

非对等 FOV 作用下的高分辨率 FTIRS 仪器线型函数研究

任利兵, 尉昊赞, 张亚, 李岩

清华大学精密仪器与机械学系, 精密测试技术及仪器国家重点实验室, 北京 100084

摘要 视场角(FOV)是仅次于最大光程差、决定高分辨率傅里叶红外光谱仪(FTIRS)仪器线型函数(ILS)的重要因素。由于光学设计和装调原因, 理论为圆形 FOV 的扩散光束, 到达探测器端时, 其水平和垂直方向上的 FOV 值往往不再严格对等。对此, 提出了以椭圆形面光源取代传统文献中的圆形面光源来反映这种非对等性, 并结合最大光程差参数, 给出了非对等 FOV 作用下的高分辨率 FTIRS 仪器线型函数的数学和图形表述。通过比较高分辨率 FTIRS 实测 CO 标气获得的光谱, 与非对等 FOV、对等 FOV 作用下的理论光谱, 发现非对等 FOV 作用下的理论谱与实测谱的差谱 RMS 值较对等 FOV 获得的差谱 RMS 值更小, 在最大吸收峰附近的差谱变化更为平缓。表明了这种非对等 FOV 作用下的 ILS 函数, 较对等 FOV 作用下的 ILS 函数能更精确的反映高分辨率 FTIRS 对谱线的真实响应。

关键词 非对等视场角; 傅里叶红外光谱仪; 仪器线型函数; 高分辨率

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2011)12-3403-04

引言

傅里叶红外光谱仪 FTIRS 以其灵敏度高、分析速度快的特点, 已经成为化学分析中的有力工具。近年来, 随着环境问题的日益严峻, 尤其是高空大气污染的快速准确监测问题对 FTIRS 提出了新的需求。然而, 常规实验室使用的通用型 FTIRS, 由于光谱分辨率较低($>1\text{ cm}^{-1}$), 无法观察到谱线的精细结构, 使后续在微窗口(波数区间)内进行大气成份反演的算法^[1]遇到了困难。针对这种情况, 国外开展了高分辨率($<1\text{ cm}^{-1}$) FTIRS 的研制, 有代表性的如加拿大的 ACE-FTIRS 和美国的 TES-FTIRS^[2,3], 其光谱分辨率分别达到了 0.02 和 0.025 cm^{-1} 。尽管高分辨率傅里叶红外光谱仪结构复杂、造价高, 但其高的光谱分辨率足以观察到单色谱线附近的详细吸收情况, 为检验 FTIRS 仪器线型函数 ILS (instrumental line shape, 也有文献称仪器响应函数)理论模型的合理性、准确性提供了帮助, 并可为后续的微窗口大气成份反演算法 SFIT2^[4,5]提供精确的输入参数。

与通用型的低分辨率 FTIRS 一样, 高分辨率 FTIRS 的 ILS 函数本质上反映的也是仪器对不同谱线的响应程度, 不同的是, 对高分辨率光谱仪, ILS 函数不再仅依赖于最大光程差, 由扩展光源造成的视场角 FOV(field of view)对 ILS

函数的影响已不能忽略。国外文献^[6,7]有报道借助反卷积和拟合的方法, 从高分辨率 FTIRS 测量的光谱中提取 ILS 函数, 并获得了较精确的结果。然而, 这种方法仅仅是获得数学意义上的逆向解, 无法从正向考察和解释 FOV 对 ILS 的影响程度。一些代表性的传统文献^[8]中, 也仅仅考虑了圆形 FOV 对 ILS 函数的影响。部分实用的红外光源产品手册^[9]中, 给出的也仅是水平或垂直方向的一维 FOV 指标(光强—配光角曲线)。然而, 由于光学设计和装调的原因, 对实际光谱仪探测器端的 FOV 测量发现, 其在水平方向和垂直方向的测量值并不完全一致, 而存在毫弧度或亚毫弧度的差别, 即由圆形面光源发出的 FOV 对等的光束经过光学系统后, 不再是对等的。对使用广泛的低分辨率 FTIRS 来说, 这种不对等性在测量谱中几乎反映不出来, 因为低的分辨率足以包络掉 FOV 对测量光谱的影响。然而, 对高分辨率 FTIRS, 这种不对等性在测量谱中可以很明显的观察到, 因而不能忽视这种差异。

对此, 本文提出了一种以椭圆形发光面产生的非对等 FOV 代替传统文献中使用的圆形发光面产生的对等 FOV, 来研究其对高分辨率光谱的响应情况。为表述方便, 非对等 FOV 和对等 FOV 以下分别称为 UFOV (unequal field of view)和 EFOV (equal field of view)。

收稿日期: 2011-03-01, 修订日期: 2011-06-28

基金项目: 国家自然科学基金项目(60827006)和中德科学基金合作项目(GZ404(303/2)资助

作者简介: 任利兵, 1981 年生, 清华大学精密仪器与机械学系博士研究生 e-mail: rlb07@mails.tsinghua.edu.cn

1 影响高分辨率 FTIRS 仪器线型函数的因素

1.1 UFOV 的影响

如前所述, UFOV 在水平和垂直方向的视场角是非对等的。因此, 其对应的光源发光面可以按椭圆形等效, 如图 1(a)。

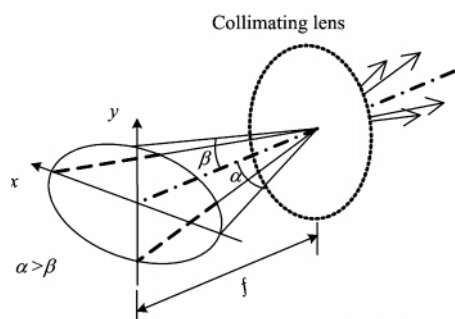


Fig 1(a) Beam divergence from elliptical source

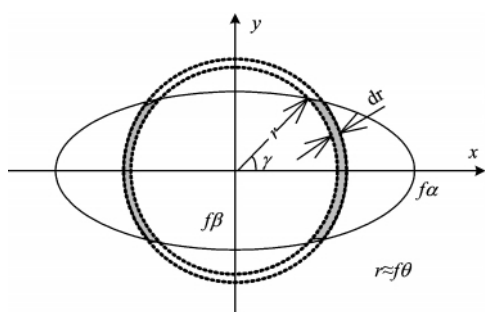


Fig 1(b) Elliptical emitting area

图 1(a) 中, f 为准直镜焦距, x 轴代表水平方向, y 轴代表垂直方向, 为方便推导, 约定 UFOV 在 x 轴上的发散半角 α 大于 y 轴上的发散半角 β 。

在使用扩展光源的情况下, FTIRS 的干涉图和光谱强度之间存在如下关系^[10]

$$I(x) = \int B(\nu) \text{sinc}(\pi\nu x (1 - \cos\theta)) \cos(2\pi\nu x \cos\theta) d\nu \quad (1)$$

其中 x 为光程差, θ 为发散半角, $\cos\theta$ 可看成是对频率 ν 的调制, 而认为光程差 x 是不变的。这样发散半角为 θ 波数为 ν_0 的光线, 通过理想 FTIRS 测量获得的光谱为

$$\nu = \nu_0 \cos\theta \quad (2)$$

观察图 1(a) 和图 1(b), 显然有 $\tan\theta = r/f$, 通常 $r \ll f$, $\theta \approx r/f$, 结合式(2), 可求得谱元 $d\nu$ 与面元 dr 有关系

$$d\nu \approx (\nu_0 r / f^2) dr \quad (3)$$

考虑图 1(b) 中的椭圆形发光面:

当发散半角 $\theta \leq \beta$ 时, 由光源扩散性导致的发光面为一圆环, 其发光强度 B 正比于圆环面积, 为 $B = K2\pi r dr$, K 为比例常数, 结合式(3)得

$$B = f^2 \frac{K2\pi}{\nu_0} d\nu \quad (4)$$

当 $\beta < \theta < \alpha$ 时, 由光源扩散性导致的发光面为残缺的椭圆环, 如图 1(b) 中虚线圆环内的阴影区, 其对应的发光强度变为

$$B = 4\gamma r dr = 4\arccos \sqrt{\frac{\alpha^2(\beta^2 - \theta^2)}{\theta^2(\beta^2 - \alpha^2)}} r dr \quad (\beta < \theta < \alpha) \quad (5)$$

其中, γ 为发光半径 r 与 x 轴夹角, 考虑式(3), 式(5)可化为

$$B = \frac{2}{\pi} \arccos \sqrt{\frac{\alpha^2(\beta^2 - \theta^2)}{\theta^2(\beta^2 - \alpha^2)}} f^2 \frac{K2\pi}{\nu_0} d\nu \quad (\beta < \theta < \alpha) \quad (6)$$

当 $\theta < \alpha$ 时, 由光源扩散性导致的发光面始终为 0, 即此条件下的 $B=0$ 。

对式(4), 令 $C = 2\pi K f^2 / \nu_0$, 显然该值是独立于谱元 $d\nu$ 的常数, 由该式也可以看出, 对圆形发光面, 光谱强度 B 为常数, 其 ILS 函数表现为矩形, 这与传统文献中对圆形 FOV 的 ILS 研究结果是一致的。将式(4)、式(6)按 C 作归一化处理, 类比圆形 FOV 的矩形 ILS 函数, 可得椭圆形发光面导致的 UFOV 的 ILS 函数为

$$\text{ILS}_{\text{UFOV}} = \begin{cases} 1 & \theta \leq \beta \\ \frac{2}{\pi} \arccos \sqrt{\frac{\alpha^2(\beta^2 - \theta^2)}{\theta^2(\beta^2 - \alpha^2)}} & \beta < \theta < \alpha \\ 0 & \theta \geq \alpha \end{cases} \quad (7)$$

观察式(7), 当发散半角 $\theta \leq \beta$ 时, UFOV 的 ILS 表现为常数, 与圆形 FOV 的 ILS 情况是一致的, 当 $\alpha < \theta < \beta$ 时, UFOV 的 ILS 表现为类似反余弦的函数, 这显然与 EFOV 的矩形 ILS 是不同的, 最终, UFOV 的 ILS 在椭圆形发光面的最大发散半角 $\theta = \alpha$ 处截止。

1.2 最大光程差的影响

根据文献[11], 最大光程差导致的傅里叶红外光谱仪的 ILS 函数可表示为

$$\text{ILS}_{\text{MPD}} = 2L \text{sinc}[2\pi(\nu - \nu_0)L] \quad (8)$$

式中, L 为最大光程差。

结合前面对 UFOV 的分析, 光谱仪的综合 ILS 函数为式(7)和式(8)的卷积, 即

$$\text{ILS}_{\text{tot}} = \text{ILS}_{\text{UFOV}} \otimes \text{ILS}_{\text{MPD}} \quad (9)$$

为了更直观的反映 UFOV 和 EFOV 对高分辨率 FTIRS 的 ILS 作用效果, 图 2 给出了 $\nu_0 = 4\,000\text{ cm}^{-1}$ 处, 最大光程差 $L = 25.2\text{ cm}$ (0.02 cm^{-1} 光谱分辨率) 条件下, 考虑 UFOV ($\alpha = 4\text{ mrad}$, $\beta = 3\text{ mrad}$)、仅考虑水平发散角 ($\alpha = \beta = 4\text{ mrad}$) 的 EFOV、仅考虑垂直发散角 ($\alpha = \beta = 3\text{ mrad}$) 的 EFOV, 根据式(7)~(9)获得的综合 ILS 曲线。

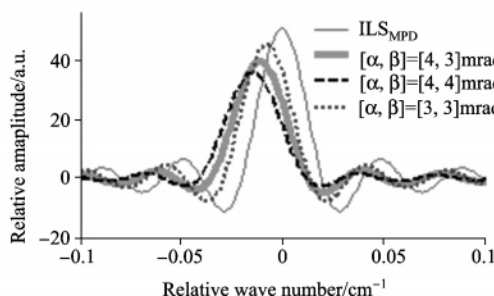


Fig 2 ILS curve affected by different FOV

为便于比较, 图 2 顺便给出了只由最大光程差决定的曲线 ILS_{MPD} , 其余三条曲线分别为 UFOV, EFOV 与 ILS_{MPD} 卷

积后的结果, 由图发现, 在最大光程差相同的情况下, 使用 UFOV 导致的综合 ILS 曲线与使用 EFOV 导致的综合 ILS 曲线在幅值和波数位置上均有明显差别, 因此, 对高分辨率 FTIRS 来说, 必须区分 UFOV 和 EFOV 对 ILS 函数的不同影响。

2 实验数据与分析

由于 CO 气体在 $2\,000\sim 2\,250\text{ cm}^{-1}$ 范围内有大量分立的强吸收谱线, 便于 ILS 函数反演。因此, 我们使用了自行研制的高分辨率 FTIRS, 按 0.02 cm^{-1} 分辨率扫描 CO 标气, 获得透过率光谱, 实验参数如表 1。

Table 1 Experimental parameters

气体总压/atm	CO 分压/atm	环境温度/K	黑体温度/K	吸收光程/m	FTIRS 最大光程差/m
1	0.000 66	296	1 000	0.05	0.252

为高效的检验 UFOV 作用下的 ILS 函数的合理性, 我们事先对高分辨率 FTIRS 的 FOV 进行了水平和垂直方向的测量, 测量结果如图 3(a) 和 (b) 所示, 横轴为发散角, 纵轴为归一化的发光强度。FOV 在水平和垂直方向的半高全宽分别为 7.8 mrad 和 6.8 mrad , 对应的发散半角分别为 3.9 mrad 和 3.4 mrad 。

将表 1 的实验参数和图 3 的发散半角, 代入式 (7)–(9) 中, 并依据 HITRAN 数据库中 CO 在 $2\,169.2\text{ cm}^{-1}$ 处的单根谱线吸收参数^[12], 卷积多普勒线型后, 再与式 (9) 的综合 ILS 函数卷积计算, 获得理论上的受 UFOV 影响的透过率光

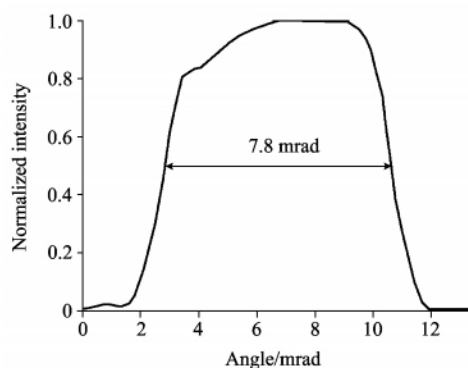


Fig 3(a) Horizontal FOV test curve

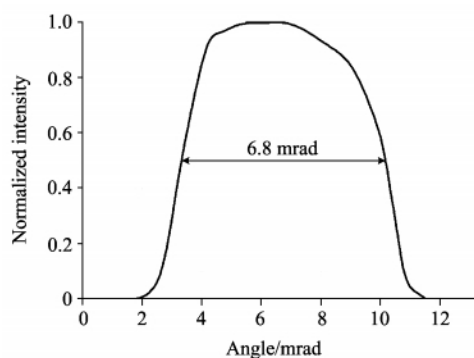


Fig 3(b) Vertical FOV test curve

谱, 为了与传统的 EFOV (仅考虑水平发散角或仅考虑垂直发散角) 情况比较, 图 4 还给出了 EFOV ($\alpha=\beta=3.9\text{ mrad}$ 和 $\alpha=\beta=3.4\text{ mrad}$) 影响下的理论计算光谱。

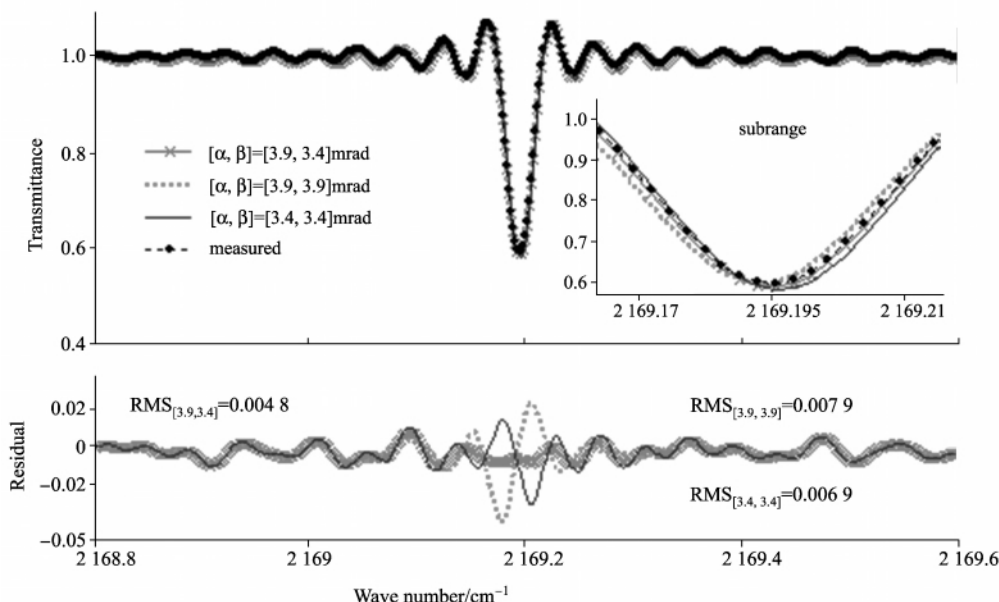


Fig 4 Comparison between the measured spectrum and the one with UFOV, EFOV

由图 4, 整体来看 CO 在 $2\,168.8\sim 2\,169.6\text{ cm}^{-1}$ 波数内的透过率情况, 使用 EFOV 和 UFOV 模型计算得到的理论光谱与实测谱的差谱 RMS (root mean square) 值分别为

0.006 9, 0.007 9 和 0.004 8, 使用 UFOV 获得差谱 RMS 值是最小的, 虽然与 EFOV 情况下的 RMS 值没有量级差别, 但是仔细观察子图 subrange 和全波数范围上的差谱分布, 发

现在最大吸收峰 $2\,169.2\text{ cm}^{-1}$ 附近, UFOV 与 EFOV 对应的差谱之间差异是较大的, 这会影响高分辨率光谱定量拟合的精度。倘定量拟合选用的微窗口区间向最大吸收峰中心压缩时, 使用 UFOV 作用下的 ILS 函数将能获得更大的拟合优势。

由此, 说明了使用非对等 FOV 的 ILS 模型比传统的对等 FOV 的 ILS 模型能在高分辨率 FTIRS 中能获得更高的定量精度。

实际的不对等性, 详细推导并给出了这种非对等 FOV 影响下的高分辨率 FTIRS 的综合仪器线型函数表达式。并以 0.02 cm^{-1} 高分辨率的 FTIRS 对 CO 标气实测, 比对了实测谱与不对等、对等 FOV 影响下的理论光谱, 实验结果表明, 较传统的对等 FOV 而言, 非对等 FOV 作用的仪器线型函数更符合高分辨率 FTIRS 的实际表现, 可为后续的高分辨率光谱定量算法提供更精确的输入参数。

3 结 论

针对傅里叶红外光谱仪中 FOV 在水平和垂直方向存在

References

- [1] Thomas von Clarmann, Georg Echle. Appl. Opt., 1998, 37: 7661.
- [2] Marc-Andre Soucy, Francois Chateaufneuf, Christophe Deutsch, et al. Proceedings of SPIE, 2002, 4814: 82.
- [3] Beer R, Glavich T A, Rider D M. Appl. Opt., 2001, 40: 2356.
- [4] Hase F, Hannigan J W, Coffey M T, et al. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 2004, 87: 25.
- [5] Pougatchev N S, Connor B J, Rinsland C P. J. Geophys. Res., 1995, 100: 16689.
- [6] Bernardo Cirilo, Griffith David W T. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 2005, 95(2): 141.
- [7] Frank Hase, Thomas Blumenstock, Clare Paton-Walsh. Applied Optics, 1999, 38(15): 3417.
- [8] Griffiths Peter R, Haseth James A de. Fourier Transform Infrared Spectrometry. New York: Wiley-interscience, 2007. 221.
- [9] <http://www.helioworks.com/ep3965.pdf>
- [10] Bell R J. Introductory Fourier Transform Spectroscopy. New York: Academic Press, 1972. 143.
- [11] XIANGLI Bin(相里斌). Acta Photonica Sinica(光子学报), 1997, 26(6): 551.
- [12] Rothman L S, Gordon I E, Barbe A, et al. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 2009, 110(9): 533.

Study of Instrumental Line Shape function of High-Resolution Fourier Transform Infrared Spectrometer with Unequal Field of View

REN Li-bing, WEI Hao-yun, ZHANG Ya, LI Yan

State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Department of Precision Instruments, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Abstract Field Of View (FOV) is an important contributor for instrumental line shape (ILS) function of high-resolution Fourier transform infrared spectrometer (FTS) only next to maximum optical difference. For the reason of optical design and layout, commonly, the measured FOV located in detector is not regularly rounded as original one. There exists more or less difference between the measured vertical FOV and measured horizontal one. In view of this case, the present paper replaces the generally circular area light source with an elliptical one, which is probably more suitable for actual FTS. At the same time, the factor maximum optical difference was considered. After these, the mathematic and graphic description about ILS function with unequal field of view (UFOV) was given. Finally, comparison between measured spectrum with standard monoxide gas and calculated one with equal field of view (EFOV) and UFOV respectively was taken. Experimental results show that the spectral residual from UFOV is less fluctuant than those from EFOV and its root mean square value is the smallest. All these indicate that the ILS function from UFOV is more accurate and suited to reflecting the response of high-resolution FTS than the one from EFOV.

Keywords Unequal field of view; Fourier transform infrared spectrometer; Instrumental line shape function; High-resolution

(Received Mar. 1, 2011; accepted Jun. 28, 2011)