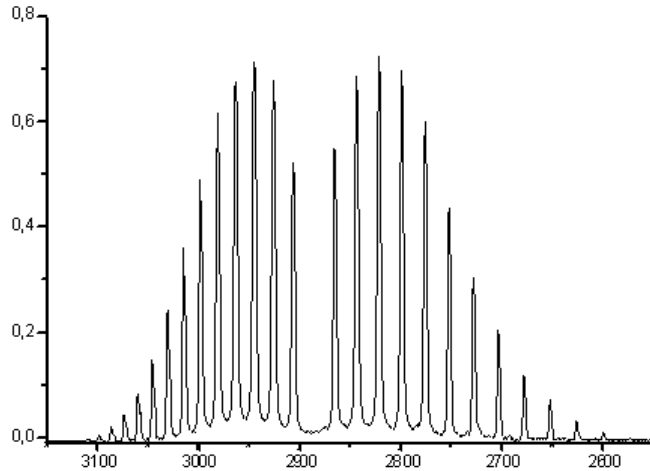
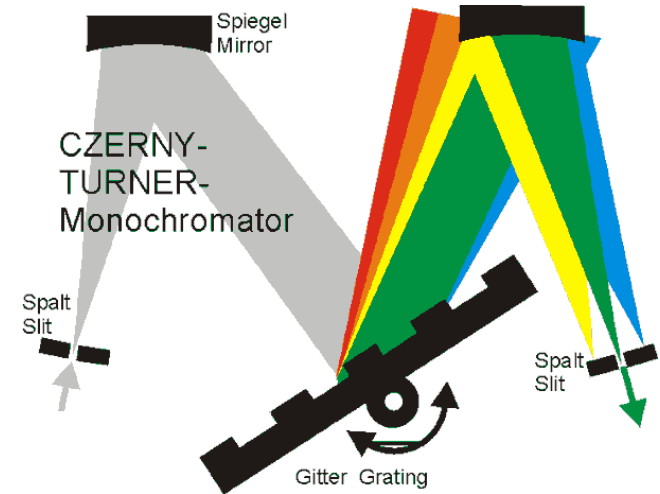


PC II

Kinetik und Struktur



Kapitel 4



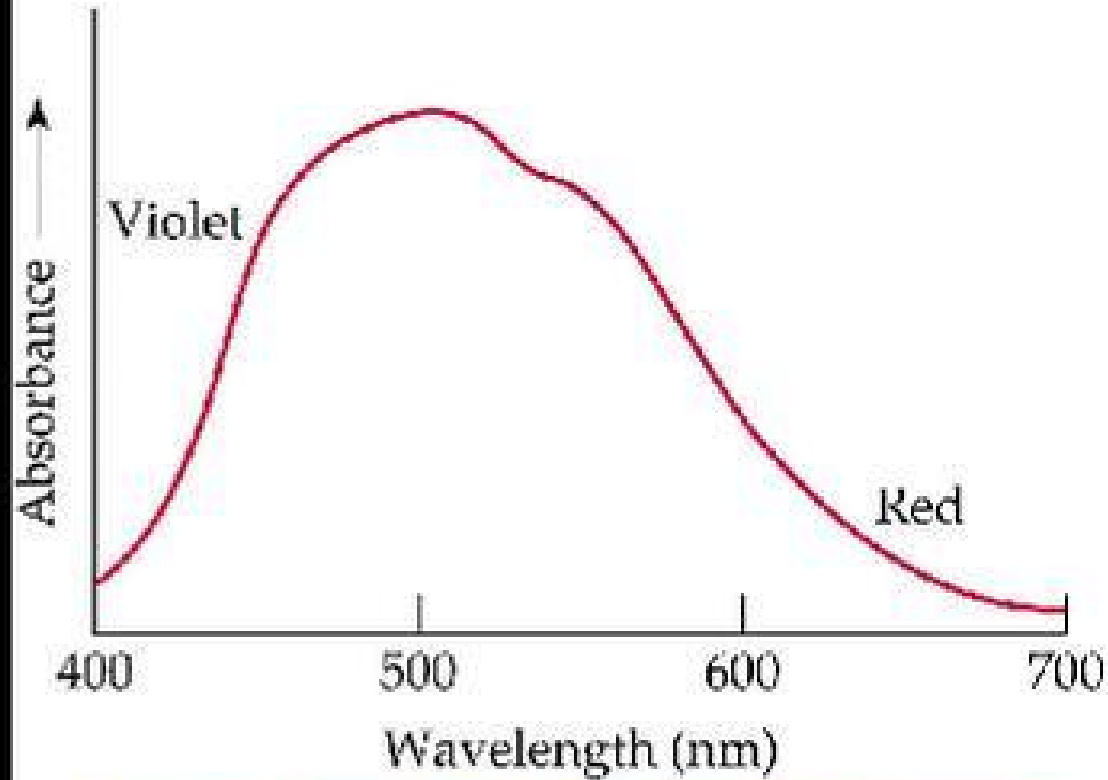
Grundzüge der Spektroskopie

Spektralbereiche, Dipolmoment, Molekülschwingungen, Energie der Schwingungen, IR-Absorptions- und Raman-Spektroskopie

Verwechslungsgefahr

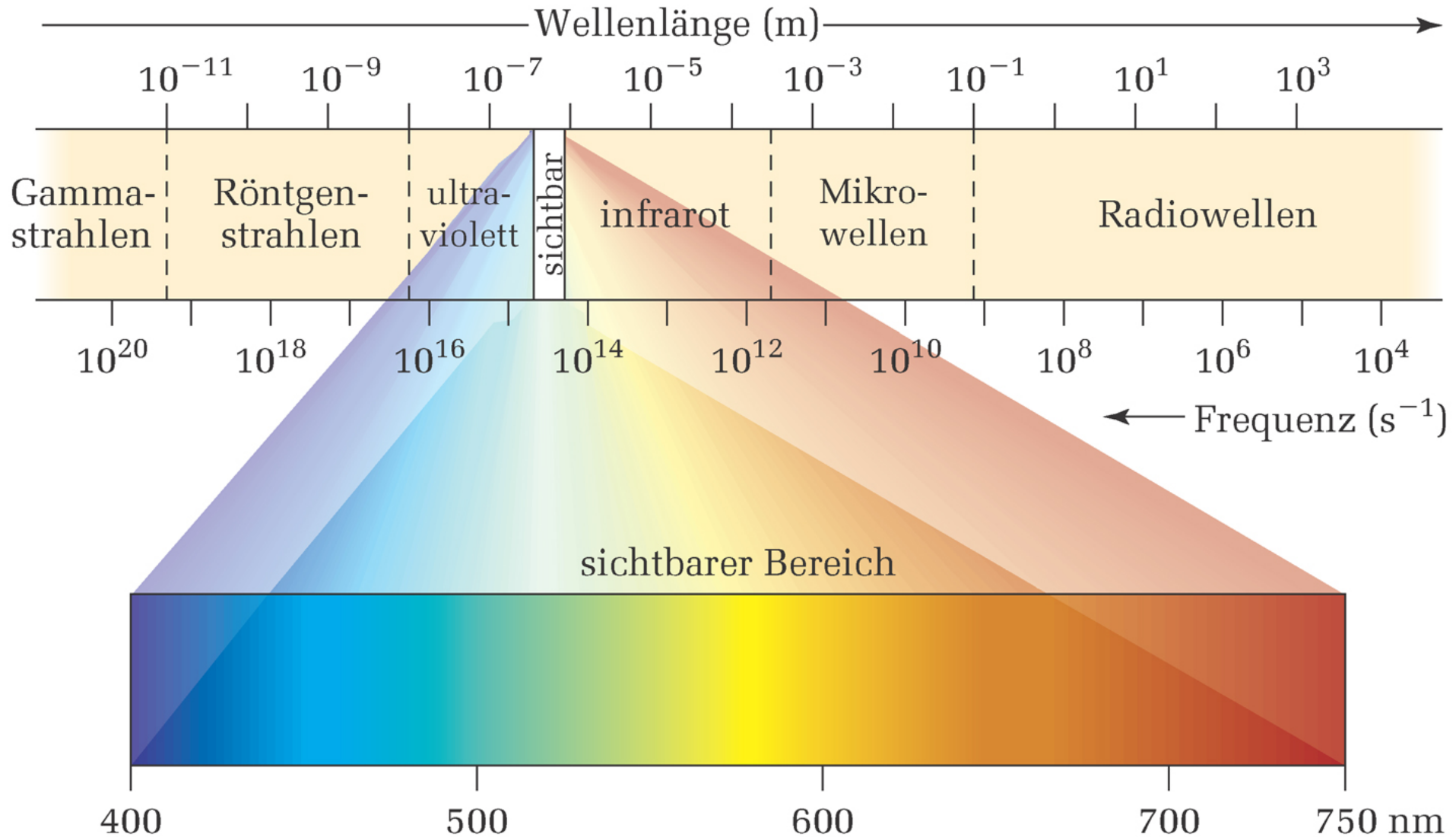


Speck drum

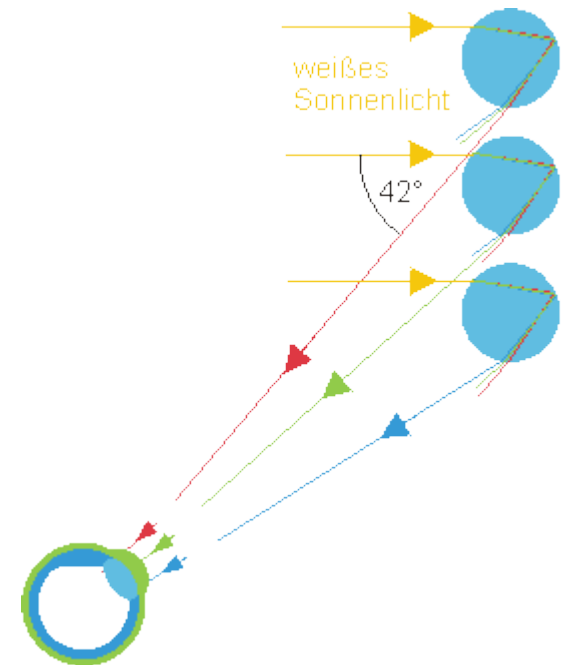
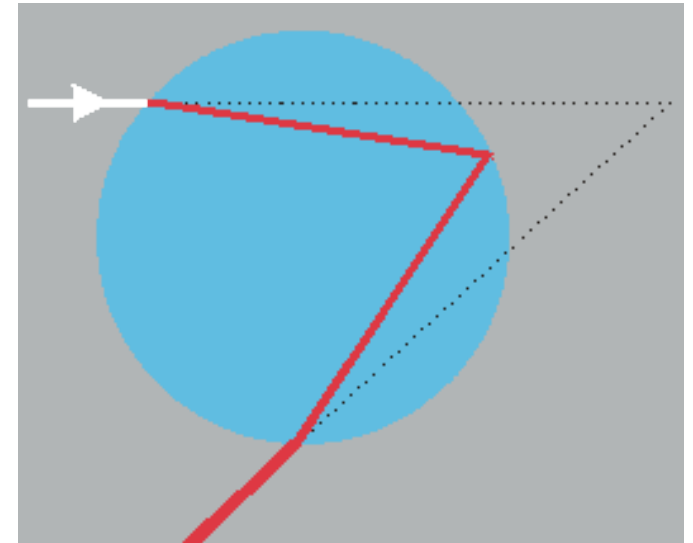


Spektrum

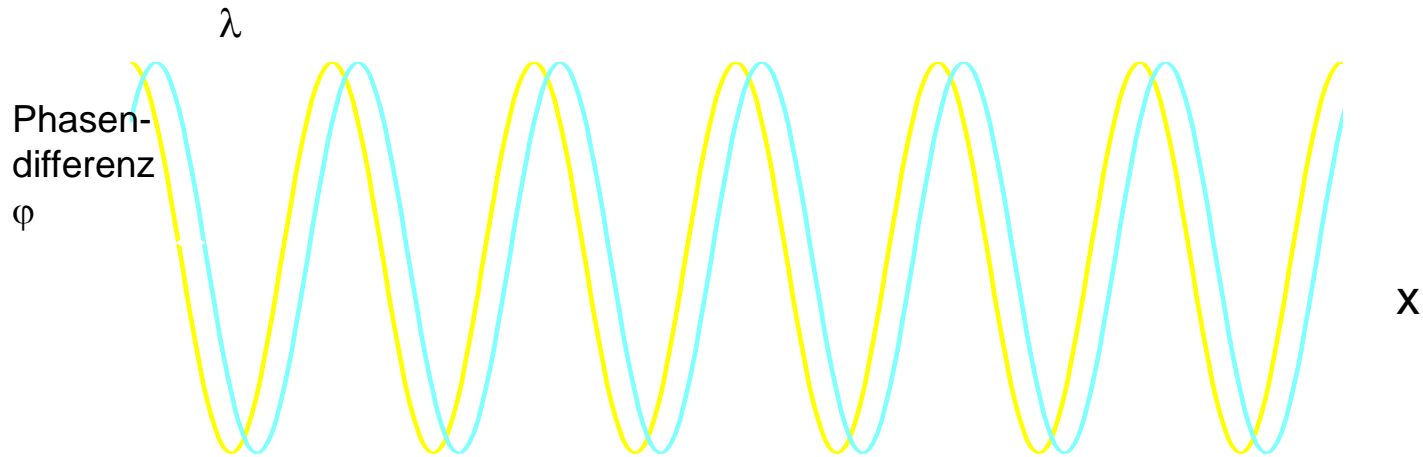
Elektromagnetisches Spektrum



Ein Spektrometer



Licht, eine elektromagnetische Welle



Frequenz $\omega=2\pi\nu$; $\lambda=c/\nu$

Amplitude A

Phase φ

Daraus folgen zwei Messprinzipien:

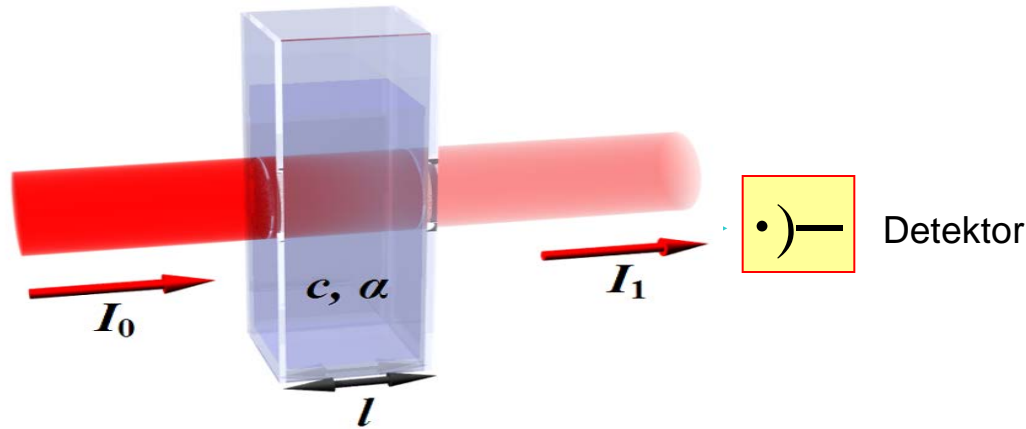
Die Frequenz ν (Wellenlänge $\lambda=c/\nu$) wird verändert und der Einfluss auf die

- a) Amplitude (Intensitätsänderung)
- b) Phase (über Interferenz)

wird gemessen.

Absorption

Ein Lichtstrahl (gerichtete elektromagnetische Strahlung) wird durch eine Küvette der Länge ℓ gestrahlt und die transmittierte Intensität gemessen.



$$dI \sim -I d\ell \Rightarrow dI = -\alpha I d\ell \Rightarrow I = I_0 e^{-\alpha\ell}$$

$$I = I_0 10^{-\alpha'\ell} = I_0 10^{-\varepsilon c\ell}$$

$$I = I_0 e^{-\alpha\ell} = I_0 e^{-\sigma N\ell}$$

c : Konzentration [Mol L⁻¹]

ε : Extinktionskoeffizient [L Mol⁻¹ cm⁻¹]

N : (absorptionsfähige) Moleküle [cm⁻³]

σ : Absorptionsquerschnitt [cm²]

Umrechnung: $\varepsilon c \ln 10 = \sigma N$ (Einheiten beachten!)



August Beer

* 31. Juli 1825 in Trier

† 18. November 1863 in Bonn

Deutscher Mathematiker,
Chemiker und Physiker



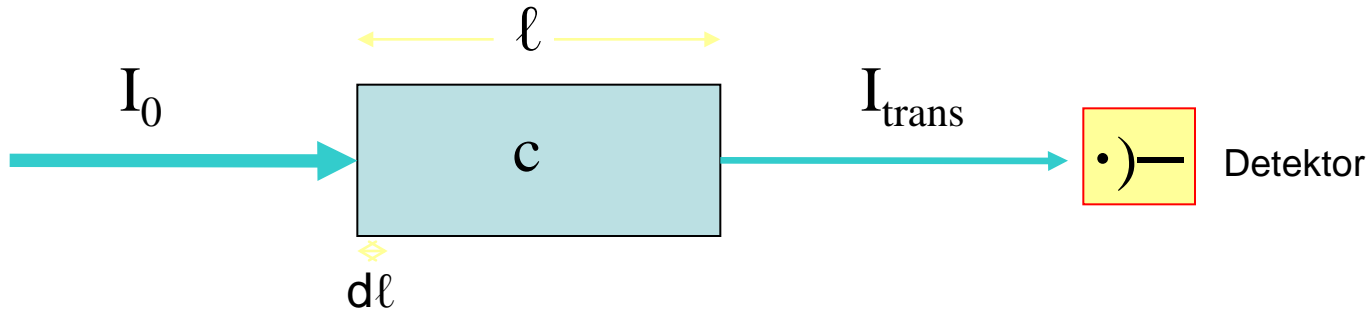
Johann Heinrich Lambert

* 26. August 1728 in Mülhausen

† 25. September 1777 in Berlin

Deutscher Mathematiker, Physiker und
Philosoph, der die Irrationalität der Zahl
Pi bewies.

Absorption: Lambert-Beersches Gesetz

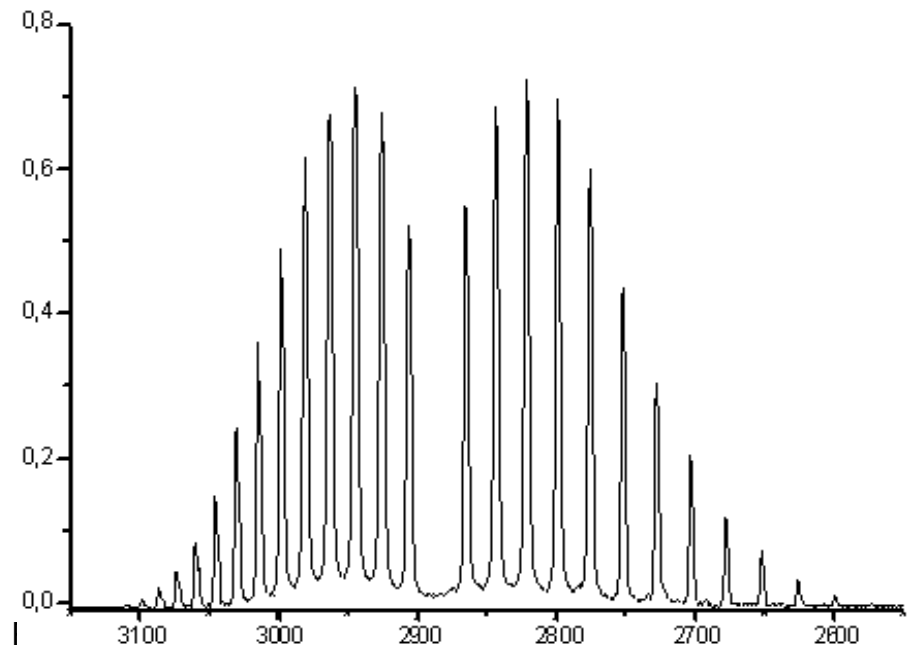


$$I(\nu) = I_0(\nu) 10^{-\epsilon c \ell}$$

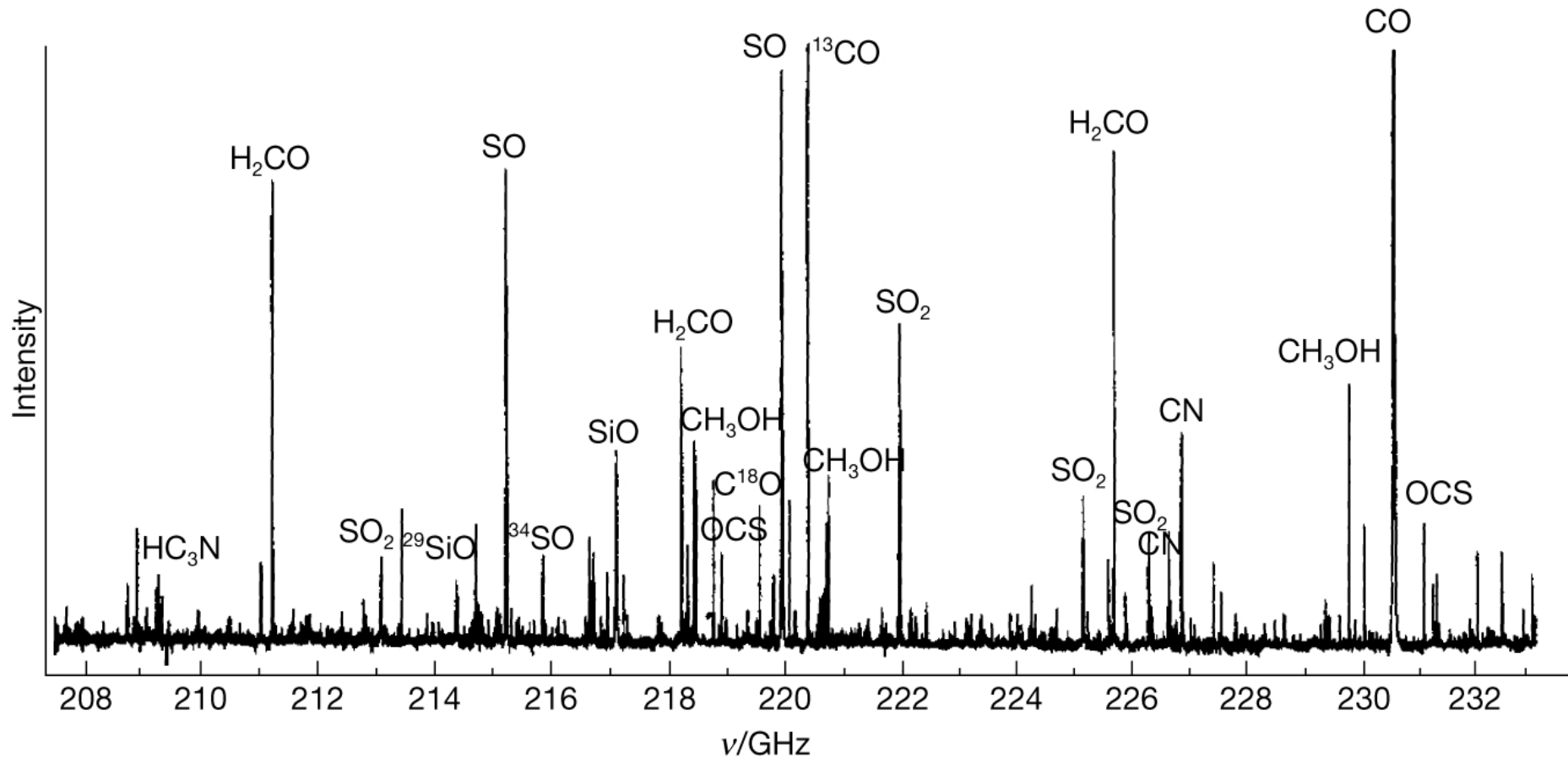
$$I(\nu) = I_0(\nu) e^{-\sigma(\nu) N(\nu) \ell}$$

$$\epsilon c \ell = \log(I_0/I) \quad := \text{optische Dichte}$$

$$\sigma(\nu) N(\nu) \ell = \ln(I_0/I) \quad := \text{Absorbanz}$$



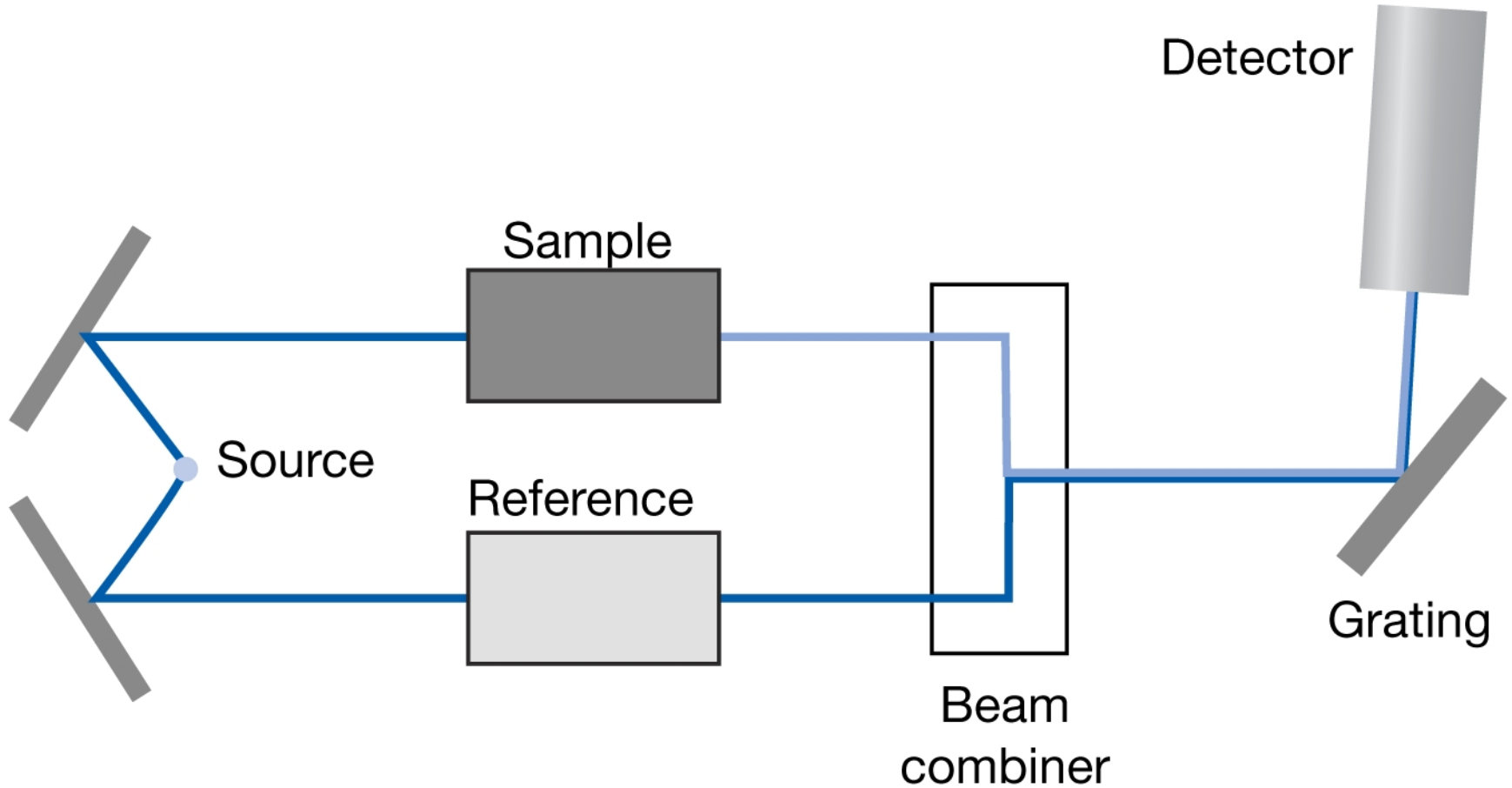
Reine Rotationsspektren - Mikrowellen



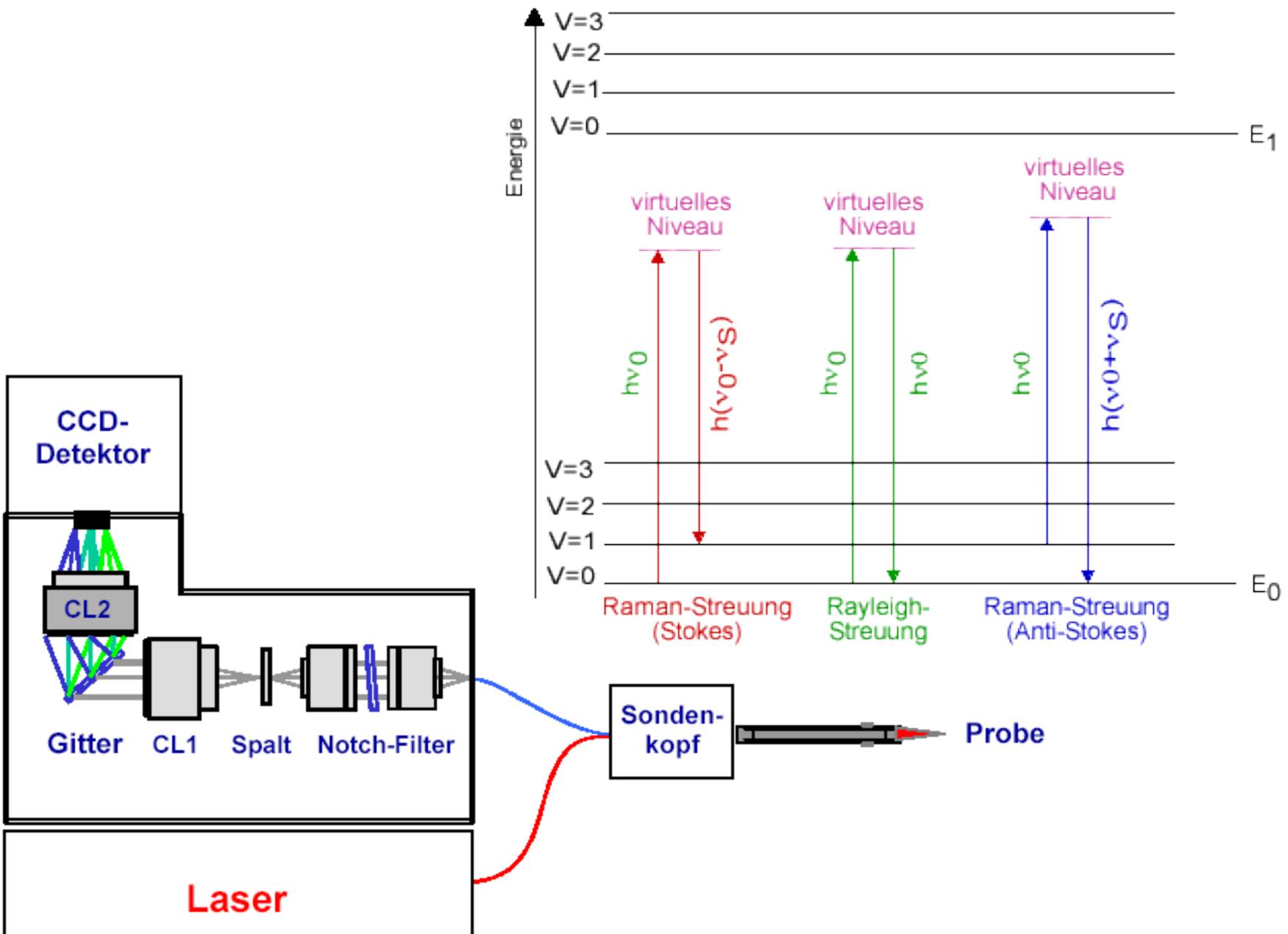
Das Rotationsspektrum des Orionnebel mit den spektralen Fingerabdrücken zwei- und mehratomiger Moleküle in der Wolke.

(Nach G. A. Blake *et al.*, *Astrophys. J.* **315** (1987) 621.)

Absorptionsspektrometer



Raman-Spektroskopie



Chandrasekhara Venkata Raman



Chandrasekhara Venkata Raman

* 7. Nov. 1888 in Trichinopoly (Indien)
+ 21. Nov. 1970 Karnataka (Indien)
1930 Nobelpreis für Physik

FTIR-Spektroskopie (Interferenz)

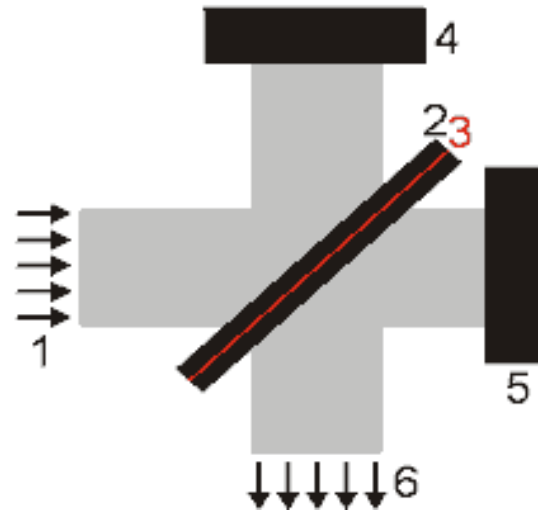
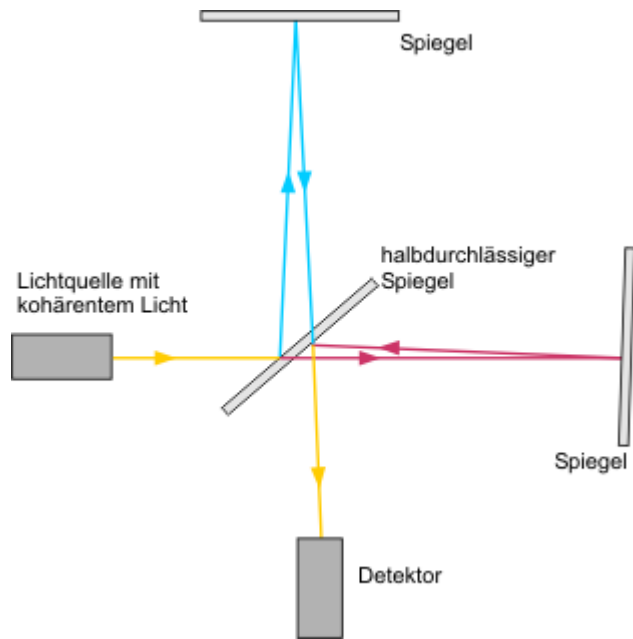
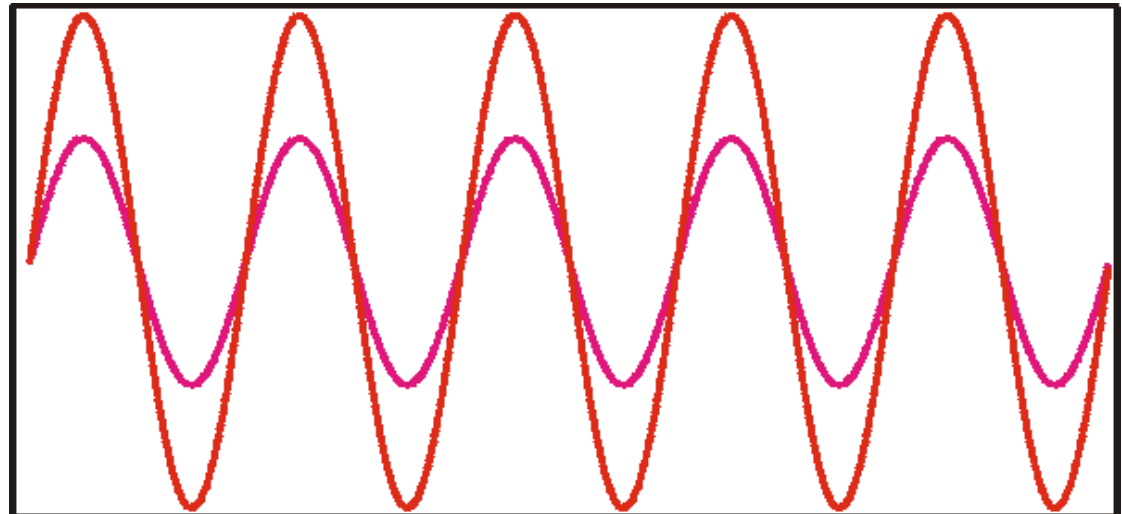


Abb. rechts:
 beide Wellen (grau und lila)
 interferieren (überlagern sich) zu
 einer resultierenden Welle (rot)

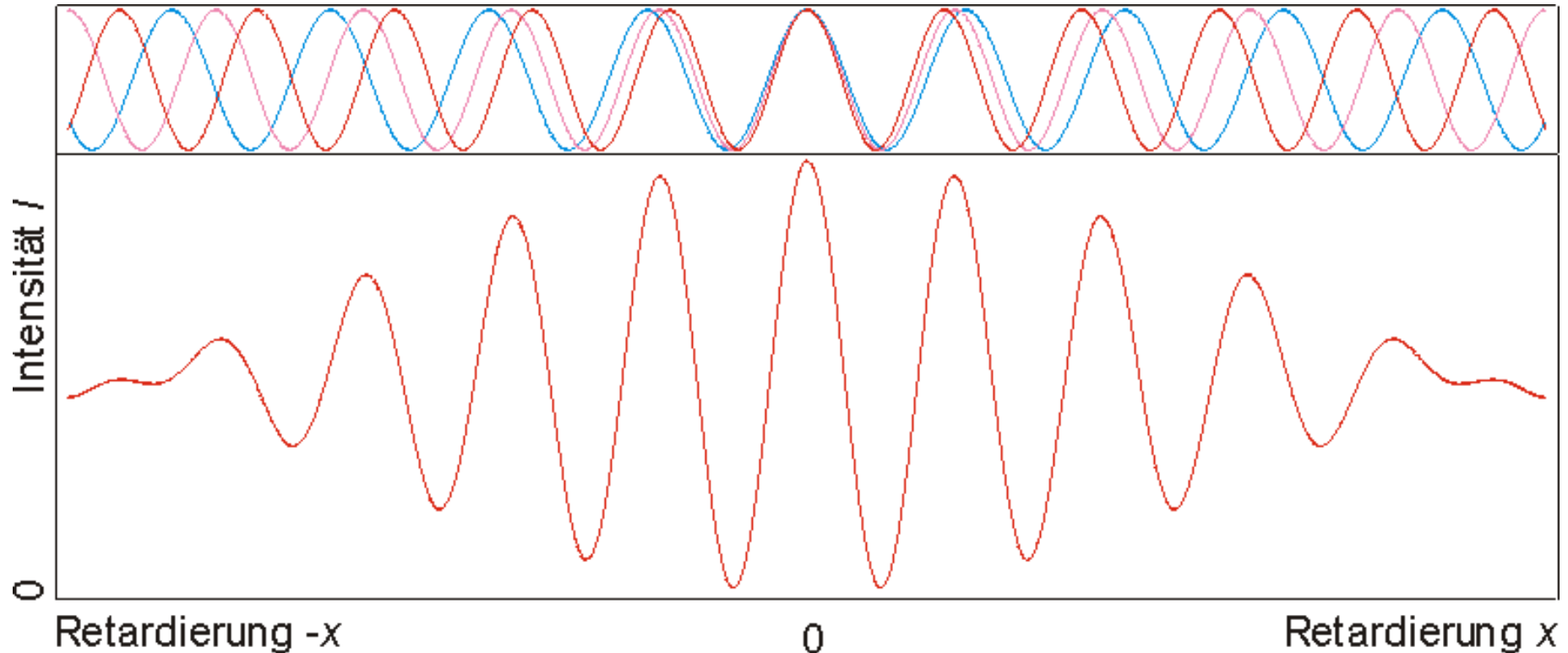
[Bemerkung: die graue sieht man nur als Animation]

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right)$$



FTIR-Spektroskopie (Interferenz)

Da Spektrometer Licht vieler Wellenlängen verarbeiten, entsteht die Interferenz für **jede** Wellenlänge. Entsprechend überlagern sich die Interferenz-Intensitäten der einzelnen Wellenlängen zusätzlich.

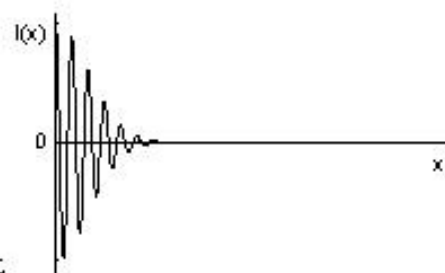
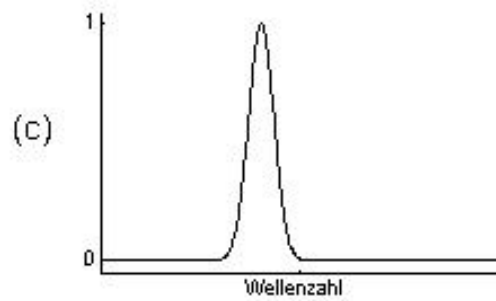
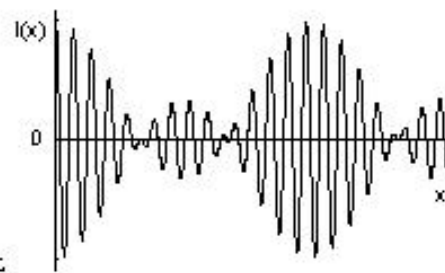
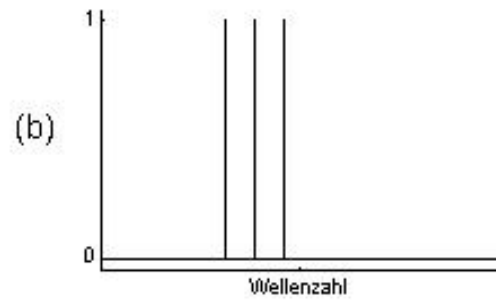
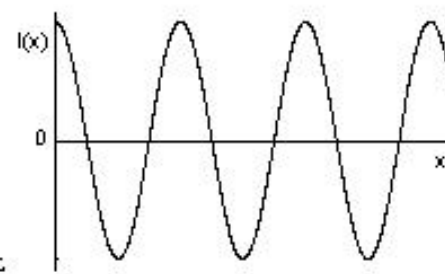
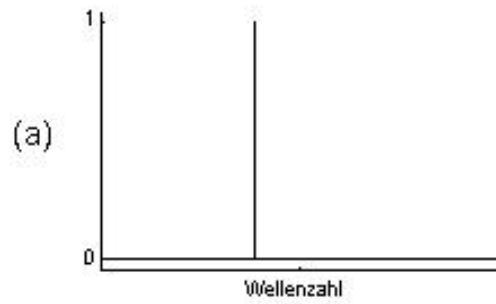


Überlagert man alle Wellenlängen (Kontinuum) des an der Messung beteiligten Lichts, so ergibt sich die vom Detektor erfasste Intensität; als Integral über die Bandbreite B der Anordnung:

$$I(x) = \int_B I(\tilde{\nu}) \cos(2\pi\tilde{\nu}x) d\tilde{\nu}$$

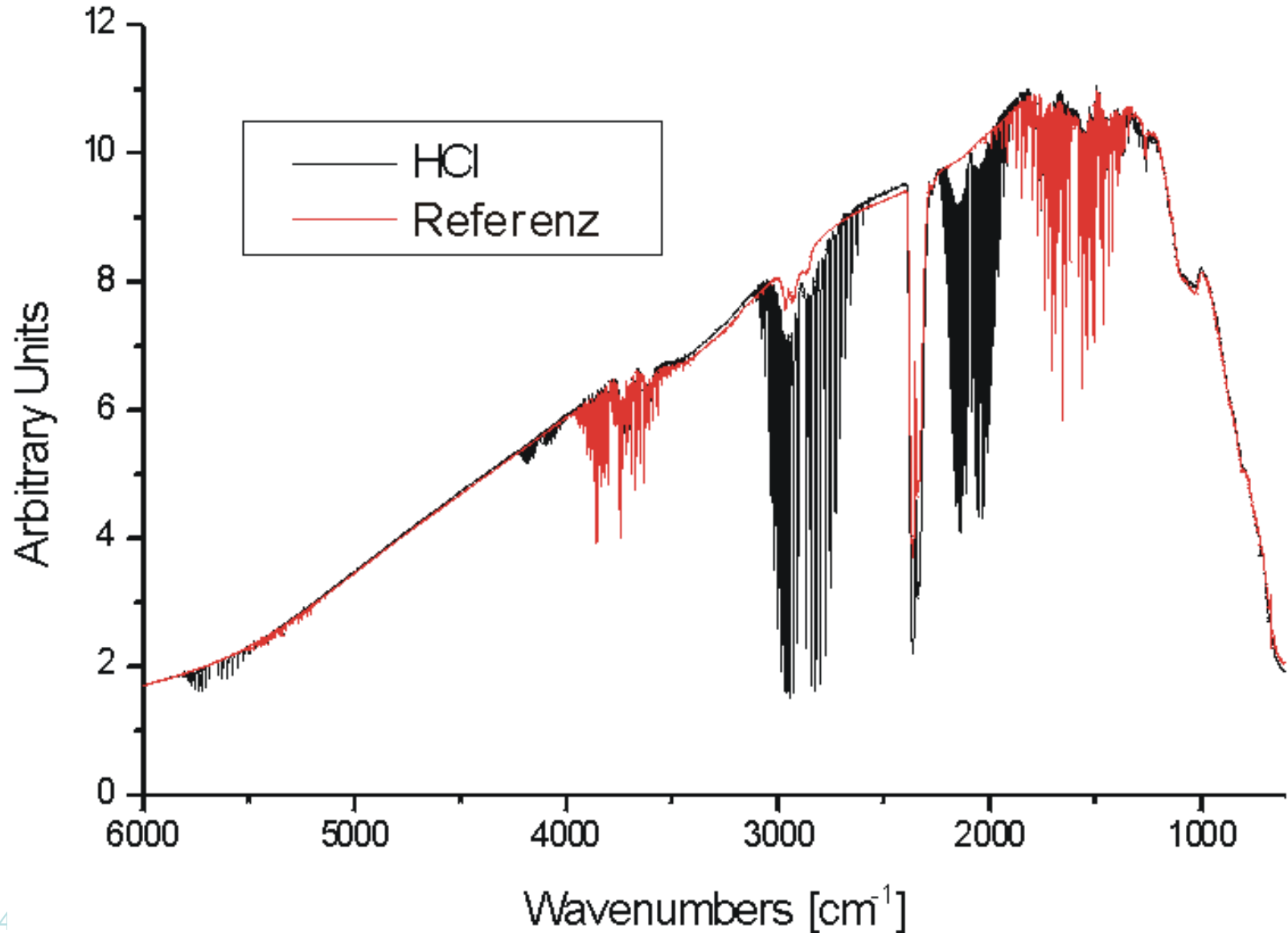
Spektrum

Interferogramm

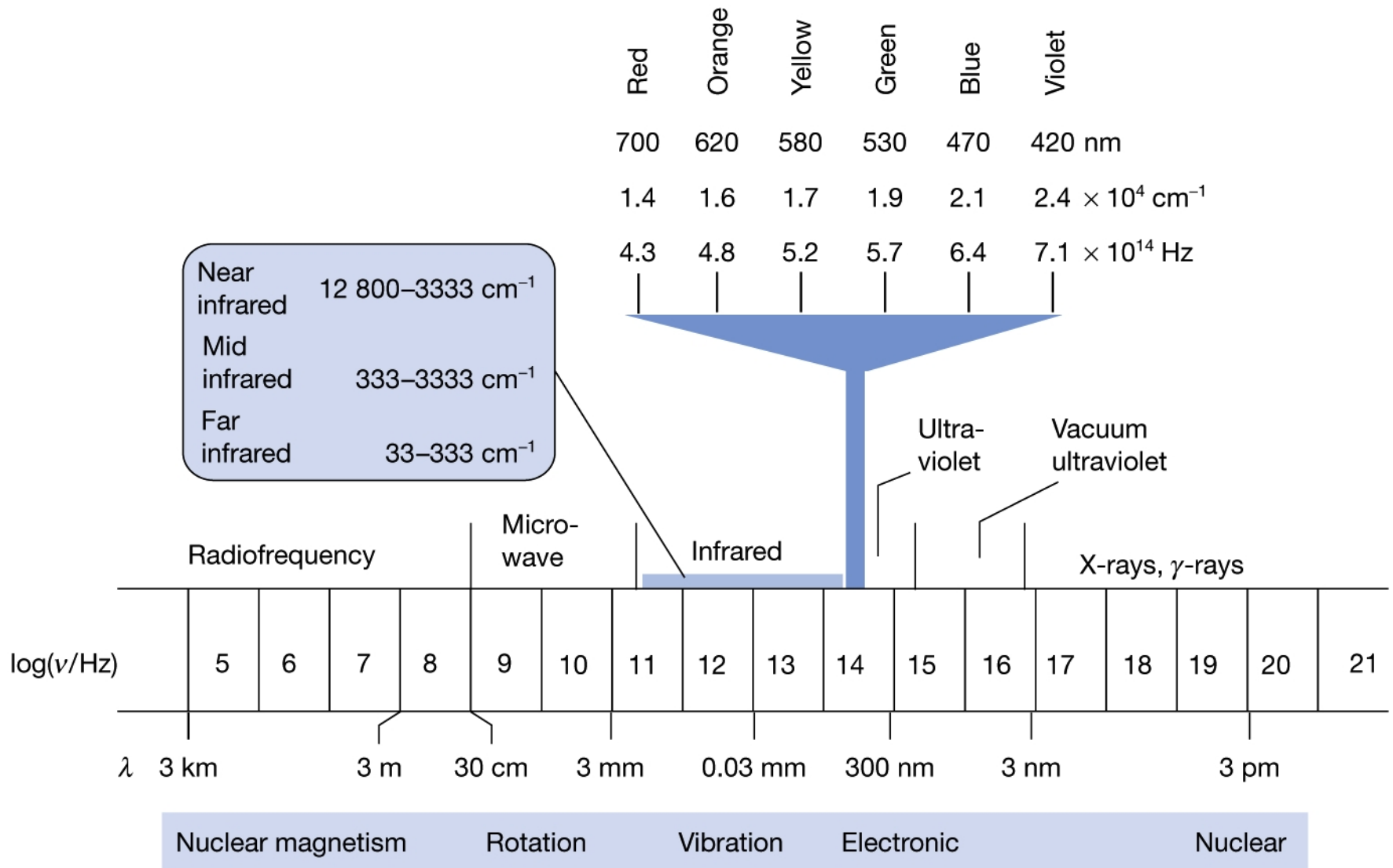


FTIR-Spektroskopie

Nach der Fouriertransformation erhält man die Einstrahlspektren



Spektralbereiche



Energieumrechnungen

Die IR-Spektroskopie (mittleres Infrarot) von Schwingungen umfasst die Spektralbereiche der elektromagnetischen Strahlung

400 ... 4000 cm^{-1}

Wellenzahlen

25 ... 2,5 μm

Mikrometer

12 ... 120 THz

Terahertz

50 ... 500 meV

Millielektronenvolt

Alle diese Angaben sind äquivalent und durch folgende Umrechnungen miteinander verknüpft:

$$\lambda [\mu\text{m}] = 10000 / \tilde{\nu} [\text{cm}^{-1}]$$

$$\lambda = c/\nu \quad \nu = c/\lambda$$

$$\nu [\text{Hz}] = 3 \cdot 10^{10} \cdot \tilde{\nu} [\text{cm}^{-1}]$$

$$\tilde{\nu} = 1/\lambda$$

$$E [\text{eV}] = 1/8065,5 \cdot \tilde{\nu} [\text{cm}^{-1}]$$

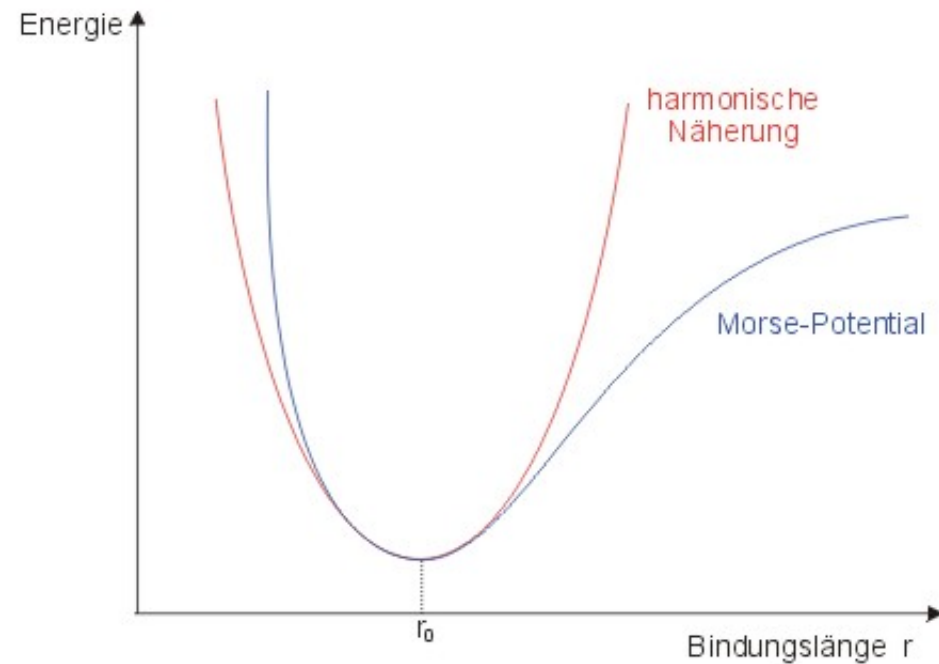
$$E = h \nu \quad (E = e U)$$

h : PLANCKsches Wirkungsquantum

e : Elementarladung

U : Spannung [Volt]; hier 1V

Molekülschwingungen



Harmonische Näherung des Potentials:
 $V(r) = \frac{1}{2} k r^2$

$$\text{Kraft } F = - \frac{\partial V}{\partial r} = - k r$$

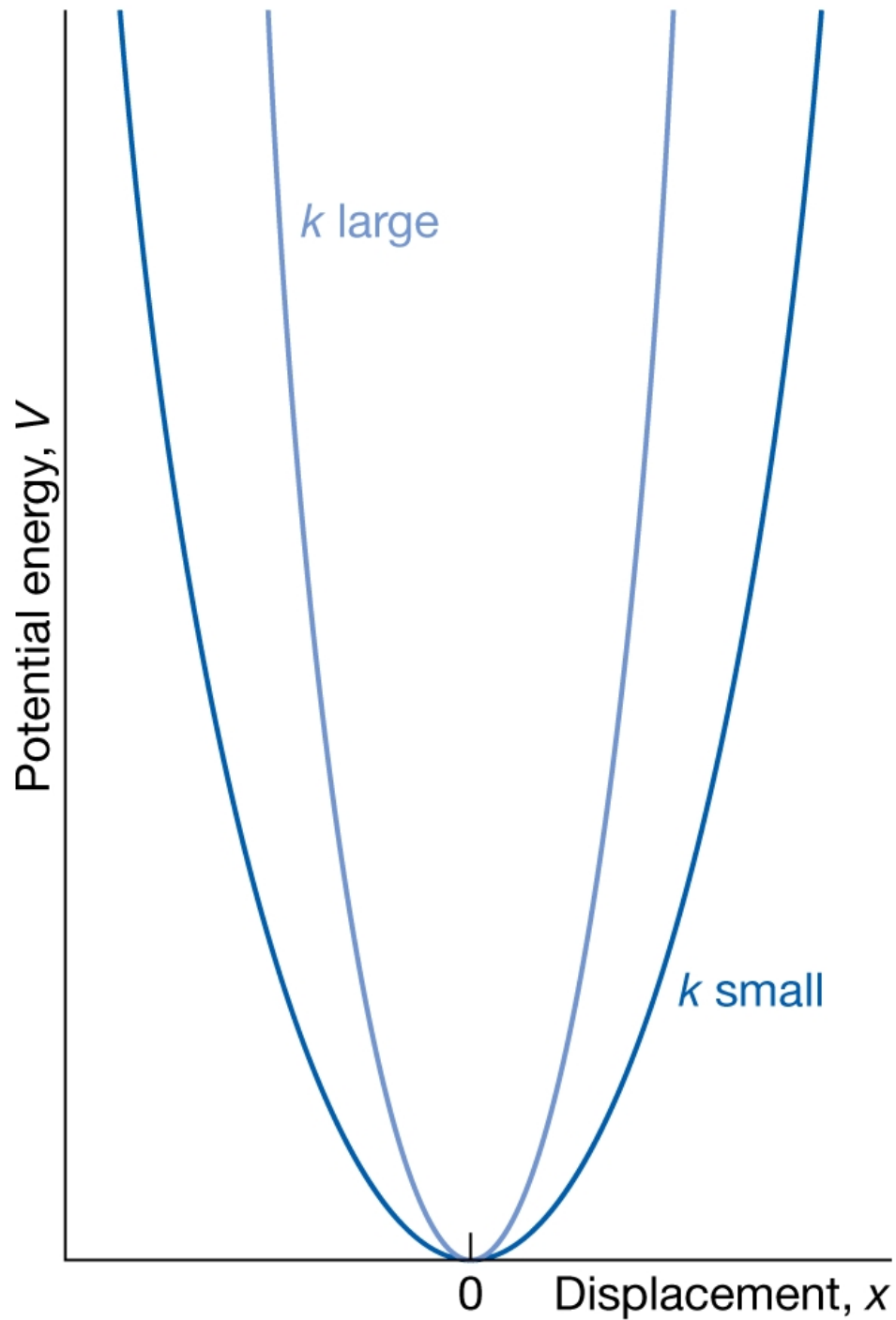
$$\text{Kraft } F = m \ddot{r} \quad (\text{für eine Masse})$$

Die Bewegungsgleichung $m \ddot{r} = - k r$ hat die Lösung

$r = a \sin \omega t$ (periodische Schwingung) mit Kreisfrequenz

$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$



$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Molekülschwingungen

In Molekülen schwingen die Atome gegeneinander, wobei sich der Schwerpunkt nicht verschieben darf. Im einfachsten Fall eines zweiatomigen Moleküls A-B, mit den beiden Massen m_A und m_B bleibt die Lösung erhalten, nur muss die Masse m durch die reduzierte Masse μ ersetzt werden:

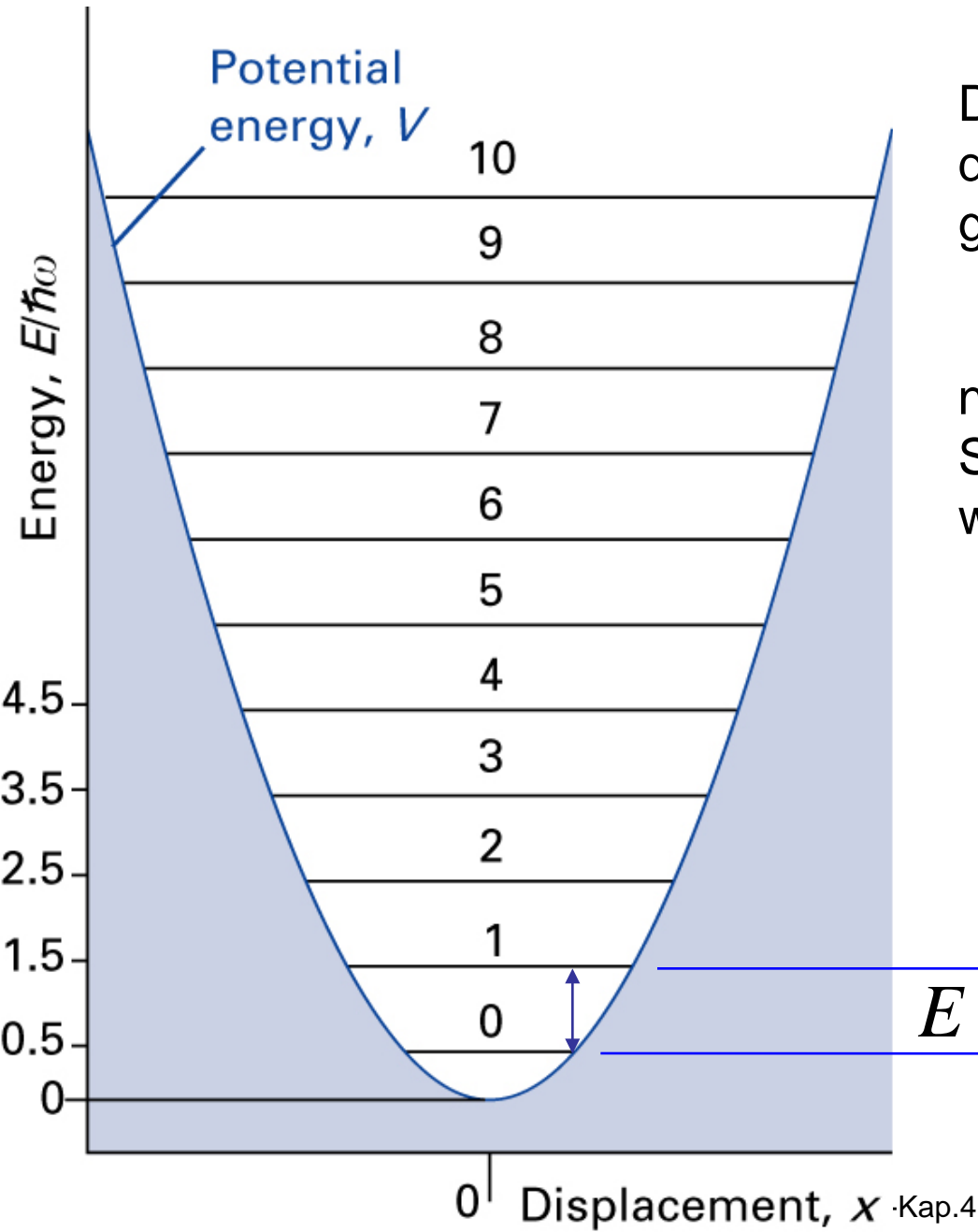
$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Die Quantenmechanik zeigt, dass die Energie der Schwingung durch

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

gegeben ist.

Molekülschwingungen



Die Quantenmechanik zeigt auch, dass die Schwingungsenergie nur ganzzahlige Vielfache von

sein kann und dem Molekül nur jeweils dieser Betrag als Schwingungsenergie zugeführt werden kann (für $V(r)=-kr^2$).

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Die Energie (auch der Schwingung) ist gequantelt



(a)



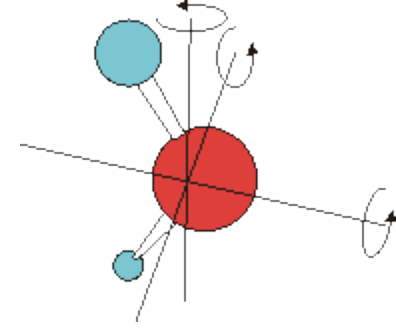
(b)

Die potenzielle Energie einer Person, die eine Rampe hochgeht (a), nimmt auf gleichmäßige, kontinuierliche Weise zu, während die potenzielle Energie einer Person, die eine Treppe hochgeht (b), stufenartig d. h. auf gequantelte Weise zunimmt.

Typische X-H, X=Y, X≡Y Bindungen

Bond Type	k	μ	$\bar{\nu}$
O-H	7	0.94	3600
N-H	6	0.93	3300
C-H	5	0.92	3000
C-C	4.25	6.00	1100
C=C	9.6	6.00	1650
C=O	12	6.86	1725
C≡C	16	6.00	2100
C≡N	21	6.46	2350

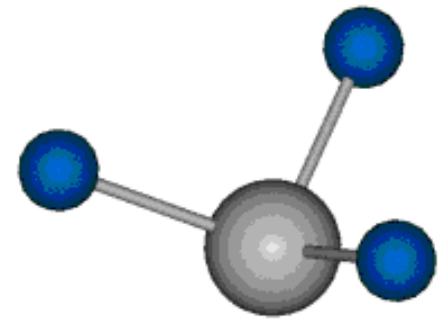
Schwingungen und Rotationen



Die Quantenmechanik zeigt, dass nur diskrete Energien erlaubt sind und Energiebeträge nur diskret aufgenommen werden können. Die Aufnahme von Energie ist deshalb nur dann möglich, wenn die Frequenz der anregenden Strahlung mit der Übergangsfrequenz $E = h\nu$ übereinstimmt. Wasser besitzt drei verschiedene, voneinander unabhängige Drehachsen. Die Rotation um jede dieser Drehachsen besitzt ein eigenes Trägheitsmoment. Deshalb benötigt die Anregung dieser verschiedenen Rotationen jeweils einen bestimmten, verschiedenen Energiebetrag. Für reine Rotationsanregungen liegen diese Frequenzen im Mikrowellenbereich, in dem nicht genügend Energie zur Anregung der Schwingungen zur Verfügung steht. Die Schwingungsanregungen absorbieren im infraroten Spektralbereich. Da hier neben der Schwingungsanregung gleichzeitig und gemeinsam die niederenergetischeren Rotationen angeregt werden, entsteht ein Rotations-Schwingungs-Spektrum, das - unter höchster Auflösung betrachtet - sehr komplex sein kann.

Rotations-Schwingungs-Spektren lassen sich nur beobachten, wenn die Moleküle frei rotieren können. Das ist in der Gasphase der Fall. In Flüssigkeiten und Festkörpern ist dies nicht möglich und die Spektren spiegeln nur die Schwingungen wider.

Wieviele unterschiedliche Molekülschwingungen gibt es ?

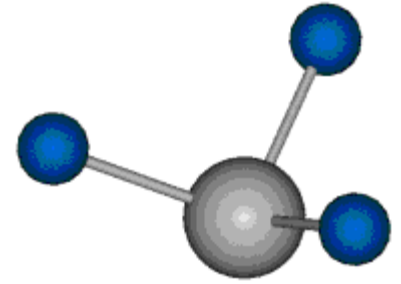


- Ein Molekül besteht aus N Atomen
- Jedes Atom kann sich in 3 Raumrichtungen bewegen, macht $3 \cdot N$
- davon geht die kollektive Bewegung der Atome ab:
 - das Molekül bewegt sich in drei Raumrichtungen, macht $3 \cdot N - 3$
 - das Molekül kann um drei Achsen rotieren, macht $3 \cdot N - 6$
 - ein lineares Molekül kann nur um 2 Achsen rotieren, macht $3 \cdot N - 5$

➤ **Lineares Molekül hat $3 \cdot N - 5$ Schwingungsmoden**

➤ **Nichtlineares Molekül $3 \cdot N - 6$ Schwingungsmoden**

Wieviele unterschiedliche Molekülschwingungen gibt es ?



Ammoniak $\Rightarrow N = 4, 3 \cdot N - 6 = 6$ Schwingungen

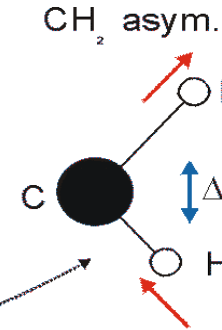
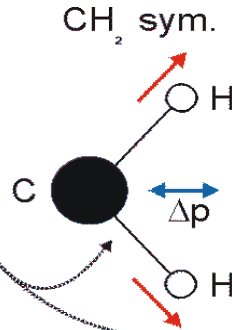
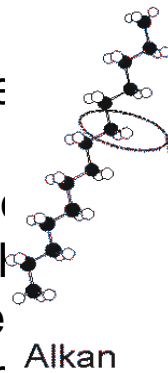
Wasser $\Rightarrow N = 3, 3 \cdot N - 6 = 3$ Schwingungen

Kohlendioxid $\Rightarrow N = 3, 3 \cdot N - 5 = 4$ Schwingungen

Sauerstoff $\Rightarrow N = 2, 3 \cdot N - 5 = 1$ Schwingung

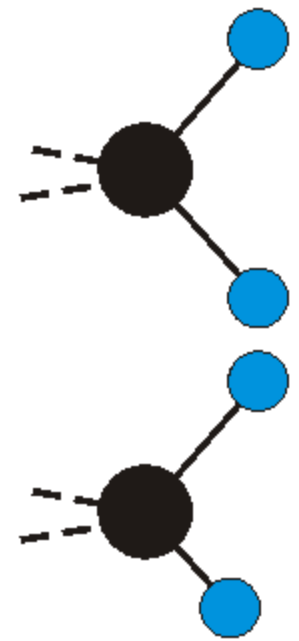
Wie diese Schwingungsmoden „aussehen“ werden wir später im Kapitel *Symmetrie* sehen.

Gruppenfrequenzen



Methylen-Schwingungen
in der H-C-H-Ebene

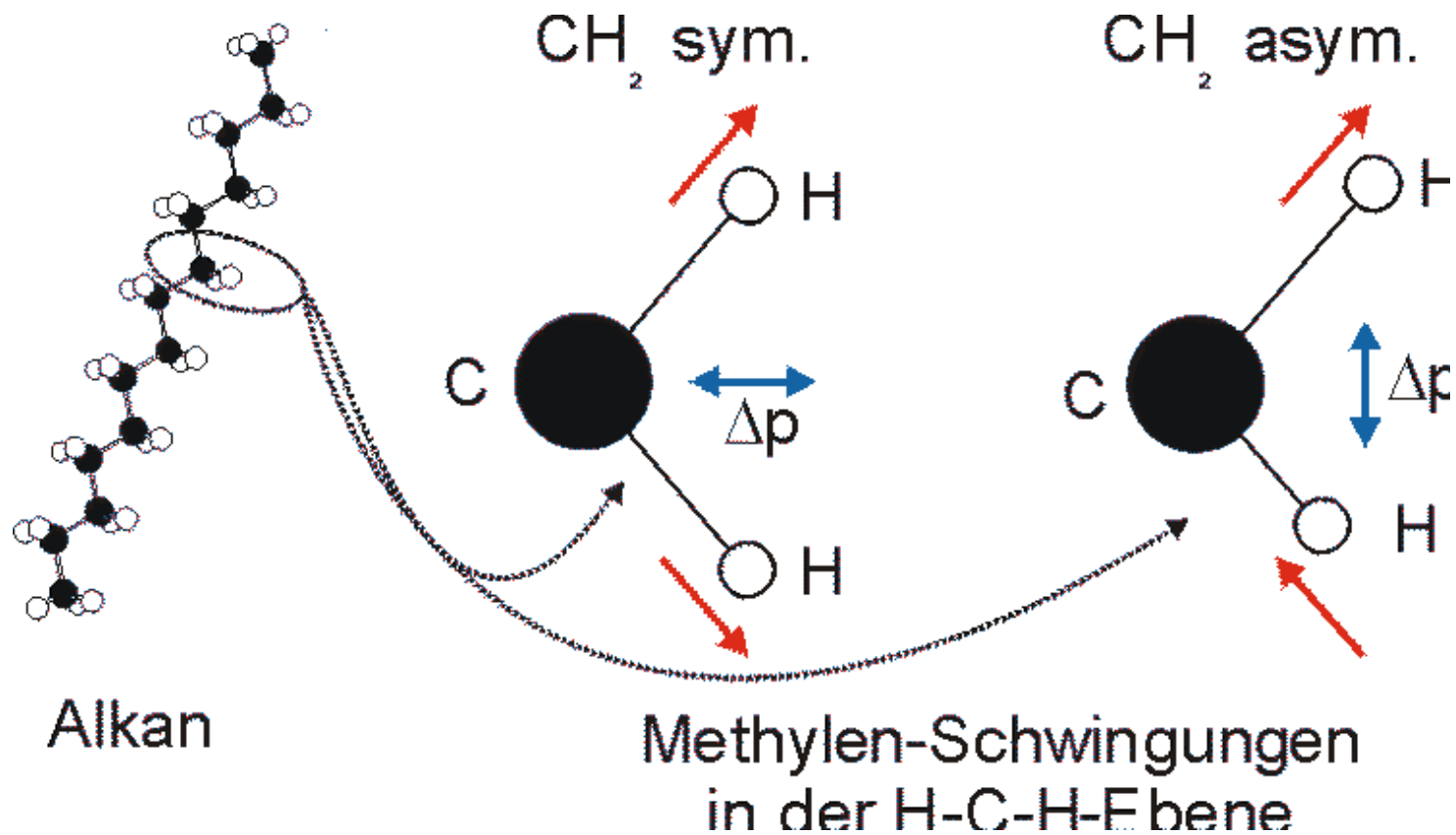
Molekül als
Schwingungen
rechts be-
wegt
s C bewegt
wesentlich
weniger.

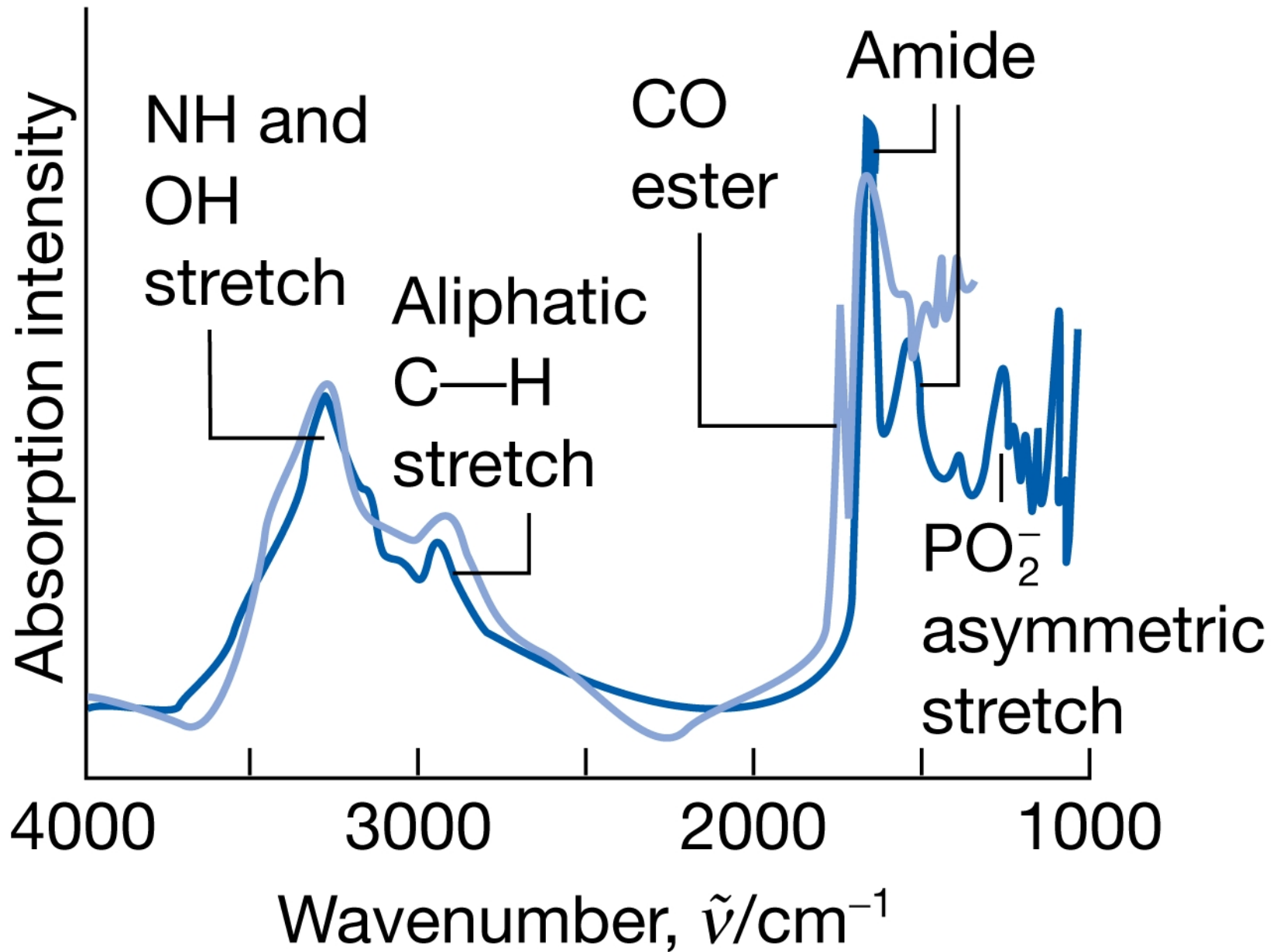


- Schwingungen be
Ganzes. In guter
eines Moleküls is
wegt sich das Kol
bewegen sich die
sich auch ein wer
leichter sind, als das C-Atom, bewegt sich das C-Atom viel weniger.
Es befindet sich *annähernd* in Ruhe.

- Schwere Atome schwingen schwächer und langsamer als leichte. Die Frequenz der Schwingungen in z.B. einer Alkankette lassen sich so in verschiedene Bereiche unterteilen: Die H-Atome der einzelnen Methylengruppe schwingen viel schneller, als die Methylengruppen gegeneinander (Deformationsschwingungen im C-C-C Winkel). Man kann diese verschiedene Schwingungen näherungsweise einzeln betrachten. Die Abstraktion auf einzelne Molekülgruppen führt zum Konzept der Gruppenfrequenzen.
- Vielen funktionelle Gruppen besitzen charakteristische Absorptionsfrequenzen. Diese sind nur wenig von ihrer chemischen Umgebung im Molekül abhängig. Sie verschieben sich in deren Abhängigkeit um einen geringen Wert (Shift). So liegt z.B. die Absorption der C=O Doppelbindung einer Carbonylgruppe (-COOH) bei 1705 cm⁻¹, wobei sie aber je nach Umgebung im Bereich 1680...1760 cm⁻¹ liegen kann.

Gruppenfrequenzen





Wellenzahl [cm ⁻¹]	Banden- stärke -form	Schwingungstyp	Verbindungs-klasse
ss = sehr stark, s = stark, m = mittel, w = schwach, b = breit, sb = sehr breit			
3600-3200	b	$\nu(\text{OH})$	Alkohole, Phenole
3550-3350	b	$\nu(\text{NH})$	Amine (Primäre Amine - 2Banden)
3200-2400	m, sb	$\nu(\text{OH})$	Carbonsäuren
3100-3000	m-w	$\nu(\text{=C-H})$	Aromaten, Olefine
3000-2800	s-m	$\nu(\text{-C-H})$	gesättigte Kohlenwasserstoffe
2960, 2870	s-m	$\nu(\text{CH}_3)$	gesättigte Kohlenwasserstoffe
2925, 2850	w	$\nu(\text{CH}_2)$	gesättigte Kohlenwasserstoffe
2600-2550	w	$\nu(\text{-S-H})$	Thiole, Thiophenole
2300-2100	m-s	$\nu(\text{-C}\equiv\text{X})$	Acetylene (X=C), Nitrile (X=N)
2270-2000	s	$\nu(\text{-X=C=Y})$	Isocyanate, Isothiocyanate, Nitrile
1850-1600	s	$\nu(\text{-C=O})$	Carbonylverbindungen
1675-1630	m	$\nu(\text{-C=C})$	Olefine
1650-1620	s	$\delta(\text{-NH}_2)$	primäre Säureamide (Amidbande)
1650-1550	m	$\delta(\text{-N-H})$	primäre und sekundäre Amine
1610-1590	m	$\nu(\text{-C=C})$	Ringschwingung der Aromaten

ν Streckschwingung einer X-H-Bindung

δ Deformationsschwingung einer X-H-Bindung

Wellenzahl [cm ⁻¹]	Banden- stärke -form	Schwingungstyp	Verbindungs- klasse
ss = sehr stark, s = stark, m = mittel, w = schwach, b = breit, sb = sehr breit			
1610-1590	m	$\nu(-C=C)$	Ringschwingung der Aromaten
1560-1515	s	$\nu(-NO_2)$	Nitroverbindungen
1500-1480	m	$\nu(-C=C)$	Ringschwingung der Aromaten
1470-1400	s-m	$\delta(-C-H)$	gesättigte Kohlenwasserstoffe
1460-1420	m	$\nu(-C=C)$	Ringschwingung der Aromaten
1420-1330	s	$\nu(-SO_2)$	Sulfonylverbindungen
1390-1370	s	$\delta(-CH_3)$	gesättigte Kohlenwasserstoffe
1360-1030	m-s	$\delta(C-N)$	Amide, Amine
1350-1240	s	$\nu(NO_2)$	Nitroverbindungen
1300-1020	ss-s	$\nu(-C-O-C)$	Ether, Ester, Anhydride, Acetale
1200-1145	m-s	$\nu(-SO_2)$	Sulfonylverbindungen
1070-1030	s	$\nu(-S=O)$	Sulfoxide
970-960	s	$\delta(=C-H)$	Olefine
840-750	s	$\delta(=C-H)_{o.o.p.}$	Substituierte Benzole
800-500	m-w	$\nu(-C-Hal)$	Halogenverbindungen
800-600	m-w	$\nu(-C-S)$	Thiole, Thioether

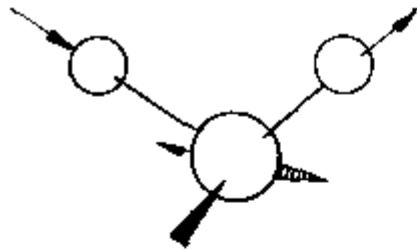
ν Streckschwingung einer X-H-Bindung

δ Deformationsschwingung einer X-H-Bindung

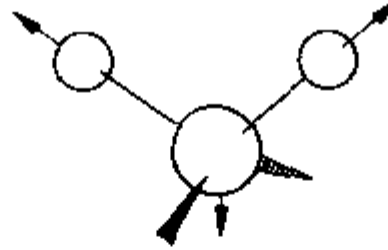
Symbol Bezeichnung der Schwingungsform

α, β	i. p. Deformationsschwingung, allgemein	in plane
Γ	o. o. p. Deformationsschwingung von Gerüstatomen	out of plane
γ	o. o. p. Deformationsschwingung	
Δ	i. p. Deformationsschwingung von Gerüstatomen	
δ	i. p. Deformationsschwingung einer X-H-Bindung	
δ_s	symmetrische Deformationsschwingung (bending)	
δ_{as}	asymmetrische Deformationsschwingung (bending)	
δ'	Deformationsschwingung (twisting, rocking)	
κ	o. o. p. wagging Schwingung einer XH_2 -Gruppe ($X^1 C$)	
r	rocking Schwingung	
r_β	i. p. rocking Schwingung	
r_γ	o. o. p. rocking Schwingung	
ρ	i. p. rocking Schwingung einer XH_2 -Gruppe ($X^1 C$)	
ν	Streckschwingung einer X-H-Bindung	
ν_s	symmetrische Streckschwingung	
ν_{as}	asymmetrische Streckschwingung	
ν_β	i. p. Streckschwingung	
ν_γ	o. o. p. Streckschwingung	
t	twisting Schwingung	
τ	Torsion, twisting Schwingung einer XH_2 -Gruppe ($X^1 C$)	
Φ	o. o. p. Ring-Deformationsschwingung	
ω	wagging Schwingung	
ω	Streckschwingung von Gerüstatomen ohne H-Bindung	

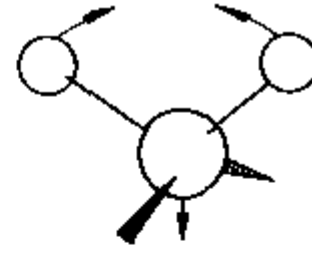
Schwingungen CH₂-Gruppe, CH₄



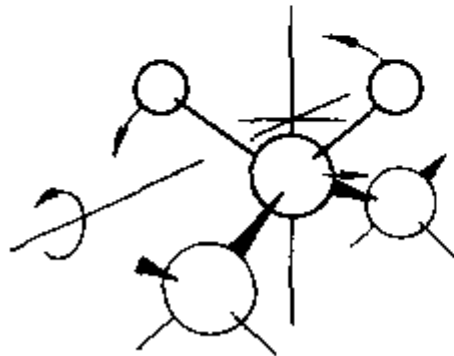
a) ν_{as} 2930 cm⁻¹



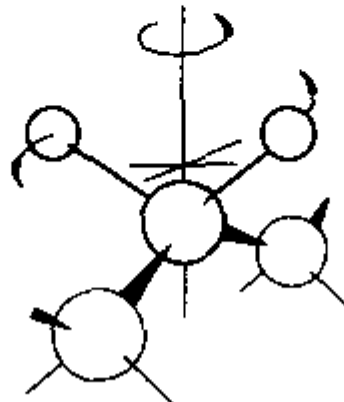
b) ν_s 2850 cm⁻¹



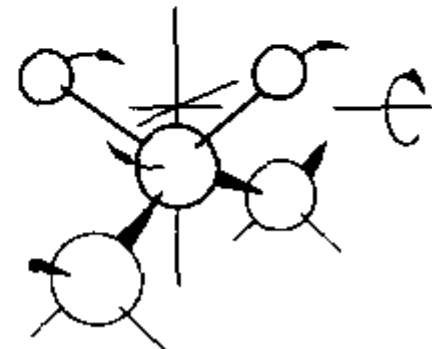
c) δ_s 1470 cm⁻¹



ρ rocking: 720 cm⁻¹



t twisting: \approx 1300 cm⁻¹



ω wagging: 1305 cm⁻¹

3 N – 5 oder Was schwingt noch?

Wasser hat als dreiatomiges nichtlineares Molekül
3 Schwingungsmoden

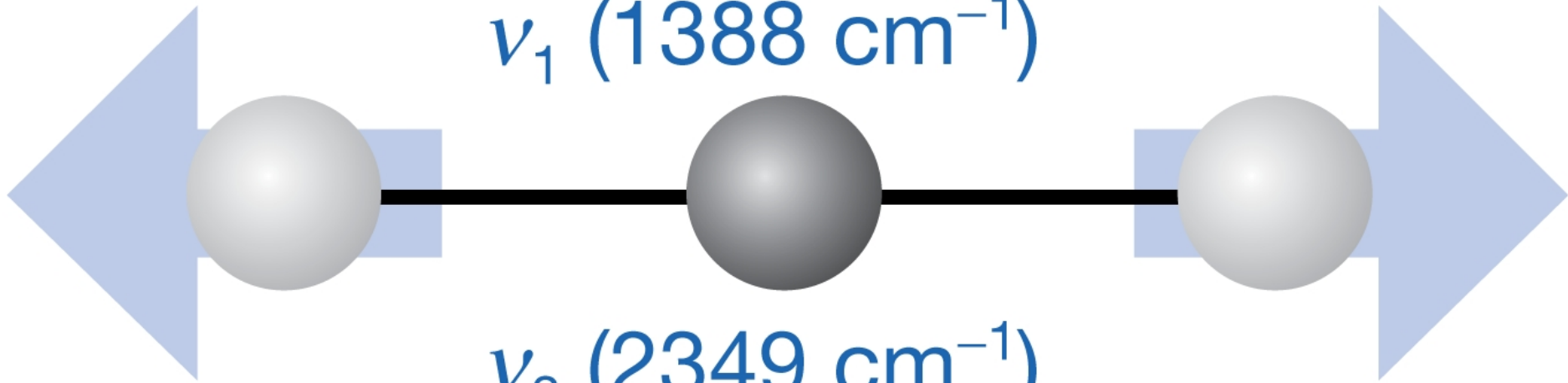
CO₂ soll 4 haben, aber welche?

- Ok: 1. symmetrische Streckschwingung
2. asymmetrische Streckschwingung
3. Biegeschwingung
4. Eine weitere Biegeschwingung:
nach „oben“ und „unten“ +
nach „vorne“ und „hinten“

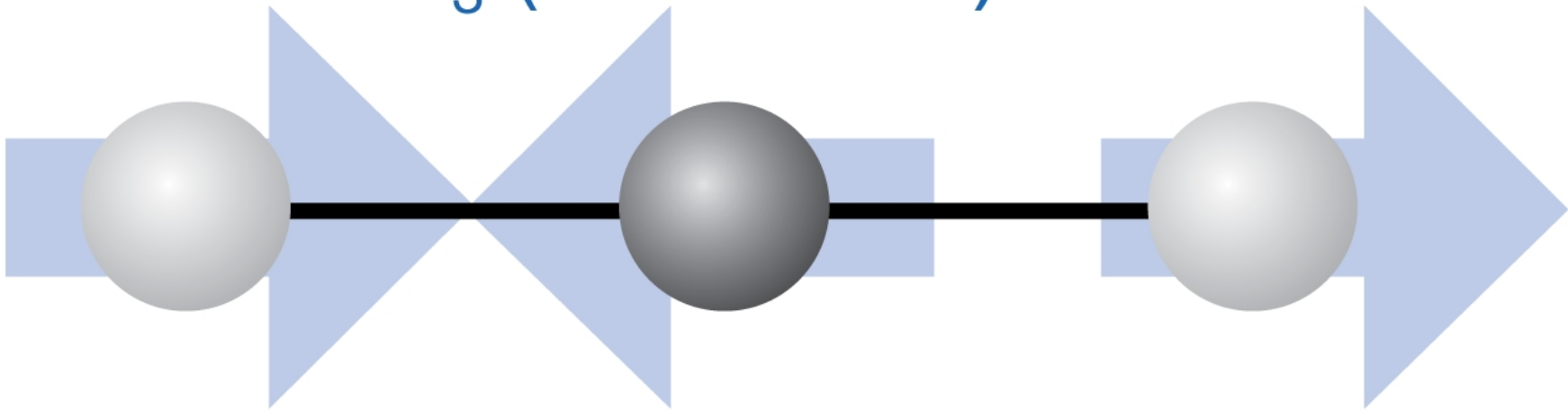
Diese beiden Schwingungen sind energetisch nicht zu unterscheiden,
man spricht in diesem Fall von einer zweifach entarteten Schwingung.

CO₂-Schwingungen

ν_1 (1388 cm⁻¹)



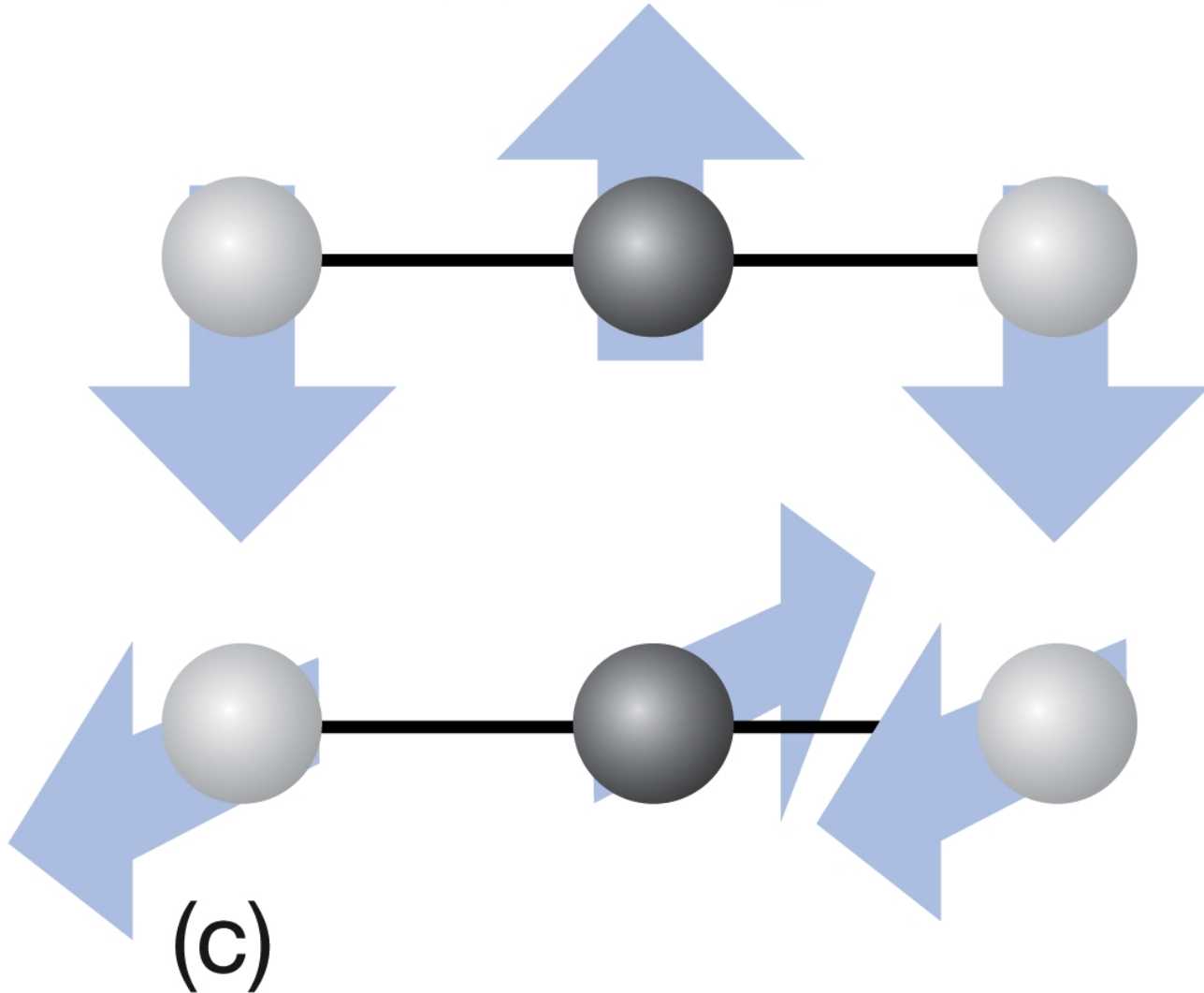
ν_3 (2349 cm⁻¹)



(b)

CO₂-Schwingungen

ν_2 (667 cm⁻¹)



Bilanz und Fragen

- ✓ Moleküle mit N Atomen haben also $3 \cdot N - 6$ (resp. $3 \cdot N - 5$) Schwingungen
- ✓ Die Gruppierung ermöglicht Atomgruppen und Moleküle zu identifizieren
- ✓ Isotopenmarkierung verschiebt (berechenbar) die Frequenzen $\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

A B E R

- ☹ Absorbieren alle Schwingungsmoden Licht?
- ☹ Welche kann ich anregen??
- ☹ Wie mache ich dies im Experiment???

Absorbieren alle Schwingungsmoden Licht?

Licht ist nach den Maxwell-Gleichungen eine elektromagnetische Welle und kann daher nur mit Ladungen (Magneten) wechselwirken.

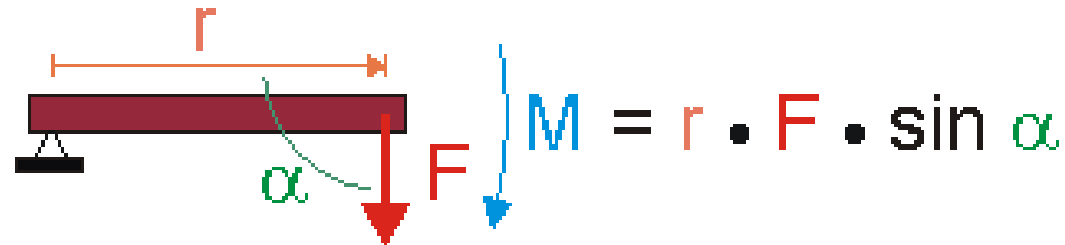
Ein Molekül besteht zwar aus Elektronen, aber eine solche elektronische Anregung benötigt Energien, die typischerweise im UV-Bereich, also bei grob der zehnfachen Energie liegen.

Das Molekül muss also (irgendwie) eine asymmetrische Ladungsverteilung aufweisen, damit Schwingungen (und Rotationen) im IR angeregt werden können.

Dipolmoment

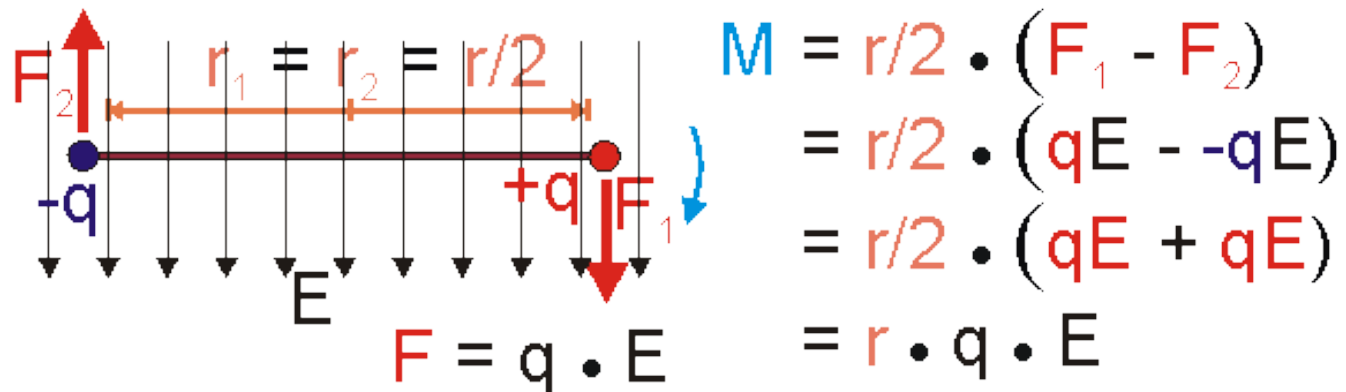
Momente (mal)

Ein Moment ist allgemein das Produkt zweier physikalischer Größen, von denen eine die Dimension der Länge hat.



So ist das Drehmoment M das Moment einer Kraft F , die vermittelt eines Hebels der Länge r als "Drehkraft" auf den Lagerpunkt dieses Hebels wirkt.

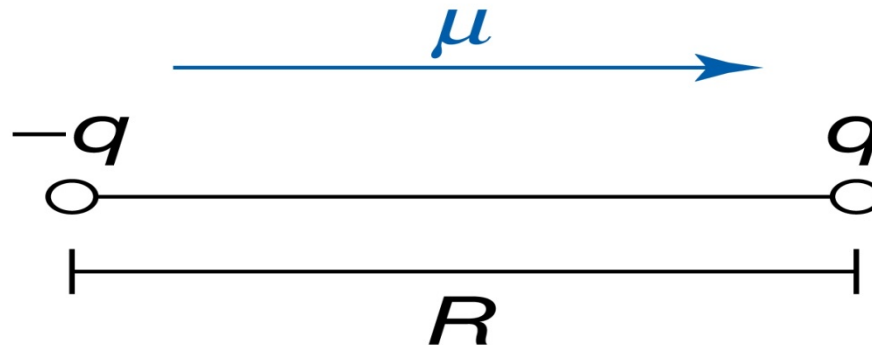
Ganz analog verhalten sich elektrische Kräfte an "starr" verbundenen Ladungen:



Dipolmoment

Das resultierende Drehmoment M ist ein Produkt aus der Ladung q , dem Abstand r und der elektrischen Feldstärke E . Ladung und Abstand lassen sich bezüglich des elektrischen Felds zum Moment des Dipols, dem **Dipolmoment μ** , zusammenfassen.

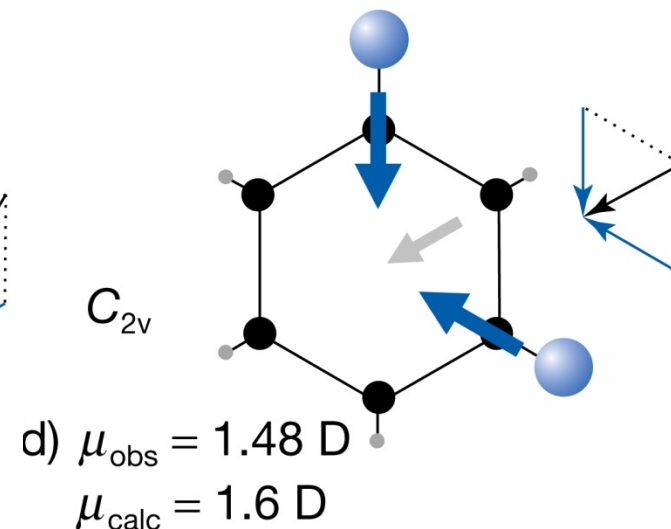
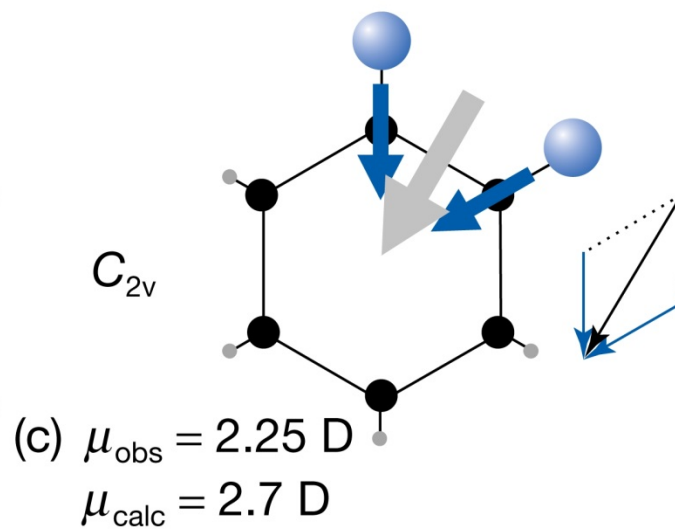
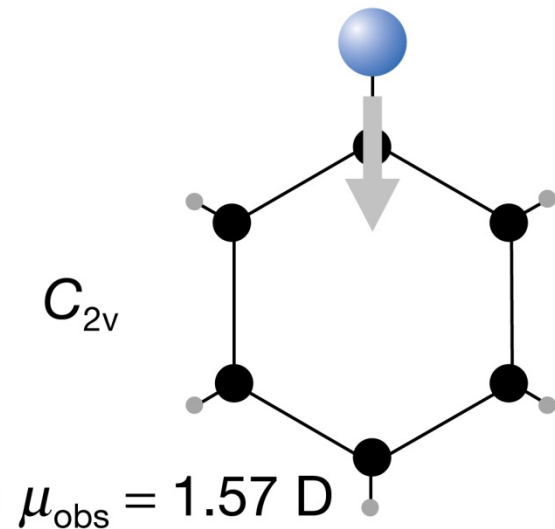
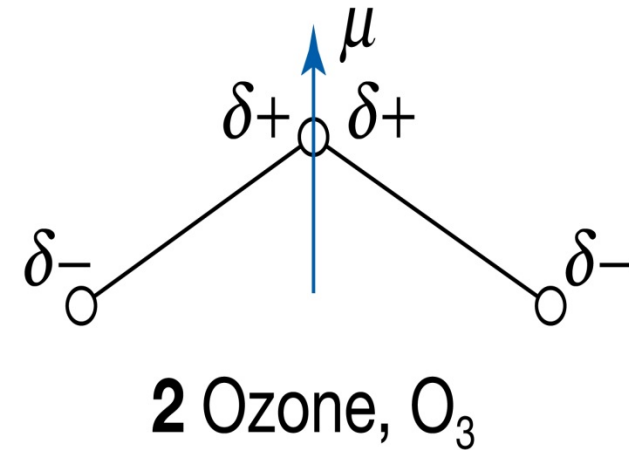
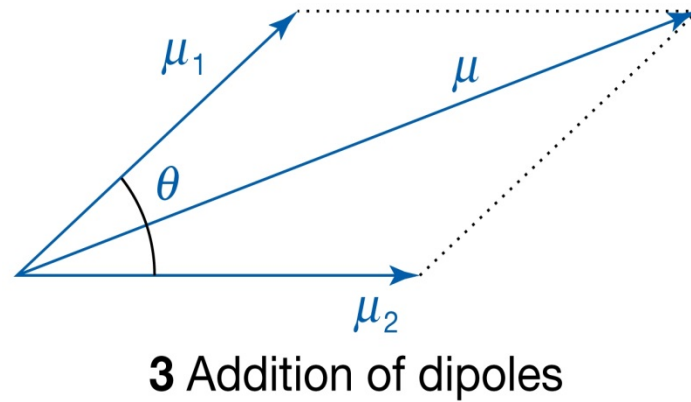
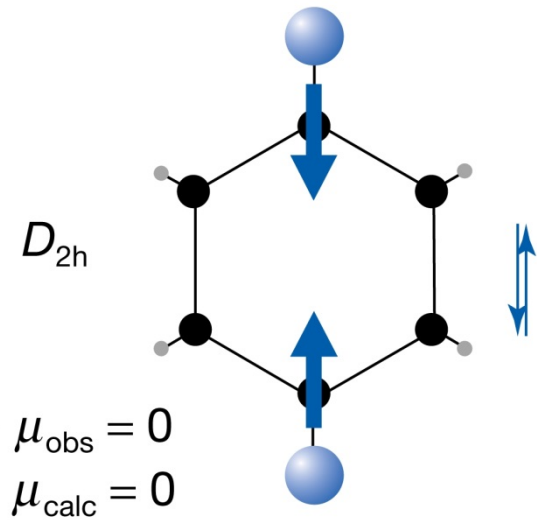
Im Ergebnis dreht sich der Dipol, er richtet sich in Feldrichtung aus. Da beide Ladungen den gleichen Betrag und entgegengesetzte Polarität besitzen, sind auch beide Kräfte gleich groß und entgegengesetzt gerichtet.



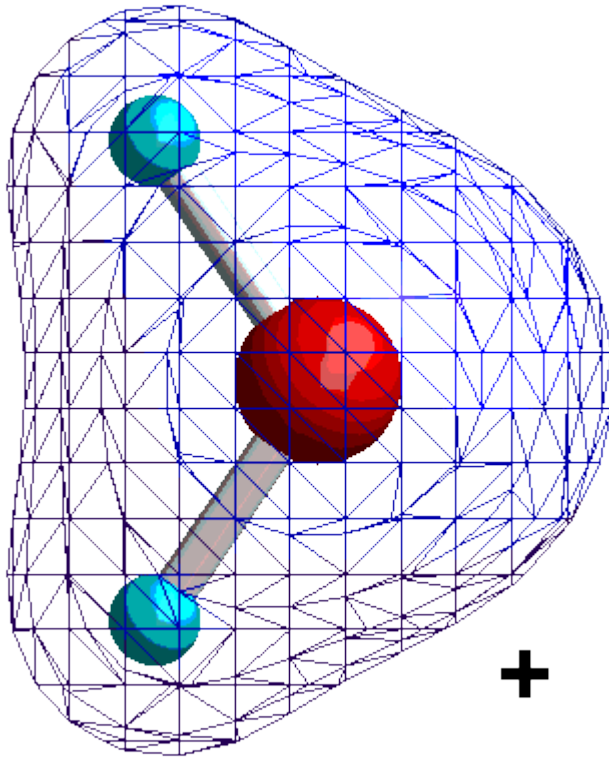
Elektrisches Dipolmoment

$$\mu = R \cdot q$$

Das Dipolmoment ist ein Vektor

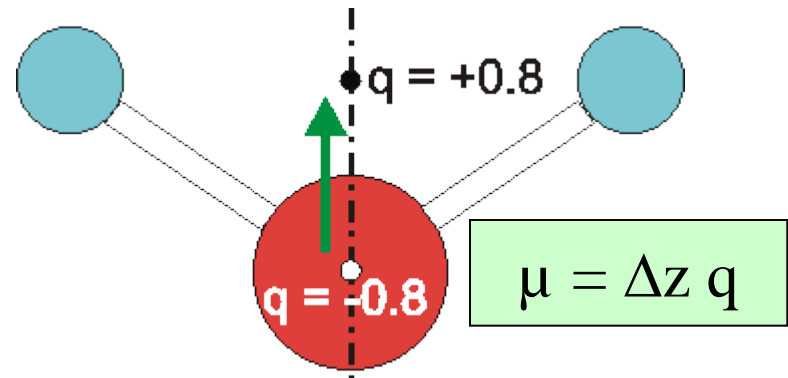
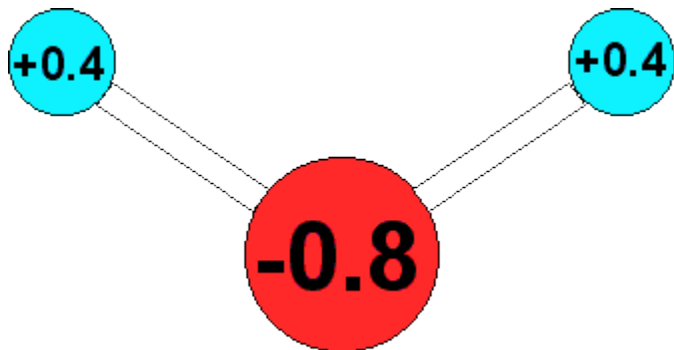


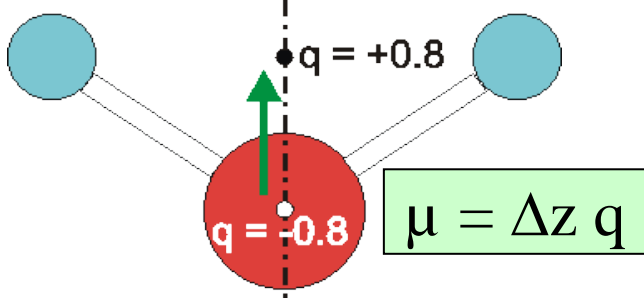
Dipolmoment beim Wasser



links: Serie von quantenmechanisch berechneten Isocharge-Flächen beim H_2O .

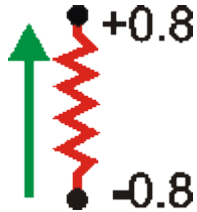
Dargestellt werden Flächen gleicher negativer Ladung (gleicher Elektronendichte) relativ zu einem mittleren Wert. Die Darstellung beginnt mit schwacher (relativ positiver) und dann stärker werdender (relativ negativer) Ladung. Daraus lässt sich ablesen, dass die Ladung (Elektronendichte) vorwiegend am Sauerstoff lokalisiert ist.



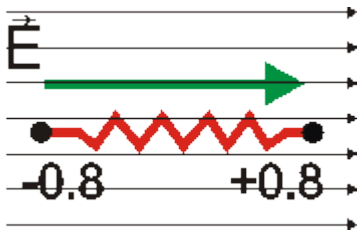


Dipolmoment

Abstrahieren wir nur unser H_2O :

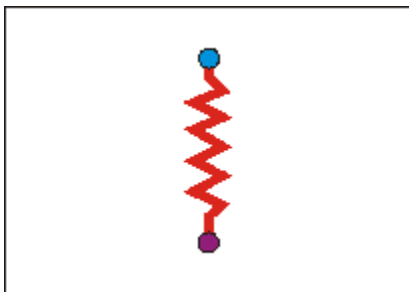


Atome bewegen sich im Potential was in harmonischer Näherung durch eine Feder zwischen dem Dipol dargestellt wird.



In einem *statischen* elektrisches Feld geschieht zweierlei:

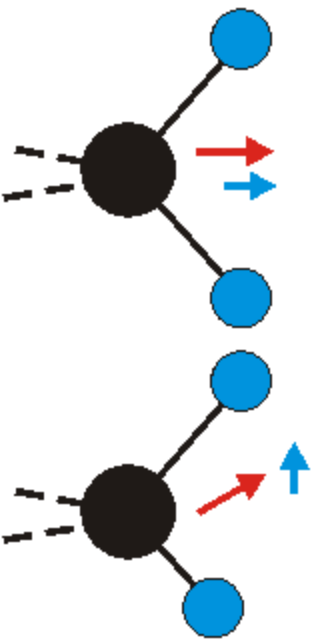
1. Das Molekül (der Dipol) dreht sich, es richtet sich längs des Felds aus.
2. Die Ladungen erfahren eine statische Kraft, die zur Vergrößerung des Abstands (Dehnung der Feder) führt.



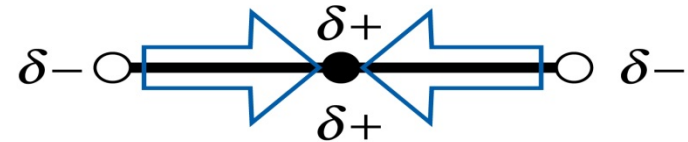
Wirkt Licht, also ein elektrisches Wechselfeld auf den "federverbundenen Dipol" ein, so beginnt dieser

1. zu rotieren und
 2. in sich (in der Bindungslänge) zu schwingen.
- Das Molekül nimmt Rotations- und Schwingungsenergie auf, die dem anregenden elektromagnetischen Feld entstammt. Dabei muss die Lichtenergie(-frequenz, $E=h\nu$) gleich der Rotations- und Schwingungsenergie sein.

Übergangsdipolmoment



Voraussetzung für die IR-Anregung ist aber nicht unbedingt ein permanentes Dipolmoment. Es reicht völlig, wenn sich durch die Schwingungsanregung das Dipolmoment (auch vom Wert Null aus) ändert. Beim H_2O (oder bei der CH_2 -Gruppe links) ist bereits ein Dipolmoment vorhanden, das sich durch die Schwingungsanregung ändert.

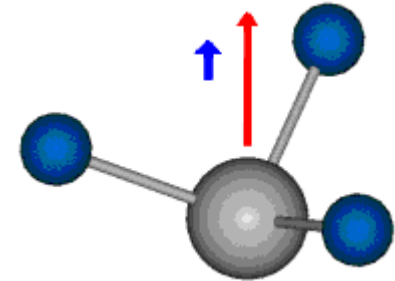


8 Carbon dioxide

Beim Kohlendioxid ist kein anfängliches Dipolmoment vorhanden. Zwar sind die O-Atome negativ und das C-Atom partial positiv geladen, aber die Polaritäten heben sich auf (Symmetrie!). Dennoch kann die asymmetrische Streckschwingung angeregt werden. Diese besitzt kein *statisches*, wohl aber ein *dynamisches* Dipolmoment. Entsprechendes gilt für die Biegeschwingung (O-C-O Winkel). Und die symmetrische Streckschwingung?

Bilanz und Fragen

- ✓ Voraussetzung für die IR-Anregung eines Schwingungsübergangs ist, dass sich das dynamische Dipolmoment während der Anregung ändert.
- o Für Wasser und Kohlendioxid kann man sich das ja noch zur Not vorstellen, aber bei einem beliebigen Molekül?
Gibt es da überhaupt eine Chance zu sagen, welche Schwingungen mit IR-Licht angeregt werden können und welche nicht ??
Und kann ich diese letzteren evtl. anders anregen ???



Die Antwort ist:

Symmetrie

Ende Kapitel 4