

红外傅里叶变换光谱仪 的切趾函数研究

范世福 徐晓初
(天津大学精密仪器系)

摘要——提出了一组新的切趾函数,对校正复原光谱的畸变具有优良特性,在 Filler 图上比余弦函数、三角形函数和 Happ-Genzel 函数等现有切趾函数具有更加理想的位置。实验结果证明了新切趾函数的优点。

在红外傅里叶变换光谱仪中,干涉仪动镜在有限的光程差 $[-L, L]$ 区间内扫描时,复原光谱为

$$B'(\nu) = B(\nu) * T(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x) T(x) e^{-i2\pi\nu x} dx,$$

其中

$$T(x) = \text{rect}\left(\frac{x}{2L}\right) = \begin{cases} 1 & |x| \leq L \\ 0 & |x| > L \end{cases}$$

为矩形截短函数,其傅里叶变换 $T(\nu)$ 即为仪器谱线函数,也常称为 ILS(Instrumental Line Shape)函数:

$$T(\nu) = \mathcal{F}[T(x)] = 2L \text{sinc}(2\pi\nu L).$$

由于 sinc 函数具有明显的旁瓣(趾),因而造成复原光谱 $B'(\nu)$ 与真实光谱间明显的畸变。为校正这种由于在 $\pm L$ 处突然截断、致使干涉图出现尖锐不连续变化而造成的复原光谱扰动,采用过种种切趾函数,以渐变的权重函数与干涉图相乘,缓和在 $\pm L$ 处干涉图的不连续程度^[1]。

使用适当的切趾函数可明显减弱其 ILS 函数的旁瓣,但付出的代价是增大谱线的半高线宽,降低了仪器的分辨率。不同的切趾函数具有不同的特性,它们的特性可由 Filler 图^[2],即切趾函数的 ILS 函数与 sinc 函数的次极大峰值与主峰半高线宽之间的关系图来描述,其纵坐标是 ILS 函数的次极大峰高绝对值 $|h|$ 与 sinc 函数次极大峰高绝对值 $|h_0|$ 的比值 $|h/h_0|$ (以对数坐标标出),其横坐标是相应的主峰半高线宽之比 ω/ω_0 。图 1 是由 1150 个不同切趾函数作出的 Filler 图^[3],从图中可见所有 1150 个函数的 ILS 函数都处于某条边界线的右上方,这条边界线可用公式

$$\log_{10} |h/h_0| \approx 1.939 - 1.401(\omega/\omega_0) - 0.597(\omega/\omega_0)^2$$

确定。理想的切趾函数的 ILS 函数应具有尽可能小的 $|h/h_0|$ 值,但不能使 ω/ω_0 值过大,而且应具有尽可能快的收敛速度。因此,切趾函数的 ILS 函数在 Filler 图上的位置越接近上述边界线,其切趾性能就越好。

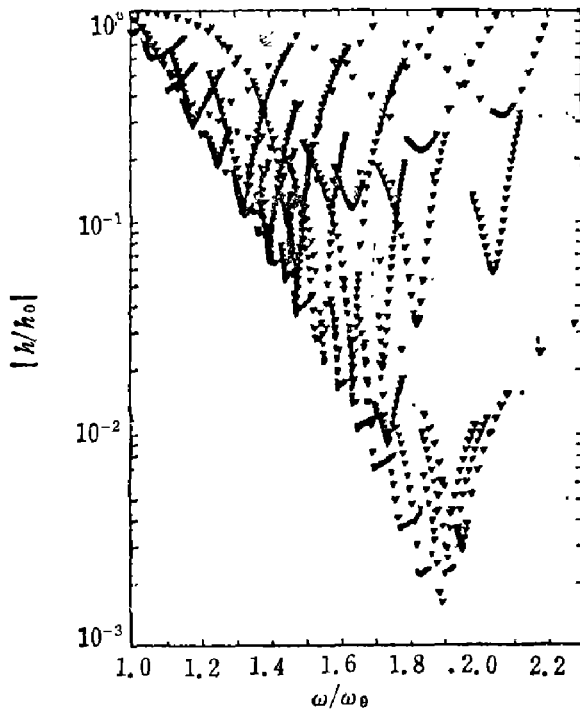


图 1 归一化后的 Filler 图

Fig. 1 Normalized Filler figure for about 1150 apodizing functions.

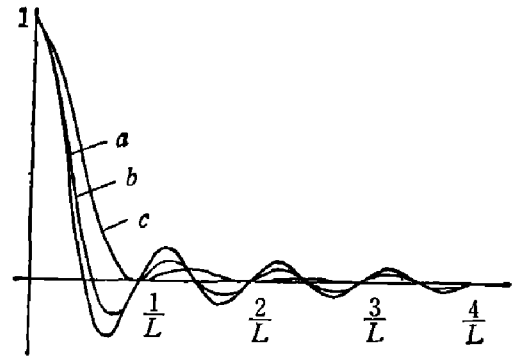


图 2 几种函数的 ILS 函数 (已归一化)

a—sinc 函数,
b—H-G 函数,
c—三角形函数

Fig. 2 Normalized ILS functions of several apodizing functions.

此外,在实际的红外傅里叶变换光谱仪中,通常都是通过实时计算过程形成切趾函数。因此,除上述评判切趾函数性能优劣的标准以外,还必须考虑占用计算机存贮空间少、运算过程快的问题。所以,优良的切趾函数必须有简单的形式,便于以有限项近似的快速计算获得尽可能靠近 Filler 图上边界线的 ILS 函数。

Happ 和 Genzel 提出的 H-G 函数^[4]

$$A(x, L) = a + (1-a) \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \quad (0 \leq a \leq 1)$$

是一种现有 FTIR 仪器中常用的性能较好的切趾函数,其 ILS 函数如图 2 所示,ILS 函数的 $|h/h_0| = 63.7\%$, $\omega/\omega_0 = 110\%$,即在旁瓣高度与半宽线高之间有良好的折衷,并且 H-G 函数形式简单、易于计算,因此获得了广泛的应用。但由于 H-G 函数中只有一个参数 a 可以变化,因此可供选择的变化范围小,不易获得最佳的切趾效果。

为此,我们在 H-G 函数中再增加一个变量 p ,构成新的切趾函数

$$A(x, L) = a + (1-a) \cos \frac{px}{L}, \quad (0 \leq a \leq 1)$$

将 $\cos \frac{px}{L}$ 按泰勒级数展开,舍去 x 的高次项,整理后得到

$$A(x, L) = 1 + C_2 \left(\frac{x^2}{L}\right) + C_4 \left(\frac{x}{L}\right)^4,$$

式中系数 $C_2 = -\frac{(1-a)}{2} p^2$, $C_4 = \frac{(1-a)}{24} p^4$ 。由于该函数中包含 a 和 p 两个可变系数,因而可有较大的选择余地挑选适当的切趾函数。表 1 列出了我们经反复筛选找到的一组切趾功能强烈程度不同的可用系数。图 3 是相应的一组 ILS 函数,并画出了 sinc 函数以供比较。

表 1 一组可用的切趾函数系数

Table 1 Coefficients of a set of suitable apodizing functions.

切趾功能	系 数	
	C_2	C_4
强	-1.635	0.895
中	-0.987	0.535
弱	-0.338	0.0864

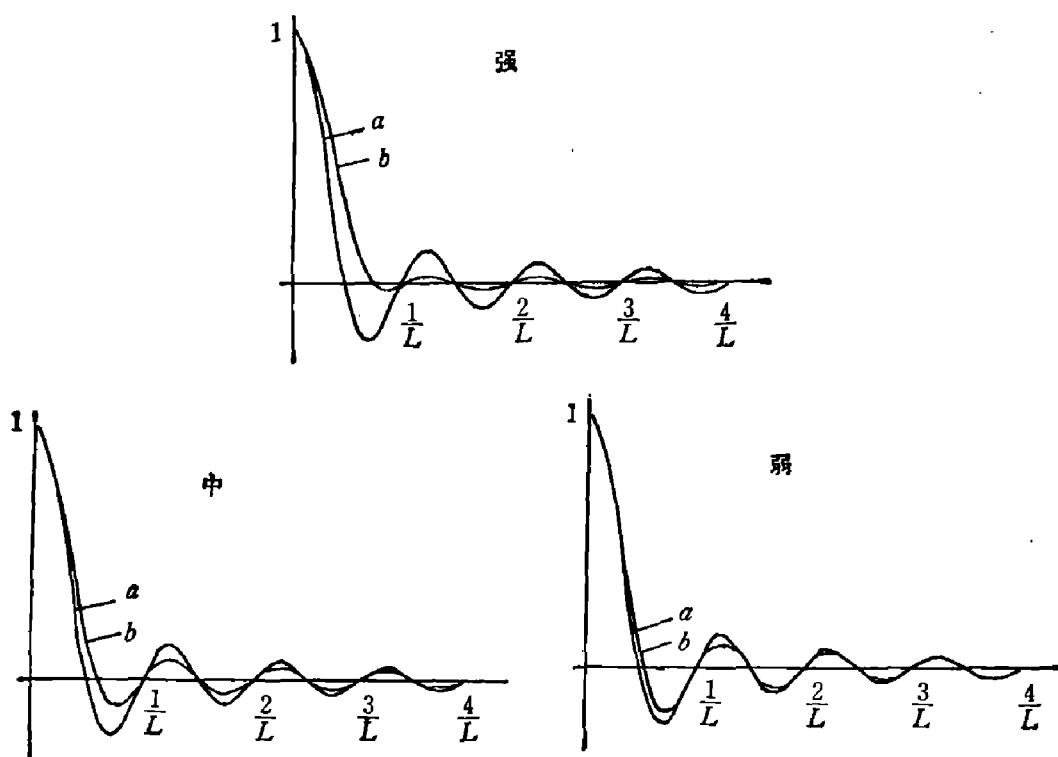


图 3 一组切趾程度不同的函数的 ILS 函数

a—sinc 函数图形, b—强弱程度不同的 3 个切趾函数的 ILS 函数图形

Fig. 3 ILS functions resulting from apodizing functions listed in Table 1.

计算表明: 中等强度的切趾函数 ILS 函数的半高线宽比 H-G 函数 ILS 函数的半高线宽小 1.46%, 比其第一次极大旁瓣(最强的趾)的高度小 9.6%, 这表明我们提出的中强度切趾函数能比 H-G 函数达到更好些的分辨率(主峰半高宽狭、而且旁瓣强度也明显降低)。同样, 强功能切趾函数与现有许多 FTIR 仪器采用的三角形切趾函数相比, 半高宽下降达 16.4%, 第一次极大旁瓣的下降量更达 38.2% 之多, 由此可见我们提出的强切趾函数的性能比三角形切趾函数优越得多。

在 Filler 图上, 我们提出的强、中、弱三个切趾函数的 ILS 函数的位置比余弦形、三角形和 H-G 等切趾函数的 ILS 函数更加靠近理想边界线, 如图 4 所示。

我们对一种气体试样在 $400 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ 范围内的红外干涉图进行了多次实验, 分别采

用不同的切趾函数在计算机上进行复原光谱计算, 获得了图 5 中 *a*、*b*、*c*、*d* 不同的复原光谱图。比较图 5 中 *a*、*b* 复原光谱图可看出: 采用我们提出的强切趾函数比采用三角形切趾函数可获得好得多的光谱分辨率; 比较图 5 中 *c*、*d* 谱图可知, 采用我们提出的中等强度切趾函数所获得的复原光谱在分辨率方面比采用 H-G 切趾函数获得的复原光谱没有明显的提高,

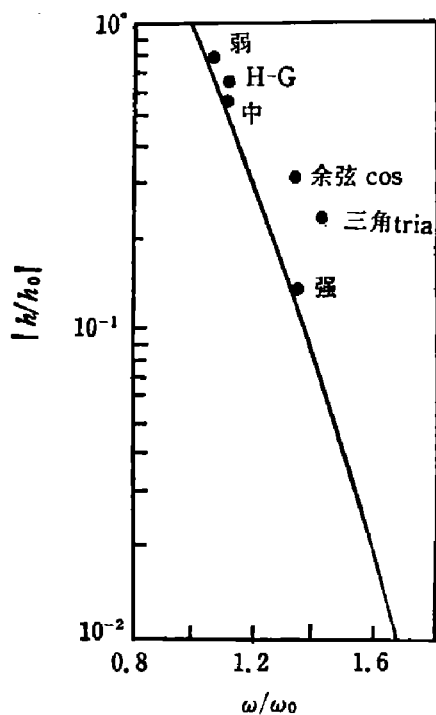
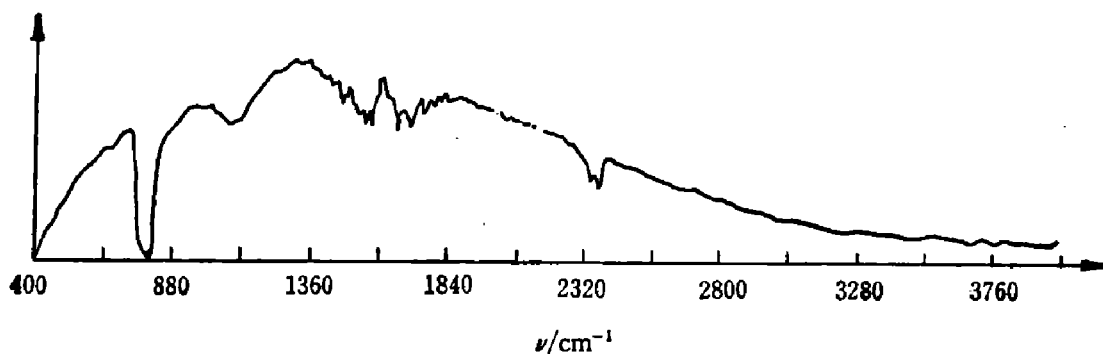
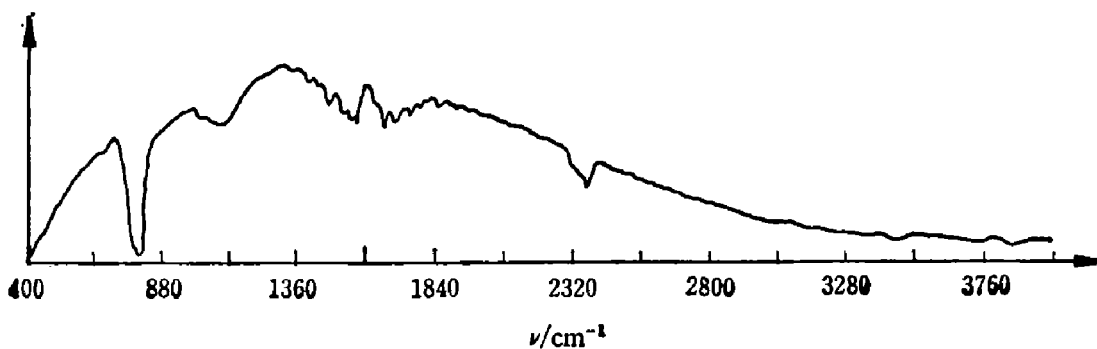


图 4 各种切趾函数的 ILS 函数在 Filler 图上的位置

Fig. 4 Filler figure for ILS resulting from apodizing functions applied in FTS.



(a)



(b)

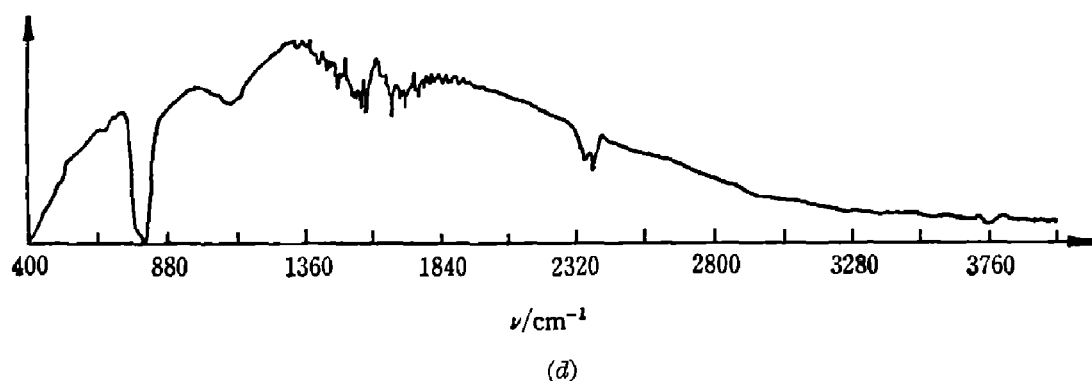
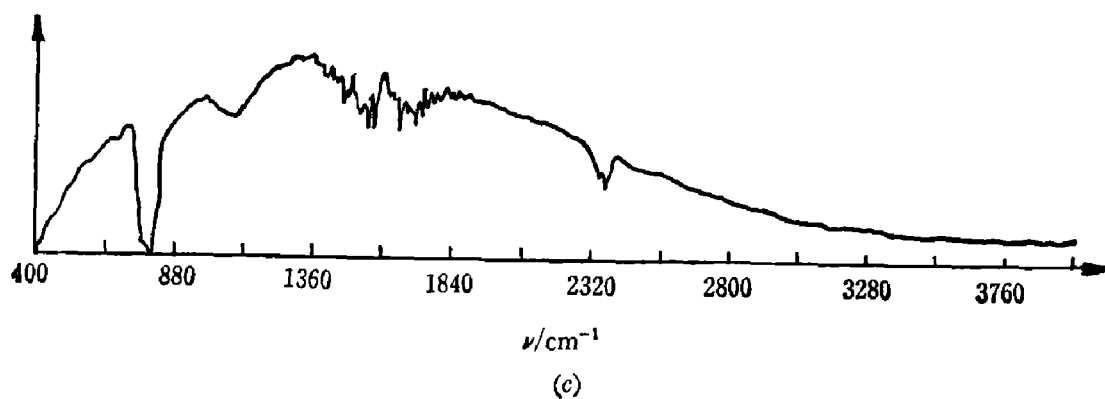


图5 使用不同切趾函数获得的复原光源

(a): 强切趾函数的结果, (b): 三角形切趾函数的结果, (c): 中切趾函数的结果,
(d): H-G 切趾函数的结果

Fig. 5 Spectra derived from different apodizing functions.

这与理论分析所得的 1.46% 的半高线宽改善程度是相吻合的。此外,从图 5 的 a、c 两复原光谱可明显看出,采用强切趾函数相对于采用中等切趾函数在光谱分辨率方面是有损失的,这与图 3 的情况相符,即不同强弱切趾函数虽能以不同的强烈程度抑制旁瓣,但也不同程度地引起主峰半高线宽的增大。

总之,理论分析和实验结果表明,本文提出的一组新的切趾函数有明显的优越性,它们在不同程度上包含了三角形、H-G 切趾函数各自的特点,但具有更好的综合实效,而且函数形式简单、便于运算,因而具有更大的实用价值。

参 考 文 献

- [1] Dossier B., *Rev. Opt.*, **33** (1954), 57; 147; 267.
- [2] Filler A. S., *J. Opt., Soc. Amer.*, **54** (1964), 762.
- [3] Norton R. H. and Beer R., *J. Opt. Soc. Amer.*, **66** (1976), 259
- [4] Genzel L., *Private Commun.*

RESEARCH ON THE APODIZING FUNCTIONS FOR FTIR

FAN SHIFU, XU XIAOCHU

(Department of Precision Instrumentation, Tianjin University)

ABSTRACT

A set of new apodizing functions which have excellent characteristics in correcting the distortion of the spectrum and have more ideal positions in the Filler figure than the cosine function, triangular function and Happ-Genzel function is presented. The experiments have proved the practical advantages of the new apodizing functions.