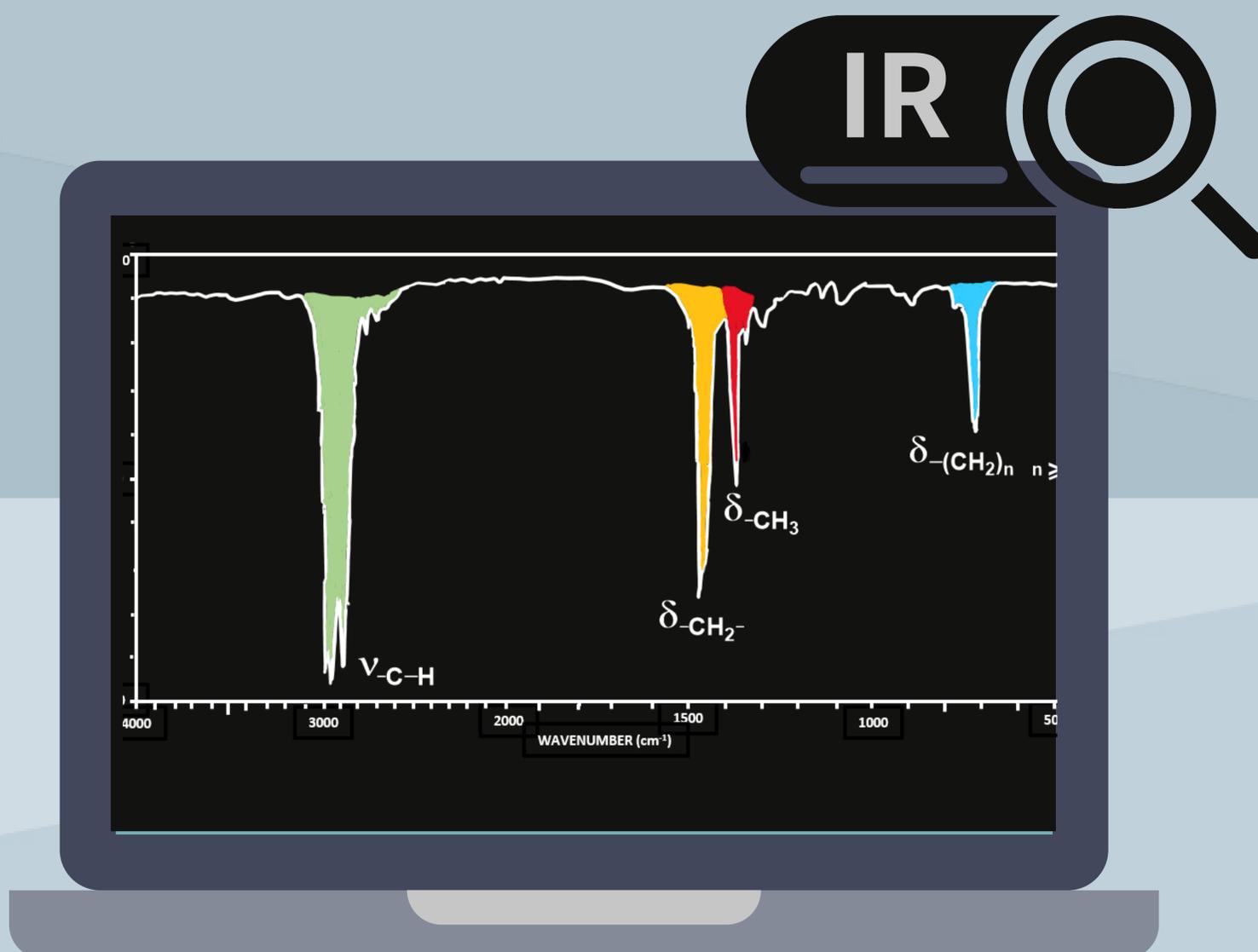




UNIVERSIDAD  
DE BURGOS

# INFOGRAFÍAS DE ESPECTROS DE INFRARROJO



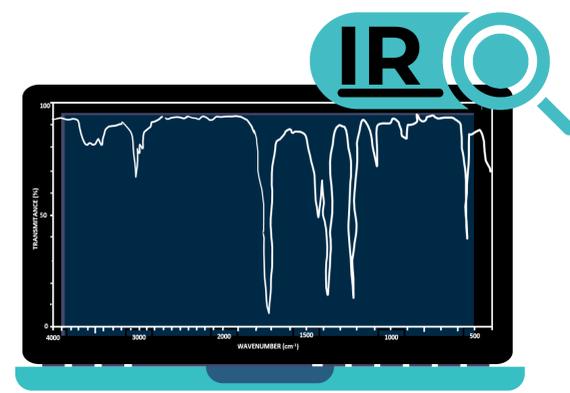


# ÍNDICE

¿En qué regiones del espectro de infrarrojo absorben los distintos enlaces?.....	1
Espectro de infrarrojo de hidrocarburos.....	2
Espectro de infrarrojo de alcanos.....	3
Espectro de infrarrojo de alquenos y alquinos.....	4
Espectro de infrarrojo de compuestos aromáticos.....	5
Espectro de infrarrojo de alcoholes.....	6
Espectro de infrarrojo de éteres.....	7
Espectro de infrarrojo de aminas.....	8
Espectro de infrarrojo de compuestos carbonílicos.....	9
Espectro de infrarrojo de aldehídos y cetonas.....	10
Espectro de infrarrojo de ácidos carboxílicos.....	11
Espectro de infrarrojo de ésteres.....	12
Espectro de infrarrojo de amidas.....	13
Espectro de infrarrojo de anhídridos de ácido.....	14
Espectro de infrarrojo de nitrilos.....	15

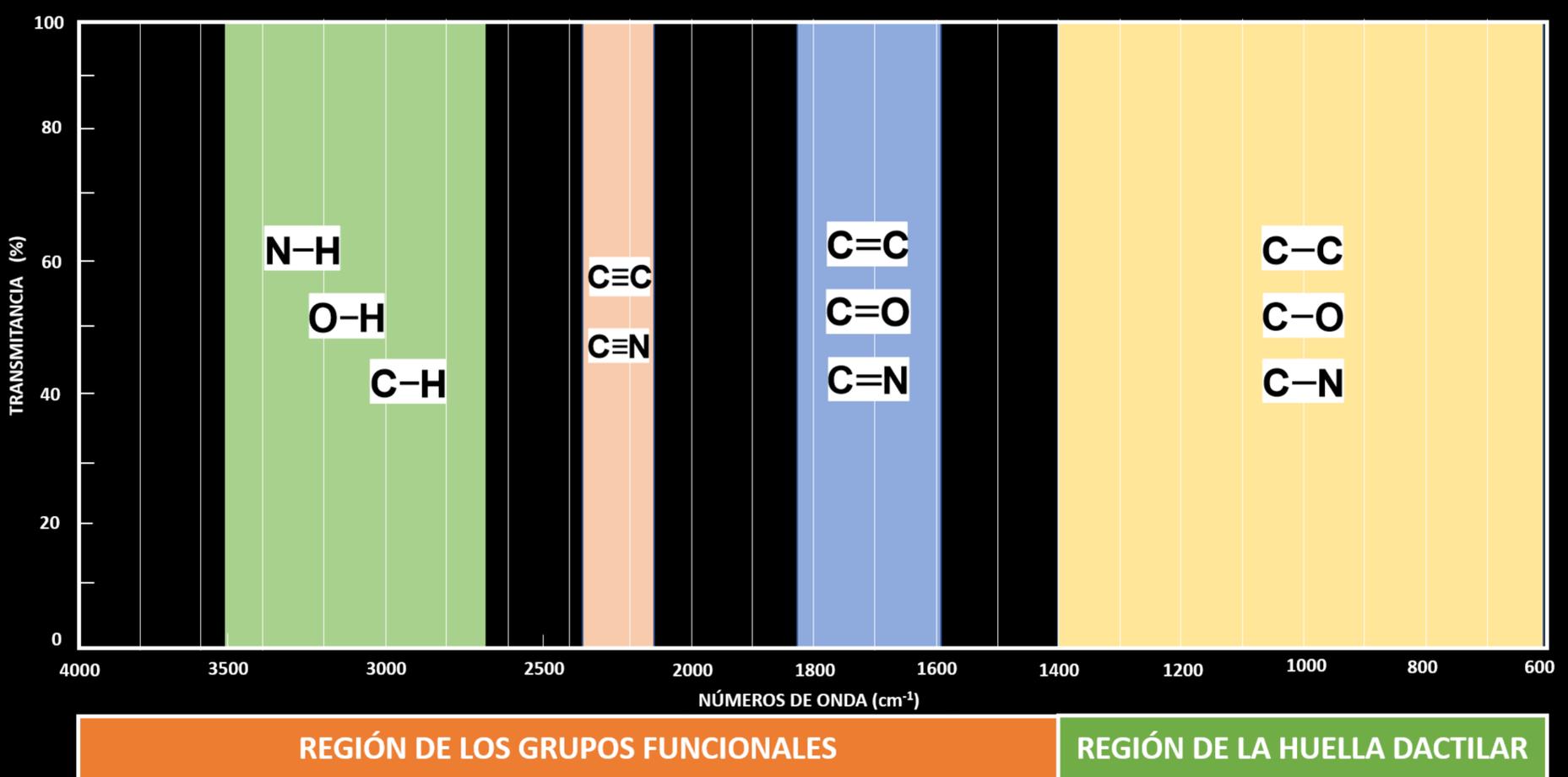


# ¿EN QUÉ REGIONES DEL ESPECTRO DE INFRARROJO ABSORBEN LOS DISTINTOS ENLACES?

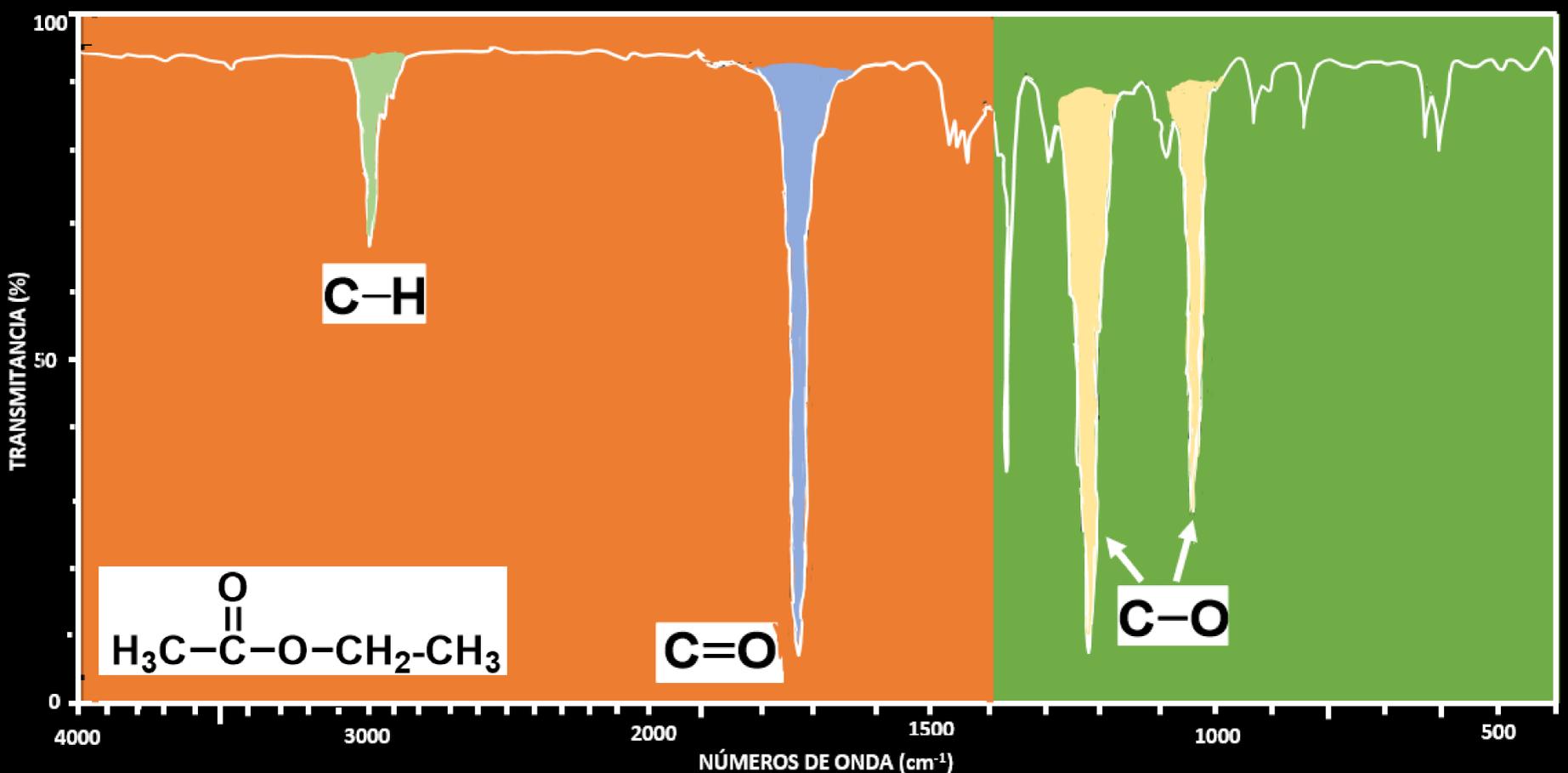


En el espectro de infrarrojo se distinguen dos regiones bien diferenciadas:

- **Región de los grupos funcionales entre 4000 y 1400  $\text{cm}^{-1}$ :** frecuencias de absorción típicas de los grupos funcionales.
- **Región de la huella dactilar entre 1400 y 600  $\text{cm}^{-1}$ :** característica de cada compuesto.



Ejemplo: espectro de IR de acetato de etilo (solución en  $\text{CCl}_4$ )





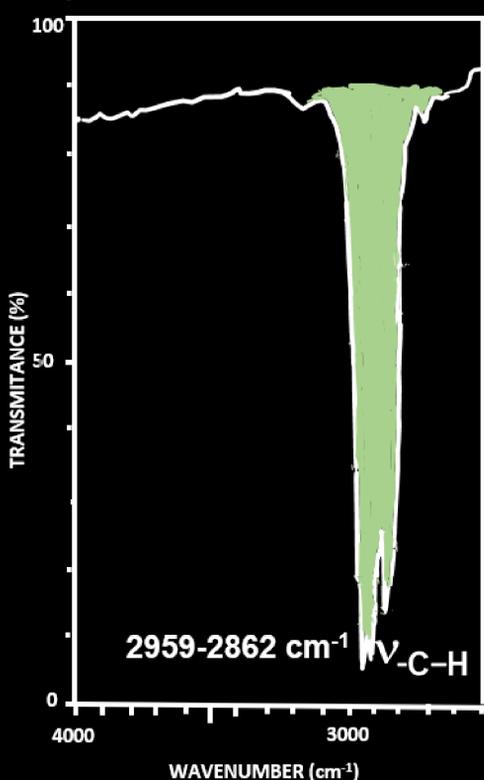
# ESPECTRO DE INFRARROJO DE HIDROCARBUROS



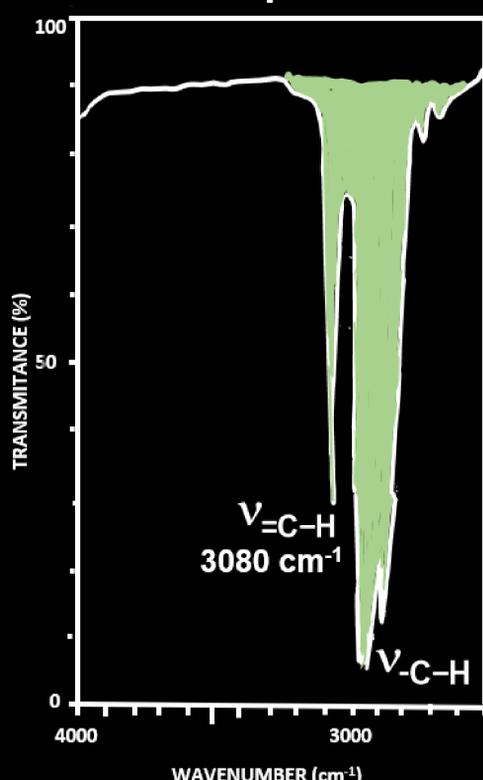
## Bandas de tensión (stretching) del enlace C-H

$\text{H}-\text{C } sp^3$ (-CH, alcanos)	2800-3000 $\text{cm}^{-1}$
$\text{H}-\text{C } sp^2$ (=CH, alquenos)	3000-3100 $\text{cm}^{-1}$
$\text{H}-\text{C } sp^2$ (=CH, aromáticos)	3030 $\text{cm}^{-1}$
$\text{H}-\text{C } sp$ ( $\equiv\text{CH}$ , alquinos)	3300 $\text{cm}^{-1}$

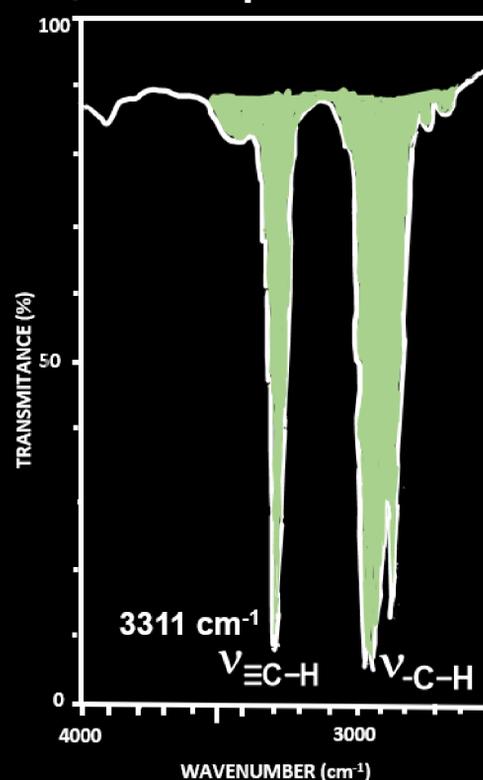
Alcano



Alqueno



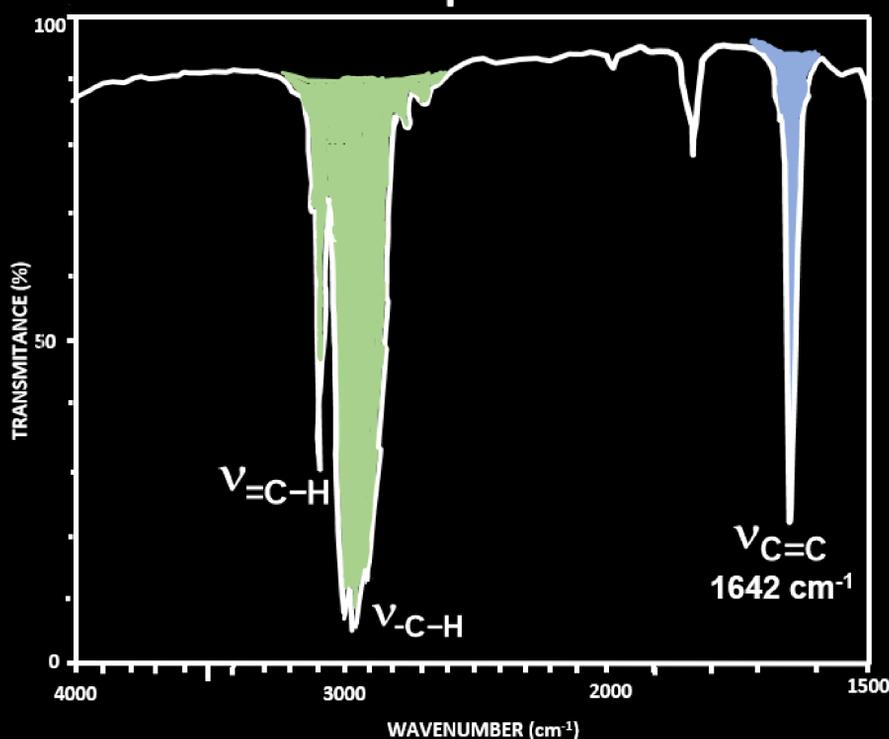
Alquino



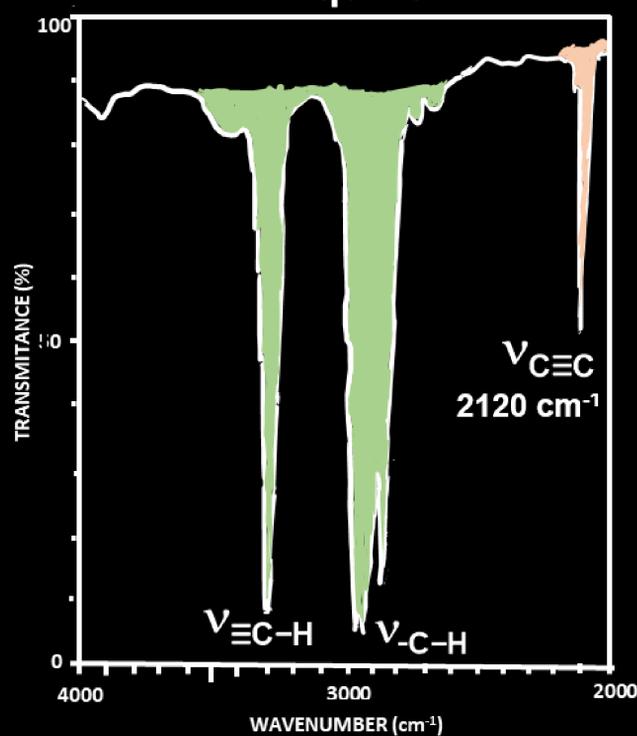
## Bandas de tensión (stretching) del enlace C-C

$\text{C}-\text{C}$	1200 $\text{cm}^{-1}$
$\text{C}=\text{C}$	1660 $\text{cm}^{-1}$
$\text{C}\equiv\text{C}$	< 2200 $\text{cm}^{-1}$ (débil o ausente si es interno)

Alqueno



Alquino

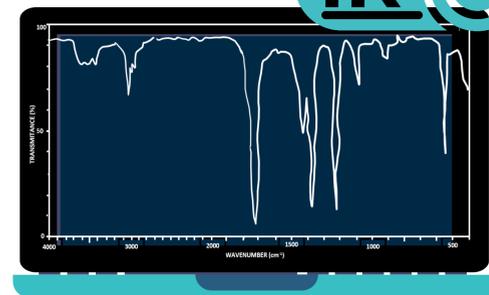


La conjugación disminuye la frecuencia:

$\text{C}=\text{C}$ aislado	1640-1680 $\text{cm}^{-1}$
$\text{C}=\text{C}$ conjugado	1620-1640 $\text{cm}^{-1}$
$\text{C}=\text{C}$ aromático	aprox. 1600 $\text{cm}^{-1}$

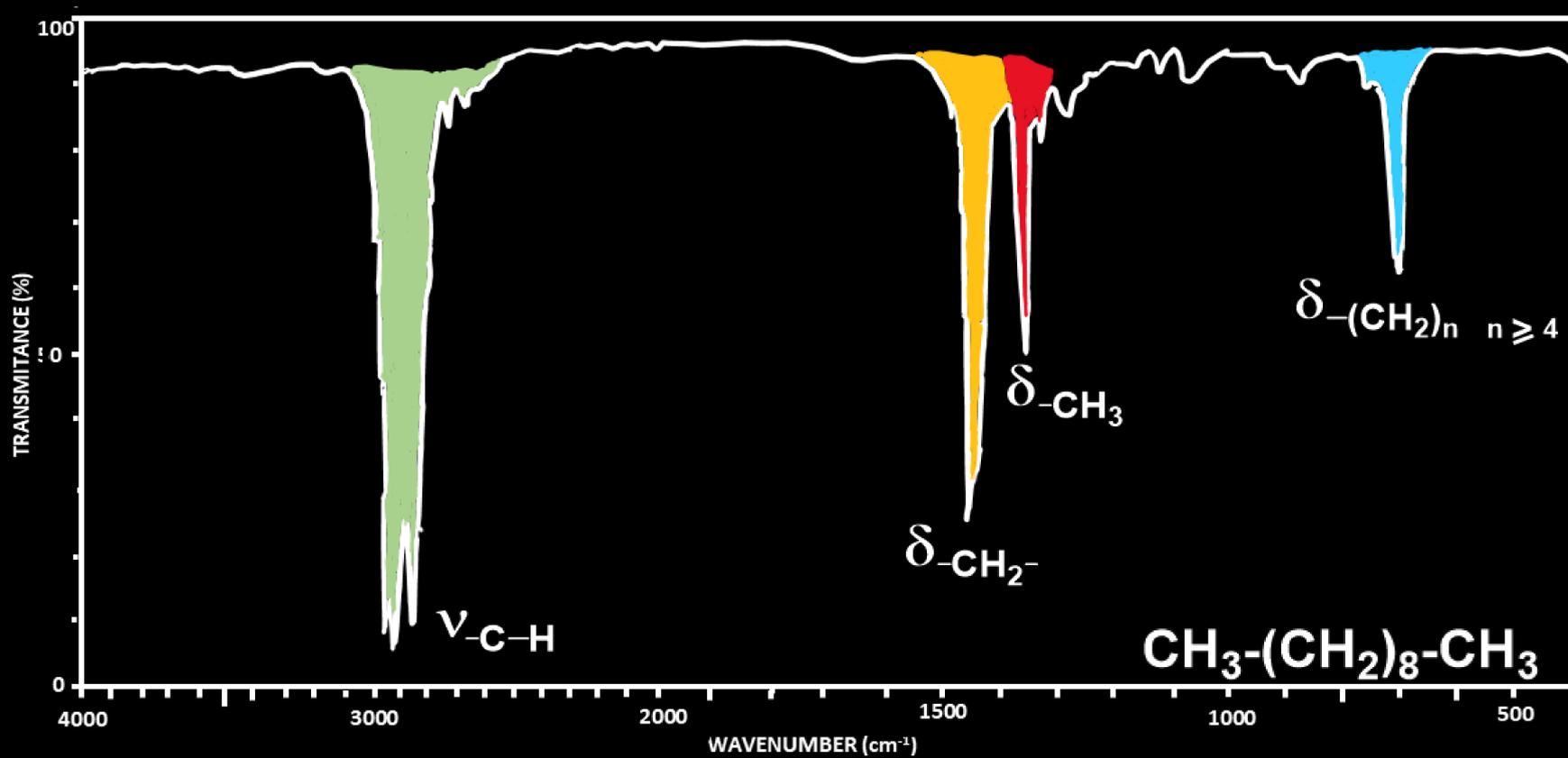


# ESPECTRO DE INFRARROJO DE ALCANOS

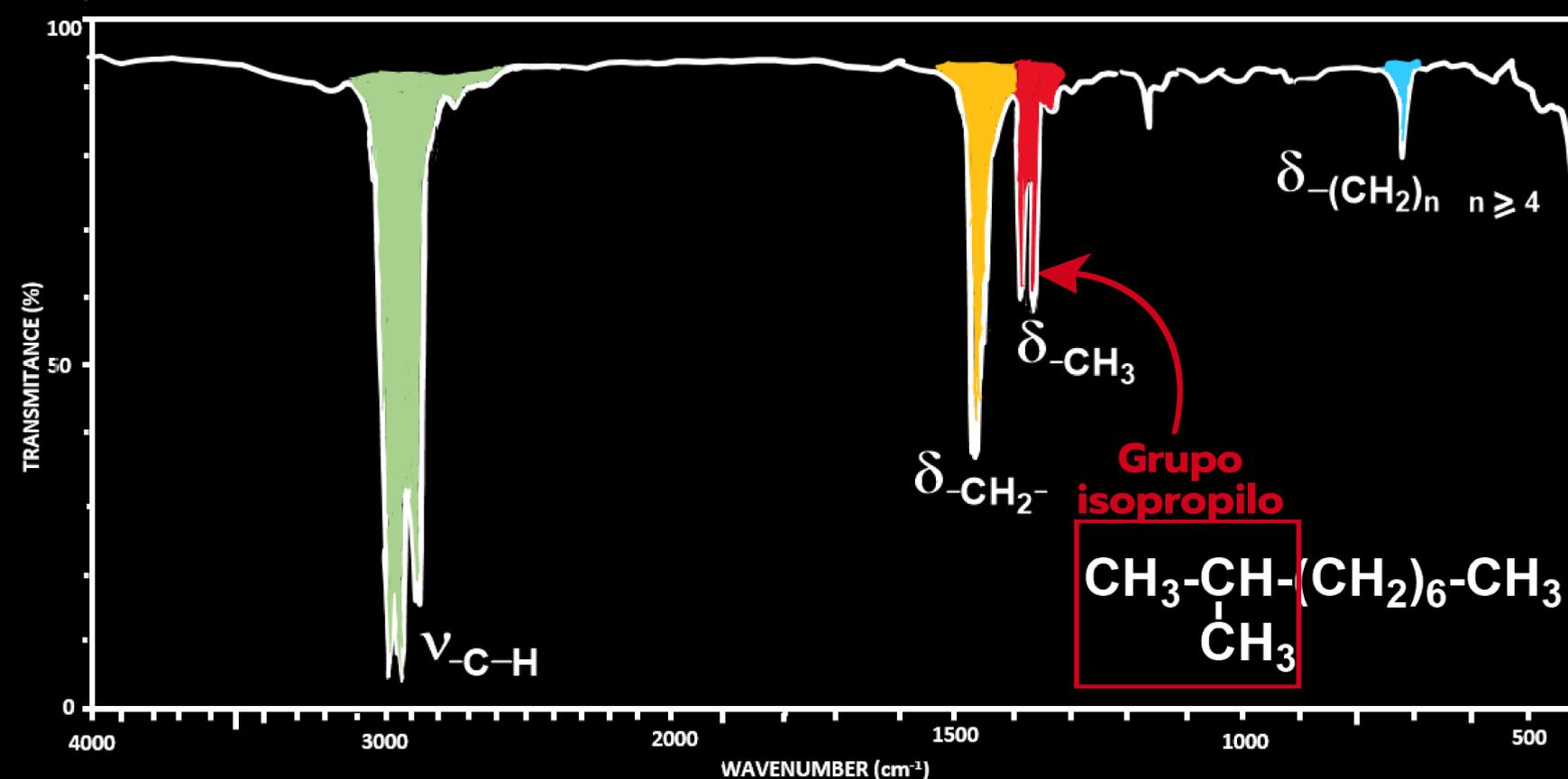


- C-H** Vibración de tensión ( $\nu$ ) 2800-3000  $\text{cm}^{-1}$
- CH<sub>2</sub>** Vibración de flexión ( $\delta$ ) 1450-1485  $\text{cm}^{-1}$   
Banda a 720  $\text{cm}^{-1}$  cuando hay más de 4 -CH<sub>2</sub> juntos
- CH<sub>3</sub>** Vibración de flexión ( $\delta$ ) 1375-1380  $\text{cm}^{-1}$   
Dobletea cuando hay grupos isopropilo o *ter*-butilo

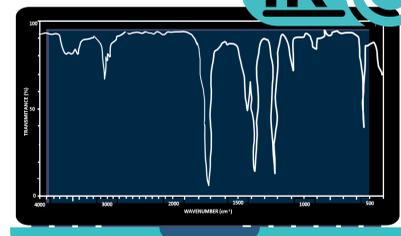
Espectro IR del decano



Espectro IR del 2-metilnonano



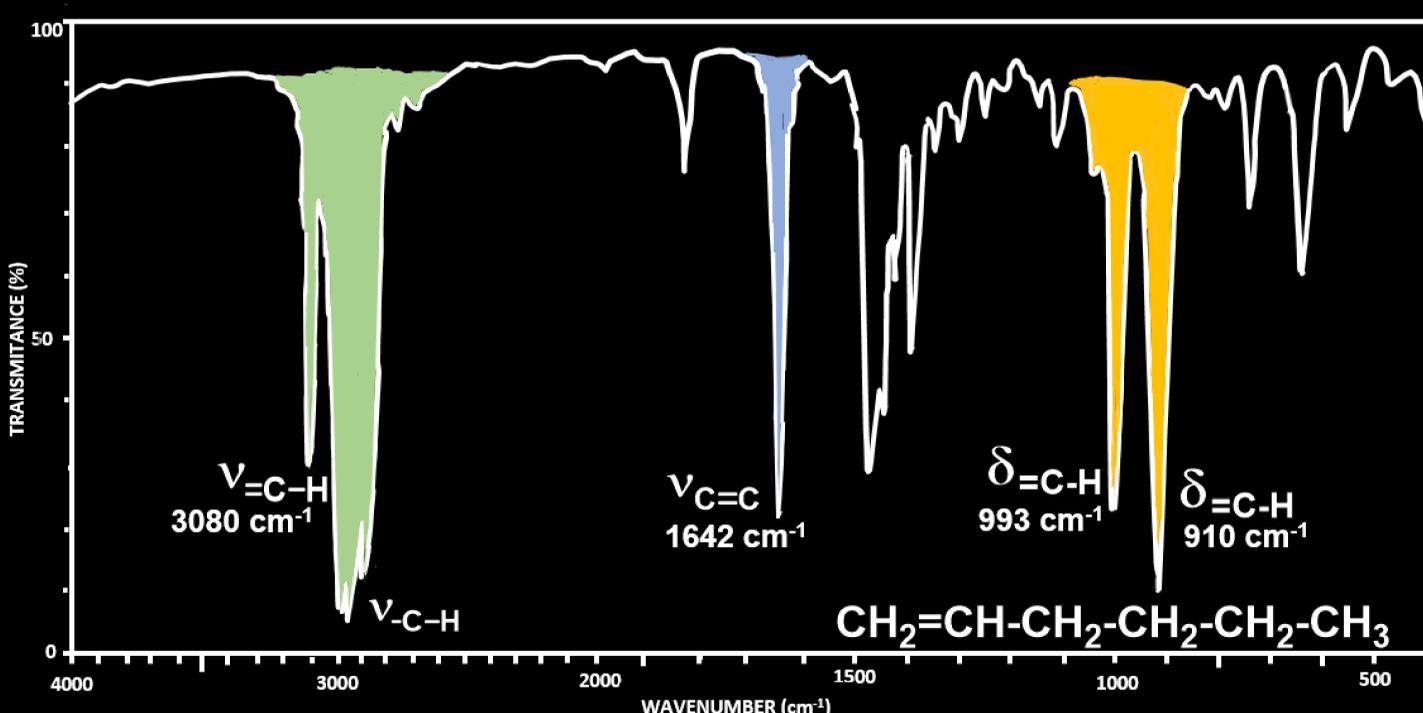
# ESPECTRO DE INFRARROJO DE ALQUENOS Y ALQUINOS



## ALQUENOS

- $\text{=C-H}$  Vibración de tensión ( $\nu$ )  $3000\text{-}3100\text{ cm}^{-1}$
- $\text{C=C}$  Vibración de tensión ( $\nu$ )  $1640\text{-}1680\text{ cm}^{-1}$  (a menudo débil)  
La conjugación desplaza la banda ( $1620\text{-}1640\text{ cm}^{-1}$ )
- $\text{=C-H}$  Vibración de flexión ( $\delta$ ) fuera del plano  $1000\text{-}650\text{ cm}^{-1}$

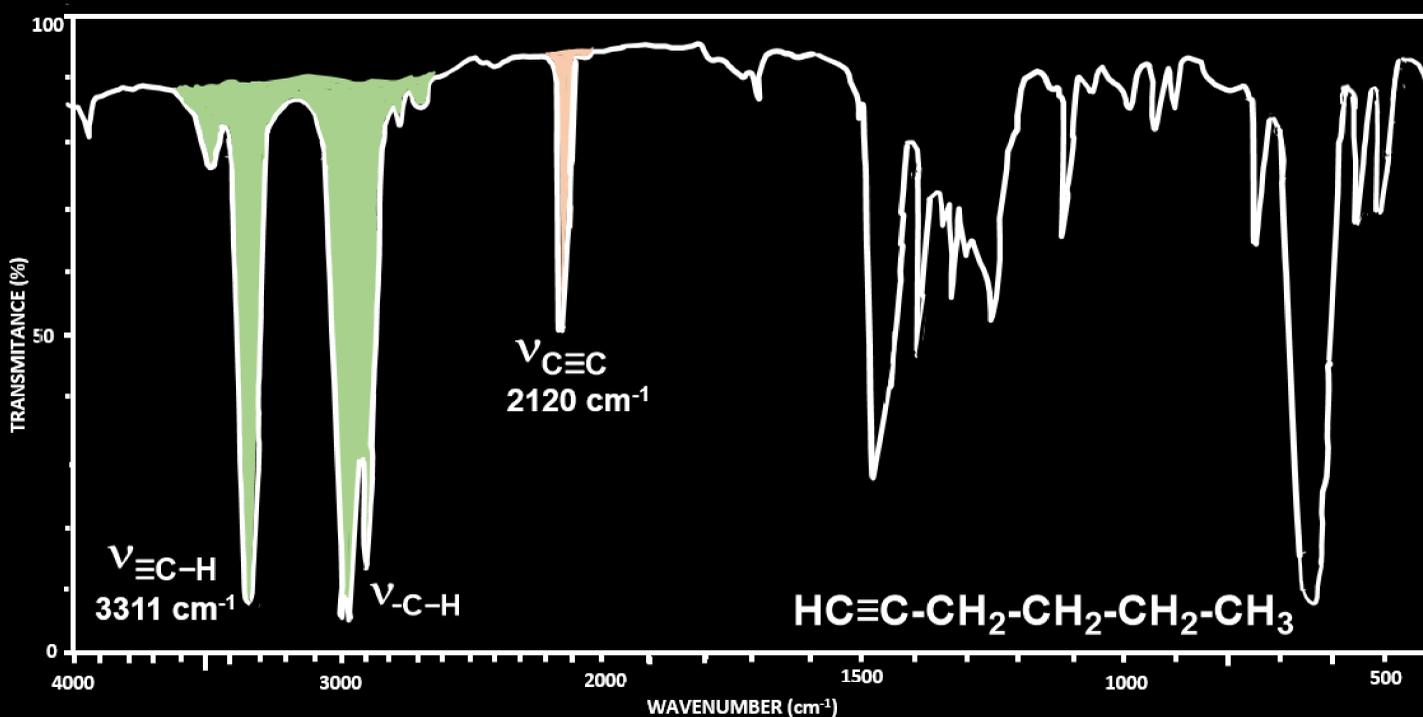
### Espectro IR del 1-hexeno



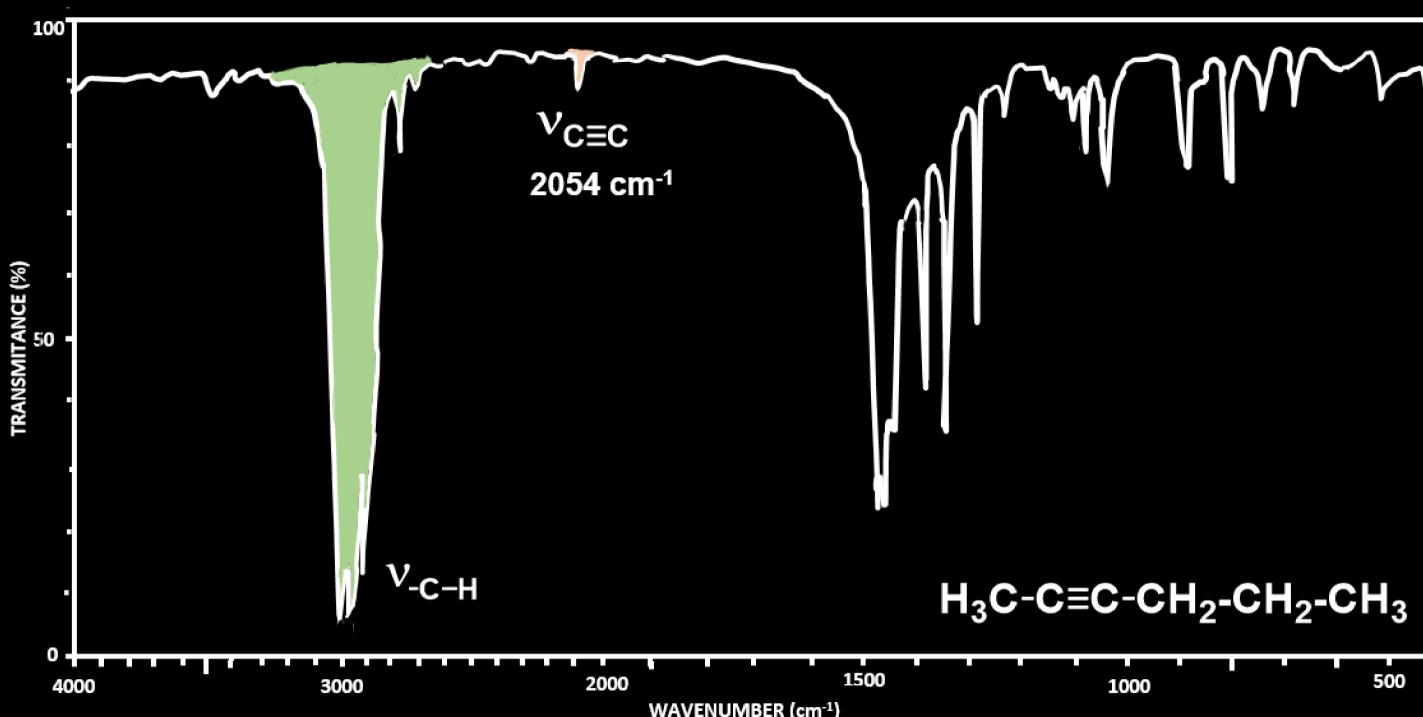
## ALQUINOS

- $\text{≡C-H}$  Vibración de tensión ( $\nu$ ) a  $3300\text{ cm}^{-1}$
- $\text{C≡C}$  Vibración de tensión ( $\nu$ )  $2150\text{ cm}^{-1}$   
La conjugación desplaza la banda a la derecha

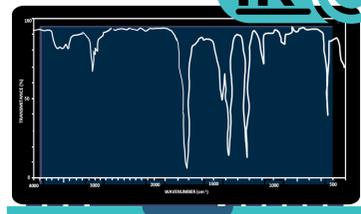
### Espectro IR del 1-hexino



### Espectro IR del 2-hexino



# ESPECTRO INFRARROJO DE COMPUESTOS AROMÁTICOS

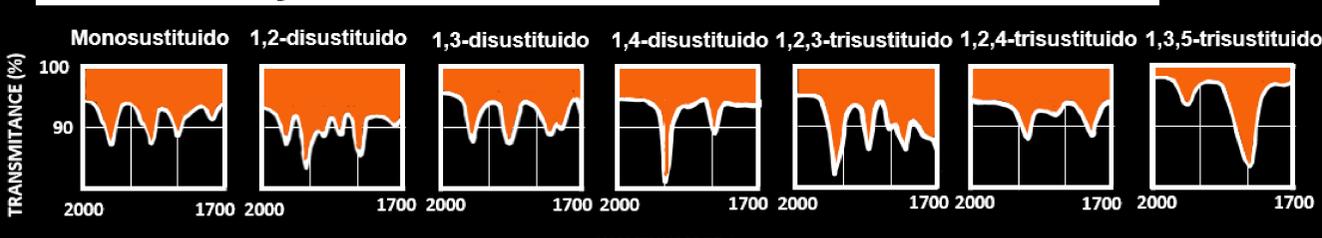


**=C-H** Vibración de tensión ( $\nu$ ) 3000-3100  $\text{cm}^{-1}$

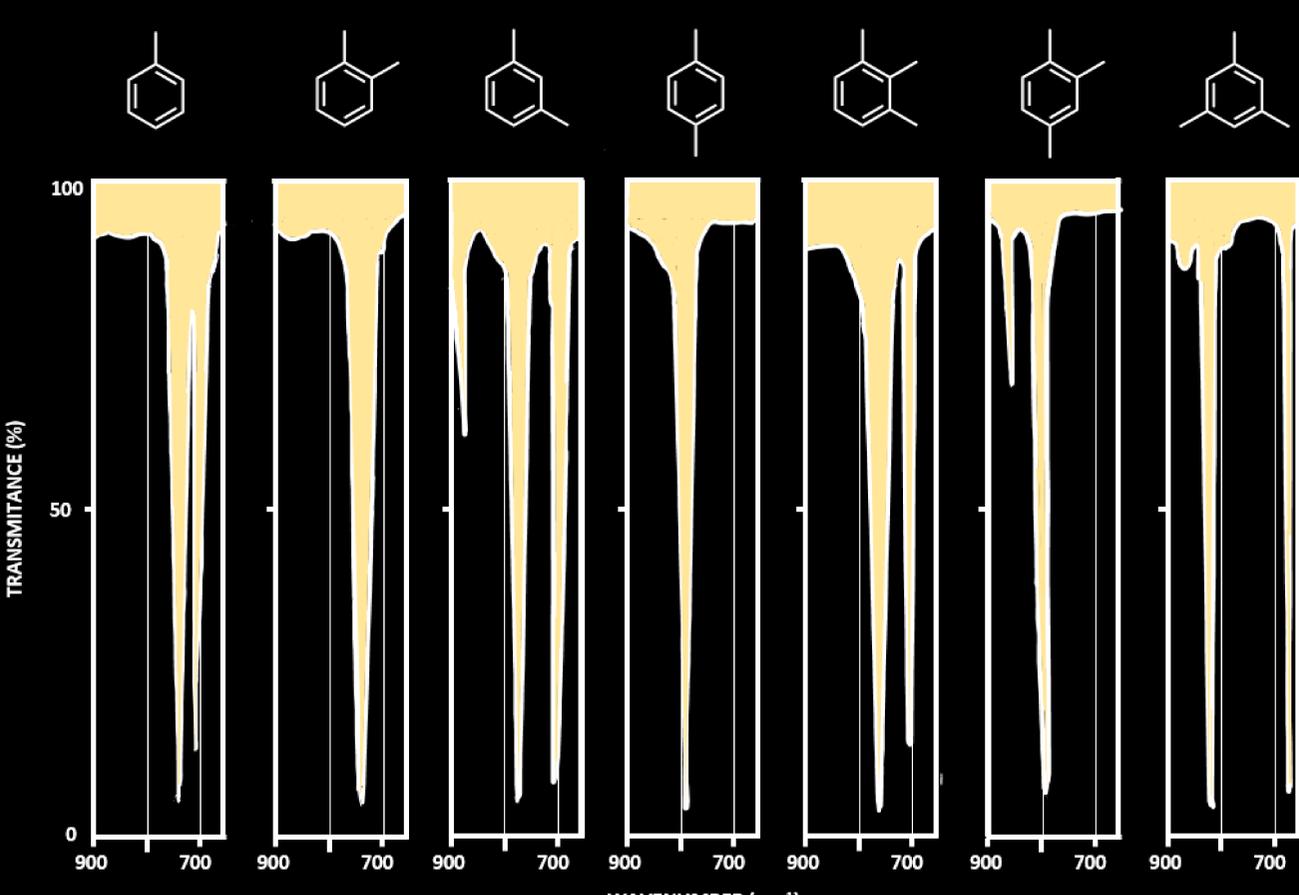
**C=C** Vibración de tensión ( $\nu$ ) dos bandas, 1600  $\text{cm}^{-1}$  y 1450  $\text{cm}^{-1}$

**=C-H** Vibración de flexión ( $\delta$ ) fuera del plano 690-900  $\text{cm}^{-1}$

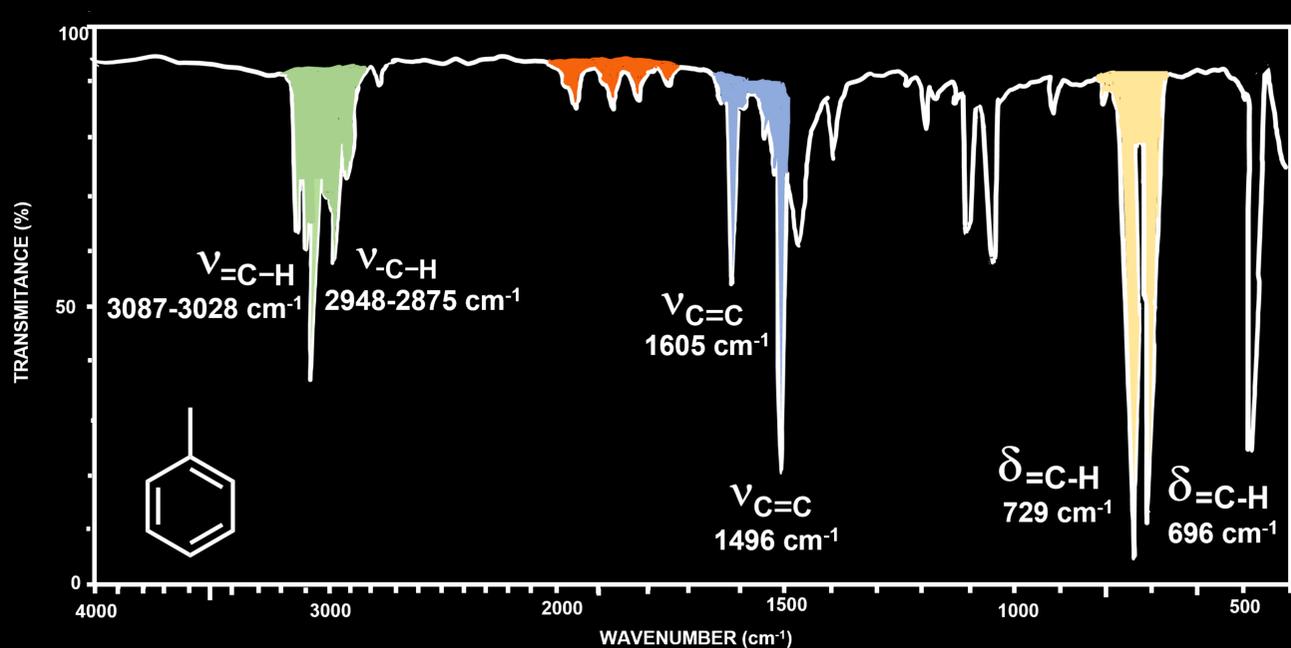
## Sobretonos y bandas de combinación entre 2000-1700 $\text{cm}^{-1}$



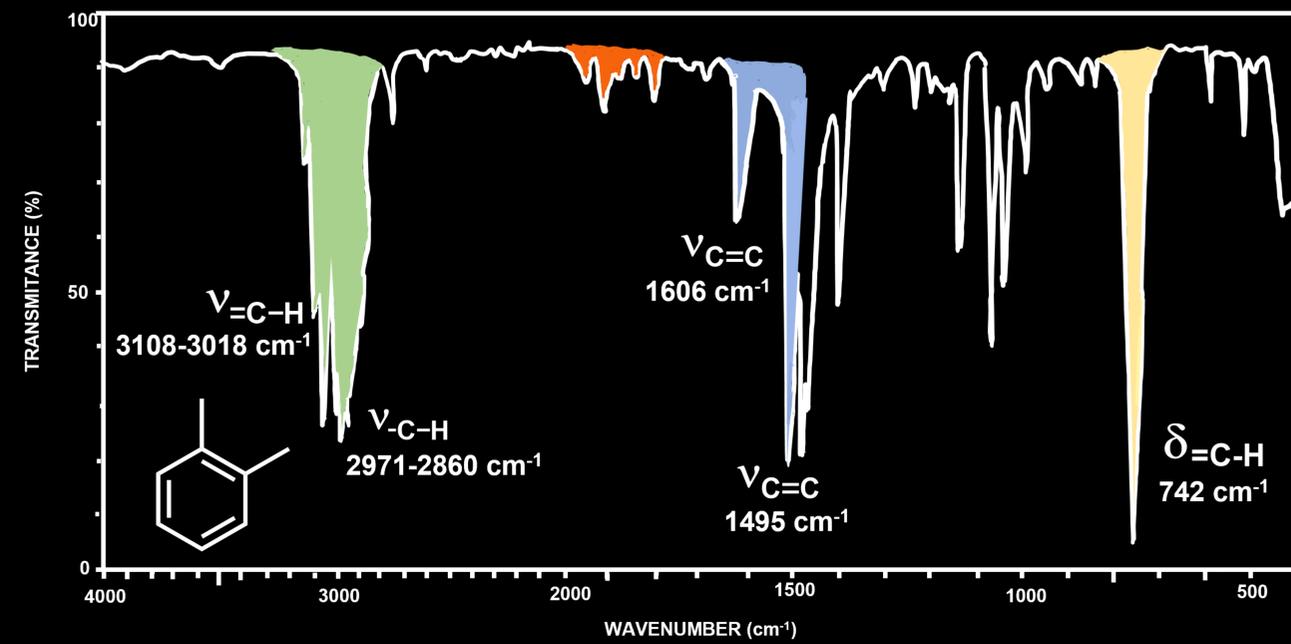
## Bandas de flexión del enlace C-H fuera del plano en bencenos sustituidos



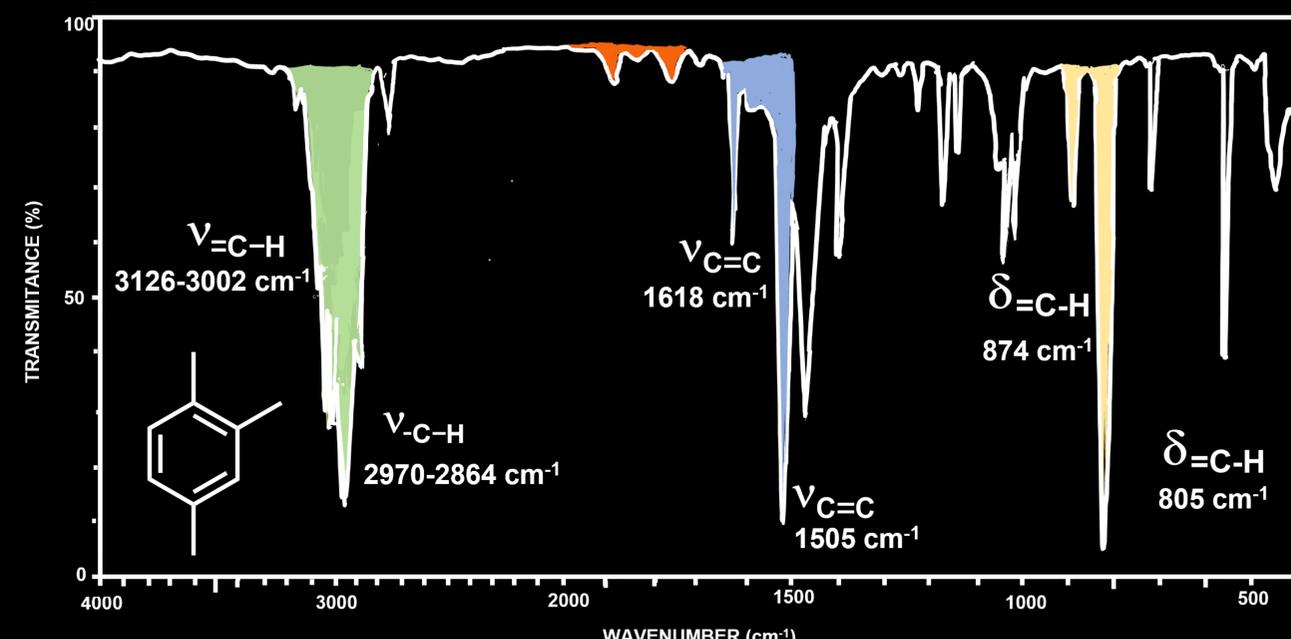
## Espectro IR del tolueno



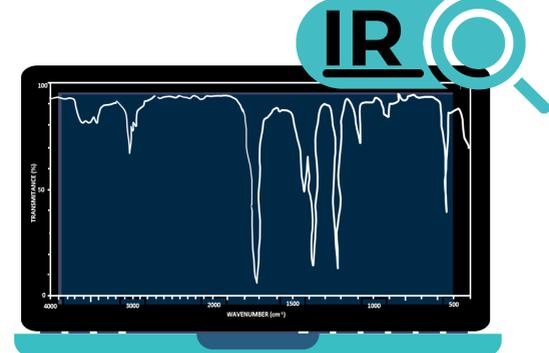
## Espectro IR del o-xileno



## Espectro IR del 1,2,4-trimetilbenceno



# ESPECTRO INFRARROJO DE ALCOHOLES

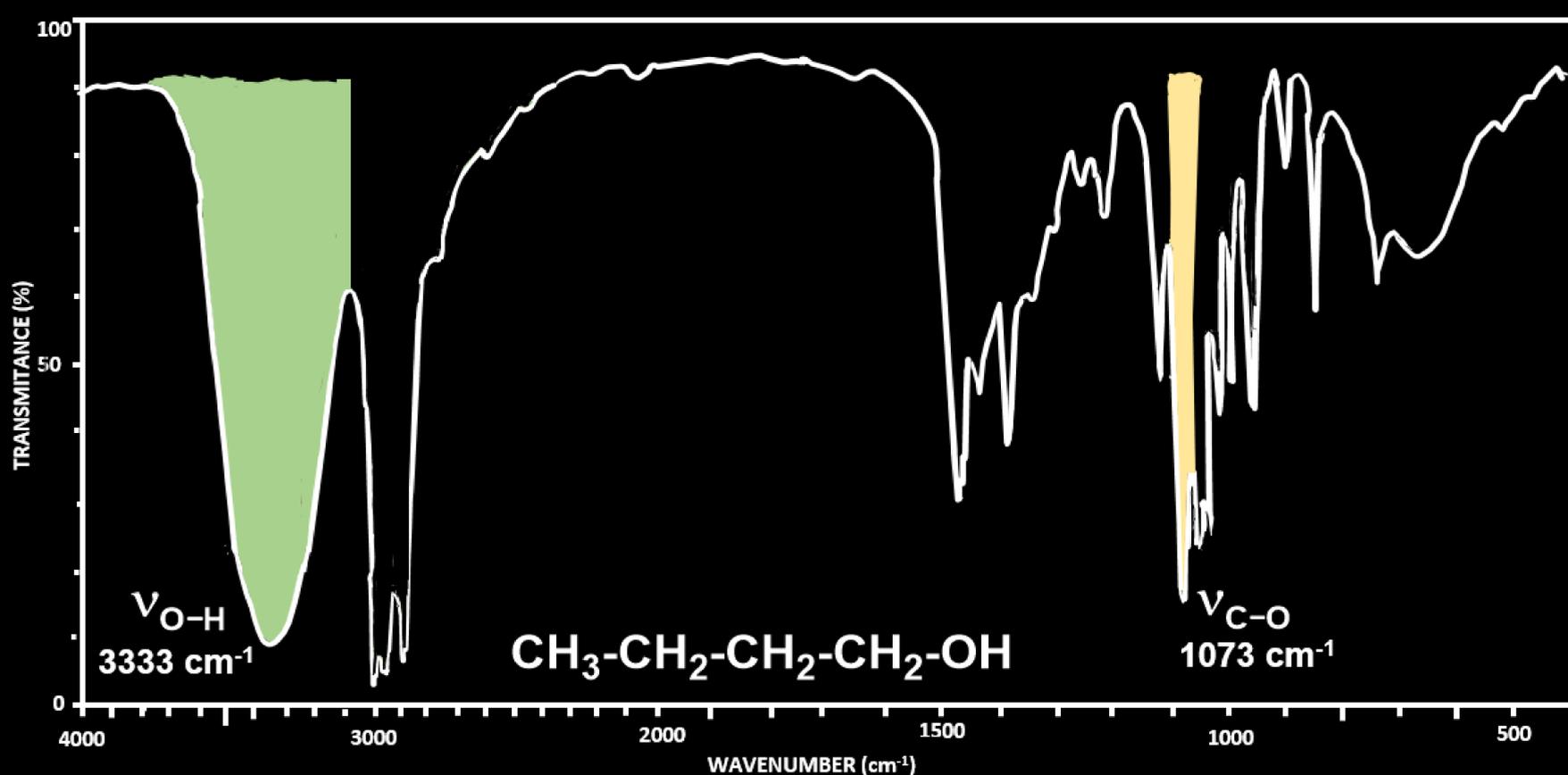


- O-H** Vibración de tensión ( $\nu$ )  $3200-3700\text{ cm}^{-1}$  (depende de la concentración)
- En solución concentrada hay enlaces de hidrógeno y se observa una banda ancha entre  $3200-3400\text{ cm}^{-1}$
  - En solución diluida hay menos enlaces de hidrógeno y aparece una segunda señal aguda a  $3600\text{ cm}^{-1}$

**C-O** Vibración de tensión ( $\nu$ )  $1000-1200\text{ cm}^{-1}$

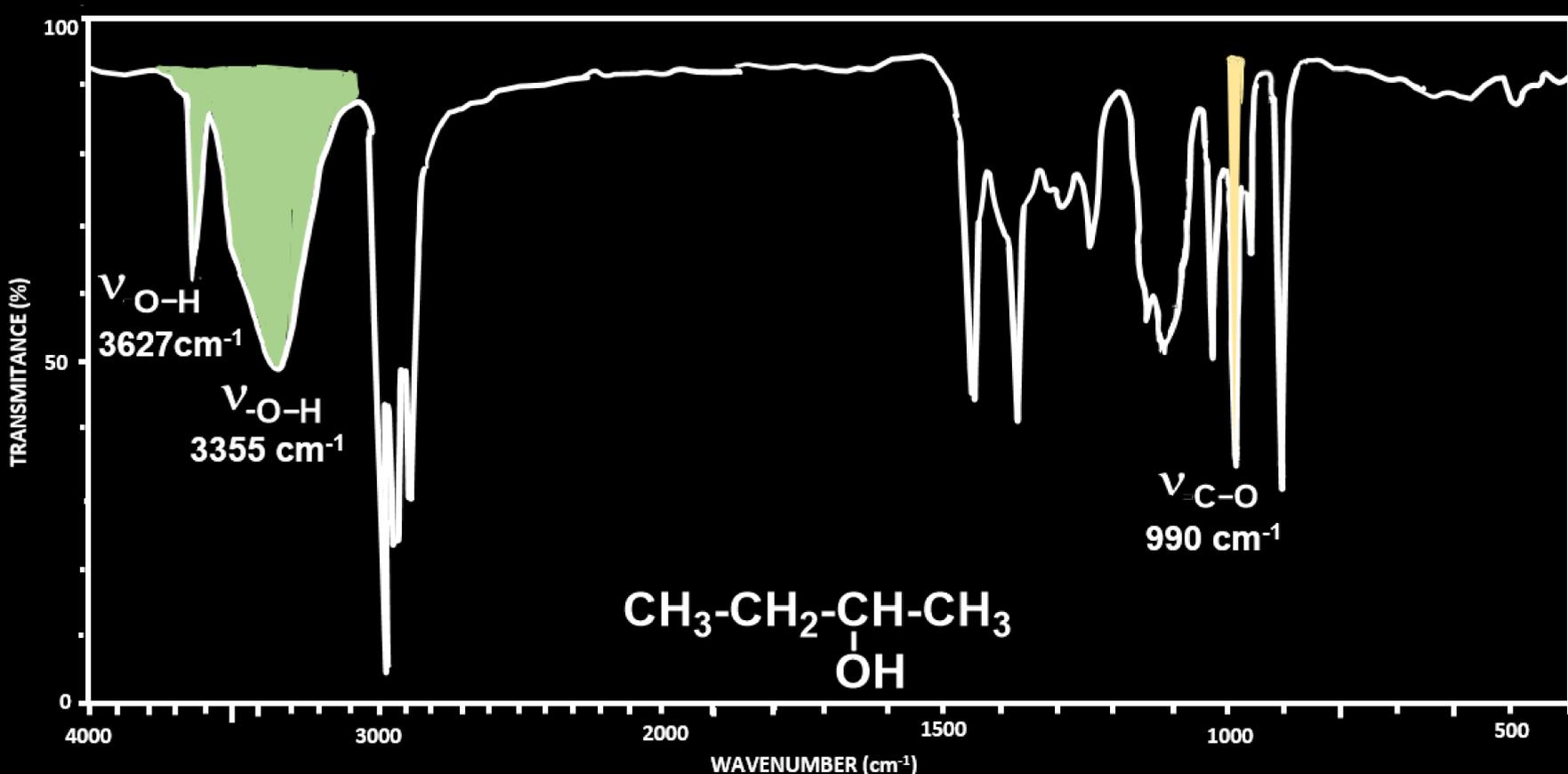
## Espectro IR del propanol

Líquido puro

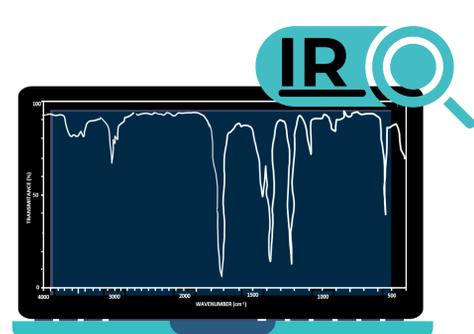


## Espectro IR del 2-butanol

Solución en tetracloruro de carbono



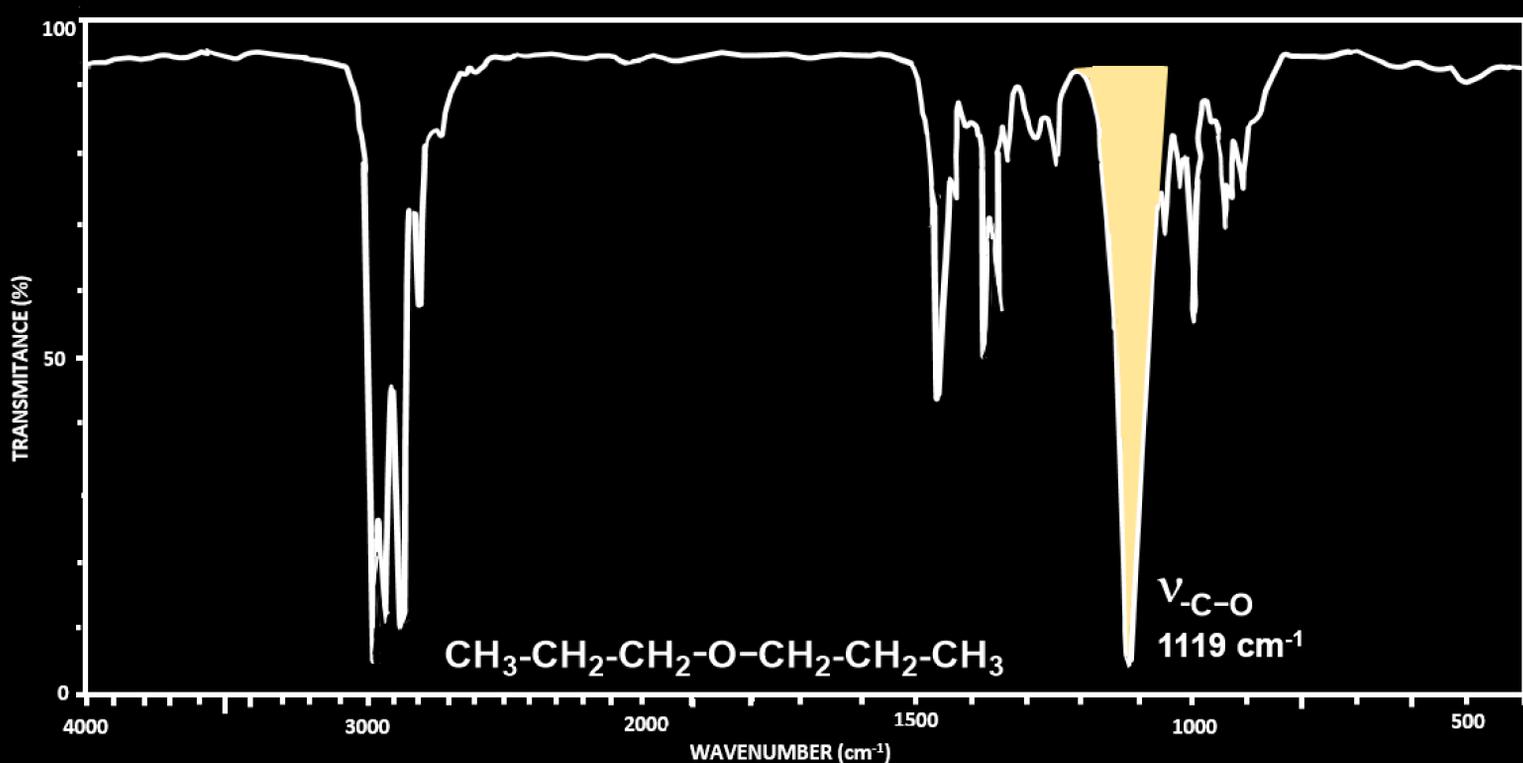
# ESPECTRO INFRARROJO DE ÉTERES



- C-O-C** Vibración de tensión ( $\nu$ ), banda intensa y ancha
- Éteres alquílicos en torno a  $1070-1150\text{ cm}^{-1}$
- =C-O-C** Vibración de tensión ( $\nu$ )
- Aril y vinil éteres
  - =C-O, más intensa entre  $1200-1275\text{ cm}^{-1}$
  - -C-O, más débil entre  $1020-1075\text{ cm}^{-1}$

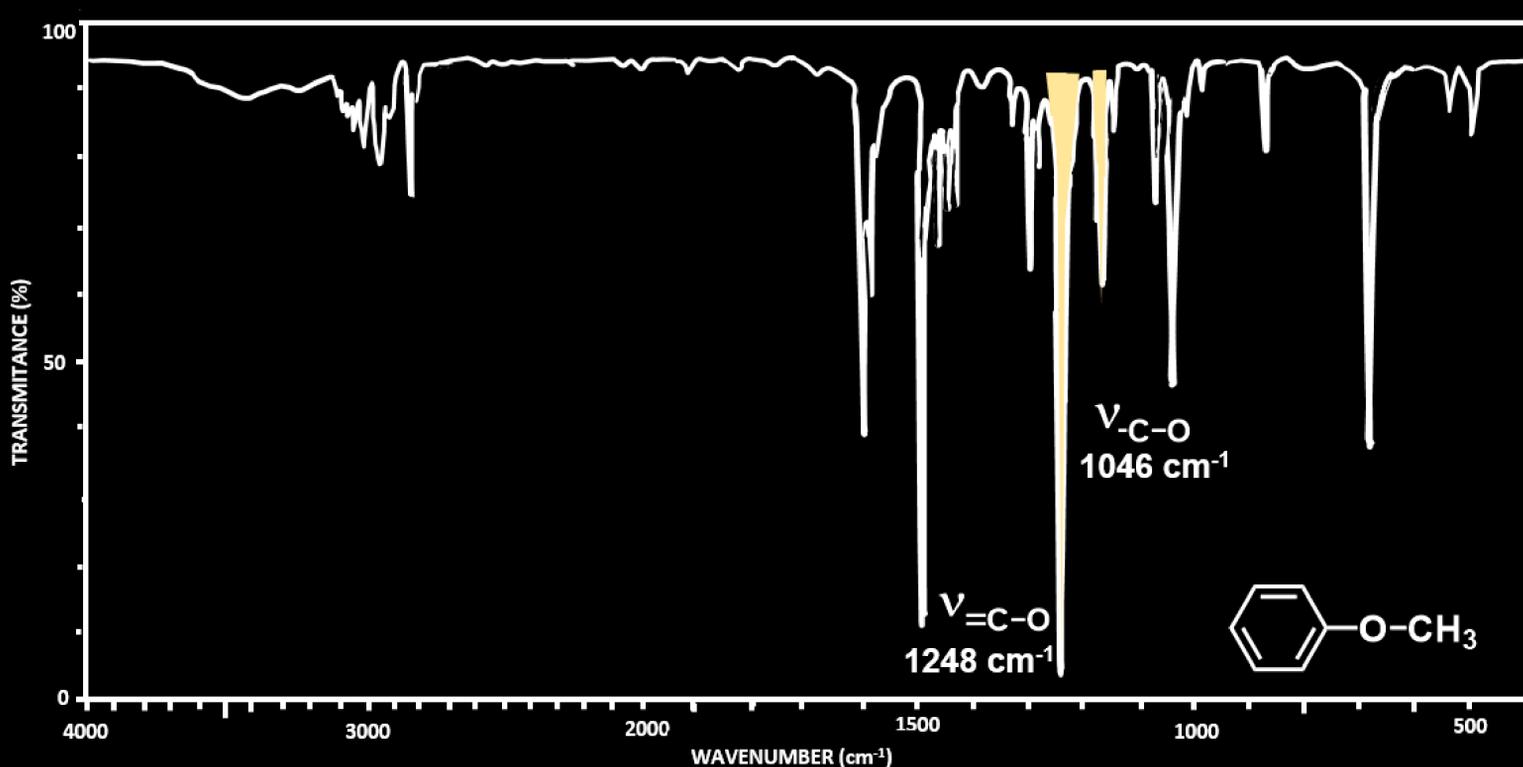
## Espectro IR del dipropiléter

Solución en tetracloruro de carbono



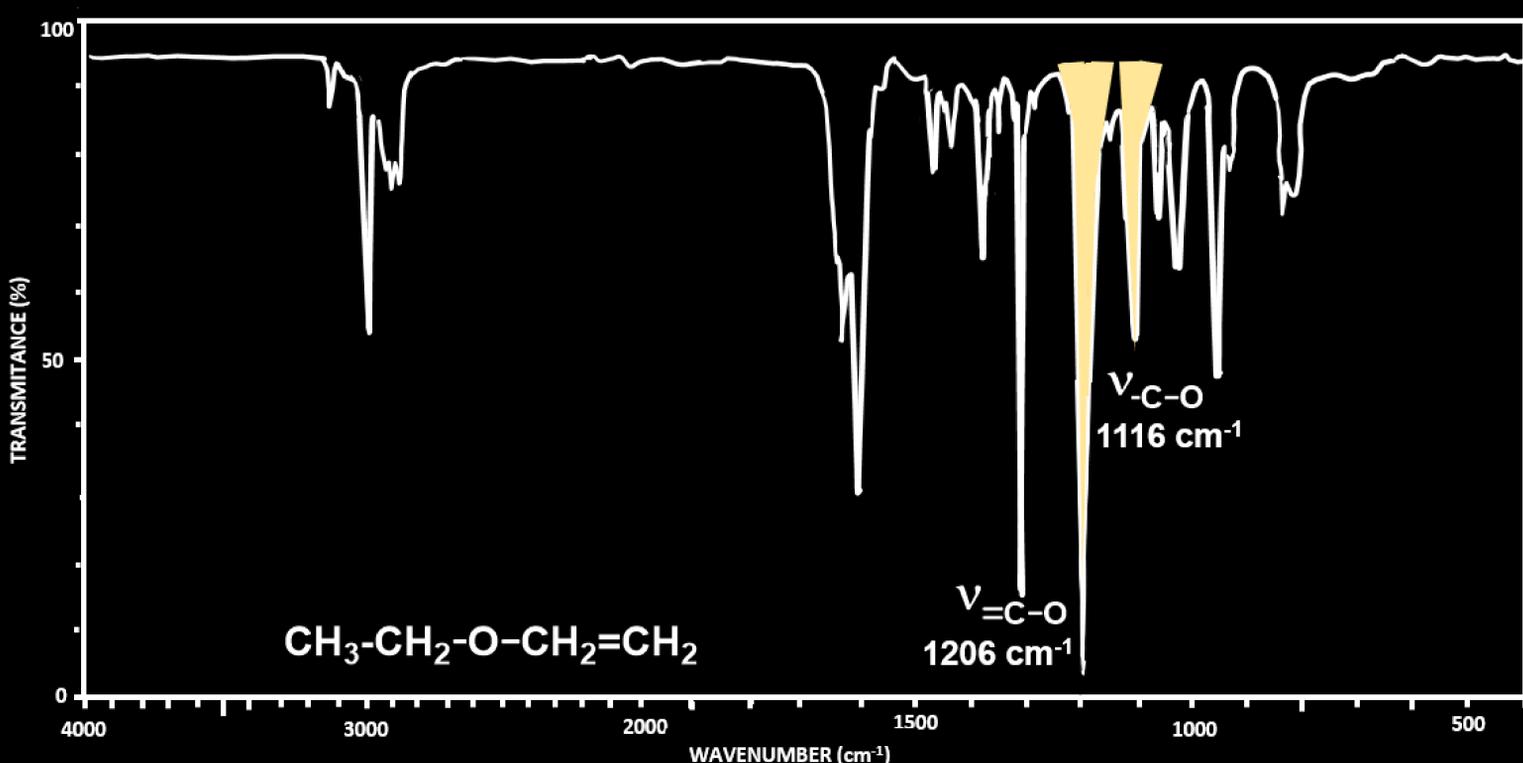
## Espectro IR del metoxibenceno

Solución en tetracloruro de carbono

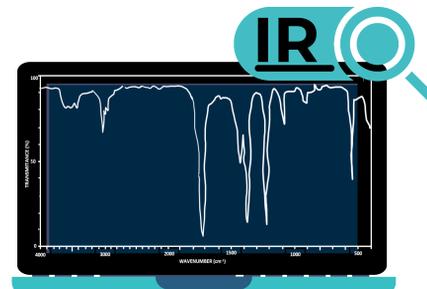


## Espectro IR del etilviniléter

Solución en tetracloruro de carbono



# ESPECTRO INFRARROJO DE AMINAS

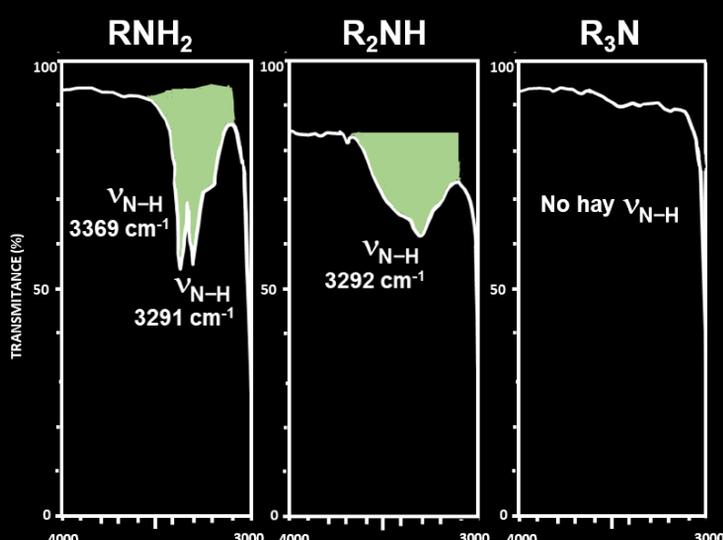


## N-H Vibración de tensión ( $\nu$ ) 3300-3500 $\text{cm}^{-1}$

$\text{RNH}_2$ : dos bandas a 3350  $\text{cm}^{-1}$  y 3450  $\text{cm}^{-1}$  (simétrica y antisimétrica)

$\text{R}_2\text{NH}$ : una banda entre 3310-3350  $\text{cm}^{-1}$

$\text{R}_3\text{N}$ : no tienen banda de estiramiento N-H

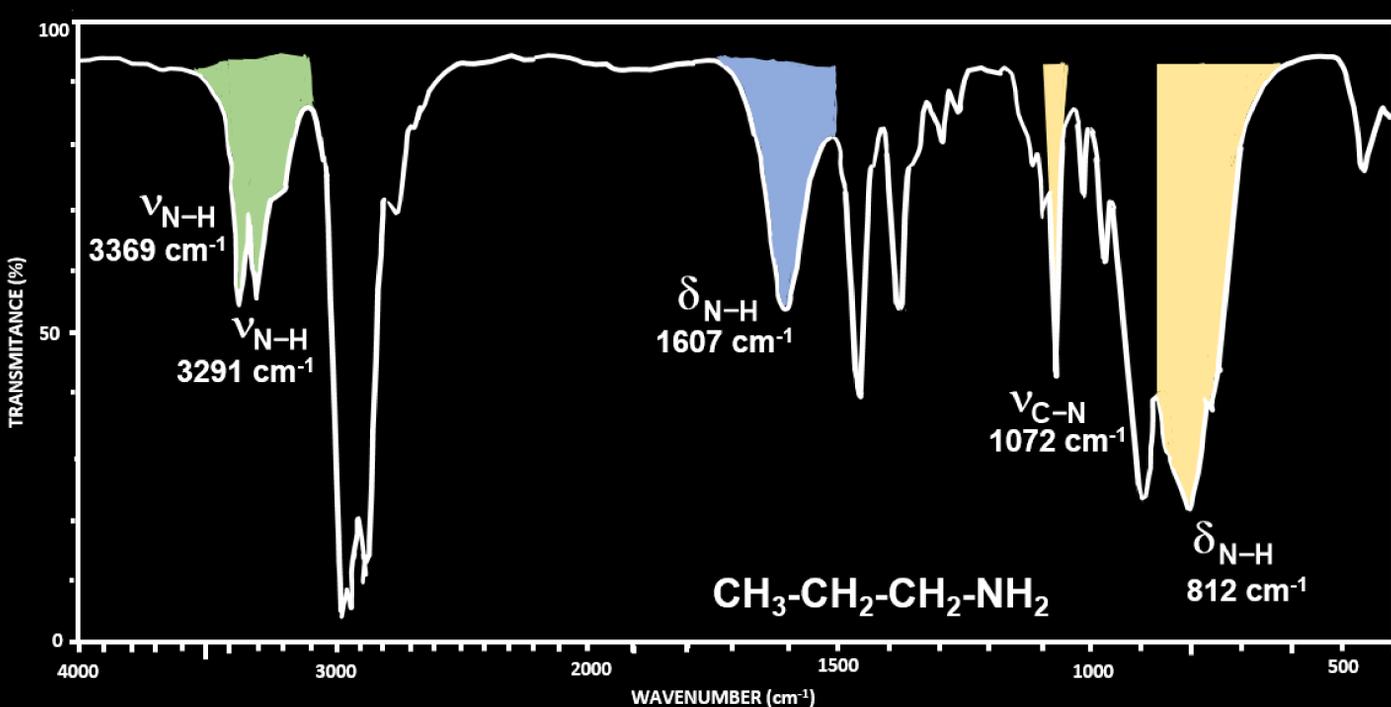


## C-N Vibración de tensión ( $\nu$ ) 1000-1350 $\text{cm}^{-1}$

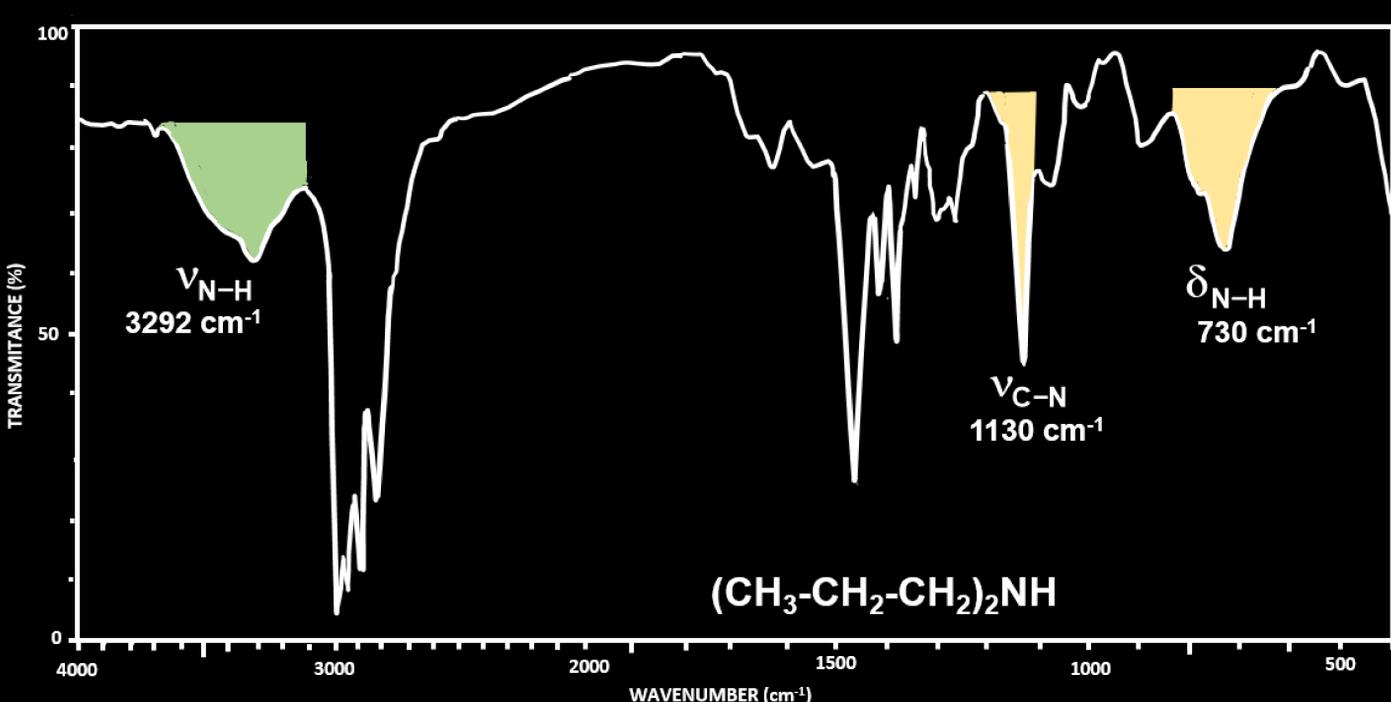
N-H Vibración de flexión tijera ( $\delta$ ) 1640-1560  $\text{cm}^{-1}$  (en  $\text{RNH}_2$ )

N-H Vibración de flexión fuera del plano ( $\delta$ ) 650-900  $\text{cm}^{-1}$  (en  $\text{RNH}_2$  y  $\text{R}_2\text{NH}$ )

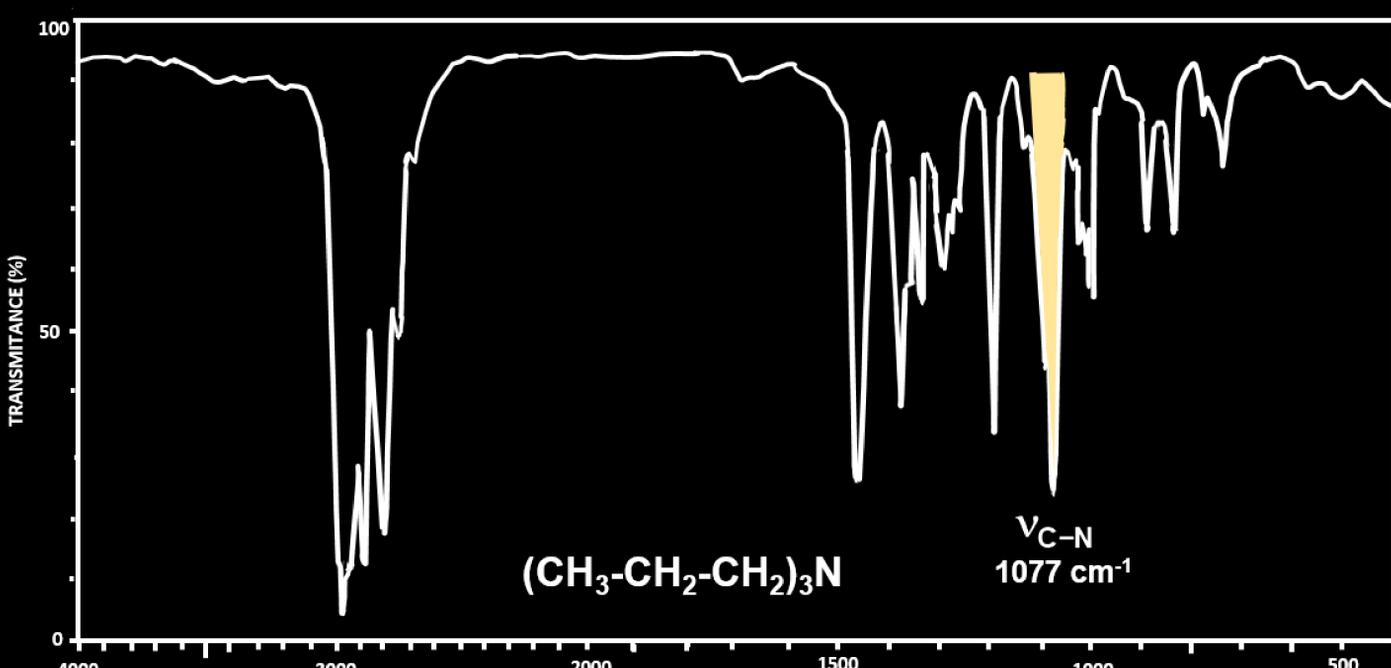
### Espectro IR de la propilamina (amina primaria) Líquido puro



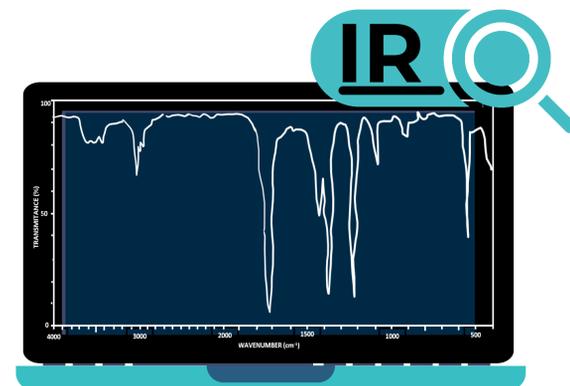
### Espectro IR de la dipropilamina (amina secundaria) Líquido puro



### Espectro IR de la tripropilamina (amina terciaria) Líquido puro

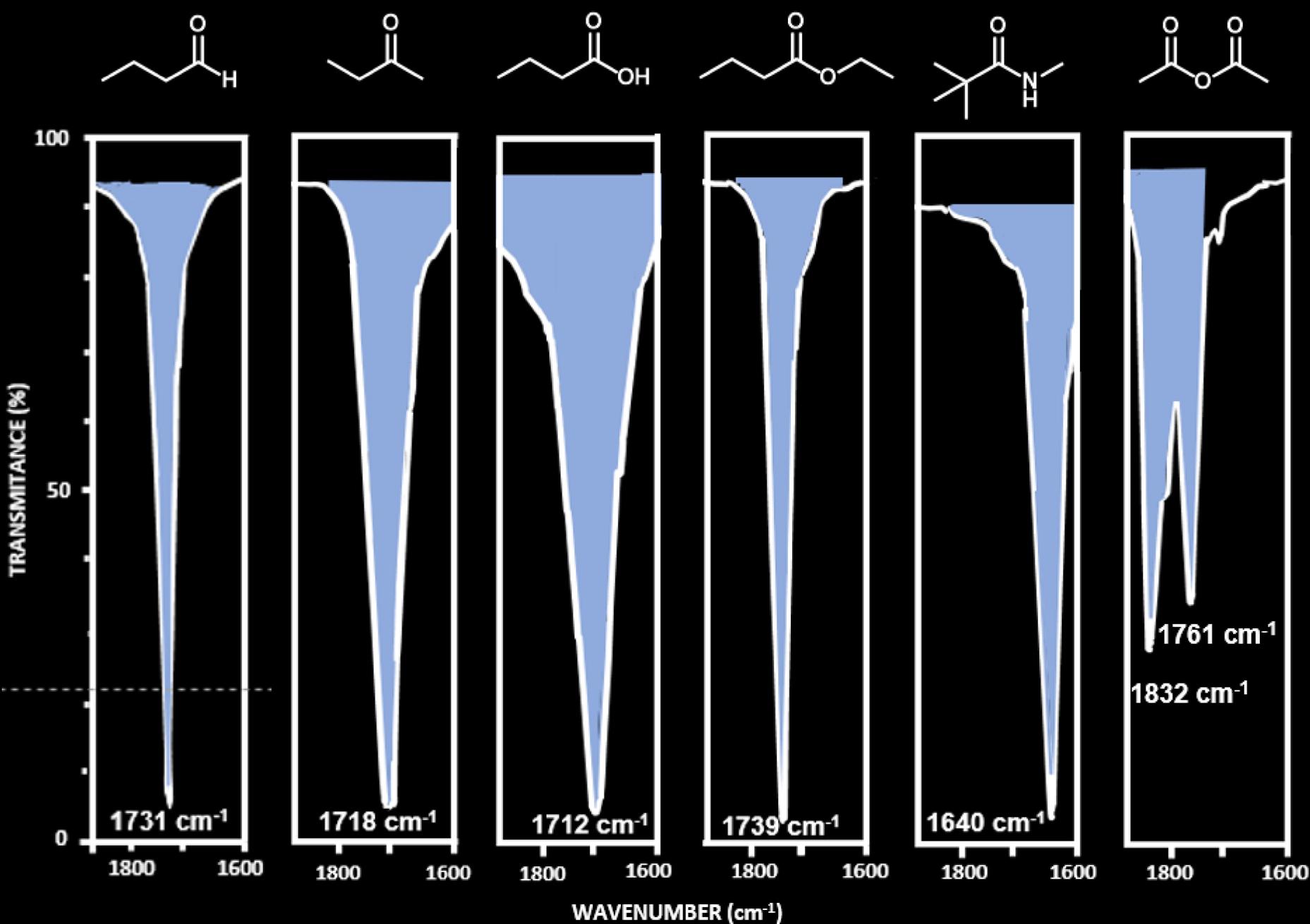


# ESPECTRO DE INFRARROJO DE COMPUESTOS CARBONÍLICOS



## Vibraciones de tensión del enlace C=O de compuestos carbonílicos

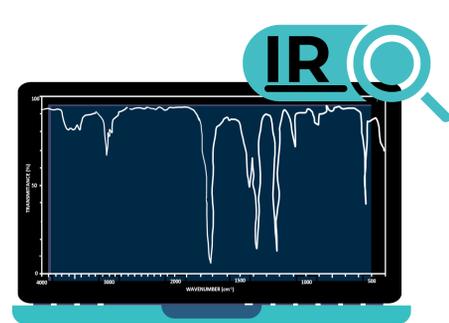
Grupo funcional	Fórmula	Vibración tensión C=O (cm <sup>-1</sup> )
Aldehído	RCHO	1720-1740
Cetona	RCOR	1705-1750
Ácido carboxílico	RCOOH	1700-1725
Éster	RCOOR	1735-1750
Amida	RCONH <sub>2</sub>	1650-1700
Anhídrido	RCO-O-COR	1820 y 1760



El tipo de compuesto carbonílico se identifica teniendo en cuenta las vibraciones de otros enlaces (=C-H, O-H, C-O, N-H), además, de la correspondiente a la tensión del enlace C=O



# ESPECTRO INFRARROJO DE ALDEHÍDOS Y CETONAS



## ALDEHÍDOS

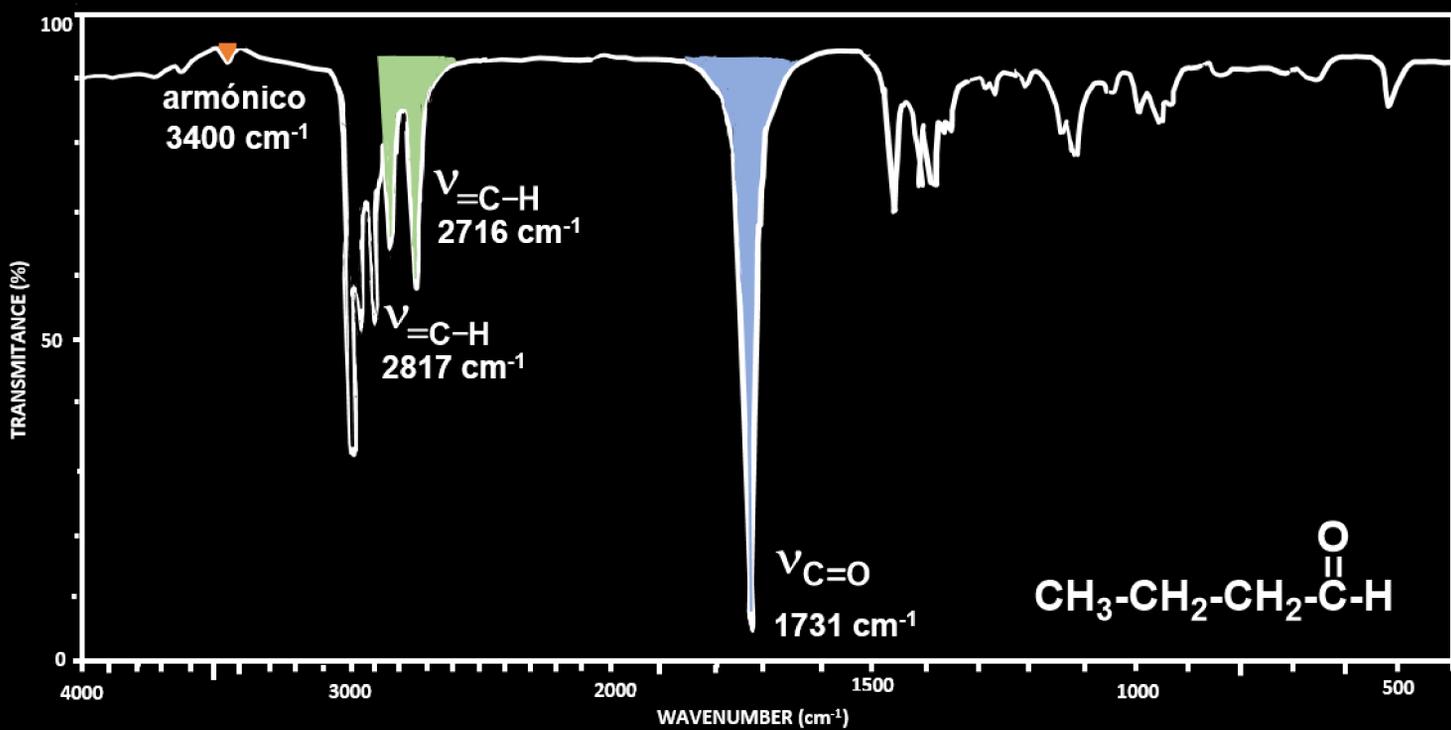
**C=O** Vibración de tensión ( $\nu$ ) en torno a  $1725 \text{ cm}^{-1}$  ( $1720\text{-}1740 \text{ cm}^{-1}$ )  
La conjugación desplaza la banda a la derecha

**=C-H** Vibración de tensión ( $\nu$ ) dos bandas a  $2700$  y  $2850 \text{ cm}^{-1}$  ( $2700\text{-}2900 \text{ cm}^{-1}$ )

A veces aparecen pequeñas bandas en torno a  $3400 \text{ cm}^{-1}$  correspondientes a armónicos o sobretonos de la banda C=O duplicando su frecuencia

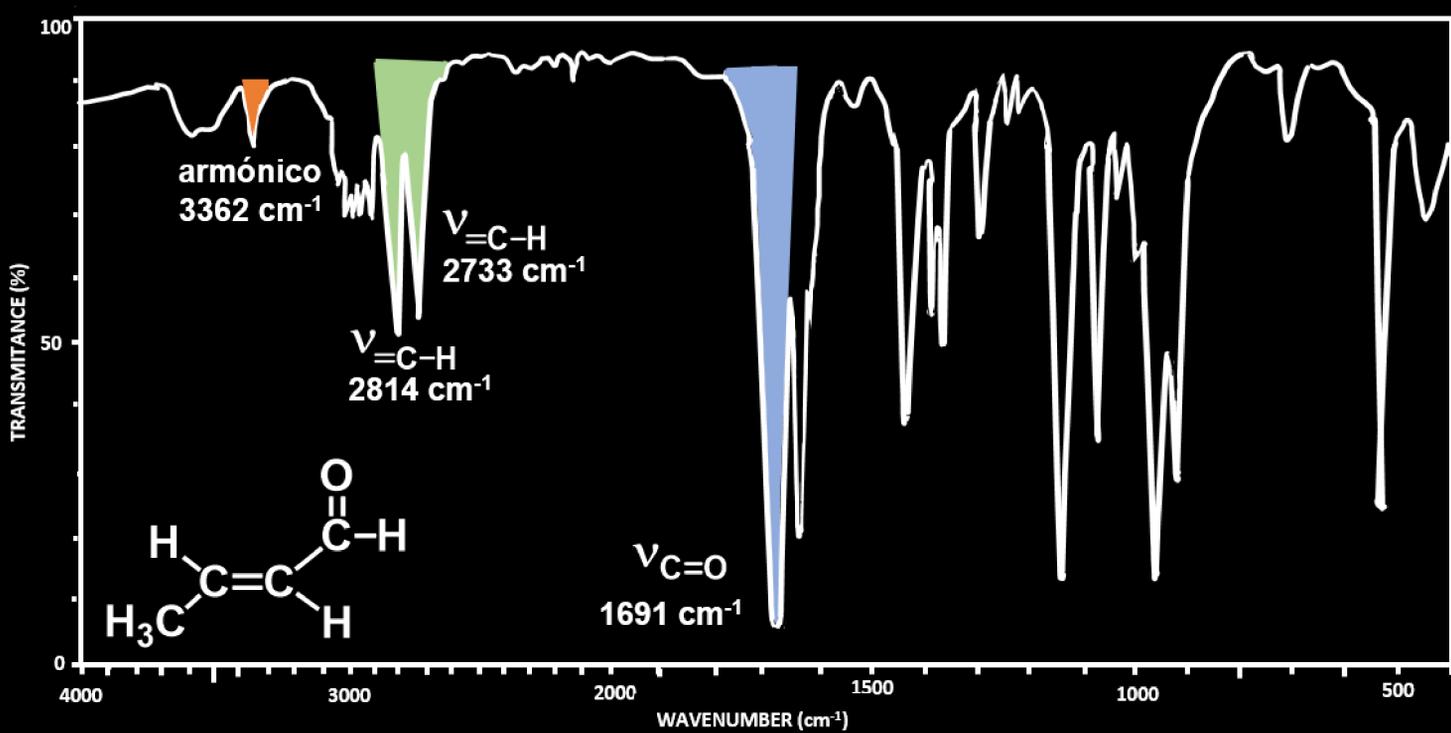
### Espectro IR del butenal

Solución en tetracloruro de carbono



### Espectro IR del *trans*-2-butenal

Líquido puro



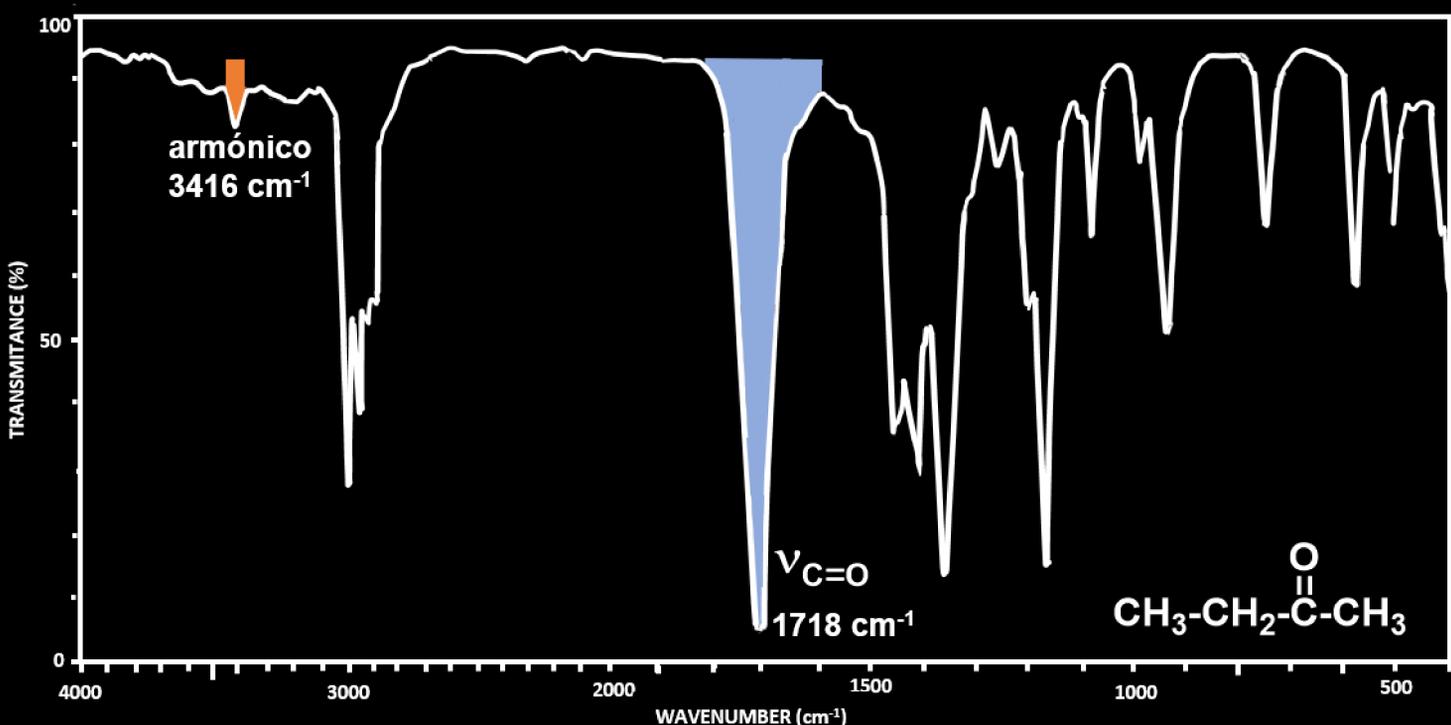
## CETONAS

**C=O** Vibración de tensión ( $\nu$ ) en torno a  $1715 \text{ cm}^{-1}$  ( $1705\text{-}1750 \text{ cm}^{-1}$ )  
La conjugación desplaza la banda a la derecha

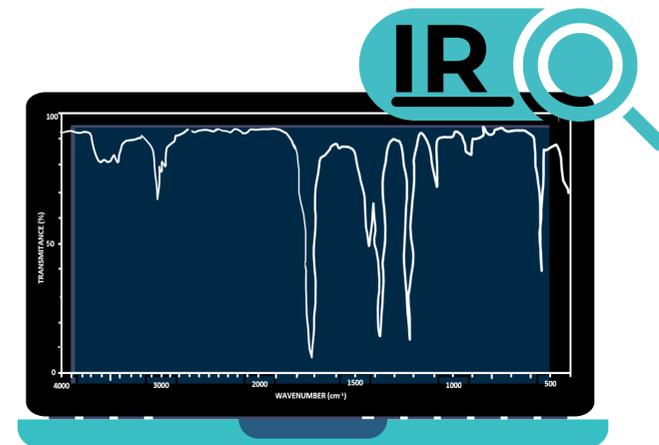
A veces aparecen pequeñas bandas en torno a  $3400 \text{ cm}^{-1}$  correspondientes a armónicos o sobretonos de la banda C=O duplicando su frecuencia

### Espectro IR de la 2-butanona

Líquido puro



# ESPECTRO INFRARROJO DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS



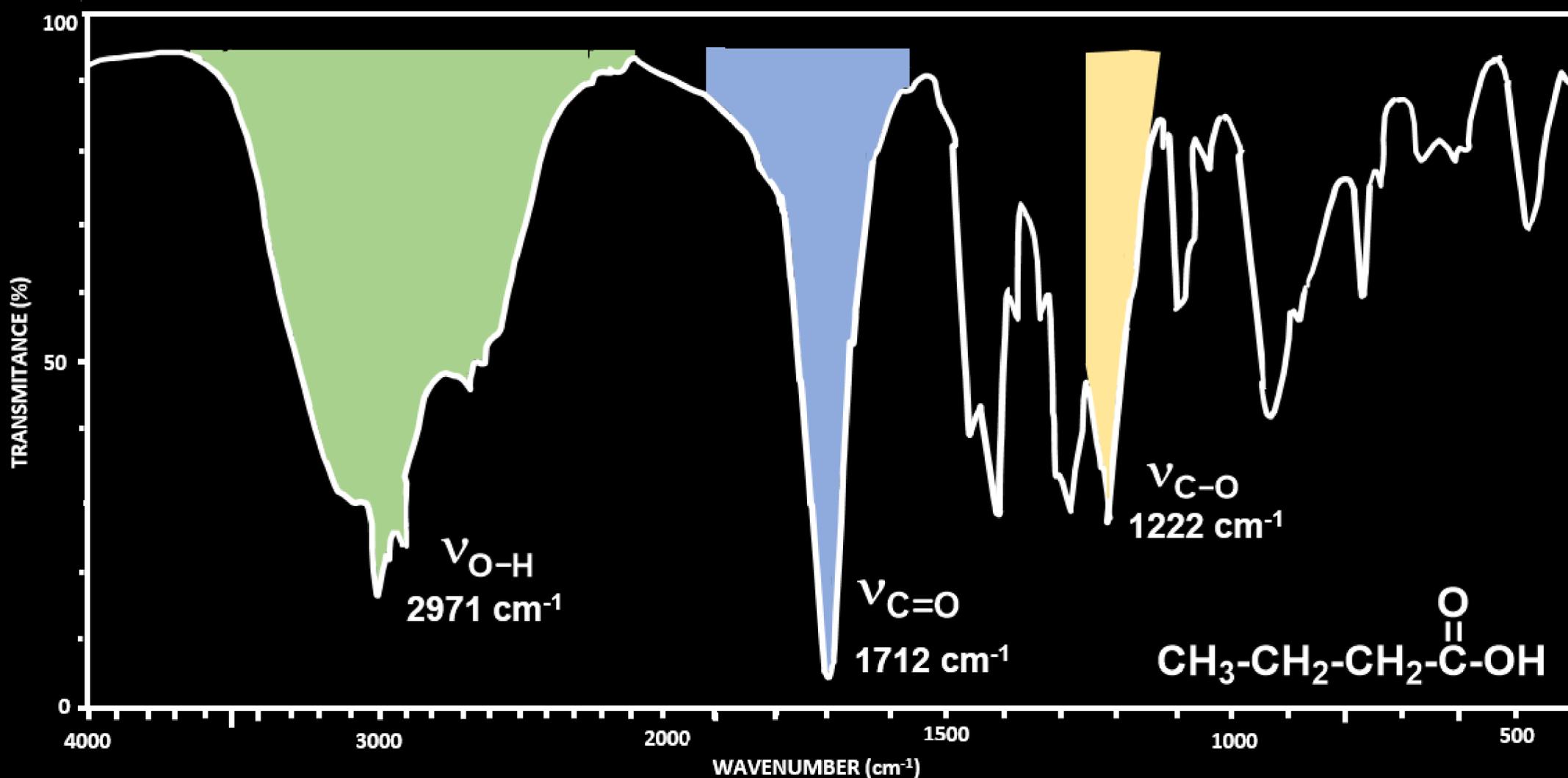
**O-H** Vibración de tensión ( $\nu$ ) 2500-3500  $\text{cm}^{-1}$  (intensa y ancha)

**C=O** Vibración de tensión ( $\nu$ ) 1700-1730  $\text{cm}^{-1}$   
La conjugación desplaza la banda a la derecha

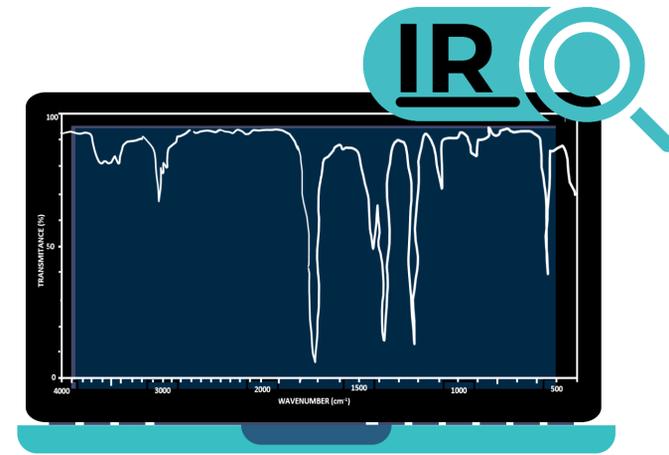
**C-O** Vibración de tensión ( $\nu$ ) 1210-1320  $\text{cm}^{-1}$

Espectro IR del ácido butírico

Líquido puro



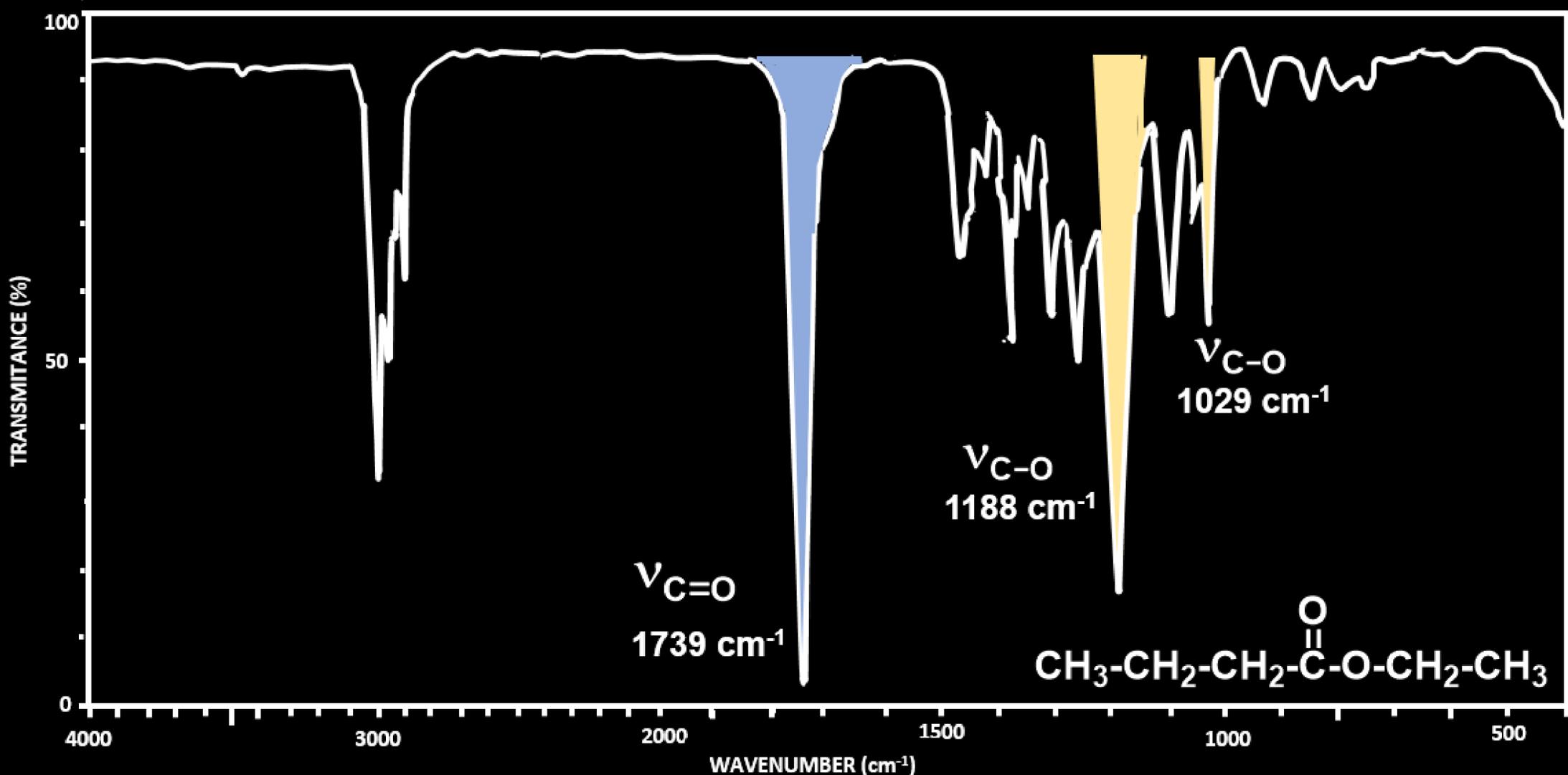
# ESPECTRO INFRARROJO DE ÉSTERES



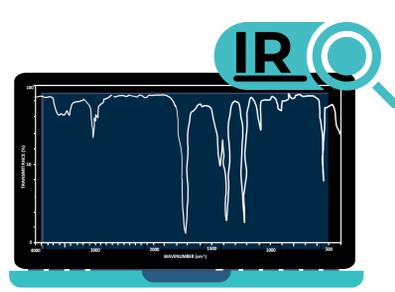
- C=O** Vibración de tensión ( $\nu$ ) banda intensa entre 1730-1750  $\text{cm}^{-1}$   
La conjugación desplaza la banda a la derecha
- C-O** Vibración de tensión ( $\nu$ ) dos bandas entre 1000-1300  $\text{cm}^{-1}$

Espectro IR del butirato de etilo

Líquido puro

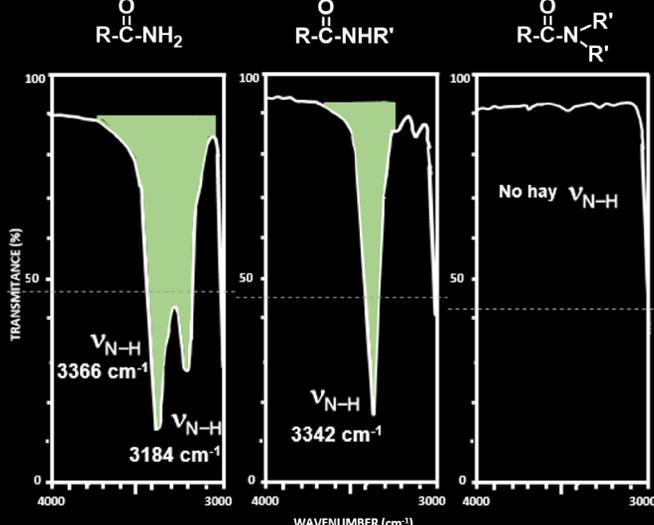


# ESPECTRO INFRARROJO DE AMIDAS



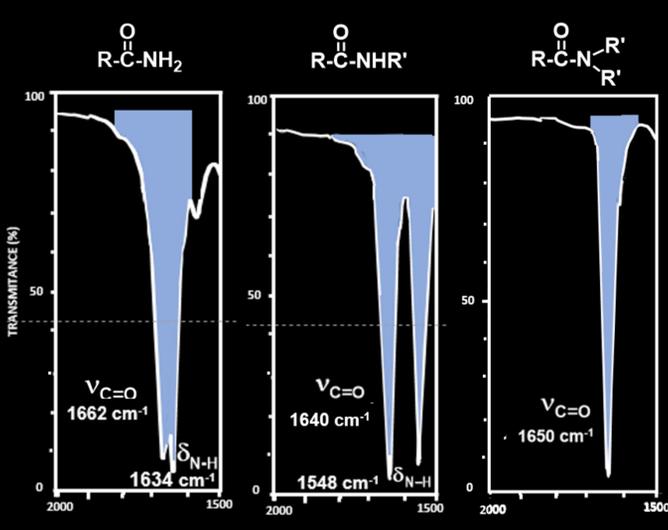
## N-H Vibración de tensión ( $\nu$ ) entre 3500-3140 $\text{cm}^{-1}$

- Amidas primarias libres: dos bandas 3500 y 3400  $\text{cm}^{-1}$   
enlazadas: dos bandas 3350 y 3200  $\text{cm}^{-1}$
- Amidas secundarias libres: una banda 3430  $\text{cm}^{-1}$   
enlazadas: una banda entre 3300-3140  $\text{cm}^{-1}$



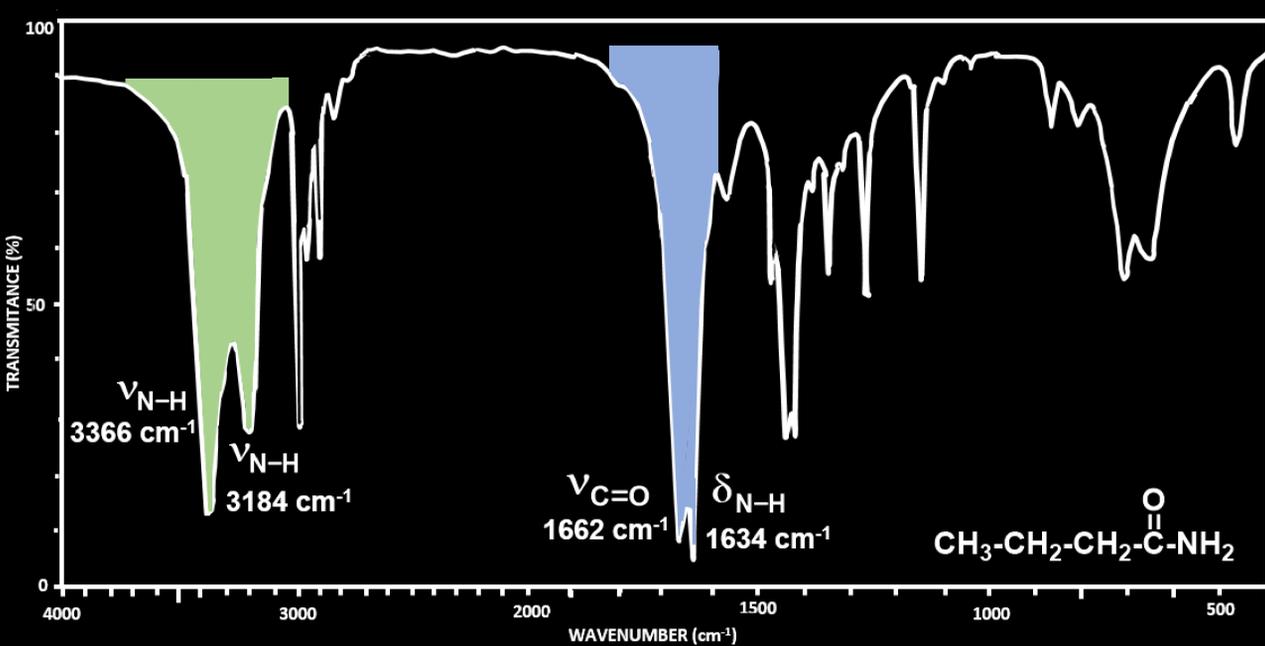
## C=O Vibración de tensión ( $\nu$ ) entre 1640-1680 $\text{cm}^{-1}$ La conjugación desplaza la banda a la derecha

- ## N-H Vibración de flexión ( $\delta$ ) entre 1620-1510 $\text{cm}^{-1}$
- Amidas primarias entre 1620-1590  $\text{cm}^{-1}$
  - Amidas secundarias entre 1550-1510  $\text{cm}^{-1}$



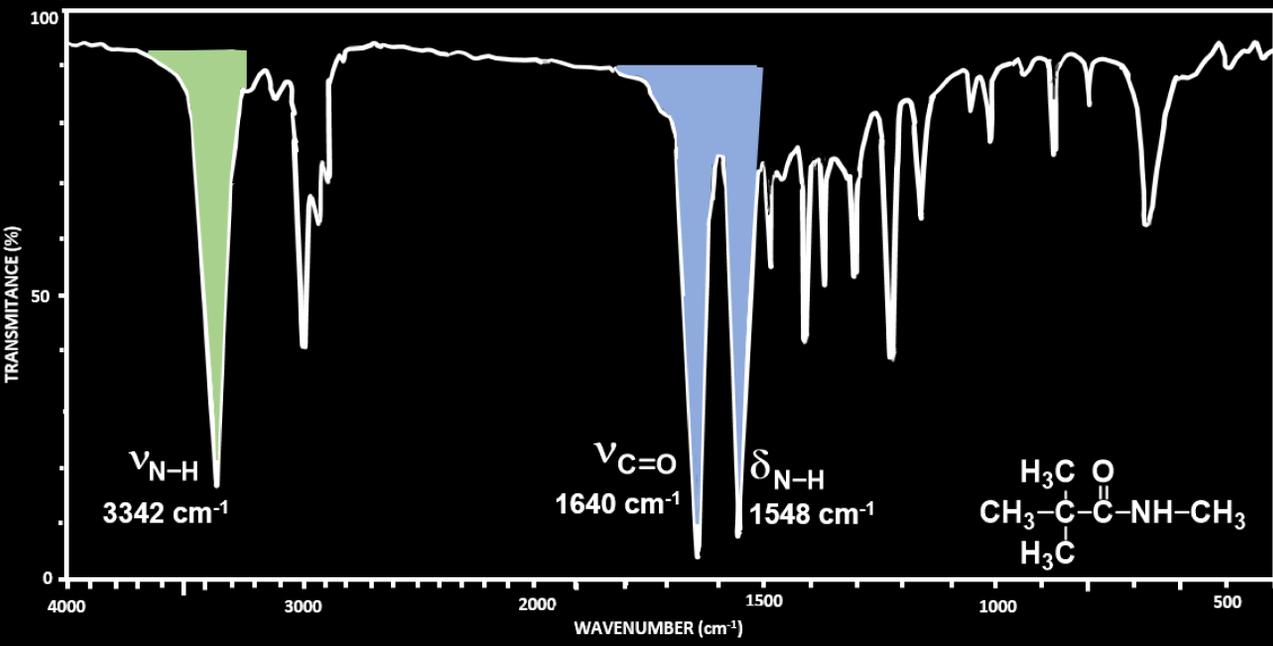
## Espectro IR de la butiramida (amida primaria) Pastilla KBr

Pastilla KBr



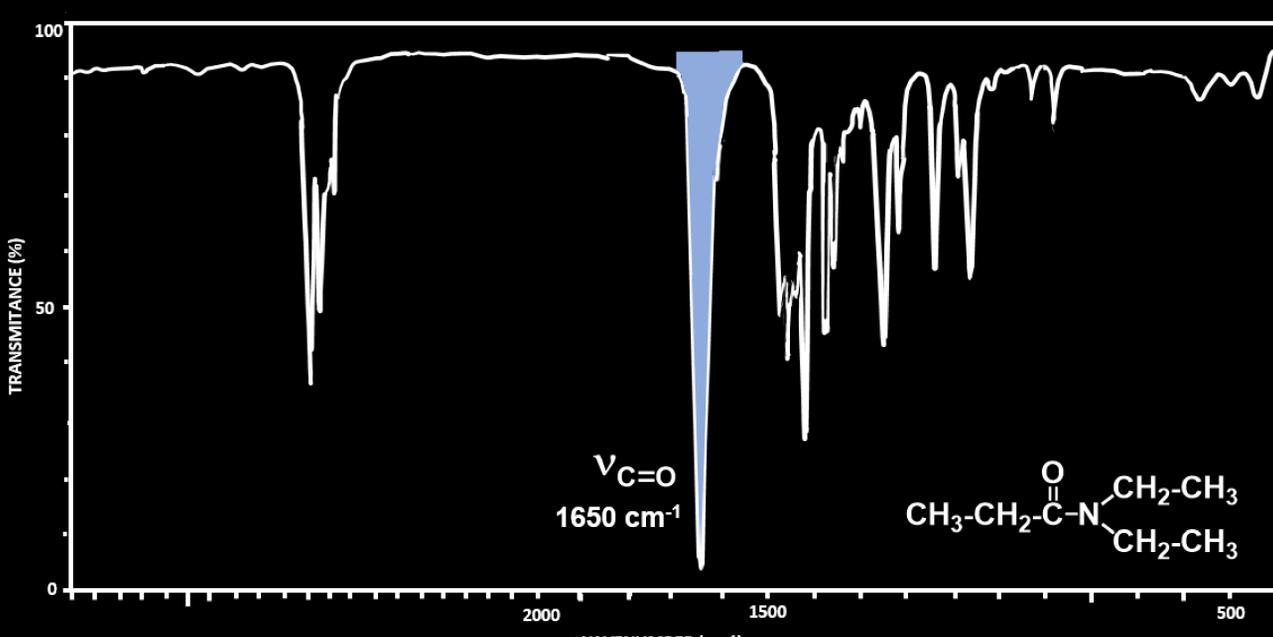
## Espectro IR de la N-metil-2,2-dimetilpropilamida (amida secundaria) Pastilla KBr

Pastilla KBr

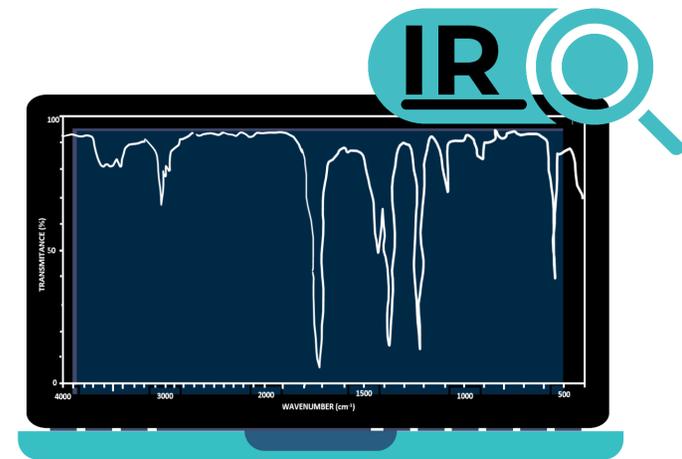


## Espectro IR de la N,N-dietilpropilamida (amida terciaria) Solución $\text{CCl}_4$

Solución  $\text{CCl}_4$



# ESPECTRO INFRARROJO DE ANHÍDRIDOS DE ÁCIDO

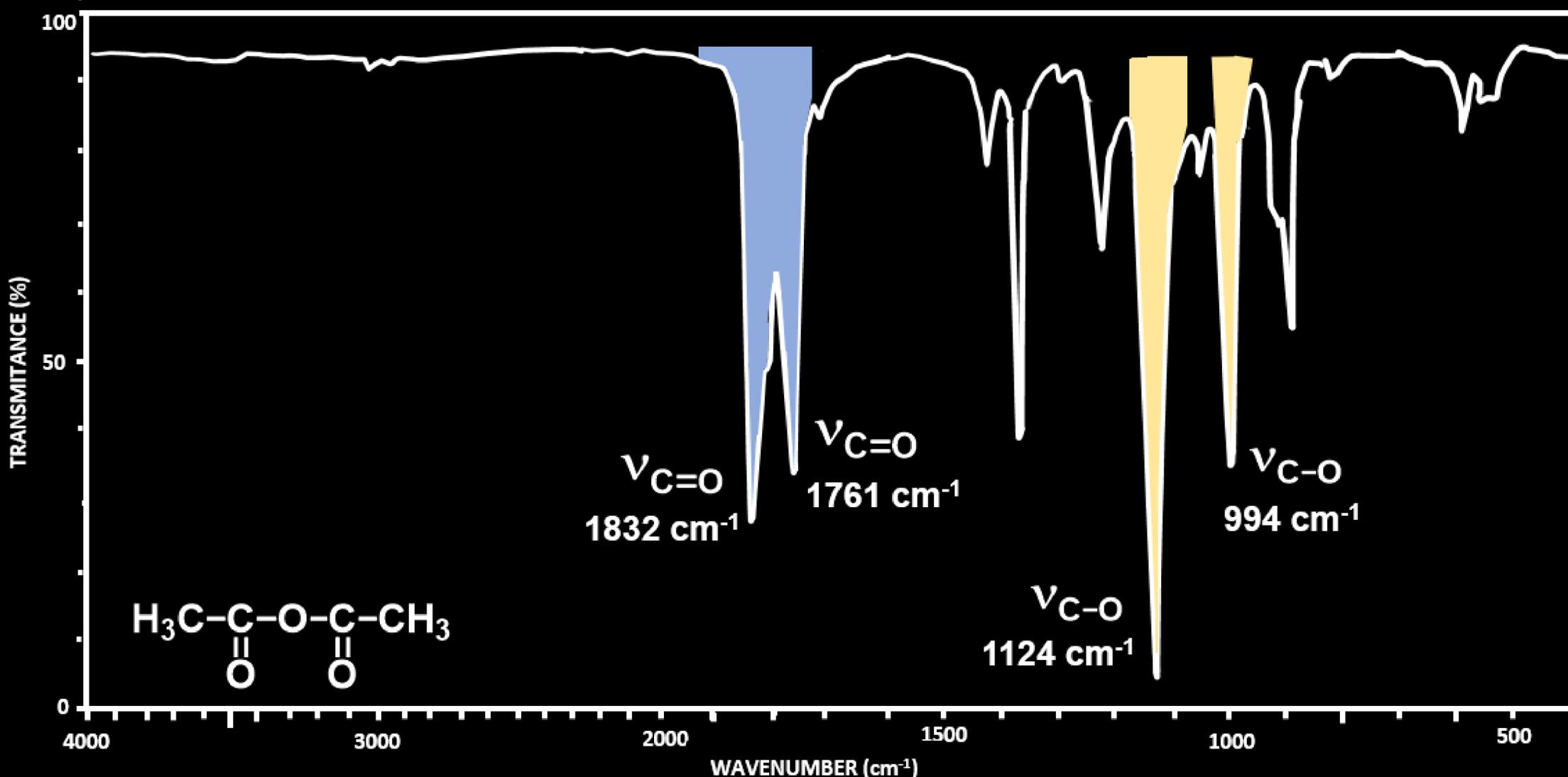


**C=O** Vibración de tensión ( $\nu$ ), dos bandas en torno a 1760 cm<sup>-1</sup> y 1820 cm<sup>-1</sup>  
La conjugación desplaza la banda a la derecha

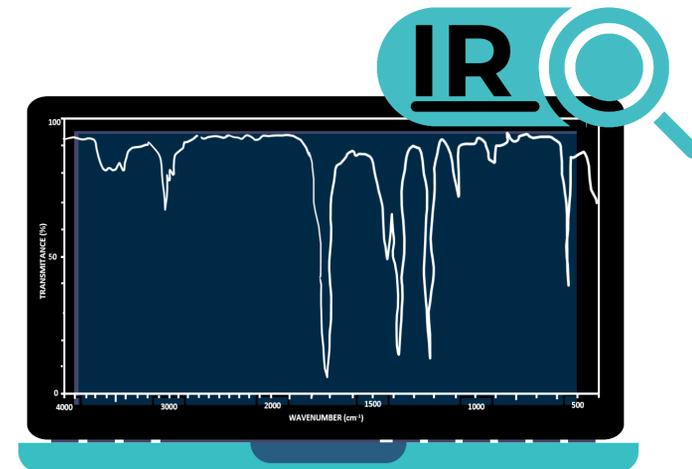
**C-O** Vibración de tensión ( $\nu$ ), una o dos bandas entre 900-1300 cm<sup>-1</sup>

Espectro IR del anhídrido acético

Solución CCl<sub>4</sub>



# ESPECTRO INFRARROJO DE NITRILOS



$\text{C}\equiv\text{N}$  Vibración de tensión ( $\nu$ ) 2200-2250  $\text{cm}^{-1}$  (intensidad media)

Espectro IR del butironitrilo

Solución  $\text{CCl}_4$

