




儀器講解

-FTIR-

製作人：高辰綱 (10832017)
所屬實驗室：蔡敏郎老師實驗室(5140)



Fourier-transform infrared spectroscopy

傅立葉轉換紅外線光譜



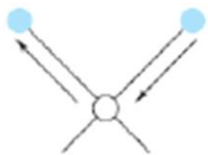
紅外線光譜 (infrared, IR)

Introduction: 測定樣品在不同頻率下的紅外線的吸收強度。最早由Herschel在1800年發現，而到了1940年，IR已成為鑑定有機化合物官能基的重要工具。紅外線是波長比可見光長而比微波短的電磁能，在IR的定性定量分析中較常使用波長0.8至2.5 μm 的近紅外線與2.5至15 μm 的中紅外線。紅外線光譜可經由頻率來測定，是因頻率直接正比於輻射能($E=h\nu$)，而頻率也常用波數來表示(波數為頻率的倒數，單位為 cm^{-1})。

Principle: 如果分子振動時，其電荷分布及相關之電荷偶極矩會發生變化，則分子能吸收紅外線。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。分子振動模式有剪式彎曲振動、對稱伸縮振動、非對稱伸縮振動等，此外，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。



Symmetric

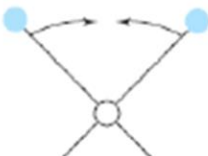


Asymmetric

(a) Stretching vibrations



In-plane rocking



In-plane scissoring



Out-of-plane wagging

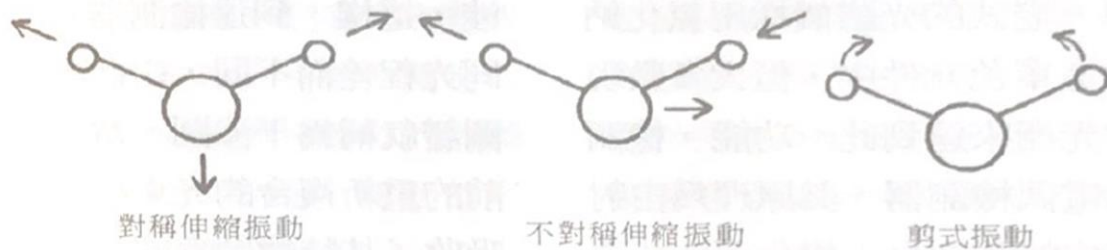


Out-of-plane twisting

(b) Bending vibrations

具有偶極矩的 分子振動類型

- ✓ 伸縮振動(Stretching vibration)
 1. 對稱(symmetrical)
 2. 非對稱(asymmetrical)
- ✓ 彎曲振動(Bending vibration)
 1. rocking
 2. scissoring
 3. wagging
 4. twisting



- 27.1 水分子的振動方式：對稱伸縮振動、不對稱伸縮振動和剪式振動的基本振動波數分別為 $3,652\text{ cm}^{-1}$ 、 $3,756\text{ cm}^{-1}$ 和 $1,596\text{ cm}^{-1}$ 。

傅立葉轉換(Fourier-transform, FT)

Introduction: 具有傅立葉轉換的紅外線光譜儀，其光源並不是以散射的形式而是全波長同步進入檢測器，再由傅立葉轉換的數學處理方式將測定結果轉換成典型的紅外線光譜。

Principle: 此種型態的儀器不採用單色器，而是用一個干涉儀，干涉儀在分裂紅外線的光束後，用反射鏡反射分裂後的光束使其重新複合，接著藉由移動反射鏡使光束的光程產生變化，因此光束重新複合後就會發生建設性干涉或破壞性干涉，如此到達檢測器的光束其輻射強度會因為光程差異而不同。

而樣品會處於檢測器之前先行接收到重新複合的光束，並因分子吸收特徵頻率的光，使光的能量產生變化，儀器便可測得吸收強度與光程差之間關係的干涉圖，再由傅立葉轉換轉化成吸光度與頻率之間關係的紅外線圖譜。由於電腦很快就能完成這種數字變換工作，所以傅立葉轉換光譜可有更大的信號雜訊比，分析速度也更快。

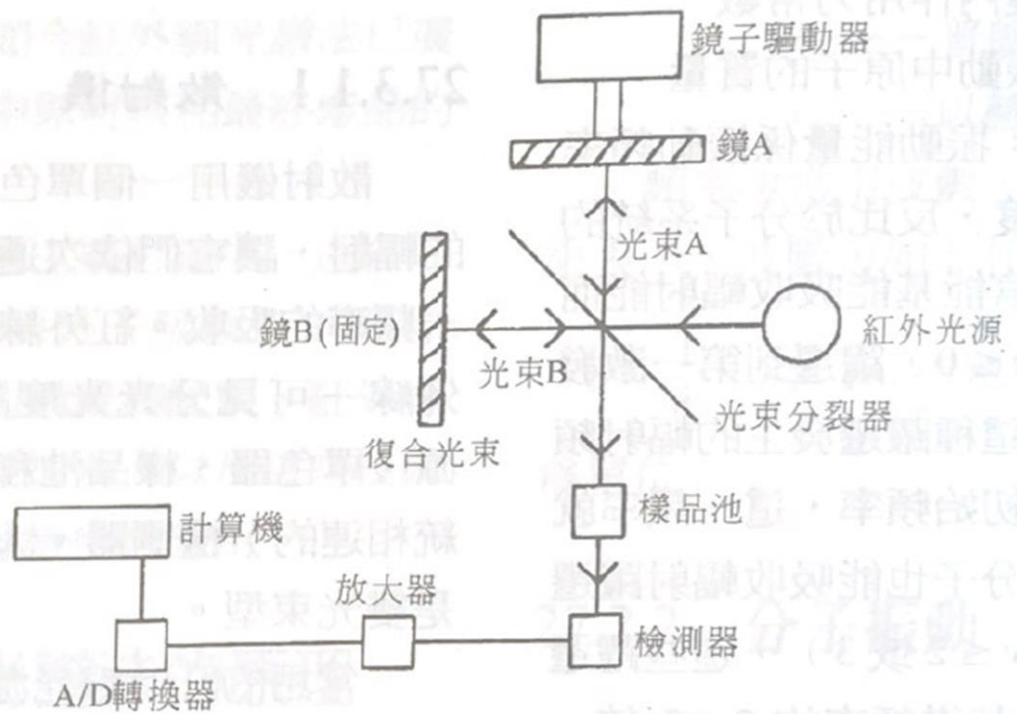
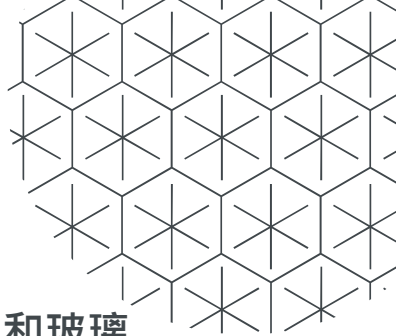
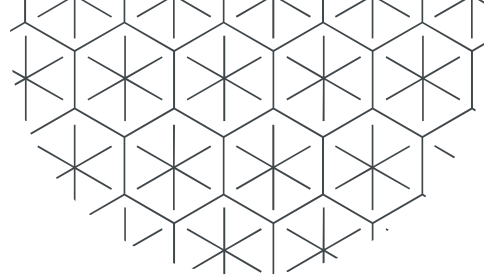


圖 27.2 在 FTIR 儀器中使用的干涉儀及相關的電子裝置示意圖。

樣品處理技術



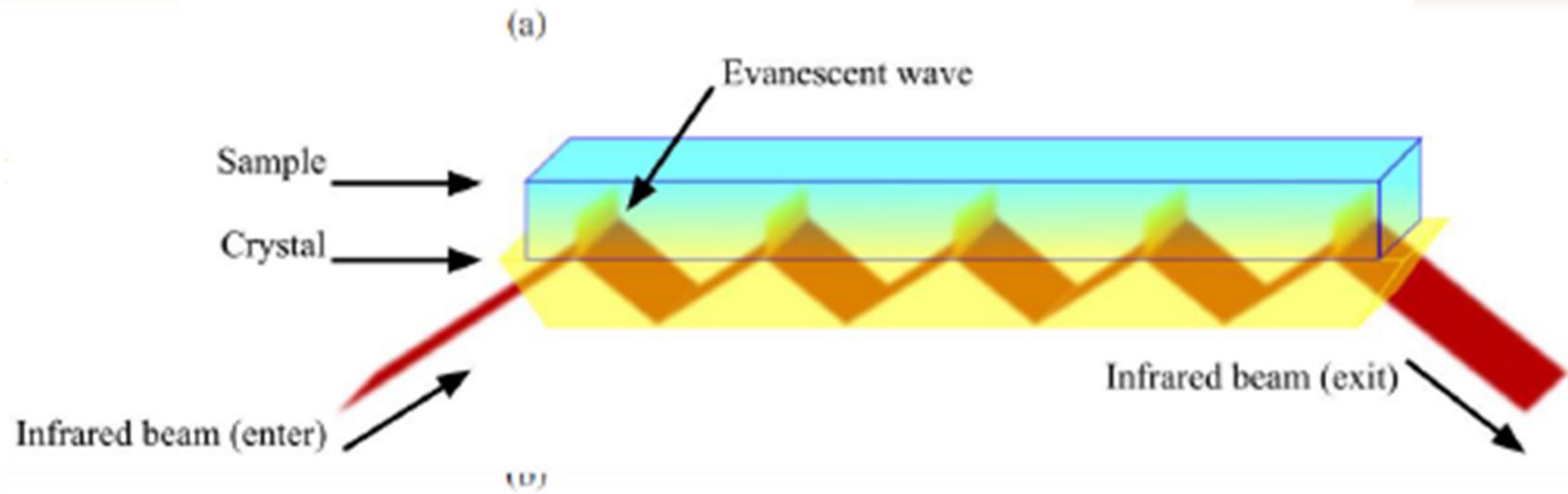
1. 液體樣品通常採用0.01至1.0 mm光程的液體樣品池，由於石英和玻璃在紅外光區有吸收，因此通常使用鹵化物和硫化物的鹽做為池窗。
2. 固體樣品可將少量樣品與溴化鉀攪拌研磨均勻後，在高壓下壓製成透明薄片，直接於紅外線光束下測量。
3. 也有將固體樣品粉碎後分散在Nujol礦物油中形成一種懸浮形式再進行測定。
4. 固體樣品也可以用半衰減全反射(ATR)來測得光譜。

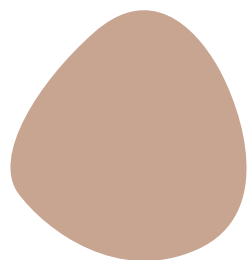
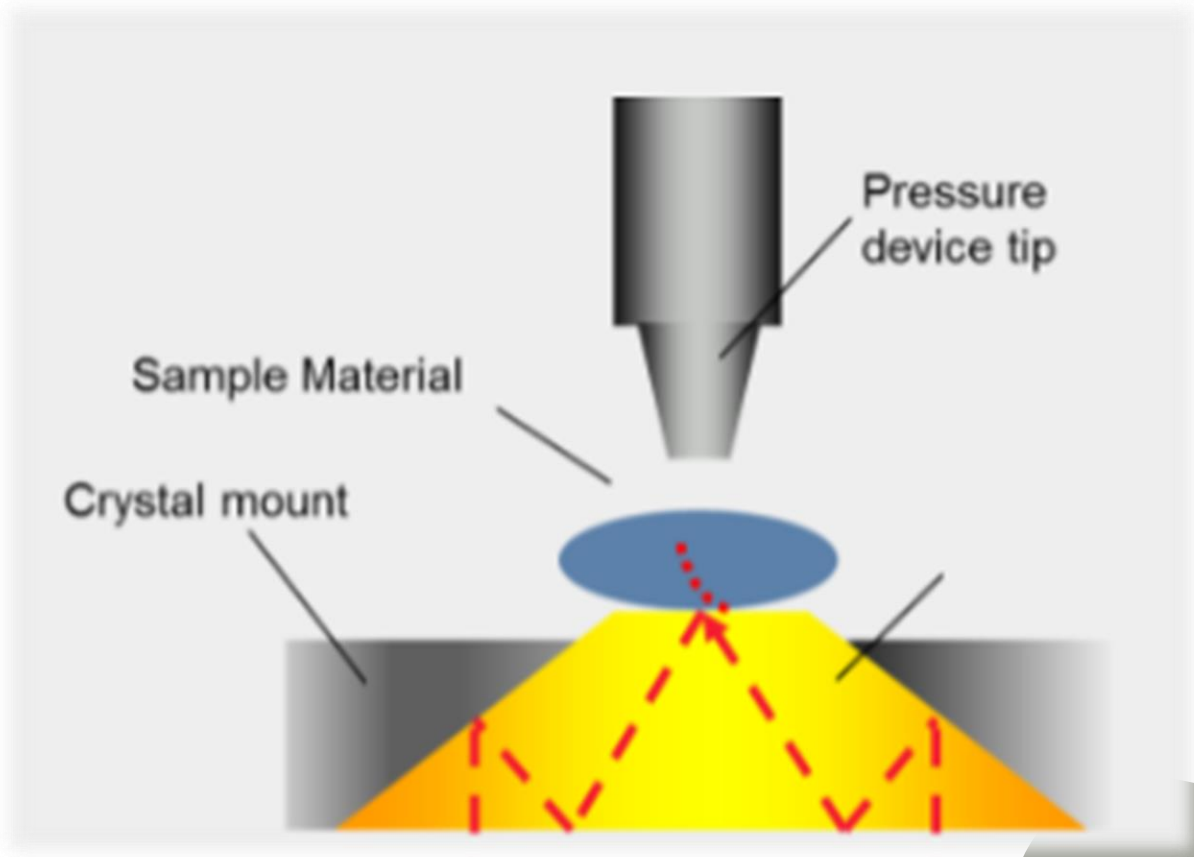


半衰減全反射(Attenuated total reflectance, ATR)

測定的是與紅外透射晶體接觸的樣品，其表面反射的能量總值。光在透射介質發生反射前，會透射進樣品一小段距離，於是反射光強度在樣品有吸收的波長下就會減小，從而得到吸收光譜。







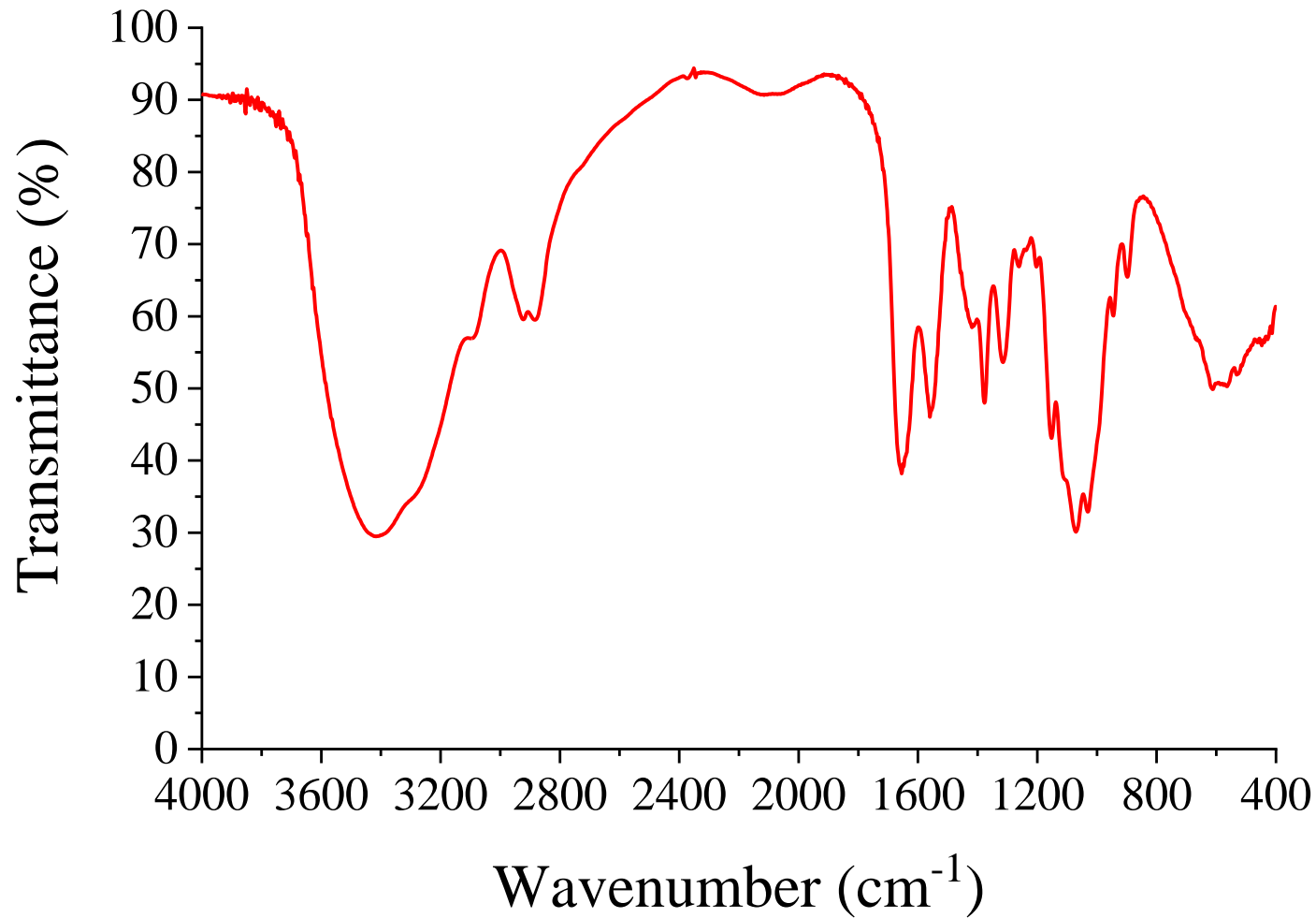
ATR屬於反射式FTIR的一種，是目前樣品處理最簡單的量測方式，最初的開發是為了對材料進行表面分析，常見的透射晶體有ZnSe(硒化鋅)、Ge(鍺)與Diamond(鑽石)。

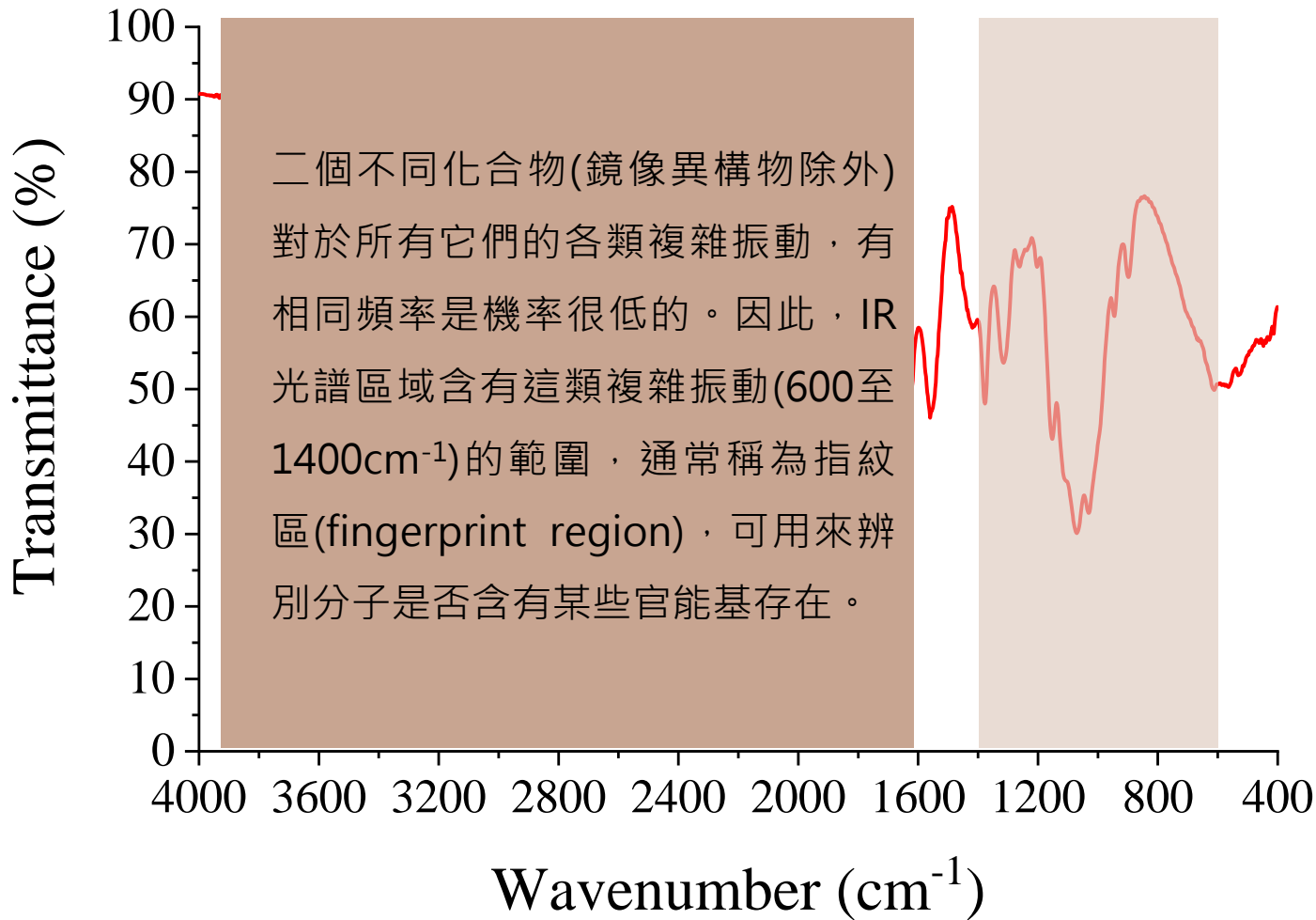
| 常見晶體 | 最低波段 (cm ⁻¹) | 折射率 | 入射深度 (微米) | 用途 |
|---------|--------------------------|-----|-----------|--------------------------------|
| ZnSe | 520 | 2.4 | 2.01 | 最一般的使用範圍，不耐酸鹼，硬度也不佳。 |
| Ge | 575 | 4 | 0.66 | 適用大多數樣品，特別是對IR光吸收的樣品，例如碳黑或是橡膠。 |
| Diamond | 575 | 2.4 | 2.01 | 適用於強酸強鹼或硬度高的樣品。 |

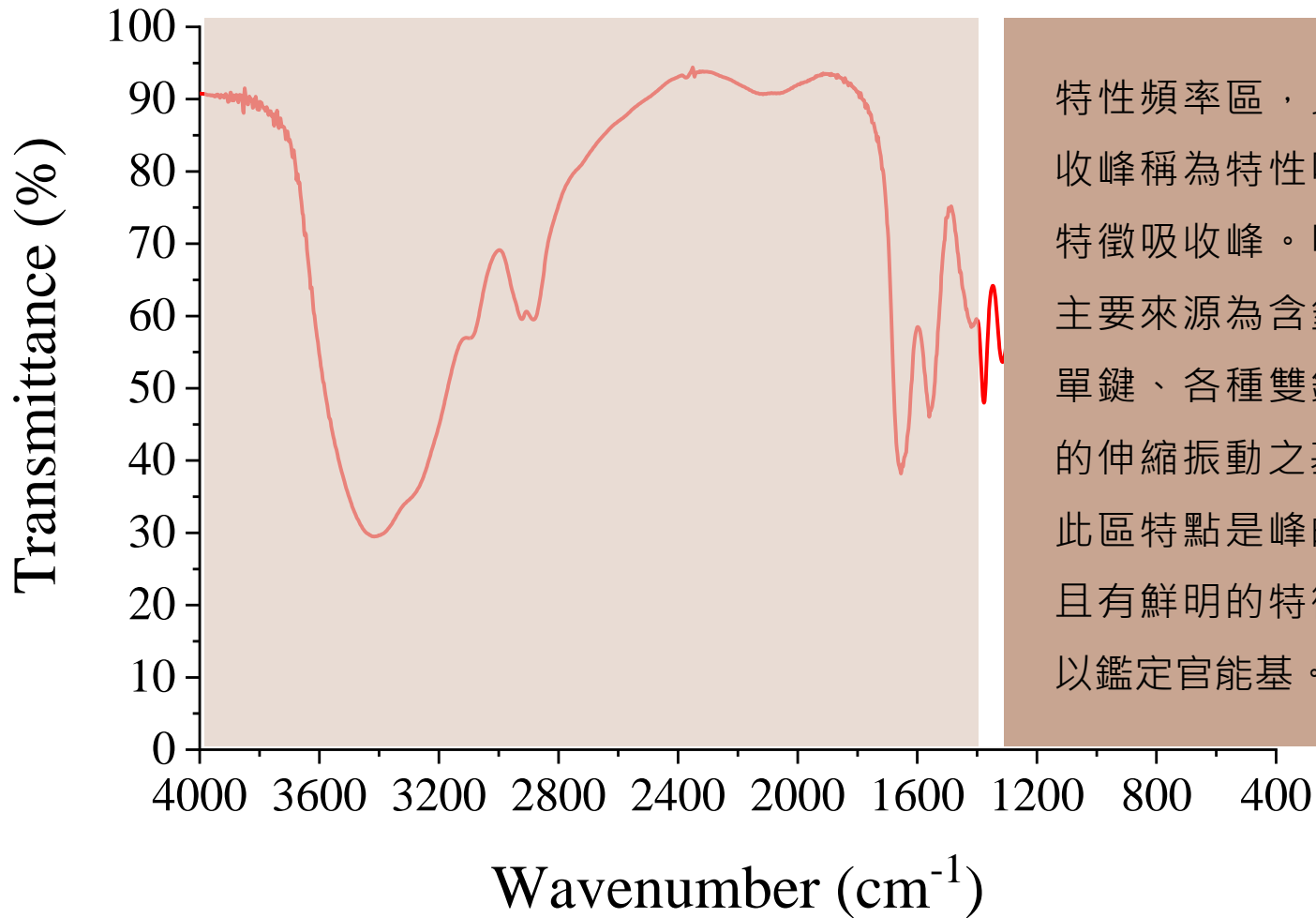
傅立葉轉換紅外線光譜儀 Nicolet iS5

1. 測量範圍：中紅外線。
2. 雙層密閉效果抵抗台灣潮濕環境。
3. 上開式配件更換設計，可搭配第三方配件，光譜收集更靈活。





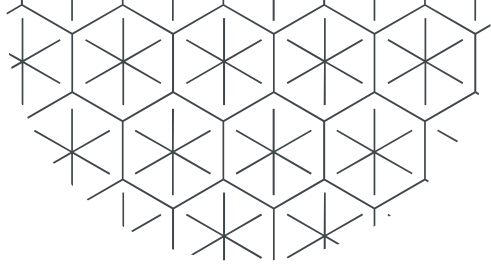




特性頻率區，此區的吸收峰稱為特性吸收峰或特徵吸收峰。吸收峰的主要來源為含氫原子的單鍵、各種雙鍵、參鍵的伸縮振動之基頻率峰。此區特點是峰的數目少且有鮮明的特徵，可用以鑑定官能基。

表 27.1 各種有機官能基的中紅外線吸收

| 官能基 | 吸收特性 | 波數 (cm ⁻¹) |
|-------|--|---------------------------|
| 烷烴 | —CH 伸展和彎曲 | 3,000~2,800 |
| | —CH ₂ 和 —CH ₃ 彎曲 | 1,470~1,420 和 1,380~1,340 |
| 烯烴 | 烯烴的 —CH 伸展 | 3,100~3,000 |
| 炔烴 | 炔烴的 —CH 伸展 | 3,300 |
| 芳香族環烴 | 芳香族的 —CH 伸展 | 3,100~3,000 |
| | —C = C— 伸展 | 1,600 |
| 醇 | —OH 伸展 | 3,600~3,200 |
| | —OH 彎曲 | 1,500~1,300 |
| | C—O 伸展 | 1,220~1,000 |
| 醚 | C—O 不對稱伸展 | 1,220~1,000 |
| 胺 | 伯胺和仲胺 —NH 伸展 | 3,500~3,300 |
| 醛和酮 | —C = O 伸展 | 1,735~1,700 |
| | —CH (雙峰) | 2,850~2,700 |
| 羧酸 | —C = O 伸展 | 1,740~1,720 |
| 醯胺 | —C = O 伸展 | 1,670~1,640 |
| | —NH 伸展 | 3,500~3,100 |
| | —NH 彎曲 | 1,640~1,550 |



**Thank for your
listening!**

參考資料

1. 李敏雄。2015。食品分析
2. 方銘志老師。儀器分析課程講義
3. 利泓科技 提供解決方案的專家：前處理設備、分析儀器、合成與製程設備
(rightek.com.tw)
4. 傅立葉轉換紅外線光譜儀 (FTIR)-跨維綠能材料中心 (ncku.edu.tw)