

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДВОЙНОЙ СВЕРТКИ ФУНКЦИЙ ЛОРЕНЦА И ГАУССА ДЛЯ ОБРАБОТКИ МЁССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ ПЕРЕСЫЩЕННЫХ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

Г. Н. Коныгин, О. М. Немцова*

УДК 539.1.08;519.642.3

<https://doi.org/10.47612/0514-7506-2021-88-6-907-913>

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
Ижевск, Россия; e-mail: olganemtsova@udman.ru

(Поступила 3 августа 2021)

Предложен алгоритм математической обработки мёссбауэровских спектров пересыщенных разупорядоченных твердых растворов методом регуляризации Тихонова с использованием двойной свертки функции Лоренца и двух гауссианов. На примерах спектров пересыщенных разупорядоченных твердых растворов $Fe_{100-x}Ge_x$ ($x = 10—25$ ат.%) и $Fe_{75}Si_{15}Al_{10}$ показано, что алгоритм позволяет проводить более корректную обработку, обеспечивающую получение достоверной функции распределения сверхтонкого магнитного поля. Показано, что для учета статистического ансамбля неэквивалентных локальных атомных конфигураций атомов Fe в разупорядоченных пересыщенных твердых растворах необходимо использование не только свертки двух функций Гаусса, но и масштабирования коэффициента проектирования сверхтонкого магнитного поля на шкалу скоростей.

Ключевые слова: мёссбауэровская спектроскопия, двойная свертка, локальная атомная конфигурация, регуляризация Тихонова, разупорядоченный пересыщенный твердый раствор.

An algorithm for mathematical processing of the Mössbauer spectra of supersaturated disordered solid solutions by the Tikhonov regularization method using a double convolution of the Lorentz function and two Gaussians is proposed. By the examples of spectra of supersaturated disordered solid solutions $Fe_{100-x}Ge_x$ ($x = 10—25$ at.%) and $Fe_{75}Si_{15}Al_{10}$, it is shown that the algorithm allows more correct processing, which provides a reliable distribution function of the hyperfine magnetic field. It is shown that to take into account the statistical ensemble of nonequivalent local atomic configurations of Fe atoms in disordered supersaturated solid solutions, it is necessary to use not only the convolution of two Gaussian functions, but also the projection scaling factor of the hyperfine magnetic field onto the velocity scale.

Keywords: Mössbauer spectroscopy, double convolution, local atomic configurations, Tikhonov regularization, disordered supersaturated solid solution.

Введение. Известно [1], что статистический ансамбль локальных атомных конфигураций координационных сфер создает вклады в сверхтонкие взаимодействия (СТВ) и соответствующий ему мёссбауэровский спектр является суперпозицией достаточно большого количества смещенных относительно друг друга резонансных линий. При этом величина и знак смещения определяются как количественным распределением атомов каждого сорта в координационных сферах, так и симметрией их распределения относительно оси квантования и возможным локальным смещением относительно среднестатистического положения в сформированной кристаллографической структуре. Основной вклад в формирование спектра вносит ближайшее окружение резонансного атома (1-я координационная сфера с координационным числом Z_1), которое зависит от концентрации элементов и опреде-

USING A DOUBLE CONVOLUTION OF LORENTZ AND GAUSS FUNCTIONS FOR PROCESSING THE MÖSSBAUER SPECTRA OF THE SUPERSATURATED DISORDERED SOLID SOLUTIONS

G. N. Konygin, O. M. Nemtsova* (Udmurt Federal Research Center Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia; e-mail: olganemtsov@udman.ru)

ляет количество локальных максимумов (K) на функциях распределения сверхтонкого магнитного поля (СТМП), поскольку смещение линий сравнимо с шириной резонансной линии или превышает ее [2]. Атомы более удаленных сфер оказывают меньшее влияние на изменение параметров СТВ, что приводит к смещению линий на величину, существенно меньшую ширины резонансной линии, и формированию широкой интегральной формы линии.

В работе [3] показано, что применение свертки функций Лоренца и Гаусса в интегральном уравнении для учета эффекта уширения элементарной спектральной линии позволяет получать существенно лучшее и физически обоснованное распределение СТМП для спектров локально неоднородных неравновесных разупорядоченных твердых растворов. Известно, что для получения физически достоверного решения необходимо математически корректное задание интегрального ядра. Применение свертки функций в ядре интегрального уравнения, как правило, выполняется с одинаковой шириной функции Гаусса (Γ_G) на всем интервале существования спектра [4—8]. Однако такой подход в общем случае не учитывает важных особенностей мёссбауэровской спектроскопии и не всегда позволяет получать достаточно разрешенное распределение СТМП с физически обоснованными локальными максимумами [7, 8]. В мёссбауэровской спектроскопии экспериментальный спектр формируется на скоростной шкале V (мм/с) доплеровского смещения энергии резонансного перехода. В случае комбинированного СТВ (наличия СТМП) при полном снятии вырождения (рассматриваются спектры именно такого типа) для шести разрешенных энергетических переходов абсолютные значения смещений, связанных с изомерным сдвигом (δ) и квадрупольным расщеплением (Q), одинаковы на всем интервале V . Соответственно, для смещений, обусловленных δ и Q , которые могут быть введены в интегральное уравнение как уширение элементарной функции Лоренца, оправдано использовать одинаковое значение Γ_G для шести переходов (линий) на интервале V .

Совсем иная картина имеет место для смещений, связанных с СТМП (H). Смещения для тех же шести разрешенных энергетических переходов, соответствующих полю H , имеют попарно (1 и 6, 2 и 5, 3 и 4) различные масштабирующие коэффициенты перехода в шкалу V [2]. Это ярко проявляется на спектрах твердых растворов (как упорядоченных, так и разупорядоченных) с наличием хотя бы нескольких неэквивалентных локальных атомных конфигураций: ширина крайних (1 и 6) линий на скоростной шкале V экспериментального спектра значительно больше, чем внутренних. Соответственно, для смещений, обусловленных H , которые могут быть введены в интегральное уравнение как уширение элементарной функции Лоренца, необходимо вводить в Γ_G для каждой пары линий (1 и 6, 2 и 5, 3 и 4) свой масштабирующий коэффициент перехода из H в шкалу скоростей V . Однако следует иметь в виду, что при наличии набора локальных атомных конфигураций (K) величина Γ_G , так же как и H , может иметь функциональную зависимость от K . Особенно это критически важно для многокомпонентных систем. Если имеется трех- и более компонентный разупорядоченный твердый раствор, то различие вкладов атомов каждого сорта в формирование H и смещения требует учета не только масштабирующего коэффициента проектирования, но и влияния распределения атомов в локальных конфигурациях на ширину Γ_G .

Таким образом, одной свертки функций Лоренца и Гаусса с одинаковой шириной Γ_G на всем интервале существования спектра может быть недостаточно для учета эффекта уширения элементарной спектральной линии в интегральном уравнении. Для проведения корректной обработки спектров и получения достоверных результатов необходимо применять двойную свертку с масштабирующим коэффициентом проектирования и зависимостью $\Gamma_G(K)$. Этому посвящена настоящая работа.

Математическая модель. Мёссбауэровский спектр формируется в результате регистрации резонансного поглощения, излучения и рассеяния гамма-квантов ядрами атомов твердого тела и описывается суперпозицией функций Лоренца:

$$L(H, V) = Y(\infty) \left[1 - \sum_{i=1}^6 \frac{I_i}{1 + 4(V - V_H)^2 / \Gamma_L^2} \right], \quad (1)$$

где H — сверхтонкое магнитное поле на ядре атома; V — относительная скорость источника мёссбауэровского излучения; $Y(\infty)$ — количество импульсов в отсутствие резонансного поглощения, фоновая составляющая; I_i — интенсивность i -й линии поглощения (при $i = 6$ существуют СТМП и шесть разрешенных энергетических переходов); Γ_L — ширина элементарной линии спектра; V_H — положение резонанса на шкале скорости ($V_H = \beta H + \delta_H + Q_H$), β — масштабирующий коэффициент проектирования H в V [2].

Известно, что свертка функций Лоренца и Гаусса является функцией Фойгта. Двойная свертка функции Лоренца с двумя функциями Гаусса также является функцией Фойгта [9]. В этом случае задача определения функции распределения сверхтонкого параметра по экспериментальному мёссбауэровскому спектру выражается интегральным уравнением Фредгольма 1-го рода

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

в котором интегральное ядро задается двумерной сверткой естественной линии спектра с двумя функциями Гаусса:

$$F(H, V) = \int_{y_2}^{y_1} \int_{x_2}^{x_1} L(H - x - \beta y, V) G_1(x) G_2(y) dx dy, \quad (3)$$

где $Y_{\sigma}(V) = Y(V) + \sigma$ — экспериментальный спектр со статистической ошибкой σ ; $L(H, V)$ — функция Лоренца (1); $P(H)$ — искомое распределение СТМП. Интегрирование функций Гаусса $G_1(x)$ и $G_2(x)$ с соответствующими ширинами Γ_{G1} и Γ_{G2} проводится на интервалах $[x_1, x_2] = [-3\Gamma_{G1}, 3\Gamma_{G1}]$, $[y_1, y_2] = [-3\Gamma_{G2}, 3\Gamma_{G2}]$ с 99.7 % долей площади функций. При интерпретации функции распределения основное внимание уделяется количеству локальных максимумов (указывает на количество спектральных составляющих K), их положению (характеризует локальное магнитное поле H_K) и вероятности локальных атомных конфигураций с K атомами примеси в ближайшем окружении резонансного атома P_K (в настоящей работе — атома Fe). Ширина Γ_{G1} связана с изомерным сдвигом (δ) и квадрупольным расщеплением (Q) и не зависит от H . Ширина Γ_{G2} имеет функциональную зависимость от K и может быть выражена функцией от H , в качестве которой взята логарифмическая зависимость:

$$\Gamma_{G2} = \Gamma_0 + \gamma \ln(H), \quad (4)$$

где Γ_0 и γ — подгоночные параметры.

Для решения интегрального уравнения (2) использован классический метод квадратур [10], а также широко известный и успешно применяемый для решения некорректных задач метод регуляризации Тихонова [11—13]. Подгоночные параметры определены методом коррекции [14]. Решение уравнения (3) найдено усовершенствованным методом взвешенной регуляризации Тихонова [15], который позволяет получать более корректные, достоверные и физически обоснованные результаты.

Результаты обработки мёссбауэровских спектров твердых растворов. На примерах обработки мёссбауэровских спектров неупорядоченных твердых растворов покажем работоспособность предлагаемой методики. Известно, что бинарные и квазибинарные сплавы являются классическими модельными объектами для изучения закономерностей формирования магнитных свойств в зависимости от сорта и концентрации sp -элемента, параметров и типа кристаллической решетки. Исследованы полученные методом механического измельчения в шаровой планетарной мельнице Пульверизетте-7 в среде аргона объемно-центрированные кристаллические (ОЦК) разупорядоченные пересыщенные твердые растворы $\text{Fe}_{100-x}\text{Ge}_x$ ($x = 10, 15, 20, 25$ ат.%) и порошки сплава $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$, полученные в среде аргона [7, 8]. Мёссбауэровские спектры образцов Fe-Ge зарегистрированы на спектрометре ЯГРС-4М при температуре 77 К, образцов $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ — на спектрометре SM2201DR при 300 К. 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 $Y(\infty)$ для $\text{Fe}_{100-x}\text{Ge}_x$ при $x = 10$ —20 ат.% составляло $\sim 3 \cdot 10^5$, для $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$ $\sim 8 \cdot 10^5$, для $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ $\sim 6 \cdot 10^5$, соответствующая относительная статистическая погрешность измерения $\Delta Y = \sqrt{Y(\infty)} / Y(\infty) \sim 0.18, 0.11$ и 0.12 %. Когда количество центров распределения относительно невелико и их относительные интенсивности значительно превышают ΔY , статистика $3 \cdot 10^5$ является приемлемой для надежной математической обработки. С увеличением количества центров распределения их относительные интенсивности уменьшаются и для получения статистически достоверного результата необходимо увеличение статистического набора спектров, чтобы ΔY не превышало относительную интенсивность центров распределения $P(H)$. Калибровка спектрометра и перевод экспериментальных спектров в скоростную шкалу выполнены по спектру α -Fe, в качестве ширины функции элементарного Лоренца использована ширина линии спектра α -Fe [1, 2]. Математическая обработка проведена методом взвешенной регуляризации Тихонова с коррекцией параметров [15]. В качестве элементарной линии использована двойная свертка функции Лоренца и двух гауссианов, где ширины функций Гаусса являются подго-

ночными параметрами. В качестве критерия восстановления экспериментальных данных использован стандартный критерий χ^2 Пирсона [16].

Из результатов обработки спектров сплавов Fe-Ge и $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ (рис. 1) видно, что применение двойной свертки обеспечивает количественное совпадение локальных максимумов функции распределения $P(H)$ с рассчитанными по биномиальному распределению вероятностями локальных атомных конфигураций с K атомами примеси в ближайшем атомном окружении для ОЦК-решетки с координационным числом $Z_1 = 8$ (рис. 2).

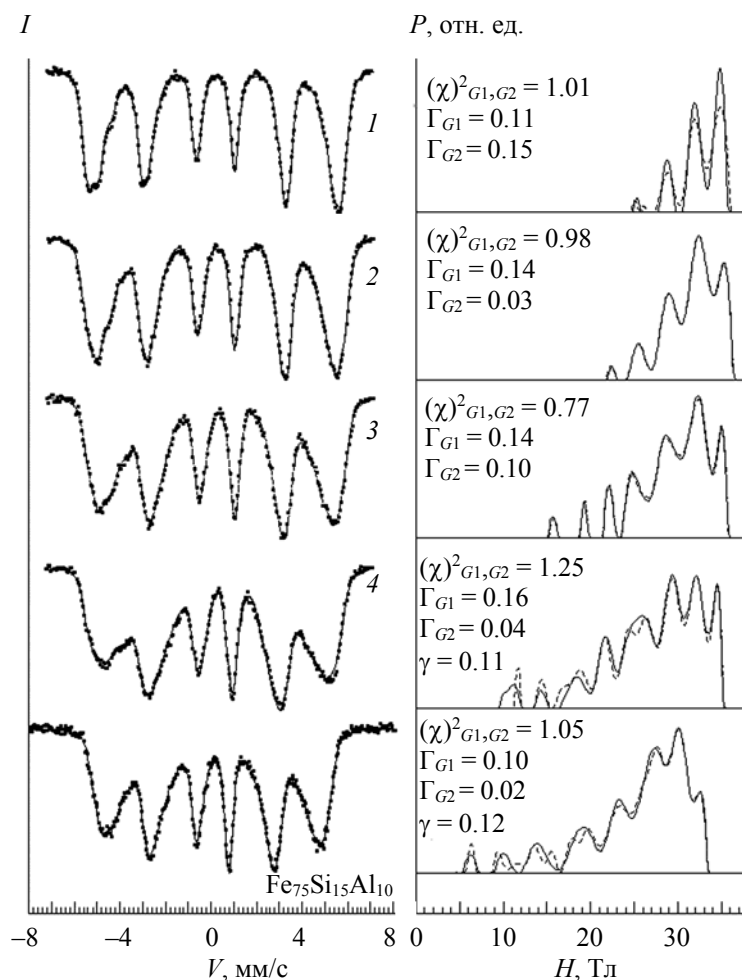


Рис. 1. Функции распределения сверхтонкого магнитного поля $P(H)$, полученные в результате обработки мёссбауэровских спектров (точки) твердых растворов Fe-Ge ($C_{\text{Ge}} = 10$ (1), 15 (2), 20 (3) и 25 ат.% (4)) и $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ методом регуляризации Тихонова с интегральным ядром в виде простой свертки с функцией Гаусса шириной Γ_{G1} (штриховая линия) и двойной свертки с ширинами Γ_{G1} и Γ_{G2} (сплошная линия)

Применение свертки с одной функцией Гаусса не позволяет корректно обрабатывать экспериментальные данные, так как на распределениях $P(H)$ для пересыщенных разупорядоченных твердых растворов $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$ и $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ наблюдается избыточное количество локальных максимумов для $K \geq 3$. В силу хаотического характера распределения атомов в решетке кристалла вероятность распределения атомов в ближайшем окружении резонансного ядра описывается распределением Бернулли [17]. Тогда для каждой концентрации примесных атомов можно рассчитать вероятность возникновения соответствующей конфигурации атомов в ближайшем окружении. Из обработки экспериментальных спектров по полученным распределениям СТМП $P(H)$ рассчитаны относительные доли локальных атомных конфигураций (рис. 2).

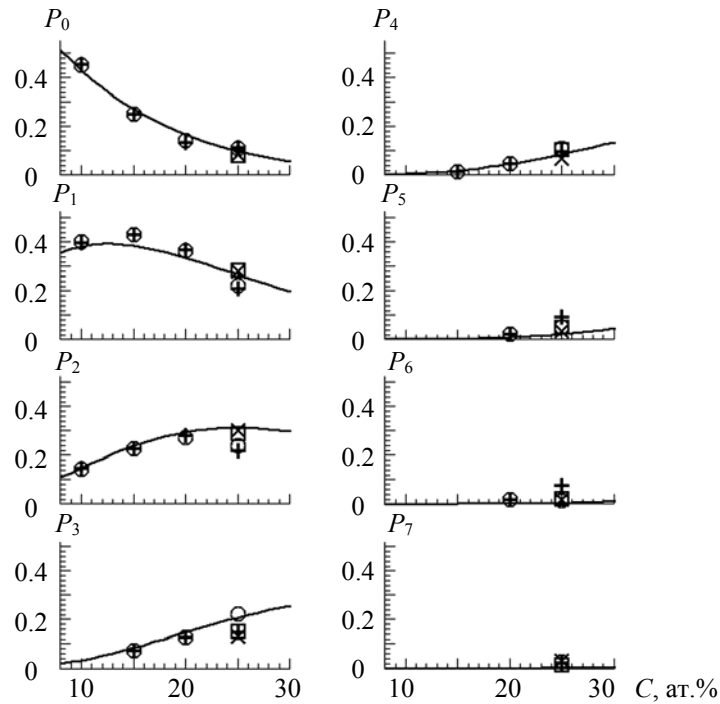


Рис. 2. Рассчитанные по биномиальному распределению вероятности P_K локальных атомных конфигураций с K атомами примеси в ближайшем атомном окружении для ОЦК-решетки с координационным числом $Z_1 = 8$ (сплошная линия) и найденные из $P(H)$ относительные интенсивности локальных составляющих спектра для модели с простой сверткой с функцией Гаусса шириной Γ_{G1} (+) и с двойной сверткой с ширинами Γ_{G1} и Γ_{G2} (o и □)

До концентрации Ge 20 ат. % экспериментальные данные удовлетворительно соответствуют расчетным кривым P_K как для однократной, так и для двойной свертки функций. При содержании Ge 25 ат. % наблюдается несоответствие экспериментальных значений расчетным кривым для $P_{K \geq 3}$ (рис. 2) при использовании одной функции Гаусса, обусловленное тем, что распределение $P(H)$ имеет место избыточное количество локальных максимумов и возникает проблема их идентификации по K . Применение двойной свертки решает эту проблему: количество локальных максимумов $P(H)$ и их относительные интенсивности полностью соответствуют расчетным кривым. Причем если до концентрации [Ge] 20 ат. % зависимость ширины Γ_{G2} функции Гаусса от H не наблюдается (рис. 3, б), то при [Ge] = 25 ат. % обнаружена зависимость (4). Это может быть связано с формированием локально искаженной ОЦК-структуры в метастабильном разупорядоченном пересыщенном твердом растворе с увеличением концентрации Ge [18].

В отличие от $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$ для сплава $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ обнаружена более сильная зависимость Γ_{G2} от H (рис. 3, б). Для объяснения этой зависимости рассмотрены биномиальные вероятности $P_{A,B}$ возникновения локальных атомных конфигураций для двух сортов атомов примеси A и B в соотношении 0.4/0.6 (что соответствует соотношению Al и Si в сплаве $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$) с координационными числами $K = 0-8$. Подразумевается, что вклад в смещение H от атомов сорта A отличается от вклада атомов сорта B на ΔH (рис. 3, а при $K = 1$). В этом случае уширение элементарной линии спектра зависит не только от количества атомов примеси A и B для данного K , но и от их распределения $P_{A,B}$. Таким образом, ширина линий спектров зависит от K и эта зависимость не является линейной. Поэтому при обработке спектра использована модель логарифмической зависимости ширины функции Гаусса (4). В результате применения метода взвешенной регуляризации Тихонова с минимально возможным параметром регуляризации [15] и метода коррекции параметров ядра интегрального уравнения [14], позволяющего находить ширины функций Гаусса в двойной свертке, определены функции распределения СТМП $P(H)$ (рис. 1) и получены зависимости $\Gamma_{G1}(H)$ и $\Gamma_{G2}(H)$ (рис. 3, б). Видно, что распределение $P(H)$ не имеет ложных локальных максимумов, которые наблюдаются при обработке стандартной функцией Фойгта. Найденные из $P(H)$ относительные интенсивности локальных составляющих

спектра с удовлетворительной точностью совпадают с кривыми P_K , рассчитанными по биномиальному распределению для $Z_1 = 8$ (рис. 2).

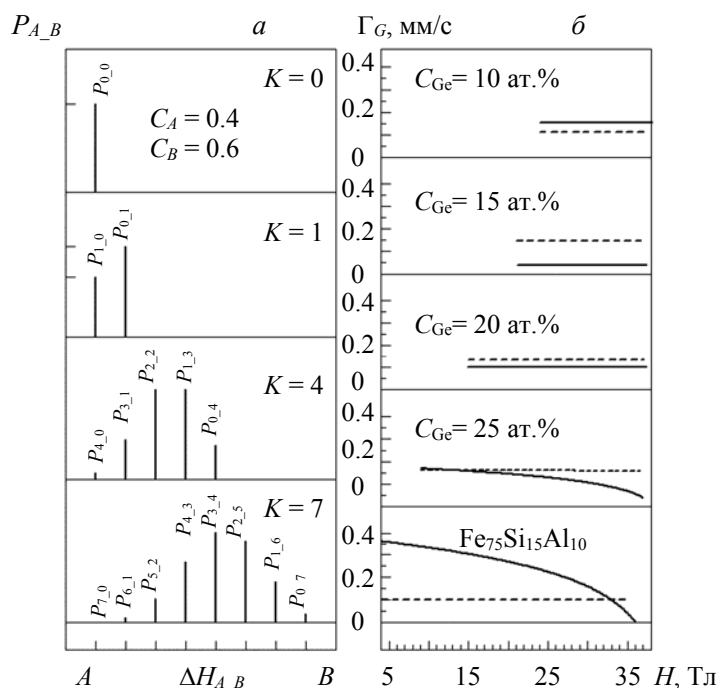


Рис. 3. Биномиальные вероятности $P_{A,B}$ возникновения локальных атомных конфигураций для двух сортов атомов примеси A и B в соотношении 0.4/0.6 с координационными числами $K = 0—8$, когда вклад в смещение сверхтонкого магнитного поля H от атомов сорта A отличается от вклада атомов сорта B на ΔH (a), и зависимости ширин Γ_{G1} (пунктир) и Γ_{G2} (сплошная линия) от сверхтонкого магнитного поля H (б)

Предложенный модифицированный алгоритм с введением второй функции Гаусса Γ_{G2} с зависимостью от H типа (4) и от масштабирующего коэффициента β (3) позволяет получать корректное физически обоснованное и удовлетворительное описание экспериментальных мёссбауэровских спектров как бинарных, так и многокомпонентных разупорядоченных пересыщенных твердых растворов. Для бинарных систем зависимость Γ_{G2} от H возникает при высокой концентрации второго компонента. Очевидно, это проявление локальных искажений ОЦК-структуры и симметрии окружения атома Fe. В многокомпонентных системах зависимость Γ_{G2} от H может усиливаться за счет дополнительного эффекта, если вклады атомов разного сорта в формирование СТМП на ядре атома Fe существенно различаются.

Закключение. Предложен алгоритм математической обработки мёссбауэровских спектров твердых растворов методом регуляризации Тихонова с использованием двойной свертки функции Лоренца и двух гауссианов и масштабирующего коэффициента проектирования сверхтонкого магнитного поля на шкалу скоростей экспериментального спектра. Показано, что для высококонцентрированных разупорядоченных пересыщенных твердых растворов применение простой свертки функций Лоренца и Гаусса в ядре интегрального уравнения не позволяет получать корректно разрешенные функции распределения сверхтонкого магнитного поля, приводит к избыточному количеству локальных максимумов и проблеме их идентификации. Использование двойной свертки приводит к тому, что количество локальных максимумов на функции распределения сверхтонкого магнитного поля и их относительные интенсивности полностью соответствуют рассчитанным по биномиальному распределению вероятностям локальных атомных конфигураций с K атомами примеси в ближайшем атомном окружении для объемно-центрированной кристаллической решетки с координационным числом $Z = 8$. Обнаружена зависимость ширины функции Гаусса Γ_{G2} от сверхтонкого магнитного поля как для бинарного $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$, так и для трехкомпонентного $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ разупорядоченных пересы-

щенных твердых растворов, которая может быть следствием проявления локальных искажений объемно-центрированной кристаллической структуры и симметрии окружения атома Fe. На примерах пересыщенных разупорядоченных твердых растворов $\text{Fe}_{100-x}\text{Ge}_x$ ($x = 10\text{—}25$ ат.%) и $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{15}\text{Al}_{10}$ показано, что алгоритм позволяет проводить более корректную обработку спектров разупорядоченных пересыщенных бинарных и многокомпонентных систем.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (№ ББ_2021_121030100003-7).

- [1] **В. С. Русаков.** Мессбауэровская спектроскопия локально неоднородных систем, Алматы, ИЯФ НЯЦ РК (2000)
- [2] **В. С. Литвинов, С. Д. Каракишев, В. В. Овчинников.** Ядерная гамма-резонансная спектроскопия сплавов, Москва, Металлургия (1982)
- [3] **Г. Н. Коныгин, О. М. Немцова, В. Е. Порсев.** Журн. прикл. спектр., **86**, № 3 (2019) 374—381 [G. N. Konygin, O. M. Nemtsova, V. E. Porsev. J. Appl. Spectr., **86** (2019) 409—415], doi: 10.1007/s10812-019-00834-0
- [4] **В. П. Гладков, С. С. Мартыненко, В. И. Петров.** Журн. прикл. спектр., **78**, № 2 (2011) 316—320 [V. P. Gladkov, S. S. Martynenko, V. I. Petrov. J. Appl. Spectr., **78** (2011) 296—300], doi: 10.1007/s10812-011-9462-5
- [5] **В. П. Гладков, В. А. Кощеев, А. Х. Кусков, В. И. Петров.** Журн. прикл. спектр., **71**, № 5 (2004) 668—671 [V. P. Gladkov, V. A. Kascheev, A. H. Kouskov, V. I. Petrov. J. Appl. Spectr., **71** (2004) 731—735], doi: 10.1023/B:JAPS.0000049636.15453.0c
- [6] **М. А. Чуев.** Докл. РАН, **438**, № 6 (2011) 747—751
- [7] **G. N. Konygin, E. P. Yelsukov, V. E. Porsev.** J. Magn. Magn. Mater., **288** (2005) 27—36, doi: 10.1016/j.jmmm.2004.07.052
- [8] **Г. Н. Коныгин, Е. П. Елсуков, В. Е. Порсев.** ФММ, **96**, № 3 (2003) 59—66
- [9] **K. Lagarec, D. G. Rancourt.** NIMB, **129** (1997) 266—280
- [10] **А. Ф. Верлань, В. С. Сизиков.** Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы, Киев, Наукова думка (1986)
- [11] **Y. Gao, L. Xiao, B. Wu.** J. Pet. Sci. Eng., **194** (2020) 107508, doi: 10.1016/j.petrol.2020.107508
- [12] **J. Cheng, B. Hofmann, S. Lu.** J. Comput. Appl. Math., **265** (2014) 110—119, doi: 10.1016/j.cam.2013.09.035
- [13] **S. Mohammady, M. R. Eslahchi.** J. Comput. Appl. Math., **371** (2020) 112677, doi: 10.1016/j.cam.2019.112677
- [14] **О. М. Немцова, Г. Н. Коныгин.** Программа обработки мессбауэровских спектров методом регуляризации Тихонова с коррекцией параметров сверхтонкого взаимодействия, св. гос. рег. ПрЭВМ № 2020667880, Роспатент (2020)
- [15] **О. М. Немцова, Г. Н. Коныгин, В. Е. Порсев.** Журн. прикл. спектр., **88**, № 2 (2021) 315—324 [O. M. Nemtsova, G. N. Konygin, V. E. Porsev. J. Appl. Spectr., **88** (2021) 373—381], doi: 10.1007/s10812-021-01185-5
- [16] **K. Pearson.** Phil. Mag. Ser., 5, **50**, N 302 (1900) 157—175
- [17] **Г. С. Жданов, А. С. Илюшин, С. В. Никитина.** Дифракционный и резонансный структурный анализ. Рентгено-, электроно-, нейтроно-мессбауэровская спектроскопия, Москва, Наука (1980)
- [18] **О. Кубашевский.** Диаграммы состояния двойных систем на основе железа, Москва, Металлургия (1985)