

Ученые записки Крымского федерального университета имени В. И. Вернадского
Биология. Химия. Том 11 (77). 2025. № 4. С. 300–306.

УДК 535.338.334

DOI 10.29039/2413-1725-2025-11-4-300-306

О ДВУХ СПОСОБАХ ПОСТРОЕНИЯ ФОЙГТОВСКОГО КОНТУРА СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ

Шейх-Заде М. И.

*ГБОУВО РК «Крымский инженерно-педагогический университет имени Февзи Якубова»,
Симферополь, Республика Крым, Россия
E-mail: tosprimea@gmail.ru*

Рассмотрены два способа построения фойгтовского контура спектральной линии на примере экспериментального контура линии излучения $\lambda_0=3125,67 \text{ \AA}$ атомов ртути. Экспериментальные данные в графическом виде для этой спектральной линии заимствованы из литературных источников и оцифрованы. Показано, что оба способа приводят к практически одинаковым результатам и что функция Фойгта удовлетворительно описывает экспериментальные данные для рассмотренной спектральной линии.

Ключевые слова: спектральная линия, контур, аппроксимация, функция Фойгта.

ВВЕДЕНИЕ

Спектроскопические методы находят широкое применение в различных областях научных исследований в химии, физике, астрофизике и так далее [1–4]. При использовании для этих целей оптической спектроскопии основную информацию о свойствах атомов и молекул, об их взаимодействии с окружающими атомами, получают из анализа данных о характеристиках спектральных линий, таких как: форма контура, ширина контура, длина волны и оптическая плотность в максимуме спектральной линии. При этом одной из важных задач теоретической спектроскопии является аналитическое описание формы контура спектральной линии. Для этих целей используют функцию Лоренца, функцию Гаусса, которые характеризуют радиационное и допплеровское уширение спектральных линий соответственно. Однако, каждая из этих функций в очень редких случаях удовлетворительно описывают контуры спектральных линий [1, 5]. Часто достаточно хорошим приближением к экспериментальным контурам спектральных линий является контур Фойгта, который учитывает одновременное действие лорентцевского и допплеровского механизмов уширения спектральных линий [1, 4–7].

Целью данной работы является рассмотрение двух способов построения фойгтовских контуров спектральных линий: 1 – путём вычисления функции Фойгта; 2 – с использованием таблицы значений функции Фойгта, полученной в работе [6].

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Функция Фойгта может быть представлена в явном виде различными выражениями [3, 6]. В данной работе функция Фойгта применяется в виде, использованном в работах [1, 4, 7, 8]:

$$H(v, a) = \frac{a}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (v - y)^2} \cdot dy, \quad (1)$$

где a, v – параметры функции (1). В литературе существует некоторое разнообразие в обозначениях и терминологии при описании характеристик контура спектральной линии. Поэтому для однозначности изложения примем следующие обозначения и определения:

- D_0, D – оптическая плотность в максимуме контура и при текущем значении абсциссы соответственно;
- $\varepsilon = D_0/D = H(v, a)/H(0, a)$;
- h – ширина контура при $D=D_0/2$; h_V, h_D, h_L – ширины фойгтовского, допплеровского, лорентцевского контуров соответственно;
- b_ε – ширина контура при заданном значении ε . Тогда при $\varepsilon=0,5$ будет $b_{0,5}=h$.

Параметры a и v функции (1) определяются формулами [1]:

$$a = \frac{h_L \cdot \sqrt{\ln 2}}{h_D} \quad (2)$$

$$v = \frac{2(\lambda - \lambda_0) \cdot \sqrt{\ln 2}}{h_D} \quad (3)$$

Для вычисления функции (1) необходимо знать значения a и v . Для этого предварительно методом интерполяции [9] экспериментальных данных нужно найти значения h_V и $b_{0,1}$. Затем значение a можно найти:

- из графика зависимости $a = f(b_{0,1}/h_V)$, который можно построить по данным работы [6];
- аналитически методом интерполяции табличных данных, приведённых в [6];
- аналитически путём построения приближающей функции для зависимости $a = f(b_{0,1}/h_V)$ по данным работы [6].

Для вычисления значений v , необходимо предварительно найти значение h_D с использованием полученных, как указано выше, значений h_V и $b_{0,1}$. Значение h_D можно найти:

- из графика зависимости $h_D/h_V = f(b_{0,1}/h_V)$, который можно построить по данным работы [6];
- аналитически методом интерполяции табличных данных, приведённых в [6];
- аналитически путём построения приближающей функции для зависимости $h_D/h_V = f(b_{0,1}/h_V)$ по данным работы [6].

Затем по формуле (3) можно найти значения v для используемых значений λ .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Значение h_V , найденное методом интерполяции [9] по трём экспериментальным точкам (узлам интерполяции), расположенным в окрестности

$\varepsilon = 0,5$ с использованием полинома Лагранжа $L_2(x)$, оказалось равным $9,3460 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$. Значение $b_{0,1}$, полученное аналогичным образом в окрестности $\varepsilon = 0,1$, оказалось равным $2,5925 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$. При этом отношение $b_{0,1}/h_V = 2,7739$. Для данного значения $b_{0,1}/h_V$ было найдено из графика зависимости $a = f(b_{0,1}/h_V)$ значение $a = 1,97$. Значение a , полученное интерполированием табличных данных из [6] с использованием полинома Лагранжа $L_2(x)$, где $x = b_{0,1}/h_V$, оказалось равным $a = 1,9660$. Значение a , было найдено и третьим (указанным выше) способом. При этом оказалось, что при $b_{0,1}/h_V > 2,5$ график зависимости $a = f(b_{0,1}/h_V)$ резко возрастает и такая зависимость неудовлетворительно аппроксимируется какой-либо приближающей функцией. Поэтому, была аппроксимирована обратная зависимость $b_{0,1}/h_V = \varphi(a)$ естественным кубическим сплайном $S_3(a)$, затем путём решения кубического уравнения с использованием полинома $P_0(a)$ сплайна $S_3(a)$ было получено значение $a = 1,9704$. Видно, что значения a , полученные тремя методами, близки между собой. Для дальнейших расчётов было использовано значение $a = 1,9660$.

Аналогично были найдены значения h_D/h_V . Из графика зависимости $h_D/h_V = f(b_{0,1}/h_V)$ получено $h_D/h_V = 0,364$. Методом интерполирования табличных данных из [6] с использованием полинома Лагранжа $L_2(x)$, где $x = b_{0,1}/h_V$, получено $h_D/h_V = 0,3636$. Методом аппроксимации обратной зависимости $b_{0,1}/h_V = \varphi(h_D/h_V)$ естественным кубическим сплайном $S_3(y)$ и решением кубического уравнения с использованием полинома $P_2(y)$ сплайна $S_3(y)$, где $y = h_D/h_V$, получено $h_D/h_V = 0,3634$. Полученные тремя методами значения h_D/h_V близки между собой. Для дальнейших расчётов использовалось значение $h_D/h_V = 0,3636$. Из этого значения h_D/h_V и ранее найденной величины h_V , получено $h_D = 3,3983 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$. С применением найденного значения h_D , по формуле (3) были рассчитаны значения v для всех λ , использованных при расчётах.

После того, как найдены значения a и v , для построения фойгтовского контура спектральной линии по первому способу, необходимо вычислить значения функции (1). Известно [5, 7, 10, 11], что функция (1) при $a > 0$ представляет собой действительную часть интеграла вероятностей

$$W(z) = e^{-z^2} \cdot \left(1 + \frac{2 \cdot i}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^z e^{y^2} \cdot dy\right) \quad (4)$$

от комплексного переменного $z = v + i \cdot a$. Поэтому, для нахождения значений функции (1) можно вычислить функцию (4) по известным алгоритмам и взять её действительную часть. В данной работе для вычисления значений функции (4) для $a = 1,9660$ и $v \geq 0$ использовалось разложение $W(z)$ в непрерывную дробь [10, 12]. Этот метод позволяет получать в первом квадранте значения $W(z)$ с относительной погрешностью $1 \cdot 10^{-6}$ [12]. Тестовые вычисления функции (4) при $a = 2$ и $v \geq 0$ показали, что результаты расчётов функции (4), полученные по изложенной методике, совпали с точностью до шести десятичных знаков (с учётом округления шестого десятичного знака) с шестизначными значениями этой функции, приведёнными в работе [11]. После вычисления значений функции (1), фойгтовский контур спектральной линии строился в виде зависимости $\varepsilon = f(\lambda - \lambda_0)$.

Для построения фойгтовского контура спектральной линии по второму способу необходимо найти (для полученных выше величин $a = 1,9660$ и $h_V = 9,3460 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$) значения $x_c = b_c/h_V$ для заданных значений ε , приведённых в [6]. Значения x_c были получены методом интерполяции с применением полиномов Лагранжа $L_2(a)$. Затем из формулы $x = 2(\lambda - \lambda_0)/h_V$ вычислялись значения $(\lambda - \lambda_0)$ и строился фойгтовский контур в виде зависимости $\varepsilon = f(\lambda - \lambda_0)$.

Для иллюстрации двух способов построения фойгтовского контура был выбран экспериментальный контур линии $\lambda_0 = 3125,67 \text{ \AA}$ атомов ртути, соответствующий переходу между уровнями $6^3P_1 - 6^3D_1$ [1]. В графическом виде этот контур приведён в работе [13]. Для проведения вычислительных процедур этот контур был оцифрован. На рис. 1 показана длинноволновая (ДВ) ветвь экспериментального контура этой линии, заимствованная из работы [13] (точки).

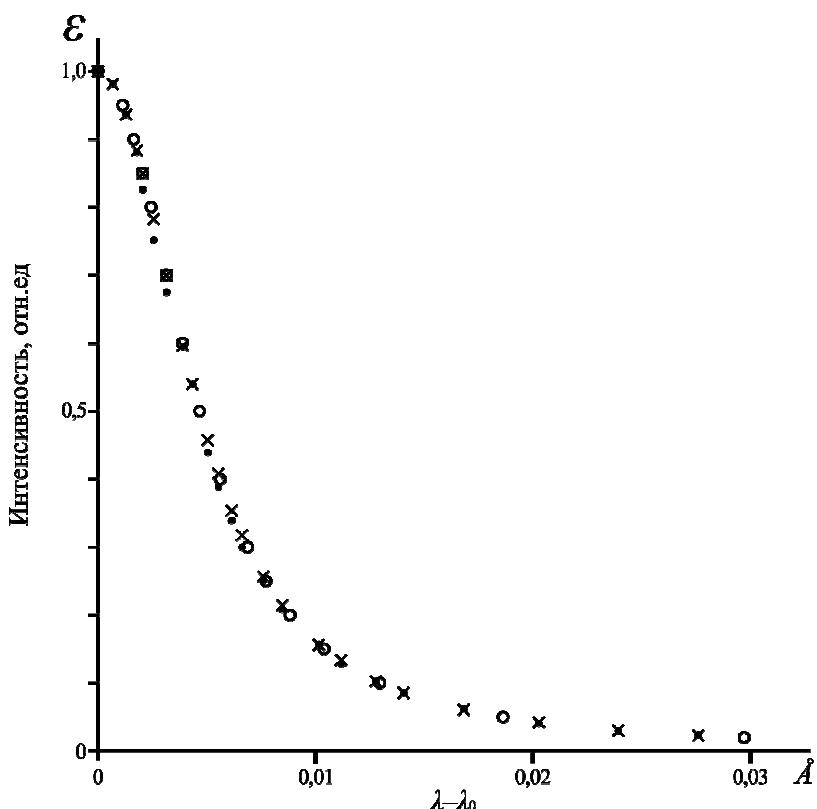


Рис. 1. ДВ ветвь экспериментального контура линии $\lambda_0 = 3125,67 \text{ \AA}$ атомов ртути (точки) и его аппроксимация функцией Фойгта по первому (крестики) и второму (окружности) способами.

Как видно из рис. 1, оба способа построения фойгтовского контура приводят в целом к удовлетворительной аппроксимации рассматриваемого экспериментального

контура, хотя на некоторых участках имеются незначительные отклонения от экспериментальных данных. Такие отклонения могут быть обусловлены:

- экспериментальными погрешностями при регистрации контура спектральной линии;
- погрешностями при оцифровке экспериментального контура;
- тем, что функция Фойгта не учитывает всех механизмов формирования контура спектральной линии;
- другими возможными причинами;
- одновременным действием всех этих причин.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Рассмотрены два способа построения фойгтовского контура на примере аппроксимации экспериментального контура линии излучения $\lambda_0=3125,67\text{\AA}$ атомов ртути функцией Фойгта.
2. Показано, что оба способа приводят к практически одинаковым результатам.

Список литературы

1. Фриш С. Э. Оптические спектры атомов / С. Э. Фриш. – М.: Лань, 2010. – 656 с.
2. Эткинс П. Физическая химия / П. Эткинс – М.: Мир, 1980. – Т. 2. – 584 с.
3. Методы исследования плазмы / Под ред. В. Лохте-Хольтгревена. – М.: Мир, 1971. – С. 103–105.
4. Ленг К. Р. Астрофизические формулы / К. Р. Ленг. – М.: Мир, 1978. – Т.1. – 448 с.
5. Вайнштейн Л. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий / Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков. – М.: Наука, 1979. – 319 с.
6. Davies J. T. A new tabulation of the Voigt profile / J. T. Davies, J. M. Vaughan // Astrophys. J. – 1963. – Vol. 137. – P. 1302–1305.
7. Harries D. L. On the line-absorption coefficient due to Doppler effect and damping / D. L. Harries // Astrophys. J. – 1948. – Vol. 108. – P. 112.
8. Митчелл А. Резонансное излучение и возбуждённые атомы / А. Митчелл, М. Земанский. – М.: ОНТИ, 1937. – 285 с.
9. Демидович Б. П. Основы вычислительной математики / Б. П. Демидович, И. А. Марон. – М.: Наука, 1979. – 664 с.
10. Drayson S. R. Rapid computation of the Voigt profile / S. R. Drayson // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 1979. – Vol. 16. – P. 611–614.
11. Фаддеева В. Н. Таблицы значений интеграла вероятностей от комплексного аргумента / В. Н. Фаддеева, Н. М. Терентьев. – М.: ГИТТЛ, 1954. – 268 с.
12. Цимлинг Ш. Е. Специальные функции и определённые интегралы / Ш. Е Цимлинг. – М.: Радио и связь, 1988. – 272 с.
13. Наумова Н. Н. Определение температуры и давления газов по фойгтовскому профилю спектральной линии / Н. Н. Наумова, В. Н. Хохлов. // Оптический журнал – 2006. – Т. 73, №8 – С. 23–26.

ABOUT TWO METHODS OF CONSTRUCTING THE VOIGT PROFILE OF SPECTRAL LINE

Sheikh-Zade M.-I.

*Crimean Engineering and Pedagogical University, Simferopol, Crimea, Russia Federation
E-mail: tospcrimea@gmail.ru*

One of the important tasks of theoretical spectroscopy is the analytical description of spectral line profiles. A often sufficiently good approximation to the experimental profiles of spectral lines is the Voigt profile, which take into account the simultaneous action of Lorentzian and Doppler broadening mechanisms of spectral lines. This paper discusses two methods for constructing Voigt profiles of spectral lines.

The first method is based on the computation of the Voigt function

$$H(v, a) = \frac{a}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (v - y)^2} \cdot dy, \quad (1)$$

where a, v – are the parameters of function (1), defined by the functions:

$$a = \frac{h_L \cdot \sqrt{\ln 2}}{h_D}, \quad v = \frac{2(\lambda - \lambda_0) \cdot \sqrt{\ln 2}}{h_D},$$

where h_D, h_L – are the widths of the Lorentzian and Doppler components of the Voigt profile. It is known that function (1) for $a > 0$ represents the real part of the probability integral

$$W(z) = e^{-z^2} \cdot (1 + \frac{2 \cdot i}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^z e^{y^2} \cdot dy) \quad (2)$$

of the complex argument $z = v + i \cdot a$. Therefore, to find the values of function (1), one can compute function (2) using known algorithms and take its real part. Using the preliminary obtained values of a and v , the values of $W(z)$ were computed using the method of expanding $W(z)$ into a continued fraction. Then, the Voigt spectral line profile was constructed as a dependence $H(v, a)/H(0, a) = f(\lambda - \lambda_0)$.

For the construction of the Voigt profile by the second method, using the preliminary obtained values of a and v , the values $x_\varepsilon = b_\varepsilon/h_V$ were obtained for given values of ε , where $\varepsilon = H(v, a)/H(0, a)$, h_V, b_ε – are the widths of the experimental contour at $\varepsilon = 0,5$ and at another given value of ε respectively. Then, the values $(\lambda - \lambda_0)$ were calculated from the formula $x = 2(\lambda - \lambda_0)/h_V$, and the Voigt profile was constructed as a dependence $H(v, a)/H(0, a) = f(\lambda - \lambda_0)$.

Both methods for constructing the Voigt profile are illustrated using the example of the long-wavelength branch of the experimental profile of the line $\lambda_0=3125.67$ Å of mercury atoms. It is shown that the constructed Voigt profiles generally lead to a satisfactory approximation of the profile of this line.

Keywords: spectral line, profile, approximation, Voigt function.

References

1. Frish S. E., *Optical atom spectra*, 656 p. (Lan', Moscow, 2010). (in Russ.).
2. Atkins P. W., *Physical chemistry*, 2, 584 p. (Mir, Moscow, 1980). (in Russ.).
3. *Plasma research methods*. Ed. By Lokhte-Khol'tgreven V., 103. (Mir, Moscow, 1971). (in Russ.).
4. Lang K. R., *Astrophysical formulae*, 1, 448 p. (Mir, Moscow, 1978). (in Russ.).
5. Vajnshtejn L. A., Sobel'man I. I., Yukov E. A., *Excitement of atoms and spectral lines broadening*, 319 p. (Nauka, Moscow, 1979). (in Russ.).
6. Davies J. T., Vaughan J. M., A new tabulation of the Voigt profile, *Astrophys. J.*, **137**, 1302 (1963).
7. Harries D. L., On the line-absorption coefficient due to Doppler effect and damping, *Astrophys. J.*, **108**, 112 (1948).
8. Mitchell A. C. G., Zemansky M. W., *Resonance radiation and excited atoms*, 285 p. (ONTI, Moscow, 1937). (in Russ.).
9. Demidovich B. P., Maron I. A., *The principles of computational mathematics*, 664 p. (Nauka, Moscow, 1979). (in Russ.).
10. Drayson S. R., Rapid computation of the Voigt profile, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **16**, 611 (1976).
11. Faddeeva V. N., Terent'ev N. M., *Tables of the probability integral for complex argument*, 268 p. (GITT, Moscow, 1954). (in Russ.).
12. Cimring Sh. E., *Special functions and definite integrals*, 272 p. (Radio and svyaz', Moscow, 1988). (in Russ.).
13. Naumova N. N., Khokhlov V. N., Temperature and gas damping determination by spectral line Voigt profiles, *Opt. Zhurn.*, **73** (8), 23 (2006). (in Russ.).