

적외선 분광법의 원리

탄소•융복합기술개발팀

What is the FI-IR

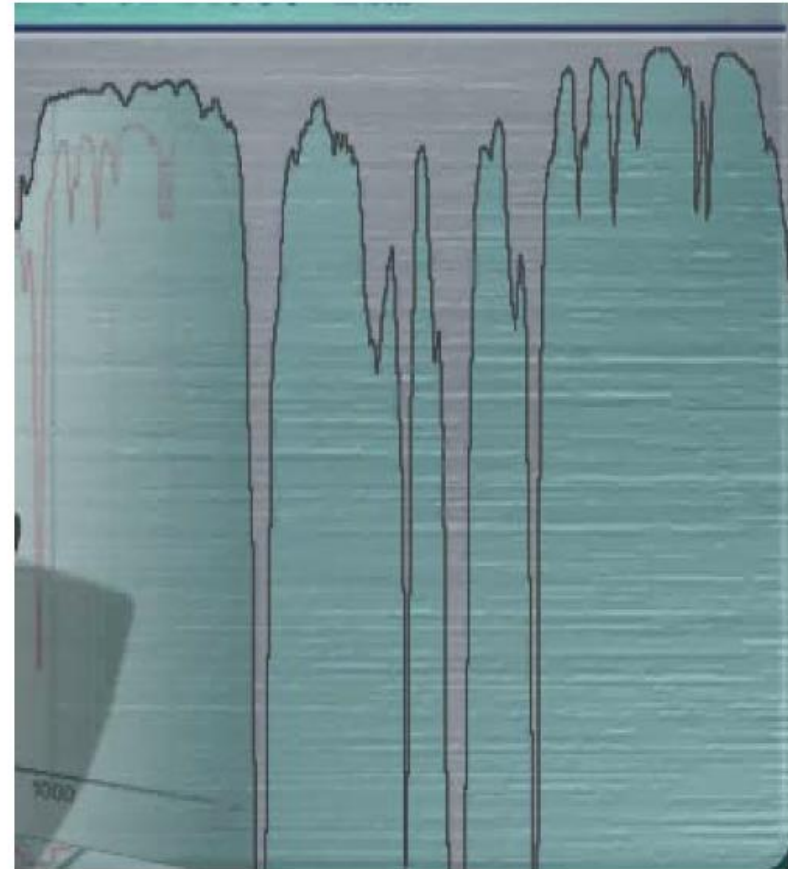
FT-IR Spectrometer

Fourier Transform Infrared Spectrometer

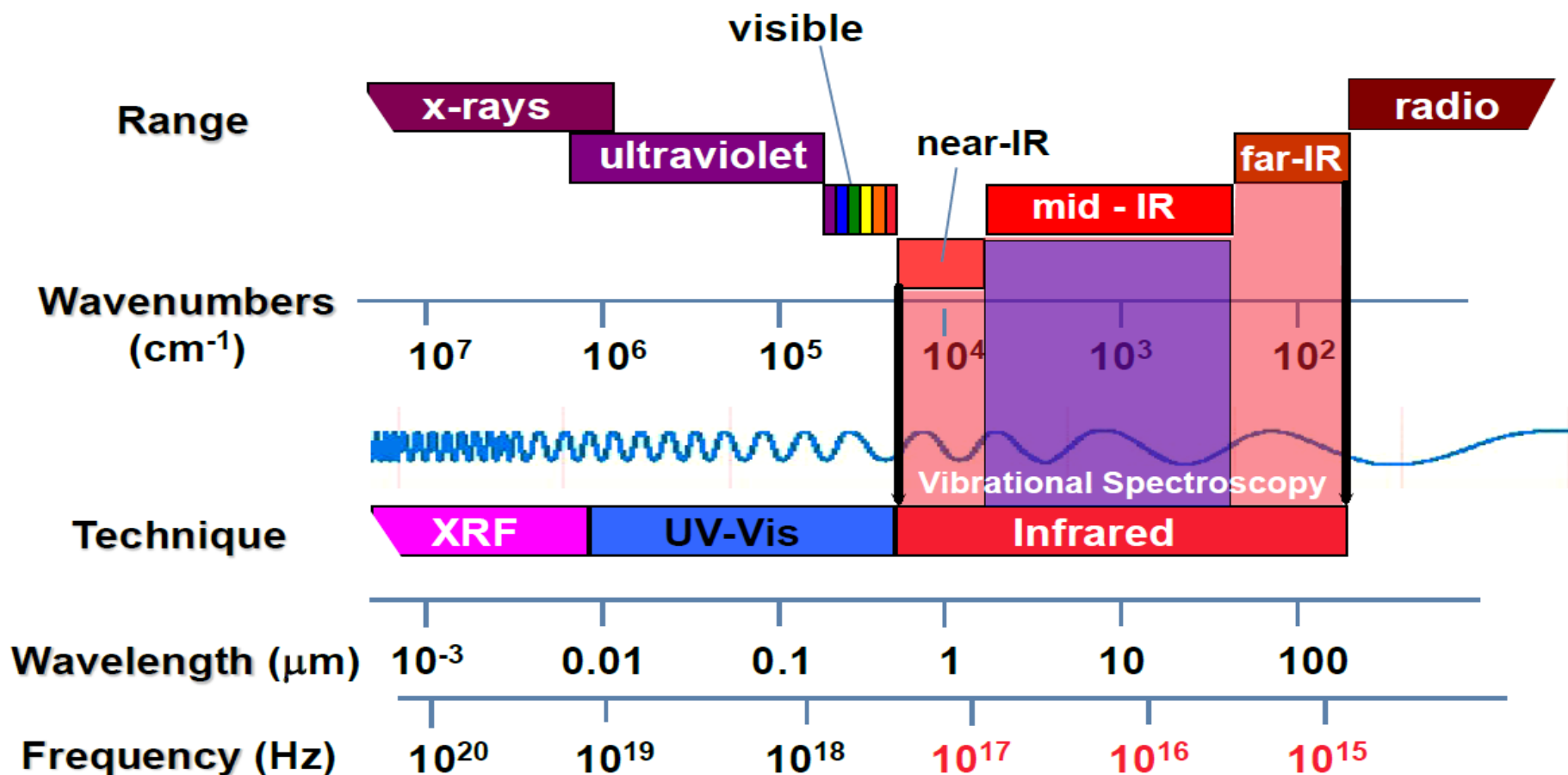
푸리에 변환 적외선 분광광도계

Use of FT-IR

- Qualitative Analysis 정성분석
- Quantitative Analysis 정량분석
- Kinetics 반응속도 / 반응정도 확인
- Organic, Inorganic, Polymer, Gas
유기물, 무기물, 고분자, 기체시료



Vibrational Spectroscopy



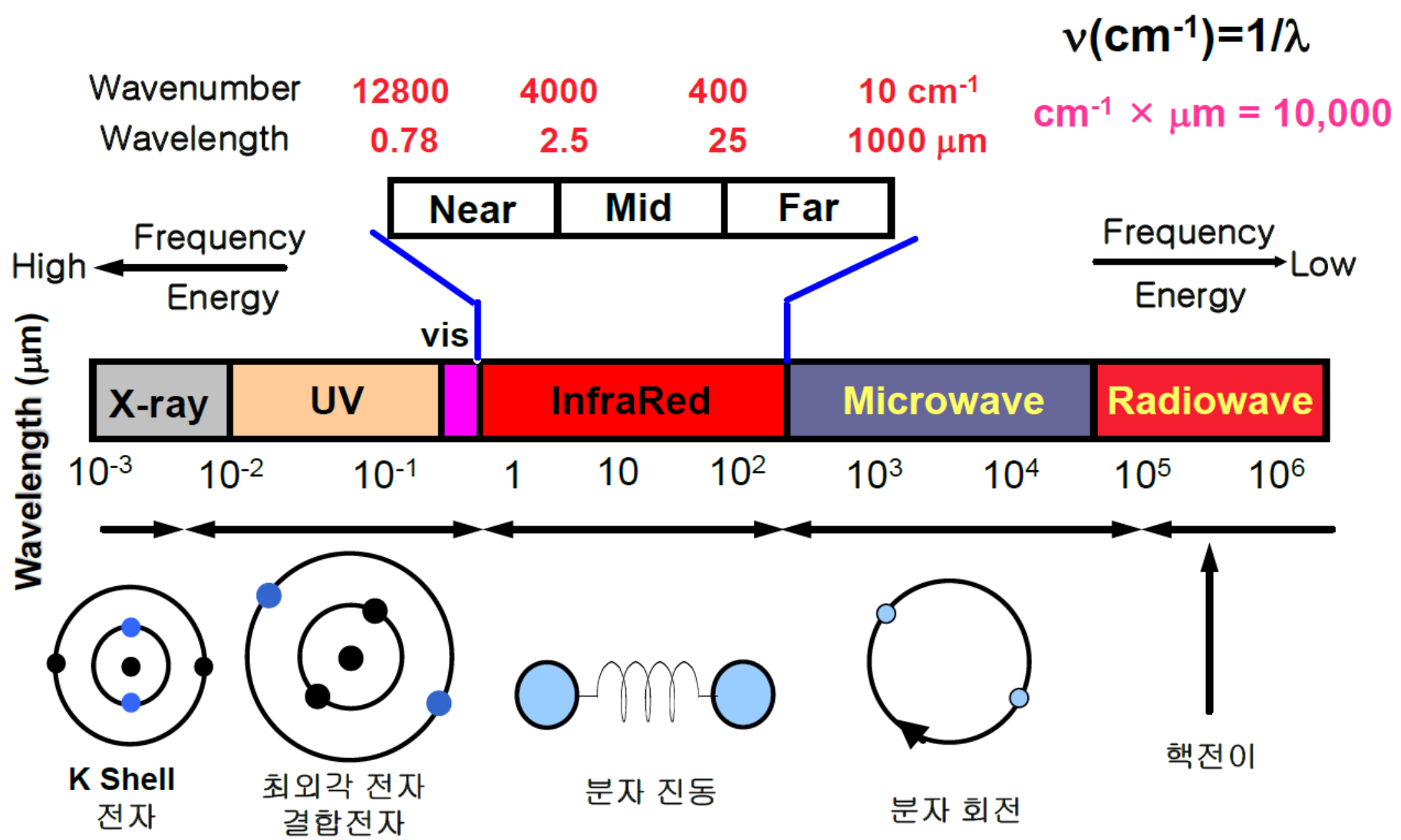
$$E = h\nu = c / \lambda,$$

$$\nu(\text{Hz}) = c(\text{ms}^{-1}) / \lambda(\text{m}),$$

$$c = \nu\lambda$$

$$\nu(\text{cm}^{-1}) = 1/\lambda$$

Electromagnetic Spectrum



기초이론

적외선 분광법 기본 원리 → 분자의 진동

IR을 쏘이면, 진동운동을 일으키는 데 필요한 고유한 진동 주파수(vibrational frequency) 빛을 흡수 → 이 에너지에 상응하는 특성적인 적외선스펙트럼 표시

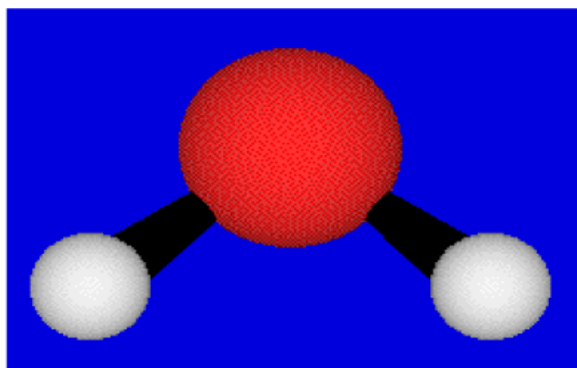
분자 운동의 진동 방식 (vibrational mode)

* 신축 진동 (stretching vibration)

: 원자들 사이의 결합 길이 변화

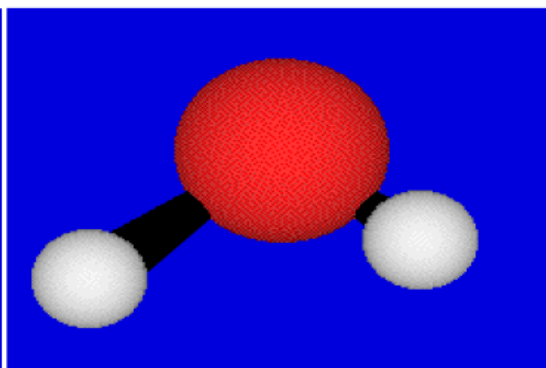
* 굽힘 진동 (bending vibration)

: 원래의 결합축에 대하여 원자들의 위치 변화
즉, 원자들 사이의 결합각 변화



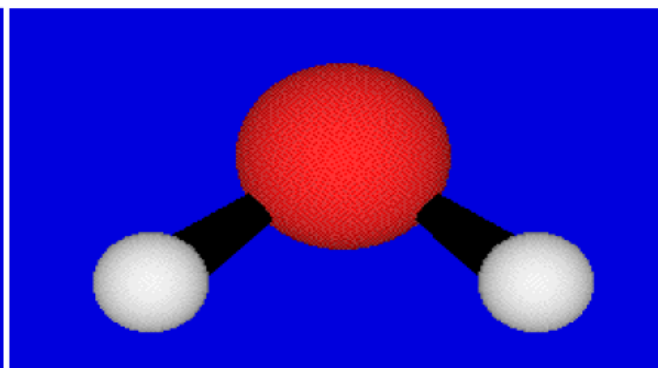
Symmetrical stretching

대칭 신축진동



Asymmetrical stretching

비대칭 신축진동



Scissoring (bending)

굽힘진동



신축 진동 에너지 변화

분자의 신축 운동을 조화 진동자
(harmony oscillator)로 가정

$$E_{vib} = (V + \frac{1}{2})h\nu$$

여기서, V : 진동양자수
(vibrational quantum No.)

ν : 주파수

h : Plank 상수



신축 진동에서 주파수 의미

고정된 벽의 스프링에 질량 m 인 공이 매달려 있을 때
늘어났다 줄어들 때의 주파수

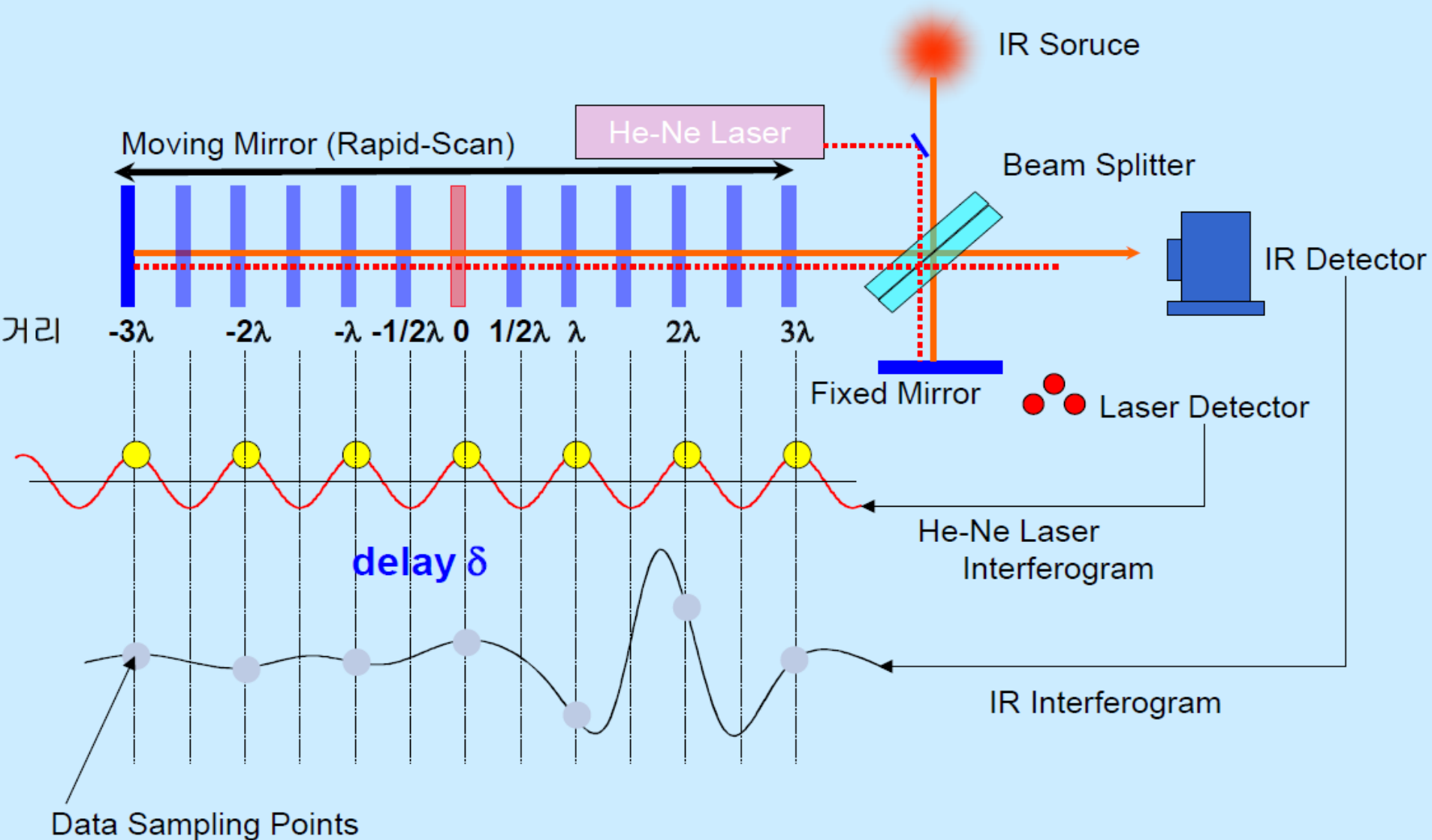
$$< \text{Hook's law} > \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

다시, 파수($\bar{\nu}$)로 나타내면

$$\bar{\nu}(\text{cm}^{-1}) = \frac{1}{\lambda(\text{cm})} = \frac{\nu}{c} \quad \longrightarrow \quad \bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

여기서, k : 스프링의 힘의 상수 (force constant, dyne/cm)
 m : 공의 질량

Data Sampling in Michelson Interferometer



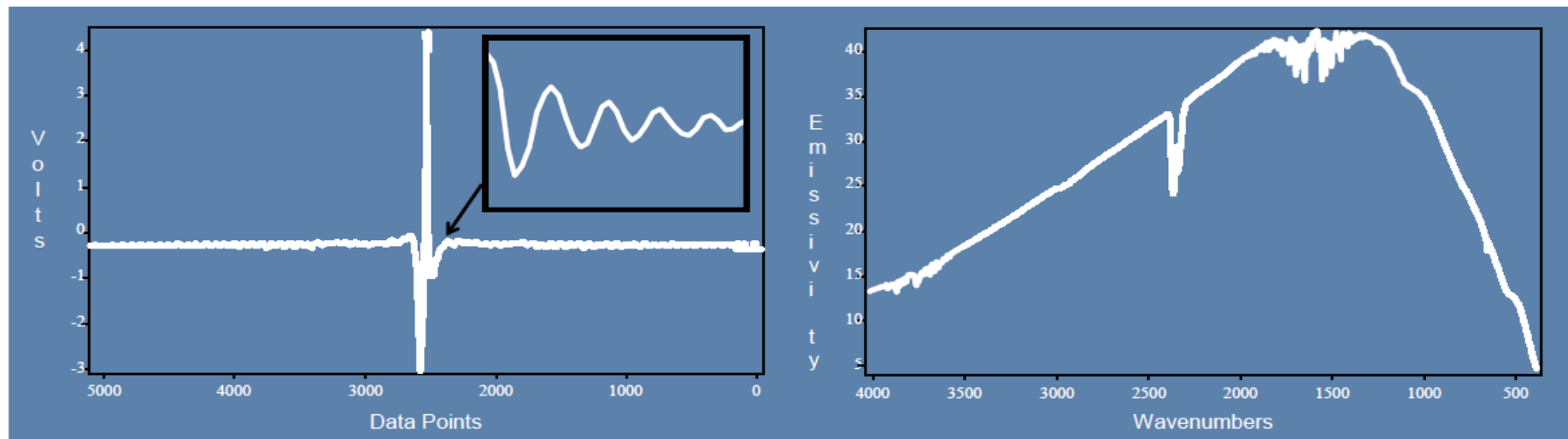
Fast Fourier Transformation 빠른 푸리에 변환

Interferogram

FFT

스펙트럼

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(\delta) \cos 2\pi\nu\delta d\delta, \delta \text{ 모든 실수}$$



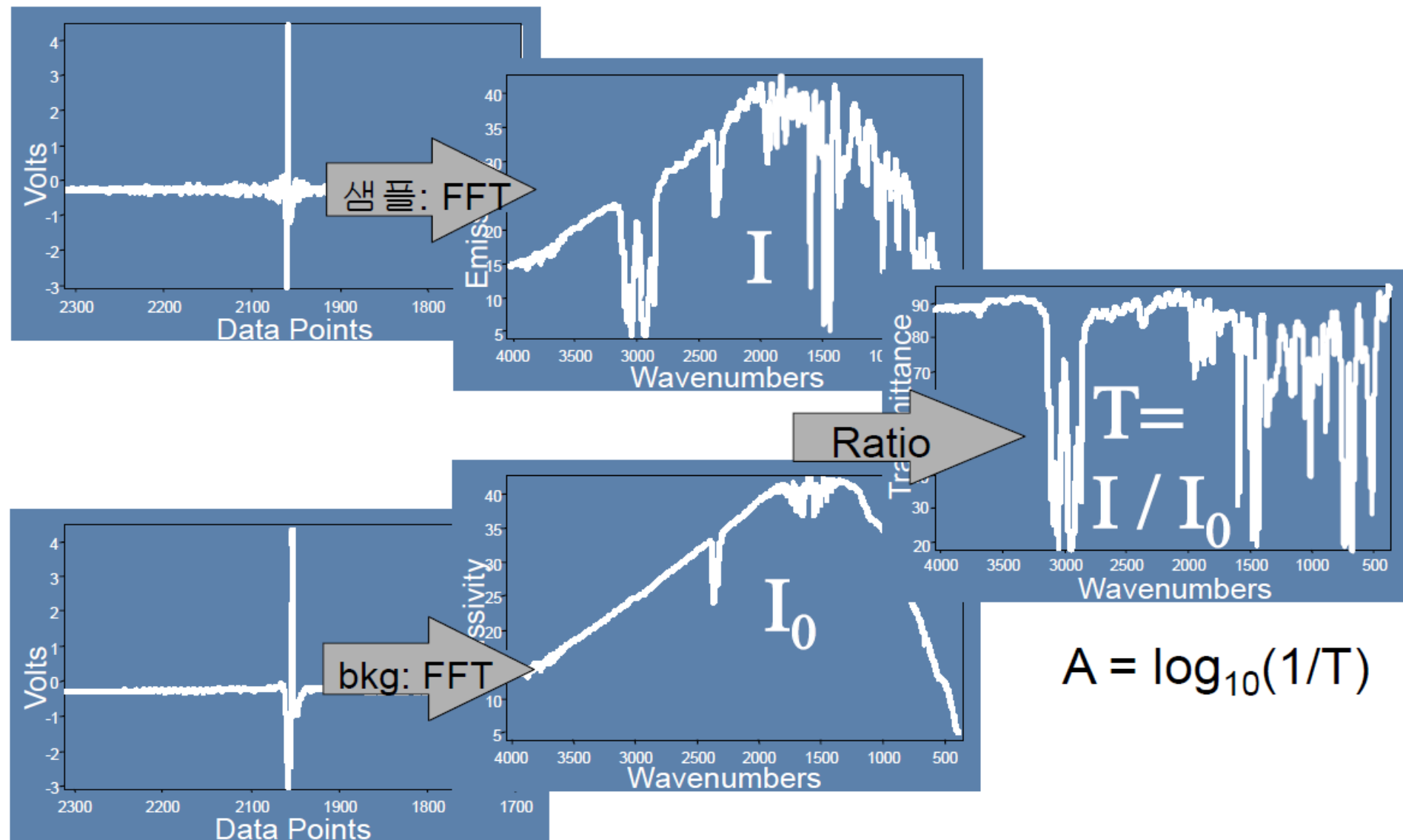
Interferogram변조된 복사선: 5~10kHz의 Audio frequency

FT-IR에서는 분산형 IR 측정기에서 사용하는 thermocouple 검출기 사용불가

→ 반응속도가 빠른 MCT 검출기 사용



Transmission Spectrum 투과 스펙트럼



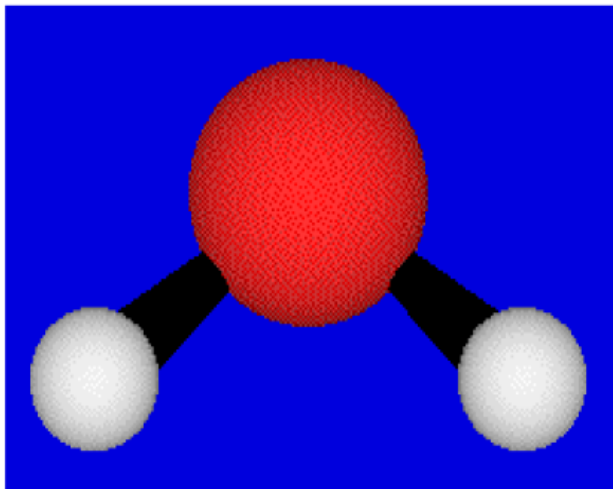
Molecular Vibration

1. Fundamental vibration 기본 진동

stretching (신축)과 **bending** (굽힘, 변각) 두 가지 진동모드

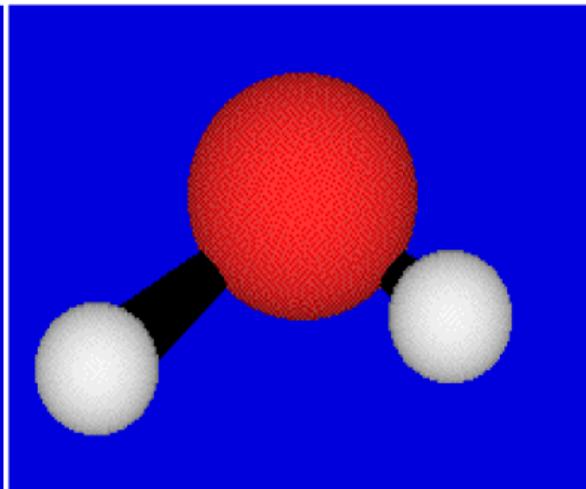
3n-6개의 fundamental vibration

3개의 **rotational vibration**과 3개의 **translational vibration**



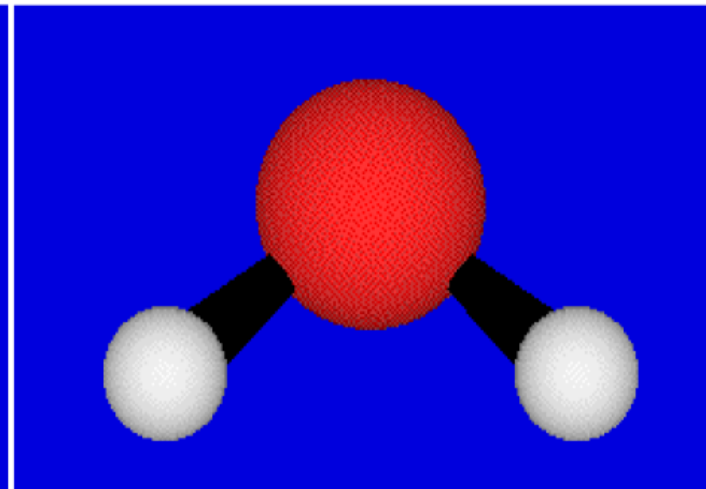
Symmetrical stretching

대칭 신축진동



Asymmetrical stretching

비대칭 신축진동



Scissoring (bending)

굽힘진동

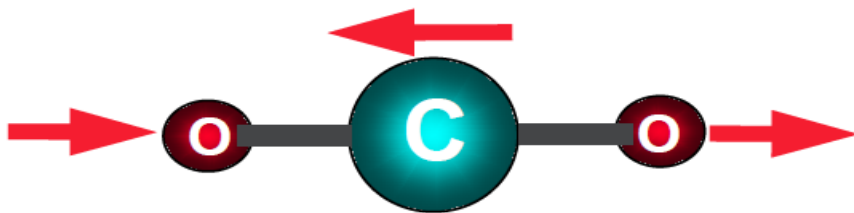


Molecular Vibration

선형분자는 $3n-5$ 개의 **fundamental vibration**

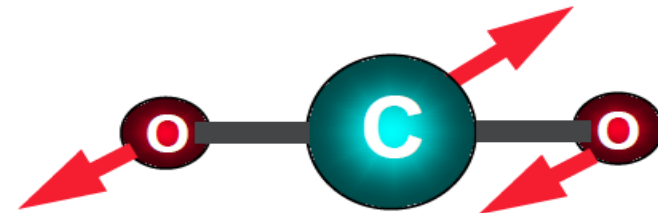
2개의 **rotational vibration**과 3개의 **translational vibration**(원자의 수 및 결합 상태에 따라)

이원자 분자(CO,HCl) 원자 사이 결합각이 없으므로 굽힘 진동 없고 신축진동만 일어남



Asymmetrical stretching

비대칭 신축진동



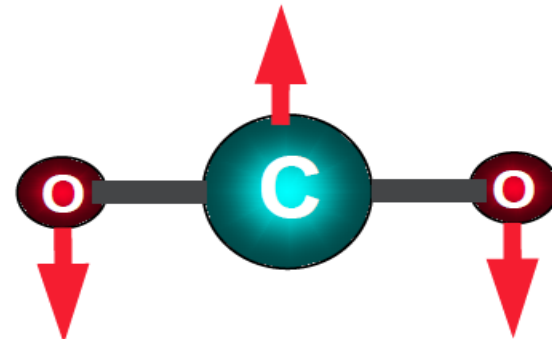
Scissoring (bending)

굽힘진동



Symmetrical stretching

대칭 신축진동



Scissoring (bending)

굽힘진동



IR 흡수 진동 - Hook 법칙

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \xrightarrow{\text{양자역학}} \bar{\nu}_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

파수 $\bar{\nu}$ (cm^{-1})

k : force constant (dynes/cm)

μ

환산질량 $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

