

ЦИФРОВА СИМУЛЯЦІЯ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОННОГО ПАРАМАГНІТНОГО РЕЗОНАНСУ

О.В. Татарин, В.Я Татарин^{1,2}, Б.В. Падляк^{2,3}

¹*Кафедра фотоніки, ІТРЕ, Національний університет "Львівська політехніка", вул. Бандери 12, Львів, 79013, e-mail vasyltataryn@gmail.com*

²*Інститут фізичної оптики, вул. Драгоманова 23, Львів, 79006, e-mail bohdan@mail.lviv.ua*

³*Division of Spectroscopy of Functional Materials, Institute of Physics, University of Zielona Góra, 4a Szafrana Str., 65-516 Zielona Góra, Poland. e-mail B.Padlyak@proton.if.uz.zgora.pl*

Сучасні спектрометри електронного парамагнітного резонансу (далі ЕПР) використовують для вивчення парамагнітних центрів (неспарених електронів) в речовинах. Їхнє застосування пов'язане з вивченням органічних вільних радикалів, комплексних іонів парамагнітних металів і фотозбудження триплетних станів [1].

Природньо, що разом з розширенням номенклатури речовин, що досліджуються, вдосконалюються і методи досліджень. Одним з таких нових методів дослідження електронного парамагнітного резонансу є цифрова симуляція спектрів ЕПР [2]. Основна увага при цьому приділяється розшифровці складних спектрів.

В даній роботі розглядаються питання розширення застосування цифрової симуляції спектрів для спрощення апаратної частини спектрометрів ЕПР. А саме досліджується можливість калібровки частоти надвисокочастотного тракту без використання реперних речовин, чи частотомірів.

Це дає можливість підвищити точність визначення параметрів спектру електронного парамагнітного резонансу, оскільки усувається одно з джерел похибок – неточність визначення робочої частоти опромінення зразка.

1. Poole Jr. C. P., Charles P. *Electron Spin Resonance*. Interscience Publication, Y. York, London, Sydney 1967.

2. Anders Lund, Masaru Shiotani, Shigetaka Shimada *Principles and Applications of ESR Spectroscopy* - © Springer Science+Business Media B.V. 2011.