

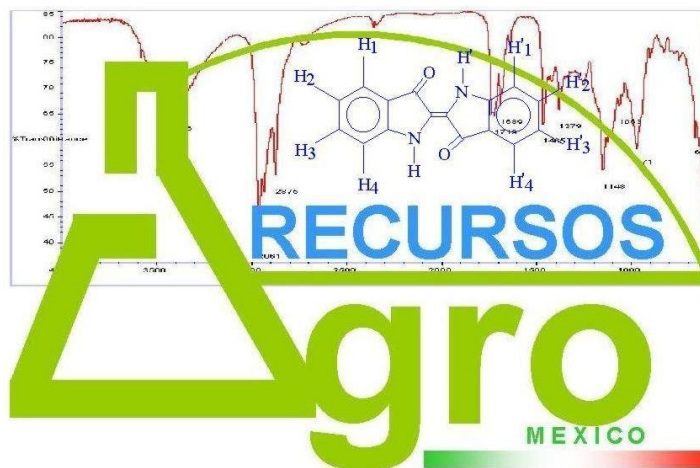
**UNIVERSIDAD AUTONOMA CHAPINGO
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA AGROINDUSTRIAL**

INTRODUCCIÓN AL ESTUDIO DE LOS

AGRORECURSOS

TEMA

Espectrometría del Infrarrojo



Elías Jaime Matadamas Ortíz

CONTENIDO

I. INTRODUCCIÓN	3
II. RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA	4
III. ABSORCIÓN DE RADIACIÓN INFRARROJA	7
IV. CARACTERÍSTICAS DE UN ESPECTRO	10
4.1. RELACIÓN ENTRE LA ABSORBANCIA Y LA CONCENTRACIÓN. LEY DE LAMBERT- BEER	10
4.2. EL ESPECTRO INFRARROJO	11
V. INTERPRETACIÓN DE UN ESPECTRO INFRARROJO	13
5.1. ENLACES CARBONO-CARBONO Y CARBONO-HIDROGENO	14
5.2. ALOALCANOS	15
5.3. ALCOHOLES Y AMINAS	15
5.4. ÉTERES	17
5.5. COMPUESTOS CARBONILOS	17
5.5.1. CETONAS	17
5.5.2. ALDEHIDOS	18
5.5.3. ACIDOS CARBOXILICOS	19
5.5.4. ÉSTERES	20
VI. CONCLUSIÓN	20
VII. ESPECTROS	21
VIII. BIBLIOGRAFÍA	29

I. INTRODUCCIÓN.

La espectroscopía es el estudio de las interacciones entre la energía radiante y la materia. Los colores que vemos y el hecho que podamos ver, son consecuencias de la absorción de energía por los compuestos orgánicos e inorgánicos.

La captura de la energía del sol por los vegetales en el proceso de la fotosíntesis es otro aspecto de la interacción de los compuestos orgánicos con la energía radiante. De interés primordial en química orgánica es el hecho que las longitudes de onda a las cuales un compuesto orgánico absorbe la energía radiante son *dependientes sobre todo de la estructura del compuesto*. Por lo tanto, podemos usar las técnicas espectroscópicas para determinar las estructuras de compuestos desconocidos y para el estudio de las características de las estructuras de compuestos conocidos.

En este capítulo, ponemos énfasis en la **espectroscopía del infrarrojo**, la cual es ampliamente usada como técnica de identificación en los estudios de las ciencias de los Agrorecursos.

Los estudiantes en formación en las ciencias de los Agrorecursos, encontrarán en esta sencilla exposición, las bases para entender los principios de la espectroscopía del infrarrojo y la interpretación de sus espectros.

Elías J. Matadamas Ortíz

Chapingo, México, enero del 2003.

II. RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA.

La radiación electromagnética es energía que es transmitida a través del espacio en forma de ondas. Cada tipo de radiación electromagnética (ondas de radio, ultravioleta, visible, infrarrojo, etc.) son caracterizadas por su longitud de onda (λ), que es la distancia de una cresta de una onda a la cresta de la siguiente onda.

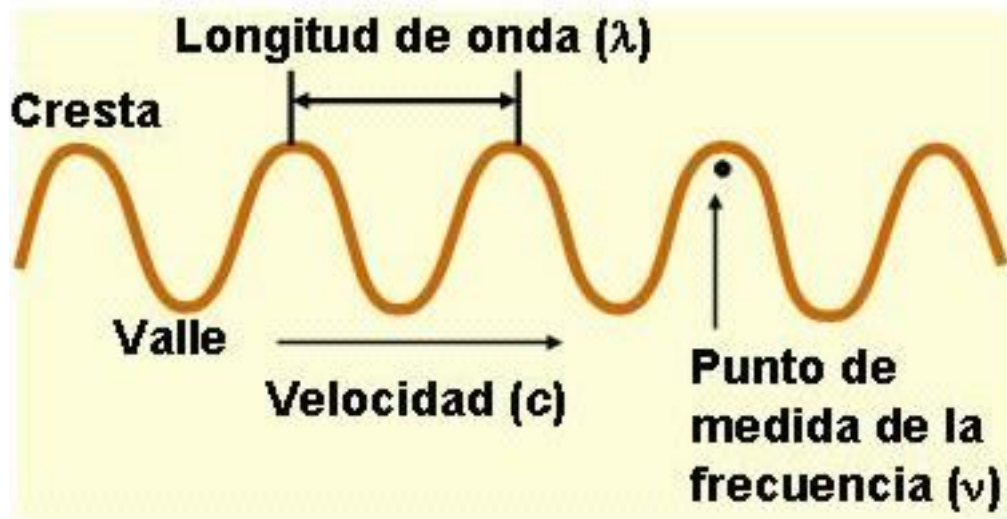


Figura 1. La radiación electromagnética se puede caracterizar por su longitud de onda (λ).

Además, la radiación también puede ser caracterizada por su **frecuencia** (ν), la cual se define como el número completo de **ciclos por segundo** (cps), también llamados Hertz (Hz).

La radiación de una alta frecuencia contiene más ondas por segundo; por lo tanto, la longitud de onda debe ser más corta. Por definición, la longitud de onda y la frecuencia son *inversamente proporcionales*. Esta relación puede ser expresada matemáticamente:

$$\nu = c/\lambda$$

donde, ν = frecuencia en Hz
 $c = 3 \times 10^{10}$ cm/seg (velocidad de la luz)
 λ = longitud de onda en cm

En la espectroscopía infrarrojo, la radiación electromagnética es generalmente expresada como **número de ondas** (wavenumbers), que es el número de ciclos por

centímetro. El número de ondas tiene unidades de **centímetros recíprocos** (1/cm, o cm^{-1}), comúnmente llamadas, *centímetros menos uno*.

El número de ondas (wavenumbers) y la longitud de onda pueden ser interconvertidas por la siguiente ecuación:

$$\text{Número de ondas en cm}^{-1} = 1/\lambda \text{ en cm}$$

$$\text{Número de ondas en cm}^{-1} = (1/\lambda \text{ en } \mu\text{m}) 10^4$$

$$\text{Longitud de onda } (\lambda) \text{ en } \mu\text{m} = (1/\text{número de ondas en cm}^{-1}) 10^4$$

Un μm (micrón) equivale a 1000 nm (nanómetros). Lo anterior significa que un 1 nm es igual a la milésima parte de un micrón (μm) o a un milimicrón ($\text{m}\mu$).

Ejercicio 1. Convertir los valores de 800, 1000, 1200, 1400, 1600, 1800, 2000, 2500, 3000, 3500 y 4000 cm^{-1} a micrones.

Ejercicio 2. ¿Cuál de las radiaciones mencionadas abajo tiene más alta energía?

- (a) Radiación infrarroja de 1500 cm^{-1} a de 1600 cm^{-1} .
- (b) Radiación ultravioleta de 200 nm o de 300 nm.
- (c) Ondas de radio de 60 000 Hz o de 60 004 Hz.

Ejercicio 3. Haga las siguientes conversiones:

- (a) 6000 μm a cm^{-1} .
- (b) 800 cm^{-1} a μm .
- (c) 1.5 μ a μm .

La unidad usada para la longitud de onda (λ) en la espectroscopía infrarrojo es el **micrómetro**, μm , (o micrón, μ). Un micrómetro es igual que un micrón.

$$1 \mu\text{m} = 1 \mu$$

donde:

$$\begin{aligned} 1 \mu\text{m} &= 10^{-6} \text{ m o } 10^{-4} \text{ cm} \\ 1 \mu\text{m o } 1 \mu &= 0.000 \text{ 001 m} \\ 1 \mu\text{m o } 1 \mu &= 0.0001 \text{ cm} \end{aligned}$$

La radiación electromagnética es transmitida en partículas o paquetes de energía llamados **fotones** o **cuantos** . La energía de un fotón es **inversamente proporcional a su longitud de onda** (matemáticamente, $E = hc/\lambda$, donde h es la constante de Planck).

La radiación de longitud de onda corta tiene más alta energía que una radiación de onda larga. Por lo que la luz ultravioleta tiene más alta energía que un fotón de luz visible y tiene sustancialmente mayor energía que un fotón de ondas de radio.

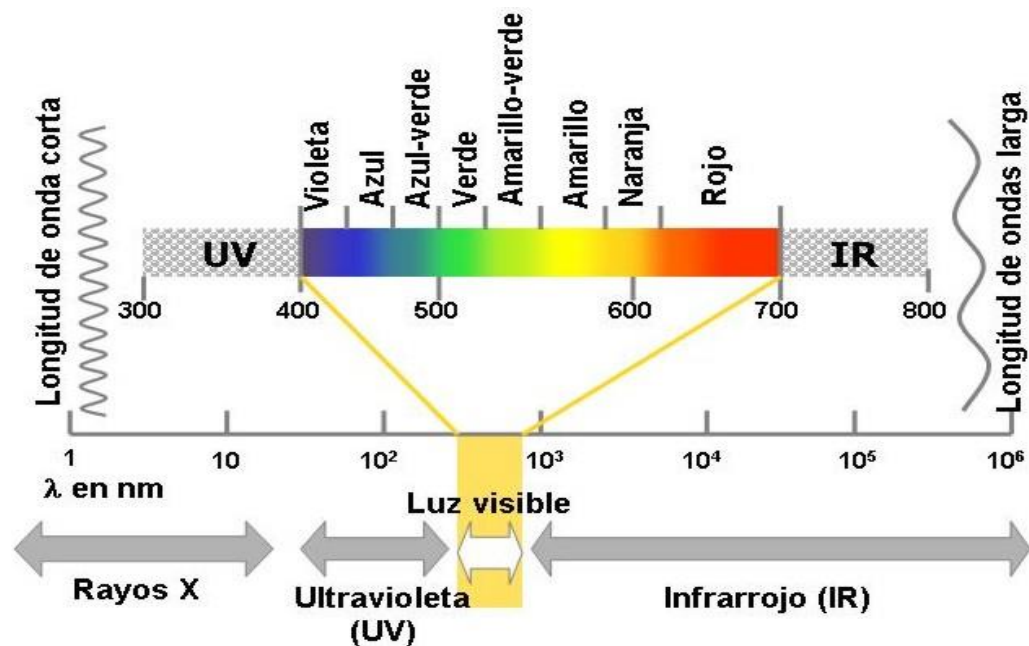


Figura 2. El espectro de la radiación electromagnética en la región ultravioleta al infrarrojo y su longitud de onda.

Por el contrario, la energía de un fotón de radiación electromagnética es **directamente proporcional a la frecuencia** (más ondas por unidad de tiempo o de longitud significan más alta energía).

Las moléculas absorben solo longitudes de onda específicas de radiación electromagnética. La absorción de luz ultravioleta (radiación de alta energía) resulta en la promoción de un electrón a un orbital de alta energía.

La radiación del infrarrojo no contiene tanta energía para promover un electrón. La absorción de la radiación infrarroja resulta en un incremento en las amplitudes de la **vibración de los átomos unidos** .

La **intensidad** de la radiación es proporcional al número de fotones, independientemente de su energía. Cuando una muestra absorbe fotones de un rayo de radiación transmitida, ya sea de radiación ultravioleta o infrarroja, el número de fotones transmitidos en el rayo debe disminuir. De este modo, la intensidad de la radiación transmitida disminuye. Es este cambio en intensidad que se mide en las espectroscopía de absorción.

III. ABSORCIÓN DE RADIACIÓN INFRARROJA.

Los núcleos de átomos unidos por enlaces covalentes sufren vibraciones, u oscilaciones, de una manera similar a dos esferas conectadas por un resorte. Cuando las moléculas absorben radiación infrarroja, la energía absorbida causa un incremento en la amplitud de las vibraciones de los átomos enlazados. La molécula está entonces en un **estado vibracional excitado**. La energía absorbida es posteriormente disipada como calor cuando la molécula regresa a su estado fundamental.

Los estados vibracionales de los enlaces se producen a niveles de energía fijos o "cuantizados". La absorción de una particular longitud de onda por un determinado tipo de enlace depende de la diferencia de energía entre el estado fundamental y el estado excitado. Por lo tanto, los diferentes tipos de enlaces (C-H, C-C, O-H, etc.) absorben radiación infrarroja a diferentes longitudes de onda características.

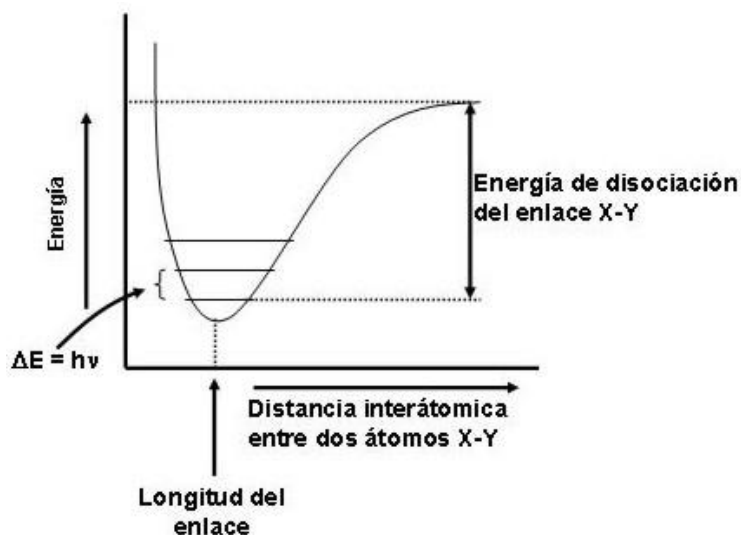


Figura 3. Absorción de radiación infrarroja y estados vibracionales de dos átomos unidos por un enlace covalente.

Un enlace dentro de una molécula puede sufrir diferentes tipos de oscilaciones: por lo tanto, un particular enlace puede absorber energía a más de una longitud de onda. Por ejemplo, un enlace O-H absorbe energía a alrededor de 3330 cm^{-1} ($3.0\ \mu\text{m}$). La energía a esta longitud de onda produce un incremento en las **vibraciones de elongación** (stretching vibrations) del enlace O-H. Pero un enlace O-H también absorbe a alrededor de 1250 cm^{-1} ($8.0\ \mu\text{m}$); energía a esta longitud de onda causa un incremento de las **vibraciones de deformación angular** (bending vibrations). Estos tipos de vibraciones son llamadas **modos de vibración fundamentales**.

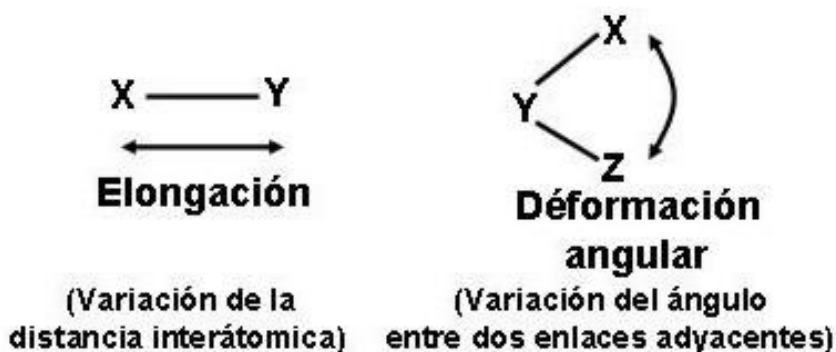


Figura 4. Modos fundamentales de vibración producidos por la absorción de radiación infrarroja.

Los anteriores son los modos simples de oscilación o vibración, pero estas pueden ser **simétricas** o **asimétricas**. Los modos de deformación angular pueden estar **sobre el plano** o **fuera del plano**.

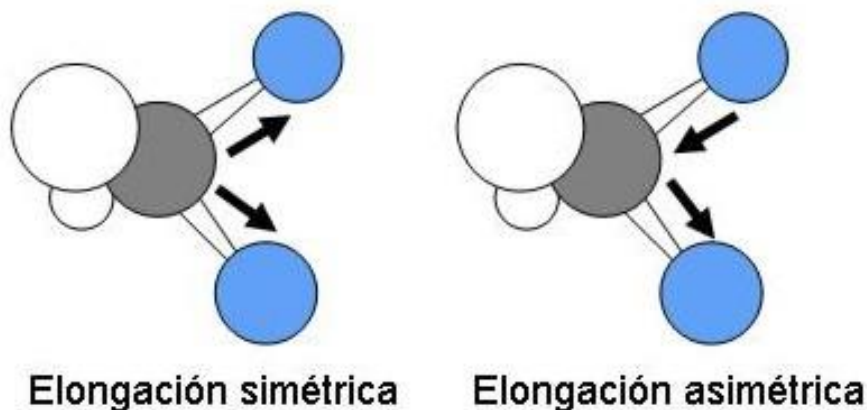


Figura 5. Modos de oscilación de elongación simétrica y asimétrica.

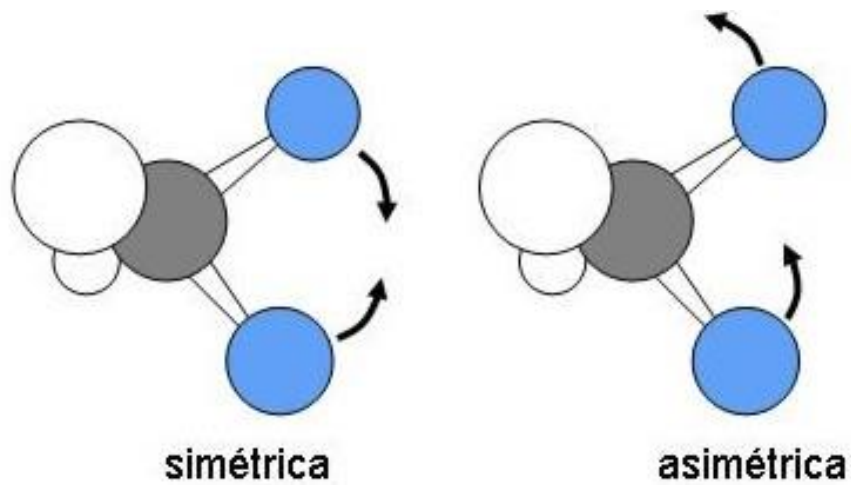


Figura 6. Vibraciones de deformación angular sobre el plano.

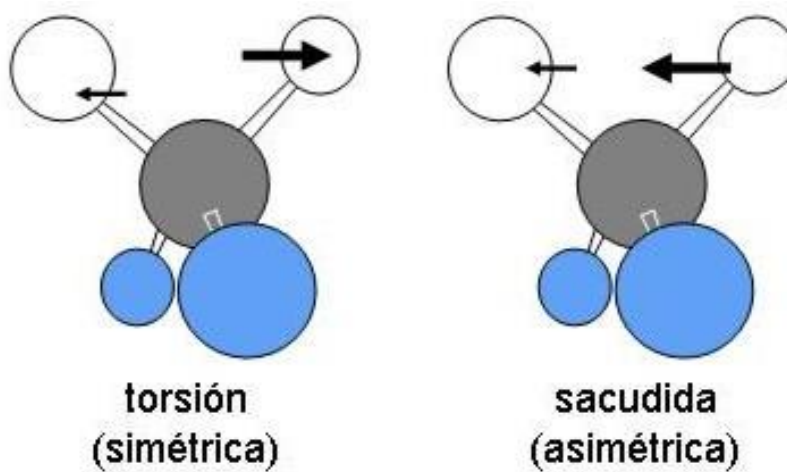


Figura 7. Vibraciones de deformación angular fuera del plano.

IV. CARACTERÍSTICAS DE UN ESPECTRO.

Un espectro infrarrojo, visible o ultravioleta de un compuesto es una gráfica; ya sea de *longitud de onda* o *frecuencia* de una pequeña porción del espectro electromagnético, contra; ya sea, *el porcentaje de transmisión* (%T) o la absorbancia (A).

$$\%T = \text{Intensidad} / \text{Intensidad original} \times 100$$

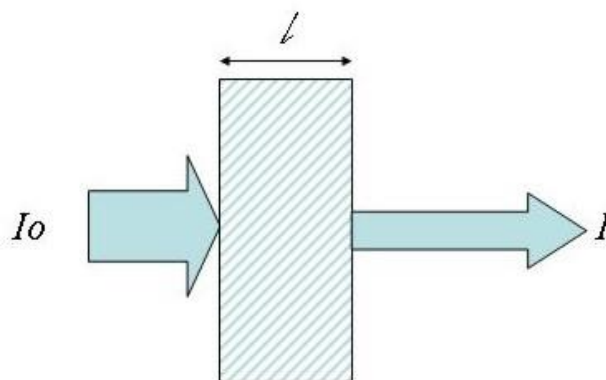


Figura 7. Disminución de la intensidad de la radiación por efecto de la absorción de una muestra de un compuesto orgánico. I_0 es la radiación original y I es la radiación resultante una vez que atraviesa la celda con la muestra, y la longitud de transmisión o longitud de la celda está representada por l .

$$T = I/I_0 \quad \text{y} \quad \%T = I/I_0 \times 100$$

$$A = \log I_0 / I$$

4.1. RELACIÓN ENTRE LA ABSORBANCIA Y LA CONCENTRACIÓN. LEY DE LAMBERT-BEER.

La relación funcional entre la cantidad medida en un método absorciométrico (A) y la cantidad deseada (la concentración del analito c), que se conoce como Ley de Beer, se puede expresar como sigue:

$$A = \log (I_0 / I) = \varepsilon c l$$

Donde: ε = Coeficiente de absorción molar
 c = Concentración del analito
 l = Longitud de la celda (1 cm).

Por lo tanto: $A = \varepsilon c l$

$$\varepsilon = A / c l$$

$$c = A / \varepsilon l$$

$$l = A / c \varepsilon$$

Es posible hacer conversiones de A a T, aún de A a %T, a partir de las siguientes expresiones:

$$A = \log 100/\%T$$

$$\%T = 100/ 10^A$$

Los espectros UV-Visible generalmente utilizan los valores de absorbancia (A) y los espectros infrarrojos por lo general vienen en unidades de porcentaje de transmitancia (%T), aunque en algunos casos las unidades usadas serán de absorbancia.

4.2. EL ESPECTRO INFRARROJO.

La mayoría de los espectros infrarrojos registran la longitud de onda o frecuencia (incluso ambas) contra %T. La ausencia de absorción por un compuesto a una particular longitud de onda es registrado como 100% T. Cuando un compuesto absorbe radiación a una particular longitud de onda, la intensidad de la radiación que esta siendo transmitida disminuye. Esto resulta en una disminución en %T y aparece en el espectro como una banda, llamada **pico de absorción** o **banda de absorción**. La parte del espectro donde el valor de %T es de 100 (o cerca de 100) es llamada la **línea base**, la cual es registrada en la prte superior de un espectro infrarrojo.

Los espectros visibles y ultravioleta son comúnmente presentados como gráficas de absorbancia (A) contra la longitud de onda. En estos casos, la línea base (cero

absorbancia) corre a lo largo de la parte inferior del espectro, y la absorción es registrada como un **incremento** de la señal.

El instrumento usado para medir la absorción de la radiación infrarroja es llamado un **espectrofotómetro infrarrojo**. Un diagrama de un instrumento típico se presenta en la Figura . A la entrada del instrumento se encuentra la fuente de luz, la cual emite todas las longitudes de onda de la radiación infrarroja. La luz desde esta fuente es separada por juegos de espejos en dos rayos, el rayo de referencia y el rayo de la muestra. Después de pasar a través de la celda de referencia (la cual contiene solvente, si se usa para solubilizar la muestra o nada si la muestra es pura) y la celda de la muestra, los dos rayos se combinan en el colector (chopper) en un solo rayo que alterna desde el rayo de referencia al rayo de la muestra. Este rayo alterno es difractado por un grating que separa el rayo en sus diferentes longitudes de onda.

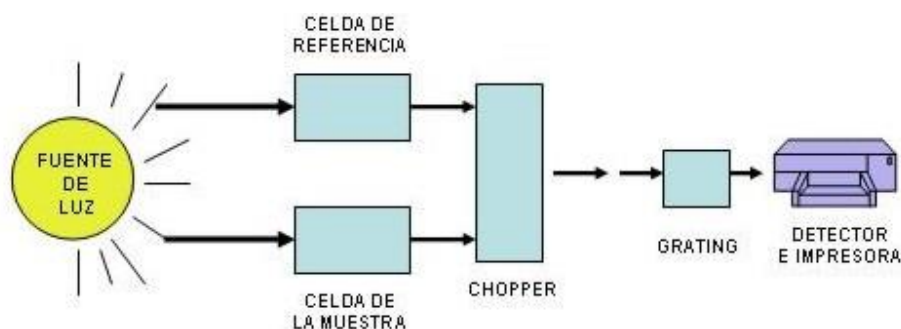


Figura 8. Esquema de un espectrofotómetro infrarrojo.

El detector registra y mide la diferencia en intensidades de los dos segmentos del rayo y cada longitud de onda y pasa esta información a una impresora, la cual elabora el espectro.

La escala en la parte inferior de los espectros infrarrojos se dan en **número de ondas** (wavenumbers), disminuyendo desde 4000 cm^{-1} a cerca de 650 cm^{-1} o menos. Las correspondientes longitudes de onda en μm (o μ) se encuentran en la parte inferior. La longitud de onda o la frecuencia del *punto mínimo* (máxima absorción) de una banda (o pico) de absorción se usa para identificar cada banda. Este punto es más reproducible que la anchura de una banda, la cual puede variar con la concentración o con la sensibilidad del aparato.

Las bandas del infrarrojo en un espectro pueden ser clasificadas de acuerdo a su intensidad: **fuerte** (*s*), **media** (*m*) y **débil** (*w*). Una banda débil que se sobrepone a una banda fuerte se llama, **traslape** (*sh*, *shoulder*). Estos términos son relativos, y la asignación de la intensidad a cualquier banda es de manera cualitativa.

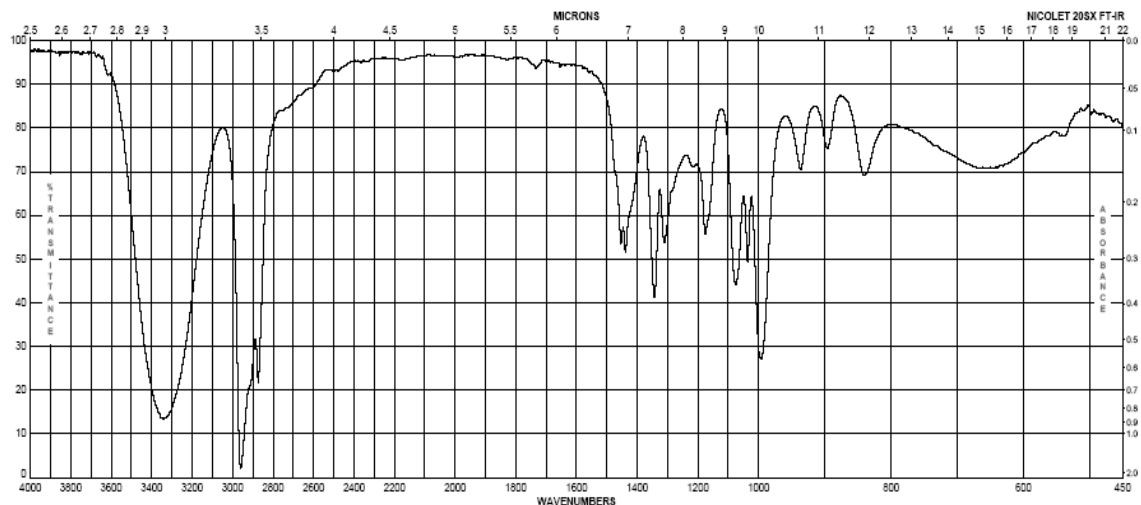


Figura 9. El espectro infrarrojo característico que se obtiene del espectrofotómetro infrarrojo.

El número de grupos idénticos en una molécula altera la fuerza relativa de las bandas de absorción en un espectro. Por ejemplo, un solo grupo OH en una molécula produce una absorción relativamente fuerte, mientras un solo enlace CH produce una absorción relativamente débil. Sin embargo, si un compuesto tiene muchos enlaces CH, el efecto colectivo de la absorción CH da lugar a un pico que va de medio a fuerte.

V. INTERPRETACIÓN DE UN ESPECTRO INFRARROJO.

Los químicos han estudiado cientos de espectros infrarrojos y han determinado rangos de longitudes de onda de absorción para cada uno de los grupos funcionales. Las **cartas de correlación** proporcionan una útil información para la interpretación de los espectros infrarrojos.

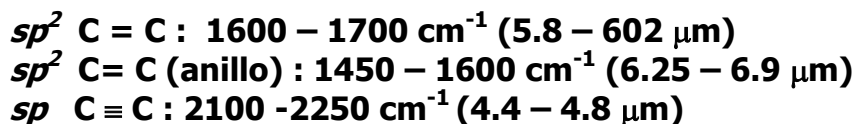
En este trabajo incluimos algunas cartas de correlación para auxiliar al lector en la tarea de la interpretación de espectros. En estas cartas podemos observar que las bandas de absorción de elongación para enlaces OH y NH se encuentran entre 3000 y 3700 cm^{-1} (2.7 – 3.3 μm). Si el espectro infrarrojo de un compuesto de estructura desconocida presenta absorción en esta región, entonces podemos sospechar que el compuesto contiene grupos OH o NH en su estructura. Si esta región no contiene ninguna banda de absorción, podemos concluir que la estructura probablemente no posee ningún grupo OH o NH.

La región de 1400 a 4000 cm^{-1} (2.5 μm a alrededor de 7.1 μm), a la izquierda del espectro infrarrojo, es especialmente útil para la identificación de varios grupos funcionales. Esta región presenta absorción que se originan de modos de elongación. La región a la derecha de 1400 cm^{-1} es frecuentemente muy compleja ya que la absorción que se da aquí pueden ser tanto de elongación como de deformación angular. En esta región, la correlación de una banda individual con un grupo funcional específico usualmente no puede hacerse con exactitud. Sin embargo, cada compuesto orgánico tiene su propia absorción aquí. Esta parte del espectro es por lo tanto llamada como la **región de la huella digital**. Aunque la porción izquierda de un espectro puede parecer el mismo para compuestos similares, la región de la huella digital nos puede aclarar si se trata del mismo o diferentes compuestos.

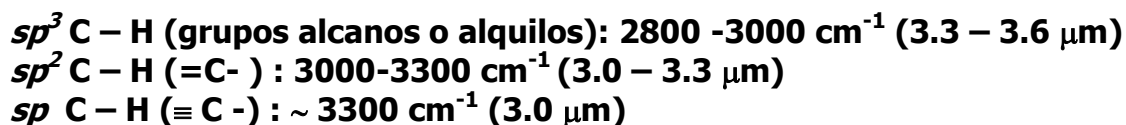
En los próximos apartados discutiremos las características de la absorción infrarroja de compuestos que poseen enlaces alifáticos C-C y C-H y otros grupos funcionales. Nuestra intención es que el lector de este trabajo se familiarice con las características de los espectros infrarrojos típicos.

5.1. ENLACES CARBONO-CARBONO Y CARBONO-HIDRÓGENO.

Los enlaces entre átomos de carbono híbridos sp^3 (enlaces simples C-C) dan lugar a bandas de absorción débil en el espectro infrarrojo. En general, estas bandas de absorción no son muy útiles para la identificación de estructuras. Los enlaces entre carbonos híbridos sp^2 (C=C) frecuentemente exhiben absorción característica (variable en intensidad) alrededor de 1600 – 1700 cm^{-1} (5.8 – 6.2 μm). Enlaces carbono-carbono de anillos presentan absorción a ligeramente bajas frecuencias (a la derecha del espectro). Los enlaces entre carbonos híbridos sp (C≡C) presentan débil, pero extremadamente característica absorción a 2100 – 2250 cm^{-1} (4.4 – 4.8 μm), una región del espectro donde la mayoría de los grupos no absorben.



Casi todos los compuestos orgánicos contienen enlaces CH. La absorción se origina de vibraciones de elongación CH a alrededor de 2800 – 3300 cm^{-1} (3.1 -3.75 μm). Los picos de elongación son frecuentemente útiles en la determinación de la hibridación del átomo de carbono:



El agrupamiento **geminal** o **gem-dimetilo** (dos grupos metilo en el mismo carbono) frecuentemente exhibe un doble pico de deformación angular C – H en la región comprendida en $1360 - 1385 \text{ cm}^{-1}$ ($7.22 - 7.35 \text{ }\mu\text{m}$). Desafortunadamente, los dos picos no son visibles en todos los espectros; algunas veces solo es visible un pico.

= C (CH₃)₂ : $1360 - 1385 \text{ cm}^{-1}$ ($7.22 - 7.35 \text{ }\mu\text{m}$) (dos picos)

5.2. ALOALCANOS.

La absorción de las vibraciones de elongación del enlace C – X de un haloalcano cae en la región de la huella digital del espectro infrarrojo, desde 500 a 1430 cm^{-1} ($7 - 20 \text{ }\mu\text{m}$). Sin adicional información, la presencia o ausencia de una banda en esta región no se puede usar para verificar la presencia de un halógeno en un compuesto orgánico.

5.3. ALCOHOLES Y AMINAS.

Los alcoholes y las aminas exhiben absorción OH y NH de elongación muy evidente a $3000 - 3700 \text{ cm}^{-1}$ ($2.7 - 3.3 \text{ }\mu\text{m}$), a la **izquierda** de la absorción CH. Si hay dos hidrógenos en una amina (-NH₂), la absorción NH aparece como un doble pico. Si hay solo un H en el N, únicamente un pico será observado. Por su puesto, si no hay NH (como en una amina terciaria, R₃N) no habrá absorción es esta región.

Los alcoholes y la aminas también exhiben absorción C – O y C – N en la región de la huella digital. Estas bandas no son siempre fáciles a identificar ya que esta región del espectro frecuentemente posee un gran número de picos.

OH o NH: $3000 - 3700 \text{ cm}^{-1}$ ($2.7 - 3.3 \text{ }\mu\text{m}$)
C – O o C – N: $900 - 1300 \text{ cm}^{-1}$ ($8 - 11 \text{ }\mu\text{m}$)

Los puentes de hidrógeno cambia la posición y apariencia de una banda de absorción infrarroja. Los espectros de la Figura 10, es de un líquido puro donde los puentes de hidrógeno se encuentran en cantidad considerable. En este espectro la absorción OH es una banda ancha a alrededor de 3330 cm^{-1} ($3.0 \text{ }\mu\text{m}$). Cuando los puentes de hidrógeno están en menor proporción, una banda de absorción OH menos intensa se observa. La Figura presenta dos espectros parciales de un alcohol. Un espectro es de un líquido puro (con puentes de hidrógeno); el otro espectro es el del alcohol en la fase de vapor (no hay puentes de hidrógeno). Las diferencias en la absorción OH se presentan en esta Figura.

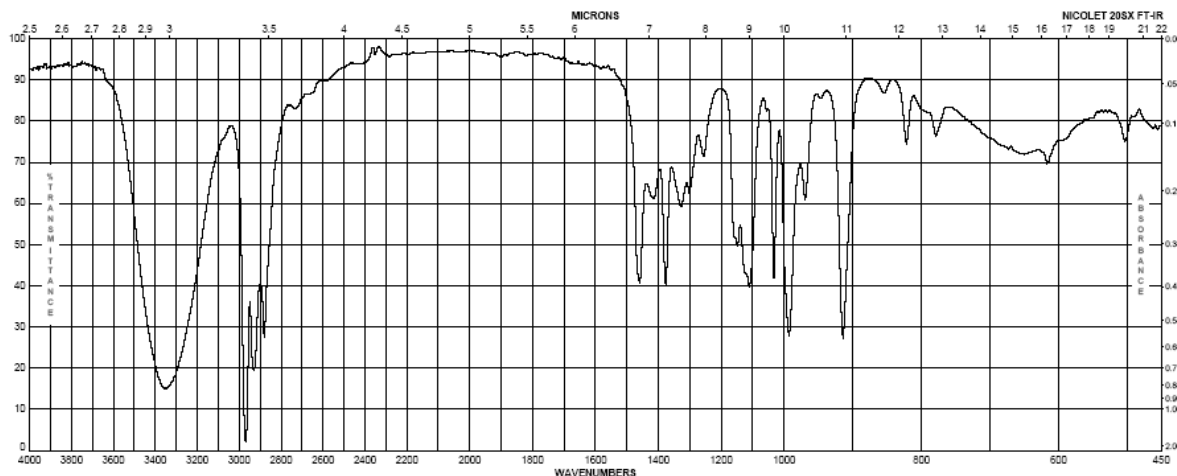


Figura 10. Espectro infrarrojo del *tert*-butanol un alcohol que presenta una banda de absorción de elongación OH a $3300 - 3400 \text{ cm}^{-1}$ de un líquido puro con numerosos puentes de hidrógeno.

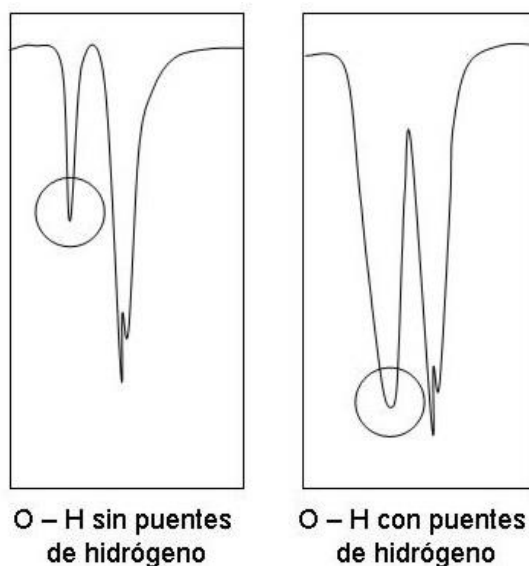


Figura 11. Espectros infrarrojo parciales de un alcohol en fases de vapor y líquida, presentando absorción O – H sin y con puentes de hidrógeno.

La absorción de enlaces NH es menos intensa que la absorción OH, en parte debido a la débil ligadura de los hidrógenos en las aminas y parcialmente los enlaces NH son menos polares.

5.4. ÉTERES.

Los éteres presentan una banda de vibración de elongación en la región de la huella digital a $1050 - 1260 \text{ cm}^{-1}$ ($7.9 - 9.5 \text{ }\mu\text{m}$). Ya que el oxígeno es electronegativo, la elongación causa un gran cambio en el momento de enlace. Por lo tanto, la absorción C – O es comúnmente fuerte. Los alcoholes, esteres, y otros compuestos que poseen enlaces simples C – O también presentan absorción aquí.

5.5. COMPUESTOS CARBONILOS.

Una de las bandas distintivas en un espectro infrarrojo es la que se origina del modo de elongación del carbonilo. Se trata de un pico de intensidad fuerte observado algunas veces entre 1640 y 1820 cm^{-1} ($5.5 - 6.1 \text{ }\mu\text{m}$).

El enlace carbonilo forma parte de un gran número de grupos funcionales. La exacta posición de la absorción del carbonilo, las posiciones de otras bandas de absorción en el espectro infrarrojo, y otras técnicas espectrales (particularmente RMN) pueden ser necesarias para identificar el grupo funcional. Las posiciones de la absorción C = O de los aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos y esteres se presentan el Cuadro 1.

Cuadro 1. Vibraciones de elongación de algunos compuestos carbonilos.

Tipo de compuesto	Posición de la absorción	
	cm^{-1}	μm
Aldehído, R(C= O) H	1720 - 1740	5.75 – 5.81
Cetona, R(C= O) R	1705 - 1750	5.71 – 5.87
Ácido carboxílico, R(C= O) OH	1700 - 1725	5.80 – 5.88
Ester, R(C= O) OR	1735 - 1750	5.71 – 5.76

5.5.1. CETONAS.

Las cetonas dan lugar a los espectros más simples de todos los compuestos carbonilos. Si un compuesto es una cetona alifática, toda la absorción infrarroja de elongación se origina tanto de C= O como de C – H. Otra funcionalidad puede

incrementar la complejidad del espectro, por supuesto. El espectro infrarrojo de una cetona se presenta en la Figura 12.

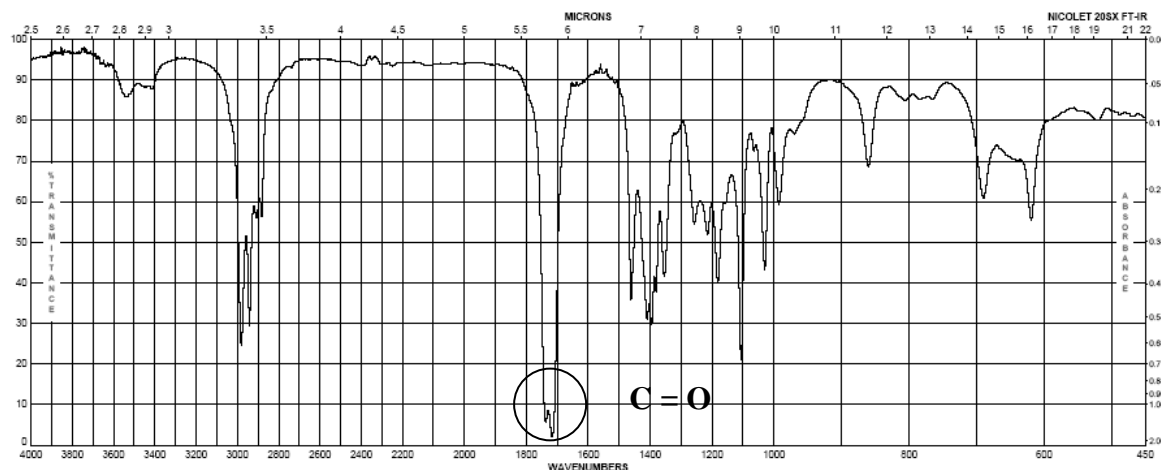


Figura 12. Espectro infrarrojo de una cetona, la 1-bromo-2-butanona ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCH}_2\text{Br}$).

5.5.2. ALDEHÍDOS.

Los aldehídos producen espectros infrarrojos muy similares a los de las cetonas. La diferencia importante entre un aldehído y una cetona es que el primero tiene un H ligado al carbono del carbonilo. Este particular enlace CH presenta dos bandas de elongación características (justo a la derecha de la banda CH alifática) a $2820 - 2900 \text{ cm}^{-1}$ ($3.45 - 3.55 \mu\text{m}$) y a $2700 - 2780 \text{ cm}^{-1}$ ($3.60 - 3.70 \mu\text{m}$). Ambos picos CH son anchos, pero débiles, y el pico a 2900 cm^{-1} ($3.45 \mu\text{m}$) puede estar oculto por otras bandas de absorción traslapadas de otros enlaces CH.

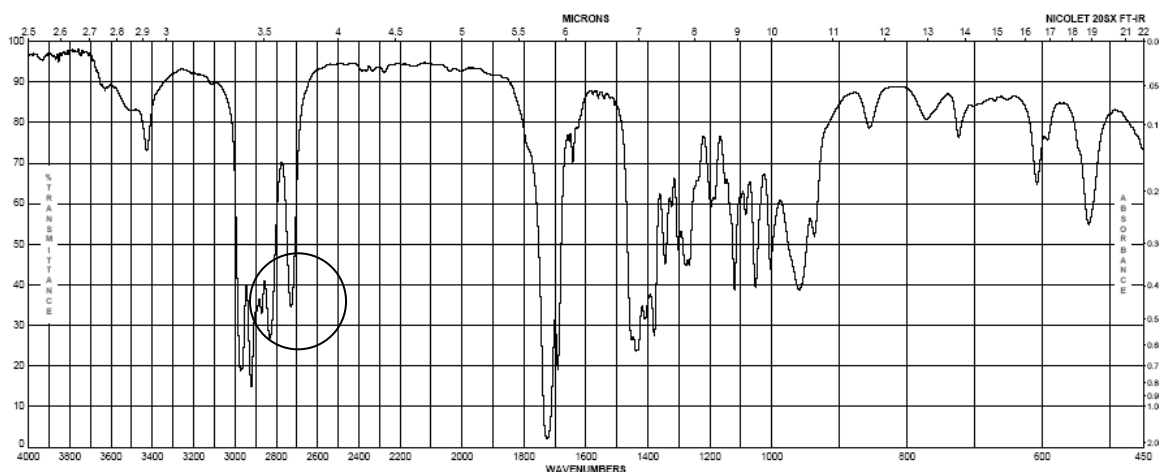


Figura 13. Espectro infrarrojo del 3 –(metilthio) butanal, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{SCH}_3)\text{COH}$, un aldehído. Observe los dos picos característicos del $-\text{HCO}$.

5.5.3. ÁCIDOS CARBOXÍLICOS.

Los ácidos carboxílicos exhiben la típica absorción C=O y también presentan una muy distintiva banda O – H, la cual comienza a alrededor de 3330 cm^{-1} ($3.0\text{ }\mu\text{m}$) y traslapa la banda de absorción alifática CH. La razón por la cual un OH carboxílico produce una apariencia del espectro diferente a la de un OH de un alcohol es que los ácidos carboxílicos forman *dimeros* ligados por puentes de hidrógeno.

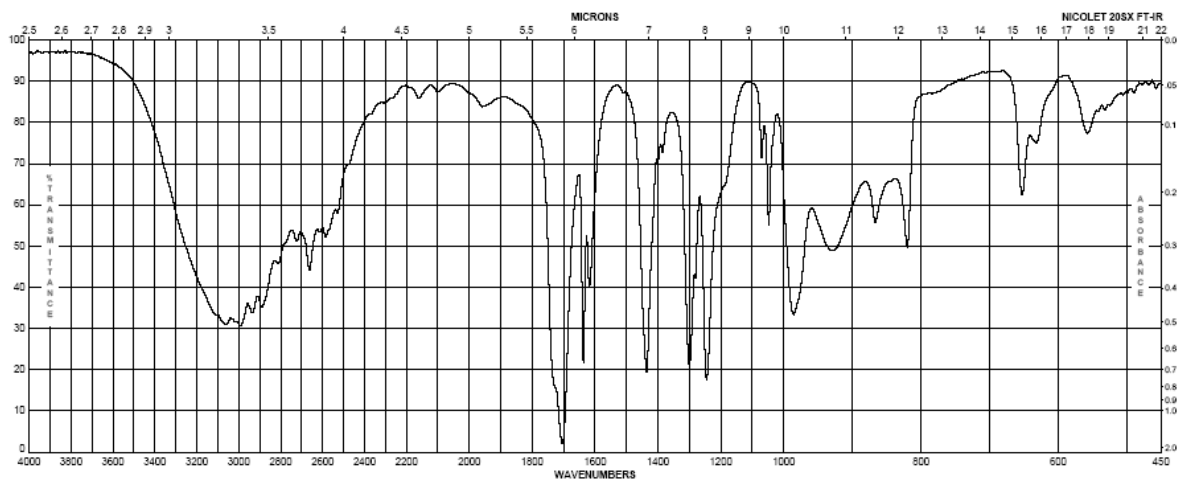


Figura 14. Espectro infrarrojo del ácido acrílico CH_2CHCOOH , ácido carboxílico. Observe la banda de absorción del OH del carbonilo.

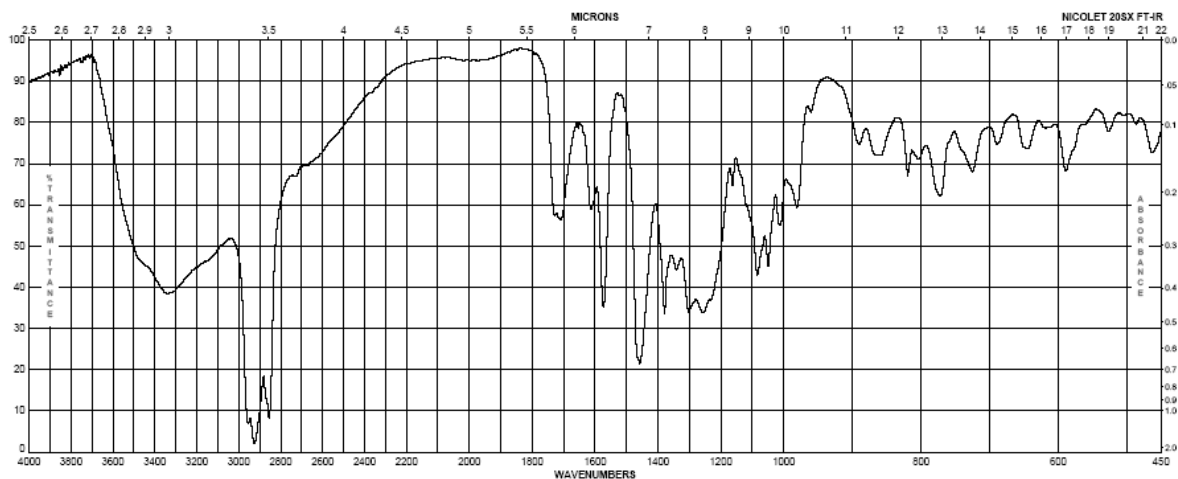


Figura 15. Espectro infrarrojo del ácido carnínico el cual presenta la absorción del enlace OH del grupo carbonilo.

5.5.4. ÉSTERES.

Los ésteres exhiben tanto la típica banda del carbonilo como una banda de absorción del enlace C – O. La banda C – O, al igual que en los éteres, se observa en la región de la huella digital, $1100 - 1300 \text{ cm}^{-1}$ ($7.7 - 9.1 \text{ }\mu\text{m}$) y es un poco difícil de identificar. Sin embargo, esta banda es de intensidad fuerte y, en algunos casos, puede ser usada para distinguir entre los ésteres y las cetonas.

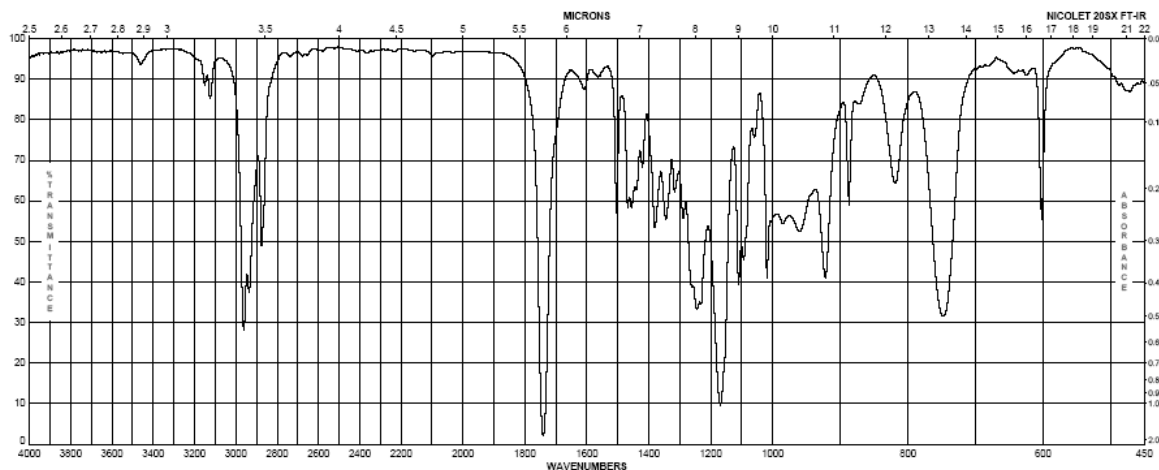


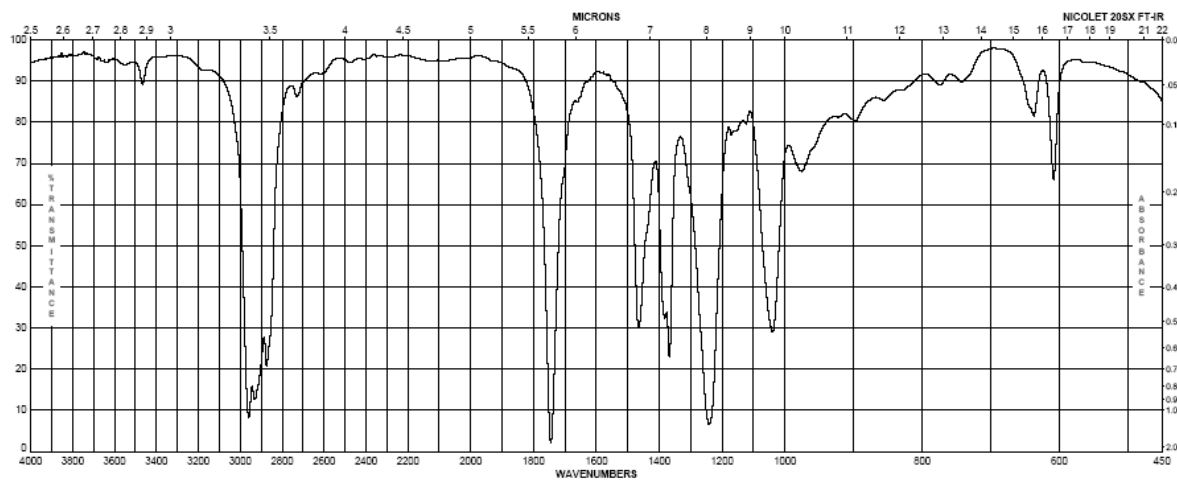
Figura 16. Espectro infrarrojo del 2- furfurilo pentanoato un ester presentando la absorción característica del enlace C – O entre 1100 a 1300 cm^{-1} .

VI. CONCLUSIÓN.

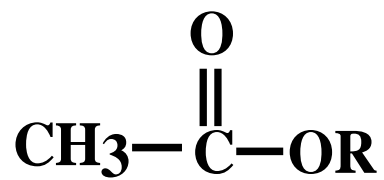
La espectrometría de absorción del infrarrojo es una potente herramienta para la obtención de información de los grupos funcionales de un compuesto orgánico. Sin embargo, en la caracterización molecular, sobre todo de compuestos desconocidos, no bastan los espectros infrarrojos para estar completamente seguros de que se trata de un determinado compuesto. Es necesario, por tanto, auxiliarnos de otras técnicas de espectrometría, por ejemplo, la resonancia magnética nuclear.

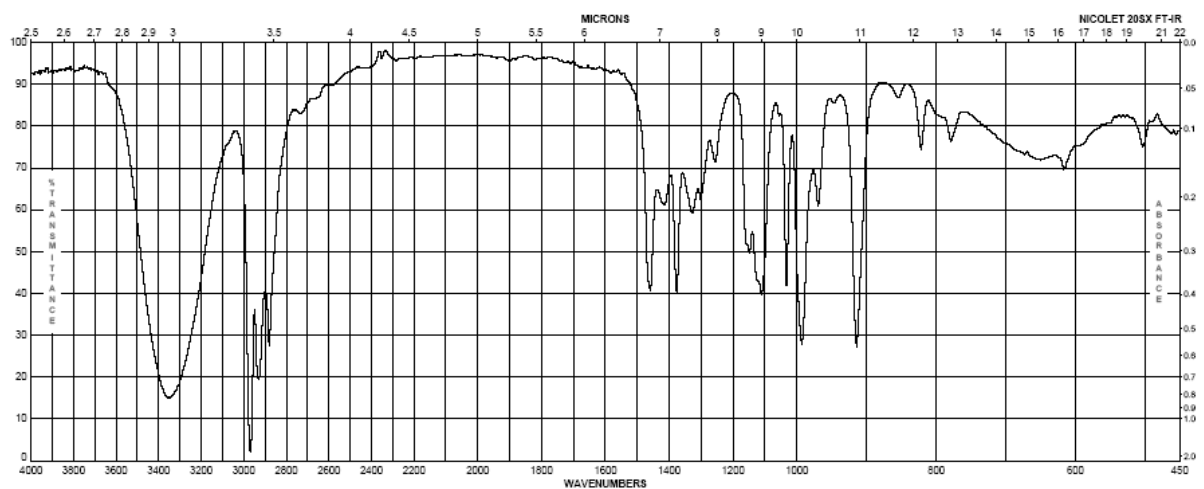
La principal limitante de la espectrometría del infrarrojo es la que tienen otras técnicas de este corte, la confiabilidad de los espectros radica en la pureza de los compuestos a analizar. Es decir, de las técnicas de separación. De aquí que, sin quitarle méritos a esta técnica, el trabajo del especialista en Agrorecursos debe ser muy cuidadoso para saber decidir si sus resultados son concluyentes o no. La sugerencia es que se debe obtener toda la información posible de la estructura de un compuesto para finalmente dar una identificación. En otras palabras, hacer una completa caracterización del compuesto antes de emitir un dictamen.

VII. ESPECTROS.

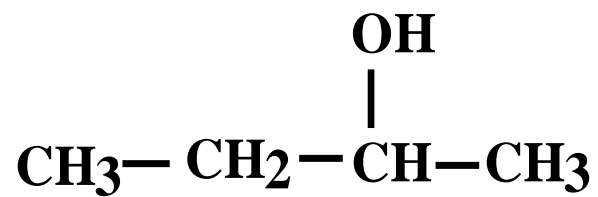


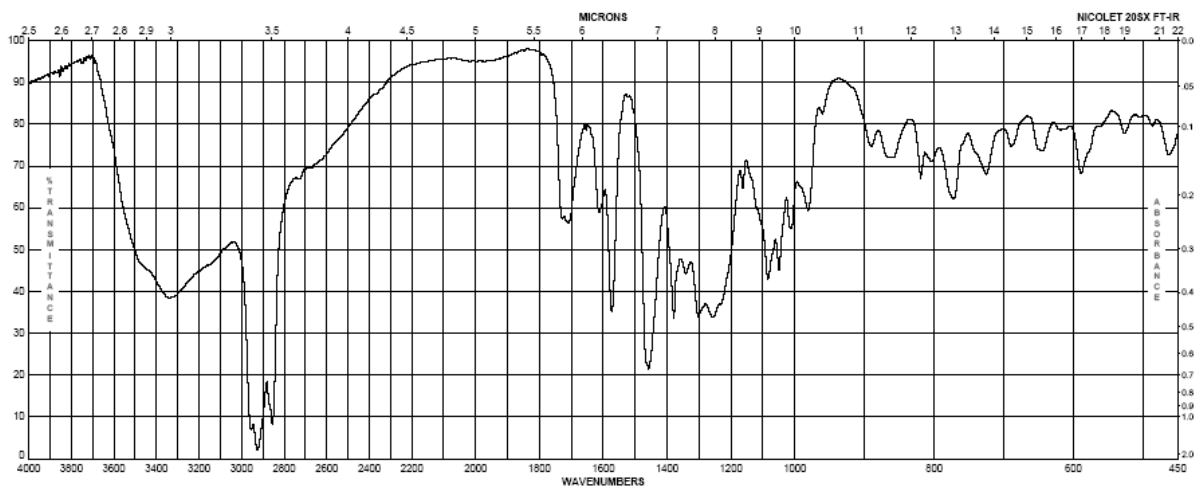
ACIDO ACÉTICO ALQUILO (C₉ A C₁₁) MEZCLA DE ESTERES



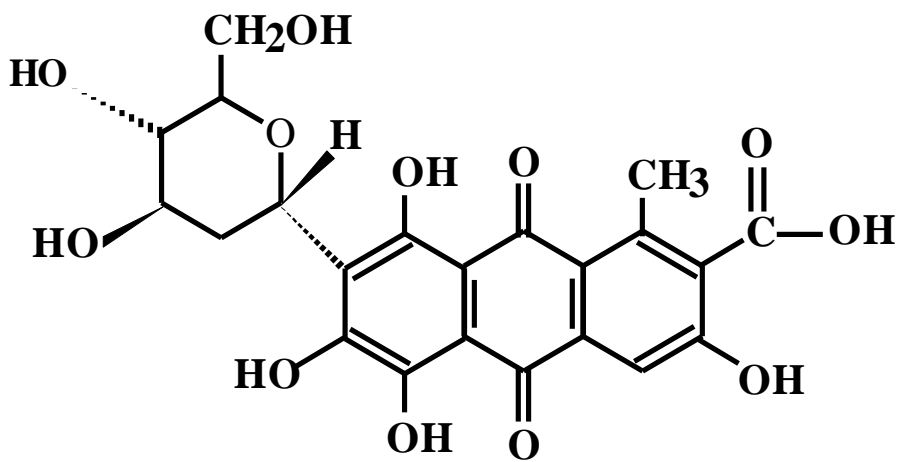


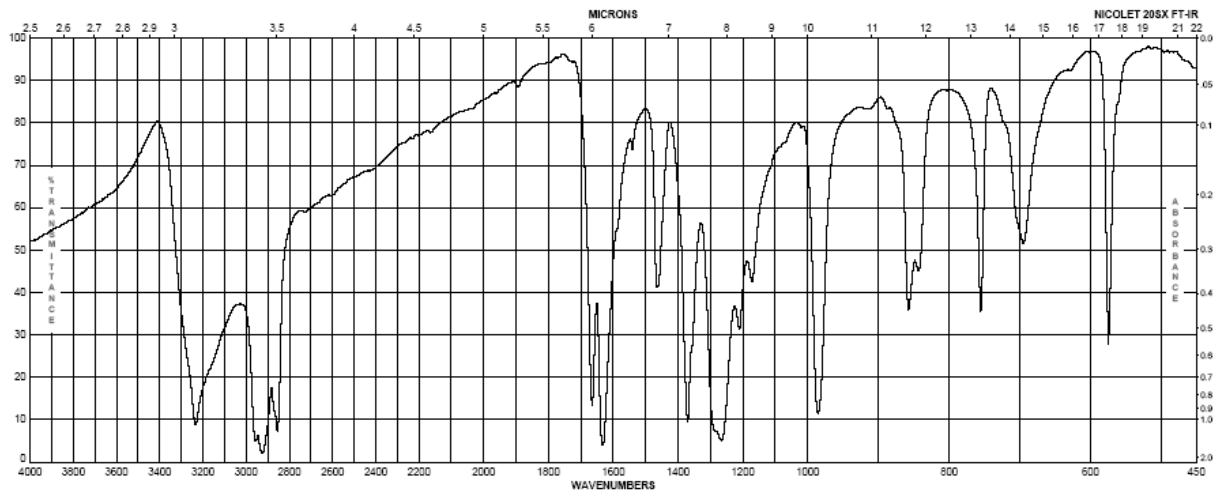
(±) 2- Butanol



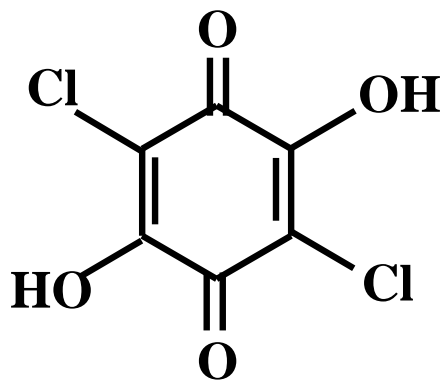


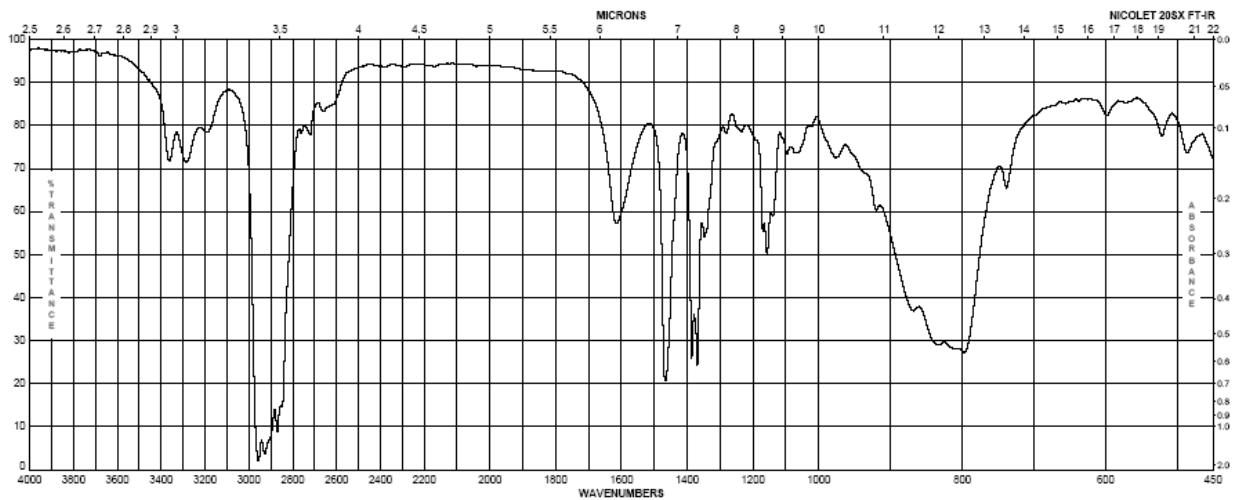
ACIDO CARMÍNICO



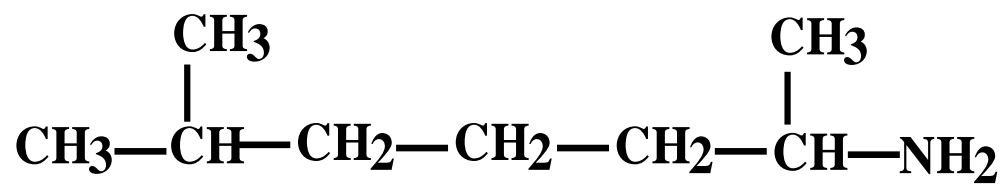


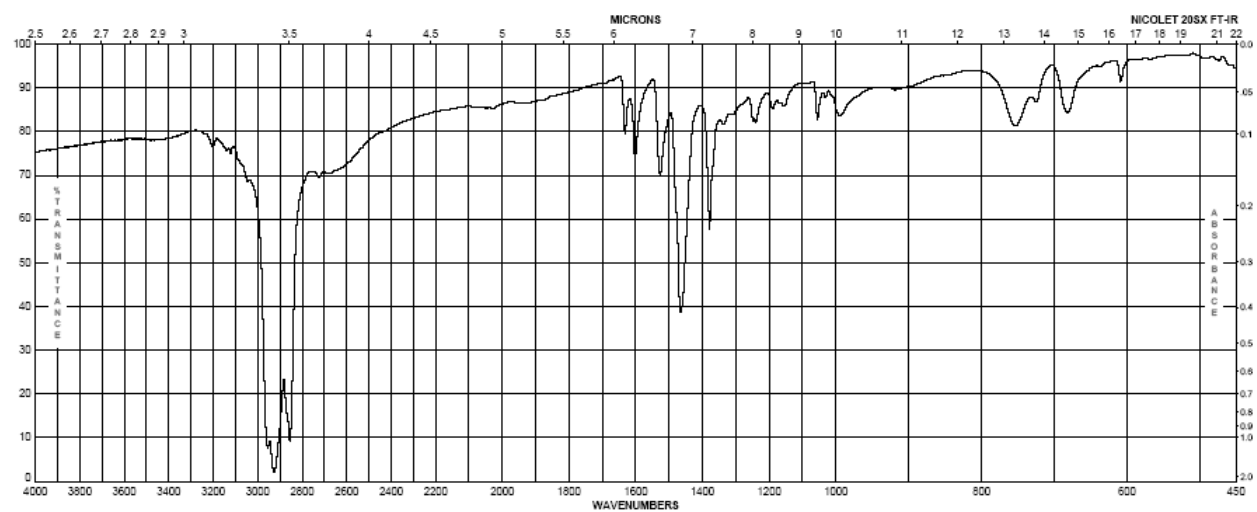
ACIDO CLOROANILICO



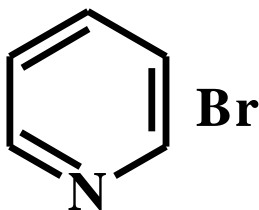


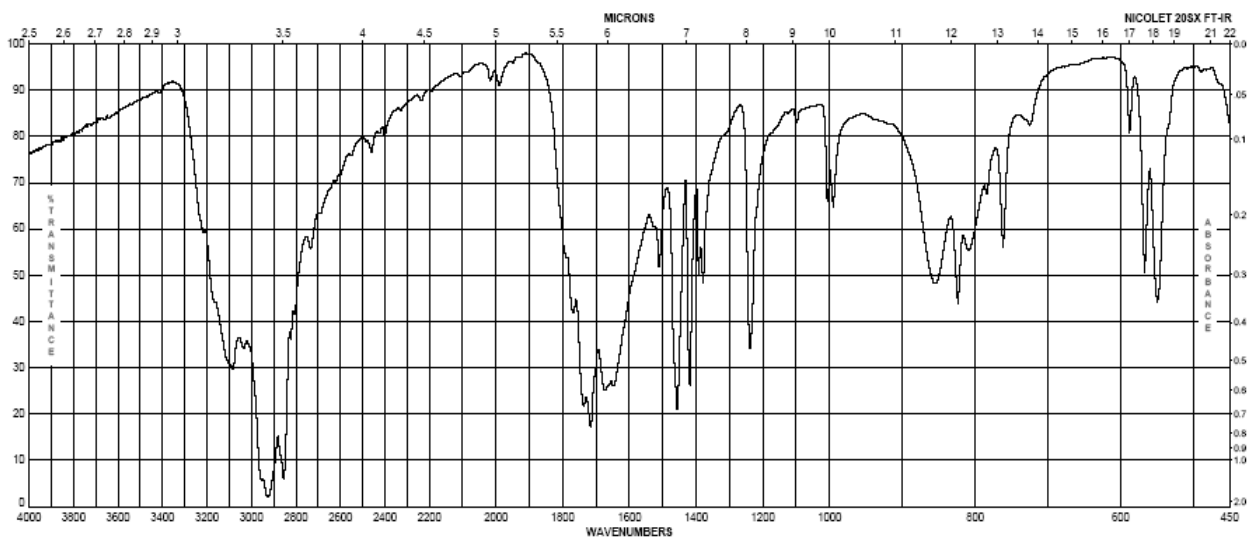
2- AMINO-6-METILHEPTANO



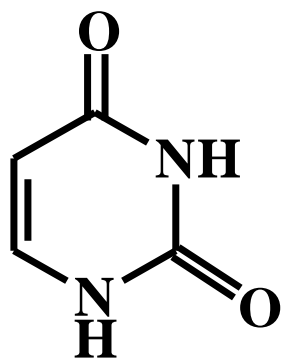


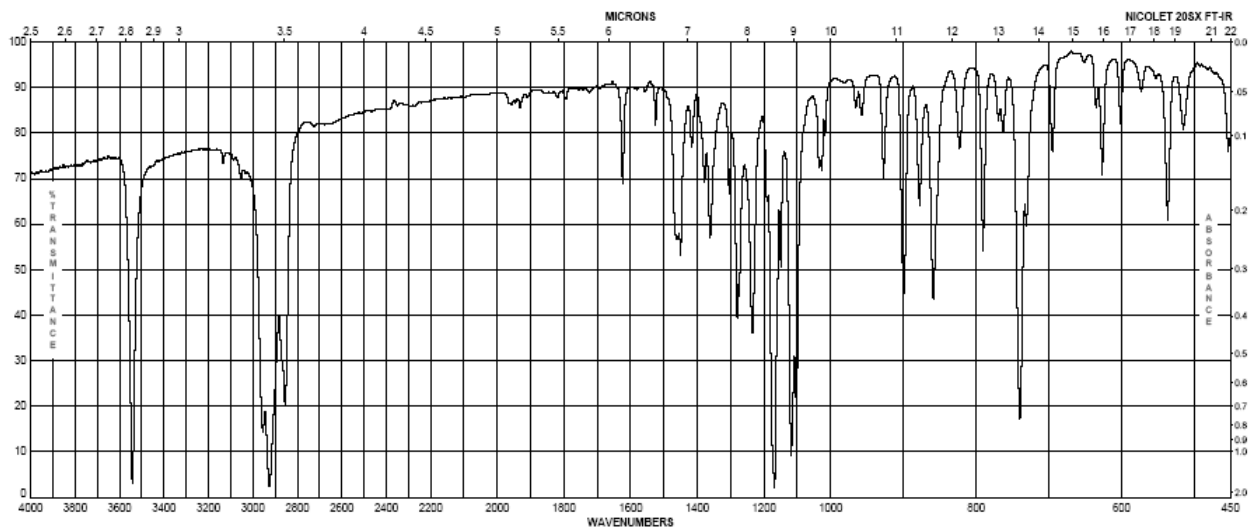
PIRIDINA HIDROBROMO



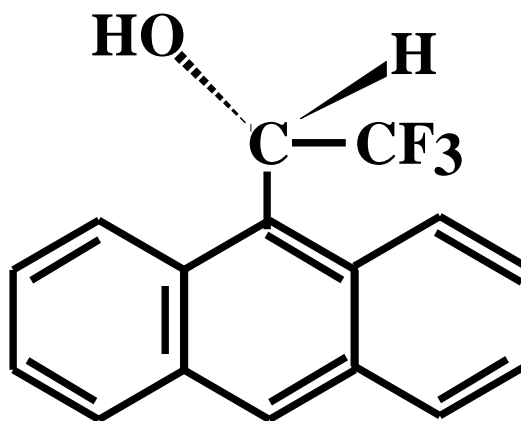


URACILO





TRIFLUOROETHANOL



VIII. BIBLIOGRAFÍA.

1. ARNAUD, P. 1997. **Chimie Organique**. 16e. édition. Ed. DUNOD. Paris, France.
2. AYRES, H.G. 1996. **Análisis Químico Cuantitativo**. Ed. HARLA. México.
3. CHAVANNE, M., BEAUDOIN, G.J., JULLIEN, A. y FLAMAND, E. 1991. **Chimie Organique Expérimentale**. 2e. Édition. Ed. BELIN. France.
4. ROUESSAC, F. Y ROUESSAC, A. 1997. **Analyse Chimique. Méthodes et Techniques instrumentales modernes**. 3 éd. Ed. MASSON. Paris, France.