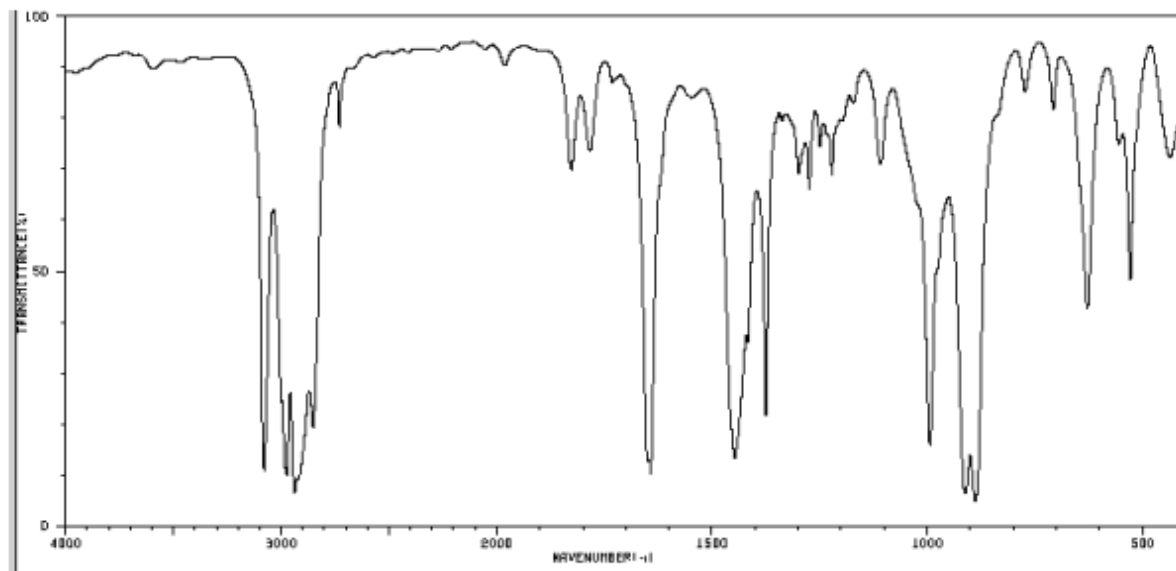


Espectroscopía IR


Espectro 1:

3693	86	2730	74	1447	12	1260	72	888	4
3079	10	1827	68	1417	34	1233	74	774	81
2999	23	1784	70	1375	20	1222	66	708	79
2973	9	1732	84	1337	77	1172	79	628	41
2937	6	1650	12	1300	66	1108	68	555	72
2924	8	1643	10	1283	72	994	15	529	46
2861	18	1546	81	1276	64	912	6	437	70

- 1) Primero, tratamos de identificar si el compuesto tiene grupos alquílicos saturados ($C(sp^3-H)$), si es un alqueno, un alquino o un aromático.

Grupos alquílicos saturados	
Estiramiento $C(sp^3)-H$ @ 3000–2850 cm^{-1}	Presente (2861, 2924, 2973 y 2999 cm^{-1})
Doblamiento $C(sp^3)-H$ @ 1470-1450 cm^{-1}	Presente (1447 cm^{-1})
Balanceo $C(sp^3)-H_3$ (metil) @ 1390-1350 cm^{-1}	Presente (1375 cm^{-1})
Balanceo $C(sp^3)-H_3$ (metil), solo se observa en alcanos de cadena larga @ 725-720 cm^{-1}	Ausente
Alquenos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkenesir.shtml)	
Estiramiento $C(sp^2)-H$ @ 3100-3000 cm^{-1}	Presente (3079 cm^{-1})
Estiramiento $C=C$ @ 1680-1640 cm^{-1}	Presente (1643, 1650 cm^{-1})
Doblamientos $C(sp^2)-H$ @ 1000-650 cm^{-1} (señales más bien discretas)	Presente (709, 888, 912, 994 cm^{-1}). No asemejan una "cueva"
Alquinos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkynesir.shtml)	

Estiramiento C(sp)-H @ 3330-3270 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Estiramiento C≡C @ 2260-2100 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Doblamiento C(sp)-H @ 700-610 cm ⁻¹	<i>Presente (628 cm⁻¹).</i>
Aromáticos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aromaticsir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000 cm ⁻¹	<i>Presente (3079 cm⁻¹)</i>
Sobretonos débiles @ 2000-1665 cm ⁻¹	<i>Presente (1784, 1827 cm⁻¹)</i>
Estiramiento C=C @ 1600-1585 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>

Conclusión 1: lo más probable es que se tenga un alqueno y un CH₃ 

2) Identificamos si el compuesto es un compuesto carbonílico

Estiramiento C=O @ 1760–1665 cm ⁻¹	<i>Posible presencia (1784 cm⁻¹), más intensa de lo esperado)</i>
---	--


Conclusión 2: Se descarta la presencia del grupo carbonilo en el compuesto.

3) Identificamos si el compuesto es un alcohol, éter, amina, haluro, nitrocompuesto o nitrilo.

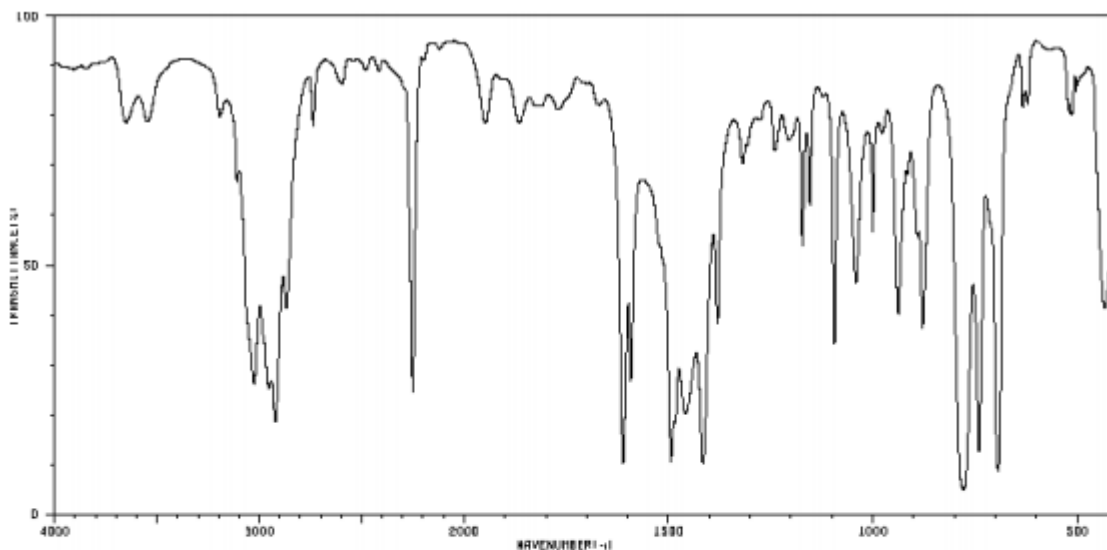
Alcohol (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alcoholsir.shtml)	
Estiramiento O–H, @ 3500-3200 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Estiramiento C–O @ 1260-1050 cm ⁻¹	<i>Ya se descartó que fuera alcohol</i>
Éter (https://bit.ly/2WESHmh)	
Estiramiento C-O cerca de 1000 cm ⁻¹ (hasta 1150 cm ⁻¹ , referenciado en las tablas de clases)	<i>Presente (994 y 1108 cm⁻¹)</i>
Amina (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aminesir.shtml)	
Estiramiento N–H @ 3400-3250 cm ⁻¹ • Amina 1°: dos bandas @ 3400-3300 y 3330-3250 cm ⁻¹ • Amina 2°: una banda @ 3350-3310 cm ⁻¹ • Amina 3°: no hay bandas en esa región	<i>Ausente</i>
Doblamiento N–H (solo 1°) @ 1650-1580 cm ⁻¹	<i>Se descartó presencia de aminas.</i>
Estiramiento C–N (anilinas) @ 1335-1250 cm ⁻¹	<i>Se descartó presencia de aminas.</i>
Estiramiento C–N (aminas alifáticas) @ 1250–1020cm ⁻¹	<i>Se descartó presencia de aminas.</i>
Doblamiento N–H (solo aminas 1° y 2°) @ 910-665 cm ⁻¹	<i>Se descartó presencia de aminas.</i>
Haluros (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkhalidesir.shtml)	
C–H wag (-CH ₂ X) from 1300-1150 cm ⁻¹	<i>Presente (1172, 1222, 1260, 1276, 1283 y 1300 cm⁻¹)</i>
Estiramiento C–X (general) @ 850-515 cm ⁻¹ • Estiramiento C–Cl @ 850-550 cm ⁻¹ • Estiramiento C–Br @ 690-515 cm ⁻¹	<i>Presente (529, 555, 628, 708 y 774 cm⁻¹). Mayoría C-Cl. Pero no se puede descartar sin conocer fórmula elemental</i>
Nitro (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/nitrosir.shtml)	
Estiramiento asimétrico N–O @ 1550-1475 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Estiramiento simétrico N–O @ 1360-1290 cm ⁻¹	<i>Hay dos bandas pero como la de estiramiento asimétrico está ausente no puede ser un compuesto Nitro</i>
Nitrilos	

Estiramiento C≡N @ 2260 – 2220 cm⁻¹

Ausente

Conclusión 3: El compuesto posiblemente se trate de un éter por la presencia de señales de C-O, sin embargo, es conocido que éstos son muy difíciles de detectar. Se puede resaltar que hay presencia de haluros de Cl y/o Br. Igualmente, posee grupos alquílicos: posiblemente uno saturado (un -CH₃), así como uno insaturado del tipo sp² (alqueno). Se descarta que haya algún grupo carbonílico, OH, amina, nitro o ciano. 

Espectro 2:



3652	74	2736	74	1484	17	1206	72	938	38
3194	77	2250	23	1459	19	1173	52	891	53
3108	84	1947	74	1416	9	1154	60	879	36
3027	26	1866	74	1380	37	1094	39	778	4
2953	23	1611	9	1318	68	1041	44	741	12
2922	16	1592	25	1307	70	1000	55	693	8
2869	39	1494	10	1241	70	976	74	434	39

- 1) Primero, tratamos de identificar si el compuesto tiene grupos alquílicos saturados (C(sp³)-H), si es un alqueno, un alquino o un aromático.


Grupos alquílicos saturados	
Estiramiento C(sp ³)-H @ 3000–2850 cm ⁻¹	<i>Presente (2869, 2922 y 2953 cm⁻¹)</i>
Doblamiento C(sp ³)-H @ 1470-1450 cm ⁻¹	<i>Presente (1459cm⁻¹)</i>
Balanceo C(sp ³)-H ₃ (metil) @ 1390-1350 cm ⁻¹	<i>Presente (1380 cm⁻¹)</i>
Balanceo C(sp ³)-H ₃ (metil), solo se observa en alcanos de cadena larga @ 725-720 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>

Alquenos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkenesir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000 cm ⁻¹	Presente (3027, 3108 cm ⁻¹)
Estiramiento C=C @ 1680-1640 cm ⁻¹	Ausente
Doblamiento C(sp ²)-H @ 1000-650 cm ⁻¹ (señales más bien discretas)	Presente (693, 741, 778, 899, 891, 938, 976 y 1000 cm ⁻¹). No asemejan una "cueva"
Alquinos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkynesir.shtml)	
Estiramiento C(sp)-H @ 3330-3270 cm ⁻¹	Ausente
Estiramiento C≡C @ 2260-2100 cm ⁻¹	Presente (2250 cm ⁻¹).
Doblamiento C(sp)-H @ 700-610 cm ⁻¹	Presente (693 cm ⁻¹).
Aromáticos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aromaticsir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000 cm ⁻¹	Presente (3027 y 3108 cm ⁻¹)
Sobretonos débiles @ 2000-1665 cm ⁻¹	Presente (1866, 1947 cm ⁻¹)
Estiramiento C=C @ 1600-1585 cm ⁻¹	Presente (1592 cm ⁻¹)

Conclusión 1: Se tiene un compuesto aromático y uno saturado 

2) Identificamos si el compuesto es un compuesto carbonílico

Estiramiento C=O @ 1760–1665 cm ⁻¹	Ausente
---	---------

Conclusión 2: Se descarta la presencia del grupo carbonilo en el compuesto 

3) Identificamos si el compuesto es un alcohol, éter, amina, haluro, nitrocompuesto o nitrilo.

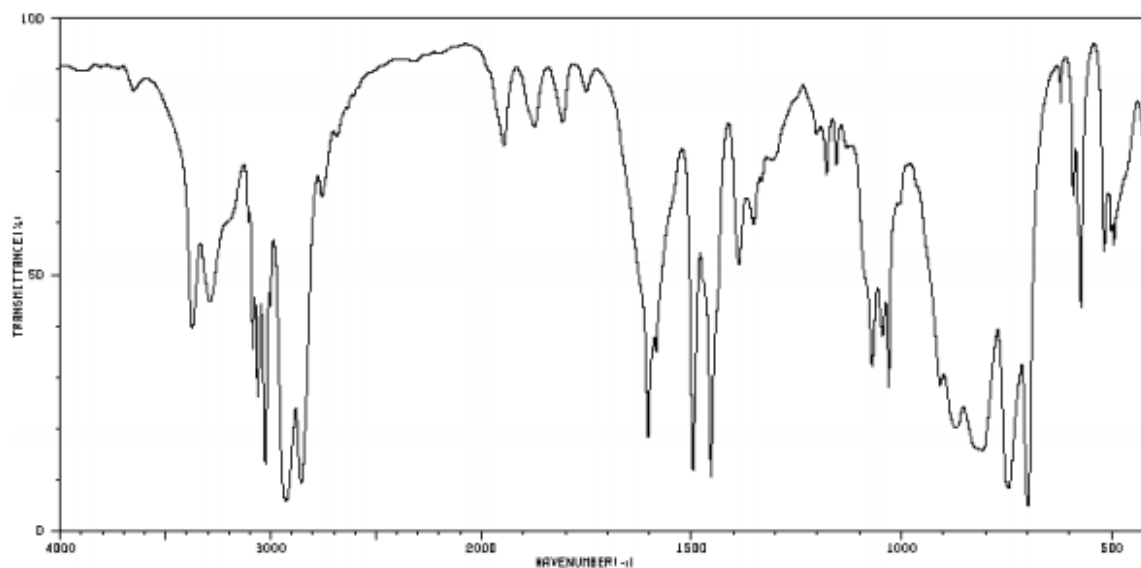
Alcohol (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alcoholsir.shtml)	
Estiramiento O–H, @ 3500-3200 cm ⁻¹	Ausente
Estiramiento C–O @ 1260-1050 cm ⁻¹	Ya se descartó que fuera alcohol
Éter (https://bit.ly/2WESHmh)	
Estiramiento C-O cerca de 1000 cm ⁻¹ (hasta 1150 cm ⁻¹ , referenciado en las tablas de clases)	Presente (1000, 1041 y 1094 cm ⁻¹)
Amina (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aminesir.shtml)	
Estiramiento N–H @ 3400-3250 cm ⁻¹ • Amina 1°: dos bandas @ 3400-3300 y 3330-3250 cm ⁻¹ • Amina 2°: una banda @ 3350-3310 cm ⁻¹ • Amina 3°: no hay bandas en esa región	Ausente
Doblamiento N–H (solo 1°) @ 1650-1580 cm ⁻¹	Se descartó presencia de aminas.
Estiramiento C–N (anilinas) @ 1335-1250 cm ⁻¹	Se descartó presencia de aminas.
Estiramiento C–N (aminas alifáticas) @ 1250–1020cm ⁻¹	Se descartó presencia de aminas.
Doblamiento N–H (solo aminas 1° y 2°) @ 910-665 cm ⁻¹	Se descartó presencia de aminas.
Haluros (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkhalidesir.shtml)	
C–H wag (-CH ₂ X) from 1300-1150 cm ⁻¹	Presente (1154, 1173, 1206, 1241, y 1307 cm ⁻¹)
Estiramiento C–X (general) @ 850-515 cm ⁻¹ • Estiramiento C–Cl @ 850-550 cm ⁻¹ • Estiramiento C–Br @ 690-515 cm ⁻¹	Presente (693, 741 y 778 cm ⁻¹). Correspondientes al rango de C-Cl.
Nitro (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/nitrosir.shtml)	
Estiramiento asimétrico N–O @ 1550-1475 cm ⁻¹	Presente (1484 y 1494 cm ⁻¹)
Estiramiento simétrico N–O @ 1360-1290 cm ⁻¹	Presente (1307 y 1318 cm ⁻¹)
Nitrilos	

Estiramiento C≡N @ 2260 – 2220 cm⁻¹

Presente (2250 cm⁻¹)

Conclusión 3: El compuesto se trate de un Nitrilo, así mismo, tenemos señales del grupo Nitro, tanto por estiramiento simétrico como asimétrico. Además de esto, hay posibilidad de tener haluros de Cl y presencia de grupos éter. También se tiene presencia de grupos alquílicos: un posible saturado (-CH₃) y uno aromático. Se descarta que haya algún grupo carbonílico, OH y amina.

Espectro 3:



3374	36	2930	6	1463	10	1046	36	746	7
3288	43	2856	8	1387	50	1031	26	699	4
3106	56	2757	62	1351	57	909	26	592	62
3086	34	1946	72	1203	74	871	19	673	42
3062	25	1603	17	1179	66	820	15	519	52
3026	12	1584	39	1156	88	812	15	502	57
3002	42	1496	11	1070	30	807	16	496	63

- 1) Primero, tratamos de identificar si el compuesto tiene grupos alquílicos saturados (C(sp³)-H), si es un alqueno, un alquino o un aromático.

Grupos alquílicos saturados	
Estiramiento C(sp ³)-H @ 3000–2850 cm ⁻¹	Presente (2856 y 2930 cm ⁻¹)
Doblamiento C(sp ³)-H @ 1470-1450 cm ⁻¹	Presente (1463 cm ⁻¹)
Balaceo C(sp ³)-H ₃ (metil) @ 1390-1350 cm ⁻¹	Presente (1351 y 1387 cm ⁻¹)
Balaceo C(sp ³)-H ₃ (metil), solo se observa en alcanos de cadena larga @ 725-720 cm ⁻¹	Ausente
Alquenos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkenesir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000) cm ⁻¹	Presente (3002, 3026, 3062, 3082, 3106)

	cm^{-1})
Estiramiento C=C @ 1680-1640 cm^{-1}	<i>Ausente</i>
Doblamiento C(sp ²)-H @ 1000-650 cm^{-1} (señales más bien discretas)	<i>Presente (673, 692, 699, 746, 807, 812, 820, 871 y 909 cm^{-1}) No parecen cueva.</i>
Alquinos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkynesir.shtml)	
Estiramiento C(sp)-H @ 3330-3270 cm^{-1}	<i>Presente (3288 cm^{-1})</i>
Estiramiento C≡C @ 2260-2100 cm^{-1}	<i>Ausente</i>
Doblamiento C(sp)-H @ 700-610 cm^{-1}	<i>Presente (673, 692, 699 cm^{-1}).</i>
Aromáticos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aromaticsir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000 cm^{-1}	<i>Presente (3002, 3026, 3062, 3082, 3106 cm^{-1})</i>
Sobretonos débiles @ 2000-1665 cm^{-1}	<i>Presente (1946 cm^{-1})</i>
Estiramiento C=C @ 1600-1585 cm^{-1}	<i>Presente (1584 y 1603 cm^{-1})</i>

Conclusión 1: Posibilidad de compuesto aromático y un -CH₃ 

2) Identificamos si el compuesto es un compuesto carbonílico


Estiramiento C=O @ 1760–1665 cm^{-1}	<i>Ausente</i>
--	----------------

Conclusión 2: No hay presencia del grupo carbonilo en el compuesto.

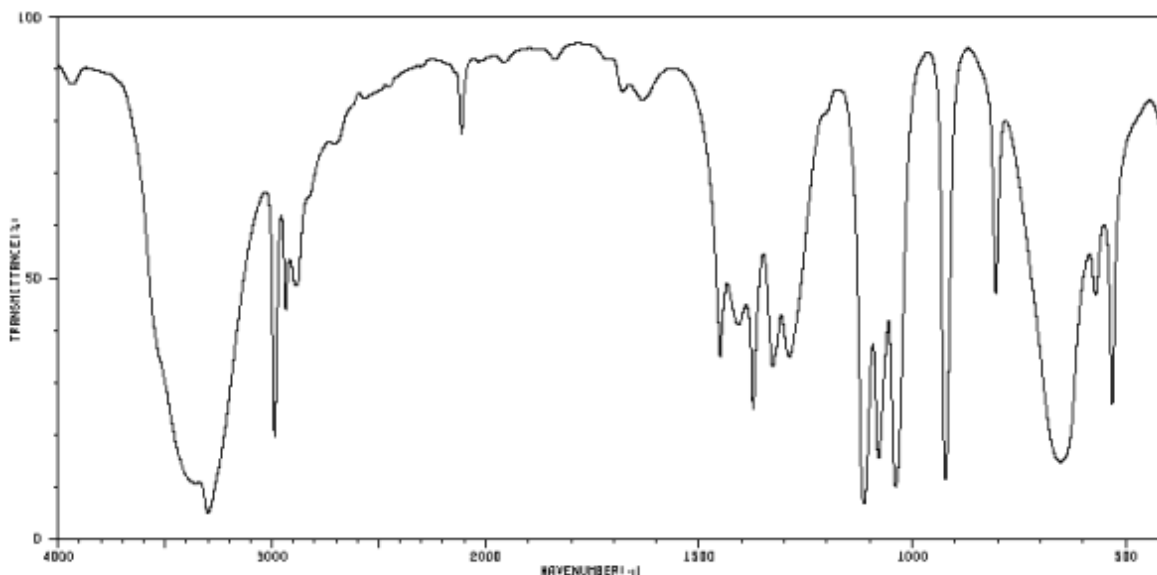
3) Identificamos si el compuesto es un alcohol, éter, amina, haluro, nitrocompuesto o nitrilo.

Alcohol (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alcoholsir.shtml)	
Estiramiento O–H, @ 3500-3200 cm^{-1}	<i>Presente (3288 y 3374 cm^{-1}) pero la banda no es ancha</i>
Estiramiento C–O @ 1260-1050 cm^{-1}	<i>Presente (1070, 1156, 1179 y 1203 cm^{-1})</i>
Éter (https://bit.ly/2WESHmh)	
Estiramiento C-O cerca de 1000 cm^{-1} (hasta 1150 cm^{-1} , referenciado en las tablas de clases)	<i>Presente (1031, 1046 y 1070 cm^{-1})</i>
Amina (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aminesir.shtml)	
Estiramiento N–H @ 3400-3250 cm^{-1} • Amina 1°: dos bandas @ 3400-3300 y 3330-3250 cm^{-1} • Amina 2°: una banda @ 3350-3310 cm^{-1} • Amina 3°: no hay bandas en esa región	<i>Presente (3288 y 3374 cm^{-1}), tenemos una amina primaria</i>
Doblamiento N–H (solo 1°) @ 1650-1580 cm^{-1}	<i>Presente (1584 y 1603 cm^{-1})</i>
Estiramiento C–N (anilinas) @ 1335-1250 cm^{-1}	<i>Ausente</i>
Estiramiento C–N (aminas alifáticas) @ 1250–1020 cm^{-1}	<i>Presente (1031, 1046, 1070, 1156, 1179 y 1203 cm^{-1})</i>
Doblamiento N–H (solo aminas 1° y 2°) @ 910-665 cm^{-1}	<i>Presente (673, 692, 699, 746, 807, 812, 820, 871 y 909 cm^{-1}).</i>
Haluros (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkhalidesir.shtml)	
C–H wag (-CH ₂ X) from 1300-1150 cm^{-1}	<i>Presente (1156, 1179 y 1203 cm^{-1})</i>
Estiramiento C–X (general) @ 850-515 cm^{-1} • Estiramiento C–Cl @ 850-550 cm^{-1} • Estiramiento C–Br @ 690-515 cm^{-1}	<i>Varias señales en dicha región (519, 673, 592, 699, 746, 807, 812 y 820 cm^{-1}). No se puede descartar sin conocer fórmula elemental</i>

Nitro (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/nitrosir.shtml)	
Estiramiento asimétrico N–O @ 1550-1475 cm ⁻¹	Presente (1496 cm ⁻¹)
Estiramiento simétrico N–O @ 1360-1290 cm ⁻¹	Presente (1351 cm ⁻¹)
Nitrilos	
Estiramiento C≡N @ 2260 – 2220 cm ⁻¹	Ausente

Conclusión 3: El compuesto se trate de una amina primaria. No se descarta la posibilidad de presencia de haluros y éteres, al igual que la del grupo Nitro. Hay señales de compuestos alquílicos, con un posible –CH₃ y un aromático. Se descarta la existencia del alcohol en vista del aspecto de la banda correspondiente a los valores del rango, pues no es lo suficientemente ancha. También se descarta la presencia de Nitrilos y grupos carbonilo. 

Espectro 4:



3932	84	1632	81	1080	14
3299	4	1451	34	1039	9
2987	18	1408	39	923	11
2936	42	1374	29	806	46
2889	46	1328	32	653	14
2112	74	1289	34	571	44
1679	81	1114	6	532	26

- 1) Primero, tratamos de identificar si el compuesto tiene grupos alquílicos saturados (C(sp³)-H), si es un alqueno, un alquino o un aromático.

Grupos alquílicos saturados	
Estiramiento C(sp ³)-H @ 3000–2850 cm ⁻¹	<i>Presente (2987, 2936, 2889 cm⁻¹)</i>
Doblamiento C(sp ³)-H @ 1470-1450 cm ⁻¹	<i>Presente (1451 cm⁻¹)</i>
Balanceo C(sp ³)-H ₃ (metil) @ 1390-1350 cm ⁻¹	<i>Presente (1374 cm⁻¹)</i>
Balanceo C(sp ³)-H ₃ (metil), solo se observa en alcanos de cadena larga @ 725-720 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Alquenos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkenesir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000) cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Estiramiento C=C @ 1680-1640 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Doblamientos C(sp ²)-H @ 1000-650 cm ⁻¹ (señales más bien discretas)	<i>Presente (653, 806, 923 cm⁻¹)</i>
Alquinos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkynesir.shtml)	
Estiramiento C(sp)-H @ 3330-3270 cm ⁻¹	<i>Presente (3299 cm⁻¹)</i>
Estiramiento C≡C @ 2260-2100 cm ⁻¹	<i>Presente (2112 cm⁻¹).</i>
Doblamientos C(sp)-H @ 700-610 cm ⁻¹	<i>Presente (632 cm⁻¹).</i>
Aromáticos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aromaticsir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Sobretonos débiles @ 2000-1665 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Estiramiento C=C @ 1600-1585 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>

Conclusión 1: lo más probable en este estudio es que el compuesto sea un alquino y que haya un posible –CH₃.

- 2) Identificamos si el compuesto es un compuesto carbonílico


Estiramiento C=O @ 1760–1665 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
---	----------------

Conclusión 2: No poseemos grupo carbonillo en el compuesto.

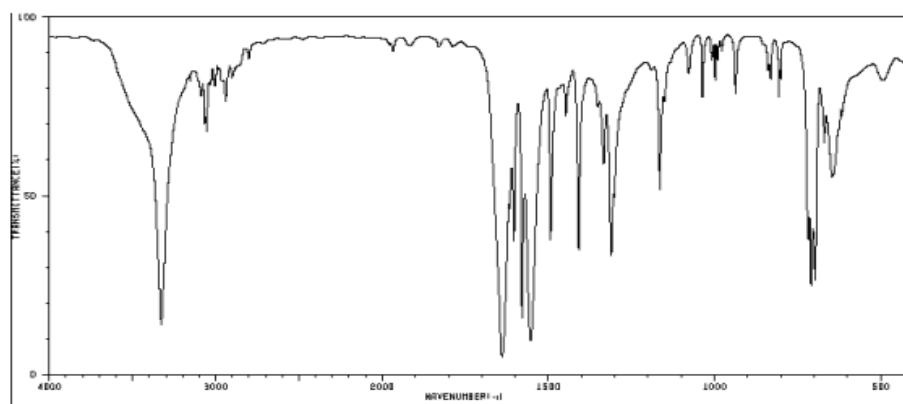
- 3) Identificamos si el compuesto es un alcohol, éter, amina, haluro, nitrocompuesto o nitrilo.

Alcohol (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alcoholsir.shtml)	
Estiramiento O–H, @ 3500-3200 cm ⁻¹	<i>Presente (3299 cm⁻¹, no tan ancha, similar a un pico)</i>
Estiramiento C–O @ 1260-1050 cm ⁻¹	<i>Presente (1080 y 1114 cm⁻¹)</i>
Éter (https://bit.ly/2WESHmh)	
Estiramiento C-O cerca de 1000 (hasta 1150, referenciado en las tablas de clases) cm ⁻¹	<i>Presente (1039, 1080 y 1114 cm⁻¹)</i>
Amina (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aminesir.shtml)	
Estiramiento N–H @ 3400-3250 cm ⁻¹ <ul style="list-style-type: none"> • Amina 1°: dos bandas @ 3400-3300 y 3330-3250 cm⁻¹ • Amina 2°: una banda @ 3350-3310 cm⁻¹ • Amina 3°: no hay bandas en esa región 	<i>Presente (3299 cm⁻¹), posible amina secundaria, pues hay una sola banda, pero la intensidad es débil.</i>
Doblamiento N–H (solo 1°) @ 1650-1580 cm ⁻¹	<i>Presente (1632 cm⁻¹, pero se</i>

	<i>descarta la presencia de aminas primarias)</i>
Estiramiento C–N (anilinas) @ 1335-1250 cm ⁻¹	<i>Presente (1289, 1328 cm⁻¹), pero se había descartado que fuera un compuesto aromático</i>
Estiramiento C–N (aminas alifáticas) @ 1250–1020 cm ⁻¹	<i>Presente (1039, 1080 y 1114 cm⁻¹)</i>
Doblamiento N–H (solo aminas 1° y 2°) @ 910-665 cm ⁻¹	<i>Presente (806 cm⁻¹)</i>
Haluros (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkhalidesir.shtml)	
C–H wag (-CH ₂ X) from 1300-1150 cm ⁻¹	<i>Presente (1289 cm⁻¹)</i>
Estiramiento C–X (general) @ 850-515 cm ⁻¹ <ul style="list-style-type: none"> • Estiramiento C–Cl @ 850-550 cm⁻¹ • Estiramiento C–Br @ 690-515 cm⁻¹ 	<i>Varias señales en dicha región. (571, 632, 653, 806 cm⁻¹) No se puede descartar sin conocer fórmula elemental</i>
Nitro (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/nitrosir.shtml)	
Estiramiento asimétrico N–O @ 1550-1475 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>
Estiramiento simétrico N–O @ 1360-1290 cm ⁻¹	<i>Presente (1374, 1328, 1289 cm⁻¹), pero como la de estiramiento asimétrico está ausente no puede ser un compuesto Nitro</i>
Nitrilos	
Estiramiento C≡N @ 2260 – 2220 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>


Conclusión 3: El compuesto se trata de un alcohol, sin embargo, hay posibilidad de que existan átomos de Cl o Br, así como la presencia de grupos éter. Igualmente, posee grupos alquílicos, tanto saturado (un -CH₃), como uno insaturado del tipo sp. Se descarta que haya algún grupo carbonílico, nitro o ciano. 

Espectro 5:




3328	13	2940	72	1494	36	1166	60	801	79
3156	79	2902	79	1448	70	1151	74	718	36
3087	74	1639	4	1409	33	1036	74	710	23
3066	68	1617	44	1362	72	999	78	698	26
3054	66	1604	36	1334	57	937	74	671	62
3004	77	1579	15	1311	32	831	78	646	53
2962	79	1564	9	1303	47	807	74	617	70

- 1) Primero, tratamos de identificar si el compuesto tiene grupos alquílicos saturados (C(sp³)-H), si es un alqueno, un alquino o un aromático.

Grupos alquílicos saturados	
Estiramiento C(sp ³)-H @ 3000–2850 cm ⁻¹	Presente (2902, 2940 y 2962 cm ⁻¹)
Doblamiento C(sp ³)-H @ 1470-1450 cm ⁻¹	Presente (1448 cm ⁻¹)
Balanceo C(sp ³)-H ₃ (metil) @ 1390-1350 cm ⁻¹	Presente (1352 cm ⁻¹)
Balanceo C(sp ³)-H ₃ (metil), solo se observa en alcanos de cadena larga @ 725-720 cm ⁻¹	Presente (718 cm ⁻¹)
Alquenos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkenesir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000 cm ⁻¹	Presente (3004, 3054, 3066, 3087 cm ⁻¹)
Estiramiento C=C @ 1680-1640 cm ⁻¹	Presente (1639 cm ⁻¹)
Doblamientos C(sp ²)-H @ 1000-650 cm ⁻¹ (señales más bien discretas)	Presente (671, 698, 710, 718, 801, 807, 831, 937, 999 cm ⁻¹). No asemejan una "cueva"
Alquinos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkynesir.shtml)	
Estiramiento C(sp)-H @ 3330-3270 cm ⁻¹	Presente (3328 cm ⁻¹)
Estiramiento C≡C @ 2260-2100 cm ⁻¹	Ausente
Doblamientos C(sp)-H @ 700-610 cm ⁻¹	Presente (617, 646, 671, 698 cm ⁻¹).
Aromáticos (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aromaticsir.shtml)	
Estiramiento C(sp ²)-H @ 3100-3000 cm ⁻¹	Presente (3004, 3054, 3066, 3087 cm ⁻¹)
Sobretonos débiles @ 2000-1665 cm ⁻¹	Ausente 
Estiramiento C=C @ 1600-1585 cm ⁻¹	Ausente 

Conclusión 1: hay gran probabilidad de que el compuesto tenga una insaturación sp² y de que haya un compuesto -CH₃.

- 2) Identificamos si el compuesto es un compuesto carbonílico

Estiramiento C=O @ 1760–1665 cm ⁻¹	Ausente 
---	--

Conclusión 2: No hay presencia del grupo carbonillo en el compuesto.

- 3) Identificamos si el compuesto es un alcohol, éter, amina, haluro, nitrocompuesto o nitrilo.

Alcohol (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alcoholsir.shtml)	
Estiramiento O–H, @ 3500-3200 cm ⁻¹	Presente (3328 cm ⁻¹), pero es similar a un pico
Estiramiento C–O @ 1260-1050 cm ⁻¹	Presente (1151 y 1166 cm ⁻¹)
Éter (https://bit.ly/2WESHmh)	
Estiramiento C–O cerca de 1000 (hasta 1150, referenciado en las tablas de clases) cm ⁻¹	Presente (999 y 1036 cm ⁻¹)
Amina (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/aminesir.shtml)	
Estiramiento N–H @ 3400-3250 cm ⁻¹ • Amina 1°: dos bandas @ 3400-3300 y 3330-3250 cm ⁻¹ • Amina 2°: una banda @ 3350-3310 cm ⁻¹ • Amina 3°: no hay bandas en esa región	Presente (3328 cm ⁻¹), posible amina secundaria, pues hay una sola banda.
Doblamiento N–H (solo 1°) @ 1650-1580 cm ⁻¹	Hay tres bandas, pero se descarta la presencia de aminas primarias

Estiramiento C–N (anilinas) @ 1335-1250 cm ⁻¹	<i>Presente (1303, 1311 y 1334 cm⁻¹), pero se había descartado que fuera un compuesto aromático</i>
Estiramiento C–N (aminas alifáticas) @ 1250–1020cm ⁻¹	<i>Presente (1036, 1151 y 1166 cm⁻¹)</i>
Doblamiento N–H (solo aminas 1º y 2º) @ 910-665 cm ⁻¹	<i>Presente (671, 698, 710, 718, 801, 807 y 831 cm⁻¹)</i>
Haluros (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkhalidesir.shtml)	
C–H wag (-CH ₂ X) from 1300-1150 cm ⁻¹	<i>Presente (1151, 1166 y 1303 cm⁻¹)</i>
Estiramiento C–X (general) @ 850-515 cm ⁻¹ <ul style="list-style-type: none"> • Estiramiento C–Cl @ 850-550 cm⁻¹ • Estiramiento C–Br @ 690-515 cm⁻¹ 	<i>Varias señales en dicha región. (671, 698, 710, 718, 801, 807 y 831 cm⁻¹) No se puede descartar sin conocer fórmula elemental</i>
Nitro (https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/nitrosir.shtml)	
Estiramiento asimétrico N–O @ 1550-1475 cm ⁻¹	<i>Presente (1494 cm⁻¹),</i>
Estiramiento simétrico N–O @ 1360-1290 cm ⁻¹	<i>Presente (1303, 1311, 1334, 1362 cm⁻¹)</i>
Nitrilos	
Estiramiento C≡N @ 2260 – 2220 cm ⁻¹	<i>Ausente</i>

Conclusión 3: El compuesto es una amina secundaria. Hay posibilidad de tener un grupo Nitro. Por otra parte, no se descarta que haya presencia de átomos de Cl o Br, así como la de grupos éter. Hay grupos alquílicos, tanto saturado (un -CH₃), como uno insaturado del tipo sp² (alqueno). Se descarta la presencia del alcohol debido al tamaño de la banda correspondiente a los valores del rango, pues no es lo suficientemente ancha. También se descarta la presencia grupos carbonilo y ciano. Igualmente, se descarta que haya algún grupo carbonílico, nitro o ciano. 