

T.C.  
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI BİYOLOJİK MATERYALLERDE ENERJİ TRANSFERİ  
VE  
DURDURMA GÜCÜ

AYŞEGÜL AKAR

DOKTORA TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN  
PROF. DR. HASAN GÜMÜŞ

SAMSUN-2005

T.C.  
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Bu çalışma jürimiz tarafından ...../...../..... tarihinde yapılan sınav ile Fizik Anabilim Dalı'nda DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan :

Üye :

Üye :

Üye :

Üye :

ONAY :

Yukarıdaki bilgilerin adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylım.

...../...../.....

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

## BAZI BİYOLOJİK MATERYALLERDE ENERJİ TRANSFERİ VE DURDURMA GÜCÜ

### ÖZET

Bu çalışmada, 20 eV-1 MeV enerji aralığında gelen elektronlar için bazı biyolojik materyallerdeki durdurma gücü (SP), ortalama serbest yol (MFP), straggling ve sürekli yavaşlama yaklaşımı (CSDA)-menzili değerlerinin hesaplanmasını sağlayan bir yöntem geliştirildi. Bunun için önce, Inokuti tarafından verilen inelastik diferansiyel tesir kesiti ifadesinde, genelleştirilmiş osilatör şiddeti (GOS) modeli kullanıldı ve değiş-tokuş düzeltmesi uygulandı. Sonra, K kabuğu osilatör şiddeti, valans kabuğu kısmi iyonlaşma potansiyeli (PMIP) ve yarı deneysel ayarlanabilir çarpan  $a$  hesaplandı. Söz konusu hesaplarda kullanılan optik osilatör şiddeti (OOS) nin doğruluğu a) Bethe-toplama kuralı ( $f$ -toplamı), b) ortalama uyarma enerjisi (MIE) değerleri yarı-deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılarak kontrol edildi.

Bu çalışmada ortaya konan hesaplama yöntemine uygun olarak, elektronların düşük atom numaralı H, C, N, O gibi hedeflerdeki ve bazı biyolojik maddelerdeki durdurma gücü, ortalama serbest yol ve straggling değerlerini ve durdurma gücü değerlerinden menzili hesaplayabilen bir bilgisayar programı geliştirildi. Çalışmada ayrıca, DNA molekülleri (sitizo-guanin ve timin-adenin), adenin, guanin, sitozin, timin gibi biyolojik hedeflere, 20 eV-1 MeV enerji aralığında gelen elektronlar için, i) durdurma gücü ii) ortalama serbest yol, iii) CSDA-menzili değerleri elde edildi. Elde edilen bu sonuçlar, literatürdeki deneysel ve teorik sonuçlarla ve NEA dan sağlanan PENELOPE programı sonuçları ile karşılaştırıldı. Tez sonuçlarının, diğer teorik ve deneysel sonuçlarla ve PENELOPE programı sonuçları ile iyi uyduğu ve düşük enerjilerde (< 500 eV) ortalama serbest yol ve CSDA menzili sonuçlarının deneysel verilerle PENELOPE programı sonuçlarından daha iyi uyduğu görüldü.

**Keywords:** Elektron durdurma gücü, Elektron ortalama serbest yol, Elektron CSDA-menzili, Genelleştirilmiş osilatör şiddeti (GOS), Değiş-tokuş düzeltmesi, Bragg toplama kuralı.

\* Bu program OECD NEA Komputer Program Servisi ([www.nea.fr](http://www.nea.fr)) tarafından sağlanmıştır.

## ENERGY TRANSFER AND STOPPING POWER ON SOME BIOLOGICAL MATERIALS

### ABSTRACT

In this study, a method to calculate the stopping power (SP), the mean free path (MFP), the straggling and the continuous slowing down approximation (CSDA) range in biological material for incident electrons with the energy in the 20 eV-1 MeV energy range are improved. For this aim, firstly, the generalized oscillator strengths (GOS) model are used in the inelastic differential cross section (IDCS) given by Inokuti (1971), and exchange expression is included the IDCS obtained. Then, K shell oscillator strength, valence shell partial mean ionization potential (PMIP) and the semi-empirical adjustment factor  $a$  are calculated. The consistency of the optical oscillator strengths (OOS) have used in this calculations, are checked by a) the Bethe sum rule,  $f - sum$ , and b) the values of the mean ionization energy (MIE),  $I$ , comparing with experimental data and theoretical results.

According to the improved calculation method in this study, a computer program to calculate the stopping power, the mean free path and the straggling and the CSDA-range has been developed for incident electrons in low atomic number targets, such as H, C, N, O, and some biological materials. In addition, for biological targets such as DNA molecules (cytosine-guanine, thymine-adenine), adenine, guanine, cytosine, thymine: i) the stopping power, ii) the mean free path and CSDA-range, are also calculated for incident electrons in 20 eV- 1 MeV energy range. The obtained this results are compared with experimental data and theoretical results in literature and PENELOPE code\* results provided from the NEA. It is shown that the results of the thesis agree well with experimental data, theoretical results and PENELOPE code\* results and results of the mean free path and the CSDA-range agree well with experimental data better than PENELOPE code\* results for low energies (< 500 eV).

**Keywords:** Electron stopping power, mean free path, generalized oscillator strength, CSDA-range, exchange correction, Bragg's rule.

\*This program was provided by OECD NEA Computer Program Service ([www.nea.fr](http://www.nea.fr)).

## TEŞEKKÜR

Doktora çalışmalarım sırasında, yardımlarını, zamanını ve hoşgörüsünü hiçbir zaman eksik etmeyen, çalışmalarımın her aşamasında değerli önerileri ile beni yönlendiren Tez Danışmanım Sayın Prof. Dr. Hasan GÜMÜŞ'e teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmamda kullandığım PENELOPE programının NEA tarafından temininde ve tez çalışmalarım sırasında bilimsel açıdan engin bilgi ve yardımlarını esirgemeyen, saygı değer hocam Prof. Dr. Nazmi Turan OKUMUŞOĞLU'na teşekkürü bir borç bilirim.

Çalışmalarımda bana gerek manevi, gerekse bilimsel açıdan katkılarını esirgemeyen, akademik çalışmalarım süresince her karşılaştığım zorlukta elimden tutarak bir adım ileriye gitmemi sağlayan, engin bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım, Prof. Dr. Tarık BAŞOĞLU'na teşekkür ederim.

NEA'ya ve F. Salvat ve arkadaşlarına PENELOPE programını sağladıkları için özel olarak teşekkür ederim.

Doktora dersleri aldığım Fen-Edebiyat fakültesi Fizik bölümündeki öğretim üyelerine ve bugüne gelene kadar üzerimde emeği olan tüm öğretmenlerime ve öğretim üyelerine şükranlarımı sunmayı bir borç bilirim.

Beni yetiştiren anneme ve babama, çalışmalarım süresince, her türlü konuda desteğini esirgemeyen ve onlara ayırmam gereken zamanın büyük bir bölümünü çalışmalarımaya ayırmamı anlayışla karşılayan eşim Ayhan AKAR'a ve ailemin diğer üyelerine de sonsuz şükranlarımı sunarım.

## İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET .....	iii
ABSTRACT .....	iv
TEŞEKKÜR .....	v
İÇİNDEKİLER .....	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ .....	viii
TABLolar LİSTESİ .....	x
1. GİRİŞ .....	1
2. GENEL BİLGİLER .....	5
2.1. Elektronların Madde İle Etkileşmesi .....	5
2.1.1. Atomlarla Elastik Saçılma .....	7
2.1.2. Atomik Elektronlarla İnelastik Saçılma .....	7
2.1.3. Frenleme Işınımı (Bremsstrahlung) .....	8
2.1.4. Cherenkov Işınımı .....	9
2.2. Enerji kaybı ve Saçılma Teorisi .....	10
2.2.1. Diferansiyel Tesir Kesiti ve Toplam Tesir Kesiti .....	11
2.2.2. Saçılma Genliği .....	12
2.2.3. Merkezci Alandan Saçılma ve Born Yaklaşımı .....	16
2.2.4. Hızlı Parçacıklar ile Atomlar Arasındaki İnelastik Çarpışmalar .....	19
2.2.5. İnelastik Çarpışmalar-Temel Formül .....	21
2.2.6. Genelleştirilmiş Geçiş İhtimalleri ve Osilatör Şiddeti .....	24
2.2.7. Genelleştirilmiş Osilatör Şiddeti (GOS), Optiksel Veriden GOS un Oluşturulması ve Optiksel Osilatör Şiddeti (OOS) .....	27
2.2.7.1. GOS için Toplama Kuralı.....	29
2.2.7.2. Ortalama Uyarma Enerjisi, $I$ .....	30
2.3. Elektronların Enerji Kaybı ve Durdurma Ortamını Karakterize Eden Nicelikler .....	32

	<b><u>Sayfa</u></b>
2.4. Bileşikte Enerji Kaybı-Bragg Toplama Kuralı .....	35
3. MATERYAL VE METOD .....	37
3.1. Programın Temini ve Hazırlanması .....	37
3.2. İnelastik Etkileşim Karakteristiklerinin Hesaplanmasında	
Kullanılan Niceliklerin Elde Edilmesi .....	42
3.2.1. Optiksel Osilatör Şiddeti-OOS, Kısmi İyonlaşma	
Potansiyeli ve Ortalama İyonlaşma Enerjisinin	
Hesaplanması .....	42
3.2.2. Değiş-tokuş Etkileşme Çarpanı .....	47
4. BİYOLOJİK MATERYALLERDE İNELASTİK ETKİLEŞİM	
KARAKTERİSTİKLERİNİN HESAPLANMASI .....	49
4.1. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin Durdurma	
Gücünün Hesabı .....	49
4.2. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin İnelastik Tesir	
Kesiti ve İnelastik Ortalama Serbest Yol Hesabı .....	51
4.3. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin Menzil ve	
Stragglıng'ın Hesaplanması .....	52
5. BULGULAR VE TARTIŞMA .....	53
5.1. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin Durdurma	
Gücü Sonuçları .....	53
5.2. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin Ortalama	
Serbest Yol Sonuçları .....	63
5.3. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin Menzil	
Sonuçları .....	68
6. SONUÇ VE ÖNERİLER .....	81
KAYNAKLAR .....	84
EKLER .....	93
A.Sayısal İntegrasyon-Yamuk Kuralı (Trapezoidal Rule).....	93
B. PENELOPE 2003 Kodu Tables.dat Örnek Çıktı Dosyası.....	95

C. Bilgisayar Programının Örnek Girdi ve Çıktı Dosyası.....	101
Özgeçmiş.....	115

## ŞEKİLLER LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
<b>Şekil 2.1.</b> Bir atomla hızlı elektronun etkileşmesi .....	6
<b>Şekil 2.2.</b> İnelastik çarpışmada belirli bir E enerji kaybı durumunda olası momentum transferi için vektör diyagramı .....	6
<b>Şekil 2.3.</b> Elastik saçılma olayı .....	7
<b>Şekil 2.4.</b> İnelastik saçılma olayı .....	8
<b>Şekil 2.5.</b> Frenleme olayı .....	9
<b>Şekil 2.6.</b> Cherenkov olayı .....	10
<b>Şekil 2.7.</b> Saçılma olayı .....	11
<b>Şekil 2.8.</b> Gelen ve saçılan parçacıkların birim zamanda kapladıkları hacimler .....	14
<b>Şekil 2.9.</b> Tesir kesiti ve demet şiddeti arasındaki ilişki .....	33
<b>Şekil 3.1.</b> PENELOPE 2001 Penelope.f alt programı veri giriş dosyası .	38
<b>Şekil 3.2.</b> PENELOPE 2003 material.f alt programı veri giriş dosyası ...	39
<b>Şekil 3.3.</b> İnelastik ortalama serbest yol için PENELOPE 2003 tables.f alt programı veri giriş dosyası .....	40
<b>Şekil 3.4.</b> Menzil hesabı için PENELOPE 2003 tables.f alt programı veri giriş dosyası .....	41
<b>Şekil 3.5.</b> Azot için PENELOPE 2001 Penelope.f alt programı veri giriş dosyası .....	41
<b>Şekil 5.1.</b> C da elektronun kinetik enerjisine göre $S(E)/r$ , CSP, değerleri .....	54
<b>Şekil 5.2.</b> H ve N de elektronun kinetik enerjisine göre $S(E)/r$ , CSP, değerleri.....	55
<b>Şekil 5.3.</b> O da elektronun kinetik enerjisine göre $S(E)/r$ , CSP, değerleri .....	56
<b>Şekil 5.4.</b> P de elektronun kinetik enerjisine göre $S(E)/r$ , CSP, değerleri.....	57
<b>Şekil 5.5.</b> H <sub>2</sub> O da elektronun kinetik enerjisine göre $S(E)/r$ , CSP, değerleri .....	58

	<b><u>Sayfa</u></b>
<b>Şekil 5.6.</b> C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O da elektronun kinetik enerjisine göre S(E)/ r , CSP, değerleri .....	59
<b>Şekil 5.7.</b> C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> de elektronun kinetik enerjisine göre S(E)/ r , CSP, değerleri .....	61
<b>Şekil 5.8.</b> C <sub>20</sub> H <sub>27</sub> N <sub>7</sub> O <sub>13</sub> P <sub>2</sub> -DNA da elektronun kinetik enerjisine göre S(E)/ r , CSP, değerleri .....	62
<b>Şekil 5.9.</b> Be de Elektronun Kinetik Enerjisine Göre Ortalama Serbest Yol, I(E) Değerleri .....	63
<b>Şekil 5.10.</b> C de Elektronun Kinetik Enerjisine Göre Ortalama Serbest Yol, I(E) Değerleri.....	64
<b>Şekil 5.11.</b> H <sub>2</sub> O da Elektronun Kinetik Enerjisine Göre Ortalama Serbest Yol, I(E) Değerleri .....	65
<b>Şekil 5.12.</b> C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O da Elektronun Kinetik Enerjisine Göre Ortalama Serbest Yol, I(E) Değerleri .....	66
<b>Şekil 5.13.</b> C <sub>20</sub> H <sub>27</sub> N <sub>7</sub> O <sub>13</sub> P <sub>2</sub> -DNA da Elektronun Kinetik Enerjisine Göre Ortalama Serbest Yol, I(E) Değerleri .....	67
<b>Şekil 5.14.</b> C de Elektronun Kinetik Enerjisine Göre CSDA Menzil, R(E) Değerleri .....	68
<b>Şekil 5.15.</b> H <sub>2</sub> O da Elektronun Kinetik Enerjisine Göre CSDA Menzil, R(E) Değerleri .....	69
<b>Şekil 5.16.</b> C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O da Elektronun Kinetik Enerjisine Göre CSDA Menzil, R(E) Değerleri .....	70
<b>Şekil 5.17.</b> C <sub>20</sub> H <sub>27</sub> N <sub>7</sub> O <sub>13</sub> P <sub>2</sub> -DNA da Elektronun Kinetik Enerjisine Göre CSDA Menzil, R(E) Değerleri .....	72

## TABLOLAR LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
<b>Tablo 2.1.</b> Teoriksel ve Yarı Deneysel Yöntemler İle Elde Edilen Ortalama Uyarma Enerjisi Değerleri .....	31
<b>Tablo 3.1.</b> Sternhimer Ayarlanabilir Çarpan, $a$ ve Valans Kabuğu Uyarma Enerjileri .....	45
<b>Tablo 3.2.</b> OOS'un Tutarlılığını Kontrol Etmek İçin ve CSP'nin Hesaplanmasında Kullanılan $f_k$ , $W_i$ , $f$ ve $I$ Değerleri .....	46
<b>Tablo 3.3.</b> OOS'un Tutarlılığını Kontrol Etmek İçin Bileşiklerde $I$ Değerleri .....	47
<b>Tablo 5.1.</b> $C_5H_5N_5$ (Adenin) Bileşiğinde Gelen Elektron İçin CSP ( $MeVcm^2/g$ ), MFP ( $A^\circ$ ) ve CSDA-Menzil ( $g/cm^2$ ) .....	74
<b>Tablo 5.2.</b> $C_5H_5N_5O$ (Guanin) Bileşiğinde Gelen Elektron İçin CSP ( $MeVcm^2/g$ ), MFP ( $A^\circ$ ) ve CSDA-Menzil ( $g/cm^2$ ) .....	75
<b>Tablo 5.3.</b> $C_4H_5N_3O$ (Sitozin) Bileşiğinde Gelen Elektron İçin CSP ( $MeVcm^2/g$ ) ve CSDA-Menzil ( $g/cm^2$ ) .....	76
<b>Tablo 5.4.</b> $C_5H_6N_2O_2$ (Timin) Bileşiğinde Gelen Elektron İçin CSP ( $MeVcm^2/g$ ) ve CSDA-Menzil ( $g/cm^2$ ) .....	77
<b>Tablo 5.5.</b> $C_{20}H_{27}N_7O_{13}P_2$ (Stizo-Guanin) Bileşiğinde Gelen Elektron İçin CSP ( $MeVcm^2/g$ ), MFP ( $A^\circ$ ) ve CSDA-Menzil ( $g/cm^2$ ) ....	78
<b>Tablo 5.6.</b> $C_{19}H_{26}N_8O_{13}P_2$ (Timin Adenin) Bileşiğinde Gelen Elektron İçin CSP ( $MeVcm^2/g$ ) ve CSDA-Menzil ( $g/cm^2$ ) .....	79
<b>Tablo 5.7.</b> $H_2O$ (Sıvı su) Bileşiğinde Gelen Elektron İçin CSP ( $MeVcm^2/g$ ), MFP ( $A^\circ$ ) ve CSDA-Menzil ( $g/cm^2$ ) .....	80

## 1.GİRİŞ

Madde içerisinde yüklü parçacıkların enerji kaybı veya maddenin durdurma gücü, radyasyon hasarı, radyasyon dozimetrisi, yüklü parçacıklarla madde analizi, iyon ekimi, radyoloji, biyoloji, nükleer fizik, sağlık fiziği ve temel parçacık fiziği gibi bir çok alanda önemlidir. Son yıllarda bu alandaki çalışmalar giderek artmakta ve elektron için maddenin durdurma gücünün daha gerçekçi ifadesine, özellikle beta spektroskopisi, elektron mikroskopisi ve elektron-pozitron yüzey spektroskopisi gibi alanlarda da daha fazla ihtiyaç duyulmaktadır. Elektronlar ve pozitronların ortamla etkileşimleri elastik saçılma, inelastik saçılma ve frenleme ışınması yolu ile olmakta, pozitronlar yok olmaya da uğramaktadır. Büyük bir enerji aralığı için (birkaç eV ile ~1 GeV arası) elastik etkileşmeler, hedefin elektrostatik alanından parçacığın saçılması olarak tanımlanabilir (Mott ve Massey, 1965). Elastik etkileşmeler, hedef atomun kuantum durumlarının korunduğu yani temel durumunun etkileşmeden önce ve sonra da aynı kaldığı etkileşmelerdir. Düşük ve orta enerjili elektronlar için baskın enerji kaybetme mekanizması, ortamda elektronik uyarılmaları ve iyonlaşmaları meydana getiren inelastik çarpışmalardır. Elektronların madde ile etkileşimi bir çok alanda büyük öneme sahiptir. Özellikle medikal fizik alanında, inelastik saçılma modelleri yardımı ile hesaplanan durdurma gücü ve enerji straggling parametresinin, doz hesaplamalarında kullanılması çok büyük öneme sahiptir.

Canlı organizmalara radyasyonun etkisi hücrelere hasar verecek bir tehlike oluşturur. Bu nedenle radyasyona karşı önlemlerin alınması ve tolerans sınırlamalarının yapılması gereklidir. Yüklü parçacıklar özellikle DNA ve RNA üzerinde, doğrudan veya dolaylı etki yolu ile genetik değişikliklere de neden olabilirler (Marmier ve Sheldon, 1969). DNA molekülleri yüklü parçacıklar tarafından hasara uğradığında DNA molekülündeki timin-adenin veya sitozin-guanin molekülleri yapısal değişime uğrayabilir. Örneğin timin-timin yanlış baz çifti oluşabilir veya moleküler yapı ölebilir. Radyasyonun bu türlü etkisine, *doğrudan etki* denir. Yukarıda belirtilen nedenlerden dolayı, düşük enerjili elektronların madde içerisinde yayılması ve enerji kaybı konusu birçok

arařtırmacı tarafından ele alınmıřtır (Ashley, 1980; Salvat ve ark., 1984, 1986, 1992, 2001, 2003; Verne ve Pimblott, 1995; Cengiz, 2002).

Genellikle elektronların inelastik diferansiyel tesir kesiti ve arpıřma-durdurma gc, serbest atomdan hızlı elektronların saılmasını dikkate alan Bethe teorisinden (Bethe, 1930; Inokuti, 1971) veya maddede ykl paracıkların enerji kaybını dikkate alan dielektrik teoriden (Fano, 1956) yararlanılarak hesaplanmaktadır. Her iki teori, birinci Born yaklařımına dayalı teorilerdir ve Born yaklařımının geerlilik kořullarını saėlamak řartı ile kullanılabilirler. Born yaklařımının geerlilik řartı  $v \gg u_K$  řeklinde yazılabilir. Burada  $v$  gelen elektronun hızı ve  $u_K$  hedefin atomik K kabuėundaki elektronunun orbital hızıdır (Inokuti, 1971). Bir yaklařım olarak, atomik inelastik diferansiyel tesir kesitine,  $E > B_i$  olan alt kabuklardan gelen katkıların bir toplamı gibi bakılabilir, burada  $E$  elektronun enerjisi,  $B_i$  de,  $i$ 'ci kabuėun baėlanma enerjisidir. Bu durumda diferansiyel tesir kesitindeki hatanın daha kk olacaėı umut edilmektedir (Powell, 1974; Fernndez-Varea, 1996). Bunun yanı sıra, zellikle gelen paracık elektron olduėunda deėiř-tokuř etkileri ve 50 keV den yukarı enerjilerde relativistik etkilerin gz nne alınması gerekir (Fernndez -Varea, 1996).

Genellikle durdurma gc hesabı iin genelleřtirilmiř osilatr řiddeti (Generalized Oscillator Strengths-GOS) ile Inokuti (1971) tarafından verilen inelastik diferansiyel tesir kesitinin kullanılması yaygın bir metottur. GOS atomik dalga fonksiyonunun nmerik integrasyonunu gerektiren matris elemanlarından hesaplanır. Bu hesaplama ok karmařıktır. Son yıllarda matris elemanlarından GOS un hesabından sakınmak iin optiksel veri modelleri nerilmektedir. Liljequist (1985), madde ile elektronların inelastik saılması iin bir optik veri modeli nermiřtir. Bu model, Salvat ve Fernndez-Varea (1992) tarafından geliřtirilmiřtir. Optik veri modelleri (Penn, 1987; Ashley, 1991; Fernndez-Varea ve ark.,1993,1996; Bro ve ark., 1995), PENELOPE (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons-PENELOPE) ve LEEPS (Low Energy Electrons and Positrons Simulations-LEEPS) gibi Monte Carlo kodlarında da

kullanılmaktadır. Optik veri modelleri, birinci Born yaklaşımını temel alan modellerdir. Son yıllarda bu modeller kullanılarak bileşiklerde örneğin sudaki elektron inelastik saçılma tesir kesitleri hesaplanmıştır (Dingfelder ve ark., 1998).

DNA çözeltisinde radyasyonun etkisi ile oluşan OH radikallerinin DNA da kimyasal yolla meydana getirdikleri hasar üzerine, ki buna radyasyonun *dolaylı etkisi* denir, deneysel (Fuciarelli ve ark.,1990 ; Milligan ve ark., 1993) ve teorik (Chatterjee ve ark., 1986) çalışmalar bulunmaktadır. Sugiyama (1985; 1989), ara enerji bölgesindeki elektronların enerji kaybı için bir ifade türetmiş ve bunun dozimetri hesaplamalarında kullanılabileceğini ileri sürmüştür. Son yıllarda Verne ve Pimblott (1995) kuru DNA ya gelen elektronlar için durdurma gücünü, ortalama serbest yolu ve menzili hesaplamışlardır.

Katı materyaller üzerine 10 keV den daha büyük enerji ile gelen elektronlar için Bethe teorisine göre hesaplanan durdurma gücü sonuçları, deneysel veriler ile iyi bir uyum vermektedir. Buna karşın düşük enerjilerde Bethe teorisi geçerliliğini kaybetmektedir. Düşük ve ara enerji aralığında, özellikle biyolojik hedefler için çok az analitik ifade mevcuttur. Dielektrik teori yaklaşımı ile durdurma gücü hesabında ise materyallerin dielektrik özelliklerine ihtiyaç duyulmaktadır. Ancak tüm materyaller için, materyallerin dielektrik özelliklerini veren deneysel verileri elde etmek zordur. Bazı materyaller için dielektrik özelliklerin rapor edildiği veri azdır (Akkerman ve Akkerman, 1999). Dielektrik teori yaklaşımı ile durdurma gücü hesabında, dielektrik fonksiyonu, analitik olarak elde edilebilir. Ancak tüm materyallerin dielektrik özelliklerini verebilecek analitik dielektrik fonksiyonu ifadesi elde etmek zordur. Örneğin Lindhard dielektrik fonksiyonu, sınırlı materyaller için, sadece Al gibi materyaller veya alkali metaller için uygulanabilmekte, yalıtkanlar veya organik bileşikler için uygulanamamaktadır (Tan ve ark., 2004).

Bu çalışmanın amacı, GOS modeli kullanılarak düşük ve orta enerjilerde geçerli olan, insanın biyolojik yapısında bulunan H, C, N, O gibi düşük atom numaralı hedefler ve adenin, guanin, timin, sitozin gibi biyolojik bileşiklerde

durdurma gücü (SP), ortalama serbest yol (MFP), menzil (R) ve enerji straggling hesabı yapabilecek bir hesaplama yönteminin geliştirilmesi, kodlanması ve DNA bileşiğine uygulanmasıdır. Katılar için tanımlanan valans kabuğu rezonans enerjisi,  $W_v$ , Salvat ve Fernández-Varea (1992) tarafından  $W_v = 28.816 \sqrt{\frac{rZ_v}{A}}$  (eV) olarak önerilmiştir. Salvat ve Fernández-Varea (1992) tarafından önerilen valans kabuğu rezonans enerjisi, düşük atom numaralı hedefler veya biyolojik hedeflerde, yarı deneysel ayarlanabilir parametre  $a$  nın doğru sonucunu vermemektedir. Bu parametrenin doğru hesaplanmaması nedeni ile de optik osilatör şiddeti (OOS) tutarlılığını veren  $f$  –toplamı ve ortalama uyarma enerjisi,  $I$ , için doğru sonuçlar elde edilememektedir. Bu çalışmada valans kabuğu rezonans enerjisinin hesaplanması, Liljequist (1983) tarafından önerilen kısmi iyonlaşma potansiyeli (PMIP) varsayımı ile yapıldı. Optik osilatör şiddetinin tutarlılığını kontrol etmek amacı ile  $f$  –toplamı ve ortalama uyarma enerjisi,  $I$ , hesaplanarak teorik sonuçlarla karşılaştırıldı. Daha sonra durdurma gücü, ortalama serbest yol ve menzil hesaplaması yapabilmek amacı ile Inokuti (1971) tarafından verilen tesir kesitine Born-Ochkur değiş-tokuş düzeltmesi uygulanarak elektronlar için hedef maddenin kütle-çarpışma-durdurma gücü (CSP), toplam tesir kesiti (TCS), ortalama serbest yol ve hesaplanan CSP değerlerinden sürekli yavaşlama yaklaşımı (CSDA)-menzili hesaplandı ve doz hesaplamalarında gerekli olan enerji straggling parametresi için analitik ifade verildi. Çalışmada elde edilen sonuçların mevcut teori ve deneysel sonuçlarla uyumluluğunun kontrol edilmesi amacı ile DNA molekülünün yapısını oluşturan H, C, N, O ve P de, 20 eV-1 MeV enerji aralığındaki enerjilerde gelen elektronlar için CSP, MFP ve CSDA-menzili değerleri hesaplandı ve diğer teorik (Akkerman ve Chernov, 1978; Liljequist, 1983; Ashley, 1988; Sugiyama, 1989; Verne ve Pimblott, 1995; Dingfelder ve ark., 1998; Akkerman ve Akkerman, 1999; Salvat ve ark., 2001; Salvat ve ark., 2003; Gümüş, 2005; ICRU 37, 1984; ESTAR, 2003) ve deneysel ve yarı-deneysel sonuçlar (Peterson ve Green, 1968; Ashley ve Williams, 1980; Iskef ve ark., 1983; Luo, 1993; Luo, 1994; Havington, 1996) ile karşılaştırıldı.

## 2. GENEL BİLGİLER

Bu bölümde E kinetik enerjisine sahip elektronların madde ile etkileşmesini göz önüne alacağız. Madde içerisinde yüklü parçacıkların enerji kaybı veya maddenin durdurma gücü,  $\frac{dE}{dx}$  in hesaplanabilmesi için, elektronlar ile maddenin etkileşmesinde hangi olayların meydana geldiğinin bilinmesi önemlidir. Bu nedenle öncelikle elektronların madde ile etkileşmelerini ele alacağız.

### 2.1. Elektronların Madde ile Etkileşmesi

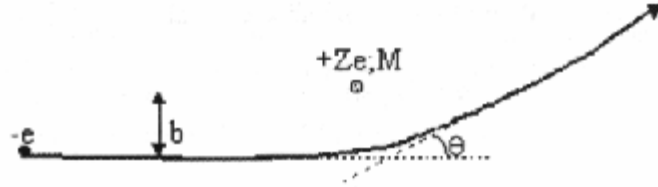
Elektronların bir ortamı geçerken enerjilerini kaybetmeleri işlemi, yüklü ağır parçacıkların enerji kaybetmeleri işleminden daha karmaşıktır. Elektron soğurucu bir maddeden geçerken, özellikle elektronun yavaşlamasına dört etki katkıda bulunur. Bunlar:

- a) atomlarla elastik saçılma,
- b) atomik elektronlarla inelastik saçılma,
- c) frenleme ışınması (Bremsstrahlung),
- d) Cherenkov ışınmasıdır.

Düşük enerjili elektronlar için enerji kaybı, daha çok, durdurucu madde atomlarında elektronların iyonlaşması ve uyarılması şeklinde olur. Hızlı yüklü parçacıkların atomlar ile inelastik çarpışmasındaki enerji kaybı teorisi ilk olarak Bohr tarafından verilmiştir (Bohr, 1915). Bu teoride, Bohr, çarpışmaları bir atom üzerine gelen parçacığın en fazla yaklaşma mesafesi olan  $b = \left( \frac{Ze^2}{mv_0^2} \right) \cot \frac{\theta}{2}$  ifadesi ile verilen b çarpışma parametresine göre sınıflandırmıştır (Bohr, 1915).

Bohr teorisi, e yüklü hızlı bir elektron ile M kütleli Ze yüklü kararlı noktasal hedef çekirdeği arasındaki etkileşmeyi tanımlar. Bu teori, Bohr atom modelini

temel alır ve ilk önce bir hedeften alfa parçacıklarının saçılmasını tanımlamada Rutherford tarafından kullanılmıştır. Etkileşme sırasında elektron, yörüngeye dik doğrultuda etkiyen bir Coulomb itmesinin etkisi altında kalır.

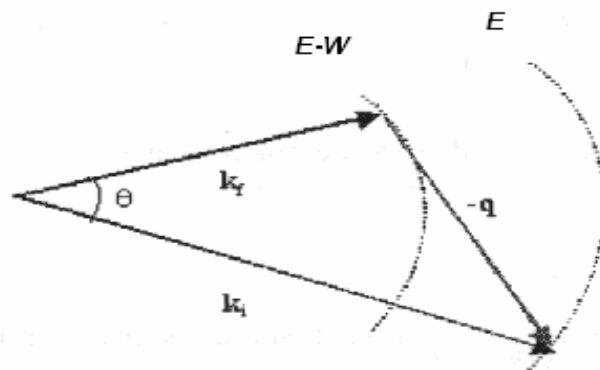


**Şekil 2.1.** Bir atomla hızlı elektronun etkileşmesi.

Daha sonra ise Bethe,  $b$  çarpışma parametresinin yerine momentum transferi  $q$  ya göre çarpışmaları sınıflandırarak enerji kaybını kuantum mekaniksel yolla ele almıştır (Fano, 1963). Gelen parçacığın dalga sayısı  $k_i$  ve saçılan parçacığın dalga sayısı  $k_f$  olmak üzere esnek çarpışmalarda ilk ve son momentum büyüklükleri eşittir:

$$q = 2k_i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.1)$$

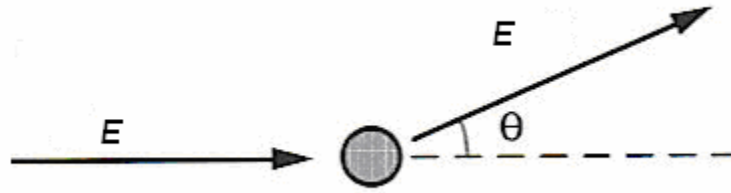
İnelastik çarpışmalar için  $|k_i| > |k_f|$  dir.



**Şekil 2.2.** İnelastik çarpışmada, belirli bir  $W$  enerji kaybı durumunda olası momentum transferi için vektör diyagramı.

### 2.1.1. Atomlarla Elastik Saçılma

Elastik etkileşmeler, hedef atomun kuantum durumlarının etkileşmeden önce ve sonra korunduğu yani temel durumunun aynı kaldığı etkileşmelerdir. 100 eV ile 1 GeV kadar geniş bir enerji aralığı için elastik etkileşmeler, hedefin elektrostatik alanından parçacığın saçılması olarak tanımlanabilir (Mott ve Massey, 1965).



**Şekil 2.3.** Elastik saçılma olayı.

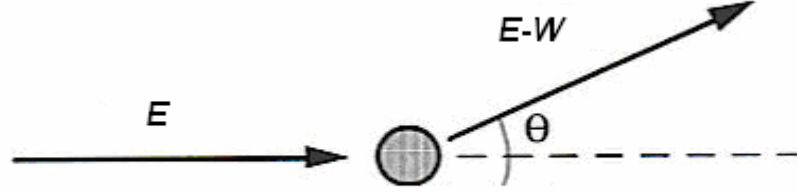
Hedef atomun büyük kütlesi nedeni ile ( $\sim 3500Zm_e$ ), gelen elektron, E tarafından kaybedilen enerji, W, elektronun sahip olduğu ilk enerjisinin çok küçük bir kısmıdır (Al atomlarından 30 keV elektron saçılması için birkaç 0.001 eV) ve genellikle ihmal edilir (Salvat ve ark., 2001).

Elastik saçılma olayında kaybedilen enerjinin çok küçük olması nedeni ile bu çalışmada, atomik elektronlarla elastik saçılma göz önüne alınmamıştır.

### 2.1.2. Atomik Elektronlarla İnelastik Saçılma

Düşük ve orta enerjili elektron için baskın enerji kaybetme mekanizması, ortamda elektronik uyarılmaları ve iyonlaşmaları meydana getiren inelastik çarpışmalardır. Gelen elektron, ortamdaki atomik elektronlarla inelastik çarpışma yaparak yolundan sapar ve bu çarpışmada atomik elektron ya bir uyarılmış duruma geçer ya da atomdan uzaklaşarak iyonlaşmış olur. Gelen

elektron çok zayıf olasılıkla da olsa enerjisinin tamamını çarpmış olduğu atomik elektrona aktarabilir.



**Şekil 2.4.** İnelastik saçılma olayı.

Atom veya moleküllerle yüklü parçacıkların çarpışması hızlı ve yavaş olmak üzere iki sınıfa ayrılır. Bu sınıflandırma, parçacığın hızının, atomik elektronun bulunduğu kabuktaki ortalama orbital hızına göre hızlı veya yavaş olmasına göre yapılır. Parçacığın atomik elektron ile çarpışma olasılığını tesir kesiti ifade eder. Gelen parçacık hedef atomun elektronları ile etkileştiğinde her zaman aynı türde etkileşme meydana getirmez. Birden fazla etkileşme meydana gelmişse, her bir çeşit etkileşme için diferansiyel tesir kesiti farklı olacaktır ve bu diferansiyel tesir kesitine ilgili etkileşmenin *diferansiyel tesir kesiti* denir. Toplam diferansiyel tesir kesiti, farklı etkileşimlerle ilgili diferansiyel tesir kesitlerinin toplamına eşit olur. İnelastik çarpışmada diferansiyel tesir kesiti Inokuti (1971) tarafından,

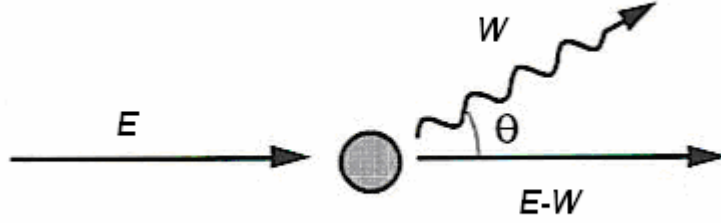
$$dS_n = 2pz^2 e^4 (mv^2)^{-1} Q^{-1} |e_n(K)|^2 d(\ln Q) \quad (2.2)$$

ifadesi ile verilmektedir. Burada  $ze$  gelen parçacığın yükü,  $m$  kütlesi,  $v$  hızı olmak üzere,  $Q$  çarpışmadaki momentum transferi,  $n$  atomik kabuk ve  $e_n(K)$  atomik matris elemanıdır.

### 2.1.3. Frenleme Işınımı (Bremsstrahlung)

Klasik elektromanyetik teoriye göre ivmeli hareket yapan yüklü bir parçacık elektromanyetik radyasyon yayınlar. Elektron gibi yüklü parçacık, atomun

elektrostatik alanı nedeni ile hızlanarak büyük bir ivmeye maruz kalabilir ve elektromanyetik enerji yayınlatabilir. Bu radyasyona frenleme ışınması ve bu olaya da frenleme ışınımı (Bremsstrahlung) denir.



**Şekil 2.5.** Frenleme olayı.

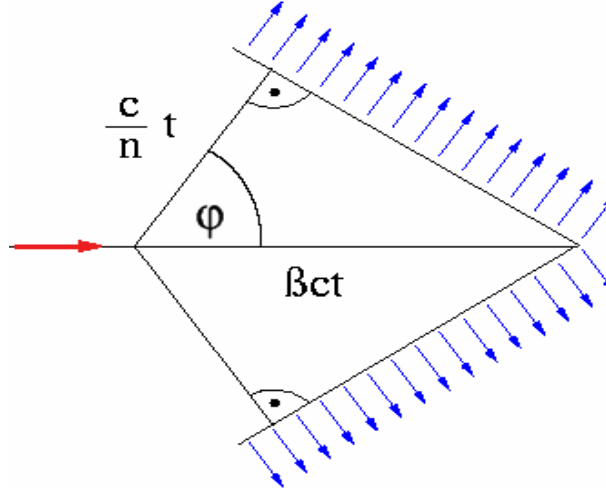
Bu olay sonrasında, E enerjili bir elektron, bir atomik elektron veya çekirdek alanında ivmelendiğinde, bir minimum enerjiden bir maksimum enerjiye kadar değerler alabilen bir foton yayınlır. Frenleme olayı,  $E \approx 1$  MeV den daha büyük kinetik enerji ile gelen elektronlar için gerçekleşmektedir.

Bu çalışmada 1 MeV den düşük enerjili elektronların çarpışması dikkate alındığından frenleme ışınımı yolu ile enerji kaybı ihmal edilmiştir.

#### 2.1.4. Cherenkov Işınımı

Bir yüklü parçacık, madde içerisinde geçerken, parçacığın hızı  $v = bc$ , ışığın faz hızı,  $c/n$  den büyükse elektromanyetik ışınım yayınlır. Bu olay ilk olarak Cherenkov tarafından gösterildi. Çok yüksek hızlı yüklü bir parçacık, saydam dielektrik bir ortamdan geçerken hızı iyonlaşma ve ışıma kayıpları hariç değişmez. Bununla beraber, parçacığın yükü ve bu yükün hareketinden dolayı oluşan elektrik ve manyetik alan  $c/n$  hızı ile yayılır. Burada  $n$  kırılma indisidir. Bunun sonucu oluşan elektromagnetik radyasyon,  $bn < 1$  ise tüm doğrultularda yıkıcı girişim ile yok olur. Parçacığın  $bc$  hızı madde içindeki ışığın faz hızı  $c/n$  yi geçerse parçacık  $bn > 1$  için tüm frekanslarda radyasyon yayınlatabilir. Bu olay

Cherenkov etkisi olarak bilinir. Cherenkov enerji kaybı  $b \leq \frac{1}{n}$  e kadarki elektron hızlarında görülmez.



**Şekil 2.6.** Cherenkov Olayı.

Bu çalışmada  $bn < 1$  hızlarındaki elektronlar dikkate alındığından Cherenkov ışınması yolu ile elektronların enerji kaybı dikkate alınmamıştır.

## 2.2. Enerji Kaybı ve Saçılma Teorisi

Atomlar ve moleküllerden oluşan bir madde içerisinde hareket eden bir parçacık tarafından birim uzunluk başına enerji kaybı,  $-\frac{dE}{dx}$ ,

$$-\frac{dE}{dx} = \sum_i N_i \sum_n E_{ni} s_{ni} \quad (2.3)$$

ifadesi ile verilir (Fano, 1963). Burada  $s_{ni}$ ,  $i$  nci tipli bir atomu taban durumundan  $E_{ni}$  uyarılmış enerji düzeyine yükselten inelastik çarpışmalar için tesir kesiti ve  $N_i$  bu atom veya moleküllerin birim hacimdeki sayısıdır. Enerji

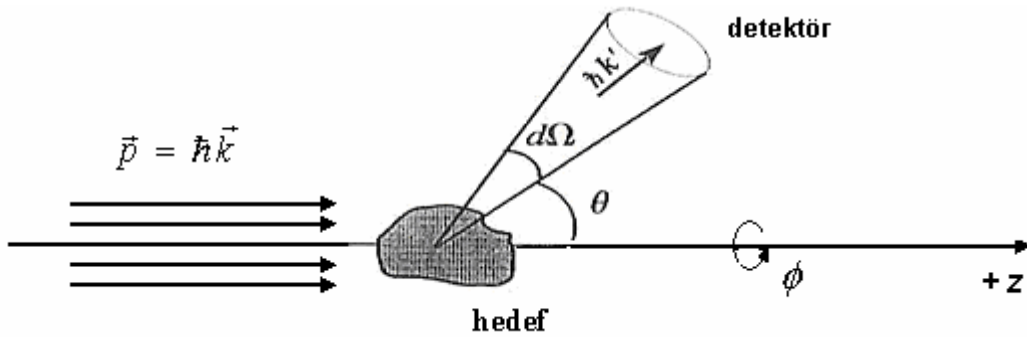
kaybını elde etmek için inelastik çarpışmalar tesir kesitini bulmak gerekir. Bu nedenle saçılma teorisini gözden geçirmek yerinde olur.

Atomlar, moleküller veya elemanter parçacıkların yapısını öğrenmede deneysel olarak saçılma yönteminden yararlanır. Bu yöntemde sabit tutulan bir hedef üzerine, belirli bir enerjiye sahip bir parçacık demeti gönderilir ve saçılan parçacıkların yön, enerji ve bir yöndeki şiddetleri (sayıları) hakkında bilgi edinilir. Saçılma problemlerinden çok azı tam olarak çözülebilir. Genellikle, saçılma konusu yaklaşık yöntemler gerektirir. Prensip olarak dalgaların ve parçacıkların saçılmaları aynı matematiksel yöntemle incelenir. Parçacığın veya dalganın tüm özellikleri  $\psi$  fonksiyonu ile karakterize edilir.

Kuantum mekaniğine göre bir fiziksel sistem hakkındaki tüm bilgiler sisteme uygun Schrödinger denkleminin çözüm fonksiyonlarından elde edilebilir. Sistemin Hamiltoniyeninin özdeğerleri bağlı durumların enerji düzeylerini verir. Hamiltoniyene ait özfonksiyonların asimtotik formundan ise çarpışma tesir kesiti bulunur ve böylece tesir kesiti kullanılarak enerji kaybı ifadesi çıkarılabilir.

### 2.2.1. Diferansiyel Tesir Kesiti ve Toplam Tesir Kesiti

Eşit enerjili parçacıklardan oluşan bir demetin, başlangıç noktasına konulmuş bir hedef üzerine gönderildiğini varsayalım (Şekil 2.7.). Gelen parçacıkların her birinin momentumu  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  ve parçacıkların gidiş yönü z-ekseni olarak alınsın.



Şekil 2.7. Saçılma olayı.

Saçılma olayını gözlemek amacı ile kullanılan bir dedektör, küresel koordinatları  $\mathcal{P} = (r, q, f)$  olan bir noktaya konulmuş olsun. Genellikle her dedektörün etkin bir kesit alanı vardır. Bu etkin alana  $dS$  dersek, bunun gördüğü katı açı  $d\Omega$ ,

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} = \sin q dq df \quad (2.4)$$

ifadesi ile verilir. Birim zamanda birim kesit alanından dik olarak geçen parçacık sayısına akı adı verilir ve  $J$  ile gösterilir.  $d\Omega$  katı açı içine birim zamanda birim kesit alanından dik olarak geçen saçılan parçacık sayısı  $dN$  olsun. Bir saçılma olayında diferansiyel tesir kesiti,

$$\frac{dS}{d\Omega} = \frac{dN}{J} \quad (2.5)$$

ifadesi ile tanımlanır. Diferansiyel tesir kesitinin tüm açılar üzerinden integrali alınırsa toplam tesir kesiti elde edilir:

$$S = \int \frac{dS}{d\Omega} d\Omega = \int_0^p \int_0^{2p} \frac{dS}{d\Omega} \sin q dq df \quad (2.6)$$

### 2.2.2. Saçılma Genliği

Saçılma olayında diğer temel bir kavram saçılma genliğidir. Saçılma probleminde iki temel varsayım vardır:

1. Önce, saçıcı hedefin başlangıç noktasında sabit olduğu varsayılır. Eğer hedef çok ağır bir parçacık ise, çarpışma sonucu hedefin hareketi gerçekten de ihmal edilebilir. Eğer hedef ile gelen parçacığın kütleleri birbirine yakınsa, bu durumda hidrojen atomu probleminde olduğu gibi, problemi iki parçacık problemine

indirgeyip, sabit bir merkezden indirgenmiş kütlelerin saçılımını inceleyerek aynı sonuca ulaşmış oluruz.

2. Etkileşme potansiyeli sonlu bir bölgede etkin olmalıdır. Başka bir deyişle, gelen parçacık sonsuzdan yola çıktığında, hiçbir potansiyel etkisi altında olmayan serbest bir parçacık olmalıdır. Bu varsayımın amacı, asimtotik olarak düzlem dalga kullanabilme olanağı sağlar. Bu varsayımın matematiksel ifadesi  $V(r)$  potansiyelinin sonsuzdaki limitinin sıfır olmasını gerektirir. Başka bir ifadeyle,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) \rightarrow 0 \quad (2.7)$$

olur, yani potansiyel  $V(r)$ ,  $1/r$  den daha hızlı olarak sıfıra gitmelidir.  $H\psi = E\psi$ ,  $H = T + V$  Schrödinger denkleminin çözümü olan dalga fonksiyonu, merkezden uzakta, yani potansiyelin etkin olmadığı bölgede,

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \psi_{gel.} + \psi_{saç.} \quad (2.8)$$

şeklinde, gelen ( $\psi_{gel.}$ ) ve saçılan ( $\psi_{saç.}$ ) olmak üzere iki terimin toplamı olarak yazılabilir. Gelen parçacık sonsuzda serbest olduğu için düzlem dalga ile temsil edilmelidir. Enerjisi  $E$  olan serbest parçacığın dalga sayısı ile enerjisi arasındaki ilişki,

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.9)$$

şeklindedir. Düzlem dalganın  $+z$  yönünde ilerlediğini varsayarsak, parçacığı temsil eden gelen dalga fonksiyonu,

$$\psi_{gel.} = e^{ik \cdot \vec{r}} = e^{ikz} \quad (2.10)$$

olur. Saçılma sonucu bu düzlem dalgaya eklenen bileşen  $r=0$  noktasından dışa doğru yayılan bir küresel dalga olmalıdır. Saçılmanın elastik olduğunu varsayarsak  $k'=k$ , yani dalga sayısının büyüklüğü aynı olacaktır. Her yönde aynı genlikte yayılan (izotropik) küresel dalga ifadesinin,

$$\frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.11)$$

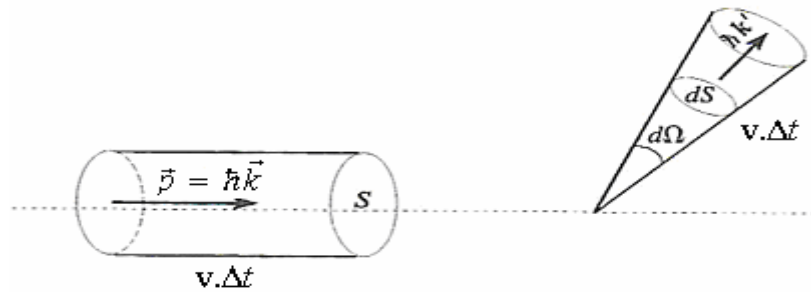
olduğu açıktır. Ancak, en genel durumda, potansiyelin etkisiyle, küresel dalganın genliği her yönde aynı olmayabilir, yani anizotropik olabilir. Bunu hesaba katmak amacıyla, küresel dalganın genliğini  $(q, f)$  açılara bağlı bir çarpan ile çarpılırsa, saçılan parçacığın dalga fonksiyonu,

$$y_{saç.} = f(q, f) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.12)$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $f(q, f)$  saçılma genliğidir. Gelen ve saçılan parçacıkların yoğunluğu şöyle tanımlıdır:

$|y_{gel.}|^2$  : Gelen parçacıkların yoğunluğu (veya birim hacimdeki sayısı).

$|y_{saç.}|^2$  : Saçılan parçacıkların yoğunluğu (veya birim hacimdeki sayısı).



**Şekil 2.8.** Gelen ve saçılan parçacıkların birim zamanda kapladıkları hacimler.

Denklem (2.5) den saçılma olayında diferansiyel tesir kesitini bulmak için + z yönünde ilerleyen  $k$  dalga sayılı serbest parçacıkların kesit alanı  $S$  olan bir yüzeye girdiklerini düşünelim (Şekil 2.8.). Bu durumda, gelen parçacık akısı,

$$J = \frac{|y_{gel.}|^2 S \cdot v \cdot \Delta t}{S \cdot \Delta t} = |y_{gel.}|^2 v \quad (2.13)$$

olur. Benzer olarak  $dN$  ifadesini bulalım. Dedektörün kapsadığı alan  $dS$  olsun. Birim zamanda saçılan parçacık sayısı,  $dN$ ,

$$dN = \frac{|y_{saç.}|^2 r^2 d\Omega v \Delta t}{d\Omega \Delta t}$$

$$dN = |y_{saç.}|^2 r^2 v \quad (2.14)$$

olur. Denklem (2.5) de  $J$  ve  $dN$  i yerlerine yazarsak

$$\frac{dS}{d\Omega} = |f(q, f)|^2 \quad (2.15)$$

bulunur. Saçılma konusunda teorcinin yaklaşımı şöyle özetlenebilir:

\* Verilen bir  $K=E$  parçacık enerjisi ve potansiyel için Schrödinger denklemini çözümlenip  $y$  dalga fonksiyonu elde edilir.

\* Bu dalga fonksiyonunun asimtotik davranışı,

$$y \approx e^{ikz} + f(q, f) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.16)$$

şeklinde ayrılır ve  $f(q, f)$  saçılma genliği elde edilir.

\* Saçılma genliğinden diferansiyel tesir kesitine geçmek üzere  $\frac{dS}{d\Omega} = |f(q, f)|^2$  ifadesi kullanılır.

Burada temel problem, saçılma olayına ait Schrödinger denkleminde saçılma genliği  $f(q, f)$  nın bulunmasıdır. Bu konu ile ilgili olarak genellikle hızlı parçacıklar için Born yaklaşımı kullanılır.

### 2.2.3. Merkezci Alandan Saçılma ve Born Yaklaşımı

Diferansiyel tesir kesitini elde etmek için ilk önce  $V(r)$  alanından parçacıklar demetinin saçılmasını temsil eden Schrödinger denklemi,

$$(\nabla^2 + k^2)y(\vec{r}) = U(r)y(\vec{r}) \quad (2.17)$$

çözölmelidir. Burada,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ ve } U(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2} \quad (2.18)$$

dır. Denklem (2.17),  $f(r) = U(r)y(r)$  alınarak,

$$(\nabla^2 + k^2)y(\vec{r}) = f(r) \quad (2.19)$$

biçiminde yazılabilir. Burada  $f(r)$  bilinen bir fonksiyondur ve asimtotik olarak, dışarı giden küresel dalga gibi davranan belirli bir integrale sahiptir.  $f(r)$  yerine  $d(\vec{r} - \vec{r}')$  alınırsa Denk. (2.19),

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = d(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.20)$$

olur,  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  fonksiyonuna Green fonksiyonu denir. Denklem (2.20)  $f(\mathbf{r}')$  ile çarpılarak integrali alınır,

$$\int f(\mathbf{r}')(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (2.21)$$

elde edilir. Denklem (2.19) nin genel çözümü,

$$\mathbf{y} = e^{ikz} + \int f(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (2.22)$$

dır.  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4p|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$  ise Denk. (2.20) de yerine yazılarak ve  $f(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\mathbf{y}(\mathbf{r})$  hatırlanarak,

$$\mathbf{y}(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}')\mathbf{y}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (2.23)$$

bulunur. Green fonksiyonu  $r \rightarrow \infty$  iken

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4p|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{e^{ik(\mathbf{r}-\hat{r}\cdot\mathbf{r}')}}{4pr} \quad (2.24)$$

olur. Denklem (2.23) bu durumda,

$$\mathbf{y}(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{-ik\hat{r}\cdot\mathbf{r}'}}{4p} U(\mathbf{r}')\mathbf{y}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (2.25)$$

biçiminde yazılır.  $\mathbf{r}$  doğrultusunda birim vektör,

$$\hat{\mathbf{r}} = \bar{\mathbf{n}} = (\sin q \cos f, \sin q \sin f, \cos q) \quad (2.26)$$

olmak üzere  $\bar{n}$  ile gösterilirse,

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{1}{4p} \int e^{ik\bar{n}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') y(\mathbf{r}') dt' \quad (2.27)$$

bulunur. Saçılma merkezinden dalganın çoklu kırınımına uğradığını farzederek  $f(\mathbf{q})$  için bir formül elde edebiliriz. Denklem (2.27) deki integralde bir yaklaşım olarak  $y(\mathbf{r}')$  yerine  $e^{ikz'}$  alabiliriz. Bu yaklaşım yalnız hızlı parçacıklar için geçerlidir.  $\bar{n}_0$ ,  $z$  eksenini boyunca  $z = \bar{n}_0 \cdot \mathbf{r}'$  olacak şekilde birim vektör olarak alınacak olursa,

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{1}{4p} \int e^{ik[(\bar{n}_0 - \hat{h})\cdot\mathbf{r}']} U(\mathbf{r}') dt' \quad (2.28)$$

olarak yazılabilir.  $m \rightarrow m$ ,  $\hat{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ ,  $U(\mathbf{r}') = \frac{2mV(\mathbf{r}')}{\eta^2}$  ve  $dt' = dV$  hacim elemanı olmak üzere Denk. (2.28),

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2p\eta^2} \int e^{i\hat{q}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') dV \quad (2.29)$$

olur. Sonuç olarak, saçılma genliğinin karesinin alınması ile  $d\Omega$  katı açı elemanında tesir kesiti,

$$dS = \frac{m^2}{4p^2\eta^4} \left| \int V e^{-i\hat{q}\cdot\mathbf{r}'} dV \right|^2 d\Omega \quad (2.30)$$

ifadesine eşit olur. Denklem (2.30) ilk olarak M. Born (1926) tarafından elde edildi. Çarpışma teorisinde, burada hesaplanan yaklaşım Born yaklaşımı olarak adlandırılır.

## 2.2.4. Hızlı Parçacıklar ile Atomlar Arasındaki İnelastik Çarpışmalar

İnelastik çarpışmalarda kullanılacak metodu açıklamak için parçacıklar ve atomlar arasındaki çarpışmaları gözönüne alalım. Hızlı parçacıklar ile atomlar arasındaki inelastik çarpışmalar, elastik çarpışmalarda olduğu gibi Born yaklaşımı yolu ile hesaplanabilir. Born yaklaşımı için uygulanacak koşul, atomik elektronun hızı ile karşılaştırıldığında gelen parçacığın hızı daha büyük olmalıdır. İnelastik çarpışmada atomun iç durumunda, aynı zamanda farklı değişimler meydana gelebilir. Atom normal durumdan kesikli veya sürekli olan uyarılmış duruma gidebilir ve daha sonra iyonize olabilir. Genel formülü türetmede bu iki durum birlikte göz önüne alınabilir (Landau ve Lifshitz, 1977).

Gelen parçacığın çarpışmadan önceki ve sonraki momentumu  $\vec{p}$  ve  $\vec{p}'$  ve buna karşılık atomun enerjilerini  $E_0$  ve  $E_n$  alalım. Sürekli spektrum durumlar arasındaki geçiş olasılığı,

$$dw_{n0} = \left(\frac{2p}{\eta}\right) |\langle n, \vec{p}' | V | 0, \vec{p} \rangle|^2 d\left(\frac{p'^2 - p^2}{2m} + E_n - E_0\right) \frac{d^3 p'}{(2p\eta)^3} \quad (2.31)$$

burada  $V$ , gelen parçacık ile atom arasındaki etkileşme enerjisidir. Etkileşme enerjisi,

$$V = \frac{zZe^2}{r} - \sum_{j=1}^Z \frac{ze^2}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} \quad (2.32)$$

ifadesine eşittir. Burada  $Ze$  atomik çekirdeğin yükü,  $ze$  gelen parçacık yükü,  $\vec{r}$  ve  $\vec{r}_j$  gelen parçacığın ve atomik elektronun, atomun çekirdeğindeki başlangıç noktasına göre yarıçap vektörleri ve  $m$  elektronun kütlesidir. Elektronun dalga fonksiyonları  $\psi_{\vec{p}}$  ve  $\psi_{\vec{p}'}$ ,

$$y_{\beta}^{\beta} = \sqrt{\frac{m}{p}} e^{(i/\eta)\beta \cdot \beta} \quad (2.33)$$

ve

$$y_{\beta'}^{\beta} = e^{(i/\eta)\beta' \cdot \beta} \quad (2.34)$$

ile verilmektedir; bu durumda çarpışma için  $dw = ds$  tesir kesitidir. Atomun başlangıçtaki ve son durumundaki dalga fonksiyonlarını  $y_0$  ve  $y_n$  ile gösteririz. Atomun son durumu kesikli spektruma uygunsa o zaman  $y_n$  ( $y_0$  gibi) bire normalize edilir. Diğer bir ifade ile atom sürekli duruma girerse, dalga fonksiyonu bu durumu tanımlayan  $\nu$  parametrelerinin delta fonksiyonu ile normalize edilir (bu parametreler örneğin atomun enerjisi ve iyonlaşmada atomdan ayrılan elektronun momentum bileşenleri olabilir). Böylece elde edilen tesir kesiti, çarpışma olasılığını verir, atom burada  $\nu$  ile  $\nu + d\nu$  aralığında sürekli spektrum durumuna girer.

Denklem (2.31) in  $p'^2$  üzerinden integrali,

$$ds_n = \frac{mp'}{4p'^2\eta^4} |\langle n, \beta' | V | 0, \beta \rangle|^2 d\Omega' \quad (2.35)$$

burada  $p'$  enerjinin korunumu kanunundan tanımlanır:

$$(p^2 - p'^2) / 2m = E_n - E_0 \quad (2.36)$$

Denklem (2.33) ve Denk. (2.34) parçacığın dalga fonksiyonlarını, Denk. (2.35) teki matris elemanında yerleştirerek,

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2\eta^4} \frac{p'}{p} \left| \iint V e^{i\beta' \cdot \beta} \psi_n \psi_0 d\tau dV \right|^2 d\Omega \quad (2.37)$$

ifadesini elde ederiz. Burada  $dt = dV_1 dV_2 \dots dV_Z$  atomdaki Z elektronunun hacim elemanıdır.  $n=0$  ve  $p=p'$  için Denk. (2.37) elastik saçılma tesir kesiti olur.

$y_n$  ve  $y_0$  fonksiyonları ortogonal olduğundan nükleer etkileşme terimi,  $\frac{zZe^2}{r}$  nin  $t$  üzerinden integrali sıfıra gider ve bu nedenle inelastik çarpışmalar için diferansiyel tesir kesiti,

$$ds_n = \frac{m^2}{4p^2\eta^4} \frac{p'}{p} \sum_j \left| \iint e^{-iq \cdot \mathbf{r}} y_n^* \frac{e^2}{|r-r_j|} y_0 dt dV \right|^2 d\Omega \quad (2.38)$$

ifadesine eşittir (Landau ve Lifshitz, 1977).

### 2.2.5. İnelastik Çarpışmalar-Temel Formül

Kütlesi  $M_1$  olan,  $ze$  yüklü (burada  $-e$  elektron yüküdür),  $v$  hızı ile hareket eden bir parçacığın temel durumda sabit duran  $M_2$  kütleli bir atom ile çarpışarak kutupsal açılar  $q, j$  yönü boyunca katı açı elemanı  $d\Omega$  içerisinde saptırıldığını ve bu çarpışmada atomun 0 temel durumundan  $n$  durumuna geçtiğini yani  $E_n$  enerji düzeyine uyarıldığını düşünelim. Parçacık yeteri kadar hızlandığında fakat hala non-relativistik iken, parçacık ile atom arasındaki etkileşme potansiyeli  $V$  ile hesaplanan diferansiyel tesir kesiti  $ds_n$  Birinci Born yaklaşımında,

$$ds_n = \frac{1}{(2p)^2} M^2 \eta^{-4} \left(\frac{k'}{k}\right) \left| \int \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) y_n^*(r_1, \dots, r_z) V y_0(r_1, \dots, r_z) dr_1 \dots dr_z \right|^2 d\Omega \quad (2.39)$$

ifadesine eşittir (Inokuti, 1971). Burada  $M = \left( \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \right)$  çarpışma sisteminin

indirgenmiş kütesidir,  $\mathbf{r}$  atomun merkezine göre gelen parçacığın konumu,  $\eta = \frac{p}{k}$

parçacığın çarpışmadan önceki momentumu,  $\eta k'$  parçacığın çarpışmadan sonraki momentumu,  $\eta k = \eta(k - k')$  momentum transferi ve  $y$  ler toplam sayısı  $Z$  olan atomik elektronun  $r_j$  koordinatlarına bağlı öz fonksiyonlarıdır. Bu olayda etkileşme Coulomb etkileşmesi olduğunda  $V$  potansiyeli aşağıdaki ifade ile verilir:

$$V = -\sum_{j=1}^Z \frac{ze^2}{|r - r_j|} + \frac{zZ_N e^2}{r} \quad (2.40)$$

Burada  $Z_N e$  atomik çekirdeğin yüküdür.

$$\int \frac{1}{|r - r_j|} \exp(iKr) dr = 4\pi K^{-2} \exp(iKr_j). \quad (2.41)$$

Böylece Denk. (2.39) aşağıdaki ifadeye dönüşür:

$$d\sigma_n = 4z^2 (Me^2 / \eta^2)^2 (k'/k) K^{-4} |\epsilon_n(K)|^2 d\Omega \quad (2.42)$$

Burada  $|e_n(K)|$  atomik matris elemanıdır ve aşağıdaki ifadeye eşittir:

$$\begin{aligned} \epsilon_n(K) &= \left\langle n \left| \sum_1^Z \exp(iKr_j) \right| 0 \right\rangle \\ &= \int y_n^* \sum_{j=1}^Z \exp(iKr_j) y_0 dr_1 \dots dr_z \end{aligned} \quad (2.43)$$

$e_n(K)$  niceliği atomun dinamiğini yansıtır ve inelastik form faktörü olarak da bilinir. Denklem (2.40) in ikinci terimi ile gösterilen nükleer etkileşme  $\langle n|$  ve  $|0\rangle$  durumlarının ortogonalliği nedeni ile katkı vermemektedir. Denklem (2.42) de  $d\Omega$  yerine  $2p \sin qdq = pd(K^2)/kk'$  ifadesini yazarak ve  $Q = (\eta K)^2 / 2m$  değişkenini kullanarak  $M \rightarrow m$  için genelleştirilmiş osilatör şiddeti,

$$f_n(K) = (E_n / Q) |e_n(K)|^2 \quad (2.44)$$

olur.  $c = 2pe^4 / mc^2 b^2$ ,  $W$ , enerji kaybı,  $E$  gelen parçacığın kinetik enerjisi ve,  $Q$  geri tepme enerjisi,

$$Q = q^2 / 2m = 2E - W - 2\sqrt{E(E - W)} \cos q \quad (2.45)$$

olmak üzere Denk. (2.2),

$$\frac{d^2 s}{dQdW} = c \frac{1}{WQ} \frac{df(Q,W)}{dW} \quad (2.46)$$

olarak ifade edilir. Böylece hızlı bir parçacığın bir miktar enerji ve momentum transfer ettiği bir çarpışmada inelastik diferansiyel tesir kesiti (IDCS) için ifade iki çarpanı içermektedir. İlk çarpan gelen parçacık ile ilgilidir. İkinci çarpan hedef ile ilgilidir ve bir atom veya molekülün genelleştirilmiş osilatör şiddetidir. Genelleştirilmiş osilatör şiddeti, bu olaydaki temel nesneyi oluşturur ve hedef ile ilgili tüm bilgiyi içerir. Toplam IDCS,

$$s^n = \int_0^{W_{\max}} dW W^n \int_{Q_-}^{Q_+} dQ \frac{d^2 s}{dQdW} \quad (2.47)$$

ifadesine eşittir (Fernández-Varea ve ark., 1993). Burada  $Q$  geri tepme enerjisi,  $Q_- < Q < Q_+$  aralığında değerler almaktadır. Geri tepme enerjisi,

$$Q_-(E,W) = \sqrt{\frac{W^2}{b^2} + (mc^2)^2} - mc^2 \quad (2.48)$$

ifadesi ile verilmektedir (Fano, 1963; Inokuti, 1978).

İnelastik ortalama serbest yol  $I_{in}^{-1}$  (birim uzunluktaki inelastik çarpışma olasılığı), durdurma gücü  $S$  (birim uzunluktaki enerji kaybı, (SP)) ve enerji straggling parametresi  $\Omega_{in}^2(E)$  sırası ile,

$$I_{in}^{-1} = N\mathcal{S}^{(0)} \quad (2.49)$$

$$S_{in} = N\mathcal{S}^{(1)} \quad (2.50)$$

$$\Omega_{in}^2(E) = N\sigma_{in}^{(2)} \quad (2.51)$$

ifadeleri ile verilmektedir (Fernández–Varea, 1998). Burada,  $N$  birim hacimdeki atomların (veya moleküllerin) sayısı,  $\mathcal{S}^{(0)}$  inelastik saçılma tesir kesiti,  $\mathcal{S}^{(1)}$  durdurma tesir kesiti ve  $\mathcal{S}^{(2)}$  enerji straggling tesir kesitidir.

Bu çalışmada inelastik çarpışma yolu ile enerji kaybı gözönünde alınarak Denk. (2.46) ile verilen diferansiyel tesir kesiti kullanılmış sadece uzak etkileşmelere değiş-tokuş etkileşme terimi katılarak elde edilen analitik bir ifade sunulmuştur.

### 2.2.6. Genelleştirilmiş Geçiş İhtimalleri ve Osilatör Şiddeti

Denklem (2.43) de verilen atomik matris elemanı,  $e_n$  ve  $E_n = \frac{hc}{l}$  olmak üzere 0 düzeyinden  $n$  düzeyine geçişe eşlik eden optiksel geçiş ihtimali,

$$f_{0n}(K) = (E_n - E_0) \frac{2m}{K^2 \eta^2} |e_{0n}(K)|^2 \quad (2.52)$$

ifadesine eşit olur. Bohr yarıçapı,  $a_0 = \frac{\eta^2}{me^2} = 0.5292 \times 10^{-8}$  cm ve Rydberg enerjisi

$$R = \frac{me^4}{2\eta^2} = 13.6 \text{ eV} \text{ olmak üzere } Ra_0^2 = \frac{me^4}{2\eta^2} \frac{\eta^4}{m^2 e^4} = \frac{\eta^2}{2m} \text{ olduğundan Denk. (2.44),}$$

$$f_n(K) = (E_n / R)(Ka_0)^{-2} |e_n(K)|^2 \quad (2.53)$$

ifadesine dönüşür.  $f_n \equiv f$ , atom tarafından  $E_n = \frac{hc}{\lambda}$  enerjili bir fotonun soğurması için tesir kesiti ile orantılıdır ve tüm mümkün geçişler için  $f_n$  nin toplamı 1 dir (Inokuti, 1971).

Bu kavramın basitliğine rağmen genelleştirilmiş osilatör şiddeti, Denk. (2.53), Denk. (2.43) de verildiği gibi teorik olarak bir atom veya molekülün matris elemanlarından hesaplanır. Gerçekte bir atom veya moleküler sistemin doğru öz fonksiyonunu bulmak çok zor ve karmaşık bir işlemdir. Atom veya moleküler sistem ile elektronun çarpışması işleminde, pratik olması ve daha doğru veri temin etmesi nedeni ile osilatör şiddeti,  $f_n$  in bulunmasında deneysel veriler tercih edilebilir. Denklem (2.53) deki,  $f_n(K)$ ,

$$\frac{df(Q,W)}{dW} \equiv \frac{W}{Q} \left| \langle \Psi | \sum_{j=1}^Z \exp(iqr_j / \eta) | \Psi_0 \rangle \right|^2 \quad (2.54)$$

biçiminde de ifade edilebilir (Fernández-Varea,1998). Burada  $\Psi_0$  ve  $\Psi$  temel ve uyarılmış durum dalga fonksiyonlarıdır. Maalesef GOS, analitik olarak sadece hidrojen atomu (Inokuti, 1971) ve serbest elektron gazı (Lindhard,1954; Lindhard ve Winter,1964) için bilinmektedir. Diğer elementler için, Denk. (2.54) in matris elemanlarından hesaplanabilmektedir. (GOS), Denk. (2.46) de verildiği gibi tesir kesitinin hesaplaması için gereklidir ve hedef atomun karakteristik özelliklerini tanımlamaktadır.

GOS ifadesi (Liljequist,1985),

$$\frac{df(Q,W)}{dW} \equiv \sum_{i=1}^M f_i F(W_i; Q, W) \quad (2.55)$$

veya,

$$\frac{df(Q,W)}{dW} \equiv \int_0^{\infty} \frac{df(W)}{dW} F(W_i; Q, W) \quad (2.56)$$

biçiminde tanımlanmaktadır (Fernández-Varea ve ark.,1993). Burada  $W_i$ , rezonans enerjisi,  $Q$ , geri tepme enerjisi ve  $W$  enerji kaybı olmak üzere,  $F(W_i; Q, W)$   $i$  kabuğun uyarma spektrumudur.  $F(W_i; Q, W)$ , Liljequist (1985) tarafından tekli osilatör modeli ile,

$$F(W_i; Q, W) = d(W - W_i)q(W_i - Q) + d(W - Q)q(Q - W_i) \quad (2.57)$$

olarak verilmiştir. Burada,  $d(W - W_i)$  Dirac-delta fonksiyonu ve  $q(Q - W_i)$  adım fonksiyonudur.

Bohr' a göre (Bohr, 1948) inelastik uyarmalar, bağlı elektronlar (iç kabuk) ile rezonans benzeri etkileşimler ve valans elektronları gibi serbest elektronlarla büyük momentum transferi nedeni ile olan etkileşmeler olmak üzere iki kısma ayrılabilir. Valans elektronları ile olan büyük momentum transferli etkileşmelerde atomik elektron serbestmiş gibi düşünülebilir. Rezonans benzeri etkileşimler, küçük momentum transferli ve bağlanma enerjisi mertebesindeki enerji transferli uyarmalara karşılık gelmektedir.

Serbest olarak göz önüne alınan zayıf bağlı elektronlarla etkileşmeler, ikili karaktere sahiptir. Bu çarpışmalar için,  $Q = W$  ifadesi geçerlidir. Özel bir durumda, hedef elektron ile etkileşim için rezonanstan serbest etkileşime geçiş, momentum transfer enerjisi  $Q$  nun, tipik rezonans enerjisi  $W_i$  yi aştığında olmaktadır (Bohr, 1948; Inokuti, 1971; Liljequist 1983). Denklem (2.57) ile verilen uyarma spektrumu, rezonans benzeri karaktere sahip olan ( $W = W_i$  ve  $Q < W$  durumu) iç kabuk elektronlarının uyarma spektrumu ve ( $Q > W_i$  ve  $Q = W$ ) serbest durum uyarma spektrumu olmak üzere iki kısma ayrılır.

$\frac{df(Q,W)}{dW}$  (GOS),  $Q \rightarrow 0$  için  $\frac{df(Q=0,W)}{dW}$  Optik osilatör şiddetine (OOS) indirgenir ve  $\frac{df(W)}{dW}$  nin optik veri modellerinden elde edilmesi ile GOS kolaylıkla oluşturulabilir.

### 2.2.7. Genelleştirilmiş Osilatör Şiddeti (GOS), Optiksel Veriden GOS un Oluşturulması ve Optiksel Osilatör Şiddeti (OOS)

OOS, Inokuti (1971) tarafından,

$$\frac{df(W)}{dW} = \frac{2W}{pe_p^2} Z \text{Im} \left( \frac{-1}{e(W)} \right) \quad (2.58)$$

ifadesi ile verilmiştir. Burada,  $Z$  her bir atomdaki (veya moleküldeki) elektronların sayısı olmak üzere,  $e_p = \sqrt{4p\eta^2 e^2 r/m}$  plazma enerjisidir. Seçilen madde için  $n$  kırılma indisi ve  $K$  sönüm sabiti deneysel optik veriden elde edilip, kompleks dielektrik sabiti,  $e = (n + iK)^2$  ye yerleştirilmesi ile OOS oluşturulmuş olur.

OOS un hazırlanmasında diğer bir yaklaşım olarak, Yerel Plazma Yaklaşımı (LPA) verilmektedir (Johnson ve Inokuti,1983):

$$\frac{df(W)}{dW} = \int_0^{r_{ws}} r(r) d[W - ge_p(r(r))] 4\pi r^2 dr \quad (2.59)$$

Burada  $r_{ws}$  Wigner-Seitz küresinin yarı çapı ve  $g$  ise ortalama uyarma enerjisinin elde edilmesinde kullanılan ayarlanabilir bir parametredir.

Optik veri modellerine bir alternatif olarak 100 eV dan fazla enerji kayıpları için,  $|e|^2 \approx 1$  alınabilir ve OOS,  $s_{ph}$  foto-elektrik tesir kesiti ile orantılıdır (Fernández-Varea, 1998). Bu veri özellikle iç kabuk iyonlaşması ile ilgili olan X

ışınından elde edilen veri ile sağlanmak zorundadır. OOS, ya hazır tablolardan  $s_{ph}$  foto-elektrik tesir kesiti (Henke ve ark., 1993) ya da teorik foto-elektrik tesir kesiti ifadesinin (Cullen ve ark., 1989) kullanılması ile aşağıdaki formülden elde edilmektedir (Fano ve Cooper, 1968; Cengiz, 2002):

$$\frac{df(W)}{dW} = \frac{mc}{2p^2 \eta e^2} s_{ph} \quad \text{veya} \quad f_i = \frac{1}{109.8} \int_{B_i}^{\infty} s_{ph}(E) dE \quad (2.60)$$

Ele alınan OOS un tutarlılığı, değişik toplama kuralları yolu ile kontrol edilebilmektedir (Fernández-Varea, 1998). OOS,  $f$ -toplama kuralını (Bethe sum rule) sağlamalıdır (Palik, 1985):

$$\frac{1}{Z} \int_0^{\infty} \frac{df(W)}{dW} dW = 1 \quad \text{veya} \quad \sum_i^M f_i = Z \quad (2.61)$$

ve katılar için mükemmel perdeleme (ps) toplama kuralı,

$$\frac{e_p^2}{Z} \int_0^{\infty} \frac{1}{W^2} \frac{df(W)}{dW} dW = 1 \quad (2.62)$$

diğer kullanılan ifade ortalama uyarma enerjisidir ve

$$I = \exp \left( \frac{1}{Z} \int_0^{\infty} \ln W \frac{df(W)}{dW} dW \right) \quad (2.63)$$

ifadesi ile verilir (Fernández-Varea, 1998).

### 2.2.7.1. Genelleştirilmiş Osilatör Şiddeti için Toplama Kuralı

$m=0 \rightarrow n$  geçişine eşlik eden salınım şiddetlerinin tüm atomik durumlar üzerinden toplamı alındığında,

$$\sum_n f_{0n}(K) = \frac{2m}{\eta^2 K^2} \sum_n (E_n - E_0) \left| \int e^{iKx} y_0 y_n^* dt \right|^2 \quad (2.64)$$

olur.  $y_0$ ,  $y_n^*$  fonksiyonları,

$$\nabla^2 y_0 + \frac{2m}{\eta^2} (E_0 - V) y_0 = 0 \quad (2.65a)$$

$$\nabla^2 y_n + \frac{2m}{\eta^2} (E_n - V) y_n^* = 0 \quad (2.65b)$$

denklemlerini sağlayan fonksiyonlardır. Denklem (2.65a) nın  $y_n^*$  ve (2.65b) nin  $y_0$  la çarpılması ve tüm uzay üzerinden integral alınması ile,

$$(E_n - E_0) \int e^{iKx} y_0 y_n^* dt = \frac{\eta^2}{2m} \int (y_n^* \nabla^2 y_0 - y_0 \nabla^2 y_n^*) e^{iKx} dt \quad (2.66)$$

ifadesine eşit olur ve Denk. (2.66) in hesaplanması ile,

$$\frac{2m}{\eta^2 K^2} \sum_n (E_n - E_0) \left| \int e^{iKx} y_0 y_n^* dt \right|^2 = \sum_n \left| \int y_n y_0^* e^{iKx} dt \right|^2 \quad (2.67)$$

ifadesi elde edilir. Böylece sonuç olarak,

$$\sum_n f_{0n}(K) = 1 \quad (2.68)$$

bulunur.

### 2.2.7.2. Ortalama Uyarma Enerjisi, $I$

Ortalama uyarma enerjisi,  $I$ , durdurma gücü formülünün temel parametresidir. Ortalama uyarma enerji değeri  $I$ , ortamın elektronik yapısına özellikle de valans elektronların düzenine duyarlıdır. Bu nedenle  $I$ , moleküler bağlanma ve ortamın tüm fiziksel durumundan etkilenmektedir.  $I$  değerinin tam teorik ifadesinin tanımı zordur ve güvenilir deneysel bilgi elde edilememektedir (Seltzer ve Berger, 1982). Ortalama uyarma enerjisi, gazlar için,

$$\ln I = \int_0^{\infty} \frac{df}{dE} \ln E dE \bigg/ \int_0^{\infty} \frac{df}{dE} dE \quad (2.69)$$

ifadesi ile verilmektedir (Seltzer ve Berger, 1982). Burada  $\frac{df}{dE}$ , temel seviyeden daha üst enerji ( $E$ ) seviyesine uyarılan elektronların birim enerji başına düşen optiksel dipol osilatör şiddetinin ( $f$ ) yoğunluğudur. Yoğun madde ortamı için ortalama uyarma enerjisi,

$$\ln I = \frac{2}{pw_p^2} \int_0^{\infty} w dw \text{Im}[-1/e(w)] \ln(\eta w) \quad (2.70)$$

ifadesi ile verilmektedir (Seltzer ve Berger, 1982). Burada  $\eta w_p$ , plazma enerjisi ve  $e(w)$ ,  $w = E/\eta$  frekansında kompleks dielektrik cevap fonksiyonudur.  $I$  değeri, yerel plazma yaklaşımı (LPA) kullanılarak da teorik olarak hesaplanmaktadır (ICRU-37,1984). Bu modele göre ortalama uyarma enerjisi,

$$\ln I = \frac{1}{Z} \int_0^{\infty} 4pr^2 n_0(r) \ln(g\eta w_0) dr \quad (2.71)$$

ifadesi ile verilir. Burada,  $w_0 = [4pe^2n_0(r)/m]^{1/2}$ , çekirdekten  $r$  uzaklıkta bir  $n_0(r)$  elektron yoğunluğuna karşılık gelen plazma frekansı ve  $g$ ,  $\sqrt{2}$  değerine sahip Lindhard ve Scharff (1953) tarafından verilen bir parametredir. İlk olarak bu ifade Lindhard ve Scharff (1953) tarafından atomun foto-soğurma özelliklerini tanımlamada kullanıldı. Yerel plazma yaklaşımı varsayımına göre, atomdaki her bir hacim elemanı, bağımsız olarak soğurma şiddetine katkıda bulunmaktadır (Johnson ve Inokuti, 1983).

$I$  değeri, yarı-deneysel osilatör şiddeti dağılımlarının kullanılması ile de türetilir (ICRU-37, 1984). Bazı gazlar için değişik teoriksel ve yarı-deneysel yöntemlerle elde edilen ortalama uyarma enerjisi değerleri, Tablo 2.1 de verilmektedir.

**Tablo 2.1.** Teorik ve yarı-deneysel yöntemler ile elde edilen ortalama uyarma enerjisi değerleri (ICRU-37, 1984).

	$I(eV)$	Yöntem	Referanslar
H	18.6 19.21 19.2 $19.26 \pm 0.19$	Yarı-deneysel OSD'dan Teoriksel OSD'dan Yarı-deneysel OSD'dan Yarı-deneysel OSD'dan	Victor ve Dalgarno (1969) Ford ve Browne (1973) Gerhart (1975) Zeiss ve ark. (1977a,b)
N	82.1 77 76.91 $81.84 \pm 0.82$	Yarı-deneysel OSD'dan Teoriksel OSD'dan Teoriksel OSD'dan Yarı-deneysel OSD'dan	Dalgarno ve ark. (1967) McGuire (1971) Dehmer ve ark. (1975) Zeiss ve ark. (1977a,b)
O	99.2 93.5 $95.02 \pm 0.95$	Teoriksel OSD'dan Teoriksel OSD'dan Yarı-deneysel OSD'dan	McGuire (1971) Dehmer ve ark. (1975) Zeiss ve ark. (1977a,b)

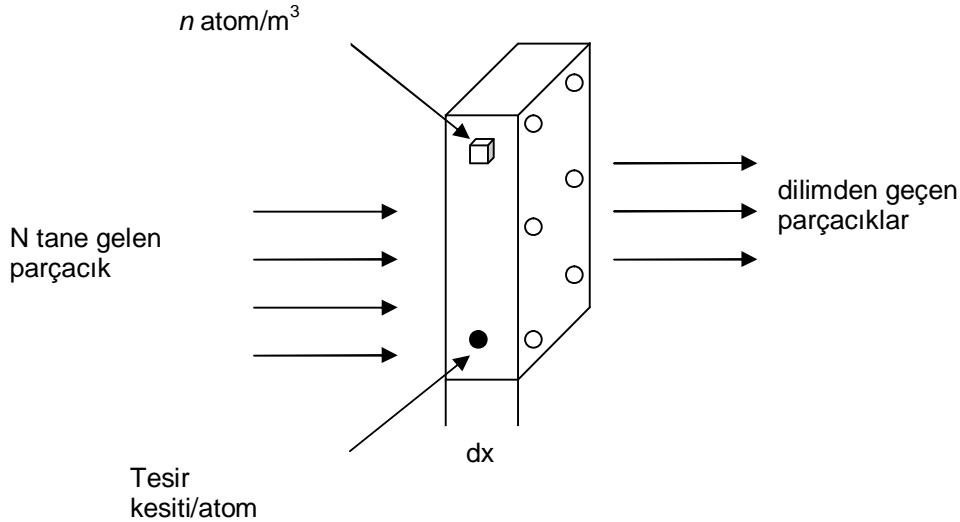
### 2.3. Elektronların Enerji Kaybı ve Durdurma Ortamını Karakterize Eden Nicelikler

Durdurma ortamı, durdurma gücü, ortalama serbest yol, menzil ve enerji stragging parametreleri ile tanımlanır. Elektronların birim yol başına kaybettikleri enerji miktarı durdurma gücü,  $S(E) = -\frac{dE}{dx}$ , olarak tarif edilir.

Elektronun çarpışmalar sonucu kaybetmiş olduğu enerji miktarı çarpışma durdurma gücü ve ışınım sonucu kaybettikleri enerji de ışınım (radiatif) durdurma gücü olarak tanımlanır. Toplam durdurma gücü iki ifadenin toplamına eşittir:

$$-\frac{dE}{dx} = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{çarp.}} + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{ışınım}} \quad (2.72)$$

Burada (-) işareti enerji kaybını göstermektedir. Işınım kayıpları için ışınım durdurma gücü sadece çok büyük ( $E > 1$  MeV) enerjiler için geçerlidir ve 1 MeV in altındaki enerjilerde, radyasyon kayıpları ihmal edilebilir.



**Şekil 2.9.** Tesir kesiti ve demet şiddeti arasındaki ilişki.

Bir maddenin yüzey alanı  $A$  ve kalınlığı  $dx$  olan bir dilimini alalım (Şekil 2.9.). Eğer maddede birim hacimde  $n$  tane atom varsa, dilimin hacmi  $A dx$  olduğundan, dilimde toplam  $n A dx$  tane atom vardır. Belirli bir etkileşme için her atom bir  $s$  tesir kesitine sahiptir. Bu nedenle, dilimdeki tüm atomların toplam tesir kesiti  $n A s dx$  dir. Eğer bir etkileşme olayında gelen parçacık demetinde,  $N$  tane gelen parçacık varsa, madde dilimdeki atomlar ile etkileşen parçacık sayısı  $dN$  nin  $N$  ye oranı,

$$\frac{dN}{N} = -\frac{n A s dx}{A} = -n s dx \quad (2.73)$$

şeklinde yazılabilir. Denkem (2.73) dilim son derece küçük kalınlıkta olduğu, yüzeydeki bir atomun arkasındakini perdelemediği durumda geçerlidir. Belirli bir  $x$  kalınlıktaki bir dilimdeki atomlar ile etkileşen gelen parçacıkların oranını bulmak için,  $dN / N$  nin integrali alınır ve düzenlenirse,

$$N(x) = N_0 e^{-n s x} \quad (2.74)$$

elde edilir.  $x$  kalınlığındaki dilimden geçen parçacık sayısı  $N(x)$ , kalınlık ile üstel olarak azalır. Tesir kesitinin birimi  $m^2$  cinsinden veya *barn* olarak ifade edilir.  $Barn = 10^{-24} \text{ cm}^2$  dir.

Bir elektronun iki etkileşme arasında gidebildiği mesafeye serbest yol denir. Bir madde içerisinde bir parçacığın *I ortalama serbest yolu*, parçacığın bir hedef atom ile çarpışmaksızın aldığı yoldur. Ortalama serbest yol,

$$I = \frac{1}{(n s_t)} \quad (2.75)$$

ifadesine eşittir. Burada  $n = rN_0 / A$ , ( $r$ , ortamın yoğunluğu,  $N_0$  Avagadro sayısı,  $A$  hedef atomun kütle numarası)  $\text{cm}^3$  teki atomların sayısıdır ve  $s_t$ , elektronun tüm olaylar için toplam tesir kesitidir.

$$s_t = s_{el} + s_{in} + s_b \quad (2.76)$$

İfadesine eşittir. Burada  $s_{el}$ , elastik etkileşme tesir kesiti,  $s_{in}$  inelastik etkileşme tesir kesiti ve  $s_b$  bremsstrahlung (frenleme ışınması) tesir kesitidir. Bir madde üzerine gelen yüklü bir parçacık hedef atomun Coulomb alanı ile etkileşir. Bu etkileşme tesir kesiti kavramı ile anlatılır. Bir hedef parçacığının tesir kesiti, ilgili olayın doğası ve gelen parçacığının enerjisi ile değişir.

Elektronların ortama giriş doğrultusunda gidebildikleri mesafeye de menzil denir. Menzil parçacığının türüne, materyalin yapısına ve parçacığının enerjisine bağlıdır. Menzil, Denk. (2.72) in, parçacığının tüm enerjileri üzerinden integrali alınarak hesaplanır:

$$R = \int_T^0 \frac{1}{dE/dx} dE \quad (2.77)$$

Denklem (2.77) den bulunan menzil,  $R$ , sürekli yavaşlama yaklaşımı, CSDA-menzili olarak da adlandırılmaktadır. Menzil için durdurma gücünün integralinin analitik olarak alınması oldukça güçtür. Bu nedenle integralin alınması için sayısal çözümlene metodları kullanılarak elektronlar için menzil elde edilir.

Elektronlar hedeften geçerken enerji kaybı dağılımlarının hesaplanması için CSDA-menzili elde edilmesi yeterli değildir. Bunun için enerji straggling

parametresi,  $\Omega^2(E)$  nin de hesaplanması gerekmektedir (Liljequist, 1983). Enerji straggling parametresi Denk. (2.51) ile hesaplanmaktadır.

Bu çalışmada CSDA-menzili yamuk kuralından hesaplanmıştır. Yamuk toplama kuralı Ek A da verilmektedir.

#### 2.4. Bileşikte Enerji Kaybı-Bragg Toplama Kuralı

Bragg ve Kleeman (1905) in çalışmalarından bu güne kadar, bileşiklerin durdurma gücünün, atomik bileşenlerin durdurma gücünün ağırlıklı toplamı ile elde edildiği bilinmektedir:

$$S_{col}/r = \sum_j w_j (S_{col}/r)_j \quad (2.78)$$

Burada  $w_j$ ,  $j$  inci atomik bileşenin ağırlıklı kesri ve  $S_{col}/r$ ,  $j$  inci atomik bileşenin kütle çarpışma durdurma gücüdür.

Bu toplama varsayımı bileşiğin ortalama uyarma enerjisini belirlemek için de kullanılmaktadır:

$$\langle I \rangle = \exp \left\{ \left[ \sum_j w_j (Z_j / A_j) \ln I_j \right] / \langle Z / A \rangle \right\} \quad (2.79)$$

Burada,  $\langle Z / A \rangle = \sum_j w_j Z_j / A_j$  ifadesine eşittir.  $Z_j$ ,  $A_j$  ve  $I_j$  sırası ile  $j$  inci bileşenin atom numarası, atomik ağırlığı ve ortalama uyarma enerjisidir.

Bileşiğin tesir kesiti toplama kuralı yolu ile,

$$S_{\text{bil.}}(E) = \sum_i n_i S(Z_i) \quad (2.80)$$

elde edilir (Watson ve ark., 2004). Burada  $n_i$ , moleküldeki  $Z_i$  atom numaralı atomların sayısıdır.

### 3. MATERYAL ve METOD

Elektronların maddede enerji kaybı hakkında elde edinilen bilgi nükleer fizik, radyoloji, nükleer tıp, sağlık fiziği, radyasyon dozimetrisi gibi bir çok alan için önemlidir. Özellikle de radyoterapide enerji depolamasının sayısal bilgisi doz hesaplamaları için gereklidir. Sağlık fiziğinde doz hesaplamalarının elde edilmesinde, doku eşdeğeri materyaller üzerinde elektronların inelastik etkileşme karakteristikleri olan durdurma gücü, ortalama serbest yol, menzil ve ayrıca doz dağılımlarının elde edilmesi için de enerji straggling hesaplamalarının yapılması gerekir. Düşük enerjili elektronlar için bu karakteristikler doğrudan deneysel ölçümlerden veya 10 keV den yukarı enerjilerde daha doğru olan Bethe nin durdurma gücü teorisinden elde edilememektedir. Tüm enerji aralığında geçerli olan çok az çalışma mevcuttur. Son yıllarda Salvat ve ark. (2001) tarafından elektronların etkileşim karakteristikleri ile ilgili katılar için hesaplama yapan PENELOPE programı geliştirilmiştir. Düşük ve orta enerjilerde geçerliliğini koruyan ve özellikle de biyolojik hedeflerde çok az çalışma vardır.

Bu çalışmanın amacı, GOS modeli kullanılarak düşük ve orta enerjilerde geçerli olan ve insanın biyolojik yapısında bulunan H, C, N, O gibi hedeflerin yanı sıra adenin, guanin, timin, sitozin gibi biyolojik materyallerde durdurma gücü, ortalama serbest yol, menzil ve enerji straggling hesabı yapabilecek bir yöntemin geliştirilmesi, programının yazılması ve bu programın biyolojik materyaller ve DNA bileşimine uygulanmasıdır. Bu amaçla bu çalışmada geliştirilen programın sonuçları PENELOPE sonuçları ile de karşılaştırıldı.

Aşağıdaki kesimde ise PENELOPE programının çalıştırılması hakkında bilgi verilecektir.

#### 3.1. Programın Temini ve Hazırlanması

Salvat ve ark., (2001) tarafından 100 eV-1 GeV enerji aralığındaki enerjilerde gelen elektron için durdurma gücü, ortalama serbest yol, CSDA-

menzili ve doz dağılımlarını hesaplamak için önerilen PENELOPE programı, Al, Au, Ag gibi metallerde elektronların etkileşim karakteristiklerini Monte Carlo yöntemi ile hesaplamaktadır. Bu program Fortran 77 bilgisayar programı ile yapılmış bir kod sistemidir.

Öncelikle bu çalışmadan elde edilen sonuçların, PENELOPE programıyla bulunan durdurma gücü sonuçları ile karşılaştırılması amacıyla PENELOPE 2001 kod sisteminin inelastik etkileşimler için durdurma gücü hesabı yapan penelope.f alt programı çalıştırıldı. Penelope.f alt programının çalıştırılması ile oluşturulan Penelope.exe nin karbon için örnek veri giriş dosyası Şekil 3.1. de verilmektedir.

```

C:\> Kısayol penelope.exe
Enter material name, for your information (no more than 60 characters) ...
Material:
Select one option (1 or 2):
  1: Enter composition data from the keyboard
  2: Read them from the file pdcompos.tab
2
Enter material identification number ...
6
  6 AMORPHOUS CARBON
Element: C (Z= 6), atoms/molecule = 1.00000E+00
Density = 2.00000E+00 g/cm**3
Number of electrons per molecule = 6.00000E+00
Mean excitation energy = 8.10000E+01 eV
Estimated energy and oscillator strength of the plasmon:
Wcb = 2.35173E+01 eV, Fcb = 4.00000E+00
(for insulators, these quantities should be set equal to zero)
Do you wish to change the Wcb and Fcb values? (1=yes,2=no)
(type 2 if you are not sure...)
2
Wcb = 2.35173E+01 eV, Fcb = 4.00000E+00
Sternheimer adjustment factor = 3.37158E+00
PENELOPE's material data file is being created.
Enter path+name for this file (up to 80 characters) ...

```

**Şekil 3.1.** PENELOPE 2001 penelope.f alt programı veri giriş dosyası.

PENELOPE 2003 kod sisteminde ortalama serbest yol ve menzil sonuçlarının elde edilmesi için tables.f alt programı çalıştırılmadan önce, penelope.f alt programı ile birlikte çalışan material.f alt programı çalıştırılarak material.exe den material.mat dosyası elde edildi. Materyal veri dosyasının oluşturulduğu material.mat dosyası, PENELOPE 2003 kod sisteminde penelope.f alt programıyla birlikte çalışan tables.f alt programında kullanılmaktadır. Tables.f alt programından tables.exe oluşturuldu ve çalıştırılarak durdurma gücü, ortalama serbest yol ve menzil sonuçlarının alındığı tables.dat çıktı dosyası elde edildi.

```

Kısayol material.exe
Select one option (1 or 2):
  1: Enter composition data from the keyboard
  2: Read them from the file pdcompos.tab
2
Enter material identification number ...
6
6 AMORPHOUS CARBON
Element: C (Z= 6), atoms/molecule = 1.00000E+00
Density = 2.00000E+00 g/cm**3
Number of electrons per molecule = 6.00000E+00
Mean excitation energy = 8.10000E+01 eV
Estimated oscillator strength and energy of the plasmon:
Fcb = 4.00000E+00, Wcb = 2.35173E+01 eV
(for insulators, these quantities should be set equal to zero)
Do you wish to change the Fcb and Wcb values? (1=yes,2=no)
(type 2 if you are not sure...)
2
Fcb = 4.00000E+00, Wcb = 2.35173E+01 eV
Sternheimer adjustment factor = 3.37125E+00
E/P in. grouping factor = 1.05000E+00
Compton grouping factor = 1.50000E+00
PENELOPE's material data file is being created.
Enter path+name for this file (up to 80 characters) ...
material.mat

```

Şekil 3.2. PENELOPE 2003 material.f alt programı veri giriş dosyası.

```

C:\> Kısayol tables.exe

The output file 'tables.dat' has been generated.
Do you wish to calculate quantities for specific
particles and energies? (y/n)
y
Range (1) or mfp (2)? (Ctrl-C stops the program)
2
Enter KPAR, E, ICOL ...
1,100,3

Electron.      E = 1.0000E+02 eV.      inelastic scattering
mean free path = 2.8848E-08 cm
               = 5.7697E-08 g/cm**2
  inverse mfp  = 3.4664E+07 1/cm
               = 1.7332E+07 cm**2/g
  cross section = 3.4568E-16 cm**2

Enter KPAR, E, ICOL ...
1,200,3

Electron.      E = 2.0000E+02 eV.      inelastic scattering
mean free path = 4.3944E-08 cm
               = 8.7889E-08 g/cm**2
  inverse mfp  = 2.2756E+07 1/cm
               = 1.1378E+07 cm**2/g
  cross section = 2.2693E-16 cm**2

Enter KPAR, E, ICOL ...
1,300,3

Electron.      E = 3.0000E+02 eV.      inelastic scattering
mean free path = 5.8490E-08 cm
               = 1.1698E-07 g/cm**2
  inverse mfp  = 1.7097E+07 1/cm
               = 8.5484E+06 cm**2/g
  cross section = 1.7050E-16 cm**2

Enter KPAR, E, ICOL ...

```

**Şekil 3.3.** İnelastik ortalama serbest yol için PENELOPE 2003 tables.f alt programı veri giriş dosyası.

Şekil 3.2. material.exe den, Şekil 3.3. ve Şekil 3.4. tables.exe den elde edilen karbon hedefi için örnek veri giriş dosyasını göstermektedir. Tables.exe den table.dat dosyası yolu ile karbon hedefi için örnek çıktı dosyası Ek B de verilmektedir. Biyolojik materyallerde PENELOPE 2003 kod sisteminden elde edilen ortalama serbest yol ve menzil sonuçları ile bu çalışma sonuçlarının karşılaştırması bulgular ve tartışma bölümünde verilecektir.

```

C:\> Kısayol tables.exe

The output file 'tables.dat' has been generated.

Do you wish to calculate quantities for specific
particles and energies?  (y/n)
y

Range (1) or mfp (2)?      (Ctrl-C stops the program)
1

Enter KPAR, E ...
1,200

Electron.      E = 2.00000E+02 eV
               range = 1.4024E-07 cm
               = 2.8047E-07 g/cm**2

Enter KPAR, E ...
1,300

Electron.      E = 3.00000E+02 eV
               range = 3.2844E-07 cm
               = 6.5687E-07 g/cm**2

Enter KPAR, E ...
1,400

```

**Şekil 3.4.** Menzil hesabı için PENELOPE 2003 tables.f alt programı veri giriş dosyası.

```

C:\> Kısayol penelope.exe

Enter material name, for your information (no more than 60 characters) ...
nitrogen
Material: nitrogen

Select one option (1 or 2):
  1: Enter composition data from the keyboard
  2: Read them from the file pdcompos.tab
2
Enter material identification number ...
7

  7 NITROGEN
Element: N (Z= 7), atoms/molecule = 1.00000E+00
Density = 1.16528E-03 g/cm**3

Number of electrons per molecule = 7.00000E+00
Mean excitation energy = 8.20000E+01 eV

Estimated energy and oscillator strength of the plasmon:
Wcb = 4.55235E-01 eV, Fcb = 3.00000E+00
(for insulators, these quantities should be set equal to zero)

Do you wish to change the Wcb and Fcb values? (1=yes,2=no)
(type 2 if you are not sure...)
2
Sternheimer adjustment factor = 2.18817E+00

PENELOPE's material data file is being created.
Enter path+name for this file (up to 80 characters) ...
material.mat

```

**Şekil 3.5.** Azot için PENELOPE 2001 penelope.f alt programı veri giriş dosyası.

### 3.2. İnelastik Etkileşim Karakteristiklerinin Hesaplamasında Kullanılan Niceliklerin Elde Edilmesi

Elektronların inelastik etkileşme karakteristiklerinden özellikle GOS model ile durdurma gücünün hesabı iç kabuk ve valans kabuğu osilatör şiddetleri, iç ve valans kabuğu PMIP leri (K, L,... ve valans kabuğu uyarma enerjileri) ve hedef atomun elektronu ile gelen elektron arasındaki değiş-tokuş etkileşmesine bağlıdır. Bu niceliklerin doğru tanımlanması daha gerçekçi durdurma gücü ve diğer inelastik etkileşme karakteristiklerinin elde edilmesini sağlar. Aşağıdaki kesimde inelastik etkileşme karakteristiklerinin hesaplanması ve teorik sonuçlarla karşılaştırılması verilmektedir.

#### 3.2.1. Optiksel Osilatör Şiddeti-OOS, Kısmi İyonlaşma Potansiyeli ve Ortalama İyonlaşma Enerjisinin Hesaplanması

İç kabuk iyonlaşması için (genellikle K kabuğu ve 100 eV dan fazla enerji kayıpları için ) OOS un bulunması X ışınından elde edilen bilgi ile sağlanmak zorundadır. Bu durumda OOS Denk. (2.60) dan K kabuğu için,

$$f_k = \frac{1}{109.8} \int_{B_k}^{\infty} s_{ph}(E) dE \quad (3.1)$$

ifadesinden hesaplanır. Burada  $s_{ph}(E)$ , barn biriminde, verilen E (MeV) enerjide fotoelektrik tesir kesitidir.

Bu çalışmada her bir hedef atomu için K kabuğu osilatör şiddeti  $f_k$ , 50 eV-1 keV bağlanma enerjisinde Henke ve ark. (1993) tarafından verilen hazır deneysel fotoelektrik tesir kesitlerinin kullanılması ile ve diğer enerjilerdeki (1 keV ile 1 MeV) Berger ve ark. (1987) tarafından yapılan XCOM programından elde edilen fotoelektrik tesir kesitlerinin kullanılması ile Denk. (3.1) in sayısal integrasyonu yoluyla hesaplandı.

Göz önüne alınan OOS un doğruluğu değişik toplama kuralları yolu ile kontrol edilebilir. Örneğin, OOS  $f$  – toplama kuralı, Denk. (2.61) i sağlamalıdır, yani tüm kabuk osilatör şiddetleri toplamı 1 e eşit olmalıdır. OOS un doğruluğunun kontrolü için diğer ifade (Denk. (2.63)),

$$\left( \sum_i^M f_i \ln W_i \right) + f_v \ln W_v = Z \ln I \quad (3.2)$$

dır. Burada  $i = 1 \dots M$  iç kabukların sayısı,  $f_k, f_L, f_M \dots$  iç kabuk osilatör şiddetleri,  $W_k, W_L, W_M \dots$  ve  $W_v$  sırası ile K, L, M .... yani iç kabuk rezonans enerjileri ve valans kabuğu rezonans enerjileridir.  $B_i$  iç kabuk bağlanma enerjisi olmak üzere iç kabuk rezonans enerjisi  $W_i$ ,

$$W_i = aB_i \quad (3.3)$$

İfadesine eşittir (Sternheimer, 1952; Liljequist,1983). Burada  $a$ , Sternheimer (1982) tarafından tanıtılan ve 1.5-2.5 arasında değerler alabilen yarı-deneysel ayarlanabilir parametredir. Yarı-deneysel ayarlanabilir çarpan  $a$ , aşağıdaki ifade ile hesaplanmaktadır:

$$a = \exp \left( \frac{Z \ln I - Z_v \ln W_v - \sum_i Z_i \ln B_i}{Z - Z_v} \right) \quad (3.4)$$

Burada  $Z_i = f_i$  ve  $Z_v = f_v$  dir. Valans kabuğu rezonans enerjisi  $W_v$ ,

$$W_v = 28.816 \sqrt{\frac{rZ_v}{A}} \text{ (eV)} \quad (3.5)$$

ifadesine eşittir (Salvat ve Fernández-Varea,1992). Burada  $Z_v$ ,  $r$  ve  $A$  sırasıyla hedef atomun valans elektron sayısı, kütle yoğunluğu ve atom ağırlığıdır. PENELOPE programında  $W_v$  Denk. (3.5) ifadesi ile hesaplanmaktadır.

Salvat ve Fernández-Varea (1992) tarafından önerilen  $W_v$ , katı durumundaki materyallere uygulanabilmektedir. Ancak  $W_v$  atom numarası düşük H, N, O.. gibi biyolojik hedefler için Denk. (3.2) toplama kuralını sağlamamaktadır. Bu nedenle Denk. (3.5) kullanıldığı takdirde, yarı-deneysel parametre  $a$  ve ortalama iyonlaşma enerjisi,  $I$  nın gerçek değeri bulunamamaktadır. İnelastik uyarımlar için rezonans enerjiler  $W_i$  ve  $W_v$ , Denk. (3.2) yi sağlamak zorundadır (Liljequist, 1983). Bu sebeple  $W_i$  ve  $W_v$ , kısmi iyonlaşma potansiyeline, PMIP e eşit düşünülebilir (Liljequist, 1983) ve  $W_i$  ve  $W_v$  bazı araştırmacılar (Salvat ve Fernández-Varea, 1992; Cengiz, 2002) tarafından kabul edildiği gibi uyarma enerjisi olarak dikkate alınabilir. Bu yaklaşım ile valans elektron PMIP i,  $W_v$ , Liljequist (1983) tarafından belirtildiği gibi LPA kullanılarak hesaplanabilir:

$$Z_v \ln W_v = \int_r^{\infty} r(r) \ln(g\eta w_p(r)) 4\pi r^2 dr \quad (3.6)$$

Burada  $r$ , çekirdekten kabuğa olan uzaklık,  $r(r)$ , elektron yoğunluğu ve  $w_p(r) = (4\pi e^2 r(r)/m)^{1/2}$ , lokal plazma frekansıdır. Elektron yoğunluğu  $r(r)$ , Lenz (1932)-Jensen (1932) atom modeline göre Elkamos ve Pape (1982) tarafından aşağıdaki analitik ifadesi ile verilmiştir:

$$r(r) = 3.675 \frac{Z^2 e^{(-h)} (1 + 0.265h)^3}{a_0^3 h^3} \quad (3.7)$$

Burada  $h$ ,

$$h = 3.303 \left( \frac{rZ^{0.3}}{a_0} \right)^{0.5} \quad (3.8)$$

dır.

Bu çalışmada  $W_i$  ve  $W_v$  nin inelastik uyarmalar için PMIP e eşdeğer ve rezonans enerjisinin uyarma enerjisi olarak kabul edilmesi ile  $W_i$  ve  $W_v$  Denk. (3.3) ve Denk. (3.6) dan hesaplanmıştır. Tablo 3.1 de bu çalışmada durdurma gücü ve diğer inelastik etkileşme karakteristiklerin hesabında kullanılan Denk. (3.4) ve Denk. (3.6) dan elde edilen  $a$  ve  $W_v$  değerlerinin diğer teorik sonuçlar ile karşılaştırması verilmektedir.

**Tablo 3.1.** Ayarlanabilir çarpan  $a$  ve valans kabuğu uyarma enerjileri.

Material	$a$ (Bu çalışma)	$a$ (Salvat ve ark., 2001) PENELOPE Programı	$W_v$ ( eV) (Bu çalışma)	$W_v$ ( eV) (Salvat ve ark., 2001) PENELOPE Programı	$W_v$ ( eV) (Sternheimer,1952)
H	1.4	1.37	-	0.2626	-
C	2.48	3.37	34.163	23.51	35.79
N	2.29	2.18	41.077	0.4552	43.98
O	1.65	2.37	51.58	0.5258	52.79
P	2.05	2.06	31.11	13.30	-

İç kabuk ve valans elektronları rezonans enerjilerinin ve OOS un Denk. (3.2) yi sağlaması gereklidir. Hesaplanan bu değerlerin kontrol edilmesi amacı ile bazı hedefler için Denk. (2.61) ve Denk. (3.2) den  $f$  ve  $I$  değerleri ve Bragg toplama kuralından (Denk. (2.79)) bazı bileşikler için ortalama uyarma enerjileri hesaplandı. Bu değerler Tablo 3.1. ve Tablo 3.2. de gösterilmektedir.

**Tablo 3.2.** OOS un tutarlılığını kontrol etmek ve CSP nin hesaplanmasında kullanılan  $f_k$ ,  $W_i$ ,  $f$  ve  $I$  değerleri.

Material	$f_k$	$f_v$	$f$	$g$	$W_i$ (eV)	$I$ ( eV) (Bu çalışma)	$I$ ( eV) (Seltzer ve Berger, 1982)	$I$ ( eV) (ICRU, 1984)
H	1	-	1	-	19.19	19.2	$19 \pm 0.4$	19.2
C	1.8	4	0.966	1.71	705.23	75.77	$78 \pm 7$	78
N	1.72	5	0.986	1.54	941.14	80.12	$82 \pm 2$	82
O	1.81	6	0.968	1.56	898.54	94.46	$95 \pm 2$	95
P	1.67	5	0.98	1.52	279.32 <sup>c</sup> 4406.5 <sup>a</sup> 388.17 <sup>b</sup>	170.68	$173 \pm 15$	-

<sup>a</sup>Fosforun K kabuğu rezonans enerjisi, <sup>b</sup> fosforun L<sub>1</sub> kabuğu rezonans enerjisi ve <sup>c</sup> fosforun L<sub>II</sub> kabuğu rezonans enerjisi

**Tablo 3.3.** OOS un tutarlılığını kontrol etmek için bileşiklerde *I* değerleri.

Material	<i>I</i> ( eV) (Bu çalışma)	<i>I</i> ( eV) (Salvat ve ark., 2001) PENELOPE Programı	<i>I</i> ( eV) (Teorik çalışma)
H <sub>2</sub> O (sıvı-su)	68.68	68.99	75 <sup>a</sup>
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> (adenin)	70.64	73.53	71.4 <sup>a</sup>
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O (guanin)	72.77	75.49	75.0 <sup>a</sup>
C <sub>20</sub> H <sub>27</sub> N <sub>7</sub> O <sub>13</sub> P <sub>2</sub> (stizo- guanin-DNA)	78.80	81.26	78.8 <sup>b</sup>

<sup>a</sup>Seltzer ve Berger, 1982; <sup>b</sup>Verne ve Pimblott, 1995

### 3.2.2. Değiş-tokuş Etkileşme Çarpanı

Gelen parçacık elektron olduğunda prensipte gelen elektron atomik elektrondan ayırtedilemeyebilir. Bu durumun dikkate alınması elektron değiş-tokuş etkilerine götürür. Herhangi bir enerjide özellikle düşük enerjilerde değiş-tokuş etkilerinin düzeltilmesi önerilmektedir. Değiş-tokuş etkilerinin yüksek hızlarda önemsiz olduğu varsayılmaktadır (Inokuti,1971; Fernández-Varea, 1996).

Elektronların inelastik saçılmasında değiş-tokuş çarpanı modifiye edilmiş Born-Ochkur yaklaşımı yolu ile hesaplanabilir ve bu yaklaşım uzak uyarımlar IDCS ye uygulanabilir (Fernández –Varea, 1996). Modifiye edilmiş Born-Ochkur yaklaşımı Fernández-Varea (1996) tarafından,

$$C_{ex} = 1 - \frac{Q}{E + W_i - W} + \left( \frac{Q}{E + W_i - W} \right)^2 \quad (3.9)$$

ifadesi ile verilmektedir.  $C_{ex}$ ,  $W = W_i$  ve  $Q \ll W$  ye karşılık gelen rezonans benzeri durum için  $C_{ex}$  deęiş tokuř düzeltmesi, ařaęıdaki ifadeye dönüşür:

$$C_{ex} = 1 - \frac{Q}{E} + \left( \frac{Q}{E} \right)^2 \quad (3.10)$$

Bu katsayı uzak etkileřmeler için inelastik diferansiyel tesir kesitine deęiş tokuř düzeltmesi uygulanmasında kullanılır.

## 4. BİYOLOJİK MATERYALLERDE İNELASTİK ETKİLEŞİM KARAKTERİSTİKLERİN HESAPLANMASI

### 4.1. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler için Durdurma Gücünün Hesabı

Rezonans karaktere sahip olan  $Q < W$  li uyarımlar, uzak çarpışmalar ve  $Q = W$  ' li uyarımlar yakın etkileşmeler (serbest elektronlarla) olarak tanımlanabilir (Salvat ve Fernández-Varea, 1992). Denklem (2.46) ya Denk. (2.55) ve Denk. (2.57) nin yerleştirilmesi ile yakın ve uzak IDCS toplamı biçimde yazılabilir:

$$\begin{aligned} \frac{d^2s}{dQdW} &= c \frac{1}{WQ} \frac{df(Q,W)}{dW} \\ &= c \frac{1}{WQ} \sum_{i=1}^M f_i (d(W - W_i)q(W_i - Q) + d(W - Q)q(Q - W_i)) \\ \frac{d^2s}{dQdW} &= \frac{d^2s_u}{dQdW} + \frac{d^2s_y}{dQdW} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Elektronlar için uzak etkileşmeler IDCS ye deęiş-tokuş düzeltmesi katılabilmektedir (Fernández-Varea, 1996). Denklem (4.1) ifadesinde uzak etkileşmeler IDCS ne deęiş tokuş düzeltmesinin katılması ile,

$$\left[ \frac{d^2s}{dQdW} \right]_{ex} = \frac{d^2s_u}{dQdW} C_{ex} + \frac{d^2s_y}{dQdW} \quad (4.2)$$

ifadesi elde edilir.

Denklem (4.1) de uzak etkileşmelere karşılık gelen IDCS ye deęiş tokuş düzeltmesinin katılması ve  $Q$  geri-tepme enerjisi üzerinden integralinin alınması ile uzak etkileşmeler için IDCS,

$$\frac{d\sigma_u}{dW} = \chi \sum_i^M \frac{f_i}{W_i} \left\{ \ln\left(\frac{W_i}{Q_-(E, W_i)}\right) - \left(\frac{W_i - Q_-(E, W_i)}{E}\right) + \left(\frac{W_i^2 - Q_-^2(E, W_i)}{E^2}\right) \right\} \delta(W - W_i) \quad (4.3)$$

ve yakın etkileşmeler için IDCS,

$$\frac{dS_y}{dW} = c \sum_i^M f_i \frac{1}{W^2} q(W - W_i) \quad (4.4)$$

elde edilmektedir. Böylece IDCS aşağıdaki ifadeye eşit olur:

$$\frac{dS}{dW} = \frac{dS_u}{dW} + \frac{dS_y}{dW} \quad (4.5)$$

Denklem (2.46), Denk. (2.47), Denk. (2.48) ve Denk (2.50) kullanılarak SP için

$$S(E) = Nc \sum_i^M f_i \left\{ \ln\left(\frac{W_i}{Q_-(E, W_i)}\right) - \left(\frac{W_i - Q_-(E, W_i)}{E}\right) + \left(\frac{W_i^2 - Q_-^2(E, W_i)}{2E^2}\right) + \ln\frac{E}{2W_i} \right\} q(E - W_i) \quad (4.6)$$

İfadesi elde edildi. Her bir hedef atomu için SP deęerleri bu ifade ile bulunduktan sonra bileşiklerin CSP leri Denk. (2.78) Bragg toplama kuralı kullanılarak hesaplandı.

## 4.2. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler için İnelastik Tesir Kesiti, İnelastik Ortalama Serbest Yol Hesabı

Bu çalışmada düşük atom numaralı hedefler için Denk. (4.5) den inelastik tesir kesiti  $s(E)$  ve ortalama serbest yol (MFP)  $I(E)$  aşağıdaki ifadelerden elde edilmektedir:

$$s(E) = \int_0^{W_m} \frac{ds}{dW} dW = \int_0^{W_m} \left( \frac{ds_u}{dW} + \frac{ds_y}{dW} \right) dW \quad (4.7)$$

$$\sigma_u(E) = \chi \sum_i^M \frac{f_i}{W_i} \left[ \ln \left( \frac{W_i}{Q(E, W_i)} \right) - \left( \frac{W_i - Q(E, W_i)}{E} \right) + \left( \frac{W_i^2 - Q^2(E, W_i)}{2E^2} \right) \right] \theta(E - W_i) \quad (4.8)$$

$$s_y(E) = c \sum_i f_i \frac{(E - 2W_i)}{EW_i} q(E - W_i)$$

$$s(E) = s_u(E) + s_y(E)$$

$$\alpha(E) = \chi \sum_i^M \frac{f_i}{W_i} \left[ \ln \left( \frac{W_i}{Q(E, W_i)} \right) - \left( \frac{W_i - Q(E, W_i)}{E} \right) + \left( \frac{W_i^2 - Q^2(E, W_i)}{2E^2} \right) + \frac{(E - 2W_i)}{EW_i} \right] \theta(E - W_i) \quad (4.9)$$

Bileşikler için toplam tesir kesiti, toplama kuralı yolu ile Denk. (2.80) den hesaplandı.

Düşük atom numaralı hedefler için MFP toplam tesir kesiti Denk. (4.9) un kullanılması ile,

$$I(E) = \frac{1}{Ns(E)} \quad (4.10)$$

ve bileşikler için MFP,

$$I_{bileşil}(E) = \frac{1}{NS_{bileşil}(E)} \quad (4.11)$$

ifadesinden hesaplandı.

### 4.3. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler için Menzil ve Straggling in Hesaplanması

Düşük atom numaralı hedefler ve bileşikler için menzil hesabı Denk. (4.6) ve Denk. (2.78) den elde edilen CSP sonuçlarının, Denk. (2.77) de kullanılması ile elde edildi.

Düşük atom numaralı hedefler için straggling, Denk. (2.47) ve Denk. (2.51) den,

$$\Omega_{in}^2(E) = NX \sum_i^M f_i \left[ \ln\left(\frac{W_i}{Q(E, W_i)}\right) - \left(\frac{W_i - Q(E, W_i)}{E}\right) + \left(\frac{W_i^2 - Q^2(E, W_i)}{2E^2}\right) + \left(\frac{E - 2W_i}{2W_i}\right) \right] \theta(E - W_i) \quad (4.12)$$

İfadesi elde edildi.

## 5. BULGULAR ve TARTIŞMA

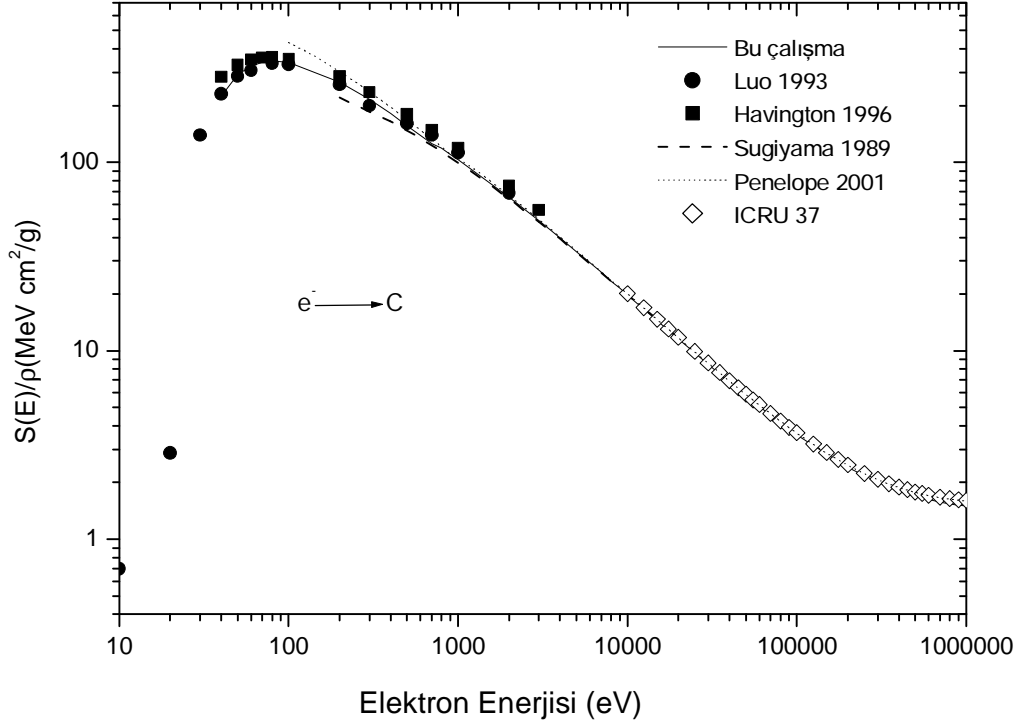
Aşağıdaki kesimde, biyolojik hedeflerde 20 eV- 1 MeV aralığında enerji ile gelen elektronlar için durdurma gücü, ortalama serbest yol ve CSDA-menzilin hesaplanması için önerilen hesaplama yönteminden elde edilen sonuçların deneysel ve diğer teorik sonuçlarla karşılaştırması verilmektedir. Düşük atom numaralı hedefler ve bileşikler için elde edilen CSP, MFP ve CSDA-menzili değerlerinin teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırması Şekil 5.1-17 de gösterilmektedir. Bu çalışmada  $C_5H_5N_5$  (adenin),  $C_5H_5N_5O$  (guanin),  $C_4H_5N_3O$  (sitozin),  $C_5H_6N_2O_2$  (timin),  $C_{20}H_{27}N_7O_{13}P_2$  (sitizo-guanin) ve  $C_{19}H_{26}N_8O_{13}P_2$  (timin-adenin) bileşikleri için CSP, MFP ve CSDA-menzili sonuçları Tablo 5.1-7 de verilmektedir.

### 5.1. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler için Durdurma Gücü Sonuçları

Şekil 5.1. Karbonda elektronlar için kütle-çarpışma-durdurma gücü değerlerinin teorik ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırmasını göstermektedir.

Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar, Joy (2001) un veri tabanında sunulan Havington (1996) ve Luo (1993) nun deneysel sonuçları, Sugiyama (1989) nın teorik sonuçları ile PENELOPE programından (Salvat ve ark., 2001) elde edilen sonuçlar ve 10 keV den yukarı kinetik enerjili elektron enerjilerinde ICRU-37 (1984) verileri ile karşılaştırıldı.

Denklem (4.6) kullanılarak hesaplanan kütle-çarpışma-durdurma gücü değerleri, 40-3000 eV kinetik enerjili gelen elektronlar için Havington (1996) ve Luo (1993) tarafından verilen deneysel veri ile % 10 ve % 5, 200-20 000 eV aralığında enerjiler için Sugiyama (1989) nın sonuçları ile % 4, PENELOPE alt programından elde edilen sonuçlar (Salvat ve ark., 2001) ile % 3 ve ICRU-37 (1984) tarafından tavsiye edilen sonuçlar ile (10 keV yukarı enerjiler için) % 3 uyumlu bulundu.

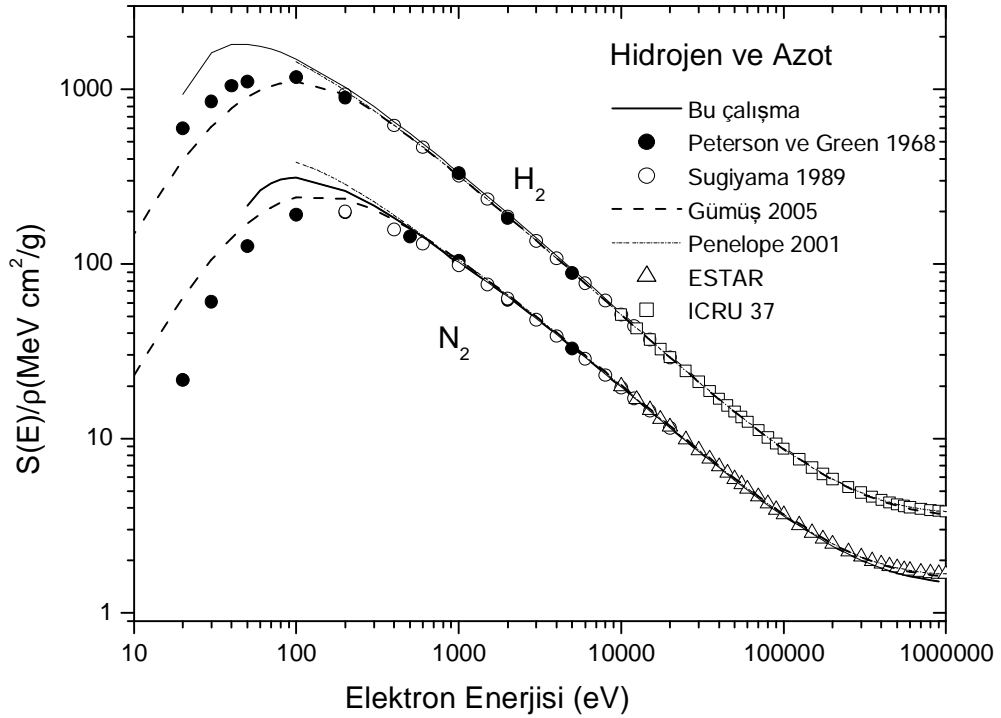


**Şekil 5.1.** C atomunda elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/r$ , CSP, değerleri.

PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2001), 100-3000 eV enerji aralıklarında Havington (1996) ve Luo (1993) tarafından verilen deneysel veri ve 200-20000 eV aralığında enerjiler için Sugiyama (1989) tarafından verilen teorik sonuçlar ile karşılaştırıldığında, sırası ile % 10, % 12, % 7 uyumluluk göstermektedir. Buna karşın bu çalışma sonuçlarının karbonda, 100-3000 enerji aralığında Havington (1996) tarafından verilen deneysel sonuçlarla PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) ile aynı uyumu gösterirken Luo (1993) tarafından verilen deneysel sonuçlar ve biyolojik materyaller için önerilen Sugiyama (1989) sonuçları ve PENELOPE 2001 programı (Salvat ve ark., 2001) sonuçlarından daha iyi bir uyum gösterdiği dikkati çekmektedir.

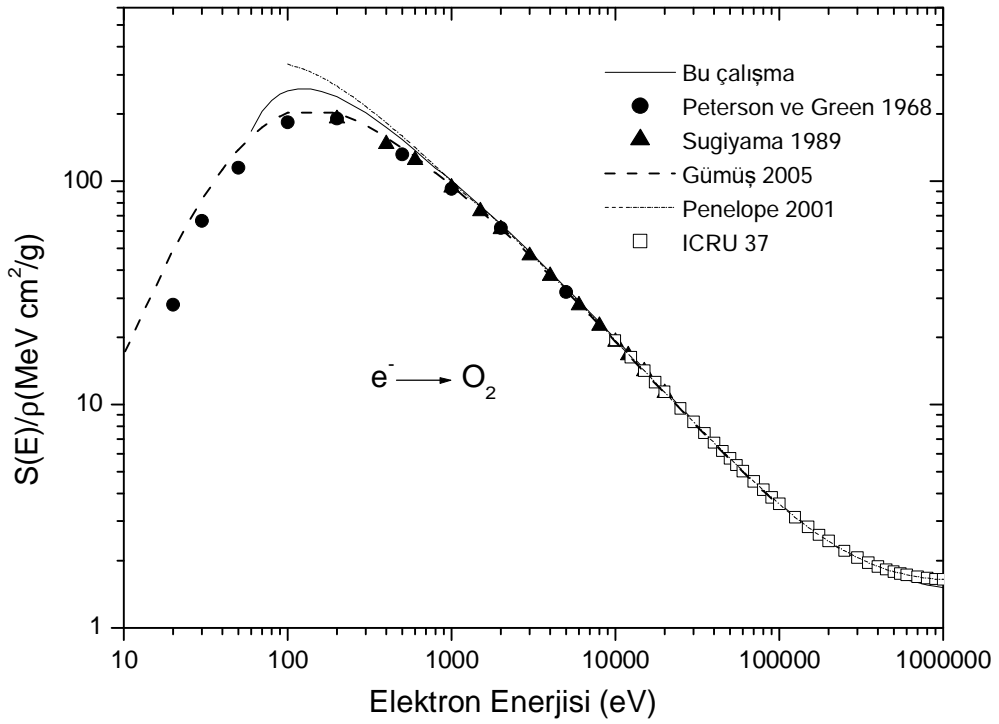
200-3000 eV enerji aralığında biyolojik materyaller için durdurma gücünün hesaplanmasında önerilen Sugiyama (1989) tarafından verilen teorik sonuçların deneysel değerler ile karşılaştırılması durumunda Sugiyama (1989) sonuçları Havington (1996) ve Luo (1993) tarafından verilen sonuçlar ile % 17 ve % 11 uyumluluk göstermektedir.

Şekil 5.2. ve 5.3. Hidrojen, Azot ve Oksijende elektronlar için kütle-çarpışma-durdurma gücü değerlerini göstermektedir. Hidrojen atomunda 200-20000 eV enerji ile gelen elektronlar için CSP değerleri, Peterson ve Green (1968) yarı deneysel formülü ile % 7, Sugiyama (1989), Gümüş (2005) tarafından verilen sonuçlarla ve PENELOPE 2001 programı sonuçları (Salvat ve ark., 2001) ile sırası ile % 4, % 3, % 3 ve 10 keV yukarı enerjilerde, ICRU 37 (1984) den alınan veri ile % 2 uyumlu bulunmuştur.



**Şekil 5.2.** H ve N atomunda elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/r$ , CSP, değerleri.

Azot ve Oksijen için hesaplanan kütle-çarpışma-durdurma gücü değerleri, Peterson ve Green (1968) yarı-deneysel formülü, Sugiyama (1989), Gümüş (2005), PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) programından elde edilen teorik sonuçlar ile ve 10 keV den büyük enerjiler için azot için NIST veritabanı (ESTAR, NIST veritabanı, 2003) ile oksijen için ICRU-37 (1984) den alınan değerler ile karşılaştırıldı.

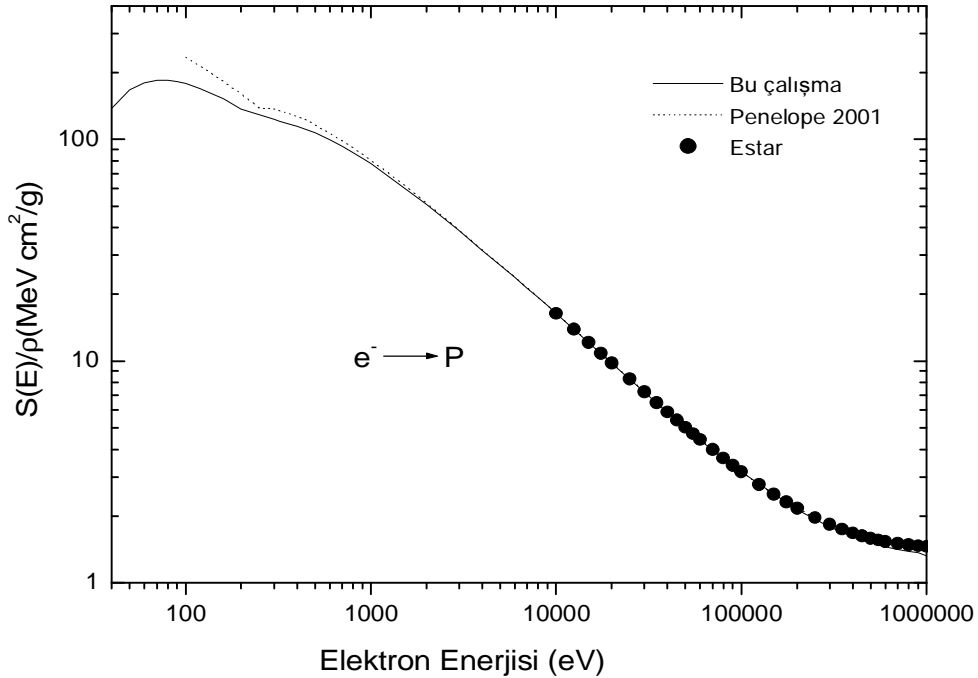


**Şekil 5.3.** O atomunda elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/r$ , CSP, değerleri.

Azot gazı üzerine, 500 eV tan büyük enerji ile gelen elektron için bu çalışmada elde edilen sonuçlar, Peterson ve Green (1968), Sugiyama (1989), Gümüş (2005), PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) den elde edilen sonuçlarla sırası ile % 5, % 3 % 3, % 3 ve 10 keV yukarı enerji bölgesinde ESTAR (NIST veri tabanı, 2003) dan elde edilen sonuçlar ile % 3 uyumlu bulundu. Benzer şekilde, oksijen üzerine 500 eV un üzerinde gelen elektron enerjileri için bu çalışma sonuçları, Peterson ve Green (1968) ile % 9, Sugiyama (1989) ile % 5,

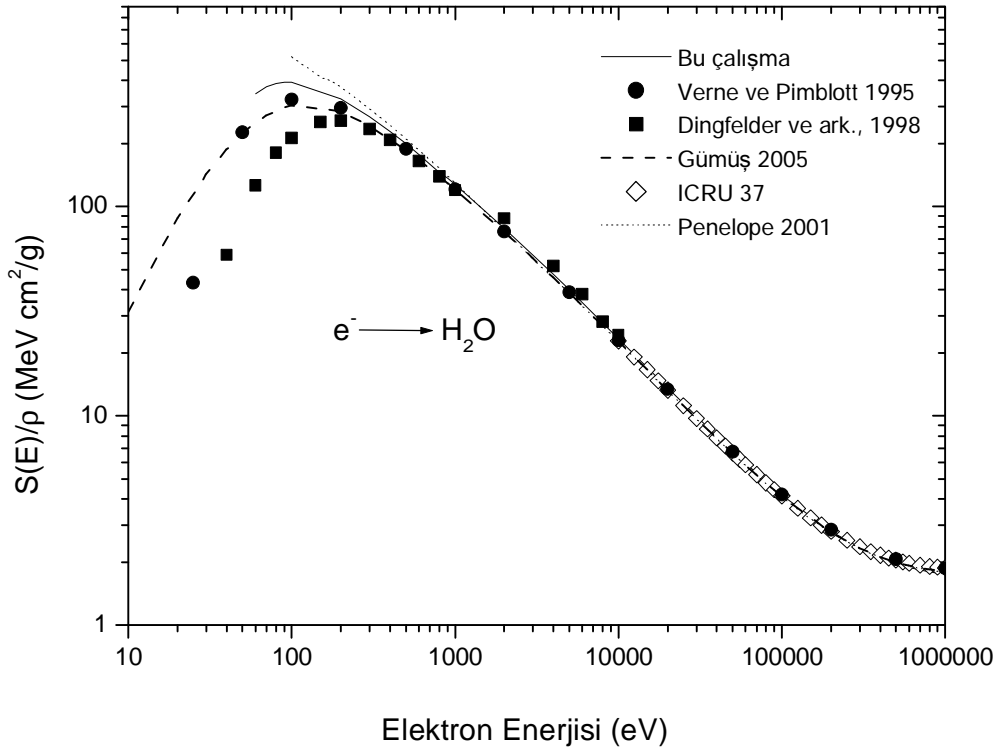
Gümüş (2005) den teorik sonuçlarla % 3, PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) den elde edilen sonuçlar ile % 2 ve ara enerjilerde (10 keV üzeri) ICRU-37 (1984) den alınan sonuçlar ile % 2 uyumlu bulundu.

PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2001), 100-3000 eV enerji ile gelen elektronlar için Peterson ve Green (1968) tarafından verilen yarı-deneysel formülden elde edilen sonuçlar ve 200-20000 eV enerji aralığında Sugiyama (1989) dan alınan sonuçlar ile karşılaştırıldığında, sırası ile azotta % 33 ve % 16, oksijende % 26 ve % 15 sapma olduğu görüldü. Aynı enerji aralıklarında bu çalışma sonuçları Peterson ve Green (1968) ve Sugiyama (1989) sonuçları ile karşılaştırıldığında azotta sırası ile % 19, % 12 ve oksijende ise % 16, % 11 sapma olduğu bulundu. Yapılan hesaplamalardan görülmektedir ki karbonda olduğu gibi bu çalışma sonuçları, durdurma gücüne en fazla katkının geldiği düşük ve ara enerji bölgesinde (100- 20000 eV) PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) den elde edilen sonuçlardan biraz daha iyi sonuçlar sergilemektedir.



**Şekil 5.4.** P atomunda elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/\rho$ , CSP, değerleri.

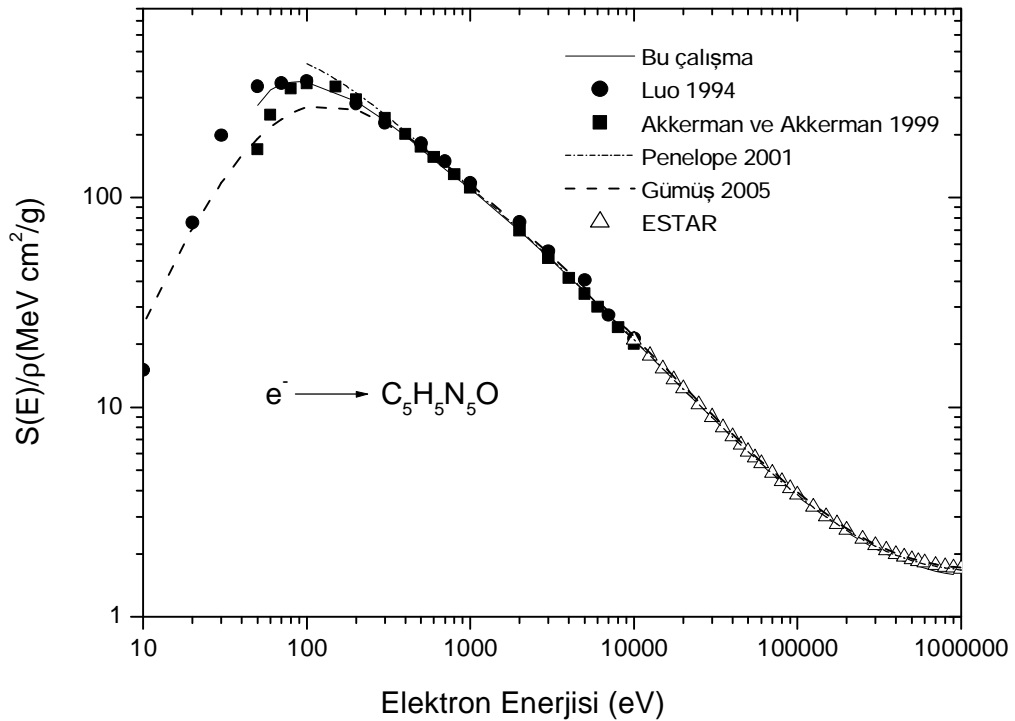
Şekil 5.4. de P de düşük ve ara enerji bölgesinde elektron için bu çalışma sonuçları, PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) ve ESTAR (NIST veri tabanı, 2003) programından elde edilen sonuçlar ile karşılaştırması verilmektedir. Bu çalışmadan hesaplanan CSP değerleri, 100 eV-1 MeV enerji aralığında PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) den elde edilen sonuçlar ile % 4 ve 10 keV-1 MeV aralığında ESTAR (NIST veri tabanı, 2003) programı ile hesaplanan sonuçlar ile % 2 uyumlu bulundu.



**Şekil 5.5.** Su molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/r$ , CSP, değerleri.

Şekil 5.5. gelen elektron için su molekülünde bu çalışmadan elde edilen sonuçları ve teorik değerlerle karşılaştırmasını göstermektedir. 100 eV aşağı düşük enerjiler dışında, kuru DNA da enerji kaybı dağılımı için önerilen Verne

ve Pimblott (1995) tarafından verilen teorik değerlerle % 3, suda deęiş-tokuş etkileşmesinin dikkate alınmasıyla hesaplanmış olan Dingfelder ve ark., (1998) nin sonuçları ile % 9, Gümüş (2005) tarafından hesaplanan teorik deęerler ile % 4, PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) programının sonuçları ile % 4 ve 10 keV den yukarı enerji bölgesi ICRU-37 (1984) CSP deęerleri ile % 3 uyumlu bulundu.

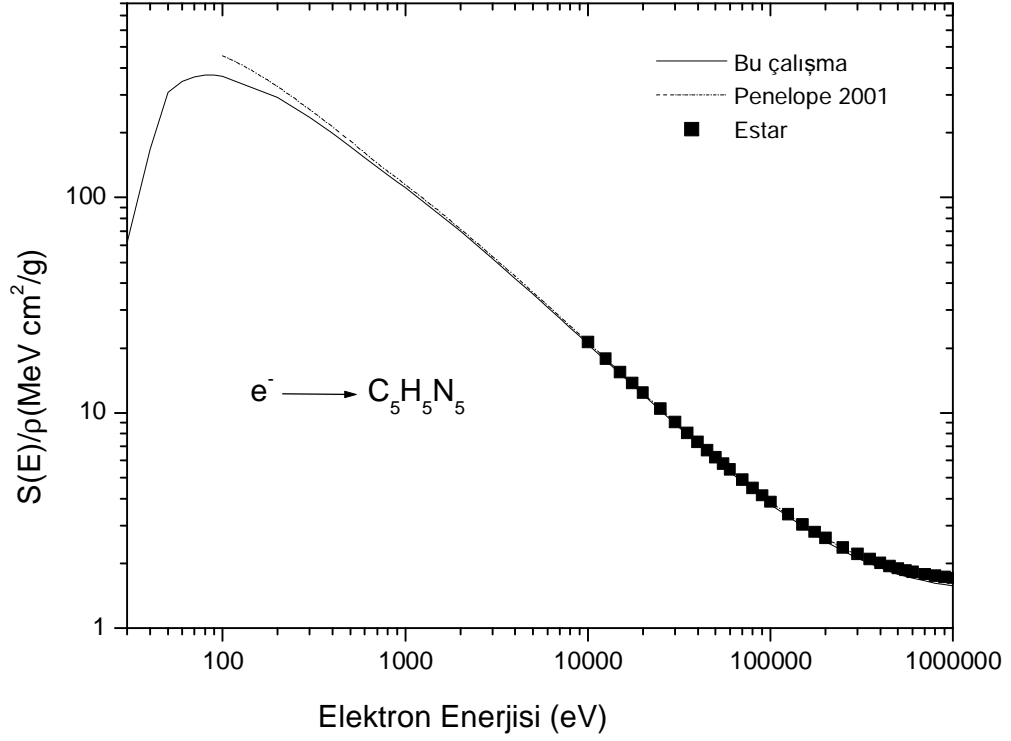


**Şekil 5.6.** Guanin molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/r$ , CSP, deęerleri.

Şekil 5.6. ve 5.7. düşük ve orta enerji bölgesinde, biyolojik maddeler, guanin ve adenin için, bu çalışmadan elde edilen kütle-çarpışma-durdurma gücü deęerlerini ve deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırmasını göstermektedir. 50 eV den düşük elektron enerjileri dışında, gelen elektron

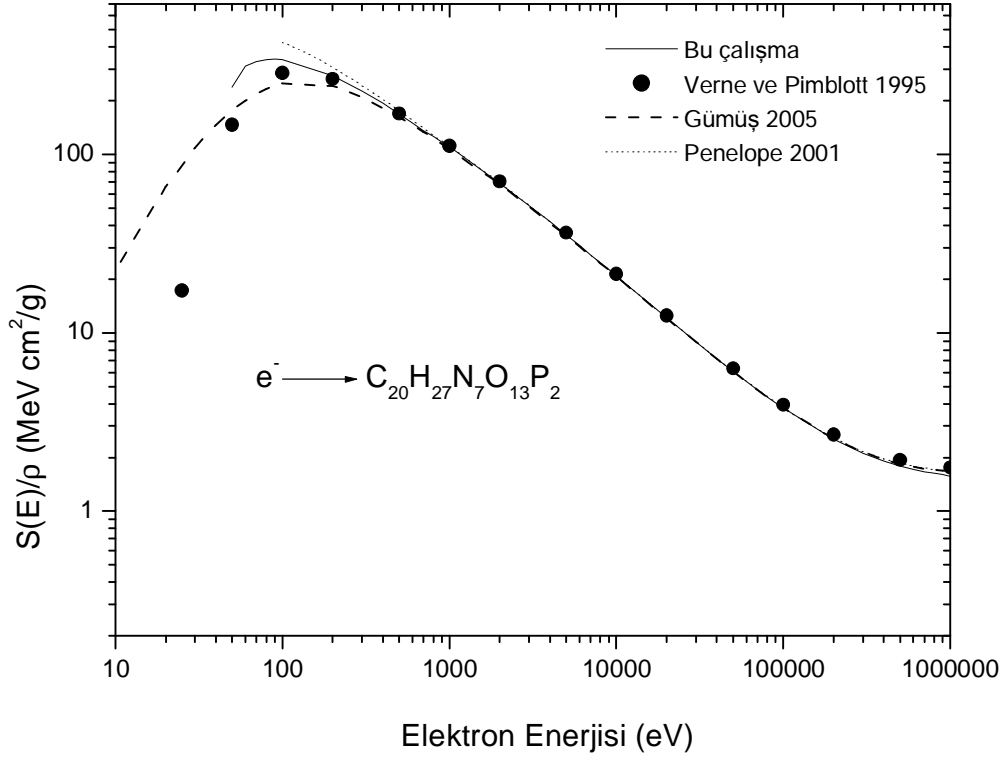
enerjileri için guanin bileşğinde bu çalışma sonuçları, Joy (2001) un veri tabanında verilen Luo (1994) tarafından sunulan deneysel sonuçlarla % 5, 200 eV yukarı enerjiler için Akkerman ve Akkerman (1999) tarafından verilen deęiş-tokuş düzeltmeli sonuçlarla % 12, 100 eV dan büyük enerjilerde gelen elektron enerjileri için Gümüş (2005) tarafından hesaplanan teorik sonuçlar ile % 5, PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) programından elde edilen sonuçlarla % 3 ve 10 keV üzeri enerjiler için ESTAR (NIST veri tabanı, 2003) programı CSP deęerleri ile % 3 uyumlu bulundu.

Bileşiklerde sadece guanin bileşğinde Luo (1994) tarafından verilen deneysel veri bulunması nedeni ile 100 eV-10 keV enerji aralığında PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) programı ve dięer teorik çalışmalar deneysel veri ile karşılaştırıldığında, PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) programının, 100 eV-10 keV enerji ile gelen elektronlar için Luo (1994) tarafından verilen deneysel verilerle % 8 uyumlu olduęu bulundu. Aynı enerji aralığında bu çalışma sonuçları ve dięer teorik çalışma sonuçlarından, Akkerman ve Akkerman (1999) deęiş-tokuş düzeltmeli sonuçlar ve Gümüş (2005) den elde edilen sonuçlar Luo (1994) tarafından verilen deneysel sonuçlarla karşılaştırıldığında sırası ile % 5, % 18 ve % 6 olarak bulundu.



**Şekil 5.7.** Adenin molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/r$ , CSP, değerleri.

Adenin bileşiğine, 100 eV-1 MeV düşük ve ara enerji aralığında gelen elektron için bu çalışmadan hesaplanan CSP değerleri, PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) sonuçları ile % 4 ve 10 keV üzeri enerjiler için ESTAR (NIST veri tabanı, 2003) CSP değerleri ile % 4 uyumlu bulundu.

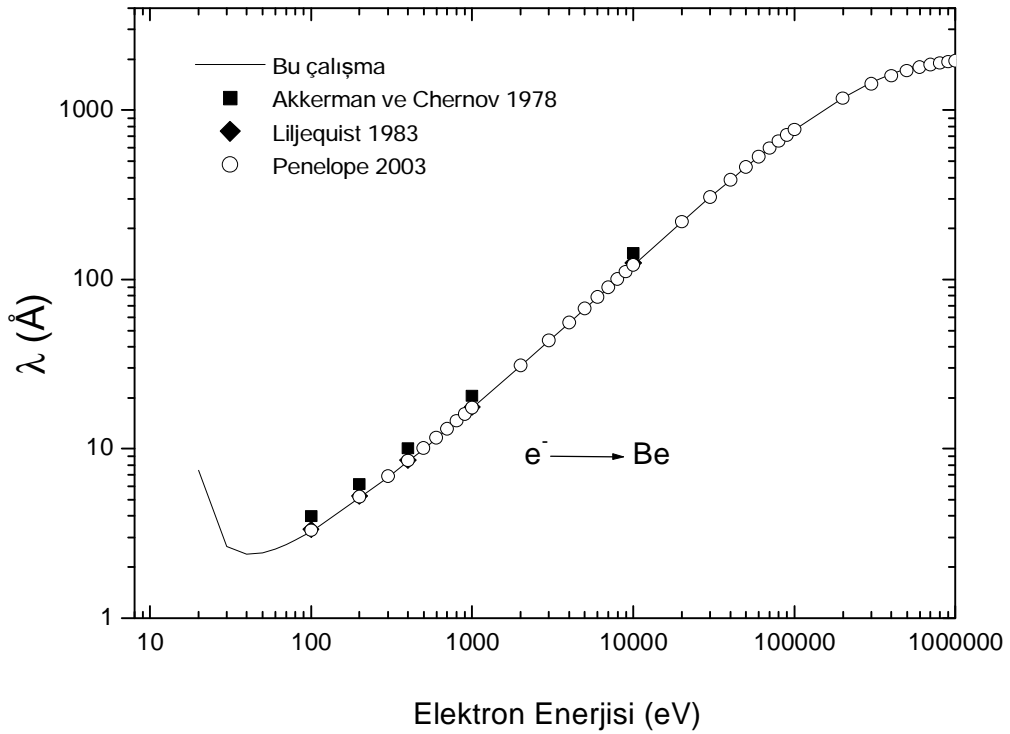


**Şekil 5.8.** DNA molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre  $S(E)/r$ , CSP, değerleri.

Şekil 5.8. de DNA bileşiğinde, elektronun düşük ve ara enerji bölgesinde bu çalışmadan hesaplanan kütle-çarpışma-durdurma gücü sonuçlarının Verne ve Pimblott (1995), Gümüş (2005) ve PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) den elde edilen sonuçlar ile karşılaştırması verilmektedir. Bu çalışmadan elde edilen kütle-çarpışma-durdurma gücü değerleri, 100 eV den küçük elektron enerjileri dışında, Verne ve Pimblott (1995), Gümüş (2005) tarafından verilen teorik sonuçlar ile % 3, % 2 ve PENELOPE (Salvat ve ark., 2001) programından alınan sonuçlar ile % 4 uyumlu bulundu.

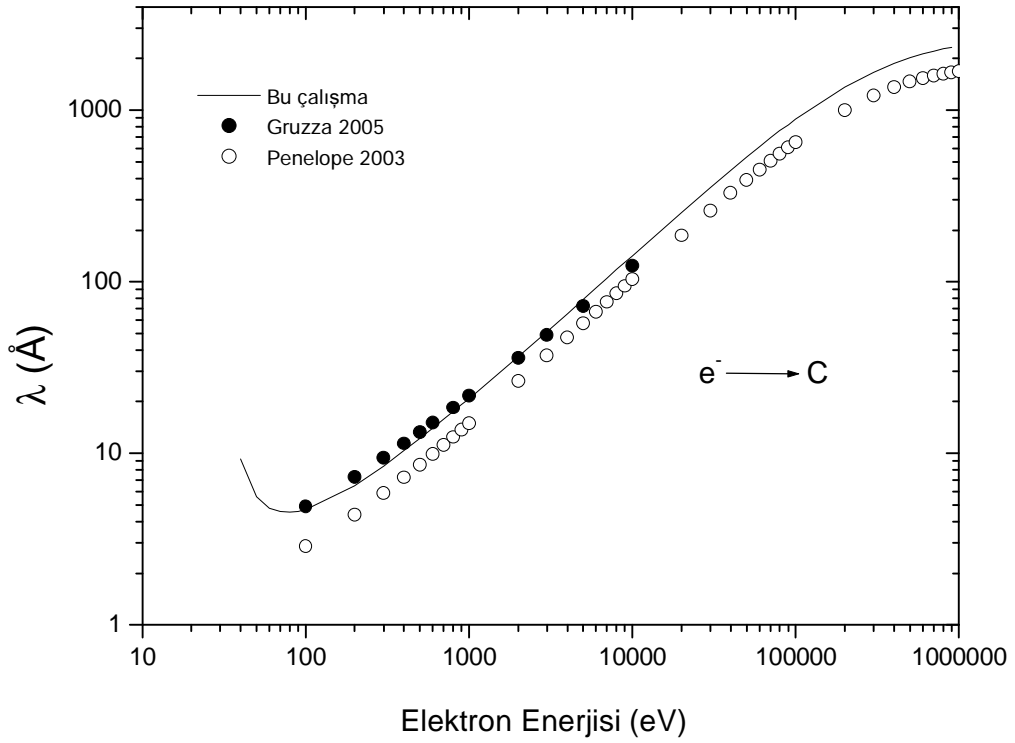
## 5.2. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler için Ortalama Serbest Yol Sonuçları

Şekil 5.9. da Berilyum atomunda elektronun 100 eV-10 000 eV enerji aralığında, bu çalışmadan hesaplanan MFP sonuçlarının, PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2003), Liljequist (1983) ve Akkerman ve Chernov (1978) den alınan sonuçlar ile karşılaştırması verilmektedir.



**Şekil 5.9.** Be atomunda elektronun kinetik enerjisine göre ortalama serbest yol,  $I(E)$  değerleri.

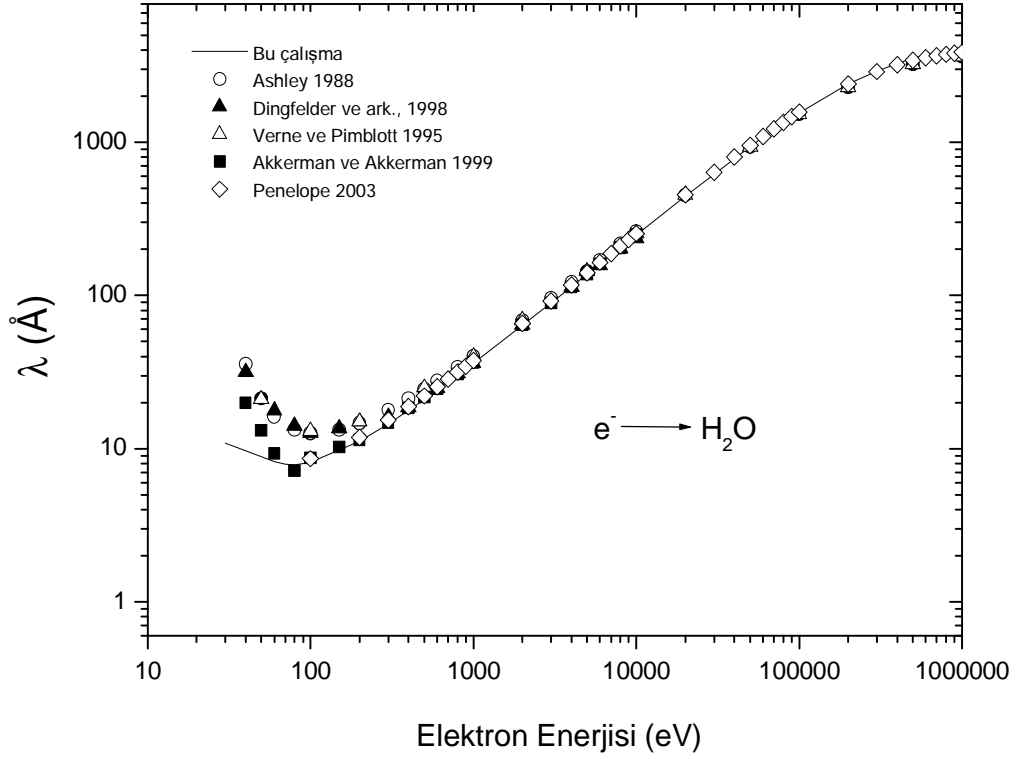
Bu çalışma sonuçları, PENELOPE (Salvat ve ark., 2003), Liljequist (1983) in teorik sonuçları ve Liljequist (1983) tarafından verilen Akkerman ve Chernov (1978) un teorik sonuçlarla sırası ile % 1, % 2, % 17 uyumlu bulundu.



**Şekil 5.10.** C atomunda elektronun kinetik enerjisine göre ortalama serbest yol,  $I(E)$  değerleri.

Şekil 5.10. da C atomunda, bu çalışmadan hesaplanan MFP sonuçlarının, 100 eV-10 000 eV enerji aralığında Gruzza (2005) tarafından verilen deneysel veriler ve 100 eV-1 MeV enerji aralığında PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2003) ile karşılaştırılmasını gösterilmektedir. Çalışma sonuçları, 100 eV-10 000 arası gelen elektron enerjileri için deneysel veri ile % 8 uyumlu iken 100 eV-1 MeV enerji aralığında PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuçları ile % 52 sapma bulundu.

PENELOPE programı sonuçları (Salvat ve ark., 2003), Gruzza (2005) nın deneysel verisi ile karşılaştırıldığında % 32 sapma olduğu hesaplandı.

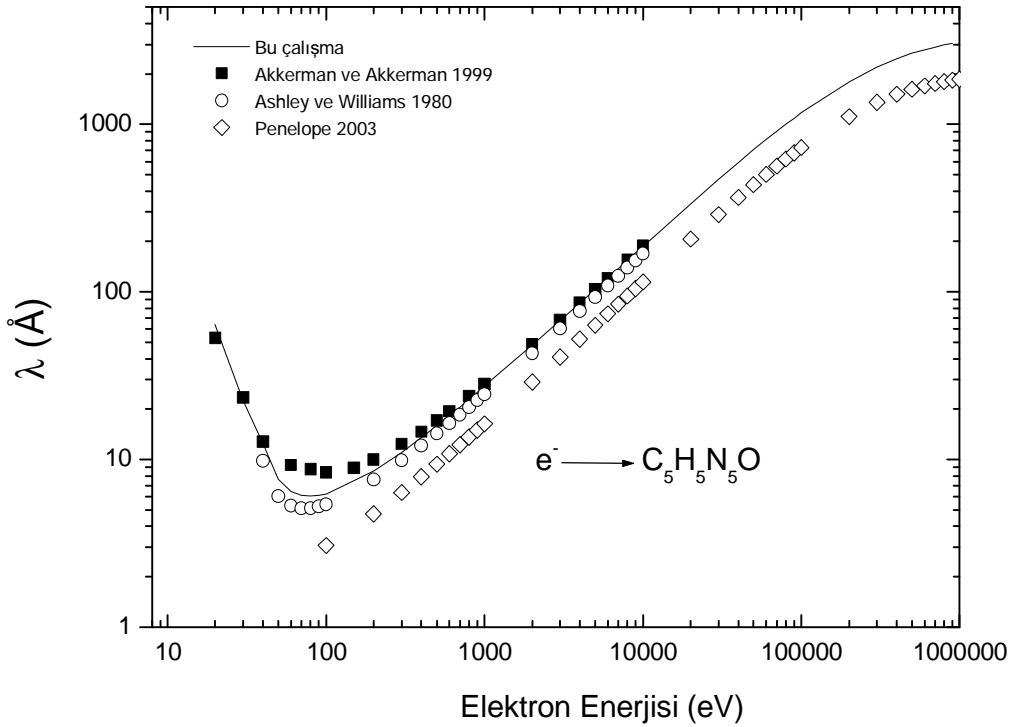


**Şekil 5.11.** Su molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre ortalama serbest yol,  $I(E)$  değerleri.

Şekil 5.11. Su bileşiğine gelen elektron için MFP sonuçlarını göstermektedir. Bu çalışmadan hesaplanan MFP değerleri, grafikte verilen teorik sonuçlarla, 200 -10 000 eV enerji bölgesinde Ashley (1988) in sonuçlarıyla % 11, Dingfelder ve ark., (1998) nın sonuçları ile % 5, Akkerman ve Akkerman (1999) nın sonuçları ile % 2 ve 200 eV-1 MeV enerji aralığında Verne ve Pimblott (1995) nın teorik sonuçları ile % 8, PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuçları ile % 3 uyumlu bulundu.

Şekil 5.12. de guanin bileşiğine gelen elektron için bu çalışma sonuçları, Akkerman ve Akkerman (1999) nın teorik çalışmasından MFP sonuçları ve Ashley ve Williams (1980) in deneysel optiksel enerji kaybı fonksiyonuna teorik

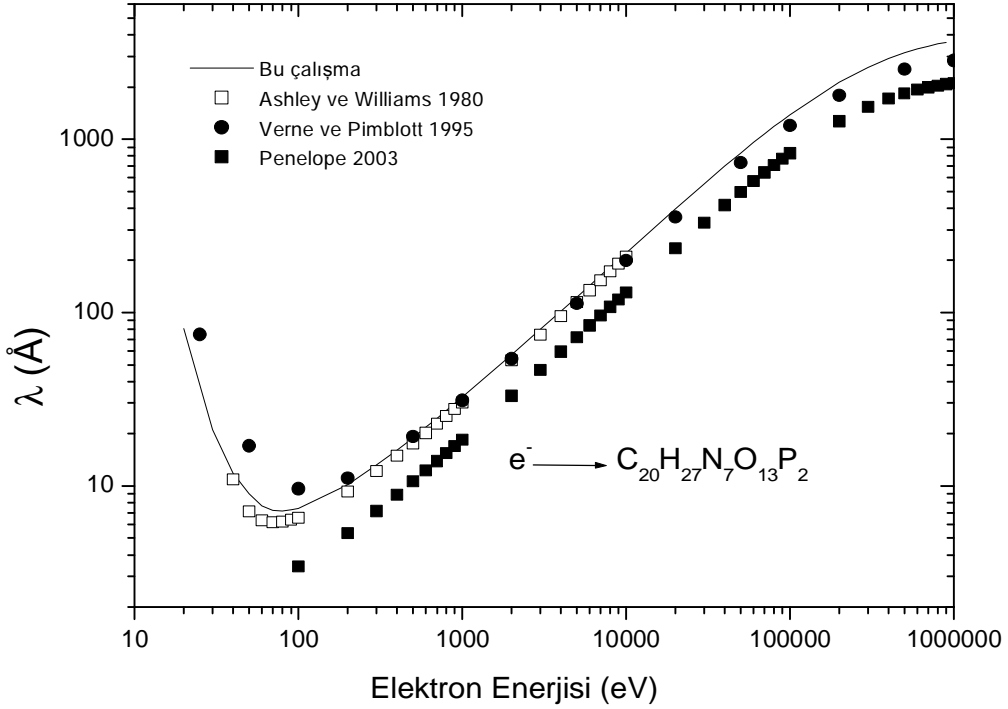
ifadeyi fitleyerek elde etmiş oldukları yarı deneysel formülden hesaplanan MFP değerleri ile karşılaştırılmaktadır. Bu çalışma sonuçları, 100 -10 000 eV enerji bölgesi için Akkerman ve Akkerman (1999) nın teorik sonuçları ile % 6 ve Ashley ve Williams (1980) ile % 11 uyumlu bulundu.



**Şekil 5.12.** Guanin molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre ortalama serbest yol,  $I(E)$  değerleri.

Özellikle düşük enerjilerde (yaklaşık 30-1000 eV) Akkerman ve Akkerman (1999) in sonuçları ile Ashley ve Williams (1980) in yarı deneysel formülden hesaplanan MFP değerleri arasında uyumsuzluk dikkati çekmektedir ve bu enerji bölgesinde sapmanın yaklaşık % 30 olduğu bulundu. 30 eV-10 keV aralığında enerji ile gelen elektronlar için bu çalışma sonuçları ile Ashley ve Williams (1980) in yarı deneysel formülden hesaplanan MFP değerleri arasında % 13 uyum bulunurken Akkerman ve Akkerman (1999) in sonuçları ile Ashley

ve Williams (1980) in yarı deneysel formülden hesaplanan MFP değerleri arasında ise % 26 sapma olduğu hesaplandı. PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuçları ile Ashley ve Williams (1980) in yarıdeneysel sonuçları arasında % 34 sapma olduğu bulundu.



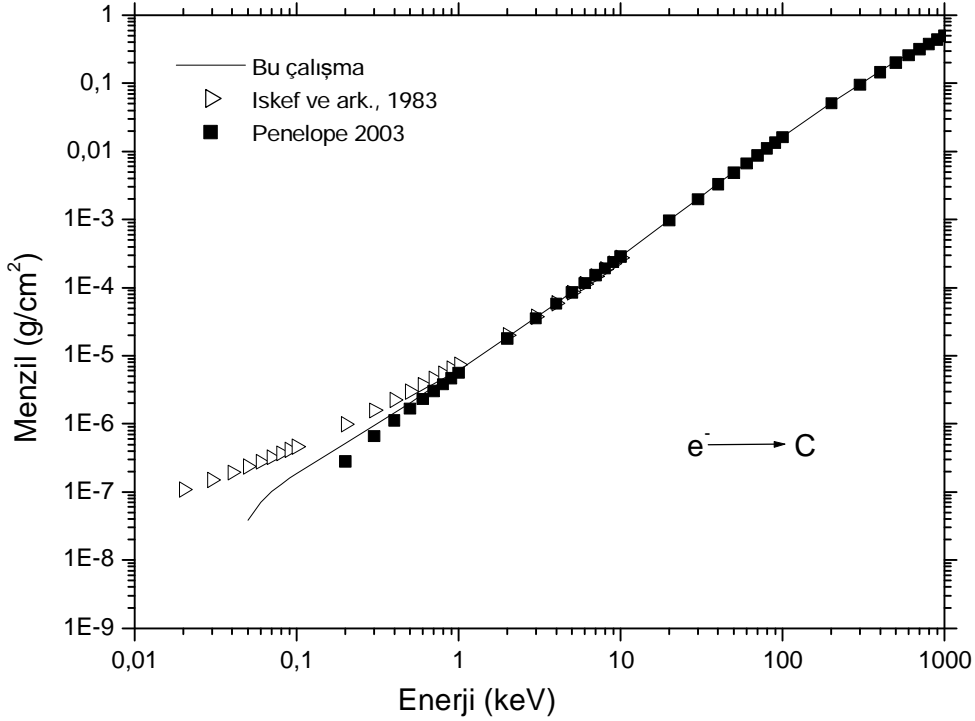
**Şekil 5.13.** DNA molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre ortalama serbest yol,  $I(E)$  değerleri.

Şekil 5.13. de DNA bileşiğine gelen elektron için MFP sonuçlarını göstermektedir. Bu çalışmadan hesaplanan MFP değerleri, grafikte verilen Ashley ve Williams (1980) in yarı deneysel formülünden hesaplanan MFP değerleri ile 100-10 000 eV enerji bölgesinde % 8 ve Verne ve Pimblott (1995) tarafından verilen teorik MFP sonuçları ile % 9 uyumlu bulundu. 40 eV-10 keV enerji ile gelen elektron için bu çalışma sonuçları ile Ashley ve Williams (1980) in yarı deneysel formülünden hesaplanan MFP değerleri arasında % 10 uyum var iken Verne ve Pimblott (1995) tarafından verilen sonuçlar ile aynı enerji

aralığı için Ashley ve Williams (1980) in yarı deneysel formülünden hesaplanan MFP değerleri arasında % 34 sapma olduğu hesaplandı. PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuçları 100 eV-10 keV enerji aralığında Ashley ve Williams (1980) in yarı deneysel formülünden hesaplanan MFP değerleri ile karşılaştırıldığında % 40 sapma bulundu.

### 5.3. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler için Menzil Sonuçları

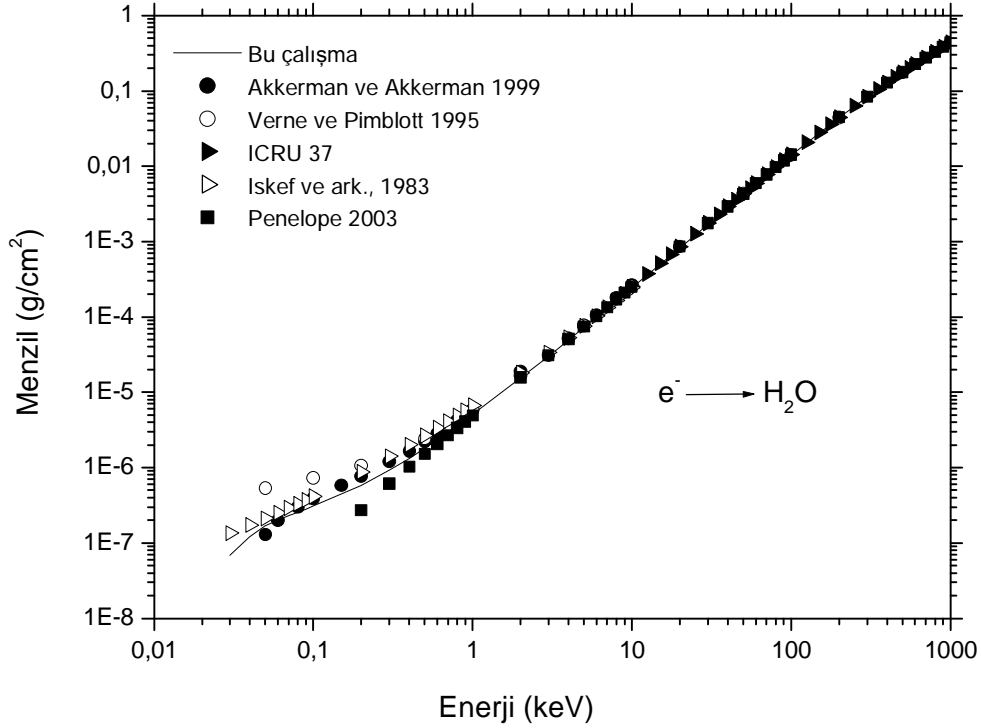
Şekil 5.14. de C atomunda gelen elektron için menzil sonuçlarını göstermektedir.



**Şekil 5.14.** C atomunda elektronun kinetik enerjisine göre CSDA-menzili,  $R(E)$  değerleri.

C atomunda 200 eV- 10 keV enerji aralığında gelen elektron için bu çalışma sonuçları ile Iskef ve ark., (1983) nın tüm deneysel çalışmalara fitleyerek önerdiği formülden elde edilen sonuçlarla karşılaştırıldığında % 17

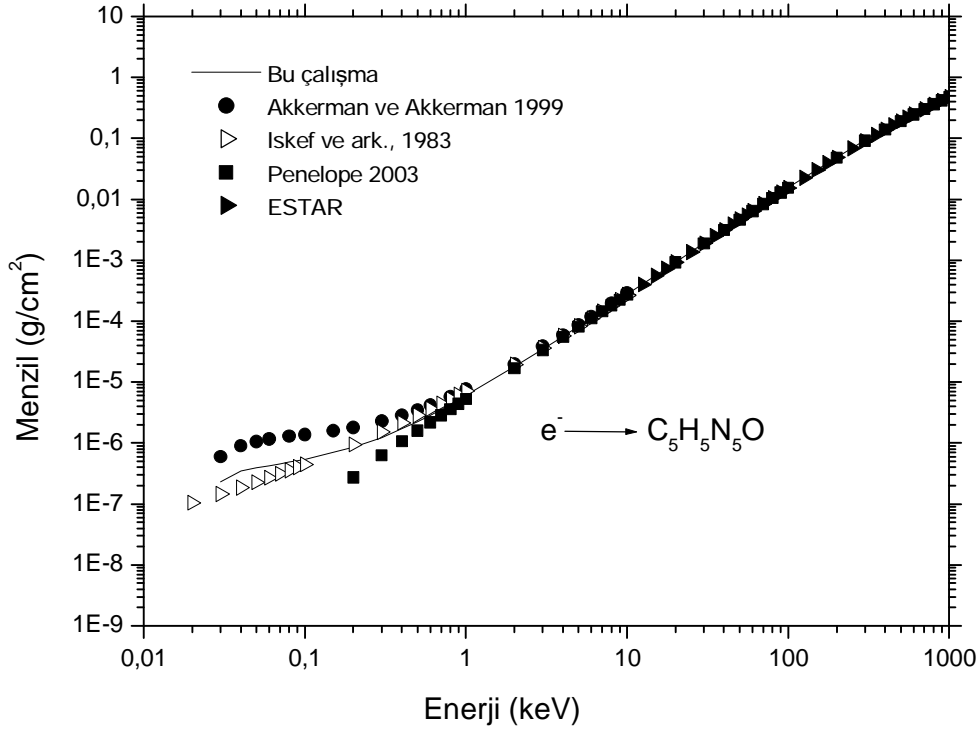
sapma hesaplandı. PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuçları ile 200 eV- 10 keV enerji aralığında Iskef ve ark., (1983) nın sonuçları karşılaştırıldığında % 23 sapma bulundu.



**Şekil 5.15.** Su molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre CSDA-menzili,  $R(E)$  değerleri.

Şekil 5.15.  $H_2O$  bileşiğine gelen elektron için CSDA-menzili sonuçlarını göstermektedir. Bu çalışmadan hesaplanan CSDA-menzili değerleri, grafikte verilen teorik sonuçlarla, 50 -10 000 eV enerji bölgesinde Akkerman ve Akkerman (1999) nın sonuçları ile % 13 iken 500 eV – 10keV enerji aralığında % 7, 50 eV-1 MeV enerji aralığında Verne ve Pimblott (1995) nın teorik sonuçları ile % 17 iken 500 eV-1 MeV de % 7 ve 10 keV-1 MeV enerji aralığında ICRU 37 (1984) sonuçları ile % 2 uyumlu bulundu.

Iskef ve ark., (1983) nın tüm deneysel çalışmalara fitleyerek önerdiği yarı-deneysel formülden elde edilen değerler, 50 eV-10 keV enerji aralığında bu çalışma sonuçları, Akkerman ve Akkerman (1999), Verne ve Pimblott (1995) un sonuçları ile karşılaştırıldığında sırası ile % 18, % 12, % 37 sapma hesaplandı. Iskef ve ark., (1983) nın sonuçları 200 eV-10 keV enerji aralığında PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuçları ile karşılaştırıldığında % 23 sapma olduğu bulundu.

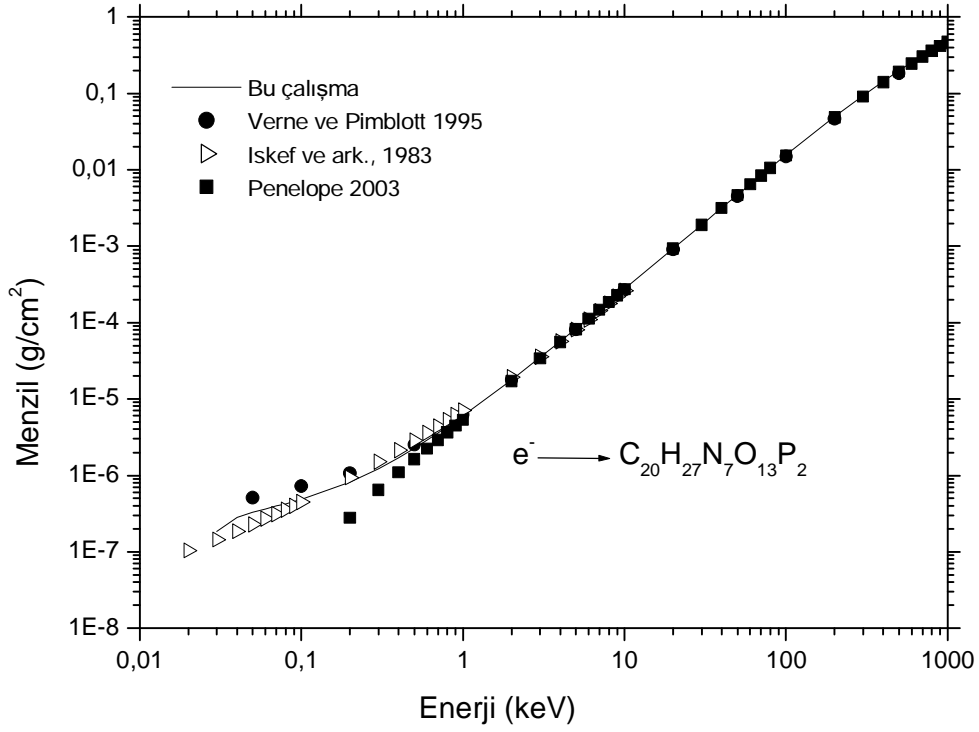


**Şekil 5.16.** Guanin molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre CSDA-menzili,  $R(E)$  değerleri.

Şekil 5.16. guanin bileşiğine gelen elektron için bu çalışmada hesaplanan CSDA-menzili değerleri teorik sonuçlar ile karşılaştırılmaktadır. Çalışmadan hesaplanan değerler 500 -10 000 eV enerji bölgesinde Akkerman ve Akkerman

(1999) nın sonuçları ile % 15, 200 eV-1 MeV enerji aralığında PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) nın sonuçları ile % 16 ve 10 keV-1 MeV enerji aralığında ESTAR (NIST veri tabanı, 2003) sonuçları ile % 3 uyumlu bulundu.

Şekil 5.16. da bu çalışma sonuçları, Akkerman ve Akkerman (1999) in sonuçları ve PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programından elde edilen sonuçlar ile Iskef ve ark., (1983) nın tüm deneysel çalışmalara fitleyerek önerdiği formülden elde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında, 30 eV- 2000 eV enerji aralığında bu çalışma sonuçlarının Iskef ve ark., (1983) den elde edilen sonuçlar ile diğer teorik sonuçlara göre daha uyum içinde olduğu dikkati çekmektedir. 30 eV-10 keV aralığında enerji ile gelen elektron için bu çalışma sonuçları ile Iskef ve ark., (1983) in yarı deneysel formülünden hesaplanan CSDA-menzili değerleri arasında % 15 sapma var iken Akkerman ve Akkerman (1999) tarafından verilen sonuçlar ile aynı enerji aralığı için Iskef ve ark., (1983) ün yarı deneysel formülünden hesaplanan CSDA-menzili değerleri arasında % 107 sapma olduğu hesaplandı. Enerji aralıkları 30 eV-1 keV ve 1 keV-1 MeV olarak dikkate alındığında Iskef ve ark. (1983) in yarı-deneysel formülünden elde edilen sonuçlar ile bu çalışma sonuçları ve Akkerman ve Akkerman (1999) tarafından verilen teorik sonuçlar karşılaştırıldığında, 30 eV-1 keV enerji aralığı için sapma sırası ile % 46, % 174 iken 1 keV-1 MeV enerji aralığı için % 5, % 7 bulundu. Iskef ve ark., (1983) tarafından verilen yarıdeneysel formülünden elde edilen değerler ile PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuçları arasında, 200 eV- 10 keV enerji aralığında % 24 sapma olduğu hesaplandı.



**Şekil 5.17.** DNA molekülünde elektronun kinetik enerjisine göre CSDA-menzili,  $R(E)$  değerleri.

Şekil 5.17. DNA bileşiğine gelen elektron için CSDA-menzili sonuçlarını göstermektedir. Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar, Verne ve Pimblott (1995) den teorik sonuçlar ile 50 eV-1 MeV enerji aralığında % 11, 500 eV-1 MeV enerji aralığında % 5 uyumlu bulundu.

Ayrıca 50 eV-10 keV aralığında enerji ile gelen elektronlar için bu çalışma sonuçları ile Iskef ve ark., (1983) nin yarı deneysel formülünden hesaplanan CSDA-menzili değerleri arasında % 11 uyum var iken aynı enerji aralığı için Verne ve Pimblott (1995) tarafından verilen teorik sonuçlar ile Iskef ve ark., (1983) nin yarı deneysel formülünden hesaplanan CSDA-menzili değerleri arasında % 32 sapma olduğu hesaplandı. 200 eV- 10 keV enerji aralığında

Iskef ve ark., (1983) nın deęerleri ile PENELOPE (Salvat ve ark., 2003) programı sonuları karşılařtırıldıęında, ancak % 23 lük bir sapma olduęu grlmektedir. Buna gre bu alıřmada elde edilen sonular bu enerji blgesinde, Iskef ve ark., (1983) nın deęerlerine daha yakındır.

**Tablo 5.1** . Adenin bileşimine gelen elektron için CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g),  
MFP (Å) ve CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>) sonuçları.

Enerji (eV)	CSP (MeVcm <sup>2</sup> /g)	MFP (Å)	CSDA-menzili (g/cm <sup>2</sup> )
20	34.79	92.5438	-
30	60.37	24.2011	0.2x10 <sup>-6</sup>
40	166.81	13.0424	0.31x10 <sup>-6</sup>
50	309.04	7.98	0.35x10 <sup>-6</sup>
60	347.00	6.9278	0.38x10 <sup>-6</sup>
80	371.25	6.5844	0.44x10 <sup>-6</sup>
100	367.40	6.841	0.49x10 <sup>-6</sup>
200	293.00	9.4472	0.79x10 <sup>-6</sup>
300	237.25	12.2847	0.12x10 <sup>-5</sup>
400	199.99	15.06677	0.16x10 <sup>-5</sup>
500	173.58	17.7792	0.22x10 <sup>-5</sup>
600	153.86	20.4297	0.28x10 <sup>-5</sup>
800	128.31	25.5582	0.42x10 <sup>-5</sup>
1x10 <sup>3</sup>	111.77	30.5033	0.59x10 <sup>-5</sup>
2x10 <sup>3</sup>	70.02	53.6284	0.18x10 <sup>-4</sup>
3x10 <sup>3</sup>	52.33	75.1917	0.34x10 <sup>-4</sup>
5x10 <sup>3</sup>	35.74	115.6765	0.82x10 <sup>-4</sup>
1x10 <sup>4</sup>	20.96	208.3000	0.00027
2x10 <sup>4</sup>	12.22	373.6626	0.00092
3x10 <sup>4</sup>	8.94	522.0537	0.0019
5x10 <sup>4</sup>	6.09	785.9878	0.0047
1x10 <sup>5</sup>	3.78	1307.048	0.016
2x10 <sup>5</sup>	2.54	2010.79	0.049
3x10 <sup>5</sup>	2.12	2451.677	0.092
5x10 <sup>5</sup>	1.78	2975.236	0.196
9x10 <sup>5</sup>	1.60	3414.6413	0.44
10 <sup>6</sup>	1.578	3480.5171	0.499

**Tablo 5.2 .** Guanin bileşğine gelen elektron için CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g)MFP (Å) ve CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>) sonuçları.

Enerji (eV)	CSP (MeVcm <sup>2</sup> /g)	MFP (Å)	CSDA-menzili (g/cm <sup>2</sup> )
20	31.11	63.9592	-
30	53.97	22.4489	0.23x10 <sup>-6</sup>
40	149.15	12.4346	0.35x10 <sup>-6</sup>
50	276.32	7.6436	0.39x10 <sup>-6</sup>
60	328.00	6.472	0.43x10 <sup>-6</sup>
80	356.30	6.0436	0.48x10 <sup>-6</sup>
100	355.36	6.2467	0.54x10 <sup>-6</sup>
200	287.25	8.5327	0.85x10 <sup>-6</sup>
300	233.57	11.0633	0.12x10 <sup>-5</sup>
400	197.30	13.55	0.17x10 <sup>-5</sup>
500	171.48	15.9758	0.23x10 <sup>-5</sup>
600	152.14	18.3477	0.29x10 <sup>-5</sup>
800	126.84	22.9379	0.43x10 <sup>-5</sup>
1x10 <sup>3</sup>	110.63	27.43	0.6x10 <sup>-5</sup>
2x10 <sup>3</sup>	69.42	48.1791	0.18x10 <sup>-4</sup>
3x10 <sup>3</sup>	51.92	67.5228	0.35x10 <sup>-4</sup>
5x10 <sup>3</sup>	35.49	103.825	0.82x10 <sup>-4</sup>
1x10 <sup>4</sup>	20.83	187.3229	0.00027
2x10 <sup>4</sup>	12.14	335.7989	0.00093
3x10 <sup>4</sup>	8.88	469.11	0.0019
5x10 <sup>4</sup>	6.06	705.147	0.00469
1x10 <sup>5</sup>	3.76	1173.4	0.156
2x10 <sup>5</sup>	2.52	1798.301	0.0492
3x10 <sup>5</sup>	2.10	2192.639	0.093
5x10 <sup>5</sup>	1.77	2653.548	0.198
9x10 <sup>5</sup>	1.59	3038.2180	0.438
10 <sup>6</sup>	1.571	3480.5133	0.501

**Tablo 5.3 .** Sitozin bileşğine gelen elektron için CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g) ve CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>) sonuçları.

<b>Enerji (eV)</b>	<b>CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g)</b>	<b>CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>)</b>
20	42.32	-
30	73.42	0.17x10 <sup>-6</sup>
40	178.66	0.26x10 <sup>-6</sup>
50	290.02	0.3x10 <sup>-6</sup>
60	344.60	0.33x10 <sup>-6</sup>
80	370.84	0.39x10 <sup>-6</sup>
100	368.29	0.44x10 <sup>-6</sup>
200	295.74	0.74x10 <sup>-6</sup>
300	240.02	0.11x10 <sup>-5</sup>
400	202.56	0.16x10 <sup>-5</sup>
500	175.94	0.21x10 <sup>-5</sup>
600	156.03	0.27x10 <sup>-5</sup>
800	130.12	0.41x10 <sup>-5</sup>
1x10 <sup>3</sup>	113.37	0.58x10 <sup>-5</sup>
2x10 <sup>3</sup>	70.98	0.17x10 <sup>-4</sup>
3x10 <sup>3</sup>	53.03	0.34x10 <sup>-4</sup>
5x10 <sup>3</sup>	36.21	0.8x10 <sup>-4</sup>
1x10 <sup>4</sup>	21.22	0.000268
2x10 <sup>4</sup>	12.36	0.000912
3x10 <sup>4</sup>	9.04	0.00187
5x10 <sup>4</sup>	6.17	0.00461
1x10 <sup>5</sup>	3.82	0.01533
2x10 <sup>5</sup>	2.56	0.04844
3x10 <sup>5</sup>	2.14	0.09155
5x10 <sup>5</sup>	1.80	0.1946
9x10 <sup>5</sup>	1.61	0.4316
10 <sup>6</sup>	1.597	0.4938

**Tablo 5.4 .** Timin bileşimine gelen elektron için CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g)  
ve CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>) sonuçları.

<b>Enerji (eV)</b>	<b>CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g)</b>	<b>CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>)</b>
20	44.74	-
30	77.62	0.16x10 <sup>-6</sup>
40	193.14	0.25x10 <sup>-6</sup>
50	273.90	0.29x10 <sup>-6</sup>
60	340.67	0.32x10 <sup>-6</sup>
80	367.95	0.37x10 <sup>-6</sup>
100	366.23	0.43x10 <sup>-6</sup>
200	295.36	0.73x10 <sup>-6</sup>
300	240.04	0.11x10 <sup>-5</sup>
400	202.73	0.16x10 <sup>-5</sup>
500	176.17	0.21x10 <sup>-5</sup>
600	156.28	0.27x10 <sup>-5</sup>
800	130.59	0.41x10 <sup>-5</sup>
1x10 <sup>3</sup>	113.80	0.57x10 <sup>-5</sup>
2x10 <sup>3</sup>	71.27	0.17x10 <sup>-4</sup>
3x10 <sup>3</sup>	53.25	0.34x10 <sup>-4</sup>
5x10 <sup>3</sup>	36.35	0.8x10 <sup>-4</sup>
1x10 <sup>4</sup>	21.31	0.000267
2x10 <sup>4</sup>	12.41	0.0009
3x10 <sup>4</sup>	9.08	0.00186
5x10 <sup>4</sup>	6.19	0.00459
1x10 <sup>5</sup>	3.84	0.01527
2x10 <sup>5</sup>	2.57	0.04824
3x10 <sup>5</sup>	2.14	0.09118
5x10 <sup>5</sup>	1.81	0.1939
9x10 <sup>5</sup>	1.62	0.4298
10 <sup>6</sup>	1.6	0.4917

**Tablo 5.5 .** Stizo-guanin bileşiğine gelen elektron için CSP(MeVcm<sup>2</sup>/g), MFP (Å) ve CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>) sonuçları.

<b>Enerji (eV)</b>	<b>CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g)</b>	<b>MFP (Å)</b>	<b>CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>)</b>
20	38.41	80.5864	-
30	66.65	21.07414	0.19x10 <sup>-6</sup>
40	167.96	11.8576	0.28x10 <sup>-6</sup>
50	233.60	8.9966	0.33x10 <sup>-6</sup>
60	308.07	7.64799	0.36x10 <sup>-6</sup>
80	337.19	7.1768	0.43x10 <sup>-6</sup>
100	337.88	7.4137	0.48x10 <sup>-6</sup>
200	275.66	10.1454	0.81x10 <sup>-6</sup>
300	226.14	13.1535	0.12x10 <sup>-5</sup>
400	192.48	16.0958	0.17x10 <sup>-5</sup>
500	168.17	18.9652	0.23x10 <sup>-5</sup>
600	149.79	21.77	0.29x10 <sup>-5</sup>
800	125.39	27.202	0.44x10 <sup>-5</sup>
1x10 <sup>3</sup>	109.57	32.44	0.61x10 <sup>-5</sup>
2x10 <sup>3</sup>	68.93	56.9535	0.000018
3x10 <sup>3</sup>	51.59	79.81	0.000035
5x10 <sup>3</sup>	35.31	122.722	0.000083
1x10 <sup>4</sup>	20.76	220.89	0.000275
2x10 <sup>4</sup>	12.12	396.0911	0.000933
3x10 <sup>4</sup>	8.88	553.2935	0.001911
5x10 <sup>4</sup>	6.06	832.9555	0.004700
1x10 <sup>5</sup>	3.76	1384.674	0.0156
2x10 <sup>5</sup>	2.52	2130.934	0.04923
3x10 <sup>5</sup>	2.10	2597.732	0.09299
5x10 <sup>5</sup>	1.78	3152.03	0.1976
9x10 <sup>5</sup>	1.59	3616.3158	0.4378
10 <sup>6</sup>	1.575	3683.4339	0.50086

**Tablo 5.6 .** Timin-adenin bileşğine gelen elektron için CSP(MeVcm<sup>2</sup>/g) ve CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>) sonuçları.

<b>Enerji (eV)</b>	<b>CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g)</b>	<b>CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>)</b>
20	39.95	-
30	69.32	0.18x10 <sup>-6</sup>
40	175.31	0.27x10 <sup>-6</sup>
50	237.62	0.32x10 <sup>-6</sup>
60	311.69	0.35x10 <sup>-6</sup>
80	340.10	0.41x10 <sup>-6</sup>
100	340.31	0.47x10 <sup>-6</sup>
200	276.99	0.79x10 <sup>-6</sup>
300	227.07	0.12x10 <sup>-5</sup>
400	193.21	0.17x10 <sup>-5</sup>
500	168.77	0.22x10 <sup>-5</sup>
600	150.29	0.29x10 <sup>-5</sup>
800	125.87	0.43x10 <sup>-5</sup>
1x10 <sup>3</sup>	109.96	0.60x10 <sup>-5</sup>
2x10 <sup>3</sup>	69.15	0.000018
3x10 <sup>3</sup>	51.74	0.000035
5x10 <sup>3</sup>	35.41	0.000082
1x10 <sup>4</sup>	20.81	0.000274
2x10 <sup>4</sup>	12.15	0.00093
3x10 <sup>4</sup>	8.90	0.00191
5x10 <sup>4</sup>	6.07	0.004688
1x10 <sup>5</sup>	3.77	0.01556
2x10 <sup>5</sup>	2.53	0.0491
3x10 <sup>5</sup>	2.11	0.09278
5x10 <sup>5</sup>	1.78	0.1971
9x10 <sup>5</sup>	1.59	0.4368
10 <sup>6</sup>	1.57	0.4997

**Tablo 5.7 .** Su bileşğine gelen elektron için CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g),  
MFP (Å) ve CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>) sonuçları.

<b>Enerji (eV)</b>	<b>CSP (MeVcm<sup>2</sup>/g)</b>	<b>MFP (Å)</b>	<b>CSDA-menzili (g/cm<sup>2</sup>)</b>
20	104.40	41.639	-
30	181.14	10.889	0.68x10 <sup>-7</sup>
40	201.68	9.5242	0.12x10 <sup>-6</sup>
50	203.26	9.5773	0.17x10 <sup>-6</sup>
60	346.84	8.2554	0.20x10 <sup>-6</sup>
80	386.78	7.8475	0.26x10 <sup>-6</sup>
100	392.15	8.1427	0.31x10 <sup>-6</sup>
200	327.27	11.1998	0.58x10 <sup>-6</sup>
300	268.89	14.5434	0.92x10 <sup>-6</sup>
400	228.35	17.8255	0.13x10 <sup>-5</sup>
500	199.12	21.0282	0.18x10 <sup>-5</sup>
600	177.07	24.1584	0.23x10 <sup>-5</sup>
800	145.93	30.2377	0.36x10 <sup>-5</sup>
1x10 <sup>3</sup>	127.21	36.104	0.51x10 <sup>-5</sup>
2x10 <sup>3</sup>	79.02	63.5496	0.000015
3x10 <sup>3</sup>	58.83	89.147	0.00003
5x10 <sup>3</sup>	40.03	137.2208	0.000072
1x10 <sup>4</sup>	23.39	247.2736	0.00024
2x10 <sup>4</sup>	13.59	443.7154	0.00083
3x10 <sup>4</sup>	9.94	619.8568	0.001701
5x10 <sup>4</sup>	6.77	934.2913	0.004198
1x10 <sup>5</sup>	4.19	1553.41899	0.013985
2x10 <sup>5</sup>	2.81	2393.7531	0.04424
3x10 <sup>5</sup>	2.34	2915.0155	0.08366
5x10 <sup>5</sup>	1.98	3535.4965	0.17792
9x10 <sup>5</sup>	1.77	4057.2014	0.39455
10 <sup>6</sup>	1.75	4128.9367	0.45146

## 6. SONUÇ ve ÖNERİLER

Bu çalışmanın ilk bölümünde, inelastik etkileşme karakteristiklerinin elde edilmesinde kullanılan, K kabuğu osilatör şiddeti, yarı-deneysel ayarlanabilir çarpan  $a$  ve valans kabuğu PMIP  $i$ ,  $W_v$  elde edildi, PENELOPE 2003 programı sonuçları (Salvat ve ark., 2003) ve diğer teorik sonuçlar ile karşılaştırıldı. Bu çalışmadan elde edilen  $a$  ve  $W_v$  nin, PENELOPE programı sonuçlarına göre, Sternheimer (1952) tarafından verilen teorik değerlere daha yakın olduğu gözlemlendi. Bunun sebebi,  $W_v$  nin Salvat ve Fernández-Varea (1992) tarafından Denk. (3.5) ile verilen ifadeden bulunması yerine bu çalışmada LPA yaklaşımı ile hesaplanmasıdır. Valans kabuğu PMIP  $i$ ,  $W_v$ ,  $a$  parametresinin, OOS un elde edilmesinde ve ortalama iyonlaşma enerjisi,  $I$  nın bulunmasında önemlidir. Bu niceliklerin elde edilmesinden sonra K kabuğu osilatör şiddeti Ek A da anlatılan sayısal integral çözümlene yöntemi ile hesaplandı. Elde edilen bu niceliklerin doğruluğunu ve OOS un tutarlılığını kontrol etmek amacı ile, bu niceliklerin  $f$ -toplama kuralını sağlayıp sağlamadığı ve ortalama uyarma enerjisi,  $I$ , değerini verip vermediği teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılarak kontrol edildi.

Çalışmanın ikinci kısmında, durdurma gücü, inelastik tesir kesiti ve ortalama serbest yol sonuçlarını elde edebilecek bir hesaplama yöntemi önerildi. Bu yöntemde sadece uzak etkileşmelere değiş-tokuş düzeltme terimi uygulandı. Durdurma gücü, inelastik tesir kesiti ve ortalama serbest yol için analitik ifade elde edildikten sonra, Mapple 6 da yukarıda belirtilen niceliklerin hesaplamasını yaparak 20 eV- 1 MeV enerji aralığında durdurma gücü, inelastik tesir kesiti, ortalama serbest yol ve CSDA-menzili sonuçları verecek bilgisayar kodlaması yapıldı. Elde edilen sonuçların güvenilirliğini test etmek için hesaplamalar deneysel, teorik sonuçlar ve PENELOPE programı ile karşılaştırıldı.

Elde edilen sonuçlar, C ve H da 200 eV-1 MeV enerji bölgesi için bu çalışmada hesaplanan CSP değerleri teorik ve deneysel sonuçlarla sırası ile % 5, % 4 uyumluluk bulundu. N ve O da 500 eV-1 MeV enerji aralığında gelen elektronlar için teorik ve deneysel sonuçlarla sırası ile % 3, % 4 uyumlu bulundu. Bragg toplama kuralının uygulanması ile su, adenin, guanin, sitozin, timin, stizo-guanin ve timin-adenin bileşiklerde CSP hesaplandı. Bu çalışmada hesaplanan su, guanin, adenin, stizo-guanin bileşiklerinde CSP değerleri, 100 eV-1 MeV enerji bölgesindeki elektronlar için teorik ve deneysel sonuçlarla sırası ile yaklaşık % 5, % 5, % 4 ve % 3 uyumlu bulundu.

Berilyum, su, guanin, stizo-guanin-DNA için MFP değerleri teorik sonuçlarla karşılaştırıldı. Bu çalışmada elde edilen MFP değerleri, teorik sonuçlarla Berilyum, su, guanin, stizo-guanin hedeflerinde 200 eV- 1 MeV enerji aralığı için yaklaşık % 7, % 6, % 9 ve % 9 uyumlu bulundu. Enerjiye karşı tüm durdurma gücü sonuçları diğer teorik ve deneysel çalışmalarda belirtildiği gibi ~100 eV civarında maksimum olmaktadır. Enerjiye göre ortalama serbest yol sonuçları ~80 eV civarında minimum göstermektedir.

Çalışmada hesaplanmış olan CSP değerlerinden sayısal yöntemle CSDA-menzili değerleri hesaplandı. Bulunan sonuçlar, diğer teorik sonuçlar ve deneysel değerler ile karşılaştırıldı. Bu çalışmada elde edilen CSDA-menzili sonuçları, 500 eV- 1 MeV enerji aralığında yaklaşık olarak diğer teorik sonuçlar ile su, guanin, stizo-guanin bileşikleri için sırası ile % 5, % 4 ve % 5 uyumlu bulundu. Bunun yanı sıra enerji stragglng parametresi de analitik olarak hesaplandı ve doz hesaplamaları için önerildi.

Inokuti (1971) tarafından belirtildiği gibi gelen parçacık elektron olduğunda herhangi bir enerjide deęiş- tokuş düzeltmesi ve 10 keV üzeri enerjilerde ise relativistik düzeltme yapılmalıdır. ICRU-37 (1984) ve ESTAR programı sonuçları ile bu çalışmanın sonuçları karşılaştırıldığında ~ 300 keV de durdurma gücü sonuçlarında ve dolayısıyla CSDA-menzili sonuçlarında ~ % 7 lik bir sapmaya kadar ulaşmaktadır. Bu sapmanın en aza indirgenmesi amacı ile bu çalışmada

önerilen analitik durdurma gücü ifadesine, frenleme ışıması ve relativistik düzeltme yapılabilir.

Bu çalışmada uygulamış olduğumuz yöntem biyolojik hedeflerde : su, adenin, guanin, sitozin, timin, stizo-guanin ve timin-adenin, durdurma gücü, ortalama serbest yol, menzil sonuçlarında deneysel ve teorik sonuçlarla 50 eV-1 MeV aralığındaki elektronlar için ortalama olarak durdurma gücünde %10, ortalama serbest yolda % 12, menzilde % 15 in altında olan hata oranları ile iyi bir uyum vermektedir. GOS model kullanılarak durdurma gücü, ortalama serbest yol ve menzil hesaplaması K ve valans kabuğu osilatör şiddetleri, K ve valans kabuğu PMIP leri ve gelen ve hedef elektronların değiş-tokuş etkileşmelerine bağlıdır. PENELOPE sonuçları biyolojik hedefler için 100 eV -1 MeV enerji aralığında ortalama serbest yolda, 200 eV 1 keV enerji aralığında ise diğer menzil sonuçlarında deneysel ve teorik sonuçlardan farklı değerler vermektedir. Bu çalışma sonuçları göstermektedir ki yukarıdaki niceliklerin doğru tanımlanması ile biyolojik hedeflerde elektron durdurma gücü, ortalama serbest yol formülleri ve menzil hesabı teorik ve deneysel verilere yakın sonuçlar vermektedir.

Bu çalışmada geliştirilen ve Mapple 6 da kodlanan bilgisayar programı kullanılarak daha başka moleküller ve karışımlar için benzeri hesaplamalar kolayca yapılabilir. Ayrıca burada geliştirilen yöntem esas alınarak biyolojik materyaller için doz hesaplamaları yapılabilir.

**KAYNAKLAR**

**Akkerman, A., Akkerman, E., 1999.** Characteristics of electron inelastic interactions in organic compounds and water over the energy range 20-10 000 eV. J. Appl. Phys. 86, 5809-5816.

**Ashley, J. C., 1980.** Inelastic Interactions of Low-Energy electrons with Organic Solids: Simple Formulae for Mean Free Paths and Stopping Power. IEEE T. Nucl. Sci., 27, 1451-1458.

**Ashley, J. C., Williams, M. W., 1980.** Electron Mean Free Paths in Solid Organic Insulators. Radiat. Res. 81, 364-373.

**Ashley, J. C., 1988.** Interaction of low-energy electrons with condensed matter: Stopping powers and inelastic mean free paths from optical data. J. Electron Spectrosc., 46, 199-214.

**Ashley, J. C., 1991.** Energy-loss probabilities for electrons, positrons in condensed matter. J. Appl. Phys, 69, 674-678.

**Báro, J., Sempau, J., Fernández, J. M., Salvat, F., 1995.** PENELOPE: An Algorithm for Monte Carlo Simulation of The Penetration and Energy Loss of Electron and Positrons in matter. Nucl. Instrum. Meth. B,100, 31-46.

**Berger, M. J., Hubbell, J. H., Seltzer, S. M., Coursey, J. S. and Zucker, D. S., 1987.** XCOM: Photon Cross Sections Data Base. Code available from <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/Text/XCOM.html>.

- Bethe, H., 1930.** Zur Theorie des Durchgangs Schneller Korpuskularstrahler durch materie. Ann. Physik, 5, 325-400.
- Bohr, N., 1915.** On the decrease of velocity of swiftly moving electrified particles in passing through matter. Phil. Mag., 30, 581.
- Bohr, N., 1948.** The Penetration of Atomic Particles through Matter. Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid., 18,1-144.
- Born, M., 1926.** Quantenmechanik der Stossvorgaenge. Z. Phys. 38, 803-827.
- Bragg, W. H., Kleeman R., 1905.** On the alpha particles of radium and their loss of range in passing through various atoms and molecules. Phil. Mag. 10, 318-340.
- Cengiz, A., 2002.** Approximate inelastic scattering cross sections of electrons. Radiat. Phys. Chem., 65,33-44.
- Cullen, D. E., Chen, M. H., Hubbell, J. H., Perkins S. T., Plechaty, E. F., Rathkopf, J. A. and Scofield, J. H., 1989.** Tables and graphs of photon interaction cross sections from 10 eV to 100 GeV derived from the LLNL Evaluated Photon data library (EPDL). Lawrence Livermore National Laboratory UCRL-50400, 6, Parts A and B.
- Chatterjee, A., Koehl, P., Magge, J. L., 1986.** Theoretical consideration of the chemical pathways for radiation induced strand breaks. Adv. Space Res., 6, 97-105.
- Dalgarno, A., Degges, T., Williams, D. A., 1967.** Dipole properties of molecular nitrogen", P. Phys. Soc. Lond., 92, 291.

- Dehmer, J. L., Inokuti, M., Saxon, R. P., 1975.** Systematics of moments of dipole oscillator-strength distributions for atoms of the first and second row. *Phys. Rev.*, A12, 102.
- Dingfelder, M., Hantke, D., Inokuti, M., Paretzke, H. G., 1998.** Electron inelastic-scattering cross sections in liquid water. *Radiat. Phys. Chem.* 53, 1-18.
- Elkomoss, S. G., Pape, A., 1982.** Stopping power calculation for semiconductors. *Phys. Rev. B*, 26, 6739-6746.
- ESTAR, 2003.** Stopping Power and Range Tables for Electron. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>
- Fano, U., 1956.** Atomic Theory of Electromagnetic Interactions in Dense Materials. *Phys. Rev.*, 103, 1202-1218.
- Fano, U., 1963.** Penetration of protons, alpha particles and mesons. *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, 13,1-66.
- Fano, U and Copper, J. W., 1968.** Spectral distribution of atomic oscillator Strengths. *Rev. Mod. Phys.*, 40, 441-507.
- Fernández –Varea, J. M., Mayol, R., Liljequist D., Salvat F., 1993.** Inelastic scattering of electrons in solids from a generalized oscillator strength model using optical photoelectric data. *J. Phys. Condens. Mat.*, 5, 3593-3610.

**Fernández –Varea, J. M., 1996.** Monte Carlo simulation of 0.1-100keV electron and positron transport in solids using optical data and partial wave methods. Nucl. Instrum. Meth. B, 108, 35-50.

**Fernández-Varea, J. M., 1998.** Monte Carlo Simulation of the inelastic scattering of electrons and positrons using optical-data models Radiat. Phys. Chem., 53, 235-245.

**Ford, A. L., Browne, J. C. 1973.** Direct-resolvent-operator computations on the hydrogen-molecule dynamic polarizability, Rayleigh, and Raman scattering. Phys. Rev., 7A, 418.

**Fuciarelli, A. F., Wegher, B. J., Blakely, W. F., Dizdaroğlu, M., 1990.** Yields of Radiation induced base products in DNA: effects of DNA conformation and gassing conditions. Int. J. Radiat. Biol., 58 , 397-415.

**Gerhart, D. E., 1975.** Comprehensive optical and collision data for radiation action. I, H<sub>2</sub>. J. Chem. Phys., 62, 821.

**Gruzza B., 2005.** The Inelastic Mean Free Path of Electrons in Solid. [www.lasmea.univ-bpclermont.fr/Personnel/Bernard.Gruzza/IMFP.html](http://www.lasmea.univ-bpclermont.fr/Personnel/Bernard.Gruzza/IMFP.html).

**Gümüş, H., 2005.** Simple stopping power formula for low and intermediate energy electrons. Radiat. Phys. Chem., 72, 7-12.

**Henke, B. L., Gullikson, E. M., Davis, J. C., 1993.** X-Ray Interaction: Photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at  $E = 50 \text{ eV-30 keV}$   $Z = 1-92$ . Atom Data Nucl. Data , 54, 181-342.

**International Commission on Radiation Units and Measurement 1984.**

Stopping powers for electrons and positrons. ICRU Report-37, ICRU Bethesda M.D.

**Inokuti, M., 1971.** Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules- The Bethe Theory Revisited. Rev. Mod. Phys., 43, 297-347.

**Inokuti M., 1978.** Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules- The Bethe theory revisited. Rev. Mod. Phys., 50, 1, 23-35.

**Iskef H., Cunningham, J. W., and Watt, D. E., 1983.** Projected ranges and effective stopping powers of electrons with energy between 20 eV and 10 keV. Phys. Med. Biol., 1983, 28, 5, 535-545.

**Jensen, H., 1932.** Die ladungsverteilung in Ionen und die Gitterkonstante des Rubidiumbromids nach der Statistischen Methode Zeitung. F. Physik 77, 722- 745.

**Johnson, R. E., Inokuti M., 1983.** The local-plasma approximation to the oscillator- strength spectrum: how good is it and why?. Comment Mol. Phys., 14, 19.

**Joy, D. C., 2001.** A Data-Base of electron-solid interaction  
<http://web.utk.edu/~srcutk/htm/interact.htm>.

**Landau, L. D., and Lifshitz, E. M., 1977.** QUANTUM MECHANICS Non-Relativistic Theory. Vol. 3, 3. Edition, Pergamon Pres, Oxford.

**La Verne, J. A and Pimblott, M. S, 1995.** Electron Energy-loss Distributions in Solid, Dry DNA. Radiat. Res.,141,208-215.

- Lenz, W., 1932.** Über die Anwendbarkeit der statistischen Methode auf Ionengitter. Zeitung. F. Physik 77, 713- 721.
- Liljequist, D., 1983.** 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, 1567-1582.
- Liljequist, D., 1985.** Simple generalized oscillator strength density model applied to the simulation of keV electron-energy-loss distributions. J. Appl. Phys. 57, 657-665.
- Lindhard, J., Scharff, M., 1953.** Energy loss in matter by fast particles of low charge. Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 27, 15, 1-31.
- Lindhard, J., 1954.** On the properties of a gas of charged particles. K. Danske Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 28, 8.
- Lindhard, J. and Winter, A., 1964.** Stopping power of electron gas and equipartition rule. Kgl. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd, 34, 4.
- Marmier, P., Sheldon, E., 1969.** Physics of nuclei and particles. Vol. 3, Academic Pres, NewYork (pp. 731-732).
- McGuire.,E. J. 1971.** Inelastic scattering of electrons and protons by the elements He to Ne. Phys. Rev., A3, 267.

- Milligan, J. R., Aguilera, J. A., and Ward, J. F., 1993.** Variation of single strand break yield with scavenger concentration for plasmid DNA irradiated in aqueous solution. *Radiat. Res.*, 113, 151-157.
- Mott, N. F., and Massey, H. S. W., 1965.** *The Theory of Atomic Collisions*, 3rd Edition Oxford Univ. Press, London.
- Palik, E. D., 1985.** *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, New York.
- Penn, D. R., 1987.** Electron mean-free-path calculations using a model dielectric function. *Phys. Rev. B*, 35, 482-486.
- Peterson, L. R. and Gren, A. E. S., 1968.** The relation between ionization yields, cross sections and loss functions. *J. Phys. B*, 1, 1131-1140.
- Powell, C. J., 1974.** Attenuation lengths of low energy electrons in solids. *Surf. Sci.*, 44, 29-46.
- Salvat, F., Parellada, J., 1984.** Penetration and Energy Loss of Fast Electrons Through matter. *J. Phys. D: Appl Phys.*, 17, 1545-1561.
- Salvat, F., Martinez, J. D., Mayol, R. and Parellada, J., 1986.** A Monte Carlo Program to Simulate The Penetration and Energy Loss of keV Electrons Through Matter. *Comput. Phys. Commun.*, 42, 93-104.
- Salvat, F. and Fernández-Varea, J. M., 1992.** Semiempirical cross sections for the simulation of the energy loss of electrons and positrons in matter. *Nucl. Instrum. Meth. B*, 63, 255-269.

**Salvat, F., Fernández-Varea, J. M., Acosta, E., Sempau, J., 2001.**  
PENELOPE A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. NEA, Data Bank, France.

**Salvat, F., Fernández-Varea, J. M., Acosta, E., Sempau J., 2003.**  
PENELOPE A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. NEA, Data Bank, France.

**Seltzer, S. M. and Berger, M. J. 1982.** Evaluation of the Collision Stopping Power of Elements and Compounds for Electrons and Positrons. Int. J. Appl. Radiat. Isot., 33,1189-1218.

**Sternheimer, R. M., 1952.** The Density effect for the ionization loss in various materials. Phys. Rev. 88, 851-859.

**Sugiyama, H., 1985.** Stopping power formula for intermediate energy electrons. Phys. Med. Biol., 30, 331-335.

**Sugiyama, H., 1989.** Stopping power formula for intermediate energy heavy charged particles and its application to radiation dosimetry. Electrotechnical laboratory No. 857, 1-87.

**Tan, Z., Xia, Y., Zhao, M., Liu, X., Li, F., Huang B., Ji, Y., 2004.** Electron stopping power and mean free path in organic compounds over the energy range of 20-10000 eV. Nucl. Instrum. Meth. B, 222, 27-43.

**Victor, G. A., Dalgarno, A., 1969.** Dipole properties of molecular hydrogen. J. Chem. Phys. 50, 2535-2539.

**Watson, R.L., Peng, Y. and Horvat, V. 2004.** Additivity of Cross Sections for Electron Loss from 6 A MeV  $\text{Xe}^{18+}$  in Molecular Targets ([cyclotron.tamu.edu/2002%20Progress%20Report/section4.html](http://cyclotron.tamu.edu/2002%20Progress%20Report/section4.html)).

**Zeiss, G. D., Meath, W. J., Macdonald, J. C. F. and Dawson, D. J. 1977a..** Dipole oscillator strength distributions, sums and some related properties for Li, N, O,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , NO and  $\text{N}_2\text{O}$ . Can. J. Phys. 55, 2080.

**Zeiss, G. D., Meath, W.J., Macdonald, J. C. F. and Dawson, D. J. 1977b.** Accurate evaluation of stopping and straggling mean excitation energies for N, O,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ , NO,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{N}_2\text{O}$  using dipole oscillator strength distributions. A test of the validity of Bragg's rule. Radiat. Res., 70, 284.

## ÖZGEÇMİŞ

05-03-1969 tarihinde ADANA/Kadirli de doğdu. Orta öğrenimini Kadirli Lisesinden mezun olarak 1986 yılında tamamladı. 1987 yılında Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdi ve 1991 yılında mezun olarak lisans eğitimini tamamladı. 1992 yılında OMÜ Tıp Fakültesi Nükleer Tıp anabilim dalında Uzman olarak çalışmaya ve OMÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik anabilim dalında yüksek lisans yapmaya başladı. 1995 yılında yüksek lisans eğitimini tamamlayarak 1997 yılında OMÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik anabilim dalında doktora yapmaya başladı ve 1 yıl İngilizce eğitimi gördü. 2001 yılında Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne görevlendirildi. Halen Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde çalışmaktadır. Evli ve iki çocuk sahibidir.