

# 用自消卷积法分辨钕玻璃中 Nd<sup>3+</sup> 的 <sup>4</sup>I<sub>9/2</sub> → <sup>4</sup>F<sub>5/2</sub>、<sup>2</sup>H<sub>9/2</sub> 吸收谱带

王振明 李正直

(苏州大学物理系)

在激光钕玻璃中, 由于 Nd<sup>3+</sup> 与配位体的相互作用, 使谱线轮廓加宽, 产生谱线重叠, 使得在一些跃迁带内各组成谱难以分辨, 以致很难确定其能级的分裂情况。

本文采用自消卷积方法, 将由 Perkin-Elmer 紫外、可见分光光度计上在室温下测得的一种激光玻璃中 Nd<sup>3+</sup> 的 <sup>4</sup>I<sub>9/2</sub> → <sup>4</sup>F<sub>5/2</sub>、<sup>2</sup>H<sub>9/2</sub> 谱带进行了数值处理, 消除了谱线本征线型, 从而改善了光谱分辨率。

我们首先进行了模拟光谱的自消卷积。该模拟光谱由两半宽度  $2\sigma = 2\text{cm}^{-1}$ , 中心相距为  $1\text{cm}^{-1}$  的洛仑兹线型组成。在结果中我们能清楚地分辨原来重叠在一起的两谱线。

在激光钕玻璃中, Nd<sup>3+</sup> <sup>4</sup>I<sub>9/2</sub> → <sup>4</sup>F<sub>5/2</sub>、<sup>2</sup>H<sub>9/2</sub> 吸收带位于 8000 Å 附近。在我们利用 Perkin-Elmer 分光光度计测量该光谱时, 尽管仪器分辨率较高, 但整个吸收带中各谱线几乎完全重叠。与模拟情形不同, 在钕玻璃中, 该跃迁带内各谱线半宽度较大。另外, 尽管我们进行了三次样条插值, 但光谱中总有一定的随机噪声存在。当它被逆傅氏变换后, 信号强度随  $\omega$  下降很快。而噪声振幅几乎不变。为避免结果中产生严重的周期性噪声。根据我们对分辨率的要求, 通常将截断长度选为  $N' = N/2$ 、 $N/4$  等(其中  $N$ 、 $N'$  分别为逆、正傅氏变换时离散点数)。

在该实测光谱的自消卷积过程中, 当我们将各参数分别取逆傅氏变换时, 步长  $\Delta\nu = 10\text{cm}^{-1}$ ,  $N = 1024$ 、 $G(\nu)$  为高斯线型, 其半宽度  $2\sigma = 240\text{cm}^{-1}$ 、 $N' = \frac{N}{2}$ 。D 为海宁函数时, 得到了较好的结果。使我们能分辨处在 12043、12119、12204、12300、12389、12503、12594、12679、12762 $\text{cm}^{-1}$  等波数位置的几条谱线。

本文还就上述吸收带的能级分裂进行了讨论。我们看到, 自消卷积能有效地提高光谱分辨率。在可见、红外、核磁共振等谱分析工作中, 它都能得到广泛的应用。