

Voigt线形函数二阶导数研究*

杨晨光 阚瑞峰 许振宇 张光乐 刘建国†

(中国科学院安徽光学精密机械研究所, 中国科学院环境光学与技术重点实验室, 合肥 230031)

(2014年7月2日收到; 2014年7月24日收到修改稿)

在强展宽条件下, 光谱信号二阶导数相互的交叠影响较小, 是一种潜在的反演光谱信息的手段. 本文研究了光谱 Voigt 线形函数的二阶导数, 得出了其二阶导数全域积分为 0 的性质, 计算了二阶导数最小值与偶数高阶导数最大值和最小值的解析结果, 并通过数值计算与曲线拟合得出了其极大值位置与零点位置的比例与洛仑兹-多普勒半宽比的关系, 为强展宽下由光谱二阶导数准确反演光谱信息提供了理论基础.

关键词: Voigt 函数, 二阶导数最小值, 零点位置

PACS: 33.20.-t, 42.62.Fi, 82.80.-d

DOI: 10.7498/aps.63.223301

1 引言

由于受到自身热运动、粒子间相互碰撞等因素的影响, 分子或原子的吸收发射光谱都有不同程度的展宽, 也对应着不同的光谱线形. 通常考虑最多的展宽机制是粒子间碰撞引起的压力展宽(对应洛仑兹线形 g_L)与粒子自身热运动引起的多普勒展宽(对应高斯线形 g_D). 这两种机制的综合光谱线形可以用洛仑兹线形函数与高斯线形函数的卷积形式表达, 也就是著名的 Voigt 线形函数^[1]. 对于光谱线形的研究, 在吸收光谱领域特别是利用可调谐二极管激光吸收光谱技术反演环境物性参数方面有着重要的应用价值^[2-5]. 在强展宽条件下, 光谱相互之间的交叠非常严重, 很难解析出单个谱线的准确线形信息, 而光谱的二阶导数的相互交叠就相对轻微. Voigt 线形函数二阶导数性质的研究为强展宽下准确反演光谱信息提供了理论基础.

自从 Voigt 线形函数提出以来, 有大量的关于其函数特性^[6]以及数值计算方法的研究^[7-9]. 关注的热点主要如何在如何快速、准确地用数值计算已知

展宽的 Voigt 线形. 但对于二阶导数光谱的研究较少, 多应用于傅里叶变换光谱中吸收峰位置的精确定位^[10]; 对 Voigt 线形函数导数性质的研究更为少见^[11]. 本文讨论了 Voigt 线形函数二阶导数的积分性质与最小值, 以及其偶数阶导数的最大值和最小值, 并对其二阶导数极值点、零点位置关系进行分析, 以期在强展宽条件下准确反演光谱线形信息提供理论基础. 本文中 Voigt 线形的数值结果均采用文献^[8]中的方法计算获得.

2 光谱线形函数及其二阶导数的定义与基本性质

2.1 光谱线形函数二阶导数

由压力展宽或自然展宽导致的线性函数为洛仑兹线形函数 g_L ,

$$g_L(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha_L}{(\nu - \nu_0)^2 + \alpha_L^2}, \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 61108034)、国家自然科学基金青年科学基金(批准号: 61205151)和中国科学院战略性先导科技专项(批准号: XDA05040102)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: jgliu@aiofm.ac.cn

其中 ν_0, α_L 分别中心频率与洛仑兹半宽. 它的二阶导数为

$$\frac{\partial^2 g_L}{\partial \nu^2} = \frac{2\alpha_L}{\pi} \frac{3(\nu - \nu_0)^2 - \alpha_L^2}{((\nu - \nu_0)^2 + \alpha_L^2)^3}. \quad (2)$$

由多普勒展宽导致的线性函数为高斯线形函数 g_D ,

$$g_D(\nu - \nu_0) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} e^{-\left(\frac{\ln 2}{\alpha_D^2}(\nu - \nu_0)^2\right)}, \quad (3)$$

其中 α_D 为多普勒半宽. 它的二阶导数为

$$\frac{\partial^2 g_D}{\partial \nu^2} = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{2 \ln 2}{\alpha_D^3} \left(\frac{2 \ln 2}{\alpha_D^2} (\nu - \nu_0)^2 - 1 \right) \times e^{-\left(\frac{\ln 2}{\alpha_D^2}(\nu - \nu_0)^2\right)}. \quad (4)$$

两者综合效果的表达式 Voigt 线形函数 g_V 是两种线形函数的卷积,

$$\begin{aligned} g_V(\nu - \nu_0) &= g_L \otimes g_D = \int_{-\infty}^{+\infty} g_L(\nu - \nu_0 - \nu') g_D(\nu') d\nu' \\ &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} \left(\frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{(\xi - t)^2 + \mu^2} dt \right), \end{aligned} \quad (5)$$

其中, 归一化波长 $\xi = \sqrt{\ln 2} \frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D}$, 洛仑兹-多普勒半宽比 $\mu = \sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$.

为了方便起见, 令 $K(\xi, \mu)$ 为

$$K(\xi, \mu) = \frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{(\xi - t)^2 + \mu^2} dt, \quad (6)$$

则,

$$g_V(\nu - \nu_0) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} K(\xi, \mu). \quad (7)$$

$K(\xi, \mu)$ 还有另一种表达形式:

$$\begin{aligned} K(\xi, \mu) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mu}{(\xi - t)^2 + \mu^2} e^{-t^2} dt \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} e^{-\mu q} \cos(q\xi - qt) dq e^{-t^2} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos(\xi q) e^{-q^2/4 - \mu q} dq. \end{aligned} \quad (8)$$

Voigt 线形函数的二阶导数可表达为

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g_V}{\partial \nu^2} &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} \frac{\partial^2 K}{\partial \nu^2} \\ &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} \left(\frac{\partial^2 K}{\partial \xi^2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial \nu} \right)^2 + \frac{\partial K}{\partial \xi} \frac{\partial^2 \xi}{\partial \nu^2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^3} \\ &\times \left(\frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{6(\xi - t)^2 - 2\mu^2}{((\xi - t)^2 + \mu^2)^3} e^{-t^2} dt \right) \\ &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^3} \left(-\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} t^2 \right. \\ &\left. \times \cos(\xi t) e^{-t^2/4 - \mu t} dt \right). \end{aligned} \quad (9)$$

2.2 Voigt 线形函数与其二阶导数的全宽

Voigt 线形函数的二阶导数有更窄的全宽范围.

洛仑兹-多普勒半宽比 μ 为 1 时, 归一化波长 ξ 与以最大或最小值绝对值归一化的线形函数及其二阶导数的关系如图 1 所示. 线形函数与其二阶导数的归一化波长十分之一全宽 (幅值大于最值绝对值的 10% 的范围) 较为接近, 分别为 7.38 与 6.56. 而归一化波长百分之一全宽 (幅值大于最值绝对值的 1% 的范围) 两者相差就非常明显, 线形函数的百分之一全宽 (23.04) 约为其二阶导数百分之一全宽 (11.64) 的两倍.

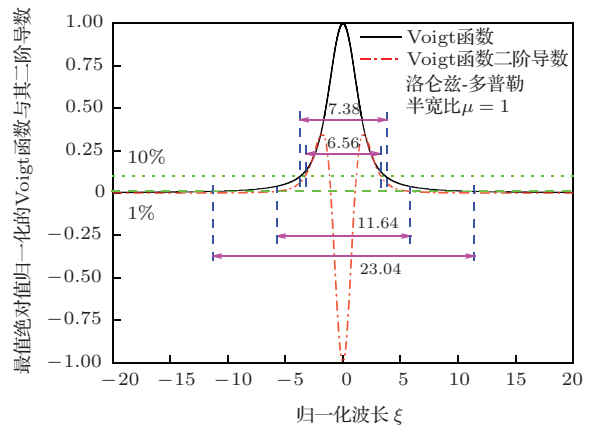


图 1 洛仑兹-多普勒半宽比 μ 为 1 时, Voigt 线形函数及其二阶导数

图 2 所示的是 Voigt 线形函数与其二阶导数洛仑兹-多普勒半宽比 μ 与归一化波长百分之一全宽的关系. 可以看出随着 μ 的增加, 线形函数与其二阶导数百分之一全宽的差距愈加明显, 线形函数的百分之一全宽约为其二阶导数的 2.5 倍. 而压力越大洛仑兹半宽越大, 对应的 μ 也越大. 所以在强展宽条件下光谱二阶导数相互之间的交叠会远小于直接光谱的相互交叠, 光谱二阶导数更易反演出相应的光谱信息.

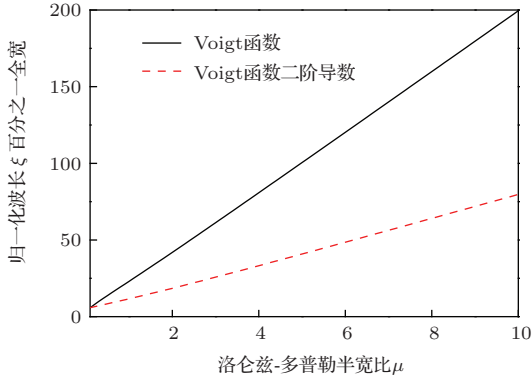


图2 Voigt 线形函数及其二阶导数百分之一全宽与洛伦兹-多普勒半宽比 μ 的关系

3 Voigt 线形函数二阶导数的积分性质与最小值

3.1 Voigt 线形函数二阶导数的积分性质

众所周知 Voigt 线形函数的全域积分为 1 ($\int_{-\infty}^{+\infty} g_V d\nu = 1$)。与之类似, 其二阶导数也具有全域积分的定值性质,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 g_V}{\partial \nu^2} d\nu \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^3} \frac{\mu}{\pi} \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{6(\xi - t)^2 - 2\mu^2}{((\xi - t)^2 + \mu^2)^3} e^{-t^2} dt d\nu \\ &= \frac{\mu}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^2} \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{6(\xi - t)^2 - 2\mu^2}{((\xi - t)^2 + \mu^2)^3} d\xi e^{-t^2} dt \\ &= \frac{2\mu}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^2} \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} \frac{6(\xi - t)^2 - 2\mu^2}{((\xi - t)^2 + \mu^2)^3} d\xi e^{-t^2} dt \\ &= \frac{2\mu}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^2} \int_{-\infty}^{+\infty} 0 \cdot e^{-t^2} dt = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

它的全域积分为 0。而由于它是偶函数, 其半域积分同样为 0,

$$\int_0^{+\infty} \frac{\partial^2 g_V}{\partial \nu^2} d\nu = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 g_V}{\partial \nu^2} d\nu = 0. \quad (11)$$

3.2 Voigt 线形函数二阶导数的最小值

由 (6) 式可以方便地计算出 Voigt 线形的最大值 $g_{V,\max}$.

$$\begin{aligned} g_{V,\max} &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} K(0, \mu) \\ &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-t^2/4 - \mu t} dt \\ &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} e^{\mu^2} \operatorname{erfc}(\mu), \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{+\infty} e^{-t^2} dt$ 为补误差函数。

如图 1 所示, 很明显 Voigt 线形最大值的位置是其二阶导数最小值 $g''_{V,\min}$ 的位置, 同样可以通过 (7) 式求出其二阶导数 $g''_{V,\min}$ 的最小值。

$$\begin{aligned} g''_{V,\min} &= \frac{\partial^2 g_V}{\partial \nu^2}(\nu_0) \\ &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^3} K''_{\xi}(0, \mu) \\ &= -\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{\ln 2}{\alpha_D^3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} t^2 e^{-t^2/4 - \mu t} dt \\ &= \frac{2 \ln 2 \sqrt{\ln 2}}{\pi \alpha_D^3} \\ & \times (2\mu - \sqrt{\pi}(2\mu^2 + 1) e^{\mu^2} \operatorname{erfc}(\mu)). \end{aligned} \quad (13)$$

为了验证解析结果的正确性, 分别用解析方法与数值计算的方法求取 Voigt 线形函数的最大值以及其二阶导数的最小值, 其中数值计算的方法是先计算出 Voigt 线形再通过二阶中心差分计算其二阶导数 (Voigt 函数二阶导数的最小值恒为负值, 为了方便与 Voigt 函数最大值比较, 取绝对值结果)。

如图 3 所示, 随着洛伦兹半宽与多普勒半宽的增加, 无论是 Voigt 函数最大值还是其二阶导数最小值的绝对值, 都相应地减小, 而且可以看出 Voigt 函数二阶导数最小值的变化比其函数最大值的变化剧烈得多。解析结果与数值计算的结果都符合得很好。从函数最大值两者的符合可以验证数值计算方法的准确性, 而从其二阶导数最小值的符合可以验证解析结果的正确性。

3.3 Voigt 线形函数偶数阶导数的最大和最小值

依据 Voigt 函数的三角函数表达形式, 其对波长 ν 的 n 阶导数可表达为

$$\frac{\partial^n g_V}{\partial \nu^n} = \frac{(\ln 2)^{(n+1)/2}}{\pi \alpha_D^{n+1}} \int_0^\infty \frac{\partial^n \cos \xi t}{\partial \xi^n} e^{-t^2/4 - \mu t} dt$$

$$= \begin{cases} (-1)^{(n+1)/2} \frac{(\ln 2)^{(n+1)/2}}{\pi \alpha_D^{n+1}} \int_0^\infty t^n \sin(\xi t) e^{-t^2/4 - \mu t} dt & n \text{ 为奇数} \\ (-1)^{n/2} \frac{(\ln 2)^{(n+1)/2}}{\pi \alpha_D^{n+1}} \int_0^\infty t^n \cos(\xi t) e^{-t^2/4 - \mu t} dt & n \text{ 为偶数} \end{cases}, \quad (14)$$

可以看出, 其奇数阶导数为奇函数, 中心波长位置为0; 其偶数阶导数为偶函数, 中心波长位置为最值.

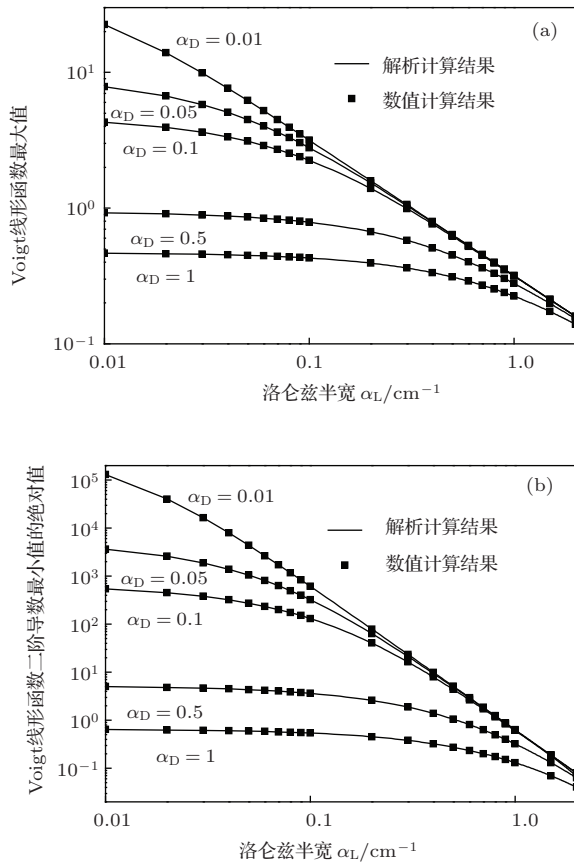


图3 不同多普勒半宽 α_D 条件下 Voigt 线形函数最大值 (a) 及其二阶导数最小值的绝对值; (b) 随洛仑兹半宽 α_L 的变化, 图中实线为解析计算结果, 实心矩形为数值计算结果

依据梅林变化公式^[12]

$$\int_0^\infty t^n \cos(\xi t) e^{-t^2/4 - \mu t} dt = 2^{(n+1)/2} \Gamma(n+1) e^{\mu^2/2} D_{-(n+1)}(\sqrt{2}\mu), \quad (15)$$

其中 $\Gamma(x)$, $D_p(x)$ 分别为伽马函数与抛物柱面函数. 所以 Voigt 函数的偶数阶 ($2m$ 阶) 导数最大值或最小值 $g_{V,\max/\min}^{(2m)}$ 为

$$g_{V,\max/\min}^{(2m)} = (-2 \ln 2)^m \frac{\sqrt{2 \ln 2}}{\pi \alpha_D^{2m+1}} \Gamma(2m+1)$$

$$\times e^{\mu^2/2} D_{-(2m+1)}(\sqrt{2}\mu)$$

$$= (-2 \ln 2)^m \frac{\sqrt{2 \ln 2} (2m)!}{\pi \alpha_D^{2m+1}}$$

$$\times e^{\mu^2/2} D_{-(2m+1)}(\sqrt{2}\mu). \quad (16)$$

由上式通过对 $D_p(x)$ 查表可方便地计算 Voigt 函数各偶数阶导数的最大或最小值.

$$g_{V,\max} = (-2 \ln 2)^0 \frac{\sqrt{2 \ln 2} 0!}{\pi \alpha_D}$$

$$\times e^{\mu^2/2} D_{-1}(\sqrt{2}\mu)$$

$$= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} e^{\mu^2} \operatorname{erfc}(\mu), \quad (17)$$

$$g_{V,\min}'' = (-2 \ln 2) \frac{\sqrt{2 \ln 2} 2!}{\pi \alpha_D^3} e^{\mu^2/2} D_{-3}(\sqrt{2}\mu)$$

$$= (2 \ln 2) \frac{\sqrt{\ln 2}}{\pi \alpha_D^3} (2\mu - \sqrt{\pi} e^{\mu^2})$$

$$\times (2\mu^2 + 1) \operatorname{erfc}(\mu), \quad (18)$$

$$g_{V,\max}^{(4)} = (-2 \ln 2)^2 \frac{\sqrt{2 \ln 2} 4!}{\pi \alpha_D^5} e^{\mu^2/2} D_{-5}(\sqrt{2}\mu)$$

$$= 4(\ln 2)^2 \frac{\sqrt{\ln 2}}{\pi \alpha_D^5} (-2\mu(2\mu^2 + 5)$$

$$+ \sqrt{\pi} e^{\mu^2} (4\mu^4 + 12\mu^2 + 3) \operatorname{erfc}(\mu)). \quad (19)$$

4 Voigt 线形函数二阶导数的极大值点与零点位置

在实际光谱测量过程中, 即使是光谱信号的二阶导数, 也往往包含一定的直流背景. 如果不能去除这个直流背景, 光谱信号二阶导数的峰值也只是相对结果. 在强展宽环境下 (高温、高压), 光谱的采样范围与临近光谱的干扰限制了利用无限远位置确定直流背景的方法. 而无论是洛仑兹、高斯线形还是 Voigt 线形的二阶导数均存在两个对称的极大值点以及两个对称的零点. 在实际测量中, 可以通过去除零点位置的直流背景获得峰值的绝对结果.

可以方便地求得洛仑兹线形函数二阶导数的

极大值点为 $\nu_0 \pm \alpha_L$, 零点为 $\nu_0 \pm \sqrt{3}\alpha_L/3$, 相对于中心波长的极大值点位置是零点位置的 $\sqrt{3}$ 倍; 高斯线形的极大值点为 $\nu_0 \pm \sqrt{3}\alpha_L/\sqrt{2\ln 2}$, 零点为 $\nu_0 \pm \alpha_L/\sqrt{2\ln 2}$, 极大值位置同样是零点位置的 $\sqrt{3}$ 倍.

而 Voigt 线形函数没有初等函数的表达形式, 很难通过求解积分方程的方式获得解析的极大值点与零点位置, 只能用数值计算的方法获得极大值点与零点的位置. 图 4 所示为数值计算得到的极大值点与零点距中心波长距离的比值云图. 可以看出, 比值与多普勒半宽 α_D 、洛仑兹半宽 α_L 的具体值无关, 仅与两者的比例有关, 最小值出现在 α_L/α_D 为 1.8 左右, 在比值趋近于 0 (高斯展宽占主导) 与趋近于 ∞ (洛仑兹展宽占主导) 时均趋于最大值 $\sqrt{3}$.

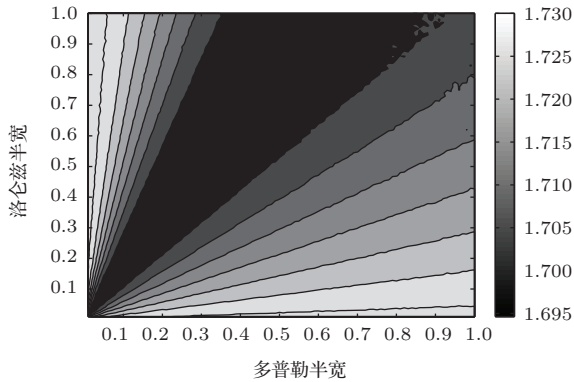


图 4 不同多普勒半宽 α_D 与洛仑兹半宽 α_L 条件下模拟得到的极大值点与零点距中心波长距离的比值云图

所以, 极大值点与零点距中心波长距离比是洛仑兹-多普勒半宽比 μ 的函数. 在 μ 值过大或过小时, 数值计算 Voigt 函数远离中心波长位置的值会有一定的误差, 再差分求二阶导数会使误差进一步放大, 所以出现如图 5(a) 所示的波动. 由于通常在高斯展宽与洛仑兹展宽效应可比拟的情况下使用 Voigt 线形, 所以仅使用 μ 从 0.1 至 10 之间变化数值计算得到的距离比 R 来拟合关系曲线, 以得到在该范围内的精确拟合结果 (如图 5(b) 所示),

$$R = \frac{1.739\mu^2 - 1.18\mu + 4.635}{\mu^2 - 0.6202\mu + 2.679} \quad (\mu = 0.1 - 10). \quad (20)$$

最小值出现在 $\mu = 1.4685$ 位置 (即 $\alpha_L/\alpha_D = 1.7638$ 位置), 等于 1.6935.

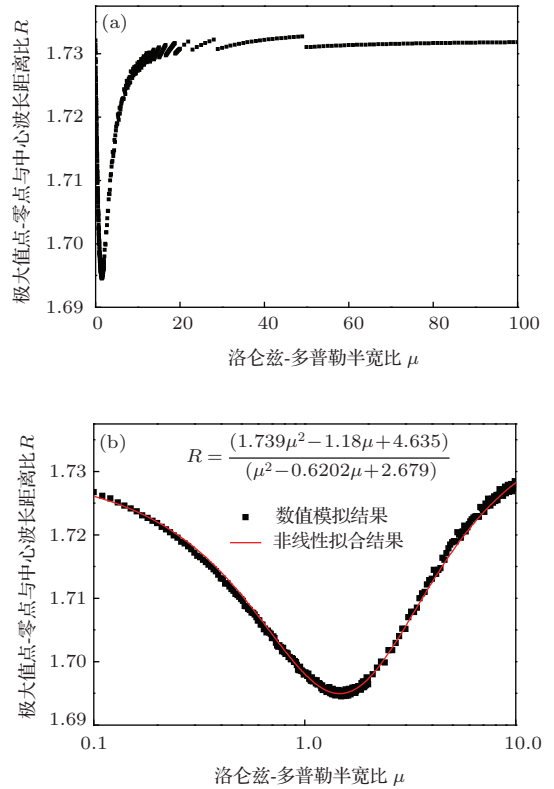


图 5 数值计算得到的极大值点-零点与中心波长距离比与洛仑兹-多普勒半宽比的关系 (a) 以及 μ 在 0.1 至 10 范围内相应的拟合结果 (b)

5 结 论

本文研究了 Voigt 线形函数二阶导数的一些特殊的性质. 推导了其二阶导数全域积分为 0 的性质, 并在 Voigt 线形函数三角函数积分表达式的基础上计算了其函数最大值与二阶导数最小值以及偶数高阶导数最值的解析结果; 通过数值计算拟合了其二阶导数极大值点与零点相对于中心波长的位置的比例与洛仑兹-多普勒半宽比的关系. 这些结论为在强展宽条件下光谱信息反演提供了理论基础.

感谢华中科技大学程孟凡博士的热情帮助.

参考文献

- [1] Demtroder W 2008 *Laser Spectroscopy* (Vol. 1) (Berlin: Springer-Verlag) p61
- [2] Xu Z Y, Liu W Q, Liu J G, He J F, Yao L, Ruan J, Chen J Y, Li H, Yuan S, Geng H, Kan R F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 234204 (in Chinese) [许振宇, 刘文清, 刘建国, 何俊峰, 姚路, 阮俊, 陈玖英, 李晗, 袁松, 耿辉, 阚瑞峰 2012 物理学报 **61** 234204]
- [3] Chen J Y, Liu J G, He Y B, Wang L, Gang Q, Xu Z Y, Yao L, Yuan S, Ruan J, He J F, Dai Y H, Kan R F 2013

- Acta Phys. Sin.* **62** 224206 (in Chinese) [陈玖英, 刘建国, 何亚柏, 王辽, 江强, 许振宇, 姚路, 袁松, 阮俊, 何俊峰, 戴云海, 阚瑞峰 2013 物理学报 **62** 224206]
- [4] Kan R F, Dong F Z, Zhang Y J, Liu J G, Liu C, Wang M, Gao S H, Chen J 2005 *Chin. Phys. B* **14** 1904
- [5] Shao J, Zhang W J, Gao X M, Ning L X, Yuan Y Q 2005 *Chin. Phys. B* **14** 482
- [6] Yin Z Q, Wu C, Gong W Y, Gong Z K, Wang Y J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 123301 (in Chinese) [尹增谦, 武臣, 宫琬钰, 龚之珂, 王永杰 2013 物理学报 **62** 123301]
- [7] Schreier F 1992 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **48** 743
- [8] Abrarov S M, Quine B M, Jagpal R K 2010 *Comput. Phys. Commun.* **181** 876
- [9] Schreier F 2011 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **112** 1010
- [10] Weng S F 2010 *Fourier Transform Infrared Spectroscopic Analysis* (Beijing: Chemical Industrial Press) p254 (in Chinese) [翁诗甫 2010 傅里叶变换红外光谱分析 (北京: 化学工业出版社) 第 254 页]
- [11] Sampoorna M, Nagendra K N, Frisch H 2007 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **104** 71
- [12] Jeffery A, Zwillinger D 2007 *Table of Integrals, Series, and Products* (London: Academic Press) p1028

Second derivative of Voigt function*

Yang Chen-Guang Kan Rui-Feng Xu Zhen-Yu Zhang Guang-Le Liu Jian-Guo[†]

(Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

(Received 2 July 2014; revised manuscript received 24 July 2014)

Abstract

In high-temperature high-pressure environment, the measurement precisions of tunable diode laser absorption spectroscopy and other laser spectrum technologies are influenced by spectral overlap because of Doppler and Lorentz broadenings. One of the potential methods to improve precision is to use the second derivative spectral signal, which has less overlap. This paper deals with the second derivative of Voigt function. The integration of its second derivative from negative to positive infinity is proved to be zero. And the analytical results of its second derivative minimum and the maxima or minima of its even-order derivatives are obtained. It is also shown that there is the relationship between the ratio of second derivative maximum point location to zero point location and the ratio of Lorentz half-width to Doppler half-width. These results provide the basis for inversing precision information from second derivative spectral signal.

Keywords: Voigt function, minimum of second derivative, locations of zero points

PACS: 33.20.-t, 42.62.Fi, 82.80.-d

DOI: 10.7498/aps.63.223301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61108034), the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61205151), and the Strategic Priority Research Program of the Chinese Academy of Sciences (Grant No. XDA05040102).

[†] Corresponding author. E-mail: jgliu@aiofm.ac.cn