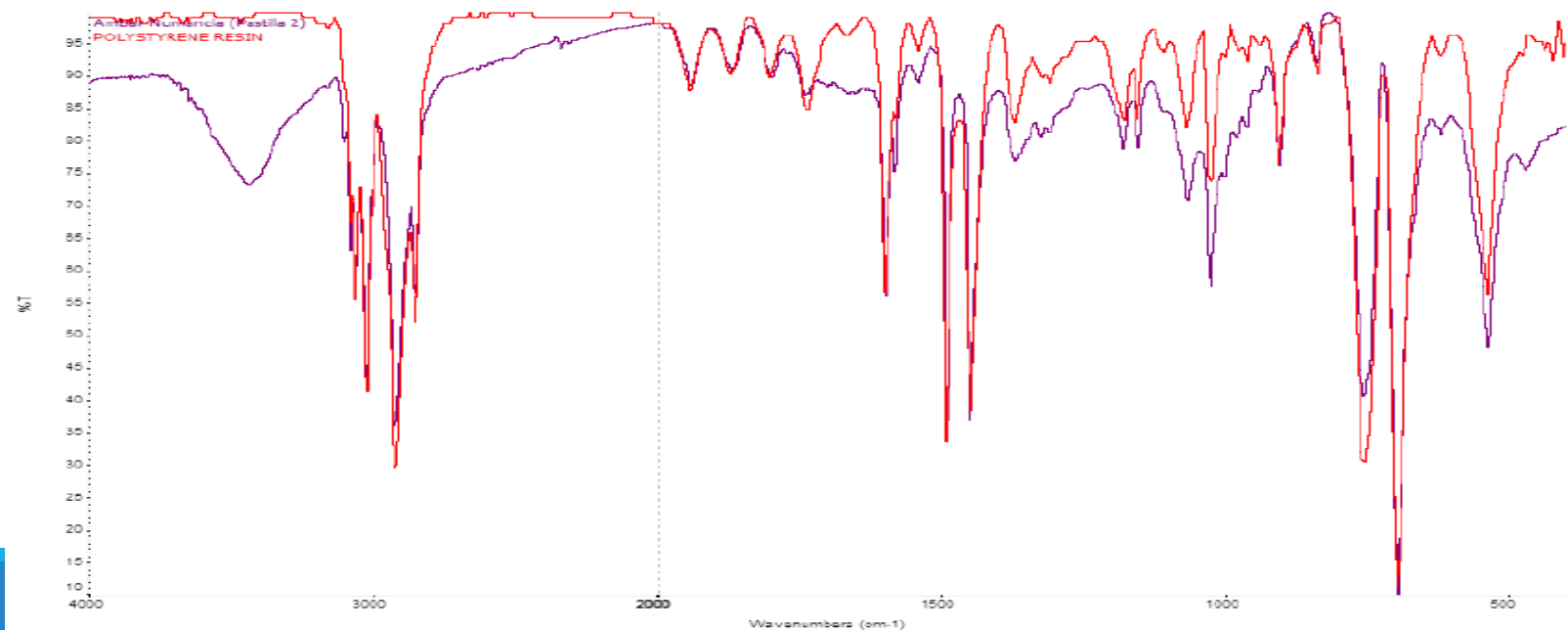
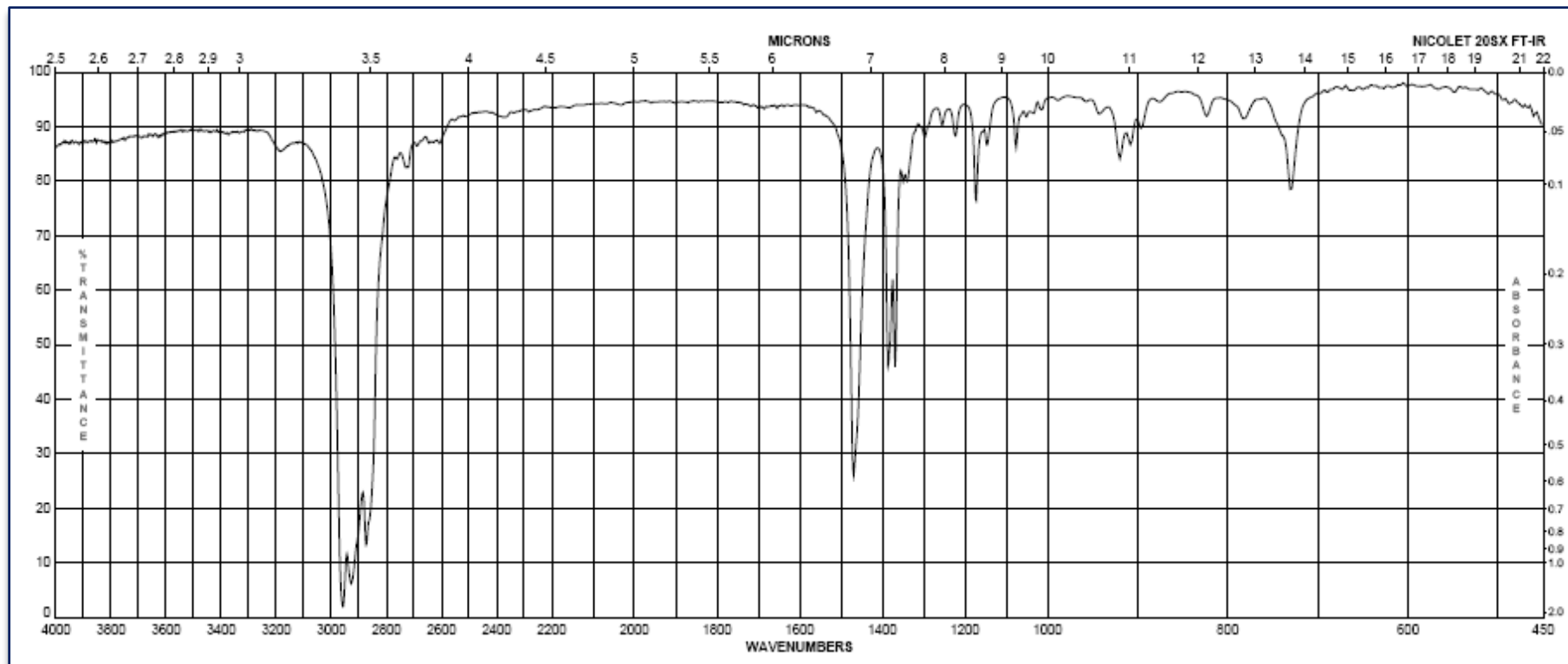


Espectroscopía de Infrarrojo (IR)



Interpretación de espectros

Espectro de Infrarrojo



$4000-1600\text{ cm}^{-1}$

***Vibraciones características
Principales grupos
funcionales***

$1600-400\text{ cm}^{-1}$

***Vibraciones de confirmación
“Huella digital”***

No todas las vibraciones fundamentales de una molécula dan bandas de absorción de radiación electromagnética

Considerar:

- ❖ Las moléculas diatómicas en las que los dos átomos son iguales (O_2 , N_2) solo producen vibraciones simétricas y por tanto no son activas en el IR.
- ❖ Moléculas simétricas como CH_4 , CCl_4 , C_6H_6 , etc. no tienen momento dipolar permanente, pero se puede desarrollar durante la vibración y son capaces de absorber radiación infrarroja.
- ❖ No deben coincidir en la misma frecuencia varias vibraciones fundamentales.
- ❖ La banda debe ser suficientemente intensa.

Características de los espectros

La intensidad de las bandas puede ser expresada en absorbancias (A) o su recíproco, % de transmitancia (T).

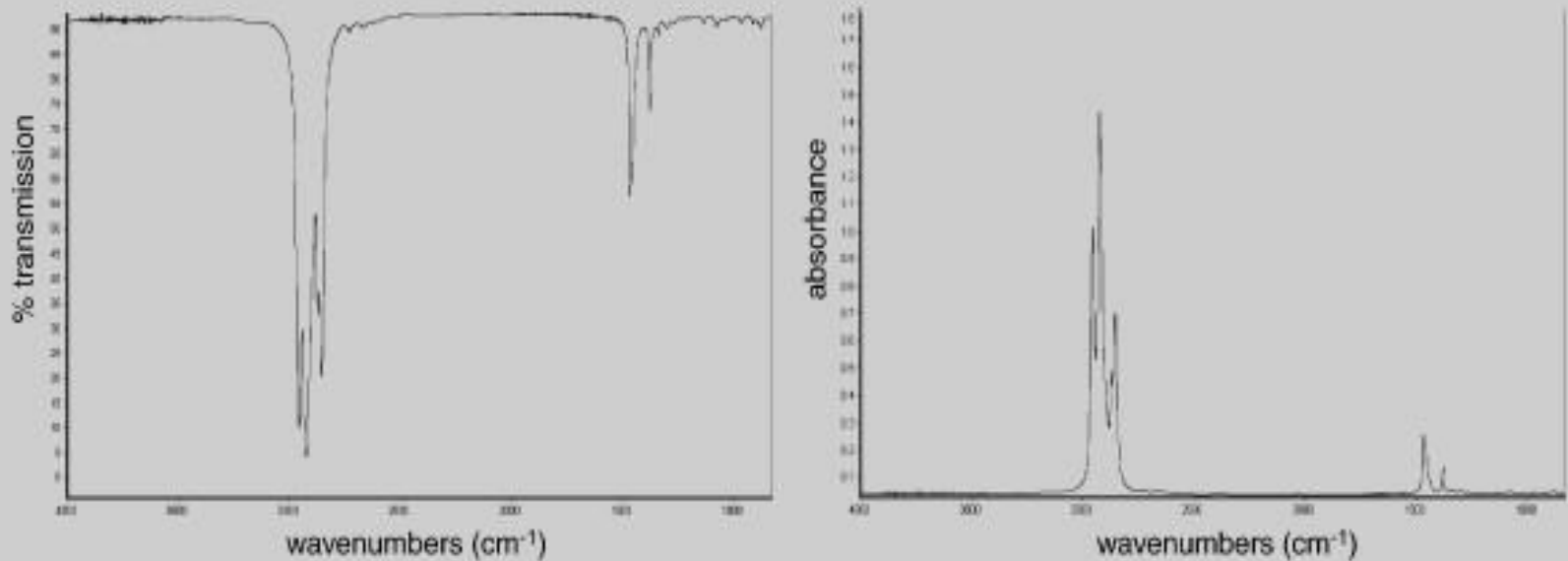


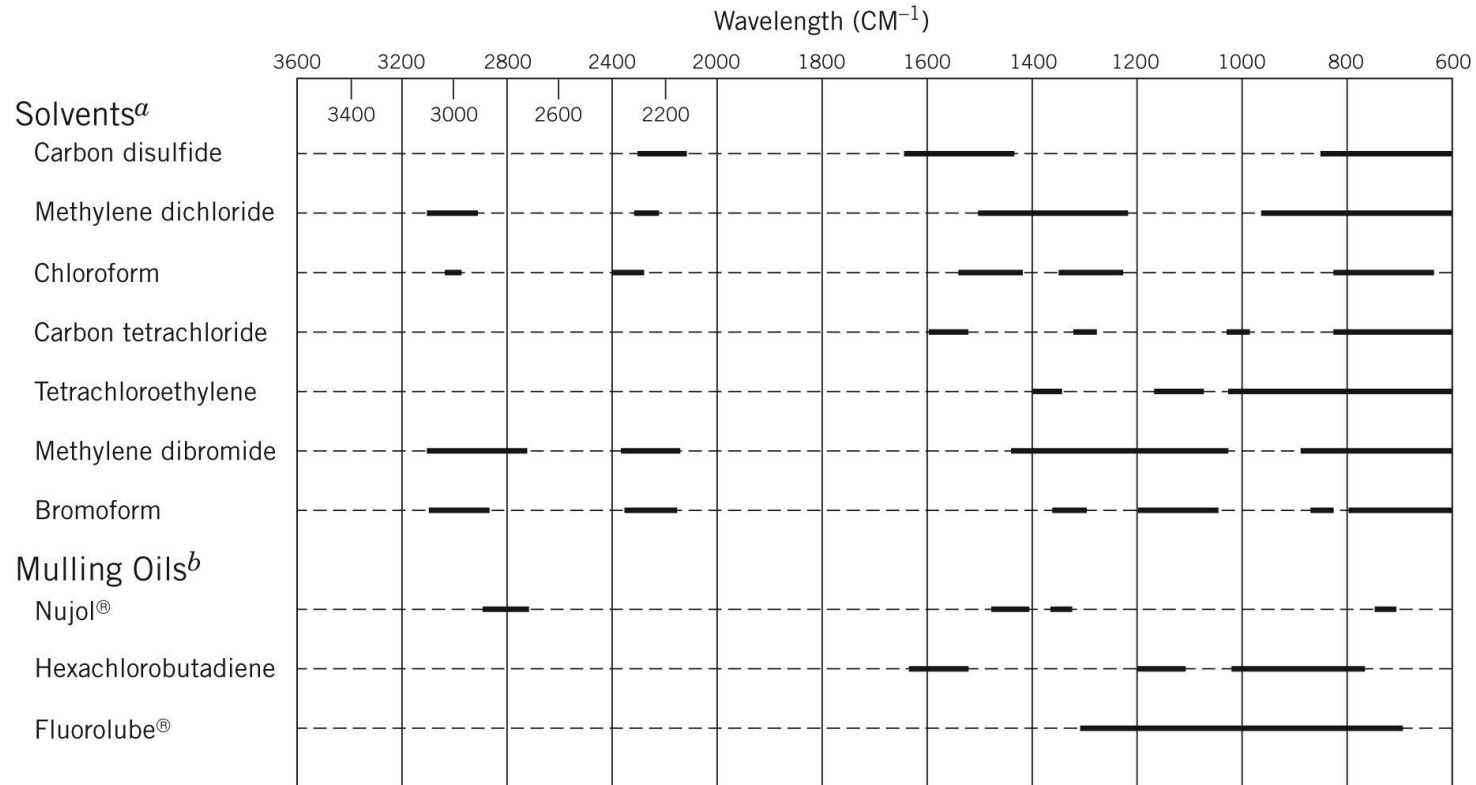
Figure 15.3 The IR spectrum of octane, plotted as transmission (left) and absorbance (right).

En general, entre mayor es la complejidad de las moléculas mayor es la complejidad del espectro. Por ello, resulta improductivo realizar un análisis a fondo de todas las señales.

Características de los espectros

Es muy importante identificar las bandas de las diferentes matrices.

APPENDIX A TRANSPARENT REGIONS OF SOLVENTS AND MULLING OILS

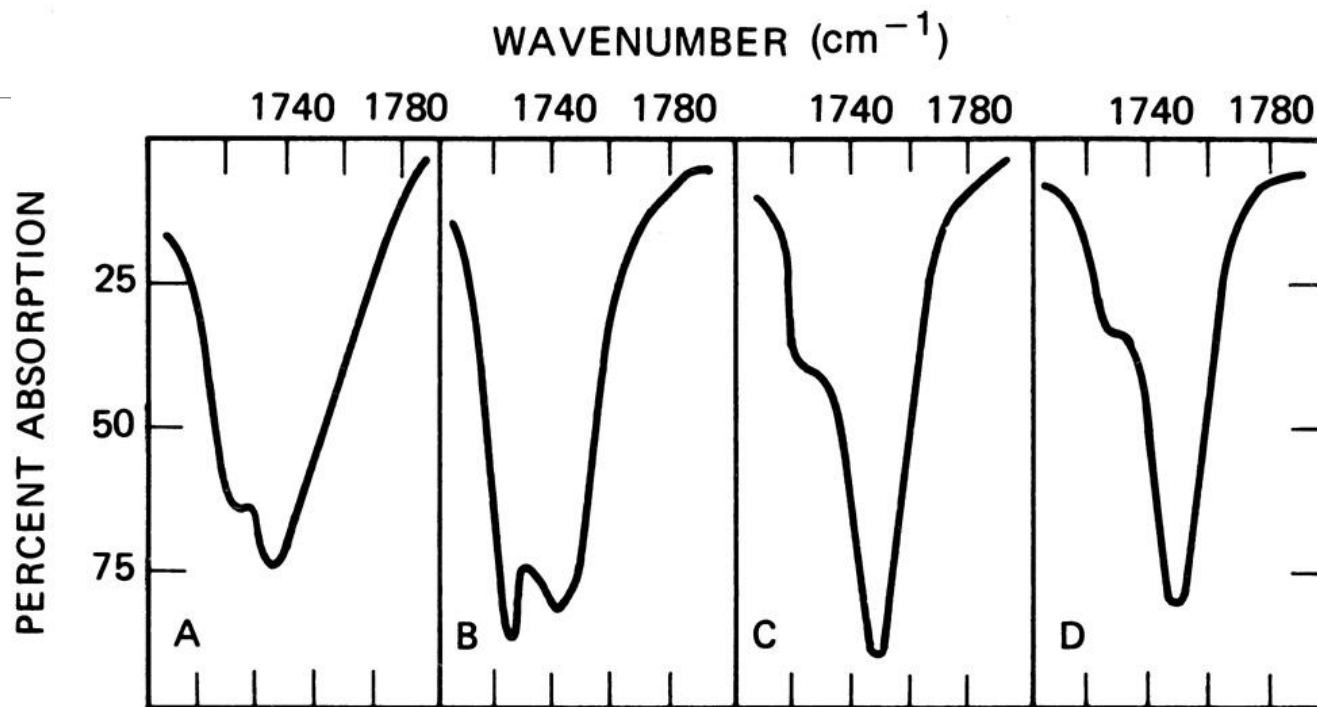


^a The open regions are those in which the solvent transmits more than 25% of the incident light at 1 mm thickness.

^b The open regions for mulling oils indicate transparency of thin films.

Características de los espectros

Algunas bandas de IR presentan diferentes formas al cambiar de matriz.



Comparación de la vibración C=O de la ciclopentanona en diferentes medios.

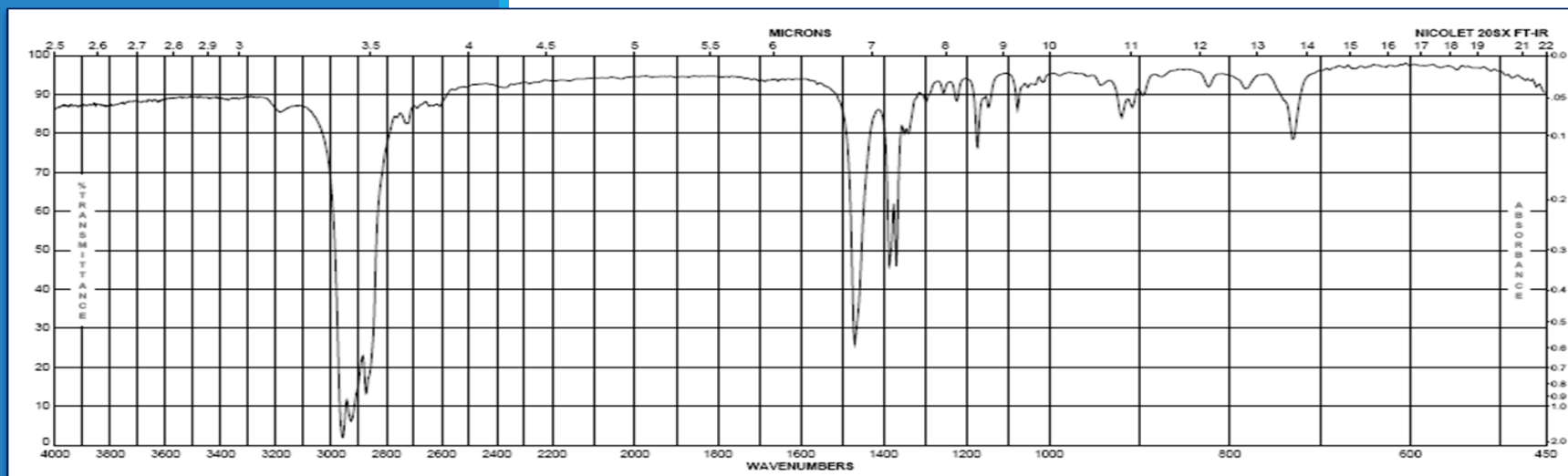
a) Disolución de CCl₄

b) CHCl₃

b) Disolución de disulfuro de carbono

d) Película líquida.

Interpretación de espectros



Metodología de interpretación

Uniones C-H de alcanos

Bandas entre 2850 - 3000 cm⁻¹

C - H, saturados ----- alcanos

CH₂ y/o CH₃

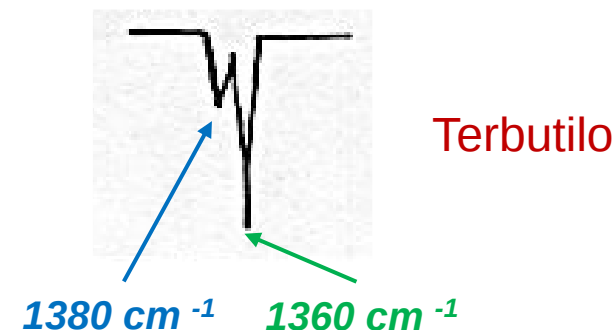
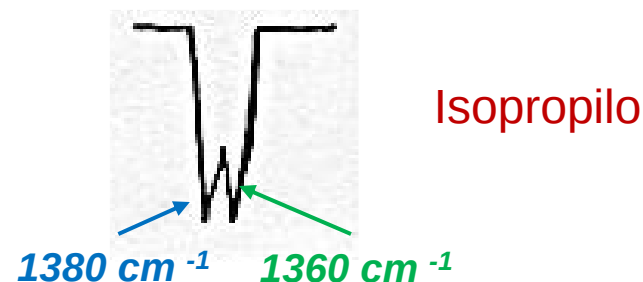
Bandas alrededor de 1460 cm⁻¹

Confirmación CH₂ y /o CH₃

Bandas alrededor de 1380 cm⁻¹

Presencia de CH₃

Banda de 1380 cm⁻¹,
característica de metilos se
dobletea cuando hay isopropilos
o *ter*-butilos.



Metodología de interpretación

Uniones C-H de alcanos

Bandas entre 2850 - 3000 cm⁻¹

C - H, saturados ----- alcanos

CH₂ y /o CH₃

Bandas alrededor de 1460 cm⁻¹

Confirmación CH₂ y /o CH₃

Bandas alrededor de 1380 cm⁻¹

Presencia de CH₃

Banda de 720 cm⁻¹

Se presenta cuando hay ≥ 4 metilenos (CH₂) juntos. .

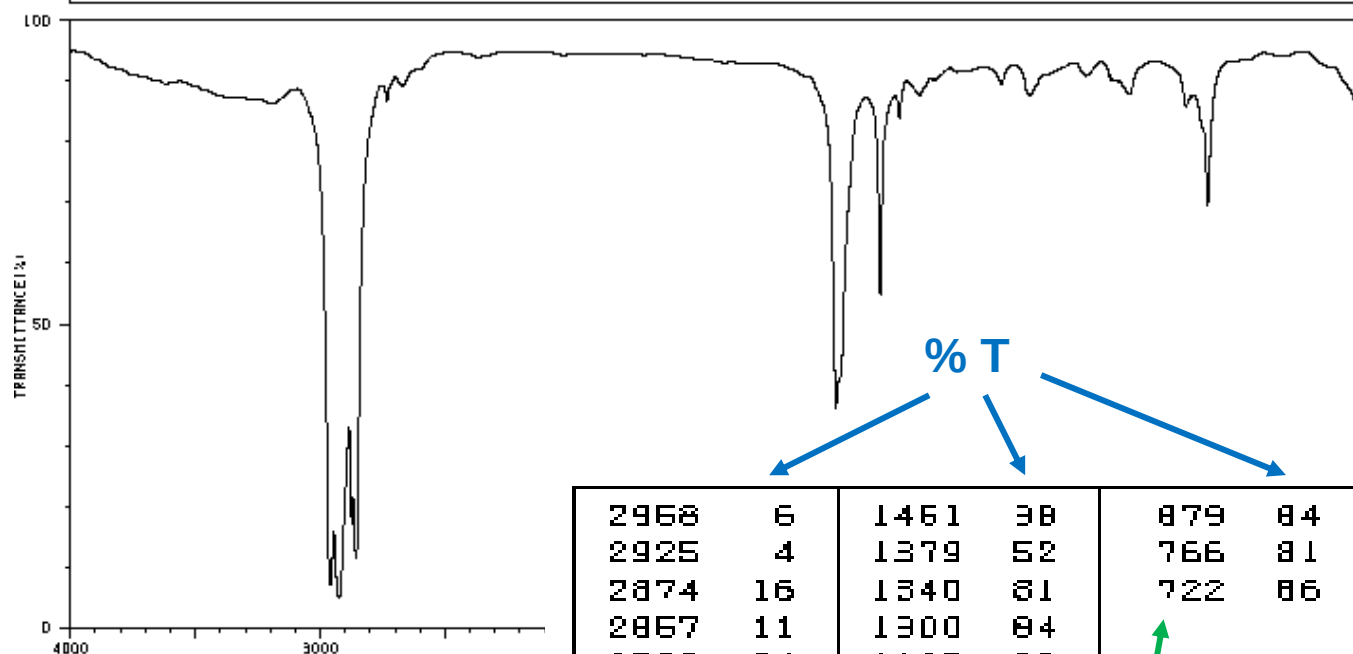
TABLA IR-I ALCANOS

Grupo	Nº de onda (cm ⁻¹)	Intensidad (mol ⁻¹ · l · cm ⁻¹)	Origen	Notas
(1) -CH ₃	2970~2950	ch 70	ν_{as} -CH ₃	2830~2815 (ϵ 35~75) en -OMe, ausente en -OEt. 2730~2820 (ϵ 15~21) en -NMe, ausente en -NEt. 2820~2710 en metilendioxi.
	2880~2860	m 30	ν_s -CH ₃	
	1470~1450	m < 15	δ_{as} -CH ₃	
	1385~1365	ch 15	δ_s -CH ₃	
(2) -CH ₂ -	2935~2915	ch 75	ν_{as} -CH ₂ -	1445 en ciclopentanos, 1450 en ciclohexanos. Se desplaza por hiperconjugación (ver (14)-(16)). Presente cuando n ≥ 4. Ocasionalmente como doblete en sólidos. Mas alto a menor n. Propilo 743~734; Etilo 790~770. El -CH ₂ - también tiene bandas de flexión en ~1300 (ϵ ≈ 1). Los espectros de sólidos con cadenas largas y grupos polares terminales (ácidos, ésteres, amidas) muestran una serie de bandas regulares entre 1350~1180.
	2865~2845	ch 45	ν_s -CH ₂ -	
	1470~1445	m 8	tijera -CH ₂ -	
	730~710	ch 3	rocking -(CH ₂) _n -	

TABLA IR-I ALCANOS

Grupo	Nº de onda (cm ⁻¹)	Intensidad (mol ⁻¹ · l · cm ⁻¹)	Origen	Notas
(1) -CH ₃	2970~2950	ch 70	v _{as} -CH ₃	2830~2815 (ε 35~75) en -OMe, ausente en -OEt. 2730~2820 (ε 15~21) en -NMe, ausente en -NEt. 2820~2710 en metilendioxi. Doblete en gem-dimetilos (ver (5)-(7)). Junto a carbonilos ver (11)-(13).
	2880~2860	m 30	v _s -CH ₃	
	1470~1450	m < 15	δ _{as} -CH ₃	
	1385~1365	ch 15	δ _s -CH ₃	
(2) -CH ₂ -	2935~2915	ch 75	v _{as} -CH ₂ -	1445 en ciclopentanos, 1450 en ciclohexanos. Se desplaza por hiperconjugación (ver (14)-(16)). Presente cuando n≥4. Ocasionalmente como doblete en sólidos. Mas alto a menor n. Propilo 743~734; Etilo 790~770. El -CH ₂ - también tiene bandas de flexión en ~1300 (ε≈1). Los espectros de sólidos con cadenas largas y grupos polares terminales (ácidos, ésteres, amidas) muestran una serie de bandas regulares entre 1350~1180.
	2865~2845	ch 45	v _s -CH ₂ -	
	1470~1445	m 8	tijera -CH ₂ -	
	730~710	ch 3	rocking -(CH ₂) _n -	

HIT-NO=1984	SCORE= ()	SDBS-NO=2672	IR-NIDA-16772 : LIQUID FILM

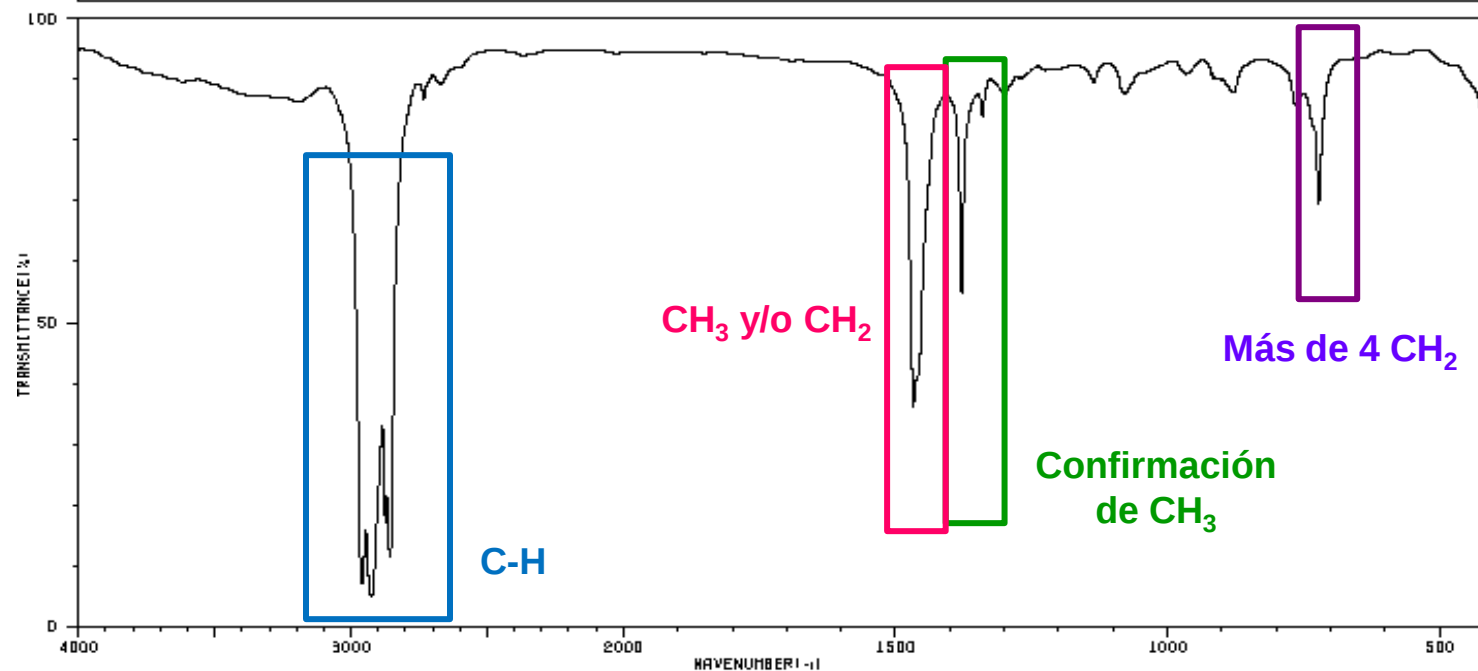


2968	6	1461	38	879	84
2925	4	1379	52	766	81
2874	16	1340	81	722	86
2867	11	1300	84		
2733	84	1135	86		
2670	86	1080	84		
1468	34	887	84		

2968	6	1461	38	879	84
2925	4	1379	52	766	81
2874	16	1340	81	722	86
2867	11	1300	84		
2733	84	1135	86		
2670	86	1080	84		
1468	34	887	84		

cm⁻¹

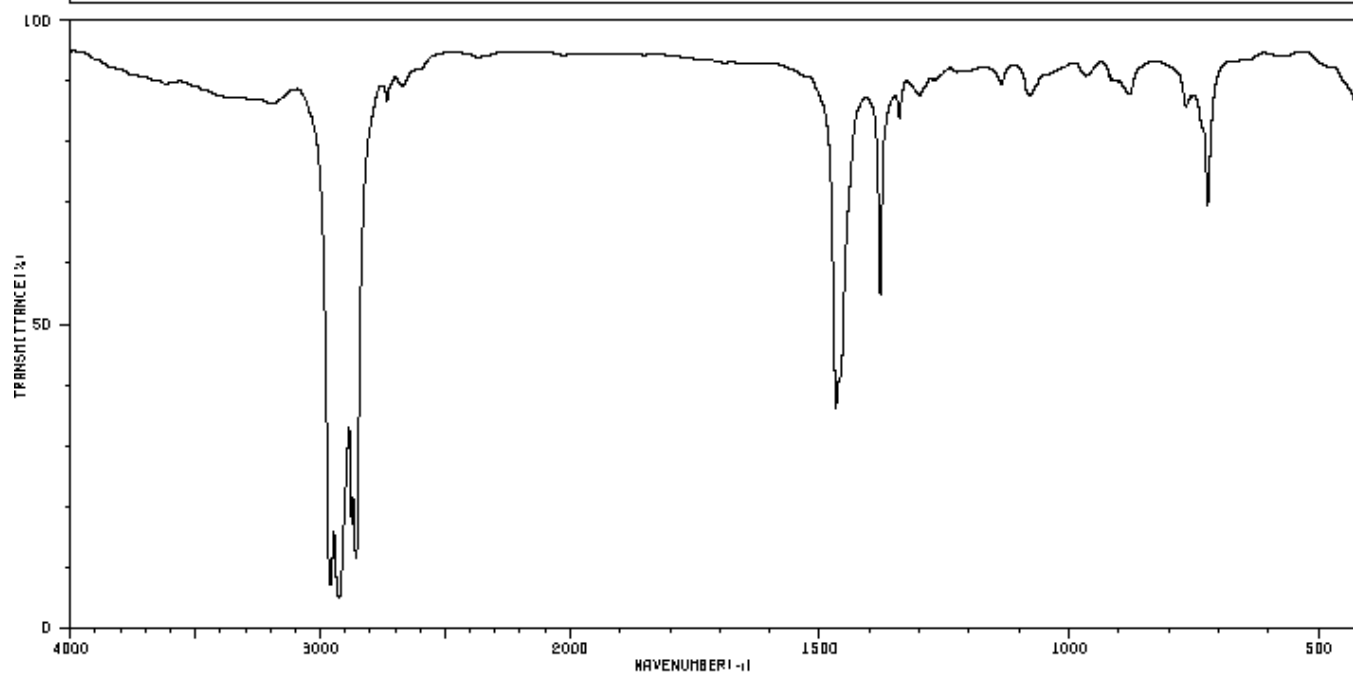
HIT-NO=1984	SCORE= ()	SDBS-NO=2672	IR-NIDA-16772 : LIQUID FILM



2958	6	1451	28	879	84
2925	4	1379	52	766	81
2874	16	1340	81	722	86
2857	11	1300	84		
2733	84	1135	86		
2670	86	1080	84		
1468	34	987	84		

Compuesto saturado C-H
 Con grupos CH₃ y CH₂
 Con más de 4 metilenos CH₂ juntos

HIT-NO=1984	SCORE= ()	SDBS-NO=2672	IR-NIDA-16772 : LIQUID FILM



2968	6	1461	38	879	84
2925	4	1379	52	766	81
2874	16	1340	81	722	86
2867	11	1300	84		
2733	84	1135	86		
2870	86	1080	84		
1468	34	887	84		

OCTANO, C₈H₁₈

Metodología de interpretación

Alquenos

Bandas entre 3100 - 3000 cm⁻¹

= C - H, insaturados ----- alquenos

olefinas o aromáticos

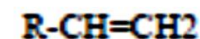
Bandas alrededor de 1660 -1640 cm⁻¹

Confirmación C = C

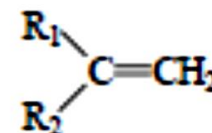
Bandas alrededor de 1000 - 650 cm⁻¹

Vibración =C - H

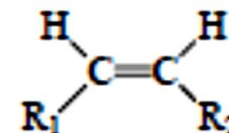
) vinilo terminal



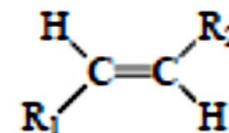
) metileno terminal



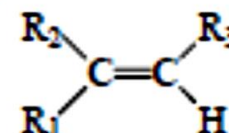
) cis, disustituído



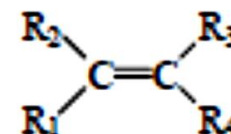
) trans, disustituído



) trisustituído



) tetrasustituído

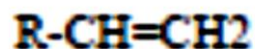


Metodología de interpretación

Alquenos

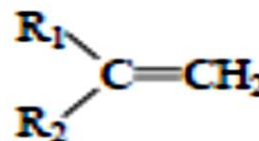
Bandas alrededor de 1000 - 650 cm^{-1}

vinilo terminal



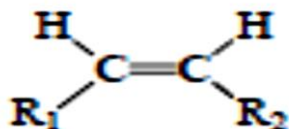
990 y 910 cm^{-1}

metileno terminal



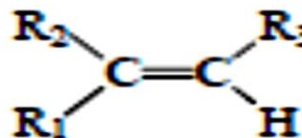
890 cm^{-1}

cis, disustituido



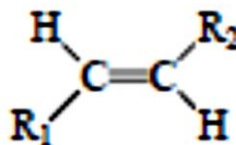
730 - 650 cm^{-1}

trisustituido



965 cm^{-1}

trans, disustituido



840 - 800 cm^{-1}

TABLA IR-II ALQUENOS

1. Frecuencias de estiramiento C-H (ϵ entre paréntesis).

A)	$=CH_2$	3080, m(30)	$\nu_{as} CH_2$	Las bandas por encima de 3000 sugieren la presencia de insaturados $=CH-$ (alquenos, aromáticos). La banda de 3000-2975 se traslapa con los alcanos.
		3000~2975, m	$\nu_s CH_2$	
B)	$\begin{array}{c} \diagup \\ C \\ \diagdown \\ H \end{array}$	3020, m	$\nu C-H$	

2. Señales de estiramiento C=C y de flexión =C-H, afectadas por el tipo de sustituyente

Tipo	$\nu C=C$	Sobretono de la flexión fuera del plano δCH .	Flexión en el plano δCH .	Flexión fuera del plano δCH .
C) vinilo terminal $R-CH=CH_2$	1660~1620 m (40)	1860~1800 m (30)	1420, m (10~20). Se encima con las señales de CH_2 de alcanos, (14)-(16) 1300, m~ancho	990, ch (50) y 910 ch (110); Incluye las flexiones simétrica y asimétrica de los 3 H.
D) metileno terminal $\begin{array}{c} R_1 \\ \diagdown \\ C=CH_2 \\ \diagup \\ R_2 \end{array}$	1665~1645 m (35)	1800~1750 m (30)	1415, m (10~20). Misma región de tabla I, (14)-(16).	890, ch (100~150). Flexión asimétrica.
E) cis, disustituido $\begin{array}{c} H & & H \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & R_2 \end{array}$	1660~1620 m (10)		1415, m (10~20)	730~675, m (40). Ocasionalmente dudoso. En cíclicos aparecen varias bandas semejantes entre 800~650 ($\epsilon \approx 50 \sim 100$), difícil asignarlas.
F) trans, disustituido $\begin{array}{c} H & & R_2 \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & H \end{array}$	1680~1660 ancho (2)			965, ch (100). Flexión asimétrica de los H.
G) trisustituido $\begin{array}{c} R_2 & & R_3 \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & H \end{array}$	1680~1660 ancho~m			840~800, ch (40). Los cíclicos dan dos señales entre 850~790.
H) tetrasustituido $\begin{array}{c} R_2 & & R_3 \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & R_4 \end{array}$	1680~1660 ancho, intenso cuando está unido directamente a O ó N.			No hay, pero los CH_2 contiguos ($>C=C-CH_2$) se pueden detectar por su flexión (Tabla I, (15)).

TABLA IR-II ALQUENOS

1. Frecuencias de estiramiento C-H (ε entre paréntesis).

A)	$=CH_2$	3080, m(30)	$\nu_{as} CH_2$	Las bandas por encima de 3000 sugieren la presencia de insaturados $=CH-$ (alquenos, aromáticos). La banda de 3000-2975 se traslapa con los alcanos.
		3000~2975, m	$\nu_s CH_2$	
B)	$\begin{array}{c} \diagup \\ C \\ \diagdown \\ H \end{array}$	3020, m	$\nu C-H$	

2. Señales de estiramiento C=C y de flexión $=C-H$, afectadas por el tipo de sustituyente

Tipo	$\nu C=C$	Sobretono de la flexión fuera del plano δCH .	Flexión en el plano δCH .	Flexión fuera del plano δCH .
C) vinilo terminal $R-CH=CH_2$	1660~1620 m (40)	1860~1800 m (30)	1420, m (10~20). Se encima con las señales de CH_2 de alcanos, (14)-(16) 1300, m~ancho	990, ch (50) y 910 ch (110); Incluye las flexiones simétrica y asimétrica de los 3 H.
D) metileno terminal $\begin{array}{c} R_1 \\ \\ C=CH_2 \\ \\ R_2 \end{array}$	1665~1645 m (35)	1800~1750 m (30)	1415, m (10~20). Misma región de tabla I, (14)-(16).	890, ch (100~150). Flexión asimétrica.
E) cis, disustituido $\begin{array}{c} H & & H \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & R_2 \end{array}$	1660~1620 m (10)		1415, m (10~20)	730~675, m (40). Ocasionalmente dudoso. En cíclicos aparecen varias bandas semejantes entre 800~650 ($\epsilon \approx 50-100$), difícil asignarlas.
F) trans, disustituido $\begin{array}{c} H & & R_2 \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & H \end{array}$	1680~1660 ancho (2)			965, ch (100). Flexión asimétrica de los H.
G) trisustituido $\begin{array}{c} R_2 & & R_3 \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & H \end{array}$	1680~1660 ancho~m			840~800, ch (40). Los cíclicos dan dos señales entre 850~790.
H) tetrasustituido $\begin{array}{c} R_2 & & R_3 \\ & \backslash & / \\ & C=C \\ & / & \backslash \\ R_1 & & R_4 \end{array}$	1680~1660 ancho, intenso cuando está unido directamente a O ó N.			No hay, pero los CH_2 contiguos ($>C=C-CH_2$) se pueden detectar por su flexión (Tabla I, (15)).

Metodología de interpretación

Alquinos

Banda entre 3325 – 3250 cm⁻¹

$\equiv \text{C} - \text{H}$

Alquinos

Banda entre 750 – 650 cm⁻¹

Confirmación

Bandas alrededor de 2100 cm⁻¹

$\equiv \text{C} - \text{H}$

Confirmación $\text{C} \equiv \text{C}$

Bandas alrededor de 2100 cm⁻¹

Otro grupo funcional con $\text{C} \equiv \text{C}$

$\text{C} \equiv \text{C} - \text{N}$

TABLA IR-IV: ENLACES $X\equiv Y$, $X=Y=Z$.

Grupo	Posición (cm-1)	ϵ	Notas
Acetileno terminal, $-C\equiv CH$	Estir. $-C\equiv C-$: 2230~2210	5	
	Estir. $\equiv C-H$: 3320~3280	100	La señal en ~3300 es muy aguda. También hay una flexión del enlace C-H en 700~600 y ocasionalmente el sobretono en 1300~1200
Acetileno central, $-C\equiv C-$	2235~2215	1	Desaparece si la simetría es alta
	1335~1325		~1330 causado por flex. $-C\equiv C-CH_2-$
Nitrilo $-C\equiv N$	Aislado: 2260~2240 Conjugado: 2240~2210	10~150	Las cianamidas ($=N-C\equiv N$) dan igual que los conjugados. Los cianuros alcalinos (NaCN, KCN) producen una señal intensa del carbanión en 2100~2050.
Sales de diazonio, $-(N\equiv N)^+$	2280~2240	Medio	La posición depende del contraión

Metodología de interpretación

Compuestos aromáticos

Bandas entre 3100 - 3000 cm^{-1}

= C - H, insaturados ----- alquenos
olefinas o aromáticos

Bandas (hasta 4 delgadas) entre

1600 - 1450 cm^{-1}

Confirmación C = C

Bandas alrededor de 950 - 650 cm^{-1}

Vibración = C - H

Bandas entre 2000 - 1600 cm^{-1}

Sobretonos

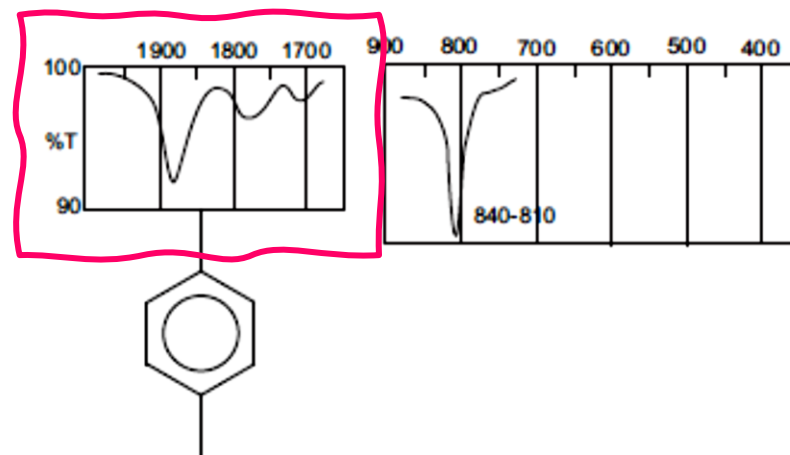
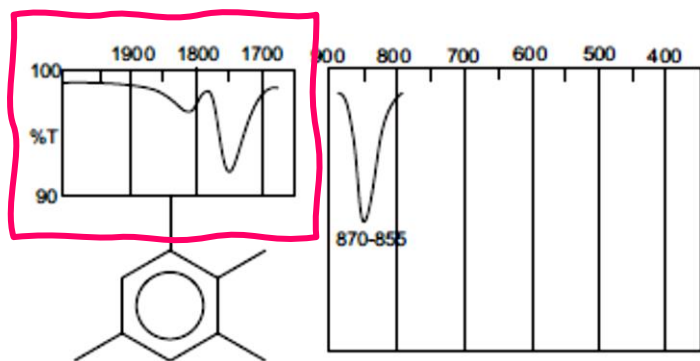
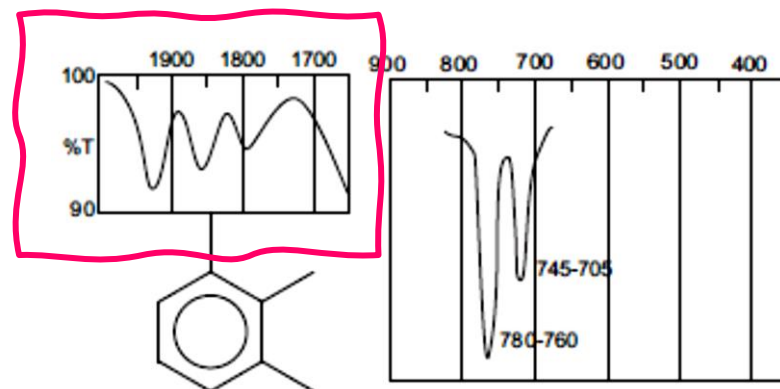
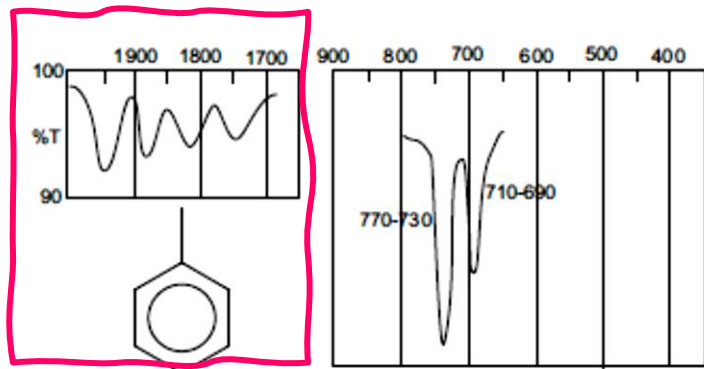
Tipo de sustitución del anillo
aromático

Metodología de interpretación

Compuestos aromáticos

1ero. Forma

Bandas entre 2000 - 1600 cm^{-1}

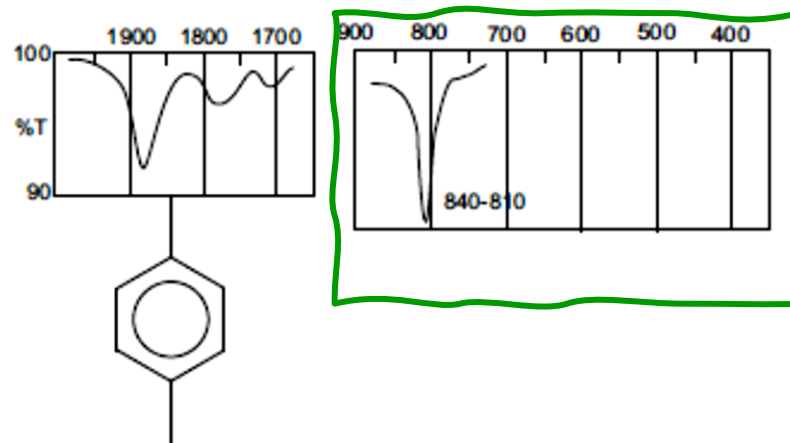
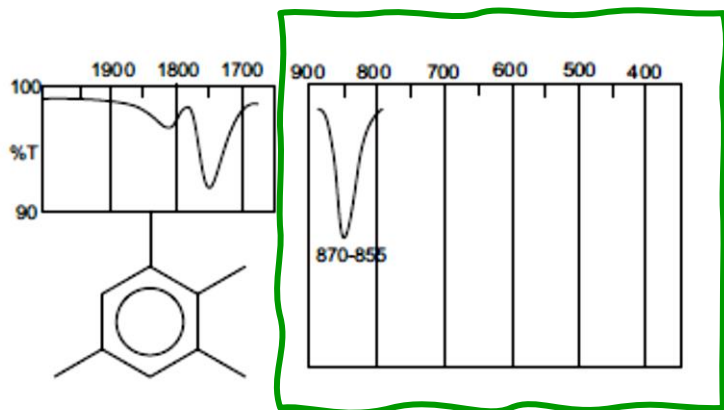
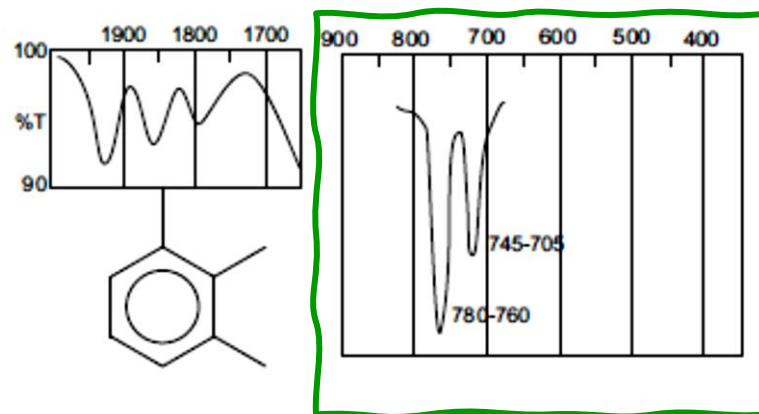
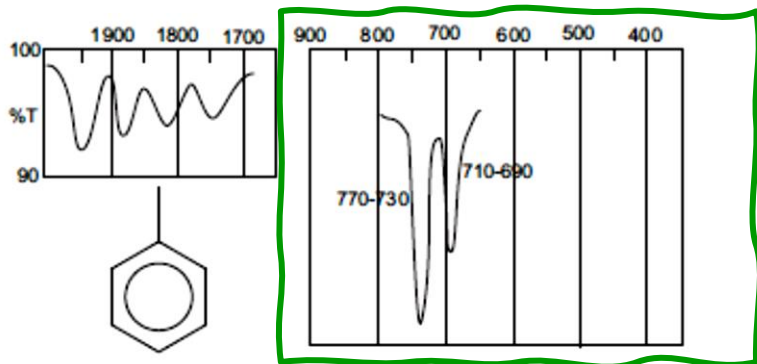


Metodología de interpretación

Compuestos aromáticos

2do.

Bandas entre 900 - 600 cm^{-1}



Metodología de interpretación

Alcoholes

Banda intensa y ancha entre

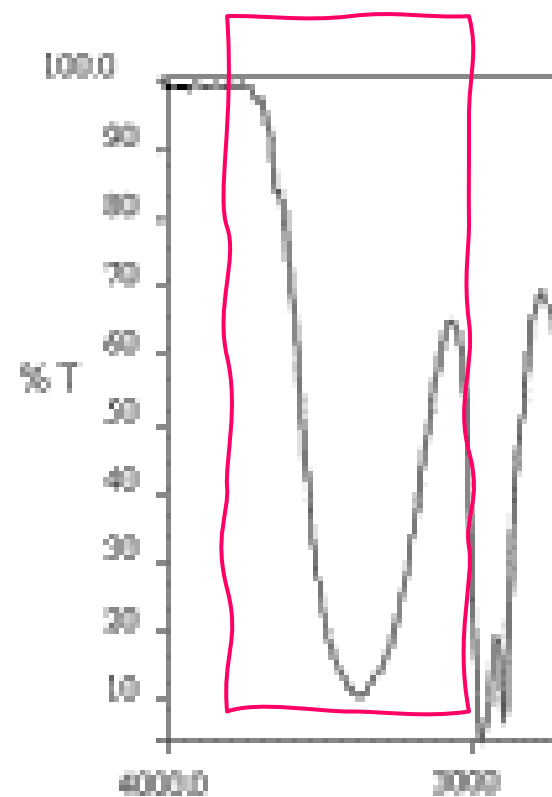
3500 - 3000 cm^{-1}

- O - H

Banda entre 1250 -1025 cm^{-1}

Tipo de alcohol

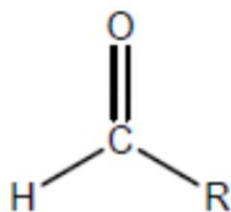
Tipo	Posición, cm^{-1}
Primario	1050
Secundario	1100
Terciario	1125 - 1150
Fenol	1200



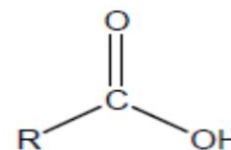
Metodología de interpretación

Grupo carbonilo

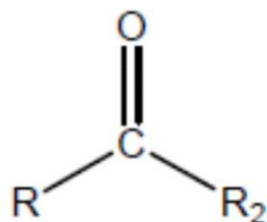
Aldehídos



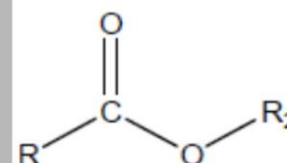
Ácidos
carboxílicos



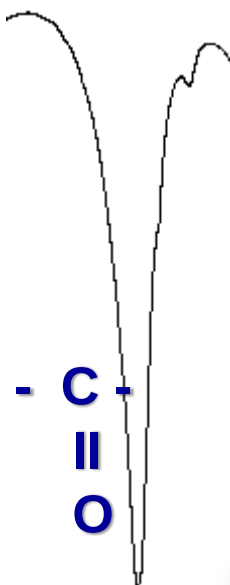
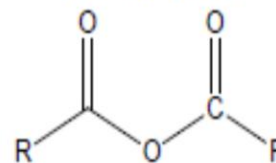
Cetonas



Ésteres



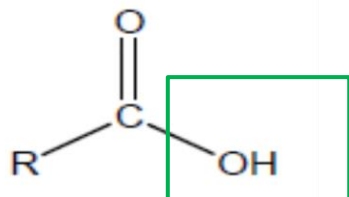
Anhidridos



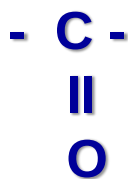
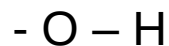
Banda alrededor de 1700 cm⁻¹

Grupo carbonilo

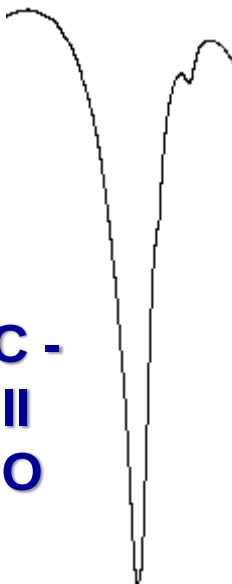
Ácidos
carboxílicos



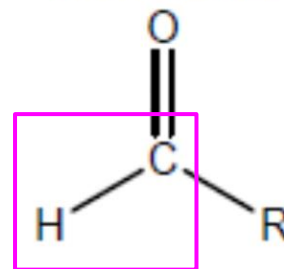
***Banda intensa y ancha
entre $3500 - 2500 \text{ cm}^{-1}$***



$\approx 1700 \text{ cm}^{-1}$



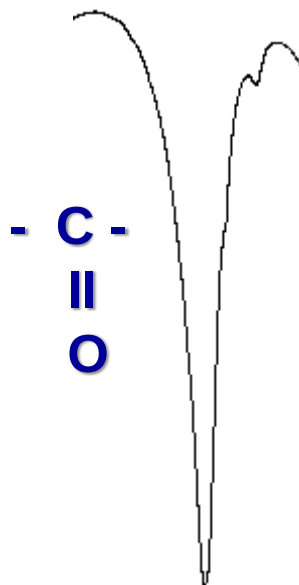
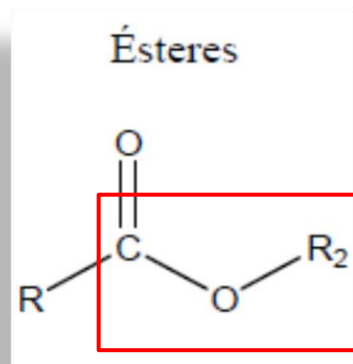
Aldehídos



Bandas en 2820 y 2720 cm^{-1}

Resonancia de Fermi

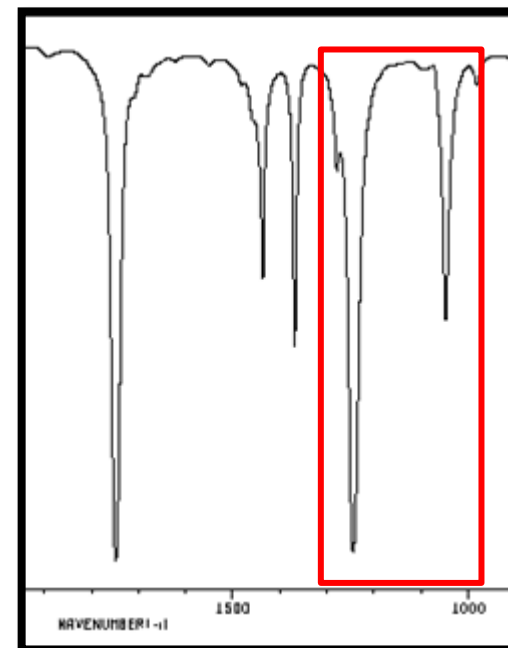
Grupo carbonilo



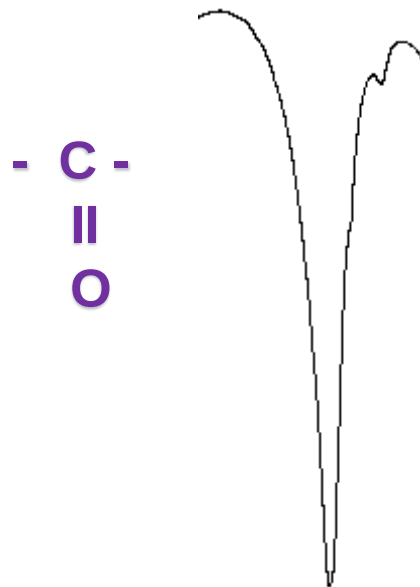
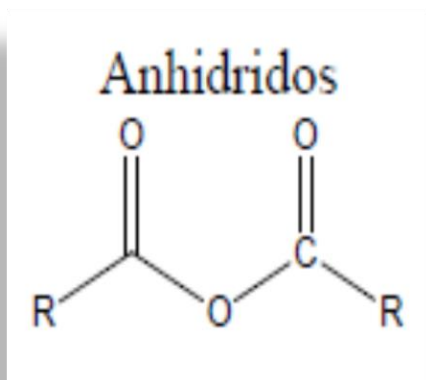
$\approx 1700 \text{ cm}^{-1}$

**Dos bandas entre
1300 - 1050 cm^{-1}**

Una igual de intensa que C=O



Grupo carbonilo



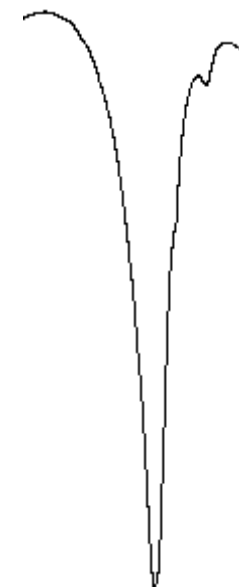
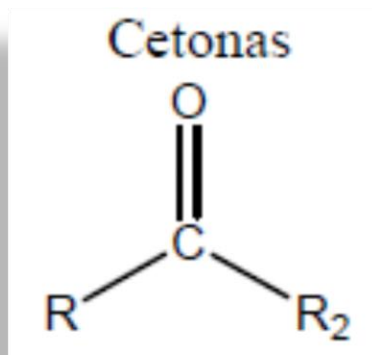
$\approx 1700 \text{ cm}^{-1}$

Banda entre 1850 – 1770 cm⁻¹

$\text{C}=\text{O} \approx 1820 \text{ cm}^{-1}$

Banda una o dos bandas intensas entre 1310 - 1020 cm⁻¹

Grupo carbonilo



$\approx 1700 \text{ cm}^{-1}$

Bandas 1100 y 1300 cm^{-1}

Bandas de baja intensidad en cetonas alifáticas e
intensas en cetonas aromáticas

Metodología de interpretación

Grupo amino

***Bandas de baja intensidad en
3500 y 3400 cm^{-1}***

N – H

R-NH₂, dos bandas

R- NH - R , una banda

Amina terciaria, no presenta banda

***Banda de mediana intensidad
entre 1230 - 1030 cm^{-1}***

C - N

Banda entre 1640 -1560 cm^{-1}

Confirmación NH₂

***Banda ancha de mediana
intensidad ancha entre
900 - 650 cm^{-1}***

N - H

Interpretación en clase

No. Espectro En clase	Equipo
9	2
10	3 y 4
11	1

Instrucciones:

1. Cada equipo cuenta de 5-10 minutos para interpretar los espectros asignados.
2. Después de este tiempo, cada equipo compartirá la interpretación ante el grupo utilizando la pizarra o una presentación.
3. Los espectros asignados deberán ser colocados en Classroom como tarea de forma individual.