

ПРИЛОЖЕНИЕ К СТАТЬЕ М. Е. МАЦНЕВА И В. С. РУСАКОВА “СОЗДАНИЕ СЛОЖНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ МЁССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ НА ПРИМЕРЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СВЕРХТОНКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КВАЗИБИНАРНЫХ СПЛАВАХ СО СТРУКТУРОЙ ФАЗ ЛАВЕСА”

DOI: 10.31857/S0015323023700031, EDN: YZOSEM

Доступные значения кода размерности параметров из таблицы dimensions в SpectrRelax:
dimensions.S — площадь парциального спектра,
dimensions.δ — сдвиг парциального спектра,
dimensions.ε — квадрупольное смещение парциального спектра,
dimensions.H — значения сверхтонкого магнитного поля,
dimensions.Γ — ширина спектральной линии.

Текст модели “Laves” на языке программирования Lua:

```
local D2R = π/180
return {
  name = 'Laves',
  parameters = {
    { name = 'I', min = 0, initial = 1 },
    { name = '2I/1I', min = 0, initial = 1 },
    { name = '3I/1I', min = 0, initial = 1 },
    { name = '4I/1I', min = 0, initial = 1 },
    { name = 'I2/I1', min = 0, max = 4/3, initial = 2/3,
    var = false },
    { name = 'I3/I1', min = 0, initial = 1/3, var = false },
    { name = 'δ', dim = dimensions.δ },
    { name = 'e2qQ', dim = dimensions.ε },
    { name = 'φ' },
    { name = 'θ' },
    { name = 'His', initial = 200, dim = dimensions.H },
    { name = 'Han' },
    { name = 'Γ1', min = 0.1, max = 5, initial = 0.21 },
    { name = 'Γ2/Γ1', min = 0.01, initial = 1, var = false },
    { name = 'Γ3/Γ1', min = 0.01, initial = 1, var = false },
    { name = 'α', min = 0, max = 1, initial = 0 } },
  area = 'I',
  distribution = { 'δ', 'e2qQ', 'His' }, — указание параметров,
  распределения которых можно восстанавливать
  initialize = function (isotope)
```

```
local PV_sextet = createModel("PseudoVoigt sextet", isotope) — использование существующей в SpectrRelax модели
Зеемановского секстета с формой резонансных линий PseudoVoigt
local IsotopeData = getIsotopeData(isotope)
local K± = 1 / (IsotopeData.g_ex * IsotopeData.M)
return function (N, R, v, S, S2S1, S3S1, S4S1, S2S1, S3S1, δ, e2qQ, φ, θ, His, Han, Γ1, Γ2Γ1, Γ3Γ1, α)
  local sinφ, cosφ, sinθ, cosθ = sin(φ*D2R), cos(φ*D2R), sin(θ*D2R), cos(θ*D2R)
  local sin2φ, sin2θ, sin2θ = sinφ * cosφ * 2, sinθ * cosθ * 2, sinθ*sinθ
  local Fa = {
    sin2θ*sin2φ + sin2θ*cosφ + sin2θ*sinφ,
    sin2θ*sin2φ - sin2θ*cosφ - sin2θ*sinφ,
    -sin2θ*sin2φ - sin2θ*cosφ + sin2θ*sinφ,
    -sin2θ*sin2φ + sin2θ*cosφ - sin2θ*sinφ, }
  local S1 = S / (1 + S2S1 + S3S1 + S4S1) — вычисление площади первого из четырех секстетов
  local aan = Han/His
  local Hn, ε, a+, a- = {}, {}, {}, {}
  for i = 1, 4 do
    local Fs = 1 + Fa[i]*aan*2 + (Fa[i] + 2)*aan*aan
    local cos2α = 1/3 * (1 + (Fa[i] + 2)*(Fa[i] + 2)*aan + (3*Fa[i] + 2)*aan*aan) / Fs
    local sin2α = 1 - cos2α
    ε[i] = e2qQ*(cos2α*3 - 1)*0.125
    Hn[i] = His*sqrt(Fs)
    local a± = e2qQ * e2qQ * K± / Hn[i] * sin2α * 3 / 16
    a+[i] = a± * (cos2α + 0.125*sin2α)
    a-[i] = a± * (cos2α - 0.125*sin2α) end
  PV_sextet(N, R, v, S1, S2S1, S3S1, δ, ε[1], Hn[1], a+[1], a-[1], Γ1, Γ2Γ1, Γ3Γ1, 1, 1, 1, α)
  PV_sextet(N, R, v, S1S2S1, S2S1, S3S1, δ, ε[2], Hn[2], a+[2], a-[2], Γ1, Γ2Γ1, Γ3Γ1, 1, 1, 1, α)
  PV_sextet(N, R, v, S1S3S1, S2S1, S3S1, δ, ε[3], Hn[3], a+[3], a-[3], Γ1, Γ2Γ1, Γ3Γ1, 1, 1, 1, α)
  PV_sextet(N, R, v, S1S4S1, S2S1, S3S1, δ, ε[4], Hn[4], a+[4], a-[4], Γ1, Γ2Γ1, Γ3Γ1, 1, 1, 1, α) end
end }
```