

Ченец В.Н., кандидат физико-математических наук, доцент  
 Дунский М.М., магистрант  
 Костанайский государственный педагогический институт

### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРИЦЕНТРОВОЙ И РЕКОМБИНАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ МОНОКРИСТАЛЛА

Запрещённая зона кристалла разделяется на  $n$  интервалов  $\frac{E_i}{n}$ , где  $E_i$  – ширина зоны (3,7 эВ). И по условиям

$$E_{1n}(1-U) \leq 0,0001 \quad (1)$$

$$|E \cdot U - E_{1n}| \leq 0,0001 \quad (2)$$

проводится «сортировка» излучаемых квантов света, где  $E_{1n}$  – граница интервала (центр),  $E$  – энергия возбуждающего излучения,  $U$  – случайное число из равномерного интервала  $[0,1]$ . Счётчик, установленный на первое условие, считает кванты внутрицентрального излучения, а счётчик, установленный на второе условие, считает кванты рекомбинационного излучения. Кванты, не относящиеся к обоим условиям, считаются участвующими в безизлучательных переходах.

Выводимая программа представляет собой матрицу, в которой первая строка – границы энергетических интервалов (центры), вторая строка – число квантов внутрицентрального излучения, приходящихся на соответствующие энергетические интервалы, третья строка – число квантов рекомбинационного излучения, приходящихся на соответствующие энергетические интервалы, четвёртая строка – отношение числа квантов внутрицентрального излучения к числу квантов рекомбинационного излучения, приходящихся на соответствующие энергетические интервалы, пятая строка – отношение числа квантов, излучённых в результате двух механизмов, к числу безизлучательных переходов.

Графически полученная информация может быть представлена в виде зависимостей:

- энергетические интервалы – отношение числа квантов внутрицентрального и рекомбинационного излучений;
- энергетические интервалы – отношение числа излучённых квантов к числу безизлучательных переходов;
- энергетические интервалы – число квантов, излучённых в результате внутрицентральных переходов (спектр);
- энергетические интервалы – число квантов, излучённых в результате рекомбинационных переходов (спектр).

Спектры излучения аппроксимируются кривой ошибок Гаусса, ввиду её большого сходства со спектром излучения реального кристалла. Следует заметить, что результаты сильно зависят от статистики, т.е. от числа испытаний. Чем больше число испытаний, тем стабильнее результат. В идеале, число испытаний должно быть равным числу возбуждающих квантов. Однако это условие ограничивается возможностями современной вычислительной техники. Например, представленная программа «считает»  $10^8$  квантов 5 часов. Увеличение на порядок числа квантов требует увеличения времени примерно на порядок. Это означает, что для пучка возбужденного излучения в  $10^{20}$  квантов потребуется время моделирования примерно  $5 \cdot 10^{12}$  часов для машины типа Pentium 4 со средними «способностями». На графиках приведены кривые, рассчитанные для  $10^9$  квантов.

ORIGIN:= 1

```

P1 := R1 ← 0
(a1 ← 0 a2 ← 0 a3 ← 0 a4 ← 0 a5 ← 0 a6 ← 0)
(a7 ← 0 a8 ← 0 a9 ← 0 a10 ← 0 a11 ← 0 a12 ← 0)
(b1 ← 0 b2 ← 0 b3 ← 0 b4 ← 0 b5 ← 0 b6 ← 0)
(b7 ← 0 b8 ← 0 b9 ← 0 b10 ← 0 b11 ← 0 b12 ← 0)
(E1 ← 3.23 E2 ← 3.08 E3 ← 2.93 E4 ← 2.78 E5 ← 2.63 E6 ← 2.48)
(E7 ← 2.33 E8 ← 2.18 E9 ← 2.03 E10 ← 1.88 E11 ← 1.73 E12 ← 1.58)
(c1 ← 0 c2 ← 0 c3 ← 0 c4 ← 0 c5 ← 0 c6 ← 0)
(c7 ← 0 c8 ← 0 c9 ← 0 c10 ← 0 c11 ← 0 c12 ← 0)
E ← 3.38
N ← 100000000
for i ∈ 1.. N
    u ← rnd(1)
    a1 ← a1 + 1 if E1·(1 - u) ≤ 0.0001
    b1 ← b1 + 1 if |E·u - E1| ≤ 0.0001
    c1 ← c1 + 1 otherwise
    a2 ← a2 + 1 if E2·(1 - u) ≤ 0.0001
    b2 ← b2 + 1 if |E·u - E2| ≤ 0.0001
    c2 ← c2 + 1 otherwise
    a3 ← a3 + 1 if E3·(1 - u) ≤ 0.0001
    b3 ← b3 + 1 if |E·u - E3| ≤ 0.0001
    c3 ← c3 + 1 otherwise
    a4 ← a4 + 1 if E4·(1 - u) ≤ 0.0001
    b4 ← b4 + 1 if |E·u - E4| ≤ 0.0001
    c4 ← c4 + 1 otherwise
    a5 ← a5 + 1 if E5·(1 - u) ≤ 0.0001
    b5 ← b5 + 1 if |E·u - E5| ≤ 0.0001
    c5 ← c5 + 1 otherwise
    a6 ← a6 + 1 if E6·(1 - u) ≤ 0.0001
    b6 ← b6 + 1 if |E·u - E6| ≤ 0.0001
    c6 ← c6 + 1 otherwise
    a7 ← a7 + 1 if E7·(1 - u) ≤ 0.0001
    b7 ← b7 + 1 if |E·u - E7| ≤ 0.0001
    c7 ← c7 + 1 otherwise
    a8 ← a8 + 1 if E8·(1 - u) ≤ 0.0001
    b8 ← b8 + 1 if |E·u - E8| ≤ 0.0001
    c8 ← c8 + 1 otherwise
    a9 ← a9 + 1 if E9·(1 - u) ≤ 0.0001
    b9 ← b9 + 1 if |E·u - E9| ≤ 0.0001
    c9 ← c9 + 1 otherwise
    a10 ← a10 + 1 if E10·(1 - u) ≤ 0.0001
    b10 ← b10 + 1 if |E·u - E10| ≤ 0.0001
    c10 ← c10 + 1 otherwise
    a11 ← a11 + 1 if E11·(1 - u) ≤ 0.0001
    b11 ← b11 + 1 if |E·u - E11| ≤ 0.0001
    c11 ← c11 + 1 otherwise
    a12 ← a12 + 1 if E12·(1 - u) ≤ 0.0001
    b12 ← b12 + 1 if |E·u - E12| ≤ 0.0001
    c12 ← c12 + 1 otherwise
R1 ← (
    E1    E2    E3    E4    E5    E6    E7    E8    E9    E10   E11   E12
    a1    a2    a3    a4    a5    a6    a7    a8    a9    a10   a11   a12
    b1    b2    b3    b4    b5    b6    b7    b8    b9    b10   b11   b12
    a1    a2    a3    a4    a5    a6    a7    a8    a9    a10   a11   a12
    b1    b2    b3    b4    b5    b6    b7    b8    b9    b10   b11   b12
    a1 + b1  a2 + b2  a3 + b3  a4 + b4  a5 + b5  a6 + b6  a7 + b7  a8 + b8  a9 + b9  a10 + b10  a11 + b11  a12 + b12
    c1    c2    c3    c4    c5    c6    c7    c8    c9    c10   c11   c12
)
R1

```

P1=

$$k := \sum_{j=1}^{10} P1_{2,j} \quad k = \blacksquare$$

$$k1 := \sum_{j=1}^{10} P1_{3,j} \quad k1 = \blacksquare$$

$$y1(\lambda) := \frac{P1_{2,1}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.74)^2 \right]}$$

$$y2(\lambda) := \frac{P1_{2,2}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.62)^2 \right]}$$

$$y3(\lambda) := \frac{P1_{2,3}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.52)^2 \right]}$$

$$y4(\lambda) := \frac{P1_{2,4}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.42)^2 \right]}$$

$$y5(\lambda) := \frac{P1_{2,5}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.32)^2 \right]}$$

$$y6(\lambda) := \frac{P1_{2,6}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.24)^2 \right]}$$

$$y7(\lambda) := \frac{P1_{2,7}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.16)^2 \right]}$$

$$y8(\lambda) := \frac{P1_{2,8}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.09)^2 \right]}$$

$$y9(\lambda) := \frac{P1_{2,9}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.02)^2 \right]}$$

$$y10(\lambda) := \frac{P1_{2,10}}{k} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 1.96)^2 \right]}$$

$$z1(\lambda) := \frac{P1_{3,1}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.74)^2 \right]}$$

$$z2(\lambda) := \frac{P1_{3,2}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.62)^2 \right]}$$

$$z3(\lambda) := \frac{P1_{3,3}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.52)^2 \right]}$$

$$z4(\lambda) := \frac{P1_{3,4}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.42)^2 \right]}$$

$$z5(\lambda) := \frac{P1_{3,5}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.32)^2 \right]}$$

$$z6(\lambda) := \frac{P1_{3,6}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.24)^2 \right]}$$

$$z7(\lambda) := \frac{P1_{3,7}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.16)^2 \right]}$$

$$z8(\lambda) := \frac{P1_{3,8}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.09)^2 \right]}$$

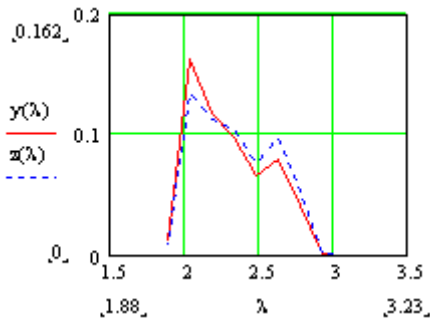
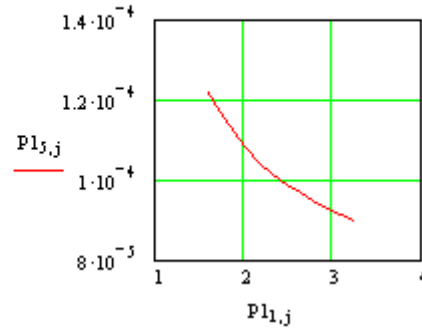
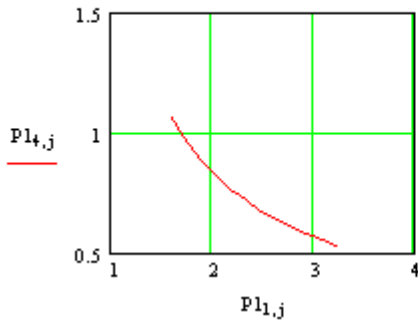
$$z9(\lambda) := \frac{P1_{3,9}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 2.02)^2 \right]}$$

$$z10(\lambda) := \frac{P1_{3,10}}{k1} \cdot e^{\left[ \frac{-1}{\sigma^2} \cdot (\lambda - 1.96)^2 \right]}$$

$$y(\lambda) := y_1(\lambda) + y_2(\lambda) + y_3(\lambda) + y_4(\lambda) + y_5(\lambda) + y_6(\lambda) + y_7(\lambda) + y_8(\lambda) + y_9(\lambda) + y_{10}(\lambda)$$

$$z(\lambda) := z_1(\lambda) + z_2(\lambda) + z_3(\lambda) + z_4(\lambda) + z_5(\lambda) + z_6(\lambda) + z_7(\lambda) + z_8(\lambda) + z_9(\lambda) + z_{10}(\lambda)$$

$$i := 1..12 \quad j := 1..12$$



**Түйіндеме**

Ұсынылған жұмыста екі әдісті механизм шеңбері арқылы монокристалдық сәулелерді математикалық моделдеуге жол беру көрсетілген.

**Conclusion**

In this work there is an effort of mathematic model to study of monocrystal radiation in two ways of mechanisms.