

분광기의 기초: 이론

과학 발전을 돕습니다

(BUILDING BETTER SCIENCE)

여러분과 함께하는 애질런트



애질런트 테크놀로지스는 교육기관
지원의 일환으로 자사 교육 자료를
제공합니다.
교육 목적으로 자사 교육 자료를
무상 지원하고 있습니다.

본 슬라이드는 애질런트가 교육용으로 제작하였습니다.

교육 이외의 용도로 사진, 스케치 또는 그림을
사용하려면 먼저 애질런트에 문의하시기 바랍니다.

소개

분광기는 물질과 전자기 방사선 사이의 상호작용에 대한 연구입니다. 역사적으로, 분광기는 프리즘을 통해 분리된 가시광선에 대한 연구에서 출발했습니다. 나중에 이 개념은 방사 에너지와 상호작용을 파장 또는 진동수의 함수로서 구성하는 것으로 크게 확장되었습니다. 분광 데이터는 흔히 관심 항목에 대한 파장 또는 진동수의 감응 함수값으로 나타냅니다.

- 스펙트럼(라틴어): 환영
- Skopos (그리스어): 관찰자
- 분광학자 = 환영 관찰자



목차

역사적 배경

- 광 스펙트럼의 초기 역사
- 1666 가시 스펙트럼의 관찰
- 1802 Fraunhofer 흡수 라인
- Kirchhoff 및 Bunsen의 방출 실험
- Kirchhoff 및 Bunsen의 흡광 실험

정의

- Milton 스펙트럼
- 분광학 및 분광기
- 전자기 스펙트럼
- 빛

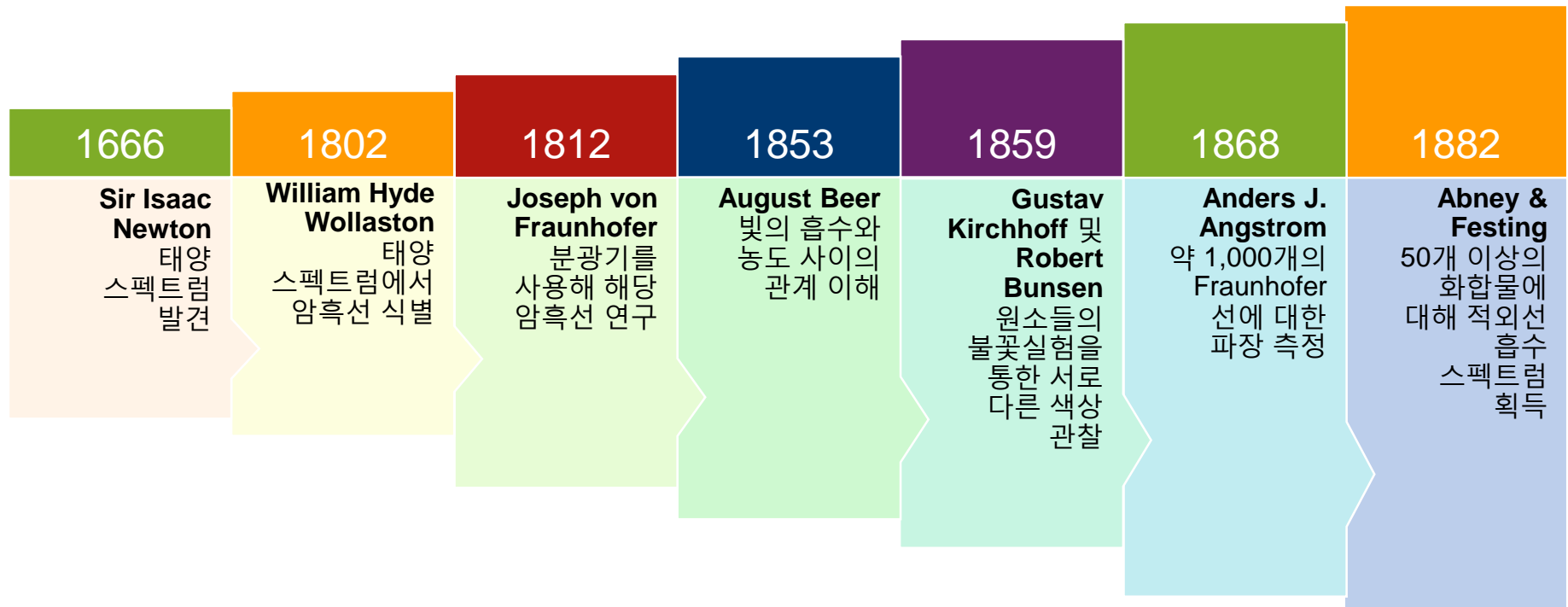
주요 파라미터

- 파장 및 진동수
- 흡수 및 방출
- 빛의 흡수 대 에너지 준위
- 원자 스펙트럼의 특징
- 흡광도 및 투과도
- 흡광도: 농도 관계
- Beer-Bouguer-Lambert 법칙



역사적 배경

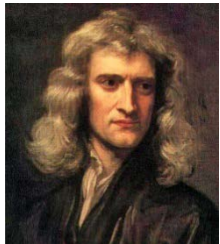
광 스펙트럼의 초기 역사



역사적 배경

1666 가시 스펙트럼의 관찰

Sir Isaac Newton 실험

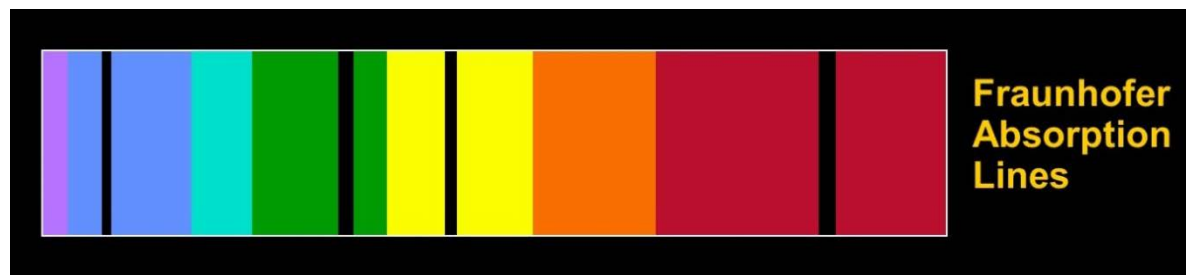


Sir Isaac Newton, 1642-1726
영국 물리학자 겸 수학자
출처: [위키피디아](#)

역사적 배경

1802 Fraunhofer 흡수선

Wollaston 및 Fraunhofer는 독립적으로 연구하여 태양 스펙트럼에서 암흑선을 발견합니다.



Fraunhofer는 더 나은 스펙트럼 분해능을 얻는 회절 격자를 소개합니다.

Fraunhofer는 암흑선은 대기가 태양 자체의 빛을 흡수하기 때문이라고 제안합니다.



사진 1: Joseph von Fraunhofer, 1787-1826, 독일 안경사
출처: [위키피디아](#)

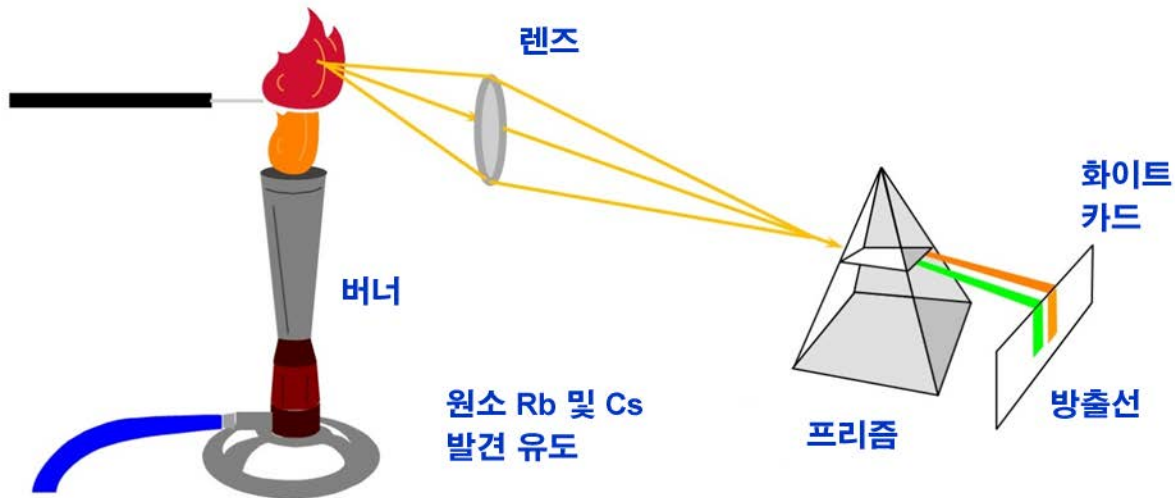
사진 2: William Hyde Wollaston, 1766-1828, 영국 화학자
출처: [위키피디아](#)

역사적 배경

Kirchhoff 및 Bunsen의 방출 실험

Kirchhoff 및 Bunsen의 실험

와이어 루프에 염을 넣고
불꽃에 대고 있습니다



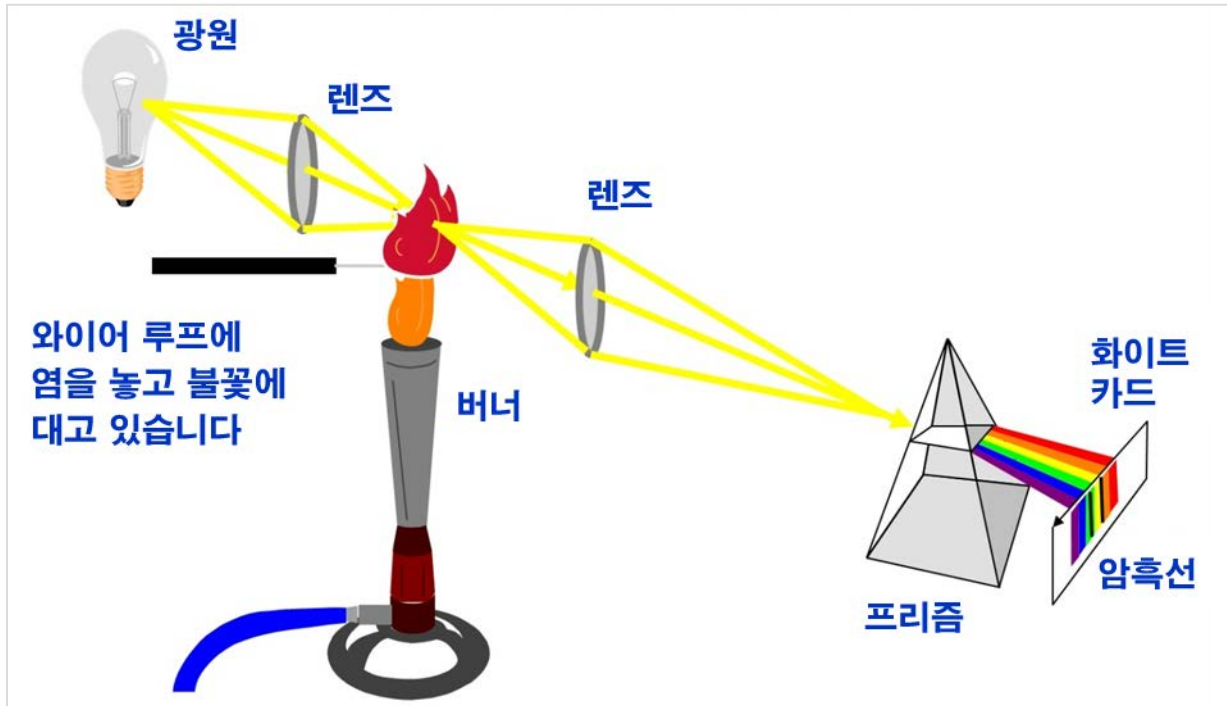
Robert Bunsen(1811-1899)
독일 화학자
출처: [위키피디아](#)

Gustav Robert Kirchhoff
(1825-1887)
독일 물리학자
출처: [위키피디아](#)

Kirchhoff 및 Bunsen은 불꽃실험을 통해 여러 원소의
다른 색상을 관찰했습니다.

역사적 배경

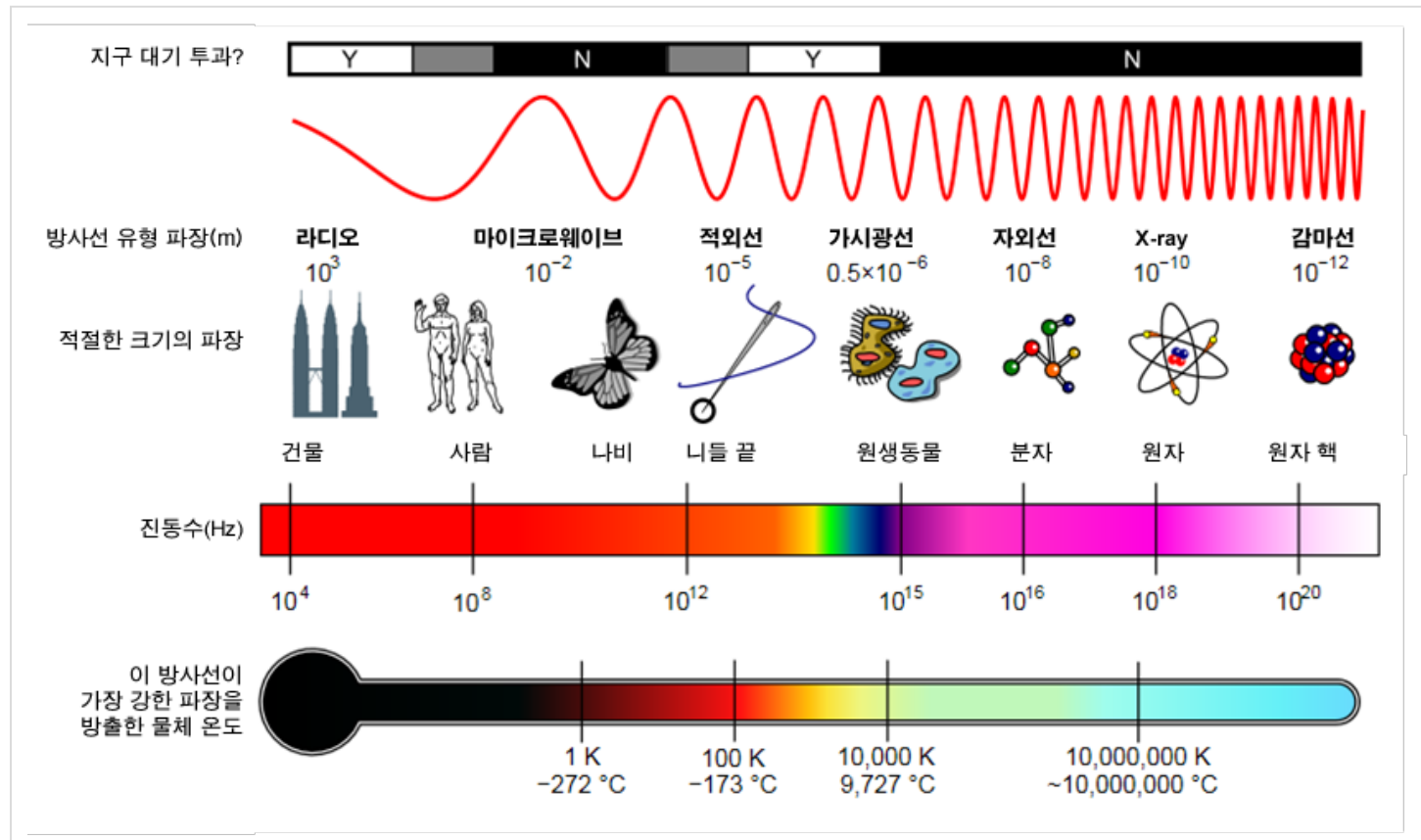
Kirchhoff 및 Bunsen의 흡광 실험



Kirchhoff와 Bunsen은 광원에서 나오는 빛을 불꽃에 가열된 염에 통과시켜서 Fraunhofer 흡수선을 얻었습니다.

정의

Milton 스펙트럼



Milton 스펙트럼 다이어그램은 유형, 파장(예제와 함께), 진동수 및 흑체 방출 온도를 보여줍니다.

출처: 위키피디아

NASA 이미지인 [EM_Spectrum3-new.jpg](#)에서 각색

정의

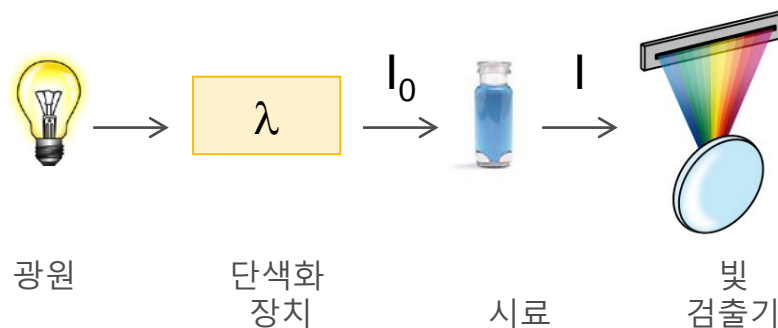
분광학

전자기 스펙트럼의 서로 다른 영역에서 다른 파장의 빛과 시료의 상호 작용을 측정

이렇게 측정된 파장 함수의 시그널은 스펙트럼에 집합이 되며, 여기에서 “분광학”이란 용어가 나왔습니다.

분광기

분광 소자에 의해 스펙트럼으로 분해된 빛을 이용해 광 스펙트럼 영역에서 상대 값을 측정하는 기기

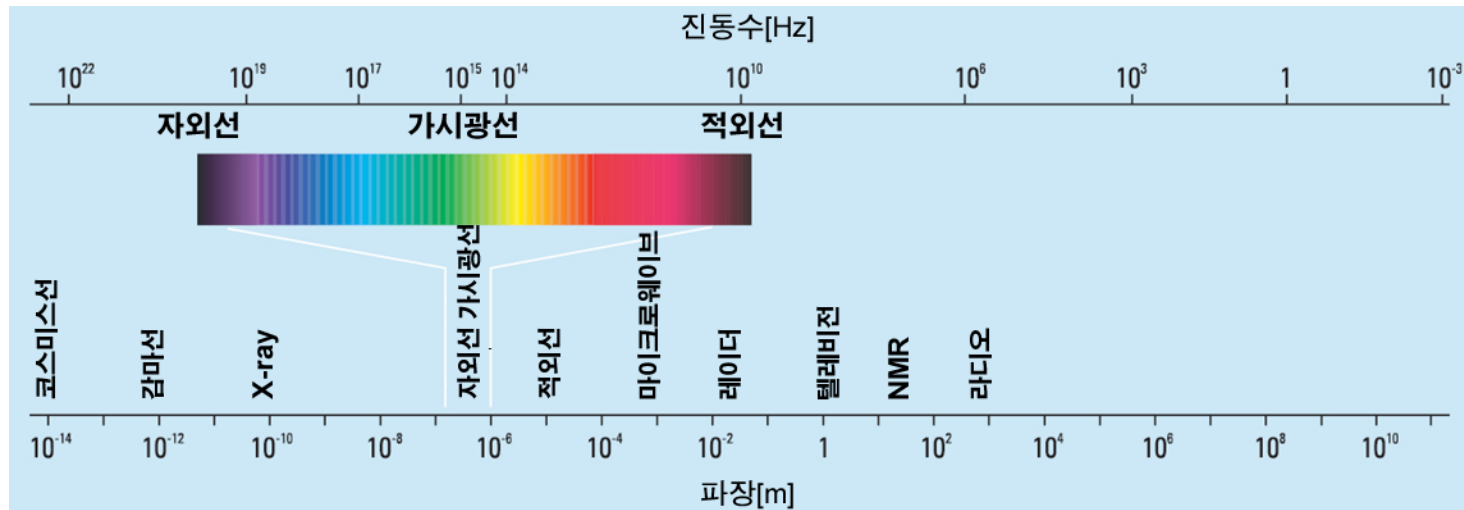


정의

전자기 스펙트럼

전자기 스펙트럼은 매우 넓은 영역의 진동수와 파장을 포함합니다.

- 스펙트럼 영역의 이름은 단순히 역사적 사실에 기반을 둡니다.
- 한 영역에서 다음 영역으로 이동할 때, 비약적이나 기본적인 변화는 없습니다.
- 가시광선 영역은 전자기 스펙트럼의 아주 작은 일부분입니다.



전자기 스펙트럼

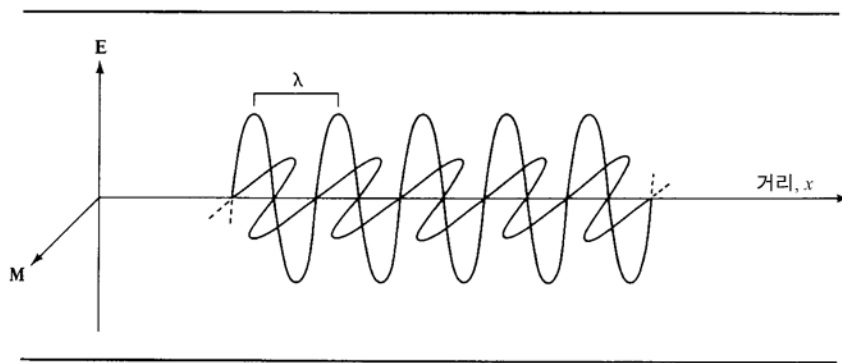
정의 빛

빛은 두 가지 형태로 설명할 수 있습니다.

- 파장과 진동수로서 웨이브 성질의 용어로 사용됩니다.
- 입자 같은 특성 광자라 부르는 에너지 패킷으로 표현됩니다.

이러한 용어는 전자기 스펙트럼 영역에서 유효하며 일반적으로 “빛”(가시광선, 자외선 및 적외선)이라고 간주되는 것으로 제한하지 않습니다.

빛은 본질적으로 진동하는 전기(E)와 자기(M) 장으로 이루어져 웨이브처럼 간주됩니다. 이 두개의 파장은 서로 직각을 이루며, 주어진 매질에서 일정 속도로 이동합니다. 진공 상태에서 이 속도는 $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ 입니다.



주요 파라미터

파장 및 진동수

전자기 방사선과 관련된 에너지는 다음과 같이 정의할 수 있습니다.

$$E = h \cdot \nu$$

진동수는 다음과 같이 파장과 관련되어 있습니다.

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

주의: 분광학에서 파장은 일반적으로 마이크로미터, 나노미터 또는 파수($1/\lambda$; 역 센티미터)로 표현됩니다.

E	에너지(J)
h	Planck 상수(6.62×10^{-34} Js)
ν	진동수(s^{-1})
c	빛의 속도(3×10^8 ms $^{-1}$)
λ	파장(m)

주요 파라미터

흡수 및 방출

물질과 전자기 방사선의 상호작용은 넓게 다음과 같이 분류될 수 있습니다.

- **흡수 과정:**

광원으로부터 방출된 전자기장이 시료에 흡수되고 검출기에 도달하는 방사 에너지의 **감소**가 일어나는 과정입니다.

- **방출 과정:**

전자기 방사선이 시료에서 나와 검출기에 도달하는 방사 에너지가 **증가**하는 과정입니다.

주요 파라미터

흡수 및 방출

흡수와 방출 과정은 서로 다른 에너지 준위 또는 상태로 **전이** 과정을 포함하고 있습니다.

전이가 발생할 때 입사 광자가 **두 상태 사이의 에너지 차이와 같은 에너지를 가져야 합니다**. 이 경우에 에너지가 흡수되고 들뜬 상태로 전이가 발생할 수 있습니다.

그러한 전이는 다음과 같은 변화가 수반될 수 있습니다

- 전자 에너지
- 진동 에너지
- 회전 에너지

$$\Delta E_{\text{전자}} > \Delta E_{\text{진동}} > \Delta E_{\text{회전}}$$

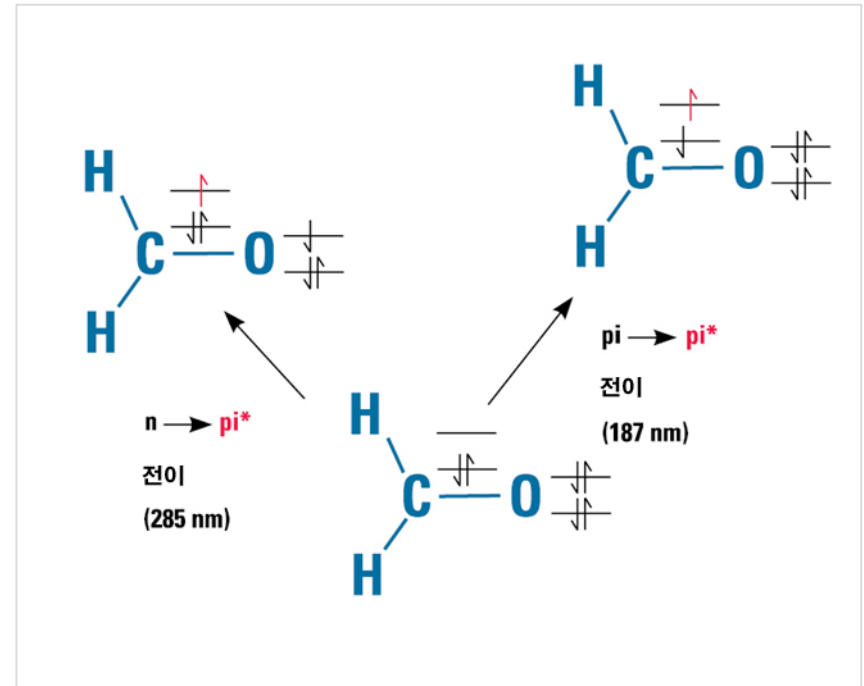
핵 에너지 준위의 변화는 매우 높은 에너지로 관찰될 수 있지만(γ 선), 핵 회전 상태의 변화는 훨씬 낮은 에너지에서 관찰될 수 있습니다(마이크로파 및 라디오파).

주요 파라미터

흡수 및 방출

이 그림은 포름알데히드에서 전자 전이와 이를 일으키는 빛의 파장을 보여줍니다.

이러한 전이로 인해 흡수하는 종의 에너지 준위에 매우 특징적인 차이를 가지는 파장에서 매우 좁은 흡광도 밴드가 발생합니다.



포름알데히드에서 전자 전이

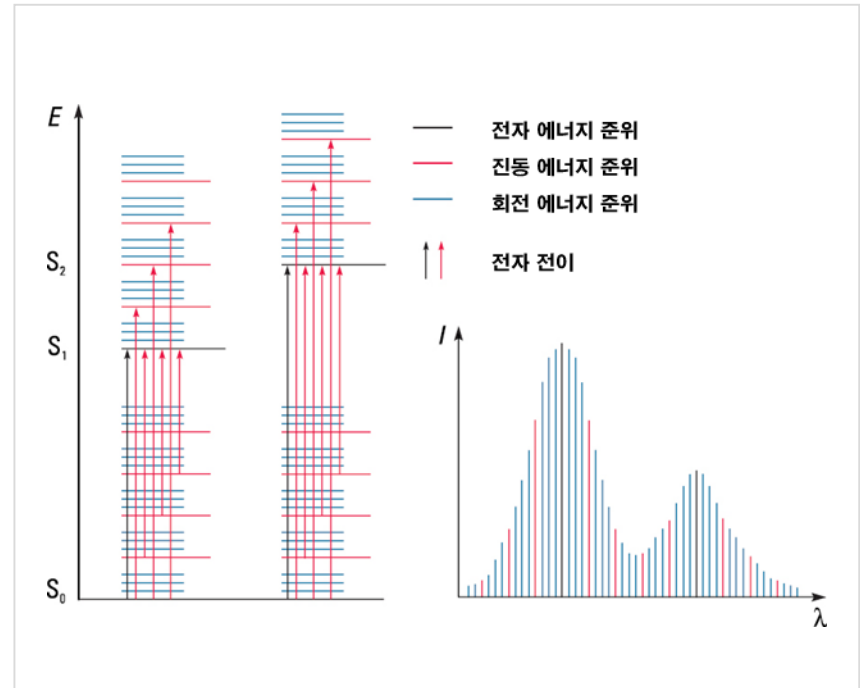
주요 파라미터

흡수 및 방출

오른쪽 그림에서 전자 에너지 준위에 겹쳐진 진동 및 회전 에너지 준위를 볼 수 있습니다.

서로 다른 에너지를 가지는 많은 전이가 발생할 수 있기 때문에 밴드가 넓어집니다.

밴드가 넓어지는 현상은 용매-용질 상호작용으로 인해 용액에서 더 커집니다.



분자에서 전자 전이와 UV-visible 스펙트럼

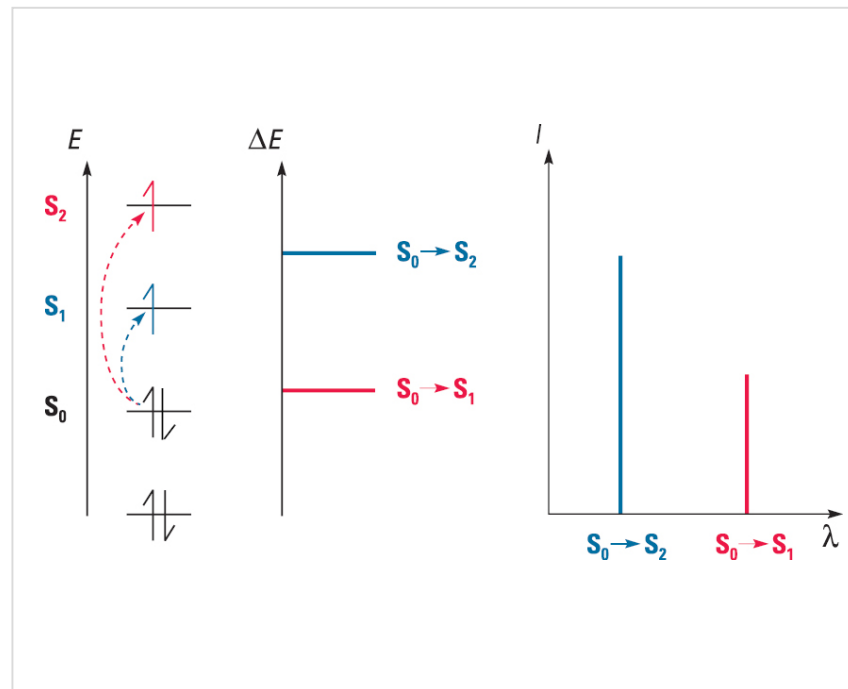
주요 파라미터

흡수 및 방출

오른 쪽 그림은 원자에서 전자 전이의 예를 보여줍니다.

이러한 전이로 인해 흡수하는 종의 에너지 준위에 매우 특징적인 차이를 가지는 파장에서 매우 좁은 흡광도 밴드가 발생합니다.

원자로부터 각 흡수/방출 에너지에 대해 고유의 파장이 존재합니다.



원자에서 전자 전이와 스펙트럼

주요 파라미터

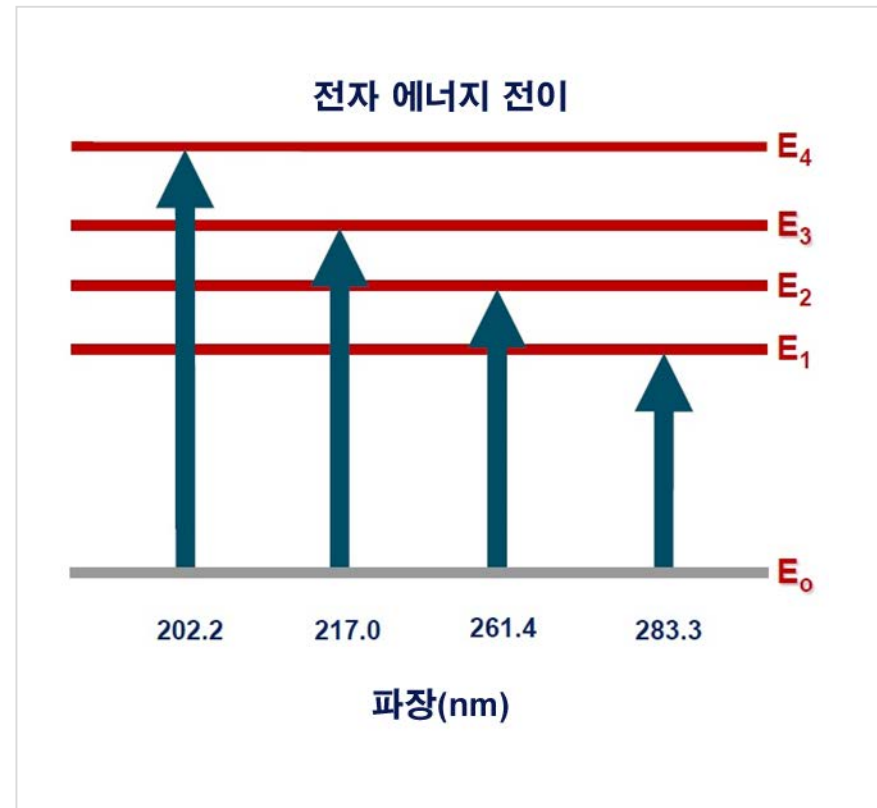
흡수 및 방출

원자들은 서로 다른 양의 에너지를 흡수할 수 있습니다:

- 가열
- 서로 다른 파장의 빛

전자가 에너지 준위를 변경할 수 있습니다:

- 에너지 준위 변화 = 흡수된 빛의 에너지
- 원자가 “들뜸”
- 전자가 더 높은 에너지 준위로 이동:
 $E_1, E_2, \dots E_n$



납(Pb)의 에너지 준위 다이어그램

주요 파라미터

빛의 흡수 대 에너지 준위

빛의 파장(λ)은 에너지 준위 사이의 간격에 역비례합니다.

$$\lambda = \frac{c}{\Delta \cdot E} \quad (\text{더 넓은 간격} = \text{더 짧은 파장})$$

각 전이는 서로 다른 간격과 에너지를 가지며 이에 따라 파장도 다릅니다.

원자도 방출 선을 가집니다. 들뜬 원자가 바닥 상태로 이완되어 방출된 빛으로 에너지를 표출합니다.

- 흡수와 동일한 에너지
- 흡수와 동일한 파장

주요 파라미터

원자 스펙트럼의 특징

선명한 피크(UV-Vis의 넓은 피크에 비해)

가장 뚜렷한 선은 바닥 상태에서 기인함

- 공명선:
 - 가장 강렬한 선
 - 원자 흡수와 가장 큰 관계

하나의 들뜬 상태에서 다른 상태로 발생 가능

- 비공명선:
 - 약한선
 - 일반적으로 원자 흡수에는 유용하지 **않음**

주요 파라미터

흡광도 및 투과도

방사선이 물질과 상호작용할 때
수 많은 과정이 일어날 수 있습니다:

- 흡광도
- 반사
- 산란
- 형광/인광
- 광화학 반응

빛이 시료를 통과하거나 시료에서
반사될 때 흡수된 빛의 양은 입사
방사선(I_0) 대 투과된 방사선(I)의
비율과 같습니다.

$$T = \frac{I}{I_0} \quad T = \left(\frac{I}{I_0} \right) \cdot 100$$

(투과도)

$$A = -\log_{10} T$$

(흡광도)

주요 파라미터

흡광도/농도 관계

Lambert의 법칙

- 투명 매질에 의해 흡수된 빛의 양은 입사광의 강도와 무관합니다
- 각각의 연속적인 매질 두께 단위는 매질을 통과하는 빛의 동일한 부분을 흡수합니다

Beer의 법칙

- 빛 흡수는 시료의 흡수 종 수에 비례합니다

UV-Vis 분광기

Beer-Bouguer-Lambert 법칙

흡광도는 Beer-Bouguer-Lambert 법칙에 따라 농도에 관련됩니다.

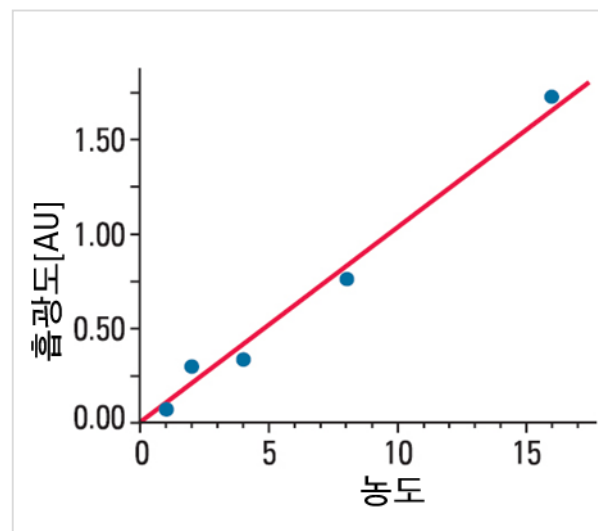
$$A = -\log_{10} T = \varepsilon \cdot b \cdot c$$

ε 흡광 계수 또는 몰 흡광도(Lmol⁻¹cm⁻¹)

b 투과 경로 길이(cm)

c 농도

흡광도는 시료와의 상호 작용 및/또는 반사 및 산란으로 인한 손실에 기인할 수 있습니다.



검량선의 예
검량은 A를
c의 변화에 따라
측정하여
이루어집니다.

출처: [UV-visible 분광기의 기초이론](#)

자세한 사항은 슬라이드 노트를 참조하십시오

약어

약어	정의
A	흡광도
AAS	원자 흡수 분광기
AES	원자 방출 분광기
b	경로 길이(cm)
c	빛의 속도($3 \times 10^8 \text{ms}^{-1}$)
ϵ	흡광 계수 또는 몰 흡광도($\text{Lmol}^{-1}\text{cm}^{-1}$)
E	진동 전계
E	에너지
h	Planck 상수($6.62 \times 10^{-34}\text{Js}$)
I	투과 방사
I_0	입사 방사

약어	정의
ICP-OES	유도 결합 플라즈마 – 원자 분광기
ICP-MS	유도결합 플라즈마 – 원자 질량 분석기
λ	파장
M	진동 자기장
MP-AES	마이크로웨이브 플라즈마 원자 방출 분광기
T	투과율
ν	진동수(s^{-1})
XRF	X-ray 형광
XRD	X-ray 회절

추가 정보

애질런트 제품에 대한 자세한 정보를 확인하시려면 www.agilent.com 또는 www.agilent.com/chem/academia를 방문하시기 바랍니다.

이 프레젠테이션에 관한 질문이나 제안은 academia.team@agilent.com으로 보내주십시오.

발행물	제목	발행 번호
입문서	Contract Environmental Laboratory에서 원자 분광기 응용 분야	5991-5326KO
입문서	UV-visible 분광기의 기초 이론	5980-1397KO
브로셔	원자 분광기 포트폴리오 브로셔	5990-6443KO
웹사이트	CHROMacademy – 학생과 대학교 직원들을 위한 온라인 수업을 무료로 제공	
동영상	www.agilent.com/chem/teachingresources	
이미지	www.agilent.com/chem/teachingresources	





감사합니다

< 목차

발행물 번호 5991-6594KO

