

УДК 535.338.334

О ФОРМЕ КОНТУРА СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ 1315 нм АТОМАРНОГО ЙОДА

Шейх-Заде М. И.

*ГБОУВО РК «Крымский инженерно-педагогический университет», Симферополь,
Республика Крым, Россия
E-mail: ems@kipu-rc.ru*

Проведена аппроксимация экспериментального контура спектральной линии 1315 нм атомарного йода функциями Коши, Гаусса и эмпирической функцией $f(k,x)$. Проведён сравнительный анализ аппроксимации этого контура указанными функциями и функцией Фойгта. Данные по аппроксимации экспериментального контура функцией Фойгта взяты из литературных источников. Показано, что из четырёх рассмотренных функций, функции Фойгта и $f(k,x)$ описывают этот контур более удовлетворительно и с сопоставимым качеством.

Ключевые слова: спектральная линия, контур, аппроксимация.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что испускание электромагнитного излучения атомами не является строго монохроматическим [1–4]. Энергия излучения всегда распределяется в некотором интервале частот. Графическое представление такого распределения образует контур спектральной линии. Характер распределения энергии по частотам определяет форму контура. Одной из важных задач теоретической спектроскопии является аналитическое описание формы контуров спектральных линий.

На формирование формы контуров спектральных линий оказывают влияние различные процессы. Основными из них являются: радиационное затухание, эффект Доплера, столкновения между атомами. Под влиянием каждого из этих процессов формируются контуры, которые описываются функциями Коши, Гаусса, Лоренца [1–4]. Весьма гибкой и универсальной функцией для аппроксимации контуров является функция Фойгта [2–7], которая учитывает все названные механизмы уширения спектральных линий.

В работе [8] для аппроксимации контуров полос ИК поглощения была предложена эмпирическая функция, которая в центрированном и нормированном к единице в максимуме виде выглядит следующим образом:

$$f(k, x) = \left\{ 1 + \frac{[1 + (2 \ln 2)(k - 1)]x^2}{k^2} \right\}^{-(k+1)/2},$$

где k -параметр, значение которого должно быть определено для аппроксимируемого контура, $x = 2(\nu - \nu_0) / \Delta\nu_{1/2}$, ν_0 – волновое число в максимуме контура, $\Delta\nu_{1/2}$ – полуширина контура (ширина контура на половине высоты). Функция $f(k,x)$

обладает предельными свойствами: при $k=1$ превращается в функцию Коши, а при $k \rightarrow \infty$ превращается в функцию Гаусса.

Целью данной работы является применение функции $f(k,x)$ для аппроксимации экспериментального контура спектральной линии 1315 нм атомарного йода и сравнение качества аппроксимации этого контура функцией $f(k,x)$ и функциями Коши, Гаусса, Фойгта. В данной работе, как и в [8], не предполагается рассматривать вопрос о физической интерпретации функции $f(k,x)$ в силу эмпирического характера этой функции.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В качестве контура спектральной линии для тестирования функции $f(k,x)$ выбран контур линии 1315 нм атомарного йода, который в графическом виде представлен в работе [7]. Для целей настоящей работы этот контур был оцифрован. Для оценки качества аппроксимации рассматриваемого контура той или иной функцией необходимо выбрать критерий наилучшего приближения. В литературе часто в качестве такого критерия используют значение коэффициента детерминации R^2 . Этот критерий используется и в данной работе. При аппроксимации контура функцией $f(k,x)$ находится такое значение k , при котором значение R^2 стремится к максимальному значению, равному единице.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Экспериментальный контур линии 1315 нм атомарного йода, построенный на основе данных работы [7], приведён на рис.1 в центрированном и нормированном к единице по интенсивности в максимуме виде (точки).

Анализ параметров этого контура показал, что контур является ассиметричным. Поэтому необходимо по-отдельности аппроксимировать низкочастотную (НЧ) и высокочастотную (ВЧ) ветви контура. При аппроксимации НЧ- и ВЧ-ветвей контура каждой из рассмотренных функций, были использованы соответственно значения полуширин НЧ- и ВЧ-ветвей экспериментального контура. Результат аппроксимации функцией Коши НЧ-ветви ($R^2=0,9970$) и ВЧ-ветви ($R^2=0,9968$) экспериментального контура показан на рис. 1 (сплошная линия). На рис. 1 также приведён результат аппроксимации функцией Гаусса НЧ-ветви ($R^2=0,9669$) и ВЧ-ветви ($R^2=0,9614$) рассматриваемого экспериментального контура (пунктирная линия). Как из рис. 1, так и из значений R^2 можно видеть, что качество аппроксимации данного контура функцией Гаусса ниже, чем функцией Коши, особенно в области крыльев контура. Из рис. 1 также видно, что экспериментальный контур расположен между контуром Коши и контуром Гаусса. Такой характер расположения экспериментального контура и контуров Коши и Гаусса является типичным как для контуров спектральных линий, так и для контуров полос ИК поглощения [9].

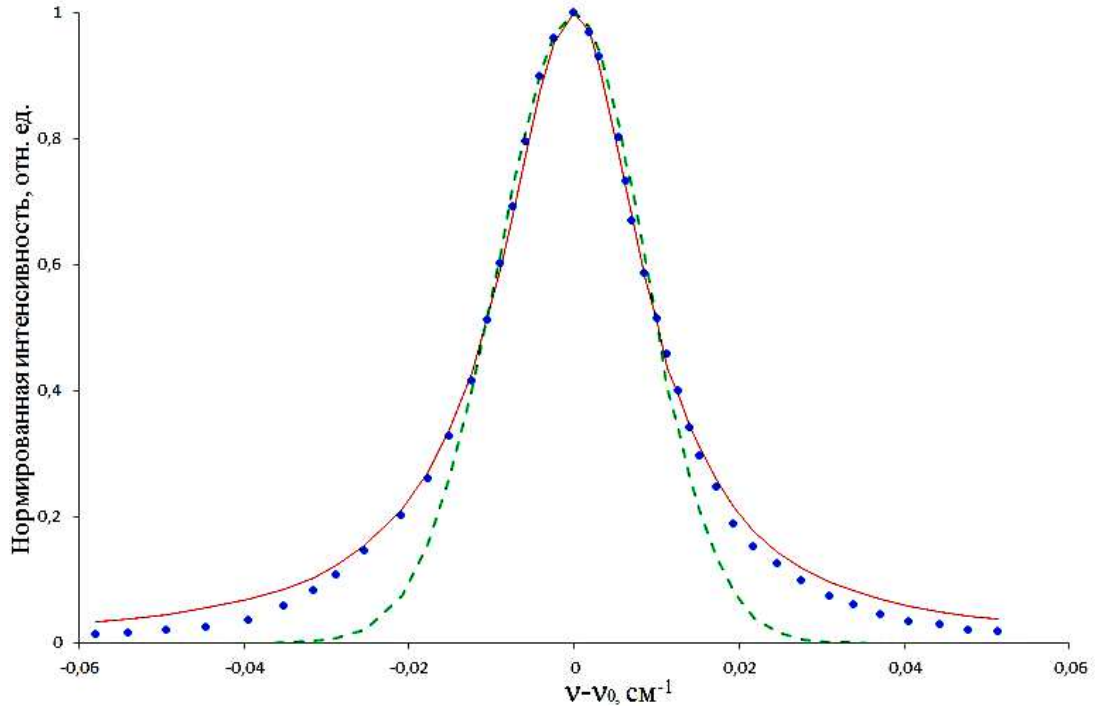


Рис. 1. Экспериментальный контур линии 1315 нм атомарного йода (точки) и его аппроксимация функциями Коши (сплошная линия) и Гаусса (пунктирная линия).

В настоящее время для аппроксимации контуров спектральных линий часто применяется функция Фойгта [10], которая может описывать контуры различной формы – от контура Коши (при $a \rightarrow \infty$) до контура Гаусса (при $a=0$), где a – параметр функции Фойгта. На рис. 2 показан результат аппроксимации экспериментального контура линии 1315 нм атомарного йода (точки) функцией Фойгта (сплошная линия), выполненный в работе [7].

На рис. 2 также приведён результат аппроксимации функцией $f(k,x)$ НЧ-ветви ($R^2=0,9991$ при $k=1,60$) и ВЧ-ветви ($R^2=0,9991$ при $k=1,55$) экспериментального контура (пунктирная линия). Для наглядности и облегчения анализа результатов, все рассчитанные данные сведены в таблицу 1.

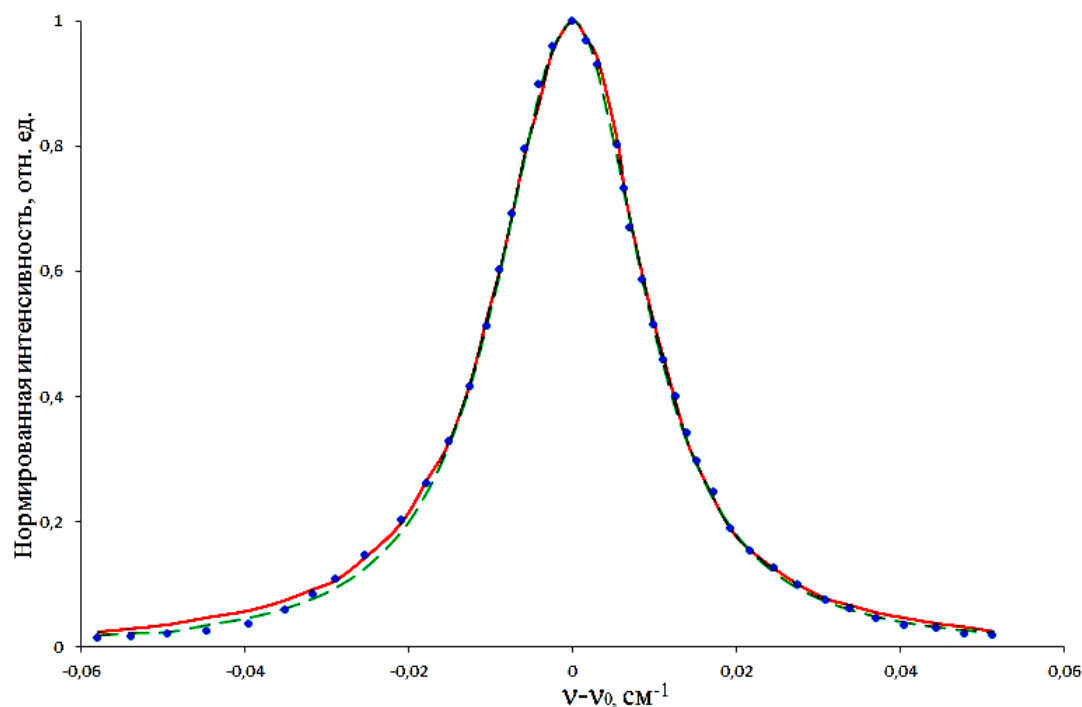


Рис. 2. Экспериментальный контур линии 1315 нм атомарного йода (точки) и его аппроксимация функциями Фойгта (сплошная линия) и функцией $f(k,x)$ (пунктирная линия).

НЧ-ветви соответствует значение $a=1,64$, а ВЧ-ветви – значение $a=1,91$ [7]. Проведя оцифровку этого контура, были рассчитаны значения R^2 , которые оказались равными 0,9985 для НЧ-ветви и 0,9994 для ВЧ-ветви.

Таблица 1
Значения параметров аппроксимирующих функций и R^2 , соответствующие критерию наилучшего приближения

Аппроксимирующие функции	НЧ-ветвь		ВЧ-ветвь	
	Параметр функции	R^2	Параметр функции	R^2
Функция Коши	-	0,9970	-	0,9968
Функция Гаусса	-	0,9669	-	0,9614
Функция Фойгта	$a=1,64$	0,9985	$a=1,91$	0,9994
Функция $f(k,x)$	$k=1,60$	0,9991	$k=1,55$	0,9991

Как видно из рис. 2, центральная часть рассматриваемого экспериментального контура (на расстояниях $\nu - \nu_0 \approx \pm 1,5 \cdot \Delta \nu_{1/2}$) аппроксимируется функциями Фойгта и $f(k, x)$ с сопоставимым качеством, а в области крыльев ($\nu - \nu_0 > \pm 1,5 \cdot \Delta \nu_{1/2}$) качество аппроксимации функцией $f(k, x)$ несколько лучше, чем функцией Фойгта.

Полученные результаты показывают, что из четырёх рассмотренных функций, функции Фойгта и $f(k, x)$ более удовлетворительно аппроксимируют экспериментальный контур спектральной линии 1315 нм атомарного йода, приведённый в [7]. Можно предложить, что функция $f(k, x)$ может быть использована для аппроксимации контуров спектральных линий.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведён сравнительный анализ качества аппроксимации экспериментального контура спектральной линии 1315 нм атомарного йода функциями Коши, Гаусса, Фойгта, $f(k, x)$. Показано, что функции Фойгта и $f(k, x)$ описывают этот контур более удовлетворительно и с сопоставимым качеством.

Список литературы

1. Королёв Ф. А. Теоретическая оптика / Ф. А. Королёв. – М.: Высшая школа, 1966. – С. 123–138.
2. Ленг К. Р. Астрофизические формулы / К. Р. Ленг – М.: Мир, 1978. – Т.1. – 448 с.
3. Пеннер С. С. Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газов / С. С. Пеннер. – М.: ИЛ, 1963. – С. 36–60.
4. Митчелл А. Резонансное излучение и возбужденные атомы / А. Митчелл, М. Земанский. – М.: ОНТИ, 1937. – С. 87–277.
5. Методы исследования плазмы / Под ред. В. Лохте – Хольтгревена. – М.: Мир, 1971. – С. 103–105.
6. Харрис Д. О коэффициенте поглощения в линии, обусловленном эффектом Допплера и затуханием / Д. Харрис // Сб.: Современные проблемы астрофизики и физики Солнца. – М.: ИЛ, 1951. – С. 50–55.
7. Наумова Н. Н. Определение температуры и давления газов по фойгтовскому профилю спектральной линии / Н. Н. Наумова, В. Н. Хохлов // Оптич. журн. – 2006. – Т. 73, № 8. – С. 23–26.
8. Шейх-Заде М. И. Эмпирическая функция для аппроксимации контуров полос ИК поглощения / М. И. Шейх-Заде // Учёные записки Крымского федерального университета им. В. И. Вернадского. Биология. Химия. – 2019. – Т.5(71), №2. – С. 225–229.
9. Цященко Ю. П. Форма контуров колебательных полос поглощения жидких хлороформа и бромформа / Ю. П. Цященко // Журн. Прикл. Спектр. – 1961. – Т.11, №2. – С. 192–195.
10. Михеев П. А. Электроразрядные генераторы атомарного йода и метастабильных атомов аргона и криптона для активных сред газовых лазеров и оптические методы исследования таких сред: Дисс. ... докт. физ.-мат. наук / П. А. Михеев. – Самара, 2016. – 168с.

ABOUT A FORM 1315 nm SPECTRAL LINE CONTOUR OF ATOMIC IODINE

*Sheikh-Zade M.-I.**Crimean Engineering and Pedagogical University, Simferopol, Crimea, Russian Federation
E-mail: ems@kipu-rc.ru*

Emission of electromagnetic radiation atoms is not monochromatic. Radiant every is always distributed in some interval of frequencies. The nature of an energy distribution by frequencies determines a form of spectral line contour. One of important problems of a theoretical spectroscopy is the analytical description of form spectral line contours.

For approximation of spectral line contours functions Cauchy (Lorentz), Gauss, Voigt are often used. The Voigt function is the most flexible and universal for these purposes. All specified functions are connected to particular physical processes which lead to formation of contours of definite form.

In this work for approximation of spectral line contours the empirical function is offered, which is not bound with processes definite these contours form. This function in aligned and the normalized to unit in a maximum looks as follows:

$$f(k, x) = \left\{ 1 + \frac{[1 + (2 \ln 2)(k - 1)]x^2}{k^2} \right\}^{-(k+1)/2},$$

were the k – parameter which value has to be defined for an approximable contour, $x = 2(\nu - \nu_0) / \Delta\nu_{1/2}$, ν_0 – wave number in a maximum of contour, $\Delta\nu_{1/2}$ – half-width of a contour (contour width on a half of height). Function $f(k, x)$ has the extreme properties: at $k=1$ turns into function of Cauchy, and at $k \rightarrow \infty$ turns into function of Gauss.

For comparisational evaluation approximating properties of the specified functions their testing is made on the experimental contour 1315 nm spectral line of an atomic iodine which is taken from literary references. This contour is asymmetric, therefore low-frequency and high-frequency branches of a contour were separately approximated. For evaluation of approximation quality the value of coefficient of determination R^2 is used. At approximation by functions of Cauchi (Lorentz), Gauss, Voigt, $f(k, x)$ a low-frequency branch of R^2 value were equal 0.9970, 0.9669, 0.9985, 0.9991 respectively, and high-frequency branch – equal 0.9968, 0.9614, 0.9994, 0.9991 respectively.

The received results show that from four considered functions, the Voigt and $f(k, x)$ functions more satisfactorily approximate the considered contour and with comparable quality. The assumption is made that function $f(k, x)$ can be used for approximation of spectral line contours.

Keywords: spectral line, contour, approximate.

References

1. Korolyov F. A., *Theoretical optics*, p.123 (Higher school, Moscow, 1966). (in Russ.).
2. Lang K. R., *Astrophysical formulae*, **1**, 448 p. (Mir, Moscow, 1978). (in Russ.).
3. Penner S. S., *Quantitative molecular spectroscopy and gas emissivities*, p. 36. (IL, Moscow, 1963). (in Russ.).
4. Mitchell A. C. G., Zemansky M. W., *Resonance radiation and excited atoms*, p. 87 (ONTI, Moscow, 1937). (in Russ.).

5. *Plasma research methods*, Ed. by Lokhte Kholtgreven V., p. 103. (Mir, Moscow, 1971). (in Russ.).
6. Harris D., *On the line-absorption coefficient due to Doppler effect and damping. In: Modern problems of astrophysics and Physics of Sun*, p. 50. (IL, Moscow, 1951). (in Russ.).
7. Naumova N. N., Khokhlov V. N., Temperature and gas pressure determination by spectral line Voigt profiles, *Opt. Zhurn.*, **73** (8), 23 (2006). (in Russ.).
8. Sheikh-Zade M. I., Empirical function for approximation of infrared absorption band contours, *Scientific Notes of V. I. Vernadsky Crimean Federal University. Biology. Chemistry*, **5**(2) 255 (2019). (in Russ.).
9. Cyashhenko Yu. P., Shape of vibration absorption bands of liquid chloroform and bromoform, *Zhurn. Prikl. Spectr.*, **11**(2), 192 (1961). (in Russ.).
10. Mikheev P. A., Electric-discharge generators of atomic iodine and metastable atoms of argon and krypton for active substances of gas lasers and optical methods of a research of such substances: Diss. ... doctor. phys. and mathem. sciences, 168 p. (Samara, 2016).