

TABLA PARA INTERPRETACIÓN ESPECTRAL*

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 dieciocho regiones y agrupar los diferentes grupos funcionales contenidos en las moléculas orgánicas:

$\lambda(\mu\text{m})$	$\bar{\nu} \text{ cm}^{-1}$	Enlace y tipo de vibración
2,5-3,13	4 000–3 200	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, X≡Y, X=Y=Z, (alargamiento); X, Y y Z pueden representar, C,N,O,y S. Alquinos, Alenos, Cianatos, Isocianatos, Nitrilo, Isocianidas, Acidas, Sales de diazonio, Cetenos, Tiocianatos, Isotiocianatos.
5,2-6,0	1 900–1 650	>C=O, (alargamiento en ácidos carboxílicos, aldehído, cetona, amida, éster, etc.).
6,2-6,6	1 690–1 620	>C=C< alifáticos y aromáticos, >C=N–, (alargamiento).
5,92-6,21	1680-1610	-N=O, (alargamiento), compuestos nitrito orgánicos.
6,04-6,21	1655-1610	-O-NO ₂ , (alargamiento asimétrico) compuestos nitrato orgánicos, el alargamiento simétrico del -O-NO ₂ ocurre en 1300 cm^{-1} - 1225 cm^{-1} .
6,25-6,62	1600-1510	-NO ₂ , (alargamiento asimétrico), compuestos nitro orgánicos, el alargamiento simétrico del -NO ₂ ocurre 1385 cm^{-1} -1325 cm^{-1} .
6,25-6,90	1600-1450	>C=C<, (alargamiento), en sistema de anillos aromáticos.
6,7-7,7	1 475–1 300	C–H, (deformación), Metilo, metileno y metino.
7,04-10,10	1420-990	>S=O, (alargamiento), sulfoxidos, sulfatos, sulfitos, ácidos o ésteres sulfínicos, sulfonas, ac. sulfónico, sulfonatos, sulfonamidas, halogenuro de-sulfonilo.
8,3-10,0	1 300–1 000	C–N-, C–O-, (alargamiento)
8,16-9,67	1225-1045	>C=S, (alargamiento), tioésteres, tioureas, tiamidas, pirotionas.
10,0-12,82	1 000–780	>C=CH-, (C–H, deformación fuera del plano), instauración alifática
11,11-14,93	900-670	Ar–H, (C–H, deformación fuera del plano), sustitución aromática
11,7-20,0	850-500	C–X, (alargamiento), organohalogenados. X puede ser Cl, Br, o I.
13,7-13,9	730-720	(CH ₂) _{n>3} , cuatro o más grupos metilénicos consecutivos



pirotiona

Fuente: Sócrates G., *Infrared Characteristic Group Frecuencias*, Second edition, John Wiley & Sons, Great Britain, 1994.