

IR-Spektroskopie (Version April 2017)**1. Ziel**

Ziel ist die qualitative Analyse (Identifizierung) oder die quantitative Analyse (mengenmäßige Bestimmung) einzelner fester, flüssiger oder gasförmiger Stoffe oder ihrer Mischungen anhand der charakteristischen Schwingungsfrequenzen in ihren IR-Spektren. Neben der Interpretation von Spektren ist auch deren Aufnahme sowie das Verständnis der Mess- und Auswerteparameter Inhalt des Versuchs.

Als Messtechniken kommen Transmissions- und Reflexionsspektroskopie, abgeschwächte Totalreflexion (ATR), Diffuse Reflexion (DRIFT) oder IR-Mikroskopie zum Einsatz. Letztere kombiniert die IR-Spektroskopie mit einem bildgebenden Verfahren, so dass ein chemisches Abbild von Oberflächen und Schnitten erstellt werden kann.

2. Theorie**2.1 Grundlagen**

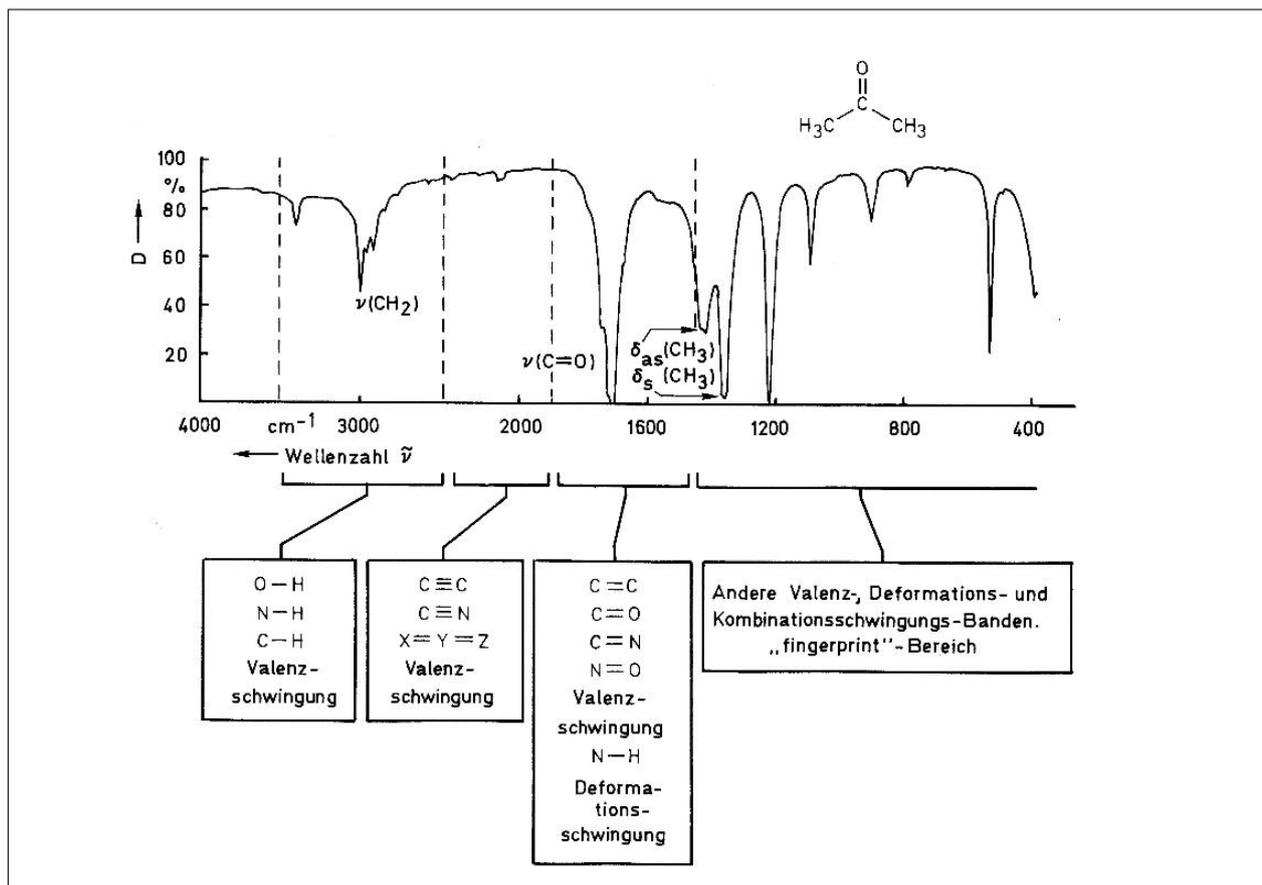
Moleküle können mit elektromagnetischer Strahlung in Wechselwirkung treten und diese absorbieren. Da gemäß den Gesetzen der Quantenmechanik jedes Molekül nur bestimmte Energiezustände annehmen kann, kann es nur dann in Wechselwirkung mit elektromagnetischer Strahlung treten, wenn deren Energie gleich der Differenz zweier Energieniveaus ΔE des Moleküls entspricht. Es erfolgt eine Anregung von das untere in das obere Energieniveau.

$$\Delta E = h \nu = h c / \lambda = h c \tilde{\nu}, \text{ mit } h = 6,62608 \cdot 10^{34} \text{ Plancksches Wirkungsquantum}$$

Die Energie der elektromagnetischen Strahlung ist proportional zur Frequenz ν und zur Wellenzahl $\tilde{\nu}$ sowie umgekehrt proportional zur Wellenlänge λ .

Bei der Infrarotspektroskopie absorbieren Moleküle Licht im mittleren und nahen Infrarot, d.h. Bereich von $5.000-500 \text{ cm}^{-1}$ ($2 - 20 \mu\text{m}$) und werden dadurch zu Rotationen und Schwingungen angeregt. Es können Schwingungen entlang von Bindungen (Streck- oder Valenzschwingungen) oder senkrecht dazu (Biege- oder Deformationsschwingungen) angeregt werden. Dies gilt für einzelne Atome, Atomgruppen (funktionelle Gruppen, $> 1500 \text{ cm}^{-1}$) oder auch für das ganze Molekülgerüst (Gerüstschwingungen, $< 1500 \text{ cm}^{-1}$). Während die Schwingungen funktioneller Gruppen für die qualitative Analyse besonders wertvoll sind, dient der auch als fingerprint-Bereich bezeichnete Bereich $< 1500 \text{ cm}^{-1}$ zur Identifizierung ganzer Moleküle. In diesem Bereich kommt es jedoch oft zur Überlagerungen, da hier auch Kombinationsschwingungen aus zwei oder mehr Fundamentalschwingungen auftreten.

Da die Schwingungsfrequenz von der Stärke der Bindung (Kraftkonstante) und der Masse der schwingenden Atome abhängt, erscheinen die charakteristischen Schwingungen der funktionellen Gruppen bei unterschiedlichen Wellenzahlen. Zur qualitativen und quantitativen Analyse werden daher Spektren aufgenommen, wobei die Transmission T oder die Extinktion E in Abhängigkeit von der Wellenzahl $\tilde{\nu}$ registriert wird. Aus Konvention wird die Wellenzahl $\tilde{\nu}$ statt der Wellenlänge λ verwendet, weil diese proportional zur Energie ist. Die Wellenzahl ist das Reziproke der Wellenlänge, $\tilde{\nu} = \lambda^{-1}$. Das Spektrum $> 1500 \text{ cm}^{-1}$ kann in drei Hauptbereiche eingeteilt werden, während der fingerprint-Bereich eher als Ganzes zu betrachten ist.



Quelle: Manfred Hesse, Herbert Meier und Bernd Zeeh, Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie.

2.2 Messmethoden

2.2.1 Transmissionsspektroskopie

Die Transmissionsspektroskopie wird im PC-Praktikum hauptsächlich für gasförmige oder flüssige Proben eingesetzt. Für Gase steht eine Edelstahl-Gasmesszelle (mit KBr- oder CaF_2 -Fenstern) zur Verfügung, die auf einer speziellen Halterung im Probenraum des Spektrometers fixiert wird. Gleiches gilt für eine Flüssigkeitsmesszelle. Die Gas-Messzelle besitzt eine Lichtweglänge von 10 cm, die Flüssigkeitsmesszelle von wenigen μm (variabel). Gemäß dem Lambert-Beerschen Gesetz ist die Absorption (Extinktion) und somit die Bandenintensität proportional zur Konzentration und zur Lichtweglänge.

2.2.2 Abgeschwächte Totalreflexion (ATR)

Die abgeschwächte Totalreflexion (Attenuated Total Reflection, ATR) wird im Rahmen des PC-Praktikums für flüssige und feste Proben eingesetzt. Dazu steht eine einfach zu bedienende Messzelle („Platinum ATR“, Fa. Bruker) mit einem Diamant-Kristall zur Verfügung. Die IR-Strahlung wird an der Grenzfläche des Diamant-Kristalls und der optisch dünneren Probe (geringerer Brechungsindex als der Diamant-Kristall) genau einmal totalreflektiert. Sie tritt aufgrund der Wellennatur des Lichtes trotzdem etwa eine Wellenlänge tief in die Probe ein und wechselwirkt dort mit den Molekülen (spezifische Absorption). Da die Eindringtiefe wellenlängenabhängig ist, sind Absorptionsbanden bei kleineren Wellenlängen (größeren Wellenzahlen) weniger intensiv als solche bei größeren Wellenlängen. ATR-Spektren erscheinen somit verzerrt in der Intensität – aber nicht in der Lage der Absorptionsbanden – im Vergleich zu Transmissionsspektren.

2.2.3 DRIFT

Die Diffuse Reflexion (Diffuse Reflectance FT Spectroscopy) wird im PC-Praktikum für pulverförmige Proben, raue Oberflächen sowie Fasern und Schäume angewendet. Sie erlaubt die direkte Messung von stark streuenden und absorbierenden Proben ohne vorherige Probenvorbereitung. Proben können direkt oder verdünnt als Dispersionen in einer nicht-absorbierender Matrix (Anorganika 5%, Organika 10% in KBr) vermessen werden.

Die IR-Strahlung wird an der Probenoberfläche absorbiert, reflektiert und gestreut. Bei der Reflexion ist gerichtete (spektrale) und diffuse Reflexion zu unterscheiden. Bei der gerichteten Reflexion ist Einfallswinkel = Ausfallswinkel. Die diffuse Strahlung hingegen dringt in die Probe ein und tritt nach mehrfacher Reflexion und Absorption in alle Richtungen wieder aus. In der Messzelle „Praying Mantis“ wird durch zwei off-axis Ellipsoid-Hohlspiegel das diffus reflektierte Licht gesammelt, während die gerichtete Komponente minimiert wird. Die Intensität wird in Kubelka-Munk-Einheiten angegeben. Im Transmissionsspektrum schwach erscheinende Banden werden bei der DRIFT verstärkt in der Intensität.

2.2.4 IR-Mikroskopie

Die IR-Mikroskopie stellt ein bildgebendes Verfahren dar. Von Oberflächen und Schnitte fester Proben wird mit Hilfe des IR-Mikroskops ein chemisches Abbild erstellt.

3. Durchführung

Achtung: Die Bedienung des FTIR-Spektrometers und des IR-Mikroskops erfolgt nur unter Anleitung!

Das FTIR-Spektrometer „Vertex 70v“ der Fa. Bruker ist ein hochauflösendes Gerät für Forschung und Industrie. Der Spektralbereich umfasst das mittlere und nahe Infrarot (MIR und NIR) von $8.000 - 350 \text{ cm}^{-1}$. Die Auflösung (Trennung benachbarter Absorptionslinien) beträgt $0,4 \text{ cm}^{-1}$. Als Infrarotquelle dient ein Globar (SiC, 1500°C). Der MCT-Detektor (Mercury Cadmium Telluride) besitzt eine hohe Empfindlichkeit und muss min. 30 Minuten vor Beginn der Messung mit flüssigem Stickstoff gekühlt werden. Die Kühlung hält 4-5 Stunden an. Sowohl die optische Bank (Quelle, Interferometer, Detektor) als auch das Probenraum können getrennt evakuiert werden. Dadurch werden die störenden atmosphärischen Absorptionen von Wasser und CO_2 (spektrale Interferenzen) minimiert.

Das vorhandene FTIR-Spektrometer ist ein Einkanalgerät. Um ein Transmissions- oder Extinktionsspektrum aufzunehmen, muss daher zunächst ein Referenzspektrum oder Hintergrundspektrum (background) vom leeren Probenraum und dann das Messspektrum von der Probe aufgenommen werden. Diese Spektren sind Einkanalspektren (single channel). Referenzspektrum und Probenspektrum müssen in allen Einstellungen wie Auflösung, Zahl der Scans, FT-Parameter, etc. übereinstimmen. Da als Ergebnisspektrum unter OPUS „Transmissionsspektrum“ standardmäßig eingestellt ist, wird nach der Messung des Probenspektrums aus diesem und dem Hintergrundspektrum automatisch das Transmissionsspektrum erzeugt und auf dem Bildschirm angezeigt.

Neben Transmissions- und Reflexionsspektroskopie können am vorhandenen FTIR-Spektrometer auch abgeschwächte Totalreflexion (ATR), Diffuse Reflexion (DRIFT) oder IR-Mikroskopie durchgeführt werden.

Transmissionsmessung

Die Transmissionspektroskopie wird im Praktikum hauptsächlich für gasförmige und flüssige Proben eingesetzt. Dazu wird im Falle von Gasen eine Edelstahl-Gasmesszelle (mit KBr- oder CaF_2 -Fenstern) mit dem zu untersuchenden Gas gefüllt und auf einer entsprechenden Halterung in den Probenraum des Spektrometers eingebracht. Flüssigkeiten werden in die Flüssigkeitsmesszelle eingebracht (bei vorgegebener Schichtdicke).

Checkliste:

- 1) Öffnen des Probenraums
- 2) Zusammensetzen der Edelstahl-Gasmesszelle
- 3) Befüllen der Messzelle mit dem Probengas
- 4) Öffnen von OPUS
- 5) Menü „Messen\Erweitere Messung“ wählen
- 6) Reiter „Grundeinstellungen“
 - Experiment: Laden der Messdatei MIR-MCT.xpm
 - Benutzername: Ihren Gruppennamen eingeben
 - Probenname: Nummer der Probe (= Dateiname)
- 7) Reiter Erweitert:
 - Dateiname: <@cnm>
 - Pfad: D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.]
 - Auflösung 2 cm^{-1}
 - Messzeit Probe: 64 Scans
 - Messzeit Hintergrund: 64 Scans
 - Datei speichern von: $7500 - 600 \text{ cm}^{-1}$
 - Resultatspektrum: Transmittance
 - Zusätzliche Datenbehandlung: kein Haken
 - Atmosphärische Kompensation: Haken setzen
 - Zu speichernde Datenblöcke: Transmittance, Einkanalspektrum, Probeninterferogramm, Hintergrundspektrum
- 8) Reiter Optikparameter:
 - Externe Synchronisation: Off
 - Quelle: MIR
 - Strahlenteiler: KBr
 - Optische Filter: Open
 - Apertur: 1 mm
 - Zubehör: Beliebig
 - Messkanal: Sample Compartment
 - Kanal Hintergrundmessung: Sample Compartment
 - Detektor LN-MCT Mid (Internal Pos. 1)
 - Spiegelgeschwindigkeit: 40 kHz
 - Verstärkung der Probe/Referenz: Automatic, Vorverstärker: Ref
- 9) Reiter Akquisition:
 - Gewünschte obere Frequenz: 15000
 - Gewünschte untere Frequenz: 0
 - Hochpass Filter: Open
 - Tiefpass Filter: 20 kHz
 - Akquisitionsmodus: Double Sided, Forward Backward
 - Korrelationsmodus: Off

- 10) Reiter FT:
 - Phasenauflösung: 32
 - Phasen-Korrekturmodus: Power Spectrum
 - Apodisationsfunktion: Blackman-Harris-3-Term
 - Zerofilling Faktor: 2
 - Nichtlinearitätskorrektur des Interferogramms vor der FT durchführen: kein Haken
- 11) Reiter Justiermodus: Überprüfung der Signalintensität
 - Anzeige: Interferogramm
 - Transmission: 15.000 Counts, ATR-Messzelle: 12.000 Counts, DRIFT-Messzelle 12.000 Counts
- 12) Reiter Grundeinstellungen: Aufnahme des Referenzspektrums mit „Hintergrundmessung“
- 13) Probe in den Probenraum bringen
- 14) Reiter Grundeinstellungen: Aufnahme des Probenspektrums:
 - Benutzername eintragen
 - Probenname eintragen
 - Probenform kann ggf. weggelassen werden
 - Pfad: D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.]
 - „Probenspektrum aufnehmen“
- 15) Reiter Auswerten\Bandensuche. Danach ggf. noch Auswerten\Einzelbandensuche unter Anklicken der noch gewünschten Peaks.
- 16) Reiter Drucken\Spektren drucken: Export des Spektrums als pdf-Datei
 - Reiter Selektierte Spektren: Beide Spektrenblöcke (Spektrum und Bandensuche) von Leiste am linken Rand in geöffnetes Fenster ziehen bei gedrückter Maustaste
 - Reiter Frequenzbereich: Auf aktuelle Anzeigegrenzen klicken
 - Reiter Optionen:
 - Dateiname: Anpassen auf Dateiname des Spektrums
 - Pfad: D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.]
 - Auf Drucken klicken
 - Spektren in Opus entladen (unter Datei bzw. auf Ordnersymbol in der Icon-Leiste)
 - Im Ordner D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.] liegen Ihre Spektren und pdf-Dateien, die Sie sich auf einen USB-Stick kopieren können.
- 17) Zerlegen und Säubern der Messzelle *unter Anleitung*. Die KBr- bzw. CaF₂-Fenster sind hygroskopisch, d.h. Sie dürfen nicht mit den Fingern berührt und müssen im Exsikkator gelagert werden!

ATR-Messzelle „Platinum ATR“

Checkliste:

- 1) Öffnen des Probenraums
- 2) Einsetzen der Platinum ATR-Einheit. Zum Einrasten muss an der Vorderseite des Spektrometers (außen) ein Knopf hineingedrückt werden.
- 3) Öffnen von OPUS
- 4) Menü „Messen\Erweitere Messung“ wählen
- 5) Reiter „Grundeinstellungen“
 - Experiment: Laden der Messdatei MIR-MCT.xpm
 - Benutzername: Ihren Gruppennamen eingeben
 - Probenname: Nummer der Probe (= Dateiname)
- 6) Reiter Erweitert:
 - Dateiname: <@cnm>

- Pfad: D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.]
 - Auflösung 2 cm^{-1}
 - Messzeit Probe: 64 Scans
 - Messzeit Hintergrund: 64 Scans
 - Datei speichern von: $7500 - 600 \text{ cm}^{-1}$
 - Resultatspektrum: ATR
 - Zusätzliche Datenbehandlung: kein Haken
 - Atmosphärische Kompensation: Haken setzen
 - Zu speichernde Datenblöcke: Transmittance, Einkanalspektrum, Probeninterferogramm, Hintergrundspektrum
- 7) Reiter Optikparameter:
- Externe Synchronisation: Off
 - Quelle: MIR
 - Strahlenteiler: KBr
 - Optische Filter: Open
 - Apertur: 1 mm
 - Zubehör: Beliebig
 - Messkanal: Sample Compartment
 - Kanal Hintergrundmessung: Sample Compartment
 - Detektor LN-MCT Mid (Internal Pos. 1)
 - Spiegelgeschwindigkeit: 40 kHz
 - Verstärkung der Probe/Referenz: Automatic, Vorverstärker: Ref
- 8) Reiter Akquisition:
- Gewünschte obere Frequenz: 15000
 - Gewünschte untere Frequenz: 0
 - Hochpass Filter: Open
 - Tiefpass Filter: 20 kHz
 - Akquisitionsmodus: Double Sided, Forward Backward
 - Korrelationsmodus: Off
- 9) Reiter FT:
- Phasenauflösung: 32
 - Phasen-Korrekturmodus: Power Spectrum
 - Apodisationsfunktion: Blackman-Harris-3-Term
 - Zerofilling Faktor: 2
 - Nichtlinearitätskorrektur des Interferogramms vor der FT durchführen: kein Haken
- 10) Reiter Justiermodus: Überprüfung der Signalintensität
- Anzeige: Interferogramm
 - Transmission: 15.000 Counts, ATR-Messzelle: 12.000 Counts, DRIFT-Messzelle 12.000 Counts
- 11) Reiter Grundeinstellungen: Aufnahme des Referenzspektrums mit „Hintergrundmessung“
- 12) Probe auf den ATR-Kristall bringen:
- Von flüssigen Proben kann ein einzelner Tropfen mittels einer Pipette auf den Kristall aufgebracht werden. Vor dem Aufbringen der Probe ist das Hintergrundspektrum (gegen Luft) aufzunehmen!
 - Feste Proben werden im Achatmörser fein zermahlen und auf den Kristall aufgebracht. Anschließend wird an der Rändelschraube der Halterung der Stempel solange heruntergedreht, bis beim Herunterdrücken des Stempels ein sanfter Druck des Stempels auf die auf dem Kristall befindliche Probe ausgeübt wird. Es darf keine

Gewalt beim Herunterdrücken des Stempels angewendet werden! Der Stempel darf niemals ohne Probe auf den Kristall gedrückt werden! Vor dem Aufgeben der Probe auf den Kristall muss das Hintergrundspektrum gemessen werden!

13) Reiter Grundeinstellungen: Aufnahme des Probenspektrums:

- Benutzername eintragen
- Probenname eintragen
- Probenform kann ggf. weggelassen werden
- Pfad: D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.]
- „Probenspektrum aufnehmen“

14) Reiter Auswerten\Bandensuche. Danach ggf. noch Auswerten\Einzelbandensuche unter Anklicken der noch gewünschten Peaks.

15) Reiter Drucken\Spektren drucken: Export des Spektrums als pdf-Datei

- Reiter Selektierte Spektren: Beide Spektrenblöcke (Spektrum und Bandensuche) von Leiste am linken Rand in geöffnetes Fenster ziehen bei gedrückter Maustaste
- Reiter Frequenzbereich: Auf aktuelle Anzeigegrenzen klicken
- Reiter Optionen:
 - Dateiname: Anpassen auf Dateiname des Spektrums
 - Pfad: D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.]
- Auf Drucken klicken
- Spektren in Opus entladen (unter Datei bzw. auf Ordnersymbol in der Icon-Leiste)
- Im Ordner D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.] liegen Ihre Spektren und pdf-Dateien, die Sie sich auf einen USB-Stick kopieren können.

16) Sorgfältiges Reinigen des Kristalls und des Stempels mit einem Tuch mit Isopropanol. Es dürfen keine Reste zurückbleiben.

DRIFT-Messzelle „Praying Mantis“

Checkliste:

- 1) Öffnen des Probenraums
- 2) Einsetzen der DRIFT-Einheit. Zum Einrasten muss an der Vorderseite des Spektrometers (außen) ein Knopf hineingedrückt werden.
- 3) Öffnen von OPUS
- 4) Menü „Messen\Erweitere Messung“ wählen
- 5) Reiter „Grundeinstellungen“
 - Experiment: Laden der Messdatei MIR-MCT.xpm
 - Benutzername: Ihren Gruppennamen eingeben
 - Probennamen: Nummer der Probe (= Dateiname)
- 6) Reiter Erweitert:
 - Dateiname: <@cnm>
 - Pfad: D:\Praktikum
 - Auflösung 2 cm⁻¹
 - Messzeit Probe: 64 Scans
 - Messzeit Hintergrund: 64 Scans
 - Datei speichern von: 7500 - 600 cm⁻¹
 - Resultatspektrum: Kubelka-Munk
 - Zusätzliche Datenbehandlung: kein Haken
 - Atmosphärische Kompensation: Haken setzen
 - Zu speichernde Datenblöcke: Transmittance, Einkanalspektrum, Probeninterferogramm, Hintergrundspektrum

7) Reiter Optikparameter:

- Externe Synchronisation: Off
- Quelle: MIR
- Strahlenteiler: KBr
- Optische Filter: Open
- Apertur: 1 mm
- Zubehör: Beliebig
- Messkanal: Sample Compartment
- Kanal Hintergrundmessung: Sample Compartment
- Detektor LN-MCT Mid (Internal Pos. 1)
- Spiegelgeschwindigkeit: 40 kHz
- Verstärkung der Probe/Referenz: Automatic, Vorverstärker: Ref

8) Reiter Akquisition:

- Gewünschte obere Frequenz: 15000
- Gewünschte untere Frequenz: 0
- Hochpass Filter: Open
- Tiefpass Filter: 20 kHz
- Akquisitionsmodus: Double Sided, Forward Backward
- Korrelationsmodus: Off

9) Reiter FT:

- Phasenauflösung: 32
- Phasen-Korrekturmodus: Power Spectrum
- Apodisationsfunktion: Blackman-Harris-3-Term
- Zerofilling Faktor: 2
- Nichtlinearitätskorrektur des Interferogramms vor der FT durchführen: kein Haken
- Reiter Justiermodus: Überprüfung der Signalintensität
- Anzeige: Interferogramm
- Transmission: 15.000 Counts, ATR-Messzelle: 12.000 Counts, DRIFT-Messzelle 12.000 Counts

10) Reiter Grundeinstellungen: Aufnahme des Referenzspektrums mit „Hintergrundmessung“

11) Probe in die Tasse der DRIFT-Einheit einbringen:

- Die Probe wird mit einer nicht-absorbierenden Matrix (KBr) verdünnt. Die Konzentration von Organika darf 10% und von Anorganika 5% nicht übersteigen.
- Pulver werden mit dem Achatmörser auf eine *einheitliche* Partikelgröße von <50µm gemahlen.
- Das Pulver wird locker in das Probentöpfchen eingefüllt. Die Oberfläche wird glatt gestrichen.

12) Reiter Grundeinstellungen: Aufnahme des Probenspektrums:

- Benutzername eintragen: Gruppen [Ihre Nr.]
- Probenname eintragen
- Probenform kann ggf. weggelassen werden
- Pfad: D:\Praktikum\Gruppe [Ihre Nr.]
- „Probenspektrum aufnehmen“

IR-Mikroskop „Hyperion 2000“

Geräteeinstellungen: Hyperion_1000_ATR.xpm

Messparameter: Auflösung 2 cm⁻¹, Zahl der Scans: 32

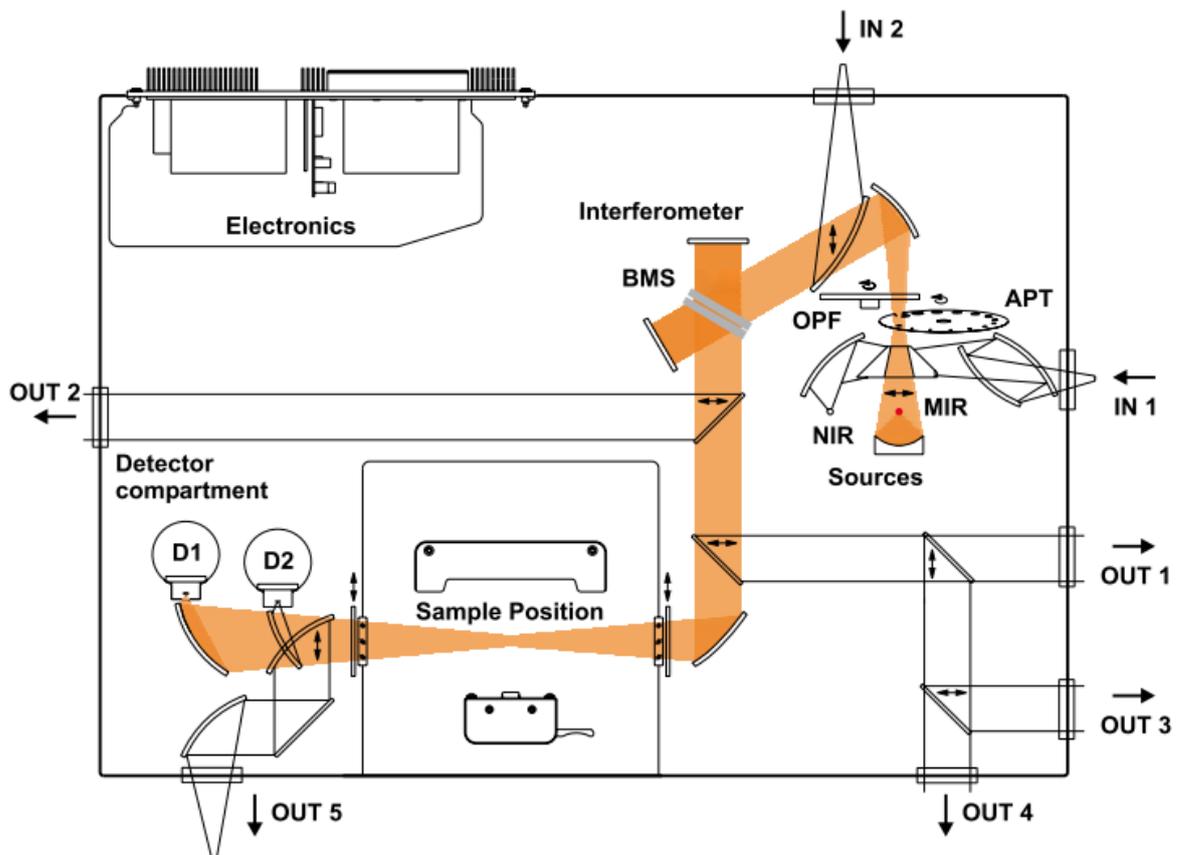
4. Auswertung

Zur Interpretation eines IR-Spektrums einer unbekanntem Verbindung bietet sich folgende Vorgehensweise an:

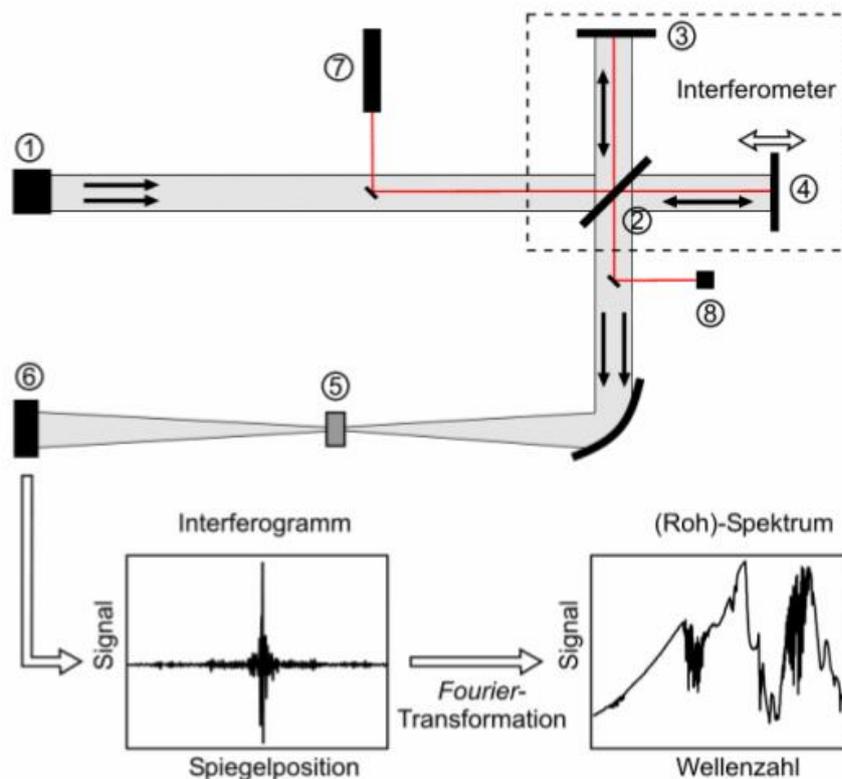
- 1) Analyse der drei Hauptbereiche des Spektrums ($> 1500\text{ cm}^{-1}$) mit Hilfe von Tabellen über die charakteristischen Frequenzen funktioneller Gruppen. Damit kann neben der *An-* auch die *Abwesenheit* funktioneller Gruppen ermittelt werden. Zur Analyse wird in erster Linie die Wellenzahl und in zweiter die Bandenintensität herangezogen. Letztere ist in Tabellen mit den Einstufungen stark (s), mittelstark (m), weniger intensiv (w) und variierend (v) angegeben.
- 2) Aus den ermittelten funktionellen Gruppen wird ein Vorschlag für die chemische Struktur des Moleküls erstellt.
- 3) Verifizierung des Strukturvorschlags anhand eines Referenzspektrums aus einer Datenbank.

Im Protokoll ist anzugeben:

- 1) Der Aufbau des für Ihre Messungen genutzten FTIR-Spektrometers sowie eine Erläuterung der verwendeten Messmethoden.



Quelle: Bruker Optik GmbH, VERTEX Series Broschüre, 2013



- 2) Eine Tabellarische Liste der charakteristischen Frequenzen funktioneller Gruppen ($> 1500 \text{ cm}^{-1}$) sowie der markanten Banden im fingerprint-Bereich ($< 1500 \text{ cm}^{-1}$):
 - Wellenzahl
 - Molekülgruppe (z.B. C-H oder C=C)
 - Schwingungsart (Valenz- oder Deformationsschwingung)
 - Bandenintensität (s, m, w, v)
- 3) Erstellung und Diskussion eines Strukturvorschlags aus den ermittelten funktionellen Gruppen (Angabe der Strukturformel).
- 4) Vergleich mit einem Referenzspektrum aus einer Spektrendatenbank

5. Literatur zur Spektreninterpretation

1. Manfred Hesse, Herbert Meier und Bernd Zeeh, Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie, VCH-Verlag, 2005
2. Dudley H. Williams, Ian Fleming, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, Mcgraw-Hill Verlag, 1995

6. Kostenlose IR-Spektrendatenbanken im Internet

http://sdfs.riodb.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_search.cgi
<http://www.spectraonline.com>
<http://webbook.nist.gov/chemistry/vib-ser.html>