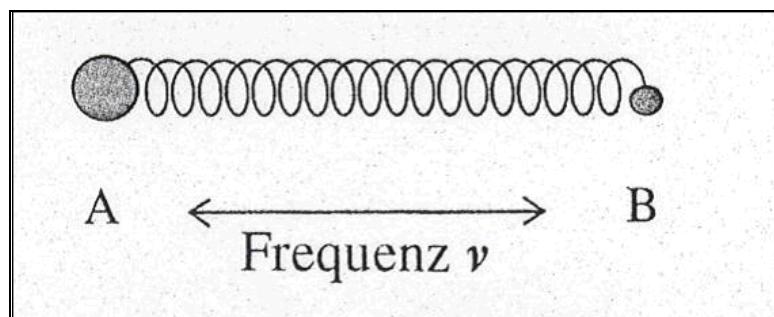


CTA - AUSBILDUNG

13. KLASSE

INFRAROT - SPEKTROSKOPIE (IR)



THEORIETEIL

1. ALLGEMEINE GRUNDLAGEN

Die Infrarot-Spektroskopie nutzt die Wechselwirkung infraroter elektromagnetischer Wellen mit Materie. Ihre Lage im Spektrum ist Abb. 1 zu entnehmen.

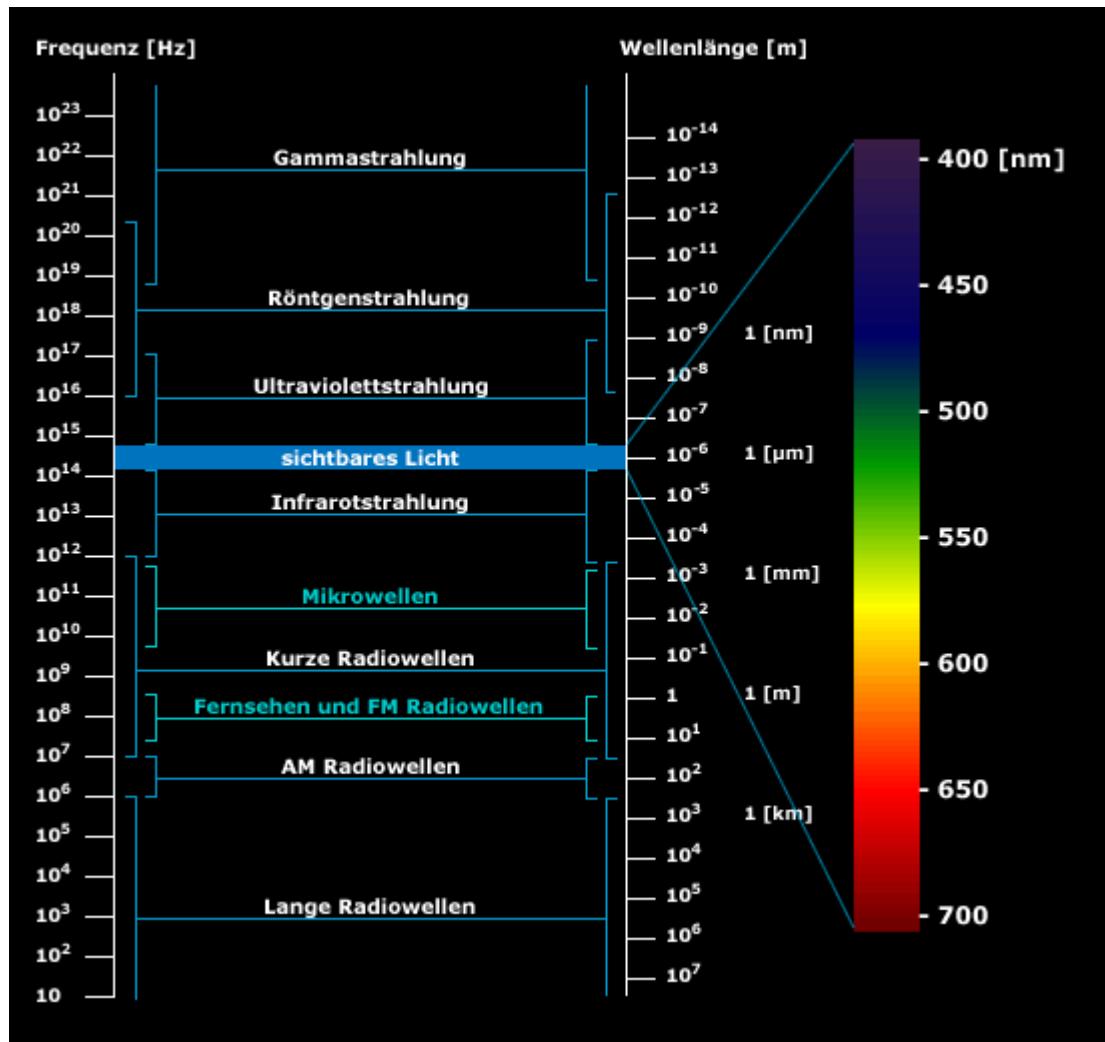


Abb. 1: Elektromagnetisches Spektrum

Infrarote elektromagnetische Wellen oder Strahlung (die Begriffe werden meist synonym verwendet) sind dem sichtbaren Bereich benachbart, aber energieärmer und „längerwellig“ als sichtbares Licht.

Da Energie und Wellenlänge sich reziprok verhalten und dies im praktischen spektroskopischen Umgang unbequem ist, wird eine neue Größe zur Charakterisierung von Wellen bzw. Strahlung eingeführt.

Es ist die **Wellenzahl**. Sie ist definiert als Kehrwert der Wellenlänge, also $1/\lambda$. Die Einheit ist cm^{-1} . Wellenzahl und Energie sind proportional, unterscheiden sich aber in Größenordnung und Einheit.

Die Abb. 2 aus Tausch/v.Wachtendonk, Chemie SII, S. 24, zeigt die Zusammenhänge.

Energie E in J	$2 \cdot 10^{-13}$	$2 \cdot 10^{-17}$	$2 \cdot 10^{-21}$	$2 \cdot 10^{-25}$
Frequenz ν in s^{-1}	$3 \cdot 10^{20}$	$3 \cdot 10^{16}$	$3 \cdot 10^{12}$	$3 \cdot 10^8$
Wellenzahl $\tilde{\nu}$ in cm^{-1}	10^{10}	10^8	10^6	10^4
Wellenlänge λ in cm	10^{-10}	10^{-8}	10^{-6}	10^{-4}
Anregung von:	γ -Strahlen	Röntgenstrahlen	Ultraviolettsichtbares LichtInfrarot-Strahlen	MikrowellenRadiowellen
	inneren Elektronen	Valenzelektronen in Atomen+Molekülen	Molekül-schwingungen	Kernspin-Zustände

Abb. 2: Spektrum mit Parametern, Strahlungsformen und Wechselwirkungen

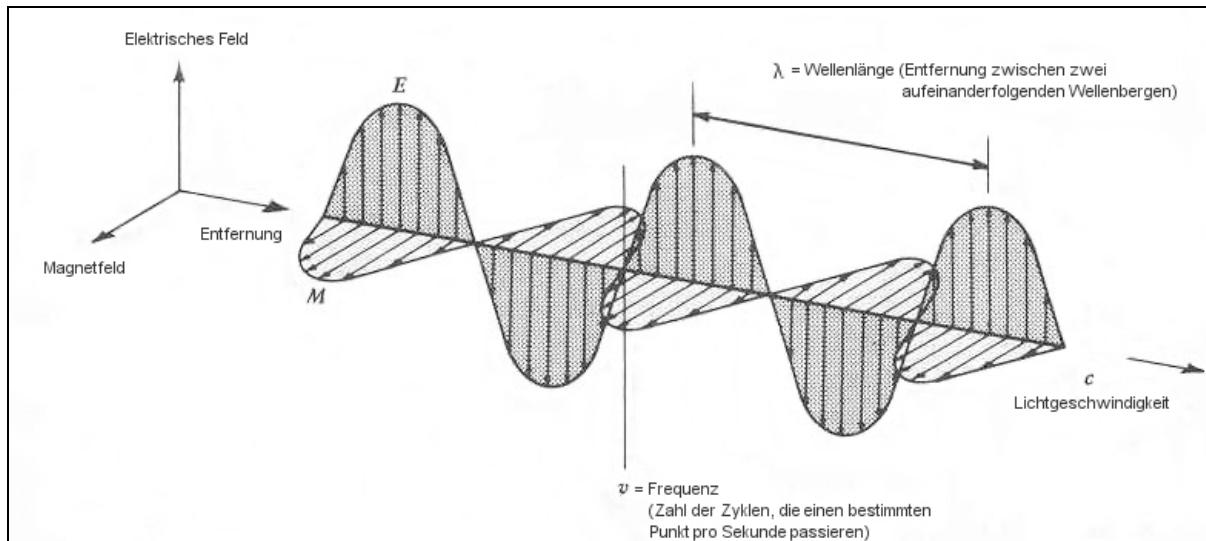


Abb. 3: Elektromagnetische Wellen mit den Parametern Frequenz und Wellenlänge

Es gelten die Fundamentalgleichungen:

$$\Delta E = h \cdot \nu$$

$$\lambda \cdot \nu = c$$

$$E = m \cdot c^2$$

Die Einheiten für die einzelnen Größen können der Abbildung 2 entnommen werden.

Die Abbildung 2 zeigt auch die verschiedenen Formen der Wechselwirkung (Anregung) zwischen Wellen/Strahlung und Materie.

Sie können in „mechanische“ Vorgänge des gesamten Moleküls, in Elektronenanregungen im Molekül und „Orientierungen“ bestimmter Atomkerne innerhalb eines Moleküls in einem Magnetfeld unterteilt werden.

Jedem dieser Vorgänge können Spektroskopiearten zugeordnet werden, wie die Abb. 4 (aus Latscha/Linti/Klein, Analytische Chemie, S. 387)

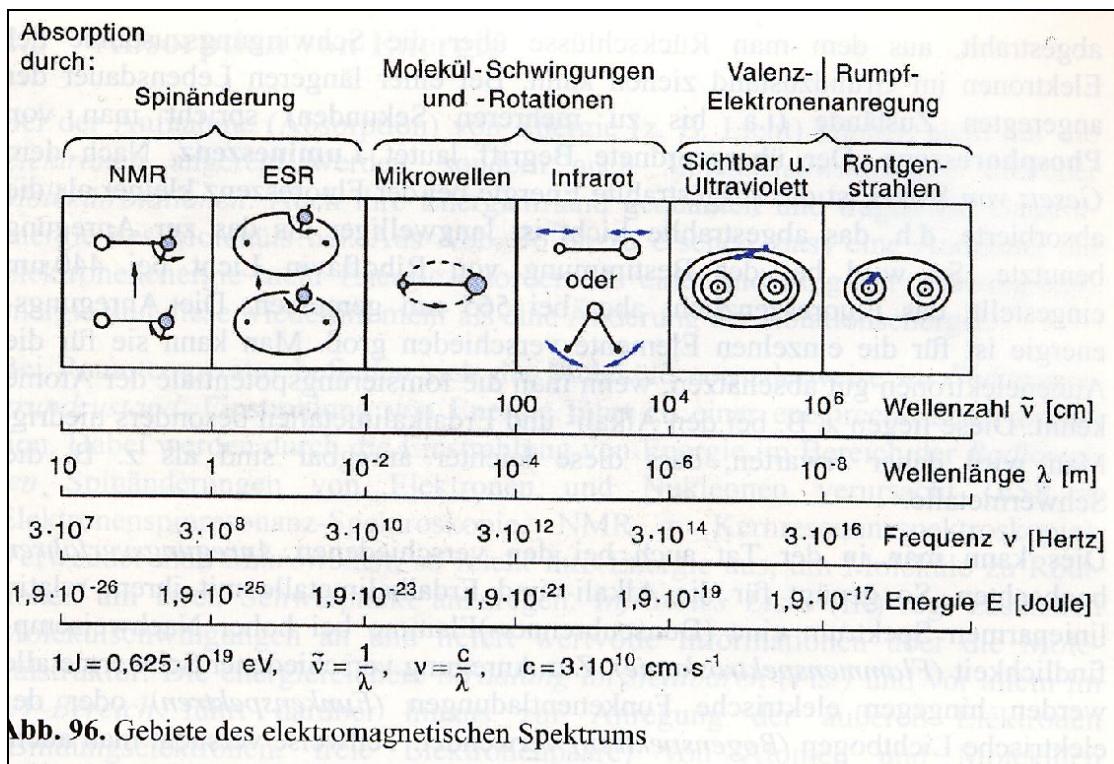


Abb. 4: Elektromagnetisches Spektrum mit zugehörigen Spektroskopiearten

Die „mechanischen“ Vorgänge sind in Abb. 5 (aus Tausch/v. Wachtendonk, S. 24) zusammengestellt, wobei in der Reihenfolge Translation, Rotation, Schwingung die notwendige „Anregungsenergie“ steigt.
D.h. wenn Moleküle schwingen, dann sind immer auch Rotationen angeregt. Dies hat Auswirkungen auf die IR-Spektren, wie wir später sehen werden.

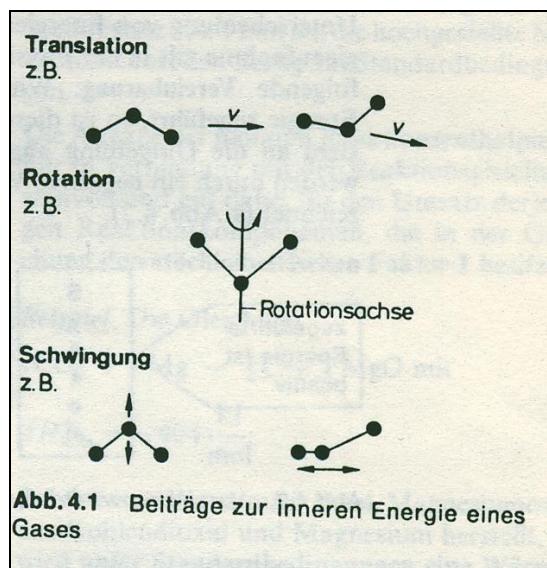


Abb. 5: „Mechanische“ Absorptionsformen

2. SCHWINGUNGSFORMEN

Für die IR-Spektroskopie sind Schwingungen im Molekül relevant. Zum Verständnis des Aufbaus von Molekülen und der Spektroskopieart, ist es notwendig, sich mit den Möglichkeiten und Formen von Schwingungen auseinander zu setzen.

Die Zahl Z der möglichen Schwingungen eines Moleküls hängt von der Anzahl der Atome N ab, aus denen es besteht. Sie ist durch die Regel für die Anzahl der Freiheitsgrade festgelegt. Für lineare Moleküle gilt:

$$(3N - 5) = Z$$

weil 3 Formen der Translation, aber nur 2 der Rotation (um die Molekülachse ist nicht möglich) möglich sind. D.h. für die 2-atomigen Gase, wie H_2 , gibt es nur eine Schwingung entlang der Molekülachse.

Das lineare Molekül CO_2 kann $9-5 = 4$ unabhängige Normalschwingungen ausführen.

Für nicht-lineare Moleküle gilt

$$(3N - 6) = Z$$

da bei diesen Strukturen 3 unterschiedliche Rotationszustände existieren.

Das nicht-lineare Molekül Wasser besteht aus 3 Atomen und kann deshalb $9-6 = 3$ „Grundschwingungen oder Normalschwingungen“ ausführen.

Prinzipiell können nun verschiedene Schwingungsformen unterschieden werden.

Ändert sich während des Schwingungsvorganges die Bindungslänge, spricht man von **Valenzschwingungen**, ändert sich der Bindungswinkel, spricht man von **Deformationsschwingungen**. In viel-atomigen Molekülen sind aber auch Molekülgruppen gegenüber dem „Restmolekül“ schwingungsfähig. Die Abb. 6 und 7 zeigen mögliche Schwingungstypen.

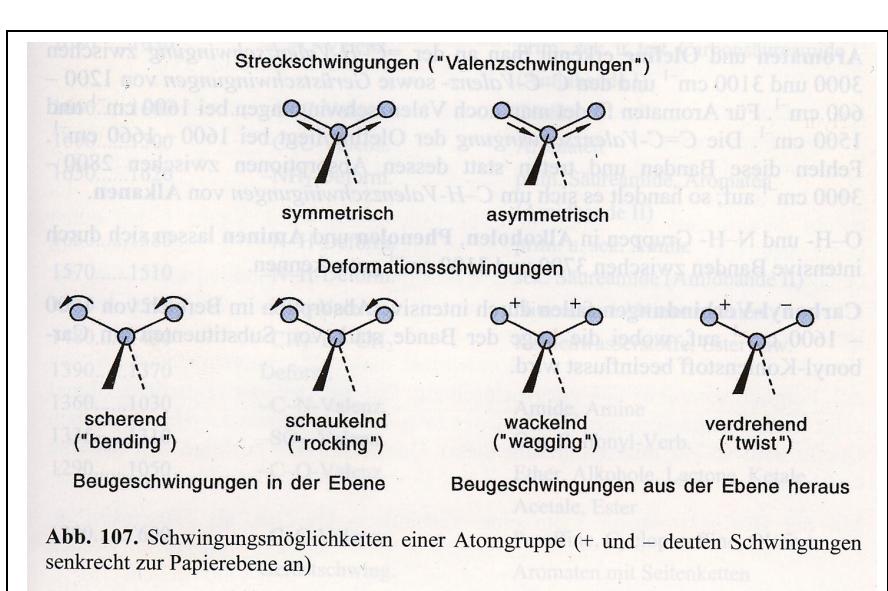
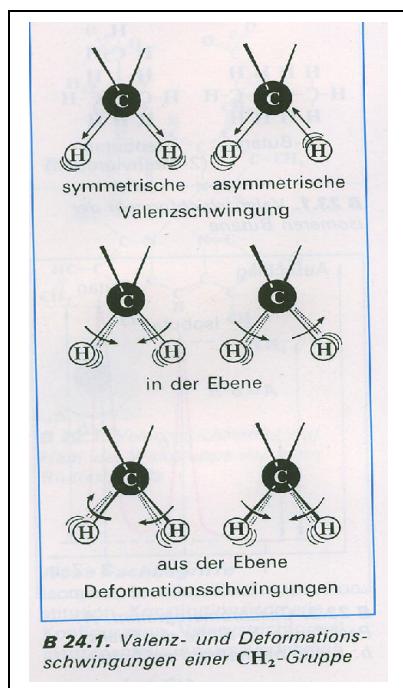


Abb. 7: Schwingungen von Atomgruppen (Fehler!)

Abb. 6: Valenz- und Deformations-schwingungen

Für die oben genannten Beispiele Wasser und Kohlenstoffdioxid können die möglichen Schwingungen nun differenzierter angegeben werden:

Tabelle 1: Schwingungen ausgewählter Moleküle

Verbindung	Symm. Typ	Formel	Z	Valenz	Deformation
CO ₂	linear	3N-5	4	1symm. 1asymm.	2
H ₂ O	Nicht-linear	3N-6	3	1symm. 1 asymm.	1
Ethin					
N ₂ O					
CCl ₄					

Werden diese Verbindungen mit Infrarotlicht bestrahlt, so sollten die genannten Schwingungen durch Absorption angeregt werden und Signale (Banden) verursachen, wenn es eine geeignete „Messenordnung“ (Spektrometer) gibt.

Es sollte eine Korrelation zwischen der Anzahl der Schwingungen und der Zahl der Banden im Spektrum existieren.

Für „vielatomige“ Moleküle sind daher „komplexe“ Spektren mit vielen Banden zu erwarten , und bei einfachen Verbindungen (s.o.) zeigt es sich, dass weniger Banden auftreten, als zu erwarten wären:

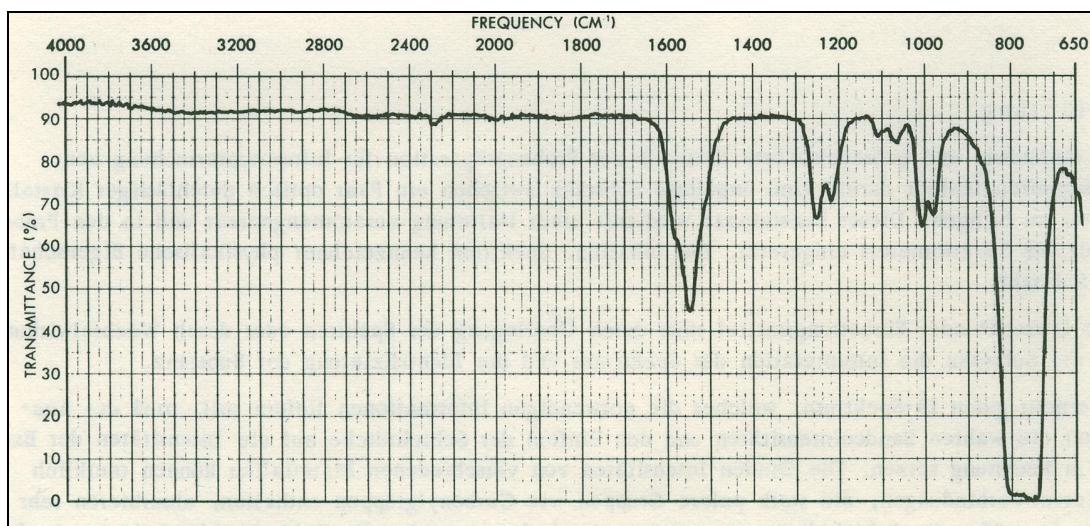


Abb. 8: IR-Spektrum von Tetrachlormethan

Aus diesem Sachverhalt muss geschlossen werden, dass nicht jede möglich Schwingung im IR-Spektrum abgebildet wird, also „aktiv“ ist.

Es gilt die Bedingung (**Auswahlregel**), dass bei der Molekülschwingung das Dipolmoment verändert werden muss, sonst gibt es kein IR-Signal.

Das Dipolmoment ist eine physikalische Größe, die durch Ladungen q im Abstand l definiert ist (Abb.9)und in „permanent“ und „induziert“ unterschieden werden kann.

Homonukleare, 2-atomige Moleküle haben kein permanentes und kein induzierbares Dipolmoment. H_2 , N_2 oder O_2 sind also nicht IR-aktiv und können daher auch nicht mit IR untersucht werden.

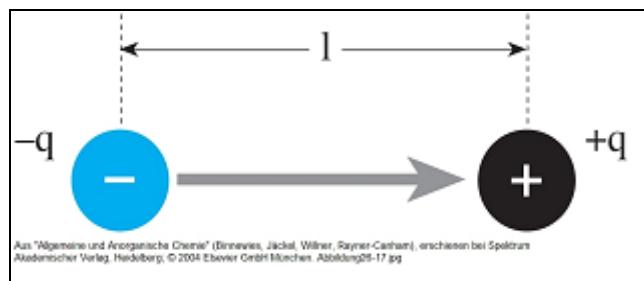


Abb. 9: Elektrisches Dipolmoment

Das Dipolmoment ist offensichtlich von der Art der Teilchen und ihrer Symmetrie abhängig. Beim Tetrachlormethan (CCl_4) beispielsweise sind nur die Schwingungen IR-aktiv, die zu einer Veränderung der tetraedrischen Symmetrie führen. (Abb. 8).

Ähnliches gilt auch für CO_2 . Es verfügt (s. Tab. 1) über 4 „Schwingungsfreiheitsgrade“, in Form von zwei Valenz- und zwei Deformationsschwingungen (Abb. 10):

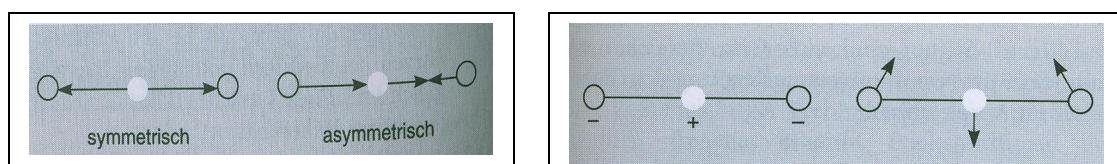


Abb. 10: Valenz- und Deformationsschwingungen im CO_2 (Aus:Skoog/Leary, S.282)

Das IR-Spektrum von CO_2 (Abb. 12) zeigt zwei Absorptionsbanden, eine bei 2330 cm^{-1} und die andere bei 667 cm^{-1} . Sie lassen sich wie folgt erklären:

Bei der symmetrischen Valenzschwingung bleibt die Symmetrie und damit die Lage des Schwerpunktes des Moleküls unverändert und damit auch das Dipolmoment. (IR-inaktive Schwingung).

Die asymmetrische Valenzschwingung führt zu einer Verschiebung des Schwerpunktes und einer Veränderung der Ladungsverteilung. Dies bewirkt eine Änderung des Dipolmomentes (das vorher Null war) und damit zu einer Absorption.

IR-aktiv sind auch die beiden Deformationsschwingungen aus der Papierebene (+ -) und auf der Papierebene (Pfeile), weil sich dabei der Schwerpunkt des Moleküls und damit das Dipolmoment verändert.

Beide Schwingungen sind aber identisch, (sie unterscheiden sich lediglich in der räumlichen Orientierung, so wie z.B. die p_x , p_y oder p_z – Atomorbitale) und besitzen damit die gleiche Energie. Sie erzeugen deshalb im Spektrum auch nur ein Signal. (In der Fachsprache wird ein solches Phänomen auch als Entartung oder Degenerierung bezeichnet).

Interessant ist auch die Betrachtung des Wassers, als Beispiel für ein nicht-lineares 3-atomiges Molekül mit 3 Eigenschwingungen ($3N-6$).

Die Valenz- und Deformationsschwingungen sind in Abb. 11 zusammengestellt. Alle drei Schwingungen sind IR-aktiv, weil sich der Schwerpunkt des Moleküls verschiebt. Es gibt auch keine Entartung, weil keine identischen Schwingungen existieren.

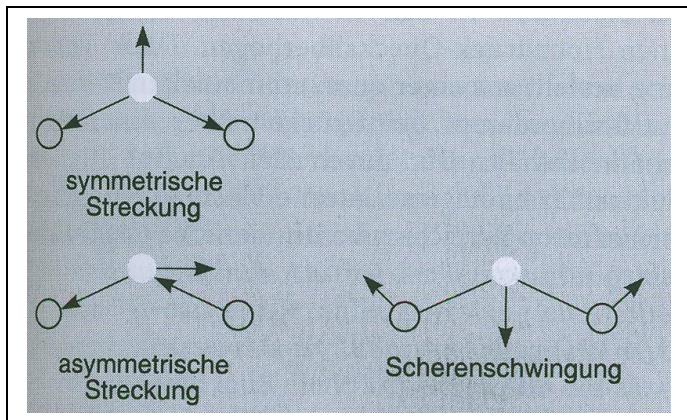


Abb. 11: Schwingungen im H_2O -Molekül

Im Spektrum von Wasser sollten also 3 Banden zu erwarten sein. Sie liegen bei 3650 und 3760 bzw. 1595 Wellenzahlen (s. Abb. 12).

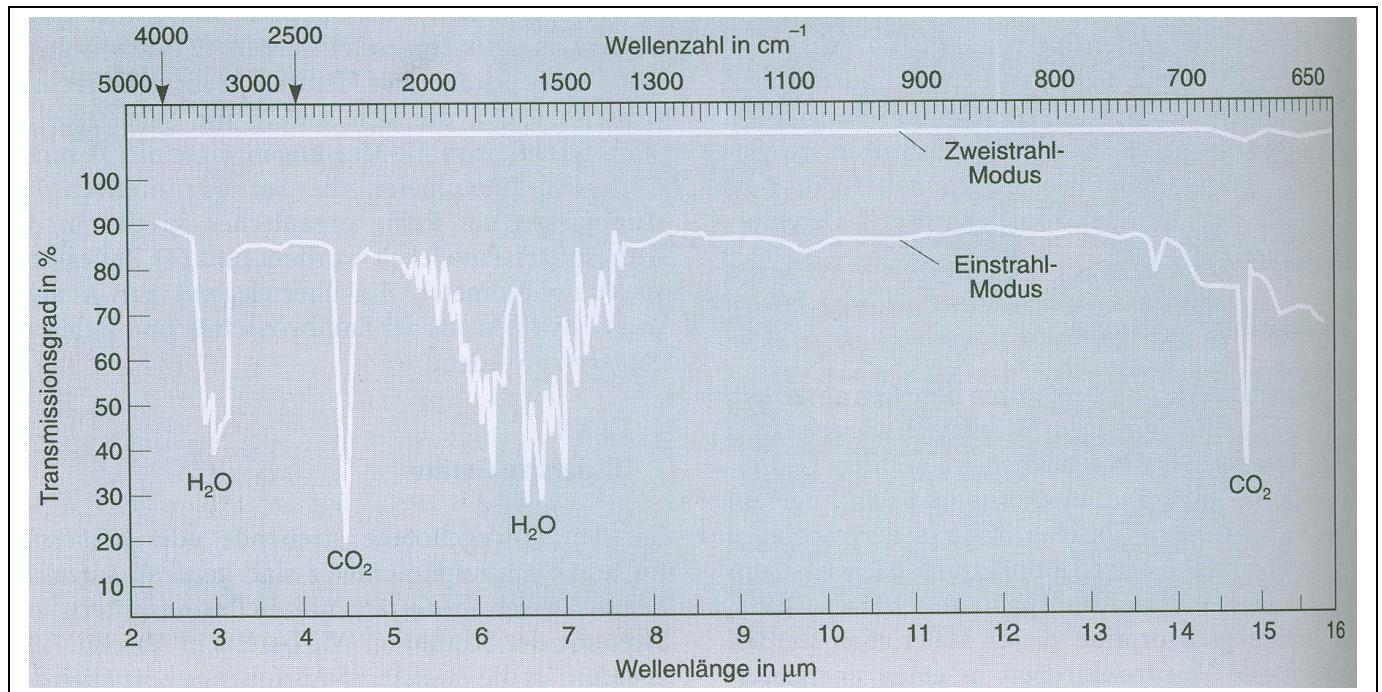


Abb. 12: IR-Spektrum von Kohlenstoffdioxid und Wasser (aus Skoog/Leary, S. 288)

Beim CO_2 erzeugen also 4 mögliche Schwingungen aus „Symmetrie- und Energiegründen“ zwei Signale, beim Wasser 3 mögliche Schwingungen auch 3 Signale.

Neben der praktischen Bedeutung der beiden Spektren (s.u. „background“) ist auch die Frage nach der Zuordnung aufgeworfen, also welche Schwingung wird bei welcher Energie (Wellenzahl in cm^{-1}) angeregt oder welche Schwingungen absorbieren bei hohen Wellenzahlen und welche bei niedrigen.

Zur Lösung dieses Problems ist es notwendig Schwingungen quantitativ zu beschreiben.

3. „SCHWINGUNGS –MODELLE“

Schwingungen von Molekülen können physikalisch durch mehrere Modelle quantitativ beschrieben werden.

Eine gute erste, klassische Annäherung liefert

3.1 DAS FEDERPENDEL

Die ungleichen Atome A und B sind kovalent zu einem 2-atomigen Molekül verknüpft. Es wird durch zwei ungleiche Massen, die durch eine Feder verbunden sind, modellartig repräsentiert. (s. Abb. 13). Eine auslenkende Kraft bringt das System zum Schwingen.

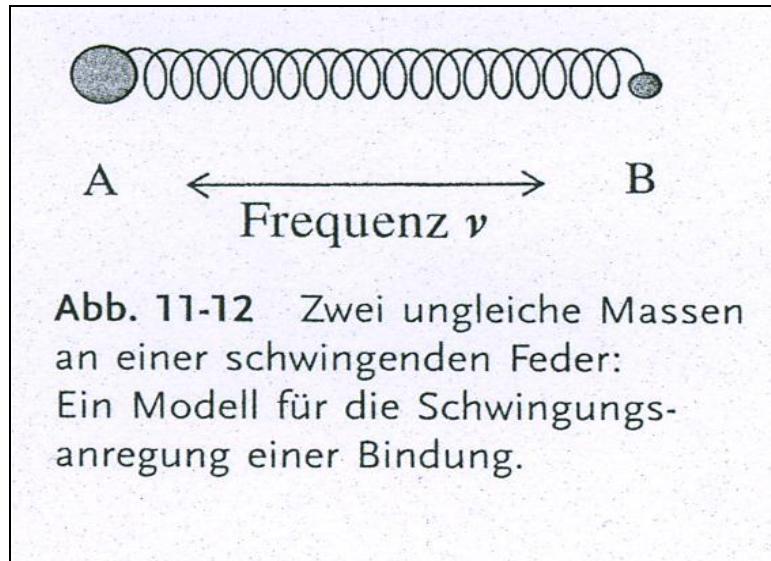


Abb. 11-12 Zwei ungleiche Massen an einer schwingenden Feder:
Ein Modell für die Schwingungsanregung einer Bindung.

Abb. 13: Federpendel als Modell für Molekülschwingungen

Es erscheint plausibel, dass die zur Schwingung anregende Kraft von der Stärke der Feder (Bindung des Moleküls) und den Massen (der Atome) abhängig ist und diese auch die Frequenz beeinflussen, mit der das Federpendel schwingt.

Der physikalisch exakte Zusammenhang kann vom Hookeschen Gesetz ($F = -Dx$) abgeleitet werden. Auf einen Oszillator (schwingendes System) angewendet, erhält man für seine Frequenz:

$$\nu_m = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}}$$

Gl. 1: Frequenzgleichung für ein Federpendel

Der Term $1/2\pi$ verweist darauf, dass Schwingungen durch periodische Funktionen (\sin, \cos) beschrieben werden können. Der Quotient aus der Summe und dem Produkt der Massen wird auch als reduzierte Masse μ bezeichnet und die Konstante k entspricht der Federkonstante D und steht für die Stärke der Bindung (Bindungsordnung, Bindungsenergie). Sie wird häufig auch als Kraftkonstante f bezeichnet.

Gl. 1 stellt also den Zusammenhang zwischen Frequenz, Massen und Bindungsstärke her.

In der IR-Spektroskopie sind Wellenzahlen ν geläufig, die als Kehrwert von λ definiert sind.

$$\text{Aus } \nu \cdot \lambda = c \quad \text{ergibt sich} \quad \nu = c \cdot \frac{1}{\lambda}$$

Damit kann Gl. 1 in Wellenzahlen ausgedrückt werden:

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \cdot \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}} = 5,3 \cdot 10^{-12} \cdot \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}}$$

und ermöglicht die Berechnung von Kraftkonstanten bzw. Bindungsenergien aus den Daten des IR-Spektrums, da die Massen der Atome bekannt sind. Umgekehrt lassen sich bei bekannten Kraftkonstanten zu erwartende Schwingungsbanden berechnen.

Wellenzahl, Frequenz und Energie sind der Bindungsstärke (Kraftkonstante) direkt proportional.

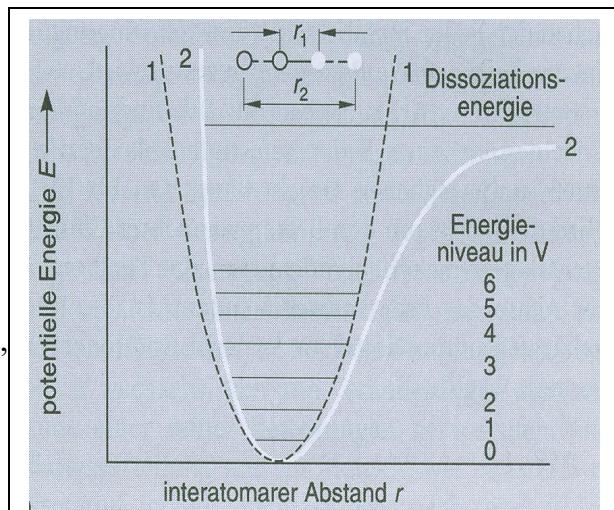
3.2 HARMONISCHER UND ANHARMONISCHER OSZILLATOR

Die energetischen Verhältnisse bei Schwingungsvorgängen, also die Umwandlung von potentieller Energie in kinetische Energie, wird durch den sog. harmonischen Oszillatoren beschrieben (Abb. 14 gestrichelte Linie 1). Er gilt für beliebige mechanische Systeme und die potentielle Energie kann beliebige Werte annehmen.

In atomaren Systemen gilt jedoch die Quantelung und Moleküle können dissoziieren bzw. Bindungen homolytisch gespalten werden.

Moleküle und ihre Schwingungszustände werden daher besser durch den sog. anharmonischen Oszillatoren (Abb. 14 weiße Linie 2) beschrieben.

Schwingungen werden also nur dann angeregt, wenn die aufgenommene Energie den Differenzen zwischen den ganzzahligen Energieniveaus entspricht. Für die Strahlungsenergie gilt also



$$\Delta E_{\text{Strahlung}} = h \cdot \nu = h \cdot \nu_m$$

Abb. 14: Harmonischer und anharmonischer Oszillatoren

wobei ν_m durch Gl. 1 gegeben ist.

Für die IR-Spektroskopie müssen also zwei Bedingungen erfüllt sein:

- Die Frequenz der Strahlung muss mit der Schwingungsfrequenz der Bindung der Bindung identisch sein.
- Die Schwingung muss zu einer Änderung des Dipolmomentes (permanent oder induziert) führen.

Sind diese Bedingungen erfüllt, tritt Resonanz ein und ein Signal wird gemessen. Da häufig mehrere Schwingungen möglich sind und Kopplungen mit benachbarten Bindungen auftreten, die Bindungszustände zudem variantenreich sind, können abwechslungsreiche, „bewegte“ „Spektrenbilder“ erwartet werden.

Das erleichtert nicht unbedingt die Auswertung, lässt aber eine gute Differenzierung zu; keine zwei Verbindungen werden das gleich IR-Spektrum aufweisen.

4. AUSWERTUNG UND INTERPRETATION VON IR-SPEKTREN

Beim IR-Spektrum befindet sich die „baseline“ oben, die Signale „erstrecken“ sich nach unten.

Das Spektrum wird über der Abszisse (Wellenzahl, Frequenz, Energie) abgetragen.
Die Ordinate bildet die „Durchlässigkeit“ oder der Transmissionsgrad, als „Ausmaß“ der Absorption bzw. Konzentration der Probe.

Hilfreiche Parameter sind also Wellenzahl und Intensität der sog. Banden.

Aufgrund theoretischer Überlegungen und praktischer Erfahrungen lässt sich ein IR-Spektrum in zwei Bereiche mit unterschiedlicher Aussagefähigkeit unterscheiden, wie Abb. 15 zeigt:

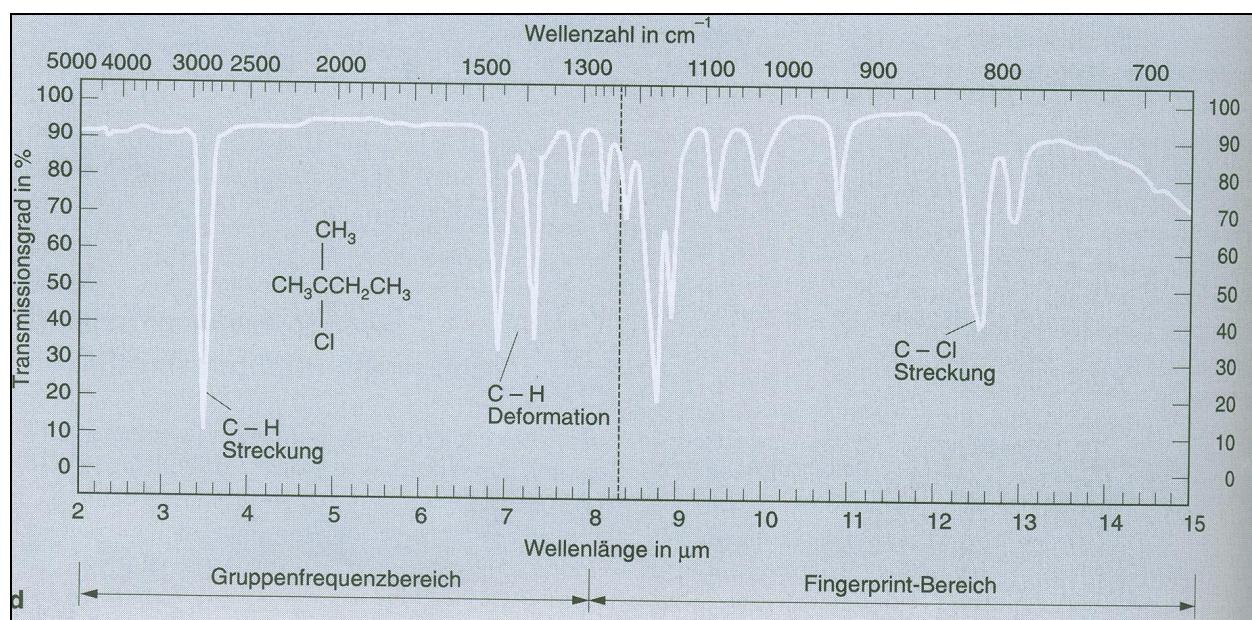


Abb. 15: IR-Spektrum von 2-Chlor 2-Methylbutan

IR-Spektren werden meist von 400 bis 4000 Wellenzahlen registriert, wobei der relevante Bereich meist schmäler ist. Der untere (400 bis 1200 cm^{-1}) wird als „Fingerprint-Bereich“ bezeichnet, der darüber als „Gruppenfrequenzbereich“. Der Fingerprintbereich ist weniger aussagefähig, was die Zuordnung von Schwingungen anlangt, aber sehr spezifisch als „Fingerabdruck“ der Substanzen z.B. im unmittelbaren Vergleich.

Im Gruppenfrequenzbereich werden die Banden der Gruppenschwingungen registriert, die sich besser zuordnen lassen. Es sind die C-C- und C-H-Valenz- und Deformationsschwingungen und die von funktionellen Gruppen und Heteroatomen. Aufgrund der schon erwähnten unterschiedlichen Bindungs- und Kopplungsverhältnisse, absorbieren sie nicht bei definierten Wellenzahlen, sondern innerhalb bestimmter Bereiche, die dann als Gruppenfrequenzen bezeichnet werden.

Aus Abbildung 15 ist auch ersichtlich, dass Valenzschwingungen bei höheren Wellenzahlen auftreten als die Deformationsschwingungen.

In der Abb. 16 sind wichtige Gruppenfrequenzen zusammengestellt.

Bindung	Verbindungstyp	Frequenzbereich, cm ⁻¹	Intensität
C–H	Alkane	2850–2970 1340–1470	stark stark
C–H	Alkene ($> \text{C}=\text{C}<\text{H}$)	3010–3095 675– 995	mittel stark
C–H	Alkine ($-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$)	3300	stark
C–H	Aromatische Ringe	3010–3100 690– 900	mittel stark
O–H	Monomere Alkohole, Phenole Wasserstoffverbrückte Alkohole und Phenole	3590–3650 3200–3600	variabel variabel, manchmal breit
	Monomere Carbonsäuren Wasserstoffverbrückte Carbonsäuren	3500–3650 2500–2700	mittel breit
N–H	Amine, Amide	3300–3500	mittel
C=C	Alkene	1610–1680	variabel
C=C	Aromatische Ringe	1500–1600	variabel
C=C	Alkine	2100–2260	variabel
C–N	Amine, Amide	1180–1360	stark
C≡N	Nitrile	2210–2280	stark
C–O	Alkohole, Ether, Carbonsäuren, Ester	1050–1300	stark
C=O	Aldehyde, Ketone Carbonsäuren, Ester	1690–1760	stark
NO ₂	Nitroverbindungen	1500–1570 1300–1370	stark stark

Abb. 16: Tabelle der Gruppenfrequenzen wichtiger organischer Gruppen

Das „Lesen“ (Interpretation) der IR-Spektren erfolgt anhand dieser Tabelle, in dem die vorhandenen Banden Molekülgruppen zugewiesen werden. Dies gelingt selten vollständig, auch wegen des Fingerprint-Bereichs.

Meist gelingt die Zuordnung zur Stoffklasse.

Eine vollständige Aufklärung ist ohnehin nur möglich, wenn weitere Informationen (MS, NMR,...) gegeben sind.

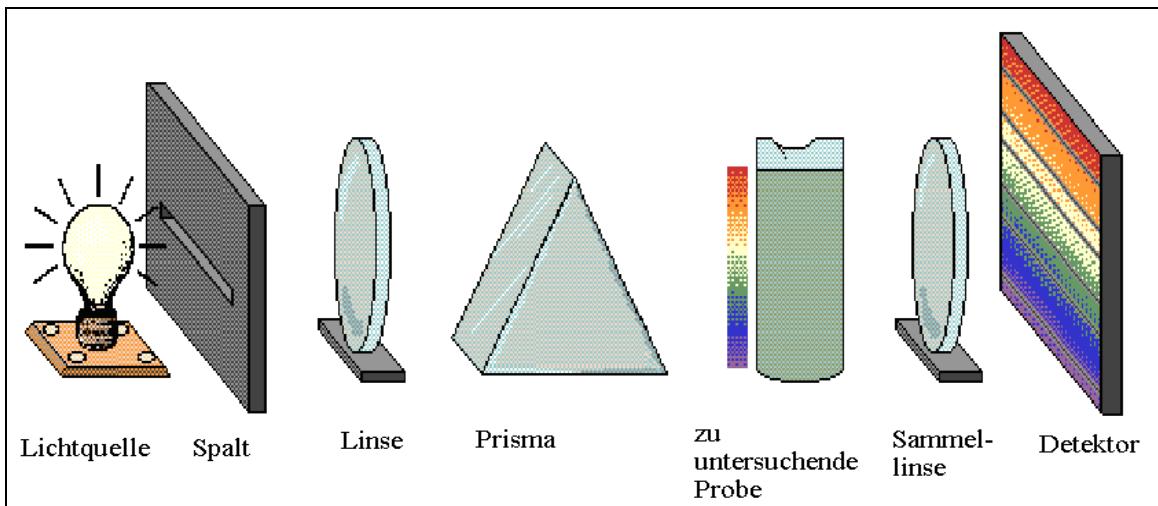
Die IR-Spektroskopie ist damit eine aussagefähige, wichtige Informationsquelle, die aber ergänzungsbedürftig ist.

Ein großer Vorteil der Methode ist die hohe Empfindlichkeit, die geringen Probemengen und der geringe Zeitbedarf (im Vergleich zu chemischen Nachweisen) für Probenvorbereitung und Messung, was uns zum abschließenden Kapitel, der technischen Realisierung führt.

5. VERFAHRENS-TECHNISCHES

Geräte zur Aufnahme von Spektren werden als Spektrometer bezeichnet und sind entsprechend Unterscheidbar in IR-, UV- oder NMR.

So verschieden die Vorgänge bei der Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung und Materie auch sind, die Spektrometer haben das gleiche Aufbauprinzip.
Es ist in einfacher und überzeugender Weise in Abb. 17 dargestellt.



Ab. 17: Aufbau eines Spektrometer im sichtbaren Bereich

Allen Spektrometern gemeinsam sind – wie man am Schema der frühgeschichtlichen Anordnung ableiten kann – :

- Strahlungsquelle
- Monochromator (Spalt, Linse und Prisma)
- „Probenanordnung“ (Küvetten, Röhrchen,...)
- Verstärker (hier Sammellinse) und
- Detektor mit „Dokumentation“ (Schreiber,)

Natürlich wurden die Geräte – nachdem man ihren Nutzen erkannte – weiter entwickelt und verbessert, was nur mit entsprechender Technik möglich war.

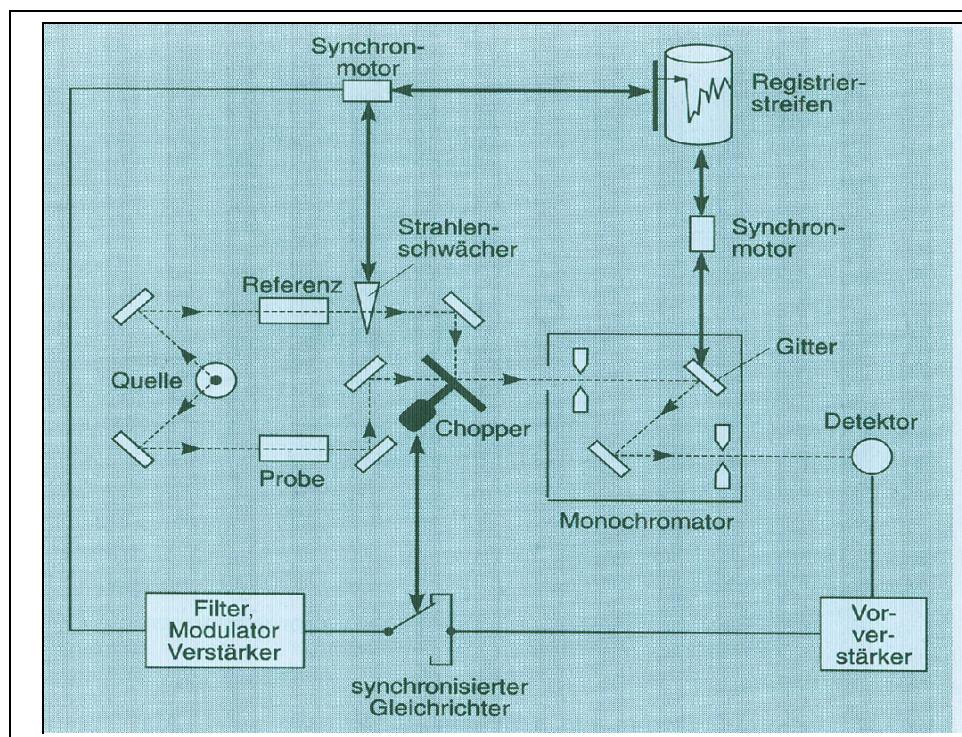


Abb. 18: Klassisches Zweistrahlspektrometer (Skoog/Leary, S.289)

Die klassischen IR-Spektrometer sind frequenz- bzw. wellenzahlabhängige Geräte, bei denen die IR-Strahlung durch einen Monochromator (Gitter) in diskrete Größen zerlegt und kontinuierlich (steigend, fallend) auf die Probe gegeben wird. Durch Absorption der Bindungen entsteht das entsprechende Spektrum.

Wegen der Zerlegung der Strahlung wird dieses Verfahren auch als dispersiv bezeichnet. Sie können als Ein- oder Zwei-Strahl-Geräte gebaut werden, wobei (Abb. 12, S. 8) Zweistrahlggeräte leistungsfähiger sind (Auflösung, Basislinienkorrektur).

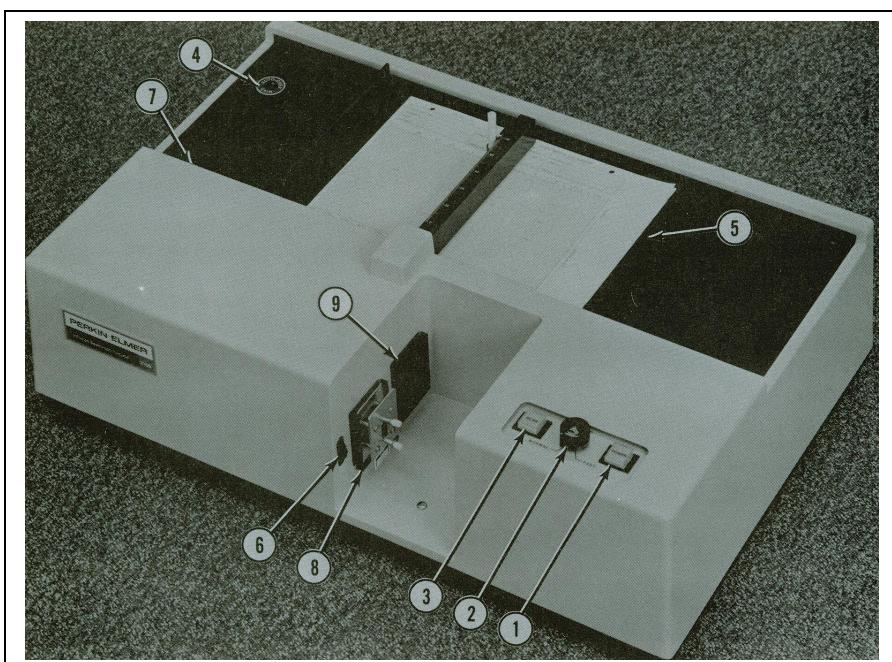


Abb.19: PE 710B Zweistrahlg-IR-Gerät (1980 –2000)

Klassische, frequenzabhängige, disperse Spektrometer gibt es heute praktisch nur noch für den UV-Bereich.

Für IR und NMR wurden sie durch die technische Entwicklung, besonders der Computer, vom Markt verdrängt.

Moderne IR-Spektrometer sind sog. „FT-IR-Fotometer“, sie sind nicht frequenz-, sondern zeitabhängig und nicht-dispersiv. Das heißt, die infrarote Strahlung wird nicht zerlegt, sondern in ihrem gesamten Spektrum ($400 - 4000 \text{ cm}^{-1}$) als „Puls“, d.h. sehr kurz (ca. 1 sec.), aber beliebig oft wiederholbar, auf die Probe eingestrahlt.

Dabei finden alle Absorptionen gleichzeitig statt, d.h. alle möglichen Schwingungen werden gleichzeitig angeregt.

Der Unterschied zwischen Frequenz- und Zeitabhängigkeit (man spricht auch von Domäne) lässt sich am Beispiel eines Glockenspiels verdeutlichen.

Beim konventionellen Verfahren werden die Glocken nacheinander im Sinne der Melodie anschlagen, beim FT-Verfahren alle gleichzeitig, wie ~~beim Geläut nur kürzer Wollte man aus dem~~ Geläut eine Melodie formen, dann müssten die Töne

Dieses „Auseinandernehmen“ erfolgt beim FT-IR nur mit Computer möglich ist, und ihm auch seiner FT steht für Fourier-Transformation(sanalyse), die (1768 – 1830) zurück geht. Fourier bewies, dass jede komplex sie auch sein mag, durch einen Satz einfacher beschrieben werden kann, die sich nur in ihren Am-

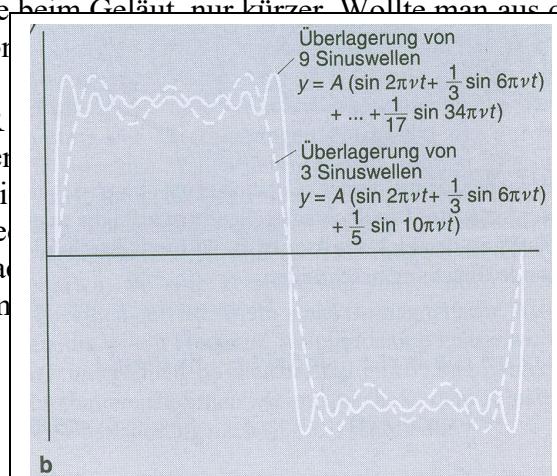


Abb. 20 zeigt, dass eine komplexe Rechteckwelle bereits durch die Überlagerung von 3 Sinuswellen recht gut und durch 9 schon ziemlich angenähert dargestellt werden kann.

Umgekehrt ist es damit möglich, die einzelnen Sinuswellen aus der Rechteckwelle herauszurechnen.

Die Berechnung ist jedoch ein aufwändiger Vorgang, so dass die Anwendung warten musste, bis leistungsfähige Computer zur Verfügung standen.

Abb.20: Rechteckwelle aus Sinuswellen

Damit ist es also prinzipiell möglich aus einem Geläut, die einzelnen Glocken „herauszuhören“, um beim Beispiel zu bleiben.

Beim FT-IR-Verfahren entsteht aus einem oder mehreren Pulsen (in der Regel 4) ein sog. Interferogramm, das der Rechteckwelle entspricht.

Aus dem Interferogramm wird auf die einzelnen Sinus- bzw. Cosinuswellen mit Fouriertransformation „zurückgerechnet“, so dass ein mit der konventionellen, dispersiven Methode identisches Spektrum entsteht.

Der Vorteil der FT-Spektrometer besteht darin, dass sie technisch einfachere Einstrahlgeräte sind, weil die Kompensation des background und die Steuerung zur Spektrenaufnahme vom Computer geleistet wird.

Außerdem sind Auflösung, Signal/Rausch-Verhältnis besser und die Probenmenge kann geringer sein.

In Verbindung mit einem ATR-Zubehör wird zudem die Probenvorbereitung erheblich verkürzt.

Schließlich werden Spektrenaufnahme, Bearbeitung und Dokumentation, sowie die auswertung durch elektronische Bibliothek extrem verbessert.

Siehe dazu auch die Betriebsanleitung.

Literatur:

Skoog/Leary, Instrumentelle Analytik, Berlin Heidelberg 1996

P.W. Atkins, Kurzlehrbuch Physikalische Chemie, Weinheim 2002

Tausch/v.Wachtendonk, Chemie S.II, Würzburg, 1993

Binnewies/Jäckel/Willner, Allgemeine und Anorganische Chemie, München, 2004