مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۱، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۰

يك مدل جديد ترمولومينسانس با توزيع پيوستة انرژي مراكز گيراندازي

مصطفي زاهدي فر و سميه هاروني

گروه فيزيك، دانشگاه كاشان

پست الكترونيكي: zhdfr@kashanu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۸۹/۴/۳۰ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۸۹/۱۱/۲)

چكيده

يك مدل مرتبة آميختة ترمولومينسانس براي توصيف منحني تابش ترمولومينسانس با يك توزيع پيوسته و يكنواخت از مراكزگيراندازي معرفي شده است. همچنين نشان داده شده است كه اين مدل در حالت‌هاي حدي به مدل‌هاي ساده‌تر تبديل مي‌شود. رابطة معرفي شده براي شدت ترمولومينسانس برحسب دماي بيشينه (T_m) و قلة تابش ترمولومينسانس (I_m) بيان شده است كه اين پارامترها به راحتي از شكل منحني تابش ترمولومينسانس قابل تخمين هستند و به عنوان مقادير تخميني اوليه در فرآيند برازش مورد استفاده قرار مي‌گيرند. با توجه به اينكه پارامترهاي وارد شده در مدل جديد مستقيماً به خصوصيات فيزيكي سيستم ارتباط دارند، نتيجه شده است كه مدل پيشنهادي در توصيف فيزيكي پديده ترمولومينسانس با توزيع پيوستة مراكز گيراندازي كارآيي بيشتري دارد.

واژه‌هاي كليدي: ترمولومينسانس، مدل مرتبة آميخته، توزيع پيوسته

۱. مقدمه

توزیع پیوستهٔ حالت‌های گیراندازی از زمان ارائه مدل‌های اولیه توصیف کنندهٔ پدیدهٔ ترمولومینسانس مطرح بوده است. بیشتر کارهایی که در ارتباط با بررسی سینتیکی فرآیند ترمولومینسانس انجام شده است، بر مبنای فرض یک نوع مرکزگیراندازی و یک نوع مرکز بازترکیب بوده است که مدل سینتیک مرتبهٔ اول نامیده می‌شود. اکثر پژوهش‌های انجام شده بر اساس این مدل بوده‌اند، مدلی که در آن فرض می‌شود حامل‌های بار تحریک شده گرمایی که از مراکزگیراندازی خارج می‌شوند فقط می‌توانند در مراکز بازترکیب با حفره‌ها ترکیب شوند و امکان بازگیراندازی آنها توسط مراکزگیراندازی خالی وجود ندارد. در عین حال برای توصیف حالت‌های گیراندازی با توزیع پیوسته، توابع توزیع مختلفی مورد بررسی قرار گرفته است. راندل و ویلکینز [۱] اولین کسانی بودند که فرآیند ترمولومینسانس را به صورت نظری مورد بررسی قرار دادند. هورنیاک و فرانکلین [۲] برای بررسی رفتار منحنی‌های تابش ترمولومینسانس، توزیع پیوسته وگاوسی را برای مراکزگیراندازی در نظر گرفتند. هورنیاک و چن [۳] رفتار قله‌های تابش ترمولومینسانس با سینتیک مرتبهٔ اول و توزیع پیوسته و یکنواخت از حالت‌های گیراندازی را مورد بررسی قرار دادند. کیتیز وگومز-راس [۴] رابطهٔ شدت ترمولومینسانس مرتبهٔ اول با توزیع پیوسته از حالت‌های گیراندازی را به صورت تابعی از I_m و T_m معرفی کردند. مزیت بیان رابطهٔ شدت ترمولومینسانس برحسب I_m و T_m به جای n_o (تمرکز اولیهٔ حامل‌های بار در مرکزگیراندازی بر حسب cm^{-3}) و s (فاکتور فرکانس) در این است که I_m و T_m را به راحتی می‌توان از روی شکل قله تابش

Archive of SID

www.SID.ir

ترمولومینسانس تخمین زد. زاهدی فر و همکارانش[۵] همین کار را برای مدل مرتبهٔ عام با توزیع پیوسته و یکنواخت انرژی مرکز گیر اندازی انجام دادند و در آن پارامتر مرتبهٔ سینتیک مؤثر را به جای پارامتر مرتبهٔ سینتیک b در مدل مرتبهٔ عام معرفی کردند. با توجه به اینکه در مدل تک ترازی پارامتر مرتبهٔ سینتیک به نحوی گویای رقابت میان بازگیراندازی و بازترکیب حامل‌های باری است که به باند هدایت تحریک شده‌اند، در مورد یک توزیع پیوسته انرژی مراکز گیراندازی که در ایجاد یک قله نقش دارند، بازگیراندازی به همه سطوح انرژی در مدل به عنوان بازگیراندازی تلقی می‌شود و لذا یک مرتبهٔ سینتیک موثر برای بازه انرژی تعریف می‌شود. در همهٔ کارهایی که برای بررسی رابطهٔ شدت ترمولومینسانس انجام شده است، یک نوع مرکز گیراندازی و یک نوع مرکز بازترکیب در نظر گرفته شده است. این در حالی است که نمونه‌های واقعی شامل انواع مختلف نواقص و ناخالصی‌ها هستند. چن و همکارانش[۶] مدل مرتبهٔ آمیختهٔ ترمولومینسانس را معرفی کردند که در آن یک مرکز گیراندازی عمیق نیز علاوه بر مرکزگیراندازی و مرکز بازترکیب در نظر گرفته شده است. مدل چن با وجود اینکه مدل واقعی‌تری نسبت به مدل‌های دیگر است، ولی توزیع پیوسته از مراکزگیراندازی در آن لحاظ نشده است. هدف از این کار این است که ضمن تعمیم رابطهٔ شدت ترمولومینسانس مدل مرتبهٔ آمیخته در حالت تک ترازی به یک حالت با توزیع پیوسته و یکنواخت از مراکزگیراندازی، رابطهٔ نهایی شدت را به رابطه‌ای برحسب I_m و T_m نیز تبدیل کنیم.

۲. رابطهٔ شدت ترمولومینسانس مدل مرتبهٔ آمیخته در حالت تک ترازی

رابطهٔ شدت ترمولومینسانس مدل مرتبهٔ آمیختهٔ چن[۶] با استفاده از حل معادلهٔ زیر به دست آمده است:

$$I(T)=-\beta\frac{dn}{dT}=s'n(n+c)\exp(-\frac{E}{kT})\,, \qquad (1)$$

که در آن $s'=\frac{s}{N+c}$ ، $s(s^{-1})$ فاکتور فرکانس، $N(\mathrm{cm}^{-3})$ چگالی مراکز گیراندازی، $c(\mathrm{cm}^{-3})$ چگالی الکترون‌های گیر افتاده در مرکز گیراندازی عمیق در حین پرتودهی، $\beta(Ks^{-1})$ آهنگ گرمادهی موقع قرائت نمونه، $n(\mathrm{cm}^{-3})$ تمرکز الکترون‌های گیرافتاده در مرکز گیراندازی، $T(K)$ دما، $E(\mathrm{eV})$ انرژی فعال سازی و $k(eVK^{-1})$ ثابت بولتزمن است.

با حل معادلهٔ دیفرانسیل $-\beta\frac{dn}{dT}=s'n(n+c)\exp(-\frac{E}{kT})$ برای یافتن n وسپس قرار دادن آن در معادلهٔ $I(T)=-\beta\frac{dn}{dT}$، شدت ترمولومینسانس برای مدل مرتبهٔ آمیخته در حالت تک ترازی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$I(T)=\frac{c^2s'\alpha\exp(-\frac{E}{kT})\exp(\frac{cs'}{\beta}\int_{T_o}^{T}\exp(-\frac{E}{kT'})dT')}{\left(\exp(\frac{cs'}{\beta}\int_{T_o}^{T}\exp(-\frac{E}{kT'})dT')-\alpha\right)^2}\,, \qquad (2)$$

که در آن $\alpha=\frac{n_o}{n_o+c}$ و $n_o(cm^{-3})$ تمرکز اولیهٔ حامل‌های بار در مرکزگیراندازی است.

این رابطه توسط کیتیز و همکارانش[۴] به رابطه‌ای برحسب I_m و T_m تبدیل شد که به صورت زیر است:

$$I(T)=I_m\frac{\left(\exp(\frac{1-\Delta_m}{R_m})-\alpha\right)^2}{\exp(\frac{1-\Delta_m}{R_m})}\times$$
$$\frac{\exp\left(\frac{E}{kT}(\frac{T-T_m}{T_m})\right)\exp\left[\frac{T^2}{{T_m}^2R_m}\exp\left(\frac{E}{kT}(\frac{T-T_m}{T_m})\right)(1-\Delta)\right]}{\left\{\exp\left[\frac{T^2}{{T_m}^2R_m}\exp\left(\frac{E}{kT}(\frac{T-T_m}{T_m})\right)(1-\Delta)\right]-\alpha\right\}^2}, \qquad (3)$$

که در آن $\Delta=\frac{2kT}{E}$، $\Delta_m=\frac{2kT_m}{E}$، $R_m=R(T_m)=\frac{A(T_m)+\alpha}{A(T_m)-\alpha}$ و $A(T_m)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

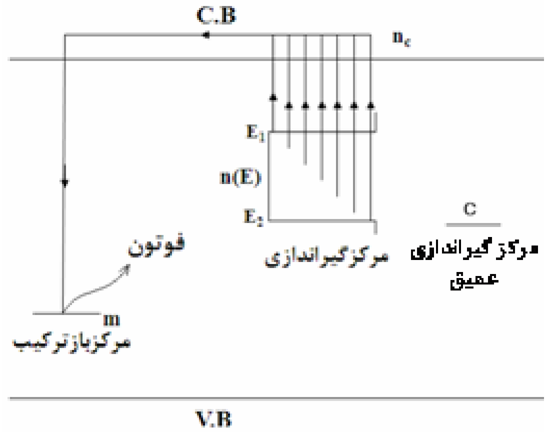
$$A(T_m)=\exp\left(\frac{cs'}{\beta}\int_{T_o}^{T_m}\exp(-\frac{E}{kT'})dT'\right). \qquad (4)$$

۳. مدل مرتبهٔ آمیختهٔ پیشنهادي با توزیع پیوسته از مراکزگیراندازي

چنانکه اشاره شد، مدل پیشنهادی بر اساس وجود یک مرکز بازترکیب، یک مرکز گیراندازی با توزیع پیوسته و یکنواخت و یک مرکز گیر اندازی عمیق (که در حین تخلیه گرمایی مرکز گیراندازی غیر فعال است) بنا شده است. نمایش طرح وار

Archive of SID

www.SID.ir



شکل ۱. نمایش طرح وار سطوح انرژی در باند ممنوع در مدل پیشنهادی.

سطوح انرژی در شکل ۱ مشاهده می‌شود.

با حل معادلهٔ دیفرانسیل $\left(-\beta\dfrac{dn}{dT}=s'n(n+c)\exp(-\dfrac{E}{kT})\right)$ در معادلهٔ (۱)، تمرکز حالت‌های گیراندازی (n) به صورت تابعی از دما به صورت زیر خواهد بود:

$$n=\frac{n_o(1-\alpha)}{\exp\left(\dfrac{cs'}{\beta}\displaystyle\int_{T_o}^{T}\exp(-\frac{E}{kT'})dT'\right)-\alpha}. \qquad (۵)$$

با در نظر گرفتن توزیع پیوسته و یکنواخت از مراکزگیراندازی رابطهٔ فوق به صورت زیر در می‌آید:

$$n(E)dE=\frac{n_o}{\Delta E}\frac{(1-\alpha)}{\exp\left(\dfrac{cs'}{\beta}\displaystyle\int_{T_o}^{T}\exp(-\frac{E}{kT'})dT'\right)-\alpha}dE\,, \qquad (۶)$$

که در آن $\Delta E=E_2-E_1$ است. E_1 و E_2 چنانکه شکل ۱ نشان می‌دهد ابتدا و انتهای بازه توزیع پیوسته انرژی مراکز گیر اندازی هستند و $n(E)dE$ تمرکز الکترون‌های گیر افتاده در مرکزگیراندازی را در بازهٔ E تا $E+dE$ نشان می‌دهد. بدیهی است که انتگرال رابطهٔ فوق روی کل بازه انرژی، n را به دست می‌دهد:

$$n=\int_{E_1}^{E_2}\frac{n_o}{\Delta E}\frac{(1-\alpha)}{\exp\left(\dfrac{cs'}{\beta}\displaystyle\int_{T_o}^{T}\exp(-\frac{E}{kT'})dT'\right)-\alpha}dE. \qquad (۷)$$

طبق رابطهٔ فوق و رابطهٔ (۱) می‌توان شدت ترمولومینسانس در مدل مرتبهٔ آمیخته با توزیع پیوسته و یکنواخت از مراکزگیراندازی را به صورت زیر به دست آورد:

$$I(T)=-\beta\frac{dn}{dT}$$
$$=\int_{E_1}^{E_2}\frac{1}{\Delta E}\frac{c^2s'\alpha\exp(-\dfrac{E}{kT})\exp(\dfrac{cs'}{\beta}\displaystyle\int_{T_o}^{T}\exp(-\frac{E}{kT'})dT')}{\left(\exp(\dfrac{cs'}{\beta}\displaystyle\int_{T_o}^{T}\exp(-\frac{E}{kT'})dT')-\alpha\right)^2}dE$$
(۸)

انتگرال روی دما در رابطهٔ (۸) را می‌توان به صورت زیر تقریب زد [۷]:

$$\int_{T_o}^{T}\exp(\frac{E}{kT'})dT'\cong\frac{kT^2}{E}\exp(-\frac{E}{kT})(1-\frac{2kT}{E})\,. \qquad (۹)$$

با اعمال معادلهٔ (۹) در معادلهٔ (۸) و با در نظرگرفتن اینکه تغییرات E فقط در قسمت نمایی(به صورت $\exp(-E/kT)$) قابل ملاحظه و در بقیهٔ جاها قابل صرف نظر است، می‌توان E واقع در نما را متغیر و در سایر موارد ثابت و برابر با E_{eff} در نظر گرفت و انتگرال روی انرژی را حل کرد [۵]. در این صورت خواهیم داشت:

$$I(T)=\frac{c\beta\alpha E_{eff}}{T(1-\Delta)\Delta E}\times$$
$$\left\{\begin{matrix}\left[\exp\left(\dfrac{cs'}{\beta}\dfrac{kT^2}{E_{eff}}(1-\Delta)\exp(-\dfrac{E_{eff}}{kT}-\dfrac{\Delta E}{2kT})\right)-\alpha\right]^{-1}- \\ \left[\exp\left(\dfrac{cs'}{\beta}\dfrac{kT^2}{E_{eff}}(1-\Delta)\exp(-\dfrac{E_{eff}}{kT}+\dfrac{\Delta E}{2kT})\right)-\alpha\right]^{-1}\end{matrix}\right\} \qquad (۱۰)$$

که در آن $E_1=E_{eff}-\dfrac{\Delta E}{2}$ و $E_2=E_{eff}+\dfrac{\Delta E}{2}$ است.

براي پیدا کردن شرط نقطهٔ ماکزیمم به صورت زیر عمل می‌کنیم:

$$(\frac{d}{dT}I(T))_{T=T_m}=0\,, \qquad (۱۱)$$

برای این منظور از رابطهٔ (۸) نسبت به T مشتق می‌گیریم و به ازای $T=T_m$ مساوی صفر قرار می‌دهیم. برای انتگرال روی دما از رابطهٔ (۹) و برای انتگرال روی انرژی از قضیهٔ مقدار میانگین که به صورت زیر است استفاده می‌کنیم:

$$\int_{E_1}^{E_2}f(E)dE=f(E_{eff})(E_2-E_1)\,, \qquad (۱۲)$$

که در این صورت شرط نقطهٔ ماکزیمم به صورت زیر می‌شود:

$$\frac{E_{eff}}{kT_m{}^2}=\frac{cs'}{\beta}\exp(-\frac{E_{eff}}{kT_m})R_m\,, \qquad (۱۳)$$

Archive of SID

www.SID.ir

R_m در رابطهٔ (۴) تعریف شده است، با این تفاوت که E با E_{eff} جایگزین شده است. با فرض اینکه R_m تابعی از α باشد، با استفاده از معادلات (۱۰) و (۱۳) به رابطهٔ زیر می‌رسیم:

$$I(T)=\frac{c\beta\alpha E_{eff}}{T(1-\Delta)\Delta E}\times \left\{\begin{array}{l}[\exp\left(\frac{T^2}{T_m{}^2R_m}(1-\Delta)\exp(\frac{E_{eff}}{kT_mT}(T-T_m)-\frac{\Delta E}{2kT})\right)-\alpha]^{-1}-\\ [\exp\left(\frac{T^2}{T_m{}^2R_m}(1-\Delta)\exp(\frac{E_{eff}}{kT_mT}(T-T_m)+\frac{\Delta E}{2kT})\right)-\alpha]^{-1}\end{array}\right\} \quad (14)$$

با قرار دادن $T=T_m$ در رابطهٔ (۱۴) خواهیم داشت:

$$I_m=\frac{c\beta\alpha E_{eff}}{T_m(1-\Delta_m)\Delta E}\left\{\begin{array}{l}[\exp\left(\frac{1-\Delta_m}{R_m}\exp(-\frac{\Delta E}{2kT_m})\right)-\alpha]^{-1}\\ -[\exp\left(\frac{1-\Delta_m}{R_m}\exp(\frac{\Delta E}{2kT_m})\right)-\alpha]^{-1}\end{array}\right\} \quad (15)$$

که در آن $\Delta_m=\frac{2kT_m}{E_{eff}}$ است.

طبق معادلات (۱۴) و (۱۵) می‌توان رابطهٔ نهایی شدت ترمولومینسانس بر اساس مدل مرتبهٔ آمیخته در حالت با توزیع پیوسته و یکنواخت از مراکزگیراندازی را برحسب I_m و T_m به دست آورد:

$$I(T)=I_m\frac{T_m(1-\Delta_m)}{T(1-\Delta)}\times \left\{\begin{array}{l}[\exp\left(\frac{T^2}{T_m{}^2R_m}(1-\Delta)\exp(\frac{E_{eff}}{kT_mT}(T-T_m)-\frac{\Delta E}{2kT})\right)-\alpha]^{-1}-\\ [\exp\left(\frac{T^2}{T_m{}^2R_m}(1-\Delta)\exp(\frac{E_{eff}}{kT_mT}(T-T_m)+\frac{\Delta E}{2kT})\right)-\alpha]^{-1}\end{array}\right\}\times$$
$$\left\{[\exp\left(\frac{1-\Delta_m}{R_m}\exp(-\frac{\Delta E}{2kT_m})\right)-\alpha]^{-1}-[\exp\left(\frac{1-\Delta_m}{R_m}\exp(\frac{\Delta E}{2kT_m})\right)-\alpha]^{-1}\right\}^{-1} \quad (16)$$

۴. نتایج بیشتر و مقایسه

به راحتی می‌توان نشان داد که با نزدیک شدن ΔE به سمت صفر معادلهٔ (۱۶) به معادلهٔ (۳) تبدیل می‌شود. وقتی در معادلهٔ (۱۶) $\Delta E=0$ قرار داده می‌شود، در ابتدا جواب مبهم $I(T)=0/0$ حاصل می‌شود. ولی وقتی رفع ابهام شود، به راحتی می‌توان به رابطهٔ (۳) رسید. همچنین وقتی α برابر با صفر (R_m برابر با ۱) قرار داده شود، رابطهٔ شدت ترمولومینسانس در مدل جدید به رابطهٔ شدت ترمولومینسانس در مدل مرتبهٔ اول با توزیع پیوسته از انرژی گیراندازی تبدیل می‌شود [۹]. مزیت نوشتن رابطهٔ شدت ترمولومینسانس برحسب I_m و T_m (به جای n_o و s) در این است که این پارامترها را به راحتی می‌توان از روی منحنی تابش ترمولومینسانس تجربی تخمین زد و برای انجام فرآیند برازش مورد استفاده قرار داد. اما مشکلی که وجود دارد این است که معادلهٔ (۱۶) با فرض اینکه R_m صرفاً تابعی از α باشد به دست آمده است و بایستی رابطهٔ R_m برحسب α را به دست آورد. اگر فرض در نظر گرفته شده در رابطهٔ (۴) را با در نظر گرفتن $E=E_{eff}$ برای توزیع پیوسته از مراکزگیراندازی به کار بریم، طبق معادلات (۴)، (۹) و (۱۳) به رابطه‌ای به صورت زیر خواهیم رسید:

$$A(T_m)=\exp\left((\frac{A(T_m)-\alpha}{A(T_m)+\alpha})(1-\Delta_m)\right). \quad (17)$$

معادلهٔ (۱۷) را نمی‌توان به صورت تحلیلی حل کرد و به یک رابطه برای A_m برحسب α رسید. کیتیز[۴] در کار خود بستگی A_m به Δ_m را نادیده می‌گیرد (یعنی معادلهٔ (۱۷) را به ازای یک Δ_m مشخص مورد بررسی قرار می‌دهد) و معادلهٔ فوق را به صورت عددی حل کرده و با یک چند جمله‌ای برحسب α برازش می‌کند. اما می‌توان نشان داد که رابطهٔ A_m برحسب α به ازای مقادیر مختلف Δ_m متفاوت است و تغییرات A_m به ازای مقادیر مختلف Δ_m خصوصاً به ازای مقادیر کوچک α را نمی‌توان نادیده گرفت.

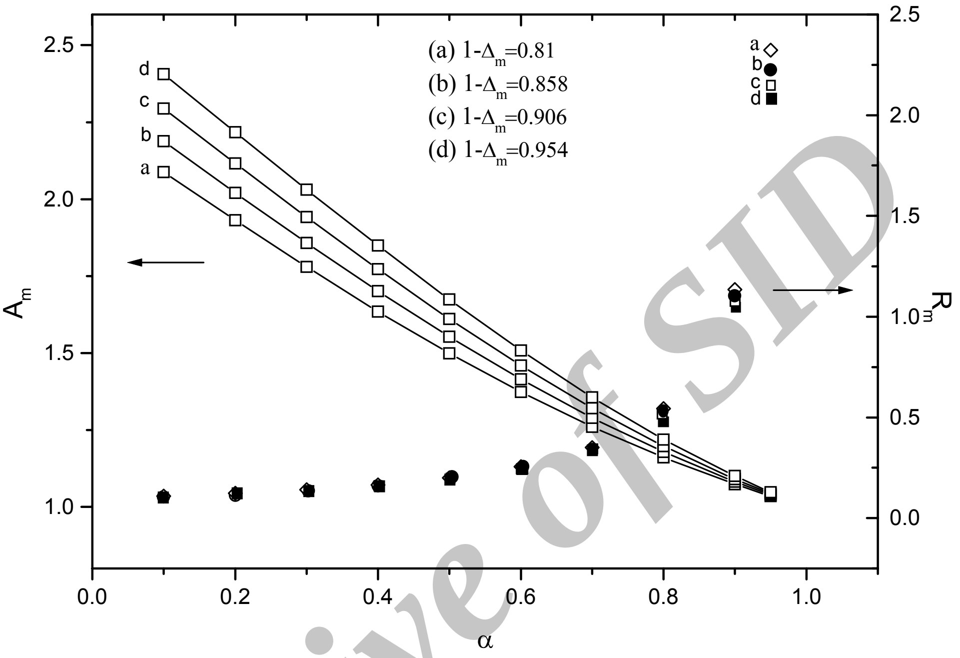
در این کار به ازای مقادیر $0/5\text{eV}\le E_{eff}\le 2/5\text{eV}$ و $320\text{K}\le T_m\le 620\text{K}$ کمیت $1-\Delta_m$ بین ۰/۷۸۶ تا ۰/۹۷۸ به دست آمده است. این محدوده به چهار بازه تقسیم شده است و با در نظر گرفتن مقدار میانگین هر بازه، ۴ مقدار مختلف برای $\overline{1-\Delta_m}$ به دست آمده است. به ازای هر یک از مقادیر $\overline{1-\Delta_m}$ مقادیر مختلف A_m برحسب α که با توجه به رابطهٔ (۱۷) و به روش عددی به دست آمده است، با چند جمله‌ای درجهٔ ۴ که بهترین برازش را با داده‌ها به‌دست می‌دهد داده شده است:

$$A_m=a\alpha^4+b\alpha^3+c\alpha^2+d\alpha+e. \quad (18)$$

Archive of SID

جدول ۱ . مقادیر مربوط به ضرایب ثابت معادلهٔ (۱۸) با استفاده از برازش این معادله با نقاط حاصل از رابطهٔ ۱۷ به ازای مقادیر مختلف $\overline{۱-\Delta_m}$.

$\overline{(۱-\Delta_m)}$	a	b	c	d	e	FOM
۰/۸۱	−۰/۱۴۸۲	۰/۵۴۲۷	−۰/۰۵۷۸	−۱/۵۸۱۵	۲/۲۴۵۵	۰/۱۰۳
۰/۸۵۸	−۰/۱۱۳۳	۰/۵۴۰۷	−۰/۱۰۹۵	−۱/۶۷۲۴	۲/۳۵۵۷	۰/۱۳۱
۰/۹۰۶	−۰/۰۵۶۲	۰/۴۹۷۲	−۰/۱۴۴۳	−۱/۷۶۶۶	۲/۴۷۱۵	۰/۱۵۳
۰/۹۵۴	۰/۰۲۶۲	۰/۴۰۳۷	−۰/۱۵۵۸	−۱/۸۶۵۴	۲/۵۹۳۳	۰/۱۶۵



شکل۲ . تغییرات R_m و A_m برحسب α به ازای مقادیر مختلف $\overline{۱-\Delta_m}$. نقاط با استفاده از رابطهٔ (۱۷) به‌دست آمده‌اند و خطوط نتیجه برازش با معادله ۱۸ هستند.

برای برازش نمودارها و به دست آوردن ضرایب در رابطهٔ فوق از یک برنامهٔ برازش بر اساس الگوریتم لونبرگ مارگارت[۱] که در آزمایشگاه ترمولومینسانس دانشگاه کاشان نوشته شده، استفاده شده است. برای به دست آوردن معیاری از یک برازش خوب ازمعیار FOM[۲] استفاده شده است[۸]. مقادیر FOM کمتر از ۲ نشان دهندهٔ یک برازش خوب است. در جدول ۱ ضرایب a، b، c، d و e به ازای چهار مقدار مختلف $\overline{۱-\Delta_m}$ همراه با مقادیر FOM مربوط به آنها مشاهده می‌شود. همان طور که در شکل ۲ نشان داده شده است به ازای چهار مقدار مختلف برای $\overline{۱-\Delta_m}$ چهار برازش جداگانه برای رابطهٔ A_m برحسب α به دست آمده است.

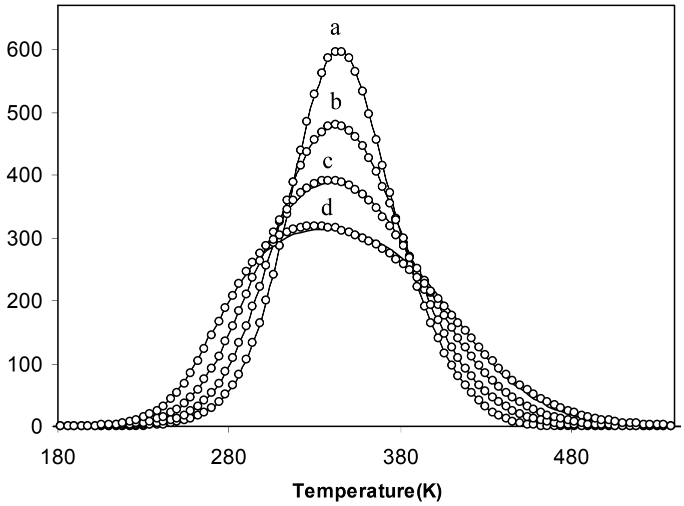
همچنین نمودار رابطهٔ A_m برحسب α به ازای مقادیر مختلف $\overline{۱-\Delta_m}$ در شکل ۲ نمایش داده شده است. خطوط پیوسته در شکل ۲ منحنی‌های برازش شده طبق معادلهٔ (۱۸) و مربع‌های تو خالی مربوط به حل عددی رابطهٔ (۱۷) برای رابطهٔ A_m برحسب α به ازای مقادیر مختلف $\overline{۱-\Delta_m}$ هستند. با نزدیک شدن پارامتر α به مقدار یک، تغییرات A_m نسبت به Δ_m قابل صرف نظر کردن است. در حالی که با نزدیک شدن پارامتر α به صفر یک پراکندگی در رابطهٔ A_m برحسب α با تغییر Δ_m دیده می‌شود. با توجه به رابطهٔ A_m و R_m می‌توان

۱. Levenberg-Marquart

۲. Figure of Merit

Archive of SID

www.SID.ir



شکل۳ . قله‌های تولید شده طبق رابطهٔ (۸) (دوایر تو خالی) و قله‌های برازش شده با استفاده از رابطهٔ (۱۶)(خطوط ممتد).

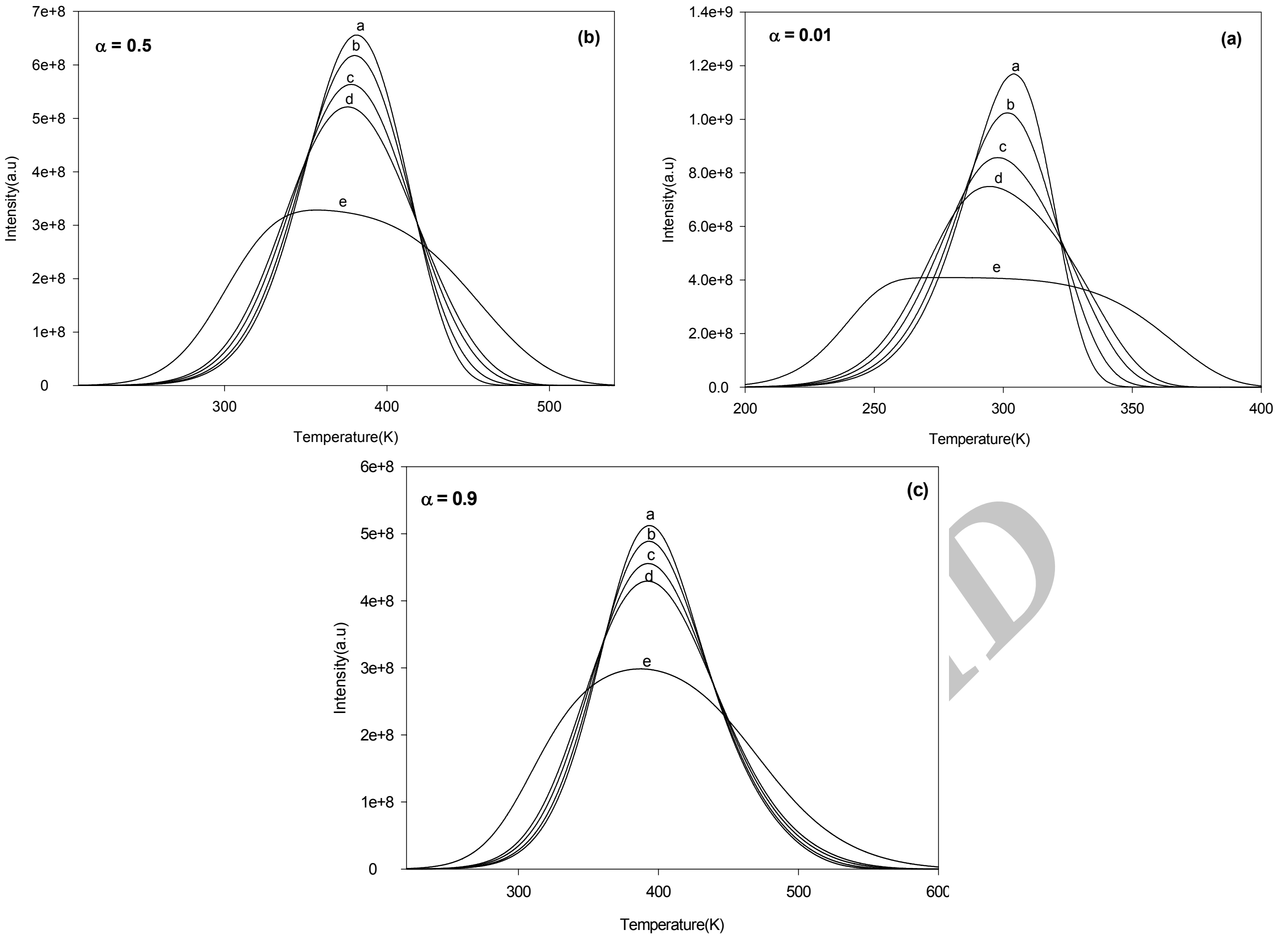
نمودارهای R_m برحسب α به ازای مقادیر مختلف $\overline{1-\Delta_m}$ را به دست آورد که در شکل ۲ و در طرف راست نمودار رسم شده است. به این ترتیب رابطهٔ (۱۶) می‌تواند برحسب پارامترهای I_m، T_m، α، E_{eff}، ΔE و R_m (به صورت تابعی از α) نوشته شود. این پارامترها به عنوان پارامترهای قابل تنظیم در فرآیند برازش می‌توانند مورد استفاده قرار گیرند. در شکل ۳ قله‌های تابش تئوری با استفاده از رابطهٔ (۸) به ازای پارامترهای سینتیک $\alpha = 0.9$، $N = 10^{8}(\text{cm}^{-3})$، $n_o = 10^{3}(\text{cm}^{-3})$، $s = 10^{10}(s^{-1})$، $E_{eff} = 0.455\text{eV}$ و $\beta = 5(Ks^{-1})$ به ازای مقادیر مختلف ΔE با دوایر تو خالی نمایش داده شده است. این مقادیر (ΔE) عبارتند از ۰/۰۱، ۰/۱، ۰/۱۵ و ۰/۲ الکترون ولت، که به ترتیب با a، b، c و d نمایش داده شده است. همچنین خطوط ممتد مربوط به قله‌های برازش شده طبق معادلهٔ (۱۶) است. مقادیر FOM به دست آمده برای قله‌های تابش a، b، c و d به ترتیب برابر با ۰/۰۰۲، ۰/۰۴۲، ۰/۲۵ و ۰/۷۳ به دست آمده است که برازش خوبی را نشان می‌دهد.

شکل ۴ (a)، (b) و (c) با استفاده از معادلهٔ (۸) به ازای مقادیر مختلف α به ترتیب برابر با ۰/۰۱، ۰/۵ و ۰/۹ رسم شده‌اند. سایر پارامترهای سینتیک در شکل فوق عبارتند از: $N = 10^{15}(\text{cm}^{-3})$، $n_o = 10^{10}(\text{cm}^{-3})$، $s = 10^{10}(s^{-1})$، $E_{eff} = 0.455$ eV و $\beta = 5\,(Ks^{-1})$ که به ازای مقادیر مختلف ΔE برابر با ۰/۰۱، ۰/۰۵، ۰/۰۸، ۰/۱ و ۰/۲ الکترون ولت، به ترتیب با a، b، c، d و e نمایش داده شده‌اند. همان طور که دیده می‌شود با افزایش ΔE (مخصوصاً به ازای مقادیر کوچک α) شکل پیک تابش به سرعت تغییر می‌کند . همچنین ما یک مقایسه نیز بین مدل مرتبهٔ عام[۵] و مدل حاضر با در نظر گرفتن یک توزیع پیوسته و یکنواخت از مراکز گیراندازی انجام دادیم.

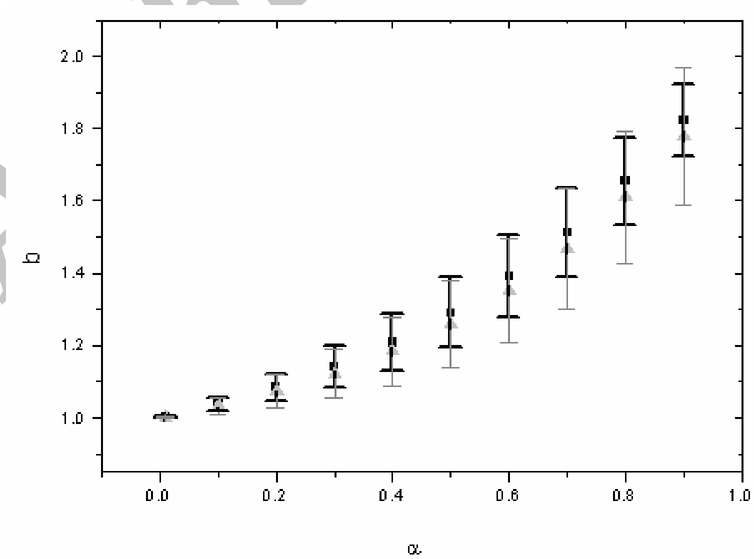
به این صورت که قله‌های تابش ترمولومینسانس را با استفاده از رابطهٔ (۱۶) با یک مقدار مشخص α و مقادیر $0.5\text{eV} \le E_{eff} \le 2.5\text{eV}$ و $320\text{K} \le T_m \le 620\text{K}$ تولید کردیم و با رابطهٔ متناظر در مدل مرتبهٔ عام [۵] برازش کردیم. همان طور که در شکل ۵ دیده می‌شود با تغییر پارامترها به ازای یک α مشخص، پراکندگی در مقادیر b مشاهده می‌شود. پراکندگی در مقادیر b به ازای مقادیر مختلف α بین ۰/۰۱ تا ۰/۹ وجود دارد. این پراکندگی موقعی کمتر شده است که ما از R_m ارائه شده در این تحقیق استفاده کردیم که دقت روابط را افزایش داده است. همچنین دیده می‌شود که با کم شدن مقدار α میزان این پراکندگی کمتر می‌شود و به صفر می‌رسد. علت این است که هر دو مدل مرتبهٔ عام [۵] و مرتبهٔ آمیخته (رابطهٔ ۱۶) به ازای $\alpha = 0$ به رابطهٔ متناظرشان در مدل مرتبهٔ اول [۴] تبدیل می‌شوند.

Archive of SID

www.SID.ir



شکل۴. شکل قله‌های ترمولومینسانس به ازای مقادیر مختلف ΔE برابر با ۰/۰۱، ۰/۰۵، ۰/۰۸، ۰/۱ و ۰/۲ eV که به ترتیب با a، b، c، d و e نشان دتده شده‌اند. شکل‌های (a) و (b) و (c) به ترتیب مربوط ۰/۰۱۰ =α، ۰/۵ =α و ۰/۹ =α هستند.



شکل۵ . رابطهٔ α و b با استفاده از R_m ارائه شده توسط کیتیز(نمودارکمرنگ) و با استفاده از R_m ارائه شده در این کار(نمودار پررنگ).

www.SID.ir

۵. نتایج

۱. مدل مرتبهٔ آمیخته در حالت تک ترازی بهتر از مدل مرتبهٔ عام در حالت تک ترازی قله‌های تابش ترمولومینسانس را توصیف می‌کند، زیرا در مدل مرتبهٔ عام فرض بر وجود یک نوع مرکز گیراندازی و یک نوع مرکز بازترکیب است در حالی که در مدل مرتبهٔ آمیخته فرض بر این است که یک نوع مرکز گیراندازی عمیق نیز وجود دارد که موقع پرتودهی نمونه کسری از حامل‌های بار توسط این مرکز گیراندازی می‌شوند و در این صورت ما با یک مدل برهم‌کنشی روبه‌رو خواهیم بود. بنابراین تبدیل این مدل به مدلی که بیان کنندهٔ یک مدل مرتبهٔ آمیخته با توزیع پیوسته از مراکز گیراندازی است دارای اهمیت است.

۲. تبدیل پارامترهای قابل تنظیم در معادلهٔ شدت ترمولومینسانس (معادلهٔ ۱۶) از شکل n_o و s به I_m و T_m دارای این مزیت است که به راحتی می‌توان پارامترهای اخیر را از روی شکل قلهٔ تابش ترمولومینسانس تجربی تخمین زد و به عنوان داده‌های اولیه در فرآیند برازش مورد استفاده قرار داد.

۳. بر خلاف فرض در نظر گرفته شده در کار کیتیز [۴]، ما از بستگی A_m نسبت به Δ_m در رابطهٔ (۱۷) صرف نظر نکردیم و یک محدودهٔ وسیع را برای پارامترهای E_{eff} و T_m در نظر گرفتیم و مقادیر بیشینه و کمینه Δ_m-1 را به دست آوردیم. سپس این محدوده را به چهار بازه تقسیم کرده و از مقدار میانگین بازهٔ مورد نظر به عنوان Δ_m-1 برای آن بازه استفاده کردیم (یعنی برای مقادیر Δ_m-1 که در یک بازه قرار دارند مقدار میانگین آن بازه را مورد استفاده قرار دادیم) و به ازای چهار مقدار مختلف برای Δ_m-1، چهار رابطه برای A_m برحسب α به دست آوردیم. همچنین معادلهٔ (۱۸) و جدول ۱ در عین حال که برای رابطهٔ (۱۶) می‌توانند مورد استفاده قرار گیرد، برای مدل مرتبهٔ آمیخته در حالت ترازی که بر حسب I_m و T_m نوشته شده است [۴] نیز می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

۴. با توجه به شکل ۴ (a)، (b) و (c) می‌توان به وضوح دید که هر دو پارامتر α و ΔE روی شکل قلهٔ تابش اثر دارند، در حالی‌که در مدل مرتبهٔ عام با توزیع پیوسته پارامترهای دخیل در شکل قلهٔ مرتبهٔ سینتیک موثر، b و ΔE هستند. همچنان‌که از تعریف α در ذیل رابطهٔ (۲) مشاهده می‌شود، این پارامتر به تمرکز اولیه الکترون‌ها در مراکز گیر اندازی فعال و تمرکز اولیه الکترون‌ها در مراکز گیر اندازی عمیق وابسته است، در حالی‌که پارامتر b را نمی‌توان به پارامترهای فیزیکی سیستم ارتباط داد. بنابراین مدل پیشنهادی که پارامتر α را به عنوان یک پارامتر قابل تنظیم دیگر در مقایسه با مدل مرتبهٔ عام ارائه می‌دهد، می‌تواند در تعیین کمیات فیزیکی وابسته به سیستم (n_o و c) نیز مفیدتر باشد.

مراجع

1. J T Randall, and M H F Wilkins, *Proc. Roy. Soc. (London)* A **184** (1945a) 366.
2. W F Hornyak, and A D Franklin, *International Journal of Radiation Application and Instrumentation*, **14** (1988) 81.
3. W F Hornyak, and R Chen, *Journal of Luminescence*, **44** (1989) 73.
4. G Kitis, and J M Gomez-Ros, *Nucl. Instrum. Methods* A **440** (2000) 224.
5. M Zahedifar, L Karimi, M J and Kavianinia, *Nucl. Instrum. Methods* A **564** (2006) 515.
6. R Chen, N Kristianpoller, Z Davidson, and R Visocekas, *Journal of luminescence,* **23** (1981) 293.
7. G Kitis, J M Gomez-Ros, and J W N Tuyn, *J. Phys.* D*,* **31**(19), (1998) 2636.
8. H G Balian, and N W Eddy, *Nucl. Instrum. Meth.*, **145** (1977) 389.
9. R Chen, and S W S McKeever, Theory of Thermoluminescence and Related Phenomena, *World Scientific Publishing, Singapore* (1997) 41.

Archive of SID

www.SID.ir