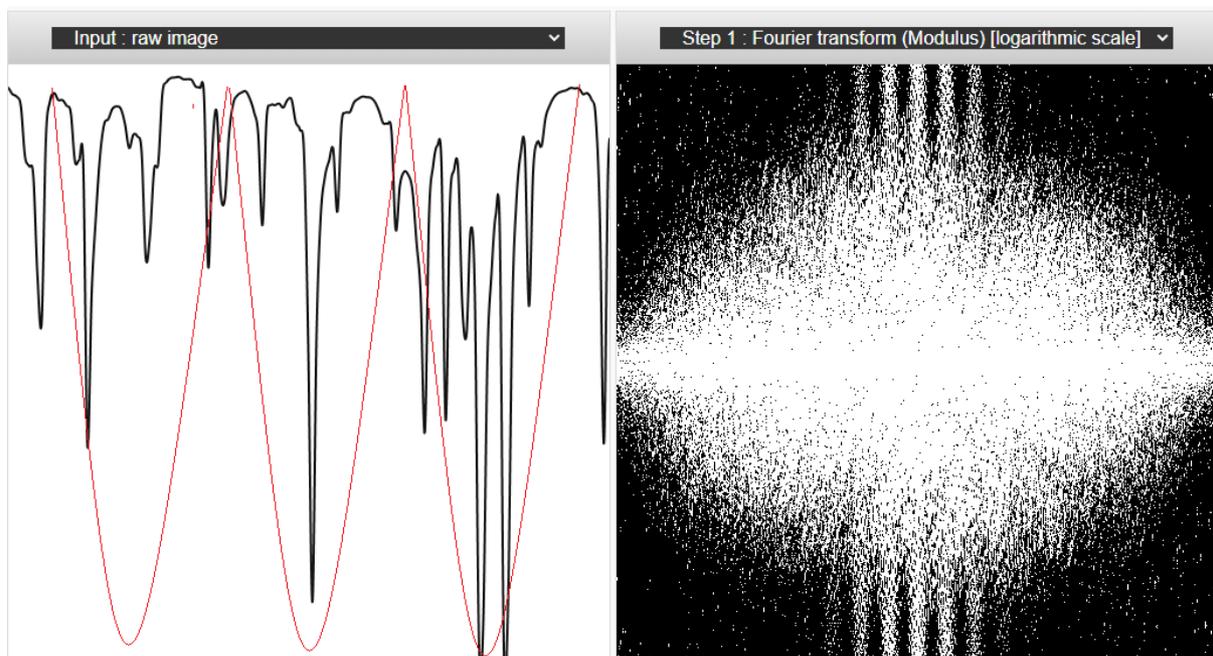


Einschub: Was “sieht” der Detektor des Spektrometers?

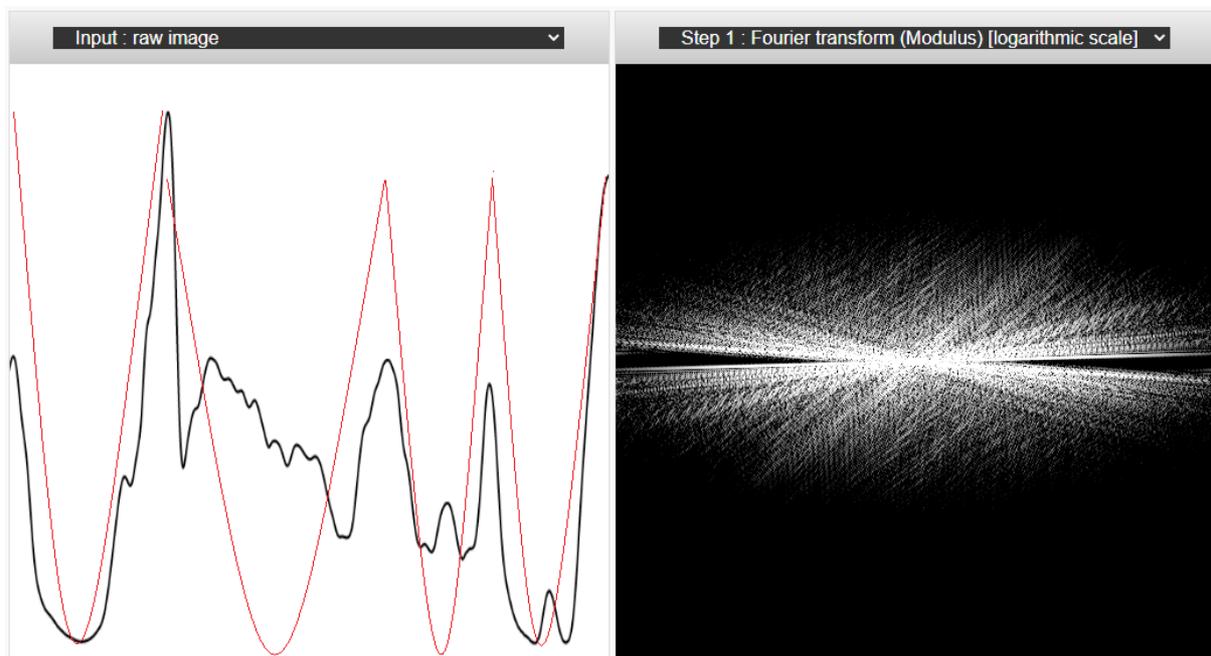
Werden Moleküle mit Licht bestrahlt, absorbieren sie bestimmte Wellenlängen und damit auch Energie und schwingen deshalb. Das Detektorsignal eines [Fouriertransformationsinterferometer](#) ist daher moduliert. Ähnlich wie in der Signaltechnik (z.B. elektrischer Schwingkreis oder Frequenz- und Amplitudenmodulation beim Rundfunk) kann mit einer Fouriertransformation eine Frequenzanalyse gemacht werden. Es gibt Resonanzfrequenzen, Grund- und Oberschwingungen. Die Fouriertransformation macht das Spektrometer von Ölcheck automatisch und stellt sie in der Analyse als Infrarotspektrum dar.

Mit einer erneuten Fouriertransformation des Infrarotspektrums erhält man wieder die Intensitätsverteilung auf dem Detektor, d.h. das was der Detektor als Bild bei der Messung “sieht” oder als Foto aufnehmen würde. Die Fouriertransformation kann man [online](#) durchführen. Das aufbereitete Bild sieht für die Referenz 1-Chloronaphthalin für den Fingerprintbereich so aus (links):



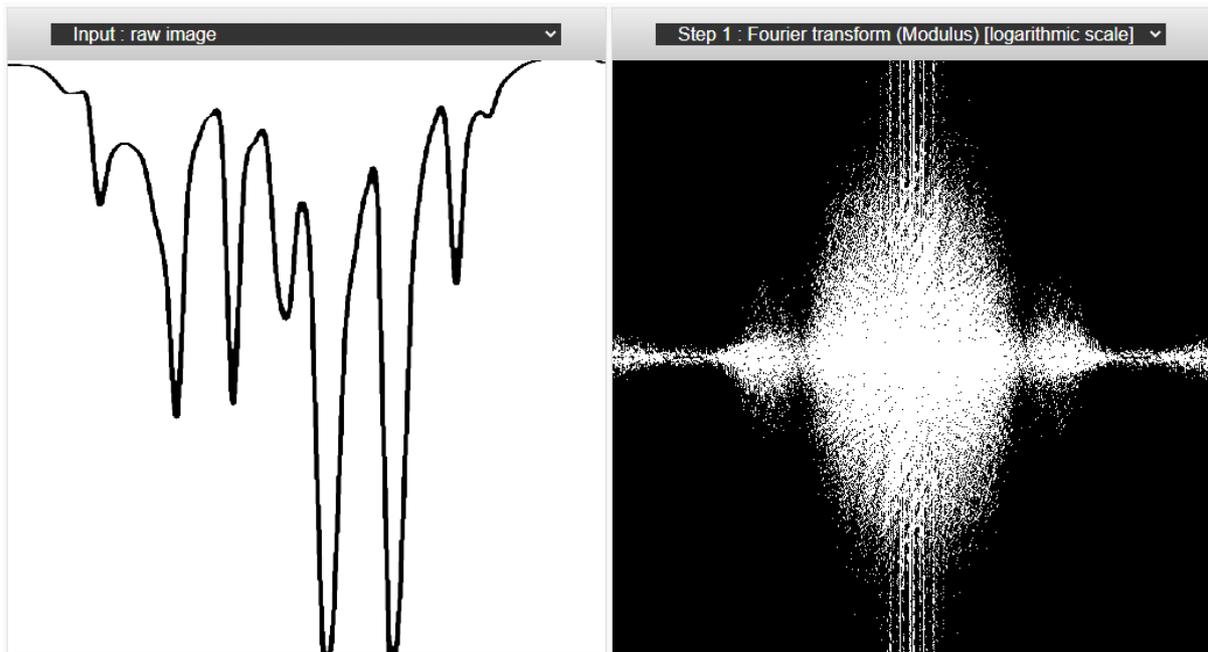
Nimmt man als Detektor den CCD-Chip einer Kamera, würde diese im Bereich $1200 - 650 \text{ cm}^{-1}$ das rechte Bild für 1-Chloronaphthalin fotografieren. Das rechte Bild ist die Fouriertransformation des linken Bildes. Das linke Bild entspricht dem Infrarotspektrum von für 1-Chloronaphthalin. Im linken Bild erkennt man gehäufte Minima mit einem Abstand von ca. 200 cm^{-1} , was die von mir eingefügten roten Linien verdeutlichen sollen. Im linken Bild ist angedeutet das die 3 Bereiche den gleichen Abstand haben. Für das linke Bild stellt man die Ascii-Daten des Infrarotspektrums z.B. mit Excel in einem Diagramm ohne weitere Linien dar und lädt sie z.B. als *.png hoch. Die periodisch wiederkehrenden senkrechten Linien im rechten Bild geben die 200 cm^{-1} -Periodizität des linken Bildes wider.

Für das Additiv sieht das aufbereitete Bild für den Fingerprintbereich so aus:

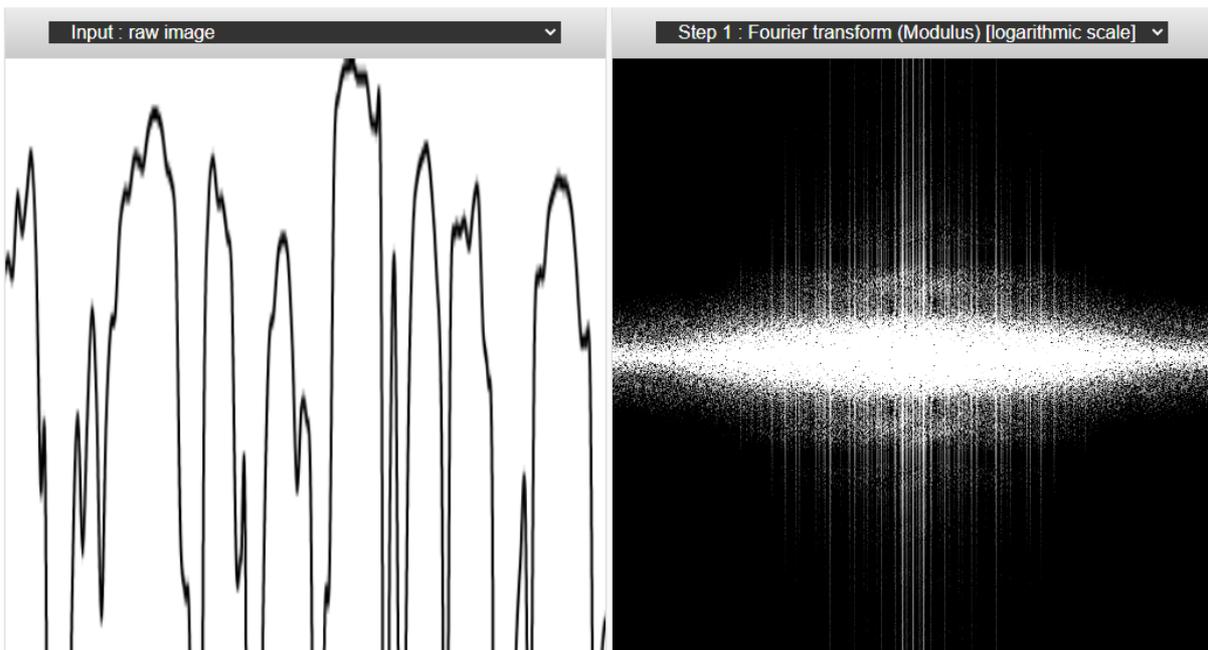


Im linken Bild sind mit den roten Linien 4 Senken angedeutet. Das rechte Bild ist die Fouriertransformation des linken Bildes. Das linke Bild entspricht dem Additiv-Infrarotspektrum von Ölcheck. Da die Senken alle unterschiedliche Abstände zueinander haben, sind im rechten Bild periodische Linien nicht zu erkennen. Die unterschiedlichen Abstände der Senken im linken Bild kommen daher, weil das 1-Chloronaphthalin im Additiv mit anderen Stoffen enthalten ist, die mit dem 1-Chloronaphthalin wechselwirken. Der Detektor würde im Fingerprintbereich das rechte Bild fotografieren.

Im nächsten Bild ist im linken Teil vom Fingerprint von 1-Chloronaphthalin der Bereich 900 bis 700 cm^{-1} zu sehen. Rechts ist die Fouriertransformation des linken Bildes zu sehen. Man erkennt auch hier im Bereich 900 bis 700 cm^{-1} periodische Schwingungen des im Additiv enthaltenen 1-Chloronaphthalin Moleküls. Würde Ölcheck 1-Chloronaphthalin untersuchen, würde der Detektor im Bereich 900 bis 700 cm^{-1} das rechte Bild fotografieren.



Auch im Bereich 1350 - 900 cm^{-1} zeigt die Fouriertransformation für 1-Chloronaphthalin bei der Referenz periodische Schwingungen an:



Würde Ölcheck 1-Chloronaphthalin untersuchen, würde der Detektor im Bereich Bereich 1350 bis 900 cm^{-1} das rechte Bild fotografieren.