

实用付里叶变换红外光谱学

林 林 吴平平 周文敏 王俊德等 编著

FTIR



中国环境科学出版社

实用付里叶变换红外光谱学

林 林 吴平平 等编著
周文敏 王俊德

中国环境科学出版社

1991 · 9

内 容 简 介

本书系统全面地介绍了红外光谱技术。从实用的角度,介绍了付里叶变换红外光谱的原理和结构,近年来的发展,实验技术,光谱技术和应用,以及计算机数据处理技术等。对于特殊样品制备、微量混合物的分离检测、高压红外光谱、低温红外光谱、基体隔离技术、反射光谱、偏振光谱、远红外和近红外光谱、红外光声光谱、动态光谱、发射光谱等都作了详细介绍。

本书由南开大学、中国科技大学、中国环境监测总站、华东化工学院、北京农业大学、长春应化所、机电部 46 研究所等单位的有关专家学者编写,内容丰富,适于化学、石油化工、环境科学、材料科学、生物学、医学、物理学、商检、药检、公安、海关等领域的科研、教学、生产人员使用,也可供大专院校师生作教材和工具书。

实用付里叶变换红外光谱学

林 林 吴平平 等编著
周文敏 王俊德

责任编辑 周永平

*

中国环境科学出版社出版

北京崇文区北岗子街 8 号

滨州激光照排印刷厂印刷

新华书店总店科技发行所发行 各地新华书店经售

*

1991 年 9 月第一版 开本:787×1092 1/16

1991 年 9 月第一次印刷 印张:32.5

印数:001—3000 字数:810 千字

ISBN 7-80093-061-0/X·545

定 价:17.50

编写人员名单

林 林 吴平平 周文敏 韩哲文
王俊德 李光平 王永泰 严衍禄
徐谨民 朱晋锐 李来明

主 编:林 林 吴平平
周文敏 王俊德

组织和整理:江罗兰 杨 健

目 录

前 言	(1)
第一篇 FTIR 光谱的原理及仪器	(3)
第一章 FTIR 光谱的基本原理	(3)
第一节 色散型红外与付里叶变换红外的差异	(3)
第二节 迈克尔逊干涉仪与干涉图	(4)
第三节 干涉图的付里叶变换和光谱的获得	(8)
第四节 FTIR 光谱的特点	(19)
参考文献	(25)
第二章 FTIR 光谱仪	(28)
第一节 FTIR 光谱仪的基本结构	(28)
第二节 FTIR 光谱仪的光学系统	(29)
第三节 FTIR 光谱仪的计算机系统	(52)
参考文献	(54)
第二篇 FTIR 实验技术和数据处理	(55)
第一章 红外光谱的样品制备技术	(55)
第一节 常用中红外区的光学材料	(55)
第二节 固体样品的制备技术	(57)
第三节 液体及水溶液样品的制备技术	(67)
第四节 气体样品的制备技术	(73)
第五节 不稳定样品及腐蚀性样品的制备	(78)
第六节 氘代样品的制备技术	(79)
参考文献	(80)
第二章 微量分析和微区分析	(81)
第一节 微量测量技术的进展	(81)
第二节 微量样品的分离提纯技术	(83)
第三节 微量测量技术	(95)
第四节 微量制样技术与测量法	(102)
第五节 FTIR 微区分析	(105)
参考文献	(118)
第三章 高压红外光谱法	(119)
第一节 引言	(119)
第二节 红外高压池	(119)
第三节 压力的单位与标定	(128)
第四节 高压红外光谱法的应用	(135)
参考文献	(147)
第四章 低温 FTIR 技术与应用	(148)
第一节 低温红外光谱技术及其特点	(148)

第二节	低温杜瓦瓶	(149)
第三节	封闭式低温循环系统	(151)
第四节	低温 FTIR 技术的应用	(157)
参考文献		(172)
第五章	付里叶变换红外光谱基体隔离技术	(173)
第一节	基体隔离技术的基本原理	(173)
第二节	实验装置和实验技术	(173)
第三节	基体隔离技术的优缺点	(183)
第四节	基体效应	(185)
第五节	在分子结构研究上的应用	(187)
第六节	定性定量分析应用	(193)
参考文献		(219)
第六章	偏振红外光谱法	(221)
第一节	偏振红外光谱的原理	(221)
第二节	偏振红外光谱的测定	(225)
第三节	偏振红外光谱的应用	(231)
参考文献		(235)
第七章	红外联机检测技术	(236)
第一节	红外联机检测的意义与发展简史	(237)
第二节	GC/FTIR 系统	(238)
第三节	GC/FTIR 的进展	(253)
第四节	GC/FTIR 的应用	(263)
第五节	LC/FTIR	(272)
参考文献		(279)
第八章	红外光谱分析中的计算机应用技术	(280)
第一节	多组分体系的定量分析	(280)
第二节	付里叶解卷积技术	(289)
第三节	红外光谱的计算机检索和辅助光谱解析	(297)
参考文献		(309)
第三篇	FTIR 光谱技术	(311)
第一章	近红外光谱技术及应用	(311)
第一节	近红外光谱的特点及其应用	(311)
第二节	近红外光谱仪	(314)
第三节	有机化合物的近红外吸收光谱法	(318)
第四节	复杂物的近红外漫反射光谱分析	(328)
第五节	近红外光谱法的应用	(340)
第六节	近红外谱区的旋光色散谱与圆二色谱	(344)
参考文献		(349)
第二章	远红外光谱	(352)
第一节	远红外光谱的特点	(352)
第二节	远红外光谱的测量技术	(355)

第三节 远红外光谱的应用	(362)
参考文献	(369)
第三章 动态红外光谱	(370)
第一节 概述	(370)
第二节 稳态平稳中的瞬态物种的研究	(372)
第三节 慢变化体系的研究	(373)
第四节 快变化体系的测定	(392)
第五节 时间分辨光谱	(394)
参考文献	(441)
第四章 红外光声光谱	(413)
第一节 光声光谱的发展	(413)
第二节 光声光谱原理	(414)
第三节 光声池的结构设计	(422)
第四节 红外光声光谱法的应用	(424)
第五节 光声光谱法的特点和适用性	(439)
参考文献	(440)
第五章 付里叶变换红外发射光谱	(442)
第一节 红外发射光谱分析原理	(442)
第二节 付里叶变换红外发射光谱分析测量方法	(447)
第三节 付里叶变换红外发射光谱分析技术的某些应用	(449)
参考文献	(465)
第六章 遥感付里叶变换红外光谱在气体测定上的应用	(466)
第一节 遥感付里叶变换红外光谱系统	(466)
第二节 系统校正	(468)
第三节 FTIR 光谱遥测气体	(471)
第四节 FTIR 光谱遥测的某些应用	(474)
参考文献	(483)
第七章 反射光谱及其应用	(484)
第一节 镜面反射光谱	(484)
第二节 外反射光谱	(500)
第三节 内反射光谱	(501)
第四节 漫反射光谱	(506)
参考文献	(510)

前言

红外分光光度法是鉴别的物质和分析物质结构的有用手段,已被广泛用于各种物质的定性鉴别和定量分析,并用于研究分子间和分子内部的相互作用。红外光谱仪已成为分析化学中应用最广的仪器之一,到目前为止红外光谱仪已发展了四代。第一代是最早使用的棱镜式色散型红外光谱仪,它对温度、湿度敏感,对环境要求苛刻。60年代由于光栅的刻制和复制技术的发展,出现了光栅代替色散棱镜的第二代光栅型色散式红外光谱仪,它提高了仪器的分辨率,拓宽了测量波段,降低了环境要求,到80年代初,计算机化的光栅型红外光谱仪得到很大发展,使数据处理和操作更为简便。70年代发展起来的干涉型红外光谱仪,是红外光谱仪的第三代,它的工作原理和色散型完全不同,它具有宽的测量范围,高测量精度和极高的分辨率,以及极快的测量速度。干涉型仪器的代表是付里叶变换红外光谱仪,它具有优良的特性,完善的功能,只是价格较贵,但随着计算机技术发展,大幅度降价,它会渐渐取代目前广泛使用的色散型红外光谱仪。70年代末发展起来的激光红外光谱,能量高,单色性好,具有极高的灵敏度,可调激光既作为光源又省去了分光部件,这类第四代红外光谱仪将成为今后研究的重要方向。

付里叶变换红外光谱法简称 FTIR (Fourier Transform Infrared Spectroscopy)。其仪器的核心是迈克尔逊干涉仪,它是 1891 年由迈克尔逊^[1] (Michelson) 制成的,干涉仪可精确地控制两相干光的光程差,他推断,从干涉仪测量的干涉条纹中,有可能导出某些光谱信息。1897 年 Rayleigh^[2] 指出,干涉条纹得到的数据,可以通过付里叶变换求出相应的辐射光谱。1911 年 Rubens^[3] 首次准确的测量了干涉图,而从干涉图获得光谱图却是由 Fellgett^[4] 首先完成。但当时的付里叶变换运算既费时又费力,应用起来很困难,实用价值不大。付里叶变换光谱技术实用化,是在 1965 年 Cooley 等^[5] 的快速付里叶变换算法出现后,此法大幅度缩短了计算时间,使之能在分秒级别上得到光谱图,它为实用的付里叶变换光谱仪提供了计算基础。60 年代末,一些价格昂贵的 FTIR 谱仪开始投入市场,充分显示了它的高精度,高分辨率和快速测量的特点,但昂贵的价格无法与低价的色散型仪器相匹配。直至 80 年代初,由于计算机技术的发展,计算机大幅度降价,促使 FTIR 谱仪迅速发展起来,技术不断更新,产品性能不断完善,出现了很多低价高性能产品^[6]。

FTIR 法发展了动态光谱、光声光谱、在线联机检测、超微量红外显微法等一系列新技术^[7-82],促进了红外光谱技术发展,为研究物质结构提供了更多的手段,在有机化学,金属有机化学,高分子化学、无机化学、催化、石油化工、材料科学、生物学、医药、物理、环境科学等领域得到广泛应用。为了使工作在各领域中的广大红外光谱工作者,能了解 FTIR 光谱的原理,掌握 FTIR 光谱的新技术,我们编写了这本书。全书共分三篇,第一篇简明地介绍了 FTIR 的原理和特点及 FTIR 光谱仪的结构和工作原理以及近代仪器的发展;第二篇介绍了 FTIR 的各种实验技术和计算机数据处理技术;第三篇介绍 FTIR 的新技术和新方法。本书由南开大学、中国科技大学、北京农业大学、华东化工学院、长春应化所、中国环境监测总站、机

电部 46 所的有关专家、学者编著。第一篇由林林编著；第二篇编著吴平平(一、三、六章)、林林(二章)、李光平(四章)、朱晋倡、李来明(五章)、周文敏(七章)、王永泰(八章)；第三篇编著严衍禄(一章)、林林(二章)、韩哲文(三、四章)、王俊德(五、六章)、徐谨民(七章)；全书由尼高力公司江罗兰、杨健组织和整理。

全书力求其实用性,以便帮助读者解决一些实际问题,同时又向读者介绍了 FTIR 法的一些新技术及其进展。由于内容涉及面很广,又是多位作者合著,虽经多次修改,但仍可能有错误之处,希望读者指教为幸。

编著者

1991.9

第一篇 FTIR 光谱的原理及仪器

第一章 FTIR 光谱的基本原理

第一节 色散型红外与付里叶变换红外的差异

付里叶变换红外光谱仪(简称 FTIR 光谱仪)和其它类型红外光谱仪一样,都是用来获得物质的红外吸收光谱,但测定原理却不相同。如图 1-1-1 所示。在色散型红外光谱仪中,光源发出的光先照射试样,而后再经光栅分成单色光,由检测器检测后获得光谱。但在付里叶变换红外光谱仪中,首先是把光源发出的光经迈克尔逊干涉仪变成干涉光,再让干涉光照射样品。检测器仅获得干涉图而得不到红外吸收光谱。实际吸收光谱是由计算机把干涉图进行付里叶数字变换得到的。

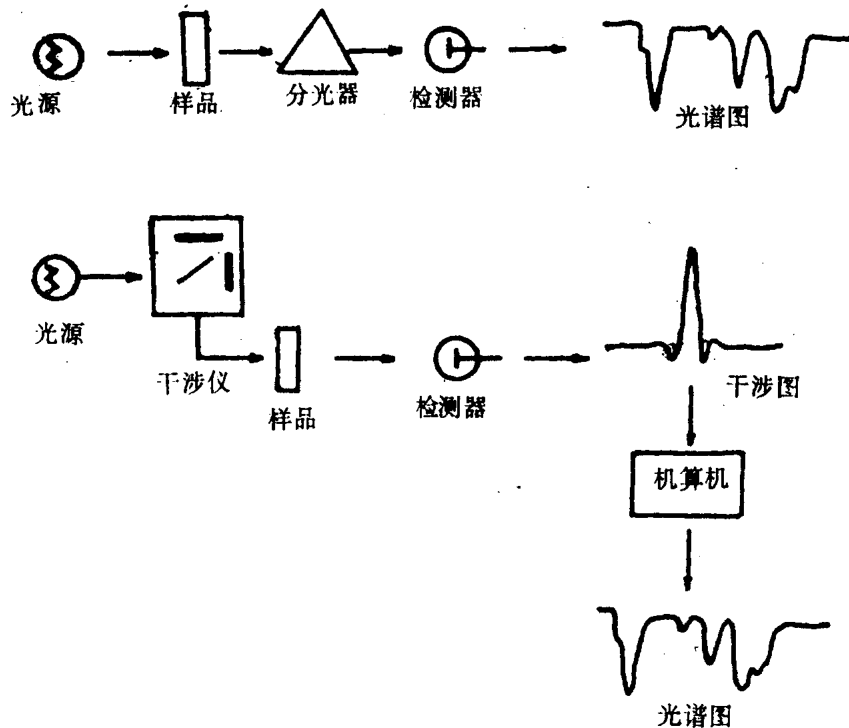


图 1-1-1 色散型红外与干涉型红外原理图

从两类红外光谱仪原理比较可知,付里叶变换红外光谱(FTIR)有其独特之处,它与一般色散型红外截然不同。FTIR 谱仪无分光系统,测量时是应用经迈克尔逊干涉仪调制的干涉光。可一次取得全波段光谱信息。具有高光通量,低噪声,测量速度快等一系列优点。它扩展了红外光谱研究领域,发展了许多特殊测试技术。其详尽原理和特点将在后几节中进行介绍。色散型与 FTIR 谱仪特点的比较列于表 1-1-1。

表 1-1-1 色散型与 FTIR 谱光性能比较表

色散型	FTIR
1. 光学部件复杂,带有多种易磨损的活动部件,有机械公差。	1. 光学部件简单,只有一个可动镜在实验过程中运动。
2. 测量波段窄,扩宽波段设计复杂,制作困难。	2. 测量波段宽,只需换用不同的分束器、光源和探测器,就能测 $45000\sim 6\text{cm}^{-1}$ 整个光谱波段。
3. 测量精度低,需用外部标准校正。	3. 利用 He-Ne 激光器提供 0.01cm^{-1} 的测量精度。
4. 为了获得高分辨光谱需用光阑限制光束,使光通量降低,检测灵敏度下降。	4. 光束全部通过,光通量大,检测灵敏度高。
5. 使用色散法,在某时间间隔内只能测量很窄的波段范围。	5. 具有多路通过特点,所有频率同时测量。
6. 扫描速度慢不宜测量快速变化的过程,与 GC、LC 联机检测困难。	6. 扫描速度最快可达 60 次/秒,可作快速反应动力学研究。并可与 GC、LC 联机检测。
7. 杂散光易造成虚假读数。	7. 使用调制音频测量,杂散光不影响检测。
8. 样品受红外光束聚焦加热,易产生热效应。	8. 样品放于分束器后测量,大量辐射由分束器阻挡。样品又接收调制波,故使热效应极小。
9. 样品自身的红外辐射会被检测器接收。	9. 检测器仅对调制的音频信号有反应。

第二节 迈克尔逊干涉仪与干涉图^[83-92]

FTIR 光谱仪的主要光学部件是迈克尔逊干涉仪,其结构如图 1-1-2 所示。

干涉仪系统包括两个互成 90° 角的平面镜、光学分束器、光源和探测器。平面镜中一个固定不动的称定镜。一个是沿图示方向平行移动的称动镜。动镜在平稳的移动中要时时与定镜保持 90° 角。为了减小磨擦,防止振动,通常把动镜固定在空气轴承上移动。光学分束器具有半透明性质,放于动镜定镜之间并和它们呈 45° 角放置。它使入射的单色光 50% 通过,50% 反射,因而从光源射来的一束光到达分束器时即被它分为两束,Ⅰ 为反射光,Ⅱ 为透射光。反射光垂直射到定镜上,在那里又被反射,沿原光路返回分束器,其中一半又透过分束器射向探测器,而另一半则被反射回光源。透射光 Ⅱ 也以相同经历穿过分束器射到动镜上,在那里被反射,沿原光路回到分束器,再被分束器反射,与 Ⅰ 光束一样射向检测器,Ⅱ 光的另一半则透过分束器返回光源。射向探测器的 Ⅰ、Ⅱ 两光束实际上又会合在一起,但已成为具有干涉光特性的相干光。

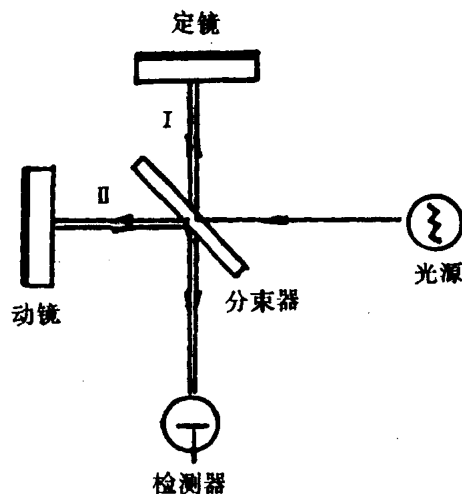


图 1-1-2 迈克尔逊干涉仪示意图

当动镜移动到不同位置时,即能得到不同光程差的干涉光强。干涉光产生的过程可用图 1-1-3 定性说明。

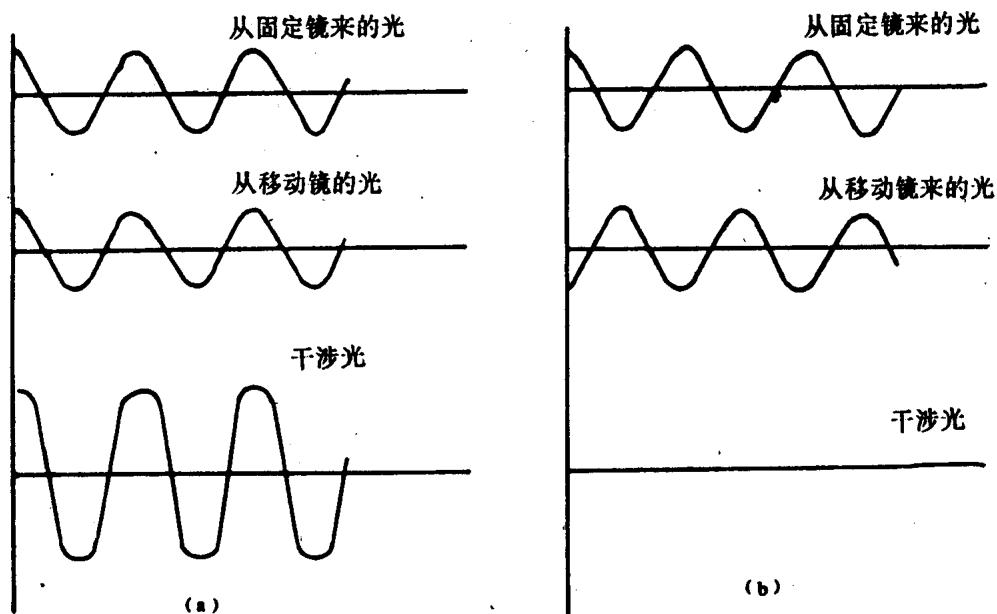


图 1-1-3 不同情况下产生的干涉

(a) 光程差 $n\lambda$ 的场合 ($n=0, 1, 2, \dots$) (b) 光程差 $(n + \frac{1}{2})\lambda$ 的场合 ($n=0, 1, 2, \dots$)

现在我们来研究一下动镜移动时如何产生干涉(参看图 1-1-4)。当定镜和动镜距分束器距离相等时(图 1-1-4A 位) I 光和 II 光到达探测器时光程一样,相位相同,产生相长干涉,亮

度最强。当动镜移动时, I 光光程无变化(定镜反射光), II 光程却随动镜移动不断变化。如动镜移动 $1/4 \lambda$ (即移动 $1/4$ 波长距离) 则 I、II 两光将有 $1/2 \lambda$ 的光程差, 相位相反, 发生相消干涉, 亮度最小。(如图 1-1-4 动镜 C 位)。如果动镜移动 $1/2 \lambda$, I、II 两光将有 1λ 的光程差, 相位相同发生相长干涉, 亮度加强。依此类推, I、II 两相干光光程差变化所产生的干涉有如下规律:

光程差为 $\pm n\lambda$ ($n=0, 1, 2, \dots$) 发生相长干涉, 光强加强。

光程差为 $n \pm 1/2 \lambda$ ($n=0, 1, 2, \dots$) 发生相消干涉, 光强减弱。

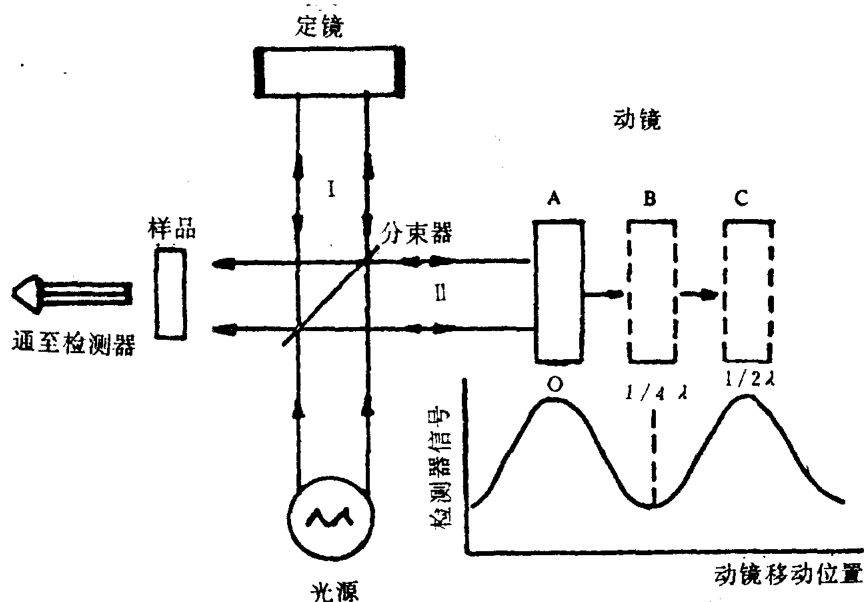


图 1-1-4 动镜移动中产生干涉示意图

负号表示动镜从零位向分束器方向移动。正号表示动镜从零位向远离分束器方向移动。零位是动镜距分束器和定镜距分束器相等的部位。

在动镜移动的相长、相消干涉间是部分相长和相消干涉。因此, 对一个纯单色光, 在动镜连续移动中将得到强度不断变化的余弦干涉波。如果动镜以速度 v 相对分束器移动, 探测器上得到的信号强度将随相长和相消干涉变化而不断改变。其周期变化规律可用下式表示,

$$f = \frac{v}{1/2\lambda} = 2v/\lambda = 2\nu v \quad (1-1-1)$$

f ——调制频率

v ——动镜移动速度;

λ ——波长;

ν ——波数 ($\nu = \frac{1}{\lambda}$)

从上式可知, 迈克尔逊干涉仪把高频振动的红外光 (光速/波长 $\approx 10^{14}$ Hz) 通过动镜不断移动调制成低频的音频频率 ($\frac{\nu}{1/2\lambda} \approx 10^2$ Hz) 例如动镜移动速度为 0.16 cm/s 时, $4000 \sim 400 \text{ cm}^{-1}$ 波段的调制频率约为 128 Hz 左右。由此可知, 在 FTIR 红外测量时, 检测器上接收的实际是音频信号, 这就是 FTIR 能抗杂散光干扰的根本原因之一。

现在我们来研究一下纯单色光经干涉仪后产生干涉光的强度变化规律。理想状态下,在任意光程差 x 时入射到探测器上的光强可用下式表示。

$$I'(x) = 2RTI(\nu)(1 + \cos 2\pi\nu x) \quad (1-1-2)$$

R ——分束器反射率; T ——分束器透射率;

$I'(x)$ ——探测器上产生的信号强度,它是光程差 x 的函数;

$I(\nu)$ ——光源强度,与光的频率有关; ν ——波数。

$$\text{改写上式} \quad I'(x) = 2RTI(\nu) + 2RTI(\nu)\cos 2\pi\nu x \quad (1-1-3)$$

从 1-1-3 式可知,探测器上产生的信号是直流部分 $2RTI(\nu)$ 和交流部分 $2RTI(\nu)\cos 2\pi\nu x$ 之和。从光谱实际测量来看,一般来说仅有交流部分才有实际意义。

$$\text{故令交流分量为;} \quad L(x) = 2RTI(\nu)\cos 2\pi\nu x \quad (1-1-4)$$

这个交流分量 $I(x)$ 代表了光强随光程差 x 的变化,我们称它为干涉图。从 1-1-4 式可知理想状态下,单色光的干涉图是一条余弦曲线(参看图 1-1-5)。在非理想状态下,检测器测得的干涉强度除和光源强度 $I(\nu)$ 有关外,也和分束器透射、反射效率,探测器对光谱频率的响应,放大器特性等有关。因此对实测干涉图来说,就需要加一修正项 $H(\nu)$ 。它是小于 1 的校正因子,代表着仪器特性对理想状态所产生的偏移。故把 1-1-4 式改写为:

$$I(x) = 2RTH(\nu)I(\nu)\cos 2\pi\nu x \quad (1-1-5)$$

$$\text{令 } B(\nu) = 2RTH(\nu)I(\nu)$$

$$\text{则 } I(x) = B(\nu)\cos 2\pi\nu x \quad (1-1-6)$$

$B(\nu)$ 项是修正后的光源强度,它是光源频率的函数,实际上即是对应于干涉图 $I(x)$ 的光源光谱。同样对一个有连续波长的复色光,其干涉图可用下式表示。

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} B(\nu)\cos 2\pi\nu dx \quad (1-1-7)$$

这复色光的干涉图是各单色光干涉图的加合。由于零光程差时各单色光强度都为极大值,其余部位则因相长或相消干涉强弱不同而相互抵消,它们加合的结果,形成一个中心突起并向两边迅速衰减的对称图形(参见图 1-1-5)。

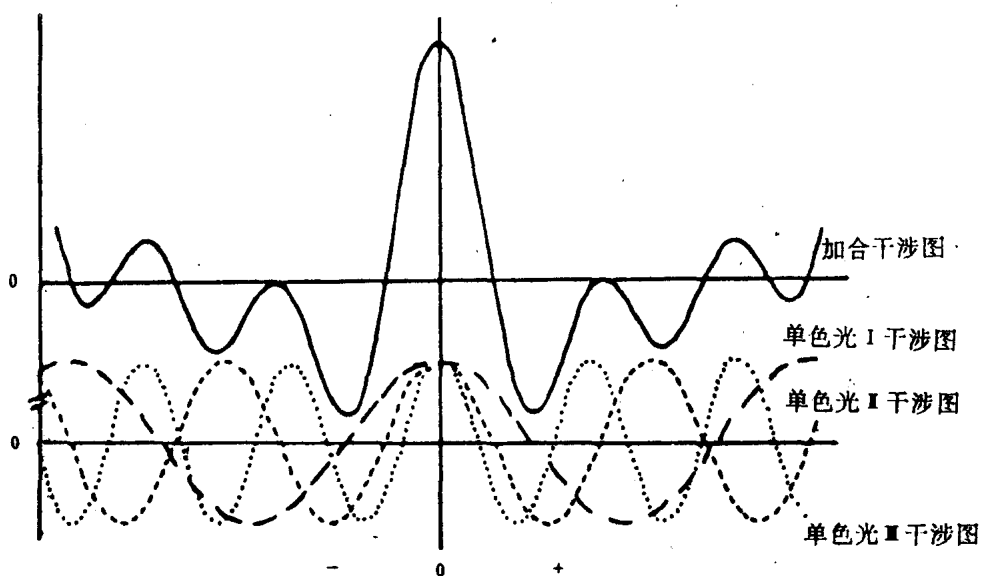


图 1-1-5 各类光的干涉图及它们加合的复光干涉图

为了更好地了解各类光谱及其相应的干涉图形形态,现选用典型的光谱及其相应干涉图图示于图 1-1-6。

从图 1-1-6 可知,纯单色光的干涉图是一条余弦曲线。两等强度不同频率光的干涉图是两单色光干涉图的叠加,由于相长、相消叠加而变成这样形态,随着谱带加宽,叠加的单色光干涉图加多,逐渐形成零光程差处最强两边逐渐衰减的干涉图。复合光是由单色光加合而成,复合光越复杂,其干涉图越锐,两边衰减也越快。

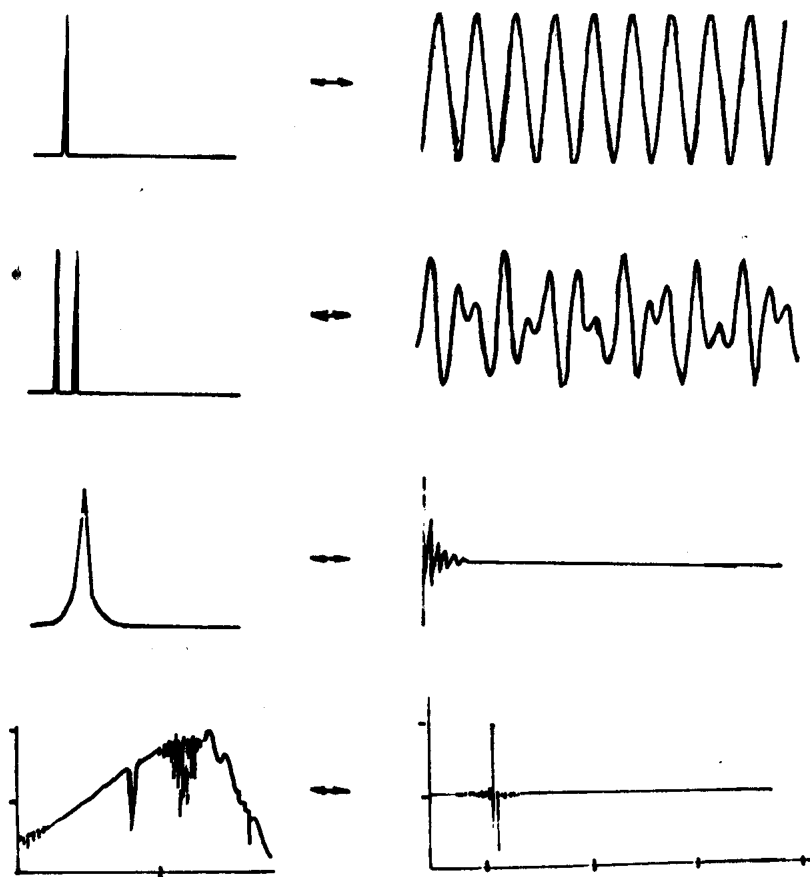


图 1-1-6 各光类谱及其相应干涉图

第三节 干涉图的付里叶变换和光谱的获得

一、理想 FTIR 光谱的获得

用迈克尔逊干涉仪虽然能测得样品的吸收干涉图,这干涉图又包含有全部入射光谱的信息。但从这些极为相似的干涉图,去辨认各种物质的吸收光谱特性却是十分困难的,虽然有人对直接辨认干涉图作了种种尝试,但到目前还不能直接进行分析。因此还需要把含有各种光谱信息的干涉图变换成我们熟悉的透射光谱。实际上把 1-1-7 式进行付里叶数字变换,就能得到我们需要的光谱 $B(\nu)$ 。即:

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(x) \cos 2\pi \nu x dx \quad (1-1-8)$$

由于干涉图 $I(x)$ 是偶函数, 是左右对称的。因此只要对干涉图 $I(x)$ 半边进行付里叶变换即可得到光谱图, 故可改写为

$$B(\nu) = \int_0^{\infty} I(x) \cos 2\pi \nu x dx \quad (1-1-9)$$

以上仅简单定性地从数字上说明了获得干涉图和把它变为光谱图的原理。为了能更直观地了解干涉图经过付里叶变换获得光谱图的过程。现用图 1-1-7 所示的图来定性直观地加以说明。

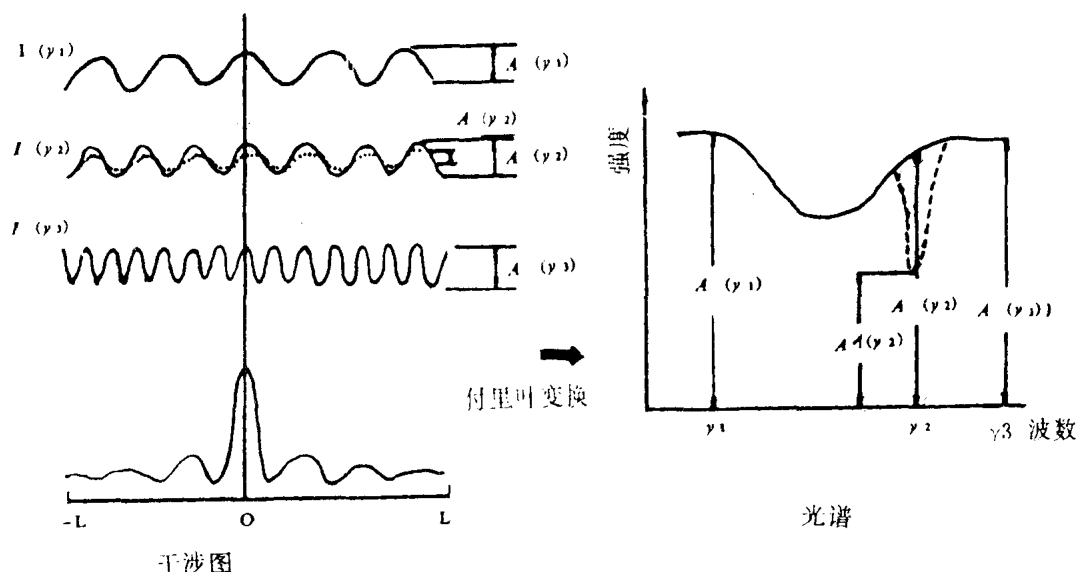


图 1-1-7 FTIR 单光谱形成示意图

图 1-1-7 所示是形成复光单光谱的干涉图 $I(\nu_2)$ 及单色光干涉图 $I(\nu_1)$, $I(\nu_2)$, $I(\nu_3)$, ……等的示意图。 $A(\nu_1)$, $A(\nu_2)$, $A(\nu_3)$ …… 分别是各相应频率光干涉图的强度。把它们进行变换即能求得各频率光谱各频率的光强, 连接这些点即能得到我们所需的光谱。付里叶变换仅是一种数学运算方法。理论上讲不管什么波形都可以用周期不同的三角函数波形进行合成。相反, 通过把波形图分解也能计算出各个三角函数波形的强度, 这种反向计算法就是我们说的付里叶变换。用付里叶变换求出各频率的光强, 把它们逐点连接起来就是我们所需的光谱图。

在红外光谱的实际测量中, 让经过调制的干涉光通过样品, 由于样品的特征吸收而使其中某些光强减弱。如图 1-1-7 图所示, 干涉图 $I(\nu_2)$ 原强度为 $A(\nu_2)$, 经样品吸收后减至 $A'(\nu_2)$ (虚线部分)。虽然样品吸收会引起光谱改变, 但从复光干涉图上看不出明显的变化。只有经付里叶变换后, 我们才能从获得的光谱与原光谱的比较中看到因样品特征吸收而发生的变化 (虚线部分和实线部分比较)。

图 1-1-7 我们看到的光谱变化, 实际只是光源光谱变化, 并非我们习惯的透射光谱。要得到实际样品的吸收光谱, 还应作如下运算处理 (见图 1-1-8)。

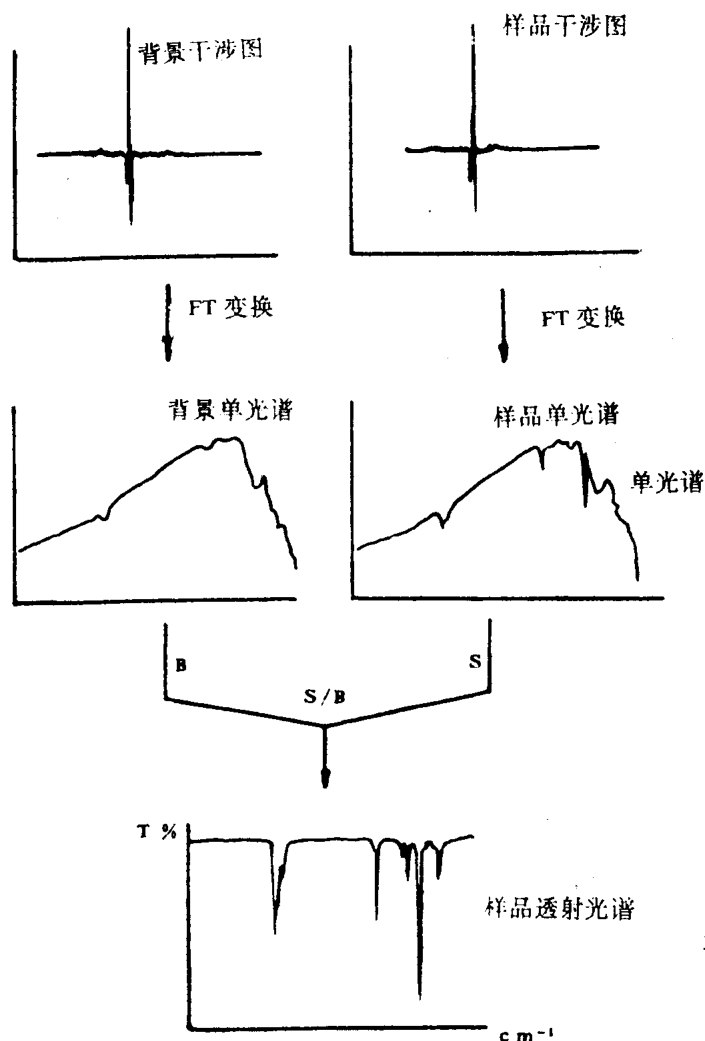


图 1-1-8 FTIR 光谱获得过程示意图

在上面的论述中都是 FTIR 理论探讨,用以说明 FTIR 光谱获得的全过程。在实际红外光谱测量中仅需测量有限波长范围,即干涉仪动镜移动范围是在有限距离 $\pm L$ 之间,而不是理论上的 $\pm\infty$ 间隔。为此需用特殊的方法从无限干涉图中截取有限距离干涉图。更由于扫描测量中零光程差位置很难准确选定,加上仪器的光学和电子器件的种种影响,常会产生相位误差,引起干涉图不对称。因此按理想状态 1-1-9 式获得光谱图已不可能了。对于这种非对称干涉图实际上应该用复数形式表示

$$I^*(x) = \int_{-\infty}^{\infty} B(\nu) \exp(i2\pi\nu x) d\nu \quad (1-1-10)$$

但这种运算相当繁琐,因此只有进行适当的技术处理,选用合适的相位校正方法,才能进行实际的付里叶变换,求得我们需要的吸收光谱。

二、干涉图的截断和切趾^[93-96]