

Estructura-5

Identificación de la estructura de una droga de diseño relacionada con el extasis (MDMA (3-4-metilendioximetanfetamina))

El compuesto tiene como fórmula empírica $C_{15}H_{19}NO_3$, peso molecular 261.32

Este compuesto se detectó en el mercado negro alemán en el 2009 y posteriormente se ha localizado en sales de baño en USA. Recientemente se ha publicado¹ la determinación de la estructura, mediante espectros de RMN y también espectrometría de masas e IR

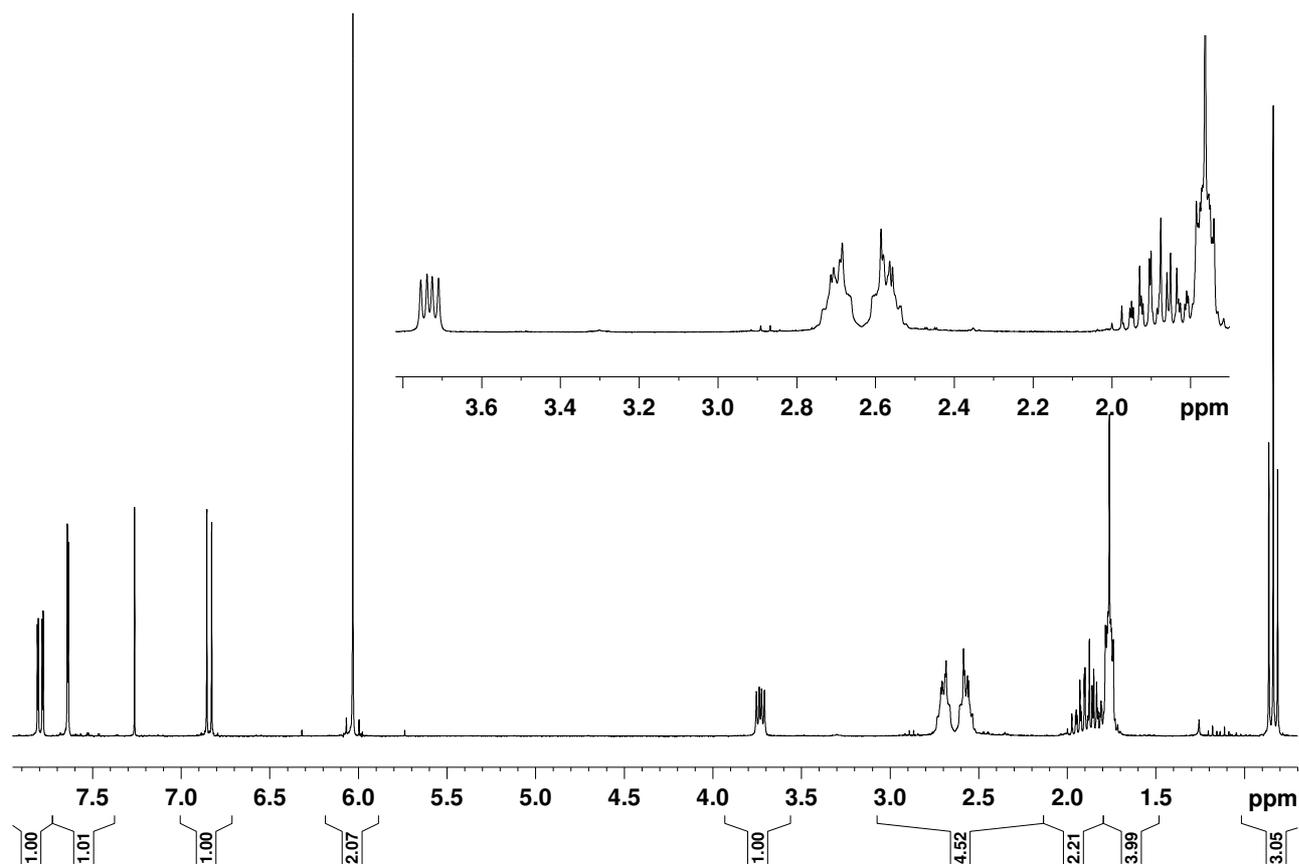
En base a los espectros de RMN ($CDCl_3$) proponer una estructura.

1. Analizar el espectro de protón.
 - a. Determinar el tipo de sustitución del sistema aromático, en base a las constantes $^3J^{HH}$ y $^4J^{HH}$.
 - b. Tener en cuenta la integración de los distintos multipletes.
 - c. La señal a 6.03 ppm integrado dos protones, ¿A que puede deberse el importante desapantallamiento de este CH2.
2. Mediante el espectro de ^{13}C y DEPT, listar todas las señales, determinando también su multiplicidad.
3. En el experimento de HSQC para comprobar y acabar de construir las tablas de desplazamientos de 1H y ^{13}C .
4. Con la ayuda del COSY establecer los distintos fragmentos, localizando un sistema ABMX3
5. Utilizar el espectro de HMBC para agrupar los fragmentos detectados en el COSY y asignar los carbonos cuaternarios.
 - a. Tener en cuenta que el experimento de HMBC se ha efectuado sin desacoplamiento y sin aplicar el filtro para las correlaciones 1H - ^{13}C a un enlace. Por ello pueden observarse correlaciones directas (doblete con una J 1H - ^{13}C aprox 140 Hz). En caso de duda utilizar la información del HSQC para localizarlas.

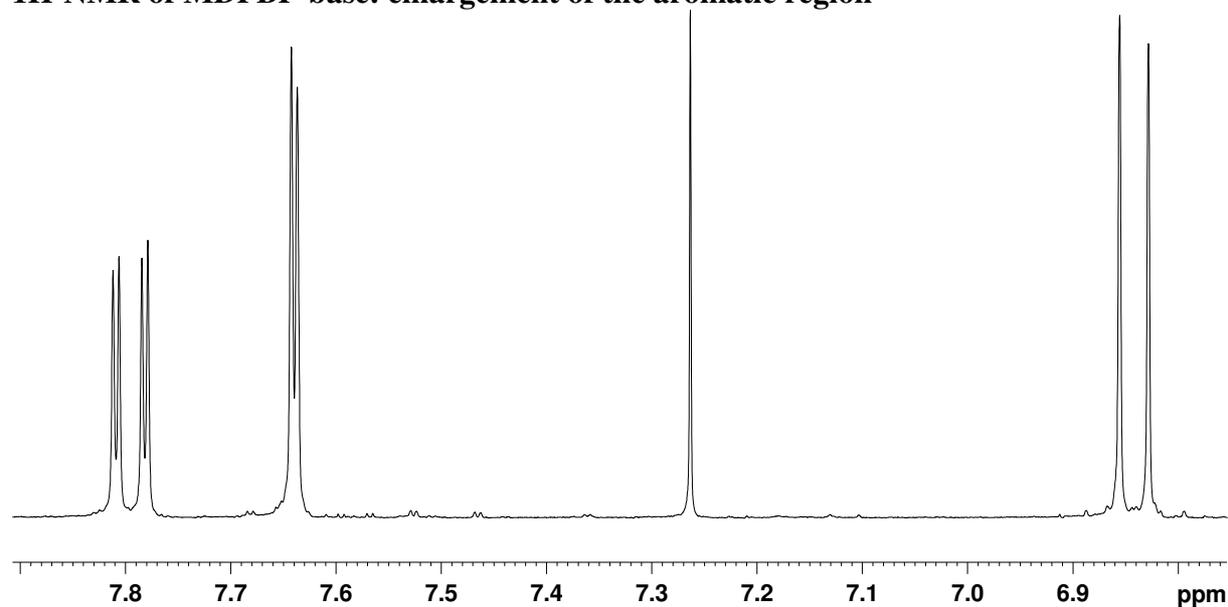
Nota: Espectros procedentes del artículo original ¹

¹ F. Westphal, et al., Spectroscopic characterization [redacted]: A new designer drug with α -pyrrolidinophenone structure, [redacted]

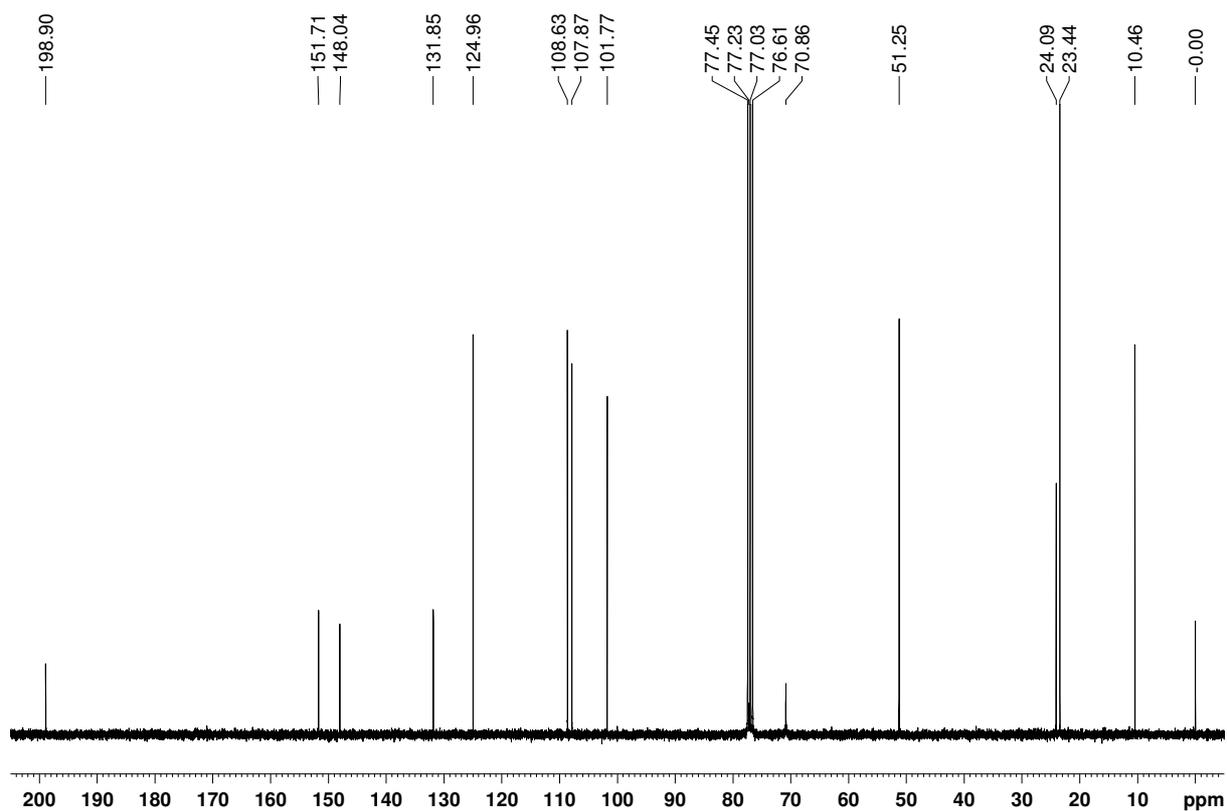
¹H-NMR of MDPBP-base



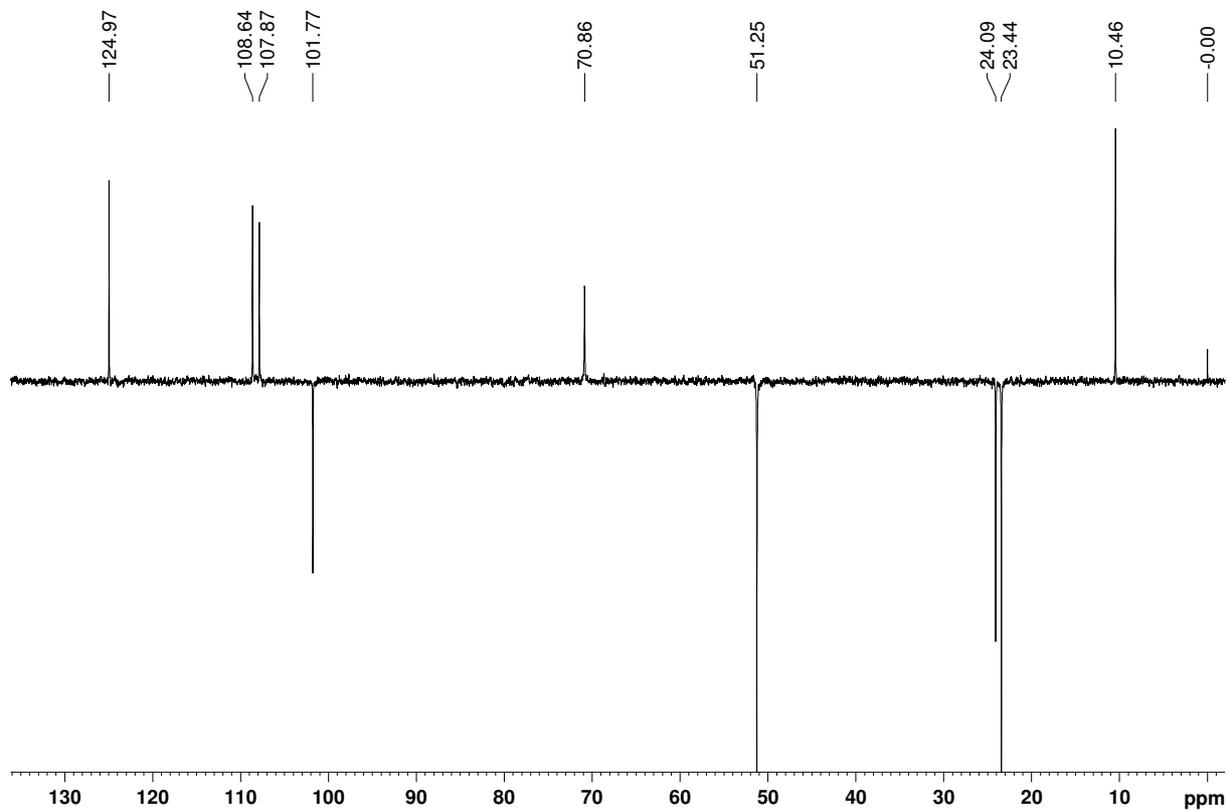
¹H-NMR of MDPBP-base: enlargement of the aromatic region



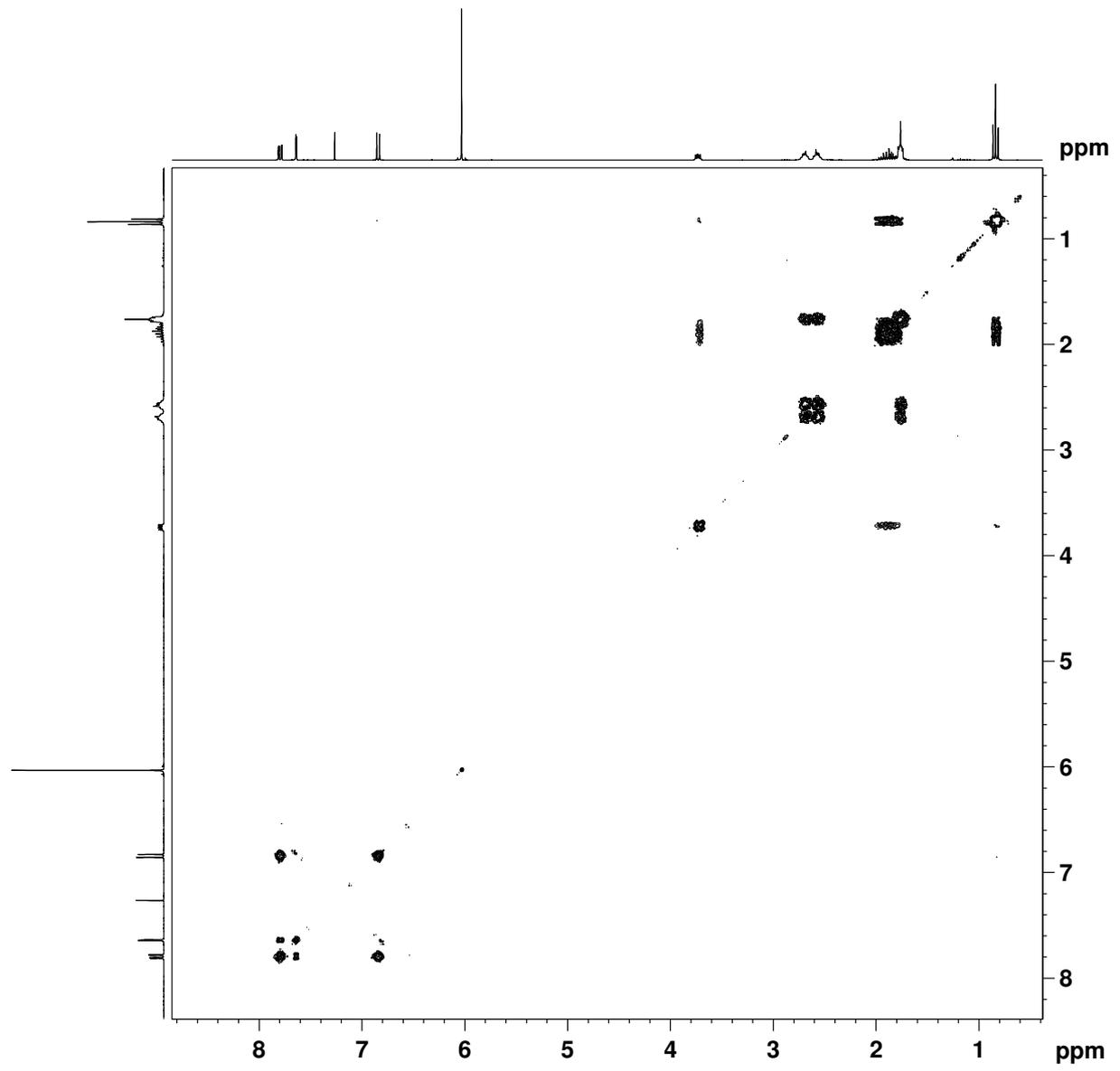
¹³C-NMR of MDPBP-base



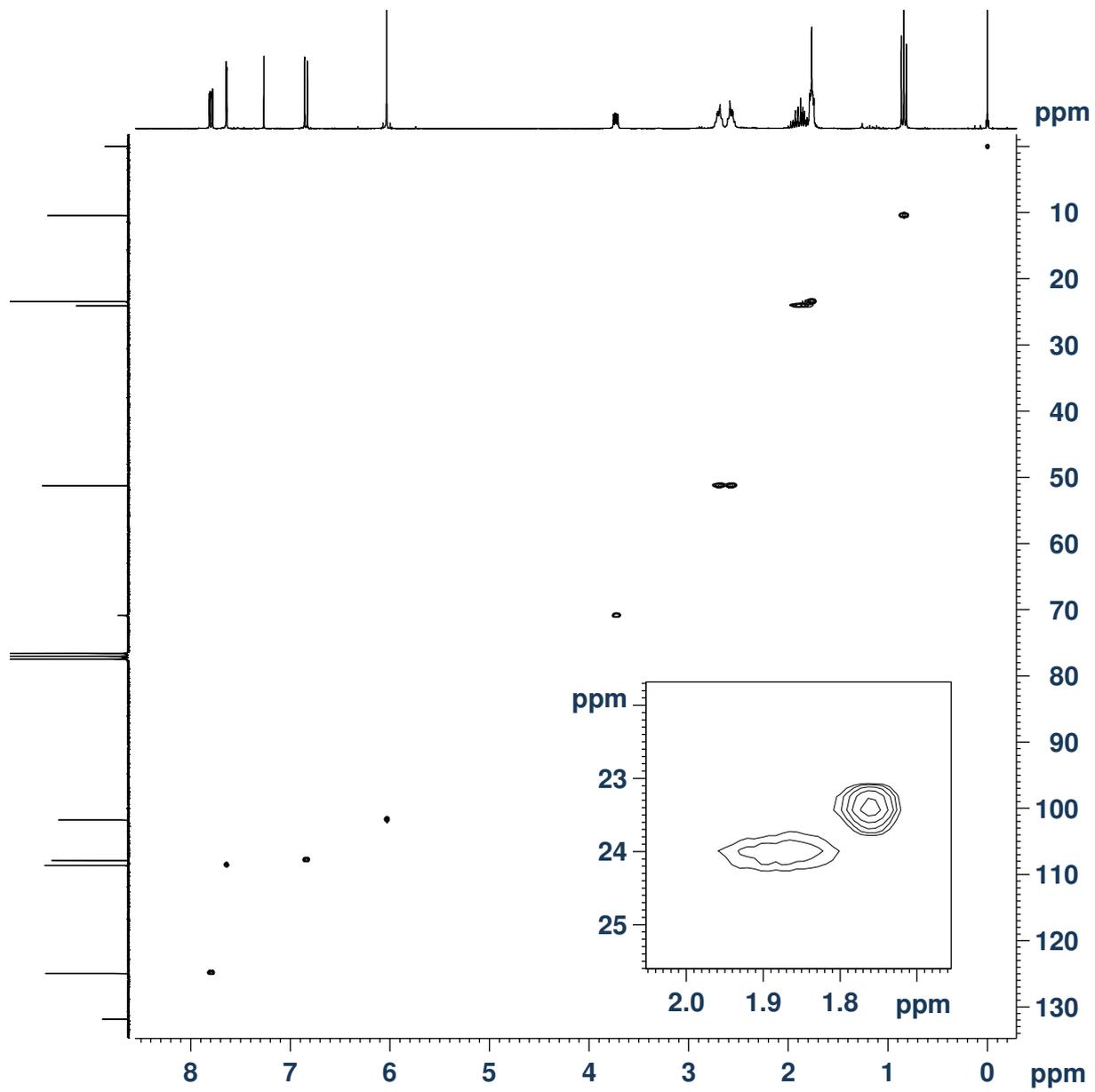
¹³C DEPT-135 of MDPBP-base



H,H-COSY of MDPBP-base



HSQC of MDPBP-base



HMBC of MDPBP-base

