

# 傅里叶变换光谱术及其应用

虞 宝 珠  
(北京大学物理系)

## 一、引 言

傅里叶变换光谱 (Fourier Transform Spectroscopy, 简称 FTS) 是以双光束干涉为基础的一种测量光谱的新方法。仪器的简单结构如图 1 所示。由光源发出的一束光经过双光束干

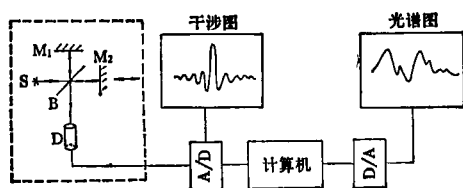


图 1

S——光源; B——分光板; D——探测器; M<sub>1</sub>——固定镜;  
A/D——模数转换器; M<sub>2</sub>——动镜; D/A——数模转换器

涉仪后,分为两束有一定光程差的相干光束,把它们所产生的干涉图,用计算机进行傅里叶变换后就得到入射光的光谱分布。由于这两束相干光之间的光程差与干涉仪中动镜的运动速度有关,因而探测器所测得的光强是由动镜运动速度调制的。入射光频率不同,对应的调制频率也不同,所以,傅里叶变换光谱仪(下面简称傅氏仪)是一种调制型的光谱仪器。在傅氏仪中最常用的双光束干涉仪是迈克耳孙干涉仪(下面简称迈氏仪)。本文中以迈氏仪为例进行讨论,其结果也适用于其它类型的双光束干涉仪。

虽然 FTS 的发展及应用只是近二十多年的事,但早在一个世纪前,当迈克耳孙发明他的著名的干涉仪时,已经预见到发展这种技术的可能性。但由于探测器和计算技术的限制,迈

物理

克耳孙并未能实现他的这一想法。直到本世纪五十年代后, Fellgett 在他的毕业论文中提出干涉仪的多路性优点和 Jacquinot 提出干涉仪的高通光能力特点后,引起了各国科学家的重视,在天文和大气物理方面做了许多实验工作和理论研究,为建立 FTS 奠定了基础。其先驱者有: 美国的 J. D. Strong 小组, 法国的 P. Connes 夫妇, 英国的 J. E. Chamberlain 小组等。特别是 1965 年 Cooley 和 Tukey 提出了快速傅里叶变换算法(简称 FFT)后,减少了计算次数,使 FTS 成为一种切实可行的高效率的光谱技术,在天文、大气物理、化学、固体物理等领域得到了广泛的应用<sup>[1]</sup>。

## 二、基本原理

### 1. 干涉图与光谱分布的傅里叶变换关系

根据干涉原理,对波数为  $\sigma_0$ , 光谱分布用  $B_0(\sigma_0)$  表示的单色光,经过迈氏仪后,所测得的光强  $S$  随光程差  $x$  的变化为

$$S(x) = AB_0(\sigma_0)(1 + \cos 2\pi\sigma_0 x), \quad (2.1)$$

其中  $A$  是由仪器决定的一个常数比例因子。

在光源为多色光的普遍情况下,光谱分布以  $\int_0^\infty B_0(\sigma)d\sigma$  表示,则有

$$S(x) = A \left[ \int_0^\infty B_0(\sigma)d\sigma + \int_0^\infty B_0(\sigma) \cos 2\pi\sigma x d\sigma \right], \quad (2.2)$$

它在  $x = 0$  的中央位置有个尖锐的极大值,

$$S(0) = 2A \int_0^\infty B_0(\sigma)d\sigma. \text{ 令 } I(x) = S(x) - \frac{1}{2} \cdot$$

$S(0)$ , 它代表  $S(x)$  相对于  $\frac{S(0)}{2}$  的变化部分, 并称为干涉图, 得到

$$I(x) = \int_0^{\infty} B_0(\sigma) \cos 2\pi\sigma x d\sigma, \quad (2.3)$$

此式建立了光谱分布  $B_0(\sigma)$  与干涉图  $I(x)$  之间的余弦傅里叶变换关系。

虽然, 从物理上来说只有当  $\sigma \geq 0$  的情况才是有意义的, 但为了应用傅里叶变换数学解决物理问题, 我们不妨把  $B_0(\sigma)$  推广到  $\sigma < 0$  的情况。定义  $B_0(\sigma)$  是偶函数, 即  $B_0(-\sigma) = B_0(\sigma)$ , 利用偶函数的对称性及欧拉公式, 把 (2.3) 式改写为

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} B_0(\sigma) e^{i2\pi\sigma x} d\sigma, \quad (2.4)$$

根据傅里叶变换数学, 相应地有

$$B_0(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx. \quad (2.5)$$

这表示光谱分布是干涉图的傅里叶变换; 而干涉图是光谱分布的逆傅里叶变换, 记为

$$B_0(\sigma) = \mathcal{F}\mathcal{F}[I(x)], I(x) = \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}[B_0(\sigma)], \quad (2.6)$$

这一组傅里叶变换是 FTS 的基础和出发点。

如果测得了干涉图, 按 (2.5) 式可求得相应的光谱分布  $B_0(\sigma)$ 。但在实际测量中, 一方面由于光程差  $x$  只能在一个有限范围内变化 (称为干涉图被截尾); 另一方面由于用逐点测量作数值求和的方法来代替上式的积分运算, 从而使计算结果不能完全恢复为原来的光谱分布  $B_0(\sigma)$ 。下面我们讨论实际测得的光谱分布  $B(\sigma)$  与  $B_0(\sigma)$  之间的关系及 FTS 中的主要物理参量。

## 2. FTS 中主要的数学公式和定理

### (1) 常用函数及其傅里叶变换

在 FTS 中常用的函数有矩形函数  $\Pi(x)$ 、三角函数  $\Lambda(x)$ 、滤波函数  $\text{sinc}(x)$ 、脉冲函数  $\delta(x)$ 、抽样函数  $\text{III}(x)$  等 (图 2)。这里着重介绍一下抽样函数的定义和性质<sup>[2]</sup>。

抽样函数  $\text{III}(x)$  又称为梳状函数, 它是一系列  $\delta$  函数的组合, 写为

$$\text{III}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.7)$$

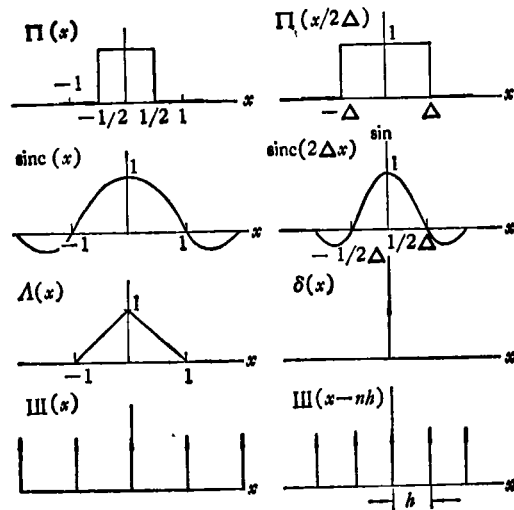


图 2

如果各  $\delta$  函数的间隔不是单位长度, 而是扩大了  $h$  倍, 则记为

$$\text{III}(x-nh) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-nh), \quad (2.8)$$

这相当于  $x$  轴被扩大了  $h$  倍。根据  $\delta$  函数的归一化性质, 得

$$\begin{aligned} \text{III}\left(\frac{x}{h}\right) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{x}{h} - n\right) \\ &= h \text{III}(x-nh). \end{aligned} \quad (2.9)$$

下表列出了常用函数的傅里叶变换, 它们是互为傅里叶变换对的, 即  $F(\sigma) = \mathcal{F}\mathcal{F}[f(x)]$ ,  $f(x) = \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}[F(\sigma)]$ 。

表 1

$f(x)$	$F(\sigma)$
1	$\delta(\sigma)$
$\Pi(x)$	$\text{sinc}(\sigma)$
$\Lambda(x)$	$\text{sinc}^2(\sigma)$
$\cos \omega x$	$\frac{1}{2} \left[ \delta\left(\sigma - \frac{\omega}{2\pi}\right) + \delta\left(\sigma + \frac{\omega}{2\pi}\right) \right]$
$\sin \omega x$	$\frac{1}{2i} \left[ \delta\left(\sigma - \frac{\omega}{2\pi}\right) - \delta\left(\sigma + \frac{\omega}{2\pi}\right) \right]$
$\text{III}(x)$	$\text{III}(\sigma)$

### (2) 主要定理

#### (A) 卷积和卷积定理

卷积: 两个函数  $f(x)$  和  $g(x)$  的卷积  $h(x)$  定义为

$$h(x) = f(x) * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(u)g(x-u)du. \quad (2.10)$$

在 FTS 中, 常用到抽样函数  $\text{III}(x)$  与任意函数  $f(x)$  的卷积, 它等于

$$f(x) * \text{III}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x-n), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (2.11)$$

这是在一  $\infty$  到  $+\infty$  范围内, 在  $x = n$  的一系列位置上等间隔地重复出现的一串  $f(x)$ , 这称为抽样函数的复制性(图 3).

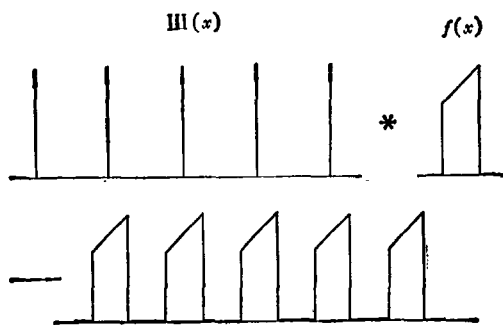


图 3

卷积定理: 设  $F(\sigma) = \mathcal{F}\mathcal{F}[f(x)]$ ,  $G(\sigma) = \mathcal{F}\mathcal{F}[g(x)]$ , 则

(a) 两个函数的卷积的傅里叶变换等于它们各自的傅里叶变换的乘积, 即

$$\mathcal{F}\mathcal{F}[f(x) * g(x)] = F(\sigma) \cdot G(\sigma). \quad (2.12)$$

(b) 两个函数的乘积的傅里叶变换等于它们各自的傅里叶变换的卷积, 即

$$\mathcal{F}\mathcal{F}[f(x) \cdot g(x)] = F(\sigma) * G(\sigma). \quad (2.13)$$

(B) 相似性定理

设  $F(\sigma) = \mathcal{F}\mathcal{F}[f(x)]$ , 并且  $b$  是一个非零的实常数, 则

$$\mathcal{F}\mathcal{F}[f(bx)] = \frac{1}{|b|} F\left(\frac{\sigma}{b}\right). \quad (2.14)$$

它表示, 当  $f(x)$  的横坐标被压缩  $b$  倍时, 它所相应的傅里叶变换  $F(\sigma)$  就在横坐标上扩大  $b$  倍, 同时在垂直方向收缩  $b$  倍, 以保持曲线下的面积不变。

例如, 对基底宽度为  $2\Delta$  的矩形函数

$\Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right)$  有(见图 2)

$$\mathcal{F}\mathcal{F}\left[\Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right)\right] = 2\Delta \text{sinc}(2\Delta\sigma) \quad (\Delta \neq 0), \quad (2.15)$$

对取样间隔为  $h$  的抽样函数  $\text{III}(hx)$ , 有

$$\mathcal{F}\mathcal{F}[\text{III}(hx)] = \frac{1}{h} \text{III}\left(\frac{\sigma}{h}\right) \quad (h \neq 0), \quad (2.16)$$

(C) 离散傅里叶变换及抽样定理

把连续信号按一定的间隔  $h$  取值得到一系列离散的数值, 这称为抽样化或离散化。这时, 连续信号  $f(x)$  就成为离散信号  $f(nh)$ , 它的傅里叶变换也是离散信号, 记为

$$F_D(\sigma) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh) h e^{-i2\pi\sigma nh}, \quad (2.17)$$

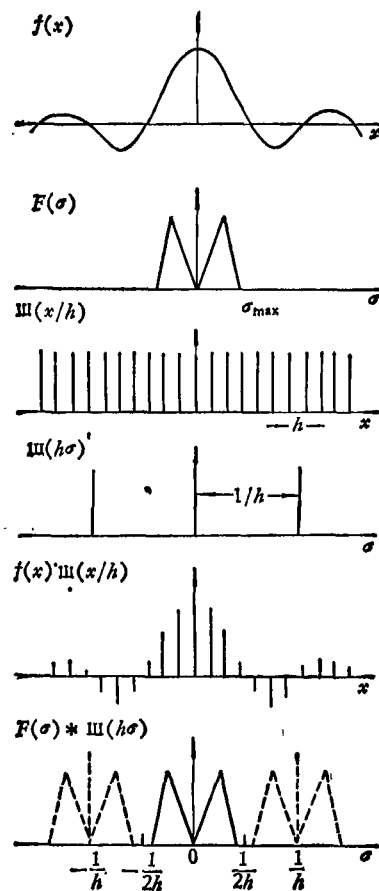


图 4

称为离散傅里叶变换。根据抽样函数的定义及卷积定理中的(2.13)式,上式也可表示为

$$F_D(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \text{III}\left(\frac{x}{h}\right) e^{-i2\pi\sigma x} dx \\ = F(\sigma) * h \text{III}(h\sigma). \quad (2.18)$$

这是在垂直方向扩大了  $h$  倍的、以  $\frac{1}{h}$  为周期的、重复出现的、一系列的  $F(\sigma)$ 。它们以  $0, \pm \frac{1}{2h}, \pm \frac{1}{h} \dots$  为对称中心,互为镜像反射(图4)。

抽样定理: 如果  $f(x)$  是一个限带函数(即在  $|\sigma| > \sigma_{\max}$  时它的傅里叶变换  $F(\sigma) = 0$ ), 只有当  $h \leq \frac{1}{2\sigma_{\max}}$  时才能避免  $F_D(\sigma)$  中相邻区的交错和重叠。 $\sigma_{\max}$  称为尼奎斯特(Nyquist)频率。

抽样定理是对信号离散化时确定取样间隔  $h$  的一个重要判据。当  $h > \frac{1}{2\sigma_{\max}}$  时,  $F_D(\sigma)$  中相邻区就要交叠在一起,从而不能辨认真正的  $F(\sigma)$ 。这种现象在数学上称为“混迭”(aliasing), 应避免这种情况发生。

### 3. 傅氏仪的仪器线形函数和理论分辨率

#### (1) 截尾干涉图及仪器线形函数

设迈氏仪的两镜间的最大光程差为一有限值  $\Delta$ , 这相当于用基底为  $2\Delta$  的矩形函数来截取干涉图, 则(2.5)式应改写为

$$B(\sigma) = \int_{-\Delta}^{\Delta} I(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right) I(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx,$$

$\Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right) I(x)$  就是被截尾了的干涉图。根据(2.13)及(2.15)式,上式可写为

$$B(\sigma) = 2\Delta \text{sinc}(2\Delta\sigma) * B_0(\sigma), \quad (2.19)$$

这表示由傅氏仪测得的光谱分布  $B(\sigma)$  并不能恢复为原光谱分布  $B_0(\sigma)$ , 而是它与  $2\Delta \text{sinc}(2\Delta\sigma)$  的卷积。后者称为傅氏仪的仪器线形函数(instrument line shape function), 记为

$$ILS = 2\Delta \text{sinc}(2\Delta\sigma). \quad (2.20)$$

如果以单色光经过傅氏仪, 所得到的谱线将被

展宽为上式所表示的形状,  $\Delta$  越小, 单色光就被展开得越宽。

#### (2) 理论分辨率和切趾法

##### (A) 理论分辨率

因为傅氏仪的仪器线形函数的第一级零点在  $\sigma = \pm \frac{1}{2\Delta}$  处, 根据瑞利判据, 它的理论分辨极限为

$$\delta\sigma = \frac{1}{2\Delta}. \quad (2.21)$$

$\Delta$  越大, 即动镜行程越远, 傅氏仪的分辨本领就越高。

##### (B) 切趾法及其对分辨极限的影响

由于 sinc 函数围绕着横轴有较大的摆动(它的第一级极小的高度约为中央峰值的 22%), 当这些次峰(FTS 学家们把它们称为“脚”)叠加在相邻谱线上时, 信号就要失真。为了减弱这些“脚”的影响, 就要把傅氏仪的仪器线形函数从 sinc 函数改变为其它“脚”较小的函数, 故称为切趾或变迹(apodization)。其方法是先将干涉图乘上一个函数  $A(x)$ , 然后再进行傅里叶变换, 得到

$$B(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} A(x) I(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx \\ = \mathcal{F}\mathcal{F}[A(x)] * B_0(\sigma), \quad (2.22)$$

$\mathcal{F}\mathcal{F}[A(x)]$  就是这种情况下的仪器线形函数。 $A(x)$  称为切趾函数, 它必须是单调的实型偶函数, 并满足  $A(0) = 1, A(x)|_{|x|>\Delta} = 0$ , 及其它情况下  $A(x)$  为正的条件的。常用的切趾函数见表 2, 其中 Happ-Genzel 函数应用较广, 并为某些商品仪器所采用。

表 2

$A(x)$	理论分辨极限 $\delta\sigma$	$\delta\sigma / \frac{1}{2\Delta}$
$\Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right)$ (无切趾情况)	$\frac{1}{2\Delta}$	1.0
$A\left(\frac{x}{\Delta}\right)$	$\frac{1}{\Delta}$	2.0
$A^2\left(\frac{x}{\Delta}\right)$	$\frac{3}{2\Delta}$	3.0
$\cos\left(\frac{\pi x}{2\Delta}\right) \Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right)$	$\frac{\pi}{4\Delta}$	1.57
Happ-Genzel 函数 $(0.54 + 0.46 \cos \frac{\pi x}{2\Delta}) \Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right)$	$\frac{2.1}{2\Delta}$	2.1

图5画出了几个典型的切趾函数的傅里叶变换。为便于比较,取中央极大值为1。值得注意的是,图中某些曲线的“脚”的相对强度虽然减小了,但中央峰的宽度却增加了,这意味着分辨本领的下降(见表2)。所以减小谱线的失真与提高分辨本领这两个要求是互相牵制的,我们必须根据具体测量要求来选择合适的切趾函数,以达到一个折衷的效果。

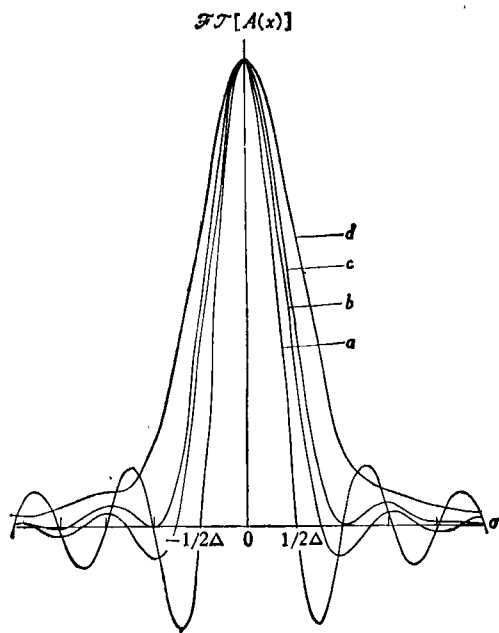


图 5

图中各曲线所对应的  $A(x)$ :

$$a \text{ 为 } \Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right); b \text{ 为 } \cos\left(\frac{\pi x}{2\Delta}\right)\Pi\left(\frac{x}{2\Delta}\right);$$

$$c \text{ 为 } \Lambda\left(\frac{x}{\Delta}\right); d \text{ 为 } \Lambda^2\left(\frac{x}{\Delta}\right)$$

#### 4. 自由光谱区和离散的光谱分布

##### (1) 自由光谱区

当按一定的取样间隔  $h$  逐点测量干涉图时,我们得到离散的干涉信号  $I(nh)$ 。按(2.17)式,相应的离散傅里叶变换为

$$B(\sigma) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I(nh) h e^{-i2\pi\sigma nh}$$

$$= B_0(\sigma) * h \text{III}(h\sigma), \quad (2.23)$$

这是以  $\frac{1}{h}$  为周期的、一系列复制的  $B_0(\sigma)$  (见

图4)。当满足抽样定理时,不发生“混迭”现象,那么由于对称性和周期性,我们只要在  $B(\sigma)$  中取宽度为  $\frac{1}{2h}$  的半个周期就包含了所需要全部光谱信息。我们称这样一个光谱范围为自由光谱区,记为

$$\sigma_{\text{FSR}} = \frac{1}{2h}. \quad (2.24)$$

如何选择取样间隔  $h$  是使用傅氏仪时首先必须考虑的问题。我们应根据给定的波段范围,按照抽样定理的要求确定  $h$ ; 或用滤光片把光谱范围限制在自由光谱区范围内。

如果待测光谱只是局限在  $\sigma_1 \rightarrow \sigma_2$  的范围内,并满足  $\sigma_2 - \sigma_1 = n(\sigma_2 - \sigma_1)$  的条件 ( $n$  是整数),则可由下式确定  $h$ :

$$h \leq \frac{1}{2(\sigma_2 - \sigma_1)}. \quad (2.25)$$

这时,虽然自由光谱区缩小了,但相邻的复制光谱并不重叠,所以仍可以得到正确的光谱信息<sup>[3]</sup>。

##### (2) 离散的光谱分布

设对干涉图的取样点数为  $N = \frac{\Delta}{h}$ , 则每个自由光谱区被分为  $N$  个间隔,间隔大小为  $g = \frac{\sigma_{\text{FSR}}}{N} = \frac{1}{2hN}$ , 每个间隔所对应的波数为  $\sigma_m = mg, m = 0, 1, 2, \dots, (N-1)$ 。经过对干涉图的抽样、截尾和切趾三方面处理后,离散的光谱分布为

$$B(mg) = \sum_{n=-N}^{N-1} h I(nh) A(nh) e^{-i2\pi m n h / 2N}. \quad (2.26)$$

改变式中  $m$ , 逐点计算  $B(mg)$ , 就可得到在自由光谱区范围内离散的光谱分布。

上式中干涉图的光程差范围是从  $-\Delta$  到  $\Delta$ , 这种干涉图称为双边干涉图。在理想情况下,双边干涉图应是完全对称的,所以我们又要在  $0$  到  $\Delta$  的范围内记录下干涉图就获得了全部信息,这称为单边干涉图,它可节约许多测量和计算的工作量。

在单边干涉图情况下,离散的光谱分布为

$$B(mg) = hI(0)A(0) + 2h \sum_{n=1}^{N-1} I(nh)A \times (nh) \cos \frac{\pi nm}{N}, [m = 0, 1, 2 \dots (N-1)]. \quad (2.27)$$

根据(2.26)或(2.27)式,应用 FFT 算法编制程序,就可通过计算得到光谱分布<sup>[4,5]</sup>。

### 5. 位相误差和修正

(1) 位相误差及其对仪器线形函数的影响

在理想情况下,干涉图应是完全对称的,并且在对于干涉图进行抽样时,应从中央零光程差位置开始,对称地、等间隔地进行。但实际情况要复杂得多。例如,对于干涉图抽样时遗漏零点,使抽样的起始点相对于零光程差位置有一定的位移  $\varepsilon$ 。又如,当光学系统调整得不够好时,双边干涉图就不是对称的,这相当于对各不同的光谱成分没有一个共同的零光程差位置,即  $\varepsilon$  与  $\sigma$  有关。这些现象都称为有位相误差。

当存在位相误差时,光谱分布应表示为

$$B_{\varphi}(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x + \varepsilon) e^{-i2\pi\sigma x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} I(x) e^{-i2\pi\sigma(x-\varepsilon)} dx, \quad (2.28)$$

定义  $\varphi(\sigma) = 2\pi\sigma\varepsilon$  为位相修正函数。如果  $\varepsilon$  是常数或只是  $\sigma$  的函数,则有

$$B_{\varphi}(\sigma) = e^{i\varphi(\sigma)} B_0(\sigma). \quad (2.29)$$

当存在位相误差时,由记录的单边干涉图得到傅氏仪的仪器线形函数为<sup>[6,7]</sup>

$$ILS = \cos \varphi(\sigma) [\Delta \text{sinc}(2\Delta\sigma)] + \sin \varphi(\sigma) \times [\Delta \sin(\pi\sigma\Delta) \text{sinc}(\Delta\sigma)], \quad (2.30)$$

图 6 画出了从  $\varphi(\sigma) = 0$  到  $\varphi(\sigma) = \frac{\pi}{2}$  范围内  $ILS$  随  $\varphi(\sigma)$  变化的情况,它们不仅在峰值位置上逐渐地偏移,而且曲线的形状也会发生很大的变化。例如,当  $\varphi(\sigma) = 0$  时,  $ILS = \Delta \text{sinc}(2\Delta\sigma)$ , 这是一个偶函数;当  $\varphi(\sigma) = \frac{\pi}{2}$  时,  $ILS = \Delta \sin(\pi\sigma\Delta) \text{sinc}(\Delta\sigma)$ , 这是一个奇函数。所以只要存在一个很小的位相误差,所测得的谱线位置及形状都会有很大变化,因此必须进行位相修正。

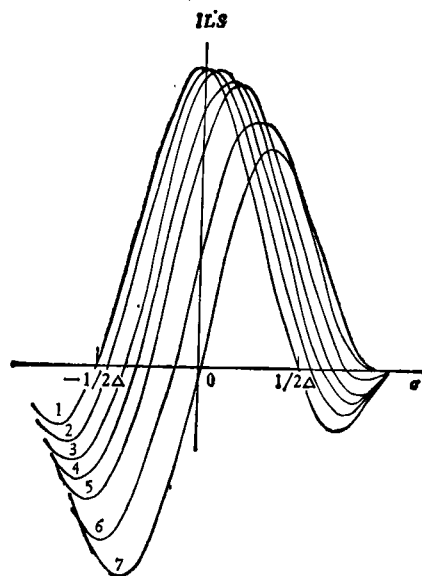


图 6

由曲线 1 至曲线 7,  $\varphi(\sigma)$  分别为  $0, \frac{\pi}{16}, \frac{\pi}{8},$

$$\frac{3}{16}\pi, \frac{\pi}{4}, \frac{3}{8}\pi, \frac{\pi}{2}$$

(2) 修正位相误差的方法

常用的修正位相误差的方法有:

(A) 相乘法: 它的基本思想是分别求出  $B_{\varphi}(\sigma)$  和  $\varphi(\sigma)$ , 然后按(2.29)式计算  $B_0(\sigma)$ 。

设  $\text{Re}, \text{Im}$  分别表示实部和虚部,由(2.29)式得

$$\begin{aligned} \varphi(\sigma) &= \text{tg}^{-1} \frac{\text{Im}[B_{\varphi}(\sigma)]}{\text{Re}[B_{\varphi}(\sigma)]} \\ &= \text{tg}^{-1} \frac{\text{Im}[\mathcal{F}\mathcal{F}(I(x+\varepsilon))]}{\text{Re}[\mathcal{F}\mathcal{F}(I(x+\varepsilon))]}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

计算  $\varphi(\sigma)$  时只需取一小段双边干涉图(一般说来,只要在零光程差位置两边各取几十个数据点即可),其取样间隔与测量  $B_{\varphi}(\sigma)$  时对于干涉图的取样间隔一致,以保证有相同的自由光谱区。在求得  $\varphi(\sigma)$  后,再根据分辨本领的要求选用一个长的单边干涉图来计算  $B_0(\sigma)$ ,从而可求得  $B_0(\sigma)$ 。

(B) 卷积法: 在“相乘法”中是先利用  $\varphi(\sigma)$  对光谱分布  $B_{\varphi}(\sigma)$  进行修正,而在“卷积法”中是先利用  $\varphi(\sigma)$  对干涉图  $I(x+\varepsilon)$  修正,然后再把被修正了的干涉图作傅里叶变换,得到

$B_0(\sigma)$ .

设  $e^{-i\varphi(\sigma)}$  是某一函数  $\Gamma(x)$  的傅里叶变换, 根据卷积定理及(2.29)式得到

$$B_0(\sigma) = e^{-i\varphi(\sigma)} B_\varphi(\sigma) = \mathcal{F}\mathcal{F}[\Gamma(x) * I(x + \varepsilon)], \quad (2.32)$$

这里  $\Gamma(x) * I(x + \varepsilon)$  就是被修正了的干涉图。

卷积法的优点是, 在计算  $B_0(\sigma)$  前我们可以根据被修正了的干涉图是否具有较好的对称性来判断位相误差被修正的情况。如果经过修正的干涉图的对称性仍然不好, 则可以它为基础再进行第二次修正……, 直到得到满意的干涉图为止。

(C) 平方光谱法: 由(2.29)式得到  $B_\varphi(\sigma)$  的模为

$$|B_\varphi(\sigma)| = [\text{Re}(B_\varphi(\sigma))^2 + \text{Im}(B_\varphi(\sigma))^2]^{\frac{1}{2}} = B_0(\sigma). \quad (2.33)$$

这样, 我们不必求出  $\varphi(\sigma)$  就能得到  $B_0(\sigma)$ 。本方法的缺点是必须采用双边干涉图, 这使计算机的存储量和计算量都大为增加; 其次, 由于随机分布的噪声经过平方运算后都成为正的, 也使误差增加。

### 三、傅里叶变换光谱仪的特点

#### 1. 高通光能力(又称 Jacquinot 优点)

在常规光谱仪(指以棱镜或光栅为色散元件的光谱仪)中, 通过仪器的光通量是受人射狭缝的宽度限制的, 缝宽增大, 仪器的分辨本领就降低, 这给测量弱信号带来了困难。在傅氏仪中, 由于没有狭缝的限制, 在分辨本领一样的条件下, 通过它的光通量比常规光谱仪的大得多。例如, 当迈氏仪(用脚标 M 表示)与光栅光谱仪(用脚标 G 表示)的分辨本领和准直透镜的面积  $A$ 、焦距  $F$  都相等时, 它们的通光能力  $E$  (throughput 或 étendue) 之比为<sup>[81]</sup>

$$\frac{E_M}{E_G} \approx \frac{2\pi F}{l}, \quad (3.1)$$

$l$  是光栅光谱仪的狭缝的高度。这里, 通光能力  $E$  的定义是  $E = A\Omega$ ,  $\Omega$  是光源对准直透镜

所张的立体角。设  $F/l \approx 30$ , 则  $E_M/E_G \approx 200$ 。

#### 2. 多路性优点(又称 Fellgett 优点)

设待测光谱共包含  $n$  个光谱元, 测量整个光谱所需时间为  $t$ , 则在单通道测量中, 每个光谱元的测量时间为  $\frac{t}{n}$ 。在多通道测量中, 用  $n$  个探测器同时接收  $n$  个光谱元, 所以每个光谱元的测量时间为  $t$ 。

根据统计理论, 如果噪声是随机的, 它不依赖于信号的大小, 那么信噪比与测量时间的平方根成正比, 得到<sup>[9]</sup>

$$\frac{(S/N)_\#}{(S/N)_*} \propto \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{t/n}} = \sqrt{n}. \quad (3.2)$$

常规光谱仪是单通道测量的情况, 而在傅氏仪中, 虽然也只用一个探测器, 但由于不同光谱元的调制频率不同, 它们被同时接收时相当于多通道测量的情况。因此傅氏仪比常规光谱仪的信噪比高  $\sqrt{n}$  倍。例如光谱范围为  $4000 - 400\text{cm}^{-1}$ , 可分辨的最小光谱元为  $\delta\sigma = 2\text{cm}^{-1}$ , 则用傅氏仪测量时信噪比可提高

$$\sqrt{n} = \sqrt{(4000 - 400)/2} \approx 42$$

倍。

值得注意的是, 只有当噪声与光源强度无关时多路性优点才会显示出来。例如, 当工作在红外波段时探测器噪声是噪声的主要来源, 它不依赖于光强, 多路性优点显著。当工作在可见波段时, 光子噪声成为噪声的主要来源, 它与入射光强的平方根成正比, 则多路性优点消失, 但这时傅氏仪的其它优点仍可发挥作用。

#### 3. 高分辨本领

在常规光谱仪中, 为了提高分辨本领, 必须制作大尺寸的棱镜或光栅, 这在生产技术上有一定困难, 所以提高分辨本领受到限制。对傅氏仪来说, 从理论上讲只要增加两镜间的光程差就可提高分辨本领, 而关键在于仪器的机械精度。Guelachvili 用多次反射增加光程差的方法, 设计了最大光程差可达 6m 的干涉仪, 用它研究波长为  $3.5\mu\text{m}$  的氙激光, 得到最小可分辨

极限  $\delta\sigma = 0.9 \times 10^{-3} \text{cm}^{-1}$ , 它与室温下的多普勒线宽接近<sup>[10]</sup>。

表 3 比较了三种仪器的理论分辨本领和数量级, 可见傅氏仪的分辨本领是较高的。

表 3

仪器类型	理论分辨本领	数值估计
棱镜光谱仪	$b \frac{dn}{d\lambda}$	$10^3-10^4$
光栅光谱仪	$kN$	$10^4-10^7$
傅氏仪	$2\Delta\sigma$	$10^4-10^7$

\* 表中  $b$  为棱镜底边长度,  $\frac{dn}{d\lambda}$  为棱镜的色散率,  $k$  为光谱级序,  $N$  为光栅刻线总数。

#### 4. 工作波段范围宽

常规光谱仪的波段范围, 一般说来, 最远到二十几微米。而对傅氏仪来说, 只要根据测量要求选择合适的光源、探测器及分光板材料, 工作波段范围可从可见区一直到  $1000\mu\text{m}$  左右的亚毫米区, 填补了常规光谱仪在远红外区的空白。

#### 5. 波数的高精确度

在常规光谱仪中, 为了确定待测光谱的频率, 要用标准光源的谱线来校准。在傅氏仪中, 若能精确测出两束光之间的光程差, 经过傅里叶变换后, 在光谱图中就能得到精确的波数值。例如, 用 He-Ne 激光的波长  $6328 \text{\AA}$  作为测量光程差的标准时, 波数精确度可达到  $0.01 \text{cm}^{-1}$ 。

#### 6. 减少了杂散光的影响

在常规光谱仪中, 信号光与杂散光是同样地被接收的。而在傅氏仪中, 信号光是被调制的, 而杂散光却并不被调制, 所以探测器对它们的响应不同, 这可使杂散光的影响减弱到 0.05% 以下。

此外, 对快速扫描型傅氏仪来说, 每次扫描只需几秒钟时间, 便于进行动态测量, 可用来监测快速的化学反应和物理过程。因为傅氏仪的体积和重量相对于常规光谱仪来说是较小的, 所以在野外测量和卫星探测中使用方便。

傅氏仪的不便之处是必须配备计算机来处理数据, 不如常规光谱仪直观。

## 四、仪器因素和实验技术

### 1. 分光板的选择及其透光特性

使用傅氏仪时应根据测量波段的要求选择相应的分光板。值得注意的是, 由于入射光束在分光板的两个内表面上多次反射所产生的干涉效应, 使每块分光板的透光特性不仅与它的材料有关, 也取决于它的厚度。当工作在短波段时, 分光板厚度必须很薄, 例如对可见及近红外区, 其厚度应小于  $10000 \text{\AA}$ , 一般采用在一定的基底上真空镀膜的方法来制备。

表 4 列出了傅氏仪中常用的各种分光板及其适用波段范围。

表 4

薄膜材料	基底	适用波段 ( $\text{cm}^{-1}$ )
银、铝	石英或玻璃	25000—10000
硅	石英	15000—3300
硅	氟化钙	9000—1650
锗	溴化钾	4000—400
锗	碘化铯	1600—200
Mylar (6.25 $\mu\text{m}$ 厚)	/	400—80
Mylar (12.5 $\mu\text{m}$ 厚)	/	200—40
Mylar (25 $\mu\text{m}$ 厚)	/	100—20
Mylar (100 $\mu\text{m}$ 厚)	/	30—10

### 2. 扩展光源的影响

前面的讨论都是基于点光源的情况, 即经过透镜后入射到分光板上的是一组平行于光轴的光线。而实际光源都是扩展光源, 光线的传播方向相对于光轴有个角分布。这些偏离光轴的光线将使所测得的光谱向低频方向移动, 并使谱线变宽, 分辨率下降。

设迈氏仪中动镜  $M_2$  和固定镜  $M_1$  的象  $M_1'$  相距  $\frac{x}{2}$  (图 7), 如果入射光束相对于光轴的夹角为  $\theta$ , 则到达探测器的两束光的光程差为  $d = x \cos \theta$ 。如果  $x$  一定, 在探测器表面上所接收到的光强将是对应于不同  $\theta$  的圆形等倾干涉条纹 (图 8)。与中心区位相差为  $\pi$  处相对应的

$$\text{倾角 } \theta_1 \approx \sqrt{\frac{1}{\sigma x}}$$



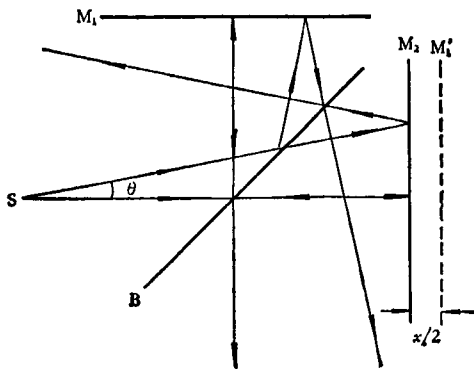


图 7

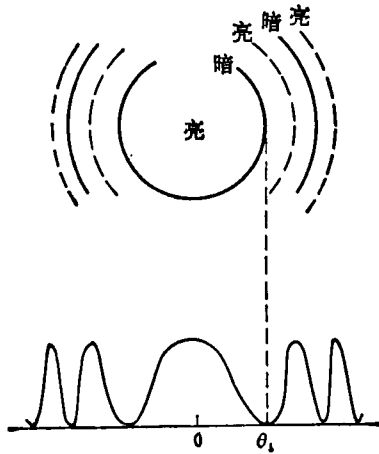


图 8

在扩展光源的情况下，推导得到干涉图与光谱分布的关系是<sup>[8]</sup>

$$I(x) = \int_0^{\infty} B_0(\sigma) \text{sinc}\left(\frac{\sigma x Q}{2\pi}\right) \cos \times \left[ 2\pi\sigma x \left( 1 - \frac{Q}{4\pi} \right) \right] d\sigma, \quad (4.1)$$

$Q$  是光源对准直透镜所张的立体角。

将上式与 (2.4) 式相比，有两点显著的变化：

(1)  $\sigma$  坐标轴被压缩了  $\left( 1 - \frac{Q}{4\pi} \right)$  倍，使所测得的波数值向低频方向偏移。

(2) 干涉图  $I(x)$  被  $\text{sinc}\left(\frac{\sigma x Q}{2\pi}\right)$  所调制。

设切趾函数为  $A(x)$ ，则波数  $\sigma_0$  对应的仪器线形函数为

物理

$$ILS = \mathcal{F}\mathcal{F}[A(x) \text{sinc}\left(\frac{\sigma_0 x Q}{2\pi}\right)] \\ = \mathcal{F}\mathcal{F}[A(x)] * \frac{2\pi}{\sigma_0 Q} \Pi\left(\frac{2\pi\sigma}{\sigma_0 Q}\right), \quad (4.2)$$

这意味着谱线展宽，分辨本领下降。 $Q$  越大，分辨本领下降的现象越显著。

实际工作中为了兼顾分辨本领及光通量这两方面的要求，取倾角等于  $\theta_1$  的光线为最边缘光线。因为  $Q = 2\pi(1 - \cos\theta) \approx \pi\theta^2$ ，所以将  $\theta_1$  代入得

$$Q_{\max} \approx \frac{\pi}{\sigma x} \leq \frac{\pi}{\sigma_{\max} \Delta}. \quad (4.3)$$

### 3. 平面镜系统失调的影响

当迈氏仪中固定镜的象  $M'_1$  和  $M_2$  不平行时，经过分光板后到达探测器的两束光将不完全重合，分辨本领下降。即使开始测量前已调节到  $M'_1$  与  $M_2$  平行，但由于动镜驱动系统的机械性能不好，随着  $M_2$  的运动，它的倾角也逐渐增加，分辨本领也要下降。如图 9 所示，当直径为  $D$  的平行光束入射时，由于  $M_2$  的倾斜，光线 1, 2 之间的附加光程差  $\delta x \approx 2D\theta$ 。当  $\delta x$  为半波长时，即光线 1, 2 之间的位相差为  $\pi$  时，干涉条纹的反差显著减弱，所以应有

$$\theta_{\max} \leq \frac{1}{4D\sigma}. \quad (4.4)$$

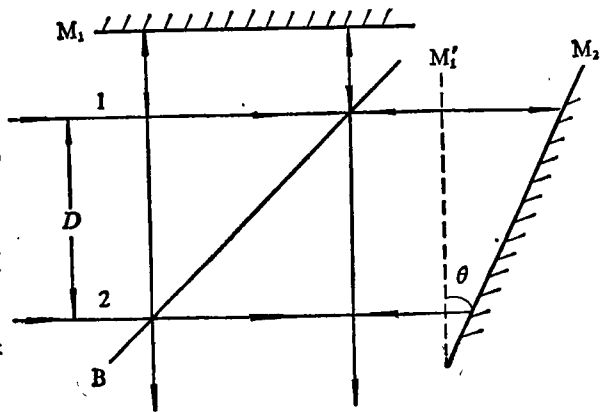


图 9

设动镜移动单位距离时  $\theta$  的改变量为  $\rho$ ，代入 (4.4) 式，并将  $\sigma$  和  $x$  都取最大可能值，得

$$\rho_{\max} = \left(\frac{\theta}{x}\right)_{\max} \leq \frac{1}{4D\sigma_{\max}\Delta} - \frac{\delta\sigma}{2D\sigma_{\max}} \quad (4.5)$$

这样,我们就可根据所要求的分辨极限提出对驱动系统的精度要求。例如,当  $\sigma_{\max} = 5000 \text{ cm}^{-1}$ ,  $D = 5 \text{ cm}$  时,若要求  $\delta\sigma = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ , 应保证  $\rho_{\max} \leq 1 \times 10^{-5} \text{ rad/cm}$ 。显然,在同样分辨本领的要求下,如果光束的直径越大,谱线的频率越高,对驱动系统精度的要求也就越高。

#### 4. 快速扫描型与慢速扫描型傅氏仪

##### (1) 扫描速度与调制频率

傅氏仪是一种调制型的光谱仪器,设动镜运动速度为  $v$ ,则光程差  $x = 2vt$ ,代入(2.4)式得

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} B_0(\sigma) e^{i2\pi\sigma \cdot 2vt} d\sigma, \quad (4.6)$$

上式中  $2\sigma v$  这个量就代表每个光谱元的调制频率,记为  $f$ 。

根据动镜速度的不同,傅氏仪可分为快速扫描型和慢速扫描型两类。

快速扫描型傅氏仪的动镜速度约为每秒十分之一厘米的数量级,调制频率在音频范围。这类仪器适用于中、近红外波段,一般都以 He-Ne 激光的波长  $6328 \text{ \AA}$  作为对干涉图取样的标准。由于扫描速度快,记录一张干涉图所需的时间仅为秒的数量级,一般都是扫描数十次求平均值,以提高信噪比。

慢速扫描型傅氏仪的动镜速度约为每秒十分之一微米的数量级,常用于远红外波段。它的动镜驱动方式有连续的和步进式的两种。对前者,采用叠栅干涉条纹计数装置来确定取样间隔;对后者,利用步进马达的精确步距为取样间隔。取样间隔约为几微米,扫描一次的时间约为几十分钟。

##### (2) 慢速扫描型傅氏仪中的调制方式

因为慢速扫描型傅氏仪的调制频率非常低,不便于对信号放大,所以必须再用附加的调制技术。常用的调制方式有振幅调制(简称 AM)和位相调制(简称 PM)两种。

振幅调制是用一个低频的斩波器使人射到探测器上的光强周期性地变化。例如用方波作

振幅调制时,当滤去调制函数中的高频项后,得到的干涉图为<sup>[11]</sup>

$$I_{AM}(x) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\pi} B_0(\sigma) e^{i2\pi\sigma x} d\sigma. \quad (4.7)$$

这与未作调制时的干涉图  $I(x)$  只差一个常数因子,在理想情况下,  $I_{AM}(x)$  仍是偶函数。

位相调制是设法使光程差作一微小的周期变化。例如在扬声器上加上微小的电压,并用它来带动固定镜振动,在滤去调制函数中的高频项后,测得的干涉图为

$$I_{PM}(x) \sim \int_0^{\infty} 4J_1(2\pi\sigma p) B_0(\sigma) \sin 2\pi\sigma x d\sigma, \quad (4.8)$$

式中  $p$  为正弦电压的振幅,  $J_1(2\pi\sigma p)$  是一阶的第一类贝塞尔函数,它是一个奇函数,所以上式中的  $I_{PM}(x)$  也是奇函数(图 10),在进行傅里叶变换运算时,只是正弦傅里叶变换起作用。

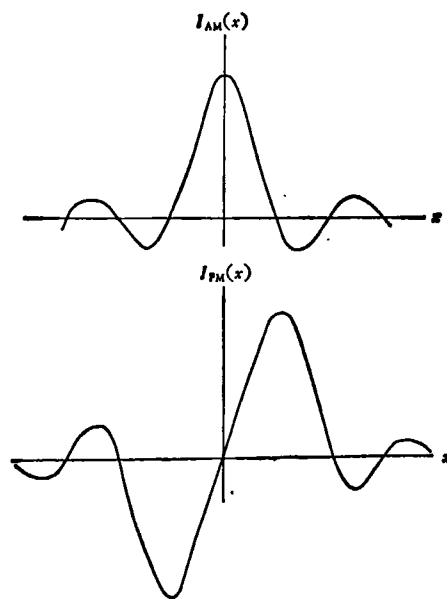


图 10

虽然 PM 的技术和装置都比 AM 要复杂,但它的信噪比要高一倍左右,所以仍是应用较广的。

## 五、应用举例

最早应用傅氏仪的是在天文、大气物理、空

间科学等领域。1971 年在美国阿斯彭 (Aspen) 召开国际会议后,大大推动了 FTS 的应用,并有商品性的傅氏仪问世。目前,FTS 已在物理、化学、天文、环境遥感、空间技术、工业生产等各领域有着成功的应用。它可以测量发射、透射(或吸收)及反射光谱,样品形式可以是固体、液体或气体,波段范围可以从远红外一直延伸到可见波段及紫外区(大量的应用是在红外区)。下面我们举些例子<sup>[7]</sup>。

### 1. 发射光谱的测量

因为傅氏仪比一般的常规光谱仪的通光能力大两百倍左右,故它适用于研究一些较弱及发射立体角较大的辐射。例如,研究化学发光、喇曼散射、环境测污等辐射能量较低的发射光谱;把它装在人造卫星或宇宙飞船上在高空测量大面积的地球表面辐射等。图 11 是高速  $^{90}\text{Sr}$  粒子通过一块半英寸厚的石英窗时所测得的切伦柯夫辐射,它的光谱分布从近红外一直延伸到紫外区,显示了傅氏仪宽光谱区的特点。

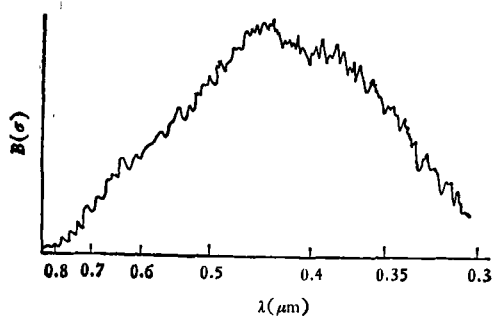


图 11

### 2. 透射或吸收光谱的测量

在测量透射光谱时,把样品放置在两束光重新汇合的光路上,即分光板和探测器之间(见图 1)。这种测量方法称为对称 FTS 或功率 FTS。若把样品放在某一臂的光路上,则称为不对称 FTS 或振幅 FTS、色散 FTS<sup>[12]</sup>。由于傅氏仪具有高通光能力、高分辨率等特点,故可测量强吸收的谱线(如透射率只有 0.3%),并可用较小的样品及较短的测量时间。图 12 是聚苯乙烯的透射曲线,样品直径只有 1mm。

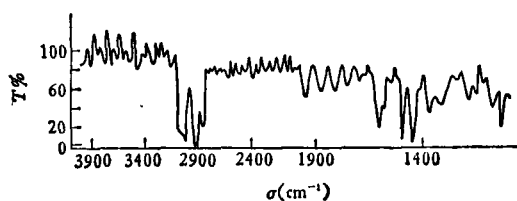


图 12

傅氏仪的另一特点是可利用沟槽光谱测定材料的折射率<sup>[13]</sup>。当样品的两个表面非常平行时,由于内表面的多次反射,经过样品的光束是一组相干的多束光。这时的干涉图除了中央干涉峰外,还包括一系列与主干涉峰形状相似的小干涉峰,它们的大小与样品的吸收系数有关;它们的间距  $\Delta x$  与样品的折射率  $n$  有关。设样品厚度为  $d$ ,则  $\Delta x = nd$ 。这时的光谱曲线上也叠加了许多规则的干涉条纹,故称为沟槽光谱(图 13)。设光谱图上相邻条纹的波数差为  $(\sigma_2 - \sigma_1)$ ,有  $(\sigma_2 - \sigma_1) = \frac{1}{2nd}$ 。所以,无论用干涉图或光谱曲线都可准确地测出折射率,它是在测量波段范围内的平均折射率。

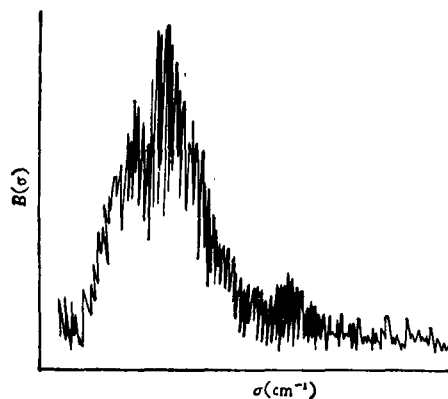


图 13

由于存在沟槽光谱现象,在使用傅氏仪时,应特别注意要使一些光学元件是楔形的(如滤光片、探测器窗片、光源外罩等),以免在光谱上叠加干涉条纹。

在测量反射光谱时也有沟槽光谱的现象,也可用它来测定样品的折射率<sup>[13]</sup>。

### 3. 时间分辨光谱的测量

由于傅氏仪具有多通道测量的特点,用它测量一些暂态过程的时间分辨光谱具有较高的精确度和效率。图 14 是被电子辐照的  $N_2-O_2$  混合气体的激发-弛豫过程中的三维时间分辨光谱。干涉仪的扫描速度是  $5 \times 10^{-3} \text{cm/s}$ , 光源的脉冲频率是 80Hz。在电子辐照达到 3.1ms 后中断辐照,然后每隔 0.5ms 采集一次数据,进行傅里叶变换后就得到在各不同时间的光谱图。

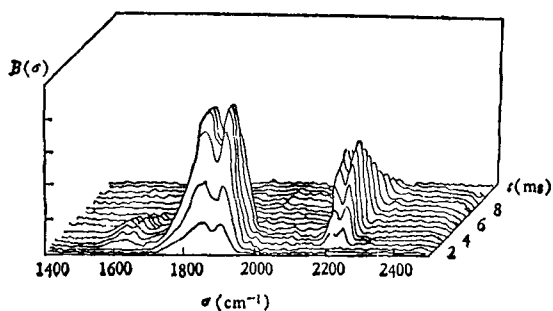


图 14

## 参 考 文 献

- [1] D. Baker et al., *Appl. Opt.*, **20** (1981), 1734.
- [2] R. N. Bracewell, *The Fourier Transform and its Application*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1978, 2nd ed.
- [3] E. V. Loewenstein, AFCRL-71-0019, 5 Jan. 1971, Spec. Rep. No. 114, p. 3.
- [4] J. Cooley and J. Tukey, *Math. of Computation*, **19** (1965), 297.
- [5] M. L. Forman, *J. Opt. Soc. Am.*, **56**(1966), 978.
- [6] J. Connes, *Rev. Opt.*, **40**(1961), 45.
- [7] G. A. Vanasse, *Spectrometric Techniques Vol. 1*, Academic Press, New York, 1977.
- [8] R. J. Bell, *Introductory Fourier Transform Spectroscopy*, Academic Press, New York, 1972.
- [9] H. Sakai, AFCRL-71-0019, 5 Jan. 1971, Spec. Rep. No. 114, p. 19.
- [10] G. Guelachvili, *Appl. Opt.*, **17**(1978), 1322.
- [11] J. Chamberlain, *The Principles of Interferometric Spectroscopy*, John Wiley and Sons, New York, 1979.
- [12] E. E. Bell, *Infrared Phys.*, **6** (1966), 57.
- [13] E. V. Loewenstein et al., *Appl. Opt.*, **10**(1971), 577.

## 真的看到了磁单极吗?!

1982年2月美国斯坦福大学的 B. Cabrera “看到了磁单极”(参见本刊 1982年第8期第509页)。1983年11月21日出版的 *Physical Review Letters* 上面登载了 Cabrera 和他的几位同事们的新实验工作情况:他们制造了一个灵敏度更高的探测器,探测器的核心部分由三个同心但互相垂直的圆超导线圈所组成。和 1982年实验的原理一样,如果有磁单极通过,则将引起线圈内磁通量的变化,从而导致超导线圈中电流强

度的变化。但经过五个月的操作,没有发现磁单极通过该装置的迹象。最后的实验结果表明,每秒钟内通过地球表面每单位立体角、每平方厘米的磁单极数必定不大于  $3.7 \times 10^{-11}$ ,而且他们的观测结果还增大了 Cabrera 1982年观察到磁单极事件“虚假原因”的概率。实验工作仍在进行中。

(许 霖)