

Identifikation unbekannter Stoffe mit dem IR-Spektroskop

Problemstellung Es sollen verschiedene Substanzen in Alltagsstoffen identifiziert und allenfalls quantitativ bestimmt werden.

Material
 Spektrometer ALPHA-P (mit Diamant)
 Notebook mit Software Opus 6.5
 Ethanol (Reinigungsmittel)
 Weiche Papiertaschentücher
 Kunststoff-Probensammlung
 Einweg-Pipetten
 Duftöle



Aufgaben Zum Kennenlernen des Messgerätes müssen drei obligatorische Fragen bearbeitet werden:

- Unbekannte Kunststoffproben werden mit dem IR-Spektrometer untersucht und die Ergebnisse den Kunststoffen aus der Datenbank (Bibliothek) zugeordnet.
- Mit dem Spektrometer wird untersucht, ob ein Wassertropfen tatsächlich aus Wasser besteht.
- Es wird versucht, Duftöle durch Riechen zu identifizieren. Anschliessend werden die Vermutungen mit dem Spektrometer überprüft.

Durchführung

Notebook einschalten und sich als «mobiLLab» anmelden.

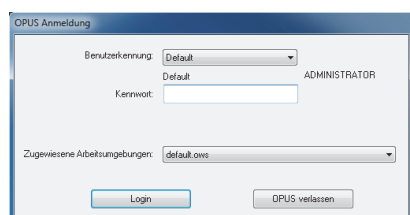
Vorbereitung der Apparatur

1. Software starten



Anmelden mit der Benutzerkennung «Default»

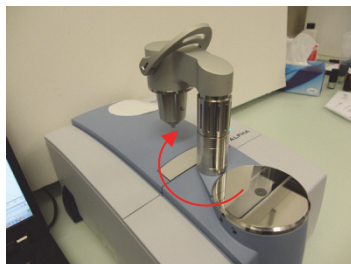
Kennwort = **OPUS**



2. Hintergrundmessung

Nach erfolgreicher Anmeldung muss zuerst eine Hintergrundmessung durchgeführt werden.

Für die Hintergrundmessung Stempel nach hinten drehen und sich versichern, dass der Kristall ganz sauber ist.



Schaltfläche «Hintergrund messen» anklicken:

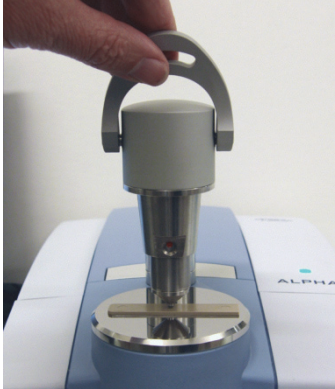
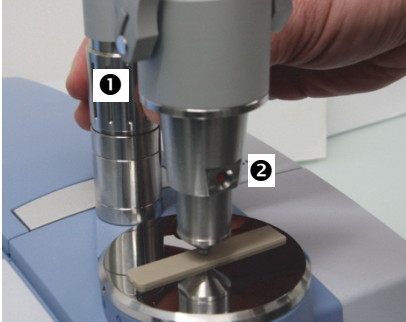
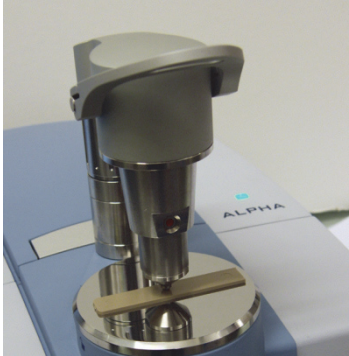

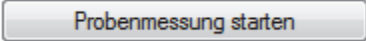
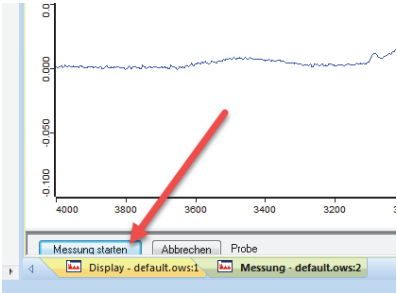
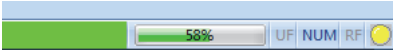




Nach erfolgreicher Hintergrundmessung (ca. 30 s) erscheint eine zusätzliche Schaltfläche:

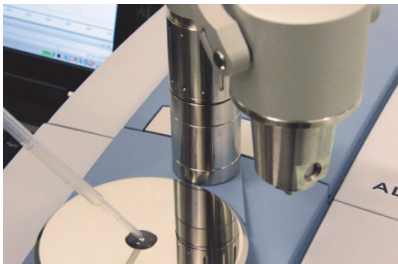

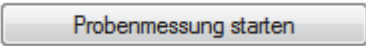
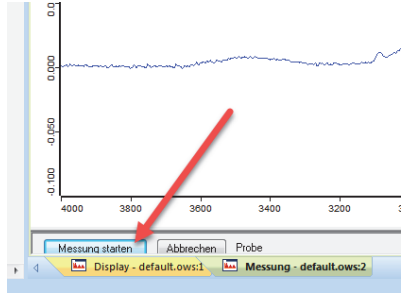
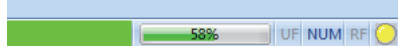



Obligatorische Aufgaben

a) *Untersuchung unbekannter Kunststoffproben*

<p>1. Probe auflegen Hebel nach oben bewegen, so dass der Anpressstempel auf die Probe zu liegen kommt.</p> 	<p>2. Anpressdruck anpassen Mit der Höhenverstellung ❶ wird die Anpressvorrichtung bis zur Zentrierung der roten Markierung verstellt ❷ (optimaler Anpressdruck).</p> 	<p>3. Hebel nach vorne klappen Nach dem Zentriervorgang wird der Hebel ganz nach vorne geklappt. Das Gerät ist nun messbereit.</p> 											
<p>4. Messung vorbereiten Schaltfläche «Probe messen» anklicken:</p> 	<p>5. Probe bezeichnen Im Feld «Probenname» eine passende Bezeichnung eingeben:</p> <p>Experiment: ATR_Di.XPM Probenname: <input type="text"/></p>	<p>6. Probemessung starten Schaltfläche «Probemessung starten» anklicken:</p> 											
<p>7. Messung starten Sobald eine Kurve angezeigt wird, die eigentliche Messung starten durch Anklicken von «Messung starten»:</p>  <p>Fortschritt der Messung:</p> 	<p>8. Bibliothekssuche Nach Abschluss der Messung muss das aufgenommene Spektrum mit den abgespeicherten Spektren in der Bibliothek verglichen werden.</p>  <p>Die Spektrensuche zeigt Stoffe mit viel bis wenig Übereinstimmung an. Eine Hitqualität über 500 heisst, dass die Substanz mit grösster Wahrscheinlichkeit gefunden wurde:</p> <table border="1" data-bbox="611 1525 1222 1637"> <thead> <tr> <th>30 Hits</th> <th>Hitqualität</th> <th>Substanzname</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>1.</td> <td>878</td> <td>Polymethylmethacrylat (PMMA)</td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/></td> <td>2.</td> <td>479</td> <td>POLYMETHYL METHACRYLATE</td> </tr> </tbody> </table> <p>Kurven können durch Anklicken der Kästchen <input type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/> ein- und ausgeblendet werden. So kann die Ähnlichkeit des gemessenen Spektrums mit den in der Datenbank gefundenen Spektren verglichen werden.</p>		30 Hits	Hitqualität	Substanzname	<input checked="" type="checkbox"/>	1.	878	Polymethylmethacrylat (PMMA)	<input type="checkbox"/>	2.	479	POLYMETHYL METHACRYLATE
30 Hits	Hitqualität	Substanzname											
<input checked="" type="checkbox"/>	1.	878	Polymethylmethacrylat (PMMA)										
<input type="checkbox"/>	2.	479	POLYMETHYL METHACRYLATE										
 <p>Weitere Proben können nach dem Anklicken der Schaltfläche «Nächste Probe» untersucht werden.</p>													

b) Untersuchung von Flüssigkeiten (Wasser)

<p>1. Probe vorbereiten</p> <p>Stempel wegdrehen und mit der Einwegpipette einen Tropfen Flüssigkeit auf den Diamanten geben:</p> 	<p>2. Messung vorbereiten</p> <p>Schaltfläche «Probe messen» anklicken:</p> 	<p>3. Probe bezeichnen</p> <p>Im Feld «Probenname» eine passende Bezeichnung eingeben:</p> <p>Experiment: ATR_Di.XPM Probenname: <input type="text"/></p> <p>4. Probemessung starten</p> <p>Schaltfläche «Probemessung starten» anklicken:</p> 								
<p>5. Messung starten</p> <p>Sobald eine Kurve angezeigt wird, die eigentliche Messung starten durch Anklicken von «Messung starten»:</p>  <p>Fortschritt der Messung:</p> 	<p>6. Bibliothekssuche</p> <p>Nach Abschluss der Messung muss das aufgenommene Spektrum mit den abgespeicherten Spektren in der Bibliothek verglichen werden.</p> <p>Die Spektrensuche zeigt Stoffe mit viel bis wenig Übereinstimmung an. Eine Hitqualität über 500 heisst, dass die Substanz mit grösster Wahrscheinlichkeit gefunden wurde:</p> <table border="1" data-bbox="614 1086 1228 1198"> <thead> <tr> <th>30 Hits</th> <th>Hitqualität</th> <th>Substanzname</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>878</td> <td>Polymethylmethacrylat (PMMA)</td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/></td> <td>479</td> <td>POLYMETHYL METHACRYLATE</td> </tr> </tbody> </table> <p>Kurven können durch Anklicken der Kästchen <input type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/> ein- und ausgeblendet werden. So kann die Ähnlichkeit des gemessenen Spektrums mit den in der Datenbank gefundenen Spektren verglichen werden.</p> 	30 Hits	Hitqualität	Substanzname	<input checked="" type="checkbox"/>	878	Polymethylmethacrylat (PMMA)	<input type="checkbox"/>	479	POLYMETHYL METHACRYLATE
30 Hits	Hitqualität	Substanzname								
<input checked="" type="checkbox"/>	878	Polymethylmethacrylat (PMMA)								
<input type="checkbox"/>	479	POLYMETHYL METHACRYLATE								



Nach jeder Flüssigkeitsuntersuchung muss der Kristall sorgfältig mit Ethanol und einem weichen Tüchlein gereinigt werden.

c) Untersuchung von Duftölen als Wettbewerb

Wichtig: Verwechselt auf keinen Fall die Verschlüsse der Flaschen – sonst werden die Messungen verfälscht.

1. Riecht an den 24 beschrifteten Duftölen und versucht, euch die Duftnoten zu merken.
2. Nehmt nun 5 der mit Buchstaben A – X bezeichneten Flaschen und versucht, sie unabhängig voneinander zu bestimmen. Notiert eure Vermutungen separat.
3. Überprüft eure Vermutungen mit Hilfe des IR-Spektroskops.

Weitere mögliche Fragestellungen

Kunststoffe

Aus welchem Material besteht z.B. ein Sichtmäppchen, ein Lineal oder eine Plastiktasche?