

## 光学結晶選択のポイント

### 透過範囲

- 測定目的に合った透過範囲の結晶を選択する必要があります。
- 透過範囲は厚さ数 mm の窓板としての使用を想定して示されています。より厚い窓板や ATR 結晶として用いる場合は光路長がより大きくなる可能性があり、その場合透過範囲はより狭くなります。

### 機械強度

- 各物質の硬度は機械強度の目安にはなりませんが、硬度が大きくても瞬間的な衝撃や急な温度変化に弱い物質もあります。また、局所的に圧力がかかった場合、その場所だけ変形してくぼむ物質や、ひびが入るように破損する物質があります。

### 溶解性・反応性

- 測定試料と反応しない物質を選択する必要があります。
- 赤外を透過する物質の多くは水溶性の塩であり、湿度が高い環境下ではすぐに曇ってしまいます。
- 水への溶解度が小さい物質でも、酸またはアルカリで溶解するものもあります。
- 洗浄に使用する溶媒にも注意が必要です。

### 屈折率

- 屈折率  $n_1$  の物質から  $n_2$  の物質に光が垂直に入射するとき、界面での反射率  $R$  は以下の式で示されます。

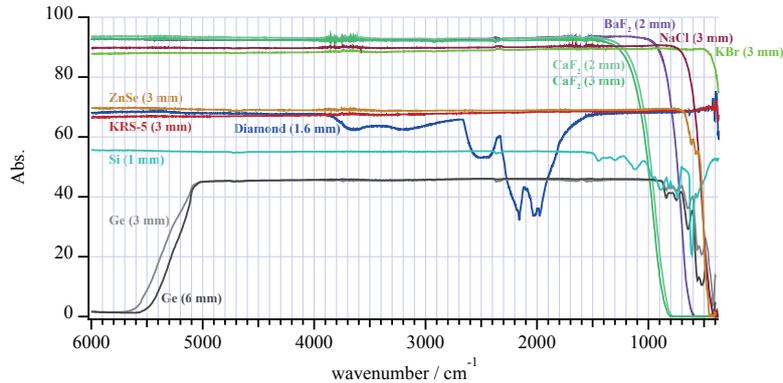
$$R = (n_1 - n_2)^2 / (n_1 + n_2)^2$$

屈折率の差が大きいほど反射率は高くなり、特に 2 枚の窓で試料を挟む場合、各窓の両面で計 4 回反射するため、反射ロスが大きくなります。反射防止 (AR) コートにより表面反射を大幅に抑えることが可能です。

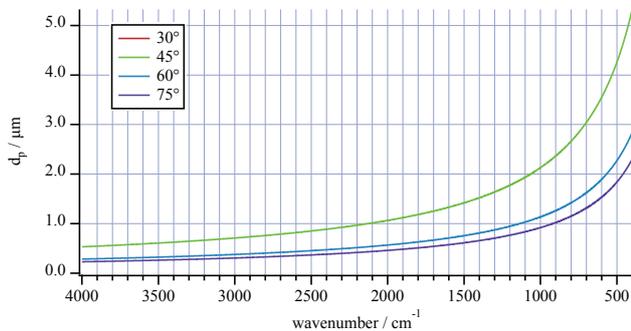
- はさんだ試料の厚さ (スペーサー厚) が光の波長と同程度の場合、反射光の干渉によってスペクトルのベースラインがうねることがあります。これを防ぐには、窓表面を荒らしたり、ウェッジタイプの窓を使用します。
- ATR 結晶として使用する場合は、屈折率によって試料へのもぐり込み深さ  $d_p$  が変化します。

$$d_p = \lambda / 2\pi n_1 [\sin^2 \theta - (n_2/n_1)^2]^{1/2}$$

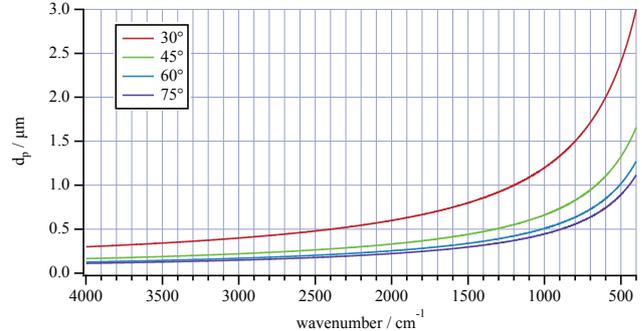
$\theta$  は入射角、 $n_1, n_2$  は ATR 結晶とサンプルの屈折率、 $\lambda$  は結晶中の波長です。屈折率が大きいほど  $d_p$  が小さくなり、表面の情報のみを選択的に測定することが可能になります。



各種結晶の透過率



ダイヤモンド ATR における試料へのもぐり込み深さ (試料の屈折率が 1.5 の場合)  
入射角 30° では ATR 条件を満たさない



ゲルマニウム ATR における試料へのもぐり込み深さ (試料の屈折率が 1.5 の場合)