

ESPECTROSCOPIA

ESPECTROSCOPIA INFRARROJA INTERPRETACIÓN ESPECTRO IR

Espectroscopia infrarroja (Espectroscopia IR) es la rama de la **espectroscopia** que trata con la parte **infrarroja** del **espectro electromagnético**. Esta cubre un conjunto de técnicas, siendo la más común una forma de **espectroscopia de absorción**. Así como otras **técnicas espectroscópicas**, puede usarse para identificar un compuesto e investigar la composición de una muestra.

¿Qué es la espectroscopia infrarroja [IR]?

Esta espectroscopia se fundamenta en la absorción de la **radiación IR** por las moléculas en vibración. Una molécula absorberá la energía de un haz de luz infrarroja cuando dicha energía incidente sea igual a la necesaria para que se de una transición vibracional de la molécula. Es decir, la molécula comienza a vibrar de una determinada manera gracias a la energía que se le suministra mediante luz infrarroja.

Pueden distinguirse dos categorías básicas de vibraciones: de tensión y de flexión. Las vibraciones de tensión son cambios en la distancia interatómica a lo largo del eje del enlace entre dos átomos. Las vibraciones de flexión están originadas por cambios en el ángulo que forman dos enlaces. En la siguiente figura se representan los diferentes tipos de vibraciones moleculares.



En principio, cada molécula presenta un espectro IR característico (huella dactilar), debido a que todas las moléculas (excepto las especies diatómicas homonucleares como O_2 y Br_2) tienen algunas vibraciones que, al activarse, provocan la absorción de una determinada longitud de onda en la zona del espectro electromagnético correspondiente al infrarrojo.

De esta forma, analizando cuales son las longitudes de onda que absorbe una sustancia en la zona del infrarrojo, podemos obtener información acerca de las moléculas que componen dicha sustancia.

¿Qué información nos da la IR?

La espectroscopia infrarroja tiene su aplicación más inmediata en el análisis cualitativo: detección de las moléculas presentes en el material.

En la zona del espectro electromagnético IR con longitudes de onda del infrarrojo medio (entre 4000 y 1300 cm^{-1}) se suelen observar una serie de bandas de absorción provocadas por las vibraciones entre únicamente dos átomos de la molécula. Estas vibraciones derivan de grupos que contienen hidrógeno o de grupos con dobles o triples enlaces aislados.

En la zona del espectro electromagnético IR con longitudes de onda comprendidas entre 1300 y 400 cm^{-1} (infrarrojo lejano), la asignación de las bandas de absorción a vibraciones moleculares es más difícil de realizar, debido a que cada una de ellas está generada por absorciones individuales sumadas (multiplicidad de las bandas). Es la denominada zona de la huella dactilar (flexión de enlaces CH, CO, CN, CC, etc.). En esta zona de longitudes de onda, pequeñas diferencias en la estructura y constitución de las moléculas dan lugar a variaciones importantes en los máximos de absorción.

En las tablas que visualizarás pinchando [aquí](#) encontrarás las bandas de absorción correspondientes a las moléculas orgánicas e inorgánicas más frecuentes.

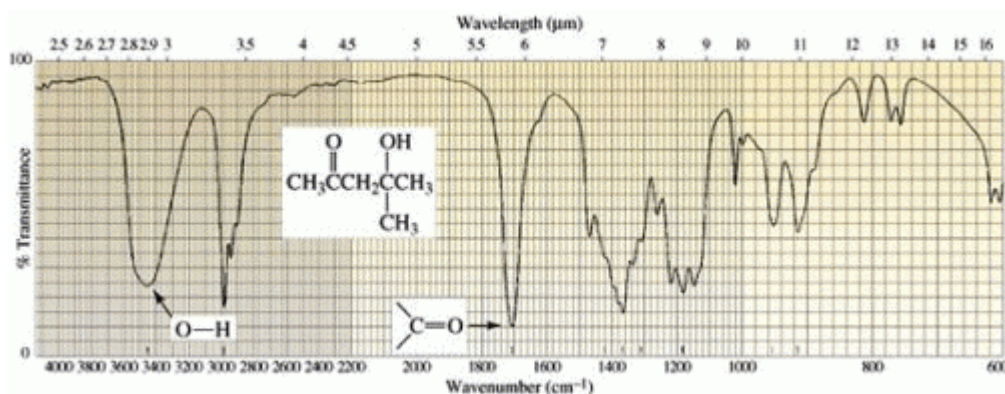
[Posición de las bandas de absorción correspondientes de grupos orgánicos o inorgánicos](#)

Fuente: Rubinson K.A., Rubinson J.F., "Análisis Instrumental", Ed. Pearson Educación, 2000.

Frecuencias características de grupos orgánicos poliatómicos f = fuerte, m = medio, d = débil				
Tipo de vibración		Frecuencia (cm^{-1})	Intensidad	
C-H	Alcanos (tensión)	3000-2850	f	
	-CH ₃ (flexión)	1450 y 1375	m	
	-CH ₂ - (flexión)	1465	m	
	Alquenos (tensión)	3100-3000	m	
	Alquenos (fuera del plano de flexión)	1000-650	f	
	Aromáticos (tensión)	3150-3050	f	
	Aromáticos (fuera del plano de flexión)	900-690	f	
	Alquino (tensión)	ca. 3300	f	
	Aldehídos		2900-2800	d
			2800-2700	d
C-C	Alquenos	No interpretable		
C=C	Alqueno	1680-1600	m-d	
	Aromáticos	1600 y 1475	m-d	
C≡C	Alquino	2250-2100	m-d	
C=O	Aldehído	1740-1720	f	
	Cetona	1725-1705	f	
	Ácidos carboxílicos	1725-1700	f	
	Éster	1750-1730	f	
	Amida	1670-1640	f	
	Anhídridos	1810 y 1760	f	
	Cloruro ácido	1800	f	
C-O	Alcoholes, éteres, ésteres ácidos carboxílicos, anhídridos	1300-1000	f	
O-H	Alcoholes, fenoles Libre	3650-3600	m	
	Alcoholes, enlace H	3500-3200	m	
	Ácidos carboxílicos	3400-2400	m	

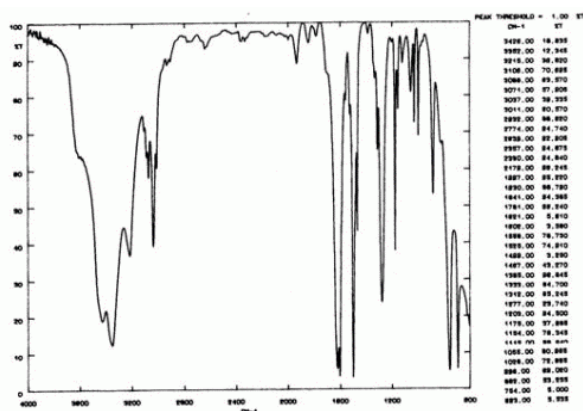
N-H	Aminas y amidas primarias y secundarias	3500-3100	m
C-N	Aminas	1350-1000	m-f
C=C	Iminas y oximas	1690-1640	d-f
C≡N	Nitrilos	2260-2240	m
X=C=Y	Alenos, quetanos, isocianatos, isotiocianatos	2270-1950	m-f
N=O	Nitro (R-NO ₂)	1550 y 1350	f
S-H	Mercaptanos	2550	d
S=O	Sulfóxidos	1050	f
	Sulfones, cloruros de sulfónidos	1375-1300 y	f
	Sulfatos, sulfoamidas	1200-1140	f
	Fluoruro	1400-1000	f
	Cloruro	800-600	f
	Bromuro, ioduro	<667	f

El aspecto típico de un espectro IR es el que se muestra en la figura:



Cada absorción observable en el espectro corresponde a una vibración determinada de algún enlace dentro de la molécula.

A la hora de identificar los grupos funcionales con la espectroscopia IR vamos a considerar el espectro de IR dividido en varias zonas tal y como se muestra en la siguiente figura:



De 4000 a 2900 cm^{-1} : Tensión de C-H, O-H y N-H

De 2500 a 2000 cm^{-1} : Tensión de triples enlaces y dobles enlaces acumulados.

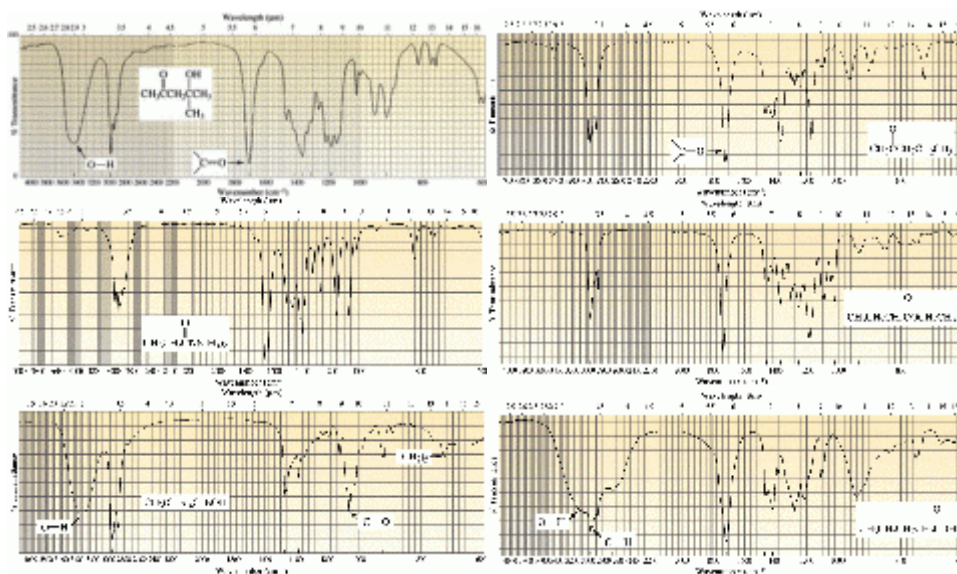
De 2000 a 1500 cm^{-1} : Tensión de C=O, C=N y C=C.

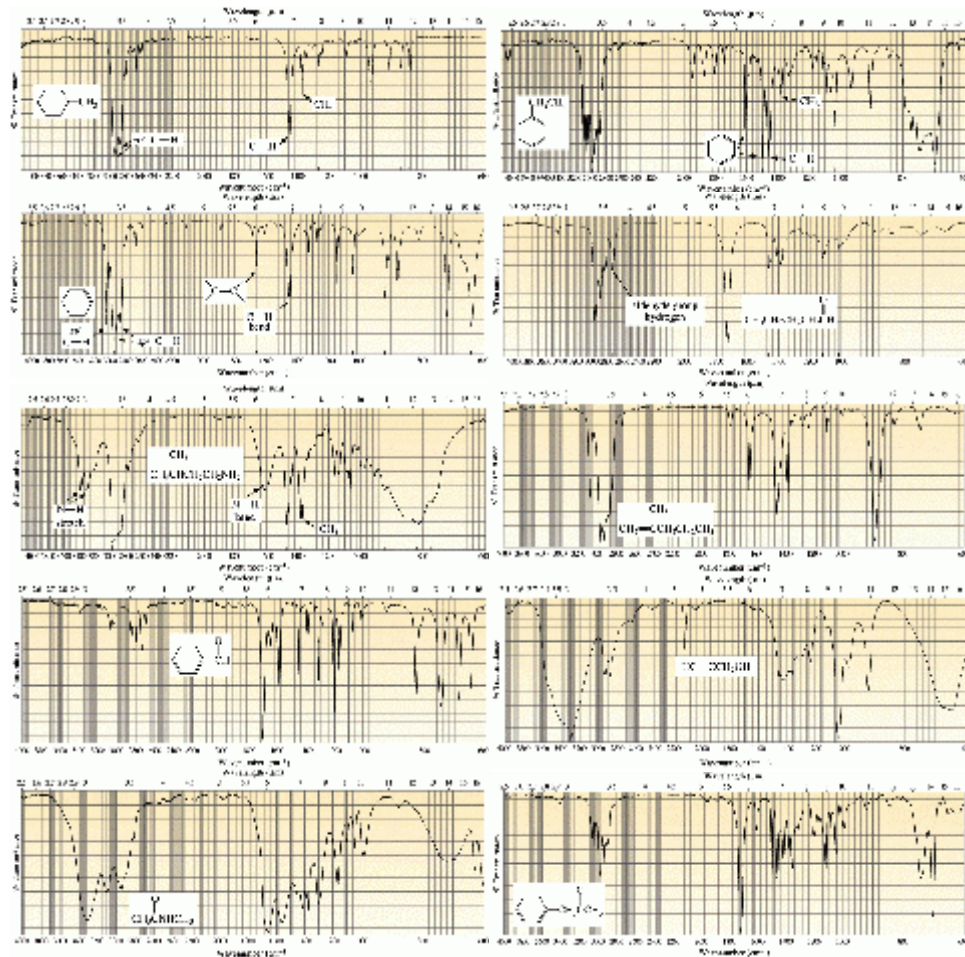
De 1500 a 600 cm^{-1} : Zona de la huella dactilar (Flexión de enlaces CH,CO,CN,CC, etc..)

De acuerdo con dicha división se podrán identificar diversos grupos funcionales, tal y como se indica en la siguiente Tabla:

GRUPO FUNCIONAL	NUMERO DE ONDA (cm ⁻¹)	GRUPO FUNCIONAL	NUMERO DE ONDA (cm ⁻¹)
OH (enlace de hidrógeno)	3100-3200	-C ≡ C-	2300-2100
OH (sin enlace de hidrógeno)	3600	-C ≡ N	~ 2250
Cetonas	1725-1700	-N=C=O	~ 2270
Aldehídos	1740-1720	-N=C=S	~ 2150
Aldehídos y cetonas α,β-insaturados	1715-1660	C=C=C	~ 1950
Ciclopentanonas	1750-1740	NH	3500-3300
Ciclobutanonas	1780-1760	C=N-	1690-1480
Ácidos carboxílicos	1725-1700	NO ₂	1650-1500 1400-1250
Esteres	1750-1735	S=O	1070-1010
Esteres α,β-insaturados	1750-1715	sulfonas	1350-1300 1150-1100
δ-Lactonas	1750-1735	Sulfonamidas y sulfonatos	1370-1300 1180-1140
γ-lactonas	1780-1760	C-F	1400-1000
Amidas	1690-1630	C-Cl	780-580
-COCl	1815-1785	C-Br	800-560
Anhidridos	1850-1740 ⁽²⁾	C-I	600-500

Como podemos observar la mayor parte de los grupos funcionales más frecuentes en Química Orgánica presentan una absorción característica en el espectro IR. Valgan como ejemplos los que se muestran a continuación:





http://es.wikipedia.org/wiki/Espectroscopia_infrarroja
<http://www.ehu.es/imacris/PIE06/web/IR.htm>
<http://www.ugr.es/~quiorred/espec/ir.htm>

EJEMPLOS DE ESPECTROS IR

