
essentials

essentials liefern aktuelles Wissen in konzentrierter Form. Die Essenz dessen, worauf es als „State-of-the-Art“ in der gegenwärtigen Fachdiskussion oder in der Praxis ankommt. *essentials* informieren schnell, unkompliziert und verständlich

- als Einführung in ein aktuelles Thema aus Ihrem Fachgebiet
- als Einstieg in ein für Sie noch unbekanntes Themenfeld
- als Einblick, um zum Thema mitreden zu können

Die Bücher in elektronischer und gedruckter Form bringen das Expertenwissen von Springer-Fachautoren kompakt zur Darstellung. Sie sind besonders für die Nutzung als eBook auf Tablet-PCs, eBook-Readern und Smartphones geeignet. *essentials*: Wissensbausteine aus den Wirtschafts-, Sozial- und Geisteswissenschaften, aus Technik und Naturwissenschaften sowie aus Medizin, Psychologie und Gesundheitsberufen. Von renommierten Autoren aller Springer-Verlagsmarken.

Weitere Bände in der Reihe <http://www.springer.com/series/13088>

Thomas Hecht

Physikalische Grundlagen der IR-Spektroskopie

Von mechanischen Schwingungen
zur Vorhersage und Interpretation
von IR-Spektren



Springer Spektrum

Thomas Hecht
Berufliche Schule
Carl-Engler-Schule Karlsruhe
Karlsruhe, Deutschland

ISSN 2197-6708
essentials

ISSN 2197-6716 (electronic)

ISBN 978-3-658-27534-1

ISBN 978-3-658-27535-8 (eBook)

<https://doi.org/10.1007/978-3-658-27535-8>

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Springer Spektrum

© Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, ein Teil von Springer Nature 2019

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von allgemein beschreibenden Bezeichnungen, Marken, Unternehmensnamen etc. in diesem Werk bedeutet nicht, dass diese frei durch jedermann benutzt werden dürfen. Die Berechtigung zur Benutzung unterliegt, auch ohne gesonderten Hinweis hierzu, den Regeln des Markenrechts. Die Rechte des jeweiligen Zeicheninhabers sind zu beachten.

Der Verlag, die Autoren und die Herausgeber gehen davon aus, dass die Angaben und Informationen in diesem Werk zum Zeitpunkt der Veröffentlichung vollständig und korrekt sind. Weder der Verlag, noch die Autoren oder die Herausgeber übernehmen, ausdrücklich oder implizit, Gewähr für den Inhalt des Werkes, etwaige Fehler oder Äußerungen. Der Verlag bleibt im Hinblick auf geografische Zuordnungen und Gebietsbezeichnungen in veröffentlichten Karten und Institutionsadressen neutral.

Springer Spektrum ist ein Imprint der eingetragenen Gesellschaft Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH und ist ein Teil von Springer Nature.

Die Anschrift der Gesellschaft ist: Abraham-Lincoln-Str. 46, 65189 Wiesbaden, Germany

Was Sie in diesem *essential* finden können

- Einen verständlichen Überblick über die physikalischen Grundlagen der Infrarotspektroskopie
- Den Zusammenhang zwischen Molekülstruktur, Bindung und Banden im IR-Spektrum
- Eine Strategie zur Vorhersage einfacher IR-Spektren
- Einige beispielhafte Interpretationen von IR-Spektren unter Beachtung der zugrunde liegenden Prinzipien

Inhaltsverzeichnis

1 Molekülspektroskopie	1
1.1 Elektromagnetisches Spektrum	1
1.2 Wechselwirkung Strahlung-Materie.	3
1.3 Einordnung der IR-Spektroskopie ins elektromagnetische Spektrum	4
2 Schwingungsspektroskopie	7
2.1 Mechanischer harmonischer Oszillator	7
2.2 Quantenmechanischer harmonischer Oszillator.	11
2.3 Quantenmechanischer anharmonischer Oszillator.	13
3 Schwingungsmoden	15
3.1 Normalschwingungen	15
3.2 Auswahlregeln	17
3.3 Banden im Infrarotspektrum	18
3.4 Ober-, Kombinationsschwingungen und „hot bands“	19
3.5 Isotopeneffekte.	19
3.6 Strategie	20
3.7 Vorsicht, Gruppentheorie.	20
4 Rotationen	23
5 Beispiele	27
5.1 Gase	27
5.1.1 Kohlenstoffdioxid.	27
5.1.2 Wasser	29
5.1.3 Halogenwasserstoffe	31

5.2	Flüssigkeiten	33
5.2.1	Formaldehyd	33
5.2.2	Aceton	34
5.2.3	Methanol	37
5.3	Feststoffe	38
5.3.1	Eicosan	38
5.3.2	Nitrate	39
5.3.3	Polyethylen	41
5.4	Fazit	41
	Literatur	45