

Spektroskopie

im IR- und UV/VIS-Bereich

Interpretation von IR-Spektren

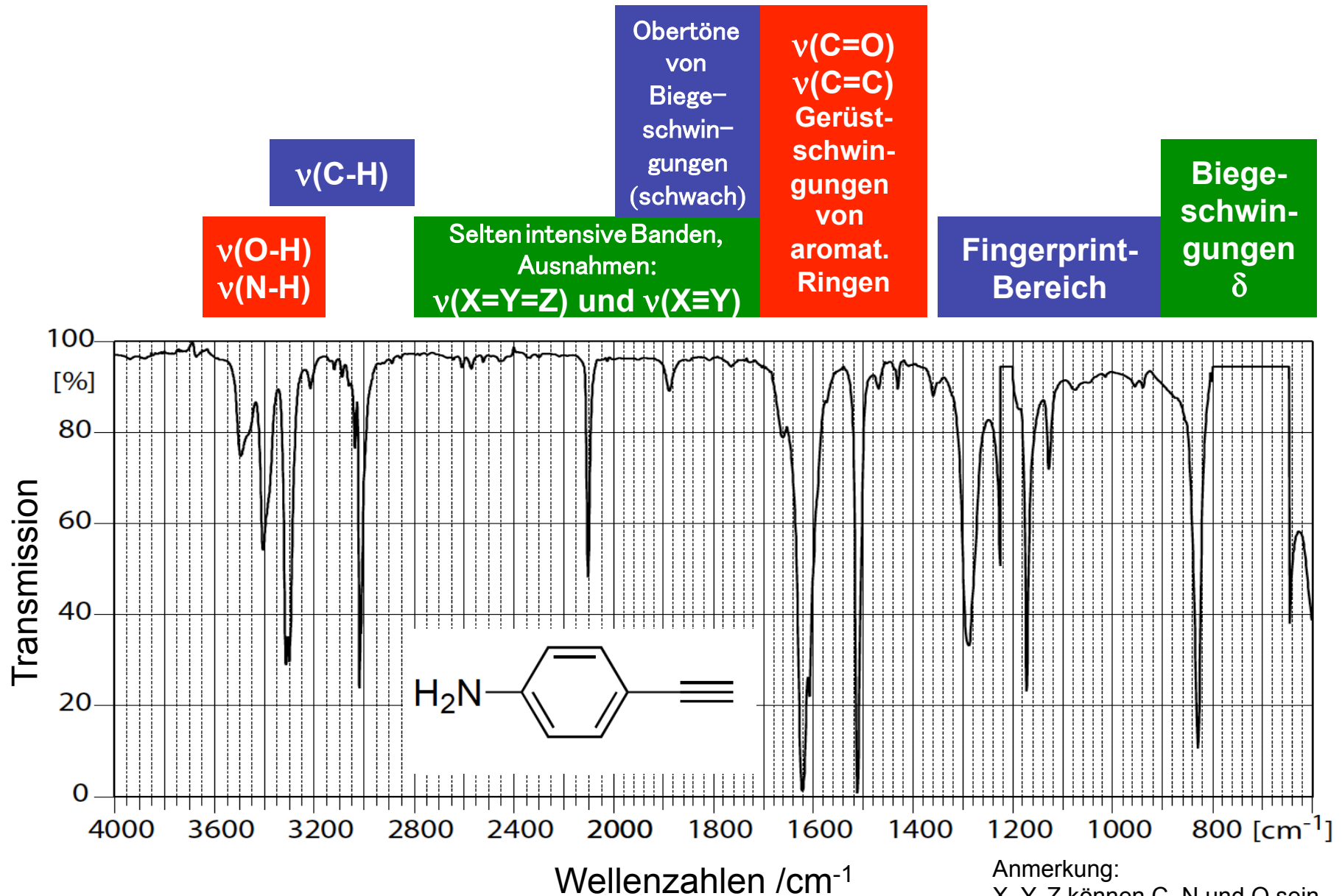
Dr. Thomas Schmid

HCI D323

schmid@org.chem.ethz.ch

<http://www.analytik.ethz.ch>

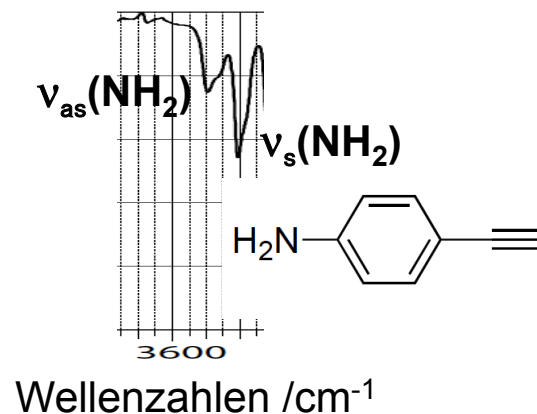
Häufige IR-Banden organischer Verbindungen



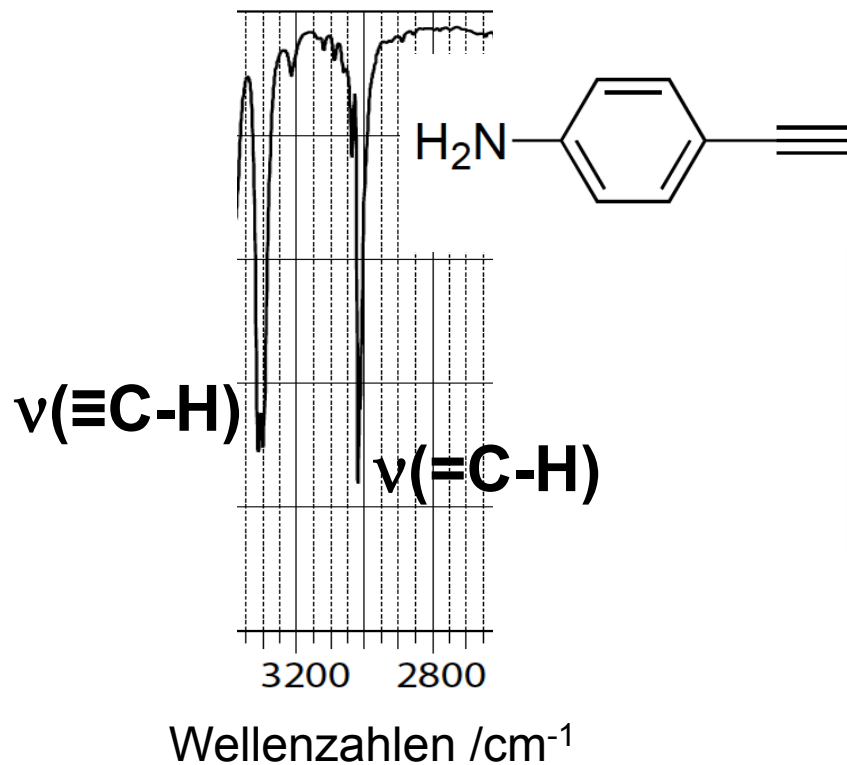
Anmerkung:
 X, Y, Z können C, N und O sein
 Bsp.: $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{C}\equiv\text{N}$, $\text{C}=\text{C}=\text{O}$,...

OH- und NH-Streckschwingungen

Wellenzahlbereich	Schwingung
3650–3200 cm ⁻¹ (typischer Bereich für Alkohole)	v(OH)
3650–3500 cm ⁻¹ schmale Bande	freies OH
3550–3450 cm ⁻¹ breite Bande	über Wasserstoffbrücken verbrücktes OH
3300–2500 cm ⁻¹ intensive, sehr breite Bande	stark verbrücktes OH von Carbonsäuren („Säuresack“)
3500–3300 cm ⁻¹ meistens 2 schmale Banden	v_{as}(NH₂) und v_s(NH₂)
3450–3300 cm ⁻¹ oft freies und verbrücktes NH	v(NH)



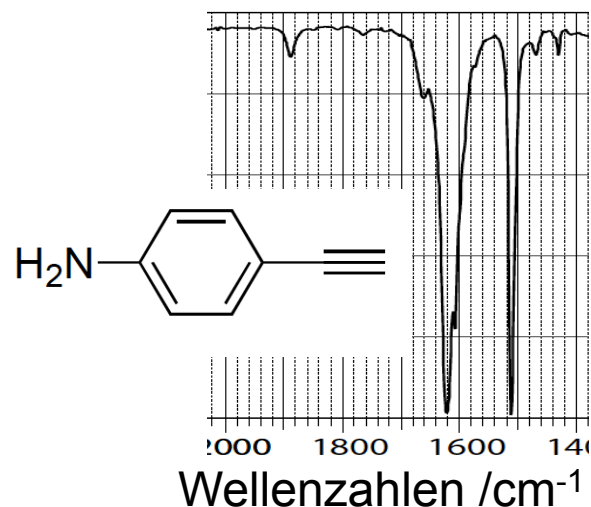
Der C-H-Streckschwingungsbereich



Wellenzahlbereich	Schwingung
3340–3250 cm^{-1}	$\nu(\equiv\text{C-H})$
3095–3010 cm^{-1}	$\nu(=\text{C-H})$
3000–2840 cm^{-1}	$\nu(-\text{C-H})$

C=C und C=O Streckschwingungen, Gerüstschwingungen aromatischer Ringe

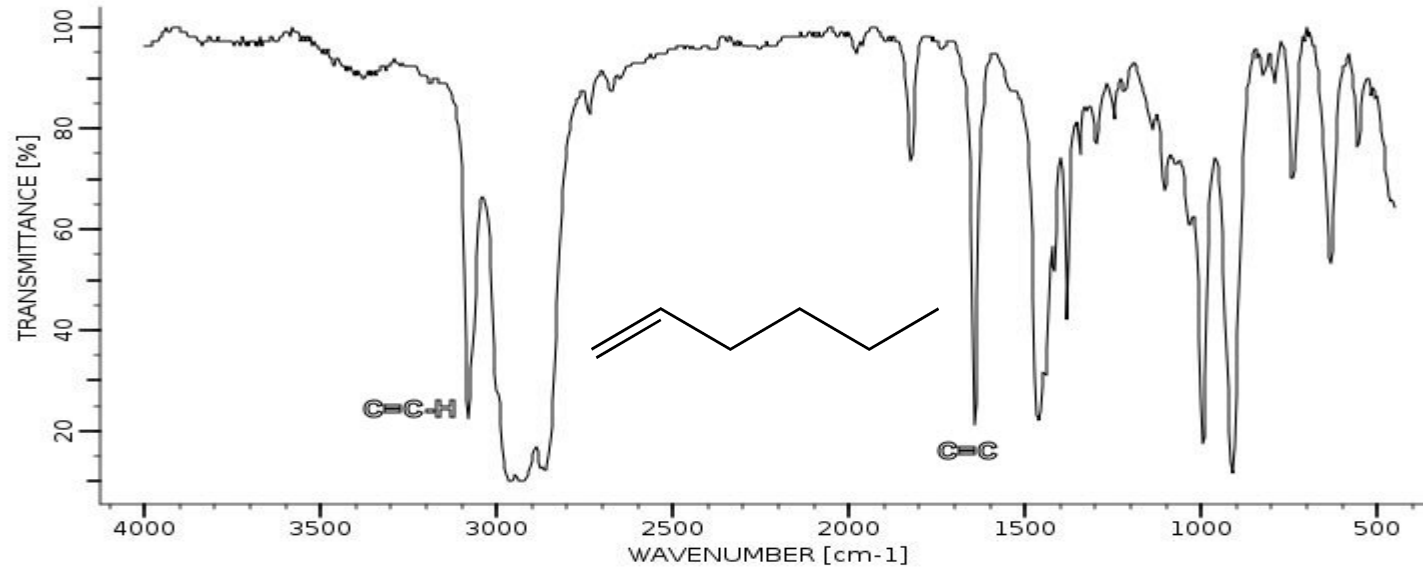
Wellenzahlen	Schwingungen
1870–1630 cm^{-1}	$\nu(\text{C}=\text{O})$ (meistens stark–sehr stark)
1690–1635 cm^{-1}	$\nu(\text{C}=\text{C})$ (meistens mittlere Intensität)
1625–1575 cm^{-1} und 1525–1450 cm^{-1} typisch: 1590 cm^{-1} und 1490 cm^{-1}	Gerüstschwingungen aromatischer Ringe (meistens mittlere Intensität)



2000–1650 cm^{-1}

Bei aromatischen Verbindungen häufig schwache Banden („Benzolfinger“) der **Obertöne** (ca. doppelte Frequenz der Grundschwingung) und **Kombinationsschwingungen** (Summe zweier Frequenzen) von C-C und C-H Deformationsschwingungen.

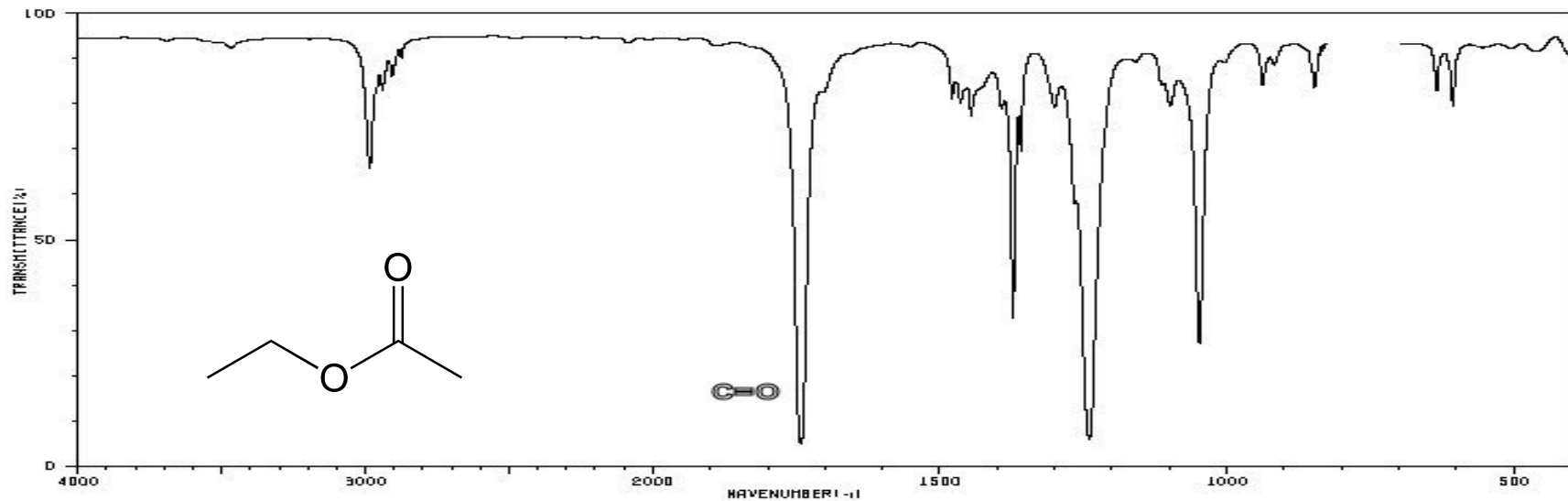
C=C und C=O Streckschwingungen



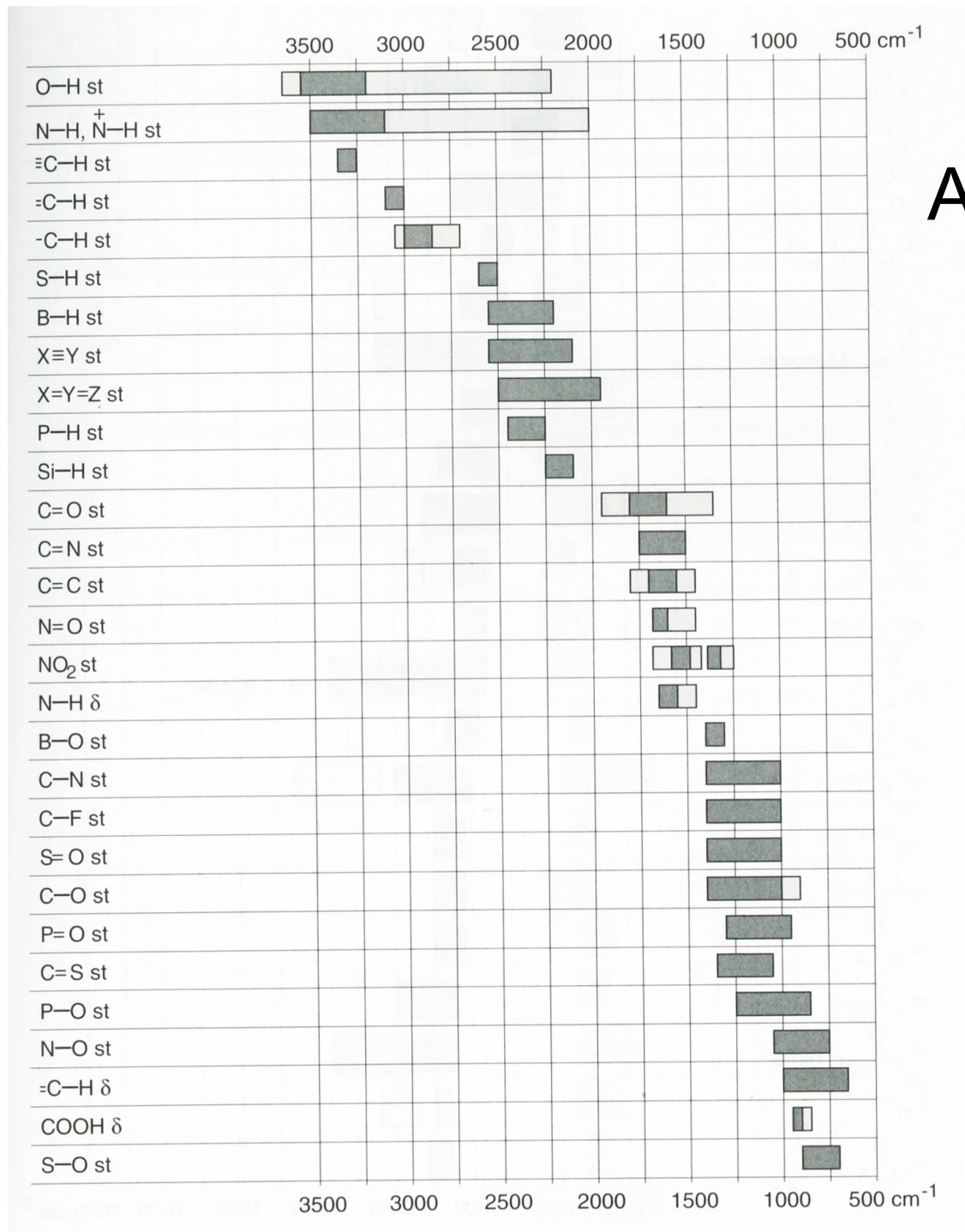
Die Bandenintensität hängt von vielen Parametern ab (z.B. Konzentration, Schichtdicke).

Deshalb: Vergleich mit der Intensität von $\nu(\text{C-H})$ als „interner Standard“.

Meistens:
 $\text{Int.}(\nu_{\text{C=O}}) \gg \text{Int.}(\nu_{\text{C-H}})$



Wichtigste IR-Absorptionsbanden



aus: E. Pretsch, P. Bühlmann,
C. Affolter, M. Badertscher,
*Spektroskopische Daten zur
Strukturaufklärung
organischer Verbindungen*,
Springer-Verlag

bzw.

*Structure Determination
of Organic Compounds*,
Springer-Verlag

→ Lehrveranstaltung im FS:
529-0289-00
Instrumentalanalyse organischer
Verbindungen (Spektrenübungen)

Interpretiertes Beispielspektrum

