

اعتماد التصادمات القريبة والبعيدة في حساب قدرة الايقاف لجسيمات الفا في بعض المركبات العضوية

هديل طالب هاشم العبيدي
كلية التربية للبنات – جامعة الكوفة

راشد عويد كاظم
كلية التربية للبنات – جامعة الكوفة

الخلاصة :

تم في هذا البحث دراسة نظرية لحساب قدرة الايقاف الالكترونية باستعمال معادلة Bohr ومعادلة Bethe واعتماد التصادمات القريبة و التصادمات البعيدة والمعادلة الناتجة من جمع التصادمات القريبة والتصادمات البعيدة لجسيمات الفا الساقطة على المركبات العضوية

($C_3H_6, C_{16}H_{14}O_3, C_{10}H_8O_4, C_2H_4O, CH_2O, C_3H_3N, C_6H_9NO$)
($C_4H_6O_2, C_{22}H_{16}N_2O_5$ and $C_{44}H_{36}O_6$) وقورنت النتائج المستحصلة لقدرة الايقاف الالكترونية مع نتائج برنامج SRIM2012 أظهرت توافق جيد معها.

حيث تم حساب قدرة الايقاف الالكترونية للمركبات العضوية باستعمال قاعدة براك للجسيمات المشحونة الثقيلة نفسها عند مرورها في المركبات العضوية .

ان الحسابات النظرية لقدرة الايقاف لجسيمات الفا المارة في المركبات العضوية المذكورة اعلاه اجريت في مدى طاقة (0.01-1000 MeV) . لقد تم استعمال الطرق الرياضية في حساب وبرمجة جميع المعادلات على وفق برنامج كتب بلغة Matlab للحصول على النتائج النظرية المطلوبة والتي تم توضيحها كرسوم بيانية .

المقدمة :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{elec} = \frac{4\pi Z_1^2 Z_2 e^4}{mv^2} N L_{elec} \quad (2)$$

حيث L_{elec} و L_{nuc} تعطي ب :

$$L_{nuc} = \ln \left(\frac{2a}{b_n} \right) \quad (3)$$

$$L_{elec} = \ln \left(\frac{mv^3}{2|Z_1|e^3\omega} \right) \quad (4)$$

$$b_n = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{M_0 v^2} \text{ ان}$$

M_0 : الكتلة المختزلة للقذيفة و الهدف .

a : انصاف اقطار ذرات الهدف

N : كثافة الذرات

Z_1 و Z_2 الاعداد الذرية للقذيفة والهدف على التوالي

m : كتلة الالكترون

e : شحنة الالكترون

v : سرعة الجسيم الساقط

$\bar{\omega} = (\omega_1 \cdot \omega_2 \dots \omega_{z_2})^{\frac{1}{z_2}}$: التردد المقيد بعدد من الالكترونات في ذرة الهدف و تلك الترددات المقيدة تأتي بافتراض بأن القوى التي قيدت الالكترونات بالنوى هي قوى توافقية [Csete,2002]. ان نظرية Bohr الكلاسيكية تعطى بالعلاقة الاتية [Sigmund,1996]:

$$S = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \ln \frac{Cmv^3}{Z_1 e^2 \omega} \quad (5)$$

حيث ان $C=1.1229$

حيث ان $\ln \frac{Cmv^3}{Z_1 e^2 \omega}$ يسمى عدد ايقاف Bohr ويرمز له بالرمز L_{Bohr} .

ان نتيجة Bohr تظهر ضمن الشرط $\kappa = \frac{2Z_1 v_0}{v} > 1$ [Sigmund,2001].

ان قدرة الايقاف للجسيمات المشحونة عند مرورها خلال الاوساط المادية اهمية كبيرة في الفيزياء الذرية فهي تعد من المواضيع المهمة التي شغلت عدد من الباحثين لما لها من اهمية في المجالات الطبية والصناعية والصحية والتفاعلات النووية والكيمياء الاشعاعية وتصميم الكواشف عالية الدقة [Csete,2002]، وذلك لتأثيرها على عمليات فقدان الطاقة للأيونات المارة خلال الهدف الذري اذ ان مقدار الطاقة التي يفقدها الجسيم في كل وحدة طول من مساره خلال الوسط او الهدف او الطرف يعرف بقدرة الايقاف stopping (power) وعادة ما تكتب بالشكل التالي $(-dE/dx)$ وهي تعتمد على شحنة وسرعة الجسيمة الساقطة وكذلك على مادة الهدف [Ahmed,2001]. في عام ١٩١٣ وضع العالم Bohr اول النظريات لحساب قدرة الايقاف بالاعتماد على الميكانيك الكلاسيكي كما قام فيما بعد باقتراح صيغه لحساب قدرة الايقاف نظريا بالاعتماد على التصادمات القريبة والبعيدة [Csete,2002]، في عام 1913 اشتق Bohr صيغة واضحة لحساب قدرة الايقاف للجسيمات المشحونة الثقيلة [Getachew,2007]. حيث اعتبر Bohr ان خسارة الطاقة للجسيمة المشحونة الثقيلة هو بسبب اصطدامها مع الالكترونات الذرة [Getachew,2007] [Turner,2004] وان الكترون الذرة ممكن ان تعتبره ساكن و حر تقريبا قبل اصطدامه مع الجسيم الساقط [Turner,2004]. في هذا النموذج يقسم انتقال الطاقة الى جزء نووي و جزء الكتروني و حسب باستخدام نظرية التشتت الكلاسيكية عندما وسط الايقاف يوصف بواسطة نموذج المتذبذب التوافقي، اذ ان النتائج تعطي المعادلتين الآتيتين [Csete,2002]:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} = \frac{4\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{M_2 v^2} N L_{nuc} \quad (1)$$

هي كتلة الهدف
: M_2

وان قدرة الايقاف الالكترونية تعطى بالعلاقة الاتية:

$$S = \frac{4\pi N Z_1^2}{mv^2} k^2 e^4 \left[\ln \frac{2mv^2}{I} - \ln \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - \frac{v^2}{c^2} \right] \quad (9)$$

حيث ان:

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (10)$$

$$\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$$

10⁻¹²

c: سرعة الضوء

و ان نموذج Bethe-Bloch لا يمكن تطبيقه في الطاقات الواطنة التي اقل من 0.01MeV لان التفاعلات النووية هي التي ستكون سائدة [Dunn & Hugtenburg,2006].

وجرى الاعتماد على نظرية الميكانيك الكمي لانها اول نظرية درست قدرة الايقاف للمركبات ونظرية Bethe - Bloch بشكل اساسي وقد استعملت قاعدة (Bragg) لحساب قدرة الايقاف في المركبات طبقا لتلك القاعدة قدرة الايقاف للمركب حسبت بواسطة الجمع الخطي لقدرة

الايقاف للعناصر الفردية المكونة لها اي للحصول $S = K \frac{Z_1^2 Z_2}{A \beta^2} L_{Bethe}$ على فقدان الطاقة في المركب L_{Bethe} الهدف بالامكان التعامل معه على انه طبقات رقيقة من عناصر نقية بالاعتماد على كثافة الكثرونات عناصر الهدف ويعبر عن قاعدة براك للمركبات بالمعادلة الاتية :

$$(11)$$

وبالاعتماد على مبدأ التصادمات القريبة والتي تم الافتراض إنها تخضع لقانون استطارة كولوم الحرة (Free Coulomb Scattering) وان حساب فقدان الطاقة يتم من خلال استطارة الالكترونات الذرية بواسطة الجسيم الساقط، وبما ان الجسيم المشحون الساقط سوف يفقد طاقته خلال هذه العملية، لذلك فإن الطاقة المنتقلة (Energy

كما استنتج العالم Bethe في عام 1930 صيغة مشابهة لصيغة بور لحساب قدرة الايقاف معتمدا على الميكانيك الكمي والتي تختلف فقط باللوغاريتم (عدد الايقاف) عن صيغة Bohr 1913 [Lozeva,2005] [Turner,2004]. حيث ان نظرية Bethe للايقاف تكون صحيحة عندما سرعة الجسيمة الساقطة اعلى من سرعة Bohr حيث ان نظرية Bethe تعطى بالعلافة الاتية [Csete,2002]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} N Z_2 \ln \frac{2mv^2}{I} \quad (6)$$

حيث ان $\ln \frac{2mv^2}{I}$ يسمى عدد ايقاف Bethe و يرمز له بالرمز L_{Bethe}

حيث I : معدل جهد التأين

وبأخذ التصحيحات النسبية فان عدد التوقف لالكترون الهدف يوصف بالمعادلة الاتي:

$$L_{Bethe} = \ln \left[\frac{2mc^2 \beta^2}{1-\beta^2} \right] - \beta^2 - \ln I \quad (7)$$

$\beta = \frac{v}{c}$ وهي النسبة بين سرعة الجسيمة الساقطة الى سرعة الضوء

ويمكن كتابة قدرة الايقاف ل(Bethe) بالشكل الاتي [Bichsel,1992]:

$$(8)$$

ثم ظهرت بعد ذلك نظرية Bethe-Bloch والتي حلت التناقض الموجود بين نظرية Bohr الكلاسيكية لايقاف الجسيمة المشحونة الساقطة و نظرية الاضطراب الكمية ل(Bethe) حيث انها اعتمدت على قيمة المؤثر η الذي يعطى بالمعادلة $\eta = z_1 e^2 / hv$ حيث ان خسارة الطاقة توصف كلاسيكيا اذا كانت قيمة $\eta \gg 1$ بينما تطبق نظرية الاضطراب في الحالة المعاكسة أي عندما η صغير . هذه النتيجة قدمت كتصحيح لتحديد المقطع العرضي لايقاف الرتبة الاولى لنظرية الاضطراب والتي يعبر عنها بالمعادلة [Sankt,2002] [Khodyrev,2000].

فعند الأخذ بنظر الاعتبار التصادمات القريبة والبعيدة والمعطاة بالمعادلات (1٢) و (١٤) لذلك معادلة (15) تصبح بالشكل الآتي:

$$= \int_0^{p_0} 2\pi p dp T_{close}(p) + \int_{p_0}^{\infty} 2\pi p dp T_{dis}(p) \quad (16)$$

حيث أن الحد الأول من المعادلة (16) يمثل التصادمات القريبة والحد الثاني يمثل التصادمات البعيدة، حيث إن (p_0) هو الذي يحدد التصادمات القريبة من التصادمات البعيدة أي عند القيمة (p_0) تكون الطاقة المنتقلة للتصادمات القريبة T_{close} مساوية للطاقة المنتقلة للتصادمات البعيدة T_{dis} أي أن:

$$T_{close}(p_0) = T_{dis}(p_0)$$

وبتعويض المعادلتين (12) و (14) في المعادلة (16) نحصل على المعادلتين الآتيتين:

$$S_{close}(p) = \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \ln \left[1 + \left(\frac{2p_0}{b} \right)^2 \right] \quad (17)$$

$$L_{close} = \ln \left[1 + \left(\frac{2p_0}{b} \right)^2 \right] \quad (18)$$

$$S_{dis} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_0 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_1 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) \quad (19)$$

$$L_{dis} = \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_0 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_1 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) \quad (20)$$

ويمكن إعادة كتابة المعادلتين (17) و (19) بالصيغة الآتية:

$$S_{close}(p) = \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} L_{close} \quad (21)$$

$$S_{dis}(p) = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} L_{dis} \quad (22)$$

وبجمع المعادلتين (18) و (20) نحصل على الصيغة العامة لعدد الإيقاف الكلي (L_{tot}) :

Transformation (Transformation) إلى ذرة الهدف كدالة لمعامل التصادم (p) تعطى بالعلاقة الآتية [Sigmund,1996]:

$$T_{close} = \frac{2Z_1^2 e^4}{mv^2 p^2} \frac{1}{1 + (b/2p)^2} \quad (1٢)$$

حيث أن :

T_{close} : تمثل الطاقة المنتقلة إلى ذرة الهدف كدالة لمعامل التصادم

b : هو قطر التصادم (Collision Diameter) ويساوي:

$$b = \frac{2Z_1 e^2}{mv^2} \quad (1٣)$$

إن المعادلة (12) مشتقة مباشرة من قانون رذرفورد $(\tan \theta/2 = b/2p)$ و $(T = 2mv^2 \sin^2 \theta/2)$ حيث إن θ زاوية استطرارة مركز الكتلة (The center-of-mass Scattering Angle) أما التصادمات البعيدة فتكون فيها الإلكترونات الذرية غير حرة، أي أنها ناتجة من ترابط الإلكترونات الهدف من خلال التردد الكلاسيكي (ω) وان الطاقة المنتقلة إلى الإلكترونات ذرة الهدف كدالة لمعامل التصادم (p) Impact Parameter) تعطى بالعلاقة الآتية: [Sigmund,1996]

$$T_{dis} = \frac{2Z_1^2 e^4}{mv^2 p^2} \left\{ \left[k_0 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) \right]^2 + \left[k_1 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) \right]^2 \right\} \quad (14)$$

حيث أن:

p_0 : معامل التصادم الحرج

k_1, k_0 تمثل دوال بيسل المعدلة (Modified Bessel Functions) وبما إن قدرة الإيقاف تعرف بدلالة الطاقة المنتقلة (Energy) transformatin ومعامل التصادم (p) (Impact Parameter) وفق المعادلة الآتية:

$$S_{tot} = \int_0^{\infty} 2\pi T(p) p dp \quad (15)$$

وبتعويض المعادلات (26) و (28) في المعادلة (30) نحصل على الصيغة العامة لحساب المقطع العرضي للايقاف لنظرية Bohr:

$$S_{\text{tot}} = \frac{4\pi e^4 Z_1^2 Z_2}{mv^2} \ln \left(\frac{Cmv^3}{Z_1 e^2 \omega} \right) \quad (31)$$

$$L_{\text{tot}} = \ln \frac{Cmv^3}{Z_1 e^2 \omega} \quad (32)$$

وهو يساوي L_{Bohr} ونلاحظ ان معامل Bohr (٤) هو المعامل الثاني الذي يؤثر في حساب المقطع العرضي للايقاف فضلا عن معامل التصادم الحرج (p_0) . اما عن كيفية الحصول على الصيغة الكلاسيكية لحساب قدرة الايقاف فتتم من خلال حل التكاملات رياضيا في المعادلتين (17) و (19) فقط بدون الاعتماد على التقريب الرياضي معادلة (24) لتجنب حصول توقف في اللوغارتم والمتمثل في المعادلة (31). فبالتعويض عن قيم m و e (كتلة وشحنة الالكترون) والعلاقة $(\beta=v/c)$ في معادلة (17) و (١٩) نحصل على المعادلتين التاليتين بوحدة $(\text{MeV.cm}^2/\text{mg})$ وكالاتي:

$$S_{\text{close}} = 0.30707 \left(\frac{Z_1^2}{\beta^2} \right) \left(\frac{Z_2}{a_2} \right) \times \frac{1}{2} \ln \left(1 + \left(\frac{2p_0}{b} \right)^2 \right) \quad (33)$$

$$S_{\text{dis}} = 0.30707 \left(\frac{Z_1^2}{\beta^2} \right) \left(\frac{Z_2}{a_2} \right) \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_0 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_1 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) \quad (34)$$

وعندما $1 < 2p_0/b$ فإن المعادلات (19) و (20) تكتب بالصيغة الآتية

ومن جمع هاتين المعادلتين نحصل على المعادلة الكلاسيكية العامة لحساب المقطع العرضي للايقاف التي تم الاعتماد عليها في حساباتنا النظرية:

$$S_{\text{tot}} = 0.30707 \left(\frac{Z_1^2}{\beta^2} \right) \left(\frac{Z_2}{a_2} \right) L_{\text{tot}} \quad (35)$$

عدد الايقاف الكلي للمعادلة (34) يعطى بالعلاقة الآتية:

$$L_{\text{tot}} = \ln \left[1 + \left(\frac{2p_0}{b} \right)^2 \right] + \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_0 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) K_1 \left(\frac{\omega p_0}{v} \right) \quad (23)$$

وان حساب Bohr استند إلى تمييز ذلك عند السرعة العالية أي عندما تكون $b \ll v$ حيث إن القيمة p_0 يمكن إيجادها اعتمادا على الفترة ω / $b \ll p_0 \ll v$ وان دوال بيسل من الممكن تمثيلها بمفكوكها الخاص ولقيم صغيرة لـ x حيث:

$$x k_0(x) k_1(x) = \ln(2/x) - \gamma + O(x^2) \quad (24)$$

حيث إن:

x يمثل متغيرا " ويعطى بالعلاقة الآتية:

$$x = \frac{\omega p_0}{v} \quad (25)$$

γ : يمثل ثابت اويلر (Euler's constant) وقيمته تساوي (0.5772)

ومن الممكن اعادة كتابة المعادلتين (17) و (18) بالشكل الاتي:

$$S_{\text{close}} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \ln \left(\frac{2p_0}{b} \right) \quad (26)$$

$$L_{\text{close}} = \ln \left(\frac{2p_0}{b} \right) \quad (27)$$

$$S_{\text{dis}} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \ln \left(\frac{Cv}{\omega p_0} \right) \quad (28)$$

$$L_{\text{dis}} = \ln \left(\frac{Cv}{\omega p_0} \right) \quad (29)$$

حيث ان C ثابت يعطى بالعلاقة $(C=2e^{-\gamma})$ [Sigmund,1996]

$$S_{\text{tot}} = S_{\text{close}} + S_{\text{dis}} \quad (30)$$

الخرج (p_0) (critical impact parameter) ومعامل Bohr (ξ) (Bohr's parameter).

ان المعامل (p_0) يفصل مابين التصادمات القريبة والتصادمات البعيدة في حساب المقاطع العرضية للايقاف (S_{close}, S_{dis}) في المعادلة (16).

يمكن ايجاد معامل Bohr الذي يمثل دالة للسرعة في حساباتنا النظرية من المعادلة الاتية:

$$\xi = \frac{mv^3}{Z_1 e^2 \omega} \quad (37)$$

ان التصادمات القريبة والتصادمات البعيدة تكون متساوية عند معامل التصادم (p_0) اي ان:

$$S_{close} = S_{dis}$$

فمن مساواة المعادلة (٢٦) و (٢٨) نحصل على:

$$\ln\left(\frac{Cv}{\omega p_0}\right) = \ln\left(\frac{2p_0}{b}\right) \quad (38)$$

$$\therefore p_0 = \left(\frac{Cvb}{2\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (39)$$

وبالتعويض عن ($\omega = I/\hbar$) والمعادلة (3) في المعادلة (39) نحصل على:

$$p_0 = \left(\frac{CZ_1 e^4}{mvv_0 I}\right)^{1/2}$$

ان اهمية معامل Bohr (ξ) ومعامل التصادم (p_0) يتوضح من خلال الشكل (1) والذي يوضح العلاقة بين التصادمات القريبة)

$$Y_{close} = \frac{mv^2 p^2}{2Z_1^2 e^4} T_{close}$$

$$Y_{dis} = \frac{mv^2 p^2}{2Z_1^2 e^4} T_{dis}$$

الخرج (p_0) وكذلك يمكن الملاحظة ان معامل Bohr (ξ) ياخذ قيم متعددة والتمثلة باعلى قيمة لها ($\xi = 10$) الى اقل قيمة ($\xi = 0.1$) حيث نلاحظ من هذا الشكل ان (p_0) تمثل دائما نقطة تقاطع عندما تكون $Y_{close} = Y_{dis}$.

ان الشكل (2) يوضح العلاقة العكسية بين معامل التصادم الحرج (p_0) ومعامل Bohr (ξ) حيث عند السرعة العالية (اعلى قيمة ξ) فان معامل التصادم (p_0) ياخذ اقل قيمة وبالعكس.

$$L_{tot} = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \left(\frac{2p_0}{b} \right)^2 \right) + xK_0(x)K_1(x) \quad (36)$$

المركبات العضوية

Organic compounds

هو أي مركب من المركبات الكيميائية التي تحتوي جزيئاتها على الكربون فيما عدا كاربيدات ، الكربونات ، ثاني أكسيد الكربون . دراسة المركب العضوي يسمى العضوية وعديد من هذه المركبات مثل البروتينات و الدهون و الكربوهيدرات ذات أهمية كبيرة في علم الكيمياء الحيوية.

السبب وراء وجود العدد الهائل لمركبات الكربون هو قدرة الكربون على تشكيل سلاسل عديدة وبأطوال متنوعة، وحلقات بمختلف الأحجام. العديد من مركبات الكربون حساسة جدا للحرارة ، وتتفكك بشكل عام بدرجات حرارة دون $300C^0$. وهي وبشكل عام أقل ذوبانية في الماء مقارنة بالأملاح الغير عضوية. وعلى عكس مثل تلك الأملاح، فإن المركبات العضوية تكون عادة أكثر ذوبانية في المذيبات العضوية كالاثير أو الكحول. وترتبط المركبات العضوية بروابط تساهمية (تشاركية).

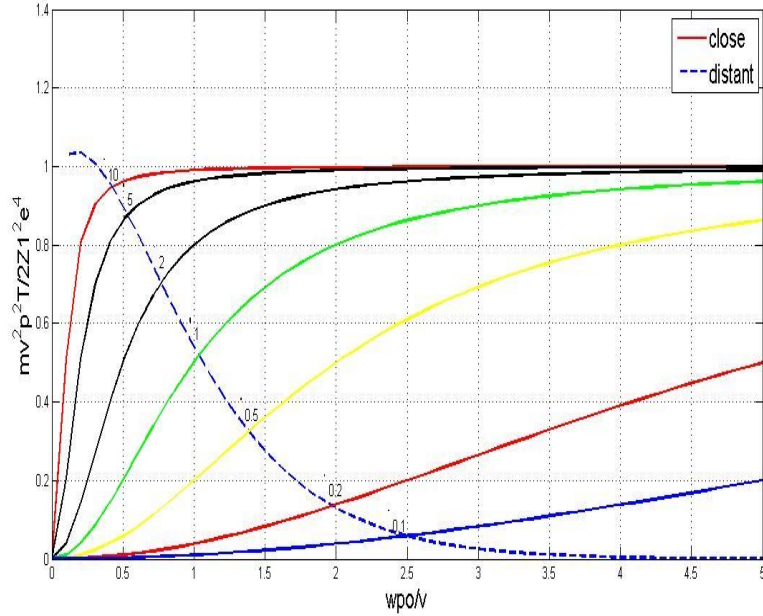
المعاملات المؤثرة في حساب المقطع العرضي للايقاف :

من المعادلتين (17) و (19) والناتجة منها معادلة Bohr (31) نلاحظ ان هناك معاملات اساسية تؤثر في حساب المقطع العرضي للايقاف الجسيمات الثقيلة وهي معامل التصادم

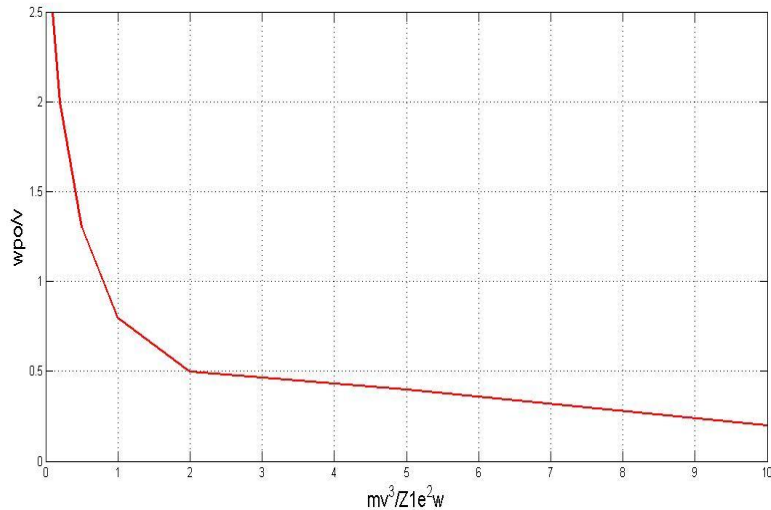
ان معادلة Bohr (31) تمثل دالة لمعامل Bohr (ξ) حيث ان عدد الايقاف لهذه المعادلة يعطى بالعلاقة الاتية :

ومن المعادلتين (16) و (18) نلاحظ ان $L_{close} = L_{dis}$ عند p_0 التي تمثل ايضا دالة لمعامل Bohr (ξ).

$$L_{Bohr} = \ln\left(\frac{Cmv^3}{Z_1 e^2 \omega}\right) \quad (40)$$



شكل (1) العلاقة بين التصادمات القريبة (T_{close}) والتصادمات البعيدة (T_{dis}) مقابل معامل التصادم الحرج (p_0) ، ويوضح الشكل ايضا اعتماد (T_{close}) على سرعة الجسيم الساقط من خلال معامل بور (ξ) الذي يأخذ قيم متعددة $0.1 < \xi < 10$.



شكل (2) التباين بين سرعة الجسيم الساقط (المتعلقة بمعامل Bohr (ξ)) ومعامل التصادم الحرج p_0

$$L_{Bohr} = L_{close} + L_{dis}$$

وعند النقطة p_0 يكون :

$$L_{Bohr} = 2L_{dis} = 2L_{close}$$

$$\therefore L_{dis} = L_{close} = L_{Bohr}/2 \quad (41)$$

من البيانات . يمكن أن يكون وسيلة مفيدة جدا لاستخلاص النتائج من البيانات التجريبية ،حيث نلاحظ من الشكل (٣) استخدام منحنى التطابق والتي برمجت في برنامج بلغة Matlab وادخال هذه البيانات باستخدام هذا المنحنى ومطابقته مع النتائج العملية لبرنامج SRIM 2012 كما موضح بالمعادلة شبه التجريبية الآتية.

Fitting

$$=(p1.*x.^2+p2.*x+p3)./(x.^3+q1.*x.^2+q2.*x+q3)$$

حيث ان $(p1,p2,p3,q1,q2,q3)$ هي ثوابت تختلف باختلاف المركبات العضوية

منحني التطابق Curve Fitting

هو عملية بناء منحنى مناسب أو دالة رياضية لمجموعة من البيانات حيث أن هذه العملية هامة في إيجاد علاقة مكافئة لأي نظام ،فمثلاً عند إدخال مجموعة من المدخلات inputs سنلاحظ ان الخرج outputs تأخذ مجموعة من النقاط المتشعبة التي لا تجمعها علاقة محددة ،أما عنداستخدام curve fitting سنلاحظ تكون علاقة تقريبية لتوصيف النظام. وتلخيص العلاقات بين اثنين أو أكثر من المتغيرات وبشكل عام هو عملية العثور على الوصف الذي يطابق أفضل مجموعة معينة

Electronic Stopping power calculation for alpha particles in organic compounds

الحسابات والنتائج :

حساب قدرة الايقاف الالكترونية لجسيمات الفا في المركبات العضوية:

لقد تم حساب قدرة الايقاف الالكترونية لجسيمات الفا المارة خلال المركبات العضوية العشرة المبينة في الجدول الآتي :

الهدف	الصيغة الكيميائية	الكثافة النوعية $\rho \left(\frac{g}{cm^3}\right)$	معدل جهد التأين او التهيج I (eV)
١- بولي بروبيلين	C3H6	0.9	55.83
٢- بولي كربونات	C16H14O3	1.2	70.10
٣- مايالر	C10H8O4	1.4	75.25

٤- بولي فينيل الكحول	C2H4O	1.3	67.66
٥- بولي اوكسيميثيلين	CH2O	1.425	74.42
٦- بولي أكريلونيتريل	C3H3N	1.17	68.03
٧- بولي فينيل بيرليدون	C6H9NO	1.25	66.13
٨- بولي فينيل أسيتات	C4H6O2	1.19	70.79
٩- كبتون	C22H10N2O5	١,٤٢	٧٦,٣٠
١٠- باكيت	C44H36O6	1.4	67.72

الجدول (١) يوضح صفات هذه الاهداف بالإضافة الى معدل التأين او التهيج I لكل هدف والذي يعتبر ذات تأثير مهم في الحسابات بالنسبة لهذه الاهداف .

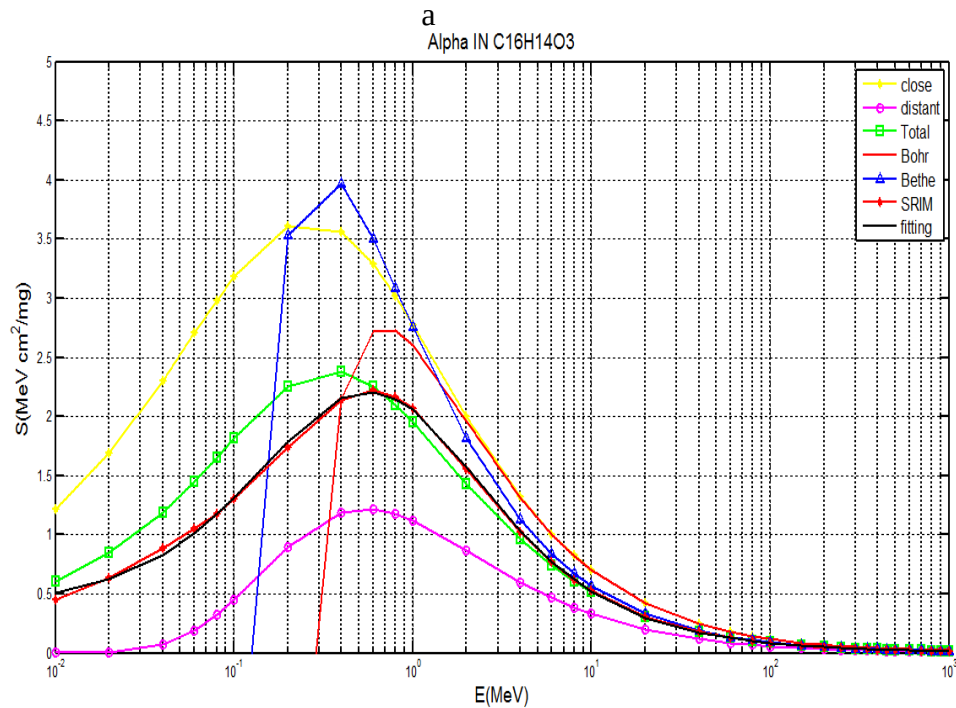
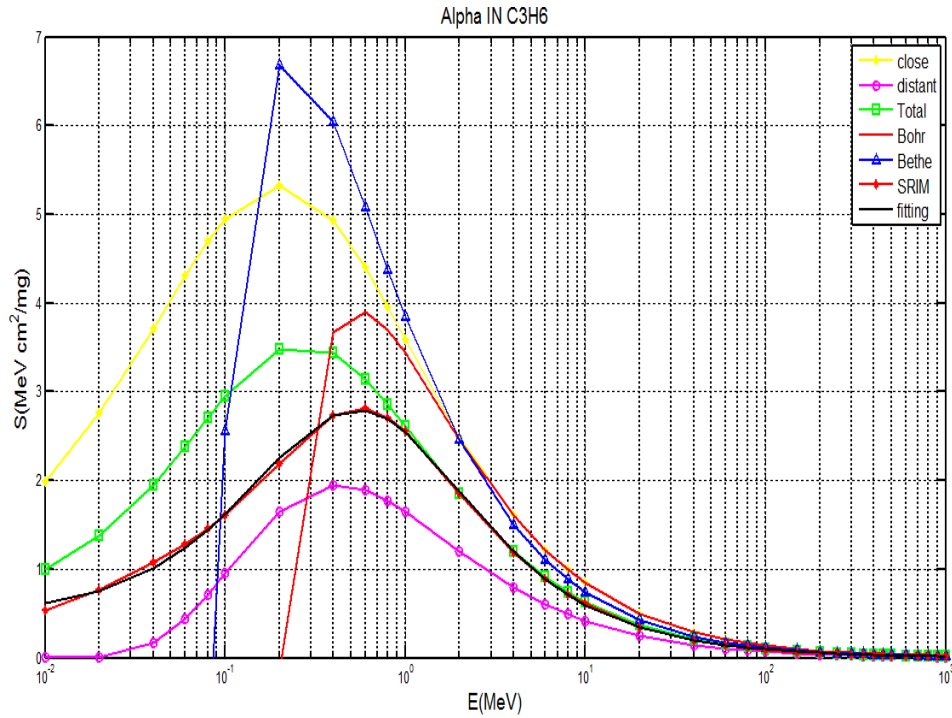
البعيدة والنتائج العملية لبرنامج SRIM 2012 . حيث نلاحظ من الاشكال (3a,b,c,d,e,f,g,h,i,j) ان اعظم قيمة لقدرة الايقاف الالكترونية الناتجة من المعادلات (٣٣)، (٣٤) و (٣٥) تكون ضمن الطاقة (0.01<E(MeV)<0.5) وبزيادة الطاقة تبدأ قدرة الايقاف بالتناقص. أما عند ملاحظة الاشكال (3d, 3c, 3f, g, 3i, 3j) فنلاحظ ان اعظم قيمة لقدرة الايقاف الالكترونية الناتجة من المعادلات (٣٣)، (٣٤) و (٣٥) بعد ادخالها بالمعادلة (١١) تقع ضمن الطاقة (0.8) <E(MeV)<0.01 وبزيادة الطاقة تبدأ قدرة الايقاف بالتناقص.

اما بالنسبة الى معادلاتي Bethe و Bohr المتمثلة بالمعادلتين (٥) ل (Bethe) و (٨) ل (Bohr) والموضحة في الشكل (3a,b,c,d,e,f,g,h,i,j) نلاحظ أنه عند الطاقات الواطئة فإن صيغة Bohr

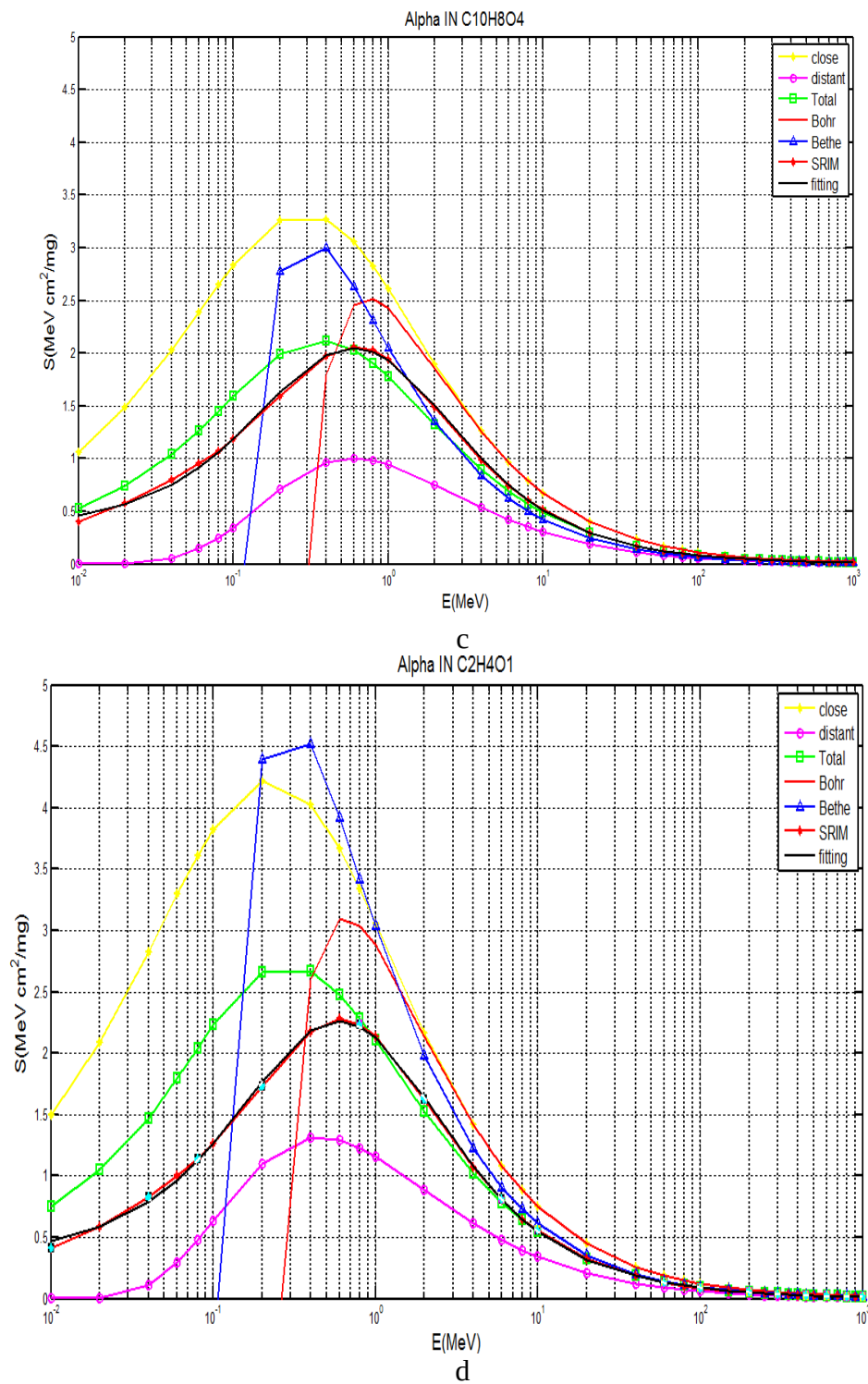
ضمن مدى طاقة (0.01-1000 MeV) باستعمال المعادلات (٥) ل (Bohr) ، (٨) ل (Bethe) ، (٣٣) الناتجة من التصادمات القريبة ، (٣٤) الناتجة من التصادمات البعيدة (٣٥) الناتجة من تأثير التصادمات القريبة والتصادمات البعيدة والتي برمجت في برنامج بلغة Matlab والتي اعتمدناها في حساباتنا النظرية لحساب قدرة الايقاف الالكترونية . اذ حسبنا قدرة الايقاف الالكترونية للعناصر المكونة لتلك المركبات ثم ادخلناها في المعادلة (١١) لبراك لحساب قدرة الايقاف الالكترونية لجسيمات الفا في كل مركب ، الشكل (٣) يوضح المقارنة بين النتائج النظرية المتمثلة بالمعادلات (٥) ل (Bohr) ، (٨) ل (Bethe) ، (٣٣) الناتجة من التصادمات القريبة ، (٣٤) الناتجة من التصادمات البعيدة و (٣٥) الناتجة من تأثير التصادمات القريبة والتصادمات

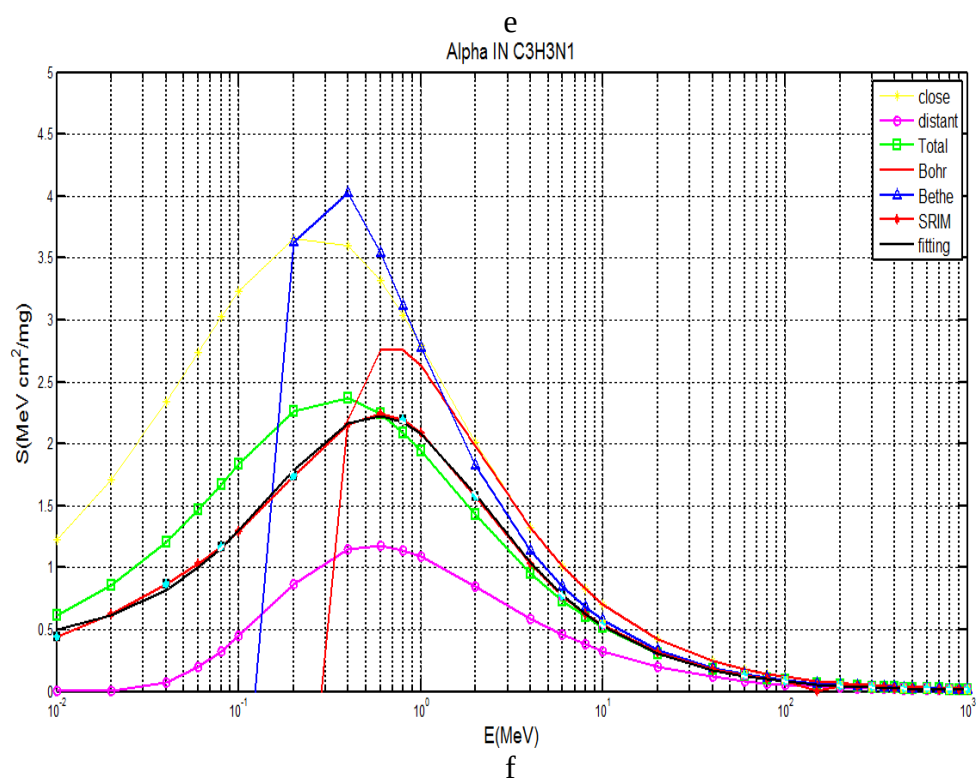
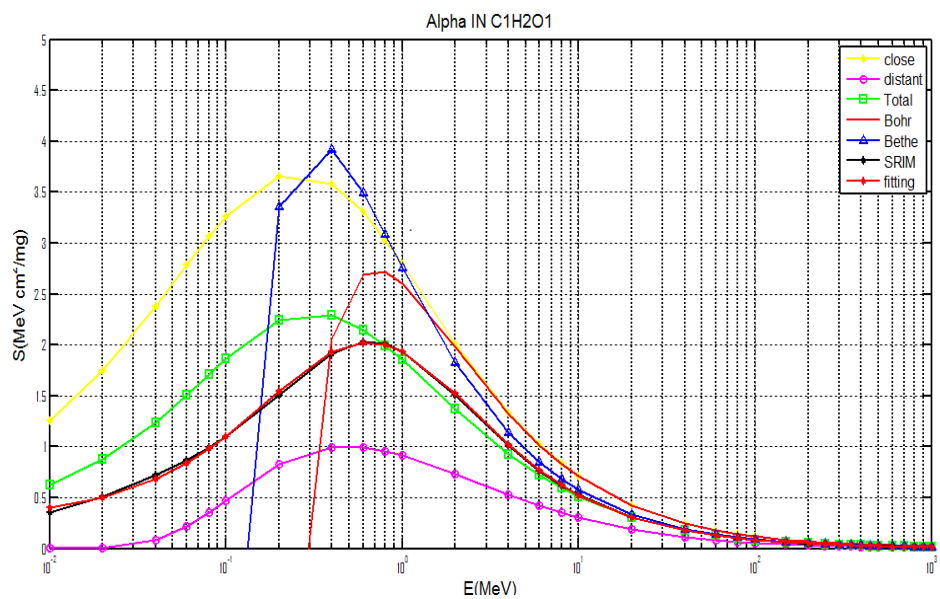
العدد الذري للهدف كلما زاد التباعد بين صيغة Bohr وصيغة Bethe كما موضح في الشكل (٤) . اما عند الطاقات العالية فأن هذا التباعد يقل ونحصل على توافق جيد بين النتائج النظرية والنتائج العملية لبرنامج SRIM2012 .

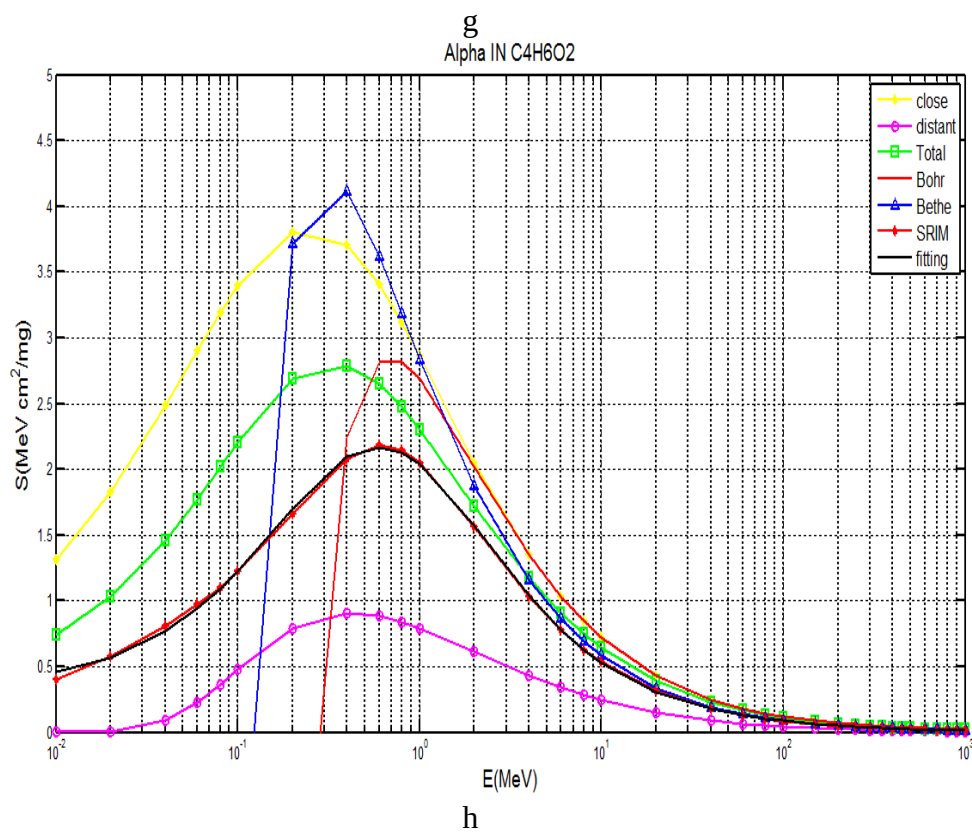
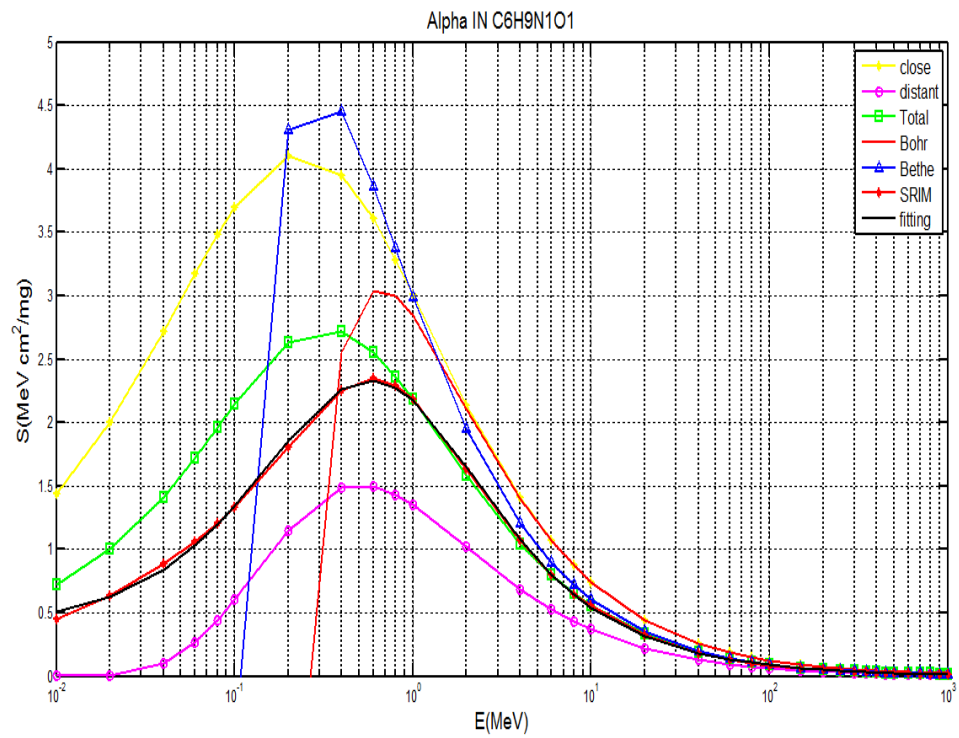
وصيغة Bethe تصل الى حد الانقطاع او التوقف (cut off) ونلاحظ وجود تباعد كبير بين صيغة Bohr وصيغة Bethe عند الطاقات الواطئة حيث تم حساب قدرة الايقاف الالكترونية لعدة جسيمات مشحونة في هدف واحد ، حيث نلاحظ أنه كلما زاد

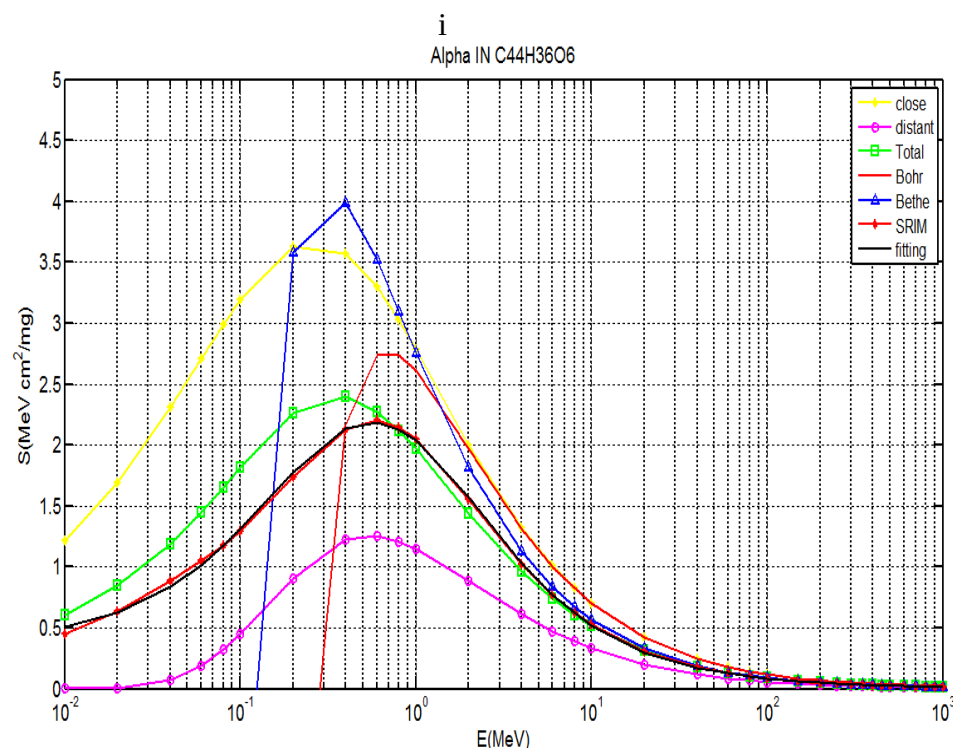
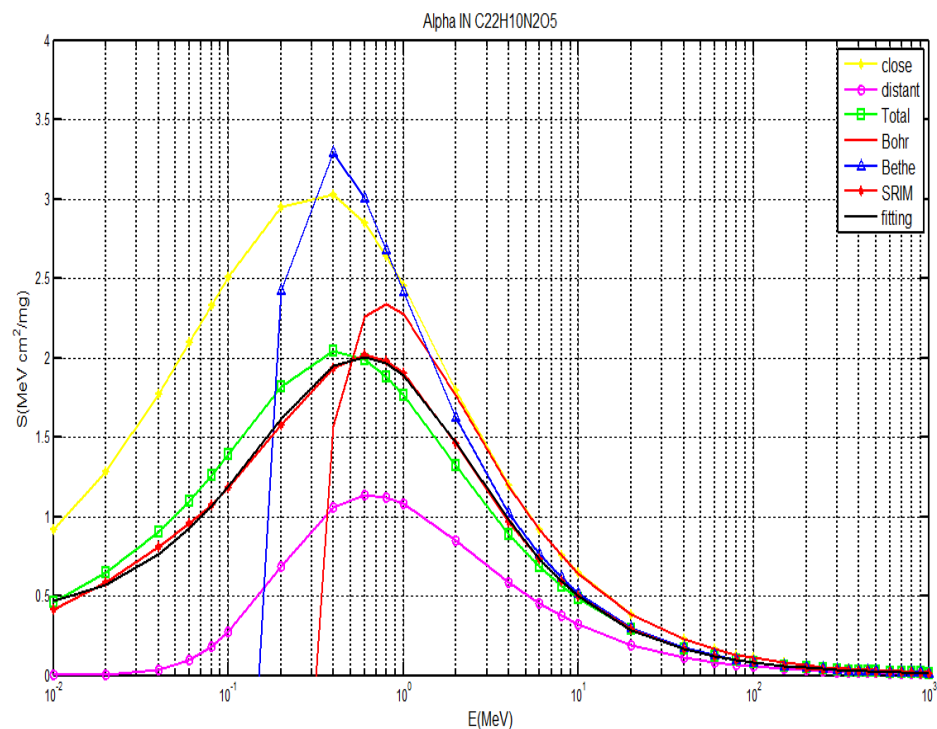


b









الشكل (3) يوضح العلاقة بين قدرة الايقاف الالكترونية لجسيمات الفا الساقطة على اهدف (المركبات العضوية)

الاستنتاجات :

من خلال دراستنا لقدرة الايقاف الالكترونية يمكن ان نستنتج النقاط المهمة الاتية :

١- على سرعة وشحنة الجسيم الساقط . وهاتين الصيغتين متشابهتين تقريبا باستثناء اللوغارتم الذي يعتبر اساس الاختلاف بين هاتين المعادلتين.

١- ان صيغة Bethe المتمثلة بالمعادلة (٨) وصيغة Bohr المتمثلة بالمعادلة (٥) على الرغم من انهما تعدان من الصيغ المهمة في حساب قدرة الايقاف الالكترونية للجسيمات الفا الثقيلة وتعتمد

(C₂₂H₁₀N₂O₅) and bakelite (C₄₄H₃₆O₆)

ان قدرة الايقاف تزداد بزيادة طاقة الجسيم الثقيل الساقط عند منطقة الى ان تصل الى قيمة محددة ثم تبدأ بالنقصان الى ان تكون قريبة من الصفر عند الطاقات العالية .

4- من ملاحظة الشكل (2) نلاحظ ان العلاقة عكسية بين معامل Bohr ومعامل التصادم الحرج P_0 اذ ان اي زيادة تطرأ على معامل Bohr فان P_0 سوف تبدأ بالنقصان ، وهذا يعتبر مؤثر مهم في حساباتنا النظرية لقدرة الايقاف من خلال المعادلة (35).

5- عند ملاحظة الشكل (3) يمكن ان نلاحظ حصول تباعد بين معادلة Bohr ومعادلة Bethe عند الطاقة الواطئة وبزيادة الطاقة فان هذا التباعد يقل وتبدأ بالتقارب الى ان تصل الى حد التوافق عند نقطة معينة بسبب التأثير اللوغارتمي.

2- يمكن استعمال المعادلة (35) في حساب قدرة الايقاف لجسيمات الفا الثقيلة في اي هدف عند السرع العالية وعند السرع الواطئة ولأي قيمة لشحنة وسرعة الجسيم الساقط ومقارنة بمعادلة Bohr ومعادلة Bethe.

3- لوحظ في حساب قدرة الايقاف لجسيمات الفا الساقطة على المركبات العضوية

Polypropylene (C₃H₆),
polycarbonate (C₁₆H₁₄O₃),
mylar (C₁₀H₈O₄),
polyvinylalcohol (C₂H₄O₁),
polyoxymethylene (C₁H₂O₁),
polyacrylonitrile (C₃H₃N₁),
polyvinylpyrrolidone (C₆H₉N₁O₁),
polyvinylacetate (C₄H₆O₂),
kapton

المصادر:

H.Bichsel,1992,"stopping power and ranges of fast ions in heavy elements",Phys.Rev.A,Vol.46,No.9,p.p.5761-5773.

J. E. Turner,2004," Interaction of ionizing radiation with matter",Health Physics Society,p.p.228-252.

M.C . Tufan and H. Gumus,2008," Stopping power calculations of compounds by using Thomas-Fermi-Dirac-Weizsäcker density functional",ACTA PHYSICA POLONICA A, Vol. 114,No.4.,p.p.703-710.

P.Sigmund,1996,"Low-speed limit of Bohr's stopping -power formula",Phys.Rev A.Vol.54,No.4,p.p.3113-3793.

P. Sigmund and A. Schinner,2001," Binary theory of electronic stopping", Preprint submitted to Elsevier Science,p.p.64-68.

R. Lozeva,2005," A new developed calorimeter telescope for identification of relativistic heavy ion reaction

O.Ahmed ,2001,"Stopping power and shell correction from orbital mean excitation energies",M.Sc.Thesis ,AL-Mustansiyah University .p.p.1-8.

A.Csete,2002,"Experimental investigations of the energy loss of slow protons and antiprotons in matter",M.Sc.Thesis,Instute of physics and astronomy,University of Aarhus,p.p.1-75.

A. Getachew,2007," Stopping power and range of protons of various energies in different materials",M.Sc.Thesis,Addis Ababa university,p.p.1-40.

A. Sankt-Petersburg,2002" Energy loss dynamic of intense heavy ion beams interacting with dense matter" ,Vom fachbereich physik der technischen universitat Darmstadt,p.p.1-104.

W. L. Dunn and R. P. Hugtenburg, 2006, "The interaction of radiation with matter: charged particle and electron interactions".

channels", PhD.Thesis, University of Sofa, p.p.1-156.

V. A. Khodyrev, 2000, "On the origin of the Bloch correction in stopping", J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 33, p.p.5045-5056.

Close and distans collision dependent to calculate stopping power of alpha particles of some organic compounds

Hadeel Talib Hashim Al-Obeidi

Rashid Owaid Kadhim

Abstract :

In this research, a theoretical study was made to calculate electronic stopping power by using Bohr equation, Bethe equation and then calculate it by depending on close collisions and distant collisions and the equation which resulting from distant and close collisions for alpha particles which interact with with organic compounds (C₃H₆, C₁₆H₁₄O₃, C₁₀H₈O₄, C₂H₄O, CH₂O C₃H₃N, C₆H₉NO, C₄H₆O₂, C₂₂H₁₆N₂O₅ and C₄₄H₃₆O₆) the results are compared with program SRIM2012, which it showed a good agreement with it.

Where was calculated electronic stopping power of organic compounds using Bragg's rule heavy charged particles when they pass in the same organic compounds.

The theoretical calculation for electronic stopping power for all alpha particles through the organic compounds are done with in energy range (0.01-1000 MeV)

A mathematical approximative methods are used in the calculation and some of equation programmed by Matlab language to obtain the theoretical result which are shown in graphic.