

# DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

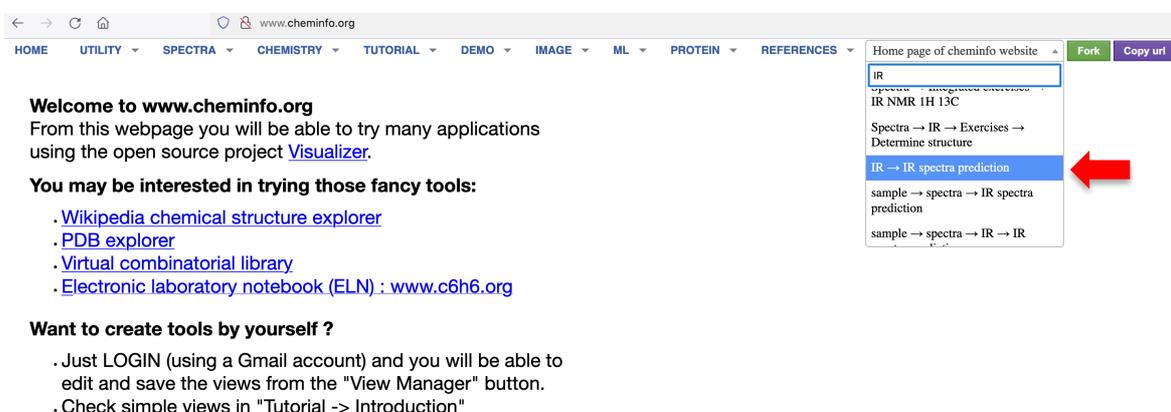
## Tutorial sobre [Cheminfo.org](https://www.cheminfo.org). IR predictions

<https://www.cheminfo.org>

José Antonio García López

La página [www.Cheminfo.org](http://www.Cheminfo.org) contiene distintas herramientas sobre varias técnicas útiles en química como RMN, IR, difracción de rayos X, espectrometría de masas, etc. En este tutorial nos vamos a centrar en la predicción de espectros IR para moléculas que nos interesen.

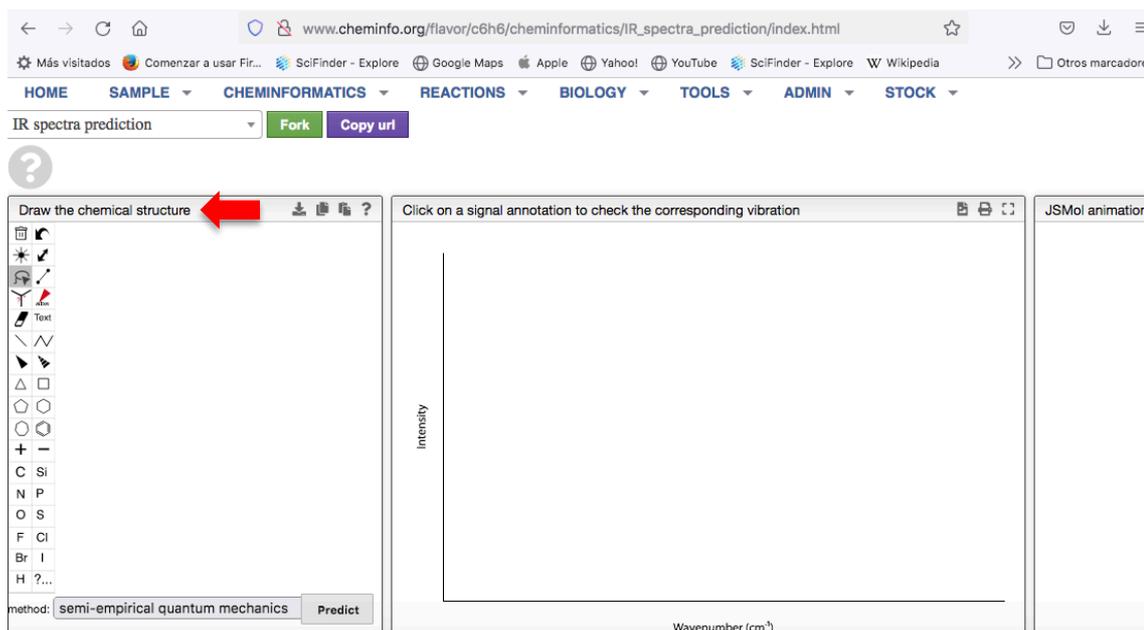
1. Abrimos la página de Cheminfo.org y en el buscador tecleamos IR. Se despliega un menú de opciones. Seleccionamos "**IR→IR spectra prediction**".



The screenshot shows the Cheminfo.org homepage with a search bar containing 'IR'. A dropdown menu is open, listing several options. The option 'IR → IR spectra prediction' is highlighted in blue, and a red arrow points to it from the right. Other options in the menu include 'IR NMR 1H 13C', 'Spectra → IR → Exercises → Determine structure', 'sample → spectra → IR spectra prediction', and 'sample → spectra → IR → IR'. The page content below the search bar includes a welcome message, a list of tools (Wikipedia chemical structure explorer, PDB explorer, Virtual combinatorial library, Electronic laboratory notebook (ELN)), and a section for creating tools by yourself.

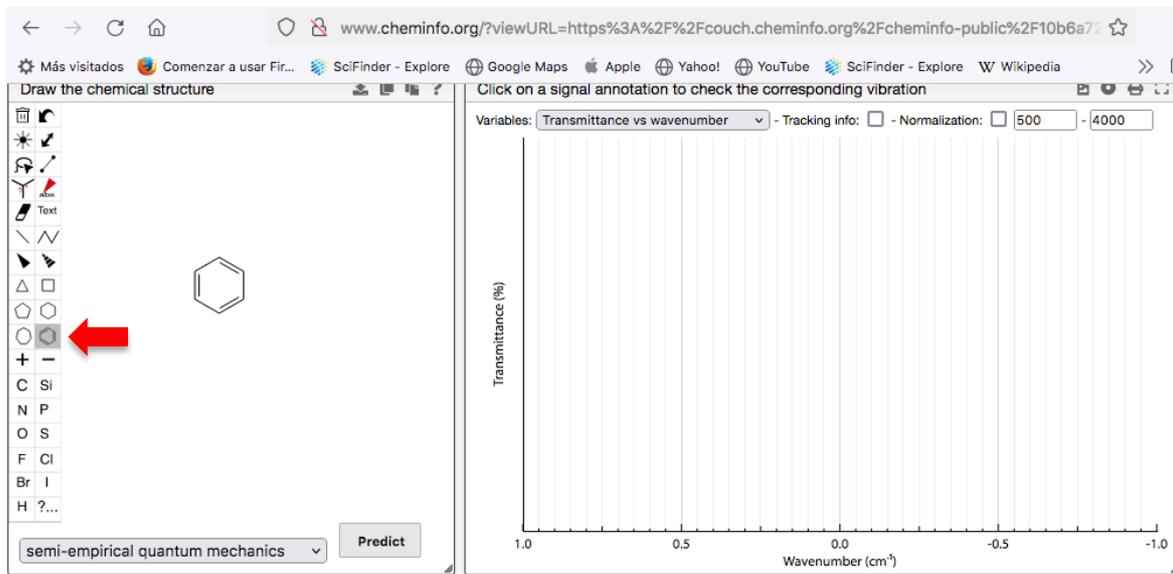


2. Aparece una nueva pantalla con un cuadro en la parte superior izquierda que indica "**Draw the chemical structure**". Utilizando los iconos de la izquierda del cuadro podemos dibujar la estructura de la molécula que nos interese.



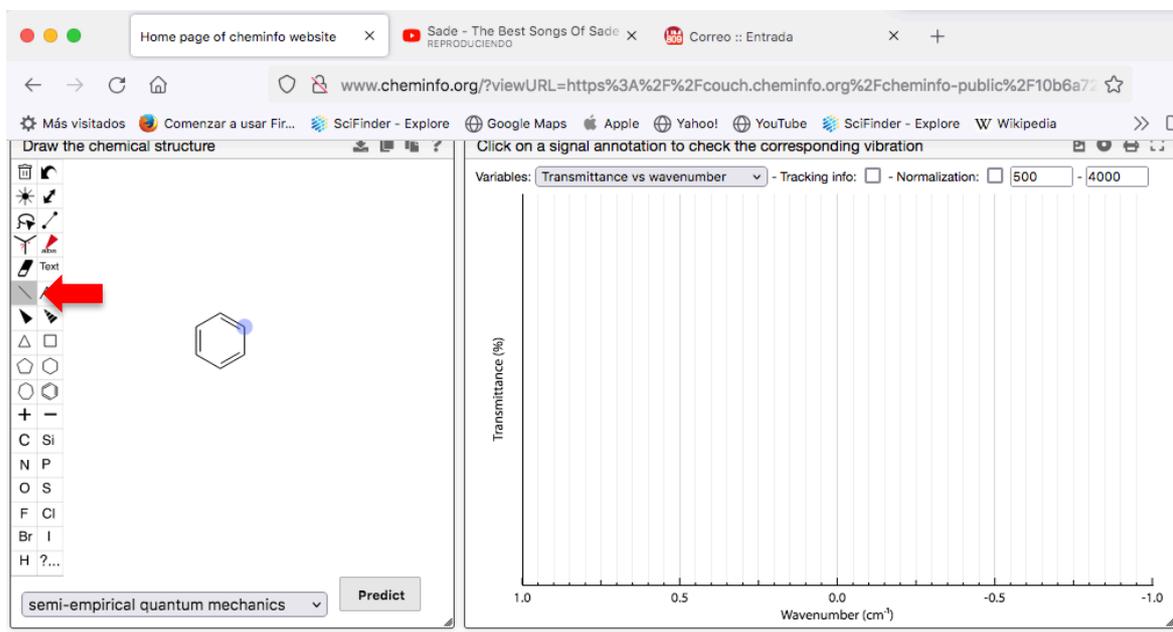
The screenshot shows the IR spectra prediction tool interface. The browser address bar is [www.cheminfo.org/flavor/c6h6/cheminformatics/IR\\_spectra\\_prediction/index.html](http://www.cheminfo.org/flavor/c6h6/cheminformatics/IR_spectra_prediction/index.html). The page has a navigation menu with options like HOME, SAMPLE, CHEMINFORMATICS, REACTIONS, BIOLOGY, TOOLS, ADMIN, and STOCK. Below the menu, there is a search bar with 'IR spectra prediction' and buttons for 'Fork' and 'Copy url'. The main content area is divided into three panels. The left panel is titled 'Draw the chemical structure' and contains a toolbar with various drawing tools and a list of elements (C, Si, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, H, ?...). A red arrow points to the 'Draw the chemical structure' title. The middle panel is titled 'Click on a signal annotation to check the corresponding vibration' and shows a plot of Intensity vs. Wavenumber (cm<sup>-1</sup>). The right panel is titled 'JSMol animation'. At the bottom of the left panel, there is a 'method: semi-empirical quantum mechanics' and a 'Predict' button.

3. Para dibujar la molécula seleccionamos el icono que nos interese, por ejemplo, un anillo de benceno. Al hacer clic en el cuadro se dibujará el elemento que hayamos seleccionado, en este caso aparece el anillo aromático.

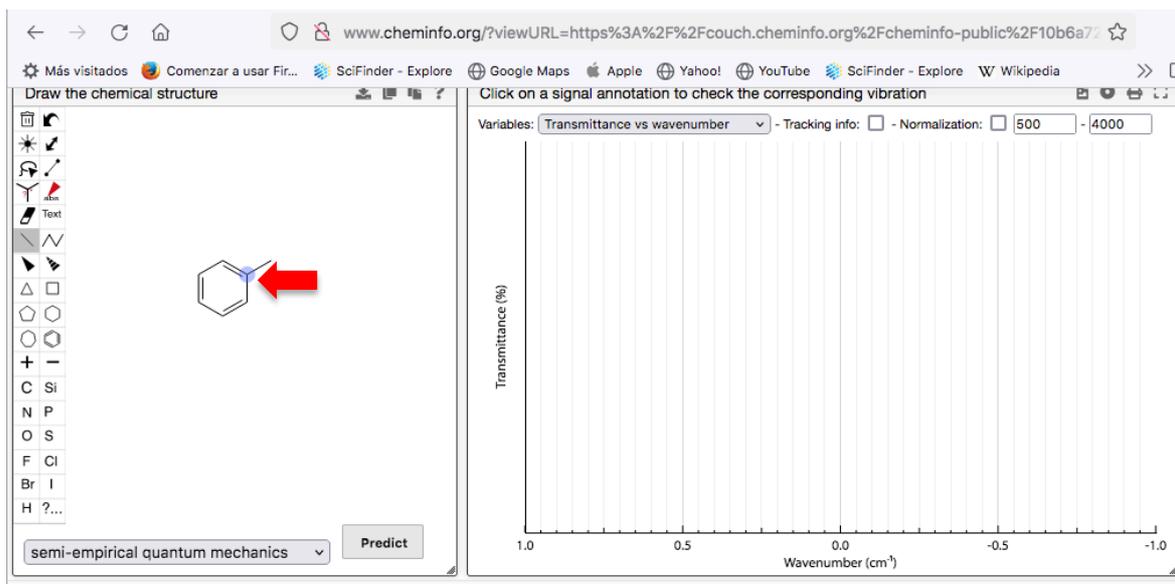


The screenshot shows the Cheminfo web application interface. On the left, the 'Draw the chemical structure' panel contains a toolbar with various drawing tools. A red arrow points to the benzene ring icon in the toolbar. The central workspace displays a benzene ring structure. Below the workspace is a 'Predict' button and a dropdown menu set to 'semi-empirical quantum mechanics'. On the right, the 'Click on a signal annotation to check the corresponding vibration' panel shows a plot of Transmittance (%) versus Wavenumber (cm<sup>-1</sup>). The plot is currently empty, with the x-axis ranging from 1.0 to -1.0 and the y-axis from 0 to 100. The plot title is 'Transmittance vs wavenumber' and it includes options for 'Tracking info' and 'Normalization'.

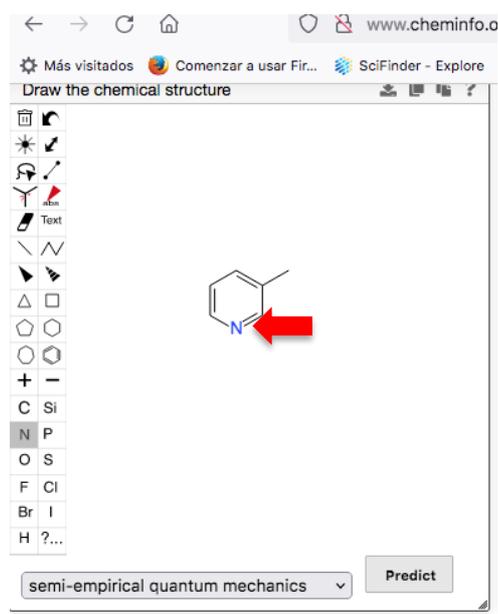
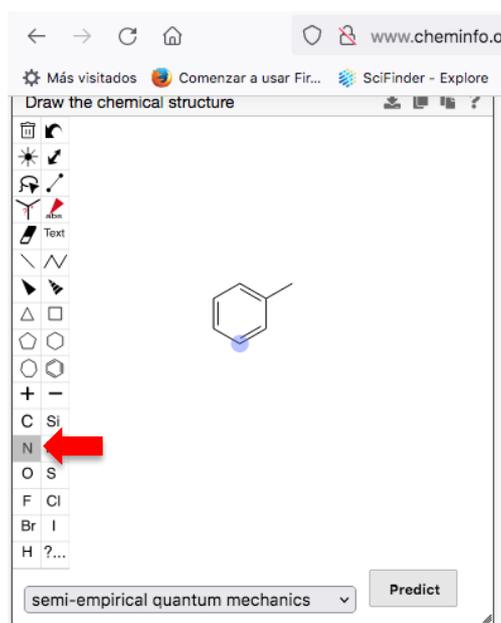
4. Para ir dibujando las uniones entre átomos, seleccionamos el icono de enlace sencillo y colocamos el cursor sobre el átomo que queremos enlazar. Aparecerá un círculo sombreado. Al hacer clic, se dibujará el enlace. Con la herramienta "borrador" podemos corregir errores o modificar la estructura.



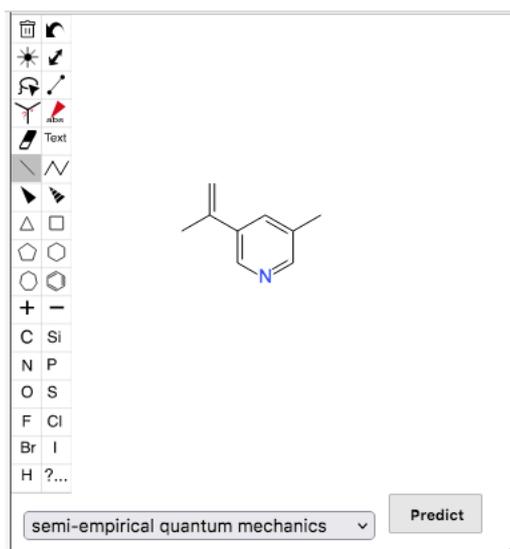
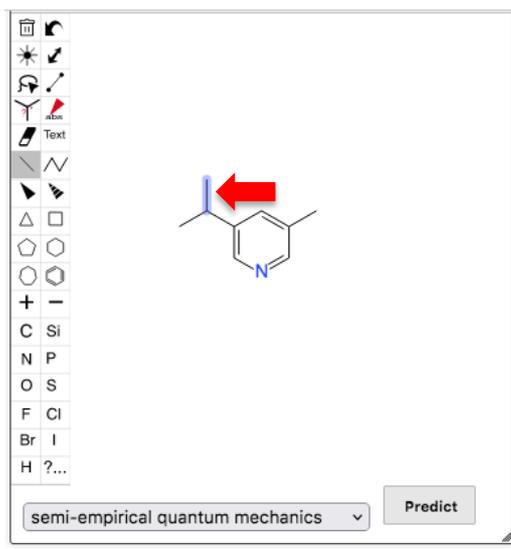
This screenshot shows the same Cheminfo interface as the previous one, but with a single bond tool selected in the toolbar, indicated by a red arrow. The benzene ring structure in the workspace now has a blue shaded circle on one of its carbon atoms, indicating that the tool is ready to be used to add a bond to that atom. The IR spectrum plot on the right remains empty.



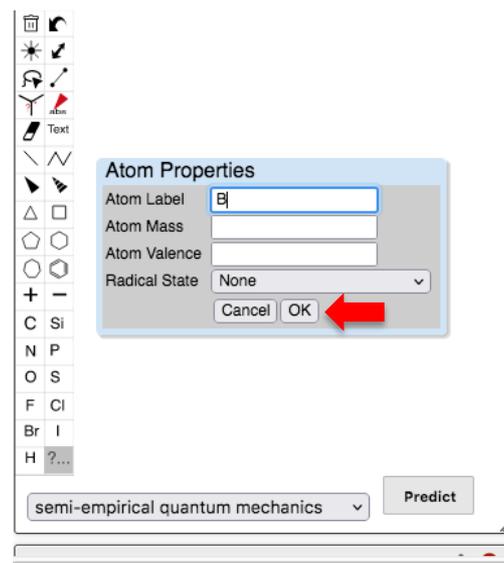
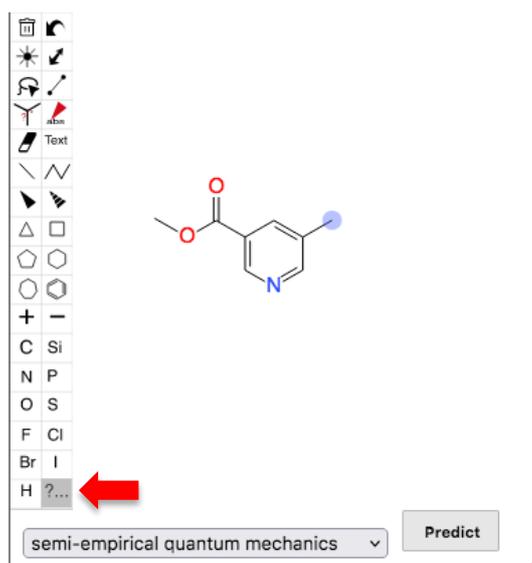
- Para introducir átomos distintos al carbono, seleccionaremos en primer lugar el átomo que deseamos dibujar. De nuevo, al colocarnos sobre uno de los átomos ya existentes en la estructura dibujada, aparecerá un círculo sombreado. Al clicar se reemplazará el átomo de carbono por el heteroátomo que hayamos seleccionado.



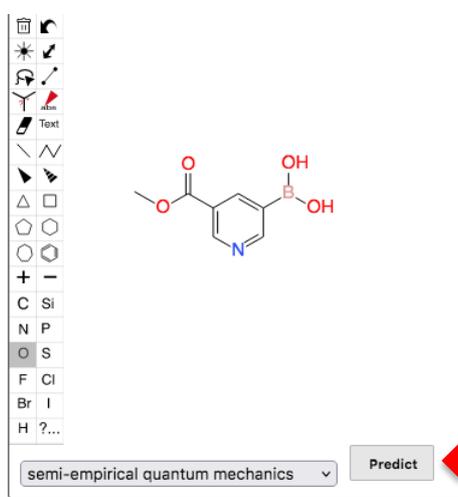
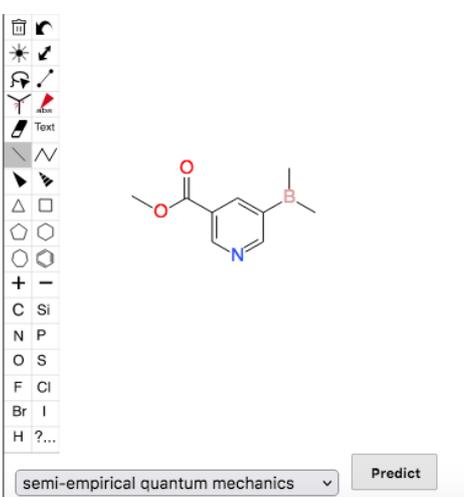
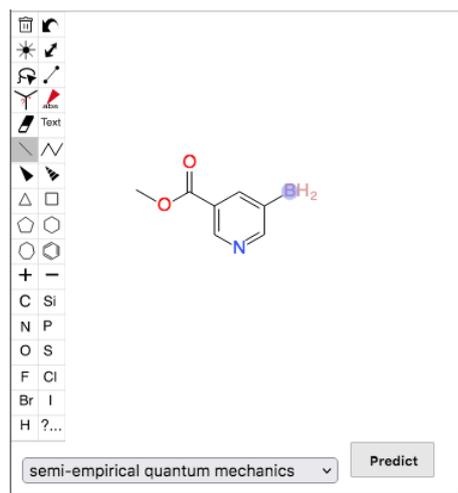
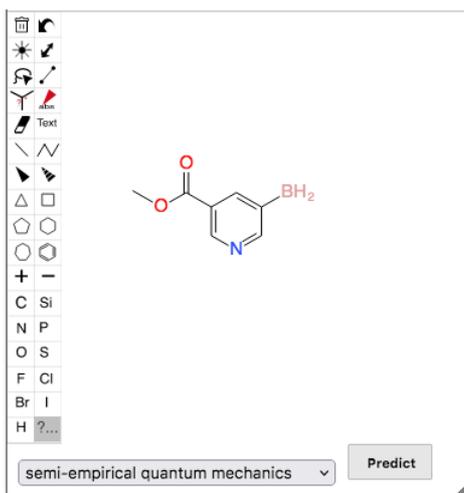
- Para dibujar dobles o triples enlaces nos colocamos sobre el enlace hasta que aparezca sombreado, con el icono de enlace sencillo previamente seleccionado. Al hacer clic se irán añadiendo (uno o dos enlaces adicionales) para formar el enlace doble o triple.



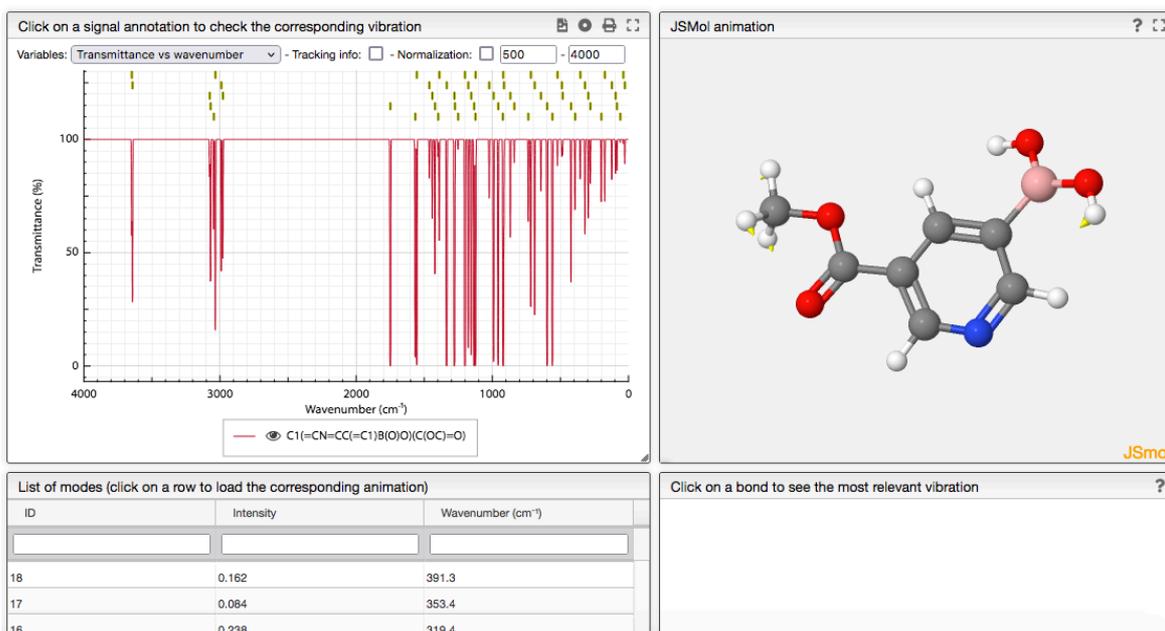
7. Para introducir elementos que no aparecen directamente en el menú de la izquierda del panel, pinchamos en el icono de interrogación. Al pinchar en el átomo que queremos reemplazar, se abre una ventana en la que indicaremos el símbolo del elemento que queremos dibujar en el apartado "**Atom Label**". Al darle a OK aparecerá el símbolo que hemos seleccionado.



En algunos casos, al seleccionar un elemento, el programa completa con átomos de hidrógeno la valencia del mismo. Por ejemplo, si seleccionamos N, aparecerá  $\text{NH}_2$ . En este ejemplo concreto, al seleccionar B, aparece  $\text{BH}_2$ . Si nos colocamos sobre el átomo de B, podremos sustituir los átomos de H por átomos de carbono y después éstos por otros heteroátomos. Respecto a otros elementos como por ejemplo metales, aunque se pueden seleccionar, la posterior simulación del espectro de IR no funciona correctamente, por lo que esta aplicación no es válida para compuestos de coordinación.



8. Una vez hemos dibujado la estructura de la molécula que queremos estudiar, pinchamos en **"Predict"** en la parte baja del cuadro de dibujo. En las ventanas aldañas aparece la simulación del espectro de IR. Justo debajo del espectro se encuentra la lista de bandas ordenadas por número de onda (**"List of modes"**).



Cuando pinchamos en una de las bandas en "**List of modes**", la molécula realiza el movimiento de tensión o torsión de enlaces al que corresponde dicha banda. Además, nos indica con unas flechas amarillas los átomos implicados en el modo de vibración.

9. También se puede predecir el espectro Raman de la misma molécula, o los dos simultáneamente.
10. Desde la página principal, también podemos:
  - a) Ver y procesar espectros IR en formato jcamp o text ([sample](#) → [spectra](#) → [IR](#) → [process IR](#)).
  - b) Resolver ejercicios de determinación de estructuras de compuestos desconocidos a partir de sus espectros IR ([Spectra](#) → [IR](#) → [Exercises](#) → [Determine structure](#)).
  - c) Resolver ejercicios de determinación de estructuras de compuestos desconocidos a partir de sus espectros IR y de RMN de  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$  ([Spectra](#) → [Integrated exercises](#) → [IR NMR 1H 13C](#)).
  - d) Resolver ejercicios de determinación de estructuras de compuestos desconocidos a partir de sus espectros de masas, IR y de RMN de  $^1\text{H}$  ([Spectra](#) → [Integrated exercises](#) → [IR MS NMR 1H](#)).