

## О ВОЗМОЖНОСТИ ДЕКОМПОЗИЦИИ СЛОЖНЫХ СПЕКТРОВ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

С.П. Крамынин, Е.М. Зобов, М.Е. Зобов

ФГБУН «Институт физики им. Х.И. Амирханова» Дагестанского федерального  
исследовательского центра РАН

367015, Россия, Республика Дагестан, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94

kraminin@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.148

**Аннотация:** Предложен метод декомпозиции интегрального спектра фотолюминесценции на составляющие, основанный на анализе идентификатора, представляющего собой соотношение первой и второй производной экспериментальных данных. В работе изучен вопрос о границах применимости данного метода декомпозиции сложного спектра фотолюминесценции. На примере интегрального спектра, образованного двумя гауссианами дано определение чувствительности метода. Показана эволюция зависимости используемого идентификатора от длины волны при изменении расстояния между максимумами элементарных компонент. С помощью синтетического эксперимента построены зависимости чувствительности от соотношения полуширин и интенсивностей составляющих интегрального спектра. Полученные зависимости имеют нелинейный характер и имеют локальные максимумы и минимумы. Использование рассчитанных зависимостей позволяет оценить при каком перекрытии полос разложение еще возможно, а при каком выделить элементарную составляющую из интегрального спектра уже невозможно.

**Ключевые слова:** фотолюминесценция, спектр, декомпозиция, ZnS, ZnO, моделирование, интегральный спектр, гауссиан, люминесцентный анализ, синтетический эксперимент.

### 1. Введение

В наше время активно исследуются оптические свойства, особенно фотолюминесценция соединений и наносистем на основе элементов группы  $A^{II}B^{IV}$ . Стоит отметить, что, например, сульфид цинка ( $ZnS$ ) является одним из наиболее важных полупроводников для оптоэлектронных устройств. Как правило,  $ZnS$  используется в качестве буферного слоя в высокоэффективных солнечных элементах  $Cu(In,Ga)Se_2$  благодаря своей экологичности.

Так, в работе [1] исследовались кристаллическая структура и фотолюминесценция нанокристаллов  $ZnSe$  и  $ZnSe:Mn$ , полученных методом горения. Авторами [2] исследованы спектрально и временно-разрешенную фотолюминесценцию легированных квантовых точек  $Cd_xZn_{1-x}Se_yS_{1-y}/ZnS$  и их наноконкомпозиты. Исследование фотолюминесцентных свойств наночастиц  $ZnS$ , легированных кальцием полученных гидротермальным методом приведено в работе [3]. В статье [4] приводятся исследования широкополосной фотолюминесценции

соединения  $g-C_3N_4/ZnO/ZnS$ , авторы предлагают использование данных соединений как основы для белых светодиодов. Авторы работы [5] занимались изучением квантовых точек  $ZnS:Eu$ , легированных ионами европия. Данное соединение предполагается использовать в оптоэлектронных и фотокаталитических приложениях. В работе [6] описывается успешный синтез гибридного композита  $ZnS-CdS$ , легированного никелем используя простой метод химического осаждения. Авторами [6] проведены исследования оптических, структурных, морфологических, и магнитных свойств гибридного композита  $ZnS-CdS$ . В работе [7] представлены исследования квантовых точек  $ZnS$  легированных кобальтом. Исходные образцы и образцы, легированные кобальтом, демонстрировали схожие спектры фотолюминесценции в синей области спектра, в то время как повышенная (в два раза) интенсивность фотолюминесценции наблюдалась для образца, легированного  $Co$ . Следует отметить, что приведенные в работах [3-12] спектры имеют сложную структуру и не представляют собой изолированные полосы гауссовой формы.

Опираясь на вышесказанное, можно утверждать, что изучение фотолюминесценции полупроводниковых соединений является очень важным и востребованным методом в исследовании оптических свойств и зонной структуры данных соединений. Спектры фотолюминесценции вышеупомянутых соединений зачастую представляют собой сложные спектры, являющиеся суперпозицией нескольких полос излучения [3-12, 16, 17]. Сложные спектры фотолюминесценции могут также наблюдаться и в других соединениях, например, в алмазе [18]. Данное обстоятельство имеет как структурную, так и дефектно-примесную природу. Исследование тонкой структуры интегральных спектров фотолюминесценции позволяет выявить центры свечения, узнать их количество и определить характеристические параметры, а также связать их с теми или иными структурными особенностями изучаемого соединения.

В данной статье мы рассмотрим особенности и границы применимости метода анализа сложных спектров [16], основанного на использовании соотношения первой и второй производной [19] экспериментального спектра.

## **2. Синтетический эксперимент**

Ранее нами был представлен идентификатор  $z(x)$ , используемый для анализа интегральных экспериментальных спектров ФЛ [16], основанный на использовании соотношения первой и второй производной:

$$z(x) = \frac{F''(x)}{(1 + F'(x)^2)^4}, \quad (1)$$

где  $F'(x)$  и  $F''(x)$  – первая и вторая производные экспериментального спектра соответственно. Такая функция имеет резко отличное от нуля значение в точках ответственных за максимумы элементарных составляющих интегрального спектра и значительно меньшее значение в остальном диапазоне. Производные от экспериментального спектра вычислялись по следующим формулам:

$$F'(x_i) = \frac{F(x_{i+1}) - F(x_{i-1}))}{2\Delta x}, \quad (2)$$

$$F''(x_i) = \frac{2F(x_{i-2}) - F(x_{i-1}) - 2F(x_i) - F(x_{i+1}) + 2F(x_{i+2}))}{7\Delta x^2}. \quad (3)$$

Данный метод расчета производных разработан в [20, с. 33-35].

Также следует указать, что в качестве элементарных составляющих интегрального спектра в данной работе используются гауссианы вида:

$$G = B \exp\left(-\frac{(\lambda - \lambda_m)^2}{2 \cdot w^2}\right), \quad (4)$$

$$H = 2\sqrt{2 \ln 2} \cdot w \approx 2.35482 \cdot w, \quad (5)$$

$$I_G = \sum_i G_i, \quad (6)$$

где  $B$  – интенсивность в максимуме,  $\lambda_m$  – положение максимума,  $H$  – ширина на полувисоте, связана с параметром  $w$  формулой (5). В нашем случае интегральный спектр представляет собой суперпозицию гауссиан.

В данной работе результаты получены с помощью проведения синтетического эксперимента, суть которого в следующем. В начале производится построение интегрального спектра (6), состоящего из двух гауссиан (4), находящихся на минимальном расстоянии  $\Delta\lambda = \lambda_{max2} - \lambda_{max1}$ . Затем производится нахождение идентификатора  $z(x)$ , производится анализ полученного графика на наличие двух локальных минимумов, если минимумы не обнаружены, то расстояние  $\Delta\lambda$  увеличивается с заданным шагом, до тех пор, пока не будут обнаружены два минимума. Как только минимумы обнаружены, производится запись полученных данных и изменение  $H$  или  $B$  (в зависимости от проводимого исследования) и вышеописанная процедура повторяется.

### 3. Чувствительность метода нахождения $z(x)$

При использовании  $z(x)$  для определения количества и положения элементарных полос в сложном интегральном спектре возникает вопрос о чувствительности данного подхода. Для определения чувствительности –  $Q$ , необходимо было формализовать данный параметр, т.е. выразить его

через соотношение характеристик элементарных составляющих (ЭС). Чтобы найти параметр  $Q$ , был проведен синтетический эксперимент, в котором данный параметр находился как отношение расстояния между элементарными пиками  $\Delta\lambda$  к ширине полосы на полувысоте  $H$ ,  $Q = \Delta\lambda / H$ . На рис. 1 представлена эволюция функции  $z(x)$  при изменении расстояния между пиками  $\Delta\lambda$  при сохранении неизменной интенсивности в максимуме и ширины на полувысоте  $H$ .

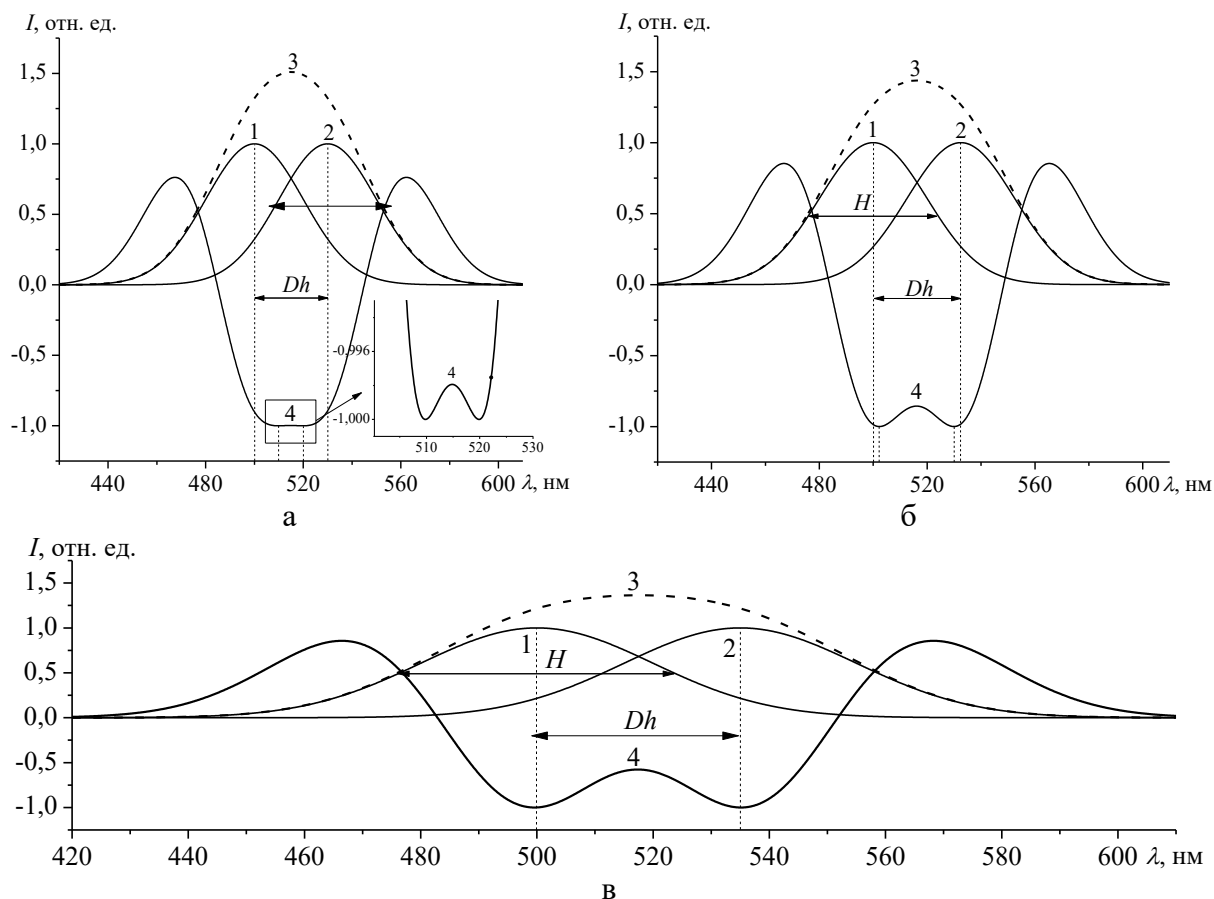


Рис. 1. Эволюция функции  $z(x)$  при изменении расстояния между пиками  $\Delta\lambda$  при сохранении неизменной интенсивности в максимуме и ширины на полувысоте  $H$ .

Цифрами обозначены следующие кривые: 1, 2 – элементарные составляющие интегрального синтетического спектра – 3, 4 – график функции  $z(x)$ . На рис. 1 а – представлен случай экстремального перекрытия, при дальнейшем незначительном уменьшении  $\Delta\lambda$  наблюдается исчезновение двух минимумов, характерных для двух ЭС на графике  $z(x)$ . В крупном масштабе показана интересующая нас часть графика  $z(x)$  во врезке. На рис. 1 б и 1 в показано значительное изменение графика  $z(x)$  при малом увеличении  $\Delta\lambda$ , видно, что ошибка определения положения максимумов ЭС стремительно уменьшается. Как показали

расчеты, две перекрывающиеся полосы с одинаковыми значениями интенсивности в максимуме и  $H$  могут быть разрешены при  $Q = 0,62$ , т.е. при  $\Delta\lambda$  равном 62% от  $H$ .

#### 4. Зависимость $Q$ от изменения $H$ и $B$ ЭС

На рис. 2. представлена зависимость отношения расстояния между максимумами элементарных составляющих, на котором всё еще возможно выделение двух компонент из интегрального спектра, от отношения полуширин этих составляющих. Как видно из графика, зависимость имеет совершенно нелинейный характер, и даже имеет локальный максимум в точке:

$$H_1 / H_2 = 0,95; \Delta\lambda / H_2 = 3,63.$$

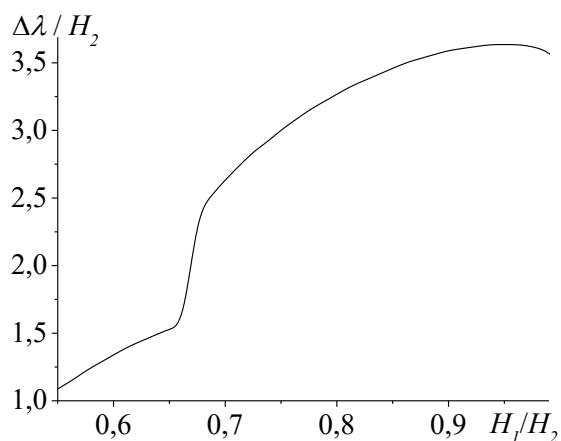


Рис. 2. Зависимость отношения расстояния обнаружения между максимумами элементарных составляющих от отношения полуширин этих составляющих  $\Delta\lambda / H_2 = f(H_1 / H_2)$ .

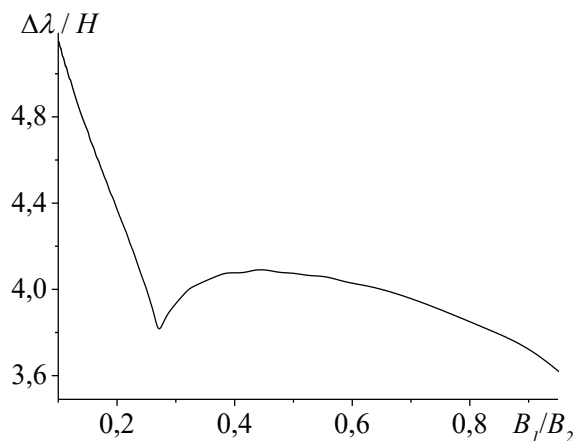


Рис. 3. Зависимость отношения расстояния обнаружения между максимумами элементарных составляющих от отношения интенсивностей этих составляющих  $\Delta\lambda / H = f(B_1 / B_2)$ .

А также две точки в которых происходит резкое изменение производной  $\partial Q / \partial(H_1/H_2)$ :

$$P1: (H_1 / H_2 = 0,68; \Delta\lambda / H_2 = 2,51), P2: (H_1 / H_2 = 0,65; \Delta\lambda / H_2 = 1,53).$$

Зависимость  $\Delta\lambda / H_2 = f(H_1 / H_2)$  исследована на диапазоне от  $H_1 / H_2 = 0,55 \div 1$ , так как при дальнейшем увеличении  $H_2$  на графике  $z(x)$  начинает наблюдаться наличие трёх минимумов, вместо ожидаемых двух, по которым производится идентификация положений максимумов элементарных составляющих.

На рис. 3 представлена зависимость отношения расстояния между максимумами элементарных составляющих, на котором всё еще возможно выделение двух компонент из интегрального спектра, от отношения интенсивностей этих составляющих. Данная зависимость, как и

зависимость  $\Delta\lambda/H_2 = f(H_1/H_2)$  (см. рис. 2) имеет нелинейный характер, и также имеет локальный максимум в точке:  $B_1/B_2 = 0,44$ ,  $\Delta\lambda/H = 4,09$ .

Для зависимости  $\Delta\lambda/H = f(B_1/B_2)$  наблюдается также локальный минимум в точке, имеющий координаты:  $B_1/B_2 = 0,27$ ;  $\Delta\lambda/H = 3,79$ .

Полученные зависимости можно интерпретировать следующим образом. Если значение  $Q$  для данного соотношения  $H_1/H_2$  лежит выше кривой на рис. 2, то две элементарные составляющие могут быть выделены из интегрального спектра. Если значение  $Q$  для данного соотношения  $H_1/H_2$  лежит ниже кривой рис. 2, то выделить элементарные составляющие из интегрального спектра будет невозможно. Данные заключения верны и для рис. 3, где зависимость изучалась от соотношения  $B_1/B_2$ .

## **5. Выводы**

Формализовано понятие чувствительности для метода анализа интегрального спектра,  $Q = \Delta\lambda/H$ . Показана эволюция графиков  $z(x)$  в результате изменении  $\Delta\lambda$ , при фиксированных значениях  $H$  и  $B$ . При таких условиях две ЭС разрешимы из интегрального спектра в случае если  $Q = 0,62$ .

Получена зависимость  $\Delta\lambda/H = f(H_1/H_2)$  (см. рис. 2), при сохранении соотношения  $B_1/B_2 = 1$ . Зависимость имеет нелинейный характер, и имеет локальный максимум в точке:  $H_1/H_2 = 0,95$ ;  $\Delta\lambda/H_2 = 3,63$ .

Рассчитана зависимость  $\Delta\lambda/H_2 = f(B_1/B_2)$ , при сохранении соотношения  $H_1/H_2 = 1$ . Данная зависимость, как и зависимость  $\Delta\lambda/H_2 = f(H_1/H_2)$  (см. рис. 3) имеет нелинейный характер, и также имеет локальный максимум в точке:  $B_1/B_2 = 0,44$ ;  $\Delta\lambda/H = 4,09$ . Для зависимости  $\Delta\lambda/H_2 = f(B_1/B_2)$  наблюдается также локальный минимум в точке, имеющий координаты:  $B_1/B_2 = 0,27$ ;  $\Delta\lambda/H = 3,79$ .

Известно, что при анализе интегральных кривых на наличие ЭС с помощью анализа второй производной указывается, что максимуму ЭС должен соответствовать минимум второй производной интегрального спектра, имеющий отрицательное значение. Как показали наши исследования – значение второй производной в точке локального минимума не всегда должно иметь значение меньше нуля. Такое положение дел характерно для ситуаций, где наблюдается значительное взаимное перекрытие элементарных составляющих и большая разница в значениях их интенсивностей в максимуме.

**Библиографический список:**

1. **Plakhtii, Ye.G.** Crystal structure and photoluminescence of ZnSe and ZnSe:Mn nanocrystals obtained by combustion synthesis / Ye.G. Plakhtii, O.V. Khmelenko // *Physica Scripta*. – 2023. – V. 98. – I. 3. – Art. № 035804. – 11 p. DOI: 10.1088/1402-4896/acb5ca.
2. **Matiushkina, A.** Time and spectrally resolved photoluminescence study of alloyed  $Cd_xZn_{1-x}Se_yS_{1-y}/ZnS$  quantum dots and their nanocomposites with SPIONs in living cells / A. Matiushkina, I. Litvinov, A. Bazhenova et al. // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2022. – V. 23. – Art. № 4061. – 20 p. DOI: 10.3390/ijms23074061.
3. **Messalti, A.S.** Investigating photoluminescence properties of Ca-doped ZnS nanoparticles prepared via hydrothermal method / A.S. Messalti, M. El-Ghozzi, D. Zambon, R. Mahiou, Z. Setifi // *Journal of Luminescence*. – 2021. – V. 238. – Art. № 118227. – 8 p. DOI: 10.1016/j.jlumin.2021.118227.
4. **Chubenko, E.B.** Broad band photoluminescence of  $g-C_3N_4/ZnO/ZnS$  composite towards white light source / E.B. Chubenko, A.V. Baglov, M.S. Leanenia, B.D. Urmanov, V.E. Borisenko // *Materials Science and Engineering: B*. – 2021. – V. 267. – Art. № 115109. – 7 p. DOI: 10.1016/j.mseb.2021.115109.
5. **Poornaprakash, B.** Photoluminescence and hydrogen evolution properties of ZnS:Eu quantum dots / B. Poornaprakash, S.V. Prabhakar Vattikuti, K. Subramanyam et al. // *Ceramics International*. – 2021. – V. 47. – I. 20. – P. 28976-28984. DOI: 10.1016/j.ceramint.2021.07.058.
6. **Madhavi, J.** Facile synthesis of Ni-doped ZnS-CdS composite and their magnetic and photoluminescence properties / J. Madhavi, V. Prasad, K.R. Reddy, Ch.V. Reddy, A.V. Raghu // *Journal of Environmental Chemical Engineering*. – 2021. – V. 9. – I. 6. Art. № 106335. – 8 p. DOI: 10.1016/j.jece.2021.106335.
7. **Poornaprakash, B.** Co-doped ZnS quantum dots: structural, optical, photoluminescence, magnetic, and photocatalytic properties / B. Poornaprakash, U. Chalapathi, P.T. Poojitha et al. // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. – 2020. – V. 33. – I. 2. – P. 539-544. DOI: 10.1007/s10948-019-05223-4.
8. **Zhang, J.** Growth of InZnP/ZnS core/shell quantum dots with wide-range and refined tunable photoluminescence wavelengths / J. Zhang, H. Gu // *Dalton Transactions*. – 2020. – V. 49. – I. 18. – P. 6119-6126. DOI: 10.1039/D0DT00575D.
9. **Wang, X.** Effects of L-cysteine on the photoluminescence, electronic and cytotoxicity properties of ZnS:O quantum dots / X. Wang, W. Dai, X. Li et al. // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2020. – V. 825. – Art. № 154052. – 8 p. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.154052.
10. **Goktas, A.** Enhancing crystalline/optical quality, and photoluminescence properties of the Na and Sn substituted ZnS thin films for optoelectronic and solar cell applications; a comparative study / A. Goktas, A. Tumbul, Z. Aba, A. Kilic, F. Aslan // *Optical Materials*. – 2020. – V. 107. – Art. № 110073. – 14 p. DOI: 10.1016/j.optmat.2020.110073.
11. **Sakthivel, P.** Influence of  $Ag^+$  and  $Mn^{2+}$  ions on structural, optical and photoluminescence features of ZnS quantum dots / P. Sakthivel, K.K. Rasu, G.K.D. Prasanna Venkatesan, A. Vilorio // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. – 2020. – V. 241. – Art. № 118666. – 7 p. DOI: 10.1016/j.saa.2020.118666.
12. **Curcio, A.** Nanostructured ZnS:Cu phosphor: correlation between photoluminescence properties and local structure / A. Curcio, L. Fernando da Silva, M.B. Bernardi, E. Longo, A. Mesquita // *Journal of Luminescence*. – 2019. – V. 206. – P. 292-297. DOI: 10.1016/j.jlumin.2018.10.073.
13. **Bo, L.** Pressure-dependent photoluminescence of CdSe/ZnS quantum dots: Critical point of different pressure regimes / L. Bo, L. Weilong, Z. Xiaojun et al. // *Physics Letters A*. – 2019. – V. 383. – I. 13. P. 1483-1486. DOI: 10.1016/j.physleta.2019.01.059.
14. **Jialun, T.** Reducing the chromaticity shifts of light-emitting diodes using gradient-alloyed  $Cd_xZn_{1-x}Se_yS_{1-y}/ZnS$  core shell quantum dots with enhanced high-temperature photoluminescence / T. Jialun, L. Fei, Y. Gaoling et al. // *Advanced Optical Materials*. – 2019. – V. 7. – I. 10. – Art. № 1801687. – 9 p. DOI: 10.1002/adom.201801687.
15. **Sakthivel, P.** Structural, optical, photoluminescence and electrochemical behaviours of Mg, Mn dual-doped ZnS quantum dots / P. Sakthivel, G.K.D. Prasanna Venkatesan, S. Kamalraj, P. Muthukrishnan // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. – 2019. – V. 30. – I. 13. – P. 11984-11993. DOI: 10.1007/s10854-019-01551-2.
16. **Kramynin, S.P.** Decomposition of  $A^{II}B^{VI}$  semiconductor compounds integral photoluminescence spectra using mathematical and computer analysis / S.P. Kramynin, E.M. Zobov, M.E. Zobov // *Journal of Luminescence*. – 2022. – V. 252. – Art. № 119432. – 8 p. DOI: 10.1016/j.jlumin.2022.119432.
17. **Kovalenko, A.V.** Sum decomposition method for gaussian functions comprising an experimental photoluminescence spectrum / A.V. Kovalenko, S.M. Vovk, Ye.G. Plakhtii // *Journal of Applied Spectroscopy*. – 2021. – V. 88. – I. 2. – P. 357-362. DOI: 10.1007/s10812-021-01182-8.

18. **Alsid, S.T.** Photoluminescence decomposition analysis: a technique to characterize N-V creation in diamond / S.T. Alsid, J.F. Barry, L.M. Pham et al. // *Physical Review Applied*. – 2019. – V. 12. – I. 4. – P. 044003-1-044003-20. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.12.044003.
19. **Zlokazov, V.B.** VSHEC – a program for the automatic spectrum calibration / V.B. Zlokazov, V.K. Utyonkov, Yu.S. Tsyganov // *Computer Physics Communications*. – 2013. – V. 184. – I. 2. – P. 428-431. DOI: 10.1016/j.cpc.2012.09.023.
20. **O'Haver, T.C.** Numerical methods for generating derivative spectra / T.C. O'Haver, A.F. Fell, G. Smith et al. // *Analytical Proceedings*. – 1982. – V. 19. – I. 1. – P. 22-46. DOI: 10.1039/AP9821900022.

#### References:

1. Plakhtii Ye.G., Khmelenko O.V. Crystal structure and photoluminescence of ZnSe and ZnSe:Mn nanocrystals obtained by combustion synthesis, *Physica Scripta*, 2023, vol. 98, issue 3, art. no. 035804, 11 p. DOI: 10.1088/1402-4896/acb5ca.
2. Matiushkina A., Litvinov I., Bazhenova A. et al. Time and spectrally resolved photoluminescence study of alloyed  $Cd_xZn_{1-x}Se_yS_{1-y}/ZnS$  quantum dots and their nanocomposites with SPIONs in living cells, *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, vol. 23, art. no. 4061, 20 p. DOI: 10.3390/ijms23074061.
3. Messalti A.S., El-Ghozzi M., Zambon D., Mahiou R., Setifi Z. Investigating photoluminescence properties of Ca-doped ZnS nanoparticles prepared via hydrothermal method, *Journal of Luminescence*, 2021, vol. 238, art. no. 118227, 8 p. DOI: 10.1016/j.jlumin.2021.118227.
4. Chubenko E.B., Baglov A.V., Leanea M.S., Urmanov B.D., Borisenko V.E. Broad band photoluminescence of  $g-C_3N_4/ZnO/ZnS$  composite towards white light source, *Materials Science and Engineering: B*, 2021, vol. 267, art. no. 115109, 7 p. DOI: 10.1016/j.mseb.2021.115109.
5. Poornaprakash B., Prabhakar Vattikuti S.V., Subramanyam K. et al. Photoluminescence and hydrogen evolution properties of ZnS:Eu quantum dots, *Ceramics International*, 2021, vol. 47, issue 20, pp. 28976-28984. DOI: 10.1016/j.ceramint.2021.07.058.
6. Madhavi J., Prasad V., Reddy K.R., Reddy Ch.V., Raghu A.V. Facile synthesis of Ni-doped ZnS-CdS composite and their magnetic and photoluminescence properties, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2021, vol. 9, issue 6, art. no. 106335, 8 p. DOI: 10.1016/j.jece.2021.106335.
7. Poornaprakash B., Chalapathi U., Poojitha P.T. et al. Co-doped ZnS quantum dots: structural, optical, photoluminescence, magnetic, and photocatalytic properties, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2020, vol. 33, issue 2, pp. 539-544. DOI: 10.1007/s10948-019-05223-4.
8. Zhang J., Gu H. Growth of InZnP/ZnS core/shell quantum dots with wide-range and refined tunable photoluminescence wavelengths, *Dalton Transactions*, 2020, vol. 49, issue 18, pp. 6119-6126. DOI: 10.1039/D0DT00575D.
9. Wang X., Dai W., Li X. et al. Effects of L-cysteine on the photoluminescence, electronic and cytotoxicity properties of ZnS:O quantum dots, *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, vol. 825, art. № 154052, 8 p. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.154052.
10. Goktas A., Tumbul A., Aba Z., Kilic A., Aslan F. Enhancing crystalline/optical quality, and photoluminescence properties of the Na and Sn substituted ZnS thin films for optoelectronic and solar cell applications; a comparative study, *Optical Materials*, 2020, vol. 107, art. no. 110073, 14 p. DOI: 10.1016/j.optmat.2020.110073.
11. Sakthivel P., Rasu K.K., Prasanna Venkatesan G.K.D., Vilorio A. Influence of  $Ag^+$  and  $Mn^{2+}$  ions on structural, optical and photoluminescence features of ZnS quantum dots, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2020, vol. 241, art. no. 118666, 7 p. DOI: 10.1016/j.saa.2020.118666.
12. Curcio A., Fernando da Silva L., Bernardi M.B., Longo E., Mesquita A. Nanostructured ZnS:Cu phosphor: correlation between photoluminescence properties and local structure, *Journal of Luminescence*, 2019, vol. 206, pp. 292-297. DOI: 10.1016/j.jlumin.2018.10.073.
13. Bo L., Weilong L., Xiaojun Z. et al. Pressure-dependent photoluminescence of CdSe/ZnS quantum dots: Critical point of different pressure regimes, *Physics Letters A*, 2019, vol. 383, issue 13, pp. 1483-1486. DOI: 10.1016/j.physleta.2019.01.059.
14. Jialun T., Fei L., Gaoling Y. et al. Reducing the chromaticity shifts of light-emitting diodes using gradient-alloyed  $Cd_xZn_{1-x}Se_yS_{1-y}@ZnS$  core shell quantum dots with enhanced high-temperature photoluminescence, *Advanced Optical Materials*, 2019, vol. 7, issue 10, art. no. 1801687, 9 p. DOI: 10.1002/adom.201801687.
15. Sakthivel P., Prasanna Venkatesan G.K.D., Kamalraj S., Muthukrishnan P. Structural, optical, photoluminescence and electrochemical behaviours of Mg, Mn dual-doped ZnS quantum dots, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2019, vol. 30, issue 13, pp. 11984-11993. DOI: 10.1007/s10854-019-01551-2.



16. Kramynin S.P., Zobov E.M., Zobov M.E. Decomposition of A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup> semiconductor compounds integral photoluminescence spectra using mathematical and computer analysis, *Journal of Luminescence*, 2022, vol. 252, art. no. 119432, 8 p. DOI: 10.1016/j.jlumin.2022.119432.
17. Kovalenko A.V., Vovk S.M., Plakhtii Ye.G. Sum decomposition method for gaussian functions comprising an experimental photoluminescence spectrum, *Journal of Applied Spectroscopy*, 2021, vol. 88, issue 2, pp. 357-362. DOI: 10.1007/s10812-021-01182-8.
18. Alsid S.T., Barry J.F., Pham L.M. et al. Photoluminescence decomposition analysis: a technique to characterize N-V creation in diamond, *Physical Review Applied*, 2019, vol. 12, issue 4, pp. 044003-1-044003-20. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.12.044003.
19. Zlokazov V.B., Utyonkov V.K., Tsyganov Yu.S. VSHEC – a program for the automatic spectrum calibration, *Computer Physics Communications*, 2013, vol. 184, issue 2, pp. 428-431. DOI: 10.1016/j.cpc.2012.09.023.
20. O'Haver T.C., Fell A.F., Smith G. et al. Numerical methods for generating derivative spectra, *Analytical Proceedings*, 1982, vol. 19, issue 1, pp. 22-46. DOI: 10.1039/AP9821900022.

*Original paper*

### **ON THE POSSIBILITY OF DECOMPOSITION OF COMPLEX PHOTOLUMINESCENCE SPECTRA**

S.P. Kramynin, E.M. Zobov, M.E. Zobov

*Institute of Physics of Daghestan Scientific Center of RAS, Makhachkala, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.148

**Abstract:** A method is proposed for decomposing the integrated photoluminescence spectrum into components based on the analysis of an identifier, which is the ratio of the first and second derivatives of the experimental data. The question of the limits of applicability of this method of decomposition of a complex photoluminescence spectrum has been studied in this paper. The definition of the sensitivity of the method is given on the example of an integral spectrum formed by two Gaussians. The evolution of the dependence of the used identifier on the wavelength is shown with a change in the distance between the maxima of the elementary components. By means of a synthetic experiment, dependences of the sensitivity on the ratio of the half-widths and intensities of the components of the integral spectrum are plotted. The dependences obtained are non-linear and have local maxima and minima. The use of the calculated dependences makes it possible to estimate at what overlap of the bands the decomposition is still possible, and at what it is no longer possible to separate the elementary component from the integrated spectrum.

*Keywords:* photoluminescence, spectrum, decomposition, ZnS, ZnO, modeling, integrated spectrum, Gaussian, luminescent analysis, synthetic experiment.

*Крамьнин Сергей Петрович – научный сотрудник, ФГБУН «Институт физики им. Х.И. Амирханова» Дагестанского федерального исследовательского центра РАН*

*Зобов Евгений Маратович – д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, ФГБУН «Институт физики им. Х.И. Амирханова» Дагестанского федерального исследовательского центра РАН*

*Зобов Марат Евгеньевич – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт физики им. Х.И. Амирханова» Дагестанского федерального исследовательского центра РАН*

*Sergey P. Kramynin – Researcher, Institute of Physics of Daghestan Scientific Center of RAS*

*Evgeniy M. Zobov – Dr.Sc., Chief Researcher, Institute of Physics of Daghestan Scientific Center of RAS*

*Marat E. Zobov – Ph. D., Senior Researcher, Institute of Physics of Daghestan Scientific Center of RAS*

Поступила в редакцию/received: 18.07.2023; после рецензирования/revised: 02.08.2023; принята/accepted: 10.08.2023.