

10.12.19  
EB

Technische Universität  
Dresden

# M4 Raman-Spektroskopie

Lea Faber, Sönke Beier

November 2019

## Inhaltsverzeichnis

<b>1 Ziel des Experiments</b>	<b>2</b>
<b>2 Theoretischer Hintergrund</b>	<b>2</b>
2.1 Wechselwirkungen von Licht mit Materie	2
2.1.1 Transmission	2
2.1.2 Streuung	2
2.1.3 Absorption und Fluoreszenz	3
2.2 Molekülschwingungen	4
2.3 Ramanaktivität von Molekülschwingungen	4
2.4 Geräteaufbau und Funktionsweise	5
2.4.1 Fluoreszenzspektrometer	5
2.4.2 Ramanspektrometer	6
2.5 Zusammenhang Raman- und Fluoreszenzspektrum	6
<b>3 Durchführung und Auswertung</b>	<b>6</b>
3.1 Fluoreszenz	6
3.2 Ramanspektroskopie	15
3.2.1 Lösungsmittelproben	15
3.2.2 Identifikation der unbekanntenen Proben	20
<b>4 Fazit</b>	<b>25</b>
<b>5 Literatur</b>	<b>25</b>

v.a. Anm. 7, 10, 12, 14, 15

1,3 10.1.20 Jaiser

<sup>1</sup>elektromagnetisches

## 1 Ziel des Experiments

Im Laufe des Experiments haben wir mithilfe eines Lumineszenzspektrometers und eines Raman-Spektrometers die Fluoreszenz bzw. Ramanspektren von verschiedenen Stoffen aufgenommen. Ziel ist es bei Spektren von bekannten Proben den einzelnen Peaks bestimmten Schwingungen der untersuchten Moleküle zuzuordnen und dann anhand von Vergleichsspektren fünf unbekannter Proben zu identifizieren.

## 2 Theoretischer Hintergrund

### 2.1 Wechselwirkungen von Licht mit Materie

Trifft Licht auf Materie (unsere Probe), so kann es zu verschiedenen Effekten kommen. Diese sind unter anderem Transmission, Streuung und Absorption. Wird eine Probe durch die Absorption von energiereichem Licht in ein höheres elektrisches<sup>1</sup> Niveau gehoben, so kann es Fluoreszenzeffekten kommen. Da alle diese Effekte von Spektrometern aufgenommen werden und richtig zugeordnet werden müssen, wird im Folgenden erklärt, wie diese Zustände kommen und wie der jeweilige Effekt identifiziert werden kann.

#### 2.1.1 Transmission

Transmission nennt man den Umstand, wenn die Lichtphotonen beim Passieren der Materie nicht mit Materieteilchen (in dem Fall Moleküle) zusammenstößt und die Materie mit selber Energie und Richtung wieder verlässt. Die transmittierten Photonen erzeugen in einem aufgenommenen Spektrum einen Peak bei der Wellenlänge des eingehenden Lichtes.

#### 2.1.2 Streuung

Treffen Photonen des eingehenden Lichtes auf Moleküle der Probe, so können Stoßprozesse, bei denen die Ausstrahlrichtung des Lichtstrahls verändert wird, auftreten. Diese nennt man Streuung. Hat das aus der Probe wieder austretende Licht die selbe Energie, so spricht man von Rayleigh-Streuung (Abb.1 (b)).

Gibt das Photon bei diesem Prozess Energie an das Molekül ab, so spricht man von Stokes-Raman-Streuung. Bei dieser Streuung wird das Molekül wie in der Abb.1 (c) von einem niedrigen Schwingungsenergieniveau  $v_1$  im elektrischen<sup>1</sup> Grundzustand auf ein höheres virtuelles Energieniveau gehoben und fällt in ein höheres Schwingungsenergieniveau  $v_2$  zurück. Die Energiedifferenz, des ausstrahlenden Lichtes im Vergleich zum einkommenden Licht entspricht genau  $\Delta E = E(v_2) - E(v_1)$ . Der durch diesen Effekt auftretende Ausschlag im Spektrum kann bei niedrigeren Wellenlängen, als die Wellenlänge des einkommenden Lichtes verortet werden.

Nimmt das Photon beim Stoßprozess Energie auf, indem das Molekül von einem höheren Schwingungszustand in einen niedrigeren Schwingungszustand fällt (Abb.1 (d)), so spricht man von Antistokes-Raman-Streuung.

Von diesen Streuprozessen ist die Rayleigh-Streuung am wahrscheinlichsten, gefolgt von der Stokes- und dann der Anti-Stokes-Streuung. Dass die Anti-Stokes-Streuung unwahrscheinlicher als die Stokes-Streuung ist, ist damit zu erklären, dass sich die Moleküle häufiger in einem Grundzustand, als im angeregten Zustand befinden (siehe Boltzmann-Verteilung). Außerdem darf, wenn es zu Anti-Stokes-Streuung kommt, gleichzeitig der Schwingungsgrundzustand<sup>2</sup> nicht besetzt sein.

<sup>2</sup> der niedrigere Schwingungszustand als „Ziel“

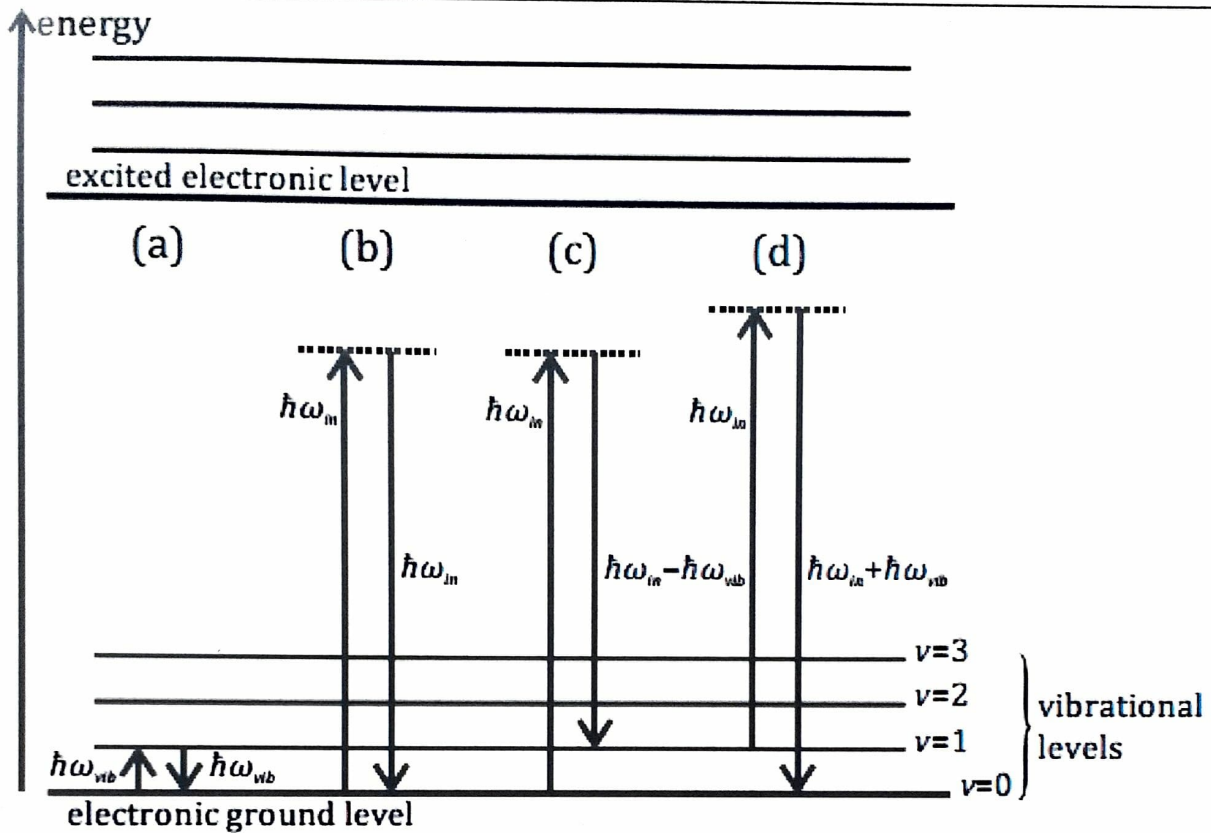


Abbildung 1: Energieniveauschema mit (a) Absorption und spontaner Emission, (b) Rayleigh-Streuung, (c) Stokes-Streuung, (d) Anti-Stokes-Streuung (Quelle: Basics of Raman Spektroskopie; PPF Anleitung der Uni Potsdam)

### 2.1.3 Absorption und Fluoreszenz

Das eintreffende Photon kann auch vom Molekül vollständig absorbiert werden, indem das Molekül in einen angeregten Zustand gehoben wird. Ob das Molekül nur den Schwingungszustand oder auf den Elektrischen Zustand ändert hängt von der Energie der eingestrahnten Lichtphotonen ab. In Abb.1 (a) wird das Molekül durch niedrigenergetischem Licht (beispielsweise Infrarot-Licht) in einen höheren Schwingungszustand angeregt. In Abb. 2 wird das Molekül durch energiereicheres Licht in einen höheren elektronischen Zustand angeregt.

Ist das Molekül einmal angeregt, so kann es sich durch spontane (oder induzierter) Emission, unter Abgabe eines Photons in den Grundzustand relaxieren (beispielsweise (a) in 1). Das hierbei abgegebene Licht hat die selbe Energie wie das eingehende Licht, aber eine zufällige Austrittsrichtung. Die Fluoreszenz entsteht, wie in Abb.2 sichtbar, aufgrund einer Kette von Emissionen (oder nicht-strahlender Übergänge). Die dabei entstehenden Lichtphotonen haben eine niedrigere Energie.

*3 ggf. - es kann auch sowohl Abs. als auch Em. zwischen den gleichen Niveaus stattfinden.*

4 Vorsicht: Bsp. H<sub>2</sub>O, alle drei Moden sind IR- und Raman-aktiv.

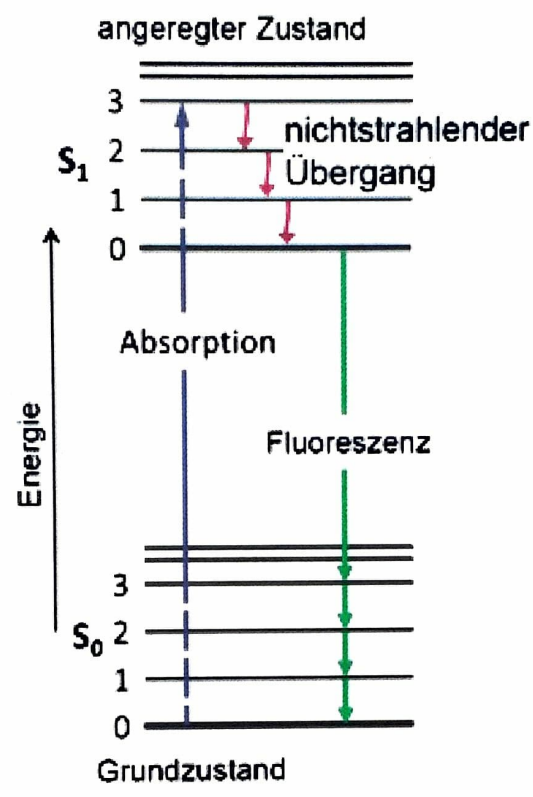


Abbildung 2: Energieniveauschema mit Absorption und Fluoreszenz  
(Quelle: <https://de.wikipedia.org/wiki/Fluoreszenzmikroskopie>)

## 2.2 Molekülschwingungen

Über Schwingungen können Moleküle Energie aufnehmen und abgeben. Hierbei gibt es verschiedene Schwingungsarten. Betrachten wir nun ein dreiatomiges lineares Molekül, so kann dieses in einer symmetrischen Streckschwingung, in einer antisymmetrischen Streckschwingung und in einer Deformationsschwingung schwingen. Da bei der Ramanspektroskopie die Intensität abhängig von der Änderung der Polarisierbarkeit während der Schwingung ist, ist die symmetrische Streckschwingung hier Raman-aktiv und die antisymmetrische Streckschwingung Raman-inaktiv.<sup>4</sup> (Die Intensität bei IR-Spektroskopie dagegen ist abhängig von der Änderung des elektrischen Dipols während der Schwingung.) Wird nun ein Photon an einem Molekül Raman-gestret, so nimmt es entweder Schwingungsenergie vom Molekül auf oder gibt Energie an das Molekül weiter.

## 2.3 Ramanaktivität von Molekülschwingungen

Eine Molekülschwingung ist Ramanaktiv, wenn sich während dieser Schwingung die Polarisierbarkeit des Moleküls ändert. Die Polarisierbarkeit  $\alpha$  ist hierbei ein Maß dafür wie leicht eine positive Ladung relativ zu einer ne-

<sup>5</sup> Und im Prinzip auch 3., 4., ... Ordnung  
<sup>6</sup> und in der Abbildung?

gativen Ladung in einem Molekül durch ein E-Feld verschoben werden kann. Es gilt hierbei  $p = \alpha E$ , mit dem elektrischen Dipolmoment  $p$  (welches ein Maß für die Ladungstrennung ist) und der elektrischen Feldstärke  $E$ .

Die Polarisierbarkeitsänderung kann bei Molekülen mittels eines Ellipsoids verdeutlicht werden. Verändert sich das Volumen oder die Form des Ellipsoids um das Molekül, so verändert sich auch die Polarisierbarkeit.

## 2.4 Geräteaufbau und Funktionsweise

### 2.4.1 Fluoreszenzspektrometer

Als Lichtquelle für das Fluoreszenzspektrometer dient eine weiße Lampe. Wir erhalten das benötigte monochromatische Einstrahllicht, indem wir mithilfe eines Gittermonochromators die gewünschte Einstrahlwellenlänge isolieren. Das Einstrahllicht trifft nur auf eine mit der zu untersuchenden Probe gefüllten Küvette. In einem Winkel von 90 Grad zum Einstrahllicht ist ein weiterer Gittermonochromator angebracht. In diesem wird das emittierte Licht in monochromatisches Licht der Wellenlänge umgewandelt, die gerade untersucht wird. Durch das Abfahren aller Wellenlängen des sichtbaren Bereichs, erhalten wir das gewünschte Fluoreszenzspektrum. Da wir bei unserem Monochromator mit einem Gitter arbeiten, entsteht ein Interferenzmuster und wir sehen einen Peak bei der eigentlichen Wellenlänge, welches das Maximum erster Ordnung ist und ein weiteres bei doppelter Wellenlänge, welche das Maximum zweiter Ordnung ist.<sup>5</sup>

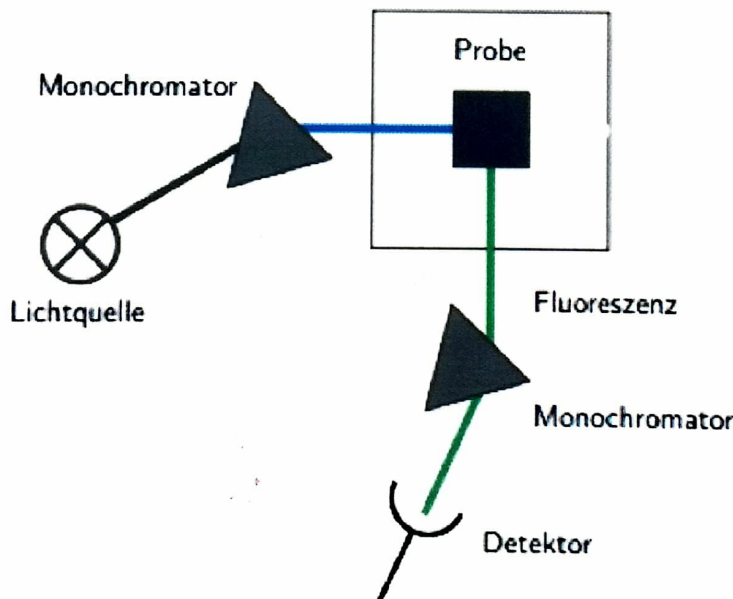


Abbildung 3: Aufbau eines Fluoreszenzspektrometers; Bei uns wurde ein Gittermonochromator benutzt<sup>6</sup>

Quelle: <http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/Spektroskopie/fluoreszenz.html>

7 Ja, aber in diesem Absatz sind Ihnen (Satzzeichen und) Indizes durcheinander geraten - bzw. das Ergebnis ist schwer verständlich.

## 2.4.2 Ramanspektrometer

Als Lichtquelle des Ramanspektrometers wurde ein Laser mit der Wellenlänge 633nm verwendet. Der Laserstrahl wird durch eine Linse auf die Kuvette der Probe fokussiert. Das gestreute Licht wird in Richtung des einfallenden Lichtes durch eine Linse aufgenommen und mittels eines Monochromators spektral aufgespaltet. Das nach der Wellenlänge geordnete Licht wird dann von einem CCD-Detektor registriert.

## 2.5 Zusammenhang Raman- und Fluoreszenzspektrum

Für die Energie eines Raman-gestreuten Photons  $E_{Raman}$  gilt:

$$E_{Raman} = E_{ein} - E_{Mol} \quad (1)$$

Dabei ist  $E_{ein}$  die Energie eines Photons des eingehenden Lichtes und  $E_{Mol}$  die Energie, die das Molekül bei einer Stokes-Raman-Streuung in Form von Schwingungen aufnimmt. Dies kann wie folgt umgeformt werden:

$$\frac{hc}{\lambda_{Raman}} = \frac{hc}{\lambda_{ein}} - \frac{hc}{\lambda_{Mol}} \quad (2)$$

$$\frac{1}{\lambda_{Raman}} = \frac{1}{\lambda_{ein}} - \frac{1}{\lambda_{Mol}} \quad (3)$$

$$\lambda_{Raman} = \frac{1}{\frac{1}{\lambda_{ein}} - \frac{1}{\lambda_{Mol}}} \quad (4)$$

$$\lambda_{Raman} = \frac{1}{\frac{1}{\lambda_{ein}} - \bar{\nu}_{Mol}} \quad (5)$$

Das Ramanspektrum, dass wir erhalten, trägt den Raman-Shift(, also die Verschiebung der Wellenlänge des Raman gestreuten Lichtes im Gegensatz zum einfallenden Licht  $\lambda_{Mol}$ ) zur Intensität der jeweiligen Streuung auf. Im Fluoreszenzspektrum wird die absolute Wellenlänge des gestreuten Lichtes dargestellt. Wollen wir nun überprüfen ob ein Peak im Fluoreszenzspektrum ein Raman Peak sein könnte, so können wir dies mit der Formel 5 überprüfen. 7

## 3 Durchführung und Auswertung

### 3.1 Fluoreszenz

Wir haben die Lumineszenzspektren von Wasser, schweres Wasser, Rutheniumtris(bipyridin)chlorid in Wasser (Rubipy), Chloroform und Poly(9,9'-bis-(2-ethylhexyl)fluoren in Chloroform (PF) mit dem Lumineszenzspektrometer aufgenommen. Hierbei haben wir unterschiedliche Anregungswellenlängen verwendet. Diese sind jeweils in den Diagrammen zu finden.

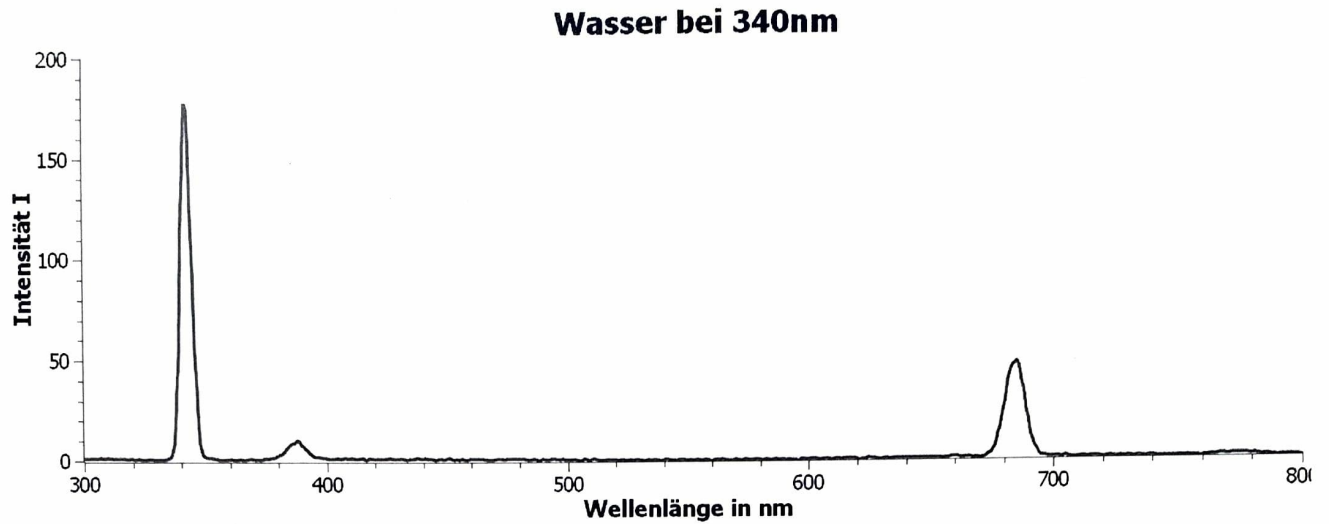


Abbildung 4: Lumineszenzspektrum von Wasser bei einer Einstrahlwellenlänge von 340nm

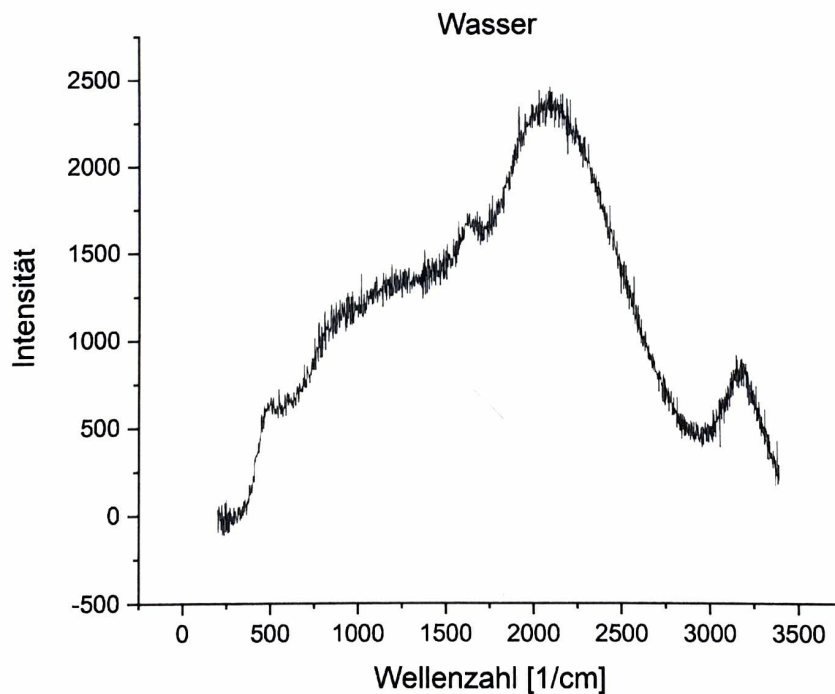


Abbildung 5: Ramanspektrum von Wasser

Wir betrachten Abb. 4. Der erste Peak bei  $\lambda_{1,Wasser} = 340nm$  entspricht dem Rayleighpeak erster Ordnung und der 3. Peak bei  $\lambda_{3,Wasser} = 680nm$  dem Rayleighpeak zweiter Ordnung. Der 2.

- 8 Seite 18: Ramanpeak bei  $\approx 3250/cm$   $\Rightarrow \lambda_2 \approx 382nm$  passt  
sogar besser  $\ddot{u}$
- 9 so etwa (Es wird ja keine Peak verschoben.)

Peak bei  $\lambda_{2,Wasser} = 380nm$  ist der Reighleigh-Peak erster Ordnung verschoben um den Ramanshift.<sup>9</sup>  
Um dies zu überprüfen vergleichen wir den Peak mit unserem aufgenommenem Ramanspektrum von Wasser (Abb. 5).

$$\lambda_{2,Wasser,berechnet} = \frac{1}{\frac{1}{\lambda_{1,Wasser}} - \nu_{Shift}} = \frac{1}{\frac{1}{340nm} - \frac{2200 * 10^{-7}}{nm}} = 367nm$$

Da  $\lambda_2 \approx \lambda_{2,Wasser,berechnet}$  ist somit bestätigt, dass es sich um die Ramanverschiebung des Reighleighpeak handelt.

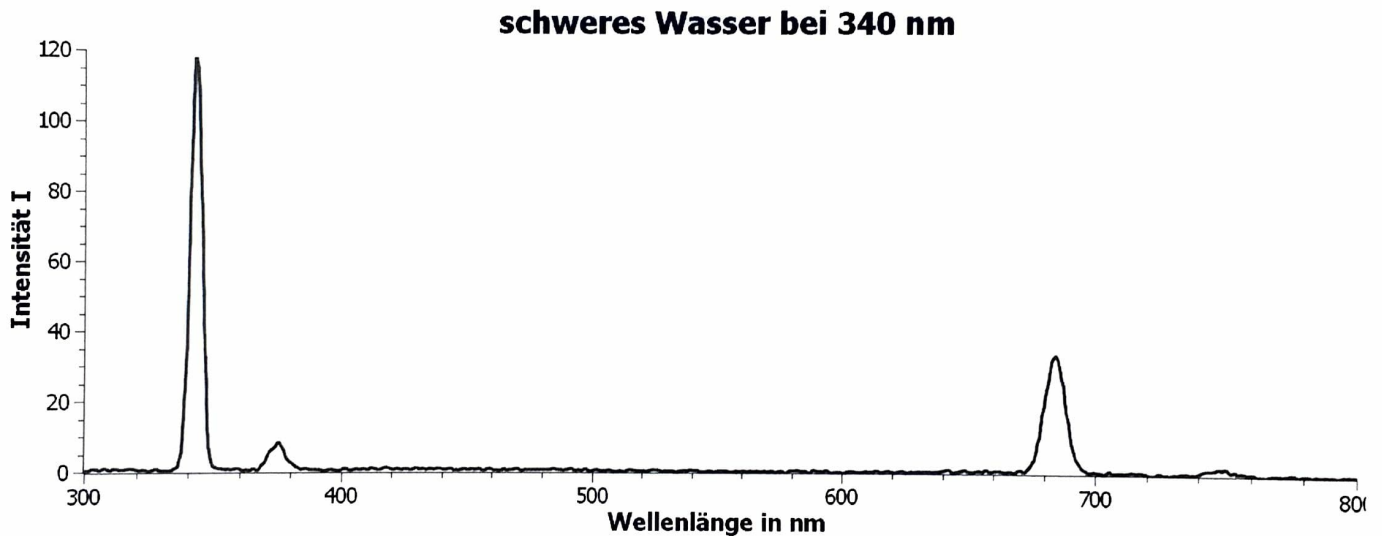


Abbildung 6: Lumineszenzspektrum von schwerem Wasser bei  $\lambda_{ein} = 340nm$



10 Quantitativ / „parast“ hier Lumineszenz- und Ramanmessung (auch) zusammen?

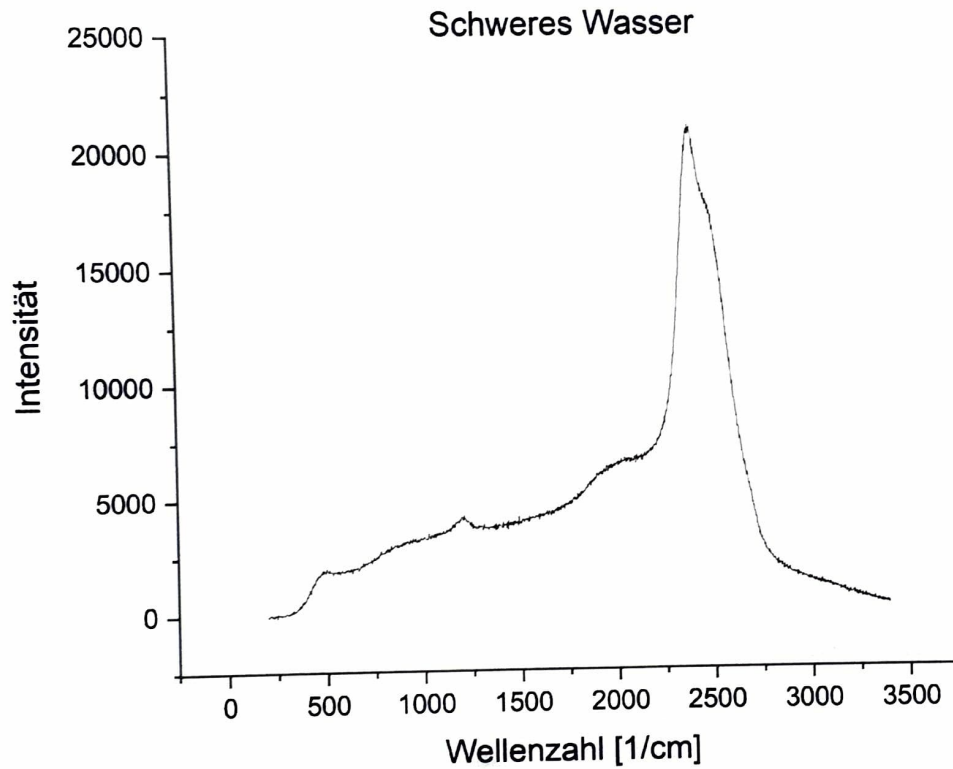


Abbildung 7: Ramanspektrum von schwerem Wasser

Beim Luminszenzspektrum von schwerem Wasser (Abb.6) zu Wasser ist der 2. Peak leicht nach links verschoben. Dies liegt daran, dass diese leicht andere Schwingungsenergien haben, aufgrund der größeren Masse des schweren Wassers.

### Rubipy bei 340nm

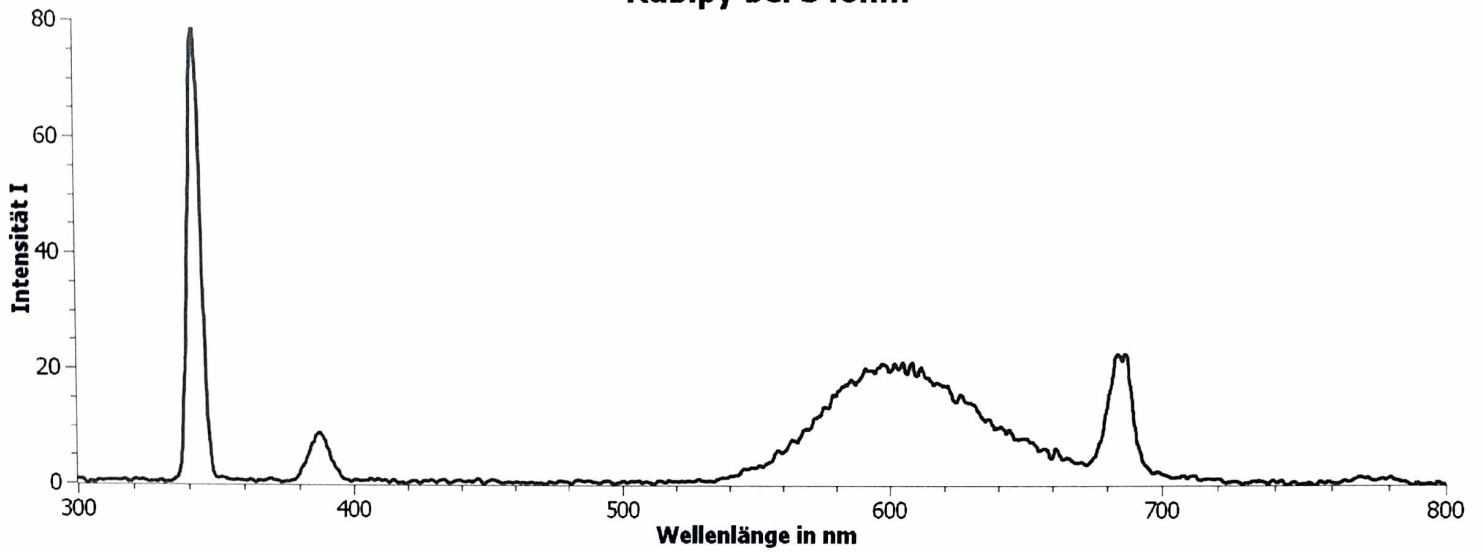


Abbildung 8: Lumineszenzspektrum von Rubipy bei  $\lambda_{ein} = 340nm$

### Rubipy bei 350nm

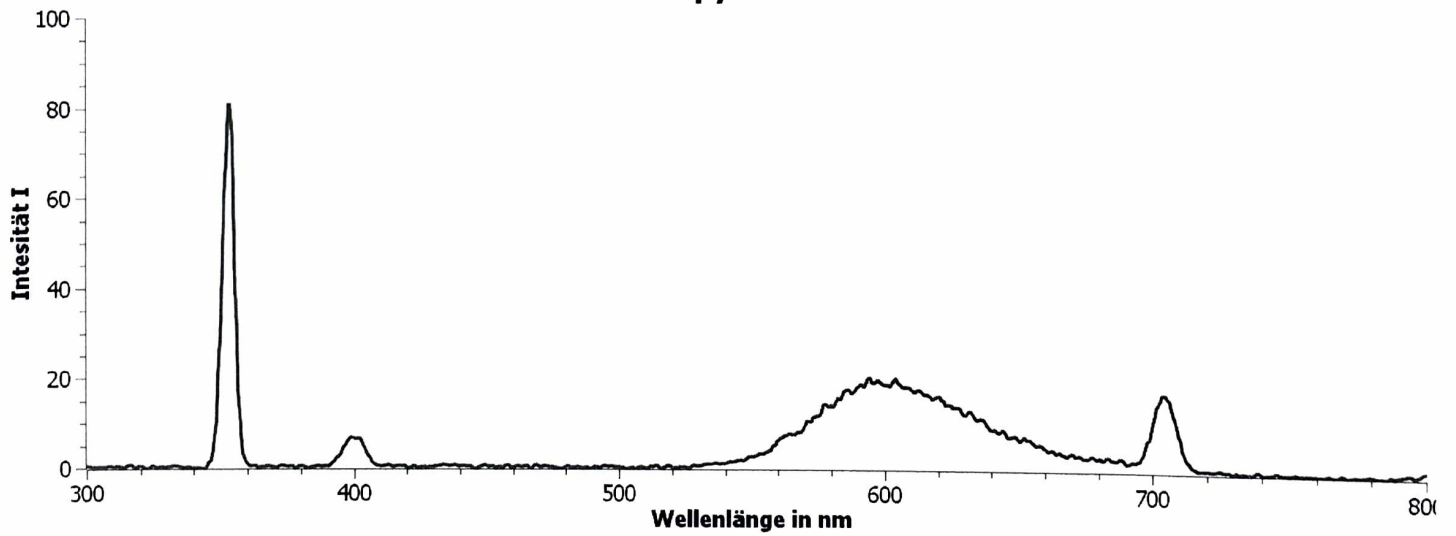


Abbildung 9: Lumineszenzspektrum von Rubipy bei  $\lambda_{ein} = 350nm$

11 eine Wellenlängenangabe oder alternativ eine „Nummerierung“ im Spektrum wäre hilfreich gewesen.

12 Was heißt „dementsprechend“ genau?

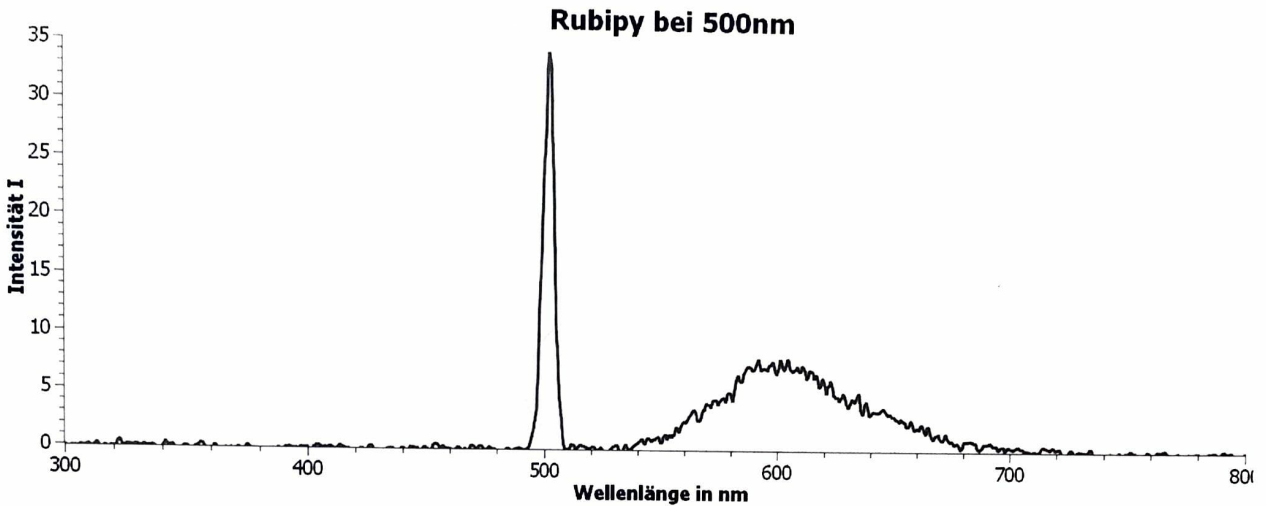


Abbildung 10: Lumineszenzspektrum von Rubipy bei  $\lambda_{ein} = 500nm$

Wenn wir Abb.8 betrachten haben wir bei unserem ersten und vierten Peak bei  $\lambda_{1,Rubipy} = 340nm$  und  $\lambda_{4,Rubipy}$  wieder die Reyleighpeaks erster und zweiter Ordnung. Unser zweiter Peak ist der Selbe, wie  $\lambda_{2,Wasser}$  und ist somit die Verschiebung des Reighleighpeaks um den Ramanshift, da unser Rubipy in Wasser aufgelöst ist. Der dritte Peak bei  $\lambda_{3,Rubipy} = 600nm$  ist von unserem roten Farbstoff Rutheniumtris(bipyridin)chlorid, welches fluoresziert. Dies kann man auch daran sehen, dass er unabhängig von der Einstrahlwellenlänge immer bei der selben Wellenlänge bleibt, wie bei Abb. 9 und 10 zu sehen. Dies liegt daran, dass dabei immer die gleiche Energie abgegeben wird, wenn das Photon von dem angeregten elektronischen Zustand in den Grundzustand fällt. Der Ramanshift bleibt ebenfalls immer gleich, der Peak wandert dementsprechend mit dem Reyleighpeak mit.

### Chloroform bei 340nm

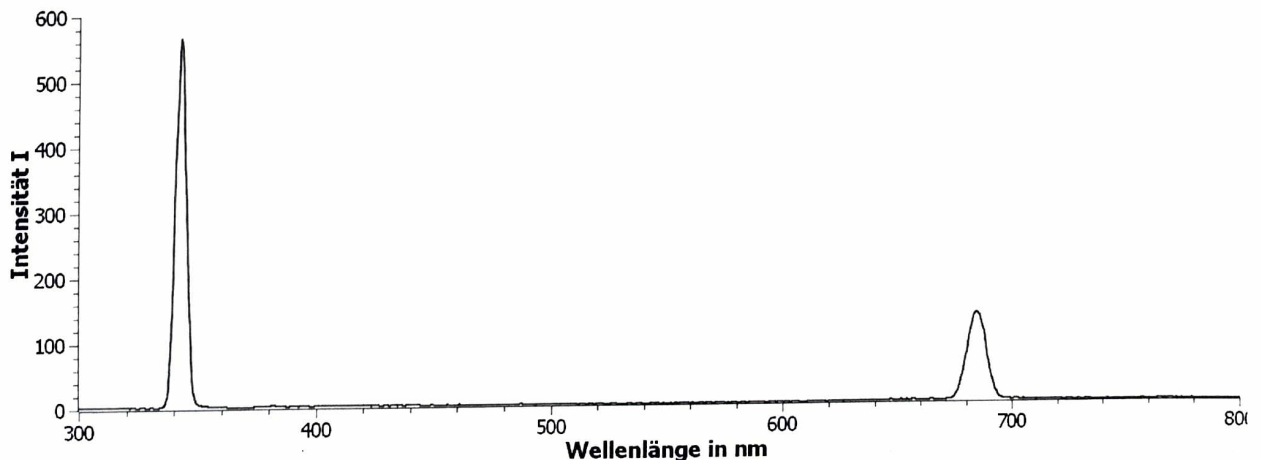


Abbildung 11: Lumineszenzspektrum von Chloroform bei  $\lambda_{ein} = 340nm$

Carbonmeter.

Bei Chloroform (Abb.11) sieht man nur die beiden Reyleighpeaks. Man sieht keine Ramanverschiebung, da die meisten Ramanlinien zu dicht an dem Reyleighpeak liegen und so von diesem verschluckt werden. Um die Ramanlinien bei  $\overline{\nu}_{\text{Chloroform}} = 3000 \frac{1}{\text{cm}}$  zu sehen, ist die Auflösung des Spektrometers nicht ausreichend.

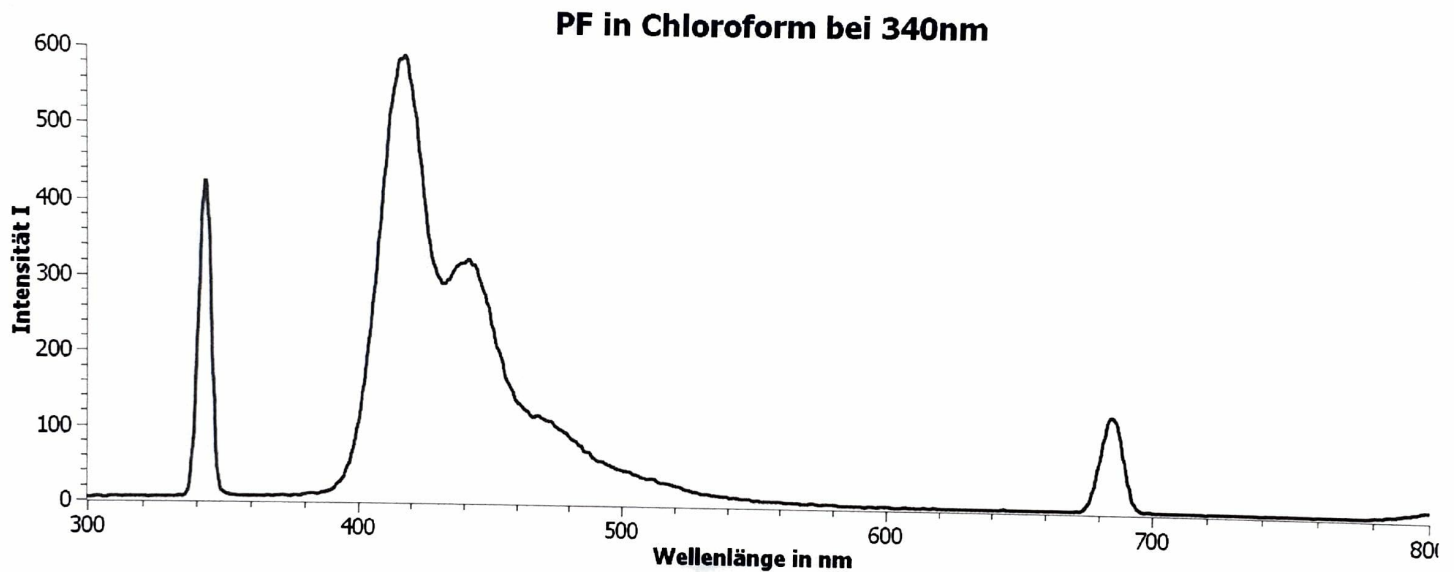


Abbildung 12: Lumineszenzspektrum von PF in Chloroform bei  $\lambda_{\text{ein}} = 340\text{nm}$

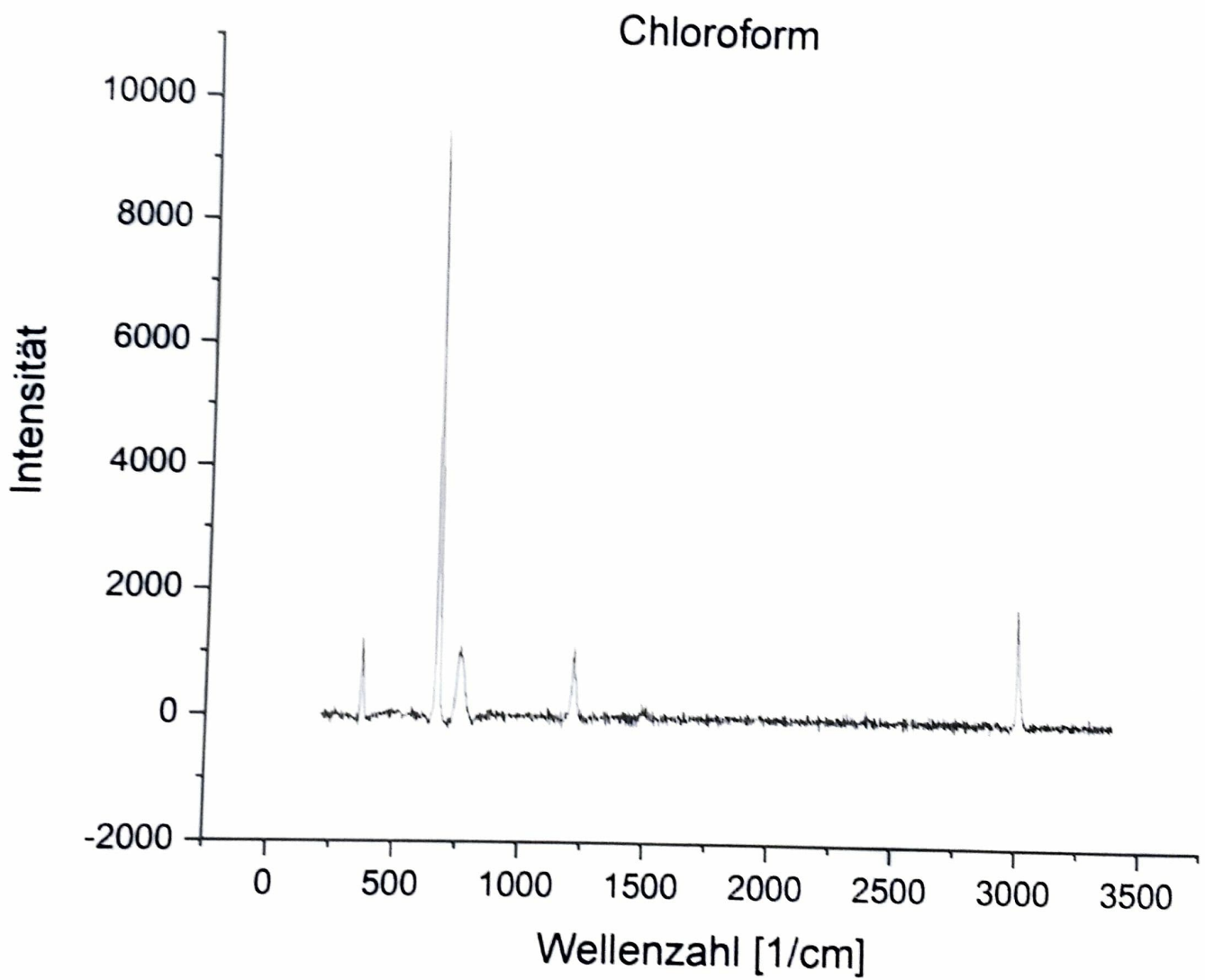


Abbildung 13: Ramanspektrum von Chloroform

13 Was ist eine IR-Verschiebung?

14 Weiss man so? Meinen Sie, dass das Peak bei 450nm Stokes-gestrecktes Licht von 415nm ist?

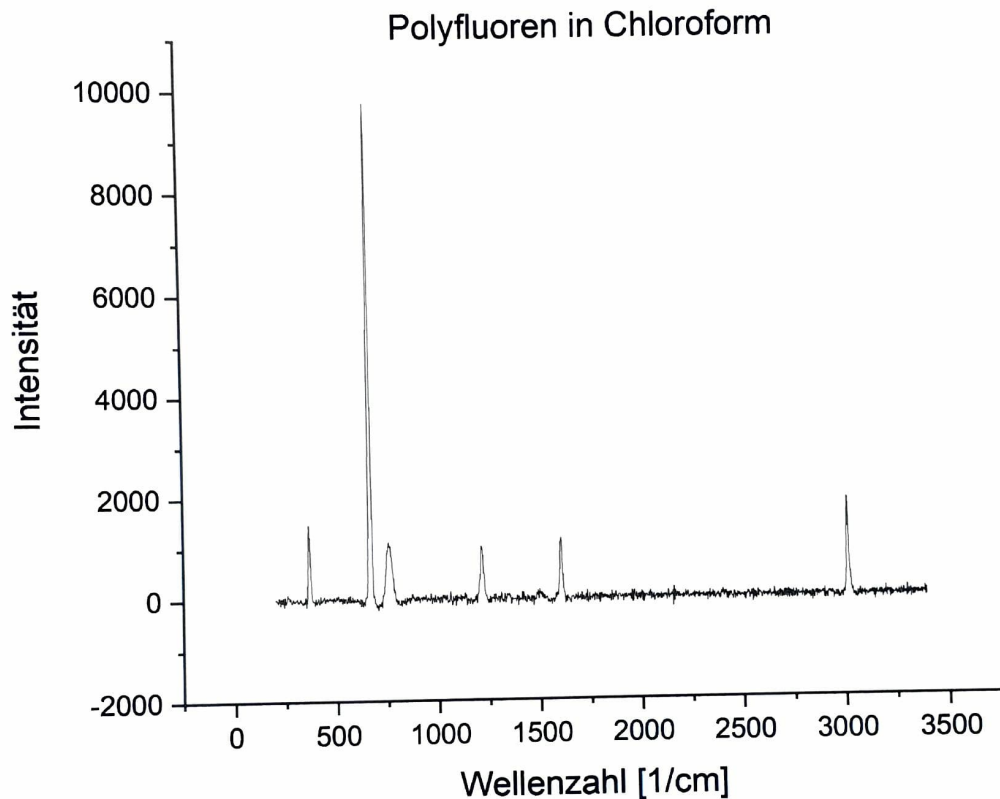


Abbildung 14: Ramanspektrum von Polyfluoren in Chloroform

In Abb.12 sind der 1. und 4. Peak wieder Rayleighpeaks erster und zweiter Ordnung. Der 2. Peak bei  $\lambda_{2,PF} = 415nm$  entspricht dem Lumineszenzpeak von PF. Da bei Fluoreszenz das Photon zunächst das Molekül in ein höheres elektronisches Niveau hebt, es dort emmissionslos auf das unterste Vibrationsniveau geht, bevor es wieder in das niedrigere elektronische Energieniveau relaxiert. Dort kann es jedoch in verschiedene Vibrationsniveaus gelangen. Die Verschiebung der Lumineszenzpeaks zueinander entsprechen einer Raman- oder IR-verschiebung. Der 3. Peak  $\lambda_{3,PF} = 450nm$  ist also vermutlich der Lumineszenzpeak um den Ramanshift verschoben ist. Um das zu überprüfen vergleichen wir dies erneut mit den Ramanspektren, die wir aufgenommen haben. Wenn wir Abb.15 und 14 vergleichen, können wir sehen, dass der Ramanpeak von Polyfluoren bei  $\bar{\nu}_{PF} = 1600 \frac{1}{cm}$  liegt.

$$\lambda_{3,PF,berechnet} = \frac{1}{\frac{1}{\lambda_{2,PF}} - \bar{\nu}_{PF}} = \frac{1}{\frac{1}{415nm} - 1600 * 10^{-7} \frac{1}{nm}} = 445nm$$

Da  $\lambda_{3,PF,berechnet} \approx \lambda_{3,PF}$  ist der Peak die Verschiebung des Lumineszenzpeaks um den Ramans-

<sup>18</sup> Das liegt aber am Spektrometer.

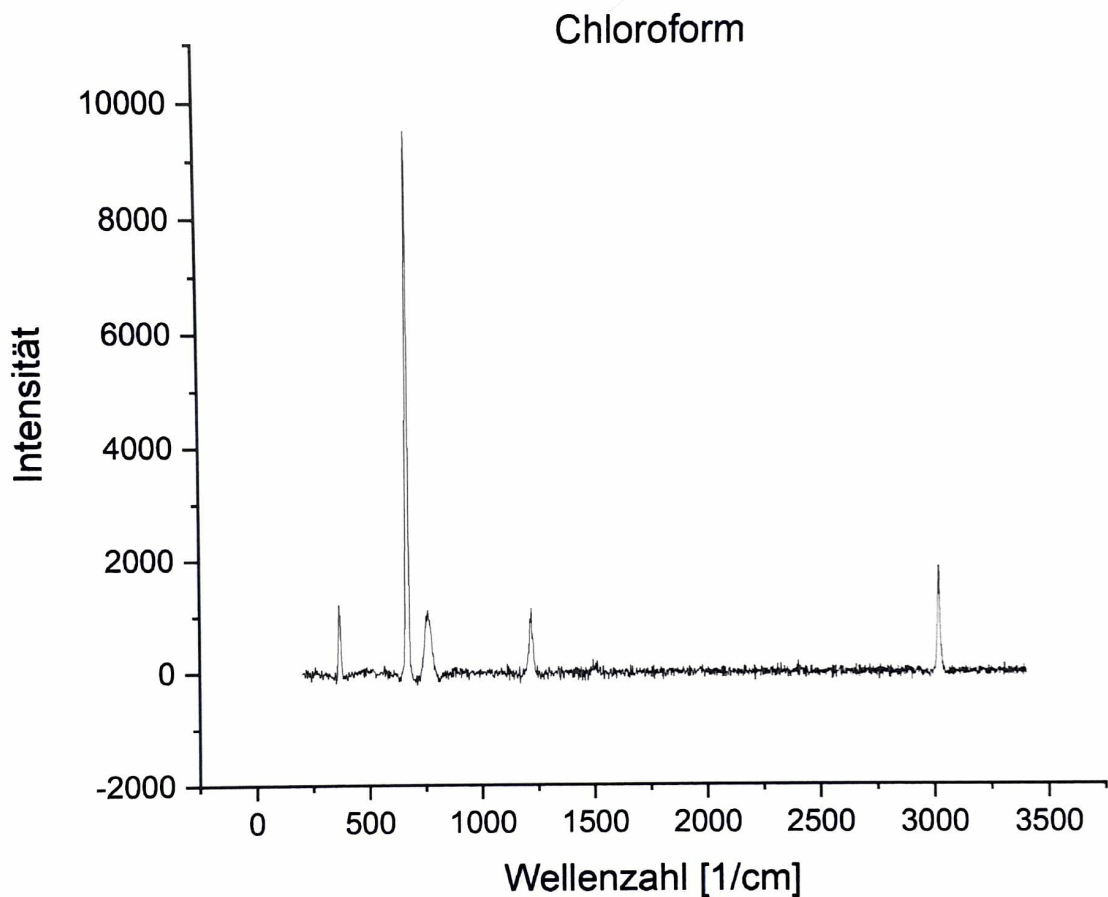


Abbildung 16: Raman Spektrum von Chloroform

In der Abb.16 kann man folgende fünf Peaks erkennen:

$$\begin{aligned}\bar{\nu}_1 &= 366\text{cm}^{-1} \\ \bar{\nu}_2 &= 665\text{cm}^{-1} \\ \bar{\nu}_3 &= 760\text{cm}^{-1} \\ \bar{\nu}_4 &= 1218\text{cm}^{-1} \\ \bar{\nu}_5 &= 3018\text{cm}^{-1}\end{aligned}$$

Vergleichen wir unsere Messwerte mit den Literaturwerten aus Abb.17, so sehen wir, nur leichte Abweichungen. Lediglich einen Peak bei  $261\text{ cm}^{-1}$  ist bei uns nicht zu erkennen.<sup>18</sup> Folgen wir der Literatur sind also alle Schwingungen Raman-aktiv. Die Schwingungsarten sind auch in der Abb.17 aufgeführt.

<sup>15</sup> Was bedeutet dieser Wert? Alternativ bzw. in dem Zusammenhang:  
Wie gut ist die Übereinstimmung der Sotd-Peaks mit den Ist-Peaks?  
(Was heißt „rms“?)

<sup>16</sup> Wie das?

<sup>17</sup> Komische Achsen?

hft.

## 3.2 Ramanspektroskopie

Nach der Ausrichtung des Lasers auf die Probe haben wir die Wellenzahl-Achse des Ramanspektrometers mittels eines schon bekannten Polystyrol-Spektrums kalibriert. Hierfür wurde vier der erkennbaren Peaks die bekannte Wellenzahl zugeordnet. Mit unserer Kalibrierung erhielten wir einen RMS-Wert von 0,61.<sup>15</sup>

### 3.2.1 Lösungsmittelproben

Nun haben wir die Lösungsmittel Wasser ( $H_2O$ ) und Chloroform ( $CHCl_3$ ) mittels des Ramanspektrometers untersucht.

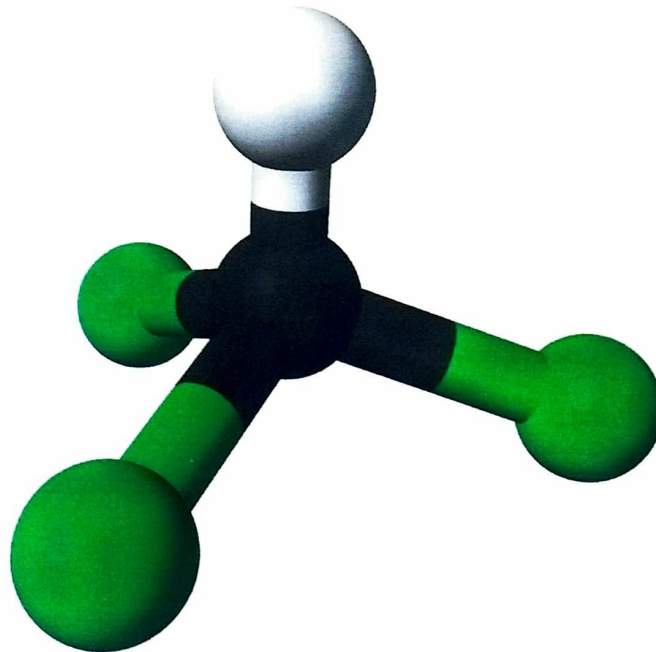


Abbildung 15: Chloroform Struktur (Quelle: <https://de.cleanpng.com/png-cti1ao/>)

**Chloroform** Das nichtlineare Molekül Chloroform (Abb.15) besitzt 12 Freiheitsgrade. Davon entfallen 3 auf Transversale Bewegungen in x,y,z Richtung und 3 auf Rotationen um die xy, yz und zx Achsen.<sup>16</sup> Also gibt es potentiell 6 Schwingungsfreiheitsgrade, die mit einem Ramanspektrometer erkannt werden können, wenn diese Raman-aktiv sind (siehe Abschnitt 2.3).<sup>17</sup>



## Symmetry: $C_{3v}$ Symmetry Number $\sigma = 3$

Sym. Species	No	Approximate type of mode	Selected Freq. Value Rating	Infrared Value Phase	Raman Value Phase
$a_1$	1	CH str	3034 B	3034.1 M gas	3030 W gas
$a_1$	2	CCl3 s-str	680 B	680 S gas	672 S gas
$a_1$	3	CCl3 s-deform	363 C	366 liq.	363 M gas
e	4	CH bend	1220 B	1219.7 VS gas	1217 W gas
e	5	CCl3 d-str	774 B	774.0 VS gas	760 W gas
e	6	CCl3 d-deform	261 B	260 liq.	261 W gas

Source: [Shimanouchi, 1972](#)

### Notes

VS Very strong

S Strong

M Medium

W Weak

Abbildung 17: Literaturwerte: Schwingungen von Chloroform Quelle: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C67663&Units=SI&Mask=800#Electronic-Spec>

**Wasser** Nun werden wir die Schwingungsmoden von Wasser untersuchen. Wasser besitzt 3 Schwingungsmoden. Diese sind in Abb. 18 dargestellt.

<sup>19</sup> Eher die Empfindlichkeitsverteilung des Detektors schlecht.

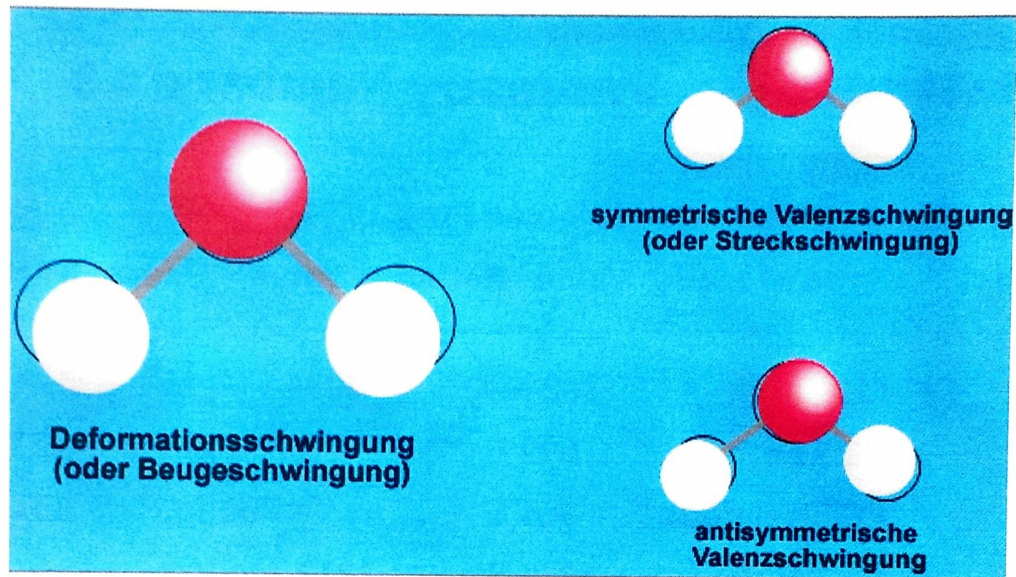


Abbildung 18: Wasser Schwingungen (Quelle: [http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/3/anc/ir\\_spek/molekuelschwingungen.vlu/Page/vsc/de/ch/3/anc/ir\\_spek/schwspek/mol\\_spek/ir3\\_2/dreiatomgewinkelt\\_m19ht0300.vscml.html](http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/molekuelschwingungen.vlu/Page/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/schwspek/mol_spek/ir3_2/dreiatomgewinkelt_m19ht0300.vscml.html))

Da sich bei allen drei Schwingungsformen die Polarisierbarkeit ändert, sind alle Raman-aktiv. Das Raman-Spektrum von Wasser ist mit dem benutzten Spektrometer trotz großer Integrationszeit nicht gut messbar. Vergleichen wir dieses Spektrum (Abb. 19) allerdings mit einem Spektrum einer leeren Küvette (Abb. 20), so lassen sich Peaks bei  $1600\text{ cm}^{-1}$  und bei  $3250\text{ cm}^{-1}$  Peaks erkennen. Ziehen wir die Literatur zu rate, so stellt sich heraus, dass Wasser bei  $1594\text{ cm}^{-1}$  (Beugeschwingung),  $3657\text{ cm}^{-1}$  (symmetrische Streckschwingung) und  $3756\text{ cm}^{-1}$  (antisymmetrische Streckschwingung) Peaks besitzt. (Quelle: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7732185&Units=SI&Mask=800#ESpecA>) Aufgrund des zu großen Rauschens konnten die letzten beiden Peaks nicht erkannt werden bzw. besitzen diese auch eine leicht andere Wellenzahl als von uns gemessen. Möglicherweise war hierfür die Kalibration zu ungenau.<sup>19</sup>

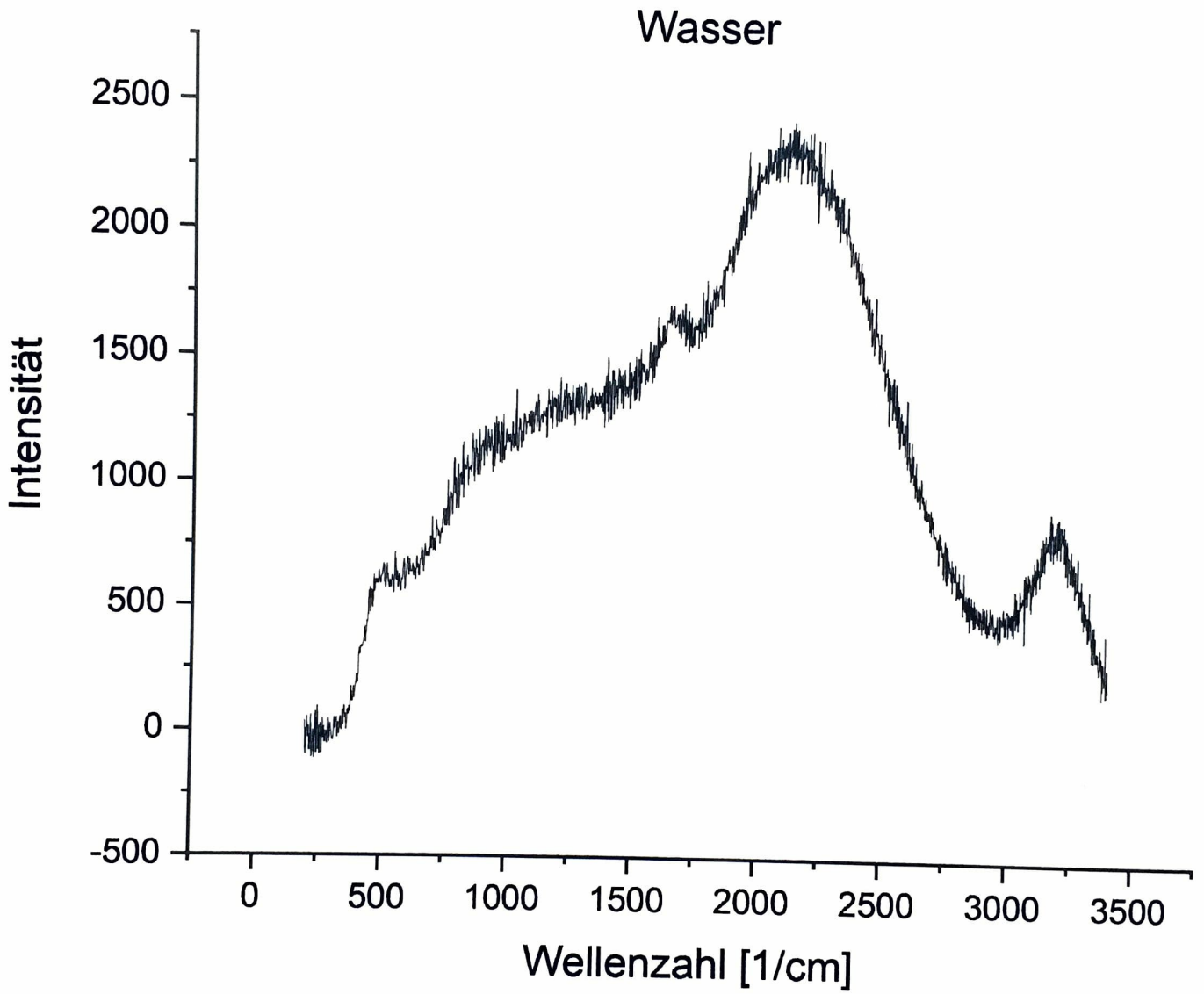


Abbildung 19: Raman Spektrum von Wasser

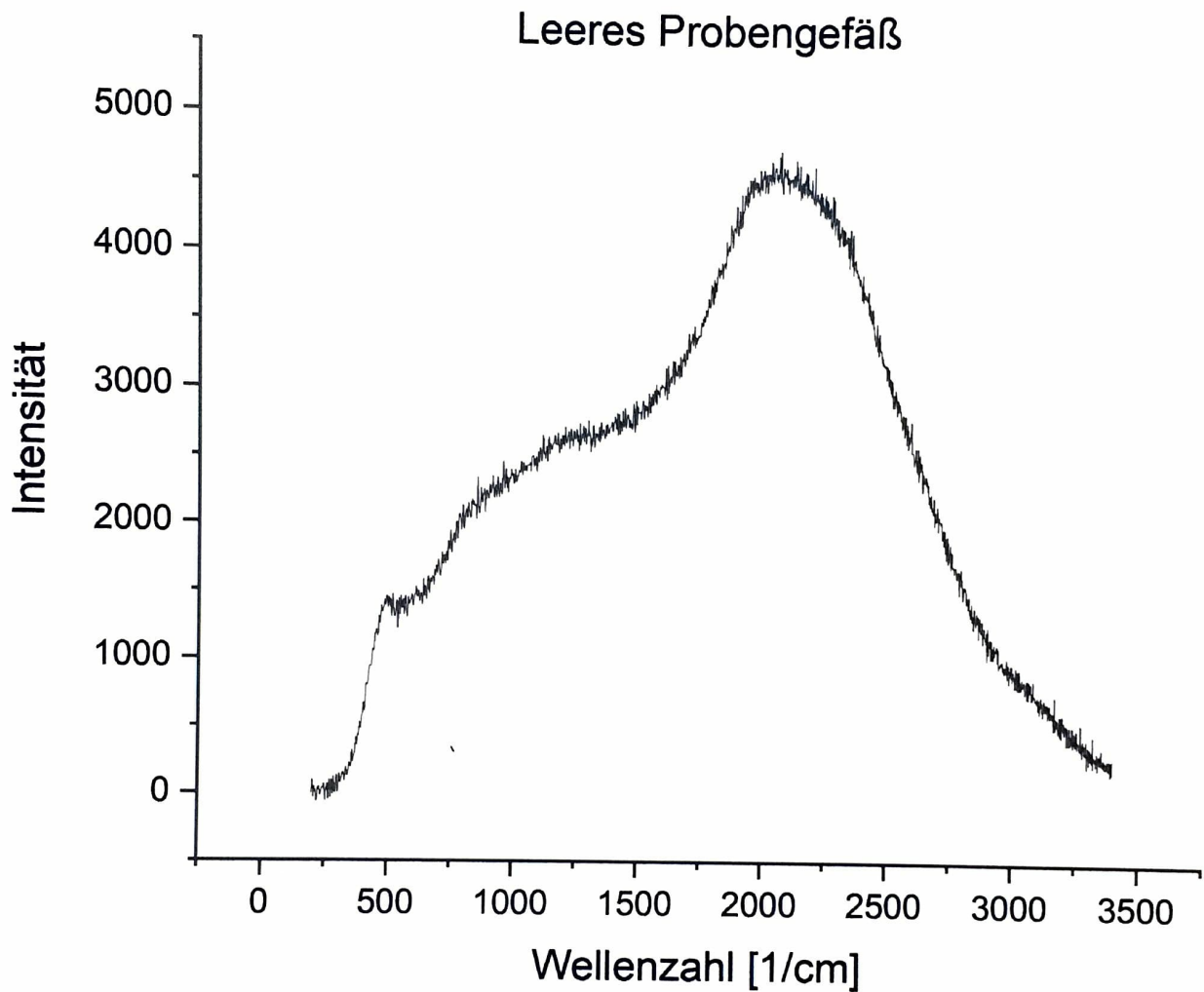


Abbildung 20: Raman Spektrum eines leeren Gefäßes

### 3.2.2 Identifikation der unbekannt Proben

In diesem Teil des Experiments haben wir die Raman-Spektren von 5 unbekannt Proben untersucht. Wir verglichen hierzu markante Bereiche der aufgenommen Spektren mit einem Katalog von Spektren bekannter Proben.

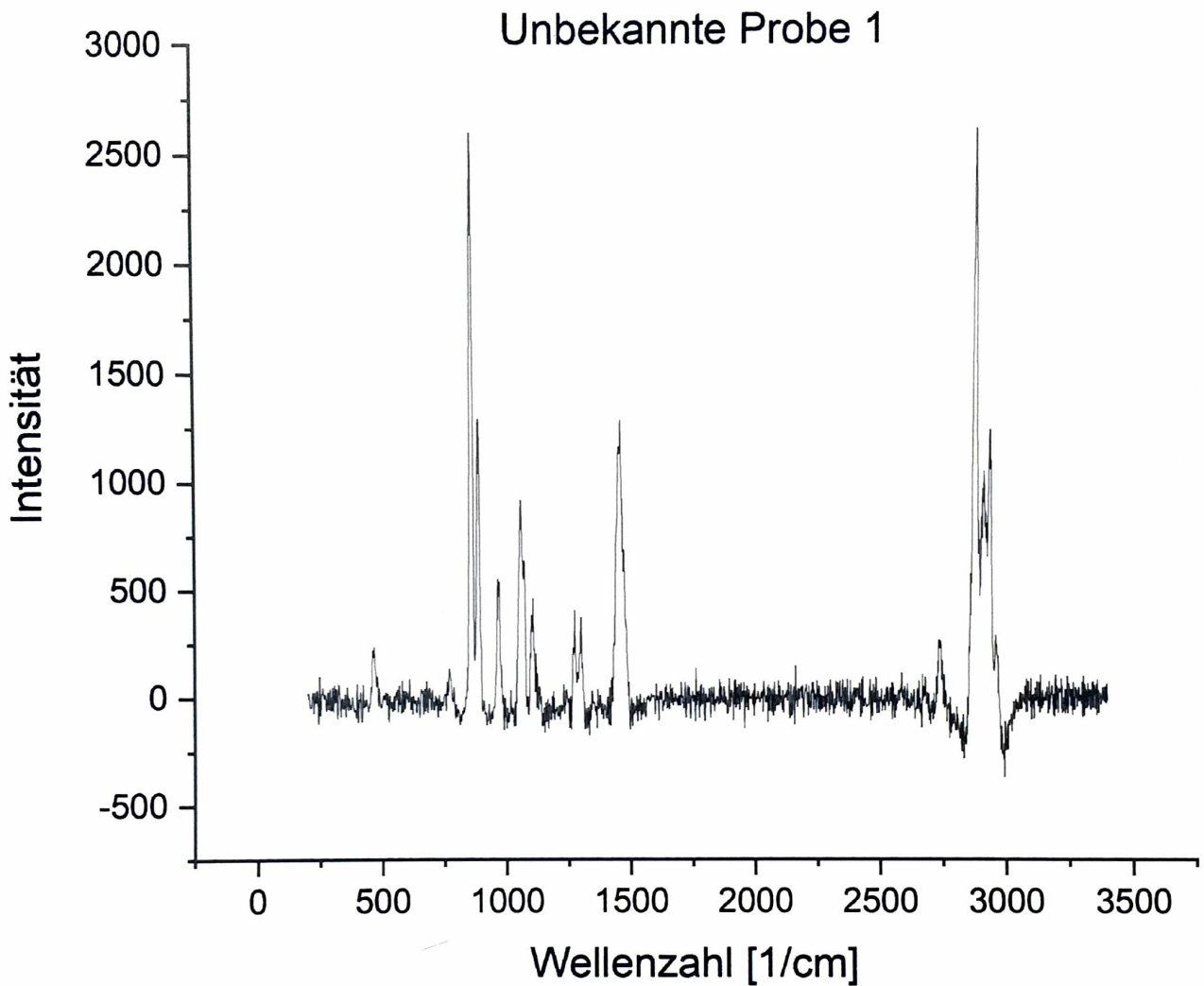


Abbildung 21: Raman Spektrum der unbekanntes Probe 1

Bei der in Abb.21 untersuchten Probe handelt es sich wahrscheinlich um 1-Propanol. Dieser Stoff hat wie die untersuchte Probe bei  $3000 \text{ cm}^{-1}$ , sowie leicht unter  $1000 \text{ cm}^{-1}$  große Peaks. Auch die Form und die Wellenzahl der übrigens kleineren Peaks passen zur untersuchenden Probe. Vor allem die kleineren Doppelpeaks bei leicht unter  $1400 \text{ cm}^{-1}$ , sowie bei ca.  $1200 \text{ cm}^{-1}$  sind auf dem Spektrum von 1-Propanol zu erkennen.

Die sehr ähnlichen Spektren von Cyclohexan und Ethanol kommen eher weniger in Frage, da diese weniger kleinere Peaks zwischen  $900$  und  $1600 \text{ cm}^{-1}$  besitzen und die Wellenzahl des größeren Peaks bei niedrigen Wellenzahlen abweicht.

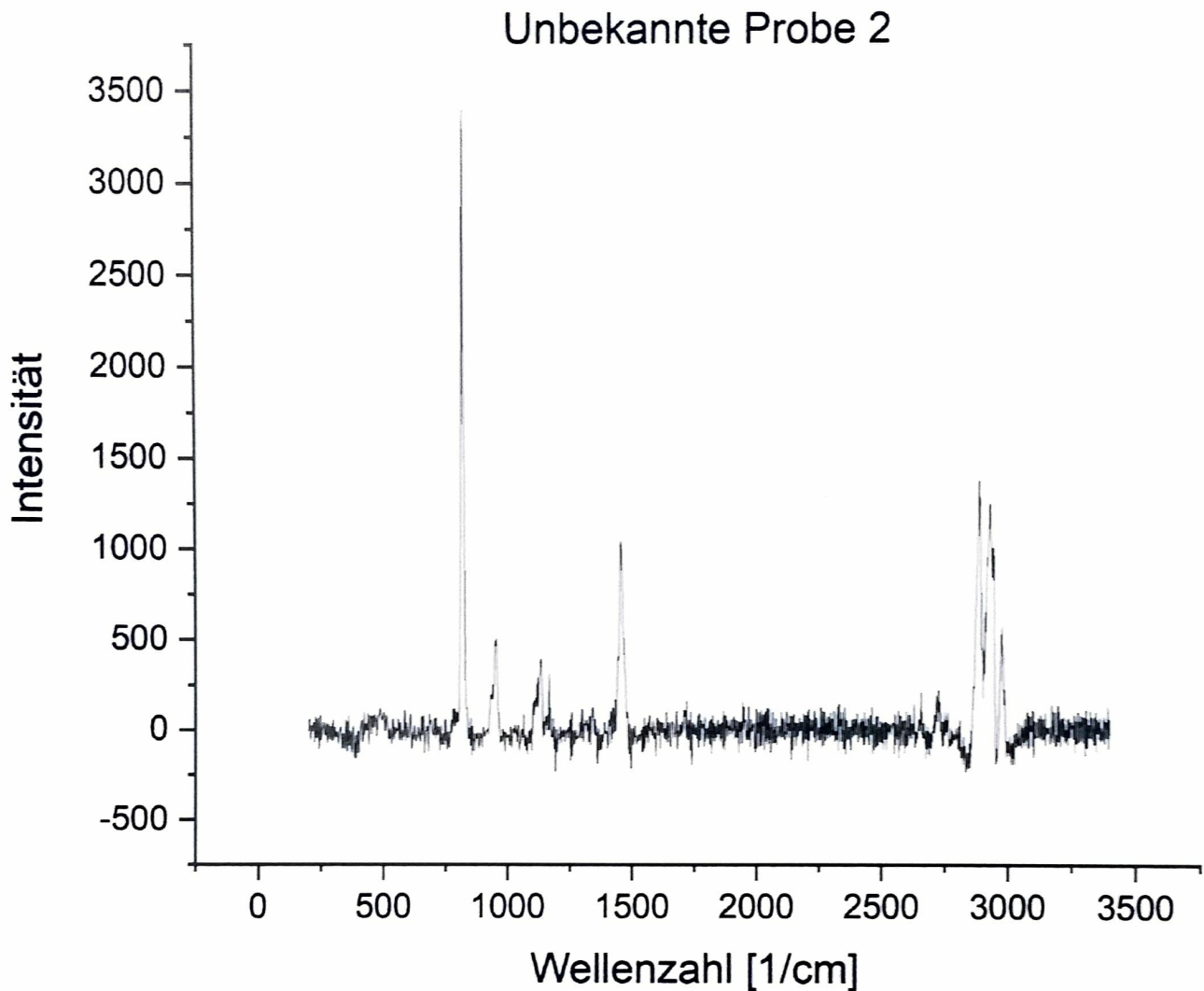


Abbildung 22: Raman Spektrum der unbekanntten Probe 2

Zum Spektrum der zweiten unbekanntten Probe passt am besten das Spektrum von 2-Propanol. Die Peaks haben die selben Formen und ungefähr die gleiche Position, wie die des 2-Propanols. Auffälliges Merkmal des Spektrums ist der schmale einzelne Peak bei ca.  $800 \text{ cm}^{-1}$ . Ein weiteres Spektrum mit einem solch schmalen Peak wäre Tetrahydrofuran. Hier ist dieser schmale Peak allerdings bei  $900 \text{ cm}^{-1}$  und die breiten mittleren Peaks passen nicht zu denen der unbekanntten Probe. Cyclohexan und Ethanol fallen aus der Betrachtung, da bei diesen die Anzahl der mittleren kleineren Peaks zu hoch ist.

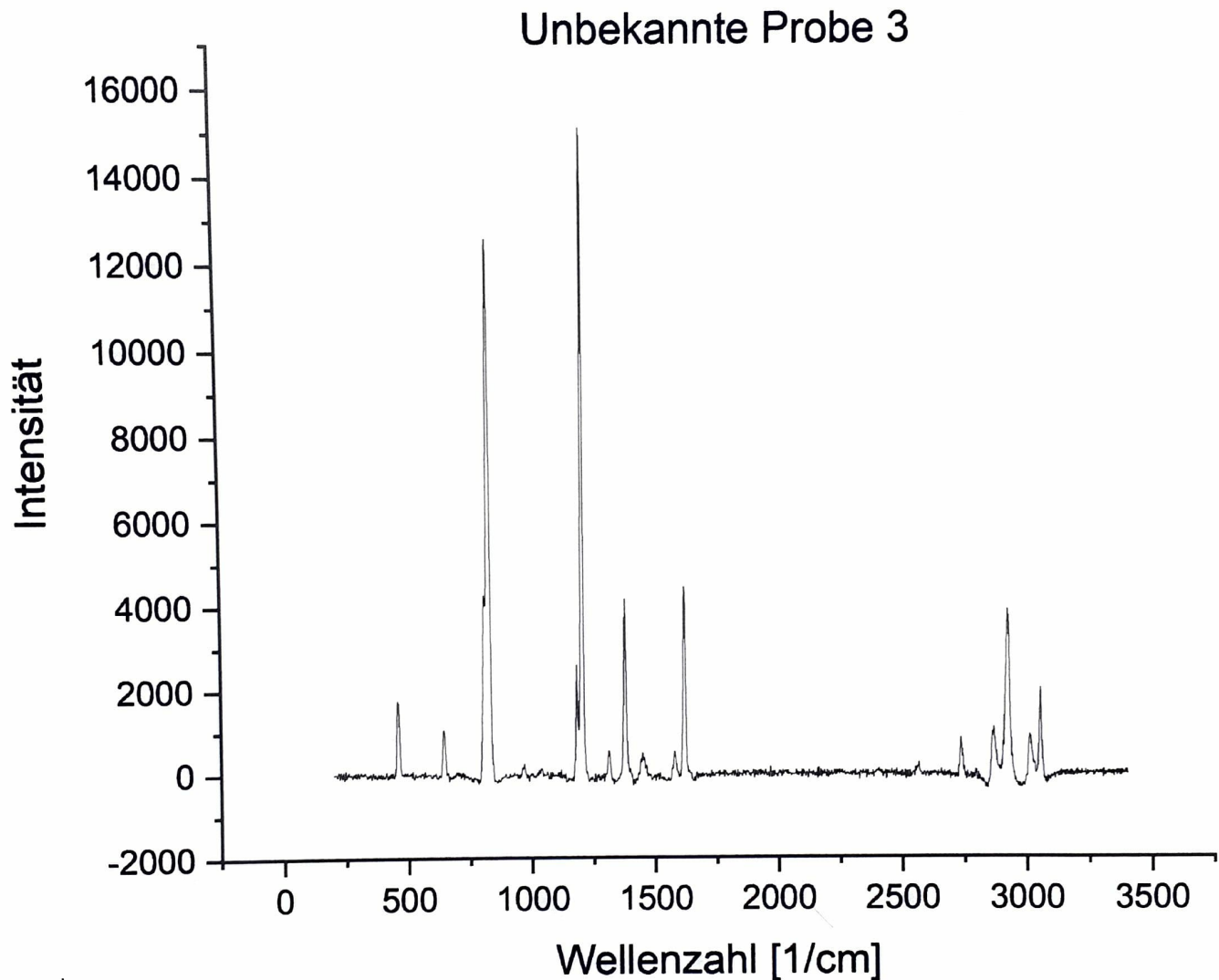


Abbildung 23: Raman Spektrum der unbekanntes Probe 3

Das Spektrum der 3. unbekanntes Probe ist schwieriger zuzordnen. Charakteristisch sind hier die beiden großen dünnen Peaks bei ca. 800 und 1200  $cm^{-1}$ . Eine vergleichbare Anordnung der Peaks besitzt P-Xylen. Hierfür würden auch die Peaks bei größeren Wellenzahlen passen (Vor allem die charakteristische Form der Peaks bei 3000  $cm^{-1}$  sind in beiden Spektren wiederzuerkennen). Die Peaks mit kleineren Wellenzahlen als 800  $cm^{-1}$  haben allerdings eine andere Größe bzw. Position. Für diese Probe ist der genaue Stoff nicht zuordbar.

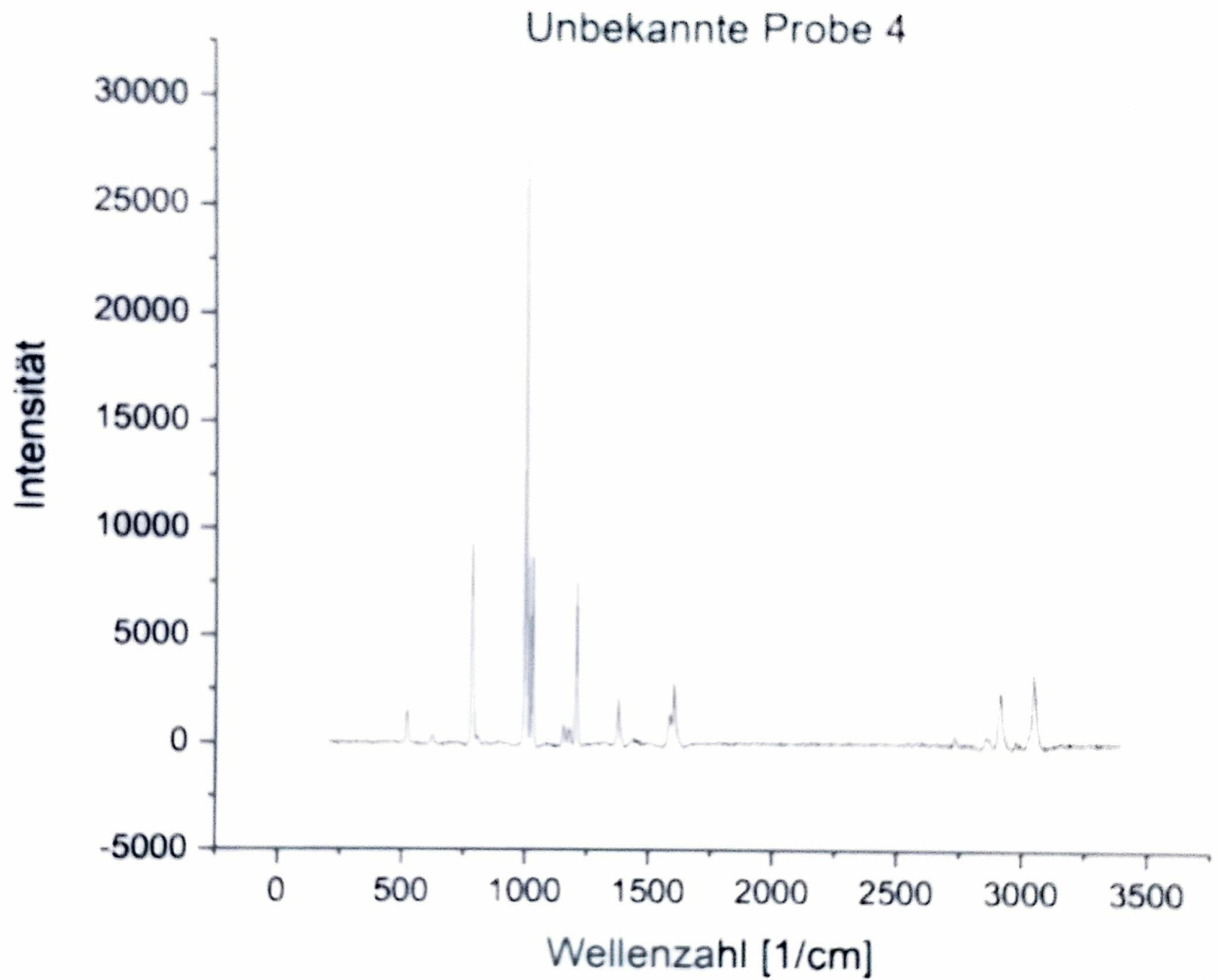


Abbildung 24: Raman Spektrum der unbekanntes Probe 4

Das Spektrum der unbekanntes Probe 4 kann am besten Toluene zugeordnet werden. Ausschlaggebend für diese Zuordnung sind vor allem die Intensität und die Position der Peaks bei ca.  $1000\text{ cm}^{-1}$ . Auch die übrigen Peaks passen in Form und Position überein. ✓



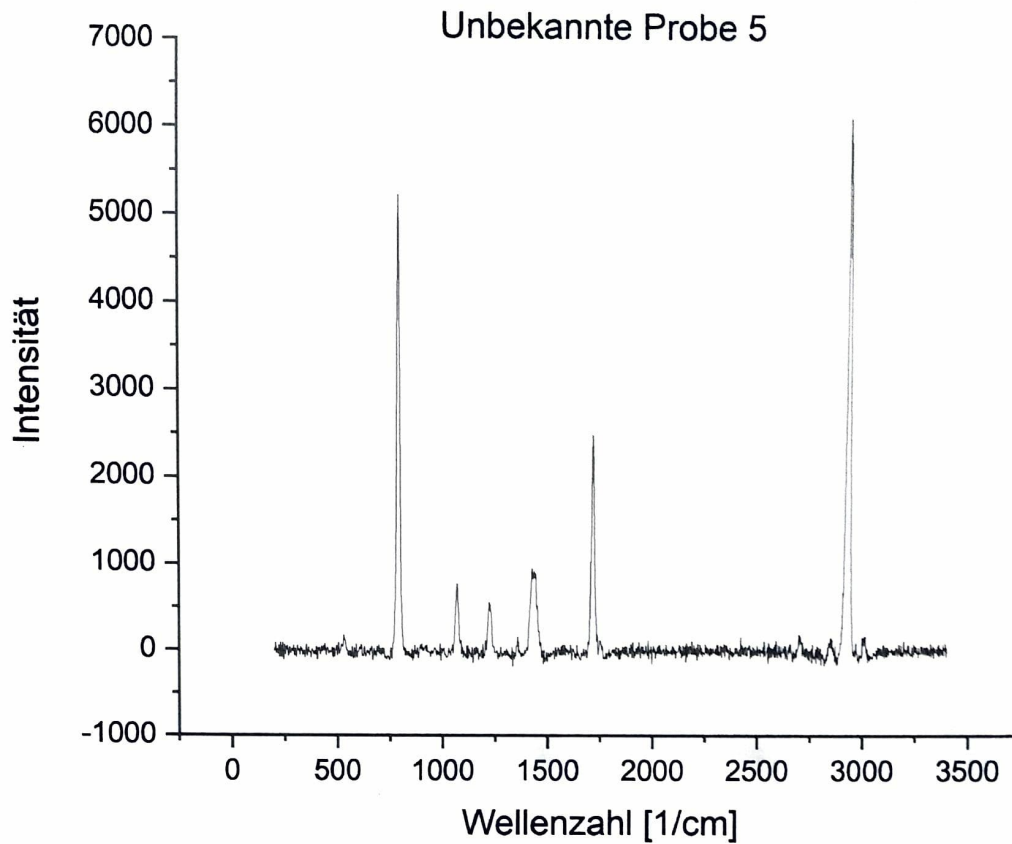


Abbildung 25: Raman Spektrum der unbekanntes Probe 5

Das Spektrum der unbekanntes Probe 5 passt am besten zu Aceton. Form und Position der Peaks passen hier überein.

## 4 Fazit

Es hat sich gezeigt, dass unter Zuhilfenahme von Raman und Fluoreszenzspektrometern die Ursachen für Peaks im Fluoreszenzspektrum ermittelt werden können und dass mit diesen beiden Methoden unbekanntes Stoffe identifiziert werden können.

## 5 Literatur

1. <https://www.uni-potsdam.de/u/physik/fprakti/ANLEIM4.pdf>
2. [http://www.chemgapedia.de/vsengine/topics/de/Chemie/Analytische\\_00032Chemie/IR\\_00047Raman\\_00045Spektroskopie/index.html](http://www.chemgapedia.de/vsengine/topics/de/Chemie/Analytische_00032Chemie/IR_00047Raman_00045Spektroskopie/index.html)

*L. I. Se*

*S. R.*