

文章编号: 1007-5461(2005)02-0165-04

# 傅里叶变换红外光谱信息处理中的波数校正

熊伟, 方勇华, 荀毓龙, 黄烨, 黄斌

(中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031)

**摘要:** 折射式扫描干涉仪与传统干涉仪相比具有高稳定性和高光通量等优点, 但其光程的改变是由补偿光楔的运动产生的, 其结构也导致了不同波长的光经过的光程不同, 从而导致了由干涉图变换出来的光谱在波数上有偏差。采用的波数校正方法很好的解决了这一问题, 并具有很高的精度。

**关键词:** 应用光学; 波数; 校正; 干涉

**中图分类号:** O646.54      **文献标识码:** A

## 1 引言

目前, 种类繁多的干涉仪已被广泛应用于石油、化工、医药、环保、农业、公安、国防和教学等领域。其中绝大部分都是以迈克尔逊干涉仪的原理为基础的。本文所讲的干涉仪也是如此, 但其光路部分采用的是折射式扫描结构。这一结构具有高稳定性和高光通量等优点, 但由于其结构的不同, 那么由干涉图得到精确光谱图的方法也不一样。本文就来具体分析这一过程。

## 2 干涉图与光谱

由干涉图经 FFT 转换为光谱的过程中, 有两个必须考虑的重要因素, 即切趾函数和相位校正。

### 2.1 切趾函数

在实际测量干涉图和对干涉图进行傅里叶变换时, 不可能在无限光程差上进行测量和变换, 而只能在有限光程差  $-L$  到  $+L$  或  $0$  到  $+L$  的区间上完成干涉图的测量和傅里叶变换。这导致复原谱的畸变, 也就是产生旁瓣的 ILS 函数与真实光谱卷积的结果。

我们知道一个余弦干涉图如果没有权重, 光谱线的形状是一个真实光谱和一个 sinc 函数的卷积。如果我们用一个权重函数代替矩形函数,

$$\begin{aligned} A_1(\delta) &= 1 - \left| \frac{\delta}{\Delta} \right| & -\Delta \leq \delta \leq +\Delta, \\ A_1(\delta) &= 0 & \delta > |\Delta|, \end{aligned} \quad (1)$$

真实的光谱就是与  $A_1(\delta)$  的傅里叶变换卷积, 这个函数决定 ILS。  $A_1(\delta)$  的傅里叶变换有下面的形式

$$f_1(\nu) = \Delta \text{sinc}^2(\pi\nu\Delta). \quad (2)$$

那么, 复原谱线为一 sinc 平方函数, 旁瓣就被抑制了。这就基本上消除了主极大附近出现虚假光谱信号或掩盖掉弱信号的根源。象这样对边上这些振动的抑制称为切趾, 象  $A_1(\delta)$  这样的函数, 为了切趾的目的给干涉图加权重, 称为切趾函数。

$A_1(\delta)$  称为三角切趾函数, 在红外傅里叶变换光谱仪中最为常见。其他常用的切趾函数有梯形、贝塞尔、高斯等函数。在实验中, 是否要采用或采用什么切趾函数, 必须根据具体条件来选择。

收稿日期: 2003-11-20; 修改日期: 2004-04-30

E-mail: frankxiong@vip.sina.com

## 2.2 相位校正

相位误差主要是由于干涉仪采样时未能从零相位开始采第一个点,而是有一个角度的误差而引起的。相位角  $\theta_{\bar{\nu}}$  通常是频率的函数。也应该注意到相位是一个复数,也就是说,它有实部和虚部。

当一个干涉图  $I(\delta)$  被转换成光谱  $B'(\bar{\nu})$ ,除非光谱是对称的,否则需要进行复数的傅里叶变换。所以

$$B'(\bar{\nu}) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\delta) e^{-i2\pi\bar{\nu}\delta} d\delta. \quad (3)$$

在变换后,  $B'(\bar{\nu})$  用一个复数加法计算

$$B'(\bar{\nu}) = \text{Re}(\bar{\nu}) + i\text{Im}(\bar{\nu}). \quad (4)$$

并且,由于上面提到的原因,幅值光谱和复数光谱之间的关系可以用相位角来表示

$$B'(\bar{\nu}) = |B(\bar{\nu})| e^{i\theta_{\bar{\nu}}}, \quad (5)$$

其中  $|B(\bar{\nu})| = \{[\text{Re}(\bar{\nu})]^2 + [\text{Im}(\bar{\nu})]^2\}^{1/2}. \quad (6)$

相位校正的目标是产生真实光谱。因为  $\theta_{\bar{\nu}}$  通常随波数变化较慢,所以可以从方程 (5) 中分解  $e^{i\theta_{\bar{\nu}}}$ 。在这种情况下,

$$B(\bar{\nu}) = B'(\bar{\nu}) e^{-i\theta_{\bar{\nu}}} = \text{Re}(\bar{\nu}) \cos \theta_{\bar{\nu}} + \text{Im}(\bar{\nu}) \sin \theta_{\bar{\nu}}. \quad (7)$$

当  $e^{i\theta_{\bar{\nu}}}$  从方程 (5) 的一边移到另一边,只有实部被保留,因为真实光谱是实函数。方程 (7) 代表双边干涉图的相位校正。

## 3 波数校正

折射式 FT-IR 光谱仪采用的是折射扫描干涉仪,如图 1 所示,这是传统的迈克尔逊干涉的一种变形。与迈克尔逊干涉仪一样,折射扫描干涉仪由分束器、补偿器及两臂上的两个反射镜组成。但不同的是,折射扫描干涉仪两臂不成直角,平面反射镜被代之以角反射镜,他们均固定不动;分束器和补偿器是楔形的,且补偿光楔可沿平行于分束器镀膜表面的方向运动。当一来自光源的红外光束射入干涉仪时,经分束器后变成了两束,透射光束和反射光束分别垂直于分束器和补偿器的外楔面,投射到两臂上的角反射镜上。角反射镜的反射光总是平行入射光。从角反射镜返回的两束光重新会合于分束器,并发生干涉。由于补偿光楔的运动引起干涉仪其中一臂光程的改变,即改变两臂的光程差,因此而获得干涉图。显然,折射式扫描干涉仪由于其特殊结构,导致了不同波长的光经过的光程不同。因此,为获得精确光谱,必须对由常规方法获得的光谱图进一步作波数校正。

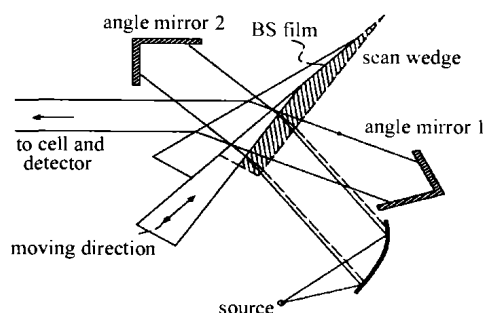


Fig.1 The sketch map of refractive scanning interferometer

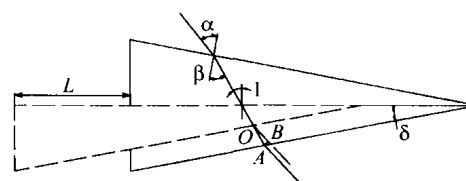


Fig.2 The sketch map of optic path in refractive scanning interferometer

### 3.1 光程差的导出

图 2 中实线为补偿光楔的起始位置, 虚线为移动一定距离  $L$  后的位置。分束器对应某一波长的折射率为  $n_\lambda$ , 光线经过的路线及相关的角度如图所示。  $\alpha$  为入射角,  $\beta$  为入斜臂折射角,  $\delta$  为单斜臂倾角 ( $8.3^\circ$ ),  $AB$  垂直于  $OB$ , 是光线的几何光程差。那么, 实际光程差为

$$n_\lambda \cdot \Delta x = 2(OA \cdot n_\lambda - OB), \quad (8)$$

$$OB = L \sin \delta. \quad (9)$$

因为  $\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = n_\lambda$ , 所以  $\beta = \sin^{-1}(\sin \alpha / n_\lambda)$ ,

$$\angle 1 = \beta - \delta, \quad \angle AOB = \beta - 2\delta,$$

$$n_\lambda \cdot OA = \frac{n_\lambda L \sin \delta}{\cos(\beta - 2\delta)} = \frac{n_\lambda L \sin \delta}{\cos[\sin^{-1}(\sin \alpha / n_\lambda) - 2\delta]}. \quad (10)$$

将 (9) 式与 (10) 式代入 (8) 式, 得到

$$n_\lambda \cdot \Delta x = 2L \sin \delta \left\{ \frac{n_\lambda}{\cos[\sin^{-1}(\sin(\alpha/n_\lambda) - 2\delta)]} - 1 \right\}. \quad (11)$$

### 3.2 校正算法与结果

迈克尔逊干涉仪常用的分束器材料是 ZnSe 和 KBr。在波数校正中, 我们通常是以氦氖激光作为基准的。假定分束器材料为 ZnSe, 其折射率公式为

$$n^2 - 1 = \sum_{i=1}^3 \frac{A_i \cdot \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_i^2} \quad (0.54 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 18.2 \mu\text{m}), \quad (12)$$

其中:  $A_1 = 4.46395, \lambda_1 = 0.20108 \mu\text{m}; A_2 = 0.46132, \lambda_2 = 0.39211 \mu\text{m}; A_3 = 2.88289, \lambda_3 = 47.04759 \mu\text{m}$ 。先用 ZnSe 的折射率公式分别计算出氦氖激光和欲校正的某一波数的光的折射率  $n_0$  和  $n$ , 然后可用下式

$$\sigma = \frac{n_0 \cdot \Delta x}{n \cdot \Delta x} = \frac{n_0}{n} \cdot \sigma'. \quad (13)$$

计算出校正后的波数。其中  $\sigma$  是校正后的波数,  $\sigma'$  是校正前的波数。但是由 (12) 式可知, 在 (13) 中  $n$  是与  $\sigma$  相关的函数, 故由上式无法求得校正后的波数  $\sigma$ 。

为解决这一问题, 可用由校正后的波数反推校正前的波数  $\sigma'$  的方法, 将 (13) 式变形得到 (14) 式, 经插值取值后直接得到均匀坐标的结果。

$$\sigma' = \sigma \cdot \eta. \quad (14)$$

其中, 根据 (11)、(12) 式分别计算出校正后某一波长的光和氦氖激光的光程差  $x_1$  和  $x_2$ , 再求出其比值  $\eta = x_1/x_2$ 。下图是校正前的光谱和校正后的光谱图, 可以明显的看出波数校正对光谱的影响。

### 3.3 结果分析

由图 3 可以看出:

1) 从总体趋势来看, 光谱图经校正后相对于校正前有一个从低波数到高波数的平移。如波数为 802.24 和 919.88 的峰值点经校正后平移到了波数为 912.16 和 1039.44 地方。这是由于在从 400 到 4400 波数范围内, 由 (11)、(12) 式得到校正后的波数是增大的。

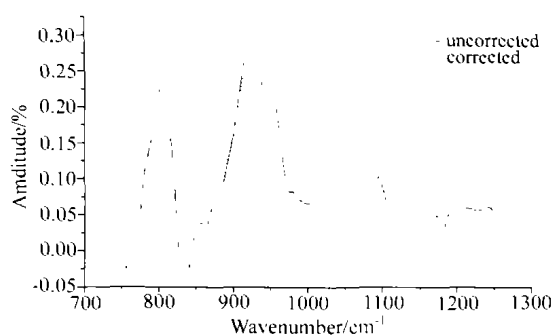


Fig.3 Comparison of the corrected spectrum with the uncorrected spectrum.

2) 由于每一个波数校正后的改变量是非均匀的, 校正后的光谱图不是未校正光谱图的简单平移。而且在实际处理中, 我们只对某一波数范围内的光谱进行分析, 若未经校正, 就会丢失有用的信息 (在上例中就丢失了一个特征峰), 必然导致最后分析结果的不准确。另外需要注意的是, 如果用一般的线性插值或取平均等插值方法得到的结果会不是很准确, 这样会对以后利用光谱来进行各种分析产生一定的不利影响, 所以我们采用的是分段埃米尔特三次插值法, 得到了比较理想的结果。

#### 4 结束语

通过对折射式干涉仪的结构分析, 推导出了其精确的光程差公式, 并用本文所述的波数校正方法, 从实验中得出了理想的结果。另外, 对北京瑞利分析仪器公司武惠中高工和崔华高工在此项工作中给予的大力支持在此表示诚挚的谢意!

#### 参考文献:

- [1] Griffiths P R, de Haseth J A. *Fourier Transform Infrared Spectrometry* [M]. New York: Wiley Press, 1986. 350-400.
- [2] Mertz L. *Transformations in Optics* [M]. New York: Wiley Press, 1965, 70-100.
- [3] Wu Jinguang. *The Technique and Application of Neoteric Fourier Transform Infrared Spectrum* [M]. Beijing: Science Press, 1994. 20-38.
- [4] Zhang Zhilian. *Fourier Transform Spectrum* [M]. Beijing: Beijing University Press, 1990. 94-105.

## Wavenumber correction in the information processing for FTIR

XIONG Wei, FANG Yong-hua, XUN Yu-long, HUANG Ye, HUANG Bin

( Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China )

**Abstract:** Compared with traditional interferometers, refractive scanning interferometer has many notable characteristics, such as high stability and luminous flux. For this kind of interferometer, the change of its optical path is cause by the movement of the optical wedge, and the optical path difference is related to the wavelength of the incident light. The wavenumber correction technique adopted solves this problem well with high precision.

**Key words:** applied optics; interference; wavenumber; correction

**作者简介:** 熊伟 (1975, 11 - ) 男, 现为中国科学院安徽光学精密机械研究所硕士研究生。主要从事基于 DSP 的高速率红外光谱信息处理研究。