

Schwingungsspektroskopie (IR, Raman)

Die Schwingungsspektroskopie ist eine energiesensitive Methode. Sie beruht auf den durch Molekülschwingungen hervorgerufenen periodischen *Änderungen der Dipolmomente (IR)* bzw. *Polarisierbarkeiten (Raman)* von Molekülen oder Atomgruppen und den damit verbundenen *diskreten Energieüberträgen* und Frequenzänderungen bei der *Absorption (IR)* bzw. *Streuung (Raman)* elektromagnetischer Strahlung (*Auswahlregeln* beachten!).

Sie wird zur Charakterisierung von Verbindungen benutzt.

IR- und Raman-spektroskopisch kann man erhalten bzw. bestimmen:

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

Schwingungsspektroskopie (IR, Raman)

Zur Beschreibung der 3N-6 bzw. 3N-5 unterschiedlichen Möglichkeiten, wie ein nicht-lineares bzw. lineares Molekül aus N Atomen schwingen kann, wird das Modell des harmonischen bzw. anharmonischen Oszillators verwendet.

Diese Schwingungsmoden (Normalschwingungen) führen bei

- Bestrahlung mit *polychromatischem Licht* geeigneter Wellenlängen bei *Änderung des Dipolmoments* $\mu = \alpha \cdot E + \dots$ zu *Absorptionsbanden* (IR) und bei
- Bestrahlung mit *monochromatischem Licht* geeigneter Wellenlänge bei *Änderung der Polarisierbarkeit* α zu *Streulicht* (Raman)

mit charakteristischen Energien/Frequenzen/Wellenzahlen/Wellenlängen, Intensitäten und Halbwertsbreiten, die bestimmt und analysiert werden.

Die Schwingungsfrequenzen liegen im Bereich von 10^{12} bis $3 \cdot 10^{14}$ Hz mit Schwingungsenergien von 0,4 bis 120 kJ/mol ($4 \cdot 10^{-3}$ bis 1,24 eV), Wellenzahlen von 33 bis 10^4 cm^{-1} und Wellenlängen von 300 bis 1 μm .

Die Intensitäten sind proportional zum Quadrat der Dipolmoments- bzw. Polarisierbarkeitsänderungen.