

УДК 519.6; 534.6

О НЕКОТОРЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ В СПЕКТРОСКОПИИ

Р. Г. ГАБРИЕЛЯН, А. Р. МКРТЧЯН, С. М. ШАГИНЯН,
А. А. МАРТИРОСЯН

Отдел прикладных проблем физики АН Арм. ССР

(Поступила в редакцию 25 мая 1982 г.)

Метод обратной задачи применен к решению некоторых задач спектроскопии. Этим методом могут быть найдены причины неоднородного уширения резонансных спектров поглощения. Например, в гамма-акустической спектроскопии на основе экспериментального спектра поглощения можно определить форму и параметры внешних периодических низкочастотных возмущений. С математической точки зрения задача оказывается некорректной, что преодолевается методом регуляризации Тихонова. Предложен также метод определения среднеквадратичных смещений мёссбауэровских изотопов в белках, которые дают представление о динамическом поведении этих биологических систем.

1. Некорректные обратные задачи

а. Постановка задачи

Известно [1—7], что форма линии поглощения в спектроскопии чувствительна к существующим в исследуемом образце разного рода неоднородностям и внешним возмущениям. В этих задачах обычно задается возможная модель возмущений и неоднородностей и методом последовательного анализа проводится сравнение расчетных данных с экспериментальными результатами. Однако очень часто возникает необходимость восстановления параметров и формы возмущения с помощью существующих спектров поглощения, что приводит к изменению самой формы линии поглощения, т. е. появляется необходимость решения обратной задачи.

Ниже рассматриваются несколько типичных физических задач в гамма-резонансной спектроскопии и радиоспектроскопии (ЭПР и ЯМР), где с помощью решения обратных задач получают возможность исследовать внешние возмущения и неоднородности.

1. Если в мёссбауэровском образце возбуждены периодические низкочастотные колебания с частотой $\Omega \ll \Gamma_0$ (Ω — частота звука, Γ_0 — ширина возбужденного ядерного спинового уровня), то форма линии поглощения сильно меняется; она имеет вид [1—4]

$$F(v_1) = \frac{1}{T} \int_0^T \frac{dt}{\left(\frac{v_1 - v_2(t)}{\hbar \Gamma / 2} \right)^2 + 1}, \quad (1)$$

где $\hbar$ — приведенная длина волны γ -кванта, T — период внешних периодических возмущений, v_1 — скорость источника, $v_2(t)$ — скорость поглопителя в поле звуковой волны, $\Gamma = 2\Gamma_0$.

Нашей целью является нахождение $v_2(t)$ по известным точкам экспериментального спектра поглощения $F(v_1)$. Непосредственное решение уравнения (1) не представляется возможным, однако после замены переменной

$$\frac{v_2(t)}{\hbar\Gamma/2} = s, \quad \frac{dt}{T} = \psi(s) ds$$

нелинейное относительно $v_2(t)$ уравнение (1) становится линейным относительно $\varphi(s)$:

$$F(x) = \int_{s_0}^{s_1} \frac{\psi(s) ds}{(x-s)^2+1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi(s) ds}{(x-s)^2+1} = \int_{-\infty}^{\infty} K(x-s) \varphi(s) ds, \quad (2)$$

где

$$x = \frac{v_1}{\hbar\Gamma/2}, \quad s_0 = \frac{\min v_2(t)}{\hbar\Gamma/2}, \quad s_1 = \frac{\max v_2(t)}{\hbar\Gamma/2},$$

$$K(x-s) = \frac{1}{1+(x-s)^2}, \quad \varphi(s) = \begin{cases} \psi(s), & s_0 < s < s_1 \\ 0, & s < s_0, s > s_1. \end{cases}$$

Таким образом, задача определения закона возбуждения (т. е. $v_2(t)$) сводится к нахождению распределения скоростей $\varphi(s)$. Фактически определение вида внешних возмущений сводится к решению линейного интегрального уравнения (2) типа свертки, где ядро имеет лоренцевскую форму (решение уравнения (2) приводится ниже в пункте 6).

Знание функции $\psi(s)$ эквивалентно знанию $v_2(t)$, так как

$$\frac{t}{T} = \int_0^s \psi(s) ds = f(s), \quad s = f^{-1}\left(\frac{t}{T}\right) = \frac{v_2(t)}{\hbar\Gamma/2}. \quad (3)$$

Вышесказанное справедливо тогда, когда в области $[0, T]$ $v_2(t)$ является монотонной или симметричной, состоящей из двух монотонных частей, функцией. Для произвольного $v_2(t)$ интервал $[0, T]$ необходимо разбить на области $[t_k, t_{k+1}]$, $k = 1, 2, \dots, n$, в которых функция $v_2(t)$ монотонна. В этом случае для $F(x)$ имеем

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{dt}{\left(x - \frac{v_2(t)}{\hbar\Gamma/2}\right)^2 + 1} = \sum_{k=1}^n (-1)^k \int_{s_{0k}}^{s_{1k}} \frac{\varphi_k(s) ds}{(x-s)^2+1} = \\ &= \sum_{k=1}^n (-1)^k \int_{s_0}^{s_1} \frac{\Phi_k(s) ds}{(x-s)^2+1} = \int_{s_0}^{s_1} \frac{\psi(s) ds}{(x-s)^2+1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi(s) ds}{(x-s)^2+1}, \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\psi(s) = \sum_{k=1}^n (-1)^k \Phi_k(s), \quad s_0 = \min s_{0k}, \quad s_1 = \max s_{1k}.$$

Фактически в произвольном случае можно найти лишь некоторую функцию $\bar{v}(t)$ (с функцией распределения скоростей $\sum_k (-1)^k \Phi_k(s)$),

которой соответствует та же самая функция $F(x)$, что и истинной $v_2(t)$. И здесь мы получили линейное интегральное уравнение (4) типа свертки.

2. В эксперименте из-за ряда случайных причин измеряемая форма линии $F(x)$ почти всегда существенно отличается от истинной формы $\varphi(x)$ (так называемый «аппаратурный эффект»). При этом она дается выражением [5]

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x-s) \varphi(s) ds, \quad (5)$$

где x — отклонение от резонансной энергии в единицах ширины, $\varphi(s)$ — истинная форма линии, $K(x-s)$ — случайная функция распределения,

$$K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \quad (6)$$

где σ — дисперсия (случайное уширение).

В этом случае для нахождения $\varphi(s)$ также имеем линейное интегральное уравнение первого рода типа свертки с ядром гауссовской формы.

3. В твердых телах уширение линии в основном обусловлено спин-спиновым взаимодействием (однородное уширение). Известно, что при этом форма линии может быть записана в виде [6]

$$g_0(\omega) = \frac{2 T_2}{1 + T_2^2 (\omega - \omega_0)^2}. \quad (7)$$

где ω_0 — резонансная частота, T_2 — время спин-спиновой релаксации.

Однако наряду со спин-спиновым взаимодействием существенный (а иногда и основной) вклад в уширение линии вносят и другие эффекты. Так, очень часто уширение обусловлено неоднородными уширениями. Рассмотрим некоторые примеры неоднородного уширения [6].

Неоднородное уширение формы линии может быть вызвано неоднородностью внешнего магнитного поля в объеме образца. В этом случае наблюдаемая форма линии $F(\omega)$ имеет вид [6]

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega') g_0(\omega - \omega') d\omega', \quad (8)$$

где $\varphi(\omega)$ есть функция распределения спинов по значениям резонансной частоты, $g_0(\omega)$ — однородная форма.

В принципе, рассмотренному случаю аналогична и ситуация, когда внешнее магнитное поле практически однородно в объеме образца, но парамагнитные центры ориентированы по-разному относительно внешнего магнитного поля, и g -факторы образца анизотропны. Тогда функция $\varphi(\omega)$ в выражении (8) отражает распределение спинов по резонансным частотам, которое возникает из-за различной ориентации парамагнитных центров.

Таким образом, здесь определение функции $\varphi(\omega)$ даст представление о неоднородностях внешнего магнитного поля и об анизотропии g -фактора.

Как видно из вышеприведенных примеров, определение возмущений из экспериментальных спектров поглощения сводится к решению линейных интегральных уравнений первого рода с разными ядрами. Ниже приводится метод регуляризации как один из возможных способов решения таких уравнений.

6. Метод регуляризации

Рассмотрим линейное интегральное уравнение первого рода типа свертки

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(s) K(x-s) ds = \hat{S}\varphi, \quad (9)$$

где $K(x)$ — ядро, $F(x)$ — известная функция, $\varphi(s)$ — искомая функция, $\hat{S}$ — линейный интегральный оператор.

Используя теорему о свертке, из уравнения (9) можно получить выражение для искомой функции:

$$\varphi(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{F}(p)}{\bar{K}(p)} e^{-ips} dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\varphi}(p) e^{-ips} dp, \quad (10)$$

где $\bar{F}(p)$, $\bar{K}(p)$ и $\bar{\varphi}(p)$ — фурье-образы функций $F(x)$, $K(x)$ и $\varphi(x)$, например

$$\bar{F}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x) e^{ipx} dx.$$

Из выражения (10) видно, что необходимым и достаточным условием существования такого решения является условие

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\bar{F}(p)}{\bar{K}(p)} \right|^2 dp < +\infty.$$

Если функция $\bar{K}(p)$ отлична от нуля, то решение $\varphi(s)$ к тому же является единственным. Действительно, если $\varphi_1(s)$ и $\varphi_2(s)$ — два решения уравнения (9), то

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x-s) (\varphi_1(s) - \varphi_2(s)) ds = 0.$$

После преобразования Фурье мы имеем следующее соотношение

$$(\bar{\varphi}_1(p) - \bar{\varphi}_2(p)) \bar{K}(p) = 0.$$

Так как $\bar{K}(p) \neq 0$, то $\bar{\varphi}_1(p) = \bar{\varphi}_2(p)$ и, следовательно, $\varphi_1(s) = \varphi_2(s)$, т. е. решение единственное.

Решение уравнения (9) обладает сильной неустойчивостью, т. е. сколь угодно малым изменениям $F(x)$ могут соответствовать сколь угодно большие изменения решения $\varphi(s)$, если норма обратного оператора $\|S^{-1}\|$ стремится к бесконечности (т. е. $\bar{K}(p) \rightarrow 0$ при $p \rightarrow \infty$). Отсюда возни-

кают характерные трудности при приближенном решении подобных уравнений в том случае, когда свободные члены $F(x)$ заданы приближенно, пусть даже с высокой точностью.

Общую схему построения приближенных решений линейных интегральных уравнений (9), обладающих неограниченным обратным оператором $\hat{S}^{-1}$, можно найти в [7]. Приближенное решение имеет вид $\varphi_\alpha = R(F_\epsilon, \alpha)$, который получен с помощью регуляризирующего оператора $R(F, \alpha)$, где $\alpha = \alpha(\epsilon)$ называется параметром регуляризации, F_ϵ — заданная приближенная функция (с погрешностью ϵ). Это решение называется регуляризованным решением уравнения (9). Если известно, что отклонение функции $F(x)$ удовлетворяет условию $\rho(F(x), F_\epsilon(x)) \leq \epsilon$, то значение α можно выбрать так, чтобы при $\epsilon \rightarrow 0$ регуляризованное решение $\varphi_\alpha(s)$ стремилось к точному решению $\varphi_T(s)$ (т. е. $\rho(\varphi_T, \varphi_\alpha) \rightarrow 0$). Это и оправдывает взятие в качестве приближенного решения уравнения (9) регуляризованного решения φ_α .

Для нахождения регуляризованного решения уравнения (9) используется вариационный принцип, т. е. в качестве приближенного решения $\varphi_\alpha(s)$ берется то решение, которое минимизирует неотрицательный функционал

$$M[\varphi] = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{S}\varphi - F_\epsilon(x))^2 dx + \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\varphi}{ds}\right)^2 ds. \quad (11)$$

Из условия минимума функционала ($\delta M = 0$) находим

$$\begin{aligned} \delta M[\varphi] &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} K(x-s') \varphi(s') ds' - F_\epsilon(x) \right\} \int_{-\infty}^{\infty} K(x-s) \delta\varphi(s) ds + \\ &+ 2\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varphi}{ds} \frac{d\delta\varphi}{ds} ds = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} K(x-s') \varphi(s') ds' - F_\epsilon(x) \right\} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} K(x-s) \delta\varphi(s) ds + 2\alpha \frac{d\varphi}{ds} \delta\varphi \Big|_{-\infty}^{\infty} - 2\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\varphi}{ds^2} \delta\varphi(s) ds = 0. \end{aligned}$$

Если выполняются условия $\varphi(\pm\infty) = 0$ или $\varphi'(\pm\infty) = 0$, то для $\varphi_\alpha(s)$ получаем уравнение

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_\alpha(s') ds' \int_{-\infty}^{\infty} K(x-s) K(x-s') dx - \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} F_\epsilon(x) K(x-s) dx - \alpha \frac{d^2\varphi_\alpha}{ds^2} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Рассмотрим теперь частные случаи ядра.

а) $K(x) = \frac{1/\pi}{1+x^2}$.

В этом случае выражение (12) упрощается:

$$\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi_{\alpha}(s') ds'}{(s'-s)^2+4} - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_{\alpha}(x) dx}{1+(x-s)^2} - \alpha \frac{d^2 \varphi_{\alpha}}{ds^2} = 0. \quad (13)$$

Для решения этого уравнения умножим его на $\exp(-ips)$ и проинтегрируем по s :

$$e^{-2|p|} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\alpha}(s) e^{-ips} ds - e^{-|p|} \int_{-\infty}^{\infty} F_{\alpha}(x) e^{-ipx} dx + \\ + \alpha p^2 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\alpha}(s) e^{-ips} ds = 0$$

или

$$(e^{-2|p|} + \alpha p^2) \bar{\varphi}_{\alpha}(p) = \bar{F}_{\alpha}(p) e^{-|p|}.$$

Отсюда для $\varphi_{\alpha}(s)$ окончательно имеем

$$\varphi_{\alpha}(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{F}_{\alpha}(p) e^{-ips} e^{-|p|}}{e^{-2|p|} + \alpha p^2} dp. \quad (14)$$

Итак, выражение (14) представляет собой приближенное регуляризованное решение уравнения (9). Естественно, при $\alpha = 0$ оно совпадает с точным решением (10).

$$б) K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right).$$

В этом случае, используя соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x-s) K(x-s') dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi\sigma}} e^{-\frac{(s-s')^2}{4\sigma^2}},$$

перепишем уравнение (12) в виде

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\alpha}(s') e^{-\frac{(s-s')^2}{4\sigma^2}} ds' - \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} F_{\alpha}(x) e^{-\frac{(x-s)^2}{2\sigma^2}} dx - \alpha \frac{d^2 \varphi_{\alpha}}{ds^2} = 0.$$

Умножим это уравнение на $\exp(-ips)$ и проинтегрируем по s :

$$(e^{-p^2\sigma^2} + \alpha p^2) \bar{\varphi}_{\alpha}(p) = \bar{F}_{\alpha}(p) e^{-\frac{p^2\sigma^2}{2}}.$$

Отсюда для $\varphi_{\alpha}(s)$ имеем выражение

$$\varphi_{\alpha}(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{p^2\sigma^2}{2}} \bar{F}_{\alpha}(p)}{e^{-p^2\sigma^2} + \alpha p^2} e^{-ips} dp, \quad (15)$$

которое представляет собой решение уравнения (5), т. е. является истинной формой линии для данной задачи.

в. Определение формы и параметров низкочастотного возбуждения методом обратной задачи

Применим вышеизложенную процедуру вычисления $\varphi_a(s)$ к конкретному примеру. Определим форму (временную зависимость) и параметры низкочастотного возбуждения на основе экспериментального спектра поглощения $F(x)$ [2].

Запишем формулу (14) для четной функции $F(x)$:

$$\varphi_a(s) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\bar{F}(p) e^{-p}}{e^{-2p} + \alpha p^2} \cos ps \, dp, \quad (16)$$

где

$$\bar{F}(p) = \int_0^{\infty} F(x) \cos px \, dx, \quad F(x) = \frac{1 - F_{\text{экс}}(x)}{f}, \quad (17)$$

$F_{\text{экс}}(x)$ — форма линии экспериментального спектра пропускания, f — фактор Мёссбауэра.

Для вычисления интегралов (16) и (17) нами был применен метод Филона [8], который развит для интегралов Фурье, суть которого заключается в следующем. В (17) область интегрирования $[0, x_0]$, где $F(x) \neq 0$, разбивается на $2n$ интервала с равными длинами $h = x_0/2n$ и вычисляется приближенное значение интеграла (17) согласно выражению

$$\bar{F}(p) \approx \gamma_1 h F(x_0) \sin p x_0 + \gamma_2 h S'_{2n} + \gamma_3 h S'_{2n}, \quad (18)$$

где

$$S'_{2n} = \sum_{m=0}^n F(2mh) \cos 2pmh - \frac{F(0)}{2} - \frac{F(x_0)}{2} \cos p x_0,$$

$$S'_{2n} = \sum_{m=1}^n F((2m-1)h) \cos p(2m-1)h,$$

$$\gamma_1 = \frac{1}{\vartheta} + \frac{\sin 2\vartheta}{2\vartheta^2} - \frac{2\sin^2 \vartheta}{\vartheta^3}, \quad \gamma_2 = 2 \left[\frac{1 + \cos^2 \vartheta}{\vartheta^2} - \frac{\sin 2\vartheta}{\vartheta^3} \right],$$

$$\gamma_3 = 4 \left[\frac{\sin \vartheta}{\vartheta^3} - \frac{\cos \vartheta}{\vartheta^2} \right], \quad \vartheta = hp.$$

Полученные значения $\bar{F}(p)$ в дальнейшем подставляем в выражение (16) и вычисляем этот интеграл также методом Филона при разных значениях параметра α . Выбор значений α осуществляется, исходя из условия $\alpha(\varepsilon) \leq \varepsilon$ [9, 10], где ε — ошибка эксперимента.

Для проверки изложенного метода вычисления $\varphi_a(s)$ и, следовательно, $s = v(t)/\lambda\Gamma/2$ используем экспериментальные результаты мёссбауэровских спектров, приведенные в работах [2, 3]. Характерные мёссбауэровские спектры поглощения для двух типов внешнего возбуждения приведены на рис. 1а и 2а. Функции $\varphi(s)$ находятся подстановкой значений $F(x)$ в выражения (16) и (17). Для определения конечной формы $\psi(s)$ необходимо найти S_0 и S_1 .

На рис. 1б и 2б приведены функции распределения скоростей $\psi(s)$ для двух значений α . В первом случае в качестве s_0 и s_1 выбраны такие значения s , при которых функция $\psi(s)$ принимает максимальное значение

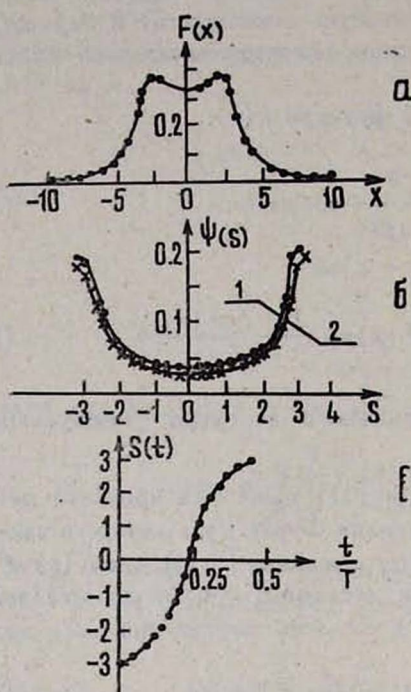


Рис. 1. а) Форма линии поглощения $F(x)$; б) функция распределения скоростей $\psi(s)$: 1— $\alpha=10^{-3}$; 2— $\alpha=5 \cdot 10^{-3}$; в) скорость движения поглотителя $s(t)$ (синусоидальное движение).

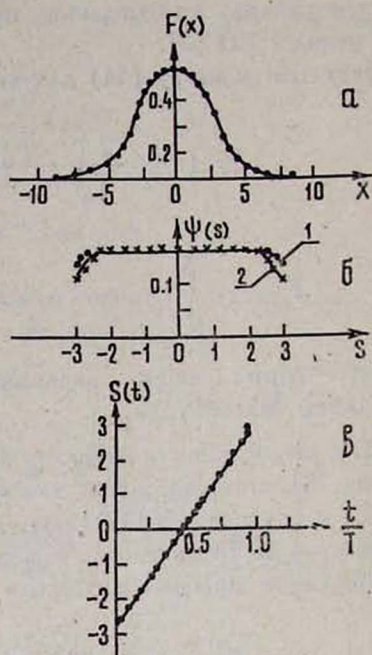


Рис. 2. а) Форма линии поглощения $F(x)$; б) функция распределения скоростей $\psi(s)$: 1— $\alpha=10^{-3}$; 2— $\alpha=5 \cdot 10^{-3}$; в) скорость движения поглотителя $s(t)$ (параболическое движение).

ние и затем быстро падает до нуля. Во втором случае s_0 и s_1 выбраны как средние значения интервала s , где $\psi(s)$ падает (см. рис. 2б). Можно показать, что эти значения в данном случае удовлетворяют условию $s_1 = -s_0 = 1/2\psi(0)$.

Используя зависимость $\psi(s)$ от s и выражения (3), можно легко определить временные зависимости скорости движения поглотителя (см. рис. 1в и 2в). Скорости $v_2(t)$, полученные этим методом, хорошо согласуются со значениями $v_2(t)$, использованными в эксперименте [2].

2. Корректная обратная задача в биофизике

В последнее время появился интерес к изучению с помощью эффекта Мёссбауэра динамики биологических систем для железосодержащих белков [11—13]. Обычно экспериментальные данные сравниваются с теоретическими значениями, полученными с помощью выражения для формы линии поглощения:

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -i(\omega - \omega_0)t - \frac{\Gamma}{2} |t| - \frac{\langle x^2(t) \rangle}{2\hbar^2} \right\} dt, \quad (19)$$

где $\langle x^2(t) \rangle$ — среднеквадратичное смещение мёссбауэровского ядра в момент времени t при данной температуре.

До сих пор для сравнения наблюдаемых величин с теорией рассматривали разные модели движения ядра и, находя $\langle x^2(t) \rangle$, вычисляли форму линии поглощения $F(\omega)$.

Можно однако непосредственно найти $\langle x^2(t) \rangle$, зная экспериментальные точки $F(\omega)$. Для этого необходимо умножить обе стороны выражения (19) на $\exp(i(\omega - \omega_0)t)$ и проинтегрировать по ω . В результате получим

$$\frac{\langle x^2(t) \rangle}{2\kappa^2} = -\ln \frac{2}{\Gamma} e^{\frac{\Gamma}{2}t} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i(\omega - \omega_0)t} d\omega = -\ln e^{\frac{\Gamma}{2}t} \int_{-\infty}^{\infty} F(x) e^{ix\tau} dx, \quad (20)$$

$$\text{где } \tau = \frac{\Gamma}{2} t, x = \frac{\omega - \omega_0}{\Gamma/2}.$$

В качестве примера рассмотрим задачу о диффузионном уширении формы линии $F(x)$. Как известно [14], в твердых телах и жидкостях из-за диффузии атомов $F(x)$ уширяется, причем ширина линии становится равной

$$\Gamma_D = \Gamma + \frac{D}{\kappa^2}, \quad (21)$$

где D — коэффициент диффузии.

На рис. 3а приведены уширенные формы линии поглощения. Используя выражение (20), мы получаем зависимость величины

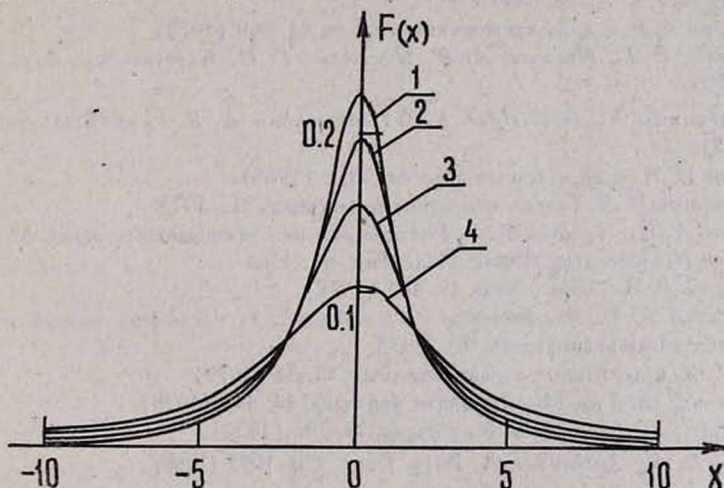
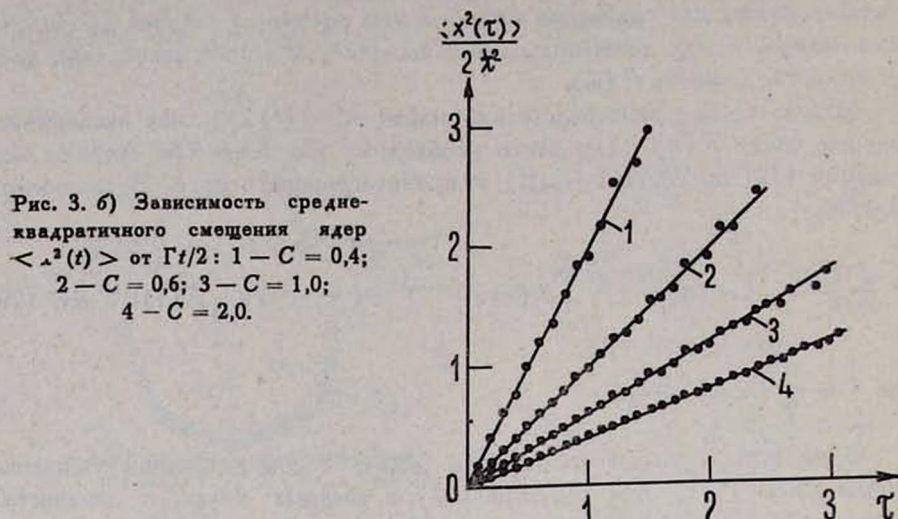


Рис. 3. а) Форма линии поглощения $F(x)$: 1 — $C = D/\Gamma\kappa^2 = 0,4$; 2 — $C = 0,6$; 3 — $C = 1,0$; 4 — $C = 2,0$.

$\frac{\langle x^2(t) \rangle}{2\kappa^2}$ от $\frac{\Gamma}{2} t$, которая приведена на рис. 3б. Как видно из этого

рисунка, мы действительно имеем дело с неограниченным диффузионным движением, так как $\langle x^2(t) \rangle$ есть линейная функция от t . С помощью этой кривой легко можно найти коэффициент диффузии D .

Этим же методом авторами решается задача о нахождении



$\langle x^2(t) \rangle / 2\kappa^2$ и для более сложного недиффузионного случая, описанно-
го в [11—13].

ЛИТЕРАТУРА

1. Мкртчян А. Р. и др. Труды Межд. конф. по мёссбауэровской спектроскопии, Бухарест, 1977, ч. 1, стр. 347.
2. Аракелян А. Р. и др. Акустический журнал, 24, 809 (1978).
3. Габриелян Р. Г., Мкртчян А. Р., Наджарян Г. Н. Акустический журнал, 26, 200 (1980).
4. Nadjaryan G. N., Gabrielyan R. G., Mkrtchyan A. R. Phys. Stat. Sol., 109, 131 (1982).
5. Тихонов А. Н. и др. Атомная энергия, 18, 6 (1965).
6. Александров И. В. Теория магнитной релаксации. М., 1975.
7. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М., 1979.
8. Снэддон И. Интегралы Фурье. Изд. Мир, М., 1965.
9. Винокуров В. А. ЖВМ и МФ, 12, 481 (1972).
10. Гончарский А. В., Черепашук А. М., Ягола А. Г. Численные методы решения обратных задач астрофизики. М., 1978.
11. Берг А. И. и др. Молекулярная биология, 13, 81 (1979).
12. Прусаков В. Е. и др. Молекулярная биология, 13, 443 (1979).
13. Шайтан К. В., Рубин А. Б. Биофизика, 25, 796 (1980).
14. Stngwi K. S., Sjölander A. Phys. Rev., 120, 1093 (1960).

ՍՊԵԿՏՐՈՍԿՈՊԻԱՅԻ ՄԻ ՔԱՆԻ ՀԱԿԱԴԱՐՁ ԽՆԴԻՐՆԵՐԻ ՄԱՍԻՆ

Ռ. Գ. ԳԱՐԲԵԼՅԱՆ, Ա. Ռ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Ս. Մ. ՇԱՀԻՆՅԱՆ,
Ա. Հ. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ

Սպեկտրոսկոպիայում կլանման սպեկտրների հիման վրա արտաքին գրգռումները և անհամասեռությունները որոշելու համար կիրառված է հակադարձ խնդրի մեթոդը: Տիկոնովի ազդվարիզացիոն մեթոդը թույլ է տալիս անալիտիկորեն լուծել ստացված գծային ինտեգրալ

Հավասարումները: Օգտագործելով մյուսբառերյան կլանման սպեկտրները, երկու դեպքերի համար ստացված են արտաքին ակուստիկ տատանումների տեսքերը և պարամետրերը: Առաջարկված է նոր մեթոդ սպիտակուցներում մյուսբառերյան իզոտոպների միջին քառակուսային շեղումները գտնելու համար, որը պատկերացում է տալիս այդ բիոլոգիական համակարգերի դինամիկ վարքի վերաբերյալ:

ON SOME INVERSE PROBLEMS IN SPECTROSCOPY

R. G. GABRIELIAN, A. R. MKRTCHIAN, S. M. SHAGINYAN,
A. H. MARTIROSYAN

The method of inverse problem was used for the determination of the form and parameters of external periodical low-frequency excitations and of the source of inhomogeneous broadening of resonance absorption spectra.