



# IR-spektroskopische Untersuchung von 1-Hexin

Kerschensteinerschule



Fächer- und jahrgangsstufenübergreifender Unterricht in der Arbeitsgemeinschaft "Chemie & Mathematik" am naturwissenschaftlich-technischen Gymnasium (NTG) der Kerschensteinerschule Stuttgart im Schuljahr 08/09

## Theoretische Grundlagen

### Infrarot-Spektroskopie

Die Infrarot-Spektroskopie ist ein physikalisch-chemisches Verfahren, das im Wellenzahlenbereich zwischen  $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$  arbeitet.

Ein Molekül nimmt IR-Strahlung auf. Dabei werden bestimmte Wellenlängen absorbiert. Das Molekül wird vom Schwingungsgrundzustand in einen angeregten Zustand überführt.

Verschiedene funktionelle Gruppen absorbieren die Strahlung bei unterschiedlichen Wellenzahlen.

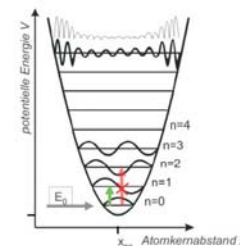


Abbildung: Durch Aufnahme von Energie wird ein Molekül in einen angeregten Zustand überführt.

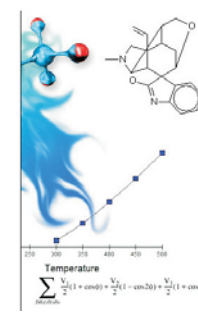
Bezeichnung	Wellenzahlbereich (in $\text{cm}^{-1}$ )
$\nu(\text{-OH})$	3600 - 3200
$\nu(\text{-NH})$	3500 - 3100
$\nu(\text{-C-H})$	3200 - 2850
$\nu(\text{-C=C-})$	2500 - 2200
$\nu(\text{-C=N})$	2260 - 2200
$\nu(\text{C=O})$	1700
$\nu(\text{-C=C-})$	1650

Tabelle: Typische IR-Bandenlagen funktioneller Gruppen

### Berechnung von IR-Spektren

Infrarotspektren lassen sich heute mit verschiedenen Verfahren berechnen, die sich durch unterschiedliche Genauigkeit und durch den Rechenaufwand unterscheiden. Grundsätzlich gibt es immer Abweichungen zwischen den berechneten und den experimentellen Werten. Diese können durch Skalierungsrechnungen verringert werden.

Alle erforderlichen Rechnungen (Geometrieoptimierung, Schwingungsanalyse, ...) wurden mit der Software *HyperChem 7.0* (Trial-Version, 30 Tage lauffähige Version) der Firma *Hypercube Inc.* durchgeführt.



Dennis Bucker, Marcel Lücke, Oliver Reif, Martin Selch, Alexander Stemmler, Sebastian Vaas (alle Klasse G1C)

Kerschensteinerschule Stuttgart  
Steiermärker Str. 72  
70469 Stuttgart

Telefon: 0711 / 13 54 96  
Telefax: 0711 / 13 54 970  
www.kerschensteinerschule.de

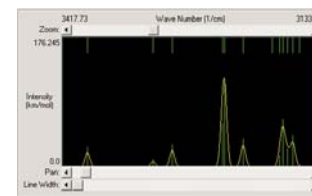
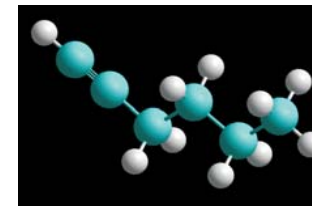
## Verfahren

Das IR-Spektrum von 1-Hexin wird ab-initio (HF/6-31G\*\*) berechnet.

Man zeichnet das Molekül und führt eine Geometrieoptimierung durch. Dabei wird der energetisch günstigste Zustand des Moleküls ermittelt.

Das theoretische IR-Spektrum wird über eine Schwingungsanalyse berechnet und angezeigt. Da die berechneten Wellenzahlen von den tatsächlichen abweichen, werden diese über Skalierungsfaktoren angepasst.

Skalierungsfaktoren werden mit Hilfe von Spektren bekannter Moleküle (in unserem Beispiel: Formaldehyd) ermittelt. Sie werden so angepasst, dass der rms-Fehler minimal wird.



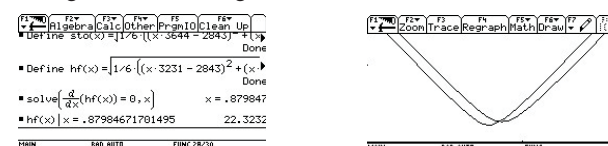
$$\text{rms} = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (\bar{\nu}_{\text{calc},i} - \bar{\nu}_{\text{exp},i})^2}$$

### Bestimmung des Skalierungsfaktors:

Schwingung:	Methode: <b>Ab Initio</b>		Molekül: <b>Formaldehyd</b>		Experimentell
	HF/6-31G* medium	Skaliert	HF/6-31G** large	Skaliert	
$\nu_{\text{as}}(\text{CH})$	3231	2843	3195	2836	2843
$\nu_{\text{s}}(\text{CH})$	3160	2780	3121	2771	2782
$\nu(\text{CO})$	2027	1783	2025	1797	1746
$\delta(\text{CH})$	1680	1478	1668	1481	1500
$\delta(\text{CHO})$	1383	1217	1376	1221	1249
$\gamma$	1336	1175	1335	1185	1167

Skalierungsfaktor:	0,88	0,89
rms-error	22,32	26,68

Optimierung des Skalierungsfaktors mit dem CAS-Rechner:



## Experimenteller Teil

Das experimentelle IR-Spektrum wurde mit dem ATR-FTIR-Spektrometer *Thermo IR200* (siehe nebenstehende Abbildung) aufgenommen.



### IR-Spektrum von 1-Hexin:

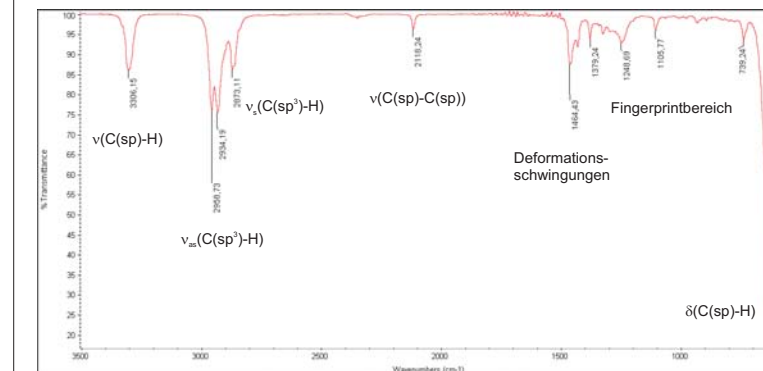


Tabelle: Berechnetes und experimentelles IR-Spektrum von 1-Hexin

Schwingung	Wellenzahlen in $\text{cm}^{-1}$			
	errechnet	skaliert <sup>(1)</sup>	gemessen	Abweichung <sup>(2)</sup>
$\nu(\text{C(sp)H})$	3643	3242	3306	64
$\nu_{\text{as}}(\text{C(sp}^3\text{)H}_3)$	3248	2891	2959	68
$\nu_{\text{as}}(\text{C(sp}^3\text{)H}_2)$	3233	2877	2934	57
$\nu_{\text{s}}(\text{C(sp}^3\text{)H}_3)$	3175	2826	2873	47
$\nu(\text{C(sp)C(sp)})$	2408	2143	2188	45
$\delta_{\text{as}}(\text{C(sp}^3\text{)H}_3)$	1627	1448	1464	16
$\delta(\text{C(sp)H})$	796	708	623	85

<sup>(1)</sup>Skalierungsfaktor: 0,89

<sup>(2)</sup>Abweichung = |skaliert - gemessen|

**Fazit:** Mit Hilfe quantenchemischer Methoden lassen sich IR-Schwingungen einfacher Moleküle relativ genau und mit geringem Zeitaufwand berechnen.