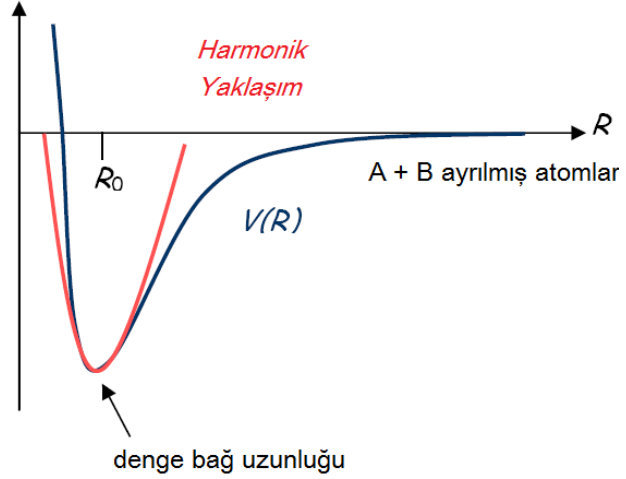


BÖLÜM 35

TİTREŞİM SPEKTROSKOPİSİ

Bu ders kapsamında defalarca vurguladığımız gibi, Born-Oppenheimer yaklaşımıyla çekirdekler, elektronların tanımladığı bir potansiyel enerji yüzeyinde (PEY) hareket eder. Örneğin, bir diatomik molekülde çekirdeğin hissettiği potansiyel sağdaki şemada görülmektedir. Düşük enerjilerde, molekül bu potansiyel enerji yüzeyinin altına yakın bir yerde bulunur.



Bu durumda potansiyelin detaylı yapısı ne olursa olsun bölgesel olarak çekirdekler

harmonik potansiyele yakın bir potansiyel "hisseder"ler. Genel olarak, çekirdeğin potansiyel enerji yüzeyi boyunca olan hareketi, titreşim hareketi olarak adlandırılır ve düşük enerjilerde çekirdek hareketinin en iyi modeli, açıkça Harmonik Osilatör dür.

Basit Örnek: Bir diatomik molekülün titreşim spektroskopisi

Bir diatomik molekülümüz varsa sadece bir serbestlik derecesi (bağ uzunluğu) vardır ve 1B harmonik osilatör kullanılarak diatomik titreşimleri modellemek akla yatkındır:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}k_o\hat{R}^2 = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}m\omega_o^2\hat{R}^2$$

Burada k_o , bağın ne kadar kuvvetli olduğunu ölçen bir kuvvet sabiti olup, dengeye yakinken doğru (harmonik olmayan) PEY elde etmek için hemen hemen ikinci türevle ilgilidir:

$$k_o \approx \left. \frac{\partial^2 V}{\partial R^2} \right|_{R_0}$$

Fermi'nin Altın Kuralı'nı uygulayarak, bir molekülü ışınladığımızda, i. ve f. harmonik osilatör hâlleri arasında bulacağımız bir geçiş olasılığı:

$$W_{fi} \propto \frac{|V_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left[\delta(E_i - E_f - \hbar\omega) + \delta(E_i - E_f + \hbar\omega) \right]$$

Burada ω , ışık frekansdır (osilatör frekansı, ω_0 ile karıştırılmamalıdır). Titreşim özdeğerleri, spini değil uzaysal serbestlik derecesini içerdiğinden burada hemen elektrik alanın (manyetik alan değil) önemli olduğunu söyleriz. Böylece, geçiş matris elemanlarını aşağıdaki gibi yazarız:

$$|V_{fi}|^2 = \left| \int \phi_f^* \hat{\mu} \cdot \mathbf{E}_0 \phi_i d\tau \right|^2 = \left| \mathbf{E}_0 \cdot \int \phi_f^* \hat{\mu} \phi_i d\tau \right|^2 = \left| \mathbf{E}_0 \cdot \int \phi_f^* e\hat{R} \phi_i d\tau \right|^2$$

Şimdi, bağ eksenini boyunca elektrik alanın bileşenini (E_R) tanımlayalım:

$$|V_{fi}|^2 = \left| E_R \int \phi_f^* e\hat{R} \phi_i d\tau \right|^2 = e^2 |E_R|^2 \left| \int \phi_f^* \hat{R} \phi_i d\tau \right|^2$$

Geçişlerin hızı, geçiş dipol matris elemanının (üçüncü terim) karesiyle olduğu kadar elektrik alan kuvvetinin (ilk iki terim) karesiyle de orantılıdır. Harmonik osilatör özfonksiyonları hakkında bildiklerimizden yararlanıp bunu kolayca sadeleştiririz. Önce, artırma ve azaltma operatörleri cinsinden konum operatörünü (R) tekrar yazarız:

$$\begin{aligned} |V_{fi}|^2 &= e^2 |E_R|^2 \left| \int \phi_f^* \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \phi_i d\tau \right|^2 = \frac{\hbar e^2}{2\mu\omega} |E_R|^2 \left| \int \phi_f^* (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \phi_i d\tau \right|^2 \\ \Rightarrow |V_{fi}|^2 &= \frac{\hbar e^2}{2\mu\omega} |E_R|^2 \left((i+1) \delta_{f,i+1} + i \delta_{f,i-1} \right) \end{aligned}$$

$\begin{array}{cc} \swarrow & \searrow \\ \sqrt{i+1} \phi_{i+1} & \sqrt{i} \phi_{i-1} \end{array}$

Yukarıdaki ifadede, “i” teriminin asla $\sqrt{-1}$ değerine atıfta bulunmadığı, daima sistemin ilk kuantum sayısına atıfta bulunduğu açıklanmalıdır. Böylece, **bir geçişin ilk ve son hâllerinin, bir uyarılmış kuantum kadar farklı olmadığında yasaklanmış olduğunu** hemen görürüz. Ayrıca geçişler, daha yüksek uyarılmış hâllerde daha muhtemel olmaktadır. Yani, i büyüdükçe V_{fi} büyür.

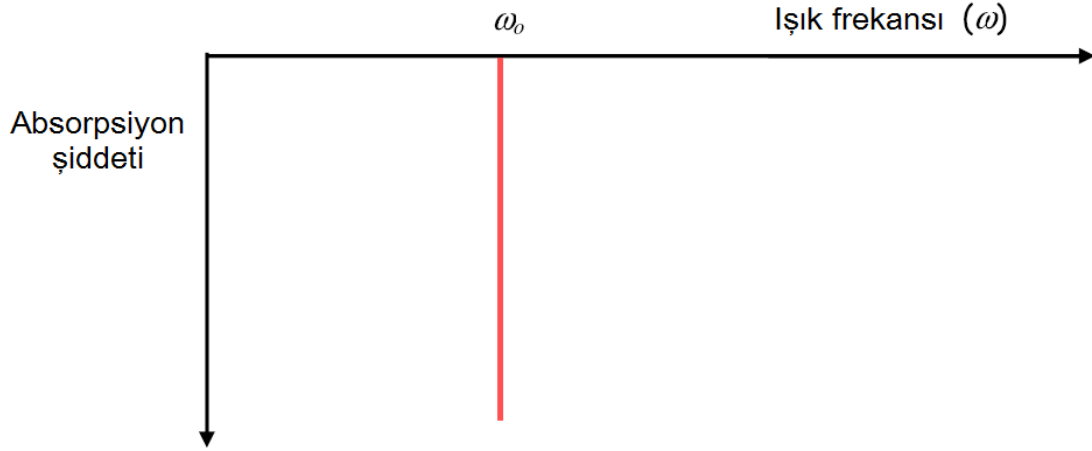
Fermi'nin Altın Kuralı'nı, geçiş matris elemanının açık ifadesiyle birleştirdiğimizde aşağıdaki bağıntıyı elde ederiz:

$$\begin{aligned} W_{fi} &\propto \frac{e^2}{8\hbar\mu\omega} |E_R|^2 \left((i+1) \delta_{f,i+1} + i \delta_{f,i-1} \right) \left[\delta(E_i - E_f - \hbar\omega) + \delta(E_i - E_f + \hbar\omega) \right] \\ \Rightarrow W_{fi} &\propto |E_R|^2 \left\{ (i+1) \delta_{f,i+1} \left[\delta(E_i - E_{i+1} - \hbar\omega) + \delta(E_i - E_{i+1} + \hbar\omega) \right] \right. \\ &\quad \left. + i \delta_{f,i-1} \left[\delta(E_i - E_{i-1} - \hbar\omega) + \delta(E_i - E_{i-1} + \hbar\omega) \right] \right\} \end{aligned}$$

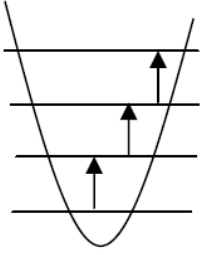
$$\Rightarrow W_{fi} \propto |E_R|^2 \left\{ (i+1) \delta_{f,i+1} \left[\delta(-\hbar\omega_o - \hbar\omega) + \delta(-\hbar\omega_o + \hbar\omega) \right] + i \delta_{f,i-1} \left[\delta(\hbar\omega_o - \hbar\omega) + \delta(\hbar\omega_o + \hbar\omega) \right] \right\}$$

$$\Rightarrow W_{fi} \propto |E_R|^2 \left\{ (i+1) \delta_{f,i+1} + i \delta_{f,i-1} \right\} \delta(\hbar\omega_o - \hbar\omega)$$

Sonuç olarak, bir Harmonik osilatörün, sadece $\hbar\omega_o$ frekansına (burada ω_o , osilatörün frekansdır) sahip fotonu absorpladığını veya yaydığını görürüz. Böylece absorpsiyon spektrumuna baktığımızda sadece tek frekansta absorpsiyon görürüz.



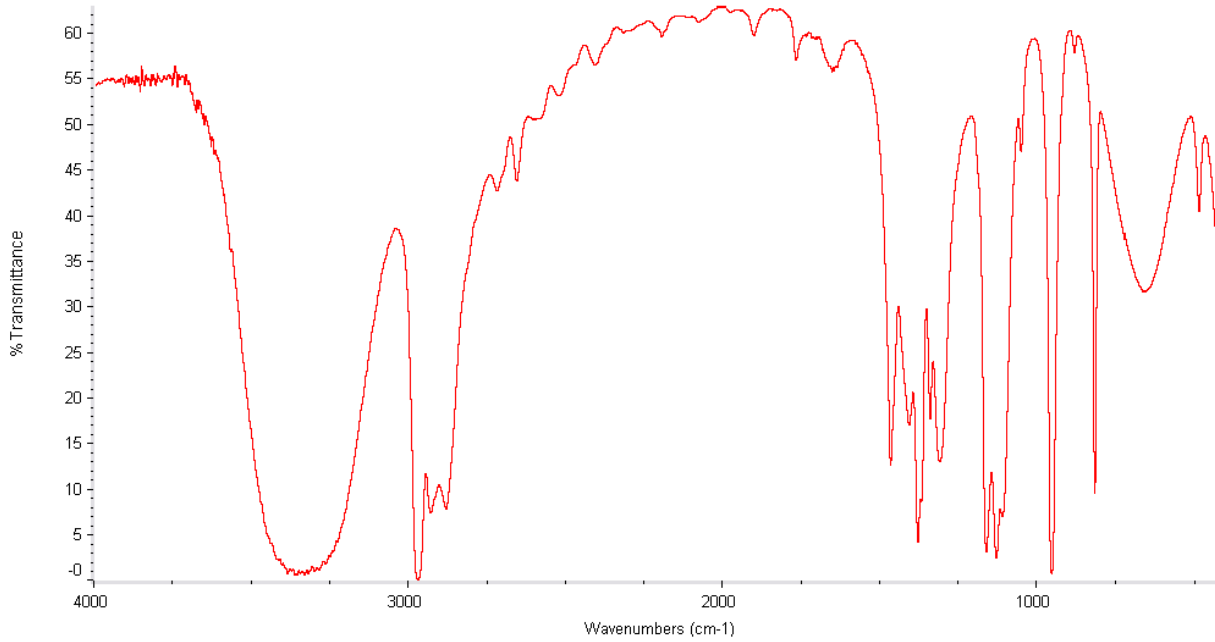
Moleküler kuvvet sabitleri, genellikle $eV / \text{Å}$ mertebesinde olup titreşim frekanslarının genellikle $500 - 3500 \text{ cm}^{-1}$ arasında olmasına ve bu absorpsiyon özelliklerini infrared bölgeye yerleştirmesine yol açar. Sonuçta bu spektroskopi biçimi, alışılmış şekildedir IR spektroskopisi olarak adlandırılır. Harmonik osilatördeki (sol tarafta) bütün $n \rightarrow n+1$ geçişlerinden kaynaklandığından dolayı, yukarıdaki spektrumla ilgileniyoruz. Elbette, çoğu zaman molekül, esas katkı $0 \rightarrow 1$ geçişinden gelecek şekilde kendi temel düzeyinde osilasyon yapmaya başlar. Ancak aynı frekansta diğer geçişler de oluşarak absorpsiyona katkı sağlar.



Bu, IR titreşim spektroskopisi için klasik örneklemedir: Her diatomik molekül, sadece PEY' in minimuma yakın eğriliğinin bir karakteristiği olan frekansta ışını absorplar. Böylece biraraya getirilmiş farklı moleküller durumunda, birini diğerinden ayırt etmek, her

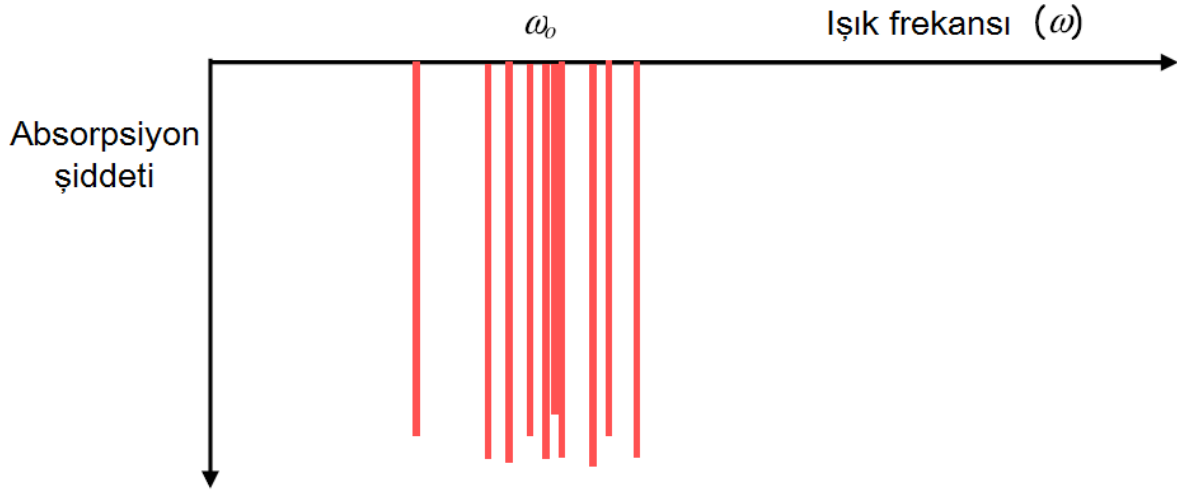
birine uygun frekansı aramakla mümkün olabilir. Özellikle burada, bağı "kuvveti" ile absorpsiyon yaptığı frekans arasında güzel bir korelasyon vardır.

Elbette, daima veya çoğunlukla diatomik moleküllerle ilgilenmiyoruz ve ayrıca, diatomik moleküller, mükemmel Harmonik osilatör de değildir. Sonuç olarak, IR absorpsiyon spektrumlarının neden yukarıda verilen klasik Harmonik osilatör gibi görünmeyip daha çok aşağıdaki gibi görünmesine dair pek çok sebep vardır:

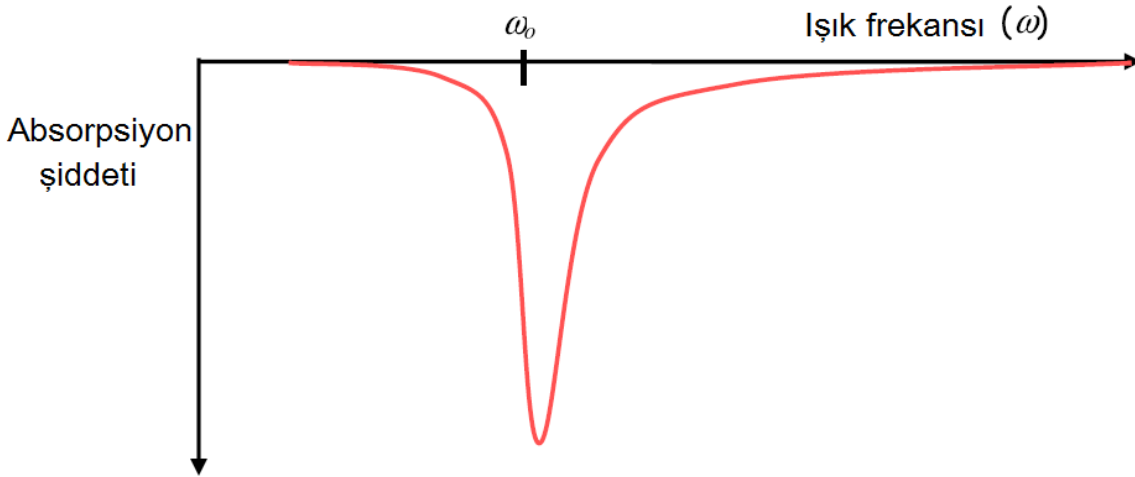


Heterojenlik

Yukarıdaki gerçek spektrumun modelden farklı görünmesinin birinci sebebi, gerçek spektrumun çözelti ortamında alınmasıdır. Model, tek bir diatomik molekül için veya özdeş diatomik moleküllerin pek çok kopyasında doğrudur. Ancak çözeltide, moleküller çok az farklı olsa bile her molekülün etrafında çözücünün az da olsa farklı bir düzenlenmesi olacaktır. Bu çözücü molekülleri, sezdirmeden PEY' i değiştirir, her molekülün titreşim frekansını yavaşça kaydırır ve geçiş dipolünü de biraz değiştirir. Böylece, tek bir HF molekülü, yukarıdaki modele benzer bir spektrum verirken pek çok HF molekülünün yer aldığı bir çözelti, aşağıdaki gibi bir spektrum verir:



10^{23} HF molekülünün olduğu duruma bakalım, spektrumlara, spektrometrenin ayırabileceğinden çok daha yakın olan çizgilerin şiddeti de eklenebilir. Çözeltideki bir diatomik molekül için titreşim spektrumunu aşağıdaki gibi bekleyebiliriz:



Spektrumdaki son özellik çizgi şekil olarak adlandırılır. Bu özellik öncelikle, osilatörleri saran farklı çevrelerin dağılımını da yansıtır. Böylece, çok iyi bilinen bir titreşim eğrisini (örneğin, C=O gerilmesi) analiz ederek bu CO gruplarının içinde bulunduğu çevreler hakkında fikir edinebiliriz: Çevresi ne kadar polar? Elektron çekici gruplara yakınlığı var mı? Konformasyonlar spektruma ne katkı sağlar? Sonuç olarak, gaz fazında kaydedilen bir titreşim spektrumu oldukça dar bant genişliğine sahip olup görüntü olarak yukarıdaki modele benzer.

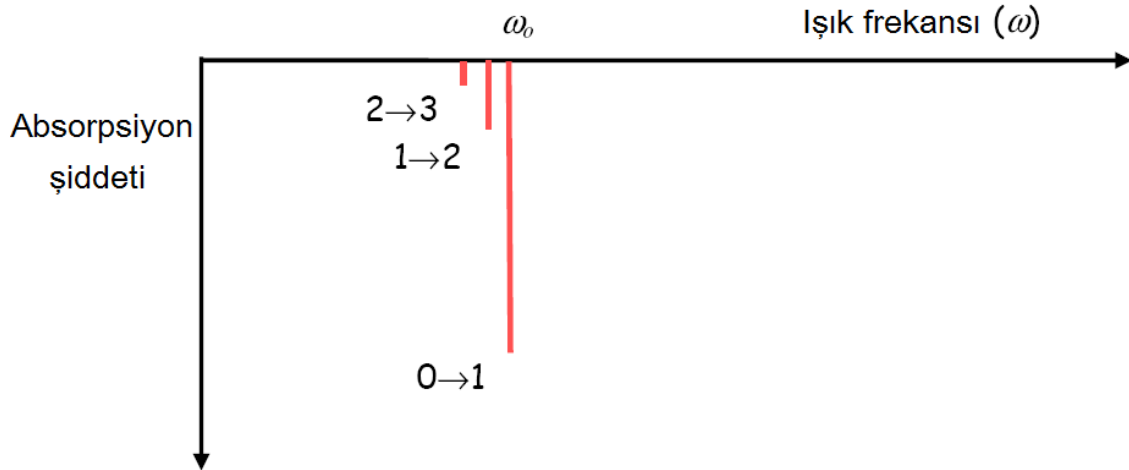
Harmonik olmama durumu

Gerçek spektrumun, modelden farklı olmasının bir diğer sebebi, PEY' in harmonik kabul edilmesi sadece bir modeldir. Yüksek doğruluk gerekirse, potansiyel ifadesinde harmonik olmayan terimleri de dikkate almalıyız:

$$V(R) = \frac{1}{2}m\omega_o^2(R - R_0)^2 + \frac{1}{6}\alpha(R - R_0)^3 + \frac{1}{24}\beta(R - R_0)^4 + \dots$$

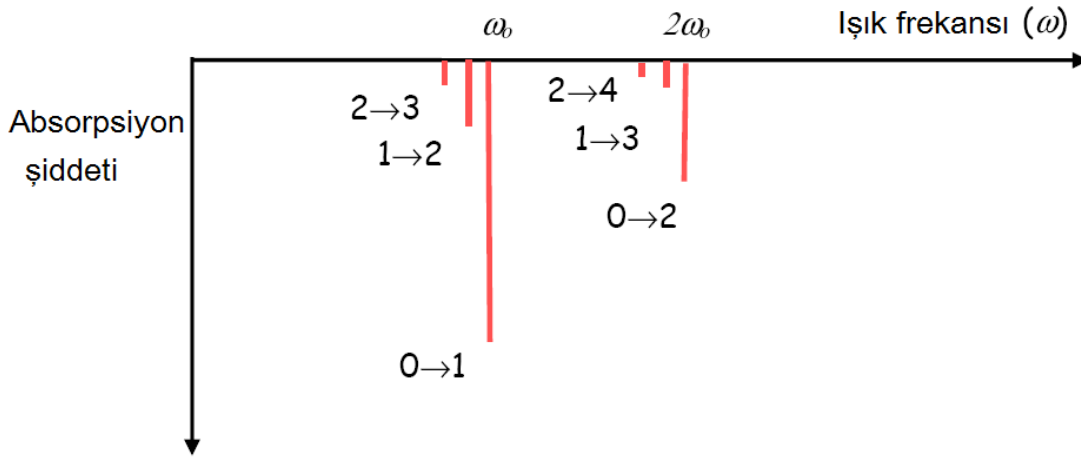
Harmonik olmayan terimlerin, spektrum üzerine nicel etkileri, varyasyon hesaplamaları yapılarak incelenebilir. Ancak, basitçe göstermek gerekirse, harmonik olmayan terimlerin titreşim spektrumları üzerine etkisi iki yolla olur:

- 1) *Bitişik hâller arasındaki enerji farkı, uzun süre sabit kalmaz.* Açıkça, harmonik olmayan Hamiltonyenin özdeğerleri, eşit aralıklı değildir-bu Harmonik sistemin özel bir durumudur. Böylece, gerçek bir sistemde, $0 \rightarrow 1$ geçişinin, $1 \rightarrow 2$ geçişine göre biraz farklı bir frekansta, $1 \rightarrow 2$ geçişinin, $2 \rightarrow 3$ geçişine göre farklı frekansta olmasını beklemeliyiz. Bu geçişler, harmonik potansiyelin yapabileceğinden daha uzun mesafelerde sonsuza ırsamadan ziyade, moleküler PEY'in sabit kopma sınırlarına doğru yönelmesine yol açar. Dolayısıyla genel olarak, daha yüksek geçişlerin, moleküler PEY şeklinden dolayı daha düşük enerjiye (yani kırmızıya kayma) sahip olduğunu söyleyebiliriz. Böylece yüksek özduyumlar, enerji bakımından, karşılık gelen harmonik potansiyeldeki özduyumlardan daha düşüktür. Bu bilgiyi kullanarak tekli, harmonik olmayan osilatördeki spektrum görüntüsünün aşağıdaki gibi olacağını tahmin edebiliriz:



Burada, $1 \rightarrow 2$ geçişinin hızı, $0 \rightarrow 1$ geçişinin yaklaşık iki katı iken (çünkü geçiş dipolü iki kat daha büyük) şiddet; (dolmuş hâlinin olasılığı) \times ($i \rightarrow s$ geçişinin hızı) olduğundan $0 \rightarrow 1$ geçişinin şiddeti daha büyüktür ve oda sıcaklığında sistem, zamanının büyük bir kısmını temel titreşim düzeyinde geçirir. Spektrumdaki $1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 3, \dots$ çizgileri **sıcak bantlar** olarak adlandırılır.

2) Harmonik olmama, $\Delta n = \pm 1$ seçicilik kuralını rahatlatır. Elde ettiğimiz bu kural, $\hat{a}^+ \phi_i \propto \phi_{i+1}$ gerçeğine dayanır. Bu, sadece Harmonik osilatör hâlleri için doğrudur. Harmonik olmayan öz durumlar, $\hat{a}^+ \phi_i \propto \phi_{i+1} + \epsilon_1 \phi_{i+2} + \dots$. Böylece, $\Delta n = \pm 2, \pm 3$ geçişleri, harmonik olmayan osilatörler için yasak olacaktır. Bunun yerine, harmonik olmama durumunda bazı geçişler, *hafifçe izinli* olacaktır. Bu gözlemleri, yukarıda 1).deki sonuçlarla birleştirdiğimizde, harmonik olmayan bir osilatörün IR spektrumunun ne şekilde görüneceğine ilişkin daha karmaşık bir spektrum elde ederiz:



$2\omega_0$ civarındaki pikler, **üst tonlardır**. Bu arada, ω_0 civarındaki pikler de **ana piklerdir**.

Çok atomlu moleküller

Yukarıdaki modellerle genel bir IR spektrumu arasındaki son fark şu: biz kimyada daima diatomik moleküllerle ilgilenmiyoruz. Çok atomlu bir molekülde, potansiyelin hâlâ Harmonik potansiyel olduğunu düşünüyoruz, ancak çok boyutlu olmak zorundadır- bazı değişkenlere (R_1, R_2, R_3, \dots) bağlı olmalıdır. Bunlar dikkate alındığında en genel Harmonik potansiyel aşağıdaki gibi olur:

$$V(R_1, R_2, R_3, \dots) = \frac{1}{2}k_{11}R_1^2 + \frac{1}{2}k_{12}R_1R_2 + \frac{1}{2}k_{13}R_1R_3 + \dots + \frac{1}{2}k_{21}R_2R_1 + \frac{1}{2}k_{22}R_2^2 + \frac{1}{2}k_{23}R_2R_3 + \dots \\ + \frac{1}{2}k_{31}R_3R_1 + \frac{1}{2}k_{32}R_3R_2 + \frac{1}{2}k_{33}R_3^2 + \dots$$

Burada R_1 ve R_2 çapraz terimlerin farklı titreşimlerle eşleştiğini belirtmemiz önemlidir. İlk bakışta, bu Hamiltonyeni çözemeyiz gibi görünüyor; çözmeyi bildiğimiz çok boyutlu Harmonik potansiyel, sadece ayrılabilir olanıdır:

$$\tilde{V}(R_1, R_2, R_3, \dots) = \frac{1}{2}k_{11}R_1^2 + \frac{1}{2}k_{22}R_2^2 + \frac{1}{2}k_{33}R_3^2 + \dots$$

Harmonik potansiyel bu formda olsaydı, özdeğerleri, 1B özdeğerlerin çarpımı şeklinde yazabilir ve enerjileri, 1B özenerjilerin toplamı şeklinde bulabilirdik. Sonuçlarına göre, koordinatları değiştirmekle, diyagonal dışı çapraz terimlerin (ilk potansiyel gibi) yer aldığı ikinci dereceden bir sistemden çapraz terimin yer almadığı (ikinci terim) bir sisteme doğru ilerleyebiliriz. Hamiltonyen tarafından ayrılan bu yeni koordinatlar, **normal modlar** olarak adlandırılır ve çok atomlu bir molekül, **bağımsız 1B osilatörlerinin** toplamına indirgememizi sağlar.

İlk olarak, V ' nin matris gösteriminde kısa yazılışını belirtelim [Not: Aşağıdaki gösterime aşina değilseniz, Matris Özdeğer Problemleri ile ilgili McQuarrie' nin katkısına başvurmanız yararlı olabilir]:

$$V(R_1, R_2, R_3, \dots) = \frac{1}{2} \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}$$

$$\mathbf{R} \equiv \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \mathbf{K} \equiv \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} & \dots \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} & \dots \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Hamiltonyen artık aşağıdaki gibi yazılır:

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{P}_i^2}{2\mu_i} + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{R}}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \hat{\mathbf{R}}$$

İlk dönüşümün, **kütle-ağırlık koordinatları** hâlinde ve Hamiltonyeni yazdığımız formda yapılması uygundur:

$$\hat{p}_i \equiv \frac{\hat{P}_i}{\sqrt{\mu_i}} \quad \hat{x}_i \equiv \sqrt{\mu_i} \hat{R}_i \quad \tilde{k}_{ij} \equiv \frac{k_{ij}}{\sqrt{\mu_i \mu_j}}$$

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2} + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{x}}^T \cdot \tilde{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{x}}$$

Yukarıdaki kinetik enerjiden açıkça görüldüğü gibi, bu koordinatlarda her serbestlik derecesi aynı indirgenmiş kütleye sahiptir.

Şimdi normal mod dönüşümünü yapalım. Aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$\hat{\mathbf{x}}^T \cdot \tilde{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{y}}^T \cdot \mathbf{K}' \cdot \mathbf{y} \quad \mathbf{K}' = \begin{pmatrix} k_{11}' & 0 & 0 & \dots \\ 0 & k_{22}' & 0 & \dots \\ 0 & 0 & k_{33}' & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

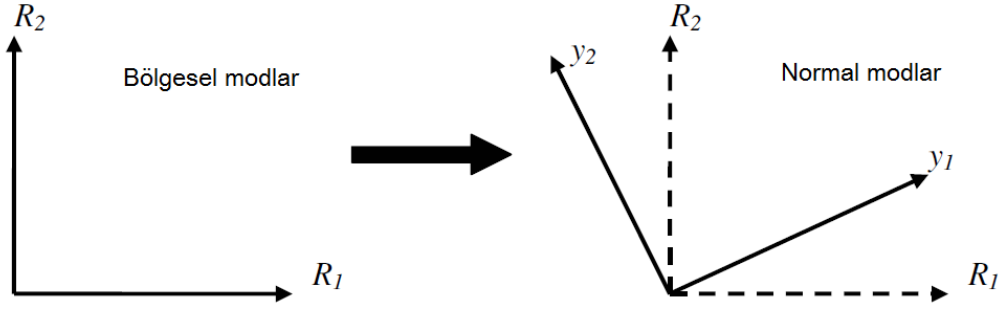
Ayrıca, \mathbf{x}' ten \mathbf{y}' ye dönüşümü sağlayan bir \mathbf{U} matrisi olduğunu varsayalım.

$$\mathbf{y} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{x} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{y}^T = \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{U}^T$$

İkinci eşitlikte, bir çarpımın devinimi, tersten sıra ile devinim yapan parametrelerin çarpımıdır şeklindeki genel kuralı hatırlayalım. Bu iki eşitlik birleştirildiğinde:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}^T \cdot \tilde{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{x}} &= \hat{\mathbf{y}}^T \cdot \mathbf{K}' \cdot \mathbf{y} = \hat{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{K}' \cdot \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{x}} \\ \Rightarrow \tilde{\mathbf{K}} &= \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{K}' \cdot \mathbf{U} \end{aligned} \quad \text{elde edilir.}$$

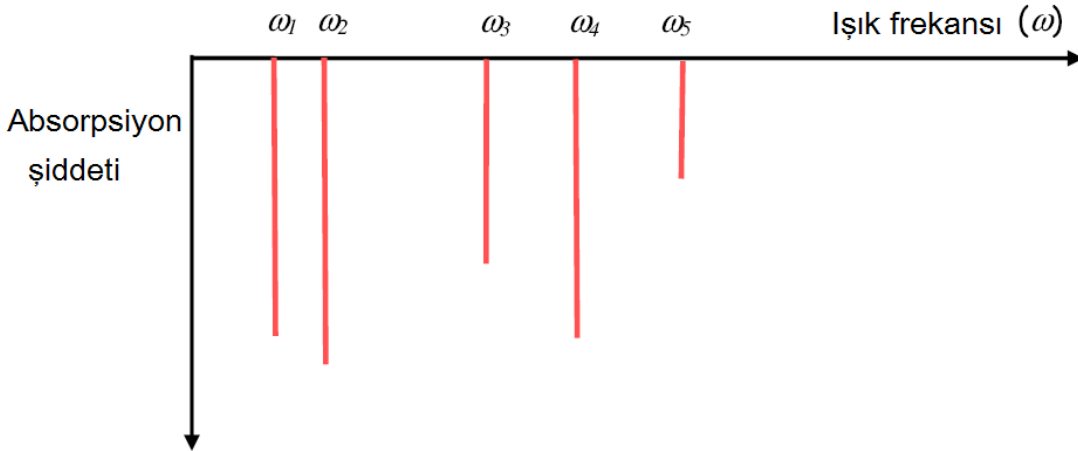
Son eşitlik, lineer cebirde karşılaşılan en genel problemdir: Yapılacak iş, belirli bir matris ($\tilde{\mathbf{K}}$) alınır ve **diyagonal forma** yerleştirilir (sağ tarafta). $\tilde{\mathbf{K}}$ gibi bir simetrik matriste bu problemin çözümünü gayet iyi biliyoruz: \mathbf{K}' diyagonal girişleri, $\tilde{\mathbf{K}}$ ' nın özdeğerleri ve dönüştürme matrisindeki (\mathbf{U}) sütunlar, $\tilde{\mathbf{K}}$ ' nın özvektörleridir. Dönüştürülmüş değişkenler (\mathbf{y}), **normal modlar** olarak tanımlanır. Bu modlar, başlangıç durumundaki R_1, R_2, R_3, \dots , bölgesel serbestlik derecelerinin doğrusal kombinasyonlarıdır. Böylece, başlangıç hareketleri, açıkça bir bağın bölgesel gerilmesine veya bir açının bükülmesine karşılık gelirken normal modlar, genelde farklı moleküler hareketlerin karmaşık bir karışımı olmaktadır. Bunu, serbestlik derecesi iki olan basit bir durum için hayal edelim. R_1, R_2 bölgesel modlar, bir düzlemdeki iki ortogonal eksen gibi düşünülebilir. Bu arada, y_1, y_2 normal modlar da ortogonal eksenlerdir ancak orijinal duruma göre çevrilmiştir:



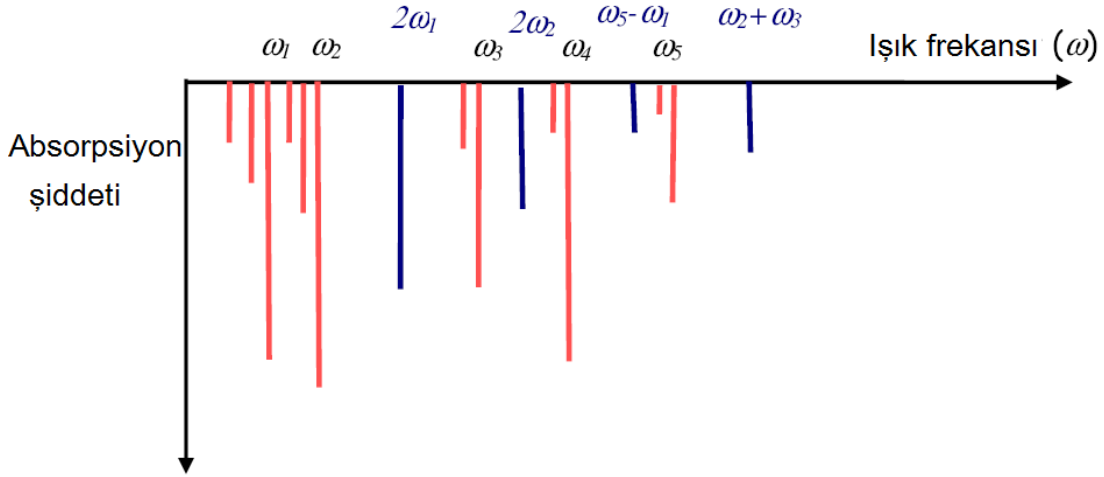
Bölgesel modlar, birbiriyle etkileşim içerisindedir: Bölgesel gerilmeler, bölgesel bükülmelerle, v.b. eşleşir. Sonuç olarak, **Hamiltonyen, R_1 , R_2 bölgesel nodları bakımından ayırlamaz.** Ancak, üzerinde oynanarak, Hamiltonyen, normal modlar cinsinden yazıldığıında ayrılabilir:

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2} + \frac{1}{2} k'_i \hat{y}_i^2$$

k_{ii} ' özdeğerleri, belirli bir y_i doğrultusunda PEY' in "sertliği" ni belirtir. **Yukarıdaki Hamiltonyen, başlangıçta kullandığımız Hamiltonyenle tamamen aynıdır.** Eşleşme terimleri, koordinatları değiştirmek suretiyle basitçe döndürülmüştür. Daha önce tartışıldığı gibi bu Hamiltonyenin spektrumlarını, birçok bağımsız osilatörün toplamı cinsinden hemen yorumlayabiliriz. Harmonik yaklaşımdaki çok atomlu bir molekül için her normal mod frekansında çizgiler görmeyi bekleyebiliriz:



Farklı osilatörlerin, farklı geçiş dipollerine sahip olacağını belirtelim. (Bariz nedenlerden dolayı titreşim spektroskopisinde, geçiş dipolünün karesi, çoğunlukla **osilatör gücü** olarak bilinir). Elbette biz harmonik olmama etkileriyle çok atomlu moleküle ait bu şekli birleştirdiğimizde, görünümünü aşağıdaki gibi olan daha genel bir spektrumu elde ederiz:



Bu spektrumda, moleküldeki her normal mod osilatörü için değişik sıcak bantlar ve üst tonların bulunmasını bekleriz. Üst tonlar daima çoklu kuantları içerirken, normal moddan kuant gelmesi gerekmez. Bu şekilde sadece $2\omega_1$ 'deki üst tonlar değil, aynı zamanda $\omega_2 + \omega_3$ ve $\omega_5 - \omega_1$ frekanslardaki **birleşim bantlarını** da bekleriz. Yukarıdaki şekil, tek bir molekülün IR spektrumunun nitel açıklaması olarak doğrudur. Spektrum çözümünde, heterojenlik, kullanmaya alışık olduğumuz karmaşık IR parmak izi bölgesinde, piklerin yayvanlaşması ve genişlemesine yol açar.

Yukarıdaki tartışmalardan açıkça görülüyor ki IR spektrumları, bir molekül hakkında bilgi hazinesiyle doludur: her normal modun sertliği, harmonik olmayan etkilerin derecesi, osilatörlerin algıladığı bölgesel çevrenin yapısı Elbette bu bilgileri özümsemek için, bir spektrum almak gerekir. Yani, sıcak bantlar, üst tonlardan ayrılmalı ve molekülün fiziksel hareketine göre normal modlarla (en azından nitel olarak) ilişkilendirilmelidir. Bu görev, başa çıkılması zor bir görevdir ve pek çok durumda kılavuz olarak bilgisayarla hesaplama kullanılmalıdır. Ancak görev yerine getirildiğinde görülür ki, incelenmekte olan her molekülün kendine özgü oldukça hassas bir parmak izi vardır.