

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

В основу винаходу поставлено задачу розробки способу аналізу експериментальних спектрів люмінесценції, який дозволяє знайти в експериментальному спектрі люмінесценції як індивідуальні смуги люмінесценції в яких до початку розкладання відомо тільки положення максимуму по осі абсцис, так і слабовиражені 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.

Поставлена задача вирішується тим, що в способі аналізу експериментальних спектрів люмінесценції, що включає одержання експериментальних спектрів люмінесценції, розкладання експериментальних спектрів люмінесценції на індивідуальні смуги інтенсивність яких 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 слабовиражених або сильно перекритих сусідніми компонентами індивідуальних смуг люмінесценції використовують розрахункові функції Гауса в яких заздалегідь невідомі значення трьох параметрів: амплітуд максимумів, напівширин й положень 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 погрішності розкладання, що являє собою монотонну функцію без значно виражених екстремумів,  $\Delta\varphi^{s-1}(x_j)$  - значення залишку експериментального спектра після  $s$ -і 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  $s$ -і 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. Для знаходження оптимальних значень параметрів функцій Гауса, які описують індивідуальні смуги люмінесценції з найденими 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 -  $A_i, w_i$ , максимуми 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:

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

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.

Таким чином запропонований спосіб аналізу експериментальних спектрів люмінесценції дозволяє знайти в експериментальному спектрі люмінесценції як слабовиражені 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.