

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

**MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE POZİTRONLARIN ALTIN
ORTAMDA MENZİL DAĞILIMLARININ İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Gülşah BAYKAL

Balıkesir, Temmuz - 2011

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

**MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE POZİTRONLARIN ALTIN
ORTAMDA MENZİL DAĞILIMLARININ İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Gülşah BAYKAL

Balıkesir, Temmuz - 2011

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

MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE POZİTRONLARIN ALTIN
ORTAMDA MENZİL DAĞILIMLARININ İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Gülşah BAYKAL

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Asuman AYDIN

Sınav Tarihi:12.07.2011

Jüri üyeleri: Prof. Dr. Asuman AYDIN (Danışman-BAÜ)
Prof. Dr. Rifat ÇAPAN (BAÜ)
Doç. Dr. Hüseyin KÜÇÜKÖZER (BAÜ)

Enstitü Yönetim Kurulunun tarih sayılı oturumunun
nolu kararı ile Mezun olmuştur.

Balıkesir, Temmuz - 2011

ÖZET

MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE POZİTRONLARIN ALTIN ORTAMDA MENZİL DAĞILIMLARININ İNCELENMESİ

Gülşah BAYKAL
Balıkesir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü,
Fizik Anabilim Dalı

(Yüksek Lisans Tezi / Tez Danışmanı: Prof. Dr. Asuman AYDIN)

Balıkesir, 2011

Bu çalışmada pozitronların menzil dağılımlarını elde etmek için benzer bir Monte Carlo programı geliştirilmiştir. 50 eV-250 keV enerji aralığında yarı sonsuz altın ortama gelen pozitronlar tek tek Monte Carlo yöntemiyle takip edilmiştir. Benzetim tekniği esnek saçılma toplam tesir kesiti için spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford diferansiyel tesir kesiti ile birlikte düşük enerjilerde kısmi dalga açılımı verilerine dayanır. Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti için Liljequist modeli kullanılmıştır. Esnek olmayan saçılma enerji kaybı hesabında ise Gryzinski'nin yarı ampirik ifadesi kullanılmıştır. Çeşitli enerji ve açılarla yarı sonsuz altın ortama giren pozitronların geri saçılma olasılıkları, ortalama girme derinlikleri ve menzil dağılımları hesaplanmıştır. Yarı sonuz altın ortamda pozitronların geri saçılma olasılıkları ve ortalama girme derinlikleri literatürdeki diğer Monte Carlo hesapları ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılmış genellikle uyumlu sonuçlar gözlenmiştir.

ANAHTAR SÖZCÜKLER: pozitron/ tesir kesiti/ geri saçılma olasılığı/
menzil dağılımı/ ortalama girme derinliği/ bilgisayar benzetimi

ABSTRACT

INVESTIGATION OF THE IMPLANTATION PROFILES OF POSITRONS IN GOLD MEDIA WITH MONTE CARLO METHOD

Gülşah BAYKAL

**Balıkesir University, Institute of Science, Department of Physics
(M. Sc. Thesis / Supervisor: Prof. Dr. Asuman AYDIN)**

Balıkesir, 2011

In this work an analog Monte Carlo code is developed to obtain the implantation profiles of positrons. The incoming positrons energy range 50 eV-250 keV have been followed in semi-infinite gold target with Monte Carlo method. The simulation technique is mainly based on the screened Rutherford differential cross section with a spin-relativistic correction factor for the elastic scattering together the data of partial wave calculations for low energies. Liljequist's model was used for the total inelastic scattering cross section calculations. Gryzinski's semi-empirical expression was used to simulate the energy loss due to inelastic scattering. Backscattering probabilities, mean penetration depths and implantation profiles of entering positrons with various energy and angles to semi-infinite gold target were calculated. The theoretical results of backscattering probabilities and mean penetration depths are compared with other Monte-Carlo calculations and experimental results for obtained for the gold semi-infinite target in the literature and usually good agreement is observed.

KEYWORDS: positron /cross section/ backscattering probability/
implantation profile/ mean penetration depth/ computer simulation

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET, ANAHTAR SÖZCÜKLER	ii
ABSTRACT, KEYWORDS	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SEMBOL LİSTESİ	vi
ŞEKİL LİSTESİ	vii
TABLO LİSTESİ	viii
ÖNSÖZ	ix
1. GİRİŞ	1
2. MONTE CARLO YÖNTEMİ	2
2.1 Gelişigüzel Sayı Üreteçleri	3
2.2 Temel Örneklemeye İlkesi (Ters Dönüşüm Yöntemi)	4
2.3 Reddetme Yöntemi	5
2.4 Ortalama Yöntemi	7
2.5 Kontrol Değişkeni Yöntemi	8
2.6 Önem Örneklemeye Yöntemi	9
3. YÜKLÜ PARÇACIK MADDE ETKİLEŞMELERİ	10
3.1 Atomik Elektronlardan Esnek Saçılma	11
3.2 Çekirdekten Esnek Saçılma	11
3.3 Atomik Elektronlardan Esnek Olmayan Saçılma	11
3.4 Çekirdekten Esnek Olmayan Saçılma	11
3.5 Tesir Kesiti	12
3.6 Ortalama Serbest Yol	15
4. ALTIN ORTAMDA POZİTRON TESİR KESİTLERİ	17
4.1 Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti	17
4.2 Altın Ortamda Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları	21
4.3 Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti	29
4.4 Altın Ortamda Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları	34
5. ÖRNEKLEMER	37
5.1 Ortalama Serbest Yol Örneklemesi	37
5.2 Esnek Saçılma Açısal Dağılım Örneklemesi	38
5.3 Esnek Olmayan Saçılma Enerji Kaybı Örneklemesi	39

5.4 Pozitronların Altın Ortamda İzlenmesi	41
6. BULGULAR VE TARTIŞMA	45
7. SONUÇ	64
EKLER:	
EK A Koordinat Dönüşümü	66
EK B Akış Diyagramı	68
KAYNAKÇA	69

SEMBOL LİSTESİ

<u>Simge Adı</u>	<u>Tanımı/Deęeri</u>	<u>Birimi</u>
σ	Mikroskopik toplam tesir kesiti	cm^2
b	Mikroskopik toplam tesir kesiti	Barn
μ	Makroskopik toplam tesir kesiti	cm^{-1}
l	Ortalama serbest yol	cm
S	Durdurma gücü	keV/cm
n	Birim hacimdeki tanecik sayısı	$1/cm^3$

ŞEKİL LİSTESİ

<u>Şekil Numarası</u>	<u>Şekil Adı</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.1	Reddetme yöntemi	6
Şekil 2.2	Ortalama yöntemi	8
Şekil 2.3	Kontrol değişkeni yöntemi	9
Şekil 3.1	Tesir kesiti	12
Şekil 3.2	Saçılma olayı	14
Şekil 4.1	Esnek saçılma	17
Şekil 4.2	Perdeleme parametrelerinin enerjiye göre değişimleri	23
Şekil 4.3	Spin-rölativistik düzeltme faktörü (a) enerjiye göre değişimi (b) açığa göre değişimi	26
Şekil 4.4	Düşük enerjilerde esnek saçılma toplam tesir kesitleri	28
Şekil 4.5	Esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	29
Şekil 4.6	Esnek olmayan saçılma	30
Şekil 4.7	Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi	36
Şekil 5.1	Yarı sonsuz altın ortamda pozitron takibi	42
Şekil 6.1 (a)-(b)	Pozitronların geri saçılma olasılıkları	46
Şekil 6.2 (a)-(d)	Geliş açısının geri saçılma olasılıklarına etkisi	47
Şekil 6.3 (a)-(d)	Geri saçılan pozitronların enerji dağılımları	50
Şekil 6.4 (a)-(b)	Pozitronların enerji dağılımlarının geliş açılarına göre değişimi	52
Şekil 6.5	Ortalama girme derinliklerinin enerjiye göre değişimleri	54
Şekil 6.6	$z_0 / \langle z \rangle$ oranının enerjiye göre değişimi	55
Şekil 6.7	m parametresinin enerjiye göre değişimi	55
Şekil 6.8	5 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları	56
Şekil 6.9	10 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları	57
Şekil 6.10	20 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları	57
Şekil 6.11	30 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları	58
Şekil 6.12	50 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları	58
Şekil 6.13	100 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları	59
Şekil 6.14	250 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları	59
Şekil 6.15	5 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi	60
Şekil 6.16	10 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi	61
Şekil 6.17	20 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi	61
Şekil 6.18	30 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi	62
Şekil 6.19	40 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi	62
Şekil 6.20	50 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi	63
Şekil A.1	Pozitron takibi	66

TABLO LİSTESİ

<u>Tablo</u> <u>Numarası</u>	<u>Adı</u>	<u>Sayfa</u>
Tablo 4.1	Spin-rölativistik düzeltme faktörü	24
Tablo 4.2	Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti için gerekli parametreler	35

ÖNSÖZ

Uzun çalışmaların sonucu olan bu tezin oluşmasında bilgi ve tecrübesi ile yardımlarını esirgemeyen çok değerli danışman hocam Prof. Dr. Asuman AYDIN'a, çalışmalarım süresinde hep yanımda olan en büyük destekçim aileme en içten teşekkürlerimi sunuyorum.

Balıkesir, 2011

Gülşah BAYKAL

1. GİRİŞ

Temel parçacıkların etkileşmelerini anlayabilmek için saçılmalar çok önemli rol oynar. İki nokta yükün saçılmasıyla ilgili olarak yapılan ilk çalışma 1903'te Thomson tarafından gerçekleştirilmiştir. Alfa parçacıklarının altın filminden saçılma deneyini 1903'te Geiger ve Marsden yapmışlardır. Bu deneyin sonucunda alfa parçacıklarının %0.01'nin hedeften geriye saçıldıklarını gözlemişlerdir. 1911'de Rutherford bu geri saçılmaların çekirdek yükünden kaynaklığını göstermiştir [1].

Bir ortama gelen yüklü parçacığın madde içindeki girciliği, enerji ve menzil dağılımları dedektör tasarımı, malzeme ışınlaması, pozitron implantasyon spektroskopisi, tıbbi uygulamalar, Auger elektron spektroskopisi gibi alanlarda çok önemli rol oynamaktadır. Madde içinden geçen yüklü parçacık istatistiksel olarak çoklu saçılmalar yaptığından ortam içinde parçacık takibi Monte Carlo yöntemiyle yapılabilir [2]. Yüklü parçacık madde etkileşmelerinde tesir kesitlerinin çok iyi hesaplanması gerekmektedir. Bu etkileşmeler çok parçacık problemi olduğundan teorik olarak hesabı mümkün olmasına rağmen, pratikte çözümü mümkün olamamaktadır. Çözüm için her enerji bölgesinde aynı yaklaşım kullanılmadığından farklı enerji bölgelerinde geçerli olan yaklaşımlar kullanılmaktadır.

Yüklü parçacık madde etkileşmeleri esnek, esnek olmayan saçılma, frenleme ışınımı (bremsstrahlung) olaylarıdır. Pozitronlar belli enerjiden sonra bu etkileşmelerin dışında yok olma olayı da gerçekleştirmektedir.

Bu çalışmada 50 eV-250 keV enerji aralığında pozitronların sadece esnek ve esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitleri hesaplanmıştır. 250 keV enerji ile ortama gelen pozitronların yok olma olayını gerçekleştirme ihtimali çok düşük olduğu için ele alınmamıştır. Frenleme ışınımı (bremsstrahlung) olayı da 1 MeV'den yüksek enerjilerde hesaba katılmalıdır.

2. MONTE CARLO YÖNTEMİ

Rastgele üretilen sayılardan faydalanılarak istatistiksel benzetimler Monte Carlo yöntemiyle yapılır. Monte-Carlo yöntemi, Nicholas Constantine Metropolis tarafından bulunmuştur ve atom bombasının geliştirildiği Los Alamos Ulusal Laboratuvarında, bombanın patlamasından sonra dağılan nötronlara karşı kalkan modellemek için Stanislaw Ulam tarafından günümüze taşınmıştır [3].

Deney girdileri belirli olmayan, kesin olmayan bir şekilde gelmesi bekleniyorsa ve dağılım bir fonksiyonla hesaplanabilecekse bu yöntem kullanılır. Monte Carlo yöntemi, gelişigüzel sayıları baz alarak tahmini sistemleri modeller. Hücre Simülasyonu, Borsa Modelleri, Dağılım Fonksiyonları, Sayısal Analiz, Doğal olayların simülasyonu, Atom ve Molekül Fiziği, Nükleer Fizik ve Yüksek Enerji Fiziği modellerini test eden simülasyonlar, deneylerde kullanılan aletlerin simülasyonu, örneğin bir madde içerisinde X ışınlarının dağılımı gibi çeşitli alanlarda kullanılmaktadır [3]. Son yıllarda karmaşık problemlerin çözümünde Monte Carlo yönteminin adı geçmektedir [4].

Yukarıdaki modellerde tahminler yapabilmek için; programlama bilgisi gerekmektedir.

1. Programlama: Temel düzeyde Monte Carlo programları öğrenildikten sonra, Monte Carlo üreteçlerini oluşturabilmek gerekmektedir. Teorik eğitimin yanında örneğin C, C++ gibi bilimsel çalışmalarda sıklıkla kullanılan programları iyi derecede bilmek gerekmektedir.

2. Teorik: Programlama aşamasına geçmeden önce problemi ya da deney sisteminin teorisini çok iyi oluşturmak gerekmektedir.

Monte Carlo yöntemi, olasılık hesaba dayalı, matematik veya fizik problemlerini çözmeyi hedefleyen bir yöntemdir. Bu yöntemde gelişigüzel sayılara ihtiyaç duyulduğundan güçlü bilgisayarlara ve ideal gelişigüzel sayı üreteçlerine gerek vardır. Günümüzde bilgisayarların hızlanması daha verimli sonuçlara ulaşmamızı sağlamaktadır [4].

Problemlerin çözümünde olasılık hesapları arasında benzerlik kurulmaktadır. Monte Carlo yöntemi, karmaşık ve çok elemanlı sistemlerin ele alınmasında önemli bir yöntemdir [4]. Örnekleme sayısı arttıkça analitik yöntemle bulunan sonuca daha çok yaklaşmaktadır.

2.1 Gelişigüzel Sayı Üreteçleri

Gelişigüzel sayı üretmek için geliştirilen yöntemlerden ilki John Von Neuman tarafından 1951 yılında önerilen orta kare yöntemidir. Bu yöntemde m basamaklı genellikle tek sayı tercih edilir. İkinci aşamada bu sayının karesi alınarak elde edilen yeni sayının ortasındaki m basamaklı sayı alınır. Bu bir gelişigüzel sayı olarak kaydedilir. Tekrar bu gelişigüzel sayının karesini alarak yeni sayının ortasındaki m basamaklı sayı alınır. Bu yöntemle elde edilen gelişigüzel sayıların birbirlerini tekrar etme olasılığı yüksektir. Bu yüzden çarpımlık uygunluk yöntemi geliştirilmiştir.

m ($m > 0$) bir doğal sayı olmak üzere, $X_1 \in \{1, 2, \dots, m-1\}$ başlangıç değerini seçip,

$$X_{i+1} = aX_i + c \pmod{m} \quad (2.1)$$

algoritmasına göre X_1, X_2, X_3, \dots sayılarını ve bu sayılar yardımıyla,

$$u_1 = X_1 / m, u_2 = X_2 / m, u_3 = X_3 / m, \dots (0,1) \quad (2.2)$$

sayılarını üretmektedir.

Herhangi bir dağılımdan gelişigüzel sayı üretmek için, (0-1) aralığında gelişigüzel değişkenler gereklidir. Monte Carlo yönteminde çok sayıda gelişigüzel sayı kullanıldığından sayı üreticilerinin hızlı olması gerekir. Üretilen gelişigüzel sayıların bir süre sonra kendini tekrarlamaması için Bay-Durham algoritması kullanılabilir [5].

Düzenli dağılımlı gelişigüzel değişkenler farklı aralıklarda farklı dağılımlardan örneklenen gelişigüzel sayılara dönüştürülür. Bu amaçla yaygın olarak kullanılan çeşitli yöntemler vardır. Bu çalışmada temel örnekleme ilkesi (ters dönüşüm yöntemi) ve reddetme yöntemi kullanılmıştır.

2.2 Temel Örnekleme İlkesi (Ters Dönüşüm Yöntemi)

$a \leq x \leq b$ aralığında, her bir x sonucunun ortaya çıkma olasılığını başka bir deyişle bir olayın “sıklık veya dağılım fonksiyonunu” $g(x)$ ile gösterelim. $g(x)$ sıklık fonksiyonu ile belirlenen bir olayı taklit etmek isteyelim. Olayda sonucun x ile $x+dx$ arasında bir değer alma olasılığı,

$$p(x) = \frac{g(x)}{\int_a^b g(x)dx} \quad (2.3)$$

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. $a \leq x \leq b$ aralığındaki her x değerine karşılık $F(x)$ fonksiyonu (0-1) aralığında gelişigüzel değerler alır. $F(x)$ değerlerinin ortaya çıkma sayısı yani sıklık fonksiyonu düzgün bir dağılım gösterir. Bu nedenle $F(x)$ 'i q 'ya eşitleyebiliriz.

$$q=F(x) \tag{2.5}$$

Denklem 2.3 ve 2.4 kullanılarak,

$$q = \frac{\int_a^x g(x')dx'}{\int_a^b g(x)dx} \tag{2.6}$$

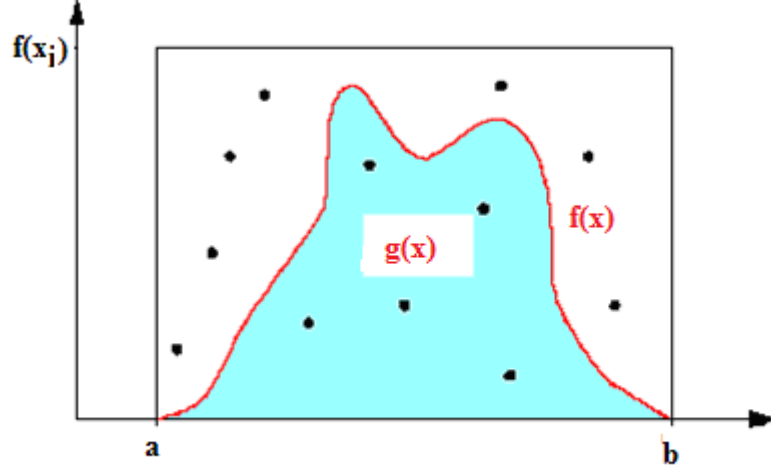
dir. Denklem 2.5 Temel Monte Carlo ilkesi olarak bilinir ve bu eşitlik tersine çözümlenip q 'ya bağlı olarak,

$$x = F^{-1}(q) \tag{2.7}$$

elde edilir. Türetilen her bir q 'ya karşılık bir x değeri Denklem 2.7'den hesaplanır. Böylece (0-1) arası düzgün dağılımlı q değerleri kullanılarak (a-b) aralığında $g(x)$ dağılımlı x değerleri elde edilir.

2.3 Reddetme Yöntemi

Reddetme yöntemi yardımıyla seçilen bir dağılım fonksiyonu kullanılarak elde edilen gelişigüzel değişkenler ile çözüme gidilmektedir. Şekil 2.1'de gösterilen siyah noktalarla gelişigüzel değişkenler, eğer $f(x)$ fonksiyonuna ait eğrinin altında kalıyorsa kabul, üstünde ise reddedilerek gelişigüzel sayılardan kaç tanesinin başarılı sonuç verdiği hesaplanmaktadır.



Şekil 2.1 Reddetme Yöntemi

q , (0-1) aralığında değişen gelişigüzel sayıdır. $g(x)$ sıklık fonksiyonu $f(x)$ 'e bağlı olarak,

$$g(x) = \frac{f(x)}{[f(x)]_{\max}} \quad (2.8)$$

şeklinde ifade edilir. a ile b arasında düzgün dağılımlı bir x sayısı,

$$x = a + q_1 (b-a) \quad (2.9)$$

eşitliği ile tanımlanır.

Bu yöntem bir veya birden fazla keskin tepesi olan fonksiyonlar için uygun bir yöntem değildir. Reddetme yönteminde bölge sınırları yanlış seçilmiş ise reddedilen noktalar vakit kaybına neden olmaktadır [6].

2.4 Ortalama yöntemi

Bu yöntem, fonksiyonun integral değerinin bulunmasında doğrudan fonksiyonun $f(x)$ değerinin kullanılmasından dolayı, probleme daha doğru bir yaklaşım sağlar. Ortalama yöntemi de rastgele seçilen noktalar üzerinde işlemler yapar. Reddetme yönteminden farklı olarak, alan taramak yerine, seçilen noktalardaki fonksiyonun değerleri, aranılan integralin bulunmasında kullanılır. Yine,

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (2.10)$$

denklemini ele alalım. V bölgenin hacmi olmak üzere ve $g(x)=1$ ise x değişkeni bölgenin içindedir. Bu denklemi verimli bir yaklaşım ile şu şekilde yazabiliriz.

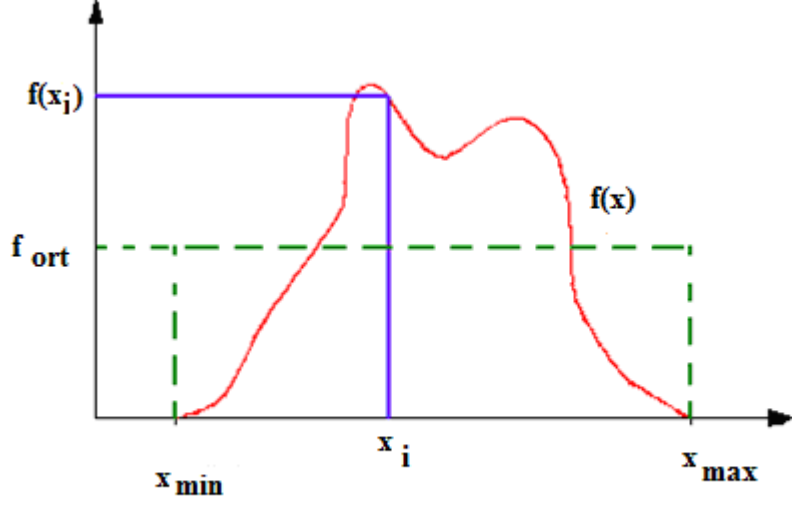
$$I = \int_a^b f(x)g(x)dx = \frac{1}{V} \int_a^b f(x)g(x)Vdx \quad (2.11)$$

olarak belirlersek, Denklem 2.10, x rastgele değişkeninin bölge içerisinde düzgün dağıldığı durum için, $h(x)=g(x)f(x)V$ fonksiyonunun beklenen değeri olarak yorumlanabilir [4].

Bu yaklaşım altında,

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_i^n h(x_i) = \frac{V}{n} \sum_i^n f(x_i) \quad (2.12)$$

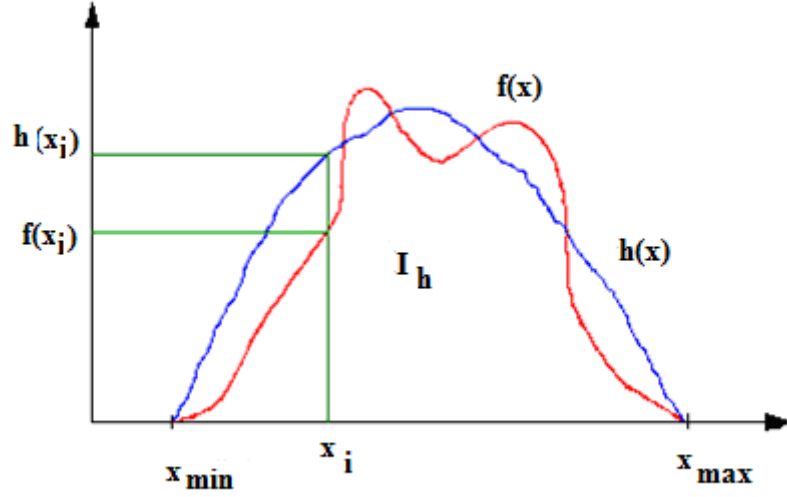
yazılabilir [4].



Şekil 2.2 Ortalama yöntemi

2.5 Kontrol Değişkeni Yöntemi

Kontrol değişkeni yönteminde, integrali alınmak istenen fonksiyona, integral çözümü bilinen ve aradığımız fonksiyona oldukça benzer ve onu iyi takip eden bir fonksiyonla yaklaşılmaya çalışılır. Böylelikle seçilen her noktada, iki fonksiyonun farkından integral değerleri arasındaki fark kestirilmeye çalışılır ve elde edilen değer bilinen fonksiyonun integral değerine eklenerek aranılan integral değerine ulaşılır [4].



Şekil 2.3 Kontrol değişkeni yöntemi

2.6 Önem Örneklemeye Yöntemi

Bu yöntem, kontrol değişkeni yöntemine oldukça benzer bir yöntemdir. Fakat burada aranan $f(x)$ fonksiyonunun hakkında kullanılan yardımcı fonksiyonun etkisi, toplamsal olarak değil çarpımsal olacaktır [4].

Bu yöntemde, kontrol değişkeni yönteminde integrali alınmak istenen fonksiyona benzer fonksiyon olarak kullanılan, $h(x)$ yaklaşım fonksiyonu örneklemede kullanılacak olasılık yoğunluk fonksiyonun elde edilmesinde kullanılır. Bu nedenle, $f(x)$ fonksiyonumuza ne kadar yakın bir $h(x)$ yaklaşım fonksiyonu kullanırsak, o kadar iyi sonuçlar elde ederiz [4].

3. YÜKLÜ PARÇACIK MADDE ETKİLEŞMELERİ

Bir ortama gelen yüklü parçacığın yapacağı etkileşmeler esnek saçılma, esnek olmayan saçılma, frenleme ışınımı (bremsstrahlung) olaylarıdır. Pozitronlar 1.022 MeV enerjiden sonra bu etkileşmelerin dışında yok olma olayı da gerçekleştirir.

Klasik elektromanyetik teoriye göre ivmeli hareket eden yüklü parçacık elektromanyetik radyasyon yayınlar. Pozitron gibi yüklü parçacık, atomun elektrostatik alanı nedeni ile hızlanarak büyük bir ivmeli alana maruz kalabilir ve elektromanyetik enerji yayımlayabilir. Bu olaya frenleme ışınımı (bremsstrahlung) olayı denir. Frenleme ışınımı (bremsstrahlung) olayı 1 MeV'in üstündeki enerjilerle gelen parçacıklar için etkili olmaya başlaması nedeniyle bu çalışmada dikkate alınmamıştır [7].

Hedefe gelen pozitron enerjisine bağlı olarak, ortamdaki elektronla birleşerek yok olabilir. 1.022 MeV'den daha yüksek enerjilerde hesaba katılan bu etkileşme türüne yok olma olayı denir [7]. Bu çalışmada gelen pozitronların enerji üst sınırı olan 250 keV'de yok olma tesir kesiti olasılığı, Heitler [8] ifadesi yardımıyla 10^{-7} mertebesinde hesaplandığı için ihmal edilmiştir.

Bir ortama gelen parçacık madde ile etkileşerek ya kinetik enerjisini kaybetmeden ya da kaybederek geliş doğrultusunu değiştirerek yoluna devam etmektedir. Başlıca yüklü parçacık madde etkileşmelerini 4 başlık altında toplayabiliriz [9].

3.1 Atomik Elektronlardan Esnek Saçılma

Gelen yüklü parçacık hedef atomun atomik elektronlarının alanında esnek olarak sapar. Bu tür saçılmalar sadece çok düşük enerjili gelen parçacıklar durumunda önemlidir [9].

3.2 Çekirdekten Esnek Saçılma

Çekirdeğe doğru gelen yüklü parçacık geliş doğrultusundan saparak esnek saçılmalar gerçekleştirir fakat ışıma yapmaz. Sadece parçacıklar arasındaki momentum korunumu için gereken kinetik enerjiyi kaybeder [9].

3.3 Atomik Elektronlardan Esnek Olmayan Saçılma

Klasik olarak hedefe gelen yüklü parçacık atomik elektronlarla etkileşmeler yaparak kinetik enerjisini azaltıp esnek olmayan saçılmalar gerçekleştirmektedir. Gelen yüklü parçacığın yönü değişir [9].

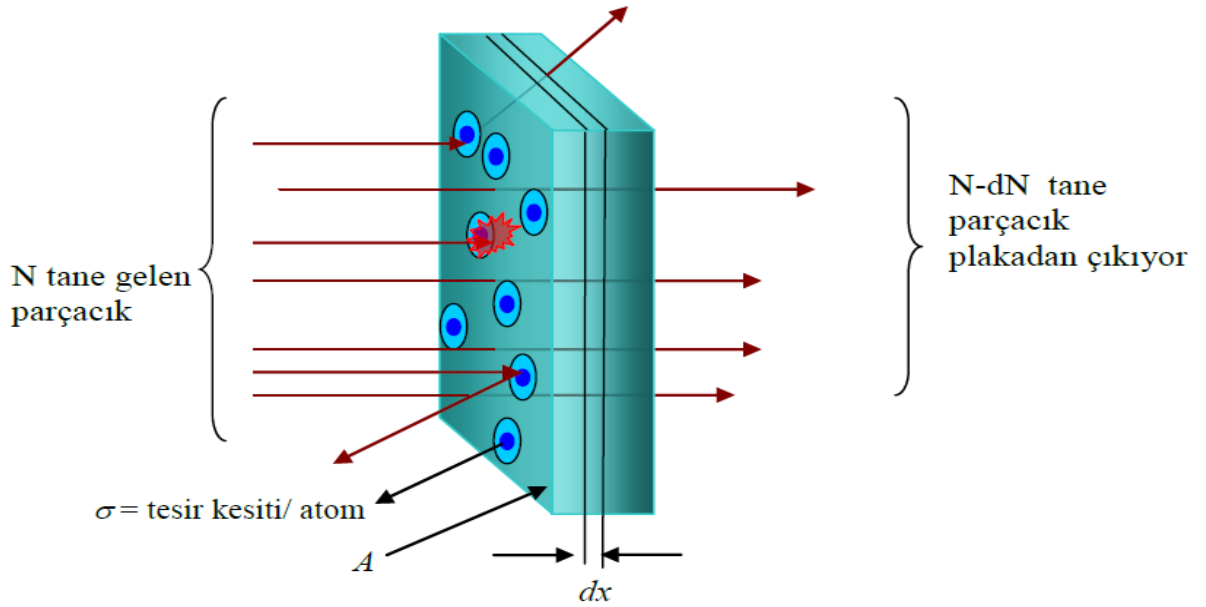
3.4 Çekirdekten Esnek Olmayan Saçılma

Çekirdeğe gelen yüklü parçacık geliş doğrultusundan sapar. Yön değiştiren yüklü parçacıkların bir kısmı ışıma (bremsstrahlung) yapar ve kinetik enerjisi azalır [9].

3.5 Tesir Kesiti

Hedefe gelen yüklü parçacığın etkileşme olasılığı tesir kesiti ifadesi ile hesaplanabilir. Yüklü parçacık madde etkileşmelerinin gerçekleşme olasılıklarının bir ölçüsü olarak tesir kesiti kavramı şu şekilde tanımlanmaktadır [10].

Gelen her parçacık hedefte belli bir kesit görür. Şekil 3.1’de gösterildiği gibi hedefe gelen parçacık madde ile etkileşmeler yapar. Parçacık demetinin gördüğü kesite bağlı olarak etkileşme olasılığı değişmektedir [10].



Şekil 3.1 Tesir Kesiti

Yüzey alanı A ve kalınlığı dx olan yassı bir levha düşünelim. Levha birim hacimde n atom içeriyorsa, hacmi $A dx$ olduğundan, levhadaki toplam atom sayısı $n A dx$ 'tir. σ etkileşme tesir kesiti olmak üzere levhadaki toplam etkileşme tesir kesiti $n A \sigma dx$ olur. Gelen demetteki parçacık sayısı N ise, levhadaki çekirdeklerle etkileşen parçacık sayısı dN ,

$$f = \frac{dN}{N} = \frac{n\sigma A dx}{A} \quad (3.1)$$

olarak belirlenir [10].

Şekil 3.1’de gösterildiği gibi aynı parçacık demetinin, sonlu bir x kalınlığındaki bir levhaya geldiğini düşünelim. Eğer parçacık sadece bir defa etkileşiyorsa, Denklem 3.1,

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

şeklinde yazılabilir. Başlangıçtaki parçacık sayısı N_0 olmak üzere,

$$\int_{N_0}^N \frac{dN}{N} = -n\sigma \int_0^x dx \quad (3.3)$$

ifadesi elde edilir. Bu ifade integre edilirse,

$$\ln N - \ln N_0 = -n\sigma x \quad (3.4)$$

$$N = N_0 e^{-n\sigma x} \quad (3.5)$$

bağıntısı elde edilir [10]. Burada σ , mikroskopik tesir kesitidir ve birimi Barn’dır.

$$1\text{Barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$$

Makroskopik tesir kesiti ise μ ile gösterilir. n hedefte birim hacimdeki atom sayısı,

$$n = \rho N_A / A$$

olmak üzere makroskopik tesir kesiti,

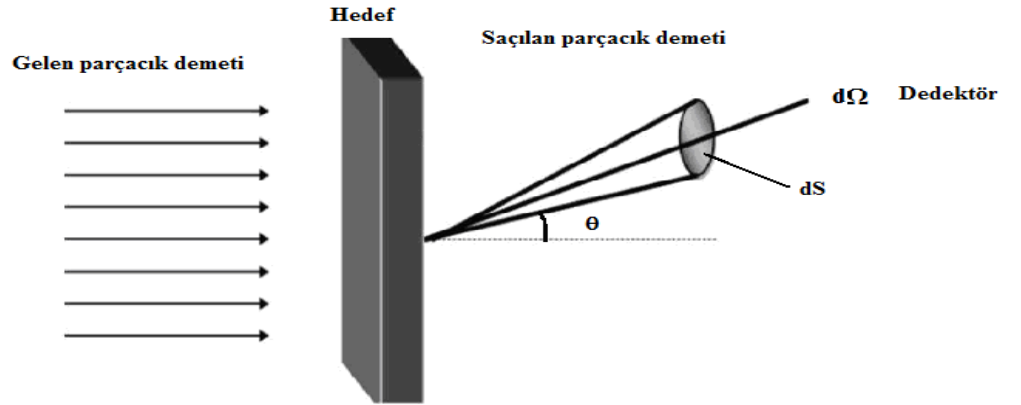
$$\mu = n\sigma \quad (3.6)$$

dir.

Denklem 3.5, makroskopik tesir kesiti kullanılarak

$$N = N_0 e^{-\mu x} \quad (3.7)$$

şeklinde de ifade edilebilir. Burada N , x kalınlığından geçen, N_0 hedefe gelen parçacık sayısıdır.



Şekil 3.2 Saçılma olayı

Şekil 3.2'deki, eşit enerjili parçacıklardan oluşan bir demetin, başlangıç noktasına konulmuş bir hedef üzerine gönderildiğini varsayalım. Saçılma olayını gözlemek için kullanılan dedektörlerin genellikle etkin kesit alanları vardır. Bu etkin alana dS dersek, bunun gördüğü katı açı $d\Omega$,

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.8)$$

ile verilmektedir [7].

$$\text{Diferansiyel tesir kesiti} = \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} \quad (3.9)$$

olarak tanımlanmaktadır. Diferansiyel tesir kesiti hesabında parçacığın türü, enerjisi ve saçılmanın gerçekleştiği ortam çok önemli rol oynar. Diferansiyel tesir kesitinin tüm açılar üzerinden integrali alınırsa toplam tesir kesiti,

$$\sigma = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (3.10)$$

elde edilmektedir [6].

Spin yönleri gelişigüzel yayıldığından diferansiyel tesir kesiti ϕ 'den bağımsızdır ve ϕ üzerinden integral alındığında,

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (3.11)$$

elde edilmektedir.

3.6 Ortalama Serbest Yol

Serbest yol, parçacığın iki etkileşme arasında aldığı yol olarak tanımlanır. Yüklü parçacık bir hedefe çarpsın. Parçacığın hedefteki bir atoma çarpma olasılığı, madde içinde Δl yolu ile orantılı ve $\mu \cdot \Delta l$ 'e eşittir. Buna göre, parçacığın çarpışmadan Δl yolunu geçme olasılığı $1 - \mu \cdot \Delta l$ dir. Bir çarpışma olmadan parçacığın $l = n \Delta l$ uzaklığını geçme olasılığı,

$$(1 - \mu \cdot \Delta l)^n = (1 - \mu \cdot \Delta l)^{l/\Delta l} \quad (3.12)$$

dir. $\Delta l \rightarrow 0$ ve l sabit olma koşuluyla $n \rightarrow \infty$ 'a giden limit alındığında olasılık,

$$\lim_{\Delta l \rightarrow 0} (1 - \Delta l)^{\mu l / \mu \Delta l} = e^{-\mu l} \quad (3.13)$$

şeklinde yazılmaktadır. $e^{-\mu l}$, bir parçacığın l uzaklığını çarpışma yapmadan geçme olasılığıdır. Bir parçacığın l uzaklığını geçtikten sonra dl yolunda bir atomla çarpışma olasılığı ise,

$$e^{-\mu l} \mu dl \quad (3.14)$$

dir. Keyfi olarak aldığımız bir yol parçasından sonra çarpışma olasılığı,

$$\int_0^{\infty} e^{-\mu l} \mu dl = 1 \quad (3.15)$$

dir.

Ortalama serbest yol; l yol parçasında atomla çarpışma olasılığının, l uzaklığını geçtikten sonra bir atomla çarpışma olasılığına oranıdır. Ortalama serbest yol denklemi,

$$l = \frac{\int_0^{\infty} l e^{-\mu l} \mu dl}{\int_0^{\infty} e^{-\mu l} \mu dl} \quad (3.16)$$

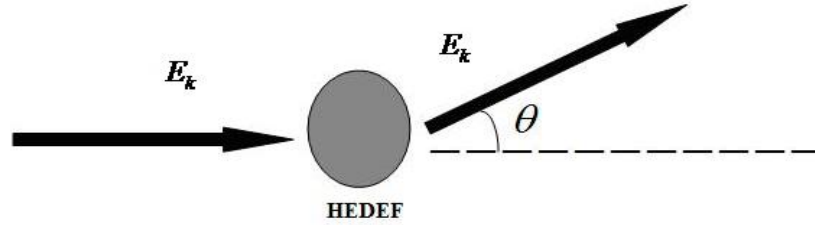
$$l = \frac{1}{\mu} = \frac{1}{n\sigma} \quad (3.17)$$

ile verilir [11].

4. ALTIN ORTAMDA TESİR KESİTİ HESAPLARI

4.1 Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti

Yüklü parçacık bir atomik hedefe çarpar ve kinetik enerjisinin bir kısmını ona verdikten sonra, geliş doğrultusundan farklı bir doğrultuya saparak hedeften uzaklaşır. Şekil 4.1’de görüldüğü gibi enerji transferi genellikle elektronların en düşük uyarılma potansiyelinden az olduğundan hedefin atomik yapısı değişmez ve geliş enerjisinin değişmediği kabul edilir. Yüklü parçacıkların atomik hedeften esnek saçılmaya uğramaları olayı momentum ve enerji korunumu kanunlarına uyar [12].



Şekil 4.1 Esnek Saçılma

Esnek saçılma toplam tesir kesitinin hesaplanması için orta enerjilerde spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli diferansiyel Rutherford tesir kesiti kullanılırken düşük enerjilerde bu yaklaşım kullanılabilirliğini yitirmektedir.

Düşük enerjilerde esnek saçılma toplam tesir kesiti hesapları kısmi dalga yöntemi ile yapılmaktadır. Saçılan parçacıkların küresel dalgalarla temsil edildiği kısmi dalga yönteminde, gelen düzlem dalga küresel dalga cinsinden,

$$\psi_g = e^{ikx} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (4.1)$$

biçiminde ifade edilmektedir. Denklem 4.1'de $j_l(kr)$ fonksiyonları, radyal Schrödinger denkleminin hedeften yeterince uzaktaki çözümleri olan küresel Bessel fonksiyonlarını ve $P_l(\cos \theta)$ fonksiyonları ise Legendre polinomlarını temsil etmektedir. Gelen ve dolayısı ile daha sonra saçılan dalganın bu açılımı, kısmi dalga açılımı olarak adlandırılmaktadır. Bu açılımda her kısmi dalga özel bir l açılal momentumuna karşılık gelmektedir. Merkezi çekirdek potansiyelinin en fazla birkaç kısmi dalga üzerinde etkili olduğunun kabulü, bu yöntemi kullanışlı hale getirmektedir [13].

Sıfır spinli parçacık demetinin sıfır spinli hedeften esnek saçılması için kısmi dalga yönteminde $f(\theta)$ saçılma genliği,

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) [e^{2i\delta_l} - 1] P_l(\cos \theta) \quad (4.2)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Burada δ_l , l . kısmi dalganın faz kaymasını göstermektedir. δ_l 'nin sıfır olması durumunda saçılma gerçekleşmeyecektir. Saçılma ile ilgili tüm bilgileri bünyesinde barındıran saçılma genliği ifadesi kullanılarak diferansiyel tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f^*(\theta)f(\theta) = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_l (2l+1)i(1-\eta_l)P_l(\cos\theta) \right|^2 \quad (4.3)$$

şeklinde verilmektedir [13]. Legendre polinomlarının integralinin alınmasıyla, saçılma toplam tesir kesitine ulaşılmaktadır.

Basit bir merkezi potansiyelden bir parçacığın esnek saçılmasının incelenmesiyle, çekici bir potansiyel δ_l faz kayması için fiziksel bir açıklama yapılabilir. Parçacık potansiyelden yeterince uzaktayken (serbest parçacık durumu) çözüm dalga fonksiyonu düzlem dalga olmasına karşın, parçacığın hedefle etkileşmesinin ardından bu potansiyelden saçılan parçacığa eşlik eden dalga fonksiyonunun fazında ve genliğinde değişme gözlenmektedir [14].

Kısmi dalga yöntemi çok fazla faz kayması içerdiğinden çözümü karmaşık ve uzundur. Bu yöntem, seçilen potansiyele göre değişen toplam tesir kesitleri vermektedir.

Bu çalışmada düşük enerji bölgesinde Antolak ve çalışma grubu [15] tarafından kısmi dalga yöntemi ile yapılan esnek saçılma toplam tesir kesiti hesaplarından yararlanılmıştır.

Orta enerji bölgesinde ise, diğer çalışmalarda [16-21] olduğu gibi diferansiyel Rutherford tesir kesiti [17],

$$\frac{d\sigma_{Ruth}(\theta, E_k)}{d\Omega} = Z^2 r_e^2 \frac{1-\beta^2}{\beta^4} \frac{1}{(1-\cos\theta)^2} \quad (4.4)$$

kullanılmıştır. Burada,

θ : saçılma açısı
 Z : ortamın atom numarası
 r_e : klasik elektron yarıçapı

dır.

Gelen parçacığın toplam enerjisi E , durgun kütle enerjisi $E_0 = mc^2$ ve $\gamma = E/E_0$ olmak üzere $\beta^2 = 1 - 1/\gamma^2$ şeklinde tanımlanmıştır.

Bu çalışmada spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford,

$$\frac{d\sigma(\theta, E_k)}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Ruth}(\theta, E_k)}{d\Omega} K_{scr}(\theta, E_k) K_{rel}(\theta, E_k) \quad (4.5)$$

ile hesaplar yapılmıştır.

Perdeleme faktörü [22, 23],

$$K_{scr}(\theta, E_k) = \left[\frac{1 - \cos \theta}{1 - \cos \theta + 2\eta} \right]^2 \quad (4.6)$$

dir.

Esnek saçılma toplam tesir kesiti hesabında perdeleme parametresi çok önemli rol oynar [16-21].

Spin-rölativistik düzeltme faktörü, Mott tesir kesitinin Rutherford tesir kesitine oranına eşittir [24].

4.2 Altın Ortamda Esnek Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları

Bu çalışmada esnek saçılma toplam tesir kesiti 15-250 keV enerji aralığında spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford tesir kesiti [17],

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = Z^2 r_e^2 \frac{1-\beta^2}{\beta^4} \frac{1}{(1-\cos\theta + 2\eta)^2} K_{rel}(\theta, E_k) \quad (4.7)$$

ifadesi ile hesaplanmıştır.

Perdeleme faktörü, $K_{scr}(\theta, E_k)$, atomik elektronlar tarafından çekirdek yükünün perdelemesini hesaba katar. Bunun için 1. ve 2. Born yaklaşımları kullanılmıştır.

Perdeleme açısı (η_I) 1. Born yaklaşımı kullanılarak, Nigam ve Marthur [22] tarafından hesaplanmıştır.

$$\eta_I = \frac{\chi_0^2}{4} \quad (4.8)$$

dir. Burada,

$$\chi_0 = 1.12 \frac{\hbar}{p} \left(\frac{Z^{1/3}}{0.885a_0} \right) \quad (4.9)$$

$$p = m_0 c [\beta^2 / (1 - \beta^2)]^{1/2}, \quad \beta = v/c = (1 - 1/\gamma^2)^{1/2} \quad (4.10)$$

dir.

Pozitronlar için perdeleme açısı (η_{II}) 2. Born yaklaşımı kullanılarak da Nigam ve çalışma grubu [23] tarafından hesaplanmıştır.

$$\eta_u = \frac{1}{4} \chi_0^2 \left\{ 1 + 2\alpha \chi_0 \left[(1 - \beta^2 / \beta) \ln \chi_0 + \frac{0.231}{\beta} + 1.448\beta \right] \right\}^2 \quad (4.11)$$

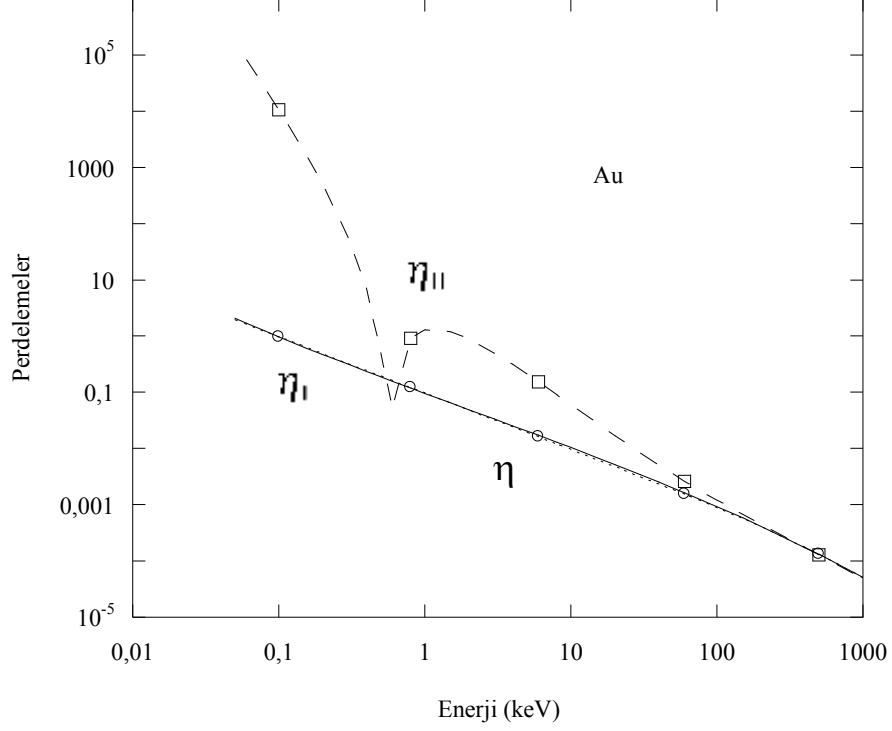
ile verilir. Burada α ince yapı sabiti altın ortamda pozitron için,

$$\alpha = -\frac{79}{137}$$

dir.

1. Born yaklaşımında ise perdelemenin, parçacığın türüne bağlı olmadığı görülür.

Şekil 4.2’de görüleceği gibi 2. Born yaklaşımı 10 keV’in altındaki enerjilerde düzensiz davranmaktadır. Bu nedenle 10 keV’in altındaki enerjilerde perdeleme parametresi için 1. Born yaklaşımı tercih edilir. Ancak bu ifade kullanıldığında elektron pozitron farkını hesaba katmak mümkün olmaz. Bu farkı pratik bir şekilde hesaba katabilmek için, 50 eV-10 keV enerji aralığında η ’nın 10-100 keV aralığındaki değerlerinin enerjiye bağlı ifadesinin sürekli bir fonksiyon olarak daha düşük enerji bölgesine ekstrapole edilmesi ile elde edilebileceği düşünülmüştür. η perdeleme açısı değişik şekillerde kullanma yöntemi başka çalışmalarda da uygulanmıştır [16-21].



Şekil 4.2 Perdeleme parametrelerinin enerjiye göre değişimleri

1. (η_I) ve 2. (η_{II}) Born yaklaşımı ile hesapladığımız değerler üzerine,

$$\eta = \exp(15.26724 - 0.39803 \ln(E_k) - 0.0155302 \ln(E_k)^2 + 0.00261318 \ln(E_k)^3) \quad (4.12)$$

ile verilen ifade fit edilmiştir. Burada E_k (keV) biriminde kullanılmıştır. Perdeleme açısı için elde edilen ifadenin enerjiye bağlı değişimi de Şekil 4.2'de düz çizgi ile gösterilmiştir.

Spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford [17] tesir kesitinde üçüncü terim olan spin-rölativistik düzeltme faktörü, Mott tesir kesitinin, Rutherford tesir kesitine oranına (σ/σ_R) eşittir. $K_{rel}(\theta, E_k)$ için değerler Idoeta ve Legarda [24] ve Doggett ve Spenser [25] tarafından yayınlanmıştır. Her iki çalışmada da altın ($Z=79$) için spin-rölativistik düzeltme faktörü hesaplanmadığından bu çalışmada Idoeta ve Legarda [24] tarafından kurşun ($Z=82$) için yayınlanan spin-rölativistik düzeltme faktörü kullanılmıştır. Bu oranlara iki aşamalı fit yapılarak elde edilen fonksiyonlar kullanılmıştır. Tablo 4.1’de verilen enerji değerleri için (σ/σ_R) oranlarının açığa bağlı ifadeleri olarak,

$$K_{rel}(\theta, E_k) = p_1(E_k) + p_2(E_k)\theta + p_3(E_k)\theta^2 + p_4(E_k)\theta^3 \quad (4.13)$$

kullanılmıştır.

Tablo 4.1 Spin-rölativistik düzeltme faktörü

$\theta^0 / E(\text{MeV})$	1.00	0.50	0.25	0.10	0.05	0.025	0.005
15	0.902029	0.917795	0.939995	0.968090	0.982280	0.990627	0.997996
30	0.804779	0.836431	0.880894	0.937040	0.965206	0.9816651	0.996153
45	0.708376	0.756640	0.823865	0.907730	0.949287	0.973340	0.994430
60	0.613421	0.679291	0.769890	0.880835	0.934863	0.965843	0.992875
75	0.521344	0.605686	0.719968	0.856817	0.922126	0.959237	0.991504
90	0.434208	0.537401	0.675036	0.835965	0.911165	0.953550	0.990321
105	0.354460	0.476113	0.635902	0.818417	0.901994	0.948781	0.989327
120	0.284685	0.423442	0.603201	0.804203	0.894589	0.944916	0.988520
135	0.227373	0.380842	0.577392	0.793278	0.888903	0.941937	0.987895
150	0.184709	0.349514	0.558782	0.785562	0.884885	0.939824	0.987451
165	0.158391	0.330351	0.547554	0.780973	0.882493	0.938563	0.987186
180	0.149495	0.323902	0.543802	0.779450	0.881699	0.938144	0.987098

Burada θ radyan biriminde gelen parçacığın saçılma açısıdır. Her bir enerji değeri için Denklem 4.13’deki p_i ler en uygun şekilde belirlenmişlerdir. İkinci aşamada spin-rölativistik düzeltme terimi her bir p_i nin enerjiye bağlı ifadeleri $p_i(E_k)$ değerleri üzerine fit yapılarak,

$$p_1(E_k) = 0.99899 - 0.00814100 E_k - 0.00403127 E_k^2 + 0.00460610 E_k^3 + 0.00693508 E_k^{0.4} \quad 4.14-a$$

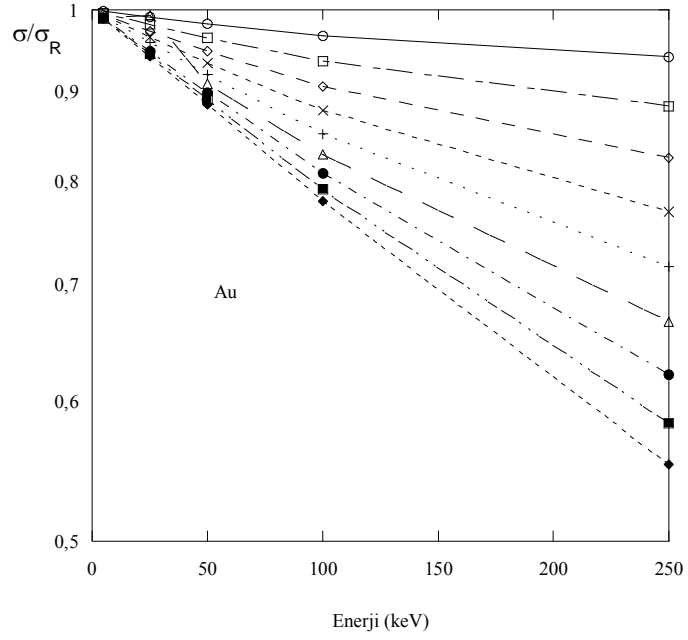
$$p_2(E_k) = 0.0175850 + 1.47593 E_k + 0.0261750 E_k^2 - 1.87348 E_k^{0.8} \quad 4.14-b$$

$$p_3(E_k) = -0.00479872 - 0.75018 E_k + 0.13755 E_k^2 + 0.58386 E_k^{0.8} \quad 4.14-c$$

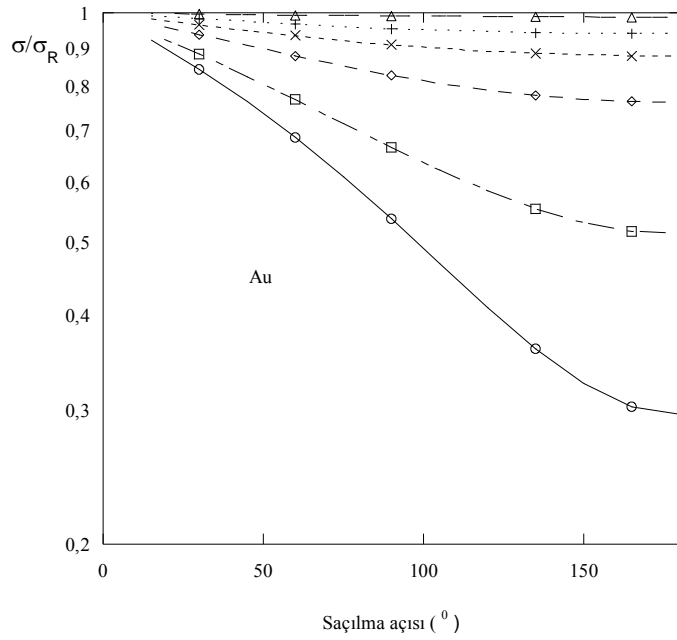
$$p_4(E_k) = 0.00173799 + 0.0476301 E_k - 0.0210731 E_k^2 - 0.00911811 E_k^{0.3} \quad 4.14-d$$

bulunmuştur. Burada E_k (MeV) biriminde parçacığın kinetik enerjisidir.

Spin-rölativistik düzeltme faktörü hesabında Idoeata ve Legarda [24] tarafından yayınlanan (σ/σ_R) oranlarının enerji ve açığa bağlı değişimleri sırasıyla Şekil 4.3 (a) ve (b)'de gösterilmiştir.



(a)



(b)

Şekil 4.3 Spin-rölativistik düzeltme faktörü (a) enerjiye göre değişimi (b) açığa göre değişimi

5 keV'in altındaki enerjilerde ise spin-rölativistik düzeltme faktörü için Bentabet ve Bourissa [26] tarafından,

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\sigma} = e^{\alpha-\beta\theta} \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \quad (4.15)$$

eşitliği önerilmiştir.

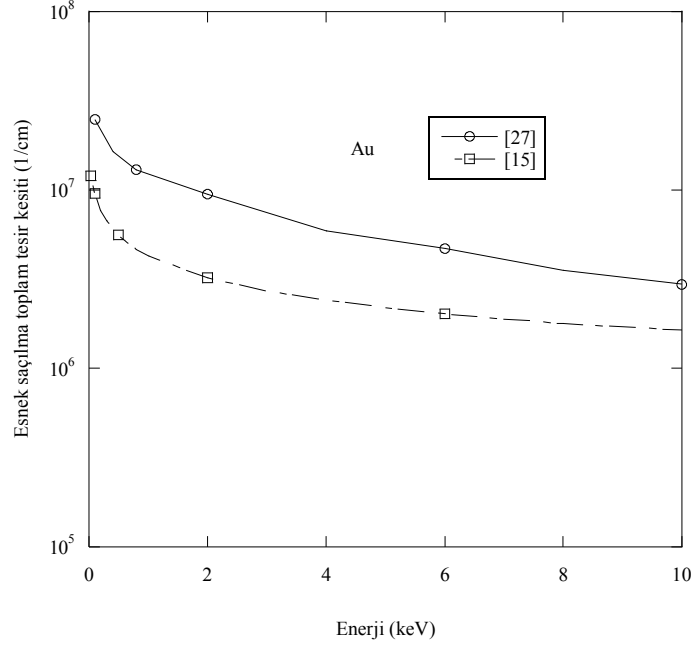
Bu çalışmada 5 keV'in altındaki enerjilerde spin-rölativistik düzeltme faktörü 1 alınmıştır. 15-250 keV enerji aralığında spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford diferansiyel tesir kesiti [17] toplam katı açı üzerinden integre edilerek,

$$\sigma(\theta, E) = \int \frac{d\sigma(\theta, E)}{d\Omega} d\Omega \quad (4.16)$$

mikroskopik toplam tesir kesiti hesaplanmıştır.

15 keV'in altındaki enerjilerde bu yöntemle tesir kesitlerini hesaplamak uygun olmayacağından bu çalışmada 50 eV-10 keV enerji aralığında Antolak ve çalışma grubu [15] tarafından kısmi dalga açılımıyla yapılan hesaplardan yararlanılmıştır. Kısmi dalga açılımıyla hesaplanan esnek saçılma toplam tesir kesiti değerlerinde atom numarasına (Z) şiddetli bir bağıllık görülmemektedir. Bu nedenle Ar için verilen [15] (Z=18) değerler, altın için Z(Z+1) düzeltmesi yapılarak kullanılmıştır.

Düşük enerjilerde kısmi dalga açılımıyla altın ortamı için hesaplanan toplam tesir kesitlerine tipik bir örnek Şekil 4.4'de verilmiştir. Düşük enerji bölgesinde tesir kesiti hesapları, birbirinden farklılıklar göstermektedir.



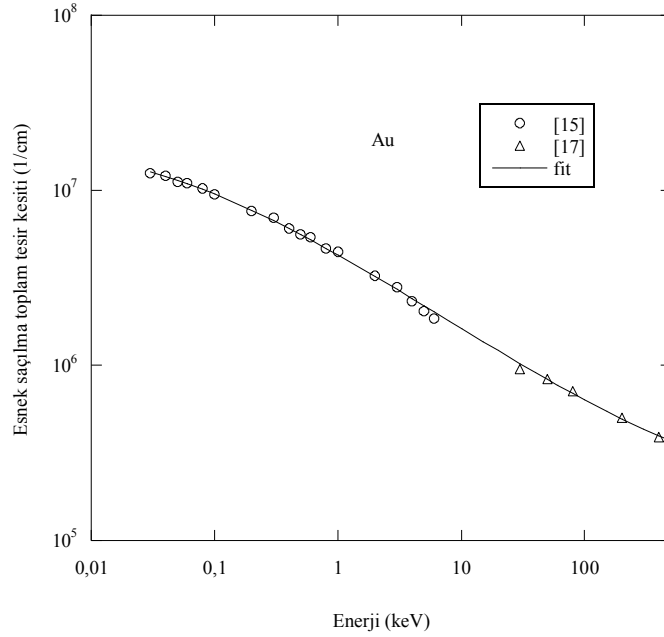
Şekil 4.4 Düşük enerjilerde esnek saçılma toplam tesir kesitleri

50 eV-10 keV enerji aralığında kısmi dalga açılımıyla yapılan çalışmadan [15] alınan değerler ve 15-250 keV enerji aralığında spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford [17] ile hesapladığımız toplam tesir kesiti değerleri ile birlikte Şekil 4.5’de gösterilmiştir. Esnek saçılma toplam tesir kesitinin 50 eV-250 keV aralığında enerjiye bağlı analitik bir ifadesini bulmak, $\mu(E_k)$ hızla değişen bir fonksiyon olduğu için zordur. Şekil 4.5’de görüleceği gibi $\ln \mu(\ln E_k)$ ifadesi basit bir fonksiyondur ve bir kuvvet serisi açılımıyla ifade edilebilir. Bu nedenle tesir kesitlerinin logaritmaları, enerjinin logaritmasının fonksiyonu olmak üzere fit yapılmıştır.

Böylece esnek saçılma toplam tesir kesiti ifadesi,

$$\mu_e (1/cm) = \exp(15.26746 - 0.39885 \ln(E_k) + 0.0158967 \ln(E_k)^2 + 0.00269955 \ln(E_k)^3) \quad (4.17)$$

elde edilmiştir. Burada E_k (keV) biriminde kullanılmıştır.



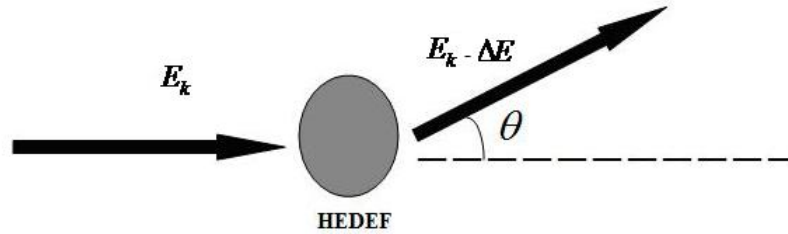
Şekil 4.5 Esnek saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi

4.3 Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti

Yüklü parçacık bir ortamdan geçerken madde içinde yapacağı etkileşmelerden biri de esnek olmayan saçılmadır. Esnek olmayan saçılmalar sonucu kaybedilen enerji miktarı, durdurma gücü, ortalama serbest yol gibi büyüklükler

nükleer fizik, nükleer tıp, yüzey fiziği, medikal fizik gibi alanlarda çok önemli rol oynamaktadır.

Esnek olmayan saçılmanın esnek saçılmadan temel farkı parçacığın kuantum durumlarının korunmuyor olmasıdır. Şekil 4.6'da görüldüğü gibi belli bir enerji ile hedef ortama giren parçacık yapacağı esnek olmayan saçılma sonrasında başlangıçta sahip olduğu E_k kinetik enerjisinin bir kısmını kaybetmektedir. Gelen parçacık hedef atomun elektronu ile çarpıştıktan sonra enerjisini hedef atomun elektronuna vermektedir. Hedef atomun elektronu ise ya bir enerji uyarılmış duruma geçer ya da iyonize olur.



Şekil 4.6 Esnek Olmayan Saçılma

Esnek olmayan saçılmaları açıklayabilmek için belirlenmesi gereken bazı temel kavramlar ortalama serbest yol ve durdurma gücüdür. Ortalama serbest yol parçacığın birim yol başına saçılma ihtimalidir. Ortalama serbest yol,

$$l^{-1} = n \int_{\Omega} d\sigma \quad (4.18)$$

ile verilmiştir.

Durdurma gücü ise parçacığın birim uzunluk başına kaybettiği enerji miktarıdır [28] ve

$$S = n \int_{\Omega} W d\sigma \quad (4.19)$$

şeklindedir.

Durdurma gücü konusundaki çalışmalar, 20.YY'ın ilk başlarında atomun yapısını anlayabilmek için başlamıştır. Daha sonra 1920'li yıllarda kuantum mekaniksel saçılma olayının geliştirilmesinde, 1930 ve 1940'lı yıllarda nükleer fisyon çalışmalarında, 1950'lerde nükleer fizik çalışmalarında, 1960'lı yıllarda iyon üretiminin teknolojik uygulamalarında ve 1970'lerde malzeme analizi ve radyasyon onkolojisinde sıkça kullanılmıştır. Durdurma gücünün bu kadar geniş bir alanda kullanılabilir ve güncelliğini koruyor olması durdurma gücü hesaplamaları için çeşitli teori ve yaklaşımların ortaya çıkmasını sağlamıştır.

Durdurma gücü ilk olarak 1913'te Bohr tarafından klasik fizik kanunları kullanılarak hesaplanmıştır. Bu çalışmadan yaklaşık on yıl sonra dalga mekaniğinin gelişmesi ile 1930'da Bethe kuantum mekaniksel yaklaşımı kullanarak durdurma gücünü hesaplamıştır. Özellikle, Bethe'nin [29] çalışması çok daha iyi sonuçlar vermektedir ve daha sonra yapılan birçok çalışmada Bethe teorisi kullanılmıştır.

Yüklü parçacıkların madde içinden geçerken birim yol başına kaybettikleri enerji olarak tanımlanan durdurma gücü çok karmaşık bir problemdir. Gelen parçacığın enerjisine bağlı olarak değişir. Düşük enerji bölgelerinde durdurma gücü hesabında kullanılan en önemli teoriler ise Lindhard ve Scharff [30] (dielektrik) ve Firsov [31] teorileridir.

Dielektrik teori, gelen parçacığın v hızı ile hareket eden bir yük bulutu olarak kabul eder ve ortamın özelliklerini dielektrik sabiti ile tanımlar. Firsov çalışmasında düşük hızda iki parçacık problemini incelerken, öncelikle bu iki parçacığın sanki bir

molekül oluşturdıklarını farz etmiştir. Bu kabul, Firsov teorisinin temelini oluşturmuştur.

Dalga mekaniğinin gelişmesiyle klasik olarak birçok problem kuantum mekaniksel olarak ele alınmaya başlanmıştır. Parçacıkların toplam esnek olmayan saçılma tesir kesitlerini belirleyebilmek için pek çok model öne sürülmüştür. Bunlardan birisi Bethe [29] teorisidir ve serbest atomdan hızlı elektronların saçılmasını dikkate almaktadır. Düşük enerji bölgelerinde geçerliliğini yitiren bu teori gelen parçacığın enerjisinin 10 keV üzerinde olduğu durumlarda kullanılmaktadır. Bethe [29] ile Bohr [32] arasındaki en önemli fark, Bethe'nin çarpışmaları tanımlamak için çarpışma parametresi yerine momentum transferi kullanmış olmasıdır. Bethe'nin [29] çalışmalarına dayanarak Liljequist [33], diferansiyel esnek olmayan saçılma tesir kesiti hesabı için,

$$\frac{d\sigma}{dWdQ} = \frac{\pi e^4}{E_k} \frac{1}{WQ} \frac{df(W, Q)}{dW} \quad (4.20)$$

eşitliğini önermiştir. Burada,

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

ifadesi genelleştirilmiş osilatör şiddet yoğunluğudur (GOS). GOS ifadesi parçacığın çarpıtığı hedefin karakteristik özellikleri ile ilgili bilgi verir.

Liljequist [33] yaptığı kuantum mekaniksel hesaplamalar sonucunda GOS için,

$$\frac{df(Q, W)}{dW} = \sum_i^M f_i F(W_i; Q, W) = \int_0^\infty \frac{df(W)}{dW} F(W_i; Q, W) \quad (4.21)$$

eşitliğini tanımlamıştır.

Esnek olmayan saçılmalar Bohr'a göre [32] rezonans tipi etkileşmeler ve serbest etkileşmeler olarak ikiye ayrılmaktadır. Rezonans tipi etkileşmeler ($Q < W_i$) parçacığın hedef atomun iç kabuk yani bağlı elektronları ile yaptıkları etkileşmelerdir. Bu tür etkileşmeler küçük momentum ve enerji transferlidir, genellikle enerji transferi bağlanma enerjisi mertebesinde uyarılmalar şeklinde gerçekleşmektedir. Serbest etkileşmeler ($Q > W_i$) ise valans elektronlarıyla olan etkileşmelerdir.

Q geri tepme enerjisinin sıfır olduğu durumda GOS ifadesi (OOS) optik osilatör şiddet yoğunluğuna indirgenir. Daha sonraki yıllarda bazı araştırmacılar tarafından OOS veri modeli geliştirilerek çeşitli optik veri modelleri öne sürülmüştür. Böylelikle esnek olmayan saçılma tesir kesiti hesabı hakkında ileri bir adım atılmıştır [32].

Dielektrik teori, parçacıkların durdurma gücü, esnek olmayan saçılma tesir kesiti gibi büyüklüklerin hesabıyla ilgili çalışmalarda öne sürülen başka bir teori olup, bu teori çerçevesinde maddelerin dielektrik özelliklerine ihtiyaç duyulmaktadır. Dielektrik teoriye dayanarak yapılan hesaplamalar sonucu Lindhard [34],

$$\frac{dE}{dX} = -\frac{Z_1 e^2}{\pi v} \text{Im} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_{-kv}^{kv} w dw \left(\frac{1}{\varepsilon(k, w)} - 1 \right) \quad (4.22)$$

şeklinde bir eşitlik öne sürmüştür.

Fano'nun [28] önerdiği esnek olmayan saçılma tesir kesiti ifadesi,

$$\frac{d^2 \sigma}{dQ dW} = \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{WQ} \frac{2W}{\pi \Omega_p^2} Z \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(Q, W)} \right) \quad (4.23)$$

şeklindedir.

4.4 Altın Ortamda Esnek Olmayan Saçılma Toplam Tesir Kesiti Hesapları

Bu çalışmada, esnek olmayan saçılma makroskobik tesir kesiti hesabı için Liljequist [33] tarafından önerilen eşitlik,

$$\mu_{eo} = n Z_i 2\pi r_e^2 \frac{m_o c^2}{\beta^2} \sum_{i=1}^M \left[\frac{1}{W_i} \ln \left(\frac{W_i}{Q_{\min}} \right) - \frac{1}{E_k} + \frac{1}{W_i} \right] \quad (4.24)$$

kullanılmıştır. Burada,

$$Q_{\min} = (\sqrt{E_k - W} - \sqrt{E_k})^2$$

W_i : Rezonans enerjisi

Q_{\min} : Minimum geri tepme enerjisi

Z_i : i. kabuğun toplam değerlik elektron sayısı

E_k : Kinetik enerji

n : Birim hacimdeki tanecik sayısı

dır.

Bu çalışmada Denklem 4.24 kullanılarak altın ortamda esnek olmayan saçılma tesir kesitlerinin hesaplanması için gerekli olan parametreler Tablo 4.2'de verilmiştir.

Tablo 4.2 Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti için gerekli parametreler (Z=79)

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

Burada E_{b_i} her kabuk için bağlanma enerjisidir. Esnek olmayan saçılma tesir kesiti için, Denklem 4.24'den yararlanarak hesapladığımız değerler üzerine

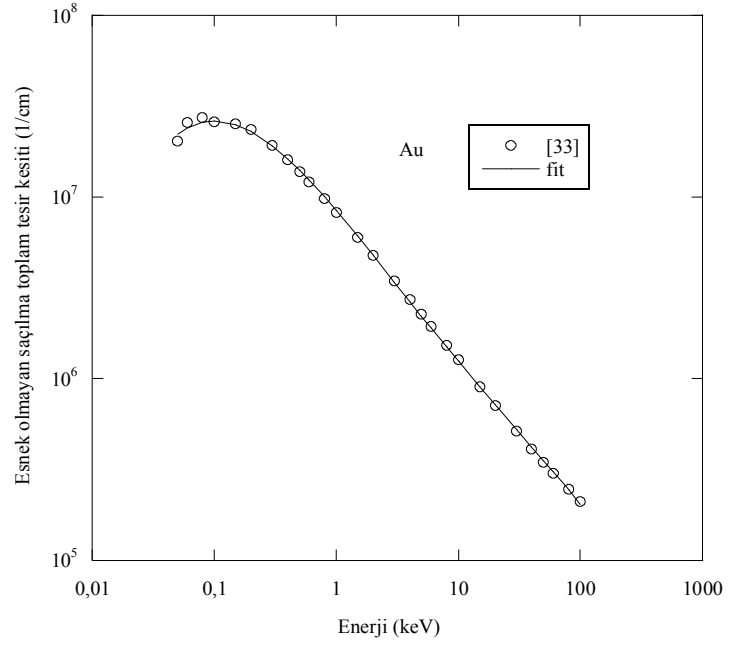
$$\mu_{eo} (cm)^{-1} = \exp(p_1 + p_2x + p_3x^2 + p_4x^3 + p_5x^4) \quad (4.25)$$

ile verilen ifade fit edilmiştir. Burada $x = \ln[E_k (keV)]$ dir. Böylece esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti ifadesi,

$$\mu_{eo} (cm)^{-1} = \exp(15.95049 - 0.78907 \ln(E_k) - 0.059557 \ln(E_k)^2 + 0.0240694 \ln(E_k)^3 - 0.00261377 \ln(E_k)^4) \quad (4.26)$$

olarak elde edilmiştir.

Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesiti için hesaplanan değerler ve bu değerler üzerine yapılan fit Şekil 4.7'de gösterilmiştir.



Şekil 4.7 Esnek olmayan saçılma toplam tesir kesitinin enerjiye göre değişimi

5. ÖRNEKLEMELER

5.1 Ortalama Serbest Yol Örnekleme

Temel örnekleme yöntemi kullanılarak ortalama serbest yol,

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

eşitliği yardımıyla hesaplanır.

Parçacığın ortam içinde etkileşme yapmadan aldığı serbest yola l dersek, l ile $l+dl$ arasında etkileşme yapma olasılığı,

$$p(l)dl = -\mu \frac{I}{I_0} dl \quad (5.2)$$

$$p(l)dl = -\mu e^{-\mu l} dl$$

dır.

Denklem 2.4 yardımıyla,

$$\int_0^l p(l')dl' = \int_0^l -\mu e^{-\mu l'} dl' = e^{-\mu l} \quad (5.3)$$

elde edilir.

Temel örnekleme ilkesinde yer alan Denklem 2.5 ve 2.6 yardımıyla,

$$q = e^{-\mu l}, \quad \ln q = -\mu l$$

elde edilerek ortalama serbest yol,

$$l = -\ln q / \mu \quad (5.4)$$

ifadesi ile örneklenir.

5.2 Esnek Saçılma Açısal Dağılım Örnekleme

Esnek saçılma açısal dağılım örnekleme için perdelemeli spin-rölativistik düzeltme faktörlü Rutherford tesir kesiti kullanılmıştır. Denklem 4.7'de yer alan $1/(1 - \cos \theta + 2\eta)^2$ ifadesine temel Monte Carlo yöntemi uygulanarak $\cos \theta$ esnek saçılma açısal dağılım örnekleme yapılmıştır.

$$q = \frac{\int_0^\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega}{\int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega} \quad (5.5)$$

dir. Denklem 5.5'de $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ alınır ve gerekli işlemler yapılarak,

$$q = \frac{\int_0^\theta \frac{\sin \theta}{(1 - \cos \theta + 2\eta)^2} d\theta}{\int_0^\pi \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta + 2\eta)^2} d\theta} \quad (5.6)$$

elde edilmiştir. Denklem 5.6'daki integraller alınır,

$$\cos \theta = 1 - \frac{2\eta q}{1 + \eta - q} \quad (5.7)$$

esnek saçılma açısal dağılım örnekleme elde edilir.

Esnek saçılma açısal dağılım örneklemesinde, η perdeleme parametresi için Denklem 4.12 kullanılmıştır.

Esnek saçılma açısal dağılım örneklemesinde spin-rölativistik düzeltme faktörü gelen parçacığın enerjisi 5 keV'in üstünde olduğunda hesaba katılmıştır. 5 keV'in altındaki enerjilerde spin-rölativistik düzeltme faktörü $K_{rel}=1$ alınmıştır.

Spin-rölativistik düzeltme faktörü için $\cos \theta$ açısal dağılım örnekleme Denklem 5.7 'den yararlanılarak hesaplanmıştır. Rölativistik düzeltme faktörü Denklem 4.13 ve 4.14'den hesaplanıp $K_{rel}(\theta, E_k)$ fonksiyonu bulunur. Bir gelişigüzel sayı (q) kullanılarak,

$$q < K_{rel}(\theta, E_k) \quad (5.8)$$

koşulunun sağlanıp sağlanmadığına bakılmalıdır. Koşul sağlandığında $\cos \theta$ açısal dağılım örnekleme yapılmış olur. Eğer koşul sağlanmazsa reddedilerek başa dönülüp işlemler tekrar edilir.

5.3 Esnek Olmayan Saçılma Enerji Kaybı Örnekleme

Esnek olmayan saçılma tesir kesiti hesabında enerji kaybının hangi kabuktan olduğunun yanı sıra ne kadar olduğunun belirlenmesi de önemlidir. Esnek olmayan saçılmanın hangi kabuktan gerçekleştireceğinin belirlenebilmesi için Gryzinski uyarma fonksiyonundan yararlanılmıştır.

Gryzinski'nin esnek olmayan diferansiyel tesir kesiti [35-37] ,

$$\frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E} = \frac{\pi e^4 n_e E_b}{\Delta E^3 E_k} \left(\frac{E_k}{E_k + E_b} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{\Delta E}{E_k} \right)^{E_b/(E_b + \Delta E)} x \left\{ \frac{\Delta E}{E_b} \left(1 - \frac{E_b}{E_k} \right) + 4/3 \ln \left[2.7 + \left(\frac{E_k - \Delta E}{E_b} \right)^{1/2} \right] \right\} \quad (5.9)$$

dir. Burada ΔE enerji kaybı, E_k gelen parçacığın kinetik enerjisi, E_b ortalama bağlanma enerjisi, e elektronun yükü ve

$$u = E_k / E_b$$

olmak üzere toplam mikroskopik tesir kesiti ise,

$$\sigma = \pi e^4 n_e [(u-1)/(u+1)]^{3/2} \left\{ 1 + 2(1-1/2u)x \ln[2.7 + (u-1)^{1/2}] / 3 \right\} / (uE_b^2) \quad (5.10)$$

dir.

Her kabuk için tek tek tesir kesitleri Denklem 5.10 yardımıyla hesaplandıktan sonra saçılmanın hangi kabuktan olacağına,

$$p_i = \sigma_i / (\sum \sigma_i) \quad (5.11)$$

eşitliği ile karar verilmiştir.

Esnek olmayan saçılmanın hangi kabuktan olduğu belirlendikten sonra ΔE enerji kaybı örnekleme için Denklem 5.9 ile verilen Gryzinski fonksiyonu ve bu fonksiyon üzerinden geçen $1/x^2$ bir zarf eğrisiyle, reddetme yöntemi kullanılarak örneklenmiştir. Gryzinski ve zarf fonksiyonları normalize edilerek kullanılmıştır. ΔE enerji kaybı örnekleme için $1/x^2$ zarf fonksiyonu temel Monte Carlo yöntemi uygulanarak,

$$q = \frac{\int_{E_b}^{\Delta E} \frac{dx}{x^2}}{\int_{E_b}^{E_k} \frac{dx}{x^2}} \quad (5.12)$$

yazılabilir. Bu eşitlikte minimum enerji kaybı, saçılmanın gerçekleştiği kabuktaki elektronun E_b bağlanma enerjisi kadardır. Maksimum enerji kaybı ise parçacığın kinetik enerjisi olan E_k kadardır. Denklem 5.12’de yer alan integraller alınarak ΔE enerji kaybı,

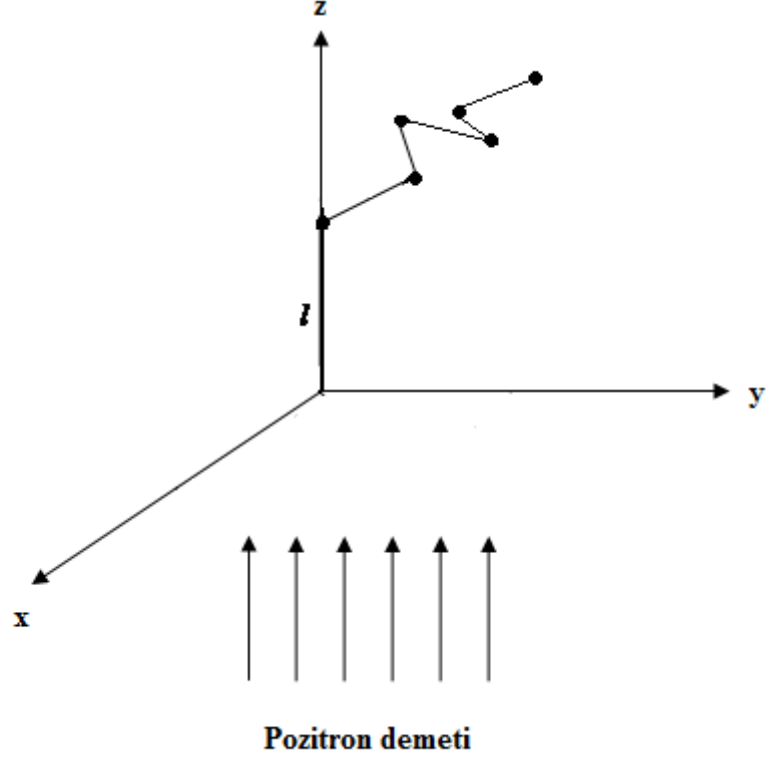
$$\Delta E = \frac{E_b}{(1 - q) + qE_b / E_k} \quad (5.13)$$

eşitliği elde edilmiştir.

5.4 Pozitronların Altın Ortamda İzlenmesi

Yüklü parçacıkların bir ortamdan geçişleri istatistiksel bir yapı gösterdiğinden Monte Carlo yöntemi ile incelenebilir. Bir ortam içinde parçacık takibi yapabilmek için öncelikle tesir kesitleri hesaplanmalıdır. Bunun için yapılan hesaplar 4. Bölüm’de verilmiştir.

Yarı sonsuz altın bir ortama dik olarak giren paralel tek enerjili pozitron demetini ele alalım. Ortamda hareket eden bir parçacık E_k geliş enerjisi (x,y,z) yer koordinatları ve (α, β, γ) doğrultu koordinatları ile karakterize edilir. Belli bir E_k enerjisi ile ortama giren pozitron giriş doğrultusunda ilk etkileşmeden önce belli bir yol alır. Bu yol program içinde enerji ve ortam özelliklerine bağlı özelliklerine bağlı olarak tanımlanan ortalama serbest yol cinsinden örneklenir.



Şekil 5.1 Yarı sonsuz altın ortamda pozitron takibi

Pozitron, Denklem 5.4 ile örneklenen ortalama serbest yolu aldıktan sonra etkileşme yapacaktır. Pozitronun ortam ile yapacağı etkileşmenin türü belirlenir. Pozitronun gerçekleştirebileceği etkileşme türleri esnek ve esnek olmayan saçılma olaylarıdır. q gelişigüzel sayıya bağlı olarak etkileşmenin esnek yada esnek olmayan saçılma olduğuna karar verilir.

Eğer etkileşme esnek ise, pozitron enerji kaybı olmadan geliş doğrultusu ile θ açısı yaparak saçılır. θ saçılma açısı diferansiyel esnek saçılma ($d\sigma/d\Omega$)' ye göre örneklenmektedir. ϕ azimut açısı hedefe gelen pozitronun z 'ye göre sapmasını gösteren açıdır. Azimut açısı $0-2\pi$ arasında değişir ve

$$\phi = 2\pi q \quad (5.14)$$

dir.

Etkileşme esnek olmayan ise, pozitron hedefe geldiği ilk enerjisinden ΔE kadarını kaybeder. Hedeften esnek olmayan saçılma yapan pozitronların kalan enerjisi,

$$E' = E_k - \Delta E \quad (5.15)$$

dir. Saçılan pozitron esnek olmayan saçılma doğrultusunun kutup açısı ikili çarpışma modeline göre [35-37],

$$\sin \theta = (\Delta E / E_k)^{1/2} \quad (5.16)$$

eşitliği ile bulunabilir. Azimut açısı ϕ , Denklem 5.14 ile örneklenir.

Ortama ilk giren pozitron z eksenini doğrultusunda Denklem 5.4 ile örneklenen l serbest yolu kadar gider ve $(0, 0, l)$ noktasında etkileşme yapar. Esnek ya da esnek olmayan saçılma yapan pozitronun doğrultusunu belirlemek için, saçılma açıları olan θ , ϕ 'ye bağlı olarak doğrultman kosinüsleri,

$$\begin{aligned} \alpha &= \sin \theta \cos \phi \\ \beta &= \sin \theta \sin \phi \\ \gamma &= \cos \theta \end{aligned} \quad (5.17)$$

ile hesaplanır.

Pozitron $(0,0,l)$ noktasından itibaren (α, β, γ) doğrultusunda yeniden örneklenen l' serbest yolu kadar gider ve yeniden etkileşir. Pozitronun yeni hareket doğrultusunun belirlenmesi gerekir. Bunu yapabilmek için Ek A'da ayrıntılı olarak anlatılan koordinat dönüşümleri yapmak gerekir.

Pozitronun ikinci etkileşme noktasının koordinatları, ilk etkileşme noktasının koordinatları (x_1, y_1, z_1) olmak üzere,

$$x_2 = x_1 + l' \alpha$$

$$y_2 = y_1 + l' \beta$$

$$z_2 = z_1 + l' \gamma$$

ifadeleriyle hesaplanır. Bundan sonraki etkileşmeler için de aynı yöntem uygulanarak pozitron takibi yapılır.

Her etkileşmenin sonunda z koordinatları iki şekilde kıyaslanır. $z < 0$ ise, hedefe gelen pozitron geri saçılır ve geri saçılan olarak sayılarak enerjisi kutulanır. Daha sonra yeni bir pozitron takibi yapılır. Eğer bu şart sağlanmazsa ($z \geq 0$) pozitron ortam içine girerek etkileşmeler yapar. Pozitronun ortam içinde ne kadar ilerlediği hesaplanarak kesilme enerjisi olan 50 eV'e düşene kadar takip edilir. Daha sonra yeni bir pozitron takibi yapılır. Böylece pozitronların ortalama girme derinlikleri ve yarı sonsuz ortamdan geri saçılma olasılıkları elde edilir.

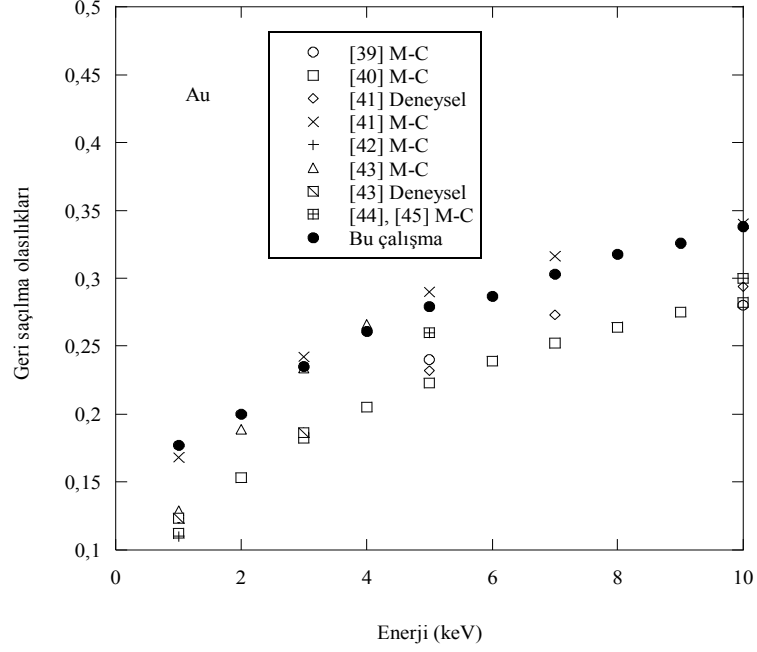
6. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada çeşitli enerji ve açılarda yarı sonsuz altın ortama gelen pozitron demetinin geri saçılma olasılıkları, enerji dağılımları, ortalama girme derinlikleri ve menzil dağılımları elde edilmiştir.

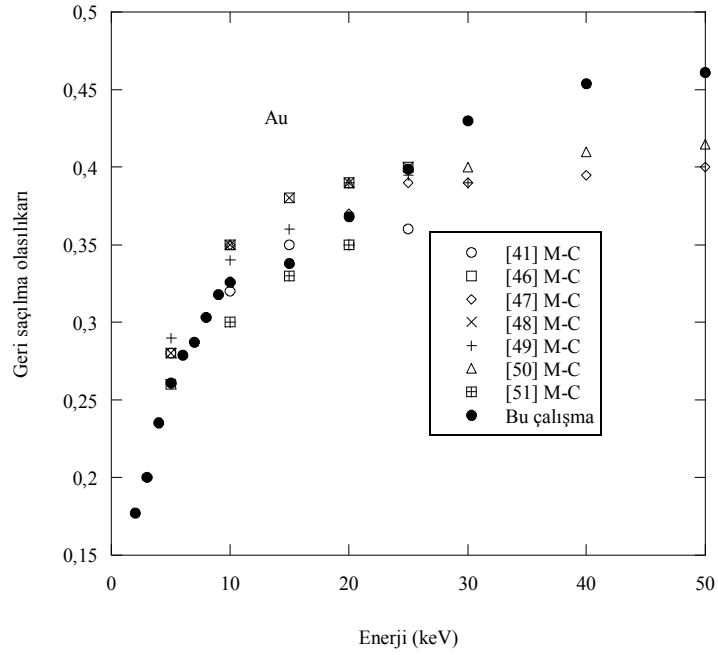
Yarı sonsuz altın ortama dik gelen pozitronların geri saçılma olasılıklarının geliş enerji ve açılara göre değişimleri ve geri saçılan pozitronların enerji dağılımlarına tipik örnekler verilmiştir.

Pozitronların yarı sonsuz altın ortamdaki menzil dağılımlarından elde edilen ortalama girme derinliklerine çeşitli enerjilerde örnekler verilmiştir. Pozitronların menzil dağılımlarına Makhovian [38,39] dağılımı fit yapılarak çeşitli enerjiler ve açılarda elde edilen sonuçlar tipik örneklerle gösterilmiştir. Bu çalışmada 250 keV'e kadar menzil dağılımları incelenmiştir.

Şekil 6.1 (a) ve (b)'de geri saçılma olasılıklarının enerjiye göre değişimi diğer teorik ve deneysel çalışmalar ile birlikte verilmiştir. Yarı sonsuz altın ortama gelen pozitronların enerjisi arttıkça geri saçılma olasılıklarının arttığı görülmektedir.



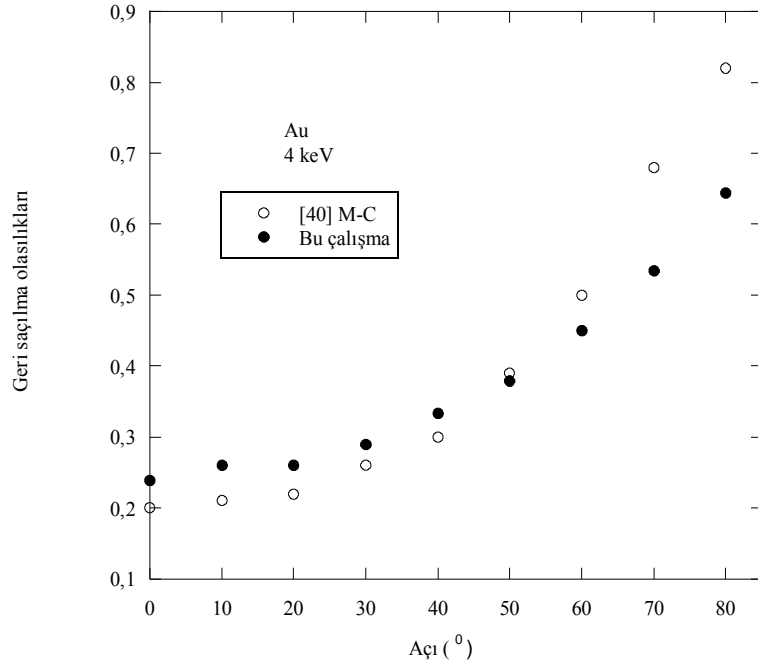
(a)



(b)

Şekil 6.1 (a) ve (b) Pozitronların geri saçılma olasılıkları

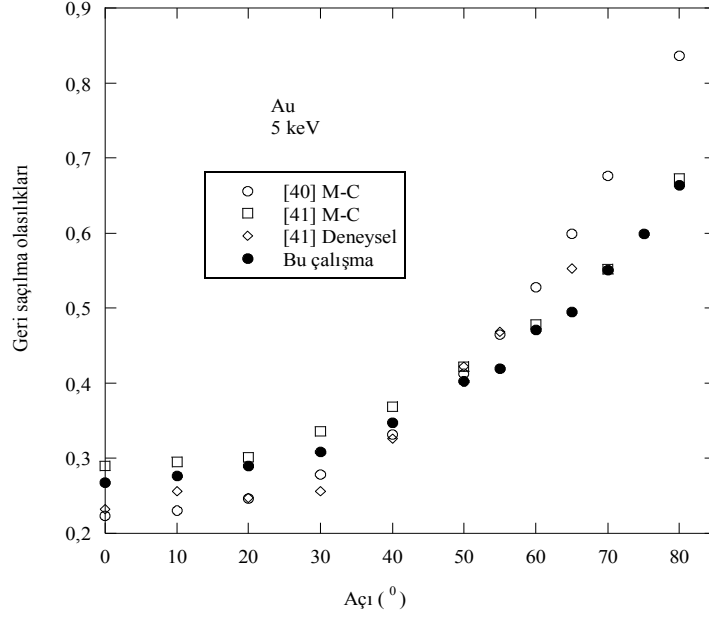
4, 5 ve 35 keV enerjileri ile altın ortama gelen pozitronların geri saçılma olasılıklarının geliş açlarına göre değişimleri diğer çalışmalar ile birlikte Şekil 6.2 (a)-(d)'de gösterilmiştir ve aynı enerjide pozitronların geliş açısı arttıkça geri saçılma olasılıkları da artar.



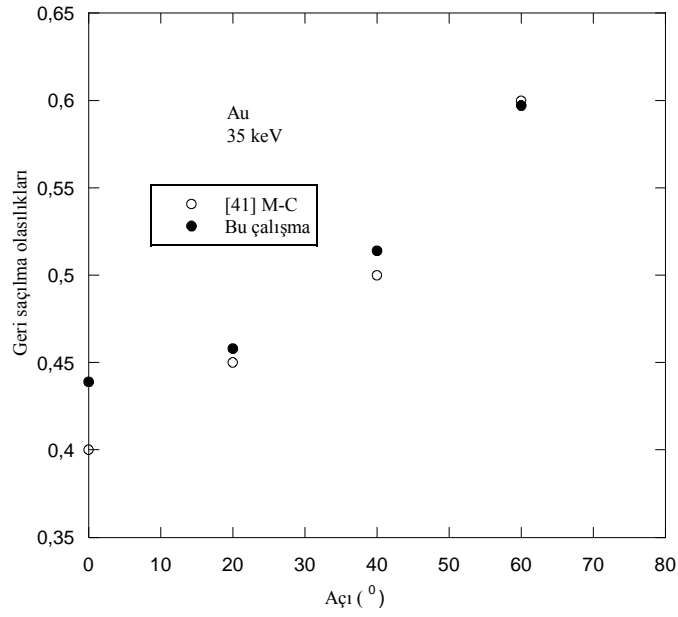
(a)

Şekil 6.2 (a)-(d) Geliş açısının geri saçılma olasılıklarına etkisi

Şekil 6.2'nin devamı

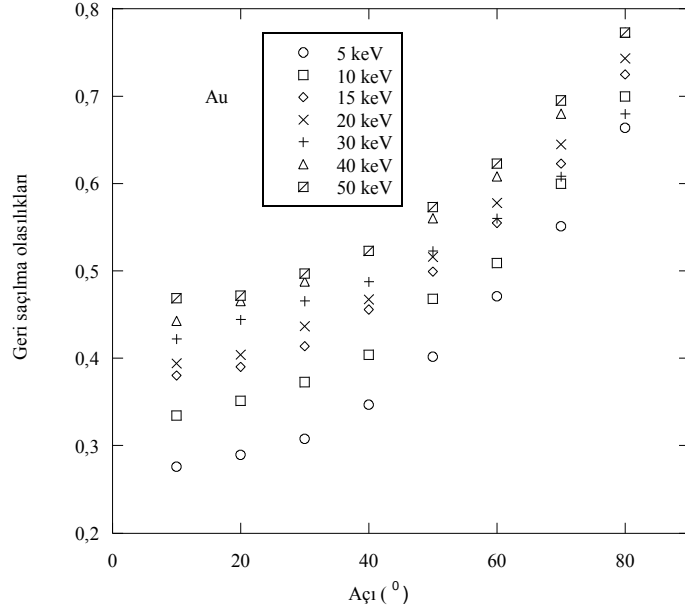


(b)



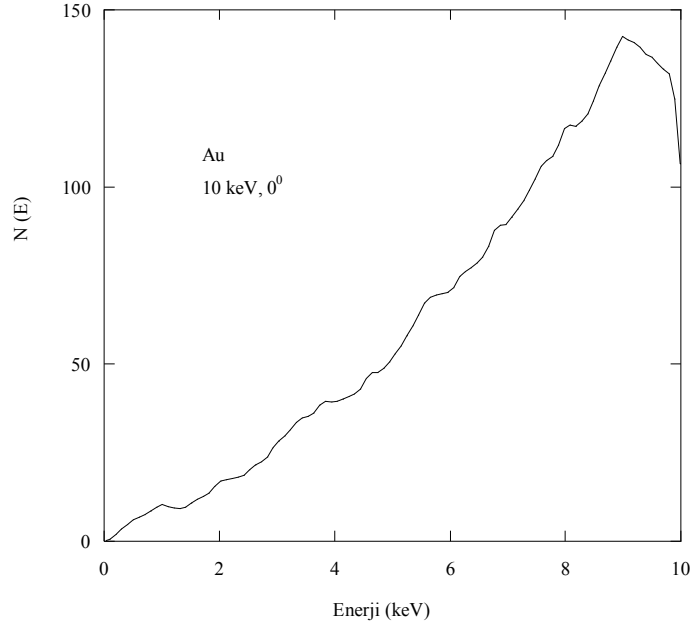
(c)

Şekil 6.2'nin devamı

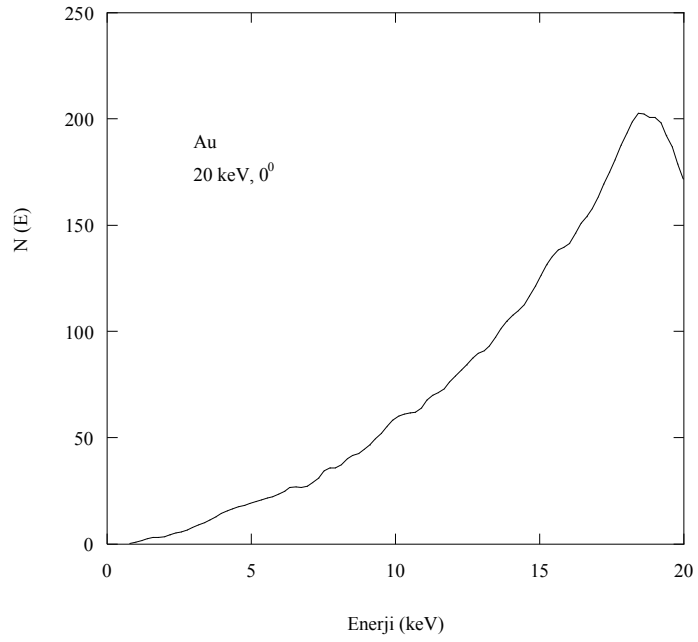


(d)

Altın ortama dik olarak gelen pozitronların enerji dağılımlarına tipik örnekler 10, 20, 40 ve 50 keV enerji değerleri için Şekil 6.3 (a)-(d)'de verilmiştir. Geliş enerjisinin geri saçılan pozitronların enerji dağılımlarına belirgin bir etkisi olmadığı görülmektedir.



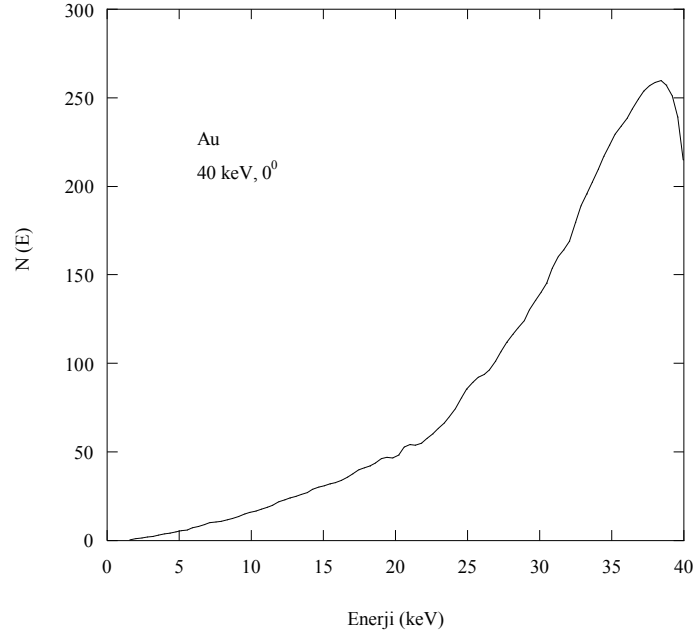
(a)



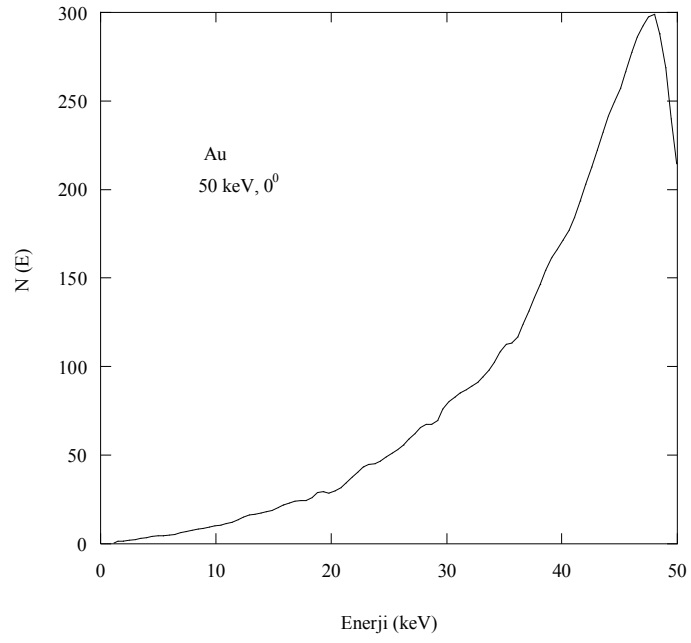
(b)

Şekil 6.3 (a)-(d) Geri saçılan pozitronların enerji dağılımları

Şekil 6.3'ün devamı

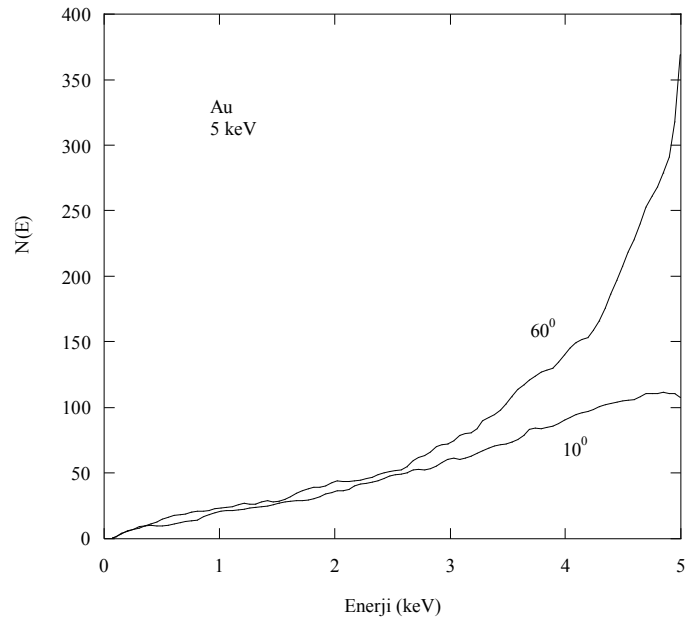


(c)



(d)

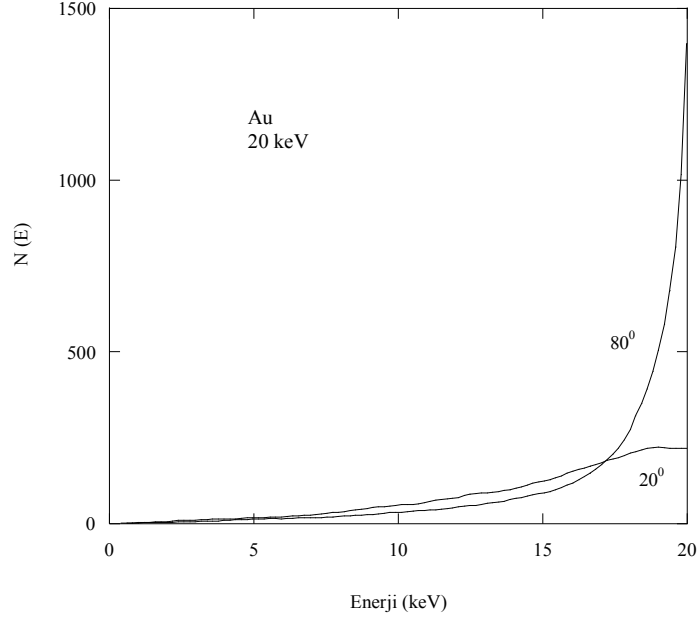
Yarı sonsuz altın ortamdan geri saçılan pozitronların enerji dağılımlarına geliş açısının etkisi de incelenmiş, elde edilen sonuçlara tipik örnekler 5 ve 20 keV geliş enerjileri için sırasıyla Şekil 6.4 (a) ve (b)'de verilmiştir.



(a)

Şekil 6.4 (a)-(b) Pozitronların enerji dağılımlarının geliş açılarına göre değişimi

Şekil 6.4'ün devamı



(b)

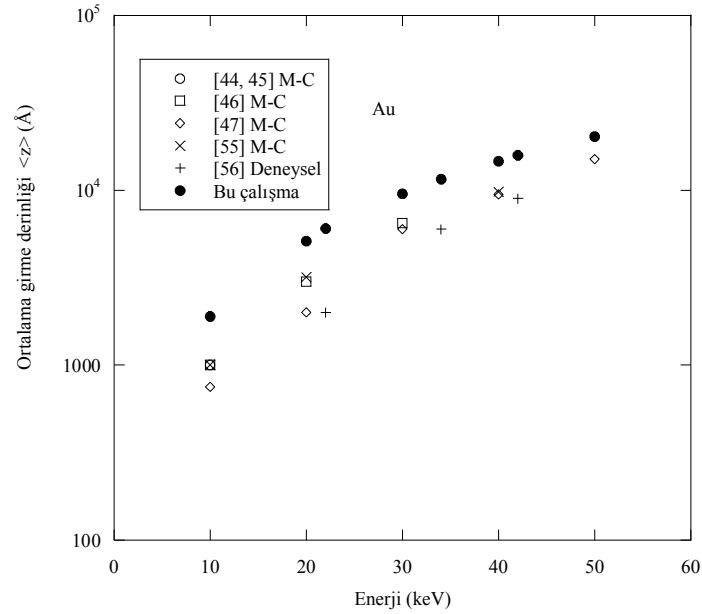
Pozitronların yarı sonsuz altın ortamdan geri saçılmaları ile birlikte menzil dağılımları incelenmiştir. Literatürde pozitronların menzil dağılımları konusunda elektronlara göre daha az sayıda çalışmalara [46, 48] rastlanmaktadır.

Elde edilen menzil dağılımlarından yararlanılarak 10-50 keV enerji aralığında pozitronların ortalama girme derinlikleri hesaplanarak diğer çalışmalar ile birlikte Şekil 6.5'de gösterilmiştir. Hesaplanan menzil dağılımları üzerine Denklem 6.1 ile verilen Makhovian [38, 39] dağılımı fit yapılmıştır. Menzil dağılımları ile ilgili diğer çalışmalarda [52-54] da genellikle Makhovian dağılımı tercih edildiği görülmüştür.

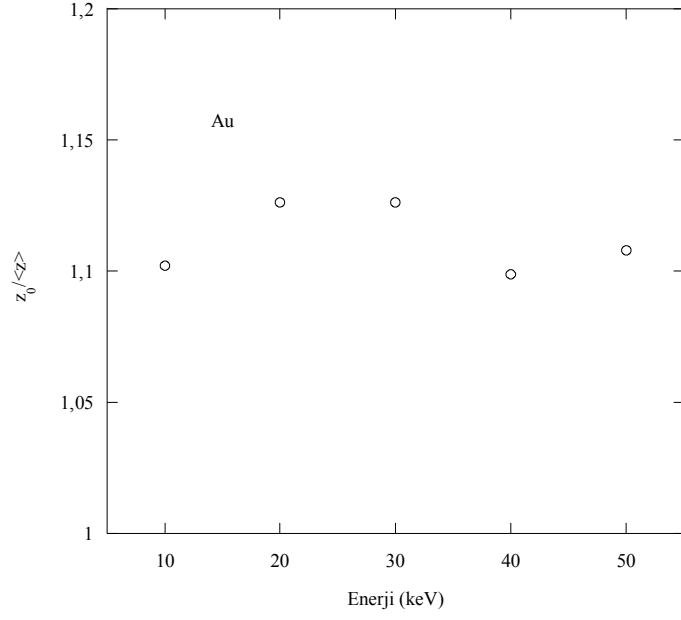
$$P(z) = N(mz^{m-1} / z_0^m) \exp[-(z/z_0)^m] \quad (6.1)$$

Burada N normalizasyon sabiti, z pozitronun girme derinliği z_0 ve m ise enerjiye bağılı parametrelerdir. z_0 parametresinin $\langle z \rangle$ ortalama girme derinliğine oranının enerjiye göre değişimi Şekil 6.6'da ve m parametresinin enerjiye göre değişimi ise Şekil 6.7'de verilmiştir. z_0 ve m parametreleri düşük enerjilerde birbirine yakın sonuçlar vermektedir.

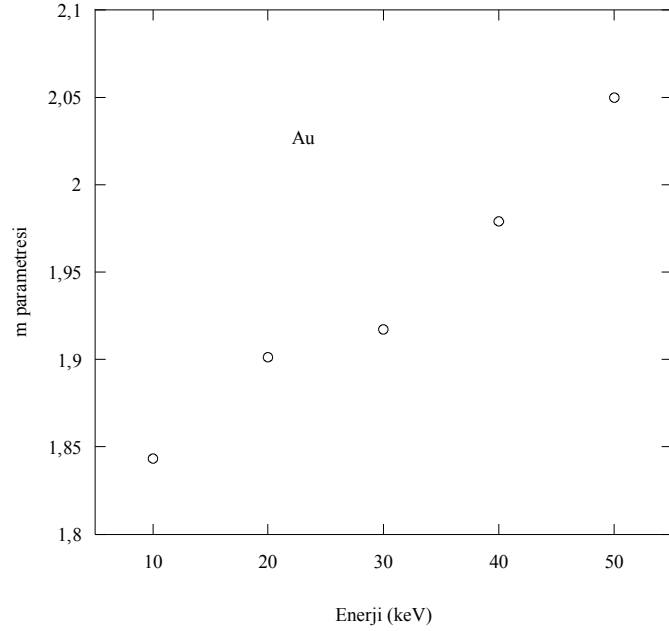
Pozitronların altın ortamda ortalama girme derinlikleri enerjiye bağılı olarak değişim gösterir. Örneğin pozitronların ortalama girme derinliği 10 keV geliş enerjisi için 1902 Å, 50 keV'de ise 20406.5 Å hesaplanmıştır. Hesaplanan ortalama girme derinlikleri 50 keV enerjiye kadar, literatürdeki diğer çalışmalarla karşılaştırılabilmektedir.



Şekil 6.5 Ortalama girme derinliklerinin enerjiye göre değişimleri

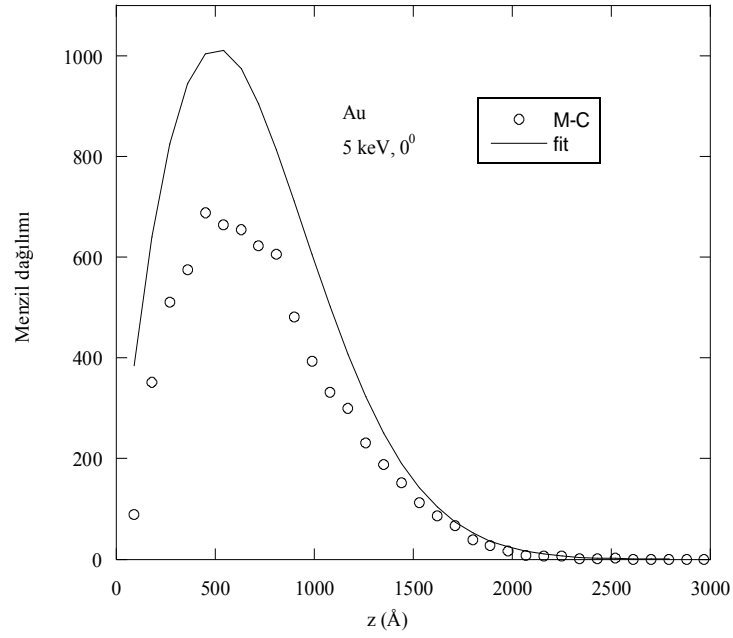


Şekil 6.6 $z_0 / \langle z \rangle$ oranının enerjiye göre değişimi

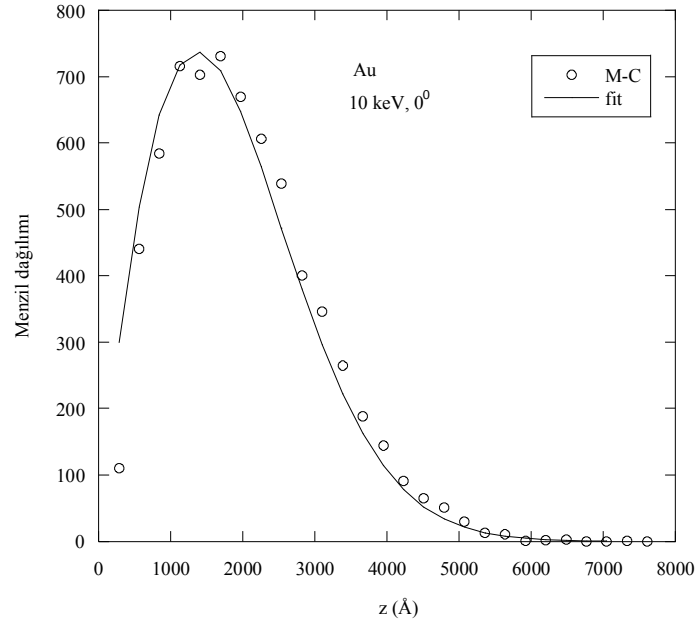


Şekil 6.7 m parametresinin enerjiye göre değişimi

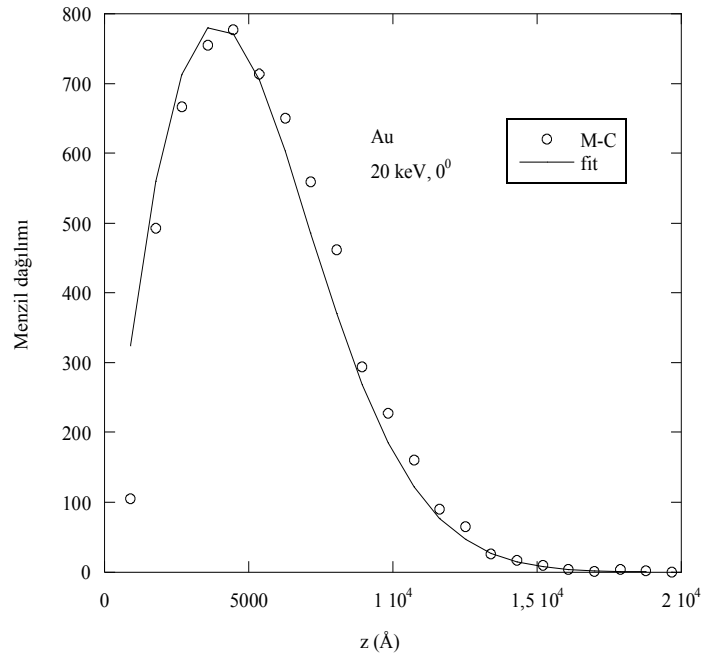
Bu çalışmada pozitronların altın ortamda elde edilen menzil dağılımlarına tipik örnekler Makhovian dağılımı ile birlikte Şekil 6.8-14'te verilmiştir. Makhovian dağılımın 100 keV ve üzeri enerjilerdeki menzil dağılımlarına uymadığı görüldüğünden Şekil 6.13 ve 14'te sadece Monte Carlo sonuçları verilmiştir.



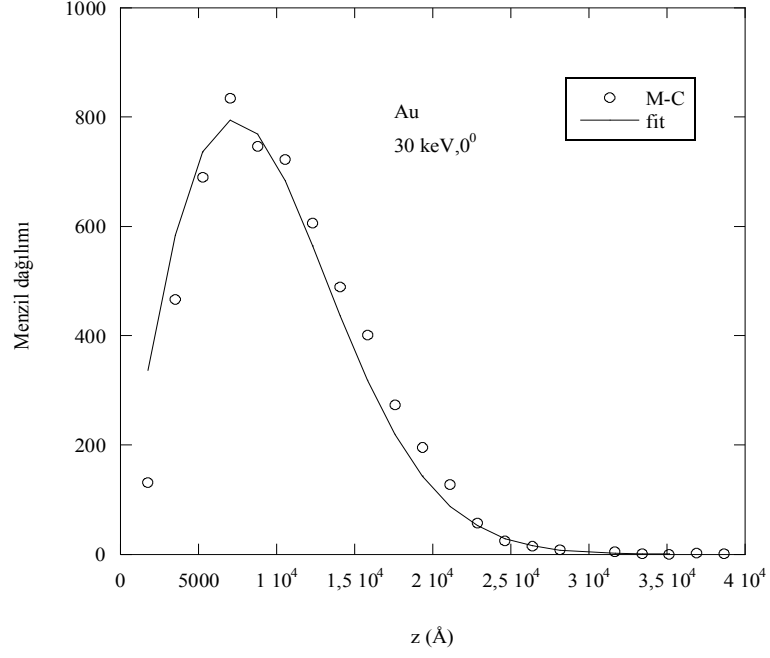
Şekil 6.8 5 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları



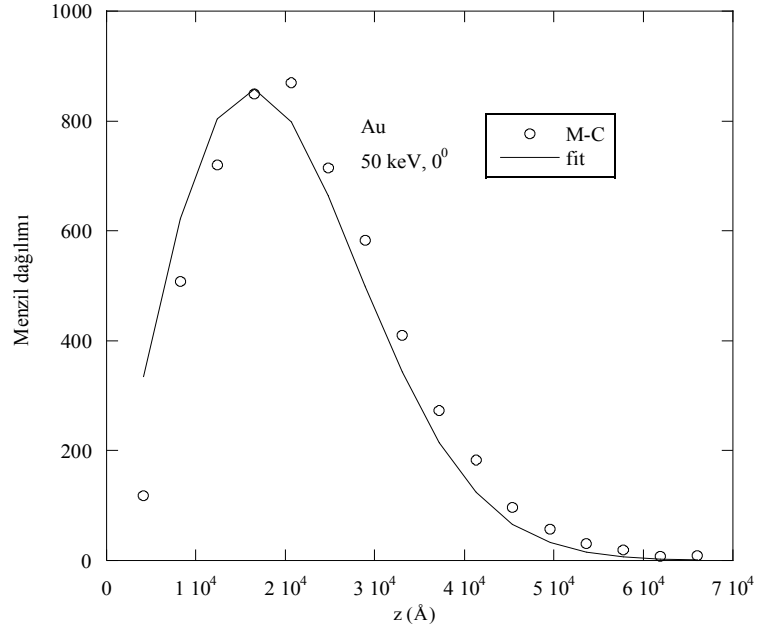
Şekil 6.9 10 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları



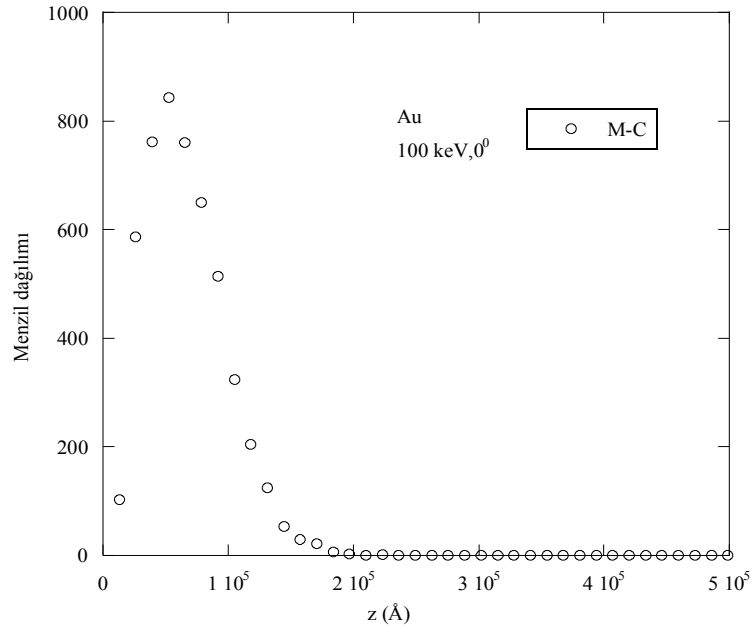
Şekil 6.10 20 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları



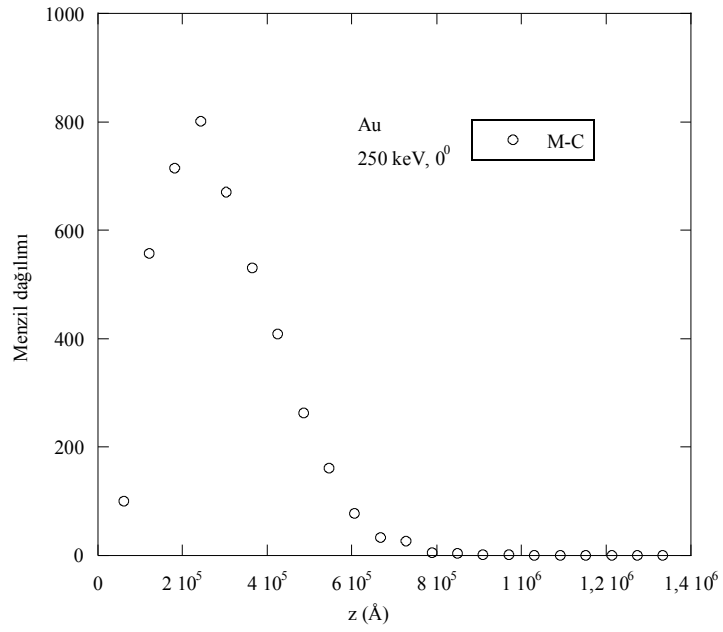
Şekil 6.11 30 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları



Şekil 6.12 50 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları

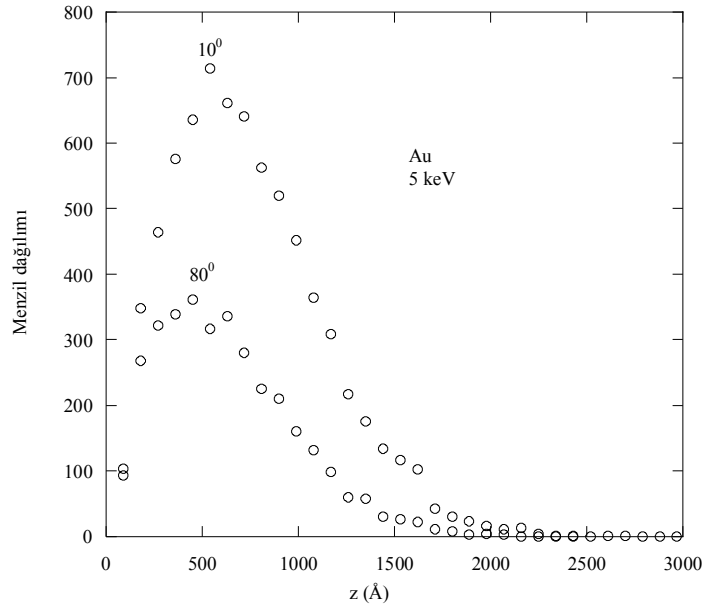


Şekil 6.13 100 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları

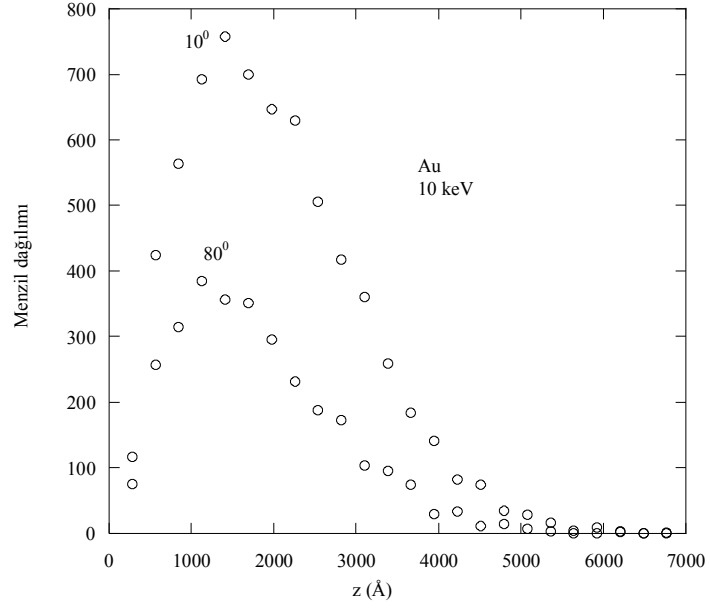


Şekil 6.14 250 keV enerjili pozitronların menzil dağılımları

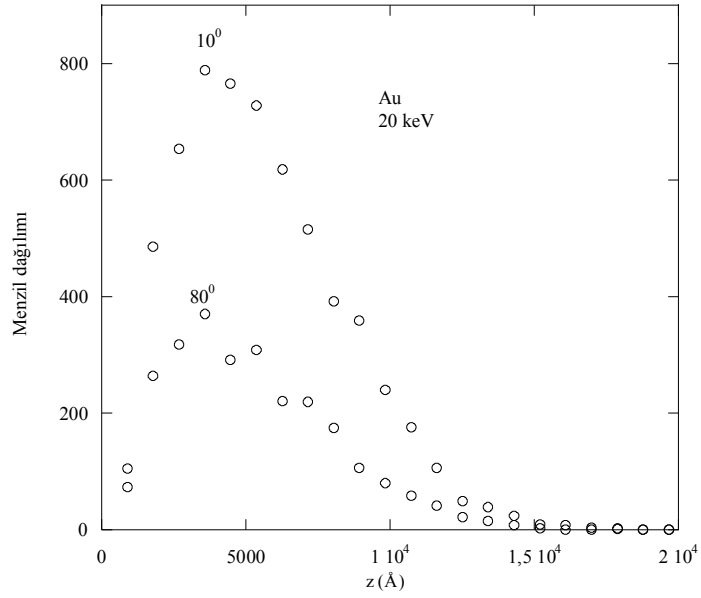
Pozitronların yarı sonsuz altın ortamda menzil dağılımlarının geliş açısına göre değişimleri de incelenmiş ve tipik örnekler Şekil 6.15-20 aralığında verilmiştir. Pozitronların geliş açısına bağlı olarak ortalama girme derinliklerinin etkilendiği görülmektedir. Örneğin 20 keV enerjiyle altın ortama 10^0 ile gelen pozitronların ortalama girme derinliği 5171.5 \AA iken 80^0 ile gelen pozitronların ortalama girme derinliği ise 4796.2 \AA hesaplanmıştır.



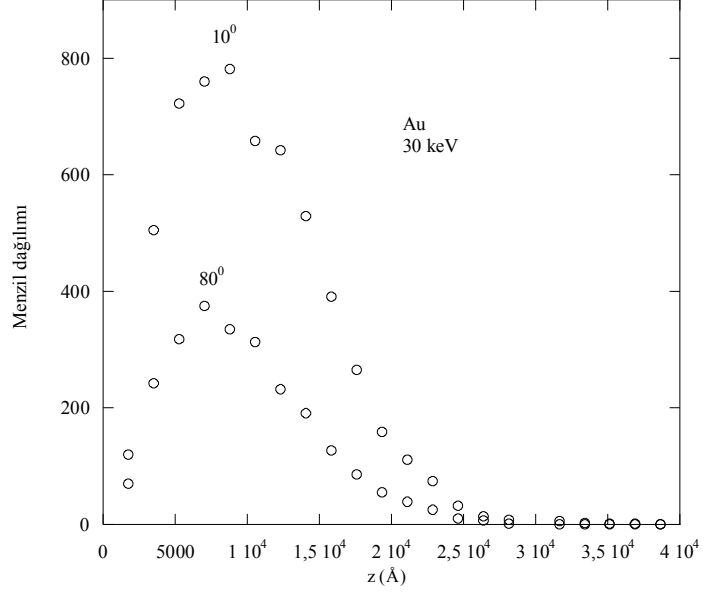
Şekil 6.15 5 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi



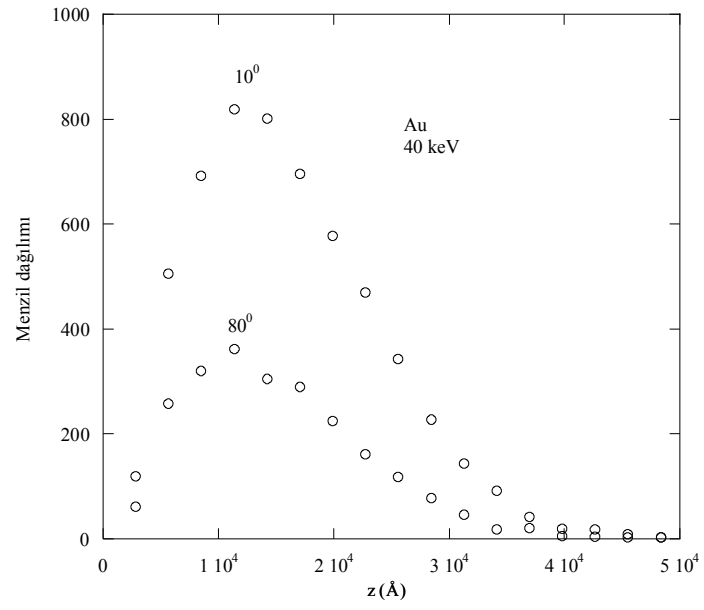
Şekil 6.16 10 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi



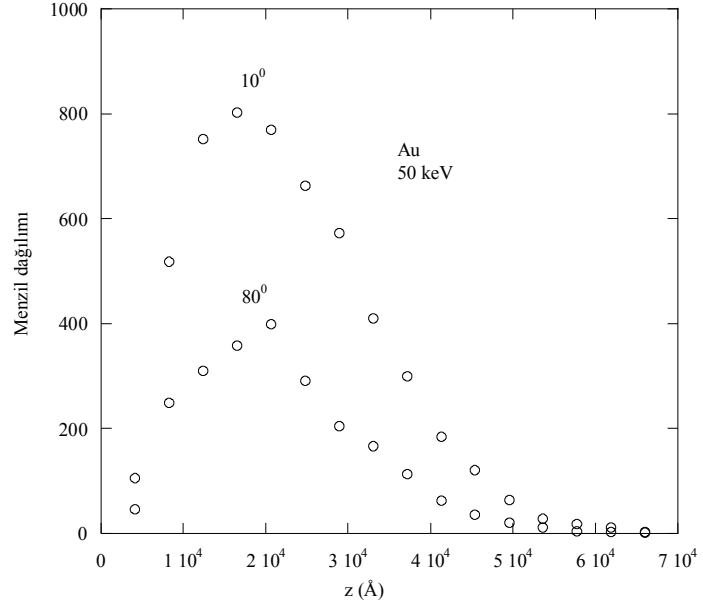
Şekil 6.17 20 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi



Şekil 6.18 30 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi



Şekil 6.19 40 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açığa göre değişimi



Şekil 6.20 50 keV enerjili pozitronların menzil dağılımının açıya göre değişimi

7. SONUÇ

Bu çalışmada, yarı sonsuz altın ortamdan pozitronların menzil dağılımları ile birlikte geri saçılmaları ve enerji dağılımları da incelenmiştir. Bu amaçla hazırlanan Monte Carlo programında tek tek parçacık takibi yapılmış ve akış diyagramı Ek B'de verilmiştir.

Yüklü parçacıklar girdikleri ortamda enerjilerine bağlı olarak çok sayıda saçılma (etkileşme) yaptığından tesir kesitleri dikkatli incelenmelidir. Bu çalışmada toplam tesir kesitleri, esnek saçılma için düşük enerjilerde kısmi dalga açılımı hesaplarından yararlanarak, orta enerjilerde spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford diferansiyel tesir kesiti ve esnek olmayan saçılma için ise Liljequist [33] modeli kullanılarak hesaplanmıştır. Esnek olmayan saçılmada enerji kaybı ise Gryzinski [35-37] modeli yardımıyla hesaplanmıştır. Tesir kesiti ifadeleri belli yaklaşımlar altında elde edilen bağıntılar olduğundan deneysel verilerle tutarlı sonuçlara ulaşabilmek için belli oranlarda düzeltme çarpanları kullanılmıştır. Program içinde ise toplam tesir kesitlerinin çeşitli yaklaşımlarla hesaplanan değerleri üzerine fit yapılarak elde edilen ifadeleri kullanılmıştır. Esnek saçılma perdeleme açısı iyi hesaplanarak açısal dağılım örneklemede iyi bir yaklaşım elde edilebilir. Ayrıca esnek olmayan saçılmada, değerlik elektronları dikkatli ele alınmalıdır.

Bu çalışmada tek tek 10000 parçacık izlenmiştir. Sonuçlardaki hatanın belirlenmesi amacıyla 15 keV enerji ile dik gelen pozitronların geri saçılma olasılığı 20 defa hesaplanarak, sonuçlardaki standart sapma yüzdesi 0.8 bulunmuştur. İzlenen pozitron sayısının yeterli olup olmadığını belirlemek amacıyla 15 keV enerjide geri saçılma olasılığı 20000 parçacık için tekrar hesaplanmıştır. 10000 parçacık izlenerek hesaplanan geri saçılma olasılığı 0.3608 iken 20000 parçacık için ise 0.3618 bulunmuştur.

Geri saçılma olasılıklarının ve ortalama girme derinliklerinin diğere çalışmalarla belli oranlarda uyumlu olmasının nedeni tesir kesiti hesaplarındaki farklılıklardan kaynaklanmaktadır. Monte Carlo programında kullanılan tesir kesiti ifadelerinin hassasiyeti diğere deneysel ve teorik sonuçlarla uyumun artmasını sağlar.

Yüklü parçacık madde etkileşmelerinin fiziksel mekanizmasının iyi anlaşılması nükleer tıp, yüzey fiziğı, mikro elektronik, vb. birçok alanda çok önemli rol oynar ve bu konuda gelişmeler sürecektir.

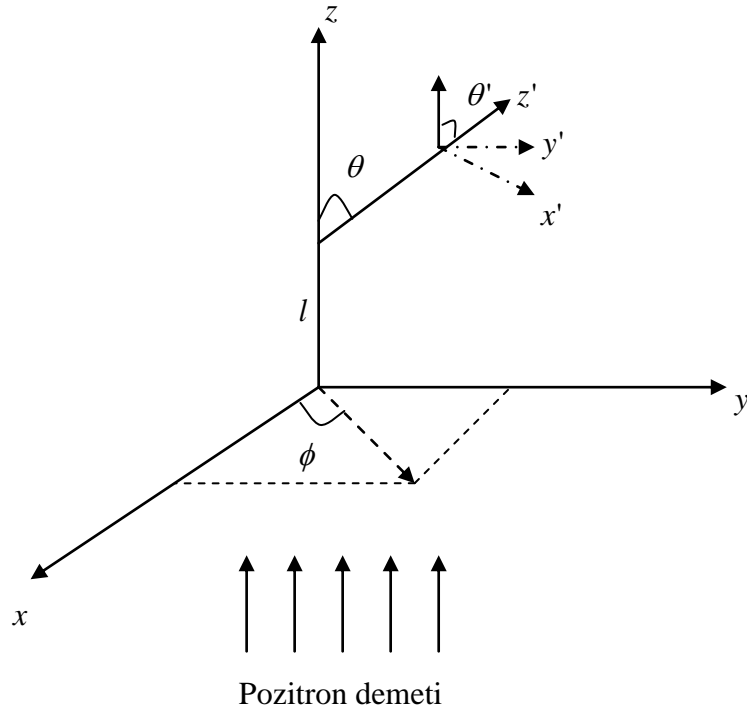
EKLER

EK A Koordinat Dönüşümü

Koordinat düzlemi (x,y,z) olan hedefe gelen yüklü parçacık, z eksenine doğrultusunda l serbest yolunu gittikten sonra $(0,0,l)$ noktasında etkileşme yapar. Esnek ya da esnek olmayan saçılan pozitronun doğrultusunu belirlemek için, saçılma açıları olan θ , ϕ 'ya bağlı olarak doğrultman kosinüsleri,

$$\begin{aligned}\alpha &= \sin \theta \cos \phi \\ \beta &= \sin \theta \sin \phi \\ \gamma &= \cos \theta\end{aligned}\tag{A.1}$$

dir.



Şekil A.1 Pozitron takibi

Pozitron l serbest yolunu aldıktan sonra (α, β, γ) doğrultusunda yol alır. Pozitronun etkileşme türü örneklendikten sonra, yeni hareket doğrultusu belirlenir.

x', y', z' koordinat sisteminde birim vektörler,

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

şeklindedir. x', y', z' koordinat sisteminden x, y, z koordinat sistemine geçmek için,

$$\begin{pmatrix} \vec{i} \\ \vec{j} \\ \vec{k} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \vec{i}' \\ \vec{j}' \\ \vec{k}' \end{pmatrix}\tag{A.3}$$

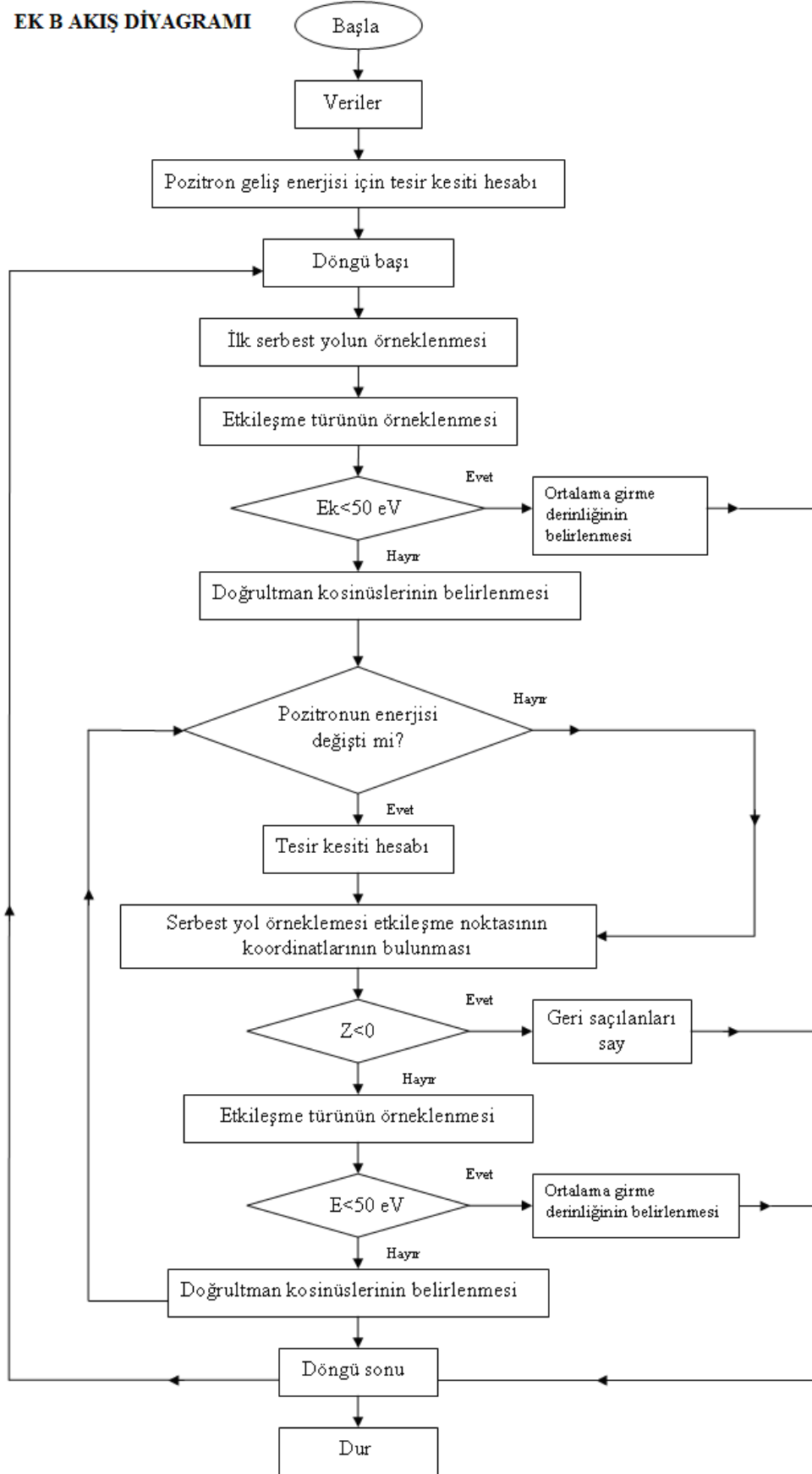
$$T = \begin{pmatrix} \alpha\gamma/\sqrt{1-\gamma^2} & -\beta/\sqrt{1-\gamma^2} & \alpha \\ \gamma\beta/\sqrt{1-\gamma^2} & \alpha/\sqrt{1-\gamma^2} & \beta \\ -\sqrt{1-\gamma^2} & 0 & \gamma \end{pmatrix}\tag{A.4}$$

dönüşüm matrisi kullanılmıştır. Pozitronun ikinci etkileşme noktasının koordinatları,

$$\begin{aligned}x_2 &= x_1 + l'\alpha \\ y_2 &= y_1 + l'\beta \\ z_2 &= z_1 + l'\gamma\end{aligned}\tag{A.5}$$

eşitlikleri yardımıyla belirlenir.

EK B AKIŞ DİYAGRAMI



KAYNAKÇA

- [1] Tufan, M.Ç., “Yüklü parçacıklar için bazı bileşiklerin durdurma gücü hesaplamaları”, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Samsun, (2007).
- [2] Aydın, A., “Yüklü parçacıkların metallerde enerji dağılımları”, *Tübav bilim*, **2/1**, (1992).
- [3] http://tr.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_benzetimi (Son erişim tarihi 27.06.2011).
- [4] Tavukçu, D., “Monte Carlo yönteminin sayısal integrallere ve elektromanyetik denklem integrallerine uygulanması”, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Elektronik ve Haberleşme Mühendisliği Anabilim Dalı, İstanbul, (2000).
- [5] Press, W.H., Numerical Recipes, Cambridge University Press, New York (1986).
- [6] www.asafvarol.com/dnotlar/mkt101/019.pptx (Son erişim tarihi 27.06.2011).
- [7] Akar, A., “Bazı biyolojik materyallerden enerji transferi ve durdurma gücü”, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Samsun, (2005).
- [8] Heitler, W., The quantum theory of radiation, Clarendon Press, Oxford, (1954) 268.
- [9] Evans, R.D., The atomic nucleus, Mc-Graw-Hill, (1955) 567.
- [10] http://home.uludag.edu.tr/users/kaynak/images/tesir_kesiti.pdf (Son erişim tarihi 27.06.2011).
- [11] Yaramış, B., Nükleer Fizik, Cilt 1, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, İstanbul, (1985) 168.
- [12] Tanyel, B., Nükleer Fizik, Ege Üniversitesi Fen Fakültesi ders kitapları serisi, İzmir, **139**, (1994) 210.

- [13] Krane, K.S., *Introductory Nuclear Physics*, John Wiley and Sons, New York, (1988) 378.
- [14] Kürkçüoğlu, M.E., “ $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ esnek saçılmasının fenomenolojik ve mikroskopik potansiyeller ile optik model analizleri”, Doktora Tezi, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Zonguldak, (2006).
- [15] Öztürk, N., Williamson, W.Jr. and Antolak, A.J., ”Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Bound Gallium and Arsenic Atoms”, *J. Appl. Phys.*, **70**, (1991) 537.
- [16] Chaoui, Z., ”A simplified positron elastic scattering model for Monte Carlo calculations”, *J. Phys. Condens. Matter.*, **18**, (2006) 10303.
- [17] Seltzer, S.M., “Electron-Photon Monte Carlo Calculations: The ETRAN Code”, *Appl. Radiat. Isot.*, **42**, (1991) 917.
- [18] Yalçın, S., Gurler, O., Gultekin, A., Gundoğdu O., ”An analytical expression for electron elastic scattering cross section from atoms and molecules in 1.0 keV to 1.0 MeV energy range”, *Phys.Letters, A* **356**, (2006) 138.
- [19] Alexander, S.P. and John, R.F., ”An accurate approximation for the highly efficient sampling of polar scattering angle of electron elastic single-scattering events”, *Scanning*, **28/6**, (2006) 333.
- [20] Legarda, F. and Idoeta, R., “Monte Carlo transport of electrons and positrons through thin foils”, *Radiat. Phys. and Chem.*, **61**, (2001) 549.
- [21] Dapor, M., ”Monte Carlo simulation of the interaction of electrons with supported and unsupported thin films”, *Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res.*, **B 202**, (2003) 155.
- [22] Nigam, B.P. and Mathur, V.S., ”Difference in the Multiple Scattering of Electrons and Positrons”, *Phys. Rev.*, **121**, (1961) 1577.
- [23] Nigam, B.P., Sundareson, M.K. and Ta You Wu, “Theory of Multiple Scattering Second Born Approximation and Corrections to Moliere’s Work” *Phys. Rev.*, **115**, (1959) 491.

- [24] Idoeta, R. and Legarda, F., "Review and Calculation of Mott Scattering Cross Section by Unscreened Point Nuclei", *Nucl. Instrum. Meth.*, B **71**, (1992) 116.
- [25] Doggett, J.A. and Spencer, L.V., "Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Point Nuclei", *Phys. Rev.*, **103/6**, (1956) 1597.
- [26] Bentabet, A. and Bouarissa, N., "Electrons impinging on solid targets: An approximation of the differential elastic scattering cross section", *Phys. Letters A* **355**, (2006) 390.
- [27] Ghosh, J.V. and Aers, G.C., "Positron stopping in elemental systems: Monte Carlo calculations and scaling properties", *Phys. Rev.*, B **51**, (1995) 187.
- [28] Fano, U., "Penetration of protons, alpha particles and mesons." *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **13**, (1963) 1.
- [29] Bethe, H., "Zur Theorie des Durchgangs Schneller Korpuskularstrahler durch materie.", *Ann. Phys.*, **5**, (1930) 325.
- [30] Lindhard, J. and Scharff M., "Energy dissipation by Ions in the keV Region.", *Phys. Rev.*, **124**, (1961) 128.
- [31] Firsov, O.B., "A Qualitative Interpretation of the Mean Electron Excitation Energy in Atomic Collisions", *J. Exptl. Theoret. Phys., U.S.S.R.*, **36**, (1959) 1076.
- [32] Bohr, N., "The Penetration of Atomic Particles through Matter", *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid.*, **18**, (1948) 1.
- [33] 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**, (1983) 1567.
- [34] Lindhard, J., "On the Properties of a Gas of Charged Particles", *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **28/8**, (1954) 1.
- [35] Gryzinski, M., "Two-particle collisions. Part I: General relations for collisions in the laboratory system", *Phys. Rev.*, A **138**, (1965a) 305.
- [36] Gryzinski, M., "Two-particle collisions. Part II: Coloumb collisions in the laboratory system of co-ordinates", *Phys. Rev.*, A **138**, (1965b) 322.

- [37] Gryzinski, M., "Classical theory of atomic collisions.Part I: Theory of inelastic collisions", *Phys. Rev., A* **138**, (1965a) 336.
- [38] Valkealahti, S. and Nieminen, R.M., "Monte-Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids", *Appl. Phys., A* **32**, (1983a) 95.
- [39] Valkealahti, S. and Nieminen, R.M., "Monte Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids.II", *Appl. Phys., A* **35**, (1984b) 51 .
- [40] Chaoui, Z. and Bouarissa, N., "Positron and electron backscattering from elemental solids in the 1–10 keV energy range", *J. Phys. Condens. Matter*, **16**, (2004) 799.
- [41] Coleman, P.G., Albrecht, L., Jensen, K.O. and Walker, A.B., "Positron backscattering from elemental solids", *J. Phys. Condens. Matter*, **4**, (1992) 10311.
- [42] Chaoui, Z., "Analytic simulation of the backscattering of hundreds eV positrons from elemental solids", *Appl. Surf. Sci.*, **252/9**, (2006) 3362.
- [43] Bentabet, A. and Fenineche, N.E., "Backscattering coefficients for low energy electrons and positrons impinging on metallic thin films:scaling study", *Appl. Phys., A* **97**, (2009) 425.
- [44] Ritley, K.A., McKeown, M., and Lynn, K.G., "Positron beams for solid and surfaces, Eds. Schultz, P.J., Massoumi G. and Simpson, P.J. AIP, New York, (1990) 3.
- [45] Ghosh, V.J., Positron spectroscopy in solids, Proc. of the international school of physics enrico fermi, Course CXXXV, (1995)
- [46] Jensen, K.O. and Walker, A.B., "Monte-Carlo simulation of the transport of fast electrons and positrons in solids", *Surf. Sci.*, **292**, (1993) 83.
- [47] Aydın, A., "Monte-Carlo calculations of positron implantation profiles in silver and gold", *Radiat. Phys. and Chem.*, **59**, (2000) 277.

- [48] Jensen, K.O., Walker, A.B. and Bouarissa, N., “Positron beams for solids and surfaces”, In: Schultz, P.J., Massoumi, G.R., Simpson, P.J. (Eds.), *AIP Conf. Proc.*, No. 218. AIP, New York, (1990) 19.
- [49] Mäkinen, J., Palko, S., Martikainen, J. and Hautojärvi, P., “Positron backscattering probabilities from solid surfaces at 2-30 keV”, *J. Phys. Condens. Matter*, **4**, (1992) 503.
- [50] Aydın, A., “Monte Carlo calculations of positron implantation profiles and backscattering probabilities in gold”, *Nukleonika*, **46/3**, (2001) 1.
- [51] Liljequist, D., “Escape probability of low energy electrons and positrons emitted in random directions beneath a plane solid surface”, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.*, B **142**, (1998) 295.
- [52] Jerzy, D. and Paweł, H., “Positron implantation profiles in layered samples”, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.*, B **267**, (2009) 3580.
- [53] Fujinami, M., Miyagoe, T., Sawada, T. and Akahane, T., “Improved depth profiling with slow positrons of ion implantation-induced damage in silicon”, *J. Appl. Phys.*, **94/7**, (2003) 4382.
- [54] Jerzy, D. and Paweł, H., “GEANT4 simulation of slow positron beam implantation profiles”, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.*, B **266**, (2008) 4000.
- [55] Aers, G.C., “Positron stopping profiles in multilayered systems”, *J. Appl. Phys.*, **76/3**, (1994) 1622.
- [56] Baker, A.J., Chilton, N.B., Jensen, K.O., Walker, A.B. and Coleman, P.G., “Material dependence of positron implantation depth”, *Appl. Phys. Lett.*, **59/23**, (1991) 2962.