

**Грушевская Е.А.<sup>1</sup>, Дмитриева Е.А.<sup>1</sup>, Лебедев И.А.<sup>1\*</sup>,  
Рябкин Ю.А.<sup>1</sup>, Темиралиев А.Т.<sup>1</sup>, Федосимова А.И.<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Физико-технический институт, Сатпаев Университет, г. Алматы, Казахстан

<sup>2</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан

\*e-mail: lebedev692007@yandex.ru

## **СПОСОБ УВЕЛИЧЕНИЯ ОТНОШЕНИЯ СИГНАЛ/ШУМ В ЭПР СПЕКТРОСКОПИИ**

Целью данного исследования было развитие методики повышения чувствительности спектроскопии, основанной на явлении электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), для анализа объектов, для которых исследования методом ЭПР имеют ограничения из-за малой концентрации в них парамагнитных центров. Исследования таких объектов затруднены ввиду низкого отношения сигнал/шум и как следствие низкой чувствительностью научной аппаратуры. В данной работе представлен способ увеличения отношения сигнал/шум в ЭПР спектроскопии. Способ может быть использован для увеличения чувствительности спектроскопических приборов, работающих в непрерывном режиме. Способ основан на том, что производится выделение полезного сигнала из шума путем сочетания двух действий: накопление отклонений от среднего значения спектра вдоль спектра (горизонтальное накопление) и усреднение спектра по времени (вертикальное накопление). Для анализа и количественной оценки величины накопленного отклонения значений анализируемой последовательности был использован модифицированный метод Херста, позволяющий выполнять поиск и анализ корреляций в спектрах различных типов. Представленный способ позволяет достигнуть того же отношения сигнал/шум, что и используемый в спектроскопии магнитного резонанса стандартный способ усреднения по времени (вертикального накопления спектра), за время, примерно на два порядка меньше.

**Ключевые слова:** ЭПР спектроскопия, чувствительность спектроскопических приборов, выделение сигнала, отношение сигнал/шум, накопление спектра, метод Херста.

Grushevskaya E.A.<sup>1</sup>, Dmitrieva E.A.<sup>1</sup>, Lebedev I.A.<sup>1\*</sup>,  
Ryabikin Yu.A.<sup>1</sup>, Temiraliev A.T.<sup>1</sup>, Fedosimova A.I.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Physics and Technology, Satbaev University, Almaty, Kazakhstan

<sup>2</sup>Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

\*e-mail: lebedev692007@yandex.ru

### **Method of increase of signal/noise ratio in EPR spectroscopy**

The purpose of the study was to develop a technique for increasing the sensitivity of spectroscopy based on the phenomenon of electron paramagnetic resonance (EPR) for the analysis of objects for which EPR studies have limitations because of the low concentration of paramagnetic centers in them. Studies of such objects are difficult because of the low signal-to-noise ratio and, as a consequence, the low sensitivity of scientific equipment. A method for increasing the signal-to-noise ratio in EPR spectroscopy is presented. The method can be used to increase the sensitivity of spectroscopic instruments operating in a continuous mode. The method is based on the fact that a useful signal is extracted from noise by combining two actions: the accumulation of deviations from the mean value of the spectrum along the spectrum (horizontal accumulation) and averaging the spectrum over time (vertical accumulation). To analyze and quantify the value of the accumulated deviation of the values of the analyzed sequence, a modified Hurst method was used, which makes it possible to search for and analyze correlations in

spectra of various types. The method achieves the same signal-to-noise ratio as the standard method of time averaging (vertical accumulation of the spectrum) used in magnetic resonance spectroscopy, for time period about two orders less.

**Key words:** EPR spectroscopy, sensitivity of spectroscopy instruments, signal extraction, signal-to-noise ratio, spectrum accumulation, Hurst method.

Грушевская Е.А.<sup>1</sup>, Дмитриева Е.А.<sup>1</sup>, Лебедев И.А.<sup>1\*</sup>,  
Рябкин Ю.А.<sup>1</sup>, Темиралиев А.Т.<sup>1</sup>, Федосимова А.И.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Физика-техникалық институты, Сәтбаев университеті, Алматы қ., Қазақстан

<sup>2</sup>Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан

\*e-mail: lebedev692007@yandex.ru

### Спектроскопиядағы ЭПР сигналының / шуыл қатынасын анықтау

Электрондық парамагниттік резонанс (ЭПР) құбылысы негізіндегі спектроскопия сезімталдығын ұлғайту әдісін жеңілдіру зерттеудің мақсаты. Парамагнит орталықтарындағы концентрациялардың аздығы ЭПР әдісімен зерттеуге шектеу қояды. Сигнал/шуыл қатынасының төмендігі мұндай объектілерді зерттеуге қиыншылық тудырады және ғылыми аспаптардың сезімталдығының төмен болуына себеп. ЭПР спектроскопиясында сигнал/шуыл қатынасын ұлғайту әдістемесі жұмыста ұсынылған. Әдістеме үздіксіз жұмыс істейтін спектроскопиялық құралдардың сезімталдығын арттыру үшін пайдалануы мүмкін. Әдістеме екі амалды біріктіре отырып, шуылдан пайдалы сигнал шығарылады: спектр бойынша өрташа мәнінен ауытқуды жинақтау (кәлденен жинақтау) және уақыт бойынша спектрді орташалау (тік жинақтау). Өртүрлі типтерде спектрдің корреляциясын іздеу, талдау үшін және ауытқудың сапалы мәнінің шамасының өзгерістерін бағалау үшін Хорст әдісі қолданылды. Магниттік-резонанстық спектроскопияда пайдаланатын уақыт бойынша орташа есептеу әдісі (спектрдің тік жинақтылығы) арқылы алынатын сигнал/шуыл қатынасын бұл әдіс арқылы шамамен екі реттен аз уақыттың аралығында қол жеткізуге болады.

**Түйін сөздер:** ЭПР спектроскопия, спектроскопиялық аспаптардың сезімталдығы, сигналды анықтау, сигнал/шуыл қатынасы, спектрді жинақтау, Хорст әдісі.

### Введение

Метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) находит широкое применение при изучении парамагнитных свойств наноструктурированных материалов в физике [1-3], химии [4-6], биологии [7-9] и в других областях науки и практико-технических приложениях [10-12]. По величинам g-фактора и спин-спинового расщепления в спектрах ЭПР можно определить структуру свободных радикалов, ион-радикалов и комплексов переходных металлов с органическими лигандами [13-14].

При этом существенное изменение свойств объекта может быть вызвано даже при малом изменении концентрации парамагнитных центров. Образование наноструктур приводит к существенному уменьшению парамагнитных центров за счет связи нескомпенсированных электронов, находящихся на внешних оболочках соседних атомов [15-19]. Исследования таких объектов затруднены ввиду низкого отношения сигнал/шум как следствие низкой чувствительностью научной аппаратуры [20].

Предлагаемый способ направлен на существенное увеличение отношения сигнал/шум при экспрессных измерениях спектра.

### Метод

В современных спектрометрах, работающих в непрерывном режиме, для реализации максимальной чувствительности часто используется способ усреднения по времени [21], теоретический анализ которого подробно рассмотрен в работе [22]. Назовем его условно способом накопления сигнала по вертикали, поскольку сигнал накапливается в каждом канале изменения спектра. Сущность этого способа заключается в проведении определенного числа идентичных измерений одного и того же спектра. Затем получаемые последовательности спектров складываются, сигналы магнитного резонанса при этом суммируются, а шум вследствие своей хаотичной природы частично усредняется. В случае белого шума при этом происходит увеличение отношения сигнал/шум в  $\sqrt{n}$  раз, где  $n$  – число записей в идентичных условиях

исходного спектра магнитного резонанса. Таким образом, чем большее число записей спектра производится, т.е. чем больше времени уходит на измерение, тем выше отношение сигнал/шум и, соответственно, чувствительность аппаратуры. Отсюда видно, что требования к повышению чувствительности аппаратуры таким способом и требования к экспрессности измерений находятся в противоречии. Поэтому в тех случаях, когда необходимо проведение экспрессных измерений, способ увеличения отношения сигнал/шум с помощью усреднения спектров по времени становится малоэффективным.

Техническим результатом предлагаемого способа является увеличение отношения сигнал/шум при сканировании спектра на спектрометрах, работающих в непрерывном режиме, с минимальной затратой времени. Сущность способа заключается в сочетании двух действий: накопление отклонений от среднего значения спектра вдоль спектра (горизонтальное накопление) и усреднение спектра по времени (вертикальное накопление). При этом сигналы магнитного резонанса накапливаются как по горизонтали, так и по вертикали, а шум, вследствие своей хаотичной природы, частично усредняется как при горизонтальном, так и при вертикальном накоплении.

В случае белого шума происходит увеличение отношения сигнал/шум в  $\sqrt{n} \frac{S}{t}$  раз, где  $S$  – площадь под кривой сигнала, а

$$t \approx \sqrt{\sum_{i=1}^k \frac{i}{k} \left(\frac{k-i}{k}\right)^{2(2H-1)}},$$

где  $k$  – полное число каналов изменения спектра,  $H$  – показатель скоррелированности (индекс Херста). В случае белого шума  $H=0,5$  [23].

Таким образом, предлагаемый способ обеспечивает уменьшение затрат времени на накопление спектра для получения требуемого отношения сигнал/шум в  $(S/t)^2$  раз по сравнению со стандартным способом накопления по времени.

### Результаты и обсуждение

Для понимания сущности предлагаемого метода, рассмотрим некий теоретический пример, в котором точно известны форма сигнала, шума, их отношение и т.д. Рассмотрим некоторый спектр  $P_i$ , который представляет собой в общем случае суперпозицию полезного сигнала и шума. Формально для теоретического примера

накопление сигнала вдоль спектра можно представить в виде величины  $X_m$  – накопленного отклонения от среднего

$$X_m = \sum_{i=1}^m (P_i - \langle P \rangle), \quad (1)$$

где  $m$  – число каналов, по которым проводится накопление отклонений от среднего значения спектра,  $1 \leq m \leq k$ ;  $P_i$  – значение спектра в  $i$ -том канале,  $1 \leq i \leq k$ ;  $\langle P \rangle = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k P_i$  – среднее значение спектра  $P$  на протяжении всего спектра ( $k$  каналов).

Выберем  $k=1024$  каналов, что характерно для большинства современных спектрометрических приборов. На выходе большинства стандартных приборов сигналы магнитного резонанса имеют вид производных от формы сигнала поглощения, которые чаще всего представляют собой функции Гаусса или Лоренца. Поэтому в качестве функции полезного сигнала  $C_i$  используем дифференциальную гауссову функцию с областью изменения значений  $[-1; 1]$ , с дисперсией  $\sigma = 200$  и средним значением  $i_0=512$ , что соответствует центру спектра при  $k=1024$  [24]:

$$C_i = -1,4 \frac{1,386(i-i_0)}{0,5\sigma} \exp \left\{ -0,693 \left( \frac{i-i_0}{0,5\sigma} \right)^2 \right\} \quad (2)$$

Для вычисления функции шума  $\Pi_i$  используем стандартную подпрограмму-функцию RNDM [25], задающую случайное число в интервале  $[0; 1]$ . Чтобы область изменения  $\Pi_i$  была  $[-1; 1]$ , т.е. соответствовала области изменения полезного сигнала, преобразуем эту функцию следующим образом:

$$\Pi_i = 2 \cdot \text{RNDM}(i) - 1, \quad (3)$$

где  $\text{RNDM}(i)$  – значение, заданное подпрограммой-функцией  $\text{RNDM}(i)$  в  $i$ -том канале.

Представим значения анализируемого теоретического спектра в  $i$ -том канале в виде суммы полезного сигнала и шума в следующем виде:

$$P_i = A \cdot C_i + B \cdot \Pi_i, \quad (4)$$

где  $A$  и  $B$  – некоторые коэффициенты, с помощью которых можно задавать любое начальное отношение сигнал/шум.

На рисунке 1а представлены значения анализируемого теоретического спектра  $P_i$  (4) с параметрами  $A=B=1$ , а на рисунке 1б – значения  $X_m$  для того же спектра после накопления вдоль спектра.

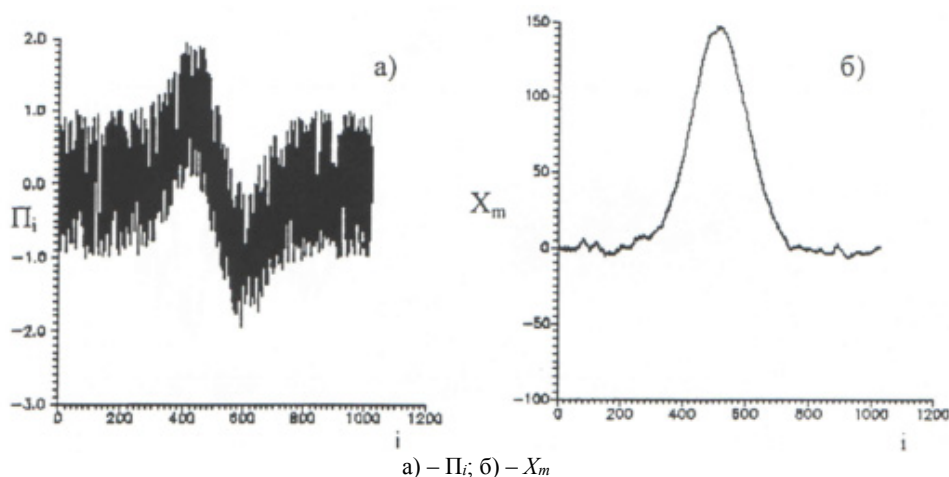


Рисунок 1 – Спектр  $\Pi_i$  с параметрами  $A=B=1$  и накопленное отклонение от среднего  $X_m$

Из рисунка 1 видно существенное увеличение отношения сигнал/шум в результате накопления спектра по предлагаемому способу. Пока нет сигнала ( $C_i=0$ ), вследствие хаотичности шума не происходит сколько-нибудь значительного регулярного накопления отклонений от среднего. Но ситуация существенно изменяется, как только  $C_i$  становится отличным от нуля на протяжении достаточно большого числа каналов. В этом случае происходит значительное накопление отклонений от среднего  $\langle \Pi \rangle$  за счет накопления сигнала. При этом, для положительных значений сигнала ( $C_i > 0$ ) накопленное отклонение от среднего возрастает, а для отрицательных ( $C_i < 0$ ) – уменьшается без учета шума на величину, равную  $\sum_{i=1}^n C_i$ . Таким образом, исходный дифференциальный сигнал в результате накопления по горизонтали получается в суммационной (интегральной) форме, т.е. в виде сигнала поглощения, что в ряде случаев представляет значительный интерес. При этом происходит существенное возрастание амплитуды сигнала относительно амплитуды шума.

В таблице 1 приведены значения отношения сигнал/шум ( $R=S/N$ ), где  $S$  – максимальная амплитуда полезного сигнала;  $N$  – дисперсия функции  $\Pi_i$ , [8]:

$$N = \left( \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (\Pi_i - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \Pi_j)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

в зависимости от числа проходов  $n$  для спектра (4) с параметрами  $A=B=1$ , накопленного предлагаемым способом. Для сравнения приведены значения сигнал/шум ( $R_1$ ) для того же

спектра, накопленного по стандартной методике, и отношение  $R/R_1$ .

Таблица 1 – Зависимость отношения сигнал/шум от числа измерений для значений спектра (4) с параметрами  $A=B=1$

$n$	$R_1$	$R$	$R/R_1$
1	1,74	36,61	21,01
4	3,34	68,71	20,57
9	5,07	87,52	17,27
16	6,79	105,48	15,54
100	17,12	247,77	14,47
10000	183,48	1878,45	10,23

Как видно из таблицы 1, в случае обычного усреднения по времени для  $n$  измерений происходит увеличение отношения сигнал/шум примерно в  $\sqrt{n}$  раз. Но если использовать предлагаемый способ, то это отношение увеличивается еще более, чем на порядок.

Таким образом, время измерений для получения одинакового отношения сигнал/шум уменьшается более, чем на два порядка по сравнению со стандартной методикой накопления по времени.

В таблице 2 приведены зависимости отношения  $R/R_1$  от параметра  $\sigma$ , входящего в уравнение (2) для последовательности (4) с параметрами  $A=B=1$ . При этом видно, что  $R$  прямо пропорционально  $\sigma$  (для  $k=\text{const}$ ), т.е. чем больше каналов занимает сигнал, тем больше отношение сигнал/шум. Экспериментально это означает, что для получения максимального отношения сигнал/шум спектры магнитного резонанса надо записывать, по возможности, при минимальной развертке магнитного поля.

**Таблица 2** – Зависимость отношения сигнал\шум от  $\sigma$  для спектра (4) с параметрами  $A=B=1$  (для одного прохождения)

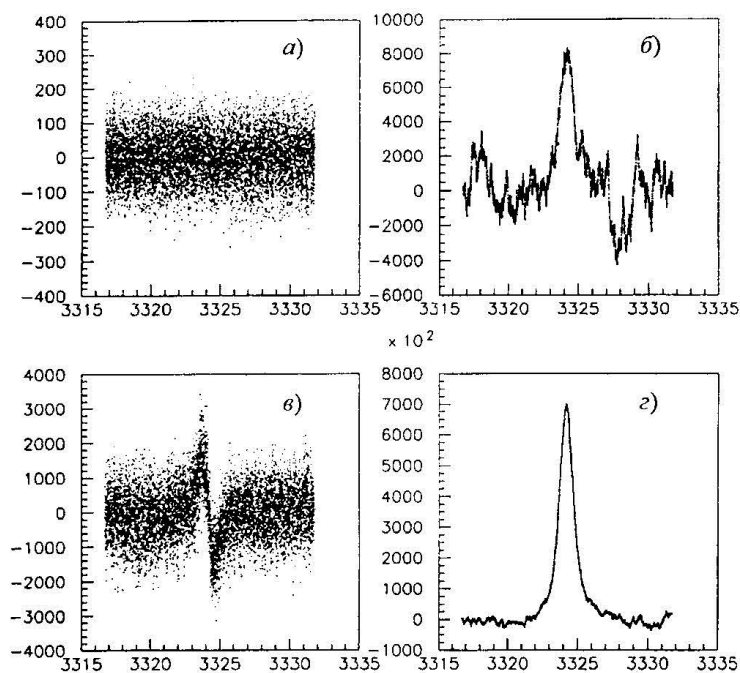
$\sigma$	$R$	$R/R_1$
150	21,01	15,75
200	36,61	21,01
250	45,77	26,25

Использование предлагаемого способа может быть особенно полезным, когда требуется существенное увеличение отношения сигнал\шум при экспрессных измерениях, а исходное отношение сигнал\шум очень мало.

На рисунке 2 представлен спектр третьей компоненты сверхтонкой структуры марганца, записанный на спектрометре ESR-300E при

следующих параметрах записи спектра: резонансное значение магнитного поля  $H_0=3409,95$  гс, амплитуда развертки магнитного поля  $H_p=100,1$  гс, амплитуда высокочастотной модуляции магнитного поля  $H_m=0,1$  гс, подводимая к резонатору микроволновая мощность  $P=15,9$  мВт, частота модуляции магнитного поля  $f_m=100$  кГц.

Как видно рисунка 2а сигнал практически не обнаруживается. Даже после 100 накоплений спектра по стандартной методике сигнал слабо различим на фоне шума (рисунок 2в). В то же время использование предлагаемого способа позволяет не только обнаружить местоположение полезного сигнала, но и проводить анализ выделенного сигнала (рис. 2б и 2г).



а) – исходный спектр; б) –  $X_m$  исходного спектра  
в) – исходный спектр после 100 накоплений по стандартной методике; г) –  $X_m$  исходного спектра после 100 накоплений

**Рисунок 2** – Спектр третьей компоненты сверхтонкой структуры марганца

### Заключение

Предложен способ увеличения отношения сигнал\шум в спектроскопии для приборов, работающих в непрерывном режиме, заключающийся в накоплении и усреднении спектра исследуемого материала по времени,

отличающийся тем, что перед усреднением по времени производят накопление отклонений текущих значений сигнала от среднего значения вдоль одного спектра.

*Работа поддержана грантом МОН РК №BR05236404.*

## Литература

- 1 Garifullin I.A. EPR study of superconductors // *J. low Temp. Phys.* – 2015. – Vol.178. – P.243-271.
- 2 Nadolinny V., Komarovskikh A., Palyanov Y. Incorporation of Large Impurity Atoms into the Diamond Crystal Lattice: EPR of Split-Vacancy Defects in Diamond // *Crystals* – 2017. – Vol.7. – Iss.8. – N.237.
- 3 Niklas J., Poluektov O.G. Charge Transfer Processes in OPV Materials as Revealed by EPR Spectroscopy // *Adv. En. Materials* – 2017. – Vol.7. – Iss.10 SI. – N1602226.
- 4 Roessler M.M., Salvadori E. Principles and applications of EPR spectroscopy in the chemical sciences // *Chem.Soc.Rev.* – 2018. – Vol.47. – N.8. – P.2534-2553.
- 5 Kemsley J. Actinide covalency measured by EPR // *Chem. Eng. News* – 2017. – Vol.95. – N.25. – P.8.
- 6 Olczyk P., Komosinska-Vassev K., Ramos P., Mencner L., Olczyk K., Pilawa B. Free Radical Scavenging Activity of Drops and Spray Containing Propolis-An EPR Examination // *Molecules* – 2017. – Vol.22. – Iss.1. – N.128.
- 7 Stefaniuk I., Wróbel D., Skręt A., Skręt-Magierło J., Góra T., Szczerba P. The Electron Paramagnetic Resonance in the study of tissue specimens // *Current Topics in Biophysics.* – 2014. – Vol.37. – P.23-28.
- 8 Hawkins C.L., Davies M.J. Detection and characterisation of radicals in biological materials using EPR methodology // *Biochimica et Biophysica Acta-General Subject* – 2014. – Vol.1849. – Iss.2 SI. – P.708-721.
- 9 El Mkami H., Norman D.G. EPR Distance Measurements in Deuterated Proteins // *Methods in Enzymology* – 2015. – Vol.564. – P. 125-152.
- 10 Guzzo P.L., Nobrega B.G., Obryk B. EPR spectroscopy in LiF:Mg,Cu,P thermoluminescent powder samples irradiated with high gamma doses // *J.Lumin.* – 2018. – Vol.198. – P.284-288.
- 11 Berliner L.J. The evolution of biomedical EPR (ESR) // *Biomedical Spectroscopy and Imaging* – 2016. – Vol.5. – Iss.1. – P. 5-26.
- 12 Marciniak A., Ciesielski B. EPR dosimetry in nails-A review // *App.Spec.Rev.* – 2016. – Vol.51. – Iss.1. – P.73-92.
- 13 Chumakova N.A., Ivanova T.A., Golubeva E.N. To the Precision of Measuring Concentrations of Nitroxide Radicals in Polymers by EPR Technique // *Appl.Mag.Res.* – 2018. – Vol.49. – Iss.5. – P. 511-522.
- 14 Andronenko S.I., Misra S.K. A Review of EPR Studies on Magnetization of Nanoparticles of Dilute Magnetic Semiconductors Doped by Transition-Metal Ions // *App.Mag.Res.* – 2015. – Vol.46. – Iss.6. – P.693-707.
- 15 Kausteklis J., Cevc P., Arcon D., Nasi L., Pontiroli D, Mazzani M., Ricco M. EPR study of nano-structured graphite // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol.84. – Iss.12. – N.125406.
- 16 Pivtsov A., Wessig M., Klovak V., Polarz S., Drescher M. Localization of Guest Molecules in Nanopores by Pulsed EPR Spectroscopy // *J. Phys. Chem. C* – 2018. – Vol.122. – Iss.10. – P. 5376-5384.
- 17 Savoyant A., Alnoor H., Bertaina S., Nur O., Willander M. EPR investigation of pure and Co-doped ZnO oriented nanocrystals // *Nanotechnology* – 2017. – Vol.28. – Iss.3. – N. 035705.
- 18 Guskos N. et al. EPR Study of nanocrystalline TiO<sub>2</sub> subjected to different modifications // *Rev. Adv. Mat. Sci.* – 2017. – Vol.52. – Iss.1-2. – P.14-17.
- 19 Nosenko V. et al. The Crystal Structure of Micro- and Nanopowders of ZnS Studied by EPR of Mn<sup>2+</sup> and XRD // *Nanoscale Research Lett.* – 2016. – Vol.11. – N.517.
- 20 Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса. – Новосибирск: НГУ, 2010. – 294 с.
- 21 Klein M.P., Barton G.W. Enhancement of signal-to-noise ratio by continuous averaging: application to magnetic resonance // *RSI.* – 1963. – Vol.34. – N.7. – P.754-759.
- 22 Ernst R.R. Sensitivity enhancement in magnetic resonance. I. Analysis of the method of time averaging // *RSI.* – 1965. – V.36. – N.12. – P. 1689-1695.
- 23 Feder J. *Fractals.* – New York: Plenum Press, 1988.
- 24 Пул Ч. Техника ЭПР-спектроскопии. – М.: Мир, 1972.
- 25 Brun R., Lienard D. CERN computer center program library long write-up. 1987. – 108 p.

## References

- 1 I.A. Garifullin, *J. low Temp. Phys.* 178, 243-271 (2015).
- 2 V. Nadolinny, A. Komarovskikh and Y. Palyanov, *Crystals* 7(8), 237 (2017). doi: 10.3390/cryst7080237
- 3 J. Niklas and O.G. Poluektov, *Adv. En. Materials* 7(10SI), 1602226 (2017). doi: 10.1002/aenm.201602226
- 4 M.M. Roessler and E. Salvadori, *Chem. Soc. Rev.* 47(8), 2534-2553 (2018).
- 5 J. Kemsley, *Chem. Eng. News* 95(25), 8-8 (2017).
- 6 P. Olczyk, K. Komosinska-Vassev, P. Ramos, L. Mencner, K. Olczyk, and B. Pilawa *Molecules* 22(1), 128 (2017). doi: 10.3390/molecules22010128.

- 7 Stefaniuk, D. Wróbel, A. Skręt, J. Skręt-Magierło, T. Góra, and P. Szczerba, *Current Topics in Biophysics*. 37, 23-28 (2014).
- 8 C.L. Hawkins and M.J. Davies, *Biochimica et Biophysica Acta-General Subject* 1849 (2S1), 708-721 (2014). doi: 10.1016/j.bbagen.2013.03.034.
- 9 H. El Mkami and D.G. Norman, *Methods in Enzymology*, 564, 125-152 (2015). doi: 10.1016/bs.mie.2015.05.027.
- 10 P.L. Guzzo, B.G. Nobrega and B. Obryk, *J. Lumin.* 198, 284-288 (2018). doi: 10.1016/j.jlumin.2018.02.048.
- 11 L.J. Berliner, *Biomedical Spectroscopy and Imaging* 5(1), 5-26 (2016). doi: 10.3233/BSI-150128.
- 12 Marciniak and B. Ciesielski, *App. Spec. Rev.* 51(1), 73-92 (2016). doi: 10.1080/05704928.2015.1101699.
- 13 N.A. Chumakova, T.A. Ivanova and E.N. Golubeva, *Appl. Mag. Res.* 49(5), 511-522 (2018).
- 14 S.I. Andronenko and S.K. Misra, *App. Mag. Res.* 46(6), 693-707 (2015). doi: 10.1007/s00723-015-0686-z.
- 15 J. Kausteklis, P. Cevc, D. Arcon, L. Nasi, D. Pontiroli, M. Mazzani and M. Ricco, *Phys. Rev. B.* 84(12), 125406 (2011).
- 16 Pivtsov, M. Wessig, V. Klovak, S. Polarz and M. Drescher, *J. Phys. Chem. C* 122(10), 5376-5384 (2018). doi: 10.1021/acs.jpcc.7b10758.
- 17 Savoyant, H. Alnoor, S. Bertaina, O. Nur and M. Willander, *Nanotechnology* 28(3), 035705, (2017). doi: 10.1088/1361-6528/28/3/035705.
- 18 N. Guskos et al. *Rev. Adv. Mat. Sci.* 52 (1-2), 14-17 (2017).
- 19 V. Nosenko et al. *Nanoscale Research Lett.* 11, 517 (2016). doi: 10.1186/s11671-016-1739-4
- 20 S.A. Dzyuba, *Osnovy magnitnogo rezonansa* (Novosibirsk, NGU, 2010). (in Russ).
- 21 M.P. Klein and G.W. Barton, *RSI* 7, 754-759 (1963).
- 22 R.R. Ernst, *RSI* 36, N12, 1689-1695 (1965).
- 23 J. Feder, *Fractals* (Plenum Press, New York, 1988).
- 24 Ch.Pul, *Tekhnika EPR-spektroskopii* (Mir, 1972), (in Russ).
- 25 Brun R., Lienard D. CERN computer center program library long write-up.