

UNIVERSITY

THESIS

---

**Title**

---

*Author:*

Author

*Supervisor:*

Supervisor

*A thesis submitted in fulfillment of the requirements  
for the degree of Degree*

*in the*

Research Group  
Department of University

July 13, 2016



# Contents

<b>1</b>	<b>Test Chapter</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation . . . . .	1
1.2	Physikalische Grundlagen . . . . .	1
1.2.1	Molekülschwingungen . . . . .	2
1.2.2	Interferometrie und Fourier-Transformation . . . . .	2
<b>A</b>	<b>Appendix Title Here</b>	<b>5</b>



# Physical Constants

Speed of Light  $c_0 = 2.99792458 \times 10^8 \frac{m}{s}$



# Chapter 1

## Test Chapter

### 1.1 Motivation

Infrarotstrahlung hat Wellenlängen, die spezifische Schwingungsniveaus innerhalb von Molekülen anregen können. Aufgrund der charakteristischen Eigenfrequenzen der Bindungen, welche zum oszillieren gebracht werden, kann durch die spektroskopische Untersuchung einer Probe - u.U. auch im Vergleich mit Datenbanken, bezieht man sich auf den sog. *fingerprint*-Bereich - auf deren Zusammensetzung gesprochen werden.

Eine FTIR-Spektroskopie einer Probe kann genau dazu genutzt werden. Sie ist zudem eine sehr umgängliche und, setzt man eine nicht zu hohe Auflösung voraus, relativ anspruchslose Methode.

### 1.2 Physikalische Grundlagen

Bei einer FTIR-Untersuchung handelt es sich um die spektroskopische Auflösung von funktionellen Gruppen einer Flüssigkeit/eines Gases mit Hilfe der Fourier Transformations Infrarotspektrometrie. Mit einem präzisen Interferometer wird dabei ein Interferogramm - der Verlauf der Interferenzerscheinungen auf dem Schirm des Interferometers, welche durch die Überlagerung von zwei Einzelstrahlen einer IR-Quelle entstehen - aufgenommen, welches dann über eine *Fourier-Transformation* aus dem Orts- in den Frequenzraum abgebildet wird.

Die bei der FTIR-Spektroskopie benutzte Infrarotstrahlung im Wellenlängenbereich zwischen  $[2500 - 15400]nm$  bzw. den Wellenzahlen  $[4000 - 650]cm^{-1}$  regt in der, im Strahlengang des Interferometers befindlichen Probe, Molekülschwingungen an. Verschiedene Arten von Molekülen bzw. funktionellen Gruppen dieser, welche wiederum anders in der Probe gebunden sind, haben unterschiedliche Eigenfrequenzen der Schwingungen. Durch diese Anregung wird Energie aus der elektromagnetischen Welle von der Probe absorbiert, was ein, für das zu untersuchende Objekt spezifisches Absorptionsspektrum liefert. Der Teil der Welle, welcher nicht absorbiert, sondern einfach transmittiert wird, ergibt wiederum ein einzigartiges Transmissionsspektrum. Diese *Fingerabdruck-Methode* bedarf einer umfangreichen Datenbank von Korrelationstabellen - Literaturspektren zu bekannten Materialien/Proben - um das eigene Spektrum einordnen und schließlich eine Bestimmung der Molekül(-gruppen) vornehmen zu können.

### 1.2.1 Molekülschwingungen

Das quantenmechanische Modell bedient sich der parabolischen Näherung des harmonischen Potentialminimums der Molekülbindungen. Man geht dabei außerdem davon aus, dass die Relativbewegung von Atomkernen und Elektronen von den wesentlich schnelleren und leichteren Fermionen bestimmt wird - die *Born-Oppenheimer-Näherung*. Des weiteren erhält man aus solchen Schwingungen nur Infrarotstrahlung, wenn ein vorliegendes Dipolmoment sich zeitlich ändert. Die stationäre Schrödingergleichung für ein Molekül im Zustand  $\Psi(\vec{x})$  mit den Atomen der reduzierten Massen  $\mu$  lautet folglich

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\Psi(\vec{x})}{d\vec{x}^2} + V(\vec{x})\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x})} \quad (1.1)$$

Für das Potential  $V(\vec{x}) = k/2 \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)^2$  um die Gleichgewichtslage  $\vec{x}_0$  liefert Equation 1.1 das Ergebnis für die Energieniveaus  $E_\nu$  nach den Schwingungsquantenzahlen  $\nu$ :

$$\boxed{E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}}} \quad (1.2)$$

Für die Vereinfachung, dass die Moleküle näherungsweise harmonische Oszillatoren sind (s.o.), so gilt die Auswahlregel für Übergänge in dem erzeugten Schwingungsspektrum  $\Delta\nu = \pm 1$ . Die Absorption von einem Photon der Energie  $\hbar\omega = \hbar\sqrt{k/m}$  entspricht demnach dem Übergang von  $\nu \rightarrow \nu + 1$ .

Starke chemische Bindungen von Atomen kleiner Massen benötigen große Schwingungsquanten, schwächere Bindungen schwerer Atome kleinere.

Unterschieden werden muss im IR-Spektrum noch zusätzlich die Art der Molekülschwingung: Normalschwingungen erzeugen nicht immer Infrarotstrahlung, sondern nur dann, wenn sich innerhalb des System des Moleküls Längen oder Winkel ändern. Demnach gehören bspw. Translationen und Rotationen nicht zu den IR-aktiven Schwingungen.

### 1.2.2 Interferometrie und Fourier-Transformation

Das Interferometer innerhalb des Spektrometers besteht aus einem halbdurchlässigen Strahlteiler, einem festen sowie einem beweglichen Spiegel. Die normale Infrarotstrahlung eines - im Idealfall - erhitzten *schwarzen Körpers* mit Wellenzahlen  $[400 - 7800]cm^{-1}$  (Infrarot  $\leftrightarrow$  Wärmestrahlung) wird an dem Strahlteiler aus Kaliumbromid - Transmission bei  $[400 - 7800]cm^{-1}$  - in zwei Teilstrahlen aufgeteilt. Wie in einem *Michelson-Interferometer* werden diese dann einerseits auf den feststehende, andererseits auf den beweglichen Spiegel gelenkt. Auf dem selben Strahlteiler kommt es danach zu verschiedenen Interferenzerscheinungen zwischen den reflektierten Strahlen, je nachdem, welche optische Wegdifferenz und Frequenz vorliegt.

Der wieder zusammengeführte Strahl wird durch eine Blende, den *J-Stopp*, auf die Probe geleitet. Dort werden die Molekülschwingungen von der Infrarotstrahlung angeregt, woraus die charakteristische Absorption bzw. Transmission in Abhängigkeit der Frequenz folgt. Ein *DTGS*-Detektor - kristallines *Deutiertes Triglycinsulfat* hat die günstige pyroelektrische



Eigenschaft, das Ladungstrennung bei Temperaturänderungen/Verformungen aufgrund polarer Einheitszellen eintritt - nimmt das erhaltene Signal in Abhängigkeit der Stellung des beweglichen Spiegels auf. Dieses nicht-korrigierte Interferogramm als Funktion  $I_{\text{IF}}(x)$  von der optischen Wegdifferenz  $x$  muss noch um einen konstanten Teil - Beachtung des, an die Quelle verloren gegangenen reflektierten Teils - berichtigt werden. Schließlich erhält man aus einer *Cosinus-Fourier-Transformation* aus dem Orts- in den Frequenzraum das Spektrum  $I_{\text{F}}(f)$ ,

$$I_{\text{F}}(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} I_{\text{IF}}(x) \cdot \cos(2\pi\nu'x) d\nu' . \quad (1.3)$$

Im allgemeinen gibt man das Spektrum in Abhängigkeit von der Wellenzahl  $k = 2\pi/\lambda$  an. Demnach findet man die Absorptionsbanden von *Streckschwingungen* der Moleküle des Typs  $X-H$ , wobei  $X$  ein beliebiges Atom und  $H$  Wasserstoff ist, im Bereich von  $[2500 - 4000] \text{ cm}^{-1}$ . Die stärkeren 3-fach Bindungen findet man hingegen im Bereich  $[2000 - 2500] \text{ cm}^{-1}$  auf Grund ihrer höheren Kopplungskonstante des Bindungspotentials. Außerdem können zu diesem Spektralbereich auch  $X-H$ -Streckschwingungen mit schweren  $X$ -Atomen beitragen. Der Größte Anteil im Bereich zwischen  $[1500 - 2000] \text{ cm}^{-1}$  ist den Streckschwingungen der Doppelbindungen mit Kohlenstoffatomen zu zuordnen .

Im sogenannten "Fingerprint"-Bereich zwischen  $[400 - 1500] \text{ cm}^{-1}$  manifestieren sich vor allem feinste Unterschiede zwischen ähnlichen Molekülen, welche durch chemische unterschiedliche Anbindungen, die Umgebung oder Defekte hervorgerufen werden. Solche sind sämtliche elektronischen Effekte sowie Beuge- und Gerüstschwingungen.

Schließlich gilt es zu beachten, dass natürlich auch die Wechselwirkung induzierter/permanenter Dipole in der Probe mit der Infrarotstrahlung eine Veränderung des reinen Schwingungsspektrums hervor ruft.



## Appendix A

# Appendix Title Here

Write appendix content here.