

**T.C.
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**



**ELEKTRONLARIN KATI ORTAMDA PENETRASYONUNUN
MONTE CARLO YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Ali PEKER

BALIKESİR, HAZİRAN - 2014

**T.C.
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**



**ELEKTRONLARIN KATI ORTAMDA PENETRASYONUNUN
MONTE CARLO YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Ali PEKER

BALIKESİR, HAZİRAN - 2014

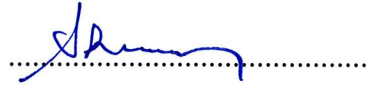
KABUL VE ONAY SAYFASI

Ali PEKER tarafından hazırlanan “ELEKTRONLARIN KATI ORTAMDA PENETRASYONUNUN MONTE CARLO YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ” adlı tez çalışmasının savunma sınavı 10.06.2014 tarihinde yapılmış olup aşağıda verilen jüri tarafından oy birliği / ~~oy çokluğu~~ ile Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Danışman
Prof. Dr. Asuman AYDIN



Üye
Doç. Dr. Mehmet BAYIRLI



Üye
Doç. Dr. Taner TANRISEVER



Jüri üyeleri tarafından kabul edilmiş olan bu tez BAÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunca onanmıştır.

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Prof. Dr. Cihan ÖZGÜR

.....

ÖZET

**ELEKTRONLARIN KATI ORTAMLARDA PENETRASYONUNUN
MONTE CARLO YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
ALİ PEKER
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
(TEZ DANIŞMANI: PROF. DR. ASUMAN AYDIN)**

BALIKESİR, HAZİRAN - 2014

Elektron katı etkileşmelerine dayalı, elektron mikroskopisi ve spektroskopisi teknikleri materyallerin yüzey analizi için yaygınca kullanılır. Elektron katı etkileşmelerinde yer alan çeşitli fiziksel süreçlerin ayrıntılı bir şekilde anlaşılmasını sağlayan elektron transport çalışmaları, bu teknikler için çok önemlidir. Bu fiziksel süreçler, esnek ve esnek olmayan saçılmalarıdır. Bu çalışmada orta enerji bölgesinde elektronların geçiş, yansıma ve soğurulma katsayıları metalik katılar için Monte Carlo yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Ayrıca geçen ve yansıyan elektronların enerji ve açısal dağılımları da elde edilmiştir. Esnek saçılmalar, spin rölativistik düzeltmeli perdeli Rutherford diferansiyel tesir kesiti ve NIST Elektron Esnek Saçılma Tesir Kesiti Veritabanı kullanılarak tanımlanmıştır. Esnek olmayan saçılmalar, genelleştirilmiş osilatör şiddetine dayalı Liljequist modeli ve Gryzinski yarı-ampirik ifadesiyle incelenmiştir. Bu saçılma modeli 500 keV'e kadar geçerlidir. Elektron geçme-yansıma olasılıkları ve enerji-açısal dağılım hesapları, deneysel sonuçlarla karşılaştırılarak tartışılmıştır. Genel olarak, simülasyon sonuçları diğer simülasyonlar ve deneysel sonuçlar ile iyi bir uyum içindedir.

ANAHTAR KELİMELEER: Monte Carlo yöntemi, elektron, tesir kesiti, esnek saçılma, esnek olmayan saçılma, geçiş olasılığı, enerji dağılımı, açısal dağılım.

ABSTRACT

INVESTIGATION OF ELECTRON PENETRATION IN SOLID MATERIALS USING MONTE CARLO METHOD

MSC THESIS

ALİ PEKER

BALIKESİR UNIVERSITY INSTITUTE OF SCIENCE

PHYSICS

(SUPERVISOR: PROF. DR. ASUMAN AYDIN)

BALIKESİR, JUNE 2014

The electron microscopic and spectroscopic techniques are widely used for surface analysis of materials which these techniques relies on electron solid interaction. The study of electron transport is very important to these techniques for a detailed understanding of a variety of physical processes involved in the electron solid interaction. These physical processes comprise elastic and inelastic scatterings. In this thesis the transmission, reflection and absorption coefficients of electrons in the medium energy region are investigated by using Monte Carlo methods for metallic solids. Also the transmitted and reflected electron energy and angular distributions are obtained. Elastic scatterings are described by using the screened Rutherford differential cross section with a spin relativistic correction and NIST Electron Elastic-Scattering Cross-Section Database. Inelastic scatterings are treated on the basis of generalized oscillator strength Liljequist's model and Gryzinski's semi-empirical expression. This scattering model is accurate in the energy about 500 keV. The calculations of electron transmitted-reflected probabilities and energy-angular distributions are discussed in comparison experimental results. In general, the simulation results are in good agreement with other simulations and experimental results.

KEYWORDS: Monte Carlo method, electron, cross section, elastic scattering, inelastic scattering, transmission probability, energy distribution, angular distribution.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
İÇİNDEKİLER	iii
ŞEKİL LİSTESİ	iv
TABLO LİSTESİ	v
SEMBOL VE KISALTMALAR LİSTESİ	vi
ÖNSÖZ	viii
1. GİRİŞ	1
2. MONTE CARLO YÖNTEMİ	4
2.1 Simülasyon Tekniği ve Monte Carlo Yöntemi	4
2.2 Gelişigüzel Sayılar	5
2.3 Temel Örnekleme İlkesi	7
2.4 Reddetme Yöntemi	8
2.5 Ortalama Yöntemi	10
2.6 Kontrol Değişkeni Yöntemi	11
2.7 Önem Örnekleme Yöntemi	13
3. YÜKLÜ PARÇACIKLARIN MADDE İLE ETKİLEŞMELERİ	14
3.1 Atomik Elektronlardan Esnek Saçılma	14
3.2 Çekirdekten Esnek Saçılma	15
3.3 Atomik Elektronlardan Esnek Olmayan Saçılma	15
3.4 Çekirdekten Esnek Olmayan Saçılma	15
3.5 Tesir Kesiti	15
3.6 Diferansiyel Tesir Kesiti	18
3.7 Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları	19
3.8 Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları	23
4. YÖNTEM	26
4.1 Elektronlar İçin Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesabı	26
4.2 Elektronlar İçin Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesabı	32
4.3 Esnek Olmayan Saçılma Enerji Kaybı Hesaplamaları	37
5. YÜKLÜ PARÇACIKLARIN BİR ORTAMDAN GEÇİŞLERİNİN SİMÜLASYONU	39
5.1 Örneklemeler	39
5.1.1 Ortalama Serbest Yol Örnekleme	39
5.1.2 Esnek Saçılma Açısız Dağılım Örnekleme	40
5.1.3 Esnek Olmayan Saçılma Enerji Kaybı Örnekleme	42
5.2 Elektron Hareketinin Dilim Ortam İçerisinde İncelenmesi	43
6. BULGULAR	48
6.1 Metal Ortamlarda Elektronların Geçiş Olasılıkları	48
6.2 Metal Ortamlarda Elektronların Enerji Dağılımları	59
6.3 Metal Ortamlarda Elektronların Açısız Dağılımları	64
7. SONUÇ VE ÖNERİLER	70
8. KAYNAKLAR	73
9. EKLER	83

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1: Reddetme yöntemi ile örneklenecek temsili $f(x)$ ve $r(x)$ dağılımları	8
Şekil 2.2: Ortalama yöntemi	11
Şekil 2.3: Kontrol değişkeni yöntemi	12
Şekil 3.1: Tesir kesiti	16
Şekil 4.1: Perdeleme parametrelerinin enerjiye göre değişimi	27
Şekil 4.2: Al için esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	30
Şekil 4.3: Ag için esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	31
Şekil 4.4: Au için esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	32
Şekil 4.5: Al için esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	35
Şekil 4.6: Ag için esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	36
Şekil 4.7: Au için esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	37
Şekil 5.1: Elektronların dilim ortam içerisindeki hareketleri	43
Şekil 6.1: Al ortamda çeşitli enerjili elektronların geçiş olasılıkları	49
Şekil 6.2: Ag ortamda çeşitli enerjili elektronların geçiş olasılıkları	50
Şekil 6.3: Au ortamda çeşitli enerjili elektronların geçiş olasılıkları	51
Şekil 6.4: Düşük enerjili elektronların Al ortamdan geçiş olasılıkları	52
Şekil 6.5: Düşük enerjili elektronların Au ortamdan geçiş olasılıkları	53
Şekil 6.6: Al-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları	54
Şekil 6.7: Ag-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları	55
Şekil 6.8: Au-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları	56
Şekil 6.9: Al-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları (15 keV)	57
Şekil 6.10: Al-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları (20 keV)	58
Şekil 6.11: 20 mg/cm ² Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların enerji dağılımları (Enerji 159 keV)	59
Şekil 6.12: 20 mg/cm ² Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların enerji dağılımları (Enerji 250 keV)	60
Şekil 6.13: Enerji dağılımlarına Ag-film kalınlıklarının etkisi	61
Şekil 6.14: Geri yansıyan elektronların enerji dağılımlarına Au-film kalınlıklarının etkisi	62
Şekil 6.15: Al, Ag ve Au ortamlardan geçen elektronların enerji dağılımları	63
Şekil 6.16: Elektron ve pozitronların Al ve Ag ortamlarda enerji dağılımları	64
Şekil 6.17: 25 mg/cm ² Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların açısız dağılımları (Enerji 159 keV)	65
Şekil 6.18: 25 mg/cm ² Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların açısız dağılımları (Enerji 336 keV)	66
Şekil 6.19: Açısız dağılımlara Ag-film kalınlıklarının etkisi	67
Şekil 6.20: Açısız dağılımlara Au-film kalınlıklarının etkisi	68
Şekil 6.21: Al, Ag ve Au ortamlarda elektronların açısız dağılımları	69
Şekil A.1: Koordinat dönüşümleri	83

TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 4.1: Mayol ve Salvat çalışmasından alınan veriler ile Al, Ag ve Au ortamlar için elde edilen esnek saçılma toplam tesir kesiti parametreleri	29
Tablo 4.2: NIST veritabanından alınan değerler ile Al, Ag ve Au ortamlar için elde edilen esnek saçılma toplam tesir kesiti parametreleri	30
Tablo 4.3: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için gerekli parametreler (Al)	33
Tablo 4.4: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için gerekli parametreler (Ag)	33
Tablo 4.5: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için gerekli parametreler (Au)	33
Tablo 4.6: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitleri için elde edilen parametreler.....	34

SEMBOL VE KISALTMALAR LİSTESİ

n	: Birim hacimdeki tanecik sayısı
σ	: Mikroskopik toplam tesir kesiti
σ_{el}	: Esnek saçılma mikroskopik toplam tesir kesiti
μ	: Makroskopik toplam tesir kesiti
η	: Atomik perdeleme parametresi
η_{TF}	: Thomas-Fermi perdeleme parametresi
η_B	: Bishop perdeleme parametresi
η_N	: Nigam perdeleme parametresi
η_A	: Adesida ve arkadaşları tarafından geliştirilen perdeleme parametresi
a_0	: Bohr yarıçapı
l	: Ortalama serbest yol
m_0	: Elektronun durgun kütlesi
β	: Elektronun ışık hızı cinsinden sahip olduğu hız
W	: Enerji aktarımı
W_i	: Rezonans enerjisi
Q	: Momentum aktarımı
Q_{min}	: Minimum geri tepme enerjisi
$K_{scr}(\theta, E)$: Perdeleme düzeltmesi
$K_{rel}(\theta, E)$: Spin-rölativistik düzeltme faktörü
$N(E)$: Enerjiye bağlı elektron sayıları
EPMA	: Elektron probe mikroanalizi
SEM	: Taramalı elektron mikroanalizi
AEM	: Analitik elektron mikroanalizi
AES	: Auger elektron spektroskopisi

XPS : X-ışınları fotoelektron spektroskopisi

XPEEM : X-ışınları foto-emisyon elektron mikroskopisi

EPES : Esnek pik elektron spektroskopisi

EELS : Elektron enerji kaybı spektroskopisi

REELS : Geri yansıyan elektronların enerji kaybı spektroskopisi

ÖNSÖZ

Yüksek lisans çalışmam boyunca bana her zaman destek olan, yol gösteren, bilgi ve deneyimini paylaşan danışman hocam Sayın Prof. Dr. Asuman AYDIN'a sonsuz teşekkür ederim.

Maddi ve manevi her türlü fedakârlığı yapan, çalışmamın her aşamasında yanımda olan aileme çok teşekkür ederim.

1. GİRİŞ

Elektron katı etkileşme problemi deneysel olarak; elektron bombardımanı altında, ortam ile elektron etkileşimine bağlı fiziksel büyüklükler ölçülerek incelenebilir. Bununla birlikte oldukça karmaşık olan bu etkileşme süreci, deneysel tekniklerin sınırlı olması nedeniyle tam olarak bilinmemektedir. Deneysel olarak elde edilemeyen bilgileri elde etmek için Monte Carlo yöntemi (simülasyon) en güçlü teorik yöntemlerden biridir. Analitik yöntemlerin karmaşık etkileşme sürecine uygulanmasında yeterli sonuçlar alınamadığında, simülasyon ideal bir tekniktir. Simülasyon ile elde edilen verilerin yorumlanması, etkileşmenin anlaşılmasını sağlar. Dikkat edilmesi gereken nokta, simülasyon temel yasaları ve etkileşim ilkelerini keşfetmez, tam tersine onlara bağlıdır.

Elektron katı bir yüzeye çarptığında katıya nüfuz ederek, klasik zikzak yörüngeler şeklinde yol alır. Hareket doğrultusunu değiştiren elektron, saçılan elektrondur. Elektron etkileşmeleri için klasik ya da kuantum mekaniksel olarak, elektronun belli bir alana saçılma olasılıklarını hesaplayan saçılma tesir kesitlerinden faydalanılır. Simülasyon tamamen bu saçılma süreçlerinin doğru modellenmesine bağlıdır. Modelleme ise elektronların ortam içerisinde etkileşmelerinin istatistiksel ve dinamiksel yorumlarıyla hazırlanan formüller doğrultusunda olur. Saçılma davranışlarını tanımlayan formüllere göre, elektronun saçılma açıları, kinetik enerji kaybı vs. gibi başlıca olaylar geliş güzel sayılar yardımıyla hesaplanır.

İlk olarak, Monte Carlo yöntemiyle geri saçılan elektronlar incelenmiştir [1]. Berger [2] Monte Carlo yöntemini kullanarak, hızlı yüklü parçacıkların katılardan saçılma sürecinin sistematik çalışılmalarını başlatmıştır. Bu modelde enerji kaybı hesabı, Bethe'nin durdurma gücü denklemine bağlı olarak yapılmıştır. Esnek saçılmada açısal dağılım, Rutherford saçılma formülünden çoklu saçılma teorileri türetilerek elde edilmiştir. Aynı zamanda Grenn [3], başka bir yarı ampirik Monte Carlo yaklaşımı önermiştir. Bunun için Grenn, belirli kalınlıkta ince filmlerden saçılan elektronların deneysel olarak elde edilen açısal dağılımlarından yararlanmıştır. Grenn bu yaklaşımını karakteristik X-ışını oluşumu ve geri saçılan

elektronların enerji dağılımları hesaplarına uygulayarak, önemli bir başarı sağlamıştır.

Daha sistematik Monte Carlo hesapları da, çoklu saçılma modeline dayalı olarak Berger [2] tarafından önerilmiş, Bishop [4] ve Shimizu [5] tarafından geliştirilmiştir. Bu hesaplamalar, katı ortamlarda elektron penetrasyonunun karmaşık saçılma sürecini anlamaya katkı sağlamış ve ayrıca X-ışını üretimi, elektron geri saçılması ve ikincil elektron üretimi [6,7] gibi çeşitli olaylarda da kullanılmıştır. Bilgisayarların hızı arttıkça esnek saçılma süreci için doğrudan simulasyon yapma imkanı doğmuştur. Bu tür Monte Carlo hesaplamaları Reimer [8] tarafından başlatılmış ve benzer çalışmalar Murata [9] tarafından yapılmış, Duncumb [10] ise başka bir pratik yaklaşım önermiştir.

Elektronların atomlarla etkileşmesi, esnek ve esnek olmayan çarpışmalar ve elektronların çeşitli materyallerle diğer etkileşimleri farklı modelli Monte Carlo programlarıyla tanımlanmaya başlanmış, 1970'lerin ortalarında ise, esnek ve esnek olmayan saçılma (enerji kaybı) süreçlerinin teorik incelemelerinde gelişmeler olmuştur. Reimer ve Krefting [11] tarafından Rutherford tesir kesiti yerine, kısmi dalga açılımı yöntemiyle türetilen Mott saçılma tesir kesitinin kullanımı [12] önerilmiş ardından Yamazaki [13] tarafından daha sistematik çalışmalar yapılmıştır. Monte Carlo simülasyonlarında Mott tesir kesitinin, Auger elektron spektroskopisi (Auger Electron Spectroscopy-AES) ve X-ışınları fotoelektron spektroskopisi (X-ray Photoelectron Spectroscopy-XPS) sinyallerinin baskın olduğu keV bölgesinin altındaki enerjilerde iyi sonuçlar verdiği görülmüştür [14].

Elektron katı etkileşmeleri süreciyle (penetrasyon) ilişkili X-ışını oluşumu, Auger elektronları, geri saçılan elektronlar, ince bir filmde ileri geçen elektronlar, ikincil elektronlar vb. gibi çeşitli olaylar; elektron probe mikroanalizi (Electron Probe Microanalysis-EPMA), taramalı elektron mikroskopisi (Scanning Electron Microscopy-SEM), analitik elektron mikroanalizi (Analytical Electron Microscopy-AEM), Auger elektron spektroskopisi (Auger Electron Spectroscopy-AES), X-ışınları fotoelektron spektroskopisi (X-ray Photo Electron Spectroscopy-XPS), X-ışınları foto-emisyon elektron mikroskopisi (X-ray Photo-Emission Electron Microscopy-XPEEM), esnek pik elektron spektroskopisi (Elastic Peak Electron

Spectroscopy-EPES), elektron enerji kaybı spektroskopisi (Electron Energy Loss Spectroscopy-EELS), geri yansıyan elektronların enerji kaybı spektroskopisi (Reflection Electron Energy Loss Spectroskopisi-REELS) ve elektron demet litografisi (Electron Beam Lithography-EBL) gibi modern analitik teknikleri karakterize etmek için kullanılır [14-16].

Elektron mikroskopisi, spektroskopisi ve mikroanalizi için kullanılan enerji aralığı genellikle 0.1-300 keV dir [15] ve bu enerji aralığında Monte Carlo simülasyonlarının ana hareket noktaları;

a) maddede elektronların esnek olmayan saçılma ortalama yolunun (IMFP) hesaplanması

b) fiziksel olayların sonuçlarının tahminleridir.

Monte Carlo modellerinin güvenilirliği, deney sonuçları ile karşılaştırılarak kontrol edilir. Ancak bazı büyüklükler sadece dolaylı olarak ölçülebilir ya da aşağıda sıralanan bazı deneysel problemler ile karşılaşılabılır:

a) uygun büyüklüklerin seçimi ki bu direk ölçülebilmeli ve hesaplama sonuçları ile ölçüm sonuçları karşılaştırılabilir

b) bu büyüklüklerin maksimum sınırlarının kontrolü; elektron enerjisi, atom numarası, kullanılan ortamın kalınlığı gibi parametrelere bağlı olmasıdır.

Elektron penetrasyon teorisinin radyasyon fiziği, yüzey analizleri, elektron mikroskopisi ve diğer alanlardaki önemi nedeniyle bu çalışmada çeşitli kalınlıklardaki alüminyum, gümüş ve altın gibi metalik ortamlarda orta enerjili elektronların geçme ve yansıma olasılıkları, enerji ve açısal dağılımları geliştirilen Monte Carlo programı ile incelenmiştir.

2. MONTE CARLO YÖNTEMİ

2.1 Simülasyon Tekniđi ve Monte Carlo Yöntemi

Fiziksel sistemlerin bilgisayar ortamına uyarlanmasının çeşitli sebepleri vardır. Bazı deneysel çalışmaların riskli, maliyetli ve zor incelenebilir olması bilgisayar simülasyonları ile çalışmayı gerektirir. Simülasyon, gerçek bir fiziksel sistemi bilgisayar ortamında programlayarak incelenmesine dayanır. Bir bilgisayar simülasyonu; analitik metotların kolaylıkla çözemediđi sistemleri sonuçlandırabilir. Bir deneyde bazı niceliklerin ölçülmesi imkansız ya da zor olduđunda, gerçeđe çok yakın olarak hesaplayabilir [17]. Bir sistemin modeli kurulduktan sonra tekrar tekrar kullanılabilir. Sistemdeki karmaşık yapıları analiz etme ve bunlar üzerinde denemeler yapma imkânı sağlar. Her sistem için ayrı bir program yazma gereksinimi vardır ve program dili gerektirir.

Monte Carlo yöntemi, olasılık temeline dayalı bir simülasyon çeşididir. Monte Carlo terimi, ismini Monako'nun kumarhaneleri ile ünlü Monte Carlo şehrindeki rulet oyunlarından almaktadır. Rulet oyunu, deđişik renkler ve sayılar bulunan bir diskdir. Disk bir yönde hızla döndürülürken, küçük bir metal top aksi yönde disk üzerinde döndürülür. Bir süre sonra top bir renk ve sayıda durur. Matematiksel olarak rulet diski, mekanik bir rastgele sayı üreticinden başka bir şey deđildir. Monte Carlo yöntemi de temelde rastgele sayı üretimine dayandıđından bu isim verilmiştir [18].

Monte Carlo yöntemi ilk olarak Amerika'da nükleer silah geliştirilmesinde kullanılmıştır. Stanislaw Ulam, nükleer reaksiyon teorilerinde kompleks integrallerin çözümünde bu yöntemi uygulamıştır, Von Neumann, Metropolis ve arkadaşları ise daha sistematik çalışmalar başlatmıştır. Neumann, yeni gelişen hesaplama tekniklerini kullanarak istatistiksel örnekleme yapma fikrini öne sürmüştür, fisyon olaylarında nötron zincir reaksiyonlarının davranışlarını bu yöntemle açıklanabileceđini savunmuştur. Monte Carlo yöntemi, gerçek bir durumun stokastik

modelini oluřturup, bu model üzerinden rnekleme deneyleri hazırlama tekniđi olarak tanımlanabilir. Bilgisayarda analitik olarak elde edilmesi mmkn olmayan geliřgzel davranıřları incelemek iin kullanılır [19].

Monte Carlo ynteminin uygulama alanlarına sayısal analiz, dođal olayların simlasyonunu, dađılım fonksiyonları, borsa modelleri, atom ve molekl fiziđi, hcre simlasyonunu, deneysel aletlerin simlasyonu, nkleer fizik ve yksek enerji fiziđi modellerini test eden simlasyonlar rnek olarak verilebilir [19].

2.2 Geliřgzel Sayılar

Gerek olayların dođasındaki rastgeleliđi elde etmek adına geliřgzel sayılardan faydalanılır. Monte Carlo yntemi ile rnekleme yapılacak olay iin de geliřgzel sayılar kullanılır. Herhangi bir dađılımdan geliřgzel deđiřken retmek veya geliřgzel sre oluřturmak iin (0,1) aralıđında deđer alan geliřgzel deđiřkenler gereklidir. Bilgisayar simlasyonlarında istatistiksel olarak gvenilir geliřgzel sayı reteleri alt program olarak kullanılmaktadır [20]. Geliřgzel sayılar, birbirinden bađımsız ve grlme olasılıkları eřit sayıların oluřturulduđu dizilerdir. Bu sayı dizileri eřit olasılık geređi dzgn olasılık dađılımını gstermektedir [21].

Geliřgzel sayı retelerinde olması gereken bazı zellikler vardır. retilen geliřgzel sayılar, gerek sayılar ile aynı zellikleri tařımalıdır. Tm geliřgzel sayı retelerinde deterministik formlasyon kullanıldıđından dolayı geliřgzel sayı dizisi kendi kendini tekrar etmeye bařlayacaktır. Dizinin uzunluđu periyot olarak adlandırılır. Bu periyodun mmkn olduđunca uzun olması sayı dizisinin kendini tekrarlamasını nleyecektir. Simlasyon alıřmasında byk sayılarda geliřgzel sayının retilmesine ihtiya olacađından rete bu sayıları mmkn olduđu kadar kısa zamanda retmeli ve bilgisayar hafızında ok fazla yer kaplamamalıdır [22].

Geliřgzel sayı retme tekniklerinden ilki John Von Neumann ve Metropolis tarafından nerilen “orta kareleri yntemi” dir. Bu yntemde belli bir x basamaklı sayı bařlangı deđer olarak seilir. Bu sayının karesi alınarak bulunan sayının

ortasındaki x kadar basamaklı sayı alınır ve gelişigüzel olarak kaydedilir. Elde edilen gelişigüzel sayının karesi alınarak yine ortasındaki x basamaklı sayı gelişigüzel sayı olarak kaydedilir. Bu işlem istenilen sayıda gelişigüzel sayı elde edilene kadar tekrarlanır. Bu yöntemde kısa periyotların bulunmasında dolayı sayıların kendini tekrarlama olasılığı vardır.

Diğer bir yöntem ise doğrusal eşlik yöntemi (linear congruential method) dir. Bu yöntemde gelişigüzel olarak belirlenen bir tamsayı x_0 başlangıç sayısı olarak seçilir. Doğrusal eşlik yöntemi ile gelişigüzel sayı üretimi arasında ilişki,

$$x_i = (ax_{i-1} + b)(\text{mod } m) \quad (i = 0, 1, \dots, m - 1) \quad (2.1)$$

şeklinde gösterilir. Burada m modüler aritmetik böleni, a çarpan, b eklenecek sabit sayıdır. m , a , b ve x_0 negatif olmayan tamsayılar olup $0 < m$, $a < m$, $b < m$ ve $x_0 < m$ koşullarını gerçekleştirmesi gerekir. Bu yöntemin algoritması incelendiğinde, ilk olarak x_0 , a , b ve m değerleri belirlenir. ax_{i-1} çarpımına b eklenerek sonuç m 'ye bölünür. Bölümün sonucunda kalan sayı x_i 'ye eşittir. Böylece gelişigüzel sayı üretiminde kullanılacak ilk değer x_i elde edilir. x_i bölme sonucunda kalan sayı olduğundan $0 \leq x_i \leq (m - 1)$ ilişkisi söz konusudur. Bir sonraki x değeri için elde edilen x_i Denklem (2.1)'de yerine konularak aynı matematiksel işlemler tekrarlanır. Üretilmek istenen gelişigüzel sayı miktarı kadar bu işlem tekrarlanır. Üretilen x_i değerleri üretim sırasına göre sıralanır ve her biri ayrı ayrı m 'ye bölünür.

$$u_i = \frac{x_i}{m} \quad (2.2)$$

ifadesi ile gelişigüzel sayılar üretilmiş olur. Ayrıca kullanılan gelişigüzel sayı üreticinin gelişigüzelliğini geliştirmek için çeşitli algoritmalar kullanılmaktadır [23].

2.3 Temel Örnekleme İlkesi

Fiziksel olarak sıklık fonksiyonu $f(x)$ bilinen bir olayı taklit etmek için; $f(x)$, $a \leq x \leq b$ aralığında, her bir x sonucunun ortaya çıkma olasılığı olmak üzere, olayda sonucun x ile $x + dx$ arasında değer alma olasılığı,

$$P(x) dx = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x) dx} \quad (2.3)$$

dir. $P(x)$ fonksiyonuna *olasılık yoğunluk fonksiyonu* adı verilir.

Toplam olasılık yoğunluk fonksiyonu ise,

$$F(x) = \int_a^x P(x') dx' \quad (2.4)$$

şeklinde tanımlanır. $F(x)$ toplam olasılık yoğunluk fonksiyonu, $a \leq x \leq b$ aralığında her x değerine karşılık $(0,1)$ aralığında gelişigüzel değerler alır. q , $(0,1)$ aralığında düzgün dağılımlı gelişigüzel sayı olarak tanımlandığından $P(x)$ olasılık yoğunluk fonksiyonunun değerleri q değişkenine eşitlenebilir.

$$q = F(x) \quad (2.5)$$

ifadesi tersine çözümlerse,

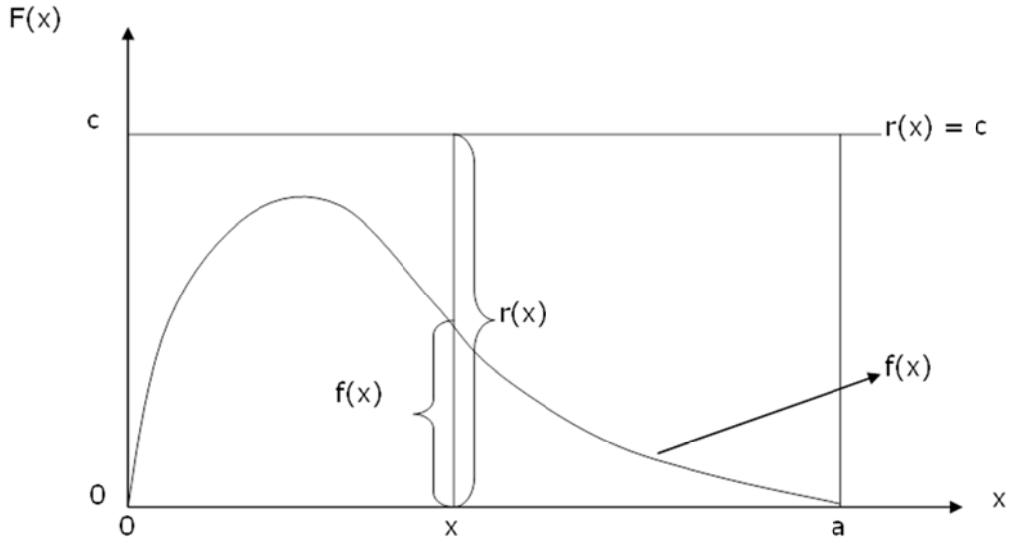
$$x = F^{-1}(q) \quad (2.6)$$

ters dönüşüm denklemi elde edilir. Böylece $(0,1)$ arasında düzgün dağılımlı q değerleri kullanılarak $(a - b)$ aralığında $F(x)$ dağılımlı x değerleri elde edilir.

2.4 Reddetme Yöntemi

Temel örnekleme ilkesi Denklem (2.4)'ün integralinin analitik olarak alınabildiği ve bulunan ifadenin tersine çözümünün analitik olarak yapılabildiği durumlarda kullanılabilir. Bu koşullar sağlanmadığında reddetme yöntemi kullanılmaktadır. Reddetme yöntemi, temel örnekleme ilkesi uygulanabilen bir fonksiyon yardımıyla temel örnekleme ilkesi uygulanamayan bir fonksiyonun dağılımının örneklemesidir.

$0 \leq x \leq b$ aralığında $f(x)$ sıklık fonksiyonu ile belirlenen bir olayı örnekleme yapmak istersek, c bir sabit sayı olmak üzere; $r(x) = c$ dağılımından yararlanırız.



Şekil 2.1: Reddetme yöntemi ile örneklenecek temsili $f(x)$ ve $r(x)$ dağılımları

$r(x) = c$ dağılımına temel örnekleme ilkesi uygulanırsa; olasılık yoğunluk fonksiyonu,

$$P(x) dx = \frac{f(x) dx}{\int_0^a f(x) dx} = \frac{c dx}{\int_0^c c dx} = \frac{c dx}{ca} = \frac{dx}{a} \quad (2.7)$$

elde edilir. Toplam olasılık yoğunluğu ise;

$$F(x) = \int_0^x P(x') dx' = \int_0^x \frac{dx'}{a} = \frac{x}{a} = q \quad (2.8)$$

şeklindedir. q , $(0,1)$ aralığında gelişigüzel sayı olmak üzere,

$$x = (aq) \quad (2.9)$$

ifadesi elde edilir. Böylece x , 0 ile a arasında türetilmiştir. Örneklenen x değerinin sıklığı $r(x) = c$, bu sıklığın $f(x)$ olma olasılığı $\frac{f(x)}{r(x)}$ dir.

Elde edilen x değerinin kabul edilmesi için ikinci bir q sayısı türetilerek

$$q \leq \frac{f(x)}{r(x)} \quad (2.10)$$

koşuluna bakılır. Koşul sağlanıyorsa x değeri kabul edilir, koşul sağlanmıyorsa yeni bir x değeri türetilerek işlem tekrarlanır. Böylece Şekil 2.1'de görüldüğü gibi $r(x) = c$ dağılımının örneklenmesiyle elde edilen düzgün dağılımlı x değerlerinden, x eksenini ile $f(x)$ arasında kalanları kabul edilip, diğerleri reddedilerek $f(x)$ dağılımlı x değerleri elde edilmiştir [24].

2.5 Ortalama Yöntemi

Reddetme yönteminden farklı olarak, alan taramak yerine, seçilen noktalardaki fonksiyonun değerleri, aranan integralin bulunmasında kullanılır. Seçilen noktalar gelişigüze'dir ve bu noktalar üzerinde işlemler yapılır.

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (2.11)$$

denklemini ele alalım. Bölgenin hacmi V olmak üzere ve

$$g(x) = \begin{cases} 1 & x \text{ de\u011fi\u015fkeni b\u00f6lgenin i\u00e7inde} \\ 0 & \text{di\u011fer} \end{cases} \quad (2.12)$$

dir. Verimli bir yakla\u015fım ile bu denklem;

$$I = \int_a^b f(x)g(x)dx = \frac{1}{V} \int_a^b f(x)g(x)Vdx \quad (2.13)$$

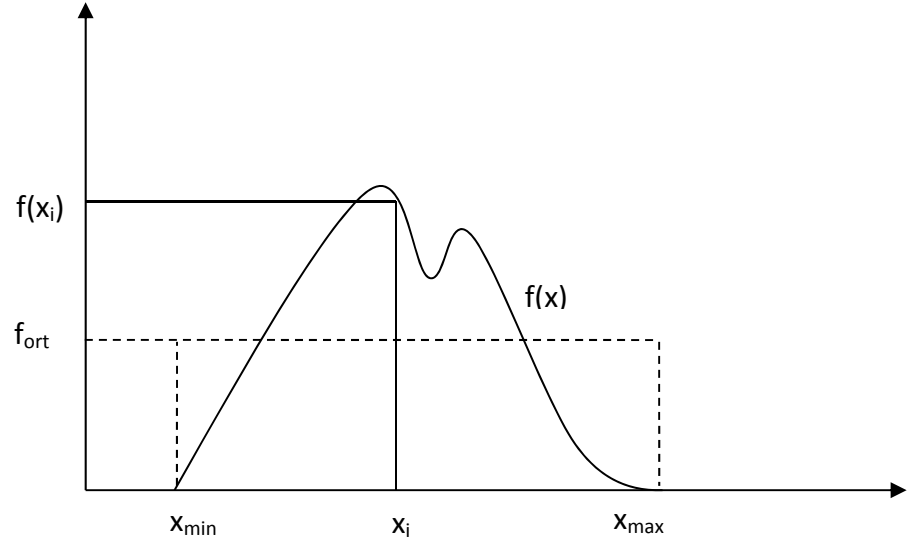
\u015feklinde yazılabilir. Bu denklem, x gelişigüzel de\u011fi\u015fkeninin b\u00f6lge i\u00e7erisinde d\u00fczg\u00fcn da\u011fıldığı durum i\u00e7in,

$$h(x) = g(x)f(x)V \quad (2.14)$$

fonksiyonunun beklenen de\u011feri olarak yorumlanabilir. Bu yakla\u015fım altında,

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_i^n h(x_i) = \frac{V}{n} \sum_i^n f(x_i) \quad (2.15)$$

yazılabilir.

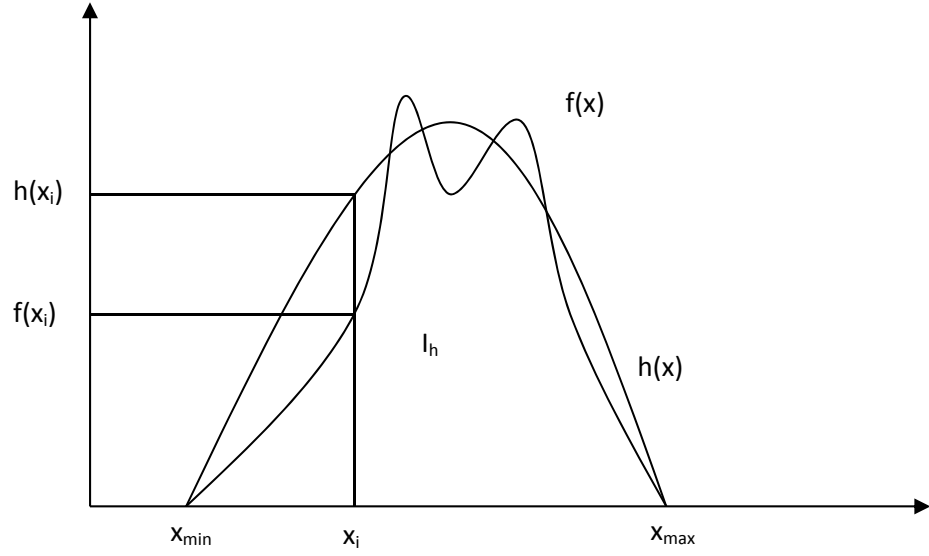


Şekil 2.2: Ortalama yöntemi

Ortalama yönteminde fonksiyona dayalı örnekleme yapılır. Bu yöntemin kullanımı çok hızlı ve basittir ancak uygulanabilirliği, fonksiyonun analitik bir ifadesi olması gerektiğinden kısıtlıdır [18].

2.6 Kontrol Değişkeni Yöntemi

Kontrol değişkeni yönteminde, integrali alınmak istenen fonksiyona yakın, daha kolay hesaplanabilir veya çözümü bilinen bir fonksiyon seçilerek işlem yapılır. İntegrali alınmak istenen fonksiyonu $f(x)$, seçilen yakın fonksiyonu ise $h(x)$ kabul edelim.



Şekil 2.3: Kontrol değişkeni yöntemi

Şekil 2.3’de görüldüğü üzere gelişigüzel noktalar seçilir. Seçilen her noktada integral değerleri arasındaki fark bulunmaya çalışılır. Bilinen $h(x)$ fonksiyonuna elde edilen değerler eklenir ve $f(x)$, integrali alınmak istenen fonksiyona yaklaşım sağlanmış olur. $h(x)$ fonksiyonunun integral değeri,

$$I_h = \int_{x_{min}}^{x_{max}} h(x) dx \quad (2.16)$$

dir.

2.7 Önem Örnekleme Yöntemi

Bu yöntem, kontrol değişkeni yöntemine benzer bir yöntemdir. Burada aranan $f(x)$ fonksiyonuna yaklaşımda kullanılan yardımcı fonksiyonun etkisi, toplamsal değil, çarpımsaldır.

Önem örnekleme yönteminde amaç, fonksiyonun karakteristiğini belirleyebilecek ve fonksiyon hakkında en çok bilgi alınabilecek bölgelerden örnek alarak, bilgiye daha hızlı erişmektir. Böylelikle gereksiz nokta seçimlerinden kaçınarak, vakit kaybı azaltılır ve işlem zamanının azaltılması sağlanır.

3. YÜKLÜ PARÇACIKLARIN MADDE İLE ETKİLEŞMELERİ

Genel olarak yüklü parçacıklar, madde içerisinden geçerken enerji kaybı ve geliş doğrultularından sapmaları gibi iki ana özelliikle karakterize edilirler. Bu etkiler öncelikle maddenin atomik elektronları ile esnek olmayan çarpışması ve çekirdekten esnek saçılmasının sonucudur. Bu reaksiyonlar maddede birim uzunluk başına birçok defa meydana gelirler [25]. Yüklü parçacıklar madde içerisinden geçerken yapacakları etkileşmeler, esnek saçılma, esnek olmayan saçılma, Cherenkov radyasyon yayınlanması, frenleme ışınımı (Bremsstrahlung) ve yok olma şeklinde sıralanabilir. Sadece pozitronların ortamda bulunan elektronlarla belirli enerjilerde birleşerek yok olması olayı dışında; elektron ve pozitronların madde içerisindeki etkileşmeleri hemen hemen aynıdır.

Elektronlar gibi hafif kütleli yüklü parçacıklar, çekirdek alanından geçtiği zaman, radyasyon yolu ile bir enerji kaybına uğrar. Bu enerji frenleme ışınımı (Bremsstrahlung) denilen sürekli X ışını spektrumu şeklinde görülür. Bu radyasyon elektronun ivmelenmesinden dolayı ortaya çıkar, çekirdeğin elektriksel çekimi yüzünden izlediği düz yolda sapma meydana getirir [25]. Düşük enerjili elektronlar için frenleme ışınımı olayının meydana gelme olasılığı zayıftır, yaklaşık 1 MeV enerji üst sınırından sonra artmaya başlar. Bu çalışmada frenleme ışınımı olayının oluşması için gerekli enerji aralığında çalışılmadığından dikkate alınmamıştır.

3.1 Atomik Elektronlardan Esnek Saçılma

Gelen yüklü parçacık, hedef atomun atomik elektronlarının alanından esnek bir şekilde sapar. Enerji ve momentum korunur. Enerji transferi genelde elektronların en düşük uyarılma potansiyelinden daha az olur. Bundan dolayı etkileşim atomun bütünüyle olur. Bu çarpışmalar çok düşük enerji (<100 eV) ile gelen elektronlar için geçerlidir [26].

3.2 Çekirdekten Esnek Saçılma

Gelen parçacık, çekirdekten esnek bir şekilde saçılarak yolundan sapar. Gelen parçacık, ışın yayınlamaz ya da çekirdeği uyarır. Sadece iki parçacık arasındaki momentum korunumu için gereken kinetik enerjiyi kaybeder [26].

3.3 Atomik Elektronlardan Esnek Olmayan Saçılma

Esnek olmayan çarpışmalar, atomların bağlı elektronları ile olur ve yüklü parçacık kinetik enerjisini kaybeder. Bu çarpışmalar sonucunda, bir veya daha fazla atomik elektron uyarılmış duruma veya bağlı olmayan duruma (iyonize) geçebilir [26].

3.4 Çekirdekten Esnek Olmayan Saçılma

Gelen yüklü parçacık, çekirdeğe yaklaşır yakalanmama durumunda enerjisinin bir kısmını kaybederek yolundan sapar. Bu çarpışmalar sonucunda frenleme ışınımı olayı oluşabilir. Genellikle gelen yüklü parçacığın çekirdeği uyarma olasılığı, frenleme ışınımı yapma olasılığından daha düşüktür [26].

3.5 Tesir Kesiti

A yüzeyinde ve dx kalınlığına sahip ince bir levha madde üzerine, I şiddetiyle gelmekte olan bir parçacık demeti düşünelim. Bir parçacık ince levhadan geçerken çekirdeklerden birine çok yaklaşmışsa bu çekirdek tarafından parçacığın yakalanma ya da saçılma olasılığı vardır. σ 'nın bir atomu kuşatan etkin alan olduğunu varsayalım. Eğer gelen parçacık bu alana düşerse bir çekirdek reaksiyonu oluşacak demektir. Levhanın birim hacmi başına n tane hedef çekirdeği olsun.

ndx = birim yüzey başına düşen çekirdek sayısı

$Andx$ = A alanındaki toplam çekirdek sayısı

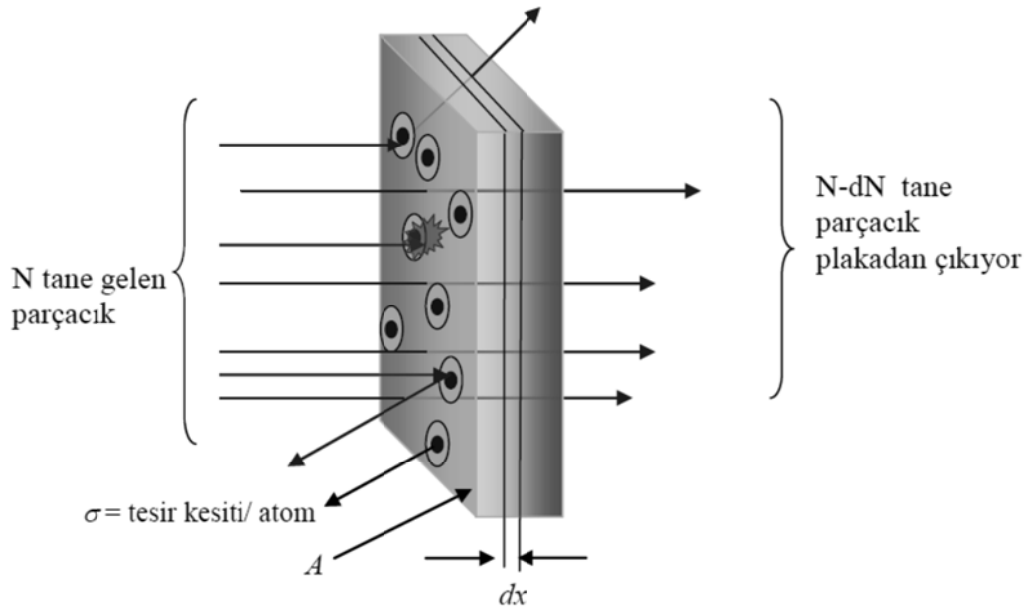
olacaktır. Her bir çekirdek σ etkin alanıyla katıldığından bir çekirdek reaksiyonu için olanaklı olan toplam etkin alan;

$$A n \sigma dx = \text{toplam etkin alan}$$

olacaktır. Etkin alan kesri ise;

$$f = \frac{\text{toplam etkin alan}}{\text{toplam yüzey alanı}} = \frac{\sigma A n dx}{A} = n \sigma dx \quad (3.1)$$

ifadesi ile verilir [27].



Şekil 3.1: Tesir kesiti

Gelen demetteki parçacık sayısı N ise, levhadaki çekirdeklerle etkileşen parçacık sayısı dN ,

$$\frac{dN}{N} = \frac{n\sigma A dx}{A} \quad (3.2)$$

olarak belirlenir. Aynı parçacık demeti, sonlu bir x kalınlığındaki bir levhaya geldiğini düşünelim. Eğer parçacık bir defa etkileşiyorsa, levhanın dx kalınlığından geçerken demetten dN kadar ayrılır. Dolayısıyla Denklem (3.2),

$$-\frac{dN}{N} = \frac{n\sigma A dx}{A} \quad (3.3)$$

şeklinde yazılabilir. Başlangıçtaki parçacık sayısı N_0 olmak üzere,

$$-\int_{N_0}^N \frac{dN}{N} = -n\sigma \int_0^x dx \quad (3.4)$$

ifadesi elde edilir. Bu ifadenin integrali alınırsa,

$$\ln N - \ln N_0 = -n\sigma x \quad (3.5)$$

$$N = N_0 e^{-n\sigma x} \quad (3.6)$$

bağıntısı elde edilir. Mikroskobik tesir kesiti σ ile gösterilir, birimi “barn” ve

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 \quad (3.7)$$

dir. $n\sigma$ ise makroskobik tesir kesiti olarak tanımlanır ve μ ile gösterilir [28].

3.6 Diferansiyel Tesir Kesiti

Gelen parçacıklar hedef çekirdekleriyle etkileşmelerinde, her zaman yalnızca bir tür çekirdek reaksiyonu oluşturmaları gerekmez. Eğer birden fazla etkileşme olmuşsa, her bir tür için tesir kesiti genellikle farklı olacaktır. Bu özel tesir kesitlerine diferansiyel (kısmi) tesir kesiti denir ve toplam tesir kesiti bunların toplamına eşit olacaktır. Çekirdek etkileşmesi ya da saçılma olduktan sonra dışarı gönderilen parçacıklar çok kez izotropik olmayan dağılım gösterirler ve aynı zamanda farklı açılarda farklı enerjilere sahip olurlar. Geliş doğrultusu ile θ açısı yaparak saniyede $d\Omega$ katı açısı içinde giden parçacıkların sayısının bilinmesi önemlidir. Bu hesabın yapılabilmesi için, açuya bağımlı başka bir tesir kesiti türü sunulur. Bu yeni tesir kesitine diferansiyel tesir kesiti adı verilir ve birim katı açı başına düşen tesir kesiti olarak tanımlanır. Bunu $\sigma(\theta, \phi)$ ile gösterirsek,

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (3.8)$$

şeklinde ifade edilir. Böylece toplam tesir kesiti,

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (3.9)$$

olacaktır. $d\Omega$ katı açısı,

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.10)$$

bağıntısı ile ifade edilir. Denklem (3.9) ve Denklem (3.10) birleştirildiğinde,

$$\sigma = 2\pi \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (3.11)$$

olacaktır. Burada,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta) \quad (3.12)$$

diferansiyel tesir kesitidir [27].

3.7 Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları

Esnek çarpışma sonucunda etkileşmeye giren parçacıkların iç yapısı değişmeden, sadece hafif kütleli parçacığın hareket yönünde değişme gözlenir [29].

Birkaç eV'den 10 keV'e kadar düşük enerjili elektron ve pozitronların diferansiyel ve toplam esnek saçılma tesir kesitleri kısmi dalga yöntemiyle çeşitli potansiyeller kullanılarak hesaplanabilir. Bu yöntem uzun ve zor kuantum mekaniksel işlemlere dayalı olarak yapılır [30-35].

Orta enerjili elektronlarla yapılan çalışmalarda ise çoğunlukla spin-rölativistik faktör içeren perdeli Rutherford diferansiyel tesir kesiti kullanılır. Üç faktörden oluşan bu tesir kesiti

$$\frac{d\sigma(\theta, E)}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Ruth}(\theta, E)}{d\Omega} K_{scr}(\theta, E) K_{rel}(\theta, E) \quad (3.13)$$

ifadesi ile verilir [36]. (3.13) ifadesinde ilk terim perdeli olmayan Rutherford tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma_{Ruth}(\theta, E)}{d\Omega} = Z^2 r_e^2 \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \frac{1}{(1 - \cos \theta)^2} \quad (3.14)$$

dir. Burada θ saçılma açısı, E gelen elektronun kinetik enerjisi, Z ortamın atom numarası, r_e klasik elektron yarıçapı ve β elektronun ışık hızı cinsinden sahip olduğu hızdır.

Denklem (3.13)'de ikinci terim perdeleme düzeltmesini içerir. Bu terim nükleer yükün orbital elektronları tarafından perdelemesi hesabını içerir ve Molière [37] saçılma teorisi ile hesaplanır.

$$K_{scr}(\theta, E) = \frac{(1 - \cos \theta)^2}{(1 - \cos \theta + 2\eta)^2} \quad (3.15)$$

dir. η atomik perdeleme parametresidir ve çalışılan enerji bölgesine göre farklı önerilmiş eşitliklerle ifade edilebilir.

Thomas-Fermi perdeleme parametresi,

$$\eta_{TF} = 4.34 \frac{Z^{2/3}}{E} \quad (3.16)$$

ifadesi ile verilir.

Bishop [38] tarafından perdeleme parametresi,

$$\eta_B = 3.4 \frac{Z^{2/3}}{E} \quad (3.17)$$

şeklinde önerilmiştir.

Diğer bir yaklaşım Nigam [39] tarafından,

$$\eta_N = 5.44 \frac{Z^{2/3}}{E} \quad (3.18)$$

ifadesi ile verilmiştir. Nigam [39] tarafından önerilmiş, Adesida ve arkadaşları [40] tarafından geliştirilmiş ifade,

$$\eta_A = \frac{2.61Z^{2/3}}{E} \quad (3.19)$$

dir. Denklem (3.16)-(3.19)'da enerji eV'dir ve ayrıntılı bilgi [41] numaralı referansında verilmiştir.

Nigam ve Mathur [42] tarafından 1. Born yaklaşımı kullanılarak atomik perdeleme parametresi,

$$\eta_t = \frac{\chi_0^2}{4} \quad (3.20)$$

şeklinde hesaplanmıştır. Burada,

$$\chi_0 = 1.12 \frac{\hbar}{p} \left(\frac{Z^{1/3}}{0.885a_0} \right) \quad (3.21)$$

dir, a_0 Bohr yarıçapı, \hbar Planck sabiti,

$$p = m_0c[\beta^2/(1 - \beta^2)]^{1/2} \quad (3.22)$$

rölativistik momentumdur. m_0 elektronun durgun kütlesi, c ışık hızıdır. 1. Born yaklaşımı kullanılarak elde edilmiş (3.20) eşitliği elektron-pozitron farkını gözletmemektedir.

Nigam ve çalışma grubu [39,42] tarafından 2. Born yaklaşımı kullanılarak,

$$\eta_u = \frac{1}{4} \chi_0^2 \left\{ 1 + 2\alpha \chi_0 \left[\frac{1 - \beta^2}{\beta} \ln \chi_0 + \frac{0.231}{\beta} + 1.448\beta \right] \right\}^2 \quad (3.23)$$

ifadesi ile atomik perdeleme parametresi hesaplanmıştır. Burada, α ince yapı sabiti'dir. Bu değer elektronlar için, $\alpha = +Z/137$ pozitronlar için $\alpha = -Z/137$ 'dir.

Denklem (3.13)'de (3.14) ve (3.15) ifadeleri yerine yazıldığında perdeli Rutherford tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma(\theta, E)}{d\Omega} = Z^2 r_e^2 \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \frac{1}{(1 - \cos \theta + 2\eta)^2} K_{rel}(\theta, E) \quad (3.24)$$

elde edilir.

Denklem (3.13)'de üçüncü terim $K_{rel}(\theta, E)$ spin-rölativistik faktördür ve Mott tesir kesitinin Rutherford tesir kesitine (σ/σ_R) oranı olarak tanımlanır. Çeşitli ortamlar için farklı enerji ve saçılma açılarında Doggett ve Spencer [43], Idoeta ve Legarda [44] tarafından hesaplanmıştır.

Esnek saçılma için rölativistik düzeltmeli perdeli Rutherford toplam tesir kesiti [38];

$$\sigma_{el} = 5.21 \times 10^{-21} \frac{Z^2}{E^2} \frac{4\pi}{\eta(1 + \eta)} \left(\frac{E + 511}{E + 1024} \right)^2 \quad (3.25)$$

ifadesi de önerilmiştir. Burada E (keV), Z ve η sırayla elektronun enerjisi, atom numarası ve atomik perdeleme parametresidir.

3.8 Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları

Esnek olmayan etkileşimlerde gelen parçacığın hedef atoma aktaracağı enerjiye bağlı olarak, atom temel seviyeden üst bir seviyeye uyarılır ya da iyonize olur. Aynı zamanda gelen parçacık enerji kaybederek geliş yönünden farklı bir yönde hareket eder [29].

Esnek olmayan etkileşim sonucu kaybedilen enerji miktarı, durdurma gücü ve ortalama serbest yol gibi kavramlar, nükleer fizik, nükleer tıp, medikal fizik, yüzey fiziği alanlarında önemli yer tutmaktadır. Birçok bilim adamı, yapılan deneysel çalışmaların sonuçlarına dayanarak esnek olmayan etkileşimleri açıklamaya yönelik çeşitli çalışmalar yapmış ve modeller kurmuşlardır.

Bethe [45], Born yaklaşımına dayalı olarak analitik bir ifade türetmiştir. Bethe teorisi halen birçok çalışmada kullanılmaktadır. Bu teori hızlı elektronların serbest atomdan saçılmasını inceler.

Daha sonra Bethe'nin çalışmalarından faydalanarak Inokuti'nin [46] öne sürdüğü, Liljequist [47] tarafından basitleştirilerek yeni bir model oluşturulmuştur. W enerji aktarımı, Q momentum aktarım enerjisi olmak üzere esnek olmayan saçılma diferansiyel tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma}{dWdQ} = \frac{\pi e^4}{E_k} \frac{1}{WQ} \frac{df(W, Q)}{dW} \quad (3.26)$$

eşitliği ile verilmiştir. Bu eşitlikteki,

$$\frac{df(W, Q)}{dW} \quad (3.27)$$

ifadesi genelleştirilmiş osilatör şiddet yoğunluğudur (GOS). Denklem (3.26)'da, verilen bir Q değerine karşılık W ya da W 'nin verilen bir değerine karşılık Q çeşitli değerler alabilir ve bu (Q, W) değerleri bir yüzey formu oluştururlar ki bu "Bethe yüzeyi" olarak adlandırılır [29]. Bethe yüzeyi hedef atom veya ortamın karakteristik özelliği hakkında bilgi verir. GOS,

$$\frac{df(W, Q)}{dW} = \sum_{i=1}^M f_i \frac{dg_i(W, Q)}{dW} \quad (3.28)$$

olmak üzere,

$$\frac{dg_i(W, Q)}{dW} = \begin{cases} \delta(W - W_i) & Q < W_i(\text{rezonans}) \\ \delta(W - Q) & Q > W_i(\text{serbest}) \end{cases} \quad (3.29)$$

şeklinde tanımlanır.

Bohr'a [48] göre esnek olmayan uyarmalar, rezonans ve serbest etkileşmeler olmak üzere ikiye ayrılmaktadır. Rezonans tipi etkileşmeler ($Q < W_i$), gelen parçacığın hedef atomun bağlı elektronları ile yaptıkları etkileşimlerdir. Bu etkileşimlerde momentum ve enerji aktarımı azdır. Serbest etkileşmeler ($Q > W_i$), gelen parçacığın hedef atomun valans elektronları ile yaptıkları etkileşimlerdir. Q 'nun sıfır olduğu durumda GOS, optik osilatör şiddet yoğunluğuna (OOS) indirgenir.

Liljequist [49] yaptığı kuantum mekaniksel hesaplamalar sonucunda GOS için,

$$\frac{df(Q, W)}{dW} = \sum_{i=1}^M f_i F(W_i; Q, W) = \int_0^{\infty} \frac{df(W)}{dW} F(W_i; Q, W) \quad (3.30)$$

eşitliğini tanımlamıştır.

Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için Liljequist [47] tarafından önerilen tesir kesiti,

$$\mu_{eo} = nZ_i 2\pi r_e^2 \frac{m_0}{\beta^2} \sum_{i=1}^M \left[\frac{1}{W_i} \ln \left(\frac{W_i}{Q_{min}} \right) - \frac{1}{E_k} + \frac{1}{W_i} \right] \quad (3.31)$$

dir. Burada W_i rezonans enerjisi, Q_{min} minimum geri tepme enerjisi, Z_i i. kabuğun toplam değerlik elektron sayısı, E_k elektronun kinetik enerjisi, n birim hacimdeki tanecik sayısıdır.

Dielektrik teori, yüklü parçacıkların enerji kaybını dikkate alır ve maddenin dielektrik özelliklerini hesaba katan bir teoridir. Dielektrik teoriye dayanarak Lindhard [50],

$$\frac{dE}{dX} = -\frac{Z_1 e^2}{\pi v^2} \text{Im} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} \int_{-kv}^{kv} w dw \left(\frac{1}{\varepsilon(k, w)} - 1 \right) \quad (3.32)$$

eşitliğini tanımlamıştır.

Başka bir ifade Fano [51] tarafından,

$$\frac{d^2\sigma}{dQdW} = \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{WQ} \frac{2W}{\pi \Omega_p^2} Z \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(Q, W)} \right) \quad (3.33)$$

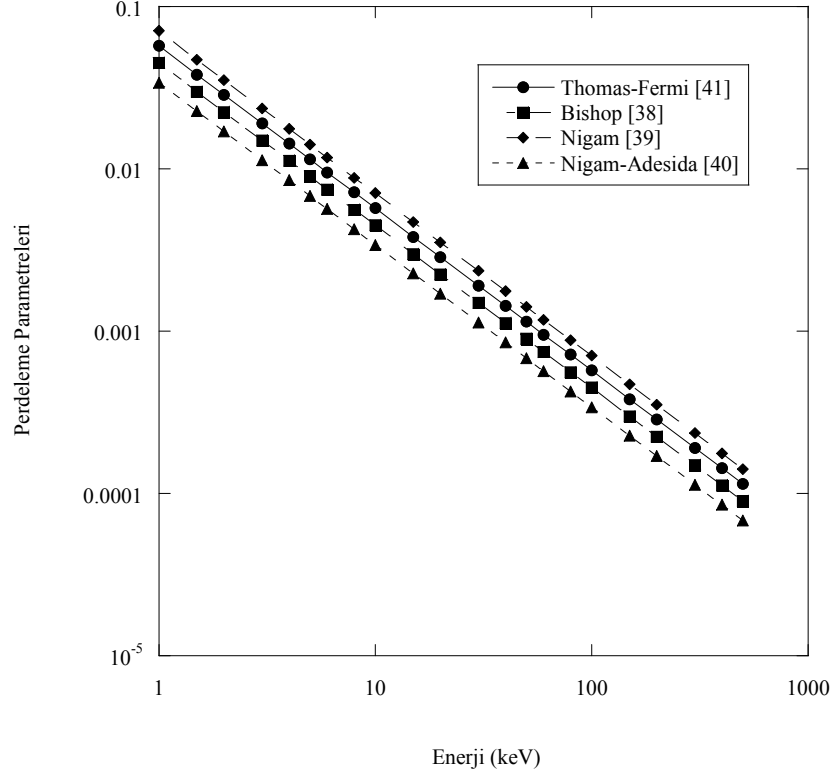
şeklinde önerilmiştir.

Penn [52] ise, dielektrik teoriye dayalı, istatistiksel yaklaşımları kullanarak Penn modelini oluşturmuştur. Bu model ile optik veriler kullanılarak, ortalama serbest yol hesapları yapılmıştır.

4. YÖNTEM

4.1 Elektronlar İçin Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesabı

Esnek saçılma toplam tesir kesiti ilk olarak Denklem (3.24) ve (3.25) yardımıyla hesaplanmıştır. Perdeleme parametresi elektronların esnek saçılmasında açısal dağılımın şeklini belirleyici olması açısından önemlidir. Bu nedenle Denklem (3.16)-(3.23) ile verilen her bir perdeleme parametresi denenerek, orta enerjili elektronlarda Nigam ve Adesida parametrelili perdelemelerin uygun olduğu görülmüş, alüminyum ve altın ortamlarda Denklem (3.19), gümüş ortamda ise Denklem (3.18) kullanılmıştır. Ayrıca hesaplanan her bir perdeleme parametrelerinin 1-500 keV enerji aralığında değişimi Şekil 4.1’de verilmiştir.



Şekil 4.1: Perdeleme parametrelerinin enerjiye göre değişimi

Denklem (3.24)'deki $K_{rel}(\theta, E)$, spin-rölativistik düzeltme faktörü için gelen elektronların kinetik enerjileri ve saçılma açılarının fonksiyonu olarak analitik bir ifadeye ihtiyaç duyulduğundan

$$K_{rel}(\theta, E) = p_1 + p_2\theta + p_3\theta^2 + p_4\theta^3 + p_5\theta^4 \quad (4.1)$$

(4.1) ifadesinden yararlanılmıştır. Alüminyum ve gümüş ortamlar için Dogget-Spencer'in [43] çalışmasından alınan saçılma açıları ve enerjiye karşılık gelen değerlere iki aşamalı fit yapılarak sırası ile (4.2) ve (4.3) eşitlikleri elde edilmiştir. Çalışılan altın ortam için spin-rölativistik düzeltme faktörü literatürde

bulunamadığından aynı çalışmadaki yakın atom numarasına sahip olan kurşun verilerinden yararlanılmış, sonuçlar Denklem (4.4)'de verilmiştir. Burada elektronun kinetik enerjisi E, MeV'dir.

Al için,

$$\begin{aligned}
 p_1 &= 0.9995291 - 0.015162057E + 0.022986532E^2 - 0.011131E^3 \\
 P_2 &= -0.019785356 - 0.3141767E + 0.06E^2 + 0.4824208E^{0.4582863} \\
 P_3 &= 0.0080394345 + 2.7197384E - 0.1444223E^2 - 2.9922342E^{0.8288} \\
 p_4 &= -0.0018192126 - 0.2363247E + 0.3185469E^{0.74877003}
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

Ag için,

$$\begin{aligned}
 p_1 &= 0.94385 - 0.0247281E + 0.1887E^{0.1} - 0.16394E^{0.2} \\
 p_2 &= 1.48452 - 4.44223E - 5.77665E^{0.2} + 8.88945E^{1/2} \\
 P_3 &= -3.82977 + 4.8199E + 16.10416E^{0.2} - 16.859E^{0.4} \\
 p_4 &= 1.57272 - 2.27445E - 5.08986E^{0.2} + 5.44365E^{1/2} \\
 P_5 &= -0.0664568 - 0.9192E + 0.62197E^2 + 0.58219E^{1/2}
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Au için,

$$\begin{aligned}
 p_1 &= 1.15580 + 0.21094E + 1.04532E^2 - 0.90293E^{1/2} \\
 p_2 &= -0.98619 + 5.51413E - 13.0890E^2 + 3.96112E^{1/2} \\
 p_3 &= 0.63866 - 9.47455E + 13.52276E^2 + 0.44878E^{1/2} \\
 p_4 &= -0.0521791 + 2.26454E - 2.70311E^2 - 0.60537E^{1/2}
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

dir.

Esnek saçılma toplam tesir kesiti hesabı için Mayol ve Salvat [53] ve NIST Elektron Esnek Saçılma Tesir Kesiti Veritabanı [54] da kullanılmıştır.

Esnek saçılma toplam tesir kesiti hızlı değişen bir fonksiyondur, 50 eV-500 keV enerji aralığında sürekli bir ifadesi için

$$\mu_e(cm^{-1}) = exp(p_1 + p_2x + p_3x^2 + p_4x^3 + p_5x^4) \quad (4.5)$$

kuvvet serisi açılımı kullanılmıştır, burada, $x = \ln[E(keV)]$ dir. Mayol ve Salvat [53] ve NIST [54] çalışmalarından alüminyum, gümüş ve altın ortamlar için alınan esnek saçılma toplam tesir kesiti değerlerine (4.5) ifadesi fit edilmiştir.

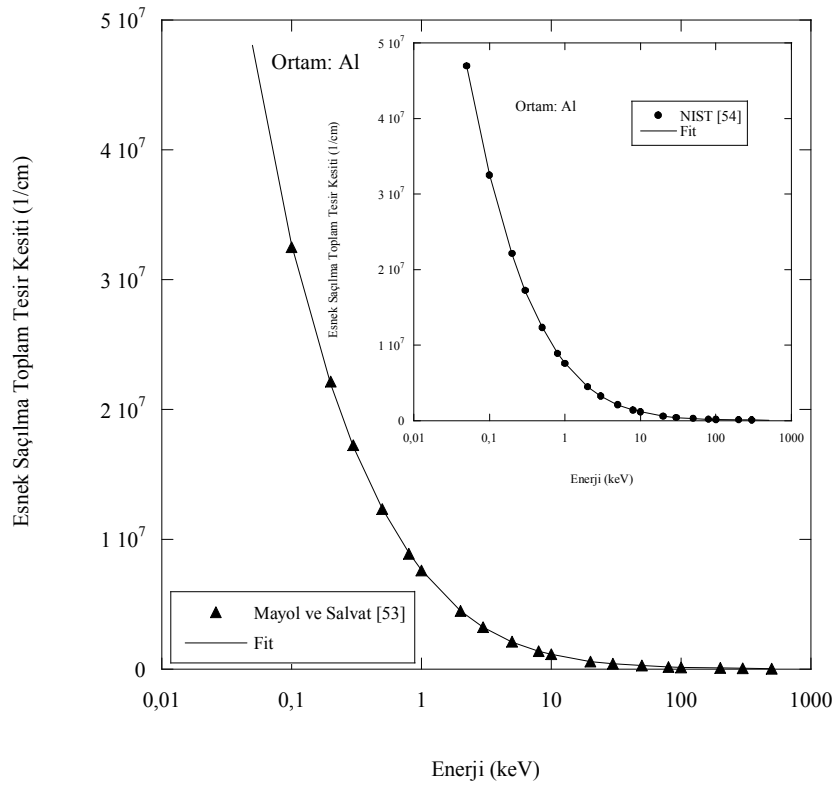
Esnek saçılma toplam tesir kesitlerinin fitlerle belirlenen parametreleri Tablo 4.1 ve Tablo 4.2’de regresyon katsayılarıyla birlikte verilmiştir. Ayrıca esnek saçılma toplam tesir kesitlerinin enerjiye bağlı değişimleri Al, Ag ve Au ortamlar için sırası ile Şekil 4.2, Şekil 4.3 ve Şekil 4.4’de görüldüğü gibidir.

Tablo 4.1: Mayol ve Salvat çalışmasından alınan veriler ile Al, Ag ve Au ortamlar için elde edilen esnek saçılma toplam tesir kesiti parametreleri

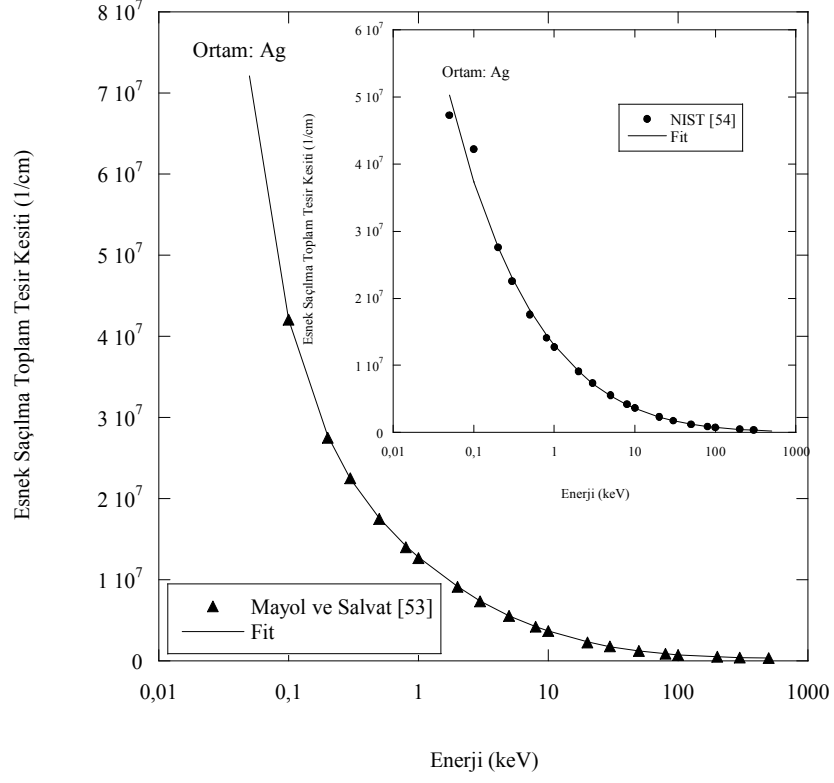
	Al	Ag	Au
p_1	15.84885	16.36351	16.54589
p_2	-0.72865	-0.46587	-0.49188
p_3	-0.0481665	-0.0148182	0.00452758
p_4	-0.0000650513	-0.0119803	-0.00889442
p_5	0.00107385	0.00180908	0.00117097
Regresyon katsayıları	1	1	0.99981

Tablo 4.2: NIST veritabanından alınan değerler ile Al, Ag ve Au ortamlar için elde edilen esnek saçılma toplam tesir kesiti parametreleri

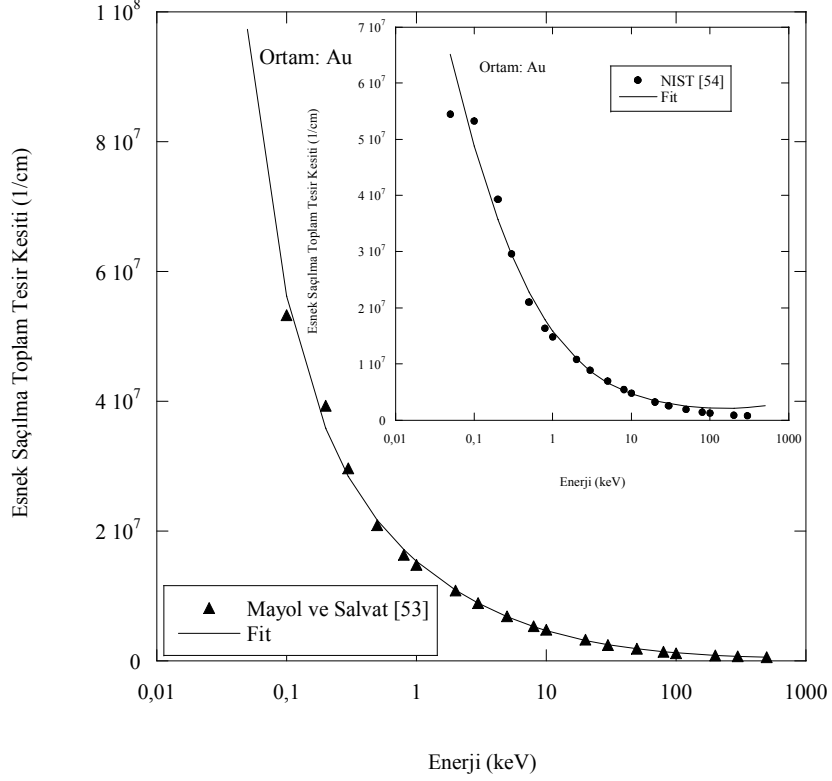
	Al	Ag	Au
p_1	15.84851	16.38461	16.57965
p_2	-0.73128	-0.49903	-0.53231
p_3	-0.0477074	-0.0249062	-0.0116452
p_4	0.000638764	-0.00171557	0.00459317
p_5	0.000913913	0.000381010	-0.000565618
Regresyon katsayıları	1	0.99986	0.99986



Şekil 4.2: Al için esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi



Şekil 4.3: Ag için esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi



Şekil 4.4: Au için esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi

4.2 Elektronlar İçin Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesabı

Bu çalışmada esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için Liljequist [47] tarafından önerilen ve Denklem (3.31) ile verilen ifade kullanılmıştır. Denklem (3.31)'de gerekli olan parametreler, Liljequist'in [49] çalışmasından alınarak alüminyum, gümüş ve altın ortamlar için sırası ile Tablo 4.3, Tablo 4.4 ve Tablo 4.5'de verilmiştir. E_{bi} her kabuk için bağlanma enerjisidir.

Tablo 4.3: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için gerekli parametreler (Al)

Kabuk	Z_i	$E_{bi}(eV)$	$W_i(eV)$
1s	2	1560	3142
2s	2	118	238
2p	6	73.5	148
3s3p	3	6	15.8

Tablo 4.4: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için gerekli parametreler (Ag)

Kabuk	Z_i	$E_{bi}(eV)$	$W_i(eV)$
.....
3p	6	581	842
3d	10	369	535
4s	2	95	138
4p	6	58	84
4d5s	11	7.58	42

Tablo 4.5: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti hesabı için gerekli parametreler (Au)

Kabuk	Z_i	$E_{bi}(eV)$	$W_i(eV)$
.....
4s4p	8	624	1035
4d	10	341	565
5s	2	108	179
4f5p	20	78	129
5d6s	11	9.226	42

Al ortam için esnek olmayan saçılma tesir kesiti değerleri; 50-80 eV enerji aralığında Lesiak ve çalışma grubunun [55] değerleri alınıp, 80 eV-100 keV enerji aralığında Liljequist modeline göre hesaplanmış ve ayrıca 500 keV'e kadar extrapole edilmiştir. Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin sürekli bir ifadesi için de,

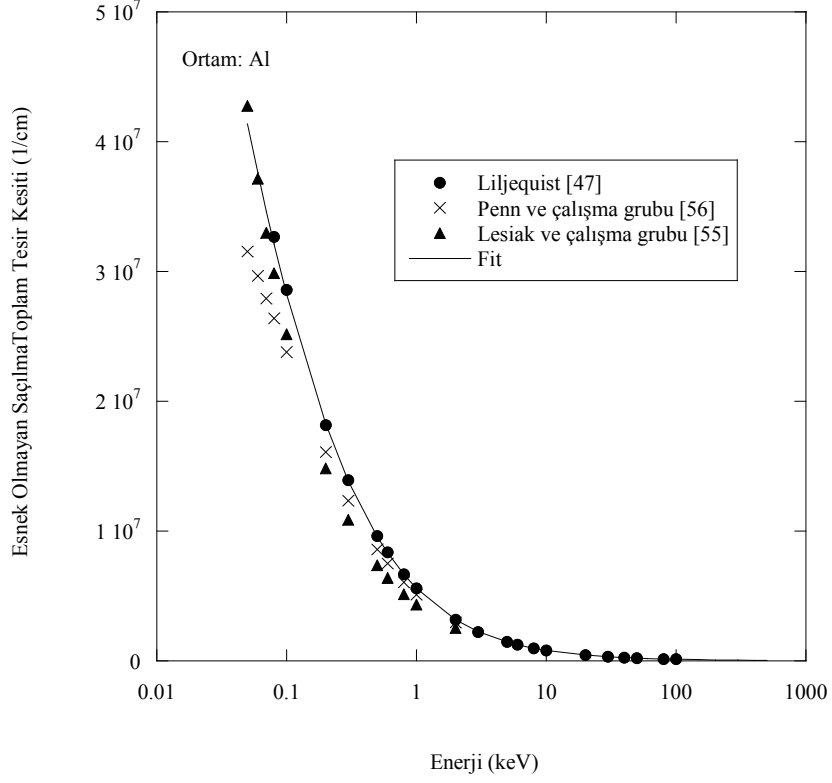
$$\mu_{eo}(cm^{-1}) = exp(p_1 + p_2x + p_3x^2 + p_4x^3 + p_5x^4) \quad (4.6)$$

eşitliği kullanılmıştır. Burada, $x = \ln[E(keV)]$ dir.

Gümüş ortam için de benzer işlemler yapılarak, 50-80 eV enerji aralığında Penn'in [56] çalışmasından alınan veriler kullanılmıştır. Altın ortamında ise 60 eV-300 keV enerji aralığında Liljequist modeline göre hesaplama yapılarak veriler elde edilmiştir. Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitleri için fit sonucu elde edilen parametreler her bir ortam için regresyon katsayılarıyla birlikte Tablo 4.6'da verilmiştir.

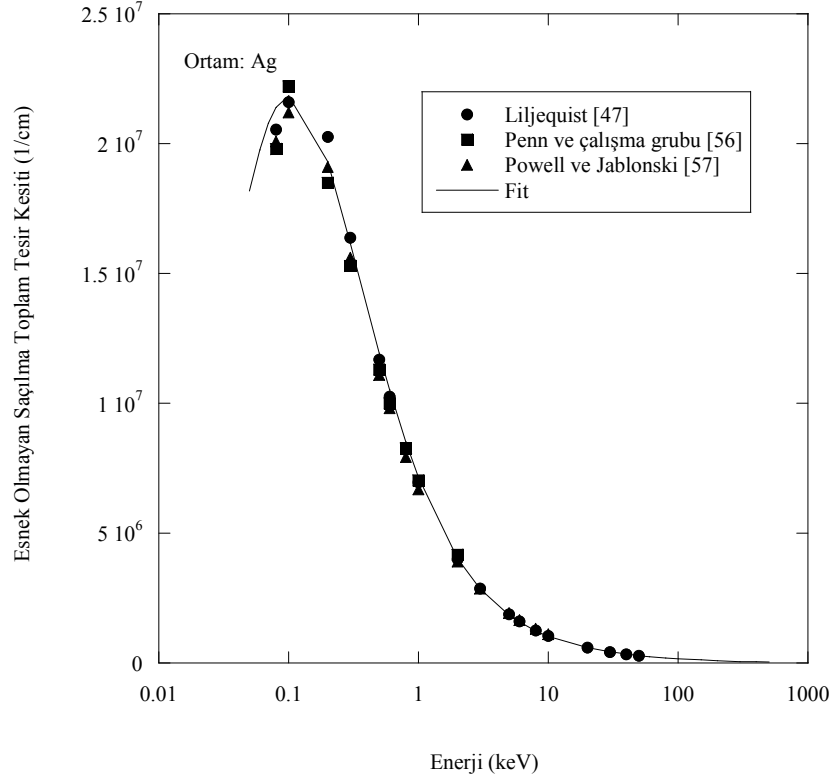
Tablo 4.6: Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitleri için elde edilen parametreler

	Al	Ag	Au
p_1	15.53756	15.78265	15.93517
p_2	-0.79712	-0.79506	-0.77755
p_3	-0.0316257	-0.063608	-0.0771681
p_4	0.00465512	0.0248458	0.0314358
p_5	-0.000280279	-0.0026102	-0.00350807
Regresyon katsayıları	1	0.99993	0.99985



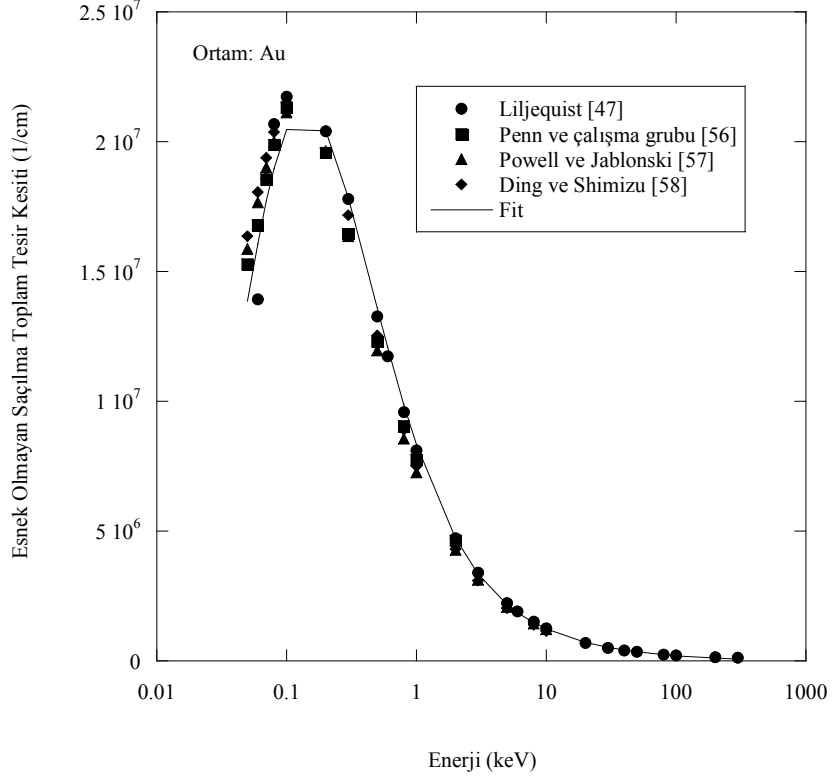
Şekil 4.5: Al için esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi

Elde edilen esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitlerinin enerjiye bağlı değişimleri Şekil 4.5-4.7’de, sırasıyla alüminyum, gümüş ve altın ortamlar için gösterilmiştir. Şekil 4.5’de alüminyum ortam için elde edilen sonuçlar Liljequist [47], Penn ve çalışma grubu [56], Lesiak ve çalışma grubunun [55] verileri ile karşılaştırılmış ve uyum sağladığı görülmüştür.



Şekil 4.6: Ag için esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi

Ayrıca Şekil 4.6'da gümüş, Şekil 4.7'de ise altın ortamlar için elde edilen sonuçlar, Liljequist [47], Penn ve çalışma grubu [56], Powell ve Jablonski [57], Ding ve Shimizu [58] çalışmalarındaki veriler ile karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.7: Au için esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi

4.3 Esnek Olmayan Saçılma Enerji Kaybı Hesaplamaları

Esnek olmayan saçılmada enerji kaybının hesaplanması için öncelikle saçılmanın hangi kabuktan gerçekleşeceği belirlenmelidir. Saçılmanın hangi kabuktan olduğu ve kaybedilen enerji miktarının belirlenmesi için Gryzinski'nin [61] yarı ampirik ifadesi kullanılmıştır. Gryzinski'nin [59-61] esnek olmayan saçılma diferansiyel tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E} = \frac{\pi e^4 n_e E_b}{\Delta E^3 E_k} \left(\frac{E_k}{E_k + E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{\Delta E}{E_k} \right)^{\frac{E_b}{E_b + \Delta E}} \times$$

$$\left\{ \frac{\Delta E}{E_b} \left(1 - \frac{E_b}{E_k} \right) + \frac{4}{3} \ln \left[2.7 + \sqrt{(E_k - \Delta E)/E_b} \right] \right\} \quad (4.7)$$

dir. Burada ΔE enerji kaybı, E_b her kabuk için elektron bağlanma enerjisi, E_k gelen parçacığın kinetik enerjisi, n_e o kabuktaki elektron sayısını belirtir. $u = \frac{E_k}{E_b}$ olmak üzere, (4.7) ifadesinin integrali alındığında,

$$\sigma = \frac{\pi e^4 n_e}{E_b^2 u} \left[\frac{u-1}{u+1} \right]^{3/2} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2u} \right) \ln [2.7 + (u-1)^{1/2}] \right\} \quad (4.8)$$

toplam mikroskobik tesir kesiti elde edilir. Her kabuk için tesir kesitleri Denklem (4.8)'dan hesaplanır. i . kabuktan saçılma ihtimali,

$$p_i = \frac{\sigma_i}{\sum \sigma_i} \quad (4.9)$$

dir. Denklem (4.9) ile esnek olmayan saçılmanın hangi kabuktan olduğu belirlenir. Daha sonra ΔE enerji kaybı örnekleme için Denklem (4.8) ifadesine uygun bir zarf fonksiyonu ($1/x^2$) seçilerek reddetme yöntemi uygulanır. Ayrıntılı bilgi Bölüm 5.1.3'de verilmiştir.

5. YÜKLÜ PARÇACIKLARIN BİR ORTAMDAN GEÇİŞLERİNİN SİMÜLASYONU

5.1 Örneklemeler

5.1.1 Ortalama Serbest Yol Örneklemesi

I_0 şiddetinde belli bir enerji ile bir ortama giren yüklü parçacıkların ortamda etkileşme yapmadan önce aldığı ortalama yola “ortalama serbest yol” denir.

Ortalama serbest yol örnekleme için temel örnekleme yöntemi kullanılır. I_0 şiddetinde belli bir enerji ile ortalama giren yüklü parçacıkların şiddeti,

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (5.1)$$

ifadesi ile gösterilir. Burada μ (cm^{-1}) makroskobik tesir kesitidir. Denklem (5.1)'de görüldüğü gibi, bir ortama giren yüklü parçacığın madde ile etkileşmesi makroskobik tesir kesitine bundan dolayı etkileşme türüne, hedef ortamdaki maddenin atom numarasına, gelen parçacığın türüne ve enerjisine bağlıdır.

Yüklü parçacığın ortamda x ile $x + dx$ arasında etkileşim yapma olasılığı,

$$P(x)dx = -\mu \frac{I}{I_0} dx \quad (5.2)$$

$$P(x)dx = -\mu e^{-\mu x} dx \quad (5.3)$$

dir. Denklem (2.4)'e göre toplam olasılık yoğunluk fonksiyonu,

$$\int_0^x P(x') dx' = \int_0^x -\mu e^{-\mu x} dx = e^{-\mu x} \quad (5.4)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.6)'ya göre,

$$q = e^{-\mu x} \quad (5.5)$$

tersine çözümlerse, $x = -\frac{\ln q}{\mu}$ elde edilir. Ortalama serbest yol l ile gösterilirse,

$$l = -\frac{\ln q}{\mu} \quad (5.6)$$

olur. Denklem (5.6)'da görüldüğü üzere ortalama serbest yol, makroskobik tesir kesitinin tersine eşittir.

5.1.2 Esnek Saçılma Açısal Dağılım Örnekleme

Esnek saçılma açısal dağılım örnekleme için Denklem (3.24)'deki perdeli Rutherford tesir kesiti kullanılır. Perdeleme terimindeki, $\frac{1}{(1-\cos\theta+2\eta)^2}$ terimine temel Monte Carlo ilkesi uygulanarak örnekleme yapılır.

$$q = \frac{\int_0^\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega}{\int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega} \quad (5.7)$$

Denklem (5.7)'de,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4E^2(1 - \cos \theta + 2\eta)^2} \quad (5.8)$$

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta \quad (5.9)$$

yerine yazılarak işlemler yapıldığında,

$$q = \frac{\int_0^\theta \frac{\sin \theta d\theta}{(1 - \cos \theta + 2\eta)^2}}{\int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{(1 - \cos \theta + 2\eta)^2}} \quad (5.10)$$

$$q = \frac{(1 - \cos \theta)(1 + 2\eta)}{(1 - \cos \theta + 2\eta)} \quad (5.11)$$

elde edilir. Bu ifade tersine çözüldüğünde ise,

$$\cos \theta = 1 - \frac{2\eta q}{1 - q + \eta} \quad (5.12)$$

esnek saçılma açısal dağılım örneklemesine ulaşılır. Esnek saçılma açısal dağılım örneklemesinde spin-rölativistik düzelme faktörü $K_{rel}(\theta, E)$, gelen yüklü parçacığın enerjisi 5 keV'in üzerinde ise hesaba katılmıştır. Gelen yüklü parçacığın enerji 5 keV'den düşük ise $K_{rel}(\theta, E)$ spin-rölativistik düzeltme faktörü 1 alınmıştır. Denklem (5.12)'de $\cos \theta$ örnekleme yapılarak θ hesaplanır ve $K_{rel}(\theta, E)$ fonksiyonu bulunur. Bir gelişigüzel sayı (q) kullanılarak,

$$q < K_{rel}(\theta, E) \quad (5.13)$$

koşulunun sağlanıp sağlanmadığına bakılır. Koşul sağlandığı takdirde $\cos \theta$ örneklenmiş olur, eğer koşul sağlanmazsa işlemler tekrarlanır.

5.1.3 Esnek Olmayan Saçılma Enerji Kaybı Örneklemesi

Esnek olmayan saçılmada enerji kaybı örneklemesi için öncelikle saçılmanın hangi kabuktan olduğu belirlenmelidir. Ayrıntılı bilgi Bölüm 4.3'de verilmiştir. Esnek olmayan saçılmanın hangi kabuktan olduğu belirlendikten sonra Denklem (4.7) ile verilen Gryzinski fonksiyonuna uygun bir $\left(\frac{1}{x^2}\right)$ zarf eğrisi seçilir.

Seçilen bu fonksiyona temel Monte Carlo ilkesi uygulandığında,

$$q = \frac{\int_{E_b}^{\Delta E} \frac{dx}{x^2}}{\int_{E_b}^{E_k} \frac{dx}{x^2}} \quad (5.14)$$

yazılır. Bu ifadeye göre oluşabilecek minimum enerji kaybı, saçılmanın meydana geldiği elektronun bağlanma enerjisi E_b , maksimum enerji kaybı ise gelen yüklü parçacığın kinetik enerjisi E_k kadardır. Denklem (5.14)'deki integral alınıp tersine çözüm yapıldığında,

$$\Delta E = \frac{E_b}{(1 - q) + qE_b/E_k} \quad (5.15)$$

elde edilir.

Saçılmanın meydana geldiği kabuktaki E_b bağlanma enerjisi değerinde, Gryzinski fonksiyonu ve seçilen zarf fonksiyonu normalize edilerek,

$$norm = \frac{d\sigma(E_b)/dE_b}{1/E_b^2} \quad (5.16)$$

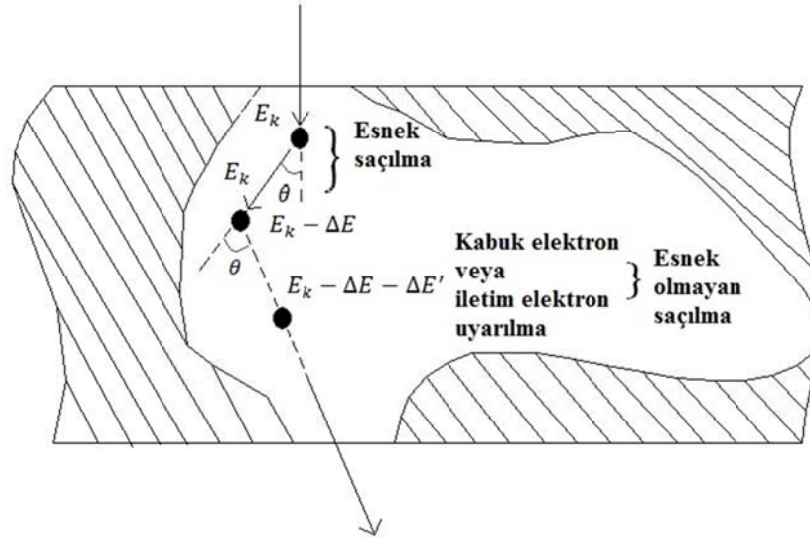
ifadesi hesaplanır. ΔE enerji kaybı Denklem (5.15)'e göre hesaplanır ve bu ΔE değeri için Gryzinski ve zarf fonksiyonları yardımıyla,

$$oran = \frac{\left(\frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E}\right) / \left(\frac{1}{\Delta E^2}\right)}{norm} \quad (5.17)$$

elde edilir. Gelişigüzel sayı q seçilerek eğrinin içinde olup olmadığına bakılır. Eğer $q < oran$ koşulu sağlanmaz ise reddedilir ve işlemler tekrarlanır. Eğer koşul sağlanırsa ΔE enerji kaybı örneklenmiş olur.

5.2 Elektron Hareketinin Dilim Ortam İçerisinde İncelenmesi

Bu bölümde, belli bir kalınlıktaki ortama giren elektronların hareketleri incelenmiştir.



Şekil 5.1: Elektronların dilim ortam içerisindeki hareketleri

Şekil 5.1’de gösterildiği gibi gelen elektronun başlangıç enerjisi E_k olmak üzere, ortama girdiğinde ilk etkileşmeyi yapmadan önce ortalama serbest yol alır ve ilk olarak ortalama serbest yol örnekleme yapılr.

Bu aşamadan sonra elektronun, hedef atomun elektronları ile etkileşmeleri başlar. Bu etkileşmeler esnek saçılma, esnek olmayan saçılma ya da frenleme ışıması (Bremsstrahlung) dır. Bu çalışmada üst enerji sınırı 500 keV olduğundan frenleme ışıması gözlenmeyecek, sadece esnek ve esnek olmayan saçılmalar izlenecektir. Programın içerisindeki gelişigüzel sayılar yardımıyla etkileşme türü örneklenerek belirlenir.

Eğer elektronun enerjisinde bir kayıp meydana gelmez ve geliş doğrultusundan θ açısı ile sapıyorsa etkileşme türü esnek saçılmadır. Küresel koordinat sisteminde elektronun doğrultusu θ kutup açısı ve ϕ azimut açısı ile belirlenir. Kutup açısı, $0 \leq \theta \leq \pi$ ve azimut açısı, $0 \leq \phi \leq 2\pi$ arasında değişir.

θ kutup açısı Bölüm 5.1.2’de örneklenmiştir. Azimut açısı ise,

$$\phi = 2\pi q \quad (5.18)$$

şeklinde örneklenir.

Etkileşme esnek olmayan saçılma ise, elektron başlangıç enerjisinden ΔE kadarını kaybeder. Elektronun kalan enerjisi,

$$E' = E_k - \Delta E \quad (5.19)$$

dir. ΔE enerji kaybı hesaplanmadan önce saçılmanın hangi kabuktan meydana geldiği belirlenir. Daha sonra Bölüm 5.1.3’de gösterildiği gibi enerji kaybı örnekleme yapılr. Esnek olmayan saçılma doğrultusunun kutup açısı ikili çarpışma modeline göre [59-61],

$$\sin \theta = \left(\frac{\Delta E}{E_k} \right)^{1/2} \quad (5.20)$$

ifadesi ile hesaplanır.

Elektron ortama ilk girdiğinde z eksenini doğrultusunda daha önce örneklenmiş olan l ortalama serbest yolunu aldıktan sonra $(0,0,l)$ noktasında etkileşme yapar. Esnek ya da esnek olmayan saçılma yapan elektronun hareket doğrultusunu bulmak için θ ve ϕ açılarına bağlı doğrultman kosinüsleri,

$$\begin{aligned} \alpha &= \sin \theta \cos \phi \\ \beta &= \sin \theta \sin \phi \\ \gamma &= \cos \theta \end{aligned} \quad (5.21)$$

ifadeleri ile hesaplanır.

Parçacığın doğrultusu belirlendikten sonra yeniden bir serbest yol (l') alır. Daha önce örneklenmiş ilk ortama serbest yol (l) gibi l' 'de örneklenerek elektron tekrar hedef ortamın atomları ile etkileşme yapar. İlk ortalama serbest yolu aldıktan sonra yapıldığı gibi tekrar etkileşmenin türü örneklenir ve elektronun yeni hareket doğrultusu belirlenir. Bunun için yeni bir koordinat sistemi x',y',z' seçilir. Elektronun hareket doğrultusu z' 'dür. Seçilen yeni koordinat sistemine göre θ' ve ϕ' açılarına bağlı doğrultman kosinüsleri,

$$\begin{aligned} \alpha' &= \sin \theta' \cos \phi' \\ \beta' &= \sin \theta' \sin \phi' \\ \gamma' &= \cos \theta' \end{aligned} \quad (5.22)$$

belirlenir. Elektronun ikinci etkileşme yaptığı noktanın koordinatları, ilk etkileşme yaptığı noktanın koordinatları (x_1, y_1, z_1) olmak üzere,

$$\begin{aligned}
x_2 &= x_1 + l'\alpha \\
y_2 &= y_1 + l'\beta \\
z_2 &= z_1 + l'\gamma
\end{aligned}
\tag{5.23}$$

ifadeleri ile hesaplanır. Bundan sonraki etkileşmelerde de bu işlemler kullanılarak tekrarlanır.

Dilim ortam geometrisinde, yani z düzlemi d mesafesine kadar alınarak parçacık takibi yapılır. Elektron ortam kalınlığı olan d mesafesine eşit ya da ondan büyük bir koordinatta ise ortamı terk etmiş demektir ve ileri geçen elektron olarak sayılarak yeni bir elektron izlenmeye başlanır. Eğer elektronun etkileşme noktası ortamın kalınlığından büyük ya da eşit değilse, elektron ortam içerisinde etkileşme yapıyor demektir. Bu çalışmada 10000 elektron ileri geçene, geri yansıyana veya kesilme enerjisi olan 50 eV değerinin altına düşüne kadar tek tek takip edilmiştir.

Elektron penetrasyonu için hazırlanan programımız ve diğer Monte Carlo programlarıyla benzer yapıdadır ve aşağıdaki adımlarla özetlenebilir.

1. Belli bir E_k enerjisiyle ortama giren elektron için tesir kesitleri hesaplanır ve elektron giriş doğrultusunda ilk çarpışmadan önce belli bir yol alır. Bu yol enerji ve ortamın özelliklerine bağlı olarak verilen ortalama serbest yol cinsinden $l = -\frac{\ln q}{\mu}$ örneklenir. Burada q gelişigüzel sayı, ($\mu = \mu_e + \mu_{eo}$) toplam tesir kesitidir.

2. Elektron örneklenen ilk serbest yolun sonunda etkileşme yapacaktır ve etkileşme türünün örneklenmesi gerekir.

a) Etkileşme esnek saçılma ise elektron enerji kaybına uğramadan, geliş doğrultusuyla θ açısı yapan herhangi bir doğrultuya saçılır.

b) Etkileşme esnek olmayan saçılma ise elektronun enerji kaybı hesaplanır. Her enerji değişiminde yeni enerji için tesir kesiti ve ortalama serbest yol hesaplanır yani her bir çarpışmadan sonra gidilen mesafe belirlenir.

3. Esnek ve esnek olmayan saçılmalar için polar ve azimütal sapma açlarına yeni gelişigüzel sayılarla örnekleme yapılarak karar verilir.

4. Saçılma açısı sabit koordinat sistemine dönüştürülür ve elektronun konumu hesaplanır.

5. Parçacığın yaşamının durması önceden belirlenen kriterlere göre kontrol edilir.

6. BULGULAR

Bu çalışmada 50 eV- 500 keV enerji aralığında çeşitli kalınlıklardaki alüminyum, gümüş ve altın ortamlara dik olarak gelen elektronların ileri geçiş ve geri yansıma olasılıkları ile enerji ve açısal dağılımları Monte Carlo yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır.

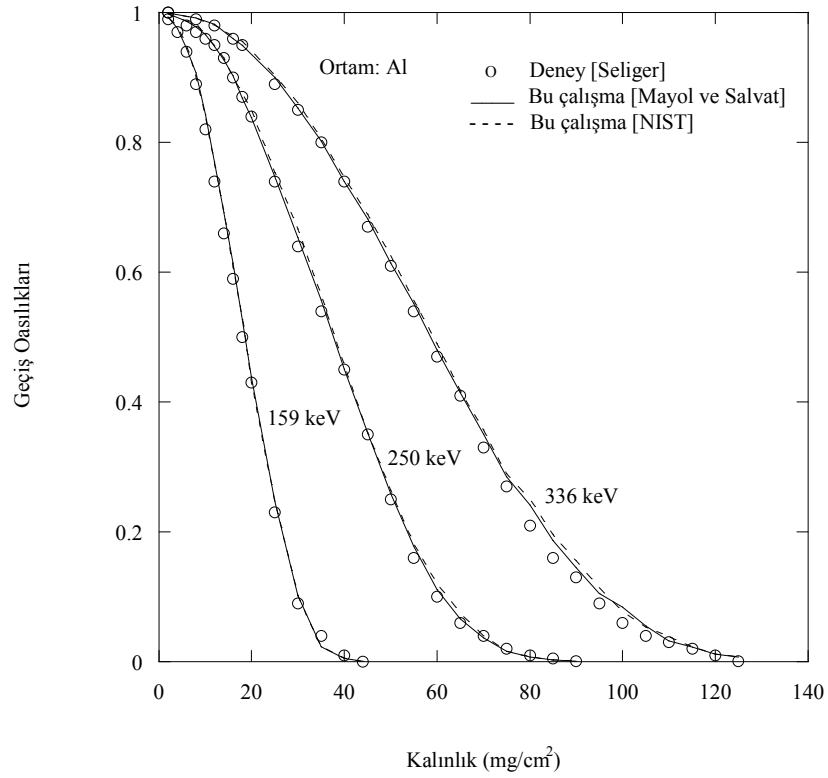
6.1 Metal Ortamlarda Elektronların Geçiş Olasılıkları

Çeşitli kalınlıklardaki metalik ortamlardan orta enerjili elektron ve pozitronların geçiş olasılıkları Seliger [62] tarafından ölçülmüştür. Elektronların 159, 250 ve 336 keV enerji değerlerinde alüminyum ve gümüş ortamlardan, 191, 293 ve 390 keV enerji değerlerinde ise altın ortamdan Monte Carlo yöntemi ile hesaplanan geçiş olasılıkları, Seliger'in [62] deneysel sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır.

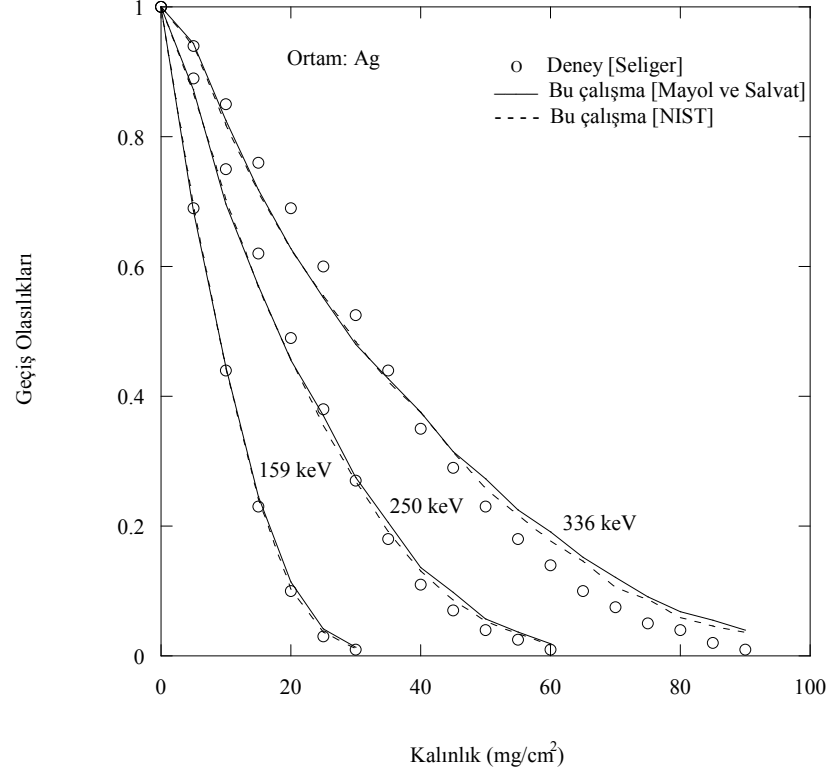
Çeşitli kalınlıklardaki alüminyum, gümüş ve altın ortamlardan elektronların geçiş olasılıkları sırasıyla Şekil 6.1, Şekil 6.2 ve Şekil 6.3'de verilmiştir. Esnek saçılma toplam tesir kesiti için Mayol ve Salvat [53] ve NIST [54] olmak üzere iki farklı ifade kullanılarak, geçiş olasılıklarına esnek saçılma tesir kesiti hesaplarının etkileri incelenmiştir. Mayol ve Salvat tarafından sunulan tesir kesitleri, Dirac–Hartree–Fock atomik elektron yoğunluğundan elde edilen perdeli potansiyellerle Dirac kısmi dalga yöntemiyle geniş bir enerji aralığında (100 eV-1 GeV) ve $Z=1-92$ atom numaralı nötr atomlar için hesaplanmıştır. Değiş-tokuş etkileri Furness and McCarthy lokal yaklaşımları yardımıyla verilmiştir. Nükleer boyut etkileri ise Born yaklaşımında Helm's nükleer form faktörü kullanılarak hesaplanmıştır. NIST çalışmasında da toplam ve diferansiyel esnek saçılma tesir kesitleri, faz kaymaları ve transport tesir kesitleri Dirac-Hartree-Fock elektron yoğunluklarından elde edilen potansiyellerle, rölativistik Dirac kısmi dalga analizleriyle hesaplanmıştır.

Esnek saçılma toplam tesir kesiti hesaplarında perdeli ve spin-rölativistik düzeltme faktörlü Rutherford tesir kesitlerinin Denklem (3.24) ve (3.25) ile verilen ifadeleri de kullanılmış fakat Seliger'in deneysel ölçümlerinde verilen geçiş

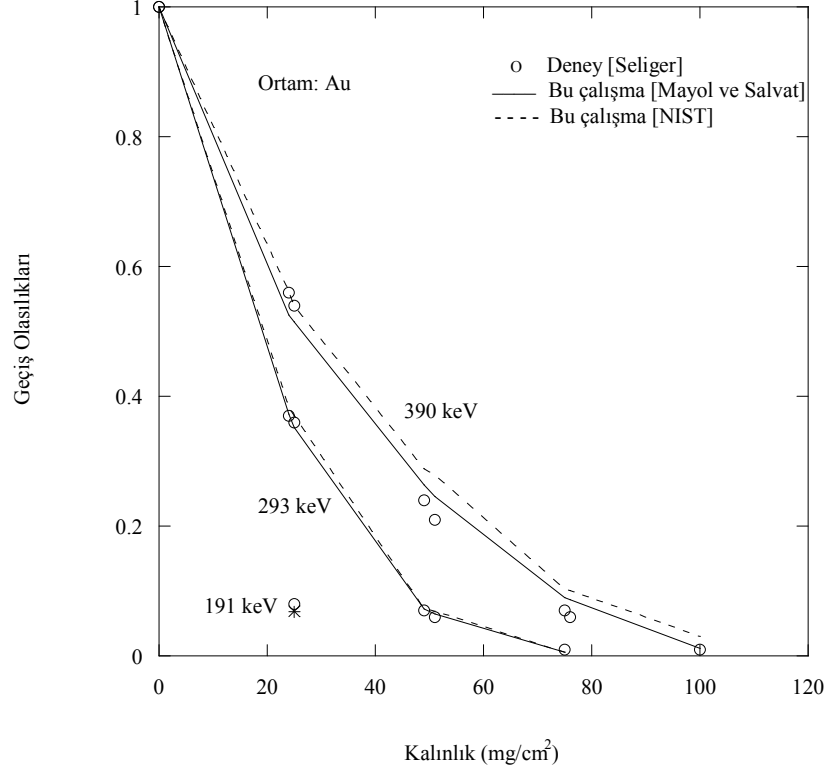
olasılıklarına yakın sonuçlar elde edilememiştir. Tesir kesiti hesaplarındaki belirsizlikler nedeniyle, Mayol ve Salvat [53] ve NIST [54] esnek saçılma toplam tesir kesitlerini, düzeltme çarpanları ile kullanarak iyi sonuçlar elde edilmiştir. Örneğin; Seliger 20 mg/cm² kalınlığındaki alüminyum ortama 159 keV enerjiyle gelen elektronların geçiş olasılığını 0.43 ölçmüştür. Bu çalışmada ise geçiş olasılığı Mayol ve Salvat [53] tesir kesiti kullanılarak 0.438, NIST [54] tesir kesiti kullanılarak ise 0.430 hesaplanmıştır.



Şekil 6.1: Al ortamda çeşitli enerjili elektronların geçiş olasılıkları



řekil 6.2: Ag ortamda eřitli enerjili elektronların geiř olasılıkları

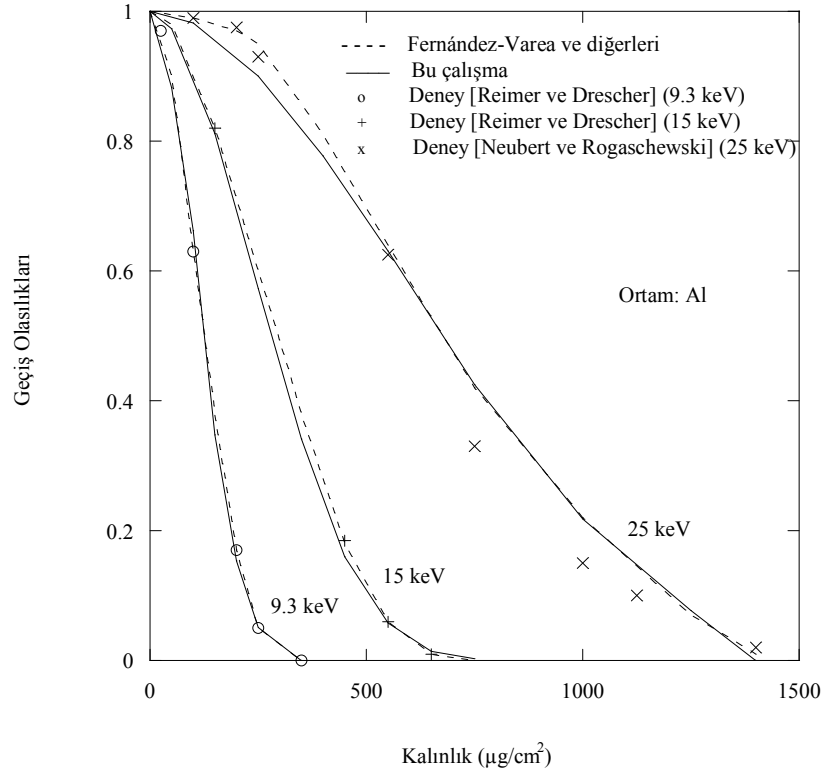


Şekil 6.3: Au ortamda çeşitli enerjili elektronların geçiş olasılıkları

Şekil 6.1, Şekil 6.2 ve Şekil 6.3’de görüldüğü üzere hesaplama sonuçları ile deneysel veriler uyum içerisindedir. Ancak ortamın kalınlığı ve atom numarası arttıkça Monte Carlo hesaplamaları ile deneysel veriler arasında farklılık görülmeye başlamaktadır. Ortamın atom numarası arttıkça, birim hacim başına düşen elektron sayısının artmasıyla elektronun ortamda daha fazla etkileşme yapmaya başlaması, Monte Carlo yönteminin istatistiksel temele dayanması nedeniyle hata birikimi oluşturmaktadır.

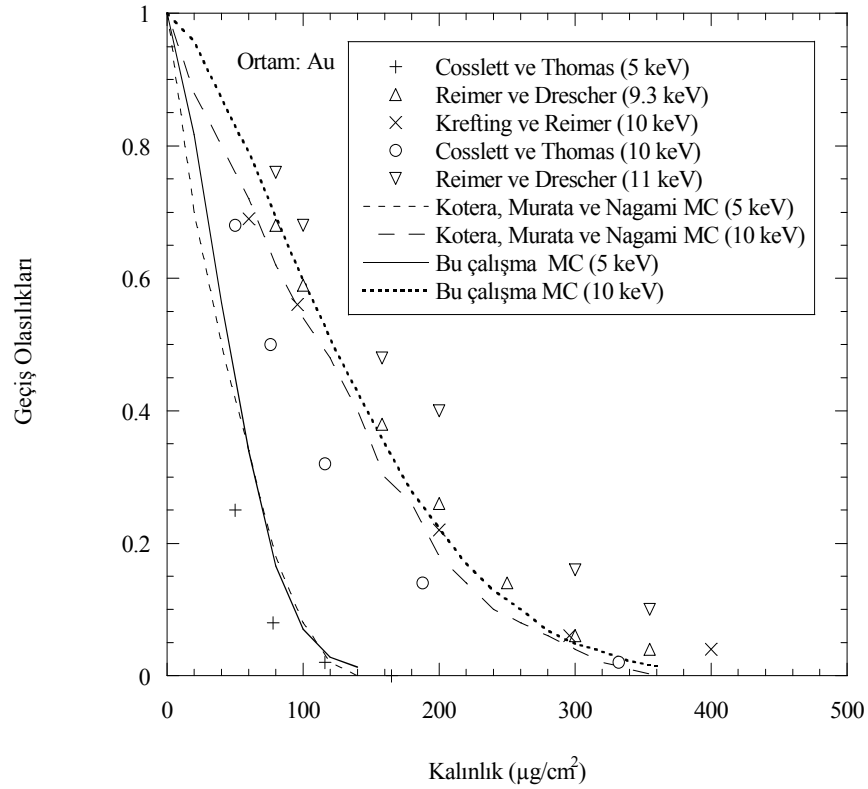
Bu çalışmada izlenen yöntemle, düşük enerjili elektronlar için de alüminyum ve altın ortamlarda geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar, Şekil 6.4 ve Şekil 6.5’de Fernández-Varea ve diğerleri [63] , Murata ve diğerleri’nin [64] Monte Carlo hesaplamaları ile Krefting ve Reimer [65], Cosslett ve Thomas [66],

Reimer ve Drescher [67], Neubert ve Rogaschewski [68] çalışmalarından alınan deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Fernández-Varea ve arkadaşlarının [63] çalışmasında esnek olmayan saçılma hesabı için optik ve fotoelektrik verilere dayalı Bethe yüzey modeli, esnek saçılma hesabı için ise Dirac-Hartree-Slater atomik potansiyelli rölativistik kısmi dalga yöntemi kullanılmıştır. Şekil 6.4’de Monte Carlo hesaplamalarının ve bazı deneysel sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir.



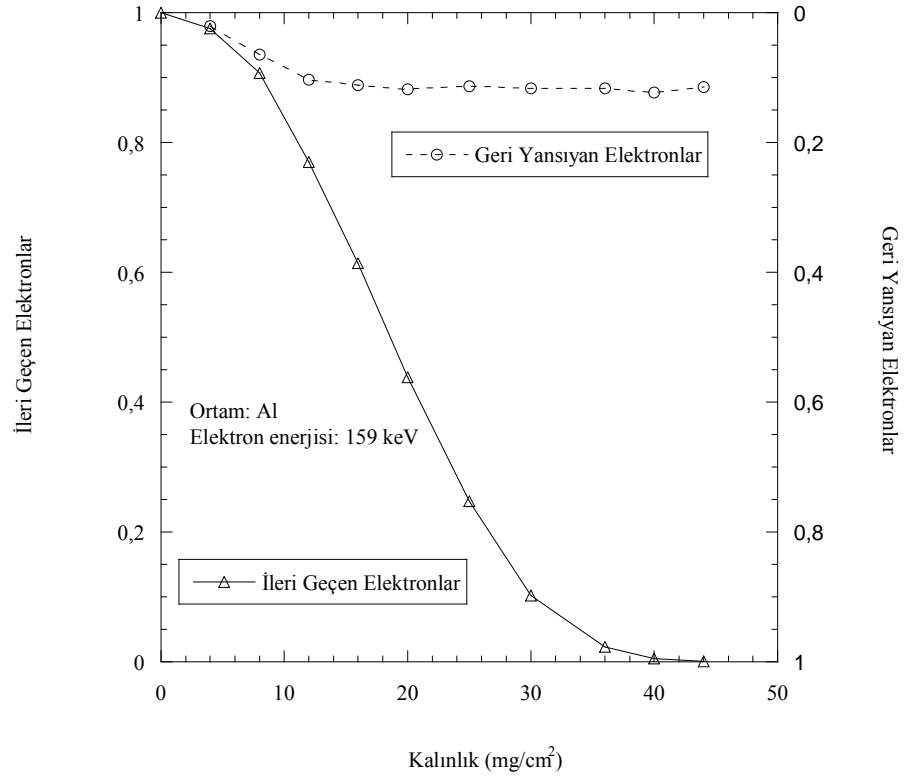
Şekil 6.4: Düşük enerjili elektronların Al ortamdan geçiş olasılıkları

Murata ve arkadaşlarının [64] çalışmasında Monte Carlo simülasyonu için tekli saçılma modeli seçilmiş, enerji kaybı hesabı için Bethe denklemi yerine ayarlanabilir parametrelili Kanaya-Okayama denklemi kullanılmıştır. Esnek saçılma tesir kesiti için daha iyi sonuçlar elde edebilmek amacıyla perdeli Rutherford denklemi yerine Mott denklemi tercih edilmiştir. Tesir kesiti hesaplarında kullanılan farklı yöntemlerin, elde edilen sonuçlar üzerindeki etkileri Şekil 6.5’de görüldüğü gibidir.

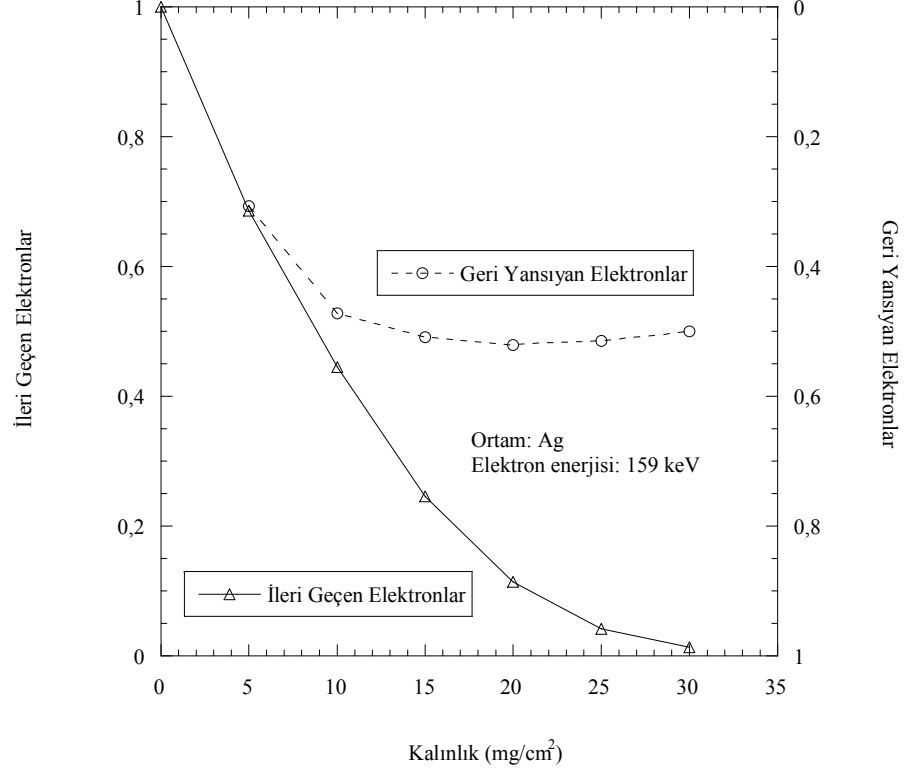


Şekil 6.5: Düşük enerjili elektronların Au ortamdan geçiş olasılıkları

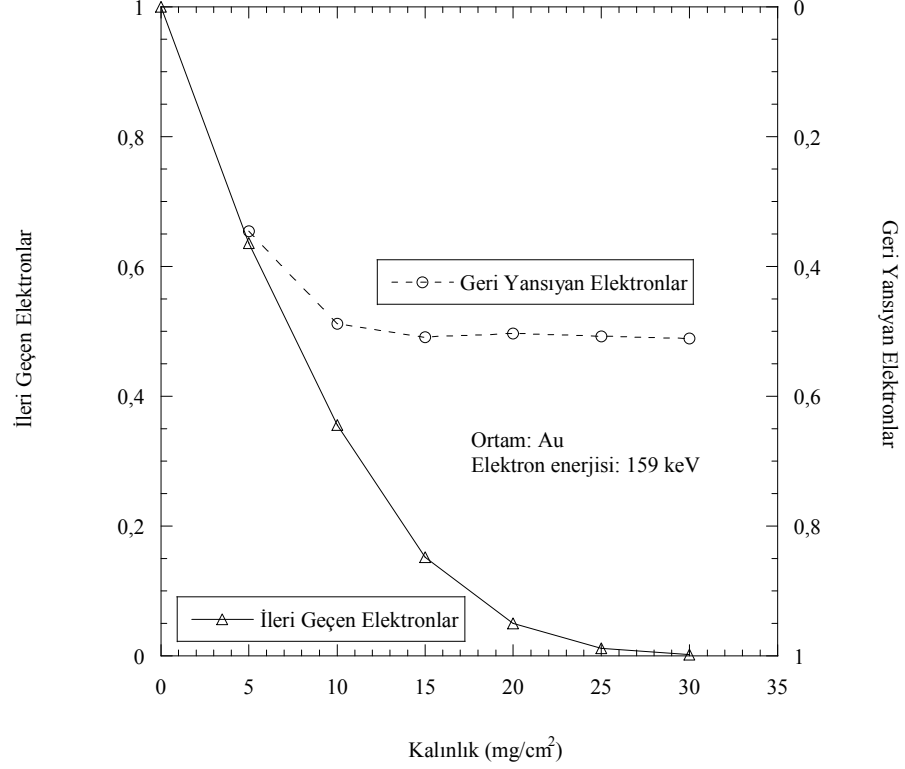
Alüminyum, gümüş ve altın ortamlar için sırası ile Şekil 6.6, Şekil 6.7 ve Şekil 6.8’de geliş enerjisi 159 keV olan elektronların ileri geçme ve geri yansıma olasılıkları karşılaştırılmıştır.



Şekil 6.6: Al-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları



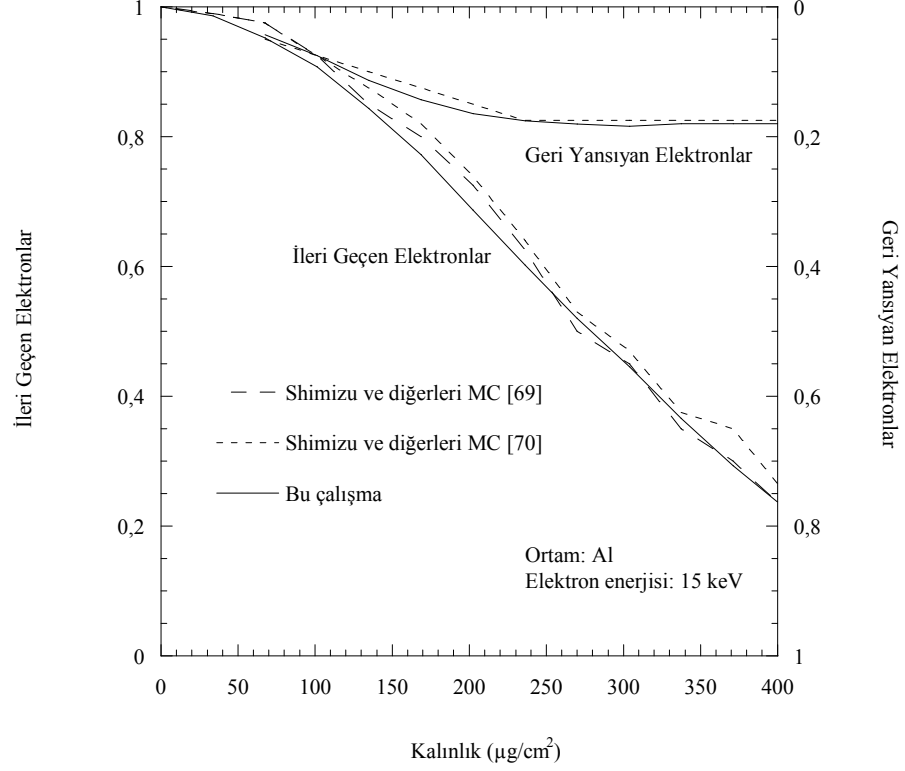
Şekil 6.7: Ag-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları



Şekil 6.8: Au-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları

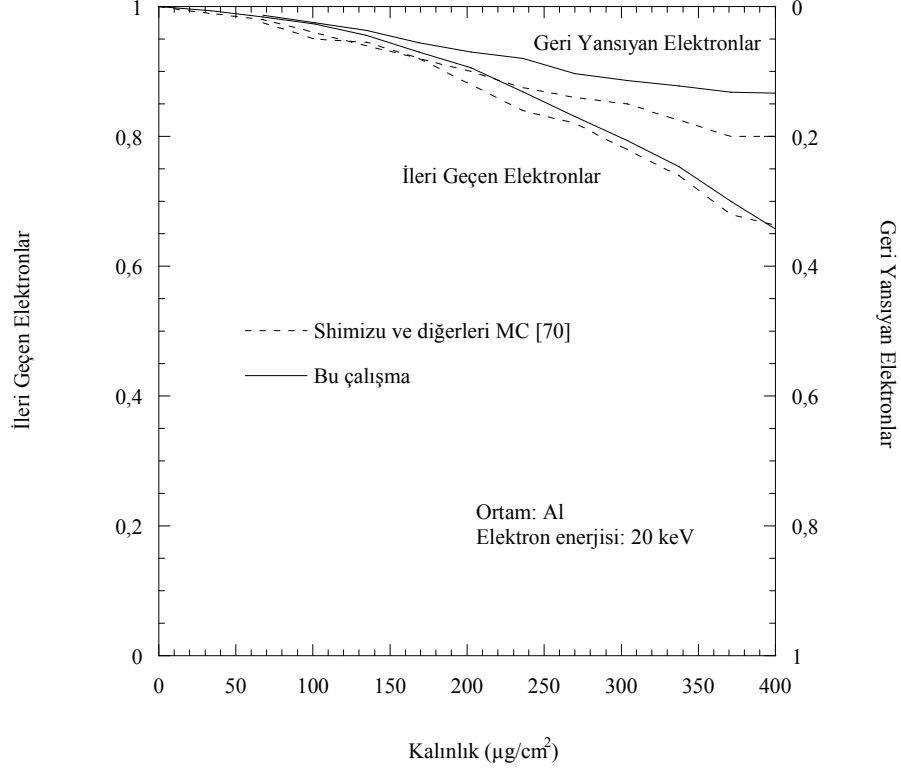
Şekil 6.6, Şekil 6.7 ve Şekil 6.8’de görüldüğü gibi ortamın kalınlığı arttıkça geçen elektronların sayısı azalmakta, soğurulan elektronların sayısı artarken geri yansıyan elektronların sayısında belli bir kalınlık değerinden sonra değişiklik olmamaktadır.

Alüminyum ortam için 15 ve 20 keV düşük enerjili elektronların ileri geçiş ve geri yansıma olasılıkları hesaplanarak, Şekil 6.9 ve 6.10’da Shimizu ve diğerlerinin [69,70] iki ayrı Monte Carlo çalışması ile karşılaştırılmıştır.



Şekil 6.9: Al-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağıl oranları (15 keV)

Şekil 6.9 ve 6.10’da görüldüğü gibi Monte Carlo hesaplamaları ile elde edilen ileri geçme ve geri yansıma olasılıkları düşük enerjilerde de birbirine yakın sonuçlar vermektedir.



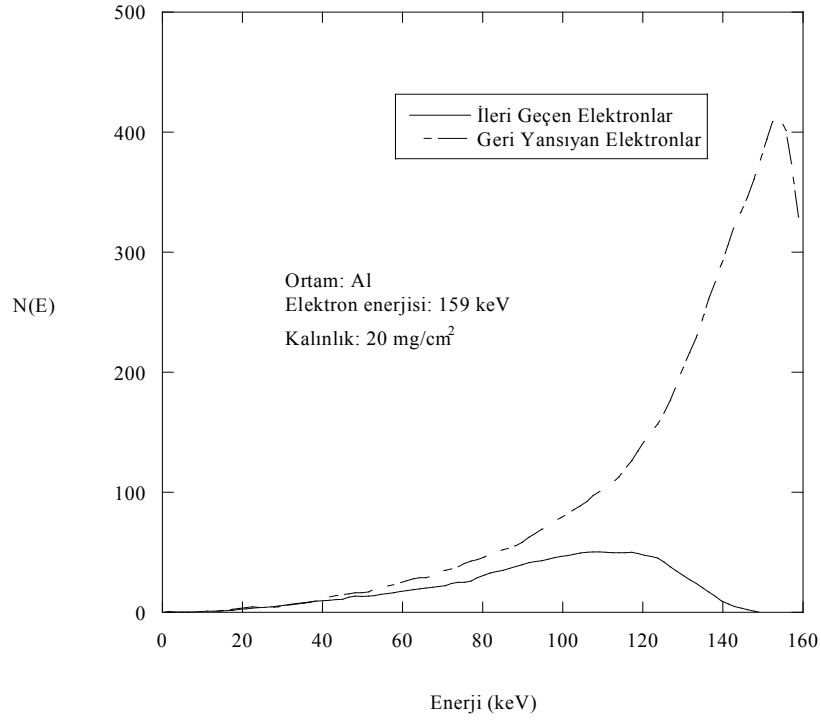
Şekil 6.10: Al-film kalınlıkları geçen ve yansıyan elektronların bağlı oranları (20 keV)

Ayrıca pozitronlarla ilgili yapılan çalışmalardan yararlanarak, elektron ve pozitronların ortamın atom numarasına bağlı olarak geçiş olasılıkları da karşılaştırılmış, Seliger'in [62] deneysel sonuçlarındaki gibi, atom numarası büyük olan ortamlarda pozitronların geçiş olasılıklarının elektronlardan daha büyük olduğu görülmüştür. Örneğin $40 \text{ mg}/\text{cm}^2$ kalınlıkta gümüş ($Z=47$) ortamda 250 keV enerjili elektronlar için, bu çalışmada hesaplanan geçiş olasılığı 0.130 iken Özmütlu ve Aydın'ın [71] çalışmasında pozitronlar için 0.170'dir. Seliger'in [62] deneysel sonuçlarında geçiş olasılığı elektronlar için 0.110, pozitronlar için ise 0.180 ölçülmüştür. Aynı enerji ve kalınlık da alüminyum ($Z=13$) ortamda ise geçiş olasılığı elektronlar için bu çalışmada 0.451 hesaplanırken, Özmütlu ve Aydın'ın [72] çalışmasında pozitronlar için 0.343'dür. Seliger'in [62] alüminyum ortamdaki ölçülen geçiş olasılığı elektron için 0.450, pozitron için ise 0.370'dir.

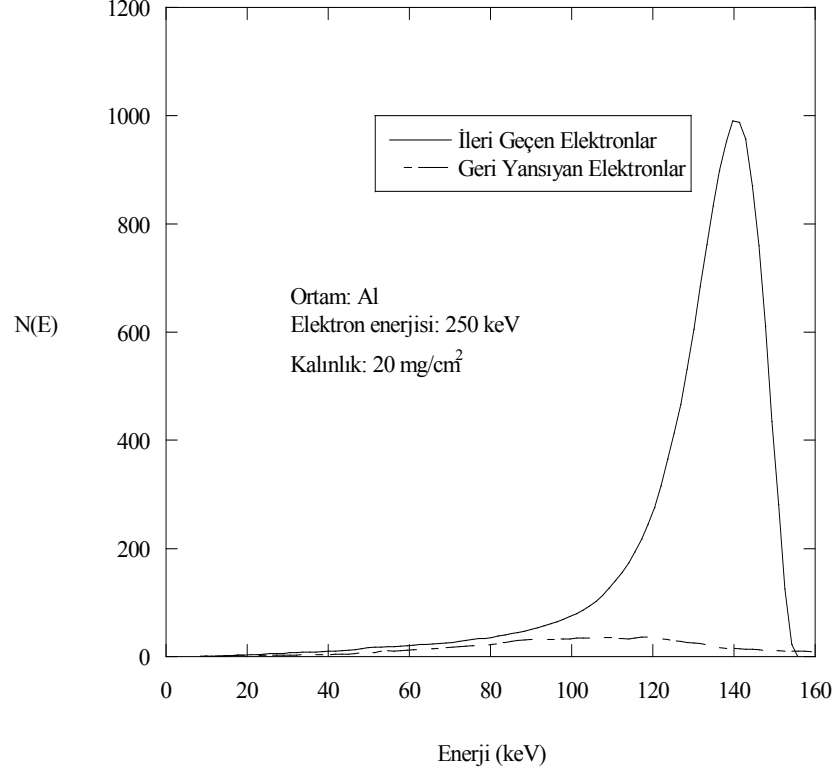
6.2 Metal Ortamlarda Elektronların Enerji Dağılımları

Elektron penetrasyonunun en temel karakteristiği olan enerji ve açısal dağılımlar, çeşitli kalınlıklardaki metalik ortamlar için hesaplanmış, elde edilen sonuçlara tipik örnekler verilmiştir.

İleri geçen ve geri yansıyan elektronların enerji dağılımları, 20 mg/cm^2 kalınlığındaki alüminyum ortama 159 keV enerji değeri ile gelen elektronlar için karşılaştırılmış ve sırasıyla Şekil 6.11 ve Şekil 6.12’de gösterilmiştir.



Şekil 6.11: 20 mg/cm^2 Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların enerji dağılımları (Enerji 159 keV)

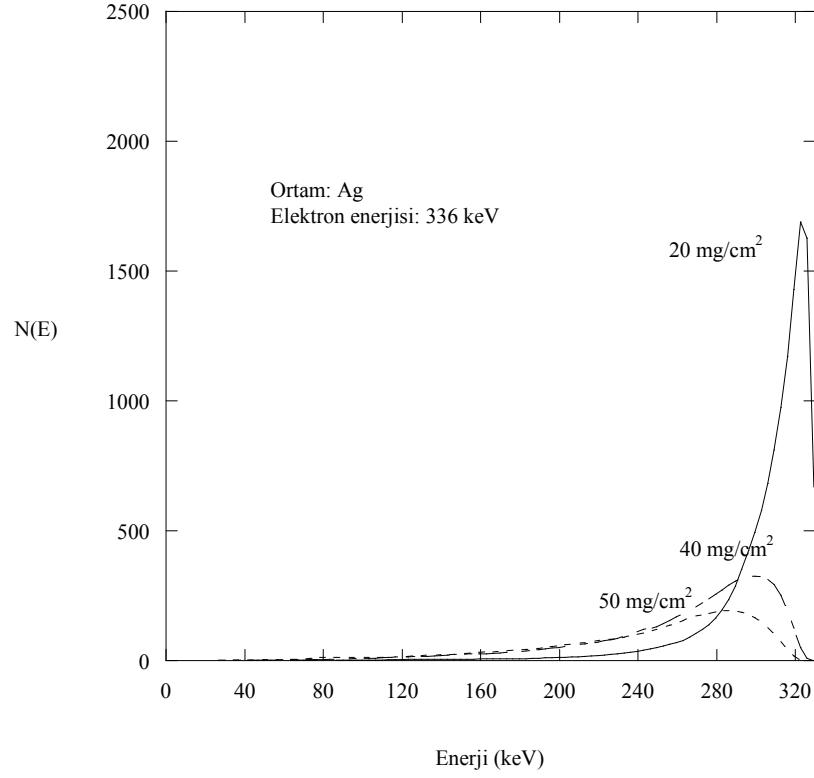


Şekil 6.12: 20 mg/cm²Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların enerji dağılımları (Enerji 250 keV)

Şekil 6.11’de görüldüğü üzere geri yansıyan elektronların sayısı, ileri geçen elektronlardan fazladır. Dolayısıyla geri yansıyan elektronların enerji dağılımları ileri geçen elektronların enerji dağılımından fazladır. Şekil 6.12’de ise kalınlık sabit tutulup, gelen elektronların enerjisi arttırıldığında ileri geçen elektronların sayısındaki artışa bağlı olarak, ileri geçen elektronların enerji dağılımları, geri yansıyan elektronların enerji dağılımdan daha fazladır.

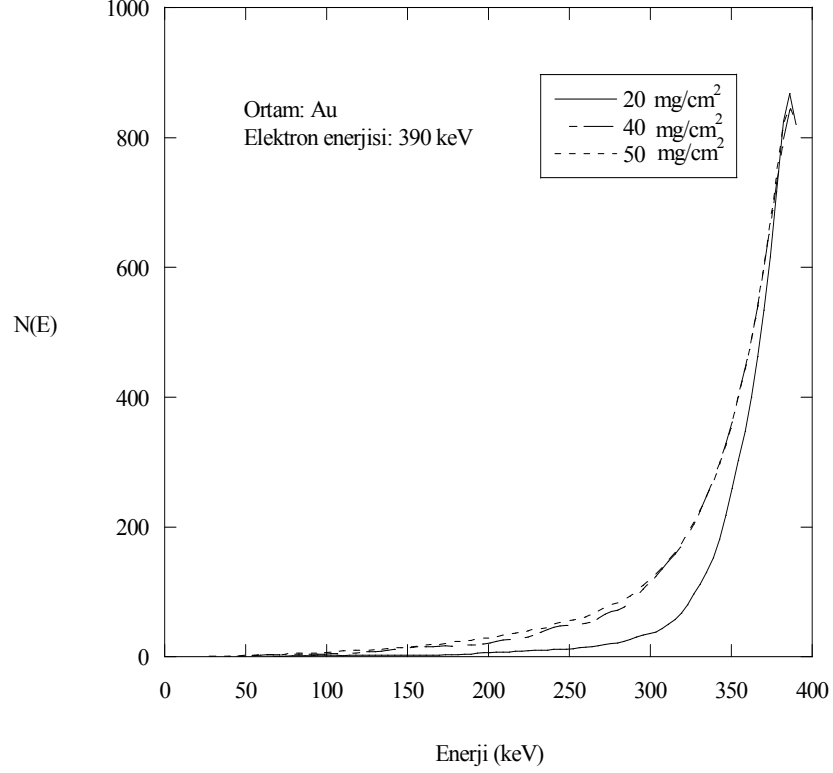
Ayrıca kalınlığa bağlı enerji dağılımlarının değişimi incelenmiş ve tipik örnekler verilmiştir. Geliş enerjisi 336 keV olan elektronların 20, 40 ve 50 mg/cm² kalınlıklardaki gümüş ortamdan ileri geçenlerinin enerji dağılımları Şekil 6.13’de görülmektedir. İnce kalınlıkta ileri geçen elektronların sayısı en fazladır, ortamın

kalınlığı arttırıldıkça ileri geen elektronların sayısı azalmaktadır. Dolayısıyla kalınlık arttıa ileri geen elektronların enerji daėılımlarında azalma meydana gelir.



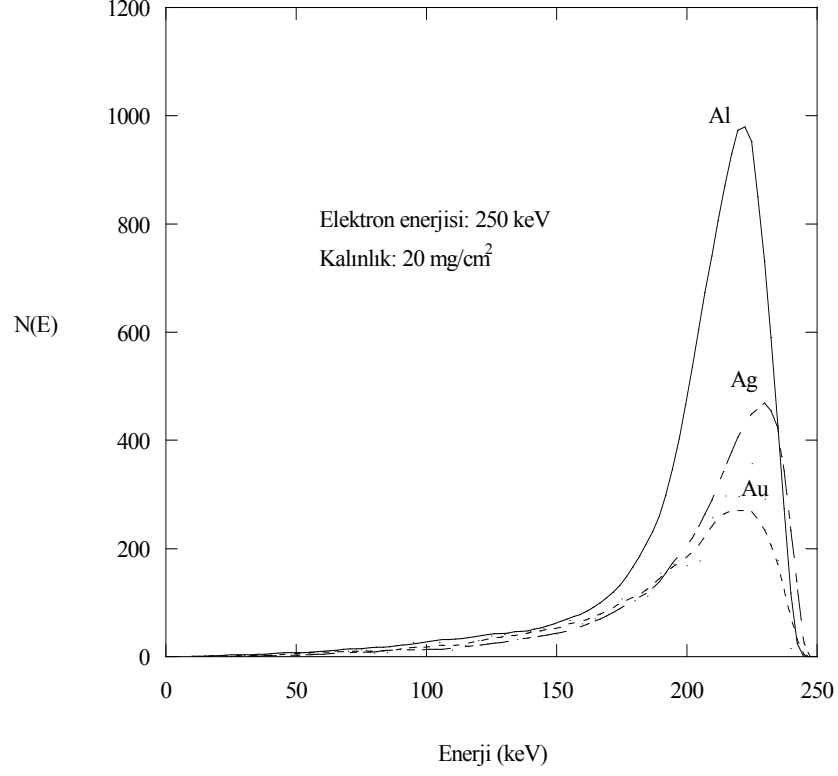
Şekil 6.13: Enerji daėılımlarına Ag-film kalınlıklarının etkisi

Geri yansıyan elektronların kalınlıėa baėlı enerji daėılımlarına bir rnek 390 keV geliş enerjisi ve 20, 40 ve 50 mg/cm² kalınlıklardaki altın ortam için Şekil 6.14’de verilmiştir.



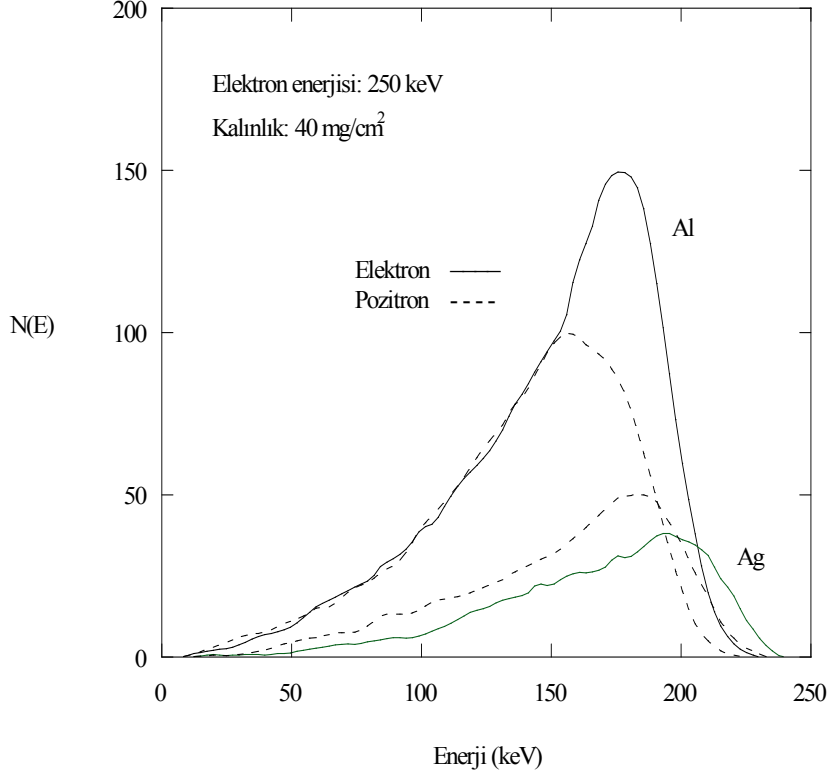
Şekil 6.14: Geri yansıyan elektronların enerji dağılımlarına Au-film kalınlıklarının etkisi

Elektronların aynı kalınlık ve enerji değerinde ortam atom numarasına bağlı enerji dağılımları da incelenerek Şekil 6.15’de geliş enerji 250 keV olan elektronların 20 mg/cm² kalınlığında alüminyum, gümüş ve altın ortamlardan ileri geçenlerinin enerji dağılımları karşılaştırılmıştır. Aynı geliş enerjisi ve kalınlıkta olan alüminyum ortamdan geçen elektronların sayısı gümüş ve altın ortamlardan geçen elektronların sayısından fazladır. Ortamın atom numarası attıkça birim hacim başına tanecik sayının artmasıyla, elektron ortamda daha fazla etkileşme yapmaya başlar, başka bir deyişle ortamda daha çok kalır. Dolayısıyla ileri geçen elektronların enerji dağılımında azalma meydana gelir.



Şekil 6.15: Al, Ag ve Au ortamlardan geçen elektronların enerji dağılımları

Ayrıca elektron ve pozitronların enerji dağılımlarının ortamın atom numarasına bağlı olarak karşılaştırılması da yapılmış ve bir örnek alüminyum ve gümüş ortamlar için Şekil 6.16'da verilmiştir. Şekil 6.1 ve Şekil 6.2'den görülebileceği gibi sabit enerji ve kalınlıkta ortam atom numarası arttıkça bağıl geçiş oranlarının azalmasına bağlı olarak, orta enerji bölgesinde alüminyum ortamda elektronların, gümüş ortamda ise pozitronların enerji dağılımlarının üstten gittiği görülmektedir.



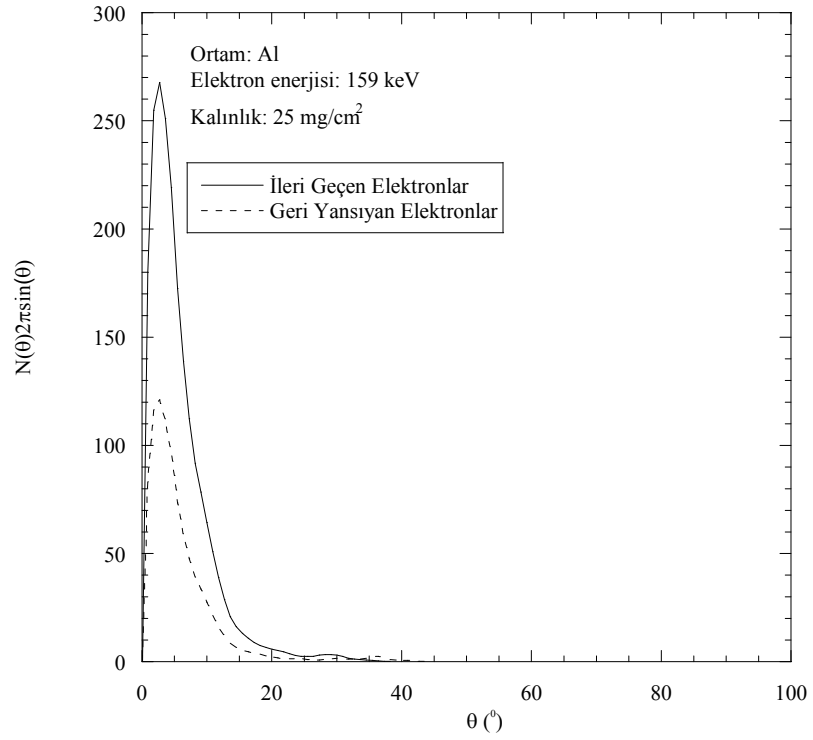
Şekil 6.16: Elektron ve pozitronların Al ve Ag ortamlarda enerji dağılımları

6.3 Metal Ortamlarda Elektronların Açısal Dağılımları

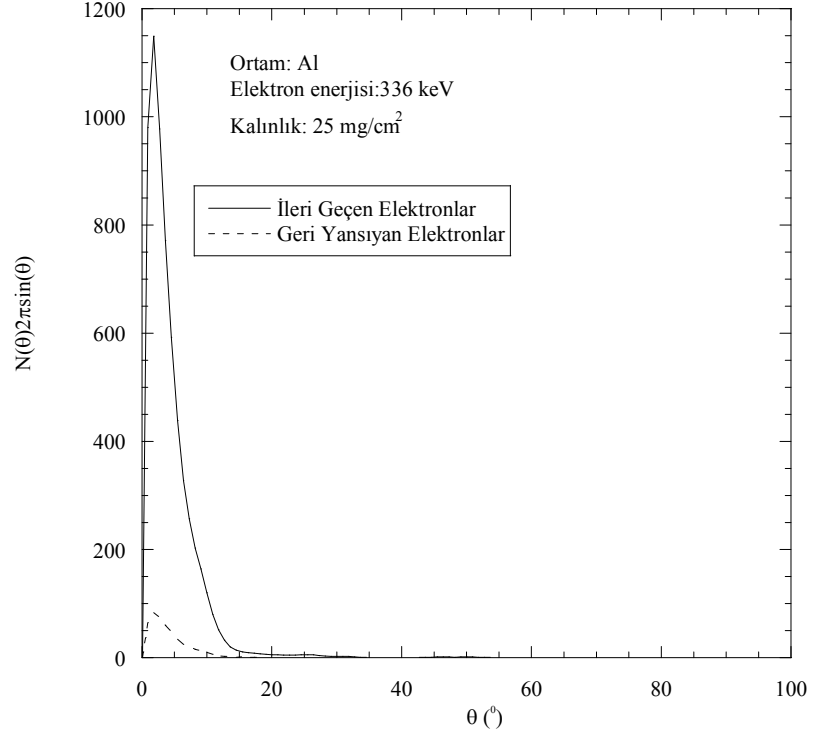
İleri geçen ve geri yansıyan elektronların açısal dağılımları çeşitli kalınlıklardaki alüminyum, gümüş ve altın ortamlar için hesaplanmıştır.

Şekil 6.17 ve Şekil 6.18’de ileri geçen ve geri yansıyan elektronların açısal dağılımları, 25 mg/cm² kalınlığındaki Al ortama 159 ve 336 keV enerji değeri ile gelen elektronlar için hesaplanmıştır. Aynı kalınlıktaki ortama gelen elektronların

enerjisi attırıldığında ileri geçen elektronların sayısı artacağından dolayı saçıldıkları açılardaki elektron sayısında artma gözlenmekte, geri yansıyan elektronların sayısında ise azalma meydana gelmektedir.

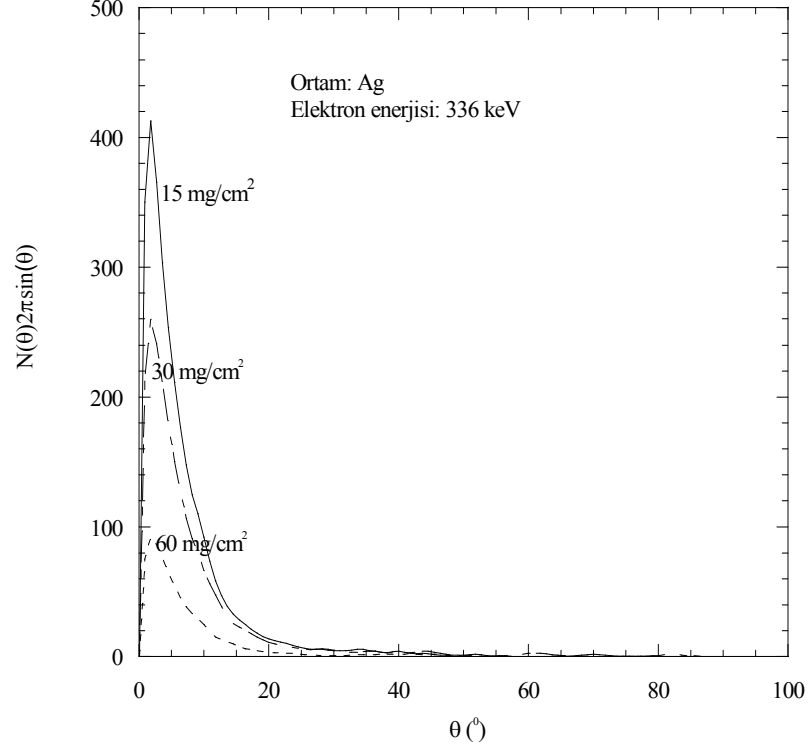


Şekil 6.17: 25 mg/cm² Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların açısal dağılımları (Enerji 159 keV)



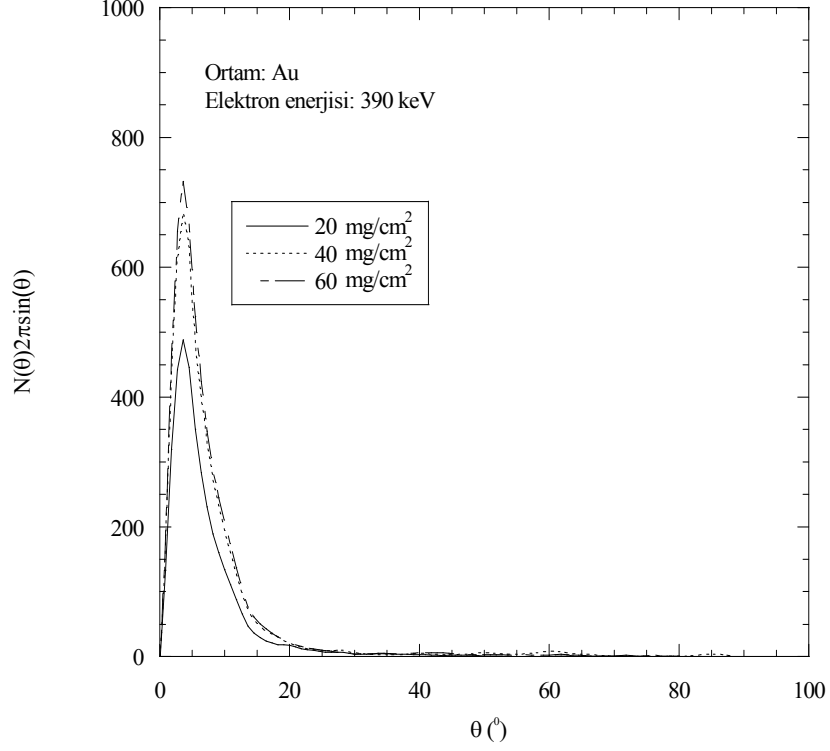
Şekil 6.18: 25 mg/cm² Al-film kalınlığı geçen ve yansıyan elektronların açısal dağılımları (Enerji 336 keV)

Geliş enerjisi 336 keV olan elektronların 15, 30 ve 60 mg/cm² kalınlıklardaki Ag ortamdan ileri geçenlerinin açısal dağılımları Şekil 6.18’de verilmiştir. Şekil 6.19’da görüldüğü üzere kalınlık arttıkça ileri geçen elektronların sayısında azalma meydana gelmesiyle, saçılma açılarındaki elektron sayısında azalma gözlenir.



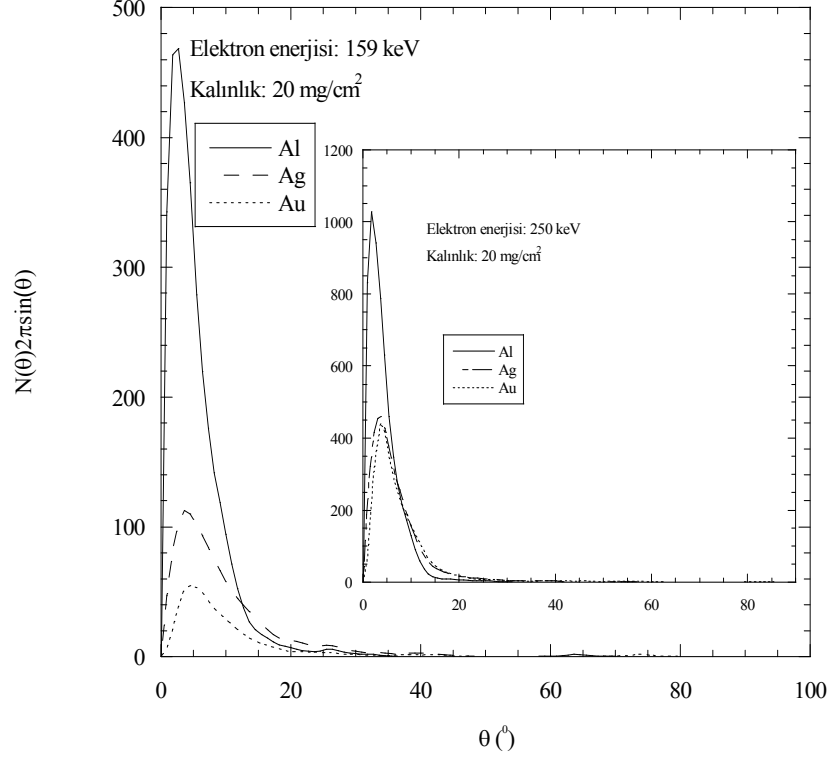
Şekil 6.19: Açısal dağılımlara Ag-film kalınlıklarının etkisi

390 keV geliş enerjisiyle 20, 40 ve 60 mg/cm² kalınlıklardaki altın ortamdan geri yansıyan elektronların da açısal dağılımlarına tipik bir örnek Şekil 6.20'de verilmiştir.



Şekil 6.20: Açısal dağılımlara Au-film kalınlıklarının etkisi

Elektronların aynı kalınlık ve farklı enerji değerlerinde ortam atom numarasına bağlı açısal dağılımlarına da örnekler Şekil 6.21’de verilmiştir. Aynı geliş enerjisi ve kalınlıkta olan alüminyum ortamdan geçen elektronların sayısı gümüş ve altın ortamlardan geçen elektronların sayısından fazladır. Aynı kalınlıkta elektronların geliş enerjisi artırıldığında ise ileri geçen elektronların sayısında artma olacağından saçılma açılarındaki elektron sayısında artma gözlenir.



Şekil 6.21: Al, Ag ve Au ortamlarda elektronların açisal dağılımları

7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada orta enerjili elektronların metalik dilim ortamlarda ileri geçiş ve geri yansıma olasılıklarıyla, enerji ve açısal dağılımları, hazırlanan Monte Carlo programı ile 10000 elektron tek tek izlenerek elde edilmiştir. Yüklü parçacıkların maddeden geçişi istatistiksel karakterde bir olay olduğundan Monte Carlo yöntemi ile hesaplar yapılabilir. Hesaplamalarının temel girdileri yüklü parçacık atom çarpışmaları için toplam ve diferansiyel tesir kesitleridir. Yüklü parçacık atom çarpışmaları çok parçacık problemi olduğundan çözümü ilke olarak mümkün olmasına rağmen, pratikte tam bir çözüm mümkün olamamaktadır. Çözüm için farklı enerji bölgelerinde geçerli olan yaklaşımlar kullanılmaktadır.

Toplam esnek ve esnek olmayan saçılma tesir kesitleri, atomik yapılara bağlı olarak büyük belirsizlikler içermektedir. Program içinde kullanılan toplam tesir kesiti ifadeleri, çeşitli yaklaşımlarla hesaplanan değerler üzerine fit yapılarak elde edilmiş olduğundan ve yüklü parçacıklar girdikleri ortamlarda esnek ve esnek olmayan binlerce saçılma yaptığından dikkatli incelenmelidir. Kalın filmlerde yüklü parçacıkların özellikle esnek olmayan çarpışmalarının sayısının artması, enerji kaybı miktarını arttırdığından elektronlar film kalınlığı arttıkça daha çok enerji kaybederler. Esnek saçılma diferansiyel tesir kesitinde perdeleme açısı, açısal dağılımın şeklini belirleyen önemli bir parametredir. Perdeli Rutherford tesir kesiti, perdeleme açısının değerlerine bağlı olarak açısal dağılım için oldukça iyi bir yaklaşım sağlar. Elektronlar için perdeleme açısı çalışılan ortama bağlı olarak iki farklı şekilde kullanılmıştır. Ayrıca esnek olmayan saçılmada enerji kaybı benzetimi özellikle valans elektronları için daha dikkatli ele alınmalıdır.

Elektronlarla ilgili deneysel çalışmalar pozitronlara oranla daha fazla olmasına rağmen, orta enerjili elektronların dilim metalik ortamlardan geçiş olasılıkları için yapılan çalışmalar, yarı sonsuz ortamlardan düşük enerjili elektronların geri saçılmalarıyla ilgili çalışmalardan [73-82] daha azdır. Elde ettiğimiz sonuçlar, literatürde bulabildiğimiz diğer Monte Carlo hesaplamaları ve deneysel verilerle karşılaştırılmış ve uyum sağladığı görülmüştür. Ancak bazı veriler

arasında gözlenen farklılık; Monte Carlo yöntemi istatistiksel temele dayandığından, ortamın atom numarasına ve kalınlığına bağlı olarak elektronların daha fazla etkileşme yapmaya başlamasından kaynaklanmaktadır. Orta enerji bölgesindeki elektronların enerji ve açısal dağılımları konusunda başka bir Monte Carlo ve/veya deneysel sonuç bulunamadığından karşılaştırma yapılamamıştır.

Yapılan hesaplardaki hatanın belirlenmesi adına, deneysel ölçümler ile Monte Carlo hesaplamalarının uyumlu olduğu ve uyumun bozulduğu iki sonuç seçilerek standart sapma hesaplanmıştır. Uyumun sağlandığı durumda, alüminyum ortama dik gelen 159 keV enerjili elektronların geçiş olasılıkları 20 defa hesaplanmış ve standart sapma % 1.22 bulunmuştur. Deneysel sonuçlardan biraz sapmanın görüldüğü bir durum olan gümüş ortamda 336 keV enerjili elektronların geçiş olasılığı hesabındaki standart sapma ise % 1.99 bulunmuştur.

Ortama gönderilen elektron sayısının yeterli olup olmadığını test etmek adına da izlenen elektron sayısı 10000'den 20000'e çıkarılarak, belli bir enerji ve kalınlıkta işlem tekrarlanmış elde edilen sonucun birbirine çok yakın olduğu görülmüştür.

Ayrıca kesilme enerjisinin sonuçlar üzerindeki etkisi de araştırılmıştır. Bu çalışmada 50 eV alınan kesilme enerjisi yerine çalışılan üç ortam içinde belli kalınlık ve enerjilerde 20 eV alınarak hesaplama yapılmış ve birbirine yakın sonuçlar elde edilmiştir. Bu çalışmada Turbo Basic Compiler ve gelişigüzel sayıları karıştırma işlemi için Bays-Durham algoritması [83] kullanılmıştır.

Elektron katı etkileşiminde yer alan çeşitli fiziksel süreçlerin ayrıntılı bir şekilde anlaşılması, elektron mikroskopisi ve spektroskopisine dayalı çeşitli tekniklerde çok önemli olduğu bilinmektedir. Çeşitli analitik ölçümlerde, örneğin esnek pik elektron spektroskopisi (*EPES*) için esnek saçılan elektronların, elektron enerji kaybı spektroskopisi (*EELS*) ve geri yansıyan elektronların enerji kaybı spektroskopisi (*REELS*) için esnek olmayan saçılma yapan elektronların, taramalı elektron mikroskopisi (*SEM*) için ikincil elektronlar ve geri saçılan elektronların bilinmesi gereklidir [16]. Elektron mikroskobu içerdiği geri saçılan elektron görüntüsü ve ikincil elektron görüntüsü teknikleriyle malzemelerin yüzey ve kesitlerinin, yüksek büyütme morfolojik ve kimyasal analizi için

kullanılmaktadır. Geri saçılan elektronların difraksiyonu ile faz analizleri gerçekleştirilmektedir. Yüklü parçacıkların bir ortamdaki davranışları çok karmaşık olmasına rağmen, iyi bir Monte Carlo programı yardımıyla bu etkileşmelerin temel fiziksel mekanizmasının daha iyi anlaşılmasıyla; esnek pik elektron spektroskopisi (EPES), taramalı elektron mikroskopisi (SEM) vb. gibi analitik tekniklerde bilinmesi gerekenler konusunda gelişmeler olacaktır. Teoriyi geliştirmek nicel sonuçları daha hassas yapabilmek için şüphesiz ki bu konuda çalışmalar devam edecektir.

8. KAYNAKLAR

- [1] MacCallum, C., *Bull. Am. Phys. Soc.*, 5, 80-379, (1960).
- [2] Berger, M. J., (eds: B. Alder, S. Fernbach and M. Rotenberg), *Methods in Computational Physics*, New York, 135-213, (1963).
- [3] Green, M., “A Monte Carlo Calculation of the Spatial Distribution of Characteristic X-ray Production in a Solid Target”, *Proc. Phys. Soc.*, 82 (2), 15-204, (1963).
- [4] Bishop, H. E., “X-ray Optics and Microanalysis”, (eds: R. Castaing, P. Deschamps and J. Philibert), Paris, 19-112, (1965).
- [5] Shimizu, R., Murata K. and Shinoda G., “X-ray Optics and Microanalysis”, (eds: R. Castaing, P. Deschamps and J. Philibert), Paris, 38-127, (1965).
- [6] Heinrich, K. F. J., “Quantitative Electron Probe Microanalysis”, (ed: K. F. J. Heinrich), Washington, (1968).
- [7] Shinoda, G., Murata, K. and Shimizu, R., “Quantitative Electron Probe Microanalysis”, (ed: K. F. J. Heinrich), Washington, 87-155, (1968).
- [8] Reimer, L., *Optik*, 27, 86-98, (1968).
- [9] Murata, K., Matsukawa, T. and Shimizu, R., “Monte Carlo Calculations on Electron Scattering in a Solid Target”, *Japan. J. Appl. Phys.*, 10 (6), 678-686, (1971).
- [10] Duncumb, P., Proc. 25th Ann. Meeting of EMAG, Bristol, 7-132, (1971).

[11] Reimer, L. and Krefting, E. R., “Use of Monte Carlo Calculation in Electron Probe Microanalysis and Scanning Electron Microscopy”, (eds: K. F. J. Heinrich, D. E. Newbury and H. Yakowitz), National Bureau of Standards, Washington, 45-95, (1976).

[12] Mott, N., “The Scattering of Fast Electrons by Atomic Nuclei”, *Proc. R. Soc.*, A 124, 425-442, (1929).

[13] Yamazaki, Y., Appendix b, Computer program list PhD Thesis Osaka University, 53-140, (1977).

[14] Shimizu, R. and Ze-Jun, D., “Monte Carlo Modelling of Electron-Solid Interaction”, *Rep. Prog. Phys.*, 487-531, (1992).

[15] Stary, V., “Monte Carlo Simulation in Electron Microscopy and Spectroscopy”, (ed: S. Mordechai), *Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering*, InTech, (2011).

[16] Li, Y. G., Mao, S. F. and Ding, Z. J., “Monte Carlo Simulation in Electron Microscopy and Spectroscopy”, (ed: S. Mordechai), *Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering*, InTech, (2011).

[17] Yavuz, S. S., “Ters Monte Carlo Modeli ile Sıvı Kalgojenler ve Sıvı Kalgojen Alaşımında Yapısal Hesaplamalar”, Yüksek Lisans Tezi, *Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Fizik Anabilim Dalı, Edirne, (2008).

[18] Tavukçu, D., “Monte Carlo Yönteminin Sayısal İntegrallere Ve ElektromanyetikDenklemler İntegrallerine Uygulanması”, Yüksek Lisans Tezi, *İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Elektronik ve Haberleşme Mühendisliği Anabilim Dalı, İstanbul, (2000).

[19] Demir, N., “Monte Carlo Metoduna Giriş [online]”, (21 Mart 2014), www.beu.edu.tr/Medya/.../561/MONTECARLOMETODUNAGİRİŞ.ppt, (2012).

[20] Dengiz, B., “Benzetim [online]”, (21 Mart 2014), www.baskent.edu.tr/~bdengiz/benzetimslayt-09/yenibenzetim11.ppt.

[21] Ocaktan, B., “Sistem Simülasyonu”, (30 Aralık 2013), http://w3.balikesir.edu.tr/~ocaktan/simulasyon10_2013.pdf, (2013).

[22] Baykoç, Ö. F., “Rassal Sayı ve Rassal Depişken Üretimi”, (30 Aralık 2013), [http://w3.gazi.edu.tr/~baykoc/Simulation/ENM316DERS5\(4_Slayt\).pdf](http://w3.gazi.edu.tr/~baykoc/Simulation/ENM316DERS5(4_Slayt).pdf).

[23] Özden, Ü. H., “İstatistiksel Simülasyon”, (2 Şubat 2014), <http://www.slideshare.net/OmerHusrev/simulasyon#>, (2008).

[24] Yalçın, S., “Nükleer ve Parçacık Fiziği’nde Monte Carlo Uygulamaları Bahar Okulu [online]”, (21 Mart 2014), www.beu.edu.tr/Medya/YazarMedya/561/Kaynak%20Tanımlamaları.ppt.

[25] Şahin, L., “Parçacıklar ve Radyasyonun Madde ile Etkileşmesi [online]”, (10 Ocak 2013), http://tarlafel.org/thm/tac/YAZOKULU/yazokulu4/dersnotlari/Latife_sahin.doc.

[26] Evans, R.D., *The Atomic Nucleus* McGraw-Hill Book Company, (1955).

[27] Yılmaz, M., *Çekirdek Fiziği*, Balıkesir: Balıkesir Üniversitesi Yayınları, (1998).

[28] Kaynak, G., (21 Mart 2014), http://kaynak.home.uludag.edu.tr/images/tesir_kesiti.pdf.

[29] Çetin, A., “Monte Carlo Yöntemiyle Düşük Enerjili Pozitronların Madde ile Etkileşmesinin ve Hedeflerde Durdurulmasının İncelenmesi”, Doktora Tezi, *Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Fizik Anabilim Dalı, Edirne, (2012).

[30] Fernández-Varea, J. M., Liljequist, D., Csillag, S., Ráty, R. and Salvat, F., “Monte Carlo Simulation of 0.1–100 keV Electron and Positron Transport in Solids Using Optical Data and Partial Wave Methods”, *Nucl. Inst. and Meth. In Phys. Res.*, B 108, 35-50, (1996).

[31] Benedito, E., Fernández-Varea, J. M. and Salvat, F., “Mixed Simulation of the Multiple Elastic Scattering of Electrons and Positrons Using Partial-Wave Differential Cross Sections”, *Nucl. Inst. And Meth. In Phys. Res.*, B 174, 91, (2001).

[32] Salvat, F., “Optical-Model Potential for Electron and Positron Elastic Scattering by Atoms”, *Phys. Rev.*, A 68, (2003).

[33] Öztürk, N., Williamson Jr., W. and Antolak, A. J., “Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Bound Gallium and Arsenic Atoms”, *J. Appl. Phys.*, 70, 537, (1991).

[34] Meredith, R. J., Williamson Jr., W., Montemayor, V. J., Öztürk, N. and Antolak, A. J., “Low-Energy Elastic Scattering of Electrons by Bound Silicon and Germanium Atoms”, *J. Appl. Phys.*, 68, 4937, (1990).

[35] Jablonski, A., Salvat, F. and Powell, C. J., “Comparison of Electron Elastic-Scattering Cross Sections Calculated from Two Commonly Used Atomic Potentials”, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 33 (2), (2004).

[36] Seltzer, S. M., “Electron-Photon Monte Carlo Calculations: The ETRAN Code”, *Appl. Radiat. Isot.*, 42, 917-941, (1991).

[37] Moliere, G. and Naturforsch, Z., “Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld”, A2, 133, (1947).

[38] Joy, D. C., “An Introduction to Monte Carlo Simulations”, *Scanning Microsc.*, 5 (2), 329-337, (1991).

[39] Nigam, B. P., Sundaresan, M. K. and Wu, T. Y., “Theory of Multiple Scattering: Second Born Approximation and Correction to Moliere’s Work”, *Phys. Rev.*, 115, 491, (1959).

[40] Adesida, I., Shimizu, R. and Everhart, T. E., “A Study of Electron Penetration in Solid Using a Direct Monte Carlo Approach”, *J. Appl. Phys.*, 51, 5962, (1980).

[41] Kyriakou, I., Emfietzoglou, D., Nojeh, A. and Moscovitch, M., “Monte Carlo Study of Electron-Beam Penetration and Backscattering in Multi-Walled Carbon Nanotube Materials: The Effect of Different Scattering Models”, *J. Appl. Phys.*, 113, 084303, (2013).

[42] Nigam, B. P. and Mathur, V.S., “Difference in the Multiple Scattering of Electrons and Positrons”, *J. Exp. and Theo. Phys.*, 121, 1577, (1961).

[43] Doggett, J.A. and Spencer, L.V., “Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Point Nuclei”, *Phys. Rev.*, 103, 1597-1601, (1956).

[44] Idoeta, R. and Legarda, F., “Review and Calculation of Mott Scattering Cross Section by Unscreened Point Nuclei”, *Nucl. Instrum. Methods*, B71, 116-125, (1992).

[45] Bethe, H., “Zur Theorie des Durchgangs Schneller Korpuskularstrahlerdurch materie”, *Ann. Physik*, 5, 325, (1930).

[46] Inokuti, M., “Inelastic Collision of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules”, *Rev.Mod.Phys.*, 43, 297-394, (1971).

[47] Liljequist, D., “A simple calculation of inelastic mean free path and stopping power for 50 eV-50 keV electrons in solids”, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 16, 1567, (1983).

[48] Bohr, N., *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid.*, “The Penetration of Atomic Particles through Matter”, 18, 1144, (1948).

[49] Liljequist, D., “ Simple generalised oscillator strength density model applied to the simulation of keV electron-energy-loss distributions ”, *J. Phys. D. Appl. Phys.*, 57, 657, (1985).

[50] Lindhard, J. and Winter, A., “Stopping power of electron gas and equipartition rule”, *Kgl. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd*, 34, 4, (1964).

[51] Fano, U., “Penetration of protons, alpha particles and mesons”, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, 13, 1, (1963).

[52] Penn, D.R., “Electron Mean-free-path Calculations Using a Model Dielectric Function”, *Phys. Rev B.*, 35 (2), 482, (1987).

[53] Mayol, R. and Salvat, F., “Total and Transport Cross Sections for Elastic Scattering of Electrons by Atoms”, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 65, 55-154, (1997).

[54] Jablonski, A., Salvat, F. and Powell, C. J., NIST Electron Elastic Scattering Cross Section Database Version 3.2, *National Institute of Standards and Technology*, Gaithersburg, MD (2010).

[55] Lesiak, B., Zommer, L., Kosinski, A., Jablonski, A., Gergely, G., Menyhard, M., Sulyok, A., Konkol, A., Daroczi, Cs. and Nagy, P., “Comparison of Al and Ni Reference Samples for Determining the Inelastic Mean free Path of Electrons Using Different Electron Spectrometers”, (eds: H. J. Mathieu, B. Reihl, and D. Briggs, John Wiley & Sons Ltd), *Proceedings of 6th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis (ECASIA '95)*, Montreux, Switzerland, 619-622, (1996).

[56] Tanuma, S., Powell, C. J. and Penn, D. R., “Calculations of Electron Inelastic Mean Free Paths. II. Data for 27 Elements Over the 50-2000 eV Range”, *Surf. Interface Anal.*, 17, 911, (1991).

[57] Powell, C. J. and Jablonski, A., “Evaluation of Calculated and Measured Electron Inelastic Mean Free Paths Near Solid Surfaces”, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 28 (1), 19, (1999).

[58] Ding, Z. J. and Shimizu, R., "A Monte Carlo Modeling of Electron Interaction with Solid Including Cascade Secondary Electron Production", *Scanning*, 18 (2), 92-113, (1996).

[59] Gryzinski, M., "Two-particle collisions. Part I: General relations for collisions in the laboratory system", *Phys. Rev.*, A 138, 305-321, (1965).

[60] Gryzinski, M., "Two-particle collisions. Part II: Coulomb collisions in the laboratory system of coordinates", *Phys. Rev.*, A 138, 322-335, (1965).

[61] Gryzinski, M., "Classical theory of atomic collisions. Part I: Theory of inelastic collisions", *Phys. Rev.*, A 138, 336-358, (1965).

[62] Seliger, H. H., "Transmission of Positrons and Electrons", *Phys. Rev.*, 100 (4), 1029, (1955).

[63] Fernández-Varea, J. M., Liljequist, D., Csillag, S., Raty, R. and Salvat, F., "Monte Carlo Simulations of 0.1-100 keV Electron and Positron Transport in Solids Using Optical Data and Partial Wave Methods", *Nucl. Instr. and Meth.*, B 108, 35-50, (1996).

[64] Kotera, M., Murata, K. and Nagami, K., "Monte Carlo Simulation of 1-10 keV Electron Scattering in a Gold Target", *J. Appl. Phys.*, 52 (2), 997, (1981).

[65] Krefting, E. R. and Reimer, L., "Quantitative Analysis with Electron Micro-probes and Secondary Ion Mass Spectroscopy", (ed: E. Preuss), Julich, 114, (1973).

[66] Cosslett, V. E. and Thomas, R. N., "Multiple Scattering of 5 - 30 keV Electrons in Evaporated Metal Films III: Backscattering and Absorption", *Brit. J. Appl. Phys.*, 16, 779, (1965).

[67] Reimer, L. and Drescher, H., "Secondary Electron Emission of 10-100 keV Electrons From Transparent Films of Al and Au", *J. Phys.*, D 10, 805, (1977).

[68] Neubert, L. and Rogaschewski, S., “Measurements of the Back-Scattering and Absorption of 15-60 keV Electrons for Transparent Solid Films at Various Angles of Incidence”, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 17, 2439, (1984).

[69] Shimizu, R., Kataoka, Y., Matsukawa, T., Ikuta, T., Murata, K. and Hashimoto, H., “Energy Distribution Measurements of Transmitted Electrons and Monte Carlo Simulation for Kilovolt Electron”, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 8, 695-704, (1975).

[70] Shimizu, R., Kataoka, Y., Ikuta, T., Koshikawa, T. and Hashimoto, H., “A Monte Carlo Approach to the Direct Simulation of Electron Penetration in Solids”, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 9, (1976).

[71] Özmutlu, N. E. and Aydın, A., “Monte Carlo Calculations of Medium Energy Positrons in Metals”, *Appl. Radiat. Isot.*, 48 (3), 403-406, (1997).

[72] Özmutlu, N. E. and Aydın, A., “Monte Carlo Calculations of 50 eV-1 MeV Positrons in Aluminum”, *Appl. Radiat. Isot.*, 45 (9), 963-971, (1994).

[73] Bentabet, A., “The range of Penetration and the Backscattering Coefficient by Using both the Analytic and the Stochastic Theoretical Ways of Electron Slowing Down in Solid Targets: Comparative Study”, *Nuclera Instruments and Methods in Physics Research*, B 269, 774-777, (2011).

[74] Chaoui, Z. and Bouarissa, N., “Positron and Electron Backscattering from Elemental Solids in the 1–10 keV Energy Range”, *J. Phys.: Condens. Matter*, 16, 799-808, (2004).

[75] Jablonski, A., Powell, C. J. and Tanuma, S., “Monte Carlo Strategies for Simulations of Electron Backscattering from Surfaces”, *Surf. Interface Anal.*, 37, 861-874, (2005).

[76] Dapor, M., “Monte Carlo Computations of the Electron Backscattering Coefficient for Bulk Targets and Surface Thin Films”, *Surf. Interface Anal.*, 40, 714-717, (2008).

[77] Stary, V., Zemek, J. and Pavluch, J., “Angular and Energy Distribution of Backscattered Electrons Simulated by Monte Carlo- Assessment by Experiment 1”, *Vacuum*, 82, 121-124, (2008).

[78] Assa'd, A. M. D. and El Gomati, M. M., “Backscattering Coefficients for Low Energy Electrons”, *Scanning Microscopy*, 12 (1), 185-192, (1998).

[79] Yadav, R. K. and Shanker, R., “Backscattering of 8-28 keV Electrons from a Thick Al, Ti, Ag and Pt Targets”, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 151, 71-77, (2006).

[80] Joy, D. C., “A Data Base on Electron-Solid Interactions”, EM Facility, University of Tennessee and Oak Ridge National Laboratory, (2008).

[81] Hunter, K. L., Snook, I. K. and Wagenfeld, H. K., “Monte Carlo Study of Electron Transmission and Backscattering from Metallic Thin Films”, *Phys. Rev. B*, 54 (4), 4507, (1996).

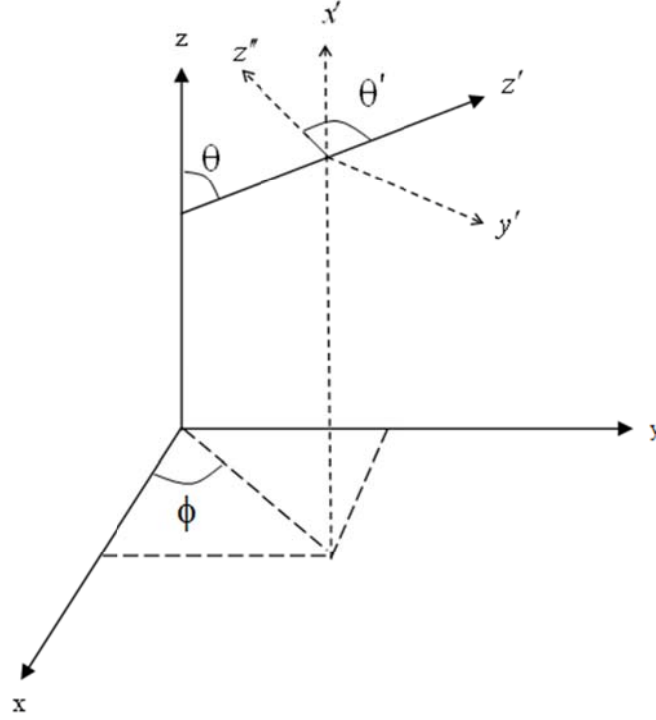
[82] Deghfel, B., Bentabet, A. and Bouarissa, N., “Transmission and Backscattering Energy Distributions of Slow Electrons from Metallic Targets”, *Phys. Stat. Sol.*, 238 (1), 136-143, (2003).

[83] Bays, C. and Durham, S. D., “Improving a Poor Random Number Generator” *ACM Transactions on Mathematical Software*, 2 (1), 59-64, (1976).

EKLER

9. EKLER

EK A Koordinat Dönüşümleri



Şekil A.1: Koordinat dönüşümleri

Saçılan parçacığın hareket doğrultusunu belirleyebilmek için şekilde gösterilen $x'y'z'$ koordinat sistemi seçilir. Bu koordinat sistemindeki birim vektörler,

$$\begin{aligned}\vec{i}' &= \alpha\gamma/\sqrt{1-\gamma^2}\vec{i} + \beta\gamma/\sqrt{1-\gamma^2}\vec{j} - \sqrt{1-\gamma^2}\vec{k} \\ \vec{j}' &= -\beta/\sqrt{1-\gamma^2}\vec{i} + \alpha/\sqrt{1-\gamma^2}\vec{j} \\ \vec{k}' &= \alpha\vec{i} + \beta\vec{j} + \gamma\vec{k}\end{aligned}\tag{A.1}$$

dir. $x'y'z'$ koordinat sisteminden laboratuvar sistemine geçmek için,

$$T = \begin{pmatrix} \alpha\gamma/\sqrt{1-\gamma^2} & -\beta/\sqrt{1-\gamma^2} & \alpha \\ \beta\gamma/\sqrt{1-\gamma^2} & \alpha/\sqrt{1-\gamma^2} & \beta \\ -\sqrt{1-\gamma^2} & 0 & \gamma \end{pmatrix} \quad (\text{A. 2})$$

dönüşüm matrisi kullanılır.

Üslü sistemindeki doğrultman kosinüsleri,

$$\begin{aligned} \alpha' &= \sin \theta' \cos \phi' \\ \beta' &= \sin \theta' \sin \phi' \\ \gamma' &= \cos \theta' \end{aligned} \quad (\text{A. 3})$$

dir.

Saçılan parçacığın laboratuvar sistemindeki doğrultman kosinüslerini elde etmek için,

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \\ \gamma' \end{pmatrix} \quad (\text{A. 4})$$

ifadesi kullanılmıştır.

EK B Dilim Ortamlarda Elektronların İleri Geçme ve Geri Yansıma Olasılıkları, Enerji Dağılımları Programının Akış Diyagramı

