

TEMA 7

ESPECTROSCOPIA INFRARROJA: CONCEPTOS BÁSICOS Y APLICACIÓN AL ANÁLISIS CUALITATIVO

Contenidos

- 7.1. Teoría de la absorción IR (págs. 101-106)
- 7.2. Absorción y tipos de vibraciones (págs.106-110)
- 7.3. Frecuencias características (págs.131-138)
 - 7.3.1. Región de las vibraciones de tensión X-H
 - 7.3.2. Región de las vibraciones de tensión del triple enlace
 - 7.3.3. Región de las vibraciones de tensión del doble enlace
 - 7.3.4. Región de la huella dactilar
- 7.4. Influencia del entorno químico y de los sustituyentes sobre las frecuencias de absorción (págs.138-153)
- 7.5. Identificación de grupos funcionales (págs.155-182)

Planteamiento del Tema

Este tema, en primer lugar, tratará de dar una visión general del fundamento físico de la Espectroscopía Infrarroja, los modos de vibración que pueden experimentar los enlaces de una molécula, su relación con la posición e intensidad de las bandas de absorción a que dan lugar y la información que proporciona la técnica con vistas a la determinación estructural de compuestos orgánicos.

En segundo lugar se abordará la aplicación práctica de los conceptos básicos al análisis cualitativo de compuestos orgánicos, aspecto este muy relevante en esta parte de la asignatura. Así, se estudiarán las diferentes regiones de la zona que abarca el espectro infrarrojo donde absorben, dando

lugar a bandas características, los diferentes tipos de enlaces constituyentes de los principales grupos funcionales.

En el apartado 7.4. se estudiarán los efectos estereoelectrónicos debidos al entorno químico y sustituyentes sobre las frecuencias de absorción de los diferentes enlaces. Este es un aspecto importante, ya que estos efectos permiten obtener cierta información acerca de características estructurales de la molécula estudiada. Por ejemplo, poder determinar si un grupo carbonilo es aldehídico, cetónico, pertenece a un éster, cloruro de ácido, etc. Es muy importante, para la comprensión de todos estos conceptos, que el estudiante examine con detenimiento los espectros IR del benzaldehído, acetofenona y cloruro de benzoílo (págs. 140-141) (efecto inductivo), fenilacetona y propiofenona (pág. 145) (efecto conjugativo), ciclohexanona, ciclopentanona y ciclobutanona (pág. 148) (efecto de la tensión de enlaces y tamaño de anillo) y etanol a dos diferentes concentraciones (págs. 151-152) (efecto de la concentración sobre la asociación).

Finalmente, el apartado 7.5. es el de carácter más práctico de este tema. Con su estudio, y aplicando los conceptos aprendidos en los apartados anteriores, el estudiante estará en condiciones de identificar los grupos funcionales presentes en una molécula, así como algunas características estructurales de ésta. Incluso podrá elucidar la estructura de moléculas sencillas si se le suministran datos como fórmula molecular, número de insaturaciones o alguna pista acerca del esqueleto hidrocarbonado. Con objeto de asimilar y aplicar de manera práctica lo estudiado en este apartado, el estudiante deberá examinar con detenimiento los espectros IR que se muestran en las págs. 164-165 (2-metil-2-buteno, ciclohexano y fenilacetileno), 171 (fenol, éter etílico y anilina) y 180-181 (butanal, acetato de etilo, ácido benzóico, acetamida y anhídrido propiónico).

Aspectos importantes a destacar, a modo de conclusiones, son: la espectroscopía infrarroja proporciona información, fundamentalmente, acerca de la funcionalidad de una molécula. Determinados grupos funcionales, como

los halógenos, no pueden caracterizarse con seguridad mediante esta técnica, siendo mucho más adecuada para ellos la Espectrometría de Masas.

Además de los resultados de aprendizaje generales que se persiguen con el estudio de este Bloque Temático, los resultados de aprendizaje asociados a este Tema son:

- Comprender los diferentes tipos de vibraciones (tensión, deformación, flexión) que pueden experimentar los enlaces de una molécula por absorción de energía en el espectro electromagnético del infrarrojo.
- Relacionar la posición o intervalo de las bandas que se originan con la fortaleza de un enlace.
- Identificar la posición de las bandas de absorción (vibraciones de tensión, flexión, deformación, etc.) características de los diferentes grupos funcionales.
- Determinar los grupos funcionales presentes en una molécula, así como algunas características estructurales relevantes de moléculas sencillas.