

УДК 519.6; 535.37

Т.А. ПРОКОФЬЕВ, А.В. ИВАНЧЕНКО

Днепровский национальный университет имени Олеса Гончара

В.В. ГНАТУШЕНКО

Национальный технический университет “Днепровская политехника”

## АНАЛИТИЧЕСКИЙ И СИНТЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД В ПОСТРОЕНИИ МОДЕЛИ СИСТЕМЫ ИЗЛУЧАЮЩИХ ЦЕНТРОВ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ШИРОКИМИ СПЕКТРАМИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

*К настоящему моменту отсутствуют эффективные методики исследования систем излучающих центров люминесценции, хотя существуют способы, позволяющие выделять индивидуальные полосы для решения задач классификации излучающих центров по их положению в кристаллической решетке и выявления их поведения при изменении условий возбуждения люминесценции. В силу определенных обстоятельств далеко не все из них удобны в практическом применении и позволяют получать адекватные модели индивидуальных полос люминесценции при различных условиях проведения эксперимента. В данной работе предложена методика анализа системы излучающих центров люминесценции путем разложения на индивидуальные составляющие и построения их адекватных количественных моделей. Рассмотрено совместное использование аналитического и синтетического подходов. Первый направлен на анализ структуры системы, а второй позволяет найти ответы на вопросы, связанные со взаимодействием рассматриваемой системы с окружающей средой. Представлено математическое описание разработанных моделей, отражающих изменения количества центров свечения с определенным типом локального окружения относительно общего количества всех центров люминесценции при изменении условий возбуждения, что в свою очередь, позволяет получить информацию об изменениях структуры изучаемых материалов. Для выделения индивидуальных полос, сопоставляемых с излучением определенных типов центров люминесценции, использовано нормальное распределение. Учитывая то, что наличие различных фоновых или иных эффектов, обусловленных влиянием кристаллической решетки, не позволяет точно описывать индивидуальные полосы с помощью нормального распределения, для получения количественных моделей центров люминесценции при изменении условий возбуждения целесообразным является использование в качестве координат по оси абсцисс как шкалы энергии излучаемых фотонов, так и шкалы длин волн.*

*Ключевые слова:* система излучающих центров, спектры люминесценции, нормальное распределение, количественная модель, индивидуальные полосы люминесценции.

Т.А. ПРОКОФ'ЄВ, О.В. ІВАНЧЕНКО

Дніпровський національний університет імені Олеса Гончара

В.В. ГНАТУШЕНКО

Національний технічний університет “Дніпровська політехніка”

## АНАЛІТИЧНИЙ І СИНТЕТИЧНИЙ ПІДХІД У ПОБУДОВІ МОДЕЛІ СИСТЕМИ ВИПРОМІНЮВАЛЬНИХ ЦЕНТРІВ МОНОКРИСТАЛІЧНИХ З'ЄДНАНЬ З ШИРОКИМ СПЕКТРОМ ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ

*До теперішнього моменту відсутні методики дослідження систем випромінюючих центрів люмінесценції, хоча існують способи, що дозволяють виділяти індивідуальні смуги для вирішення задач класифікації випромінюючих центрів по їх положенню в кристалічній решітці і виявлення їх поведінки при зміні умов збудження люмінесценції. В силу певних обставин далеко не всі з них зручні в практичному застосуванні і дозволяють отримувати адекватні моделі індивідуальних смуг люмінесценції при різних умовах проведення експерименту. В даній роботі запропоновано методику аналізу системи випромінюючих центрів люмінесценції шляхом розкладання на індивідуальні складові і побудови їх адекватних кількісних моделей. Розглянуто спільне використання аналітичного та синтетичного підходів. Перший спрямований на аналіз структури системи, а другий дозволяє знайти відповіді на питання, пов'язані із взаємодією даної системи з навколишнім середовищем. Представлено математичний опис розроблених моделей, що*

відображають зміни кількості центрів свічення з певним типом локального оточення щодо загальної кількості всіх центрів люмінесценції при зміні умов збудження, що в свою чергу, дозволяє отримати інформацію про зміни структури досліджуваних матеріалів. Для виділення індивідуальних смуг, які відповідають випромінюванню певних типів центрів люмінесценції використано нормальний розподіл. З огляду на те, що наявність різних фонових чи інших ефектів, обумовлених впливом кристалічної решітки, не дозволяє точно описувати індивідуальні смуги з допомогою нормального розподілу, для отримання кількісних моделей центрів люмінесценції при зміні умов збудження доцільним є використання в якості координат по осі абсцис як шкали енергії випромінюваних фотонів, так і шкали довжин хвиль.

Ключові слова: система випромінюючих центрів, спектри люмінесценції, нормальний розподіл, кількісна модель, індивідуальні смуги люмінесценції.

T.A. PROKOFIEV, A.V. IVANCHENKO

Oles Honchar Dnipro National University

V.V. HNATUSHENKO

Dnipro University of Technology

## ANALYTICAL AND SYNTHETIC APPROACH TO BUILDING A MODEL OF A SYSTEM OF EMITTING CENTERS OF SINGLE CRYSTAL COMPOUNDS WITH WIDE LUMINESCENCE SPECTRA

*To date, there is no definite technique for studying systems of emitting luminescence centers, although there are methods that make it possible to single out individual bands for solving the problems of classifying emitting centers by their position in the crystal lattice and revealing their behavior when changing the conditions of luminescence excitation. Due to certain circumstances, far from all of them are convenient in practical application and make it possible to obtain adequate models of individual luminescence bands under various experimental conditions. The technique for analyzing a system of emitting luminescence centers by decomposition into individual components and constructing their adequate quantitative models is proposed in this work. The joint use of both analytical and synthetic approaches is considered. The first one is aimed at clarifying what the system under consideration consists of, and the second allows one to find answers to questions related to the interaction of the system under consideration with the environment. Both approaches complement each other. The mathematical description of the developed models is presented. It describes the changes in the number of luminescence centers with a certain type of local environment relative to the total number of all luminescence centers when the excitation conditions change, which, in turn, makes it possible to obtain information on changes in the structure of the materials under study. A normal distribution was used to isolate individual bands associated with the emission of certain types of luminescence centers. Considering that the presence of various phonon or other effects caused by the influence of the crystal lattice does not allow an accurate description of individual bands using a normal distribution, it is advisable to use both the energy scale of the emitted photons and the wavelength scale as coordinates along the abscissa axis to obtain quantitative models of luminescence centers with a change in the excitation conditions.*

*Key words: system of emitting centers, luminescence spectra, normal distribution, quantitative model, individual luminescence bands.*

### Постановка проблемы

Большинство монокристаллических материалов, размеры которых значительно превышают постоянную их кристаллической решетки, обладают широкими спектрами люминесценции, обусловленными всеми излучающими центрами в исследуемых образцах и определенным образом характеризующими их люминесцентные свойства. Как правило, эти центры имеют различную природу, занимают разные положения в кристаллической решетке, имеют разное локальное окружение и, соответственно, излучают свет в разных участках спектра. Для их классификации и получения информации об изменениях люминесцентных свойств исследуемых монокристаллических материалов возникает необходимость разделения общих, широких экспериментальных спектров люминесценции

на индивидуальные составляющие – полосы излучения, каждая из которых связывается с излучением центров с определенным локальным окружением. В общем случае эти индивидуальные полосы перекрываются между собой. Их количество, состав, форма контура и положение в экспериментальном спектре могут быть неизвестны, что накладывает определенные сложности для построения адекватной модели системы излучающих центров и выявления свойств исследуемых материалов.

### **Анализ последних исследований и публикаций**

К настоящему моменту существуют способы, позволяющие выделять индивидуальные полосы для решения задач классификации излучающих центров по их положению в кристаллической решетке и выявления их поведения при изменении условий возбуждения люминесценции. В силу определенных обстоятельств далеко не все из них удобны в практическом применении и позволяют получать адекватные модели индивидуальных полос люминесценции при различных условиях проведения эксперимента. Так, например, известный метод Аленцева-Фока [1] позволяет графическим путем определить форму контура и количество индивидуальных полос, но сложность его применения существенно зависит от их числа. Модуляционные методы [2, 3], благодаря своей высокой чувствительности, непосредственно в процессе экспериментов позволяют выявить в экспериментальном спектре слабые структуры сложных индивидуальных полос. Однако, их высокая чувствительность по отношению к различного рода шумовым сигналам часто приводит к тому, что число регистрируемых индивидуальных полос может превышать число известных типов центров люминесценции, что, в свою очередь требует проведения дополнительных уточняющих экспериментов. С точки зрения системного подхода к разрабатываемой в настоящей работе методике наиболее близки аппроксимационные методы исследования, где для математического описания индивидуальных полос используется нормальное распределение (функция Гаусса) [4, 5]. При этом удается получать достаточно адекватные количественные модели центров люминесценции для разных условий возбуждения при наличии априорной информации о количестве индивидуальных полос и положениях их максимумов.

### **Цель исследования**

Целью данной работы является разработка методики анализа спектров люминесценции путем создания адекватных моделей системы излучающих центров, отражающих их поведение при различных изменениях условий возбуждения.

### **Основная часть**

Систему излучающих центров можно отнести к классу очень сложных систем с точки зрения недостаточности информации о ней [6]. Каждая новая часть получаемой информации позволяет более точно прогнозировать ее свойства при различных условиях проведения эксперимента, а, значит, упрощает эту изучаемую систему и позволяет использовать новые экспериментальные результаты на очередном этапе практического применения исследуемых материалов. Для описания системы следует построить ее адекватную модель, отражающую поведение системы при различных изменениях окружающей среды. Для этого будем исследовать возможность применения двух подходов в построении моделей: аналитического и синтетического [6]. Первый направлен на выяснение, из чего состоит рассматриваемая система, а второй позволяет найти ответы на вопросы, связанные со взаимодействием рассматриваемой системы с окружающей средой.

Оба подхода не противопоставляются, а взаимно дополняют друг друга. Следуя аналитическому подходу необходимо последовательно выполнить следующие этапы:

- 1) сложное разделить на более мелкие, простые части;
- 2) объяснить каждый из полученных фрагментов;
- 3) объединить объяснение частей в объяснение целого.

Исходя из классификации моделей [6], общий экспериментальный спектр люминесценции – это реальная модель прямого подобия люминесценции оригинальной системы излучающих центров изучаемого монокристаллического материала (далее оригинал), реально отображающая количество центров с определенными энергиями оптических переходов (либо излучающих на определенной длине волны). Предложенная в данной работе модель системы индивидуальных полос является моделью косвенного подобия (далее модель), где для описания этого же количества используются законы распределения и другие математические выражения. Проводя декомпозицию сложного оригинала на более простые составляющие согласно п. 1), общий экспериментальный спектр люминесценции раскладывается на индивидуальные полосы. Для того, чтобы дать объяснение каждому из полученных фрагментов согласно п. 2) определяется форма этих полос, положение их максимума, излучение каждой из них связывается с излучением центров люминесценции с разной локальной симметрией, занимающих определенные положения в кристаллической решетке изучаемых монокристаллических материалов. Анализ поведения кривой суммы индивидуальных полос, позволяет выполнить п. 3), объединяя объяснение частей в объяснение целого. Математическое описание этих действий представлено формулой:

$$I(x) = y_1(x) + y_2(x) + \dots + y_n(x) + \Delta A(x), \quad (1)$$

где  $I(x)$  – интенсивность экспериментального спектра в точках измерения;  $y_1(x)$ ,  $y_2(x)$ , ...,  $y_n(x)$  – функции, определяющие индивидуальные полосы;  $\Delta A(x)$  – функция «ошибки», характеризующая точность разложения.

Адекватность построенной модели оригиналу можно определить по точности совпадения кривой суммы индивидуальных полос с кривой общего экспериментального спектра, то есть по значению интеграла от функции  $\Delta A(x) - \int \Delta A(x) dx$ . Чем меньше значение этого интеграла, тем более адекватна модель. Данный параметр во многом зависит от правильности описания формы индивидуальных полос, то есть от правильности выбора функций  $y_1(x)$ ,  $y_2(x)$ , ...,  $y_n(x)$ . Система однотипных излучающих центров большинства монокристаллических соединений, размеры которых значительно превышают постоянную их кристаллической решетки, вполне удовлетворяет следствию центральных предельных теорем теории вероятностей, утверждающих, что сумма большого количества независимых случайных величин имеет распределение близкое к нормальному. Поэтому, использование функции нормального распределения для описания индивидуальных полос люминесценции, обусловленных излучением центров свечения с определенным типом локальной симметрии, имеющих нормальное распределение по своим свойствам, вполне обосновано:

$$P(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (2)$$

где  $P(x)$  – плотность вероятности,  $\sigma$  – дисперсия,  $\mu$  – математическое ожидание,  $x$  – абсцисса случайной величины.

В координатах экспериментальных спектров выражение (2) приводится к виду:

$$y_i(x) = A_i \exp \left[ \frac{-(x - x_{i\max})^2}{2w_i^2} \right], \quad (3)$$

где  $y_i(x)$  – интенсивность излучения  $x_{i\max}$  – координата соответствующего максимума по оси абсцисс,  $w_i$  – ширина пика на уровне половины амплитуды максимума,  $A_i$  – амплитуда максимума  $i$ -ой индивидуальной полосы,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

При этом:

$$A_i = \frac{a_i}{\sqrt{2\pi}w_i}, \quad (4)$$

где  $a_i$  – коэффициент пропорциональности между функцией плотности вероятности нормального распределения вида (1) и функцией, описывающей интенсивность излучения соответствующей индивидуальной полосы.

Таким образом в модели (1) левая часть выражения – это значения интенсивности экспериментального спектра в точках измерения, а правая представляет собой сумму моделируемых индивидуальных полос, каждая из которых описывается нормальным распределением со своими параметрами  $A_i, w_i$ . Данные величины могут быть найдены в результате использования метода наименьших квадратов и минимизации специальной целевой функции вида:

$$\Phi(A_i, w_i) = \sum_{j=1}^m \left[ I(x_j) - \sum_{i=1}^n \left[ A_i \exp \left( \frac{-(x_j - x_{i\max})^2}{2(w_i)^2} \right) \right] \right]^2 = \min, \quad (5)$$

где  $j$  и  $m$  – номер экспериментальной точки и их количество, соответственно.

Минимизация выражения (5) является весьма непростой задачей, если, во-первых, изначально неизвестны количество полос и положения их максимумов, а во-вторых – неизвестны их полуширины. Неизвестность первого в итоге приводит к недостаточной адекватности получаемой модели всей системы, а в результате неизвестности второго возникает задача минимизации нелинейной целевой функции (5). Поэтому, до начала моделирования число полос необходимо конкретизировать путем использования различных экспериментальных методик. Наличие перекрытия индивидуальных полос делает крайне сложным определение значений  $w_i$ . Априорное предположение значений этих величин снимает нелинейность выражения (5), приводя его к виду:

$$\Phi(A_i) = \sum_{j=1}^m \left[ I(x_j) - \sum_{i=1}^n \left[ A_i \exp \left( \frac{-(x_j - x_{i\max})^2}{2(w_i)^2} \right) \right] \right]^2 = \min, \quad (6)$$

но получаемая при этом модель в большинстве случаев имеет низкую адекватность как показано на рис. 1, где концентрация активатора  $C_{Mn} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ gMnS/gZnS}$ , длина волны

возбуждающего света  $\lambda_{exit} = 396$  нм, величина ПД  $\varepsilon = 0$  %. Точками обозначены экспериментальные значения общего спектра фотолуминесценции (ФЛ). Сплошными линиями обозначены расчетные функции интенсивностей индивидуальных полос ФЛ и их сумма. На вставке изображена функция отклонения значений огибающей разложения  $\Delta A$  от значений экспериментальных спектров.

В то же время более сложная минимизация (5), позволяющая более точно найти значения  $A_i, w_i$ , дает возможность получить более адекватную модель, как показано на рис. 2 [4], где концентрация активатора  $C_{Mn} = 10^{-2} \text{ gMnS/gZnS}$ , длина волны возбуждающего света  $\lambda_{exit} = 408$  нм.

Площадь под кривой, пропорциональная количеству центров свечения, ответственных за излучение каждой индивидуальной полосы –  $y_i(x)$ , будет определяться по формуле:

$$S = \int_{x_1}^{x_2} y_i(x) dx . \quad (7)$$

Пределы интегрирования  $x_1$  и  $x_2$  принадлежат участку, где функция  $y_i(x) \neq 0$ .

Если адекватность полученной модели удовлетворительна, то построение можно считать законченным, если же нет, то необходимо проводить дальнейшую декомпозицию «сложных» фрагментов с объяснением полученных частей и объединением этого объяснения в объяснение целого. То есть, либо производить корректировку функций  $y_i(x)$ , либо разделять на фрагменты  $\Delta A(x)$ . Последнее является сложной задачей, поскольку связано с учетом различных фоновых или иных эффектов, вызывающих отклонения формы спектра излучения индивидуальной полосы от нормального вида. Эти эффекты достаточно трудно контролируемые (поскольку их количество и характер зависит от многих параметров таких как вид, размер, форма, условия возбуждения исследуемого материала, и т.д.). В результате возникает ситуация, когда адекватность получаемой модели все еще недостаточна, а дальнейшую декомпозицию проводить невозможно и люминесцентный анализ приходится прекращать.

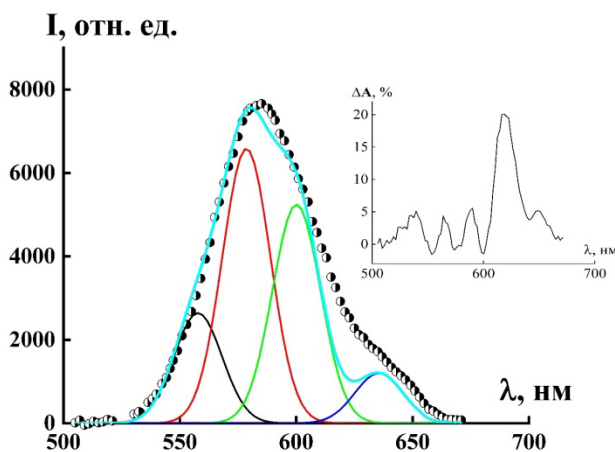


Рис. 1. Разложение спектра ФЛ монокристаллов  $ZnS:Mn$  на индивидуальные полосы с  $\lambda_{max} = 557, 578, 600$  и  $635$  нм при использовании целевой функции (6)

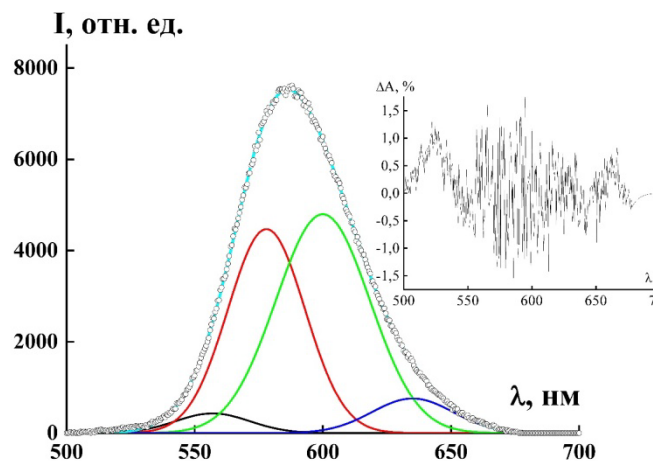


Рис. 2. Разложение спектра ФЛ монокристаллов  $ZnS:Mn$  на индивидуальные полосы с  $\lambda_{max} = 557, 578, 600$  и  $635$  нм при использовании целевой функции (5)

Кроме того, существуют вопросы, на которые аналитический подход не может дать ответ в принципе, поскольку он не связан ни с внутренним устройством системы, ни с ее взаимодействием с окружающей средой. Например, можно до бесконечности анализировать устройство механических часов, изучать взаимодействие отдельных узлов и механизмов, изучать их взаимодействие между собой, но это не дает ответа на вопрос, зачем нужно знать время. Применительно к рассматриваемому люминесцентному анализу, можно достаточно точно провести разложение с учетом и объяснением всех фононных, или иных эффектов, вызывающих отклонение формы спектра индивидуальных полос от нормальной, но это не даст ответа на вопрос зачем это нужно делать. Ответы на подобные вопросы дает синтетический подход [6], согласно которому выполняются последовательно следующие этапы:

- 1) выделяется метасистема, частью которой является рассматриваемая система индивидуальных полос люминесценции;
- 2) производится возможный анализ метасистемы, то есть рассматриваются ее состав и структура;
- 3) дается объяснение роли рассматриваемой системы индивидуальных полос в составе метасистемы с помощью изучения ее связей с другими частями метасистемы.

Применительно к нашей модели в качестве метасистемы рассматривается изучаемый монокристаллический материал, частью которого является система излучающих центров, представленная экспериментальным спектром люминесценции – оригиналом. В качестве модели, соответственно, выступает система индивидуальных полос (1). Анализ метасистемы заключается в учете результатов предыдущих и текущих исследований анализируемых люминесцентных материалов. Изменения условий возбуждения люминесценции отражаются в экспериментальных спектрах и моделируются в (1) путем подбора значений  $A_i$ ,  $w_i$  при минимизации (5) и достижения минимальности  $\int \Delta A(x) dx$ , то есть достижения максимальной адекватности модели оригиналу. В результате получим модель, отражающую изменения количества центров свечения с определенным типом локального окружения относительно общего количества всех центров люминесценции при изменении условий возбуждения, что в свою очередь, позволяют получить информацию об изменениях структуры изучаемых материалов.

Для получения количественной модели центров свечения по оси ординат чаще всего в относительных единицах откладывается величина, пропорциональная количеству регистрируемых фотонов. Вопрос использования различных координат по оси абсцисс для выделения, удовлетворяющих нормальному распределению, индивидуальных полос, не имеет однозначного ответа. Наиболее часто используемыми единицами измерения при регистрации люминесцентного излучения в видимом диапазоне являются единицы длин волн (нанометры) и единицы энергии фотонов (электронвольты). При этом если, например, в шкале энергий использовать нормальное распределение для описания индивидуальной полосы, то переход к шкале длин волн даст ассиметричную негауссову форму. Если взять две одинаковые гауссовы кривые А и Б в разных участках шкалы длин волн, то площади под этими кривыми будут равны. Если теперь перейти к шкале энергий, то площади под кривыми уже не одинаковы. Соответственно, если на основании первого вычисления сделать вывод о равенстве количества центров, ответственных за полосы А и Б, то по результатам вычислений в шкале энергий этот вывод будет неверен. Таким образом, при наличии нескольких перекрывающихся полос, аппроксимация их с помощью

нормального распределения может привести к ошибкам двух видов: либо неверному соотношению интенсивностей полос, либо в дополнение к этому неверное определение их количества (асимметричную негауссову полосу можно успешно аппроксимировать двумя «гауссианами»).

С одной стороны, поскольку ожидается нормальное распределение центров свечения по их свойствам, то для центров различной конфигурации следует ожидать нормального распределения количества носителей заряда, характеризующих их состояние в шкале энергий излучательных переходов по оси абсцисс. При этом площадь под кривой индивидуальной полосы, пропорциональная количеству излучающих центров, будет иметь физический смысл суммарной энергии излучения индивидуальной полосы, то есть число фотонов, умноженное на энергию фотона. Однако, если использовать «энергетические» координаты и предполагать, что в таких координатах индивидуальные полосы имеют гауссову форму, а не какую-то другую, то для этого, согласно классическим представлениям, нужно иметь веские основания [1]. При этом, если нет никаких дополнительных сведений о форме индивидуальных полос, то неизвестно в каких координатах следует анализировать сложную полосу для разделения ее на гауссовы составляющие. Следовательно, с теоретической точки зрения остается неясным, почему в качестве элементарной следует брать гауссову, а не какую-нибудь иную, например, колоколообразную форму. В работах [1, 7] приводится модель конфигурационных координат, из которой следует, что как раз в энергетических координатах спектр люминесценции может иметь гауссову форму только в том случае, если участок потенциальной кривой основного состояния, расположенный под областью минимума возбужденного состояния, можно заменить отрезком прямой. Во всех остальных случаях спектр люминесценции не будет иметь гауссовой формы. Таким образом, гауссова форма элементарной полосы в «энергетических» координатах с учетом вышеописанного, и в результате действия фононных или иных эффектов скорее является частным случаем, чем правилом, и для применения нормального распределения для описания индивидуальных полос имеется много достаточно жестких условий.

С точки зрения предложенной в этой работе модели (1) это означает, что если функции  $u_n(x)$  удовлетворяют выражению (3), то даже теоретически интеграл от функции  $\Delta A(x)$  не может быть равен нулю  $\int \Delta A(x) dx \neq 0$ , что изначально снижает адекватность (1). Следуя при этом аналитическому подходу построения модели, необходимо проводить дальнейшую декомпозицию системы излучающих центров, выделять неизвестные фононные эффекты, давать их объяснение и учитывать это при определении формы индивидуальной полосы. При таком подходе сложность моделирования уже на этапе данной декомпозиции многократно возрастает, что может привести к потере актуальности выполняемой задачи.

С другой стороны, если изначально форма индивидуальной полосы неизвестна и в результате наличия описанных выше причин реальная форма спектра в энергетической шкале отличается от гауссовой, то в силу учета этих же обстоятельств при использовании нормального распределения в шкале длин волн по оси абсцисс, значение интеграла  $\int \Delta A(x) dx$  в шкале длин волн может быть меньше, чем в шкале энергий фотонов:

$$\int \Delta A(\lambda) d\lambda < \int \Delta A(h\nu) d(h\nu), \quad (8)$$

где  $\lambda$  – длина волны в нанометрах,  $h\nu$  – энергия излучаемых фотонов в электронвольтах.



Следовательно, в данном случае, несмотря на то, что, на первый взгляд, не просматривается физический смысл использования нормального распределения в шкале длин волн, более адекватной может быть модель индивидуальных полос (1) именно в таких координатах по оси абсцисс.

Исходя из вышеописанного, в зависимости от вида исследуемых материалов, для получения наиболее полной информации, на наш взгляд, было бы целесообразным исследование обоих случаев. В результате мы получаем «облако» данных, внутри которого могут находиться точные значения формы контуров индивидуальных полос люминесценции исследуемых монокристаллических материалов.

### Выводы

Таким образом, в процессе анализа спектров люминесценции путем построения модели системы индивидуальных полос при отсутствии априорной информации об их форме и количестве для получения наилучшей адекватности модели при изменении условий возбуждения люминесценции необходимо комплексное использование аналитического и синтетического подхода. Учитывая то, что наличие различных фоновых или иных эффектов, обусловленных влиянием кристаллической решетки, не позволяет точно описывать индивидуальные полосы с помощью нормального распределения, для получения количественных моделей центров люминесценции при изменении условий возбуждения целесообразным является использование в качестве координат по оси абсцисс как шкалы энергии излучаемых фотонов, так и шкалы длин волн. При этом точные значения формы контуров индивидуальных полос могут находиться внутри своеобразного «облака» результатов, полученных при использовании обоих шкал.

### Список использованной литературы

1. Фок М. В. Разделение сложных спектров на индивидуальные полосы при помощи обобщённого метода Аленцева. *Труды ФИАН СССР*. 1972. № 59. С. 3–24.
2. Бобыль А. В., Будянский В. И., Федоров А. И., Шейкман М. К. Исследование структуры сложных полос люминесценции в  $CdSe_x Te_{1-x}$   $\lambda$  - методом. Сб. *Люминесцентные и особо чистые вещества*. Ставрополь. 1974. Т. 2. С. 82-85.
3. Будянский В.И., Лепсверидзе Д.С., Сальков Е.А., Шепельский Г.А. Дифференциальный спектр люминесценции. *ФТТ*. 1973. Т. 15. № 5. С. 1620-1621.
4. Prokofiev T. A., Ivanchenko A.V., Gnatushenko V. V. (2019). Luminescent Analysis of ZnS:Mn Single-Crystal Lattice Changes During Plastic Deformation. *Journal of Applied Spectroscopy*. doi:10.1007/s10812-019-00802-8.
5. Прокофьев Т.А., Иванченко А.В. Температурные зависимости фотолюминесценции ионов  $Mn^{2+}$  с разным локальным окружением в монокристаллах ZnS. Журнал прикладной спектроскопии. 2020. Т. 87, № 4. С. 561–569.
6. Тарасенко Ф.П. Прикладной системный анализ. Москва, издательство “КноРус”. 2010. С. 35–38, 59–61.
7. Прокофьев Т.А., Полежаев Б.А., Коваленко А.В. Журнал прикладной спектроскопии. 2005. Т. 72, № 6. С. 788–793.

### References

1. Fok, M. V. (1972). Razdelenie slozhnyih spektrov na individualnyie polosyi pri pomoschi obobschYonnogo metoda Alentseva. *Trudy FIAN SSSR*. **59**, 3–24.
2. Bobyil, A.V., Budyanskiy, V.I., Fedorov, A.I. & Sheykman, M.K. (1974). Issledovanie strukturyi slozhnyih polos lyuminesentsii v CdSex Te<sub>1-x</sub> λ-metodom. *Sb. Lyuminescentnyie i osobo chistyie veschestva*. Stavropol. **2**, 82-85.
3. Budyanskiy, V.I., Lepsveridze, D.S., Salkov, E.A. & Shepelskiy, G.A. (1973). Differentsialnyiye spektr lyuminesentsii. *FTT*. **15**, 5, 1620-1621.
4. Prokofiev, T. A., Ivanchenko, A. V. & Gnatushenko, V. V. (2019). Luminescent Analysis of ZnS:Mn Single-Crystal Lattice Changes During Plastic Deformation. *Journal of Applied Spectroscopy*. doi:10.1007/s10812-019-00802-8.
5. Prokofev, T.A. & Ivanchenko, A.V. (2020). Temperaturnyie zavisimosti fotolyuminesentsii ionov Mn<sup>2+</sup> s raznyim lokalnym okruzheniem v monokristallah ZnS. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*. **87**, 4, 561–569.
6. Tarasenko, F.P. (2010). Prikladnoy sistemnyiy analiz. Moskva, izdatelstvo “KnoRus”. 35–38, 59–61.
7. Prokofev, T.A., Polezhaev, B. A. & Kovalenko, A.V. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*. **72**, 6, 788–793.

Прокоф'єв Тихін Анатолійович — к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедри комп'ютерних наук та інформаційних технологій Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара (м. Дніпро), e-mail: tichonprok@yahoo.de, ORCID: 0000-0002-5812-4618.

Іванченко Олександр Володимирович — к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедри прикладної радіофізики, електроніки та наноматеріалів Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара (м. Дніпро), e-mail: ivanchenkoav@ukr.net, ORCID: 0000-0003-4380-268X.

Гнатушенко Володимир Володимирович — д.т.н., професор, завідувач кафедри інформаційних технологій та комп'ютерної інженерії Національного технічного університету «Дніпровська політехніка» (м. Дніпро), e-mail: vvgnat@ukr.net, ORCID: 0000-0003-3140-3788.