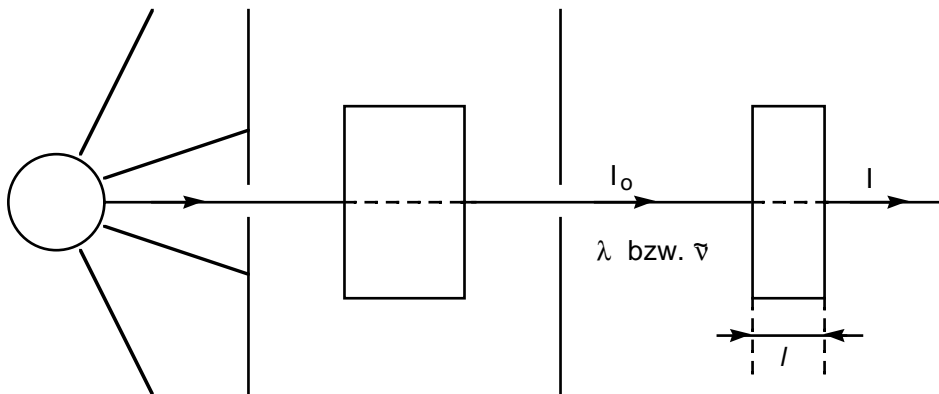


Einleitung zur Infrarot (IR)- und Elektronen (UV/VIS)-Spektroskopie

Entsprechend der unten zusammengefassten Untersuchungsmethodik handelt es sich bei der IR- und UV/VIS-Spektroskopie um das Studium der Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung (vgl. nächste Seite) mit Materie:



Strahlungsquelle

Monochromator
(Filter, Prisma, Gitter)

Probe:
Schichtdicke l [cm]
Konzentration c [mol lit⁻¹]

Oft sind Probe und Monochromator vertauscht (IR-Spektroskopie).

Bouguer-Lambert-Beersches Gesetz :

$$T = \frac{I}{I_0} = 10^{-\epsilon c l}$$

$$A = \log \frac{I_0}{I} = \epsilon c l = -\log T$$

$$T [\%] = 100 T$$

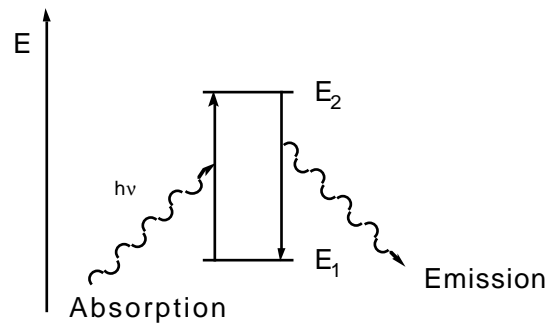
T: Durchlässigkeit, Transmission (Transmittance)

A: Extinktion (Absorbance)

ϵ : Molarer dekadischer Extinktionskoeffizient, bzw. als molarer Absorptionskoeffizient insbesondere in der klinischen Chemie bezeichnet (Molar {decadic} absorption coefficient).

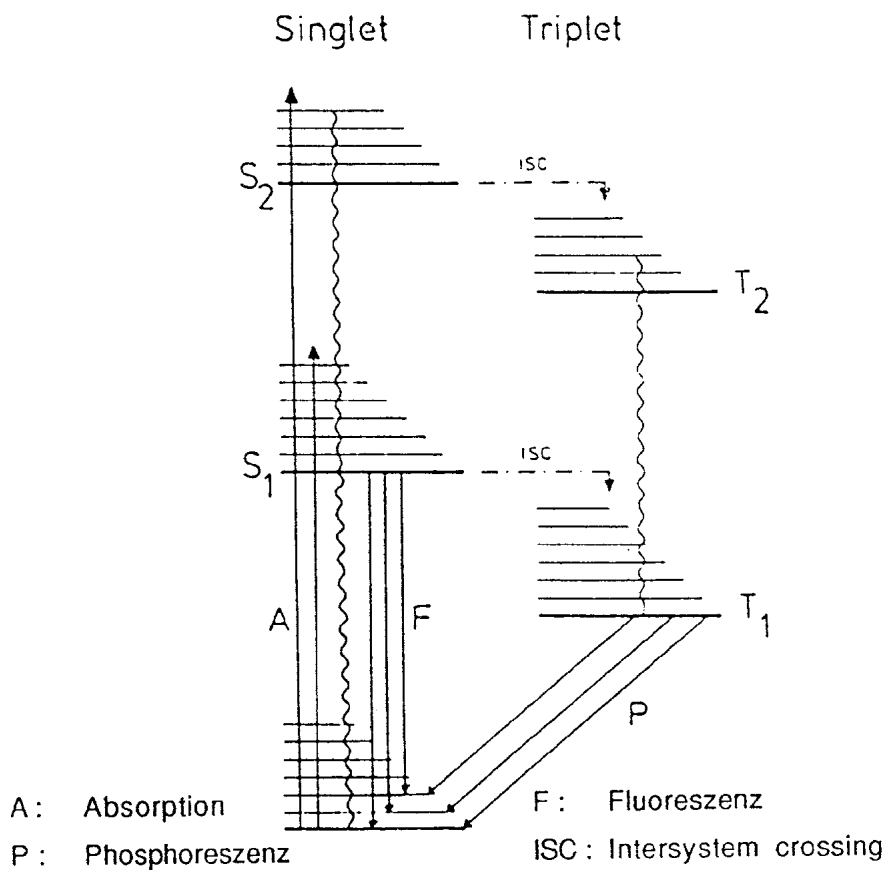
2.2. Elektromagnetische Strahlung

Grundsätzlich sind Absorptions- und Emissionsprozesse möglich:



E_1, E_2 : Energieniveaus der Zustände 1 bzw. 2

Zur Veranschaulichung von Elektronen-Übergängen kann das Jablonski-Term-schema herangezogen werden:




Zur Charakterisierung der Strahlung können verwendet werden:

λ :	Wellenlänge	[nm = 10 ⁻⁹ m] ; [μm = 10 ⁻⁶ m]
$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$:	Wellenzahl	[cm ⁻¹]
$\nu = \frac{c}{\lambda}$:	Frequenz	[Hz = s ⁻¹]
$\Delta E = h \nu$:	Energie	[kcal mol ⁻¹] ; [J mol ⁻¹]

Der molare Extinktionskoeffizient ε bzw. die Energieaufnahme der Probe ändert als Funktion der Wellenlänge bzw. der Energie der eingesetzten Strahlung:

$$\varepsilon = \varepsilon(\lambda) \quad \text{bzw.} \quad \varepsilon = \varepsilon(\tilde{\nu})$$

Es gilt : $[\varepsilon] = \frac{\text{lit}}{\text{mol cm}}$  $\frac{\text{Fläche}}{\text{mol}}$

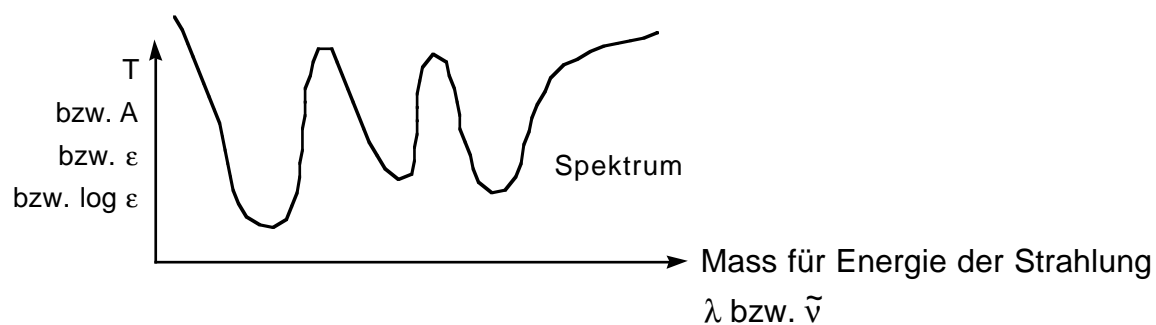
wobei $0 \leq \varepsilon \leq \text{ca. } 100'000$

In der Elektronenspektroskopie sind Werte von ε bis 600'000 gefunden worden (Decamethylsapphyrin, vgl. J. Am. Chem. Soc. **105**, 6429 (1983)).

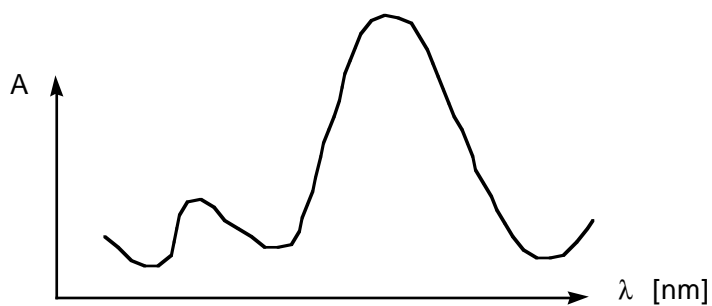
Die obere Grenze ist unter der Annahme ableitbar, dass die Übergangswahrscheinlichkeit (Wahrscheinlichkeit, mit der ein auf die Molekel treffendes Photon absorbiert wird) gleich 1 ist.

2.3. Spektren

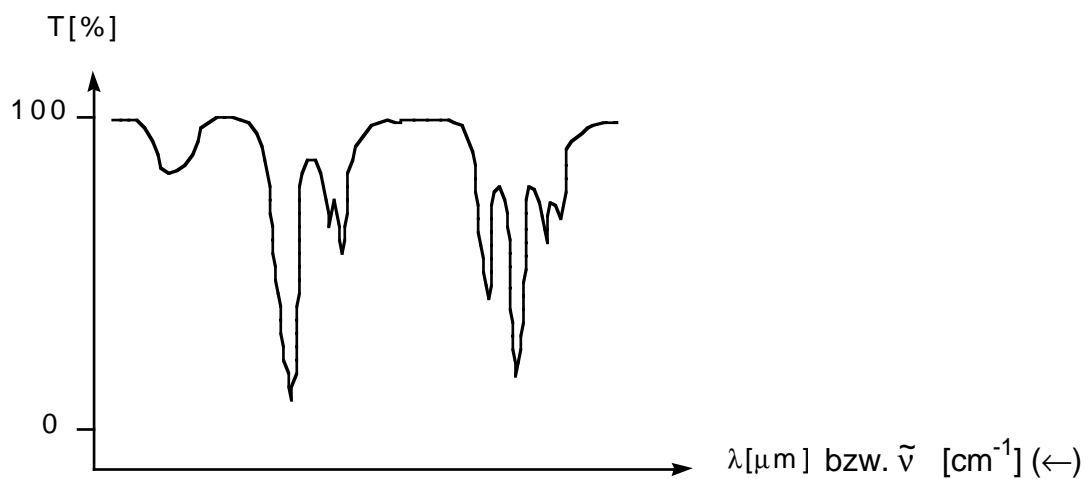
Spektren sind graphische Darstellungen vom Typ :



Im Speziellen finden in der organisch-chemischen Praxis oft Verwendung :



Elektronenspektrum (UV/VIS-Spektrum)



IR-Spektrum