

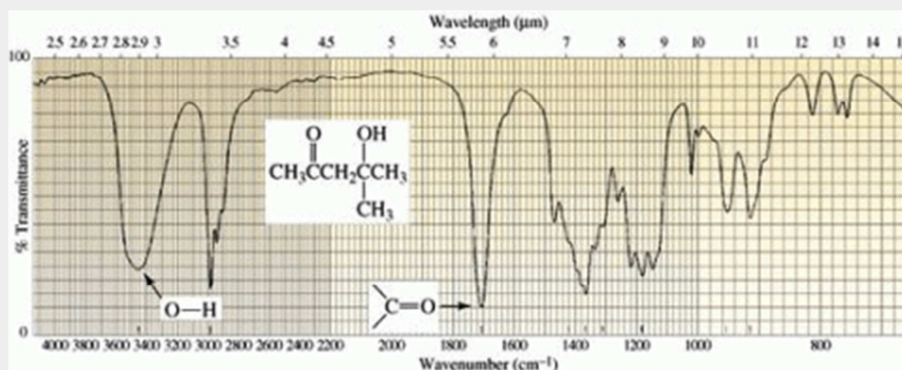
Elucidación estructural: espectroscopía de infrarrojo

Utiliza la radiación del espectro electromagnético cuya longitud de onda (λ) está comprendida entre los 800 y los 400000 nm (0.8 y 400 μ $1 \mu = 10^{-4}$ cm) y su efecto sobre la materia orgánica, como se indicó con anterioridad, es producir deformaciones de los enlaces de la sustancia. Debido a su gran amplitud se suele dividir en tres zonas:

10000 cm^{-1}	4000 cm^{-1}	666 cm^{-1}	400 cm^{-1}	250 cm^{-1}
IR proximo 0.75-2.7 μ	IR medio 2.5-16 μ		IR lejano 25 -400 μ	
0.75 μ	2.5 μ	16 μ	25 μ	400 μ

Siendo el IR medio el normalmente utilizado experimentalmente en determinación estructural (2.5 - 16 μ). Debido a consideraciones de tipo histórico la unidad más usada en la espectroscopia infrarroja no es la longitud de onda (λ) sino el número de onda (ν , $\nu = 1/\lambda \text{ cm}^{-1}$), correspondiendo el IR medio a la zona comprendida entre 4000 y 625 cm^{-1} .

El aspecto típico de un espectro IR es el que se muestra en la figura:



Cada absorción observable en el espectro corresponde a una vibración determinada de algún enlace dentro de la molécula.

MODOS DE VIBRACIÓN DE LOS ENLACES

Hay diferentes modos normales de vibración en las moléculas, llevan asociado un movimiento característico de los átomos, los principales son: las deformaciones de enlace, ángulos de valencia, ángulos diedros, deformaciones fuera del plano, etc.

Deformación de enlace



Por ejemplo, [sigue este enlace](#) para ver los modos normales de vibración del formaldehído. Cada uno de estos tipos de vibración tiene asociada una frecuencia característica, que puede ser calculada mediante la ecuación de Hooke para el movimiento vibratorio:

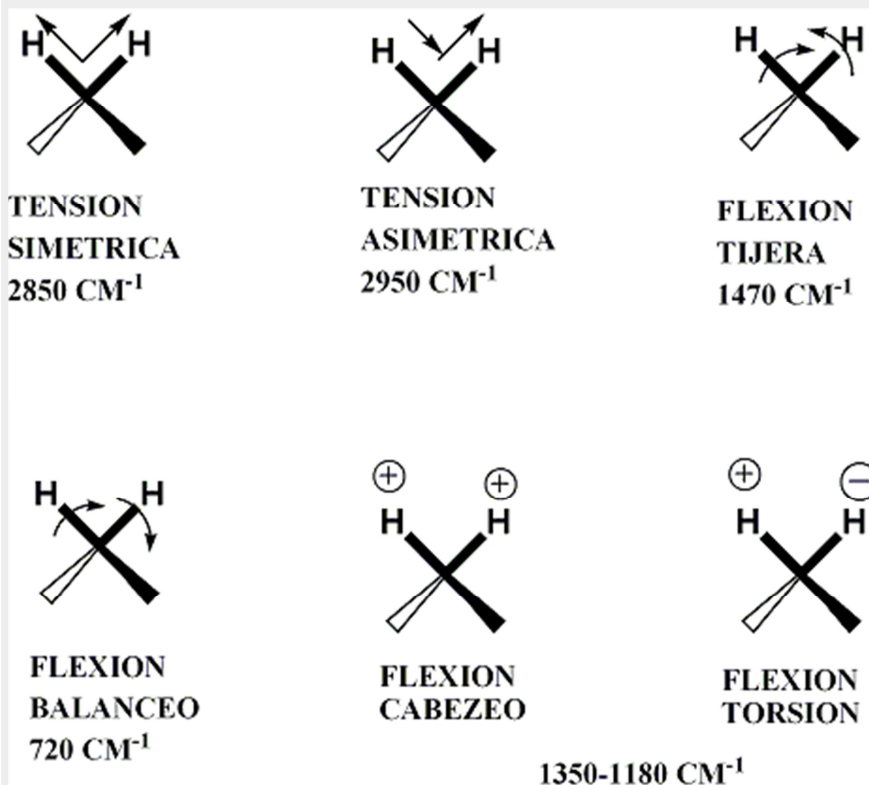
$$u = (1/2\pi) \cdot \sqrt{k/m_A} \quad (\text{ec. 1})$$

$$u = (1/2\pi) \cdot \sqrt{k/u} \quad (\text{ec. 2})$$

donde k es la constante de fuerza del enlace y u es la masa reducida del sistema. Según sea la relación entre las masas de los átomos que intervienen en el enlace, así usaremos la ecuación (1) cuando $m_A \ll m_B$ o la (2) cuando ambas masas sean equiparables.

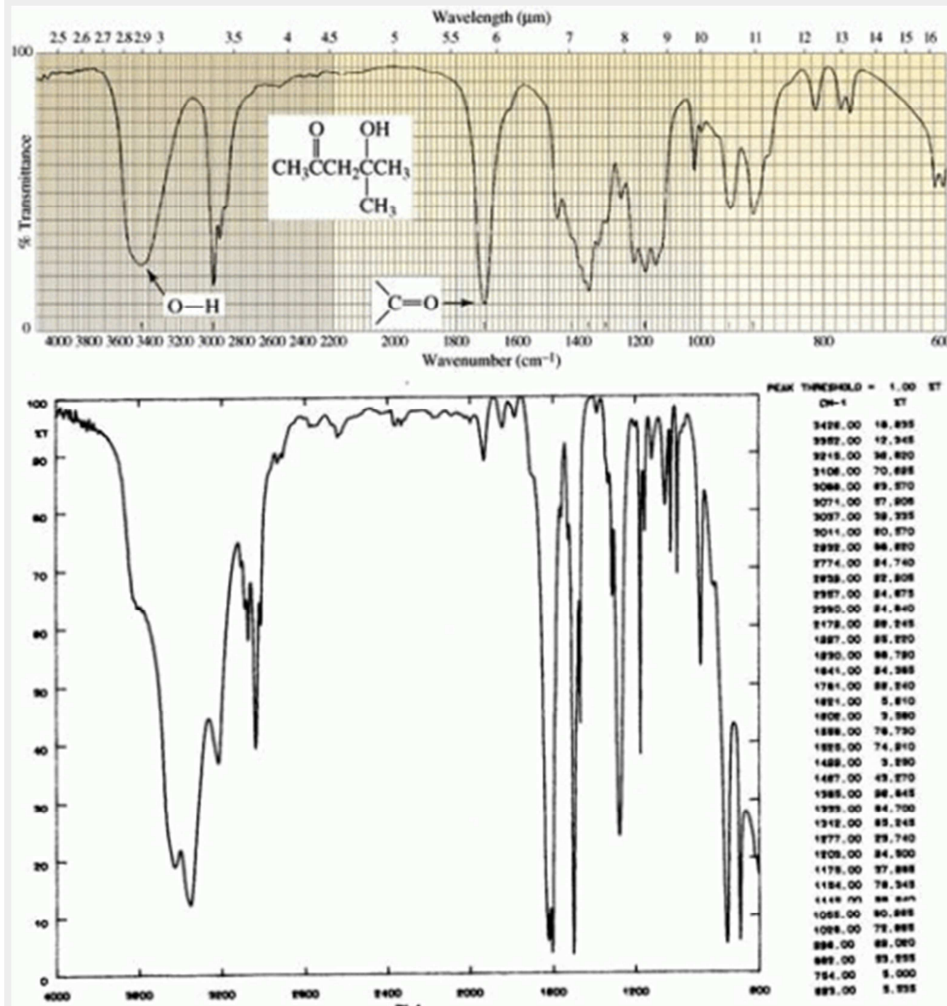
En una molécula con n átomos deben aparecer $3n-6$ bandas de tensión y flexión ($3n-5$ cuando la molécula es lineal); de todas ellas solo darán una banda observable en el IR aquellas vibraciones que produzcan un cambio en el momento bipolar (las vibraciones simétricas no aparecen en el IR, pero se podrían observar en la espectroscopia Raman).

Por ejemplo, los modos de vibración del grupo metileno serán:



A la hora de identificar los grupos funcionales con la espectroscopia IR vamos a considerar el espectro de IR dividido en varias zonas tal y como se muestra

en las siguientes figuras:



De 4000 a 2900 cm^{-1} : Tensión de C-H, O-H y N-H

De 2500 a 2000 cm^{-1} : Tensión de triples enlaces y dobles enlaces acumulados.

De 2000 a 1500 cm^{-1} : Tensión de C=O, C=N y C=C.

De 1500 a 600 cm^{-1} : Zona de la huella dactilar (Flexión de enlaces CH,CO,CN,CC, etc..)

De acuerdo con dicha división se podrán identificar diversos grupos funcionales, tal y como se indica en la siguiente Tabla:

GRUPO FUNCIONAL	NUMERO DE ONDA (cm^{-1})	GRUPO FUNCIONAL	NUMERO DE ONDA (cm^{-1})
OH (enlace de hidrógeno)	3100-3200	-C \equiv C-	2300-2100
OH (sin enlace de hidrógeno)	3600	-C \equiv N	~ 2250

Cetonas	1725-1700	-N=C=O	~ 2270
Aldehídos	1740-1720	-N=C=S	~ 2150
Aldehídos y cetonas α,β -insaturados	1715-1660	C=C=C	~ 1950
Ciclopentanonas	1750-1740	NH	3500-3300
Ciclobutanonas	1780-1760	C=N-	1690-1480
Ácidos carboxílicos	1725-1700	NO ₂	1650-1500 1400-1250
Esteres	1750-1735	S=O	1070-1010
Esteres α,β -insaturados	1750-1715	sulfonas	1350-1300 1150-1100
δ -Lactonas	1750-1735	Sulfonamidas y sulfonatos	1370-1300 1180-1140
γ -lactonas	1780-1760	C-F	1400-1000
Amidas	1690-1630	C-Cl	780-580
-COCl	1815-1785	C-Br	800-560
Anhidridos	1850-1740 ⁽²⁾	C-I	600-500

Como podemos observar la mayor parte de los grupos funcionales más frecuentes en Química Orgánica presentan una absorción característica en el espectro IR. Valgan como ejemplos los que se muestran a continuación:

