

# 用新的切趾函数提高傅里叶 变换红外光谱仪的分辨本领

董隽逸 李正直\*

(苏州大学物理系)

**摘要**——本文用新的切趾函数<sup>[1]</sup>研究了傅里叶变换红外(FT-IR)光谱仪中切趾对分辨本领的影响。结果表明,切趾不一定导致分辨本领下降,选择合适的切趾函数,甚至可使切趾后的分辨本领高于未经切趾时的分辨本领,而又不明显升高其邻近次峰。对真空区熔硅单晶干涉图的处理表明,新的切趾函数在实用上优于 FT-IR 光谱仪中使用的切趾函数。

## 一、引 言

在傅里叶光谱方法中,切趾对光谱复原有很大的影响。未经切趾的仪器函数是  $\text{sinc}(x)$  函数。由于它具有约为主峰 22% 的次峰(也称旁瓣),容易干扰邻近的谱线,因此必须进行切趾处理。然而,以往多数文献都认为切趾势必导致分辨本领下降<sup>[2~4]</sup>。例如,两条相互靠近的等强度谱线,其半宽度由  $\text{sinc}(x)$  函数决定时,具有  $0.7/L$  的分辨率,而使用三角形切趾后,其分辨率则下降为  $0.9/L$ ,这里  $L$  是最大光程差<sup>[5]</sup>。Sirohi<sup>[6]</sup> 曾对两条靠得很近的不等强度的谱线进行了研究,指出没有切趾的系统比采用切趾的系统具有更高的分辨率。本文用我们得到的一类新的切趾函数<sup>[1]</sup>讨论切趾对分辨本领的影响,得出与上述文献不同的结论。

## 二、模拟光谱的计算

我们利用勒让德多项式获得了一类新的切趾函数<sup>[1]</sup>:

$$\left. \begin{aligned}
 a(n) &= \frac{x_0^{2n}}{2^{2(N/2+n)}} \sum_{i=0}^{N/2-n} (-1)^{N/2-n-i} \left(\frac{x_0}{2}\right)^{2i} \frac{[2(N/2+n+i)]!}{i!(N/2-n-i)!(N/2+n+i)!(2n+i)!} \\
 a(N/2) &= 2 \frac{x_0^N (2N)!}{2^{2N} (N!)^2},
 \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$n=0, 1, 2, \dots, N/2-1,$

本文 1985 年 4 月 6 日收到。

\* 现在杭州大学物理系工作。

其中  $x_0$  是供选择的常数因子。取  $N=16$  时, 一些典型的切趾函数和与之对应的仪器函数的形状如图 1 所示。

我们的计算结果表明, 与式(1)所对应的仪器函数在保持与  $\text{sinc}(x)$  函数的半宽度相同时, 次极大峰值为  $\text{sinc}(x)$  函数的 70% 左右; 而保持与次极大峰值相同时, 前者的半宽度比后者减小 7.2% 左右。显然, 这类新的切趾函数的性能比以往的切趾函数有了较大的改善。应用这类切趾函数, 对于分辨两条相互靠近且等强度的谱线, 其分辨能力显然不一定会比未经切趾的差, 这一点可以从图 1(b) 直接看出。

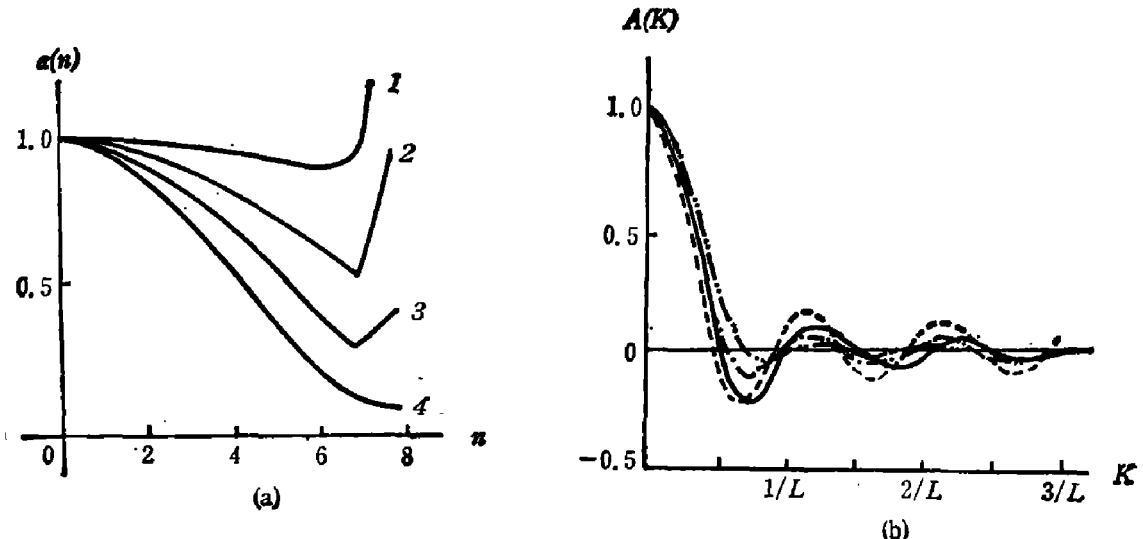


图 1  
 (a) 切趾函数 (b) 仪器函数  
 Fig. 1  
 (a) Apodization functions (b) Instrumental functions

要分辨两条靠得很近而强度不等的谱线, 情况就比较复杂。不进行切趾处理, 弱线势必被强线的次级峰淹没或发生畸变; 若进行切趾处理, 则由于仪器函数的半宽度的增大而有可能使两条谱线重合而不易辨别。我们用式(1)的切趾函数对两条相互靠近的不等强度谱线进行了模拟计算, 仍采用文献[1]的计算方法, 取  $N'=256, N=18$ 。

**1. 高斯线型谱线**

单色光的干涉图是余弦波, 而高斯线型的傅里叶变换仍是高斯线型, 所以, 这里采用的模拟干涉图是由两个强度比为 3:2 的高斯线型分别和两个频率不同的余弦波的乘积的迭加所组成的。计算结果如图 2 所示, (a) 是未经切趾的结果, (b)、(d) 是式(1)中  $x_0$  分别取 1.0045 和 1.0200 的结果。这里应指出, 对应于  $x_0$  取 1.0045 的切趾函数在截断处取式(1)的 1/4 值而不是 1/2 值, 其目的是为了压低如图 1(a) 中的切趾函数的上翘部分, 以减小图 2(b) 中两边的次峰。(c) 是使用三角形切趾函数的结果。

由于截断的缘故, 计算得到的结果应该是高斯线型和仪器函数的卷积。比较图 2(b) 和 (a) 可知, 使用新的切趾函数, 切趾后第一负瓣比未经切趾时降低了约 1/3, 而两者的分辨率却保持相同水平。显然, 由于对应于三角切趾函数的仪器函数  $\text{sinc}^2(x)$  的半宽度较宽而不能分辨出这两条谱线。比较图 2(d) 和 (c), 就不难看出使用式(1)的优越性了。

**2. 理想线型谱线**

下面考虑两条强度比为 15:2 的谱线。为了略去谱线本身线型的影响, 这里仅考虑没有

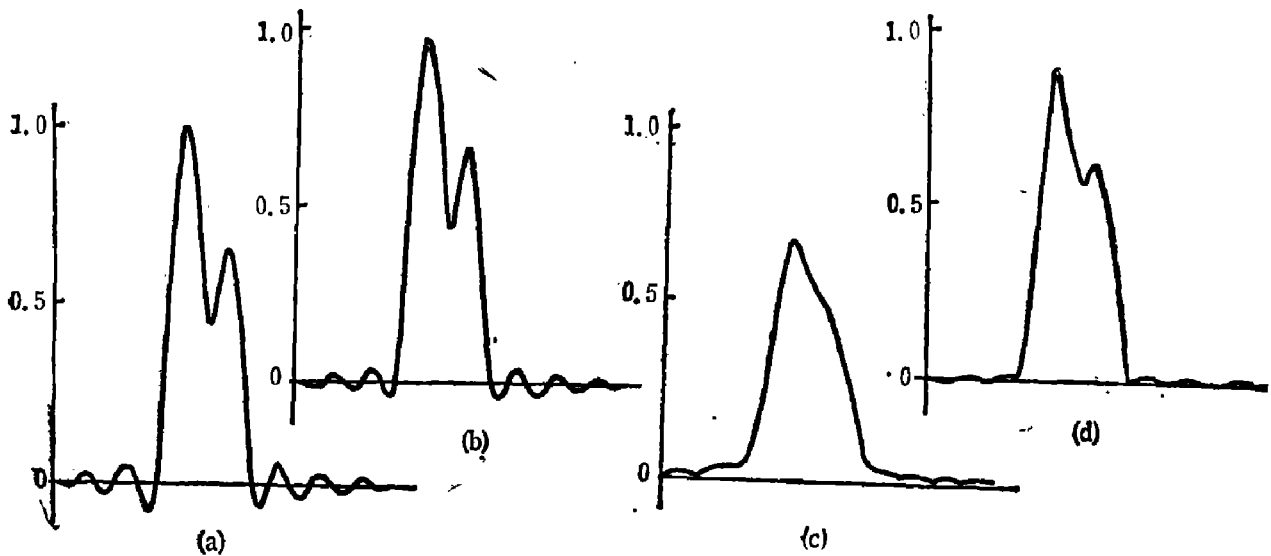


图2 高斯线型的模拟谱

(a) 未经切趾 (b)  $x_0=1.0045$  切趾 (c) 三角形切趾 (d)  $x_0=1.0200$  切趾

Fig. 2 Model spectra of Gaussian lineshapes

(a) No apodizing (b)  $x_0=1.0045$  apodizing (c) Triangular apodizing (d)  $x_0=1.0200$  apodizing

带宽的理想线型。取两条间隔为未经切趾时刚好能完全分开的等强度谱线。模拟干涉图由两个不同频率、强度比为 15:2 的余弦波的迭加所组成。显然,由于截断效应,经傅里叶变换后谱线的形状已由仪器函数的轮廓代替了  $\delta(x)$  函数的线型。结果如图 3 所示, (a) 是未经切趾的情形, (b)、(d) 是  $x_0$  分别取 1.0200、1.0450 切趾后的结果, (c) 是三角形切趾结果。

注意到模拟计算是把两条谱线的间距取为未经切趾时刚好能完全分开两条等强度谱线时的间距, 它们的位置和间距如图 3 中横坐标上的标记所示。可以看出, 图 3(a) 由于  $\text{sinc}(x)$  函数具有较大的旁瓣, 使得弱线发生了较大的频率位移, 靠近强线的一部分已被强线的第一负瓣所淹没而为负值, 另一部分则是和强线的第一正瓣迭加的结果。两谱线的强度比变为 17:4, 而不是原来的 15:2。显然, 这已是一种虚假现象了。图 3(b) 基本上保留了原来的特征, 两谱线的强度比为 13:2, 接近于 15:2 的数值。图 3(c) 则由于  $\text{sinc}^2(x)$  函数的半宽度较

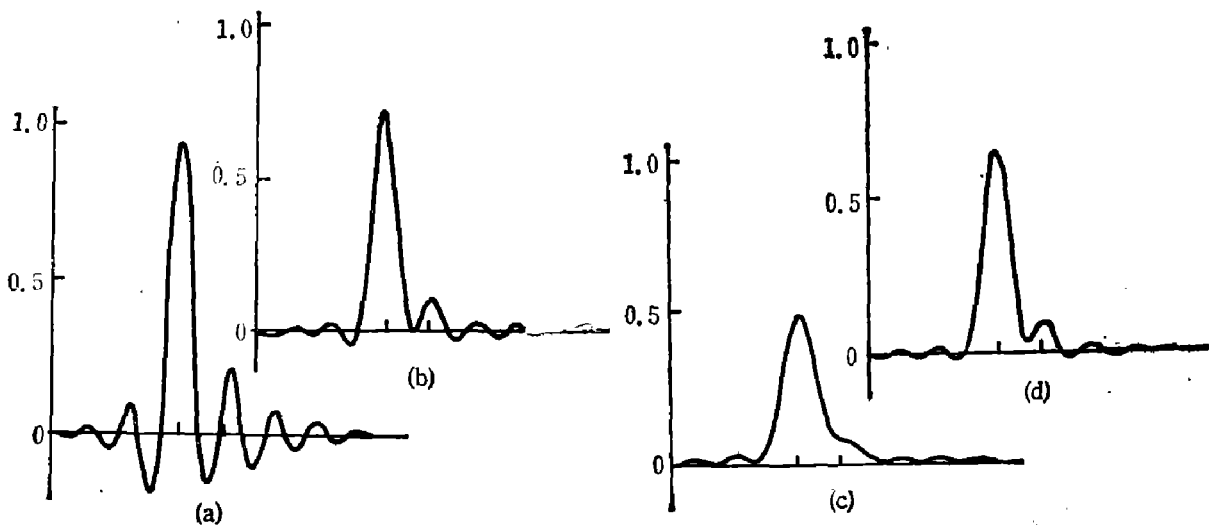


图3 理想线型的模拟谱

(a) 未经切趾 (b)  $x_0=1.0200$  切趾 (c) 三角形切趾 (d)  $x_0=1.0450$  切趾

Fig. 3 Model spectra of ideal lineshapes

(a) No apodizing (b)  $x_0=1.0200$  apodizing (c) Triangular apodizing (d)  $x_0=1.0450$  apodizing

宽,降低了分辨率,而不能分辨这两条谱线。图 3(d)是为了与(c)进行比较而引入的,显然,(d)中两谱线分开的凹度和次级峰的高度均优于(c)。

若进一步缩小两条谱线的间距,由图 3(a)可见,弱线将完全淹没于  $\text{sinc}(x)$  函数的第一负瓣之中。而从图 3(b)、(d)则很容易看出,只要选取适当的  $x_0$  进行切趾,仍然能够分辨出弱线。

### 三、讨 论

从前面的结果可以看到,使用新的切趾函数即式(1)时,只要选取适当的参数  $x_0$ ,在保持次极大相同时,可以获得高于未经切趾的分辨率;在保持与未经切趾相同的分辨率时,仍具有切趾功能。虽然与这种切趾函数( $x_0=1.0045$ )相对应的仪器函数仍有较大的次极大峰值,但却说明切趾不一定导致分辨率下降。

观察一下图 1(a)就不难发现式(1)在  $x_0$  取较小数值时,在截断处附近有上升的趋势,这与以前单调下降的切趾函数明显不同。我们知道,干涉图的数值随着光程差的增加而迅速下降,远离零光程差处的数值比零光程差处的数值要小许多倍。若用单调下降的切趾函数去实施切趾,那么,切趾后远离零光程差处干涉图的数值将更小,势必导致光谱信息的损失,使分辨率下降。使用式(1)的切趾函数,其单调下降部分有助于抑制旁瓣,而上升部分则把微弱的信号加以放大,相当于增加了信息量,从而使分辨率有所提高。

应该指出,与这种切趾函数对应的仪器函数的次级峰衰减速度比  $\text{sinc}(x)$  函数的衰减速度慢。可以认为,使用这种切趾函数( $x_0=1.0045$ )之所以既能达到切趾效果,又不降低分辨率的部分原因是由于这种切趾的作用等效于把  $\text{sinc}(x)$  函数靠近谱线中心的次极大的能量分配到远离谱线中心的区域,这样,就减弱了间距较近的两谱线间由于截断效应而产生的相互干扰,相应地就提高了分辨率。远离谱线中心的次级峰增高的效果等效于提高了系统的噪声电平,而这种等效噪声是极其微弱的,这一点可通过图 2(a)、(b)的比较直接看出。

文献[7]曾指出可以用增加系统的噪声来提高分辨率。根据上面的讨论,我们得出结论:在信噪比较高的情况下,通过使用性能优良的切趾函数稍微降低信噪比可提高仪器的分辨本领。

### 四、实 验 结 果

我们在 Nicolet 7199 C 型 FT-IR 光谱仪上实测了真空区熔硅单晶及其背景的干涉图。由干涉图经过切趾、相位校正及傅里叶变换求得光谱。引起相位误差的原因很多<sup>[3,8,9]</sup>,相位校正的主要目的是消除各种原因引起的干涉图的非对称性。相位校正有求平方根法、乘法、卷积法、切趾法等等<sup>[9]</sup>。本文选用了最简单的求平方根法。若用  $B_r(\sigma)$  和  $B_i(\sigma)$  分别表示傅里叶变换后的实部和虚部,可以证明,以  $B(\sigma) = \sqrt{B_r^2(\sigma) + B_i^2(\sigma)}$  求得的  $B(\sigma)$  即为相位校正后的光谱。

记录下来的数据用 TRS-80 微机进行切趾、相位校正和傅里叶变换。使用 FORTRAN 语言及 FFT 算法。图 4(a)、(b)是取 1024 个实测数据,分别使用式(1)及三角形切趾函数计算得到结果;(c)是 7199 C FT-IR 光谱仪对所测干涉图进行直接处理后分辨率为

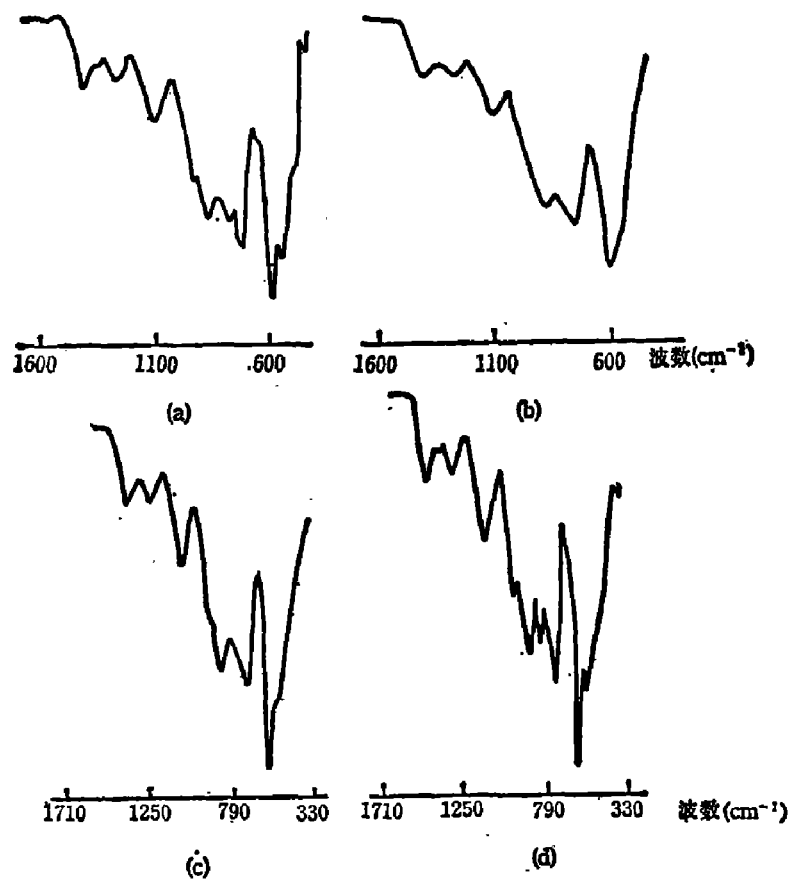


图4 硅单晶光谱图

(a)  $N=16$ ,  $\alpha_0=1.0150$  切趾 (b) 三角形切趾 (c) Happ-Genzel 切趾(分辨率为  $16\text{ cm}^{-1}$ )  
(d) Happ-Genzel 切趾(分辨率为  $2\text{ cm}^{-1}$ )

Fig. 4 Silicon single crystal spectra

(a)  $N=16$ ,  $\alpha_0=1.0150$  apodizing (b) Triangular apodizing (c) Happ-Genzel apodizing (the resolution is  $16\text{ cm}^{-1}$ ) (d) Happ-Genzel apodizing (the resolution is  $2\text{ cm}^{-1}$ )

$16\text{ cm}^{-1}$  的硅单晶光谱图,使用了 Happ-Genzel 切趾函数。比较图 4(a)、(c),由(a)能清楚地分辨出位于  $562\text{ cm}^{-1}$  处的吸收峰,位于  $961\text{ cm}^{-1}$  处的吸收峰也依稀可见,而(c)则达不到这种效果。为验证图 4(a)的正确性,图 4(d)给出了  $7199\text{ C}$  光谱仪扫出的分辨率为  $2\text{ cm}^{-1}$  的硅单晶光谱图。很明显,图 4(a)和(d)中的吸收峰有着——对应的关系。可见,图 4(a)比(c)具有更高的光谱分辨率。(b)表明用三角形函数切趾获得的光谱分辨率就更低了。

根据以上结果和文献[1]可得出结论,新的切趾函数优于目前 FT-IR 光谱仪中使用的切趾函数。使用新的切趾函数,可以提高 FT-IR 光谱仪的分辨能力并改善其测试性能。

致谢——上海冶金研究所祁明维同志给予了很大帮助,谨表谢意。

### 参 考 文 献

- [1] 董隽逸、李正直,红外研究, 4 (1985), 1: 9.
- [2] Filler A. S., *J. Opt. Soc. Amer.*, 54 (1964), 6: 762.
- [3] Vanasse G. A. and Sakai H., *Progress in Opt.*, 6 (1967), 261.
- [4] Norton R. H. and Beer R., *J. Opt. Soc. Amer.*, 66 (1976), 3: 259.
- [5] Chamberlain J., *The Principles of Interferometric Spectroscopy*, New York: Wiley, 1979, p 139.
- [6] Sirohi R. S., *Optik*, 31 (1970), 327.
- [7] Williams R. A. and Chang. W. S. C., *J. Opt. Soc. Amer.*, 56 (1966), 2: 167.
- [8] 沈学础,物理学进展, 2(1982), 3: 275.
- [9] 董隽逸、李正直,光学与光谱技术, 6 (1985), 1: 12.

# IMPROVEMENT OF THE RESOLUTION IN FT-IR SPECTROMETER BY USING NEW APODIZATION FUNCTIONS

DONG JUNYI, LI ZHENZHI\*  
(*Department of Physics, Suzhou University*)

## ABSTRACT

Using a new class of apodization function, the effects of apodization on resolution in FT-IR spectrometer are studied. Results show that the degradation of resolution as a result of apodization does not necessarily occur. Given fine apodization functions, the resolution may be better than that of the unapodized while the largest secondary maximum remains at the same level. Experimental results show that the performances of the instrument could be upgraded if the new apodization functions are applied to FT-IR spectrometer.

---

\* Li Zhenzhi works at Department of Physics, Hangzhou University now.