

# 钻石多面体几何结构特征的频谱分析及应用研究

黎新<sup>1</sup> 黄国亮<sup>1,2</sup> 李强<sup>1</sup> 陈圣伊<sup>1</sup>

(<sup>1</sup>清华大学医学院生物医学工程系, 北京 100084  
<sup>2</sup>国家工程中心北京生物芯片研究中心, 北京 102206)

**摘要** 采用傅里叶光学分析方法,在空间频域对钻石各表面反射光进行分析,从理论上推导了空间频谱图与钻石表面结构空间特征的对应关系式。并搭建钻石反射光空间频谱检测分析系统实验平台,检测了真实钻石样品,并获取代表钻石身份信息的多面体几何结构特征频谱图,分析了空间频谱图与钻石表面结构特征差异的一一对应关系和空间平移旋转不变性。

**关键词** 傅里叶光学; 钻石鉴定; 共轴对称光路; 空间频谱分析

**中图分类号** O438.2      **文献标识码** A      **doi**: 10.3788/LOP48.060701

## Frequency Analysis of Geometric Structure Feature of Diamond Polyhedron and Application

Li Xin<sup>1</sup> Huang Guoliang<sup>1,2</sup> Li Qiang<sup>1</sup> Chen Shengyi<sup>1</sup>

(<sup>1</sup>Department of Biomedical Engineering, School of Medicine, Tsinghua University, Beijing, 100084, China  
<sup>2</sup>National Engineering Research Center for Beijing Biochip Technology, Beijing, 102206, China)

**Abstract** The corresponding relation between spatial spectrum and the diamond geometric structure feature is derived by using the optical Fourier transform. An experimental platform for diamond reflected light spatial spectrum detecting analysis system is set up, and the spatial spectrum of a real diamond sample is detected by using this platform. The spatial spectrum of the diamond geometric feature is analyzed, and the characteristics of rotation invariance and translation invariance are discussed.

**Key words** optics Fourier transform; diamond identification; coaxial symmetric optical path; spatial frequency spectrum analysis

**OCIS codes** 070.4790; 000.3110; 080.4225; 110.2960

## 1 引言

目前,国内外对钻石鉴定技术的研究分为3个层次。第1个层次包括钻石的硬度检验、导热性试验<sup>[1]</sup>、观察反射光、看生长点、同类化学成分测验等。第2个层次包括测量折射率<sup>[2]</sup>、双折射特性、特征光谱<sup>[3~5]</sup>等。第3个层次包括利用拉曼光谱技术<sup>[6,7]</sup>、阴极发光技术<sup>[8]</sup>、X射线衍射技术<sup>[9]</sup>、中子活化分析技术<sup>[10]</sup>等对钻石进行物质成分的鉴定。上面介绍的钻石鉴定技术重点在分析钻石的物质特性,而对钻石表面几何外型结构特征的研究非常少。见诸于文献报道目前只有以色列魏茨曼科学研究院(Weizmann Institute of Sciences)进行过钻石几何结构特征的分析研究,申请了相关专利<sup>[11]</sup>,并利用该技术开发了一个宝石登记系统投入到实际应用中。由于该系统是从侧面进行空间频谱图像采集,边缘畸变很大,严重影响了特征识别的准确性。

**收稿日期**: 2010-08-18; **收到修改稿日期**: 2010-11-21; **网络出版日期**: 2011-05-25

**基金项目**: 国家863计划(2006AA020803)、国家973计划(2011CB707700)和国家自然科学基金(60978064)资助课题。

**作者简介**: 黎新(1988—),男,硕士研究生,主要从事生物芯片的光学检测方面的研究。E-mail: xinli@capitalbio.com

**导师简介**: 黄国亮(1966—),男,副教授,主要从事生物医学光学检测方面的研究。E-mail: tshgl@mail.tsinghua.edu.cn

## 2 钻石表面几何特征频谱的理论分析与物理建模

### 2.1 钻石表面几何特征的频谱分布表达式

如图1所示,平行光垂直入射后被钻石不同的表面反射形成具有离散空间频率的光波,这些光波在空间域平面上叠加形成特定的复振幅分布。透镜对空间域平面进行傅里叶变换,并在频率域平面将其空间频谱显示出来。

在图1中,空间域平面坐标系为 $(x, y, z)$ ,透镜后焦点坐标系为 $(x', y', z')$ 。现在考虑钻石面平行反射光束在距离透镜 $d_0$ 的空间域平面上的复振幅分布 $\tilde{E}_1(x, y)$ ,  $\tilde{E}_2(x, y), \dots, \tilde{E}_n(x, y)$ 。设钻石面1、钻石面2、 $\dots$ 、钻石面 $n$ 平行反射光束的空间频率分别为 $(f_{x1}, f_{y1}, f_{z1}), (f_{x2}, f_{y2}, f_{z2}), \dots, (f_{n1}, f_{n1}, f_{n1})$ ,并设此平面距坐标原点距离为 $z_0$ ,得到钻石面平行反射光束在空间域平面上的总复振幅分布 $\tilde{E}(x, y)$ 为<sup>[12]</sup>

$$\tilde{E}(x, y) = \sum_{i=1}^n A_i \exp[j2\pi(f_{x_i}x + f_{y_i}y + f_{z_i}z_0)]. \quad (1)$$

计算其空间频谱分布 $\tilde{E}'(x', y')$ 为

$$\tilde{E}'(x', y') = \sum_{i=1}^n \tilde{E}'_i(x', y') = \sum_{i=1}^n A_i \exp(j\theta_i) \delta\left(\frac{x'}{\lambda f} - f_{x_i}\right) \delta\left(\frac{y'}{\lambda f} - f_{y_i}\right), \quad (2)$$

由于实际的接受屏只能接收光的强度信息,因此求接收屏上的光强分布:

$$|\tilde{E}'(x', y')|^2 = \sum_{i=1}^{i=n} |\tilde{E}'_i(x', y')|^2 = \sum_{i=1}^{i=n} A_i^2 \left[ \delta\left(\frac{x'}{\lambda f} - f_{x_i}\right) \delta\left(\frac{y'}{\lambda f} - f_{y_i}\right) \right]^2. \quad (3)$$

### 2.2 钻石多面体角与频谱分布的理论关系——平移不变性

由(3)式可见,钻石多面体的频谱分布是由一系列离散谱叠加组成的,在视觉上是一组离散的亮斑,离散谱点的数量与多面体外表面的数量相等。下面主要分析谱点分布与多面体空间几何特征的关系。定义多面体反射光波矢量用外表面的法向角度余弦 $(\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma)$ 来表示,各切割面反射光的空间频率为 $(f_x, f_y, f_z) = \left(\frac{\cos \alpha}{\lambda}, \frac{\cos \beta}{\lambda}, \frac{\cos \gamma}{\lambda}\right)$ ,代入(3)式可求得多面体外表面法向的角度余弦 $(\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma)$ 与频谱点坐标 $(x', y')$ 关系为

$$x' = f \cos \alpha; \quad y' = f \cos \beta, \quad (4)$$

式中 $f$ 为透镜焦距。可见,频谱点坐标与多面体外表面法向是一一对应的,而与多面体各面的中心坐标无关。换句话说,对钻石进行平移不会改变频谱分布。下文称此性质为钻石频谱的平移不变性。

### 2.3 钻石绕中心轴旋转对频谱分布的影响不大——旋转不变性

显然,钻石台面反射光的频谱位置保持不变,为 $(0, 0)$ 。对于其他表面,其方向会发生变化。如图2所示, $O$ 为钻石质心, $A$ 为旋转前的表面中心, $\mathbf{AB}$ 为所选择表面的方向矢量。 $A'$ 为旋转后的表面中心, $\mathbf{A'B'}$ 为旋转后的表面方向矢量。分析旋转前后频谱之间的关系,设 $A$ 的坐标为 $(x_a, y_a, z_a)$ ;  $B$ 的坐标为 $(x_b, y_b, z_b)$ ; 旋转后 $A'$ 坐标为 $(x'_a, y'_a, z_a)$ ,  $B'$ 坐标为 $(x'_b, y'_b, z_b)$ , 计算得 $\mathbf{AB}$ 的方向余弦 $r_{AB}$ 为

$$r_{AB} = \left( \frac{x_b - x_a}{|\mathbf{AB}|}, \frac{y_b - y_a}{|\mathbf{AB}|}, \frac{z_b - z_a}{|\mathbf{AB}|} \right) = (\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma). \quad (5)$$

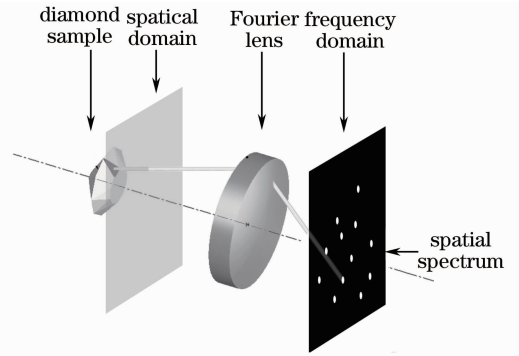


图1 钻石表面几何特征频谱分析示意图  
Fig.1 Spectrum analysis model of diamond surface feature

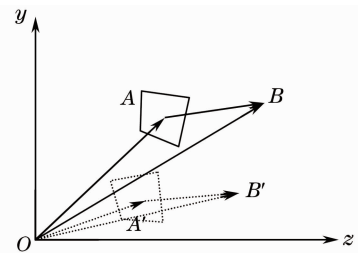


图2 钻石面旋转空间示意图  
Fig.2 Rotation schematic of diamond surfaces

$A'B'$  的方向余弦为

$$\mathbf{r}_{A'B'} = \left( \frac{x_{b'} - x_{a'}}{|A'B'|}, \frac{y_{b'} - y_{a'}}{|A'B'|}, \frac{z_{b'} - z_{a'}}{|A'B'|} \right) = (\cos \alpha', \cos \beta', \cos \gamma'). \quad (6)$$

由于旋转过程中

$$|AB| = |A'B'|, \quad (7)$$

因此有

$$\cos \gamma = \cos \gamma', \quad (8)$$

所以

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta = \cos^2 \alpha' + \cos^2 \beta', \quad (9)$$

因此对应的频谱点坐标有如下关系:

$$x_0'^2 + y_0'^2 = x_1'^2 + y_1'^2, \quad (10)$$

$(x_0', y_0')$  和  $(x_1', y_1')$  分别为旋转前后频谱点的坐标。由(10)式可知,当钻石旋转时,频谱点到坐标原点的距离保持不变,因此钻石频谱具有旋转不变性。

### 3 钻石表面几何特征频谱检测平台的搭建

#### 3.1 频谱检测识别原理

由理论分析可知,钻石频谱具有空间平移不变性,只要保证光束垂直入射到钻石台面,则钻石的移动不会对频谱点到坐标原点的距离产生影响。根据钻石频谱空间的平移不变性和旋转不变性,在搭建系统时,令台面反射光聚焦在光源处即可确保光束垂直入射到钻石台面;通过比较频谱点到坐标原点的距离即可区分识别不同的钻石。

#### 3.2 光学系统的设计与构建

为了实现钻石表面几何特征的频谱检测及相应的应用研究,构建了一个钻石表面几何特征频谱检测系统实验平台。检测系统光路系统的结构如图3所示,通过透镜将单色点光源发出的光会聚成平行光,平行光垂直入射到钻石台面上,从钻石反射出来的离散平行光束一部分透过分束镜,并将台面反射光会聚回光源孔阑;一部分反射进入傅里叶透镜并将频谱成像于后焦面。

透镜焦距将会影响到分束镜与光阑、分束镜与接收屏间的距离。理想情况下应使仪器总体积尽量小。但是由于钻石的空间频谱截止频率较高,若选择短焦透镜,将会减小分束镜与光阑、分束镜与接收屏间的距离。一些起到连接、固定作用的机械部件与光阑等光学元件都会阻挡钻石出射光,造成空间频谱图的缺失。若选择长焦透镜,将会增大分束镜与光阑、分束镜与接收屏的距离,这时由于钻石频谱截止频率较高,将需要一个很大的接收屏才能接收到完整频谱,导致仪器总体积过大,因此透镜焦距存在上限。本文在实验中分别使用了 33, 50, 100, 150 mm 焦距的透镜搭建不同光路结构的系统,并进行实验。实验结果表明焦距为 50 mm 的透镜效果最佳。

凸透镜的种类也会影响成像效果。实验中分别使用双凸透镜、凹凸透镜进行实验,实验结果表明,在透镜直径都是 25 mm 的条件下,高空间频率的发散光束在双凸透镜作用下没有很好地会聚成点,而是形成块状亮斑;而高空间频率的发散光束在凹凸透镜作用下可以很好地会聚成点,效果最佳,这与凹凸透镜具有良好的发散光聚光能力是一致的。

检测系统选择 LED 作为光源。LED 是部分相干光源,其部分相干性会减少屏上的相干噪声,改善成像

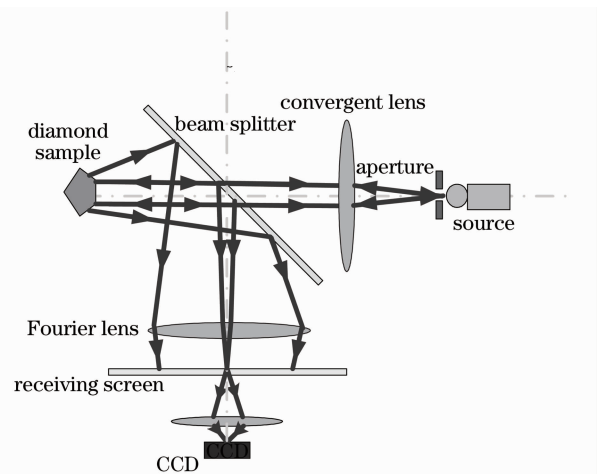


图3 钻石表面几何特征频谱检测分析系统结构图

Fig. 3 Spectrum analysis system of diamond surface feature

效果,同时 LED 散热性能较好,寿命较长,无噪声。

### 3.3 软件系统的设计与开发

检测系统用 VC2003 (Visual Studio 2003)开发软件平台,连接 OpenCV 库进行图像处理,通过半径比较法分析钻石几何表面频谱特征。钻石表面几何特征频谱分析主要过程如下:

- 1)检测并记录空间频谱图中每个点的像素坐标。
- 2)比较两幅频谱图中离散谱点的数量(即比较空间频谱一维信息中圆的数量信息),若数量不同,则比较结束,两幅图对应的钻石样品不一样;若数量相同,再求取所有点到零级频谱点的距离,按照降序排列。
- 3)依次比较降序排列对应序号上的数值求取均方误差和最大误差(概念详见 4.2)。
- 4)主程序流程图与寻找空间频谱点对应像素递归函数如图 4 所示。

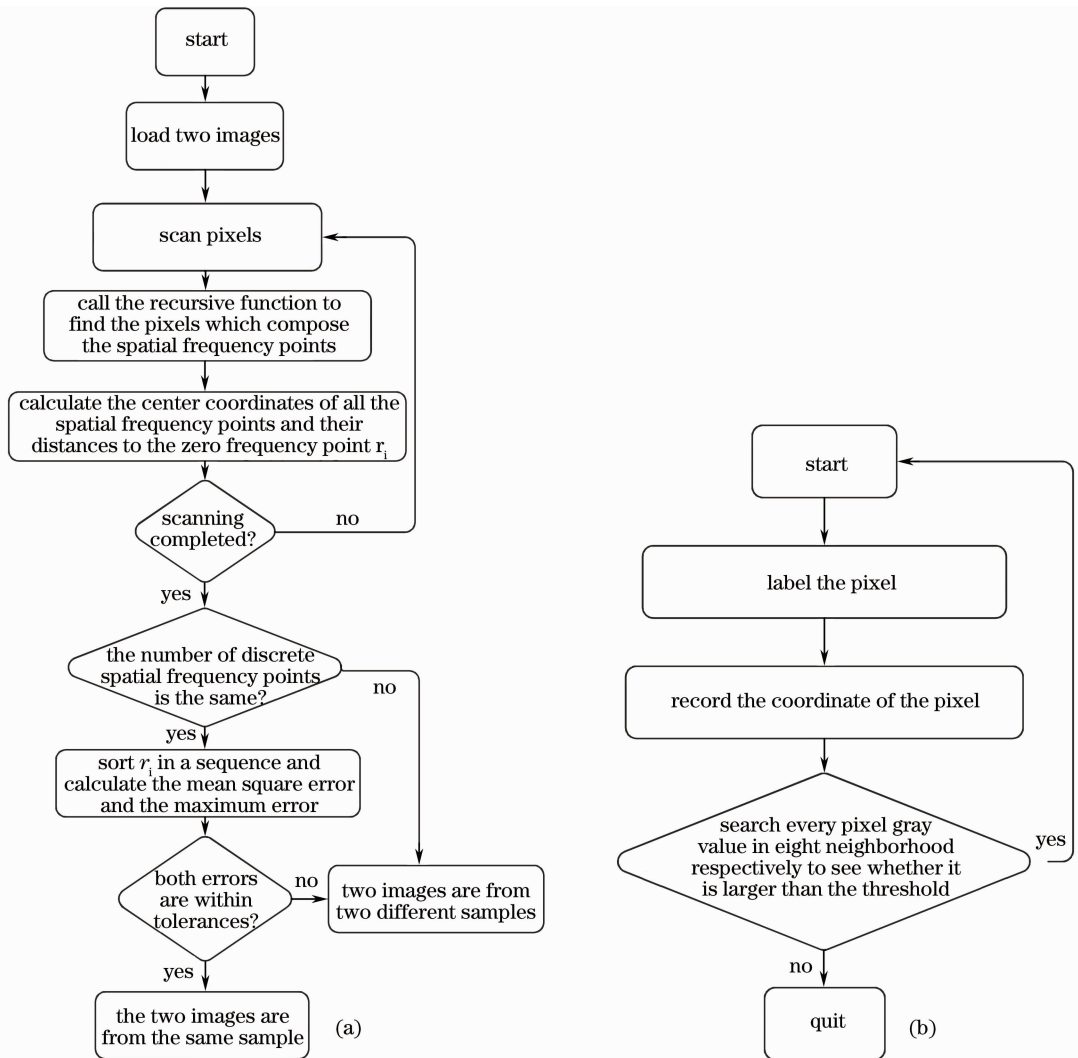


图 4 空间频谱分析流程图。(a)主程序流程图,(b)递归函数空间频谱分析流程图

Fig. 4 Program flowchart of spatial frequency analysis. (a) main program flowchart,

(b) recursive function for spatial frequency analysis

## 4 实验结果与讨论

### 4.1 实验步骤

1)打开 LED 光源,调整各元件的位置,使各光学元件共轴。

2)用钻石夹夹住钻石样品并安装在钻石夹固定座上,旋转 3D 调节台旋钮,确保平行光束完全照射到钻石样品上,并确保零级频谱反射光束沿原光路返回到光源处。这样做的目的在于保证平行光束垂直钻石台

面入射。平行光垂直入射,是钻石空间频谱空间不变性的前提条件。

3)打开 CCD 电源,运行 CCD 图像采集软件,调整 CCD 位置与焦距,确保采集到完整、清晰的空间频谱图像,并通过软件截图,在 Matlab 环境下对图片进行去背景处理,得到频谱图如图 5 所示。

4)在钻石台面内将钻石平移至另一位置,重复步骤 1~3。

5)围绕中心轴将钻石旋转一个角度,重复步骤 1~3。

6)用不同钻石样品进行实验,重复步骤 1~3

7)撤掉钻石,其余不变,拍摄背景图,用于图像相减去背景处理。

8)运行程序分析钻石平移、旋转前后的频谱图,并比较不同钻石频谱图的差异,获得钻石频谱特征识别的结果。

## 4.2 实验结果

实验结果如表 1 所示,表中均方误差(MSE)指将各图与原始频谱图中所有点到零级频谱的距离进行降序排列,对两幅频谱图降序排列相同序号上频谱点的信号强度值求均方差。最大误差(ME)指对相同序号上的两个频谱点信号强度值求差,取最大值。

表 1 空间频谱图分析结果

Table 1 Spatial frequency spectrum analysis result

Type of spatial frequency spectrum	Amount of spectral point	MSE /mm	ME /mm
Original	37	--	--
Diamond translation of 3 mm	37	0.032	0.068
Opposite direction translation of 3 mm	37	0.035	0.071
Diamond rotation of 90°	37	0.494	1.070
Diamond rotation of 180°	37	0.619	1.217
Different samples	37	1.886	5.018

## 4.3 分析讨论

从表 1 中第 2,3 行数据可见,平移后的频谱图上的点与平移前相比位置误差均非常小,这说明平移后的钻石频谱图与平移前近似相同,证明了钻石空间频谱具有平移不变性。从表 1 中第 4,5 行数据可见,旋转后频谱图上的点误差比平移频谱图误差大,但是从第 6 行数据中发现,用不同钻石进行实验所得最大误差为 5.018 mm,旋转频谱图的最大误差大约为其 1/4~1/5,因此可认为旋转误差不足以影响钻石空间频谱的识别,能说明旋转后的钻石图谱与旋转前的图谱信息近似相同,因此证明了钻石空间频谱具有旋转不变性。从表 1 中第 6 行数据可见,均方误差与最大误差很大,说明此两颗不同钻石的空间频谱离散频率点的位置具有较大差别,可以作为钻石身份鉴定的依据。未来可进一步对更多钻石样品进行分析。

## 4.4 误差分析

钻石空间频谱检测系统的误差来源主要有以下几个方面:

1)系统误差按影响大小顺序依次是:

a) 实验中,为了保证平行光垂直入射到钻石台面,需让钻石台面平行反射光聚焦到光源前的光阑小孔上。由于光阑小孔与焦点都存在大小,因此两者很难达到完全重合,导致了平行光倾斜入射到钻石台面,当钻石旋转时,前后空间频谱会产生误差;

b) 透镜、接收屏、CCD 之间不完全同轴,也是钻石旋转前后的空间频谱误差产生的原因;

c) 系统的平行光不是理想平行光,将导致平移、旋转前后的空间频谱产生误差。

2)随机误差主要是: CCD 噪声会使采集的空间图谱中的亮点以及背景灰度值产生微小变化,导致亮点中心位置产生变化,产生了误差。



图 5 钻石表面结构的空空间频谱图

Fig. 5 Spatial spectrum of diamond surface feature

## 5 结 论

从理论模拟和实验研究两个方面开展钻石表面几何特征频谱检测分析研究。对钻石表面几何特征频谱进行了理论分析和模拟仿真计算,构建了钻石表面几何特征频谱检测实验平台,并在该平台上用实际钻石样品进行实验研究,验证了钻石表面几何特征的空间频谱具有平移不变性、旋转不变性,并进行了钻石空间频谱身份鉴定的特异性研究,验证了钻石空间频谱特征识别的可行性。与文献[11]中介绍的技术相比,本研究采用的共轴对称光路检测系统结构克服了文献[11]中空间频谱图像采集发生扭曲且边缘畸变显著的缺点,保证 CCD 探测器接收到完整准确的空间频谱图,有利于后续图像处理与特征识别分析。

## 参 考 文 献

- 1 Shen Caiqing. Conductivity meter applications in bullion identification[J]. *Overseas Uranium and Gold Geology*, 2000, **17**(1): 85~89  
沈才卿. 热导仪在珠宝首饰鉴定中的应用[J]. 国外铀金地质, 2000, **17**(1): 85~89
- 2 Yuan Xinqiang. A gemstone refractometer[P]. China Patent: CN2101234,1992  
袁心强. 一种宝石折射仪[P]. 中国专利: CN2101234,1992
- 3 Collins A. T., Woods G. S.. An anomaly in the infrared—absorption spectrum of synthetic diamond[J]. *Philosophical Magazine B*, 1982, **44**(1): 77~83
- 4 Robertson R., Fox J. J.. Infra-red spectrum of diamond by infra-red spectrometer and Raman methods[J]. *Nature*, 1930, **125**(3158): 704~704
- 5 Hanke W., Sham L. J.. Dielectric response in the wannier representation; application to the optical spectrum of diamond [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1974, **33**(10): 582~585
- 6 Solin S. A., Ramdas A. K.. Raman spectrum of diamond[J]. *Phys. Rev. B*, 1970, **1**(4): 1687~1698
- 7 Prawer S., Nugent K. W., Jamieson D. N. *et al.*. The Raman spectrum of nanocrystalline diamond[J]. *Chem. Phys. Lett.*, 2000, **332**(1-2): 93~97
- 8 Chin K., Nishimura K., Ko E. *et al.*. Consistent Quality Diamond Prepn. -by Optimising Raw Material Gas Compsn., Gas Flow Rate, Operating Temp. etc., with Resultant Diamond Evaluated by Cathode Luminescence [P]. US Patent: US5882740-A,1999
- 9 Tian Lianguang, Huang Wenhui, Chen Youfa *et al.*. Gemmological applications of X-ray diffraction topography techniques [J]. *Journal of Gems & Gemmology*, 1999, **1**(2): 41~44  
田亮光, 黄文慧, 程佑法等. X射线衍射貌相技术在宝石学中的应用[J]. 宝石和宝石学杂志, 1999, **1**(2): 41~44
- 10 Kaneko J., Yonezawa C., Kasugai Y. *et al.*. Determination of metallic impurities in high-purity type IIa diamond grown by high-pressure and high-temperature synthesis using neutron activation analysis[J]. *Diam. Relat. Mater.*, 2000, **9**(12): 2019~2023
- 11 Vanier Dana J., Wallner Hermann F., Leydon Michael. Gemstone Registration System[P]. US Patent: US5828405,1998
- 12 Yu Daoyin, Tan Hengying. Engineering Optics[M]. Beijing: China Machine Press, 2006. 380~385  
郁道银, 谈恒英. 工程光学[M]. 北京: 机械工业出版社, 2006. 380~385