

## ***ESPECTROSCOPIA INFRARROJA***

En el espectro luminoso el infrarrojo (del latín *infra*, “debajo”) la frecuencia está justo debajo de la zona visible e inmediatamente por encima de la zona del microondas ( $\lambda=8 \times 10^{-5}$ - $1 \times 10^{-2}$  cm). El ámbito de trabajo de un espectrómetro está entre  $2,5 \times 10^{-4}$  y  $25 \times 10^{-4}$  cm.

Para determinar una banda del infrarrojo se puede utilizar la longitud de onda ( $\lambda$ ), y se expresa en *micras* ( $\mu\text{m}$ ); pero la mayoría de veces se utiliza el **número de ondas** ( $\nu$ ), y se mide en  $\text{cm}^{-1}$ . En los equipos comerciales las determinaciones se hacen entre  $4000$ - $600$   $\text{cm}^{-1}$ .

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

## *Vibraciones moleculares*

El enlace covalente se comporta como un muelle. Si la molécula es diatómica ( H-H, H-F), los átomos se mueven en una dirección única, aproximándose y alejándose. A este modo de moverse se le denomina **Tensión de vibración**. Las moléculas triatómicas, por ejemplo CO<sub>2</sub> (O=C=O), tienen dos movimientos de tensión. *Tensión simétrica*, los dos O-s se acercan o se alejan del C. *Tensión no simétrica*, un O se acerca al C mientras el otro se aleja.

Las moléculas con más de dos átomos, pueden sufrir modificaciones en los ángulos. Son las **Vibraciones de Flexión**.

Los enlaces entre átomos siempre están vibrando. Cuando indicamos un adistancia de enlace estamos hablando de un valor promedio. La vibración de un enlace puede ser de dos tipos;

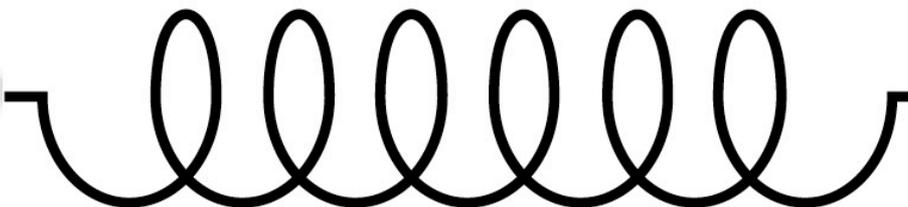
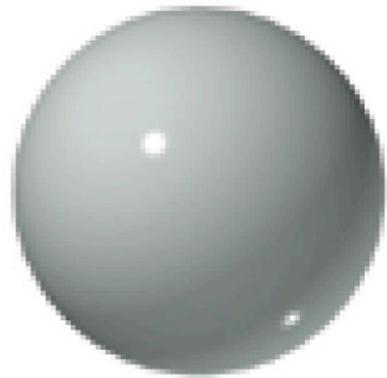
- *Tensión* alargándose y acortándose
- *Flexión* modificando el ángulo de enlace

Para que ocurra una determinada flexión o un alargamiento necesitamos una energía concreta y esa energía la podemos relacionar directamente con la frecuencia de vibración. Cuando incidimos en una molécula con una radiación de esa misma frecuencia, la molécula absorbe esa energía y la amplitud de la vibración aumenta. El enlace se mueve entonces con más intensidad.

H



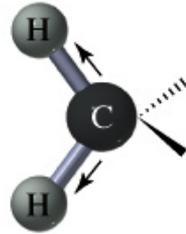
Cl



**VIBRACION DE TENSION**

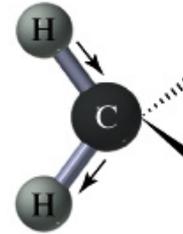
# MODOS DE VIBRACIÓN EN LOS ENLACES COVALENTES

## Vibraciones de tensión



symmetric stretch

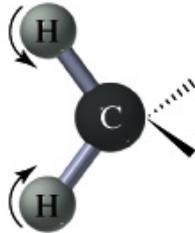
Tensión simétrica



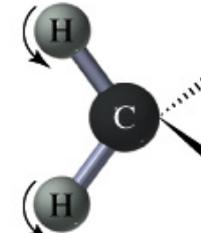
asymmetric stretch

Tensión asimétrica

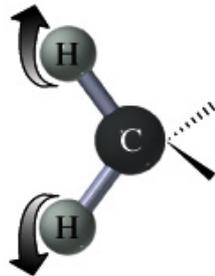
## Vibraciones de flexión



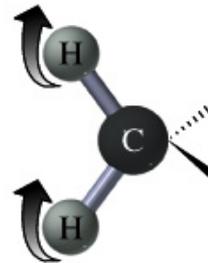
Flexión simétrica en el plano (tijeras)



Flexión no simétrica en el plano (rock)



Flexión simétrica fuera del plano (twist)



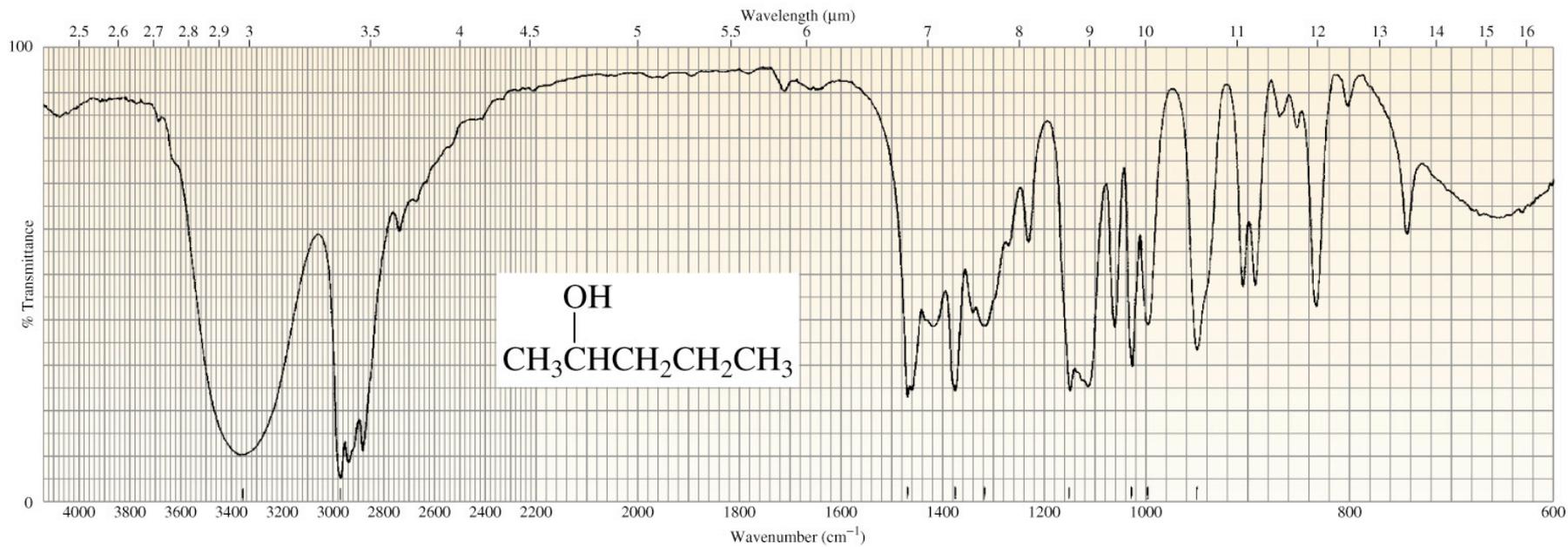
Flexión no simétrica fuera del plano

**En un espectro de infrarrojo podemos distinguir dos zonas:**

- Zona de los grupos funcionales (4000-1400  $\text{cm}^{-1}$ )**
- *Zona dactilar* (1400-600  $\text{cm}^{-1}$ )**

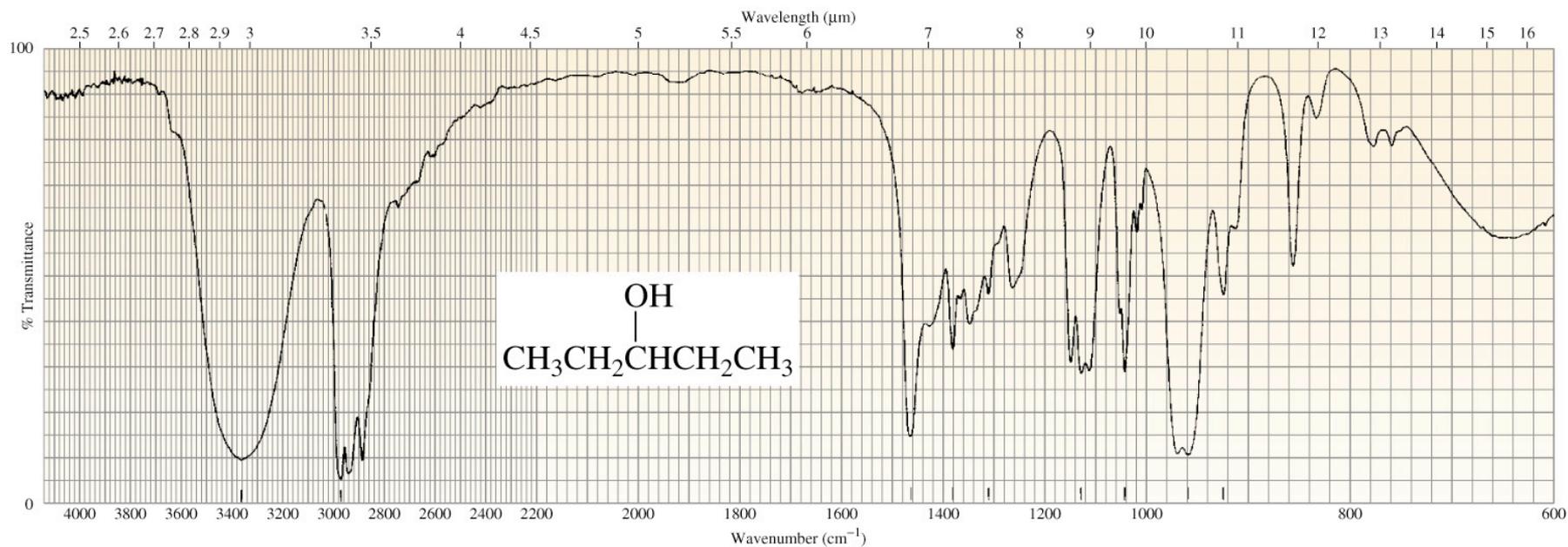
**La mayoría de grupos funcionales absorben energía en la primera zona.**

**La segunda zona corresponde a cada molécula. Cuando se realiza una identificación mediante comparación de espectros por ordenador, se analiza esa zona dactilar.**

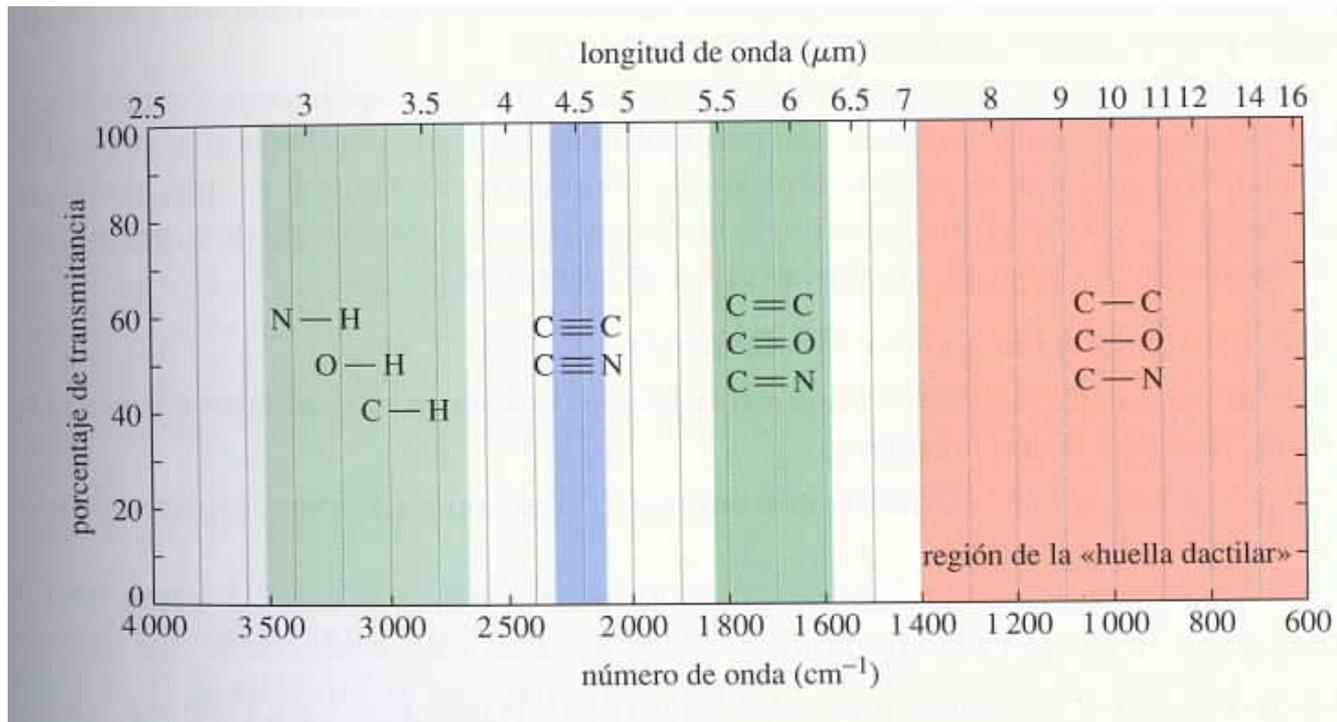
**a.**

*Zona de los grupos funcionales*

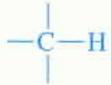
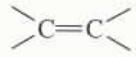
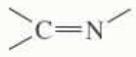
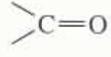
*Zona dactilar (de 1400 a 600  $\text{cm}^{-1}$ )*

**b.**

## Resumen de las vibraciones en el IR

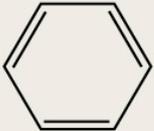


**TABLA 12.2** Resumen de las frecuencias de tensión de IR

Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Grupo funcional	Comentarios	
3 300	alcohol	O—H	siempre es ancha
	amina, amida	N—H	puede ser ancha, puntiaguda o ancha con picos
	alquino	≡C—H	siempre es puntiaguda, generalmente intensa
3 000	alcano		justo por debajo de 3 000 cm <sup>-1</sup>
	alqueno		justo por encima de 3 000 cm <sup>-1</sup>
	ácido	O—H	muy ancha
2 200	alquino	—C≡C—	justo por debajo de 2 200 cm <sup>-1</sup>
	nitrilo	—C≡N	justo por encima de 2 200 cm <sup>-1</sup>
1 710 (muy fuerte)	carbonilo		cetonas, aldehídos, ácidos, superior en el caso de los ésteres, aproximadamente 1 735 cm <sup>-1</sup> la conjugación disminuye la frecuencia más bajo en el caso de las amidas, aprox. 1 650 cm <sup>-1</sup>
1 660	alqueno		la conjugación disminuye la frecuencia en el caso del C=C aromático aprox. 1 600 cm <sup>-1</sup>
	imina		más intensa que en el C=C
	amida		más intensa que en el C=C (véase arriba)

Los éteres, ésteres y alcoholes también presentan tensiones C—O entre 1 000 y 1 200 cm<sup>-1</sup>.

**Table 13.4 Important IR Stretching Frequencies**

Type of bond	Wavenumber (cm <sup>-1</sup> )	Intensity
C≡N	2260–2220	medium
C≡C	2260–2100	medium to weak
C=C	1680–1600	medium
C=N	1650–1550	medium
	~1600 and ~1500–1430	strong to weak
C=O	1780–1650	strong
C—O	1250–1050	strong
C—N	1230–1020	medium
O—H (alcohol)	3650–3200	strong, broad
O—H (carboxylic acid)	3300–2500	strong, very broad
N—H	3500–3300	medium, broad
C—H	3300–2700	medium