

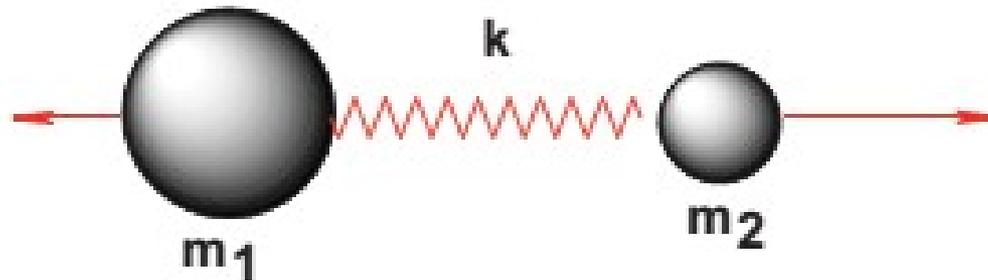
IR Spektroskopie

Spektroskopische Methoden

Grundlagen

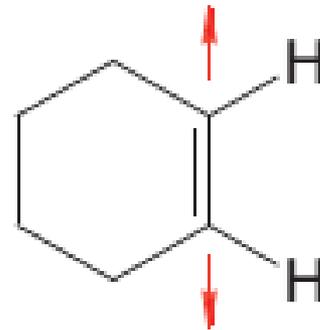
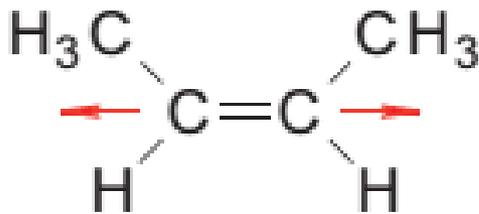
Bei Bestrahlung eines Moleküls mit infrarotem Licht kann Absorption eintreten. Hierbei werden dessen Atome zu **Schwingungen** angeregt. Da die verschiedenen Atomgruppen eines Moleküls (O–H, C=C, C=O usw.) bei einer ganz bestimmten Frequenz absorbieren, können mit Hilfe der Infrarotspektroskopie Teilstrukturen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



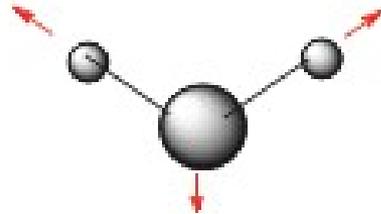
- Auch in einem **mehratomigen Molekül** lassen sich viele Schwingungen als Schwingungen zweier Atome beschreiben.
- Man unterscheidet **zwei Arten** von Molekülschwingungen: die *Streckschwingung* (Zeichen: **v**) und die *Deformationsschwingung* (Zeichen: **δ**).

Streckschwingung einer Doppelbindung:

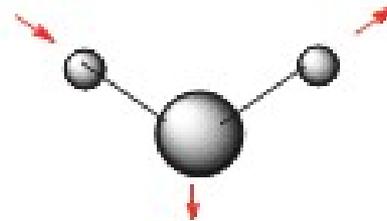


Wellenzahl von ca. 1650 cm^{-1}

symmetrisch:

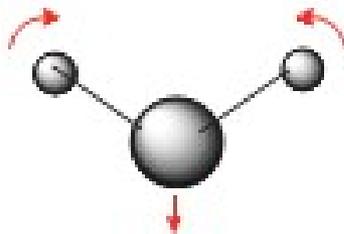


asymmetrisch:

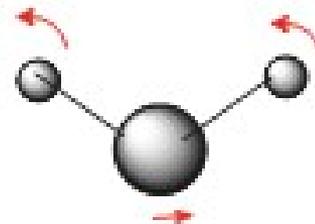


Streckschwingungen ν

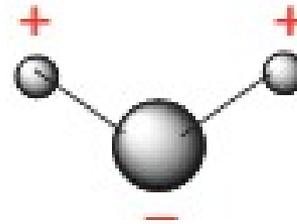
Spreizschw.



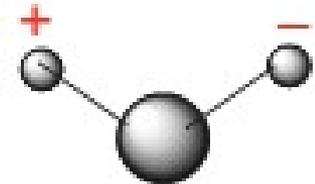
Pendelschw.



Kippschw.



Torsionsschw.



Deformationsschwingungen δ

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 cm^{-1} .

Interpretation von IR-Spektren

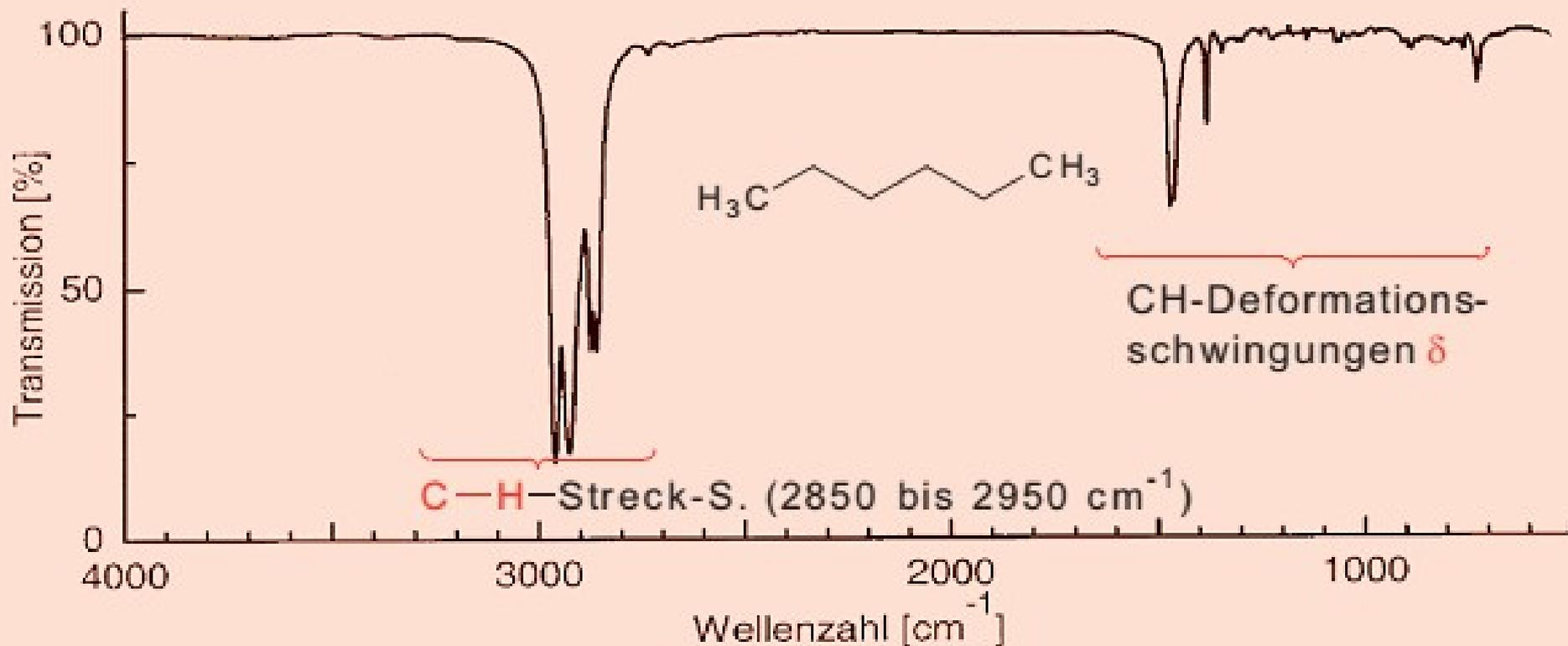
Die meisten IR-Spektren bestehen aus vielen Absorptionsbanden. Das Infrarotspektrum (IR-Spektrum) ist in der Regel ein Diagramm **mit der Wellenzahl als Abszisse** und **der Transmission (Durchlässigkeit) als Ordinate**. Die Transmission ist das Verhältnis I/I_0 (I_0 = Intensität des Lichtstrahls vor 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

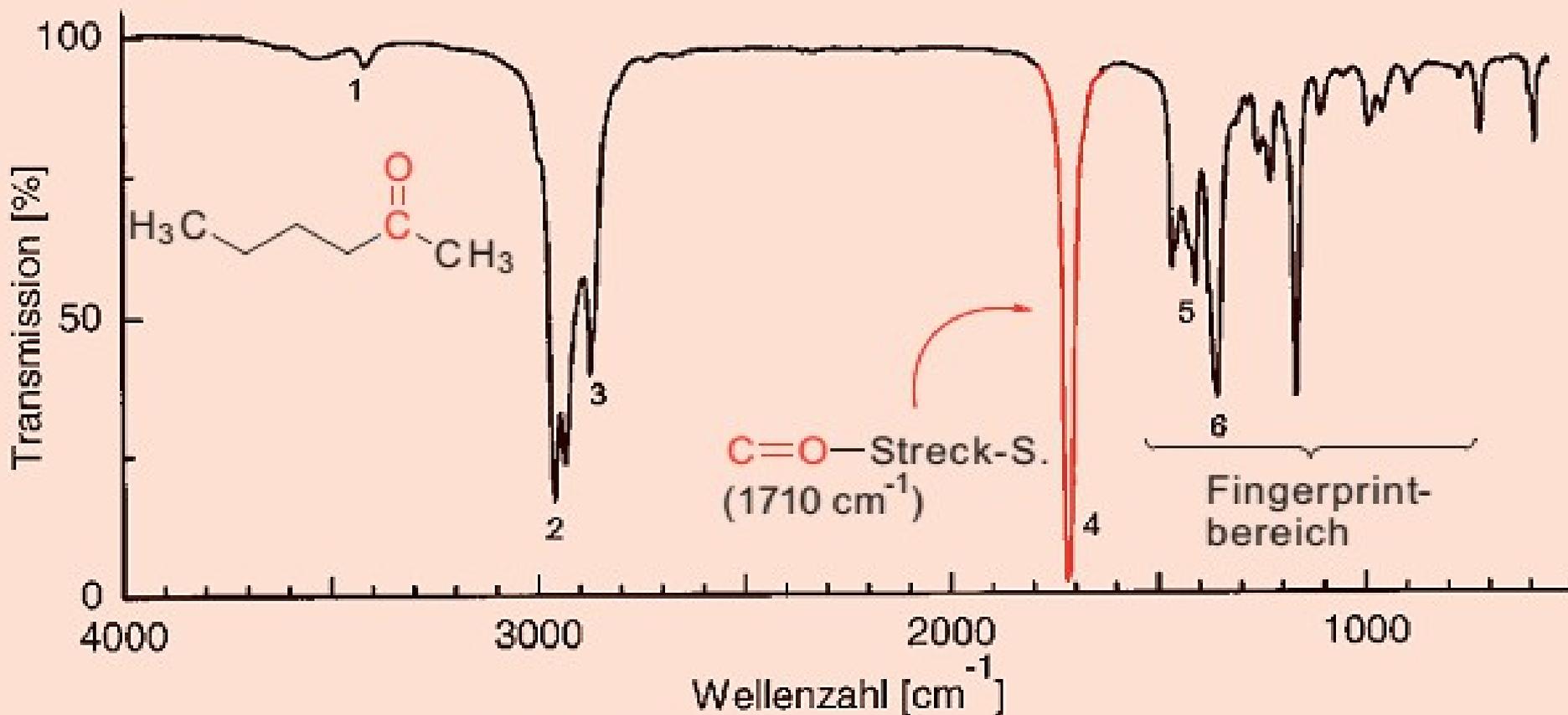
Molekülfragment	IR-Bande in cm^{-1}
C–C, C–N, C–O	800 - 1300
C=C, C=N, C=O	1500 - 1800
C≡C, C≡N	2000 - 2300
C–H, N–H, O–H	2850 - 3600

Die beiden Banden um 2900 cm^{-1} : C-H-**Streckschwingungen**;
die drei Banden zwischen 700 und 1450 cm^{-1} :
Deformationsschwingungen der CH_2 - bzw. CH_3 -Gruppen.



IR-Spektrum von Hexan

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

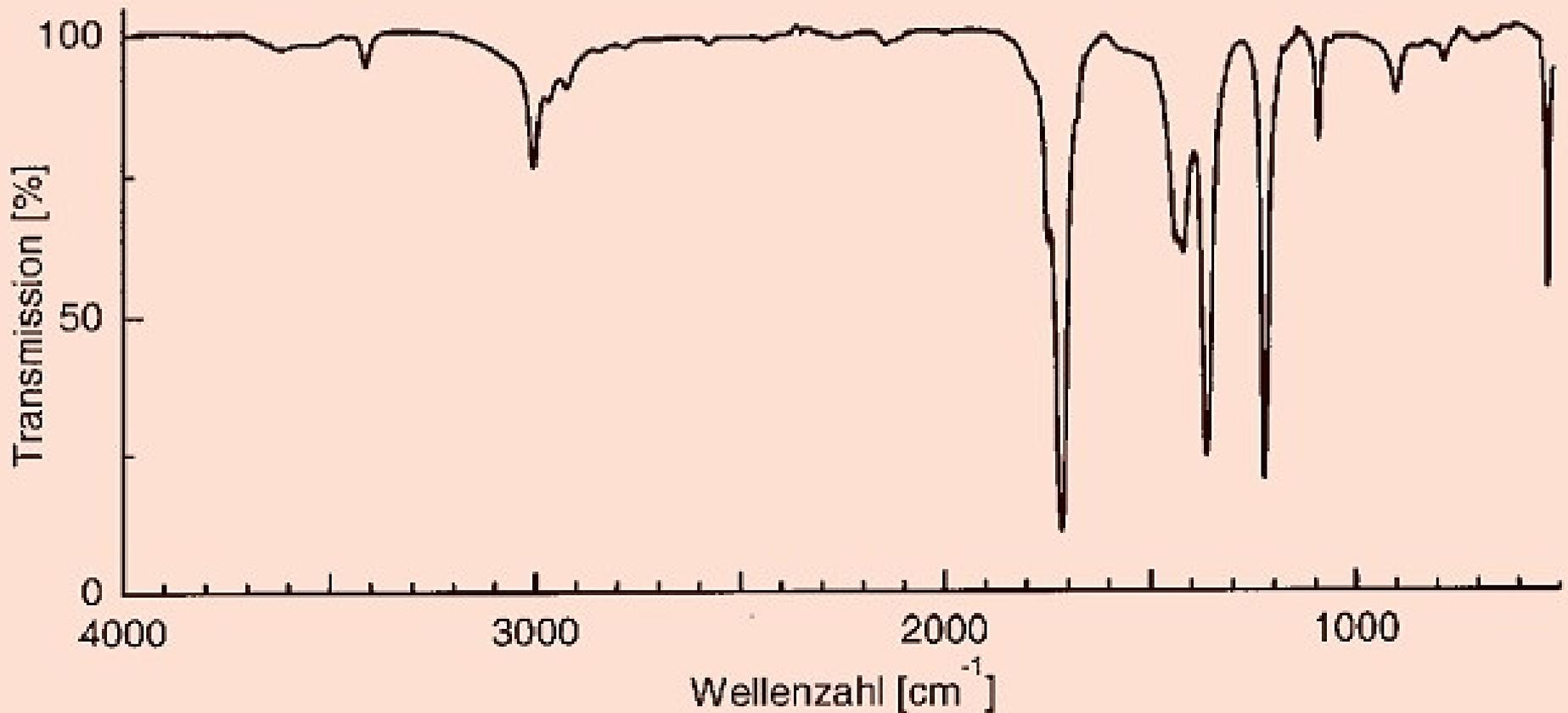


IR-Spektrum von 2-Hexanon

Augabe:

Auf welche funktionelle Gruppe weist das folgende

IR-Spektrum?



Antwort:

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

= ENDE =