

# 傅里叶变换光谱学方法

## — 基本原理、近期进展及其应用

沈 学 础

(中国科学院上海技术物理研究所)

**摘要:** 傅里叶变换光谱学方法是目前红外、远红外波段最重要的一种光谱方法。本文简述傅里叶变换光谱学的基本原理和优点, 评述和讨论它的近期进展以及在固体物理、有机化学、生物学大分子、天文观测和能源开发等方面的较重大的应用实例或前景。

### 一、引 言

傅里叶变换光谱学方法, 利用干涉图和光谱图间的对应关系通过测量干涉图和对干涉图进行傅里叶积分变换的方法来测定和研究光谱图, 因而可以看作是以某种数学方式对光谱信息进行编码的摄谱仪。它同时测量、记录所有谱元, 比传统的色散型光谱仪有高得多的讯噪比和分辨率, 发展成为目前红外和远红外波段最有力的光谱手段。它的研究、开发和应用已经形成了光谱学的一个独立的分支——傅里叶变换光谱学, 或称干涉光谱学<sup>[1-6]</sup>。

历史上, 早在上一世纪末, 迈克尔逊发明了以他自己的名字命名的干涉仪, 精确地获得了两束光相干后产生的干涉条纹——干涉图。同时瑞利很快认识到可以通过傅里叶积分变换将迈克尔逊获得的干涉图和光源辐射光谱联系起来。

然而傅里叶变换光谱学的真正突破和开展乃是五十年代以来的事情。正是在这一时期, 借助于现代计算机首次真正从干涉图进行傅里叶积分数值计算获得了光谱图; 从理论上弄清了傅里叶变换光谱学方法的本质优点——多频道优点和高光学通过量优点; 解决了傅里叶变换光谱方法的一系列复杂技术问题和具体理论方法问题, 使之真正远远超过色散型光谱仪的性能, 并填补了50~100 $\mu\text{m}$ 的光谱空白。

傅里叶变换光谱仪作为一种仪器产品, 最早出现在六十年代初期, 但第一代产品由于计算机联用等方面的一系列困难和缺点未能获得广泛应用。七十年代中以来, 由于快速傅里叶变换(FFT)、快扫描和激光取样数据采集等技术的日趋完善和数据处理系统的迅速发展, 在红外波段, 新一代傅里叶变换光谱仪已显得全面优于传统的色散型光谱仪, 并且价格上也已达到可与后者匹敌的地步, 以致在今后5—10年内, 国外似有可能在红外波段完全取代传统的色散型光谱仪。

如今傅里叶变换光谱学方法, 一方面已广泛地用于化学、物理、生物和医药的基本研究和检测、天文观察、各种工业生产过程和大气环境污染状况的检测及控制、核同位素分析、等离子体热核反应诊断及温度测量等各个方面; 另一方面, 傅里叶变换光谱学方法和技术本身也仍在不断发展和开发之中, 如色散傅里叶变换光谱学、双光束傅里叶光谱方法、高分辨率傅里叶光谱方法、高速及时间分辨傅里叶光谱和其他技术的联用等等。

### 二、傅里叶变换光谱学的基本原理和本质优点

傅里叶变换光谱仪通过对双束干涉仪产生的干涉图的傅里叶变换值计算来测定光谱图。

图 1 给出一振幅为  $a_0$  波数为  $\tilde{\nu}$  的理想准直单色光通过理想的迈克尔逊干涉仪到达探测器的光程及干涉合成过程, 合成信号振幅为:

$$A_D = rta_0(1 + e^{-i\phi}) \quad (1)$$

式中  $\phi = \phi_m - \phi_s = 2\pi \frac{x}{\lambda} = 2\pi \tilde{\nu} x$ ,  $x$  为光程差,  $\phi$  为相位差。

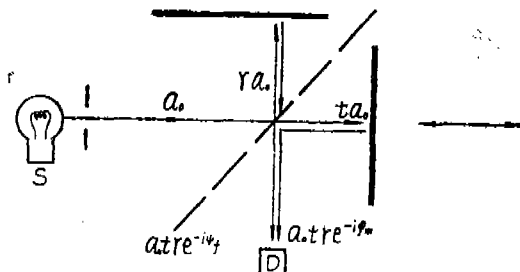


图 1 理想准直单色光通过迈克尔逊干涉仪时的讯号干涉合成过程  
合成讯号强度则为:

$$I_D(x, \tilde{\nu}) = A_D \cdot A_D^* = 2RTB_0(\tilde{\nu}) (1 + \cos 2\pi \tilde{\nu} x) \quad (2)$$

如果光源具有任意光谱分布, 则干涉合成讯号为上式对所有波数的积分, 即:

$$I_D(x) = \int_0^\infty 2RTB_0(\tilde{\nu}) (1 + \cos 2\pi \tilde{\nu} x) d\tilde{\nu} \quad (3)$$

图 2 给出  $10 \sim 55 \text{cm}^{-1}$  波数内高压汞灯辐射通过迈克尔逊干涉仪后探测器接收到的干涉讯号, 可以看作是双束干涉仪导致的干涉图的典型例子。这样, 我们把光源的频谱函数  $B_0(\tilde{\nu})$  转换为光强随距离变化的空间域函数  $I_D(x)$ 。如果考虑到  $x$  和  $t$  的线性关系, 也可以说变换为光强随时间改变的时域中的函数。

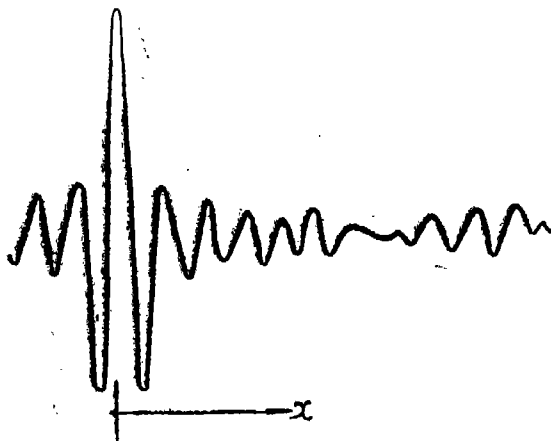


图 2  $10 \sim 55 \text{cm}^{-1}$  波数内高压汞灯辐射通过干涉仪后探测器接收到的干涉讯号

公式 (3) 右边实际上是函数  $2RTB_0(\tilde{\nu})$  的傅里叶积分变换, 不难证明其逆变换的可行性, 这样干涉图的逆变换就给出复原光谱  $B(\tilde{\nu}) = RTB_0(\tilde{\nu})$ 。略去直流成份, 可以将逆变换写为:

$$B(\tilde{\nu}) = 2RTB_0(\tilde{\nu}) = 2 \int_0^\infty I_D(x) \cos 2\pi \tilde{\nu} x dx \quad (4)$$

或者在更一般的干涉图不对称情况下写为:

$$B(\tilde{\nu}) = \int_{-\infty}^{\infty} I_D(x) e^{-2\pi i \tilde{\nu} x} dx \quad (5)$$

这样我们看到, 干涉图的傅里叶逆变换给出决定于光源辐射特性加分束片光谱特性的复原光谱。

干涉图的取样、读出及变换过程的数学描述可形象地示于图(3)。它表明, 离散的数字化的复原光谱可表为干涉图和梳函数乘积的傅里叶逆变换, 即:

$$\begin{aligned} B_i(\tilde{\nu}) &= FT^{-1}\left\{I_D(x) \cdot III\left(\frac{x}{\Delta x}\right)\right\} \\ &= B(\tilde{\nu}) \star III\left(\frac{\tilde{\nu}}{\Delta \tilde{\nu}}\right) \end{aligned} \quad (6)$$

公式(6)表明, 数值计算获得的离散的复原谱是真实复原光谱和梳函数  $III\left(\frac{x}{\Delta x}\right)$  的逆变换  $III\left(\frac{\tilde{\nu}}{\Delta \tilde{\nu}}\right)$  的卷积, 并且复原光谱的扩展范围  $\Delta \tilde{\nu}$  就决定于梳函数的, 因而干涉图的取样间隔  $\Delta x$ , 而复原光谱的分辨率  $\delta \tilde{\nu}$  则决定于干涉图的读出长度  $L = N \Delta x$ 。

图1和公式4—6也表明了傅里叶变换光谱学方法的本质优点。我们看到, 异于色散型光谱仪, 傅里叶变换光谱学方法是在测量时间  $T = N \Delta T$  内同时观测  $N$  个谱元的, 这导致在同样测量时间, 同样分辨率条件下傅里叶光谱仪的讯噪比比传统色散型光谱仪高  $\sqrt{N}$  倍, 借助于无线电技术的术语, 这就称之为傅里叶光谱方法的多频道优点。

其次, 我们看到, 傅里叶变换光谱仪中, 人们不必采用传统的狭缝结构来实现分辨率要求, 而直接应用扩展光源。这样干涉仪的孔径可表为:

$$\Omega_{FTS} = \pi / L \tilde{\nu}_{max} \quad (7)$$

它比传统光谱仪的由狭缝决定的孔径  $\Omega_o = Wl/f^2$  高二个数量级。正是这两个本质优点,

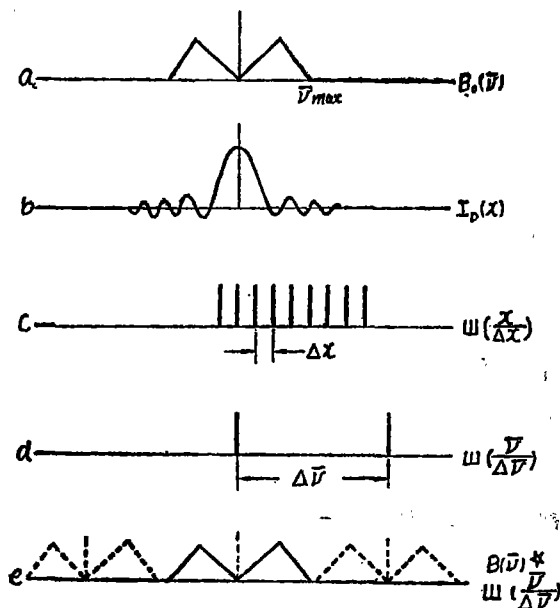


图3 干涉图取样及变换过程示意图

使傅里叶变换光谱仪在相同测量时间情况下，比传统光谱仪有高得多的讯噪比和分辨率。或者在维持同样分辨率和讯噪比条件下，仅需短得多的测量时间。以致某些情况下，傅里叶变换光谱学方法可以用于动态过程的研究和测量，如等离子反应过程的温度分布测量、化学反应过程动态观测等。

### 三、近年来的一些进展

近年来，傅里叶变换光谱学方法又不断取得新进展。这些进展包括干涉图快扫描技术、色散傅里叶变换光谱方法、双光路傅里叶方法、偏振干涉光谱学方法、高分辨率傅里叶变换光谱仪、时间分辨傅里叶变换光谱方法、可见光波段傅里叶变换光谱方法、亚毫米波片状光栅傅里叶变换光谱仪、数据处理技术、傅里叶变换光谱学和其他技术、实验方法的联用和结合等等<sup>[1-3]</sup>。正是这些新进展，使得作为仪器产品的傅里叶变换光谱仪不断更新，日益完善，以致在红外波段，正在取代和可能完全取代传统色散型光谱仪，同时不断地扩充着傅里叶变换光谱学方法的应用范围。限于篇幅，本节主要讨论色散傅里叶变换光谱方法和双光束光学补偿傅里叶变换光谱学方法。

迄今研究过的傅里叶变换光谱方法中，实验样品或者放在光源和干涉仪之间，或者放在干涉仪和探测器之间。这时，理想情况下干涉图是对称的，其逆变换给出复原光谱。然而样品也可放在干涉仪的一臂中，这时不同波数的干涉条纹相对于未放置样品情况漂移了  $2d\{n(\tilde{\nu}) - 1\}$ 。这样，干涉图的零相位点漂移了，又由于  $n(\tilde{\nu})$  的色散行为，干涉图也变得不对称了，如图 4 所示意。这种不对称干涉图的逆变换仍是可行的，只是必须运用复傅里叶变换。并且决定于插入的是透射样品或是反射样品，有：

$$\begin{aligned} & -B(\tilde{\nu})r^*(\tilde{\nu}) \\ \text{或} & -B(\tilde{\nu})t^*(\tilde{\nu}) = \int_{-\infty}^{\infty} I_D(x)e^{-i2\pi\tilde{\nu}x} \end{aligned} \quad (8)$$

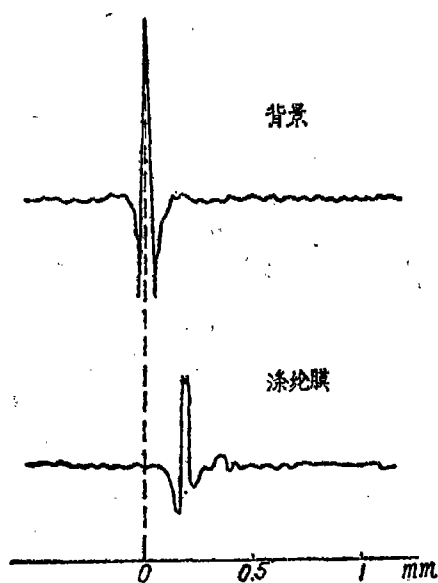


图 4

式中  $r(\tilde{\nu}), t(\tilde{\nu})$  为振幅反射系数和振幅透射系数。将干涉图的复傅里叶变换结果写为：

$$\int_{-\infty}^{\infty} I_D(x) e^{-i2\pi \tilde{\nu} x} dx = P(\tilde{\nu}) - iQ(\tilde{\nu}) \quad (9)$$

则以反射样品为例，可得振幅反射系数的模量和相位为：

$$r_0(\tilde{\nu}) = \left\{ \frac{P^2(\tilde{\nu}) + Q^2(\tilde{\nu})}{P_M^2(\tilde{\nu}) + Q_M^2(\tilde{\nu})} \right\}^{1/2}$$

$$\varphi_r(\tilde{\nu}) = \pi + \text{tg}^{-1} \left\{ \frac{Q(\tilde{\nu})}{P(\tilde{\nu})} \right\} \quad (10)$$

由此可计算样品的光学常数（折射率和消光系数）为：

$$n(\tilde{\nu}) = \frac{1 - r_0^2(\tilde{\nu})}{1 + 2r_0(\tilde{\nu}) \cos[\varphi_r(\tilde{\nu})] + r_0^2(\tilde{\nu})} \quad (11)$$

$$K(\tilde{\nu}) = \frac{-2r_0(\tilde{\nu}) \sin[\varphi_r(\tilde{\nu})]}{1 + 2r_0(\tilde{\nu}) \cos[\varphi_r(\tilde{\nu})] + r_0^2(\tilde{\nu})}$$

这些计算都可以在计算机上进行。这样，色散傅里叶变换光谱学的真正困难只在于实验技巧上的困难——在干涉仪一臂中放入样品或以样品取代固定镜而不破坏仔细调节获得的干涉仪的准直性。近年来，许多人设计了各种装置、方法，克服了这一困难，获得了不同温度条件下许多固体、液体材料的光学常数<sup>[1, 7]</sup>。图(5)作为一个例子，给出最近用这种方法测得的低温下剩余射线吸收区附近KBr的折射率和消光系数。其测量精度，据NPL的Birch博士的实验结果，对n、k无重大非线性变化的远红外区域，n<sub>1</sub>的测量精度可达10<sup>-4</sup>，k的测量精度可达0.1~0.2cm<sup>-1</sup>。这样，不必引用Kramers—Krönig变换，也不必借用任何物理模型，即直接测量了各种材料的光学常数，这是傅里叶变换光谱学的独特贡献之一。结合偏振光和低温测量等，这种光学常数测量还使得我们可以研究晶格吸收、软模、声子自能量等远红外物理问题。

最近，孔凡平和Birch的实验表明，对片状透射样品，如果干涉束的非正入射方式通过样品并分别测量来自样品的第一透射（反射）束和第二透射（反射）束，那么，利用色散傅

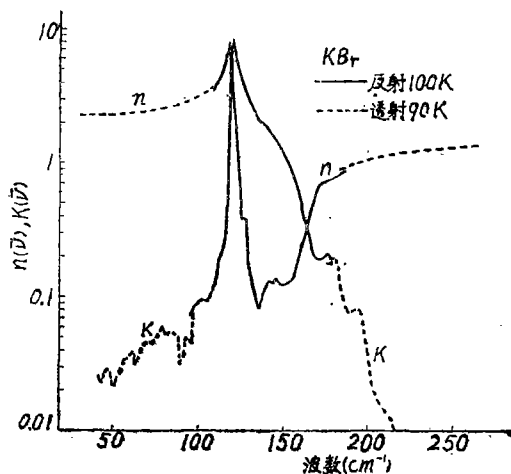


图5 用色散傅里叶变换光谱学方法测得的低温下剩余射线吸收区附近波段KBr的光学常数n、k

里叶变换光谱学方法，可以同时测量材料的光学常数 $n(\omega)$ 、 $k(\omega)$ 和样品厚度 $d$ 。这种同时测量 $n$ 、 $k$ 、 $d$ 的方法在许多情况下包括薄膜光学性质研究中看来会找到其应用前景。

和传统光谱学方法相比，尽管傅里叶变换光谱学方法有其本质优点，但也曾经有许多缺点和弱点。经过过去近30年的努力，这些缺点或不足之处大都已经克服。据我看来，仅有的主要弱点是难以采用双光束方法。又因为光源、探测器等的不稳定性造成的背景谱随时间的漂移，因而根据实验时间的长短，用傅里叶变换光谱仪测得的透射比、反射比等，最大可以有百分之几的系统误差。消除这种系统误差的可能途径之一是引用传统光谱仪双光路的概念，采用双光束光学补偿傅里叶变换光谱学方法。采用图6所示的 Czerny-Turner 型干涉仪，运用干涉仪器固有的双光束特性，Genzel 和作者等人证明在双输入或双输出或既双输入又双输出工作模式情况下，合成干涉图可大致实现光学补偿<sup>[9]</sup>。如果在两输出束中分别放入样品(S)和参考标准(R)，则合成干涉图主要反映了样品和参考标准透射特性(或反射特性)之差。详细的数学推导和讨论证明，如令 $I_{SR}(x)$ 、 $I_{RS}(x)$ 、 $I_{R1}(x)$ 和 $I_{R2}(x)$ 分别为四种不同组合的双输入双输出模式情况下的干涉图(在此脚标SR、RS、R1和R2分别表示两输出束中置入样品和参考标准的状况及次序)，那么样品透过率和参考标准透过率之比可表为：

$$1 - \frac{T_S}{T_R} = \frac{\int (I_{SR} - I_{RS}) \cos 2\pi \tilde{\nu} x dx}{\int (I_{R2} - I_{R1}) \cos 2\pi \tilde{\nu} x dx} \quad (12)$$

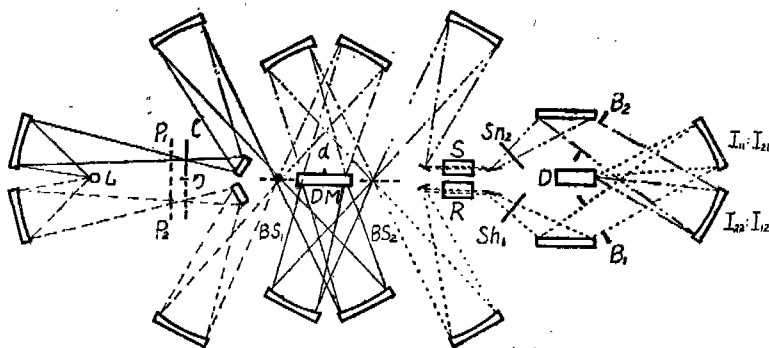


图6 利用Czerny-Turner型干涉仪的双光束、光学补偿傅里叶变换光谱仪的光学设计示意图

并且这一比值和两分束片特性及吸收、两输入束的光谱分布特性及差异、探测器在两方向上的频率响应特性及差别无关。利用这种方法和以高莱管为探测器测量氦气(在3cm长样管内充压力3Torr的氦气)远红外分子转动跃迁吸收获得的干涉图及变换光谱如图7所示。这一结果证明了这种双光束光学补偿傅里叶变换光谱方法的实际效用。此外，它在降低数值变换动态范围，提高测量讯噪比等方面也具有重要意义。这种方法在快扫描傅里叶变换光谱仪上的实际应用原则上也应该是可能的。

此外，可以指出的有趣进展是Braut、Connes 等人在近红外和远红外分别获得了 $10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ 的高分辨率傅里叶变换光谱<sup>[3-5]</sup>。英国NPL研究组等实现了10ms级时间分辨的很快扫描的傅里叶变换光谱<sup>[5]</sup>，从而用傅里叶变换光谱学方法测量了托卡马克核聚变装置中等离子体温度的时间、空间三维分布特性。

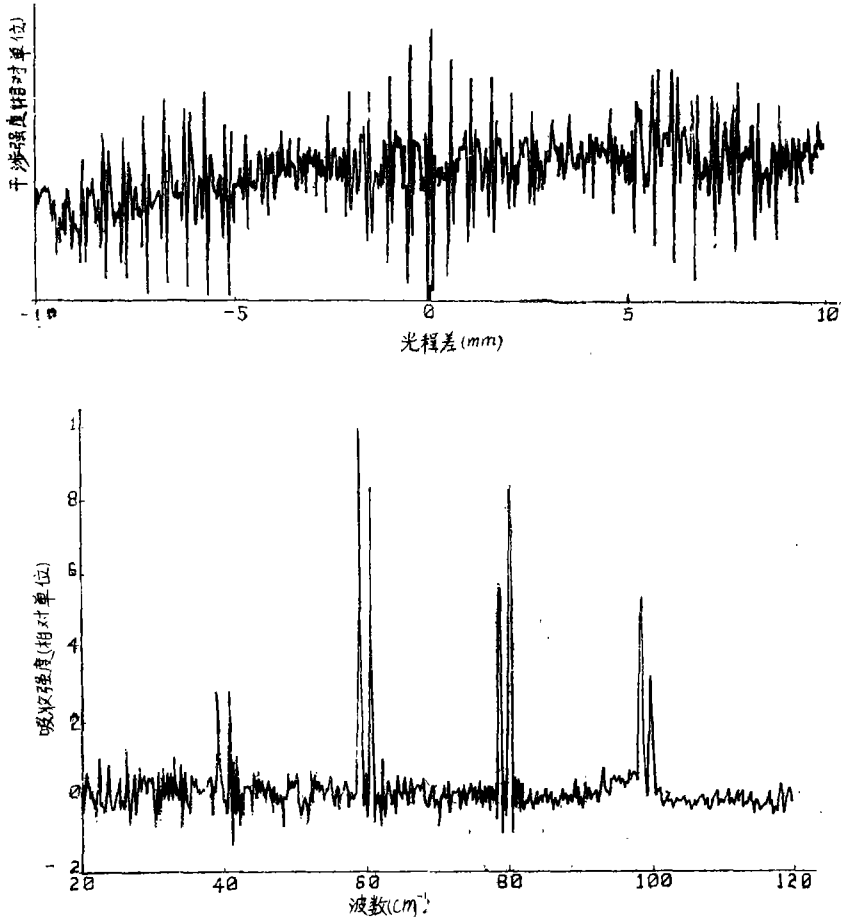


图7 用双光束、光学补偿傅里叶变换光谱装置测得的微量氨振动跃迁吸收的干涉图(上)和光谱图(下)

#### 四、傅里叶变换光谱学方法的应用举例

作为一种兼有宽波段、高分辨率和快响应等优点的光谱手段和光谱仪器，傅里叶变换光谱学方法在科学研究和国民经济各方面的应用不胜枚举。在此仅就作者个人熟悉或偏爱的方面举例说明。

在固体物理研究中，远红外傅里叶变换光谱学方法的应用使得近年来在半导体浅杂质能态、低频晶格振动、磁共振和超导能隙研究等方面取得重要进展。自从1958年Schäfer<sup>[9]</sup>发现定域模以来，缺陷、无序和混晶化效应诱发固体晶格振动研究一直是活跃的领域。但直到不久前为止，对半导体晶体来说，其主要结果仅限于频率高于声子频带的那些振动特征，对低频远红外振动行为，建树不著。其重要原因之一看来是缺乏远红外波段的灵敏的和宽波段的光谱手段。1979年作者等人，首先在上一节讨论过的双光束光学补偿傅里叶变换光谱装置上，观察到无序半导体中轻杂质诱发的位于横声学声子带上方的准定域模<sup>[10]</sup>，随后在掺杂半导体单晶<sup>[11]</sup>、混晶<sup>[12, 13]</sup>等各种不同材料和体系中观察到这类低频特征振动行为。

半导体浅杂质能态是最重要的半导体物理问题和应用基础之一，傅里叶变换光谱学方法也早已用来研究半导体中浅杂质的能态，测定有关杂质的含量。近来，将傅里叶变换光谱学方法和光电导技术相结合，发展了光热电离谱方法<sup>[14]</sup>。远红外光子将杂质电子从基态激发到

激发态，然后通过吸收声子再跃迁到导带(空穴跃迁到价带)而产生对光电导讯号的贡献，并用傅里叶变换光谱仪测量这种光电导讯号的频谱。这种方法不必很低的实验温度，更重要的是它兼有电学方法的更高灵敏度的优点和傅里叶变换光谱学方法的高分辨率、宽频域优点，为研究半导体中浅杂质能态提供了有力手段。图 8 给出的超纯锗的光热电离谱说明了这种方法的能力，图中除起主导作用的受主杂质外，通过能量接近禁带宽度的光照还给出了少量施主

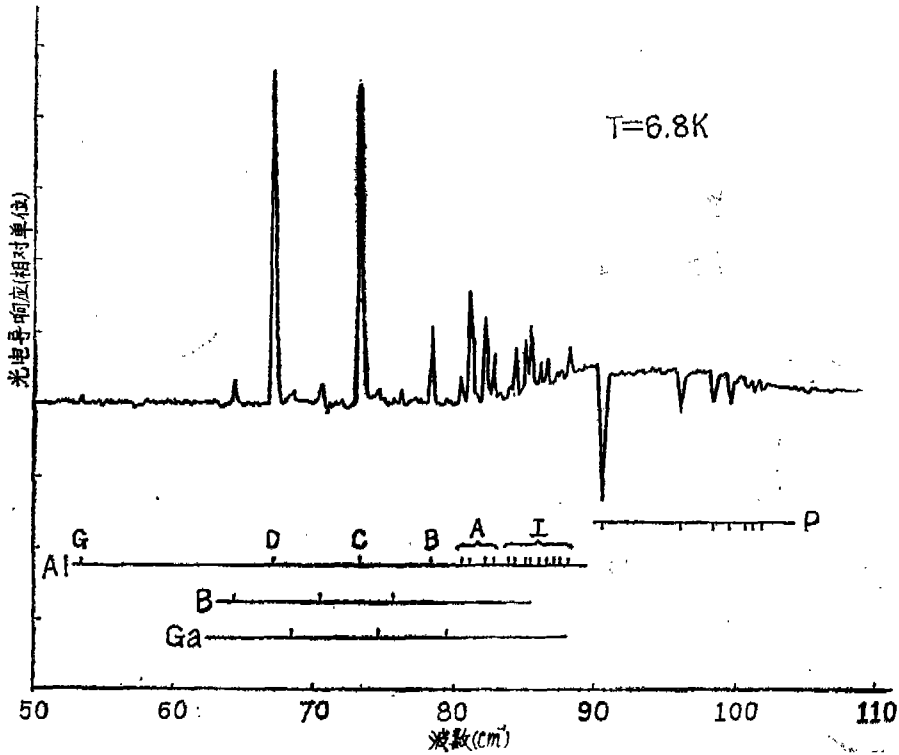


图 8 超纯锗的傅里叶变换光热电离谱。除受主能级外，能量接近 $E_g$ 的光照使少量杂质能级被填充并导致负光电导谱线，它们对应于磷杂质谱线

补偿杂质的光电导讯号。如果以此作为检测浅杂质含量的一种手段，它使我们能够检测到含量小达  $10^7 \text{cm}^{-3}$  的浅杂质含量，即  $10^{18}$  个主晶格原子中含有一个这种品种的浅杂质原子，并明白无误地判定其杂质种类和属性。傅里叶变换光谱学方法和光热电离谱还被用来研究带二个电子的施主杂质态 ( $D^-$  态) 和带二个空穴的受主态 ( $A^+$  态)。

傅里叶变换光谱学方法在化学方面的应用比在物理研究中更为广泛。通过各种化学键的不同模式振动频率的傅里叶变换高分辨率光谱测量和分析，可以研究各种化合物的化学键结构和其他物理性质及化学性质、同位素丰度及精细结构等等。例如通过测量某些高分子聚合物的振动光谱，可以研究它们的力学性质和热学性质，研究它们在拉伸或压缩过程中的破裂机制，长期户外使用和经受辐照情况下的老化效应。随着快扫描、高灵敏度快响应碲镉汞探测器和时间分辨技术的发展，傅里叶变换光谱学方法也已有可能被用来研究化学反应过程动力学和反应过程中各种反应物及生成物的变化规律。傅里叶变换光谱学方法在化学、化工中的另一个重要应用是它和气相层析技术的联用<sup>[4, 5, 15]</sup>，从而实现了气相层析分离样品红外光谱的在线(实时)测量。其灵敏度目前已达到毫微克( $\text{ng}$ )的水平，分辨本领也已大为提高。这种方法的有趣的应用例子是用来分析和研究抽烟导致的烟雾中各种有毒物的种类和含

量，和饮用水中各种有害痕量有机物的种类及含量。在 35ml 的一缕烟雾中发现了包括氰化物，尼古丁在内的10多种有毒成份，在饮用水中发现和判定了超过30种的含量小于1ppm 的痕量有机化合物。

近年来，傅里叶变换光谱方法在生物学大分子振动特性和分子生物学特性研究方面的应用异军突起，颇受重视，并已成为近来国际傅里叶变换光谱学会议和国际红外与毫米波会议的重要和热门主题之一。生物学大分子常常伴有结晶水或其他形式的水分子，或者常常以水溶液的形式存在，前者如溶菌酶，白蛋白和肌浆蛋白等，后者如血红蛋白，牛血清蛋白等。水分子的强的红外吸收常常掩盖了酰胺-I振动频率的观测。利用傅里叶变换光谱学高分辨率高灵敏度优点，并采用差谱方法，已经可以排除水吸收带的影响，观察出溶于水的  $\alpha$ -螺旋构造 ( $\alpha$ -Helix) 的和  $\beta$ -片状构造 ( $\beta$ -Sheet) 的血红蛋白的酰胺-I振动频率分别为  $1656\text{cm}^{-1}$  和  $1647\text{cm}^{-1}$ 。其他蛋白质分子和核糖核酸的酰胺-I振动频率也有类似情况，从而使傅里叶变换光谱方法成为判定蛋白质分子及其他生物学大分子构造的一种有效手段。

人们猜测，生物学分子的远红外振动特性或许更密切地和分子的生物学行为相联系，这一猜测导致许多学者寻找生物学分子的远红外振动模式及其频率。作者的实验发现<sup>[16]</sup>，多晶结构的简单氨基酸类声子振动吸收带的低频侧，存在若干规则分布的尖锐的振动吸收谱线。图9所示是L- $\alpha$ -丙氨酸多晶薄层的实验结果，在远红外波段50—150 $\text{cm}^{-1}$ 之间，存在6条规则排列的尖锐吸收谱线，其中包括两条双线。这种尖锐吸收谱线的数目随分子结构趋于复杂和分子中原子数的增加而很快增加。在D-L-丙氨酸情况下，谱线数目则增加到目前尚不能

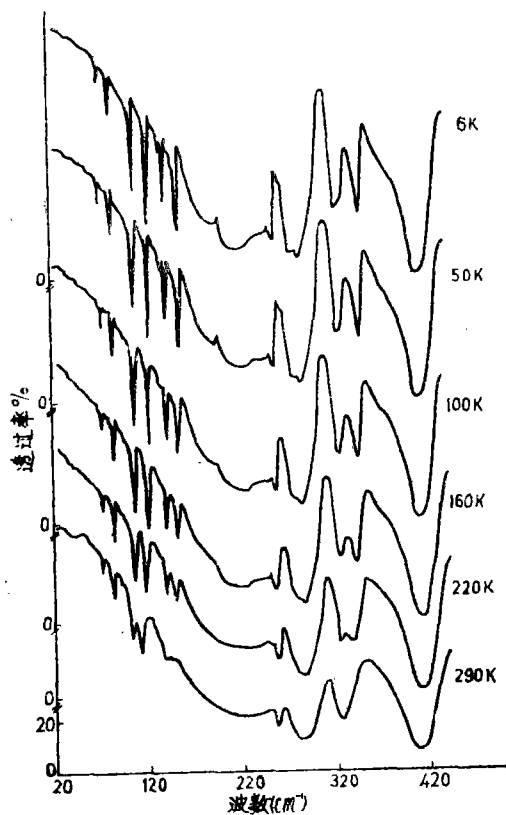


图9 不同温度下L- $\alpha$ -丙氨酸多晶薄层(厚约80 $\mu\text{m}$ )的远红外透射光谱。  
较高波数处的宽吸收带为类声子吸收。尖锐谱线讨论见正文

完满解释的地步。而在每个分子包含成千上万个原子的蛋白质大分子情况下，利用现有光谱手段只能观察到类声子吸收带低频端的隆起，而完全分辨不出分立的谱线。这种尖锐吸收谱线的物理起源大致可归诸为组成多晶原胞的分子间的桥式氢键、非化学键相互作用等弱氢键的振动跃迁。

在天文研究方面，已经在陆地、高空气球和人造卫星上用带望远镜的傅里叶变换光谱仪进行了多种观测，如红外星的发现和观测，行星及行星卫星的大气组份的光谱研究，星云、星际尘埃及星际分子的傅里叶光谱观测。正是这种观测确定了金星大气的主要组份是HCl，HF和CO<sub>2</sub>等，并在猎户座星云中判定了氢的存在。图 10 给出木星大气光谱、月面附近光

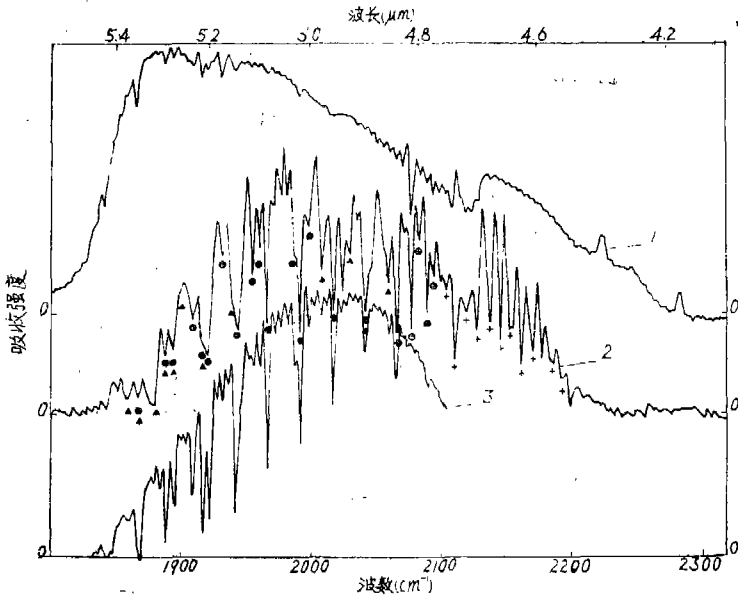


图 10

1—月球      2—木星      3—实验室中水蒸汽的光谱

谱及其和地球上实验室中水蒸汽吸收光谱的比较，从而以明确无误的证据证明了木星大气中大量水蒸汽分子的存在。近来天体物理学家还利用远红外傅里叶变换光谱仪观测到宇宙背景图10，在12.4km 的高空用带望远镜的傅里叶变换光谱仪测得的木星大气光谱、月面附近光谱及其与地球上实验室水蒸汽光谱的比较。⊕, +, ▲等符号表明，除水蒸汽外，木星大气中还含有NH<sub>3</sub>、CH<sub>4</sub>或CH<sub>3</sub>D。辐射和3K黑体辐射之间存在某些差别。

傅里叶变换光谱学方法在国民经济重大应用项目和环境工程等方面也有重要应用。例如核燃料的分析、检定，核聚变反应等离子体诊断，太阳能-电能转换和大气、水质污染检测等等。以核燃料分析检定为例，我们知道，天然氧化铀含铀235约0.7%，核电站中作为核燃料的铀棒含铀235约4%左右，而核废料中铀235含量则为万分之几。利用高分辨率、高灵敏度的傅里叶变换光谱仪并和矩阵光谱方法(Ar or Kr Matrix Isolation Spectra)相结合，通过不同同位素的UO<sub>x</sub>振动谱线的定量观测可以达到分析和检定核燃料的目的<sup>[17]</sup>。图11给出用这个方法获得的700—900cm<sup>-1</sup>范围内UO<sub>3</sub>中和氧的同位素有关的振动吸收谱线显示了这种方法的能力。热核反应可以释放出巨大的能量，为实现受控核聚变反应，要求很高的温度和等离子体密度。如前所述，10ms量级时间分辨的傅里叶变换光谱方法已成功地用于测量托克马克装置等离子体温度的时间、空间三维分布。

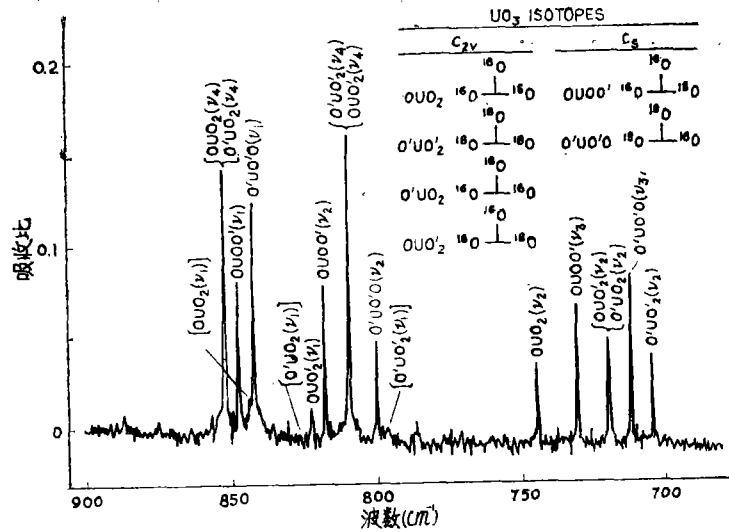


图11 用傅里叶变换光谱仪和Ar矩阵光谱方法测得的 UO<sub>3</sub> 的红外振动吸收光谱及氧同位素判定, <sup>16</sup>O/<sup>18</sup>O = 0.93

以上几个例子说明了傅里叶变换光谱方法在科学研究和国民经济各方面应用的重要性和前景。

## 五、结 语

傅里叶变换光谱方法, 从五十年代重新提出以来, 经30年左右的开发和发展, 已经成为从亚毫米波到红外、近红外甚至可见波段的最有力最通用的光谱学方法。并且可望在今后若干年内, 在红外远红外波段, 取代以致完全取代传统的色散型光谱仪。它的数字化数据处理的基本思想和方法, 也已被其他类型的光谱仪器采用, 而促进了其他光谱方法的自动化和现代化。

随着科学技术的迅速发展, 出现其它光谱学方法和傅里叶变换光谱方法竞争是可能的。例如 Hadamard 变换光谱学方法也和傅里叶变换光谱学方法一样具有多频道优点, 然而理论上可以证明, 这种方法在原理上实验上更为不便和困难, 因而迄今未见这种方法真正成为可供使用的光谱学方法。对吸收和反射研究来说, 可调谐激光器提供了研究相应波段内高分辨率光谱的有效方法, 然而, 由于调谐范围、速度等各方面的原因, 它和傅里叶变换光谱学方法可相互补充而看不出取代的可能性。此外宽波段红外探测器列阵的发展和成熟, 有可能使传统的色散光谱学方法在某些范围某些应用中东山再起, 但在分辨率、扫描范围等方面看来, 也不能和傅里叶变换光谱学方法匹敌。傅里叶变换光谱学方法由于自己的优点和特点而迅速发展并获得广泛应用。

### 参 考 文 献

- [1] R. J. Bell; Introductory Fourier Transform Spectroscopy, Academic Press, 1972.
- [2] P. R. Griffiths; Chemical Infrared Fourier Transform Spectroscopy, Wiley & Sons, Inc., New York, 1975.
- [3] Aspen Int. Conf. on FTS, ed. by G. A. Vanasse etc., 1970.

- [4] 1981 Int. Conf. on Fourier Transform Infrared Spectroscopy, South Carolina, ed. by H. Sakai, SPIE, 1981.
- [5] 1983 Int. Conf. on FTS, Durham, ed. by J. R. Birch; Infrared Phys., 1984, 24, No 2/3.
- [6] 沈学础; 傅里叶变换光谱学, 物理学进展, 1982, 2, 275.
- [7] T. J. Parker, W. G. Chambers, J. E. Ford and C. L. Mok; A Fourier Spectrometer for Determining the Optical Constants of Transparent Solids in the Far-Infrared from 77 to 300K, Infrared Phys., 1978, 18, 571.
- [8] 沈学础, T. Welker, J. Kuhl and L. Genzel; The Performance of a Double-beam Fourier Transform Spectrometer and Its Application to the Measurement of Weak IR Absorption, Infrared Phys., 1980, 20, 277.
- [9] G. Schafer; Das Ultrarote Spektrum des U-Zentrums, J. Phys. Chem. Solids, 1960, 12, 233.
- [10] 沈学础, 方容川, M. Cardona and L. Genzel; Far-Infrared Absorption of Pure and Hydrogenated  $\alpha$ -Ge and  $\alpha$ -Si, Phys. Rev., 1980, B22, 2913.
- [11] M. Cardona, 沈学础 and S. P. Varma; Infrared Absorption and Raman Spectra of Li-compensated B-doped Si, Phys. Rev., 1981, B23, 5329.
- [12] 沈学础, 半导体中定域模、准定域模晶格振动的光谱研究, 物理学进展, 1984, 4, 452.
- [13] 沈学础, 褚君浩;  $Cd_xHg_{1-x}Te$ 混晶声子谱的远红外光谱研究, 物理学报, 1984, 33, 477.
- [14] E. E. Haller, W. L. Hansen and F. S. Goulding; Physics of Ultra-Pure Germanium, Advances in Phys., 1981, 30, 93.
- [15] P. R. Griffiths; Gas Chromatography and Fourier Transform Infrared, in Fourier Transform Infrared Spectroscopy, Academic Press, 1978.
- [16] 沈学础, L. Santo and L. Genzel; Infrared Spectroscopy of Amino Acids, Polypeptides and Proteins, Can. J. of Spectroscopy, 1981, 26, 126.
- [17] D. W. Green and G. T. Reedy; Matrix Isolation Studies with Fourier Transform Infrared, in Fourier Transform Infrared Spectroscopy, Academic Press, 1978.

## Fourier Transform Spectroscopy Method—Fundamental Principle, Recent Developments and Applications

Shen Xuechu

(Shanghai Institute of Technology and Physics, Academia Sinica)

### Abstract

Fourier Transform Spectroscopy is now one of the most important and useful spectral methods in infrared and far infrared region. We illustrate here simply the fundamental principle and the intrinsic advantage, review and discuss its recent developments and essential applications in solid state physics, organic chemistry, biological macromolecule, astronomical observation and energy exploitation.