

## Voigt 线型函数及其最大值的研究\*

尹增谦<sup>†</sup> 武臣 官琬钰 龚之珂 王永杰

(华北电力大学数理系, 保定 071003)

(2012年11月26日收到; 2013年3月5日收到修改稿)

研究了多普勒和洛伦兹线型函数卷积形式的 Voigt 线型函数, 给出了它的最大值. 结果表明, Voigt 线型函数是关于中心频率的对称函数, Voigt 线型函数的最大值由多普勒和洛伦兹线型函数的半宽度决定, 与中心频率无关, 且比洛伦兹和多普勒线型函数的最大值都小. 提出了利用 Voigt 线型函数最大值和半宽度获得多普勒线型函数和洛伦兹线型函数的方法, 并利用 Monte Carlo 方法进行了验证.

**关键词:** Voigt 线型函数, 半宽度, 最大值, 傅里叶变换

**PACS:** 33.20.-t, 42.62.Fi, 82.80.Dx, 87.64.K-

**DOI:** 10.7498/aps.62.123301

## 1 引言

由于光谱线型中包含有发光粒子的内部结构、粒子间相互作用、周围环境(如温度和压力)等信息, 光谱线型的研究在化学反应动力学、气象学、宇宙学等研究领域有很重要的理论意义和应用价值<sup>[1,2]</sup>. 在低气压情况下, 谱线的展宽为多普勒效应导致的多普勒展宽占优势, 而在压强很高的情况下, 则由发光粒子与其他粒子的频繁碰撞导致的碰撞展宽占优势. 在实际的发光系统, 如多普勒展宽和碰撞展宽共存的气体放电系统中, 导致谱线展宽的机制不是孤立、单一存在的, 两种展宽机制都存在, 光谱线型为综合展宽线型<sup>[3,4]</sup>. 此时线型函数是高斯线型函数和洛伦兹线型函数的卷积形式, 称为 Voigt 线型函数<sup>[5,6]</sup>.

自 Voigt 线型提出以来, 对它的研究一直受到重视, 但 Voigt 线型函数是一个积分形式, 没有容易计算的解析形式, 多年来的研究多集中在 Voigt 线型函数的数值计算<sup>[7-9]</sup>. 本文在深入分析 Voigt 线型函数的基础上, 利用傅里叶变换方法得到了 Voigt 线型函数最大值的解析式, 并且给出了与其他两种线型函数的最大值之间的关系式. 同时由已知的 Voigt 线型, 利用三种线型的半宽度和最大值

的关系分别得到了对应的洛伦兹和多普勒线型, 从而为从光谱线型提取出相关的物理信息, 提供了重要的参考依据.

## 2 光谱线型函数

## 2.1 洛伦兹线型函数和多普勒线型函数

由于自发辐射和碰撞而导致的均匀展宽线型函数为洛伦兹线型函数

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

其中,  $\nu_0$ ,  $\alpha_L$  分别为中心频率和半宽度. 显然, 洛伦兹线型函数的最大值为

$$g_{L,\max} = g_L(\nu_0, \nu_0) = \frac{1}{\pi\alpha_L}.$$

由于发光粒子的速度分布而导致的非均匀展宽的线型函数, 即由多普勒效应而导致的线型函数为高斯分布函数, 相应的多普勒线型函数为

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

$$\alpha_D = \frac{\nu_0}{c} \left(\frac{2kT}{m} \ln 2\right)^{1/2},$$

\* 中央高校基本科研业务费(批准号: 10ML40)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: yinzq\_1964@sina.com

其中,  $\nu_0, \alpha_D$  分别为中心频率和半宽度,  $m, T$  分别为发光粒子的质量和气体温度,  $k, c$  分别为玻尔兹曼常数和真空中光速. 显然, 多普勒线型函数的最大值为

$$g_{D,\max} = g_D(\nu_0, \nu_0) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D}.$$

## 2.2 Voigt 线型函数

对于气体工作物质, 上述由碰撞导致的均匀展宽和多普勒效应导致的非均匀展宽是主要的展宽类型, 同时考虑这两种展宽机制, 可以得到综合展宽线型函数.

利用光谱线型函数形式中的辐射能量按频率的分布函数可以获得综合加宽线型函数<sup>[10]</sup>. 假设在只有均匀加宽的情形下加入多普勒效应的影响并考虑全部频率范围, 则辐射能量  $I_0$  在  $(\nu, \nu + d\nu)$  频率范围的能量为

$$I_0 \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} g_L(\nu_1, \nu_0) \cdot g_D(\nu, \nu_1) d\nu_1 \right] d\nu,$$

综合加宽线型函数为

$$\begin{aligned} g_z(\nu, \nu_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} g_L(\nu_1, \nu_0) \cdot g_D(\nu, \nu_1) d\nu_1 \\ &= \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha_L}{(\nu_1 - \nu_0)^2 + \alpha_L^2} \frac{1}{\alpha_D} \\ &\quad \times e^{-\left[\frac{\ln 2}{(\alpha_D)^2}(\nu - \nu_1)^2\right]} d\nu_1. \end{aligned} \quad (3)$$

对于上式, 考虑只有一种展宽机制即  $\alpha_D \rightarrow 0$  或  $\alpha_L \rightarrow 0$ , 则相应的  $g_D(\nu, \nu_0)$  或  $g_L(\nu, \nu_0)$  成为  $\delta$  函数, 根据  $\delta$  函数的选择性定理, 综合加宽线型函数蜕化为相应的洛伦兹线型函数或多普勒线型函数.

在 (3) 式中,  $\alpha_D$  与中心频率  $\nu_1$  有关. 由于  $\alpha_L, \alpha_D$  与线型中心频率  $\nu_0$  相比都很小, 所以在积分中可以取  $\alpha_D$  为常数, 则有

$$\begin{aligned} g_z(\nu, \nu_0) &= V(\nu, \nu_0) \\ &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} \left( \frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(\xi + t)^2 + \mu^2} e^{-t^2} dt \right), \end{aligned} \quad (4)$$

其中,  $\xi = \sqrt{\ln 2} \frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D}, \mu = \sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D}, t = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\alpha_D}(\nu_1 - \nu), V(\nu, \nu_0)$  称为 Voigt 线型函数.

若记

$$K(\xi, \mu) = \frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(\xi + t)^2 + \mu^2} e^{-t^2} dt, \quad (5)$$

则

$$V(\nu, \nu_0) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} K(\xi, \mu). \quad (6)$$

## 3 Voigt 线型函数的归一化条件和对称性

### 3.1 Voigt 线型函数的归一化条件

综合加宽线型函数  $g_z(\nu, \nu_0)$  自然严格满足归一化条件, 那么, 作为其特殊值的 Voigt 线型函数也自然满足归一化条件, 即

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} V(\nu, \nu_0) d\nu \\ &= \frac{\mu}{\pi^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(\xi + t)^2 + \mu^2} e^{-t^2} dt \right) d\xi = 1, \end{aligned}$$

通过采用交换积分次序等计算, 结果表明上式成立, 即 Voigt 线型函数严格满足归一化条件.

Voigt 线型函数严格满足归一化条件的原因在于尽管将  $\alpha_D$  近似为与中心频率无关的常数, 但是计算中所依据的多普勒线型函数仍然满足归一化条件. Voigt 线型函数满足归一化条件并不意味着  $V(\nu, \nu_0)$  与  $g_z(\nu, \nu_0)$  偏差很小, 只有当  $\alpha_L, \alpha_D$  与中心频率  $\nu_0$  相比都很小时,  $V(\nu, \nu_0)$  与  $g_z(\nu, \nu_0)$  才近似相等, 这也是一般的气体放电中所能够满足的条件.

### 3.2 Voigt 线型函数的对称性

根据 (1) 和 (2) 式, 洛伦兹线型函数  $g_L(\nu, \nu_0)$  关于  $\nu = \nu_0$  严格对称, 而多普勒线型函数  $g_D(\nu, \nu_0)$  关于  $\nu = \nu_0$  在线芯范围内近似对称. 下面分析 Voigt 线型函数的对称性.

由 (5) 式, 有

$$\begin{aligned} K(\xi, \mu) &= \frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(\xi + t)^2 + \mu^2} e^{-t^2} dt \\ &= \frac{\mu}{\pi} \int_0^{\infty} \left[ \frac{1}{(-\xi + t)^2 + \mu^2} + \frac{1}{(\xi + t)^2 + \mu^2} \right] e^{-t^2} dt, \end{aligned}$$

显然,  $K(\xi, \mu) = K(-\xi, \mu)$ , 即  $K(\xi, \mu)$  关于  $\xi$  为偶函数, 根据 (6) 式和  $\xi = \sqrt{\ln 2}(\nu - \nu_0)/\alpha_D$ , 可得  $V(\nu, \nu_0)$  关于  $\nu = \nu_0$  对称.

综上所述, Voigt 线型函数严格满足归一化条件并关于  $\nu = \nu_0$  对称.

### 4 Voigt 线型函数、洛伦兹线型函数和多普勒线型函数三者最大值的及其应用

#### 4.1 三种线型函数最大值的的关系

根据对  $\frac{dK(\xi, \mu)}{d\xi}$  和  $\frac{d^2K(\xi, \mu)}{d\xi^2}$  的分析, 容易得到, 当  $\xi = 0$  时,  $K(\xi, \mu)$  取得最大值, 即当  $v = v_0$  时,  $V(v, v_0)$  取得最大值, 为

$$K_{\max} = K(0, \mu) = \frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{t^2 + \mu^2} e^{-t^2} dt. \quad (7)$$

令

$$f_1(t) = \frac{1}{\mu^2 + t^2}, \quad f_2(t) = e^{-t^2}.$$

若  $\mathcal{F}[f_1(t)]$ ,  $\mathcal{F}[f_2(t)]$  分别为函数  $f_1(t)$ ,  $f_2(t)$  的傅里叶变换, 则

$$\mathcal{F}[f_1(t)] = \frac{\pi}{\mu} e^{-\mu|\omega|}, \quad \mathcal{F}[f_2(t)] = \sqrt{\pi} e^{-\frac{\omega^2}{4}}.$$

根据傅里叶变换的乘积定理 [11], 有

$$\begin{aligned} K(0, \mu) &= \frac{\mu}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\mu^2 + t^2} e^{-t^2} dt \\ &= \frac{e^{\frac{\mu^2}{2}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} e^{-(\frac{\omega}{2} + \mu)^2} d\omega \\ &= e^{\mu^2} [1 - \text{erf}(\mu)], \end{aligned}$$

即, Voigt 线型函数的最大值为

$$g_{V, \max} = V(v_0, v_0) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} e^{\mu^2} [1 - \text{erf}(\mu)], \quad (8)$$

其中,  $\text{erf}(\mu)$  为误差函数:  $\text{erf}(\mu) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\mu e^{-x^2} dx$ .

由于  $\mu = \sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{g_{D, \max}}{g_{L, \max}}$ , 则

$$\begin{aligned} g_{V, \max} &= g_{D, \max} e^{\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{g_{D, \max}}{g_{L, \max}}\right)^2} \\ &\times \left[ 1 - \text{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{g_{D, \max}}{g_{L, \max}}\right) \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

三种线型函数的最大值的的关系如图 1 所示.

根据  $\mu \in (0, \infty)$ ,  $0 < \text{erf}(\mu) < 1$ , 由误差函数渐近表达式 [12] 有,

$$\begin{aligned} e^{\mu^2} [1 - \text{erf}(\mu)] &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\mu} \left[ 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{(2k-1)!!}{(2\mu^2)^k} \right] \\ &< \frac{1}{\sqrt{\pi}\mu}. \quad (10) \end{aligned}$$

根据 (8) 式和  $\mu = \sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$  得到:  $g_{V, \max} < \frac{1}{\pi\alpha_L}$ , 即

$$g_{V, \max} < g_{L, \max}. \quad (11)$$

将 (8) 式对  $\mu$  求导, 有

$$\frac{dg_{V, \max}}{d\mu} = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} \left\{ 2\mu e^{\mu^2} [1 - \text{erf}(\mu)] - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \right\}.$$

根据 (10) 式,  $e^{\mu^2} [1 - \text{erf}(\mu)] < \frac{1}{\sqrt{\pi}\mu}$ ,  $2\mu e^{\mu^2} [1 - \text{erf}(\mu)] < \frac{2}{\sqrt{\pi}}$ , 有  $\frac{dg_{V, \max}}{d\mu} < 0$ , 即  $g_{V, \max}(\mu)$  为单调递减函数, 则  $g_{V, \max} < \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D}$ , 即

$$g_{V, \max} < g_{D, \max}. \quad (12)$$

由 (11) 和 (12) 式, Voigt 线型函数的最大值比洛伦兹和多普勒线型函数的最大值都要小.

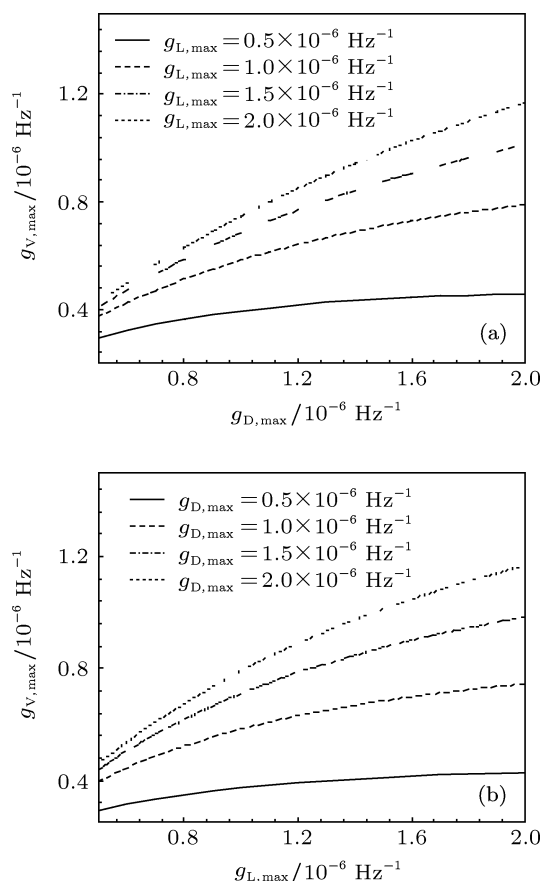


图 1 (a) 在不同洛伦兹线型最大值下, Voigt 线型最大值随多普勒线型最大值的变化; (b) 在不同多普勒线型最大值下, Voigt 线型最大值随洛伦兹线型最大值的变化

另外, 若  $\alpha_D$  很小而  $\alpha_L$  很大, 则  $\mu = \sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$  很大, 由于  $\text{erf}(\infty) = 1$ , 根据洛比达法则, Voigt 线型

函数的最大值接近于洛伦兹线型函数的最大值. 如果  $\alpha_L$  很小而  $\alpha_D$  很大, 那么  $\mu = \sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$  很小, 则 Voigt 线型函数的最大值接近于多普勒线型函数的最大值.

### 4.2 由 Voigt 线型函数获得 $\alpha_L, \alpha_D$

由 (9) 式得到 Voigt 最大值与洛伦兹和多普勒线型半宽度的关系式为

$$g_{V,\max} = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} e^{\left(\sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D}\right)^2} \times \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\sqrt{\ln 2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D}\right) \right]. \quad (13)$$

三种线型半宽度之间没有精确的解析关系, 较精确的一个经验公式<sup>[13]</sup>为

$$\alpha_V = \frac{1}{2} \left( 1.0692\alpha_L + \sqrt{0.86639\alpha_L^2 + 4\alpha_D^2} \right). \quad (14)$$

根据 (13) 和 (14) 式, 可以由  $V_{\max}$  和  $\alpha_V$  值得到  $\alpha_L$  和  $\alpha_D$ , 即可以由实验获得的光谱线型得到洛伦兹和多普勒线型的半宽度  $\alpha_L$  和  $\alpha_D$ , 从而提取出相关的物理信息, (13) 和 (14) 式对应的曲线如图 2 所示. 例如, 若实验获得的光谱线型的最大值和半宽度分别为  $\alpha_V/v_0 = 3.2 \times 10^{-6}$ ,  $v_0 g_{V,\max} = 0.12 \times 10^6$ , 则由 (13) 和 (14) 式的解, 即图 2 中两条曲线的交点为:  $\alpha_L/v_0 = 1.60 \times 10^{-6}$ ,  $\alpha_D/v_0 = 2.23 \times 10^{-6}$ .

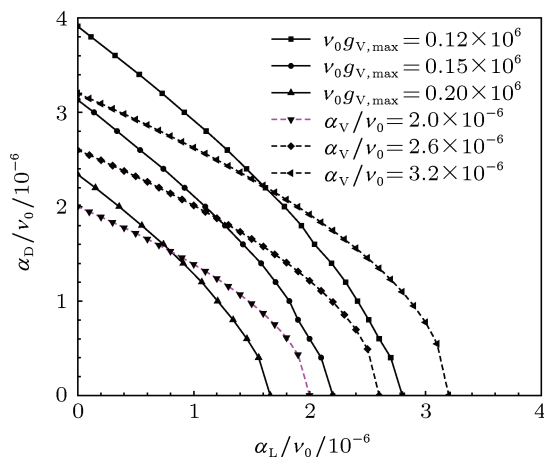


图 2 Voigt 线型最大值和半宽度的变化曲线

为了验证上述方法的可行性, 进行了大量的计算. 在计算中设定洛伦兹和多普勒线型函数的半宽度  $\alpha_L/v_0$  和  $\alpha_D/v_0$ , 由 Monte Carlo 方法根据 (3) 式求出 Voigt 线型函数, 从而获得最大值  $v_0 g_{V,\max}$  和半宽度  $\alpha_V/v_0$ , 再利用上述方法求得洛伦兹和多普

勒线型函数的半宽度  $\alpha_L/v_0$  和  $\alpha_D/v_0$ . 结果表明, 所得到的  $\alpha_L$  和  $\alpha_D$  与原来设定值极为接近. 图 3 给出了一例, 其中设定的  $\alpha_L/v_0 = 1.21 \times 10^{-6}$ ,  $\alpha_D/v_0 = 1.86 \times 10^{-6}$ , 用 Monte Carlo 方法得到的 Voigt 线型曲线如图 3(a) 所示, 可知其最大值和半宽度分别为  $v_0 g_{V,\max} = 0.1514 \times 10^6$ ,  $\alpha_V/v_0 = 2.5984 \times 10^{-6}$ . 图 3(b) 为 (13) 和 (14) 式的两条曲线, 其交点为  $\alpha_L/v_0 = 1.2160 \times 10^{-6}$ ,  $\alpha_D/v_0 = 1.8594 \times 10^{-6}$ , 与原设定的值极为接近. 总之, 本工作所提出的由 Voigt 线型获得洛伦兹与多普勒线型半宽度的方法是可行的.

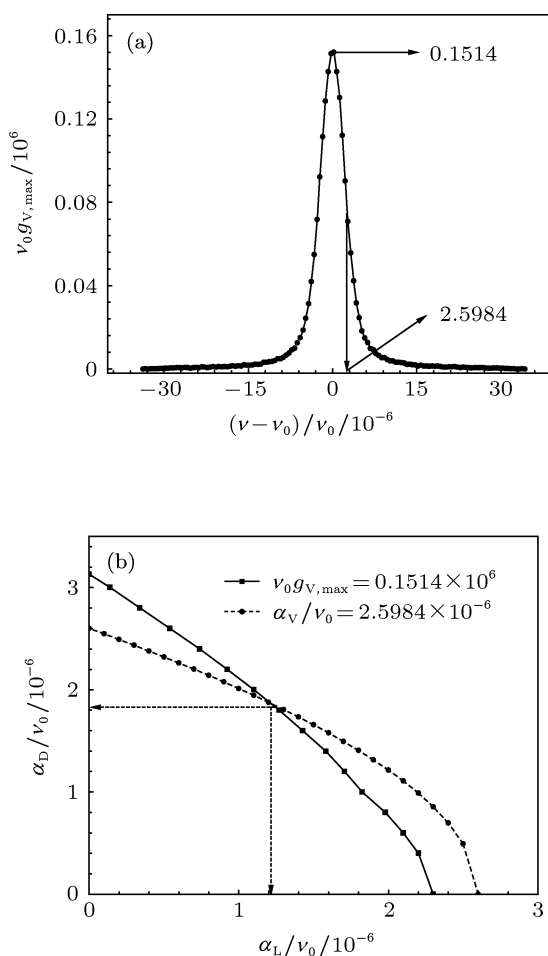


图 3 (a) 用 Monte Carlo 抽样统计方法得到的 Voigt 线型曲线; (b) 分别由 (a) 中的最大值、半宽度决定的  $\alpha_D-\alpha_L$  曲线及其交点

## 5 结论

1) 作为综合展宽线型函数近似的 Voigt 线型函数是关于中心频率的对称函数, 且严格满足归一化条件.

2) Voigt 线型函数的最大值为  $V_{\max} =$

$\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\alpha_D} e^{\mu^2} [1 - \operatorname{erf}(\mu)]$ , 即  $g_{V,\max}$  由多普勒线型函数和洛伦兹线型函数的半宽度决定, 而且其最大值比洛伦兹和多普勒线型的最大值都小.

3) 由 Voigt 函数的最大值和半宽度的经验公式

得出了多普勒线型函数和洛伦兹线型函数的半宽度, 为由 Voigt 线型函数获得光源的物理信息提供了一种有效方法.

感谢华北电力大学谷根代教授提供的热情帮助.

- [1] Dong L F, Ran J X, Mao Z G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2167 (in Chinese) [董丽芳, 冉俊霞, 毛志国 2005 物理学报 **54** 2167]
- [2] Lin J L 2000 *Ph. D. Dissertation* (Wuhan: Institute of Physics and Mathematics) (in Chinese) [林洁丽 2000 博士学位论文 (武汉: 中国科学院武汉物理与数学研究所)]
- [3] He J, Zhang C M, Zhang Q G 2007 *Spectrosc. Spectr. Anal.* **27** 423 (in Chinese) [贺健, 张淳民, 张庆国 2007 光谱学与光谱分析 **27** 423]
- [4] Dobryakow S N, Lebedev Y S 1969 *Sov. Phys. Dokl.* **9** 13
- [5] Roston G D, Obaid F S 2005 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **94** 255
- [6] Belafhal A 2000 *Opt. Commun.* **177** 111
- [7] Dulov E N, Khripunov D M 2007 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **107** 421
- [8] Gianni P, Francesco M 2010 *J. Comput. Appl. Math.* **233** 1590
- [9] Abrarov S M, Quine B M 2011 *Appl. Math. Comput.* **218** 1894
- [10] Yin Z Q, Wu C, Wang Y J, Li X C 2012 *Spectrosc. Spectr. Anal.* **32** 1189 (in Chinese) [尹增谦, 武臣, 王永杰, 李雪辰 2012 光谱学与光谱分析 **32** 1189]
- [11] Feng W G 2000 *Integral Transformation* (Shanghai: Shanghai Jiaotong University Press) p44 (in Chinese) [冯卫国 2000 积分变换 (上海: 上海交通大学出版社) 第 44 页]
- [12] Wang L X, Fang D Z 1998 *Handbook of Mathematics* (Beijing: Higher Education Press) p595 (in Chinese) [王连祥, 方德植 1998 数学手册 (北京: 高等教育出版社) 第 595 页]
- [13] Olivero J J, Longbothum R L 1977 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **17** 233

## Voigt profile function and its maximum\*

Yin Zeng-Qian<sup>†</sup> Wu Chen Gong Wan-Yu Gong Zhi-Ke Wang Yong-Jie

(Department of Mathematics and Physics, North China Electric Power University, Baoding 071003, China)

(Received 26 November 2012; revised manuscript received 5 March 2013)

### Abstract

The Voigt profile function which is the convolution of the Doppler and Lorentzian function is investigated analytically and its maximum is obtained. The results indicate that the maximum of the Voigt profile function is smaller than maxima of Doppler and Lorentzian profile function, which is determined by the half-widths of Doppler and Lorentzian profile function. The Voigt profile function is a symmetric function about the central frequency. A new technique is presented, with which the Doppler and Lorentzian profile function can be obtained by using the maximum and half-width of the Voigt profile function, and the technique is verified by the Monte Carlo method.

**Keywords:** Voigt profile function, half-width, maximum value, Fourier transform

**PACS:** 33.20.-t, 42.62.Fi, 82.80.Dx, 87.64.K-

**DOI:** 10.7498/aps.62.123301

\* Project supported by the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. 10ML40).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: yinzq\_1964@sina.com