



УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **122574** (13) **C2**
(51) МПК (2020.01)
G01N 21/62 (2006.01)
G01J 3/00
G06N 7/00

НАЦІОНАЛЬНИЙ ОРГАН
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ
ДЕРЖАВНЕ ПІДПРИЄМСТВО
"УКРАЇНСЬКИЙ ІНСТИТУТ
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ"

(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА ВИНАХІД

(21) Номер заявки:	а 2018 01412	(73) Володілець (володільці): ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА, просп. Гагаріна, 72, м. Дніпро, 49010 (UA)
(22) Дата подання заявки:	13.02.2018	(56) Перелік документів, взятих до уваги експертизою: Разработка автоматизированной системы определения спектров фотoluminesценции В рor-Si / А. П. Оксанич, В. Н. Чебенко, М. Г. Когдась, Е. А. Паливода // Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського. – Випуск 5/2016 (100). Частина 2. – С. 17-24. RU 2412452 C2, 20.02.2011 Individul glow bands of Mn ²⁺ ions photoluminescence in plastically deformed ZnS single crystals / Т. А. Prokofiev, А. V. Kovalenko, В. F. Polezaev et all. //Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2004. – V. 7. - №1. – P. 63-67. SU 693125 A1, 25.10.1979 RU 2233438 C1, 27.06.2004 Методы разложения спектров фотoluminesценции кристаллов ZnS:Mn на индивидуальные составляющие / А. С. Морозов, А. В. Коваленко, Ю. В. Ушаков, Т. А. Прокофьев // Вестник Днепропетровского университета, серия «Физика. Радиоэлектроника». – Т. 16, вып. 15. – 2008. - №2. – С.147-152. Стеценко М. А. Анализ результатов аппроксимации спектральных характеристик поверхностного плазмонного резонанса аналитическими функциями / М. А. Стеценко // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. – 2014. – Вып. 49. – С. 93-97.
(24) Дата, з якої є чинними права інтелектуальної власності:	11.12.2020	
(41) Публікація відомостей про заявку:	27.08.2019, Бюл.№ 16	
(46) Публікація відомостей про державну реєстрацію:	10.12.2020, Бюл.№ 23	
(72) Винахідник(и): Прокоф'єв Тихін Анатолійович (UA), Гнатушенко Володимир Володимирович (UA), Іванченко Олександр Володимирович (UA)		

(54) СПОСІБ АНАЛІЗУ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ СПЕКТРІВ ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ

(57) Реферат:

Винахід належить до способів дослідження й аналізу матеріалів за допомогою оптичних засобів. Спосіб аналізу експериментальних спектрів люмінесценції включає одержання експериментальних спектрів люмінесценції, розкладання спектрів на індивідуальні смуги, випромінювання кожної з яких пов'язують з центрами люмінесценції, а інтенсивність описують з використанням розрахункових функцій Гауса, параметри яких знаходять за допомогою

UA 122574 C2

математичного методу найменших квадратів. Згідно з винаходом, для знаходження значень інтенсивності випромінювання слабо виражених або сильно перекритих сусідніми компонентами індивідуальних смуг люмінесценції застосовують математичне моделювання з використанням розрахункових функцій Гауса, в яких заздалегідь невідомі значення трьох параметрів: амплітуд максимумів, півширини й положення максимумів індивідуальних смуг. При цьому для знаходження невідомих положень максимумів застосовують багаторазове віднімання суми значень знайдених індивідуальних смуг зі значень залишку експериментального спектра. Для знаходження оптимальних значень параметрів функцій Гауса, які описують індивідуальні смуги люмінесценції з знайденими або відомими положеннями максимуму, використовують "нелінійну" модель мінімізації цільової функції, коли одночасно оптимізуються амплітуда максимуму і півширина. Технічним результатом винаходу є виявлення нових або слабо виражених смуг випромінювання, покращення надійності і точності люмінесцентного аналізу.

Винахід належить до способів дослідження й аналізу матеріалів за допомогою оптичних засобів, зокрема до способів дослідження й аналізу за допомогою люмінесцентних вимірів таких як спектри фото-, електро-, катодолюмінесценції, спектри радіолюмінесценції, спектри рентгенолюмінесценції, за допомогою методів і способів математичного моделювання.

Об'єктом винаходу є спосіб аналізу експериментальних спектрів люмінесценції, у тому числі монокристалічних з'єднань з різними домішками, котрі мають широкі спектри люмінесценції, які є сукупністю випромінювання кількох індивідуальних смуг, пов'язаних з певними центрами випромінювання, призначений як для виявлення нових або слабо виражених смуг випромінювання, так і для покращення надійності і точності їх автоматизованого люмінесцентного аналізу.

Технічним результатом є як виявлення нових або слабо виражених смуг випромінювання, так і покращення надійності і точності їх автоматизованого люмінесцентного аналізу. З урахуванням того, що площа спектра люмінесценції пропорційна кількості центрів випромінювання, фактично виявлення форми контуру індивідуальної смуги за допомогою заявленого способу дозволяє одержати значення відносної кількості центрів випромінювання, які пов'язані з даною смугою (відносно загальної кількості), і тим самим як виявити нові локальні, так і удосконалити відомі загальні випромінювальні властивості люмінесцентних матеріалів, які знаходять широке застосування у промисловому виробництві, від проектування і вироблення пристроїв відображення інформації до створення складних напівпровідникових приладів і мікросхем.

Основними цілями аналізу спектрів люмінесценції з однієї сторони є з'ясування природи центрів люмінесценції різних типів, випромінювання яких складає випромінювання експериментального спектра люмінесценції, з іншого боку - одержання інформації про зміни механізмів збудження люмінесценції в результаті різноманітних зовнішніх впливів. З урахуванням неоднорідності центрів люмінесценції, що складають випромінювання експериментального спектра, виникає необхідність розкладання експериментальних спектрів люмінесценції на індивідуальні смуги, випромінювання яких пов'язується з випромінюванням кількох груп центрів люмінесценції. Кожна із цих груп складається із центрів близьких по природі й певним чином реагує на зміну умов збудження люмінесценції.

Відомий спосіб аналізу спектрів люмінесценції шляхом розкладання експериментальних спектрів на індивідуальні смуги за допомогою методу Аленцева [1. 2], що включає одержання спектрів люмінесценції при зміні різних умов збудження люмінесценції, обробку отриманих результатів за допомогою математичної моделі [1], яка дозволяє визначити форму контуру індивідуальної смуги й кількість індивідуальних смуг в експериментальному спектрі.

Недоліком даного способу є нечутливість до дуже слабких і вузьких смуг люмінесценції, випромінювання яких перекривається випромінюванням більш інтенсивних індивідуальних смуг люмінесценції, а також складність у практичному застосуванні, пов'язана з багаторазовими змінами форми експериментального спектра в результаті зміни умов експерименту й складність знаходження коефіцієнтів розкладання при великій кількості індивідуальних смуг.

Відомий модуляційний спосіб аналізу спектрів люмінесценції [3. 4], що включає одержання експериментальних спектрів люмінесценції при зміні різних умов збудження люмінесценції й застосуванні різних моделюючих сигналів, що накладаються на експериментальний сигнал від досліджуваного зразка. При цьому виявлення в експериментальному спектрі слабкої структури складних індивідуальних смуг люмінесценції відбувається безпосередньо в процесі експерименту. Завдяки своїй чутливості, число особливостей в одержуваному спектрі люмінесценції може перевищувати кількість незалежних центрів світіння, що вимагає проведення додаткових експериментів для уточнення фізичної природи одержуваних результатів і є недоліком даного способу аналізу.

Найбільш близькими до способу, що заявляється, є способи аналізу спектрів люмінесценції, які включають одержання експериментальних спектрів люмінесценції, розкладання експериментальних спектрів люмінесценції на індивідуальні смуги, інтенсивність яких описується за допомогою розрахункових функцій Гауса, параметри яких знаходяться з використанням математичного методу найменших квадратів, виходячи із критерію мінімального значення суми квадратів різниць між розрахунковими й експериментальними значеннями по всіх експериментальних точках [5-7].

Недоліком даних способів є їхня незастосовність для знаходження в експериментальному спектрі люмінесценції слабо виражених індивідуальних смуг люмінесценції, випромінювання яких перекривається випромінюванням більш інтенсивних індивідуальних смуг. Використання математичного методу найменших квадратів для знаходження параметрів розрахункових функцій Гауса, виходячи із критерію мінімального значення суми квадратів різниць між

розрахунковими й експериментальними значеннями по всіх експериментальних точках, в цьому випадку вимагає оптимізації трьох параметрів розрахункових функцій Гауса: амплітуд максимумів, напівширини й положення максимумів індивідуальних смуг по осі абсцис та дозволяє отримати дуже велику множину рішень, з якої практично неможливо вибрати оптимальні значення цих параметрів. Крім цього, застосування даних способів аналізу експериментальних спектрів люмінесценції обмежено наявністю результатів інших досліджень, не пов'язаних з розкладанням на індивідуальні смуги. Також, за допомогою критерію мінімального значення суми квадратів різниць між розрахунковими й експериментальними значеннями по всіх експериментальних точках фактично оптимізується тільки один параметр - амплітуда максимуму функції Гауса. Положення максимумів смуг вважаються відомими, а напівширина є залежним від амплітуди параметром [5, 6], або підбирається дослідним шляхом [7].

В основу винаходу поставлено задачу розробити спосіб аналізу експериментальних спектрів люмінесценції, який дозволяє знайти в експериментальному спектрі люмінесценції як слабо виражені індивідуальні смуги люмінесценції, випромінювання яких перекривається випромінюванням більш інтенсивних індивідуальних смуг і в яких заздалегідь невідомі всі три параметри розрахункових функцій Гауса, які описують ці індивідуальні смуги, так і індивідуальні смуги люмінесценції, в яких до початку розкладання відомо тільки положення максимуму по осі абсцис.

Поставлена задача вирішується тим, що в способі аналізу експериментальних спектрів люмінесценції, що включає одержання експериментальних спектрів люмінесценції, розкладання експериментальних спектрів люмінесценції на індивідуальні смуги випромінювання кожної з яких пов'язують з центрами люмінесценції, а інтенсивність описується з використанням розрахункових функцій Гауса, параметри яких знаходяться за допомогою математичного методу найменших квадратів, виходячи із критерію мінімального значення суми квадратів різниць між розрахунковими й експериментальними значеннями по всіх експериментальних точках, новим є те, що для знаходження значень інтенсивності випромінювання слабо виражених або сильно перекритих сусідніми компонентами індивідуальних смуг люмінесценції застосовують математичне моделювання з використанням розрахункових функцій Гауса, в яких заздалегідь невідомі значення трьох параметрів: амплітуд максимумів, напівширини й положення максимумів індивідуальних смуг, при цьому для знаходження невідомих положень максимумів застосовують багаторазове віднімання суми значень знайдених індивідуальних смуг зі значень залишку експериментального спектра:

$$\Delta\varphi^s(x_j) = \Delta\varphi^{s-1}(x_j) - F^s(x_j), \quad (1.1)$$

де $\Delta\varphi^s(x_j)$ - кінцеві значення похибки розкладання, що являє собою монотонну функцію без значно виражених екстремумів, $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$ - значення залишку експериментального спектра після $s-1$ віднімання, s - індекс, який характеризує номер і кількість циклів віднімання, що являє собою кінцеву послідовність цілих чисел - $s = 1, 2, 3, \dots, f$, $j = 1, 2, \dots, k$ - індекс, що відповідає положенню експериментальної точки спектра люмінесценції по осі абсцис, k - число експериментальних точок, $F^s(x_j)$ - сума значень знайдених індивідуальних смуг після s -того віднімання зі значень $s-1$ залишку експериментального спектра - $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$:

$$F^s(x_j) = \sum_{i=1}^{n_s} A_i \exp \left[\frac{-(x_j - x_{i\max})^2}{2w_i^2} \right], \quad (1.2)$$

де A_i - амплітуда максимуму, w_i - напівширина, $x_{i\max}$ - положення максимуму i -ої індивідуальної смуги по осі абсцис, n_s - число знайдених індивідуальних смуг після s -того вирахування, а для знаходження оптимальних значень параметрів функцій Гауса, які описують індивідуальні смуги люмінесценції з знайденими або відомими положеннями максимуму, використовують "нелінійну" модель мінімізації цільової функції, коли одночасно оптимізуються амплітуда максимуму - A_i і напівширина - w_i , при цьому цільова функція - $\Phi^s(A_i, w_i)$, що дозволяє знайти наступні пари параметрів індивідуальних смуг - A_i , w_i , максимумами яких

проявляються після s -того віднімання суми значень знайдених індивідуальних смуг - $F^s(x_j)$ зі значень $s-1$ залишку експериментального спектра - $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$, має вигляд:

$$\Phi^s(A_i, w_i) = \sum_{j=1}^k [\Delta\varphi^{s-1}(x_j) - F^s(x_j)]^2 = \min, \quad (1.3)$$

а для спрощення мінімізації і полегшення знаходження оптимальних параметрів цільової функції (1.3) застосовується розділення цільової функції на окремі частини по ділянках інтегрального спектра люмінесценції з використанням додаткового критерію мінімальності всіх її частин:

$$\Phi(A_i, w_i) = \sum_m \Phi_m(A_i, w_i), \quad (1.4)$$

$$\Phi_1(A_i, w_i) \wedge \Phi_2(A_i, w_i) \wedge \dots \wedge \Phi_m(A_i, w_i) = \min. \quad (1.5)$$

де m - число смуг.

Запропонований спосіб ґрунтується на припущенні, що експериментальний спектр люмінесценції в загальному випадку неоднорідний і складається з кількох індивідуальних смуг, випромінювання яких пов'язане з центрами люмінесценції, що мають різне локальне оточення. Використання функції нормального розподілу для опису індивідуальних смуг люмінесценції обґрунтовано, виходячи з наслідку центральних граничних теорем - класу теорем теорії ймовірності, що стверджують, що сума великої кількості незалежних, випадкових величин має розподіл, близький до нормального:

$$y = A \exp \left[\frac{-(x - x_{\max})^2}{2w^2} \right], \quad (1.6)$$

де A - амплітуда максимуму, w - ширина на рівні половини амплітуди максимуму

(напівширина), x_{\max} - положення максимуму по осі абсцис.

Як видно з (1.6), основними параметрами, необхідними для побудови розрахункової функції

Гауса є параметри A , w і x_{\max} . Параметр A входить у цю функцію "лінійно", x_{\max} - стоїть в чисельнику, а w - у знаменнику показника експоненти й обидва зводяться у квадратичний ступінь. Якщо формально оптимізувати всі три цих параметри, то цільова функція (1.3) приймає "нелінійний" вид і задача оптимізації параметрів цільової функції ускладнюється зі зростанням числа індивідуальних смуг. Найкращі результати виходять при оптимізації тільки одного параметра - A , оскільки в цьому випадку мінімізується так звана "лінійна" модель цільової функції й особливих складностей не виникає. Два параметра, що залишилися, вважаються відомими й знаходяться іншими методами.

З урахуванням вищевказаного, експериментальний спектр люмінесценції можна представити у вигляді:

$$\sum_{j=1}^k I(x_j) = \sum_{j=1}^k (F^0(x_j) + \Delta\varphi^0(x_j)), \quad (1.7)$$

де $I(x_j)$ - значення інтенсивності випромінювання експериментального спектра люмінесценції в кожній експериментальній точці x_j , k - кількість експериментальних точок.

$F^0(x_j)$ - сума значень розрахункових функцій Гауса, що описують інтенсивність люмінесценції індивідуальних смуг у яких відомі положення максимумів, $\Delta\varphi^0(x_j)$ - похибка розкладання, що з однієї сторони являє собою різницю між експериментальними й розрахунковими значеннями інтенсивності люмінесценції в кожній експериментальній точці x_j :

$$\Delta\varphi^0(x_j) = I(x_j) - F^0(x_j). \quad (1.8)$$

При цьому

$$F^0(x_j) = \sum_{i=1}^{n'} A_i \exp \left[\frac{-(x_j - x_{i\max})^2}{2w_i^2} \right] + \sum_{i=1}^{n''} A_i \exp \left[\frac{-(x_j - x_{i\max})^2}{2w_i^2} \right], \quad (1.9)$$

де n' число індивідуальних смуг люмінесценції з відомими $x_{i\max}$ і w_i , n'' число індивідуальних смуг люмінесценції з відомими $x_{i\max}$.

З іншого боку, $\Delta\varphi^0(x_j)$ може містити в собі значення інтенсивності випромінювання прихованих індивідуальних смуг і подібно (1.7) задовольняє виразу:

$$\sum_{j=1}^k \Delta\varphi^0(x_j) = \sum_{j=1}^k (F^1(x_j) + \Delta\varphi^1(x_j)) \quad (1.10)$$

де значення $F^1(x_j)$, являють собою суму значень функцій Гауса, що описують індивідуальні смуги в яких заздалегідь невідомі значення всіх трьох параметрів - A_i , w_i і $x_{i\max}$:

$$F^1(x_j) = \sum_{i=1}^{n_1} A_i \exp \left[\frac{-(x_j - x_{i\max})^2}{2w_i^2} \right], \quad (1.11)$$

де n_1 - число індивідуальних смуг люмінесценції з невідомими A_i , w_i і $x_{i\max}$. При цьому $\Delta\varphi^1(x_j)$ - значення похибки розкладання після першого віднімання суми знайдених розрахункових значень індивідуальних смуг зі значень експериментального спектра люмінесценції в кожній експериментальній точці x_j :

$$\Delta\varphi^1(x_j) = \Delta\varphi^0(x_j) - F^1(x_j). \quad (1.12)$$

На початку розкладання, складається цільова функція виду:

$$\Phi^0(A_i, w_i) = \sum_{j=1}^k [I(x_j) - F^0(x_j)]^2 = \min \quad (1.13)$$

при мінімізації якої підбирається оптимальний набір параметрів A_i , w_i функцій Гауса, що входять до складу $F^0(x_j)$. Потім, з (1.8) визначаються значення $\Delta\varphi^0(x_j)$. Якщо обвідна значень $\Delta\varphi^0(x_j)$ містить значно виражені максимуми, то вважаючи координати максимумів по x_j , знайденими координатами максимумів невідомих індивідуальних смуг, складається цільова функція виду:

$$\Phi^1(A_i, w_i) = \sum_{j=1}^k [\Delta\varphi^0(x_j) - F^1(x_j)]^2 = \min \quad (1.14)$$

Мінімізація проводиться ще раз і знаходяться наступні пари оптимальних параметрів A_i , w_i .

Після цього, подібно (1.8) з (1.12) знаходяться значення $\Delta\varphi^1(x_j)$. Якщо обвідна значень $\Delta\varphi^1(x_j)$ також містить максимуми, то $\Delta\varphi^1(x_j)$ є величиною подібною $\Delta\varphi^0(x_j)$ і задовольняє виразу:

$$\sum_{j=1}^k \Delta\varphi^1(x_j) = \sum_{j=1}^k (F^2(x_j) + \Delta\varphi^2(x_j)) \quad (1.15)$$

Описані вище операції можуть проводитися доти, поки наступна обвідна значень похибки - $\Delta\varphi^s(x_j)$ не прийме монотонний характер у всій області значень x_j , що представляє собою множину всіх експериментальних точок, або її значення будуть настільки мали, що ними можна

знехтувати. При цьому, наступна цільова функція - $\Phi^s(A_i, w_i)$, що дозволяє знайти параметри індивідуальних смуг- A_i, w_i . максимуми яких з'являються в інтегральному спектрі після наступного віднімання суми значень знайдених індивідуальних смуг - $F^s(x_j)$ зі значень наступного залишку експериментального спектра - $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$ прийме вигляд (1.3).

5 Для спрощення мінімізації (1.3), (1.13). (1.14) необхідно досліджувати можливість групування індивідуальних смуг у загальному експериментальному спектрі. Якщо індивідуальні смуги можна згрупувати таким чином, що їхні області визначення по x , можуть бути обмежені мінімальними значеннями $I(x_j)$ набагато меншими, ніж значення найменшого з максимумів експериментального спектра, то цільову функцію можна представити у вигляді суми:

$$10 \quad \Phi(A_i, w_i) = \sum_r \Phi_r(A_i, w_i), \quad (1.16)$$

де індекс r визначає відповідний інтервал по x_j на границях якого значення $I(x_j)$ мінімальні.

Кожний доданок суми (1.16) можна мінімізувати незалежно від інших, що скорочує число операцій при оптимізації параметрів A_i, w_i , і дозволяє отримати найкращу точність розкладання.

15 Якщо можливості групування немає, то область визначення цільових функцій з (1.3). (1.13), (1.14) за значеннями x_j необхідно розбити на m інтервалів, що відповідають кількості обумовлених індивідуальних смуг згідно (1.4) і шукати мінімальне значення не тільки у всій

20 області значень x_j , але й у кожному вибраному інтервалі m , тобто вимагати виконання логічного виразу (1.5). Границі кожного інтервалу, доцільно визначити як середнє арифметичне між координатами x_j відповідних максимумів індивідуальних смуг.

Таким чином запропонований спосіб аналізу експериментальних спектрів люмінесценції дозволяє знайти в експериментальному спектрі люмінесценції як слабо виражені індивідуальні смуги люмінесценції, випромінювання яких перекривається випромінюванням більш інтенсивних індивідуальних смуг і в яких заздалегідь невідомі всі три параметри розрахункових функцій Гауса, які описують ці індивідуальні смуги, так і індивідуальні смуги люмінесценції, в яких до початку розкладання відомо тільки положення максимуму по осі абсцис. Тим самим, запропонований спосіб дозволяє як виявити нові технічні властивості матеріалів, так і покращити надійність і точність їх автоматизованого люмінесцентного аналізу.

30 Джерела інформації:

1. Фок М.В. Разделение сложных спектров на индивидуальные полосы при помощи метода Аленцева. // Труды ФИАН СССР. - 1972. - Т. 59. - С. 3-24.

2. Букке Е.Е., Вознесенская Т.И., Голубева Н.И., Горбачева Н.А., Илюхина З.П., Панасюк Е.Н., Фок М.В. Применение обобщенного метода Аленцева для анализа спектра сине-голубой области люминесценции. // Труды ФИАН. - 1972. - Т. 59. - С. 25-37.

3. Бобыль А.В., Будянский В.И., Федоров А.И., Шейкман М.К. Исследование структуры сложных полос люминесценции в $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ λ. - методом. // Сб. Люминесцентные и особо чистые вещества. - Ставрополь, 1974. - Т. 2. - С. 82-85.

4. Будянский В.И., Лепсверидзе Д.С., Сальков Е.А., Шепельский Г.А. Дифференциальный спектр люминесценции. // ФТТ. - 1973. - Т. 15. - № 5. - С. 1620-1621.

5. Luminescence spectroscopy of NaF:U bulk and fiber crystals / B.V. Shulgin, A.N. Tcherepanov. V.Yu. Ivanov, T.S. Koroleva, M.M. Kidibaev. Ch. Pedrini, Ch. Dujardin // Journal of Luminescence. - 2007. - Vol. 125.- Iss. 1-2. - P. 259-265.

6. Таланов А.С, Коротов СВ... Черепанов А.Н., Пиличев В.В, Ищенко А.В., Семенова А.В. Способ анализа спектров люминесценции. Рос. патент. RU 2 412 452 C2, 02.04.2009.

45 7. Individual glow bands of Mn^{2+} ions photoluminescence in plastically deformed ZnS single crystals / T.A. Prokofiev, A.V. Kovalenko, B.A. Polezaev, M.F. Bulanyi, A.A. Gorban, O.V. Hmelenko // Semicond. Phys., Quant. Electron. & Optoelectron (SQQ). - 2004. - V. 7. - № 1. - P. 63-67.

ФОРМУЛА ВИНАХОДУ

Спосіб аналізу експериментальних спектрів люмінесценції, що включає одержання експериментальних спектрів люмінесценції, розкладання експериментальних спектрів люмінесценції на індивідуальні смуги, випромінювання кожної з яких пов'язують з центрами люмінесценції, а інтенсивність описують з використанням розрахункових функцій Гауса, параметри яких знаходять за допомогою математичного методу найменших квадратів, виходячи із критерію мінімального значення суми квадратів різниць між розрахунковими й експериментальними значеннями по всіх експериментальних точках, який **відрізняється** тим, що для знаходження значень інтенсивності випромінювання слабо виражених або сильно перекритих сусідніми компонентами індивідуальних смуг люмінесценції застосовують математичне моделювання з використанням розрахункових функцій Гауса, в яких заздалегідь невідомі значення трьох параметрів: амплітуд максимумів, півширини й положення максимумів індивідуальних смуг, при цьому для знаходження невідомих положень максимумів застосовують багаторазове віднімання суми значень знайдених індивідуальних смуг зі значень залишку експериментального спектра:

$$\Delta\varphi^s(x_j) = \Delta\varphi^{s-1}(x_j) - F^s(x_j),$$

де $\Delta\varphi^s(x_j)$ - кінцеві значення похибки розкладання, що являє собою монотонну функцію без

значно виражених екстремумів, $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$ - значення залишку експериментального спектра після s-1 віднімання, s - індекс, який характеризує номер і кількість циклів віднімання, що являє собою кінцеву послідовність цілих чисел - $s=1,2,3...f$, $j=1,2...k$ - індекс, що відповідає положенню експериментальної точки спектра люмінесценції по осі абсцис, k - число експериментальних точок, $F^s(x_j)$ - сума значень знайдених індивідуальних смуг після s-го віднімання зі значень

s-1 залишку експериментального спектра - $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$:

$$F^s(x_j) = \sum_{i=1}^{n_s} A_i \exp \left[-\frac{(x_j - x_{imax})^2}{2w_i^2} \right],$$

де A_i - амплітуда максимуму, w_i - півширина, x_{imax} - положення максимуму i-ої індивідуальної смуги по осі абсцис, n_s - число знайдених індивідуальних смуг після s-го вирахування,

а для знаходження оптимальних значень параметрів функцій Гауса, які описують індивідуальні смуги люмінесценції з знайденими або відомими положеннями максимуму, використовують "нелінійну" модель мінімізації цільової функції, коли одночасно оптимізуються амплітуда максимуму - A_i і півширина - w_i , при цьому цільова функція - $\Phi^s(A_i, w_i)$, що дозволяє знайти наступні пари параметрів індивідуальних смуг - A_i , w_i , максимумами яких проявляються після s-того віднімання суми значень знайдених індивідуальних смуг - $F^s(x_j)$ зі значень s-1 залишку

експериментального спектра - $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$, має вигляд:

$$\Phi^s(A_i, w_i) = \sum_{j=1}^k [\Delta\varphi^{s-1}(x_j) - F^s(x_j)]^2 = \min,$$

а для спрощення мінімізації і полегшення знаходження оптимальних параметрів цільової функції застосовується розділення цільової функції на окремі частини по ділянках інтегрального спектра люмінесценції з використанням додаткового критерію мінімальності всіх її частин:

$$\Phi_1(A_i, w_i) \wedge \Phi_2(A_i, w_i) \wedge \dots \wedge \Phi_m(A_i, w_i) = \min,$$

де m - число смуг.