



دانشگاه تبریز

دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر الکترونیک

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته مهندسی برق - الکترونیک

:

طراحی و شبیه سازی میکرو FTIR (طیف نگاری تبدیل فوریه مادون قرمز) برای تشخیص مواد آلی
در باند میانی مادون قرمز

:

دکتر هادی ولادی

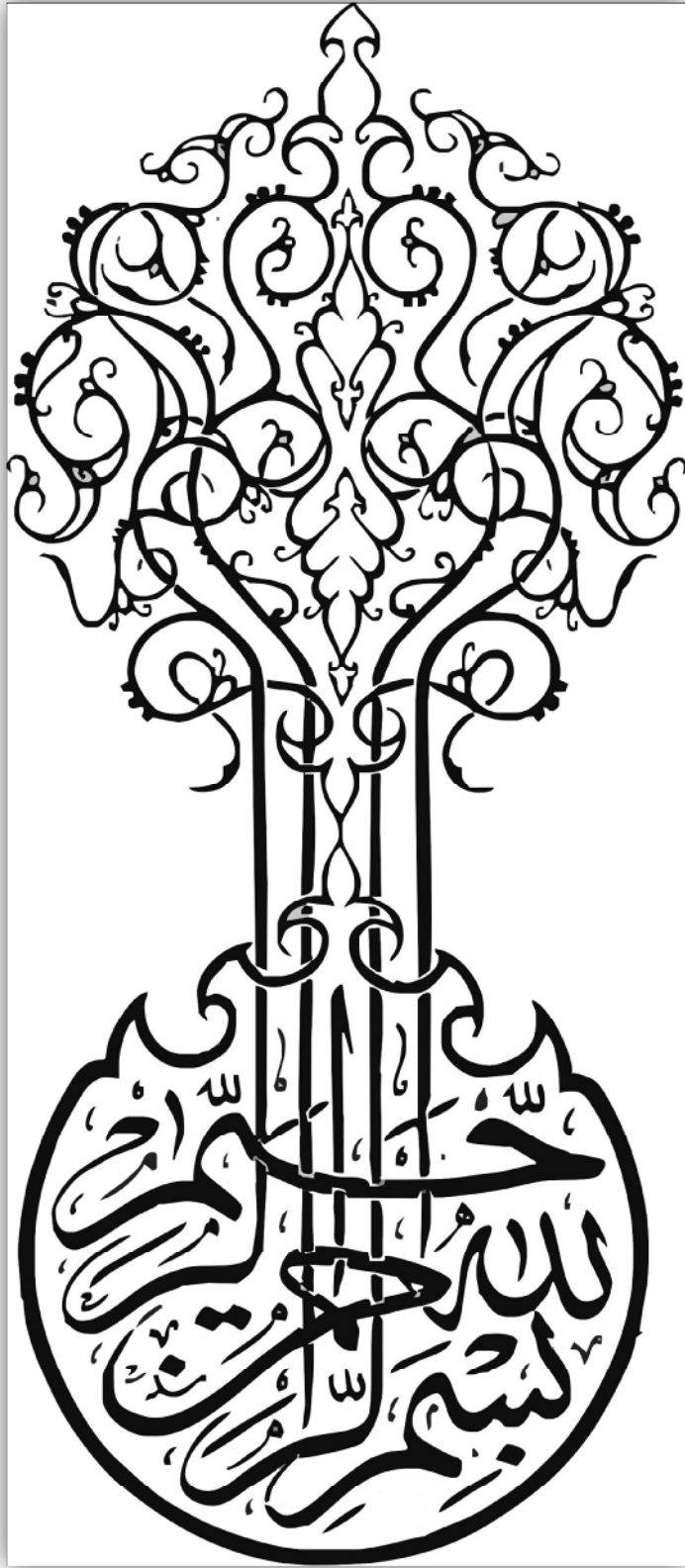
:

دکتر جواد فرونچی

:

علی صباغی فر

1390



تقدیم به

عزیز و

تقدیر و تشکر:

"خداوند کسانی را که ایمان آورده‌اند و کسانی را که علم به آنان داده‌شده، درجات عظیمی می‌بخشد؛ و خداوند به آنچه انجام می‌دهید آگاه است."

آیه 11

سپاس و شکر خدا را که هستی‌مان بخشید و بندها را بگشود و به طریق علم و دانش چینی از دنیای علم را روزیمان ساخت؛ و سپاس بی‌کران خدایی را که پس از ضعف و ناتوانی قوت و نیرو می‌بخشد و به مخلوقاتش بسیار مشفق و مهربان است. اینک به پاس نعمتهای بی‌شمار پروردگار بر خود وظیفه می‌دانم که از تمامی عزیزانی که در مراحل تکمیل این پایان‌نامه، یاریم نمودند، تشکر نمایم.

قبل از هر چیز از استاد راهنمای عزیزم جناب آقای دکتر ، که در تمام تکمیل مراحل این پایان‌نامه یاریم نمودند و همواره مشوق و پشتیبانم بودند، کمال تشکر را دارم. همچنین، از استاد عزیز، جناب آقای دکتر جواد فرونچی، که با رهنمودهای ارزنده خویش اینجانب در انجام این پایان‌نامه بودند، کمال تشکر را دارم. در پایان، وظیفه خود می‌دانم که از زحمات بی‌دریغ کلیه دوستان و عزیزانی که در طی این چند سال در مسیر طی شده تا انجام این پایان‌نامه همراه من بودند بویژه هم اتاقی های عزیزم آقای سامان عقیلی، کامبیز نظامی، نوید وفایی و دیگر ، کمال تشکر و قدردانی را بعمل آورم.

| | |
|--|--------------------------|
| نام خانوادگی: صباغی فر | نام: علی |
| عنوان پایان نامه: طراحی و شبیه سازی میکرو FTIR (طیف نگاری تبدیل فوری مادون قرمز) برای تشخیص مواد آلی در باند میانی مادون قرمز | |
| دکتر: | |
| تحصیلی: کارشناسی | مهندسی: گرایش: الکترونیک |
| دانشکده: مهندسی | تاریخ: کامپیوتر |
| 80: | 90 |
| کلید : طیف سنج تبدیل فوری مادون قرمز، مادون قرمز میانی، تداخل سنج مایکلسون، تداخل سنج توری های پراش | |
| چکیده: | |
| <p>طیف‌سنجی مادون قرمز یکی از روش دقیق و متداول برای شناسایی مواد تبدیل گردیده . تبدیل فوری در طیف سنجی مادون قرمز که منجر به بهبود عملکرد این تجهیزات در مقایسه با دستگاه طیف سنج معمولی گردیده و مزایای فراوانی به همراه داشته . آوری اطلاعات و نسبت سیگنال به نویز بهتر . در این پایان هدف طراحی و شبیه سازی یک نمونه طیف سنج مادون قرمز تبدیل فوری میکرو که ابتدا شبیه سازی در سطح سیستمی انجام . Matlab با شبیه سازی تداخل سنج مایکلسون و بررسی المانهای متغیر در این تداخل سنج تلاش شد که سیگنال تداخل نما و طیف حاصل از این سیگنال را در خروجی بدست آوریم و در مرحله بعدی تغییرات المانهای متغیر در کیفیت سیگنال خروجی بررسی شد که قایسه نتایج سعی شد سیستم مناسبی طراحی شود. در قدم بعدی با بررسی امکانات ساخت و تلاش برای طراحی یک طیف سنج مادون قرمز به این نتیجه رسیدیم که استفاده از تداخل سنج توری های پراش گزینه مناسبتری برای ساخت خواهد بود. در این راستا انواع توری پراش بررسی شد و با گزینش نمونه مناسب بر اساس تحقیقات پیشین، شبیه سازی یک نمونه Matlab انجام دادیم و با بررسی المانهای تاثیر گذار در سیگنال تداخل نمای خروجی سعی شد طراحی مناسبی برای این تداخل سنج . مرحله بعدی مدل کردن و شبیه سازی پارامترهای اپتیکی ماده Matlab اپتیکی ماده مورد نظر برای تاثیر بر سیگنال تداخل نما در برنامه بود که با بررسی مدل های اپتیکی مختلف - تخمین . مشخصات اپتیکی بیه ساز وارد شد و نتیجه طیف خروجی با طیف این منابع علمی مقایسه شد. با توجه به این که مناسبی برای تخمین مشخصات اپتیکی ماده آلی یافت نشد، نمونه ای از تحلیل مواد آلی در این پایان نامه وارد نگردید. ولی در صورت بدست آمدن مدل اپتیکی یک ماده آلی و ورود آن در برنامه امکان تخمین طیف ماده مورد نظر وجود دارد.</p> <p>بعد از شبیه سازی در برنامه Matlab تصمیم به شبیه سازی در برنامه های تخصصی اپتیک تا شبیه سازی دقیقتر و با حضور شرایط واقعی تر نوری انجام بگیرد و با بررسی برنامه های مختلفی همچون OptiFDTD Comsol امکانات نرم افزاری دانشکده، تصمیم به استفاده از OptiFDTD و شبیه سازی تداخل سنج در این نرم افزار گرفته شد که نتایج این شبیه سازی ها در پایاننامه آورده شده است.</p> <p>مختلف پیشنهاد شده است. در روش اول که روش</p> | |

ساده تری است امکان استفاده از زیر لایه های قابل دسترس

در این پایان نامه هدف شبیه سازی در ناحیه طول موجی مادون قرمز میانی بوده است در صورتی که در نتایج شبیه سازی ناحیه های طول موجی مادون قرمز نزدیک و مادون قرمز دور نیز مورد بررسی قرار گرفته است.

| | | | |
|---------|--------------------------|--------|----------|
| 1..... | | | |
| 4..... | : | | |
| 5..... | | | 1-1 |
| 5..... | | ی | 1-1-1 |
| 8..... | | ی | 2-1-1 |
| 9..... | (MS) ی | ی | 3-1-1 |
| 10..... | | ی | 4-1-1 |
| 10..... | | ی | 5-1-1 |
| 10..... | NMR | ی | 6-1-1 |
| 11..... | | ی | 2-1 |
| 12..... | تفکیکی | ی | 1-2-1 |
| 12..... | | ی | 3-1 |
| 14..... | | | 1-3-1 |
| 14..... | | ی | 2-3-1 |
| 15..... | | ی | 3-3-1 |
| 16..... | | | 1-3-3-1 |
| 17..... | FTIR | کاربرد | 4-1 |
| 17..... | شناسایی پلیمرها | کاربرد | طیف سنجی |
| 17..... | ارزیابی کیفیت درونی میوه | کاربرد | طیف سنجی |
| 18..... | پزشکی | کاربرد | طیف سنجی |
| 19..... | : | | |
| 20..... | یکلسون | ی | 1-2 |
| 20..... | یکلسون | ی | 1-1-2 |

| | | | |
|---------|----------------------|-----|--------|
| 21..... | یکلسون..... | | 2-1-2 |
| 21..... | یکلسون..... | | 3-1-2 |
| 23..... | یکلسون (MATLAB)..... | ی | 4-1-2 |
| 28..... | | ی | 2-2 |
| 29..... | | | 1-2-2 |
| 33..... | | | 2-2-2 |
| 35..... | تفکیک، دقت ی ی | | 3-2-2 |
| 37..... | تفکیک : | | 4-2-2 |
| 38..... | ی : | | 5-2-2 |
| 39..... | () : | | 6-2-2 |
| 39..... | ی : | ی | 7-2-2 |
| 39..... | : | | 8-2-2 |
| 50..... | MATLAB | ی | 9-2-2 |
| 53..... | OptiFDTD | ی | 10-2-2 |
| 55..... | | ی ی | 3-2 |
| 56..... | یکی | | 1-3-2 |
| 61..... | ی ی ی : | | |
| 62..... | | ی ی | |
| 64..... | | ی | |
| 65..... | | | |

فهرست اشکال:

| | | |
|-------------------|-----------------|----------|
| 6.....[7] | یک | شکل 1-1 |
| 13.....[7] | یک کامل یک | شکل 2-1 |
| 16.....[8] | کننده | شکل 3-1 |
| 20.....[9] | یکسون - | شکل 1-2 |
| 21.....[8] | یکسون - | شکل 2-2 |
| 22.....[9] | یکسون | شکل 3-2 |
| 24.....[9] | یکسون - | شکل 4-2 |
| 25..... | تمرکز یک کوچکتر | شکل 5-2 |
| 25..... | | شکل 6-2 |
| 26.....sin(t) | | شکل 7-2 |
| 26.....sin(t*e13) | | شکل 8-2 |
| 27..... | | شکل 9-2 |
| 28..... | | شکل 10-2 |
| 30.....[11] | یک | شکل 11-2 |
| 32..... | | شکل 12-2 |
| 33.....[11] | | شکل 13-2 |
| 34.....[11] | | شکل 14-2 |
| 35.....[11] | | شکل 15-2 |
| 40.....[16] | SEM یک | شکل 16-2 |
| 41.....[20]ANSYS | | شکل 17-2 |
| 42..... | | شکل 18-2 |
| 42..... | | شکل 19-2 |
| 43..... | آبکار الکتریکی | شکل 20-2 |
| 43..... | | شکل 21-2 |
| 43..... | | شکل 22-2 |

| | | | |
|---------|---------------------|-------|---------------------|
| 44..... | آبکار الکتریکی | ی | شکل 23-2 |
| 44..... | | ی | شکل 24-2 |
| 44..... | ی | ی | شکل 25-2 |
| 44..... | | بی | شکل 26-2 |
| 45..... | پیکون | ی | شکل 27-2 |
| 45..... | etch stop | ی | شکل 28-2 |
| 46..... | پیکون | اکسیه | شکل 29-2 |
| 46..... | | | شکل 30-2 کاشت |
| 46..... | | ی | شکل 31-2 |
| 47..... | پیکون | اکسیه | شکل 32-2 |
| 47..... | پیکونی | ی | شکل 33-2 |
| 47..... | | | شکل 34-2 |
| 47..... | پیکون | اکسیه | شکل 35-2 |
| 48..... | پیکون | ی | شکل 36-2 |
| 48..... | پکنیه | ی | شکل 37-2 |
| 48..... | | | شکل 38-2 اکسیه کردن |
| 48..... | | | شکل 39-2 |
| 49..... | | | شکل 40-2 |
| 49..... | تکیه | ی | شکل 41-2 |
| 49..... | پیکون | اکسیه | شکل 42-2 |
| 50..... | پیکون | | شکل 43-2 |
| 50..... | پیکون | اکسیه | شکل 44-2 |
| 50..... | حرکت الکترواستاتیکی | ی | شکل 45-2 |
| 51..... | [13] | ی | شکل 46-2 |
| 51..... | [16] | یک | شکل 47-2 |
| 52..... | ی | پیک | شکل 48-2 |
| 53..... | حداکثر بی | پیک | شکل 49-2 |
| 54..... | OptiFDTD | ی | شکل 50-2 |

فهرست اشکال

| | | | | |
|-------------|---|---|--------|----------|
| 55..... | ی | ی | ی | شکل 51-2 |
| 55.....x | | ی | ی | شکل 52-2 |
| 56..... [7] | ی | ی | یک کلی | شکل 53-2 |
| 59..... | | | | شکل 54-2 |
| 60..... | | ی | ی | شکل 55-2 |
| 60..... | | ی | ی | شکل 56-2 |



:

1-1 فرکانس ی ی [3].....7

جذب نمی‌کند .

طیف سنجی مولکولی

طیف سنجی مولکولی متنوع هستند ولی پایه این

پله یک مولکول استوار است و همگی نحوه پاسخ دهی یک مولکول را نسبت به جذب آن اندازه گیری می‌کنند. در توصیف این تاکید ما بر روی کاربرد در تعیین ساختمان خواهد بود.

اصول طیف سنجی مولکولی تابش الکترومغناطیس: الکترومغناطیس که نور مرئی بخشی از آن است دارای هر دو خاصیت موجی و ذره ای است. فوتون نامیده می‌شود و هر یک دارای هستند که به عنوان یک کوانتوم معرفی می‌شود. 1900 ماکس پلانک فیزیک

دان آلمانی بیان کرد یک (E) ایما متناسب با فرکانس آن می‌باشد .

یک فوتون متناسب با منبع آن می‌باشد. مقادیر متنوعی انرژی داشته باشد.

ایکس جریانهایی با انرژی خیلی زیاد می‌باشد. رادیویی انرژی کمی

بهای بنفش نور مرئی دارد. انرژی تابش مادون قرمز کمتر

انتهای قرمز نور مرئی است. وقتی که یک مولکول در معرض تابش الکترومغناطیس قرار گیرد

ممکن است یک فوتون جذب کند انرژی آن متناسب با انرژی فوتون افزایش یابد. مولکول

فرکانس می‌کند جذب می‌کند فرکانس

پله یک مولکول جذب می‌شود. میزان انرژی که به وسیله یک مولکول جذب می‌شود

ساختمان مولکولی آن است و به وسیله می‌شود که طیف سنج نامیده می‌شود اندازه گیری

بسیار دقیقی از ساختمان مولکولی بوده و شیوه کار تجزیه

شیمیایی را دگرگون کرده است.

طیف جهت اندازه گیری میزان جذب تابش الکترومغناطیس توسط یک نمونه طراحی

می‌شود. یک طیف سنج دارای یک منبع تابش شامل نمونه که تابش از میان آن می‌گذرد

یک آشکار ساز می‌باشد. فرکانس تابش را مداوم تغییر داده و شدت آن در آشکار ساز

در منبع مقایسه می‌شود. وقتی فرکانس به جایی برسد که نمونه آن تابش را جذب کند آشکار ساز

یک کاهش در شدت را نشان می‌دهد. ارتباط بین فرکانس و جذب به صورت یک طیف رسم

می‌شود که شامل یک سری پیک در فرکانس می‌باشد. تفسیر این طیف می‌تواند

هر نوع طیف سنجی مستقل از دیگری بدست می‌آید.

بین شکل اطلاعات از یکی به دیگری مختلف است. یک طیف NMR IR

می‌آید و هر دو نسبت به طیف UV-VIS کاملا می‌تواند

اطلاعات قابل توجهی از ماده مورد نظر را در اختیار شیمیدان یا زیست شناس قرار میدهد
انتخاب روش مناسب برای فرآیند آتی یاری می نماید[1].

در ادامه لازم به ذکر است طیف سنجی مادون قرمز امروزه با توجه به این که در بسیاری
از کاربردها نیاز اصلی طیف سنج بررسی بخش محدودی از پهنه طول موجی مادون قرمز برای ثبت
یک اصلی نمونه ترکیب مولکولی آن است، در کاربردهای اخیر طیف سنج مادون قرمز
ی . برای نیل به این هدف به دو نکته اساسی توجه شده است. اول وزن
و اندازه کوچک سنسور و دیگری دقت بالای سنسور. با توجه به پیشرفت تکنولوژی و ورود علم میکرو
سیستم در این زمینه علمی امکان تحقق هر دو نکته بالا ایجاد شده و تلاش برای دستیابی به
تکنولوژی ساخت این نمونه طیف سنجها و ارتقاء کیفیت ساخت روبه افزایش است.

:

بررسی و پیشینه پژوهش

طیف سنجی

1-1

متنوع طیف سنجی در دسترس هستند. برخی از در فهرست زیر

:

طیف سنجی با پرتو زیر قرمز IR

طیف سنجی رامان

طیف سنجی جرمی MS

طیف سنجی با پرتو فرابنفش UV

طیف سنجی رزونانس مغناطیسی هسته NMR

طیف سنجی با پرتو CD

طیف سنجی رزونانس اسپین الکترون ESR

کاربرد مورد نظر، ممکن است یکی از برگزیده شود یا مجموعه ای از

کار گرفته شود. برای تعیین ساختار شیمیایی یک ترکیب ناشناخته، مجموعه ای از

طیف سنجی به کار گرفته می . داده های فیزیکی یمیایی، تجزیه ای و بلور شناسی نیز ممکن

افزوده شود تا شناخت درستی از ساختار مولکول پیچیده به دست بد [2].

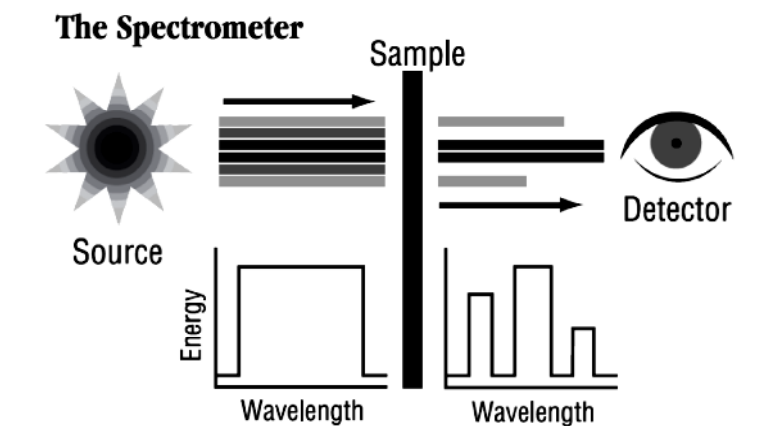
طیف سنج مادون قرمز

طیف سنجی مادون قرمز (شکل 1-1)) بر اساس جذب تابش و بررسی جهش های ارتعاشی مولکول ها و یون های چند اتمی صورت می گیرد. تقریباً تمامی ترکیباتی که پیوند کووالانسی دارند، ی یا معدنی، فرکانسهای متفاوتی از اشعه الکترومغناطیس را در ناحیه مادون قرمز طیف جذب می کنند. ناحیه مادون قرمز طیف مغناطیسی دارای طول موجی بلندتر از طول موج نور مرئی و کوتاهتر از طول موج مایکروویو است.

مانند انواع دیگر جذب انرژی، موقعی که مولکولها اشعه مادون قرمز را جذب میکنند، به حالت انرژی بالاتر برانگیخته می گردند. جذب هر فرآیند جذب دیگر، یک فرآیند کوانتایی است، بدین صورت که فقط فرکانسهای (انرژیهای) مشخصی از تابش مادون قرمز توسط مولکول جذب می گردد. جذب تابش مادون قرمز با تغییر انرژی بین 8-40 کیلو ژول بر مول همراه است. تابشی که دارای چنین انرژی باشد، فرکانسهای ارتعاشی کششی و خمشی پیوندهای کووالانسی اکثر مولکولها را شامل می شود. در فرآیند جذب، فرکانسهایی از اشعه مادون قرمز که با فرک

ارتعاش طبیعی مولکول مورد نظر تطبیق کند جذب خواهد شد و انرژی جذب شده برای افزایش دامنه حرکت ارتعاشی اتصال موجود در مولکول به کار گرفته می شود. باید توجه داشت که تمام پیوندهای موجود در مولکول قادر به جذب انرژی مادون قرمز نیستند، حتی اگر فرکانس اشعه کاملا با فرکانس حرکت تطبیق کند. فقط آن پیوندهایی که دارای گشتاور دو قطبی هستند قادر به جذب اشعه مادون

ناحیه بالاتر از $50\mu\text{m}$ ناحیه مادون قرمز دور ، ناحیه بین $0.8\mu\text{m}$ - $2.5\mu\text{m}$ ناحیه مادون قرمز نزدیک و ناحیه بین $2.5\mu\text{m}$ تا $25\mu\text{m}$ ناحیه اثر انگشت می . در این ناحیه یک طیف مخصوص به خود دارد که برای شناسایی گروه‌های عاملی آن به کار می .



شکل 1-1 شماتیک طیف سنج مادون قرمز [7]

موارد استفاده از طیف مادون قرمز

چون هر پیوند دارای فرکانس ارتعاشی خاصی است و نیز چون یک پیوند بخصوص در دو مولکول مختلف در دو محیط متفاوت قرار داشته، بنابراین، هیچگاه دو مولکول با ساختمانهای متفاوت جذب مادون قرمز یا به عبارت بهتر، طیف مادون قرمز مشابهی نمی دهند. اگر چه ممکن است که بعضی از فرکانسهای جذب شده در دو مولکول مشابه باشند، اما هیچ گاه دو مولکول مختلف، طیف مادون قرمز یکسانی را نخواهند داشت. بنابراین طیف مادون قرمز را می توان مانند اثر انگشت در انسان برای شناسایی مولکولها به کار گرفت. با مقایسه طیف مادون قرمز دو ماده که تصور می رود مشابه باشند، می توان پی برد که آیا واقعا آنها یکی هستند یا نه. اگر تمام جذب ها در طیف دو مولکول بر یکدیگر منطبق باشند، آن موقع به احتمال قریب به یقین دو ماده یکسان هستند.

کاربرد دوم طیف مادون قرمز که مهمتر از اولی است، این است که طیف مزبور اطلاعاتی راجع به ساختمان یک مولکول می دهد. جذبهای مربوط به هر پیوند در بخش کوچکی از ناحیه ارتعاشی

مادون قرمز یافت می شوند.

تجزیه کیفی

عمومی طیف بینی یمیدان آزمایشگاهی یی
ترکیبات آلی 1950 میلادی [3].

اگر طیف IR یک ترکیب آلی مجهول را در اختیار داشته باشیم ، شناسایی این ترکیب آلی مجهول یک فرآیند دو مرحله ای : مرحله اول شامل تعیین حضور محتمل ترین گروه های عاملی با بررسی ناحیه فرکانس گروهی (که تابش از حدود 1200 3600⁻¹CM⁻¹) را در بر می گیرد) می

م شامل مقایسه جزئیات طیف مجهول با طیف ترکیبات خالصی که محتوی کلی گروه های عاملی یافت شده در مرحله اول هستند، که این ناحیه از طیف در بازه 600 1200 قرار می گیرد و ناحیه اثر انگشتی نام دارد زیرا تفاوت های کوچکی در ساختار و سرشت یک مولکول به تغییرات قابل توجهی در ظهور و توزیع پیک های جذبی در این ناحیه منجر می شود. دیدیم که فرکانس یا عدد موجی را که در آن یک گروه عاملی مانند $C=O$ $C=C$ $C-H$ $C\equiv C$ یا O

$$H \text{ تابش مادون قرمز را جذب می کند، می توان با استفاده از رابطه } \bar{\nu} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

این فرکانس ها ، فرکانسهای گروهی نامیده می شوند.

فرکانسهای گروهی اجازه می دهند تا حدسهای هوشیارانه ای درباره حضور یا عدم حضور گروههای عاملی در یک مولکول بزنیم. پس در فرم کلی می توان گستره ای از فرکانس ها را گرفت که به احتمال خیلی زیاد پیک جذب یک گروه عاملی معین در این گستره قرار گیرد. فرکانسهای گروهی برای چند گروه عاملی متداول در جدول 1-1

تشخیص دادن گروههای مربوطه بنا به طول موجهای ثبت شده هر کدام استفاده می شود.

1-1 فرکانس یی [3]

| پیوند | آلکانها | گستره فرکانس |
|-------|---------|--------------|
| C_H | آلکانها | 2970-2850 |
| C_H | آلکانها | 1470-1340 |
| | | 3010-3095 |
| | | 995-675 |

| | | | |
|------------------|------------------------|---|-----------------|
| | 3300 | آلکین ها (C-H -C) | C_H |
| | 3100-3010 900-690 | حلقه های آروماتیک | C_H |
| متغیر | 3590-3650 | الکل تک پار | O_H |
| متغیر تا حدی پهن | 3600-3200 | الکل با پیوند هیدروژنی ، فنول ها | |
| | 3500-3650 | کربوکسیلیک ها اسیدهای تکپاری | |
| | 2700-2500 | کربوکسیلیک اسیدهای با پیوند هیدروژنی | |
| | 3500-3300 | آمین ها و آمیدها | N_H |
| متغیر | 1680-1610 | آلکن ها | C=C |
| متغیر | 1600-1500 | حلقه آروماتیک | C=C |
| متغیر | 2260-2100 | آلکین ها | C C |
| | 1360-1180 | آمین ها ، امیدها | C_N |
| | 2280-2210 | نیتريد ها | C N |
| | 1300-1050 | الکل ، کربوکسیلیک اسیدها ، | C_O |
| | 1690-1760 | آلیدهیدها ، کتون ها ، کربوکسیلیک اسیدها ، | C=O |
| | 1500-1570 1370-1300 | ترکیبات نیترو | NO ₂ |

طیف سنجی رامان

کنش نور با ماده در ناحیه زیر قرمز می
این پدیده شناسایی گیری ترکیبات
پراکندگی تشکیل می .
پدیده پراکندگی رامان، دارای علامت ضعیفی است. به همین دلیل تا سال 1982 این پدیده
باید . که چندین کشف پدیده پراکندگی
وسیله مایعات بررسی کشف