

國立清華大學 電機工程學系

實作專題研究成果報告

Applications and Analysis of Fourier-  
Transform Infrared Spectroscopy

Measurement Techniques

傅立葉轉換紅外光譜儀測量技術之  
應用與分析

專題領域：光電領域

組 別：B622

指導教授：陳柏翰

組員姓名：李致誼，程保中

研究期間：114年1月6日 至 114年11月24日 止，共 10 個月

## 摘要

傅立葉式紅外光譜儀(Fourier Transform Infrared, FTIR, Spectrometer)量測技術是基於物質分子內部的震動與轉動模式，不同分子會有不同的吸收光譜特性[1]，此技術廣泛應用於各領域的物質分析中，許多相關的 FTIR 應用技術亦隨之被發表，此量測技術也因期許多優點(低汙染，分析時長短，可量測的物品種類多樣等)而逐漸被許多領域的科學家重視[2]。

傅立葉轉換紅外光譜過往多用於量測波長較長的太赫茲 (THz) 或是中遠紅外光，鮮少有近紅外光光譜區域(波長介於800 - 2500nm 之間)的量測與應用。

在本實作專題中我們設計並搭建了一傅立葉式紅外光譜儀，採用中心波長為1030 nm 的近紅外光雷射，並以此為基準設計麥克生干涉儀光路，使其可用於量測寬頻近紅外光光源之光譜，在將來的延伸應用中把量測到的吸收光譜與資料庫做比對，可達到分析樣品中含有之物質成分與其濃度的目的。

## 1. 背景與動機

傅立葉式紅外光譜儀(Fourier Transform Infrared, FTIR, Spectrometer)是一個被廣泛應用於各種領域的分析量測工具，得益於其可分析之樣本種類之多樣，無論固體、液體還是氣體樣品，都能透過該樣本對紅外線光譜之吸收情形得到其構成物之資訊。且紅外光譜分析相較於其他傳統化學分析方式比較之下還有許多優點，如：

- (1)分析所需時常相對短，只要將樣本置於光路上，僅需幾毫秒或幾秒掃描即可得到樣品的吸收光譜。
- (2)不需要化學試劑，不會對待測樣品產生汙染。
- (3)不會破壞樣品的架構，確保了檢測結果的準確性。

在各式領域中都會有對樣品的構成內容進行分析的需求，且 FTIR 光譜量測法已在多個領域被廣泛地採用，作為快速準確的分析工具，包括藥學、環境科學、食品科學等等。如分析農牧產品中營養成分(醣類、脂質、蛋白質、水分等)分析，並以測量結果為基準確定產品改良方向與為產品劃分等級；藥品制備過程中對藥物成分的分析，確保藥品品質；檢測環境中水源或空氣汙染情況及嚴重程度，確認某處的環境汙染類別並依此制定改善方針[2]。

有鑑於傅立葉紅外光譜量測技術的重要性與泛用性，我們在本專題中想自行架設一個可實際用於進行樣本分析的傅立葉紅外光譜儀，並量測記錄雷射本體的光譜及樣品的吸收光譜，以及分析在不同的馬達步距下所帶來頻譜成像差異。

## 2. 研究目的

本專題研究旨在使用傅立葉轉換紅外光譜探討樣品(於本專題中使用太陽能電池)的吸收頻譜，並期望達成以下目標：

### (1) 光譜鑑別技術

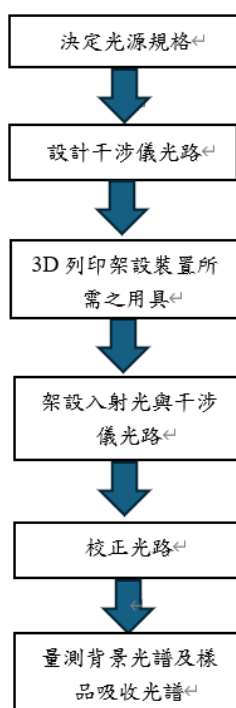
利用 FTIR 取得樣品在近紅外區的光譜。透過與雷射本身背景光譜相減取得吸收光譜，可辨識並比較不同材料的分子結構。在將來的延伸應用中，可用來鑑定未知化合物或鑑定複雜混合物中是否含有某特定的添加物或污染物。

### (2) 熟悉光學測量器材架設與方法

透過實驗流程與資料分析，加深對 FTIR 原理的理解（包含干涉儀結構、傅立葉轉換演算法與吸收光譜解析），並強化在光學實驗架設及光譜資料處理方面的實作能力。

## 3. 研究方法

### (1) 實驗流程



圖一：實驗流程圖

## (2) 架構設計

### (2.1) 系統架設

實驗系統以中心波長為 1030 nm 之 Yb:YAG 雷射作為光源。雷射光束通過展頻後導入由 50:50 分光鏡、固定反射鏡與可動反射鏡所組成的麥克生干涉儀。兩路光在干涉儀中重新會合後於預計放置 photo diode 處形成干涉條紋。

### (2.2) LabVIEW 控制馬達掃描

可動反射鏡固定於高精度平移台上，位移台由步進馬達驅動(步距為 10nm/step)。以 LabVIEW 介面自動化掃描流程。程式可控制反射鏡位移步距與掃描區間，自動掃描並擷取資料。此自動化操作有效降低人為誤差，並提升量測的準確性。

### (2.3) 光電偵測與資料擷取

重新合束的干涉光被聚焦至 photo diode 上，將光強轉換為電訊號。將輸出訊號進行記錄。收集到的基於時域光強度訊號圖再由 MATLAB 進行傅立葉轉換，以重建頻率域光譜。

## (3) 模擬驗證

為了解干涉圖 (interferogram) 的形成機制，以及其參數對光譜重建的影響，本研究使用 MATLAB 進行下列模擬

### (3.1) 輸入光譜建立

建立中心波長 5000 nm、FWHM 300 nm 的高斯光譜作為輸入光源。光譜越寬，其對應的時域脈衝越短。

### (3.2) 轉換至頻率域

將波長軸轉換為頻率軸，得到頻率域的高斯型電場振幅。

### (3.3) 時域電場重建

利用反傅立葉轉換 (IFFT) 將頻率域電場轉換為時域電場  $E(t)$ 。

### (3.4) 脈衝干涉模擬

將兩個具有光程差  $\tau$  的脈衝相加後取平方，以模擬麥克生干涉儀的輸出干涉圖：

$$I(t) = |E(t) + E(t - \tau)|^2$$

干涉圖反映光強隨光程差變化之行為。

### (3.5) 光譜重建與比較

對干涉圖進行快速傅立葉轉換 (FFT)，得到重建光譜。結果與原始輸入光譜相比，其主峰位置高度一致，證明轉換方法正確。

### (3.6) 參數分析

本研究改變掃描範圍 (delay window) 與取樣間距，分析其對頻譜解析度的影響：

較大掃描範圍 → 較佳頻譜解析度

較小步距 → 較平滑與精細的光譜

過大步距或過窄掃描範圍 → 解析度降低、高頻資訊遺失

模擬結果用於後續實驗參數調整之依據。

## 4. 實驗結果

本章將呈現本研究所建置之近紅外傅立葉轉換紅外光譜 (FTIR) 量測系統的實驗結果，並分別對原始光譜、平均光譜與吸收度光譜進行分析。所有量測數據皆由本專題建置之軟硬體平台取得，包括：

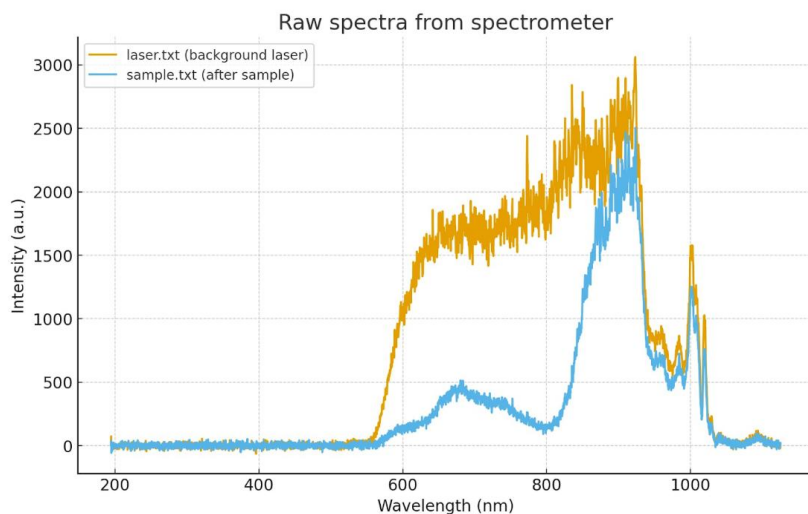
- (1) LabVIEW 控制之步進馬達可動鏡光程差 (OPD) 掃描系統
- (2) 光偵測器 (Photodiode) 之干涉訊號擷取
- (3) MATLAB 執行之基線校正、平滑化、背景扣除與吸收度計算

最後將說明實驗結果是否成功達成本專題之研究目的，並驗證本系統架構與設計之可行性與有效性。

### (1) Raw Spectra Measurement

圖二顯示使用光譜儀量測到的原始光譜，包括背景光譜 (未置入樣品) 與樣品光譜 (光通過樣品後)。在 600 – 850 nm 波段，樣品光譜相較背景光譜出現明顯下降，顯示

樣品在此區域具有強烈吸收特徵。此結果證實：本光學架構、干涉儀調整與偵測鏈皆能正常運作，且能明確辨識樣品造成之光強變化。



圖二：Raw spectra from spectrometer. (背景光譜 vs. 樣品光譜)

## (2) Averaged FTIR Spectra

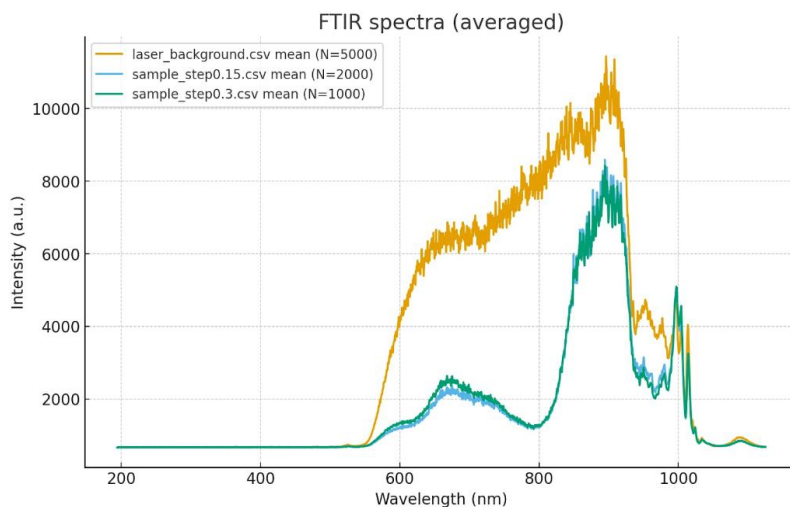
為降低雜訊、提高訊號穩定性，本研究對連續量測數據進行不同的量測步距，以探討其差異(步距  $N = 1000 - 5000$ )。

結果如圖三所示：

步距越小 → 雜訊越低

步距越小 → 頻譜越平滑、解析度越高

step = 0.15 mm 所得光譜在所有波段皆較 step = 0.3 mm 平滑



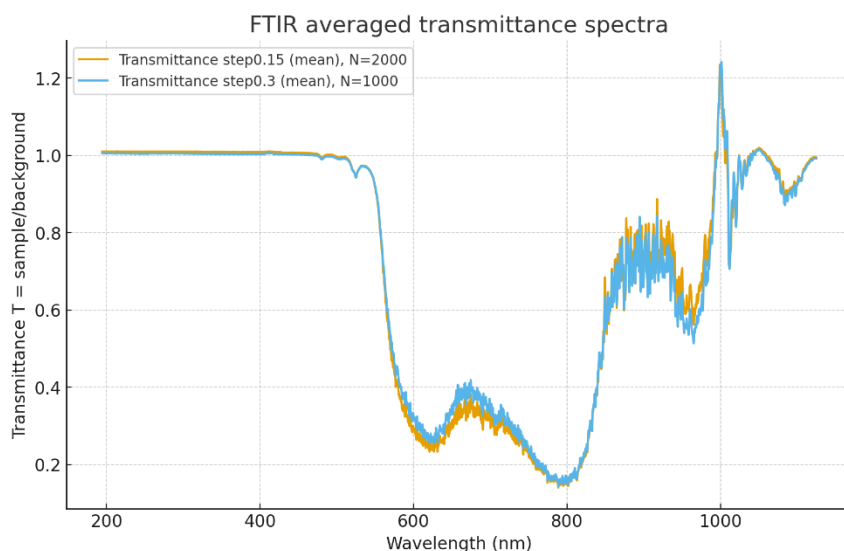
圖三：Averaged FTIR spectra. (不同 step 之比較)

此現象符合 FTIR 取樣原理：

更密集的 delay sampling（更小步距）能提升頻域解析度；較多的平均次數能提高訊雜比(SNR)。此結果亦驗證 LabVIEW 掃描控制系統穩定，馬達位移步距精確。

### (3) Transmittance Spectra

圖四顯示顯示以樣品光譜除以背景光譜所得的穿透頻譜，可用來突顯樣品吸收行為。



圖四： Transmittance spectra

實驗結果顯示：

在 600 – 850 nm 區間出現明顯吸收區間，代表樣品對此區域光強吸收最強

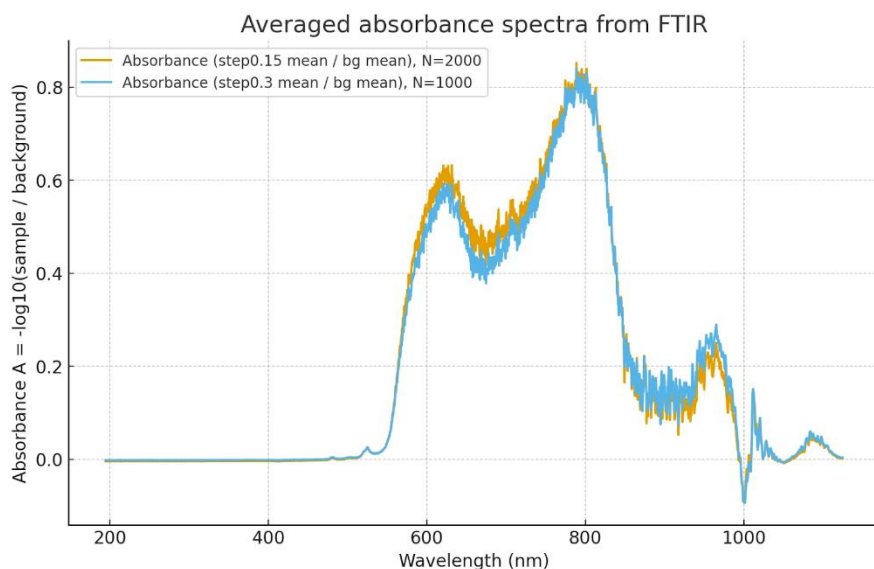
不同掃描步距的結果形狀一致，差異僅在雜訊量

此一致性顯示本系統干涉儀光路、PD 讀取與馬達同步等環節均穩定可靠。

### (4) Absorbance Spectra

吸收度依標準公式計算：

$$A(\lambda) = -\log_{10}\left(\frac{I_{sample}(\lambda)}{I_{background}(\lambda)}\right)$$



圖五：Averaged absorbance spectra.

圖五顯示本研究重建之吸收度光譜，具有 FTIR 光譜分析中常見的物理意義：

主要吸收峰：650 – 850 nm

次級吸收峰：900 – 1050 nm

兩組不同掃描條件所得光譜重疊度高，顯示系統良好再現性吸收度光譜與前述背景扣除光譜一致，證明資料處理流程正確，且系統可用於吸收特性分析。

## 5. 結論

本研究成功建置一套以 1030 nm 近紅外雷射為光源之傅立葉轉換紅外光譜 (FTIR) 量測系統，並實現干涉訊號擷取、LabVIEW 自動化掃描與光譜重建的完整流程。模擬與實驗結果高度一致，證明本系統能有效重建樣品吸收特性，達成本專題原先設定之研究目的。所量測之光譜具一致性、可再現性與物理意義，顯示本系統架構具穩定性與可靠度。本研究所建立之平台可作為後續近紅外光譜分析、材料特性量測與教學示範的基礎，並具備未來擴充至更廣頻譜範圍或加入樣品分析模組之潛力。

## 6. 參考文獻

- [1] Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy by Catherine Berthomieu, Rainer

Hienerwadel Photosynth Res (2009) 101:157–170

[2] Yahui Gong, Xuerong Chen, Wei Wu, Application of fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy in sample preparation: Material characterization and mechanism investigation, Advances in Sample Preparation, Volume 11, 2024

## 7. 心得

在本次專題研究中，我們對非線性光學實驗架構與傅立葉轉換光譜儀（FTIR）的整體設計與操作流程有了更深入且系統性的理解。實際動手架設後才真正體會到，傅立葉光譜儀的建置遠比預期複雜，各階段皆伴隨許多未曾預料的挑戰。例如：原始寬頻雷射源的光譜寬度不足，需額外透過多通腔（MPC）進行光譜展寬；馬達驅動移動鏡時的微小振動造成干涉訊號不穩定，必須透過額外設計並3D列印機構件加以抑制；在尋找干涉條紋成像位置時，因展頻後光源頻寬較大，使得能觀測到穩定干涉條紋的可用光程差區域僅約 13  $\mu\text{m}$ ，導致調整光源與定位干涉條紋的位置耗費大量時間與心力。儘管過程繁複，但在教授的指導與學長的耐心協助下，我們得以逐一克服技術瓶頸，使實驗系統最終順利建置完成。本次專題不僅讓我們獲得珍貴的實作經驗，更讓我們在面對未來更具挑戰性的實驗研究時，能夠具備更充足的信心與能力。同時，也使我们深刻理解課堂知識在實務情境中的應用價值。