

Таблица 2 – Параметры, определенные из сравнения расчетных и измеренных спектров отражения в области свободных А- и В-экситонов CuInSe<sub>2</sub> при T = 4.2 K

	А-экситон	В-экситон
Резонансная энергия	$E = 1.04104 \text{ eV}$	$E = 1.04455 \text{ eV}$
Параметр затухания	$\Gamma = 0.91 \text{ meV}$	$\Gamma = 0.74 \text{ meV}$
Толщина мертвого слоя	$d = 7.83 \text{ nm}$	$d = 8.46 \text{ nm}$
Поляризуемость	$4\pi\alpha = 0.0033$	$4\pi\alpha = 0.0027$

### Заключение

В настоящей работе проанализированы спектры отражения нанокристаллов GaN и CuInSe<sub>2</sub> с помощью одно- и двухосцилляторной моделей с учетом "мертвого" слоя. Из сравнения экспериментальных и расчетных контуров спектров отражения определены значения энергии экситонного резонанса, параметра затухания, толщины "мертвого" слоя и поляризуемости.

### СПИСОК ЦИТИРОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Борн, М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф. – Москва, 1970.
2. Hopfield, J.J.; Thomas, D. Theoretical and Experimental Effects of Spatial Dispersion on the optical Properties of Crystals // Phys. Rev., 32, 1963. – S. 563-572.
3. Экситоны / Под ред. Э.И. Рашба. – Москва, 1985.
4. Киселев, В.А. Экситонная спектроскопия приповерхностной области полупроводников / В.А. Киселев, Б.В. Новиков, А.Е. Чередниченко. – Ленинград, 1987.
5. Ракович, Ю.П. Экситонное отражение монокристаллов ZnSe с учетом влияния поверхностного электрического поля // ЖПС. 1999. – Т. 66. – № 3.
6. Rakovich, Yu. Computer modeling the Excitonic Reflection and Photoluminescence Spectra of GaN Epitaxial Layers. International Conference on Neural Networks and Artificial Intelligence / Yu. Rakovich, N.P. Tarasjuk, A.A. Gladyschuk, E.V. Lucenko, G.P. Yablonskii, M. Heuken, K. Heime. – Brest, 1999. – P. 204-209.
7. Боглаев, Ю.П. Вычислительная математика и программирование. – Москва, 1990.

УДК 535.337

*Ивенкова О.А.*

*Научный руководитель: ст. преподаватель Тарасюк Н.П.*

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСИТОННЫХ СПЕКТРОВ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

### Введение

Широкимасштабные исследования оптических спектров экситонов в полупроводниковых кристаллах вызваны в первую очередь потребностями бурно развивавшейся опто- и квантовой электроники.

Для анализа спектров в области экситонного резонанса наибольшее распространение получил метод подгонки вычисляемых по формулам Френеля кривых экситонного отражения к экспериментальным спектрам [1]. Далее по определенным из спектров отражения значениям резонансной энергии  $E_0$ , параметра затухания  $\Gamma$ , поляризуемости  $4\pi\alpha$ , толщины "мертвого" слоя  $d$  анализируются спектры фотолюминесценции и определяются коэффициент диффузии  $D_{ex}$  и время жизни экситонов  $T_{ex}$ .

Далее рассмотрим расчет экситонных спектров фотолюминесценции CuInSe<sub>2</sub> и GaN.

### Расчет спектров фотолюминесценции

При описании формы спектра фотолюминесценции используется следующее выражение [2]:

$$I_{PL}^0(\omega) = \rho(\omega) \cdot (1 - R'(\omega)) \int_0^l n_{ex}(x) \cdot \exp(-k(\omega)x) dx. \quad (1)$$

(Кристалл имеет вид плоскопараллельной пластины, ограниченной плоскостями  $x = 0$  и  $x = l$ . Свет частоты  $\omega$  падает перпендикулярно плоскости  $x = 0$  из области  $x < 0$ .) Здесь  $\rho(\omega)$  – отнесенная к единице времени вероятность образования фотона с частотой  $\omega$  при гибели экситона,  $R'(\omega)$  – коэффициент отражения,  $k(\omega)$  – коэффициент экситонного поглощения,  $n_{ex}(x)$  – функция распределения экситонов по глубине кристалла.

Коэффициент отражения  $R'(\omega)$  определяется по формуле (2):

$$R'(\omega) = |\tilde{r}(\omega)|^2, \quad (2)$$

где  $\tilde{r}(\omega) = \frac{\tilde{r}_{12}(\omega) + r_{23}e^{2i\beta}}{1 + \tilde{r}_{12}(\omega)r_{23}e^{2i\beta}}$ ,  $\tilde{r}_{12}(\omega) = \frac{\tilde{n}(\omega) - n_0}{\tilde{n}(\omega) + n_0}$ ,  $r_{23} = \frac{n_0 - n}{n_0 + n}$ ,  $n_0$  – показатель преломления безэкситонного слоя,  $\tilde{n}(\omega)$  – показатель преломления кристалла,  $n = 1$ .

Распределение экситонов по координате можно определить из системы диффузионных уравнений для электронно-дырочных пар  $n_e$  и экситонов  $n_{ex}$  при учете рекомбинации только через экситонные состояния [3]:

$$D_e \frac{d^2 n_e}{dx^2} = \gamma_B \cdot n_e^2 - I_{ex} k \cdot \exp(-k \cdot x) - \alpha \cdot n_{ex}, \quad (3)$$

$$D_{ex} \frac{d^2 n_{ex}}{dx^2} = \frac{n_{ex}}{\tau_{ex}} + \alpha \cdot n_e - \gamma_B n_e^2. \quad (4)$$

Здесь  $D_e$  и  $D_{ex}$  – коэффициенты диффузии носителей и экситонов,  $I_{ex}$  – интенсивность возбуждения,  $k$  – коэффициент поглощения на длине волны возбуждения,  $\gamma_B$  – коэффициент связывания электронно-дырочных пар в экситоны,  $\alpha = \gamma_B N_{cve}$  – коэффициент термической диссоциации экситонов, где  $N_{cve}$  – эффективная плотность состояний в разрешенных зонах, приведенная к уровням экситонов.

Для случая преобладания диффузии и концентрации экситонов над амбиполярной диффузией и концентрацией электронно-дырочных пар, из двух уравнений получается одно для экситонов:

$$D_{ex} \frac{d^2 n_{ex}}{dx^2} = \frac{n_{ex}}{\tau_{ex}} - I_{ex} k \cdot \exp(-k \cdot x). \quad (5)$$

При учете граничных условий на плоскости  $x=0$ :

$$D_{ex} \frac{dn_{ex}}{dx} \Big|_{x=0} = S_{ex} n_{ex}(0) \quad \text{и} \quad n_{ex} \Big|_{x=l} = 0, \quad (6)$$

решение уравнения (5) получается в виде

$$n_{ex}(x) = \frac{I_{ex} \cdot k \cdot \tau_{ex}}{L^2 k^2 - 1} \left( \frac{k - \frac{S_{ex}}{D_{ex}}}{1 - \frac{S_{ex}}{D_{ex}}} \cdot \exp\left(-\frac{x}{L}\right) - \exp(-k \cdot x) \right) \quad (7)$$

Здесь  $S_{ex}$  – скорость поверхностной рекомбинации экситонов,  $L = \sqrt{D_{ex} \cdot \tau_{ex}}$  – длина диффузии экситонов.

Значения резонансной энергии  $E_0$ , параметра затухания  $\Gamma$ , поляризуемости  $\Delta\mu$ , толщины “мертвого” слоя  $d$  берутся из рассчитанных спектров отражения.

## Результаты

Для подгонки вычисляемых кривых к экспериментальным спектрам использовалась целевая функция вида

$$F = \sum_{i=1}^N \left( Y_{теор_i} - Y_{эксн_i} \right)^2, \quad (8)$$

где  $N$  – число экспериментальных точек,  $Y_{теор_i}$  и  $Y_{эксн_i}$  – теоретические и экспериментальные значения [4].

Для минимизации функции целевой функции  $F$  использовался метод квадратичной интерполяции-экстраполяции [5].

Ниже приведены экспериментальные (сплошная кривая) и рассчитанные (штриховая кривая) контуры полосы фотолюминесценции (рисунки 1 и 2)  $\text{CuInSe}_2$ , а также параметры, полученные из подгонки (таблицы 1 и 2).

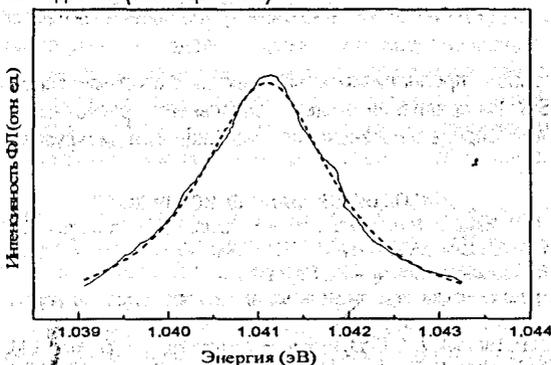


Рисунок 1 – Экспериментальный (сплошная линия) и рассчитанный (штриховая) спектры фотолюминесценции  $\text{CuInSe}_2$  при  $T = 4.2$  К для А-экситона

Таблица 1 – Параметры, определенные из сравнения расчетных и измеренных спектров фотолюминесценции в области свободного А-экситона  $\text{CuInSe}_2$  при  $T = 4.2$  К ( $l_{ex} = 5 \frac{\text{Bm}}{\text{cm}^2}$ ,

$k = 3.5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ ,  $\epsilon_0 = 13.6$ ,  $S_{ex} = 100 \text{ см/с}$ ,  $l = 4 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ ,  $E_{0A} = 1.04106 \text{ эВ}$ ,  $\Gamma = 1.04 \text{ мэВ}$ ,  $4\pi\alpha = 0.00255$ ,  $d = 13.5 \text{ нм}$ )

Коэффициент диффузии экситона $D_{ex}$ , $\frac{\text{см}^2}{\text{с}}$	0.86
Время жизни экситонов $\tau_{ex}$ , пс	42

Таблица 2 – Параметры, определенные из сравнения расчетных и измеренных спектров фотолюминесценции в области свободного В-экситона  $\text{CuInSe}_2$  при  $T = 4.2$  К ( $l_{ex} = 5 \frac{\text{Bm}}{\text{cm}^2}$ ,

$k = 3.5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ ,  $\epsilon_0 = 13.6$ ,  $S_{ex} = 100 \text{ см/с}$ ,  $l = 4 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ ,  $E_{0B} = 1.04449 \text{ эВ}$ ,  $\Gamma = 0.96 \text{ мэВ}$ ,  $4\pi\alpha = 0.00194$ ,  $d = 1.6 \text{ нм}$ )

Коэффициент диффузии экситона $D_{ex}$ , $\frac{\text{см}^2}{\text{с}}$	3.67
Время жизни экситонов $\tau_{ex}$ , пс	33

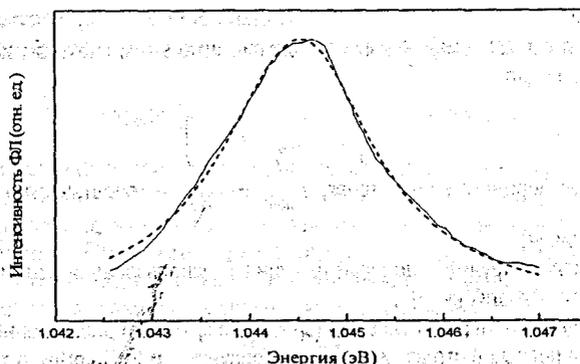


Рисунок 2 – Экспериментальный (сплошная линия) и рассчитанный (штриховая) спектры фотолюминесценции  $\text{CuInSe}_2$  при  $T = 4.2$  К для В-экситона

### Заключение

В настоящей работе проанализированы спектры фотолюминесценции нанокристаллов  $\text{GaN}$  и  $\text{CuInSe}_2$ . Из сравнения экспериментальных и расчетных контуров спектров фотолюминесценции определены значения коэффициента диффузии  $D_{ex}$  и время жизни экситонов  $\tau_{ex}$ .

### СПИСОК ЦИТИРОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. А.В. Мудрый, М.В. Якушев, Р.Д. Томлинсон, А.Е. Хилл, Р.Д. Пилкингтон, И.В. Боднар, И.А. Виктор, В.Ф. Гременок, И.А. Шакин, А.И. Патук // ФТП. – 2000. – Т.34. – № 5. – С. 550-554.
2. Агранович, В.М. Теория экситонов. – М.: Наука, 1968.
3. Нолле, Э.Л. О рекомбинации через экситонные состояния в полупроводниках // ФТТ. – 1967. – Т.9. – N 1. – С. 122-128.
4. Yu. Rakovich, N.P. Tarasjuk, A.A. Gladyshchuk, E.V. Lucenko, G.P. Yablonskii, M. Heuken, K. Heime. Computer modeling the Excitonic Reflection and Photoluminescence Spectra of  $\text{GaN}$  Epitaxial Layers. International Conference on Neural Networks and Artificial Intelligence. – Brest, 1999. – P. 204-209.
5. Боглаев, Ю.П. Вычислительная математика и программирование. – Москва, 1990.

УДК 681.3

Кочурко В.А., Согоян А.Л.

Научный руководитель: профессор Муравьев Г.Л.

### ПОДХОД К ГЕНЕРАЦИИ ТЕСТОВЫХ ОПИСАНИЙ СИСТЕМ

Моделирование и в том числе имитационное широко используется для анализа и синтеза систем. Одним из этапов, который обеспечивает проведение моделирования, является этап обследования системы, процессов функционирования системы с целью получения информации, необходимой как для разработки моделей, так и оценки их адекватности. Последнее как раз и предполагает получение характеристик функционирования системы, которые и используются в качестве эталонных при оценке адекватности построенных моделей. Соответственно одна из задач обучения моделированию – обеспечить полный цикл работ, включая разработку модели и ее аттестацию.

Здесь рассматривается подход к организации автоматического формирования исходных тестовых описаний, представляющих собой наборы параметров систем и набо-