

带有微计算机的付里叶变换光谱仪*

张光昭

(电子系)

六十年代末至七十年代初期的付里叶变换光谱仪,实质上是一部迈克尔逊干涉仪⁽¹⁾。要获得一个付里叶变换光谱所需要的实验周期较长,操作也不方便。随着计算机技术的迅速发展,近年来已将计算机和干涉仪合为一体,实现计算机的实时控制,记录和处理数据。但是,一部具有专用计算机的付里叶变换光谱仪,价格十分昂贵(约值20万美元),一般的单位是不容易得到的。最近已有将微计算机应用到付里叶变换光谱仪中的报导⁽²⁾。我们利用一台通用的微型计算机,加上一些计算机接口,同干涉仪配合在一起,同样实现了实时控制,记录和处理数据的目的。而且,在仪器暂时不工作时,微计算机仍然可以作为其它的一般用途;同时,这种微计算机接口技术还可以应用到其他光谱仪中去。

其次,为了消除测微计的机械误差给光谱图带来的严重影响⁽³⁾,我们还采用了激光控制取样技术,用数激光干涉条纹的办法来确定移动镜的位移,从而改善了光谱图的质量。

一、激光控制取样

我们所用的干涉仪是七十年代初期根据Grubb-Persons/NPL的设计而制作的仪器⁽⁴⁾,移动镜通过螺旋测微计由步进马达来驱动,取样的距离直接由螺旋测微计的读数来决定。由于螺旋测微计的周期性的机械误差,会使谱线产生畸变,而且在尖锐吸收线两侧相隔 10cm^{-1} 处出现所谓“鬼线”(即出现本来不应该出现的“谱线”,相隔 10cm^{-1} 是由螺旋测微计每旋转一圈改变 0.5mm 所决定的),这样往往会造成分析的错误,严重影响实验结果。

为了消除这种影响,我们采用了激光控制取样的技术,其示意图如图1所示。移动镜直接由同步马达驱动。氦-氖激光器的光束经过束分裂器分成两束,由固定镜和移动镜反射以后,再会合成一束,其相干图样由光敏三极管检出,再输入到激光控制取样单元,控制信息的取样。因为激光干涉图样相邻峰值之间的距离为二分之一激光波

- 本工作是在英国伦敦大学Westfield学院完成的,我感谢那里的同事们对我的工作的支持和帮助,特别是感谢Dr. G. A. Gledhill, Dr. C. L. Mok和Dr. W. G. Chambers对我的帮助。

长，因此，通过数相干峰值的数目就可以决定移动镜的移动距离。这样就可以消除螺旋测微计机械误差的影响，把移动镜移动距离的测量精度提高到激光波长的精度。同时，激光控制取样也可以解决在测量期间由于温度的变化所引起的干涉仪的两臂的膨胀的问题，因为，激光控制取样自动地补偿了这种膨胀，从而给出更为可靠的光谱。

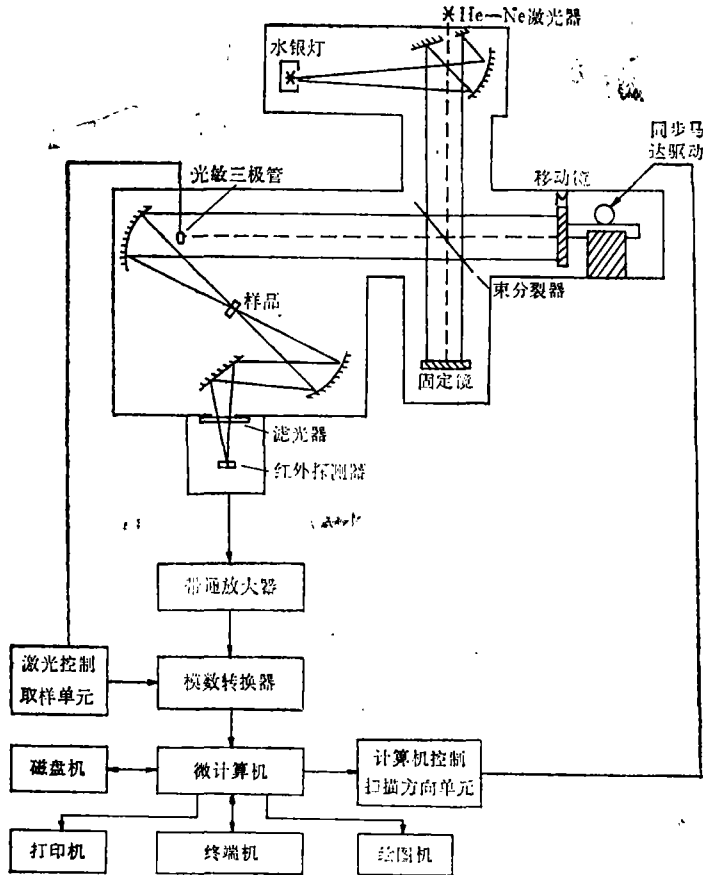


图1 带微计算机的付里叶光谱仪示意图

激光控制取样单元如图2所示，它是由激光束检测器，放大整形，脉冲计数和输出级四个部分所组成。如果开关S置于位置“8”，它表示每计数8个激光的相干峰值，即输出一个触发取样脉冲。改变开关S的位置，就可以改变取样的距离。

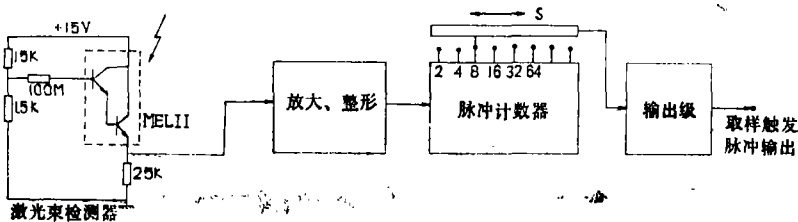


图2 激光控制取样单元方块图

二、带微计算机的付里叶光谱仪

带微计算机的付里叶变换光谱仪由两部分所组成(如图1所示):一部分是带激光控制取样的干涉仪,另一部分是带微计算机的数据记录,处理和控制系统。

所用的微计算机是带有64K内存的 TUSCAN 微计算机,它的 CPU是 Z80,时钟频率为2MHz或4MHz,机内附有5条S100插座,可以方便地配上所需要的输入/输出接口。它的外围设备有一个终端机,二个8吋的磁盘机,一个打印机和一个X-Y绘图机。64K内存可以进行最多为8千点的付里叶变换。每片8吋单密度双面磁盘可以贮存0.8兆字节,用于贮存所需要的程序和实验数据。实验结果可以在终端机显示,由打印机打出或者由绘图机描出。

带通放大器实际上可以用来选择所希望的干涉图的频谱范围。如果所希望的干涉图的频谱范围是在波数 σ_1 和 σ_2 之间,那么带通放大器的通带频率 ν 可以这样选择,使得[1]

$$2\sigma_1 V \leq \nu \leq 2\sigma_2 V$$

式中V为移动镜的扫描速度,如果 $V = 0.5\text{cm/秒}$,所希望的频谱范围是 $100\text{—}200\text{cm}^{-1}$,那么带通放大器的通带范围是 $100\text{—}200\text{Hz}$ 。

模数转换器及其接口的电路示意图如图3所示。它由四个部分组成,一是快速模数转换集成块(ADC581),它是12位的转换器,转换时间为 $17\mu\text{S}$;二是地址解码器;三是数据缓冲器;四是信号交换系统。它的工作原理是这样的:当电源接通时,微计算机输出一个POC信号来触发触发器,使其输出为“0”。微计算机保持检查这个触发器的输出端,直到它变为“1”为止。当从激光控制取样单元输出一个触发脉冲触发ADC时,ADC转换模拟信号为数字信号。当转换完成之后,ADC的状态信号触发触发器,使其输出变为“1”。然后,微计算机开始读入ADC数据,第一次读入较低的8位,并使触发器复原,第二次读入其余的4位。当这个过程结束以后,触发器的输出已恢复为“0”,计算机检查着这个输出端,ADC等待着另一个触发信号,这样周而复始,直到所有的信息都读入到计算机里,然后微计算机将所有数据写入到磁盘中去。整个数据的记录过程都是由软件来控制。

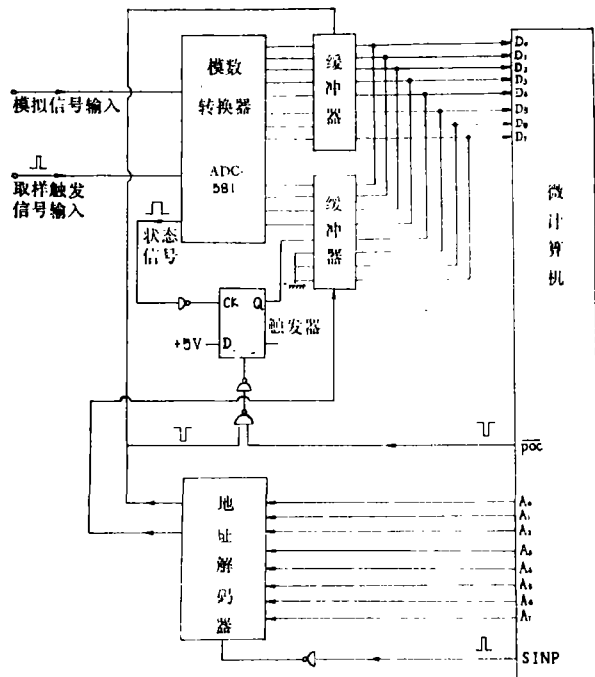


图3 模数转换器及其接口方块图

为了改善信-噪比,实验需要重复多次,然后取其平均值。如果重复的次数为 n ,那么可以使信-噪比提高 \sqrt{n} 倍。为了使实验能够自动地重复所希望的次数,这里装了一个计算机控制扫描方向的单元,使得扫描完一次以后,能自动地改变扫描方向,这样重复多次,直到完成所希望的次数为止。

如果我们对每一次扫描的结果进行付里叶变换,然后对所有付里叶变换的结果进行平均,那么会花很长的时间来进行计算,因为用这种微计算机进行1000点的付里叶变换大约需要2分钟。实际上,我们可以先对所记录的干涉图进行平均,然后进行一次的付里叶变换,这样就可以节省大量的计算时间。如果对干涉图进行平均,就要求每次扫描的取样点都在相应的位置上,但实际上是不可能的。我们在对干涉图取平均时,是先将干涉图的最大点重合在一起,然后逐点进行平均。这样做的结果可能会给光谱图带来一些影响,但可以证明,这种影响是很小的。

付里叶变换光谱是由下式给出的[1]:

$$B_1(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} \{ [I(\delta) - I(\infty)] \exp(-i2\pi\sigma\delta) \} d\delta, \quad (1)$$

这里 σ 是波数, δ 是两个反射镜之间的光程差, $[I(\delta) - I(\infty)]$ 是干涉图。现在假定在另一次扫描中原点改变了光学距离 β , 那么它的付里叶变换光谱是由下式决定的:

$$B_2(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} \{ [I(\delta - \beta) - I(\infty)] \exp(-i2\pi\sigma\delta) \} d\delta \quad (2)$$

应用付里叶积分的位移定律,上式又可写为:

$$B_2(\sigma) = B_1(\sigma) \exp(-i2\pi\sigma\beta) \quad (3)$$

现在,在保证其最大点相重合的条件下,将两个干涉图相加在一起,然后取平均,那么其付里叶变换光谱为:

$$\begin{aligned} B(\sigma) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \{ [I(\delta) - I(\infty)] + [I(\delta - \beta) - I(\infty)] \exp(-i2\pi\sigma\delta) \} d\delta \\ &= \frac{1}{2} [B_1(\sigma) + B_1(\sigma) \exp(-i2\pi\sigma\beta)] \\ &= \frac{1}{2} B_1(\sigma) [1 + \exp(-i2\pi\sigma\beta)], \end{aligned}$$

因此,它的功率谱为:

$$|B(\sigma)| = |B_1(\sigma) \cos(\pi\sigma\beta)| \quad (4)$$

因为我们在迭加两个相干图时,保证它们的最大点相重合,因此 $\beta \leq \frac{1}{2} \Delta\delta$, 这里 $\Delta\delta$ 是取样的光程差。如果所研究的频谱范围的最大波数为 σ_{\max} , 为了获得不会相重迭的付里叶变换光谱,要求 $\Delta\delta \leq \frac{1}{2\sigma_{\max}}$ [1], 所以, $\beta \leq \frac{1}{4\sigma_{\max}}$ 。在最坏的情况下,取 $B = \frac{1}{4\sigma_{\max}}$,

将此值代入式(4)得:

$$|B(\sigma)| = |B_1(\sigma) \cos\left(-\frac{\pi\sigma}{4\sigma_{\max}}\right)| \quad (5)$$

因此,平均的功率谱 $|B(\sigma)|$ 等于真实的光谱 $B_1(\sigma)$ 乘上一个函数 $M(\sigma) = \left| \cos\left(\frac{\pi\sigma}{4\sigma_{\max}}\right) \right|$

因为在 $\sigma = 0$ 到 $\sigma = \sigma_{\max}$ 范围内, $M(\sigma)$ 是一个光滑且平坦的函数,因此,它只对谱线的相

对高度作些修正,而对谱线的位置没有什么影响,对谱线的形状也不会影响很大。而且, β 是个随机的参变量,重复测量的次数越多, β 的平均值越趋近于零,因而,平均的光谱越接近于真实的光谱。

由于采用了激光控制取样,快速模数转换和计算机记录系统,可以大大提高移动镜的扫描速度。依赖于所采用的红外探测器的响应时间,所要求的分辨率和所研究的频段范围,扫描一次的时间一般为几秒钟至几十秒钟,而在改进前则为几分钟至二小时。

由于微计算机的容量有限,运算速度也比较慢,因此要求更高的分辨率时,必须利用更大容量的计算机。但是,这时微计算机仍然可以作为实时控制和自动记录数据之用,并且利用计算机之间的通讯的办法,使微计算机同其他较大的计算机(例如PDP11)连接起来,将微计算机记录得到的数据直接传送到较大的计算机中去进行数据处理,必要时还可以将处理结果送回来显示或打印。

参 考 文 献

- [1] R. J. Bell, *Introductory Fourier Transform Spectroscopy*, Academic Press, (1972).
- [2] R. C. DuVarney and S. Perkowitz, *Int. J. of Infrared and Millimeter Waves*, 2 (1981), 587.
- [3] M. J. H. Van de Steeg, H. W. H. M. Jongbloets, J. H. M. Stoelinga, R. W. Van der Heijden, R. J. M. Van Vucht and P. Wyder, *Infrared Physics*, 20 (1980), 121.
- [4] G. W. Chantry, *Submillimetre Spectroscopy*, Academic Press, (1971).

A Fourier Transform Spectrometer with an On-line Microcomputer

Zhang Guangzhao

Abstract

Abstract: A far infrared Fourier transform spectrometer with an on-line microcomputer is described. An on-line microcomputer is used for data acquisition, data analysis and real-time experimental control. A laser controlled sampling method is used instead of the mechanical sampling, so that the effect on the spectrum of the mechanical errors is eliminated. This instrument possesses relatively simple construction, excellent performance at a low cost.