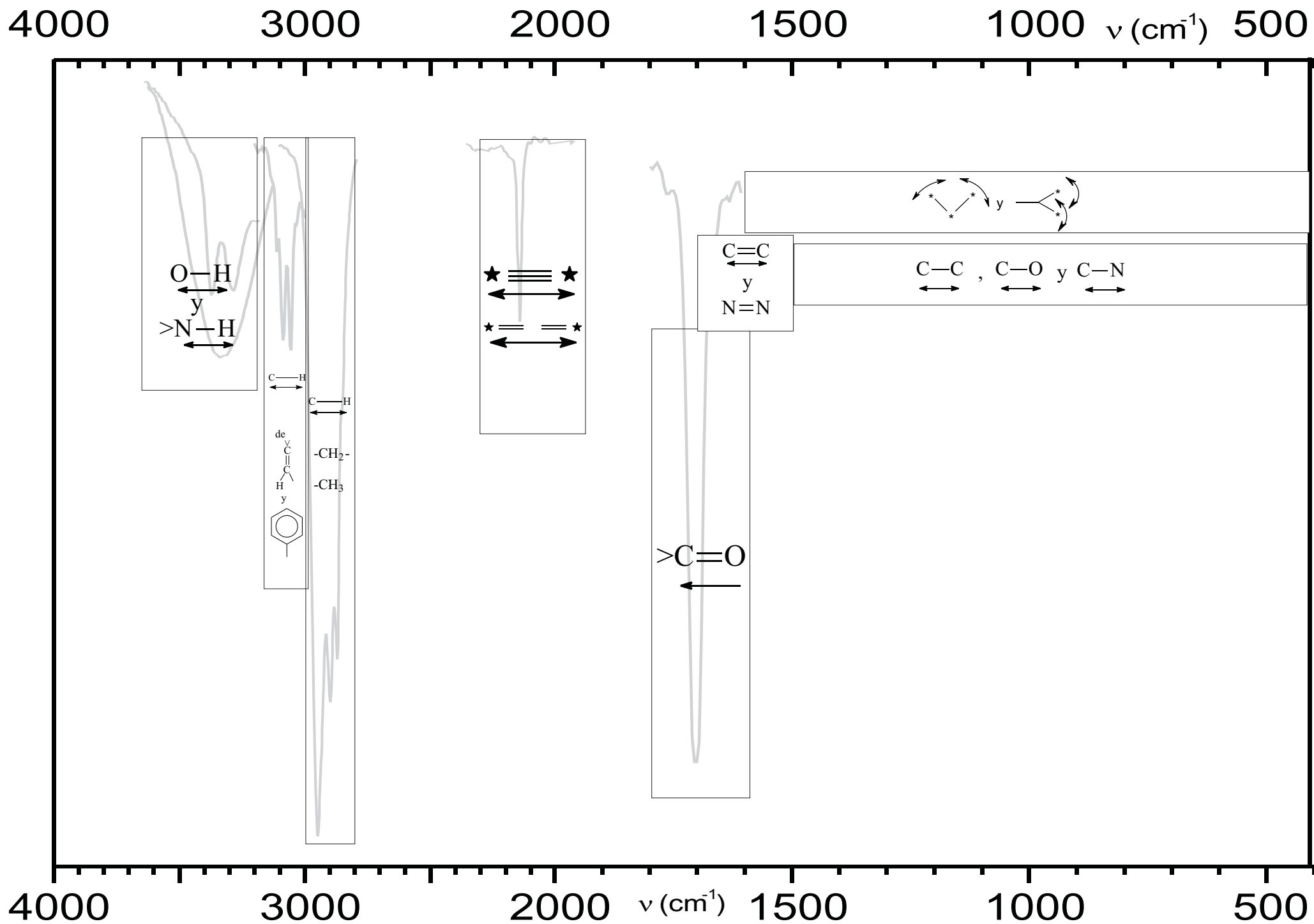


# Tablas de Espectroscopía Infrarroja

Elaboradas por:  
Francisco Rojo Callejas

# Figura IR-1 Regiones básicas de un espectro de Infrarrojo



# Figura IR-2 Algoritmo general de interpretación de espectros de IR

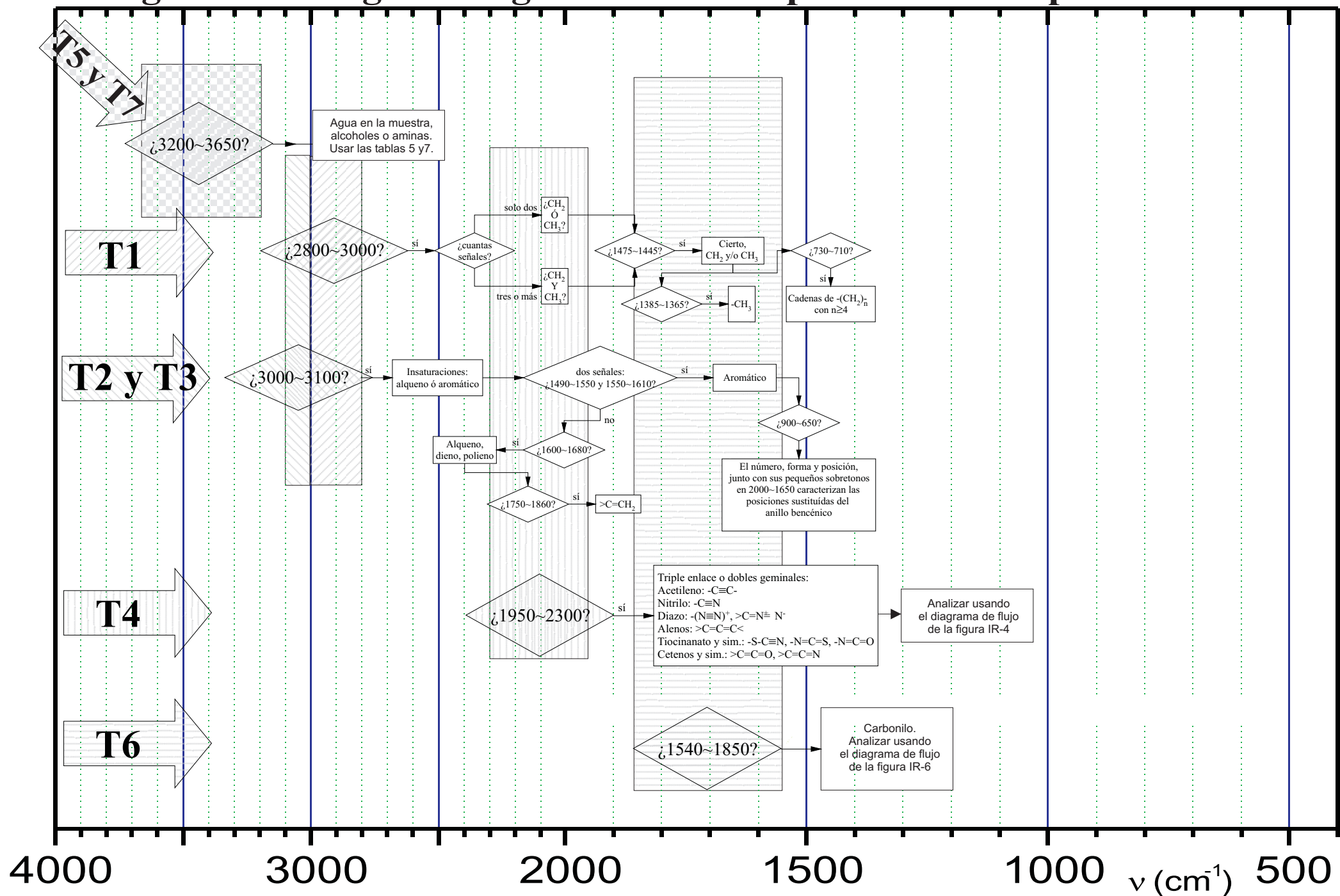
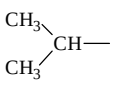
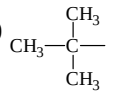
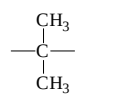
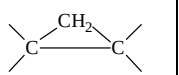
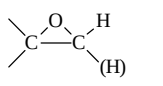
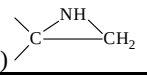


**TABLA IR-I ALCANOS**

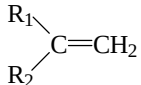
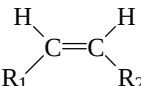
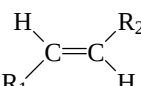
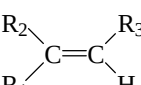
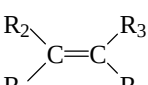
| Grupo                                                                                                    | Nº de onda<br>(cm <sup>-1</sup> ) | Intensidad<br><i>c</i> mol <sup>-1</sup> ·l·cm <sup>-1</sup> <sub>n</sub>                                                                                                                                                                                                                      | Origen                                     | Notas                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (1) -CH <sub>3</sub>                                                                                     | 2970~2950                         | ch 70                                                                                                                                                                                                                                                                                          | v <sub>as</sub> -CH <sub>3</sub>           | 2830~2815 (ε 35~75) en -OMe, ausente en -OEt.<br>2730~2820 (ε 15~21) en -NMe, ausente en -NEt.<br>2820~2710 en metilendioxi.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|                                                                                                          | 2880~2860                         | m 30                                                                                                                                                                                                                                                                                           | v <sub>s</sub> -CH <sub>3</sub>            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|                                                                                                          | 1470~1450                         | m < 15                                                                                                                                                                                                                                                                                         | δ <sub>as</sub> -CH <sub>3</sub>           | Doblete en gem-dimetilos (ver (5)-(7)). Junto a carbonilos ver (11)-(13).                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|                                                                                                          | 1385~1365                         | ch 15                                                                                                                                                                                                                                                                                          | δ <sub>s</sub> -CH <sub>3</sub>            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (2) -CH <sub>2</sub> -                                                                                   | 2935~2915                         | ch 75                                                                                                                                                                                                                                                                                          | v <sub>as</sub> -CH <sub>2</sub> -         | 1445 en ciclopentanos, 1450 en ciclohexanos. Se desplaza por hiperconjugación (ver (14)-(16)).<br>Presente cuando n≥4. Ocasionalmente como doblete en sólidos. Mas alto a menor n. Propilo 743~734; Etilo 790~770. El -CH <sub>2</sub> - también tiene bandas de flexión en ~1300 (ε≈1). Los espectros de sólidos con cadenas largas y grupos polares terminales (ácidos, ésteres, amidas) muestran una serie de bandas regulares entre 1350~1180. |
|                                                                                                          | 2865~2845                         | ch 45                                                                                                                                                                                                                                                                                          | v <sub>s</sub> -CH <sub>2</sub> -          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|                                                                                                          | 1470~1445                         | m 8                                                                                                                                                                                                                                                                                            | tijera -CH <sub>2</sub> -                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|                                                                                                          | 730~710                           | ch 3                                                                                                                                                                                                                                                                                           | rocking -(CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> - |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (3)                     | 2890<br>1340                      | débil<br>débil                                                                                                                                                                                                                                                                                 | v CH<br>δ CH                               | sin uso práctico<br>sin uso práctico                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| (4) -(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> -O-                                                                 | 742~734                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                | rocking de -CH <sub>2</sub> -              | corresponde a la banda en 720 de (2).                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| (5)                     | 1170                              | ch, mas débil que el doblete de 1380 (ε≈15).                                                                                                                                                                                                                                                   | esqueleto                                  | Un doblete en 1380 sugiere grupos gem-dimetilo; la confirmación se realiza por la vibración del esqueleto (5)-(7).                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|                                                                                                          | 1145                              | ch "                                                                                                                                                                                                                                                                                           | "                                          | Hombro en 1145 de la de 1170.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| (6)                   | 1255                              | ch "                                                                                                                                                                                                                                                                                           | "                                          | Posición mas estable que la de la banda en 1210.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|                                                                                                          | 1210                              | ch "                                                                                                                                                                                                                                                                                           | "                                          | También absorbe en 930~725.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| (7) C cuaternario<br> | 1195                              | ch "                                                                                                                                                                                                                                                                                           | "                                          | De estas dos la de 1195 es mas estable, la señal en 1215 es un hombro de la primera.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|                                                                                                          | 1215                              | ch "                                                                                                                                                                                                                                                                                           | "                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (8)                   | 3050                              | m                                                                                                                                                                                                                                                                                              | v <sub>as</sub> CH <sub>2</sub>            | Ausente en anillos sin -CH <sub>2</sub> -                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|                                                                                                          | 1020~1005                         | m 20~80                                                                                                                                                                                                                                                                                        | esqueleto                                  | Normalmente obstruido por señales fuertes de otro tipo.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| (9) ver tabla XI<br>  | 3000                              | 20~60                                                                                                                                                                                                                                                                                          | v CH metino                                | Se desplaza hasta 3040~3030 al incrementar la tensión del grupo epoxi, p. ej. unido a ciclopentanos.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|                                                                                                          | 3050                              | 30                                                                                                                                                                                                                                                                                             | v <sub>as</sub> CH <sub>2</sub> metileno   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 10)                   | 3050                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                | v <sub>as</sub> CH <sub>2</sub>            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (11) O-CO-CH <sub>3</sub>                                                                                | 1380~1365                         | Caracterizado por su alta intensidad. Al acetilar la banda en 1380 se vuelve mas intensa que la de 1460. Lo mismo ocurre con acetatos de enol y fenol. Ocasionalmente se vuelve doblete.                                                                                                       |                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (12) -CO-CH <sub>3</sub>                                                                                 | 1360~1355                         | Se desplaza a frecuencias menores que la flexión usual de CH <sub>3</sub> (1380). Señal aguda e intensa. La flexión asimétrica permanece en su posición usual (1460), pero se desplaza en los terpenos (1420~1425).                                                                            |                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (13) -COOCH <sub>3</sub>                                                                                 | 1440~1435                         | δ <sub>as</sub> -CH <sub>3</sub> . También con bandas en 1135, 1155, 790~760.                                                                                                                                                                                                                  |                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|                                                                                                          | 1365~1356                         | δ <sub>s</sub> -CH <sub>3</sub>                                                                                                                                                                                                                                                                |                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (14) -CH <sub>2</sub> -CO-                                                                               | 1440~1400                         | La flexión de todos los metilenos activos se observa como una serie de bandas intensas y agudas entre las bandas comunes de 1465 a 1380. Lo mismo ocurre con -CH <sub>2</sub> -SO <sub>2</sub> - y otros. La integración de la intensidad pudiera proporcionar el número de metilenos activos. |                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (15) -CH <sub>2</sub> -C=C-<br>-CH <sub>2</sub> -C≡C-                                                    | 1445~1425                         | No es muy intensa. Los dobles enlaces pudieran ser de aromáticos. La intensidad disminuye aún mas si el -CH <sub>2</sub> - está entre dos enlaces múltiples (dobles o triples).                                                                                                                |                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| (16) -CH <sub>2</sub> -N <sup>+</sup>                                                                    | 1440~1400                         | El -CH <sub>2</sub> - adyacente al N <sup>+</sup> también se desplaza como los dos anteriores. Si aparecen nuevas bandas al convertir la amina en sal, entonces se sabe que hay grupos -CH <sub>2</sub> -N-.                                                                                   |                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |

## TABLA IR-II ALQUENOS

### 1. Frecuencias de estiramiento C-H ( $\epsilon$ entre paréntesis).

|    |                                                                                   |                             |                                 |                                                                                                                                                      |
|----|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|---------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| A) | $=CH_2$                                                                           | 3080, m(30)<br>3000~2975, m | $\nu_{as} CH_2$<br>$\nu_s CH_2$ | Las bandas por encima de 3000 sugieren la presencia de insaturados $=CH-$ (alquenos, aromáticos). La banda de 3000-2975 se traslapa con los alcanos. |
| B) |  | 3020, m                     | $\nu C-H$                       |                                                                                                                                                      |

### 2. Señales de estiramiento C=C y de flexión $=C-H$ , afectadas por el tipo de sustituyente

| Tipo                                                                                                          | $\nu C=C$                                                           | Sobretono de la flexión fuera del plano $\delta CH$ . | Flexión en el plano $\delta CH$ .                                                              | Flexión fuera del plano $\delta CH$ .                                                                                                                       |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| C) vinilo terminal<br>$R-CH=CH_2$                                                                             | 1660~1620<br>m (40)                                                 | 1860~1800<br>m (30)                                   | 1420, m (10~20).<br>Se encima con las señales de $CH_2$ de alcanos, (14)-(16)<br>1300, m~ancho | 990, ch (50) y 910 ch (110);<br>Incluye las flexiones simétrica y asimétrica de los 3 H.                                                                    |
| D) metileno terminal<br>     | 1665~1645<br>m (35)                                                 | 1800~1750<br>m (30)                                   | 1415, m (10~20).<br>Misma región de tabla I, (14)-(16).                                        | 890, ch (100~150).<br>Flexión asimétrica.                                                                                                                   |
| E) cis, disustituído<br>   | 1660~1620<br>m (10)                                                 |                                                       | 1415, m (10~20)                                                                                | 730~675, m (40). Ocasionalmente dudoso. En cíclicos aparecen varias bandas semejantes entre 800~650 ( $\epsilon \approx 50 \sim 100$ ), difícil asignarlas. |
| F) trans, disustituído<br> | 1680~1660<br>ancho (2)                                              |                                                       |                                                                                                | 965, ch (100). Flexión asimétrica de los H.                                                                                                                 |
| G) trisustituído<br>       | 1680~1660<br>ancho~m                                                |                                                       |                                                                                                | 840~800, ch (40). Los cíclicos dan dos señales entre 850~790.                                                                                               |
| H) tetrasustituído<br>     | 1680~1660<br>ancho, intenso cuando está unido directamente a O ó N. |                                                       |                                                                                                | No hay, pero los $CH_2$ contiguos ( $>C=C-CH_2$ ) se pueden detectar por su flexión (Tabla I, (15)).                                                        |

### 3. Dobles enlaces conjugados

| Grupo      | $\nu C=C$                                                                                      | $\delta C-H$ (fuera del plano)                                                                                                  |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| I) Dieno   | 1650 y 1600                                                                                    | La conjugación influye poco. En ocasiones la banda trans de 965 sube a 990. La banda cis aparece en 720, a veces como un prupo. |
| J) Trieno  | 1650 y 1600; en ocasiones solo una banda y en otras la de 1600 aparece como un hombro de 1650. |                                                                                                                                 |
| K) Polieno | Banda ancha en 1650~1580                                                                       |                                                                                                                                 |

## TABLA IR-III AROMÁTICOS

| Posición                                             | Intensidad $\epsilon$                                                                                               | Origen                                                         | Notas                                                                                                                                                                             |
|------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1) <b>3100~3000</b>                                  | Menos de 60                                                                                                         | Estiram C-H y combinaciones                                    | En algunos aromáticos la banda principal está debajo de $3000\text{ cm}^{-1}$                                                                                                     |
| 2) <b>2000~1660</b> , varias bandas, ver figura IR-1 | Baja, $\sim 5$                                                                                                      | Sobretono de las flexiones fuera del campo C-H y combinaciones | Grupo de 2 a 6 bandas pequeñas, característico del patrón de sustitución, comparar con fig. IR-3, si necesita ampliar concentre la muestra. Los carbonilos ocultan estas señales. |
| 3) 1600~1580<br>1500~1490                            | Variable, menos de 100. La señal de 1600 en ocasiones es mas intensa que la correspondiente (1680-1620) de alquenos | Nucleo bencénico                                               | Usualmente 1500 es mas intensa que 1600. Conjugado con dienos da otra señal en 1580. Los sistemas condensados absorben en 1650-1600 y dos bandas en 1525-1450.                    |

### Flexiones fuera del plano (debajo de $900\text{ cm}^{-1}$ )

Bandas muy intensas,  $\epsilon \approx 100$  a 500. El número, forma e intensidad relativa depende de los hidrógenos libres, como lo muestra la fig. IR-3. Para piridinas y similares se usa la misma tabla, el heteroátomo se considera entonces un sustituyente.

### Flexiones en el plano ( $1225\sim 950\text{ cm}^{-1}$ )

Estas señales son solo complementarias, pues los estiramientos C-C, C-N y C-O caen en la misma región. Aparecen varias señales en función del número de hidrógenos. Señales débiles, pero agudas, que pueden aumentar significativamente en presencia de grupos polares.

| Sustituyentes en: |                                                     |
|-------------------|-----------------------------------------------------|
| 1-                | 1175~1125, 1110~1070, 1070~1000                     |
| 1:2-              | 1225~1175, 1070~1000 (doblete), 1000~960            |
| 1:3-              | 1175~1125, 1110~1070, 1070~1000                     |
| 1:4-              | 1225~1175, 1070~1000 (doblete)                      |
| 1:2:3-            | 1175~1125, 1110~1070, 1070~1000, 1000~960           |
| 1:2:4-            | 1225~1175, 1175~1125, 1070~1000 (doblete), 1000~960 |
| 1:3:5-            | 1175~1125, 1070~1000                                |

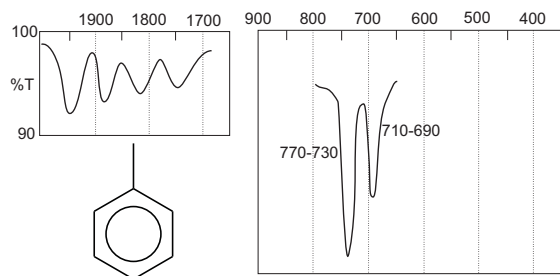
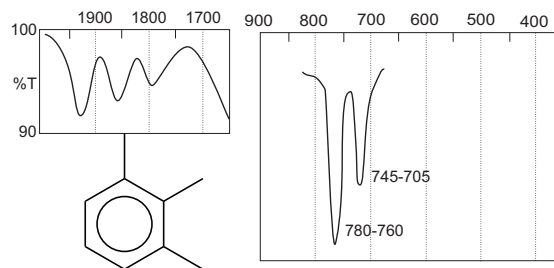
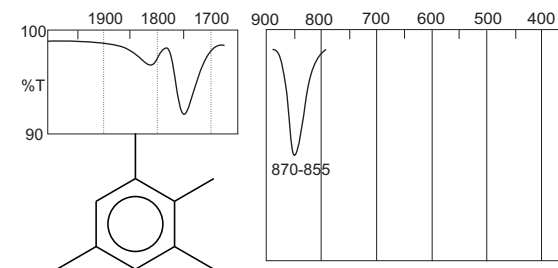


**Figura IR-5 Señales Características de Sustituciones en Aromáticos**

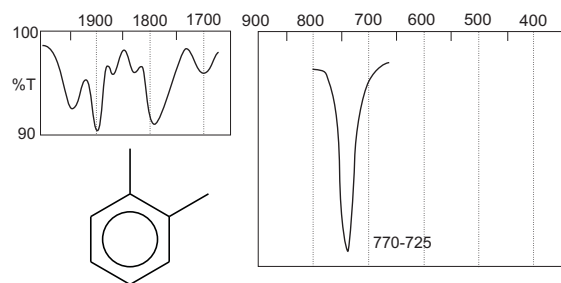
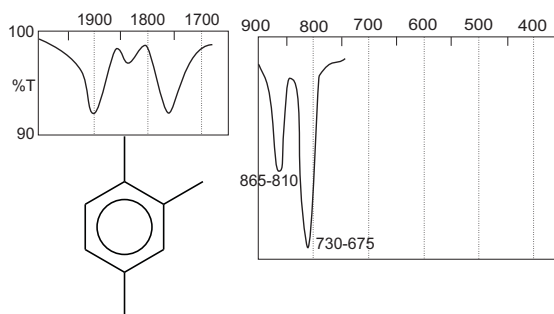
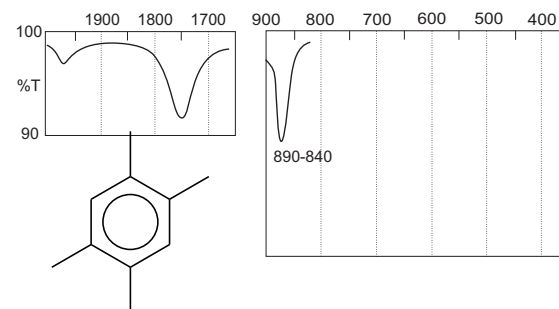
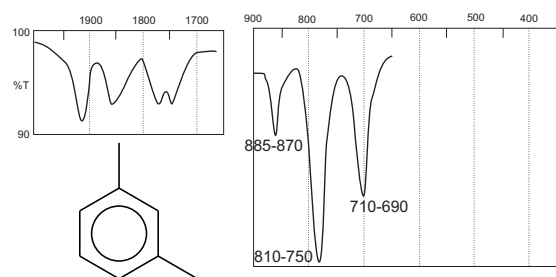
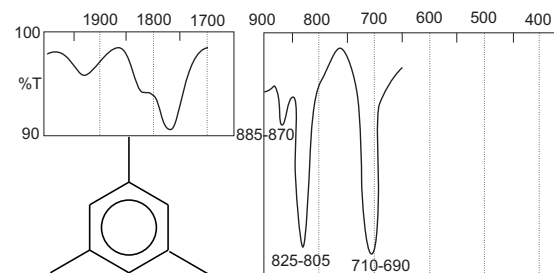
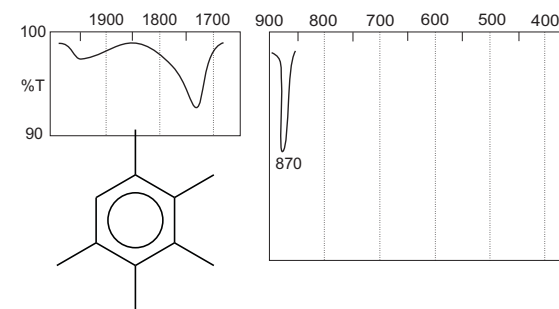
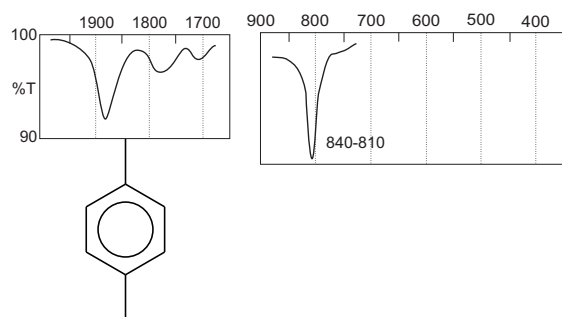
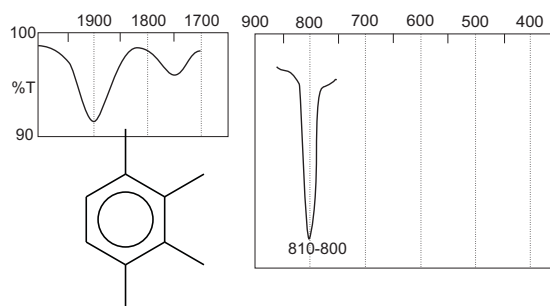
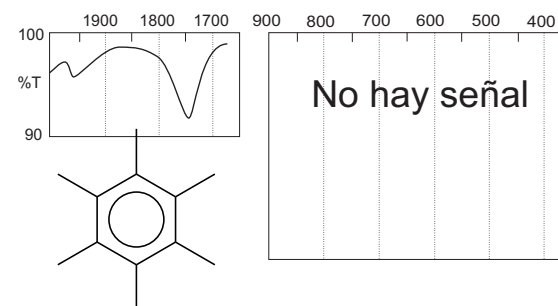
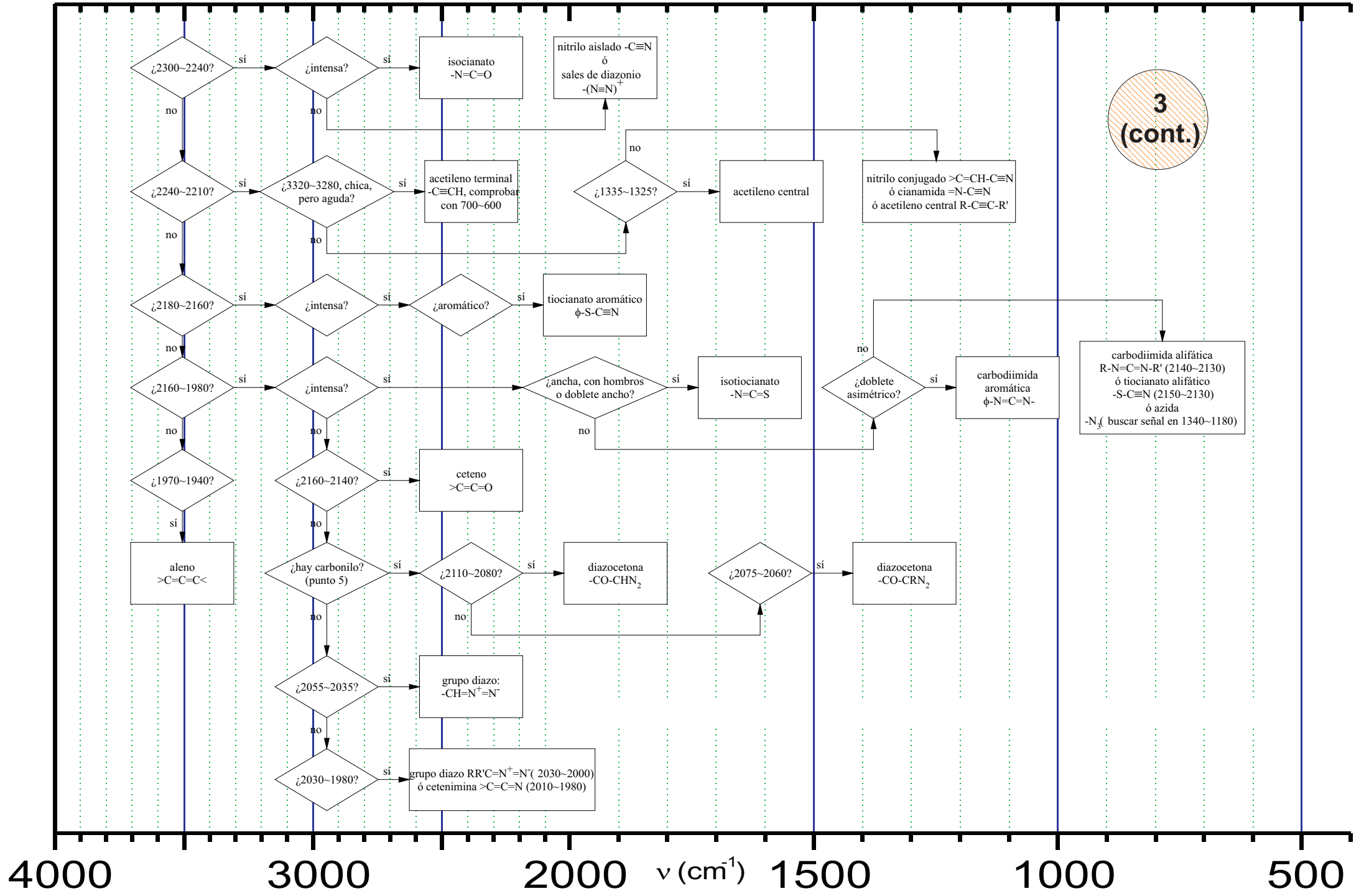


**TABLA IR-IV: ENLACES  $X\equiv Y$ ,  $X=Y=Z$ .**

| Grupo                                | Posición (cm-1)                                 | $\epsilon$                   | Notas                                                                                                                                                     |
|--------------------------------------|-------------------------------------------------|------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Acetileno terminal, $-C\equiv CH$    | Estir. $-C\equiv C-$ : 2230~2210                | 5                            |                                                                                                                                                           |
|                                      | Estir. $\equiv C-H$ : 3320~3280                 | 100                          | La señal en ~3300 es muy aguda. También hay una flexión del enlace C-H en 700~600 y ocasionalmente el sobretono en 1300~1200                              |
| Acetileno central, $-C\equiv C-$     | 2235~2215                                       | 1                            | Desaparece si la simetría es alta                                                                                                                         |
|                                      | 1335~1325                                       |                              | ~1330 causado por flex. $-C\equiv C-CH_2-$                                                                                                                |
| Nitrilo $-C\equiv N$                 | Aislado: 2260~2240<br>Conjugado: 2240~2210      | 10~150                       | Las cianamidas ( $=N-C\equiv N$ ) dan igual que los conjugados. Los cianuros alcalinos (NaCN, KCN) producen una señal intensa del carbanión en 2100~2050. |
| Sales de diazonio, $-(N\equiv N)^+$  | 2280~2240                                       | Medio                        | La posición depende del contraión                                                                                                                         |
| Diazo $-CH=N^+=N^-$                  | 2050~2035                                       |                              |                                                                                                                                                           |
| $>C=N^+=N^-$                         | 2030~2000                                       |                              |                                                                                                                                                           |
| Diazocetonas $-CO-CHN_2$             | 2100~2090                                       |                              | En aromáticos el estiram. del carbonilo se desplaza a 1645, en alifáticos a 1630~1605                                                                     |
| $-CO-CRN_2$                          | 2070~2060                                       |                              |                                                                                                                                                           |
| Alenos $>C=C=C<$                     | 1950                                            |                              | Se divide si el aleno es terminal y tiene grupos electroatrayentes (e.g. ácidos, cetonas).                                                                |
|                                      | 850 (solo si el aleno es terminal, flexión C-H) |                              | 850 mas intensa que 1950, sobretono en 1700.                                                                                                              |
| Isocianato $-N=C=O$                  | 2275~2250                                       | 1300~2000                    | Muy intensa, no le afecta conjugación                                                                                                                     |
| Carbodiimida, $-N=C=N-$              | Alifática: 2140~2130                            | 1340~1580                    | Mas intensa que carbonilo.                                                                                                                                |
|                                      | Aromática: 2145<br>2115                         | 1380~1680                    | Los aromáticos dan este doblete asimétrico.                                                                                                               |
|                                      |                                                 | 400~1560                     |                                                                                                                                                           |
| Azida, $-N_3$                        | 2160~2095                                       | intensa                      | Estiram. asim., en aromáticos se divide                                                                                                                   |
|                                      | 1340~1180                                       | débil                        | Estiram. sim.                                                                                                                                             |
| Tiocianato, $-S-C\equiv N$           | Alifático 2140<br>Aromático 2175~2160           | Mas intensas que isocianatos |                                                                                                                                                           |
| Isotiocianato, $-N=C=S$              | Alifático 2140~1990 y 1090                      |                              | 2100 un poco ancha, dividida o con hombros.                                                                                                               |
|                                      | Aromático 2130~2040, 1250 y 930                 |                              |                                                                                                                                                           |
| Ceteno, $>C=C=O$                     | ~2150                                           |                              |                                                                                                                                                           |
| Cetenimina, $>C=C=N$                 | ~2000                                           |                              |                                                                                                                                                           |
| Bióxido de carbono, $O=C=O$ , $CO_2$ | 2349.3<br>720.5<br>667.3                        | intensa                      | Estiram. antisim., estruct. Fina<br>Las tres son señales finas, usadas en la calibración del equipo.                                                      |

Fig. IR-4 Algoritmo para la interpretación de señales en la zona 2300-1950 cm<sup>-1</sup>

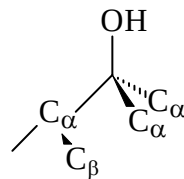


## TABLA IR-V: ALCOHOL Y FENOLES.

**Tabla 5.a: Vibraciones de estiramiento del enlace O-H:**

| Estado del alcohol                                                            | Posición, $\text{cm}^{-1}$ | Coeficiente $\epsilon$ | Forma        | Notas                                                                                                                                                                                                                        |
|-------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|------------------------|--------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1) <b>Libre, sin asociar:</b>                                                 | <b>3640-3610</b>           | 30-100                 | <b>Agudo</b> | Medido en fase vapor o en disolventes no polares, pero si estos están húmedos, también aparece la señal del agua en 3710.                                                                                                    |
| Primario, $-\text{CH}_2-\text{OH}$                                            | 3640                       | 70                     |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| Secundario,<br>$\text{R}'-\text{CH}-\text{OH}$                                | 3630                       | 60-50                  |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| Terciario,<br>$\text{R}'-\text{C}-\text{OH}$                                  | 3620                       | 45                     |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| Fenoles, $\phi-\text{OH}$                                                     | 3610                       |                        |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| 2) Hidroperóxido: $-\text{O}-\text{O}-\text{H}$                               | 3560-3530                  |                        |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| Puentes de hidrógeno:                                                         |                            |                        |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| 3) Dímero<br>$\text{R}-\text{OH} \cdots \text{O}-\text{R}$                    | 3600~3500                  |                        | Agudo        | No se observa normalmente, por ocultarlo la banda polimérica. También aquí aparecen otros puentes de hidrógeno con éteres, cetonas y aminas                                                                                  |
| 4) <b>Polimérico</b><br>$\text{R}-\text{O}-\text{H} \cdots \text{O}-\text{R}$ | <b>3400~3200</b>           | Grande                 | <b>Ancho</b> | También aquí aparecen las aminas (3500~3200) y la pequeña señal de sobretono del carbonilo. En muestras húmedas aparece la señal de estiramiento H-O-H (3600~3100), en cuyo caso también se observa la flexión en 1640~1615. |
| Puentes intramoleculares:                                                     |                            |                        |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| 5) Alcoholes polivalentes                                                     | 3600~3500                  | 50-100                 | Agudo        |                                                                                                                                                                                                                              |
| 6) puentes $\pi$                                                              | 3600-3500                  |                        |              |                                                                                                                                                                                                                              |
| 7) Puente intramolec. con carbonilos, nitro, etc.                             | 3200~2500                  |                        | Ancho        | Generalmente se pierde bajo la señal de los estiramientos C-H                                                                                                                                                                |

**Tabla 5.b: Vibraciones de estiramiento del enlace C-OH:**



| Tipo de alcohol | Posición, $\text{cm}^{-1}$ | Desplazamientos, $\text{cm}^{-1}$                                                              | Notas                                                                                                                                                                                                                     |
|-----------------|----------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Primario        | <b>1050</b> (1075~1025)    | Ramificación en $\alpha$ : -15                                                                 | Las insaturaciones pueden ser alquenos o aromáticos. Sobre $\beta$ y mas lejos no influyen en la posición. Si tanto en $\alpha$ como en $\alpha'$ y $\alpha''$ hay ramificaciones, descuenten otros 15 $\text{cm}^{-1}$ . |
| Secundario      | <b>1100</b> (1150~1100)    | Insaturación en $\alpha$ : -30                                                                 |                                                                                                                                                                                                                           |
| Terciario       | <b>1125</b> (1200~1100)    | Anillo en $\alpha-\alpha'$ : -50                                                               |                                                                                                                                                                                                                           |
| Fenoles         | <b>1200</b> (1250~1150)    | Insaturación en $\alpha$ y anillo $\alpha-\alpha'$ : -90<br>Dieno conjugado en $\alpha$ : -140 |                                                                                                                                                                                                                           |

**Tabla 5.c: Vibraciones de torsión del enlace C-OH:**

| Posición ( $\text{cm}^{-1}$ ) | Forma | Notas          |
|-------------------------------|-------|----------------|
| 660 $\pm$ 50                  | Ancha | No es muy útil |

**TABLA IR-VI: GRUPO CARBONILO.**  
**ÁCIDOS CARBOXÍLICOS, ÉSTERES, ANHIDRIDOS, ALDEHÍDOS Y CETONAS**

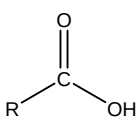
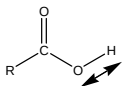
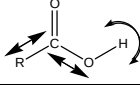
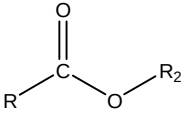
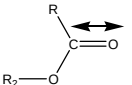
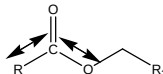
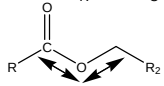
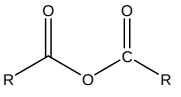
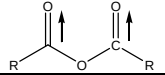
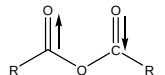
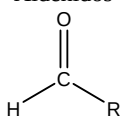
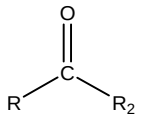
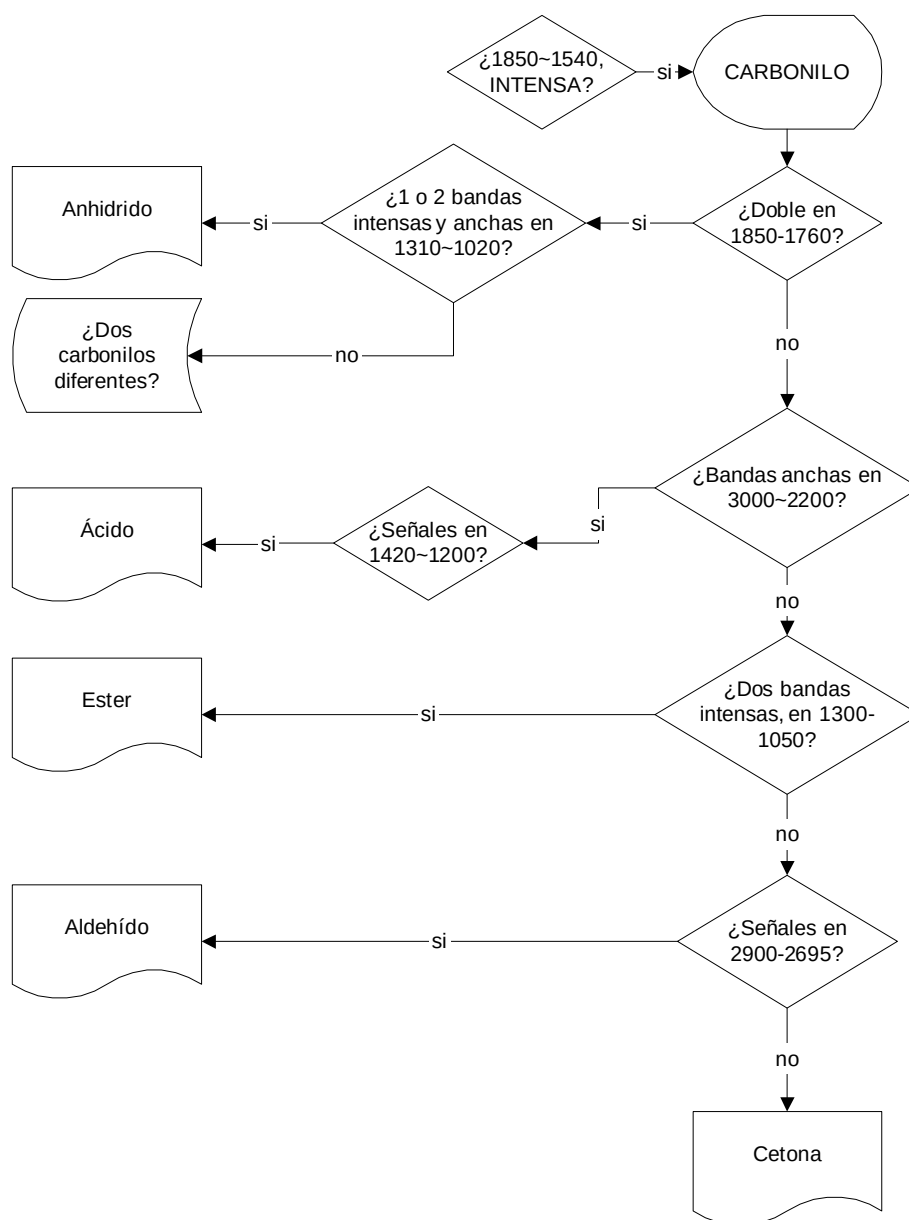
| GRUPO                                                                                                        | Frecuencia ( $\text{cm}^{-1}$ ) | NOTAS                                                                                                                                          | ORIGEN                                                                                                                                                                                                                                                             |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>Ácidos carboxílicos</p>  | 1725-1700                       | Señal intensa, característica del grupo carbonilo                                                                                              | Estiramiento del carbonilo<br>                                                                                                                                                  |
|                                                                                                              | 3000-2200                       | Señal ancha por puentes de hidrógeno, con patrón de sobretonos de la torsión entre 2800-2200.                                                  | Estiramiento del OH<br>                                                                                                                                                         |
|                                                                                                              | 1420-1200                       | Dos señales, una ancha en 1320-1200, otra más débil en 1440-1390                                                                               | Torsión/estiramiento del carboxilo<br>                                                                                                                                          |
|                                                                                                              | 960-875                         | Ancha, mediana                                                                                                                                 | Torsión fuera del plano del dímero del carboxilo                                                                                                                                                                                                                   |
| <p>Ésteres</p>              | 1750-1715                       | Señal intensa, característica del grupo carbonilo                                                                                              | Estiramiento del carbonilo<br>                                                                                                                                                  |
|                                                                                                              | 1300-1050                       | Dos bandas, una de mayor intensidad:<br>Formiato 1214-1180<br>Acetato 1260-1230<br>Alquil ester 1220-1160                                      | Estiramientos simétrico y asimétrico.<br>Mayor $\nu$ e intensidad:<br><br>menor $\nu$ :<br> |
| <p>Anhidridos</p>         | 1850-1770                       | <b>Doble banda de carbonilo</b><br>Normalmente el simétrico (mayor $\nu$ ) es mas intenso que el antisimétrico, excepto en anhidridos cíclicos | Estiramiento simétrico de los carbonilos:<br>                                                                                                                                 |
|                                                                                                              | 1790-1760                       |                                                                                                                                                | Estiramiento antisimétrico de los carbonilos:<br>                                                                                                                             |
|                                                                                                              | 1310-1020                       | Uno o dos bandas intensas.                                                                                                                     | Estiramientos simétrico y asimétrico de los enlaces C-CO-O-CO-C                                                                                                                                                                                                    |
| <p>Aldehídos</p>          | 1740-1645                       | Señal intensa, característica del grupo carbonilo                                                                                              | Estiramiento del carbonilo<br>                                                                                                                                                |
|                                                                                                              | 2900-2800 y 2775-2695           | Dos señales, la primera puede estar muy cerca de metilos y metilenos                                                                           | Resonancia de Fermi                                                                                                                                                                                                                                                |
|                                                                                                              | 1410-1380                       |                                                                                                                                                | Torsión de los C-H                                                                                                                                                                                                                                                 |
| <p>Cetonas</p>            | 1765-1540                       | Señal intensa, característica del grupo carbonilo                                                                                              | Estiramiento del carbonilo<br>                                                                                                                                                |
|                                                                                                              | 1100 y 1300                     | Señales pequeñas en alifáticos, más intensas y finas en aromáticos                                                                             | Torsión del carbonilo                                                                                                                                                                                                                                              |

Fig. IR-6 Algoritmo para la interpretación de señales en 1850-1540  $\text{cm}^{-1}$



## TABLA IR-VII: AMINAS Y SALES DE AMONIO.

**Tabla 7.a: Vibraciones de estiramiento del enlace N-H:**

| Tipo de amina                                                                                                                                                                                                                                                                        | Posición, $\text{cm}^{-1}$                                  | Coeficiente $\epsilon$                                         | Notas                                                                  |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| <b>Libre:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                             |                                                                |                                                                        |
| 1) Primaria:                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                             |                                                                |                                                                        |
| $\text{R-NH}_2$ y $\phi\text{-NH}_2$                                                                                                                                                                                                                                                 | $\sim 3500$ (estiram. asim.)<br>$\sim 3400$ (estiram. sim.) | Ancha en primarias<br>$\epsilon \sim 30$ en $\phi\text{-NH}_2$ | La presencia de estas dos señales es característica de aminas prim.    |
| 2) Secundaria:                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                             |                                                                |                                                                        |
| $\text{R-NH-R}'$                                                                                                                                                                                                                                                                     | <b>3350~3310</b>                                            | ancha                                                          | Muy pequeña en N-heterociclos como la piperidina                       |
| $\phi\text{-NH-R}$ y $\phi\text{-NH-}\phi'$                                                                                                                                                                                                                                          | <b>3450</b>                                                 | $\epsilon \sim 30$ a 40                                        |                                                                        |
| Pirroles, indoles, etc.<br>                                                                                                                                                                         | <b>3490</b>                                                 | $\epsilon \sim 150$ a 300                                      | Característicos, ver tabla 10-2                                        |
| $>\text{C=NH}$                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>3400~3300</b>                                            |                                                                | También estiramiento $\text{C=N}$ en $1690\sim 1640 \text{ cm}^{-1}$ . |
| <b>Asociada:</b> El desplazamiento desde la posición libre es inferior a $100 \text{ cm}^{-1}$ , aunque puede llegar hasta $3100 \text{ cm}^{-1}$ . En general son mas pequeñas, agudas y menos sensibles a los cambios en concentración que las bandas de alcoholes $\text{R-OH}$ . |                                                             |                                                                |                                                                        |

**Tabla 7.b: Vibraciones de flexión del enlace N-H:**

| Tipo                       | Posición, $\text{cm}^{-1}$ | Intensidad      | Notas                                                                                                                             |
|----------------------------|----------------------------|-----------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Primarias, $-\text{NH}_2$  | 1640~1560                  | Chica a mediana | Flexión de tijera, tanto en aminas alifáticas como aromáticas.                                                                    |
|                            | <b>} 900~650</b>           | Mediana, ancha  | Muy característica, corresponde a la torsión, presente solo en aminas 1 <sup>as</sup> y 2 <sup>as</sup> , no en 3 <sup>as</sup> . |
| Secundarias, $-\text{NH}-$ | 1580~1490                  | ancha           | No es útil por su difícil detección                                                                                               |

**Tabla 7.c: Vibraciones de estiramiento del enlace C-N:**

Si bien la posición es casi igual al estiramiento  $\text{C-C}$ , la intensidad es mucho mayor, debido a la polaridad del enlace  $\text{C-N}$ .

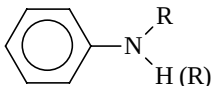
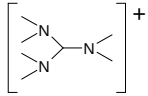
| Tipo de enlace C-N                                                                  | Posición ( $\text{cm}^{-1}$ ) | Intensidad | Notas                                                                                         |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\text{R}-\text{N} \begin{matrix} \text{R(H)} \\ \text{R(H)} \end{matrix}$          | 1230~1030                     | mediana    | Dos señales en terciarias, en aminas cíclicas la posición está a menor número de onda.        |
|  | 1360~1250                     | Chica      | Estiramiento $\phi\text{-N}$ . Se desplaza por el incremento en el carácter del doble enlace. |
|                                                                                     | 1280~1180                     | mediana    | Estiramiento del enlace $\text{C}_{\text{alifático}}\text{-N}$                                |

**Tabla 7.d: Sales de aminas iónicas:**

| Grupo                                                                                                                                                                                                                         | Posición (cm <sup>-1</sup> ) | Forma y tamaño   | Notas                                                                                          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------|------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>                                                                                                                                                                                                  | 3300~3030                    | Ancho y chico    |                                                                                                |
| Amina primaria,<br>R-NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>                                                                                                                                                                             | ~3000                        | Ancho            | Los estiram. asim. y sim. de N-H se traslapan sobre la banda C-H, se le llama banda de amonio. |
|                                                                                                                                                                                                                               | ~2500                        | Varias, medianas | Tonos combinados y sobretonos, no siempre aparecen.                                            |
|                                                                                                                                                                                                                               | ~2000                        | mediana          | Tonos combinados y sobretonos, no siempre aparecen.                                            |
|                                                                                                                                                                                                                               |                              |                  |                                                                                                |
|                                                                                                                                                                                                                               |                              |                  |                                                                                                |
| Amina Secundaria,<br>>NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>                                                                                                                                                                            |                              |                  |                                                                                                |
| Amina Terciaria,<br>NH <sup>+</sup>                                                                                                                                                                                           |                              |                  |                                                                                                |
| Ión Amonio cuaternario<br>>N <sup>+</sup> <                                                                                                                                                                                   |                              |                  |                                                                                                |
| Aminas insaturadas,<br>(aromáticas):<br>                                                                                                     |                              |                  |                                                                                                |
| <br>Guanidinio:<br>Estiram. C-N de las<br>guanidinas libres en<br>clorhidratos:<br>Mono-substituídas<br>Di-substituídas<br>Tri-substituídas |                              |                  |                                                                                                |