

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА СВЯЗИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ ТЦАЛЛИАНОВОЙ ФОРМЫ

© 2023 г. Л. В. Менделевич^а, Ю. А. Кокшаров^{а, б, с, *}

^аФизический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, дом 1, стр. 2, Москва, 119234 Российская Федерация
^бИнститут радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
ул. Моховая, 11, корп. 7, Москва, 125009 Российская Федерация
^сУниверситет МГУ-ППИ в Шэньчжэне, Шэньчжэнь, 518172 Китай

*E-mail: yak@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 27.04.2022 г.

После доработки 06.07.2022 г.

Принята к публикации 23.07.2022 г.

Получена точная аналитическая формула, связывающая экспериментальные и теоретические параметры спектральной линии, описываемой функцией Тцаллиса, включающей, как частные случаи, гауссиан, лорентциан, промежуточные между ними формы линии, а также суперлорентциан. Исследована процедура численного расчета теоретических параметров формы линии на примере спектров электронного парамагнитного резонанса. Рассмотрено влияние на точность определения теоретических параметров тцаллиана осложняющих экспериментальных факторов, таких как шум и дискретность оцифровки аналоговых сигналов. Показано, что предложенный метод определения теоретических параметров спектральной линии не уступает в точности методу минимизации функционала среднеквадратичной ошибки. Предсказано, что новый подход может быть использован как альтернатива уже известным методам анализа формы спектральной линии.

DOI: 10.31857/S0033849423050145, EDN: UIJYHF

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Анализ формы спектральной линии во многих случаях позволяет получать информацию об особенностях резонансных центров, их взаимодействия друг с другом и с окружением [1]. Далее будем говорить о спектрах электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), хотя предлагаемый метод анализа формы линии применим к любому разделу спектроскопии. Теория ЭПР [1] предсказывает две основные формы линии симметричных синглетных линий ЭПР – лорентцеву и гауссову. Линии ЭПР лорентцевой формы называют однородно уширенными, так как предполагается, что все резонансные центры находятся в эквивалентных условиях (в частности, в практически одинаковом локальном магнитном внешнем поле) [2]. Линии ЭПР гауссовой формы называют неоднородно уширенными, предполагая, к примеру, что разброс резонансных полей линий резонансных центров вызван случайными факторами: значительными диполь-дипольными локальными магнитными полями соседей, дефектами структуры и другими причинами, приводящими к неэквивалентности отдельных резонансных центров [3]. Однако во

многих случаях форма синглетной линии ЭПР отличается как от лорентциана, так и от гауссиана [1]. В литературе известны разные подходы к описанию такой “промежуточной” формы линии различной степени сложности [4–9].

Наиболее общим методом определения параметров неизвестного спектра ЭПР является разновидность “метода наименьших квадратов” – метод минимизации функционала ошибки (МФО) [10]. Сущность метода такова. Задается пробный спектр $F_T(H)$ с параметрами $a^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, p$ и сравнивается с экспериментальным спектром $F_E(H)$:

$$\min(a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(p)}) = \int_{-\infty}^{\infty} [F_E(H) - F_T(H)]^2 dH. \quad (1)$$

Параметры $a^{(i)}$ теоретического спектра $F_T(H)$ варьируются, чтобы минимизировать функционал ошибки $\min(a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(p)})$. К недостаткам метода МФО можно отнести возможность попадания в локальный, а не абсолютный минимум функции (1), например, при неудачном выборе начальных значений параметров $a^{(i)}$.

Широко распространенным методом анализа формы линии ЭПР долгое время являлся также метод линейных анаморфоз, заключающийся в том, что спектральную линию “спрямляют” в некоторой специальной системе координат [10]. Например, линия Лорентца при известных значениях центра линии B_0 и ее полуширины G “спрямляется” в координатах $\sqrt{(B_0 - B)/F'(B - B_0)}$ и $(B - B_0)^2$:

$$y = \sqrt{\frac{B_0 - B}{F'(B - B_0)}} = \sqrt{\frac{1}{2G^2 Y_{\max}}}(G^2 + (B - B_0)^2) = a + b(B - B_0)^2. \quad (2)$$

В настоящее время метод анаморфоз применяется редко, так как может быть использован, если только известен способ “спрямления”. Кроме того, он не имеет принципиальных преимуществ в сравнении с методом МФО.

Форму линии ЭПР можно анализировать также методом моментов [9]. По определению, момент n -го порядка спектральной линии ЭПР $F(B)$ рассчитывается по формуле

$$M_n = \int_{-\infty}^{\infty} F(B - B_0)(B - B_0)^n dB. \quad (3)$$

Нечетные моменты симметричной линии ЭПР равны нулю. Для определения формы линии можно использовать, например, отношение четвертого момента ко второму. Однако это отношение зависит не только от формы линии, но и от ширины диапазона магнитного поля, в пределах которого зарегистрирован спектр ЭПР (реальные пределы интегрирования отличаются от теоретических в формуле (3)).

Ранее было предложено анализировать форму линий спектров ЭПР функциями Тцаллиса (тцаллиан) [8]. Изменяя параметр q тцаллиана, можно плавно изменять форму линии: получить симметричные линии ЭПР гауссовой ($q = 1$) и лорентцевой формы ($q = 2$), линии с формой, промежуточной между гауссовой и лорентцевой ($1 < q < 2$), а также так называемые суперлорентцианы с $q > 2$, обнаруживаемые в последнее время в различных видах магнитно-резонансной спектроскопии [11–14].

Метод линейных анаморфоз и метод моментов не очень удобны для анализа экспериментальной спектральной линии с формой тцаллиана. Первый метод требует для линеаризации знания двух параметров, q и G , а не одного G , как в случае лорентциана. Для лорентциана параметр G однозначно находится с помощью измерения ширины линии ΔB_{pp} (peak-to-peak – этот термин в спектроскопии ЭПР указывает на способ измерения физической величины: от одного пика (максимума) до другого (минимума)). Для тцаллиана ши-

рина линии зависит как от q , так и от G . Поэтому, измерив только ширину линии, нельзя найти оба параметра q и G . Метод моментов для тцаллиана имеет ограниченное применение, так как второй и четвертый моменты перестают существовать при $q > 5/3$ и $q > 7/3$ соответственно [8]. Наиболее универсален описанный выше метод МФО, при котором минимизируется сумма квадратов отклонений теоретических и экспериментальных точек. Однако и у него есть недостаток. Так, в работе [8] был использован метод МФО для анализа экспериментального спектра Gd^{3+} , представляющего собой семь отдельных линий тонкой структуры. Наименьшее значение функции ошибки (1) в работе [8] достигалось при $q = 2.3$. Однако из-за пологости минимума этой функции осталось неясным, с чем связано полученное значение $q > 2$: с недостаточной точностью метода МФО или с истинной природой резонансной линии. Для таких случаев желательно иметь альтернативный методу МФО способ определения параметров симулирующего тцаллиана.

Такой способ предлагается в данной статье. Он основан на использовании точной аналитической формулы, вывод которой приведен в следующем разделе.

2. ОПИСАНИЕ НОВОГО МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЛИНИИ ТЦАЛЛИАНОВОЙ ФОРМЫ

Цель метода – используя непосредственно измеряемые параметры экспериментального спектра ЭПР A_{pp} , ΔB_{pp} , B_0 , B_1 (см. рис. 1), а также интегральную характеристику экспериментального спектра, определить параметры тцаллиана, описывающего этот спектр. На рис. 1 используются обозначения: A_{pp} – “peak-to-peak” амплитуда, ΔB_{pp} – “peak-to-peak” ширина, B_0 – резонансное поле, B_1 – начальное значение магнитного поля при записи спектра. Число точек N_p в спектре на рис. 1 равно 4000, интервал между точками dB равен 0.0061 Гс.

Запишем основные формулы для функции Тцаллиса Y и ее производных. С учетом особенностей спектроскопии ЭПР удобно в качестве аргумента использовать величину внешнего магнитного поля B :

$$Y = Y_{\max}(1 + bx^2)^a, \quad (4)$$

где

$$a = -\frac{1}{(q-1)}, \quad (5)$$

$$x = \frac{(B - B_0)}{G}, \quad (6)$$

$$b = 2^{q-1} - 1. \quad (7)$$

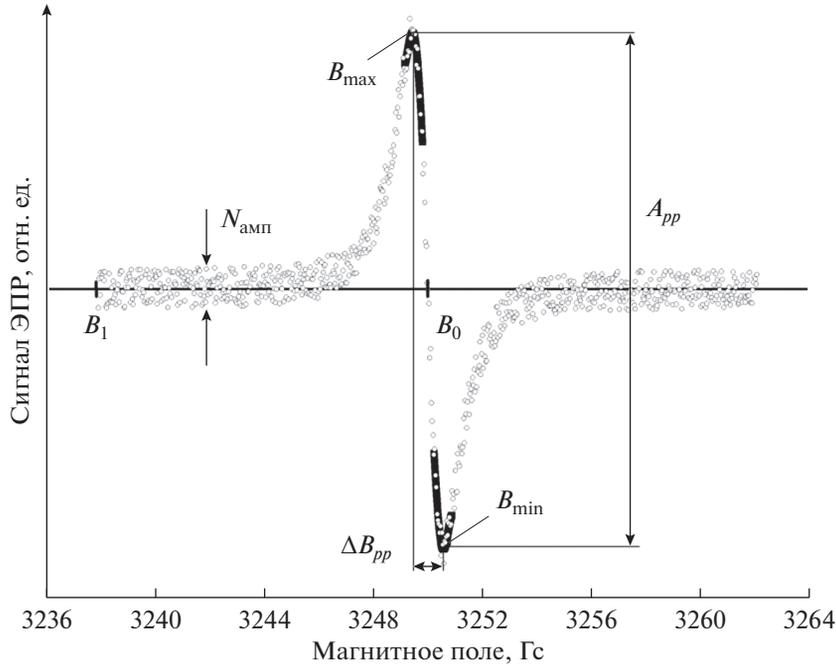


Рис. 1. Симулированный зашумленный спектр ЭПР (светлые символы); темные линии – полиномы, сглаживающие спектр вблизи экстремумов. Спектр без шума имеет форму тцалиана с параметрами $G = 1.0$, $q = 2.0$, $B_0 = 3250.0$. Амплитуда шума равна $N_{амп} = A_{pp}/10$. Экспериментально определяемые параметры спектра: A_{pp} , ΔB_{pp} , B_0 , B_1 . Способы измерения ΔB_{pp} , A_{pp} и $N_{амп}$ показаны стрелками.

Величины Y_{max} , B_0 , q , G являются параметрами тцалиана [8]. Центр линии B_0 определяется из экспериментального спектра (в предположении его симметричности) как полусумма полей его максимума и минимума. Нахождение параметров Y_{max} , q , G требует более сложной процедуры.

Первая производная функции (4) записывается в виде

$$Y_1(B) = \frac{dY}{dB} = \frac{1}{G} \frac{dY}{dx} = \frac{1}{G} (2abxY_{max})(1 + bx^2)^{a-1}. \quad (8)$$

Вторая производная функции (4) имеет вид

$$Y_2(B) = \frac{dY_1}{dB} = \frac{d^2Y}{d^2B} = \frac{1}{G^2} (2abY_{max})(1 + x^2b(2a - 1))(1 + bx^2)^{a-2}. \quad (9)$$

Используя экспериментальный спектр ЭПР, можно вычислить интеграл:

$$I_{10} = \int_{B_1}^{B_0} Y_1(B)dB, \quad (10)$$

где пределы интегрирования B_1 и B_0 – начало и середина спектра (см. рис. 1).

Так как

$$Y_{max} = Y(B_0) = \int_{-\infty}^{B_0} Y_1(B)dB, \quad (11)$$

то можно записать соотношение

$$Y_{max} = Y_{max}(1 + bx_1^2)^a + I_{10}, \quad (12)$$

где

$$x_1 = \frac{(B_1 - B_0)}{G}. \quad (13)$$

Положение экстремумов $Y_1(B)$ задается условием $Y_2(B) = 0$. Из (9) находим относительное (нормированное на G) смещение положительного пика $Y_1(B)$ относительно B_0 (см. (6)):

$$x_0 = -\frac{1}{(b(1 - 2a))^{1/2}}. \quad (14)$$

Отметим, что из симметричности тцалиана следует

$$2x_0 = -\frac{\Delta B_{pp}}{G}. \quad (15)$$

Из (8) можно получить

$$A_{pp} = \frac{4}{G} (abx_0Y_{max})(1 + bx_0^2)^{a-1}. \quad (16)$$

Решая совместно (12) и (4) и учитывая (16), получаем основное уравнение нового метода

$$A_{pp} = \frac{8I_{10} \left[\frac{2q}{(q+1)} \right]^{\frac{q}{q-1}}}{\left((q+1)\Delta B_{pp} \left(1 - \left[1 + \gamma^2 \frac{(q-1)}{(q+1)} \right]^{\frac{1}{q-1}} \right) \right)}, \quad (17)$$

где

$$\gamma = \frac{x_1}{x_0} = -\frac{2(B_1 - B_0)}{\Delta B_{pp}}. \quad (18)$$

Напомним, что в (17) и (18) величины A_{pp} , ΔB_{pp} , I_{10} , B_1 , B_0 считаются известными (определены из экспериментального спектра). Незвестной величиной в (17) является q . Уравнение (17) нелинейное, но так как q изменяется в ограниченных пределах (обычно $1 < q < 3$), его легко решить численно, например, методом бисекции [16].

Вычислив с помощью (17) величину q , можно найти x_0 из (14), а затем из уравнения (15) вычислить полуширину тцаллиана:

$$G = -\frac{\Delta B_{pp}}{2x_0}. \quad (19)$$

Величина Y_{\max} вычисляется с помощью уравнения (12)

$$Y_{\max} = \frac{I_{10}}{1 - (1 + bx_1^2)^{\frac{1}{q-1}}}. \quad (20)$$

Таким образом, уравнения (17)–(20) позволяют полностью решить задачу нахождения параметров симулирующего тцаллиана q , G , Y_{\max} , если известны параметры экспериментального спектра A_{pp} , ΔB_{pp} , I_{10} , B_1 , B_0 .

3. ФАКТОРЫ, ВЛИЯЮЩИЕ НА ТОЧНОСТЬ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ТЦАЛЛИАНА

Чтобы решить уравнение (17), необходимо с достаточной точностью определить параметры A_{pp} , ΔB_{pp} , I_{10} , B_1 , B_0 . Как показал проведенный нами анализ, на точность определения параметров ΔB_{pp} и A_{pp} существенно влияют следующие величины: количество точек в экспериментальном спектре, полученных в результате его оцифровки, дискретность оцифровки, амплитуда шума и ширина спектра (диапазон изменения магнитного поля при записи спектра). Чтобы минимизировать влияние этих факторов, мы сглаживали спектр вблизи экстремумов при помощи полиномов 4-й степени (темные участки на симулированном спектре ЭПР, приведенном на рис. 1).

Экстремумы этих полиномов заменяли экстремумы спектра, искаженные шумами и погрешностями оцифровки. Для нахождения коэффициентов полинома выбирали точку с номером i_0 , соответствующую экстремуму экспериментального спектра. В интервале $i_0 + N_{\text{сим}}$ рассчитывали коэффициенты полинома, обеспечивающие минимум суммы квадратов отклонения полинома от спектра для $2N_{\text{сим}} + 1$ точек. Задача нахождения этого минимума для полинома 4-й степени сводится к решению системы пяти линейных уравнений следующим образом.

Исходный полином имеет вид

$$y = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4. \quad (21)$$

В качестве x была взята разность

$$x = B - B_{\text{инт}}, \quad (22)$$

где $B_{\text{инт}}$ – аргумент при котором достигается максимум численно проинтегрированного экспериментального спектра. Интегрирование экспериментального спектра проводилось методом трапеции.

Введем обозначение N :

$$N = 2N_{\text{сим}} + 1. \quad (23)$$

Тогда квадратичная ошибка полинома равна

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N (c_0 + c_1x_i + c_2x_i^2 + c_3x_i^3 + c_4x_i^4 - y_i)^2, \quad (24)$$

где y_i – значения экспериментального спектра, а x_i – координаты этих точек. Чтобы минимизировать ошибку, возьмем частные производные функции (24) по параметрам c_k , $k = \{0, 1, 2, 3, 4\}$ (k – показатель степени x_i^k и индекс у c_k):

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial c_k} = \sum_{i=1}^N 2x_i^k (c_0 + c_1x_i + c_2x_i^2 + c_3x_i^3 + c_4x_i^4 - y_i) = 0. \quad (25)$$

Преобразовав выражения (25), получим

$$c_0 \sum_{i=1}^N x_i^k + c_1 \sum_{i=1}^N x_i^{k+1} + c_2 \sum_{i=1}^N x_i^{k+2} + c_3 \sum_{i=1}^N x_i^{k+3} + c_4 \sum_{i=1}^N x_i^{k+4} = \sum_{i=1}^N y_i x_i^k. \quad (26)$$

Выражения (26) при $k = \{0, 1, 2, 3, 4\}$ образуют систему пяти линейных уравнений.

Введем обозначения F_k и D_k :

$$\sum_{i=1}^N x_i^k = F_k, \quad \sum_{i=1}^N y_i x_i^k = D_k. \quad (27)$$

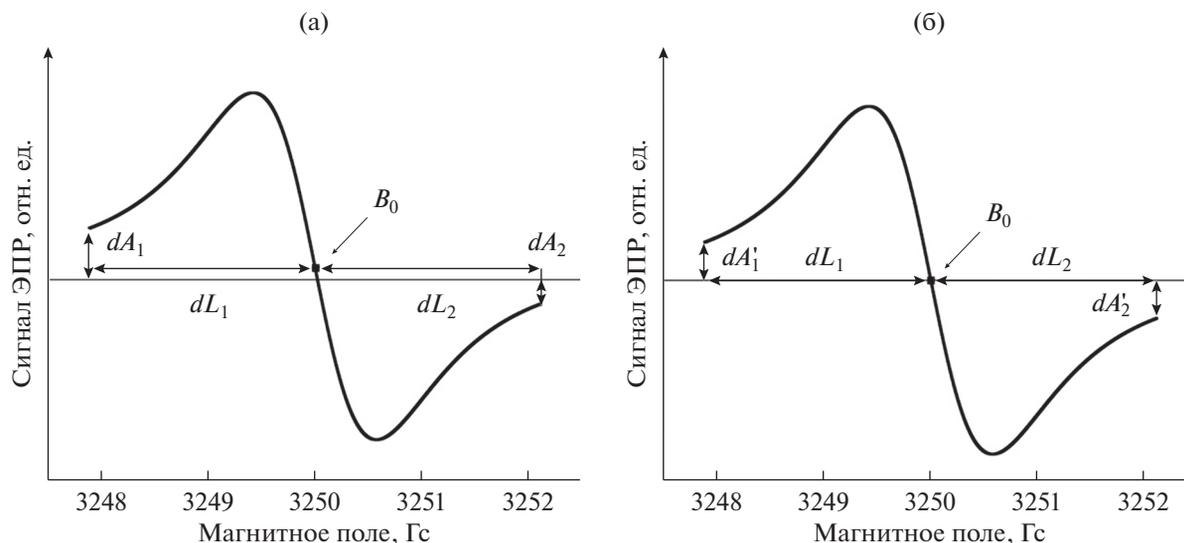


Рис. 2. Процедура вертикального сдвига (выбора нулевой линии) для спектра ЭПР: а – исходный спектр до сдвига, отступы от левого края dA_1 и от правого края dA_2 не равны, б – спектр после сдвига, вертикальный сдвиг спектра как целого приводится к виду, когда средние модули отступа dA'_1 и dA'_2 становятся равными; dL_1 и dL_2 – расстояние (в Гс) от середины спектра B_0 до его начала и конца соответственно.

Тогда система из уравнений (26) примет вид

$$F_k c_0 + F_{k+1} c_1 + F_{k+2} c_2 + F_{k+3} c_3 + F_{k+4} c_4 = D_k. \quad (28)$$

Проведенный нами анализ показал, что наилучший результат (минимальная погрешность в определении q с помощью (17)) достигается, если для решения системы (28) использовать метод Гаусса.

Параметры c_k из решения (28) подставляем в условие экстремума функции (21)

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{0.25c_1}{c_4} + \frac{0.5c_2}{c_4} x + \frac{0.75c_3}{c_4} x^2 + x^3 = 0. \quad (29)$$

Кубическое уравнение (29) может иметь один или три вещественных корня. В случае нескольких корней выбираем ближайший к точке с номером i_0 .

Так как для зашумленного спектра точка с номером i_0 не совпадает, вообще говоря, с экстремумом незашумленного спектра, процедура построения полинома повторяется с различными номерами центральной точки в некотором интервале вблизи i_0 . В итоге выбираем полином с наименьшей квадратичной ошибкой (темные линии на рис. 1); коэффициенты полиномов:

– для максимума $c_0 = 0.041$, $c_1 = -0.329$,
 $c_2 = 0.867$, $c_3 = 2.440$, $c_4 = 1.402$;

– для минимума $c_0 = -0.036$, $c_1 = -0.271$,
 $c_2 = -1.065$, $c_3 = 2.539$, $c_4 = -1.356$.

Для корректного определения параметров тцаллиана нужно учесть и другие возможные осложняющие факторы. Экспериментальный спектр может быть сдвинут вдоль вертикальной оси и поэтому

может не пересекать ось абсцисс в середине спектра (в точке B_0 , рис. 2). При этом спектр может быть зашумлен и иметь недостаточное количество точек для точного определения, места пересечения спектра и оси абсцисс. Поэтому параметр B_0 находим, как упоминалось выше, исходя из симметрии спектра по формуле

$$B_0 = \frac{B_{\max} + B_{\min}}{2}, \quad (30)$$

где B_{\max} и B_{\min} – максимум и минимум экспериментального спектра соответственно (см. рис. 1).

Для дальнейших операций спектр должен быть симметричен относительно горизонтальной оси, поэтому вертикальным сдвигом спектра как целого, отступ от нулевой линии делается одинаковым для правой и левой границ спектра. Для этого выбирается несколько симметричных относительно B_0 точек с правой и левой границ спектра, находится среднее значение их отклонения от нулевой линии и с учетом этого производится вертикальный сдвиг спектра (см. рис. 2).

После интегрирования симметризованного экспериментального спектра в пределах от B_1 до B_0 определяется значение интеграла I_{10} . Для интегрирования в данной работе был использован метод трапеции.

Так как экспериментальный спектр искажен шумом, то, как показали наши вычисления, для некоторых $N_{\text{сим}}$ аппроксимирующий экстремумы полином может иметь некорректную форму. Поэтому описанная выше процедура нахождения

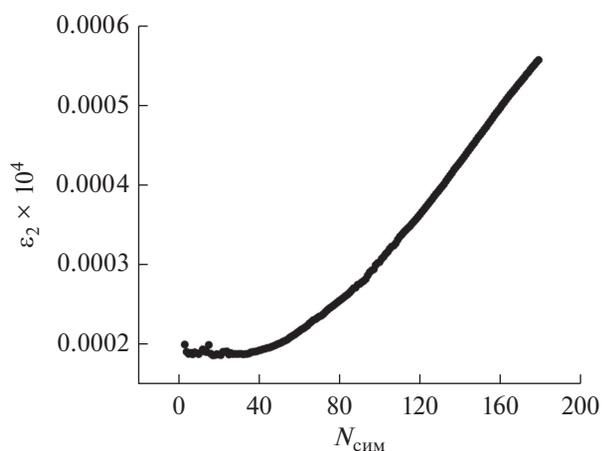
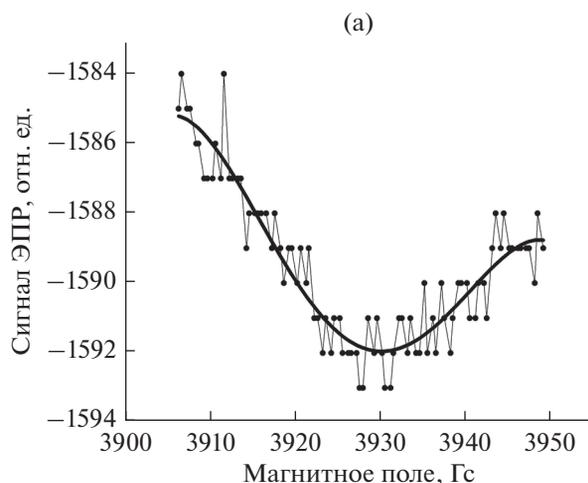


Рис. 3. Зависимость погрешности (ошибки) ε_2 от $N_{\text{сим}}$ симулированного спектра с экспериментальными параметрами $G = 1.0$, $q = 2.0$, $B_0 = 3250.0$. Минимальная ошибка достигается при $N_{\text{сим}} = 17$; соответствующий минимуму ошибки тцаллиан имеет параметры $q = 2.03$ и $G = 1.02$; значение ошибки в минимуме $\varepsilon_{2\text{min}} = 1.84 \times 10^{-4}$ равно.

параметров G , Y_{max} , B_0 , q проводится для нескольких значений $N_{\text{сим}}$ в интервале [4, 180]. Для каждого значения $N_{\text{сим}}$ по найденным параметрам строили теоретический спектр Y_{1t} и сравнивали с экспериментальным симметризованным Y_1 . Вычисляли ошибку по формуле

$$\varepsilon_2 = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_p} (Y_1(x_i) - Y_{1t}(x_i))^2}}{N_p}, \quad (31)$$



(N_p — количество точек в экспериментальном спектре) и выбирали тот $N_{\text{сим}}$ и соответствующий ему спектр Y_{1t} , для которого ошибка ε_2 минимальна (рис. 3).

Для повышения точности рассматриваемого метода в работе применяли также другие виды обработки экспериментальных спектров. При большой амплитуде шума мы анализировали “усредненный” экспериментальный спектр. Для усреднения использовали метод скользящего среднего и метод Савицкого–Голея. Оба метода показали примерно одинаковое влияние на повышение точности определения параметров тцаллиана.

Увеличение количества точек в оцифрованном экспериментальном спектре, как правило, повышает точность обсуждаемого метода. Однако дискретность оцифровки часто приводит к “горизонтально-линейчатому” виду слабых экспериментальных сигналов (рис. 4). Эта дискретность может ухудшать качество процедуры сглаживания экстремумов спектра полиномом (ср. рис. 4а и рис. 4б). При избыточном количестве экспериментальных точек шум приводит к заметному отклонению формы полинома от параболического вида, присущего экстремуму функции (рис. 4а). Если “проредить” спектр, убрав, например, каждую n -ю точку, форма полинома становится почти параболической (рис. 4б).

3. СРАВНЕНИЕ МЕТОДА МФО И НОВОГО МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРА ЭПР ТЦАЛЛИАНОВОЙ ФОРМЫ

Мы провели сравнительное исследование по определению параметров зашумленного симули-

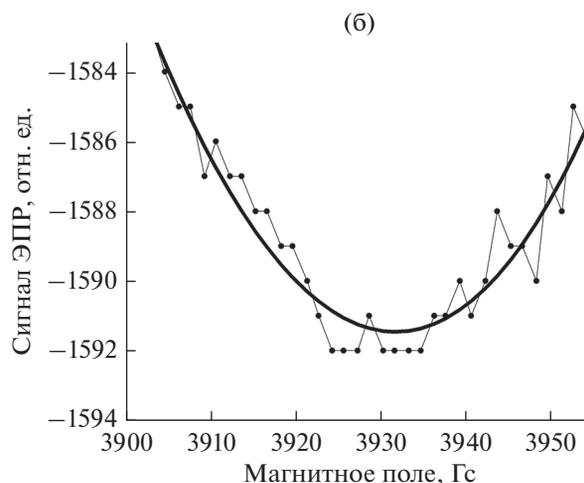


Рис. 4. Изменение формы сглаживающего полинома для спектра ЭПР с заметным проявлением дискретности оцифровки: а — исходный спектр, б — спектр после “прореживания” (из групп последовательных трех точек оставлена только первая точка); точки — эксперимент, сплошные линии — полином.

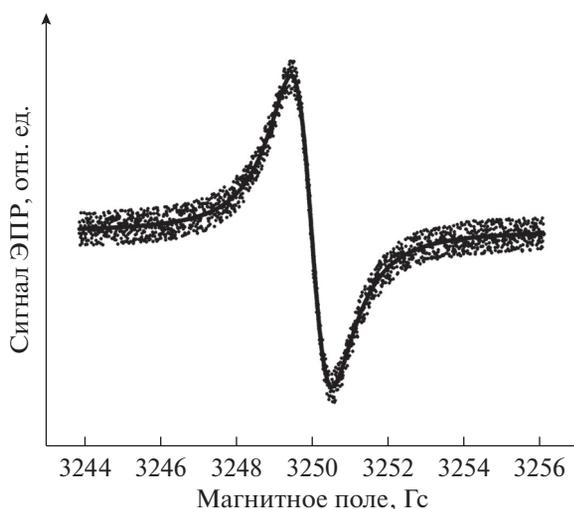


Рис. 5. Симулированный зашумленный спектр ЭПР, использованный для сравнения точности двух методов определения параметров тцаллиана: МФО и нового метода; параметры спектра: $q = 2.2$; $G = 1.0$; $B_0 = 3250.0$; отношение амплитуды спектра к амплитуде шума 10 : 1; символы – исходный спектр, линия – наложение двух визуально неразличимых симулирующих тцаллианов, построенных с использованием метода МФО и нового метода.

рованного спектра ЭПР методом МФО и с помощью метода, основанного на формуле (17). На рис. 5 представлен симулированный зашумленный тцаллиан с $q = 2.2$ (суперлорентциан) и $G = 1.0$. Параметры спектра, определенные с помощью метода МФО: $q_{\text{МФО}} = 2.211$; $G_{\text{МФО}} = 1.00$. Среднеквадратичная ошибка равна 6.407×10^{-4} . Новый метод дал значения $q = 2.191$ и $G = 1.003$ при среднеквадратичной ошибке 6.409×10^{-4} . Таким образом, параметры одного и того же спектра определены двумя методами при одинаковой среднеквадратичной ошибке.

Из представленных данных видно, что новый метод, при аккуратном использовании, не уступает в точности наиболее часто используемому методу МФО.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ формы спектральной линии – одна из актуальных и важных проблем для различных видов спектроскопии, от рентгеновского до радиодиапазона [17]. Новые подходы к этой проблеме, развитые вначале для одного спектрального диапазона, могут впоследствии оказаться полезными и для других. Функция Тцаллиса формы спектральной линии стала впервые использоваться в спектроскопии ЭПР [8]. Впоследствии она была успешно применена для описания спектров фер-

ромагнитного резонанса [12] и ядерного магнитного резонанса [18]. Однако, по нашему мнению, функция Тцаллиса недостаточно известна среди спектроскопистов и недооценена. Благодаря изменению параметра q тцаллиан может плавно изменять свою форму в широких пределах – от гауссиана до суперлорентциана. Это свойство может быть полезным для анализа сложных спектральных линий при их разложении на несколько компонент [19]. Такая ситуация часто возникает при исследовании наночастиц [19, 20] и других неоднородных систем. Важно то, что для тцаллиана существует относительно простая точная аналитическая формула. Это, в частности, позволило нам получить аналитическую формулу связи экспериментальных и теоретических параметров спектральной линии тцаллиановой формы, которую, как мы надеемся, можно будет использовать для быстрого и точного анализа экспериментальных спектров ЭПР. Отметим, что формула (17) непосредственно применима только для спектров ЭПР, имеющих вид производной сигнала поглощения. Для спектральных методов, в которых регистрируется сигнал поглощения, для использования формулы (17) необходимо предварительно получить производную сигнала.

Выражаем уверенность, что данная работа повысит внимание исследователей, занимающихся анализом формы спектральных линий (не обязательно в области ЭПР), к функции Тцаллиса, как удобному инструменту такого анализа.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Poole C.P., Farach H.A.* // Bull. Magn. Resonance. 1980. V. 1. № 4. P. 162.
2. *Bertrand P.* Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy: Applications. Cham: Springer, 2020.
3. Electron Paramagnetic Resonance: a Practitioner's Toolkit / Eds. by M. Brustolon, G. Giamello. Hoboken Wiley, 2009.
4. *Stoneham A.M.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 1972. V. 5. № 3. P. 670.
5. *Posener D.W.* // Australian J. Phys. 1959. V. 12. № 4. P. 184.
6. *Wertheim G.K., Butler M.A., West K.W., Buchanan D.N.E.* // Rev. Sci. Instrum. 1974. V. 45. № 11. P. 1369.
7. *Maltempo M.M.* // J. Magn. Resonance. 1986. V. 68. P. 102.
8. *Howarth D.F., Weil J.A., Zimpel Z.* // J. Magn. Resonance. 2003. V. 161. P. 215.
9. *Sebby K.B., Walter E.D., Usselman R.J. et al.* // J. Phys. Chem. B. 2011. V. 115. № 16. P. 4613.
10. *Жидомиров Г.М., Лебедев Я.С., Добряков С.Н. и др.* Интерпретация сложных спектров ЭПР. М.: Наука, 1975.

11. *Edmonds A.M., Newton M.E., Martineau P.M. et al.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. № 24. Article No. 245205.
12. *Кокшаров Ю.А.* // ФТТ. 2015. Т. 57. № 10. С. 1960.
13. *Scott E., Drake M., Reimer J.A.* // J. Magn. Resonance. 2016. V. 264. P. 154.
14. *Стельмах В.Ф., Стригуцкий Л.В.* // Журн. прикладной спектроскопии. 1998. Т. 65. № 2. С. 224.
15. *Mitchell D.G., Quine R.W., Tseinlin M. et al.* // J. Phys. Chem. B. 2011. V. 115. № 24. P. 7986.
16. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы: Учеб. пособие для вузов. М.: Наука, 1989.
17. *Truong G.-W., Anstie J.D., May E.F. et al.* // Nature Commun. 2015. V. 6. Article No. 8345. <https://doi.org/10.1038/ncomms9345>
18. *Ajoy A., Safvati B., Nazaryan N. et al.* // Nature Commun. 2019. V. 10. Article No. 5160. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13042-3>
19. *Ивичева С.Е., Каргин Ю.Ф., Овченков Е.А. и др.* // ФТТ. 2011. Т. 53. № 6. С. 1053.
20. *Гуляев Ю.В., Черепенин В.А., Вдовин В.А. и др.* // РЭ. 2015. Т. 60. № 10. С. 1051. <https://doi.org/10.7868/S0033849415100034>