


# Grundlagen der Molekülspektroskopie: Hardware

**FÜR EINE**  
BESSERE WISSENSCHAFT

AGILENT AND YOU



Agilent Technologies engagiert sich für Ausbildung und Lehre und möchte den Zugang zu firmeneigenem Material ermöglichen.

---

Diese Präsentation wurde von Agilent Technologies nur für Lehrzwecke erstellt. Möchten Sie Bilder, Schaubilder oder Zeichnungen für andere Zwecke verwenden, nehmen Sie bitte vorher Kontakt mit Agilent auf.

# Inhaltsverzeichnis

## Einführung

- [Klassifizierung](#)

## Molekülspektroskopie

- [Allgemeines](#)
- [UV-VIS-Spektroskopie](#)
  - [Allgemeiner Aufbau](#)
  - [Lichtquelle](#)
  - [Dispersionsvorrichtungen](#)
  - [Detektoren](#)
  - [System](#)
  - [Qualitative und quantitative Analyse](#)
  - [Applikationen](#)
  - [Beispiele](#)
  - [Einsatzmöglichkeiten](#)

- [Fluoreszenzspektroskopie](#)
  - [Allgemeiner Aufbau](#)
  - [Lichtquelle](#)
  - [System](#)
  - [Applikationen](#)
  - [Beispiele](#)
  - [Einsatzmöglichkeiten](#)
- [Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie](#)
  - [Allgemeiner Aufbau](#)
  - [Interferogramm](#)
  - [Qualitative und quantitative Analyse](#)
  - [System](#)
  - [Applikationen](#)
  - [Beispiele](#)
  - [Einsatzmöglichkeiten](#)
- [Weitere Informationen](#)



# Einführung

## Klassifizierung

Die Spektroskopie ist ein weites Feld mit vielen Unterdisziplinen, die nach der zu analysierenden Materialart eingeteilt werden können. Diese Präsentation behandelt die **Molekülspektroskopie**.

### ATOME

Element-  
spektroskopie

- AAS
- MP-AES
- ICP-OES
- ICP-MS

### MOLEKÜLE

Molekül-  
spektroskopie

- UV-VIS
- UV-VIS-NIR
- FTIR
- Fluoreszenz

### KRISTALLE

- Röntgen-  
kristallographie

### KERNE

- Kernmagne-  
tische  
Resonanz-  
spektroskopie

# Molekülspektroskopie

## Allgemeines

Die Zusammenstellung von Atomen in Moleküle schafft einzigartige energetische Zustände und daher auch unikale Übergangsspektren zwischen den Zuständen.

Molekülspektren erhält man für:

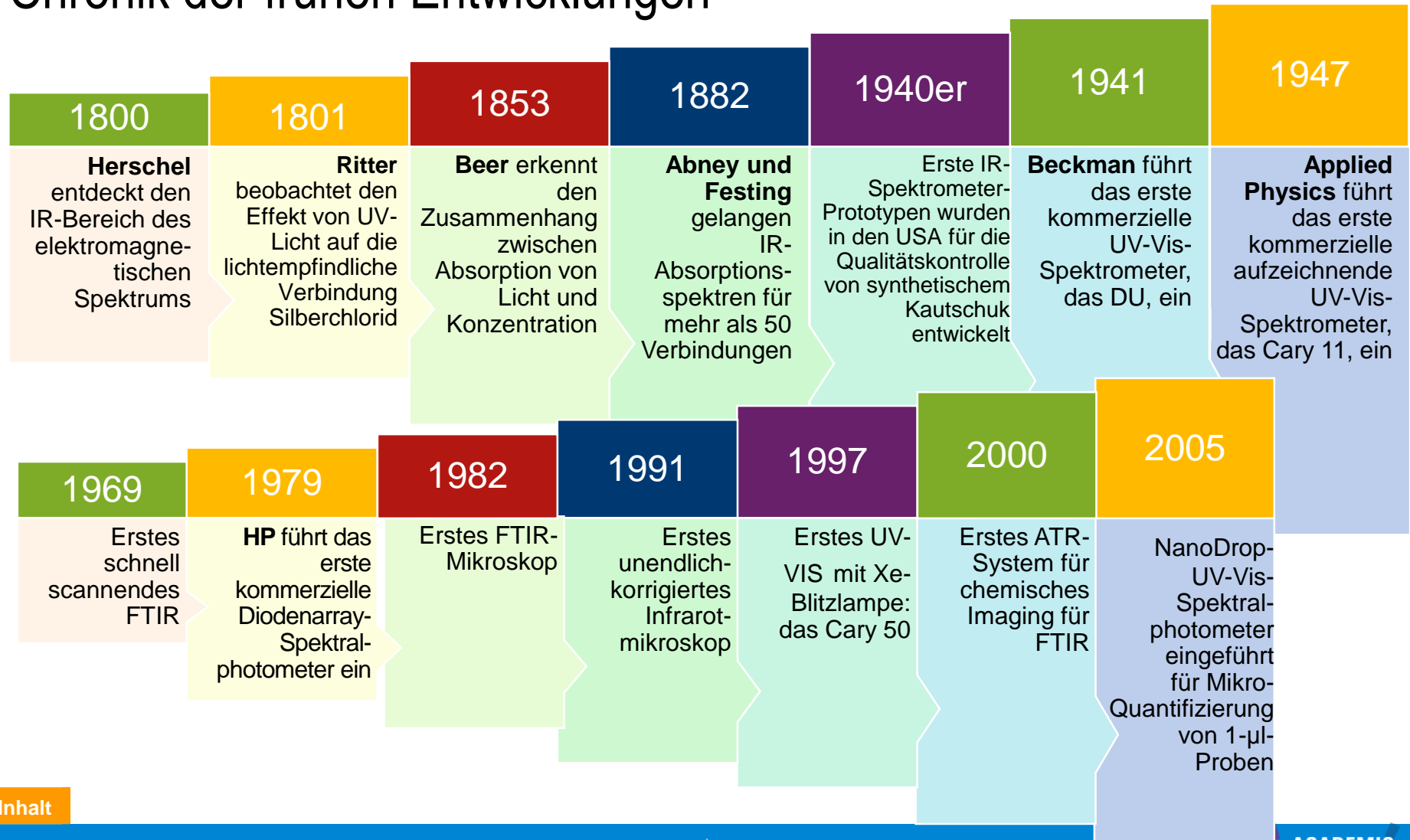
- Elektronen-Spin-Zustände
- Molekülrotationen
- Molekülschwingung
- Elektronische Zustände

### Molekülspektroskopie

	Nach Applikation
UV-Vis	Untersucht Wechselwirkungen zwischen elektromagnetischer Energie im ultravioletten, sichtbaren und nahen Infrarot Bereich und Materie
FTIR	Untersucht Wechselwirkungen zwischen elektromagnetischer Energie im Infrarotbereich und Materie
Fluoreszenz	Untersucht die Emission von elektromagnetischer Energie nach der Wechselwirkung von elektromagnetischer Energie typischerweise im ultravioletten und sichtbaren Bereich mit Materie

# Einführung

## Chronik der frühen Entwicklungen



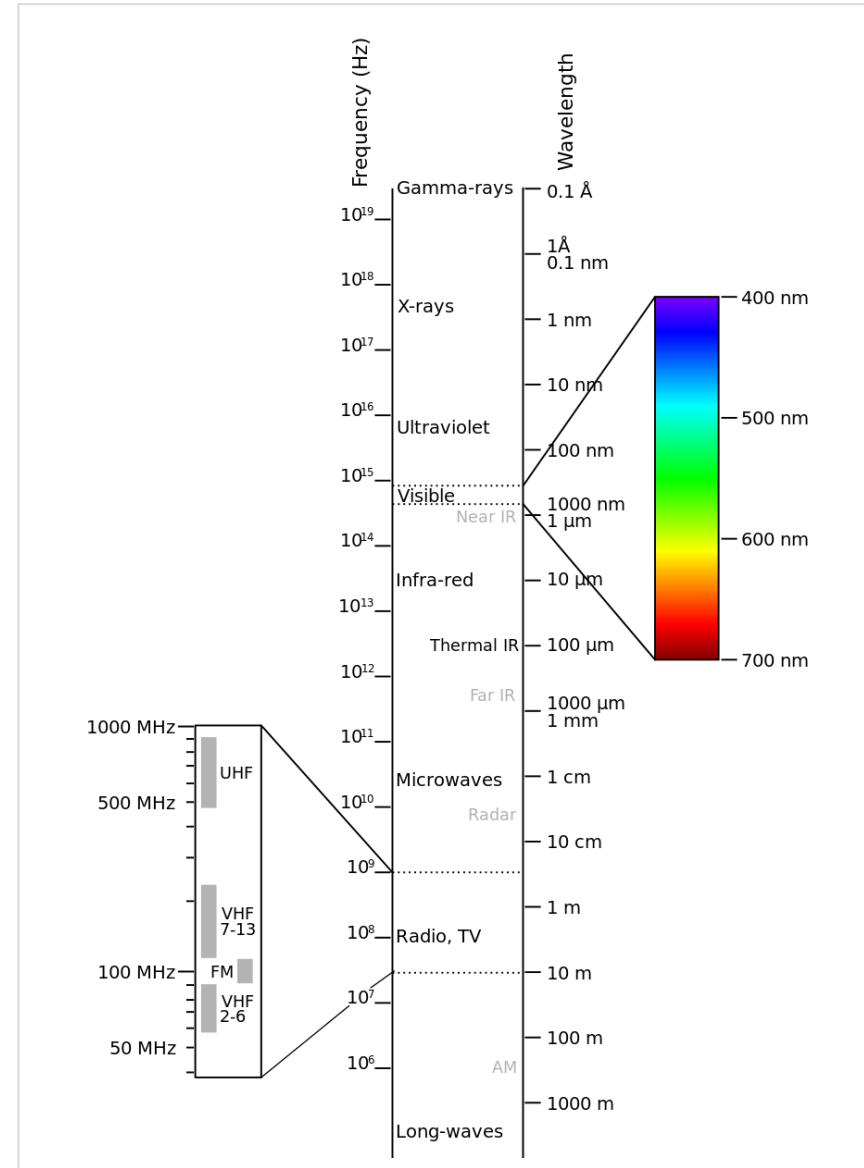
# UV-Vis-Spektroskopie

## Allgemeines

Das **elektromagnetische Spektrum** umfasst viele Größenordnungen der Frequenz und Wellenlänge. Das sichtbare Licht stellt nur einen sehr kleinen Teil des elektromagnetischen Spektrums dar.

- Ultraviolett: 190 bis 400 nm
- Sichtbar: 400 bis 800 nm
- Infrarot: 800 bis 100.000 nm

„Electromagnetic-Spectrum“ von Victor Blacus



Quelle: [Wikipedia](#)



# UV-Vis-Spektroskopie

## Allgemeines

Ein Spektralphotometer misst die Lichtmenge, die durch eine Probe hindurchtritt oder von ihr reflektiert wird.

Alle für die Forschung geeigneten Spektralphotometer können den Prozentsatz des hindurchtretenden oder reflektierten Lichts bei allen Wellenlängen von ungefähr 190 nm (mittleres Ultraviolett) bis mindestens 900 nm (nahes Infrarot) mit einer Auflösung von weniger als 2 nm messen.

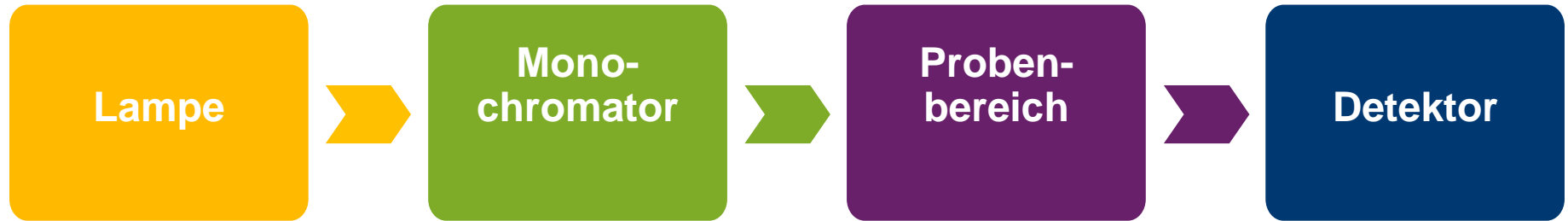
Beim Arbeiten mit Lösungen wird der Prozentsatz des hindurchtretenden Lichts als Extinktion ausgedrückt, die direkt proportional zur Konzentration ist.





# UV-Vis-Spektroskopie

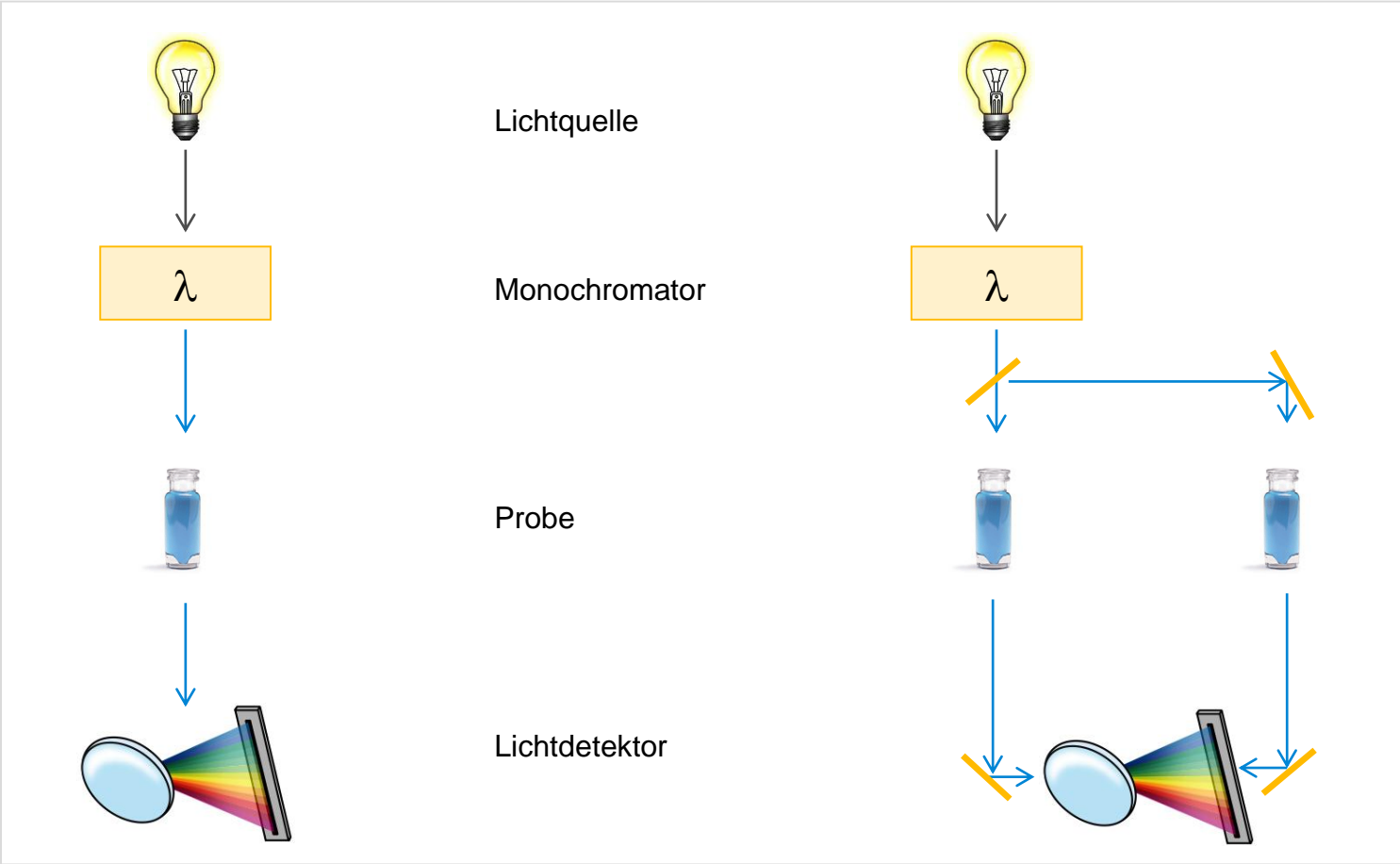
## Allgemeiner Aufbau



- Die Lampe (Quelle) emittiert Licht verschiedener Wellenlängen in einem bestimmten Bereich.
- Der Monochromator (Dispersionsvorrichtung) wählt eine Wellenlänge aus.
- Der Analyt absorbiert Licht (Probenbereich).
- Das hindurchtretende Licht wird gemessen (Detektor).
- Die Konzentration wird durch Vergleich mit Standardproben bestimmt.

# UV-Vis-Spektroskopie

## Allgemeiner Aufbau: Einstrahl- und Zweistrahlenspektrometer



*Die Zweistrahlösung ermöglicht die Korrektur von Schwankungen der Lichtintensität.*

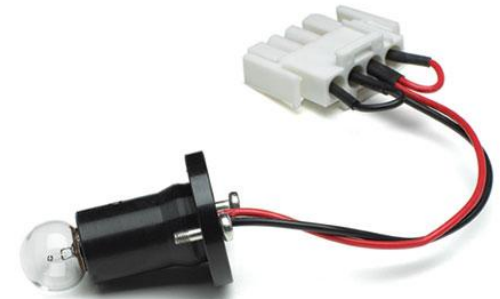
# UV-Vis-Spektroskopie

## Lichtquelle

Die ideale Lichtquelle würde bei allen Wellenlängen eine konstante Intensität mit geringem Rauschen und langfristiger Stabilität liefern.

Üblicherweise in UV-Vis-Spektralphotometern verwendete Quellen:

- **Deuterium-Bogenlampe** → brauchbare Intensität im ultravioletten Bereich
- **Wolframhalogenlampe** → gute Intensität in einem Teil des UV-Spektrums und im gesamten sichtbaren Bereich
- **Xenonlampe** → gutes Kontinuum im gesamten ultravioletten und sichtbaren Bereich



*Deuteriumquelle (oben) und Wolframhalogenlampe (unten) für UV-Systeme*

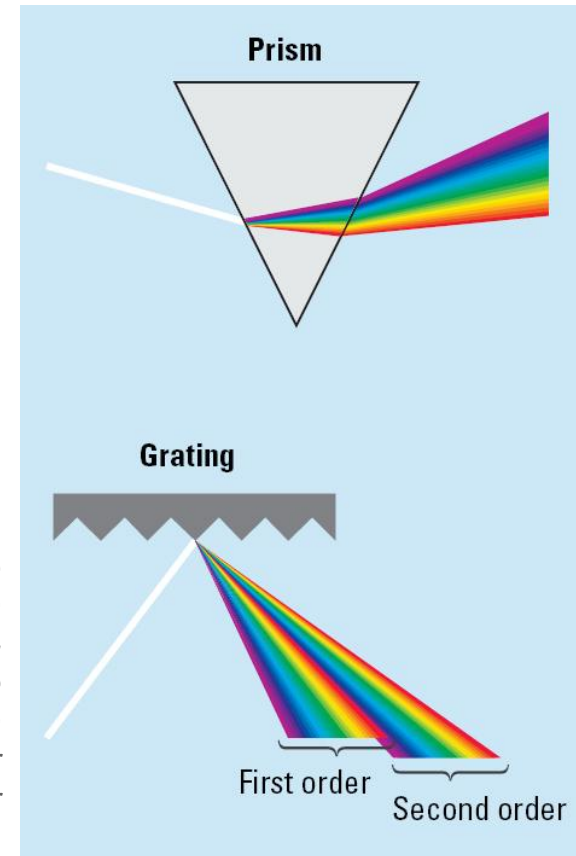
# UV-Vis-Spektroskopie

## Dispersionsvorrichtungen

Dispersionsvorrichtungen brechen die Wellenlängen des Lichts in unterschiedlichen Winkeln. In Verbindung mit einem geeigneten Austrittsspalt können diese Vorrichtungen dazu verwendet werden, eine bestimmte Wellenlänge (oder genauer gesagt, ein schmales Wellenband) des Lichts aus einer kontinuierlichen Quelle auszuwählen.

Es gibt zwei verschiedene Arten von Vorrichtungen:

- **Prismen**  
Diese spalten das Sonnenlicht in einen Regenbogen auf. Der Nachteil ist, dass der Dispersionswinkel temperaturempfindlich ist.
- **Holographische Gitter**  
Diese sind nicht temperaturempfindlich. Das Licht, das auf das Gitter fällt, wird abhängig von der Wellenlänge in verschiedenen Winkeln reflektiert.



Quelle: [Fundamentals of UV-visible spectroscopy](#)

# UV-Vis-Spektroskopie

## Detektoren

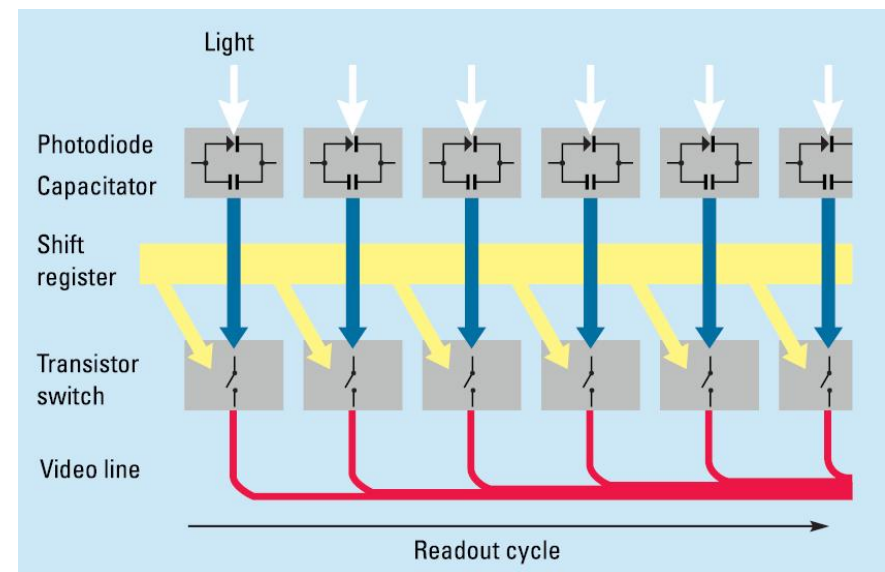
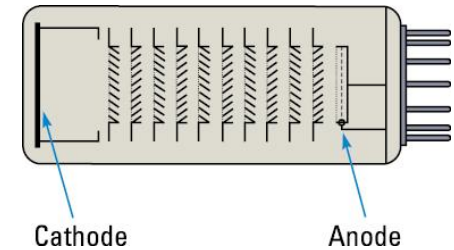
Ein Detektor wandelt ein Lichtsignal in ein elektrisches Signal um. Im Idealfall sollte er über einen großen Bereich hinweg ein lineares Signal mit geringem Rauschen und hoher Empfindlichkeit liefern.

### Photomultiplier-Detektor

Verbindet Signalumwandlung mit mehreren Verstärkungsstufen innerhalb der Röhre. Der gesamte Wellenlängenbereich wird gescannt.

### Photodioden-Detektor

Das Licht, das auf das Halbleitermaterial fällt, ermöglicht den Fluss von Elektronen und dadurch die Verringerung der Ladung eines Kondensators, der an das Material angeschlossen ist. Die Ladungsmenge, die erforderlich ist, um den Kondensator wieder aufzuladen, ist proportional zur Lichtintensität. Der gesamte Wellenlängenbereich wird in nur einer Messung erfasst.

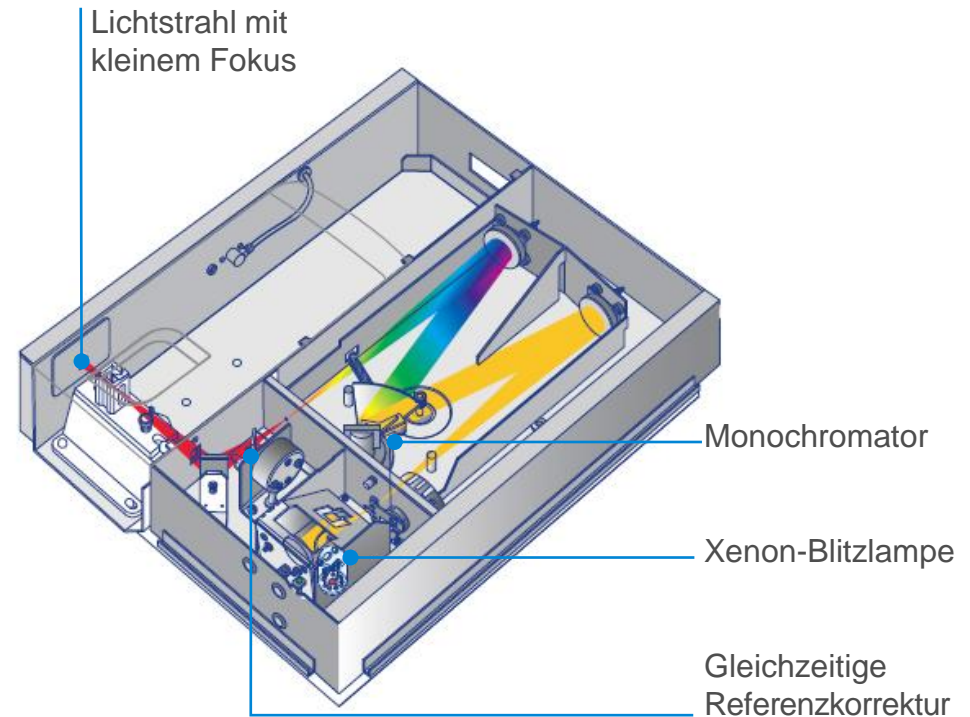


Schematische Darstellung eines Photomultiplier-Detektors (oben) und eines Photodioden-Arrays (unten).

# UV-Vis-Spektroskopie System

## Wichtige Applikationen

- Messung von Kinetiken
- Charakterisierung unbekannter oder neu synthetisierter Verbindungen
- Bestimmung der Reinheit von DNA
- Quantifizierung von DNA und Proteinen
- Analyse von Nährstoffen in Wasser, Lebensmitteln und landwirtschaftlichen Proben



# UV-Vis-Spektroskopie

## Qualitative und quantitative Analyse

UV-Vis-Spektren zeigen im Allgemeinen nur wenige breite Absorptionsbanden. Der größte Teil der Absorptionen organischer Substanzen beruht auf der Anwesenheit von  $\pi$ -Bindungen (d. h. ungesättigter Bindungen).

Ein Chromophor ist eine Gruppe innerhalb eines Moleküls, die üblicherweise eine  $\pi$ -Bindung enthält. Wird er in einen gesättigten Kohlenwasserstoff (der kein UV-Vis-Absorptionsspektrum hat) eingeführt, entsteht eine Mischung mit einer Absorption zwischen 185 und 1000 nm.

**Ausgewählte Chromophore und ihre Extinktionsmaxima**

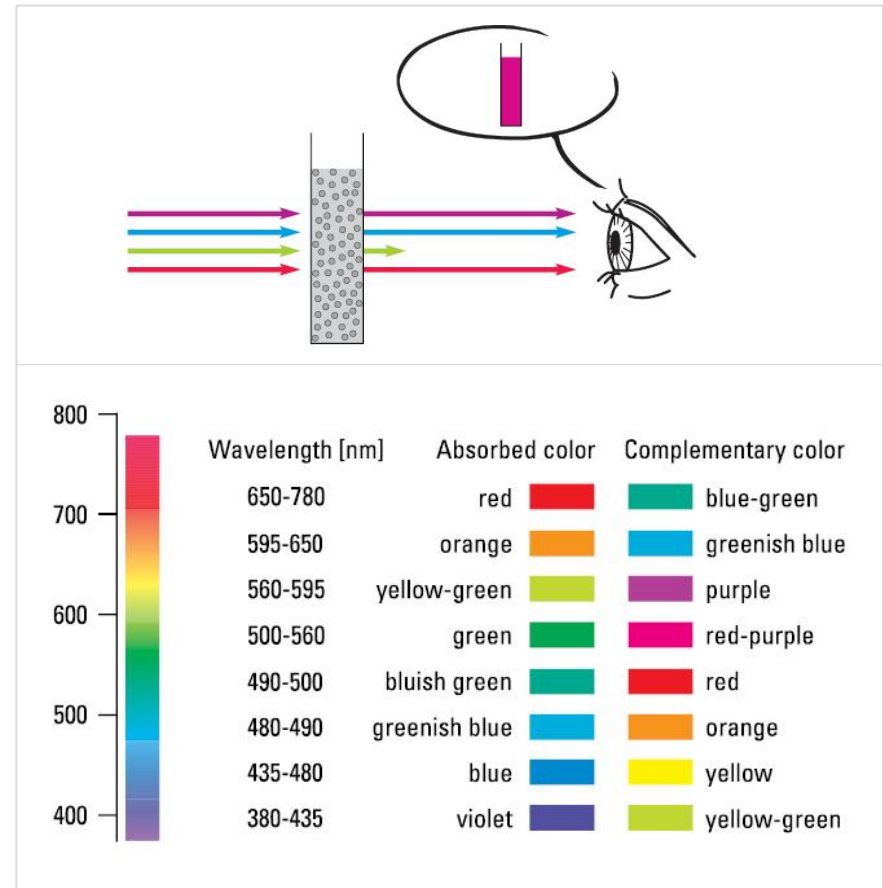
Chromophor	Formel	Beispiel	$\lambda_{\max}$ (nm)
Carbonyl (Keton)	$RR'C=O$	Aceton	271
Carbonyl (Aldehyd)	$RHC=O$	Acetaldehyd	293
Carboxyl	$RCOOH$	Essigsäure	204
Amid	$RCONH_2$	Acetamid	208
Nitro	$RNO_2$	Nitromethan	271



# UV-Vis-Spektroskopie

## Qualitative und quantitative Analyse

Die Farbe ist eine wichtige Substanzeigenschaft. Die Farbe von Materie hängt von ihrem Absorptions- oder Reflexionsvermögen ab. Das menschliche Auge sieht die Komplementärfarbe der absorbierten Farbe.



*Transmission und Farbe (oben)  
Extinktion und  
Komplementärfarben (unten)*

Quelle: [Fundamentals of UV-visible spectroscopy](#)

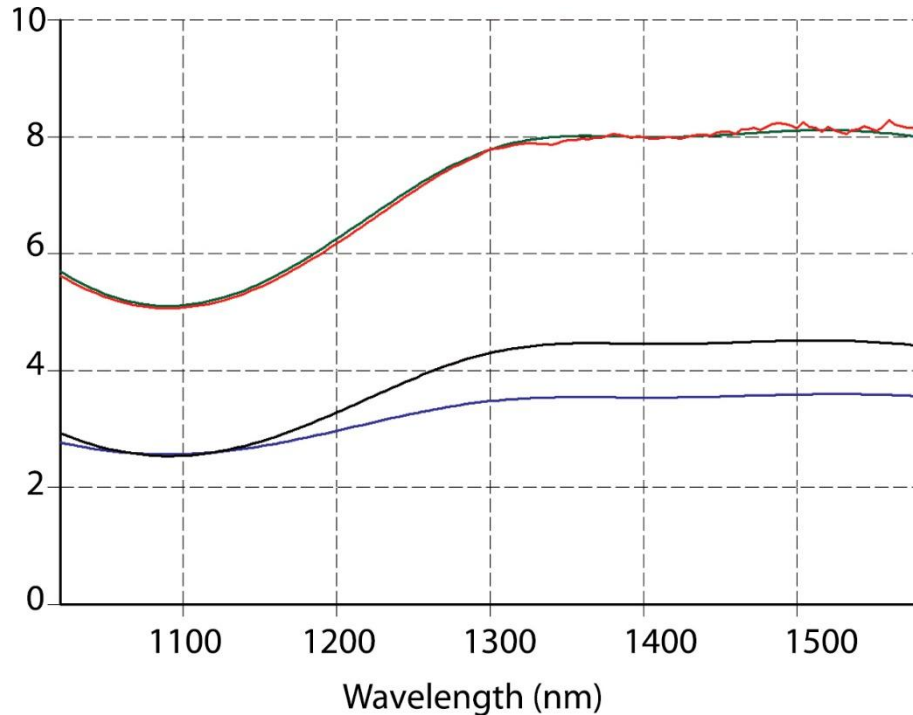
# UV-Vis-Spektroskopie

## Applikationen

MARKT	APPLIKATIONEN
Werkstoff	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Massenware</li> <li>• Optische Komponenten: Filter, Linsen, Spiegel, Strahlteiler, Polarisatoren, Glas</li> <li>• Dünnschichten, optische und Antireflex-Beschichtungen, Nano-Verbundwerkstoffe, Farben und Lacke, Solarzellen</li> <li>• Schutzbrillen</li> <li>• Zellstoff und Papier</li> <li>• Tarnmaterial</li> <li>• Sonnenbrillen</li> <li>• Gewebe/Textilien</li> </ul>
Chemie	<ul style="list-style-type: none"> <li>• QS/QK bei Rohstoffen und Fertigprodukten in der Produktion</li> <li>• Chemische Identifizierung oder Untersuchung chemischer Prozesse: in Synthesechemielabors, in der photochemischen Forschung, bei der Charakterisierung von Nanopartikeln, in der Oberflächenbehandlungsforschung</li> <li>• Analytische Chemie</li> <li>• Farbmessungen: Farben/Lacke und Textilien (Farbübereinstimmung, QS/QK bei Geweben, SPF-Messungen)</li> </ul>
Biotechnologie und Pharmazie	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Arzneimittelbindungstests</li> <li>• Enzymatische Reaktionen</li> <li>• Analyse getriebener biologischer Proben, von Geweben und Zellhomogenaten</li> <li>• Intrazelluläre Ionenmessungen</li> <li>• Nukleinsäure- (RNA/DNA) und Proteinbestimmung</li> <li>• DNA- und Protein-Denaturierungs-/Renaturierungsmessungen</li> </ul>

# UV-Vis-Spektroskopie

## Messung der Absorption von Schott-Glasfiltern



Spektrum des UG11-Filters 1 (blau), des UG11-Filters 2 (schwarz) und das Spektrum des UG11-Filters 1 und des UG 11-Filters 2 gemeinsam (rot). Das grüne Spektrum ist das vorhergesagte Ergebnis aufgrund der Addition des blauen und schwarzen Spektrums.

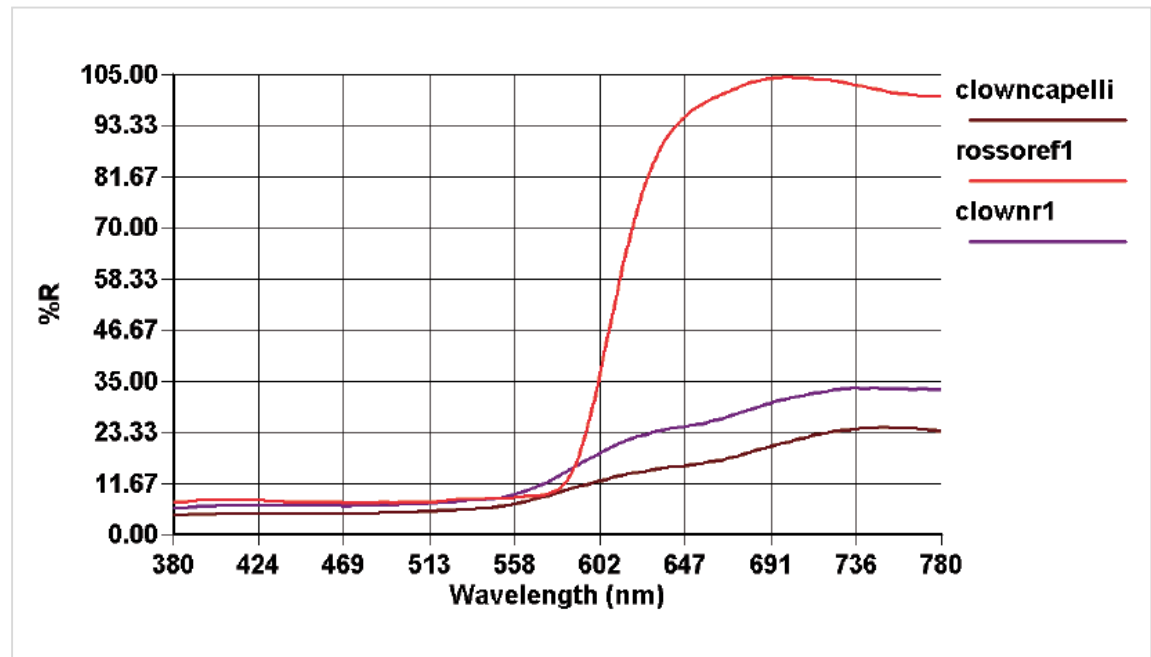
*Zwei Filter wurden getrennt gemessen und numerisch addiert (Voraussage). Diese Ergebnisse sind identisch mit den Ergebnissen, wenn beide Filter gemeinsam gemessen werden (Messung).*

# UV-Vis-Spektroskopie

## Messung des Farbtons von Farbe auf Leinwand



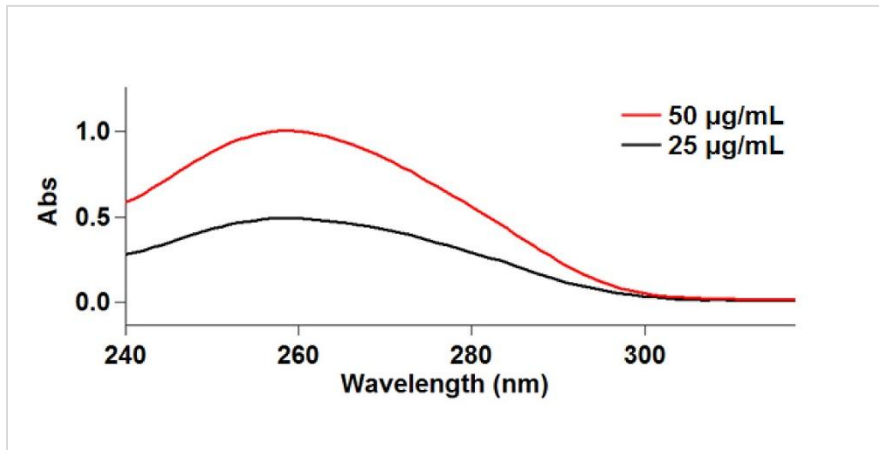
Die Spektren zeigen, dass die Proben clownnr1 und clowncapelli aus ähnlichen Materialien bestehen.



Quelle: [Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer](#)

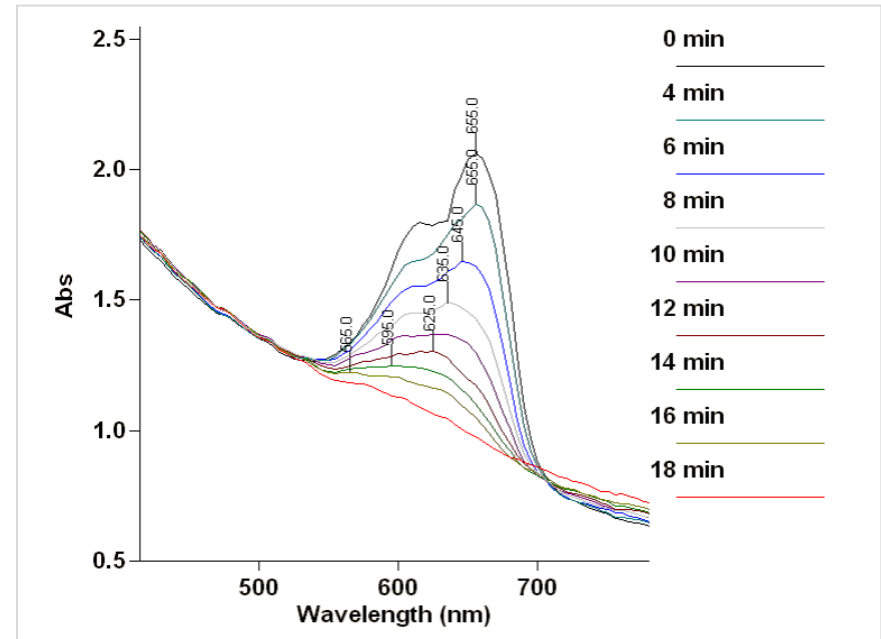
# UV-Vis-Spektroskopie

## Reinheitsanalyse und kinetische Analyse



Scans von 150- $\mu$ l-Proben DNA bei 4 °C in zwei Konzentrationen. Sie zeigen den charakteristischen Absorptions-Peak bei 260 nm. Beachten Sie auch die Absorption von 1,0 Absorptionseinheiten für 50  $\mu$ g/ml DNA und den Absorptions-Peak von 0,5 Absorptionseinheiten für 25  $\mu$ g/ml DNA. Dies zeigt die Gültigkeit des Lambert-Beerschen Gesetzes.

Quelle: [Measuring the purity of low volumes of DNA at 4 °C using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics microprobe](#)



Scans der Kinetik von Metylenblau bei Exposition unter einer hochintensiven UV-Lampe (Oriell 500-W-Hg(Xe)-Lampe) für 20 Minuten mittels in-situ-Messung mit Faseroptik im Bereich von 400 bis 800 nm. Angegeben sind jeweils die Wellenlängen der maximalen Absorption.

Quelle: [Simple, automated measurements of the photocatalytic properties of colorimetric species using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics.](#)

# UV-Vis-Spektroskopie

## Einsatzmöglichkeiten

Die einfache lineare Beziehung zwischen Absorption und Konzentration sowie die relativ problemlose Messung des UV-Vis-Lichts haben die UV-Vis-Spektroskopie zur Grundlage Tausender quantitativer analytischer Methoden gemacht.

### UV-Vis-Spektroskopie

#### Vorteile

- Großer Applikationsbereich für qualitative und quantitative Analysen
- Kann für viele organische und anorganische Moleküle und Ionen verwendet werden.
- Einfach anzuwenden
- Schnell
- Wenig Wartung erforderlich
- Zerstörungsfreie Messung

#### Beschränkungen

- Höhere (schlechtere) Nachweisgrenze als bei Fluoreszenz
- Überlappende Absorptionsbanden können stören
- Kann bei Verwendung einer Deuterium- oder QI-Quelle für lichtempfindliche Verbindungen schwierig sein (gilt nicht für eine Xenonquelle).

# Fluoreszenzspektroskopie

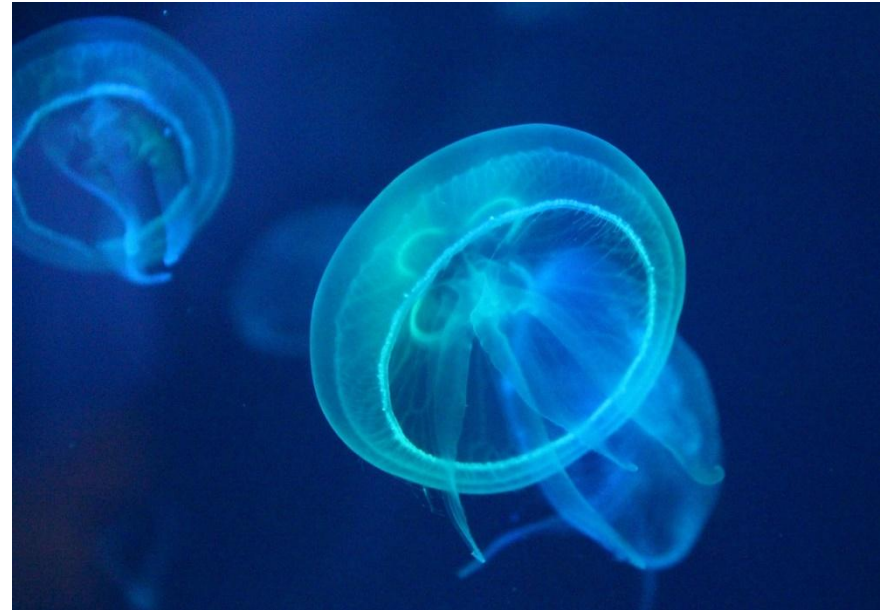
## Allgemeines

Fluoreszenz ist die Emission von Photonen nach der Anregung durch Photonen mit höherer Energie.

Fluoreszenzspektrometer bieten eine hohe Empfindlichkeit (pikomolar), da sie im Gegensatz zu Spektralphotometern ein Signal vor einem schwarzen Hintergrund nachweisen.

Geräte für die Forschung verwenden scannende Monochromatoren sowohl für die Anregung als auch für die Emission.

Viele Fluoreszenzsysteme können auch Phosphoreszenz und Lumineszenz messen.





# Fluoreszenzspektroskopie

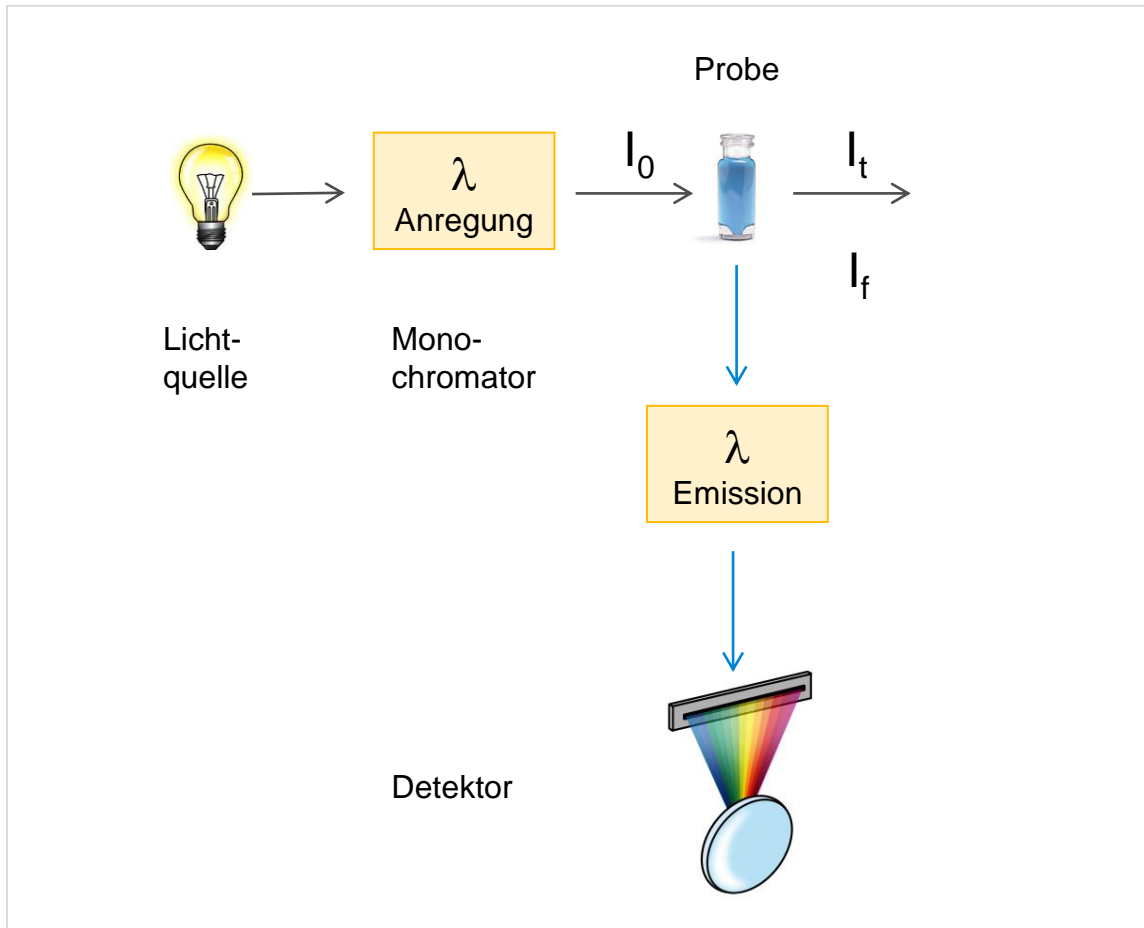
## Allgemeiner Aufbau



- Die Lampe (Quelle) emittiert Licht verschiedener Wellenlängen in einem bestimmten Bereich.
- Der Monochromator wählt die Anregungswellenlänge aus.
- Die Probe befindet sich im Probenbereich, der Analyt absorbiert Licht.
- Das emittierte Licht hat eine längere Wellenlänge.
- Der Monochromator wählt die Emissionswellenlänge aus.
- Das hindurchtretende Licht wird gemessen (im Detektor).

# Fluoreszenzspektroskopie

## Allgemeiner Aufbau



*Hinweis: Der Detektor befindet sich nicht in gerader Linie hinter der Lichtquelle, um das Risiko zu minimieren, dass hindurchtretende oder reflektierte Lichtstrahlen den Detektor erreichen.*

# Fluoreszenzspektroskopie

## Lichtquelle

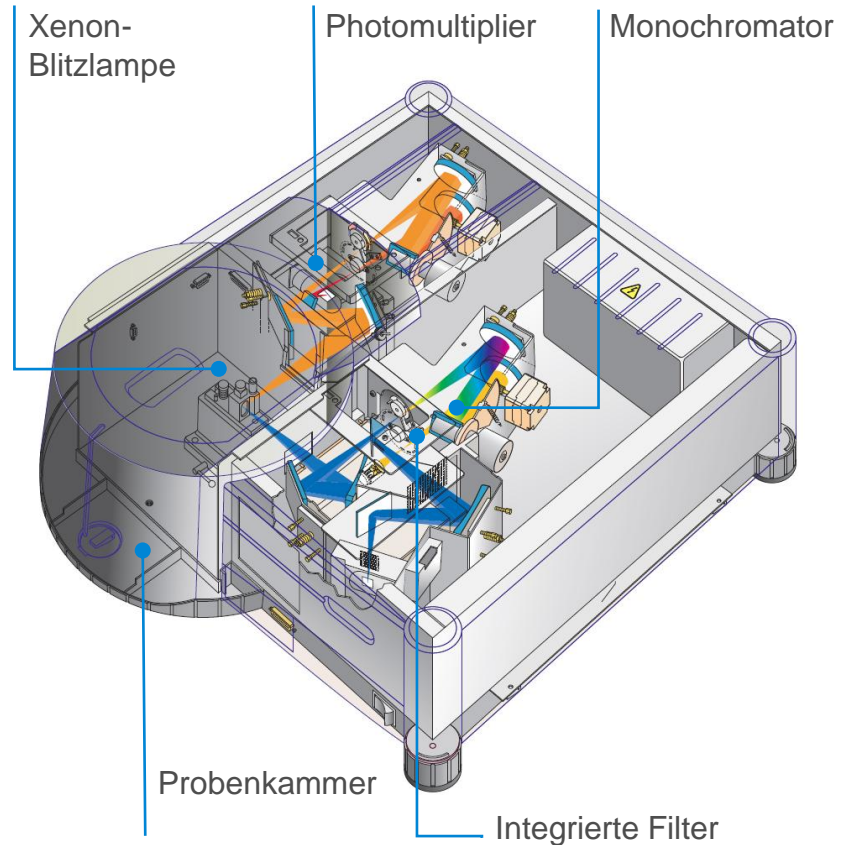
**In Fluoreszenzspektrometern werden verschiedene Lichtquellen verwendet:**

- **Xenonlampe:** kontinuierliches Emissionsspektrum mit annähernd konstanter Intensität von 300 bis 800 nm
- **Quecksilberdampfampe:** Emittiert ein Linienspektrum, die Wellenlängen des emittierten Lichts liegen in der Nähe der Wellenlängen der Peaks
- **Laser:** Beschränkungen bei der Auswahl der Wellenlängen, kann nicht verändert werden

# Fluoreszenzspektroskopie System

## Wichtige Applikationen

- Thermische Stabilität von Biokatalysatoren
- Charakterisierung von Biomarkern für die Untersuchung lebender Zellen (Live Cell Imaging)
- Kohlenwasserstoffgemische in Erdöl
- Charakterisierung der GPCR-Oligomerisierung



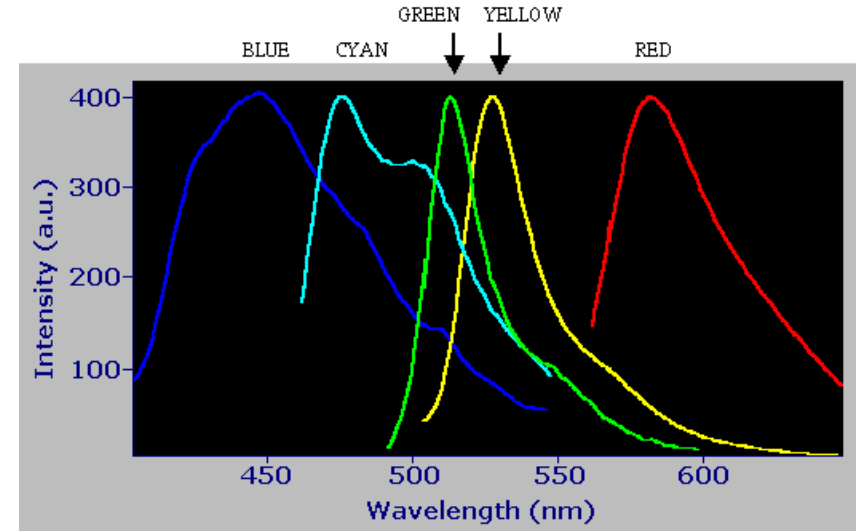
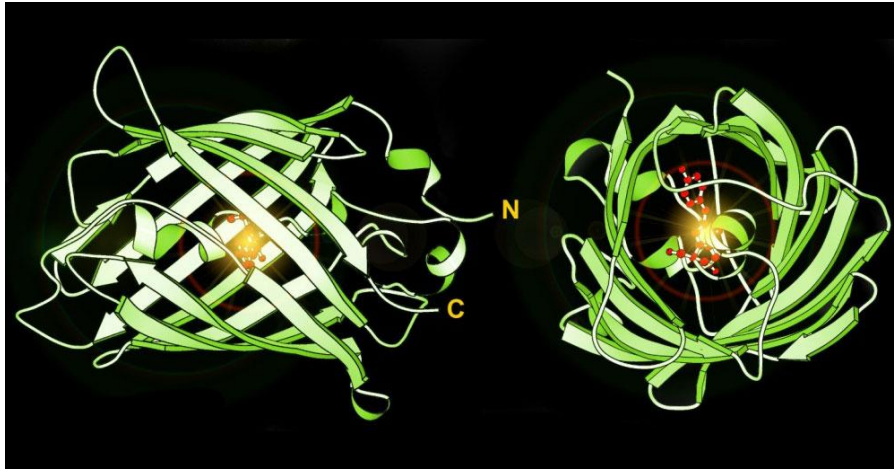
# Fluoreszenzspektroskopie

## Applikationen

MARKT	APPLIKATIONEN
Chemie	<ul style="list-style-type: none"><li>• Photochemische Forschung</li><li>• Charakterisierung von Nanopartikeln</li><li>• Oberflächenbehandlungs-Forschung</li><li>• Analytische Chemie</li></ul>
Pharmazie und Biotechnologie	<ul style="list-style-type: none"><li>• Biochemische und biophysikalische Forschung</li><li>• Proteinquantifizierung und Strukturuntersuchungen: Protein-Protein-Wechselwirkungen, Membranuntersuchungen</li><li>• Enzymologie: Enzymkinetiken mit fluoreszierendem Substrat</li><li>• Molekularbiologie: DNA- und RNA-Quantifizierung</li></ul>

# Fluoreszenzspektroskopie

## Expression des grün fluoreszierenden Proteins im Zytosol

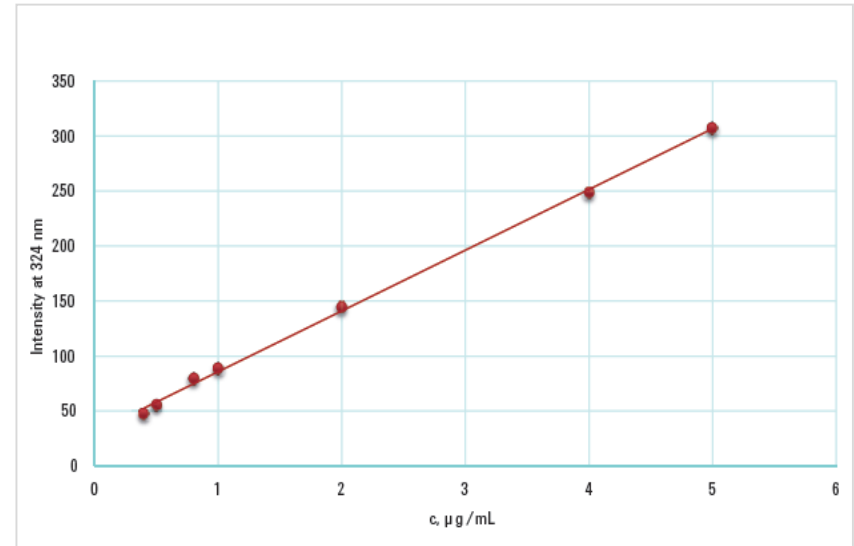
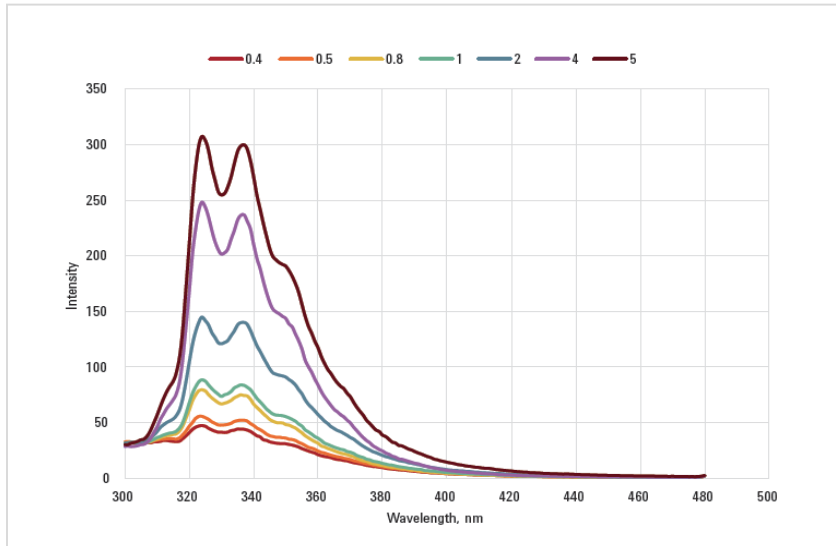


Schematische Darstellung des grün fluoreszierenden Proteins. Links: Tripeptidfluorophor in rot. Rechts: Intensität gegen Emission aufgetragen für das gesamte Spektrum der fluoreszierenden Proteine.

Quelle: [Cytosolic expression of Green Fluorescent Protein \(GFP\) and its derivatives in the yeast \*Saccharomyces cerevisiae\*: Detection in vivo using the Agilent Cary Eclipse](#)

# Fluoreszenzspektroskopie

## Quantifizierung polycyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe in Erdöl



Fluoreszenzspektren von Naphthalin, Anregungswellenlänge 250 nm, Anregungsspalt 10 nm, Emissionsspalt 5 nm (links);

Kalibrierkurve (Punkte für gleiche Konzentration gemittelt) für die fluorimetrische Bestimmung von Naphthalin bei 324 nm, Anregungswellenlänge 250 nm, Anregungsspalt 10 nm, Emissionsspalt 5 nm.

Quelle: [Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer According to astm d 5412-93 \(2000\)](#)



# Fluoreszenzspektroskopie

## Möglichkeiten

Bei niedrigen Konzentrationen ist die Fluoreszenz im Allgemeinen proportional zur Konzentration des Fluorophors.

Quenching-Effekte können jedoch das Ergebnis beeinflussen. Das Quenching ist die Abnahme der Fluoreszenzintensität einer gegebenen Substanz und kann das Ergebnis verschiedener Prozesse sein, z. B. Reaktionen im angeregten Zustand oder Quenching aufgrund von Kollision.

### Fluoreszenzspektroskopie

#### Vorteile

- Extrem empfindlich für aromatische und ungesättigte Verbindungen
- Kann mit Derivatisierung oder Markierung für andere Verbindungen verwendet werden.
- Einfach anzuwenden
- Wenig Wartung erforderlich

#### Beschränkungen

- Beschränkt auf bestimmte Verbindungsarten
- Mischungen müssen ggf. aufgereinigt werden.
- Quenching kann auftreten.

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

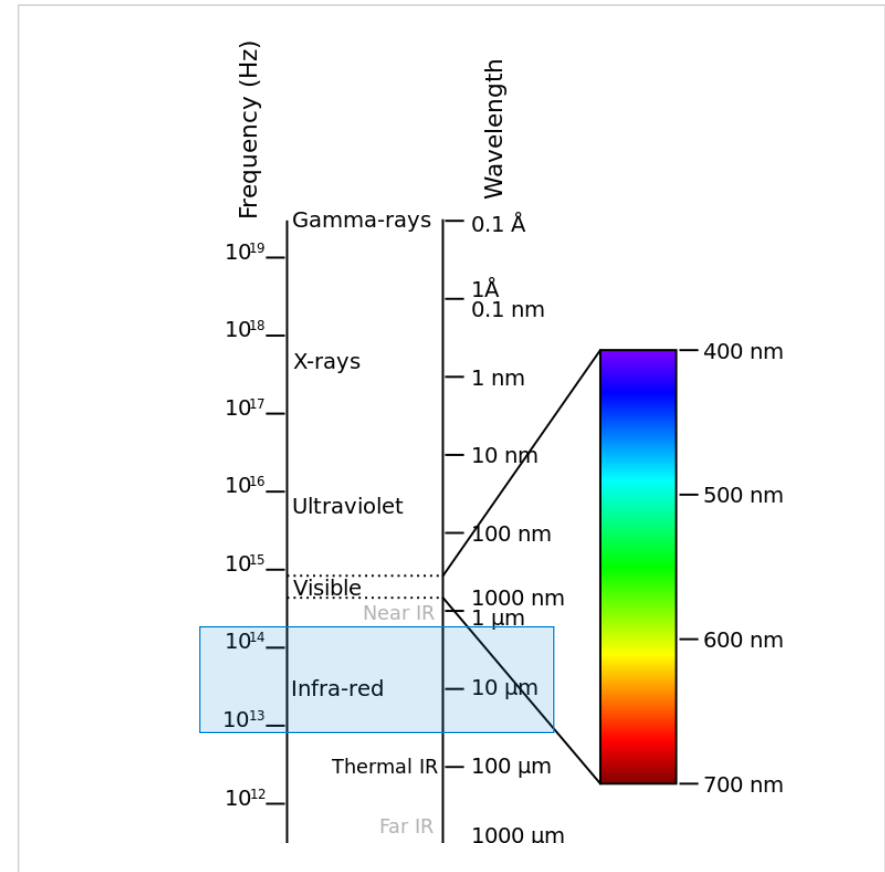
## Allgemeines

Infrarotes Licht hat eine längere Wellenlänge und eine kleinere Frequenz als sichtbares Licht.

Das Infrarotspektrum ist unterteilt in Strahlung des nahen, des mittleren und des fernen Infrarot. Der am häufigsten verwendete Bereich ist das mittlere Infrarot (Frequenz:  $4\ 000$  und  $400\ \text{cm}^{-1}$ ).

Die Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) ist eine Technik, die aus Feststoffen, Flüssigkeiten oder Gasen ein Infrarotspektrum der Absorption, Emission, Photoleitfähigkeit oder Raman-Streuung erhält.

Ein FTIR Spektrometer nimmt gleichzeitig Daten mit hoher spektraler Auflösung über einen großen Spektralbereich auf.



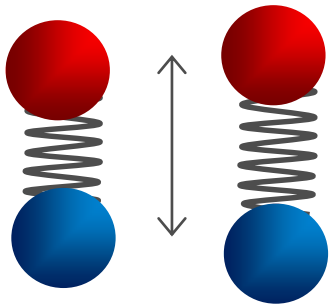
„Electromagnetic-Spectrum“ von Victor Blacus

Quelle: [Wikipedia](#)

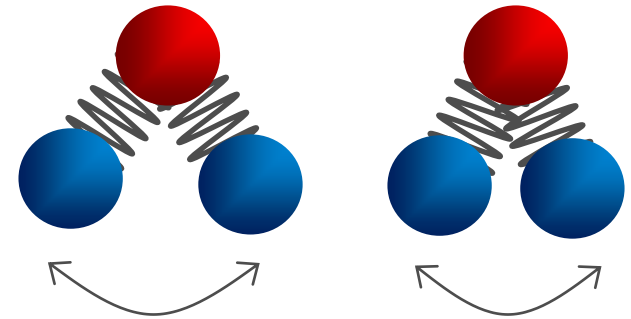
# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Allgemeines

Absorbiertes Infrarotlicht kann Molekülschwingungen hervorrufen. Die Infrarotspektroskopie misst die Änderung der Amplitude.



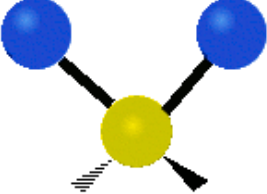
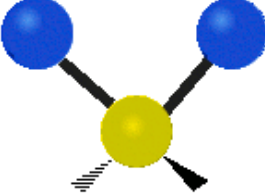
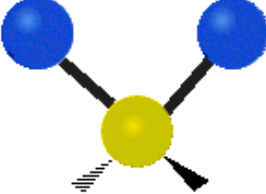
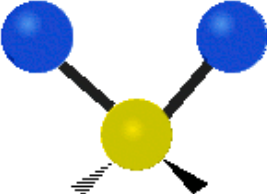
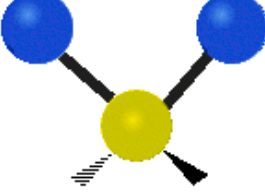
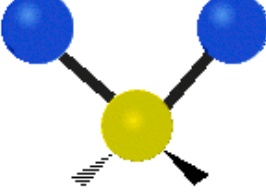
$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$



$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

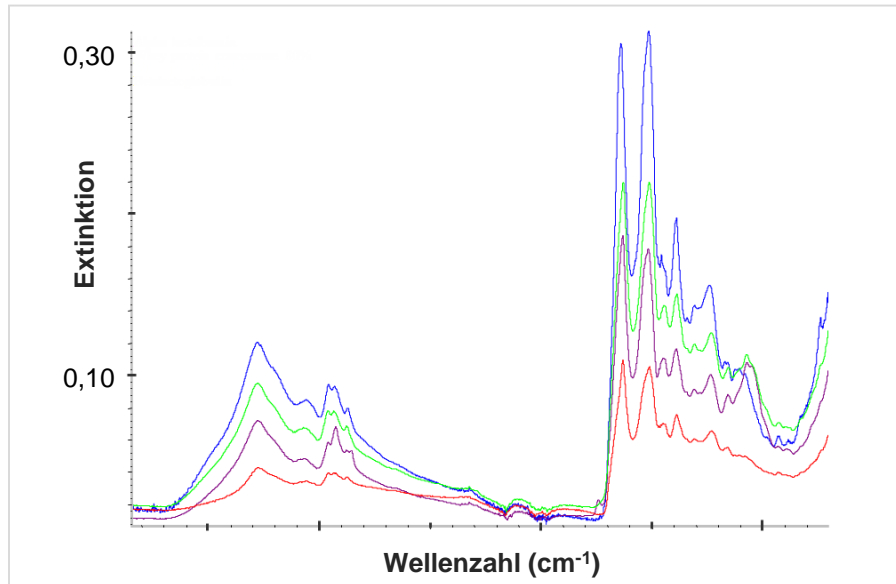
## Allgemeines

Symmetrische Streckschwingung	Asymmetrische Streckschwingung	Sprenschwingung
		
Pendelschwingung	Kippschwingung	Torsionsschwingung
		

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Allgemeines

- IR-aktive Bindungen verursachen Peaks.
- Diese Bindungen schwingen bei bestimmten Frequenzen.
- Kleine Schwankungen der Peakposition und -höhe ermöglichen eine Unterscheidung.
- Das IR-Spektrum ist der Fingerabdruck einer Verbindung.



IR

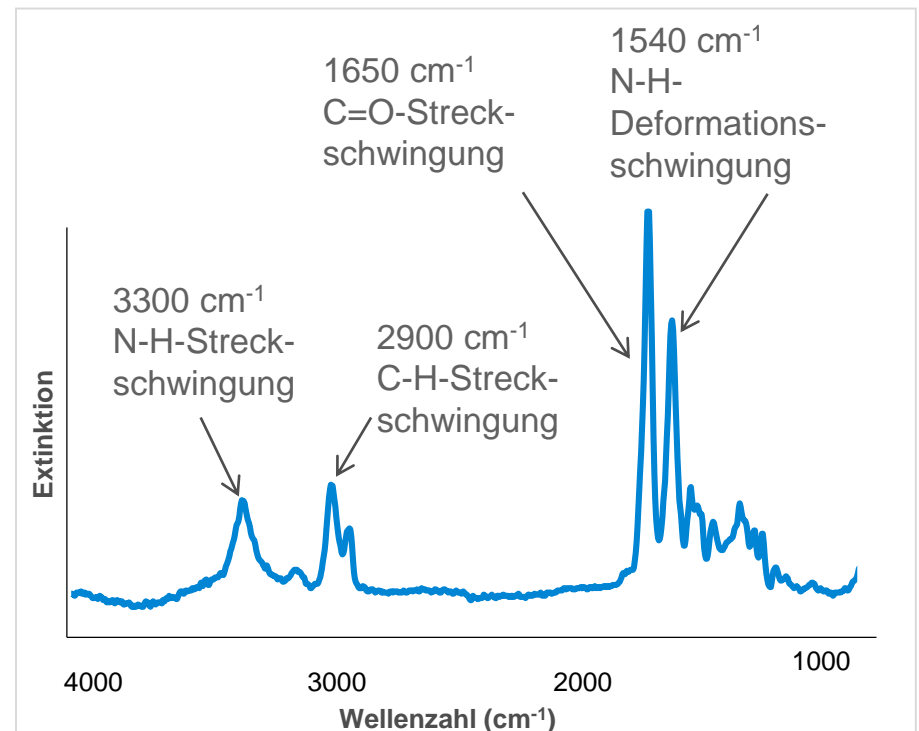
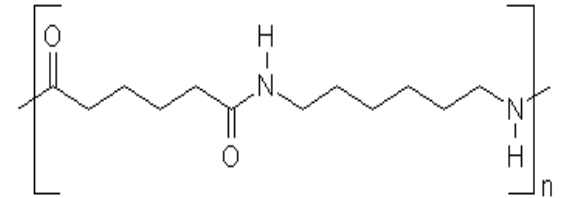


# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Allgemeines

Die Wellenzahl, bei der verschiedene Bindungen (meist als „funktionelle Gruppen“ bezeichnet) absorbieren, gibt die Stärke der Bindung an. Stärkere Bindungen absorbieren bei höheren Wellenzahlen.

Jede funktionelle Gruppe absorbiert bei ihrer eigenen charakteristischen Frequenz, so dass es möglich ist, aus dem Infrarotspektrum eines Stoffs seine chemische Struktur abzuleiten.



# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Allgemeines

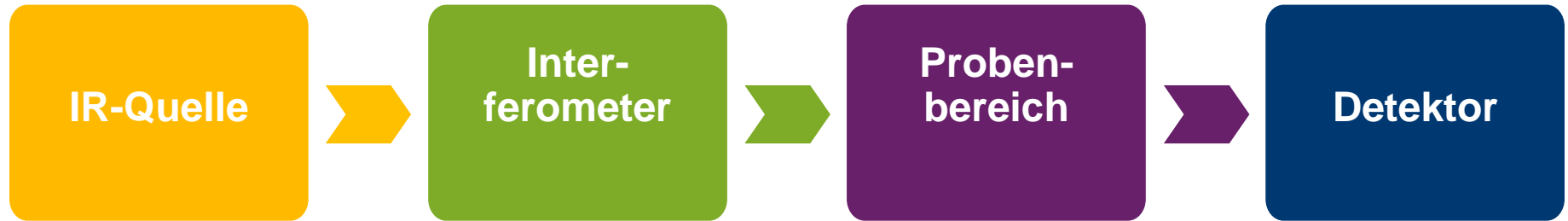
### Molekülbindungen und Wellenlängen

Bindung	Art der Schwingung	Wellenzahl Bereich (cm <sup>-1</sup> )
C-H	Alkan (Streckschwingung)	3000 – 2850
	-CH <sub>3</sub> (Deformationsschwingung)	1450 u. 1375
	-CH <sub>2</sub> (Deformationsschwingung)	1465
	Alken Streckschwingung	3100 – 3000
	(Deformationsschwingung aus der Ebene)	1000 – 650
Aromatisch	(Streckschwingung)	3150 – 3050
	(Deformationsschwingung aus der Ebene)	900 – 600
	~ 3300	
Alkin (Streckschwingung)	2900 – 2700	
Aldehyd		
C=C	Alken	1680 – 1600
	Aromatisch	1600 u. 1475
C≡C	Alkin	2250 - 2100
C=O	Aldehyd	1740 – 1720
	Keton	1725 – 1705
	Carbonsäure	1725 – 1700
	Ester	1750 – 1730
	Amid	1680 – 1630
Anhydrid	1810 – 1760	

Bindung	Art der Schwingung	Wellenzahl Bereich (cm <sup>-1</sup> )
C-O	Alkohole, Ester, Ether, Carbonsäuren, Anhydride	1300 – 1000
O-H	Alkohole, Phenole	3650 – 3600
	Frei H-gebunden Carbonsäuren	3400 – 3200 3400 – 2400
N-H	Primäre und sekundäre Amine und Amide (Streckschwingung) (Deformationsschwingung)	3500 – 3100 1640 – 1550
C-N C=N	Amine Imine und Oxime	1350 – 1000 1690 – 1640

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Allgemeine Aufbau



- Die IR-Quelle erzeugt einen Infrarotstrahl (Breitband-Lichtquelle).
- Das Interferometer (Spiegelanordnung) erzeugt ein Interferenzmuster.
- Die Probe befindet sich im Probenbereich, der Infrarotstrahl tritt durch die Probe.
- Der Detektor erzeugt ein Interferogramm.
- Der Computer verwandelt das Interferogramm in ein Spektrum.

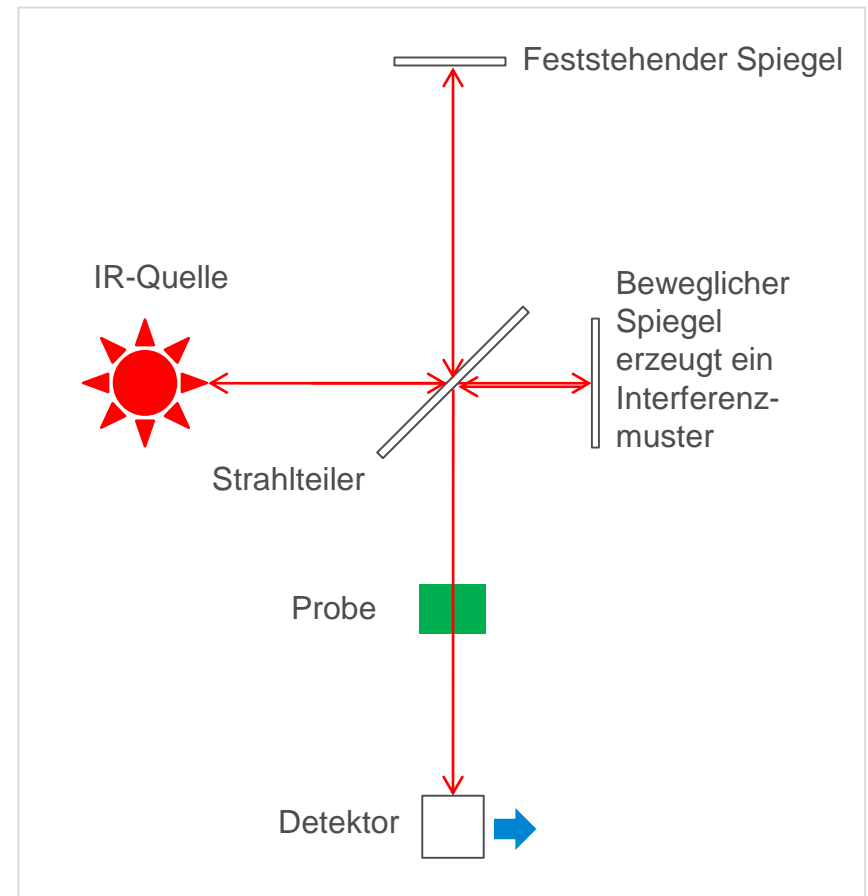
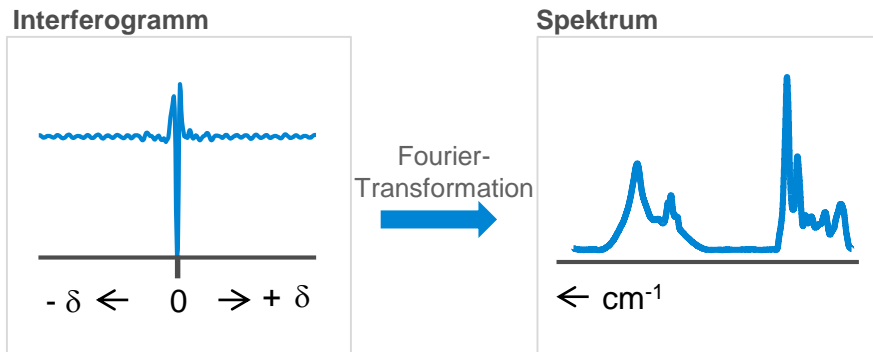


# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Interferogramm

Ein Interferogramm ist eine Darstellung der Infrarotintensität gegen die Position des beweglichen Spiegels.

Der Fourier-Transformations-Algorithmus verwandelt das Interferogramm in ein Spektrum, indem die einzelnen Absorptionsfrequenzen getrennt werden und die Intensität gegen die Wellenzahl aufgetragen wird.

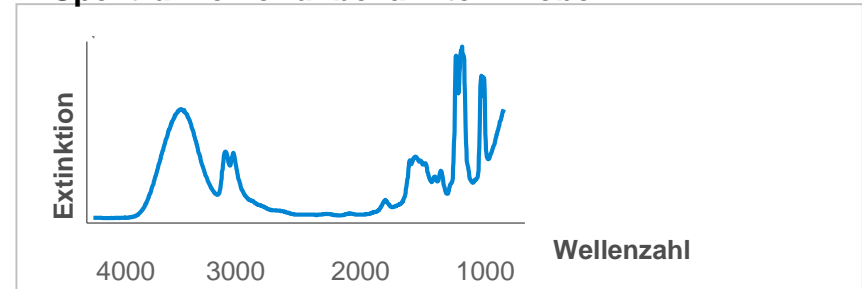


# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

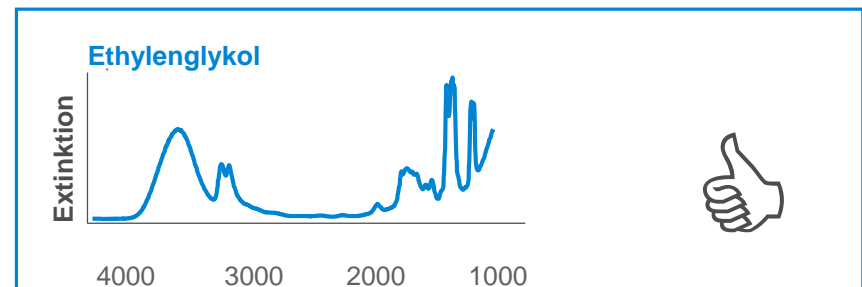
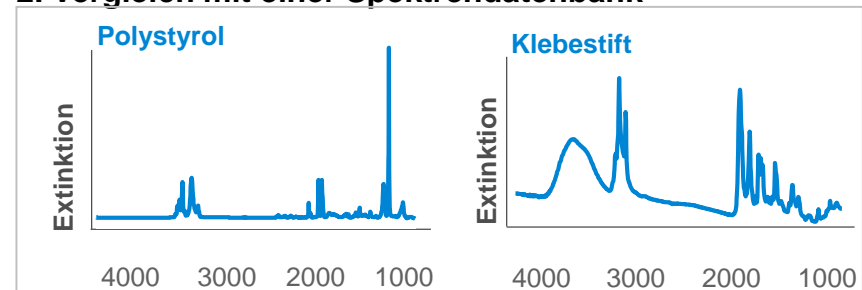
## Qualitative Analyse

- Verbindungen können aufgrund ihres einzigartigen Infrarotspektrums identifiziert werden.
- Infrarotspektren liefern Erkenntnisse zur Molekülstruktur (z. B. das Vorliegen einer Cyanogruppe).
- Computer können Infrarotdatenbanken durchsuchen, um eine Verbindung zu identifizieren.

### 1. Spektrum einer unbekanntnen Probe



### 2. Vergleich mit einer Spektrendatenbank



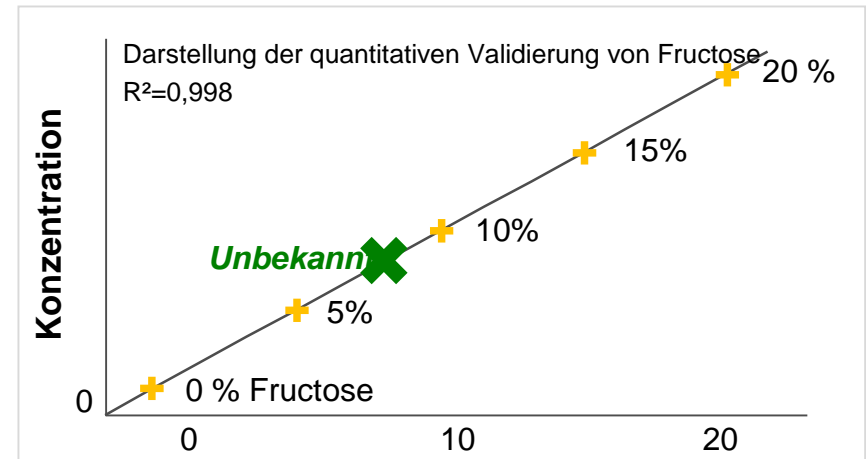
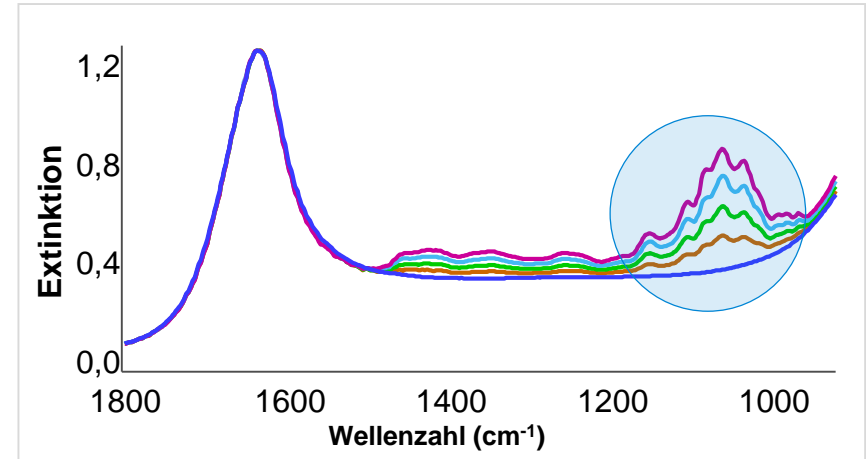
# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Quantitative Analyse

### Quantifizierung

- Lambert-Beersches Gesetz kann in der FTIR-Spektroskopie angewendet werden.
- Vergleich der Probe mit der Kalibrierungskurve aus der Absorption gegen die Konzentration eines Standards
- Anwendbar für Mischungen – gleichzeitige Quantifizierung

*Kalibrierungskurve für Fructose von 0-20 %*

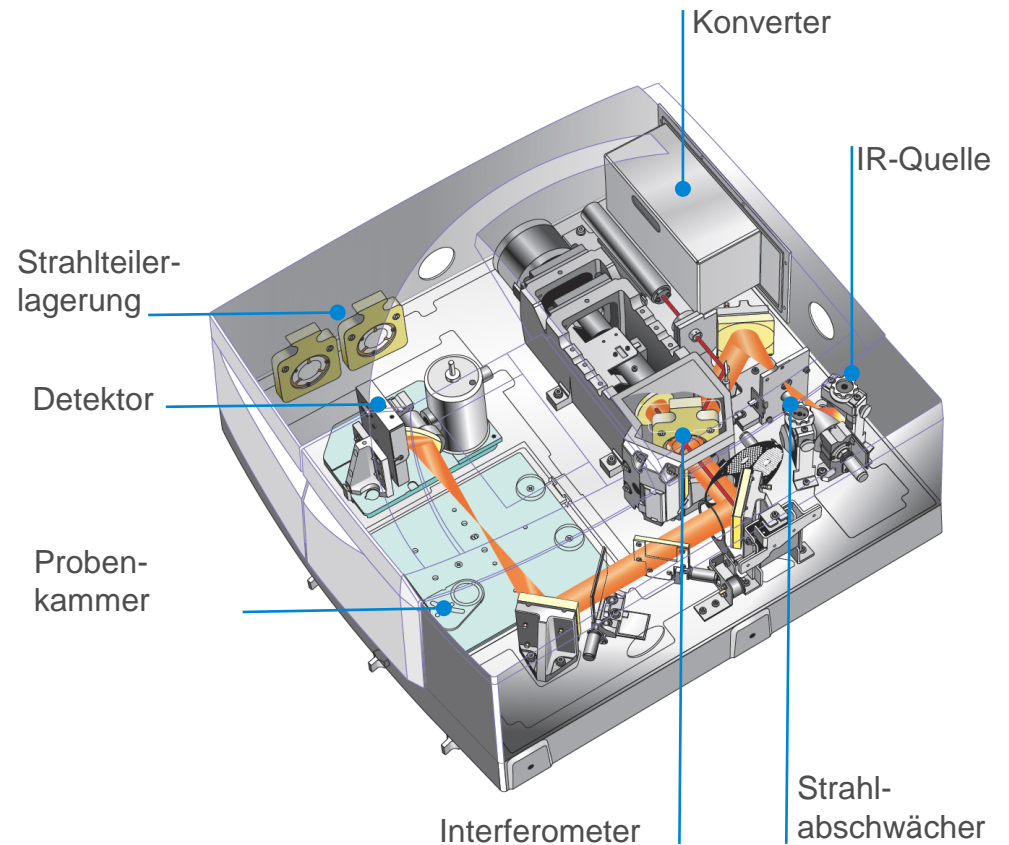


Quelle: Internes Schulungsmaterial von Agilent

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie System

## Wichtige Applikationen

- Biomedizinisches Imaging (Gewebe)
- Chemisches Imaging
- Prozesssteuerung (Biodiesel)
- Polymer-/Materialforschung/Steuerung
- Forensische Applikationen (Blutalkoholgehalt)



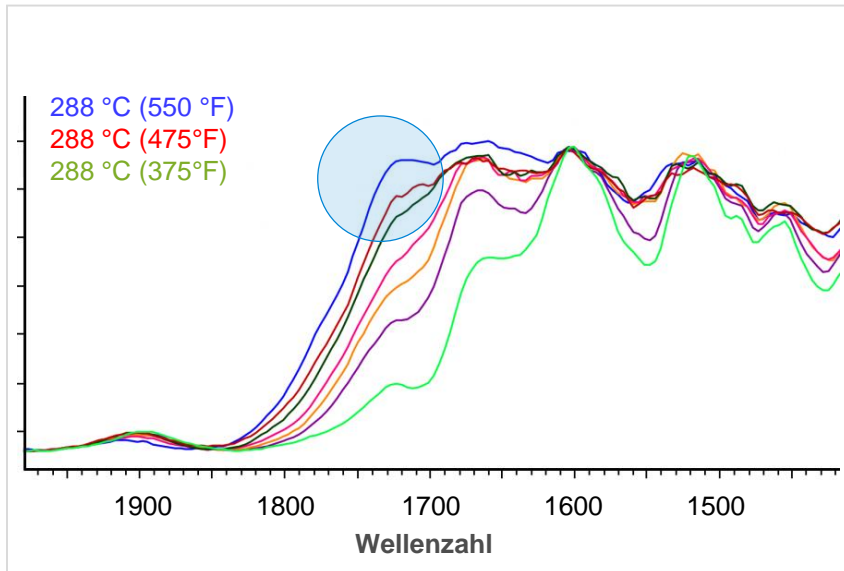
# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Applikationen

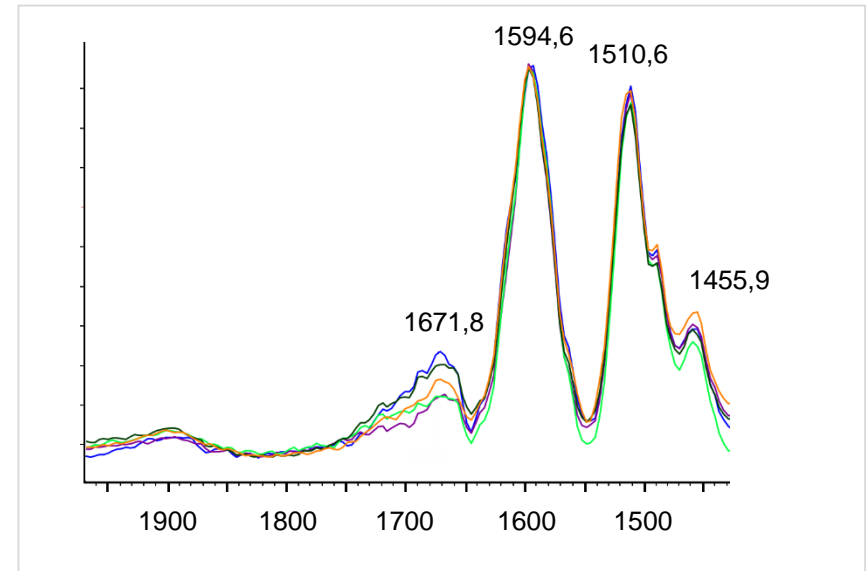
MARKT	APPLIKATIONEN
Werkstoffe	<ul style="list-style-type: none"><li>• Schäden an Verbundstoffen durch Hitze und UV-Strahlung oder Aushärtung von Verbundstoffen</li><li>• Identifizierung von Oberflächenbeschichtungen, Oberflächenreinheit und -präparation von Oberflächen, Verschleiß von Beschichtungen sowie Verwitterung</li><li>• Qualitätskontrolle, Konservierung von Kunstgegenständen und historischen Objekten, Materialforschung</li></ul>
Energie und Chemie	<ul style="list-style-type: none"><li>• Qualitätskontrolle von eingehenden flüssigen Rohstoffen und Fertigprodukten, einschließlich organischer Chemikalien, oberflächenaktiver Substanzen, Schmiermitteln und Speiseölen</li></ul>
Lebensmittel	<ul style="list-style-type: none"><li>• Qualitätskontrolle von eingehenden Rohstoffen und Fertigprodukten</li></ul>

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Untersuchung von Schäden an Verbundstoffen



*Thermisch beschädigtes Epoxidharz 1-Verbundmaterial, unbesandetes Band. Die Streifen aus Verbundstoff werden 1 Stunde lang verschiedenen Temperaturen ausgesetzt. Die Absorptionsbande bei 1722 cm<sup>-1</sup> (blauer Kreis) stammt von der Carbonyl-Streckschwingung, die auf die Oxidation des Harzes zurückzuführen ist, und deutet auf eine thermische Überexposition hin.*



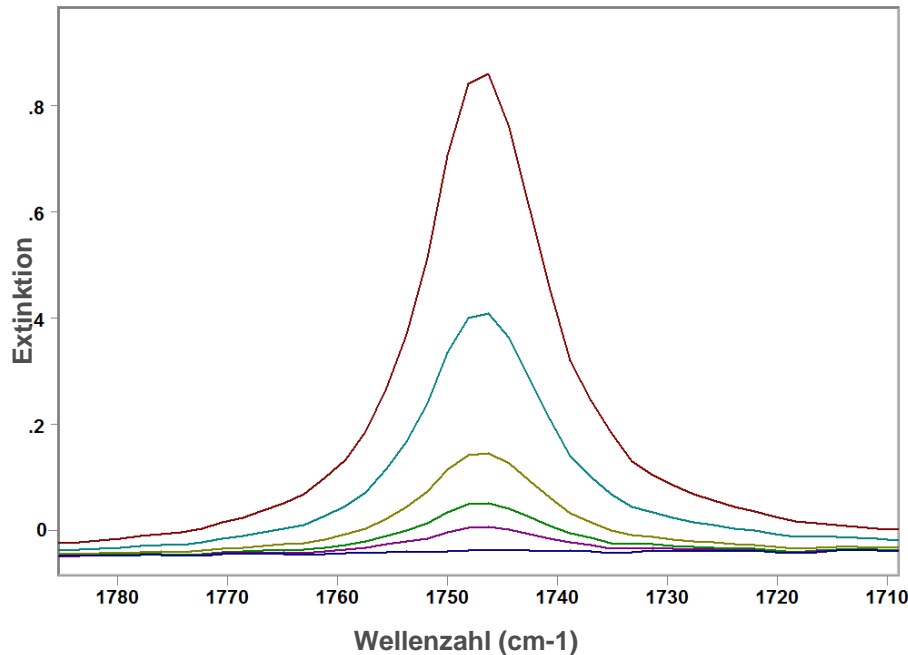
*Thermisch beschädigtes Epoxidharz 1-Verbundmaterial, besandetes Band. Die Streifen aus Verbundstoff werden 1 Stunde lang verschiedenen Temperaturen ausgesetzt. Die Schwingung bei 1722 cm<sup>-1</sup> fehlt in der anaeroben Umgebung.*

*Die Abnahme der Absorption bei 1672 cm<sup>-1</sup> stellt eine gute negative Korrelation zur Temperaturexposition dar.*

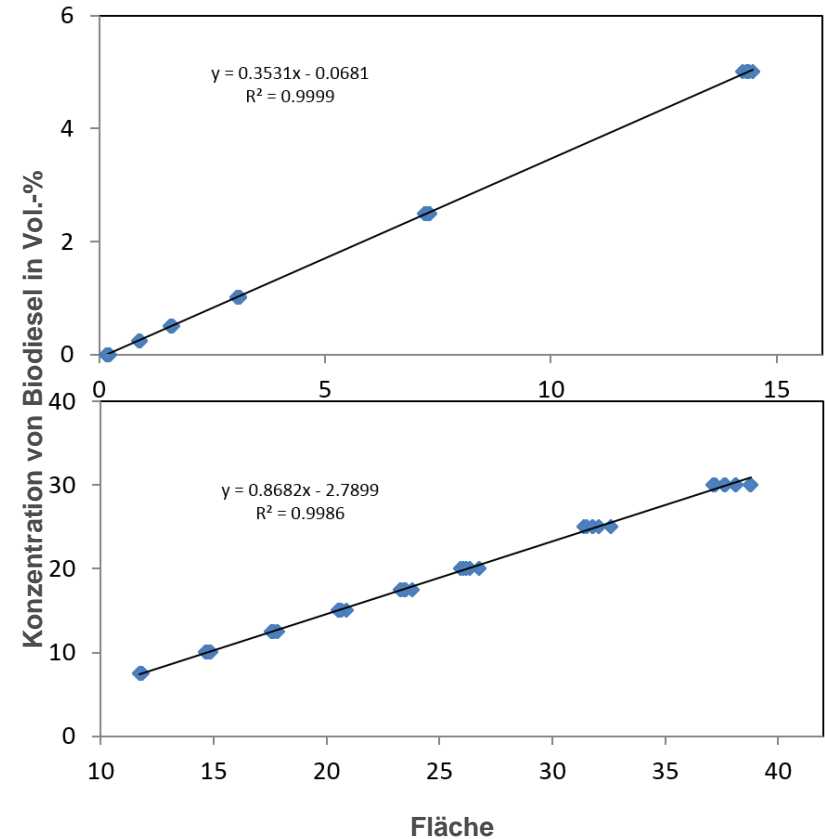
Quelle: [Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent's New Handheld 4300 FTIR](#)

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Messung von Biodieselskonzentrationen in Dieselkraftstoff mit hoher Cetanzahl



Überlagerte Infrarotspektren von Dieselkraftstoffen und Kalibrierung für unterschiedliche Biodieselskonzentrationen in Dieselkraftstoff mit hoher Cetanzahl. Absorptionsbereich von 1713 bis 1784  $\text{cm}^{-1}$  wurde bei der Kalibrierung für einen Konzentrationsbereich von 0 bis 6 % verwendet.



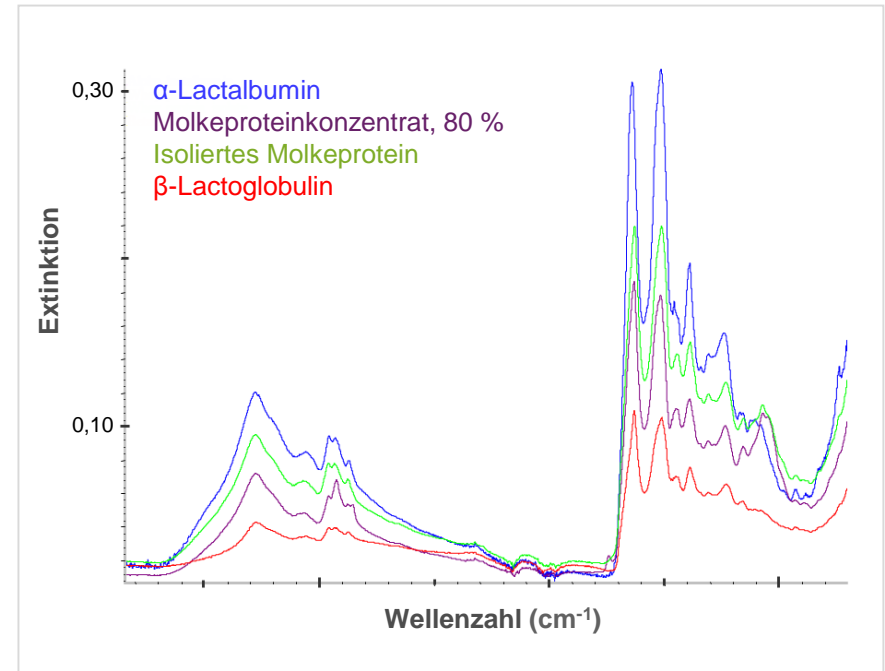
Quelle: [ASTM D7806-12 for Biodiesel in Petroleum-based Diesel Fuel Oil](#)

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Qualitätskontrolle von Milchpulver

### Die Spektrenerfassung wurde folgendermaßen durchgeführt:

- Eine kleine Menge Proteinpulver wurde auf die Diamant-ATR-Oberfläche gegeben.
- Die Proben wurden mithilfe der angebrachten Druckklammer gegen den Diamantkristall gepresst. (Eine Rutschkupplung an der Klammer verhindert einen zu großen Druck.)
- Erfassung von 64 aufaddierten Spektren (~30 s Aufnahmezeit bei  $4 \text{ cm}^{-1}$  Auflösung) zwischen  $4000$  und  $650 \text{ cm}^{-1}$ .



*Infrarotspektren ausgewählter Milchpulver, aufgenommen mit einem Cary 630 ATR-FTIR-Analyzer*

Quelle: [QA/QC of dairy powders using the Agilent Cary 630 ATR-FTIR analyzer](#)



# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Messung von Acrylamid in Kartoffelchips

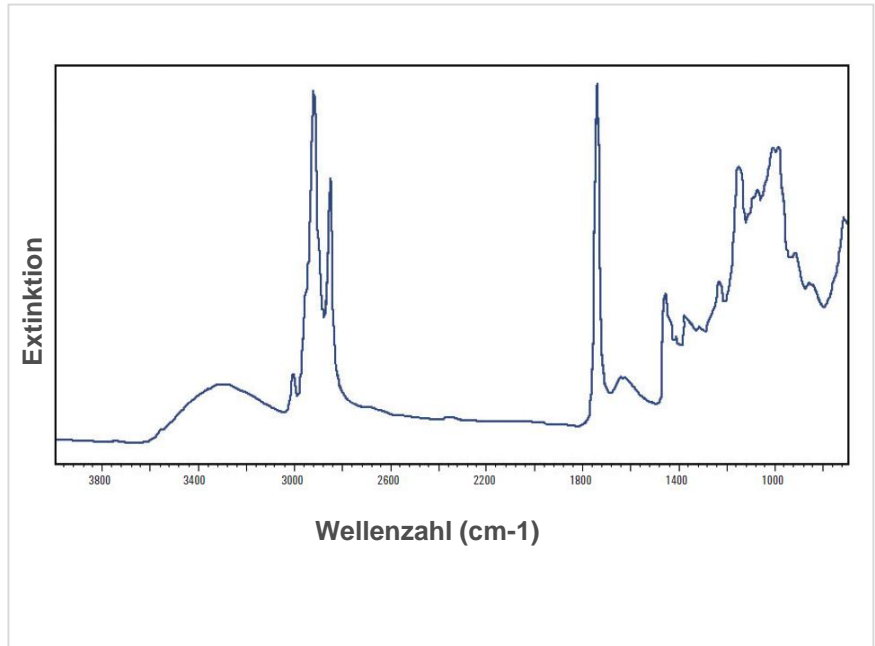
Sensor	Potato Chip Type		Factors	SE ( $\mu\text{g/L}$ )	r
Portable Cary 630 MIR	<sup>a</sup> Regular	Calibration	7	65	0.95
		Cross Val.	7	74	0.93
		Prediction*	7	75	0.90
	<sup>b</sup> Seasoned	Calibration	7	59	0.96
		Cross Val.	7	75	0.92
	<sup>c</sup> Sweet	Calibration	7	74	0.99
Cross Val.		7	98	0.98	

<sup>a</sup> "Regular" refers to potato chips containing only potatoes, vegetable oils and salt.

<sup>b</sup> "Seasoned" refers to potato chips containing additional ingredients.

<sup>c</sup> "Sweet" refers to sweet-potato chips.

\* independent variable predictions made on regular potato chips only



Ergebnisse und Spektrum von Kartoffelchips, gemessen mithilfe des tragbaren FTIR-Analyzers mit einfach reflektierender Diamant-ATR-Probentechnologie.

Quelle: [Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety](#)

# Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

## Einsatzmöglichkeiten

Die Infrarotspektroskopie ist eine leistungsstarke und vielseitige Technik, die zur Analyse von Gasen, Flüssigkeiten und Feststoffen verwendet werden kann.

Sie wird häufig zur Identifizierung von Strukturen verwendet, da funktionelle Gruppen charakteristische Banden hervorrufen, sowohl was die Intensität angeht, als auch deren Lage (Frequenz).

Es ist eine einfache, zuverlässige Methode, die von der Forschung bis zur Industrie weithin angewandt wird.

### Infrarotspektroskopie

#### Vorteile

- Einfach durchzuführen
- Schnelle und genaue Analysen
- Kann verschiedene Probentypen und -größen messen
- Qualitative und quantitative Analysen möglich
- Erfordert häufig wenig oder keine Probenvorbereitung
- Zerstörungsfreie Analyse

#### Beschränkungen

- Moleküle müssen auf das Infrarotlicht reagieren
- Minimale Informationen über Elementarzusammensetzung



# Abkürzungen

Abkürzung	Definition
A	Extinktion
b	Schichtdicke (cm)
c	Lichtgeschwindigkeit ( $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ )
$\varepsilon$	Extinktionskoeffizient oder molare Absorption ( $\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$ )
E	oszillierendes elektrisches Feld
$E$	Energie
FTIR	Fourier-Transform-Infrarot
h	Plancksches Wirkungsquantum ( $6,62 \times 10^{-34} \text{ Js}$ )
I	ausgesandte Strahlung
$I_0$	einfallende Strahlung
$\lambda$	Wellenlänge
T	Transmission
UV-VIS	ultraviolett – sichtbar
$\nu$	Frequenz ( $\text{s}^{-1}$ )

# Weitere Informationen

Weitere Informationen über Produkte von Agilent finden Sie unter: [www.agilent.com](http://www.agilent.com) oder unter [www.agilent.com/chem/academia](http://www.agilent.com/chem/academia)

Haben Sie Fragen oder Anregungen zu dieser Präsentation? Kontakt [academia.team@agilent.com](mailto:academia.team@agilent.com)

Early history	“The Early History of Spectroscopy” by Nicholas C. Thomas, <i>J Chem Edu</i> , Vol 68, 6, August 1991	
Primer	<a href="#">Fundamentals of UV-visible spectroscopy</a>	5980-1397EN
Application	<a href="#">Measuring optical densities over 10 Abs on the Agilent Cary 7000 Universal Measurement Spectrophotometer (UMS)</a>	5991-2528EN
Application	<a href="#">Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer</a>	5991-3783EN
Application	<a href="#">Simple, automated measurements of the photocatalytic properties of colorimetric species using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics</a>	5990-7864EN
Application	<a href="#">Cytosolic expression of Green Fluorescent Protein (GFP) and its derivatives in the yeast <i>Saccharomyces cerevisiae</i>: Detection in vivo using the Agilent Cary Eclipse</a>	SI-A-1831
Application	<a href="#">Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer according to astm d 5412-93 (2000)</a>	5991-3166EN
Application	<a href="#">Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent’s New Handheld 4300 FTIR</a>	5991-4037EN
Application	<a href="#">ASTM D7806-12 for Biodiesel in Petroleum-based Diesel Fuel Oil</a>	5991-5591EN
Application	<a href="#">QA/QC of dairy powders using the Agilent Cary 630 ATR-FTIR analyzer</a>	5991-0784EN
Application	<a href="#">Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety</a>	5991-3818EN
Web	<a href="#">CHROMacademy</a> – free access for students and university staff to online courses	
Videos & Images	<a href="http://www.agilent.com/chem/teachingresources">www.agilent.com/chem/teachingresources</a>	



# VIELEN DANK

Publikationsnummer 5991-6592DEE

 Inhalt

Nur für Lehrzwecke

March 14, 2016

50



Agilent Technologies

ACADEMIC  
& INSTITUTIONAL  
RESEARCH