

APÉNDICES

El Sistema SI de Unidades

El sistema Internacional de Unidades (SI) ha sido adoptado por la Conferencia General de Pesos y Medidas y confirmado por la Organización Internacional para estandarización (OIE) (ISO) y la Comisión Internacional Electrónica (OIE)(IEC).

El sistema SI se basa en las siguientes 7 unidades primarias

Magnitud	Unidad	Símbolo
Longitud	metro	m
Masa	kilogramo	kg
Tiempo	segundo	s
Corriente eléctrica	ampere	A
Temperatura termodinámica	kelvin	K
Cantidad de sustancia	mol	mol
Intensidad luminosa	candela	cd

Los múltiplos y submúltiplos decimales de las unidades del SI

se forman con los siguientes prefijos

Factor	Prefijo	Símbolo	Factor	Prefijo	Símbolo
10^{24}	yotta	Y	10^{-1}	deci	d
10^{21}	zetta	Z	10^{-2}	centi	c
10^{18}	exa	E	10^{-3}	mili	m
10^{15}	peta	P	10^{-6}	micro	μ
10^{12}	tera	T	10^{-9}	nano	n
10^9	giga	G	10^{-12}	pico	p
10^6	mega	M	10^{-15}	femto	f
10^3	kilo	k	10^{-18}	ato	a
10^2	hecto	h	10^{-21}	zepto	z
10^1	deca	da	10^{-24}	yocto	y

Unidades derivadas del sistema CGS (con nombre especial)

Nombre	Símbolo	Valor en unidades SI
erg	erg	1 erg= 10^{-7} J (joule)
dyne	dyn	1 dyn= 10^{-5} N (newton)
poise	P	1 P=1 dyn·s/cm ² =0,1 Pa·s (pascal.segundo)
stokes	St	1 St=1 cm ² /s= 10^{-4} m ² /s
gauss	G	1 G corresponde a 10^{-4} T (tesla)
oersted	Oe	1 Oe corresponde a $(1\ 000/4\pi)$ A/m
maxwell	Mx	1 Mx corresponde a 10^{-8} Wb (weber)
stilb	sb	1 sb =1 cd/cm ² = 10^4 cd/m ² (candela/m ²)
phot	ph	1 ph= 10^4 lx (lux)
gal	Gal	1 Gal=1 cm/s ² = 10^{-2} m/s ²

Es preferible evitar emplearlas y usar el valor en unidades SI.

Reglas generales para la escritura de las unidades del SI

Reglas Generales para la escritura de las unidades del SI

1. El símbolo de las unidades debe escribirse con minúsculas en caracteres romanos rectos . No en caracteres oblicuos ni con letras cursivas. El símbolo de las unidades debe escribirse con minúscula a excepción hecha de las que se derivan de nombres propios, no utilizar abreviaturas. Ejemplos: newton, N; watt, W.

2. Para escribir una magnitud se debe dejar un espacio entre el valor numérico y el símbolo de la unidad; ejemplo, 3 metros, aceptado 3 m , no aceptado 3m. Excepto para el uso de los símbolos del grado, minuto y segundo.
3. No se deben colocar puntos después de la unidad, a menos que se termine un párrafo.
4. Los símbolos de las unidades no deben pluralizarse.
5. El signo de multiplicación para indicar el producto de dos o más unidades debe ser de preferencia un punto. Este punto puede suprimirse cuando, a la falta de separación de los símbolos de las unidades que intervengan en el producto no se presten a confusión.
6. Cuando una unidad derivada se forma por el cociente de dos unidades, se puede utilizar una línea inclinada, una horizontal, o bien potencias negativas.
7. No deben utilizarse dos o más líneas inclinadas a menos que se agreguen paréntesis
8. Los símbolos de los prefijos deben ponerse en caracteres romanos (rectos). Sin el espacio entre el símbolo del prefijo y el símbolo de la unidad.
9. Los símbolos de concentración se escriben en mayúscula en caracteres romanos cursivos, ejemplo: normalidad, *N*; molaridad, *M*; Formalidad, *F*; excepto molalidad, *m*.
10. Los prefijos compuestos deben evitarse.
11. Cuando se escriba la unidad por su nombre, siempre se utilizan minúsculas, ejemplos: newton, watt, ampere. Excepto grado Celsius, que es el único que se escribe con mayúscula.

Reglas para la escritura de los números y signo decimal.

Números

Los números deberán ser generalmente impresos en tipo romano (letra de molde).

Para facilitar la lectura de números con varios dígitos, éstos deben ser separados en grupos apropiados preferentemente de tres, contando el signo decimal a la derecha y a la izquierda, los grupos deben ser separados por un pequeño espacio, nunca una coma, un punto o por otro medio. Ejemplo; tres mil, aceptado 3 000, no aceptado 3,000; dos diezmilésimos, aceptado, 0,000 2; no aceptado, 0,0002.

Signo decimal

El signo debe ser una coma sobre la línea (.), si la magnitud de un número es menor que la unidad, el signo decimal debe ser precedido por un cero.

Razones por las cuáles se escogió la coma como indicador decimal (recomendación ISO).

- . Se distinguen y se identifican más fácilmente que el punto.
- . El punto puede ser accidental o producto de un descuido.
- . El punto facilita el fraude, puede transformarse en coma, pero no lo contrario.
- . En notación científica, el punto es usado como signo de multiplicación; esto puede provocar confusión, ya que se utiliza el mismo signo para diferentes propósitos.
- . La coma se usa en Europa y en la mayoría de los países sudamericanos.
- . Siempre hay que escribir una cifra antes y después del signo decimal.

Evitar confundir magnitudes con unidades mal expresadas

Se recomienda	No se recomienda
tensión eléctrica, diferencia de potencial, fuerza electromotriz, potencial eléctrico corriente eléctrica frecuencia distancia en kilómetros potencia, flujo energético volumen	voltaje amperaje ciclaje kilometraje wattaje cubicaje

Utilización de términos no adecuados o incorrectamente traducidos

Se recomienda	No se recomienda
alcance patrón, nivel, modelo, prototipo, usual, común, norma, referencia, primario, normalizado verificar, inspeccionar interruptor cuadrante, escala calibre, calibrador indicador electrónico, pantalla	rango estándar checar switch dial gauge display

Conversión de las Unidades Comunes a Equivalentes en Unidades del *Si*

Longitud	
1 pie	= 0,3048 m
1 pulg	=25,4 mm=2,54 cm
Area	
1 pie ² (pie cuadrado)	= 0,092 903 m ² =929,030 cm ²
Volumen	
1 pie ³ (pie cúbico)	= 0,028 316 8 m ³ =28,3168 dm ³
1 pulg ³ (pulgada cúbica)	=16,387 1 cm ³
Capacidad	
1 gal	= 4,546 09 dm ³ = 4,546 L
1 gal EUA	= 3,785 41 dm ³ = 3,785 L
1 pinta	= 0,568 261 dm ³ =0,568 L
1 onza fl	=28,4131 cm ³
1 barril de petróleo	=42 gal EUA = 158,97 L
Masa	
1 ton	=1 000 kg
1 quintal (cwt)	= 50,8023 kg
1 lb	= 0,453 592 kg
1 oz	= 28,3495 g
Temperatura	
$\frac{^{\circ}\text{C}}{100} = \frac{^{\circ}\text{R}}{80} = \frac{^{\circ}\text{F} - 32}{180} = \frac{\text{K} - 273,13}{100}$	
Energía	
1 cal ₁₅ (caloría medida a 15°C)	=4,1855 J

Índice de Refracción del Agua

Temperatura °C grados Celsius	Índice de refracción $n_D \lambda_{\text{prom}}=589,26 \text{ nm}$
0	1,333 95
5	1,333 88
10	1,333 69
15	1,333 39
20	1,333 00
21	1,332 90
22	1,332 80
23	1,332 71
24	1,332 61
25	1,332 50
26	1,332 40
27	1,332 29
28	1,332 17
29	1,332 06
30	1,331 94
35	1,331 31
40	1,330 61
45	1,329 85
50	1,329 04
55	1,328 17
60	1,327 25

Constantes Dieléctricas e Índices de Refracción a 25°C para algunos Líquidos Polares y No Polares.

Compuesto	n_D	n_D^2	ϵ
CS ₂	1,613	2,66	2,63
H ₂ O	1,333	1,78	80
IF ₇	1,287	1,66	1,75
IOF ₅	1,292	1,67	1,97
XeOF ₄	1,428	2,04	24,6

Mody- Thomas, Momentos Dipolares en Química Inorgánica, Ed. Alhambra, Madrid, 1974

Refracciones Atómicas y de Grupos

Grupo	Mr _D	Grupo	Mr _D
H	1,100	N (amina primaria aromática)	3,210
C	2,418	N (amina sec-aromática)	3,590
C=C	1,733	N (amina ter-aromática)	4,360
C≡C	2,398	N (Amida primaria)	2,650
(C ₆ H ₅) Fenilo	25,463	N (Amida sec)	2,270
(C ₁₀ H ₇) Naftilo	43,000	N (Amida ter)	2,710
O de C=O	2,211	N (Imidina)	3,776
O de O-H	1,525	N (Oximido)	3,901
O de C-O (éter,éster)	1,643	N (Carbimido)	4,10
F	0,950	N (hidrazona)	3,460
Polifluoruros	1,100	N (hidroxilamina)	2,48
Cl	5,967	N (hidracina)	2,47
Br	8,865	N (cianuro o nitrilo alifático) C≡N	3,05
I	13,900	N (cianuro o nitrilo aromático) C≡N	3,79
C=S (tiocarbonilo)	7,970	N(nitrilo aromático)	3,790
S de S-H (Tiol)	7,690	N (oxima alifática)	3,930
S de -S-S (Ditio)	8,110	NO (nitroso)	5,910
Anillo 3 miembros	0,710	NO ₂ (nitrato de alquilo)	7,590
Anillo 4 miembros	0,480	Nitrito de alquilo	7,440
N (amina alifática primaria)	2,322	Nitro alifático	6,720
N (amina sec-alifática)	2,499	Nitro aromático	7,300
N (amina ter-alifática)	2,840	Nitramina	7,510

Lange Manual de Química Tomo IV, Decimotercera edición, McGraw-Hill Co., México 1989.

Cálculo de la Refracción específica y de la Refracción Molar

Ejemplo: El acetato de 1-propinilo tiene un $n_D=1,4187$ y densidad=0,9982 a 20 grados Celsius; el peso molecular es 98,102. De la ecuación de Lorentz y Lorentz:

$$\text{Refracción específica } r_D = \frac{(1,4287)^2 + 1}{(1,4187)^2 + 2} \cdot \frac{1}{0,9982} = 0,2528$$

$$\text{La refracción molar es } Mr_D = (98,102)(0,2528) = 24,80$$

De las refracciones atómicas y de grupos de la tabla anterior, la refracción molar se calcula como sigue:

6 H	6,600
5 C	12,090
1 C≡C	2,398
1 O (éter)	1,643
1 O (carbonilo)	2,211
Mr_D	24,942

Indices de Refracción De Líquidos Orgánicos (Referidos a 20°C)*

Compuesto	n_D	Compuesto	n_D
Acetaldehido	1,3316	Estireno	1,5485 ^{16,6}
Acético ácido	1,3719	Etanol	1,361
Acético anhídrido	1,3904	Etilo acetato de	1,3727
Acetona	1,3591	Etileno bromuro de	1,4239
Acetonitrilo	1,3474	Etileno óxido de	1,3597 ⁷
Acetofenona	1,5339	Etilendiamina	1,4540 ^{26,1}
Acetilo cloruro de	1,3898	Eugenol	1,5439 ^{14,5}
Acrílico ácido	1,4224	Fenol	1,5425 ⁴¹
Alílico alcohol	1,4134	Fenol <i>o</i> -cloro	1,5473 ⁴⁰
<i>i</i> -Amílico acetato	1,4005	Fenol <i>p</i> -cloro	1,5579 ⁴⁰
<i>n</i> -Amílico acetato	1,4012	Formamida	1,4453 ^{22,7}
Anilina	1,5863	Fórmico ácido	1,3714
Anilina, <i>m</i> -cloro	1,5931	Furano	1,4216
Anilina, <i>o</i> -cloro	1,5895	Furfural	1,5261
Anisaldehido	1,5764 ^{12,7}	Glicerina	1,4729
Anisol	1,517	<i>n</i> -Heneicosano	1,4344 ^{45,3}
Benceno	1,50112	<i>n</i> -Heptadecano	1,437
Benzaldehido	1,5464	<i>n</i> -Heptano	1,38764
Benzonitrilo	1,5257 ^{25,5}	1 Heptanol	1,425
Bencilico alcohol	1,5399	Hepteno	1,39744
Bencilo cloruro de	1,539	<i>n</i> -Hexano	1,37486
Bencil amina	1,5440	1 Hexeno	1,38788
1-Butanol	1,396	Metanol	1,329
<i>i</i> -Butilo acetato de	1,389	Metilo acetato de	1,3619
<i>n</i> -Butilo acetato de	1,3951	Metilo acrilato de	1,3984
<i>i</i> -Butilamina	1,394	Naftaleno	1,5827 ^{99,6}
<i>n</i> -Butilamina	1,401	Nitrobenceno	1,5510
<i>n</i> -Butiraldehido	1,3843	Nitroetano	1,392
<i>n</i> -Butírico ácido	1,3979	Nitrometano	1,382
Carbono tetracloruro de	1,4607	<i>n</i> -Nonano	1,40542
Cloroformo	1,4467	<i>n</i> -Octano	1,39743
Crotonaldehido	1,4373	1-Octeno	1,40870
Cicloheptano	1,4452	<i>n</i> -Pentano	1,35745
Ciclohexano	1,4262	1-Pentanol	1,414 ¹³
Ciclohexanol	1,461	3-Pentanol	1,406
Ciclohexanona	1,4503	1-Penteno	1,37148
Ciclohexeno	1,44654	1 Propanol	1,386
Ciclopentano	1,406446	2 Propanol	1,3772
Ciclopentanona	1,436	Propionaldehido	1,3636
Ciclopenteno	1,42246	Propiónico ácido	1,3868
<i>n</i> -Decano	1,41189	<i>n</i> -Propilo acetato de	1,3844
Dietil eter	1,3526	Piridina	1,509
Dietil cetona	1,3927	Salicilaldehido	1,5735
Dietil oxalato de	1,4104	Tiofeno	1,5285
Dietil sulfuro de	1,4425	Tolueno	1,49693
Dietilamina	1,387	<i>o</i> -Tolunitrilo	1,5272 ^{23,1}
Difenilo	1,588 ^{77,1}	<i>m</i> -Xileno	1,49283
Difenil eter	1,5826 ²⁴	<i>o</i> -Xileno	1,50100
<i>n, n, Dimetilformamida</i>	1,4294	<i>p</i> -Xileno	1,49582

*Meites L., Handbook of Analytical Chemistry, 11st. Edition, Ed. McGraw-Hill Co., New York 1963, Pag. 6-263.

Propiedades de los Carbohidratos Alimenticios

Nombre	Fórmula	Rotación específica* [α] _D ²⁰	Punto de fusión °C	Reacción con la solución de Fehling
MONOSACÁRIDOS				
Arabinosa	C ₅ H ₁₀ O ₅	+190,6→+104,5	160	+
Dextrosa	C ₆ H ₁₂ O ₆	+112,2→+ 52,7	146	+
Fructosa	C ₆ H ₁₂ O ₆	-132,2→- 92,4	103	+
Galactosa	C ₆ H ₁₂ O ₆	+151 →+ 80,2	167	+
Manosa	C ₆ H ₁₂ O ₆	- 17,0→+ 14,2	132	+
DISACÁRIDOS				
Sacarosa	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	+ 66,53	160	-
Lactosa (anhidra)	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	+ 34,9→+ 55,4	252	-
Lactosa (hidratada)	C ₁₂ H ₂₄ O ₁₂	+ 85,0→+ 52,6	203	+
Maltosa (hidratada)	C ₁₂ H ₂₄ O ₁₂	+111,7→+130,4	102	+
TRISACÁRIDO				
Rafinosa(hidratada)	C ₁₈ H ₄₂ O ₂₁	+105,2	118	-
POLISACÁRIDOS				
Almidón		+195		-
Celulosa				-
Inulina		- 33 a - 40	178	-
Glicógeno		+196		-
Dextrina		+195		-

*También se dan los cambios debidos a la mutarrotación.

*Harold E., Ronald S. K., Ronald S., Análisis Químico de Alimentos de Pearson, 4ta. Impresión, Ed. Compañía Editorial Continental, S. A. de C. V., México 1991, Pag. 150.

Constantes Dieléctricas de Disolventes Ácido-Base comunes

Solvente	Constante Dieléctrica	Momento Dipolar D
Acido acético	6,15 (20°C)	1,74
Acido fórmico	58,5 (16°C)	1,41
Acido sulfúrico	100 (25°C)	
Agua	78,3 (25°C)	1,84
Amoniaco (a -50°C)	22 (-33°C)	
Anhídrido acético	20,7 (20°C)	2,8
Acetato de etilo	6,02 (25°C)	1,81
Acetona	20,7 (25°C)	2,88
Acetonitrilo	37,5 (20°C)	3,92
n-Butanol	17,5 (25°C)	1,66
n-Butilamina	5,3 (20°C)	
Clorobenceno	5,62 (25°C)	1,69
n,n-Dimetilformamida	37,71 (25°C)	
Dimetilsulfóxido	46,6 (25°C)	3,925
Etanol	24,55 (25°C)	1,69
Etanolamina	37,7 (25°C)	
Etilendiamina	14,2 (20°C)	
Metanol	32,70 (25°C)	1,7
4-Metil-2-Pentanona (Metil iso-Butil Cetona)	13,11 (20°C)	
Nitrometano	35,87 (30°C)	3,46
iso-Propanol	18,3 (25°C)	1,66
Piridina	12,3 (25°C)	2,2

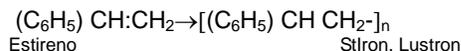
Fórmulas De Materiales Termoplásticos, Termosensibles y Gomas

Materiales Termoplásticos

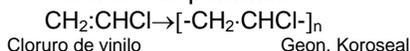
(1) Polietileno



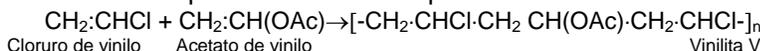
(2) Poliestireno



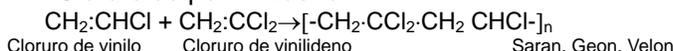
(3) Cloruro de polivinilo



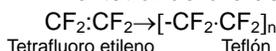
(4) Cloruro de polivinilo acetato de polivinilo



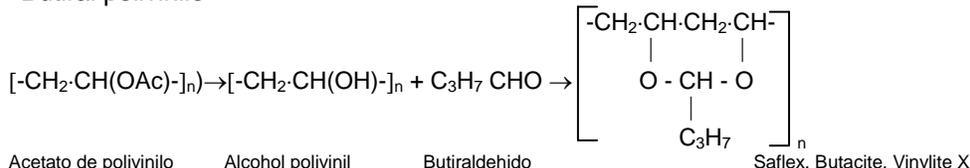
(5) Cloruro de polivinilideno



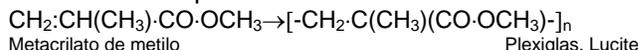
(6) Politetrafluoruro de etileno



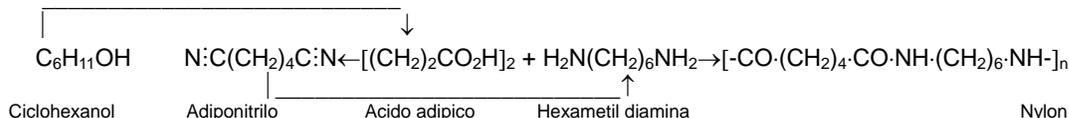
(7) Butiral polivinilo



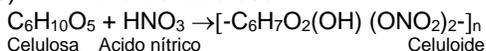
(8) Metacrilato de polimetilo



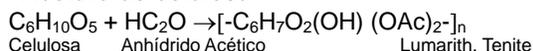
(9) Nylon



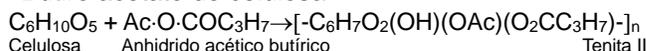
(10) Nitrato de celulosa



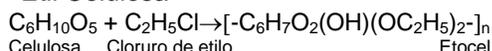
(11) Acetato de celulosa



(12) Butiro acetato de celulosa

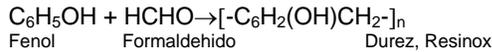


(13) Etil Celulosa

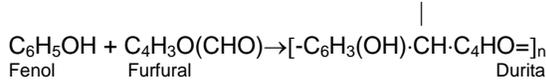


B. Materiales Termosensibles

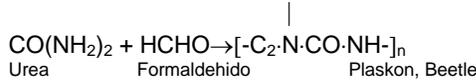
(14) Fenol formaldehído



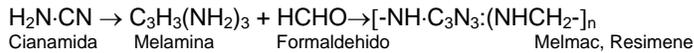
(15) Fenol furfural



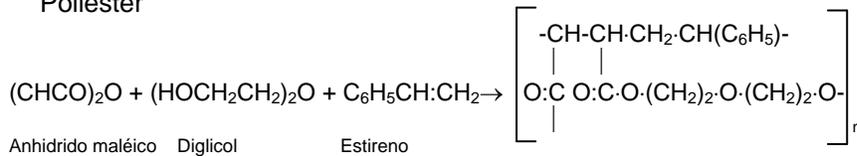
(16) Urea formaldehído



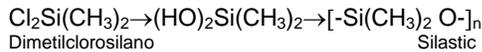
(17) Melamina formaldehído



(18) Poliester



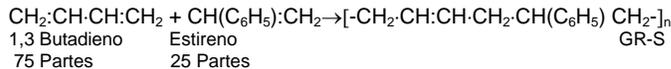
(19) Goma de silicón



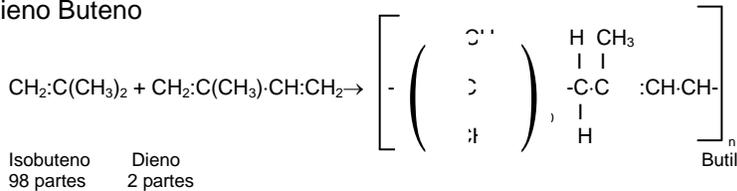
C. Materiales Plásticos

Proporciones aproximadas en partes por peso.

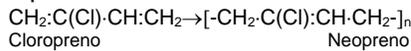
a) GR-S



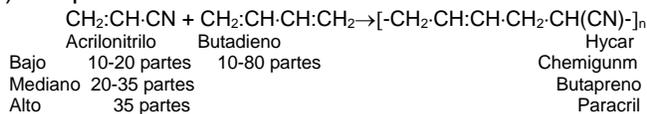
b) Dieno Buteno



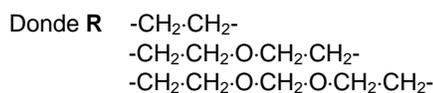
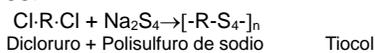
c) Neopreno



d) Copolimero de acrilonitrilo



e) Tiocol



Termoplásticos

Nombre	Abreviatura (en inglés)
Polimerizados acrilnitrilo-butadieno-estireno	ABS
Acetato de celulosa	CA
Acetato butirato de celulosa	CAB
Propionato de celulosa	CP
Poliestireno expandido= espuma de poliestireno	EPS
Polimerizado de PVC en emulsión	E-PVC
Copolímeros acetato de vinilo y etileno	EVA
Polietileno de alta densidad	HD-PE
Polietileno de baja densidad	LD-PE
Polietileno densidad media (no normalizada)	MD-PE
PVC polimerizado en masa	M-PVC
Poliamida	PA
Polibuteno	PB
Policarbonato	PC
Polietileno	PE
Tereftalato de polietileno	PET
Polipropileno	PP
Poliestireno	PS
Copolímeros estireno-acrilnitrilo	SAN
Politetrafluoroetileno	PTFE
Acetato de polivinilo	PVAC
Cloruro de polivinilo	PVC
Copolímeros cloruro-acetato de vinilo	PVCAC
Cloruro de polivinilideno	PVDC
Copolímeros estireno-butadieno=poliestireno antichoque	SB
PVC polimerizado en suspensión	
Poliésteres	

Termofijos

Plástico	Abreviatura
Resinas o masas de colada melamina-formaldehído	MF
Resinas o masas de moldeo de fenol-formaldehído	PF
Polimetil-metracrilato	PMMA
Polimetil penteno	PMP
Poliacetal	POM
Poliuretanos	PUR
Resinas o masas de moldeo de urea-formaldehído	UF
Hule natural	
Hule sintético	

Momento Dipolar de Varias Sustancias

Los momentos dipolares representados por λ están expresados en unidades Debye.
 Un Debye es igual a 10^{-18} unidades electroestáticas.

Sustancia	λ	Sustancia	λ
Acetona	2,7	Hidracina	1,19
Agua	1,84	Hidrógeno bromuro de	0,78
Amoniaco	1,46	Hidrógeno cianuro de	2,93
Azufre dióxido de	1,6	Hidrógeno cloruro de	1,03
Benceno	0	Hidrógeno ioduro de	3,38
Benzofenona	2,95	Hidrógeno peróxido de	2,1
Boro tricloruro de	0	Hidrógeno sulfuro de	1,10
Bromo	0	Hidrógeno	0
Butilamina	1,40	Ioduro	0
Carbono dióxido de	0	<i>iso</i> -Amil cianuro de	3,53
Carbono disulfuro de	0	<i>iso</i> -Propilo cianuro de	3,61
Carbono tetracloruro de	0	<i>n</i> -Amil fluoruro de	1,85
Ciclohexeno	0	Nitrógeno	0
Cloro	0	<i>o</i> -Diclorobenceno	2,51
Difenil éter	1,15	Parafina	0
Dioxano	0	<i>p</i> -Cloro nitrobenzeno	2,78
Estaño cloruro de	0	Rosin	8,8
Estaño dióxido de	0	<i>ter</i> -Amil fluoruro de	1,92

Momentos Dipolares de Grupo

Cada valor del momento determinado, es el que puede encontrarse cuando un grupo enlistado en la primera columna es atacado por uno de los grupos enlistados en la parte superior de la tabla. Por ejemplo: el momento enlistado para el C_6H_5-Cl es el del clorobenceno.

Grupo	C_6H_5		CH_3-		C_2H_5-		Angulo en grados
	gas	sol	gas	sol	gas	sol	
-CH ₃	0,36	0,4	0	...	0	...	180
-OCH ₃	1,35	1,25	1,30	55
-SCH ₃	...	1,27	...	1,40	52
-NH ₂	1,48	1,53	1,23	...	1,2	1,38	...
-I	1,6	1,30	1,64	1,5	1,87	1,8	0
-Br	1,75	1,52	1,80	1,8	2,01	1,9	0
-Cl	1,72	1,55	1,87	1,7	2,05	1,8	0
-F	1,57	1,43	1,81	...	1,92	...	0
-OH	1,4	1,6	1,69	1,66	1,69	1,7	62
-CO ₂ H	...	1,7	1,73	1,6	1,73	1,7	74
-CO ₂ CH ₃	...	1,9	1,67	1,75	1,76	1,9	70
-CHO	3,1	2,8	2,72	2,5	2,73	2,5	58
-COCH ₃	3,00	2,9	2,84	1,74	2,78	...	59
-CN	4,39	4,0	3,94	3,4	4,00	3,57	0
-NO ₂	4,21	3,98	3,50	3,1	3,68	3,3	0

Meites L., Handbook of Analytical Chemistry, 11st. Edition, Ed. Mc Graw-Hill Co., New York 1963, Pag. 10-153.

COLORES DE LA RADIACION VISIBLE		
Rango aproximado de longitud de onda en nm	Color	Complemento
400-465	Violeta	Verde-amarillo
465-482	Azul	Amarillo
482-487	Azul verdoso	Naranja
487-493	Azulverde	Rojo-naranja
493-498	Verde azuloso	Rojo
498-530	Verde	Rojo-púrpura
530-559	Verde amarillento	Púrpura-rojizo
559-571	Amarillo verde	Púrpura
571-576	Amarillo verdoso	Violeta
576-580	Amarillo	Azul
580-587	Naranja amarillento	Azul
587-597	Naranja	Azul-verdoso
597-617	Naranja rojizo	Azul-verde
617-780	Rojo	Azul-verde

Ewing Galen, (544.EWI), *Instrumental Methods of Chemical Analysis*, Fifth Edition, McGraw-Hill, New York, 1985.

Ejemplos de grupos que absorben en la región ultravioleta:

GRUPO FUNCIONAL	Absorción Máxima para las Transiciones $\pi \rightarrow \pi^*$ y $n \rightarrow \pi^*$ de algunos Grupos Funcionales aislados	
	TRANSICIÓN, nm	
	$\pi \rightarrow \pi^*$ ABSORCIÓN INTENSA	$n \rightarrow \pi^*$ ABSORCIÓN DEBIL
	170	No presenta
	170	No presenta
	166	280
	190	300
		340
		500
		665

Olsen Eugene D., *Modern Optical Methods of Analysis*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1975.

Absorción Máxima aproximada y absortividad molar de la transición $\pi \rightarrow \pi^*$ en varios enlaces de Carbono.		
ESTRUCTURA	λ_{\max} nm	ϵ
- C = C -	170	16 000
- C = C - C = C -	220	21 000
- C = C - C = C - C = C -	260	35 000

Olsen Eugene D., *Modern Optical Methods of Analysis*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1975.

Absorción Máxima para las Transiciones $\pi \rightarrow \pi^*$ de algunos Grupos Funcionales		
GRUPO FUNCIONAL	TRANSICION, nm	
	$\pi \rightarrow \pi^*$	$n \rightarrow \pi^*$
	ABSORCION INTENSA	ABSORCION DÉBIL
- C = O	166	280
- C = C - C = O	240	320
- C = C - C = C - C = O	270	350
<i>para-quinona</i>	245	435

Olsen Eugene D., *Modern Optical Methods of Analysis*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1975.

DISOLVENTES GRADO ESPECTROSCOPICO CON SU LONGITUD DE ONDA DE CORTE EN EL RANGO ULTRAVIOLETA

DISOLVENTE	λ (nm)
Acido Acético	260
Acetona	330
Acetonitrilo	190
Cloroformo	245
Ciclohexano	210
Etanol	210
Metanol	210
Tolueno	286
Metil etil cetona	330
Agua	191

BUENAS PRÁCTICAS DE LABORATORIO EN ESPECTROFOTOMETRIA DE ULTRAVIOLETA-VISIBLE.

- Verificar el espectrofotómetro una vez a la semana, utilizando el material de referencia de óxido de holmio para verificar la escala de longitud de onda. En caso de alguna desviación de los parámetros revisados con el material de referencia, solicitar el servicio del proveedor para su revisión.
- Antes de encender el espectrofotómetro verificar que el compartimento de muestras esta vacío.
- Recuerde que el equipo es de doble haz por lo que el ajuste a cero se realiza colocando en la celda de atrás y en la del frente la solución de referencia.
- Tomar las celdas siempre de la parte esmerilada para evitar dejar manchas de grasa de las manos por donde atraviesa la luz.
- Mantener las celdas limpias, después de usarlas se deben limpiar con metanol y dejarlas secar.
- Secar las celdas con un pañuelo desechable suave humedecido con metanol, si se encuentran muy sucias emplear jabón líquido al 20% en agua destilada y limpiarlas con un cotonete, después enjuagar abundantemente para eliminar totalmente el detergente y enjuagar con agua deionizada, al final con metanol.
- Procurar colocar las celdas siempre hacia el mismo lado. Generalmente traen una letras en la parte superior, estas pueden tomarse como referencia para mantener siempre la misma posición.
- Nunca sacuda las celdas para eliminar los restos de líquido, mejor permite que escurran sobre un papel absorbente.
- Cuando se analicen sustancias volátiles utilizar las celdas con tapa.
- Nunca introduzcas las celdas en el portamuestras del espectrofotómetro con restos de líquido en la parte externa.
- Las celdas deben llenarse a $\frac{3}{4}$ de su capacidad, el volumen equivale a 3 mL.

GLOSARIO DE TÉRMINOS UTILIZADOS EN ESPECTROSCOPIA

Absorbencia: Medida de concentración del material presente: \log (de base 10) negativo de la Transmitancia ($-\log T$) del producto de coeficiente de extinción, paso óptico y la concentración escrito como $A = \epsilon bc$ y en función de T , $A = \log(1/T)$. La absorbencia es adimensional.

Absortividad: Probabilidad de absorber la luz a una longitud de onda particular por un analito específico bajo condiciones específicas, por ejemplo, pH, disolvente y temperatura. Así una cantidad específica de material a condiciones determinadas absorberá una fracción específica de la luz que chocó con él.

Absortividad: es abreviado por una ϵ o por una a . Se usa ϵ cuando la concentración se expresa en Moles/L y sus unidades son $\text{Lmol}^{-1}\text{cm}^{-1}$, a es para cuando las unidades de concentración son en cualquier otro tipo y se hace el ajuste que corresponda a la expresión $A/b(\text{cm})$ Concentración.

Ajuste: Es la selección de las condiciones apropiadas para el funcionamiento adecuado de un instrumento, o de un sistema de medición.

Alcance de medición: Conjunto de valores del mensurando, para los cuales se supone que el error de un instrumento de medición se encuentra entre límites especificados.

Analito: El material particular o cualidad a ser determinada en un análisis.

Anchura de Rendija: Tamaño de la abertura de la rendija a través de la cual emerge la luz. El tamaño depende del rango de la longitud de onda, habilidad de separación del selector de longitud de onda y aislamiento deseado de longitud de onda específica. Generalmente fijada o programada automáticamente.

Calibración: Conjunto de operaciones que establecen, bajo condiciones especificadas, la relación entre los valores indicados por un instrumento o un sistema de medición o los valores representados por una medida materializada y los valores correspondientes realizados por los patrones o materiales de referencia.

Colorímetros: Los colorímetros utilizan el ojo humano como detector y el cerebro como transductor. Los métodos colorimétricos requieren siempre la utilización de uno o más patrones en el momento en el que se realiza el análisis.

Concentración: La cantidad de un soluto en un volumen determinado de solución, Ej., moles por litro.

Corte de Disolvente: La longitud de onda en la cual el disolvente absorbe una porción significativa de la luz, causando una pérdida de la señal e inhabilidad para ejecutar un análisis. En otras palabras, el disolvente se vuelve opaco a las longitudes de onda usadas. Esto es común en el ultravioleta, raro en la zona visible. En forma práctica es la longitud de onda que corresponde a una absorbencia de uno, utilizando una celda de 1 cm de paso óptico.

Cubeta o celda: Receptáculo transparente en el cual las soluciones de muestra son introducidas en la senda de la luz del espectrómetro. Generalmente cuenta con dos lados iguales Ej., 1 cm, 1 cm mientras que la tercera dimensión es alargada posiblemente tan grande como 15 cm. Para trabajos en ultravioleta, el material es cuarzo. El trabajo en zona visible permite utilizar celdas de vidrio o plástico.

Curva de Calibración: Los resultados de una calibración cuando son graficados, generalmente en coordenadas Cartesianas, Ej., concentración (en molaridad) contra la absorbencia.

Detector: Dispositivo usado para detectar la intensidad de la radiación de la muestra de los haces de la muestra o referencia. Generalmente un diodo de silicio sencillo o un tubo fotomultiplicador más sensible.

Disolvente: Líquido usado para disolver la muestra a analizar. Comúnmente agua o metanol de alta pureza. Generalmente designado, especialmente o purificado para trabajo en ultravioleta , Ej., "Spectro-Quality" o "Spectro-Grade".

Espectro: Series de longitudes de onda de la radiación, pertenecientes a una porción específica del electromagnético continuo, Ej. El espectro visible, donde los "colores" son examinados aumentando la longitud de onda. Para la porción visible del continuo, los colores son rojo, anaranjado, amarillo, verde, azul, índigo y violeta.

Espectrofotómetro de Doble Haz: Es un instrumento en el cual el haz se divide para permitir la comparación de la muestra y el disolvente (o reactivo que sirve como blanco) al mismo tiempo. Por lo general, la operación de este aparato está muy automatizada.

Espectrofotómetro de Simple Haz (Un solo haz): Es un instrumento que tiene una trayectoria óptica. La muestra y el disolvente puro (o el reactivo que funciona como blanco) se examinan por separado para establecer P y P_0 y realizar las mediciones de absorbencia. Por lo general, se opera en forma manual.

Error aleatorio: Es el resultado de una medición menos la media de un número infinito de mediciones del mismo mensurando, efectuadas éstas en condiciones de repetibilidad.

Error de medición: Es el resultado de una medición menos un valor convencionalmente verdadero del mensurando.

Error sistemático: Es la media que resultaría de un número infinito de mediciones del mismo mensurando, efectuadas bajo condiciones de repetibilidad, menos un valor verdadero del mensurando.

Exploración: El proceso en donde el rango de longitud de onda del sistema es inspeccionado en orden, generalmente de la longitud de onda más baja a la más alta. Esto generalmente ocurre cuando la red de dispersión es rotada sobre su eje.

Extinción/Coeficiente de Extinción: Sinónimo para la absorbencia y la absortividad, respectivamente.

Fotómetro: Es un dispositivo sencillo relativamente barato para los análisis por absorción. El equipo utiliza una lámpara de filamento de tungsteno, lentes para proporcionar un haz paralelo de radiación, un obturador, un filtro, un atenuador de haz en forma de cuña y un detector (microamperímetro).

Fototubo: Es un detector fotoeléctrico común para las regiones ultravioleta-visible e infrarrojo cercano y se encuentra en los instrumentos más baratos.

Frecuencia: El número de veces por unidad de tiempo que la magnitud de una onda electromagnética va de un máximo a un mínimo y posteriormente regresa a la amplitud máxima. La unidad para el número de ondas por segundo es el hertz (Hz).

Fuente: También conocida como "lámpara". Este es el origen de la luz utilizada en el espectrómetro, y puede ser una fuente incandescente para la zona visible o una lámpara de descarga de gas de deuterio para el ultravioleta.

Incertidumbre de medición: Parámetro asociado al resultado de una medición, el cual caracteriza la dispersión de los valores que se podrían atribuir razonablemente al mensurado.

Lámpara de Tungsteno: Es una lámpara de luz, eléctrica, que tiene un filamento calentado por electricidad y que es tungsteno metálico. Al igual que otros sólidos incandescentes, el filamento da una longitud de onda continua que se aproxima a la “radiación de cuerpo oscuro”. En condiciones normales de operación, la lámpara es adecuada como una fuente para la región visible del espectro y es útil sólo para distancias cortas en las regiones ultravioleta e infrarrojo.

Ley de Beer: Relación entre la cantidad de luz absorbida por un analito y su concentración, paso óptico (b) y absorptividad (a), expresada en gramos por 100 mL o molaridad, escrito como $A = \epsilon bc$.

Ley de Bouguer: Algunas veces se le llama ley de *Lambert*. Dividamos un medio absorbente homogéneo en capas imaginarias de igual espesor. Cada capa absorbe la misma fracción de radiación monocromática que choca contra ella. Con todas las demás sucede lo mismo y la absorbencia es directamente proporcional a la longitud de la trayectoria del haz a través del medio.

Ley de Bouguer-Beer: Es una combinación de las leyes de *Bouguer* y de *Beer*. Con frecuencia se escribe como $A = \epsilon bc$, en donde A =absorbencia, ϵ =absortividad molar y b =longitud de la trayectoria de haz (paso óptico) a través de una solución con una concentración molar de soluto igual a c .

Líneas de Franhofer: Son las líneas oscuras en el espectro del sol y que son ocasionadas por la absorción de la envoltura solar que está más fría que la superficie. Es de especial interés histórico para la espectrofotometría de absorción atómica.

Límite de Cuantificación: Es la concentración más pequeña con la que pueden realizarse medidas cuantitativas, en base a la desviación estándar y la pendiente de la curva de calibración, puede expresarse como $LC = 10\sigma/S$ donde σ es la desviación estándar de las lecturas de la referencia y S es la pendiente de la curva de calibración

Límite de Detección: La cantidad, más pequeña de analito que puede ser vista sobre el nivel de ruido del instrumento, esto es lo que puede detectarse para un nivel de confianza dado. Está determinado por el análisis de muestras con concentración desconocida de analito y por el establecimiento del nivel mínimo al cual puede ser detectable. Basado en la desviación estándar de la respuesta y la pendiente de la curva de calibración se expresa $LD = 3\sigma/S$, donde σ es la desviación estándar de las lecturas de la referencia y S es la pendiente de la curva de calibración.

Lineal: Línea recta: En el contexto, esto significa que para el doble de concentración del analito la señal de absorbencia será duplicada. Esto permite la predicción de la concentración utilizando la curva de calibración.

Linealidad: Un experimento que demuestra que la respuesta de un instrumento cambia de una manera previsible con el incremento de analito.

Longitud de Onda: La distancia de una cresta, de una onda electromagnética a la misma posición en la onda subsecuente. Distancia pico a pico, generalmente medida en nanómetros.

Luz Extraviada (luz parásita): Cualquier radiación que llega al detector que no es emitida por la muestra a la longitud de onda seleccionada.

Magnitud (Medible): Atributo de un fenómeno, de un cuerpo o de una sustancia, el cual es susceptible de ser identificado cualitativamente y determinado cuantitativamente.

Material de referencia: Material o sustancia para el cual uno o varios, de los valores de una o varias, de sus propiedades son lo suficientemente homogéneos y bien establecidos para ser utilizados en la

calibración de un instrumento, en la evaluación de un método de medición, o para asignar valores a las propiedades de otros materiales

Material de referencia Certificado: Material de referencia, acompañado de un certificado, para el cual uno o varios, de los valores de una o varias, de sus propiedades están certificados por medio de un procedimiento que establece su trazabilidad a una realización exacta de la unidad en la que se expresa el valor de cada propiedad. Cada valor certificado se especifica con su incertidumbre respectiva.

Matriz: Medio en el que se encuentra el analito.

Mensurando: Magnitud particular sujeta a medición.

Método de medición: Secuencia lógica de operaciones, descritas de manera genérica.

Monocromador: En los espectrofotómetros es un instrumento que aísla una banda estrecha de longitud de onda de toda la energía radiante que llega hasta él. Sus partes principales son un elemento dispersante (un prisma o una rejilla de difracción) y un sistema de rendijas.

Nanómetro, nm: Antiguamente milimicrón o milimicra, $m\mu$. Es una unidad común para la longitud de onda, en particular para la región ultravioleta-visible. $1\text{ nm}=10^{-9}\text{ m}$.

Paso Óptico: La distancia por la que pasa la luz a través de la muestra y su contenedor. En términos prácticos la dimensión de la cubeta o celda.

Patrón de Medición: Medida materializada, instrumento de medición, material de referencia o sistema de medición, destinado a definir, realizar, conservar o reproducir una unidad o uno o varios valores de una magnitud para servir de referencia.

Protocolo: Instrucciones detalladas para la realización de todos los aspectos de un programa de medición.

Razón Señal/Ruido: La razón numérica de la señal total a 100% de Transmitancia al ruido del instrumento.

Red de Dispersión: Una superficie de reflexión cubierta con ranuras microscópicas uniformemente espaciadas, cuyo propósito es separar las longitudes de onda individuales de la luz blanca. La distancia entre las ranuras y el ángulo de las caras está determinada por las longitudes de onda a separar. La red de dispersión (excepto para arreglo de diodos) es rotada a una velocidad determinada y la longitud de onda deseada es emitida a través de una rendija de salida sobre la muestra o el estándar.

Referencia. (Blanco): En el contexto, todo lo que está en el paso de luz de la muestra excepto el analito de interés: cubeta, disolvente y cualquier buffer o matriz para preparar la muestra.

Región Ultravioleta: Es una porción del espectro electromagnético que se encuentra entre el final de la longitud de onda larga de la región de los rayos X, aproximadamente a 40 nm (400 Å), y el límite violeta de la región visible, cerca de los 400 nm (4 000 Å). Los químicos emplean de rutina bandas de absorción entre 200 y 400 nm.

Repetibilidad (de los resultados de mediciones): Proximidad de la concordancia entre los resultados de las mediciones sucesivas del mismo mensurado, con las mediciones realizadas con la aplicación de la totalidad de las siguientes condiciones: el mismo procedimiento de medición, el mismo observador, el mismo instrumento de medición utilizado en las mismas condiciones, el mismo lugar o la repetición dentro de un periodo corto de tiempo.

Reproducibilidad (de los resultados de mediciones): Proximidad de la concordancia entre los resultados de las mediciones del mismo mensurando, con las mediciones realizadas haciendo variar las condiciones de medición. Las condiciones que se pueden variar pueden ser: método de medición, observador, el instrumento de medición, el patrón de referencia, el lugar, las condiciones de uso, el tiempo.

Ruido: Cualquier señal generada por el detector que no responde directamente a la luz transmitida en la longitud de onda requerida.

Selectividad: La selectividad de un método analítico denota el grado de ausencia de interferencias debidas a otras especies contenidas en la matriz de la muestra.

Sensibilidad: La sensibilidad de un instrumento o de un método analítico mide su capacidad de discriminar entre pequeñas diferencias en la concentración del analito. Dos factores la limitan, la pendiente de la curva de calibración y la reproducibilidad o precisión del sistema de medida. La *sensibilidad de calibración* es la pendiente de la curva de calibración a la concentración de interés. La *sensibilidad analítica* se expresa como $\gamma = S/\sigma$, donde S es la pendiente y σ la desviación estándar de las mediciones.

Sensor: Elemento de un instrumento de medición o de cadena de medición, que está directamente afectado por el mensurando.

Señal: La salida del detector debida a su respuesta a la luz emergente del contenedor de la muestra o de referencia.

Sesgo: La diferencia entre los resultados de prueba esperados y el valor de referencia aceptado. El sesgo es el error sistemático total en contraste con el error aleatorio.

Técnica: Principio químico o físico utilizado separadamente o en combinación con otras técnicas para analizar la composición de los materiales.

Titulación Fotométrica: Es una titulación en la cual el punto final se detecta por medio de mediciones de absorbancia.

Transmitancia, T: Es la fracción de la energía radiante incidente que transmite o emite la muestra. $T = P/P_0$. A menudo se expresa como un porcentaje: $\%T = (P/P_0) \times 100$.

Trazabilidad: Propiedad del resultado de una medición o de un patrón de medición, por medio de la cual estos pueden relacionarse a referencias establecidas, generalmente patrones nacionales o internacionales, por medio de una cadena ininterrumpida de comparaciones teniendo todas ellas incertidumbres determinadas.

Tubo de Descarga de Hidrógeno: (Con frecuencia es de deuterio.) Es una fuente para la espectrofotometría de ultravioleta en la cual las líneas de emisión del gas de relleno (H_2 o D_2) tienen un ensanchamiento de presión suficiente para proporcionar una longitud de onda continua a través de la región ultravioleta.

Tubo Fotomultiplicador: Es un detector fotoeléctrico común para las regiones ultravioleta-visible e infrarrojo cercano; más sensible que los fototubos ordinarios, se encuentra en los mejores instrumentos.

Transmitancia: Razón del poder radiante transmitido por una muestra al poder radiante transmitido por una referencia, en una celda equivalente o por algunos medios de compensación para la absorción, pérdidas por reflexión, etc. Se relaciona con A mediante $T = 1/10^A$ y se expresa en porcentaje.

Validación: Confirmar objetivamente el cumplimiento de requisitos particulares para un uso específico propuesto.

Validación de método: Es el proceso de establecer las características de desempeño y limitaciones de un método de medición y la identificación de aquellas influencias que pueden modificar estas características y a que grado le afectan.

Valor de blanco (en medición): es la lectura o resultado originado por la matriz, reactivos y cualquier sesgo residual, en un proceso o instrumento de medición que contribuye al valor obtenido de una magnitud en el procedimiento de medición analítica.

Verificar: Confirmar objetivamente el cumplimiento de requisitos para el funcionamiento de un instrumento o de un sistema de medición.

Visible: La porción del espectro electromagnético detectable por el ojo humano. La porción del espectro desde 350 780 nm.

Reglas de Fieser para predecir la absorción de sistemas homo y heteroanular

Valor base para dieno heteroanular 214
 (también para dieno de cadena abierta)

Valor base para dieno homoanular 253

Incrementos para:

Doble enlace que extiende la conjugación	30
Sustituyente alquilo o residuo de anillo	5
Doble enlace exocíclico	5

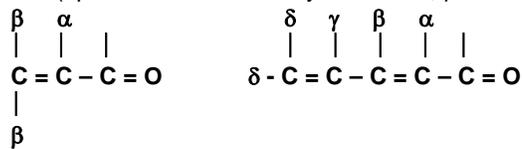
Grupos polares:

OAc	0
OAlquilo	6
SAlquilo	30
Cl, Br	5
N(Alquilo) ₂	60
Corrección de disolvente	___0

$$\lambda_{\text{calculada}} = \text{total}$$

Reglas de Fieser para calcular la absorción de enonas (aplicables a aldehídos y cetonas α , β insaturadas).

Sistema:



Valor base de enona acíclica	215 nm
Valor base de anillo de 6 miembros de cetona α , β insaturado	215 nm
Valor base para enona de 5 miembros	202 nm
Valor asignado al patrón de aldehído α , β insaturado	207 nm

Incremento para;	Doble enlace que extiende la conjugación	30
	grupo alquilo, o residuo de anillo α	10
	β	12
	γ o mayor	18
	cada sustituyente (grupo polar)-OH	α 35
		β 30
		δ 50
	-OAc	α, β, δ 6
	-OMe	α 35
		β 30
		γ 17
		δ 31
	-SAIq	β 85
	-Cl	α 15
		β 12
	-Br	α 25
		β 30
	-NR ₂	β 95
	Doble enlace exocíclico	5
	Componente homodieno (dieno Homoanular)	39
	Corrección por disolvente	

$\lambda_{\text{calc}} = \text{total}$

Corrección por disolvente:

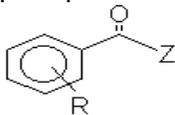
Etanol	0
Metanol	0
Dioxano	5
Cloroformo	1
Eter	7
Agua	-8
Hexano	11
Ciclohexano	11

ABSORCION MAXIMA DE LOS ANILLOS DEL BENCENO Ph-R

R	λ_{max} nm (ϵ) H ₂ O ó MeOH como disolvente					
	Primaria (E ₂)		Secundaria(B)			
H	203	(7 400)	254	204		
NH ₃ ⁺	203	(7 500)	254	160		
-CH ₃	206	(7 000)	261	225		
-I	207	(7 000)	257	700		
-Cl	209	(7 400)	263	190		
-Br	210	(7 900)	261	192		
-OH	210	(6 200)	270	1 450		
-OCH ₃	217	(6 400)	269	1 480		
-SO ₂ NH ₂	217	(9 700)	264	740		
-CN	224	(3 000)	271	1 000		
-CO ₂ ⁻	224	(8 700)	268	560		
-CO ₂ H	230	(11 600)	273	970		
-NH ₂	230	(8 600)	280	1 430		
-O ⁻	235	(9 400)	287	2 600		
-NHAc	238	(10 500)				
-COCH ₃	245	(9 800)				
-CH=CH ₂	248	(14 000)	282	750	291	500
-CHO	249	(11 400)				
-Ph	251	(18 300)				
-OPh	255	(11 000)	272	2 000	278	1 800
-NO ₂	268	(7 800)				
-CH=CHCO ₂ H	273	(21 000)				
-CH=CHPh	295	(29 000)				

* H. H. Jaffé. Y M. Orchin, Theory and Applications of Ultraviolet Spectroscopy, Wiley, New York, 1962.

Reglas para predecir la λ_{max}^{EtOH} para compuestos del tipo:



Donde Z = H, OH, Oalquilo o alquilo. Estas reglas están referidas a bandas muy fuertes e la región 200 nm -400 nm.

REGLAS PARA LA BANDA PRINCIPAL DE DERIVADOS DE BENCENO SUSTITUIDO DEL TIPO RC₆H₄CO Z.

	ORIENTACION	λ_{max}^{EtOH}
Cromóforo patrón:		
Z: alquilo o residuo de anillo		246
Z: H		250
Z: OH, o Oalquilo		230
Incrementos para cada sustituyente:		
R: alquilo o residuo de anillo		
	<i>o</i> , <i>m</i>	3
	<i>p</i>	10
R: OH, OCH ₃ , Oalquilo	<i>o</i> , <i>m</i>	7
	<i>p</i>	25
R: -O-	<i>o</i>	11
	<i>m</i>	20
	<i>p</i>	78
R: Cl	<i>o</i> , <i>m</i>	0
	<i>p</i>	10
R: Br	<i>o</i> , <i>m</i>	2
	<i>p</i>	15
R: NH ₂	<i>o</i> , <i>m</i>	13
	<i>p</i>	58
R: NHAc	<i>o</i> , <i>m</i>	20
	<i>p</i>	45
R: NHCH ₃	<i>p</i>	73
R: N(CH ₃) ₂	<i>o</i> , <i>m</i>	20
	<i>p</i>	85

Interpretación de espectros de la región Infrarroja

R-1 La identificación de las bandas de absorción características, causadas por grupos funcionales diferentes, es la base para la interpretación de espectros infrarrojos. Es útil hacer una división de la porción media del infrarrojo en nueve regiones y agrupar los diferentes grupos funcionales contenidos en las moléculas orgánicas:

λ (μm)	$\bar{\nu}$ - cm^{-1}	Enlace y tipo de vibración
2,7-3,0	3 750–3 300	O–H, N–H (alargamiento)
3,0-3,3	3 300–3 000	-C≡C–H, >C=CH-, Ar–H, (C-H de alargamiento)
3,3-3,7	3 000–2 700	-CH ₃ , -CH ₂ -, -C–H, -COH, (C-H de alargamiento)
4,2-4,7	2 400–2 100	C≡C, C≡N, (alargamiento)
5,2-6,0	1 900–1 650	C=O (alargamiento en ácidos, aldehído, cetona, amida, éster, etc.)
6,2-6,6	1 680–1 500	>C=C< alifáticos y aromáticos , >C=N– (alargamiento)
6,7-7,7	1 475–1 300	C–H, (deformación)
8,3-10,0	1 200–1 000	C–N, C–O, (alargamiento)
10,0-15,4	1 000– 650	>C=CH-, Ar–H, (C-H, deformación fuera del plano)

R-2 Se deben hacer ciertas distinciones importantes en la región, del alargamiento (3 750 cm^{-1} – 3 300 cm^{-1}) de los enlaces O–H, N–H

Las vibraciones de alargamiento del O–H libre se localizan en el rango de 3 700 cm^{-1} –3 500 cm^{-1} . Las vibraciones del fenol libre se encuentran en el valor más bajo de este rango (3 500 cm^{-1}).

Las bandas de absorción del O–H libre tienen una intensidad menor que las del O–H asociado y solo son evidentes en soluciones muy diluidas y en fase gaseosa.

La absorción del hidrógeno de O–H asociado aparece en el rango de 3 450 cm^{-1} –3 200 cm^{-1} como una banda ancha e intensa.

Las aminas no asociadas presentan bandas en la región de 3 500 cm^{-1} –3 300 cm^{-1} , mientras que las aminas asociadas dan bandas en la región de 3 500 cm^{-1} –3 100 cm^{-1} . Estas son más débiles que las del O–H asociado, pero más agudas. Las aminas primarias muestran dos bandas, las secundarias e iminas una banda, y las terciarias no muestran ninguna. Las amidas y lactamas también muestran absorción en la región de 3 500 cm^{-1} –3 300 cm^{-1} .

Los ácidos carboxílicos en estado sólido y aún en soluciones relativamente diluidas existen como dímeros y no muestran la absorción del grupo O–H donde se esperaría, en su lugar ocurre una absorción intensa y ancha en la región de 3 000 cm^{-1} –2 500 cm^{-1} .

R-3 Los diferentes tipos de enlaces C-H muestran absorción dentro de áreas bien definidas en la región de alargamiento del C-H de 3 300–2 700 cm⁻¹. Las posiciones aproximadas de las bandas para el alargamiento del C-H de diferentes tipos de grupos son mostradas a continuación.

Tipo de H	$\bar{\nu}$ - cm ⁻¹	Intensidad de la Banda
C≡C-H	3 300	Fuerte
C=C-H	3 040 – 3 010	Moderada
Ar-H	3 030	Moderada
-CH ₃	2 960 y 2 870	Fuerte
-CH ₂ -	2 930 y 2 850	Fuerte
C-H	2 890	Débil
-CH=O	2 720	Débil

Note que la absorción de C≡C-H, C=C-H y Ar-H absorben arriba de 3 000 cm⁻¹ mientras que el enlace C-H en alifáticos y aldehídicos absorbe debajo de 3 000 cm⁻¹. También note que tanto el -CH₃ y -CH₂- da pico en dos bandas.

R-4 A continuación se resume la región de alargamiento simétrico para el triple enlace:

Tipo de enlace triple	$\bar{\nu}$ -cm ⁻¹	Intensidad de la Banda
H-C≡C-R	2 140–2 100	Fuerte
R-C≡C-R'	2 260-2 190	Variable
RC≡CR	No absorbe	
RC≡N	2 260–2 240	Fuerte

La conjugación causará pequeños desplazamientos de estos valores a números de onda menores, por ejem. Los cianuros de arilo absorben en la región de 2 240 cm⁻¹–2 190 cm⁻¹. Los acetilenos simétricos no muestran absorción porque la vibración simétrica no causa cambios en el momento dipolar.

R-5 Muchas bandas importantes aparecen en la región espectral del carbonilo y las podemos clasificar en la siguiente forma:.

Tipo de carbonilo	$\bar{\nu}$ cm ⁻¹	Intensidad de la Banda
Amida	1 700–1 640	Fuerte
Ac. Carboxílico	1 725–1 705	Fuerte
Cetona saturada	1 725–1705	Fuerte
Ésteres (no cíclicos)	1 740–1 710	Fuerte
Aldehído saturado	1 740–1 720	Fuerte
Lactonas de 6 y 7 miembros	1 750–1 730	Fuerte
Halogenuros de acilo	1 815–1 720	Fuerte
Lactonas de 5 miembros	1 780–1 760	Fuerte
Anhídridos	Dos bandas separadas aproximadamente en 60 cm ⁻¹ a 1 850- 1 800 cm ⁻¹ y 1 780–1 740 cm ⁻¹	Fuerte

R-6 La región de alargamiento simétrico del doble enlace de 1 680 cm⁻¹–1 500 cm⁻¹ contiene bandas debidas a los siguientes grupos:

Tipo de Unión doble	$\bar{\nu}$ cm ⁻¹	Intensidad de la Banda
>C=C<	1 680–1 620	Variable
>C=N-	1 690–1 640	Variable
-N=N-	1 630–1 575	Variable

R-7 La región de 1 000 cm⁻¹–650 cm⁻¹ que corresponde a la vibración de deformación del enlace C–H proporciona información útil para la caracterización de olefinas y la posición en las sustituciones en los anillos aromáticos.

	$\bar{\nu}$ cm ⁻¹	Intensidad de la Banda
Deformación del C–H Etilénico		
TIPO OLEFINICO		
RCH=CH ₂	990 y 910	Fuerte
RCH=CRH (<i>cis</i>)	690	Moderada a fuerte
RCH=CRH (<i>trans</i>)	970	Moderada a fuerte
R ₂ C=CH ₂	890	Moderada a fuerte
R ₂ C=CHR	840-790	Moderada a fuerte
Benceno Substituido		
TIPO DE SUBSTITUCION AROMÁTICA		
<i>mono</i> sustituido (5H adyacentes)	750 y 700	Usualmente moderada a fuerte
<i>orto</i> disustituido (4H adyacentes)	750	Usualmente moderada a fuerte
<i>meta</i> disustituido (3H adyacentes)	780-810	Usualmente moderada a fuerte
<i>para</i> disustituido (2H adyacentes)	850-800	Usualmente moderada a fuerte

Creswell /Runquist /Campbell, Spectral Analysis of Organic Compounds, 2nd edition, Burgess Publishing Company, U.S.A., 1972.

TABLA DE CONSTANTES DIELECTRICAS DE VARIOS DISOLVENTES			
DISOLVENTE	ϵ	DISOLVENTE	ϵ
<i>n</i> -Pentano	1,84	1,2-Dicloroetano	10,1
<i>n</i> -Hexano	1,89	Piridina (py)	12,3
<i>n</i> -Heptano	1,92	Salicil-aldehido	13,9
<i>n</i> -Octano	1,95	Oxicloruro Fosforoso	14,0
<i>n</i> -Decano	1,991	Etilen-diamina	14,2
Ciclohexano	2,02	Ciclohexanol	15,0
Ciclohexeno	2,20	Acetoacetato de Etilo	15,7
1,4-Dioxano	2,209	Cloruro de Acetilo	15,8
Tetracloruro de Carbono	2,238	Amoniaco	17,0
Benceno	2,3	<i>n</i> -Butanol	17,5
Etil Benceno	2,41	Benzaldehido	17,8
Trietilamina	2,42	<i>iso</i> -Propanol	18,3
Tolueno	2,568	Cianuro de Bencilo	18,4
<i>o</i> -Xileno	2,57	<i>n</i> -Propanol	20,3
Disulfuro de Carbono	2,64	<i>n</i> -Butironitrilo	20,3
Tiofeno	2,73	<i>iso</i> -Butironitrilo	20,4
Furano	2,95	Trimetil Fosfato (TMP)	20,6
Eter Dietílico	4,3	Acetona (AC)	20,7
Anisol	4,33	Anhídrido Acético	20,7
Bromoformo	4,39	Cloruro de Benzoilo	23,0
<i>o</i> -Clorotolueno	4,45	Fluoruro de Benzoilo (BF)	23,0
Cloroformo	4,80	Etanol	24,55
Clorobenceno	5,62 (25°C)	Benzonitrilo (BN)	25,2
<i>iso</i> -Propilamina	6,0	Dicloruro Fenil Fosfórico	26,0
<i>ter</i> -Butilamina	6,0	Propionitrilo	27,7
Acetato de Etilo	6,02	Difloruro Fenil Fosfónico	27,9
<i>p</i> -Clorotolueno	6,06	Hexa-metil-fosforo-amida (HMPA)	30,0
Acido Acético	6,15	Carbonato de Dicloroetileno (DEC)	31,6
Acetato de Metilo	6,7	Metanol	32,65
Tributil Fosfato (TBP)	6,8	Nitrobenceno (NB)	34,82
Anilina	6,89	Nitrometano (NM)	35,9
Etil Amina	6,9	<i>N,N'</i> Dimetilformamida (DMF)	36,1
Cloruro de Bencilo	7,0 (13°C)	<i>N,N'</i> Dimetilacetamida (DMA)	37,8
1,2-Dimetoxietano	7,0	Acetonitrilo (AN)	38,0
Ioduro de Metilo	7,0	Etilen-Glicol	38,66
Dimetoxietano (DME)	7,2	Sulfito de Etileno (ES)	41,0
Cloruro de <i>n</i> -Butilo	7,39	Sulfolano (Tetrametilen Sulfona-TMS)	42,0
Tetrahidrofurano (THF)	7,6	Dimetil Sulfoxido (DMSO)	45,0
Tricloro Etano	7,52	Oxicloruro de Selenio	46,0
Cloruro de Metileno	9,0	Hidracina	51,7
Cloruro de Tionilo	9,2	Carbonato de 1,2-Propanodiol (pdc)	69,0
Cloruro de Sulfurilo	10,0	Agua	81,0
1,1-Dicloroetano	10,0 (25°C)	Carbonato de Etileno (EC)	89,1

Admed Wasi, J. Chem. Ed., 56, 795(1985)

Dean John A., Lange's Handbook of Chemistry, Thirteenth Ed. (1985)

Jensen William B., Chem. Reviews, 78, No. 1, pags. 1-22.(1978)

GRUPOS FUNCIONALES Y RADICALES DE IMPORTANCIA EN QUÍMICA ORGÁNICA

Acetal	$>C(OR)_2$	Amoxilo	$CH_3(CH_2)_4O^-$
Acetal (etil tio)	$>C(S-CH_2)_2$	Anhidrido	$R-CO-O-CO-R$
Acetamida	$CH_3-CO-NH-$	Anilino	C_6H_5NH-
Acetilo	CH_3-CO-	Arsina	AsH_3
Acetimido	$CH_3-C(=NH)-$	Azina	$>C=N-N=C<$
Acetonilo	$CH_3-CO-CH_2-$	Azo	$-N=N-$
Acetoxilo	$CH_3-CO-O-$	Azoxi	$-N^+(-O)=N-$
Acilo	$R-CO-$	Bencilo	$C_6H_5-CH_2-$
Acilo (halogenuro de)	$R-CO-X$	Bencenilo	$C_6H_5C=C<$
Acilo (cianuro de)	$-CO-CN$	Bencililo	$(C_6H_5)_2C(OH)CO-$
Acida	$-N = N^{(+)} = N^{(-)} =$	Benzal	$C_6H_5CH<$
Acridil	$C_{13}H_8N-$	Benzohidrilo	$(C_6H_5)_2CH-$
Acrilato	$H_2C=CH-CO-O-R$	Benzoilo	C_6H_5CO-
Acrilonitrilo	$CH_2=CH-CN$	Benzoxi	C_6H_5CO-O-
Adipilo	$-CO-(CH_2)_4-CO-$	Butirilo	$CH_3(CH_2)_2CO-$
Alcohol	$R-OH$	Cáprico (ácido)	$CH_3-(CH_2)_8CO_2H$
Alcoholato	$R-O-$	Carbamato	$H_2N-CO-O-$
Alcoholato (Metal)	$R-O-Metal$	Carbamato (ditio)	$-NH-CS-SH$
Aldehido	$R-CO-H$	Carbámico (ácido)	$H_2N-COOH$
Aldol	$-CH(OH)-(CH_2)_n-CO-H$ $n=0,1,2,3,\dots$	Carbamida	$>N-CO-N<$
Aleno	$>C=C=C<$	Carbeno	$H_2C:$
Amida primaria	$-CO-NH_2$	Carbetoxi	C_2H_5O-CO
Amida secundaria	$-CO-NH-$	Carbino	$HC:$
Amidina	$-C(=NH)-NH_2$	Carbinol	$-CH_2-OH$
Amidoácido	$>N-CO-COOH$	Carbonato	$-O-CO-O-$
Alanil	CH_3CHNH_2CO-	Carbonato(tio) dialquil	$Alq-S-CO-O-Alq$
Alilo	$-CH_2-CH=CH_2$	Carbonato(tio) alquil aril	$Ar-S-CO-O-Alq$
Amilo	$-(CH_2)_4-CH_3$	Carbonatos dialquil ditio	$Alq-R-S-CO-S-Alq$
Amina primaria	$R-NH_2$	Carbonílicos	
Amina secundaria	$R-NH-$	Ácido carboxílico	$-CO-OH$
Aminoácido	$R-CH(NH_2)-COOH$	Ácido carbatiónico	$-CO-SH$
Amonio (sal cuaternaria de)	R_4N^+	Ester de ácido carboxílico	$-CO-O-R$
		Tioéster	$-CO-SR$

Cloruro de acilo -CO-Cl

Amida -CO-NH₂

Anhídrido -CO-O-CO-

Cetena R₂C=C=O

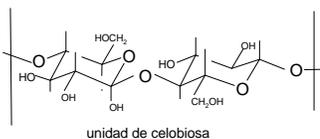
Ceto -CO-

Cetona R-CO-R

Alfa-acetoácido -CO-CO-OH

β-cetoéster -CO-CH₂-CO-OR

Celósolve R-CH(OH)-CH(OR) R



Celulosa

Cetal R₂C(OR)₂.

Cetoácido R-COCH₂-COOH

Cetol C(OH)-(CH₂)_n-CO-CH₃

Cianamida NC-NH₂

Cianamida dialquil >N-CN

Cianato R-O-CN

Cianhídrico (ácido) H-CN

Cianhidrina NC-C-OH

Ciánico HO-CN

Cianoacrilato NC-C(:CH₂)-COR

Cianógeno NC-CN

Ciclamato C₆H₅-NH-SO₃⁻

Cinamal C₆H₅CH=CHCH=

Cinamato C₆H₅-CH=CH-CO-OR

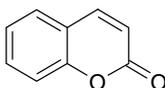
Cloral Cl₃C-CH(OH)

Cloramina NH₂-Cl

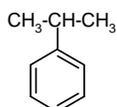
Cresol σ HO-C₆H₄-CH₃

Crotonato CH₃-CH=CHCO-OR

Cumarina



Cumeno



DDT p⁻ Cl-C₆H₄-CH(CCl₃)-C₆H₄-Cl

Diacilperóxidos R-CO-O-O-CO-R

Diazo -⁽⁺⁾N≡N:

Diazoato de alquilo -N=N-O-Alquilo

Diazocetona -CO-CH-⁽⁺⁾N≡N:

Diazometano CH₂ N₂

Diazonio (sal de en medio ácido) -N⁽⁺⁾=N⁽⁻⁾-

Dicloroetileno Cl-CH₂-CH₂-Cl

Difenoles

o- pirocatecol

m- resorcinol

p- hidroquinona

Diisocianato -N=C=

DMF Acrónimo de dimetilformamida

H-CO-N-(CH₃)₂

Dimetilglioxima

CH₃-C(=N-OH)-C(=N-OH)-CH₃

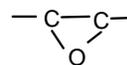
Dimetilsulfóxido CH₃-SO-CH₃

Dioxano (CH₂)₄O₂

Disulfuro -S-S-

Efedrina C₁₀H₁₅NO

Enol -CH=CH(OH)



Epoxi

Estireno C₆H₅-CH=CH₂

Etanoilo CH₃-CO-

Etenil CH≡C-

Eteno >C=C<

Eter R-O-R

Etilencetal >C(OCH₂)₂

Etilendiamina H₂N-CH₂-CH₂-NH₂

Etino -C≡C-

Etoxi CH₃-CH₂-O-

Fosfato alquílico Alq-O-PO(OH)₂

Fosfina PH₃

Fosfito $O=PR(-OR)_2$

Fosfonato $Z=PR(X)-OR'$

$X=F$ o CN , $Z=O$ o S

Fosforilo $[(-O)_3P=O]^{3-}$

Fosgeno $(Cl)_2C=O$

Freón Nombre comercial de los
clorofluorocarbonos

Ftálico (ácido) $o-C_6H_4(COOH)_2$

Fulmínico (ácido) $>C=N-OH$

Fumárico (ácido) $HOOC-CH=CH-COOH$



Furano

Glicina $H-CH(NH_2)-COOH$

Glicol $R-CH(OH)-CH(OH)-R'$

Glioxal $O=CH-CH=O$

Glioxilo $O=CH-C(=O)-$

Glioxílico (ácido) $O=CH-CO(OH)$

Glioxima $HO-N=CH-CH=N-OH$

Glutámico $HOOC-CH_2-CH_2-CH(NH_2)-$
 $COOH$

Glutárico $HOOC-(CH_2)_3-COOH$

Guanidilo $HN=C(-NH)_2$

Guanidina $HN=C(NH_2)_2$

Haloamida $-CO-NH-X$

Haloformo HCX_3 , $X=Cl, Br, I$

Halohidrina $RCH(X)CH(OH)R'$

Haluro de alquilo $Alq-X$, $X=Cl, Br, I$

Hemiacetal $RCHOH(OR')$

Hidracina H_2N-NH_2

Hidracida $-CO-HN-NH_2$

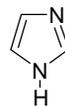
Hidrazo $-NH-NH-$

Hidrazona $>C=N-NH-$

Hidroxámico (ácido) $-CO-NH-OH$

Hidroxilamina $HO-NH_2$

Imida $R-CO-NH-CO-R'$

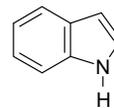


Imidazol

Imina $R_2C=NH$

Imina (base de Schiff) $R_2C=NR$

Imino alcohol $-C(OH)=NH-$



Indol

Isocianato $R-N=C=O$

Isotiocianato $-N=C=S$

Isonitrilo $-N\equiv C$

Isopropilo $(CH_3)_2-CH-$

Isotiocianato $R-N=C=S$

Isourea $HN=C(NH_2)-OH$

Lactama Amida cíclica $\{-CO-NH-\}$

Lactona Éster cíclico $\{-CO-O-\}$

Láurico Ac. Graso de C_{12}

Laurilo $CH_3-(CH_2)_{10}-$

Laurilsulfonato DETERGENTE ANIÓNICO

Maleico (ácido) $HO-CO-CH=CH-CO-OH$

Malico (ácido) $HOOC-CH_2-CHOH-COOH$

Malónico (ácido) $HOOC-CH_2-COOH$

Melamina Trímero de la cianamida

H_2N-CN

Mercaptal $>CH(S-R)_2$

Mercaptano $R-SH$

Mercaptona $>C(S-R)_2$

Mesacónico (ácido)

$HOOC-(CH_3)C=C(H)-COOH$

Metacrilato

$H_2C=C(CH_3)-COOR$

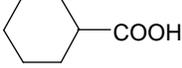
Metacrílico (ácido)

$H_2C=C(CH_3)-COOH$

Metanal $H_2C=O$

Metanóico (ácido) $H-CO(OH)$

Metanol $\text{CH}_3\text{-OH}$
 Metoxi $\text{CH}_3\text{-O-}$
 Mixta R-Metal-X
 MTB acrónimo de 2-metoxi-2-metilpropano
 Nafta Mezcla de hidrocarburos de $\text{C}_5\text{-C}_{10}$

Nafténico (ácido) 

Nitrato Alquílico Alq-O-NO_2

Nítrico (ácido) HNO_3

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

Nitrilo (N-Óxido de) $\text{-C}\equiv\text{N}\rightarrow\text{O}$

Nitrito NO_2^-

Nitrito de Alquilo Alq-O-N=O

Nitro -NO_2

Nitrol (pseudo) $\text{-C(NO}_2\text{)-N=O}$

Nitrólico $\text{-C(NO}_2\text{)=N-OH}$

Nitrónico (ácido) $\text{-CH=N}^+(\text{-O}^-)\text{-OH}$

Nitronio NO_2^+

Nitrosamina >N=N=O

Nitroso -NO

Nitrosilo NO^+

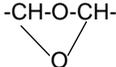
Nitroso (ácido) HNO_2

Nitroso (óxido) N_2O

Nitruro $[\text{N}\equiv\text{N-N}]^-$

Oxima (aldo) -CH=N-OH

Oxima (ceto) >C=N-OH

Ozónido 

Palmítico (ácido) $\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{-COOH}$

2,4 Pentanodiona ACETILCETONA

Perácido R-CO-O-OH

Piperazina $\text{HN(CH}_2\text{-CH}_2\text{)}_2\text{NH}$

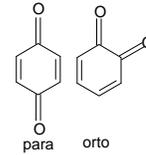
Pirúvico (ácido) $\text{CH}_3\text{-CO-COOH}$

Polipéptido $[-\text{NH-CH(R)-CO-}]$

Propargil $\text{-CH}_2\text{-C}\equiv\text{CH}$

Propoxi $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-}$

Queroseno Mezcla de hidrocarburos de $\text{C}_{11}\text{y C}_{12}$



Quinonas

Ricinoleico Ac. graso saturado de C_{18}

Sacarina $\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_3\text{S}$

Salicílico $\text{o}^- \text{HO-C}_6\text{H}_4\text{-CO}_2\text{H}$

Seda Polipéptido de cuatro aminoácidos
 constituyentes glicina, alanina, (75%)
 serina y tirosina

Semicarbazida R-NH-NH-CO-NH_2

Semicarbazona

>C=N-NH-CO-NH_2

Serina $\text{H}_3\text{C-CH(NH}_2\text{)-COOH}$

Silano $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$

Sulfhidrilo (tiol) -SH

Sulfínico (ácido) R-SO-OH

Sulfínico (anhídrido) R-SO-O-SO-R

Sulfínico (cloruro de alquilo) R-SO-Cl

Sulfito bi (de alquilo) Alq-O-SO-OH

Sulfito de alquilo Alq-O-SO-O-Alq

Sulfona $\text{R}_2\text{-SO}_2$

Sulfonamida $\text{R-SO}_2\text{-NH}_2$

Sulfónico (ácido) $\text{-SO}_3\text{H}$

Sulfónico (éster de ácido) $\text{-SO}_2\text{-O}$

Sulfónico (anh. de ácido) $\text{-SO}_2\text{-O-SO}_2\text{-}$

Sulfónico (halogenuro de ácido) $\text{-SO}_2\text{-X}$

Sulfonilo $\text{R-SO}_2\text{-}$

Sulfonilo halogenuro de $\text{-SO}_2\text{-X}$

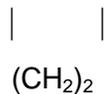
Sulfonio $\text{R}_1\text{-S}^+(\text{R}_2)\text{R}_3$

Sulfóxido >S=O

Sulfuro -S-

Sulfurilo $\text{-SO}_2\text{-}$

Sulfona $\text{SO}_2\text{-O-}$



Tiocianato $\text{N}\equiv\text{C-S-R}$

Tioéter $>\text{C-S-C}<$

Tionilamina $-\text{N}=\text{S}=\text{O}$

Tionilo $-\text{SO-}$

Tiosulfato $(\text{S}_2\text{O}_3)_2^-$

Tiourea $\text{NH}_2\text{-CS-NH}_2$

Trietanolamina $\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_3$

Trifenilfosfina $(\text{Ø})_3\text{-P}$

Urea $\text{NH}_2\text{-CO-NH}_2$

Ureido $(\text{R-CO-HN})\text{CO}(\text{NH-CO-R})$

Uretano RO-CO-NH_2

Valérico $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{-COOH}$

Vinilo $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$

Vinilo haluro de $\text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{X})\text{-}$

Xantato(di) $-\text{O-C}(=\text{S})\text{-S-S-}$

Xántico (ácido) $-\text{O CS-SH}$

Xantato $[\text{R-O-CS-S}]^-$

Bibliografía:

John A. Dean, Lange MANUAL DE QUÍMICA, Decimotercera Edición, McGraw-Hill, México, 1989.

Jacques Angenault, Diccionario Enciclopédico de Química, Editorial C.E.C.S.A., México, 1999.

John Daintith, A Dictionary of Chemistry, Third Edition, Oxford University Press, Oxford, 1996.

Incertidumbre de medición

Incertidumbre de Medición: Es el resultado de la evaluación orientada a la caracterización del **intervalo** dentro del cual se estima que cae el **valor verdadero**, generalmente con una determinada probabilidad. La incertidumbre calculada a partir de mediciones repetidas se conoce como Incertidumbre tipo A; la incertidumbre debida a fuentes de información como los certificados de calibración o los certificados del Material de Referencia se conoce como Incertidumbre tipo B. La expresión de la incertidumbre tipo A (u) puede ser estimada por medio del cálculo de la desviación estándar de la media.

Cálculo de la desviación estándar de la media

El cálculo de la desviación estándar de la media es una medida de variabilidad útil y es a su vez una forma de estimar la incertidumbre.

Como un procedimiento adicional a las prácticas, el alumno debe de realizar el estudio de los datos para reportar el valor de la medición; considerando siempre la desviación estándar de la media.

Aplicación

Plantilla para el cálculo de la desviación estándar media para una curva de calibración en Espectroscopia Ultravioleta – Visible.

moles/L							
Absorbencia							
Promedio de Abs							
S							
n							
u_A							

S Desv Est
 n No. de mediciones
 u_A Desv Est Media

$$u_A = \frac{s}{\sqrt{n}}$$

Cálculo de la desviación estándar media para una curva de calibración en Espectroscopia Ultravioleta – Visible.

moles/L	0,02	0,04	0,06	0,08	0,1	0,12	M. Problema
Absorbencia	0,1071	0,1994	0,3192	0,4281	0,5305	0,6005	0,3849
	0,1072	0,1995	0,3194	0,4284	0,5308	0,6024	0,3830
	0,1072	0,1998	0,3195	0,4282	0,5319	0,6014	0,3824
	0,1072	0,1994	0,3195	0,4283	0,5315	0,6008	0,3842
	0,1070	0,1996	0,3195	0,4295	0,5312	0,6003	0,3825
Promedio de Abs	0,1071	0,1995	0,3194	0,4285	0,5312	0,6011	0,3834
S	0,00009	0,00017	0,00013	0,00057	0,00055	0,00085	0,00110
n	5	5	5	5	5	5	5
u_A	0,00004	0,00007	0,00006	0,00025	0,00025	0,00038	0,00049

S Desv Est
 n No. de mediciones
 u_A Desv Est Media

$$u_A = \frac{s}{\sqrt{n}}$$

Tomando en cuenta que el equipo nos proporciona mediciones con 4 cifras, se debe redondear el valor de la desviación estandar media para adecuarla a las cifras significativas correspondientes. Por lo tanto el valor de absorbencia de la muestra problema se expresará como sigue.

$$(0,3834 \pm 0,0005) A$$

Esto nos dice que en el intervalo entre 0,3829 y 0,3839 se encuentra el valor verdadero de absorbencia de la muestra problema.

En esta sección encontrarás la(s) raíz(ces) de algunos compuestos químicos y de terminología química. Te será de utilidad para comprender los nombres de los compuestos, sabemos que te resultará entretenida.

Acroleína;	del lat., <i>acer, acris</i> , “agrio, acre”, <i>olere</i> , “sentir” y el sufijo –ina.
Adenina;	del gr., <i>aden</i> , “glándula”. Base púrica que interviene en la composición de ácidos nucleicos.
Adip-, adipo-;	del lat., <i>adepens, adipis</i> , “grasa”. Elementos grasos.
Alifático;	del gr., <i>aleiphar, aleiphotos</i> , “grasa”.
Alilo;	del lat., <i>a (l) lium</i> , “ajo”, e-ilo.
Alotropía;	del gr., <i>allos</i> , “otro”, y <i>tropos</i> , “manera de ser”.
Amigdalina;	del radical lat., <i>amygdala</i> , “almendra”.
Anilina;	del portugués <i>anil</i> , “indigo”.
Apatita;	del gr., <i>apatân</i> , “engañar”.
Asbesto;	del lat., <i>asbestos</i> , “no combustible”.
Ascórbico;	de a- y escorb(uto).
Aspargina;	del lat., <i>asparagus</i> , “espárrago”.
Atropina;	de atropa, nombre científico de la belladona.
Auxócromo;	del gr., <i>auksein</i> , “acrecentar, engrandecer” y – <i>chromos</i> , “color”.
Axial;	del lat., <i>axis</i> , “eje”.
Azeótropo;	de a-, del gr., <i>zein</i> , “hervir”, y <i>tropus</i> , “acción de girar”.
Azúcar;	del lat., <i>saccharum</i> .
Baquelita;	nombre que derivó en 1907 del Backeland el inventor.
Barbitúrico;	del alemán <i>barbitusaüre</i> (creado por Baeyer, en honor a Bárbara) y úrico.
Buna;	nombre propuesto en 1948, de bu(tadieno) y Na, símbolo del sodio.
Butir-, butiro-;	del gr., <i>bouturon</i> , lat., <i>butyrim</i> , “mantequilla”.
Cacodílico;	del gr., <i>kakôdes</i> , “que tiene mal olor”.
Cal;	del lat., <i>calx, calcis</i> , “piedra”.
Calomel;	del gr., <i>Kalos</i> , “bello” y <i>melas</i> , “negro”.
Caolín;	del chino <i>Kaoling</i> , “colina elevada”.
Cáprico;	del lat., <i>capra</i> , “cabra”.
Caroteno;	de <i>carotte</i> , “zanahoria”.
Catalisis;	del gr., <i>katalusis</i> , “disolución”.
Cefalosforina;	del céphalosporium, nombre del mohó.
Celda;	del lat., <i>cella</i> , “cámara”.
Cemento;	del lat., <i>caementum</i> , “piedra natural”.
Cerámica;	del gr., <i>keramikos</i> , “arcilla, de <i>Keramos</i> , “arcilla”.

Chalco;	del gr., <i>khalkos</i> , “cobre”.
Cinabrio;	del gr., <i>Kinnabari</i> . Sulfuro natural de mercurio
Cis;	del lat., <i>cis</i> , “de este lado”.
-cito, cito-;	del gr., <i>Kutos</i> , “cavidad, celda”.
Citr(o)-;	del lat., <i>citrus, citreum</i> , “limón”.
Clatrato;	del gr., <i>klathrom</i> , “cierre, barrera”.
Clorofila;	del gr., <i>khlôros</i> , “verde” y <i>phullon</i> , “hoja”.
Colofonia;	del gr., “resina de colofón”, villa de Lídice.
Coloide;	del inglés <i>colloid</i> y del gr., <i>kola</i> , “goma”.
Compactación;	del lat., <i>compactus</i> , “amontonado”.
Complejo;	del lat., <i>complexus</i> , del <i>complecti</i> , “contener”.
Concatenación;	del lat., <i>cattena</i> , “cadena”.
Copilación;	del francés, <i>coupelle</i> , “copa pequeña”.
Creatinina;	del gr., <i>kreas, kreatos</i> , “carne”.
Creosota;	del gr., <i>kreas, kreatos</i> , “carne” y <i>sôzein</i> , “conservar”.
Cri(o)-;	del gr., <i>kruos</i> , “frío”.
Criptato;	del gr., <i>kryptein</i> , “ocultar”.
Cumarina;	de <i>coumarou</i> , “arbol exótico”.
Detergencia;	del frances <i>déterger</i> , “limpiar”.
Detergente;	del lat., <i>detergens, detergere</i> , “limpiar”.
Deuterio;	del gr., <i>deuteros</i> , “segundo”.
Dinamita;	del gr., <i>dunamis</i> , “fuerza”.
Disolvente;	del lat., <i>solvere</i> , “disolver”.
Ecuatorial;	del lat., <i>aequator</i> , “ecuador”.
-edro, -edria, -édrico;	del gr., <i>hedra</i> , “cara, base”.
Efedrina;	de <i>ephedra</i> , nombre del arbusto del cual se obtiene.
eka-;	prefijo del sánscrito <i>eka</i> , “uno”.
Electrolito;	de electro y el gr, <i>lutos</i> , “que puede descomponerse”.
Enantiómero;	del gr., <i>enantios</i> , “opuesto” y mero.
Endergónico;	de endo y del gr., <i>ergon</i> , “trabajo, fuerza”.
Endo;	del gr., <i>endon</i> , “hacia adentro”.
Entalpia;	de en y el gr., <i>thalpein</i> , “calentar”.
Entropia;	del gr., <i>entropê</i> , “regreso”.
Enzima;	del gr., <i>en-</i> , “dentro” y <i>zumê</i> , “levantamiento”.
Eosina;	del gr., <i>êôs</i> , “aurora, color rojo de la aurora”.
Equilibrio;	del lat., <i>aequilibrium</i> , de <i>aequs</i> , “igual” y libra “balanza”.
Eritro-;	del gr., <i>aruthros</i> , “rojo”.

Escualano;	(de escualo). Derivado del triterpeno de fórmula $C_{30}H_{50}$.
Esfarelita;	del gr., <i>sphaleros</i> , “engañoso”.
Espinela;	del italiano <i>spinella</i> , del lat., <i>spina</i> , “espina”.
Espodumeno;	del gr., <i>spodos</i> , “ceniza”.
Estearina;	del gr., <i>stear</i> , “grasa” e –ina.
Estérico;	del gr., <i>stereos</i> , “solido”.
Estibeno;	del gr., <i>stilbein</i> , “brillar”.
Eutéctico;	del gr., <i>eutektos</i> , “que funde con facilidad”.
Fenantreno;	de fen y del gr., <i>anthrax</i> , “carbón”.
Fórmico;	del lat., <i>fórmica</i> , “hormiga”.
Fotólisis;	de foto- y el gr., <i>lusion</i> , “disolución”.
Fracción;	del lat., <i>frangere</i> , “romper”.
Fructosa;	del lat., <i>fructus</i> , “fruta” y osa de fórmula $C_6H_{12}O_6$.
Galactosa;	del gr., <i>galaktos</i> , “leche”.
Galena;	del gr., <i>galênê</i> , “plomo”.
Glicerina;	del gr., <i>glukeros</i> , “dulce”.
Guanina;	de guano.
Hema- ;	del gr., <i>haima</i> , <i>haimotos</i> , “sangre”.
Hemi-;	del gr., <i>hêmi</i> , “a medias”.
Hemo-;	del gr., <i>haima</i> , “sangre”.
Heter(o)- ;	del gr., <i>heteros</i> , “otro”.
Hip(o)-;	del gr., <i>hupos</i> , “debajo”.
Hista-, histo-;	del gr., <i>histos</i> , “tejido”.
Indicador;	del lat., <i>indicator</i> , “acusador”.
Indol;	del rad índigo, y el lat., <i>oleum</i> , “aceite”.
Jabón;	del lat., <i>sapo</i> , <i>saponis</i> .
Kieselguhr;	de la palabra alemana “tierra silicosa”.
Lábil;	del lat., <i>labilis</i> , “deslizarse, caer”.
Lact-;	del lat., <i>lac</i> , <i>lactis</i> , “leche”.
Latón;	del árabe <i>latun</i> , “cobre”.
Láurico;	del lat., <i>laurus</i> , “laurel”.
Lecitina;	del gr., <i>lekithos</i> , “yema de huevo”.
Lejía;	del lat., <i>lixiva</i> de <i>lix</i> o <i>lixa</i> , “agua para lavar”.
Leuco-;	del gr., <i>leukos</i> , “blanco”.
Levógiro;	del lat., <i>laevus</i> , “izquierdo” y del gr., <i>guros</i> , “circulo”.
Ligando;	del lat., <i>ligandum</i> , de <i>ligare</i> , “unir”.
Lignina;	del lat., <i>lignum</i> , “madera”.

Linoléico;	del lat., <i>linum</i> , “lino” y <i>oléum</i> , “aceite”.
Lio-;	del gr., <i>luein</i> , “desorden”.
Lípido;	del gr., <i>lipos</i> , “grasa”.
Lisina;	del gr., <i>lisis</i> , “disolución, disociación”.
Litargirio;	del gr., <i>lithargyrus</i> , “piedra de plata”.
-lito;	del gr., <i>lithos</i> , “piedra”.
Macr(o);	del gr., <i>makros</i> , “grande”.
Málico;	del lat., <i>malum</i> , “manzana”.
Margarina;	del gr., <i>margaron</i> , “perla”.
Melamina;	del gr., <i>melos</i> , <i>melanos</i> , “negro” y amina.
-mero;	del gr., <i>meros</i> , “parte”.
Mesacónico;	de meso y con(i) del lat., <i>conium</i> , “cicuta”.
Meso-;	del gr., <i>mesos</i> , “en medio, mediador”.
Met(a);	del gr., <i>meta</i> , “detrás de”.
Mica;	del lat., <i>mica</i> , “partícula”.
Micela;	del lat., <i>mica</i> , “partícula”.
Mon(o);	del gr., <i>monos</i> , “solo”.
Monazita;	del alemán <i>monazit</i> , del gr., <i>monazein</i> , “que está solo, extraño”.
Monoclínico;	de mono- y del gr., <i>Klinein</i> , “inclinación”.
Morfina;	de Morfeo, dios del sueño.
Muriático;	de muriato.
Muriato;	del lat., <i>muria</i> , “salmuera”.
Nailon;	derivación de la denominación inicial “no run” paso a “nuron” y evolucionó a nailon.
Napalm;	de Na y palm, abreviatura de palmitato.
Neo-;	prefijo del gr., <i>neos</i> “nuevo”.
Nicotina;	de Jean Nicot (quien llevó a Francia el tabaco).
Oligo-;	prefijo del gr., <i>oligos</i> , “pequeño, poco numeroso”.
Orbital;	del lat., <i>orbita</i> , “órbita”.
Osmio;	del gr., <i>osmé</i> , “olor”.
Oxalato;	del gr., <i>oxalis</i> , “acedera”.
Ozono;	del gr., <i>ozein</i> , “exhalar un olor”.
Pantotenico;	del gr., <i>pantothern</i> , “de todas partes”.
Parafina;	del lat., <i>parum affinis</i> , “que tiene poca afinidad”, <i>parafina</i> , “resina, pez”.
Petróleo;	del lat., <i>petra</i> , “piedra” y <i>oleum</i> , “aceite”.
Picr(o);	del gr., <i>pikros</i> , “amargo”.

Pigmento;	del lat., <i>pigmentum</i> , “especias”.
Pineno;	del lat., <i>pinus</i> , “pino”.
Piperazina;	del lat., <i>piper</i> , “pimienta”.
Piridina;	del gr., <i>pur</i> , “fuego”.
Pirrol;	del gr., <i>purrhos</i> , “rojo”.
Pirúvico;	de pir y del lat., <i>uva</i> , “pasa”.
Plagida;	palabra inglesa, de <i>pest</i> , “insecto, plaga, planta nociva” y el sufijo –cida.
Polarización;	del gr., <i>polein</i> , “hacer girar”.
Poli-;	del gr., <i>polus</i> , “numeroso”.
Pólvora;	del lat., <i>pulvis</i> , “polvo”.
Quelato;	del gr., <i>Khêlê</i> , “pinza”.
Querógeno;	del gr., <i>Kêros</i> , “cera” y –geno.
Quiral;	del gr., <i>kheir</i> , “pinza”.
Racémico;	del lat., <i>racemus</i> , “pasa”.
Radical;	del lat., <i>radix</i> , <i>radicis</i> , “raíz”.
Radio;	del lat., <i>radius</i> , “rayo”.
Rayón;	del frances <i>rayon</i> , “de sol”. Debido a su aspecto brillante.
Relajación;	del lat., <i>relaxatio</i> .
Resonancia;	del lat., <i>resonantia</i> , “eco”.
Rodamina;	del gr., <i>rhodos</i> , “rojo y amina.
Salitre;	del lat., <i>salpetrae</i> , “sal de piedra”.
Saponificación;	del lat., <i>sapo</i> , <i>saponis</i> , “jabón”.
Seda;	de lat., seta.
Sistema;	del gr., <i>sûstema</i> , “conjunto, composición”.
Solución;	del lat., <i>solutos</i> , “disuelto”.
Subérico;	del lat., <i>suber</i> , “corcho”.
Surfactante;	de <i>surf act a nts</i> , (surface active agents), agente de superficie activa.
Táctico;	del gr., <i>taktikhê</i> , “arte de ordenar, de disponer”.
Tergal;	apocope de tereftálico. Fibra sintética.
Terpeno;	del alemán <i>Terpene</i> de terpenia, tromentina.
Ti(o)-;	del gr., <i>theion</i> , “azufre”.
Tintura;	del lat., <i>tinctura</i> , e <i>tingere</i> , “teñir”.
Tirosina;	del gr., <i>turos</i> , “queso”.
Trementina;	del lat., <i>terebenthina</i> , “resina”.
Tritio;	del gr., <i>tritos</i> , “tercero”.
Vanadio;	de Vanadis, una “mujer sabia” diosa escandinava.

Xant(o)-; del gr., *xanthos*, “amarillo”.

Xileno; del gr., *xulon*, “madera”.

Fuente:

John A. Dean, Lange *MANUAL DE QUÍMICA*, Decimotercera Edición, McGraw-Hill, México, 1989

Jacques Angenault, *Diccionario Enciclopédico de Química*, Editorial C.E.C.S.A., México, 1999

A Vives, *Diccionario Latino-Español/Español-Latino*, Segunda edición, Editorial Colsa, España, 1954.

John Daintith, *A Dictionary of Chemistry*, Third Edition, Oxford University Press, Oxford, 1996.

David W. Ball, *J. Chem. Educ.*, **62**, 787 (1985)

RANGOS ^a ESPERADOS DE CONDUCTANCIA MOLAR (Λ_M) PARA ELECTROLITOS ($\sim 10^{-3} M$) DE 2, 3, 4 y 5 IONES EN ALGUNOS DISOLVENTES COMUNES A 25 °C^b

Solvente	Constante Dieléctrica	Tipos de Electrolito			
		1:1	2:1	3:1	4:1
Agua	78,4	118-131	235-273	408-435	~560
Nitro metano	35,9	75-95	150-180	220-260	290-330
Nitrobenceno	34,8	20-30	50-60	70-82	90-100
Acetona	20,7	100-104	160-200		
Acetonitrilo	36,2	120-160	220-300	340-420	
<i>N, N</i> -Dimetilformamida	36,7	65-90	130-170	200-240	
Metanol	32,6	80-115	160-220		
Etanol	24,3	35-45	70-90		

^a Las unidades en todas las conductancias molares son $S \cdot cm^2 \cdot mol^{-1}$

^b Geary, W. J. *Coord. Chem. Rev.* **1997**, 7, 81.