

· 研究简报 ·

一个能描述多种谱线轮廓的新函数

余卫龙 李庆行 余振新

(激光与光谱学研究所)

摘 要

本文提出一个能统一描述多种谱线轮廓的新函数。它能准确地包括洛伦兹线型函数和双曲正割函数,并可逼近高斯型函数和佛克脱线型函数。此外,它还能描述有兰姆凹陷的谱线及非对称的单峰、双峰谱线。

关键词 洛伦兹, 高斯, 佛克脱线型, 兰姆凹陷线型

过去,描述无凹陷对称线状光谱轮廓常用的函数有洛伦兹线型函数、双曲正割函数、高斯函数、佛克脱(Voigt)线型函数。描述有兰姆凹陷的线状光谱则用兰姆凹陷型函数。不同的线型必须选用不同的函数,缺乏统一性。另外,有些无凹陷谱线单独用前3个函数之一去拟合,符合不好。佛克脱线型函数不能写成明显的解析表达式,应用不方便。兰姆凹陷型函数也只有弱饱和近似下才能写成明显解析表达式。本文给出一个新的线型函数,它形式简单,明显解析。不但包括了前二个函数,而且逼近高斯函数及佛克脱线型函数;它既能描述具有兰姆凹陷的谱线,又能描述单峰和双峰的非对称谱线。

1 新的线型函数及其讨论

本文设定的新函数是

$$I(x) = A \cosh[\alpha(x - x_0)] / [1 + \frac{1}{K^2} (e^{\beta(x-x'_0)} - e^{-\gamma(x-x'_0)})^2] \quad (1)$$

式中 $A, \alpha, \beta, \gamma, K$ 为常数; x, x_0, x'_0 相应于光子能量或光子频率。(1)式应用于双峰非对称谱线时 $x_0 \neq x'_0$ 。对于其它各种类型谱线 $x_0 = x'_0$ 。此时,(1)式变为

$$I(x) = A \cosh[\alpha(x - x_0)] / [1 + \frac{1}{K^2} (e^{\beta(x-x_0)} - e^{-\gamma(x-x_0)})^2] \quad (2)$$

x_0 为(2)式的极值点或非极值点或拐点。当 x_0 是极大值点时,(2)式曲线呈单峰状;当 x_0 是极小极点时,(2)式曲线呈双峰状;当 x_0 是非极值点时,(2)式曲线呈平顶状;当 x_0 是拐点时,(2)式仍属单峰型(光谱图上常意味着隐含两条未能分辨的谱线)。可以证明,下面关系成立。

$$\text{单峰} \quad \alpha^2/2 - (1/K^2)(\beta + \gamma)^2 < 0 \quad (3)$$

$$\text{双峰} \quad \alpha^2/2 - (1/K^2)(\beta + \gamma)^2 > 0 \quad (4)$$

$$\text{平顶} \quad \alpha^2/2 - (1/K^2)(\beta + \gamma)^2 = 0, \beta = \gamma \quad (5)$$

本文1988年10月29日收到

有拐点 $\alpha^2/2 - (1/K^2)(\beta + \gamma)^2 = 0, \beta \neq \gamma$ (6)

当 $\alpha = \beta = \gamma$ 时，可以证明，(2)式曲线的半极大处全宽度 (FWHM) 为

$$w = (2/\alpha) \cosh^{-1}[(K^2 + \sqrt{K^4 - 4K^2 + 16})/4] \quad (7)$$

下面对(1)式用于各种线型分别进行讨论。

1.1 对称单峰线型 当 $\beta = \gamma$ 时，特别是 $\alpha = \beta = \gamma$ 时，(2)式是对称的。对称单峰线型可以包含下述几类：

① 洛伦兹线型极限。令 $\alpha = \beta = \gamma, w = K/\alpha$ (有限)，(2)式为

$$I(x) = A \cosh\left[\frac{K}{w}(x-x_0)\right] / \left\{1 + \frac{4}{K^2} \sinh^2\left[\frac{K}{w}(x-x_0)\right]\right\} \quad (8)$$

当 $K \rightarrow 0$ 时，有

$$\lim_{K \rightarrow 0} I(x) = A / \left[1 + \frac{4}{w^2}(x-x_0)^2\right] \quad (9)$$

这是洛伦兹线型函数。数值计算表明，当 $K \leq 0.1$ 时，(8)、(9)两式之绝对差不大于峰值的 5.0×10^{-4} 倍。

② 双曲正割型。令 $\alpha = \beta = \gamma, K = 2$ ，(2)式为

$$I(x) = A \operatorname{sech}[\alpha(x-x_0)] \quad (10)$$

这是双曲正割函数。

③ 高斯线型近似。(2)式虽无高斯函数极限，但数值计算表明，当 $\alpha = 0, \beta = \gamma = 2.42313/w, K = 3.044958$ 时

$$I(x) = A / \left[1 + \frac{4}{K^2} \sinh^2(\beta(x-x_0))\right] \quad (11)$$

与高斯函数的绝对差不大于峰值的 9.0×10^{-3} 倍。

在实际情况下，这种差异相对于实验误差来说可以忽略。图1是 $A = 1, w = 1$ 时的拟合结果，曲线上的点对应高斯函数。

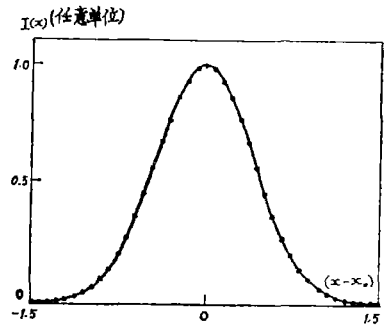


图1 (2)式拟合高斯函数
Fig.1 Fun.(2) fits Gaussian function

④ 佛克脱线型近似。(2)式无佛克脱线型函数极限，但适当选择 α, β ，它可作为佛克脱线型函数近似。记 $Q = w_L/w_D$ (w_L, w_D 分别为洛伦兹线宽和高斯线宽)。因佛克脱线型只由 Q 值决定，所以拟合时取 $w_D = 1$ 。拟合的最优化参数是： $Q = 0.01$ 时， $\alpha = 1.016025 \times 10^{-3}, \beta = 2.395548, K = 3.01758$ ，最大绝对差为峰值的 7.9×10^{-3} 倍； $Q = 0.1$ 时， $\alpha = 2.807257 \times 10^{-2}, \beta = 2.142641, K = 2.760488$ ，最大绝对差为峰值的 4.69×10^{-3} 倍； $Q = 0.5$ 时， $\alpha = 2.950414, \beta = 2.606789, K = 2.135739$ ，最大绝对差为峰值的 1.40×10^{-2} 倍； $Q = 0.8$ 时， $\alpha = 3.817643, \beta = 2.747597, K = 1.882337$ ，最大绝对差为峰值的 1.70×10^{-2} 倍； $Q = 1.5$ 时， $\alpha = 0.141962, \beta = 0.3751097, K = 0.7601828$ ，最大绝对差为峰值的 2.14×10^{-2} 倍； $Q = 5$ 时， $\alpha = 7.243732 \times 10^{-2}, \beta = 8.789801 \times 10^{-2}, K = 0.4505733$ ，最大绝对差为峰值的 7.50×10^{-3} 倍，上述的最大绝对差，是在最优化参数下，每个峰取400个点验算的结果。图2是(2)

式拟合 $Q = 0.5$ 的佛克脱线型函数的结果。从上面计算结果看出 K 的值随 Q 的增大而变小。 $Q = 0.01$ 时, K 的值接近高斯函数近似时的 K 值, $Q = 5$ 时, K 的值接近洛伦兹线型函数近似的 K 值。

1.2 不对称单峰线型 当 $\beta \neq \gamma$ 时,(2)式表示的谱线轮廓是不对称的。在简单情况下, $\alpha = \beta$ 或 $\alpha = \gamma$ 。图3中曲线(a)、(b)分别为纯Al及Al(PO₃)₃的Al X射线荧光光谱 $K\beta$ 线的拟合结果^[1]。拟合的最优化参数如下:(a)对于纯Al, $A = 4.27$ (任意单位), $x_0 = 1.558990(\text{keV})$, $\alpha = \gamma = 312.066(1/\text{keV})$, $\beta = 541.402(1/\text{keV})$, $K = 2.359418$;(b)对于Al(PO₃)₃中的Al, $A = 3.08$ (任意单位), $x_0 = 1.553245(\text{keV})$, $\alpha = \beta = 385.052(1/\text{keV})$, $\gamma = 506.938(1/\text{keV})$, $K = 2.08648$,拟合时,扣除非零常数本底,作图时将两谱线高度归一化。

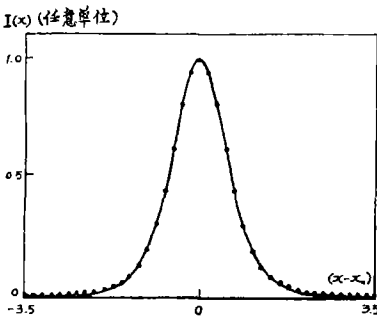


图2 (2)式拟合佛克脱线型函数($Q = 0.5$)
Fig.2 Fun.(2) fits Voigt line shape function for $Q(=w_L/w_D) = 0.5$

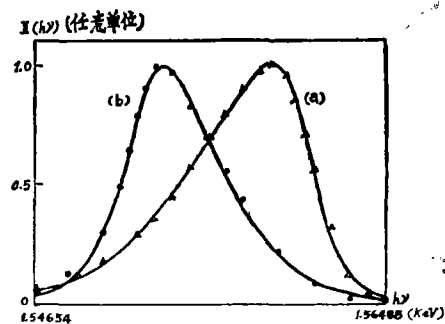


图3 (2)式拟合纯Al及Al(PO₃)₃中Al的X射线荧光光谱 $K\beta$ 线($x = h\nu$)
Fig.3 Fun.(2) fits the profiles of AlK β line
(a) 纯Al, (b) Al(PO₃)₃

1.3 兰姆凹陷线型 当(4)式条件被满足时,(2)式可用于描述具有兰姆凹陷特征的谱线。图4是有兰姆凹陷的He-Ne激光谱线的拟合结果^[2]。拟合参数如下:对曲线(a), $A = 25.7$ (任意单位), $\alpha = 1.40170 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $\beta = 4.32648 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $\gamma = 4.45188 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $K = 14.3633$;对曲线(b), $A = 45$ (任意单位), $\alpha = 2.14169 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $\beta = 3.20188 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $\gamma = 3.30600 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $K = 8.06000$,对曲线(c), $A = 74.7$ (任意单位), $\alpha = 1.78979 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $\beta = 2.59535 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $\gamma = 2.69294 \times 10^{-2}(\text{s/Mc})$, $K = 8.03931$ 。

1.4 有拐点的不对称线型 有些光谱线是有拐点的不对称线型。这种线型是由某种微扰作用造成的。图5是Si的X射线荧光光谱 $K\alpha$ 线,它就属于这种线型^[3]。用(1)式拟合的结果是: $A = 4.337$ (任意单位), $x_0 = 5.40587(\text{keV})$, $x'_0 = 5.40691(\text{keV})$, $\alpha = \gamma = 306.438(1/\text{keV})$, $\beta = 283.167(1/\text{keV})$, $K = 4.00292$ 。

2 新函数的物理机制

(1)式能较普遍地描述各种类型的光谱线轮廓,我们认为它的物理起源有可能揭示出辐射的客观机制。若有形如下式的电磁振动

$$F(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{A' \cosh[\alpha(x-x_0)]} \cdot e^{i\theta(x)}}{1 \pm i[e^{\beta(x-x'_0)} - e^{-\gamma(x-x'_0)}]} e^{ixt} dx \quad (12)$$

则必将发射形如(1)式的轮廓的光谱线。式中 A' 为常数, $i = \sqrt{-1}$, $\theta(x)$ 为 x 的实连续函数。(12)式的物理含义正待进一步深入研究。

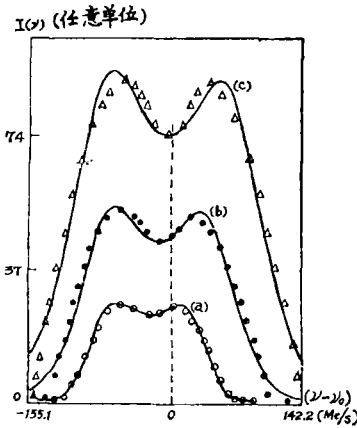


图4 (2)式拟合具有兰姆凹陷的He-Ne 激光谱线($\lambda_0 = 1.15\mu$, $x = \nu$)
 Fig.4 Fun.(2) fits the profiles of He-Ne laser lines($\lambda_0 = 1.15\mu$, $x = \nu$) with a Lamb dip (from ref.[2]), where $x = \nu$

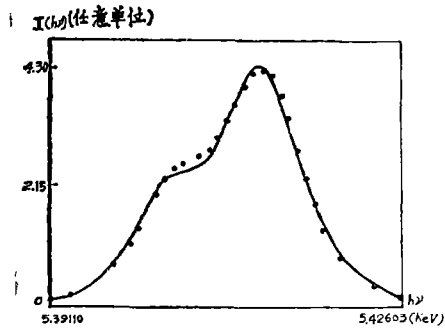


图5 (1)式拟合纯Si X射线荧光 光谱K α 线($x = h\nu$)
 Fig.5 Fun.(1) fits the profile of SiK α line of pure Si (from Ref.[3]), where $x = h\nu$

参 考 文 献

- [1] 吉 昂等, 分析化学, 10 (1985), 13, 749
- [2] Szoke A, *Phys. Rev. Lett.*, 12(1963), 10, 521
- [3] 余卫龙等, 分析化学, 11 (1984), 12, 970

A New Function Describing Varians Profiles of Spectral Lines

She Weilong* Li Qingxing Yu Zhenxin

Abstract

A new function of spectral line shapes is represented. It includes Lorentz line shape function, hyperbolic secant (sech) function and approximates to Gaussian function and Voigt line shape [function. [Besides this, it can describe not only the line shape with a Lamb dip but also describe unsymmetrical single-peak and double-peak line shapes.

Keywords Lorentz, Gauss, Voigt line shape, Lamb dip line shape

• Research Institute of Laser and Spectroscopy