



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΑΤΤΙΚΗΣ**

**ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΣΧΕΔΙΑΣΗΣ ΚΑΙ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ**

**«Χρήση της τεχνικής υπέρυθρης φασματοσκοπίας  
στη μελέτη πλαστικών στη βιομηχανία»**

**Συγγραφέας**

*Γαλάνης Παρασκευάς*

**Αριθμός μητρώου**

*46174*

**Επιβλέπων**

*Γκανέτσος Θεόδωρος*

*Καθηγητής Α βαθμίδας*

Αθήνα, Ιούνιος 2024



**UNIVERSITY OF WESTERN ATTICA**

**SCHOOL OF ENGINEERING**

**DEPARTMENT OF ENGINEERING INDUSTRIAL DESIGN AND  
PRODUCTION**

**The use of infrared spectroscopy in the study of plastics in industry**

**Author**

Galanis Paraskevas

**Registration Number**

46174

**Supervisor**

Ganetsos Theodoros

Grade Professor

Athens, June 2024


### Δήλωση Συγγραφέα Διπλωματικής Εργασίας

Ο κάτωθι υπογεγραμμένος, Γαλάνης Παρασκευάς με αριθμό μητρώου 46174, φοιτητής του Πανεπιστημίου Δυτικής Αττικής της Σχολής Μηχανικών του Τμήματος Βιομηχανικής Σχεδίασης και Παραγωγής, δηλώνω υπεύθυνα ότι:

«Είμαι συγγραφέας αυτής της πτυχιακής/διπλωματικής εργασίας και ότι κάθε βοήθεια την οποία είχα για την προετοιμασία της είναι πλήρως αναγνωρισμένη και αναφέρεται στην εργασία. Επίσης, οι όποιες πηγές από τις οποίες έκανα χρήση δεδομένων, ιδεών ή λέξεων, είτε ακριβώς είτε παραφρασμένες, αναφέρονται στο σύνολό τους, με πλήρη αναφορά στους συγγραφείς, τον εκδοτικό οίκο ή το περιοδικό, συμπεριλαμβανομένων και των πηγών που ενδεχομένως χρησιμοποιήθηκαν από το διαδίκτυο. Επίσης, βεβαιώνω ότι αυτή η εργασία έχει συγγραφεί από μένα αποκλειστικά και αποτελεί προϊόν πνευματικής ιδιοκτησίας τόσο δικής μου, όσο και του Ιδρύματος.

Παράβαση της ανωτέρω ακαδημαϊκής μου ευθύνης αποτελεί ουσιώδη λόγο για την ανάκληση του πτυχίου μου».

Ο Δηλών



### Μέλη Εξεταστικής Επιτροπής

Η διπλωματική εργασία εξετάστηκε επιτυχώς από την κάτωθι Εξεταστική Επιτροπή:

<b>α/α</b>	<b>Όνομα / Επώνυμο</b>	<b>Ψηφιακή Υπογραφή</b>
1	ΓΚΑΝΕΤΣΟΣ ΘΕΟΔΩΡΟΣ <i>Καθηγητής</i>	
2	ΛΑΣΚΑΡΗΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ Επίκουρος Καθηγητής	
3	ΔΡΟΣΟΣ ΧΡΗΣΤΟΣ Επίκουρος Καθηγητής	

## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω την ειλικρινή μου ευγνωμοσύνη προς τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Γκανέτσο Θεόδωρο, για την καθοδήγησή του και τις ουσιαστικές του συμβουλές, οι οποίες ήταν καθοριστικές για την επιτυχή ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας. Επίσης, θα ήθελα να δηλώσω την βαθιά μου ευχαριστία προς την οικογένειά μου, η οποία μου προσέφερε συνεχή υποστήριξη και ήταν πηγή εμπύχωσης σε κάθε δυσκολία, συμβάλλοντας σημαντικά σε όλες τις ακαδημαϊκές και προσωπικές μου προσπάθειες. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους φίλους μου που έδειξαν κατανόηση στις ψυχολογικές μου δυσκολίες, με στήριξαν να ξεπεράσω το άγχος και με ενθάρρυναν να επιμείνω για να πετύχω τους στόχους μου.

## Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία εξετάζει τη χρήση της υπέρυθρης φασματοσκοπίας στη μελέτη πλαστικών στη βιομηχανία.

Η υπέρυθρη φασματοσκοπία (Infrared Spectroscopy – IR) θεωρείται σημαντική φασματοσκοπική τεχνική στην επιστήμη των υλικών, λόγω της ευκολίας λήψης φασμάτων και της σύγκρισής τους με φάσματα κυρίως οργανικών ενώσεων.

Ειδικότερα η χρήση στη βιομηχανία της τεχνικής υπέρυθρης φασματοσκοπίας στη μελέτη πολυμερών με χρήση φασμάτων απορρόφησης και διάχυτης ανάκλασης, συμβάλουν σημαντικά στη ταυτοποίηση των οργανικών ενώσεων.

**Λέξεις-κλειδιά:** Πλαστικά, Υπέρυθρη φασματοσκοπία IR, Ταυτοποίηση πολυμερών, Βιομηχανία, φάσματα, διάθλαση, ανάκλαση.

## **Abstract**

This thesis examines the use of infrared spectroscopy in the study of plastics in industry.

Infrared Spectroscopy (IR) is considered an important spectroscopic technique in materials science, due to the ease of obtaining spectra and their comparison with spectra of mainly organic compounds.

In particular, the use in the industry of the infrared spectroscopy technique in the study of polymers using absorption and diffuse reflection spectra, contribute significantly to the identification of organic compounds.

**Keywords:** Plastics, Infrared IR spectroscopy, Identification of polymers, Industry, spectra, refraction, reflection.

## Περιεχόμενα

Ευχαριστίες .....	5
Περίληψη.....	6
Abstract .....	7
<b>Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή .....</b>	<b>9</b>
1.1 Εισαγωγή στη τεχνική της υπέρυθρης φασματοσκοπίας.....	9
1.2 Υλικά που μελετά η υπέρυθρη φασματοσκοπία.....	10
1.3 Η προετοιμασία των δειγμάτων .....	11
1.4 Σύγκριση με τη βιβλιογραφία.....	13
<b>Κεφάλαιο 2: Τεχνολογία υπέρυθρου - IR.....</b>	<b>16</b>
2.1 Βασικές αρχές της φασματοσκοπίας IR.....	16
2.2 Άλλες μέθοδοι στη μοριακή φασματογραφία δόνησης.....	19
2.3 Ζώνες απορρόφησης.....	21
2.4 Δύο διαστάσεων Υπέρυθρη φασματοσκοπία – Two dimensional IR.....	25
<b>Κεφάλαιο 3: Οργανολογία - Μετρήσεις .....</b>	<b>28</b>
3.1 Χαρακτηριστικά στοιχεία των τεχνολογιών.....	28
3.2 Οργανολογία.....	43
<b>Κεφάλαιο 4: Παρουσίαση μετρήσεων σε πλαστικά στη Βιομηχανία - Συμπεράσματα</b>	<b>50</b>
4.1 Χαρακτηρισμός μεμβρανών Si .....	50
4.2 Μετρήσεις σε πολυμερή τη Νανοτεχνολογία.....	53
4.3 Προσδιορισμός πάχους του στρώματος βαφής αυτοκινήτου.....	56
<b>Βιβλιογραφία.....</b>	<b>60</b>



# Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

## 1.1 Εισαγωγή στη τεχνική της υπέρυθρης φασματοσκοπίας

Τα υπέρυθρα φασματοσκόπια ανήκουν στην κατηγορία των εργαλείων φασματοσκοπίας, τα οποία χρησιμοποιούνται για τη μέτρηση και την ανάλυση της υπέρυθρης ακτινοβολίας που εκπέμπεται από αντικείμενα. Τα φασματοσκόπια αυτά λειτουργούν με τη μέτρηση της απορρόφησης, της ανάκλασης ή της διάχυσης της υπέρυθρης ακτινοβολίας ώστε να προσδιορίσουν τα χαρακτηριστικά των υλικών που ανιχνεύονται.

Η θεωρητική βάση τους βασίζεται στις αρχές της κβαντομηχανικής και της οπτικής φυσικής. Κάθε χημική ουσία έχει μοναδικό υπέρυθρο φάσμα, που μπορεί να αναλυθεί με ακρίβεια μέσω υπέρυθρης φασματοσκοπίας. Αυτή η τεχνική είναι ευρέως χρησιμοποιούμενη σε πολλούς τομείς, όπως η χημεία, η βιοχημεία, η φαρμακευτική, η περιβαλλοντική επιστήμη και η βιοϊατρική.

Συνοψίζοντας, τα υπέρυθρα φασματοσκόπια είναι ισχυρά εργαλεία ανάλυσης για τη μελέτη των χαρακτηριστικών και των δομών χημικών ουσιών, βασιζόμενα σε αρχές κβαντομηχανικής και φυσικής.

## 1.2 Υλικά που μελετά η υπέρυθη φασματοσκοπία

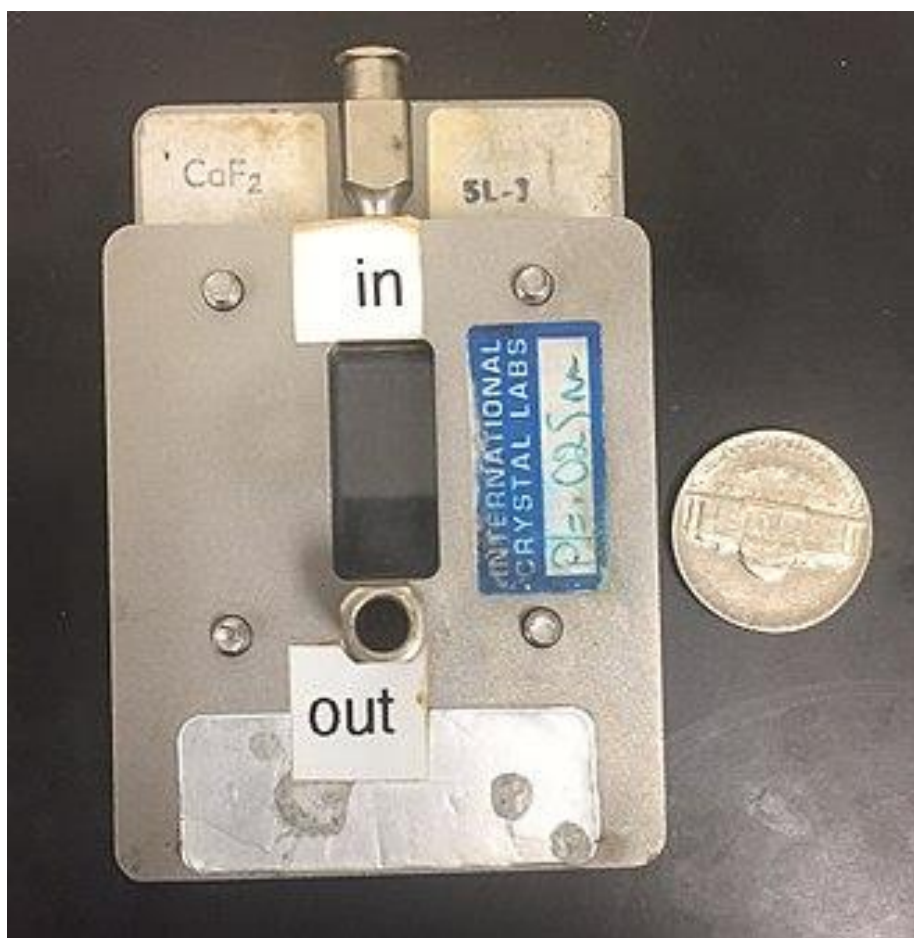
Το υπέρυθρο φάσμα ενός δείγματος καταγράφεται περνώντας μια δέσμη υπέρυθρου φωτός μέσα από το δείγμα. Όταν η συχνότητα του IR είναι ίδια με τη συχνότητα δόνησης ενός δεσμού ή μιας συλλογής δεσμών, λαμβάνει χώρα απορρόφηση. Η εξέταση του εκπεμπόμενου φωτός αποκαλύπτει πόση ενέργεια απορροφήθηκε σε κάθε συχνότητα (ή μήκος κύματος). Αυτή η μέτρηση μπορεί να επιτευχθεί σαρώνοντας το εύρος μήκους κύματος χρησιμοποιώντας ένα μονοχρωμάτορα. Εναλλακτικά, ολόκληρο το εύρος μήκους κύματος μετράται χρησιμοποιώντας ένα όργανο μετασχηματισμού Fourier και στη συνέχεια δημιουργείται ένα φάσμα διαπερατότητας ή απορρόφησης χρησιμοποιώντας μια ειδική διαδικασία.

Αυτή η τεχνική χρησιμοποιείται συνήθως για την ανάλυση δειγμάτων με ομοιοπολικούς δεσμούς. Τα απλά φάσματα λαμβάνονται από δείγματα με λίγους IR ενεργούς δεσμούς και υψηλά επίπεδα καθαρότητας. Πιο πολύπλοκες μοριακές δομές οδηγούν σε περισσότερες ζώνες απορρόφησης και πιο πολύπλοκα φάσματα.

### 1.3 Η προετοιμασία των δειγμάτων

#### Δείγματα αερίου

Τα αέρια δείγματα απαιτούν μια κυψέλη δείγματος με μεγάλο μήκος διαδρομής για να αντισταθμιστεί η αραίωση. Το μήκος διαδρομής του κυττάρου δείγματος εξαρτάται από τη συγκέντρωση της ένωσης που ενδιαφέρει. Ένας απλός γυάλινος σωλήνας μήκους 5 έως 10 cm εξοπλισμένος με υπέρυθρα διαφανή παράθυρα και στα δύο άκρα του σωλήνα μπορεί να χρησιμοποιηθεί για συγκεντρώσεις κάτω από αρκετές εκατοντάδες ppm. Οι συγκεντρώσεις αερίου δείγματος πολύ κάτω από ppm μπορούν να μετρηθούν με ένα κύτταρο White στο οποίο το υπέρυθρο φως καθοδηγείται με καθρέφτες για να ταξιδέψει μέσα στο αέριο. Τα κύτταρα White είναι διαθέσιμα με οπτικό μήκος διαδρομής που ξεκινά από 0,5 m έως εκατό μέτρα.



Τυπική κυψέλη διαλύματος IR. Τα παράθυρα είναι CaF<sub>2</sub>.

### Υγρά δείγματα

Τα υγρά δείγματα μπορούν να τοποθετηθούν μεταξύ δύο πλακών ενός άλατος (συνήθως χλωριούχο νάτριο ή κοινό αλάτι, αν και χρησιμοποιούνται επίσης ορισμένα άλλα άλατα όπως βρωμιούχο κάλιο ή φθοριούχο ασβέστιο).[29] Οι πλάκες είναι διαφανείς στο υπέρυθρο φως και δεν εισάγουν καμία γραμμή στα φάσματα. Με την αυξανόμενη τεχνολογία στο φιλτράρισμα υπολογιστών και τον χειρισμό των αποτελεσμάτων, τα δείγματα σε διάλυμα μπορούν τώρα να μετρηθούν με ακρίβεια (το νερό παράγει ευρεία απορρόφηση σε όλο το εύρος ενδιαφέροντος και έτσι καθιστά τα φάσματα μη αναγνώσιμα χωρίς αυτήν την επεξεργασία υπολογιστή)

### Στερεά δείγματα

Τα στερεά δείγματα μπορούν να παρασκευαστούν με διάφορους τρόπους. Μια συνηθισμένη μέθοδος είναι η σύνθλιψη του δείγματος με ένα ελαιώδες πολτοποιητικό παράγοντα (συνήθως ορυκτέλαιο Nujol). Μια λεπτή μεμβράνη του καλύμματος εφαρμόζεται σε πλάκες αλατιού και μετράται. Η δεύτερη μέθοδος είναι η άλεση μιας ποσότητας του δείγματος με ένα ειδικά καθαρισμένο αλάτι (συνήθως βρωμιούχο κάλιο) σε λεπτή λεπτή λείανση (για την απομάκρυνση των φαινομένων σκέδασης από μεγάλους κρυστάλλους). Αυτό το μείγμα σκόνης στη συνέχεια πιέζεται σε μια μηχανική πρέσα για να σχηματιστεί ένα ημιδιαφανές σφαιρίδιο μέσα από το οποίο μπορεί να περάσει η δέσμη του φασματομέτρου.

Μια τρίτη τεχνική είναι η τεχνική «cast film», η οποία χρησιμοποιείται κυρίως για πολυμερή υλικά. Το δείγμα διαλύεται πρώτα σε κατάλληλο, μη υγροσκοπικό διαλύτη. Μια σταγόνα αυτού του διαλύματος εναποτίθεται στην επιφάνεια ενός κυττάρου KBr ή NaCl. Το διάλυμα στη συνέχεια εξατμίζεται μέχρι ξηρού και το φιλμ που σχηματίζεται στο κελί αναλύεται απευθείας. Είναι σημαντικό να διασφαλίσετε ότι το φιλμ δεν είναι πολύ παχύ, διαφορετικά δεν μπορεί να περάσει φως. Αυτή η τεχνική

είναι κατάλληλη για ποιοτική ανάλυση. Η τελική μέθοδος είναι η χρήση μικροτομής για την κοπή ενός λεπτού (20-100 μm) φιλμ από ένα στερεό δείγμα. Αυτός είναι ένας από τους πιο σημαντικούς τρόπους ανάλυσης αποτυχημένων πλαστικών προϊόντων, για παράδειγμα, επειδή διατηρείται η ακεραιότητα του στερεού.

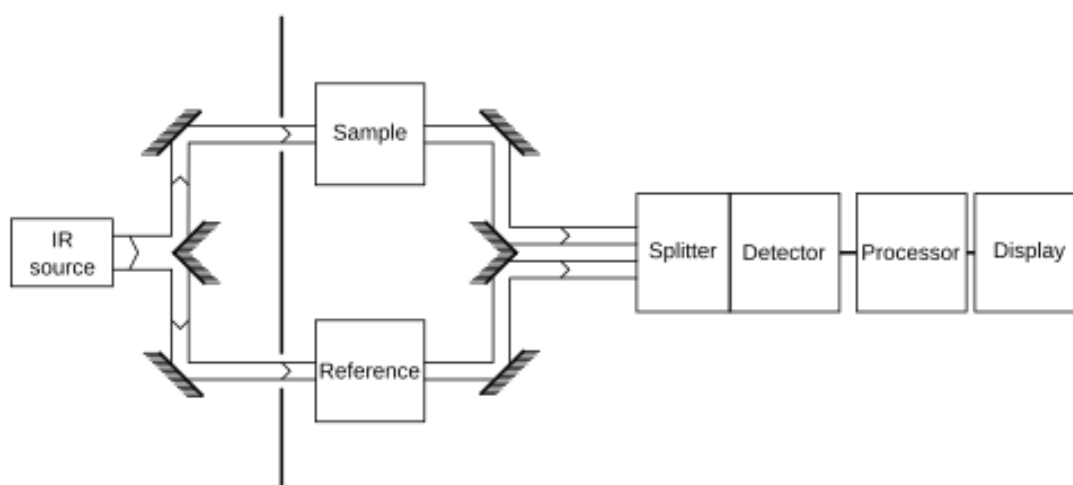
## 1.4 Σύγκριση με τη βιβλιογραφία

Είναι χαρακτηριστικό να καταγράφεται φάσμα τόσο του δείγματος όσο και μιας «αναφοράς». Αυτό το βήμα ελέγχει έναν αριθμό μεταβλητών, π.χ. ανιχνευτή υπερύθρων, ο οποίος μπορεί να επηρεάσει το φάσμα. Η μέτρηση αναφοράς καθιστά δυνατή την εξάλειψη της επιρροής του οργάνου.[απαιτείται παραπομπή]

Η κατάλληλη «αναφορά» εξαρτάται από τη μέτρηση και τον στόχο της. Η απλούστερη μέτρηση αναφοράς είναι η απλή αφαίρεση του δείγματος (αντικατάσταση του με αέρα). Ωστόσο, μερικές φορές μια διαφορετική αναφορά είναι πιο χρήσιμη. Για παράδειγμα, εάν το δείγμα είναι μια αραιή διαλυμένη ουσία διαλυμένη σε νερό σε ένα ποτήρι, τότε μια καλή μέτρηση αναφοράς μπορεί να είναι η μέτρηση του καθαρού νερού στο ίδιο ποτήρι. Στη συνέχεια, η μέτρηση αναφοράς θα ακυρώσει όχι μόνο όλες τις ιδιότητες του οργάνου (όπως η πηγή φωτός που χρησιμοποιείται), αλλά και τις ιδιότητες απορρόφησης και ανάκλασης φωτός του νερού και του ποτηριού, και το τελικό αποτέλεσμα θα έδειχνε απλώς τις ιδιότητες του διαλυμένη ουσία (τουλάχιστον κατά προσέγγιση).

Ένας συνηθισμένος τρόπος σύγκρισης με μια αναφορά είναι η διαδοχική: πρώτα μετρήστε την αναφορά, μετά αντικαταστήστε την αναφορά από το δείγμα και μετρήστε το δείγμα. Αυτή η τεχνική δεν είναι απολύτως αξιόπιστη. εάν η λυχνία υπερύθρων είναι λίγο πιο φωτεινή κατά τη μέτρηση αναφοράς, τότε λίγο πιο σκοτεινή κατά τη μέτρηση του δείγματος, η μέτρηση θα παραμορφωθεί. Πιο περίπλοκες μέθοδοι, όπως η ρύθμιση "δύο ακτίνων" (βλ. εικόνα), μπορούν να διορθώσουν αυτούς τους τύπους εφέ για να δώσουν πολύ ακριβή αποτελέσματα. Η τυπική μέθοδος προσθήκης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την στατιστική ακύρωση αυτών των σφαλμάτων.

Ωστόσο, μεταξύ των διαφορετικών τεχνικών που βασίζονται στην απορρόφηση που χρησιμοποιούνται για την ανίχνευση αέριων ειδών, η φασματοσκοπία δακτυλίου προς τα κάτω κοιλότητας (CRDS) μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μέθοδος χωρίς βαθμονόμηση. Το γεγονός ότι το CRDS βασίζεται στις μετρήσεις των χρόνων ζωής των φωτονίων (και όχι στην ένταση του λέιζερ) το καθιστά περιττό για οποιαδήποτε βαθμονόμηση και σύγκριση με μια αναφορά.



Σχήματα φασματομέτρου απορρόφησης δύο δεσμών. Παράγεται μια δέσμη υπέρυθρου φωτός, περνά μέσα από ένα μονοχρωματικό (δεν φαίνεται) και στη συνέχεια χωρίζεται σε δύο ξεχωριστές δέσμες. Το ένα περνά μέσα από το δείγμα και το άλλο μέσω αναφοράς. Οι δέσμες ανακλώνται και οι δύο πίσω προς έναν ανιχνευτή, ωστόσο πρώτα περνούν από έναν διαχωριστή, ο οποίος εναλλάσσει γρήγορα ποια από τις δύο δέσμες εισέρχεται στον ανιχνευτή. Στη συνέχεια συγκρίνονται τα δύο σήματα και προκύπτει μια εκτύπωση. Αυτή η ρύθμιση "δύο ακτίνων" δίνει ακριβή φάσματα ακόμα κι αν η ένταση της πηγής φωτός μετατοπίζεται με την πάροδο του χρόνου.

Ορισμένα όργανα αναγνωρίζουν επίσης αυτόματα την ουσία που μετράται από μια αποθήκη χιλιάδων φασμάτων αναφοράς που βρίσκονται σε αποθήκευση. Στο τρίτο κεφάλαιο, η εστίαση μετατοπίζεται στα μικροπλαστικά και την παρουσία τους στο περιβάλλον. Αρχικά, παρουσιάζεται η ταξινόμηση και οι ιδιότητες των μικροπλαστικών, περιγράφοντας τις διάφορες κατηγορίες και τις φυσικοχημικές τους ιδιότητες. Στη συνέχεια, αναλύονται οι πηγές των μικροπλαστικών και οι διαδρομές που ακολουθούν στο περιβάλλον, συμπεριλαμβανομένης της μεταφοράς και κατανομής τους στη Μεσόγειο Θάλασσα. Εξετάζονται επίσης οι επιπτώσεις των μικροπλαστικών στα θαλάσσια οικοσυστήματα και τη θαλάσσια ζωή, αναλύοντας τις φυσικές και χημικές επιδράσεις τους. Τέλος, παρουσιάζονται οι υπάρχουσες πολιτικές και οι στρατηγικές διαχείρισης για την αντιμετώπιση της ρύπανσης από μικροπλαστικά, προτείνοντας βελτιώσεις και νέες προσεγγίσεις.

## Κεφάλαιο 2: Τεχνολογία υπέρυθρου - IR

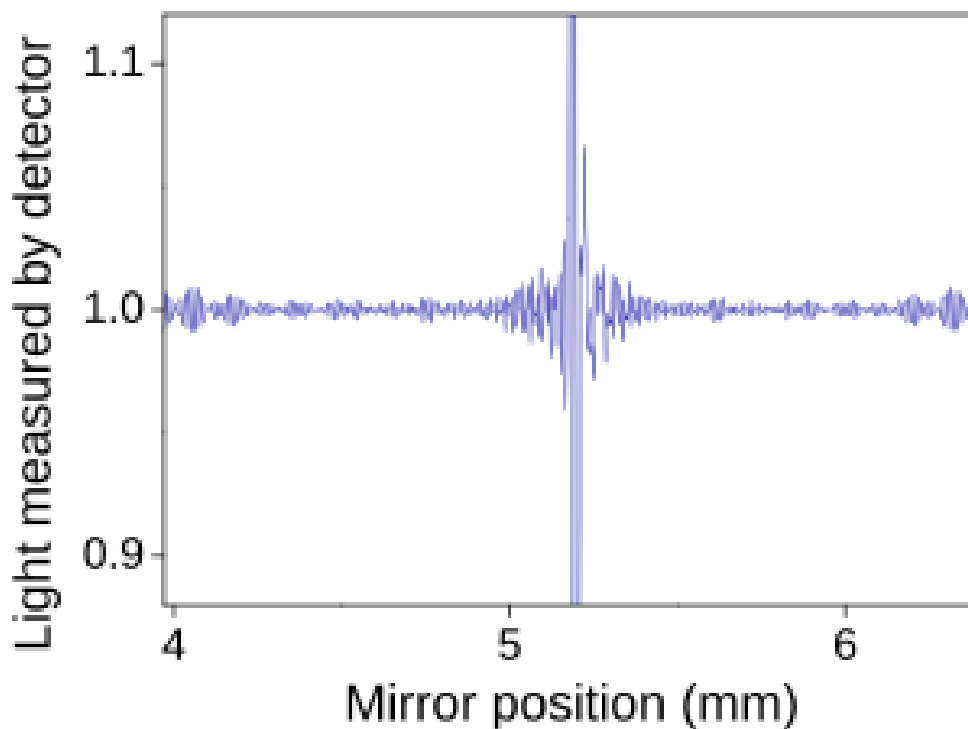
### 2.1 Βασικές αρχές της φασματοσκοπίας IR

Η φασματοσκοπία υπέρυθρων μετασχηματισμού Fourier (FTIR) είναι μια τεχνική μέτρησης που επιτρέπει σε κάποιον να καταγράψει υπέρυθρα φάσματα. Το υπέρυθρο φως καθοδηγείται μέσω ενός συμβολόμετρου και στη συνέχεια μέσω του δείγματος (ή αντίστροφα).

Ένας κινούμενος καθρέφτης μέσα στη συσκευή αλλάζει την κατανομή του υπέρυθρου φωτός που διέρχεται από το συμβολόμετρο. Το σήμα που καταγράφεται άμεσα, που ονομάζεται «παρενθετικό διάγραμμα», αντιπροσωπεύει την έξοδο φωτός ως συνάρτηση της θέσης του καθρέφτη.

Μια τεχνική επεξεργασίας δεδομένων που ονομάζεται μετασχηματισμός Fourier μετατρέπει αυτά τα ακατέργαστα δεδομένα στο επιθυμητό αποτέλεσμα (φάσμα του δείγματος): έξοδος φωτός ως συνάρτηση του υπέρυθρου μήκους κύματος (ή ισοδύναμα, του κύματος). Όπως περιγράφηκε παραπάνω, το φάσμα του δείγματος συγκρίνεται πάντα με μια αναφορά.





Ένα παρεμβολόγραμμα από μια μέτρηση FTIR. Ο οριζόντιος άξονας είναι η θέση του καθρέφτη και ο κατακόρυφος είναι η ποσότητα φωτός που ανιχνεύεται. Αυτά είναι τα "ακατέργαστα δεδομένα" που μπορούν να μετασχηματιστούν Fourier για να ληφθεί το πραγματικό φάσμα.

Μια εναλλακτική μέθοδος για την απόκτηση φασμάτων είναι η μέθοδος «διασποράς» ή «μονοχρωματιστής σάρωσης». Σε αυτή την προσέγγιση, το δείγμα ακτινοβολείται διαδοχικά με διάφορα μεμονωμένα μήκη κύματος. Η μέθοδος διασποράς είναι πιο κοινή στη φασματοσκοπία UV-Vis, αλλά είναι λιγότερο πρακτική στο υπέρυθρο από τη μέθοδο FTIR. Ένας λόγος για τον οποίο ευνοείται το FTIR ονομάζεται "πλεονέκτημα Fellgett" ή "πλεονέκτημα πολλαπλών πλευρών": Οι πληροφορίες σε όλες τις συχνότητες συλλέγονται ταυτόχρονα, βελτιώνοντας τόσο την ταχύτητα όσο

και την αναλογία σήματος προς θόρυβο. Ένα άλλο ονομάζεται "Πλεονέκτημα απόδοσης του Jacquinot": Μια μέτρηση διασποράς απαιτεί την ανίχνευση πολύ χαμηλότερων επιπέδων φωτός από μια μέτρηση FTIR. Υπάρχουν άλλα πλεονεκτήματα, καθώς και ορισμένα μειονεκτήματα, αλλά ουσιαστικά όλα τα σύγχρονα υπέρυθρα φασματοόμετρα είναι όργανα FTIR.

## 2.2 Άλλες μέθοδοι στη μοριακή φασματογραφία δόνησης

Υπάρχουν διάφορες μορφές υπέρυθρης μικροσκοπίας. Αυτές περιλαμβάνουν εκδόσεις IR της μικροσκοπίας υποδιάθλασης[32] όπως IR NSOM, φωτοθερμική μικροφασματοσκοπία, Nano-FTIR και φασματοσκοπία υπερύθρων με βάση το μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (AFM-IR).

Η υπέρυθρη φασματοσκοπία δεν είναι η μόνη μέθοδος μελέτης μοριακών φασμάτων δόνησης. Η φασματοσκοπία Raman περιλαμβάνει μια ανελαστική διαδικασία σκέδασης κατά την οποία μόνο ένα μέρος της ενέργειας ενός προσπίπτοντος φωτονίου απορροφάται από το μόριο και το υπόλοιπο τμήμα σκεδάζεται και ανιχνεύεται. Η διαφορά ενέργειας αντιστοιχεί στην απορροφούμενη δονητική ενέργεια.

Οι κανόνες επιλογής για την υπέρυθρη και για τη φασματοσκοπία Raman είναι διαφορετικοί τουλάχιστον για ορισμένες μοριακές συμμετρίες, έτσι ώστε οι δύο μέθοδοι να είναι συμπληρωματικές στο ότι παρατηρούν δονήσεις διαφορετικών συμμετριών.

Μια άλλη μέθοδος είναι η φασματοσκοπία απώλειας ενέργειας ηλεκτρονίων (EELS), στην οποία η ενέργεια που απορροφάται παρέχεται από ένα ανελαστικά σκεδασμένο ηλεκτρόνιο και όχι από ένα φωτόνιο. Αυτή η μέθοδος είναι χρήσιμη για τη μελέτη των δονήσεων των μορίων που προσροφούνται σε μια στερεή επιφάνεια.

Πρόσφατα, το EELS υψηλής ανάλυσης (HREELS) εμφανίστηκε ως τεχνική για την εκτέλεση φασματοσκοπίας δόνησης σε ηλεκτρονικό μικροσκόπιο μετάδοσης (TEM).

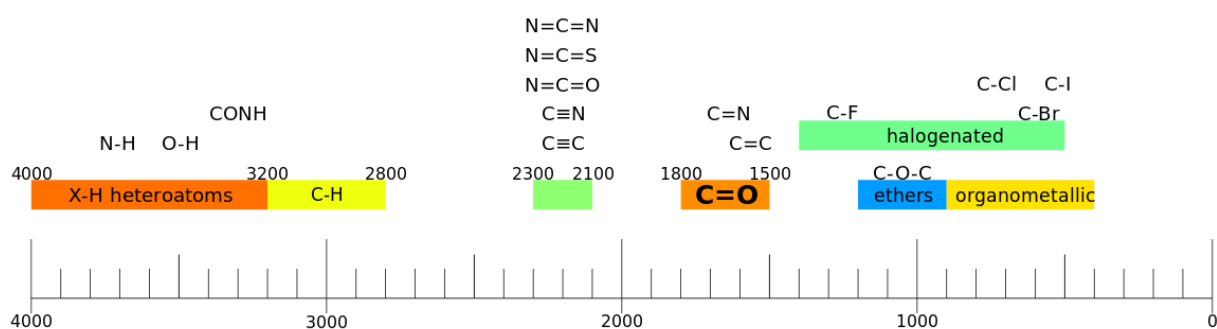
Σε συνδυασμό με την υψηλή χωρική ανάλυση του TEM, έχουν πραγματοποιηθεί άνευ προηγουμένου πειράματα, όπως μετρήσεις θερμοκρασίας σε νανοκλίμακα, χαρτογράφηση ισοτοπικά σημασμένων μορίων, χαρτογράφηση τρόπων φωνονίων σε θέση και ορμή διάστημα, χαρτογράφηση δονητικής επιφάνειας και χύδην τρόπου λειτουργίας σε νανοκύβους, και έρευνες των τρόπων πολάριτον σε κρυστάλλους van der Waals. Η ανάλυση των τρόπων δόνησης που είναι ανενεργοί στο IR αλλά

εμφανίζονται σε ανελαστική σκέδαση νετρονίων είναι επίσης δυνατή σε υψηλή χωρική ανάλυση χρησιμοποιώντας το EELS.[42] Αν και η χωρική ανάλυση των HREEL είναι πολύ υψηλή, οι ζώνες είναι εξαιρετικά ευρείες σε σύγκριση με άλλες τεχνικές.

Συνοψίζοντας, η FTIR είναι μια ισχυρή και ευέλικτη τεχνική που προσφέρει σημαντικά πλεονεκτήματα στην ανάλυση και την ταυτοποίηση υλικών. Η ευρεία γκάμα εφαρμογών της καθιστά την FTIR απαραίτητο εργαλείο σε πολλούς τομείς της επιστήμης και της βιομηχανίας, συμβάλλοντας στην πρόοδο της έρευνας και της τεχνολογίας.

## 2.3 Ζώνες απορρόφησης

Η φασματοσκοπία υπερέθρων χρησιμοποιείται συχνά για την αναγνώριση δομών επειδή οι λειτουργικές ομάδες δημιουργούν χαρακτηριστικές ζώνες τόσο ως προς την ένταση όσο και τη θέση (συχνότητα). Οι θέσεις αυτών των ζωνών συνοψίζονται σε πίνακες συσχέτισης όπως φαίνεται παρακάτω.



Κατάλογος των κύριων ζωνών φασματοσκοπίας IR. Για παράδειγμα, η καρβοξυλική ομάδα θα περιέχει μια ζώνη C = O στα 1700 cm<sup>-1</sup> και μια ζώνη OH στα 3500 cm<sup>-1</sup> (συνολική ομάδα -COOH). Κυματοαριθμοί που αναφέρονται σε cm<sup>-1</sup>.

## Περιοχές

Ένας φασματογράφος συχνά ερμηνεύεται ότι έχει δύο περιοχές.

- ✓ **περιοχή λειτουργικής ομάδας  $\geq 1,500 \text{ cm}^{-1}$**

Στη λειτουργική περιοχή υπάρχουν μία έως λίγες ενδείξεις ανά λειτουργική ομάδα

- ✓ **περιοχή δακτυλικών αποτυπωμάτων  $< 1.500 \text{ cm}^{-1}$**

Στην περιοχή των δακτυλικών αποτυπωμάτων υπάρχουν πολλές κοιλότητες που σχηματίζουν ένα περίπλοκο σχέδιο το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν δακτυλικό αποτύπωμα για τον προσδιορισμό της ένωσης.

## ***Ο κανόνας του Badger***

Για πολλά είδη δειγμάτων, οι αντιστοιχίσεις είναι γνωστές, δηλαδή ποιες παραμορφώσεις δεσμών σχετίζονται με ποια συχνότητα. Σε τέτοιες περιπτώσεις μπορούν να συλλεχθούν περαιτέρω πληροφορίες σχετικά με τη δύναμη ενός δεσμού, βασιζόμενοι στην εμπειρική κατευθυντήρια γραμμή που ονομάζεται κανόνας του Badger. Αρχικά δημοσιεύθηκε από τον Richard McLean Badger το 1934, αυτός ο κανόνας δηλώνει ότι η ισχύς ενός δεσμού (σε όρους σταθεράς δύναμης) συσχετίζεται με το μήκος του δεσμού. Δηλαδή, η αύξηση της αντοχής του δεσμού οδηγεί σε αντίστοιχη βράχυνση του δεσμού και αντίστροφα.

## ***Φαινόμενα ισοτόπων***

Τα διαφορετικά ισότοπα σε ένα συγκεκριμένο είδος μπορεί να εμφανίζουν διαφορετικές λεπτές λεπτομέρειες στην υπέρυθη φασματοσκοπία. Για παράδειγμα, η συχνότητα τάνυσης O–O (σε αντίστροφα εκατοστά) της οξυαιμοκυανίνης

προσδιορίζεται πειραματικά ότι είναι 832 και 788  $\text{cm}^{-1}$  για  $\nu(16\text{O}-16\text{O})$  και  $\nu(18\text{O}-18\text{O})$ , αντίστοιχα.

Θεωρώντας τον δεσμό O–O ως ελατήριο, η συχνότητα απορρόφησης μπορεί να υπολογιστεί ως κυματικός αριθμός [= συχνότητα/(ταχύτητα φωτός)]

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

όπου  $k$  είναι η σταθερά του ελατηρίου για τον δεσμό,  $c$  είναι η ταχύτητα του φωτός και  $\mu$  είναι η μειωμένη μάζα του συστήματος A–B:

$$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$$

Όπου  $m_i$  είναι η μάζα του ατόμου  $i$

Οι ανοιγμένες μάζες για  $^{16}\text{O}-^{16}\text{O}$  και  $^{18}\text{O}-^{18}\text{O}$  μπορούν να προσεγγιστούν ως 8 και 9 αντίστοιχα. Έτσι:

$$\frac{\tilde{\nu}(^{16}\text{O})}{\tilde{\nu}(^{18}\text{O})} = \sqrt{\frac{9}{8}} \approx \frac{832}{788}$$

Η επίδραση των ισοτόπων, τόσο στη δόνηση όσο και στη δυναμική της διάσπασης, έχει βρεθεί ότι είναι ισχυρότερη από ό,τι πιστεύαμε προηγουμένως. Σε ορισμένα συστήματα, όπως το πυρίτιο και το γερμάνιο, η διάσπαση της αντισυμμετρικής λειτουργίας τάνυσης του ενδιάμεσου οξυγόνου περιλαμβάνει τη συμμετρική λειτουργία τάνυσης με ισχυρή εξάρτηση από ισότοπο. Για παράδειγμα, αποδείχθηκε ότι για ένα δείγμα φυσικού πυριτίου, η διάρκεια ζωής της αντισυμμετρικής δόνησης είναι 11,4 ps. Όταν το ισότοπο ενός από τα άτομα του πυριτίου αυξηθεί σε  $^{29}\text{Si}$ , η διάρκεια ζωής αυξάνεται στα 19 ps. Με παρόμοιο τρόπο, όταν το άτομο πυριτίου αλλάξει σε  $^{30}\text{Si}$ , η διάρκεια ζωής γίνεται 27 ps



## 2.4 Δύο διαστάσεων Υπέρυθρη φασματοσκοπία – Two dimensional IR

Η δισδιάστατη ανάλυση φασματοσκοπίας συσχέτισης υπερέθρων συνδυάζει πολλαπλά δείγματα φασμάτων υπερέθρων για να αποκαλύψει πιο σύνθετες ιδιότητες. Με την επέκταση των φασματικών πληροφοριών ενός διαταραγμένου δείγματος, η φασματική ανάλυση απλοποιείται και η ανάλυση ενισχύεται.

Τα δισδιάστατα σύγχρονα και δισδιάστατα ασύγχρονα φάσματα αντιπροσωπεύουν μια γραφική επισκόπηση των φασματικών αλλαγών που οφείλονται σε μια διαταραχή (όπως μια μεταβαλλόμενη συγκέντρωση ή μεταβαλλόμενη θερμοκρασία) καθώς και τη σχέση μεταξύ των φασματικών αλλαγών σε δύο διαφορετικούς κυματαριθμούς.

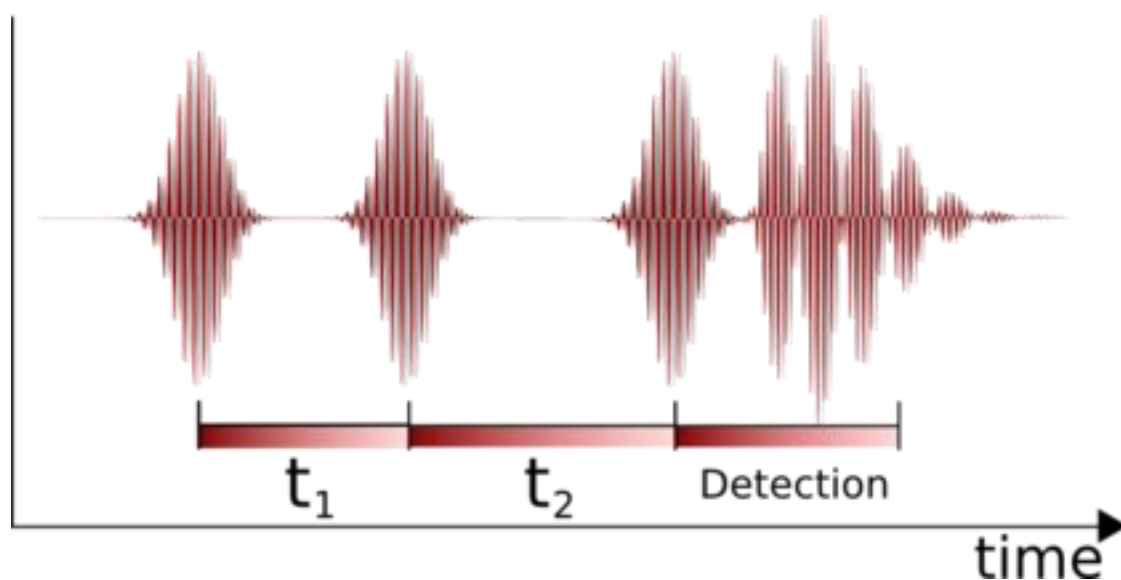
Η μη γραμμική δισδιάστατη υπέρυθη φασματοσκοπία[47][48] είναι η υπέρυθη εκδοχή της φασματοσκοπίας συσχέτισης. Η μη γραμμική δισδιάστατη φασματοσκοπία υπερέθρων είναι μια τεχνική που έχει γίνει διαθέσιμη με την ανάπτυξη παλμών υπέρυθρου λέιζερ femtosecond.

Σε αυτό το πείραμα, πρώτα εφαρμόζεται ένα σύνολο παλμών αντλίας στο δείγμα. Ακολουθεί χρόνος αναμονής κατά τον οποίο το σύστημα αφήνεται να χαλαρώσει. Ο τυπικός χρόνος αναμονής διαρκεί από μηδέν έως αρκετά picoseconds και η διάρκεια μπορεί να ελεγχθεί με ανάλυση δεκάδων femtoseconds.

Στη συνέχεια εφαρμόζεται ένας παλμός ανιχνευτή, με αποτέλεσμα την εκπομπή ενός σήματος από το δείγμα. Το μη γραμμικό δισδιάστατο υπέρυθρο φάσμα είναι ένα δισδιάστατο διάγραμμα συσχέτισης της συχνότητας  $\omega_1$  που διεγείρεται από τους αρχικούς παλμούς της αντλίας και της συχνότητας  $\omega_3$  που διεγείρεται από τον παλμό του ανιχνευτή μετά το χρόνο αναμονής. Αυτό επιτρέπει την παρατήρηση της σύζευξης μεταξύ διαφορετικών τρόπων δόνησης.

Λόγω της εξαιρετικά λεπτής χρονικής του ανάλυσης, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παρακολούθηση της μοριακής δυναμικής σε χρονική κλίμακα picosecond. Είναι

ακόμα μια σε μεγάλο βαθμό ανεξερεύνητη τεχνική και γίνεται ολοένα και πιο δημοφιλής για θεμελιώδη έρευνα.



Ακολουθία παλμών που χρησιμοποιείται για τη λήψη ενός δισδιάστατου φάσματος υπέρυθρου μετασχηματισμού Fourier. Η χρονική περίοδος  $t_1$  αναφέρεται συνήθως ως χρόνος συνοχής και δεύτερη χρονική περίοδος  $t_2$  είναι γνωστό ως χρόνος αναμονής. Η συχνότητα διέγερσης λαμβάνεται με μετασχηματισμό Fourier κατά μήκος του  $t_1$ .

Όπως και με τη δισδιάστατη φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (2DNMR), αυτή η τεχνική απλώνει το φάσμα σε δύο διαστάσεις και επιτρέπει την παρατήρηση εγκάρσιων κορυφών που περιέχουν πληροφορίες για τη σύζευξη μεταξύ διαφορετικών τρόπων λειτουργίας.

Σε αντίθεση με το 2DNMR, η μη γραμμική δισδιάστατη υπέρυθρη φασματοσκοπία περιλαμβάνει επίσης τη διέγερση σε τόνους. Αυτές οι διεγέρσεις έχουν ως αποτέλεσμα

κορυφές απορρόφησης διεγερμένης κατάστασης που βρίσκονται κάτω από τις διαγώνιες και εγκάρσιες κορυφές.

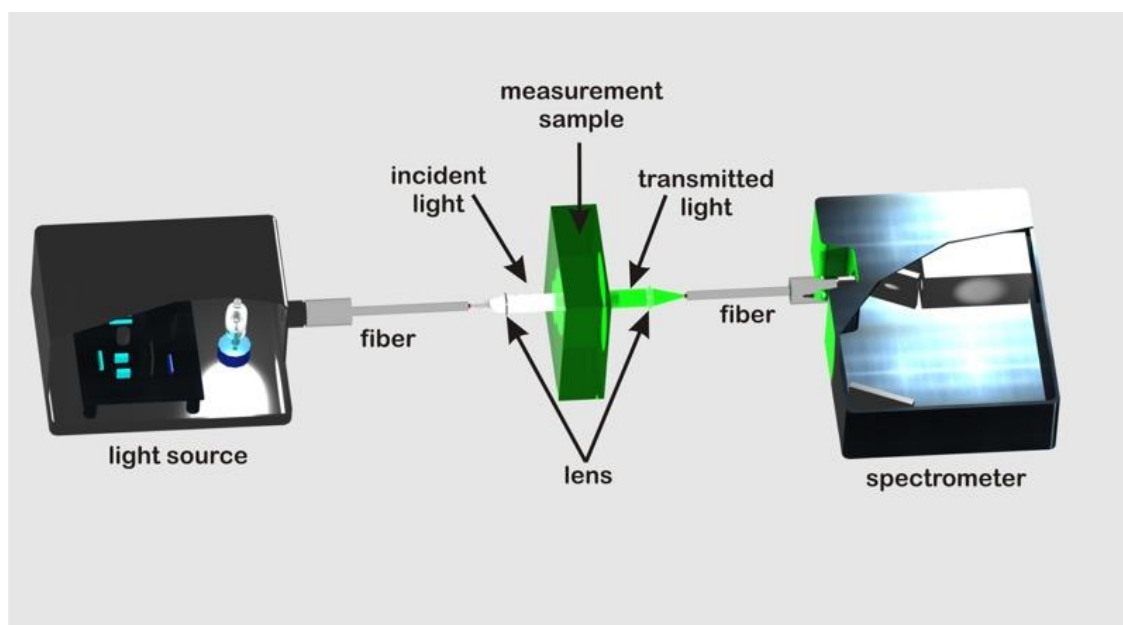
Στο 2DNMR, δύο διαφορετικές τεχνικές, η COZY και η NOESY, χρησιμοποιούνται συχνά. Οι εγκάρσιες κορυφές στην πρώτη σχετίζονται με τη βαθμωτή σύζευξη, ενώ στη δεύτερη σχετίζονται με τη μεταφορά σπιν μεταξύ διαφορετικών πυρήνων. Στη μη γραμμική δισδιάστατη υπέρυθη φασματοσκοπία, έχουν σχεδιαστεί ανάλογα με αυτές τις τεχνικές 2DNMR.

Η μη γραμμική δισδιάστατη υπέρυθη φασματοσκοπία με μηδενικό χρόνο αναμονής αντιστοιχεί στο COSY και η μη γραμμική δισδιάστατη φασματοσκοπία υπερύθρων με πεπερασμένο χρόνο αναμονής που επιτρέπει τη μεταφορά πληθυσμού δόνησης αντιστοιχεί στο NOESY. Η παραλλαγή COZY της μη γραμμικής δισδιάστατης υπέρυθρης φασματοσκοπίας έχει χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό της περιεκτικότητας σε δευτερογενή δομή των πρωτεϊνών.

## Κεφάλαιο 3: Οργανολογία - Μετρήσεις

### 3.1 Χαρακτηριστικά στοιχεία των τεχνολογιών

Απορρόφηση: είναι ο λόγος της προσπίπτουσας έντασης φωτός στο υπό εξέταση δείγμα ( $I_0$ ) προς την ένταση φωτός που μεταδίδεται μέσω του δείγματος. Η απορρόφηση είναι παράμετρος χωρίς μονάδα, συνήθως μετριέται σε λογαριθμική κλίμακα και εξαρτάται από το μήκος κύματος.



$$A = -\log_{10}(I_0/I_1) \text{ ή } A = -\log_{10}\{(I_1 - I_d)/(I_0 - I_d)\}$$

αν λάβουμε υπόψη το σκοτεινό ή βασικό φάσμα. Όταν:

$$A=0.0 \text{ συνεπάγεται ότι } I_1=1.00 \cdot I_0$$

$$A=0.1 \text{ συνεπάγεται ότι } I_1=0.79 \cdot I_0$$

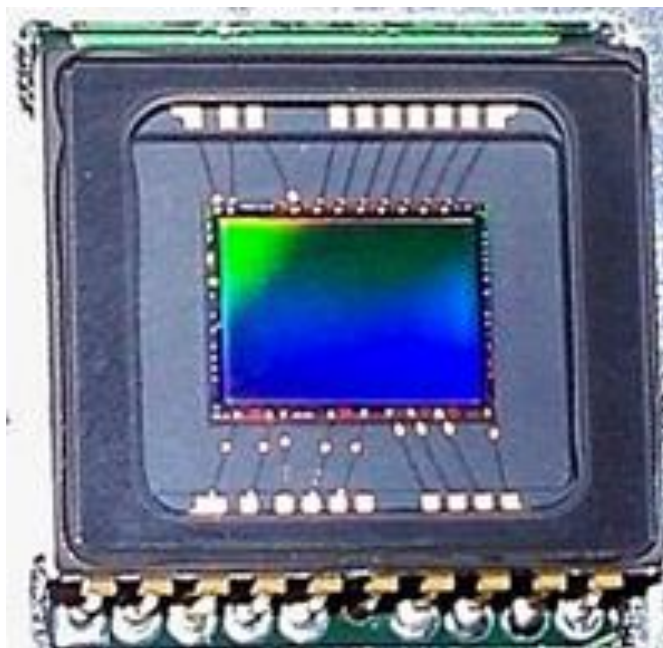
$$A=0.5 \text{ συνεπάγεται ότι } I_1=0.32 \cdot I_0$$

$$A=1.0 \text{ συνεπάγεται ότι } I_1=0.10 \cdot I_0$$

Μια συσκευή συζευγμένης φόρτισης (CCD) είναι μια συσκευή για την κίνηση του ηλεκτρικού φορτίου, συνήθως από το εσωτερικό της συσκευής σε μια περιοχή όπου μπορεί να χειριστεί το φορτίο, για παράδειγμα μετατροπή σε ψηφιακή τιμή.

Αυτό επιτυγχάνεται με τη «μετατόπιση» των σημάτων μεταξύ των σταδίων μέσα στη συσκευή ένα κάθε φορά. Οι CCD μετακινούν το φορτίο μεταξύ χωρητικών δοχείων στη συσκευή, με τη μετατόπιση να επιτρέπει τη μεταφορά φορτίου μεταξύ των κάδων.

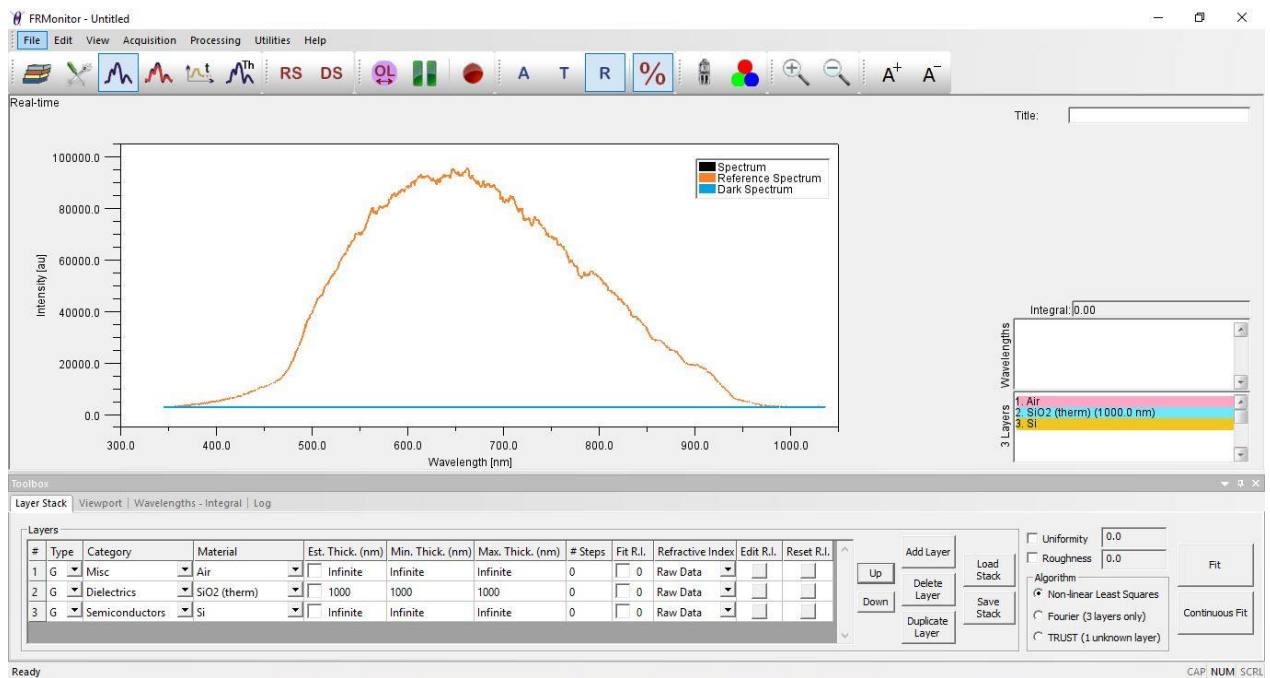
Το CCD είναι μια σημαντική τεχνολογία για την ψηφιακή απεικόνιση. Σε έναν αισθητήρα εικόνας CCD, τα εικονοστοιχεία αντιπροσωπεύονται από πυκνωτές MOS με p-doped. Αυτοί οι πυκνωτές είναι πολωμένοι πάνω από το όριο για αναστροφή όταν αρχίζει η λήψη εικόνας, επιτρέποντας τη μετατροπή των εισερχόμενων φωτονίων σε φορτία ηλεκτρονίων στη διεπιφάνεια ημιαγωγού-οξειδίου. το CCD χρησιμοποιείται στη συνέχεια για την ανάγνωση αυτών των χρεώσεων. Το CCD μαζί με τη σχισμή και το πλέγμα είναι τα βασικά συστατικά του φασματομέτρου.



Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Charge-coupled\\_device](http://en.wikipedia.org/wiki/Charge-coupled_device)

Το Φάσμα μηδενός (Dark Spectrum) είναι το φάσμα ανάκλασης όταν η πηγή φωτός είναι απενεργοποιημένη, η επίδραση του φωτός περιβάλλοντος στο φάσμα μέτρησης καταγράφεται.

Το Φάσμα μηδενός μαζί με το Φάσμα Αναφοράς χρησιμοποιούνται για τη μέτρηση της ανάκλασης και τον υπολογισμό του πάχους(ών) του φιλμ και των ιδιοτήτων του υπό διερεύνηση δείγματος. Το γεγονός ότι έχει καταγραφεί το Dark Spectrum επιτρέπει τη λειτουργία σε τυπικές συνθήκες δωματίου, με αναμμένα φώτα. Ωστόσο, συνιστάται να αποφεύγεται ο άμεσος φωτισμός του δείγματος από τα φώτα του δωματίου.



Το Φάσμα μηδενός (Dark Spectrum)

*Η λυχνία δευτερίου* είναι μια φωτεινή πηγή χαμηλής πίεσης εκκένωσης αερίου. Ένας λαμπτήρας δευτερίου χρησιμοποιεί ένα νήμα βολφραμίου και μια άνοδο που τοποθετούνται στις απέναντι πλευρές μιας δομής κιβωτίου νικελίου που έχει σχεδιαστεί για να παράγει το καλύτερο φάσμα εξόδου.

Σε αντίθεση με έναν λαμπτήρα πυρακτώσεως, το νήμα δεν είναι η πηγή φωτός στους λαμπτήρες δευτερίου. Αντίθετα, δημιουργείται ένα τόξο από το νήμα προς την άνοδο, μια παρόμοια διαδικασία με τους λαμπτήρες τόξου. Επειδή η λάμπα λειτουργεί σε υψηλές θερμοκρασίες, τα κανονικά γυάλινα περιβλήματα δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για περίβλημα.

Θα εμπόδιζαν επίσης την υπεριώδη ακτινοβολία. Αντίθετα, χρησιμοποιείται ένας φάκελος λιωμένου χαλαζία, γυαλί UV ή φθοριούχου μαγνησίου, ανάλογα με τη συγκεκριμένη λειτουργία του λαμπτήρα.[2] Ο λαμπτήρας δευτερίου εκπέμπει ακτινοβολία που εκτείνεται από 112 nm έως 900 nm, αν και το συνεχές φάσμα του είναι μόνο από 180 nm έως 370 nm.



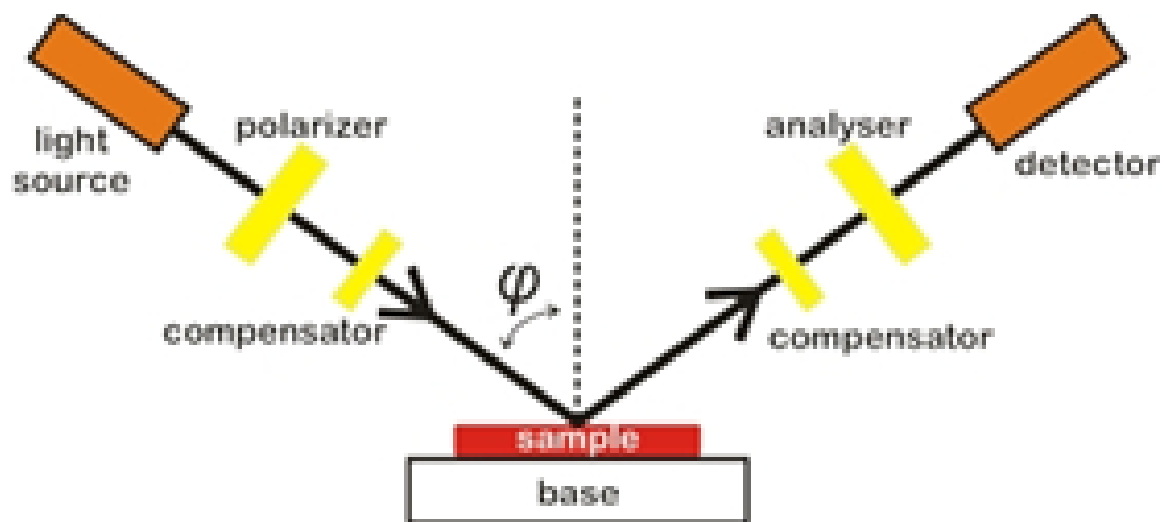
Η λυχνία δευτερίου

Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Deuterium\\_arc\\_lamp](http://en.wikipedia.org/wiki/Deuterium_arc_lamp)

Η ελλειψομετρία μετρά την αλλαγή της πόλωσης, συνήθως σε λειτουργία ανάκλασης. Η ακριβής φύση της αλλαγής πόλωσης καθορίζεται από τις ιδιότητες του δείγματος (πάχος, σύνθετος δείκτης διάθλασης ή τανυστής διηλεκτρικής λειτουργίας).

Αν και οι οπτικές τεχνικές είναι εγγενώς περιορισμένες σε περίθλαση, η ελλειψομετρία εκμεταλλεύεται τις πληροφορίες φάσης και την κατάσταση πόλωσης του φωτός και μπορεί να επιτύχει ανάλυση κάτω από nm. Στην απλούστερη μορφή της, η τεχνική είναι εφαρμόσιμη σε λεπτές μεμβράνες με πάχος μικρότερο από ένα νανόμετρο έως αρκετά μικρόμετρα. Τ

ο δείγμα πρέπει να αποτελείται από μικρό αριθμό διακριτών, καλά καθορισμένων στρωμάτων που είναι οπτικά ομοιογενή και ισότροπα. Η ελλειψομετρία είναι μια έμμεση μέθοδος, δηλαδή γενικά τα μετρούμενα  $\Psi$  και  $\Delta$  δεν μπορούν να μετατραπούν απευθείας στις οπτικές σταθερές του δείγματος. Κανονικά, πρέπει να γίνει ανάλυση μοντέλου. Χρησιμοποιώντας μια επαναληπτική διαδικασία (ελαχιστοποίηση ελαχίστων τετραγώνων) μεταβάλλονται άγνωστες οπτικές σταθερές και/ή παράμετροι πάχους και οι τιμές  $\Psi$  και  $\Delta$  υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις Fresnel. Οι υπολογισμένες τιμές και οι τιμές που ταιριάζουν καλύτερα με τα πειραματικά δεδομένα παρέχουν τις οπτικές σταθερές και τις παραμέτρους πάχους του δείγματος.



Η ελλειψομετρία

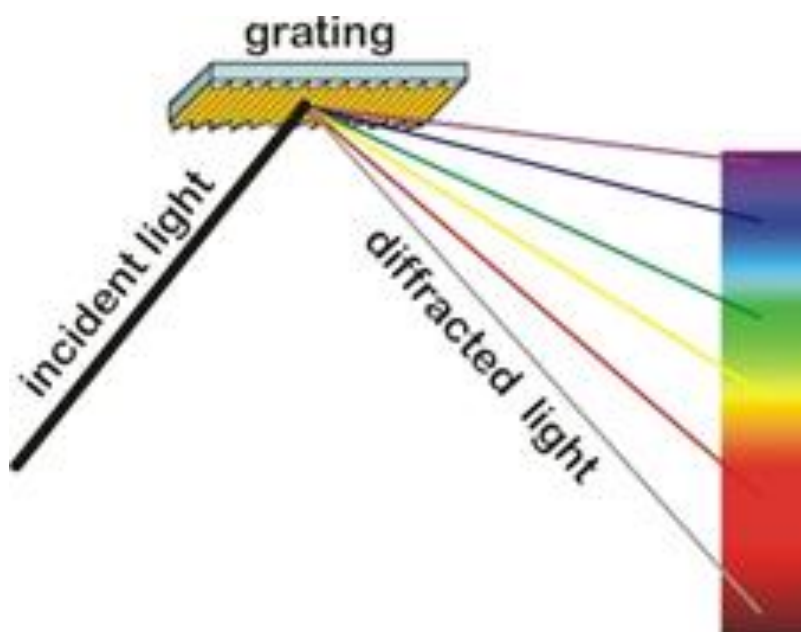


Το πλέγμα είναι ένα οπτικό εξάρτημα με περιοδική δομή, το οποίο διασπά και περιθλά το φως σε πολλές δέσμες που ταξιδεύουν σε διαφορετικές κατευθύνσεις.

Οι κατευθύνσεις αυτών των δεσμών εξαρτώνται από την απόσταση του πλέγματος και το μήκος κύματος του φωτός έτσι ώστε το πλέγμα να λειτουργεί ως στοιχείο διασποράς. Εξαιτίας αυτού, οι σχάρες χρησιμοποιούνται συνήθως σε μονοχρωμάτορες και φασματομέτρα.

Έτσι, όταν το φως προσπίπτει κανονικά στο πλέγμα, το περιθλασόμενο φως θα έχει μέγιστες γωνίες  $\theta_m$  που δίνονται από:

$$d \cdot \sin(\theta_m) = m \cdot \lambda$$



Το πλέγμα

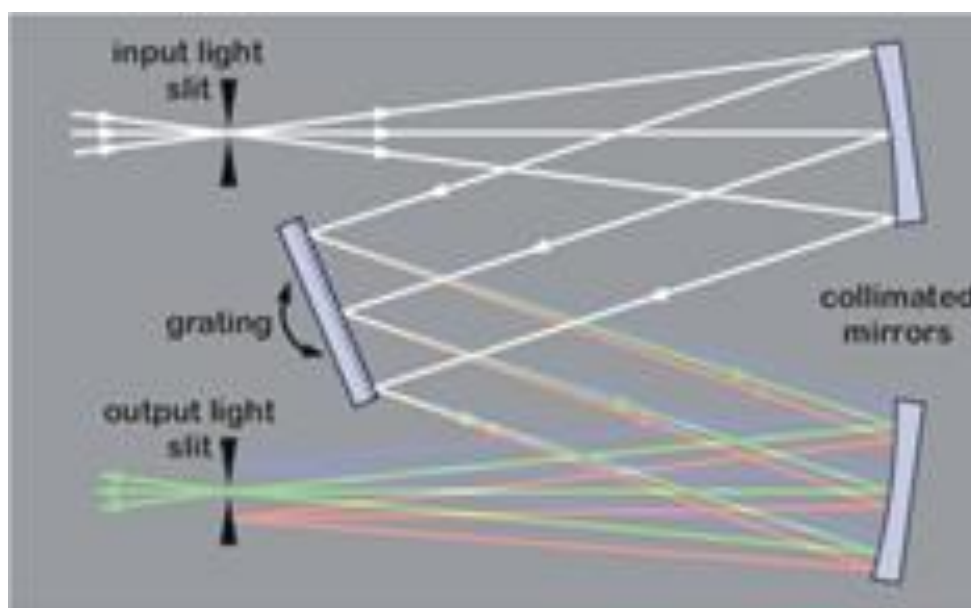
Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Diffraction\\_grating](http://en.wikipedia.org/wiki/Diffraction_grating)

Ο μονοχρωμάτορας είναι μια οπτική συσκευή που μεταδίδει μια μηχανικά επιλέξιμη στενή ζώνη μηκών κύματος φωτός ή άλλης ακτινοβολίας που επιλέγεται από ένα ευρύτερο φάσμα μηκών κύματος που είναι διαθέσιμο στην είσοδο.

Ένας μονόχρωμος μπορεί να χρησιμοποιήσει είτε το φαινόμενο της οπτικής διασποράς σε ένα πρίσμα, είτε αυτό της περίθλασης χρησιμοποιώντας ένα πλέγμα περίθλασης, για να διαχωρίσει χωρικά τα χρώματα του φωτός. Συνήθως διαθέτει μηχανισμό για να κατευθύνει το επιλεγμένο χρώμα σε μια σχισμή εξόδου.

Συνήθως η σχάρα ή το πρίσμα χρησιμοποιείται σε ανακλαστική λειτουργία. Ένα ανακλαστικό πρίσμα κατασκευάζεται φτιάχνοντας ένα ορθογώνιο πρίσμα (συνήθως, το μισό ενός ισόπλευρου πρίσματος) με τη μία πλευρά να καθρεφτίζεται. Το φως εισέρχεται μέσω της όψης της υποτεινουσας και ανακλάται πίσω μέσω αυτής, διαθλώντας δύο φορές στην ίδια επιφάνεια.

Η ολική διάθλαση και η ολική διασπορά είναι ίδια με αυτήν που θα συνέβαινε αν χρησιμοποιούταν ένα ισόπλευρο πρίσμα στον τρόπο μετάδοσης



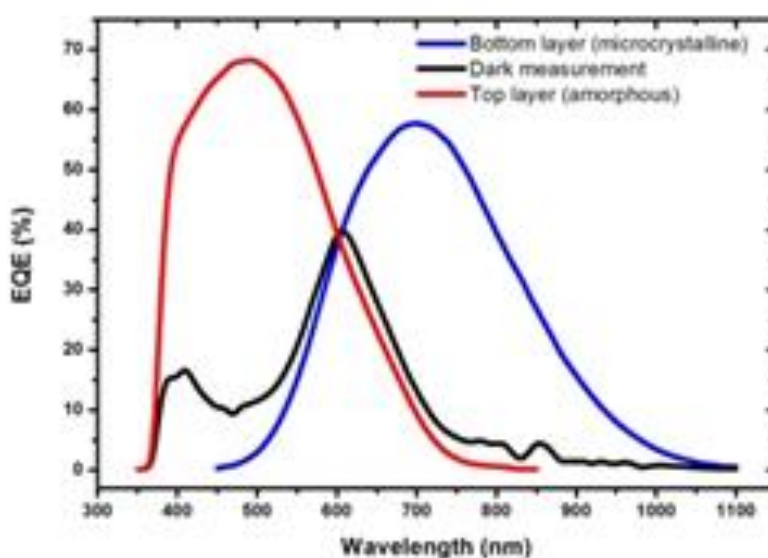
Ο μονοχρωμάτορας

Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
<http://en.wikipedia.org/wiki/Monochromator>

Η τιμή κβαντικής απόδοσης ενός ηλιακού κυττάρου (solar cell) υποδεικνύει την ποσότητα ρεύματος που θα παράγει το στοιχείο όταν ακτινοβοληθεί από φωτόνια συγκεκριμένου μήκους κύματος. Εάν η κβαντική απόδοση της κυψέλης ενσωματωθεί σε ολόκληρο το ηλιακό ηλεκτρομαγνητικό φάσμα, μπορεί κανείς να αξιολογήσει την ποσότητα ρεύματος που θα παράγει η κυψέλη όταν εκτεθεί στο ηλιακό φως. Συχνά εξετάζονται δύο τύποι κβαντικής απόδοσης ενός ηλιακού κυττάρου:

Η εξωτερική κβαντική απόδοση (EQE) είναι η αναλογία του αριθμού των φορέων φορτίου που συλλέγονται από το ηλιακό κύτταρο προς τον αριθμό των φωτονίων μιας δεδομένης ενέργειας που λάμπουν στο ηλιακό κύτταρο από έξω (προσπίπτοντα φωτόνια).

Η εσωτερική κβαντική απόδοση (IQE) είναι ο λόγος του αριθμού των φορέων φορτίου που συλλέγονται από το ηλιακό κύτταρο προς τον αριθμό των φωτονίων μιας δεδομένης ενέργειας που λάμπουν στο ηλιακό κύτταρο από έξω και απορροφώνται από το στοιχείο. Το IQE είναι πάντα μεγαλύτερο από το EQE. Ένα χαμηλό IQE υποδηλώνει ότι το ενεργό στρώμα του ηλιακού κυττάρου δεν μπορεί να χρησιμοποιήσει σωστά τα φωτόνια. Για να μετρηθεί το IQE, πρώτα μετράται το EQE της ηλιακής συσκευής, στη συνέχεια μετράει τη μετάδοση και την ανάκλασή του και συνδυάζει αυτά τα δεδομένα για να συμπεράνει το IQE.

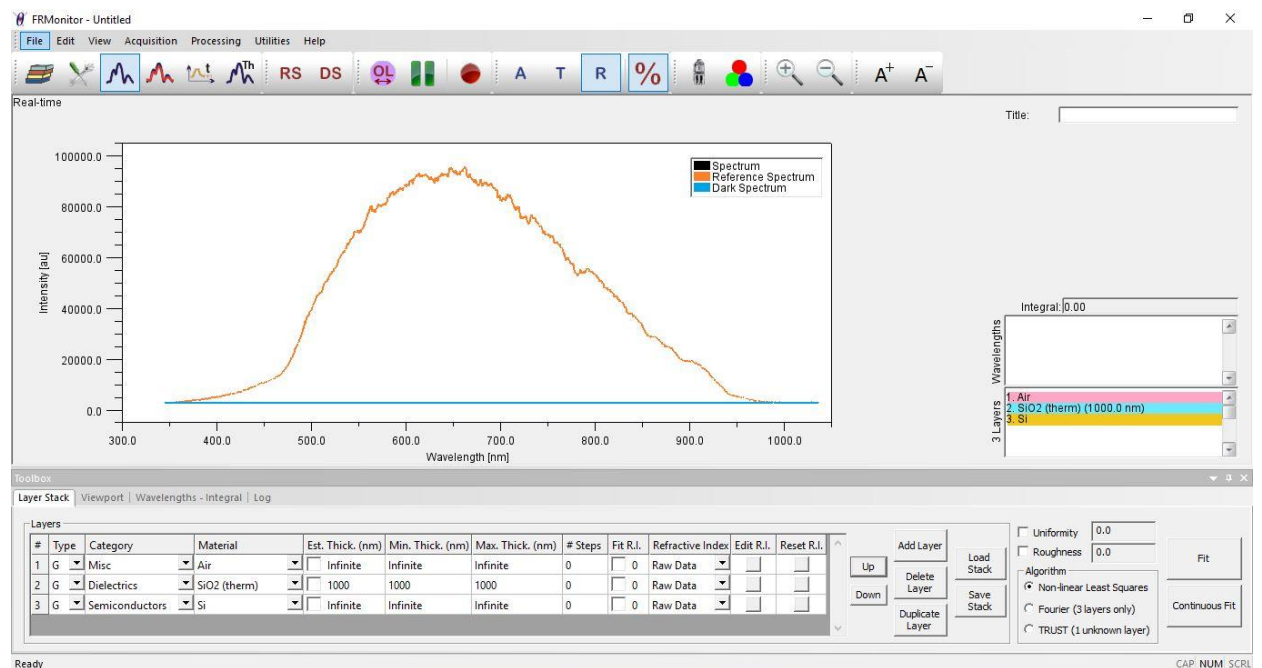


Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum\\_efficiency](http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_efficiency)

Φάσμα αναφοράς (reference spectrum) είναι το φάσμα ανάκλασης από ένα δείγμα με γνωστές ιδιότητες ανάκλασης.

Το Φάσμα Αναφοράς απαιτείται προκειμένου να εξαλειφθεί η λειτουργία μεταφοράς του φασματομέτρου, της πηγής φωτός και των οπτικών ινών. Επομένως, Η ανάκλαση πρέπει να καταγράφεται στις ίδιες συνθήκες δειγματοληψίας με το υπό διερεύνηση δείγμα.

Τυπικά δείγματα για την καταγραφή του Φάσματος Αναφοράς είναι το αλουμίνιο και το πυρίτιο.



Φάσμα αναφοράς (reference spectrum) για το Πυρίτιο Si

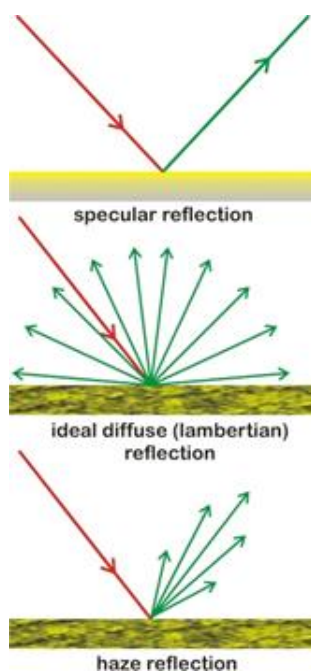
Η ανάκλαση (reflectance) είναι το κλάσμα της προσπίπτουσας οπτικής ισχύος που ανακλάται σε μια διεπαφή και εκφράζεται επίσης ως το τετράγωνο του συντελεστή ανάκλασης. Η ανάκλαση είναι πάντα θετικός πραγματικός αριθμός και είναι συνάρτηση του μήκους κύματος.

Στην περίπτωση λεπτών στρωμάτων, η ανάκλαση εξαρτάται επίσης από το πάχος της στρώσης. Όταν το φιλμ γίνει πολύ παχύ, η ανάκλαση φτάνει σε μια ορισμένη τιμή που

ονομάζεται ανακλαστικότητα. Η ανάκλαση μπορεί να είναι κατοπτρική ή/και διάχυτη ανάκλαση.

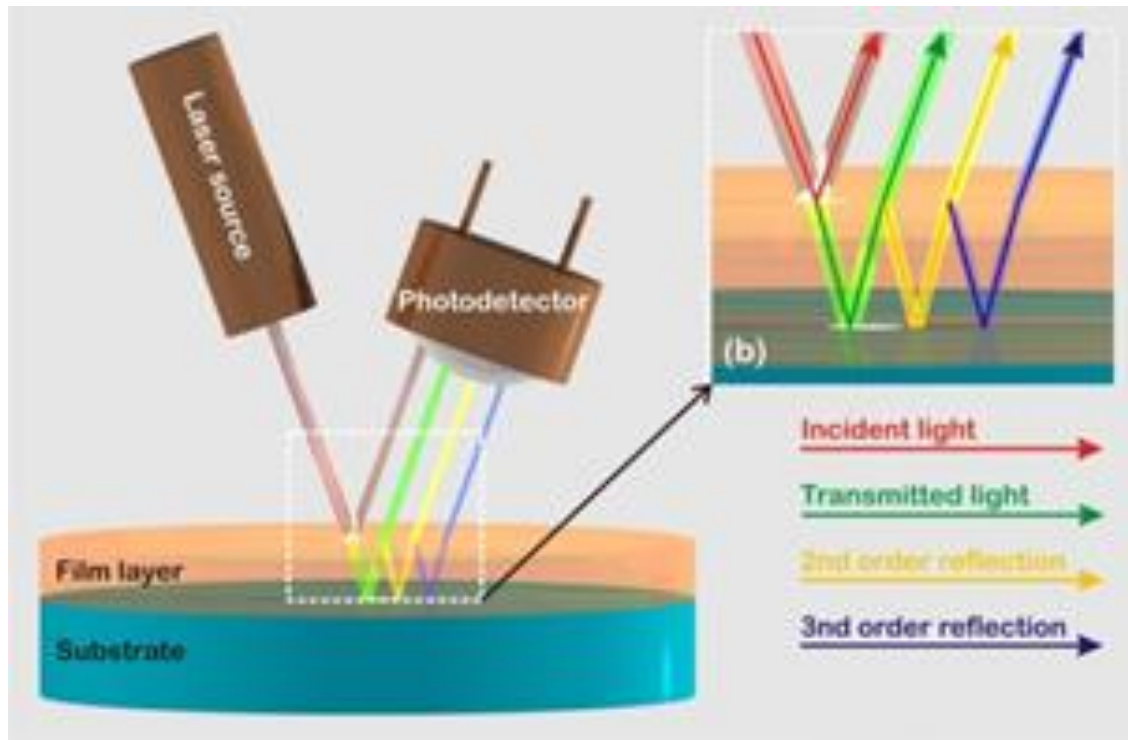
Η κατοπτρική ανάκλαση είναι η κατοπτρική ανάκλαση του φωτός από μια επιφάνεια. Στην κατοπτρική ανάκλαση, η κατεύθυνση του εισερχόμενου φωτός και η κατεύθυνση του εξερχόμενου φωτός που ανακλάται καθιστούν την ίδια γωνία σε σχέση με την επιφάνεια κανονική. Τυπικές κατοπτρικές επιφάνειες είναι το γυαλί και τα γυαλισμένα μέταλλα.

Η διάχυτη ανάκλαση είναι η ανάκλαση του φωτός από μια επιφάνεια έτσι ώστε μια προσπίπτουσα ακτίνα ανακλάται σε πολλές γωνίες και όχι σε μία μόνο γωνία όπως στην περίπτωση της κατοπτρικής ανάκλασης. Μια φωτισμένη ιδανική διάχυτη ανακλαστική επιφάνεια θα έχει ίση φωτεινότητα από όλες τις κατευθύνσεις στο ημισφαίριο που περιβάλλει την επιφάνεια (Λαμπέρτια ανάκλαση). Μεταξύ της κατοπτρικής ανάκλασης και της λαμπερτιανής ανάκλασης βρίσκεται η ανάκλαση θολότητας στην οποία το προσπίπτον φως διασκορπίστηκε γύρω από την κατοπτρική κατεύθυνση. Η τυπική διάχυτη επιφάνεια είναι η λευκή ματ βαφή.



Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
<http://en.wikipedia.org/wiki/Reflectivity>

Η συμβολομετρία απλού μήκους κύματος (SWI) είναι μια οπτική μεθοδολογία για την παρακολούθηση δυναμικών φαινομένων, (π.χ. στο SWI, το δείγμα τοποθετείται σε μια επίπεδη επιφάνεια και η δέσμη φωτός από μια οιονεί μονοχρωματική πηγή φωτός προσπίπτει στην επιφάνεια του δείγματος σε γωνία σχεδόν 90°.

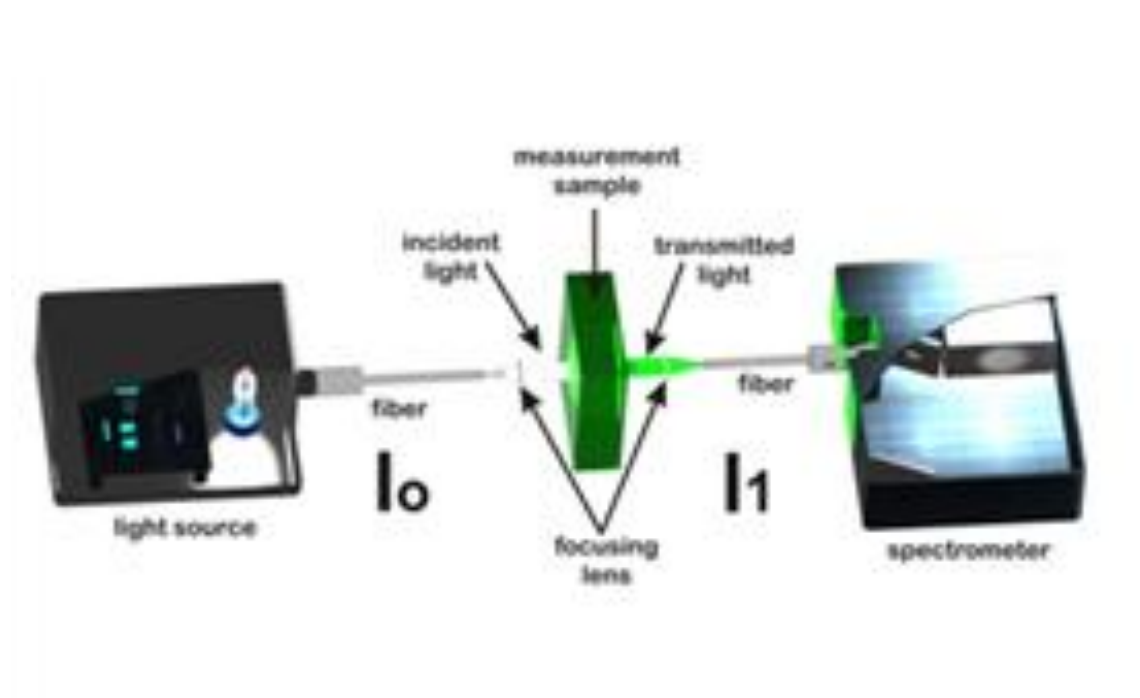


### Η συμβολομετρία

Το σήμα που καταγράφεται στον ανιχνευτή αποτελείται από το άθροισμα της ενέργειας από τις ανακλώμενες δέσμες, δηλαδή από τη διεπαφή δείγματος/αέρα, τη διεπαφή μεμβράνης/υποστρώματος, από τις εσωτερικές ανακλάσεις στο διαφανές φιλμ. Οποιοσδήποτε αλλαγές στις ιδιότητες του φιλμ προκαλούν αλλαγή στο σήμα του ανιχνευτή που καταγράφεται στον υπολογιστή μέσω της κάρτας απόκτησης δεδομένων.

Το φασματόμετρο είναι ένα όργανο που χρησιμοποιείται για τη μέτρηση των ιδιοτήτων του φωτός σε ένα συγκεκριμένο τμήμα του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος. Τα μικροσκοπικά φασματόμετρα αποτελούνται από μια σχισμή, ένα πλέγμα και μια διάταξη CCD και ελέγχονται πλήρως από υπολογιστές.

Η φασματική περιοχή που μπορεί να λειτουργήσει το φασματόμετρο ορίζεται από τη διάταξη CCD και το πλέγμα. Τα περισσότερα μικροσκοπικά φασματόμετρα λειτουργούν στα 350-1000nm χρησιμοποιώντας μια διάταξη Si CCD



Το φασματόμετρο

Διαπερατότητα είναι το κλάσμα του προσπίπτοντος φωτός που διέρχεται από ένα δείγμα.

Σε μορφή εξίσωσης,  $T=I_1/I_0$  όπου  $I_0$  είναι η ένταση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας και  $I_1$  είναι η ένταση της ακτινοβολίας που εξέρχεται από το δείγμα.



Ένας λαμπτήρας αλογόνου, είναι ένας λαμπτήρας πυρακτώσεως που έχει προστεθεί μικρή ποσότητα αλογόνου όπως ιώδιο ή βρώμιο. Ο συνδυασμός του αερίου αλογόνου και του νήματος βολφραμίου παράγει μια χημική αντίδραση κύκλου αλογόνου η οποία επαναεναποθέτει το εξατμισμένο βολφράμιο πίσω στο νήμα, αυξάνοντας τη διάρκεια ζωής του και διατηρώντας τη διαύγεια του περιβλήματος.

Ο λαμπτήρας αλογόνου παράγει ένα συνεχές φάσμα φωτός, από σχεδόν υπεριώδες έως βαθιά στο υπέρυθρο. Δεδομένου ότι το νήμα της λάμπας μπορεί να λειτουργήσει σε υψηλότερη θερμοκρασία από μια λάμπα μη αλογόνου, το φάσμα μετατοπίζεται προς το μπλε, παράγοντας φως με υψηλότερη αποτελεσματική θερμοκρασία χρώματος.

Για τη μείωση της ακούσιας έκθεσης στην υπεριώδη ακτινοβολία και για τη συγκράτηση θραυσμάτων θερμού λαμπτήρα σε περίπτωση βλάβης του εκρηκτικού λαμπτήρα, οι λαμπτήρες γενικής χρήσης έχουν συνήθως ένα γυάλινο φίλτρο που απορροφά την υπεριώδη ακτινοβολία πάνω ή γύρω από τον λαμπτήρα.



Ένας λαμπτήρας αλογόνου

Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Halogen\\_lamp](http://en.wikipedia.org/wiki/Halogen_lamp)

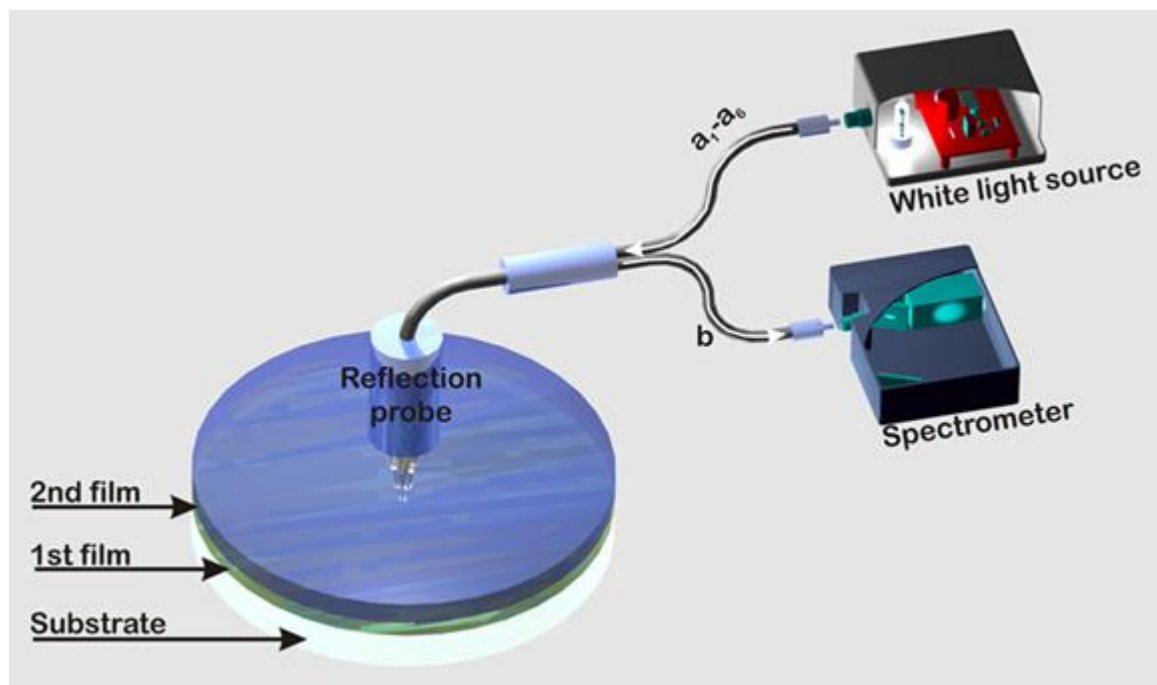


Η φασματοσκοπία ανάκλασης λευκού φωτός (WLRs) μοιάζει με το SWI, αλλά περιλαμβάνει, αντί για λέιζερ (μονού μήκους κύματος), μια πηγή φωτός VIS-NIR (ή ευρύτερο φάσμα εάν χρειάζεται) και ένα μικροσκοπικό φασματόμετρο που λειτουργεί από υπολογιστή, που λειτουργεί στο αντίστοιχο φάσμα, αντί για ένας φωτοανιχνευτής.

Το φως που βγαίνει από την πηγή φωτός οδηγείται σε έναν ανιχνευτή ανάκλασης που οδηγεί το λευκό φως στο υπό διερεύνηση δείγμα. Το δείγμα φωτίζεται κατακόρυφα μέσω μιας δέσμης 6 ινών διατεταγμένων σε κύκλο και το ανακλώμενο φως συλλέγεται από την ίνα που βρίσκεται στο κέντρο του κύκλου και οδηγείται στο φασματόμετρο.

Οι ίνες φωτισμού και η ίνα που συλλέγει το φως ανάκλασης αποτελούν τον καθετήρα ανάκλασης. Το τυπικό υπό ανάλυση δείγμα αποτελείται από μια στοιβία διαφανών και ημιδιαφανών μεμβρανών πάνω από ένα κατάλληλο ανακλαστικό ή διαβιβαστικό υπόστρωμα (π.χ. γκοφρέτα Si, γυάλινη πλάκα μικροσκοπίου).

Το ανακλώμενο φως καταγράφεται συνεχώς και αναλύεται από το ενσωματωμένο φασματόμετρο. Το φάσμα ανάκλασης επιτρέπει τη μέτρηση του πάχους του φιλμ και των οπτικών ιδιοτήτων των φιλμ.

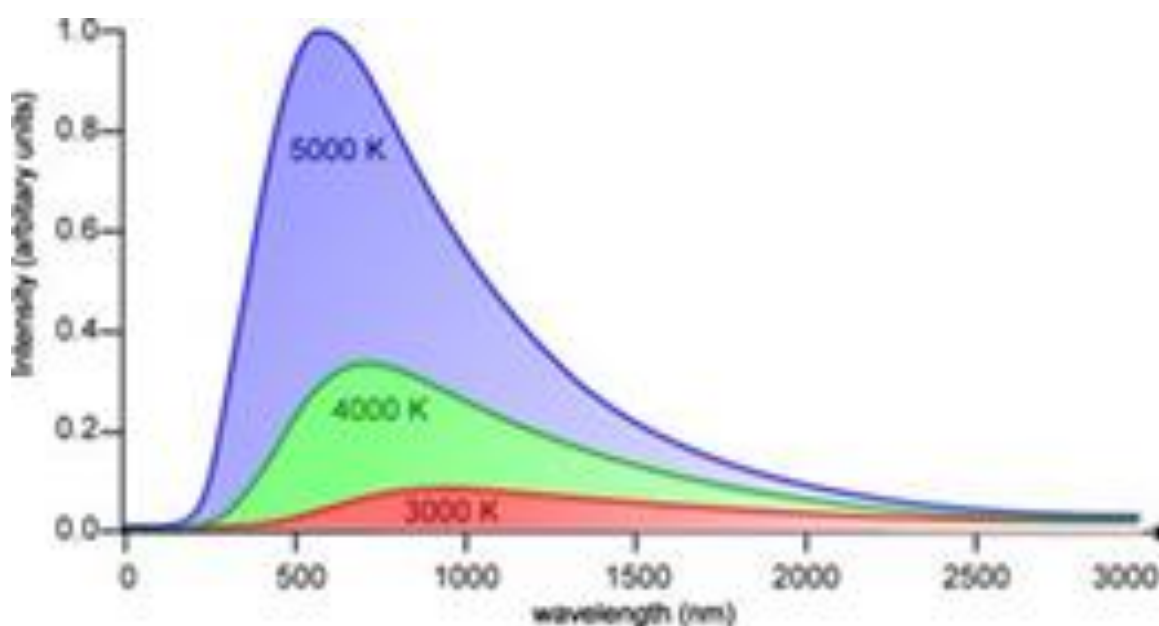


Η φασματοσκοπία ανάκλασης λευκού φωτός (WLRs)

Η θερμοκρασία χρώματος είναι ένα χαρακτηριστικό του ορατού φωτός που έχει σημαντικές εφαρμογές στον φωτισμό, τη φωτογραφία, τη βιντεοσκόπηση, τις εκδόσεις, τη βιομηχανία, την αστροφυσική, την κηπουρική και άλλους τομείς.

Η θερμοκρασία χρώματος μιας πηγής φωτός είναι η θερμοκρασία ενός ιδανικού ψυγείου μαύρου σώματος που εκπέμπει φως παρόμοιας απόχρωσης με εκείνη της πηγής φωτός. Στην πράξη, η θερμοκρασία χρώματος έχει νόημα μόνο για πηγές φωτός που στην πραγματικότητα αντιστοιχούν κάπως στην ακτινοβολία κάποιου μαύρου σώματος, όπως μια λάμπα πυρακτώσεως.

Οι θερμοκρασίες χρώματος άνω των 5.000 K ονομάζονται ψυχρά χρώματα (γαλαζωπό λευκό), ενώ οι χαμηλότερες θερμοκρασίες χρώματος (2.700–3.000 K) ονομάζονται ζεστά χρώματα (κίτρινο λευκό έως κόκκινο).



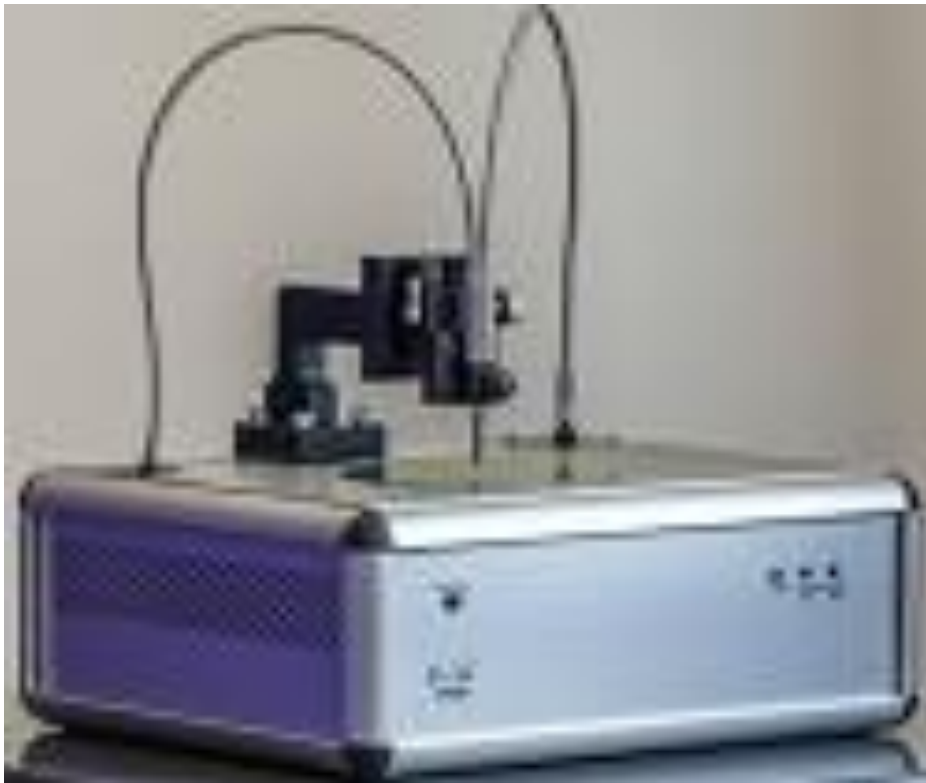
### Η θερμοκρασία χρώματος

Περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να βρείτε στη διεύθυνση:  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Color\\_temperature](http://en.wikipedia.org/wiki/Color_temperature)

### 3.2 Οργανολογία

Το επιστημονικό όργανο FR-pRo, είναι ένα πλήρως αναδιαμορφώσιμο και επεκτάσιμο εργαλείο, που καλύπτει όλες τις ανάγκες των πελατών για Χαρακτηρισμό Φιλμ (πάχος, οπτικές ιδιότητες, χρώμα), Απορρόφηση, Φθορισμό, Ανάκλαση.

Ο τελικός χρήστης ορίζει τη φασματική περιοχή του εργαλείου σε οποιοδήποτε φασματικό καθεστώς εντός του εύρους 190-2500 nm. Το εργαλείο θα μπορούσε να αναβαθμιστεί περαιτέρω με αξεσουάρ μέσω μιας ευρείας λίστας εξαρτημάτων που περιλαμβάνει: θερμικό κιτ, κιτ υγρών, μονάδα εστίασης, σφαίρες ενσωμάτωσης κλπ.



Το επιστημονικό όργανο FR-pRo

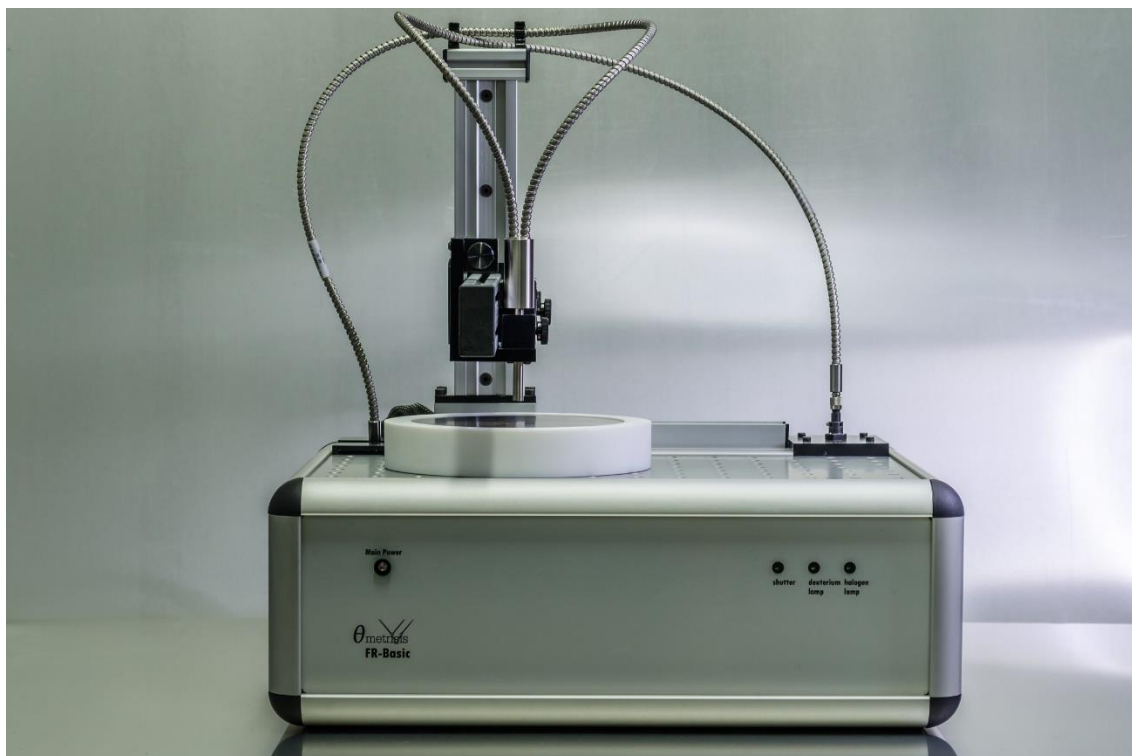
Το FR-pRo είναι μια αρθρωτή και επεκτάσιμη σειρά οργάνων μέτρησης που είναι προσαρμοσμένα στις ανάγκες των πελατών και μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε ένα ευρύ φάσμα διαφορετικών εφαρμογών μέσω τυπικών μετρήσεων

απορρόφησης/διαπερατότητας και ανάκλασης, έως χαρακτηρισμό φιλμ σε περιβάλλον ελεγχόμενης θερμοκρασίας και περιβάλλοντος.

Τα εργαλεία FR-pRo έχουν σχεδιαστεί προσεκτικά για να συναρμολογούνται από:

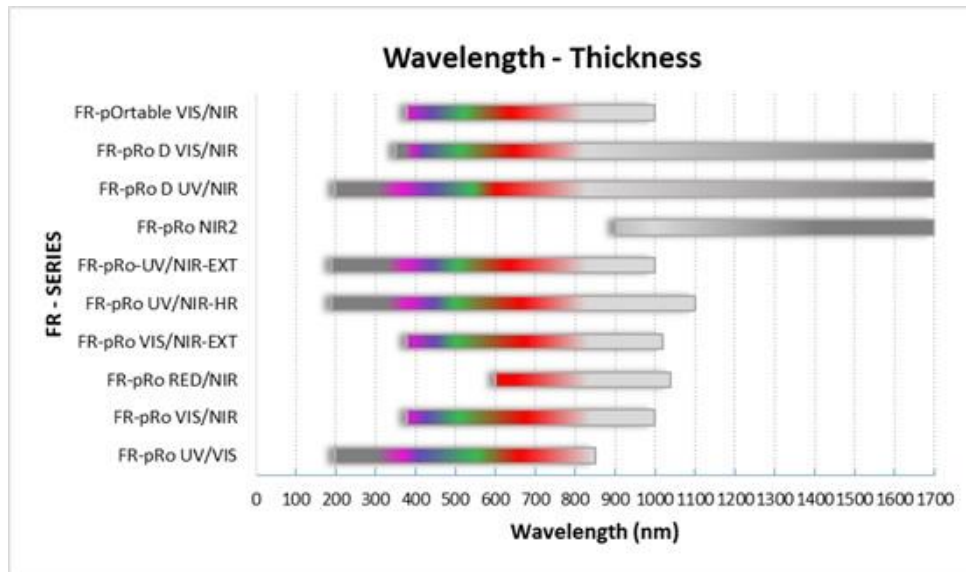
- Η Μονάδα Πυρήνα και
- Modules & Kits από τη λίστα Measurement Configuration & Accessories.

Επιλέγοντας ή συνδυάζοντας τις διάφορες βασικές μονάδες και τις διαφορετικές μονάδες και κιτ μπορεί κανείς να κάνει την πιο κατάλληλη ρύθμιση μέτρησης και χαρακτηρισμού για τις ανάγκες του/της.

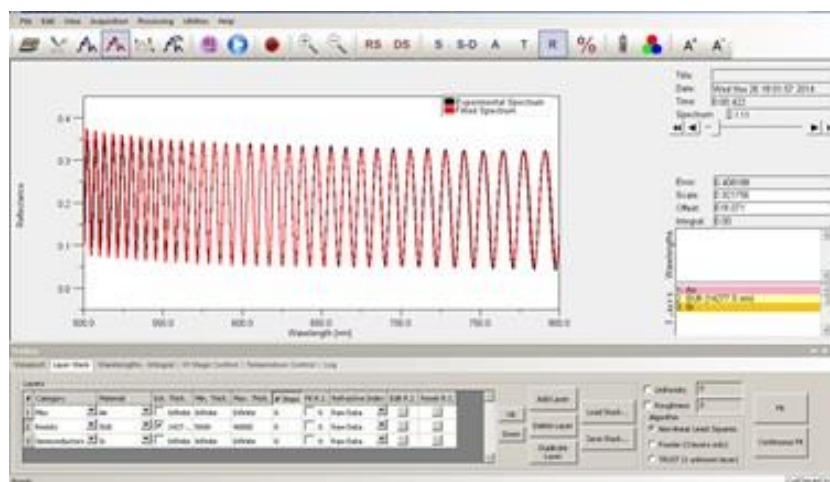
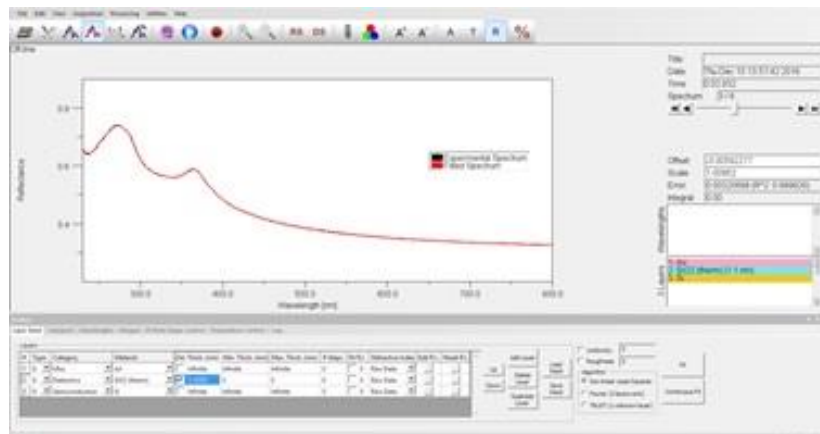


Το επιστημονικό όργανο FR-pRo στο εργαστήριο ZA211 στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Αττικής Τμήμα ΜΒΣΠ

## Προδιαγραφές οργάνου



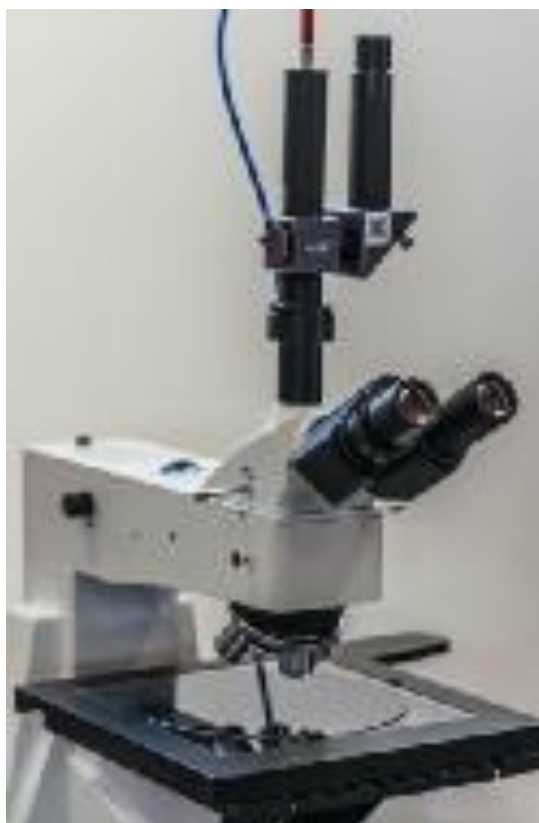
## Τυπικά αποτελέσματα



Το επιστημονικό όργανο FR-μProbe, είναι ένα αυτόνομο εργαλείο για εφαρμογές που απαιτούν μέγεθος σημείου τόσο μικρό όσο λίγα μικρά, π.χ. επιφάνειες με μικρομοτίβα, δείγματα που παρουσιάζουν υψηλό επίπεδο φωτός σκέδασης και πολλά άλλα.

Το FR-uProbe, απλά συνδέεται στον προσαρμογέα C-mount των περισσότερων εμπορικά διαθέσιμων οπτικών μικροσκοπίων (ανακλαστικότητα ή/και μετάδοση) και παρέχει:

- ✓ Φασματοσκοπικές μετρήσεις σε πραγματικό χρόνο στην περιοχή μήκους κύματος που υποστηρίζονται από το μικροσκόπιο
- ✓ Πάχος φιλμ, οπτικές ιδιότητες, μετρήσεις ανομοιομορφίας
- ✓ Απεικόνιση με USB και έγχρωμη κάμερα υψηλής ευκρίνειας και ποιότητας
- ✓ Μη επηρεασμένη απόδοση του μικροσκοπίου

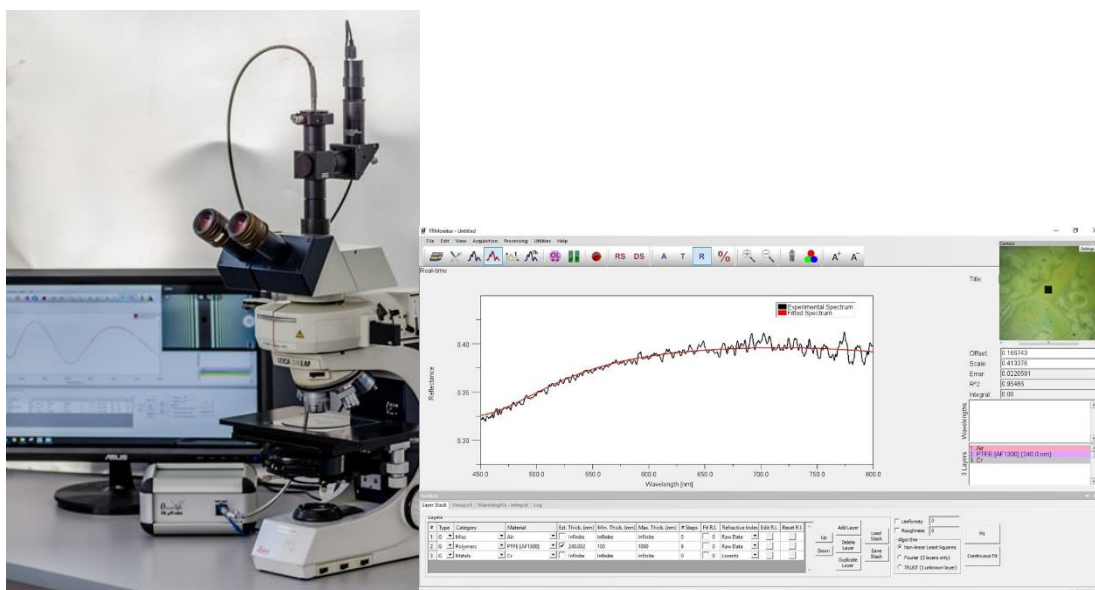


Το επιστημονικό όργανο FR-μProbe στο εργαστήριο ZA211 στο Πανεπιστήμιο  
Δυτικής Αττικής Τμήμα ΜΒΣΠ



Το FR-μProbe είναι μια μικροσκοπική λύση με το κλειδί στο χέρι για οπτικές μετρήσεις σε διάφορους τρόπους λειτουργίας όπως απορρόφηση, διαπερατότητα, ανάκλαση και φθορισμός μέσω οπτικού μικροσκοπίου. Το εργαλείο ενσωματώνει δύο οπτικά στοιχεία: ένα φασματόμετρο που λειτουργεί στη φασματική περιοχή που υποστηρίζεται από το μικροσκόπιο και μια μονάδα που είναι τοποθετημένη στη θύρα C οποιουδήποτε τριοφθαλμικού οπτικού μικροσκοπίου.

Η πηγή φωτός που χρησιμοποιείται για τις μετρήσεις είναι αυτή που είναι διαθέσιμη στο οπτικό μικροσκόπιο. Η περιοχή μεγέθους από την οποία συλλέγεται το σήμα ορίζεται από τη μεγέθυνση του αντικειμενικού φακού που χρησιμοποιείται. Τυπικά για έναν αντικειμενικό φακό 50X, η παρακολουθούμενη περιοχή είναι ένας κύκλος με διάμετρο  $\sim 5\mu\text{m}$ . Η περιοχή συλλογής θα μπορούσε να μειωθεί περαιτέρω χρησιμοποιώντας αντικειμενικούς φακούς μεγαλύτερης μεγέθυνσης ή μικρότερου διαφράγματος.

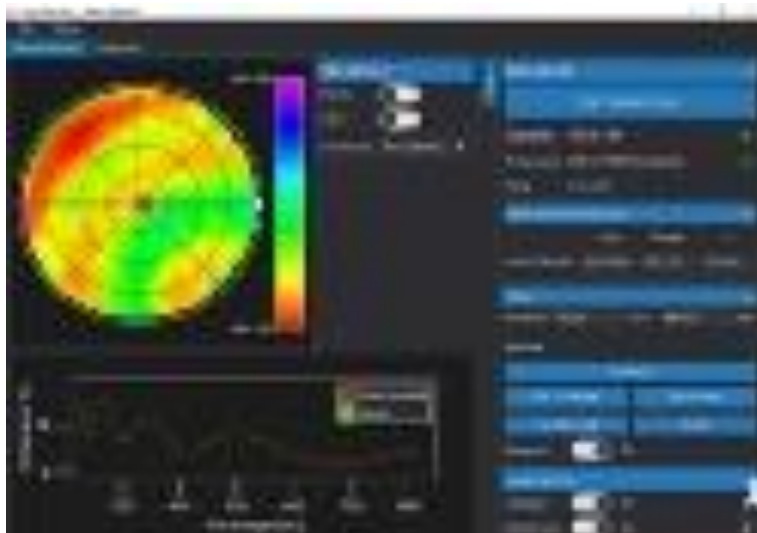


### Επεξεργασία μετρήσεων με το επιστημονικό όργανο FR-μProbe στο εργαστήριο ΖΑ211 στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Αττικής Τμήμα ΜΒΣΠ

Μέσω της επεξεργασίας των μετρήσεων ανάκλασης υπολογίζονται το πάχος της μεμβράνης και οι οπτικές σταθερές ( $n$  &  $k$ ) των περιοχών των υπό διερεύνηση πολλαπλών λεπτών και παχιών φιλμ,

Το FR-Monitor v4.0, είναι η πλατφόρμα λογισμικού ελέγχου και επεξεργασίας δεδομένων για όλα τα εργαλεία FR.

Ο χρήστης μπορεί να πραγματοποιήσει μεμονωμένες μετρήσεις ή να καταγράψει δυναμικά σε πραγματικό χρόνο μια διαδικασία π.χ. μετρήστε το πάχος και τις οπτικές ιδιότητες των στοίβων πολλαπλών στρώσεων, μετρήστε το Tg πολυμερών, καταγράψτε την απορρόφηση σε σχέση με το χρόνο μιας βιολογικής ή χημικής αντίδρασης.



Το λογισμικό FR-Monitor v4.0

### Περιγραφή

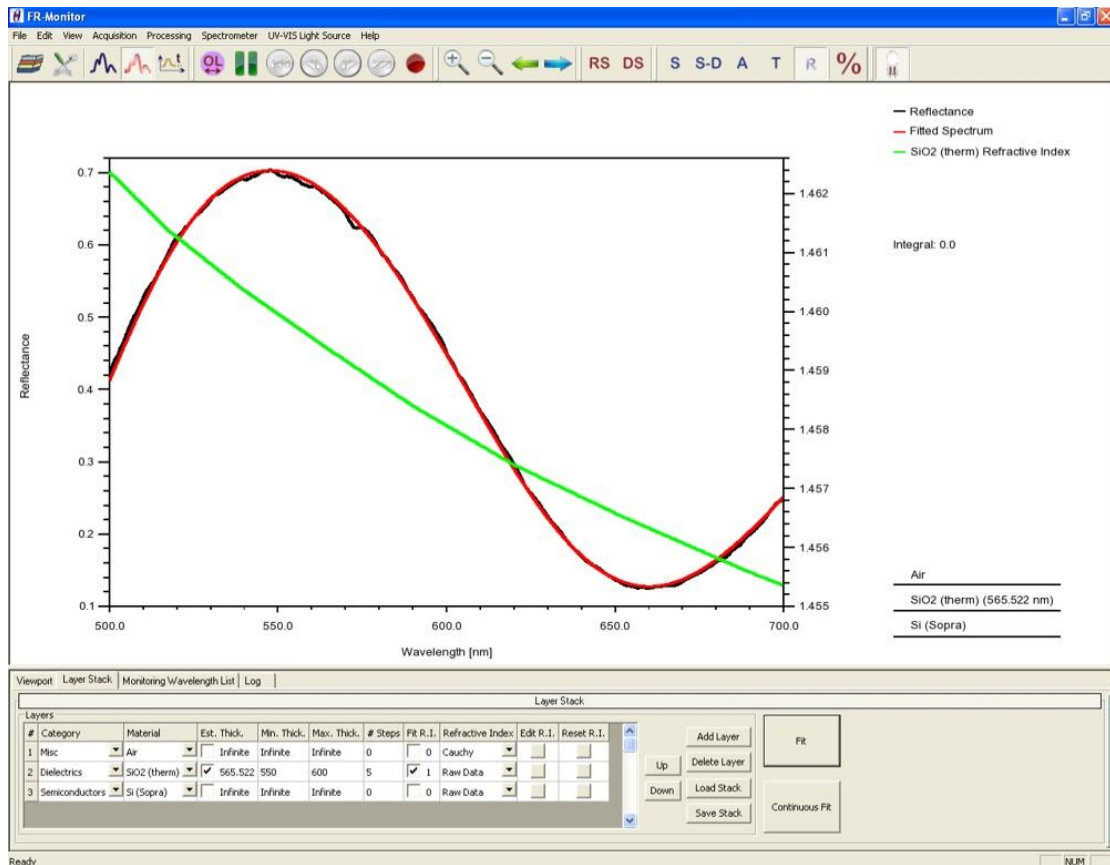
Το FR-Monitor (Εικόνα) είναι ένα λογισμικό που αναπτύχθηκε από την ThetaMetrisis και υποστηρίζει όλα τα εργαλεία της σειράς FR. Εφαρμόζεται σε Visual C++ και είναι κατάλληλο για λειτουργικά συστήματα Windows (Windows XP/Vista/ 7 32/64bit). Το FR-Monitor έχει σχεδιαστεί ως μια γενική πλατφόρμα λογισμικού για τον πλήρη έλεγχο όλων των υποσυστημάτων εργαλείων FR: φασματόμετρα, πηγές φωτός, υποστηρικτικές ηλεκτρονικές μονάδες όπως ελεγκτής θερμοκρασίας, αισθητήρες υγρασίας κ.λπ. Το FR-Monitor υποστηρίζει διάφορους τρόπους λειτουργίας, όπως πχ.

- Πεδίο (ακατέργαστο φάσμα μέτρησης),
- Scope-Dark (ακατέργαστη μέτρηση μείον σκοτεινό φάσμα),
- Λειτουργία απορρόφησης,
- Λειτουργία μετάδοσης,



➤ Λειτουργία ανάκλασης.

Σε όλους τους τρόπους λειτουργίας υποστηρίζονται οι ακόλουθες λειτουργίες α) καταγραφή φασμάτων, β) παρακολούθηση ειδικού μήκους κύματος, γ) ενσωμάτωση συγκεκριμένου τμήματος του φάσματος.



Χρήση του λογισμικού FR-Monitor στο εργαστήριο ZA211 στο Πανεπιστήμιο  
Δυτικής Αττικής Τμήμα ΜΒΣΠ

## Κεφάλαιο 4: Παρουσίαση μετρήσεων σε πλαστικά στη Βιομηχανία - Συμπεράσματα

### 4.1 Χαρακτηρισμός μεμβρανών Si

#### Χρήση φασματοσκοπίας ανάκλασης λευκού φωτός (WLR)

Μέσα & Μέθοδοι: Τα δείγματα αιωρήθηκαν με μεμβράνες Si σε γκοφρέτες Si με ενδιάμεσες στρώσεις SiO<sub>2</sub>. Το πυρίτιο απορροφά στο ορατό εύρος του φάσματος και για χοντρές μεμβράνες θα πρέπει να γίνονται μετρήσεις στο εύρος NIR. Οι μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν με ένα FR-Basic IR που λειτουργεί στο φασματικό εύρος 900-1700nm.

Ο καθετήρας ανάκλασης που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα αξιολόγηση έχει διάμετρο οπτικής ανάκλασης ~500X500μm<sup>2</sup>

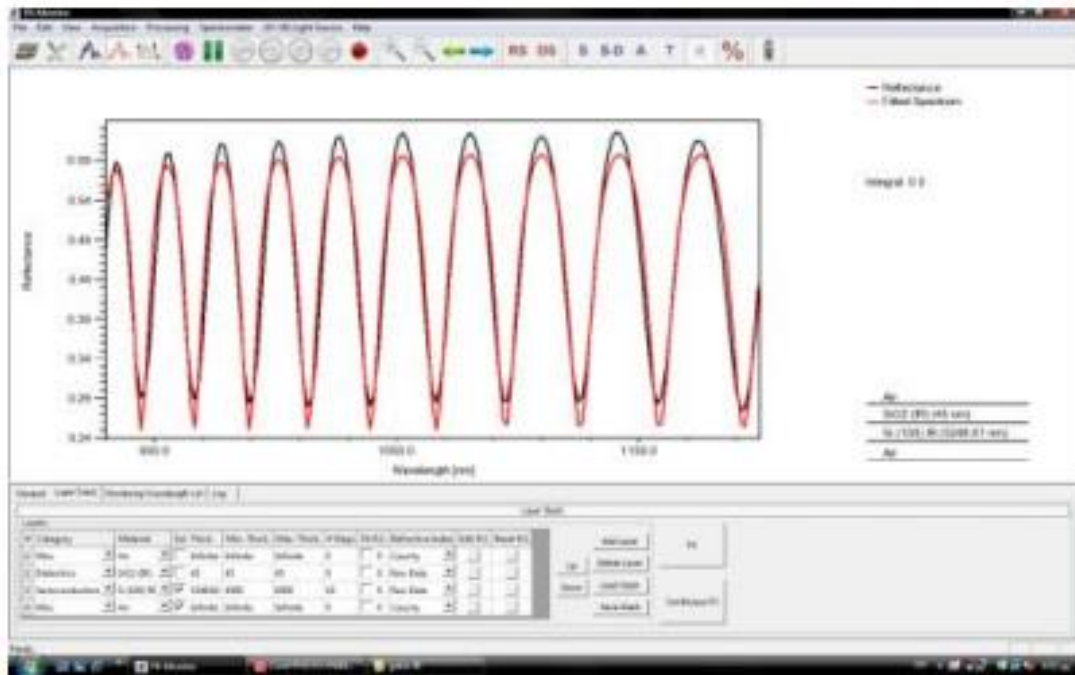
Αποτελέσματα: Στο επόμενο σχήμα, ένα αντιπροσωπευτικό φάσμα ανάκλασης για το εύρος 900-1700 nm από μια μεμβράνη Si είναι εικονογραφημένο. Η επιφάνεια της μεμβράνης είναι 300X900μm<sup>2</sup>



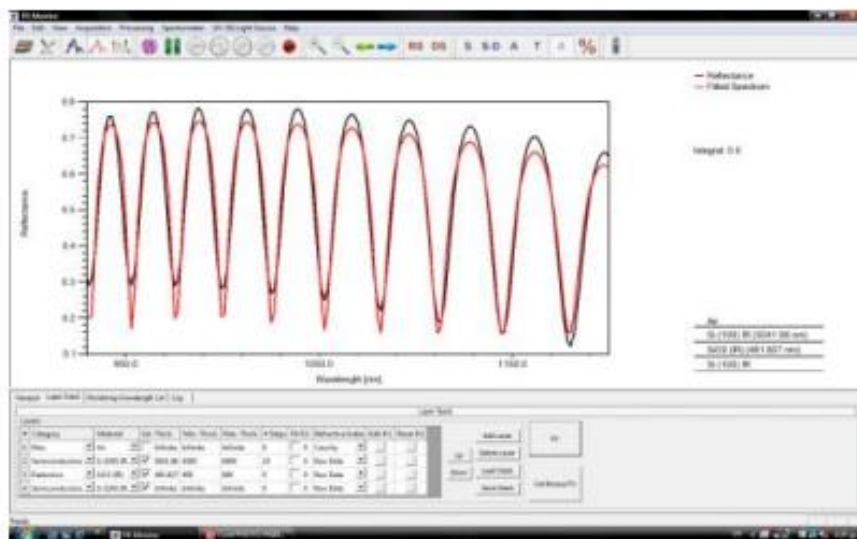
Το δείγμα που εξετάστηκε σε αυτήν την περίπτωση ήταν Air/Si(100)/SiO<sub>2</sub>/Air, δηλ.

αναρτημένη μεμβράνη Si σε ένα εξαιρετικά λεπτό στρώμα SiO<sub>2</sub>, κατασκευασμένο με χάραξη στην πίσω πλευρά του υποστηρικτικού Si.

Στο επόμενο σχήμα εμφανίζεται μια μεταβολή στη φασματική περιοχή (930-1200 nm) που χρησιμοποιείται για την προσαρμογή. Το πάχος της μεμβράνης Si είναι 5,25 μm.



Στο επόμενο σχήμα παρουσιάζεται το πειραματικό και προσαρμοσμένο φάσμα ανάκλασης από μία δομή SOI. Η κοιλότητα είναι 300X900μm<sup>2</sup>. Τα υπολογιζόμενα πάχη για το επάνω στρώμα Si και το στρώμα SiO<sub>2</sub> είναι 5,04 μm και 0,48 μm αντίστοιχα.



### Συμπεράσματα

Η μεθοδολογία WLRS είναι ικανή να μετρήσει το φιλμ πάχους μεμβρανών Si σε μεγάλο πάχος και εύρος που ξεκινά από μερικές δεκάδες nm έως αρκετές microns (ανάλογα με τη διαμόρφωση Fr-Basic).

Η χάραξη KOH παράγει επιφανειακή χάραξη που είναι επίσης υψηλό για τη μεθοδολογία WLRS. Σε περίπτωση οπισθοχάρακωσης ή μπροστινής χάραξη κοιλότητες/μεμβράνες Si διπλής όψης πρέπει να χρησιμοποιούνται δομές.

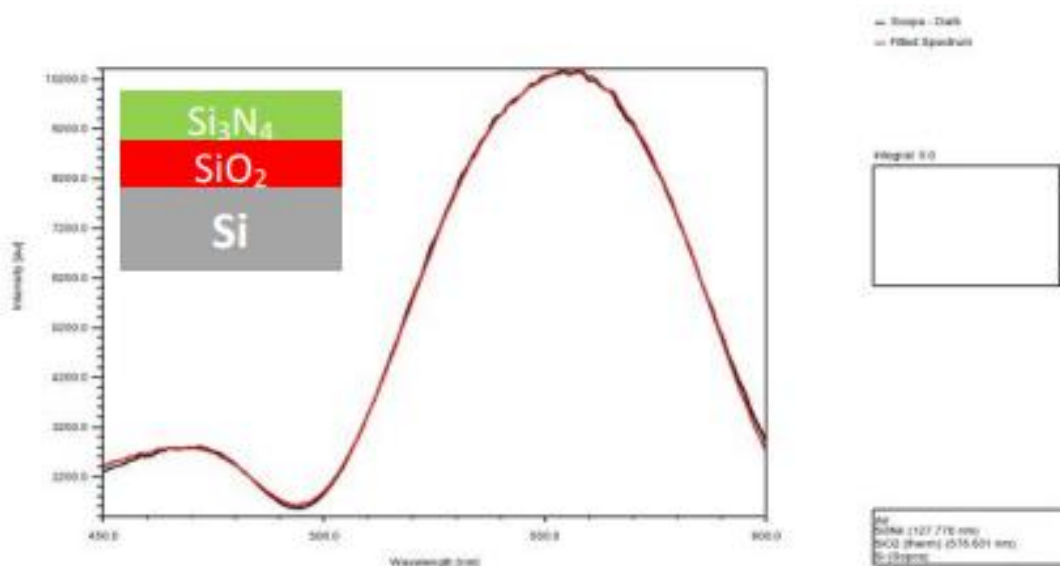
## 4.2 Μετρήσεις σε πολυμερή τη Νανοτεχνολογία

### Μέτρηση πάχους στρώμας πολυμερών φιλμ με White Light Φασματοσκοπία ανάκλασης (WLRS)

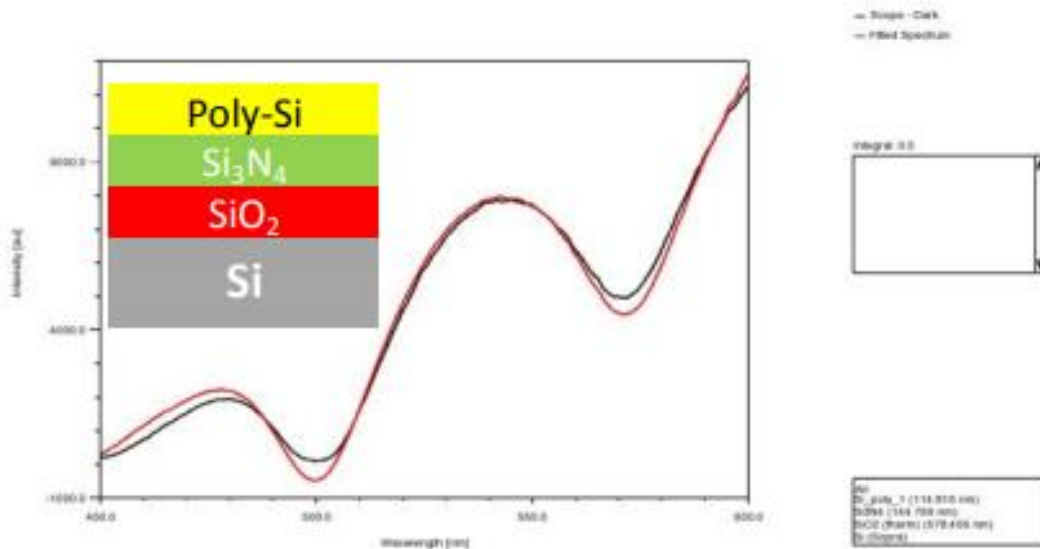
Μέσα & Μέθοδοι: Το WLRS εισάγεται για τη μέτρηση του πάχους φιλμ σε περίπτωση στρώμας πολυμερών με διηλεκτρικές και ημιαγωγικές μεμβράνες. Όλες οι μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν με FR-Basic στα 400-1000nm. Ο ανιχνευτής ανάκλασης είχε μέγεθος ενεργού σημείου 1 mm σε διάμετρο. Το δείγμα ήταν ένα δισκίο Si με περιοχές που αποτελούνται από  $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$ , poly-Si / $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$ , PMMA/poly-Si / $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$ .

Για τις μετρήσεις αναφοράς χρησιμοποιήθηκε καθρέφτης με επίστρωση Al υψηλής ανακλαστικότητας (NT01-913-533, Edmund Optics).

Αποτελέσματα: Στο επόμενο σχήμα εμφανίζεται το φάσμα ανάκλασης από μια στρώμα  $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$  σε δισκίο Si. Μετά τους υπολογισμούς τα πάχη ήταν: 576,63 nm για το  $\text{SiO}_2$  και 127,78 nm για το  $\text{Si}_3\text{N}_4$ .



Στο επόμενο σχήμα εμφανίζεται το φάσμα ανάκλασης από τη δομή. Εμφανίζεται η στοιβία πολυμερών poly-Si/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub> στο Si. Τα υπολογιζόμενα πάχη ήταν: 578,45 nm για το SiO<sub>2</sub> ενώ 144,77 nm για το Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> και 114,82 nm για το πολυκρυσταλλικό Si.

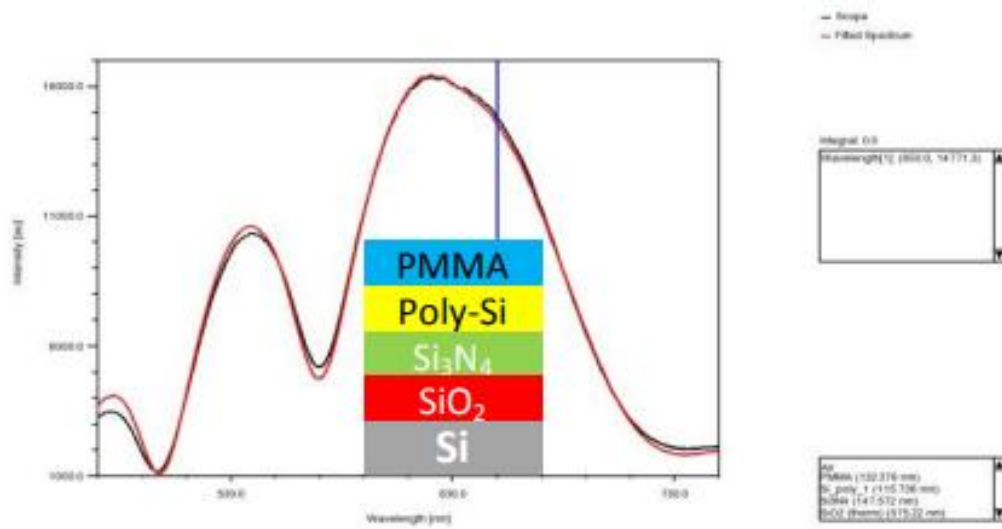


Στο επόμενο σχήμα εμφανίζεται το φάσμα ανάκλασης από μια στοιβία PMMA/poly Si/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub> (4 στρώματα) στο Si.

Τα υπολογιζόμενα πάχη ήταν: 575,22 nm για SiO<sub>2</sub> και 147,57 nm για το Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, 115,73 nm για το πολυκρυσταλλικό Si και 132,38 nm για το PMMA.

Το φιλμ υπολογίζεται ταυτόχρονα χωρίς προηγούμενη γνώση του πάχους του φιλμ σε όλες τις περιπτώσεις.

Σε κάθε περίπτωση, τα υπολογισμένα πάχη του φιλμ ήταν σε πολύ καλή συμφωνία με τις τιμές που ελήφθησαν με φασματοσκοπία ελλειψομετρία (<1% διαφορά).



Συμπεράσματα: Το πάχος τουλάχιστον 4 πολυμερών διαδοχικών στρώσεων μπορεί να υπολογιστεί ταυτόχρονα.

### 4.3 Προσδιορισμός πάχους του στρώματος βαφής αυτοκινήτου

#### Προσδιορισμός πάχους του στρώματος βαφής διαφανούς επίστρωσης του αυτοκινήτου

Εισαγωγή: Η ομοιομορφία πάχους του διαφανούς στρώματος επίστρωσης (το στρώμα που προστατεύει το στρώμα βαφής ενός αυτοκινήτου), είναι υπεύθυνη για την τελική ποιότητα επιφάνειας ενός αυτοκινήτου.

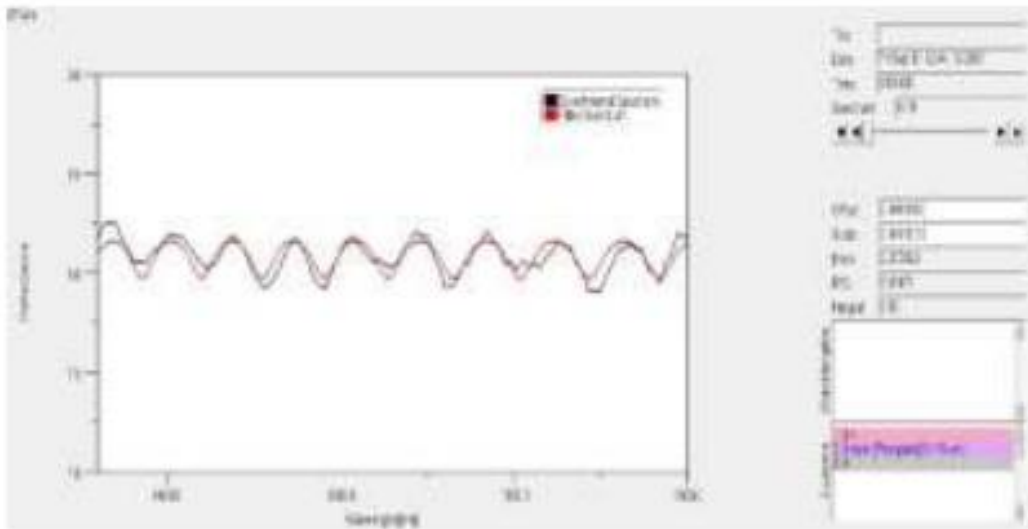
Επομένως, ο προσδιορισμός του πάχους είναι μια σημαντική παράμετρος που πρέπει να είναι σε παρακολούθηση κατά τη διαδικασία βαφής του αυτοκινήτου. Σε αυτή τη σημείωση εφαρμογής, μετρήσεις διαφανούς χρώματος επίστρωσης Το πάχος στρώσης σε διαφορετικά σημεία ενός μεταχειρισμένου αυτοκινήτου αποδεικνύεται χρησιμοποιώντας τα εργαλεία ThetaMetrisis FR-Tools.

Μέσα & Μέθοδοι: Το πάχος της διαφανούς στρώσης βαφής μετρήθηκε στο φασματικό καθεστώς 850 - 1700nm, χρησιμοποιώντας προϊόν της σειράς FR. Ωστε να προσδιοριστεί η ομοιομορφία του πάχους της βαφής, έγιναν μετρήσεις σε διαφορετικά σημεία ενός μεταχειρισμένου αυτοκινήτου. Η ρύθμιση μέτρησης φαίνεται στην εικόνα που ακολουθεί.

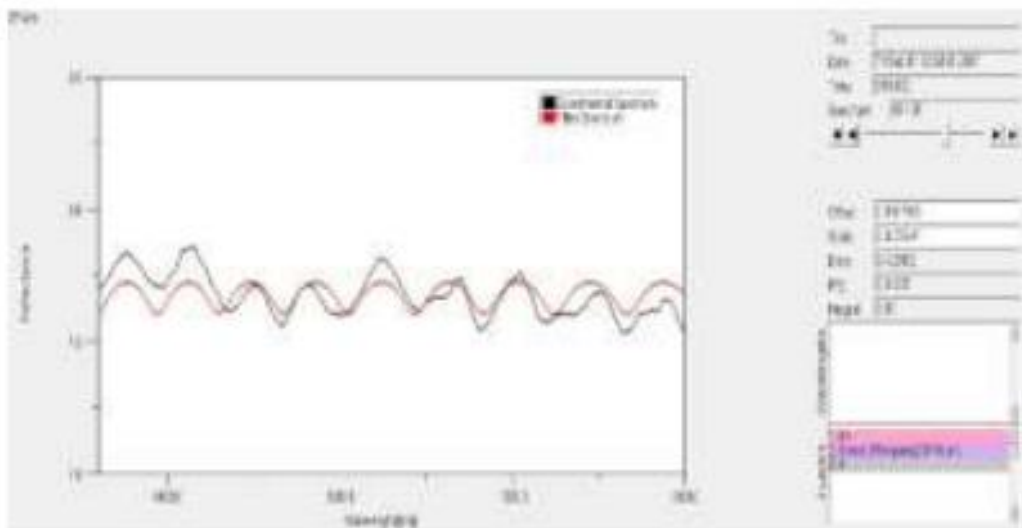




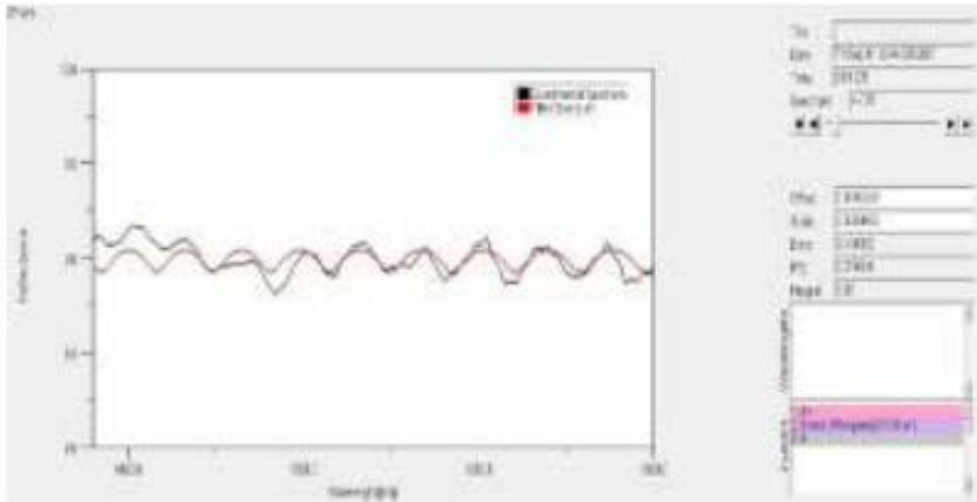
Ακολουθεί η παρουσίαση των μετρήσεων πάχους.



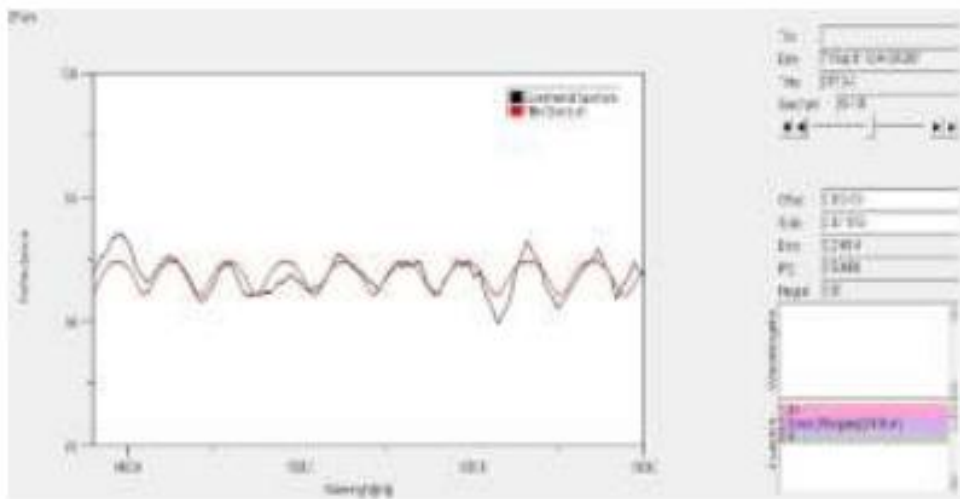
Ανάκλαση και προσαρμοσμένα φάσματα από το διάφανο στρώμα πάνω από το αυτοκίνητο στο σημείο 1. Πάχος= 41,6μm



Ανάκλαση και προσαρμοσμένα φάσματα από το διάφανο στρώμα πάνω από το αυτοκίνητο στο σημείο 2. Πάχος= 39,8μm



Ανάκλαση και προσαρμοσμένα φάσματα από το διάφανο στρώμα πάνω από το αυτοκίνητο στο σημείο 3. Πάχος= 45,0μm



Ανάκλαση και προσαρμοσμένα φάσματα από το διάφανο στρώμα πάνω από το αυτοκίνητο στο σημείο 4. Πάχος= 44,9μm

Αποτελέσματα: Έγιναν μετρήσεις στο πάνω μέρος και στην πόρτα του αυτοκινήτου. Η εφαρμογή εφαρμόστηκε στη Φασματική περιοχή 1600 nm. Η ανάκλαση και τα προσαρμοσμένα φάσματα και τα υπολογισμένα πάχη απεικονίζονται στις εικόνες πιο πάνω.

Το πάχος στην κορυφή μετρήθηκε στο σημείο 1 = 41,6μm και στο σημείο 2 = 39,8μm και στην πόρτα μετρήθηκε στο σημείο 3 = 45μm και στο σημείο 4 = 44,9μm. Τα εργαλεία FR σε αυτό το συγκεκριμένο φασματικό εύρος θα μπορούσε να χρησιμοποιείται για μη καταστροφική γρήγορη και ακριβή μέτρηση του πάχους αυτού του στρώματος και να συνεισφέρει σημαντικά στη διασφάλιση ποιότητας της βαφής του αυτοκινήτου.

## Βιβλιογραφία

Zeitler JA, Taday PF, Newnham DA, Pepper M, Gordon KC, Rades T (February 2007). "Terahertz pulsed spectroscopy and imaging in the pharmaceutical setting--a review". *The Journal of Pharmacy and Pharmacology*. 59 (2): 209–23. doi:10.1211/jpp.59.2.0008. PMID 17270075. S2CID 34705104.

Boosa, Venu; Varimalla, Shirisha; Dumpalapally, Mahesh; Gutta, Naresh; Velisoju, Vijay Kumar; Nama, Narender; Akula, Venugopal (2021-09-05). "Influence of Brønsted acid sites on chemoselective synthesis of pyrrolidones over H-ZSM-5 supported copper catalyst". *Applied Catalysis B: Environmental*. 292: 120177. Bibcode:2021AppCB.29220177B. doi:10.1016/j.apcatb.2021.120177. ISSN 0926-3373.

Fajdek-Bieda, Anna; Wróblewska, Agnieszka; Miądlicki, Piotr; Tołpa, Jadwiga; Michalkiewicz, Beata (2021-08-01). "Clinoptilolite as a natural, active zeolite catalyst for the chemical transformations of geraniol". *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*. 133 (2): 997–1011. doi:10.1007/s11144-021-02027-3. ISSN 1878-5204. S2CID 236149569.

Azancot, Lola; Bobadilla, Luis F.; Centeno, Miguel A.; Odriozola, José A. (2021-05-15). "IR spectroscopic insights into the coking-resistance effect of potassium on nickel-based catalyst during dry reforming of methane". *Applied Catalysis B: Environmental*. 285: 119822. Bibcode:2021AppCB.28519822A. doi:10.1016/j.apcatb.2020.119822. hdl:10261/251396. ISSN 0926-3373. S2CID 232627637.

Nuguid, Rob Jeremiah G.; Elsener, Martin; Ferri, Davide; Kröcher, Oliver (2021-12-05). "Operando diffuse reflectance infrared detection of cyanide intermediate species during the reaction of formaldehyde with ammonia over V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/WO<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>". *Applied Catalysis B: Environmental*. 298: 120629. doi:10.1016/j.apcatb.2021.120629. ISSN 0926-3373.

"Infrared Spectroscopy". *ColourLex*. 12 March 2021. Retrieved 19 January 2022.

Derrick MR, Stulik D, Landry JM (1999). *Infrared Spectroscopy in Conservation Science* (PDF). Scientific Tools for Conservation. Getty Publications. ISBN 0-89236-469-6.

Ricciardi P. "Unlocking the secrets of illuminated manuscripts". Retrieved 11 December 2015.

Lau WS (1999). *Infrared characterization for microelectronics*. World Scientific. ISBN 978-981-02-2352-6.

Osborne BG (2006). "Near-Infrared Spectroscopy in Food Analysis". *Encyclopedia of Analytical Chemistry*. John Wiley & Sons. doi:10.1002/9780470027318.a1018. ISBN 9780470027318.

Villar A, Gorritxategi E, Aranzabe E, Fernández S, Otaduy D, Fernández LA (December 2012). "Low-cost visible-near infrared sensor for on-line monitoring of fat and fatty acids content during the manufacturing process of the milk". *Food Chemistry*. 135 (4): 2756–60. doi:10.1016/j.foodchem.2012.07.074. PMID 22980869.

www.TRMThemes.com, TRM Theme by. "Infrared (IR) / Optical Based Archives - Heath Consultants". Heath Consultants. Archived from the original on 2022-01-20. Retrieved 2016-04-12.

"NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database". The Astrophysics & Astrochemistry Laboratory. 12 September 2019. Retrieved 19 January 2022.

Hoover R (February 21, 2014). "Need to Track Organic Nano-Particles Across the Universe? NASA's Got an App for That". NASA. Archived from the original on September 6, 2015. Retrieved February 22, 2014.

Becker, Wolfgang; Sachsenheimer, Kerstin; Klemenz, Melanie (2017). "Detection of Black Plastics in the Middle Infrared Spectrum (MIR) Using Photon Up-Conversion Technique for Polymer Recycling Process". *Polymers*. 9 (9). MDPI. doi:10.3390/polym9090435. PMC 6418689. PMID 30965736.