

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد

اثر پرتوهای کم انرژی بر ساختارهای نانو

میلااد جوانی

استاد راهنما

دکتر مسلم سوهانی

بهمن ۱۳۹۴

تقدیم بہ

پدر و مادر عزیز تر از جانم

سپاس گزاری...

سپاس مخصوص خداوند مهربان که به انسان توانایی و دانایی بخشید تا به بندگانش شفقت ورزد، مهربانی کند و در حل مشکلاتشان یاری شان نماید.

از راحت خویش بگذرد و آسایش هم نوحان را مقدم دارد، با او معامله کند و در این خلوص انباز نکیرد و خوش باشد که پروردگار سمیع و بصیر است.

خدای رابستی ساکرم که از روی کرم، پدر و مادری خداکار نصیبیم ساخته تا در سایه درخت پربار وجودشان بیسایم و از ریشه آنها شاخ و برگ

گیریم و از سایه وجودشان در راه کسب علم و دانش تلاش نمایم. والدینی که بودندشان تاج افتخاری است بر سرم و نشان دلیلی است بر بودنم،

چرا که این دو وجود، پس از پروردگار، یار هستی ام بوده اند دستم را گرفتند و راه رفتن را در این وادی زندگی پر از فراز و نشیب آموختند. خواهرانم،

همراهان همیشگی و پشتوانه های زندگیم و آموزگارانی که برایم زندگی، بودن و انسان بودن را معنا کردند.

باتقدیر و شکر شایسته از استاد فریخته و فرزانه جناب آقای دکتر مسلم سوهانی که با نکته های دلاویز و گفته های بلند، صحیفه های سخن را علم پرور

نمود و همواره راهنما و راه گشای مجارنده در اتمام و اكمال پیمان نامه بوده است.

میلا د جوانی

بهمن ۱۳۹۴

چکیده

از کاربردهای پرتوی ذرات، می‌توان استفاده از آنها در صنعت، پزشکی و کشاورزی نام برد. قصد ما در این پایان‌نامه مطالعه و بررسی اثر تابش این پرتوها در انرژی‌های پایین بر روی ساختارهای نانو است. اما از این لحاظ که این موضوع یک موضوع تقریباً جدید در سطح دانشگاه‌های کشور است، بنابراین لازم است که ابتدا این مطالعات بر روی ساختار مواد که شکل طبیعی خود را دارند انجام گیرد. از طرفی گام نخست در این بررسی، محاسبه‌ی مقدار انرژی آزاد شده از برخورد پرتوها بر روی سطح ماده است. با آگاهی از این انرژی می‌توانیم تغییرات به وجود آمده در ساختار و خواص مکانیکی و فیزیکی مواد را پیش‌بینی کنیم. همچنین می‌توانیم از این انرژی برای رشد ساختارهای جدید مانند بلورهای نانو در سطح ماده استفاده کنیم. در این بررسی از کد شبیه‌سازی Geant4 که یک کد مونتِ کارلو است، برای شبیه‌سازی سیستم آزمایشی و محاسبه‌ی مقدار دُز جذب شده استفاده شده است.

کلمات کلیدی: اثر تابش، کد Geant4، شبیه‌سازی، دُز جذبی

فهرست مقالات مستخرج

جوانی، میلاد و سوهانی، مسلم؛ استفاده از کد Geant4 برای برآورد دوز جذب شده در پرتودهی با الکترون و پروتون کم انرژی به اهداف کربن، مس و سیلیسیوم؛ اولین کنفرانس بین‌المللی علوم فیزیک و ریاضی؛ ایران؛ ۱۳۹۴

فهرست مطالب

صفحه	عنوان	
ج.....	چکیده.....	
۱.....	مقدمه.....	۱ فصل اول:
۲.....	تاریخچه.....	۱-۱
۴.....	تفاوت بین ذرات باردار سبک و سنگین.....	۲-۱
۵.....	اهداف کلی توسعه‌ی کاربرد پر توها.....	۳-۱
۵.....	اهداف و نتایج این پایان نامه.....	۴-۱
۷.....	توقف یون‌ها در مواد.....	۲ فصل دوم:
۸.....	مقدمه.....	۱-۲
۸.....	نقص دینامیکی ناشی از تابش.....	۲-۲
۱۰.....	طراحی (مهندسی) نانو ساختارها توسط پرتو یون‌ها.....	۳-۲
۱۰.....	اثر تابش بر نانو مواد.....	۴-۲
۱۲.....	توقف و برد یون‌ها در ماده.....	۵-۲
۱۵.....	کاهش انرژی از طریق هسته‌ای.....	۱-۵-۲
۱۹.....	کاهش انرژی از طریق الکترونی.....	۲-۵-۲
۲۳.....	نظریه‌ی برد.....	۳-۵-۲
۲۵.....	اثرات تابش بر ساختار مواد.....	۳ فصل سوم:
۲۶.....	مقدمه.....	۱-۳
۲۷.....	مفاهیم اساسی.....	۲-۳
۲۷.....	تولید نقص‌های منفرد.....	۱-۲-۳
۳۱.....	حرکت و جابه‌جایی نقص‌ها.....	۲-۲-۳

۳۳.....	تحول میکروساختاری در طول تابش‌دهی	۳-۲-۳
۳۴.....	تغییر ابعاد ناشی از تابش‌دهی	۴-۲-۳
۳۶.....	رفتار مکانیکی	۵-۲-۳
۳۷.....	پیشرفت‌ها و دستاوردها	۳-۳
۳۸.....	بررسی آسیب تابشی	۴-۳
۴۳.....	میکروسکوپ یونی	۱-۴-۳
۴۴.....	میکروسکوپ الکترونی	۲-۴-۳
۴۵.....	مطالعه‌ی زنجیره‌ها در غیر فلزات	۳-۴-۳
۴۶.....	تابش‌ها با دُز بالا	۴-۴-۳
۴۷.....	شبیه‌سازی و انواع آن	۴ فصل چهارم:
۴۸.....	مقدمه	۱-۴
۴۸.....	تعریف شبیه‌سازی	۱-۱-۴
۴۹.....	موارد استفاده از شبیه‌سازی	۲-۴
۵۰.....	دلایل استفاده از شبیه‌سازی	۱-۲-۴
۵۰.....	مراحل شبیه‌سازی	۳-۴
۵۲.....	انواع شبیه‌سازی	۴-۴
۵۳.....	روش مونت کارلو	۱-۴-۴
۵۶.....	روش دینامیک مولکولی	۲-۴-۴
۵۹.....	کد شبیه‌سازی <i>Geant4</i>	۵ فصل پنجم:
۶۱.....	مقدمه	۱-۵
۶۱.....	کاربردهای کد <i>Geant4</i>	۲-۵
۶۲.....	کاربرد در زمینه پزشکی	۱-۲-۵
۶۲.....	کاربرد در تشعشعات فضایی	۲-۲-۵

کاربرد <i>Geant4</i> در فیزیک ذرات انرژی بالا	۳-۲-۵	۶۳
محاسبه و نتایج شبیه‌سازی‌های دز جذبی	فصل ششم:	۶۵
شبیه‌سازی هندسه، چشمه و محاسبه‌ی دُز جذب شده برای پرتوهای الکترون و پروتون	۱-۶	۶۶
شبیه‌سازی و محاسبه‌ی دُز جذب شده برای پرتوی گاما	۲-۶	۷۵
نتیجه‌گیری و پیشنهادات	فصل هفتم:	۸۳
نتیجه‌گیری	۱-۷	۸۴
پیشنهادات	۲-۷	۸۴
منابع		۸۶

فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱: تصویر دست همسر رونتگن در سال ۱۸۹۶.....	۳
شکل ۱-۲: توان توقف هسته‌ای و الکترونی SiO_2 برای یون‌های طلا که از نرم‌افزار SRIM به دست آمده است [۲۰]. توان توقف انرژی از دست‌رفته یون بر واحد طول مسیر است. توجه داشته باشید که محور X لگاریتمی است.	۱۳
شکل ۲-۲: پراکندگی یون از اتم ایستا در چارچوب آزمایشگاه [۱۸].	۱۵
شکل ۳-۲: تصویری از توده‌ی گرمایی و زنجیره‌ی برخورد خطی در طول تابش یون به یک جامد. دایره‌های قرمز، آبی، سبز و زرد به ترتیب اولین، دومین، سومین و چهارمین اتم‌های پس‌زده شده هستند. دایره‌های ارغوانی تصویری از توده‌ی حرارتی است، و درجایی که زنجیره چگال‌تر و برخوردهای چندگانه در حجمی کوچک اتفاق می‌افتند، تشکیل می‌شود. خارج از توده‌ی حرارتی، اتم‌ها در خط‌های مستقیم بین برخوردها حرکت می‌کنند. تصویر از [۲۷].	۱۸
شکل ۴-۲: ناحیه‌ی توان توقف الکترونی. توان توقف الکترونی برای یون‌های کند ($> 200 keV$) متناسب است با سرعت یون‌ها درحالی‌که برای یون‌های سریع ($< 1 MeV$) توان توقف الکترونی با افزایش انرژی جنبشی کاهش می‌یابد [۱۸].	۲۱
شکل ۵-۲: نمودار قله‌ی براگ برای پرتوهای مختلف در بافت انسان. این نمودار دُز نسبی به عمق نفوذ ذره را نشان می‌دهد که به ۱۰۰٪ نرمال شده است [۳۱].	۲۲
شکل ۱-۳: مثالی مفهومی از اتفاق‌های رخ داده در طول برخورد یک نوترون با شبکه‌ی فلزی [۳۲].	۲۸
شکل ۲-۳: نموداری از بهبود (کاهش) مقاومت الکتریکی در مس که از تابش‌دهی الکترون $1 MeV$ در دمای $4K$ و ترمیم همزمان نقص‌های منفرد که ناشی از افزایش دما است، به دست آمده است [۳۲].	۳۳
شکل ۳-۳: میکروساختار فولاد ضد زنگ ۳۱۶ که در دمای $580^\circ C$ توسط نوترون با دُز $1.9 * 10^{26} n/m^2$ تابش‌دهی شده است. شکل بالا مربوط به ماده با خلوص تجاری و شکل پایین مربوط به ماده با خلوص بسیار بالاست [۴۷].	۳۵
شکل ۴-۳: نمایی از زنجیره‌ی برخورد [۵۴].	۴۰
شکل ۵-۳: تصویری از دنباله‌های برخورد جابه‌جایی [۵۴].	۴۲

شکل ۳-۶: تصویری تجسمی از منطقه‌ی تهی، که با تک یون Mo^+ با انرژی $30 keV$ ایجاد شده است [۵۶،۵۷]. ۴۳

شکل ۳-۷: میکروگرافی از مناطق اختلالی ایجاد شده به وسیله‌ی یون Cu^+ با انرژی $100 keV$ در Cu_3Au ، تصویر برداری در بازتاب ابر شبکه‌ی $g = 100$ انجام شده است [۵۴]. ۴۵

شکل ۴-۱: نمودار فرایند محاسبات در یک شبیه‌سازی مونت کارلو [۷۲]. ۵۵

شکل ۵-۱: یک آشکارساز ذرات با انرژی بالا که به وسیله‌ی کد Geant4 شبیه‌سازی شده است [۸۱]. ۶۳

شکل ۶-۱: یک نمونه فایل ماکرو ایجاد شده در کد Geant4 که در آن مشخصات چشمه وارد می‌شود. ۶۸

شکل ۶-۲: (a) نمایی از هندسه‌ی سیستم تابش دهی. (b) چشمه و هدف از نمای بالایی - قطر شار تابشی $14 cm$ است. ۶۹

شکل ۶-۳: (a) نمایی از هدف و اتاقک خلاء شبیه‌سازی شده با کد (b) Geant4. نمایی از هدف پس از پرتو دهی (هر دو شکل از کد Geant4 استخراج شده است) ۷۰

شکل ۶-۴: Carbon(electron) دُز جذب شده در سطح برای هدف کربنی که با پرتوی الکترونی $200 keV$ پرتو دهی شده است و Carbon(proton) نیز دُز جذب شده در سطح که با پرتوی پروتونی $200 keV$ پرتو دهی شده است. ۷۲

شکل ۶-۵: copper(electron) دُز جذب شده در سطح برای هدف مسی که با پرتوی الکترونی $200 keV$ پرتو دهی شده است و copper(proton) نیز دُز جذب شده در سطح که با پرتوی پروتونی $200 keV$ پرتو دهی شده است. ۷۳

شکل ۶-۶: Silicon(electron) دُز جذب شده در سطح برای هدف سیلیکونی که با پرتوی الکترونی $200 keV$ پرتو دهی شده است و Silicon(proton) نیز دُز جذب شده در سطح که با پرتوی پروتونی $200 keV$ پرتو دهی شده است. ۷۴

شکل ۶-۷: هدف پرتو دهی شده با گامای $1 MeV$ ۷۶

شکل ۶-۸: مقدار دُز جذب شده در هدف‌های کربن، مس و سیلیکون در سطح از تابش پرتوی گامای $1 MeV$ ۷۷

شکل ۶-۹: حداکثر دُز جذب شده از تابش پرتوی الکترون، پروتون $200 keV$ و گامای $1 MeV$ همراه با خطای اندازه‌گیری در اهداف مورد نظر برای در سطح. توجه داشته باشید که دُز به صورت لگاریتمی رسم شده است و به دلیل اینکه خطای اندازه‌گیری از مرتبه‌ی $10^{-3} \mu Gy$ تا $10^{-6} \mu Gy$ است و بسیار کوچک است، بنابراین خطا به صورت نقطه‌ای در منطقه مورد نظر یافت می‌شود. ۷۹

شکل ۶-۱۰: مقدار دُز جذب شده برای هدف کربنی حاصل از پرتوهای الکترون و پروتون $200 keV$ و گاما $1 MeV$ به همراه خطای محاسبه شده در عمق‌های مختلف که X و Y آن در بازه‌ی ۲۵ قرار دارد. نمودار دُز به صورت لگاریتمی رسم شده است. ۸۰

شکل ۶-۱۱: مقدار دُز جذب شده برای هدف سیلیکونی حاصل از پرتوهای الکترون و پروتون $200 keV$ و گاما $1 MeV$ به

همراه خطای محاسبه شده در عمق‌های مختلف که X و γ آن در بازه‌ی ۲۵ قرار دارد. ۸۰.....

شکل ۶-۱۲: مقدار دُز جذب شده برای هدف مسی حاصل از پرتوهای الکترون و پروتون $200\ keV$ و گاما $1\ MeV$ به همراه

خطای محاسبه شده در عمق‌های مختلف که X و γ آن در بازه‌ی ۲۵ قرار دارد. ۸۱.....

۱ فصل اول:

مقدمه

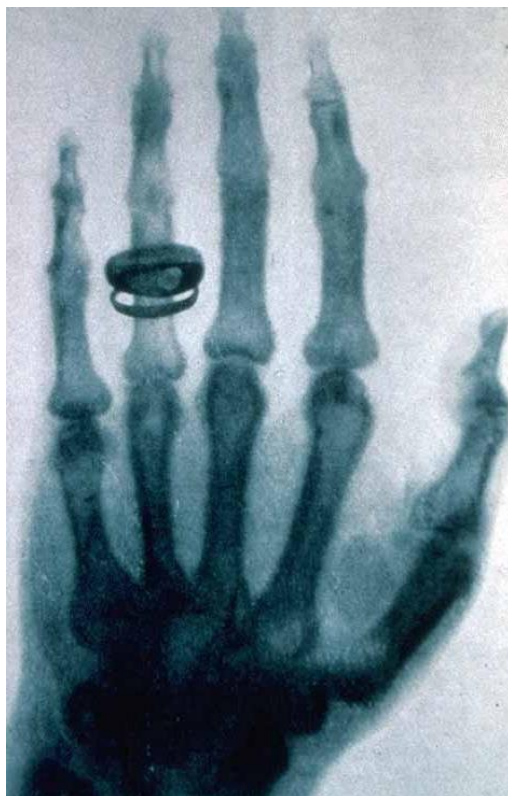
امروزه همه‌ی تکنولوژی‌های برتر از دانش هسته‌ای سود می‌برند و با دانش مهندسی هسته‌ای کاربرد پرتوها می‌توان ارزش افزوده محصولات صنعتی را با بهینه‌سازی تولید بالا برد و امکان دستیابی به دانش‌های جدیدی که غالباً از طریق شرکت‌های خارجی به کشور خدمات می‌رسانند فراهم ساخت و نیروهای تربیت شده می‌توانند جایگزین شرکت‌های خارجی در خدمات به صنایع کشور گردند.

۱-۱ تاریخچه

در واقع اولین کاربرد و استفاده از پرتوها در اواخر قرن نوزدهم میلادی زمانی که اشعه‌ی ایکس یا همان اشعه‌ی رونتگن توسط ویلهلم رونتگن^۱ (۱۸۴۵-۱۹۲۳) دانشمند بزرگ آلمانی در سال ۱۸۹۵ کشف شد، صورت گرفت. در نیمه‌ی صدی نوزدهم هاینریش گایسر کشف کرد که اگر لوله‌ای که فاقد هواست تحت ولتاژ بالا تخلیه‌ی الکتریکی شود نورهای زیبایی درون لوله تولید خواهد شد. مدتی پس از آن کروس اثبات کرد که علت درخشندگی ذرات الکتریکی است. پس از آن هاینریش هرتر نشان داد که این اشعه می‌تواند از لایه‌های نازک طلا و یا پلاتین عبور کند. پس از آن بود که رونتگن با انجام آزمایشات فراوان متوجه شد که بلورهای نزدیک لوله می‌درخشند. چون او می‌دانست اشعه‌ای که قبلاً کشف شد (اشعه‌ی کاتدی) از شیشه عبور نمی‌کند تا چنین اثری داشته باشد بنابراین گمان برد باید نوع دیگری از اشعه وجود داشته باشد. چون این اشعه‌ی نامرئی که از نور و اشعه‌ی دیگر بسیار تفاوت داشت و قابل تشریح نبود، آن را اشعه‌ی ایکس (به معنی اشعه‌ی مجهول) نامید.

اولین عکس پرتو ایکس از دست همسر رونتگن گرفته شد که انگشتر او به خوبی در عکس مشخص است (شکل ۱-۱).

^۱ Wilhelm Röntgen



شکل ۱-۱: تصویر دست همسر رونتگن در سال ۱۸۹۶.

پرتوی ذرات یکی از موفق‌ترین ابزار آزمایشگاهی برای کاوش در ساختار ماده است. از کاربردهای این ابزار می‌توان استفاده از آن در زمینه‌های پزشکی، کشاورزی، صنعت و غیره نام برد. در واقع، آزمایشات اولیه در برخورد ذرات باردار آلفا به ورقه‌ی نازک طلا، آزمایش مشهور گایگر-مارسدن^۱ بود [۱]، که به ساخت مدل رادرفورد^۲ از اتم در سال ۱۹۱۱ کمک کرده است [۲] و توسط نیلز بور^۳ در سال ۱۹۱۳ بهبود یافت [۳]. امروز، صد سال پس از پیشرفت غیر منتظره‌ی این توصیف از ساختار اتم، فیزیکدانان در مرکز تحقیقاتی سرن^۴ با استفاده از برخورد پرتوی ذرات به کاوش در اینکه جهان از چه ساخته شده و چگونه کار می‌کند، می‌پردازند. در این صد سال بعد از گذشت آزمایش گایگر-مارسدن، فناوری پرتو یون پیشرفت زیادی داشته است و نقش بزرگی در بخش توسعه‌ی کامپیوترهای مدرن ایفا

^۱ Geiger-Marsden

^۲ Rutherford

^۳ Niels Bohr

^۴ Cern

کرده است.

همان‌طور که بور شناخت بهتری برای پیشرفت مدلی برپایه‌ی فیزیک کوانتومی از اتم‌ها را به وجود آورد، وی وسیله‌ساز پیشرفت نظری در چگونگی برخورد ذرات باردار با ماده [۴-۶] و یا نظریه‌ی توقف (که ما امروز می‌نامیم) نیز بود. از آن پس ب^۱، فرمی^۲، لیندهارد^۳ و دیگران مدل‌های توصیفی از اتلاف انرژی یون را پیشنهاد دادند. مدل‌های محاسباتی، مانند تقریب دودویی برخورد و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ابزارهای ضروری ثابت شده‌ای در مطالعه‌ی برهم‌کنش‌های بین یون و جامد هستند. مثل برهم‌کنش یون با ماده، درک این فرآیند برای استفاده کنترل شده از پرتوی یون در فرآیندهای تکنولوژیک بسیار لازم است.

۱-۲ تفاوت بین ذرات باردار سبک و سنگین

آیا برهم‌کنش تمام ذرات باردار مشابه است؟ جواب این سؤال هم بله و هم خیر است. بله، زیرا طبیعت برخورد تمام ذرات باردار در این محدوده از انرژی ذاتاً مشابه است (برخورد غیرالاستیک). خیر، زیرا ظاهر برهم‌کنش‌ها در ذرات سبک‌تر (باجرم در حد یک الکترون، مثل e^- و e^+) و ذرات سنگین‌تر (با جرم مساوی یا بیشتر از یک پروتون، مثل p و α) کاملاً متفاوت است. ذرات سبک در برخورد غیرالاستیک با الکترون‌های اتم هدف، علاوه بر ازدست دادن انرژی با زاویه‌ی بزرگتری نسبت به ذرات سنگین، منحرف می‌شوند؛ که سبب اختلاف در برد دو ذره می‌شود. مسیر ذرات سنگین تقریباً خط مستقیم ولی ذرات سبک خطوط شکسته (زیگزاگ) است. هرگاه یک ذره‌ی سبک با زاویه‌ی بزرگ منحرف شود انرژی انتقالی به الکترون اتم هدف نیز بسیار بزرگ است. در نتیجه، الکترون‌های جدا شده از هدف با جذب این انرژی، مشابه ذره‌ی باردار پراانرژی رفتار می‌کند، یعنی خودش در ماده‌ی هدف،

^۱ Bethe

^۲ Fermi

^۳ Lindhard

مسیری را طی می‌کند. مسیرهای تولیدی ناشی از الکترون‌های پرنرژی ثانویه را پرتوی δ می‌نامند. در مورد پروتون و دیگر ذرات سنگین این نوع انتقال انرژی به‌ندرت اتفاق می‌افتد [۷].

۳-۱ اهداف کلی توسعه‌ی کاربرد پرتوها

عبارات انرژی هسته‌ای و فناوری هسته‌ای اولین چیزی را که به ذهن عامه جامعه متبادر می‌سازد، نیروگاه و برق هسته‌ای می‌باشد، اما دامنه‌ی کاربرد این فناوری بسیار فراتر بوده و به عنوان ابزاری منحصربفرد در زمینه‌های تحقیقاتی و کاربردی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

حیطه‌ی کاربرد این فناوری طیف وسیعی از فعالیت‌ها را در زمینه‌های پزشکی، صنعتی، کشاورزی، محیط زیست و مدیریت منابع آب و خاک و پژوهش‌های بنیادی شامل می‌شود. امروزه کاربرد این فناوری به ویژه در زمینه‌ی پزشکی تا حدودی جایگاه خود را در جامعه نمایان ساخته است.

- تولید و توسعه رادیوداروها و کیت‌های رادیودارویی و رادیوایزوتوپ‌های صنعتی

- ارائه‌ی خدمات تخصصی و کاربردی در زمینه‌ی کاربرد پرتوها از قبیل خدمات پرتودهی،

آنالیز و تامین چشمه‌های مورد نیاز

- طراحی، ساخت و توسعه سامانه‌های پرتودهی و کاربرد آن‌ها

- طراحی، ساخت و توسعه شتاب‌دهنده‌ها با تمرکز بر کاربرد پزشکی

۴-۱ اهداف و نتایج این پایان‌نامه

در ادامه قصد داریم با استفاده از شبیه‌سازی، انرژی آزاد شده روی سطوح اهداف کربنی، مسی و سیلیکونی از تابش پرتوهای کم انرژی (200 keV) الکترونی و پروتونی را بررسی کنیم. شبیه‌سازی با استفاده از کد Geant4 صورت گرفته است که یک کد شبیه‌سازی مبتنی بر روش مونت کارلو است.

در فصل دوم با مفهوم توقف یونها در مواد آشنا می‌شویم، سپس در فصل سوم تأثیر تابش بر ساختار مواد بررسی می‌شود. در فصل چهارم به بررسی مختصر در مورد شبیه‌سازی و انواع آن می‌پردازیم، در فصل پنجم نیز به معرفی کوتاهی از کد شبیه‌سازی Geant4 اشاره می‌کنیم، و در فصل آخر به بررسی نتایج شبیه‌سازی، محاسبه و مقادیر دُز جذب شده در سطوح مواد مختلف و مقایسه‌ی آن‌ها با یکدیگر می‌پردازیم. در نهایت، در فصل هفتم نتایج و پیشنهادات را بیان می‌کنیم.

توقف یون مادر مواد

یکی از کاربردهای مهم پرتوهای یونی، استفاده از آنها در تجزیه و تحلیل مواد است. این کاربردها همگی به برهم‌کنش پایه بین یون پراثرژی و الکترون‌ها و هسته‌های اتم‌های ماده هدف وابسته است. برهم‌کنش یون‌های پراثرژی با مواد از طریق برخورد با اتم‌های تشکیل‌دهنده‌ی ماده‌ی هدف است. این برخوردها، انرژی و تکانه را از ذرات پرتابی که یون‌های متحرکند، به ذرات هدف (الکترون‌ها و هسته‌های اتمی) انتقال می‌دهند. هر برخورد منجر به کاهش انرژی ذره‌ی پرتابی و همچنین انحراف از مسیر که در اثر پراکندگی است، می‌شود. در نتیجه این فرایند باعث انتقال انرژی به ماده‌ی هدف می‌شود. توقف یون‌ها در مواد به علت کاهش انرژی (از دست دادن انرژی در نتیجه‌ی پراکندگی الکترون‌ها و هسته‌های درون ماده) است. وقتی یک یون به یک جامد نفوذ می‌کند، تعداد زیادی برخورد را تجربه می‌کند. ذرات باردار با الکترون‌ها و اتم‌های داخل مواد برهم‌کنش (کولنی و یا هسته‌ای) انجام می‌دهند. انتقال انرژی جنبشی به اتم‌ها می‌تواند باعث جابه‌جایی آنها از مکان اصلی‌شان در ساختار کریستالی ماده شود. بدین طریق ساختار کریستالی دچار نقص می‌شود. انتقال انرژی به الکترون‌های هدف (چه مقید و چه آزاد) تولید زوج الکترون-حفره می‌کند. این امر می‌تواند باعث باردار شدنِ نقص‌های کریستالی از قبل موجود در ماده، برانگیختگی اتمی، گسستگی زنجیره‌ی پیوندهای کووالانسی و یونی، افزایش انرژی آزاد، تغییرات در دینامیک انتقال فاز و همچنین شکل‌گیری نقص‌های کریستالی جدید در مقیاس اتمی باشد. چنین برخوردهای اتمی و یونش‌هایی می‌تواند رفتار فیزیکی و شیمیایی نانو مواد را تغییر دهند [۸،۹].

۲-۲ نقص دینامیکی ناشی از تابش

از آنجا که انتقال انرژی از یک یون به هسته‌ی یک اتم در یک برخورد واحد اغلب چند بار

بزرگ‌تر از انرژی بستگی اتم به ساختار شبکه‌ای ماده است، اتم می‌تواند از مکان خود در ساختار ماده جابه‌جا شود. علاوه بر این، اتم‌های جابه‌جا شده به وسیله‌ی برخورد یون‌ها ممکن است انرژی بسیار زیادی دریافت کنند. این اتم‌ها می‌توانند به نوبه‌ی خود اتم‌های دیگر را جابه‌جا کنند و آبشاری (زنجیره‌ای) از برخوردهای اتمی را ایجاد کنند. در نهایت، تعداد زیادی از اتم‌های درون ماده می‌توانند حرکت کنند. این جابه‌جایی‌ها می‌تواند منجر به ایجاد تهی‌جاها، اتم‌های میان‌بافتی، اختلال لایه‌ها در اثر برهم‌کنش با لایه‌ی مجاور، یا اختلال شبکه در اطراف مسیر یون و غیره شود. در مواد بلورین، همچنان که تعداد برخوردهای یونی افزایش می‌یابد، مناطق منفرد بی‌نظمی (مناطق که به صورت جداگانه بی‌نظم شده‌اند) می‌توانند شروع به تداخل کنند. در برخی مناطق، یک لایه‌ی به شدت آسیب دیده تشکیل می‌شود. مجموع تعداد و انواع بی‌نظمی‌ها همچنین توزیع آن‌ها در عمق، به نوع یون، انرژی، دُز و ماده‌ی هدف بستگی دارد [۸].

از طرفی تابش بر ساختارهای نانو سبب ایجاد تغییر در خواص آن‌ها می‌شود که در این مورد توضیحاتی را بیان می‌کنیم. در ابتدا توضیح مختصری در مورد این مواد ارائه می‌کنیم. مواد نانو ساختار با ساختمان بلوکی در اندازه‌ی $1-100 \text{ nm}$ یک نوع جدید از مواد هستند که انقلابی در دهه‌ی گذشته به وجود آورده‌اند. از خواص این مواد می‌توان در مهندسی و طراحی دستگاه‌هایی در ابعاد محدود استفاده کرد (ذرات فلزی، سرامیکی و یا پلیمری در اندازه‌ی نانومتر). می‌توان خواص فیزیکی، الکترونیکی و نوری را صرفاً با تغییر اندازه‌ی ذرات به نانو، برای انواع برنامه‌های کاربردی، تغییر داد. با توجه به ساختار جالب نانو مواد و وابستگی استثنایی خواص آن‌ها به اندازه، نانو مواد برای تولید کاتالیست‌های جدید، سنسورهای غشائی، ساختارهای جدید الکترونیکی، مواد مغناطیسی جدید و کاربردهای زیست مادی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۸].

نقص ناشی از تابش در نانو مواد به دلیل اندازه‌ی محدود از چند نظر با نقص ایجاد شده در مواد

حجیم^۱ متفاوت است. برخلاف سیستم‌های حجیم، که در همه‌ی آن‌ها تمام انرژی در نهایت جذب می‌شود، ذرات پرنرژی ممکن است از نانو ساختارها عبور کنند و انرژی کمی از خود در ماده برجای گذارند. در نتیجه، میزان آسیب در نانو ساختارهای منفرد کم است. از طرفی، اندازه‌ی محدود نانو ساختارها ممکن است ساختار الکترونی و بنابراین مکانیسم تبدیل برانگیختگی‌های الکترونی به انرژی جنبشی اتم‌ها را تحت تأثیر قرار دهد [۱۰].

۲-۳ طراحی (مهندسی) نانو ساختارها توسط پرتو یون‌ها

در معرض تابش قرار دادن جامدات با ذرات پرنرژی باعث ایجاد بی‌نظمی در ماده می‌شود. مطالعات اخیر روی تابش یون‌ها نشان می‌دهد که یون‌های پرنرژی می‌توانند نقش بسیار مهمی در مهندسی نانو ایفا کنند. در این مورد می‌توان به اثرات مفید تابش بر مهندسی مواد نانو ساختار کربنی اشاره کرد. ساختار اتمی لوله‌های کربنی یا ساختارهای وابسته می‌تواند با تابش مناسب [۹،۱۰]، و در یک مسیر کنترل‌شده به هم پیوندند [۱۱]. تابش می‌تواند فشار داخل نانو لوله‌ها را به شدت افزایش دهد (منظور از فشار، فشردگی شدن لایه‌های کربن است) [۱۲]. علاوه بر این، تابش می‌تواند در به هم پیوند دادن خواص مکانیکی، الکتریکی و مغناطیسی نانو کربن مورد استفاده قرار گیرد. مهندسی نانو ساختار با پرتوهای یون پرنرژی نیز شامل الگودهی و یا مرتب‌سازی خواص مغناطیسی فیلم‌های نازک فرومغناطیس [۱۳،۱۴] و ساخت نانو نقطه‌ها توسط تک یون‌ها نیز می‌شود [۱۵].

۲-۴ اثر تابش بر نانو مواد

درک تأثیرات تابش در نانو مواد یک موضوع چالش برانگیز است، چرا که ممکن است کلیدی برای باز کردن طراحی مواد جدید برای سیستم‌های مهندسی انرژی هسته‌ای را در خود داشته باشد. با افزایش تقاضا برای انرژی و رشد برنامه‌ی تولید انرژی هسته‌ای، نیاز به توسعه‌ی مواد مقاوم در برابر

^۱-Bulk materials

تابش افزایش خواهد یافت.

مواد نانو ساختار شامل طبقه‌ی گسترده‌ای از مواد در شکل فیلم‌های نازک، پوشش‌ها، پودرها، یا مواد حجیم می‌شوند. مواد معمولی دارای دانه‌هایی با اندازه‌ای از حدود چند میکرون تا چند میلی‌متر هستند. دانه‌های در حد نانو حاوی اتم‌های کمتری هستند. کاهش اندازه دانه‌ها (یعنی خرد کردن ماده به اندازه‌های کوچک‌تر)، باعث افزایش شدید نسبت سطح دانه‌ها به حجم آن‌ها می‌شود، که تأثیر عظیمی در خواص فیزیکی و شیمیایی مواد ایجاد می‌کند.

سیستم‌های متشکل از نانو کریستال‌ها یا نانو لوله‌های فلزی که خواص آن‌ها بهبود یافته است، و مقاومت بهتری در برابر تابش از خود نشان می‌دهند، به هر دو صورت تجربی و نظری گزارش شده‌اند. بهبود عملکرد تابش به دلیل ایجاد مرز دانه‌ها و فصل مشترک‌ها است که به عنوان چاهک‌های مؤثر برای باز ترکیب نقص‌ها عمل می‌کنند. برای مثال، کامپوزیت چندلایه‌ای Cu/Nb با لایه‌های داخلی نانو، مقاومت خوبی در برابر تغییر ساختار ناشی از تابش نشان می‌دهد [۱۶، ۱۷]. کامپوزیت نانو لایه‌ای Cu/Nb با لایه‌هایی به ضخامت ۲/۵ nm مقاومت بسیار بالایی در برابر آسیب تابشی از خود نشان داده است [۱۷].

درک اثرات تابش در سطح اتمی و در فصل مشترک‌های نزدیک سطح، که شامل مرز دانه‌ها و فصل مشترک‌های شبکه‌ی انباشت است، برای ساختن مواد هسته‌ای پیشرفته که می‌توانند در برابر تابش‌های شدید محیطی (مثلاً در راکتورها، شتاب‌دهنده‌ها، و پسماندهای ذخیره‌شده‌ی هسته‌ای در زیر زمین) دوام بیاورند، بسیار مهم است. تلاش‌های نظری و آزمایش‌های بیشتری برای روشن کردن مکانیسم آسیب در مواد نانو ساختار لازم است.

۵-۲ توقف و برد یون‌ها در ماده

توان توقف^۱ برای یک ذره، میانگین انرژی ازدست‌رفته بر واحد طول مسیر ذره است که به دلیل برهم‌کنش با اتم‌های ماده هدف صورت می‌گیرد و به‌صورت زیر تعریف می‌شود [۱۸]:

$$S = - \frac{dE}{dx} \quad ۱-۲$$

که در آن E انرژی جنبشی ذره و x مسافت طی شده در امتداد مسیر در ماده هدف است. با توجه به تعریف معادله (۱-۲)، می‌بینیم که S بیانگر یک نیرو است و نه یک توان (چرا که بعد آن نیرو است) [۱۹]. در واقع اصطلاح نیروی توقف^۲ در مواردی برای آن پیشنهاد شده است، اما اصطلاح توان توقف در این زمینه ریشه‌دار و به‌طور گسترده‌ای مورد قبول واقع شده است. اولاً، توان توقف یک هدف برای یک یون، وابسته به انرژی و عدد اتمی یون است، ثانیاً به چگالی و عدد اتمی عناصر هدف بستگی دارد.

کاهش انرژی از دیدگاه اتمی، در برهم‌کنش بین یون و اتم‌های هدف روی می‌دهد. مکانیسم‌های برهم‌کنش که یون از طریق آن‌ها می‌تواند انرژی ازدست دهد عبارتند از: (i) تحریک و یونش الکترون‌ها در هدف (کاهش انرژی از طریق الکترونی^۳) (ii) برخورد کشسان با هسته‌ی اتم‌های هدف (کاهش انرژی از طریق هسته‌ای^۴) (iii) انتشار انرژی تابشی (که ناشی از اثر تابش ترمزی^۵ و نیز اثر تابش چرنکوف^۶ است)، هستند. بنابراین S کل می‌تواند به سه قسمت مستقل تقسیم شود [۱۸].

^۱ Stopping power

^۲ Stopping force

^۳ Electronic energy loss

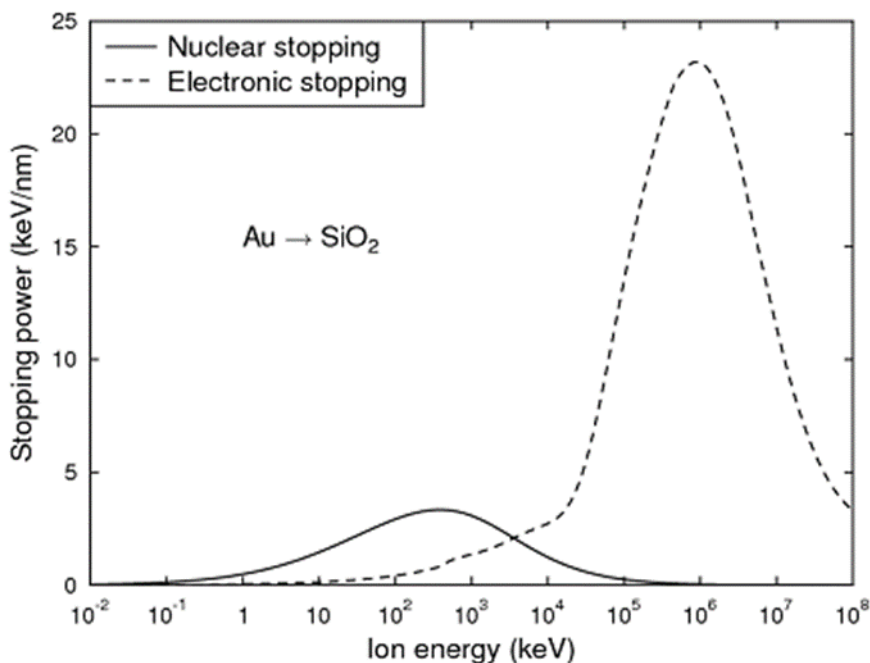
^۴ Nuclear energy loss

^۵ Bremsstrahlung emission

^۶ Cerenkov radiation

$$S_{tot} = S_{electronic} + S_{nuclear} + S_{radiative}$$

۲-۲



شکل ۱-۲: توان توقف هسته‌ای و الکترونی SiO_2 برای یون‌های طلا که از نرم‌افزار SRIM به دست آمده است [۲۰].
توان توقف انرژی از دست‌رفته یون بر واحد طول مسیر است. توجه داشته باشید که محور x لگاریتمی است.

در انرژی‌های معادل با سرعت‌های بسیار کمتر از سرعت نور، می‌توان از S_{rad} صرف نظر کرد. این امر کاهش انرژی از طریق الکترونی و هسته‌ای را برای ما باقی می‌گذارد، که در بخش‌های بعد با جزئیات بررسی خواهد شد. به‌عنوان مثال (شکل ۱-۲)، اتلاف انرژی الکترونی و هسته‌ای یون‌های طلا در دی‌اکسید سیلیکون را، برحسب انرژی یون طلا، نشان می‌دهد. به‌منظور توصیف نظری میانگین اتلاف انرژی، به درک میکروسکوپی از سطح مقطع واکنش (σ) نیازمند هستیم. اگر برای برخی واکنش‌ها، سطح مقطع برای انتقال انرژی T از پرتابه با انرژی اولیه E و $\sigma(E, T)$ را بدانیم، بنابراین میانگین انرژی انتقالی \bar{T} با رابطه‌ی (۳-۲) داده می‌شود [۱۸]:

$$\bar{T} = \frac{\int T \sigma dT}{\int \sigma dT} \quad ۳-۲$$

و مسافت آزاد میانگین بین پراکندگی‌ها،

$$\lambda = 1/\sigma N \quad ۴-۲$$

است، که در آن N چگالی حجم اتم‌های هدف است. حال از این دو معادله، \bar{T} و λ ، توان توقف به دست می‌آید [۱۸]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{\bar{T}}{\lambda} = \frac{\int T \sigma(E, T) dT}{\int \sigma(E, T) dT} \cdot N \int \sigma(E, T) dT = N \int T \sigma(E, T) dT \quad ۵-۲$$

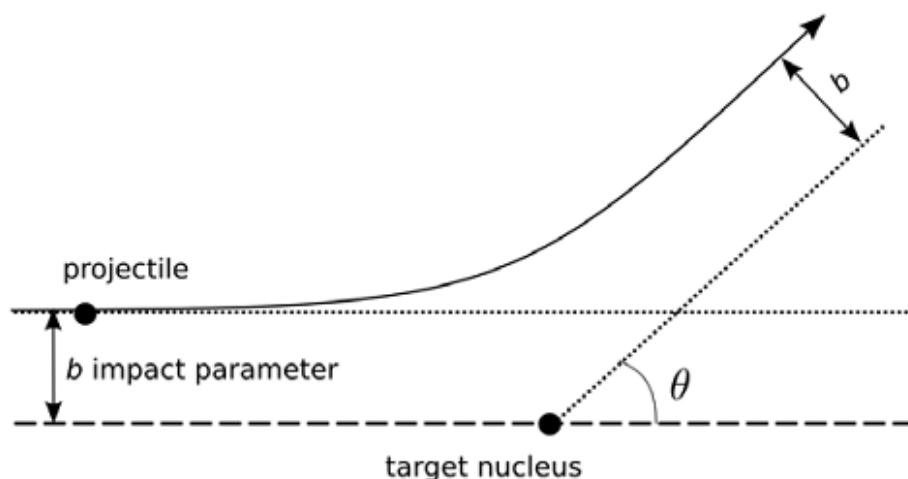
توان توقف در ارتباط نزدیکی با برد یون است. برد یون، طول مسیری از یون در هدف است تا زمانی که به حالت سکون برسد. کمیت مفیدتر، برد عمودی پرتابه به سطح هدف یا مقدار عمقی که یون‌ها به هدف نفوذ می‌کنند است. اگر توان توقف به‌عنوان یک تابع انرژی شناخته شود و فرض شود که انرژی به‌طور پیوسته کاهش پیدا می‌کند، می‌توان برد را محاسبه کرد.

آگاهی از توان‌های توقف و بردها هم در تحلیل انرژی پرتوی یونی و هم در تحلیل تغییر شکل مواد مهم است. می‌توانیم عمق نفوذ (یا برد پرتابه‌ها) از اتم‌های القا شده را اگر از میزان اتلاف انرژی آنی آگاه باشیم تخمین بزنیم. روش‌های تحلیل پرتوی یونی همچون اندازه‌گیری انرژی یون پس از پس‌پراکنی در طیف پس‌پراکنی رادرفورد و تصحیحات لازم برای اتلاف انرژی‌های متفاوت به طول مسیر داخل هدف وابسته هستند [۲۱]. دیگر کاربردی که می‌توان به آن اشاره کرد یون درمانی برای درمان سرطان است [۲۲]. درحالی که انرژی اشعه‌ی X به‌طور پیوسته در بافت‌ها آزاد می‌شود، می‌توان انرژی پرتوی یون را با بیشترین برد مورد نظر متناسب کرد، به گونه‌ای که بیشترین انرژی به عمق تومورهای سرطانی داده شود.

۲-۵-۱ کاهش انرژی از طریق هسته‌ای

چارچوب نظری توان توقف از توصیف ریاضی برخورد کلاسیک بین دو ذره‌ی باردار شروع می‌شود. در ادامه به پیدا کردن توضیحی برای سطح مقطع پراکندگی به‌عنوان یک تابع از انرژی برای پرتابه‌ی ورودی که می‌توان با استفاده از آن از طریق معادله‌ی (۲-۵) توان توقف را محاسبه کرد، خواهیم پرداخت. این مسئله در شکل (۲-۲) نمایش داده شده است.

به‌عنوان گام اول، قصد داریم انرژی منتقل شده از پرتابه به اتم را در یک برخورد پیدا کنیم. در



شکل ۲-۲: پراکندگی یون از اتم ایستا در چارچوب آزمایشگاه [۱۸].

یک برخورد کشسان بین یک یون با جرم m_1 و انرژی جنبشی E_0 و یک ذره‌ی ساکن به جرم m_2 انرژی و تکانه پایسته خواهد ماند. با انتقال مسئله به سیستم مرکز جرم (CM) و ارزیابی برهم‌کنش پراکندگی [۲۳، ۲۴] را ببینید، درمی‌یابیم که انرژی منتقل شده‌ی T از پرتابه به اتم به زاویه‌ی پراکندگی θ به شکل زیر وابسته است [۱۸]:

$$T = \frac{4E_0 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = T_{max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad ۶-۲$$

توجه کنید که این فرمول فقط در سرعت‌های غیر نسبیتی قابل قبول است. انتظار می‌رود بیشترین انتقال انرژی در برخورد رو در رو ($\theta = \pi$) و وقتی پرتابه و اتم جرم برابر دارند اتفاق افتد. این نتیجه برای هر برهم‌کنشی قابل قبول است، اما اگر پتانسیل $V(r)$ که یک پتانسیل کولنی است را متقارن کروی در نظر بگیریم، می‌توانیم انتگرال کلاسیک پراکندگی را به صورت زیر نوشت [۱۸]:

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \left[1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{b^2}{r^2}\right]}, \quad ۷-۲$$

که در آن b پارامتر برخورد، E_c انرژی مرکز جرم و r شعاع مرتبط با پرتابه به اتم است. معادلات (۶-۲) و (۷-۲) به ترتیب θ را به عنوان تابعی از T و b را به عنوان تابعی از θ به دست می‌دهند. حال می‌توان این روابط را در محاسبه‌ی سطح مقطع دیفرانسیلی بکار برد [۱۸]:

$$\sigma(E_i, T) = 2\pi b db = 2\pi b \frac{db}{d\theta} \frac{d\theta}{dT} \quad ۸-۲$$

$$\sigma(E_i) = \int \sigma(E_i, T) dT \quad ۹-۲$$

که توان توقف را از طریق معادله‌ی (۵-۲) به دست می‌دهد.

بزرگ‌ترین مشکل برای تعیین توان توقف پیدا کردن پتانسیل پس‌زنی $V(r)$ است. در انرژی‌های بالا و در شبکه‌های درون اتمی کوچک جدا از هم، $V(r)$ با برهم‌کنش پس‌زنی کولنی کاهش می‌یابد. در آزمایشات انجام گرفته در محدوده انرژی میانی (انرژی از 10 keV تا 10 MeV)، که بیشترین ناحیه انرژی استفاده شده برای بمباران‌های یونی است، ابر الکترونی قسمتی از بار مثبت هسته را در هنگام برخورد می‌پوشاند که سبب می‌شود ذره‌ی پرتابی این قسمت هسته را مشاهده نکند، در نتیجه پتانسیل کولنی در این ناحیه نیاز به اصلاح خواهد داشت. در مدل دیگر نیاز داریم یک

تابع حائل اختصاصی $\Phi(r)$ برای پتانسیل کولنی پیدا کنیم [۱۸]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad ۱۰-۲$$

که در آن a نشان دهنده‌ی طول حائل (دیواره) و اغلب به عدد اتمی Z وابسته است، و r/a شعاع کاهش یافته^۱ نامیده می‌شود. استفاده از شعاع کاهشی موجب می‌شود تابع $\Phi(r/a)$ در بیشتر پتانسیل‌های درون اتمی کلاسیک مستقل از Z_2 و Z_1 باشد.

یکی از بیشترین استفاده‌های تابع حائل برای مدل‌سازی برخوردهای اتمی توسط زیگلر^۲، لیتمارک^۳ و بیرساک^۴ پیشنهاد شده است [۲۴]. آن‌ها از محاسبات هارتری-فوک^۵ و تقریب چگالی موضعی در پیدا کردن پتانسیل درون اتمی بین تعداد زیادی از جفت عناصر که به صورت تصادفی انتخاب شده‌اند و تطبیق تابع حائل با داده‌ها استفاده کرده‌اند. این دستاورد به آن‌ها اجازه داد تا تابع عمومی حائل را به تابع حائل منفرد کاهش یافته متناسب سازند [۲۴]:

$$\Phi(x) = 0.1818e^{-3.2x} + 0.5099e^{-0.9423x} + 0.2802e^{-0.4029x} + 0.02817e^{-0.2016x} \quad ۱۱-۲$$

$$a = \frac{0.8854 a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad ۱۲-۲$$

برای اختصار، در معادله‌ی (۱۱-۲) r/a با x عوض شده است. با تقریبی خوب می‌توان بیشترین توان توقف را با استفاده از پتانسیل درون اتمی در انتگرال پراکندگی و محاسبه‌ی سطح مقطع دیفرانسیلی انرژی انتقالی همچون خطوط بالا به دست آورد. اگر پتانسیل پس‌زنی دقیق‌تری نیاز باشد، برای مثال در شبیه‌سازی تابش یونی، محاسبات *ab initio* برای جفت اتم-هدف خاص می‌تواند مورد استفاده

^۱ Reduced Radius

^۲ Ziegler

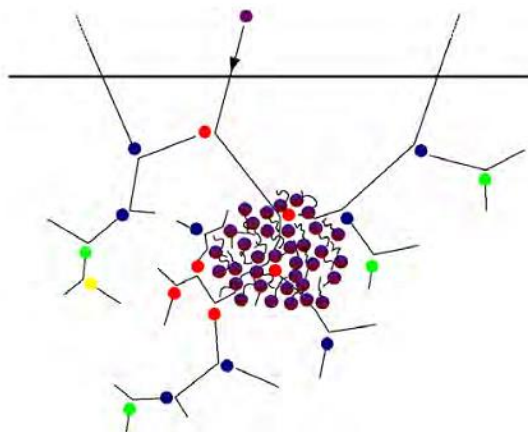
^۳ Littmark

^۴ Biersack

^۵ Hartree-Fock

قرار گیرد [۲۵]. رایج‌ترین نوع محاسبات *ab initio* در فیزیک ماده چگال نظریه‌ی تابع چگالی^۱ (DFT)، اصل موضوعه ایست که (i) همه‌ی خواص سیستم با چگالی الکترون $\rho(r)$ مشخص می‌شود (ii) چگالی الکترونی دقیق انرژی کل سیستم را به حداقل می‌رساند [۲۶].

پراکندگی کشسان اتم‌ها توسط یون‌های پرانرژی سبب ایجاد زنجیره‌ای از برخوردها می‌شود که می‌تواند ساختار مواد را تعدیل یا در آن ایجاد خسارت (نقص) کند. اتم‌های جابه‌جا شده توسط یون را اتم‌های پس‌زده شده‌ی اولیه می‌نامند. اتم‌های پس‌زده شده‌ی اولیه با انرژی به‌اندازه‌ی کافی بالا اتم‌های دیگر را جابه‌جا و یک زیر زنجیره از برخوردها در امتداد یون پرتابی ایجاد می‌کنند. این موضوع در شکل ۲-۳ به تصویر کشیده شده است. یون‌های سبک اغلب زیر زنجیره‌های مجزای کوچکی را به‌وجود می‌آورند. از سوی دیگر زیر زنجیره‌های به‌وجود آمده از یون‌های سنگین می‌توانند خیلی بزرگ و شامل صدها اتم باشد. این زنجیره‌ها توده‌ی گرمایی^۲ یا توده‌ی حرارتی^۳ نامیده می‌شوند [۲۷].



شکل ۲-۳: تصویری از توده‌ی گرمایی و زنجیره‌ی برخورد خطی در طول تابش یون به یک جامد. دایره‌های قرمز، آبی، سبز و زرد به ترتیب اولین، دومین، سومین و چهارمین اتم‌های پس‌زده شده هستند. دایره‌های ارغوانی تصویری از توده‌ی حرارتی است، و درجایی که زنجیره چگال‌تر و برخوردهای چندگانه در حجمی کوچک اتفاق می‌افتند، تشکیل می‌شود. خارج از توده‌ی حرارتی، اتم‌ها در خط‌های مستقیم بین برخوردها حرکت می‌کنند. تصویر از [۲۷].

^۱ Density Function Theory

^۲ Heat Spike

^۳ Thermal Spike

۲-۵-۲ کاهش انرژی از طریق الکترونی

در کل، برخلاف توجه گسترده به آسیب تابشی ناشی از توقف هسته‌ای، بیشتر انرژی یون از طریق الکترونی از دست می‌رود. برهم‌کنش بین یک ذره‌ی باردار و الکترون ظرفیت بسیار پیچیده است و بنابراین توصیف نظری آن مشکل است. یعنی، الکترون‌ها در هدف می‌توانند هم برخورد کشسان با یک پرتابه داشته باشد و هم برانگیخته و یا یونیزه شوند. فرایندی مشابه نیز می‌تواند برای الکترون‌های یون پراثری رخ دهد [۲۴].

انرژی از دست رفته‌ی الکترونی برای یون‌ها یک پیک در ناحیه‌ی انرژی‌های میانی دارد (شکل ۲-۴). در پرتابه‌های پراثری، یون‌عاری از الکترون است و این موقعیت می‌تواند یک تقریب خوب به‌عنوان پراکندگی کولنی بین یون و الکترون‌های هدف به نظر رسد. در نتیجه توان توقف با حل انتگرال پراکندگی (معادله‌ی ۲-۷) برای پتانسیل کولنی (معادله‌ی ۲-۱۰) بدون حائل و استفاده از NZ_2 به‌عنوان چگالی الکترون به دست می‌آید [۸]:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = NZ_2\pi \frac{Z_1^2 \epsilon^4 m_1}{E m_e} \ln\left(\frac{wE}{\bar{I}}\right) \quad ۱۳-۲$$

که در آن w فاکتور سینماتیک و مساوی با $\frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2}$ و \bar{I} میانگین انرژی یونش است. معادله‌ی (۱۳-۲) فقط از تحلیل برخوردهای کشسان نشأت گرفته و تقریباً مشابه معادله‌ی بث^۱ [۲۹] برای توقف الکترونی در انرژی‌های بالاست، صرف نظر از یک ضریب ۲ که برخاسته از وقوع رفتار کوانتوم مکانیکی است. فرمول (۱۲-۲) همچون فرمول بث دارای محدودیت‌هایی است. این فرمول در انرژی‌های بالا جایی

^۱ Bethe Equation:

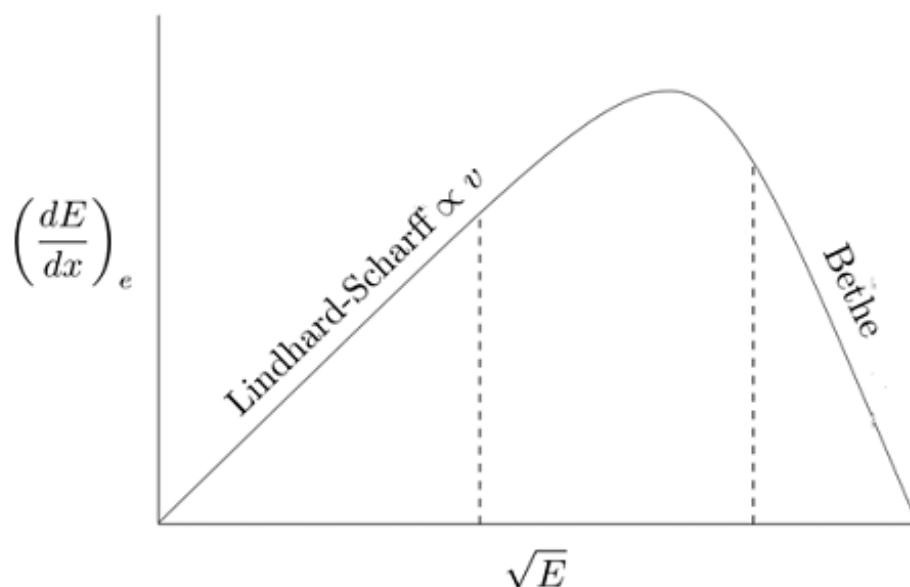
$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = NZ_2\pi \frac{Z_1^2 \epsilon^4 m_1}{E m_e} \ln\left(\frac{2wE}{\bar{I}}\right)$$

که $wE/\bar{I} \ll 1$ است قابل قبول است. همچنین این فرمول با این فرض که ذرات خیلی سریع تر از الکترون‌های هدف حرکت می‌کنند پایه‌ریزی شده است. در انرژی‌های پایین این فرمول به دلیل این که عبارت $L\eta$ منفی می‌شود، شکست می‌خورد و مقداری منفی برای توان توقف به دست می‌دهد.

همچنین در محدوده انرژی‌های پایین، بار ذره مثبت شده و در حین حرکت الکترون‌هایش را از دست می‌دهد، بنابراین بار خالص ذره و توان توقف کاهش می‌یابد. وقتی که سرعت ذرات سنگین (V) با سرعت الکترون‌هایی که در مدار اتم می‌چرخند قابل قیاس و یا کمتر باشد، گیراندازی الکترون اهمیت می‌یابد.

وابستگی فرمول (۲-۱۲) به Z^2 ، مربع بار ذره‌ی فرودی، باعث می‌شود که ذرات با اندازه‌ی بار و انرژی یکسان اما با علامت بار مخالف، مانند پایون مثبت و منفی (π^\pm) و میون مثبت و منفی (μ^\pm)، توان توقف و برد یکسانی داشته باشند. فرمول بٹ با محاسبه‌ی توان توقف در اولین تقریب بورن^۱ در مکانیک کوانتومی به دست می‌آید. اعتبار این تقریب بر این فرض استوار است که سرعت (V) ذره‌ی برخوردی در مقایسه با سرعت الکترون‌های اتمی بزرگ‌تر است. از آنجایی که سرعت‌ها نمی‌توانند بیشتر از سرعت نور شوند، V اغلب در مقایسه با سرعت چرخش الکترون‌ها بزرگ‌تر نیست، مخصوصاً برای لایه‌های داخلی عنصرهای سنگین [۳۰].

^۱ Born approximation



شکل ۲-۴: ناحیه‌ی توان توقف الکترونی. توان توقف الکترونی برای یون‌های کند ($> 200 \text{ keV}$) متناسب است با سرعت یون‌ها درحالی‌که برای یون‌های سریع ($< 1 \text{ MeV}$) توان توقف الکترونی با افزایش انرژی جنبشی کاهش می‌یابد. [۱۸].

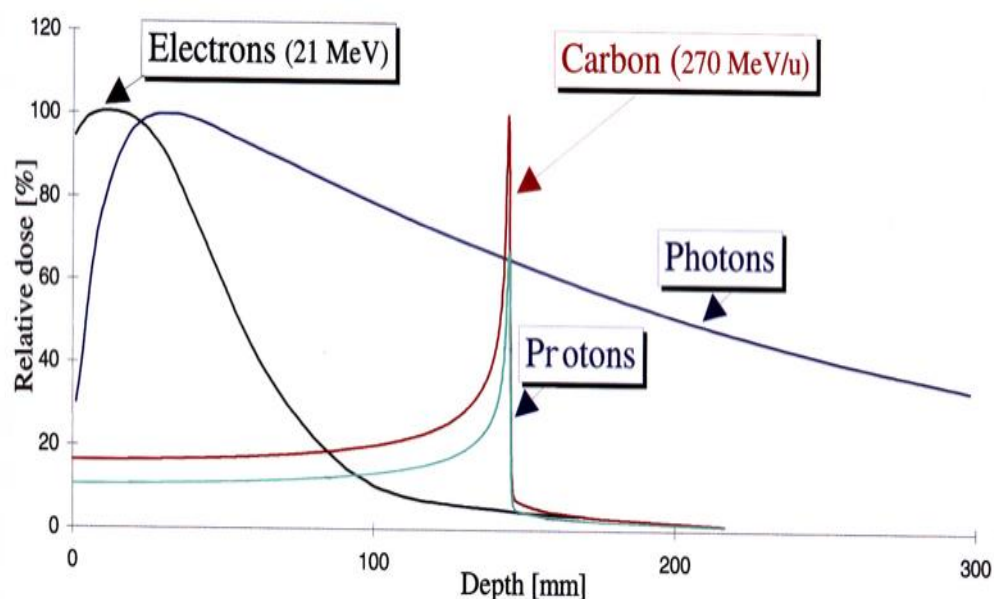
همانطور که در شکل ۲-۴) نیز ملاحظه می‌کنید فرمول بـت تقریب خوبی برای توقف الکترونی در انرژی‌های بالا به دست می‌دهد اما زیر این ناحیه نیاز به تصحیحاتی دارد.

در پرتابه‌های کم انرژی، یون به حالت خنثی نزدیک‌تر است و الکترون‌های رسانش سهم بیشتری در از دست رفتن انرژی الکتریکی دارند. به همین دلیل برای تحریک این الکترون‌ها در مقایسه با الکترون‌های پوسته درونی، که نزدیک‌ترین سطح انرژی ممکن است، انرژی کمتری مورد نیاز است. ملاحظات ساده درباره‌ی برخورد کشسان بین یک پرتابه و یک الکترون و سهمی از الکترون‌هایی که قابلیت برانگیختگی را دارند [۲۳]، توان توقف در انرژی‌های پایین را به دست می‌دهد که متناسب با سرعت یون است [۸]:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = 8\sigma_e N \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2} E^{1/2} = kE^{1/2} \quad ; \quad \Delta \text{ keV} \leq E < 1 \text{ MeV} \quad 14-2$$

این عبارت تقریبی از توان توقف را در ناحیه‌ی یون‌های کم انرژی به دست می‌دهد.

لازم است اشاره کنیم که وقتی ذرات باردار سریع به داخل ماده نفوذ می‌کنند، باعث یونش اتم‌های ماده‌ی هدف شده و انرژی خود را در طول مسیر حرکت در ماده آزاد می‌کنند. همچنان که انرژی ذره کاهش می‌یابد، سطح مقطع واکنش افزایش پیدا می‌کند و در نتیجه یک قله در نمودار انرژی آزاد شده از ذره در ماده درست قبل از به سکون رسیدن ذره پدید می‌آید که به این قله "قله‌ی براگ"^۱ گفته می‌شود. انرژی از دست رفته‌ی ذرات با معکوس مجذور سرعت ذرات متناسب است و این دلیلی است که توضیح می‌دهد چرا قله‌ی براگ درست قبل از به سکون رسیدن اتفاق می‌افتد (که در ناحیه‌ی یون‌های با انرژی بالا یعنی ناحیه‌ی بعد قله در شکل ۲-۴ درست است). در شکل ۲-۵ نمونه‌ای از نمودار قله‌ی براگ را برای پرتوهای مختلف مشاهده می‌نمایید.



شکل ۲-۵: نمودار قله‌ی براگ برای پرتوهای مختلف در بافت انسان. این نمودار دُز نسبی به عمق نفوذ ذره را نشان می‌دهد که به ۱۰۰٪ نرمال شده است [۳۱].

نمودار شکل ۲-۵ مقدار دوز نسبی در واحد عمق نفوذ ذره در هدف را نشان می‌دهد. در این نمودار حداکثر مقدار دُز نسبی جذب شده به ۱۰۰٪ نرمال شده است. همان طور که ملاحظه می‌کنید

^۱ Bragg peak

این سطح زیر نمودار در منطقه‌ای که قله شکل گرفته است برای پروتون و کربن بسیار کوچک‌تر از الکترون و فوتون است که این مسئله به دلیل جرم بیشتر این ذرات نسبت به الکترون و فوتون است. همچنین مشاهده می‌کنید الکترون و فوتون انرژی خود را به صورت آهسته‌تری از دست می‌دهند و حتی ملاحظه می‌کنید که فوتون متوقف نمی‌شود.

۳-۵-۲ نظریه‌ی برد

یک ذره‌ی باردار هر قدر در یک ماده بیشتر حرکت کند، انرژی بیشتری از دست داده و اتم‌های نزدیک به مسیر حرکت، بیشتر یونیزه و برانگیخته می‌شوند و در نهایت، ذره‌ی باردار تمام انرژی جنبشی خود را از دست داده و تقریباً می‌ایستد. متوسط طولی که یک ذره‌ی باردار در امتداد مسیر ورودی طی کند، برد (R) نامیده می‌شود. این تعریف، فقط برای ذرات باردار سنگین نظیر ذره‌ی α کاملاً معتبر است. تعریف دقیق برد برای ذرات سبک مشکل است و فرض می‌شود برد ذرات سبک، نظیر الکترون و پوزیترون، کمترین ضخامت ماده‌ای است که قادر به عبور از آن نباشد [۷].

به‌طور کلی توزیع برد برای ذره‌ی پرتاب‌شده به سمت یک هدف، به عنوان چگالی احتمال برای پیدا کردن ذره‌ی پرتابی در حال سکون در مکانی داخل هدف در زمانی بعد از ورود تعریف می‌شود. در اینجا نمادهای آماری وارد می‌شوند زیرا برد یک کمیت میانگین است. ذرات از یک نوع و انرژی جنبشی که در محیطی حرکت می‌کنند دقیقاً پس از پیمودن ضخامت یکسان R نخواهند ایستاد آنچه که واقعاً روی می‌دهد این است که نقاط پایانی طول‌های مسیر در اطراف یک ضخامت میانگین به نام برد توزیع می‌شوند [۷]. بنابراین، برای اهداف بی‌شکل و با توزیع تصادفی حتی محاسبه‌ی مسیر حرکت یک تک یون آماری است، زیرا مراکز پراکندگی، که سبب توقف یون بر اثر برانگیختگی و یونش الکتریکی هستند، به‌صورت آماری توزیع شده‌اند.

در نظریه ی برد، توزیع برد به عنوان اثر نهایی از توصیف مسئله ی حرکت یون ها که در طول حرکت انرژی شان به صفر کاهش پیدا می کند، در نظر گرفته می شود. در نهایت توزیع برد با نظریه ی تجزیه و تحلیل انتقال، محاسبات مونت کارلو، یا شبیه سازی مستقیم مسیر حرکت یون محاسبه می شود. مسئله مشترک در این رفتارها، شامل توصیفات قابل قبولی برای برهم کنش بین حرکت یون و ذرات مجاور هدف است. برهم کنش ها در برخورد های کشسان مضاعف^۱ با هسته های اتم های هدف و برخوردهای ناکشسان^۲ با الکترون های هدف، معمولاً به صورت جدا از هم مورد بررسی قرار می گیرند.

برهم کنش کشسان بین یون و هسته ی هدف به وسیله ی پتانسیل برهم کنش دقیق در شبیه سازی های مستقیم و با سطح مقطع پراکندگی در محاسبات مونت کارلو توصیف می شود. برخوردهای کشسان هم عامل انحراف زاویه ای و هم توقف (از دست دادن انرژی) یون ها هستند.

در امور حفاظت در برابر پرتو، برای طراحی آشکارسازها و دُزیمتری، مفهوم برد یک ذره ی باردار بسیار مفید است. برد ذرات باردار سنگین که کم و بیش در خط مستقیم حرکت می کنند، تقریباً مساوی متوسط مسیر طی شده در ماده ی مفروض است؛ در صورتی که برد ذرات سبک تر نظیر الکترون، که مسیر شکسته را طی می کنند، کوتاه تر از طول متوسط مسیر طی شده است. مفهوم برد، گاهی اوقات برای رادیونوکلوئیدهای بتا دهنده که ذره ی β را با مقادیر مختلف انرژی تا مقدار ماکزیمم انرژی E_{β} منتشر می کند، به کار می رود. در این مورد، برد کم و بیش با انرژی ماکزیمم تعیین می شود.

[۷].

^۱ Binary Elastic Collisions

^۲ Inelastic Collisions

۳ فصل سوم:

اثرات تابش بر ساختار مواد

۱-۳ مقدمه

وقتی ذره‌ی پر انرژی با یک جامد برخورد می‌کند، اتم‌ها از مکان‌شان در داخل شبکه جابه‌جا می‌شوند. نتیجه‌ی این برخورد تشکیل تهی‌جا‌های خوشه‌ای و یا منفرد در داخل ماده است و ذره‌ی برخورد کرده نیز ممکن است در جایی داخل ماده متوقف شود. این مکان ممکن است در داخل ساختار شبکه و یا خارج از آن باشد که در این صورت به این نقص، نقص میان‌بافتی می‌گویند. اختلال اولیه‌ی ناشی از پراکندگی‌های کشسان و غیر کشسان ایجاد شده در اثر تابش در مواد را اصطلاحاً آسیب تابشی می‌نامند. در دماهای محدود یا تحت تابش‌های پیوسته، بعضی از نقص‌ها ترمیم و بعضی خوشه‌بندی می‌شوند. این نقص‌ها هم به صورت منفرد و هم به صورت جمعی و همراه با ذرات نفوذی شروع به حرکت می‌کنند، پس از تغییر میکروساختاری در اثر آسیب اولیه و پایداری آن‌ها در ماده، تغییراتی در خواص ماده به دلیل تابش ایجاد می‌شود. بخصوص ممکن است که تغییرات در ابعاد، ترکیبات میکرو مقیاس و خواص مکانیکی شدید باشد.

تقریباً از ۳۰ سال گذشته تا به امروز، مطالعه‌ی تأثیرات تابش به عنوان شاخه‌ای بزرگ از علم مواد پیشرفت قابل توجهی کرده است. توسعه‌ی سریع این مطالعات حاصل دو جریان قوی است. از یک

طرف، استفاده‌ی روز افزون از تابش که یکی از اندک ابزارها برای تولید مجموعه‌ای از نقص‌های منفرد^۱ و خوشه‌های نقص^۲ چندگانه (مانند تهی‌جاها، توده‌های جابه‌جایی و غیره) در ماده است. از طرف دیگر؛ راکتورهای هسته‌ای، که در طول این دوره توسعه یافته‌اند، دچار مشکلات شدید و غیر معمول شدند. این امر به سبب در معرض تابش قرار گرفتن ساختار مواد آن‌ها با شار بالای نوترون‌ها است. بنابراین انجام مطالعات و آزمایش برای توسعه در بهبود مواد امری ضروری تلقی می‌شود.

گروهی از دانشمندان و مهندسان کارهای فراوانی را با مشارکت یکدیگر در این زمینه انجام داده‌اند. محدوده‌ی کار این گروه اساساً مطالعه‌ی تولید و ترمیم نقص در حالت جامد است، بیشتر فعالیت‌شان بر روی مشخصات مواد شامل نقص‌های پیچیده و تلاش برای توسعه‌ی آلیاژهای پیشرفته است و به همان نسبت کارهای گسترده‌ای بر روی فلزات یا آلیاژها، نیمه هادی‌ها، عایق‌ها و پلیمرها صورت گرفته است. مسائل جالب توجهی در هر یک از این بخش‌ها رخ داده است، اما به دلیل فضای محدود در این فصل فقط به کار بر روی ساختار فلزات و آلیاژها پرداخته‌ایم [۳۲].

۳-۲ مفاهیم اساسی

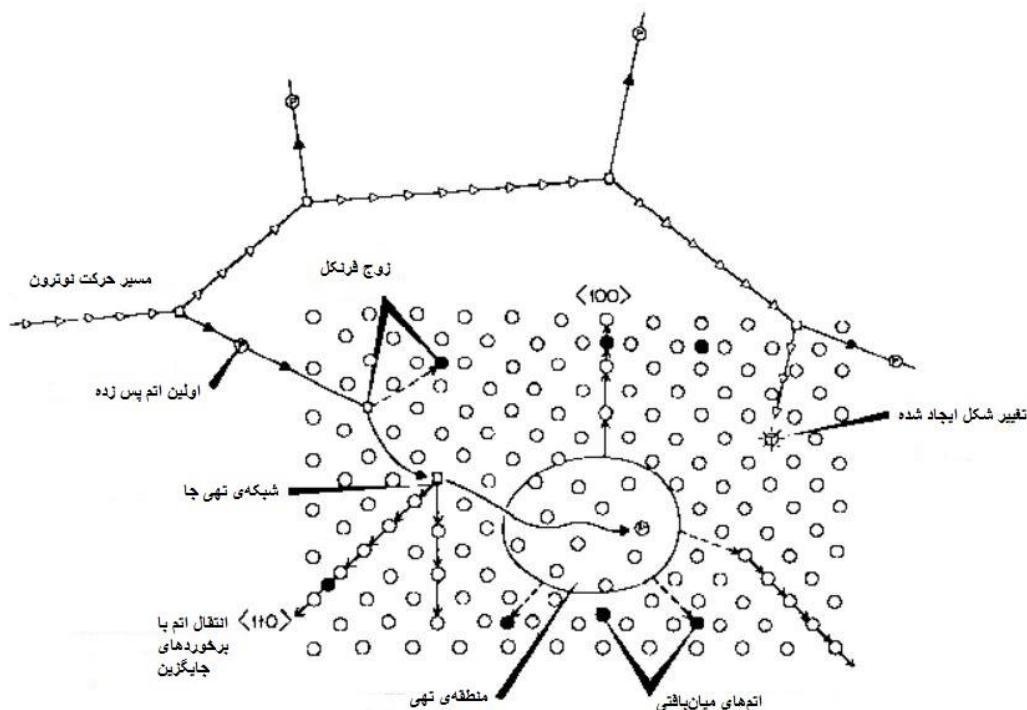
۳-۲-۱ تولید نقص‌های منفرد

مقدار انرژی کافی انتقال یافته به ماده برای جابه‌جایی اتم‌ها از مکان‌شان در ساختار شبکه کمتر از 10 eV است که البته این مقدار در مواد مختلف متفاوت است. در راکتورهای نوعی، نوترون‌ها دارای انرژی‌ای تا 100 keV هستند و بنابراین قادرند انرژی زیادی به شبکه‌های اتمی برای جابه‌جایی اتم‌ها منتقل کنند. اتم‌های جابه‌جا شده یا پس‌زده با اتم‌های مجاور برخورد کرده و پس از انتقال انرژی خودشان به اتم دیگر به حالت سکون می‌رسند. مقدار زیادی از این انرژی منتقل شده به اتم‌های دیگر، برای جابه‌جایی دیگر اتم‌ها کافی می‌باشد. این نتیجه در یک شاخه از زنجیره‌ی جابه‌جایی که شامل

^۱ Point Defects

^۲ Cluster Defects

محدوده‌ای پیرامون مسیر یک ذره‌ی پس‌زده است در شکل ۳-۱) نشان داده شده است. به دلیل ساختار بلوری شبکه‌های فلزی، ممکن است اتم‌ها با برخوردهای متمرکز یا برخوردهای جایگزین به طور قابل ملاحظه‌ای به فواصل دوری از مرکز زنجیره انتقال یابند و در نتیجه انرژی نیز از طریق همین برخوردها به اتم‌هایی که در فواصل دور واقع شدند انتقال می‌یابد [۳۳]. اتم‌های میان‌بافتی نیز در لایه‌های پراکنده اطراف زنجیره قرار می‌گیرند و ناحیه‌ی مرکزی ممکن است کاملاً خالی شود که اغلب آن را منطقه‌ی تهی می‌خوانند.



شکل ۳-۱: مثالی مفهومی از اتفاق‌های رخ داده در طول برخورد یک نوترون با شبکه‌ی فلزی [۳۲].

توصیف کیفی زنجیره‌های جابه‌جایی به صورت تجربی و با استفاده از میکروسکوپ‌های یونی [۳۴] و همچنین با استفاده از شبیه‌سازی بررسی شده و به اثبات رسیده‌اند [۳۵،۳۶]. تولید زنجیره به سرعت و در زمان 10^{-3} ثانیه از اولین برخورد شکل می‌گیرد [۳۷] و پس از این که این زنجیره‌ها تولید شدند، شروع به پراکنده شدن و توزیع در حجم ماده می‌کنند و در طی این فرایند خوشه‌بندی نقص‌ها و یا ترمیم آن‌ها صورت می‌پذیرد. فقط تعداد اندکی از اتم‌های جابه‌جا شده از نقص اولیه به عنوان

نقص‌های مجزا، باقی می‌مانند و نقص‌های دیگر ممکن است از خوشه‌بندی دیگر تهی‌جاها و اتم‌های میان‌بافتی به وجود آیند [۳۸]. در اثر دمای محیط اتم‌های میان‌بافتی و تهی‌جاهای اندکی ممکن است از زنجیره خارج شوند و حرکت کنند تا زمانی که این نقص‌ها در داخل شبکه به دام بیفتند و یا در شکل این نقص‌ها ترمیم ایجاد شود.

اندازه و شکل زنجیره به انرژی اولین اتم پس‌زده و عدد اتمی ماده‌ای که در آن زنجیره تشکیل می‌شود وابسته است. در مواد با عدد اتمی پایین، محدوده‌ی انرژی اولین اتم پس‌زده نسبتاً زیاد است و زنجیره‌ها در داخل ماده توزیع می‌شوند. در مواد با عدد اتمی بالا، محدوده‌ی گسترش این انرژی کمتر است و در نتیجه زنجیره‌ها متراکم‌تر هستند. اتم‌های پس‌زده‌ی اولیه با انرژی کم، انرژی‌شان را در طول برخورد با شبکه‌های اتمی از دست می‌دهند. در انرژی‌های بالا، کسر بالایی از انرژی از دست رفته صرف تحریک الکترون‌های اتمی می‌شود. انرژی از دست رفته از طریق برخوردهای اتمی، که اصطلاحاً به آن انرژی آسیب می‌گویند، می‌تواند در تخمین تعداد جابه‌جایی‌های اتمی تولید شده در زنجیره مورد استفاده قرار گیرد. لیندهارد و همکاران [۳۹] نظریه‌ای را بیان کردند، که در آن مجموع انرژی از دست رفته را عبارتی حاصل از جمع مولفه‌های الکترونی و هسته‌ای معرفی کرده‌اند، که در فصل ۲ نیز به آن اشاره شده است.

در محاسبه‌ی آسیب تولید شده در یک بلور، لازم است از طیف ذرات پس‌زده‌ی اولیه آگاهی داشته باشیم. چرا که تفاوت‌های قابل توجهی در طیف‌های به دست آمده از بمباران با ذرات مختلف دیده می‌شود. تابش الکترون یک مثال ساده از این مسئله است. برای مثال در مس، حداکثر انرژی‌ای که یک الکترون ۱ MeV می‌تواند به یک شبکه‌ی اتمی منتقل کند، ۶۸ eV است. زمانی که انرژی منتقل شده در محدوده‌ی ۲۰-۳۰ eV باشد، فقط زوج‌هایی مجزا از اتم‌های میان‌بافتی و تهی‌جاها یا همان زوج‌های فرنکل^۱ تولید می‌شوند. از طرفی یک پروتون ۱ MeV می‌تواند بیشتر از ۶۱,۵ keV

^۱ Frenkel pairs

انرژی به اتم مس منتقل کند. برخورد یون‌های سنگین با شبکه‌های اتمی از طریق پتانسیل کولنی انجام می‌شود. نوترون‌های با اندک انرژی بالاتر از ۱ MeV نیز دست‌خوش پراکندگی‌های کشسان می‌شوند. نوترون‌های با انرژی زیاد ممکن است هسته را در یک حالت برانگیخته قرار دهند که با تابش فوتون یا ذرات دیگر فروپاشی می‌کنند. رخدادهای غیر کشسان، ذرات پس‌زده‌ی پراکندگی‌های پرتابی و پراکندگی‌های کشسان ایجاد می‌کنند. بنابراین حالت آسیب اولیه، وابستگی زیادی به ذرات پرتابی و انرژی‌شان دارد. به عنوان مثال محدوده‌ی زوج‌های فرنکل، که تحت تابش الکترون ایجاد می‌شوند و یا تشکیل زنجیره‌هایی با متوسط انرژی کمتر از keV که از طریق بمباران یون‌های سنگین ایجاد می‌شوند و نیز زنجیره‌هایی با انرژی بالاتر (در حدود ۱۰۰ keV)، که از بمباران نوترون‌های پراکندگی به وجود می‌آیند، همگی وابسته به نوع و انرژی ذره‌ی تابشی هستند.

پراکندگی و توزیع نقص در مواد نیز به نوع و انرژی ذره‌ی پرتابی بستگی دارد. مسافت آزاد میانگین^۱ (MFP) نوترون‌ها در برخورد با شبکه‌های اتمی از مرتبه‌ی سانتی‌متر است، و زنجیره جابه‌جایی‌های تولید شده از این برخوردها به طور یکنواختی در ماده توزیع می‌شوند. در مقایسه با آن، یون‌های سنگین با انرژی کمتر از MeV، بردی بیشتر از چند میکرومتر ندارند. بنابراین نقص‌هایی که از برخورد این یون‌ها تولید می‌شود به ناحیه‌ی سطوح لایه‌های نازک محدود می‌شود و این نقص‌ها به شکل غیر یکنواخت در این لایه‌ها توزیع می‌شوند. یون‌های سبک و الکترون‌ها نیز محدوده‌ای از مرتبه‌ی میلی‌متر و یا بیشتر دارند و بنابراین قادرند نقص‌هایی در مواد حجیم به وجود آورند. آنچه که در برخورد این پرتابه‌ها با ماده‌ی هدف بسیار مهم است، انرژی آسیب یا همان انرژی منتقل شده از پرتابه به ماده‌ی هدف است. انرژی آسیب کسری از انرژی ذرات بمباران شده است، که قادر است جابه‌جایی‌هایی را در ماده ایجاد کند. تعداد زوج‌های فرنکل (V) متناسب است با انرژی آسیب E_{DAM} ، که با رابطه‌ی زیر داده می‌شود [۴۰، ۴۱]:

^۱ Mean Free Path

$$v = \frac{kE_{DAM}}{2E_d} \text{ for } E_{DAM} > \frac{2E_d}{k} \quad 1-3$$

که در آن E_d آستانه انرژی جابه‌جایی و k بازده جابه‌جایی است. معمولاً برای اندازه‌گیری دُز و یا مقدار تابش داده شده به یک هدف از تعداد جابه‌جایی‌ها به ازای یک اتم (DPA)^۱ استفاده می‌شود؛ که برابر است با مجموع تعداد زوج‌های فرنکل تولید شده در شبکه‌ی اتم به ازای هر اتم. البته این یک اندازه‌گیری از تولید آسیب در دماهای بسیار پایین است که در این دماها نقص‌های منفرد بدون حرکت و ساکن هستند. در دماهای بالاتر به دلیل تحرک این نقص‌ها، تعدادشان به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد. با این وجود، انرژی آسیب‌ابزاری مفید برای مقایسه‌ی آسیب تولید شده توسط ذرات مختلف را فراهم می‌آورد.

۳-۲-۲ حرکت و جابه‌جایی نقص‌ها

پس از ایجاد نقص‌های اولیه، تهی‌جاها و اتم‌های میان‌بافتی به وجود آمده در ماده توزیع می‌شوند و شروع به حرکت و جابه‌جایی می‌کنند. وقایعی که برای نقص‌ها در طول فرایند انتشار و توزیع رخ می‌دهد منجر به تغییرات میکروسکوپی در خواص مکانیکی و فیزیکی مواد، همچون برآمدگی^۲ (تورم)، خزش^۳ و سخت‌شدگی^۴ می‌شود. نقص‌های تولید شده در ماده طی حرکت و جابه‌جایی‌هایی که انجام می‌دهند، ممکن است با ناخالصی‌های باقی مانده در ماده و یا با ناخالصی‌های تزریق شده به ماده بازترکیب، جابه‌جا و یا به آن‌ها مقید شوند. چنین فرایندهایی در ماده می‌تواند باعث تغییر در خواص ماده شود. از طرفی فرایندهایی که منجر به تغییر خواص می‌شوند در دماهایی کمی بالاتر از T_m ^{۰,۳} اتفاق می‌افتد، که T_m دمای نقطه‌ی ذوب است که می‌توان از این نکته در طراحی و ساخت مواد جدید بهره برد.

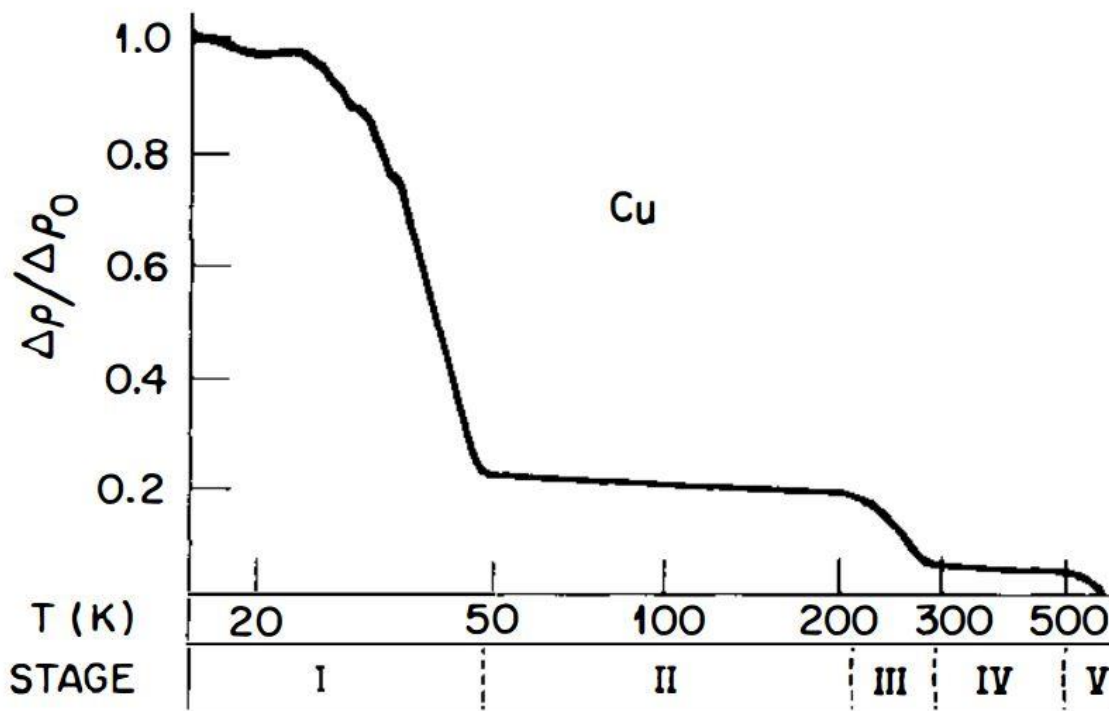
^۱ Displacements Per Atom

^۲ Swelling

^۳ Creep

^۴ Hardening

یکی از موارد استفاده از حرکت و جابه‌جایی نقص‌ها تغییر در مقاومت الکتریکی در یک نمونه‌ی تابش‌دهی شده است. افزایش مقاومت الکتریکی نمونه‌ی تحت تابش، به دلیل نقص‌های به وجود آمده است. بهبود (کاهش) در مقاومت الکتریکی زمانی حاصل می‌شود که در حین تابش‌دهی ماده دمای آن را افزایش دهیم زیرا این عمل سبب ترمیم نقص‌ها می‌شود و افزایش بیشتر دما عمل ترمیم را نیز افزایش می‌دهد. شکل ۳-۲)، منحنی‌ای از مجموع نقص‌های ترمیم شده برای یک نمونه مس است، که توسط الکترون ۱ MeV و در دمای ۴ K تابش‌دهی شده است. همان طور که مشخص است، ناحیه‌ی دمایی به پنج مرحله (I-V) تقسیم شده است. مرحله‌ی اول از حرکت و جابه‌جایی اتم‌های میان‌بافتی تولید شده به وسیله‌ی تابش ناشی می‌شود، مرحله‌ی سوم یا از جابه‌جایی تهی‌جا‌های تولید شده از تابش و یا از اتم‌های میان‌بافتی ثانویه منتج می‌شود، و مرحله‌ی پنجم از تشکیل و جابه‌جایی تهی‌جا‌های حرارتی پدید می‌آید. مرحله‌ی دوم و چهارم خیلی آرام شکل می‌گیرند. در این دو مرحله به دلیل خوشه شدن نقص‌های منفرد و اثرات ناشی از ناخالصی‌های ماده، فرایند بهبودی در مقاومت الکتریکی کند می‌شود [۴۲-۴۵].



شکل ۳-۲: نموداری از بهبود (کاهش) مقاومت الکتریکی در مس که از تابش دهی الکترون 1 MeV در دمای 4 K و ترمیم همزمان نقص های منفرد که ناشی از افزایش دما است، به دست آمده است [۳۲].

۳-۲-۳ تحول میکروساختاری در طول تابش دهی

وقتی یک فلز ترکیبی؛ برای مثال آلیاژها، تحت تابش قرار می گیرد، جابه جایی و حرکت نقص های منفرد بر اثر تابش بیشتر می شود. این تأثیرات به ترکیبات اولیه و میکروساختار ماده وابسته اند. تعداد کمی از نقص های منفرد تولید شده در اثر تابش باقی مانده و ثابت می شوند، همچون مجموعه نقص های ثانویه مثل تهی جاها و اتم های میان بافتی که به عنوان توده های تهی و توده هایی از اتم های میان بافتی ثابت و ساکن می شوند. اگر توده های نقص ساکن نشوند، ممکن است به تدریج حرکت کنند و در شبکه ی اتم ها جابه جا شوند. نقص های منفرد باقی مانده نیز ممکن است فرایندهای نفوذ را افزایش دهند و فعل و انفعالاتی که در غیاب تابش به آرامی انجام می شوند را سرعت بخشند. حضور نقص منفرد در سیستم ممکن است انرژی آزاد یک فاز را نسبت به فاز دیگر تغییر دهد. اتم های ترکیب شده در هدف نیز ممکن است با جریانی که از نقص های منفرد به وجود آمده انتقال یابند؛ و انتشار سریع آن ها ممکن است شاری از تهی جاها و اتم های میان بافتی را ایجاد کند و این نقص ها با

یکدیگر جابه‌جا شوند. این تغییرات اساسی ممکن است باعث تغییر در خواص فیزیکی و مکانیکی مواد ترکیبی شوند. در واقع، تابش به طور پیوسته تحول و تغییراتی در میکروساختار و مجموعه خواص فیزیکی و مکانیکی ماده ایجاد می‌کند.

۳-۲-۴ تغییر ابعاد ناشی از تابش‌دهی

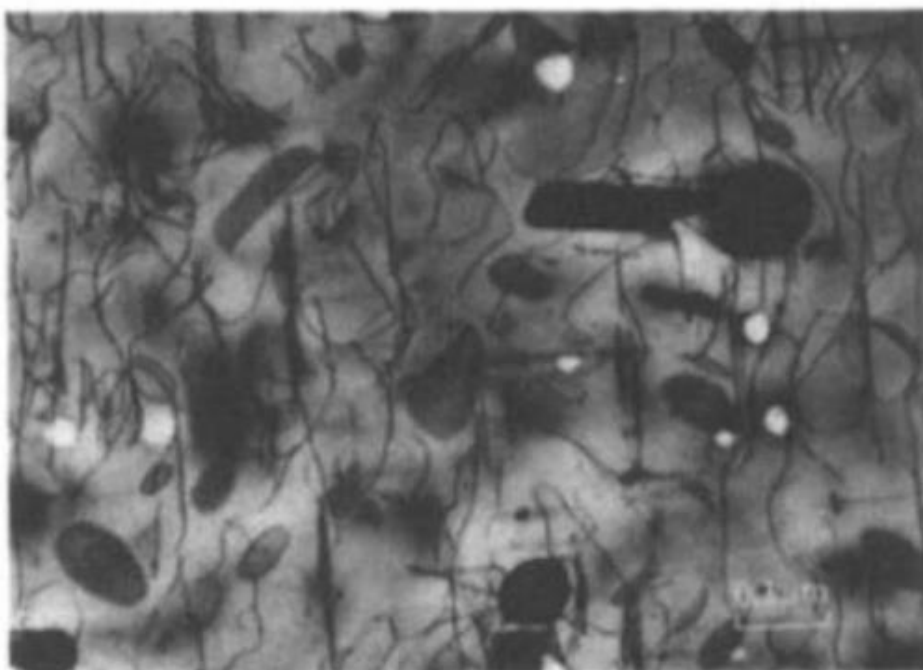
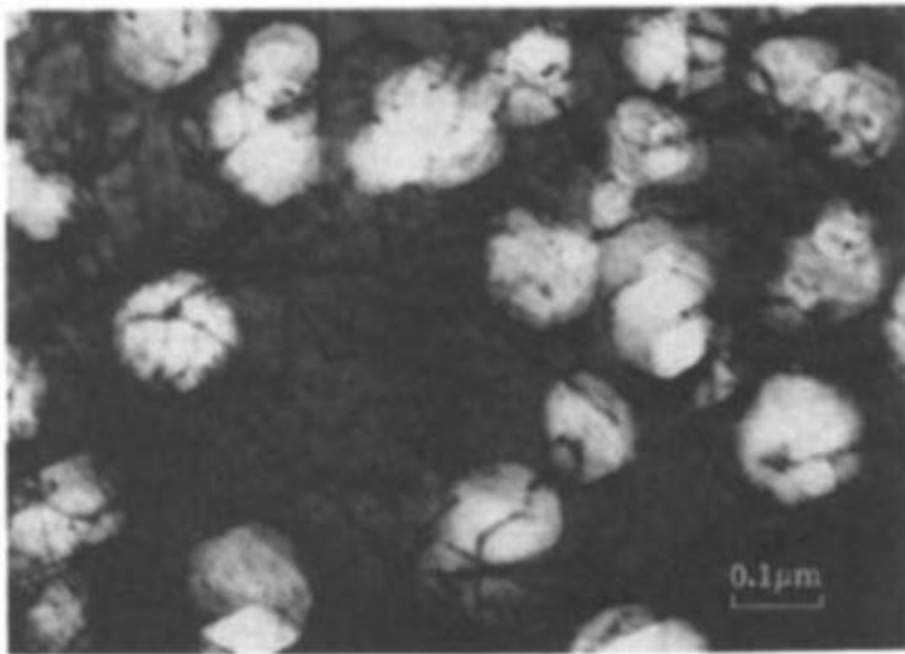
سه اثر مهم تابش که با تغییر در ابعاد فلزات و آلیاژها همراه است، شناسایی شده‌اند. این سه اثر عبارتند از: تورم (برآمدگی)، خزش و رشد^۱ که توضیح مختصری در مورد این اثرات بیان می‌کنیم.

تورم؛ به انبساط حجم ماده در اثر تابش، تورم تابشی گویند. در اثر انبساط ماده، تهی‌جاها در خوشه‌های سه بعدی که اصطلاحاً حفره یا گودال نامیده می‌شوند، به حالت سکون می‌رسند. محدوده‌ی اندازه‌ی آن‌ها از چند میکرون تا چند صد نانومتر است، و این اتفاق به طور خودبه‌خودی در فلزات و آلیاژهای تحت تابش رخ می‌دهد. برای مثال راکتورهای تابشی می‌توانند تورمی در حدود ۲۰٪ در فولادهای ضد زنگ ایجاد کنند. اولین مشاهدات تورم ناشی از تابش در فولاد ۳۱۶ با روکش ضد زنگ توسط کاتورن^۲ و فولتن^۳ گزارش شده است [۴۶]. برای اثبات تورم از میکروسکوپ الکترونی (شکل ۳-۳) و نیز مقدار کاهش چگالی مشاهده شده در ماده، استفاده شده است.

^۱ Growth

^۲ Cawthorne

^۳ Fulton



شکل ۳-۳: میکروساختار فولاد ضد زنگ ۳۱۶ که در دمای 580°C توسط نوترون با دُز $1.9 \times 10^{26} \text{ n/m}^2$ تابش‌دهی شده است. شکل بالا مربوط به ماده با خلوص تجاری و شکل پایین مربوط به ماده با خلوص بسیار بالاست [۴۷].

خزش؛ به تغییر شکل وابسته به زمان یک فلز که در دمای بالا تحت تابش قرار گرفته است، خزش تابشی می‌گویند. به علاوه این تغییر شکل همراه فرایندهای دیگری همچون تورم ناشی از تابش نیز رخ می‌دهد. این پدیده نخستین بار در واکنش آلفا-اورانیوم [۴۸،۴۹] مشاهده شده است. شواهد تجربی نشان می‌دهند که این پدیده در مواد شکافت‌ناپذیر مثل فولاد ضد زنگ نیز رخ می‌دهد [۴۹]. در بررسی‌های جدید، مشخص شده که آگاهی داشتن در مورد خزش تابشی در ساختار مواد راکتورهای سریع و طراحی آن‌ها، اهمیت خاصی دارد. چرا که برای مثال، خزش می‌تواند در کم کردن تنش‌های ناشی از تورم‌های ناهمسان در بست‌ها و لوله‌های سوختی مفید واقع شود. همچنین اگر خزش خیلی زیاد باشد، ماده نمی‌تواند در برابر تغییر شکل ناشی از تنش‌های ساده مقاومت کند. بنابراین تشخیص و آگاهی از خزش تابشی، روشی مهم برای بررسی اثرات تابش است.

رشد؛ رشد تابشی، کشیدگی ماده از یک جهت و انقباض در جهت دیگر در حین تابش‌دهی است، به طوری که حجم نمونه ثابت باقی بماند. این امر به طور خودبه‌خودی و در غیاب تنش‌های خارجی در برخی مواد رخ می‌دهد. رشد تابشی هم در فلزات شکافت‌پذیر و هم شکافت‌ناپذیر روی می‌دهد. با اینکه رشد تابشی پدیده‌ای مهم در برخی مواد و سیستم‌های راکتوری است، اما اطلاعات کاملی در این زمینه موجود نمی‌باشد [۵۰].

۳-۲-۵ رفتار مکانیکی

تغییرات میکروساختاری حاصل از تولید و جابه‌جایی نقص‌های منفرد، به صورت تغییر در رفتار مکانیکی مواد منعکس می‌شود. خوشه‌های کوچک نقص، توده‌ها، جابه‌جایی‌های خطی، حفره‌ها و در نهایت ذرات به سکون رسیده در مواد، باعث تغییر سختی آن‌ها می‌شوند. از طرفی ممکن است فرایندهایی در ماده رخ بدهد که به ترمیم ساختارهای آسیب دیده کمک کنند، که به آن‌ها "فرایندهای بهبود" گفته می‌شود. مثلاً حرارت دادن ماده برای ترمیم نقص، نمونه‌ای از فرایندهای بهبود است زیرا با ترمیم نقص از مقدار سختی ماده کاسته می‌شود. تعادل بین این فرایندهای متقابل،

وابستگی شدیدی به پارامترهای تابش (مثل شار) و ترکیبات میکروساختاری مواد دارند. در طی تابش‌دهی ممکن است مواد مختلف رفتارهای متفاوتی از خود نشان دهند، و ابتدا در هنگام تشکیل نقص از خود مقاومت نشان دهند. تغییر در سختی مواد طی تابش‌دهی را می‌توان به صورت کیفی مطالعه و توصیف کرد، ولی محدوده‌ی مکانیسم‌های احتمالی برای کنترل رفتار، بسیار گسترده است و به شدت به ترکیبات و میکروساختار مواد وابسته است که این امر پیش‌بینی رفتارها را مشکل می‌سازد. به دلیل پیچیدگی این رشته، پیشرفت در زمینه‌ی مطالعات بنیادی به کندی صورت می‌گیرد. در واقع بیشتر اطلاعات ما در این ناحیه، نتیجه‌ی تحقیقات و بررسی‌های انجام گرفته بر روی مطالعات پایه‌ی پیشین است. به دلیل فضای محدود و پیشرفت ناکافی در این زمینه از بحث در مورد این ناحیه خودداری می‌کنیم. ولی باید بدانیم که این یک ناحیه‌ی مهم از نقطه نظر تکنولوژیکی است و بنابراین انتظار می‌رود که پیشرفت‌ها در این زمینه بیشتر از پیش باشد.

۳-۳ پیشرفت‌ها و دستاوردها

در سال‌های اخیر پیشرفت‌ها و دستاوردهای جدیدی در این زمینه صورت گرفته که در این قسمت به پیشرفت حاصل در زمینه‌ی تولید نقص اشاره می‌کنیم.

انتظار می‌رود که بتوان آسیب ناشی از نوترون‌ها در راکتور گداخت را با استفاده از شبیه‌سازی راکتور و بمباران آن با ذرات باردار پیش‌بینی کرد. در راکتورهای پیشرفته‌ی شکافت و گداخت، تلاش‌های فراوانی برای ارزیابی تأثیرات انرژی و انواع ذرات بمباران شده برای تولید نقص انجام گرفته است. در اصل این پیشرفت‌ها در آزمایشگاه‌ها اتفاق می‌افتند، جایی که روش‌هایی برای اندازه‌گیری کمی از خوشه‌های نقص تولید شده و توزیع آن‌ها در اثر تابش‌دهی ماده، توسعه پیدا کرده و بکار گرفته شده‌اند.

مرکل^۱ و همکاران تصاویری از خوشه‌ها و توده‌های جابه‌جایی را گزارش کرده‌اند، که این تصاویر مستقیماً از تصاویر میکروسکوپ الکترونی (TEM)^۲، که از خوشه‌های تشکیل شده گرفته شده‌اند، به دست آمده‌اند [۵۱-۵۳]. در این تصاویر تشکیل توده‌های تهی‌جا در بمباران ورقه‌ی نازک طلا توسط یون‌های با انرژی در حد keV مشاهده می‌شود. آن‌ها نشان دادند که اتم‌های میان‌بافتی از طریق نزدیک‌ترین سطح آزاد، به سطح ماده می‌آیند و اینکه توده‌ها از فروپاشی هسته‌ی زنجیره‌های کاملاً تهی نتیجه می‌شوند. آن‌ها معتقدند که اصطلاح اندازه و توزیع توده‌ها، در اصل از اصطلاح اندازه و توزیع زنجیره‌ها نشأت گرفته است. در این کار اطلاعاتی از مشاهده‌ی یک توده‌ی مرئی که احتمال تشکیل آن با افزایش انرژی ذره‌ی بمباران شده و یا یون پس زده‌ی اولیه افزایش می‌یابد، به دست آمده است. مثلاً برای طلا، در انرژی هر ۵۰ keV انرژی منتقل شده یا بیشتر یک توده‌ی مرئی تولید شده است. در مواردی که انرژی منتقل شده بیشتر است، خوشه‌هایی از توده‌های مرئی مشاهده می‌شود. مرکل و همکارانش عنوان کردند که زنجیره‌های بزرگتر از ترکیب خوشه‌هایی با زنجیره‌های کوچک‌تر پدید می‌آیند، و نیز این زنجیره‌ها با انرژی‌های منتقل شده‌ی پایین‌تر هم تولید می‌شوند. همچنین مرکل بیان کرد که خوشه‌بندی زیرزنجیره‌ها در انرژی‌های بسیار پایین در عناصر سبک‌تر اتفاق می‌افتد و توده‌ی مرئی فقط زمانی که زیرزنجیره‌ها با هم تداخل کنند تشکیل می‌شود.

۳-۴ بررسی آسیب تابشی

مسئله‌ی آسیب تابشی در جامدات از دو منظر قابل بررسی است. رویکرد اول، که ممکن است آن را رویکرد مهندسی بنامند، مشخصه‌ی کاملی از ماده برای مجموعه‌ای از شرایط خاص مانند دُز، آهنگ دُز، دما، تاریخچه‌ی قبلی و ... را از نظر اندازه‌گیری ماکروسکوپیکی، در نظر می‌گیرد. این رویکرد اطلاعات اندکی از فرایندهای اتمی که عامل تغییر خواص اند بدست می‌دهد، و در کل پیش‌بینی موفقی از رفتار مواد تحت دیگر شرایط تابش ندارد. حتی بعضی مواقع تغییرات کوچک در شرایط بکار گرفته

^۱ Merkle

^۲ Transmission Electron Microscope

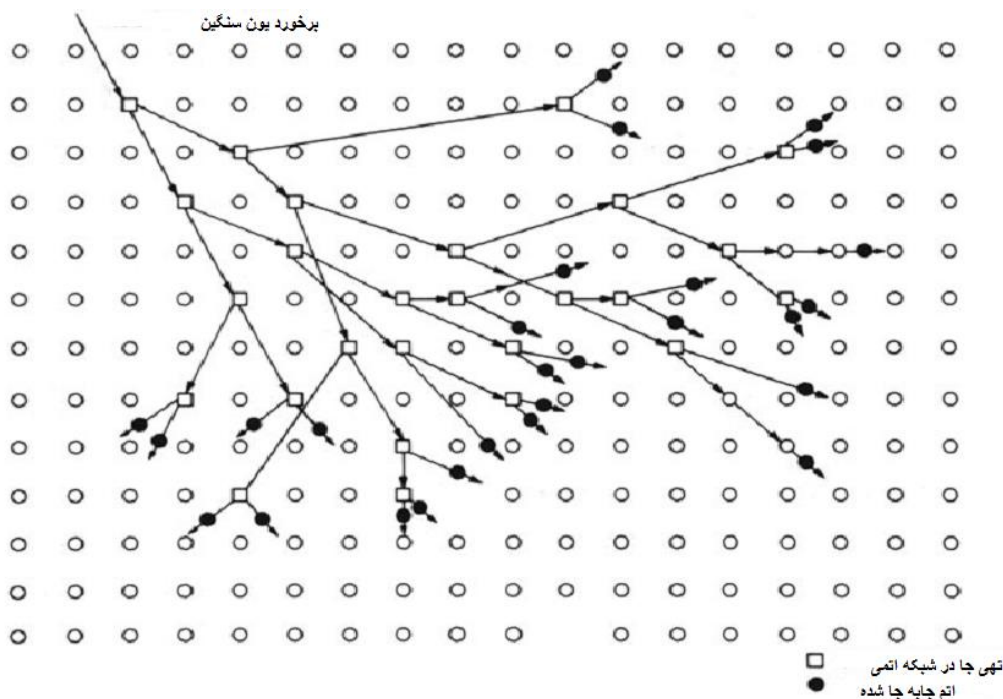
شده می‌تواند منجر به استخراج نتایج غیر قابل انتظار شود. از این رو رویکرد دوم، که مطالعه‌ی مشخصه‌ی مواد با توصیف میکروساختار و شناسایی مکانیسم اتمی است، متداول شده است. چندین روش متفاوت برای کسب اطلاعات در مورد ساختار مواد با استفاده از فرایندهای بنیادی مانند اشعه x ، پراکندگی نوترون و ذرات، یا در بعضی موارد طیف سنجی نقص وجود دارند. اما مستقیم‌ترین روش، "تصویر سازی" با میکروسکوپ الکترونی و میکروسکوپ یونی است.

تابش یون سنگین مخصوصاً در پیوند با این روش‌های میکروسکوپی، اطلاعات قابل توجهی در مورد مکانیسم‌های بنیادی آسیب تابشی و مخصوصاً در مطالعه‌ی اثر نوترون‌های سریع بدست می‌دهند. مزایای استفاده از پرتوی یون‌های سنگین آن است که انرژی، دُز و آهنگ دُز پرتوی یونی را می‌توان در محدوده‌ی خوبی کنترل کرد. از آنجا که آهنگ دُز ذرات باردار تولیدی در شتابدهنده‌ها می‌تواند بزرگ‌تر از راکتورهای با نوترون سریع باشد، می‌توان دُزهای جذبی زیادی را در زمان‌های مناسب در ماده‌ی هدف تولید کرد.

اگر بخواهیم به صورت کیفی در مورد آسیب یون سنگین با عبور یک یون از میان یک جامد بحث کنیم، انرژی یون از طریق برخورد با الکترون‌ها و اتم‌های جامد از دست می‌رود. آهنگ انرژی آزاد شده همچون قانون حاکم بر نسبت اتلاف انرژی الکترونی به اتلاف انرژی هسته‌ای، به سرعت یون وابسته است. اگر انرژی منتقل شده به شبکه اتمی بزرگ‌تر از انرژی آستانه E_d (معمولاً $\cong 40\text{eV}$) باشد در آن زمان اتم از مکانش در شبکه جابه‌جا خواهد شد و یک نقص فرنکل^۱ ایجاد می‌کند، یعنی یک تهی‌جا (مکانی خالی در شبکه) و یک اتم میان بافتی (اتمی که مکانی خارج از شبکه را اشغال کرده است). اگر انرژی منتقل شده خیلی بیشتر از keV باشد، اتم جابه‌جا شده قادر است اتم‌های دیگر را جابه‌جا کند که به نوبه‌ی خود ممکن است باعث ایجاد جابه‌جایی‌های بیشتری شوند. ترتیب این اتفاقات که زنجیره‌ی جابه‌جایی‌ها نامیده می‌شود در شکل ۳-۴ نمایش داده شده است. اتم‌های جابه‌جا

^۱ Frenkel defect

شده به سرعت مسافت آزاد میانگین شان کوتاه شده و برخوردها به طور قابل توجهی در فواصل نزدیک افزایش می یابند. ناحیه‌ی مرکزی زنجیره ممکن است حاوی چند صد نقص فرنکل در حجم نمونه‌ای در ابعاد 10 nm^3 باشد [۵۴].



شکل ۳-۴: نمایی از زنجیره‌ی برخورد [۵۴].

اگر انرژی برخورد یون E را به سه ناحیه‌ی مختلف تقسیم می کنیم [۵۴]:

$$E < 0 \text{ keV} \quad \text{i}$$

$$0 \text{ keV} < E < 200 \text{ keV} \quad \text{ii}$$

$$E > 200 \text{ keV} \quad \text{iii}$$

در انرژی‌های $E < 0 \text{ keV}$ برخوردهای یون‌های منفرد می‌تواند انرژی کافی برای تولید زوج‌های فرنکل منفرد یا آبشار جابه‌جایی‌های کم انرژی در ناحیه‌ای خیلی بسته (۱-۲nm) در سطح هدف را داشته باشند. یون‌های سنگین در این سطح انرژی تنها قادرند نقص‌های فرنکل مجزا از برخوردهای اولیه در نزدیکی سطح را تولید کنند. انرژی منتقل شده‌ی آستانه برای ایجاد جابه‌جایی‌ها، E_d ، به

جهت محورها با توجه به امتداد پرتوی یون و نوع شبکه بلوری (مانند fcc^۱ و bcc^۲) وابسته است. مقادیر نوعی انرژی برای فلزات خاص در محدوده $40\text{eV} - 20$ هستند. سیلسیبی^۳ [۵۵] در طی انجام آزمایش اشاره کرده که انرژی و تکانه می‌توانند در امتداد جهت پایین کریستالوگرافی^۴ متمرکز شوند، و اگر انرژی منتقل شده در هر برخورد بزرگ‌تر از E_d باشد، بنابراین ممکن است دنباله‌ای از جابه‌جایی‌ها منجر به جدایی قابل توجه اتم‌های میان‌بافتی از تهی‌جاها متناظرشان شود. این رویداد فرایند مهمی برای تابش یون کم انرژی در بلورها است، زیرا اگرچه ذرات با برخورد تنها می‌توانند در لایه‌های اتمی کمی نفوذ کنند اما نقص‌های منفرد و اتم‌های میان‌بافتی می‌توانند در عمق‌های قابل توجهی نفوذ کنند. دو نمونه از دنباله‌های برخورد جابه‌جایی در شکل ۳-۵ نشان داده شده است. آزمایشاتی در این ناحیه‌ی انرژی برای به دست آوردن اطلاعات از مکانیسم انتقال کم انرژی (همچون دنباله‌ی جابه‌جایی‌های متمرکز شده) که ممکن است میان‌بافتی‌ها را در فواصلی بزرگ (ده‌ها نانومتر) نفوذ دهند، طراحی شده‌اند.

در ناحیه‌ی انرژی $200\text{keV} - 5$ ، نقص‌ها در لایه‌های نازک در فاصله‌ای کمتر از ده نانومتر از سطح هدف تولید می‌شوند. انرژی یون‌های سنگین در این محدوده از انرژی، در عمق $20 - 10\text{nm}$ از سطح از دست می‌رود، همان‌طور که در بالا اشاره شد یون‌ها انرژی کافی برای تولید زنجیره‌ی برخورد شدید را دارا می‌باشند و با ایجاد یک زنجیره‌ی جابه‌جایی به حالت سکون می‌رسند (در شکل ۳-۴ نشان داده شده است).

در انرژی‌های $E > 200\text{keV}$ و بخصوص در انرژی‌های تا 1MeV ، ممکن است یون‌های برخورد کننده به صورت عمیقی در هدف نفوذ کنند و زنجیره‌های متراکم برخورد را فقط در انتهای

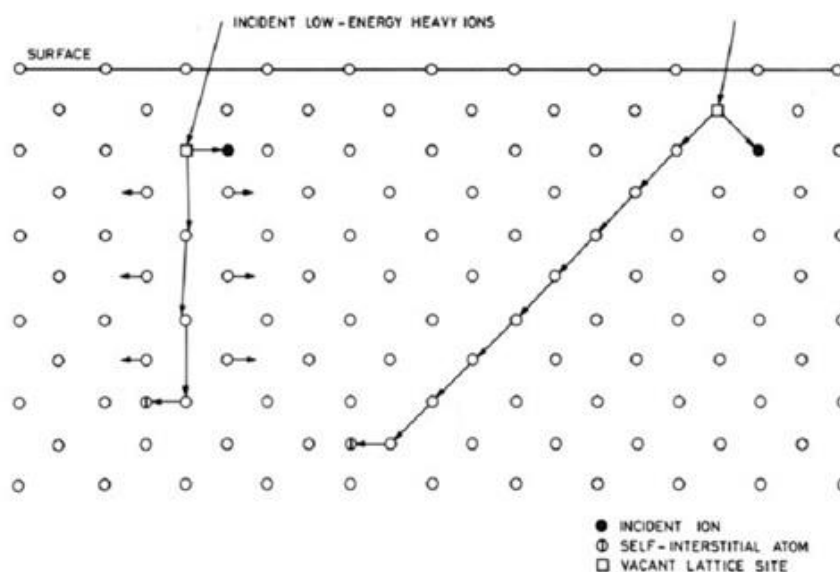
^۱ Face-centered-cubic

^۲ Body-centered-cubic

^۳ Silsbee

^۴ Crystallographic

مسیرشان وقتی که انرژی‌شان به $E < 200 \text{ keV}$ می‌رسد ایجاد کنند. آزمایشات در این ناحیه‌ی انرژی اغلب در دُزها و دماهای بالا انجام می‌شوند تا آسیب ایجاد شده با دُز بالا را در راکتور شبیه‌سازی کنند. چنین آزمایشاتی احتمالاً در راکتورهای همجوشی اهمیت بیشتری پیدا خواهند کرد. از آنجا که این ناحیه از انرژی در محدوده‌ی انرژی‌های بالاست و در ناحیه‌ی بررسی‌های ما نیست از توصیف این بخش صرف نظر کرده‌ایم.



شکل ۳-۵: تصویری از دنباله‌های برخورد جابه‌جایی [۵۴].

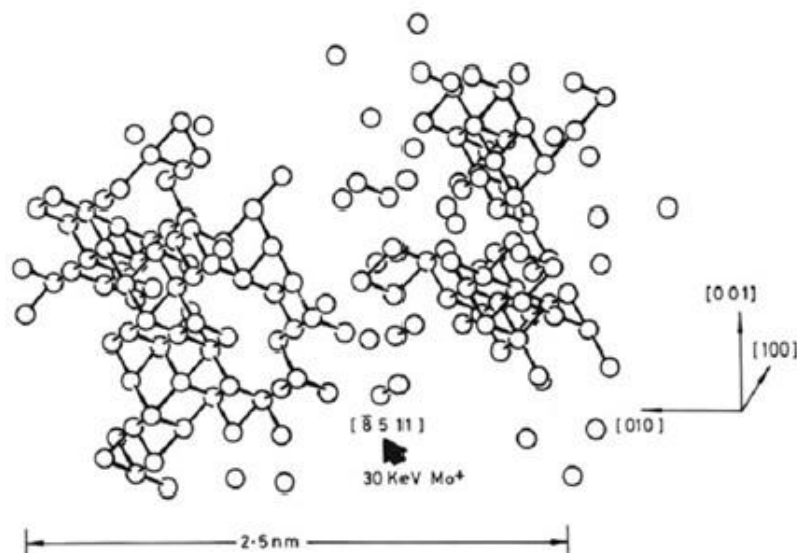
دو روش تجربی وجود دارد که این امکان را به ما می‌دهند تا آگاهی نسبی از زنجیره‌های جابه‌جایی داشته باشیم. روش اول میکروسکوپ یونی است، که این امکان را می‌دهد تا بازسازی دقیقی از ساختار یک نقص منفرد از زنجیره را داشته باشیم. روش دوم میکروسکوپ الکترونی است، که این امکان را می‌دهد تا نواحی‌ای از اختلال موضعی - که از ایجاد جابه‌جایی‌ها در زنجیره به وجود آمده‌اند - به تصویر کشیده شود. هر دو روش نتایجی بدست می‌دهند که در آن‌ها امکان مقایسه‌ی مستقیم با نظرات تحلیلی یا مدل‌های زنجیره‌ای منتج شده از شبیه‌سازی‌های کامپیوتری وجود دارد. هر روش نقاط ضعف خود را دارد. میکروسکوپ یونی تنها برای تعداد محدودی از مواد (اکثراً فلزات مقاوم که در

آن‌ها پیکربندی نقص توسط تنش‌های بالای مکانیکی ناشی از میدان‌های الکتریکی تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد) قابل اجرا است. روش میکروسکوپ الکترونی تنها در آلیاژهایی که دچار نقص شده‌اند قابل اجرا است و تمایز خوبی تنها در نواحی خیلی نازک از ورقه‌ها با ضخامت کمتر از 30 nm به دست می‌دهد. علی‌رغم این محدودیت‌ها، این دو روش قادرند به طور مستقل بیشتر ایده‌های اصلی از نظریه‌ی زنجیره را اثبات کنند [۵۴].

۳-۴-۱ میکروسکوپ یونی

در حال حاضر میکروسکوپ یونی تنها ابزار در دسترس با وضوح کاملاً اتمی است، که می‌تواند برای بررسی نمونه در سه بعد استفاده شود.

ساختاری از منطقه‌ی تهی‌جا که با تابش یون Mo^+ با انرژی 30 keV به تنگستن تولید شده است در شکل ۳-۶ [۵۶] نشان داده شده است. این زنجیره‌ی فشرده حاوی ۱۶۹ تهی‌جا است، که ۱۲۴ عدد از آن‌ها قسمتی از سه خوشه‌ی بزرگ هستند.

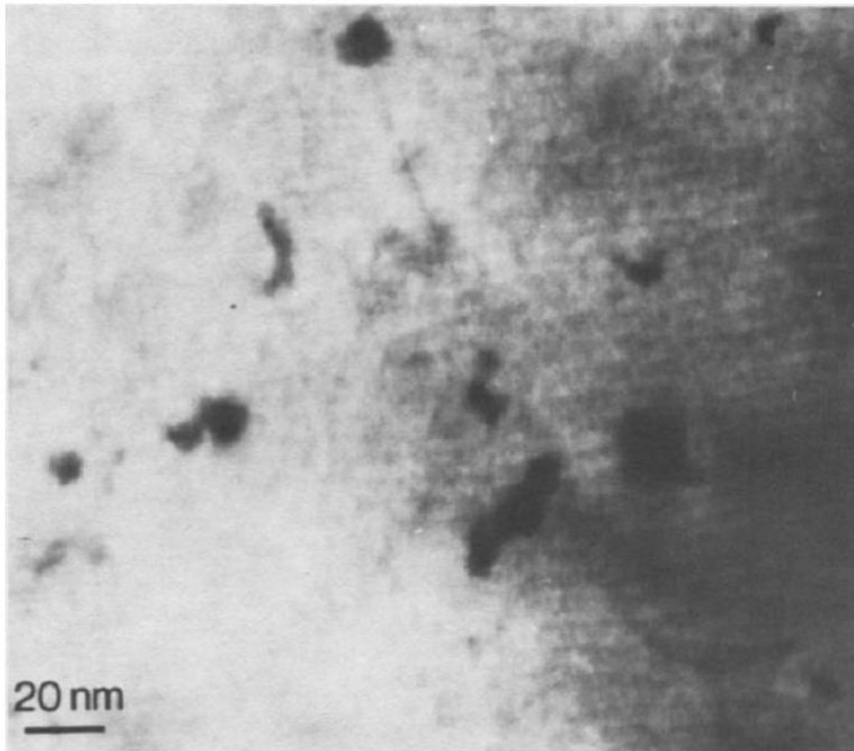


شکل ۳-۶: تصویری تجسمی از منطقه‌ی تهی‌جا، که با تک یون Mo^+ با انرژی 30 keV ایجاد شده است [۵۶، ۵۷].

۳-۴-۲ میکروسکوپ الکترونی

جنکینز^۱ و همکارانش توانستند با استفاده از میکروسکوپ الکترونی پیشرفته مناطق دنباله‌ی جابه‌جایی در آلیاژهای دارای نقص را مطالعه کنند [۶۰-۵۸]. این روش از این حقیقت استفاده می‌کند که یک دنباله‌ی جابه‌جایی در یک آلیاژ با ترکیبات یکنواخت، سبب ایجاد بی‌نظمی‌های موضعی می‌شود؛ یعنی منطقه‌ی بی‌نظم ایجاد شده در ناحیه‌ی زنجیره، در یک ماتریس منظم جایگزین می‌شود، که با میکروسکوپ الکترونی قابل مشاهده است [۶۰]. مثالی از مناطق بی‌نظم ایجاد شده در Cu_3Au با یون‌های Cu^+ با انرژی 100 keV در شکل ۳-۷ نشان داده شده است؛ نواحی زنجیره‌ای همچون نقاط تیره در نواحی نازک ورقه قابل دیدن هستند (برای وضوح بهتر $30 \text{ nm} \leq$ ضخامت است). این روش این امکان را می‌دهد تا تعداد، اندازه و شکل زنجیره‌های جابه‌جایی را با جزئیات بیشتر مطالعه کنیم.

^۱ M. L. Jenkins



شکل ۳-۷: میکروگرافی از مناطق اختلالی ایجاد شده به وسیله یون Cu^+ با انرژی 100 keV در Cu_3Au . تصویر برداری در بازتاب ابر شبکه‌ی $g=100$ انجام شده است [۵۴].

از طرفی روش حاضر به یک روش قدرتمند برای بررسی طیف یون‌های پس زده‌ی اولیه در محیط‌های مختلف تبدیل شده است، حال آنکه مقایسه‌ی دقیق داده‌های تجربی با مدل‌های نظری آسیب، اطلاعاتی ارزشمند از مکانیسم‌های آسیب را به دست می‌دهد. زنجیره‌ها در سیستم‌های آلیاژی متفاوت (مانند: Zr_3Al ، Nb_3Sn ، Cu_3Pd و Fe_3Al) با درجه موفقیت‌های مختلف، بررسی شده‌اند [۶۱].

۳-۴-۳ مطالعه‌ی زنجیره‌ها در غیر فلزات

اگرچه کاشت یون روشی است که به طور گسترده برای ناخالص سازی عناصر و نیمه هادی‌ها استفاده می‌شود، ولی در مورد ساختار زنجیره‌ی جابه‌جایی در نیمه هادی‌ها شناخت کمی وجود دارد؛ آزمایشاتی بر روی Si ، Ge ، GaP و GaAs انجام شده است که نشان می‌دهند تحت برخی شرایط - بخصوص وقتی که انرژی آزاد شده زیاد است - ساختار زنجیره در این مواد اساساً آمورف (نامنظم)

است. برای مثال، مطالعه‌ی آسیب تابش در سیلیکون با میکروسکوپ الکترونی توسط مایزی^۱ و همکارانش انجام شده است و آن‌ها در بررسی‌های خود مناطقی با قطر تقریبی ۵ nm پس از بمباران یون Ne⁺ با انرژی ۸۰ keV را گزارش داده‌اند. پس از بمباران با شدت 10^{17} یون/m² الگوی پراش الکترونی نشان می‌دهد که ماده آمورف (نامنظم) شده است [۶۲].

۳-۴-۴ تابش‌ها با دُز بالا

در دُزهای بالا (شدت $< 10^{16}$ یون/m²) تداخل زنجیره رخ می‌دهد و ساختار آسیب مشاهده شده در اصل به سادگی حوادثی که در یک تک زنجیره رخ می‌دهد، نیست. آزمایشات دُز بالا در فلزات اغلب برای شبیه‌سازی مراحل بعدی رشد آسیب در راکتور، مثلاً برای مطالعه‌ی تورم حفره‌ها استفاده می‌شود، اما معمولاً از انرژی بالا (> 200 keV) به منظور دستیابی به نفوذ خوب و در نتیجه شبیه‌سازی اثرات بزرگ استفاده می‌شود. خوشه‌بندی اتم‌های میان‌بافتی در آزمایشاتی با دُز بالا و انرژی کمتر از ۲۰۰ keV مشاهده شده است (برای مثال آزمایشات مسترز^۲ روی آهن [۶۳] و جانسون^۳ و همکاران روی آلومینیوم [۶۴]).

در شدت‌های بزرگتر از 10^{17} یون/m² آسیب‌ها معمولاً از نوع کاشت یون در عناصر و نیمه هادی‌ها هستند و در نتیجه معمولاً باعث ایجاد لایه‌های نامنظم می‌شوند که باید توسط عملیات حرارتی باز متبلور شوند. علاوه بر این، کاشت با شدت بالا می‌تواند سبب بلوری شدن با عبور از فاز بی‌نظمی شود [۶۵].

^۱ Mazey

^۲ Masters

^۳ Johnson

شمه سازی و انواع آن

یکی از روش‌های تجزیه و تحلیل سیستم‌ها، شبیه‌سازی است. این که مفهوم دقیق شبیه‌سازی چیست و چه موقع از آن استفاده می‌شود و دارای چه کاربردهایی است و چه مزایا و معایبی دارد و دارای چه فرایندی است، بحث‌هایی هستند که در این بخش به آنها خواهیم پرداخت.

برخلاف بسیاری از علوم فنی که می‌توانند برحسب رشته‌ای که منشاء آنها است رده‌بندی شوند (مانند فیزیک یا شیمی)، شبیه‌سازی در تمام رشته‌ها قابل استفاده است. انگیزه اصلی شبیه‌سازی ریشه در برنامه‌های فضایی دارد، اما حتی یک بررسی غیر رسمی نوشته‌های مربوط به شبیه‌سازی، می‌تواند زمینه وسیع کاربردهای فعلی آن را نشان دهد. به عنوان مثال رابرت شانون^۱ در کتاب خود (علم و هنر شبیه‌سازی سیستم‌ها) از کتاب‌هایی که در رابطه با کاربرد شبیه‌سازی در موارد زیر نوشته شده‌اند نام می‌برد [۶۶]. این موارد عبارتند از بازرگانی، اقتصاد، بازاریابی، تعلیم و تربیت، سیاست، علوم اجتماعی، علوم رفتاری، روابط بین‌الملل، ترابری، نیروی انسانی، اجرای قوانین، مطالعات شهری و سیستم‌های جهانی. بعلاوه تعداد بیشمار مقالات فنی، گزارش‌ها و رساله‌های دوره‌ی دکترا و کارشناسی ارشد، تقریباً در همه زمینه‌های اجتماعی، اقتصادی، فنی و انسانی، گواه بر تأثیر و رشد گسترده استفاده از شبیه‌سازی در تمام جنبه‌های زندگی دارد.

۱-۱-۴ تعریف شبیه‌سازی

از شبیه‌سازی تعاریف زیادی ارائه شده است اما جامع‌ترین و کامل‌ترین تعریف را شانون ارائه داده است. شانون شبیه‌سازی را چنین تعریف می‌کند «شبیه‌سازی عبارت از فرایند طراحی مدلی از سیستم واقعی و انجام آزمایش‌هایی با این مدل است که با هدف پی‌بردن به رفتار سیستم، یا ارزیابی استراتژی‌های گوناگون (در محدوده‌ای که به وسیله معیار و یا مجموعه‌ای از معیارها اعمال شده است)

^۱ Rabert Shanon

برای عملیات سیستم، صورت می‌گیرد» [۶۶]. شبیه‌سازی تقلیدی از عملکرد فرآیند یا سیستم واقعی با گذشت زمان است. هم‌چنان که یک سیستم با گذشت زمان تکوین می‌یابد، رفتار آن با ایجاد مدل شبیه‌سازی بررسی می‌شود. این مدل، معمولاً به‌شکل مجموعه‌ای از فرض‌های مربوط به عملکرد سیستم است. این فرض‌ها در چارچوب رابطه‌های ریاضی، منطقی و نمادین بین نهاده‌ها یا اهداف مورد نظر سیستم بیان می‌شود [۶۷]. بنابراین در می‌یابیم که فرایند شبیه‌سازی، هم شامل ساختن مدل و هم شامل استفاده تحلیلی از آن برای مطالعه‌ی یک مسئله است. در تعریف فوق، سیستم واقعی به معنای سیستمی که وجود دارد یا قابلیت ایجاد شدن را دارد، بکار رفته است.

۲-۴ موارد استفاده از شبیه‌سازی

شبیه‌سازی زمانی استفاده می‌شود که بعزت پیچیدگی سیستم مورد نظر، استفاده از روش‌های تحلیلی غیر عملی است. از این‌رو روش‌های مطالعه سیستم از طریق شبیه‌سازی مطرح می‌شود. غالباً پیچیدگی موجود در سیستم‌های واقعی به‌صورت اشکال زیر نمود پیدا می‌کند [۶۸]:

۱. حالت عدم اطمینان در سیستم؛ شبیه‌سازی، مکانیزمی سودمند را برای غلبه بر عدم اطمینان فراهم می‌آورد؛ بدون آنکه محدودیتی برای سیستم ایجاد کند.
۲. رفتار پویا؛ رفتار سیستم در طول زمان ثابت نیست و متغیرهای اصلی موجود، همانند بهره‌وری نیز در طول زمان متغیرند. برای تشخیص علّت تغییرات و کنترل آن، بایستی از مدل پویا و متناسب با تغییرات، استفاده شود.
۳. مکانیزم‌های بازخورد؛ رفتارهای انجام شده و تصمیمات اتخاذ شده در یک مرحله از یک فرآیند، قسمت‌های دیگر فرآیند را به‌طور مستقیم یا غیر مستقیم تحت تأثیر قرار می‌دهد و شناسایی این اثرات و علل آن، بسیار ضروری است.

۴-۲-۱ دلایل استفاده از شبیه‌سازی

شبیه‌سازی، تکنیکی کمی است که از آن برای مطالعه و ارزیابی گزینه‌های گوناگون استفاده می‌شود. این کار، از طریق مدل‌سازی سیستم واقعی و اجرای آزمایشات بر روی مدل، به‌منظور پیش‌بینی رفتار آینده، سیستم امکان‌پذیر است. این دلایل را می‌توان به‌صورت گزاره‌های زیر خلاصه کرد [۶۹]:

۱. استفاده از مدل‌های تحلیلی در زمینه ارزیابی و بهبود فرآیند تولید پایگاه‌های اطلاعات امکان‌پذیر نیست.

۲. هنگام استفاده از شبیه‌سازی، چهارچوب ساختاری مدل، به‌راحتی قابل تغییر است و به سوالات مختلف درباره اینکه "اگر سیستم واقعی چنین شود، چه پیش خواهد آمد؟" به‌راحتی پاسخ داده می‌شود. این خصوصیت شبیه‌سازی در مورد مراکزی که در محیطی پویا و متلاطم با متغیرهای در حال تغییر مداوم قرار دارند، بسیار مؤثر است.

۳. چنانچه هزینه اعمال تغییرات پیشنهادی زیاد باشد، شبیه‌سازی می‌تواند بسیار مفید بوده و حتی در بررسی مواردی که هنوز سیستم در عمل خلق نشده و فقط درباره روابط نظری آن اطلاعاتی در دسترس است، این ابزار تنها راه حل است.

۴. در شبیه‌سازی، امکان فشرده‌سازی زمان وجود دارد.

۴-۳ مراحل شبیه‌سازی

اصولاً پروژه‌های مبتنی بر شبیه‌سازی زمانی آغاز می‌شود که در سیستم، مسئله‌ای به وجود آید. در این زمان، برای شبیه‌سازی مدل مناسب، باید گام‌های زیر را طی کرد [۷۰]:

۱. تدوین مسئله؛ برای یافتن جواب مسئله باید فهمید که اصل آن چیست؟ بنابراین اولین قدم در آزمایش شبیه‌سازی، همانند هر آزمایش دیگری، تعیین هدف آزمایش است، چون این هدف است که نحوه‌ی آزمایش، جزئیات لازم و نتایج نهایی را تعیین می‌کند.

۲. تعریف سیستم؛ در این مرحله می‌بایست تعیین کرد که از چه روش‌ها و تکنیک‌هایی می‌توان برای بررسی و مطالعه‌ی سیستم استفاده کرد. تعریف سیستم در حقیقت، تعیین اجزای سیستم، عناصر و عوامل داخلی و خارجی محیط سیستم و پارامترها و متغیرهای سیستم را شامل می‌شود. پس از آن، روابط و قوانین حاکم میان ویژگی‌های سیستم و متغیرهای آن مشخص و یا فرموله شده، سپس چگونگی رفتار سیستم مورد بررسی قرار گرفته و جزئیات حاصل از تغییر متغیرها در سیستم معلوم می‌شود.

۳. تدوین مدل؛ هنر مدل‌سازی عبارت است از توانایی تحلیل مسئله، چکیده‌سازی خصایص آن، انتخاب مفروضات و سپس تکمیل و توسعه مدل تا زمانی که تقریب مفیدی از واقعیت به دست آید. هرچه مدل کامل‌تر باشد، وضعیت پیچیده را روشن‌تر منعکس می‌کند.

۴. تدارک داده‌ها؛ هر مطالعه‌ای، مستلزم جمع‌آوری داده‌ها است. در یک مدل شبیه‌سازی، داده‌های ورودی، باید با اطلاعات مربوط به اجزای سیستم و ارتباط میان آنها رابطه نزدیک داشته باشد. در این زمان تحلیل‌گر باید تصمیم بگیرد چه داده‌هایی مورد نیاز هستند و چگونه باید این اطلاعات را جمع‌آوری کرد.

۵. برگرداندن مدل؛ گام ششم با برگرداندن مدل برداشته می‌شود. در این مرحله باید مدلی که از سیستم تهیه شده را برای کامپیوتر توصیف کنیم. مدل‌های شبیه‌سازی، از لحاظ منطقی بسیار پیچیده بوده و دارای فعل و انفعالات متقابل بسیاری در بین عناصر سیستم هستند.

۶. تعیین اعتبار مدل؛ این مرحله، مهم‌ترین و مشکل‌ترین مرحله از مراحل شبیه‌سازی است.

تعیین اعتبار، یعنی آنکه آیا مدل ساخته شده رفتار سیستم واقعی را به درستی شبیه‌سازی و توصیف می‌کند؟ بنابراین آنچه که اهمیت دارد قابل اعتماد بودن مدل است نه حقیقت ساختار آن.

۷. برنامه‌ریزی استراتژیکی و تاکتیکی؛ برنامه استراتژیک یعنی طرح آزمایشی که اطلاعات مطلوب از آن حاصل می‌شود و برنامه‌ریزی تاکتیکی یعنی تعیین این موضوع که هر یک از آزمون‌های مشخص شده در طرح آزمایش، چگونه صورت می‌گیرد.

۸. آزمایش و تفسیر؛ در این مرحله، اشتباهات و نواقص برنامه‌ریزی آشکار می‌شود و مراحل اجرا شده مورد بازبینی قرار می‌گیرد.

۹. پیاده‌سازی و مستندسازی؛ موفقیت یک پروژه شبیه‌سازی را تنها می‌توان زمانی محقق دانست که مدل پذیرفته شده، تفهیم شود و مورد استفاده قرار گیرد. مستندسازی دقیق و کامل از چگونگی ایجاد، توسعه و نحوه عمل مدل، می‌تواند عمر مفید و شانس پیاده‌سازی موفق آن را افزایش دهد.

۴-۴ انواع شبیه‌سازی

۱. شبیه‌سازی همانی؛ در این روش، خود سیستم را به‌عنوان مدل آن در نظر گرفته و رفتار آن را بررسی می‌کنیم. به عبارت دیگر این روش، همان آزمایش مستقیم روی سیستم است و در صورت یافتن پاسخی برای مسئله مورد نظر، صد درصد قابل استفاده و مفید است.

۲. شبیه‌سازی نیمه‌همانی؛ در این روش، تا آنجا که امکان دارد، از اشیا و قوانین واقعی سیستم استفاده می‌کنیم. تنها، اشیا یا مراحل از سیستم واقعی که باعث غیر ممکن شدن شبیه‌سازی همانی است، مدل‌سازی می‌شود. به عبارت دیگر، بخشی از مدل سیستم، واقعی و بخش دیگر غیر واقعی یا شبیه‌سازی شده است.

۳. شبیه‌سازی آزمایشگاهی؛ در این روش، بعضی از نماها و اشیای سیستم واقعی، به‌وسیله‌ی امکانات آزمایشگاهی ساخته‌شده و بعضی نماها و روابط دیگر به وسیله سمبل‌ها جایگزین می‌شوند. مثل راداری که با امکانات و مقیاس آزمایشگاهی ساخته می‌شود.

۴. شبیه‌سازی کامپیوتری؛ در شبیه‌سازی کامپیوتری، مدل ساخته‌شده، برنامه‌ای کامپیوتری است که کلیه‌ی اشیا و نماهای سیستم، به ساختارهای برنامه‌ای و کلیه مشخصات و رفتار آن، به متغیرها و توابع ریاضی تبدیل شده و قوانین و روابط حاکم بر سیستم و ارتباطشان با یکدیگر، در درون برنامه در نظر گرفته می‌شود. شبیه‌سازی کامپیوتری (به‌علت عملی بودن و داشتن امتیازات خاص خود)، برای بررسی و مطالعه اغلب سیستم‌ها؛ از قبیل حمل و نقل، بیمارستان، سیستم‌های صنعتی، تولیدی، ترافیک، انبار و غیره بکار می‌رود. [۷۱]

در این فصل دو روش شبیه‌سازی کامپیوتری را که در فیزیک و شیمی بکار می‌روند به طور خلاصه معرفی می‌کنیم.

۴-۴-۱ روش مونت کارلو

روش مونت کارلو یک الگوریتم محاسباتی است که از نمونه‌گیری تصادفی برای محاسبه‌ی نتایج استفاده می‌کند. روش‌های مونت کارلو معمولاً برای شبیه‌سازی سیستم‌های فیزیکی، ریاضی و اقتصادی استفاده می‌شوند.

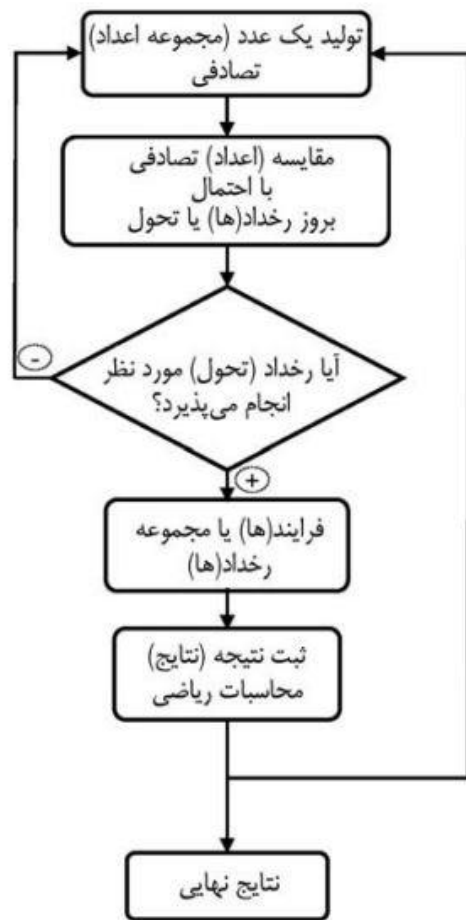
از طرف دیگر روش مونت کارلو یک طبقه از الگوریتم‌های محاسبه‌گر می‌باشد که برای محاسبه‌ی نتایج خود بر نمونه‌گیری‌های تکرار شونده‌ی تصادفی اتکاء می‌کند. روش‌های مونت کارلو اغلب زمان انجام شبیه‌سازی یک سامانه ریاضی یا فیزیکی استفاده می‌شوند. به دلیل اتکای آن‌ها بر محاسبات تکراری و اعداد تصادفی یا تصادفی کاذب، روش‌های مونت کارلو اغلب به گونه‌ای تنظیم می‌شوند که توسط رایانه اجرا شوند. گرایش به استفاده از روش‌های مونت کارلو، زمانی که محاسبه‌ی

پاسخ دقیق با کمک الگوریتم‌های قطعی ناممکن یا ناموجه باشد، بیشتر می‌شود. روش‌های شبیه‌سازی مونت کارلو مخصوصاً در مطالعه‌ی سیستم‌هایی که در آن تعداد زیادی متغیر با درجه آزادی‌های دو به دو مرتبط وجود دارد مفید است، از جمله این سیستم‌ها می‌توان به سیالات، جامداتی که به شدت جفت شده‌اند، مواد بی‌نظم و ساختارهای سلولی اشاره نمود. از آن گذشته، روش‌های مونت کارلو برای شبیه‌سازی پدیده‌هایی که عدم قطعیت زیادی در ورودی‌های آن‌ها وجود دارد نیز مفید هستند، مثلاً محاسبه ریسک در تجارت. همچنین این روش‌ها به طور گسترده‌ای در ریاضیات مورد استفاده قرار می‌گیرند: یک نمونه استفاده سنتی، کاربرد این روش‌ها در برآورد انتگرال‌های نامعین است، به خصوص انتگرال‌های چند بعدی با محدوده‌های مرزی پیچیده [۷۲].

تنها یک روش مونت کارلو وجود ندارد، بلکه این واژه به گستره‌ی وسیعی از روش‌هایی که بسیار از آن‌ها استفاده می‌شود، اطلاق می‌گردد. به هر حال، این رویکردها از یک الگوی مشخصی پیروی می‌کنند:

۱. محدوده‌ای از ورودی‌های ممکن را تعریف می‌کنند.
۲. از آن محدوده ورودی‌های تصادفی را تولید می‌کنند.
۳. با استفاده از ورودی‌های بدست آمده یک سری محاسبات مشخص را انجام می‌دهند.
۴. نتایج هر یک از اجراهای محاسباتی را در پاسخ نهایی لحاظ می‌کنند.

در شکل ۴-۱ نیز می‌توانید یک روال از محاسبات در یک شبیه‌سازی مونت کارلو را مشاهده کنید.



شکل ۴-۱: نمودار فرایند محاسبات در یک شبیه‌سازی مونت کارلو [۷۲].

هر الگوریتم محاسباتی و شبیه‌سازی مونت کارلو در شکل ساده یا پیچیده شامل چند جزء اصلی است. این اجزا می‌توانند بیش از یک بار، به‌طور مستقل و یا متداخل و در بخش‌های مختلف الگوریتم تکرار شوند. این اجزا عبارتند از اعداد تصادفی، تابع توزیع احتمال، قواعد نمونه برداری، تخمین خطا و کاهش انحراف معیار پراکندگی، موازی سازی محاسبات و الگوریتم متروپلیس هستند [۷۲-۷۴].

از کدهای شبیه‌سازی که مبنای آن‌ها روش مونت کارلو است می‌توان MCNP و Geant4 را نام برد که در فیزیک هسته‌ای، مهندسی هسته‌ای و پزشکی کاربرد دارند.

۴-۴-۲ روش دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی یکی از شاخه‌های فیزیک محاسباتی است. در این روش برهم‌کنش میان اتم‌ها و ملکول‌ها در بازه‌هایی از زمان بر اساس قوانین فیزیک، به وسیله کامپیوتر شبیه‌سازی می‌شود. این روش برای اولین بار در سال ۱۹۵۷ توسط آلدِر^۱ و واین‌رایت^۲ بر مبنای مدل کره سخت به کار گرفته شد [۷۵]. در سال ۱۹۶۴ رحمان^۳ مدل کره نرم را در شبیه‌سازی خود به کار برد. از وی به عنوان پدر دینامیک مولکولی یاد می‌شود [۷۶].

دینامیک مولکولی ابزاری قدرتمند جهت مدل‌سازی سیستم‌ها و پدیده‌های مختلف در مقیاس نانو می‌باشد. اهمیت موضوع مدل‌سازی در دو زمینه قابل بحث است. یکی در زمینه مدل‌سازی نمونه‌های زیستی جهت کشف و درک فرآیندهای مختلفی که در مقیاس‌های کوچک در دورن سلول و بدن اتفاق می‌افتد و طراحی دارو و ابزارهای مناسب جهت بهبود عملکرد سیستم‌های زیستی بر اساس مدل‌سازی و طراحی مناسب. زمینه دوم مدل‌سازی ابزارها و ادواتی است که در سال‌های اخیر در مقیاس نانو ساخته شده‌اند و همچنین سایر سیستم‌های در مقیاس نانو.

دینامیک مولکولی شکلی از شبیه‌سازی کامپیوتری است که در آن اتم‌ها و مولکول‌ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده فیزیک باهم برهم‌کنش کنند و چشم‌اندازی از حرکت اتم‌ها بدهند. از آنجائیکه سیستم‌های مولکولی عموماً شامل تعداد زیادی از ذرات هستند امکان پذیر نیست که ویژگی‌های سیستم‌های پیچیده را به‌طور تحلیلی بدست آوریم. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی این مساله را با بکار بردن روش محاسباتی حل می‌کند. این روش یک واسطه بین تجربیات آزمایشگاهی و نظریه ایجاد می‌کند و به عنوان یک آزمایش مجازی در نظر گرفته می‌شود. دینامیک

^۱ Alder

^۲ Wainwright

^۳ Anees Rahman

مولکولی روابط بین ساختار مولکول‌ها، حرکت مولکول‌ها و توابع مولکولی را بررسی می‌کند. دینامیک مولکولی یک روش منظم چندگانه است. قوانین و نظریه‌های آن از ریاضیات، فیزیک و شیمی بدست می‌آید و الگوریتم‌هایی را از علم رایانه و نظریه اطلاعات بکار می‌برد. دینامیک مولکولی ابتدا در فیزیک نظری در دهه ۱۹۵۰ استفاده شد [۷۵،۷۶]. اما امروزه بیشتر در علم مواد و زیست مولکول بکار می‌رود. قبل از اینکه امکان شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با رایانه‌ها به وجود بیاید عده‌ای کار سخت آزمایش کردن آن بوسیله مدل‌های فیزیکی مانند کره‌های ماکروسکوپی را متعهد شدند. از دیگر مزایای استفاده از این برنامه‌ی شبیه‌سازی این است که تمام فعالیت‌ها و شروط قید شده در زمان‌های مختلف که در برنامه لحاظ می‌شود را در خود ذخیره می‌کند [۷۷].

در بررسی دینامیک مولکولی، ابتدا سیستمی شامل n ذره در داخل جعبه‌ای به نام جعبه محاسبات در نظر گرفته می‌شود. در شبیه‌سازی‌های سه بعدی جعبه محاسبات معمولاً به شکل مکعب انتخاب می‌شود. اما بنا به ضرورت می‌توان آن را به شکل‌های دیگری نیز انتخاب کرد. مکان اولیه ذرات، با توجه به چگالی ماده و بسته به اینکه سیستم مورد نظر بلور یا غیر بلور است، تعیین می‌شود. شرایط اولیه دیگری که به سیستم اعمال می‌شود، انتساب سرعت‌های معین به ذرات است. سرعت‌ها طوری انتخاب می‌شوند که تکانه خطی کل سیستم و میانگین انرژی جنبشی ذرات آن، مبین دمای مورد نظر باشد. با دانستن قانون نیرو و پتانسیل بین دو ذره، این مدل از نظر ریاضی قابل حل است. به این ترتیب که برای هر ذره، جمع نیروهای وارد بر آن را در اثر وجود بقیه ذرات محاسبه کرده و شکل دیفرانسیلی قانون دوم نیوتن را می‌نویسیم.

برای n ذره تعداد $6n$ معادله دیفرانسیلی معمولی خواهیم داشت. حل تحلیلی این دستگاه معادله‌ها وقتی که n بزرگتر از ۲ است دچار اشکال می‌شود. اما حل عددی آنها کار آسانی است. معادله‌های دیفرانسیلی را به معادله‌های تفاضلی گسسته تبدیل می‌کنیم و آن وقت با استفاده از گام زمانی مناسب، می‌توانیم مکان و سرعت همه ذرات در هر گام را به دست بیاوریم. با دانستن مکان و

سرعت ذرات در هر گام می‌توان تمام خواص استاتیکی و دینامیکی سیستم را محاسبه کرد. از دیدگاه نظریه پردازان، اهمیت بررسی‌های دینامیک مولکولی در این است که نتایج شبه تجربی دقیقی را برای یک مدل کاملاً مشخص فراهم می‌کند. بنابراین استنتاج‌های نظری را می‌توان با اطمینان به کمک تجربه گذاشت.

روش دینامیک مولکولی، قابلیت‌های متنوعی دارد که آن را برای هر دو گروه نظریه پرداز و آزمایشگر جالب می‌کند. از جمله توانایی در وصول نتایجی که به آسانی در آزمایشگاه قابل اندازه‌گیری نیستند و دسترسی به جزئیات سیستم در هر زمان و مکان انجام آزمایش در شرایط جالب و احیاناً غیر فیزیکی می‌سازد.

تفاوت آشکار میان روش‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مونتِ کارلو که دو روش عمده شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای به شمار می‌آیند در آن است که دینامیک مولکولی اطلاعاتی درباره وابستگی زمانی خواص سیستم در اختیار می‌گذارد، درحالی که بین پیکربندی‌های متوالی مونت کارلو ارتباط زمانی وجود ندارد. در روش‌های دینامیک مولکولی، که جزء روش‌های تعینی هستند، پیکربندی‌های پی‌درپی سیستم با هم ارتباط زمانی دارند، اما در روش‌های مونت کارلو، که جزء روش‌های کاتوره‌ای هستند، هر پیکربندی فقط به پیکربندی قبل از خود وابسته است. بر خلاف روش‌های مکانیک کوانتومی (که در آن اثرات الکترون‌ها در نظر گرفته می‌شوند) می‌توان از روش‌های دینامیک مولکولی (که فقط هسته‌ها در نظر گرفته می‌شوند) برای بررسی رفتار دینامیکی ماکرومولکول‌های زیستی مانند پروتئین‌ها، اسیدهای نوکلئیک (DNA, RNA) و ... استفاده کرد [۷۵].

۵ فصل پنجم:

کدشبه سازی Geant4

طرح آزمایشات در حوزه‌ی ذرات مدرن و فیزیک هسته‌ای رقابتی سخت در ایجاد نرم‌افزارها و ابزارهای محاسباتی و شبیه‌سازی به وجود آورده است. اهمیت خاص آن‌ها افزایش روز افزون در شبیه‌سازی‌های دقیق و جامع از آشکارسازهای ذرات است که در این آزمایشات استفاده شده‌اند. همچنین تقاضا در مورد اندازه، پیچیدگی و حساسیت آشکارسازها و در دسترس بودن آن‌ها با حداقل هزینه، و نیز سیستم‌های کامپیوتری با توان بالا که در آن انجام پیچیده‌ترین شبیه‌سازی‌ها ممکن باشد، به شدت افزایش یافته است. به‌طور مشابه این خواسته‌ها در دیگر رشته‌ها، مثل: فیزیک پرتو، علوم فضایی، پزشکی هسته‌ای و در واقع هر جایی که برهم‌کنش ذرات در ماده نقشی ایفا می‌کند، افزایش یافته است.

در پاسخ به این خواسته‌ها، ابزار شبیه‌سازی شیء‌گرای Geant4 توسعه پیدا کرد. این ابزار یک محدوده‌ی وسیع، متنوع و در عین حال مجموعه‌ای منسجم از اجزای نرم‌افزاری فراهم می‌کند، که می‌توانند در مجموعه‌ای از تنظیمات بکار گرفته شوند [۷۸].

Geant4 ابزاری به منظور شبیه‌سازی مسیر ذرات در ماده بوده و موتور شبیه‌سازی مرجع برای آزمایشات LHC^۱ در سرن و آزمایشگاه‌های انرژی بالا در سرتاسر جهان می‌باشد. کد Geant4 کامل‌ترین کد شبیه‌سازی در زمینه‌های ذکر شده می‌باشد که به روش مونت کارلو عمل می‌کند. مزیتی که نسبت به سایر کدهای شبیه‌سازی دارد در این است که قادر به لحاظ کردن میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی و الکترومغناطیسی در شبیه‌سازی نیز می‌باشد [۷۸،۷۹].

این کد براساس زبان برنامه نویسی C++ نوشته شده است و تکنیک‌های بسیار پیشرفته‌ی مهندسی نرم‌افزار و ویژگی‌های گرایبی را مورد استفاده قرار داده است. ولی توجه داشته باشید که یادگیری این کد شما را ملزم به فراگیری کامل زبان C++ نمی‌کند، کفایت اطلاعات پایه‌ای مانند تعریف متغیر و تابع و ... را مطالعه کنید. پس نکته جالب توجه این کد در این می‌باشد با کمترین اطلاعات از زبان C++ می‌توانید از این کد استفاده کنید [۸۰].

Geant4 ابزاری برای شبیه‌سازی عبور ذرات از میان مواد است. این کد شامل طیف کاملی از قابلیت‌ها از جمله ردیابی، طراحی هندسه و مدل‌های فیزیکی است. فرایندهای برهم‌کنش‌های فیزیکی ارائه شده طیف جامعی از الکترومغناطیس، فرایندهای هادرونی و نوری، مجموعه‌ای وسیع از ذرات و مواد و عناصر با عمر طولانی، طیفی وسیع از محدوده‌های انرژی (از ۱ keV تا TeV) هستند. این ابزار حاصل همکاری فیزیکدانان و مهندسی نرم‌افزار سرتاسر جهان است [۷۷].

۲-۵ کاربردهای کد Geant4

این کد در تمام زمینه‌هایی که به نوعی با پرتو سروکار دارند کاربرد دارد مانند [۸۱]:

^۱ Large Hadron Collider

۵-۲-۱ کاربرد در زمینه پزشکی

این کد قادر به شبیه‌سازی برهم‌کنش انواع پرتوها با مواد مختلف می‌باشد و نیز شما را قادر می‌سازد که شتاب‌دهنده‌های درمانی را شبیه‌سازی کنید و همچنین از این کد به عنوان یک برنامه طراحی درمان دقیق استفاده کنید.

کاربردهای این کد در زمینه‌ی پزشکی عبارتند از :

۱- براکی تراپی

۲- رادیو تراپی

۳- حفاظ سازی در برابر پرتوها

۴- تأثیر پرتودهی در مقیاس DNA (توسط این کد قادر خواهید بود تأثیر پرتودهی بر روی بافت‌های زنده را شبیه‌سازی کنید).

۵- BNCT و ...

۵-۲-۲ کاربرد در تششعات فضایی

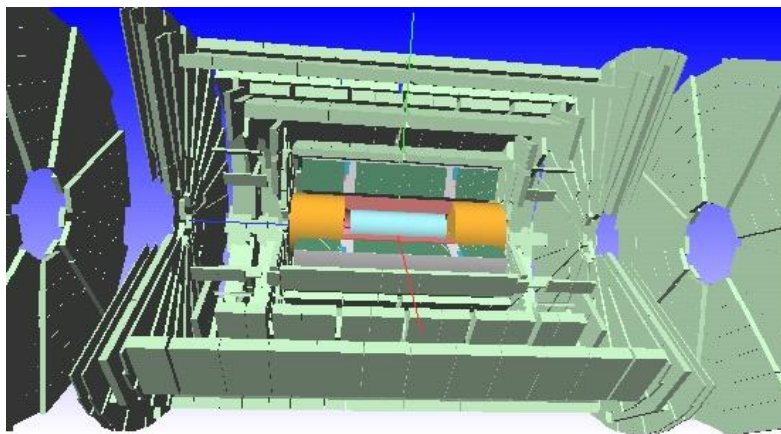
این کد توانایی محاسبات مرتبط با تششعات فضایی را دارا می‌باشد. با توجه به تأثیرات بیولوژیکی که پرتوهای کیهکسانی دارند باید با توجه به این پرتوها اثرات مورد مطالعه قرار گیرد. دامنه کاربرد این کد :

۱. سیستم‌های الکترونیکی و آشکارسازهای علوم فضایی

۲. شبیه‌سازی خطرات تابش روی فضانوردان

۳-۲-۵ کاربرد Geant4 در فیزیک ذرات انرژی بالا^۱

همانطور که گفته شد این کد در سرن توسعه پیدا کرده است و قادر است تمام ذراتی که تا حالا در فیزیک شناخته شده‌اند را شبیه‌سازی کند و می‌تواند محدوده‌ی انرژی از چند الکترون ولت تا چندین گیگا الکترون ولت را شبیه‌سازی کند. این کد قادر است پیچیده ترین هندسه‌ها را پیاده سازی کند. در شکل زیر نمایی از یک آشکارساز ذرات با انرژی بالا نمایش داده شده است.



شکل ۵-۱: یک آشکارساز ذرات با انرژی بالا که به وسیله‌ی کد Geant4 شبیه‌سازی شده است [۸۱].

وقتی ذره‌ای با انرژی بالا به ماده‌ای برخورد می‌کند این کد قادر است به صورت آنلاین مسیر ذرات را نمایش داده و حتی مسیر ذرات ثانویه‌ای که در اثر برخورد به وجود می‌آیند را نیز با رنگ‌های متفاوت نمایش دهد و هندسه به صورت سه بعدی قابل نمایش می‌باشد و حتی قادر خواهید بود این تصاویر را ذخیره کنید. این کد کامل‌ترین کد برای شبیه‌سازی ذرات با انرژی بالا می‌باشد و یادگیری این کد را دانشجویان فیزیک پیشنهاد می‌کنیم.

^۱ High Energy Physics

محاسبه و نتایج شبیه‌سازی‌های دینامیکی

همان طور که در فصول قبل هم اشاره شد، برخورد پرتوی تابشی به ماده باعث انتقال انرژی از پرتوی فرودی به اتم‌های هدف می‌شود. اگر انرژی پرتابه به حد کافی باشد، انتقال انرژی از پرتو به یک اتم اغلب چند بار بزرگ‌تر از انرژی بستگی اتم به ساختار شبکه‌ای ماده است، لذا اتم می‌تواند از مکان خود در ساختار جابه‌جا شود. علاوه بر این، ممکن است اتم‌های جابه‌جا شده به وسیله‌ی برخورد پرتوها انرژی زیادی دریافت کنند که آن‌ها نیز می‌توانند به نوبه‌ی خود اتم‌های دیگر در ساختار را جابه‌جا کنند و زنجیره‌ای از برخوردها و جابه‌جایی‌های اتمی را ایجاد کنند. همچنین این برخوردها می‌توانند باعث برانگیزش و یونش ماده شوند. در نهایت این برخوردها چه با هسته‌ی اتم و چه با الکترون‌های آن باعث تغییراتی در ساختار ماده و در نتیجه در خواص ماده‌ی هدف می‌شود. این تغییرات به نوبه‌ی خود به مقدار انرژی آزاد شده در ماده‌ی هدف وابسته است [۲۳، ۸۲، ۸۴، ۸۵]. ما قصد داریم در این فصل با استفاده از شبیه‌سازی به محاسبه‌ی این مقدار انرژی یا همان دُز جذب شده توسط ماده بپردازیم. ما در اینجا مقدار دُز جذب شده از برهم‌کنش الکترون، پروتون و گاما با اهداف کربنی (C)، مسی (Cu) و سیلیکونی (Si) را با استفاده از کد Gean4 محاسبه می‌کنیم.

۱-۶ شبیه‌سازی هندسه، چشمه و محاسبه‌ی دُز جذب شده برای پرتوهای الکترون و

پروتون

دُز جذبی طبق تعریف، انرژی جذب‌شده از پرتو در هدف بر واحد جرم ماده جذب‌کننده است.

$$D \left(\frac{J}{Kg} \right) = \frac{E}{m} \quad ۱-۶$$

که در آن D مقدار دُز جذب شده بر حسب گری، E انرژی جذب شده در ماده بر حسب ژول و m جرم ماده‌ی هدف بر حسب کیلوگرم است.

با استفاده از کد شبیه‌سازی Geant4 یک آزمون پرتودهی را با اهداف کربنی (C)، مسی (Cu)، سیلیکونی (Si) و چشمه‌های الکترون و پروتون با انرژی 200 keV با تعداد 10^7 ذره فرودی به هدف شبیه‌سازی کرده‌ایم.

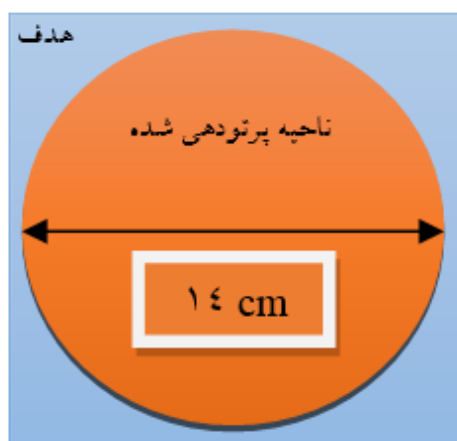
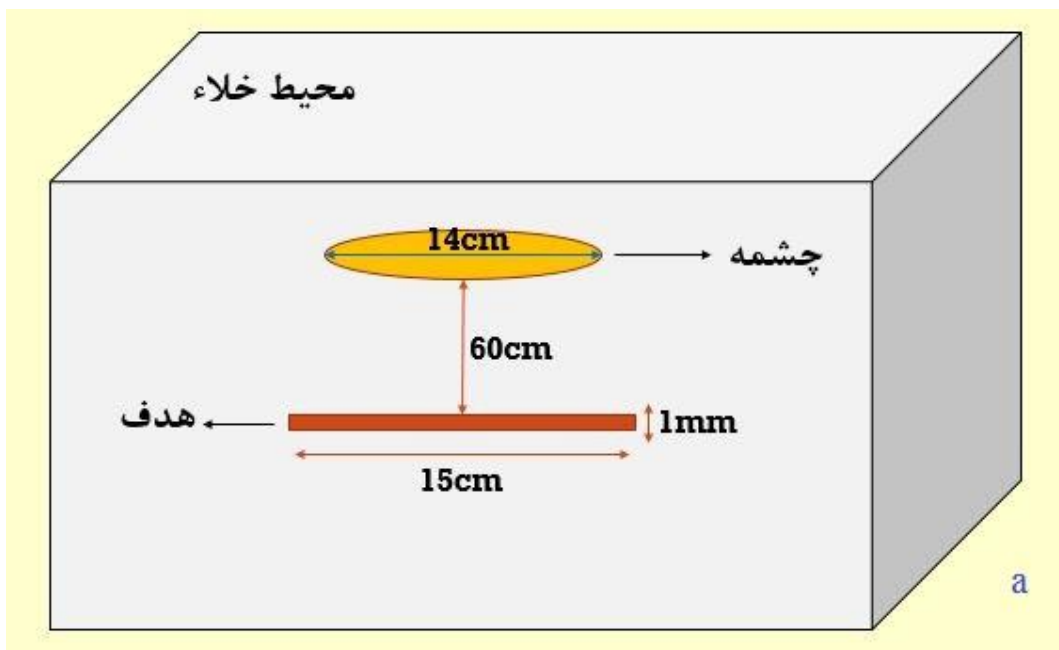
در این شبیه‌سازی هدف را به صورت یک صفحه‌ی مربعی به ضلع 15 cm و ضخامت 1 mm، در نظر گرفته‌ایم. چشمه نیز به صورت یک باریکه دایره‌ای با قطر 14 cm در نظر گرفته شده است و چشمه در فاصله 60 cm از هدف روی محور z واقع گردیده است. لازم به ذکر است که دلیل انتخاب ابعاد هدف این است که وقتی برد ذرات فرودی در این اهداف را محاسبه می‌کنیم، درمی‌یابیم که باید ضخامت ماده را طوری انتخاب کنیم که ذره در داخل ماده هدف متوقف شود و حداکثر انرژی خود را در داخل ماده باقی بگذارد، بنابراین حداقل ضخامت در نظر گرفته شده برای این منظور 1 mm است. از طرفی قطر باریکه را باید طوری انتخاب کنیم که گرمای ایجاد شده از جریان پرتوها ماده‌ی هدف را از بین نبرد. همچنین فاصله‌ی چشمه از هدف به صورت دلخواه انتخاب می‌شود چرا که سیستم در یک محیط خلاء قرار دارد و فاصله‌ی چشمه از هدف تأثیری ب شدت جریان ندارد. باید اشاره کنیم که چشمه به صورت جداگانه و در یک فایل ماکرو^۱ تعریف می‌شود. نمونه‌ای از این فایل در شکل ۶-۱ مشاهده می‌شود. همان طور که مشاهده می‌کنید در این فایل ابتدا مشخصات چشمه از قبیل نوع ذره‌ی ساطع شده، نحوه‌ی انتشار، مختصات و انرژی آن را وارد می‌نماییم، سپس ناحیه یا نواحی را که می‌خواهیم مقدار انرژی آزاد شده، دُز و یا دیگر پارامترهایی که در کد تعریف شده‌اند، در آن ناحیه محاسبه شود را به صورت شبکه (Mesh) با مختصات و بازه‌بندی‌های دلخواه تعریف می‌کنیم، در آخر نیز تعداد ذره‌ی دلخواه برای برهم‌کنش و ایجاد فایلی برای ذخیره‌ی مقادیر محاسبه شده را تعریف می‌کنیم. در مسئله‌ی ما نوع ذره‌ی پرتابی الکترون و پروتون است که به صورت موازی و یکنواخت در یک صفحه‌ی دایره‌ای در جهت zهای منفی انتشار می‌یابند. از طرفی شبکه‌ی تعریف شده برای

^۱ Macro File

محاسبه‌ی دُز در آن، به شکل ماده‌ی هدف یعنی یک شبکه‌ی مربعی که ابعاد آن همانند ماده‌ی هدف دارای طول و عرض ۱۵cm و ارتفاع ۱mm است، که طول و عرض آن هر کدام به ۵۰ بازه و ضخامت آن به ۱۰ بازه تقسیم‌بندی شده است. توجه داشته باشید که سطح اولیه‌ی ماده در $z=9$ قرار دارد و z های پایین‌تر نشان‌دهنده‌ی عمق‌های داخلی ماده هستند. گفتنی است که هدف و چشمه هر دو در اتاقکی از خلاء با فشاری در حدود 10^{-18} پاسکال فرض شده‌اند تا از برخورد پرتوها با دیگر ذرات و اتلاف انرژی جلوگیری شود. نمایی از هندسه‌ی شبیه‌سازی‌شده را در شکل ۶-۲ و شکل ۶-۳ مشاهده می‌نمایید.

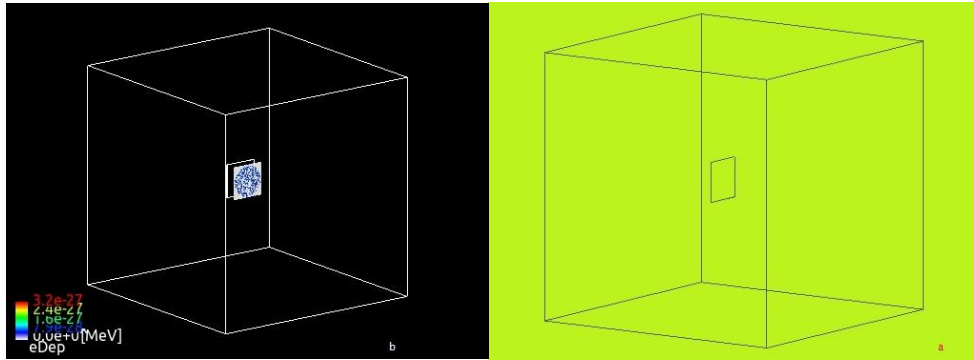
```
/gps/particle e-  
/gps/pos/type Plane  
/gps/pos/shape Circle  
/gps/pos/centre 0. 0. 60. cm  
/gps/pos/radius 7. cm  
#/gps/pos/halfz 20. cm  
/gps/direction 0 0 -1  
/gps/energy 0.2. MeV  
  
/score/create/boxMesh box_1  
/score/mesh/boxSize 7.5 7.5 0.05 cm  
/score/mesh/translate/xyz 0. 0. 0.5 cm  
/score/mesh/nBin 50 50 10  
/score/quantity/doseDeposit dDep  
  
/score/close  
  
/score/list  
  
/vis/disable  
/run/beamOn 100000  
/vis/enable  
/score/dumpQuantityToFile box_1 dDep C-e1000.txt  
/score/drawProjection box_1 dDep
```

شکل ۶-۱: یک نمونه فایل ماکرو ایجاد شده در کد Geant4 که در آن مشخصات چشمه وارد می‌شود.



b

شکل ۶-۲: (a) نمایی از هندسه‌ی سیستم تابش‌دهی. (b) چشمه و هدف از نمای بالایی- قطر شار تابشی ۱۴ cm است.



شکل ۳-۶: (a) نمایی از هدف و اتاقک خلاء شبیه‌سازی شده با کد Geant4. (b) نمایی از هدف پس از پرتودهی (هر دو شکل از کد Geant4 استخراج شده است).

دُز جذب‌شده در هدف با استفاده از رابطه‌ی توان توقف و با توجه به برد ذره‌ی نفوذی در هدف برای الکترون و پروتون به دست می‌آید. دُز جذبی نیز توسط کد Geant4 محاسبه می‌گردد. همچنین برای به‌دست آوردن برد پرتو در هدف می‌توان از نرم‌افزار^۱ SRIM [۸۶] استفاده کرد که البته این نرم‌افزار تنها برای یون‌ها کاربرد دارد و برای بدست آوردن برد الکترون و یا گاما باید از روابط خاص خودشان استفاده کرد.

روابط تئوری‌ای که از آن‌ها برای به‌دست آوردن توان توقف استفاده می‌شود به‌قرار زیر است که در بیشتر کتاب‌های آشکارسازی ذکر شده‌اند. رابطه‌ی اول برای توان توقف پروتون و رابطه‌ی دوم برای توان توقف الکترون بکار می‌رود [۷، ۸۳]:

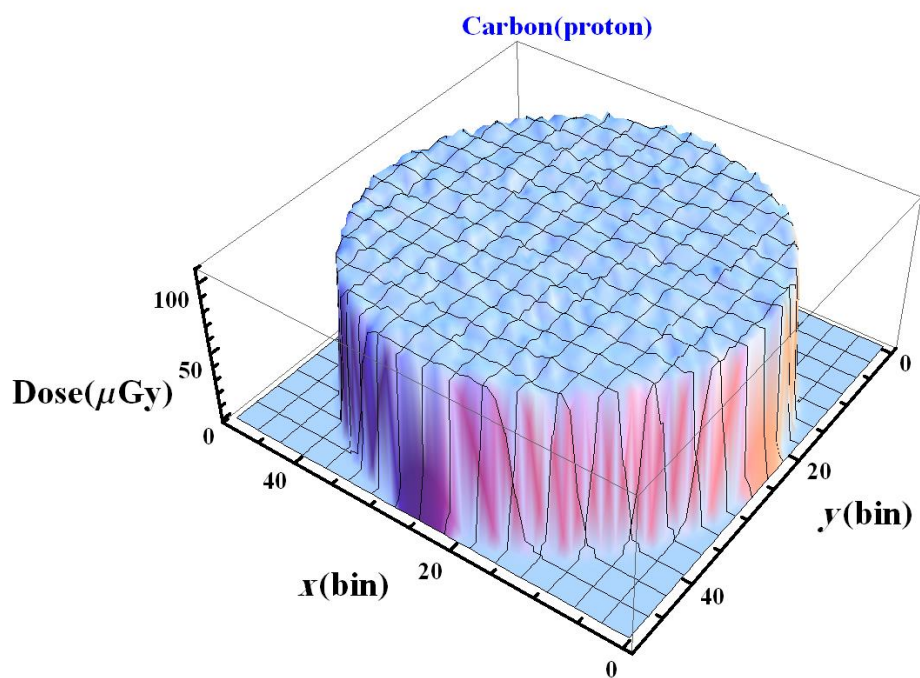
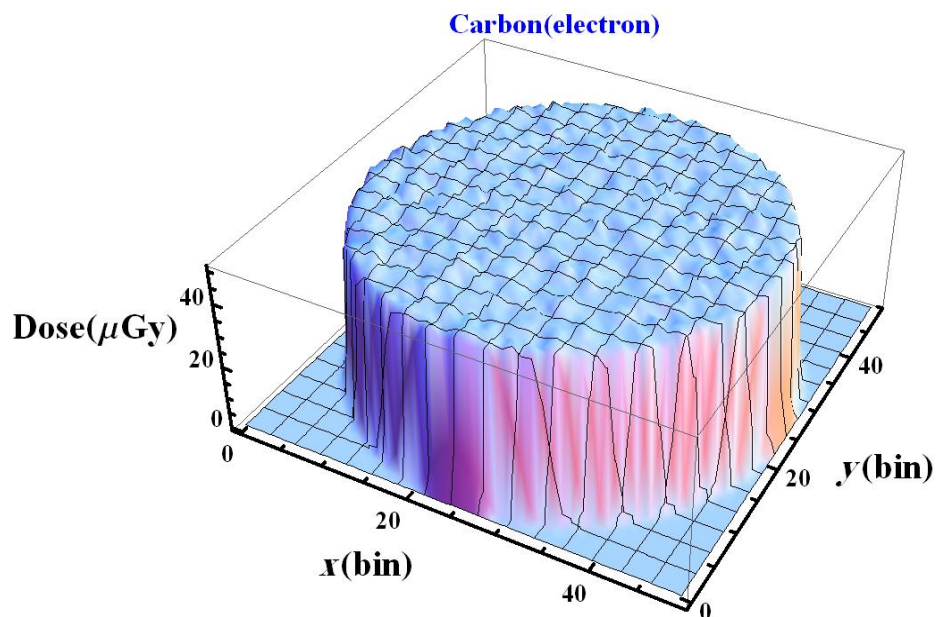
$$-\frac{dE}{dx} \left(\frac{MeV}{m} \right)_p = 4\pi r_0^2 \frac{mc^2}{\beta^2} NZ \left[\ln \left(\frac{2mc^2}{I} \beta^2 \gamma^2 \right) - \beta^2 \right] \quad ۲-۶$$

^۱ SRIM - The Stopping and Range of Ions in Matter

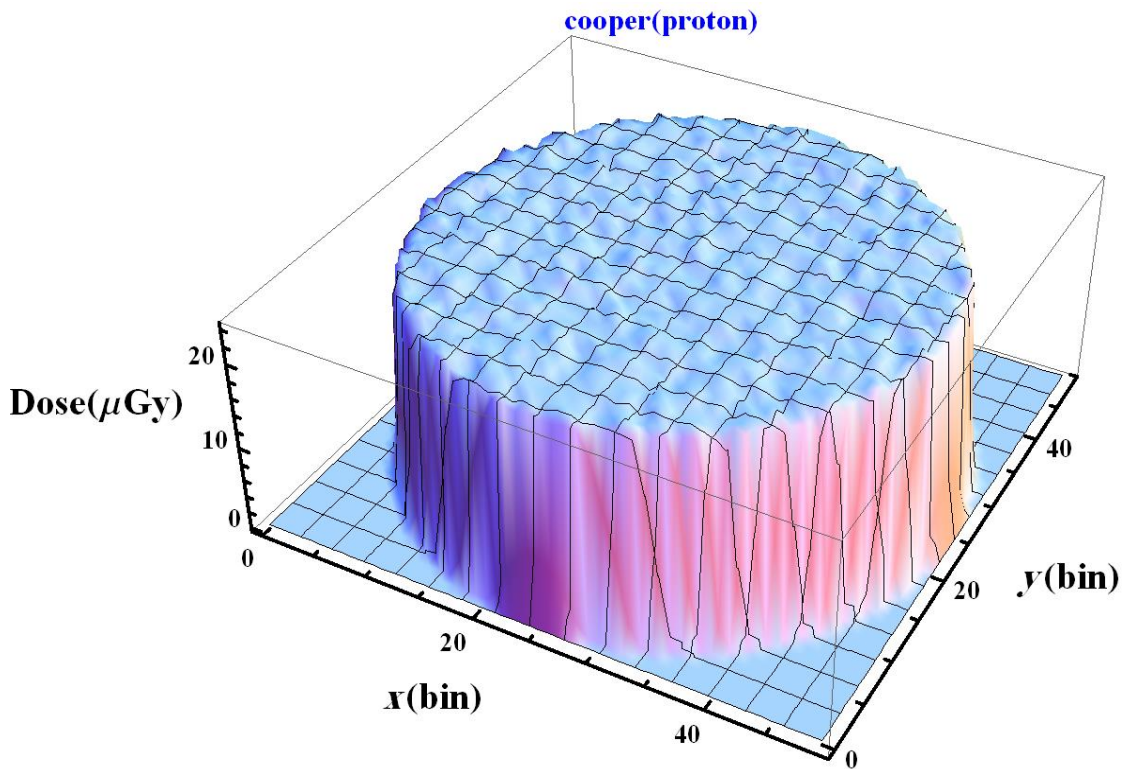
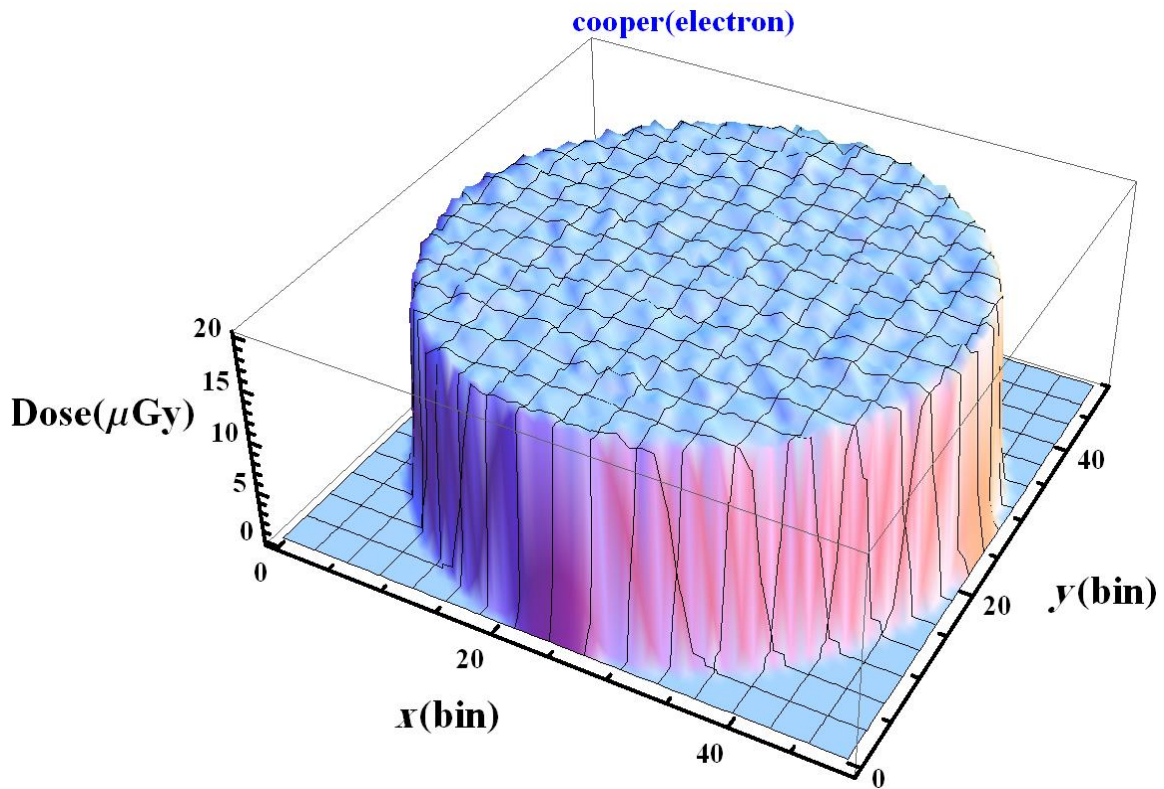
$$-\frac{dE}{dx} \left(\frac{\text{MeV}}{m} \right)_e = 4\pi r_0^2 \frac{mc^2}{\beta^2} NZ \left\{ \ln \left(\frac{\beta\gamma\sqrt{\gamma-1}}{I} \right) + \frac{1}{2\gamma^2} \left[\frac{(\gamma-1)^2}{8} + 1 - (\gamma^2 + 2\gamma - 1)\ln 2 \right] \right\}$$

که در آن T انرژی جنبشی پرتابه و M جرم سکون ذره باردار، $\beta = v/c$ ، c سرعت نور و v سرعت ذره پرتابی، N چگالی هسته‌ی هدف در واحد حجم ($\text{m}^3 / \text{اتم}$) برای ماده‌ای که ذره در آن حرکت می‌کند، Z عدد اتمی ماده‌ی هدف، z بار ذره فرودی و I پتانسیل برانگیزش متوسط ماده‌ی هدف است. البته لازم به ذکر است که روابط (۲-۶) و (۳-۶) توان توقف ناشی از یونش-برانگیزش برای الکترون و پروتون در ماده هستند. همچنین در مورد بازه‌ی قابل قبول برای انرژی در روابط بالا در فصل ۲ بحث کرده‌ایم.

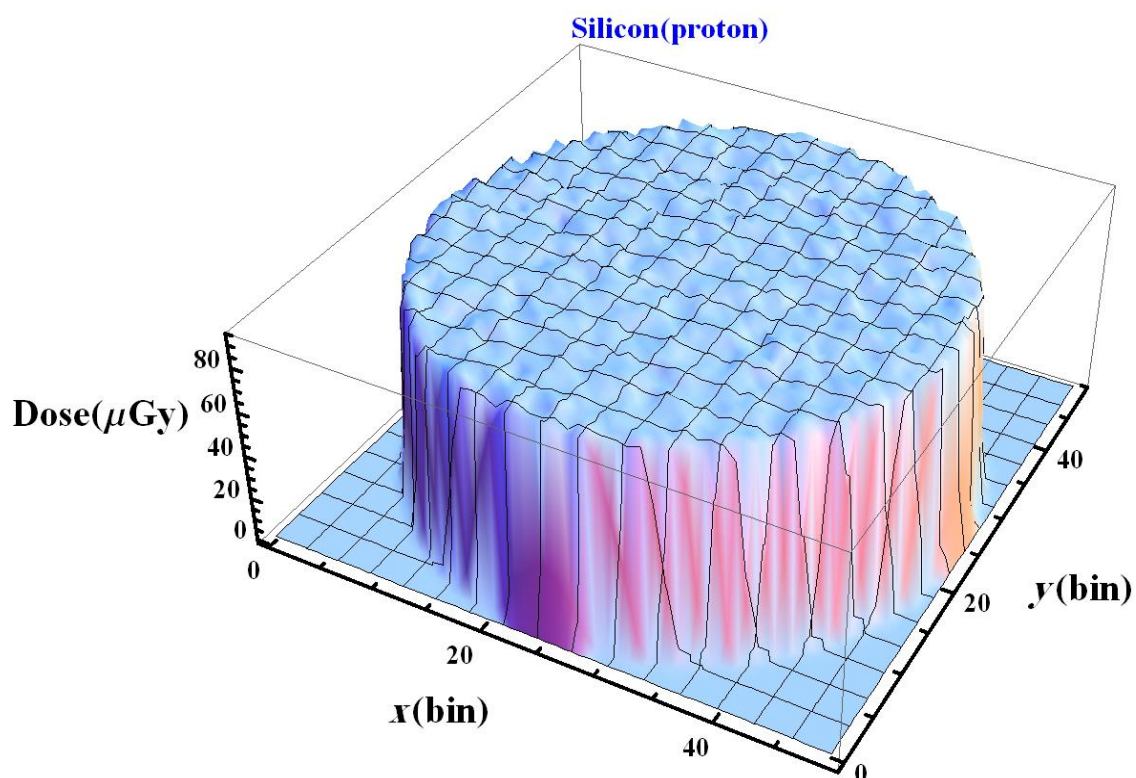
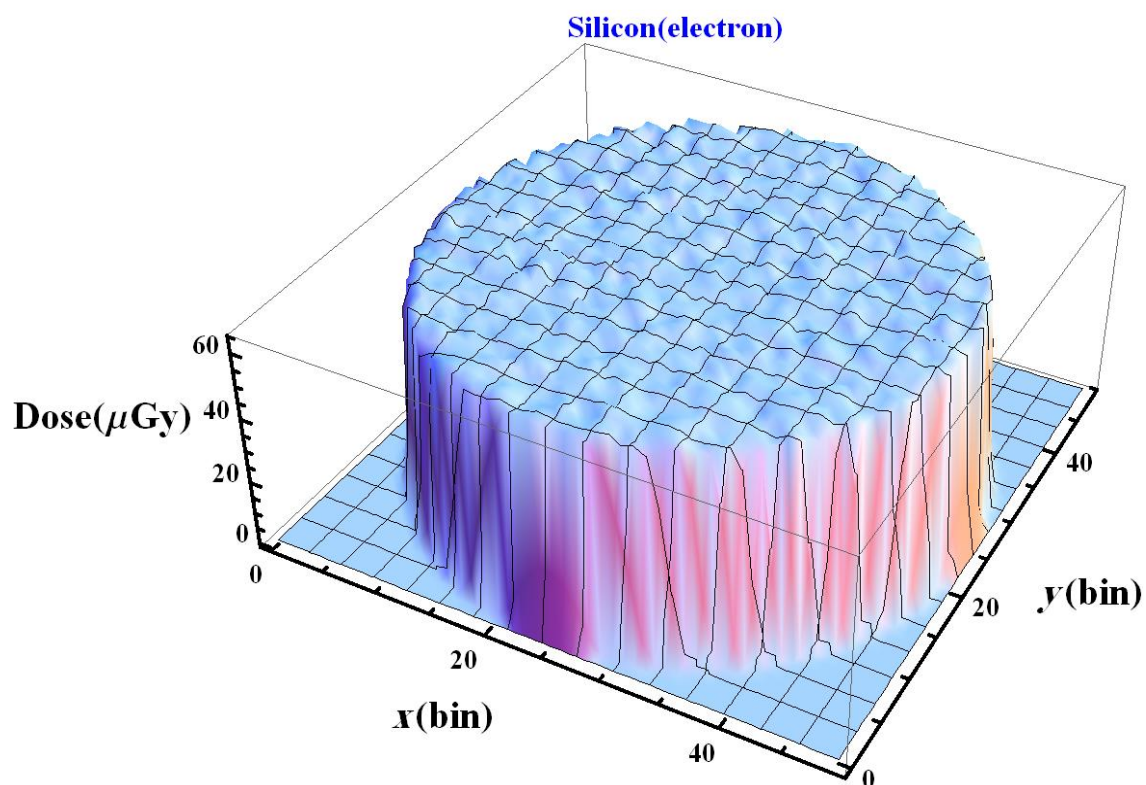
خروجی کد با توجه به پارامتری که ما در فایل ماکرو تعریف کرده‌ایم استخراج می‌شود. اگر پارامتری که تعریف کرده‌ایم انرژی آزادشده (energy Deposit or [eDep]) در هر بازه‌ی تعریف شده از شبکه‌ی تعریف شده روی ماده‌ی هدف باشد، واحد انرژی برحسب MeV است که می‌توانیم با استفاده از تبدیلات مناسب آن را به دُز جذب شده برحسب گری (Gy) تبدیل کنیم. ولی اگر پارامتر، مقدار دُز شده (dose Deposit or [dDep]) در هر بازه‌ی تعریف شده از شبکه‌ی تعریف شده روی ماده باشد دیگری نیازی به تبدیلات نیست. همانطور که گفته شد، مقادیر به دست آمده در یک فایل ذخیره می‌شود، از این رو می‌توانیم این مقادیر را با استفاده از نرم‌افزارهای ریاضی رسم کنیم که ما این کار را با نرم‌افزار Mathematica انجام داده‌ایم. (شکل ۴-۶، شکل ۵-۶ و شکل ۶-۶)



شکل ۴-۶: Carbon(electron) دُز جذب‌شده در سطح برای هدف کربنی که با پرتوی الکترونی ۲۰۰ keV پرتودهی شده است و Carbon(proton) نیز دُز جذب‌شده در سطح که با پرتوی پروتونی ۲۰۰ keV پرتودهی شده است.



شکل ۵-۶: copper(electron) دُز جذب‌شده در سطح برای هدف مسی که با پرتوی الکترونی ۲۰۰ keV پرتودهی شده است و copper(proton) نیز دُز جذب‌شده در سطح که با پرتوی پروتونی ۲۰۰ keV پرتودهی شده است.



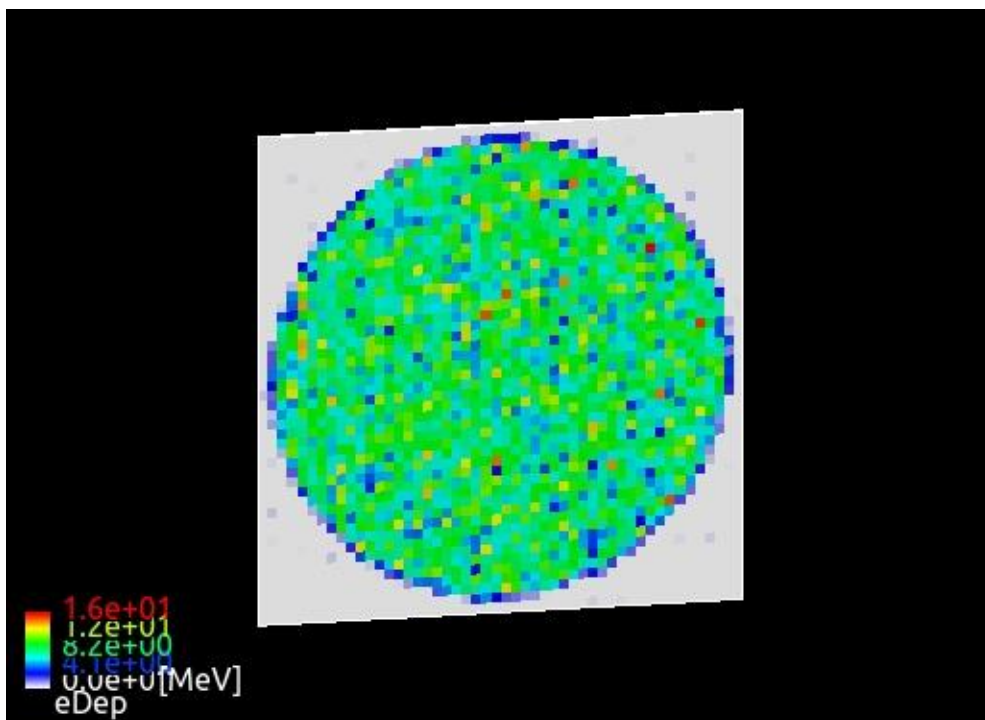
شکل ۶-۶: Silicon(electron) دُز جذب‌شده در سطح برای هدف سیلیکونی که با پرتوی الکترونی ۲۰۰ keV پرتودهی شده است و Silicon(proton) نیز دُز جذب‌شده در سطح که با پرتوی پروتونی ۲۰۰ keV پرتودهی شده است.

همان‌طور که انتظار داشتیم و در شکل ۴-۶، شکل ۵-۶ و شکل ۶-۶ مشخص است انرژی

به صورت یکنواخت روی سطح ماده هدف آزاد شده است چرا که پرتوها به صورت یکنواخت و موازی به هدف تابانده شده‌اند. لازم به ذکر است که نمودارها همگی در سطح ماده رسم شده‌اند. همچنین مشاهده می‌شود که در برخورد پروتون‌ها با هدف انرژی بیشتری نسبت به الکترون‌های فرودی در سطح ماده آزاد می‌شود. این امر به دلیل توان توقف بیشتر محیط برای پروتون و نیز سطح مقطع بیشتر برهم‌کنش ماده با پروتون است.

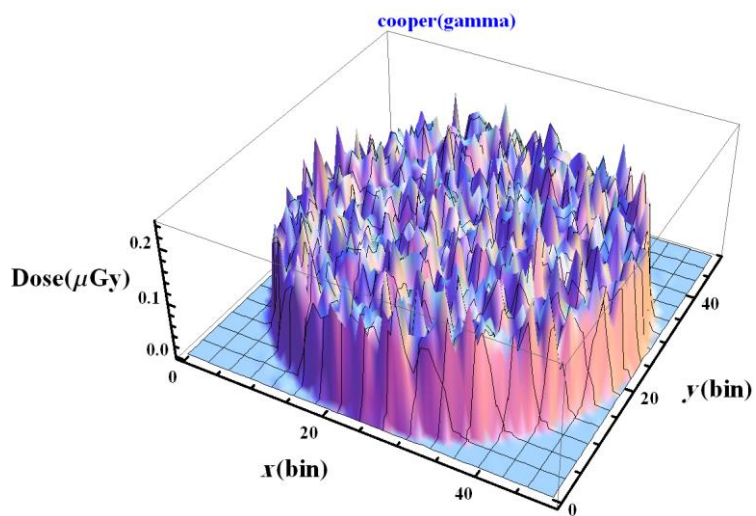
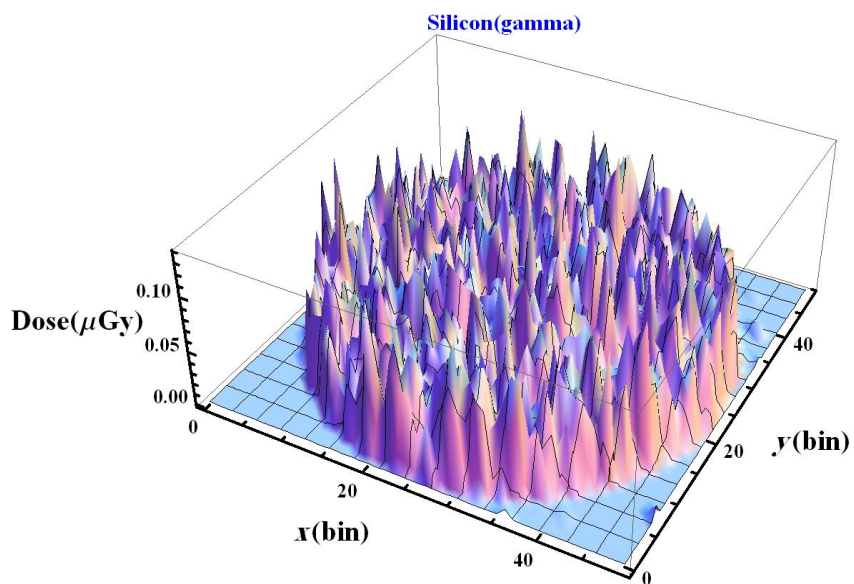
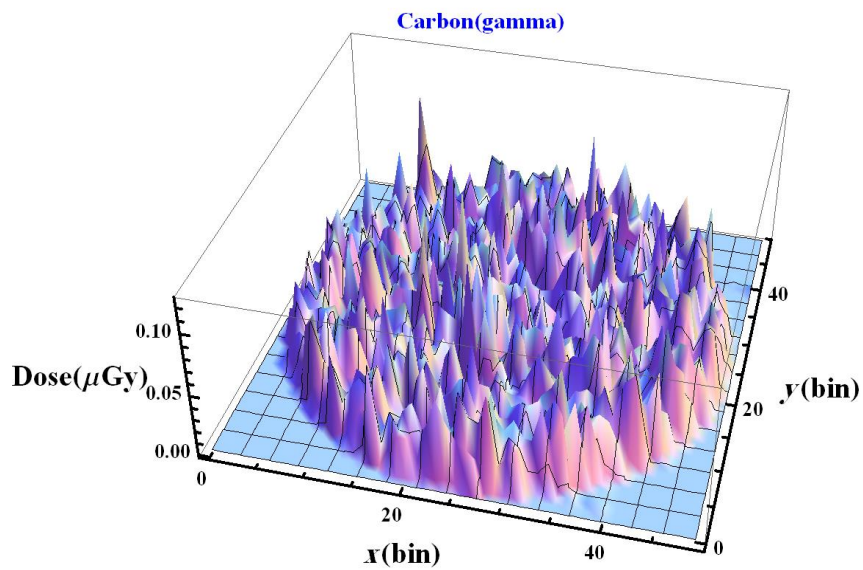
۲-۶ شبیه‌سازی و محاسبه‌ی دُز جذب شده برای پرتوی گاما

شرایط هندسه‌ی مسئله همانند بخش ۶-۱ است با این تفاوت که چشمه در اینجا چشمه‌ی گاما با انرژی ۱ MeV است. با توجه به اینکه اشعه گاما یک اشعه‌ی الکترومغناطیسی می‌باشد، در نتیجه فاقد بار و جرم سکون است. اشعه گاما موجب برهم‌کنش‌های کولنی نمی‌گردد و لذا آنها برخلاف ذرات باردار به طور پیوسته انرژی از دست نمی‌دهند. معمولاً اشعه گاما تنها یک یا چند برهم‌کنش اتفاقی با الکترون‌ها یا هسته‌های اتم‌های ماده جذب کننده احساس می‌کند. در این برهم‌کنش‌ها اشعه‌ی گاما یا به طور کامل ناپدید می‌گردد یا انرژی آن به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌یابد. اشعه گاما دارای بردهای مجزا نیست، به جای آن، شدت یک باریکه اشعه گاما به طور پیوسته با عبور آن از میان ماده مطابق قانون نمایی جذب کاهش می‌یابد. از طرفی واکنش‌هایی که گاما از طریق آن‌ها به ماده انرژی منتقل می‌کند، عبارتند از: اثر فوتوالکتریک، پراکندگی کامپتون، تولید و نابودی زوج. هر یک از این واکنش‌ها با توجه به انرژی گاما و سطح مقطع واکنش در ماده‌ی مورد نظر اتفاق می‌افتند و محاسبه‌ی مقدار دُز جذبی از این واکنش‌ها کار پیچیده‌ای است که کد Geant4 این محاسبات را با توجه پارامترها و شرایط مسئله انجام می‌دهد [۷، ۸۹]. در شکل ۶-۷ نمایی از هدف که تحت تابش گاما قرار گرفته است را مشاهده می‌کنید.



شکل ۶-۷: هدف پرتودهی شده با گامای ۱ MeV.

مقدار دُز جذب شده توسط هدف نیز برای اشعه‌ی گاما محاسبه و با نرم‌افزار رسم کرده‌ایم که نتیجه را در شکل زیر ملاحظه می‌نمایید.



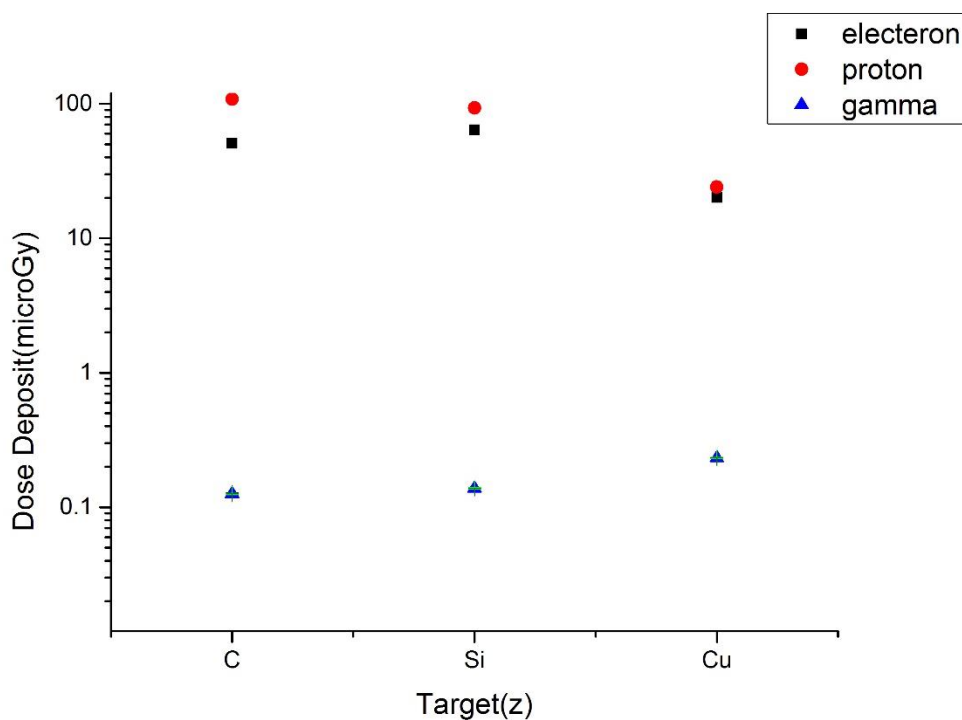
شکل ۶-۸: مقدار دُز جذب شده در هدف‌های کربن، مس و سیلیکون در سطح از تابش پرتوی گامای ۱ MeV.

همان طور که انتظار می‌رفت و در شکل ۶-۸ مشخص است پرتوی گاما برهم‌کنش بسیار کمتری نسبت به پرتوهای الکترونی و پروتونی با ماده انجام داده است و در نتیجه مقدار انرژی آزاد شده در سطح ماده به مراتب کمتر از این ذرات باردار است. در ضمن همانطور که مشاهده می‌کنید انرژی به صورت یکنواخت روی سطح هدف آزاد نشده است و در مناطقی انرژی بیشتری آزاد شده است.

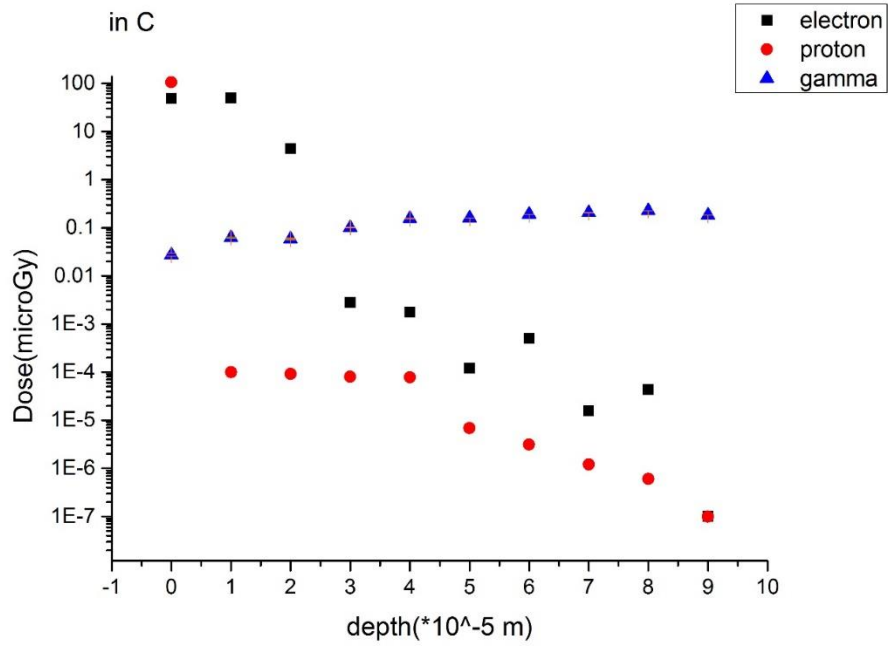
در شکل ۶-۹ نیز حداکثر دُز جذب شده در هر سه ماده مشاهده می‌کنید، در این نمودار مقدار دُز جذبی به صورت لگاریتمی رسم شده است. با توجه به شکل در می‌یابیم که مقدار دُز جذب شده از پروتون در کربن بیشتر از سیلیکون و سیلیکون بیشتر از مس است، که این امر همان بستگی توان توقف به نوع ماده را نشان می‌دهد. همچنین ملاحظه می‌کنید که مقدار دُز جذبی حاصل از پروتون در هر سه ماده بیشتر از الکترون است اما اختلاف این دو دُز با افزایش عدد اتمی کاهش می‌یابد که این امر به این دلیل است که الکترون نیز بیشتر انرژی خود را در همان سطح اولیه آزاد می‌کند و کمتر به داخل ماده نفوذ می‌کند. از طرفی مقدار دُز جذب شده از الکترون در سیلیکون بیشتر از کربن و مس است که یعنی توان توقف سیلیکون و همچنین سطح مقطع برهم‌کنش آن با الکترون از کربن و مس بیشتر است.

شکل ۶-۱۲ تا شکل ۶-۱۲ نموداری از مقدار دُز جذب شده با خطای محاسبه شده توسط کد Geant4 در عمق‌های مختلف است که برای اهداف کربن، سیلیکون و مس رسم شده است. توجه داشته باشید که نمودار به صورت لگاریتمی رسم شده است و خطای محاسبه شده برای ذرات الکترون و پروتون از مرتبه 10^{-3} μGy و برای گاما از مرتبه 10^{-6} μGy است. همان‌طور که در شکل مشخص است هرچه از سطح به سمت اعماق ماده می‌رویم، مقدار دُز جذبی کم‌تر شده و به صفر میل می‌کند. این بدین معناست که بیشتر انرژی پرتابه در همان برخوردهای اولیه به ماده انتقال پیدا می‌کند و پرتابه در همان سطوح اولیه متوقف می‌شود. همچنین مشخص است که پرتابه‌ی پروتونی

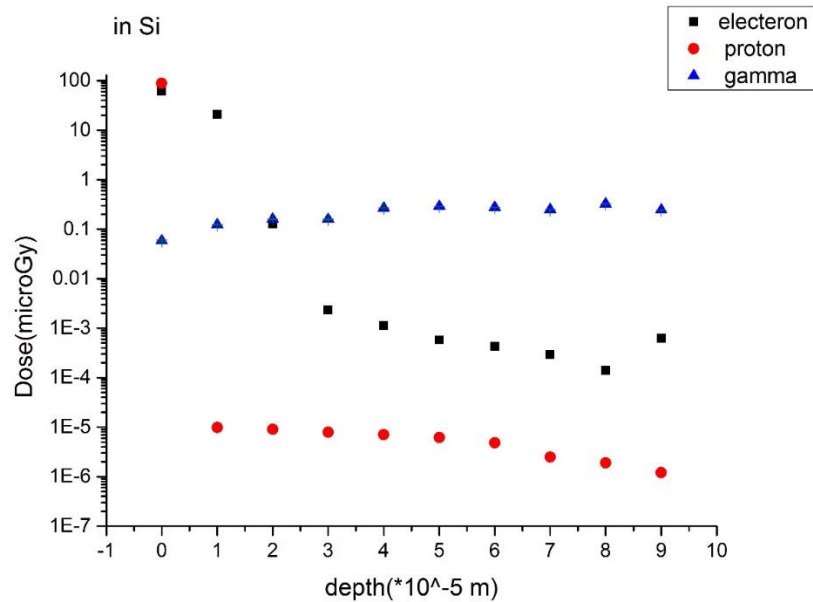
تمام انرژی خود را در برخورد با سطح از دست داده است و در همان سطح متوقف شده است، در نتیجه انرژی به سطوح داخلی ماده منتقل نشده است و این یعنی اینکه برد پروتون در کربن بسیار کم تر از ضخامت کربن است و پروتون به سرعت در همان سطح اول متوقف می شود.



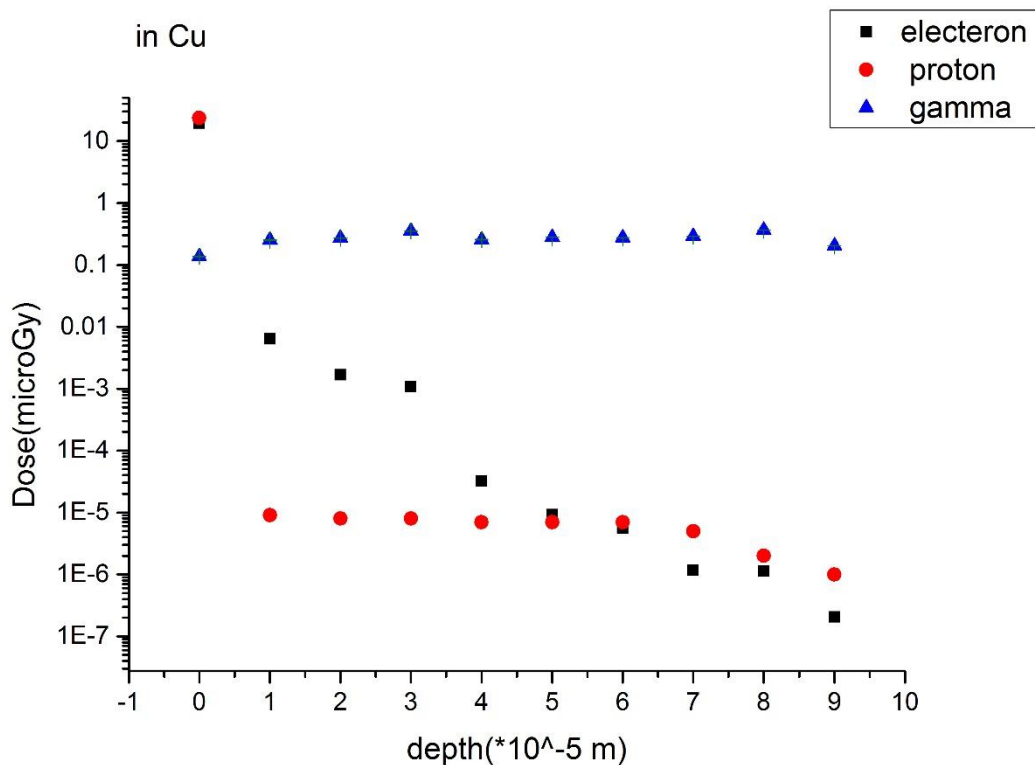
شکل ۶-۹: حداکثر دُز جذب شده از تابش پرتوی الکترون، پروتون ۲۰۰ keV و گامای ۱ MeV همراه با خطای اندازه گیری در اهداف مورد نظر برای در سطح. توجه داشته باشید که دُز به صورت لگاریتمی رسم شده است و به دلیل اینکه خطای اندازه گیری از مرتبه 10^{-2} μGy تا 10^{-6} μGy است و بسیار کوچک است، بنابراین خطا به صورت نقطه ای در منطقه مورد نظر یافت می شود.



شکل ۶-۱۰: مقدار دُز جذب شده برای هدف کربنی حاصل از پرتوهای الکترون و پروتون ۲۰۰ keV و گاما ۱ MeV به همراه خطای محاسبه شده در عمق‌های مختلف که x و y آن در بازه‌ی ۲۵ قرار دارد. نمودار دُز به صورت لگاریتمی رسم شده است.



شکل ۶-۱۱: مقدار دُز جذب شده برای هدف سیلیکونی حاصل از پرتوهای الکترون و پروتون ۲۰۰ keV و گاما ۱ MeV به همراه خطای محاسبه شده در عمق‌های مختلف که x و y آن در بازه‌ی ۲۵ قرار دارد.



شکل ۶-۱۲: مقدار دُز جذب شده برای هدف مسی حاصل از پرتوهای الکترون و پروتون ۲۰۰ keV و گاما ۱ MeV به همراه خطای محاسبه شده در عمق‌های مختلف که x و y آن در بازه‌ی ۲۵ قرار دارد.

از مشاهده‌ی شکل ۶-۹ درمی‌یابیم که دُز جذب‌شده در هدف‌های کربنی و سیلیکونی در سطح هدف نسبت به هدف مسی در هر ۲ حالت (پرتوی الکترونی و پروتونی) بیشتر است. این یعنی این که در کربن و سیلیکون بهتر می‌توان رشد ساختارهای جدید همچون نانو ساختارها را با پرتودهی القا کرد.

با توجه به نمودارها می‌بینیم که بیشترین مقدار دوز جذب شده در سطح ماده تمرکز دارد. مقدار دوز ناچیزی به دیگر سطوح ماده رسیده است. بنابراین اتم‌های روی سطح هدف انرژی بیشتری دریافت می‌کنند و پیوندهای آن‌ها شکسته می‌شود و آمادگی این را دارند تا با قرار گرفتن در یک شرایط مناسب با ذرات و اتم‌های دیگر واکنش داده و یک ساختار جدید در سطح هدف ایجاد کنند.

همچنین برای مثال در شکل ۶-۴ می‌بینیم که ناحیه‌ی مجاور محدوده‌ی برخورد، دُز ناچیزی

دریافت کرده است. یعنی اینکه می‌توانیم به کمک یک شار پرتوی با شکل و لبه‌ی مشخص، ناحیه‌ای معین از هدف را به‌طور خاص تحت تابش قرارداده و آن محدوده را برای رشد ساختار موردنظر تحریک نمود. و این مفهوم با توجه به محاسبه‌ی برد ذره در هدف و اینکه ذره‌ی فرودی بیشتر انرژی خود را در همان سطح اولیه‌ی هدف باقی می‌گذارد دریافت می‌شود. البته باید این موضوع را در نظر داشت که آیا این انرژی آزاد شده در محدوده‌ای هست که واکنشی در سطح ماده انجام گیرد و ساختار جدید رشد کند یا خیر؟ هرچند با افزایش انرژی پرتوی فرودی و یا تحت تابش قرار دادن هدف به مدت طولانی می‌توان انرژی آزاد شده را افزایش داد. این فرایند کاربردهای وسیعی در تولید تجهیزات نانو و همچنین در دیگر شاخه‌های علم و فن‌آوری دارد.

۷ فصل هفتم:

نتیجہ گیری و پیشہ اداات

۱-۷ نتیجه‌گیری

با توجه به مطالب فصل‌های ۲ و ۳، اگر ذرات با انرژی مناسب به ماده برخورد کنند می‌توانند انرژی خود را به اتم‌های ماده‌ی هدف انتقال دهند. اگر این انرژی منتقل شده به اندازه‌ای باشد که بتواند اتم را از جایگاهش در ساختار شبکه‌ی ماده جابه‌جا کند خود این اتم می‌تواند زنجیره‌ای از برخوردها را در ماده ایجاد نماید. از طرفی اگر اتم از ساختار خارج شده و به سمت سطح ماده حرکت کند و انرژی قابل توجهی را با خود حمل کند، می‌تواند در یک محیط شیمیایی مناسب با ذرات دیگر واکنش شیمیایی انجام داده و ساختار جدیدی روی سطح ماده‌ی هدف ایجاد کند و به این طریق می‌توان ساختارهای جدید را بر روی سطح ماده هدف رشد داد. از آنجا که این ساختار جدید با ساختار ماده‌ی هدف تفاوت دارد، بنابراین از نظر خواص فیزیکی و مکانیکی و شیمیایی از هم متفاوتند. در نتیجه می‌توان از این روش برای تولید مواد با خواص جدید و رشد ساختارهای جدید مثلاً نانو ساختارها استفاده کرد، به گونه‌ای که بتوان آن‌ها را در علوم و صنایع مختلف مورد استفاده قرار داد.

نتیجه‌ی دیگر، کاربرد مفید شبیه‌سازی در انجام آزمایشات است. با توجه به در دسترس نبودن وسایل و لوازم مورد نیاز برای انجام آزمایش و بررسی این موضوع به شکل عملی، و همچنین نبود بودجه و زمان کافی برای تهیه‌ی این لوازم، با استفاده از کد شبیه‌سازی مناسب می‌توانیم با صرف کم‌ترین هزینه و زمان ممکن، آزمایش را شبیه‌سازی کنیم و اطلاعات جالبی از این بررسی به دست آوریم.

۲-۷ پیشنهادات

۱. با توجه به اینکه موضوع مورد بحث در این پایان‌نامه یک موضوع جدید و در حال

پیشرفت در سطح کشور است، پیشنهاد می‌شود که تحقیقات و بررسی‌ها در این زمینه بیشتر شود.

۲. استفاده از دیگر چشمه‌ها برای انجام این آزمایش مانند چشمه‌ی عناصر رادیواکتیو.
۳. از طرفی این موضوع یک مسئله‌ی مشترک بین گروه‌های هسته‌ای و حالت جامد و نانو است و همکاری این گروه‌ها در این زمینه پیشرفت در این حوزه را سرعت می‌بخشد و می‌توانیم در آینده این رشته را به عرصه‌ی صنعت وارد کنیم.
۴. انجام آزمایش‌های عملی در این زمینه نیازمند هزینه است، بنابراین برای این که بتوانیم آزمایشی با کم‌ترین هزینه‌ی ممکن را داشته باشیم، پیشنهاد می‌کنیم که به بحث آموزش و یادگیری روش‌های شبیه‌سازی در این زمینه بیشتر توجه شود، زیرا با انجام شبیه‌سازی آزمایش قبل از انجام آن می‌توانیم هم در وقت و هم در هزینه صرف جویی کنیم.

منابع

- [1]. H. Geiger and E. Marsden, On a Diffuse Reflection of the α -Particles, Proc. Roy. Soc. A 82, 495(1909).
- [2]. E. Rutherford, The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atoms ,Philos. Mag. 21, 669 (1911).
- [3]. N. Bohr, On the Constitution of Atoms and Molecules, Philos. Mag.26, 1 (1913).
- [4]. N. Bohr, On the Theory of Decrease of Velocity of Moving Electrified Particles on Passing through Matter, Philos. Mag. Series 6 25, 10 (1913).
- [5]. N. Bohr, On the decrease of velocity of swiftly moving electrified particles in passing throughmatter, Philos. Mag. 30, 581 (1915).
- [6]. N. Bohr, The penetration of atomic particles through matter, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.18, 1 (1948).
- [7]. Nicholas.Tsoufanidis,"Detection Of Radiation", Secend Edition, Taylor & Francis1995, University of Missouri-Rolla, ISBN 1-56032-317-5.
- [8]. Hellborf R., Whitlow H.J., Zhang Y. (eds.) Ion Beams in Nanoscience and Technology (Springer, 2009)(ISBN 3642006221)(468s).

- [9]. T. Kunert, and R. Schmidt, Excitations and fragmentation mechanisms in ion–fullerene collisions, *Phys. Rev. Lett.* 86 (2001) 5258–5261.
- [10]. F. Banhart, and P. M. Ajayan, Carbon onions as nanoscopic pressure cells for diamond formation, *Nature* 382 (1996) 433–435.
- [11]. W. Mickelson, S. Aloni, W. Q. Han, J. Cumings, and A. Zettl, Packing C60 in boron nitridenanotubes, *Science* 300 (2003) 467–469.
- [12]. L. Sun, et al. Carbon nanotubes as high-pressure cylinders and nanoextruders, *Science* 312(2006) 1199–1202.
- [13]. C. Chappert, et al., Planar patterned magnetic media obtained by ion irradiation, *Science* 280 (1998) 1919–1922.
- [14]. H. Bernas, et al., Ordering intermetallic alloys by ion irradiation: A way to tailor magnetic media, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 077203.
- [15]. E. Akċ oltekin, et al., Creation of multiple nanodots by single ions, *Nat. Nanotechnol.* 2 (2007)290–294.
- [16]. T. Ḣ ochbauer, A. Misra, K. Hattar, and R. G. Hoagland, Influence of interfaces on the storage of ion-implanted He in multilayered metallic composites *J. Appl. Phys.* 98 (2005)123516.
- [17]. A. Misra¹, M. J. Demkowicz, X. Zhang, and R. G. Hoagland, The radiation damage tolerance of ultra-high strength nanolayered composites, *JOM J. Miner. Metals Mater. Soc.*59 (2007) 62–65.
- [18]. Marie Backman, Effects of nuclear and electronic stopping power on ion irradiation of siliconbased compounds, University of Helsinki, 2012, 49 p.+appendices, University of Helsinki ReportSeries in Physics, HU-P-D200, ISSN 0356-0961, ISBN 978-952-10-8086-9 (printed version), ISBN978-952-10-8087-6 (PDF version) .
- [19]. P. Sigmund, Stopping power: Wrong terminology, *ICRU News* 5 (2000).

- [20]. J. F. Ziegler, SRIM-2008 software package, available online at <http://www.srim.org>.
- [21]. W.-K. Chu, J. W. Mayer, and M.-A. Nicolet, Backscattering Spectrometry (Academic Press, London, 1978).
- [22]. M. Durante and J. S. Loeffler, Charged particles in radiation oncology, *Nat. Rev. Clin. Oncol.* 7, 37 (2010).
- [23]. G. S. Was, In Fundamentals of Radiation Materials Science (Springer, Berlin Heidelberg, 2007).
- [24]. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, The stopping and range of ions in solids (Pergamon, New York, 1985).
- [25]. K. Nordlund, N. Runeberg, and D. Sundholm, Repulsive interatomic potentials calculated using Hartree-Fock and density-functional methods, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* 132, 45(1997).
- [26]. R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).
- [27]. R. S. Averback and T. Diaz de la Rubia, in Solid State Physics, edited by H. Ehrenfest and F. Spaepen (Academic Press, New York, 1998), Vol. 51, pp. 281–402.
- [28]. Adapted from the Wikimedia Commons file "File:Heatspikecollisioncascade.png"
<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Heatspikecollisioncascade.png>.
- [29]. H. Bethe, Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie, *Ann. Physik* 397, 325 (1930).
- [30]. James E. Turner, 'Atoms, Radiation, and Radiation Protection', Third edition 2010, Completely Revised and Enlarged Edition, ISBN 978-3-527-40606-7.

- [31]. <http://www.quantumdiaries.org/2012/02/15/the-hidden-face-of-cern/bragg-peak-3>.
- [32]. J. O. Stiegler and L. K. Mansur, RADIATION EFFECTS IN STRUCTURAL MATERIALS, Ann. Rev. Mater. Sci. 1979. 9:405-54. *8639
- [33]. Seeger, A. K. 1958. Proc. 2nd UN Con :{ Peace ful Uses At. Energy Geneva 6: 250-73}
- [34]. Seidman, D. N. 1976. See “Harkness, S. D., Peterson, N. L., eds .1976. Radiation Damage in Metals, Proc .Mater. Sci. Symp., Cincinatti, 9-10 Nov . Metals Park, Ohio : Am. Soc. Met. 405 pp.”, pp. 28-57.
- [35]. Beeler, J. R. 1966. Phys. Rev. 150: 490-97.
- [36]. Robinson, M. T., Torrens, I. M. 1974 .Phys. Rev. B 9: 5008-24.
- [37]. Robinson, M.T. 1976. See Ref. 36,pp. 1-27.
- [38]. English, C. A., Eyre, B. L., Summers, J ,Wadley, H. 1976. See “Robinson, M. T., Young, F. W., eds. 1975. Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals, Proc. ConL Gatlin-burg, Tenn., 6-10 Oct. 1975, CONF-751006. 2 Vol., 1302 pp.”, pp. 910-17.
- [39]. Lindhard, J., Scharff , M., Schiott, H. E. 1963. K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 33(14) : 1-42.
- [40]. Kinchen, G. H., Pease, R. S. 1955. Rep. Prog. Phys. 18: 1-57.

- [41]. Robinson, M. T. 1965. *Philos. Mag.* 12: 741-65.
- [42]. Robinson, M. T., Young, F. W., eds. 1975. *Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals*, Proc. ConL Gatlin-burg, Tenn., 6-10 Oct. 1975, CONF-751006. 2 Vol., 1302 pp.
- [43]. Peterson, N. L., Siegel, R. W., eds. 1976. *Properties of Atomic Defects in Metals*, Proc. Conf. Argonne, Ill., 18-22 Oct. ; *J. Nucl. Mater.* 69, 70 : 1-856.
- [44]. Seeger, A. K., Schumacher, D., Schilling, W., Diehl, J., eds. 1970. *Vacancies and Interstitials in Metals 1970*, Proc. Int. Conf. Jülich, Germany, Sept. 1968. 1073 pp.
- [45]. Young, f. W. Jr. 1976. See Ref. 36, pp. 95-124.
- [46]. C. Cawthorne and E. 1. Fulton, *Nature* 216:575 (1967).
- [47]. Bloom, E. E., Stiegler, J. O. 1974. *Effects of Radiation on Substructure and Mechanical Properties of Metals and Alloys*, ASTM STP 529, pp. 360-80. Philadelphia, Penn. Am. Soc. Test. Mater.
- [48]. Roberts, A. c., Cottrell, A. C. 1956. *Philos. Mag.* 1: 71 1-17.
- [49]. Straalsund, J. L. 1977. See Ref. 10, pp. 19 1-207.
- [50]. Nichols, F. A. 1972. *Ann. Rev. Mater. Sci.* 2: 463-500.
- [51]. Merkle, K. 1969. See "Radiation Damage in Reactor Materials, Proc. Symp., Vienna, 2-6 June 1969. Vienna : Int. At. Energy Agency. 2 Vol., 1069 pp.", I: 159-70.
- [52]. Merkle, K. 1974. *Nucl. Technol.* 22 : 66-78.
- [53]. Lyles, R. L., Merkle, K. L. 1976. See Ref. 4, pp. 19 1-206.
- [54]. D.Allan.Bromley,"Treatise on Heavy-Ion Science", vol 6, Astrophysics,

Chemistry, and Condensed Matter, Springer 1985, ISBN 978-1-4615-8105-5, DOI 10.1007/978-1-4615-8103-1.

- [55]. H. Silsbee, J. Appl. Phys. 28:1246 (1957).
- [56]. C-Y-Wei, M. I. Current, and D. N. Seidman, Cornell University Materials Science Center Report No. 4235, Phil. Mag. A 44:459 (1981).
- [57]. C-Y-Wei and D. N. Seidman, Cornell University Materials Science Center, Report No 40SS, Phil. Mag_ A 43: 1419 (1981).
- [58]. M. L. Jenkins and M. Wilkins, Phil. Mag. 34:1155 (1976).
- [59]. M. L. Jenkins, K. H. Katerbau, and M. Wilkins, Phil. Mag. 34:1141 (1976).
- [60]. M. L. Jenkins, N. G. Norton, and C. A. English, Phil. Mag. A 40:131 (1979).
- [61]. C. A. English and M. L. Jenkins, J. Nucl. Mater. 96:341 (1981).
- [62]. C. D. Moak, H. O. Lutz, L. B. Bridwell, L. C. Northcliffe, and S. Datz, Phys. Rev. 176:427 (1968).
- [63]. B. C. Masters, Phil. Mag. 11:881 (1965).
- [64]. E. Johnson and J. A. Ytterhus, Phil. Mag. 28:489 (1973).
- [65]. H. M. Naguib, J. F. Singleton, W. A. Grant, and G. Carter, J. Mater. Sci. 78:1633 (1973).

[۶۶]. شانون، رابرت؛ علم و هنر شبیه‌سازی سیستم‌ها، علی‌اکبر عرب‌مازار، تهران، مرکز نشر

دانشگاهی، ۱۳۸۰، چاپ دوم.

[۶۷]. اخوان، پیمان و معینی، علیرضا؛ نقش مهندسی مجدد در شبیه‌سازی سازمان، مجله

تدبیر، ۱۳۸۴، شماره ۱۵۸، سال سیزدهم، ص ۱۶.

[۶۸]. گلزار ادبی، رامین؛ شبیه‌سازی در تصمیم‌گیری‌های مدیریتی، مجله تدبیر، ۱۳۸۵،

شماره ۱۷۷، سال چهاردهم، ص ۲۱.

[۶۹]. رنجگری، علیرضا؛ شبیه‌سازی ابزاری نیرومند برای تصمیم‌گیری، مجله روشن، ۱۳۷۷،

شماره ۴۷، ص ۲۹.

[70]. Keller, M.I. & Raymond, J.M. & Raffo, D.M; Software process simulation modeling: Way? What? How? Journal of system and software, 1999, Vol.46 Nos.2/3, P254-59.

[۷۱]. صالح فتح‌آبادی، حسن؛ شبیه‌سازی سیستم‌ها به وسیله کامپیوترهای رقمی، تهران،

نشر جهاد دانشگاهی، ۱۳۶۵، چاپ اول، ص ۱۰۱.

[۷۲]. غیاث، مجید؛ مقدمه‌ای بر روش شبیه‌سازی مونت کارلو، تهران، فصل‌نامه‌ی علمی-

ترویجی، سال چهارم، شماره ۱، صفحه ۶۷-۷۷، ۱۳۹۳، ISSN:2252-0449

[73]. Metropolis N. and Ulam S., The Monte Carlo Method, J. Am. Stat. Assoc., 44, 335-341, 1949.

[74]. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., and Teller A.H., Equation of State Calculation by Fast Computing Machines, J. Chem. Phys., 21, 1087-1092, 1953.

[75]. Alder, B. J.; Wainwright, T. E. (1959). "Studies in Molecular Dynamics. I. General Method". J. Chem. Phys. 31 (2): 459. Bibcode:1959JChPh..31..459A. doi:10.1063/1.1730376.

[76]. Rahman, A. (19 October 1964). "Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon". Physical Review 136 (2A): A405–A411. Bibcode:1964PhRv..136..405R. doi:10.1103/PhysRev.136.A405.

[77]. Bernal, J.D. (1964). "The Bakerian lecture, 1962: The structure of liquids". Proceedings of the Royal Society 280 (1382): 299–322. Bibcode:1964RSPSA.280..299B. doi:10.1098/rspa.1964.0147.

[78]. S. Agostinelli et al., "Geant4: A simulation toolkit," Nucl. Instrum. Meth. A, vol. 506, no. 3, pp. 250–303, 2003.

- [79]. G. Cosmo, "Software process in Geant4," in Proc. Computing in High Energy and Nuclear Physics, Beijing, China, 2001, pp. 469–472.
- [80]. M. Dobbs and J. B. Hansen, "The HepMC C++ Monte Carlo event record for high energy physics," Comp. Phys. Comm., vol. 134, no. 1, pp. 41–46, 2001.
- [81]. Geant4 Web page: <http://cern.ch/geant4>.
- [82]. U. Littmark and J. F. Ziegler, Handbook of Range Distributions for Energetic Ions in All Elements, Pergamon Press, New York (1980), Vol. 6.
- [83]. Knoll, Glenn F .Radiation detection and measurement. 3rd ed p. cm .
Include index .ISBN 0-471-07338-5.
- [84]. Al Meldrum, Lynn A. Boatner, Rodney C. Ewing, "Size effects in irradiation-induced crystalline-to-amorphous transformation", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 207 (2003) 28–35.
- [85]. Thomas Kunert and Rüdiger Schmidt, "Excitation and Fragmentation Mechanisms in Ion/Fullerene Collisions", Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden, Germany (Received 2 November 2000).
- [86]. <http://srim.org/#SRIM>.

Abstract

Particle beams are of use in industry, medicine and agriculture. In this thesis we intend to study the effects of this radiation on nano structures at low energies. But considering that the subject is a relatively new issue in the country's universities, we have to study the natural forms of the materials first. On the other hand, the first step in this review, is to calculate the amount of released energy because of radiation on the surface of the material. Knowing this makes us able to predict changes in structure, physical and mechanical properties of materials. We can also use this energy to grow new structures including nano crystals on the material surface. In this study, the Geant4 code, that is a Monte Carlo simulation code, was used to simulate the experimental system and to calculate the amount of the absorbed dose.

Keywords: radiation effect, Geant4 code, simulation, absorption dose



Shahrood University of Technology
Faculty Physics

Dissertation Submitted in Partial
Fulfillment of The Requirements For The
Degree of Master of Science in
Nuclear Physics

Effects of low-energy radiations on nano-structures

Milad Javani

Supervisor

Dr. Moslem Sohani

February 2016