

双窗函数方法及其在量子振荡频谱 分析中的应用

何 豫 生

(清华大学物理系)

1985年4月18日收到

提 要

对于形状比较复杂的费密面,普通的固体量子振荡频谱分析方法遇到了很大的困难,某些问题的研究工作(例如,IV—VI族化合物畸变相费密面的研究)因此而一度停顿.本文提出了一种双窗函数方法,成功地解决了 $Pb_{1-x}Sn_xTe$, $SnTe$ 等畸变相费密面的测绘问题.这种方法选用“强”、“弱”两种不同时窗函数,加在量子振荡信号上,分别进行频谱分析,从而最大限度地压低噪声水平,尽可能提高检测灵敏度的同时,又保证了较高的分辨率和较低的误差.对计算机模拟信号(由振幅不等的10个分量组成)的分析表明,最大频率误差不超过1%.

以德哈斯-凡阿尔芬(dHVA)效应及舒伯尼科夫-德哈斯(SdH)效应为代表的量子振荡,是固体中的一种重要的宏观量子现象.这种量子振荡的频率,正比于固体的费密面极值截面面积.根据这一特性,就可以进一步求出整个费密面的大小和形状.因此,对于实验中记录下来的振荡信号进行傅里叶分析,就成为这一实验的数据处理中的关键步骤.

二十多年来,用这一方法成功地绘制了许多元素和化合物的费密面^[1].但是对于形状复杂的费密面,普通的频谱分析方法却遇到了极大的困难.例如IV—VI族窄禁带半导体 $(Pb,Sn)Te$ 和 $(Pb,Ge)Te$ 等在低温下由于经历位移结构相变,其费密面由简单椭球发生畸变,再加上“畴”的出现,使振荡变得十分复杂.1966年美国Burke, Houston和Savage曾观测过 $SnTe$ 的SdH效应^[2],并由频谱分析得到了一、二十个振荡频率.但是由于频率过多,一时又无法分辨真伪,得不出肯定的结论.1972年他们又用dHVA和SdH效应,再次测量 $SnTe$ 的费密面^[3].为便于分析,他们只取了频谱中信号较强的低频部分.由于信息毕竟过少,还是得不到满意的解释.1980年Murase等人又对结构与 $SnTe$ 类似的 $(Pb,Ge)Te$ 的SdH效应进行分析,发现即使在 $H//100$ 方向上,SdH频率好象也不止是一个^[4].两年后,他们称“只能从振荡的低场一边的振荡信号中得出SdH振荡的主要频率来”,而其它频率“尚不十分清楚”^[5].可见,找到一个合适的分析方法是何等重要.

作者从1980年开始用SdH效应研究 $(Pb,Sn)Te$ 的能带结构.经过反复探索,找到了一种双窗函数方法,终于成功地解决了对SdH信号进行傅里叶分析中的问题,得出了在畸变相下 $(Pb,Sn)Te$ 的费密面^[6].并以此为基础,进一步对十二年前的悬案—— $SnTe$

的 dHVA 和 SdH 实验结果提出了新的解释^[7]. 下面着重对双窗函数方法作一简单的介绍.

我们知道,任何一个观测到的信号都是有限长的. 在进行傅里叶分析的时候,实际上相当于把这有限长的信号进行无限的周期扩展. 由于这一有限信号两端边界值往往并不相等,这种周期延拓就出现了不连续(或虽连续却不光滑),正是这种不连续(或不光滑)引起了频谱的畸变. 所谓时窗函数,就是用一个在边界处具有高阶数光滑的加权函数加在信号上,以改善这种不连续性,最大限度地降低噪声水平,从而提高对信号中微弱分量的可探测性(灵敏度).

实际上,所谓“有限信号”本身,也可以看作是由一个矩形时窗作用在一个无限长的信号上的结果. 而这种有限信号(或称为无限信号的截尾信号)的频谱,实际上是无限信号的频谱与时窗函数频谱的卷积. 设无限信号 $x(n)=x(n\Delta)$ (其中 $-\infty < n < \infty, \Delta$ 为抽样时间间隔),其频谱为 $X(f)$; 时窗函数 $w_N(n)$, 频谱 $W_N(f)$. 得到的截尾信号可表示为

$$x_N(n) = x(n)w_N(n), \quad (1)$$

相应频谱

$$X_N(f) = X(f) * W_N(f) = \Delta \int_{-\frac{1}{2\Delta}}^{\frac{1}{2\Delta}} W_N(\lambda) X(f - \lambda) d\lambda. \quad (2)$$

由(2)式不难看出,截尾信号频谱 $X_N(f)$ 与原始信号频谱 $X(f)$ 的差异,完全由时窗函数频谱 $W_N(f)$ 确定. 因此,问题的关键就是选择一个合适的时窗函数,对矩形截尾信号(实验中获得有限信号)加以改造,使其频谱能更好地反映原始频谱的特点.

图 1 给出矩形时窗的频谱. 它的主瓣(即谱中间峰)不是很宽,但是旁瓣的水平却相当高(第一旁瓣仅比主瓣低 13dB 左右). 如此数目多、水平高的旁瓣,在形成截尾函数频谱 $X_N(f)$ 过程中,会产生很大的破坏作用. 设主瓣宽度为 $2F$, 则(2)式可改写为

$$\begin{aligned} X_N(f) &= \Delta \int_{-\frac{1}{2\Delta}}^{\frac{1}{2\Delta}} W_N(\lambda) X(f - \lambda) d\lambda \\ &= \Delta \int_{-\frac{1}{2\Delta}}^{-F} W_N(\lambda) X(f - \lambda) d\lambda + \Delta \int_{-F}^F W_N(\lambda) X(f - \lambda) d\lambda \\ &\quad + \Delta \int_F^{\frac{1}{2\Delta}} W_N(\lambda) X(f - \lambda) d\lambda \\ &= \Delta \int_{f+F}^{f+\frac{1}{2\Delta}} W_N(f - w) X(w) dw + \int_{f-F}^{f+F} W_N(f - w) X(w) dw \\ &\quad + \Delta \int_{f-\frac{1}{2\Delta}}^{f-F} W_N(f - w) X(w) dw. \end{aligned} \quad (3)$$

(3)式右端第一、三两项反映了原始频谱 $X(f)$ 在范围 $[f - F, f + F]$ 之外的值对 f 点截尾频谱的影响,这是旁瓣作用的结果,称为“时窗泄漏”. 若旁瓣削为 0,一、三两项则为 0,这种影响即可消除. 针对这一点,人们往往把主瓣振幅与最大旁瓣振幅之比或振幅平方之比的大小,作为判断时窗优劣的一个标准. 创造了最大振幅比时窗、最大能量比时窗等多种最佳时窗.

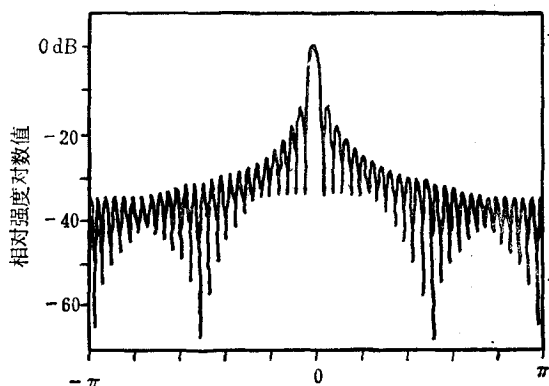


图 1

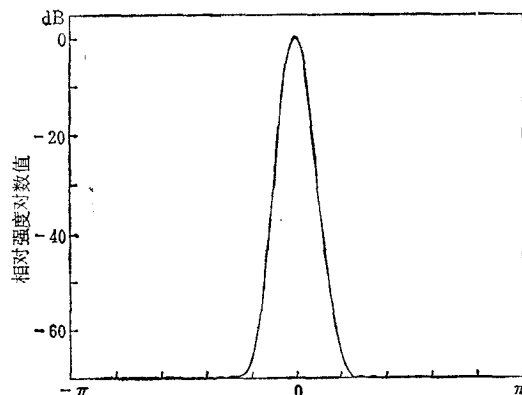


图 2

但是,单纯削减旁瓣的振幅,并不能完全解决截尾频谱的畸变问题。由(3)式右端第二项可以看出,时窗频谱的主瓣对原始频谱的作用,实际上是在主瓣宽度范围 $[f - F, f + F]$ 内,由加权函数 $W_N(f - \omega)$ 对原始频谱 $X(\omega)$ 求和平均,使得原始频谱在宽度为 $2F$ 的范围内被主瓣平滑了。因此,一般说来,在原始频谱有尖锐值的地方,平滑后就产生较大的差异。尤其严重的是,如果原始信号的两个强度相近的分量间的距离小于主瓣的宽度,在截尾信号频谱上往往就很难加以分辨。这样主瓣带宽的增加,就给截尾信号带来较大的频率误差并造成对待测信号中强度相近的分量的分辨能力的降低。图 2 给出在对 dHVA 或 SdH 等实验数据进行傅里叶分析时常用的高斯时窗函数的频谱(其中参量 α , 标准偏差的倒数,取为 3.5)。它的旁瓣已削到了极低的水平,基本上解决了时窗泄漏造成灵敏度降低的问题,但是主瓣的显著加宽,又带来了上述新的困难。

综上所述,可以看出,对一个好的时窗函数,希望能满足两条:(1)旁瓣水平相对于主瓣尽可能地低,以提高对复杂信号中微弱分量的检测灵敏度;(2)主瓣宽度尽可能地小,以获得较高的分辨率和精确度¹⁾。但是,这两个条件彼此间是有矛盾的。实际上只有主瓣越宽大,旁瓣水平就可能越低。两者无法兼得。正是这种对时窗函数的互相矛盾的要求,导致了双窗函数方法的设想。

简单地说,所谓“双窗函数方法”,就是选择两个不同的时窗函数,各自满足上述两条互相矛盾的要求中的一个方面,分别作用在被测信号上,进行傅里叶分析,最后将两次分析的结果加以综合分析,就可以得到较高的灵敏度、分辨率和精确度。

为了找到合适的时窗函数,作者曾对许多的时窗函数进行了检验:从简单的三角时窗^[10]、余弦时窗^[10],到比较复杂的高斯(钟形)时窗^[11],Hamming 时窗^[10],Hanning-Poisson 时窗^[12]等。表 1 给出部分时窗频谱的主要参数。在这几种时窗中,以所谓 Kaiser-Bessel 时窗^[13]效果最好²⁾。这个时窗函数是一种最大能量比时窗,是由 Kaiser 在 1966 年首先用第

1) 当然,全面评价一个时窗的优劣,是一个复杂的问题。还要考虑相干增益、重叠相关等因素。因篇幅关系,不在这这里一一讨论。建议参看有关文献,例如文献[8,9]。

2) 应当指出,表 1 中给出的 Dolph-Chebyshev 时窗^[14],虽然是一种最大振幅比时窗,在振幅比相同情况下,其主瓣带宽甚至比 Kaiser-Bessel 时窗还要窄,但它的旁瓣水平在整个频谱范围内保持不变,因而实际上给截尾频谱造成的畸变比 Kaiser-Bessel 时窗要大。

表 1 几种时窗函数频谱的主要参数

时窗函数名称	最高旁瓣水平 (dB)	旁瓣衰减情况 (dB/oct)	等价噪声带宽	文献	
矩形时窗	-13	-6	1.0		
余弦时窗	-23	-12	1.23	[10]	
三角时窗	-27	-12	1.33	[10]	
Hamming 时窗	-43	-6	1.36	[10]	
Hanning-Poisson 时窗	$\alpha = 0.5$ $\alpha = 1.0$	-35 -39	-18 -18	1.61 1.73	[12]
高斯时窗	$\alpha = 2.5$ $\alpha = 3.0$ $\alpha = 3.5$	-42 -55 -69	-6 -6 -6	1.39 1.64 1.90	[11]
Dolph-Chebyshev 时窗	$\alpha = 2.5$ $\alpha = 3.0$ $\alpha = 3.5$	-50 -60 -70	0 0 0	1.39 1.51 1.62	[14]
Kaiser-Bessel 时窗	$\alpha = 0.1$ $\alpha = 2.5$ $\alpha = 3.0$	-25 -57 -69	-6 -6 -6	1.20 1.65 1.80	[13]

一类零阶贝塞耳函数形式提出来的。其表达式为

$$w(n) = \frac{I_0 \left[\pi \alpha \sqrt{1.0 - \left(\frac{n}{N/2} \right)^2} \right]}{I_0(\pi \alpha)} \quad 0 \leq n \leq N/2, \quad (4)$$

其中 $I_0(x)$ 是变形的第一类零阶贝塞耳函数,

$$I_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left[\frac{\left(\frac{x}{2} \right)^k}{k!} \right]^2.$$

时窗函数相应的频谱可近似表为

$$W(f) = \frac{N}{I_0(\pi \alpha)} \cdot \frac{\sin h[\sqrt{\pi^2 \alpha^2 - (N \cdot f/2)^2}]}{\sqrt{\pi^2 \alpha^2 - (N \cdot f/2)^2}}. \quad (5)$$

(4),(5)两式中, $\pi \alpha$ 是带宽参数. α 较大时, 窗函数本身较窄, 边界点附近的光滑度 (高阶导数连续性) 较高; 换句话说, 其相应的频谱旁瓣水平较低, 而主瓣宽度较大. 如果我们选取不同的 α 值, 就可以得到满足不同要求的不同的时窗函数. 在分析 (Pb, Sn)Te 合金的 SdH 实验结果时, 我们选取 $\alpha = 2.5$ 作为第一个时窗 (称为强时窗), 取 $\alpha = 0.1$ 作为第二个时窗 (称为弱时窗). 从图 3(a), (b) 可以看到这两个时窗的频谱分别满足旁瓣水平要低或主瓣宽度要窄的要求.

为了进一步研究上述两个时窗的特性和检验双窗函数方法的可靠性, 我们参照 (Pb, Sn)Te 的 SdH 振荡实际情况, 根据 Adam-Holstein 理论^[17], 用计算机产生了一个模拟 SdH 振荡信号

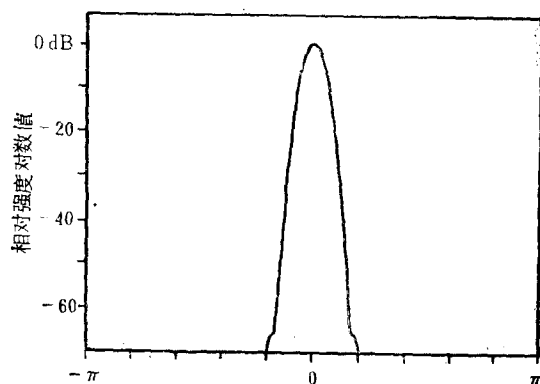
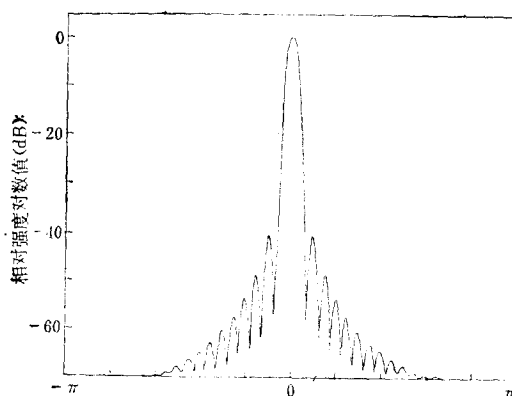
(a) $\alpha = 2.5$ 强时窗(b) $\alpha = 0.1$ 弱时窗

图3 Kaiser-Bessel 时窗的频谱

$$Y = \sum_i C A_i \cos\left(\frac{2\pi F_i}{B} + \phi_i\right) + n_1 B + n_2 B, \quad (6)$$

其中

$$C = \frac{\exp(-14.69 m^* T_D / B)}{B^{1/2} \sinh(14.69 m^* T / B)} J_1\left(\frac{2\pi b F_i}{B^2}\right). \quad (7)$$

(7)式中 $m^* = 0.02$, $T_D = 10\text{K}$, $T = 4.2\text{K}$, $b = 0.014\text{T}$, 均参照 (Pb, Sn)Te 的实验值给出; J_1 为一阶贝塞耳函数, B 是磁感应强度. (6) 式中 n_1, n_2 为两个常数, 用以模拟背景信号; 振荡信号是以 $1/B$ 为周期的余弦函数; i 表示信号的不同分量, 依实验数据的实际情况, 取 $i = 10$; A_i, F_i, ϕ_i 分别表示第 i 分量的振幅、频率和位相. 表 2 列出了给定各分量频率和振幅值及用两个时窗函数进行傅里叶分析得到的相应结果. 图 4(a)~(d) 给出输入信号频谱以及相应的双窗函数分析结果.

从表 2 和图 4 不难看出, 在“强时窗”的作用下, 信噪比大大提高, 噪声水平压低到输入信号最强分量的 0.2% 以下, 比最弱分量还要小一个数量级. 相对强度为最强分量 1% 左右的几个微弱分量, 在频谱 (图 4(c)) 上清晰可见. 表明“强时窗”所具有的检测灵敏度

较高的特点;但其分辨率却比较差,振幅相近、频率相差仅为1—2T的几个分量(其间隔为总频谱宽度的2%)无法分辨(如 $F = 21\text{T}$, $F = 36\text{T}$ 等分量在图4(c)中‘失踪’),并由此带来了较大的频率误差(3—4%左右)。作为一种补救,我们转向“弱时窗”,尽管噪声水平增加了一百多倍,以致所有微弱分量都被“淹没”在无数的小峰之中,但是分辨率却得到了极大的改善,在“强时窗”下合并的峰全部分裂开来,因而频率的精确度(仅对高于噪声水平的分量而言)提高到 $\Delta F/F < 0.5\%$ 。这样把前后两个时窗,两套结果加以对照比较、综合分析,就可以比较准确地、完整地反映出原始信号的频谱来。

如前所述,用这种方法对 (Pb, Sn)Te 样品的 SdH 实验结果进行分析,成功地得出畸变相的费密面。由这个结果推算出的电子有效质量(理论值)与从 SdH 振幅分析直接得到的电子有效质量(实验值)相比较,符合得很好^[16],也进一步证明了这个方法的可靠性。自然,这一方法并不仅仅局限于对 SdH 振荡信号的处理,它对一般信号的傅里叶分析,特别是复杂的、由多个以致十几个分量组成的混合振荡信号的傅里叶分析尤为适宜。一般说来,其灵敏度(可探测的最弱分量强度小于主分量强度的3%)、分辨率(可分辨的邻近

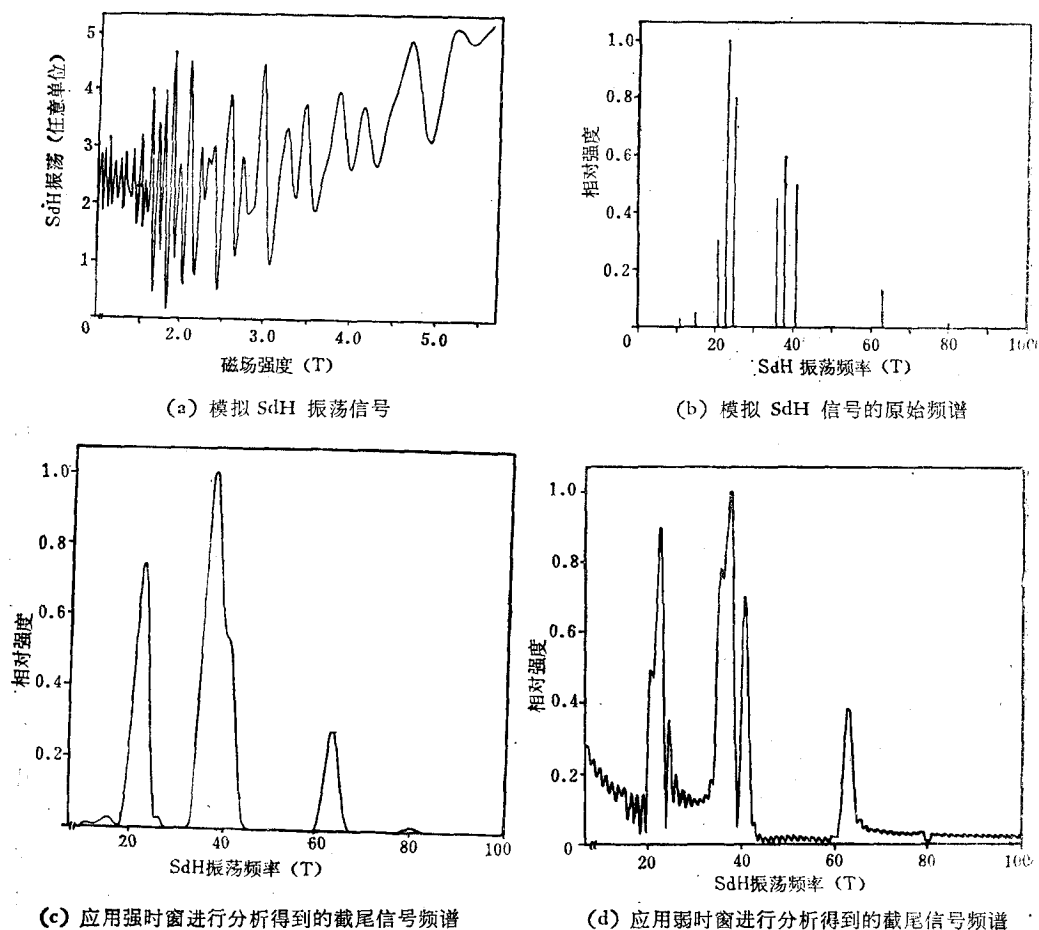


图4 模拟SdH信号及双窗函数方法分析结果

分量频率间隔小于总频谱宽度的 2%) 及频率精确度 ($\Delta F/F < 1\%$) 均可达到比较高的水平。

表 2 模拟 SdH 信号及双窗函数方法分析结果

	模拟 SdH	强时窗分析结果		弱时窗分析结果	
	信号	结果	误差	结果	误差
1 频率	11.0	11.0	0%	?	
1 振幅	0.03	0.017		低于噪声水平	
2 频率	15.0	15.0	0%	?	
2 振幅	0.05	0.027		低于噪声水平	
3 频率	21.0	?		21.0	0%
3 振幅	0.3			0.49	
4 频率	23.0	22.4	3%	22.9	0.4%
4 振幅	1.0	0.74		0.9	
5 频率	25.0	25.9	4%	24.9	0.4%
5 振幅	0.8	0.37		0.35	
6 频率	36.0	?		36.15	0.4%
6 振幅	0.45			0.80	
7 频率	38.0	37.0	3%	37.8	0.5%
7 振幅	0.60	1.0		1.0	
8 频率	41.0	40.51	1%	41.1	0.3%
8 振幅	0.60	0.53		0.7	
9 频率	63.0	63.0	0%	63.0	0%
9 振幅	0.29	0.28		0.38	
10 频率	80.0	80.0	0%	?	
10 振幅	0.02	0.014		低于噪声水平	
平均噪声水平(相对于主振幅高度)		0.002		0.20	

参 考 文 献

- [1] 参看例如: M. Springford, *Electrons on the Fermi Surface*, Cambridge, (1980).
- [2] J. R. Burke, B. Houston and H. T. Savage, *Proc. Int. Conf. Phys. Semicond.* 8th, Kyoto, (1966), 384.
- [3] H. T. Savage, B. Houston and J. R. Burke, *Phys. Rev.*, B6(1972), 2292.
- [4] K. Murase, *Proc.*, 15th Int. Conf. Phys. Semicond., Kyoto, *J. Phys. Soc. Japan* 49 Suppl(1980), A725.
- [5] S. Takaoka and K. Murase, *J. Phys. Soc. Japan*, 51(1982), 1837.
- [6] He Yusheng and A. D. C. Grassie, *Application of High Magnetic Field in Semiconductor Physics*, Springer-Verlag, (1983), 369 or *J. Phys. F*, 15 (1985), 317.
- [7] He Yusheng and A. D. C. Grassie, *Solid State Commun.*, 51 (1984), 243.
- [8] William D. Stanley, *Digital Signal Processing*, Reston Publishing Company, Inc., (1975).
- [9] Fredric J. Harris, *Proc. IEEE*, 166 (1978), 51.
- [10] R. B. Blackman and J. W. Tukey, *The Measurement of Power Spectra*, Appendix B5 p. 95 New York: Dover, (1958).
- [11] T. W. Anderson, *The Statistical Analysis of Time Series*, John Wiley and Sons, (1976).
- [12] N. K. Bary, *A Treatise on Trigonometric Series Vol. 1*, New York: Macmillan, (1964).
- [13] F. F. Kuo and J. F. Kaiser, *System Analysis by Digital Computer*, New York: Wiley, (1964), 232.
- [14] H. D. Helms, *IEEE Trans. Audio Electroacoust.*, Vol AO-19 (1971), 87.

- [15] E. N. Adams and T. D. Holstein, *J. Phys. Chem. Solids*, **10**(1959), 254.
[16] He Yusheng and A. D. C. Grassie, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 2937 or *J. Phys. F*, **15** (1985), 337.

THE TWO WINDOW FOURIER TRANSFORM TECHNIQUE AND ITS APPLICATION IN THE SPECTRUM ANALYSIS OF QUANTUM OSCILLATIONS

HE YU-SHENG

(Department of Physics, Tsinghua University)

ABSTRACT

The conventional Fourier transform methods were found to give an inadequately accurate and complete spectrum of the quantum oscillation frequencies for some materials with complicated Fermi surface such as IV—VI compounds in the distorted phase. Because of this problem, the early de Haas-van Alphen data of SnTe could not be interpreted properly. The 'two window Fourier transform' technique was developed, and it solved this problem successfully in the Fermi surface measurements of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ and SnTe. In this technique, the spectrum analysis are performed twice for each set of data by using two different windows, referred as 'strong window' and 'weak window' respectively, so as to increase the signal to noise ratio and to detect components with weaker strength and to resolve neighbouring components of similar strength. Hence higher detectability and resolvability and better accuracy can be achieved. The analysis results of the pseudo-SdH simulation signal, consisting of 10 components with different amplitude, show that the error in frequency of the spectrum is less than 1%.