

# 傅利叶变换光谱技术中的“折叠假线”研究

陈习意 林海 王冬\* 朱清时

(中国科学技术大学选键化学开放研究实验室 合肥 230026)

**摘要:** 根据奈奎斯特(Nyquist)采样定理,解释了傅利叶变换光谱采集过程中由于折叠而出现的假线现象,并且对假线的特点进行了预测,进而总结出实验过程中利用光学滤波器和电子学滤波器来防止假线,同时兼顾信噪比的实验参数设置方法,经实验证实,这套方法是行之有效的。

**关键词:** 傅利叶变换光谱; 假线; 折叠; 滤波器

**中图分类号:** O433.5<sup>+</sup>1      **文献标识码:** A

## 1 引言

傅利叶变换光谱技术<sup>[1]</sup>是一项已被广泛应用的光谱测量技术,然而,在具体的傅利叶变换光谱实验中,各种各样的假线(artifacts,也称 false lines)常令人感到困惑,甚至会导致错误的实验结果。一个广为人知的例子是工频信号及其谐波分量的干扰,其在谱图中表现为 50 Hz (有些地方是 60 Hz) 及其倍频处的鬼线(ghost lines)。如果信号屏蔽比较好,这种干扰可以被大大抑制。另外一种情形是信号被周期性或非周期性调制,一般而言,它与实验的具体设计安排有关。例如, Mantz 等人在反应  $(\text{CH}_3)_2\text{CO} + h\nu \rightarrow 2\text{CH}_3 + \text{CO}$  的时间分辨傅利叶变换光谱测量方面的工作<sup>[2]</sup>,先是由 Garrison 等人指出<sup>[3]</sup>,之后又被 de Hanseth 通过计算机模拟证实<sup>[4]</sup>,他们所得到的谱线是假线。这是因为在 Mantz 等人的实验中,由于对反应生成的气体样品抽空速率不够,导致生成的气体样品越积越多,浓度不断升高,造成干涉图被调制,所以记录的谱图上出现鬼线。本文要讨论的是第三种情况,即由于频谱折叠而造成的假线。这是一种最普遍而又往往被忽视的情况,例如,在文献[5]中就发现, Herman 等人的 16866.05 和 17941.68  $\text{cm}^{-1}$  处的两个乙炔带<sup>[6]</sup>并不能被灵敏度更高的激光腔内吸收光谱实验<sup>[7]</sup>所重复,而是折叠造成的假谱。在我们的  $\text{XH}_n$  型分子局域模振动高分辨傅利叶变换光谱测量实验中,同样的问题也曾长期困扰我们。这里要报告的就是我们关于这个问题的通过实验验证的研究结果。

## 2 问题概述

傅利叶变换光谱通过对干涉图进行傅利叶变换得到光谱图。在实际光谱测量中和数学运算中,计算机不可能处理连续信号,而必须进行数字化和离散化。前者主要对应 A/D 变换,也包括系统参量和运算的数字化过程,后者对应干涉图空间采样。关于采样,有大家所熟悉的采样定理(Nyquist Criterion)<sup>[8]</sup>,简单地说就是:当时域(或空间域)采样频率等于或高于被采样信

\* 通讯联系人。

号带宽的 2 倍时,被采样信号可以由采样数据点完全恢复而不丢失信息:

$$f_{\text{sampling}} \geq 2(v_{\text{max}} - v_{\text{min}}) \quad (1)$$

其中,  $v_{\text{max}}$  和  $v_{\text{min}}$  分别为被采样信号频带的高截止频率和低截止频率,即在这两个频率之外的频率分量为零或者在工程上足够小,可以忽略不计。另一方面,时间(或空间)采样间隔和采样频率是成反比关系的:

$$f_{\text{sampling}} = 1/\Delta_{\text{sampling}} \quad (2)$$

其中,  $\Delta_{\text{sampling}}$  为采样间隔。因此,在实验中我们就要选择足够小的采样点间隔以保证频谱不会因折叠(folding)而引起混淆(aliasing)。

我们知道,光谱的分辨率越高,动镜扫描的距离就越长,采样点就越多,采样点的间隔乘以采样点数目就是扫描的距离。然而,计算机的存储器容量是一定的,因此,提高分辨率必然导致采样点间隔的变宽,从而降低了采样频率,进而缩小了被测信号的允许带宽。可是我们测量透射谱时,光源的光谱范围往往非常宽。允许带宽之外的频带就会折叠进来,造成假线。这也说明了为什么这一类型的假线往往只在高分辨光谱中出现,而在低分辨光谱测量中计算机的存储器容量不是制约因素,这个问题往往不出现。正因为这样,人们常常忽视了这个问题。

将允许带宽之外的信号截去是保证没有折叠的最好方法。可以有两种选择。第一种方法是用光学滤波器,一般情况下指的是光学滤波片。但是分束器、窗片、光路中的反射镜乃至探测器都有一定的响应波段范围,因此它们往往也会起到一定的滤波作用。第二种方法是用电子学滤波器,将探测器的输出信号在送往 ADC 之前用电子学滤波器(往往是一个高通滤波器串联一个低通滤波器而成)滤波以限制其带宽。两种方法各有特点,它们的特点比较请见表 1。

表 1 光学滤波片和电子学滤波器的比较

Table 1 Comparison of optical filters with electronic filters

	Optical Filters	Electronic Filters
Edge	Sharp	Smooth
Improve S/N ratio	Yes, by reducing the optical bandwidth with $\text{SNR} \propto 1/\sqrt{\text{BW}_{\text{opt}}}$	Yes, by eliminating the electronic noises
Prevent detector from overloading	Yes	No
Prevent ADC from overloading	Yes	Yes

从表 1 中可以看出光学滤波器和电子学滤波器各有优点,最好联合起来使用,不仅能够防止折叠,还能够提高信噪比。

但是很多光谱实验中为什么使用了电子学滤波器来防止折叠,却没有效果呢?原来,这是因为电子学滤波器的边缘很平缓的缘故。我们平时说的截止频率,对电子学滤波器来说,往往指的是其频率响应特性下降到 3dB 点时的频率。这时其透过率仍然高达 50%,而且下降平缓,到工程上认为可以忽略不计的程度(比如说 3%)时的频率还有很长的一大段。在我们的 Bruker IFS 120 HR 上的电子学滤波器,实验测得这样的一条“尾巴”可以长达  $2500 \text{ cm}^{-1}$  以上。而光学滤波器在截止频率处其透过率往往已经下降到 5%,并且“尾巴”也很短,因此就不会造成很明显的麻烦。

虽然光学滤波器在防止折叠方面比电子学滤波器性能要好,但是更换不方便。一种光学滤

波片只有一种带通范围,而电子学滤波器却可以很容易地通过程控开关的选择来改变其带通范围,无需更换实验装置和重调光路。在某些以宽带激光作为外光源的实验里,光学滤波片还可能会对激光信号产生一些不利的影响,比如影响激光的偏振模式。在中远红外波段,光学滤波片都是用各种特殊的晶体做成的。因此,有时只能使用电子学滤波器来防止折叠。

### 3 解决方法与实验验证

为防止折叠,选择合适的电子学滤波器是很重要的。要兼顾较高的信噪比和防止折叠假线,我们的选择只能是各方面因素妥协的结果。为此,我们在实验中总结出两种方法。第一种是最简单的完全滤波方式,如图 1a 所示。因为是完全滤波,在折叠频率外没有谱带,所以肯定没有折叠产生。但是这种方法往往因为透过率太低导致信噪比太差而无法使用。第二种是比较实用的不完全滤波方式,参见图 1b。实验前先测量滤波器的滤波特性,光源的基线范围,根据折叠频率选择合适的电子学滤波器参数,计算未受折叠的范围。计算方法如下:

$$f_{LUF} = 2f_{LFF} - f_{LFC} \quad (3a)$$

$$f_{HUF} = 2f_{HFF} - f_{HFC} \quad (3b)$$

其中,  $f_{LUF}$  和  $f_{HUF}$  是测量结果的低端和高端无折叠频率 (Low/High Unfolding Frequency),  $f_{LFF}$  和  $f_{HFF}$  是仪器低端和高端折叠频率 (Low/High Folding Frequency), 由系统根据测量参数给出,  $f_{LFC}$  和  $f_{HFC}$  是低通和高通滤波器的实际截止频率 (Lowpass/Highpass Filter Cut-off), 不是频幅特性下降到 3dB 点的截止频率。

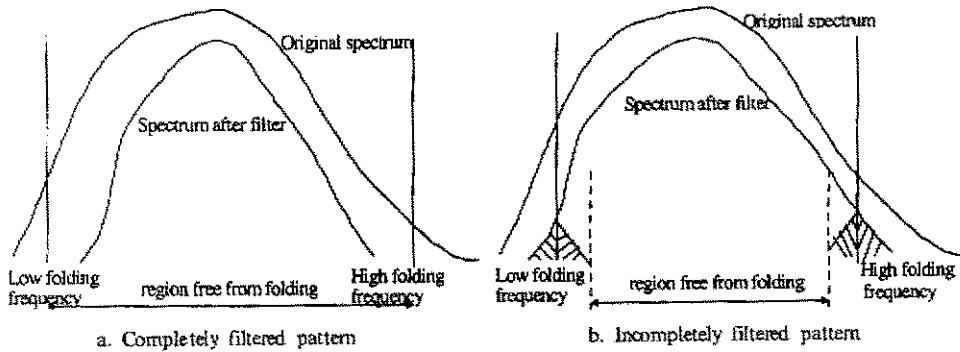


图 1 实验中计算频谱折叠范围示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the unfolding region calculation

然后在其它实验参数固定,只改变折叠频率的条件下,用低分辨谱测量验证折叠所影响的范围区间。一般说来,我们计算的区间范围和测量结果吻合得很好,相对误差很小。例如,在测量碲烷  $\nu=4$  的光谱时,仪器给出高端折叠频率为  $10532 \text{ cm}^{-1}$ ,低端折叠频率为  $5266 \text{ cm}^{-1}$ ,我们选择的电子学高通滤波器的 3dB 截止频率是  $6911 \text{ cm}^{-1}$ ,低通滤波器则是  $13823 \text{ cm}^{-1}$ 。由于 InSb 探测器的频率响应最多只到  $9800 \text{ cm}^{-1}$ ,而低于高端折叠频率为  $10532 \text{ cm}^{-1}$ ,因此高端不可能有频谱折叠产生,此时探测器起到了部分光学滤波的作用。在低端,我们测得实际截止频率为  $3500 \text{ cm}^{-1}$  左右(此时高通滤波器的频幅特性下降到足够小,为 1% 以下),远远低于 3dB 点的截止频率。再根据式(3b),可估算出测量结果在低于  $7000 \text{ cm}^{-1}$  的地方会有频谱折叠,被实验结果

所证实,见图 2. 如果用 3dB 截止频率来算就会认为没有折叠产生. 在图 2 中  $5300\text{ cm}^{-1}$  附近有一个明显的折叠造成的谱带. (a) 和 (b) 的分辨率都是  $10\text{ cm}^{-1}$ , 它们唯一差别在于它们采样时的采样间隔不同.

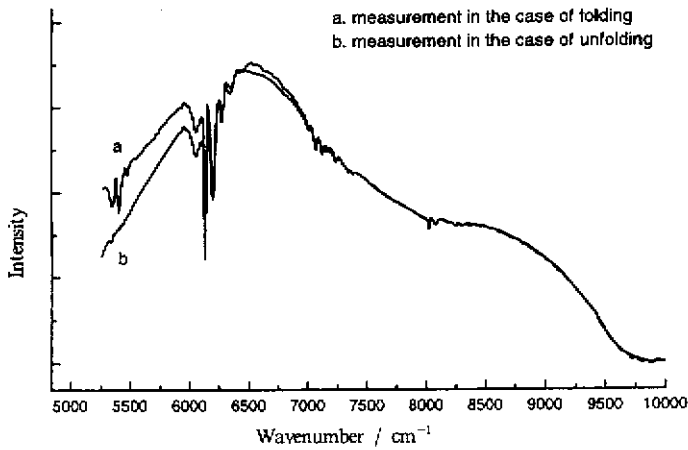


图 2 实验检验折叠所影响的区间

Fig. 2 Experimental confirmation of the unfolding region calculation

又例如在测量神烷  $\nu=3$  的高分辨光谱时, 原来有折叠时 (111) 局域模合频带被大量的假线完全淹没, 如图 3 b 所示, 而去除了折叠的影响之后重测的 (111) 带则干干净净 (图 3a), 放大后可以看见没有折叠的谱图清清楚楚地显示出对称陀螺分子平行带的 K 结构 (图 4).

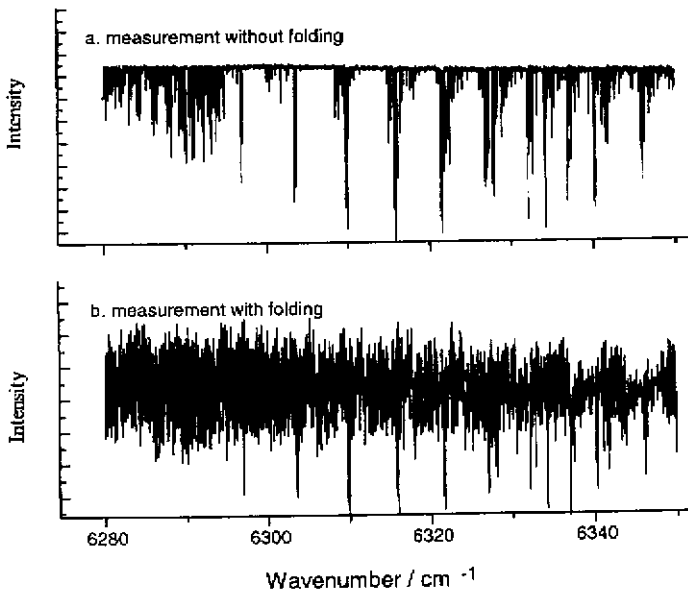


图 3 神烷 (111) 局域模合频带高分辨傅利叶变换光谱

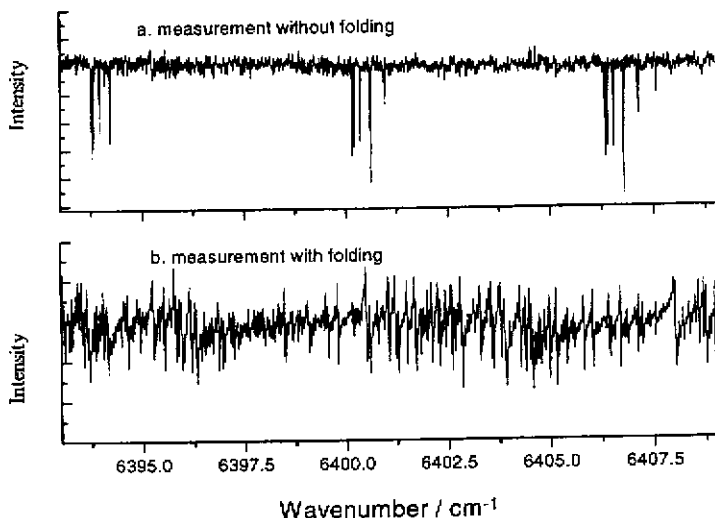


图 4 砷烷(111)局域模合频带的部分精细结构

Fig. 4 Fine structures of  $\text{AsH}_3(111)$  local mode combination band

## 4 讨 论

通过上面的分析,可以看出在傅利叶变换光谱测量中防止假线的重要性。傅利叶变换光谱实验各项参数的设置是很重要的,而且这些参数还往往互相关联。总的说来,在选择电子学滤波器时,要兼顾其它因素的影响,特别是信噪比。因为电子学滤波器的尾巴很长,其透过率又较低,而过低的信号幅度会严重损害信噪比,导致 ADC 量化噪音占主导地位,而一个好的测量系统应该是以探测器本身的噪音为极限的(Detector noises limited)。总之,最后的选择往往是各方面因素协调作用的结果。

## 参 考 文 献

- [1] Griffiths P R, de Haseth J A. *Fourier Transform Infrared Spectrometry*, Wiley, New York, 1986
- [2] Mantz A W. *Appl. Spectrosc.*, 1976, **30**: 459
- [3] Garrison A A, Crocombe R A, Mamantov G, de Haseth J A. *Appl. Spectrosc.*, 1980, **34**: 399
- [4] de Haseth J A. *Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng.*, 1981, **289**: 34
- [5] Yang Shengfu (杨生福). *Doctoral Thesis (博士学位论文)*, University of Science and Technology of China (中国科学技术大学), 1997
- [6] Herman M, Tamsamani M A, Lemaitre D, Auwera J V. *Chem. Phys. Lett.*, 1991, **185**: 200
- [7] Yang S F, Bienier L, Campargue A, Tamsamani M A, Herman M. *Mol. Phys.*, 1997, **90**: 807
- [8] Oppenheim A S, Wilsky A S, Young I T. *Signals and Systems*, Prentice-Hall Inc., 1983

# False Lines due to Folding in Fourier Transform Spectroscopy

Chen Xiyi   Lin Hai   Wang Dong\*   Zhu Qingshi

*(Open Research Laboratory for Bond Selective Chemistry and Advanced Institute of  
Research, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)*

**Abstract** The phenomenon of false lines due to folding in Fourier Transform Spectroscopy is explained using by Nyquist sampling theorem. The characters of false lines are discussed. The key to avoid false lines is to use suitable filters to remove the signal outside the wanted spectral region. Two kinds of filters, optical and electronic filters namely, are compared to serve this purpose. It is found out that both kind of filters should be combined in order to prevent folding as well as secure a good signal to noise ratio. Some experimental parameters setting rules are advanced. The method proved to be successful in our experiments of recording the  $\nu=3$  and  $\nu=4$  highly vibrational spectra of arsine.

**Key words** Fourier transform spectroscopy, False lines, Folding, Filters

\* To whom correspondence should be addressed.