

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 \equiv 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 \equiv C, C \equiv 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	Fuerte
	aproximadamente en 60 cm ⁻¹ a 1 850-	
	1 800 cm ⁻¹ y 1.780–1 740 cm ⁻¹	

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.

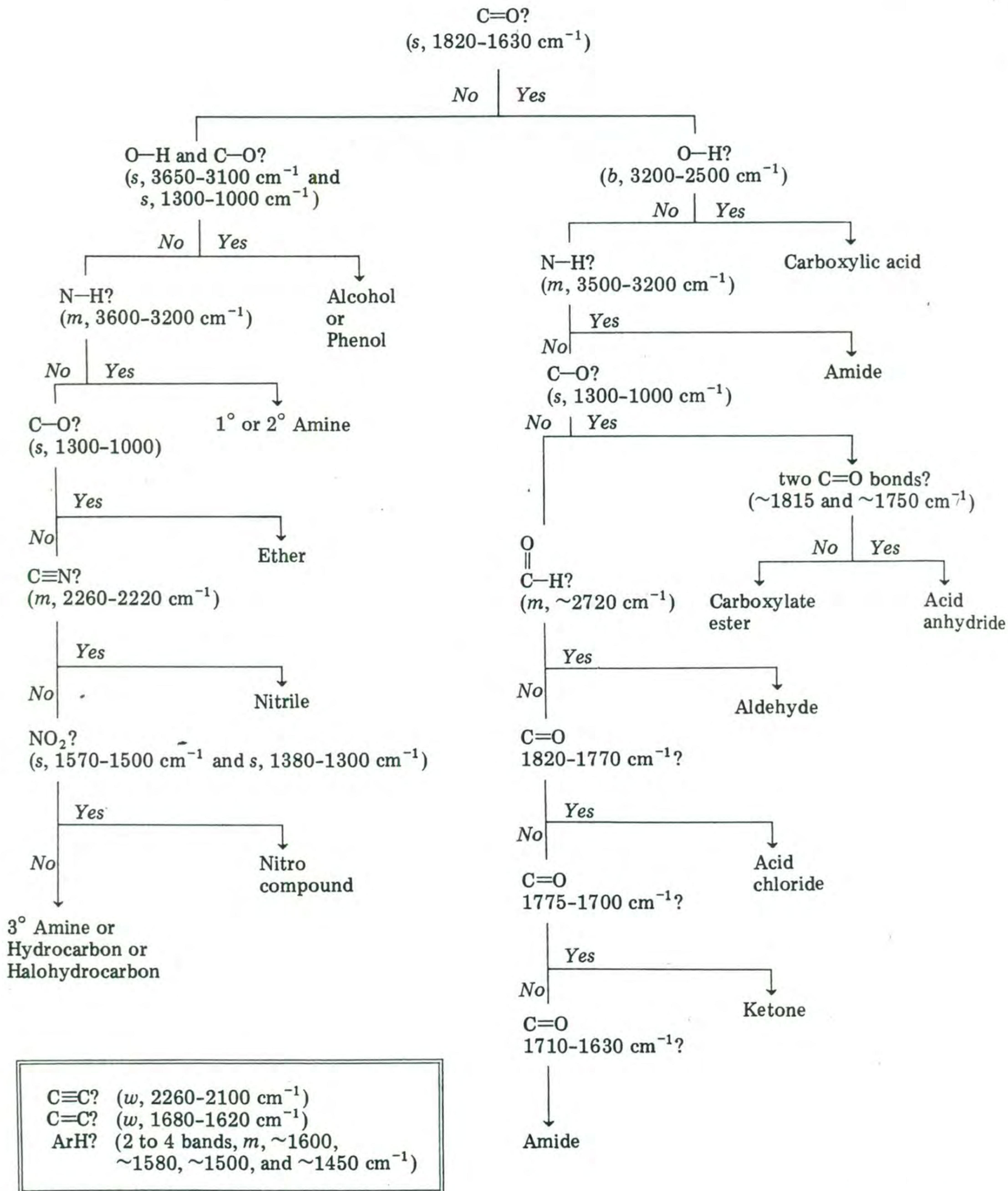


Figure 25.1 Scheme for the analysis of an infrared spectrum. (s = strong, m = medium, w = weak, b = broad).

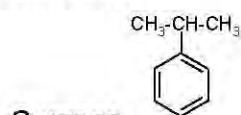
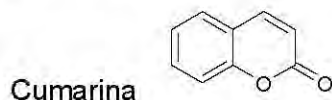
GRUPOS FUNCIONALES Y RADICALES DE IMPORTANCIA EN QUÍMICA ORGÁNICA

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

Anhídrido	-CO-O-CO-
Cetena	R ₂ C=C=O
Ceto	-CO-
Cetona	R-CO-R
Alfa-acetoácido	-CO-CO-OH
β-cetoéster	-CO-CH ₂ -CO-OR
Celosolve	R-CH(OH)-CH(OR) R



Celulosa	
Cetal	R ₂ C(OR) ₂ .
Cetoácido	R-COCH ₂ -COOH
Cetol	C(OH)-(CH ₂) _n -CO-CH ₃
Cianamida	NC-NH ₂
Cianamida dialquil	>N-CN
Cianato	R-O-CN
Cianhídrico (ácido)	H-CN
Cianhidrina	NC-C-OH
Ciánico	HO-CN
Cianoacrilato	NC-C(:CH ₂)-COR
Cianógeno	NC-CN
Ciclamato	C ₆ H ₅ -NH-SO ₃ ⁻
Cinamal	C ₆ H ₅ CH=CHCH=
Cinamato	C ₆ H ₅ -CH=CH-CO-OR
Cloral	Cl ₃ C-CH(OH)
Cloramina	NH ₂ -Cl
Cresol	σ HO- C ₆ H ₄ -CH ₃
Crotonato	CH ₃ -CH=CHCO-OR



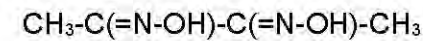
DDT	p ⁻ Cl- C ₆ H ₄ -CH(CCl ₃)- C ₆ H ₄ -Cl
Diacilperóxidos	R-CO-O-O-CO-R

Diazo	-(⁺)N≡N:
Diazoato de alquilo	-N=N-O-Alquilo
Diazocetona	-CO-CH-(⁺)N≡N:
Diazometano	CH ₂ N ₂
Diazonio (sal de en medio ácido)	-N(⁺)=N(⁻)-
Dicloroetileno	Cl-CH ₂ -CH ₂ -Cl

Difenoles

<i>o</i> -	pirocatecol
<i>m</i> -	resorcinol
<i>p</i> -	hidroquinona

Diisocianato	-N=C=
DMF Acrónimo de dimetilformamida	
	H-CO-N-(CH ₃) ₂
Dimetilglioxima	



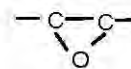
Dimetilsulfóxido	CH ₃ -SO-CH ₃
------------------	-------------------------------------

Dioxano	(CH ₂) ₄ O ₂
---------	--

Disulfuro	-S-S-
-----------	-------

Efedrina	C ₁₀ H ₁₅ NO
----------	------------------------------------

Enol	-CH=CH(OH)
------	------------



Epoxi

Estireno	C ₆ H ₅ -CH=CH ₂
----------	---

Etanoilo	CH ₃ -CO-
----------	----------------------

Etenil	CH≡C-
--------	-------

Eteno	>C=C<
-------	-------

Eter	R-O-R
------	-------

Etilencetal	>C(OCH ₂) ₂
-------------	------------------------------------

Etilendiamina	H ₂ N-CH ₂ -CH ₂ -NH ₂
---------------	--

Etino	-C≡C-
-------	-------

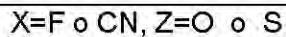
Etoxi	CH ₃ -CH ₂ -O-
-------	--------------------------------------

Fosfato alquílico	Alq-O-PO(OH) ₂
-------------------	---------------------------

Fosfina	PH ₃
---------	-----------------

Fosfito	O=PR(-OR) ₂
---------	------------------------

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



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 $H CX_3$, $X=Cl, Br, I$

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

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

Hemiacetal $RCHOH(OR')$

Hidracina H_2N-NH_2

Hidracida $-CO-HN-NH_2$

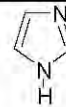
Hidrazo $-NH-NH-$

Hidrazona $>C=N-NH-$

Hidroxámico (ácido) $-CO-NH-OH$

Hidroxilamina $HO-NH_2$

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

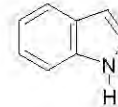


Imidazol

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

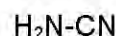
Laurilsulfonato DETERGENTE ANIÓNICO

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

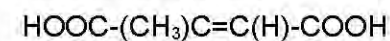


Mercaptal $>CH(S-R)_2$

Mercaptano $R-SH$

Mercaptona $>C(S-R)_2$

Mesacónico (ácido)



Metacrilato



Metacrílico (ácido)



Metanal $H_2C=O$

Metanóico (ácido) H-CO(OH)

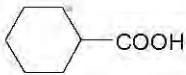
Metanol $\text{CH}_3\text{-OH}$

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 

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

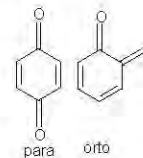
Polipéptido $[-\text{NH-CH(R)-CO-}]$

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 C_{11}y

C_{12}



Quinonas

Ricinoleico Ac. graso saturado de C_{18}

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

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

Sulfihidrilo (tiol) -SH

Sulfínico (ácido) R-SO-OH

Sulfínico (anhídrido) R-SO-O-SO-R

Sulfínico (cloruro de alquil) 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	-SO ₂ -
Sultona	SO ₂ -O-
	(CH ₂) ₂
Tiocianato	N≡C-S-R
Tioéter	>C-S-C<
Tionilamina	-N=S=O
Tionilo	-SO-
Tiosulfato	(S ₂ O ₃) ₂ -
Tiourea	NH ₂ -CS-NH ₂
Trietanolamina	N(CH ₂ CH ₂ OH) ₃
Trifenilfosfina	(Ø) ₃ -P
Urea	NH ₂ -CO-NH ₂
Ureido	(R-CO-HN)CO(NH-CO-R)
Uretano	RO-CO-NH ₂
Valérico	CH ₃ (CH ₂) ₃ -COOH
Vinilo	H ₂ C=CH ₂
Vinilo haluro de	H ₂ C=C(X)-
Xantato(di)	-O-C(=S)-S-S-
Xántico (ácido)	-O CS-SH
Xantato	[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.