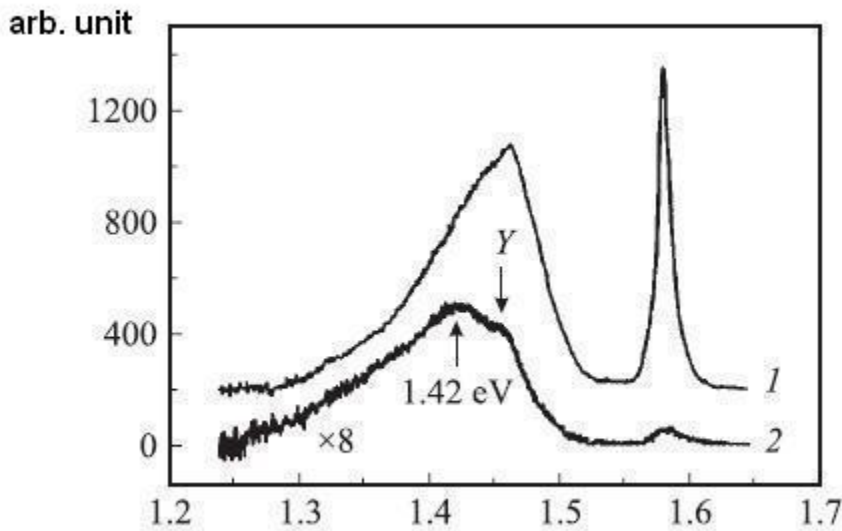


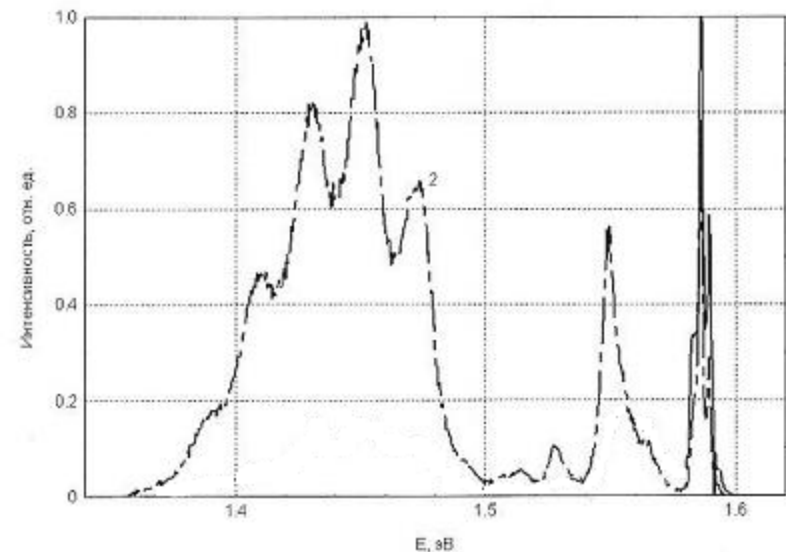
# Моделирование спектра люминесценции в полупроводниках CdTe с учетом электрон-фононного взаимодействия

Руководитель: Белова И.М.  
Студент: Герасимова В.Н.

# Экспериментальное исследование спектров люминесценции в материале CdTe при энергиях излучения 1.36 - 1.49 эВ.



Спектр люминесценции  
при  $T=100\text{K}$



Спектр люминесценции  
при  $T=4.2\text{K}$

# Расчетные формулы

$$E_e(R) = E_e(R_0) + \sum_{n\alpha} B_{n\alpha} u_{n\alpha}$$

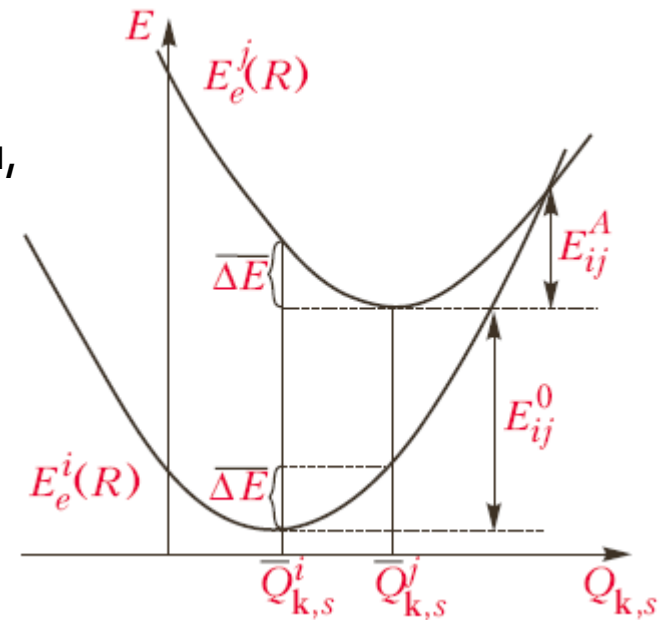
где  $E_e(R)$  - энергия электронной системы,  
 $E_e(R_0)$  - энергия электронной системы в начальном состоянии

$B_{n\alpha}$  - постоянные,  $\alpha$  - номер атома в элементарной ячейке, соответствующей радиус вектору  $n$

$u_{n\alpha}$  - смещение системы относительно начального состояния

$$S = \Delta \bar{E} / \hbar \Omega_s(k) \quad - \text{фактор Хуанга-Риса}$$

где  $\Omega_s(k)$  - частота моды  $s$



# Сильная электрон-фононная связь

Форма линии выглядит следующим образом:

$$G(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-S} S^n}{n!} \delta(\omega - E_{fi}^0 / \hbar - n\Omega_0)$$

где  $n$  – число фононов

В нашем случае дельта-функции заменим на распределение Гаусса

$$G(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-S} S^n}{n!} e^{-\frac{(E - E_0)^2}{\sigma^2}}$$

# Метод Левенберга-Маркуарта

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{y_i - y(x_i, a)}{\sigma_i} \right)^2, \quad y_i \text{ - экспериментальные значения}$$

$$y(x_i, a) = \sum_{j=0}^4 e^{-\frac{(x-E)^2}{\sigma^2}} \cdot e^{-S} \frac{S^j}{j!}$$

1) Вычислить  $\chi^2(a)$

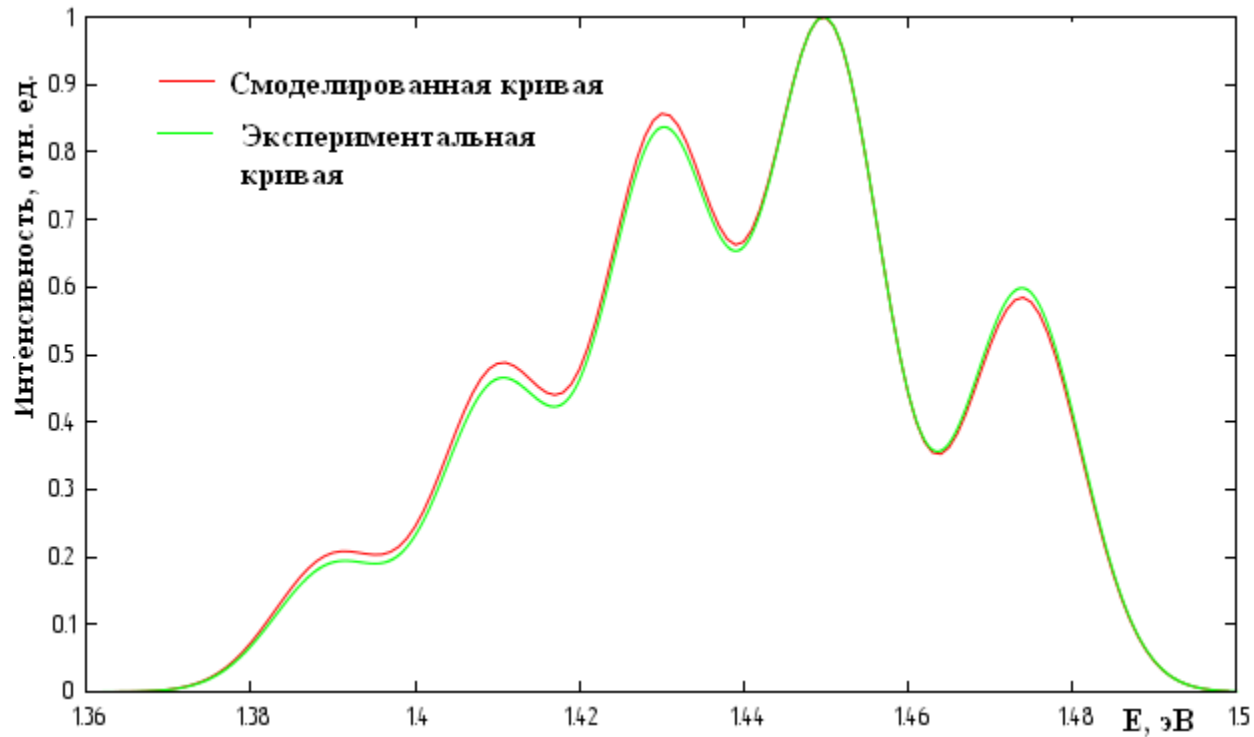
2) Выбрать начальное значение для  $\lambda$ , например  $\lambda = 0.001$

3) Решить систему линейных уравнений  $\sum_{l=1}^M \alpha_{kl} \delta a_l = \beta_k$  для  $\delta a$  и оценить  $\chi^2(a + \delta a)$

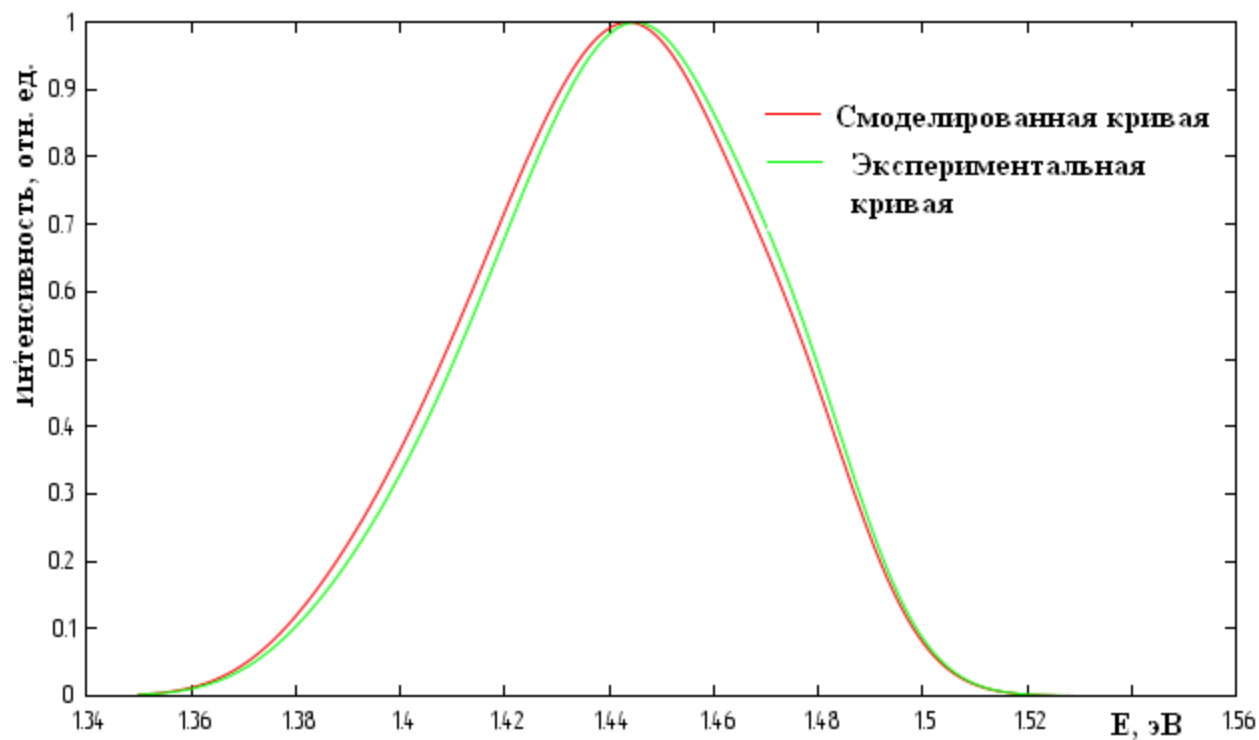
4)  $\chi^2(a + \delta a) \geq \chi^2(a)$ , то умножить  $\lambda$  на 10 (или любой другой постоянный множитель) и перейти к пункту 3

5) Если  $\chi^2(a + \delta a) < \chi^2(a)$ , то разделить  $\lambda$  на 10 (или любой другой постоянный множитель), изменить текущее решение  $a \leftarrow a + \delta a$  и перейти к пункту 3

# Результаты



Спектры люминесценции CdTe при температуре жидкого гелия. Зеленым цветом обозначена экспериментальная кривая, красным — смоделированная кривая с найденными параметрами  $S = 1.69$ ,  $\text{Sigma} = 0.01$  эВ.



Спектры люминесценции CdTe при температуре жидкого азота. Зеленым цветом обозначена экспериментальная кривая, красным – смоделированная кривая с найденными параметрами  $S = 1.59$ ,  $\text{Sigma} = 0.02$  эВ.

## Выводы

- 1) В настоящей работе предложена модель, объясняющая экспериментальные данные излучательной рекомбинации в полупроводнике CdTe в интервале энергий 1.36 - 1.49 эВ при температуре жидкого гелия.
- 2) Разработана программа, позволяющая путем подгонки теоретической кривой под экспериментальную методом Левенберга-Маркуарта определить значение фактора Хуанга-Риса и дисперсию в распределении Гаусса.
- 3) Исходя из результатов моделирования, следует, что тонкую структуру спектра люминесценции при температуре жидкого гелия, можно объяснить фоонными повторениями основной линии (1.474 эВ). Также был смоделирован спектр люминесценции при температуре жидкого азота, и оказалось, что выбранная нами модель, подходит для объяснения характерного пика в области 1.4-1.5 эВ.
- 4) Нахождение фактора Хуанга-Риса по экспериментальным данным, может служить средством идентификации дефекта, отвечающего данной линии люминесценции, в материале.