



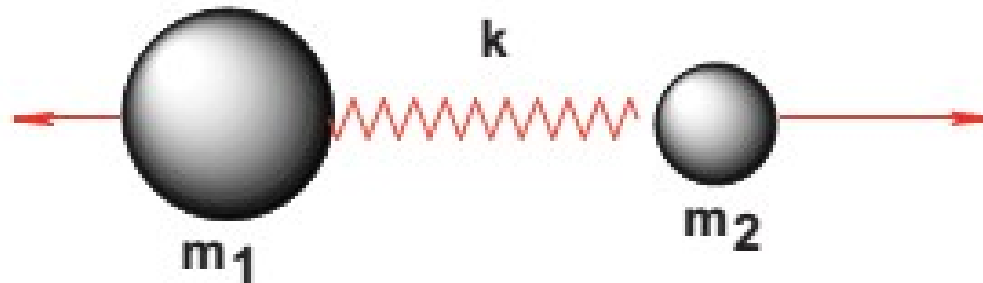
# IR Spektroskopie

## Spektroskopische Methoden

# Grundlagen

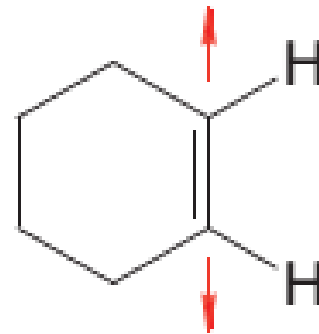
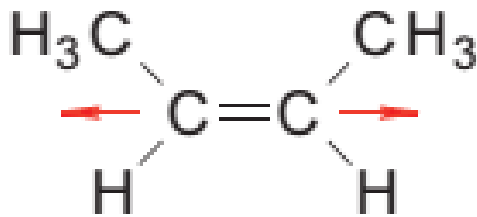
Bei Bestrahlung eines Moleküls mit infrarotem Licht kann Absorption eintreten. Hierbei werden dessen Atome zu **Schwingungen** angeregt. Da die verschiedenen Atomgruppen eines Moleküls (O–H, C=C, C=O usw.) bei einer ganz bestimmten Frequenz absorbieren, können mit Hilfe der Infrarotspektroskopie Teilstrukturen eines Moleküls erkannt werden.

Die Atome eines *zweiatomigen* Moleküls können gegeneinander schwingen, ähnlich wie es mit zwei durch eine Schraubenfeder verbundenen Kugeln bei kurzzeitiger Dehnung dieser Feder geschieht.



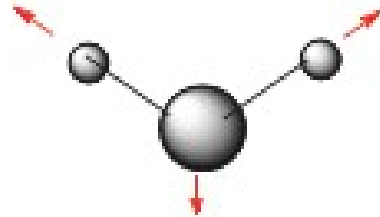
- Auch in einem **mehratomigen Molekül** lassen sich viele Schwingungen als Schwingungen zweier Atome beschreiben.
- Man unterscheidet **zwei Arten** von Molekülschwingungen: die *Streckschwingung* (Zeichen:  $\nu$ ) und die *Deformationsschwingung* (Zeichen:  $\delta$ ).

**Streckschwingung einer Doppelbindung:**

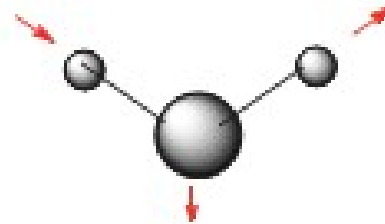


Wellenzahl von ca.  $1650 \text{ cm}^{-1}$

symmetrisch:

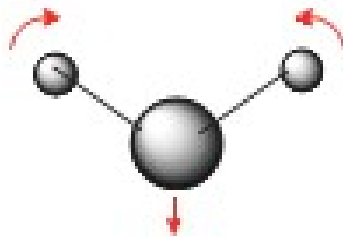


asymmetrisch:

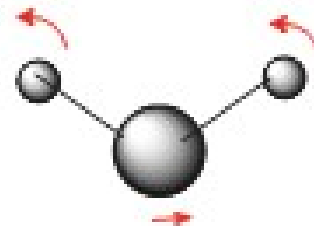


**Streck**schwingungen  $\nu$

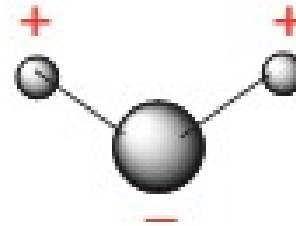
Spreizschw.



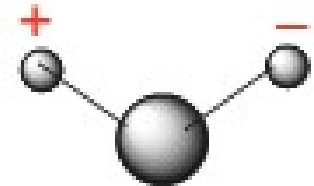
Pendelschw.



Kippschw.



Torsionsschw.



**Deformations**schwingungen  $\delta$

## Sehr wichtig:

Statt der Schwingungsfrequenzen werden in der IR-Spektroskopie die sogenannten *Wellenzahlen*  $1/\lambda = \nu/c$  verwendet. Die **Wellenzahl** gibt die Anzahl der Wellen pro 1 cm an; die Dimensionen der Wellenzahl beträgt  $\text{cm}^{-1}$ .

# Interpretation von IR-Spektren

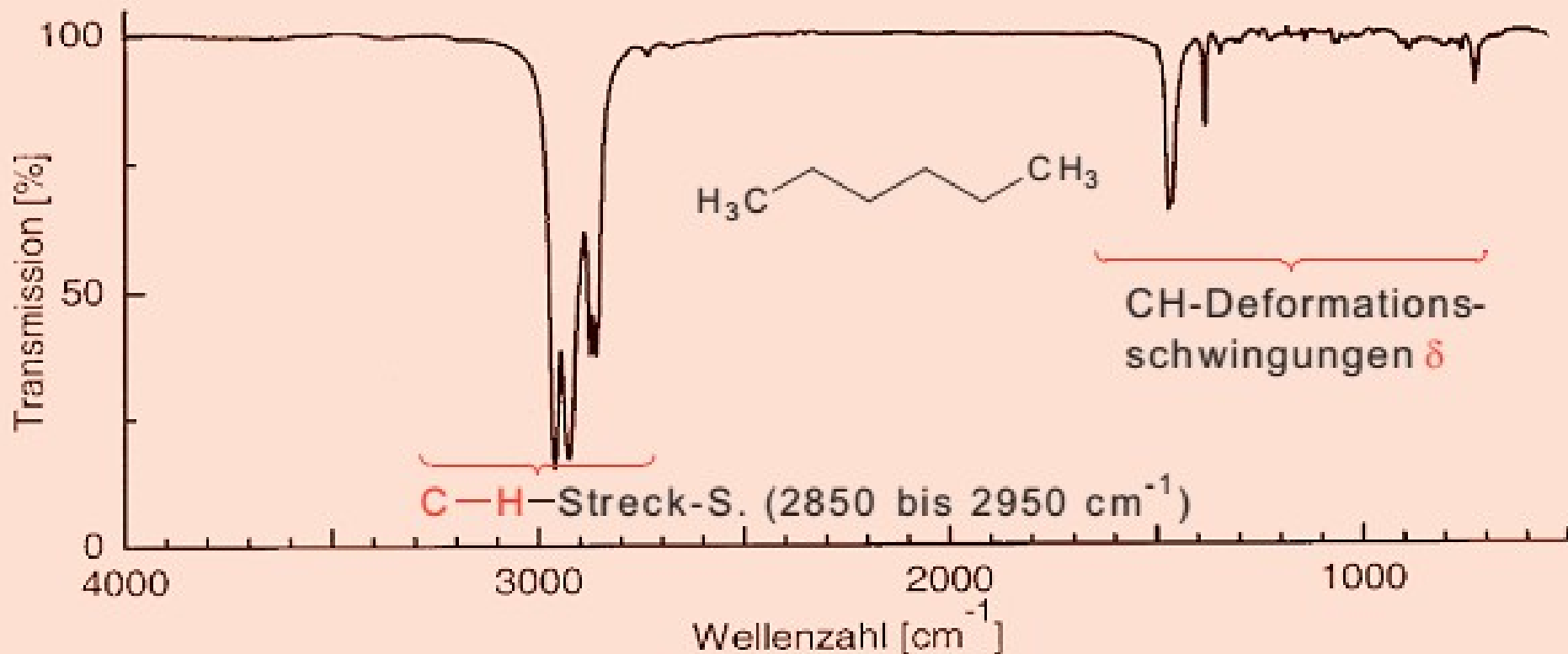
Die meisten IR-Spektren bestehen aus vielen Absorptionsbanden. Das Infrarotspektrum (IR-Spektrum) ist in der Regel ein Diagramm **mit der Wellenzahl als Abszisse** und **der Transmission (Durchlässigkeit) als Ordinate**. Die Transmission ist das Verhältnis  $I/I_0$  ( $I_0$  = Intensität des Lichtstrahls vor der Messprobe,  $I$  = Intensität danach). Oft wird die Transmission  $T$  auch in % angegeben:  $T = 100 I/I_0$ .

In der Tabelle sind die IR-Banden wichtiger Molekülfragmente angegeben. Die **Wellenzahlen** liegen um so höher, je kleiner die Massen der beteiligten Atome sind (vgl. C–C mit C–H) und je stärker die Bindung und damit die Kraftkonstante ist (vgl. C–C, C=C und C≡C).

### Tabelle. Streckschwingungen wichtiger Molekülfragmente

Molekülfragment	IR-Bande in $\text{cm}^{-1}$
C–C, C–N, C–O	800 - 1300
C=C, C=N, C=O	1500 - 1800
C≡C, C≡N	2000 - 2300
C–H, N–H, O–H	2850 - 3600

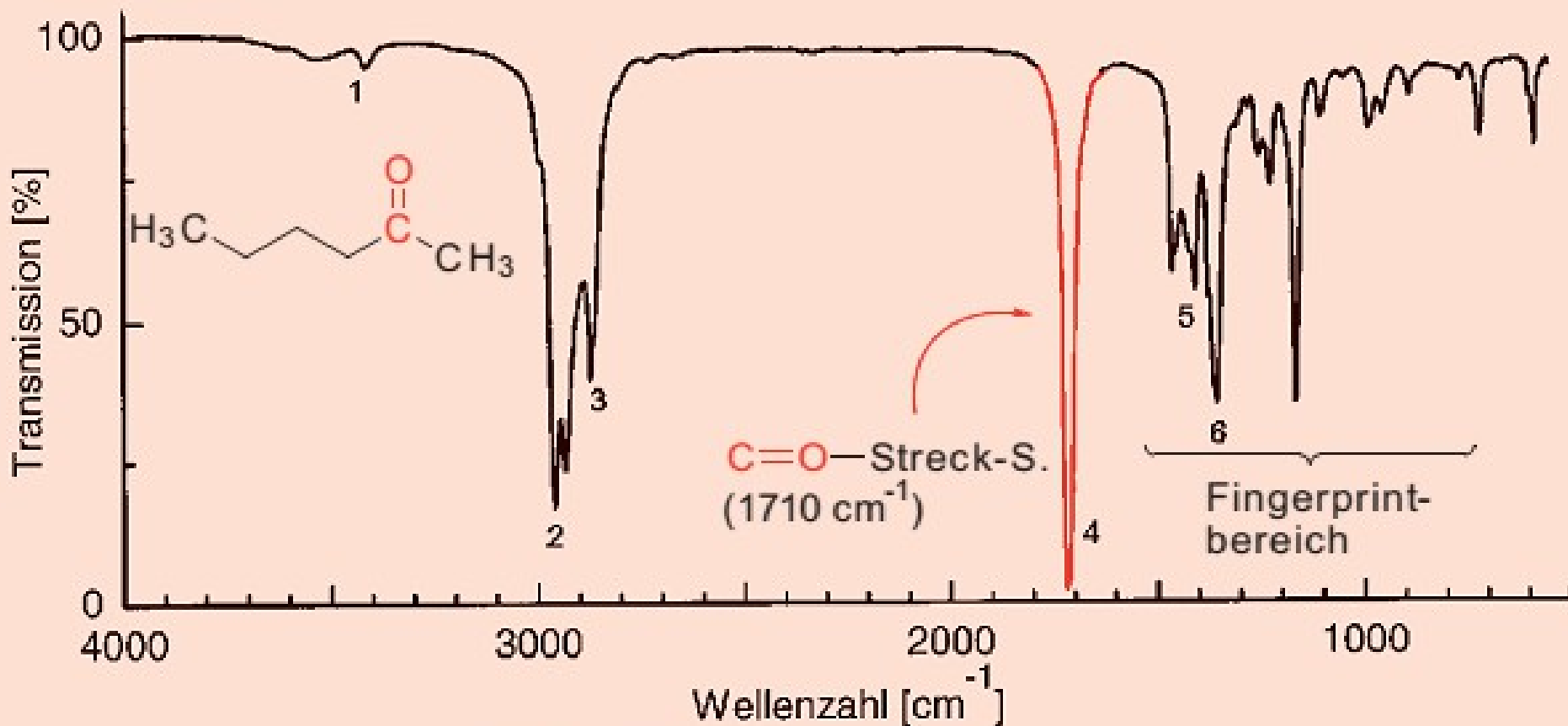
Die beiden Banden um  $2900\text{ cm}^{-1}$ : C-H-Streckschwingungen;  
die drei Banden zwischen  $700$  und  $1450\text{ cm}^{-1}$ :  
Deformationsschwingungen der  $\text{CH}_2$ - bzw.  $\text{CH}_3$ -Gruppen.



IR-Spektrum von Hexan



Im IR-Spektrum des Ketons 2-Hexanon fällt eine starke Bande bei  $1710\text{ cm}^{-1}$  auf. Sie ist charakteristisch für **Ketone** und beruht auf der **Streckschwingung**  $\nu_{\text{C=O}}$ .

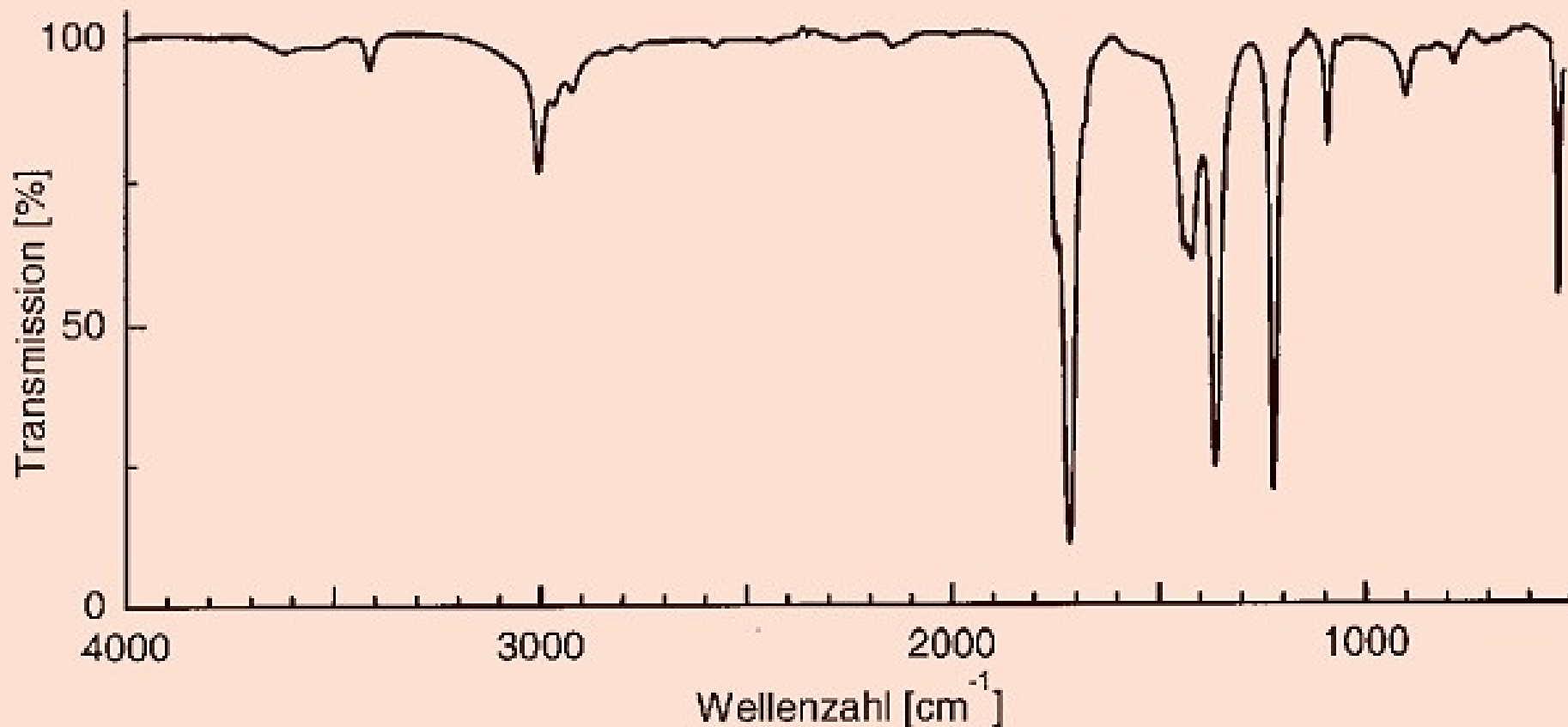


IR-Spektrum von 2-Hexanon

## Augabe:

Auf welche funktionelle Gruppe weist das folgende

IR-Spektrum?



Antwort:

Eine Carbonylgruppe bei  $1710\text{ cm}^{-1}$ .  
Dies ist das Spektrum des Acetons.

= ENDE =