

Г. П. ПЕТРОВА, Н. А. ПИЧИКЯН

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОБСТВЕННОЙ ШИРИНЫ БОКОВЫХ КОМПОНЕНТОВ СПЕКТРА ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ЛИНИИ РЕЛЕЕВСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В *n*-ГЕКСАДЕКАНЕ

С помощью алгоритма быстрого преобразования Фурье определяются истинные контуры компонентов триплета Манделъштама — Бриллюэна в гексадекане при 60°C. Показано, что в случае, когда ширина экспериментального контура и аппаратной функции близки по величине, можно рассчитать истинный контур при наложении определенных условий на спектр искомой функции.

Тонкая структура спектров молекулярного рассеяния света несет в себе информацию о целом ряде важных характеристик рассеивающей среды. В частности, временное затухание тепловых неоднородностей или поглощение гиперзвуковых волн в жидкой среде может быть определено по ширине боковых компонентов триплета Манделъштама — Бриллюэна.

Использование лазера в качестве источника света, и в особенности лазера, работающего в одночастотном режиме, позволяет с достаточно высокой точностью воспроизвести контуры спектральных линий триплета Манделъштама — Бриллюэна. Однако при этом необходимо определить действительную ширину компонентов исследуемого спектра. Известно, что наблюдаемый контур спектральной линии $F(y)$ в результате искажающего влияния оптического прибора (спектрографа) всегда отличается от истинного контура $f(x)$ этой линии [1, 2]. Уравнение, связывающее вход прибора и его выход, имеет вид

$$F(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) h(y-x) dx. \quad (1)$$

Так как возбуждающая линия и аппаратная функция анализатора отличаются от δ -функции, то результирующая функция отклика $h(y-x)$ играет роль эффективной аппаратной функции оптической установки и совпадает с контуром, наблюдаемым на выходе прибора, когда на его вход воздействует возбуждающая линия.

Задача восстановления входа прибора $f(x)$ по известному выходу $F(y)$ заключается в решении интегрального уравнения (1). Для решения, как правило, используется аппарат Фурье-преобразований с учетом свойства свертки, согласно которому Фурье-преобразование

свертки двух функций равно произведению Фурье-преобразований каждой функции в отдельности. В тех случаях, когда видимый контур и аппаратная функция не являются гауссовскими или лоренцевыми, для решения интегрального уравнения приходится аппроксимировать их какой-либо функциональной зависимостью. Для вычислений Фурье-преобразования функции, которая задана в виде последовательности дискретных отсчетов, на ЭВМ может быть использован алгоритм так называемого «быстрого преобразования Фурье» [3, 4]. Определение истинного контура спектральной линии с помощью ЭВМ в этом случае сводится к следующим операциям.

Нахождение последовательности дискретных отсчетов $F(y)$ и $h(x)$ для наблюдаемого контура и аппаратной функции.

Вычисление с помощью «быстрого преобразования Фурье» спектров функций $F(y)$ и $h(x)$ ($\tilde{F}(\omega)$ и $\tilde{h}(\omega)$).

$$\text{Расчет величины } \tilde{f}(\omega) = \frac{F(\omega)}{h(\omega)}.$$

Нахождение с помощью обратного преобразования Фурье последовательности дискретных отсчетов $f(x)$ для контура входа $f(x) = F^{-1}\{\tilde{f}(\omega)\}$.

Изложенный метод был использован для определения истинных контуров спектров тонкой структуры релеевской линии в *n*-гексадекане при температурах от 20°C до точки кипения. Экспериментальные данные были получены на установке, описанной в [5] с фотоэлектрической регистрацией спектров рассеяния, возбужденного излучением He—Ne лазера в одночастотном режиме. Очищенное от пыли исследуемое вещество нагревалось в цилиндрической стеклянной кювете [6]. Как показывает эксперимент, контуры спектральных линий триплета Манделштама—Бриллюэна в гексадекане характерны тем, что ширины боковых и центральной компонент близки к ширине аппаратной функции.

Для отработки программы расчета на ЭВМ задавались в виде таблиц (число точек разбиения 128) две дисперсионные кривые, полуширины которых приблизительно соответствовали полуширинам наблюдаемых в эксперименте контуров компонент спектра и аппаратной функции (в отсчетных интервалах $\delta v_F=9$, $\delta v_h=6$). Полуширина восстановленного контура равнялась $\delta v_f=3$.

В реальном эксперименте значения функций $F(y)$ и $h(x)$ всегда определяются с некоторой погрешностью. В [2] показано, что в этом случае без наложения дополнительных ограничений на функцию $\tilde{f}(\omega)$, задача определения точного значения функции $f(x)$ будет некорректной. В особенности это существенно тогда, когда ширина спектра входного воздействия близка к ширине спектра аппаратной функции. Способ аппроксимации для нахождения искомой функции $f(x)$ может быть выбран в каждом конкретном случае [7, 8].

Для получения оценки с минимальной среднеквадратичной ошибкой в простейших случаях процедура регуляризации решения может быть выполнена с помощью введения винеровского корректирующего фильтра [8] с характеристикой вида

$$\frac{|\hat{S}(\omega)|^2}{|\hat{S}(\omega)|^2 + \tilde{N}(\omega)}, \quad (2)$$

где $|\hat{S}(\omega)|^2$ — ожидаемый спектр мощности восстановленного сигнала, $\tilde{N}(\omega) = \sigma^2(\omega)$ — спектральная плотность мощности ошибок измерения.

Функция отклика $h(x)$, как правило, определяется с более высокой точностью, чем $F(y)$, и спектр ее более широкий, поэтому ошибки в определении h можно не учитывать.

Применение подобных методов регуляризации решения для нахождения входного воздействия по экспериментальным значениям $F(x)$ и $h(x)$ предполагает наличие априорных сведений о форме спектра вносимых погрешностей и о классе

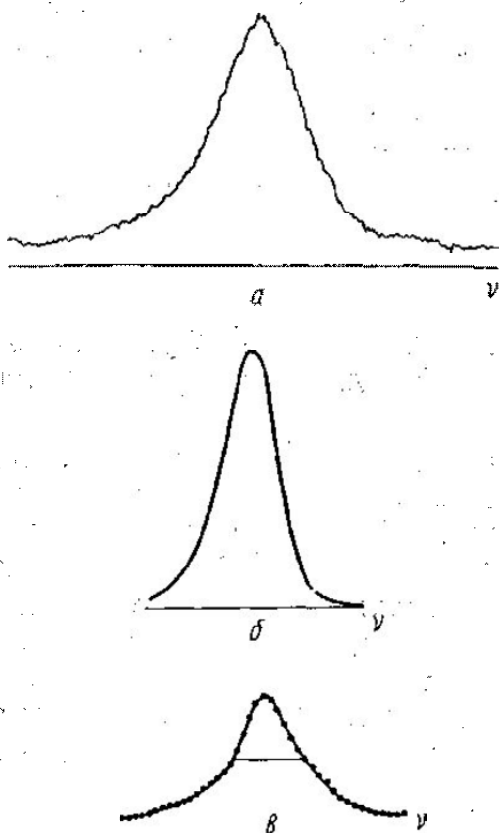


Рис. 1. Контур бокового компонента спектра тонкой структуры релеевского рассеяния света в n -гексадекане при 63°C (а), контур аппаратной функции установки (б) и вычисленный на машине контур бокового компонента (в)

оса. ов. фу. ц. В действительности эти факторы меняются от опыта к опыту, поэтому в качестве $S(\omega)$ и $N(\omega)$ разумно использовать их статистические оценки, получаемые из экспериментальных данных.

Так как дискретные отсчеты снимаются с экспериментальных кривых через достаточно большие интервалы, то спектр погрешностей можно приближенно считать «белым». На это указывает также наличие незатухающих высокочастотных «хвостов» в рассчитанных спектрах $\tilde{F}(\omega)$. В этом случае постоянную спектральную плотность $N(\omega)$ можно оценить по среднеквадратичному значению отсчетов в высокочастотной области $\tilde{F}(\omega)$. Задача оценки ожидаемого спектра $\tilde{S}(\omega)$ является более сложной.

В случае экспериментальных контуров в гексадекане спектр $\tilde{S}(\omega)$ наилучшим образом описывается экспоненциальной зависимостью, которая и принималась в качестве оценки $\tilde{S}(\omega)$. Вычисленный из этих данных регуляризирующий множитель (2), начиная с определенной гармоники достаточно резко спадает от значений, близких к 1, до нуля. Резкий характер спада регуляризатора позволяет

фактически заменить его прямоугольной функцией, отбрасывающей все последующие гармоники.

$t^\circ\text{C}$	$f \cdot 10^{-9}$ Гц	$\delta\nu_{\text{МБ}}$ см $^{-1}$	$\delta\nu_{\text{МБ}}$ мГц	α см $^{-1}$	$\alpha/f^2 \cdot 10^{17}$ см $^{-1} \cdot \text{с}^2$	$1/2I_{\text{бок}}$ (интегр)
25	4,32	0,0162	4860	11 302	60,6	—
63	3,81	0,010	3000	7 806	53,8	0,38
111	3,24	0,0053	1590	4 800	45,75	0,305
163	2,76	0,0042	1260	4 334	55,95	—
188	2,46	0,0031	930	3 889	64,3	0,22
288	2,13	0,0022	660	2 646	64,26	0,20

МБ—Мандельштама—Бриллюэна.

Для проверки допустимости такого упрощения процедуры регуляризации был проведен контрольный расчет по восстановлению дисперсионного контура $f(\nu_i)$, когда значения функции $F(\nu_i)$ были заданы с

шумом 3%, который превышает уровень экспериментальных ошибок. Как показали расчеты, аппроксимация нулями не дает заметного ухудшения точности приближения к истинному контуру. Найденная таким способом полуширина восстановленного дисперсионного контура $\delta\nu$ равна 3,5, т. е. определяется с погрешностью в 15%.

При обработке экспериментальных данных для каждого контура бокового и центрального компонента триплета Мандельштама — Бриллюэна, соответствующих различным температурам в гексадекане, находилось соотношение (2), величина которого позволяла определить

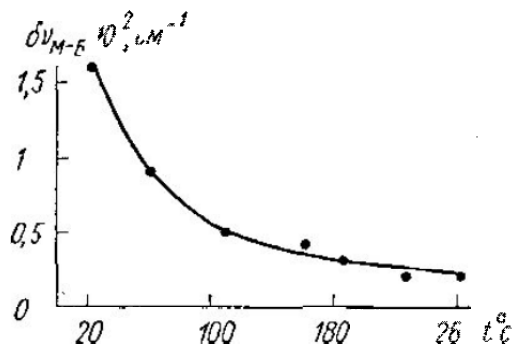


Рис. 2. Температурная зависимость собственной ширины компонентов Мандельштама—Бриллюэна в *n*-гексадекане

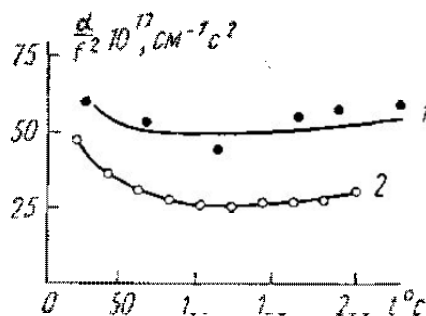


Рис. 3. Температурная зависимость параметра α/f^2 для *n*-гексадекана: 1 — расчет по экспериментальным данным, 2 — стоксовские значения

гармонику в спектре, начиная с которой все последующие гармоники $\tilde{F}(\omega)$ отбрасывались.

В качестве примера на рис. 1 представлены три контура: наблюдаемый экспериментальный контур бокового компонента спектра тонкой структуры линии релеевского рассеяния света в *n*-гексадекане при 63°C, контур аппаратной функции установки и восстановленный с помощью машинного счета контур бокового компонента. Уровень шума, с которым записывались экспериментальные контуры, не превышал 1%, при этом точность определения собственной полуширины бокового компонента составляла 5—6%, центрального — 10—15%.

На графике рис. 2 и в таблице приводится зависимость от температуры собственной полуширины бокового компонента $\delta\nu_{MB}$ в спектре молекулярного рассеяния света в гексадекане. Как видим, $\delta\nu_{MB}$ уменьшается почти на порядок при приближении к температуре кипения по сравнению со значением при комнатной температуре. По найденной полуширине боковых компонентов рассчитывался амплитудный коэффициент поглощения гиперзвука $\alpha = \frac{\pi c \delta\nu_{MB}}{v_T}$ (где v_T — скорость гиперзвука) и параметр $\frac{\alpha}{f^2}$. Результаты представлены в таблице.

Как видно из таблицы, амплитудный коэффициент поглощения гиперзвука α уменьшается с ростом температуры.

На рис. 3 приводится график температурной зависимости значений $\frac{\alpha}{f^2}$ для *n*-гексадекана, рассчитанных по экспериментальным данным. Здесь же приведены значения этого параметра, рассчитанные по формуле классического поглощения (формула Стокса):

$$\frac{\alpha}{f^2} = \frac{8}{3} \frac{\pi^2}{\rho v^3}$$

где v — скорость звука. Как можно видеть из графика, экспериментальные значения параметра $\frac{\alpha}{f^2}$ превышают стоковские значения, обусловленные сдвиговой вязкостью и теплопроводностью, т. е. наблюдается сверхстоксовское поглощение.

В таблице приводятся также значения соотношения интенсивностей в компонентах триплета Мандельштама—Бриллюэна ($I_{\text{ц}}/2 I_{\text{бок}}$) для восстановленных контуров. Эти данные примерно на 20% выше приведенных в работе [6] значений $I_{\text{ц}}/2 I_{\text{бок}}$, вычисленных по экспериментально наблюдаемым контурам.

В заключение авторы выражают благодарность В. А. Бурову за постоянные консультации и В. Г. Артамонову за помощь при проведении экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Раутман С. Г. «Успехи физических наук», 16, вып. 3, 1955.
2. Хургин Я. И., Яковлев В. П. Фinitные функции в физике и технике. М., 1971.
3. Cooley J. W., Tukey J. W. «Math. of Comput.», 19, 297, 1965.
4. Бергланд. «Зарубежная радиоэлектроника», 3, 52, 1971.
5. Ахметов А. Т. Дипломная работа. МГУ, 1968.
6. Петрова Г. П., Пичикян Н. А. «Вестн. Моск. ун-та», 13, 531, 1972.
7. Болдескул А. Е., Буян Г. П. «Оптика и спектроскопия», 31, вып. 4, 579, 1971.
8. Турчин В. Ф., Козлов В. П., Малкевич М. С. «Успехи физических наук», 102, вып. 3, 345, 1970.

Поступила в редакцию
6.7 1973 г.

Кафедра
молекулярной физики