

Infrarotspektroskopie (IR)

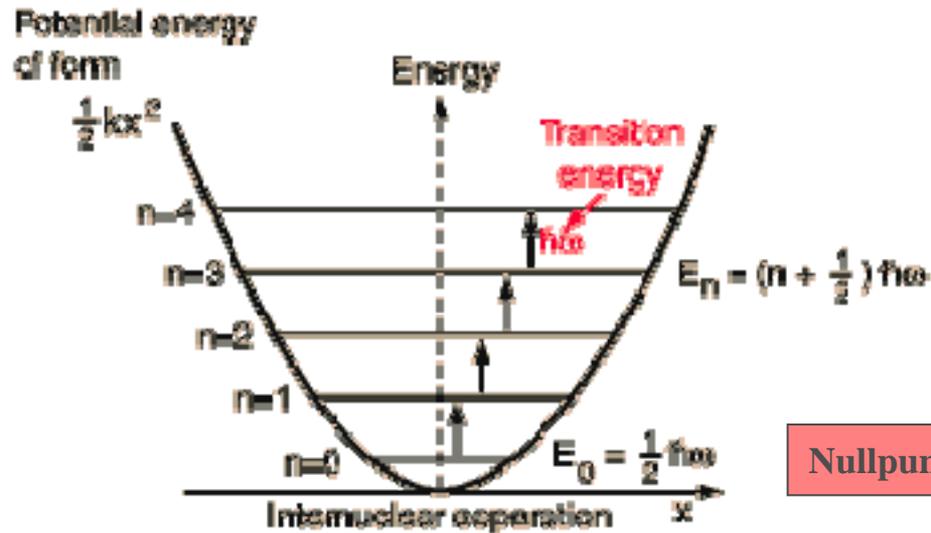
Die Infrarotspektroskopie ist eine energiesensitive Methode. Sie beruht auf den durch Molekülschwingungen bzw. Molekülrotationen hervorgerufenen Dipolmomentsänderungen und den damit verbundenen diskreten Energieüberträgen und Frequenzänderungen. Sie wird zur Charakterisierung von Verbindungen benutzt. Schwingungsspektroskopisch kann man erhalten bzw. bestimmen:

- Die Identifizierung bereits bekannter Verbindungen (Fingerprint)
- Die Komponenten einer unbekanntes Verbindung (funktionelle Gruppen)
- und damit die mögliche/voraussichtliche Struktur einer Verbindung
- Konzentrationsänderungen von Komponenten während einer Reaktion
- Bindungseigenschaften (Bindungsstärken, Kraftkonstanten)

Da sich Bindungen in Molekülen wie Federn verhalten, wird das Modell des harmonischen bzw. anharmonischen Oszillators zur Beschreibung der $3N-6$ bzw. $3N-5$ unterschiedlichen Möglichkeiten verwendet, wie ein nicht-lineares bzw. lineares Molekül aus N Atomen schwingen kann.

Diese Schwingungsmoden (Normalschwingungen) führen (bei Dipolmomentsänderung) zu Absorptionsbanden mit charakteristischen Energien /Frequenzen/ Wellenzahlen, Intensitäten und Halbwertsbreiten, die bestimmt und analysiert werden.

Schwingungsenergieniveaus in harmonischer Näherung



Nullpunktsschwingung/-energie!



$x=0$ represents the equilibrium separation between the nuclei.

Achtung: Molekülschwingungen sind meist anharmonisch

Schwingungsenergieniveaus in harmonischer/anharmonischer Näherung

$$E_{\text{VIB}} = h \nu_{\text{osc}} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad \Delta n = \pm 1$$

$$\Delta E_{\text{VIB}} = E_{n+1} - E_n = h \nu_{\text{osc}}$$

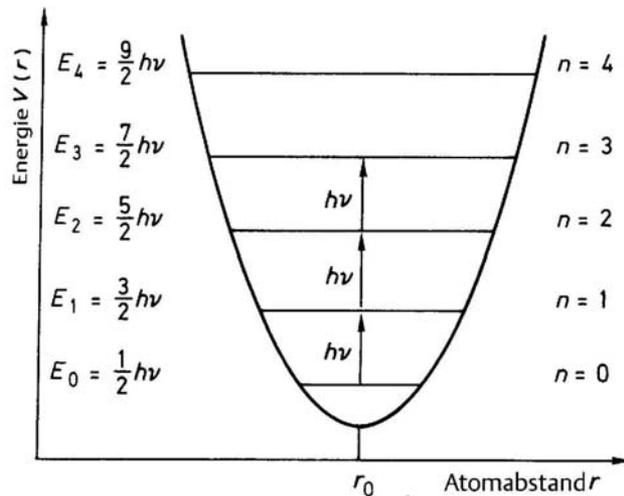
n Schwingungsquantenzahl

h Planck-Wirkungsquantum

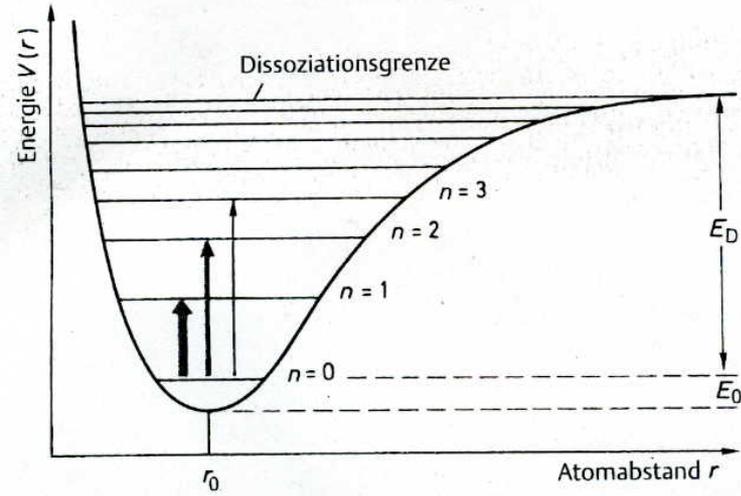
E_{VIB} Schwingungsenergie (VIB von Vibration)

$$E_{\text{VIB}} = h \nu_{\text{osc}} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{h^2 \nu^2}{4E_D} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (\Delta n = \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Bei anharmonischen Schwingungen wird der Abstand benachbarter Schwingungsniveaus mit zunehmendem n immer kleiner (Pfeildicken symbolisieren Übergangswahrscheinlichkeiten bzw. Intensitäten).



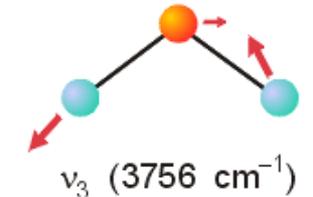
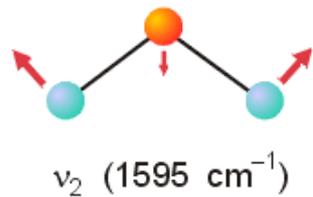
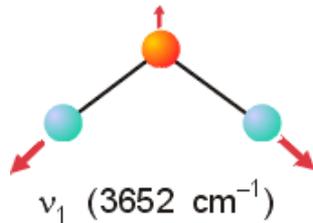
Potentialkurve des harmonischen Oszillators
(E_n : Schwingungsniveaus, E_0 : Nullpunktenergie)



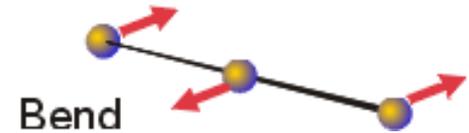
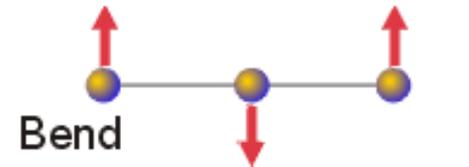
Potentialkurve des anharmonischen Oszillators
(E_0 : Nullpunktenergie, E_D : Dissoziationsenergie)

Normalschwingungen (normal modes)

$3N - 6$ Moden ($3N - 5$, wenn linear)



$$\tilde{\nu} \sim \sqrt{f / m}$$



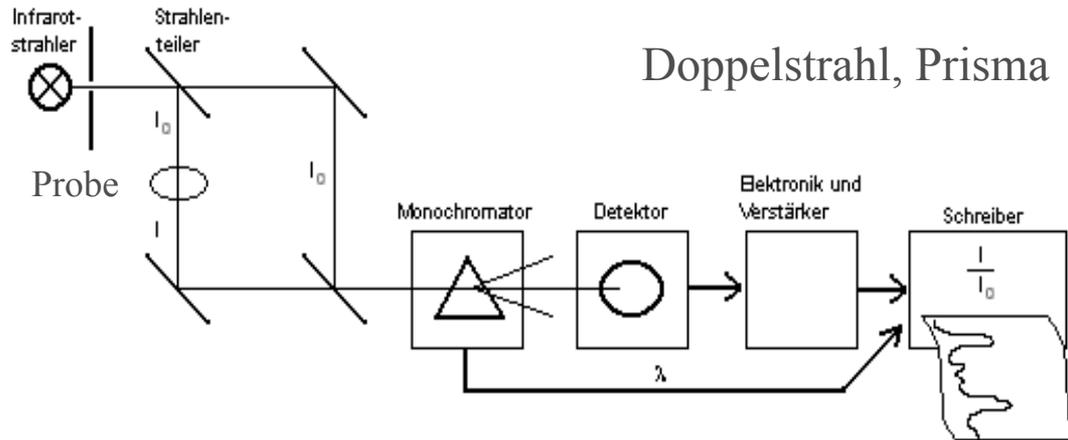
Die drei Normalschwingungen von H_2O und ihre Wellenzahlen

Die vier Normalschwingungen von CO_2 (linear)

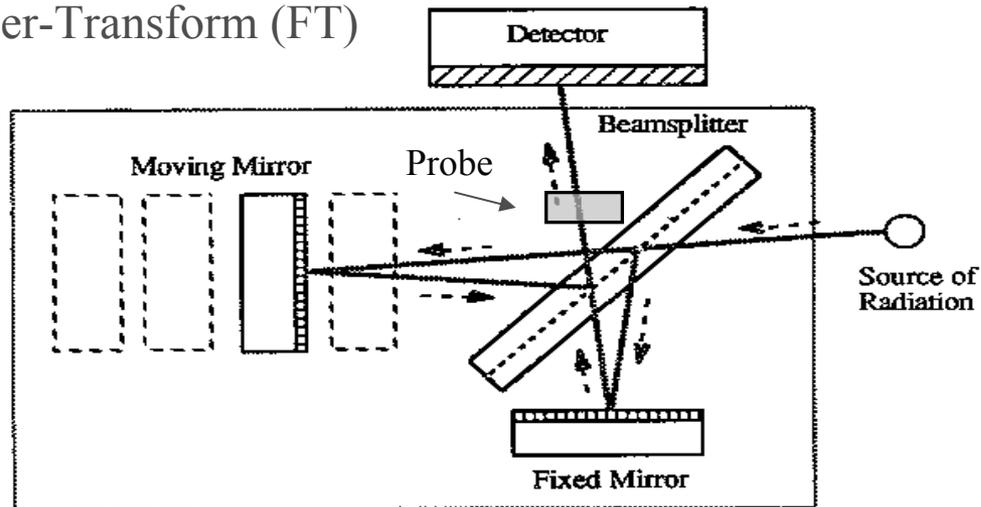
Typische Wellenzahlen von Streck- und Deformations- schwingungen (stretching and bending vibrations)

“Molekül“	stretching	bending
C - H	2800 - 3000	
N - N	3300 - 3500	
H ₂ O	3600 - 3000	1600
C = O	1700	
C = C	1600	
SO ₃ ²⁻	970 (ν _s) 930 (ν _{as})	620 (γ) 470 (δ)

IR - Spektrometer



Fourier-Transform (FT)



Beispiele

