

Juan Camilo Monroy Gómez
 Richard Alejandro Benítez Grupo N. 1

Taller escrito N. 2

• Ejercicio N. 1. Espectro: IR (C: 58,82%; H: 9,80%) propionato de etilo

ν: cm⁻¹	Asignación posible		Asignación definitiva		
	Palabras	estructura		Palabras	Estructura
2950	De intensidad variable. Asociados al estiramiento del enlace carbono-hidrógeno en un sistema alifático		estiramiento C-H en el sistema alifático del propionato de etilo		
2900					
2890-2840					
1740	Muy intensa. Corresponde al estiramiento carbono doble enlace oxígeno en un éster alifático.		estiramiento C=O en el propionato de etilo		
1460	flexión asimétrica de H-C-H en grupo metilo o metileno		flexión asimétrica de los 2 grupos metilo y 2 grupos metileno de la molécula		
1450	flexión asimétrica de H-C-H en grupo metilo		flexión asimétrica de H-C-H en los metilos terminales del propionato de etilo		
1430	flexión simétrica de H-C-H en grupo metileno (flexión de "Tigre")		flexión simétrica de los grupos metileno en la molécula		
1370	flexión simétrica de H-C-H en metilo terminal no geminal		flexión simétrica de H-C-H en 2 metilos terminales del propionato de etilo		
1190	estiramiento carbono enlace sencillo oxígeno en éster alifático (formato, Propionato, etc)		estiramiento C=O en el éster alifático debido al propionato		

• Ejercicio N. 1. Espectro: EM (propionato de etilo)

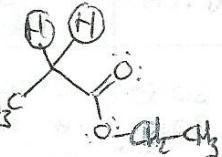
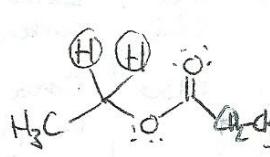
Nº	m/z	Parity masa/carga	Tipo pico	Ecuación
1.	102	par	+.	íon molecular
2.	75	Impar	+	íon fragmento
3.	74	par	+	íon fragmento

nb.	m/z	Paridad masa	carga	Tipo pico	Ecuación
4.	73	impar	+	ión fragmento	
5.	57	impar	+	ión fragmento	
6.	58	par	+	abundancia isotópica	Completo: $100 \cdot \frac{\%[M+1]}{\%[M]} = 1,1 C = 100 \cdot \frac{91\%}{93\%} = 1,1 \cdot 3$ $3,39 \approx 3,3$
7.	45	impar	+	ión fragmento	
8.	43	impar	+	ión fragmento	
9.	29	impar	+	pico padre	
10.	27	impar	+	ión fragmento	
11.	15	impar	+	ión fragmento	

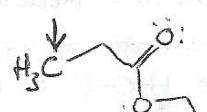
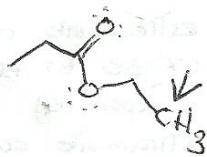
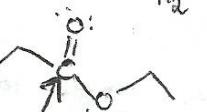
Ejercicio No. 1.

Espectro: RMN¹H (propionato de etilo)

nb.	δ (ppm)	Multiplicidad Denominación	J:Hz	Integral (n.t.H)	Asignación definitiva en palabras	Estructura
1.	1,15	Triplete	7,35	3	Hidrogenos, en carbono metínico, acoplados escalarmente con 2 hidrogenos a 3 uniones. Con grupo metíleno en la posición β al hidrogeno y grupo carbonilo en la posición α al hidrogeno.	
2.	1,24	Triplete	7,12	3	Hidrogenos, en carbono metínico, acoplados escalarmente con 2 hidrogenos a 3 uniones. Con grupo metíleno en la posición β al hidrogeno y grupo carboxilato en la posición α al hidrogeno.	

Nº.	δ (ppm)	Multiplicidad Denominación	J:Hz	Integral (Nº.H)	En palabras	Asignación definitiva	Estructura
3.	2,375	Cuarteto	7,35	2	Hidrógeno en carbono metílenico acoplado escalarmente con 3 hidrógenos a 3 uniones. Hidrógeno en sistema $Z-CH_2-Y$ con $Z=$ metilo y $Y=$ carbonilo de grupo éster	Hidrógeno en carbono metílenico acoplado escalarmente con 3 hidrógenos a 3 uniones. Hidrógeno en sistema $Z-CH_2-Y$ con $Z=$ metilo y $Y=$ carbonilo de grupo éster	
4.	4,13	Cuarteto	7,12	2	Hidrógeno en carbono metílenico acoplado escalarmente con 3 hidrógenos a 3 uniones. El hidrógeno está en un sistema $Z-CH_2-Y$ donde Z es un metilo e Y un grupo carboxilato	Hidrógeno en carbono metílenico acoplado escalarmente con 3 hidrógenos a 3 uniones. El hidrógeno está en un sistema $Z-CH_2-Y$ donde Z es un metilo e Y un grupo carboxilato	

Ejercicio No.1 Espectro RMN ^{13}C (propionato de etilo)

Nº.	δ (ppm)	Tipo de C	En palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	9,18	primario, metílico	Por la Técnica "off resonance" se revela que Tiene unidos 3 hidrógenos (es primario). Por su desplazamiento químico corresponde a un carbono de grupo metilo unido a grupo alquilo ($-CH_2-R$). Se le asigna al carbono metílico, en la molécula, más desplazado a campo alto (mayor densidad electrónica)	Por la Técnica "off resonance" se revela que Tiene unidos 3 hidrógenos (es primario). Por su desplazamiento químico corresponde a un carbono de grupo metilo unido a grupo alquilo ($-CH_2-R$). Se le asigna al carbono metílico, en la molécula, más desplazado a campo alto (mayor densidad electrónica)	
2.	14,22	primario, metílico	En el espectro que usa Técnica "J-mod" Tiene la misma intensidad que el pico anteriormente asignado, es por tanto también primario (se menciona también que está en fase positiva, lo que asegura la asignación). Corresponde al carbono metílico con menor densidad de carga (que el otro), pues está a 2 uniones del oxígeno, átomo electronegativo, que explica porque se desplaza está señal a campo bajo.	En el espectro que usa Técnica "J-mod" Tiene la misma intensidad que el pico anteriormente asignado, es por tanto también primario (se menciona también que está en fase positiva, lo que asegura la asignación). Corresponde al carbono metílico con menor densidad de carga (que el otro), pues está a 2 uniones del oxígeno, átomo electronegativo, que explica porque se desplaza está señal a campo bajo.	
3.	28,90	secundario, metílenico	En fase negativa en el espectro Tipo "J-mod", además es un Triplete en la Técnica "off resonance", corresponde a un carbono en grupo metíleno. De los dos metílenos en la molécula, corresponde al carbono con mayor densidad electrónica: metíleno unido a grupo carbonilo	En fase negativa en el espectro Tipo "J-mod", además es un Triplete en la Técnica "off resonance", corresponde a un carbono en grupo metíleno. De los dos metílenos en la molécula, corresponde al carbono con mayor densidad electrónica: metíleno unido a grupo carbonilo	
4.	60,49	secundario, metílenico	Carbono de metíleno unido a grupo carboxilato ($-CO$ con carbono secundario)	Carbono de metíleno unido a grupo carboxilato ($-CO$ con carbono secundario)	
5.	173,9	carbonílico, cuaternario	Carbono carbonílico en grupo éster. Muy desplazado hacia campo bajo, típico de un carbono con poca densidad electrónica.	Carbono carbonílico en grupo éster. Muy desplazado hacia campo bajo, típico de un carbono con poca densidad electrónica.	

Ejercicio N° 2 Espectro: IR (butirato de 4'-metilbencilo)

ν : cm^{-1}	Asignación posible: Palabras	Estructura	Asignación definitiva: Palabras	Estructura
3050	Estiramiento carbono sp^2 -hidrógeno en sistema aromático o en alqueno		Estiramiento C-H en carbonos sp^2 del anillo aromático	
3020	Estiramiento C-H en metilo		Estiramiento C-H de los metilos	
2960	Estiramiento C-H en metilo		Estiramiento C-H de los metilenos en la molécula	
2900	Estiramiento carbono-hidrógeno en carbonos sp^3 (alifáticos)			
2835				
1950	Banda de combinación. Evidence de la presencia de una estructura aromática. Interpretaciones más arriesgadas no son tomadas en cuenta			
1610	Estiramiento de carbono doble enlace carbono en sistema aromático		Estiramiento doble enlace carbono-carbono en sistema aromático para sustituido	
1450	Flexión asimétrica de H-C-H en metilo o metilenos		flexión asimétrica de H-C-H en metilos y metilenos	
1400	Asociada al régimen de flexión de H-C-H en metileno (flexión simétrica, de "Tercera")		flexión de Tercera de los metilenos en la molécula	
1374	flexión H-C-H en metilo terminal no geminal (flexión simétrica)		flexión simétrica de H-C-H en las dos metilos terminales	
1180	estiramiento carbono enlace sencillo oxígeno en éster (formato, propionato o superiores)		estiramiento C=O en butirato	
1740	estiramiento carbono doble enlace oxígeno en éster alifático saturado		estiramiento C=O en butirato de 4'-metil bencilo	
800	flexión fuera del plano de C=C-R en benceno disustituido en para		flexión fuera del plano de C=C-R en benceno para sustituido	

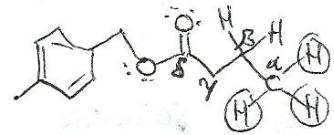
Ejercicio N° 2 Espectro: EM (butirato de 4'-metilbencilo)

Nº.	m/z	Porcentaje Carga	Tipo pico	Ecuación
1.	193	Impar	$\cdot +$ abundancia isotópica	Complejo: $100 \cdot \frac{16[M+1]}{16[M]} = 1,1C + 0,36N$ ^{no tiene Nitrogeno} $100 \cdot \frac{4,6\%}{34,9\%} = 1,1 [12]$ $13,33 \approx 13,2$
2.	192	par	$\cdot +$ ión molecular	

Nº	m/z	Paridad Masa/carga	Tipo pico	Estructura
3.	122	par	+ · ion fragmento	
4.	123	ímpar	+ · abundancia isótopica	Complejidad: $100 \cdot \frac{\%[M+1]}{\%[M]} = 1,1C$ $100 \cdot \frac{7,9\%}{84,8\%} = 1,1 \cdot 8$ $8,73 \approx 8,8$
5.	121	ímpar	+ · ion fragmento	
6.	105	ímpar	+ · pico padre	
7.	106	par	+ · abundancia isótopica	Complejidad: $100 \cdot \frac{\%[M+1]}{\%[M]} = 1,1 \cdot C$ $100 \cdot \frac{8,9\%}{100\%} = 1,1 \cdot 8$ $8,9 \approx 8,8$
8.	104	par	+ · ion fragmento	
9.	91	ímpar	+ · ion fragmento	
10.	79	ímpar	+ · ion fragmento	
11.	71	ímpar	+ · ion fragmento	
12.	43	ímpar	+ · ion fragmento	

Ejercicio Nº. 2

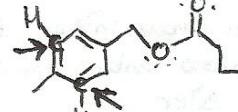
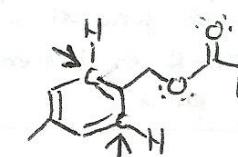
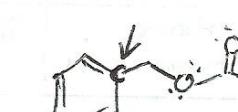
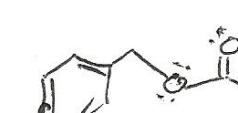
Especro: RMN^{1H} (butirato de 4-metilbenzilo)

Nº	δ (ppm)	multipletas denominación $J: H_2$	Integral (nb.t.)	Palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	9,94	Triplete	7,28	3	Hidrógenos en carbono de grupo metilo terminal no geminal. Acoplado escalar con 2 hidrógenos a 3 uniones. Grupos metilo "β" y "γ" al hidrógeno y grupo carbonilo de un éster "δ" al hidrógeno.	

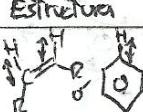
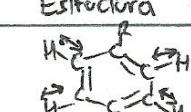
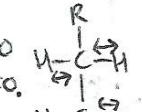
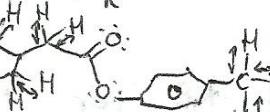
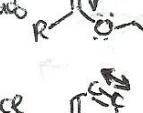
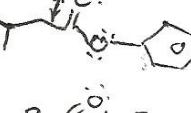
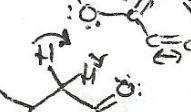
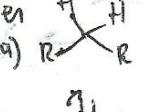
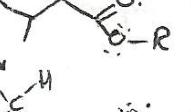
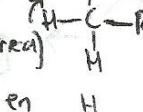
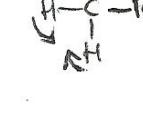
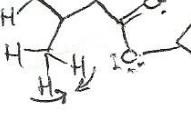
Nº.	δ (ppm)	multiplicidad Denominación	J_{Hz}	Integral	Asignación definitiva Palabras	Estructura
2.	1,64	doblete de J=7,28 Triplete J=7,3		2	Hydrogenos en carbono metílico acoplados a 3 uniones con 5 hydrogenos. Hidrógeno metílico en sistema $Z-\text{CH}_2-Y$ donde $Z=\text{metilo}$ e $Y=-\text{CH}_2-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-\text{R}$	
3.	2,308	Triplete	7,3	2	Hydrogenos en carbono metílico en sistema $Z-\text{CH}_2-Y$ donde: $Y=\text{alquilo}$ e $Z=-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-\text{R}$. Acoplados con 2 hidrógenos a 3 uniones.	
4.	2,305	singlete		3	Hydrogenos en carbono metílico unido a un anillo aromático	
5.	5,10	singlete		2	Hydrogenos en carbono metílico en sistema $Z-\text{CH}_2-Y$ donde: $Y=\text{anillo aromático}$ y $Z=\text{grupo}$ carboxilato	
6.	7,11	doblete	7,83	2	Hydrogenos en anillo aromático con grupo $-\text{R}$ (alquilo $-\text{CH}_3$) en orto y grupo $-\text{CH}_2-\text{O}-(\text{C}=\text{O})-\text{R}$ en meta.	
7.	7,21	doblete	7,83	2	Hydrogenos en anillo aromático con grupo alquilo en meta y grupo $-\text{CH}_2-\text{O}-(\text{C}=\text{O})-\text{R}$ en ortho.	

Ejercicio Nº. 2 Espectro RMN ^{13}C (butirato de 4-metilbenzilo)

Nº.	δ (ppm)	Tipo de C	En palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	13,68	primario, metílico	Carbono de grupo metilo terminal no geminal, unido a grupo alquilo	Carbono de grupo metilo Terminal no geminal, unido a grupo alquilo	
2.	18,38	secundario, metílenico	Carbono de grupo metíleno unido a grupos alquilo	Carbono de grupo metíleno unido a grupos alquilo	
3.	21,08	primario, metílico	Carbono de grupo metilo unido a un sistema aromático	Carbono de grupo metilo unido a un sistema aromático	
4.	36,31	secundario, metílenico	Carbono de grupo metíleno unido a un grupo alquilo y a un grupo carbonilo (correspondiente al éster). La cercanía al grupo carbonilo explica el desplazamiento a campo bajo (respecto al grupo metíleno asignado en el pto N. 2)	Carbono de grupo metíleno unido a un grupo alquilo y a un grupo carbonilo (correspondiente al éster). La cercanía al grupo carbonilo explica el desplazamiento a campo bajo (respecto al grupo metíleno asignado en el pto N. 2)	
5.	66,68	primario, metílenico	Carbono unido a oxígeno cuando el carbono es primario	Carbono unido a oxígeno cuando el carbono es primario	

No.	δ (ppm)	Tipo de C	En palabras	Asignación definitiva	Estructura
6.	128,10	métílico	Carbonos sp^2 en anillo aromático. Deben de tener enlace con hidrógeno (aparece en fase (τ) en RMN 1H Técnica J-mod).	Carbonos sp^2 en anillo aromático. Deben de tener enlace con hidrógeno (aparece en fase (τ) en RMN 1H -J-mod).	
7.	129,10	métílico	Carbono sp^2 en anillo aromático, con hidrógeno unido al carbono (fase (τ) en RMN 1H -J-mod). Se le asigna al carbono que se desplaza ligeramente a campo bajo por la cercanía a un grupo éster.	Carbono sp^2 en anillo aromático, con hidrógeno unido al carbono (fase (τ) en RMN 1H -J-mod). Se le asigna al carbono que se desplaza ligeramente a campo bajo por la cercanía a un grupo éster.	
8.	133,04	ciclopentano	Carbono sp^2 en anillo aromático. No lo acompaña ningún hidrógeno (fase (τ) en RMN 1H -J-mod). Dos carbonos en la molécula eran candidatos, se le asigna el pico al carbono más protegido (con mayor densidad electrónica).	Carbono sp^2 en anillo aromático. No lo acompaña ningún hidrógeno (fase (τ) en RMN 1H -J-mod). Dos carbonos en la molécula eran candidatos, se le asigna el pico al carbono más protegido (con mayor densidad electrónica).	
9.	137,84	ciclopentano	Carbono sp^2 en anillo aromático. Tipo Terciario, sin hidrógenos unidos a él (fase (τ) J-mod).	Carbono sp^2 en anillo aromático. Tipo Terciario, sin hidrógenos unidos a él (fase (τ) J-mod).	
10.	173,47	primario	Carbono unido a oxígeno por doble enlace en éster $-(C=O)-OR$	Carbono unido a oxígeno por doble enlace en éster $-(C=O)-OR$	

Ejercicio No. 3 Espectro: IR (isovalerato de p-Tolilo)

ν : cm^{-1}	Asignación posible Palabras	Estructura	Asignación definitiva Palabras	Estructura
3080	estiramiento carbono hidrógeno en carbono sp^2 ; alqueno o aromático		estiramiento $=C-H$ en sistema aromático	
2950	De intensidad variable. Asociadas al estiramiento del enlace carbono hidrógeno en un sistema alifático.		estiramiento C-H en metilos y metileno de la molécula	
2910	Asociadas al estiramiento del enlace carbono hidrógeno en un sistema alifático.			
2850	2850 hydrogeno en un sistema alifático. C-H tanto en metilos como en metilenos			
1760	estiramiento carbono doble enlace oxígeno de éster alifático saturado o de un anhídrido		estiramiento $C=O$ en éster isovalerato	
1600	estiramiento carbono doble enlace carbono en sistema aromático		estiramiento $C=C$ en aromático	
1500	flexión en el plano de H-C-H en grupo metileno (flexión asimétrica)		flexión asimétrica de H-C-H en el metileno del isovalerato	
1450	flexión en el plano de H-C-H en grupo metileno (flexión asimétrica)			
1449				
1490	varios de intensidad media. Asociadas a la flexión H-C-H de grupos metilo (flexión asimétrica)		flexión asimétrica de H-C-H en los grupos metilo del isovalerato de p-Tolilo	
1400				
1374	flexión simétrica de H-C-H en metilo terminal no geminal		flexión simétrica de H-C-H en los grupos metilo de la molécula	

V: Cm ⁻¹	Asignación posible Palabras	Estructura	Asignación definitiva Palabras	Estructura
1090	Dos bandas intensas. Estiramiento carbono enlace sencillo oxígeno en ester		estiramiento =C=O en el ester del isovalerato de p-tolilo	
1260				
800	flexión fuera del plano de C=C-R en benceno disustituido en para		flexión fuera del plano de C=C-R en benceno disustituido en para	

Ejercicio N°3

Espectro: EM (isovalerato de p-Tolilo)

No.	m/z	Pareja: masa - carga	Tipo pico	Ecuación
1.	192	par	+ · ion molecular	
2.	109	Impar	+ · ion fragmento	
3.	108	par	+ · ion padre	
4.	107	Impar	+ · ion fragmento	

No	m/z	Paridad Masa	Carga	Tipo pico	Estructura
5.	91	Impar	+	ión fragmento	
6.	85	Impar	+	ión fragmento	
7.	57	Impar	+	ión fragmento	
8.	41	Impar	+	ión fragmento	

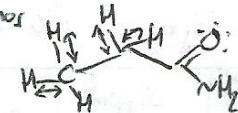
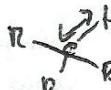
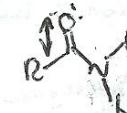
Ejercicio N°.3 Espectro: RMN ^1H (isovalerato de p-tolilo)

No.	δ (ppm)	Multiplicidad denominación	$J:\text{Hz}$	Integral (no. H)	Pablos	Asignación definitiva	Estructura
1.	1,07	doblete	6,34	6	Hidrógenos en carbonos metílicos geminales acoplados con 1 hidrógeno a 3 uniones		
2.	2,06	Tripletes de multiplete de 7	$J_1: 7,24$ $J_2: 6,34$	1	Hidrógeno en carbono terciario. Acoplado escasamente a 3 uniones con 6 hidrógenos con J_1 , y a 3 uniones con 2 hidrógenos con J_2 .		
3.	2,25	doblete	7,24	2	Hidrógeno en carbono metílenico en sistema $-\text{CH}_2-\text{Y}$ donde $\text{Z}=\text{carbonilo de grupo éster}$ e $\text{Y}=(\text{CH})_2(\text{CH}_2)_2$. Acoplado escasamente a un hidrógeno a 3 uniones		
4.	2,34	singlete		3	Hidrógeno en grupo metilo unido a sistema aromático		
5.	6,96	doblete	8,42	2	Hidrógenos en anillo aromático con grupo isovalerato en posición orto y grupo alquilo en posición meta. Acoplados a un hidrógeno a 3 uniones		
6.	7,17	doblete	8,42	2	Hidrógenos en anillo aromático en posiciones meta respecto a un grupo isovalerato y orto respecto a un grupo alquilo. Acoplados a 3 uniones con 1 hidrógeno.		

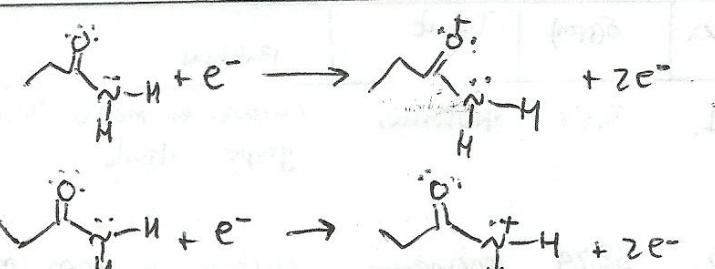
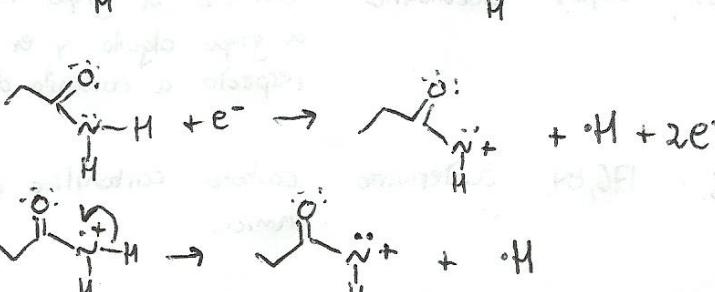
Ejercicio No. 3 Espectro: RMN ^{13}C (Isovalerato de p-Tolilo)

Nº.	δ (ppm)	Tipo de C	En palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	29,95	metílico	carbono de grupo metilo unido a anillo aromático	carbono de grupo metilo unido a anillo aromático	
2.	22,25	metílico	carbonos de grupos metilos geminales en el isovalerato		
3.	25,30	metílico	carbono terciario unido a dos grupos metilo y en posición β respecto al carbono carbonílico del ester		
4.	43,0	metilenico	Carbono de grupo metileno unido a grupo alquilo y en posición α respecto al carbono carbonílico del ester		
5.	121,00	metílico	carbono sp^2 en anillo aromático en posición orto respecto al grupo más desactivante		
6.	129,86	metálico	carbono sp^2 en anillo aromático en posiciones orto a grupo alquilo y meta respecto a grupo carboxilato		
7.	135,43	Cuaternario	carbono sp^2 en anillo aromático unido a grupo alquilo		
8.	150,99	Cuaternario	carbono sp^2 en anillo aromático unido a grupo carboxilato (isovalerato)		
9.	171,22	Cuaternario	desplazado a campo bajo, típico de un carbono con baja densidad electrónica Corresponde al carbono carbonílico del grupo ester		

Ejercicio N°. 4 Espectro IR (propionamida)

\bar{v} : cm ⁻¹	Asignación posible parámetros	Estructura	Asignación definitiva parámetros
3390	estiramientos nitrogeno-hidrógeno en amida primaria (dos bandas) o en amida	$R-N(H)-C(H)=O$	estiramiento N-H en amida primaria
3150			
2950	estiramientos carbono hidrógeno en carbonos sp^3		estiramiento C-H en carbonos sp^3 (sistema alifático)
2900			
2890	estiramiento carbono hidrógeno en carbono Terciario o metílico		estiramiento C-H en metílico
1670	estiramiento carbono doble enlace oxígeno en amida primaria o Terciaria. Por la presencia de estiramiento N-H en primaria.		estiramiento C=O en amida primaria
1470	flexión en el plano H-C-H asimétrica en metílico o metilo		flexión H-C-H de metílico y metilos (asimétrica)
1430	flexión en el plano H-C-H de metílico (flexión simétrica, de "tijera")		flexión de tijera de H-C-H de metílico

Ejercicio N°. 4 Espectro EM (propionamida)

Nº.	m/z	Paridad masa	carga	Tipo pico	Ecuaciones
1.	73	ímpar	+	los moleculares	
2.	72	Par	+	los fragmentos	 
3.	57	ímpar	+	los fragmentos	 
4.	44	par	+	pico padre	

No.	M_z	Paridad masa Carga	Tipo pico	Ecuación
5.	29	Impar	+ los fragmentos	

Ejercicio N° 4

Especie: RMN- 1H (propionamida)

No.	δ (ppm)	Multiplicidad Denominación	J : Hz	Integral	Asignación definitiva En palabras	Estructura
1.	1,08	Tripleto	7,2	3	hidrógenos en carbono metílico Unido a grupo alquilo. Acoplado con 2 hidrógenos a 3 uriones	
2.	2,575	Cuarteto	7,2	2	hidrógenos en carbono metilénico, en sistema $-\text{CH}_2-\text{Y}$ donde $\text{Y} =$ carbonilo de una amida y $\text{Z} =$ un grupo alquilo. Acoplado con 3 H a 3 uriones	
3.	7,05	Singulete		2	hidrógenos unidos a nitrógeno en amida primaria	

Ejercicio N° 4

Especie: RMN- ^{13}C (propionamida)

No.	δ (ppm)	Tipo de Palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	7,87	metílico	Carbono en metilo terminal unido a grupo alquilo	
2.	38,24	metilénico	carbono en grupo metileno unido a grupo alquilo y en paralelo a respecto a carbonilo de grupo amida	
3.	176,84	carbonílico	carbono carbonílico de grupo amida	

Ejercicio No. 5

Especro: IR (4-diethylamino-2-butanona)

T: Cari	Asignación posible Palabras	Estructura	Asignación definitiva Palabras	Estructura
2970	estiramientos carbono-hidrógeno en sistema alifático. Corresponden a CH tanto en metilo como metileno.		estiramientos C-H en sistema alifático	
2936				
2874				
1710	estiramiento carbono doble sobre oxígeno en cetona alifática		estiramiento C=O en cetona alifática	
1467	flexión asimétrica en el plano H-C-H en grupo metilo o metilo		flexión asimétrica de H-C-H en los grupos metilo y metileno	
1358				
1421	flexión simétrica en el plano H-C-H en grupo metileno (flexión de "tijera")		flexión de tijera en los metilenos	
1070	estiramiento carbono-nitrogeno en grupo amina (alifática, no conjugada)		estiramiento C=N en amina Terciaria	

Ejercicio No. 5 Espectro: EM (4-diethylamino-2-butanona)

No.	m/z	Pareja masa/carga	Tipo pico	Ecuación
1.	193	ímpar +	pó fragmento	
2.	128	par +	pó fragmento	
3.	86	par +	pico padre	
4.	57	ímpar +	pó fragmento	
5.	43	ímpar +	pó fragmento	

Ejercicio N°5 Espectro: ^1H (4-dietilamino-2-butanoa)

No.	δ (ppm)	multiplicidad y rotacionales	J : Hz	Integral	Asignación definitiva en palabras	Estructura
1.	1,00	Triplete	3,1	6	hidrogenos en carbono metílico unido a grupo alquilo. Acoplados a 3 uniones con 2 hidrogenos	
2.	2,23	singlete		3	hidrogenos en grupo metilo unido a carbonilo	
3.	2,8	cuarteto	7,1	4	hidrogenos en el grupo metíleno unido a nitrógeno y a grupo alquilo. Acoplados con 3 hidrogenos a 3 uniones	
4.	2,93	ddd (doblete de doblete de doblete)	$J_1 = 14,91 \text{ (a } 2\text{)} \text{ Hz}$ $J_2 = 9,14$ $J_3 = 5,02$		hidrogenos en metíleno unido a carbonilo y a grupo alquilo. Acoplados a tres hidrogenos cada uno con J distinto, por lo que son magnéticamente diferentes.	
5.	3,01	ddd (doblete de doblete de doblete)	$J_1 = 14,91 \text{ (a } 2\text{)} \text{ Hz}$ $J_2 = 9,14$ $J_3 = 5,02$	2	hidrogenos en metíleno unido a nitrógeno y a grupo alquilo. Acoplados a tres hidrogenos magnéticamente en ambientes distintos.	

Ejercicio N°5 Espectro ^13C (4-dietilamino-2-butanoa)

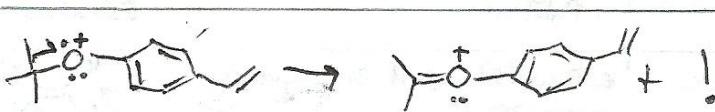
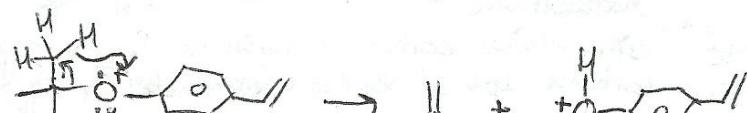
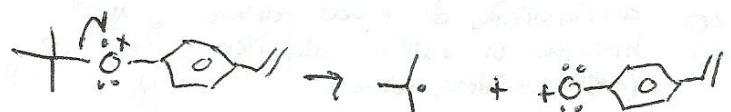
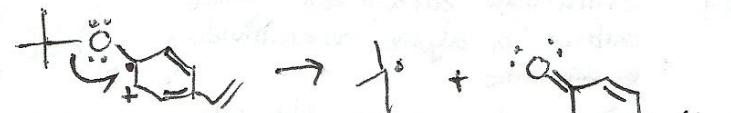
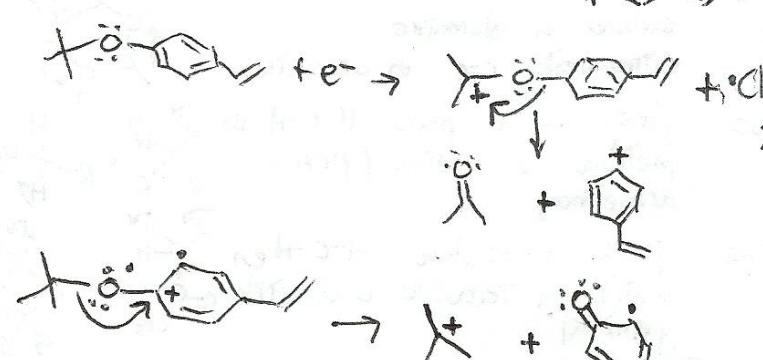
No.	δ (ppm)	Tipo de C	Palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	11,79	metílico		carbono en grupo metilo unido a grupo alquilo	
2.	39,17	metílico		carbono en grupo metilo unido a carbonilo	
3.	41,59	metilenico		carbono en grupo metíleno unido a carbonilo y a grupo alquilo	
4.	47,0	metilenico		carbono en grupo metíleno unido a nitrógeno y a grupo alquilo	
5.	206,22	metilenico		carbono en grupo metíleno unido a nitrógeno y en posición β a carbonilo	
6.	207,91	carbonato		carbono carbonílico en cetona alifática	

Ejercicio N° 6 Espectro: IR (4-Terbutoxi estireno)

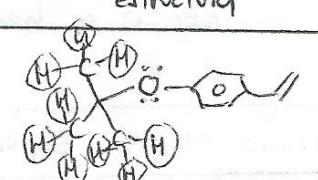
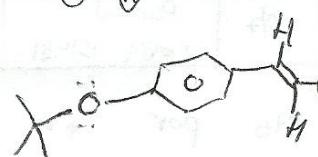
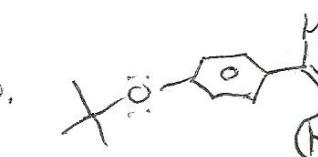
$\tilde{\nu}$ cm ⁻¹	Asignación posible Palabras	Estructura	Asignación definitiva Palabras	Estructura
3100	estiramiento =C-H en alqueno monosustituido		estiramiento =C-H en alqueno monosustituido	
3040	estiramientos carbono hidrógeno en carbonos sp ² de alqueno o aromático		estiramientos =C-H en alqueno y en aromático	
3060	asociado a los estiramientos acortamientos de enlaces carbono hidrógeno en sistema alifático (metilo, metileno, metino)		estiramiento C-H en metilo de grupo tert-butilo	
2970	asociado a los estiramientos acortamientos de enlaces carbono hidrógeno en sistema alifático			
2920				
2890				
1639	estiramiento carbono doble enlace carbono en alquenos monosustituidos o en aromático		estiramiento C=C de alqueno monosustituido	
1610	estiramiento carbono doble enlace carbono en aromático		estiramiento C=C de sistema aromático	
1500	estiramiento C=C en aromáticos			
1460	flexión en el plano H-C-H en metíleno o metilo (flexión asimétrica)		flexión en el plano H-C-H de grupos metilo en terbutilo (asimétrica)	
1370	flexión en el plano H-C-H en metilo en Terbutilo o dimetilo geminal		flexión en el plano H-C-H de grupos metilo en Terbutilo (simétrica)	
1260	intensq y ancha, estiramiento de carbono enlace sencillo oxígeno en alquil aril éter		estiramiento =C=O en alquil aril éter	
850	flexión fuera del plano de C=C-R en benceno disustituido en para.		flexión fuera del plano en benceno disustituido en para	

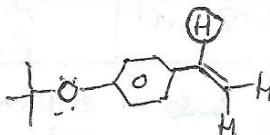
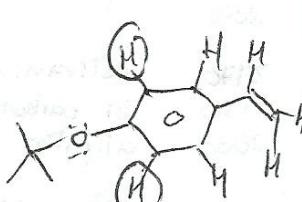
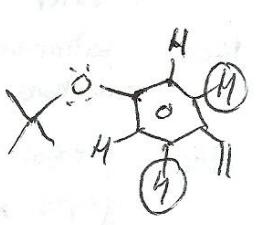
Ejercicio N° 6 Espectro: EM (4-Terbutoxi estireno)

No.	m/z	Paridad Masa Carga	Tipo pico	Ecuación
1.	176	par	+e ⁻ ion molecular	 $+ e^- \rightarrow \text{radical cation}$
				 $+ e^- \rightarrow \text{neutral radical}$
				 $+ e^- \rightarrow \text{neutral form}$
				 $+ e^- \rightarrow \text{neutral form}$

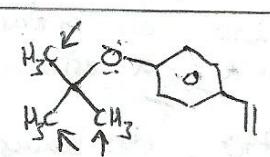
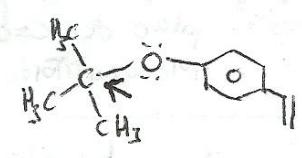
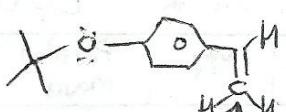
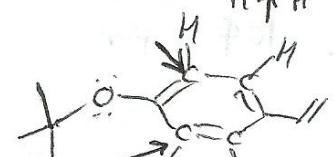
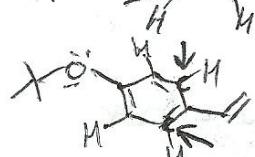
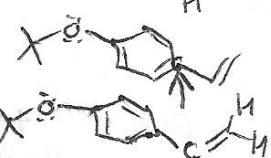
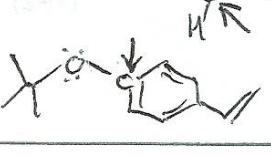
Nº.	m/z	Parcial masa Carga	Tipo picos	Ecuación
2.	161	Impar	+ ion fragmento	
3.	120	par	+ par padre	
4.	119	Impar	+ ion fragmento	
5.	103	Impar	+ ion fragmento	
6.	57	Impar	+ ion fragmento	

Ejercicio 6. Espectro: RMN ^1H (4-Terbutoxiestireno)

Nº.	δ (ppm)	Multiplicidad Parámetros J:Hz	Integral	Asignación definitiva En palabras	estructura
1.	1,25	singlete	9	hidrógenos en grupo metilo en tert-butilo unido a grupo metoxilo	
2.	5,09	doblete	10,87	1 hidrógeno en carbono sp^2 Terminal en parafina Trans en el alqueno. Acoplado a 3 uniones con 1 hidrógeno en CIS	
3.	5,56	doblete	17,53	1 hidrógeno en carbono sp^2 Terminal de alqueno monosustituido. En parafina CIS. Acoplado a 3 uniones con 1 hidrógeno en Trans.	

No.	δ (ppm)	Multiplicidad Denominación	J(H ₂) Integral	Asignación definitiva En palabras	Estructura
4.	6,64	doblete de dobletes	$J_1 = 10,87$ 1 $J_2 = 17,57$	hidrógeno en carbono sp ² en alqueno monosustituido. Acoplado a 2 hidrógenos a 3 uniones que podrían ser químicamente diferentes, tienen asociados su propio J.	
5.	6,89	doblete	8,46 2	hidrógenos en anillo aromático en posición orto a grupo Terbutoxi y meta a grupo aril. Acoplados a 3 uniones con 1 hidrógeno en orto.	
6.	7,43	doblete	8,96 2	hidrógenos en anillo aromático en posición orto a grupo aril y meta a grupo Terbutoxi. Acoplados a 3 uniones con 1 hidrógeno en orto.	

Ejercicio 6. Espectro: RMN ¹³C (4-Terbutoxiestreno)

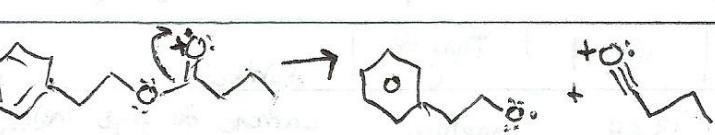
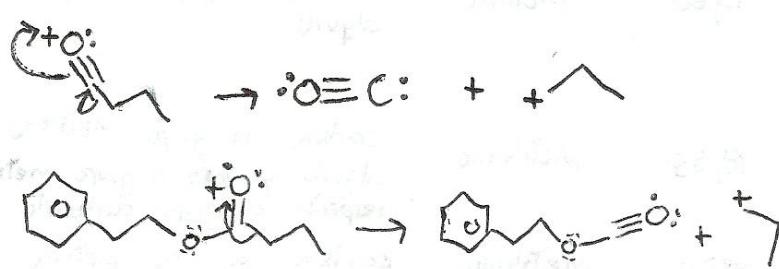
No.	δ (ppm)	Tipo de Palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	28,71	métlico	Carbonos de grupo metilo en Terbutilo unido a grupo fenoxi	
2.	79,85	cuaternario	carbono cuaternario de Terbutilo unido a grupo fenoxi	
3.	113,35	mátenico	carbono sp ² de alqueno monosustituido. Carbono unido a 2 hidrógenos.	
4.	113,76	mátenico	carbono sp ² en anillo aromático. Unido a hidrógeno y en posición orto al grupo Terbutoxi y meta a grupo aril	
5.	125,21	mátenicos	carbono sp ² en anillo aromático. Unido a hidrógeno y en posición orto a grupo aril y meta a grupo Terbutoxi	
6.	136,45	cuaternario	carbono sp ² en anillo aromático unido a grupo aril y para respecto a Terbutoxi	
7.	137,73	mátenico	carbono sp ² en alqueno, unido a hidrógeno y a grupo fenil	
8.	161,62	cuaternario	carbono en anillo aromático unido a oxígeno	

Ejercicio 7. Espectro: IR (butírito de fenetilo)

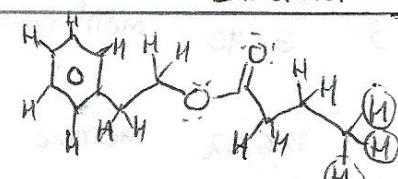
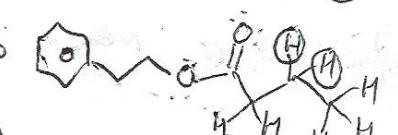
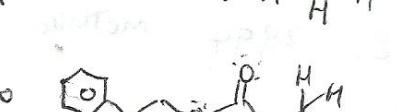
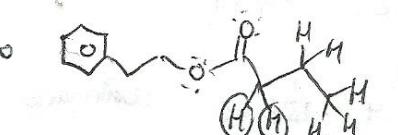
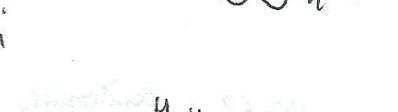
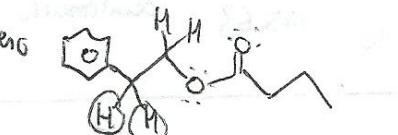
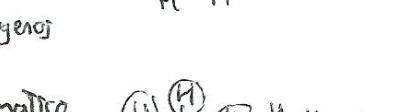
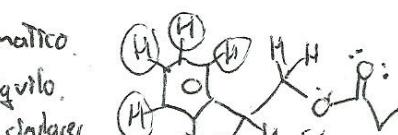
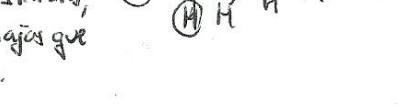
R: CRI	Asignación posible Palabras	Estructura	Asignación definitiva Palabras	Estructura
3080 3060 3070	estiramientos $\equiv\text{C-H}$ en carbonos sp^2		estiramiento $\equiv\text{C-H}$ en aromaticos	
2970 2930 2880	estiramientos carbono-hidrógeno en carbonos sp^3 de sistema alifático		estiramiento C-H en metilo y metilenos de la molécula	
1740	estiramiento carbono doble enlace oxígeno en grupo ester		estiramiento C=O en grupo ester alifático	
1600	estiramiento carbono doble en lote carbono en sistema aromático		estiramiento C=C en aromático	
1460	flexión en el plano H-C-H de grupos metilo o metileno (flexión asimétrica)		flexión asimétrica H-C-H en metilo terminal	
1410 1390	flexión simétrica (de Nijera) en el plano H-C-H de grupos metilo		flexión de Nijera en los grupos metileno	
1270 1070	dos bandas bastante intensas asociadas a estiramientos C-O en ester		estiramiento C=O en ester alifático, no conjugado	
740 690	dos bandas. Flexiones fuera del plano de C=C-R en benceno Monosustituido		flexión fuera del plano de C=C-R en benceno monosustituido	

Ejercicio 7. Espectro: EM (butírito de fenetilo)

No.	m/z	Paridad Masa	Carga	Tipo pro	Ecuación
1.	104	par	+.	Principio	
2.	105	ímpar	+	res fragmento	
3.	106	par	$+ \cdot$ y $(M-2)$	abundancia Isotópica	<p>Completo: $100 \cdot \frac{8[M+2]}{\%[M]} = \frac{(1,1\text{C})^2}{200} + 0,20$</p> $100 \cdot \frac{10\%}{100\%} = \frac{(1,1\text{C})^2}{200} + 0,20$ $1,0\% 94 \rightarrow \text{le le suma la contribución}$ $\text{de } [M+1] \Rightarrow 1050,91$

No.	m/z	Punto de Masa	Carga	Tipo pico	Ecuación
4.	71	Impar	+	ión fragmento	
5.	43	Impar	+	ión fragmento	

Ejercicio 7: Espectro: RMN ^2H (butirato de fenetilo)

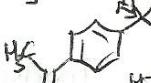
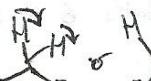
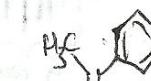
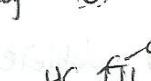
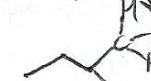
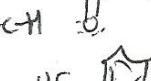
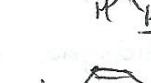
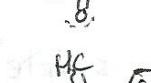
No.	δ (ppm)	Multiplicidad Determinación	J : Hz	Integral	En palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	0,94	Triplete	7,3	3	hidrógenos en grupo metilo unido a grupo alquilo. Acoplados con 2 hidrógenos a 3 enlaces.		
2.	1,64	Cuarteto de Triplete	$J_1 = 7,3$ $J_2 = 7,27$	2	hidrógenos en grupo metílico unido a grupos alquilo. Acoplado con 5 hidrógenos a 3 enlaces.		
3.	2,31	Triplete	7,27	2	hidrógenos en grupo metílico unido a grupo alquilo y a un grupo carbonilo (de éster). Acoplado con 2 hidrógenos a 3 enlaces.		
4.	2,99	Triplete	7,0	2	hidrógenos en grupo metílico unido a grupo fenilo y a grupo alquilo. Acoplados con dos hidrógenos a 3 uniones.		
5.	4,19	Triplete	7,0	2	hidrógenos en grupo metílico unido a grupo alquilo y a grupo carboxilato (butirato en este caso). Acoplado con 2 hidrógenos a 3 enlaces.		
6.	7,20	Triplete	16,0	5	hidrógenos en anillo aromático monosustituido por grupo alquilo. Resultan ser químicamente muy similares, con constantes de acoplamiento bajas que no se resuelven en el espectro.		

Ejercicio 7.

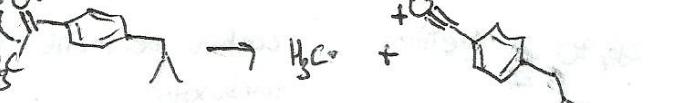
Espectro: RMN ^{13}C (butilato de fenetilo)

No.	δ (ppm)	Tipo de C	Palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	13,68	metílico		carbono de grupo metil unido a grupo alquilo	
2.	18,55	metilenico		carbono en grupo metileno unido a grupo alquilo y unido a grupo metileno que es a respecto a grupo carbonilo	
3.	~33,0	metilenico		carbono en grupo metileno unido a grupo fenilo y grupo alquilo	
4.	36,43	metilenico		carbono en grupo metileno unido a grupo carbonilo y a grupo alquilo	
5.	62,90	metilenico		carbono de grupo metileno unido a oxígeno y a grupo alquilo	
6.	126,22	metínico		carbono en anillo aromático unido a hidrógeno, en parádo, para respecto a grupo alquilo (anillo monosustituido)	
7.	128,40	metínico		carbono en anillo aromático monosustituido en parádó para respecto a grupo alquilo	
8.	128,94	metínico		carbono en anillo aromático monosustituido en parádó otro respecto a grupo alquilo	
9.	138,90	cuaternario		carbono cuaternario en anillo aromático monosustituido por grupo alquilo.	
10.	173,63	cuaternario	Carbono carbonílico en fundo éster.	Carbono carbonílico en fundo éster.	

Ejercicio No. 8 Espectro: IR (4'-Isobutilacetofenona)

ν : cm ⁻¹	Asignación parcial Palabras	Estructura	Asignación definitiva Palabras	Estructura
3010 3025	estiramientos carbono-hidrógeno en carbonos sp^2		estiramiento =C-H en aromático	
2950 2920 2880	estiramientos de carbono-hidrógeno en sistema alifático		estiramientos C-H en sistema alifático	
1680	estiramiento carbono doble sobre oxígeno en cadena alifática o conjugada		estiramiento C=O en metil-fenil cetona	
1460 1430	flexión en el plano H-C-H de metilo o metilenos (flexión asimétrica)		flexión en el plano de H-C-H de metilos y metilenos (flexión asimétrica)	
1600	estiramiento de enlaces C=C en sistema aromático		estiramiento C=C en aromático	
1380 1364	dos bandas, más intensa en 1364, flexión en el plano de H-C-H en dimetilo geminal		flexión en el plano H-C-H en dimetilo geminal	
780	flexión fuera del plano de C=C-R en benceno disustituido en para		flexión fuera del plano en benceno disustituido en para	

Ejercicio N°. 8 Espectro; EM (4-nitrobutilacetofenona)

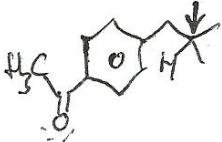
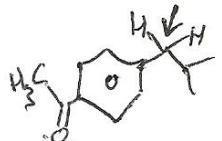
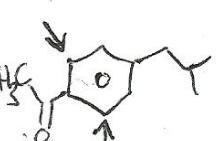
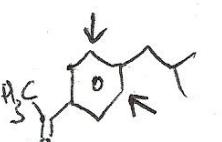
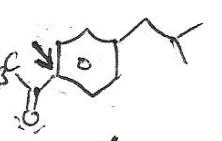
No.	m/z	Paridad Masa	Carga	Tipo pico	Ecuación
1.	177	ímpar	+	abundancia Isótopica	Complejo: $100 \cdot \frac{\% (M+1)}{\% (M)} = 1,16 \cdot 0,85\% = 1,1 \cdot 1,2 \quad 13,5 \approx 13,2$
2.	176	par	+	ión molecular	
3.	161	ímpar	+	pico padre	
4.	43	ímpar	+	ión fragmento	

Ejercicio N° 8 Espectro RMN ^1H ($4'$ -isobutilacetofenona)

No.	δ (ppm)	Multipletos Denominación	J : Hz	Integral	Asignación definitiva En palabras	Estructura
1.	0,935	doblete	6,78	6	hidrógenos en dimetilo geminal, acoplados con 1 hidrógeno a 3 uniones	
2.	1,91	Triplete de multiplete de 7	$J_1 = 6,78$ $J_2 = 6,0$	1	hidrógeno en carbono metínico unido a dos metilos y a grupo alquilo. Acoplado con 8 hidrógenos a 3 uniones, de los cuales 6 acoplan con J_1 y 2 con J_2	
3.	2,995	doblete	6,0	2	hidrógenos en carbono metilénico en sistema $\text{Z}-\text{CH}_2-\text{Y}$ donde $\text{Y} = \text{grupo alquilo}$ y $\text{Z} = \text{grupo fenilo}$. Acoplado a 3 uniones con 1 hidrógeno	
4.	7,58	singlete		3	hidrógenos en metilo unido a grupo carbonilo	
5.	7,25	doblete	8,0	2	hidrógenos en anillo aromático sobre carbono en posición orto a grupo alquilo y meta a grupo carboxilo	
6.	7,83	doblete	8,0	2	hidrógenos en anillo aromático para sustituido, sobre carbono en posición orto a grupo carboxilo y para a grupo alquilo	

Ejercicio N° 8 Espectro RMN ^{13}C ($4'$ -isobutilacetofenona)

No.	δ (ppm)	Tipo de C	Palabras	Asignación definitiva	Estructura
1.	22,32	métílico	Carbono de grupo metilo en grupo isobutilo (carbonos metílicos geminales)		
2.	26,90	Métílico	Carbono de metilo unido a grupo carboxilo		

No.	δ (ppm)	Tipo de C	Palabras	Asignación definitiva	Estructura
3.	39,13	metínico		Carbono metínico unido a grupos: metilo, metilo y alquilo.	
4.	45,03	metílenico		Carbono metílico en sistema $\text{---CH}_2\text{---Y}$ donde Y = isopropil y --- grupo fenilo	
5.	128,04	metínico		Carbonos sp^2 en anillo aromático unidos a hidrógeno. En pares, respecto a grupo carbonilo de una cetona	
6.	129,59	metínico		carbonos sp^2 en anillo aromático unidos a hidrógeno (carbonos metínicos). En pares, uno a grupo alquilo y meta a grupo carboxilo	
7.	134,80	cuaternario		carbono cuaternario en anillo aromático disustituido en para, unido a grupo carboxilo	
8.	141,11	cuaternario		carbono cuaternario en anillo aromático disustituido en para, unido a grupo alquilo	
9.	197,80	cuaternario		carbono carbonílico en cetona aromática (metil-ari-cetona)	