

## شبیه سازی قله های ترمولومینسانس نانوذرات $\text{LiF:Mg,Cu,P}$ با استفاده از روش مونت کارلو

مصطفی زاهدی<sup>۱\*</sup>، سمانه قنبری کاشان<sup>۱</sup> و عصمت حسین پور فیثی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران.

<sup>۲</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران.

\*کاشان، کیلومتر ۶ بلوار قطب راوندی، دانشگاه کاشان، دانشکده فیزیک، کدپستی: ۸۷۳۱۷-۵۳۱۵۳

پست الکترونیکی: zhdfr@kashanu.ac.ir

### چکیده

در این پژوهش یک برنامه جدید برای شبیه سازی نمودارهای شدت ترمولومینسانس (TL) در نانوذرات با استفاده از روش مونت کارلو معرفی شده است. این برنامه می تواند با دقت قابل قبولی با استفاده از چند پارامتر قابل تنظیم که به خصوصیات فیزیکی سیستم و احتمالات مطرح در آنها وابسته هستند نمودارهای شدت TL متفاوتی را ایجاد کند. با افزایش انرژی فعال سازی یا کاهش فاکتور فرکانس الکترون در گیر انداز، شدت TL به سمت دماهای پایین تر جابه جا می شود. با افزایش ضریب باز ترکیب و کاهش ضریب باز گیراندازی شدت قله افزایش یافته و با افزایش نسبت ضرایب باز گیراندازی به باز ترکیب، فاکتور تقارن قله ها افزایش می یابد. نتایج بدست آمده از این شبیه سازی با نمودارهای شدت ترمولومینسانس تجربی نانوذرات به خوبی قابل تطبیق هستند. یکی از این نمونه ها  $\text{LiF:Mg,Cu,P}$  است.

**کلید واژگان:** ترمولومینسانس، نانوذرات،  $\text{LiF:Mg,Cu,P}$ ، شبیه سازی، مونت کارلو.

### ۱. مقدمه

برخی موارد شاهد ظاهر شدن قله در دماهای پایین تر و کم شدن تعداد قله ها هستیم [۶] اما در بعضی موارد با کوچک شدن اندازه ذرات تعداد قله ها افزایش می یابد [۲]. به علت وجود چنین رفتارهای پیچیده ای توصیف TL نانوذرات دشوار است. در سال های قبل بعضی از محققان سعی کردند تا با مطرح کردن خوشه های اتمی و ارتباط فضایی میان آنها رفتار TL را با در نظر گرفتن این فرض توصیف کنند [۷]. با در نظر گرفتن اثر محدودیت اندازه بر روی ترازهای انرژی می توان گفت که در نانومواد لبه نوار هدایت و نوار ظرفیت از هم فاصله بیشتری پیدا می کنند و در اصطلاح پهنای نوار گاف انرژی افزایش پیدا می کند. علاوه بر این اثر اکسیتونی در

با گسترش نانو تکنولوژی علاقه مندی ها به ترمولومینسانس نانوذرات نیز افزایش پیدا کرد. در نانوذرات با افزایش نسبت سطح به حجم مواد روبرو هستیم و این موضوع سبب می شود که انرژی کل، میزان ناپایداری و تعداد حالت های سطحی مفید سیستم افزایش پیدا کند و در برخی از موارد شاهد افزایش کارایی نانوذرات نسبت به مواد توده ای هستیم. اما رفتار TL در نانوذرات بسیار گسترده و متنوع است به عبارت دیگر هر ماده در اندازه نانو، رفتار TL جدیدی از خود نشان می دهد که نسبت به نمونه های توده ای آنها متفاوت است. پاسخ ترمولومینسانس نانوذرات در بعضی موارد بیشتر از نمونه های توده ای [۲ و ۱] و در بعضی موارد کمتر از آنها گزارش شده است [۳-۵]. در

$$I = -\frac{dm}{dt} = r_c \cdot m \cdot n_c$$

$$\frac{dn}{dt} = -Sn \exp\left(-\frac{E}{KT}\right) + r_r n_c (N - n) \quad (1)$$

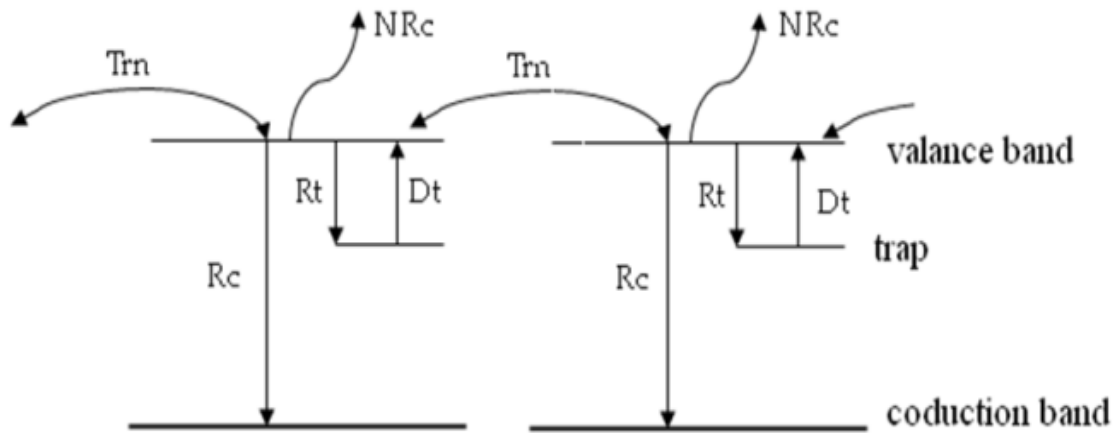
$$n + n_c = m$$

که  $r_c (cm^3 s^{-1})$  ضریب احتمال بازترکیب،  $m (cm^3)$  تمرکز حفره‌ها در مرکز بازترکیب،  $n_c (cm^3)$  تمرکز الکترون‌ها در باند هدایت،  $n (cm^3)$  تمرکز الکترون‌ها در مرکز گیراندازی،  $r_r (cm^3 s^{-1})$  ضریب احتمال بازگیراندازی و  $N (cm^3)$  تمرکز تعداد کل الکترون‌هایی است که می‌توانند توسط مرکز گیراندازی به دام بیفتند. به طور کلی مکانیزم پدیده ترمولومینسانس شامل دو مرحله می‌شود در مرحله اولیه حامل‌های بار توسط تحریک خارجی از یکدیگر جدا می‌شوند و به زوج الکترون و حفره تبدیل می‌شوند که الکترون با جذب انرژی از محرک وارد نوار هدایت می‌شود و با از دست دادن انرژی توسط شبه ترازوی که درون نوار ممنوعه قرار دارد و از نظر انرژی زیر نوار هدایت و نزدیک به آن وجود دارد به دام می‌افتد. به این شبه‌تراز، گیر انداز گفته می‌شود. وقتی یک بلور یا آشکار ساز تحت تابش قرار می‌گیرد این مرحله به پایان رسیده است. مرحله دوم عبارت است از تحریک گرمایی حامل‌های بار درون گیرانداز به منظور باز ترکیب تابشی آنها با یکدیگر و آزادسازی فوتون که با ثبت فوتون‌های حاصله می‌توان منحنی پاسخ TL را به دست آورد. فرضها و مدل‌های گوناگونی که برای توصیف ترمولومینسانس وجود دارند به مرحله دوم مربوط می‌شوند. با این مدل‌ها سعی می‌شود با ساده‌تر کردن یا در نظر گرفتن جنبه‌های فیزیکی مسئله آن را توصیف کرد. شبیه‌سازی مونت کارلو و استفاده از اعداد تصادفی در این زمینه مفید و کارآمد است. همانطور که در شکل ۱ می‌بینیم، اگر در ابتدا فرض کنیم که یک گیرانداز تک انرژی، یک مرکز باز ترکیب و احتمالات بازگیراندازی و بازترکیب قابل تنظیم داریم، کار بسیار ساده‌تر می‌شود و نوشتن برنامه برای ما امکان‌پذیر می‌شود.

نانوذرات (به دلیل کوچک‌تر شدن شعاع‌های اکسیتونی و افزایش جاذبه میان زوج الکترون و حفره) سبب پایین کشیده شدن لبه نوار هدایت به سمت نوار ظرفیت می‌شود. روی هم رفته از این دو اثر می‌توان به سادگی چشم پوشی کرد زیرا تغییرات ناشی از این دو اثر باعث افزایش چند میلی الکترون ولتی گاف انرژی می‌شود (در حدود ۲۰ میلی الکترون ولت) و این میزان تغییر انرژی در ترمولومینسانس به سادگی قابل اغماض است [۷]. علاوه بر این یک نانوپودر از تعداد زیادی خوشه مجزا تشکیل شده است که هر خوشه دارای نوار هدایت، نوار ظرفیت و گیراندازهای جداگانه است. به عبارت دیگر الکترون می‌تواند از یک خوشه به خوشه‌های دیگر تونل بزند و همین امر سبب بوجود آمدن تفاوت‌هایی در قله نانوذرات نسبت به ذرات توده‌ای می‌شود. احتمال تونل‌زنی از یک خوشه به خوشه‌های دیگر با عبارت  $S_{tran} \cdot \exp\left(-\frac{E_{tran}}{KT}\right)$  داده می‌شود.  $S_i, E_i$  به ترتیب سد انرژی مقابل ذره و فاکتور فرکانس آن حین تونل زنی از یک خوشه به خوشه دیگر است و انتقال الکترون‌ها در میان خوشه‌ها با تحریک دمایی الکترون‌ها امکان‌پذیر می‌گردد.

## ۲. مدل پیشنهادی

تا کنون مدل‌های متفاوتی برای توصیف ترمولومینسانس مواد توده‌ای گوناگون به کار گرفته شده‌اند این مدل‌ها باید علاوه بر قابل فهم بودن با در نظر گرفتن راه‌های مختلف انتقال حامل‌های بار بین ترازهای مختلف، نتایجی را پیش‌بینی و تولید کنند که با واقعیات تجربی مطابق باشند. برای این منظور مدل‌ها از یک سری معادلات شدت استفاده می‌شود. در ساده‌ترین حالت با در نظر گرفتن دو شرط حدی برای این دسته معادلات می‌توان به سادگی به معادلات شدت مرتبه اول و مرتبه دوم دست یافت.



شکل (۱): مسیرهای مجاز الکترون برای بازترکیب شدن غیر مستقیم [۶].

$$P_{dt}(T_0) = \frac{s \cdot \exp\left(-\frac{E}{KT_0}\right)}{\sum_{T_i=T_0}^{T_{stop}} s \cdot \exp\left(-\frac{E}{KT_i}\right)} \quad (2)$$

اگر احتمال تونل‌زنی را در هر دمای \$T\_j\$ با عبارت \$P\_{dt}(T\_j)\$ نشان دهیم خواهیم داشت:

$$P_{dt}(T_j) = \frac{s \cdot \exp\left(-\frac{E}{KT_j}\right)}{\sum_{T_i=T_0}^{T_{stop}} s \cdot \exp\left(-\frac{E}{KT_i}\right)} \quad (3)$$

با در دست داشتن احتمال تونل‌زنی می‌توان مدت زمانی که طول می‌کشد تا الکترون از گیرانداز خارج شود و به نوار هدایت وارد شود را حساب کنیم. این زمان با تولید یک عدد تصادفی بین صفر و یک و از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\int_0^{t_{dt}} P_{dt}(T_0) dt = \xi \quad (4)$$

که \$\xi\$, \$t\_{dt}\$ به ترتیب عدد تصادفی و زمان تصادفی خارج شدن از گیرانداز هستند. در این مرحله الکترون به نوار هدایت وارد شده است و با چهار احتمال مختلف روبرو است ممکن است به خوشه‌های مجاور تونل بزند و وارد آنها شود، یا دوباره

بعلاوه وقتی که با نانوذرات سر و کار داریم وجود خوشه‌های چند صد اتمی و تونل‌زنی الکترون را در میان آنها نمی‌توان نادیده گرفت، پس احتمال تونل‌زنی الکترون وارد برنامه می‌شود. البته فرض منطقی دیگری نیز وجود دارد و آن اینکه از کل الکترون‌هایی که در گیرانداز به دام افتاده‌اند تعدادی به صورت غیرتابشی بازترکیب می‌شوند به عبارت دیگر به ازای بازترکیب این دسته از الکترون‌ها هیچ فوتونی ثبت نمی‌شود. با دنبال کردن مسیر یک الکترون از گیرانداز تا مرکز بازترکیب می‌توان این کار را انجام داد. در گام اول فرض می‌کنیم که الکترون درون گیرانداز قرار دارد. در این مرحله دمای سیستم \$T\_0\$ است و احتمال حضور الکترون در گیرانداز یک است (فرض اولیه) احتمال تونل زدن الکترون از گیرانداز به نوار هدایت با عبارت \$S \cdot \exp\left(-\frac{E}{KT}\right)\$ داده می‌شود احتمال تونل زنی در دماهای بالاتر با افزایش دما بصورت نمایی افزایش می‌یابد و برای سادگی، این احتمالات را نرمال به یک می‌کنیم. یعنی در هر دما احتمال تونل‌زنی را به مجموع احتمالات تونل زنی از \$T\_0\$ تا \$T\_{stop}\$ تقسیم می‌کنیم تا همواره عدد حاصل برای احتمال بین صفر و یک قرار بگیرد. اگر \$P\_{dt}(T\_0)\$ نشان‌دهنده احتمال تونل زنی در دمای \$T\_0\$ باشد:

$$\varphi_{tran}(T_0) = \frac{\int_{T_0}^{T_1} s_{tran} \exp\left(-\frac{E}{KT}\right) dT}{\int_{T_0}^{T_1} \left\{ s_{tran} \exp\left(-\frac{E}{KT}\right) + rt + rc + vn \right\} dT} \quad (5)$$

$$\varphi_{rt}(T_0) = \frac{\int_{T_0}^{T_1} (rt) dT}{\int_{T_0}^{T_1} \left\{ s_{tran} \exp\left(-\frac{E}{KT}\right) + rt + rc + vn \right\} dT} \quad (6)$$

$$\varphi_{rc}(T_0) = \frac{\int_{T_0}^{T_1} (rc) dT}{\int_{T_0}^{T_1} \left\{ s_{tran} \exp\left(-\frac{E}{KT}\right) + rt + rc + vn \right\} dT} \quad (7)$$

$$\varphi_{vn}(T_0) = \frac{\int_{T_0}^{T_1} (vn) dT}{\int_{T_0}^{T_1} \left\{ s_{tran} \exp\left(-\frac{E}{KT}\right) + rt + rc + vn \right\} dT} \quad (8)$$

به ترتیب نشان دهنده احتمالات خام بازترکیب غیرتابشی، بازترکیب فوتون‌زا، بازگیراندازی و تونل‌زنی به خوشه‌های مجاور در دمای  $T_0$  هستند. به این ترتیب مجموع این چهار عبارت همواره یک است.

برنامه یک عدد تصادفی  $\xi$  بین صفر و یک انتخاب می‌کند اگر داشته باشیم:

$$0 < \xi < \varphi_{rt} \quad (9)$$

در این صورت بازگیراندازی اتفاق می‌افتد و الکترون به درون گیرانداز بر می‌گردد احتمال برگشت الکترون به گیرانداز با عبارت  $P_{rt}(T_0)$  نشان داده می‌شود.

توسط گیر انداز به دام بیفتند، به صورت غیرتابشی بازترکیب شود و یا بالاخره با یک حفره در مرکز بازترکیب، ترکیب شود و یک فوتون ساطع کند. اگر به نوار هدایت خوشه‌های دیگر تونل بزنند دوباره همین چهار احتمال پیش روی آن قرار می‌گیرد و به همین صورت و اگر دوباره وارد گیرانداز شود شرایط مثل ابتدای برنامه می‌شود، با این تفاوت که احتمال حضور الکترون در گیرانداز تغییر کرده و زمانی نیز صرف تونل‌زنی به نوار هدایت و گیرافتادن مجدد در گیرانداز شده است. اگر هر یک از دو بازترکیب انجام گیرند تاریخچه ذره به پایان می‌رسد ولی این دو بازترکیب در شدت ترمولومینسانس متفاوت عمل می‌کنند.

هر یک از این فرآیندها احتمال مخصوص به خود را دارند و با توجه به فاکتورهایی که در ابتدا تعریف می‌کنیم مشخص می‌شوند. در این مرحله نیز مانند مرحله قبل احتمالات را نرمال می‌کنیم با این تفاوت که در این مرحله این چهار عبارت را همزمان و در هر دمایی جداگانه نرمال می‌کنیم پشتوانه این کار شهودی است زیرا روند در هر دما با دماهای دیگر متفاوت است. احتمال تونل‌زنی به خوشه‌های مجاور که با عبارت  $S_{tran} \cdot \exp\left(-\frac{E_{tran}}{KT}\right)$  داده می‌شود و با افزایش دما به صورت نمایی افزایش پیدا می‌کند [۷۶]. در حالیکه آهنگ بازترکیب تابشی و غیرتابشی و بازگیراندازی نسبت به دما ثابت است و با افزایش دما تغییر نمی‌کند و این باعث می‌شود تونل زنی در دماهای بالاتر قوی شود به همین دلیل در هر دما نرمال‌سازی تکرار می‌شود. علاوه بر این هیچ الکترونی در نوار هدایت باقی نمی‌ماند یا به خوشه مجاور تونل می‌زند یا وارد گیرانداز می‌شود و یا بازترکیب می‌شود به همین دلیل این چهار عبارت را همزمان به این صورت نرمال می‌کنیم.

و اگر داشته باشیم:

$$(16)$$

$$P_{rt}(T_0) + P_{tran}(T_0) \langle \xi \rangle \langle \varphi_{tran}(T_0) + \varphi_{rt}(T_0) + \varphi_{vn}(T_0) \rangle$$

باز ترکیب غیرتابشی صورت می‌گیرد و احتمال آن را با  $P_{vn}(T_0)$  نشان می‌دهیم.

$$P_{vn}(T_0) = P_{dt}(T_0) \times \varphi_{vn}(T_0) \quad (17)$$

وقتی الکترون باز ترکیب غیرتابشی انجام می‌دهد تاریخچه ذره به پایان می‌رسد بدون اینکه هیچ شدتی برای ما به ثبت رسیده باشد. و بالاخره اگر داشته باشیم:

$$\langle \xi \rangle \langle \varphi_{tran}(T_0) + \varphi_{rt}(T_0) + \varphi_{vn}(T_0) \rangle \quad (18)$$

باز ترکیب فوتون‌زا داریم و تاریخچه ذره به پایان می‌رسد. مثل مراحل قبلی احتمال باز ترکیب فوتون‌زا  $P_{rc}(T_0)$  و زمان تصادفی مربوط به آن یعنی  $t_{rc}$  به این صورت داده می‌شود:

$$P_{rc}(T_0) = P_{dt}(T_0) \times \varphi_{rc}(T_0) \quad (19)$$

$$\int_0^{t_{rc}} P_{rc}(T_0) dt = \xi \quad (20)$$

در این مرحله تمام زمان‌های قبلی با هم جمع می‌شوند یا به عبارت دیگر کل زمانی را که الکترون صرف کرده تا از گیرانداز به مرکز باز ترکیب برسد را حساب می‌کنیم:

$$Time_{total} = t_{dt} + \dots + t_{rc} \quad (21)$$

$$I = \frac{dq}{dt} \quad (22)$$

$dq$  بار الکتریکی جابه‌جا شده در زمان  $dt$  است اینجا کل بار جابه‌جا شده یک الکترون است که بار مربوط به آن در صورت قرار می‌گیرد و  $dt$  همان زمان کل است که به دست آمد به این ترتیب می‌توان شدت ترمولومینسانس را در دمای  $T_0$  برای یک الکترون به دست آورد. برای اینکه این عدد به واقعیت

$$P_{rt}(T_0) = P_{dt}(T_0) \times \varphi_{rt}(T_0) \quad (10)$$

احتمال حضور الکترون در نوار هدایت  $P_{dt}(T_0)$  است. می‌توان در این قسمت نیز با استفاده از عدد تصادفی تولید شده و احتمال باز گیراندازی، زمان تصادفی باز گیراندازی را نیز به دست آورد:

$$\int_0^{t_{rt}} P_{rt}(T_0) dt = \xi \quad (11)$$

که  $t_{rt}$  زمان تصادفی باز گیراندازی است. اگر داشته باشیم:

$$\varphi_{rt}(T_0) \langle \xi \rangle \langle \varphi_{tran}(T_0) + \varphi_{rt}(T_0) \rangle \quad (12)$$

تونل‌زنی به خوشه‌های مجاور را خواهیم داشت و الکترون وارد نوار هدایت خوشه‌های مجاور می‌شود احتمال تونل‌زنی الکترون به نوار هدایت خوشه‌های مجاور را با  $P_{tran}(T_0)$  نشان می‌دهیم و مثل مرحله قبلی داریم:

$$P_{tran}(T_0) = P_{dt}(T_0) \times \varphi_{tran}(T_0) \quad (13)$$

در گام بعدی اگر الکترون پس از این نوار هدایت با انتخاب یک عدد تصادفی دیگر به نوار هدایت خوشه‌های دیگر وارد شود در این صورت احتمال تونل‌زنی الکترون در این مرحله به عبارت زیر داده می‌شود:

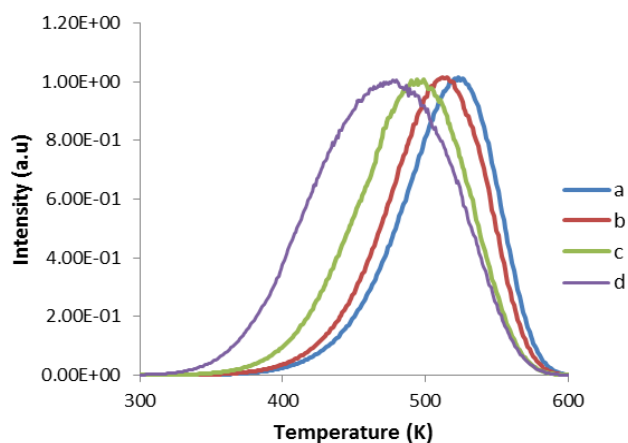
$$P_{tran}(T_0) = \varphi_{tran}(T_0) \times P_{dt}(T_0) \times \varphi_{tran}(T_0) \quad (14)$$

این عبارت به دلیل نسبت‌های شاخه‌ای در عبارت قبلی ضرب می‌شود که یادآور این مطلب است که با تونل‌زنی به خوشه‌های مجاور احتمال حضور الکترون در آن خوشه‌ها بصورت شاخه‌ای تقسیم می‌شود. زمان تصادفی تونل‌زنی نیز به این صورت حساب می‌شود [6].

$$\int_0^{t_{tran}} P_{tran}(T_0) dt = \xi \quad (15)$$

### ۳. نتایج

با استفاده از این برنامه و تغییر هر یک از هفت پارامتر قابل تنظیم برنامه می‌توان نمودارهای شدت ترمولومینسانس گوناگونی را به دست آورد. در شکل ۳ با ثابت نگه داشتن تمام متغیرهای دخیل در برنامه و تغییر دادن انرژی تونل‌زنی الکترون از یک نوار هدایت به نوار هدایت دیگر نقش این فاکتور در تغییر دادن قله‌ها بررسی شد. با کم کردن انرژی تونل‌زنی الکترون در میان خوشه‌ها که هم ارز با کاهش اندازه ذرات است، قله به سمت دماهای پایین‌تر رانده می‌شود و دمای بیشینه آن از ۵۲۷ درجه (قله a) به ۴۷۸ درجه (قله d) کاهش می‌یابد که پارامترها در جدول ۱ دیده می‌شود، این مسئله در بعضی نانوذرات قابل مشاهده است [۴]. اثر ضریب بازترکیب روی نمودارها نیز در شکل ۴ و پارامترها در جدول ۲ دیده می‌شود. همانطور که از شکل ۴ قابل مشاهده است، با افزایش ضریب بازترکیب، شدت قله‌ها افزایش می‌یابد و این نتیجه نیز برای نانوذرات مورد انتظار است [۱].



شکل (۳): نمودار شدت ترمولومینسانس با تغییر انرژی تونل‌زنی الکترون از یک نوار هدایت به نوار هدایت خوشه‌های مجاور.

نزدیک باشد، این روند را در همین دما برای تعداد زیادی الکترون (۳۰۰۰۰) تکرار می‌کنیم و میانگین زمان را به عنوان زمان واقعی قبول می‌کنیم. حالا دما را به اندازه  $\beta$  (آهنگ گرمادهی) زیاد می‌کنیم و همه مراحل را با دمای جدید تکرار می‌کنیم با این تفاوت که در این دما احتمال حضور الکترون در گیرانداز با  $P_{ex}(T_0 + \beta)$  نشان می‌دهیم و داریم:

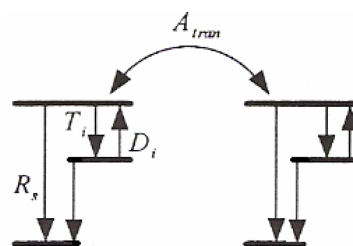
$$p_{ex}(T_0 + \beta) = p_{ex}(T_0) \times [p_{ex}(T_0) - p_{dt}(T_0) + p_{rt}(T_0)] \quad (23)$$

$$p_{ex}(T_0) = 1 \quad (24)$$

در هر دمای دیگر نیز داریم:

$$p_{ex}(T_0 + (i+1)\beta) = p_{ex}(T_0 + i\beta) \times [p_{ex}(T_0 + i\beta) - p_{dt}(T_0 + i\beta) + p_{rt}(T_0 + i\beta)] \quad (25)$$

به این ترتیب می‌توان شدت را در هر دمایی به دست آورد. می‌توان این برنامه را طوری طراحی کرد که بتواند فرضهای فیزیکی بیشتری را در بر بگیرد در این صورت پارامترهای برنامه تبدیل به هشت پارامتر قابل تنظیم می‌شود که شامل بازترکیب مستقیم از گیرانداز (ضریب بازترکیب مستقیم از گیرانداز  $dr$ ) نیز می‌شود در نظر گرفتن بازترکیب فوتون‌زا از گیرانداز کارایی بهتر برنامه را ممکن می‌سازد. این احتمال نیز به همان روشی که قبلاً گفته شد وارد برنامه می‌شود شکل کلی را می‌توان در شکل ۲ مشاهده کرد.

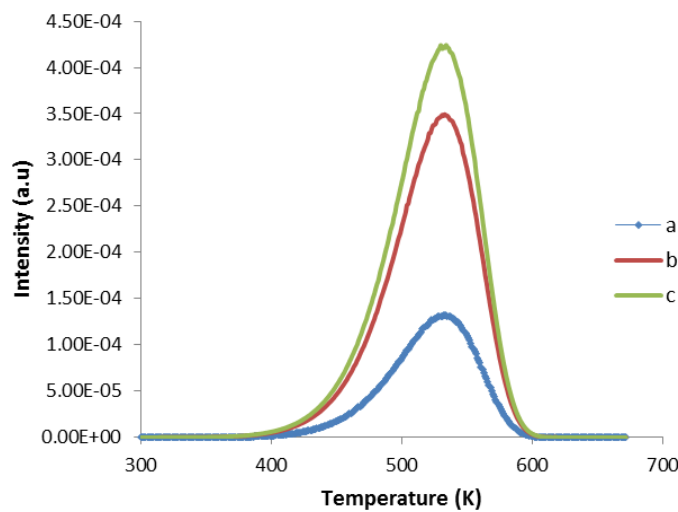


شکل (۲): مسیرهای مجاز الکترون برای بازترکیب شدن مستقیم و غیر

مستقیم [۷].

جدول (۱): پارامترهای برنامه با تغییر  $E_2$  (انرژی تونل زنی الکترون از یک نوار هدایت به نوار هدایت خوشه های مجاور)

	$E_1$	$S_1$	$rc$	$rt$	$vn$	$E_2$	$S_2$
a	۰/۶۸	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^v$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^{-0}$	۰/۹۰	$1 \times 10^{14}$
b	۰/۶۸	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^v$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^{-0}$	۰/۸۰	$1 \times 10^{14}$
c	۰/۶۸	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^v$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^{-0}$	۰/۷۰	$1 \times 10^{14}$
d	۰/۶۸	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^v$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^{-0}$	۰/۶۰	$1 \times 10^{14}$



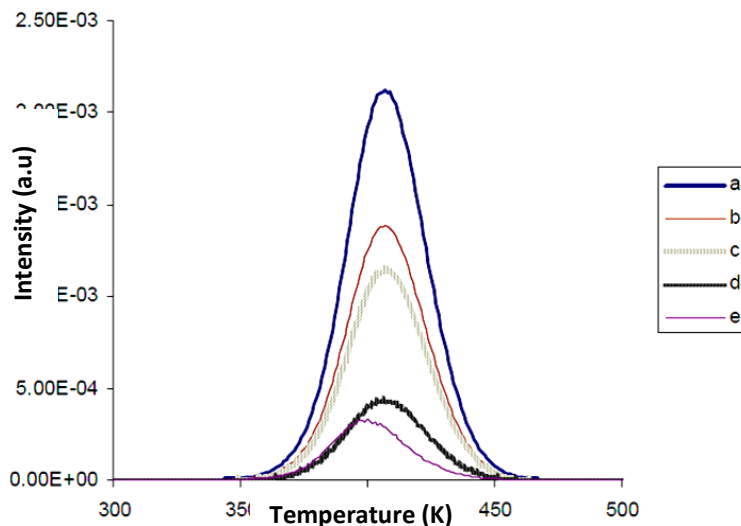
شکل (۴): نمودار شدت ترمولومینسانس با تغییر ضریب باز ترکیب.

جدول (۲): پارامترهای برنامه با تغییر  $rc$  (ضریب باز ترکیب)

	$E_1$	$S_1$	$rc$	$rt$	$vn$	$E_2$	$S_2$
a	۰/۷۰	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^v$	$1 \times 10^v$	۵/۰۰	۱/۰۰	$1 \times 10^{12}$
b	۰/۷۰	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^A$	$1 \times 10^v$	۵/۰۰	۱/۰۰	$1 \times 10^{12}$
c	۰/۷۰	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^9$	$1 \times 10^v$	۵/۰۰	۱/۰۰	$1 \times 10^{12}$

در شکل ۶ نیز ارتباط انرژی گیراندازی با شکل قله ها و دمای بیشینه آنها قابل مشاهده است با افزایش انرژی فعال سازی، قله به سمت دماهای بالاتر رانده می شود و پهنای قله در نیمه بیشینه اندکی کاهش می یابد. پارامترهای این دسته قله ها در جدول ۴ نمایش داده شده است.

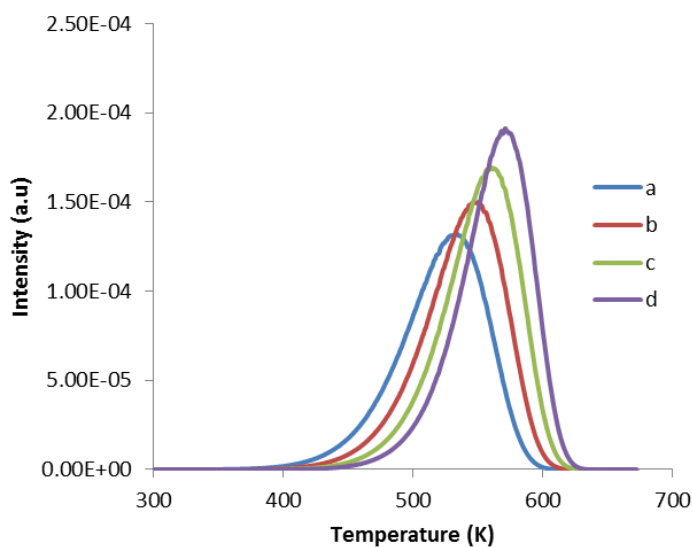
همچنین می توان وابستگی فاکتور تقارن قله ها را به نسبت ضرایب باز ترکیب و باز گیراندازی مشاهده کرد. هر چه نسبت باز ترکیب به باز گیراندازی کاهش می یابد فاکتور تقارن قله ها نیز افزایش می یابد اطلاعات این دسته قله ها نیز در شکل ۵ و جدول ۳ قابل مشاهده است.



شکل (۵): نمودار شدت ترمولومینسانس با تغییر نسبت ضریب بازگیراندازی به ضریب بازترکیب

جدول (۳): فاکتور تقارن  $\mu$  با تغییر  $\frac{rt}{rc}$  (نسبت ضریب بازگیراندازی به ضریب بازترکیب)

	$\frac{rt}{rc}$	$\mu$
a	$10^{-6}$	۰/۵
b	$10^{-2}$	۰/۵۱۳۱
c	$10^{-1}$	۰/۵۱۳۵
d	۱/۰	۰/۵۷
e	$10^3$	۰/۵۸



شکل (۶): نمودار شدت ترمولومینسانس با تغییر انرژی گیراندازی الکترون

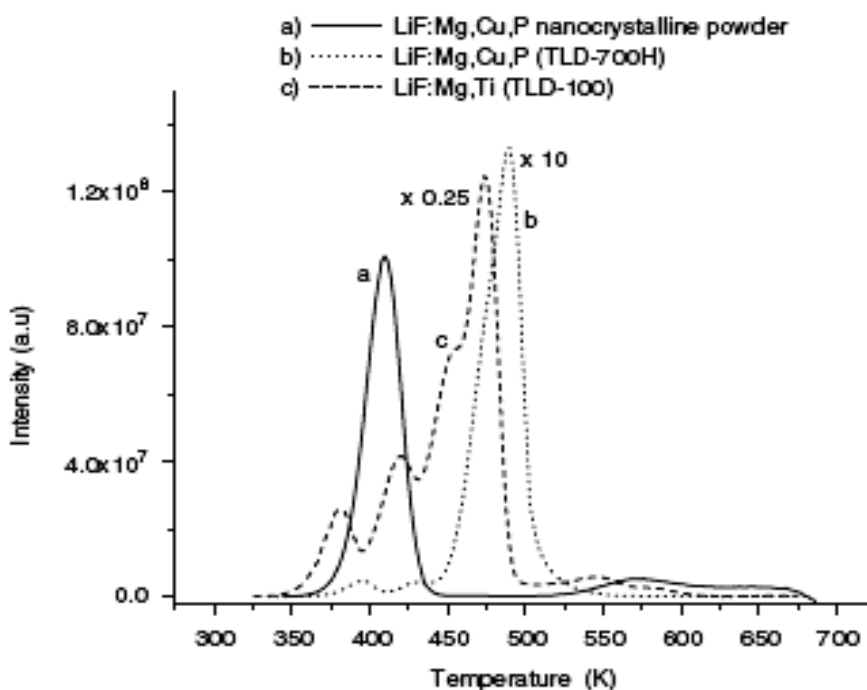


جدول (۴) : پارامترهای برنامه با تغییر  $E_1$  (انرژی گیراندازی الکترون)

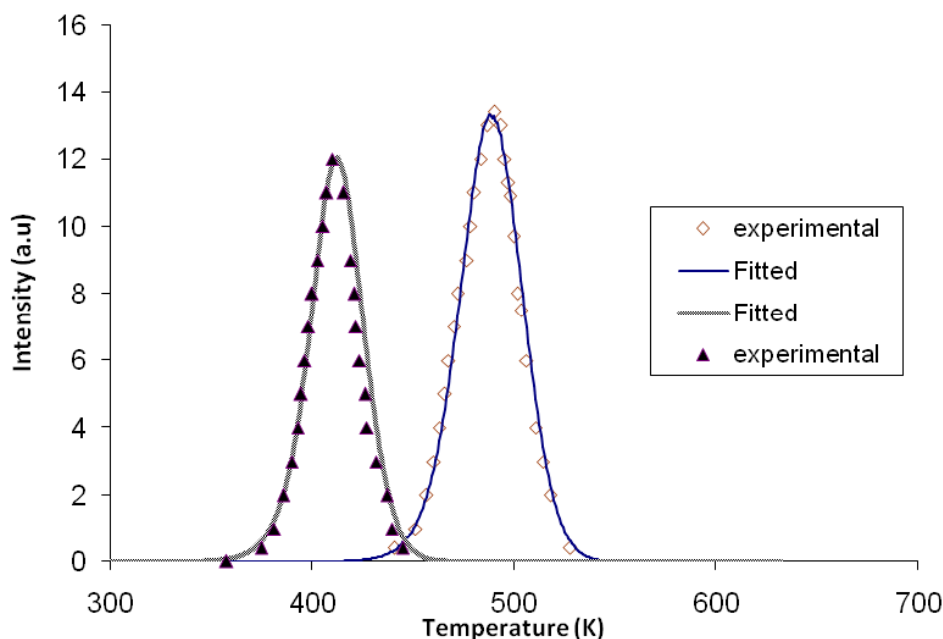
	$E_1$	$S_1$	$rc$	$rt$	$vn$	$E_2$	$S_2$
a	۰/۷۰	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^7$	۵/۰۰	۱/۰۰	$1 \times 10^{12}$
b	۰/۸۰	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^7$	۵/۰۰	۱/۰۰	$1 \times 10^{12}$
c	۰/۹۰	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^7$	۵/۰۰	۱/۰۰	$1 \times 10^{12}$
d	۱/۰۰	$1.0 \times 10^{18}$	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^7$	۵/۰۰	۱/۰۰	$1 \times 10^{12}$

کردن اندازه، قله شماره ۵ TLD-700H (نمودار b شکل ۷) که در دمای ۴۹۰ درجه قرار دارد در نمونه نانومتری LiF:Mg,Cu,P (نمودار a شکل ۷) به دمای ۴۱۰ درجه می-رسد. شکل ۸ برازش قله تجربی دزیمتر LiF:Mg,Cu,P را با قله شبیه سازی شده توسط برنامه را نشان می دهد [۲].

و البته با افزایش فاکتور فرکانس، قله به سمت دماهای کمتر جابه‌جا می‌شود. در نهایت تغییر دادن پارامترها در راستایی که به اندازه‌های کوچکتر نزدیک شد یک قله را که در دمای ۴۹۰ کلومین قرار داشت به یک قله در دمای ۴۱۰ کلومین منتقل کرد. شواهد تجربی این موضوع را تصدیق می‌کنند که با کوچک



شکل (۷) : منحنی تابش ترمولومینسانس نمونه نانومتری LiF:Mg,Cu,P [۴]



شکل (۸): داده ها با مثلث توپر مربوط به برازش قله نانومتري LiF:Mg,Cu,P و

داده ها با لوزی توخالی مربوط به برازش قله شماره ۵ LiF:Mg,Cu,P (TLD-700H)

جدول (۵): پارامترهای شبیه سازی شده توسط برنامه

	$E_1$	$S_1$	$dr$	$rc$	$rt$	$vn$	$E_2$	$S_2$
a	۲/۰۰	$1 \times 10^{18}$	۰/۰۰۱۹۷	$1 \times 10^{17}$	$1 \times 10^9$	$1 \times 10^3$	۳/۵۰	$1 \times 10^{19}$
b	۲/۰۰	$21 \times 10^{19}$	۰/۰۰۰۰۷	$1 \times 10^{11}$	$1 \times 10^2$	$1 \times 10^3$	۰/۶۰	$1 \times 10^{20}$

## ۵. مراجع

- [1] W. Chen, Z. Wang, Z. Lin, L. Lin. Thermoluminescence of ZnS nanoparticles. Appl. Physics. 70 (1997) 1465–1467.
- [2] N. Salaha, P.D. Sahare, S.P. Lochab, P. Kumar. TL and PL studies on CaSO<sub>4</sub>: Dy nanoparticles, Radiation Measurements 41 (2006) 40-47.
- [3] M. Zahedifar, E. Sadeghi, Thermoluminescence dosimetry properties of new Cu doped CaF<sub>2</sub> nanoparticles. Radiat. Prot. Dosim. 157, 3, (2013) 303.
- [4] N. Salaha, P.D. Sahare, A.A. Rupasov. Thermoluminescence of nanocrystalline LiF:Mg,Cu,P. Journal of Luminescence 124 (2007) 357-364.
- [5] M. Zahedifar, E. Sadeghi. Thermoluminescence characteristics of CaF<sub>2</sub>:Dy nanoparticles prepared by using hydrothermal method. Nucl. Instrum. and Meth. B 291 (2012) 65–72.
- [6] A. Mandowski, J. Swiatek. The kinetics of trapping and recombination in low dimensional structures. Synthetic Metals 109 (2000) 203-206.
- [7] A. Mandowski. Semi-localized transitions model for thermoluminescence. J. Phys. D: Appl. Physics. 38 (2005) 17-21.