

Ein heuristisches Modell für Linienprofile¹

Эвристическая модель для профилей спектральных линий

A Heuristic Model for Spectral-Line-Profiles

Von H. MELCHER und E. GERTH, Potsdam

Eingegangen am 7. 4. 1977

Zusammenfassung

Die *Fourier*-Transformation einer *Poisson*-Verteilung ergibt eine Verteilungsfunktion, die man als *Lorentz*-Funktion n -ten Grades bezeichnen kann; sie ist zur Darstellung von symmetrischen Linienprofilen geeignet. Diese Funktion umfaßt die Grenzfälle der *Gauß*-Funktion und der *Lorentz*-Funktion ersten Grades. Mit ihr lassen sich *Voigt*-Funktionen approximieren bzw. ersetzen. Eine allgemeine *Lorentz*-Funktion – ein multiplikativer und additiver Ausdruck – ergibt sich auch für Leistungsübertragungen bei Netzen elektronischer Tiefpässe, so daß ein abstraktes Modell eines solchen Netzwerkes (oder eines kinetischen Reaktionssystems) den Vorgängen im Originalraum zugrunde gelegt werden kann, die zu den statistischen Verteilungen im Frequenzraum führen.

Резюме

Преобразование Фурье распределения Пуассона даёт функцию распределения, которую можно назвать функцией Лоренца степени n . Она пригодна для представления симметричных профилей линий. Эта функция включает в себе предельные случаи функций Гаусса и Лоренца первой степени. С помощью этой функции можно аппроксимировать или заменить функцию Фохта.

Общее представление функции Лоренца получается и для передачи мощности в сетях электронных фильтров нижних частот, так что абстрактная модель такой сети (или кинетической системы реакции) может быть положена в основу процессов в начальном пространстве функции, отражающихся в пространстве частоты как спектральные распределения.

Abstract

By means of the Fourier-transformation for the statistical *Poisson*-distribution a function $y(x)$ is obtained, which is called in this paper *Lorentz*-function of the n -th degree: $y = (1 + x^2)^{-n}$.

Special cases such as $n = 1$ and $n \rightarrow \infty$, resp. are used for representing types of spectral lines: the *Lorentz*- or dispersion-type and the *Gauss*-type, resp. Up to now the region between these two types has been represented by the so-called *Voigt*-function. The new general *Lorentz*-function is suitable for approximating or replacing the complicated *Voigt*-function.

The general *Lorentz*-function is based upon an abstract model which is valid for processes in kinetic systems or in electronic networks.

Einleitung

Für Linienprofiluntersuchungen wird häufig die *Voigt*-Funktion verwendet, die aus der Faltung einer *Lorentz*- und einer *Gauß*-Funktion entsteht. Hierbei sind nicht immer die speziellen Voraussetzungen eines Dispersions- und eines Dopplerprofils erfüllt. Es werden nachstehend eine allgemeine *Lorentz*-Funktion (19) und eine *Lorentz*-Funktion n -ten Grades (11) definiert, die geeignet sind, den Bereich der *Voigt*-Funktion, der zwischen den Grenzlagen des *Lorentz*- und *Gauß*-Profils liegt, zu erfassen und darüber hinaus auch noch relativ breitere Linienflügel darzustellen. Diese Funktionen ergeben sich auf der Grundlage einer Modellvorstellung, wonach stufen- oder kettenförmige Prozesse reaktionskinetischer Art im Originalraum zu Linienprofilen im Frequenzraum führen.

¹Abstract: www.ewald-gerth.de/47abs.pdf – attached at the end of this article (page 527).

Ein solches heuristisches Modell ist auch den Untersuchungen über Leistungsfaktoren elektronischer Filter (Hoch- und Tiefpässe) adäquat, wobei man durch *Fourier*-Transformation zur allgemeinen *Lorentz*-Funktion gelangt. Durch *Fourier*-Transformation der *Poisson*-Funktion der Besetzungszahl z ergibt sich ein als *Lorentz*-Funktion des Grades $n = z + 1$ zu bezeichnender Ausdruck, der als Grenzfälle für $n = 1$ die *Lorentz*-Funktion ersten Grades und für $n \rightarrow \infty$ die *Gauß*-Funktion umfaßt; die Werte $n < 1$ führen auf Typen relativ breiter Linienflügel. Mit Hilfe der *Lorentz*-Funktion n -ten Grades können *Voigt*-Profile approximiert bzw. ersetzt und weitere Faltungen ausgeführt werden.

1 Allgemeine *Lorentz*-Funktion bei elektronischen Tief- und Hochpässen

Die *Lorentz*-Funktion
$$P_L = \frac{1}{1+x^2} \quad (1)$$

dient nicht nur zur Berechnung von Spektrallinienprofilen, sondern spielt auch in vielfältiger Weise bei anderen physikalischen Aufgabenstellungen eine große Rolle, z. B. im Falle der Resonanz bei erzwungenen mechanischen Schwingungen, bei Leistungsübertragungen durch elektronische Tiefpässe, bei der *Breit-Wigner*-Beziehung für Wirkungsquerschnitte, bei der Depolarisation der Resonanzfluoreszenz als Funktion der Magnetfeldstärke (*Hanle*-Effekt) und – in Analogie zur *Voigt*-Funktion – bei der Sechs-Faktoren-Formel in der Reaktorthorie.

Den Leistungsfaktor eines elektronischen Tiefpasses beschreibt eine *Lorentz*-Funktion vom Typ (1)

$$P_{L,T} = \frac{1}{1+(\omega RC)^2} = \frac{1}{1+\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2}; \quad (2)$$

hierin bedeuten ω die Kreisfrequenz, R den Widerstand und C die Kapazität sowie $\alpha = 1/RC$ die Halbwertskreisfrequenz.

Die Frequenzfunktion (2) des Leistungsfaktors folgt durch *Fourier*-Transformation aus der Übergangsfunktion

$$U = U_0 \exp(-t/RC), \quad (3)$$

die ihrerseits eine Übergangsfunktion einer Sprungfunktion (Deltafunktion) an einem RC -Glied ist, nach Multiplikation mit der konjugiert-komplexen *Fourier*-Transformierten.

Für zwei hintereinandergeschaltete Tiefpässe ($\alpha_1 = 1/R_1C_1$ und $\alpha_2 = 1/R_2C_2$) erhält man als *Fourier*-Transformierte $\Phi_{12} = \Phi_1 \cdot \Phi_2$, also das Produkt aus den einzelnen *Fourier*-Transformierten, da der Faltung der Übergangsfunktionen im Originalraum eine Multiplikation ihrer *Fourier*-Transformierten im Frequenzraum entspricht. Als Leistungsfaktor berechnet man somit

$$P_{L,T} = \frac{1}{1+\left(\frac{\omega}{\alpha_1}\right)^2} \cdot \frac{1}{1+\left(\frac{\omega}{\alpha_2}\right)^2}. \quad (4)$$

Ein analoges Ergebnis erhält man für hintereinandergeschaltete Hochpässe. Daraus ergibt sich dann für die aus m Hoch- und aus n Tiefpässen zusammengesetzte Wahrscheinlichkeit der Leistungsübertragung

$$P_{L,T,H} = \frac{1}{\left\{ \prod_{i=1}^m \left[1 + \left(\frac{\omega_{H,i}}{\omega} \right)^2 \right] \right\} \left\{ \prod_{k=1}^n \left[1 + \left(\frac{\omega}{\omega_{T,k}} \right)^2 \right] \right\}}. \quad (5)$$

Der Produktausdruck (5) stellt eine verallgemeinerte *Lorentz*-Form dar: darin bedeuten $\omega_{H,i}$ bzw. $\omega_{T,k}$ die Halbwertskreisfrequenzen des i -ten Hoch- bzw. des k -ten Tiefpasses.

2 *Fourier-Transformierte der Gauß- und der Poisson-Funktion*

Die *Gauß-Funktion*

$$P_G = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-(\alpha x)^2/2\right) \quad (6)$$

wird ebenfalls zur Darstellung impulsartiger Übergangsfunktionen verwendet [1], [2], [3]. Als *Fourier-Transformierte* erhält man wiederum eine *Gauß-Funktion* im Frequenzraum

$$\Phi_G = \exp\left(-\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2/2\right) \quad (7)$$

und als Leistungsfaktor bzw. als Intensitätsverteilung, die das zugehörige Linienprofil beschreibt,

$$P_G = \exp\left(-\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2\right). \quad (8)$$

Die *Poisson-Funktion*

$$P_{x,z} = \frac{(\alpha x)^z \cdot \exp(-\alpha x)}{z!} \quad (9)$$

geht für $z = 0$ in die Exponentialfunktion und für $z \rightarrow \infty$ in die *Gauß-Funktion* über [4]. Hierin ist x die verallgemeinerte unabhängige Variable (im speziellen Fall die Zeit t) und z die Zellenbesetzungszahl.

Damit kann gezeigt werden, daß zwischen der *Lorentz-Funktion* (2) und der *Gauß-Funktion* (8) ein Übergang besteht, der durch die *Poisson-Funktion* gegeben ist. Als *Fourier-Transformierte* der *Poisson-Funktion* erhält man

$$\Phi_P(\omega) = \left(\frac{1 - i\frac{\omega}{\alpha}}{1 + \left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2}\right)^{z+1} \quad (10)$$

und für den Leistungsfaktor bzw. für die Intensitätsverteilung mit $z + 1 \equiv n$

$$P_P = \left(\frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2}\right)^n. \quad (11)$$

Die Form der Spektrallinie ist gemäß (11) durch die Parameter α (entsprechend einer Halbwertsbreite) und durch n bestimmt. Die Größe n entspricht der Anzahl gleichartiger Tiefpässe gemäß Gl. (2) einer Übertragungskette oder – in Analogie – der Ordnung eines kettenartigen Reaktionsablaufes. Die Beziehung (11) kann als *Lorentz-Funktion* n -ten Grades bezeichnet werden.

3 Grenzfälle der *Lorentz-Funktion* n -ten Grades

Der Wahrscheinlichkeitsausdruck (11) ist bei der *Fourier-Transformierten* einer *Poisson-Funktion* für die Besetzungszahl z gleich der $(z + 1)$ -fachen Potenz der *Lorentz-Funktion* (2). Die Gl. (2) erweist sich also als eine spezielle Beziehung, die für $z = 0$ (bzw. $n = 1$) aus (11) folgt. Mit anderen Worten: Die *Fourier-Transformierte* der *Poisson-Funktion* der Besetzungszahl z ist eine *Lorentz-Funktion* des Grades $z + 1$.

Es läßt sich nun zeigen, daß die *Gauß-Funktion* (8) für $z \rightarrow \infty$ aus der *Fourier-Transformierten* der *Poisson-Funktion* folgt. Man geht hierbei zweckmäßigerweise nicht von der anomalen Dispersionsbeziehung (6), sondern von der normalen Dispersion aus,

$$F_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} \exp\left(-\frac{(\alpha x - n)^2}{2n}\right); \quad (12)$$

hierin ist $n = z + 1$ (s. [4], S. 25 und 94). Im Unterschied zu (7) findet man

$$\Phi_G(\omega) = \exp(-n/2) \cdot \exp\left[-n/2\left(\frac{\omega}{\alpha} + i\right)^2\right], \quad (13)$$

also zwar wiederum eine *Gauß*-Funktion, die allerdings wegen der Asymmetrie der Funktion (12) zur Ordinatenachse nicht mehr reell ist; das Maximum hat eine Phasenverschiebung und ein Dekrement $-n/2$.

Als Leistungsfaktor ergibt sich aus (13) durch Multiplikation mit der konjugiert-komplexen Größe

$$P_P = \exp\left(-n\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2\right). \quad (14)$$

Diese Gl. (14) unterscheidet sich von (8) durch den Faktor n im Exponenten.

Bringt man die Gl. (11) mit $z = n - 1$ in die Form

$$P_P = \left(\frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2}\right)^n = \left[1 + \left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2\right]^{-n}. \quad (15)$$

und führt für große n eine Reihenentwicklung durch,

$$P_P(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left[-n\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2\right]^k, \quad (16)$$

so findet man für hinreichend große n

$$P_P(\omega) \approx \exp\left(-n\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2\right),$$

d. h. Übereinstimmung mit (14).

Die n -te Wurzel aus (14) ergibt also die Beziehung (8) für die anomale Dispersion. Hingegen ergibt die n -te Wurzel aus (15) bzw. (11) die *Lorentz*-Funktion ersten Grades (2). Mit anderen Worten: Die n -te Potenz der *Lorentz*-Funktion und die *Gauß*-Funktion gleichen sich um so mehr, je größer der Exponent n ist. Die *Lorentz*-Funktion n -ten Grades (11) geht demnach für $n = 1$ bzw. $n \rightarrow \infty$ in die Grenzfälle der *Lorentz*-Funktion ersten Grades und in die *Gauß*-Funktion über.

4 Weitere Verallgemeinerungen

Für die Hintereinanderschaltung von n gleichartigen Tiefpässen gilt gemäß (11)

$$P_P = \left(\frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2}\right)^n = \prod_{k=1}^n \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\alpha}\right)^2}. \quad (17)$$

Die Produkte der *Lorentz*-Funktionen stellen Faltungen von (gleichartigen) Exponentialfunktionen im Originalraum dar, also solcher Übergangsfunktionen, wie sie z. B. bei Ketten von Tiefpässen und mehrstufigen reaktionskinetischen Prozessen vorkommen. Derartige aufeinanderfolgende Stufen lassen sich als Schemata von *Markow*-Ketten angeben mit Übergangskoeffizienten $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$; bei gleichen Elementen der Kette ist $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \dots = \alpha_n$.

Eine Verallgemeinerung der Profildfunktion (17) ergibt sich, wenn Tiefpässe bzw. Kettenglieder unterschiedlicher Abkling- oder Übergangskoeffizienten α_k vorliegen. Beispielsweise ist eine sukzessive Übertragung von Energie über eine gewisse Anzahl diskreter Stufen denkbar (z. B. Mehrfachstreuung), wobei jeder Übergang durch eine eigene Halbwertszeit bzw. mittlere Lebensdauer gekennzeichnet sein kann. In diesem Fall gilt statt (17) die allgemeinere Form einer Profildfunktion

$$P_{P;\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_n} = \prod_{k=1}^n \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\alpha_k}\right)^2}. \quad (18)$$

In weiterer Verallgemeinerung kann ein umfangreiches Netzwerk von elektronischen Tiefpässen vorliegen, die parallel- und hintereinandergeschaltet sind. Das bedeutet im abstrakten Wahrscheinlichkeitsmodell, daß sich im Reaktionssystem des Originalraumes Wechselwirkungsprozesse gemäß *Sowohl-als-auch-* und *Entweder-oder-*Wahrscheinlichkeiten superponieren. Das würde im Frequenzraum einer multiplikativen und additiven Verknüpfung von Frequenzverteilungen entsprechen, so daß an Stelle von (18) ein allgemeinerer Ausdruck der Form

$$P = \frac{a_1}{\left(1 + \left(\frac{\omega}{\alpha_1}\right)^2\right)^{n_1}} + \frac{a_2}{\left(1 + \left(\frac{\omega}{\alpha_2}\right)^2\right)^{n_2}} + \frac{a_3}{\left(1 + \left(\frac{\omega}{\alpha_3}\right)^2\right)^{n_3}} + \dots + \frac{a_k}{\left(1 + \left(\frac{\omega}{\alpha_k}\right)^2\right)^{n_k}}. \quad (19)$$

oder

$$P = \sum_1^k \prod_1^i \frac{a_{ik}}{\left(1 + \left(\frac{\omega}{\alpha_{ik}}\right)^2\right)^{n_{ik}}}. \quad (20)$$

treten würde. Dieser mathematische Formalismus kann – in einfacher Form der Gl. (11) – auf die makroskopische Verteilungskurve der Intensität z. B. einer Spektrallinie oder eines magnetischen Kernresonanz-Signals (NMR) übertragen werden, so daß ein (abstraktes) Modell eines Netzwerkes elektronischer Tiefpässe – bzw. eines statistischen Reaktionssystems – auch zur Analyse der Linien angewendet werden kann. Beispiele für derartige Linienformanalysen sind von MELCHER und GERTH in [7] gegeben.

Es läßt sich bei solchen Linienformanalysen zeigen, daß mit Hilfe von (11) *Voigt*-Profile approximiert bzw. ersetzt werden können. Im Gegensatz zu einer Aussage von BORN: „Die Ableitung der *Voigtschen* Formel ist aber anfechtbar, die Formeln selbst sind verwickelt und undurchsichtig.“ ([6], S. 484) – ist die *Lorentz*-Funktion *n*-ten Grades (11) leichter handhabbar als die allgemeine *Lorentz*-Funktion in der Form (18) oder gar (19) bzw. (20).

Die Beziehung (18), die für die Frequenztransmission eines Filters (Absorbers) gilt, ergibt sich auch aus der *Laplace*-Transformation einer als Matrixgleichung geschriebenen analytischen Darstellung für das zeitliche Verhalten einer kinetischen Reaktionskette; s. [5], dort Gl. (58). Das aber bedeutet, daß eine Profildfunktion (im Frequenzraum) durch Prozesse reaktionskinetischer Art im Originalraum zustande kommt.

Literatur

- [1] AMBARZUMJAN, V. A.: Theoretische Astrophysik. – Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften 1957.
- [2] UNSÖLD, A.: Physik der Sternatmosphären. 2. Aufl. – Berlin/Göttingen/Heidelberg: Springer-Verlag 1955.
- [3] POOLE, C. P.: Electron Spin Resonance. – New York/London/Sidney: Interscience Publishers John Wiley & Sons 1967.
- [4] MELCHER, H.: Transmission und Absorption. – Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften 1970.
- [5] MELCHER, H., GERTH, E.: Behandlung von Strahlungstransportproblemen mit Matrixfunktionon. – Wiss. Z. Pädagog. Hochschule „Dr. Theodor Neubauer“ Erfurt/Mühlhausen, Math.-Naturwiss. Reihe **8** (1972) Heft 1, S. 3.
- [6] BORN, M.: Optik. – Berlin: Springer-Verlag 1965.
- [7] MELCHER, H., GERTH, E.: Darstellung von Linienprofilen durch *Lorentz*-Funktionen n -ten Grades. – Exper. Techn. Phys. **25** (1977) 527

Prof. Dr. habil. HORST MELCHER, 15 Potsdam, Auf dem Kiewitt 23/29
Dr. sc. EWALD GERTH, 15 Potsdam, Gontardstraße 130.

Anmerkung zur Wiedergabe des Textes:

Der vorliegende Artikel in der Wissenschaftlichen Zeitschrift der PH Erfurt wurde im Jahre 2008 mittels der modernen Computertechnik mit Schriftanalyse aufgenommen und textgetreu wiedergegeben. Die Originalschrift wurde mit dem Textverarbeitungsprogramm LaTeX 2e behandelt. Zur Vereinheitlichung mit anderen Arbeiten wurde ein Umbruch und eine Veränderung der Paginierung bis auf die Anfangsseite durchgeführt.

Abstract: www.ewald-gerth.de/47abs.pdf

A Heuristic Model for Spectral-Line-Profiles

Horst Melcher¹ and Ewald Gerth²

¹ *Pedagogic College "Dr. Theodor Neubauer", Erfurt-Mühlhausen, GDR*

² *Central Institute for Astrophysics of the Academy of Sciences of the GDR, Potsdam*

Abstract

By means of the Fourier-transformation for the statistical *Poisson*-distribution a function $y(x)$ is obtained, which is called in this paper *Lorentz*-function of the n -th degree:

$$y = (1 + x^2)^{-n}.$$

Special cases such as $n = 1$ and $n \rightarrow \infty$, resp. are used for representing types of spectral lines: the *Lorentz*- or dispersion-type and the *Gauss*-type, resp. Up to now the region between these two types has been represented by the so-called *Voigt*-function. The new general *Lorentz*-function is suitable for approximating or replacing the complicated *Voigt*-function.

The general *Lorentz*-function is based upon an abstract model which is valid for processes in kinetic systems or in electronic networks.

Publication

Zeitschrift für experimentelle Technik der Physik,

Band 25, 1977, S. 521–525.

Eingegangen am 7. 4. 1977

Journal for Experimental Techniques of Physics

Volume 25, 1977, p. 521–525.

Received 1977, April 7th

Institution of the authors in 1977

Professor Dr. rer. nat. habil. Horst Melcher

Pedagogic College "Dr. Theodor Neubauer" Erfurt-Mühlhausen,

leader of the scientific area of Experimental Physics I

of the section Mathematics/Physics

Dr. sc. nat. Ewald Gerth

Central Institute of Astrophysics of the Academy of Sciences of the GDR,

Potsdam, East Germany

Article available in German by the web-address: www.ewald-gerth.de/47.pdf