



УДК 517.958:539.18

## Расширенная математическая модель обратной задачи ядерного гамма-резонанса. Достоверность и информативность применения

*О. М. Немцова, Г. Н. Коныгин, И. С. Веселков*

Удмуртский федеральный исследовательский центр  
Уральского отделения Российской академии наук,  
Россия, 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

### Аннотация



При изучении свойств твердых растворов на основе железа методом мессбауэровской спектроскопии возникает проблема интерпретации результатов обработки экспериментальных данных в рамках традиционной математической модели. Поскольку для разупорядоченных, например в результате механоактивации, твердых растворов характерно наличие ансамбля различных локальных атомных конфигураций, то соответствующие им мессбауэровские спектры содержат большое количество смещенных относительно друг друга спектральных составляющих с близкими значениями параметров сверхтонкого взаимодействия. При этом величина и знак смещения определяются многими факторами: количественным распределением атомов каждого сорта в координационных сферах, симметрией их распределения относительно оси квантования, возможным локальным смещением относительно среднестатистического положения в кристаллографической структуре и т.д. Аналитически учесть все эффекты смещения в математической модели, как правило, невозможно.

Предложенная расширенная математическая модель описания мессбауэровских спектров твердых растворов позволяет учесть смещения спектральных составляющих посредством введения в модель функции нормального распределения Гаусса, описывающей статистический набор

**Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ**  
**Научная статья**

© Коллектив авторов, 2024

© СамГТУ, 2024 (составление, дизайн, макет)

  Контент публикуется на условиях лицензии [Creative Commons Attribution 4.0 International \(https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru\)](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru)

### Образец для цитирования

Немцова О. М., Коныгин Г. Н., Веселков И. С. Расширенная математическая модель обратной задачи ядерного гамма-резонанса. Достоверность и информативность применения // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2024. Т. 28, № 1. С. 152–170. EDN: EKWSDV. DOI: 10.14498/vsgtu2060.

### Сведения об авторах

*Ольга Михайловна Немцова*  <https://orcid.org/0000-0002-5676-9578>

кандидат физико-математических наук, доцент; старший научный сотрудник; лаб. физики и химии наноматериалов; e-mail: [olganemtsova@udman.ru](mailto:olganemtsova@udman.ru)

*Григорий Николаевич Коныгин*  <https://orcid.org/0000-0002-6202-9509>

кандидат физико-математических наук; заведующий лабораторией; лаб. физики и химии наноматериалов; e-mail: [gnkon@mail.ru](mailto:gnkon@mail.ru)

*Иван Сергеевич Веселков*  <https://orcid.org/0009-0008-5590-6068>

аспирант; лаб. физики и химии наноматериалов; e-mail: [nerorus97@gmail.com](mailto:nerorus97@gmail.com)

локальных искажений. Ширина распределения Гаусса позволяет оценить степень локальных искажений кристаллической решетки, возникающих из-за различий в размерах атомов смешиваемых компонентов, локальных искажений структуры и симметрии окружения резонансного атома.

Обратная задача ядерного гамма-резонанса выражается интегральным уравнением Фредгольма 1 рода и является некорректно поставленной задачей с априорными ограничениями на искомое решение. Введение в ядро интегрального уравнения двух функций Гаусса с неизвестными априори ширинами линий приводит к проблеме решения уравнения классическими методами. В работе предложен алгоритм получения достоверного решения, опирающийся на метод регуляризации Тихонова с коррекцией параметров ядра интегрального уравнения. Достоверность и информативность расширенной математической модели обратной задачи ядерного гамма-резонанса продемонстрирована на примерах исследования реальных объектов.

**Ключевые слова:** обратная задача ядерного гамма-резонанса, твердый раствор, вероятность атомной конфигурации, математическая модель, интегральное уравнение Фредгольма 1 рода.

Получение: 5 сентября 2023 г. / Исправление: 20 ноября 2023 г. /

Принятие: 15 декабря 2023 г. / Публикация онлайн: 16 августа 2024 г.

**1. Введение.** Твердые растворы являются основой важнейших конструкционных и нержавеющей сталей, бронз, латуней, алюминиевых и магниевых сплавов высокой прочности. Свойства твердых растворов регулируются их составом, термической или термомеханической обработкой [1–3]. Получение материалов с заданными свойствами невозможно без знания их микроструктуры. Как известно, при смешении компонентов твердого раствора имеют место локальные искажения кристаллической решетки, возникающие из-за различий в размерах атомов смешиваемых компонентов [4, 5]. При изучении свойств твердых растворов, содержащих железо, традиционно применяется метод мессбауэровской спектроскопии в виде обратной задачи ядерного гамма-резонанса. Классическая математическая модель обратной задачи ядерного гамма-резонанса представляет собой интегральное уравнение Фредгольма 1 рода с функцией Лоренца в качестве интегрального ядра и набором параметров, характеризующих сверхтонкую структуру [6, 7]. Однако опыт исследования разупорядоченных, например в результате механоактивации, твердых растворов бинарных и особенно многокомпонентных систем методом мессбауэровской спектроскопии показал, что применение такой математической модели не обеспечивает корректность результатов [8–11]. Очевидно, что невозможность достоверной интерпретации мессбауэровских спектров затрудняет изучение свойств этих материалов и их дальнейшее использование.

Известно, что для структуры твердых растворов характерно наличие ансамбля различных локальных атомных конфигураций, а для твердых растворов на основе Fe в ОЦК (объемно-центрированной кубической) решетке возможно формирование различных типов твердых растворов (рис. 1). Особенно много различных локальных атомных конфигураций возникает в разупорядоченных твердых растворах многокомпонентных систем. В результате

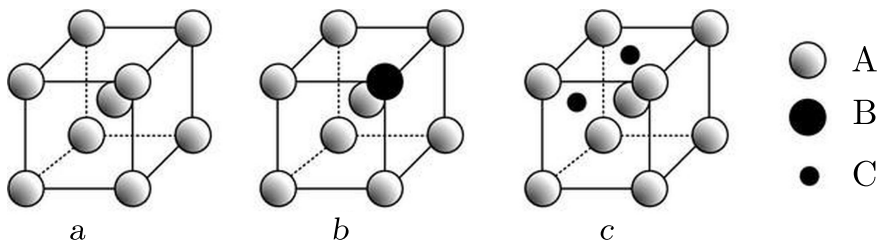


Рис. 1. Решетка чистого металла А (а); твердый раствор замещения (атом металла А заменили на атом типа В) (b); твердый раствор внедрения (атомы С внутри решетки металла А) (c)

[Figure 1. Lattice of pure metal A (a); substitutional solid solution (a metal atom A is replaced by a type B atom) (b); interstitial solid solution (C atoms are inside the lattice of metal A) (c)]

мессбауэровские спектры таких материалов являются суперпозицией достаточно большого количества смещенных относительно друг друга резонансных линий с близкими значениями параметров сверхтонкого взаимодействия [12–14]. При этом величина и знак смещения определяются многими факторами: количественным распределением атомов каждого сорта в координационных сферах, симметрией их распределения относительно оси квантования, возможным локальным смещением относительно среднестатистического положения в кристаллографической структуре и т.д. Аналитически учесть все эффекты смещения в математической модели, как правило, невозможно. Поэтому для обработки экспериментальных данных с удовлетворительной точностью экспериментаторы используют интегральную форму линии [15–18]: модифицированную функцию Лоренца; суперпозицию двух смещенных линий Лоренца; функцию псевдо-Фойгта (линейная комбинация распределений Лоренца и Гаусса с весами) и т.д. В ряде работ [12, 13, 19–21] для описания случайного распределения атомов в ближайшем окружении резонансного атома предлагается использовать свертку функций Лоренца и Гаусса — функцию Фойгта. Однако в работе [22] показано, что применения одной функции Гаусса недостаточно для описания возможных локальных искажений кристаллической решетки: на функции распределения сверхтонкого магнитного поля  $P(H)$  определяется избыточное количество локальных максимумов и возникает проблема их идентификации (рис. 2, b). При интерпретации функции распределения основное внимание уделяется следующим свойствам: количество локальных максимумов (указывает на количество спектральных составляющих, соответствующих локальным атомным конфигурациям с  $K$  атомами второго или третьего компонента в ближайшем окружении резонансного атома Fe), их положение (характеризует величину локального магнитного поля  $H_K$ ) и вероятности  $P_K$ . Только применение двух функций Гаусса в математической модели обратной задачи ядерного гамма-резонанса позволяет получать количество локальных максимумов, соответствующих биномиальному распределению локальных атомных конфигураций с атомами в ближайшем атомном окружении для ОЦК решетки с координационным числом  $Z = 8$  (рис. 2, c).

Обратная задача ядерного гамма-резонанса выражается интегральным уравнением Фредгольма 1 рода и является некорректно поставленной задачей с априорными ограничениями на искомое решение [7, 23]. Введение

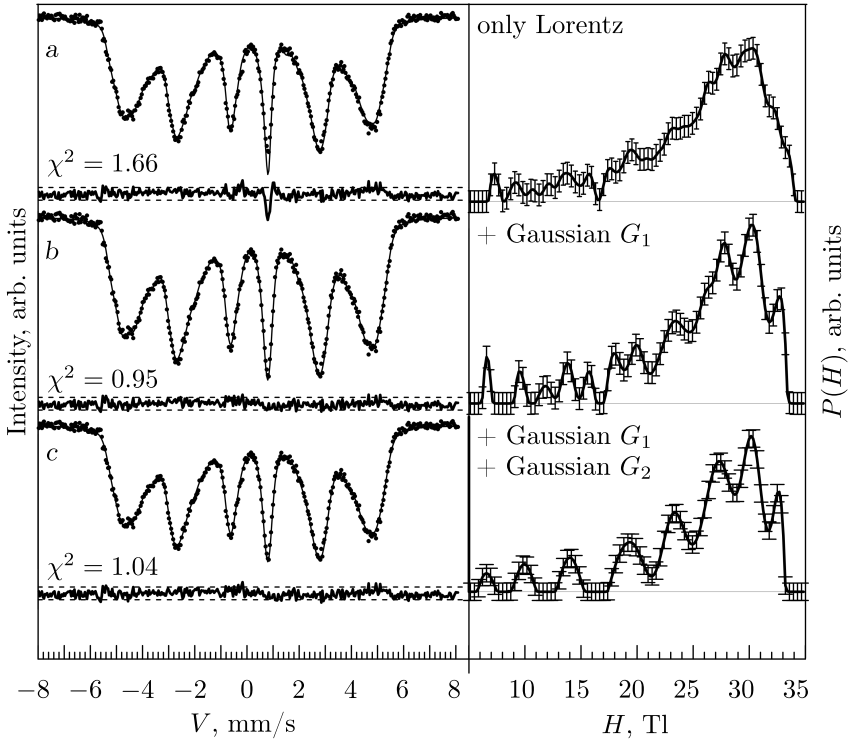


Рис. 2. Обработка мессбауэровского спектра системы  $\text{Fe}_{75}\text{Al}_{10}\text{Si}_{15}$  (слева) в рамках разных моделей спектральных составляющих (справа): функция Лоренца ( $\chi^2 \gg 1$ ) (a); свертка функций Лоренца и Гаусса (b); свертка функции Лоренца и двух функций Гаусса (c)

[Figure 2. Processing of the Mössbauer spectrum of the  $\text{Fe}_{75}\text{Al}_{10}\text{Si}_{15}$  system (left) by different models of spectral components (right): Lorentz function ( $\chi^2 \gg 1$ ) (a); convolution of Lorentz and Gaussian functions (b); convolution of Lorentz function and two Gaussian functions (c)]

в ядро интегрального уравнения свертки функции Фойгта с еще одной функцией Гаусса с априори неизвестной шириной осложняет задачу вычисления интеграла. Для решения уравнения с одной функцией Фойгта используют различные методы приближенных вычислений: разложение в ряд, представление в комплексном виде и преобразование Фурье, аппроксимация псевдо-Фойгтом с весовыми множителями и др. [13, 17, 24]. В рамках математически обоснованного и успешно применяемого метода регуляризации Тихонова замена функции Лоренца на свертку функций Фойгта и Гаусса не представляет особой сложности [25–28]. Более того, замена непрерывной задачи разностным аналогом позволяет определять ширину распределения Гаусса методом коррекции параметров [22, 29]. В работе представлена расширенная математическая модель обратной задачи ядерного гамма-резонанса, описана методика получения достоверного решения методом регуляризации Тихонова с коррекцией параметров и доказана достоверность и информативность применения расширенной модели.

**2. Расширенная математическая модель.** Мессбауэровский спектр формируется в результате регистрации резонансного поглощения, излучения и рассеяния гамма-квантов ядрами атомов твердого тела и описывается су-

перпозицией функций Лоренца [6]:

$$Y(V) = Y(\infty) \left[ 1 - \sum_l^6 L(V - V_l(H)) \right],$$

$$L(V - V_l(H)) = \frac{I_l}{1 + 4(V - V_l(H))^2 / \Gamma_L^2}. \quad (1)$$

Здесь  $V$  — относительная скорость источника мессбауэровского излучения;  $Y(\infty)$  — количество импульсов в отсутствие резонансного поглощения, фоновая составляющая;  $I_l$  — интенсивность  $l$ -й линии поглощения (при  $l = 6$  существует шесть разрешенных энергетических переходов и формируется магнитное сверхтонкое взаимодействие);  $\Gamma_L$  — ширина линии поглощения;  $V_l(H)$  — положение резонанса на шкале скорости:

$$V_l(H) = S_l V(H) + V(\delta_H, Q_H),$$

где  $H$  — сверхтонкое магнитное поле на ядре атома (СТМП);  $S_l$  — коэффициенты энергетических переходов, попарно различные для 1 и 6 линии спектра, 2 и 5, 3 и 4;  $\delta_H, Q_H$  — параметры сверхтонкого взаимодействия, характеризующие смещения спектральных составляющих; их значения априори неизвестны [7].

Обратная задача ядерного гамма-резонанса в случае непрерывного распределения СТМП и экспериментальных исследований описывается математической моделью в виде интегрального уравнения Фредгольма 1 рода:

$$\int_{H_{\min}}^{H_{\max}} \sum_l^6 L(V - V_l(H)) P(H) dH = Y_\sigma(V), \quad V \in [V_{\min}, V_{\max}], \quad (2)$$

где  $Y_\sigma(V) = Y(V) + \sigma$  — экспериментальный спектр со статистической ошибкой  $\sigma = \sqrt{M}$ ;  $M$  — экспериментальная фоновая составляющая;  $P(H)$  — искомое распределение сверхтонкого магнитного поля  $H$ ;  $L(V)$  — функция Лоренца (1), полученная в результате калибровки оборудования;  $[V_{\min}, V_{\max}]$  — интервал скорости при проведении эксперимента;  $[H_{\min}, H_{\max}]$  — интервал существования СТМП.

На искомую функцию распределения  $P(H)$  накладываются априорные ограничения, обусловленные вероятностными свойствами функции и физическим смыслом решения задачи:

1)  $P(H) \in W_2^1[H_{\min}, H_{\max}]$  — непрерывно дифференцируемая функция;

$$\|P(H)\|_{W_2^1} = \left( \int_{H_{\min}}^{H_{\max}} P^2(H) dH + \int_{H_{\min}}^{H_{\max}} \left( \frac{dP}{dH} \right)^2 dH \right)^{1/2};$$

2) граничные условия:

$$P(H_{\min}) = 0 \quad \text{или} \quad \frac{dP}{dH}(H_{\min}) = 0, \quad P(H_{\max}) = 0 \quad \text{или} \quad \frac{dP}{dH}(H_{\max}) = 0;$$

3) условие нормировки:

$$\int_{H_{\min}}^{H_{\max}} P(H)dH = 1; \quad (3)$$

4) неотрицательность решения:  $P(H) \geq 0$  на  $[H_{\min}, H_{\max}]$ .

Для решения этой задачи применяются методы многопараметрической подгонки [31, 25] и методы регуляризации в сочетании с итерационными алгоритмами обеспечения априорных ограничений [32–35]. Для обработки мессбауэровских спектров, характерных для разупорядоченных твердых растворов, в качестве элементарной спектральной составляющей необходимо использовать свертку функции калибровочного Лоренца с двумя функциями Гаусса, которые описывают статистические наборы локальных атомных конфигураций с различными значениями сверхтонких параметров. Одна функция Гаусса описывает наборы смещений, вызванные изомерным сдвигом  $\delta_H$  и квадрупольным расщеплением  $Q_H$ , а другая — доплеровское смещение СТМП  $S_l H$ . В результате расширенная модель обратной задачи ядерного гамма-резонанса (2) записывается в виде интегрального уравнения:

$$\int_{H_{\min}}^{H_{\max}} \sum_{l=1}^6 F(V - V_l(H))P(H)dH = Y(V), \quad (4)$$

где ядром является функция двойной свертки:

$$F(V - V_l(H)) = \int_{V'} \int_{V''(H)} L(V - V'(\delta_H, Q_H) - S_l(V(H) - V''(H)), \Gamma_L) \times \\ \times G_1(V'(\delta_H, Q_H) - V(\delta_H, Q_H), \Gamma_{G_1}) G_2(V(H) - V''(H), \Gamma_{G_2}) dV' dV''(H), \quad (5)$$

$$G_1(V' - V, \Gamma_{G_1}) = \frac{Am_1}{\sqrt{2\pi}\Gamma_{G_1}} \exp\left[-\frac{(V'(\delta_H, Q_H) - V(\delta_H, Q_H))^2}{2\Gamma_{G_1}^2}\right], \quad (6)$$

$$G_2(V(H) - V''(H), \Gamma_{G_2}) = \frac{Am_2}{\sqrt{2\pi}\Gamma_{G_2}} \exp\left[-\frac{(V(H) - V''(H))^2}{2\Gamma_{G_2}^2}\right]. \quad (7)$$

Здесь  $L(V - V_l(H))$  — линия калибровочного Лоренца с шириной  $\Gamma_L$ ; функция Гаусса  $G_1(V' - V, \Gamma_{G_1})$  описывает статистический набор значений сверхтонких параметров  $\delta_H, Q_H$ ; функция Гаусса  $G_2(V(H) - V''(H), \Gamma_{G_2})$  характеризует смещения, связанные с СТМП. Интегрирование функций Гаусса  $G_1$  и  $G_2$  с ширинами распределения  $\Gamma_{G_1}$  и  $\Gamma_{G_2}$  проводится на интервалах  $[-3\Gamma_{G_1}, 3\Gamma_{G_1}]$ ,  $[-3\Gamma_{G_2}, 3\Gamma_{G_2}]$ , что соответствует вероятности описания распределения 99.7%.

Для решения уравнения (4) с интегральным ядром (5) используется метод регуляризации Тихонова с коррекцией параметров ядра интегрального уравнения [36, 37], разработанный для нахождения параметров сверхтонкого взаимодействия при решении обратной задачи ядерного гамма-резонанса (2) с априорными ограничениями на решение (3).

Если ввести интегральный оператор

$$A[\bar{z}]P(H) \equiv \int_{H_{\min}}^{H_{\max}} \sum_{l=1}^6 F(V - V_l(H), \bar{z})P(H)dH,$$

где  $\bar{z} = \{\delta_H, Q_H, I_{(2;5)}, \Gamma_{G_1}, \Gamma_{G_2}, \dots\}$  — вектор неизвестных параметров, то метод можно описать итерационной процедурой, состоящей из двух этапов:

- 1) методом регуляризации Тихонова находится  $P^k(H) = P_a[\bar{z}^k]$  как решение вариационной задачи

$$\min_{P(H)} \|A[\bar{z}^k]P^k(H) - Y[\bar{z}^k]\|^2 + \alpha \|P^k(H)\|_{W_2^1}^2 \quad (8)$$

при фиксированных значениях вектора параметров на  $k$ -той итерации и заданном значении параметра регуляризации  $\alpha$ ;

- 2) методом Гаусса—Ньютона решается уравнение невязки относительно вектора неизвестных параметров при найденном на первом шаге решении  $P^k(H)$ , т.е. вычисляется  $\Delta\bar{z}^k$  как решение задачи

$$\min_{\Delta\bar{z}} \left\| (A[\bar{z}^k]P^k(H) - Y[\bar{z}^k]) - \sum_{i=1}^m \frac{\partial(A[z_i^k]P^k(H) - Y[z_i^k])}{\partial z_i^k} \Delta z_i^k \right\|. \quad (9)$$

Полагая  $\bar{z}^{k+1} = \bar{z}^k - \Delta\bar{z}^k$ ,  $k = k + 1$ , повторяем цикл. Начальные значения неизвестных параметров задаются исходя из априорной информации  $\bar{z} = \bar{z}^0$ . Итерационная процедура заканчивается при условии выполнения критерия описания экспериментальных данных модельной огибающей — критерия Пирсона  $\chi^2 \approx 1$ . Минимизация функционала (8) выполняется методом Эйлера—Лагранжа [37] с учетом граничных условий (3); устойчивость решения к погрешностям экспериментальных данных обеспечивается требованием гладкости искомого решения с параметром регуляризации  $\alpha \sim C\sigma$  ( $C = \text{const}$ ) [39]. Производные по параметрам в задаче (9) вычисляются в численном виде с заранее заданными шагами  $\Delta z_i$  для каждого параметра  $z_i^k \in \bar{z}^k$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ ,  $m$  — количество неизвестных параметров:

$$\frac{\partial(A[z_i]P(H))}{\partial z_i} \equiv \frac{A[z_i + \Delta z_i]P(H) - A[z_i]P(H)}{\Delta z_i}. \quad (10)$$

В результате формируется матрица производных Якоби размерности [число искомых параметров  $\times$  количество экспериментальных точек]. Отличие расширенной математической модели состоит в том, что ядро интегрального уравнения (5) является двойной сверткой функции Лоренца и двух функций Гаусса (6) и (7), ширину которых необходимо найти. В этом случае при вычислении матрицы Якоби имеют место производные по ширинам  $\Gamma_{G_1}$  и  $\Gamma_{G_2}$ :

$$\frac{\partial A[\bar{z}]}{\partial \Gamma_{G_1}} \equiv \int_{V'} \int_{V''(H)} L(V, \Gamma_L) \frac{\partial G_1(V' - V, \Gamma_{G_1})}{\partial \Gamma_{G_1}} G_2(V - V'', \Gamma_{G_2}) dV' dV'', \quad (11)$$

$$\frac{\partial A[\bar{z}]}{\partial \Gamma_{G_2}} \equiv \int_{V'} \int_{V''(H)} L(V, \Gamma_L) G_1(V' - V, \Gamma_{G_1}) \frac{\partial G_2(V - V'', \Gamma_{G_2})}{\partial \Gamma_{G_2}} dV' dV'', \quad (12)$$

которые вычисляются при замене уравнения (5) численным аналогом с использованием квадратурных формул интегрирования. Минимизация функционала (9) с частными производными по искомым параметрам (10)–(12) выполняется методом наименьших квадратов. Размерности сеток по переменным  $V'$ ,  $V''(H)$  для вычисления функций Гаусса задаются динамически, согласовано с шагом основной экспериментальной сетки по скорости  $V$ . Амплитуды функций Гаусса  $Am_1$  и  $Am_2$  обеспечивают площадь, равную 1. Сходимость метода Гаусса–Ньютона имеет локальный характер и обусловлена заданием начальных значений корректируемых параметров, близких к точным [29], при условии существования решения обратной задачи (4).

**3. Моделирование ширины распределений Гаусса.** Отдельной задачей является моделирование ширины распределений Гаусса  $\Gamma_{G_1}$  и  $\Gamma_{G_2}$ . Величина уширения спектральных линий характеризует количество различных наборов локальных атомных конфигураций и локальных искажений решетки в исследуемом материале. Если величина уширения близка к нулю, т.е. спектральные линии описываются функцией Лоренца, то твердый раствор находится в упорядоченном состоянии и количество локальных атомных конфигураций соответствует стехиометрическому соединению [40]. С другой стороны, каждая локальная атомная конфигурация характеризуется своим набором значений сверхтонких параметров и, значит, ширина функции Гаусса зависит от этих параметров. Ширина распределения Гаусса  $\Gamma_{G_1}$ , связанного с изомерным сдвигом  $\delta_H$  и квадрупольным расщеплением  $Q_H$ , смоделирована аналогично зависимости самих параметров  $\delta_H$ ,  $Q_H$  [7] в виде линейной функции скорости

$$\Gamma_{G_1} = d + eV(\delta_H, Q_H), \quad (13)$$

где  $d$  и  $e$  — параметры подгонки.

Для выяснения вида функциональной зависимости уширения спектральных линий второй функцией Гаусса была рассмотрена трехкомпонентная система на основе Fe с двумя сортами атомов второго и третьего компонентов примеси  $V_1$  и  $V_2$ . Для этой системы были рассчитаны биномиальные вероятности возникновения различных локальных атомных конфигураций в решетке с координационным числом  $Z = 8$  при соотношении компонентов 0.40/0.60, 0.20/0.80 и 0.05/0.95. Подразумевается, что вклад в смещение сверхтонкого магнитного поля от атомов сорта  $V_1$  отличается от вклада атомов сорта  $V_2$ . В этом случае уширение элементарной линии спектра зависит не только от количества  $K$  атомов  $V_1$  и  $V_2$ , но и от их распределения  $P_K(V_1, V_2)$ . По полученным биномиальным вероятностям [22] смоделированы зависимости уширения линий мессбауэровских спектров от распределения атомов  $V_1$  и  $V_2$  в первой координационной сфере  $K = 0 \div 8$  при различных соотношениях концентрации атомов (рис. 3). По рисунку видно, что зависимость ширины линии от количества атомов в общем случае не является линейной. Поэтому в качестве функции, моделирующей уширение линий элементарной спектральной составляющей, была выбрана логарифмическая зависимость. Для конфигурации с чисто железным окружением  $K = 0$  (атомов сортов  $V_1$  и  $V_2$  нет) все три зависимости имеют одно значение. Поскольку количество и распределение атомов в ближайшем окружении резонансного атома Fe формирует величину сверхтонкого магнитного поля, ширину Гауссова распределения  $\Gamma_{G_2}$



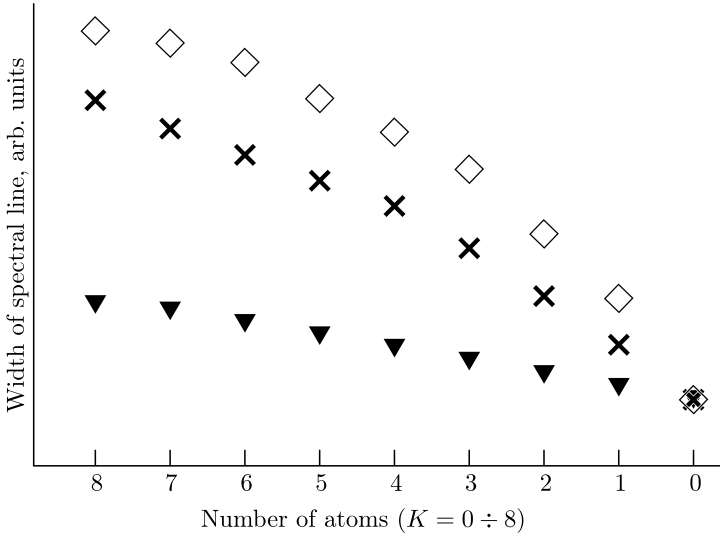


Рис. 3. Зависимости уширения линий мессбауэровских спектров от распределения атомов двух сортов  $B_1$  и  $B_2$  примеси в первой координационной сфере при различных соотношениях концентрации  $B_1/B_2$ : ромбики — 0.40/0.60, крестики — 0.20/0.80, треугольники — 0.05/0.95

[Figure 3. Dependences of the line broadening of the Mössbauer spectra on the distribution of atoms of two types  $B_1$  and  $B_2$  in the first coordination sphere at different  $B_1/B_2$  concentration ratios: diamonds — 0.40/0.60; crosses — 0.20/0.80; triangles — 0.05/0.95]

можно задать логарифмической функцией от  $V(H)$ :

$$\Gamma_{G_2} = b + c \ln(1 + V(H_0) - V(H_i)). \quad (14)$$

Здесь  $H_0$  — значение сверхтонкого магнитного поля для конфигурации атомов с чисто железным окружением резонансного атома ( $H_0 = 33$  Тл при комнатной температуре);  $b$  и  $c$  — являются подгоночными параметрами. Особенность второй функции Гаусса состоит в ее связи с коэффициентами энергетических переходов  $S_l$ , которые уширяют линии спектра попарно различно [40]:  $S_1 = S_6 = 1.6$  (мм/с)/Тл,  $S_2 = S_5 = 0.92$  (мм/с)/Тл,  $S_3 = S_4 = 0.25$  (мм/с)/Тл.

Влияние функций Гаусса на уширение спектральных линий Лоренцевой формы продемонстрировано на рис. 4. Чтобы оценить вклад от уширения каждой функцией, были использованы формулы определения ширины свертки двух функций Гаусса и ширины функции Фойгта [41]:

$$\Gamma_G = \sqrt{\Gamma_{G_1} + \Gamma_{G_2}}, \quad \Gamma_V = \frac{\Gamma_L}{2} + \sqrt{\frac{\Gamma_L^2}{4} + \Gamma_G^2}.$$

Уширение линий калибровочного Лоренца шириной  $\Gamma_L = 0.27$  мм/с функцией Гаусса с одинаковой шириной распределения  $\Gamma_{G_1} = 0.20$  мм/с для всех шести линий (13) (результатирующая ширина функции Фойгта  $\Gamma_V = 0.38$  мм/с) сильно уменьшает амплитуду спектральной линии — практически в 2 раза. А свертка со второй функцией Гаусса, ширина которой зависит от скорости с логарифмической зависимостью (14), и учет коэффициентов перехода приводит к существенно разному уширению центральных линий ( $\Gamma_V = 0.31$  мм/с)

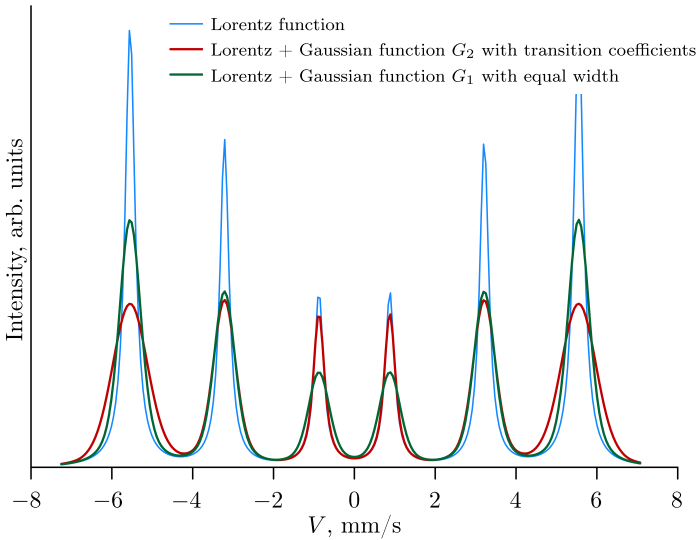


Рис. 4. Смоделированные мессбауэровские спектры с разной шириной спектральных составляющих: только функция Лоренца; свертка функций Лоренца и Гаусса с одинаковой шириной для всех линий; свертка функций Лоренца и Гаусса с коэффициентами перехода [Figure 4. Simulated Mössbauer spectra with different widths of spectral components: Lorentz function only; convolution of Lorentzian and Gaussian with the same width for all lines; convolution of Lorentzian and Gaussian functions with transition coefficients]

и крайних линий спектра ( $\Gamma_V = 0.47$  мм/с). Следовательно, уширение линий, обусловленное СТМП и коэффициентами энергетических переходов, невозможно описать распределением Гаусса с одинаковой шириной для всего спектра.

Важно, что введение функциональных зависимостей в ядро интегрального уравнения обратной задачи ядерного гамма-резонанса не означает их обязательного присутствия. Метод регуляризации Тихонова с коррекцией параметров ядра интегрального уравнения выявляет наличие или отсутствие введенных зависимостей.

**4. Достоверность и информативность применения расширенной модели.** Для проверки достоверности предложенной расширенной математической модели обратной задачи ядерного гамма-резонанса использовались мессбауэровские спектры тестовых объектов: твердого раствора состава  $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$  в разупорядоченном и упорядоченном состоянии [5] и разупорядоченный твердый раствор трехкомпонентной системы  $\text{Fe}_{75}\text{Al}_{10}\text{Si}_{15}$ . Твердые растворы получены механическим измельчением в шаровой планетарной мельнице Pulverisette 7 в среде аргона в течение 40 ч, упорядоченное состояние обеспечено путем отжига в течение 4 ч в вакуумной печи при температуре 723 К. На рентгенограммах исследуемых систем наблюдаются только уширенные ОЦК рефлексы, что свидетельствует о формировании однофазного твердого раствора [5]. Мессбауэровские спектры снимались на спектрометре ЯГРС-4М при температуре жидкого азота 77 К. При выполнении исследований использовалось оборудование ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО

РАН. Количество импульсов в отсутствие резонансного поглощения составляла  $Y(\infty) \approx 10^5$ , что соответствует относительной статистической погрешности измерения  $\approx 0.10\%$ . Калибровка спектрометра и перевод экспериментальных данных на скоростную шкалу выполнялись по спектру  $\alpha$ -Fe, т.е. в качестве ширины функции Лоренца использовалась ширина линии калибровочного спектра  $\Gamma_L(\alpha\text{-Fe}) = 0.27$  мм/с [6]. Математическая обработка экспериментальных спектров проводилась методом регуляризации Тихонова с коррекцией параметров в рамках расширенной модели (4)–(7). Размерность сетки по скорости определяется размерностью экспериментального спектра 256 каналов,  $[V_{\min}, V_{\max}] = [-7.2515; 7.07185]$  мм/с. Размерность сетки в пространстве  $H$  задавалась  $N = 200$  на всем интервале существования решения  $[H_{\min}, H_{\max}] \in [0; 36]$  Тл. В итерационной процедуре начальные значения параметров сверхтонкого взаимодействия задавались традиционными для этих соединений [5, 42], а ширины распределений Гаусса задавались одинаковыми во избежание приоритетного выбора:

$$\Gamma_{G_1} = 0.10 + 0.01V(\delta_H, Q_H), \quad \Gamma_{G_2} = 0.10 + 0.01 \ln(1 + V(H_0) - V(H)).$$

Шаги сеток соответственно  $\Delta V = 0.056$ ,  $\Delta H = 0.022$ ,  $\Delta V' = 0.041$ ,  $\Delta V''(H) = 0.033$  мм/с. Шаги по производным определялись диапазоном возможных значений каждого параметра:  $\Delta z_i = 0.01$  мм/с для  $\delta_H$ ,  $Q_H$ ,  $I_{(2;5)}$  и  $\Delta z_i = 0.005$  мм/с для коэффициентов функций Гаусса —  $b$ ,  $c$ ,  $d$ ,  $e$ . Для восстановления экспериментальных данных модельной огибающей в рамках критерия Пирсона требуется в среднем 8–10 шагов итерационной процедуры (8), (9). Результат обработки экспериментальных спектров и найденные значения ширин распределений Гаусса указаны на рис. 5. На функции распределения  $P(H)$  для разупорядоченного твердого раствора (рис. 5, б) явно выделяются 8 локальных максимумов, что соответствует количеству центров распределения ОЦК решетки. Для упорядоченного твердого раствора найденные ширины распределений Гаусса оказались равными нулю (рис. 5, а), характер упорядоченного состояния подтвердился. Соответствие полученных результатов теоретически рассчитанным значениям и спрогнозированным физическим свойствам [5] доказывает достоверность предложенной расширенной модели обратной задачи ядерного гамма-резонанса. Для проверки функциональной зависимости ширины распределения Гаусса от количества  $K$  и распределения  $P_K(V_1, V_2)$  атомов второй и третьей компоненты в ближайшем окружении атома Fe была выполнена обработка мессбауэровского спектра разупорядоченного твердого раствора трехкомпонентной системы  $\text{Fe}_{75}\text{Al}_{10}\text{Si}_{15}$ . В данной системе соотношение атомов сорта  $V_1 = \text{Al}$  и  $V_2 = \text{Si}$  равно  $10/15 = 0.40/0.60$  и экспериментальные результаты сравниваются со смоделированной кривой (рис. 6). Видно, что зависимость имеет нелинейный характер и хорошо согласуется с модельными расчетами. Следовательно, введение в расширенную модель логарифмической функции (14) обосновано и может использоваться в качестве количественного критерия интерпретации результатов обработки мессбауэровских спектров.

**Заключение.** Расширенная математическая модель описания мессбауэровских спектров твердых растворов позволяет получать физически обоснованные и непротиворечивые результаты при обработке экспериментальных спектров сложных многокомпонентных разупорядоченных систем. Традици-

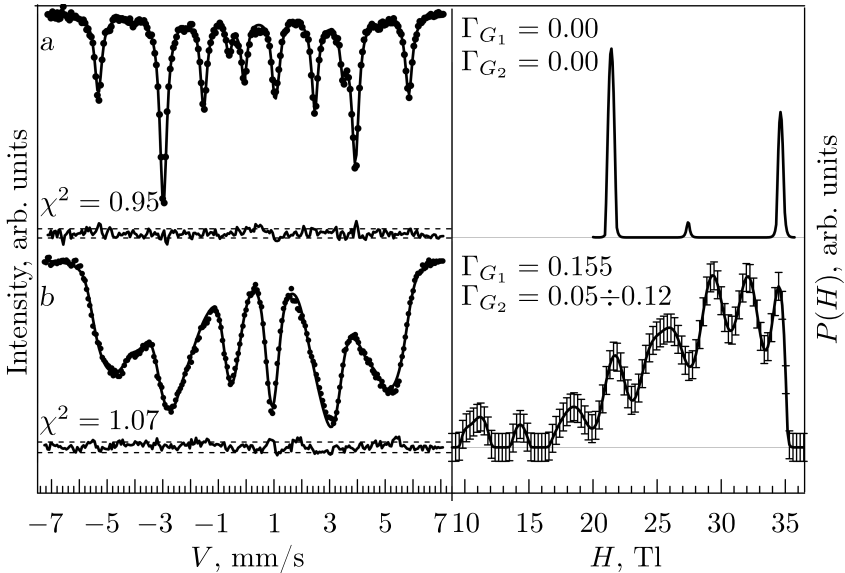


Рис. 5. Результат обработки экспериментальных спектров упорядоченного (а) и разупорядоченного (б) твердого раствора  $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$ . Для разупорядоченного твердого раствора на решении  $P(H)$  явно выделяются 8 локальных максимумов (коридор ошибки указан)

[Figure 5. The result of processing the experimental spectra of ordered (a) and disordered (b) solid solution  $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$ . For a disordered solid solution, 8 local maxima are clearly determined on the  $P(H)$  solution (decision error is shown)]

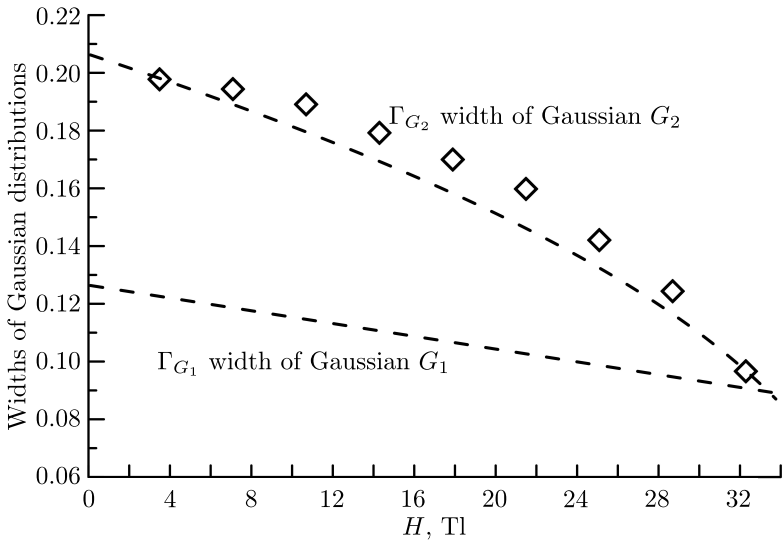


Рис. 6. Полученные из экспериментальных данных зависимости ширин распределений Гаусса  $\Gamma_{G_1}$  и  $\Gamma_{G_2}$  от величины сверхтонкого магнитного поля  $H$ . Для распределения Гаусса  $G_2$  наблюдается хорошее согласие с модельными расчетами (ромбики)

[Figure 6. The dependences of the width of the Gaussian distribution  $\Gamma_{G_1}$  and  $\Gamma_{G_2}$  on the magnitude of the hyperfine magnetic field  $H$  are obtained from experimental data. The Gaussian distribution  $G_2$  shows good agreement with the model calculations (diamonds)]

онная математическая модель описания мессбауэровских спектров была расширена:

- а) введением свертки функции Лоренца и двух распределений Гаусса в ядро интегрального уравнения обратной задачи ядерного гамма-резонанса;
- б) введением в уравнение функции Гаусса с коэффициентами перехода;
- в) введением в уравнение функциональной зависимости ширины распределения Гаусса от величины сверхтонкого магнитного поля.

Введение в расширенной модели обратной задачи ядерного гамма-резонанса двух распределений Гаусса не означает их обязательного присутствия. Метод регуляризации Тихонова с коррекцией параметров ядра интегрального уравнения выявляет наличие или отсутствие введенных распределений, тем самым расширяя область применения традиционной модели.

**Конкурирующие интересы.** Заявляем, что в отношении авторства и публикации этой статьи конфликта интересов не имеем.

**Авторский вклад и ответственность.** О. М. Немцова — описание расширенной математической модели и метода решения обратной задачи; работа с черновиком и переработанным вариантом рукописи. Г. Н. Кобыгин — описание физического эксперимента; обработка данных и подготовка соответствующих рисунков; работа с черновиком и переработанным вариантом рукописи. И. С. Веселков — моделирование зависимостей; расчет расширенной модели; работа с черновиком и переработанным вариантом рукописи. Авторы несут полную ответственность за предоставление окончательной рукописи в печать. Окончательная версия рукописи была одобрена всеми авторами.

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 121030100003-7).

## Библиографический список

1. Hade F., Otmani A., Djekoun A., Grenèche J. M. Investigation of mechanosynthesized  $\text{Fe}_{50}\text{Ni}_{40}\text{Al}_{10}$  powders // *J. Magn. Magn. Mater.*, 2013. vol. 343. pp. 214–220. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.04.074>.
2. Hade F., Otmani A., Djekoun A., Grenèche J. M. Mössbauer effect study of fine atomic structure of  $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{40}\text{Ni}_{10}$  powders // *Superlattices Microst.*, 2012. vol. 51, no. 6. pp. 952–958. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2012.03.015>.
3. Ломаева С. Ф., Маратканова А. Н., Немцова О. М. [и др.] Формирование структурно-фазового состава и магнитных свойств нанокомпозитов  $\text{Fe}(\text{Fe}_3\text{C}, \text{Fe}_5\text{SiC})\text{-SiO}_2$  в процессе механосинтеза // *ФММ*, 2010. Т. 109, № 5. С. 572–583. EDN: [MSQBHZ](#).
4. Ломаева С. Ф., Немцова О. М., Елсуков Е. П. [и др.] Формирование метастабильных фаз при механоактивации сплава Fe–Si в жидких органических средах // *Химия в интересах устойчивого развития*, 2005. Т. 13, № 2. С. 279–290. EDN: [HRMZIF](#).
5. Аржников А. К., Добышева Л. В., Кобыгин Г. Н., Елсуков Е. П. Магнитные моменты и сверхтонкие магнитные поля в упорядоченных и разупорядоченных квазибинарных сплавах  $\text{Fe}_{75}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_{25}$  // *ФТТ*, 2005. Т. 47, № 11. С. 1981–1989. EDN: [RDAEPF](#).
6. Шпинель В. С. *Резонанс гамма-лучей в кристаллах*. М.: Наука, 1969. 407 с.
7. Литвинов В. С., Каракишев С. Д., Овчинников В. В. *Ядерная гамма-резонансная спектроскопия сплавов*. М.: Металлургия, 1982. 144 с.
8. Русаков В. С. *Мессбауэровская спектроскопия локально неоднородных систем*. Алматы: ОПНИ ИЯФ НЯЦ РК, 2000. 431 с.
9. Елсуков Е. П., Ульянов А. Л., Порсев В. Е. [и др.] Особенности механического сплав-

- ления высококонцентрированных сплавов Fe–Cr // *ФММ*, 2018. Т. 119, № 2. С. 165–170. EDN: **YOVMXB**. DOI: <https://doi.org/10.7868/S0015323018020079>.
10. Гладков В. П., Кащеев В. А., Кусков А. Х., Петров В. И. Математический метод учета искажений формы регистрируемых линий мессбауэровского спектра // *Журнал прикладной спектроскопии*, 2004. Т. 71, № 5. С. 668–671. EDN: **HMRJNV**.
11. Русаков В. С., Покатилон В. С., Губайдулина Т. В., Мацнев М. Е. Сверхтонкие магнитные поля на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в интерметаллической системе  $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$  // *ФММ*, 2019. Т. 120, № 4. С. 366–371. EDN: **ZACXZR**. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0015323019040119>.
12. Boukherroub N., Guittoun A., Laggoun A., et al. Microstructure and magnetic properties of nanostructured  $(\text{Fe}_{0.8}\text{Al}_{0.2})_{100-x}\text{Si}_x$  alloy produced by mechanical alloying // *J. Magn. Magn. Mater.*, 2015. vol. 385. pp. 151–159. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.03.011>.
13. Borrego J. M., Conde A., Peña-Rodríguez V. A., Grenèche J. M. A fitting procedure to describe Mössbauer spectra of FINEMET-type nanocrystalline alloys // *Hyperfine Interact.*, 2000. vol. 131. pp. 67–82. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1010858927701>.
14. Djekoun A., Otmani A., Bouzabata B., et al. Synthesis and characterization of high-energy ball milled nanostructured  $\text{Fe}_{50}\text{Ni}_{50}$  // *Catal. Today*, 2006. vol. 113, no. 3–4. pp. 235–239. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2005.11.084>.
15. Гладков В. П., Мартыненко С. С., Петров В. И. Уточнение формы регистрируемой линии мессбауэровских спектров // *Журнал прикладной спектроскопии*, 2011. Т. 78, № 2. С. 316–320. EDN: **NDESKB**.
16. Чуев М. А. Эффективный метод анализа сверхтонкой структуры гамма резонансных спектров с использованием профиля Фойта // *Докл. АН*, 2011. Т. 438, № 6. С. 747–751. EDN: **NXQPAR**.
17. Ida T., Ando M., Toraya H. Extended pseudo-Voigt function for approximating the Voigt profile // *J. Appl. Cryst.*, 2000. vol. 33, no. 6. pp. 1311–1316. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0021889800010219>.
18. Baidakova N. V., Chernykh N. I., Koloskov V. M., Subbotin Y. N. A new algorithm for analysis of experimental Mössbauer spectra // *Ural Math. J.*, 2017. vol. 3, no. 2. pp. 33–39. EDN: **YMBVNR**. DOI: <https://doi.org/10.15826/umj.2017.2.005>.
19. Li Z., Ping J. Y., Jin M. Z., Liu M. L. Distribution of  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Fe}^{3+}$  and next-nearest neighbour effects in natural chromites: Comparison between results of QSD and Lorentzian doublet analysis // *Phys. Chem. Miner.*, 2002. vol. 29, no. 7. pp. 485–494. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00269-002-0258-2>.
20. Satuła D., Szymański K., Dobrzyński L. Maximum entropy method in Mössbauer spectroscopy — A problem of magnetic texture doublet analysis // *Acta Phys. Pol. A*, 2011. vol. 119, no. 1. pp. 78–80. DOI: <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.119.78>.
21. Кобылин Г. Н., Немцова О. М., Порсев В. Е. Обработка мессбауэровских спектров твердых растворов с применением функции Фойта // *Журнал прикладной спектроскопии*, 2019. Т. 86, № 3. С. 374–381. EDN: **ZGWZDV**.
22. Кобылин Г. Н., Немцова О. М. Использование двойной свертки функций Лоренца и Гаусса для обработки мессбауэровских спектров пересыщенных разупорядоченных твердых растворов // *Журнал прикладной спектроскопии*, 2021. Т. 88, № 6. С. 907–913. EDN: **MFOVVJ**. DOI: <https://doi.org/10.47612/0514-7506-2021-88-6-907-913>.
23. Сизиков В. С., Кривых А. В. Восстановление непрерывных спектров методом регуляризации с использованием модельных спектров // *Оптика и спектроскопия*, 2014. Т. 117, № 6. С. 1040–1048. EDN: **RAFMTK**. DOI: <https://doi.org/10.7868/S0030403414110166>.
24. Киселев Е. А. Системы целочисленных сдвигов, порожденные сверткой функций Гаусса и Лоренца // *Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика*, 2016. Т. 4. С. 43–50. EDN: **WYMNUX**.
25. Vasin V. V. Irregular nonlinear operator equations: Tikhonov's regularization and iterative approximation // *J. Inverse Ill-Posed Probl.*, 2013. vol. 21, no. 1. pp. 109–123. DOI: <https://doi.org/10.1515/jip-2012-0084>.

26. Морозов В. А. О восстановлении зашумленных сигналов методом регуляризации // *Вычислительные методы и программирование*, 2012. Т. 13, № 1. С. 247–252. EDN: PIXMDN.
27. Nemtsova O. M., Ageev A. L., Voronina E. V. The estimation of the error of the hyperfine interaction parameter distribution from Mössbauer spectra // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., Sect. B.*, 2002. vol. 187, no. 1. pp. 132–136. EDN: LHCMCZ. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(01\)00830-8](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(01)00830-8).
28. Xiong X., Xue X. A fractional Tikhonov regularization method for identifying a space-dependent source in the time-fractional diffusion equation // *Appl. Math. Comput.*, 2019. vol. 349. pp. 292–303. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.12.063>.
29. Voronina E. V., Ageev A. L., Nemtsova O. M., Yelsukov E. P. Algorithm of parameters correction for solving the inverse problem of Mössbauer spectroscopy // *Czechoslov. J. Phys.*, 1997. vol. 47, no. 5. pp. 547–552. EDN: LEEEAU. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1021263524297>.
30. Matsnev M. E., Rusakov V. S. SpectrRelax: An application for Mössbauer spectra modeling and fitting // *AIP Conf. Proc.*, 2012. vol. 1489, no. 1. pp. 178–185. EDN: RGGVFT. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4759488>.
31. Немцова О. М., Кобыгин Г. Н., Порсев В. Е. Разрешение перекрывающихся спектральных составляющих методом взвешенной регуляризации Тихонова // *Журнал прикладной спектроскопии*, 2021. Т. 88, № 2. С. 315–324. EDN: IJLWSD.
32. Edwards T. H., Stoll S. Optimal Tikhonov regularization for DEER spectroscopy // *J. Magn. Reson.*, 2018. vol. 288. pp. 58–68. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmr.2018.01.021>.
33. Sizikov V. S., Stepanov A. V. Method of training examples in solving inverse ill-posed problems of spectroscopy // *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2015. vol. 15, no. 6. pp. 1147–1154. EDN: SVHGBQ. DOI: <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2015-15-6-1147-1154>.
34. Васин В. В., Агеев А. Л. *Некорректные задачи с априорной информацией*. Екатеринбург: Наука, 1993. 264 с. EDN: ZQYUJZ.
35. Агеев А. Л., Антонова Т. В., Воронина Е. В. Методы уточнения параметров при решении интегральных уравнений I рода // *Матем. моделирование*, 1996. Т. 8, № 12. С. 110–124.
36. Немцова О. М., Кобыгин Г. Н. *Программа обработки мессбауэровских спектров методом регуляризации Тихонова с коррекцией параметров сверхтонкого взаимодействия*: Свид. гос. рег. ПрЭВМ № 2020667880, 2020. EDN: TJFFRR.
37. Ягола А. Г. Некорректные задачи с априорной информацией // *Сиб. электрон. матем. изв.*, 2010. Т. 7. С. С.343–С.361.
38. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. *Методы решения некорректных задач*. Москва: Наука, 1970. 288 с.
39. Язовских К. А., Ломаева С. Ф., Шаков А. А. [и др.] Влияние органической среды размола на структурно-фазовый состав и коррозионную стойкость сплавов Fe–Si // *Химическая физика и мезоскопия*, 2018. Т. 20, № 2. С. 284–296. EDN: YLSJEL.
40. Ивойлов Н. Г. *Мессбауэровская спектроскопия*. Казань, 2003. 93 с.
41. AlOmar A. S. Line width at half maximum of the Voigt profile in terms of Gaussian and Lorentzian widths: Normalization, asymptotic expansion, and chebyshev approximation // *Optik*, 2020. vol. 203, 163919. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.IJLEO.2019.163919>.
42. Yazovskikh K. A., Lomayeva S. F., Shakov A. A., et al. Surface modification of sendust powders prepared by ball milling // *Mater. Today Proc.*, 2019. vol. 12. pp. 172–176. EDN: OUYGFK. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.03.090>.

MSC: 65Z05, 35R30

## Extended mathematical model of the inverse problem of nuclear gamma-resonance. Reliability and informative of application

*O. M. Nemtsova, G. N. Konygin, I. S. Veselkov*Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
34, T. Baramzina str., Izhevsk, 426067, Russian Federation.

### Abstract

Research the properties of iron-based solid solutions by Mössbauer spectroscopy has the problem of interpreting the results of processing experimental data within the traditional mathematical model. Since the disordered solid solutions, for example, as a result of mechanical activation, are consisted of a set of the different local atomic configurations, the corresponding Mössbauer spectra contain a large number of the shifted relative to each other spectral components with close values of the hyperfine interaction parameters. The magnitude and sign of these shift are determined by many factors: the quantitative distribution of atoms of each type in the coordination spheres, the symmetry of their distribution relative to the quantization axis, the possible local shift relative to the average statistical position in the crystallographic structure, etc. In the mathematical model, as a rule, it's not possible to taken into account all these effects of the shift by analytically.


The proposed extended mathematical model for describing the Mössbauer spectra of solid solutions makes it possible to take into account the shifts in the spectral components by using Gaussian normal distribution function, as a function of statistical set of local distortions. The width of the Gaussian distribution makes it possible to estimate the degree of local distortions of the crystal lattice that arise due to differences in the sizes of atoms of the mixed components, local distortions of the structure and symmetry of the environment of the resonant atom.

The inverse problem of nuclear gamma-resonance is formulated by the Fredholm integral equation of the first kind and is an ill-posed problem

### Mathematical Modeling, Numerical Methods and Software Complexes Research Article

© Authors, 2024

© Samara State Technical University, 2024 (Compilation, Design, and Layout)

 The content is published under the terms of the [Creative Commons Attribution 4.0 International License](http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

#### Please cite this article in press as:

Nemtsova O. M., Konygin G. N., Veselkov I. S. Extended mathematical model of the inverse problem of nuclear gamma-resonance. Reliability and informative of application, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2024, vol. 28, no. 1, pp. 152–170. EDN: EKWSDV. DOI: [10.14498/vsgtu2060](https://doi.org/10.14498/vsgtu2060) (In Russian).

#### Authors' Details:

*Olga M. Nemtsova*  <https://orcid.org/0000-0002-5676-9578>Cand. Phys. & Math. Sci.; Associate Professor; Senior Researcher; Lab. of Physics and Chemistry of Nanomaterials; e-mail: [olganemtsova@udman.ru](mailto:olganemtsova@udman.ru)*Grigory N. Konygin*  <https://orcid.org/0000-0002-6202-9509>Cand. Phys. & Math. Sci.; Head of Laboratory; Lab. of Physics and Chemistry of Nanomaterials; e-mail: [gnkon@mail.ru](mailto:gnkon@mail.ru)*Ivan S. Veselkov*  <https://orcid.org/0009-0008-5590-6068>Postgraduate Student; Lab. of Physics and Chemistry of Nanomaterials; e-mail: [nerorus97@gmail.com](mailto:nerorus97@gmail.com)



with a priori constraints on the desired solution. The introduction of two Gaussian functions with a priori unknown linewidths into the kernel of the integral equation leads to the problem of solving the equation by classical methods. Algorithm for obtaining a reliable solution based on the Tikhonov regularization method with correction of the parameters of the kernel of the integral equation is proposed in this paper. On the examples of the study of real objects, the reliability and informative application of the extended mathematical model of the inverse problem of nuclear gamma-resonance is proved.

**Keywords:** inverse problem of nuclear gamma-resonance, solid solution, probability of atomic configuration, mathematical model, Fredholm integral equation of the first kind.

Received: 5<sup>th</sup> September, 2023 / Revised: 20<sup>th</sup> November, 2023 /

Accepted: 15<sup>th</sup> December, 2023 / First online: 16<sup>th</sup> August, 2024

**Competing interests.** The authors declare that they have no competing interests.

**Authors' contributions and responsibilities.** O. M. Nemtsova: Description of the extended mathematical model and method for solving the inverse problem; Writing — original draft and review & editing. G. N. Konygin: Description of the physical experiment; Data processing and preparation of corresponding figures; Writing — original draft and review & editing. I. S. Veselkov: Modeling dependencies; Calculation of the extended model; Writing — original draft and review & editing. The authors bear full responsibility for providing the final manuscript for publication. The final version of the manuscript was approved by all authors.

**Funding.** The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme no. 121030100003-7).

## References

1. Hadeif F., Otmani A., Djekoun A., Grenèche J. M. Investigation of mechanosynthesized Fe<sub>50</sub>Ni<sub>40</sub>Al<sub>10</sub> powders, *J. Magn. Magn. Mater.*, 2013, vol. 343, pp. 214–220. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.04.074>.
2. Hadeif F., Otmani A., Djekoun A., Grenèche J. M. Mössbauer effect study of fine atomic structure of Fe<sub>50</sub>Al<sub>40</sub>Ni<sub>10</sub> powders, *Superlattices Microst.*, 2012, vol. 51, no. 6, pp. 952–958. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2012.03.015>.
3. Lomaeva S. F., Maratkanova A. H., Nemtsova O. M., et al. Formation of the structural-phase composition and magnetic properties of nanocomposites Fe(Fe<sub>3</sub>C, Fe<sub>5</sub>SiC)–SiO<sub>2</sub> in the process of mechanosynthesis, *Phys. Met. Metallogr.*, 2010, vol. 109, no. 5, pp. 534–546. EDN: MXMLTR. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0031918X10050145>.
4. Lomaeva S. F., Nemtsova O. M., Elsukov E. P., et al. Formation of metastable phases during mechanical activation of Fe–Si alloy in liquid organic media, *Chemistry for Sustainable Development*, 2005, vol. 13, no. 2, pp. 275–286.
5. Arzhnikov A. K., Dobysheva L. V., Konygin G. N., Elsukov E. P. Magnetic moments and hyperfine magnetic fields in ordered and disordered quasi-binary Fe<sub>75</sub>(Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>)<sub>25</sub> alloys, *Phys. Solid State*, 2005, vol. 47, no. 11, pp. 2063–2071. EDN: LJDHJF. DOI: <https://doi.org/10.1134/1.2131146>.
6. Spinel' V. S. *Resonans gamma-luchey v kristallakh* [Resonance of Gamma-rays in Crystals]. Moscow, Nauka, 1969, 407 pp. (In Russian)
7. Litvinov V. S., Karakishev S. D., Ovchinnikov V. V. *Iadernaia gamma-rezonansnaia spektroskopiiia splavov* [Nuclear Gamma-Resonance Spectroscopy of Alloys]. Moscow, Metallurgiya, 1982, 144 pp. (In Russian)
8. Rusakov V. S. *Messbauerovskaia spektroskopiiia lokal'no neodnorodnykh sistem* [Mössbauer Spectroscopy of Locally Inhomogeneous Systems]. Almaty, 2000, 431 pp. (In Russian)

9. Yelsukov E. P., Ul'yanov A. L., Porsev V. E., et al. Peculiarities of mechanical alloying of high-concentration Fe–Cr alloys, *Phys. Met. Metallogr.*, 2018, vol. 119, no. 2, pp. 153–160. EDN: **XXGLYT**. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0031918X17120055>.
10. Gladkov V. P., Kascheev V. A., Kouskov A. X., Petrov V. I. Mathematical method of allowance for distortions of the shape of the registered Mössbauer spectrum lines, *J. Appl. Spectrosc.*, 2004, vol. 71, no. 5, pp. 731–735. EDN: **LIGCHZ**. DOI: <https://doi.org/10.1023/B:JAPS.0000049636.15453.0c>.
11. Rusakov V. S., Pokatilov V. S., Gubaidulina T. V., Matsnev M. E. Hyperfine Magnetic Fields at the Nuclei of  $^{57}\text{Fe}$  in the Intermetallic System  $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$  intermetallic system, *Phys. Met. Metallogr.*, 2019, vol. 120, no. 4, pp. 339–344. EDN: **GXEJUD**. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0031918X19040112>.
12. Boukherroub N., Guittoum A., Laggoun A., et al. Microstructure and magnetic properties of nanostructured  $(\text{Fe}_{0.8}\text{Al}_{0.2})_{100-x}\text{Si}_x$  alloy produced by mechanical alloying, *J. Magn. Magn. Mater.*, 2015, vol. 385, pp. 151–159. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.03.011>.
13. Borrego J. M., Conde A., Peña-Rodríguez V. A., Grenèche J. M. A fitting procedure to describe Mössbauer spectra of FINEMET-type nanocrystalline alloys, *Hyperfine Interact.*, 2000, vol. 131, pp. 67–82. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1010858927701>.
14. Djekoun A., Otmani A., Bouzabata B., et al. Synthesis and characterization of high-energy ball milled nanostructured  $\text{Fe}_{50}\text{Ni}_{50}$ , *Catal. Today*, 2006, vol. 113, no. 3–4, pp. 235–239. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2005.11.084>.
15. Gladkov V. P., Martynenko S. S., Petrov V. I. Refinement of the shape of the detected line in mössbauer spectra, *J. Appl. Spectrosc.*, 2011, vol. 78, no. 2, pp. 296–300. EDN: **OHZFET**. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10812-011-9462-5>.
16. Chuev M. A. An efficient method of analysis of the hyperfine structure of gamma-resonance spectra using the Voigt profile, *Dokl. Phys.*, 2011, vol. 56, no. 6, pp. 318–322. EDN: **PDYEMB**. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1028335811060097>.
17. Ida T., Ando M., Toraya H. Extended pseudo-Voigt function for approximating the Voigt profile, *J. Appl. Cryst.*, 2000, vol. 33, no. 6, pp. 1311–1316. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0021889800010219>.
18. Baidakova N. V., Chernykh N. I., Koloskov V. M., Subbotin Y. N. A new algorithm for analysis of experimental Mössbauer spectra, *Ural Math. J.*, 2017, vol. 3, no. 2, pp. 33–39. EDN: **YMBVNR**. DOI: <https://doi.org/10.15826/umj.2017.2.005>.
19. Li Z., Ping J. Y., Jin M. Z., Liu M. L. Distribution of  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Fe}^{3+}$  and next-nearest neighbour effects in natural chromites: Comparison between results of QSD and Lorentzian doublet analysis, *Phys. Chem. Miner.*, 2002, vol. 29, no. 7, pp. 485–494. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00269-002-0258-2>.
20. Satuła D., Szymański K., Dobrzyński L. Maximum entropy method in Mössbauer spectroscopy — A problem of magnetic texture doublet analysis, *Acta Phys. Pol. A*, 2011, vol. 119, no. 1, pp. 78–80. DOI: <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.119.78>.
21. Konygin G. N., Nemtsova O. M., Porsev V. E. Mössbauer spectra of solid solutions processed using the Voigt function, *J. Appl. Spectrosc.*, 2019, vol. 86, no. 3, pp. 409–415. EDN: **PCQMPU**. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10812-019-00834-0>.
22. Konygin G. N., Nemtsova O. M. Use of a double convolution of Lorentz and Gaussian functions for processing Mössbauer spectra of supersaturated disordered solid solutions, *J. Appl. Spectrosc.*, 2021, vol. 88, no. 6, pp. 1176–1182. EDN: **VDOWSU**. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10812-022-01296-7>.
23. Sizikov V. S., Krivykh A. V. Reconstruction of continuous spectra by the regularization method using model spectra, *Opt. Spectrosc.*, 2014, vol. 117, no. 6, pp. 1040–1048. EDN: **UFJYAL**. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0030400X14110162>.
24. Kiselev E. A. Systems of integer shifts generated by convolution of Gauss and Lorentz functions, *Proc. Voronezh State Univ., Ser. Phys. Math.*, 2016, vol. 4, pp. 43–50 (In Russian). EDN: **WYMNUX**.

25. Vasin V. V. Irregular nonlinear operator equations: Tikhonov's regularization and iterative approximation, *J. Inverse Ill-Posed Probl.*, 2013, vol. 21, no. 1, pp. 109–123. DOI: <https://doi.org/10.1515/jip-2012-0084>.
26. Morozov V. A. On restoration of noisy signals by a regularization method, *Numerical Methods and Programming*, 2012, vol. 13, no. 1, pp. 247–252 (In Russian). EDN: PIXMDN.
27. Nemtsova O. M., Ageev A. L., Voronina E. V. The estimation of the error of the hyperfine interaction parameter distribution from Mössbauer spectra, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., Sect. B.*, 2002, vol. 187, no. 1, pp. 132–136. EDN: LHCMCZ. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(01\)00830-8](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(01)00830-8).
28. Xiong X., Xue X. A fractional Tikhonov regularization method for identifying a space-dependent source in the time-fractional diffusion equation, *Appl. Math. Comput.*, 2019, vol. 349, pp. 292–303. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.12.063>.
29. Voronina E. V., Ageev A. L., Nemtsova O. M., Yelsukov E. P. Algorithm of parameters correction for solving the inverse problem of Mössbauer spectroscopy, *Czechoslov. J. Phys.*, 1997, vol. 47, no. 5, pp. 547–552. EDN: LEEEAV. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1021263524297>.
30. Matsnev M. E., Rusakov V. S. SpectrRelax: An application for Mössbauer spectra modeling and fitting, *AIP Conf. Proc.*, 2012, vol. 1489, no. 1, pp. 178–185. EDN: RGGVFT. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4759488>.
31. Nemtsova O. M., Konygin G. N., Porsev V. E. Separation of overlapping spectral lines using the Tikhonov regularization method, *J. Appl. Spectrosc.*, 2021, vol. 88, no. 2, pp. 373–381. EDN: BJZFXZ. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10812-021-01185-5>.
32. Edwards T. H., Stoll S. Optimal Tikhonov regularization for DEER spectroscopy, *J. Magn. Reson.*, 2018, vol. 288, pp. 58–68. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmr.2018.01.021>.
33. Sizikov V. S., Stepanov A. V. Method of training examples in solving inverse ill-posed problems of spectroscopy, *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2015, vol. 15, no. 6, pp. 1147–1154. EDN: SVHGBQ. DOI: <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2015-15-6-1147-1154>.
34. Vasin V. V., Ageev A. L. *Nekorrektnye zadachi s apriornoi informatsiei* [Ill-Posed Problems with A Priori Information]. Ekaterinburg, Nauka, 1993, 264 pp. (In Russian). EDN: ZQYUJZ.
35. Ageev A. L., Antonova T. V., Voronina E. V. Methods of parameter adjustment for the solution of integral equations of the first kind, *Mat. Model.*, 1996, vol. 8, no. 12, pp. 110–124.
36. Nemtsova O. M., Konygin G. N. *Program for processing Mössbauer spectra using the Tikhonov regularization method with correction of hyperfine interaction parameters*, Certificate of State Registration of Computer Program no. 2020667880, 2020 (In Russian). EDN: TJFFRR.
37. Yagola A. G. Ill-posed problems with apriori information, *Sib. Electron. Mat. Izv.*, 2010, vol. 7, pp. C.343–C.361.
38. Tikhonov A. N., Arsenin V. Ya. *Metody resheniia nekorrektnykh zadach* [Methods for Solving Ill-Posed Problems]. Moscow, Nauka, 1970, 288 pp. (In Russian)
39. Yazovskikh K. A., Lomaeva S. F., Shakov A. A., et al. Influence of organic medium of ball milling on structural-phase composition and corrosion resistance of Fe–Si alloys, *Chem. Phys. Mesoscop.*, 2018, vol. 20, no. 2, pp. 284–296 (In Russian). EDN: YLSJEL.
40. Ivoylov N. G. *Mössbauerovskaia spektroskopiiia* [Mössbauer Spectroscopy]. Kazan', 2003, 93 pp. (In Russian)
41. AlOmar A. S. Line width at half maximum of the Voigt profile in terms of Gaussian and Lorentzian widths: Normalization, asymptotic expansion, and chebyshev approximation, *Optik*, 2020, vol. 203, 163919. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.IJLEO.2019.163919>.
42. Yazovskikh K. A., Lomayeva S. F., Shakov A. A., et al. Surface modification of sendust powders prepared by ball milling, *Mater. Today Proc.*, 2019, vol. 12, pp. 172–176. EDN: OTYGFK. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.03.090>.