

付里叶变换光谱学原理

张光昭 编著



中山大学出版社

付里叶变换光谱学原理

张 光 昭 编著

中山大学出版社

付里叶变换光谱学原理

张光昭 编著

中山大学出版社出版发行

广东省新华书店经销

广东韶关新华印刷厂印刷

787×1092毫米 32开本 9.875印张 21.9万字

1988年11月第1版 1988年11月第1次印刷

印数：1—1000册

ISBN7-306-00104-3

N·5 定价：1.65元

前 言

光谱仪是研究辐射和物质相互作用的强有力的工具。从原子分子的微观研究到天体物理的宏观研究,从物理学化学的基础研究到工业农业的应用研究,都广泛使用各种类型的光谱仪。传统的光谱仪利用棱镜或者光栅作为分光器件,入射和出射狭缝的宽度大大地限制了光谱仪的分辨率和灵敏度的提高。本世纪六十年代兴起的付里叶变换光谱仪用干涉器件代替分光器件,大大地放宽了对光源面积的要求,而且,每个时刻的相干信息中都包含了所有频率的信息,因而使光谱仪的分辨率和灵敏度都显著提高。除此之外,付里叶变换光谱仪具有测量速度快、波数测量精确、残余辐射影响小等优点,使得付里叶变换光谱仪的应用越来越广泛,完全有取代传统光谱仪的趋势

本书是作者在几年来从事“付里叶变换光谱学”教学的讲稿的基础上,加以整理而成。本书分为四部分。第一部分(包括第二章)比较系统地介绍付里叶变换的基本知识。第二部分(包括第三至第五章)比较详细地叙述传统的付里叶变换光谱仪、色散付里叶变换光谱仪和透层光栅付里叶变换光谱仪的基本理论。第三部分(包括第六章至第八章)比较具体地描述实际的付里叶变换光谱仪的基本结构、调整方法和实验参数的选择,分析付里叶变换谱仪的信噪比,以及快速付里叶变换的计算方法和编程技术。最后一部分概括地介绍近年

来自回归谱分析法在付里叶变换谱中的应用，其中包括了作者近期的一些研究成果。

本书的读者对象是广大从事付里叶变换光谱研究的科技工作者，以及大专院校无线电物理专业、光学专业、化学分析仪器专业的师生。

由于作者水平所限，加之时间匆促，错漏之处望读者批评指正。

张光昭

一九八七年十二月于中山大学

目 录

第一章 引 言	(1)
§ 1.1 传统的光谱仪与付里叶变换光谱仪	(1)
§ 1.2 付里叶变换光谱仪的优越性	(4)
§ 1.3 历史的回顾	(6)
第二章 数学背景	(8)
§ 2.1 付里叶变换和付里叶积分定理	(8)
1. 定义	(8)
2. 奇函数和偶函数	(9)
3. 偶函数和奇函数的意义	(11)
4. 复数共轭	(13)
5. 余弦变换和正弦变换	(14)
§ 2.2 卷积	(14)
1. 定义	(14)
2. 自相关函数	(17)
3. 自相关函数的付里叶变换	(18)
4. 瑞利定理	(19)
§ 2.3 一些函数的付里叶变换	(20)
1. 矩形函数 Π	(20)
2. 三角形函数 $\wedge$	(22)
3. Δ 函数 δ	(23)
4. 阶跃函数 $H(x)$	(26)
5. 符号函数 $\text{sgn}(x)$	(27)

6. 高斯分布函数 $Erf(x)$	(28)
7. 取样函数(或梳齿函数) $III(x)$	(30)
§ 2.4 取样定理.....	(33)
§ 2.5 一些常用的基本定理.....	(38)
1. 相似性定理.....	(38)
2. 相加定理.....	(40)
3. 位移定理.....	(40)
4. 调制定理.....	(40)
5. 卷积定理.....	(41)
6. 微商定理.....	(42)
7. 对称定理.....	(43)

第三章 付里叶变换光谱仪的理论.....(44)

§ 3.1 付里叶变换光谱的基本积分.....	(44)
1. 基本积分.....	(44)
2. 干涉图的相干性.....	(48)
§ 3.2 截趾.....	(48)
1. 仪器的线形.....	(49)
2. 截趾.....	(51)
§ 3.3 分辨率.....	(54)
1. 瑞利判则.....	(54)
2. 由于有限扫描所引起的分辨率极限.....	(56)
3. 由于面光源所引起的分辨率极限.....	(58)
4. 由于噪声所引起的分辨率极限.....	(65)
§ 3.4 取样间隔.....	(66)
§ 3.5 快速扫描付里叶变换光谱仪.....	(68)
§ 3.6 相位误差的纠正——双边带和单边带.....	

付里叶变换谱.....	(72)
1. 相位误差.....	(72)
2. 双边带付里叶变换谱.....	(73)
3. 单边带付里叶变换谱.....	(74)
第四章 色散付里叶变换光谱仪的一般理论.....	(81)
§ 4.1 复数插入损耗.....	(83)
§ 4.2 色散付里叶变换光谱的基本积分.....	(84)
§ 4.3 平面平行样品的透射和反射.....	(88)
1. 复数折射率.....	(88)
2. 在界面的透射和反射.....	(89)
3. 平面平行样品的透射和反射.....	(93)
§ 4.4 从复数插入损耗计算光学常数.....	(94)
1. 样品为不透明的固体.....	(95)
2. 样品为厚的透明物质.....	(96)
3. 样品为薄的吸收物质.....	(99)
4. 双通过式的透射测量	(100)
第五章 迭层光栅付里叶变换光谱仪的理论	(102)
§ 5.1 迭层光栅干涉仪	(102)
§ 5.2 迭层光栅的衍射理论	(105)
§ 5.3 高阶衍射的影响	(110)
§ 5.4 腔效应及其对分辨率的影响	(113)
§ 5.5 离轴光线的影响	(116)
第六章 实际的付里叶变换光谱仪	(118)
§ 6.1 付里叶变换光谱仪的组成	(118)

§ 6.2 光路系统	(119)
1. $5DX$ 的光路系统	(120)
2. $170SX$ 的光路系统	(122)
3. $IFS113$ 的光路系统	(125)
4. 透射光谱和吸收光谱的测量	(127)
5. 反射光谱的测量	(128)
6. 发射光谱的测量	(131)
§ 6.3 光源	(132)
1. 热光源——硅碳棒	(132)
2. 等离子体光源——高压水银弧灯	(133)
3. 白炽灯——钨卤灯	(133)
§ 6.4 分束器	(134)
1. 介质膜片分束器	(134)
2. 镀在基底上的介质膜分束器	(139)
3. 线栅分束器	(140)
4. 分束器的效率	(145)
5. 分束器的极化效应	(147)
§ 6.5 窗口材料和滤光器	(149)
1. 结晶石英	(150)
2. 聚乙烯	(151)
3. TPX	(152)
4. 碱金属卤化物晶体	(152)
5. $KRS-5$	(153)
6. 金刚石	(153)
7. 硅和锗	(153)
8. 金属栅网滤波器	(154)
§ 6.6 检测器	(158)

1. 热检测器	(159)
2. 光电导检测器	(162)
3. 测辐射热计	(163)
6.7 电子电路	(164)
1. 放大器和带通滤波器	(165)
2. 模数转换器及其动态范围	(175)
3. 伺服控制电路	(184)
§ 6.8 数据系统	(192)
§ 6.9 干涉仪的调整	(197)
1. 干涉仪的调整	(197)
2. 红外光源准直不好的影响	(199)
3. 干涉仪两臂反射镜调整不好的影响	(200)
4. 动镜驱动不良的影响	(200)
§ 6.10 实验参数的选择	(203)
1. 光源的类型和尺寸	(203)
2. 分束器的选择	(203)
3. 滤波器的选择	(204)
4. 取样间隔的确定	(204)
5. 扫描长度的确定	(205)
6. 扫描速度的选择	(205)
7. 红外检测器的选择	(205)
第七章 付里叶变换谱仪的信噪比	(207)
§ 7.1 检测器的噪声	(207)
§ 7.2 信噪比、分辨率和测量时间的关系	(212)
1. 信噪比和测量时间的关系	(212)
2. 信噪比和分辨率的关系	(213)

§ 7.3 截趾对噪声电平的影响	(215)
§ 7.4 其它噪声来源	(217)
1. 量化噪声	(217)
2. 取样噪声	(218)
3. 振动噪声	(219)
4. 折迭引起的噪声	(219)
5. 信号源的噪声	(220)
第八章 快速付里叶变换	(221)
§ 8.1 离散付里叶变换	(221)
1. 离散付里叶变换	(221)
2. 循环卷积	(226)
3. 离散付里叶变换的基本定理	(227)
§ 8.2 快速付里叶变换	(228)
1. 时间序列抽取算法	(229)
2. 频率序列抽取算法	(234)
3. 快速付里叶逆变换	(237)
4. 几种特殊情况的付里叶变换	(238)
§ 8.3 快速付里叶变换的实现	(246)
1. 快速付里叶变换的流程图	(246)
2. 快速付里叶变换程序	(249)
第九章 自回归谱分析法在付里叶变换谱中的应用	(252)
§ 9.1 自回归谱分析法	(253)
1. Levinson-Durbin算法	(253)
2. Burg 算法	(256)
3. LS算法	(258)

4.SVD 算法.....	(260)
§ 9.2 超分辨率付里叶变换谱	(264)
1.实现方法	(264)
2.程序流程图	(270)
3.结果和讨论	(272)
附录 I 快速付里叶变换的 FORTRAN 程序.....	(284)
附录 II Burg 算法程序.....	(287)
附录 III Marple 的 LS 算法程序	(289)
中英文名词对照	(296)
参考文献	(299)

第一章 引言

§ 1.1 传统的光谱仪与付里叶变换光谱仪^[1~3]

在研究可见光和红外波段时，常用三棱镜光谱仪和光栅光谱仪。三棱镜光谱仪的原理图如图 1.1 所示，它由五个基本部件所组成：1. 宽带光源 S ；2. 入射狭缝 L_1 ；3. 三棱镜 P ；4. 出射狭缝 L_2 ；5. 检测器 D 。入射狭缝 L_1 的作用是从光源发出的光中分出一束狭长的光线，狭缝越窄，在检测器 D

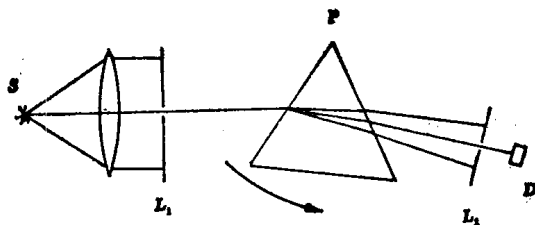


图1.1 三棱镜光谱仪的原理图

上的像就越细，分辨率就越高。三棱镜 P 起分光作用，不同波长的光其折射角也不同。出射狭缝 L_2 的作用是将通过三棱镜后散开来的光选择一个特定的、很小的频率范围的光通过它，狭缝越窄，所通过的光的频率范围就越小，分辨率就越高。转动棱镜 P 时，不同波长的光通过狭缝 L_2 ，检测器 D 就能记录下不同波长的光谱强度。因此，要获得高的分辨率，狭缝 L_1 和 L_2 都必须非常窄。另一方面，当狭缝 L_1 和 L_2 很窄

时，通过它们的光的能量就很小，检测器所能检测到的信号就很弱，信噪比很小，因而又影响了仪器的检测灵敏度和分辨率。因此，对于三棱镜光谱仪，其分辨率的提高受到了很大的限制。尤其在远红外和亚毫米波段，由于缺乏很强的宽带光源和灵敏的检测器，其分辨率的提高受到更大的限制。

光栅光谱仪的原理同三棱镜光谱仪的相似，只不过分光元件用光栅 G 代替三棱镜 P ，如图1.2所示。同样，它也需要入射狭缝 L_1 和出射狭缝 L_2 ，其分辨率的提高同样受到很大的限制。



图1.2 光栅光谱仪的原理图

付里叶(Fourier)变换光谱仪同传统的光谱仪在原理上完全不同，它不是利用分光的原理，而是利用相干的原理。付里叶变换光谱仪实际上是由迈克尔逊干涉仪和付里叶变换单元所组成，其原理图如图1.3所示。迈克尔逊干涉仪由五个基本元件所组成：1.宽带光源 S ；2.分束器 B ；3.固定反射镜 M_1 ；4.可移动的反射镜 M_2 ；5.检测器 D 。光源 S 发出的光经准直镜后变成平行光束，以 45° 角入射到分束器 B 上，其中一部分光经分束器 B 反射以后，射向固定反射镜 M_1 ，反射后重新射向 B ，其中一部分经 B 反射后回到光源 S 方向，另一部分则透过 B 射向检测器 D 。从光源来的另一部分光透过 B 以

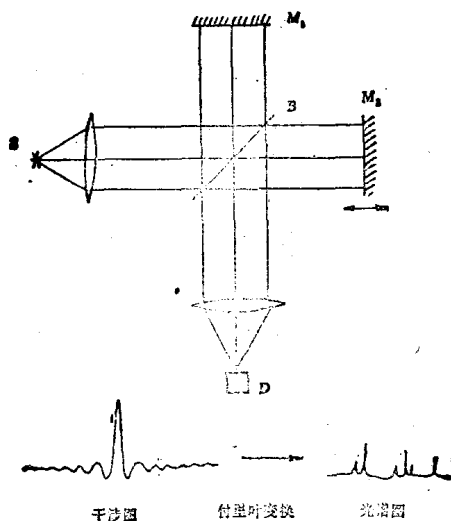


图1.3 付里叶变换光谱仪的原理图

后射向可移动的反射镜 M_2 ，反射后重新射向 B ，其中一部分透过 B 回到光源 S 方向，另一部分则经 B 反射，同由 M_1 反射回来的光会合以后一起射向检测器 D 。射向检测器 D 的两束光线是由同一光源发出的，因此，它们是相干的。相干的结果是相长还是相消决定于它们的光程差。当可动镜 M_2 移动时，其光程差可连续地变化，因此，检测器 D 上就能检测到连续变化的相干条纹。如果光源 S 是单色光的话，则检测到的相干条纹是等幅的余弦波。经付里叶变换以后就得到单一条谱线。如果光源 S 是双线光源的话（如钠灯的双线），则检测到的是两个余弦振荡的拍频，经付里叶变换以后就得到双线的光谱。

可见，付里叶变换光谱仪的原理同传统光谱仪的不同，结构也不一样。付里叶变换光谱仪没有入射狭缝和出射狭缝，光源面积的大小对仪器分辨率的影响并不像传统光谱仪

那么严重，因而它可以用较大面积的光源；而且，它每次检测到的信号都包含整个频段的信息，并不像传统光谱仪那样每次只能检测到一个很小的频率范围的信息。因此，付里叶变换光谱仪的信噪比比传统光谱仪的高得多。

§ 1.2 付里叶变换光谱仪的优越性

同传统的光谱仪相比，付里叶变换光谱仪具有下列的优越性。

1. Fellgett优越性，或称多重优越性^[4]

付里叶变换光谱仪在动镜扫描的每一瞬间，检测器所检测到的信息来自所给定的整个频段，而传统光谱仪每次只能检测到落在出射狭缝的非常窄的频段。假定付里叶变换光谱仪和传统光谱仪测量某一谱段 $\sigma_{\min}$ 到 $\sigma_{\max}$ 需要相同的时间 T ，那么，传统光谱仪测量每一个频谱单元 R 时所需的时间为 T/M ，这里 $M = (\sigma_{\max} - \sigma_{\min})/R$ ，而付里叶变换光谱仪对每一个频谱单元的测量时间都是 T 。如果系统的噪声仅决定于检测器的话（正如红外和远红外波段的情况），那么，对于付里叶变换光谱仪，所检测到的信号的积分正比于 T ，而噪声的积分正比于 $\sqrt{T}$ ，即信噪比正比于 $\sqrt{T}$ 。而传统的光谱仪，对于每一个频谱单元所检测到的信号的积分正比于 T/M ，而噪声的积分正比于 $(T/M)^{1/2}$ ，即信噪比正比于 $(T/M)^{1/2}$ 。可见，在测量时间相同的情况下，付里叶变换光谱仪的信噪比比传统光谱仪的提高 $\sqrt{M}$ 倍。或者，可以用另一种陈述的方式，即在信噪比相同的情况下，付里叶变换光谱仪的测量时间可比传统光谱仪的少 M 倍。这就是 Fellgett 于 1951 年在他的博

士论文中最早指出来的多重优越性(Multiplex advantage), 或称为 Fellgett 优越性。值得指出的是, 当工作在更短的波长时(例如可见光波段), 如果用光电倍增管作检测器时, 这时主要的噪声来源在于所测量的光子数目的涨落。在这种情况下, 付里叶变换谱仪的信噪比变得同传统光谱仪的可以比拟, 因而, 这时便丧失了 Fellgett 优越性^[6]。

2. Jacquinot 优越性, 或称为通量优越性^[6]

付里叶变换谱仪允许使用较大的光源面积而不会严重影响仪器的分辨率。而对于传统光谱仪, 如果入射狭缝和出射狭缝的大小相同, 则仪器的分辨率线性地依赖于狭缝的宽度, 而检测功率则比例于狭缝面积的平方。因此, 在相同分辨率的情况下, 付里叶变换谱仪的光通量比传统光谱仪的大得多。这就是 Jacquinot 于 1948 年指出的通量优越性(Throughput advantage), 或称为 Jacquinot 优越性。

3. 非常高的波数精度

干涉仪动镜的移动距离可以用激光干涉仪精确地测量, 经付里叶变换以后就能在计算的谱图上产生很高的波数精度。它不像传统的光谱仪那样, 要用标准谱图进行定标。

4. 大大地缩减了残余辐射的影响

因为残余辐射仅改变干涉图的直流电平, 而不会影响计算的谱图。因此, 付里叶变换谱仪可以测量很弱的谱线。

5. 具有非常高的分辨率

由于付里叶变换谱仪具有 Fellgett 和 Jacquinot 优越性, 因而有很高的信噪比, 动镜的扫描距离可以很长, 因而可以做到很高的分辨率。一般可比传统光谱仪高两个数量级以上。

6. 非常快的测量时间

前面已经说过, 在同样分辨率的情况下, 付里叶变换谱