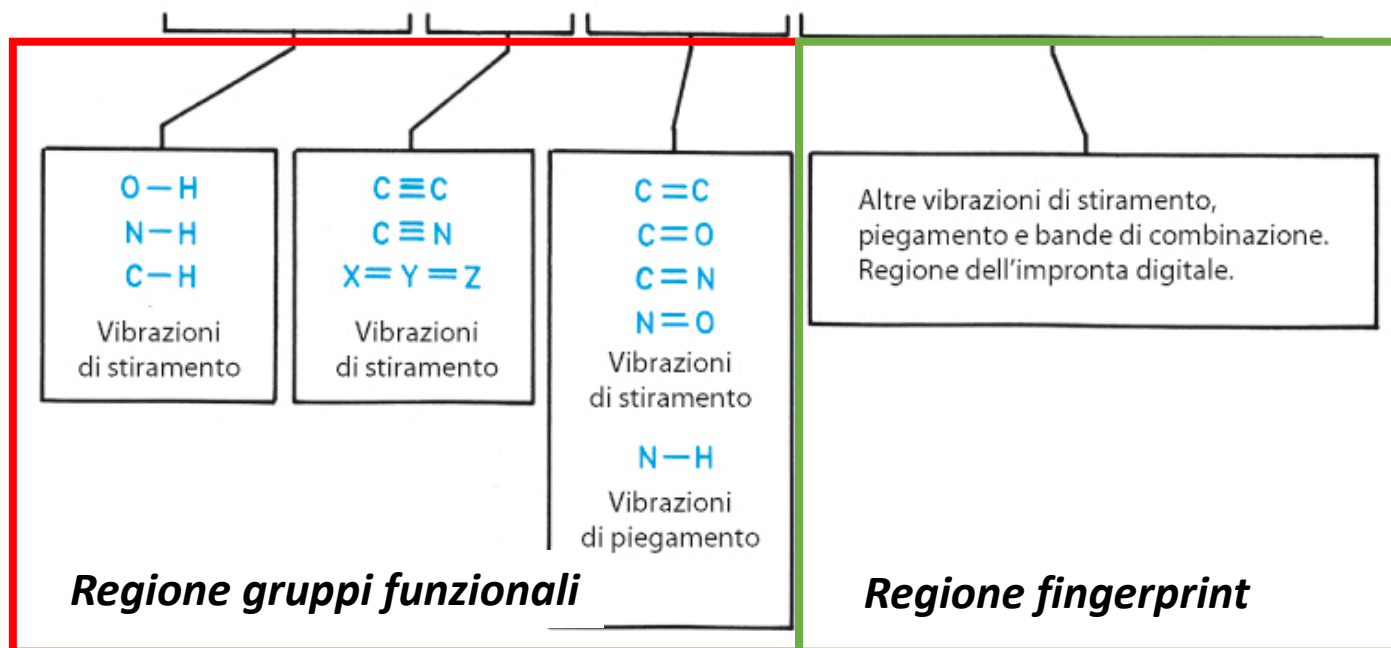
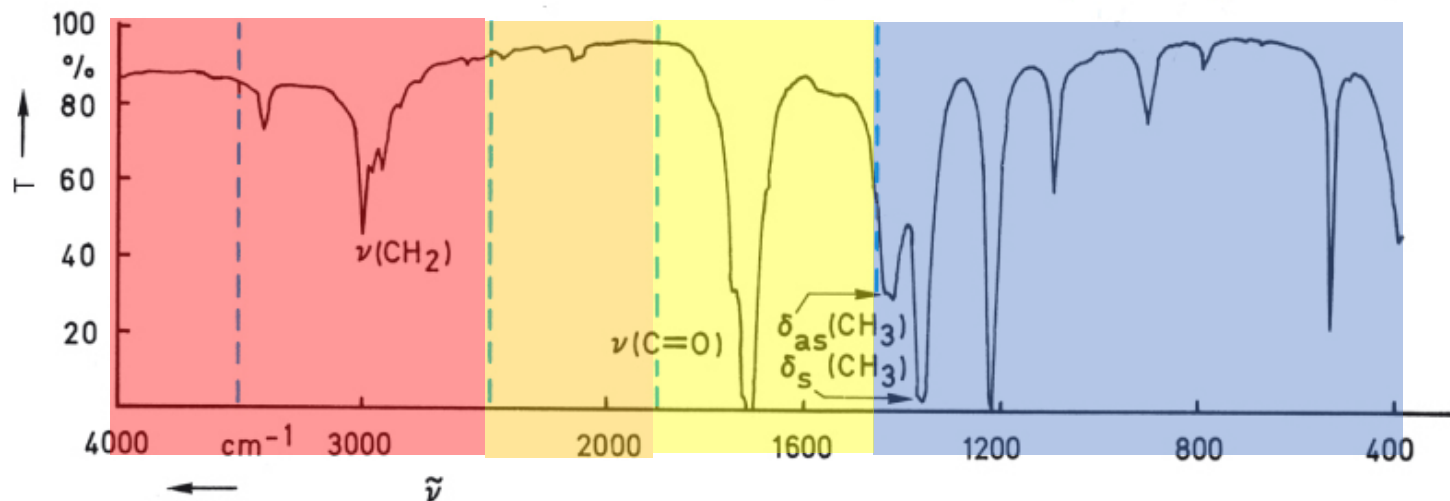
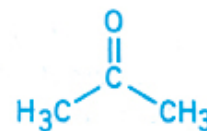
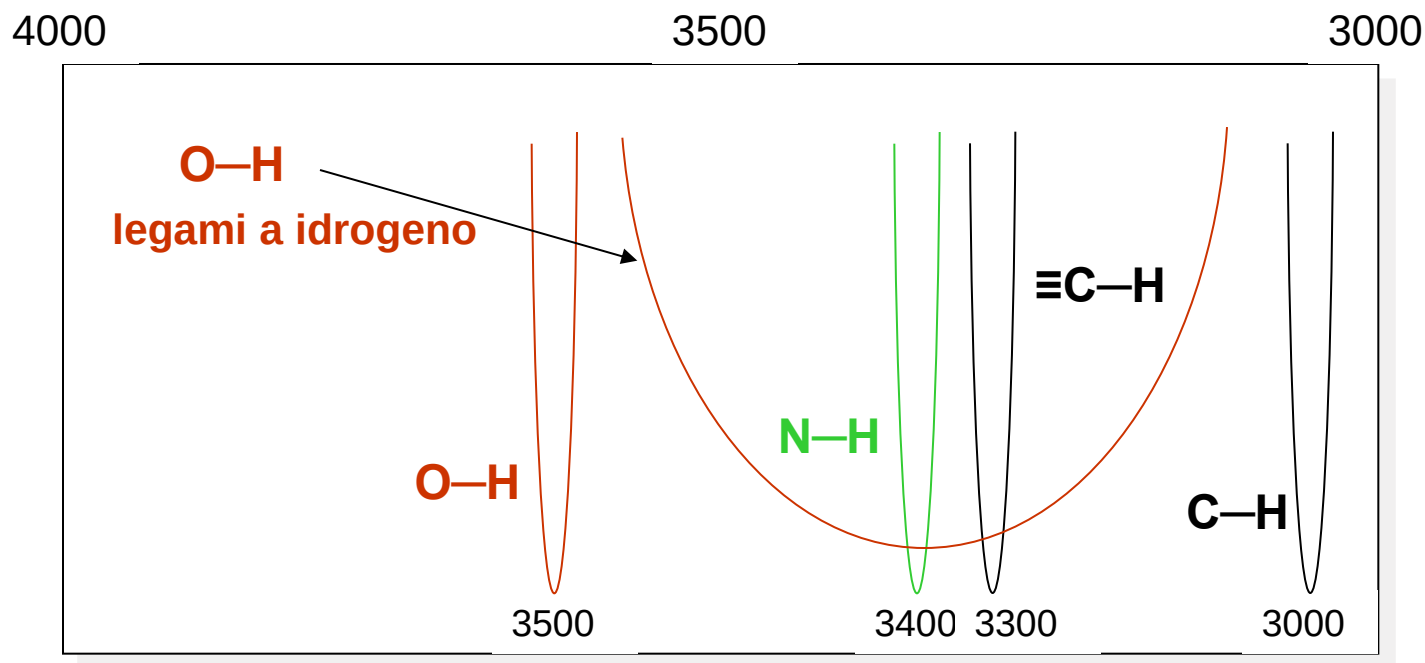


Esempio di spettro IR



Analisi dello spettro: la regione X-H



Alcani

Elettronegatività di H e C sono molto simili: le vibrazioni portano a variazioni piccole di momento di dipolo elettrico e essere IR inattive in molecole simmetriche

Vibrazioni osservabili: stretching (ν) $\text{CH}_{2/3}$, bending (δ) $\text{CH}_{2/3}$, rocking (ρ) CH_2 .

Gli stretching e bending C–C ed i bending CH_2 (wagging e twisting) sono deboli e spesso non osservabili.

Bending CH_2 e CH_3 tra $1500 - 1300 \text{ cm}^{-1}$

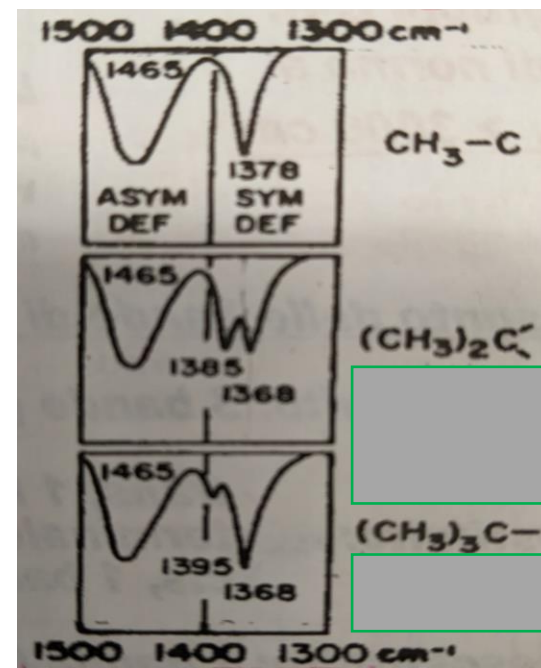
CH_2 (*n*-esano) 1468 cm^{-1}

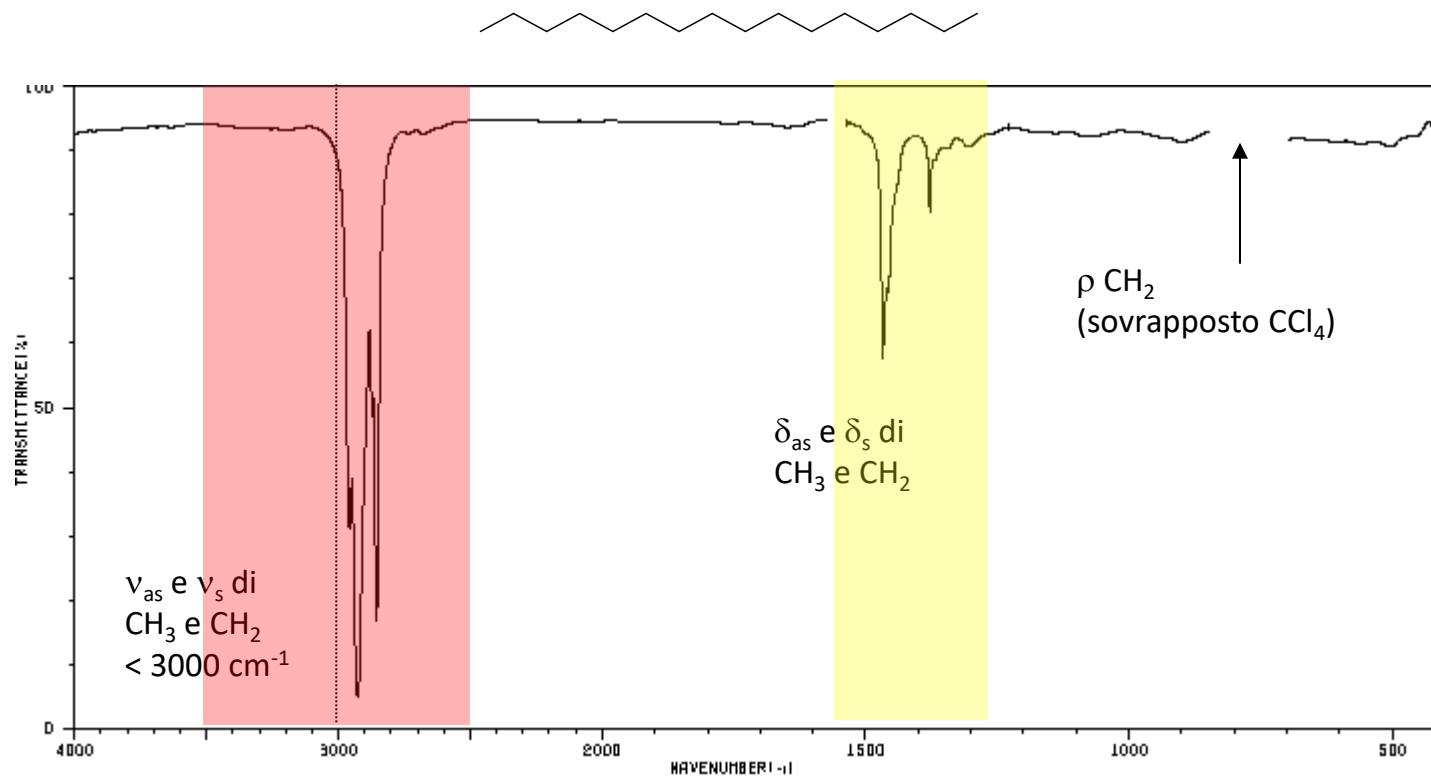
CH_3 $1465 \delta_a$, $1378 \delta_a$

Isopropile e t-butile: sdoppiamento del $\delta_s \text{CH}_3$

$1380, 1370 \text{ cm}^{-1}$ isopropile

$1390, 1370 \text{ cm}^{-1}$ t-butile



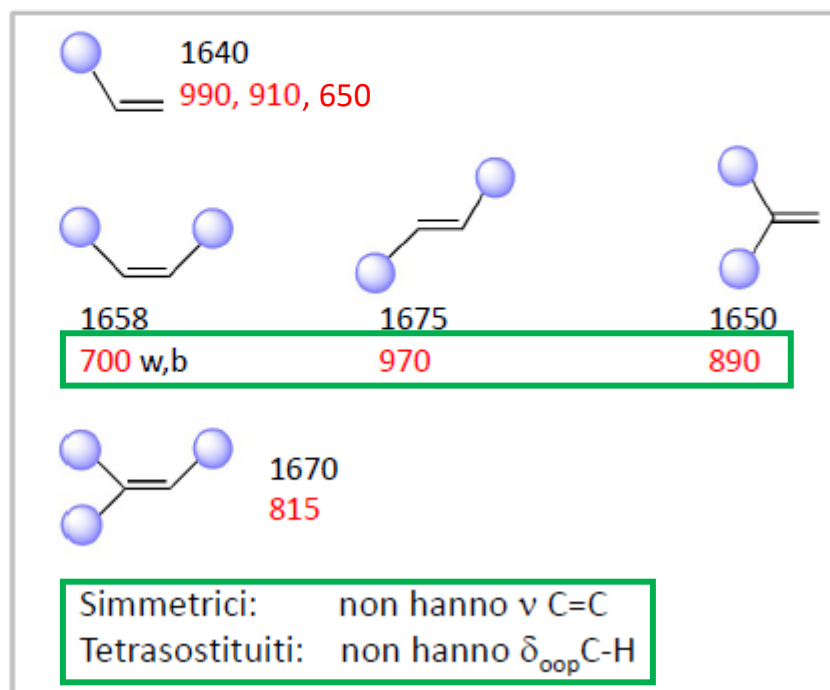
Alcani: esadecano in CCl_4 

Alcheni

 ν C-H 3100-3000 cm^{-1} ν C=C 1680-1640 cm^{-1} δ_{oop} C-H 1000-650 cm^{-1}

Informazione sulla sostituzione

In questa zona ci sono
interferenze dei
bending dei aromatici
e legame C-Cl

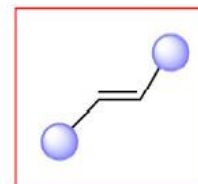
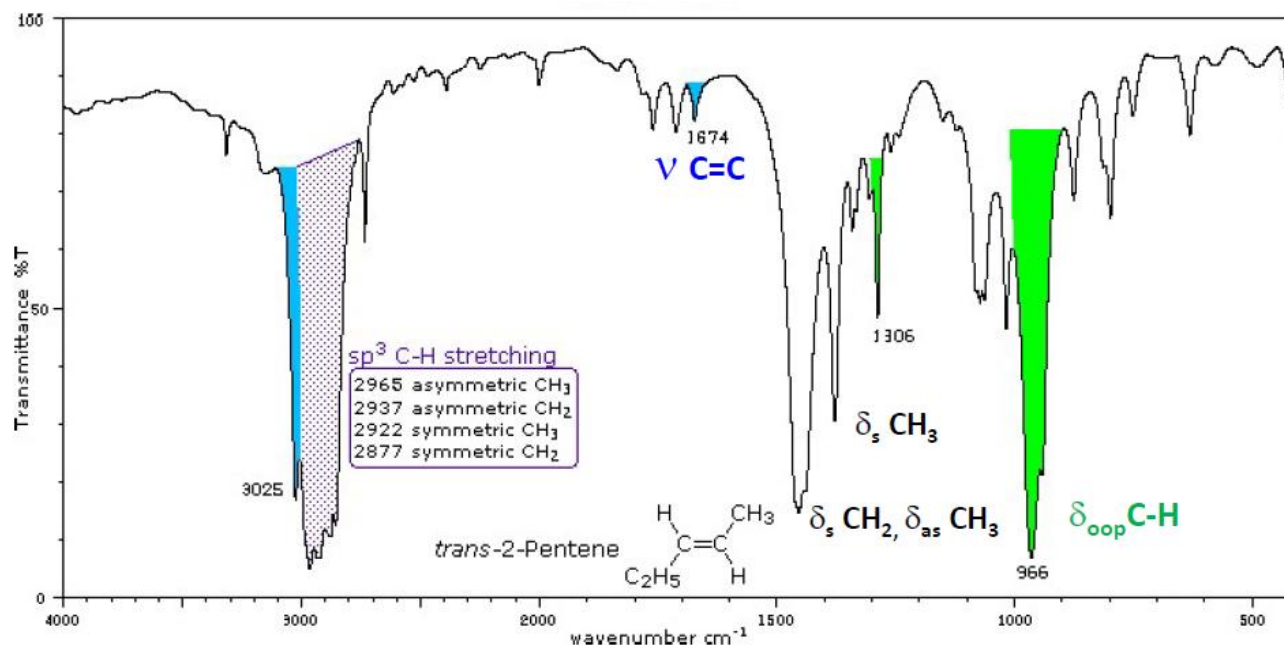
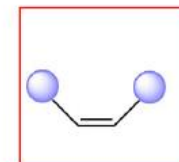
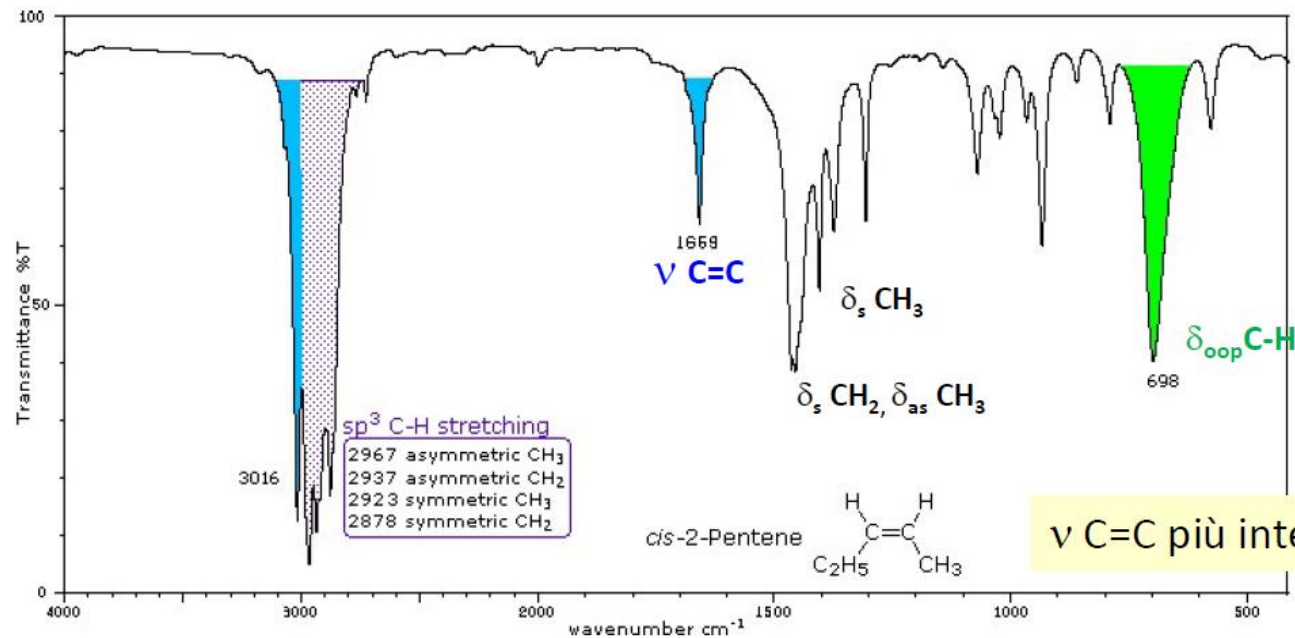
**Bande di piegamento fuori del piano C-H**

Monosostituito: 3 bande (1000, 900, 650 debole)

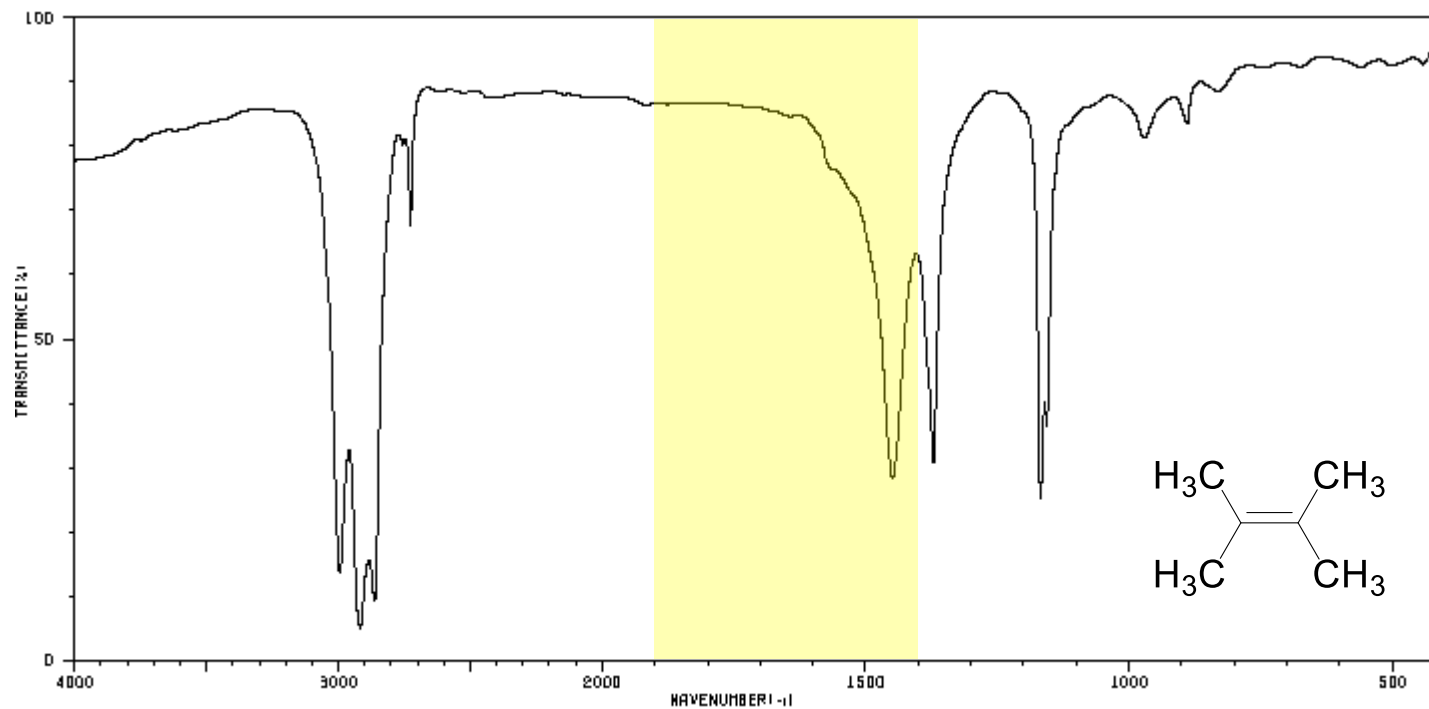
Disostituito: trans, 1 banda (1000)
terminale, 1 banda (900)
cis, 1 banda (700)

Trisostituito: 1 banda (800-850)

Alcheni

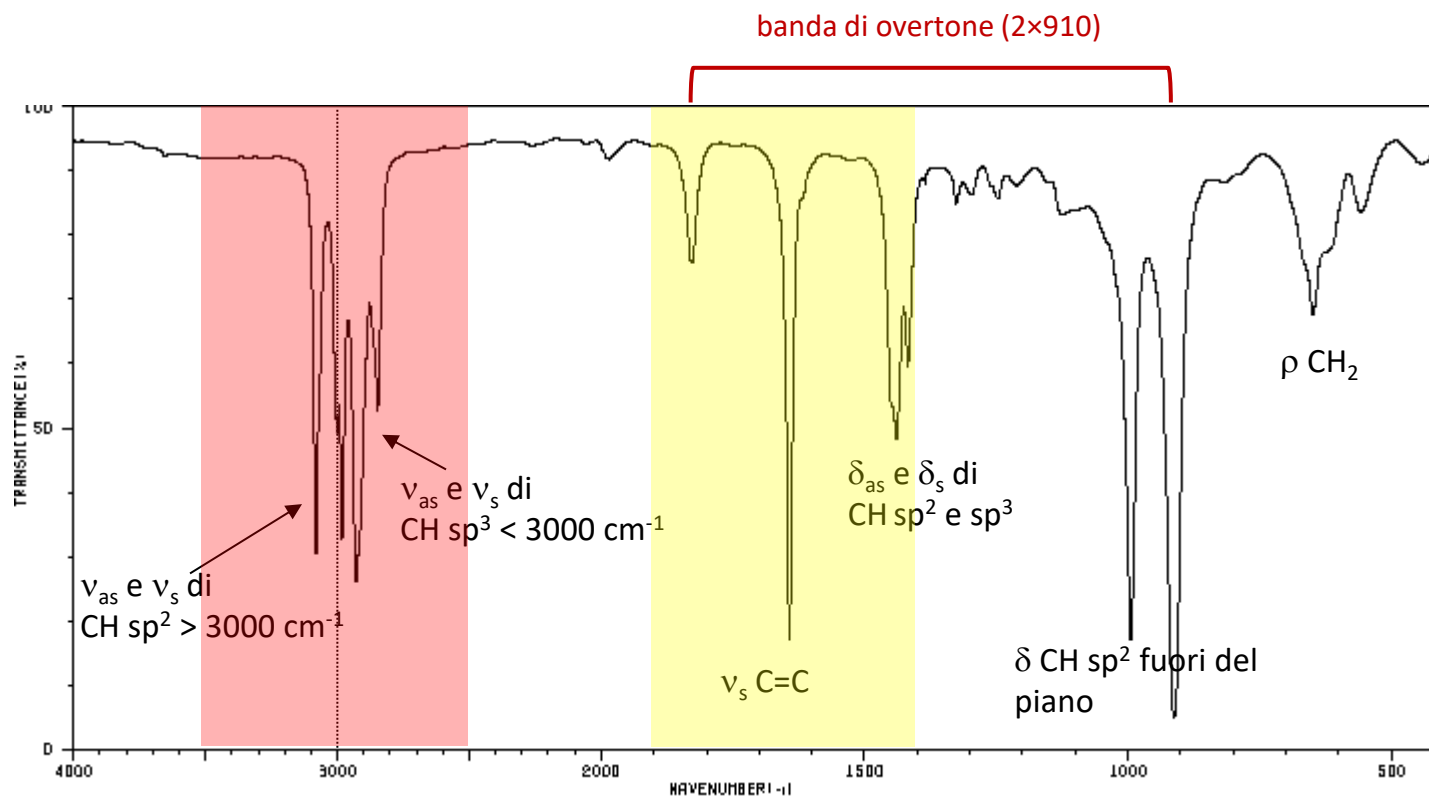
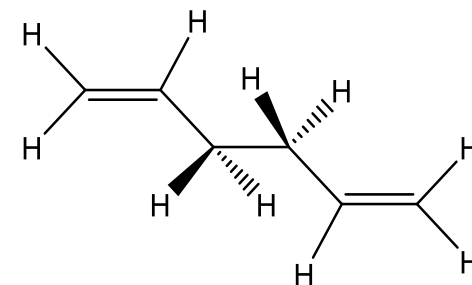


Alcheni: 2,3 dimetil-2-butene



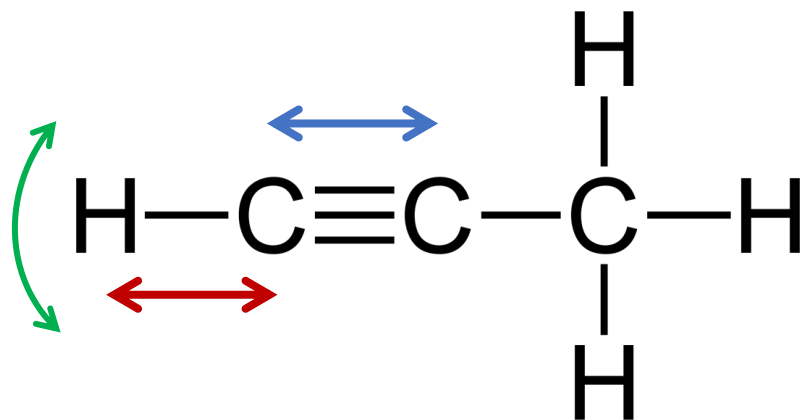
Perché non si vede lo stretching C=C ?

Alcheni: 1,5-esadiene, film liquido

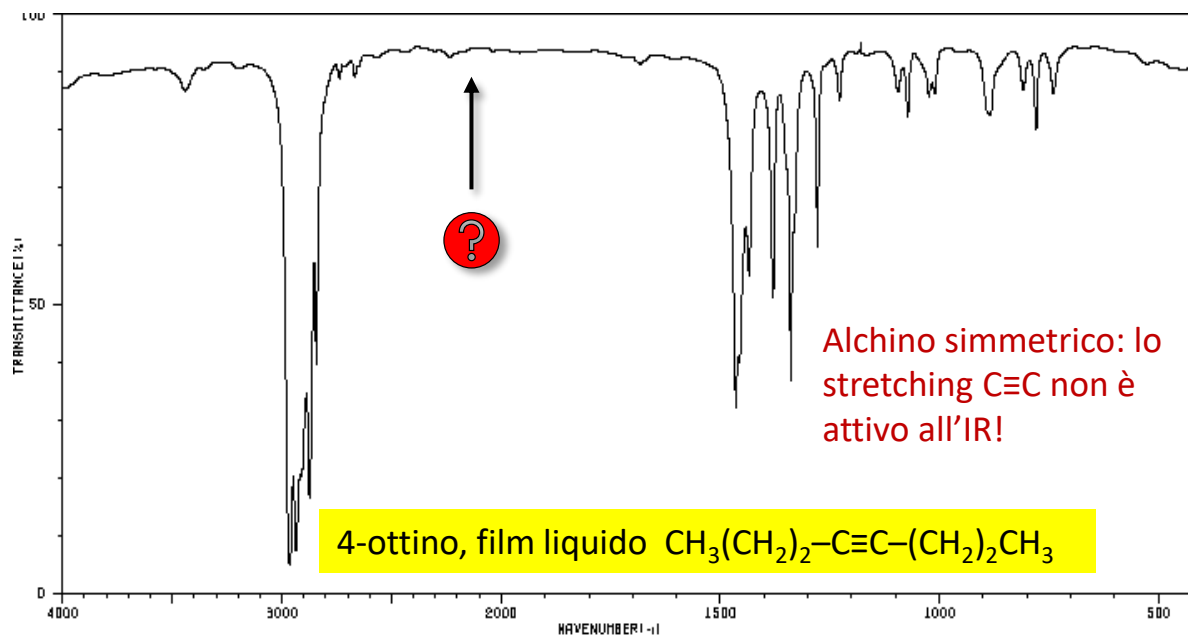
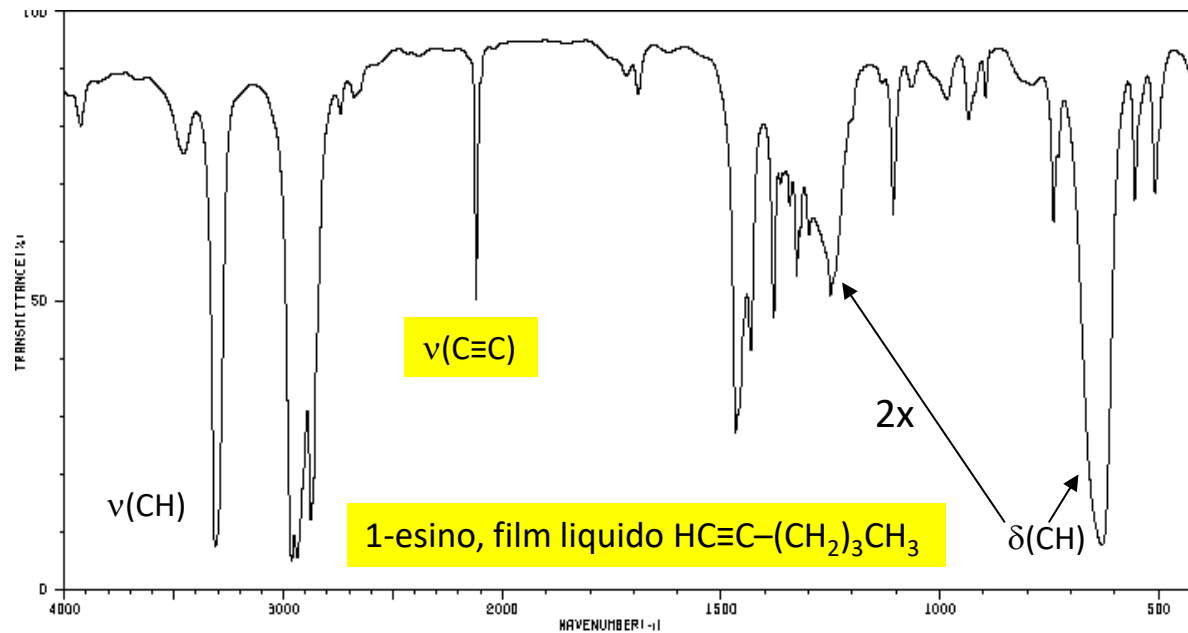


Alchini

- stretching C–H del C_{sp} a 3300 cm^{-1}
- stretching $C\equiv C$ a 2200 cm^{-1}
- bending C–H (650 e **overtone a 1300 cm^{-1}**).

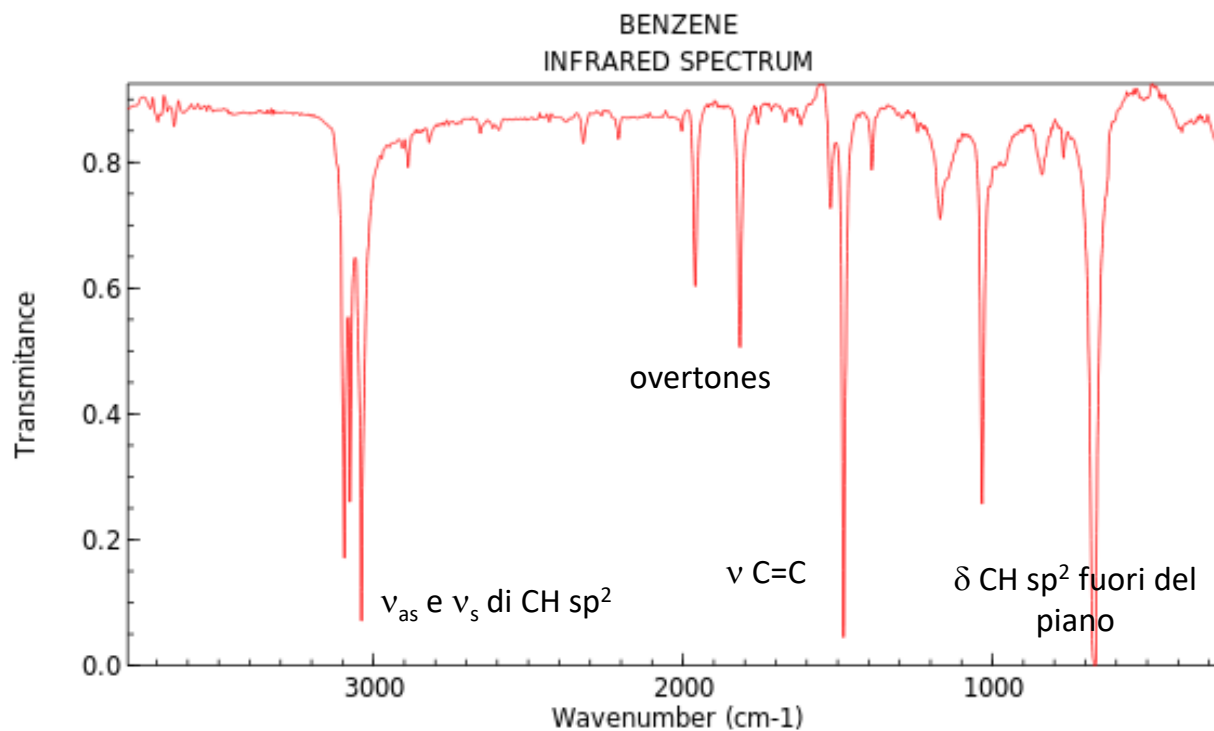
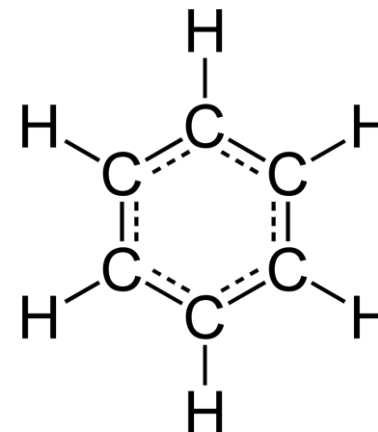


Alchini



Idrocarburi aromatici

- stretching C–H del C_{sp^2} a $3000-3100\text{ cm}^{-1}$
- Stretching armonico dei C=C a 1605 e 1500 cm^{-1}
- bending C–H oop a $750-650$
- **Bande di overtone (deboli) a $1700-2000\text{ cm}^{-1}$**



Idrocarburi aromatici

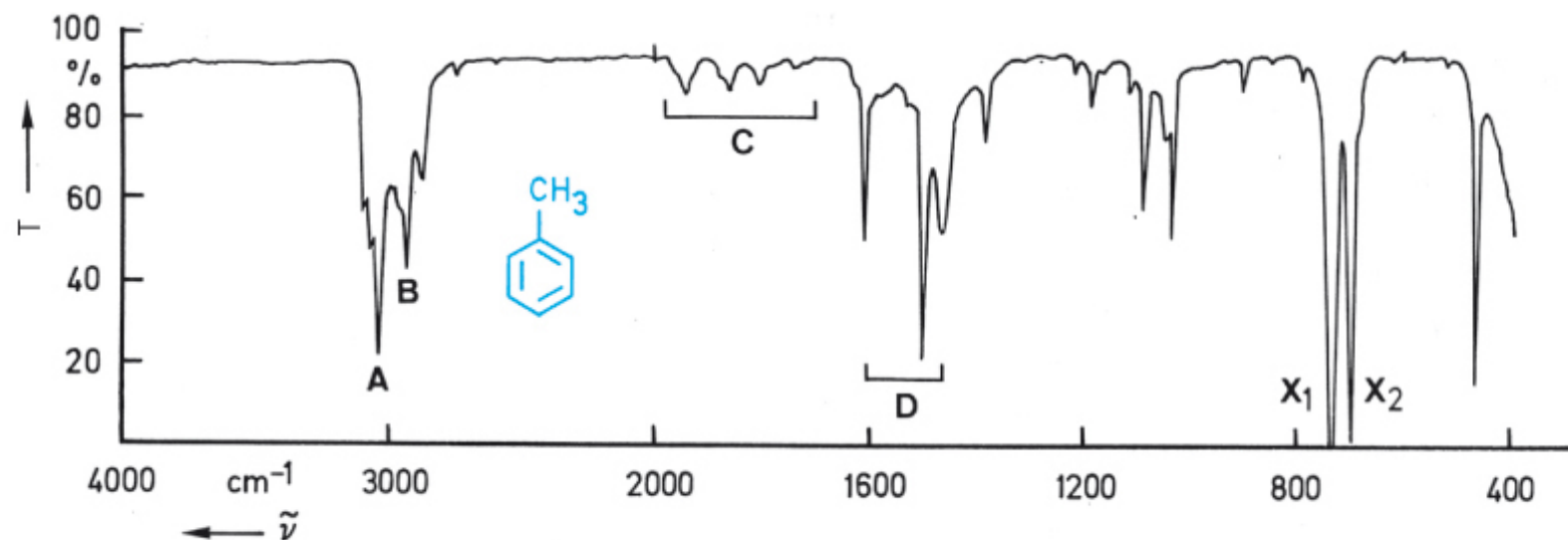
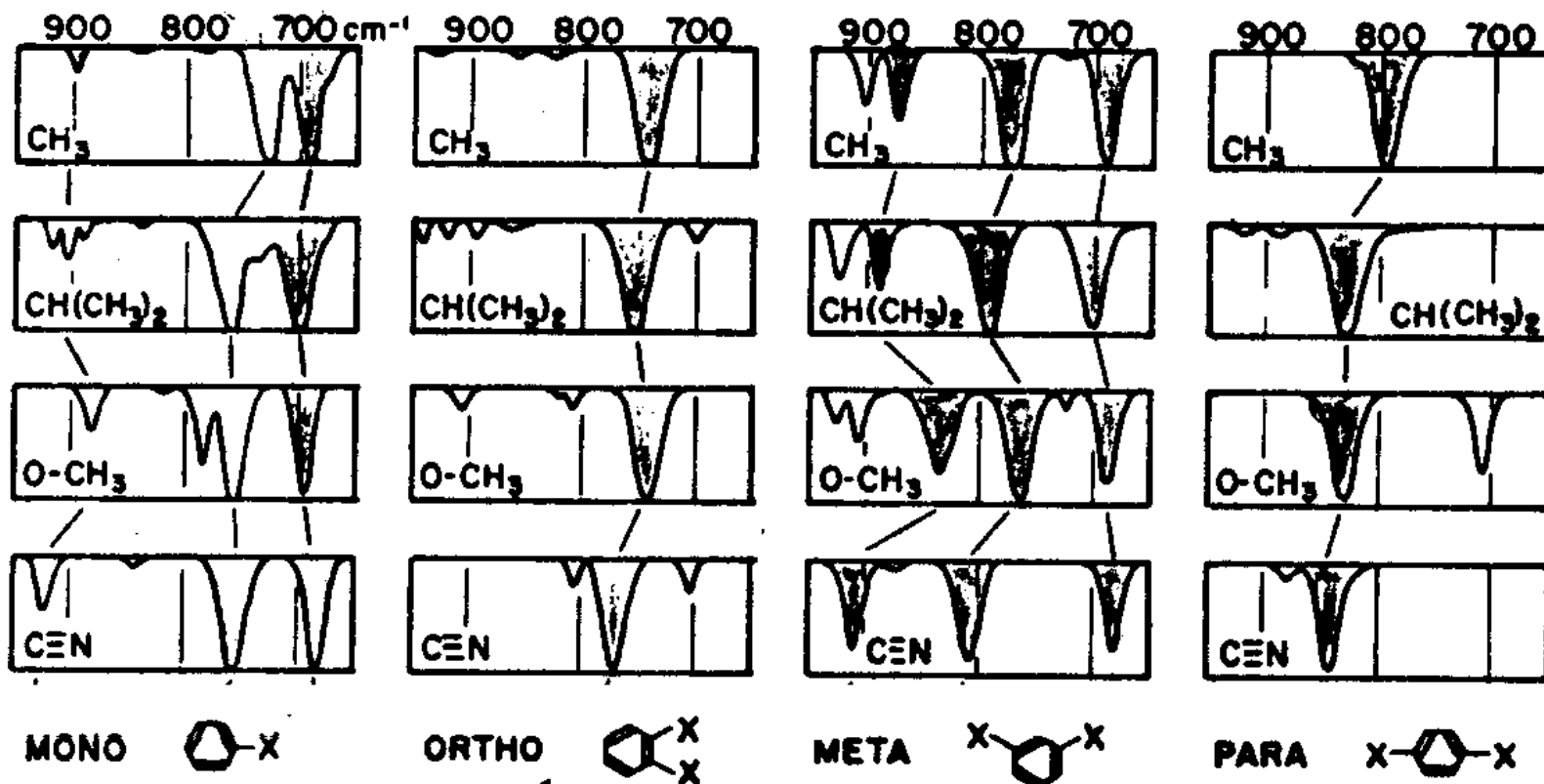


Fig. 2.23 Toluene (film liquido).

- | | |
|---|---|
| A | Vibrazioni di stiramento dei C—H aromatici |
| B | Vibrazioni di stiramento dei C—H alifatici |
| C | Bande armoniche e di combinazione dei sistemi aromatici |
| D | Vibrazioni di stiramento dei C=C, tipiche dei composti aromatici |
| X₁ 730 cm ⁻¹ | Vibrazione di piegamento dei C—H <i>fuori dal piano</i> (vedi Tabella 2.16, pag. 57), caratteristiche dei sistemi aromatici monosostituiti (5 idrogeni adiacenti) |
| X₂ 695 cm ⁻¹ | Vibrazione di piegamento dell'anello, caratteristica dei benzeni monosostituiti |

Idrocarburi aromatici

Zona sotto i 1000 cm⁻¹ $\delta_{\text{oop}} \text{C-H}$ 900-690 cm⁻¹Monosostituito:

2 bande (750, 700)

Disostituito:

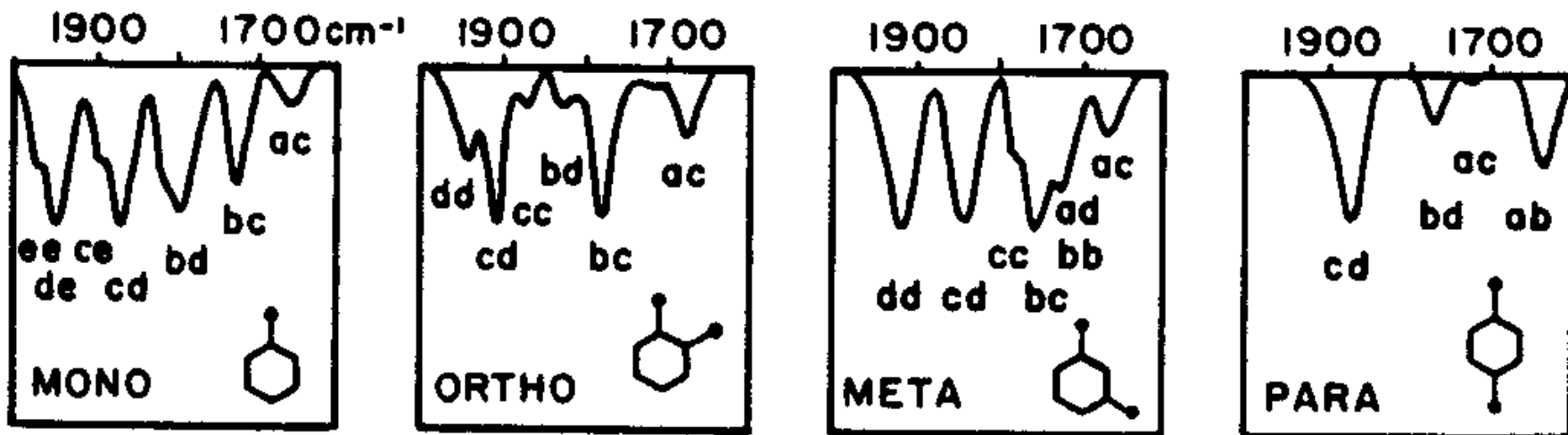
Orto – 1 banda (750)

Para – 1 banda (850)

Meta – 3 bande (900, 800, 700) (sono un po' ballerine, ma sono 3)

Idrocarburi aromatici

Zona 1700-2000 cm^{-1} (overtone e combinazione)



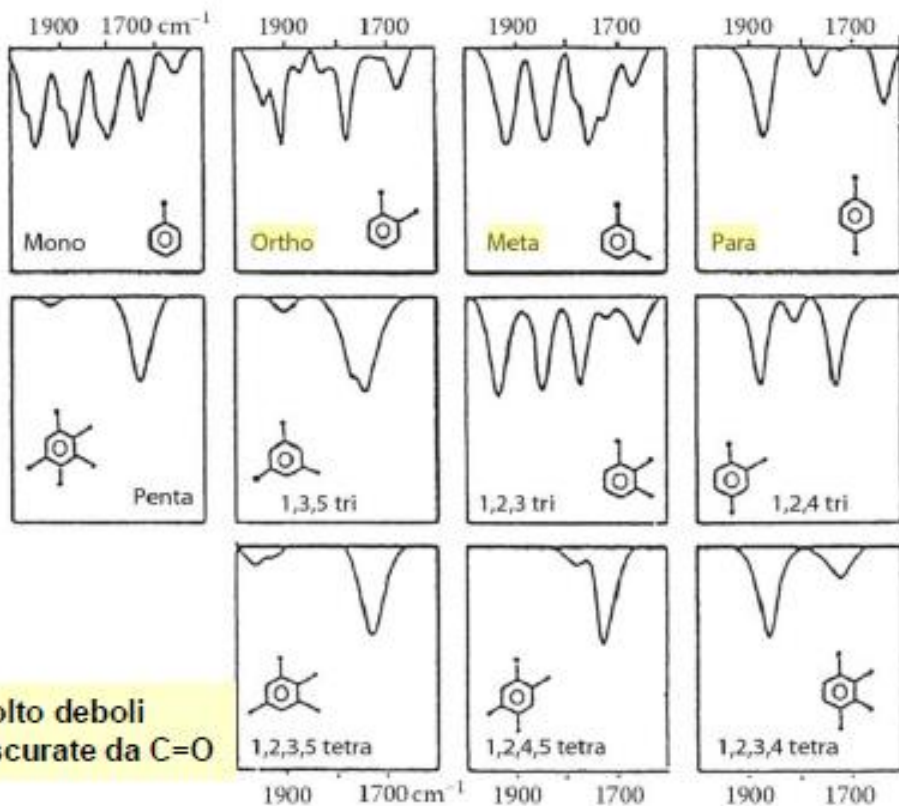
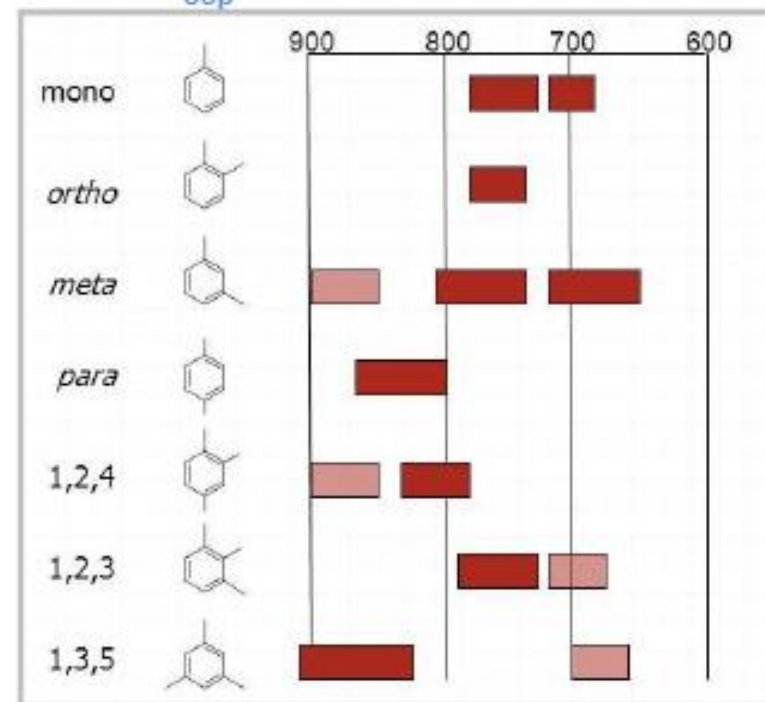
Sono bande *poco intense* che possono essere nascoste da altri gruppi funzionali (es: C=O)

- overtone (armoniche, cioè multipli di una data frequenza)
- toni di combinazione (somma di due vibrazioni).

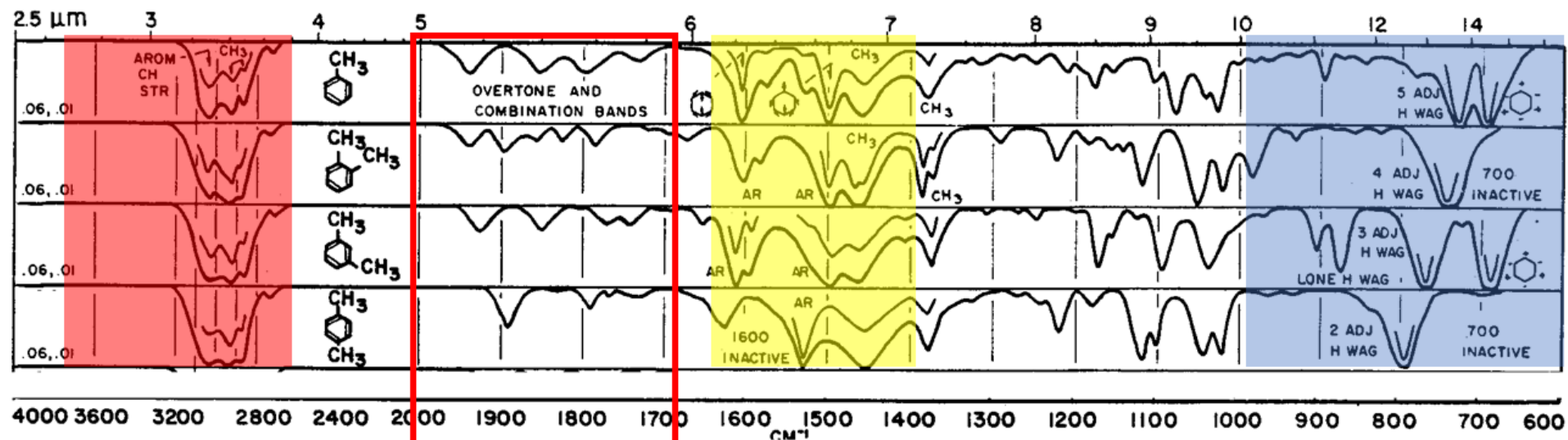
Idrocarburi aromatici

 ν C-H 3100-3000 cm^{-1} combinazione 2000-1667 cm^{-1} ν C=C 1605, 1475 cm^{-1} δ_{oop} C-H 900-690 cm^{-1}

Informazione sulla sostituzione

combinazione 2000-1667 cm^{-1}  δ_{oop} C-H 900-690 cm^{-1} 

Esempi di spettri IR di composti aromatici



Zona di stiramento
dei legami C-H
Sia sp³ che sp²

Zona di stiramento
dei legami C=C
Coinvolge i 6
atomi dell'anello

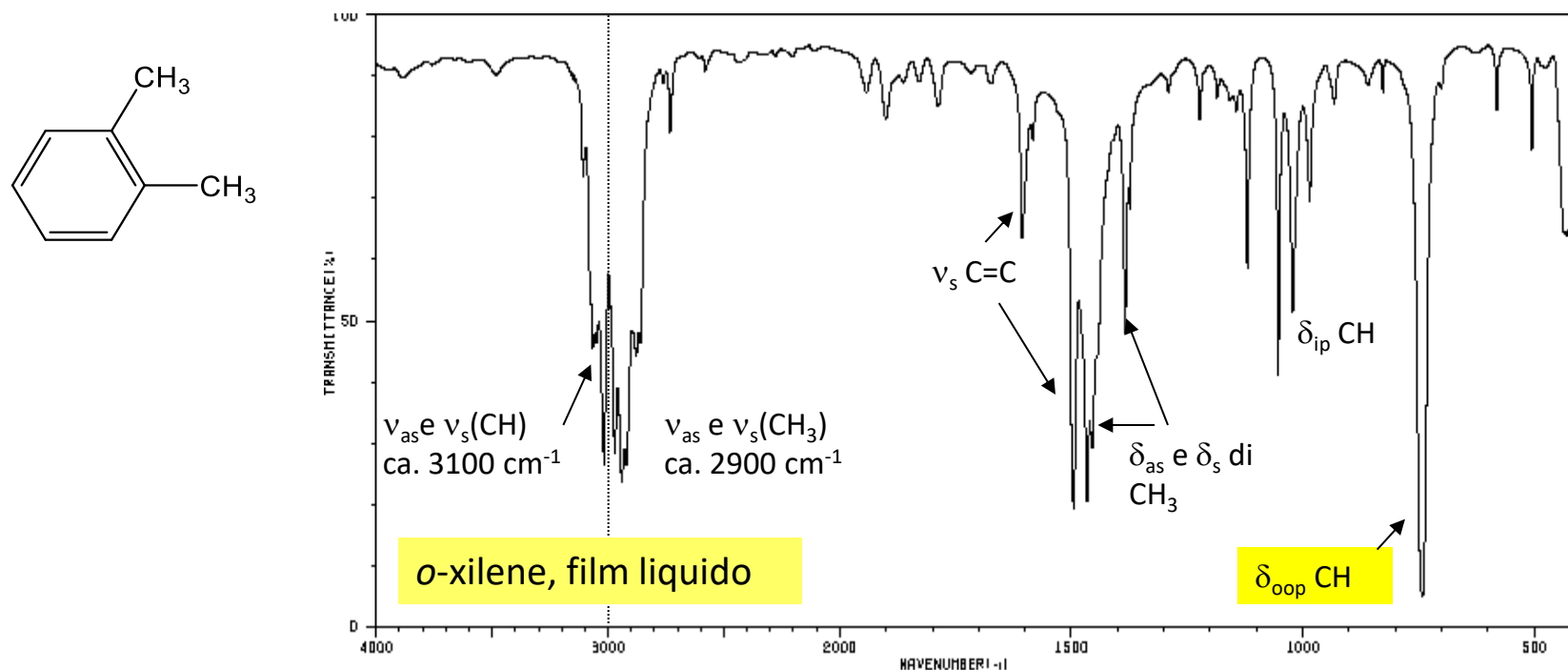
Zona di piegamento
fuori del piano dei
legami Ar-H e dei C di
anello

Zona delle bande di
overtone e combinazione

Salti di 2 livelli
energetici. Negli
alcheni una sola
banda

Siamo nella zona
impronte digitali

Idrocarburi aromatici



Stretching dei CH dell'anello, ca. 3100 cm^{-1} ;

Stretching $\text{C}=\text{C}$, ca. 1600 cm^{-1} ;

Bending in plane dei CH dell'anello e, molto caratteristico, il bending out of plane dei CH dell'anello.

Le vibrazioni di bending oop sono caratteristiche del tipo di sostituzione, se i sostituenti non sono fortemente polari.

Aromatici vs Alifatici

- ➡ Guardate il grado di insaturazione
- ➡ Gli aromatici hanno bande di combinazione tra 2000-1667 cm^{-1} che gli alcheni non hanno
- ➡ Un aromatico da solito presenta una banda a 1605 cm^{-1} per lo stretching C=C
- ➡ Stretching C=C alchene tra 1700-1600 cm^{-1} , medio o debole