

YÜKLÜ PARÇACIKLARIN METALLERDE ENERJİ DAĞILIMLARI

Asuman AYDIN *

Balıkesir Üni. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Çağış Kampüsü 10145- Balıkesir

Özet

Bu çalışmada, elektron veya pozitronların enerji dağılımları, dilim veya yarı-sonsuz ortamlarda, geliştirilen bir Monte-Carlo programıyla incelenmiştir. Benzetim tekniği esas olarak, elektron-atom esnek saçılma tesir kesiti hesabı için spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford diferansiyel tesir kesitine, esnek olmayan saçılma nedeniyle enerji kaybı benzetimi Gryzinski yarı-ampirik ifadesine ve toplam tesir kesiti hesabı Liljequist modeline dayanır. Elektron ve pozitronların çeşitli geometriler için enerji dağılımları elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Monte-Carlo, Pozitron, Elektron, Ortalama serbest yol, Enerji dağılımı

ENERGY DISTRIBUTIONS OF CHARGED PARTICLES IN METALS

Abstract

In this work, the energy distributions of electron or positrons in the slab or semi-infinite matters with an improved Monte-Carlo code have been investigated. The simulation technique is mainly based on the screened Rutherford differential cross section with the spin-relativistic correction factor for the calculation of electron-atom elastic scattering cross section, Gryzinski's semi-empirical expression to simulate the energy loss due to inelastic scattering and Liljequist's model to calculate the total inelastic scattering cross section. The energy distributions of electron and positrons have been obtained for various geometries.

Key Words: Monte-Carlo, Positron, Electron, Mean free path, Energy distribution

* E-posta: aydina@balikesir.edu.tr

1. Giriş

Elektron ve pozitronların madde içindeki girciliği, enerji ve menzil dağılımlarının iyi anlaşılması, tıbbi uygulamalar (radyoterapi çalışmaları), detektör tasarım ve karakterizasyonu, malzeme ışınlaması, pozitron implantasyon spektroskopisi, Auger elektron spektroskopisi, elektron mikrolitografisi gibi bir çok alanda önemlidir. Elektron-transport hesapları genellikle analitik teoriyle veya yüklü parçacıkların maddeden geçişi istatistiksel karakterde bir olay olduğundan Monte-Carlo benzetimi yardımıyla yapılabilir. Monte-Carlo benzetimi ve analitik kuramlar için katılarda yüklü parçacık saçılmalarının iyi bilinmesi gerekir. Monte-Carlo benzetiminde saçılma olayları tek tek parçacık yörüngelerinin modellenmesiyle başarılmasına rağmen, katılarda elektron-transport analitik kuramı tamamlanamamıştır. Yüklü parçacık atom çarpışmaları için toplam ve diferansiyel tesir kesitleri çok iyi hesaplanmalıdır. Bu çarpışmalar çok parçacık problemi olduğundan çözümü ilke olarak mümkün olmasına rağmen, pratikte tam bir çözüm mümkün olamamaktadır. Çözüm için farklı enerji bölgelerinde geçerli olan yaklaşımlar kullanılır [1-4].

Geliştirilen analog bir Monte-Carlo programı ile dilim veya yarı-sonsuz olarak iki ayrı geometride alüminyum ^{27}Al , bakır ^{64}Cu , gümüş ^{108}Ag , kalay ^{117}Sn , altın ^{197}Au ve kurşun ^{207}Pb ortamlar olmak üzere, geniş bir atom numarası aralığında çeşitli enerji ve açılarla gelen elektron veya pozitronların enerji dağılımları modellenmiştir.

2. Yöntem

Başlıca yüklü parçacık etkileşmeleri, atomlarla esnek saçılma, esnek olmayan saçılma, frenleme ışını (bremsstrahlung) ve pozitron yok olmasıdır. Bu çalışmada gelen elektron veya pozitronların üst enerji limiti 250 keV seçildiğinden frenleme ışını ve yok olma olayları ihmal edilerek, hesaplamada sadece esnek ve esnek olmayan saçılmalar göz önüne alınmıştır. Yüklü parçacıkların bir ortamdan geçişlerinin benzetimi, öncelikle esnek ve esnek olmayan saçılmalar için makroskopik toplam tesir kesitlerinin hesaplanmasını, açısal dağılım ve enerji kaybı örneklemelerinin yapılmasını gerektirir.

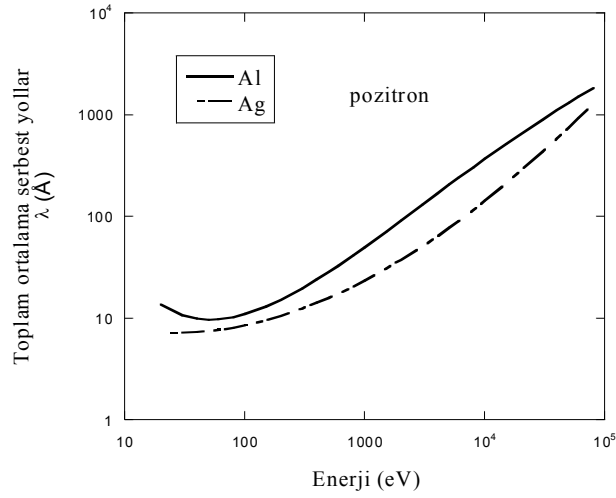
Elektron ve pozitronların esnek saçılması için tesir kesitlerinin hesapları, esas olarak düşük enerjilerde bazı ilave tesir kesiti bilgisiyle [5,6] spin-rölativistik düzeltme faktörlü perdeli Rutherford diferansiyel tesir kesiti [7], esnek olmayan saçılmadan ileri gelen enerji kaybı benzetimi Gryzinski [8] yarı-ampirik ifadesi ve toplam esnek olmayan saçılma tesir kesiti hesabı ise Liljequist [9] modeli kullanılarak yapılmıştır. Tesir kesitlerinin ayrıntılı hesapları, referans [10,11] 'de verilmiştir.

Al, Cu, Ag, Sn, Au ve Pb ortamlar için, esnek μ_e (cm^{-1}) ve esnek olmayan μ_i (cm^{-1}) makroskopik toplam tesir

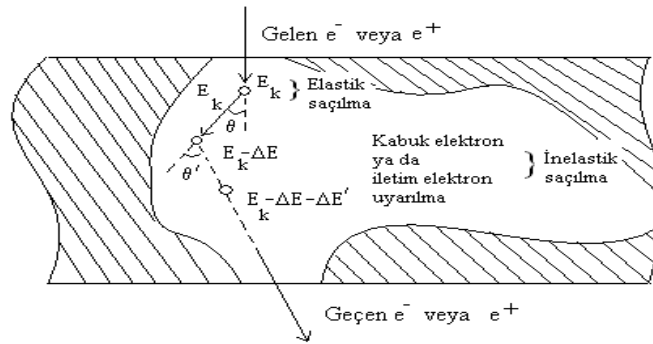
kesitlerinin hesaplanan kesikli değerleri ayrı ayrı $\sum_{i=1}^n p_i E^{i-1}$ polinom eşitliklerine fit edilerek, sürekli tesir kesiti

ifadelerine ulaşılmıştır. Burada p_i 'ler fitle belirlenen parametrelerdir. Makroskopik toplam tesir kesitlerinin terslerinin toplamı $(1/\mu_e + 1/\mu_i)$ olarak tanımlanan toplam ortalama serbest yollar (λ), hesaplanmış ve bir örnek, Al ve Ag ortamlarda pozitronlar için Şekil 1'de gösterilmiştir

Çalışılan enerji bölgesinde baskın olan elektron ve pozitron etkileşmeleri atomlarla esnek ve esnek olmayan saçılmalar olduğundan belli bir E_k enerjisi ile ortama giren elektron veya pozitron Şekil 2'de görüldüğü gibi ilk serbest yolun sonunda etkileşme yapacaktır. 10000 adet elektron veya pozitron, çeşitli dilim veya yarı-sonsuz metal ortamlar içinde ortamı geçinceye, geri yansınıncaya, veya enerjisi kesilme enerjisine (50 eV) düşünceye kadar tek tek izlenmiştir.



Şekil 1. Toplam ortalama serbest yollar



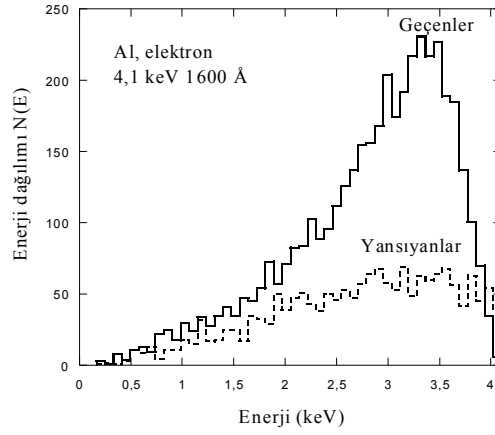
Şekil 2. İnce bir filmde esnek ve esnek olmayan saçılma olayları

3. Bulgular ve tartışma

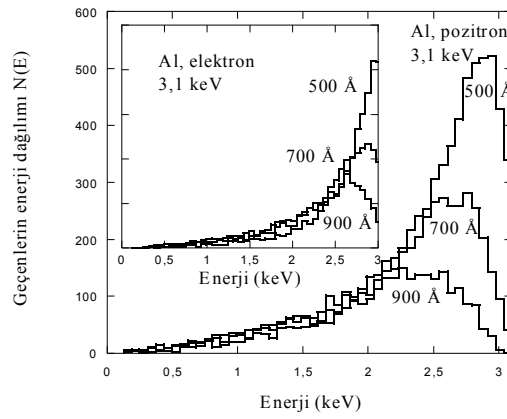
Yüklü parçacıkların çeşitli film kalınlıklarından geçme ve yarı-sonsuz ortamlardan geri saçılma olasılıkları daha önceki çalışmalarda [10-16] hesaplanmış ve elde edilen sonuçların deneysel değerlerle ve diğer Monte Carlo sonuçlarıyla uyumlu olduğu görülmüştür. Bu nedenle önceki hesaplara dayalı olarak, bu çalışmada dilim veya yarı-sonsuz ortamlarda elektron veya pozitronların enerji dağılımlarının, atom numarasına göre değişimleri $Z=13 - 82$ aralığında incelenmiştir. Elde edilen enerji dağılımları, farklı ortam ve enerjiler için tipik şekillerle örneklendirilmiştir. 1600 Å kalınlıklı alüminyum ortama 4,1 keV enerjiyle gelecek, bu kalınlığı 0,418 olasılıkla geçen ve 0,185 olasılıkla yansıyan elektronların enerji dağılımı Şekil 3'te görülür. 3,1 keV geliş enerjisi için farklı kalınlıklı Al-filmli geçen pozitronların enerji dağılımları Şekil 4 te, iç-şekilde ise aynı enerji için aynı film kalınlıklarının geçen elektronların enerji dağılımları sunulmuştur. Pozitronların farklı ortamlardaki enerji dağılımlarına tipik örnekler Şekil 5'te ve iç-şekilde verilmiştir: 250 keV geliş enerjisi için 10 mg/cm² ve 20 mg/cm² Ag- ve Pb-film kalınlıkları geçen pozitronların enerji dağılımları sırasıyla Şekil 5'te ve iç-şekilde görülür.

Şekil 4 ve Şekil 5 ten görülebileceği gibi, film kalınlığı arttıkça geçen parçacıkların enerji dağılımında uzun-dar bir halden kısa-geniş bir hale doğru değişim gözlenir. Kalın filmlerde yüklü parçacıkların çarpışmalarının sayısı artar, özellikle esnek olmayan çarpışmaların sayısının artması, enerji kaybı miktarının artmasıdır. Kısaca, elektron veya pozitronlar film kalınlığı arttıkça daha çok enerji kaybederler.

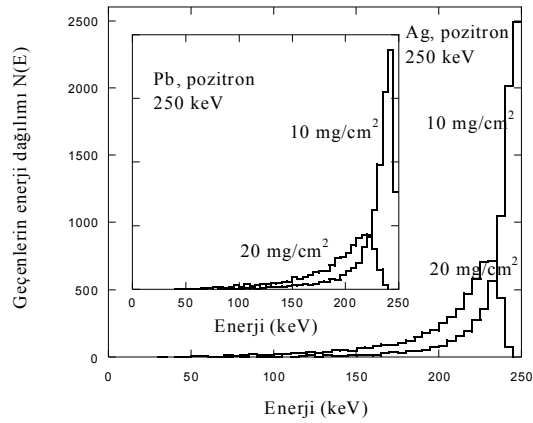
Dilim ve yarı-sonsuz ortamlara gelen elektron ve pozitronlarla ilgili bir çok Monte-Carlo hesapları ve az sayıda da deneysel çalışma [3,4,10-22] vardır. Deneyler ve Monte-Carlo hesapları, elektron geri saçılma olasılıklarının, pozitronlarınkinden daha büyük olduğunu göstermektedir. Bunun nedeni elektron ve pozitronlar için atomlarla esnek saçılma tesir kesitlerinin farklı olmasıdır.



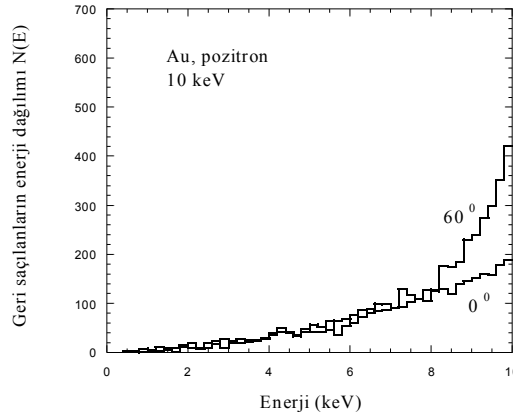
Şekil 3. 1600 Å kalınlıklı Al-filmi geçen ve yansıyan elektronların enerji dağılımları



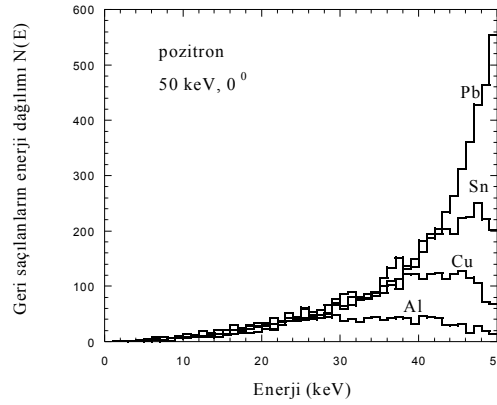
Şekil 4. Aynı enerjiyle farklı kalınlıklardan geçen elektron ve pozitronların enerji dağılımları



Şekil 5. Aynı enerji ile aynı Ag- ve Pb-film kalınlıklarını geçen pozitronların enerji dağılımları



Şekil 6. Yarı-sonsuz Au hedefe farklı açılarla gelecek geri saçılan pozitronların enerji dağılımları



Şekil 7. Yarı-sonsuz hedeflerden geri saçılan pozitronların enerji dağılımları

Yüklü parçacıkların yarı-sonsuz ortamlardan geri saçılma olasılıkları ortama geliş açısına bağlıdır ve dolayısıyla enerji dağılımlarını etkilemektedir. Yarı-sonsuz ortamlardan geri saçılan pozitronların enerji dağılımlarının geliş açısına göre değişimi incelenmiş, elde edilen sonuçlara bir örnek, altın-Au hedefe 10 keV enerjiyle dik ve 60° açılarla gelen pozitronlar için Şekil 6'da verilmiştir. Ayrıca 50 keV enerji ile yarı-sonsuz Al, Cu, Sn ve Pb ortamlara dik olarak gelecek, geri saçılan pozitronların enerji dağılımları Şekil 7'de görülebilir. Aynı enerjide, kurşundan geri saçılan pozitronların enerji dağılımının kalay, bakır ve alüminyumdan daha yüksek olduğu görülür. Bunun nedeni, ağır atomların büyük esnek saçılma tesir kesitlerine sahip olmaları ve esnek çarpışmalarda büyük açılara saçılma olasılıklarıdır. Hafif elementlerde daha çok esnek olmayan çarpışmalar görülür. Böylece geri saçılan elektron veya pozitronların enerji kaybı, hafif elementlerde daha büyüktür.

4. Sonuçlar

Toplam esnek ve esnek olmayan saçılma tesir kesitleri atomik yapılara bağlı olarak büyük belirsizlikler içermektedir. Elektron ve pozitronlar girdikleri ortamlarda esnek ve esnek olmayan binlerce saçılma yaptığından dikkatli incelenmelidir. Perdeli Rutherford tesir kesiti, perdeleme açısının değerleri dikkatli seçilmek koşuluyla açısal dağılım için oldukça iyi bir yaklaşım sağlar. Esnek olmayan saçılmada enerji kaybı benzetimi özellikle değerlik elektronları için daha dikkatli ele alınmalıdır. Elektron ve pozitronların katılarla etkileşmelerinin temel fiziksel mekanizmasının iyi anlaşılmasıyla, nükleer tıp, yüzey fiziği, mikro elektronik, vb. bir çok alanda gelişmeler sürecektir.

Kaynaklar

- [1] M. Dapor, A. Miotello, "Differential, total and transport cross sections for elastic scattering of low energy positrons by neutral atoms" *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 69, 1-100 (1998).
- [2] M. Dapor, "Electron-Beam Interactions with Solids: Application of the Monte Carlo Method to Electron Scattering Problems" *Springer*, Berlin, (2003).
- [3] B. Deghfel, A. Bentabet, N. Bouarissa, "Transmission and backscattering energy distributions of slow electrons from metallic targets" *Phys. Stat. Sol. b* 238 (1), 136-143 (2003).
- [4] Z. Chaoui, N. Bouarissa, "Positron and electron backscattering from elemental solids in the 1–10 keV energy range" *J. Phys. Condens. Matter* 16, 799-808 (2004).
- [5] N. Öztürk, W.Jr. Williamson, A.J. Antolak, "Elastic scattering of electrons and positrons by bound gallium and arsenic atoms" *J. Appl. Phys.* 70 (2), 537-542 (1991).
- [6] N. Öztürk, W.Jr. Williamson, A.J. Antolak, "Elastic scattering of electrons and positrons by bound phosphorus, indium and antimony atoms" *J. Appl. Phys.* 71 (1), 11-14 (1992).
- [7] S.M. Seltzer, "Electron-photon Monte-Carlo calculations: the ETRAN code" *Appl. Radiat. Isot.* 42, 917-941 (1991).
- [8] M. Gryzinski, "Two-particle collisions. Part I: General relations for collisions in the laboratory system" *Phys. Rev.* A138, 305-321 (1965).
- [9] D. Liljequist, "A simple calculation of inelastic mean free path and stopping power for 50 eV \pm 50 keV electrons in solids" *J. Phys. D: Appl. Phys.* 16, 1567-1582 (1983).
- [10] Özmütlu E. N., Aydın A., "Monte-Carlo Calculations of 50 eV-1 MeV Positrons in Al" *Appl. Radiat. Isot.* 45 (9), 963-971 (1994).
- [11] A. Aydın, "Total Cross Sections For Elastic Scattering of Positrons For Silicon, Gallium and Antimony Atoms" *BaÜ. Fen Bilimleri Enstitüsü*, 2 (1), 47-57 (2000).
- [12] E. N. Özmütlu, A. Aydın, "Monte-Carlo Calculations of Low Energy Positrons in Cu" *Appl. Radiat. Isot.* 47 (2), 185-189 (1996).
- [13] E. N. Özmütlu, A. Aydın, "Monte-Carlo Calculations of Medium Energy Positrons in Metals" *Appl. Radiat. Isot.* 48 (3), 403-406 (1997).
- [14] A. Aydın, "Monte Carlo Calculations of Positron Implantation Profiles in Silver and Gold" *Radiat. Phys. Chem.* 59 (3), 277-280 (2000).
- [15] A. Aydın, "Monte Carlo Calculations of Positron Implantation Profiles and Backscattering Probabilities in Gold, *Nukleonika*, 46 (3), 87-90 (2001).
- [16] A. Aydın, "Monte Carlo simulation of kilovolt positron penetration and backscattering probabilities in solids" *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B.* 197, 11-16 (2002).
- [17] I. Adesida, R. Shimuzu, T.E. Everhart, "A study of electron penetration in solids using a direct Monte-Carlo approach" *J. Appl. Phys.* 51 (11), 5962-5969 (1980).
- [18] F. Legarda, R. Idoeta, "Monte-Carlo transport of electrons and positrons through thin foils" *Radiat. Phys. Chem.* 61, 549-551 (2001).
- [19] P.G. Coleman, L. Albrecht, K.O. Jensen, A.B. Walker, "Positron backscattering from elemental solids" *J. Phys. Condens. Matter* 4, 10311-10322 (1992).
- [20] K.O. Jensen, A.B. Walker, "Monte-Carlo simulation of the transport of fast electrons and positrons in solids" *Surf. Sci.* 292, 83-97 (1993).
- [21] J.M. Fernández-Varea, et al., "Monte-Carlo simulation of 0.1-100 keV electron and positron transport in solids using optical data and partial wave methods" *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B.* 108, 35-50 (1996).
- [22] G.R. Massoumi, et al., "Electron and positron backscattering in the medium energy range" *Phys. Rev. B* 47 (17), 11007-11018 (1993).