

Find semi-empirical relationship to calculate the electronic stopping power of Carbon and Oxygen ions in some organic compounds

استنباط علاقة شبه تجريبية لحساب قدرة الإيقاف الالكترونية لأيونات الكربون والاكسجين في بعض المركبات العضوية .

ا.م.د. راشد عويد كاظم م.م. شعله عبد السادة كاظم

جامعة الكوفة - كلية التربية للبنات - قسم الفيزياء

البحث مستل من رسالة الماجستير للباحث الثاني

الخلاصة :-

تم في هذا البحث استنباط علاقة شبه تجريبية لحساب قدرة الإيقاف الالكترونية للجسيمات المشحونة (لأيونات الكربون والاكسجين) المتفاعلة مع المركبات العضوية

[polypropylene(C₃H₆), Polycarbonate(C₁₆H₁₄O₃), Mylar (C₁₀H₈O₄), Polyvinylalcohol (C₂H₄O), Polyoxymethylene (CH₂O), Polyacrylonitrile (C₃H₃N), Polyvinylpyrrolidone (C₆ H₉ N O), باعتماد النسبة $\left(\frac{Z_2}{A_2}\right)$ ، ضمن مدى الطاقة [0.01-1000] MeV ، ومن خلال مقارنة النتائج المستحصلة مع نتائج برنامج الـ SRIM 2012 لنفس القذائف في تلك المركبات فقد أظهرت توافقاً جيداً مع نتائج الـ SRIM 2012 . الكلمات المفتاحية: - قدرة الايقاف الالكترونية ، العلاقات شبه التجريبية ، برنامج الـ SRIM 2012 .

Abstract :-

In this research find semi-empirical relationships to calculate the electronic stopping power of charged (Carbon ions and Oxygen ions) interacting with organic compounds :-

[Polypropylene (C₃H₆), Polycarbonate (C₁₆H₁₄O₃), Mylar (C₁₀H₈O₄), Polyvinylalcohol (C₂H₄O), Polyoxymethylene (CH₂O), Polyacrylonitrile (C₃H₃N), Polyvinylpyrrolidone (C₆ H₉ NO), Polyvinylacetate (C₄H₆O₂), Kapton (C₂₂ H₁₀ N₂ O₅) , Bakelite (C₄₄ H₃₆ O₆)] using the ratio $\left(\frac{Z_2}{A_2}\right)$, within range of energy [0.01-1000] MeV, and by comparing the obtained results with the results of the SRIM 2012 program for the same projectiles in these compounds have shown good agreement with the results of the SRIM 2012.

Key words: - electronic stopping power, semi-empirical relations, the SRIM 2012 program.

1- المقدمة :- Introduction

تأخذ عملية فقدان الطاقة للجسيمات المشحونة اهتماماً واسعاً في كافة مجالات الفيزياء الذرية والنوية ومجالات العلوم الأخرى. وتعتمد عمليات حساب فقدان الطاقة على عوامل أساسية للجسيم الساقط ومادة الهدف من خلال السرعة v والشحنة $Z_1 e$ والكتلة (M) بالنسبة للجسيم الساقط وكذلك على صفة ذلك الوسط (أي مادة الهدف) لذلك تختلف عمليات فقدان الطاقة من خلال طبيعة ونوع الجسيم الساقط والوسط [1].

2- النظرية :- Theory

لقد اعتبر بور فقدان طاقة جسيمة مشحونة ثقيلة نشيطة بسبب تصادمها مع الكثرونات الذرة وإن الإلكترون يعد تقريباً حر وساكن قبل التصادم [2]. حيث إشتق علاقة قدرة الإيقاف الالكترونية لكل الكثران هدف من المادة [3] بالاعتماد على الميكانيك الكلاسيكي :

$$S_e = -\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \ln \frac{Cmv^3}{Z_1 e^2 \omega} \dots \dots \dots (1)$$

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} L_{Bohr} \dots \dots \dots (2)$$

حيث $-\frac{dE}{dx} = S_e$ ، تمثل قدرة الإيقاف الالكترونية، $Z_1 e$ شحنة الجسيمة المشحونة الثقيلة، v سرعتها، m كتلة الألكترون، e شحنته.

وأن: $L_{Bohr} = \ln \frac{Cmv^3}{Z_1 e^2 \omega} = \ln \xi C$ عدد إيقاف بور [5,4].

كما اشتق بيث Bethe صيغة مماثلة لصيغة بور لقدرة الإيقاف الالكترونية للجسيمات المشحونة الثقيلة معتمداً على الميكانيك الكمي حيث حسب المقطع العرضي التفاضلي باستخدام تقريب بورن الاول لإستطارة الايون [6,5,2].

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi e^4 Z_1^2 N}{mc^2 \beta^2} \ln \frac{2mv^2}{I} \dots \dots \dots (3)$$

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi e^4 Z_1^2 N}{mc^2 \beta^2} L_{Bethe} \dots \dots \dots (4)$$

حيث إن N الكثافة الالكترونية للهدف

β النسبة بين سرعة الجسيمة الساقطة الى سرعة الضوء

و $L_{Bethe} = \ln \frac{2mv^2}{I}$ يسمى عدد إيقاف بيث

إذ $I = \hbar \omega$ معدل جهد التأين.

بالإضافة إلى الدراسات النظرية فالعديد من الدراسات التجريبية اجريت بهدف صياغة علاقات طاقة ومدى قياسية لحساب قدرة الإيقاف. وقد تمت مراجعة الموضوع في العقدين (1950-1960) من قبل عدد من الباحثين مثل Taylor، Bethe، Askin، Allision، Warshaw، Uehling، Barkas و Berger. وإن أغلب البيانات التجريبية جمعت من قبل Whaling Bichsel، على هيئة جداول [7].

توصل H. V. Gupta و A. K. Chaubey الى العلاقة التجريبية التالية لقدرة إيقاف البروتونات [7]:

$$-\frac{dE}{pdX} = \frac{a}{A_2} E^{-b} Z_2^c \log E + d \dots \dots \dots (5)$$

إن القيم المناسبة للثوابت a, b, c, d هي $a=915, b=0.85, c=0.145, d=0.635$ ، أما ρ فهي الكثافة للوسط و A_2 الوزن الذري و Z_2 العدد الذري للوسط (للمادة الموقفة) بينما E تمثل الطاقة الحركية للجسيمة الساقطة (القذيفة) بوحدات MeV/amu [7].

فالعلاقة اعلاه صحيحة ضمن مدى الطاقة (0.7-12) MeV/amu، والثوابت c, d تم الحصول عليها من مطابقة Northcliffe و Schilling (التي دعيت فيما بعد NS)، وقد وجدت لتكون مستقلة عن نوع الجسيمة حيث حسبت قدرة الإيقاف بواسطة طريقة التربييعات الصغرى، أما الثوابت a, b فقد استخلصت من البيانات التجريبية لـ Whaling و Anderson et al وكذلك بيانات NS عند الطاقات الواطئة وقدرة الإيقاف الناتجة تقاس بوحدات $\text{MeV cm}^2/\text{gm}$ [7]. قدرة الإيقاف للايونات الاثقل من البروتونات يمكن ايجادها بواسطة التعبير المعطى من قبل Blann و Pierce [7]:

$$\left(-\frac{dE}{\rho dX}\right)_H = \frac{Z_{eff}^2}{\gamma^2} \left(-\frac{dE}{\rho dX}\right)_P \dots \dots \dots (6)$$

حيث: $Z_{eff}^2 = \gamma^2 Z_2^2$ ، هنا الطاقة فوق 0.7 MeV لذلك للبروتونات $\gamma_p=1$ وبتعويض (6) في (5) نحصل على:

$$\left(-\frac{dE}{\rho dX}\right)_H = \gamma^2 Z_2^2 a E^{-b} Z_2^c \log E + d \dots \dots \dots (7)$$

γ كسر الشحنة الفعالة لإيون طاقته E (MeV/amu) يمكن تخمينها من الصيغة التجريبية لـ Booth و Grant [7]:

$$\gamma^2 = f(EZ_2^{-4/3})$$

حيث: $f(x) = 1 - \exp(-24.73x + 247.6x^2 - 1131x^3)$

ولحساب قدرة إيقاف جسيمات ألفا من المعادلة (7)، نفترض بأن الطاقة اكبر من 4 MeV، كسر الشحنة الفعالة لجسيمات ألفا $\gamma^2 = 1$ وعند الطاقة أقل من 4 MeV اي من 0.7 إلى 1 MeV/amu، بمطابقة بيانات NS لجسيمات ألفا بواسطة طريقة التربييعات الصغرى وابقاء c و d ثوابت تصبح $b = 0.84, a = 3574$ ، لذا للطاقة بين (0.7-1) MeV/amu لجسيمات ألفا، فإن المعادلة (5) ينبغي ان تعذل الى [7]:

$$\left(-\frac{dE}{\rho dX}\right) = \frac{3574}{A_2} E^{-0.84} Z_2^{0.145} \log E + 0.635 \dots \dots \dots (8)$$

وقدرة الإيقاف في الاهداف المركبة يمكن الحصول عليها بواسطة نظرية الجمع [7]:

$$\left(-\frac{dE}{\rho dX}\right)_{\text{compound}} = \frac{1}{M_2} \sum_i N_i A_i \left(-\frac{dE}{\rho dX}\right)_i \dots \dots \dots (9)$$

حيث M_2 الوزن الجزيئي للوسط المركب من N من الذرات ذات الوزن الذري A_2 . وكذلك لخص Anderson و Ziegler بيانات قدرة إيقاف البروتون التجريبية للعديد من العناصر لمدى واسع من الطاقات. وللحصول على القيم لكل العناصر على مدى مستمر من طاقات البروتون، قام الباحثون بمطابقة (fitting) المنحنيات مع البيانات التجريبية المتوفرة لتوليد معاملات لإستعمالها في قدرة الإيقاف شبه التجريبية كدالة لطاقة البروتون E (keV) والعدد الذري Z_2 للهدف . S_e أقرضت لتكون متناسبة مع $E^{0.45}$ للطاقة $E < 25$ keV ، ماعدا $Z_2 \leq 6$ فإنها تتناسب مع $E^{0.25}$ ، ولـ (25KeV ≤ E ≤ 10MeV) استعمل Ziegler et al العلاقة [8] :-

$$\frac{1}{S_e} = \frac{1}{S_{low}} + \frac{1}{S_{high}} \quad \dots \dots \dots (10)$$

حيث :-

$$S_{low} = A_1 E^{A_2} + A_3 E^{A_4} \quad \dots \dots \dots (11)$$

$$S_{high} = \frac{A_5 \ln \left(\frac{A_6}{E} + A_7 E \right)}{E^{A_8}} \quad \dots \dots \dots (12)$$

S_e قدرة الإيقاف الالكترونية . S_{high} ، S_{low} قدرة الإيقاف الالكترونية للطاقات الواطئة والعالية على التوالي . وللطاقة $10\text{MeV} \leq E \leq 2\text{GeV}$ يتطلب استعمال العلاقة التالية [8] :-

$$S_e = A_9 + A_{10} \left(\frac{\ln E}{E} \right) + A_{11} \left(\frac{\ln E}{E} \right)^2 + A_{12} \left(\frac{E}{\ln E} \right) \quad \dots \dots \dots (13)$$

والمعاملات A_i لكل Z_2 متوفرة على شكل جداول الـ TRIM [8] .

3- الحسابات و النتائج :- Calculations and results

في هذا البحث فقد تم اقتراح علاقتان شبه تجريبية لحساب قدرة إيقاف أيونات الكربون والاكسجين في المركبات العضوية العشرة وقد تم برمجتها ببرنامج حاسوبي بلغة الماتلاب MATLAB للحصول على النتائج النظرية المطلوبة والتي تم توضيحها كرسوم بيانية ومن ثم تم مقارنتها مع نتائج برامج الـ SRIM 2012 .

3-1 العلاقة شبه التجريبية لحساب قدرة إيقاف أيونات الكربون في المركبات العضوية العشرة :-

لقد تم اقتراح علاقة شبه تجريبية لحساب قدرة إيقاف أيونات الكربون في المركبات العضوية العشرة ضمن مدى الطاقة [0.01-1000]MeV وذلك باستخدام النسبة $\left(\frac{Z_2}{A_2} \right)$ ، وبتعويض طاقة القذيفة ومعدل جهد التأين للوسط تم الحصول على نتائج أكثر تقارب مع نتائج الـ SRIM 2012، والعلاقة شبه التجريبية المقترحة هي :

$$S_{emp} = abE^{-1} \quad \dots \dots \dots (14)$$

$$a = 70 * \left\langle \frac{Z_2}{A_2} \right\rangle \quad \text{حيث :-}$$

$$b = \ln \left(1 + 12.5 * \left(\frac{E^{1.6}}{I} \right) \right) \quad \text{و}$$

$$\left\langle \frac{Z_2}{A_2} \right\rangle = \frac{\sum_i n_i Z_{2i}}{\sum_i n_i A_{2i}} \quad \dots \dots \dots (15)$$

حيث :- Z_{2i} و A_{2i} العدد الذري و الوزن الذري للعنصر i th من عناصر الهدف، n_i عدد الذرات للهدف (الوسط) . وأن I تمثل معدل جهد التأين للوسط والتي تحسب كالتالي [10,9] :-

$$I \cong \begin{cases} 19.0 \text{ eV} & , Z_2 = 1 \text{ (Hydrogen)} \\ 11.2 + 11.7 Z_2 \text{ eV}, & 2 \leq Z_2 \leq 13 \\ 52.8 + 8.71 Z_2 \text{ eV}, & Z_2 > 13 \end{cases} \quad \dots \dots \dots (16)$$

$$\ln \langle I \rangle = \frac{\sum_i n_i Z_{2i} \ln I_i}{\sum_i n_i Z_{2i}} \quad \dots \dots \dots (17)$$

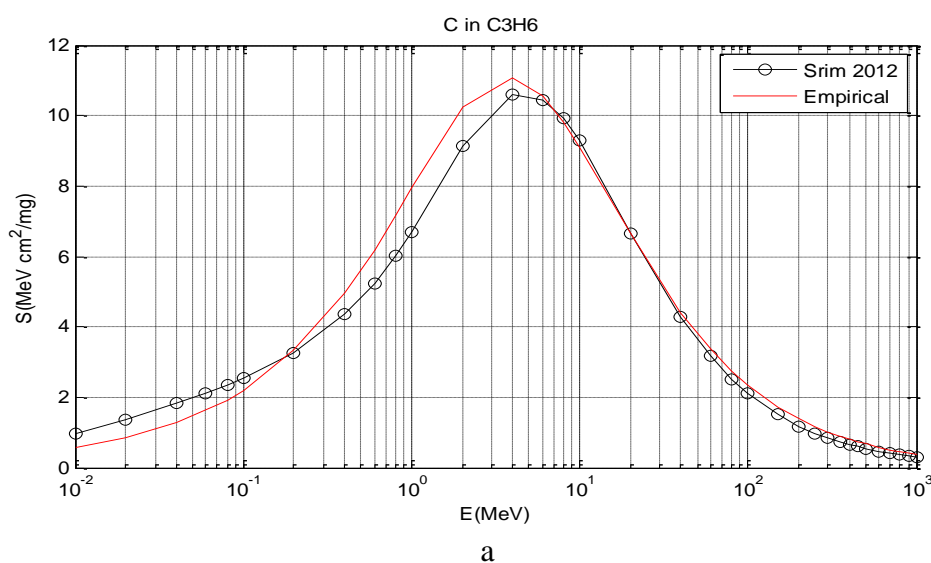
الشكل (1a, b, c,d,e,f,g,e,h,i,j) يوضح ان قدرة الايقاف تزداد مع الطاقة حتى تصل اعظم قيمة لقدرة الايقاف عند الطاقة (3-4) MeV ثم تبدأ بالنقصان كلما تزداد الطاقة .

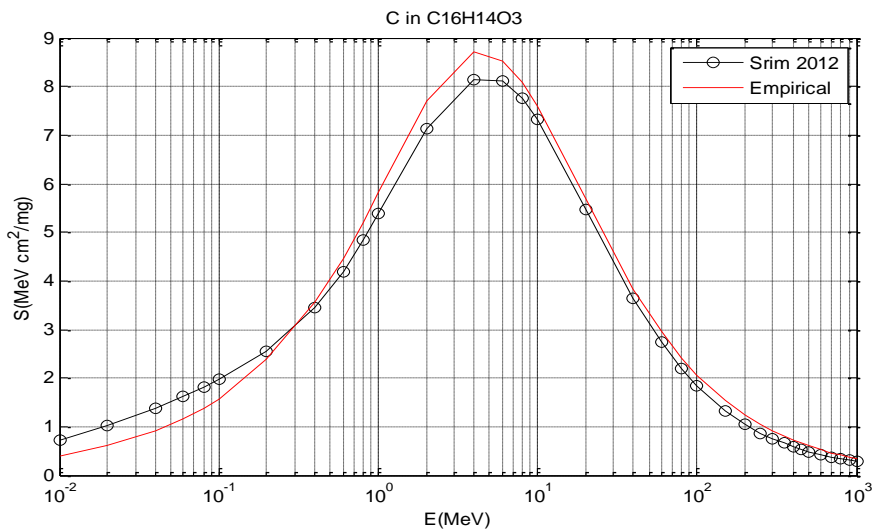
ويكون الايقاف النووي هو السائد ضمن مدى الطاقة (0.01-0.2)MeV وتأثير التهيج والتأين يكون ضمن مدى الطاقة (0.2-40)MeV وضمن مدى الطاقة (40-1000)MeV يكون الايقاف الالكتروني هو السائد .

ومن خلال الشكل (1a,b,c,d,e,f,g,e,h,i,j) تم ملاحظة ان النتائج المحسوبة باستعمال الشبه التجريبية المقترحة تتطابق بشكل جيد مع نتائج برنامج الـ SRIM 2012 وكان معامل الارتباط هو (0.992748-0.998032) وكذلك نسبة الخطأ كانت (0.170832-0.42632) كما مبين في الجدول (1).

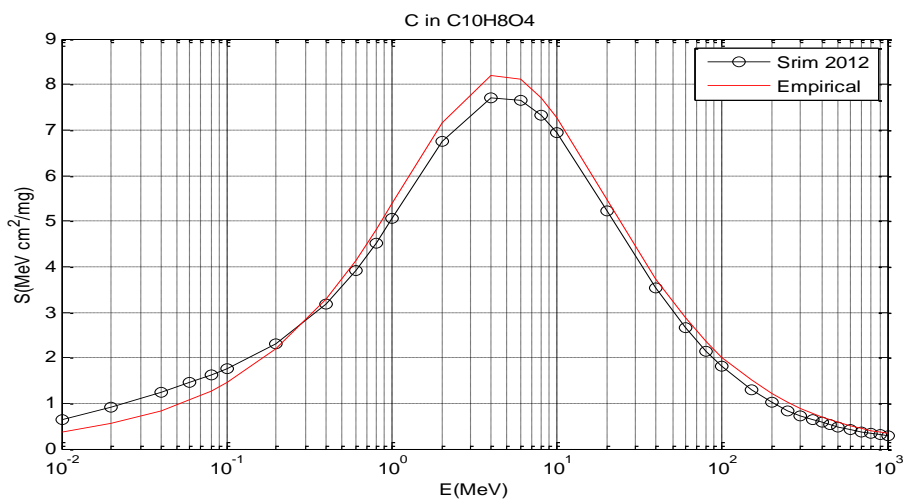
جدول (1) يبين الكثافة الكتلية ومعامل جهد التأين والنسبة $\langle \frac{Z_2}{A_2} \rangle$ ومعامل الارتباط ونسبة الخطأ لأيونات الكربون في المركبات العشرة .

ت	الصيغة المركب	الكثافة الكتلية ρ g/cm ³	معدل جهد التأين $\langle I \rangle$ eV	النسبة $\langle \frac{Z_2}{A_2} \rangle$	معامل الارتباط	نسبة الخطأ
1	C ₃ H ₆ Polypropylene	0.9	56.5429	0.5714	0.992748	0.42632
2	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	1.2	73.171	0.5276	0.996403	0.235929
3	C ₁₀ H ₈ O ₄ Mylar	1.4	78.6116	0.5208	0.997232	0.195364
4	C ₂ H ₄ O Polyvinylalcohol	1.3	69.53	0.5455	0.997119	0.225541
5	CH ₂ O Polyoxymethylene	1.425	77.1016	0.5333	0.998032	0.170832
6	C ₃ H ₃ N Polyacrylonitrile,	1.17	72.006	0.5283	0.995488	0.267171
7	C ₆ H ₉ NO Polyvinylpyrrolidone	1.25	68.75	0.5405	0.996153	0.259948
8	C ₄ H ₆ O ₂ Polyvinylacetate	1.19	73.57	0.5349	0.997428	0.201677
9	C ₂₂ H ₁₀ N ₂ O ₅ Kapton	1.42	80.368	0.5131	0.994039	0.27826
10	C ₄₄ H ₃₆ O ₆ Bakelite	1.4	72.5149	0.5273	0.995194	0.274042

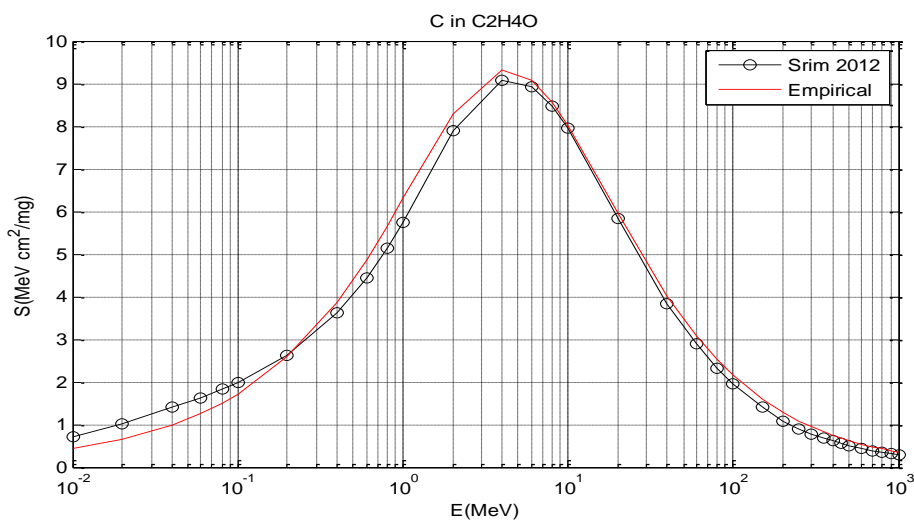




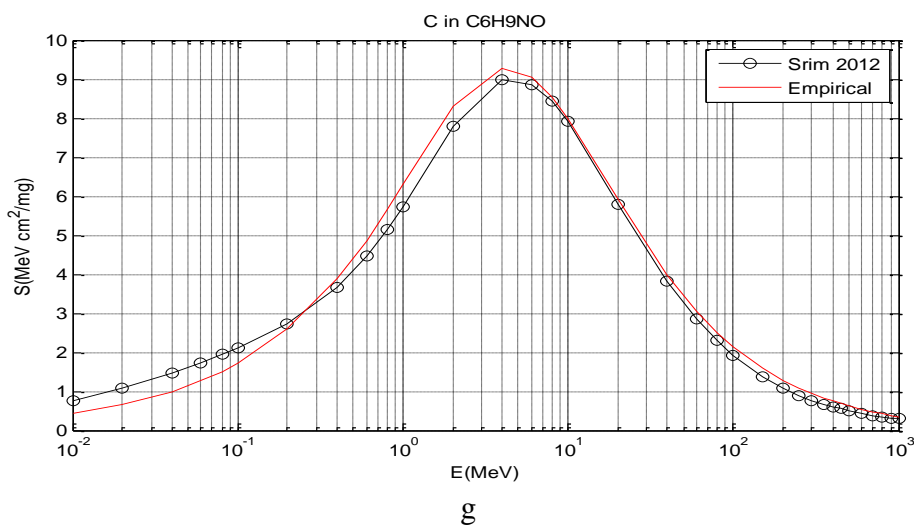
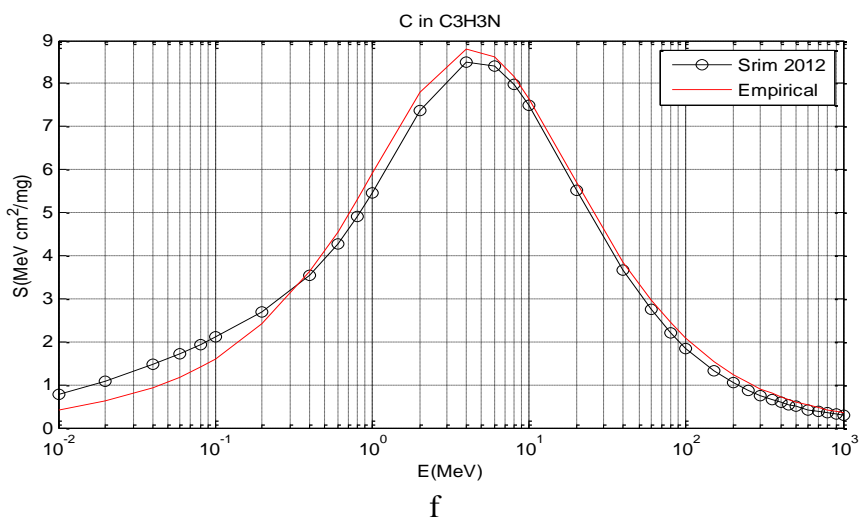
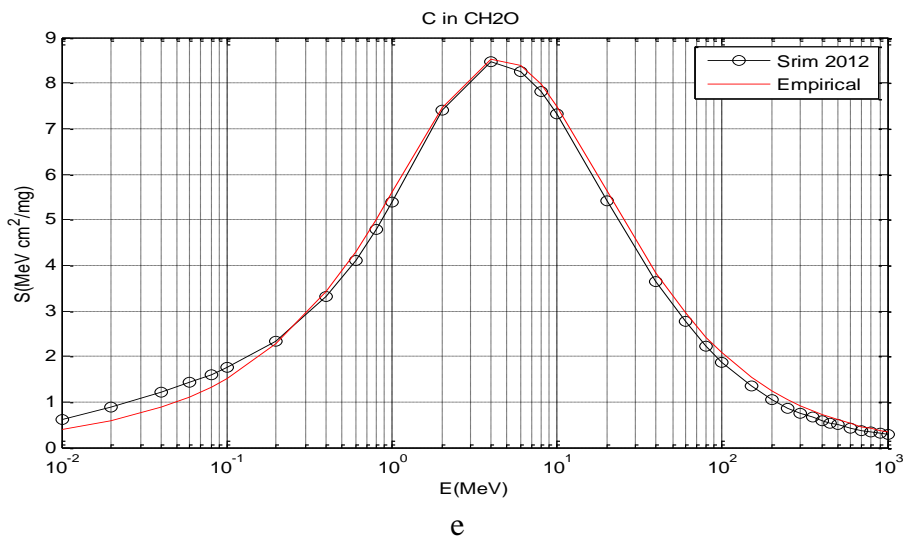
b

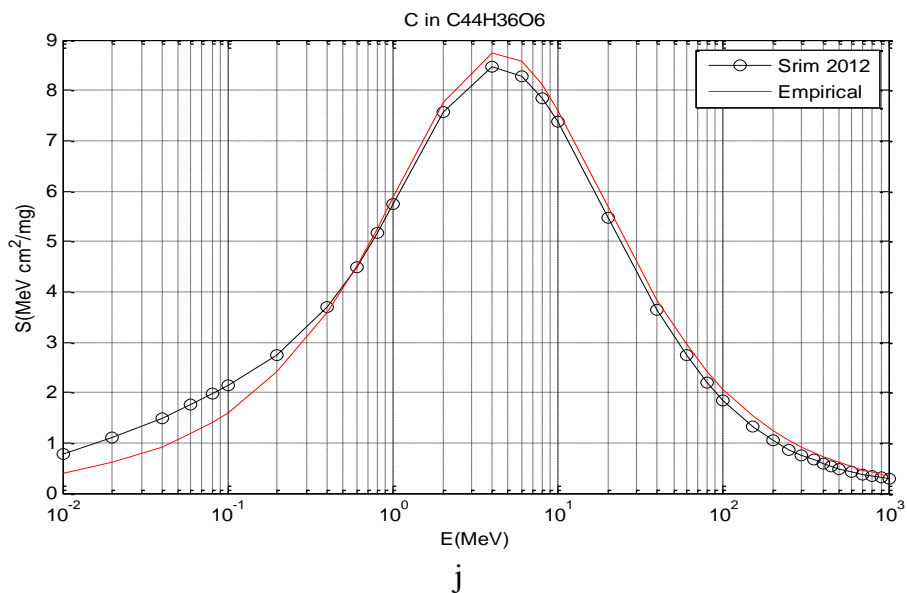
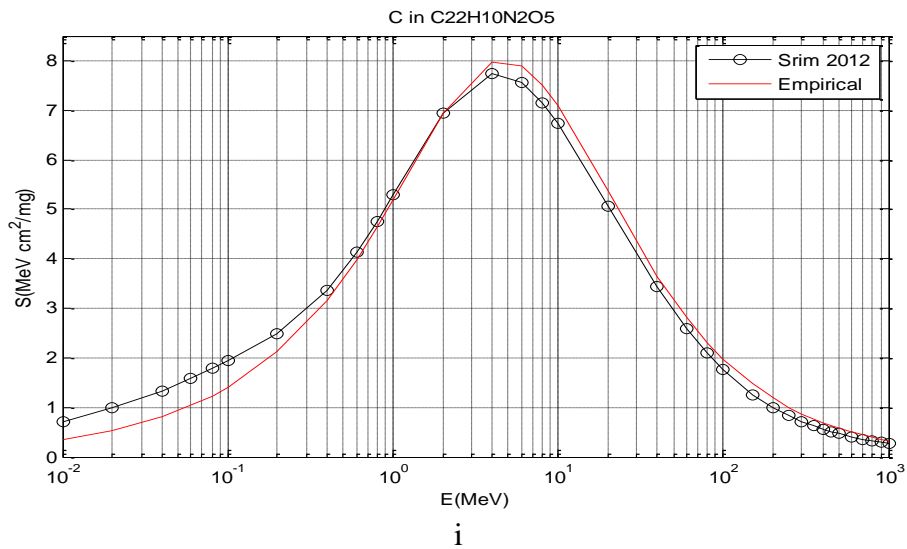
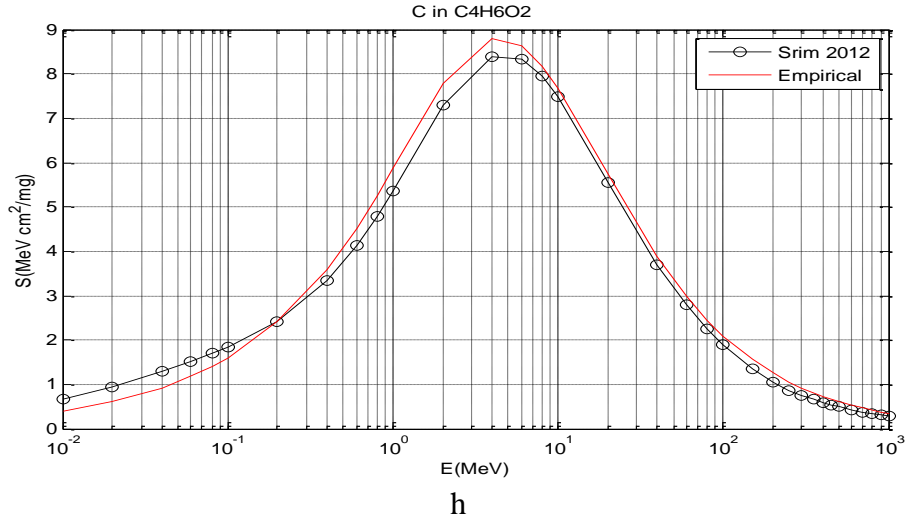


c



d





شكل (1a, b, c, d, e, f, g, e, h, i, j) يوضح العلاقة بين قدرة الإيقاف الالكترونية لأيونات الكربون المارة خلال الأهداف , (C₃H₆) , (C₁₆H₁₄O₃) , (C₁₀H₈O₄) , (C₂H₄O) , (C₂H₂O) , (C₃H₃N) , (C₆H₉NO) , (C₄H₆O₂) , (C₂₂H₁₀N₂O₅) , (C₄₄H₃₆O₆) على التوالي.

2-3 العلاقة شبه التجريبية لحساب قدرة إيقاف أيونات الاوكسجين في المركبات العضوية العشرة :-

لقد تم اقتراح علاقة تجريبية لحساب قدرة إيقاف أيونات الاوكسجين في مركبات العضوية العشرة ضمن مدى الطاقة [0.01-1000]MeV وذلك باستخدام النسبة $(\frac{Z_2}{A_2})$ ، وبتعويض طاقة الفذيفة ومعدل جهد التأين للوسط نحصل على نتائج أكثر تقارب مع نتائج الـ SRIM 2012، والعلاقة شبه التجريبية المقترحة هي :

$$S_{emp} = abE^{-1} \quad \dots \dots \dots (18)$$

حيث

$$a = 137.7 * (\frac{Z_2}{A_2})$$

$$b = \ln(1 + 6 * (\frac{E^{1.7}}{I}))$$

و

الشكل (1a, b, c,d,e,f,g,e,h,i,j) يوضح ان قدرة الايقاف تزداد مع الطاقة حتى تصل اعظم قيمة لقدرة الايقاف عند الطاقة (6-8) MeV ثم تبدأ بالنقصان كلما تزداد الطاقة .

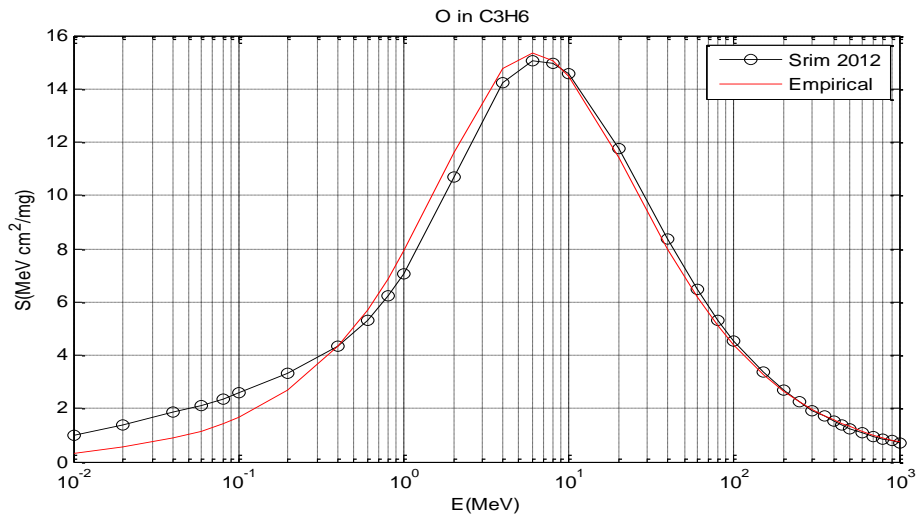
ويكون الايقاف النووي هو السائد ضمن مدى الطاقة (0.01-0.4)MeV وتأثير التهيج والتأين يكون ضمن مدى الطاقة (0.4-100)MeV وضمن مدى الطاقة (100-1000)MeV يكون الايقاف الالكتروني هو السائد .

ومن خلال الشكل (1a,b,c,d,e,f,g,e,h,i,j) تم ملاحظة ان النتائج المحسوبة باستعمال الشبه التجريبية المقترحة تتطابق بشكل جيد مع نتائج برنامج الـ SRIM 2012 وكان معامل الارتباط هو (0.994186-0.997944) وكذلك نسبة الخطأ كانت (0.247482-0.457659) كما مبين في الجدول (2) .

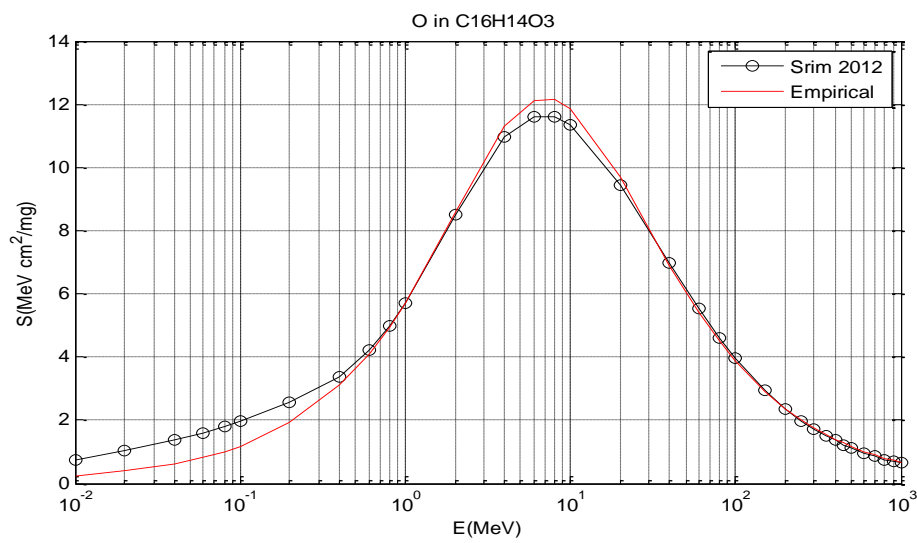
جدول (2) يبين الكثافة الكتلية ومعدل جهد التأين والنسبة $(\frac{Z_2}{A_2})$ ومعامل الارتباط ونسبة الخطأ لأيونات الاوكسجين في المركبات العشرة .

ت	الصيغة المركب	الكثافة الكتلية $g/cm^3 \rho$	معدل جهد التأين $\langle I \rangle$ eV	النسبة $(\frac{Z_2}{A_2})$	معامل الارتباط	نسبة الخطأ
1	C ₃ H ₆ Polypropylene	0.9	56.5429	0.5714	0.995579	0.457659
2	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	1.2	73.171	0.5276	0.996985	0.299227
3	C ₁₀ H ₈ O ₄ Mylar	1.4	78.6116	0.5208	0.997386	0.263478
4	C ₂ H ₄ O Polyvinylalcohol	1.3	69.53	0.5455	0.997825	0.27109
5	CH ₂ O Polyoxymethylene	1.425	77.1016	0.5333	0.997853	0.247482
6	C ₃ H ₃ N Polyacrylonitrile,	1.17	72.006	0.5283	0.996475	0.327016
7	C ₆ H ₉ NO Polyvinylpyrrolidone	1.25	68.75	0.5405	0.997171	0.308323
8	C ₄ H ₆ O ₂ Polyvinylacetate	1.19	73.57	0.5349	0.997944	0.249786
9	C ₂₂ H ₁₀ N ₂ O ₅ Kapton	1.42	80.368	0.5131	0.994186	0.38163
10	C ₄₄ H ₃₆ O ₆ Bakelite	1.4	72.5149	0.5273	0.995515	0.36661

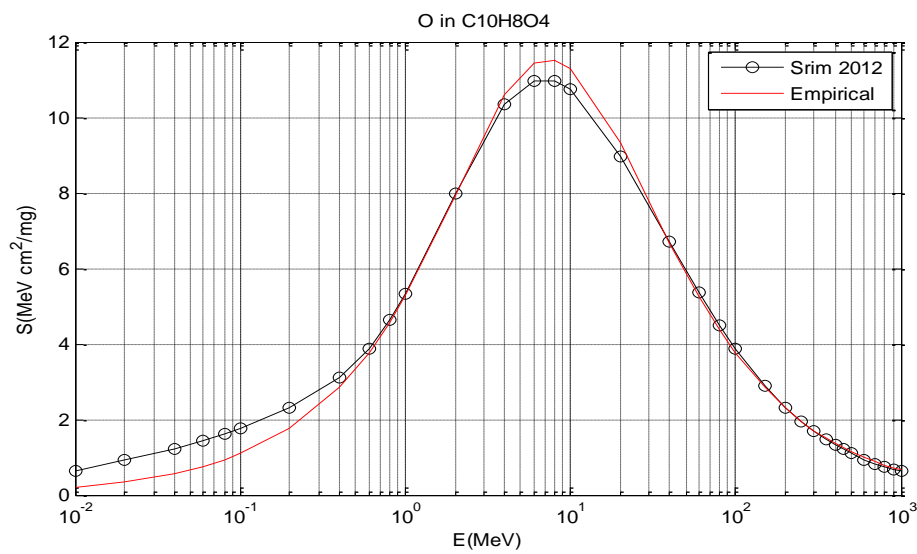
جدول (2)



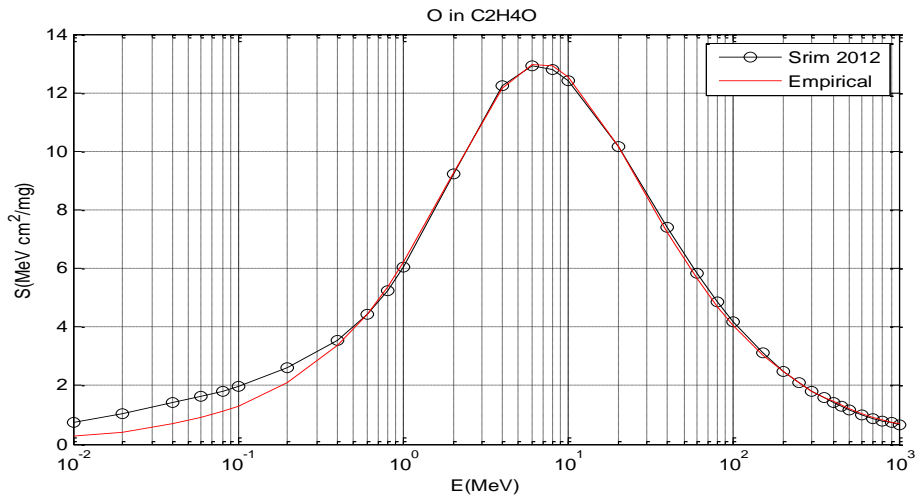
a



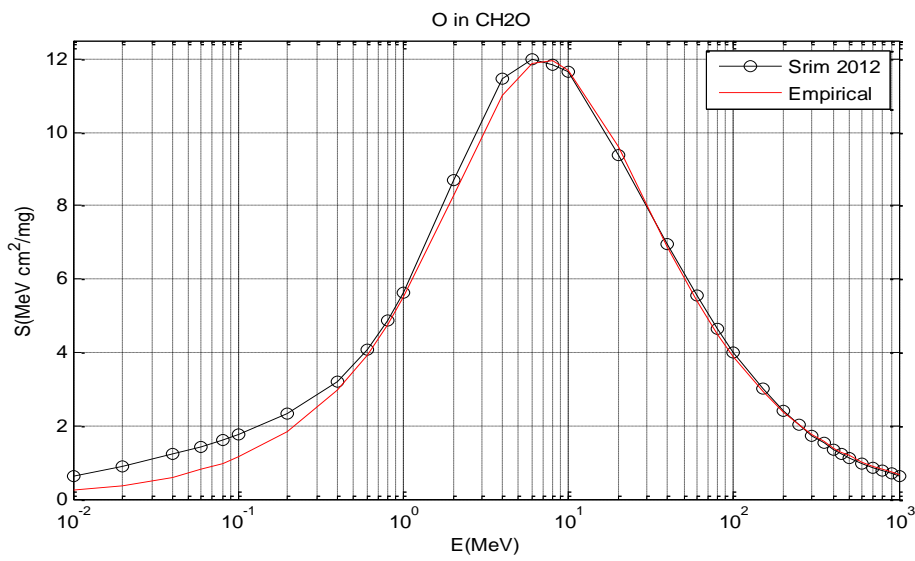
b



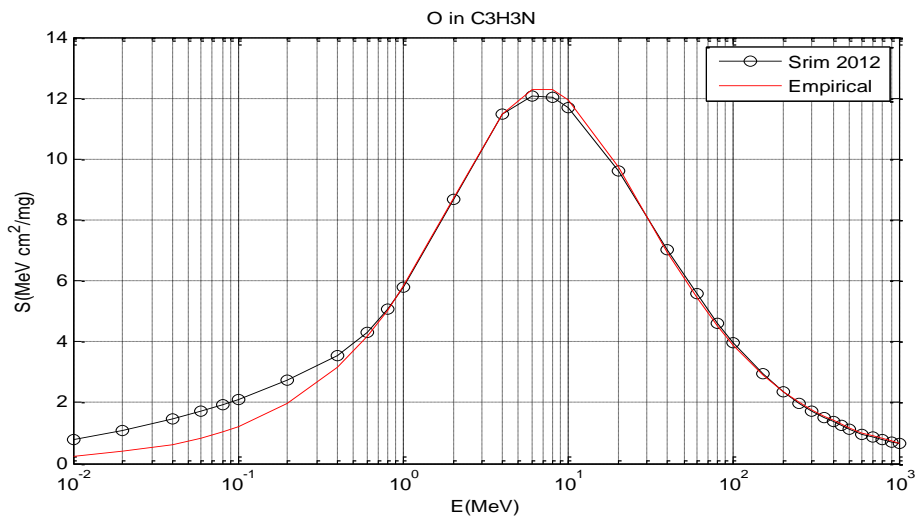
c



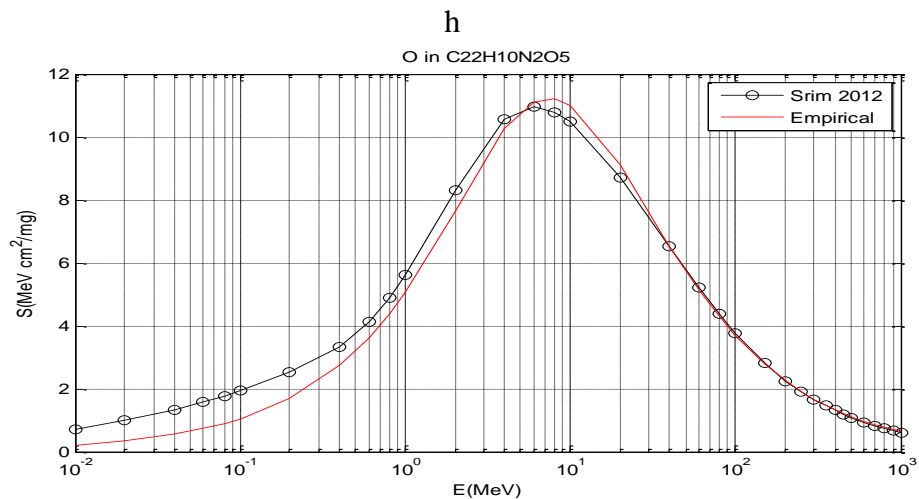
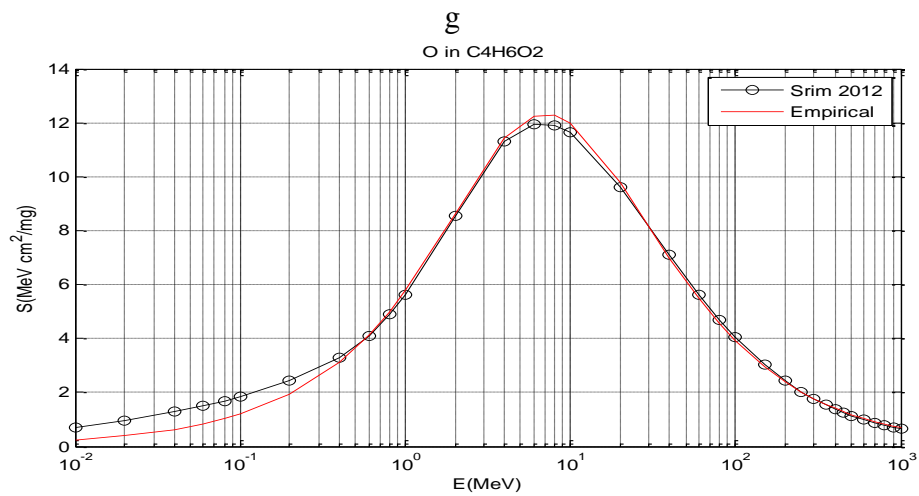
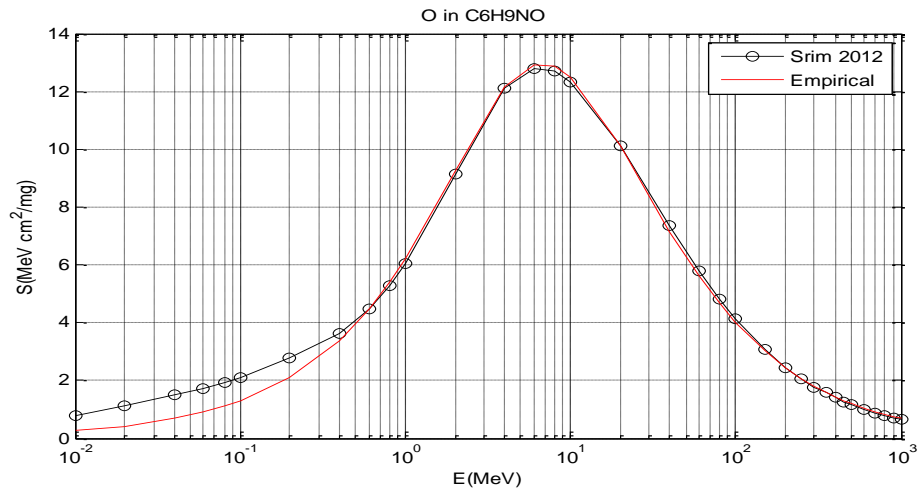
d

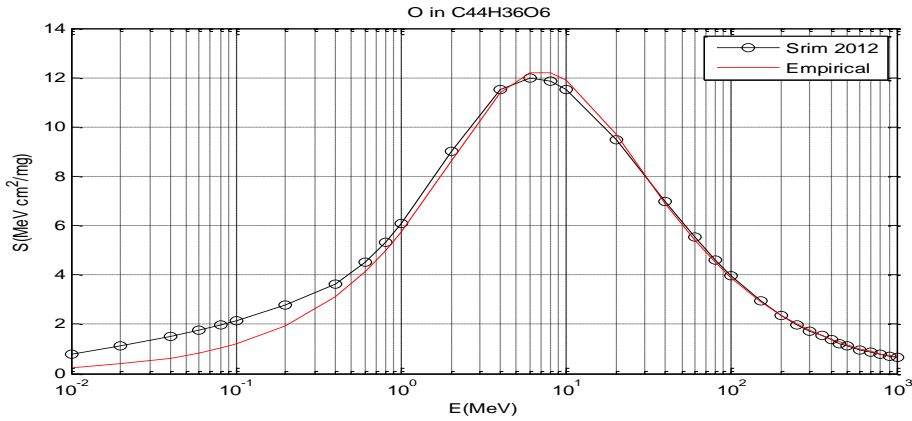


e



f





شكل (2) يوضح العلاقة بين قدرة الإيقاف الالكترونية لأيونات الاوكسجين المارة خلال الأهداف (C_3H_6), ($C_{16}H_{14}O_3$), ($C_{10}H_8O_4$), (C_2H_4O), (C_2H_2O), (C_3H_3N), (C_6H_9NO), ($C_4H_6O_2$), ($C_{22}H_{10}N_2O_5$), ($C_{44}H_{36}O_6$) على التوالي.

الاستنتاجات:-

من خلال دراستنا لقدرة الإيقاف الالكترونية للجسيمات المشحونة الثقيلة (أيونات الكربون والاكسجين) في أوساط ذرية مختلفة والمتمثلة بمركبات عضوية يمكن أن نستنتج ان العلاقات (14,18) الشبه تجريبية التي تم استنباطها من خلال البحث ابدت توافقاً جيداً مع نتائج الـ SRIM 2012 ولمدى كبير من الطاقات (0.01-1000) MeV وبالتالي فهي مفيدة في دراسة قدرة الإيقاف الالكترونية للفدائف في المركبات التي تم دراستها في هذا البحث .

References:-

- [1] A . Aziz Al Rubyi , " Increase the range of stopping power of energies ($1 < E(\text{MeV/u}) \leq 0.1$) ", M. SC. Thesis , Al - Mustansiriyah University, (1999).
- [2] J. E. Turner, "Interaction of ionizing radiation with matter ", Health Physics, Vol. 86, No.3, p.p. (228-252) , (2004) .
- [3] P. Sigmund , " Low-speed limit of Bohr's stopping–power formula " , Phys. Rev A , Vol.54 , No.4 , p.p. (3113-3118) , (1996).
- [4] A. Schinner and P. Sigmund , " Polarization effect in stopping of swift partially screened heavy ions: Perturbative theory " , Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, Vol. 164, No.165, p.p. (220-229) , (2000) .
- [5] P. Sigmund , "Charge - dependent electronic stopping of swift nonrelativistic heavy ions", Phys. Rev. A , Vol. 56 , No. 5, p.p. (3781-3792) , (1997).
- [6] R. Lozeva , "A new developed calorimeter telescope for identification of relativistic heavy ion reaction channels", Ph. D. thesis , Sofia University ,(2005) .
- [7] A. K. Chaubey and H. V. Gupta, " New empirical relations for stopping power and range of charged particles " , revue de physique appliquée , Vol. 12, p.p. (321-329) , (1977) .
- [8] H.H. Andersen and J.F. Ziegler, " The Stopping and Ranges of Ions in Matter " , Vol. 2 , Pergamon Press, New York (1977).
- [9] D. E. Groom, N. V. Mokhov, and S. Striganov , " Muon Stopping Power and Range Tables 10 MeV-100 TeV " , Atomic Data and Nuclear Data Tables, Vol. 76, No. 2, p.p. (1-37), (2001).
- [10] J. E. Turner , "Atoms, radiation, and radiation protection " , physics textbook , John Wiley & Sons , (2008) .