

УДК 535.31
DOI 10.26456/vtchem2026.1.9

Методические аспекты построения контура Фойгта на примере контура полосы поглощения 1035 см^{-1} в ИК спектре жидкого бензола

М.И. Шейх-Заде

ГБОУВО РК «Крымский инженерно-педагогический университет имени Февзи Якубова», г. Симферополь

Рассмотрены методические аспекты построения двумя способами фойгтовского контура на примере контура полосы поглощения 1035 см^{-1} в ИК спектре жидкого бензола. Функция Фойгта $H(v,a)$ при $a>0$ рассматривалась как действительная часть интеграла вероятностей $W(z)$ от комплексного аргумента $z=v+i\cdot a$. Для вычисления значений функции $W(z)$ использовалось разложение $W(z)$ в непрерывную дробь. Показано, что оба способа построения фойгтовского контура приводят к одинаковому результату и что функция Фойгта удовлетворительно аппроксимирует экспериментальный контур рассмотренной полосы поглощения в ИК спектре.

Ключевые слова: ИК спектр, полоса поглощения, контур, аппроксимация, функция Фойгта.

В различных областях химии широко используются физические методы исследования строения и свойств вещества в различных агрегатных состояниях. Весьма эффективными среди этих методов являются спектроскопические методы, в частности, метод ИК спектроскопии [1–3]. Основную информацию из ИК спектров получают на основе данных о таких характеристиках полос поглощения как волновое число и оптическая плотность в максимуме полосы, ширина полосы, форма контура полосы. Знание формы контуров полос поглощения важно при разделении перекрывающихся полос, при количественном спектральном анализе с использованием интегрального коэффициента поглощения. Форма контуров полос в ИК спектрах жидкостей может быть источником информации о межмолекулярных взаимодействиях в таких средах [4] и т.п. Поэтому исследование формы контуров полос поглощения в ИК спектрах является актуальной задачей теоретической спектроскопии.

Целью данной работы является рассмотрение двух способов построения фойгтовских контуров полос поглощения в ИК спектрах. При этом акцент делается на методические аспекты такого построения. Иллюстрация решения этой задачи проводится на примере

высокочастотной (ВЧ) ветви полосы поглощения 1035 см^{-1} в ИК спектре жидкого бензола.

Экспериментальный контур этой полосы, полученный методом НПВО, приведён в [5] в табличном виде как зависимость показателя поглощения κ от волнового числа ν . Однако, в спектроскопии часто используется натуральный показатель поглощения α (здесь сохранены обозначения и терминология работы [5]), который связан с κ соотношением:

$$\alpha = 4\pi\nu\kappa \quad (1)$$

В настоящей работе использованы значения α , пересчитанные по формуле (1) из значений κ , заимствованных из [5].

Построение контура Фойгта по первому способу сводится к вычислению значений функции Фойгта для заданных значений волнового числа, которые являются абсциссами экспериментальных точек. Функция Фойгта может быть представлена в явном виде различными выражениями [6, 7]. В настоящей работе функция Фойгта применяется в виде, использованном в [8, 9]:

$$H(\nu, a) = \frac{a}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (\nu - y)^2} \cdot dy, \quad (2)$$

где a, ν – параметры функции (2). Введём следующие обозначения и определения, которые будут использоваться в дальнейшем:

- D_0, D – оптическая плотность в максимуме контура и при текущем значении волнового числа соответственно;
- $\varepsilon = \alpha/\alpha_0 = D/D_0 = H(\nu, a)/H(0, a)$;
- h – ширина контура при $D = D_0/2$; h_ν, h_D – ширины фойгтовского и доплеровского контуров соответственно;
- b_ε – ширина контура при заданном значении ε . Тогда при $\varepsilon = 0,5$ будет $b_{0,5} = h$.

Для вычисления значений функции (2) необходимо знать значения параметров a и ν . Для этого предварительно нужно найти значения h_ν и $b_{0,1}$. Значение h_ν , найденное методом интерполирования по трём узлам интерполяции с использованием полинома Лагранжа $L_2(\varepsilon)$, оказалось равным $10,6092 \text{ см}^{-1}$. Значение $b_{0,1}$, полученное аналогичным методом, равно $28,1964 \text{ см}^{-1}$. Тогда отношение $b_{0,1}/h_\nu = 2,6577$. Заметим, что здесь и далее рассчитанные значения физических величин приводятся с четырьмя десятичными знаками, так как исходные данные в [5] приведены с четырьмя десятичными знаками. Для полученного значения $b_{0,1}/h_\nu$ было найдено значение $a = 1,455$ из графика зависимости $a = f(b_{0,1}/h_\nu)$, построенного по данным работы [7]. Значение a было также получено аналитически методом интерполирования данных из [7] по трём узлам интерполяции с использованием полинома Лагранжа $L_2(x)$, где $x = b_{0,1}/h_\nu$. Найденное

таким способом значение a оказалось равным 1,4563. Это значение a было использовано в дальнейших расчётах.

Для вычисления значений параметра ν необходимо предварительно найти значение h_D с использованием полученных выше значений h_ν и $b_{0,1}$. Для $b_{0,1}/h_\nu=2,6577$ было получено из графика зависимости $h_D/h_\nu = f(b_{0,1}/h_\nu)$, построенного по данным [7], значение $h_D/h_\nu = 0,449$, откуда следует $h_D = 4,7635 \text{ см}^{-1}$. Значение h_D/h_ν можно получить аналитически методом интерполирования данных из [7], например, по трём узлам интерполяции с использованием полинома Лагранжа $L_2(x)$. Найденное таким способом значение h_D/h_ν оказалось равным 0,4495, откуда следует $h_D = 4,7688 \text{ см}^{-1}$. Это значение h_D использовалось в дальнейших расчётах. Далее по формуле

$$\nu = \frac{2(\nu - \nu_0) \cdot \sqrt{\ln 2}}{h_D},$$

которая даёт определение параметра ν , были рассчитаны значения ν для всех ν , использованных при расчётах.

После того, как найдены значения параметров a и ν , для построения фойгтовского контура рассматриваемой полосы поглощения по первому способу, необходимо вычислить значения функции (2). Известно [10–12], что функция (2) при $a > 0$ представляет собой действительную часть интеграла вероятностей

$$W(z) = e^{-z^2} \cdot \left(1 + \frac{2 \cdot i}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^z e^{-y^2} \cdot dy\right) \quad (3)$$

от комплексного переменного $z = \nu + i \cdot a$. Поэтому, для нахождения значений функции (2) можно вычислять функцию (3) по известным алгоритмам и брать её действительную часть. В настоящей работе для вычисления значений функции (3) для $a = 1,4563$ и $\nu \geq 0$ использовалось разложение $W(z)$ в непрерывную дробь [12, 13]. Этот метод позволяет получать в первом квадранте значения $W(z)$ с относительной погрешностью $1 \cdot 10^{-6}$ [13]. Тестовые вычисления функции (3) при $a = 1,46$ и $\nu \geq 0$, а также при $a = 1,50$ и $\nu \geq 0$ показали, что результаты расчётов функции (3), полученные по изложенной методике, совпали с точностью до шести десятичных знаков с шестизначными значениями этой функции, приведёнными в [10]. После того, как были получены значения функции (2), фойгтовский контур ВЧ ветви рассматриваемой полосы поглощения строился в виде зависимости $\varepsilon = f(\nu - \nu_0)$, рис. 1.

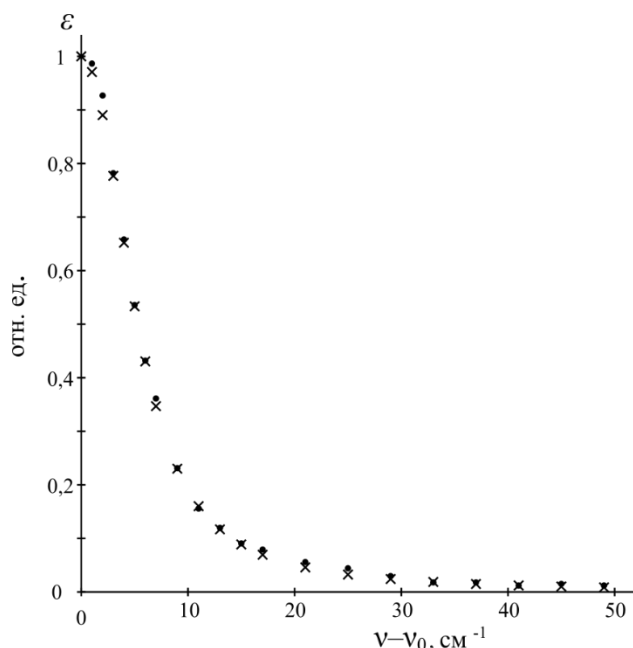


Рис. 1. ВЧ ветвь экспериментального контура полосы поглощения $\nu_0 = 1035 \text{ см}^{-1}$ жидкого бензола (точки) и его аппроксимация контуром Фойгта, построенного по первому способу (крестики)

Отметим, что если экспериментальный контур полосы поглощения является симметричным, то фойгтовский контур низкочастотной (НЧ) ветви строится как зеркальное отражение ВЧ ветви. В противном случае НЧ и ВЧ ветви фойгтовского контура строятся по-отдельности [14].

Для построения фойгтовского контура рассматриваемой полосы поглощения по второму способу необходимо найти, для полученных выше величин $a = 1,4563$ и $h_\nu = 10,6092 \text{ см}^{-1}$, значения $x_\epsilon = b_\epsilon/h_\nu$ для заданных значений ϵ , приведённых в [7]. Значения x_ϵ были получены методом интерполирования по трём узлам интерполяции данных из [7] с использованием полиномов Лагранжа $L_2(a)$. Затем из формулы $x_\epsilon = 2(\nu - \nu_0)_\epsilon/h_\nu$ были найдены значения $(\nu - \nu_0)_\epsilon$ и строился фойгтовский контур ВЧ ветви рассматриваемой полосы поглощения в виде зависимости $\epsilon = f(\nu - \nu_0)$, рис. 2.

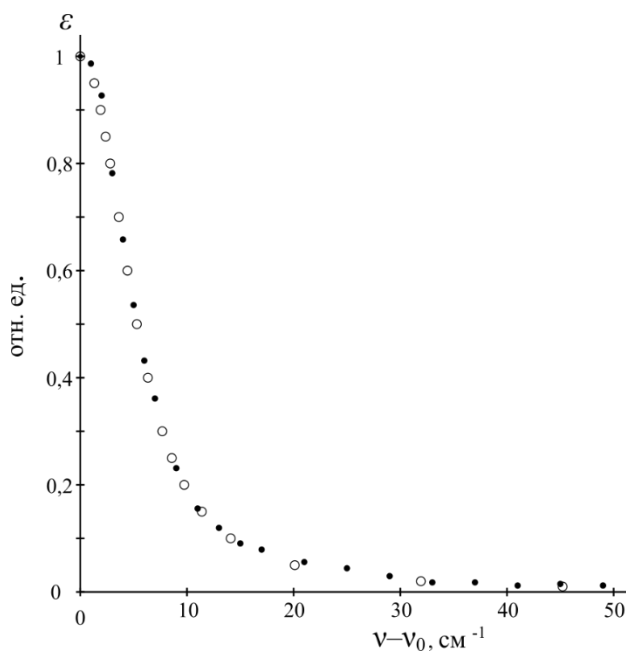


Рис. 2. ВЧ ветвь экспериментального контура полосы поглощения $\nu_0 = 1035 \text{ см}^{-1}$ жидкого бензола (точки) и его аппроксимация контуром Фойгта, построенного по второму способу (окружности)

Если оба рисунка совместить, то контуры Фойгта на этих рисунках полностью совпадут. Это означает, что оба способа построения контура Фойгта приводят к одинаковому результату.

Из рис. 1 и рис. 2 можно видеть, что оба способа построения фойгтовского контура приводят, в целом, к удовлетворительной аппроксимации ВЧ ветви экспериментального контура рассматриваемой полосы поглощения. Небольшие отклонения контура Фойгта от экспериментальных данных на некоторых участках могут быть обусловлены:

- экспериментальными погрешностями при регистрации контура полосы поглощения;
- тем, что функция Фойгта не учитывает всех механизмов формирования контура полосы поглощения;
- другими возможными причинами;
- одновременным действием всех этих причин.

Список литературы

1. Бранд Дж., Эглинтон Г. Применение спектроскопии в органической химии. – М.: Мир, 1967. – 279 с.
2. Эткинс П. Физическая химия. – Т.2. – М.: Мир, 1980. – 584 с.

3. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. – М.: Мир, 1982. – 328 с.
4. Лазарев В.В., Краузе А.С. // Изв. Уфимского научного центра РАН. Сер. Физика. – 2013. – №2. – С. 27–32.
5. Золотарёв В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. – Л.: Химия, 1984. – 216 с.
6. Методы исследования плазмы / Под ред. В. Лохте-Хольтгревена. – М.: Мир, 1971. – С. 103-105.
7. Davies J.T., Vaughan J.M. // *Astrophys. J.* – 1963. – V. 137. – P. 1302–1305.
8. Ленг К.Р. Астрофизические формулы. – Т.1. – М.: Мир, 1978. – 448 с.
9. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. – М.: Лань, 2010. – 656 с.
10. Фаддеева В.Н., Терентьев Н.М. Таблицы значений интеграла вероятностей от комплексного аргумента. – М.: ГИТТЛ, 1954. – 268 с.
11. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий – М.: Наука, 1979. – 319 с.
12. Drayson S.R. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* – 1979. – V. 16. – P. 611–614.
13. Цимринг Ш.Е. Специальные функции и определённые интегралы. – М.: Радио и связь, 1988. – 272 с.
14. Наумова Н.Н., Хохлов В.Н. // *Оптический журнал* – 2006. – Т.73, №8. – С. 23–26.

Об авторе:

ШЕЙХ-ЗАДЕ Мамет-Исмет – кандидат физико-математических наук, доцент ГБОУВО РК «Крымский инженерно-педагогический университет имени Февзи Якубова» (295015, г. Симферополь, пер. Учебный, д. 8); e-mail: tospcrimea@gmail.com. ORCID: 0009-0007-0019-8781, SPIN-код: 4803-8274, PИИЦ AuthorID: 1327872.

Methodical aspects of constructing the voigt contour using the example of the absorption band contour at 1035 cm⁻¹ in the IR spectrum of liquid bezene

M.-I. Sheikh-Zade

Fevzi Yakubov Crimean Engineering and Pedagogical University, Simferopol

Methodical aspects of constructing the Voigt contour in two ways are considered, using the example of the absorption band contour at 1035 cm⁻¹ in the IR spectrum of liquid benzene. If $a > 0$ the Voigt function $H(\nu, a)$ was treated as the real part of the probability integral $W(z)$ of the complex argument $z = \nu + i \cdot a$. To compute the values of the $W(z)$ functions, an expansion of $W(z)$ into a continued fraction was used. It is shown that both methods of constructing the Voigt contour yield identical results and that the Voigt function satisfactorily approximates the experimental contour of the considered band in the IR spectrum.

Keywords: *IR spectrum, absorption band, contour, approximation, Voigt function.*

Дата поступления в редакцию: 09.02.2026.
Дата принятия в печать: 13.02.2026.