

# Newsletter – FTIR 原理

## 1. IR 光譜

當分子中的原子間發生振動或轉動時，會吸收特定的能量，一般而言，分子轉動及振動所吸收的能量範圍在紅外線的範圍，即形成 IR 光譜。由於每一特定的分子振動或轉動時，均會有特定波長的吸收，因此可藉由 IR 光譜做為鑑定分子結構的工具。

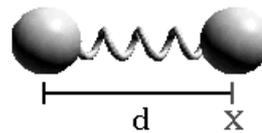
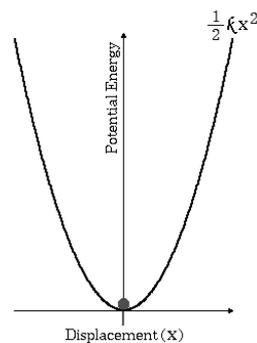
## 2. 分子振動理論

分子振動吸收能量的現象可以兩方面解釋：

### (1) Hook's Law



可將一雙原子分子的原子視為剛性體，兩者的平均分子量  $m$ ，兩原子間的鍵結視為彈性常數  $k$  的彈簧，其運動行為符合 Hook's Law。

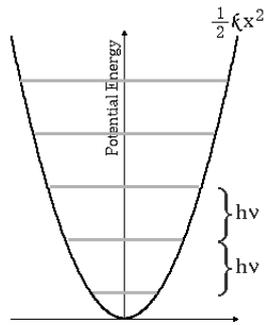


當其振動時，頻率與  $m$ 、 $k$  的關係如下：

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

### (2) Quantum Theory

將位能分為數個不連續能階，每個能階的能量差為  $h\nu$ ，振動即是在能階之間的躍遷，吸收之能量為  $h\nu$  的整數倍。



$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

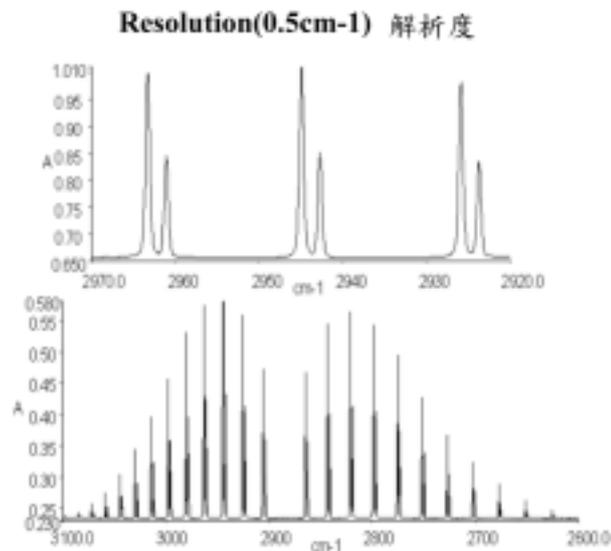
### 3. 分子振動模式

- (1) 剪式彎曲振動
- (2) 對稱伸縮振動
- (3) 非對稱伸縮振動

根據自由度的理論，線性分子具有  $3N-5$  個振動，非線性分子具有  $3N-6$  個振動， $N$  為分子內的原子數。每一個振動均會吸收某一特定波長的紅外光，因此，一個分子的 IR 吸收光譜具有多個波長吸收峰，但並不是所有的振動皆有 IR 吸收，必須是有偶極矩變化的振動，才有 IR 吸收光譜的產生。

### 4. 分子轉動

由於固體及液體分子間受到的束縛力較大，因此看不到轉動光譜的存在。而氣體分子則不受到束縛，因此可以看到 IR 轉動光譜。下圖為 HCl 氣體在  $0.5\text{cm}^{-1}$  解析度下的 IR 光譜圖。

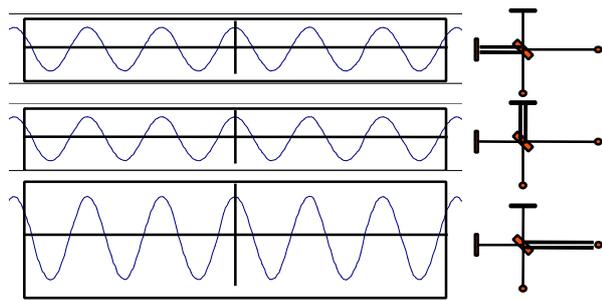


### 5. FTIR 的原理

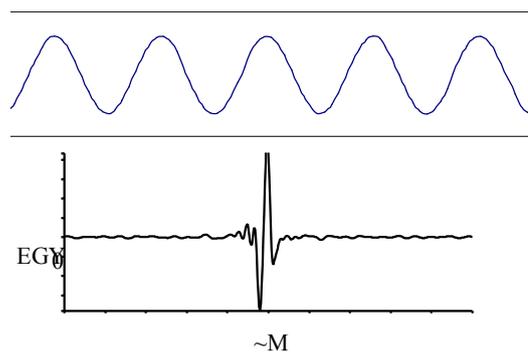
利用干涉儀的設計，使其產生干涉波，照射至樣品後得到干涉光譜，經傅利葉轉換之後，得到 FTIR 光譜。其優點在於提高了量測的速度、靈敏度且更準確，提高 FT-IR 的應用範圍，舉凡晶片、薄膜、液體及固體等各種樣品皆可測試，並且可擴充 TG/IR，GC/IR，FT-IR/Microscope 擴展其運用領域。

以下為干涉儀設計的原理：

### 建設性干涉訊號產生



### 干涉訊號產生



### 傅利葉轉換成 IR 光譜

