

# 基于 MATLAB 的衍射场模拟计算

钱晓凡, 胡涛, 张晔

(昆明理工大学 理学院, 云南 昆明 650093)

**摘要:** 光的衍射现象研究, 不仅具有重要的理论意义, 而且在光学仪器研制和成像分析等均有重要价值. 针对衍射计算困难的问题, 选择合适的计算公式, 并基于科学计算软件 MATLAB 5.3 编写计算程序, 使计算变得简洁, 大大提高了实验的效率. 用 MATLAB 编程得出的计算结果与用数码相机记录的衍射图样进行比较, 两者吻合得很好.

**关键词:** 衍射计算; MATLAB; 菲涅尔衍射; 傅立叶变换; 卷积

**中图分类号:** O436.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1007-855X(2004)03-0132-03

## On Simulated Calculation of Diffraction Based on MATLAB

QIAN Xian-fan, HU Tao, ZHANG Ye

(Faculty of Science, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China)

**Abstract:** The calculation of diffraction was too complicated to be done until computer was invented. By choosing proper formula and software, not only can the result of calculation of diffraction be given, but also figures can be worked out easily. It greatly improves the efficiency of experiments. At the same time, since digital camera is more and more popularized, it provides a new method for recording diffraction pattern. It turns out to be that the results gotten by using software MATLAB 5.3 are identical with photographs taken by digital camera.

**Key words:** calculation of diffraction; MATLAB; Fresnel diffraction; Fourier transform; convolution

### 0 引言

光的衍射是一重要的光学现象. 对光的衍射现象的研究, 不仅具有重要的理论意义, 而且在光学仪器研制和成像分析等诸多实际应用方面均有重要价值. 对光的衍射的研究, 始于 17 世纪, 但至 19 世纪才建立了一些定量分析理论及一些数学公式, 由于这些数学公式的复杂性, 使得实际的计算工作变得很繁杂. 文章用 MATLAB 5.3 编写有关计算程序, 使计算变得简洁, 提高了实际应用的效率. 因为计算是建立在基尔霍夫对衍射的解析分析理论上的, 先简单介绍该理论.

如图 1, 设  $S$  为衍射孔,  $d_s$  为  $S$  面的一个面积元,  $P$  为前方一点, 引起的振动振幅与面积元  $d_s$  成正比. 根据惠更斯-菲涅尔原理,  $P$  点的振动等于  $S$  面的所有面积元所引起的振动的叠加, 所以  $P$  点的合振动等于整个  $S$  面的积分:

$$U(P) = \iint_S U_0(x, y_1) \frac{k(\theta)}{r} \cos(\theta - \frac{2\pi}{\lambda} r) ds \quad (1)$$

式中,  $U_0(x_1, y_1)$  是  $S$  面上的光场分布,  $k(\theta)$  为  $S$  面的一个函数, 称为倾斜因子,  $\omega$  为光波的圆频率,  $\lambda$  为波长.

在菲涅尔的理论中倾斜因子  $k(\theta)$  没有严格定义. 1880 年基尔霍夫从麦克斯韦理论出发, 经过严格的数学处理建立了一个公式——基尔霍夫公式:

收稿日期: 2003-09-09. 基金项目: 云南省教育厅基金资助项目(项目编号: 03Y225A).

第一作者简介: 钱晓凡(1963~), 男, 副教授. 主要研究方向: 拉曼光谱和光信息处理. E-mail: qianxiaofan1@hatmail.com

$$U(p) = \frac{A}{2j} \iint_{\Sigma} U_0(x, y_1) \frac{\exp[jkr]}{r} [\cos(n, r) - \cos(n, l)] ds \quad (2)$$

其中  $(n, r)$  和  $(n, l)$  分别是孔径面的法线与  $l$  和  $r$  的夹角. 在大多数衍射问题中, 倾斜因子  $\frac{[\cos(n, r) - \cos(n, l)]}{2}$  可看作常量.

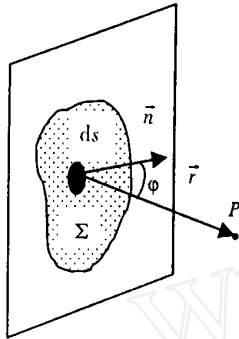


图1 波阵面示意图

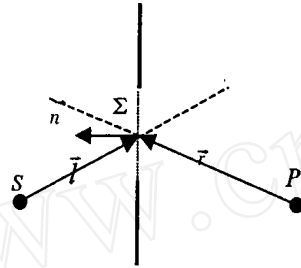


图2 孔径面的法线与  $l$  和  $r$  的夹角

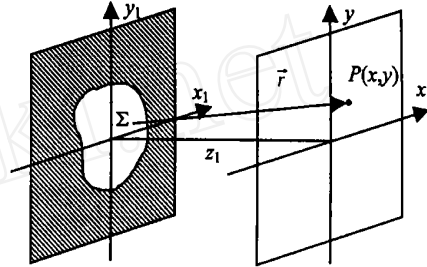


图3 孔径  $\Sigma$  的衍射

### 1 菲涅尔近似和夫朗和费近似

为了计算(2)式的积分, 需要用坐标变换表示  $r$  和  $ds$ . 如图3, 如果采用直角坐标系, 可以将  $r$  展开:

$$r = z_1 + \frac{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2}{2z_1} + \frac{[(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2]^2}{8z_1^3} + \dots \quad (3)$$

当  $z_1$  大到使  $z_1^3 \gg \frac{1}{4} [(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2]^2$  成立时, 为菲涅尔衍射, (2) 式变为:

$$U(p) = \frac{\exp[jkz_1]}{jz_1} \iint_{\Sigma} U_0(x, y_1) \exp\left\{-\frac{jk}{2z_1} [(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2]\right\} dx_1 dy_1 \quad (4)$$

或:

$$U(p) = \frac{\exp[jkz_1]}{jz_1} \exp\left[-\frac{jk}{2z_1} (x^2 + y^2)\right] \iint_{\Sigma} U_0(x, y_1) \exp\left[-\frac{jk}{2z_1} (x_1^2 + y_1^2)\right] \exp\left[-j2 \left(x_1 \frac{x}{z_1} + y_1 \frac{y}{z_1}\right)\right] dx_1 dy_1 \quad (5)$$

当继续增大  $z_1$ , 使:  $\gg k \frac{(x_1^2 + y_1^2)}{2z_1}$  成立时, 为夫朗和费衍射, (4) 式变为:

$$U(p) = \frac{\exp[jkz_1]}{jz_1} \exp\left[-\frac{jk}{2z_1} (x^2 + y^2)\right] \iint_{\Sigma} U_0(x, y_1) \exp\left[-j2 \left(x_1 \frac{x}{z_1} + y_1 \frac{y}{z_1}\right)\right] dx_1 dy_1 \quad (6)$$

### 2 衍射计算公式

#### 2.1 傅立叶变换与卷积

##### 2.1.1 傅立叶变换

非周期函数  $f(x, y)$  在整个无限  $x, y$  平面上满足狄里赫利条件, 且  $\iint f(x, y) / dx dy$  存在, 则二元函数  $f(x, y)$  的傅立叶变换定义为

$$F(, ) = \iint f(x, y) \exp\{-j2 (x + y)\} dx dy \quad (7)$$

##### 2.1.2 卷积

函数  $h(x, y)$  和函数  $f(x, y)$  为二维函数, 它们的卷积定义为:

$$g(x, y) = \iint (f(x', y') \cdot h(x - x', y - y')) dx' dy' = f(x, y) * h(x, y) \quad (8)$$

## 2.2 衍射计算公式

将(4), (5)和(6)式与(7)和(8)式比较, 显见菲涅尔衍射可以用函数  $\frac{\exp[ikz_1]}{jz_1} U_0(x_1, y_1)$  与函数  $\exp[-\frac{jk}{2z_1}(x^2 + y^2)]$  的卷积来计算:

$$U(p) = \frac{\exp[ikz_1]}{jz_1} U_0(x_1, y_1) * \exp[-\frac{jk}{2z_1}(x^2 + y^2)] \quad (9)$$

菲涅尔衍射也可以用函数  $U_0(x_1, y_1) \exp[-\frac{jk}{2z_1}(x_1^2 + y_1^2)]$  的傅立叶变换, 再乘以函数  $\frac{\exp[ikz_1]}{jz_1} \exp[-\frac{jk}{2z_1}(x^2 + y^2)]$  来计算.

而夫朗和费衍射则可以直接用函数  $U_0(x_1, y_1)$  的傅立叶变换, 再乘以函数  $\frac{\exp[ikz_1]}{jz_1} \exp[-\frac{jk}{2z_1}(x^2 + y^2)]$  来计算. 实际计算时, 我们使用的就是上述三种计算方法.

## 3 用 MATLAB 进行计算机模拟计算的实验结果

我们使用的软件是 MATLAB 5.3, 它是一个功能十分强大的应用软件, 可以在很多学科中得到应用. 与其它计算机语言相比它更加灵活, 更加接近科技人员的思维方式, 因而编程效率更高. 我们用 MATLAB 5.3 编写程序分别计算了矩形孔、圆孔和三角形孔的菲涅尔和夫朗和费衍射, 并与用数码相机记录的结果进行了比较, 两者非常吻合. 要特别指出的是, 由于 MATLAB 5.3 已经内定了计算二维傅立叶变换的函数“fft2”和计算二维卷积的函数“conv”, 所以整个计算程序不到 20 行, 非常容易编写和修改, 而且每次运算时间不到 10 s.

我们的实验器材有: He-Ne 激光器, 光具座, 凸透镜(焦距为 77.1 mm), 衍射屏, 观察屏和数码相机. 图 4 和图 5 分别是观察和记录菲涅尔衍射和夫朗和费衍射的光路图.

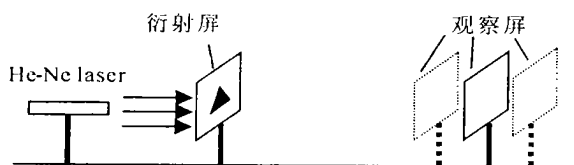


图 4 观察和记录菲涅尔衍射的光路图

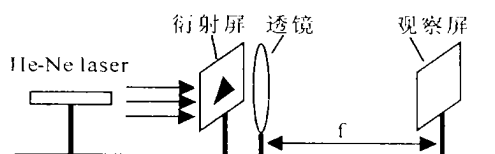


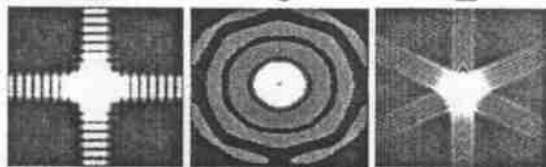
图 5 观察和记录夫朗和费衍射的光路图

我们计算了各种形状和尺寸的衍射孔在不同衍射距离上的菲涅尔衍射, 下面给出一组典型结果:

衍射孔形状



计算结果



数码相机记录结果

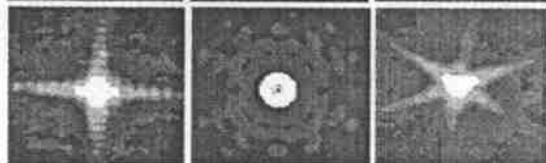


图 6 三种形状衍射孔的菲涅尔衍射计算结果与实验的比较

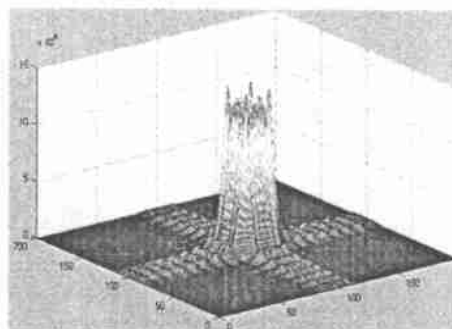


图 7 用网格图形式输出的矩形孔衍射图

(下转第 151 页)

大,手性的不同对膦铑络合物的少部分键长、键角数据有所影响;(3)在与(MAC)形成络合物前后,双膦配体上主要原子的电荷分布变化并不显著,但金属铑原子上的电荷则显著增加,可能是MAC在与膦铑配体络合过程中有电荷向铑原子上进行了转移。

#### 参考文献:

- [1] 林国强,陈耀全,陈新滋,李月明.手性合成-不对称反应及其应用[M].北京:科学出版社,2000.250~253.
- [2] Steven Feldgus,Clark R. Landis. Large - Scale Computational Modeling of  $[\text{Rh}(\text{DuPHOS})]^+$  - Catalyzed Hydrogenation of Prochiral Enamides: Reaction Pathways and the Origin of Enantioselection[J]. J. Am. Chem. Soc.,2000,122(51):12714~12727.
- [3] Achim Kless, Armin Borner, Detlef Heller, Rudiger Selke. Ab Initio Studies of Rhodium(I) - N - Alkenylamide Relevance for the Mechanism of Catalytic Asymmetric Hydrogenation of Prochiral Dehydroamino Acids[J]. Organometallics.,1997,16(10):2096~2100.
- [4] Portmann S, Luthi H P. Molekel:An Interactive Molecular Graphics Tool[J]. CHIMIA,2000,(54):766~770.

(上接第134页)

以上图形是在衍射孔尺寸为1.5 mm,衍射距离为50 mm时的菲涅尔衍射结果,可以看出,计算的结果与数码相机记录结果很吻合,说明基于MATLAB模拟计算衍射场是可行的,这些结果我们已经用于教育厅基金项目研究中。

MATLAB允许用不同格式输出图形,图7是用网格图的形式输出的矩形孔衍射图案,可以方便地观察衍射图案的细节。

另外,夫朗和费衍射的计算结果吻合得也很好,这里不再给出。

衍射是一个古老的问题,但直到19世纪科学家才把他弄清楚,而衍射的计算又很复杂,这使得很多问题很难解决,如今有了计算机和高级科学计算软件,使我们可以很方便地计算许多问题,这也使得光的传播问题可以用模拟的方式来解决。

#### 参考文献:

- [1] 赵达尊,张怀玉.波动光学[M].北京:北京理工大学出版社,1999.102~113.
- [2] 苏显渝,李继陶.信息光学[M].北京:科学出版社,2000.34~45.
- [3] Grant R. Fowles. Introduction to Modern Optics[M]. New York:Dover Publications, Inc.,1989.106~111.
- [4] 王炳武,等. MATLAB5.3实用教程[M].北京:中国水利水电出版,2000.227~230.