Experimentelle Technik der Physik **25** (1977) 6, 527-538

Darstellung von Linienprofilen durch Lorentz-Funktionen n-ten Grades[1]

Представление профилей линий с помощью функций Лоренца степени n

Representation of Spectral-Line-Profiles by Means of the Lorentz-Function of the n-th Degree

Von H. Melcher und E. Gerth, Potsdam

Eingegangen am 7. 4. 1977

Zusammenfassung

Es wird gezeigt, daß für Linienformanalysen eine anpassungsfähige *Lorentz*-Funktion n-ten Grades verwendet werden kann. Multiplikative und/oder additive Verknüpfungen von *Lorentz*-Funktionen können wiederum durch eine *Lorentz*-Funktion n-ten Grades approximiert werden. Für das Analyseverfahren werden geeignete Tabellen zur Bestimmung von n mitgeteilt.

Eine Gegenüberstellung von Werten der *Voigt*-Funktion und der *Lorentz*-Funktion n-ten Grades zeigt, daß die *Voigt*-Funktion durch die *Lorentz*-Funktion n-ten Grades angepaßt bzw. ersetzt werden kann. Bei Linien mit relativ breiten Flügeln ist $n < 1$; in diesem Fall kann gefolgert werden, daß eine solche Linie aus mehreren Komponenten zusammengesetzt ist. Rückschlüsse von der im Frequenzraum makroskopisch gemessenen Verteilungskurve auf Art und Zahl der (statistischen) Elementarprozesse oder Wechselwirkungsakte im Originalraum sind nicht eindeutig.

Резюме

Показано, что для анализа формы линии можно воспользоваться приспособляемой функцией Лоренца степени n. Сложные и многократные композиции функций Лоренца можно опять аппроксимировать функцией Лоренца степени n. Для метода анализа и определения значения n приведены соответственные таблицы.

Противопоставление значений функции Фохта и функции Лоренца степени n показывает, что функцию Фохта можно аппроксимировать или даже заменить функцией Лоренца степени n. Для линий с относительно широкими крыльями $n < 1$; в этом случае можно заключить, что такая линия состоит из нескольких компонентов. Выводы, сделанные на основании макроскопически измеренной кривой распределения в частотном пространстве, о виде и числе элементарных процессов не являются однозначными.

Abstract

It will be shown how to fit the *Lorentz*-function of the n-th degree to profiles of spectral lines. Some examples are given for analyzing profiles by a new method, called the “cutting-method”.

Values of the *Voigt*-function are compared with those of the general *Lorentz*-function (of the n-th degree). It seems to be impossible to differentiate these two functions by means of experimental methods. The results of the analysis of profiles yielding $n < 1$ may be due to those profiles being composed of two or more components.

Einleitung

Profile symmetrischer Spektrallinien lassen sich häufig durch *Voigt*-Funktionen anpassen, die sich durch Faltung einer *Gauß*-Funktion mit einer Lorentz-Funktion (ersten Grades) ergeben. In der Arbeit [1] wurde gezeigt, daß sich Profilfunktionen aus Produkten und/oder Summen von allgemeinen *Lorentz*-Funktionen darstellen lassen:

$$P_{\mathrm{L}} = \sum_1^k \prod_1^i \frac{a_{ik}}{\left(1 + (\frac{\omega}{\alpha_{ik}})^2\right)^{n_{ik}}} \tag{1}$$

[1] Abstract: `www.ewald-gerth.de/48abs.pdf` – attached at the end of this article (page 538).

In Gl. (1) bedeuten ω die Frequenz, α_{ik} die Übergangskoeffizienten bzw. Halbwertsgrößen und die a_{ik} die maximalen Werte (Scheitel) des jeweiligen Profils. Für hintereinander ablaufende Stufenprozesse im Modell eines reaktionskinetischen Systems gilt der Produktausdruck

$$P_{\mathrm{L}} = \frac{1}{\prod_{1}^{i}\left(1+(\frac{\omega}{\alpha_k})^2\right)}. \tag{2}$$

Nachstehend soll die einfache Form $P_{\mathrm{L}} \equiv y$ mit n gleichen Halbwertsgrößen $x_{0,5}$ für die Darstellung von Linienprofilen verwendet werden,

$$y = \frac{1}{\left(1+(\frac{x}{x_{0,5}})^2\right)^n}. \tag{3}$$

Diese Gleichung kann man als *Lorentz*-Funktion n-ten Grades bezeichnen, die für $n = 1$ in die (übliche) *Lorentz*-Funktion ersten Grades und für $n \to \infty$ in die *Gauß*-Funktion übergeht; man erhält sie auch als *Fourier*-Transformierte der *Poisson*-Funktion [1].

Offensichtlich werden durch (3) Kurvenverläufe, d. h. Profilformen, beschrieben, die in den Bereich der *Voigt*-Funktion fallen. Überdies lassen sich aber auch für $n < 1$ Profile mit sehr breiten Flügeln darstellen.

Zweifellos sind die Voraussetzungen der *Voigt*-Funktion nicht in allen Analysefällen erfüllt, so daß sich eine einfacher zu handhabende Funktion (3) als praktisch erweisen kann. Im Hinblick auf die abstrakte Modellvorstellung von im Originalraum hintereinander und nebeneinander ablaufenden Stufen- oder Kettenprozessen könnte der Gl. (3) [bzw. Gl. (1)] eine weitergehende Bedeutung zukommen als nur die einer bequemen Approximations- oder Interpolationsformel. Die Beziehungen (1), (2) und (3) können als Wahrscheinlichkeitsausdrücke (Verteilungskurven) aufgefaßt werden.

Im folgenden werden Kurvenanpassungen mit *Lorentz*-Funktionen n-ten Grades durchgeführt, an Hand einiger Beispiele näher erläutert und mit Werten von *Voigt*-Funktionen verglichen.

1 Das Verfahren zur Linienformanalyse

Der Funktionsverlauf (3) ist für verschiedene n-Werte in Abb. 1 dargestellt. Die (halbe) Halbwertsbreite $x_{0,5}$ der Linie ergibt sich für $y = 0,5$, die (halbe) Zehntelwertsbreite $x_{0,1}$ für $y = 0,1$ usw. Bei der Analyse ist in jedem Fall der maximale y-Wert $y_{\max}$ (an der Stelle $x = 0$) $y = 1$.

Für die Kurven Nr. 1, 5 und 6 ist $x_{1,5} = 1$ gewählt, ebenso für die Kurvenparameter $n = 0,5$ und $n = 0.25$. In dem gestrichelten Bereich würden die *Voigt*-Funktionen verlaufen. In diesem Bereich liegen aber auch die *Lorentz*-Funktionen für $1 \leq n < \infty$. Oberhalb von $n = 1$ (für $x > 1$) verlaufen die Kurven für $n < 1$; sie weisen relativ breite Flanken auf.

Mit wachsenden n-Werten fallen die Kurven rascher ab, und der Unterschied zwischen der *Gauß*-Funktion und einer *Lorentz*-Funktion hohen Grades wird zunehmend geringer. Am deutlichsten treten die Unterschiede der n-Werte in den Kurvenausläufern hervor.

Zur Ermittlung von n bestimmt man aus der experimentellen Kurve am günstigsten $x_{0,1}$ und $x_{0,5}$. Der Quotient ist gemäß Gl. (3)

$$\frac{x_{0,1}}{x_{0,5}} = \sqrt{\frac{\sqrt[n]{10}-1}{\sqrt[n]{2}-1}}, \tag{4}$$

worin n in impliziter Form enthalten ist. Man entnimmt n aus Tabelle l, die sich bequem mit Hilfe eines elektronischen Taschenrechners aufstellen läßt.

Tabelle 1

n	$x_{0,1}/x_{0,5}$	$x_{0,05}/x_{0,5}$	$x_{0,01}/x_{0,5}$	x_H
0,10	$3{,}126\,526\,999 \cdot 10^3$	$1{,}000\,488\,642 \cdot 10^5$	$3{,}126\,526\,999 \cdot 10^8$	31,984 371 17
0,20	$5{,}679\,589\,956 \cdot 10$	$3{,}212\,876\,817 \cdot 10^2$	$1{,}796\,053\,020 \cdot 10^4$	5,567 764 364
0,30	$1{,}540\,061\,391 \cdot 10$	$4{,}890\,412\,665 \cdot 10$	$7{,}149\,990\,561 \cdot 10^2$	3,013 199 029
0,40	8,227 462 463	$1{,}959\,384\,866 \cdot 10$	$1{,}465\,384\,208 \cdot 10^2$	2,157 974 571
0,50	5,744 562 648	$6{,}153\,256\,260 \cdot 10$	$5{,}773\,214\,000 \cdot 10$	1,732 050 807
0,60	4,569 766 762	8,203 575 843	$3{,}146\,704\,640 \cdot 10$	1,474 721 026
0,70	3,907 167 846	6,487 905 565	$2{,}061\,080\,404 \cdot 10$	1,300 692 272
0,80	3,489 331 725	5,473 411 187	$1{,}512\,245\,700 \cdot 10$	1,174 058 870
0,90	3,204 827 919	4,815 227 787	$1{,}195\,512\,361 \cdot 10$	1,077 088 426
1,00	3,000 000 000	4,358 898 945	9,949 874 374	1,000 000 000
1,25	2,676 646 877	3,670 696 386	7,236 642 144	0,860 872 305
1,50	2,489 878 152	3,292 579 847	5,913 965 812	0,766 420 931
1,75	2,369 050 170	3,056 140 120	5,151 032 993	0,697 132 906
2,00	2,284 775 713	2,895 250 891	4,661 321 925	0,643 594 253
2,25	2,222 771 193	2,779 077 397	4,323 023 918	0,600 657 973
2,50	2,175 298 081	2,691 432 365	4,076 514 659	0,565 250 308
2,75	2,137 813 856	2,623 047 422	3,889 487 615	0,535 410 962
3,00	2,107 482 407	2,568 251 699	3,743 042 239	0,509 824 529
3,25	2,082 444 231	2,523 388 912	3,625 437 694	0,487 571 826
3,50	2,061 430 663	2,485 999 620	3,529 021 022	0,467 988 947
3,75	2,043 547 149	2,454 370 541	3,448 603 004	0,450 582 996
4,00	2,028 145 175	2,427 272 598	3,380 547 160	0,434 979 442
4,25	2,014 743 318	2,403 801 747	3,322 233 047	0,420 887 983
4,50	2,002 976 810	2,383 278 547	3,271 726 685	0,408 079 698
4,75	1,992 564 304	2,365 182 710	3,227 570 853	0,396 371 337
5,00	1,983 285 337	2,349 109 176	3,188 647 436	0,385 614 257
5,25	1,974 964 768	2,334 738 019	3,154 084 760	0,375 686 452
5,50	1,967 461 695	2,321 813 215	3,123 193 514	0,366 486 728
5,75	1,960 661 497	2,310 127 496	3,095 421 649	0,357 930 356
6,00	1,954 470 006	2,299 511 313	3,070 322 006	0,349 945 779
6,25	1,948 809 108	2,289 824 603	3,047 528 572	0,342 472 098
6,50	1,943 613 508	2,280 950 710	3,026 739 006	0,335 457 115
6,75	1,938 828 180	2,272 791 665	3,007 701 375	0,328 855 798
7,00	1,922 951 152	2,265 264 611	2,990 204 128	0,322 629 066
7,25	1,930 308 413	2,258 298 997	2,974 068 334	0,316 742 812
7,50	1,926 499 846	2,251 834 373	2,959 141 633	0,311 167 126
7,75	1,922 951 152	2,245 818 660	2,945 293 532	0,305 875 643
8,00	1,919 636 636	2,240 206 741	2,932 411 588	0,300 845 032
8,25	1,916 533 889	2,234 959 352	2,920 398 437	0,296 054 551
8,50	1,913 623 241	2,230 042 117	2,909 169 292	0,291 485 701
8,75	1,910 887 425	2,225 424 895	2,898 650 083	0,287 121 911
9,00	1,908 311 152	2,221 081 070	2,888 775 722	0,282 948 297
10,00	1,899 351 690	2,206 005 948	2,854 672 772	0,267 905 698
20,00	1,860 121 373	2,140 577 023	2,709 666 624	0,187 789 574
30,00	1,847 431 442	2,119 617 441	2,664 259 514	0,152 885 225
40,00	1,841 157 498	2,109 292 456	2,642 079 438	0,132 210 786
50,00	1,837 415 643	2,103 146 403	2,628 935 716	0,118 150 243
100,00	1,829 982 347	2,090 963 521	2,603 012 726	0,083 399 940
∞	$\sqrt{\ln 10/\ln 2}$ = 1,822 615 729	$\sqrt{\ln 20/\ln 2}$ = 2,078 924 745	$\sqrt{\ln 100/\ln 2}$ = 2,577 567 883	

Der Exponent n kann auch durch numerische Inversion der Gl. (4) iterativ nach dem *Newton*schen Näherungsverfahren bestimmt werden. Für $n \to \infty$ ergibt sich

$$x_{0,1}/x_{0,5} = \sqrt{\ln 10/\ln 2}. \tag{5}$$

Als Kriterium dafür, daß exakt eine *Lorentz*-Funktion n-ten Grades vorliegt, verwendet man weitere Quotienten gemäß Gl. (4), um festzustellen, ob $n = \text{const}$ ist. Verfügt man beispielsweise in den Kurvenausläufen noch über die Werte $x_{0,05}$ und $x_{0,01}$, so bestimmt man die Quotienten

$$\frac{x_{0,05}}{x_{0,5}} = \sqrt{\frac{\sqrt[n]{20}-1}{\sqrt[n]{2}-1}} \tag{6}$$

bzw.

$$\frac{x_{0,01}}{x_{0,5}} = \sqrt{\frac{\sqrt[n]{100}-1}{\sqrt[n]{2}-1}} \tag{7}$$

und entnimmt die zugehörigen n-Werte den Spalten 3 und 4 der Tabelle 1.

Im Hinblick auf Gl. (5) findet man nunmehr für $n \to \infty$

$$x_{0,1}/x_{0,5} = \sqrt{\ln 20/\ln 2} \tag{8}$$

bzw. in bezug auf (7)

$$x_{0,1}/x_{0,5} = \sqrt{\ln 100/\ln 2}. \tag{9}$$

Im Fall, daß n nicht konstant ist, kann man für die Kurvenanpassung gemäß (4) erforderlichenfalls n etwas variieren, was ebenfalls mit einem elektronischen Taschenrechner bequem durchzuführen ist.

Mit diesem Verfahren der Linienprofil-Analyse kann man also rasch entscheiden, ob ein *Gauß*- oder *Lorentz*-Profil ersten Grades vorliegt: Man mißt die (halbe) Zehntelwertsbreite sowie die (halbe) Halbwertsbreite. Ergibt daraus der Quotient den Wert 1,8226... , so handelt es sich um ein *Gauß*-Profil; für den Quotienten 3,0000... folgt $n = 1$, also das übliche *Lorentz*-Profil (Tab. l, Spalte 2).

In der gleichen Weise führt der Quotient $x_{0,05}/x_{0,5} = 2,0789$ auf ein *Gauß*-Profil und $x_{0,05}/x_{0,5} = 4.3589$ auf ein *Lorentz*-Profil ersten Grades. Messungen der (halben) Hundertstelwertsbreite ergeben – ins Verhältnis zur (halben) Halbwertsbreite gesetzt – bei der *Gauß*-Kurve den Quotienten 2,5776... und bei der *Lorentz*-Kurve ersten Grades 6,2449... (s. Tab. 1, Spalte 3 bzw. 4).

Die Spalten Nr. 2, 3, 4 der Tabelle 1 werden simultan angewendet, um zu entitheiden, ob ein Profil durch einen einheitlichen n-Wert darstellbar ist. In diesem Fall mißt man stets die drei Breiten $x_{0,1}$, $x_{0,05}$ und $x_{0,01}$ – außerdem $x_{0,5}$. Ist n dann für alle drei Quotienten (4). (6) und (7) gleich, so liegt exakt eine *Lorentz*-Funktion des Grades n vor. Selbstverständlich kann der n-Wert bei diesen *Lorentz*-Funktionen auch durch Quotienten anderer Halbbreiten (z. B. $x_{0,8}/x_{0,2}$) bestimmt werden, wofür man dann weitere Spalten in Art von 2. 3 oder 4 berechnet.

Das Analyseverfahren wird noch durch folgende Beispiele erläutert. Messungen am Profil ergeben $x_{0,1} = 2{,}0796$ und $x_{0,5} = 0{,}9102$. Für den Quotienten $x_{0,05}/x_{0,5} = 2,2848$ entnimmt man aus der Spalte 2 der Tabelle 1 den Wert $n = 2$ und aus Spalte 5 $x_{\mathrm{H}x_H} = \sqrt{\sqrt[n]{2}-1}$, also $x_{\mathrm{H}x_H} = 0,6436$. Damit ergibt sich für die *Lorentz*-Funktion

$$y = [1 + (x \cdot x_{\mathrm{H}}/x_{0,5})^2]^{-n}.$$

also

$$y = [1 + 0,5000x^2]^{-2}.$$

Es liegt exakt eine *Lorentz*-Funktion zweiten Grades vor, da die Quotienten $x_{0,05}/x_{0,5} = 2,89525$ und $x_{0,01}/x_{0,5} = 4,66132$ jeweils auf denselben Wert $n = 2$ führen.

2 Approximation allgemeiner *Lorentz*-Funktionen durch *Lorentz*-Funktionen n-ten Grades

Wenn sich für die verschiedenen Quotienten (4), (6) oder (7) unterschiedliche n-Werte ergeben, so kann dieser Sachverhalt darauf hindeuten, daß an Stelle der *Lorentz*-Funktion n-ten Grades (3) eine allgemeine *Lorentz*-Funktion (2) oder (1) vorausgesetzt werden muß. In der nachstehenden Tabelle 2 werden Beispiele angeben, wonach Produktfunktionen (2) in befriedigender Weise mit Hilfe von (3) approximiert werden können; hierbei ergeben sich im allgemeinen gebrochene n-Werte. Es gilt also

$$y = \frac{1}{\prod_{i=1}^{m}\left[1 + (\frac{x}{\alpha_i})^2\right]} \xrightarrow{\text{appr.}} \frac{1}{[1 + (x_{\mathrm{r}}x)^2]^n}, \tag{10}$$

wobei x_{r} den Quotienten der (halben) Halbbreite x_{H} für den betreffenden n-Wert und der Halbbreite der Produktfunktion $x_{0,5}$ bedeutet,

$$x_{\mathrm{r}} = x_{\mathrm{H}}/x_{0,5}. \tag{11}$$

Es läßt sich zeigen, daß für die Grenzlagen $/\alpha \to 0$ und $/\alpha \to \infty$ ein Produkt von *Lorentz*-Funktionen wieder eine *Lorentz*-Funktion ergibt. Das Übergangsgebiet wird durch mittlere Werte von n und α approximiert.

Tabelle 2

Nr.	Produktfunktion	$\xrightarrow{\text{approx.}}$	Lorentz-Funktion n-ten Grades
1	$[(1 + x^2)(1 + 4x^2)]^{-1}$		$[1 + (1{,}6829x)^2]^{-1{,}7}$
2	$[(1 + x^2)(1 + x^2/4)]^{-1}$		$[1 + (0{,}8299x)^2]^{-1{,}75}$
3	$[(1 + x^2)(1 + x^2/2)(1 + x^2/4)(1 + x^2/8)]^{-1}$		$[1 + (0{,}7861x)^2]^{-3}$
4	$[(1 + x^2)(1 + 2x^2)(1 + 4x^2)(1 + 8x^2)]^{-1}$		$[1 + (2{,}2233x)^2]^{-3}$
5	$[(1 + x^2)^2(1 + 4x^2)^2]^{-1}$		$[1 + (1{,}7183x)^2]^{-3{,}35}$
6	$[(1 + x^2)^2(1 + x^2/4)^2]^{-1}$		$[1 + (0{,}8584x)^2]^{-3{,}35}$

Aus den Beispielen Nr. 3 und Nr. 4 der Tabelle 2 ist ersichtlich, daß man bei der Analyse von Leistungskurven im Falle elektronischer Tiefpässe [1] auf das Vorhandensein dreier gleichartiger hintereinandergeschalteter Tiefpässe schließen würde, obgleich realiter vier verschiedene Tiefpässe vorliegen. Das gilt auch analog für die Beispiele Nr. 5 und Nr. 6 der Tabelle 2.

Es ist also angezeigt, mit größter Vorsicht und mit größten Vorbehalten aus Messungen makroskopischer Verteilungskurven (Intensitäten) Rückschlüsse auf die mikrophysikalischen Vorgänge zu ziehen und Aussagen über die Einzelprozesse oder über Zahl und Art von Wechselwirkungen machen zu wollen. Derartige Aussagen verstehen sich selbstverständlich allein innerhalb der Gültigkeitsgrenzen des zugrunde gelegten Modells (und der jeweiligen Meßgenauigkeit), wobei die Meßergebnisse durchaus nicht mit Sicherheit das vorausgesetzte Modell bestätigen können. So können beispielsweise Meßergebnisse eo ipso sowohl mit dem einen (*Voigt*-Funktion) also auch mit dem anderen Modell, das zur allgemeinen *Lorentz*-Funktion führt, übereinstimmen.

3 Additive und multiplikative Zusammensetzung von *Lorentz*-Funktionen

Praktische Analysen von Linienformen sowohl bei optischen Spektrallinien [2] als auch bei Kernresonanzspektren [3] führen auch zu Werten $n < 1$. Dieser Sachverhalt kann darauf hindeuten, daß sich in diesem Fall zwei oder mehrere Komponenten additiv zu der resultierenden Meßkurve zusammensetzen. Das gilt für Komponenten gleicher sowie ungleicher maximaler y-Werte. In der nachstehenden Tabelle 3 sind einige Beispiele für $n < 1$ aufgeführt.

Tabelle 3

Nr.	Summenfunktion	$\xrightarrow{\text{approx.}}$	Lorentz-Funktion n-ten Grades
1	$(1 + x^2)^{-1} + (1 + 4x^2)^{-1}$		$[1 + (1{,}5274x)^2]^{-0{,}9}$
2	$(1 + x^2)^{-1} + (1 + x^2/4)^{-1}$		$[1 + (0{,}8273x)^2]^{-0{,}8}$
3	$(1 + x^2)^{-1} + (1 + 16x^2)^{-1}$		$[1 + (2{,}7603x)^2]^{-0{,}65}$
4	$(1 + x^2)^{-1} + (1 + x^2/16)^{-1}$		$[1 + (0{,}6901x)^2]^{-0{,}65}$
5	$(1 + x^2)^{-1} + (1 + 2x^2)^{-1} + (1 + 3x^2)^{-1} + (1 + 4x^2)^{-1}$		$[1 + (1{,}5942x)^2]^{-0{,}91}$
6	$(1 + x^2)^{-1} + (1 + x^2/4)^{-1} + (1 + x^2/16)^{-1} + (1 + x^2/64)^{-1}$		$[1 + (0{,}5174x)^2]^{-0{,}61}$

Die Analysen der Summenfunktionen ergeben, daß eine solche Funktion nur durch einen mittleren n-Wert (sowie eine mittlere Halbwertsbreite) angenähert werden kann. Beispielsweise liefert die Analyse für die Summenfunktion Nr. 5 (Tabelle 3) gemäß den Quotienten der Gl. (4), (6) und (7) die n-Werte 0,91, 0,94 und 0,96. Im allgemeinen ist dem n-Wert für $x_{0,1}/x_{0,5}$ der Vorzug zu geben, da $x_{0,05}$ oder $x_{0,01}$ – wenn überhaupt – mit geringerer Genauigkeit aus den Meßkurven zu entnehmen sind.

Die Superposition von *Lorentz*-Funktionen n-ten Grades unterschiedlicher $y_{\max}$-Werte kann ebenfalls durch eine resultierende *Lorentz*-Funktion approximiert werden. Hierbei ergibt sich, daß dadurch im allgemeinen die resultierende Halbwertsbreite und der resultierende n-Wert verändert werden. Das zeigt beispielsweise der Vergleich von

$$(1 + x^2)^{-1} + 0,2(1 + 4x^2)^{-1} \xrightarrow{\text{approx.}} [1 + (1,34x)^2]^{-,95}$$

mit dem Beispiel 1 in der Tabelle 3.

Verknüpft man additiv die Beispielfunktionen Nr. 3 und Nr. 5 der Tabelle 2 mit der Funktion Nr. 6 der Tabelle 3. so erhält man

$$y = [1 + (3,3127x)^2]^{-0,4}. \tag{12}$$

Dieser Ausdruck (12) steht näherungsweise für 12 *Lorentz*-Funktionen y (12). Den Werten y (12) werden die gemäß Gl. (12) errechneten Werte in der nachstehenden Tabelle 4 gegenübergestellt.

Tabelle 4

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,65143	0,7
$y(12)$	0,9624	0,8703	0,7633	0,6673	0,5895	0,5272	0,5000	0,4768
y	0,9592	0,8645	0,7597	0,6666	0,5899	0,5274	0,5000	0,4766

x	1,0	2,0	4,8565	9,0550
$y(12)$	0,3708	0,2225	0,1000	0,0500
y	0,3704	0,2183	0,1082	0,0658

Für bessere Anpassungen kommen Verfahren zur nichtlinearen Approximation [4] in Frage; in diesem Fall werden dann Rechenprogramme eingesetzt, z. B. [5].

Innerhalb der Zeichen- und Meßgenauigkeit stimmen die ,,Meßwerte“ y (12) mit den approximierten y-Werten des extremen Beispiels (Tabelle 4) gut überein. Diese Komposition aus 12 *Lorentz*-Funktionen zeigt, daß multiplikative und additive Verknüpfungen – analog der Zusammensetzung aus Sowohl-als-auch- und Entweder-oder-Wahrscheinlichkeiten – zu Verbreiterungen glockenförmiger Kurven führen, die – approximativ – Linienprofile darstellen können. Das abstrakte Modell eines Systems in Art kinetischer Reaktionsabläufe und die damit verbundenen Wahrscheinlichkeitsausdrücke für statistische Verteilungskurven eröffnen möglicherweise eine allgemeinere Anwendbarkeit und Anpassungsfähigkeit als die *Voigt*-Funktion, die sich aus der Faltung der *Gauß*-Funktion und der *Lorentz*-Funktion ersten Grades ergibt. Solche Faltungen können auch mit Hilfe allgemeiner *Lorentz*-Funktionen oder *Lorentz*-Funktionen n-ten Grades durchgeführt werden.

4 Beispiele für Linienformanalysen

Im allgemeinen ist nicht bekannt, aus wieviel Lorentz-Faktoren oder/und *Lorentz*-Summanden eine resultierende Meßkurve zusammengesetzt ist, so daß für Zwecke der Approximation eine *Lorentz*-Funktion n-ten Grades für die nachstehenden Analysebeispiele vorausgesetzt werden soll.

Von historischem Interesse sei zunächst die Analyse der roten Lithium-Linie und der beiden gelben Natrium-Linien von W. VOIGT [6]. VOIGT fand, daß die Meßkurven zwischen den Grenzfällen der *Gauß*- und der *Lorentz*-Kurve (ersten Grades) liegen. Er approximierte die Meßkurven durch folgende Beziehung:

$$y = \frac{\arctan a/x^2 - b}{\arctan a - b}. \tag{13}$$

VOIGT bemerkt zu diesem Ausdruck: ,,Derselbe bietet natürlich durch die drei in ihm auftretenden Parameter von vornherein mehr Hilfsmittel zur Darstellung der Erfahrung. Ich habe für die drei Kurven in den Tafeln diese Parameter durch Probieren bestimmt ... “

Für die rote Li-Linie gibt VOIGT die Parameter $a = 143$, $b = 65$ an, für Na-D_1 findet er $a = 36$, $b = 26$ und für Na-D_2 schließlich $a = 48$, $b = 32$.

Bei der *Voigt*schen Kurvenanpassung fällt auf, daß die Meßkurven für Werte bis etwa $x_{0,4}$ gut wiedergegeben werden, daß aber zu den weiteren Flügelausläufern die Meßkurve rascher abfällt als die Anpassungskurve (13). Aus der nachstehenden Tabelle 5 ist ersichtlich, daß die *Lorentz*-Funktion n-ten Grades, die als Anpassung an die *Voigt*-Funktion speziell für den n-Wert aus $x_{0,1}/x_{0,5}$ gewählt wurde, ebenfalls für große x-Werte rascher abklingt; damit liegt es nahe, eine *Lorentz*-Funktion n-ten Grades für die drei klassischen Linienanpassungen zu bestimmen.

Als Darstellung gemäß Gl. (10) findet man
für die rote Li-Linie $n = 3{,}3$ und $x_r = 0{,}336$,
für die D_1-Linie (Na) $n = 2{,}4$ und $x_r = 0{,}681$,
für die D_2-Linie (Na) $n = 2{,}5$ und $x_r = 0{,}581$.

Von G. ELSTE [2] wurde das Profil der He-D_3-Linie ($\lambda = 5876 Å$) durch *Voigt*-Funktionen approximiert. Das in der Arbeit von ELSTE wiedergegebene Profil kann hinreichend genau auch mit einer *Lorentz*-Funktion n-ten Grades dargestellt werden:

$$y = [1 - (0,00689x)^2]^{-2,6}, \text{ wobei } x \text{ für } \Delta\lambda \text{ (in mÅ) steht.}$$

Tabelle 5

Voigt-Profile und Lorentz-Funktion n-ten Grades

				Reduzierte Ordinate ($y = 1$ für $x = 0$)										
$\beta_2/\beta_1 = \eta$	β_2/h	β_1/h	n	0,9	0,8	0,7	0,6	0,4	0,3	0,2	0,1	0,05	0,02	0,01
				Reduzierte Linienbreite ($x_{0,5} = 1$)										
0,00	0,60	0,000			0,57	0,72	0,86	1,15	1,32	1,52	1,82	2,08	2,38	2,58
			∞	0,3899	0,5674	0,7173	0,8585	1,1498	1,3179	1,5238	1,8226	2,0789	2,3757	2,5776
0,04	0,59	0,025			0,56	0,72	0,86	1,15	1,33	1,53	1,84	2,12	2,49	2,82
			42,63	0,3885	0,5658	0,7159	0,8575	1,1513	1,3219	1,5320	1,8400	2,1074	2,4214	2,6380
0,09	0,57	0,050			0,56	0,71	0,86	1,15	1,33	1,54	1,87	2,19	2,63	3,13
			15,92	0,3863	0,5632	0,7135	0,8560	1,1533	1,3287	1,5461	1,8700	2,1570	2,5019	2,7455
			E	0,3875	0,5647	0,7148	0,8568	1,1526	1,3264	1,5434	1,8737	2,1863		3,115
0,14	0,55	0,075			0,56	0,71	0,86	1,16	1,33	1,56	1,90	2,25	2,79	3,56
			9,92	0,3841	0,5607	0,7112	0,8545	1,1563	1,3353	1,5601	1,9000	2,2071	2,5845	2,8571
0,19	0,54	0,100			0,56	0,71	0,86	1,16	1,34	1,57	1,94	2,34	3,00	4,08
			6,69	0,3813	0,5574	0,7083	0,8525	1,1596	1,3440	1,5784	1,9400	2,2748	2,6980	3,0124
			E	0,3850	0,5614	0,7117	0,8546	1,1560	1,3361	1,5665	1,9371	2,3302		4,044
0,24	0,52	0,125			0,56	0,71	0,86	1,17	1,34	1,59	1,98	2,42	3,24	4,58
			5,095	0,3787	0,5543	0,7054	0,8507	1,1627	1,3524	1,5966	1,9800	2,3434	2,8152	3,1750
0,30	0,50	0,150			0,55	0,71	0,85	1,17	1,35	1,60	2,02	2,54	3,52	5,05
			4,15	0,3761	0,5513	0,7026	0,8489	1,1658	1,3607	1,6144	2,0200	2,4130	2,9362	3,3450
0,36	0,48	0,175			0,55	0,70	0,85	1,17	1,36	1,62	2,06	2,64	3,80	5,50
			3,52	0,3736	0,5484	0,7000	0,8471	1,1688	1,3689	1,6321	2,0600	2,4835	3,0608	3,5225
0,43	0,46	0,200			0,55	0,70	0,85	1,18	1,37	1,64	2,10	2,75	4,14	5,96
			3,07	0,3713	0,5456	0,6974	0,8454	1,1718	1,3769	1,6495	2,1000	2,5548	3,1891	3,7076
			E	0,3785	0,5538	0,7039	0,8497	1,1650	1,3618	1,6284	2,1167	2,7617		5,716
0,51	0,44	0,225			0,54	0,70	0,85	1,18	1,38	1,66	2,15	2,87	4,44	6,40
			2,663	0,3684	0,5422	0,6943	0,8433	1,1753	1,3866	1,6710	2,1500	2,6452	3,3545	3,9496
0,59	0,42	0,250			0,54	0,70	0,84	1,18	1,39	1,68	2,19	2,98	4,73	6,78
			2,416	0,3663	0,5396	0,6919	0,8418	1,1781	1,3943	1,6880	2,1900	2,7185	3,4909	4,1517
0,69	0,40	0,275			0,53	0,69	0,84	1,19	1,40	1,71	2,24	3,12	5,03	7,15
			2,173	0,3663	0,5365	0,6890	0,8398	1,1815	1,4037	1,7089	2,2400	2,8112	3,6665	4,4152
0,79	0,38	0,300			0,53	0,69	0,84	1,19	1,41	1,74	2,29	3,26	5,32	7,52
			1,982	0,3611	0,5335	0,6862	0,8380	1,1848	1,4129	1,7296	2,2900	2,9051	3,8476	4,6907
			E	0,3702	0,5437	0,6940	0,8434	1,1779	1,4006	1,7191	2,3751	3,2876		7,223
0,92	0,35	0,325			0,53	0,68	0,84	1,19	1,42	1,77	2,34	3,39	5,57	7,86
			1 827	0,3587	0,5306	0,6836	0,8362	1,1880	1,4219	1,7500	2,3400	3,0003	4,0342	4,9783
1,07	0,33	0,350			0,52	0,68	0,84	1,20	1,44	1,81	2,40	3,54	5,83	8,21
			1,676	0,3559	0,5273	0,6804	0,8341	1,1918	1,4325	1,7742	2,4000	3,1161	4,2654	5,3396
1,26	0,33	0,375			0,52	0,68	0,83	1,20	1,45	1,85	2,46	3,70	6,07	8,55
			1,553	0,3533	0,5241	0,6775	0,8321	1,1955	1,4428	1,7981	2,4600	3,2335	4,5044	5,7186
1,50	0,27	0,400			0,52	0,67	0,83	1,21	1,47	1,88	2,54	3,85	6,30	8,86
			1,4205	0,3498	0,5200	0,6736	0,8295	1,2002	1,4563	1,8294	2,5400	3,3926	4,8352	6,2517
			E	0,3574	0,5283	0,6803	0,8337	1,1968	1,4548	1,8472	2,6793	3,8273		8,628
			D/V	0,35782	0,52879	0,68099	0,83376	1,19589	1,45137	1,84219	2,67030	3,81151	6,05566	8,5768
1,83	0,23	0,425			0,51	0,67	0,83	1,21	1,48	1,92	2,64	4,00	6,55	9,18
			1,2903	0,3459	0,5152	0,6691	0,8264	1,2059	1,4726	1,8678	2,6400	3,5953	5,2678	6,9632
2,38	0,19	0,450			0,51	0,66	0,82	1,22	1,50	1,96	2,74	4,13	6,76	9,50
			1,1877	0,3421	0,5107	0,6648	0,8235	1,2114	1,4885	1,9054	2,7400	3,8023	5,7217	7,7255
			E	0,3476	0,5165	0,6700	0,8263	1,2097	1,4889	1,9219	2,8395	4,0946		9,298
3,54	0,13	0,475			0,51	0,66	0,82	1,22	1,52	1,98	2,87	4,25	6,92	9,77
			1,0827	0,3376	0,5052	0,6596	0,8199	1,2182	1,5084	1,9532	2,8700	4,0773	6,3432	8,7935
∞	0,00	0,500			0,50	0,66	0,82	1,22	1,53	2,00	3,00	4,36	7,00	9,95
			1,000	0,3333	0,5000	0,6547	0,8165	1,2247	1,5275	2,000	3,0000	4,3589	7,0000	9,9499
			0,75	0,3150	0,4775	0,6330	0,8014	1,2548	1,6181	2,2288	3,6766	5,9219	10,9791	17,4568
			0,50	0,2796	0,4330	0,5890	0,7698	1,3229	1,8359	2,8284	5,7946	11,5326	28,8617	57,7321
			0,40	0,2544	0,4005	0,5559	0,7452	1,3811	2,0350	3,4336	8,2275	19,5838	61,6104	146,5384
			0,30	0,2153	0,3487	0,5015	0,7032	1,4918	2,4461	4,8407	15,4006	48,9041	225,2104	714,9991
			0,20	0,1496	0,2573	0,3996	0,6185	1,7658	3,6390	10,0386	56,7959	321,2877	3175,0032	17960,5302

Das von ELSTE in derselben Abbildung angegebene entzerrte Profil läßt sich ebenfalls durch eine *Lorentz*-Funktion n-ten Grades darstellen:

$$y = [1 + (0{,}3699x)^2]^{-9}.$$

Des weiteren findet ELSTE [2], daß sich die Krypton-Linie ($\lambda = 5872$Å durch die Summe zweier *Voigt*-Funktionen approximieren läßt. Gemäß dem weiter oben angegebenen Analyseverfahren, findet man einen n-Wert, der kleiner als 1 ist: $n = 0{,}8$. Dieser Sachverhalt kann darauf hindeuten, daß sich das Profil aus einer Summe von *Lorentz*-Funktionen zusammensetzen läßt. Dieses Profil kann durch $y = [1 + (0,0487x)^2]^{-0,8}$ dargestellt werden; hierbei steht x wiederum für $\Delta\lambda$, das im vorliegenden Fall in mÅ gemessen wird.

Auf einen n-Wert, der kleiner als 1 ist, führt auch die Analyse eines Kernresonanzsignals (NMR) [3]. Die Tatsache, daß für $x_{0,1}/x_{0,5}$ $n = 0{,}65$ ist. legt den Schluß nahe, daß es sich auch in diesem Fall um eine additive Zusammensetzung von *Lorentz*-Funktionen handeln kann.

Das abstrakt aufzufassende Modell von Stufen- oder/und Verzweigungsprozessen im Originalraum scheint auch geeignet für die Darstellung von Stufenprozessen bei Streuvorgängen (z.B. Mehrfachstreuung) oder für die Streuung von Licht an statistischen thermischen Dichteschwankungen in Flüssigkeiten, der sog. *Brillouin*-Streuung. Es ist deshalb naheliegend, auch *Brillouin*-Linienprofile durch die *Lorentz*-Funktion n-ten Grades darzustellen, da für die zu überlagernden Linien nicht immer das übliche *Lorentz*-Profil der Funktion ersten Grades als gegeben vorausgesetzt werden darf. So wurde bei experimentellen und theoretischen Untersuchungen an Tetrachlorkohlenstoff festgestellt, daß die *Brillouin*-Komponenten keine *Lorentz*-Form (ersten Grades) haben [7].

5 Approximation bzw. Ersatz von *Voigt*-Funktionen durch *Lorentz*-Funktionen n-ten Grades

Die vorstehende Tabelle 5 bringt einen Vergleich zwischen den Werten der *Voigt*-Funktion und der mit einem geeigneten n-Wert jeweils angepaßten *Lorentz*-Funktion n-ten Grades. In den ersten drei Spalten und den zugehörigen Zeilen sind die Zahlenwerte angegeben, die bei Unsöld [8] zu finden sind. In der jeweils darunter stehenden Zeile sind die für den passenden n-Wert (Spalte 4) berechneten Werte der *Lorentz*-Funktion (incl. für $y = 0{,}9$) aufgeführt. In den mit E gekennzeichneten Zeilen sind zum weiteren Vergleich die von Elste [2] berechneten Funktionswerte angegeben, die für $y = 0{,}2$ dort nicht berechnet sind.

Diese Tabelle 5 kann für $n < 1$ ergänzt werden. Die Übereinstimmung der *Unsöld*-Tabellenwerte von $y = 0{,}9$ bis $y = 0{,}1$ mit denen einer *Lorentz*-Funktion n-ten Grades ist bemerkenswert. Selbstverständlich läßt sich eine bessere Anpassung auch für $y < 0,1$ vornehmen; allerdings stehen hier mitunter keine Meßwerte oder aber nur Meßwerte mit geringerer Genauigkeit zur Verfügung.

Für den Wert $\eta = \beta_1/\beta_2 = 1,50$ ist zum Vergleich noch eine Zeile D/V eingefügt. Es handelt sich hier um Werte, die von Davies und Vaughan [9] für *Voigt*-Profile berechnet wurden. Man erkennt deutliche Abweichungen gegenüber den eine Zeile darüber stehenden Werten von Elste [2].

In der graphischen Darstellung (Abb. 1) ist die Kurve 5 der *Lorentz*-Funktion 4. Grades von der *Voigt*-Funktion $\eta = 0,30$ (Tabelle 5) kaum zu unterscheiden. Ebenso kann man die Kurve 2 der Abb. 1 durch ein *Voigt*-Funktionsprofil mit $\eta = 0.79$ (Tabelle 5) – und umgekehrt – ersetzen.

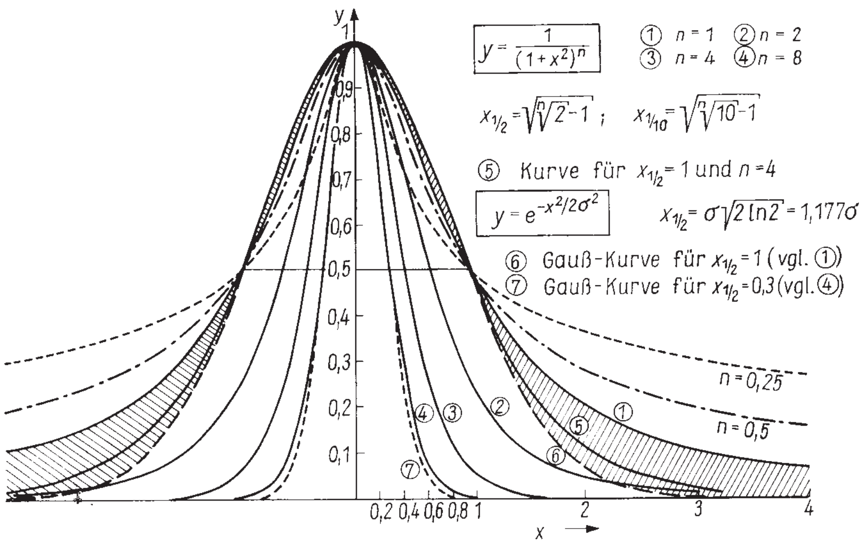

Abb. 1

Auf einen Vergleich mit weiteren Tabellen wird verzichtet, da hierzu Interpolationen notwendig wären: Die Tabellen von F. HJERTING [10], V. A. AMBARZUMJAN [11], G. D. FINN und MUGGLESTONE [12] sowie die 8stelligen Tafeln von D. G. HUMMER [13] bringen die zu vorgegebenen x-Werten gehörenden y-Werte, während in der obigen Tabelle 5 –in Anlehnung an UNSÖLD [8] – die reduzierten y-Koordinaten vorgegeben sind.

Vergleicht man die Ordinatendifferenzen zwischen der *Voigt*-Funktion und der *Lorentz*-Funktion n-ten Grades für die reduzierten Ordinaten 0,05, 0,02 und 0.01 in der Tabelle 5, so bleiben sie unter 1,6%. Dieser Unterschied verringert sich, wenn die n-Werte etwas kleiner gewählt werden, wenn sie also auf $x_{0,05}/x_{0,5}$ oder $x_{0,01}/x_{0,5}$ bezogen werden. In der Praxis werden aber die Ordinatenwerte für $x_{0,05}$ oder für $x_{0,01}$ relativ seltener oder zu ungenau bestimmt, so daß $x_{0,1}$ der übliche Bezugspunkt ist.

Es sei noch bemerkt, daß auch die beim *Voigt*-Profil vorausgesetzte Dopplerbreite – gemäß einer *Maxwell*- bzw. *Gauß*-Verteilung – nicht immer gewährleistet ist. So haben A. V. ELETZKIJ und B. G. FREINKMAN [14] festgestellt, daß in Entladungen u. U. eine erhebliche Abweichung von einer Maxwellverteilung besteht, was eine Abweichung der Spektrallinienform von der allgemein angenommenen *Doppler*-Linienform bedingt.

Die Genauigkeit der Anpassung von Meßkurven und der daraus zu berechnenden Größen hängt insbesondere von der experimentellen Meßgenauigkeit ab. Größere Schwierigkeiten bereitet dabei der Übergang zum Kontinuum bei Absorptionslinien. Hierdurch können die Halbwertsbreiten zu klein bestimmt werden. Betrachtet man beispielsweise in Abb. l das Profil für $n = 0{,}25$, so kann man – ohne Kenntnis des Nullniveaus – das Kontinuum für $x \to \infty$ etwa bei $0{,}2 = y$ legen. Das aber führt zu einer fehlerhaften Bestimmung der Halbwertsbreite und damit zu einem größeren n-Wert, nämlich zu $\approx 0,67$. In ähnlicher Weise würde man für das Profil mit $n = 0.5$ – bei einem angenommenen Untergrund bei $y = 0,1$ – einen Wert $n \approx 0,85$ bestimmen. Es ist nicht ausgeschlossen, daß mitunter auf diese Weise zu hohe n-Werte bestimmt werden können. Erhält man z. B. bei dieser fehlerhaften Bestimmung des Rauschens ($y_{\max}$ also zu klein) einen Wert $n = 1$, so liegt eben keine reine *Lorentz*-Linie vor, sondern möglicherweise ein Profil, das sich additiv aus mehreren Komponenten zusammensetzen kann; in diesem Fall ist nämlich der resultierende (mittlere) n-Wert kleiner als Eins.

Literatur

[1] MELCHER, H.; GERTH, E.: Ein heuristisches Modell für Linienprofile. - Exper. Technik Physik **25** (1977) 521–525.

[2] ELSTE, G.: Die Entzerrung von Spektrallinien unter Verwendung von Voigt-Funktionen. - Z. Astrophysik **33** (1953/54) 39-73.

[3] GÖLZ, E.; ZACHMANN, H. G.: Untersuchungen von teilkristallinem Polyäthylen mit Hilfe der hochauflösenden Kernresonanz. - Kolloid-Z. u. Z. Polymere **247** (1971) 814-819.

[4] PEIL, J.: Ein Verfahren zur nichtlinearen Approximation und seine Anwendung auf verschiedene naturwissenschaftliche, technische und medizinische Probleme. - Nova Acta Leopoldina **35** (1970) Nr. 195.

[5] BARD, Y.: IBM-Rechenprogramm “Nonlinear parameter estimation and programming”.

[6] Voigt, W.: Über die Intensitätsverteilung innerhalb einer Spektrallinie. - Phys. Z. **14** (1913) 377.

[7] Carome, E. F.; Nichols, W. H.; Kunsitis-Swyt, C. R.; Singal, S. P.: Ultrasonic and Light-Scattering Studies of Carbon Tetrachloride. - J. chem. Phys. **49** (1968) 1013-1017.

[8] Unsöld, A.: Physik der Sternatmosphären. 2. Aufl. - Berlin/Göttingen/Heidelberg: Springer-Verlag 1955.

[9] Davies, J. T.; Vaughan, J. M.: A New Tabulation of the Voigt Profile. - Astrophys. J. **137** (1963) 1302-1305.

[10] Hjerting, F.: Tables Facilitating the Calculation of Line Absorption Coefficients. - Astrophys. J. **88** (1938) 508-515.

[11] Ambarzumjan, V. A.: Theoretische Astrophysik. - Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften 1957.

[12] Finn, G. D.; Mugglestone, D.: Tables of the Line Broadening Function H (a, v). - Month. Notes royal astronom. Soc. **129** (1965) 221-235.

[13] Hummer, D. G.: The Voigt Function. - Mem. royal astronom. Soc. **70** (1965) 1 - 32.

[14] Eletzkij, A. V.; Freinkman, B. G.: The Distribution Function and Radiation Line Contour of Ions in the Low-Pressure Discharge. - Dokl. Akad. Nauk SSSR **210** (1973) 62-65.

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. Zum Zwecke der Vereinheitlichung mit anderen Arbeiten sowie der besseren Lesbarkeit auf dem Bildschirm wurde ein Umbruch auf eine Spalte pro Seite und eine Veränderung der Paginierung bis auf die Anfangsseite durchgeführt.

Abstract: `www.ewald-gerth.de/48abs.pdf`

Representation of spectral line profiles by means of the Lorentz-function of n-th degree

Horst Melcher[1] and Ewald Gerth[2]

[1] *Pedagogic College ,,Dr.Theodor Neubauer", Erfurt-Mühlhausen, GDR*
[2] *Central Institute for Astrophysics of the Academy of Sciences of the GDR, Potsdam*

Zusammenfassung

It will be shown how to fit the Lorentz-function of n-th degree to profiles of the spectral lines. Some examples are given for analyzing profiles by a new method, called the "cutting-method". Values of the Voigt-function are compared with those of the general Lorentz-function (of n-th degree). It seems to be impossible to differentiate these two functions by means of experimental methods. The results of the analysis of profiles yielding $n < 1$ may be due to those profiles being composed of two or more components.

Publication
Zeitschrift für experimentelle Technik der Physik,
Band 25, 1977, S. 52z–538.
Eingegangen am 7. 4. 1977

Journal for Experimental Techniques of Physics
Volume 25, 1977, p. 527–538.
Received 1977, April 7$^{\mathrm{th}}$

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/48.pdf`