

01;07

О новом методе восстановления спектров

© А.М. Егиазарян, Х.В. Котанджян

Институт прикладных проблем физики НАН Республики Армения

Поступило в Редакцию 28 июля 1997 г.

Предложен теоретический метод для точного восстановления спектра по ограниченному набору дискретных значений интенсивностей спектра. Метод основывается на известной в оптике теореме отсчетов. Применением последней решено соответствующее интегральное уравнение для исключения искажений прибора и точного восстановления спектров по соответствующим дискретным значениям спектра.

Введение

В литературе [1–4] достаточно хорошо освещены методы получения рентгеновских спектров, мессбауэровских спектров, а также теоретические методы обработки экспериментальных данных. Поскольку спектральные линии отражают распределение электронов по уровням энергии атомов, молекул кристаллов, то необходимо обеспечить по возможности большую разрешающую силу. При обработке экспериментальных данных кривые аппроксимируются суммами рядов разной степени, что приводит к сглаживанию экспериментальных точек. С другой стороны, увеличение разрешающей способности связано с преодолением проблематичных трудностей. Целью настоящей статьи является предложение теоретического метода точного восстановления спектра по ограниченному набору дискретных значений интенсивностей спектра. Метод основывается на известной в оптике теореме отсчетов [5]. Предложена формула для полного восстановления спектров с учетом того, что волновые цуги имеют конечную длительность. При применении последней решено соответствующее интегральное уравнение для исключения искажений прибора, когда эти искажения описываются дисперсионным распределением. Получена формула для точного восстановления спектров и представлены соответственно обработанные экспериментальные кривые.

Теоретическое обоснование метода

Известно, что для определенного класса функций, известных под названием функций с ограниченной шириной спектра, можно осуществить полное восстановление функций по наборам их дискретных значений, если потребовать, чтобы интервал между дискретными значениями не превышал определенного значения. Под названием функции $g(x)$ с ограниченной шириной спектра имеются в виду функции, фурье-образы которых не равны нулю только в пределах конечной области пространства $2B$. Вышеуказанное утверждение известно под названием теоремы В.А. Котельникова, согласно которой

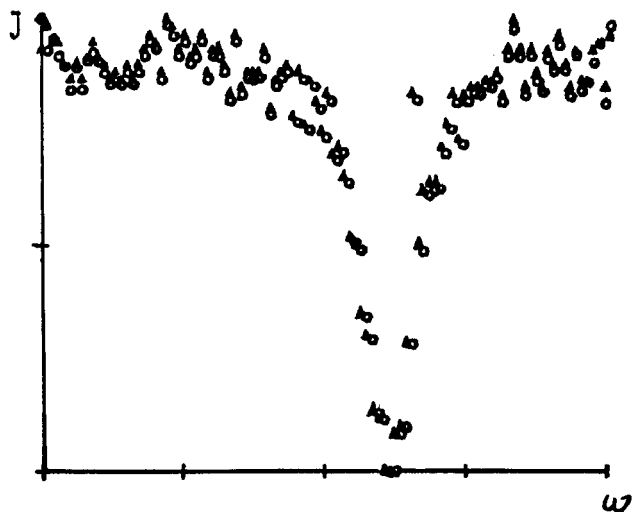
$$g(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} g\left(\frac{k}{2B}\right) \frac{\sin \pi[2Bx - k]}{\pi[2Bx - k]}, \quad (1)$$

т. е. функцию $g(x)$ можно полностью восстановить по ее соответственным дискретным значениям.

Независимо от физической природы волновые пути имеют конечную длительность $2B$. Пусть временная зависимость амплитуды цуга описывается функцией $f(t)$. Тогда фурье-образ $F(\omega)$ будет представлять амплитуду волны в пространстве частот, а $J(\omega) = |E(\omega)|^2$ — это спектральная интенсивность.

Из вышеуказанного следует, что $J(\omega)$ — это функция с ограниченной шириной спектра и, следовательно, ее можно восстановить по наборам ее дискретных значений. Эту идею мы применили для полного восстановления мессбауэровских спектров зарегистрированных в нашем институте. На рисунке представлена экспериментальная кривая и соответственно восстановленная по формуле (1) теоретическая кривая. При этом как $1/2B$ выбрано наименьшее расстояние между экспериментальными точками.

При обычных методах обработки экспериментальных данных (например, метод степенных рядов) экспериментальные кривые приблизительно аппроксимируются некоторыми аналитическими функциями. В зависимости от точности приближения на эту аналитическую кривую попадает лишь часть экспериментальных точек. При этом имеет место сглаживание экспериментальных точек. При восстановлении спектра вышеуказанным методом все экспериментальные точки точно находятся на кривой $g(x)$, что видно из рисунка.



Экспериментальная кривая мессбауэровского спектра (круглые отметки) и теоретически восстановленная кривая соответственного спектра (треугольные отметки).

Для исключения искажений прибора и восстановления точного вида спектра $I(\omega)$ необходимо решить интегральное уравнение

$$J(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x) \frac{dx}{\pi \Omega \left[1 + \left(\frac{\omega-x}{\Omega} \right)^2 \right]}, \quad (2)$$

где Ω — полуширина кривой искажения прибора.

Имея в виду (1), применим на (2) теорему сверки для фурье-преобразования. Так как

$$\frac{\sin \pi [2B\omega - k]}{\pi [2B\omega - k]} = \int_{-\infty}^{\infty} \text{rect } P \exp[-12\pi P(2B\omega - k)] dp, \quad (3)$$

где

$$\text{rect } P = \begin{cases} 1 & -\frac{1}{2} < P < \frac{1}{2} \\ 0 & P > \frac{1}{2}, \quad P < -\frac{1}{2}, \end{cases}$$

а фурье-образ дисперсионного распределения не имеет нулей [6]. Из (2) получим:

$$I(w) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-\infty}^{\infty} dP \operatorname{rect} P \exp \left[i 2\pi q w + 2\pi\Omega|q| + 12\pi P k \right] J\left(\frac{k}{2B}\right) \delta(2BP + q), \quad (4)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака.

После некоторых преобразований из (4) получим:

$$I(w) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J\left(\frac{k}{2B}\right) \times \left[\frac{(8\pi B w - 4\pi k + 8\pi\Omega B) \exp 2\pi\Omega B \sin(2\pi B w - \pi k) - 8\pi\Omega B}{(4\pi B w - 2\pi k)^2 + (4\pi\Omega B)^2} \right]. \quad (5)$$

Нетрудно заметить, что когда $\Omega = 0$, т.е. когда прибор не искажает спектр, разложение (5) тождественно совпадает с разложением (1).

Таким образом, согласно (5), можно восстановить точный вид спектра $I(w)$ из полученных в эксперименте соответственных дискретных значений спектра.

Предложенным методом мы экспериментальные кривые точно описываем аналитическими выражениями и тем самым обходим сглаживание экспериментальных точек.

При применении предложенного метода в спектроскопии отпадает проблема уменьшения шага гониометра, так как восстановление равносильно применению гониометров с бесконечно малым шагом.

Предложенный метод дает большой выигрыш во времени по сравнению с обычными экспериментальными методами снятия спектров; обеспечивает возможность исключения искажений, вносимых аппаратурой, и получения точного спектра.

Авторы приносят свою благодарность академику А.Р. Мкртчяну за ценные обсуждения.

Список литературы

- [1] *Блохин М.А.* Физика рентгеновских лучей. М.: Гос. изд. техн. теор. лит., 1957.
- [2] *Блохин М.А.* Методы рентгеноспектральных исследований. М.: Изд. физ.-мат., лит., 1959.
- [3] *Пинскер З.Г.* Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982.
- [4] *Gabrielyan R.G., Kotandjian Kh.V.* // Phys. stat. sol. (b). М.: 1989. V. 151. P. 655.
- [5] *Кольер Р., Беркхарт К., Лин Л.* Оптическая голография. М.: Мир, 1973.
- [6] *Прудников А.П., Брычков Ю.А., Марычев О.И.* Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981.