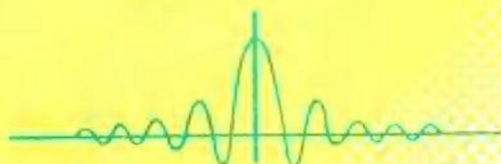
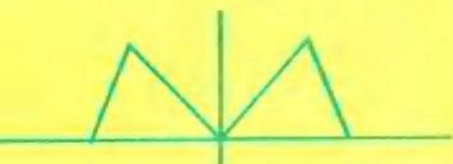


傅里叶变换光谱

G. GUELACHVILI 讲授
张知廉 编译 林 中 审校



1135429

傅里叶变换光谱

〔法〕G.GUELACHVILI 讲授

张知廉 编译

林 中 审校

北京 大学 出版 社

内 容 简 介

傅里叶变换光谱是利用干涉图的傅里叶变换得到光谱的一种技术。它具有多路性、高通量、高波数精度、测量快速等优点，在基础科学和应用研究中有着广泛的用途。全书共分六章，前两章介绍干涉光谱学的基本概念和傅里叶变换数学基础；第三章讨论傅里叶变换光谱仪器问题；第四章是离散傅里叶变换和快速傅里叶变换计算方法；第五章是傅里叶变换光谱的畸变和诊断；最后一章是一次干涉图采样的教学处理。

本书可供从事傅里叶变换光谱工作者，物理、化学工作者以及大专院校师生参考。

傅里叶变换光谱

(法) G. GUELA CHVILI 讲授

张知廉 编译

林 中 审校

责任编辑：朱新邨

*

北京大学出版社出版

(北京大学校内)

国防科工委印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

787×1092毫米 32开本 4.125印张 92千字

1990年5月第一版 1990年5月第一次印刷

印数：00001—2,000册

ISBN 7-301-01121-0/O·196

定价：2.10元

编译者序

傅里叶变换光谱是对测量的干涉图进行傅里叶变换得到光谱图的方法。与传统的棱镜和光栅色散型光谱仪不同，傅里叶变换光谱仪是一种调制光谱仪。它是对入射光强进行频率调制后，由一个探测器同时接收多个不同频率信号，再通过傅里叶变换计算解码而得到所有频率光谱信息的仪器。傅里叶变换光谱具有多路性、高通量、高波数精度、高分辨率、光谱测量范围宽、测量快速等优点。目前，已成为光谱学的一个独立分支。

早在一个世纪以前，迈克耳孙已认识到从干涉图可获得某些光谱信息。不久，瑞利提出对干涉图进行傅里叶变换可得到光谱。但在当时，这样的计算是无法实现的。

直到1948年Jacquinot等发现干涉仪具有高通量优点，1951年 Fellgett 提出干涉仪具有比常规光谱仪信噪比高的多路性优点，才引起各国科学家的极大重视，进行了大量开拓性工作，奠定了傅里叶变换光谱学的理论和实验基础。60年代中期，Cooley-Tukey发现快速傅里叶变换算法，大大缩短了计算时间。与此同时，He-Ne激光器、小型计算机和热释电探测器的进展，最终导致中分辨率快扫描傅里叶变换红外光谱仪的问世，有力地推动了傅里叶变换光谱学的迅速发展。目前，傅里叶变换红外光谱仪在价格上可以和光栅红外光谱仪竞争，而性能上更为优越，已进入取代后者的过程中。

随着傅里叶变换光谱仪的改善，新的仪器和计算机技术也在迅速发展。在中远红外光谱区，除发射和吸收光谱测量外，衰减全反射、漫反射、反射吸收测量、显微样品测量、光声光热光谱、时间分辨、低温基体隔离法、气相色谱和液相色谱傅里叶变换红外等技术已广泛应用。在紫外可见近红外光谱区，原子发射光谱和傅里叶变换喇曼光谱已成为热门话题。计算机技术方面，条纹消除和吸收差减技术也在应用。傅里叶变换光谱正广泛用于物理、化学、生物、天文、地质、环境、军事、工业和农业等众多的领域。

1984年秋，国际知名傅里叶变换光谱学家，法国南巴黎大学国家科研中心红外实验室 G.GUELACHVILI 教授应浙江大学中心实验室邀请来校讲学，对傅里叶变换光谱的原理、方法、仪器和光谱畸变诊断等作了系统的较全面的介绍。本书是根据讲学内容编译而成的，为便于阅读，对部分章节作了补充。由于本人水平所限，书中缺点错误在所难免，望读者不吝指正。

借此机会，仅向 G.GUELACHVILI 教授表示感谢。在他鼓励下，我们研究小组已研制成适用于高校教学实验和中分辨率光谱测量的可见-近红外傅里叶变换光谱仪，并推广使用。请参看附录。

张知廉 林 中

1988.10

序 言

目前，傅里叶变换光谱已成为一种普遍重视和广泛应用的近代光谱技术，它对许多科学领域的发展作出了重要贡献，并正在基础研究和工农业生产方面产生效益。

本书是根据1984年10月至11月间我在浙江大学中心实验室讲授傅里叶变换光谱的内容编译的，它从基本原理出发，对傅里叶变换光谱作了比较全面的介绍。由于篇幅所限，书中所作的讨论比较简短，为了对希望深入了解各项具体问题的读者提供帮助，特在书后列出了若干参考书及参考文献，包括其题目。这些参考文献并非详尽无遗，如迈克耳孙的论文等许多重要文章未曾列入，但仍可查阅到许多所需要的资料。

全书共有六章，其详细的目录已为理解本书的内在联系提供了信息。第一章和第二章讨论了“干涉图与光谱”的一般问题和“傅里叶变换、采样和干涉图采样”的数学基础。第三章具体介绍了“研制傅里叶变换光谱仪”的问题。第四章是“离散傅里叶变换和快速傅里叶变换的实际计算方法”。第五章讨论了“傅里叶变换光谱的畸变和诊断”。最后一章是“一次采样的数学处理”。其它方面的资料可以从参考书及文献目录中查找。书中第三章和第五章是与文献[9]和文献[28]相应的。

在此，我仅向浙江大学的各位同事致意，深切感谢他们对于傅里叶变换光谱所表现的浓厚兴趣和给予我的热情接待。

G. GUELA CHVILI

目 录

第一章 干涉图与光谱

(一) 干涉.....	1
1. 非相干光源的干涉.....	1
2. 在何处看到干涉条纹.....	2
(二) 迈克尔孙干涉仪 (M.I.).....	4
1. M.I. 的输出.....	4
2. 干涉图是光谱的傅里叶变换吗?	5
(三) 傅里叶变换光谱 (F.T.S.) 的主要优点	6
1. 多通道优点 (P. FELLGETT 优点)	6
2. 高通量优点 (P. JACQUINOT 优点)	7
3. 精确度优点 (A. A. MICHELSON, P. CONNES 优点)	10
4. 数字化优点.....	10
(四) 仪器函数	10
1. 理论仪器函数.....	10
2. 切趾法.....	13
3. 相位误差.....	15
4. 实际仪器函数.....	18

第二章 傅里叶变换、采样、干涉图采样

(一) 傅里叶积分、基本公式.....	22
1. 奇偶性.....	23
2. 线性性.....	23

3.	$x(t)$ 是实函数时, $X(f)$ 是哈密顿函数.....	24
4.	若 $X(f)=FT[x(t)]$, $FT[x(-t)]$ 是什么?.....	24
5.	相移定理.....	25
6.	乘积的傅里叶变换.....	25
7.	卷积.....	26
8.	$FT[x(t) * y(t)]$ 是什么?.....	28
9.	$FT[x(at)]$ 是什么?.....	28
(二)	采样.....	29
1.	狄拉克分布.....	29
2.	狄拉克分布梳状函数.....	32
3.	采集信号和计算光谱.....	34
4.	采样定理 (Shannon定理).....	35
5.	一些常用傅里叶变换函数对.....	36
(三)	干涉图采样.....	39
第三章	研制用于傅里叶变换光谱的干涉仪	
	——主要性能和实际应用	
(一)	总体考虑.....	42
(二)	记录方式.....	42
1.	快扫描方式.....	43
2.	步进方式.....	43
(三)	光学系统.....	44
1.	后向反射器.....	44
2.	动态校正.....	45
3.	补偿.....	45
(四)	光程差的测量.....	46
(五)	实际应用.....	47
1.	干涉仪的光学结构.....	47
2.	内调制.....	49

3. 几点说明.....	52
(六) 采样记录	52

第四章 傅里叶变换算法

(一) 离散傅里叶变换(D.F.T.)	55
1. D.F.T.关系的建立.....	55
2. 指数矩阵.....	59
3. D.F.T.的一些性质.....	63
4. 指数矩阵的构成.....	65
5. D.F.T.的计算时间.....	69
(二) 快速傅里叶变换(F.F.T.)	70
1. 一般考虑.....	70
2. Cooley-Tukey 算法.....	74
3. 信号流程图.....	79
4. Cooley 流程图的结构.....	84
5. 小结	88
6. 用于构成 $N=32=2^5$ 图.....	89
7. 实际计算.....	91

第五章 傅里叶变换光谱的畸变和诊断

(一) 波数校正	94
(二) 强度校正	95
(三) 系统误差的分类.....	96
1. 附加误差.....	96
2. 倍增误差.....	96
(四) 一些系统影响的评述	98
1. 仪器	98
2. 光程差控制系统.....	101
3. 采样的强度测量.....	103

第六章 一次采样的数据处理

(一) 光谱的插值.....	106
1. 线性插值.....	108
2. 加零.....	108
3. 卷积.....	108
(二) 切趾.....	110
(三) 数字滤波.....	110
(四) 相位校正.....	113
1. 在不变情况下由一次干涉图进行.....	114
2. 由新干涉图计算进行相位校正 (FORMAN, STEEL, VANASSE).....	115

参考资料

1. 参考书.....	115
2. 傅里叶变换光谱学国际会议论文集.....	116
3. 参考文献.....	117

附录

第一章 干涉图与光谱

(一) 干 涉

一般的光源均为非相干光源。但在极短的时间内，是处处可以看到干涉的。

1. 非相干光源的干涉

(1) 几个光束

这些光束必须来自同一个光源 S 。

波前分割：

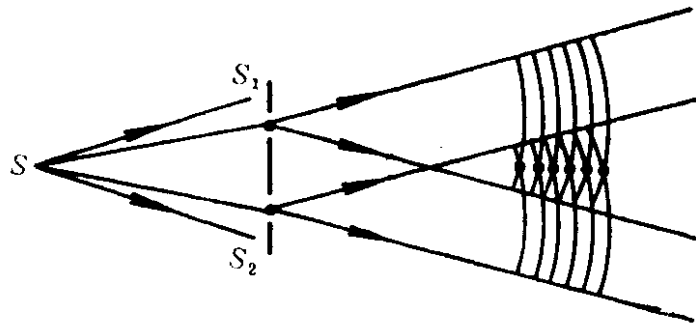


图1-1 杨氏装置

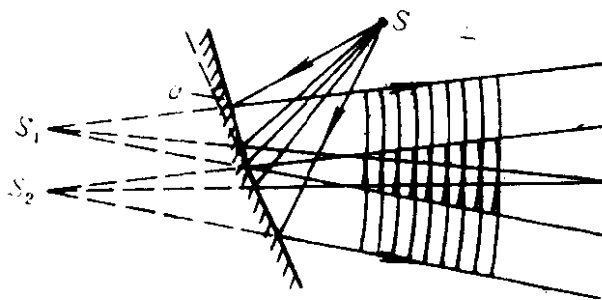


图1-2 菲涅耳双面镜

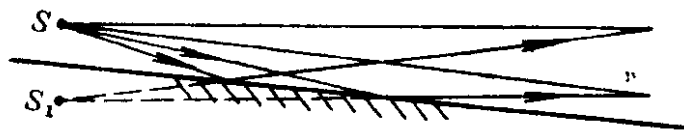


图1-3 洛埃镜

振幅分割:

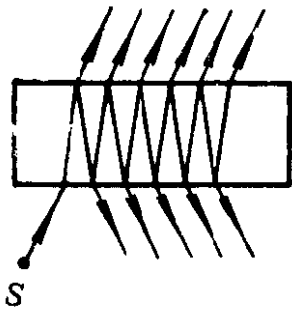


图1-4 平面法布里-珀罗干涉仪

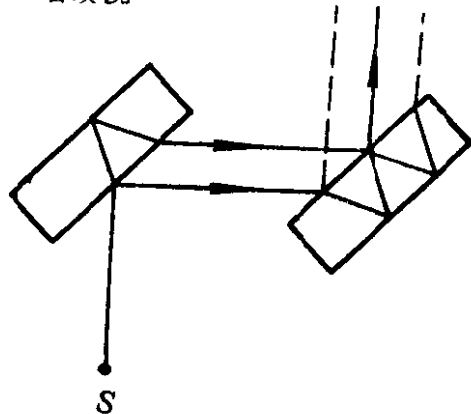


图1-5 雅满干涉仪

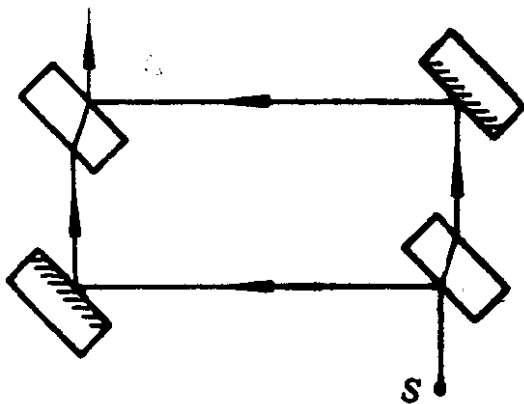


图1-6 马赫-泽德干涉仪

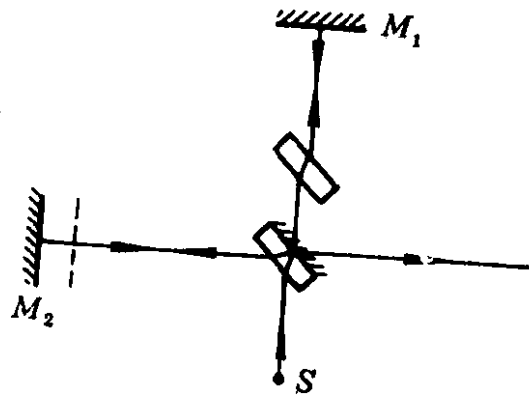


图1-7 迈克耳孙干涉仪

(2) 两种干涉

双光束：雅满、马赫-泽德、迈克耳孙等。

多光束：法布里-珀罗等。

迈克耳孙干涉仪是一种振幅分割的双光束干涉系统。

2. 在何处看到干涉条纹

假如是单色光源：

(1) 点光源

双光束干涉如图 1-8 所示。对所有的 P 位置， $\Delta S = (SAA'P) - (SBB'P)$ 能很好确定。并且，干涉条纹是非定域的。

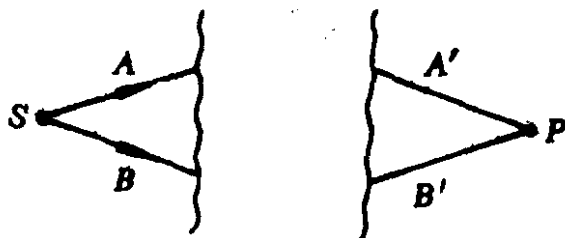


图 1-8 点光源的双光束干涉

(2) 扩展光源

双光束干涉如图 1-9 所示。除非对所有的 S' 位置存在 $\Delta S \approx \Delta S'$ ，否则 P 点一般不出现干涉条纹。如果从 S' 到 P 与 $(SAA'P)$ 有相同的光程，则 S' 必定在 (S, SA) 所规定的波前上，即处于 S 周围，并垂直于 SA 的平面上，这样必定有 $S'S \perp SA$ 。如果从 S' 到 P 与 $(SBB'P)$ 有相同的光程， S' 必定也满足 $S'S \perp SB$ 。但只有在 $SA \equiv SB$ 时， $S'S$ 才可同时垂直于 SA 和 SB 。因此得出结论，干涉条纹的定域面是从同一初始光束来的干涉光线相会点的轨迹。

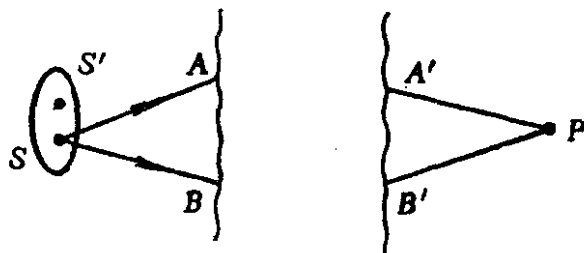


图 1-9 面光源的双光束干涉

(二) 迈克耳孙干涉仪(M.I.)

迈克耳孙干涉仪具有以下特点：光程差是易于改变的；光路中使用补偿板，入射光的一半返回光源；在空气与玻璃的界面反射时相位改变 $\Delta\varphi = \pi$ ；环状干涉条纹一直伸展到无穷远处；等厚干涉条纹是由于两个镜子间的光学联系引起的，在调节仪器时必须注意到两种干涉条纹。

1. M.I.的输出

点光源辐射的单色光 σ_0 的振幅，用复数表示可写为

$$A(t, x) = A_0 \exp j[\omega_0 t - \varphi(x)]$$

在理想分束板情况下，复数振幅透过率和反射率为 τ 和 r ， $\varphi(x) = 0$ 。若以 x_r 和 x_t 表示迈克耳孙干涉仪两臂上的光程，所得合成振幅是

$$A = A_0 r \tau \exp j(\omega_0 t - 2\pi\sigma_0 x_r) + A_0 \tau r \exp j(\omega_0 t - 2\pi\sigma_0 x_t)$$

光强度是

$$\begin{aligned} I = AA^* &= A_0^2 |r\tau|^2 [\exp(-2\pi j\sigma_0 x_r) + \exp(-2\pi j\sigma_0 x_t)] \\ &\quad \times [\exp(+2\pi j\sigma_0 x_r) + \exp(+2\pi j\sigma_0 x_t)] \\ &= 2A_0^2 |r\tau|^2 [1 + \cos 2\pi\sigma_0(x_r - x_t)] \end{aligned}$$

式中 $x_r - x_t = \Delta$ ， $|r| = |\tau| = 1/\sqrt{2}$ ，再以 I_0 表示 A_0^2 ，上式可写为

$$I(\Delta) = \frac{1}{2} I_0 [1 + \cos 2\pi\sigma_0 \Delta]$$

如果辐射是从 σ_1 到 σ_2 范围的宽带光谱，可以将各单色辐射强度 $B(\sigma)d\sigma$ (σ 和 $\sigma+d\sigma$ 之间的辐射能)相加，最后得到

$$I(\Delta) = \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) (1 + \cos 2\pi\sigma\Delta) d\sigma \quad (1-1)$$

其中调制部分所得到的干涉图是

$$I(\Delta) = \int_0^{\infty} B(\sigma) \cos 2\pi\sigma\Delta d\sigma \quad (1-2)$$

这就建立了光谱分布 $B(\sigma)$ 与干涉图 $I(\Delta)$ 之间的傅里叶变换关系。

2. 干涉图是光谱的傅里叶变换吗?

傅里叶积分的定义是

$$X(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(t) \exp(-2\pi jft) dt$$

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} X(f) \exp(+2\pi jft) df$$

式中 $x(t)$ 是信号, t 是时间, $X(f)$ 是光谱, f 是频率。如果我们用 $I(\Delta)$ 干涉图、 Δ 光程差、 $B(\sigma)$ 光谱、 σ 波数来代替它们, 则有

$$B(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\Delta) \exp(-2\pi j\sigma\Delta) d\Delta$$

$$I(\Delta) = \int_{-\infty}^{+\infty} B(\sigma) \exp(+2\pi j\sigma\Delta) d\sigma$$

(1-2)式也可写为

$$I(\Delta) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} B(\sigma) \exp(+2\pi j\sigma\Delta) d\sigma$$

$$+ \frac{1}{2} \int_0^{\infty} B(\sigma) \exp(-2\pi j\sigma\Delta) d\sigma$$

从物理意义来说, 对于负的 σ 值, 光谱 $B(\sigma)$ 不可能存在。又假定 $\sigma \geq 0$ 时, $B(\sigma) = B(\sigma)$; $\sigma \leq 0$ 时, $B(\sigma) = B(-\sigma)$

(并不等于 $\mathcal{B}(\sigma)$ 是偶的), 则有

$$\begin{aligned} I(\Delta) &= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \mathcal{B}(\sigma) \exp(+2\pi j\sigma\Delta) d\sigma \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 \mathcal{B}(\sigma) \exp(+2\pi j\sigma\Delta) d\sigma \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathcal{B}(\sigma)}{2} \exp(2\pi j\sigma\Delta) d\sigma \end{aligned}$$

这表示 $I(\Delta)$ 是 $\mathcal{B}(\sigma)/2$ 的傅里叶变换。

$I(\Delta)$ 的傅里叶变换不是 $B(\sigma)$, 而是类似于 $\sigma \geq 0$ 时, $B(\sigma)$ 的偶函数 $\mathcal{B}(\sigma)$, 因为 $I(\Delta)$ 也是偶函数, 根据 $I(\Delta)$ 和 $\mathcal{B}(\sigma)$ 的奇偶性, 我们可以合理地使用余弦傅里叶变换关系来代替由定义给出的傅里叶积分。

(三) 傅里叶变换光谱(F.T.S.)的主要优点

1. 多通道优点 (P.FELLGETT优点)

设 T 为实验的总时间, M 为光谱中独立的信息元总数目, S 为信号, N 为噪声。

(1) 检测器噪声

若噪声水平是恒定的, 则

$$\text{在单通道情况下, } S_{\#} \propto \frac{T}{M}, N_{\#} \propto \sqrt{\frac{T}{M}}, \left(\frac{S}{N}\right)_{\#} \propto \sqrt{\frac{T}{M}}$$

$$\text{在多通道情况下, } S_{\#} \propto T, N_{\#} \propto \sqrt{T}, \left(\frac{S}{N}\right)_{\#} \propto \sqrt{T}$$

多通道与单通道的信噪比关系为 $\left(\frac{S}{N}\right)_{\#} / \left(\frac{S}{N}\right)_{\#} = \sqrt{M}$, 或

或者说, 为得到相同的信噪比, $T_{\#}/T_{\#} = M$ 。若 $M = 10^4$,