

Tablas de Espectroscopía Infrarroja

Elaboradas por:
Francisco Rojo Callejas

Figura IR-1 Regiones básicas de un espectro de Infrarrojo

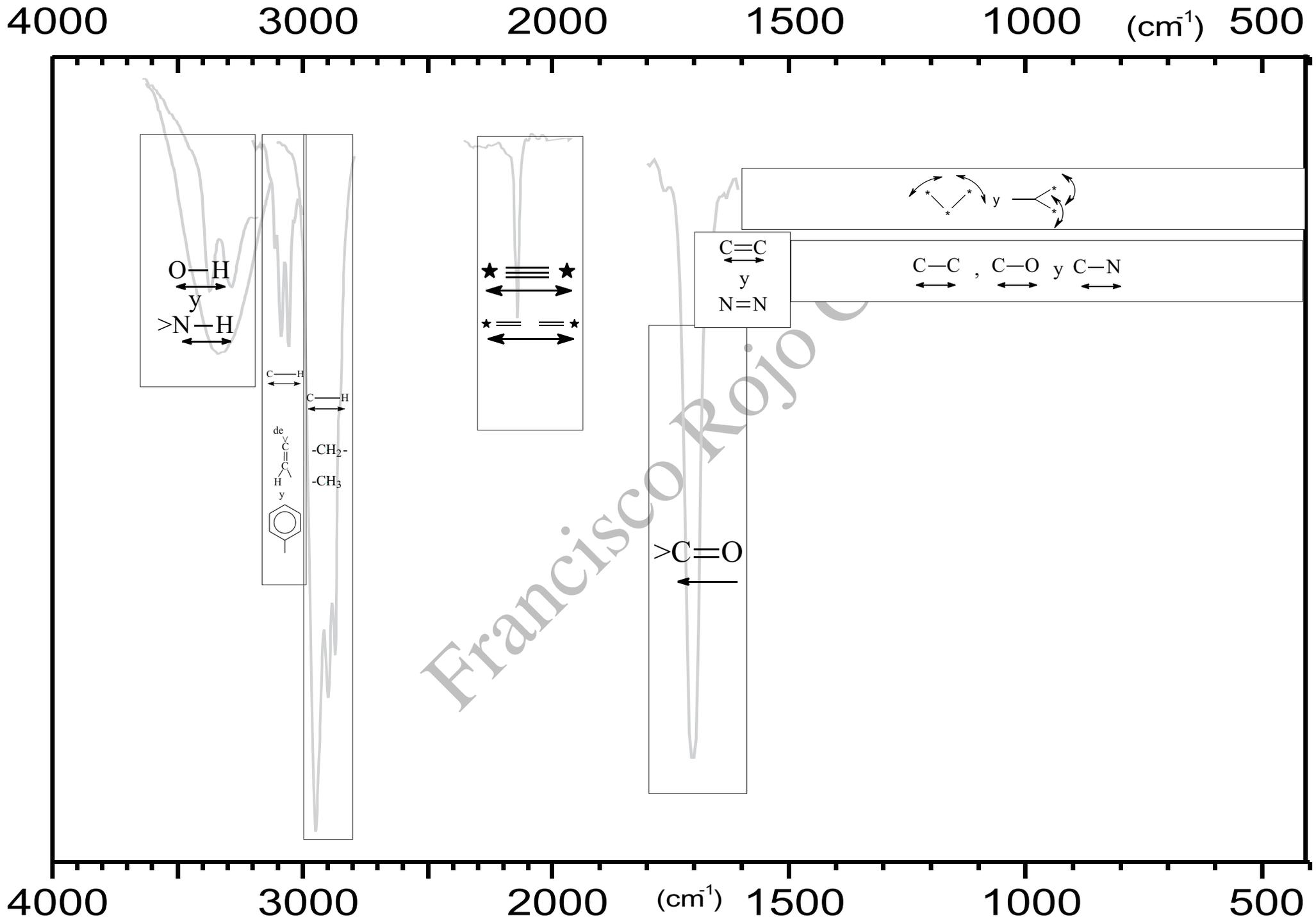


Figura IR-2 Algoritmo general de interpretación de espectros de IR

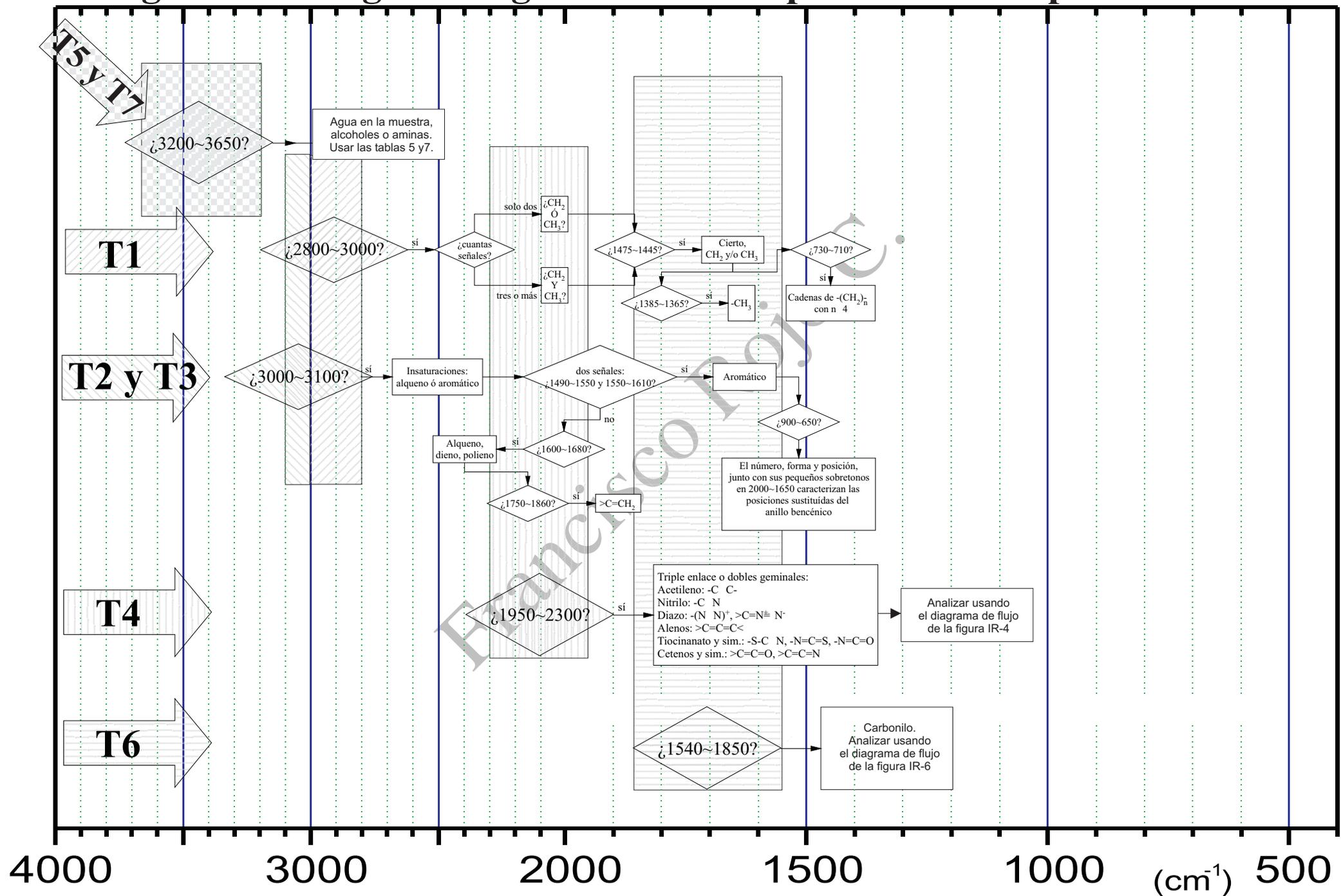


TABLA IR-I ALCANOS

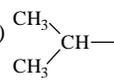
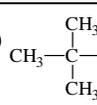
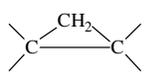
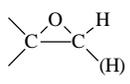
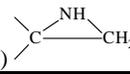
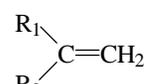
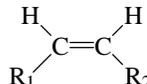
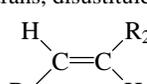
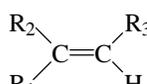
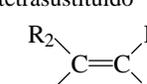
Grupo	Nº de onda (cm ⁻¹)	Intensidad (mol ⁻¹ ·l·cm ⁻¹)	Origen	Notas
(1) -CH ₃	2970~2950	ch 70	v _{as} -CH ₃	2830~2815 (ε 35~75) en -OMe, ausente en -OEt. 2730~2820 (ε 15~21) en -NMe, ausente en -NEt. 2820~2710 en metilendioxi.
	2880~2860	m 30	v _s -CH ₃	
	1470~1450	m < 15	δ _{as} -CH ₃	Doblete en gem-dimetilos (ver (5)-(7)). Junto a carbonilos ver (11)-(13).
	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 -	
(3) 	2890 1340	débil débil	v CH δ CH	sin uso práctico sin uso práctico
(4) -(CH ₂) ₄ -O-	742~734		rocking de -CH ₂ -	corresponde a la banda en 720 de (2).
(5) 	1170	ch, mas débil que el doblete de 1380 (ε≈15).	esqueleto	Un doblete en 1380 sugiere grupos gem-dimetilo; la confirmación se realiza por la vibración del esqueleto (5)-(7).
	1145	ch "	"	Hombro en 1145 de la de 1170.
(6) 	1255	ch "	"	Posición mas estable que la de la banda en 1210.
	1210	ch "	"	También absorbe en 930~725.
(7) C cuaternario 	1195	ch "	"	De estas dos la de 1195 es mas estable, la señal en 1215 es un hombro de la primera.
	1215	ch "	"	
(8) 	3050	m	v _{as} CH ₂	Ausente en anillos sin -CH ₂ -
	1020~1005	m 20~80	esqueleto	Normalmente obstruido por señales fuertes de otro tipo.
(9) ver tabla XI 	3000	20~60	v CH metino	Se desplaza hasta 3040~3030 al incrementar la tensión del grupo epoxi, p. ej. unido a ciclopentanos.
	3050	30	v _{as} CH ₂ metileno	
10) 	3050		v _{as} CH ₂	
(11) O-CO-CH ₃	1380~1365	Caracterizado por su alta intensidad. Al acetilar la banda en 1380 se vuelve mas intensa que la de 1460. Lo mismo ocurre con acetatos de enol y fenol. Ocasionalmente se vuelve doblete.		
(12) -CO-CH ₃	1360~1355	Se desplaza a frecuencias menores que la flexión usual de CH ₃ (1380). Señal aguda e intensa. La flexión asimétrica permanece en su posición usual (1460), pero se desplaza en los terpenos (1420~1425).		
(13) -COOCH ₃	1440~1435	δ _{as} -CH ₃ . También con bandas en 1135, 1155, 790~760.		
	1365~1356			
(14) -CH ₂ -CO-	1440~1400	La flexión de todos los metilenos activos se observa como una serie de bandas intensas y agudas entre las bandas comunes de 1465 a 1380. Lo mismo ocurre con -CH ₂ -SO ₂ - y otros. La integración de la intensidad pudiera proporcionar el número de metilenos activos.		
(15) -CH ₂ -C=C -CH ₂ -C≡C-	1445~1425	No es muy intensa. Los dobles enlaces pudieran ser de aromáticos. La intensidad disminuye aún mas si el -CH ₂ - está entre dos enlaces múltiples (dobles o triples).		
(16) -CH ₂ -N ⁺	1440~1400	El -CH ₂ - adyacente al N ⁺ también se desplaza como los dos anteriores. Si aparecen nuevas bandas al convertir la amina en sal, entonces se sabe que hay grupos -CH ₂ -N-.		

TABLA IR-II ALQUENOS

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

A)	$=CH_2$	3080, m(30) 3000~2975, m	$\nu_{as} CH_2$ $\nu_s CH_2$	Las bandas por encima de 3000 sugieren la presencia de insaturados $=CH-$ (alquenos, aromáticos). La banda de 3000-2975 se traslapa con los alcanos.
B)		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 	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, disustituído 	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, disustituído 	1680~1660 ancho (2)			965, ch (100). Flexión asimétrica de los H.
G) trisustituído 	1680~1660 ancho~m			840~800, ch (40). Los cíclicos dan dos señales entre 850~790.
H) tetrasustituído 	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)).

3. Dobles enlaces conjugados

Grupo	$\nu C=C$	$\delta C-H$ (fuera del plano)
I) Dieno	1650 y 1600	La conjugación influye poco. En ocasiones la banda trans de 965 sube a 990. La banda cis aparece en 720, a veces como un grupo.
J) Trieno	1650 y 1600; en ocasiones solo una banda y en otras la de 1600 aparece como un hombro de 1650.	
K) Polieno	Banda ancha en 1650~1580	

TABLA IR-III AROMÁTICOS

Posición	Intensidad ϵ	Origen	Notas
1) 3100~3000	Menos de 60	Estiram C-H y combinaciones	En algunos aromáticos la banda principal está debajo de 3000 cm^{-1}
2) 2000~1660 , varias bandas, ver figura IR-1	Baja, ~ 5	Sobretono de las flexiones fuera del campo C-H y combinaciones	Grupo de 2 a 6 bandas pequeñas, característico del patrón de sustitución, comparar con fig. IR-3, si necesita ampliar concentre la muestra. Los carbonilos ocultan estas señales.
3) 1600~1580 1500~1490	Variable, menos de 100. La señal de 1600 en ocasiones es mas intensa que la correspondiente (1680-1620) de alquenos	Nucleo bencénico	Usualmente 1500 es mas intensa que 1600. Conjugado con dienos da otra señal en 1580. Los sistemas condensados absorben en 1650-1600 y dos bandas en 1525-1450.

Flexiones fuera del plano (debajo de 900 cm^{-1})

Bandas muy intensas, $\epsilon \approx 100$ a 500. El número, forma e intensidad relativa depende de los hidrógenos libres, como lo muestra la fig. IR-3. Para piridinas y similares se usa la misma tabla, el heteroátomo se considera entonces un sustituyente.

Flexiones en el plano ($1225\sim 950\text{ cm}^{-1}$)

Estas señales son solo complementarias, pues los estiramientos C-C, C-N y C-O caen en la misma región. Aparecen varias señales en función del número de hidrógenos. Señales débiles, pero agudas, que pueden aumentar significativamente en presencia de grupos polares.

Sustituyentes en:	
1-	1175~1125, 1110~1070, 1070~1000
1:2-	1225~1175, 1070~1000 (doblete), 1000~960
1:3-	1175~1125, 1110~1070, 1070~1000
1:4-	1225~1175, 1070~1000 (doblete)
1:2:3-	1175~1125, 1110~1070, 1070~1000, 1000~960
1:2:4-	1225~1175, 1175~1125, 1070~1000 (doblete), 1000~960
1:3:5-	1175~1125, 1070~1000

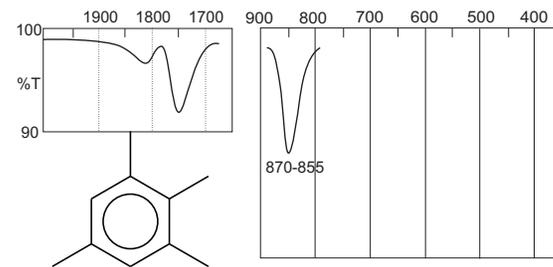
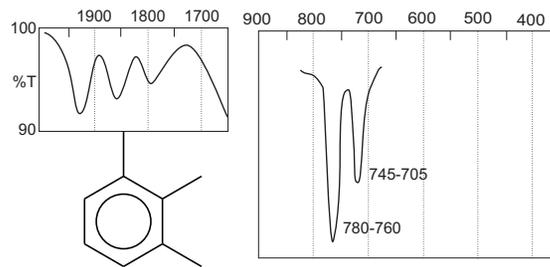
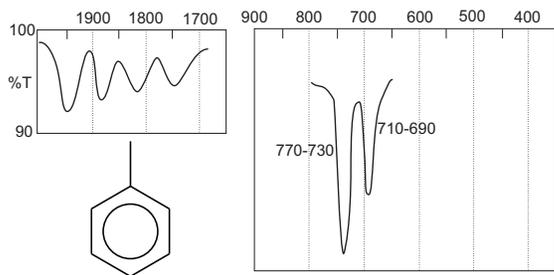


Figura IR-5 Señales Características de Sustituciones en Aromáticos

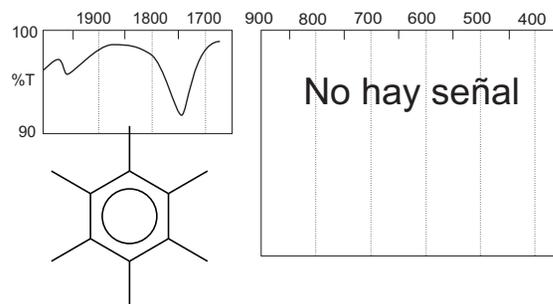
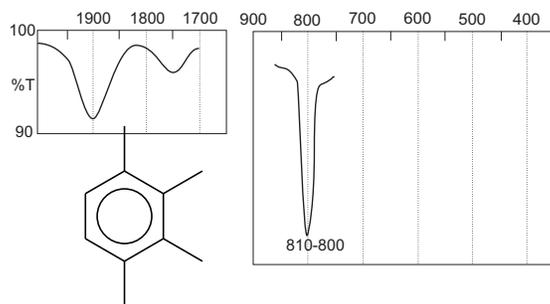
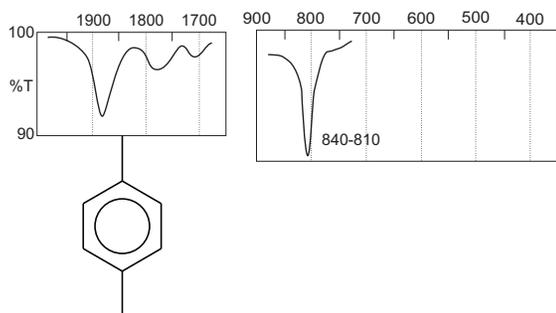
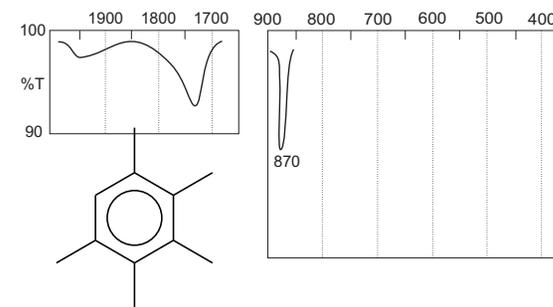
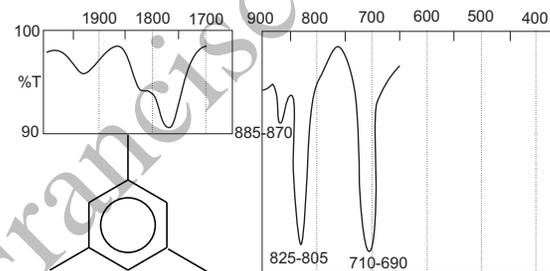
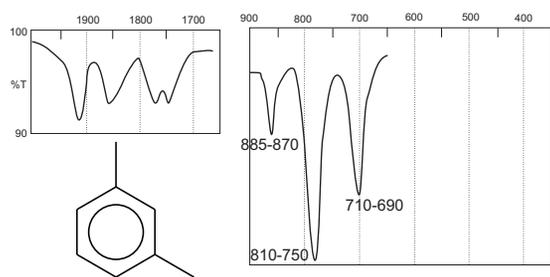
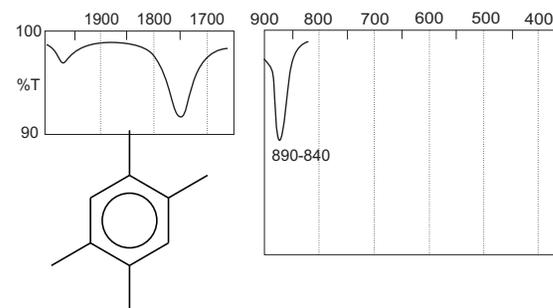
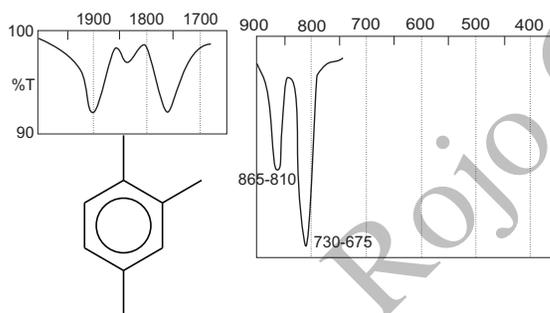
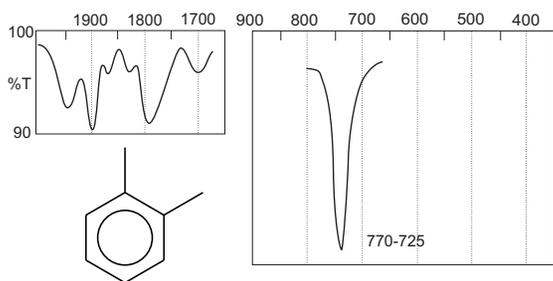
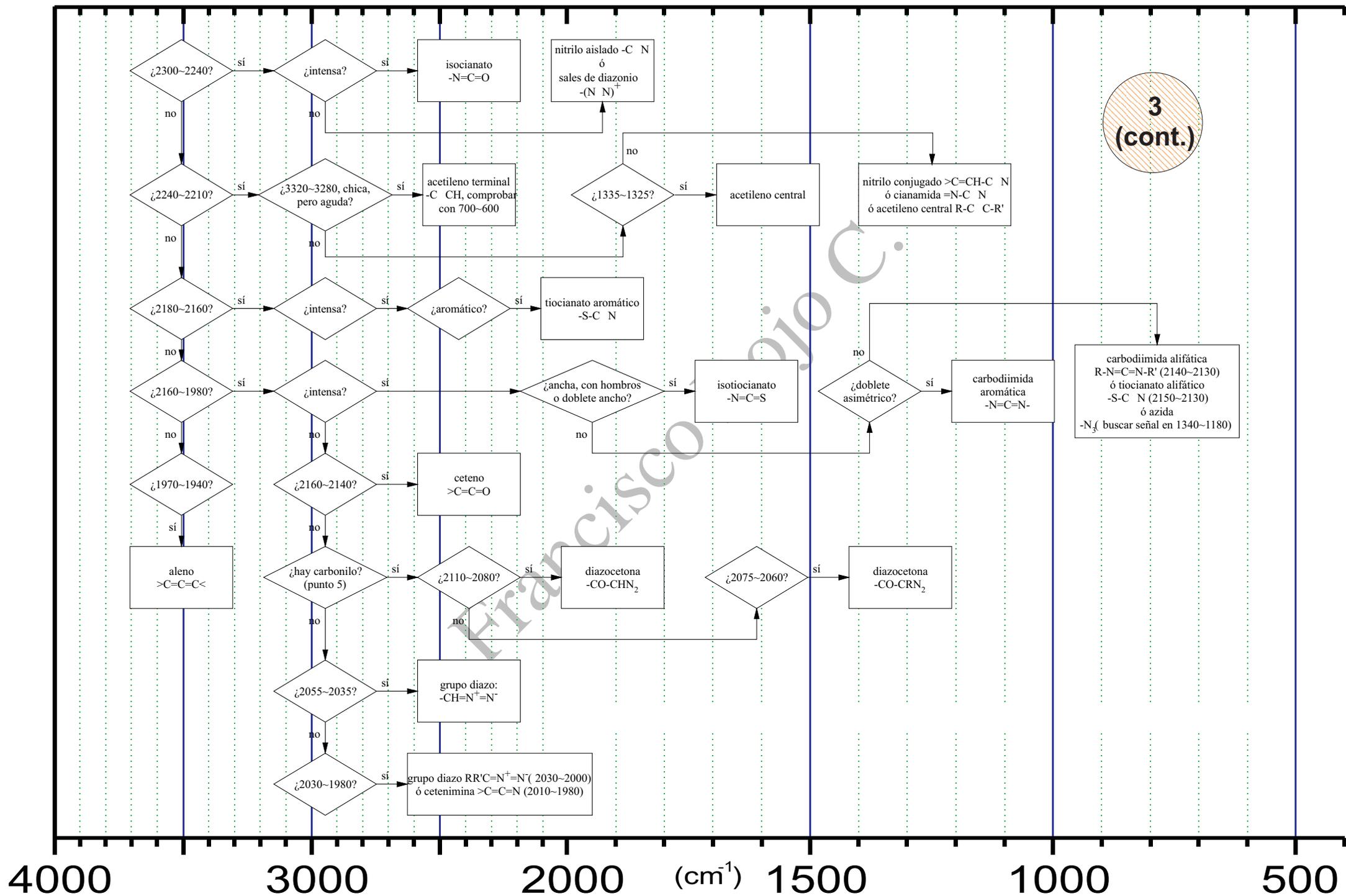


TABLA IR-IV: ENLACES $X\equiv Y$, $X=Y=Z$.

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
Diazo $-CH=N^+=N^-$ $>C=N^+=N^-$	2050~2035		
	2030~2000		
Diazocetonas $-CO-CHN_2$	2100~2090		En aromáticos el estiram. del carbonilo se desplaza a 1645, en alifáticos a 1630~1605
$-CO-CRN_2$	2070~2060		
Alenos $>C=C=C<$	1950		Se divide si el aleno es terminal y tiene grupos electroatrayentes (e.g. ácidos, cetonas).
	850 (solo si el aleno es terminal, flexión C-H)		850 mas intensa que 1950, sobretono en 1700.
Isocianato $-N=C=O$	2275~2250	1300~2000	Muy intensa, no le afecta conjugación
Carbodiimida, $-N=C=N-$	Alifática: 2140~2130	1340~1580	Mas intensa que carbonilo.
	Aromática: 2145 2115	1380~1680	Los aromáticos dan este doblete asimétrico.
		400~1560	
Azida, $-N_3$	2160~2095	intensa	Estiram. asim., en aromáticos se divide
	1340~1180	débil	Estiram. sim.
Tiocianato, $-S-C\equiv N$	Alifático 2140 Aromático 2175~2160	Mas intensas	
Isotiocianato, $-N=C=S$	Alifático 2140~1990 y 1090	que isocianatos	2100 un poco ancha, dividida o con hombros.
	Aromático 2130~2040, 1250 y 930		
Ceteno, $>C=C=O$	~2150		
Cetenimina, $>C=C=N$	~2000		
Bióxido de carbono, $O=C=O$, CO_2	2349.3 720.5 667.3	intensa	Estiram. antisim., estruct. Fina Las tres son señales finas, usadas en la calibración del equipo.

Fig. IR-4 Algoritmo para la interpretación de señales en la zona 2300-1950 cm^{-1}



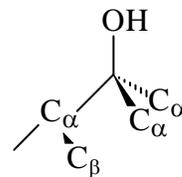
3
(cont.)

TABLA IR-V: ALCOHOLES Y FENOLES.

Tabla 5.a: Vibraciones de estiramiento del enlace O-H:

Estado del alcohol	Posición, cm^{-1}	Coefficiente ϵ	Forma	Notas
1) Libre, sin asociar:	3640-3610	30-100	Agudo	Medido en fase vapor o en disolventes no polares, pero si estos están húmedos, también aparece la señal del agua en 3710.
Primario, $-\text{CH}_2-\text{OH}$	3640	70		
Secundario, $\begin{array}{c} \text{R} \\ \diagdown \\ \text{C}-\text{OH} \\ \diagup \\ \text{R}' \end{array}$	3630	60-50		
Terciario, $\begin{array}{c} \text{R} \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{R}'' \end{array}-\text{OH}$	3620	45		
Fenoles, $\phi-\text{OH}$	3610			
2) Hidroperóxido: $-\text{O}-\text{O}-\text{H}$	3560-3530			
Puentes de hidrógeno:				
3) Dímero $\begin{array}{c} \text{R}-\text{OH} \cdots \text{O}-\text{R} \\ \\ \text{H} \end{array}$	3600~3500		Agudo	No se observa normalmente, por ocultarlo la banda polimérica. También aquí aparecen otros puentes de hidrógeno con éteres, cetonas y aminas
4) Polimérico $\begin{array}{c} \text{R}-\text{O} \quad \text{O}-\text{R} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \\ \text{R}-\text{OH} \cdots \text{O}-\text{R} \\ \quad \\ \text{R}-\text{OH} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{R}-\text{OH} \quad \text{R}-\text{OH} \end{array}$	3400~3200	Grande	Ancho	También aquí aparecen las aminas (3500~3200) y la pequeña señal de sobretono del carbonilo. En muestras húmedas aparece la señal de estiramiento H-O-H (3600~3100), en cuyo caso también se observa la flexión en 1640~1615.
Puentes intramoleculares:				
5) Alcoholes polivalentes	3600~3500	50-100	Agudo	
6) puentes π	3600-3500			
7) Puente intramolec. con carbonilos, nitro, etc.	3200~2500		Ancho	Generalmente se pierde bajo la señal de los estiramientos C-H

Tabla 5.b: Vibraciones de estiramiento del enlace C-OH:



Tipo de alcohol	Posición, cm^{-1}	Desplazamientos, cm^{-1}	Notas
Primario	1050 (1075~1025)	Ramificación en α : -15	Las insaturaciones pueden ser alquenos o aromáticos. Sobre β y mas lejos no influyen en la posición. Si tanto en α como en α' y α'' hay ramificaciones, descuenten otros 15 cm^{-1} .
Secundario	1100 (1150~1100)	Insaturación en α : -30	
Terciario	1125 (1200~1100)	Anillo en $\alpha-\alpha'$: -50	
Fenoles	1200 (1250~1150)	Insaturación en α y anillo $\alpha-\alpha'$: -90 Dieno conjugado en α : -140	

Tabla 5.c: Vibraciones de torsión del enlace C-OH:

Posición (cm^{-1})	Forma	Notas
660 ± 50	Ancha	No es muy útil

TABLA IR-VI: GRUPO CARBONILO.
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS, ÉSTERES, ANHIDRIDOS, ALDEHÍDOS Y CETONAS

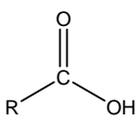
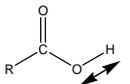
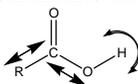
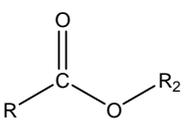
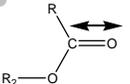
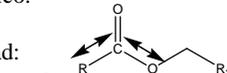
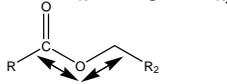
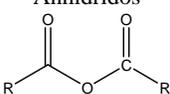
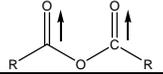
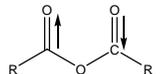
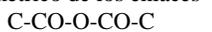
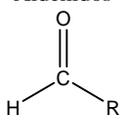
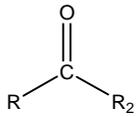
GRUPO	Frecuencia (cm^{-1})	NOTAS	ORIGEN
<p>Ácidos carboxílicos</p> 	1725-1700	Señal intensa, característica del grupo carbonilo	Estiramiento del carbonilo 
	3000-2200	Señal ancha por puentes de hidrógeno, con patrón de sobretonos de la torsión entre 2800-2200.	Estiramiento del OH 
	1420-1200	Dos señales, una ancha en 1320-1200, otra más débil en 1440-1390	Torsión/estiramiento del carboxilo 
	960-875	Ancha, mediana	Torsión fuera del plano del dímero del carboxilo
<p>Ésteres</p> 	1750-1715	Señal intensa, característica del grupo carbonilo	Estiramiento del carbonilo 
	1300-1050	Dos bandas, una de mayor intensidad: Formiato 1214-1180 Acetato 1260-1230 Alquil ester 1220-1160	Estiramientos simétrico y asimétrico. Mayor ν e intensidad:  menor ν : 
<p>Anhidridos</p> 	1850-1770	<p>Doble banda de carbonilo Normalmente el simétrico (mayor ν) es mas intenso que el antisimétrico, excepto en anhidridos cíclicos</p>	Estiramiento simétrico de los carbonilos: 
	1790-1760		Estiramiento antisimétrico de los carbonilos: 
	1310-1020	Uno o dos bandas intensas.	Estiramientos simétrico y asimétrico de los enlaces C-CO-O-CO-C 
<p>Aldehídos</p> 	1740-1645	Señal intensa, característica del grupo carbonilo	Estiramiento del carbonilo 
	2900-2800 y 2775-2695	Dos señales, la primera puede estar muy cerca de metilos y metilenos	Resonancia de Fermi
	1410-1380		Torsión de los C-H
<p>Cetonas</p> 	1765-1540	Señal intensa, característica del grupo carbonilo	Estiramiento del carbonilo 
	1100 y 1300	Señales pequeñas en alifáticos, más intensas y finas en aromáticos	Torsión del carbonilo

Fig. IR-6 Algoritmo para la interpretación de señales en 1850-1540 cm^{-1}

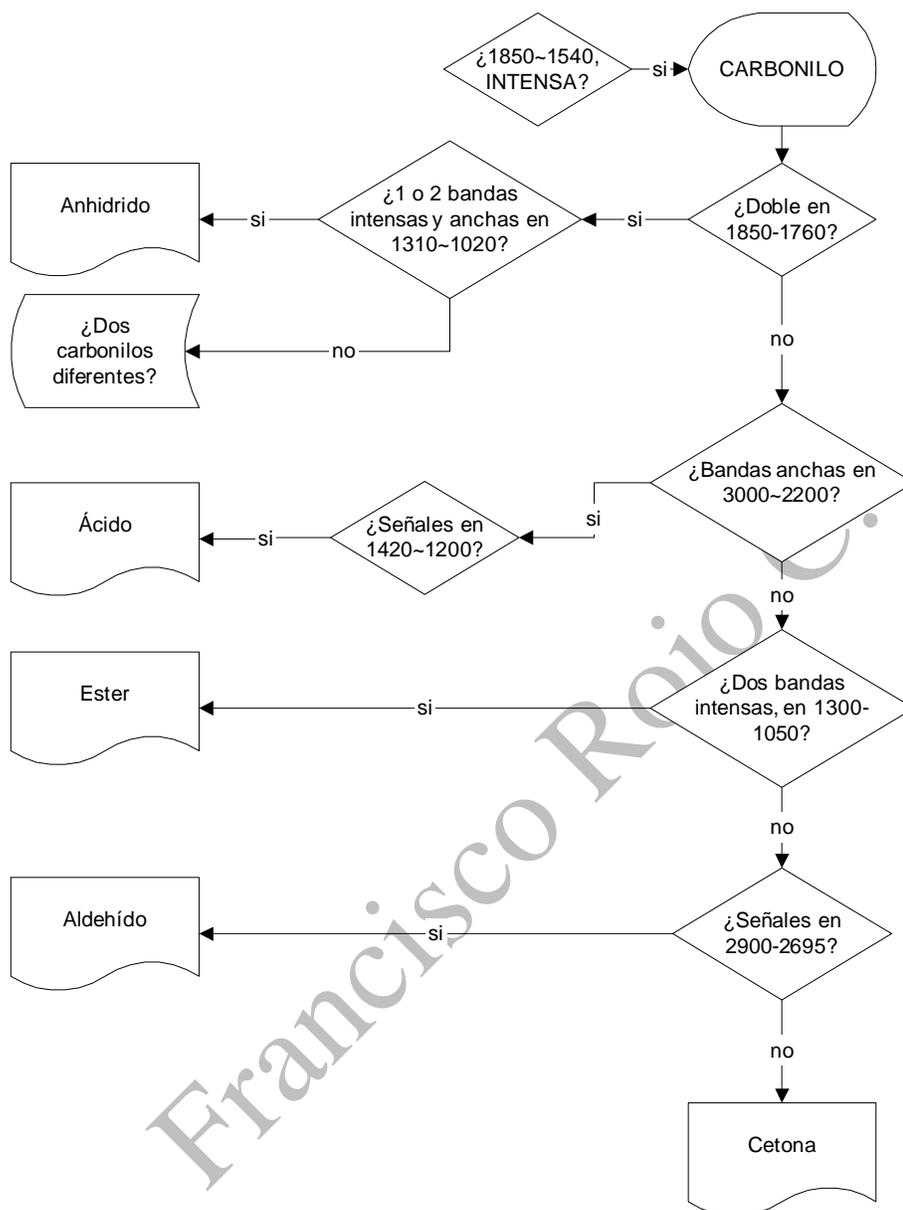


TABLA IR-VII: AMINAS Y SALES DE AMONIO.

Tabla 7.a: Vibraciones de estiramiento del enlace N-H:

Tipo de amina	Posición, cm^{-1}	Coefficiente ϵ	Notas
Libre:			
1) Primaria:			
R-NH ₂ y ϕ -NH ₂	~3500 (estiram. asim.) ~3400 (estiram. sim.)	Ancha en primarias $\epsilon \sim 30$ en ϕ -NH ₂	La presencia de estas dos señales es característica de aminas prim.
2) Secundaria:			
R-NH-R'	3350~3310	ancha	Muy pequeña en N-heterociclos como la piperidina
ϕ -NH-R y ϕ -NH- ϕ'	3450	$\epsilon \sim 30$ a 40	
Pirroles, indoles, etc. 	3490	$\epsilon \sim 150$ a 300	Característicos, ver tabla 10-2
>C=NH	3400~3300		También estiramiento C=N en 1690~1640 cm^{-1} .
Asociada: El desplazamiento desde la posición libre es inferior a 100 cm^{-1} , aunque puede llegar hasta 3100 cm^{-1} . En general son mas pequeñas, agudas y menos sensibles a los cambios en concentración que las bandas de alcoholes R-OH.			

Tabla 7.b: Vibraciones de flexión del enlace N-H:

Tipo	Posición, cm^{-1}	Intensidad	Notas
Primarias, -NH ₂	1640~1560	Chica a mediana	Flexión de tijera, tanto en aminas alifáticas como aromáticas.
	} 900~650	Mediana, ancha	Muy característica, corresponde a la torsión, presente solo en aminas 1 ^{as} y 2 ^{as} , no en 3 ^{as} .
Secundarias, -NH-		1580~1490	ancha

Tabla 7.c: Vibraciones de estiramiento del enlace C-N:

Si bien la posición es casi igual al estiramiento C-C, la intensidad es mucho mayor, debido a al polaridad del enlace C-N.

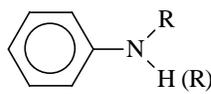
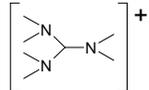
Tipo de enlace C-N	Posición (cm^{-1})	Intensidad	Notas
$\text{R}-\text{N} \begin{matrix} \text{R(H)} \\ \text{R(H)} \end{matrix}$	1230~1030	mediana	Dos señales en terciarias, en aminas cíclicas la posición esta a menor número de onda.
	1360~1250	Chica	Estiramiento ϕ -N. Se desplaza por el incremento en el carácter del doble enlace.
	1280~1180	mediana	Estiramiento del enlace C _{alifático} -N

Tabla 7.d: Sales de aminas iónicas:

Grupo	Posición (cm ⁻¹)	Forma y tamaño	Notas
NH ₄ ⁺	3300~3030	Ancho y chico	
Amina primaria, R-NH ₃ ⁺	~3000	Ancho	Los estiram. asim. y sim. de N-H se traslapan sobre la banda C-H, se le llama banda de amonio.
	~2500	Varias, medianas	Tonos combinados y sobretonos, no siempre aparecen.
	~2000	mediana	Tonos combinados y sobretonos, no siempre aparecen.
Amina Secundaria, >NH ₂ ⁺			
Amina Terciaria, NH ⁺			
Ión Amonio cuaternario >N ⁺ <			
Aminas insaturadas, (aromáticas): $\text{C}=\overset{\text{H}}{\text{N}^+}$			
 <p>Guanidinio: Estiram. C-N de las guanidinas libres en clorhidratos: Mono-sustituídas Di-sustituídas Tri-sustituídas</p>			