

**POZİTRONLARIN BAZI BİYOLOJİK
BİLEŞİKLERDE ELEKTRONİK ENERJİ
KAYBI HESAPLAMALARI**

TUBA NAMDAR

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

POZİTRONLARIN BAZI BİYOLOJİK BİLEŞİKLERDE ELEKTRONİK ENERJİ
KAYBI HESAPLAMALARI

TUBA NAMDAR

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN
PROF. DR. HASAN GÜMÜŞ

SAMSUN-2010

ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Bu çalışma jürimiz tarafından 05/ 02/ 2010 tarihinde yapılan sınav ile Fizik
Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. Hasan GÜMÜŞ

Üye: Doç. Dr. Kamil IŞIK

Üye: Yrd. Doç. Dr. M. Çağatay TUFAN

ONAY :

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

...../...../2009

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü
Prof. Dr. Hasan GÜMÜŞ

POZİTRONLARIN BAZI BİYOLOJİK BİLEŞİKLERDE ELEKTRONİK ENERJİ KAYBI HESAPLAMALARI

ÖZET

Bu çalışmada 10 eV-10 MeV aralığındaki enerjilerde gelen pozitronlar için bazı biyolojik bileşiklerin durdurma gücü (Stopping Power-SP) hesaplamaları gerçekleştirildi. Bu hesaplamaları yapabilmek için Inokuti tarafından verilen inelastik diferansiyel tesir kesiti (IDCS) ifadesinde Genelleştirilmiş Osilatör Şiddeti (GOS) modeli kullanıldı ve her bir atomik kabuğun durdurma gücüne katkısı hesaplandı. İnelastik diferansiyel tesir kesiti, uzak ve yakın çarpışmaların toplamı şeklinde değerlendirildi. Pozitronların, yakın etkileşmeler için tesir kesitinde Bhabha formülü kullanıldı. Bu çalışmada pozitronların, düşük atom numaralı H, C, N, O, P gibi hedeflerde durdurma gücünü veren bir bilgisayar programı geliştirildi. Ayrıca, DNA molekülleri (sitizo-guanin ve timin-adenin), adenin, guanin, sitozin, timin gibi biyolojik hedeflere, 10 eV-10 MeV enerji aralığında gelen pozitronlar için durdurma gücü değerleri elde edildi. Elde edilen sonuçların, literatürdeki diğer teorik sonuçlarla ve PENELOPE programı sonuçları ile uyduğu gözlemlendi.

Anahtar Kelimeler: Durdurma Gücü, Genelleştirilmiş Osilatör Şiddeti (GOS), Diferansiyel Tesir Kesiti (DCS), Bhabha Tesir Kesiti

ELECTRONIC ENERGY LOSS CALCULATIONS OF SOME BIOLOGICAL COMPOUNDS FOR POSITRONS

ABSTRACT

In this work, stopping power (SP) calculations of some biological compounds for incident positrons with the energy in the 10 eV-10 MeV energy range were calculated. Generalized Oscillator Strength (GOS) Model in inelastic differential cross section given by Inokuti were used for making this calculations and calculated contribution of each atomic shell for stopping power. Inelastic differential cross section were evaluated to be the total of distant and close interactions. For positron Bhabha formula were used in close interactions cross section. In the study, a computer program to calculate the stopping power has been developed for incident positrons in low atomic number targets, such as H, C, N, O, P materials. In addition, for biological targets such as DNA molecules (cytosine-guanine, thymine-adenine), adenine, guanine, cytosine, thymine, the stopping power is also calculated for incident positrons in 10 eV-10 MeV energy range. The obtained results have been compared with other theoretical results in literature and PENELOPE code results.

Keywords : Stopping Power, Generalized Oscillator Strength (GOS), Inelastic Differential Cross Section (DCS), Bhabha Cross Section

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince her türlü imkanı sağlayarak, çalışmamın her aşamasında bana yardımcı olan, engin bilgisini ve zamanını esirgemedi beni yönlendiren, olumlu yaklaşımı ve desteğiyle güçlendiren çok değerli hocam Prof. Dr. Hasan GÜMÜŞ' e;

Birlikte çalışmaktan keyif aldığım, maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen araştırma görevlisi arkadaşlarıma ve çok değerli hocalarıma;

Her şeyimi borçlu olduğum, dünyanın en şanslı insanı olarak hissettiren canım aileme, yaşamdaki heyecanı ve azmiyle bana güç veren sevgili eşim Ferda NAMDAR'a sonsuz teşekkürler.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ	vi
TABLolar LİSTESİ	viii
1. GİRİŞ	1
2. GENEL BİLGİLER	4
2.1. İnelastik Çarpışmalar.....	4
2.2. Genelleştirilmiş Osilatör Şiddeti (GOS).....	7
2.3. GOS Model.....	9
2.4. Diferansiyel tesir kesiti (DCS).....	13
2.4.1. Elektronların yakın çarpışmaları için diferansiyel tesir kesiti.....	14
2.4.2. Pozitronların yakın çarpışmaları için diferansiyel tesir kesiti.....	15
2.5. İnelastik Etkileşmeler İçin Toplam Tesir Kesiti.....	17
2.6. Yüksek Enerjilerde Elektronların ve Pozitronların Durdurma Gücü.....	19
2.7. Optiksel Veriden GOS'un Oluşturulması ve Optiksel Osilatör Şiddeti (OOS).....	20
2.8. Ortalama Uyarma Enerjisi (I).....	21
2.9. Bileşikte Enerji Kaybı ve Bragg Toplama Kuralı.....	23
3. MATERYAL VE YÖNTEM	25
3.1. PENELOPE Programının Çalıştırılması ve Veri Elde Edilmesi.....	25

3.2. İnelastik Etkileşim Karakteristiklerinin Hesaplanmasında Kullanılan	
Niceliklerin Elde Edilmesi	27
3.2.1. Optiksel Osilatör Şiddeti (OOS), Kısmi İyonlaşma Potansiyeli (PMIP) ve Ortalama Uyarma Enerjisi (I) ' nin Hesaplanması.....	27
3.2.2. Pozitronların Yakın Çarpışmaları İçin Bhabha Formülü.....	29
4. BİYOLOJİK MATERYALLERDE İNELASTİK ETKİLEŞİM	
KARAKTERİSTİKLERİNİN HESAPLANMASI.....	30
4.1. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin Durdurma Gücü	
Hesabı.....	30
5. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	32
5.1. Düşük Atom Numaralı Hedefler İçin Durdurma Gücü Sonuçları.....	32
5.2. Biyolojik Bileşikler İçin Durdurma Gücü Sonuçları.....	38
6. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	44
7. KAYNAKLAR.....	46
8. EKLER.....	52
8.1. EK-A.....	52
8.2. EK-B.....	56
9. ÖZGEÇMİŞ.....	62

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.1. Farklı durdurma gücü bölgeleri.....	2
Şekil 2.1. Taban durumundaki hidrojen atomunun iyonizasyonu için GOS.....	7
Şekil 2.2. $U_k = 2 \text{ keV}$ olan bir iç kabuğun GOS'u için osilatör model.....	10
Şekil 3.1. PENELOPE 2005 material.f alt programı veri giriş dosyası.....	25
Şekil 3.2. PENELOPE 2005 tables.f alt programı veri giriş dosyası.....	26
Şekil 5.1. H atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	32
Şekil 5.2. C atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	33
Şekil 5.3. N atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	33
Şekil 5.4. O atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	34
Şekil 5.5. P atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	35
Şekil 5.6. $C_5H_5N_5$ (Adenin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	38
Şekil 5.7. $C_4H_5N_3O$ (Sitozin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	38
Şekil 5.8. $C_5H_5N_5O$ (Guanin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	39
Şekil 5.9. $C_5H_6N_2O_2$ (Timin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	39
Şekil 5.10. $C_{20}H_{27}N_7O_{13}P_2$ (Sitozin-Guanin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	40

Şekil 5.11. $C_{19}H_{26}N_8O_{13}P_2$ (Timin-Adenin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	40
Şekil 5.12. H_2O (Su) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.....	41

TABLOLAR LİSTESİ

Tablo 1. Teorik ve yarı-deneysel yöntemler ile elde edilen ortalama uyarma enerjisi değerleri (ICRU-37, 1984).....	23
Tablo 2. H, C ve N üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm ² /g) sonuçları.....	36
Tablo 3. O ve P üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm ² /g) sonuçları.....	37
Tablo 4. Adenin, Sitozin, Guanin ve Timin üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm ² /g) sonuçları.....	42
Tablo 5. Sitozin-Guanin, Timin-Adenin ve Sıvı Su üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm ² /g) sonuçları.....	43

1. GİRİŞ

Madde içerisinde yüklü parçacıkların enerji kaybı veya maddenin durdurma gücü, Uluslararası Radyasyon Birimleri ve Ölçümleri Komisyonu (ICRU) tarafından, radyasyonun ortamda hareketi boyunca birim uzunlukta ortama bıraktığı enerji olarak tanımlanır.

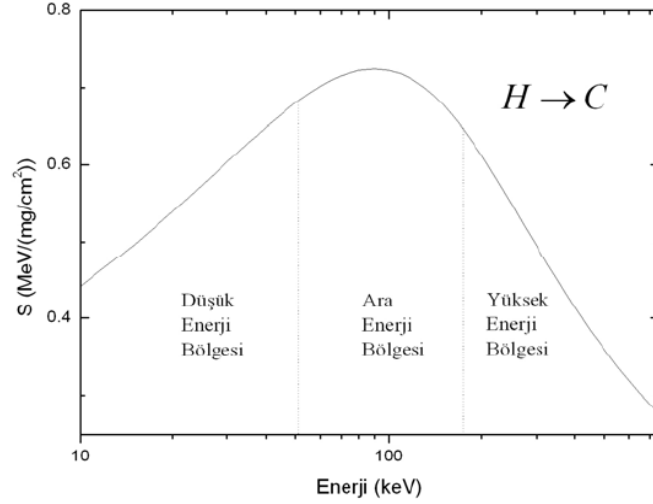
Durdurma gücü konusundaki deneysel araştırmalar; hızlandırıcılar ve dedektör gibi sistemlerin gelişmesiyle; teorik çalışmalar da bilgisayarların devreye girmesiyle hız kazanmıştır ve çalışılan enerji menzili eV' dan TeV mertebesine kadar genişletilebildiği için uygulama alanı da çok fazladır. Malzeme Bilimi ve Teknolojisi, Nükleer Reaktör Teknolojisi, Mikro elektronik Aygıtlar, Nükleer Radyasyonla Teşhis ve Tedavi Birimleri, Biyolojik ve Jeolojik Çevre Bilimleri, Kozmik Radyasyon, Radyoaktivite, Hızlandırıcılar, Detektörler, parçacıkların durdurulmalarını esas alan çalışmaları kapsayan temel uygulama alanlarıdır. Pozitron Emisyon Tomografi (PET)' nin Tıp ' ta düzenli kullanılması ve gelişmesi, pozitronların gönderildiği hedef materyal (biyolojik yapılar) ile fiziksel ve kimyasal etkilerinin iyi anlaşılır olması önem kazanmıştır. Durdurma gücünün bu kadar geniş bir alanda kullanılması durdurma gücü için çeşitli teori ve yaklaşımların ortaya çıkmasını sağlamıştır.

Ancak, tüm bu alanlarda, durdurma gücü hesaplarından çıkarılacak hedef sonuçların farklı farklı olması, deneylerin kurgularının da farklılıklar göstermesine neden olur ve bu kadar uzun yıllar yapılan çalışmalara rağmen deneylerle tam uyum içinde olabilecek kesin bir teorik şema yoktur.

Hızlı yüklü parçacıkların atomlarla inelastik çarpışmaları sonucu meydana gelen enerji kaybı ilk olarak Bohr tarafından yarı klasik bir yaklaşımla hesaplanmıştır (Bohr, 1913). Daha sonra Bethe kuantum mekaniksel yaklaşımı kullanarak durdurma gücünü hesaplamıştır (Bethe, 1930). Bohr ve Bethe teorileri ayrı atomlara yani gazlara uygulanır. Aynı anda hem gelen parçacıkla hem de birbirleriyle etkileşen bir çok atomun etkisi (yoğunluk etkisi) ilk olarak Fermi tarafından hesaba katılmıştır (Fermi, 1940). Bethe ve Fermi Teorileri arasındaki ilgi ise Fano tarafından tartışılmıştır (Fano, 1963).

Durdurma gücü için ortaya konulan teorilerde elde edilen sonuçlar, gelen parçacığın tüm enerjileri için deneysel verilerle iyi bir uyum sağlayamamaktadır. Bu

nedenle durdurma gücü, gelen parçacığın hızına dolayısıyla enerjisine bağlı olarak üç ayrı bölgede göz önüne alınır. Birincisi durdurma gücünün artan hızla azaldığı yüksek enerji bölgesi (Born yaklaşımının geçerli olduğu bölge), ikincisi parçacığın yüksek hızdan düşük hıza geçtiği ve durdurma gücünün maksimum olduğu ara enerji bölgesi, üçüncüsü durdurma gücünün parçacığın hızıyla orantılı olarak azaldığı düşük enerji bölgesidir. Farklı durdurma gücü bölgeleri Şekil 1.1’ de gösterilmektedir.



Şekil 1.1. Farklı durdurma gücü bölgeleri (Tufan, 2007)

Yüksek enerjili gelen parçacıkların madde içinde birim yol başına kaybettikleri enerjinin hesabı için iki önemli teori vardır. Bunlardan ilki Bohr (1913) tarafından, diğeri ise Bethe (1930) tarafından oluşturulan çözümdür. Düşük enerji bölgesinde durdurma gücü hesabında kullanılan en önemli teoriler ise dielektrik (Lindhard ve Scharff; 1961) ve Firsov (1959) teorileridir.

Durdurma gücü hesabı için genelleştirilmiş osilatör şiddeti (Generalized Oscillator Strength-GOS) ile Inokuti (1971) tarafından verilen inelastik diferansiyel tesir kesitinin kullanılması da yaygın bir metottur. GOS atomik dalga fonksiyonlarının sayısal integrasyonunu gerektiren matris elemanlarından hesaplanır. Fakat bu hesaplama oldukça karmaşıktır. Son yıllarda matris elemanlarından GOS'un hesabından sakınmak için optiksel veri modelleri önerilmektedir. Liljequist (1985), madde ile elektronların inelastik saçılması için optik veri modeli önermiştir. Bu model, Salvat ve Fernandez-Varea (1992) tarafından geliştirilmiştir. Optik veri modelleri (Penn, 1987; Ashley, 1991; Fernandez-Varea ve ark., 1993, 1996; Baro ve ark., 1995), PENELOPE (Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons) ve LEEPS (Low Energy Electrons and

Positrons Simulations) 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).

Pozitronların hedef içinde durdurulma mekanizması elektronlarınkine benzemesine rağmen bıraktıkları iz dolayısıyla çok önemli farklı bir özelliğe sahiptir. Ancak elektronlarla pozitronların durdurulmaları arasındaki fark küçük enerjilerde önem kazanmaktadır (Pimblott ve Siebbeles, 2002). Yaklaşık 1 keV'in üzerindeki enerjilerde, enerji kaybı elektron ve pozitronlar için benzerdir. Daha düşük enerjilerde önemli farklılıklar vardır (Pimblott ve ark., 2000). Pozitron durdurma gücü hesapları 10 keV'in üstündeki enerjilerde (Seltzer and Berger, 1982; ICRU 37 Report), teorik ve deneysel olarak uyuşmalarına rağmen 10 keV'in altında kolay kullanılabilir bir işlem hemen hemen yok gibidir. Batra (1987) tarafından bulunan bir eşitlik 1 keV ile 500 keV menziline geçerli sonuçlar vermektedir. Pimblott ve Siebbeles (2002), 0.01 keV ile 10 keV enerji aralığındaki elektron ve pozitronların, suda, yoğunluk normalize durdurma gücü hesaplarını yapmışlardır.

Bu çalışmanın amacı, GOS modeli kullanarak düşük ve orta enerjilerde geçerli olan, insanın biyolojik yapısında bulunan H, C, N, O gibi hedefler ve adenin, guanin, sitozin ve timin gibi biyolojik bileşiklerde durdurma gücü hesabı yapabilecek bir hesaplama yönteminin geliştirilmesi, kodlanması ve uygulanmasıdır. Bu çalışmada durdurma gücü hesabı, Inokuti ve Kim (1970) tarafından verilen inelastik çarpışma tesir kesitindeki yakın etkileşme tesir kesiti ifadesine Bhabha formülü uygulanarak elde edildi. Sonuçlar diğer teorik (Gümüş, 2006; Gümüş, 2008; ICRU 37; PENELOPE 2005; Pimblott ve Siebbeles, 2002) sonuçlarla karşılaştırıldı.

2. GENEL BİLGİLER

Düşük ve orta enerjili elektronlar ve pozitronlar için baskın enerji kaybetme mekanizması, ortamda elektronik uyarmaları ve iyonlaşmaları meydana getiren inelastik çarpışmalardır.

2.1. İnelastik Çarpışmalar

Hızlı yüklü parçacıkların atomlar ile inelastik çarpışmasındaki enerji kaybının deneysel verilerle uyumlu ilk teorik hesaplaması Bohr tarafından klasik fizik yasaları kullanılarak 1913 yılında yapılmıştır (Bohr, 1913). Bohr, enerji kaybı için gelen parçacığın doğrultusu ile hedef atomun merkezi arasındaki uzaklığı kritik çarpışma parametresi (b) olarak almıştır. Bu çalışmada enerji kaybı hesaplanırken iki durum göz önüne alınır:

İlki çarpışma parametresi belirli bir değerden küçükken, ikincisi ise çarpışma parametresi bu değerden büyük olduğunda durdurma gücü hesabıdır. Bu kritik değer, gelen parçacık ile hedef atoma bağlı elektronun birbirine en yakın oldukları uzaklık olan, en yakın yaklaşma uzaklığıdır (b_1) ve değeri

$$b_1 = \frac{Z_1 e^2 (M + m)}{v^2 m M} \quad (2.1)$$

ile hesaplanır. Burada Z_1 gelen parçacığın atom numarası, e elektronun yükü, M gelen parçacığın kütlesi, m elektronun kütlesi ve v gelen parçacığın hızıdır.

Eğer çarpışma parametresi b_1 'den küçükse ($b < b_1$) bu durumda çarpışmanın serbest bir elektronun, gelen parçacıktan saçılması problemiymiş gibi olduğu varsayılır. Çarpışma parametresi b_1 'den büyükse (yani $b > b_1$ ise), elektron üzerine etki eden kuvvetler daha ayrıntılı olarak ele alınır. Temel kabul, elektronun yörünge periyodunun çarpışma zamanı ile karşılaştırıldığında çok büyük olduğu ve bu yüzden çarpışma boyunca elektronun yer değiştirmedir. Enerji kaybı, elektronun gelen parçacığın yoluna dik ve paralel hareketleri incelenerek hesaplanır. Çarpışma boyunca elektrona aktarılan enerjilerin çarpışma parametresi üzerinden integralinin alınmasıyla, birim hacminde N tane atom bulunan ve her bir atomu r tane elektron içeren hedef içine gelen parçacığın birim yol başına kaybettiği toplam enerji;

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4 N}{mv^2} \sum_{s=1}^r \log \left(\frac{v^3 k M m}{n_s Z_1 e^2 (M + m)} \right) \quad (2.2)$$

biçiminde bulunur. Burada $k=1,123$ 'dür.

Atomlar ve moleküller ile yüklü parçacıkların inelastik çarpışmalarının kuantum teorisi ilk olarak Bethe (1930, 1932) tarafından formülleştirilmiştir. Bethe çarpışmaları tanımlamak için çarpışma parametresi yerine momentum transferini kullanmıştır. Dalga mekaniği ilkeleri, momentumu iyi bir şekilde belli olan bir parçacık için çok küçük bir bölgeye yerleştirilmiş bir dalga paketi biçimini yasaklar. Böyle dalga paketlerini kullanan klasik yaklaşım çok yakın çarpışmalar için doğru sonuçlar vermez. Bu yüzden klasik yaklaşımın geçersiz olduğu çarpışmalar vardır. Bethe 1930'da, Born (1926) tarafından geliştirilen en düşük mertebeden tamamiyle kuantum mekaniksel yaklaşımı kullanarak problemi çözmeye çalışmıştır (Tufan, 2007).

$Z_1 e$ yüklü m_1 kütleli ve p momentumlu bir parçacık atom numarası Z_2 olan bir hedefe çarpsın. Eğer sadece gelen parçacık ile hedef atomun elektronları arasındaki etkileşme incelenirse, (p', d^3p') aralığında saçılan parçacıklar için ve elektronik sistemi E_0 taban durumundan E_n durumuna uyarma için tesir kesiti

$$d\sigma = \frac{d^3q}{(2\pi)^2 v} \left(\frac{4\pi Z_1 e^2}{q^2} \right)^2 \left| \left\langle n \left| \sum_i e^{iq \cdot r_i / \hbar} \right| 0 \right\rangle \right|^2 \delta \left(\frac{p \cdot q + q^2/2}{m_1} + E_n - E_0 \right) \quad (2.3)$$

biçiminde yazılabilir. Bu ifadeden durdurma gücünü elde etmek için uyarılmış durumlar üzerinden toplam alınmalı ve bu ifadenin tüm momentum transferleri (q) üzerinden integrali alınmalıdır. Bu ifade hesaplandığında,

$$S_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} Z_2 \ln \left(\frac{2mv^2}{I} \right) \quad (2.4)$$

eşitliği elde edilir.

Yoğun maddelerde inelastik çarpışmalar için teori, Fano (1963) tarafından tartışılmıştır. Yoğun maddeler için kuantum teorisinin biçimsel yönü oldukça karmaşıktır fakat sonuçlar temelde klasik dielektrik teoriden elde edilene eşittir.

Gelen parçacık üzerine inelastik çarpışmaların etkisi, enerji kaybı W ve polar ve azimutal saçılma açıları θ ve ϕ ile tam olarak belirlenir. Rastgele yönlendirilmiş atom veya moleküllerle amorf ortam için inelastik çarpışma diferansiyel tesir kesiti (IDCS) azimutal saçılma açısı ϕ 'den bağımsızdır. Polar saçılma açısı θ yerine

$$Q(Q + 2m_e c^2) = (cq)^2 \quad (2.5)$$

ifadesi ile tanımlanan Q geri tepme enerjisini kullanmak uygundur. q niceliği $\mathbf{q} \equiv \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ ile verilen momentum transferinin büyüklüğüdür. $\mathbf{p}$ ve $\mathbf{p}'$ sırasıyla gelen parçacığın çarpışmadan önce ve sonraki çizgisel momentumlarıdır.

Taban durumunda Z_2 elektrona sahip izole edilmiş bir atom veya molekül ile elektron ve pozitronların ($z_1^2 = 1$) inelastik etkileşmelerini göz önüne alalım. Birinci Born yaklaşıklığından elde edilen, W enerji kaybı ve Q geri tepme enerjisi ile çarpışmalar için DCS,

$$\frac{d^2\sigma_{in}}{dWdQ} = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{m_e v^2} \left(\frac{2m_e c^2}{WQ(Q + 2m_e c^2)} + \frac{\beta^2 \sin^2 \theta_r 2m_e c^2}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]} \right) \frac{df(Q, W)}{dW} \quad (2.6)$$

ifadesi ile verilir (Fano, 1963). Burada $v = \beta c$ gelen parçacığın hızı, θ_r ise gelen parçacığın ilk momentum vektörü ile momentum transferi vektörü arasındaki açıdır ve

$$\cos^2 \theta_r = \frac{W^2 / \beta^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \left(1 + \frac{Q(Q + 2m_e c^2) - W^2}{2W(E + m_e c^2)} \right)^2 \quad (2.7)$$

şeklindedir.

Eşitlik (2.6)'nın sağ tarafı iki terimden oluşur. Bunlardan ilki anlık Coulomb alanı (boyuna) yoluyla etkileşmelerden, ikincisi ise sanal fotonların değiş tokuşu (enine) yoluyla etkileşmelerden gelen katkılardır. $df(Q, W)/dW$ çarpanı ise Birinci Born yaklaşıklığı içinde gelen parçacık üzerine inelastik etkileşmelerin etkisini tam olarak belirleyen atomik genelleştirilmiş osilatör şiddeti (GOS) dir. GOS'un bilinmesi enerji spektrumunu ve ikincil elektronların açısal dağılımını tanımlamak için yeterli değildir.

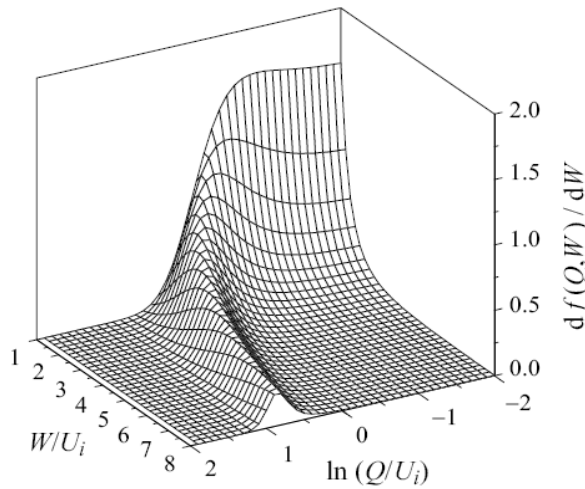
2.2.Genelleştirilmiş Osilatör Şiddeti

GOS materyale bağlı bir niceliktir. İnelastik bir çarpışmada enerji ve momentum transferinin bir fonksiyonu olarak yazılır. GOS bilindiğinde etkileşme tesir kesiti, durdurma gücü gibi nicelikler de elde edilebilir. GOS,

$$\frac{df(Q,W)}{dW} \equiv \frac{W}{Q} \left\langle \left| \Psi \left| \sum_{j=1}^Z \exp(iqr_j / \hbar) \Psi_0 \right| \right|^2 \right\rangle \quad (2.8)$$

olarak ifade edilebilir (Fernández-Varea, 1998). Burada Ψ ve Ψ_0 uyarılmış ve temel durum dalga fonksiyonlarıdır. GOS'un analitik hesaplamaları yalnızca hidrojen atomu (Inokuti, 1971) ve serbest elektron gazı (Lindhard, 1954; Lindhard ve Winter, 1964) için mümkündür. Çok elektronlu serbest atomlar için GOS' un sayısal hesaplamaları da elde edilebilir, fakat onlar yaklaşık atomik dalga fonksiyonlarına dayanır. Bu dalga fonksiyonları, genellikle Dirac-Hartree-Slater öz uyum hesaplamalarından elde edilir ve iç elektron kabuklarının uyarılmalarını tanımlamak için uygundur.

GOS, (Q,W) düzlemi üzerinde Bethe yüzeyi (Inokuti, 1971; Inokuti ve ark., 1978) olarak adlandırılan bir yüzey olarak temsil edilebilir (Şekil 2.1). Bu durumlarda bile GOS'un analitik ifadesi simülasyon süreçleri için oldukça karmaşıktır. İç kabuk iyonizasyonu için GOS ilk prensipten (Manson, 1972) sayısal olarak hesaplanabilir, fakat kapsamlı sayısal tablolar ile tanımlanan GOS'un kullanılması Monte Carlo simülasyonu için kullanışlı değildir.



Şekil 2.1. Taban durumundaki hidrojen atomunun iyonizasyonu için GOS.

Yoğun maddelerde valans elektronları uyarılmalarından GOS'a gelen katkının doğru bir hesaplaması zordur. Dahası sayısal bir GOS'a göre tanımlanan IDCS kullanımı, DCS'nin integrallerinin değerini belirlemek ve inelastik etkileşmelerin Monte Carlo Simulasyonu'nu yapmak için kullanışlı değildir. Bu nedenle uygun, doğru ve detaylı GOS modeli optik veri modeli kullanılarak elde edilebilir.

Yoğun ortamda inelastik etkileşmeler için "atomik" DCS, ortamın bir dielektrik olarak göz önünde bulundurulduğu yarı klasik bir işlemde elde edilebilir. Burada ortam k dalga sayısı ve w frekansına bağlı $\epsilon(k, w)$ gibi kompleks bir dielektrik fonksiyon ile tanımlanır (Salvat ve ark., 2001):

$$\frac{df(Q, W)}{dW} \equiv W \frac{Q + m_e c^2}{m_e c^2} \frac{2Z_2}{\pi \Omega_p^2} \text{Im} \left(\frac{-1}{\epsilon(Q, W)} \right). \quad (2.9)$$

Burada Ω_p , $\Omega_p^2 = 4\pi N Z \hbar^2 e^2 / m_e$ eşitliği ile verilen serbest elektron gazının plazma enerjisidir.

Denklem (2.9), bireysel atomların bir özelliği olan atomik GOS ile makroskobik bir kavram olan dielektrik fonksiyon arasında bir bağ kurar. Yoğun ortam için DCS aşağıdaki ifade ile belirlenebilir:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma_{in}}{dW dQ} = & \frac{2\pi z_1^2 e^4}{m_e v^2} \frac{df(Q, W)}{dW} \left(\frac{2m_e c^2}{WQ(Q + 2m_e c^2)} \right. \\ & \left. + \left\{ \frac{\beta^2 \sin^2 \theta_r 2m_e c^2}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} - D(Q, W) \right\} \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

$D(Q, W)$ terimi, yoğunluk etkisi katkısı (Sternheimer, 1952) olarak adlandırılır ve yalnızca küçük Q 'lar için değerlendirilir. Bu terimin kaynağı ortamın kutuplanabilirliğidir. Yoğunluk etkisi katkısı $D(Q, W)$, dielektrik fonksiyonu tarafından belirlenir. Böylece GOS, yoğun ortamda elektron/pozitron inelastik etkileşmeler DCS'sini hesaplamak için gerekli tüm bilgiye sahiptir.

Çok küçük geri tepme enerjileri sınırında, hedef elektronların momentum dağılımları ve bağlanmaları etkileşimde çok küçük bir etkiye sahiptir. Bu nedenle büyük Q bölgesinde hedef elektronları serbest ve durgunmuş gibi davranır. Sonuç olarak GOS $W=Q$ çizgisi boyunca Inokuti (1971) tarafından Bethe bombesi olarak isimlendirilen bir bombe haline gelir. Taban durumundaki Hidrojenik iyonlar durumunda (Şekil 2.1)

Bethe bombesi oldukça küçük geri tepme enerjilerinde açıkça görülmeye başlar. Çok küçük Q 'lar için Bethe yüzeyinin yapısı materyalin karakteristiğidir ve $Q \rightarrow 0$ limitinde, GOS optik osilatör şiddetine (OOS) indirgenir.

$$\frac{df(W)}{dW} \equiv \frac{df(Q=0, W)}{dW} \quad (2.11)$$

OOS, W enerjili fotonlar için fotoelektrik tesir kesiti ile yakından ilişkilidir (Fano, 1963). OOS'nin deneysel bilgisi hem fotoelektrik tesir kesiti hem de dielektrik fonksiyonların ölçümleri ile sağlanır (Fernández-Varea ve ark., 1993). GOS Denk. (2.12) ile verilen Bethe toplam kuralını sağlar (Inokuti, 1971):

$$\int_0^\infty \frac{df(Q, W)}{dW} dW = Z_2. \quad (2.12)$$

Rölativistik olmayan teoriden elde edilen bu toplam kuralının genellikle sağlandığı varsayılır. Bu da GOS'un birim enerji transferi başına elektronların etkin sayısı olarak yorumlanmasına yol açar.

Ortalama uyarma enerjisi I , aşağıdaki ifade ile belirlenir (Fano, 1963; Inokuti, 1971):

$$Z_2 \ln I = \int_0^\infty \ln W \frac{df(W)}{dW} dW. \quad (2.13)$$

Bu ifade Bethe durdurma gücü formülünde merkezi bir rol oynar. Bu nicelik, ağır yüklü parçacıkların durdurma gücü ölçümlerinden veya deneysel optik dielektrik fonksiyonlarından büyük atom numaralı materyaller için deneysel olarak hesaplanmıştır.

2.3. GOS Model

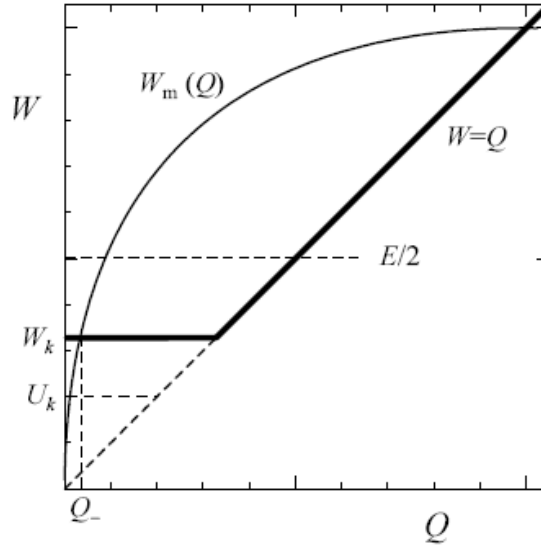
PENELOPE'de elektron ve pozitronların inelastik çarpışmalarının simülasyonu için GOS modeli temel rol oynar. GOS'un farklı atomik elektron kabuklarından gelen katkılara ayrıldığı varsayılır. Her bir atomik kabuk k , iyonizasyon enerjisi U_k ve kabuktaki elektronların sayısı f_k ile gösterilir. Modelde GOS'a bir kabuğun katkısı için Hidrojen atomu (Şekil 2.1) referans alınmıştır ve $Q > U_k$ için GOS'un azaldığı

gözlemlenmiştir. Oysaki $Q < U_k$ için Q ile hemen hemen sabit, W ile hızlı bir şekilde azalmaktadır. OOS'nin büyük bir kısmı oldukça dar bir W aralığında yoğunlaşır. Ağır atomların iç kabukları (Manson, 1972) ve serbest elektron gazı (Lindhard ve Winter, 1964) gibi diğer iyi bilinen sistemlerin göz önünde bulundurulması, GOS'un bütün özelliklerinin genel olduğunu gösterir.

Liljequist (1983), bir “ δ -osilatör” ile her bir kabuğun GOS modelini önermiştir:

$$\frac{df_k(Q, W)}{dW} = f_k [\delta(W - W_k) \theta(W_k - Q) + \delta(W - Q) \theta(Q - W_k)] . \quad (2.14)$$

Denklem (2.14)'teki ilk terim, W_k enerjisinde bir tek titreşim olarak tanımlanan titreşimli düşük- Q (uzak) etkileşmelerini temsil eder. İkinci terim, hedef elektronlarının serbest ve durgunmuş gibi tepki verdiği büyük- Q (yakın) etkileşmelerine karşılık gelir.



Şekil 2.2. $U_k = 2 \text{ keV}$ olan bir iç kabuğun GOS'u için osilatör model.

Şekil 2.2' de sürekli eğri $E = 10 \text{ keV}$ enerjiye sahip elektron veya pozitronlar için $W_m(Q)$ geri tepme enerjisinin bir fonksiyonu olarak maksimum izinli enerji kaybını verir. Uzak etkileşmeler için mümkün geri tepme enerjileri Q_- ile W_k aralığında uzanır. W_k 'dan daha büyük geri tepme enerjileri yakın etkileşmelere karşılık gelir. En büyük izinli enerji kaybı W_{max} , elektronlar için $E/2$, pozitronlar için E 'ye eşittir.

GOS, Denk. (2.15) ile verilen toplam kuralını sağlar.

$$\int_0^\infty \frac{df_k(Q, W)}{dW} dW = f_k \quad (2.15)$$

Osilatör şiddeti f_k , osilatör tarafından temsil edilen elektronların sayısı olarak tanımlanabilir. Osilatör model sıfır genişlikli bir Bethe bombesi, diğer bir deyişle hedef elektronlarının momentum dağılımlarının ihmal edildiği bir genişleme verir. Bu elektron ve pozitron gibi hafif parçacıklar için ciddi bir eksiklik değildir, fakat kütlesi elektronun kütlesinden daha büyük olan yavaş ve ağır parçacıklar için tesir kesiti hesaplamalarında büyük hatalara sebep olabilir.

Kapalı kabuklar iç kabuklar olarak gösterilir. Bir iç kabuğun kısmi GOS' u $W_i = 1.65U_i$ rezonans enerjisi ile bir osilatör tarafından

$$\frac{df_i(Q, W)}{dW} = f_i [\delta(W - W_i)\theta(W_i - Q) + \delta(W - Q)\theta(Q - W_i)] \quad (2.16)$$

ifadesi ile temsil edilir (Liljequist, 1983). W_i 'nin bu değeri hidrojenik modelden çıkarılır. Bu modelden elde edilen kabuk iyonizasyon tesir kesitleri yalnızca kaba bir yaklaşımdır.

Toplam tesir kesitine en büyük katkı düşük W 'li uyarılmalardan gelir. Bu nedenle, toplam tesir kesiti çoğunlukla zayıf bağlı elektronların OOS'si ile belirlenir. İletkenler ve yarıiletkenler durumunda en dış kabuklardaki elektronlar iletim bandında (ib) yer alır. Bu elektronlar ortam içinde serbestçe hareket ederler. Bu nedenle onların bağlanma enerjileri $U_{ib} = 0$ dır. İletim bandını uyarılmaları tek bir osilatör tarafından

$$\frac{df_{ib}(Q, W)}{dW} = f_{ib} [\delta(W - W_{ib})\theta(W_{ib} - Q) + \delta(W - Q)\theta(Q - W_{ib})] \quad (2.17)$$

ifadesi ile tanımlanır. W_{ib} ve f_{ib} değişkenleri sırasıyla plazmon enerjisi ve plazmon uyarılmalarına dahil olan, atom veya molekül başına elektronların etkin sayısı olarak tanımlanır. Bu nicelikler elektron enerji kaybı spektrumlarından veya optik veri ölçümlerinden elde edilebilir. Bu bilgiler elde edilemediğinde f_{ib} yerine 15 eV'dan daha düşük iyonizasyon enerjili elektronların etkin sayısı, W_{ib} yerine de iletim elektronlarıyla

aynı yoğunluğa sahip Denk. (2.18) ile verilen serbest elektron gazının plazmon enerjisi alınabilir:

$$W_{ib} = \sqrt{\frac{4\pi N f_{ib} \hbar^2 e^2}{m_e}} = \sqrt{\frac{f_{ib}}{Z}} \Omega_p . \quad (2.18)$$

Bu alüminyum gibi serbest elektron benzeri mealler için oldukça gerçekçi bir modeldir, çünkü, rezonans enerjisi serbest elektron gazının enerjisine eşittir (Kittel, 1976).

K ve L kabuklarından başka kabuklar dış kabuklar olarak göz önünde bulundurulur. İletkenler durumunda iletim bandındaki kabuklar dış kabuklardan ayrı tutulurlar. Her bir dış kabuk $W_j = gU_j$ rezonans enerjisi ile bir osilatör tarafından
$$\frac{df_j(Q, W)}{dW} = f_j [\delta(W - W_j)\theta(W_j - Q) + \delta(W - Q)\theta(Q - W_j)] \quad (2.19)$$

ifadesiyle tanımlanır. Burada g tüm dış kabuklar için aynı olan ayarlanabilir bir değişkendir. Böylece GOS,

$$\begin{aligned} \frac{df_k(Q, W)}{dW} &= \sum_k \frac{df_k(Q, W)}{dW} \\ &= \sum_k f_k [\delta(W - W_k)\theta(W_k - Q) + \delta(W - Q)\theta(Q - W_k)] \end{aligned} \quad (2.20)$$

olarak yazılır. Burada k toplamı tüm iç ve dış kabuklar üzerinden alınır. Bu GOS model Bethe toplam kuralını sağlar:

$$\int_0^\infty \frac{df_k(Q, W)}{dW} dW = \sum_k f_k = Z_2 . \quad (2.21)$$

GOS $Q \rightarrow 0$ limitinde OOS' ye indirgenir.

$$\frac{df(Q = 0, W)}{dW} = \sum_k f_k \delta(W - W_k) \quad (2.22)$$

Bu Sternheimer (1952)'in yoğunluk etkisi katkısı hesaplamalarında kullandığı OOS ile aynı biçimdedir.

2.4. Diferansiyel Tesir Kesiti (DCS)

GOS modelden elde edilen, inelastik çarpışmalar için DCS, uzak boyuna, uzak enine ve yakın etkileşmelerden gelen katkılara ayrılır:

$$\frac{d^2\sigma_{in}}{dWdQ} = \frac{d^2\sigma_{u,b}}{dWdQ} + \frac{d^2\sigma_{u,e}}{dWdQ} + \frac{d^2\sigma_y}{dWdQ}. \quad (2.23)$$

Uzak boyuna etkileşmeler için DCS, Denk.(2.10)' da ki ilk terim olarak verilir:

$$\frac{d^2\sigma_{u,b}}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \frac{1}{W} \frac{2m_e c^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \delta(W - W_k) \theta(W_k - Q). \quad (2.24)$$

Uzak enine etkileşmeler için DCS karmaşık bir ifadedir. Bunu basitleştirmek için bu etkileşmelerde gelen parçacığın açısız sapmalarını ihmal edebiliriz. Böylece uzak enine etkileşmeler için DCS,

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{u,e}}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \frac{1}{W} \left\{ \ln \left(\frac{1}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \delta_F \right\} \\ \times \delta(W - W_k) \theta(W_k - Q_-) \delta(Q - Q_-) \end{aligned} \quad (2.25)$$

olarak yazılır. Burada, Q_- , W enerji transferi için minimum geri tepme enerjisidir ve δ_F geçmişte yaygın olarak çalışılmış (Sternheimer, 1952; Fano, 1963) durdurma gücüne fermi yoğunluk etkisi katkısıdır. δ_F aşağıdaki ifade ile hesaplanabilir (Fano, 1963):

$$\delta_F \equiv \frac{1}{Z} \int_0^\infty \frac{df(Q=0, W)}{dW} \ln \left(1 + \frac{L^2}{W^2} \right) dW - \frac{L^2}{\Omega_p^2} (1 - \beta^2). \quad (2.26)$$

L Denk.(2.27)' nin (Inokuti ve Smith, 1982) pozitif kökleri olarak tanımlanan β^2 'nin gerçek değerli bir fonksiyonudur.

$$\mathcal{F}(L) \equiv \frac{1}{Z} \Omega_p^2 \int_0^\infty \frac{1}{W^2 + L^2} \frac{df(Q=0, W)}{dW} dW = 1 - \beta^2 \quad (2.27)$$

$\mathcal{F}(L)$ fonksiyonu L ile monoton olarak azalır ve bundan dolayı yalnızca $1 - \beta^2 < \mathcal{F}(0)$ olduğunda $L(\beta^2)$ kökü mevcuttur, diğer yerlerde $\delta_F = 0$ 'dır. $L(\beta^2)$

fonksiyonu $\beta^2 = 1 - \mathcal{F}(0)$ 'da sıfır ile başlar ve β^2 'nin artmasıyla monoton bir şekilde büyür.

Yüksek enerji limitinde ($\beta \rightarrow 1$), Denk. (2.27)' den elde edilen L değeri büyük ($L \gg W_k$) olur ve bu durumda $L^2 = \Omega_p^2 / (1 - \beta^2)$ yaklaşıklığı yapılabilir. Bethe toplama kuralı ($\sum_k f_k = Z$) kullanılarak yüksek enerji limitinde δ_F ifadesi elde edilir:

$$\delta_F \cong \ln \left(\frac{\Omega_p^2}{(1 - \beta^2) I^2} \right) - 1. \quad (2.28)$$

Yakın etkileşmeler için DCS,

$$\frac{d^2 \sigma_y}{dW dQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \frac{1}{W^2} \left(1 + \frac{\beta^2 (E - W)W - EW}{E(W + 2m_e c^2)} \right) \delta(W - Q) \theta(W - W_k) \quad (2.29)$$

olarak verilir.

2.4.1. Elektronların Yakın Çarpışmaları için Diferansiyel Tesir Kesiti

Gelen parçacık bir elektron olduğunda, DCS gelen elektron ve hedef elektronun ayırt edilemezliğini açıklamak için düzeltilmelidir. Uzak etkileşmeler için bu katkının etkisi küçüktür ve ihmal edilir. Born yaklaşıklığından elde edilen durgun serbest elektronlarla elektronların ikili çarpışmaları için enerji kaybı DCS'si Møller (1932) formülü ile verilir:

$$\frac{d^2 \sigma_M}{dW dQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \left[1 + \left(\frac{W}{E - W} \right)^2 - \frac{W}{E - W} + a \left(\frac{W}{E - W} + \frac{W^2}{E^2} \right) \right] \delta(W - Q) \quad (2.30)$$

burada ,

$$a = \left(\frac{E}{E + m_e c^2} \right)^2 = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \quad (2.31)$$

ile verilir.

Elektronların yakın etkileşmelerinde DCS' nin değiş tokuş etkilerini oluşturmak için Denk. (2.29)' daki parantez içindeki ifade yerine Møller formülündeki benzer ifade

kullanılmalıdır. Bu durumda yakın etkileşmeler için DCS,

$$\frac{d^2\sigma_y^{(-)}}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \frac{1}{W^2} F^{(-)}(E, W) \delta(W - Q) \theta(W - W_k) \quad (2.32)$$

olur. Burada,

$$F^{(-)}(E, W) = 1 + \left(\frac{W}{E - W}\right)^2 - \frac{W}{E - W} + a \left(\frac{W}{E - W} + \frac{W^2}{E^2}\right) \quad (2.33)$$

ile verilir.

Son durumda ayırt edilemez iki serbest elektron olur ve bunlardan en hızlı olanı birincil elektron olarak kabul edilir. Bu nedenle yakın çarpışmalar için maksimum izinli enerji transferi $W_{max} = E/2$ olmalıdır.

Bir iç kabuk iyonlaşmasından sonra birincil elektron $E - W$ kinetik enerjisine sahip olur. İkincil elektron ise $W - U_i$ kinetik enerjisiyle çıkar ve kalan iyon uyarılmış durumda kalır. Bu enerji auger elektronları ve x ışınları yayılmasıyla serbest kalır.

2.4.2. Pozitronların Yakın çarpışmaları için DCS

Pozitronlar, elektronlar ile yok olmaya uğrayan kararsız parçacıklardır. Aynı zamanda yeterli elektromanyetik enerjiye ($> 2m_e c^2$) sahip bir foton, elektron-pozitron çifti oluşturabilir. Bir pozitron alışılmış bir yüklü parçacık gibi maddeyle etkileşime girmez. Çünkü yok olma sürecini yeniden oluşma süreci takip eder. Yok olma/yeniden oluşma sürecini içeren Birinci Born yaklaşımından elde edilen, serbest durgun elektronlarla pozitronların ikili çarpışmaları için DCS Bhabha (1936) formülü ile verilir:

$$\frac{d^2\sigma_B}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E}\right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E}\right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E}\right)^4 \right] \delta(W - Q) \quad (2.34)$$

burada,

$$b_1 = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma}\right)^2 \frac{2(\gamma + 1)^2 - 1}{\gamma^2}, \quad (2.35a)$$

$$b_2 = \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \frac{3(\gamma+1)^2 + 1}{(\gamma+1)^2}, \quad (2.35b)$$

$$b_3 = \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \frac{2\gamma(\gamma-1)^2}{(\gamma+1)^2}, \quad (2.35c)$$

$$b_4 = \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \frac{(\gamma-1)^2}{(\gamma+1)^2}, \quad (2.35d)$$

ile verilir.

Pozitronların yakın inelastik etkileşme DCS' sinde yok olma/yeniden oluşma etkisini yaklaşık olarak hesaplamak için, Denk. (2.29)' da parantez içindeki ifadeyi Bhabha faktörüyle değiştirebiliriz:

$$F^{(+)}(E, W) = 1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E}\right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E}\right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E}\right)^4. \quad (2.36)$$

Buradan pozitronların yakın etkileşmeleri için DCS,

$$\frac{d^2\sigma_y^{(+)}}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \frac{1}{W^2} F^{(+)}(E, W) \delta(W - Q) \theta(W - W_k) \quad (2.37)$$

olarak elde edilir.

İyonlaşma süreci, gelen parçacığın elektron olduğu durum ile aynıdır. Bir iç kabuğun iyonlaşmasında delta ışınları $W - U_i$ enerjisine eşit başlangıç kinetik enerjisi ile yayımlanırlar. İyonlaşma bir dış kabukta olduğunda, ikincil elektronun W kinetik enerjisine sahip olduğu varsayılır. E kinetik enerjili pozitronların çarpışmalarında maksimum enerji kaybı $W_{max} = E$ kadardır.

2.5. İnelastik etkileşmeler için toplam tesir kesiti

İnelastik etkileşmeler için toplam tesir kesiti,

$$\sigma_{in}^{(n)} \equiv \int_0^{W_{max}} W^n \frac{d\sigma_{in}}{dW} dW = \sigma_{in} \langle W^n \rangle \quad (2.38)$$

ile verilir (Salvat ve ark., 2001). Burada $\langle W^n \rangle$ tekli bir çarpışma için enerji kaybının n. momentini tanımlar. $\sigma_{in}^{(0)}, \sigma_{in}^{(1)}, \sigma_{in}^{(2)}$ sırası ile inelastik çarpışma tesir kesiti, durdurma tesir kesiti ve enerji dağılımı tesir kesitidir.

İnelastik çarpışmalar için ortalama serbest yol λ_{in} ,

$$\lambda_{in}^{-1} = N\sigma_{in} \quad (2.39)$$

ifadesine eşittir. Burada N birim hacim başına saçılma merkezlerinin (atom veya molekül) sayısıdır. Durdurma gücü S_{in} ve enerji dağılımı Ω_{in}^2 parametreleri,

$$S_{in} = N\sigma_{in}^{(1)} = \frac{\langle W \rangle}{\lambda_{in}} \quad (2.40)$$

$$\Omega_{in}^2 = N\lambda_{in} = \frac{\langle W^2 \rangle}{\lambda_{in}} \quad (2.41)$$

ile verilir (Salvat ve ark., 2001). Durdurma gücü, birim yol uzunluğu başına ortalama enerji kaybıdır. Dağılım parametresinin fiziksel anlamı kesin değildir. ds kalınlığında bir engel üzerine çarpan tek enerjili bir elektron veya pozitron ışınını düşünelim ve elektronların veya pozitronların engelden saçılmadığını farz edelim, bu durumda $\Omega_{in}^2 ds$ çarpımı engeli geçtikten sonra ışının enerji dağılımının değişimini verir.

Toplam tesir kesiti $\sigma_{in}^{(n)}$, uzak enine, uzak boyuna ve yakın etkileşmelerin toplamı şeklindedir.

$$\sigma_{in}^{(n)} = \sigma_{u,b}^{(n)} + \sigma_{u,e}^{(n)} + \sigma_y^{(n)} \quad (2.42)$$

Uzak boyuna ve uzak enine etkileşmelerden gelen katkılar,

$$\sigma_{u,b}^{(n)} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k W_k^{n-1} \ln \left(\frac{W_k Q_- + 2m_e c^2}{Q_- W_k + 2m_e c^2} \right) \theta(W_{max} - W_k) \quad (2.43)$$

ve

$$\sigma_{u,e}^{(n)} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k W_k^{n-1} \left\{ \ln \left(\frac{1}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \delta_F \right\} \theta(W_{max} - W_k) \quad (2.44)$$

biçiminde verilir (Salvat ve ark., 2001). Elektron ve pozitronların her ikisinde de uzak etkileşmeler için maksimum enerji kaybı $W_{max} = E$ dir.

Yakın çarpışmalar için tesir kesiti,

$$\sigma_y^{(n)} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \int_{W_k}^{W_{max}} W_k^{n-2} F^{(\pm)}(E, W) dW \quad (2.45)$$

ile verilir (Salvat ve ark., 2001). Elektronlar durumunda bu formüldeki integral,

$$J_n^{(-)} = \int W^{n-2} \left[1 + \left(\frac{W}{E - W} \right)^2 - \frac{(1 - a)W}{E - W} + \frac{aW^2}{E^2} \right] dW \quad (2.46)$$

ifadesinden analitik olarak hesaplanabilir. Pozitronlar için Denk.(2.45)' deki integral

$$J_n^{(+)} = \int W^{n-2} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E} \right)^4 \right] dW \quad (2.47)$$

ifadesinden analitik olarak hesaplanabilir (Salvat ve ark., 2001).

2.6. Yüksek Enerjili elektron ve pozitronların durdurma gücü

Yüksek enerjilerde gelen parçacık göz önünde bulundurulduğunda $U_k \ll 2m_e c^2$ olduğu varsayılır. Bu durumda $Q_- \ll 2m_e c^2$ olur ve minimum geri tepme enerjisi,

$$Q_- \cong \frac{W_k^2}{2m_e c^2 \beta^2} \quad (2.48)$$

ifadesi ile yazılabilir.

Durdurma gücüne uzak (enine ve boyuna) ve yakın etkileşmelerden gelen katkı,

$$\sigma_u^{(1)} \cong \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \left\{ \ln \left(\frac{2m_e c^2}{W_k} \right) + \ln \left(\frac{1}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \delta_F \right\} \quad (2.49)$$

$$\sigma_y^{(1)} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \int_{W_k}^{W_{max}} W^{-1} F^{(\pm)}(E, W) dW \quad (2.50)$$

ifadeleri ile verilir (Salvat ve ark., 2001). Yüksek enerji durumunda $E \gg U_k$ olduğundan yakın etkileşme tesir kesiti, elektronlar için,

$$\begin{aligned} \sigma_y^{(1)} \cong \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \left\{ \ln \left(\frac{E}{W_k} \right) + 1 - \left[1 + \beta^2 + 2\sqrt{1 - \beta^2} \right] \ln 2 \right. \\ \left. + \frac{1}{8} \left(1 - \sqrt{1 - \beta^2} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.51)$$

pozitronlar için,

$$\sigma_y^{(1)} \cong \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \left\{ \ln \left(\frac{E}{W_k} \right) - b_1 + \frac{b_2}{2} - \frac{b_3}{3} + \frac{b_4}{4} \right\} \quad (2.52)$$

biçiminde ifade edilir (Salvat ve ark., 2001).

Uzak ve yakın durdurma tesir kesiti ifadelerinin eklenmesiyle durdurma gücü için Bethe formülüne benzer bir ifade elde edilir:

$$S_{in} \equiv N(\sigma_u^{(1)} + \sigma_y^{(1)}) = N \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} Z_2 \left\{ \ln \left(\frac{E^2 \gamma + 1}{I^2} \right) + f^{(\pm)}(\gamma) - \delta_F \right\}, \quad (2.53)$$

burada $f^{(-)}(\gamma)$,elektronlar için,

$$f^{(-)}(\gamma) = 1 - \beta^2 - \frac{2\gamma - 1}{\gamma^2} \ln 2 \quad (2.54)$$

ve $f^{(+)}(\gamma)$ pozitronlar için

$$f^{(+)}(\gamma) = 2\ln 2 - \frac{\beta^2}{12} \left[23 + \frac{14}{\gamma + 1} + \frac{10}{(\gamma + 1)^2} + \frac{4}{(\gamma + 1)^3} \right] \quad (2.55)$$

biçiminde tanımlanır (Salvat ve ark., 2001).

2.7. Optiksel Veriden GOS'un Oluşturulması ve Optiksel Osilatör Şiddeti (OOS)

Optik Osilatör Şiddeti, Inokuti (1971) tarafından,

$$\frac{df(W)}{dW} = \frac{2W}{\pi \varepsilon_p^2} \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(W)} \right) \quad (2.56)$$

ifadesi ile verilmiştir. Burada, Z_2 her bir atomdaki (veya moleküldeki) elektronların sayısı olmak üzere, $\varepsilon_p = \sqrt{4\pi\hbar^2 e^2 \rho / m}$ ile verilen plazma enerjisidir. Seçilen madde için n kırılma indisi ve K sönüm sabiti deneysel optik veriden elde edilip, kompleks dielektrik sabiti, $\varepsilon = (n + iK)^2$ ye yerleştirilmesi ile OOS oluşturulur.

OOS'nin hazırlanmasında diğer bir yaklaşım Yerel Plazma Yaklaşımı (LPA)'dır (Johnson ve Inokuti, 1983).

$$\frac{df(W)}{dW} = \int_0^{r_{ws}} \rho(r) \delta[W - \gamma \varepsilon_p(\rho(r))] 4\pi r^2 dr \quad (2.57)$$

Burada r_{ws} Wigner-Seitz küresinin yarıçapı ve γ ortalama uyarma enerjisinin hesabında kullanılan ayarlanabilir bir parametredir.

OOS, σ_{ph} foto-elektrik tesir kesiti ile orantılıdır (Fernandez-Varea, 1998). Bu veri özellikle iç kabuk iyonlaşması ile ilgili olan X-ışınından elde edilen veri ile sağlanmak zorundadır. OOS, fotoelektrik tesir kesitinin kullanılması ile aşağıdaki formülден hesaplanabilir (Fano ve Cooper, 1968; Cengiz, 2002):

$$\frac{df(W)}{dW} = \frac{mc}{2\pi^2\hbar e^2} \sigma_{ph} \quad (2.58)$$

OOS' nin tutarlılığı değişik toplama kurallarıyla kontrol edilmelidir (Fernandez-Varea, 1998). OOS f-toplama kuralını (Bethe toplama kuralı)' nı sağlamalıdır (Palik, 1985);

$$\frac{1}{Z} \int_0^\infty \frac{df(W)}{dW} dW = 1 \quad (2.59)$$

Katılar için mükemmel perdeleme (ps) toplama kuralı,

$$\frac{\varepsilon_p^2}{Z} \int_0^\infty \frac{1}{W^2} \frac{df(W)}{dW} dW = 1 \quad (2.60)$$

ve ortalama uyarma enerjisi,

$$I = \exp \left(\frac{1}{Z} \int_0^\infty \ln W \frac{df(W)}{dW} dW \right) \quad (2.61)$$

ifadeleri ile verilir (Fernandez-Varea, 1998).

2.8. Ortalama Uyarma Enerjisi, I

Ortalama uyarma enerjisi, I , durdurma gücü formülünün temel parametresidir. Ortalama uyarma enerji değeri I , ortamın elektronik yapısına özellikle de valans elektronlarının 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,

$$\ln I = \frac{\int_0^\infty \frac{df}{dE} \ln E dE}{\int_0^\infty \frac{df}{dE} dE} \quad (2.62)$$

ifadesi ile verilmektedir (Seltzer ve Berger, 1982). Burada 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,

$$\ln I = \frac{2}{\pi \omega_p^2} \int_0^\infty \omega d\omega \operatorname{Im}[-1/\varepsilon(\omega)] \ln(\hbar \omega) \quad (2.63)$$

ifadesi ile verilmektedir (Seltzer ve Berger, 1982). Burada $\hbar \omega_p$, plazma enerjisi ve $\varepsilon(\omega)$, $\omega = E/\hbar$ 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,

$$\ln I = \frac{1}{Z} \int_0^\infty 4\pi r^2 n_0(r) \ln(\gamma \hbar \omega_0) dr \quad (2.64)$$

ifadesi ile verilir. Burada, $\omega_0 = [4\pi e^2 n_0(r)/m]^{1/2}$, çekirdekten r uzaklıkta bir $n_0(r)$ elektron yoğunluğuna karşılık gelen plazma frekansı ve γ , $\sqrt{2}$ değerinde 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 teorik ve yarı-deneysel yöntemlerle elde edilen ortalama uyarma enerjisi değerleri, Tablo 1' de verilmektedir.

Tablo 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 ± 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 ± 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 ± 0.95	Teoriksel OSD'dan Teoriksel OSD'dan Yarı-deneysel OSD'dan	McGuire (1971) Dehmer ve ark. (1975) Zeiss ve ark. (1977a,b)

2.9. Bileşikte Enerji Kaybı ve 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:

$$\frac{S}{\rho} = \sum_j \omega_j \left(\frac{S}{\rho} \right)_j , \quad (2.65)$$

burada ω_j , j inci atomik bileşeninin ağırlıklı kesri ve S/ρ , j inci atomik bileşenin kütle çarpışma durdurma gücüdür.

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

$$\langle I \rangle = \exp \left\{ \left[\sum_j \omega_j (Z_j / A_j) \ln I_j \right] / \langle Z / A \rangle \right\} , \quad (2.66)$$

burada, $\langle Z/A \rangle = \sum_j \omega_j Z_j/A_j$ 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 yoluyla,

$$\sigma_{bil}(E) = \sum_i n_i \sigma(Z_i) \quad (2.67)$$

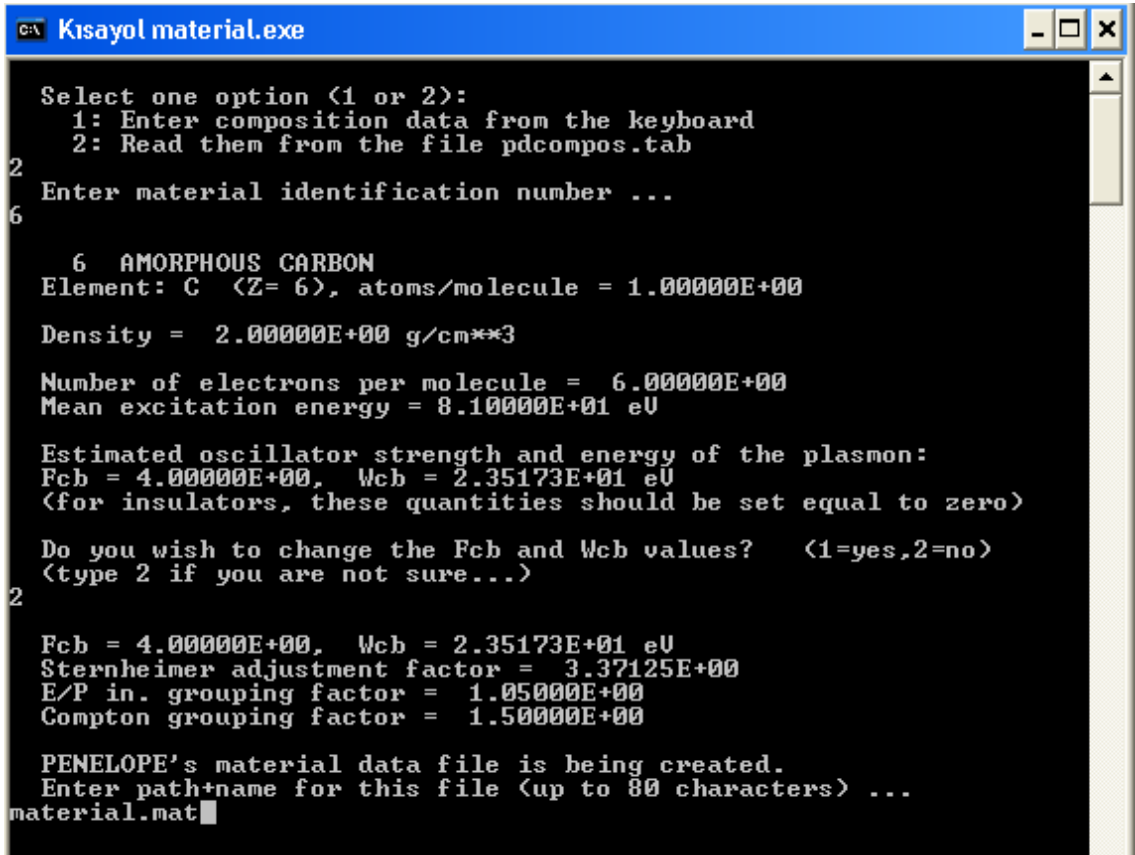
elde edilir (Watson ve ark., 2004). Burada n_i , moleküldeki Z_i atom numaralı atomların sayısıdır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1.PENELOPE Programının Çalıştırılması ve Veri Elde Edilmesi

Nükleer Enerji Ajansı (NEA)’dan sağlanan PENELOPE paket programının 2005 versiyonu, PENELOPE_05 dizinine açıldığında, doc, mains, fsource, pendbase ve other dizinleri oluşur. Bu dizinlerden ayrı olarak kendi çalışmamızı yürütmek ve sonuçları saklamak üzere yine PENELOPE_05 dizini altında ÇALIŞ isimli dizin oluşturuldu. Doz ve diğer hesaplamalarla ilgili giriş veri dosyası oluşturmak için öncelikle “materyal” program parçasının çalıştırılması gerekmektedir.

Materyal.exe’nin oluşturulması için ÇALIŞ dizini içine pendbase dizini kopyalandı ve bu dizin içine fsource dizinindeki “materyal.f” isimli FORTRAN kaynak programı kopyalandı ve çalıştırıldı. Böylece “materyal.exe” elde edildi ve çalıştırılarak giriş veri dosyası oluşturuldu. Bu exe dosyasını çalıştırdığımızda, program seçimli olarak klavyeden ya da “pdcompos.p05” isimli dosyasından okumakta ve materyal tesir kesiti, durdurma gücü gibi verileri veren dosya oluşturmaktadır.

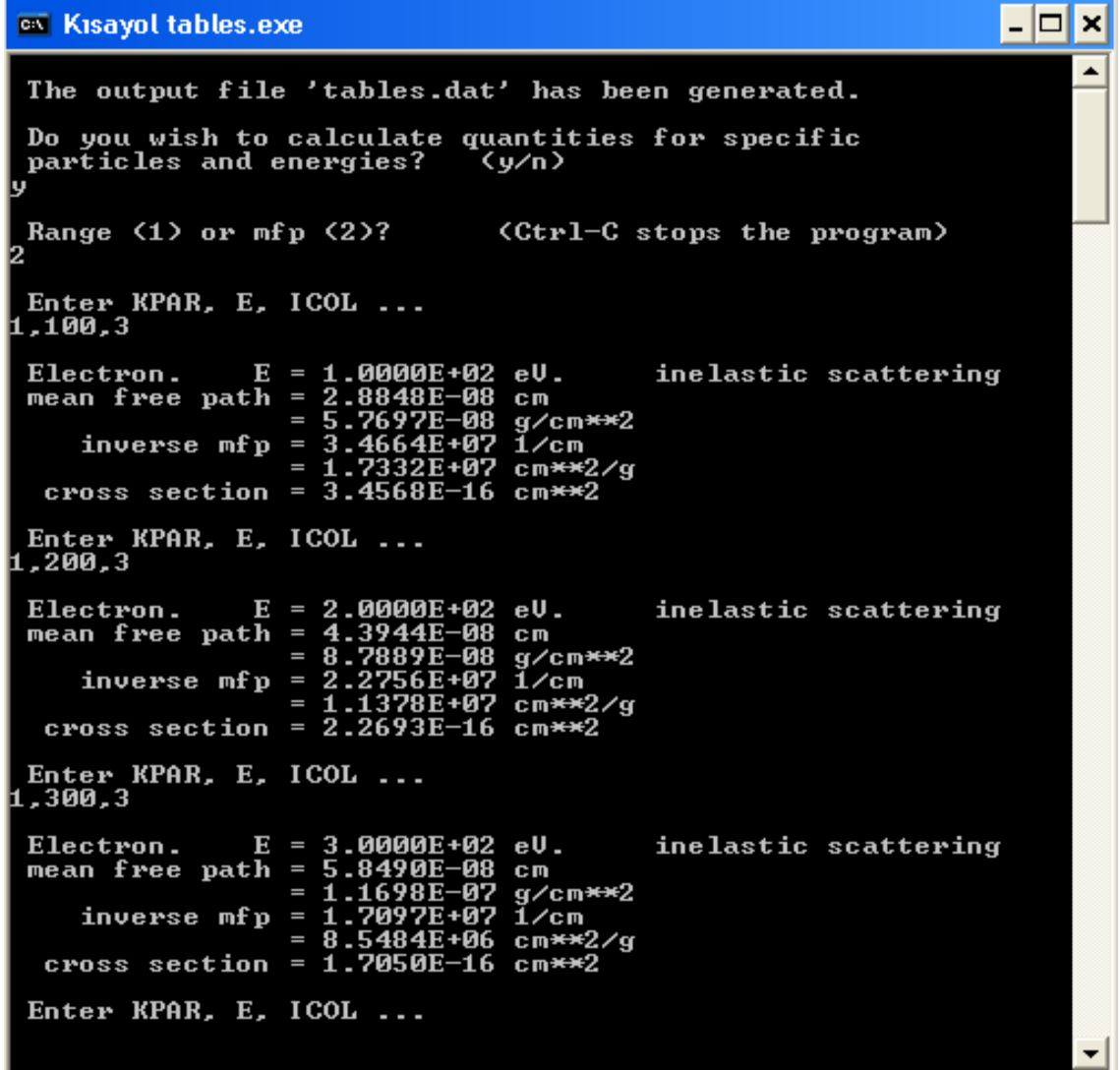


```

C:\ 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 = 1.000000E+00
Density = 2.000000E+00 g/cm**3
Number of electrons per molecule = 6.000000E+00
Mean excitation energy = 8.100000E+01 eV
Estimated oscillator strength and energy of the plasmon:
Fcb = 4.000000E+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)
2
Fcb = 4.000000E+00, Wcb = 2.35173E+01 eV
Sternheimer adjustment factor = 3.37125E+00
E/P in. grouping factor = 1.050000E+00
Compton grouping factor = 1.500000E+00
PENELOPE's material data file is being created.
Enter path+name for this file (up to 80 characters) ...
material.mat
  
```

Şekil 3.1. PENELOPE 2005 material.f alt programı veri giriş dosyası

PENELOPE 2005 kod sisteminde ortalama serbest yol ve menzil sonuçlarının elde edilmesi için tables.f alt programı çalıştırılmadan önce, material.exe den material.mat dosyası oluşturuldu. Bu veri dosyası tables.f alt programında kullanılmaktadır. Tables.f alt programından table.exe oluşturuldu ve çalıştırılarak ortalama serbest yol, menzil sonuçlarının alındığı tables.dat dosyası elde edildi.



```

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 3.2. PENELOPE 2005 tables.f alt programı veri giriş dosyası

Şekil 3.1 material.exe den, Şekil 3.2 tables.exe den elde edilen C hedefi için örnek veri giriş dosyalarını göstermektedir.

3.2. İnelastik Etkileşim Karakteristiklerinin Hesaplanmasında Kullanılan

Niceliklerin Elde Edilmesi

Pozitronların GOS model ile durdurma gücünün hesabı, inelastik etkileşme karakteristiklerinden, özellikle iç kabuk ve valans kabuğu osilatör şiddetleri, iç ve valans kabuğu PMIP lerine (K, L,... ve valans kabuğu uyarma enerjileri) bağlıdır. Bu niceliklerin doğru tanımlanması daha gerçekçi durdurma gücü ve diğer inelastik etkileşme karakteristiklerinin elde edilmesini sağlar. Bu bölümde hesaplamalarda kullanılan inelastik etkileşme karakteristiklerinin elde edilmesi 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 K kabuğu için OOS,

$$f_k = \frac{1}{109,8} \int_{B_k}^{\infty} \sigma_{ph}(E) dE \quad (3.1)$$

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

Bu çalışmada kullanılan, 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 enerjilerde (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 (Akar ve Gümüş, 2005).

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

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

dir. 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 ,

$$W_i = a B_i \quad (3.3)$$

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

$$a = \exp \left(\frac{Z_2 \ln I - Z_v \ln W_v - \sum_i Z_i \ln B_i}{Z - Z_v} \right), \quad (3.4)$$

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

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

ifadesine eşittir (Salvat ve Fernández-Varea, 1992). Burada Z_v, ρ ve A sırasıyla hedef atomun valans elektron sayısı, kütle yoğunluğu ve atom ağırlığıdır. PENELOPE programında W_v , Denk. (3.5) ifadesi ile hesaplanmaktadır. W_v , Liljequist (1983) tarafından belirtildiği gibi LPA kullanılarak hesaplanabilir,

$$Z_v \ln W_v = \int_r^\infty \rho(r) \ln \left(\frac{\hbar \omega_p(r)}{4\pi r^2} \right) 4\pi r^2 dr, \quad (3.6)$$

burada r , çekirdekten kabuğa uzaklık, $\rho(r)$, elektron yoğunluğu ve $\omega_p(r)$, lokal plazma frekansıdır.

Bu çalışmada W_i ve W_v , inelastik uyarımlar için PMIP' e eşdeğer ve rezonans enerjisinin uyarma enerjisi olarak kabul edilmesiyle Denk. (3.3) ve Denk. (3.6) dan, ayarlanabilir çarpan a ise Denk. (3.4) den elde edilmiştir (Akar ve Gümüş, 2005).

3.2.2. Pozitronların Yakın Çarpışmaları İçin Bhabha Formülü

Pozitronlar, elektronlar ile yok olmaya uğrayan kararsız parçacıklardır. Aynı zamanda yeterli elektromanyetik enerjiye ($> 2m_e c^2$) sahip bir foton, elektron-pozitron çifti oluşturabilir. Bir pozitron alışımlı bir yüklü parçacık gibi maddeyle etkileşime girmez. Çünkü yok olma sürecini yeniden oluşma süreci takip eder. Yok olma/yeniden oluşma sürecini içeren Birinci Born yaklaşımından elde edilen, serbest durgun elektronlarla pozitronların ikili çarpışmaları için DCS Denk.(2.34)' deki Bhabha (1936) formülü ile verilir (Fernandez-Varea ve ark., 2005):

$$\frac{d^2\sigma_B}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E} \right)^4 \right] \delta(W - Q)$$

Burada izinli enerji kayıpları (W,E) aralığındadır, $E > W$ olduğunda bu ifade sıfır olmaktadır.

4. BİYOLOJİK MATERYALLERDE İNELASTİK ETKİLEŞİM KARAKTERİSTİKLERİNİN HESAPLANMASI

4.1. Düşük Atom Numaralı Hedefler ve Bileşikler İçin Durdurma Gücü Hesabı

Rezonans karaktere sahip olan $Q < W$ 'li uyarmlar, uzak çarpışmalar ve $Q = W$ 'li uyarmlar yakın etkileşmeler (serbest elektronlarla) olarak tanımlanabilir (Salvat ve Fernández-Varea, 1992). İnelastik diferansiyel tesir kesiti bu uzak ve yakın etkileşmelerin toplamı şeklinde yazılır.

$$\frac{d^2\sigma_{in}}{dWdQ} = \frac{d^2\sigma_{u,b}}{dWdQ} + \frac{d^2\sigma_{u,e}}{dWdQ} + \frac{d^2\sigma_y}{dWdQ} \quad (4.1)$$

Uzak etkileşmeler durumunda elektron ve pozitronların tesir kesitleri aynıdır. Yakın etkileşmeler durumunda ise elektronlar için değiş-tokuş etkilerinin, pozitronlar içinse yok olma/yeniden oluşma süreçlerinin dahil edildiği Moller ve Bhabha tesir kesitleri kullanılmaktadır (Fernandez-Varea ve ark., 2005).

Bu durumda Denk. (4.1)' de yakın etkileşme tesir kesiti yerine Bhabha tesir kesiti kullanıldığında ifade,

$$\frac{d^2\sigma_B}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E} \right)^4 \right] \delta(W - Q) \quad (4.2)$$

şeklinde yazılır.

Uzak etkileşmeler için diferansiyel tesir kesiti ise enine ve boyuna gelen katkıların toplamı olarak,

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_u}{dWdQ} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \left(\frac{1}{W} \frac{2m_e c^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} + \frac{1}{W} \left\{ \ln \left(\frac{1}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \delta_F \right\} \right) \delta(W \\ - W_k) \theta(W_k - Q) \end{aligned} \quad (4.3)$$

şeklinde yazılır. Denk. (4.2) ve Denk.(4.3) toplanarak mümkün tüm izinli W ve Q değerleri üzerinden integral alındığında toplam inelastik etkileşme tesir kesti elde edilir:

$$\begin{aligned}
\sigma_{in}^{(1)} = & \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \left(\ln \left(\frac{W_k Q_- + 2m_e c^2}{Q_- W_k + 2m_e c^2} \right) + \ln \left(\frac{1}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \delta_F \right. \\
& + \frac{1}{W} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E} \right)^4 \right] \Bigg) \theta(W_{max} \\
& - W_k)
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Denklem (2.40) ve Denk. (4.4)' ün kullanılmasıyla ve pozitronlar durumunda $W_{max} = E$ alınmasıyla durdurma gücü için,

$$\begin{aligned}
S(E) &= N \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \sum_k f_k \left(\ln \left(\frac{W_k Q_- + 2m_e c^2}{Q_- W_k + 2m_e c^2} \right) + \ln \left(\frac{1}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \delta_F \right. \\
&+ \frac{1}{W} \left[1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E} \right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E} \right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E} \right)^4 \right] \Bigg) \theta(W_{max} \\
&- W_k)
\end{aligned} \tag{4.5}$$

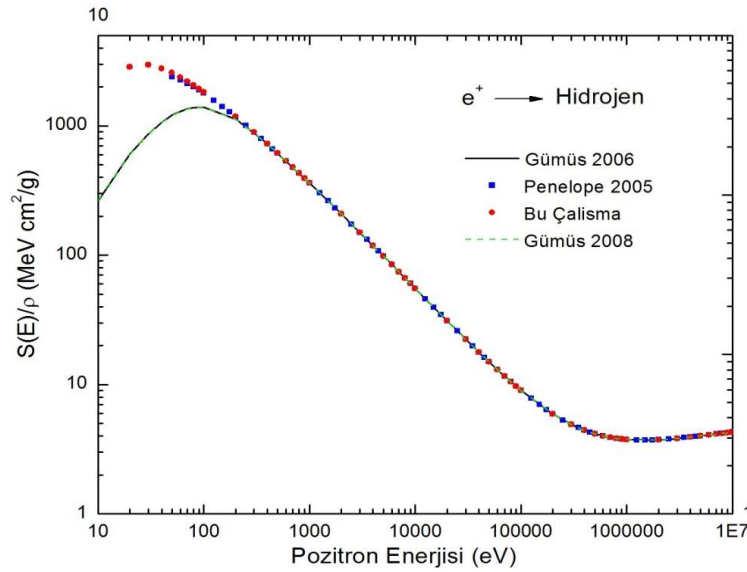
ifadesi elde edildi. Her bir hedef atomu için durdurma gücü değerleri bu ifade ile bulunduktan sonra bileşiklerin CSP leri Bragg toplama kuralı kullanılarak hesaplandı.

5.BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu kesimde, biyolojik hedeflerde 10 eV-10 MeV aralığında enerji ile gelen pozitronlar için önerilen hesaplama yönteminden elde edilen durdurma gücü sonuçlarının, diğer teorik (Gümüş, 2006; Gümüş 2008; ICRU 37; PENELOPE 2005; Pimblott ve ark., 2002) sonuçlarla karşılaştırılması verilmektedir. Gümüş 2008’de elektronlar için geliştirilen modelin pozitronlara uyarlanması Hasan Gümüş tarafından yapılmış ve kendisi tarafından bir program geliştirilmiştir. Tezde, Gümüş 2008 olarak belirtilen bu programın sonuçlarını göstermektedir.

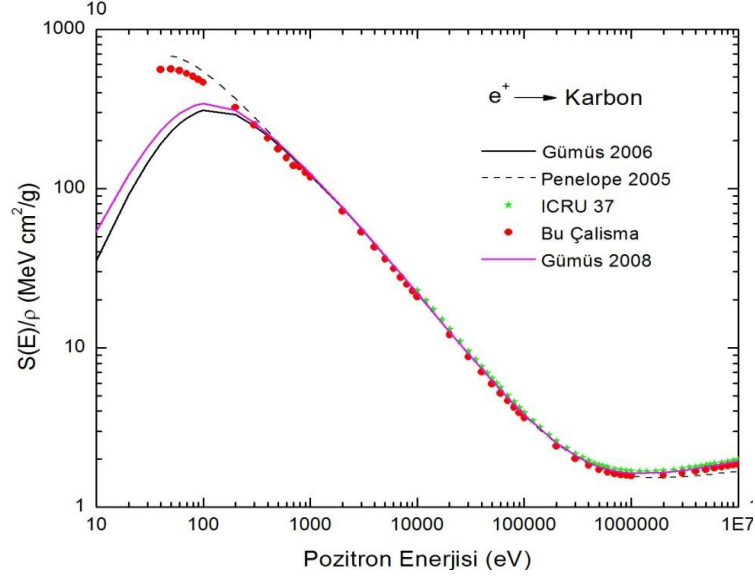
5.1.Düşük Atom Numaralı Hedefler İçin Durdurma Gücü Sonuçları

Tablo 4. ve Tablo 5’te H, C, N, O ve P için durdurma gücü sonuçları verilmiştir. Şekil 5.1-5.5’te bu çalışmadan elde edilen sonuçlar diğer teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır.



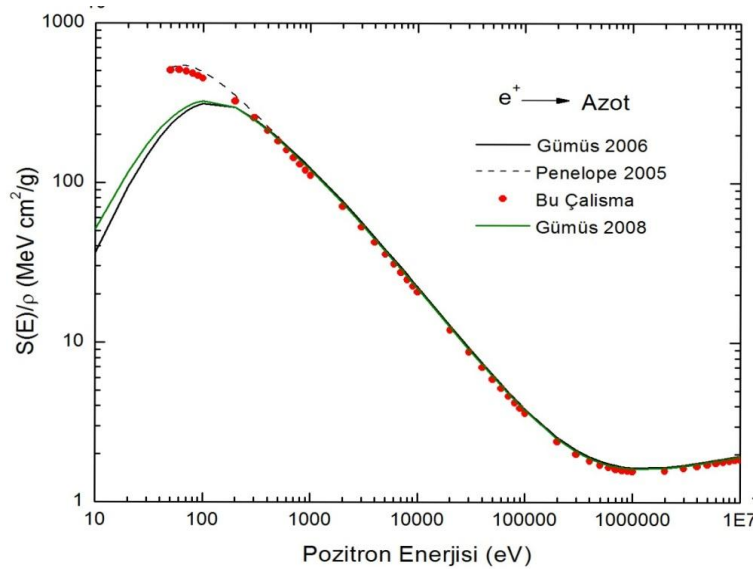
Şekil 5.1. H atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri

Şekil 5.1’ de Hidrojende pozitronlar için CSP ($\text{MeV cm}^2/\text{g}$) değerlerinin diğer teorik sonuçlarla karşılaştırılması gösterilmektedir. Denklem (4.5) kullanılarak hesaplanan kütle çarpışma durdurma gücü değerleri, PENELOPE ile 50-100 eV kinetik enerjili gelen pozitronlar için % 7, 100 eV-10 MeV enerji aralığında ise % 0,2’ lik bir uyum sağlamaktadır. Gümüş (2006, 2008) ile 400eV-10 MeV aralığında %1oranında uyumlu sonuçlar elde edilmiştir.



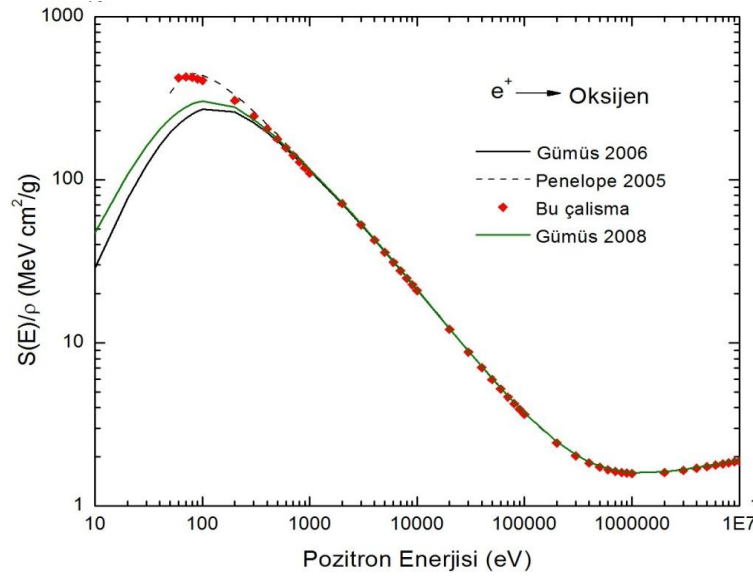
Şekil 5.2. C atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri

Şekil 5.2’ de karbonda pozitronlar için CSP ($\text{MeV cm}^2/\text{g}$) değerlerinin diğer teorik sonuçlarla karşılaştırılması gösterilmiştir. PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2001) ile 50-700 eV aralığında % 15, 700 eV-100 keV aralığında % 5, 100 keV-2 MeV aralığında % 2, 2-10 MeV aralığında ise % 8’ lik bir uyum göstermektedir. Gümüş (2006, 2008) ile 200-800 eV aralığında % 7, 800 eV-10 MeV aralığında ise % 5 lik bir uyum göstermektedir. ICRU 37 (1984) ten alınan veriler ile 10 keV-100 keV aralığında % 7, 100 keV-2 MeV aralığında % 25, 2-10 MeV aralığında ise % 20’ lik bir uyum elde edildi.



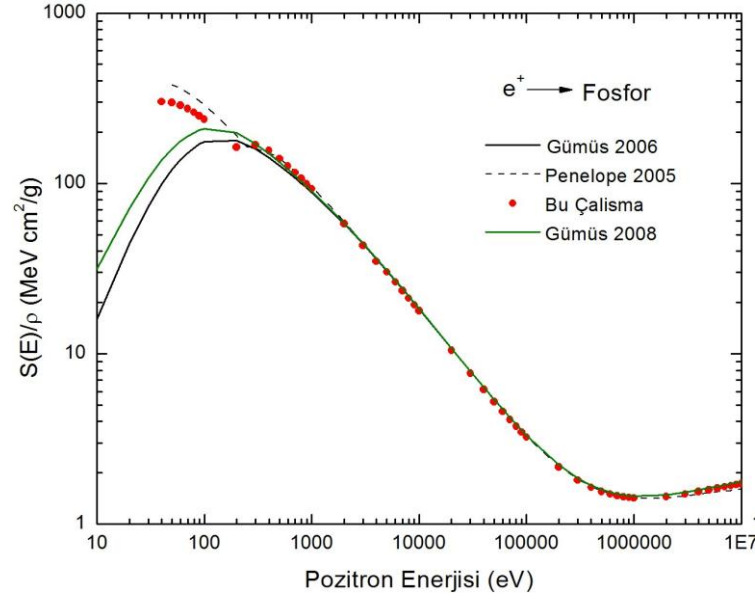
Şekil 5.3. N atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri

Şekil 5.3'te Azotta pozitronlar için CSP ($\text{MeV cm}^2/\text{g}$) değerlerinin diğer teorik sonuçlarla karşılaştırılması gösterilmektedir. PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2001) ile 50-400 eV aralığında % 8, 400 eV-80 keV aralığında % 6, 80 keV-10 MeV aralığında ise % 4'lük bir uyum sağlamaktadır. Gümüş (2006, 2008) ile 50-100 eV aralığında uyumlu sonuçlar elde edilemedi, 100 eV-10 keV aralığında % 10, 10 keV-1 MeV aralığında % 6 ve 1-10 MeV aralığında % 3'lük bir uyum olduğu görüldü.



Şekil 5.4. O atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri

Şekil 5.4'te Oksijende pozitronlar için CSP ($\text{MeV cm}^2/\text{g}$) değerlerinin diğer teorik sonuçlarla karşılaştırılması gösterilmektedir. PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2001) ile 60-1000 eV aralığında % 7, 1000 eV-1 MeV aralığında % 2, 1-10 MeV aralığında % 17'lik bir uyum sağlamaktadır. Gümüş (2006, 2008) ile 100 -600 eV aralığında % 8, 600 eV-10 MeV aralığında % 2'lik bir uyum olduğu görüldü.



Şekil 5.5. P atomunda pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri

Şekil 5.5'te Fosforda pozitronlar için CSP (MeV cm²/g) değerlerinin diğer teorik sonuçlarla karşılaştırılması gösterilmektedir. PENELOPE programı (Salvat ve ark., 2001) ile 50-200 eV aralığında % 20, 200 eV-1 MeV aralığında % 2, 1-10 MeV aralığında % 7'lik bir uyum sağlamaktadır. Gümüş (2006, 2008) ile 100 eV-1 keV aralığında % 5, 1 keV-10 MeV aralığında % 3'lük bir uyum olduğu görüldü.

Tablo 4. ve Tablo 5'te H, C, N, O ve P için durdurma gücü sonuçları verilmiştir.

Tablo 4. H, C ve N üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm²/g) sonuçları

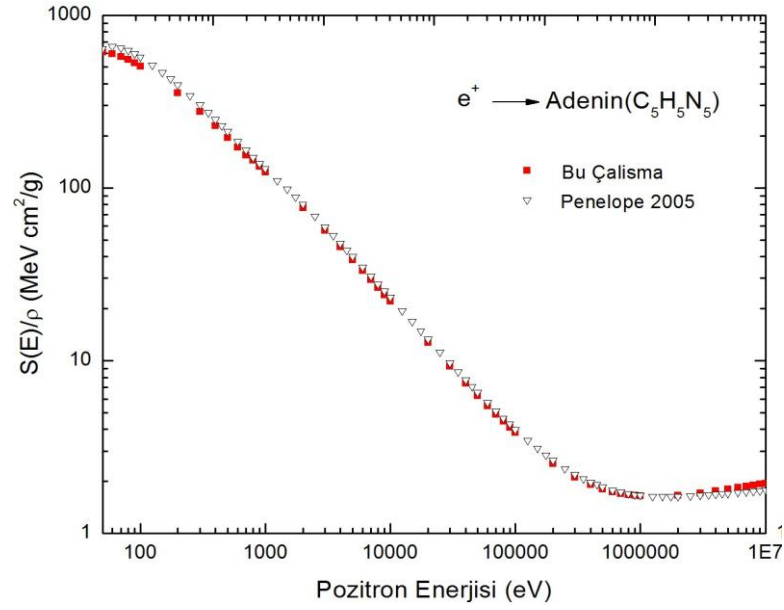
Enerji (eV)	CSP (MeV cm ² /g)		
	Hidrojen	Karbon	Azot
50	2569,602	562,752	506,515
60	2377,919	548,578	508,595
70	2209,718	527,906	498,627
80	2063,508	505,658	483,818
90	1936,110	483,765	467,320
100	1824,566	463,001	450,587
200	1182,325	322,349	323,996
300	893,671	250,358	254,523
400	726,419	206,657	211,406
500	615,997	177,058	181,871
600	537,107	155,542	160,245
700	477,660	139,125	143,656
800	431,030	136,529	130,477
900	393,464	126,361	119,733
1000	362,354	117,747	110,786
2000	208,651	72,192	71,163
3000	150,006	53,387	52,715
4000	118,411	42,874	42,384
5000	98,453	36,083	35,693
6000	84,640	31,299	30,981
7000	74,459	27,731	27,461
8000	66,607	24,960	24,726
9000	60,390	22,743	22,535
10000	55,305	20,924	20,736
20000	31,119	12,066	11,978
30000	22,385	8,774	8,714
40000	17,813	7,029	6,981
50000	14,908	5,932	5,899
60000	12,972	5,186	5,157
70000	11,601	4,641	4,616
80000	10,508	4,228	4,201
90000	9,699	3,900	3,876
100000	9,022	3,634	3,614
200000	5,909	2,415	2,405
300000	4,911	2,013	2,006
400000	4,439	1,822	1,816
500000	4,151	1,716	1,712
600000	3,977	1,654	1,653
700000	3,907	1,616	1,611
800000	3,832	1,590	1,585
900000	3,783	1,577	1,571
1000000	3,749	1,567	1,560
2E6	3,729	1,583	1,576
3E6	3,822	1,633	1,630
4E6	3,914	1,681	1,678
5E6	3,995	1,721	1,719
6E6	4,066	1,756	1,754
7E6	4,128	1,787	1,785

Tablo 5. O ve P üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm²/g) sonuçları

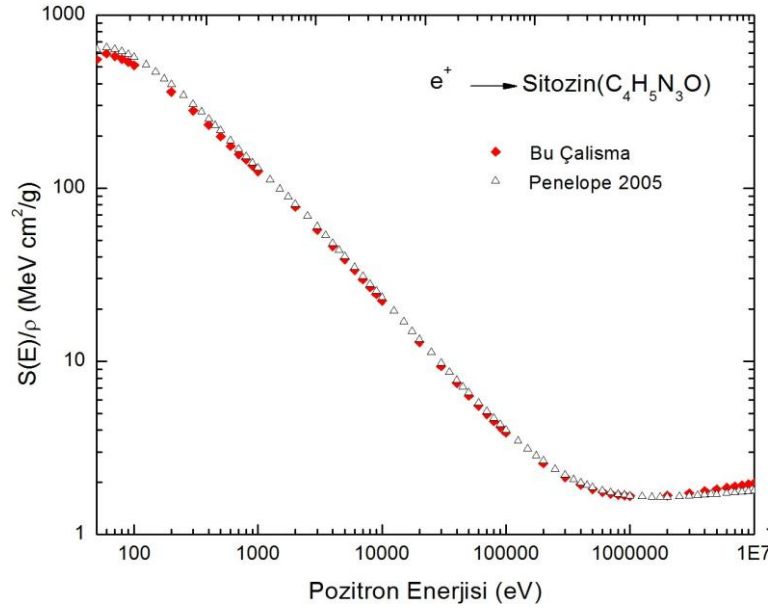
Enerji (eV)	CSP (MeV cm ² /g)	
	Oksijen	Fosfor
50	0	298,326
60	420,451	287,425
70	426,188	274,502
80	422,793	261,517
90	414,923	249,181
100	404,918	237,729
200	306,060	163,166
300	244,470	167,933
400	204,884	156,028
500	177,282	139,588
600	156,849	126,382
700	141,056	115,623
800	128,439	106,708
900	118,106	99,192
1000	109,469	92,773
2000	71,324	57,955
3000	52,915	43,198
4000	42,577	34,857
5000	35,881	30,178
6000	31,157	26,345
7000	27,628	23,457
8000	24,885	21,201
9000	22,686	19,379
10000	20,876	17,875
20000	12,073	10,477
30000	8,787	7,673
40000	7,043	6,173
50000	5,953	5,232
60000	5,205	4,583
70000	4,660	4,110
80000	4,244	3,749
90000	3,915	3,462
100000	3,649	3,232
200000	2,429	2,161
300000	2,026	1,808
400000	1,835	1,641
500000	1,730	1,550
600000	1,668	1,497
700000	1,630	1,462
800000	1,606	1,444
900000	1,589	1,430
1000000	1,580	1,423
2E6	1,598	1,448
3E6	1,652	1,500
4E6	1,700	1,547
5E6	1,742	1,588
6E6	1,778	1,623
7E6	1,810	1,653

5.2. Düşük Atom Numaralı Bileşikler İçin Durdurma Gücü Sonuçları

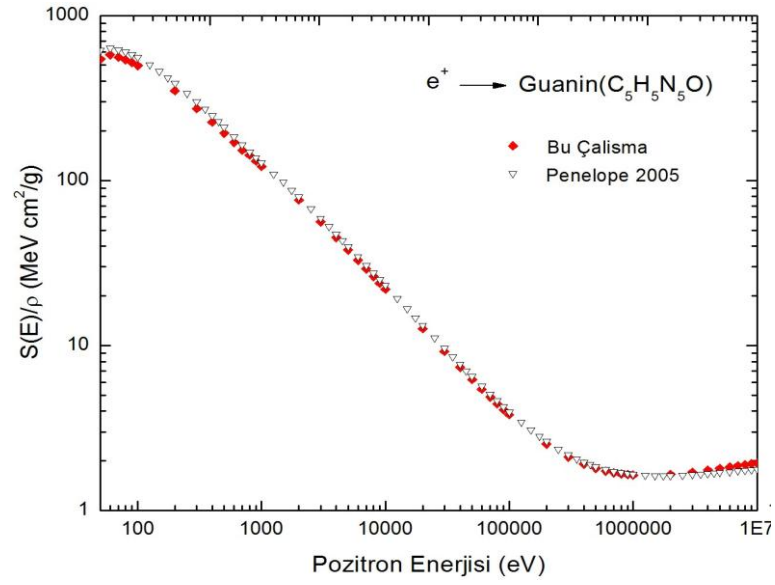
Tablo 6 ve Tablo 7’ de $C_5H_5N_5$ (Adenin), $C_4H_5N_3O$ (Sitozin), $C_5H_5N_5O$ (Guanin), $C_5H_6N_2O_2$ (Timin), $C_{20}H_{27}N_7O_{13}P_2$ (Sitozin-Guanin), $C_{19}H_{26}N_8O_{13}P_2$ (Timin-Adenin) ve H_2O (Su) için durdurma gücü sonuçları verilmektedir. Şekil 5.6-12’ de bu çalışmadan elde edilen sonuçlar diğer teorik sonuçlarla karşılaştırmalı olarak gösterilmektedir.



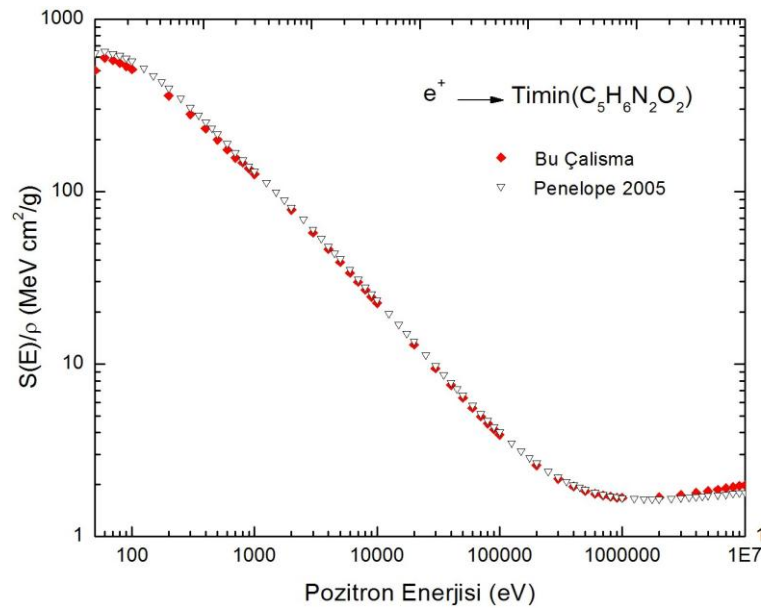
Şekil 5.6. $C_5H_5N_5$ (Adenin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.



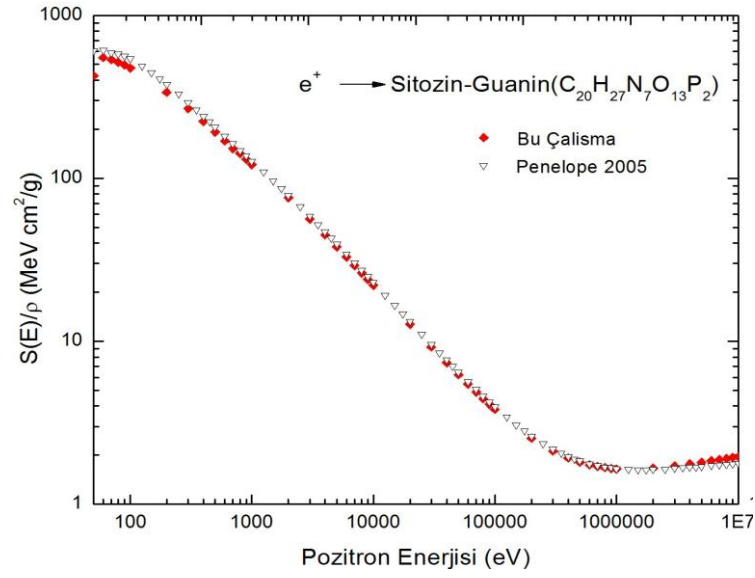
Şekil 5.7. $C_4H_5N_3O$ (Sitozin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.



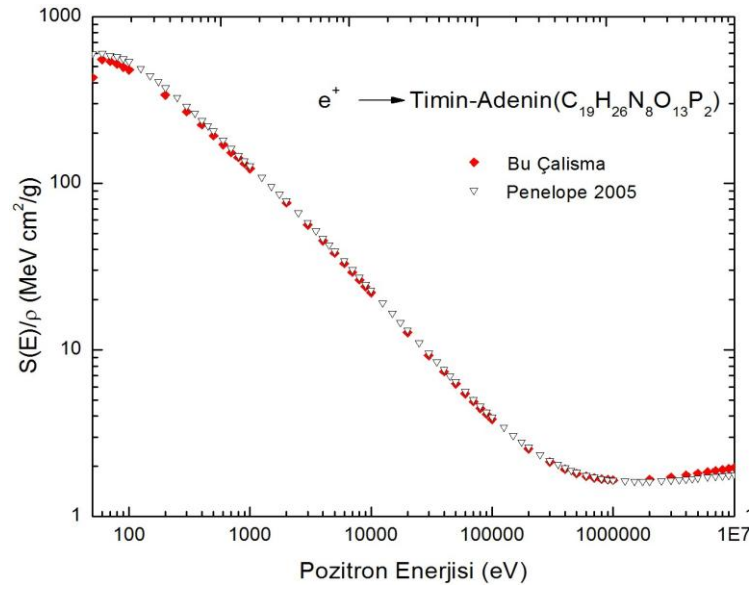
Şekil 5.8. C₅H₅N₅O (Guanin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.



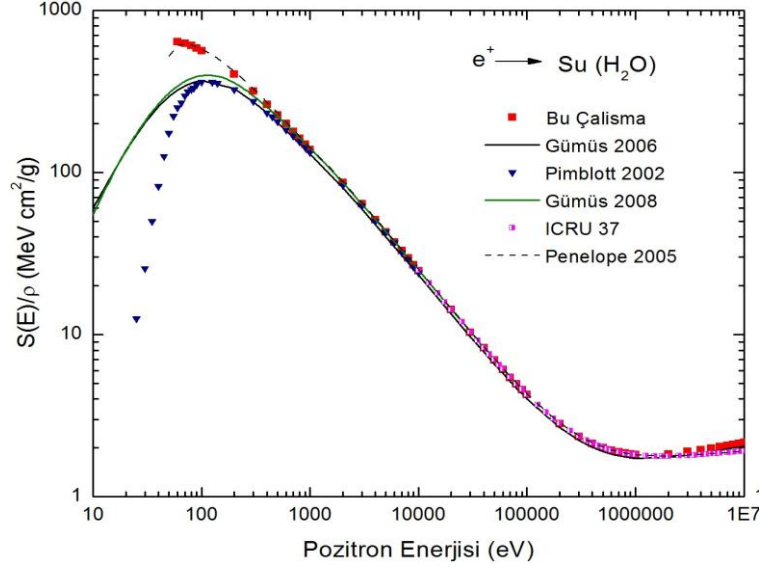
Şekil 5.9. C₅H₆N₂O₂ (Timin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.



Şekil 5.10. $\text{C}_{20}\text{H}_{27}\text{N}_7\text{O}_{13}\text{P}_2$ (Sitosin-Guanin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.



Şekil 5.11. $\text{C}_{19}\text{H}_{26}\text{N}_8\text{O}_{13}\text{P}_2$ (Timin-Adenin) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre $S(E)/\rho$ değerleri.



Şekil 5.12. H₂O (Su) molekülünde pozitronun kinetik enerjisine göre S(E)/ρ değerleri.

Şekil 5.6-11’de Adenin, Sitozin, Guanin, Timin, Sitozin-Guanin ve Timin-Adenin gibi biyolojik bileşiklerde pozitronların durdurma gücü değerleri PENELOPE programı değerleriyle karşılaştırıldı. Sonuç olarak, tüm bileşikler için, 50-700 eV aralığındaki enerjilerde % 10, 700 eV-400 keV enerji aralığında % 4, 400 keV-2 MeV enerji aralığında yaklaşık % 2, 2-10 MeV enerji aralığında ise % 8’ lik bir uyum sağladığı görüldü.

Şekil 5.12’ de Su için durdurma gücü değerleri, PENELOPE 2005, Pimblott 2002, ICRU 37, Gümüş (2006, 2008) sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Penelope programı ile 60-600 eV enerji aralığında % 3, 600 eV-2 MeV enerji aralığında % 2, 2-10 MeV enerji aralığında ise % 10 luk bir uyum olduğu görüldü. ICRU 37 sonuçları ile 10 keV-2 MeV enerji aralığında % 1, 2-10 MeV enerji aralığında ise % 10 uyumlu olduğu bulundu. Pimblott 2002 sonuçları ile 100-700 eV enerji aralığında % 10, 700 eV-10 keV enerji aralığında ise % 4’lük bir uyum sağladığı görüldü. Gümüş (2006, 2008) sonuçları ile 100 eV-4 keV enerji aralığında % 10 ve 4 keV-10 MeV enerji aralığında ise yaklaşık olarak % 6’ lık bir uyum olduğu görüldü. Gümüş (2006, 2008), Pimblott 2002 sonuçları ile 60-100 eV enerji aralığında uyum gözlenemedi. Tablo 6. ve Tablo 7’ de C₅H₅N₅ (Adenin), C₄H₅N₃O (Sitozin), C₅H₅N₅O (Guanin), C₅H₆N₂O₂ (Timin), C₂₀H₂₇N₇O₁₃P₂ (Sitozin-Guanin), C₁₉H₂₆N₈O₁₃P₂ (Timin-Adenin) ve H₂O (Su) için durdurma gücü sonuçları verilmektedir.

Tablo 6. Adenin, Sitozin , Guanin ve Timin üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm²/g) sonuçları.

Enerji (eV)	CSP (MeV cm ² /g)			
	Adenin	Sitozin	Guanin	Timin
50	608,435	551,568	544,015	503,542
60	596,065	598,072	577,464	594,733
70	575,440	578,556	559,630	576,069
80	552,426	556,210	538,693	554,319
90	529,394	533,587	517,267	532,129
100	507,335	511,776	496,484	510,643
200	355,268	359,686	350,053	359,711
300	276,50	280,306	273,108	280,553
400	228,498	231,807	225,994	232,115
500	195,919	198,849	193,942	199,172
600	172,207	174,841	170,578	175,162
700	154,096	156,495	152,713	156,807
800	144,373	146,456	142,684	147,209
900	132,885	134,801	131,318	135,561
1000	123,259	125,037	121,798	125,791
2000	76,746	77,879	76,171	78,262
3000	56,641	57,456	56,246	57,733
4000	45,437	46,079	45,133	46,298
5000	38,206	38,741	37,960	38,924
6000	33,123	33,583	32,914	33,740
7000	29,334	29,738	29,153	29,876
8000	26,392	26,754	26,232	26,878
9000	24,039	24,367	23,895	24,480
10000	22,109	22,409	21,97	22,512
20000	12,730	12,900	12,661	12,95
30000	9,250	9,372	9,201	9,413
40000	7,406	7,503	7,368	7,537
50000	6,250	6,331	6,218	6,359
60000	5,461	5,532	5,434	5,556
70000	4,887	4,951	4,863	4,972
80000	4,448	4,506	4,427	4,526
90000	4,104	4,157	4,084	4,175
100000	3,825	3,874	3,806	3,891
200000	2,540	2,572	2,528	2,583
300000	2,118	2,144	2,108	2,153
400000	1,916	1,941	1,908	1,949
500000	1,805	1,827	1,797	1,835
600000	1,740	1,761	1,732	1,768
700000	1,699	1,721	1,692	1,728
800000	1,671	1,692	1,664	1,700
900000	1,656	1,677	1,649	1,684
1000000	1,645	1,665	1,638	1,673
2E6	1,659	1,680	1,653	1,688
3E6	1,713	1,735	1,707	1,742
4E6	1,762	1,784	1,756	1,791
5E6	1,805	1,827	1,798	1,834
6E6	1,841	1,864	1,835	1,871
7E6	1,873	1,896	1,867	1,904

Tablo 7. Sitozin-Guanin, Timin-Adenin ve Sıvı Su üzerine gelen pozitron için CSP (MeV cm²/g) sonuçları.

Enerji (eV)	CSP (MeV cm ² /g)		
	Sitozin-Guanin	Timin-Adenin	Sıvı Su
50	425,850	429,938	287,538
60	549,582	553,248	639,450
70	534,104	537,315	625,722
80	515,124	517,986	606,346
90	495,349	497,933	585,102
100	475,979	478,337	563,736
200	337,238	338,525	404,084
300	267,638	268,544	317,091
400	223,391	224,097	263,224
500	192,409	192,988	226,357
600	169,673	170,167	199,384
700	152,209	152,639	178,708
800	142,046	142,630	162,286
900	130,852	131,406	148,907
1000	121,459	121,985	137,756
2000	75,961	76,194	86,684
3000	56,102	56,265	63,774
4000	45,021	45,148	51,059
5000	37,942	38,047	42,879
6000	32,911	33,000	37,139
7000	29,159	29,236	32,866
8000	26,244	26,313	29,551
9000	23,911	23,973	26,902
10000	21,995	22,052	24,727
20000	12,683	12,714	14,203
30000	9,221	9,243	10,308
40000	7,386	7,404	8,248
50000	6,235	6,249	6,955
60000	5,449	5,462	6,074
70000	4,878	4,889	5,436
80000	4,441	4,451	4,944
90000	4,097	4,107	4,562
100000	3,818	3,827	4,250
200000	2,537	2,543	2,818
300000	2,116	2,120	2,349
400000	1,915	1,920	2,126
500000	1,804	1,808	2,001
600000	1,739	1,742	1,926
700000	1,699	1,703	1,885
800000	1,672	1,676	1,855
900000	1,656	1,660	1,834
1000000	1,646	1,649	1,823
2E6	1,662	1,665	1,836
3E6	1,716	1,720	1,895
4E6	1,766	1,769	1,948
5E6	1,808	1,812	1,994
6E6	1,845	1,849	2,034
7E6	1,877	1,881	2,069

6. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, geniş bir enerji aralığında gelen pozitronların bazı biyolojik hedeflerdeki durdurma gücünü elde etmek için bir hesaplama yöntemi önerildi. Bu yöntemde kullanılan inelastik diferansiyel tesir kesitinde, GOS model kullanılarak her bir atomik kabuğun durdurma gücüne katkısı dahil edildi. İnelastik diferansiyel tesir kesiti uzak ve yakın etkileşme tesir kesitlerinin toplamı şeklinde değerlendirildi. Pozitronlar durumunda, yakın etkileşme tesir kesitinde Bhabha tesir kesiti kullanıldı.

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. 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.

Bu çalışmada, inelastik tesir kesiti karakteristikleri olan K kabuğu osilatör şiddeti (f_k), yarı deneysel ayarlanabilir çarpan a ve valans kabuğu PMIP'i W_v değerleri Akar ve ark. (2005) tarafından hesaplanan değerler olarak alındı. Bu şekilde H, C, N, O, P gibi tek hedeflerde durdurma gücü için analitik bir ifade oluşturulduktan sonra Maple 6 programı ile bu hesaplamaları yapabilecek bilgisayar kodlaması yapıldı. Bragg ve Kleeman' ın çalışmalarından bu güne kadar, bileşiklerin durdurma gücünün, atomik bileşenlerin durdurma gücünün ağırlıklı toplamı ile elde edildiği bilinmektedir. Bu çalışmada da moleküler hedefler için durdurma gücü hesaplamaları, bahsedilen yöntem Bragg toplama kuralı ile birlikte kullanılarak gerçekleştirildi. Elde edilen sonuçların güvenilirliğini test etmek için diğer teorik sonuçlarla ve PENELOPE sonuçlarıyla karşılaştırıldı.

Hazırlanan hesaplama yöntemiyle elde edilen sonuçlar PENELOPE sonuçlarıyla karşılaştırıldığında, H ve C gibi hedeflerde 200 keV-10 MeV enerji aralığında ortalama % 3 gibi bir uyumluluk göstermektedir. N, O ve P gibi hedefler içinse 200 keV-10 MeV enerji aralığında ortalama % 8 uyumluluk göstermektedir. Bu hedeflerde elde edilen maksimum durdurma gücü değeri diğer teorik çalışmalarda ~90 eV iken, bu çalışmada ~70 eV da elde edilmiştir.

Bu çalışmada uygulamış olduğumuz yöntemle, su, adenin, guanin, sitozin, timin, stizo-guanin ve timin-adenin gibi biyolojik hedeflerde elde edilen durdurma gücü sonuçları, PENELOPE sonuçlarıyla 50-700 eV aralığındaki enerjilerde % 10, 700 eV-400 keV enerji aralığında % 4, 400 keV-2 MeV enerji aralığında yaklaşık % 2, 2-10 MeV enerji aralığında ise % 8' lik oranlarda uyumlu olduğu görüldü.

Bu çalışmada geliştirilen ve Mapple 6 da kodlanan bilgisayar programı kullanılarak daha başka moleküller ve karışımlar için ortalama serbest yol, menzil ve durdurma gücü hesaplamaları yapılabilir. Ayrıca burada geliştirilen yöntem esas alınarak biyolojik materyaller için doz hesaplamaları yapılabilir.

7. KAYNAKLAR

- Ashley, J. C., 1991.** Energy-loss probabilities for electrons, positrons in condensed matter. J. Appl. Phys, 69, 674-678.
- Akar, A., Gümüş, H., 2005.** Electron stopping power in biological compounds for low and intermediate energies with the generalized oscillator strength (GOS) model. Rad. Phy. And Chem. 73, 196-203
- 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.
- Batra, R.K., 1987.** Approximate Stopping Power of Low Energy Electrons and Positrons in Matter. Nucl. Instrum. Meth. B, 28, 195-198.
- 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.
- Bethe H. A., 1932.** Bremsformel für Elektronen relativistischer Geschwindigkeit. Z. Phys. 76, 293-299.
- Bhabha H.J. 1936.** “ The scattering of positrons by electrons with Exchange on Dirac’ s theory of the positron” Proc. R. Soc. (London) A 154, 195-206
- Bohr N., 1913.** On the Theory of the decrease of Velocity of Moving electrified Particles on Passing Through Matter, Phil. Mag. 25, 10-31.
- Born M., 1926.** Quantum Physics in Impact Processes. 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.
- 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.
- Fano, U., 1963.** Penetration of protons, alpha particles and mesons. *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, 13,1-66.
- Fano, U ve Copper, J. W., 1968.** Spectral distribution of atomic oscillator Strengths. *Rev. Mod. Phys.*, 40, 441-507.
- Fermi, E., 1940.** The Ionization Loss of Energy in Gases and in Condensed Materials. *Phys. Rev.* 57, 485–493
- 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. Ve ark., 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.
- Fernández-Varea, J. M., Salvat, F., Dingfelder, M., Liljequist, D., 2005.** A relativistic optical-data model for inelastic scattering of electrons and positrons in condensed matter. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 229, 187-218

- Firsov, O. B., 1959.** A Qualitative Interpretation of the Mean Electron Excitation Energy in Atomic Collisions. *J. Exptl.Theoret.Phys.* **36**, 1076-1080.
- 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.
- Gerhart, D. E., 1975.** Comprehensive optical and collision data for radiation action. I, H₂. *J. Chem. Phys.*, 62, 821.
- Gümüş, H., Kabadayı, Ö., Tufan, M.Ç., 2006.** Calculation of Stopping Power for Intermediate Energy Positrons. *Chinese Journal of Physics*, 44.
- Gümüş, H., 2008.** New stopping power Formula for intermediate energy electrons. *Applied radiation and Isotopes*, 66, 12, 1886-1890.
- Henke, B. L., Gullikson, E. M., Davis, J. C., 1993.** X-Ray Interaction: Photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at $E = 50 \text{ eV}-30 \text{ keV}$ $Z = 1-92$. *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., Kim, Y. K., 1970.** Total Cross Sections for Inelastic Scattering of Charged Particles by Atoms and Molecules. IV. Positive Lithium Ion. *Phys. Rev. A* 1, 1132-1137.
- 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.
- Inokuti, M., Simith, D. Y., 1982.** Fermi density effect on the stopping power of metallic aluminum. *Phys. Rev. B* 25, 61–66.
- 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.

- Kittel C., 1976.** Introduction to Solid Physics (John Wiley and Sons, New York)
- 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. Kgl. Danske Videnskab. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 28, 8, 1-57.
- Lindhard, J., Scharff, M., 1961.** Energy Dissipation by Ions in the kev Region. Phys. Rev. 124, 128–130.
- Lindhard, J. and Winter, A., 1964.** Stopping power of electron gas and equipartition rule. Kgl. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd, 34, 4.
- Manson S.T., 1972.** “ The Theoretical study of generalized oscillator strengths in atoms: comparison with experiment and other calculations” Phys. Rev. A 5, 668-677.
- McGuire, E. J. 1971.** Inelastic scattering of electrons and protons by the elements He to Ne. Phys. Rev., A3, 267.
- Møller C., 1932.** On the Theory of the Passage of Rapid Electrons through Matter. Ann. Physik, 14, 531-585.
- Palik, E. D., 1985.** Handbook of optical constants of solids. Academic Pres. NewYork.
- Penn, D. R., 1987.** Electron mean-free-path calculations using a model dielectric function. Phys. Rev. B, 35, 482-486.
- Pimblott, M. S, Jay A. LaVerne, A. AlbaGarcia, and Laurens D. A. Siebbeles, 2000.** Energy Loss by Nonrelativistic Electrons and Positrons in Polymers and Simple Solid Hydrocarbons. J. Phys. Chem. B 2000, 104, 9607-9614

- Pimblott, M. S., Siebelles, L. D. A., 2002.** Energy loss by non-relativistic electrons and positrons in liquid water. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 194, 237–250
- 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, 2005.** 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.
- Sternheimer, R. M., 1982.** Density effect for the ionization loss of charged particles in various substances. Phys. Rev. B 26, 6067–6076.
- Tufan, M.Ç., 2007.** Yüklü Parçacıklar İçin Bazı Bileşiklerin Durdurma Gücü Hesaplamaları, Yüksek Lisans Tezi, O.M.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, 140 sf.
- Victor, G. A., Dalgarno, A., 1969.** Dipole properties of molecular hydrogen. J.Chem. Phys. 50, 2535-2539.
- Watson, J. D., Crick, F. H. C., 2004.** Molecular Structure of Nucleic Acids. Medical Research Council Unit for the Study of the Molecular Structure of Biological Systems, 171, 737-738.
- 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, H₂, N₂, O₂, NH₃, H₂O, NO and N₂O. 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, H₂, N₂, O₂, NO, NH₃, H₂O and N₂O using dipole oscillator strength distributions. A test of the validity of Bragg's rule. *Radiat. Res.*, 70, 284.

8. EKLER

8.1. EK-A. PENELOPE 2005 Örnek Material.dat Dosyası

PENELOPE (v. 2005) Material data file

Material: PHOSPHORUS

Mass density = 2.20000000E+00 g/cm**3

Number of elements in the molecule = 1

atomic number = 15, atoms/molecule = 1.00000000E+00

Mean excitation energy = 1.73000000E+02 eV

Number of oscillators = 5 (E/P inelastic model)

1	3.00000000E+00	0.00000000E+00	1.33016668E+01	0	30
2	2.00000000E+00	1.60000000E+01	3.40440459E+01	15	5
3	6.00000000E+00	1.35333333E+02	2.78249848E+02	15	3
4	2.00000000E+00	1.89000000E+02	3.88364236E+02	15	2
5	2.00000000E+00	2.14900000E+03	4.41470280E+03	15	1

Number of shells = 4 (Compton IA model)

1	3.00000000E+00	0.00000000E+00	9.99540166E-01	0	30
2	2.00000000E+00	1.60000000E+01	8.97000000E-01	15	5
3	8.00000000E+00	1.48750000E+02	1.63250000E-01	15	30
4	2.00000000E+00	2.14900000E+03	5.92000000E-02	15	1

Stopping powers for electrons and positrons, NDATA = 111

Energy (eV)	Scol,e- (MeV/mtu)	Srad,e- (MeV/mtu)	Scol,e+ (MeV/mtu)	Srad,e+ (MeV/mtu)
----------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------

5.000E+01	2.97600E+02	1.44973E-03	3.79623E+02	5.40498E-05
6.000E+01	2.82877E+02	1.54399E-03	3.61437E+02	6.52806E-05
7.000E+01	2.67711E+02	1.62844E-03	3.41250E+02	7.62115E-05
8.000E+01	2.55917E+02	1.70569E-03	3.21896E+02	8.68585E-05

9.000E+01 2.44000E+02 1.77664E-03 3.04124E+02 9.72029E-05
1.000E+02 2.32729E+02 1.84294E-03 2.88041E+02 1.07290E-04
1.250E+02 2.08259E+02 1.99165E-03 2.54404E+02 1.31428E-04
1.500E+02 1.88551E+02 2.12224E-03 2.28126E+02 1.54252E-04
1.750E+02 1.72504E+02 2.23978E-03 2.07131E+02 1.76018E-04
2.000E+02 1.59213E+02 2.34702E-03 1.89980E+02 1.96891E-04
2.500E+02 1.38464E+02 2.53781E-03 1.63608E+02 2.36460E-04
3.000E+02 1.36958E+02 2.70591E-03 1.60111E+02 2.73832E-04
3.500E+02 1.32119E+02 2.85673E-03 1.55489E+02 3.09448E-04
4.000E+02 1.27019E+02 2.99485E-03 1.50307E+02 3.43719E-04
4.500E+02 1.22035E+02 3.12186E-03 1.45465E+02 3.76760E-04
5.000E+02 1.16249E+02 3.24078E-03 1.39526E+02 4.08872E-04
6.000E+02 1.06351E+02 3.45742E-03 1.28003E+02 4.70518E-04
7.000E+02 9.84299E+01 3.65218E-03 1.17887E+02 5.29321E-04
8.000E+02 9.15231E+01 3.83017E-03 1.09207E+02 5.85770E-04
9.000E+02 8.57306E+01 3.99481E-03 1.01754E+02 6.40209E-04
1.000E+03 8.06292E+01 4.14849E-03 9.53094E+01 6.92889E-04
1.250E+03 7.03359E+01 4.49203E-03 8.25009E+01 8.17506E-04
1.500E+03 6.25802E+01 4.78611E-03 7.29686E+01 9.32601E-04
1.750E+03 5.65248E+01 5.03864E-03 6.55862E+01 1.03879E-03
2.000E+03 5.16556E+01 5.25886E-03 5.96876E+01 1.13732E-03
2.500E+03 4.42819E+01 5.62748E-03 5.08212E+01 1.31552E-03
3.000E+03 3.89346E+01 5.92555E-03 4.44446E+01 1.47319E-03
3.500E+03 3.48594E+01 6.17249E-03 3.96172E+01 1.61442E-03
4.000E+03 3.16392E+01 6.38102E-03 3.58233E+01 1.74221E-03
4.500E+03 2.91796E+01 6.55925E-03 3.29226E+01 1.85868E-03
5.000E+03 2.72141E+01 6.71347E-03 3.06435E+01 1.96560E-03
6.000E+03 2.39257E+01 6.96625E-03 2.68670E+01 2.15578E-03
7.000E+03 2.13949E+01 7.16307E-03 2.39732E+01 2.32043E-03
8.000E+03 1.93942E+01 7.32121E-03 2.16915E+01 2.46562E-03
9.000E+03 1.77772E+01 7.44949E-03 1.98448E+01 2.59486E-03
1.000E+04 1.64574E+01 7.55624E-03 1.83176E+01 2.71151E-03
1.250E+04 1.39531E+01 7.75308E-03 1.54424E+01 2.95937E-03

1.500E+04 1.21812E+01 7.88593E-03 1.34212E+01 3.16212E-03
1.750E+04 1.08569E+01 7.98036E-03 1.19170E+01 3.33349E-03
2.000E+04 9.82685E+00 8.05041E-03 1.07506E+01 3.48195E-03
2.500E+04 8.32291E+00 8.14403E-03 9.05379E+00 3.72915E-03
3.000E+04 7.27380E+00 8.20577E-03 7.87469E+00 3.93226E-03
3.500E+04 6.49724E+00 8.25143E-03 7.00459E+00 4.10583E-03
4.000E+04 5.89778E+00 8.29080E-03 6.33460E+00 4.25953E-03
4.500E+04 5.42021E+00 8.32668E-03 5.80198E+00 4.39818E-03
5.000E+04 5.03033E+00 8.35984E-03 5.36793E+00 4.52467E-03
6.000E+04 4.43109E+00 8.42115E-03 4.70225E+00 4.74965E-03
7.000E+04 3.99136E+00 8.49197E-03 4.21496E+00 4.95446E-03
8.000E+04 3.65454E+00 8.57044E-03 3.84245E+00 5.14494E-03
9.000E+04 3.38815E+00 8.65273E-03 3.54830E+00 5.32332E-03
1.000E+05 3.17215E+00 8.73850E-03 3.31010E+00 5.49247E-03
1.250E+05 2.77683E+00 8.96698E-03 2.87493E+00 5.88759E-03
1.500E+05 2.50897E+00 9.21564E-03 2.58064E+00 6.25939E-03
1.750E+05 2.31606E+00 9.48219E-03 2.36897E+00 6.61896E-03
2.000E+05 2.17102E+00 9.76715E-03 2.20997E+00 6.97439E-03
2.500E+05 1.96885E+00 1.03906E-02 1.98849E+00 7.69027E-03
3.000E+05 1.83628E+00 1.10748E-02 1.84328E+00 8.42371E-03
3.500E+05 1.74405E+00 1.18125E-02 1.74218E+00 9.18208E-03
4.000E+05 1.67720E+00 1.25970E-02 1.66881E+00 9.96767E-03
4.500E+05 1.62730E+00 1.34228E-02 1.61393E+00 1.07808E-02
5.000E+05 1.58922E+00 1.42853E-02 1.57193E+00 1.16206E-02
6.000E+05 1.53650E+00 1.61139E-02 1.51347E+00 1.33824E-02
7.000E+05 1.50347E+00 1.80592E-02 1.47647E+00 1.52431E-02
8.000E+05 1.48237E+00 2.01163E-02 1.45247E+00 1.72039E-02
9.000E+05 1.46889E+00 2.22619E-02 1.43679E+00 1.92474E-02
1.000E+06 1.46049E+00 2.44973E-02 1.42667E+00 2.13763E-02
1.250E+06 1.45264E+00 3.03878E-02 1.41579E+00 2.69964E-02
1.500E+06 1.45463E+00 3.66481E-02 1.41582E+00 3.29895E-02
1.750E+06 1.46111E+00 4.32197E-02 1.42093E+00 3.93020E-02
2.000E+06 1.46966E+00 5.00538E-02 1.42846E+00 4.58874E-02

2.500E+06 1.48876E+00 6.43702E-02 1.44613E+00 5.97396E-02
3.000E+06 1.50770E+00 7.94188E-02 1.46413E+00 7.43641E-02
3.500E+06 1.52532E+00 9.50541E-02 1.48106E+00 8.96123E-02
4.000E+06 1.54133E+00 1.11161E-01 1.49656E+00 1.05366E-01
4.500E+06 1.55577E+00 1.27641E-01 1.51059E+00 1.21523E-01
5.000E+06 1.56878E+00 1.44450E-01 1.52327E+00 1.38037E-01
6.000E+06 1.59116E+00 1.78912E-01 1.54514E+00 1.71976E-01
7.000E+06 1.60968E+00 2.14304E-01 1.56330E+00 2.06921E-01
8.000E+06 1.62531E+00 2.50483E-01 1.57866E+00 2.42715E-01
9.000E+06 1.63875E+00 2.87348E-01 1.59188E+00 2.79247E-01
1.000E+07 1.65051E+00 3.24792E-01 1.60346E+00 3.16404E-01
1.250E+07 1.67463E+00 4.20413E-01 1.62726E+00 4.11463E-01
1.500E+07 1.69366E+00 5.18214E-01 1.64608E+00 5.08882E-01
1.750E+07 1.70936E+00 6.17674E-01 1.66161E+00 6.08094E-01
2.000E+07 1.72271E+00 7.18545E-01 1.67484E+00 7.08819E-01
2.500E+07 1.74457E+00 9.23950E-01 1.69654E+00 9.14151E-01
3.000E+07 1.76207E+00 1.13304E+00 1.71392E+00 1.12337E+00
3.500E+07 1.77662E+00 1.34484E+00 1.72840E+00 1.33543E+00
4.000E+07 1.78905E+00 1.55886E+00 1.74076E+00 1.54979E+00
4.500E+07 1.79987E+00 1.77474E+00 1.75153E+00 1.76607E+00
5.000E+07 1.80943E+00 1.99228E+00 1.76106E+00 1.98403E+00
6.000E+07 1.82570E+00 2.43116E+00 1.77727E+00 2.42378E+00
7.000E+07 1.83916E+00 2.87334E+00 1.79069E+00 2.86681E+00
8.000E+07 1.85061E+00 3.31847E+00 1.80210E+00 3.31273E+00
9.000E+07 1.86054E+00 3.76636E+00 1.81200E+00 3.76134E+00
1.000E+08 1.86929E+00 4.21666E+00 1.82074E+00 4.21228E+00
1.250E+08 1.88745E+00 5.34963E+00 1.83887E+00 5.34654E+00
1.500E+08 1.90197E+00 6.48971E+00 1.85336E+00 6.48754E+00
1.750E+08 1.91406E+00 7.63446E+00 1.86543E+00 7.63294E+00
2.000E+08 1.92441E+00 8.78304E+00 1.87577E+00 8.78197E+00
2.500E+08 1.94153E+00 1.10882E+01 1.89287E+00 1.10877E+01
3.000E+08 1.95539E+00 1.33993E+01 1.90672E+00 1.33990E+01
3.500E+08 1.96705E+00 1.57125E+01 1.91837E+00 1.57124E+01

4.000E+08 1.97710E+00 1.80311E+01 1.92842E+00 1.80310E+01
 4.500E+08 1.98595E+00 2.03565E+01 1.93726E+00 2.03565E+01
 5.000E+08 1.99385E+00 2.26849E+01 1.94516E+00 2.26849E+01
 6.000E+08 2.00750E+00 2.73395E+01 1.95880E+00 2.73395E+01
 7.000E+08 2.01902E+00 3.19989E+01 1.97031E+00 3.19989E+01
 8.000E+08 2.02898E+00 3.66683E+01 1.98028E+00 3.66683E+01

8.2. EK-B. Bilgisayar Programının Örnek Dosyası

POZİTRONLARIN BAZI BİYOLOJİK BİLEŞİKLERDE DURDURMA GÜCÜ HESAPLAMALARI

DATA FOR FIRST ELEMENT IN THE TARGET #####
 > z2:=15;

z2 := 15

Stopping power units factors

1. keV/mg/cm2 :

> carp:=602.2/m2; carpcom:=602.2/mcom; # 6. keV/mg/cm2 :

carp := 19.42956701

carpcom := 19.42956701

Giriş verileri

Data Tab tablosunda verilen giriş verileri sırası ile aşağıdaki değerleri göstermektedir.

>

> z2 a2 i2 m2 gf2 gs2 b2 zs2 ro2 aro2 gff2 fk fl1 fl2 fv Bk Bl1 Bl2 Wv1

>

DataTab:=array(1..15,1..19,[[1,1,19.2,1.0078,597.7,2.529,1.26,1.0,0.07149,4.271,1.09,1
 ,0,0,0,13.6,0,0,0],[2,4,41.8,4.0026,150.5,2.753,1.26,1.26,0.12590,1.894,1.173,0,0,0,0,24
 .6,0,0,0],[3,7,40.0,7.0160,86.63,1.756,1.26,1.45,0.52970,4.597,1.261,0,0,0,1,54.7,0,0,0]
 ,[4,9,62.7,9.0120,66.85,2.064,1.26,2.04,1.80200,12.046,1.23,0,0,0,2,111.5,0,0,17.65],[5
 ,11,79.0,11.0090,55.37,2.081,1.26,2.26,2.35000,13.093,1.2,0,0,0,3,188,0,0,0],[6,12,81.0
 ,12.0000,50.16,1.778,1.26,2.12,2.26600,11.364,1.165,1.8018,0,0,4.0069,284.2,0,0,34.1
 63],[7,14,88.0,14.0030,43.02,1.40,1.26,2.00,0.80960,3.481,1.13,1.724725948,0,0,5.080

285,409.9,37.3,0,41.0774],[8,16,98.0,15.9950,37.66,1.614,1.26,2.20,1.14300,4.302,1.106,1.81826911,0,0,6.091444,543.1,0,0,51.5846],[9,19,106.,18.9980,31.71,1.551,1.26,2.17,1.11100,3.522,1.09,0,0,0,7,696.7,0,0,0],[10,20,137.,19.9920,29.85,1.804,1.26,2.56,1.20100,3.585,1.957,0,0,0,8,870.2,48.5,21.7,0],[11,23,134.,22.9900,26.21,1.604,1.18,2.55,0.97000,2.541,1.06,0,0,0,1,1070.8,63.5,30.6,0],[12,24,150.,23.9850,24.78,1.646,1.18,2.67,1.73700,4.302,1.07,0,0,0,2,1303,88.6,49.6,0],[13,27,167.,26.9820,22.33,1.692,1.18,2.83,2.69800,6.023,1.05,0,0,0,3,117.8,72.9,20.03,2.7],[14,28,175.,27.9770,21.45,1.647,1.18,2.82,2.32100,4.977,1.07,0,0,0,4,1838.9,149.7,99.8,0],[15,31,166.,30.9940,19.45,1.457,1.18,2.55,1.82200,3.542,1.07,1.672371,2,6,5.0464,2145.5,189.0,136.0,31.11]]);

Osilatör modeline göre Durdurma Gücünü Hesaplayan Prosedür

```
> POSITRON_GOS:=proc(z2,enerk)
>local NA, m, fk, fl1, fl2, fv, arho, iyo, Bk, Bl1, Bl2, Wv1, zk, zl1, zl2, zv, Wk, Wl1,
Wl2, Wv, Wmax, a, gama, beta, b1, b2, b3, b4, ksi, n, Qk, Ql1, Ql2, Qv, tetak, tetal1,
tetal2, tetav, tetayk, tetayl1, tetayl2, tetayv, sigmaTop, SPpos, CSPpos, ener;
>
> ener:=enerk/1000.;
>
> NA:=6.022136736e+23; # 1/gmol Avagadro sayısı
>
> gama:=1+(ener/(0.5109989e+3)); # keV cinsinden enerji
> beta:=(((gama^2)-1)^0.5)/gama;
> b1:=((gama-1)/gama)^2*(2*(gama+1)^2-1)/(gama^2-1);b2:=((gama
1)/gama)^2*(3*(gama+1)^2+1)/(gama+1)^2; b3:=((gama-1)/gama)^2*2*gama*(gama-
1)/(gama+1)^2; b4:=((gama-1)/gama)^2*(gama-1)^2/(gama+1)^2;
>
> # z2 a2 i2 m2 gf2 gs2 b2 zs2 ro2 aro2 gff2 fk fl1 fl2 fv Bk Bl1 Bl2 Wv1
> iyo:=DataTab [z2,3];
> m:=DataTab [z2,4];
> arho:=DataTab [z2,10];
```

```

>fk:=DataTab [z2,12]; fl1:=DataTab [z2,13]; fl2:=DataTab [z2,14]; fv:=DataTab
[z2,15]; Bk:=DataTab [z2,16]; Bl1:=DataTab [z2,17]; Bl2:=DataTab [z2,18];
Wv1:=DataTab [z2,19];

> zk:=fk; zl1:=fl1; zl2:=fl2; zv:=fv;
> if z2=1. then a:=exp((z2*ln(iyo)-(zk*ln(Bk)))/(z2)); end if;
> if z2>=3. and z2<=10 then a:=exp((z2*ln(iyo)-zv*ln(Wv1)-(zk*ln(Bk)))/(z2-zv)); end
if;
> if z2>=11. and z2<=18 then a:=exp((z2*ln(iyo)-zv*ln(Wv1)-(zk*ln(Bk))-
(zl1*ln(Bl1))-(zl2*ln(Bl2)))/(z2-zv)); end if;
>
> Wk:=(a*Bk)/1000;
> Wl1:=(a*Bl1)/1000;
> Wl2:=(a*Bl2)/1000;
> Wv:=Wv1/1000;
>
>
> if Wk<=ener then tetak:=1; else tetak:=0; end if;
> if z2>=11. and Wl1<=ener then tetal1:=1; else tetal1:=0; end if;
> if z2>=11. and Wl2<=ener then tetal2:=1; else tetal2:=0; end if;
> if z2>=3. and Wv<=ener then tetav:=1; else tetav:=0; end if;
>
> if Wk<=ener then tetayk:=1; else tetayk:=0; end if;
> if z2>=11. and Wl1<=ener then tetayl1:=1; else tetayl1:=0; end if;
> if z2>=11. and Wl2<=ener then tetayl2:=1; else tetayl2:=0; end if;
> if z2>=3. and Wv<=ener then tetayv:=1; else tetayv:=0; end if;

> ksi:=(0.25495922522e-21*2/1000)/(beta^2); # birimi cm^2*(keV)
> n:=(arho*NA/m);
> Wmax:=ener;

> Qk:=(((Wk^2/(beta^2)))+(0.5109989e+3)^2)^0.5-(0.5109989e+3);
> Ql1:=(((Wl1^2/(beta^2)))+(0.5109989e+3)^2)^0.5-(0.5109989e+3);

```

```

> Ql2:=(((Wl2^2/(beta^2)))+(0.5109989e+3)^2)^0.5)-(0.5109989e+3);
> Qv:=(((Wv^2/(beta^2)))+(0.5109989e+3)^2)^0.5)-(0.5109989e+3);

> if z2>=1. And z2<=2 then >
sigmaTop:=evalf((ksi)*(((fk)*(ln((Wk*(Qk+2*0.5109989e+3)))/(Qk*(Wk+2*0.5109989
e+3))))+ln(1/(1-beta^2))-beta^2)*tetak)+((fk)*(ln(ener/Wk)-(b1*(ener-
Wk)/ener)+b2*((ener^2-Wk^2)/2/ener^2)-(b3*(ener^3-Wk^3)/3/ener^3)+(b4*(ener^4-
Wk^4)/4/ener^4))*tetayk))); end if;

>

> if z2>=3. and z2<=10 then
sigmaTop:=evalf((ksi)*(((fk)*(ln((Wk*(Qk+2*0.5109989e+3)))/(Qk*(Wk+2*0.5109989
e+3))))+ln(1/(1-beta^2))-
beta^2)*tetak+(fv)*(ln((Wv*(Qv+2*0.5109989e+3)))/(Qv*(Wv+2*0.5109989e+3)))+ln(
1/(1-beta^2))-beta^2)*tetav)+((fk)*(ln(ener/Wk)-(b1*(ener-Wk)/ener)+b2*((ener^2-
Wk^2)/2/ener^2)-(b3*(ener^3-Wk^3)/3/ener^3)+(b4*(ener^4-
Wk^4)/4/ener^4))*tetayk+ (fv)*(ln(ener/Wv)-(b1*(ener-Wv)/ener)+b2*((ener^2-
Wv^2)/2/ener^2)-(b3*(ener^3-Wv^3)/3/ener^3)+(b4*(ener^4-
Wv^4)/4/ener^4))*tetayv))); end if;

>

> if z2>=11. and z2<=18 then >
sigmaTop:=evalf((ksi)*(((fk)*(ln((Wk*(Qk+2*0.5109989e+3)))/(Qk*(Wk+2*0.5109989
e+3))))+ln(1/(1-beta^2))-
beta^2)*tetak+(fl1)*(ln((Wl1*(Ql1+2*0.5109989e+3)))/(Ql1*(Wl1+2*0.5109989e+3)))
+ln(1/(1-beta^2))-
beta^2)*tetal1+(fl2)*(ln((Wl2*(Ql2+2*0.5109989e+3)))/(Ql2*(Wl2+2*0.5109989e+3)))
+ln(1/(1-beta^2))-
beta^2)*tetal2+(fv)*(ln((Wv*(Qv+2*0.5109989e+3)))/(Qv*(Wv+2*0.5109989e+3)))+ln
(1/(1-beta^2))-beta^2)*tetav)+(((fk)*(ln(ener/Wk)-(b1*(ener-Wk)/ener)+b2*((ener^2-
Wk^2)/2/ener^2)-(b3*(ener^3-Wk^3)/3/ener^3)+(b4*(ener^4-
Wk^4)/4/ener^4))*tetayk+(fl1)*(ln(ener/Wl1)-(b1*(ener-Wl1)/ener)+b2*((ener^2-
Wl1^2)/2/ener^2)-(b3*(ener^3-Wl1^3)/3/ener^3)+(b4*(ener^4-
Wl1^4)/4/ener^4))*tetayl1+(fl2)*(ln(ener/Wl2)-(b1*(ener-Wl2)/ener)+b2*((ener^2-
Wl2^2)/2/ener^2)-(b3*(ener^3-Wl2^3)/3/ener^3)+(b4*(ener^4-
Wl2^4)/4/ener^4))*tetayl2+(fv)*(ln(ener/Wv)-(b1*(ener-Wv)/ener)+b2*((ener^2-
Wv^2)/2/ener^2)-(b3*(ener^3-Wv^3)/3/ener^3)+(b4*(ener^4-
Wv^4)/4/ener^4))*tetayv)))); end if;

> SPpos:=evalf(NA*(sigmaTop/m));

>

> end proc:

```

>

> POSITRON_GOS(6,60); carp*POSITRON_GOS(6,60);#

493.3629914

9585.829302

Bileşikler için Durdurma Gücünü Hesaplayan Prosedür

> PosBILSP:=proc(z2,arhocom,z21,z22,z23,z24,z25,w1,w2,w3,w4,w5,e0)

> local ncom, gama, beta,ener,BILSP;

> ncom:=arhocom*NA/m1com;

>BILSP:=w1*POSITRON_GOS(z21,e0)+w2*POSITRON_GOS(z22,e0)+w3*POSITRON_GOS(z23,e0)+w4*POSITRON_GOS(z24,e0)+w5*POSITRON_GOS(z25,e0);

> PosBILSPAdenin:=e0->PosBILSP(101,1.35,1,6,7,1,1,0.03729,0.4444,0.5183,0,0,e0);

PosBILSPAdenin :=

e0 → PosBILSP(101, 1.35, 1, 6, 7, 1, 1, .03729, .4444, .5183, 0, 0, e0)

> PosBILSPAdenin(40);

429.8889160

>PosBILSPSitozin:=e0->PosBILSP

(102,1.3,1,6,7,8,1,0.04536,0.4326,0.3782,0.143999,0,e0);

PosBILSPSitozin :=

e0 → PosBILSP(102, 1.3, 1, 6, 7, 8, 1, .04536, .4326, .3782, .143999, 0, e0)

> PosBILSPSitozin(40);

468.8056581

>PosBILSPGuanin:=e0->PosBILSP

(103,1.58,1,6,7,8,1,0.03334,0.397378,0.4634,0.10586,0,e0);

PosBILSPGuanin :=

e0 → PosBILSP(103, 1.58, 1, 6, 7, 8, 1, .03334, .397378, .4634, .10586, 0, e0)

> PosBILSPGuanin(40);

384.3782135

>PosBILSPTimin:=e0->PosBILSP

(104,1.6,1,6,7,8,1,0.047955,0.476,0.222,0.2537,0,e0);

PosBILSPTimin :=

e0 → PosBILSP(104, 1.6, 1, 6, 7, 8, 1, .047955, .476, .222, .2537, 0, e0)

> PosBILSPTimin(40);

504.9736422

```
>PosBILSPC_G:=e0->PosBILSP
```

```
(105,1.35,1,6,7,8,15,0.04118,0.35859,0.1761,0.3268,0.097339,e0);
```

```
PosBILSPC_G :=
```

```
e0 → PosBILSP(105, 1.35, 1, 6, 7, 8, 15, .04118, .35859, .1761, .3268, .097339, e0)
```

```
> PosBILSPC_G(40);
```

```
427.9516760
```

```
>PosBILSPT_A:=e0->PosBILSP
```

```
(106,1.35,1,6,7,8,15,0.0428,0.378,0.1543,0.3273,0.09749,e0);
```

```
PosBILSPT_A :=
```

```
e0 → PosBILSP(106, 1.35, 1, 6, 7, 8, 15, .0428, .378, .1543, .3273, .09749, e0)
```

```
> PosBILSPT_A(40);
```

```
446.7096780
```

```
> PosBILSPSu:=e0->PosBILSP(107,1,1,1,1,8,1,0.1119,0,0,0.888,0,e0);
```

```
PosBILSPSu := e0 → PosBILSP(107, 1, 1, 1, 1, 8, 1, .1119, 0, 0, .888, 0, e0)
```

```
> PosBILSPSu(40);
```

```
621.6330225
```

```
>
```

```
##### sonuçların yazdırılması #####
```

```
> k:=0:i:=0:
```

```
>
```

```
> for k from 1 to 8 do
```

```
> for i from 1 to 9 do
```

```
> e0:=i*10^k;
```

```
>
```

```
>lprint(e0,PosBILSPAdenin(e0),PosBILSPSitozin(e0),PosBILSPGuanin(e0),PosBILSP  
Timin(e0),PosBILSPC_G(e0),PosBILSPT_A(e0),PosBILSPSu(e0));
```

```
> end do;end do;
```


ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Tuba NAMDAR

Doğum Yeri : Samsun

Doğum Tarihi : 11.03.1981

Medeni Hali : Evli

Eğitim Durumu:

Orta Öğretim : Samsun Ondokuz Mayıs Lisesi, 1997

Lisans : Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fizik Bölümü, 2002

Yüksek Lisans : Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Tezsiz

Yüksek Lisans, 2005

Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek

Lisans, 2010

Çalıştığı Kurumlar ve Yıllar:

Kurum : Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü,

Fizik Anabilim Dalı

Unvan : Araştırma Görevlisi

Yıl : 2006-

İletişim Bilgileri:

Tel : 0 362 3121919/ 5257

e-posta : tsimsek@omu.edu.tr