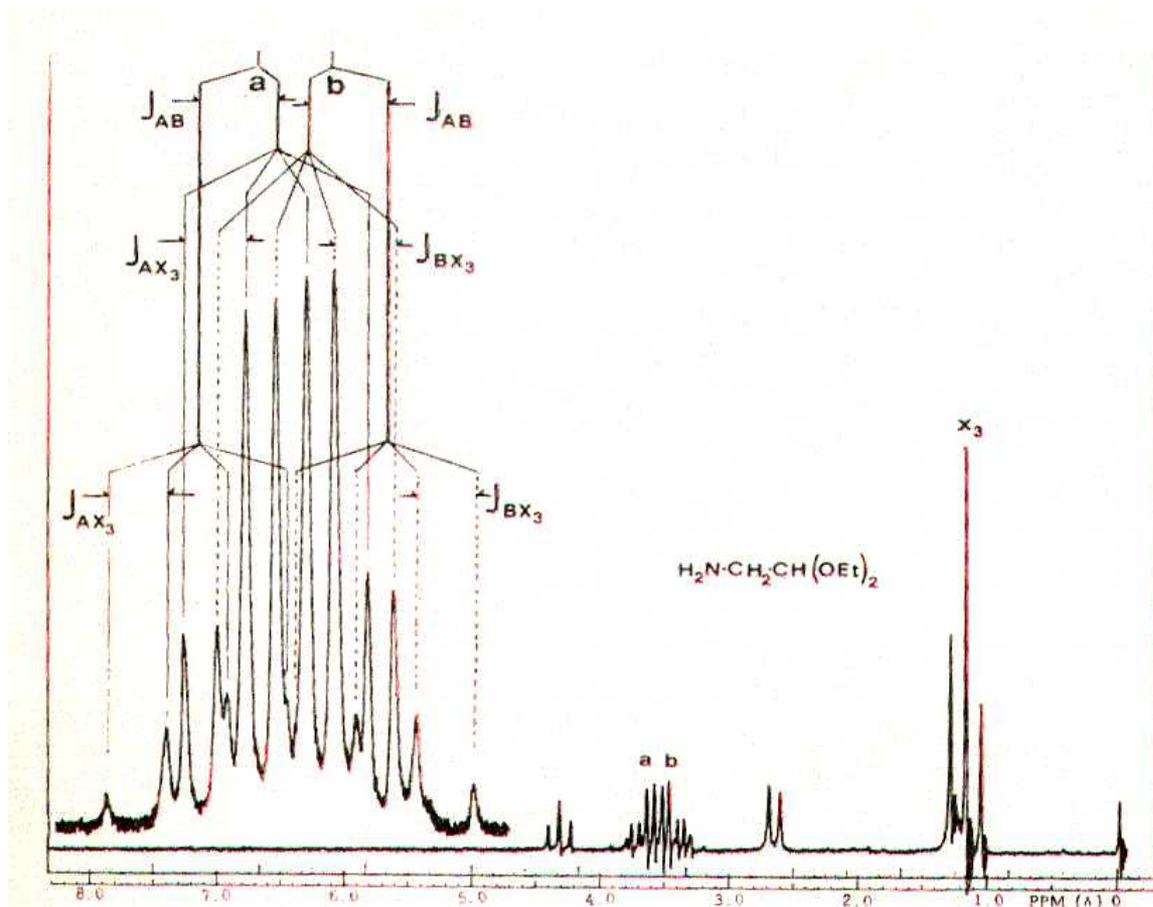


Arreglos en el sistema ABX₃

Sistema ABX₃



Sistema ABX₃



Espectro de RMP del etilcetal del amino-acetaldehído
(en CCl_4)

Sistema ABX₃

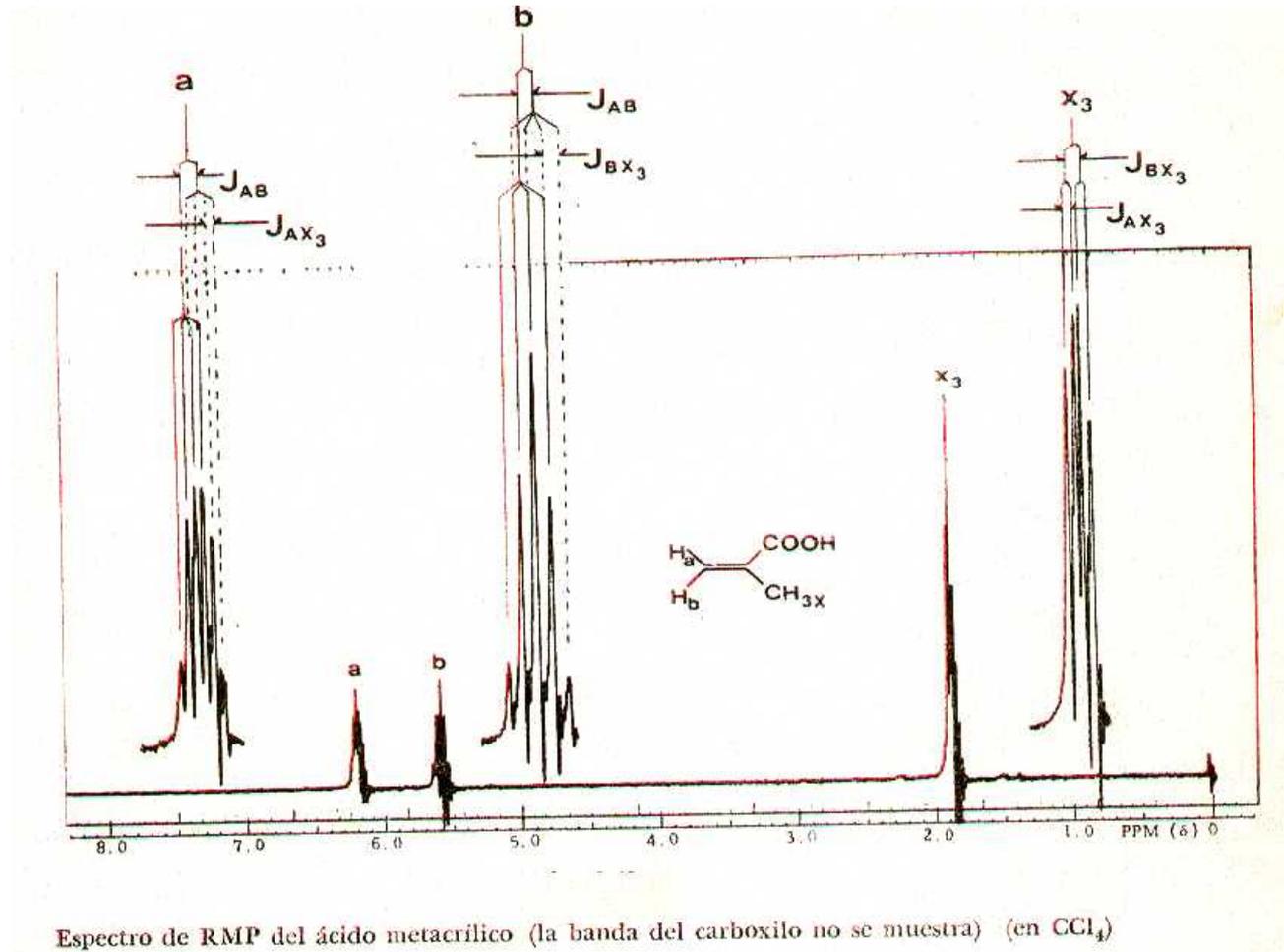


TABLE 3-8

Some Features of Concern in the Interpretation of Spin-Spin Patterns

- I. Many spin system designations are only approximations. The best description is the simplest one which gives the desired agreement with the observed pattern.
- II. First-order patterns and the relative intensities of the peaks can be pictured by the use of first-order splitting diagrams.
- III. Methylene protons which are chemically equivalent may be magnetically nonequivalent because of restricted rotation, restricted inversion about a nitrogen atom, or because of molecular asymmetry.
- IV. Differences in chemical shifts among protons is averaged out if the environments of the protons are interchanged at a rate equal, in times per second, to the difference in chemical shift in cycles per second.
- V. Coupling can, and does, occur with other magnetic nuclei. Of particular concern are H^2 , N^{14} , F^{19} , and P^{31} .

Isomería Geométrica y Análisis Conformacional

Así como los valores de desplazamiento químico pueden usarse para decirnos que tipos de protones están presentes en una molécula, la magnitud de las constantes de acoplamiento espín-espín se pueden emplear para la confirmación elucidación de una estructura. Las constantes de acoplamiento están afectadas por varios factores, las constantes de acoplamientos de protones vecinos (protones sobre átomos de carbono adyacentes) se considerarán primero.

1. La magnitud de la constante de acoplamiento vecinal, J , es una función del ángulo diedro ϕ . La relación está dada por la ecuación de *Karpus*.

$$J(\text{Hz}) = 4,2 - 0,5 \cos \phi + 4,5 \cos 2\phi$$

2. La dependencia de la constante de acoplamiento vecinal J en función de la electronegatividad de X ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-X}$) está dada por la ecuación:

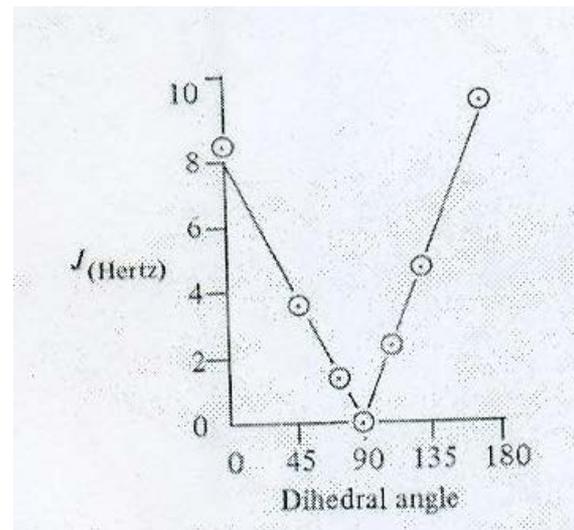
$$J(\text{Hz}) = 7,9 - n \cdot 0,7(\Delta\chi)$$

donde n es igual al número de hidrógenos reemplazados por un grupo X y $\Delta\chi$ es igual a $(\chi_X - \chi_H)$ donde $\chi_X - \chi_H$ son las electronegatividades del sustituyente y del hidrógeno, respectivamente.

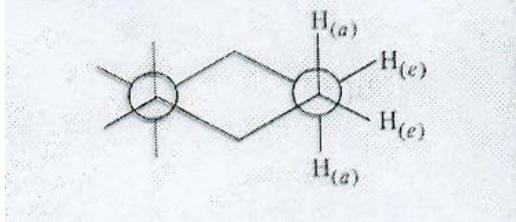
3. La constante de acoplamiento vecinal J disminuye con el aumento de la longitud de enlace $\text{C} - \text{C}$.

4. La constante de acoplamiento vecinal J depende del ángulo de enlace C-C-H . Cuando los ángulos entre los hidrógenos aumentan, la constante de acoplamiento disminuye; siempre y cuando se mantenga el mismo orden de enlace.

Angle in degrees	$\cos \phi$	J (Hz)
45	$1/\sqrt{2}$	3.9
60	$1/2$	1.8
90	0	-0.3
120	$-1/2$	2.1
135	$-1/\sqrt{2}$	4.5
180	-1	9.2



Below is a Newman projection (end on view) for the chair form of a cyclohexane ring. Predict the magnitude of the *diaxial* coupling constant.



$$\phi_{aa} = 180^\circ \quad J_{aa} = 9.2 \text{ Hz}$$

(usually 9–13 Hz)

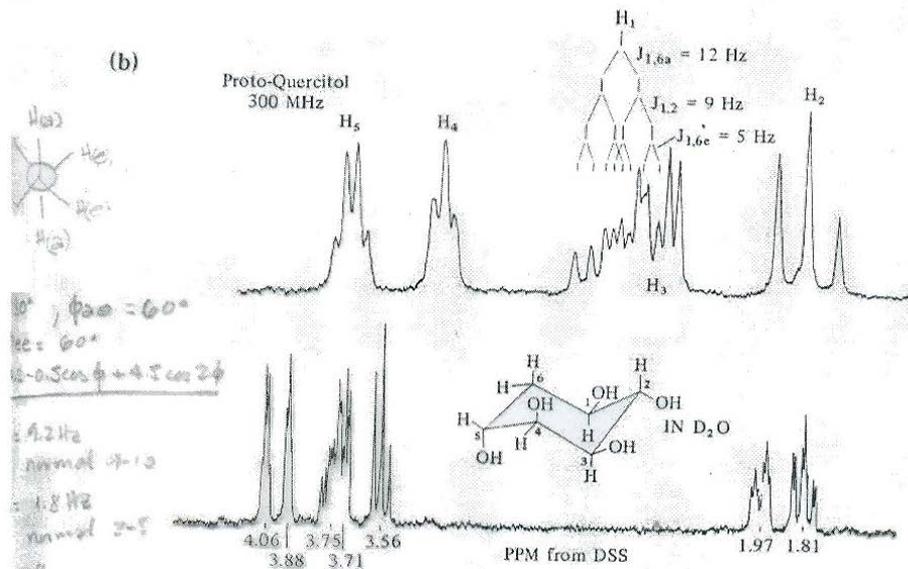
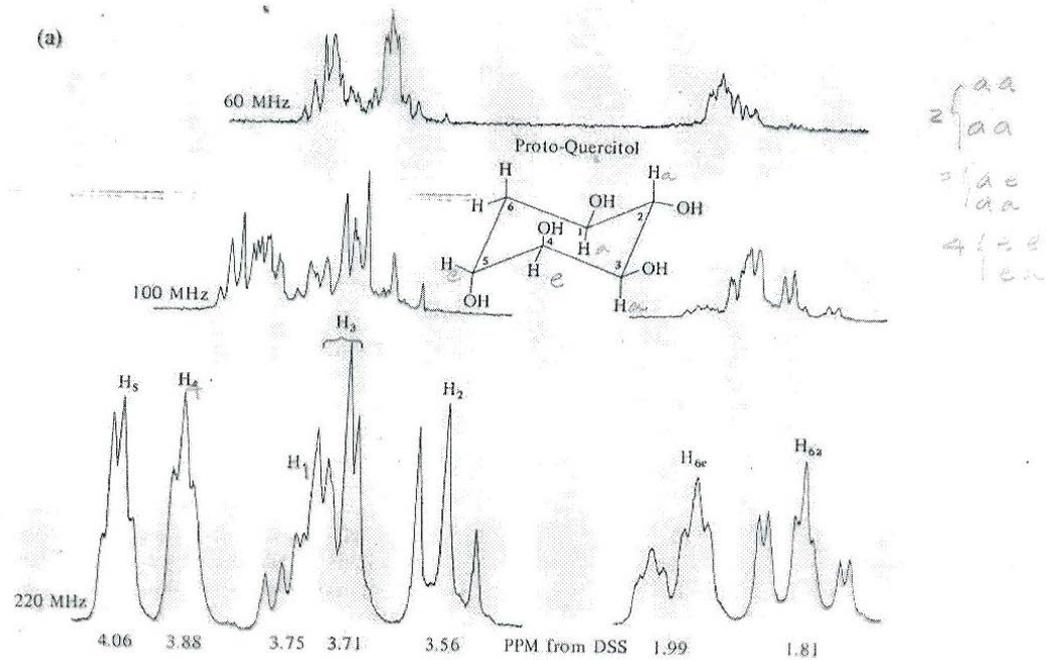


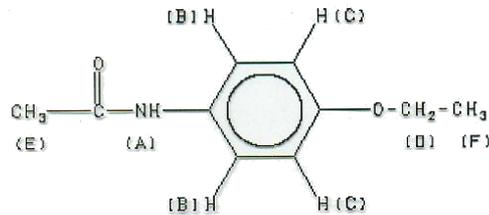
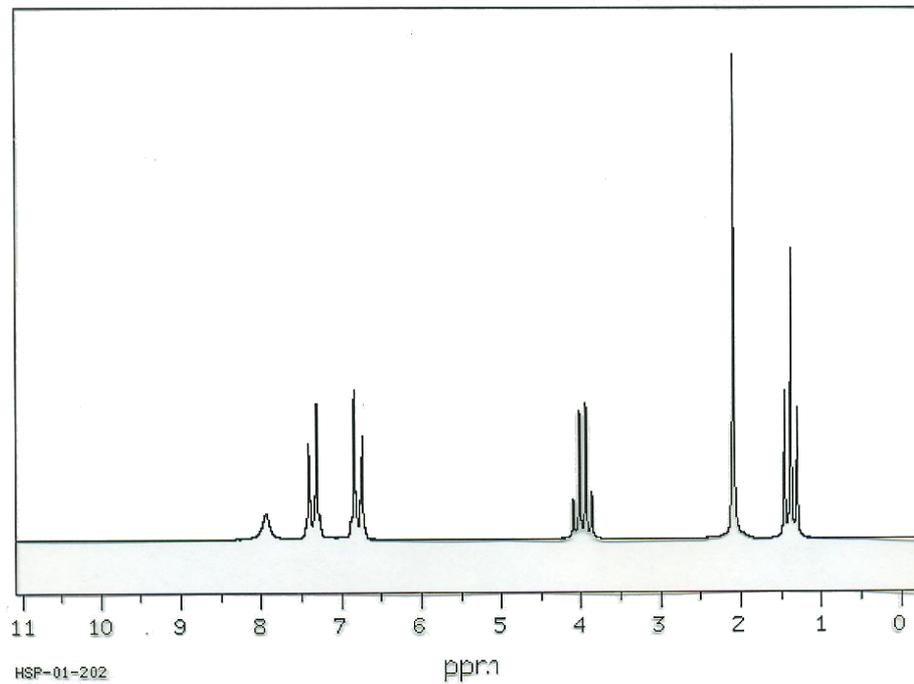
Fig. 4.19 (a) 60-, 100-, and 220-MHz spectra of *proto-quercitol* in D_2O . (b) 300-MHz spectrum of *proto-quercitol* in D_2O . [Reproduced from Ref. 1, with permission of the American Chemical Society.]

PATRONES DE ACOPLAMIENTO ESPÍN-ESPÍN EN BENCENOS SUSTITUIDOS				
Substitución		Protones	Simétrica	Asimétrica
Mono	1	2,3,4,5,6	AB ₂ C ₂ AB ₂ X ₂	
Di-	Orto	3,4,5,6	A ₂ B ₂ A ₂ X ₂	ABCD ABXY, etc.
	Meta	2,4,5,6	AB ₂ C AB ₂ X	ABCX
	Para	2,3,5,6	A ₄	A ₂ B ₂ A ₂ X ₂
Tri-	Vecinal	4,5,6	AB ₂ AX ₂	ABC ABX
	Asimétrico	3,5,6		ABC ABX
	Simétrico	2,4,6	A ₃	AB ₂ ABC ABX
Tetra	1,2,3,4	Orto	A ₂	AB AX
	1,2,3,5	Meta	A ₂	AB AX
	1,2,4,5	Para	A ₂	AB AX
Penta	1,2,3,4,5,	6	A	A

Esta tabla y todos los espectros presentados son de: Pedro Joseph Nathan y Eduardo Díaz T., *Elementos de Resonancia Magnética Nuclear de Hidrógeno*, Segunda edición Grupo Editorial Iberoamérica, México 1993.

SDBS-¹H NMR
C₁₀H₁₃NO₂
p-acetophenetidine

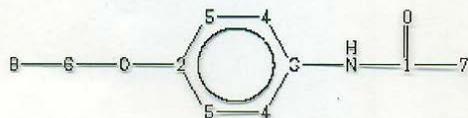
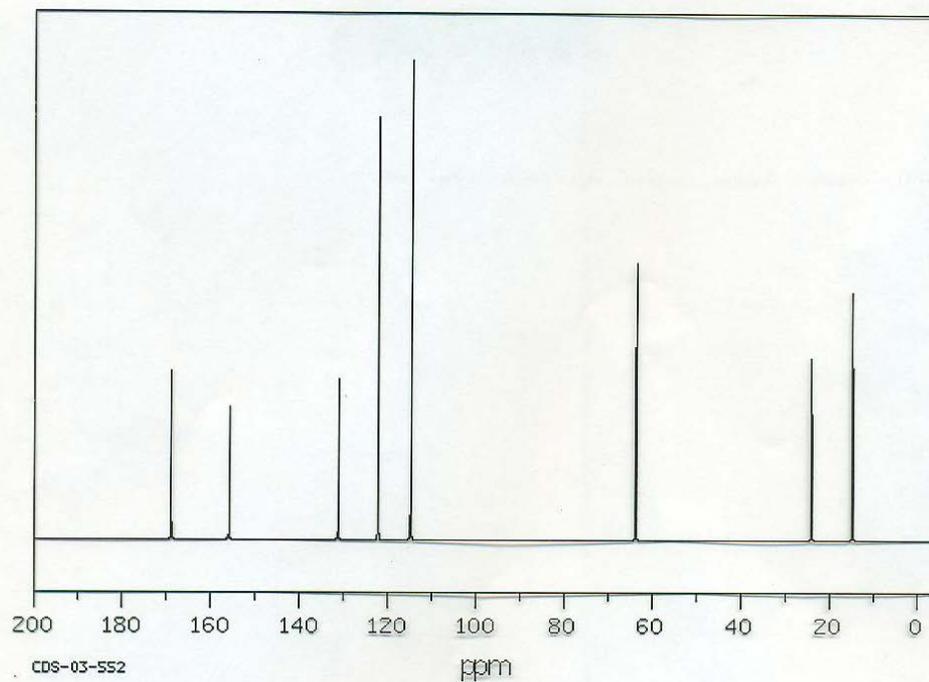
89.56 MHz
0.045 g : 0.5 ml CDCl₃



Assign.	Shift (ppm)
A	7.94
B	7.36
C	6.80
D	3.976
E	2.092
F	1.380

SDBS-¹³C NMR $C_{10}H_{13}NO_2$ **p-acetophenetidine**

25.16 MHz

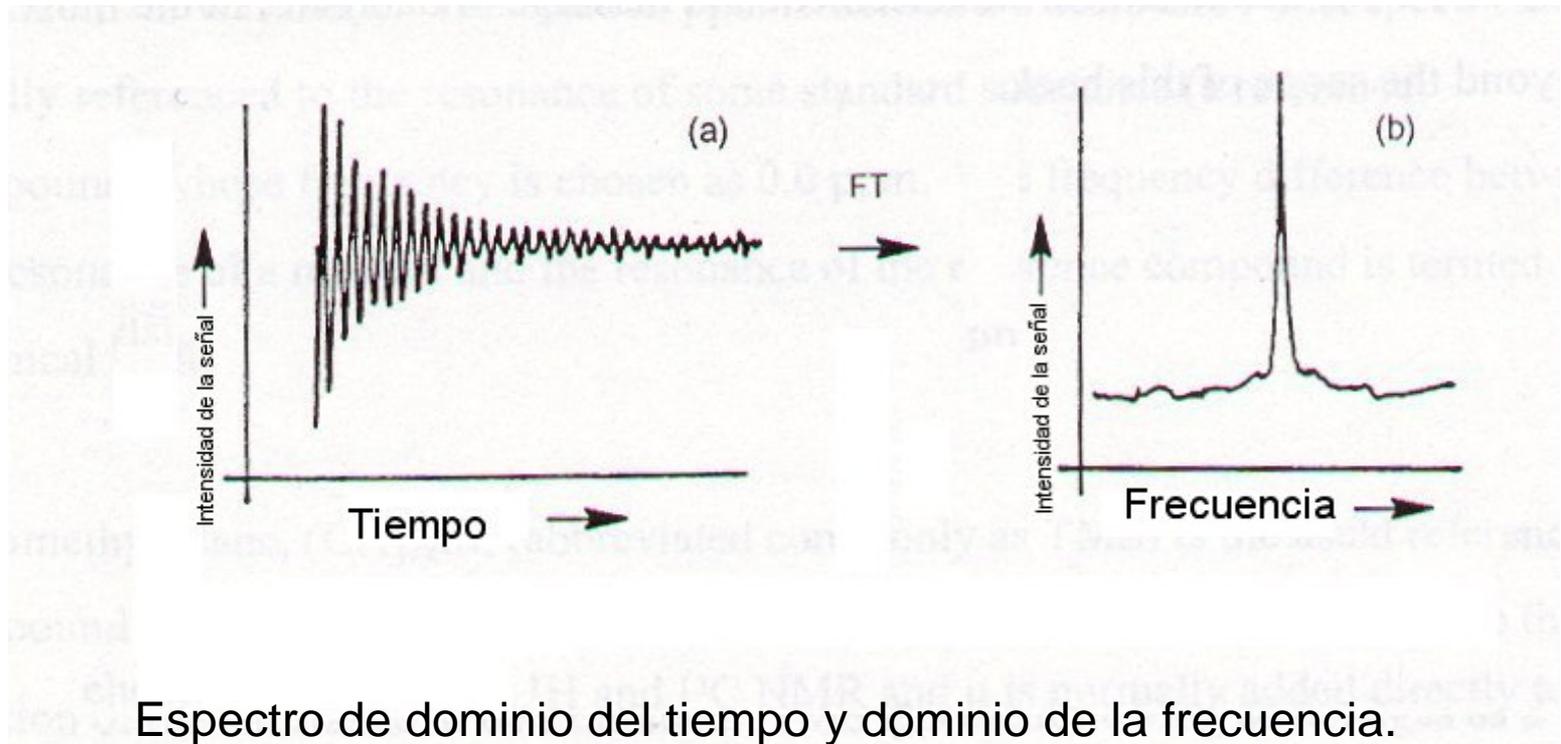
SatURatED in $CDCl_3$ 

ppm	Int.	Assign.
-----	------	---------

168.81	348	1
155.80	274	2
131.18	333	3
122.13	881	4
114.74	1000	5
63.73	577	6
24.11	378	7
14.83	517	8

ESPECTROSCOPÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICO NUCLEAR DE ^{13}C

El isótopo más abundante del carbono (^{12}C) no puede ser observado por resonancia magnético nuclear (RMN). El ^{13}C es un núcleo raro (de 1,1 % de abundancia natural) y su baja concentración aunada al hecho de que el ^{13}C tiene una frecuencia de resonancia relativamente baja, conduce a su relativa insensibilidad como un núcleo activo a la RMN (cerca de 1/6 000 tan sensible como el ^1H). Sin embargo, con el incremento de la disponibilidad de espectrómetros de rutina de pulso, de Transformada de Fourier (FT), es ahora sencillo obtener cualquier espectro y adicionarlos. Esto es, pasarlos del dominio del tiempo a dominio de frecuencia, pasando una señal llamada de decaimiento libre de inducción (FID) a la forma más usual -espectro del dominio de frecuencia- aplicando la operación matemática conocida como Transformada de Fourier (FT). Así puede ser obtenido fácilmente un espectro de RMN de ^{13}C .

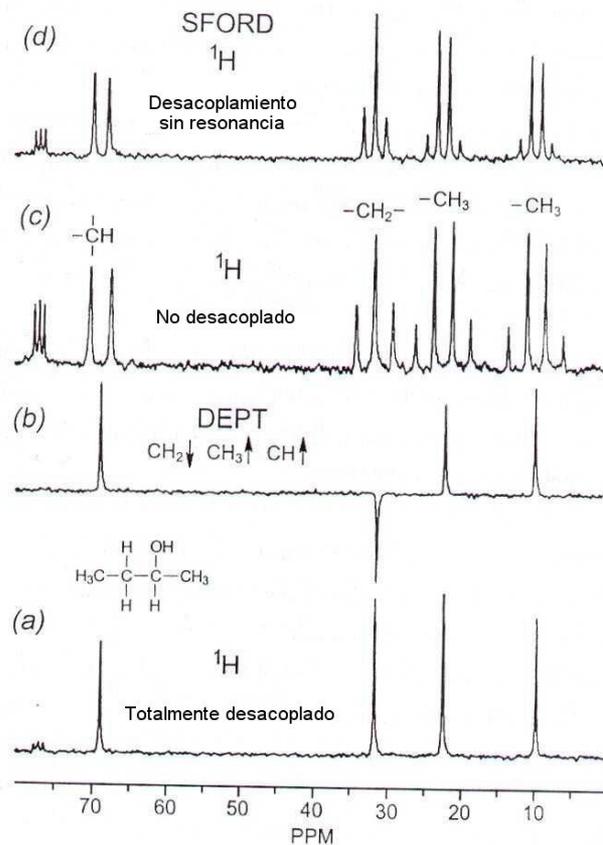


Espectro de dominio del tiempo y dominio de la frecuencia.

Diversas técnicas para realizar estudios en RMN de ^{13}C

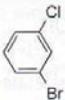
- **SFORD: Desacoplamiento sin resonancia.** Otro método para obtener los espectros de RMN de ^{13}C (aún reteniendo la información de multiplicidad) involucra la aplicación de una señal de desacoplamiento intenso en una frecuencia sencilla justo fuera del rango de la resonancia del protón. Este tiene el efecto de desacoplar incompleta o parcialmente los protones del núcleo de ^{13}C . La técnica es generalmente referida como **SFORD** (Single Frequency Off Resonance Decoupling - *Frecuencia sencilla de desacoplamiento sin resonancia*-).

- DEPT (Distortionless Enhancement by Polarisation Transfer- *Realce sin distorsión por transferencia de polarización*). El DEPT es un experimento de RMN pulsado que requiere una serie de pulsos de radiofrecuencia (RF) programados para los núcleos de H y ^{13}C en un muestra. El espectro DEPT resultante contiene únicamente señales que son originadas por los carbonos protonados (los carbonos no protonados no dan señales en el espectro DEPT de ^{13}C).

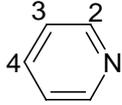


Espectro de RMN de ^{13}C del 2-butanol (disolvente DCCl_3 , 50 MHz). (a) Espectro desacoplado de ^1H con anchura de banda completa; (b) Espectro DEPT, (c) Espectro sin desacoplamiento de ^1H , (d) espectro SFORD.

Número de átomos de ^{13}C resonantes en diversas moléculas aromáticas

Molécula	Número de átomos de C resonantes	Molécula	Número de átomos de C resonantes
	1		2
	4		4
	3		6
	4		6

Valores típicos de desplazamiento químico de ^{13}C .

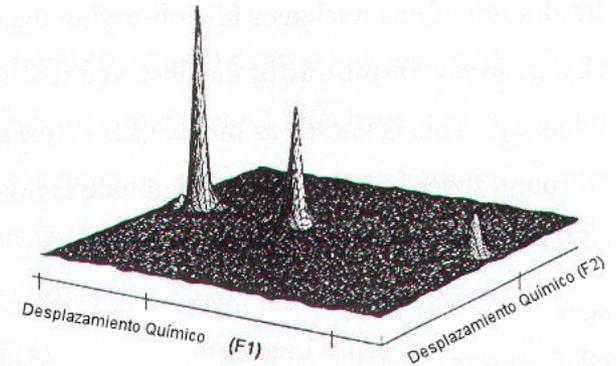
Compuesto	$\delta^{13}\text{C}$ (ppm respecto al TMS)	Grupo	^{13}C Desplazamiento (ppm)
CH_4	-2,1	TMS	0,0
CH_3CH_3	7,3	$-\text{CH}_3$ (con solo $-\text{H}$ o $-\text{R}$ en C_α y C_β)	0–30
CH_3OH	49,0	$-\text{CH}_2$ (con solo $-\text{H}$ o $-\text{R}$ en C_α y C_β)	20–45
CH_3Cl	23,8	$-\text{CH}$ (con solo $-\text{H}$ o $-\text{R}$ en C_α y C_β)	30–60
CH_2Cl_2	52,9	C (con solo $-\text{H}$ o $-\text{R}$ en C_α y C_β)	30–50
CHCl_3	77,3	$\text{O}-\text{CH}_3$	50–60
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	11,5 (CH_3) 26,5 ($-\text{CH}_2-$) 46,7 ($-\text{CH}_2-\text{Cl}$)	$\text{N}-\text{CH}_3$	15–45
$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	122,1	$\text{C}\equiv\text{C}$	75–95
CH_3CHO	31,2 ($-\text{CH}_3$) 200,5 ($-\text{CHO}$)	$\text{C}=\text{C}$	105–45
CH_3COOH	20,6 ($-\text{CH}_3$), 178,1 ($-\text{COOH}$)	C (aromático)	110–155
CH_3COCH_3	30,6 ($-\text{CH}_3$), 206,7 ($-\text{CO}-$) 128,0	C (hetero-aromático)	105–165
		$-\text{C}\equiv\text{N}$	115–125
	150,2 (C-2) 123,9 (C-3) 135,9 (C4)	$\text{C}=\text{O}$ (ácidos, ésteres y amidas)	155–185
		$\text{C}=\text{O}$ (aldehidos, cetonas)	185–225

MISCELANEA DE TEMAS

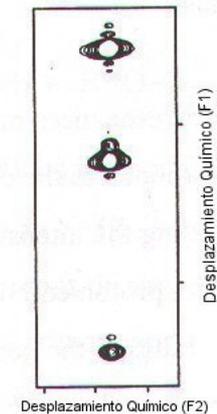
- La irradiación de un núcleo mientras se observa la resonancia de otro puede dar como resultado un cambio en la amplitud de la resonancia observada, o sea un realce de la intensidad de la señal. Esto se conoce como Efecto nuclear Overhauser (NOE). El NOE es un efecto "a través del espacio" y su magnitud es inversamente proporcional a la sexta potencia de la distancia entre los núcleos interaccionantes. Debido a la dependencia del NOE de la distancia, es un método importante para establecer que grupos están cercanos en el espacio y debido a que el NOE puede ser medido con exactitud, es un medio muy poderoso para determinar la estructura en tres dimensiones (y la estereoquímica) de los compuestos orgánicos.

Espectroscopía de RMN bidimensional

Los espectros en dos dimensiones tienen la apariencia de superficies, generalmente con dos ejes que corresponden a desplazamientos químicos y el tercer eje (vertical) corresponde a la intensidad de la señal.



Generalmente es más útil graficar espectros en dos dimensiones vistos directamente de abajo (un gráfico del contorno de la superficie) para hacer mediciones y asignaciones.



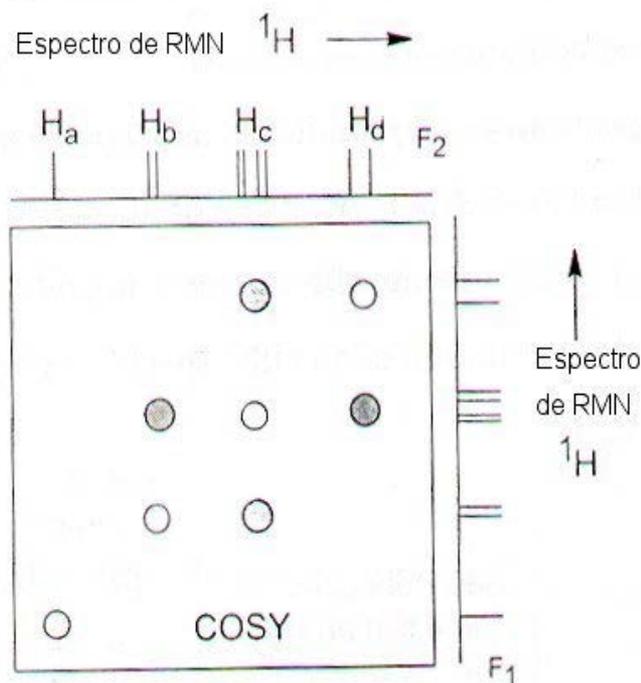
- Los experimentos de RMN más importantes en dos dimensiones para resolver problemas de estructura son COSY (Correlation SpectroscopY -Espectroscopía de correlación-), NOESY (Nuclear Overhauser Enhancement SpectroscopY -Espectroscopía de realce de efecto nuclear Overhauser-) y el HETCOR (HETero nuclear chemical Shif CORrelation - correlación de desplazamiento químico heteronuclear-). Los espectrómetros de RMN de campo alto tienen la capacidad de adquirir espectros COSY, NOESY y HETCOR.

El espectro COSY muestra cuales pares de núcleos en una molécula están acoplados. El espectro COSY es un espectro simétrico que tiene el espectro de RMN de ^1H de la sustancia para los dos ejes de desplazamiento (F1 y F2).

En un espectro sencillo COSY, todos los acoplamientos espín-espín en una molécula pueden ser identificados.

El espectro COSY tiene un grupo de picos que están en diagonal (círculos claros) y otros que están fuera de la diagonal (círculos rellenos). Los picos fuera de la diagonal son señales importantes puesto que estos ocurren en posiciones donde hay acoplamiento entre un protón del eje F1 y otro del eje F2.

En el espectro esquemático de la derecha, las señales fuera de la diagonal muestran que hay un acoplamiento espín-espín entre Hc y Hd, y también entre Hb y Hc pero el protón marcado como Ha no tiene patrones de acoplamiento.

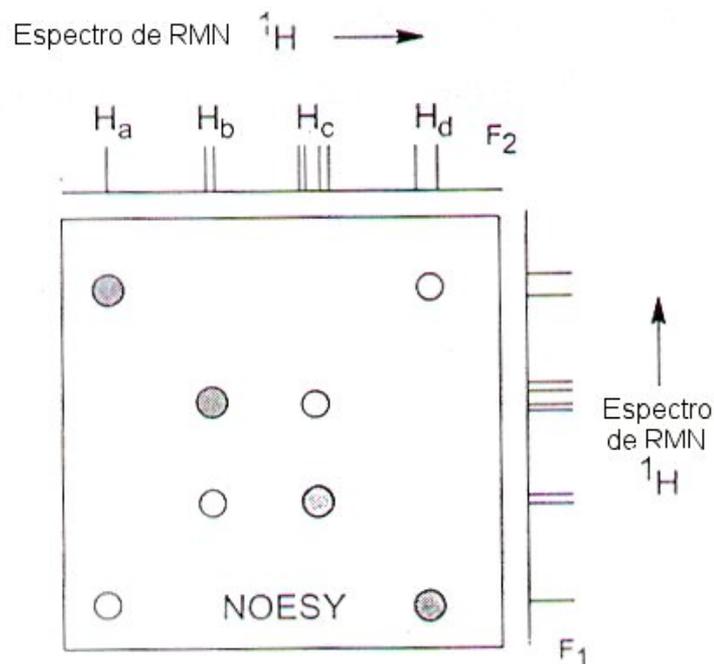


El espectro NOESY depende del efecto nuclear Overhauser y muestra cuales pares de núcleos en una molécula están cercanos. El NOESY es también un espectro simétrico que tiene el espectro de RMN de ^1H de la sustancia para los dos ejes de desplazamiento químico (F_1 y F_2). A continuación se ilustra una representación esquemática del espectro NOESY.

El espectro NOESY tiene un grupo de picos en diagonal (círculos claros) y otros fuera de ella (círculos rellenos). Los picos fuera de la diagonal se presentan en posiciones donde un protón del eje F_1 está cercano a otro sobre el eje F_2 .

En el diagrama esquemático del espectro de la derecha, las señales fuera de la diagonal muestran que H_a debe estar localizado cercano a H_d y H_b debe estar cercano a H_c .

En un espectro NOESY, todos los núcleos que se encuentran cercanos pueden ser identificados. Del análisis de un espectro NOESY, puede ser determinada la estructura dimensional de una molécula o pares de ella.



El espectro HETCOR es un espectro heteronuclear análogo al espectro COSY. El espectro NOESY es muy similar en apariencia al espectro COSY. El espectro HETCOR tiene el espectro de RMN de ^1H de la sustancia en un eje (F_2) y el de ^{13}C (o el espectro de cualquier otro núcleo) sobre el segundo eje (F_1). A continuación se presenta una representación esquemática del espectro HETCOR.

- El espectro HETCOR no tiene picos en diagonal. Los picos en un espectro HETCOR se observan en posiciones donde un protón en el espectro sobre el eje F_2 está acoplado a un carbono en el espectro sobre el eje F_1 . En el espectro esquemático de la derecha, H_a y H_b están acoplados a C_a , H_d está acoplado a C_b y H_c esta acoplado a C_c .
- En un espectro HETCOR, puede ser obtenida la correlación entre los protones en un espectro RMN de ^1H y el del núcleo de ^{13}C . Es posible asignar fácilmente todas las señales del espectro de resonancia o sea establecer cual protón en una molécula da cada señal en el espectro, usando información del acoplamiento espín-espín. El espectro de ^{13}C puede ser asignado por correlación a las resonancias del protón.

