

INFRAGORRI ESPEKTROSKOPIA

Argi espektroaren infragorri aldeko (latinetik *infra*, "azpian") maiztasunak juxtu ikuskorraren azpian eta mikrouhinen gainetik daude ($\lambda = 8 \times 10^{-5} - 1 \times 10^{-2}$ cm). Espektrometroen lan eremua $2,5 \times 10^{-4}$ y 25×10^{-4} cm artean dago.

Infragorriko banda bat adierazteko uhin luzeera erabili daiteke (λ), eta *mikretan* (μ m) adierazten da; baina gehienetan **uhin zenbakia** (ν) erabiliko degu, eta cm^{-1} -etan neurtzen da. Aparailu komertzialetan $4000 - 600 \text{ cm}^{-1}$ artean egiten dira neurketak.

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

Molekulen dardara

Muelle baten antzera portatzen da lotura kobalentea. Molekula diatomikoa bada (H-H, H-F), atomoak direkzio bakar baten mugitzen dira, urbiltuz eta ondoren urrutiratuz. Mugitzeko modu honi *tentsio dardara* deitzen zaio. Hiru atomoko molekulek, adibidez CO₂ (O=C=O), bi tentsio mugimendu dituzte. *Tentsio simetrikoa*, bi O-k C-tik batera urrutiratzen dira. *Tentsio ezsimetrikoa*, O bat C-runtz dijoa eta bestea urrutiratzen doa.

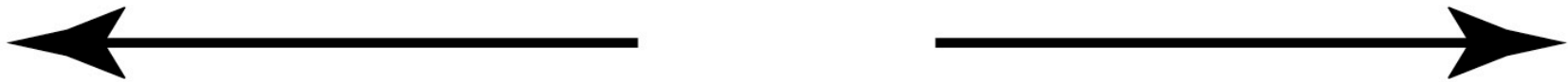
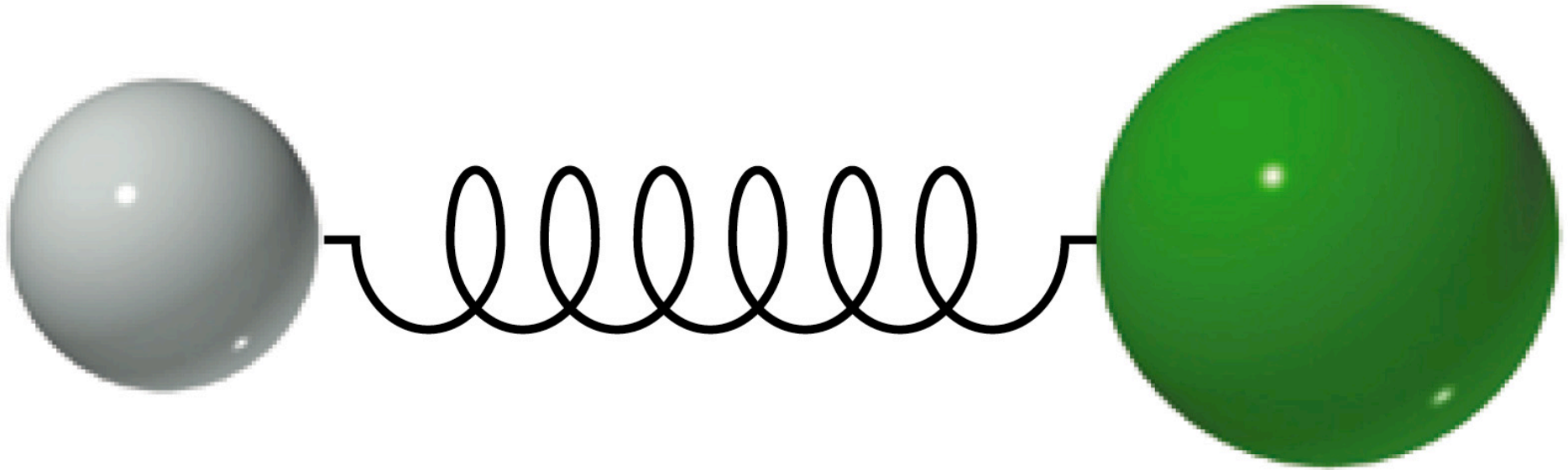
Bi atomobaino gehiago dituzten molekulak, lotura angeluetan ere aldaketat jasotzen dituzte. Flexio dardarak edo bibrazioak dira

Atomoen arteko loturak beti dardarka ari dira. Lotura distantziak ematen ditugunean, berez batez besteko balore bat ematen ari gera. Lotura baten bibrazioa bi modutakoa da :

- *Tentsioa* luzatuz,edo laburtuz
- *Flexioa* atomoen arteko angelua aldatuz

Luzapen edo flexio bakoitza gerta dedin, energi jakin bat behar degu eta energi hori zuzenean lotu dezakegu loturaren dardar maiztasunarekin. Frekuentzia hori bera duen erradiazio batez molekulari eragiten diogunean, honek energia absorbatu egiten du eta bibrazio amplitudea zabaldu egten da. Lotura orduan intensitate haundiagoarekin mugitzen da.

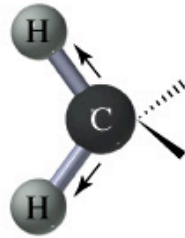
H ————— Cl



TENTSIO DARDARKETA

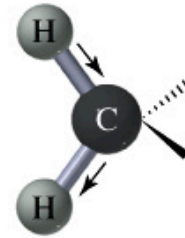
Lotura kobalenteen dardarketa moduak

Tentsio dardarketak



symmetric stretch

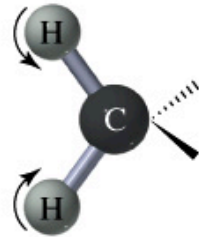
Tentsio simetrikoa



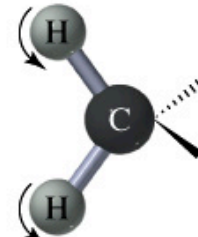
asymmetric stretch

Tentsio ezsimetrikoa

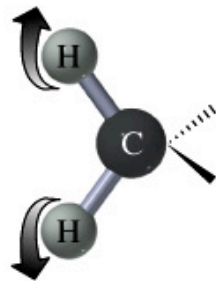
Flexio dardarketak



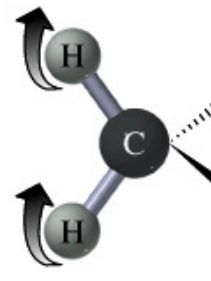
Makurdura simetrikoa
planoan (guraizea)



Makurdura ezsimetrikoa
planoan (rock)



Makurdura simetrikoa
planoaz kanpo (twist)



Makurdura ezsimetrikoa
planoaz kanpo

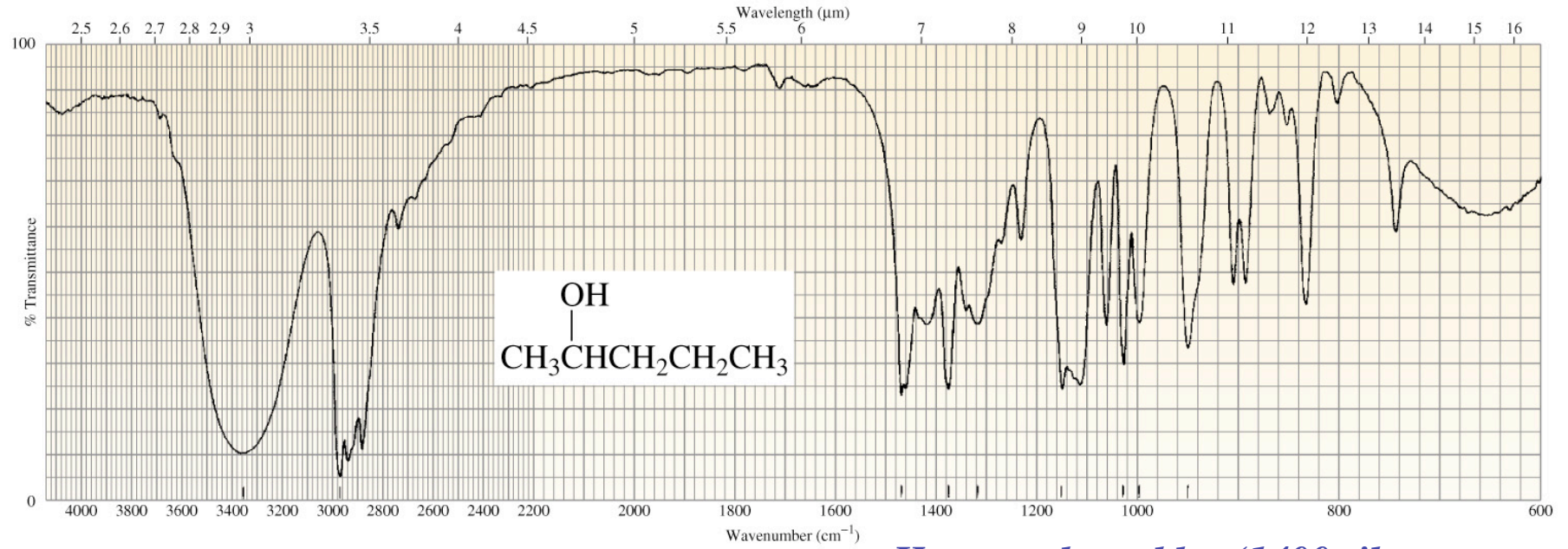
Infragorri espektruan bi alde antz eman litezke:

- **Talde funtzionalen aldea (4000-1400 cm^{-1})**
- ***Hatz-marken aldea (1400-600 cm^{-1})***

Talde funtzional gehienak lehendabiziko aldean absorbatzen dute energia.

Bigarren aldea molekulabakoitzari dagokio, konputagailuko bilduma bidez konposatuek identifikatzen ditugunean, hatz-marken alde horren konparaketa zuzena erabiltzen da.

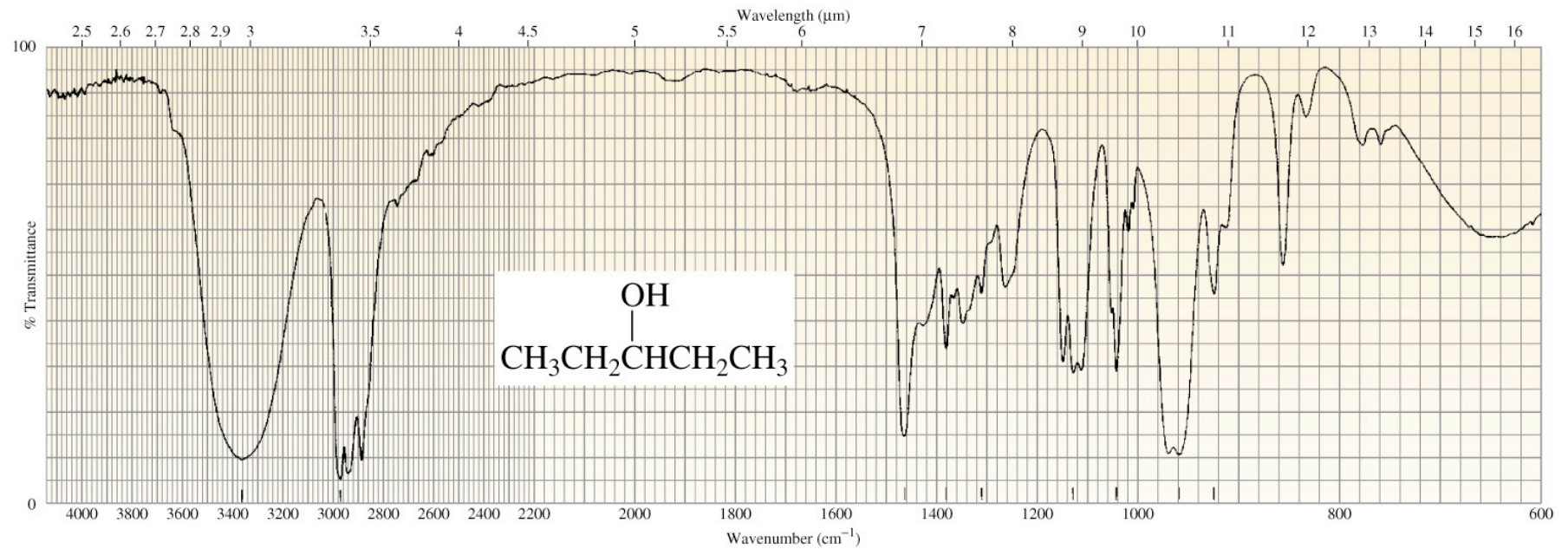
a.



Talde funtzionalen aldea

*Hatz-marken aldea (1400-tik
600 cm⁻¹-ra)*

b.



IGko maiztasun tentsioen laburbilduma

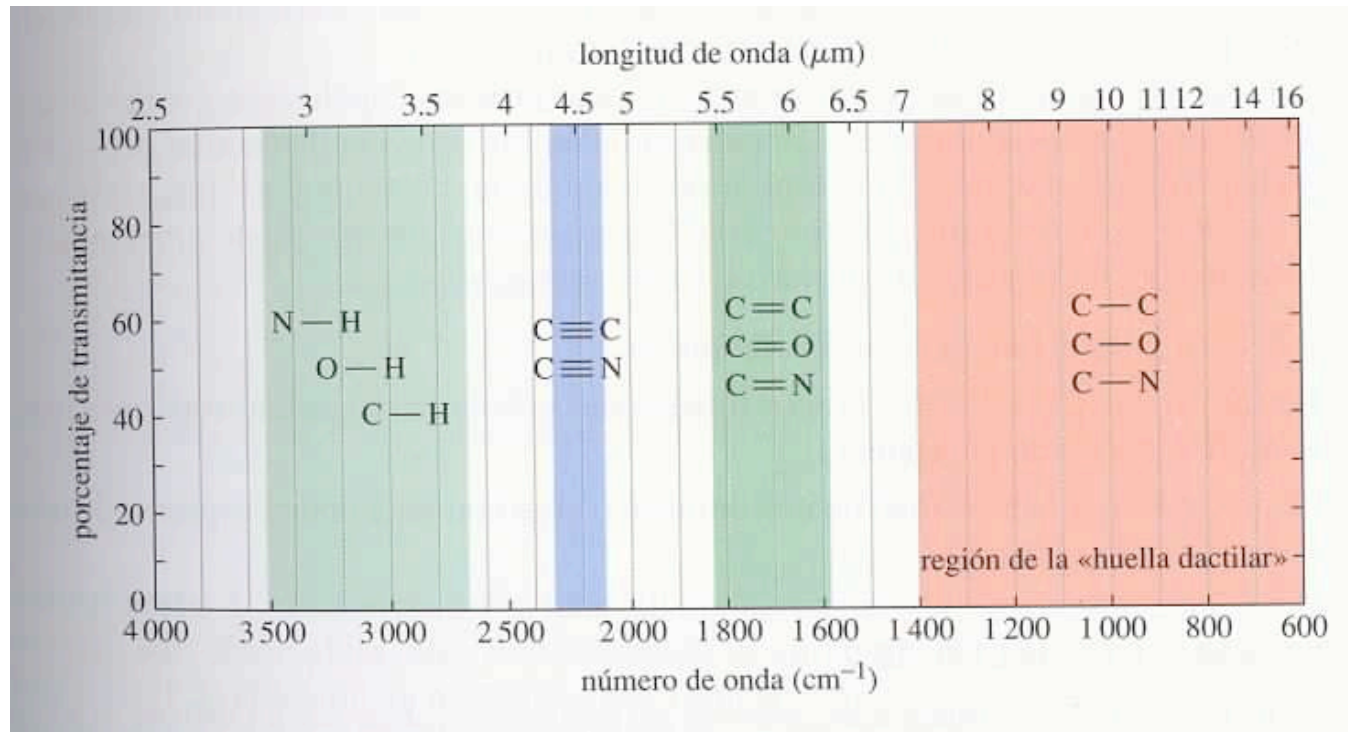
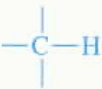
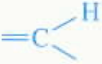

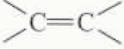
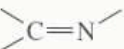
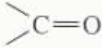
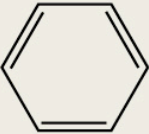


TABLA 12.2 Resumen de las frecuencias de tensión de IR

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

Los éteres, ésteres y alcoholes también presentan tensiones C—O entre 1 000 y 1 200 cm⁻¹.

Table 13.4 Important IR Stretching Frequencies

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