



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΗΣ
ΚΑΙ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ**

**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ**



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

**Αναλυτική μελέτη της σκέδασης Mott για
εφαρμογές σε Ιοντικές Τεχνικές Ανάλυσης**

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Φώτη Μαραγκού

Επιβλέπων Καθηγητής: Μιχάλης Κόκκορης

Αθήνα, Ιούνιος, 2019

Ευχαριστίες

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρ. Μιχάλη Κόκκορη, Καθηγητή της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου και επιβλέπων Καθηγητής της συγκεκριμένης εργασίας και τη Δρ. Ρόζα Ζάννη Βλαστού, Καθηγήτρια της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, μέλος της τριμελούς επιτροπής, για τη συνεχή παρουσία τους, καθοδήγηση και ενθάρρυνση που έχουν προσφέρει καθόλη την ακαδημαϊκή μου πορεία μέχρι στιγμής. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρ. Αναστάσιο Λαγογιάννη Ερευνητή Β' βαθμίδας του Ινστιτούτου Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δημόκριτος", επιβλέπων Ερευνητή της παρούσας εργασίας, για τη καίρια βοήθεια και καθοδήγηση που προσέφερε σε όλα τα στάδια περάτωσης της αυτής της διπλωματικής.

Επιπλέον θα ήθελα να ευχαριστήσω όλα τα μέλη της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου τωρινά και πρώην για τη συνεργασία, τη βοήθεια και το συνολικό κλίμα αλληλεγγύης που έχουν προσφέρει και καλλιεργήσει όλα αυτά τα χρόνια μέσα στην ομάδα.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την αμέριστη υποστήριξη και κατανόηση που έχουν δείξει σε όλη τη διάρκεια των σπουδών μου καθώς και για τις θυσίες που έχουν κάνει όλα αυτά τα χρόνια.

Abstract

In this current work the program MottCalc, which was developed for calculating Mott Scattering cross sections for use in ERD Analysis and applications, is presented. Elastic Recoil Detection Analysis (or E.R.D.A.) techniques are a sub-category of the Ion Beam Analysis (or I.B.A) family of experimental techniques and they are prominently used for the accurate quantitative determination of elemental depth profile concentrations in near surface layers of various matrices. These kind of measurements are needed in a variety of applied science and technological fields like Micro-Electronics, Bio-Medical applications, Archeological measurements and many more since they offer great accuracy and are non-destructive. However, the accidental occurrence of Mott Scattering in such applications is not an unrealistic possibility. As a result, strong deviations from the Rutherford formula appear in the cross section of such elastic scatterings which in turn leads to the need for special treatment of the experimental data.

Mott Scattering refers to the elastic scattering of identical nuclei. According to the indistinguishability principle, the scattering of identical nuclei can only be calculated quantum mechanically, leading to an interference term contributing to the reaction's cross section. This interference term creates oscillations in the cross section resulting in deviations of orders of magnitude when compared to the Rutherford's formula results for the reaction. These deviations affect both angular and energy distributions. The influence of the interference term depends on the spin and the statistical distribution of the nucleus, fermionic or bosonic, the kinetic energy of the incident nucleus and the detection angle. The phenomenon is described by the analytical Mott formula.

Targets used E.R.D.A. in techniques commonly contain unknown impurities. Incidentally, a lot of the more common isotopes found as these impurities, for example carbon, can also be used as incident beams hence the scattering of identical nuclei. The detection however of these instances is only possible in forward detection angles, in the range of 0 to 90 degrees, due to the kinematics of the reaction (scattering of two identical masses). That is why only ERDA applications are susceptible to such accidental occurrences.

Using the aforementioned Mott formula, a program, MottCalc, was developed for the calculation of angular or energy cross section distributions. As target and incident nucleus 314 isotopes are available for the user, who can also specify the characteristics of the distribution. The user is also able to expand the list of the available isotopes. For the results to be able to be compared with actual experimental data the screening phenomenon is taken into account by implementing the Andersen model. The program is available in two different versions, as an excel spreadsheet and as an application. The application produces r33 files while the excel spreadsheet provides further information about the screening factors and the cross sections in the Center of Mass frame of reference. Both versions also provide graphs for the distributions. Both versions of the program are presented.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1 : Εισαγωγή	9
Κεφάλαιο 2: Θεωρητικά Στοιχεία	13
2.1 Ion Beam Analysis	15
2.2 Ανάλυση δειγμάτων μέσω Ανίχνευσης Ελαστικά Ανακρουόμενων πυρήνων (Elastic Recoil Detection Analysis, ERDA)	17
2.3 Ελαστική Σκέδαση – Κινηματική	20
2.4 Ελαστική Σκέδαση Rutherford	21
2.5 Τα Συστήματα Εργαστηρίου και Κέντρου μάζας	22
2.6 Ελαστική Σκέδαση Mott.....	23
2.7 Το Φαινόμενο της Εγκάρσιας Ισοτροπίας (Transverse Isotropy)	33
2.8 Το Φαινόμενο ηλεκτρονικής θωράκισης του πυρήνα (Screening Effect).....	35
Κεφάλαιο 3: Το Φύλλο Excel MottCalc	37
3.1 Περιγραφή του φύλλου Excel	39
3.2 Χρήση του Φύλλου	40
3.2.1 Το φύλλο “Quick Calculator”	40
3.2.2 “Angular Distribution” και “Energy Distribution” φύλλα εργασίας	43
3.3.3 Το φύλλο εργασίας “Table of Isotopes” – Προσθήκη Ισοτόπου	46
Κεφάλαιο 4 : Η Εφαρμογή MottCalc	49
4.1 Περιγραφή της Εφαρμογής	51
4.2 Οδηγίες Χρήσης της Εφαρμογής.....	52
4.2.1 Επιλογή Ισοτόπου	52
4.2.2 Επιλογή Κατανομής (Mode Selection).....	53
4.2.4 Δημιουργία ASCII R33 αρχείου	56
Κεφάλαιο 5: Λήψη και Εγκατάσταση των προγραμμάτων MottCalc	57
Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα και Προοπτικές	61
Κεφάλαιο 7 : Βιβλιογραφία-Αναφορές	65

Κεφάλαιο 1 : Εισαγωγή

Οι τεχνικές *Ανάλυσης Δειγμάτων μέσω χρήσης Δέσμης Φορτισμένων Σωματιδίων* (Ion Beam Analysis, IBA) αποτελούν μία ομάδα αναλυτικών πειραματικών μεθόδων οι οποίες εφαρμόζονται για τον χαρακτηρισμό υλικών. Η μεγάλη ακρίβεια αυτών έχει καθιερώσει την ευρεία χρήση τους τόσο στον ερευνητικό όσο και στον βιομηχανικό τομέα. Κοινό χαρακτηριστικό των μεθόδων που ανήκουν σε αυτή την οικογένεια είναι η χρήση δέσμης φορτισμένων σωματιδίων (ιόντων). Το ενεργειακό εύρος της δέσμης είναι της τάξης των MeV. Σε αυτές τις ενέργειες τα σωματίδια της δέσμης αλληλοεπιδρούν με τους πυρήνες του στόχου μέσω ελαστικής σκέδασης ή και πυρηνικών αλληλεπιδράσεων. Αυτό επιτρέπει την ταυτοποίηση των στοιχείων από τα οποία αποτελείται ο εκάστοτε στόχος, την ποσοτικοποίηση αυτών και τον καθορισμό της χωρικής τους κατανομής. Οι παραπάνω μέθοδοι μπορούν να εφαρμοστούν είτε για τον χαρακτηρισμό λεπτών στόχων είτε για τον προσδιορισμό της σύστασης της επιφάνειας στόχων απείρου πάχους.

Μία από τις πειραματικές τεχνικές που εντάσσονται στην οικογένεια της IBA είναι η Ανάλυση δειγμάτων μέσω Ανίχνευσης Ελαστικά Σκεδαζόμενων Ανακρουόμενων πυρήνων (Elastic Recoil Detection Analysis, ERDA) η οποία εφαρμόζεται για τη μελέτη ελαφρών στοιχείων ενός στόχου. Η δημοτικότητα της μεθόδου παρουσιάζει τα τελευταία χρόνια μεγάλη άνοδο έπειτα από τον συνδυασμό αυτής με μετρήσεις χρόνου πτήσης (TOF-ERDA). Στην ERDA γίνεται χρήση δέσμης η οποία αποτελείται από ιόντα με μεγαλύτερο ατομικό (Z) και μαζικό (A) αριθμό από τους προς μελέτη πυρήνες του στόχου. Η ελαστική σκέδαση των βαρέων ιόντων της δέσμης με τους ελαφρότερους πυρήνες του ατομικού πλέγματος του στόχου οδηγεί στην αποκόλληση αυτών από το ατομικό πλέγμα το οποίο επιτρέπει την ανίχνευσή τους. Ένα σημαντικό πρόβλημα της μεθόδου αυτής είναι η περίπτωση κάποιο από τα στοιχεία του στόχου να αποτελεί το ίδιο ισότοπο με αυτό των ιόντων της δέσμης. Η πιθανότητα αυτή αυξάνεται σημαντικά εάν γίνεται χρήση δέσμης η οποία αποτελείται από ισότοπα με μεγάλη αφθονία στο περιβάλλον όπως ^{12}C ή ^{16}O . Η μεγάλη παρουσία αυτών των ισωτόπων στον φυσικό κόσμο αυξάνει την πιθανότητα επιμόλυνσης του εκάστοτε στόχου από αυτά όμως αρκετές φορές τέτοιου είδους δέσμες προσφέρουν πλεονεκτήματα τεχνικής φύσης. Ως αποτέλεσμα της σκέδασης 2 ταυτόσημων πυρήνων προκύπτουν αποκλίσεις τάξεις μεγέθους από τους γνωστούς τύπους που ακολουθούν οι ελαστικές σκεδάσεις. Αυτό καθιστά την ανάλυση των δεδομένων αδύνατη μέσω των καθιερωμένων μεθοδολογιών.

Οι αποκλίσεις αυτές οφείλονται στην κβαντομηχανική αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο ταυτόσημων πυρήνων. Όταν δύο ταυτόσημα σωματίδια σκεδάζονται ελαστικά είναι αδύνατο να ταυτοποιηθεί εάν το σωματίδιο που ανιχνεύεται αποτελούσε το βλήμα ή το στόχο πριν τη σκέδαση. Η συνεισφορά και των δύο πιθανοτήτων πρέπει να ληφθεί υπ όψιν, το οποίο έχει σαν αποτέλεσμα την εμφάνιση όρου συμβολής λόγω των κυματικών ιδιοτήτων των σωματιδίων. Ο όρος αυτός εξαρτάται από το σπιν των πυρήνων και την κατανομή που αυτά ακολουθούν (φερμιονική ή μποζονική κατανομή). Η ελαστική σκέδαση ταυτόσημων σωματιδίων μελετήθηκε πρώτα από τον Mott ο οποίος υπολόγισε τον αναλυτικό τύπο ο οποίος περιγράφει αυτού του είδους τις σκεδάσεις. Τέτοιου είδους αντιδράσεις ονομάζονται σκεδάσεις Mott. Μία σημαντική υποπερίπτωση της σκέδασης αυτής αποτελεί η σκέδαση πυρήνων με ακέραιο σπιν (μποζόνια) σε συγκεκριμένες ενέργειες. Οι συνθήκες αυτές οδηγούν σε ένα φαινόμενο υπό την ονομασία εγκάρσια ιστροπία (Transverse Isotropy) στο οποίο ο όρος συμβολής συμβάλλει ελάχιστα στη συνολική ενεργό διατομή της αντίδρασης. Αυτό επιτρέπει τη μελέτη των ασθενών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των δύο πυρήνων.

Παρόλο το ενδιαφέρον που παρουσιάζει η σκέδαση Mott, τόσο στο ερευνητικό επίπεδο όσο και στις εφαρμογές της στις τεχνικές ERDA, κανένα από τα ευρέως χρησιμοποιούμενα υπολογιστικά προγράμματα όπως το SIMNRA ή το DF δεν είναι ικανό να

δώσει θεωρητικούς υπολογισμούς για την ενεργό διατομή τέτοιων σκεδάσεων. Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας αναπτύχθηκε ένα τέτοιο πρόγραμμα υπό την ονομασία MottCalc βασιζόμενο στον αναλυτικό τύπο του Mott για τον υπολογισμό της ενεργού διατομής. Το πρόγραμμα είναι ικανό να υπολογίσει γωνιακές ή ενεργειακές κατανομές σκέδασης Mott για 314 διαφορετικά ισότοπα. Στους υπολογισμούς λαμβάνεται υπ όψιν η συνεισφορά του φαινομένου screening μέσω του εμπειρικού μοντέλου του Andersen. Υλοποιήθηκαν δύο διαφορετικές εκδοχές του προγράμματος. Η μία εκδοχή είναι σε μορφή ενός φύλλου Excel και προσφέρει στον χρήστη την κατανομή της ενεργού διατομής στο σύστημα του εργαστηρίου αλλά και στο σύστημα του κέντρου μάζας, σύγκριση των τιμών με τις αναμενόμενες τιμές από τον τύπο του Rutherford και στα δύο συστήματα καθώς και την επίδραση του φαινομένου screening στα αποτελέσματα. Η δεύτερη εκδοχή είναι μία εφαρμογή η οποία παράγει γωνιακές ή ενεργειακές κατανομές σε R33 αρχεία. Στο παρόν κείμενο γίνεται αναφορά στους διάφορους μηχανισμούς πυρηνικών αλληλεπιδράσεων, στη μέθοδο Ion beam Analysis και ειδικότερα στην τεχνική ERDA καθώς και σε θεωρητικά προβλήματα τα οποία εμφανίζονται σε πειραματικές συνθήκες όπως το φαινόμενο screening. Παρουσιάζεται αναλυτικά η θεωρία της ελαστικής σκέδασης Mott με όλο το βασικό τυπολόγιο που χρησιμοποιήθηκε για την ανάπτυξη αυτού του προγράμματος. Τέλος παρουσιάζονται οι δύο εκδοχές του προγράμματος, το πως αναπτύχθηκαν και οι βασικές λειτουργίες τους.

Κεφάλαιο 2: Θεωρητικά Στοιχεία

2.1 Ion Beam Analysis

Ο όρος *Ανάλυση Δειγμάτων μέσω χρήσης Δέσμης Φορτισμένων Σωματιδίων* (Ion Beam Analysis, IBA) αναφέρεται σε μία ευρεία ομάδα πειραματικών τεχνικών οι οποίες εφαρμόζονται για τον χαρακτηρισμό και προσδιορισμό της στοιχειομετρίας λεπτών υμενίων ή επιφανειακών στρωμάτων δειγμάτων και υλικών. Οι τεχνικές αυτές αποτελούν τις λιγότερο καταστροφικές πειραματικές μεθόδους οι οποίες επιτρέπουν:

- Την ταυτοποίηση των στοιχείων που αποτελούν το επιφανειακό στρώμα του δείγματος.
- Την ποσοτικοποίηση αυτών με πολύ καλή ακρίβεια.
- Τον καθορισμό της χωρικής κατανομής των στοιχείων σε βάθος έως και δεκάδων μικρομέτρων (μm) από την επιφάνεια του δείγματος.

Κοινό χαρακτηριστικό όλων αυτών των τεχνικών είναι η χρήση δεσμών φορτισμένων σωματιδίων ενέργειας της τάξης των MeV. Τα (θετικά) φορτισμένα σωματίδια της δέσμης αλληλεπιδρούν με τους πυρήνες του ατομικού πλέγματος του στόχου. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές οδηγούν σε σκεδάσεις (ελαστικές και ανελαστικές) και πυρηνικές αντιδράσεις, οι οποίες με τη σειρά τους οδηγούν σε εκπομπή σωματιδίων ή ακτινοβολίας. Γνωρίζοντας τα σωματίδια που αποτελούν τη δέσμη, την κινητική ενέργεια αυτών και το είδος της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας, προσδιορίζονται οι αντιδράσεις οι οποίες έλαβαν χώρα και ταυτοποιούνται τα στοιχεία του στόχου. Ο αριθμός των σωματιδίων που ανιχνεύονται χρησιμοποιείται σαν ένδειξη για τον αριθμό των συγκεκριμένων αντιδράσεων που πραγματοποιήθηκαν. Ο αριθμός αυτός, σε συνδυασμό με τη διαφορική ενεργό διατομή της αντίδρασης, επιτρέπει την ποσοτικοποίηση των στοιχείων. Η κινηματική κάθε αντίδρασης καθορίζει την ενέργεια των παραγομένων σωματιδίων για κάθε γωνία ανίχνευσης. Τα σωματίδια της δέσμης όμως αλληλεπιδρούν και με τα ηλεκτρόνια του ατομικού πλέγματος του στόχου καθ' όλη τη διάρκεια της παραμονής τους στο εσωτερικό του στόχου με αποτέλεσμα την απώλεια μέρους της ενέργειάς τους. Αυτή η απώλεια ενέργειας χρησιμοποιείται για να καθοριστεί το βάθος στο οποίο έλαβε χώρα η εκάστοτε αντίδραση, το οποίο με τη σειρά του επιτρέπει τον καθορισμό του χωρικού προφίλ του στόχου. Στην περίπτωση λεπτών υμενίων, μέσω αυτής της διαδικασίας μπορεί να προσδιοριστεί και το πάχος του στόχου.

Σημαντικό είναι να τονιστεί ότι οι τεχνικές IBA εφαρμόζονται μόνο σε λεπτά υμένια ή για τον προσδιορισμό επιφανειακών στρωμάτων στη περίπτωση μεγάλων δειγμάτων (απείρου πάχους). Ο περιορισμός αυτός οφείλεται στο ότι η διαφορική ενεργός διατομή της ελαστικής σκέδασης μειώνεται όσο αυξάνεται η ενέργεια. Στην περίπτωση λεπτών στόχων η ενέργεια των σωματιδίων της δέσμης δεν χρειάζεται να είναι πολύ μεγάλη ώστε να εξέλθει από το στόχο. Στην περίπτωση όμως παχέων στόχων οι ενέργειες που θα χρειάζονταν ώστε η δέσμη να μπορεί να εξέλθει από το στόχο είναι της τάξης των εκατοντάδων MeV. Σε τέτοιες ενέργειες η ενεργός διατομή της ελαστικής σκέδασης είναι πολύ μικρή ώστε να έχει πρακτική εφαρμογή, επομένως είναι δυνατή η μελέτη μόνο επιφανειακών στρωμάτων τέτοιων στόχων.

Τα χαρακτηριστικά των τεχνικών IBA έχουν καθιερώσει τη χρήση τους σε ευρύ φάσμα εφαρμογών καθώς εξασφαλίζουν τη μικρότερη δυνατή φθορά στα υπό μέτρηση δείγματα, ενώ παράλληλα επιτρέπουν την ακριβή ποσοτικοποίηση της κατανομής κατά βάθος των στοιχείων από τα οποία αυτά αποτελούνται. Μερικές από τις εφαρμογές των τεχνικών IBA είναι η ανάλυση και ο χαρακτηρισμός νέων τεχνολογικών και ευαίσθητων υλικών που χρησιμοποιούνται σε βιομηχανικές εφαρμογές (όπως στη μικροηλεκτρονική), στη μέτρηση βιολογικών δειγμάτων για βιοιατρικές εφαρμογές, σε μετρήσεις δειγμάτων πολιτιστικής κληρονομιάς κ.ά. Σε όλες τις παραπάνω εφαρμογές, εκτός από την ακρίβεια της μέτρησης, εξίσου σημαντική είναι και η μη φθορά του υπό μέτρηση δείγματος.

Μερικές από τις πιο διαδεδομένες τεχνικές IBA είναι οι παρακάτω:

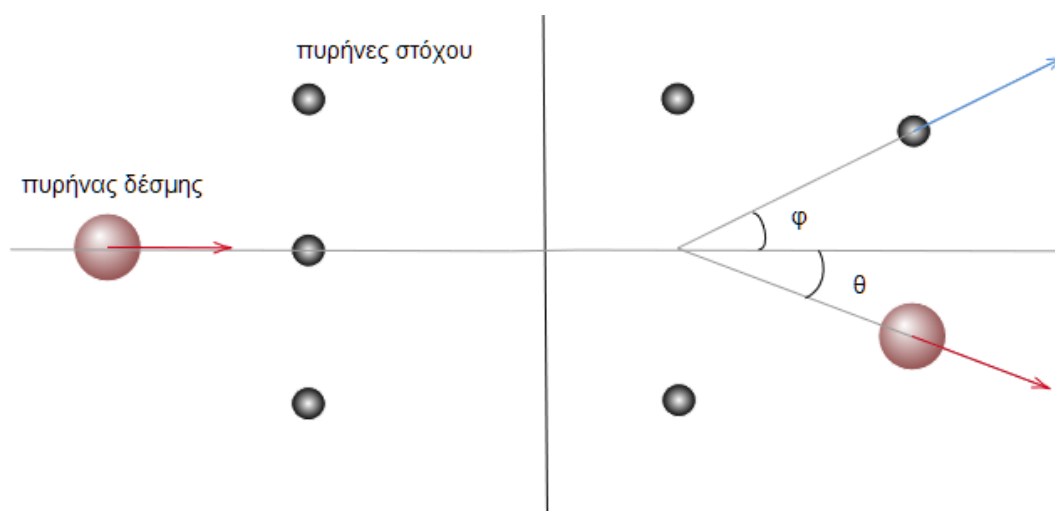
- Ανάλυση δειγμάτων μέσω Οπισθοσκέδασης Rutherford (Rutherford BackScattering, RBS)
- Ανάλυση δειγμάτων μέσω Ελαστικής Οπισθοσκέδασης (Elastic BackScattering, EBS)
- Ανάλυση δειγμάτων μέσω Ανίχνευσης Ελαστικά Ανακρουόμενων πυρήνων (Elastic Recoil Detection, ERD)
- Ανάλυση δειγμάτων μέσω Πυρηνικών Αντιδράσεων (Nuclear Reaction Analysis, NRA)
- Ανίχνευση ακτίνων γάμμα μέσω αντίδρασης με δέσμη σωματιδίων (Particle Induced Gamma ray Emission, PIGE)
- Ανίχνευση ακτίνων-x μέσω αντίδρασης με δέσμη σωματιδίων (Particle Induced X ray Emission, PIXE)

Κάθε τεχνική χρησιμοποιεί διαφορετικές αντιδράσεις και τρόπους ανίχνευσης της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας, γεγονός που προσφέρει διαφορετικά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα σε κάθε μία. Ανάλογα με το σκοπό της εκάστοτε μέτρησης επιλέγεται η κατάλληλη μέθοδος ή και συνδυασμός αυτών. [Mayer_77]

2.2 Ανάλυση δειγμάτων μέσω Ανίχνευσης Ελαστικά Ανακρουόμενων πυρήνων (Elastic Recoil Detection Analysis, ERDA)

Η Ανάλυση δειγμάτων μέσω Ανίχνευσης Ελαστικά Ανακρουόμενων πυρήνων (Elastic Recoil Detection Analysis, ERDA) είναι μία από τις πειραματικές μεθόδους της οικογένειας IBA η οποία χρησιμοποιείται κυρίως για τη μελέτη και το χαρακτηρισμό ελαφρών στοιχείων (όπως του Υδρογόνου ^1H) ενός δείγματος. Σε αυτή την τεχνική, η αρχική δέσμη αποτελείται από σωματίδια ίσου ή μεγαλύτερου ατομικού αριθμού από τους προς μελέτη πυρήνες του στόχου. Η ERDA δεν αποτελεί τη μοναδική τεχνική IBA η οποία βασίζεται στην ελαστική σκέδαση των πυρήνων της δέσμης με τους πυρήνες του στόχου, όμως παρουσιάζει συγκεκριμένα χαρακτηριστικά τα οποία τη διαφοροποιούν από τις υπόλοιπες και την καθιστούν ιδανική για τέτοιου είδους μελέτες.

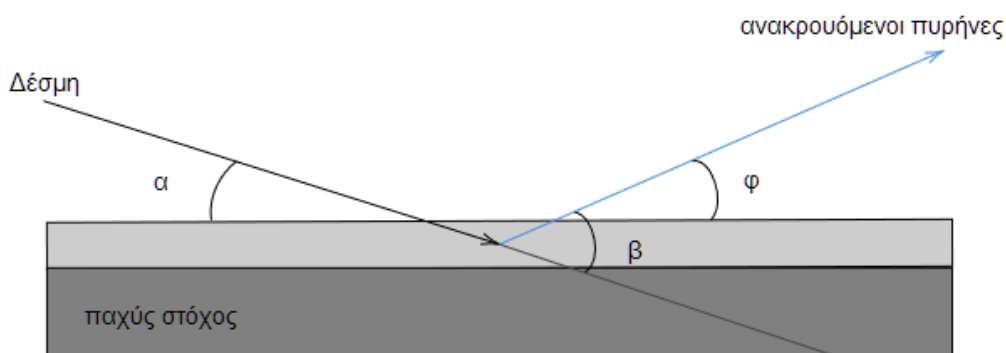
Σε αντίθεση με άλλες τεχνικές οι οποίες ανιχνεύουν τους σκεδαζόμενους πυρήνες της δέσμης, η ERDA βασίζεται στην ανίχνευση των ανακρουόμενων πυρήνων του στόχου για το χαρακτηρισμό του δείγματος. Απαραίτητη για την επιτυχία τέτοιων μετρήσεων είναι η μεταφορά αρκετής κινητικής ενέργειας στους πυρήνες του στόχου κατά τη σκέδαση ώστε να μπορούν να αποκολληθούν από το ατομικό πλέγμα. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω χρήσης σωματιδίων στην αρχική δέσμη με ατομικό και μαζικό αριθμό (Z & A αντίστοιχα) συνήθως πολύ μεγαλύτερο από τα στοιχεία που αποτελούν το στόχο μελέτης. Το εύρος των γωνιών ανίχνευσης για τους ανακρουόμενους πυρήνες περιορίζεται μεταξύ 0° και 90° λόγω της αρχής διατήρησης της ορμής.



Εικόνα 1: Σχηματική αναπαράσταση της σκέδασης μεταξύ ενός πυρήνα της δέσμης με ένα πυρήνα του ατομικού πλέγματος του στόχου στο σύστημα του εργαστηρίου. Ο πυρήνας της δέσμης είναι βαρύτερος από τους πυρήνες του στόχου. Λόγω της αρχής διατήρησης της ορμής και οι δύο πυρήνες μετά τη σκέδαση κινούνται προς τα δεξιά στο σύστημα του εργαστηρίου, γεγονός το οποίο περιορίζει τις γωνίες σκέδασης του σκεδαζόμενου βλήματος και του ανακρουόμενου πυρήνα (θ και ϕ αντίστοιχα) στο γωνιακό εύρος 0° έως 90° .

Τα παραπάνω χαρακτηριστικά εξασφαλίζουν ορισμένα πλεονεκτήματα στις μετρήσεις ERDA έναντι άλλων μεθόδων IBA. Καταρχάς, η χρήση βαρύτερων πυρήνων ως δέσμη επιτρέπει τον εντοπισμό και μελέτη ελαφρών στοιχείων ($Z < 10$) τα οποία είναι δύσκολο να ανιχνευθούν με ακρίβεια μέσω άλλων μεθόδων. Επίσης, σε άλλες μεθόδους που βασίζονται στην ελαστική σκέδαση οι πληροφορίες για το είδος του στοιχείου που ανιχνεύεται και το βάθος στο οποίο ανιχνεύτηκε περιέχονται στην ενέργεια του σκεδαζόμενου σωματιδίου της δέσμης. Αντίθετα στη περίπτωση μετρήσεων ERDA ανιχνεύονται οι πυρήνες των στοιχείων του στόχου και η ενέργεια αυτών οδηγεί στο προσδιορισμό του βάθους στο οποίο έγινε η εκάστοτε σκέδαση. Αυτό επιτρέπει την ταυτοποίηση των στοιχείων και τον προσδιορισμό της χωρικής κατανομής αυτών στο εσωτερικό του στόχου με μεγαλύτερη ακρίβεια από άλλες διαθέσιμες μεθοδολογίες. Επιπροσθέτως, όπως σε κάθε μέθοδο IBA, ο αριθμός των πυρήνων που καταγράφονται εξαρτάται από τον αριθμό των πυρήνων του κάθε στοιχείου στο εσωτερικό του στόχου και από τη διαφορική ενεργό διατομή της αντίδρασης, με αποτέλεσμα να επιτρέπει την ποσοτικοποίηση των στοιχείων.

Παρόλα τα πλεονεκτήματα που προσφέρουν αυτού του είδους οι μετρήσεις, ταυτόχρονα παρουσιάζουν ορισμένες τεχνικές δυσκολίες οι οποίες τις καθιστούν δύσχρηστες. Καταρχάς, οι δέσμες που απαιτούν αυτού του είδους οι μετρήσεις μπορεί να παρουσιάζουν τεχνικές δυσκολίες στη δημιουργία και επιτάχυνσή τους. Επιπλέον, δέσμες που αποτελούνται από μεσοβαρείς και βαρείς πυρήνες δεν έχουν τη δυνατότητα μεγάλης διείσδυσης στο εσωτερικό του στόχου λόγω της μεγάλης ισχύος ανάσχεσης που έχουν. Επομένως το βάθος των χωρικών κατανομών που μπορούν να μελετηθούν είναι αρκετά μικρότερο από άλλες μεθόδους. Εκτός των παραπάνω, στη περίπτωση παχέος στόχου τα ανακρουόμενα σωματίδια δεν έχουν αρκετή ενέργεια ώστε να διασχίσουν το εσωτερικό αυτού και να ανιχνευθούν. Για να είναι δυνατή η μέτρηση ο στόχος πρέπει να τοποθετηθεί οριζόντια και η δέσμη να πέφτει σε αυτόν υπό γωνία α . Λόγω αυτού η εστίαση της δέσμης και η τοποθέτηση του στόχου και του ανιχνευτή απαιτούν προσοχή ώστε να επιτευχθούν με ακρίβεια οι σχετικά μικρές γωνίες ανίχνευσης που απαιτεί η μέθοδος.



Εικόνα 2: Μέτρηση παχέος στόχου μέσω ERDA. Επειδή οι ανακρουόμενοι πυρήνες δεν έχουν αρκετή κινητική ενέργεια ώστε να διαπεράσουν το στόχο, αυτός τοποθετείται οριζόντια και η δέσμη εισέρχεται σε αυτόν υπό γωνία α . Η γωνία ανίχνευσης των ανακρουόμενων πυρήνων ϕ εξαρτάται από τις γωνίες α και β . Η δέσμη δεν μπορεί να εισχωρήσει βαθύτερα από το αρχικό επιφανειακό στρώμα του στόχου.

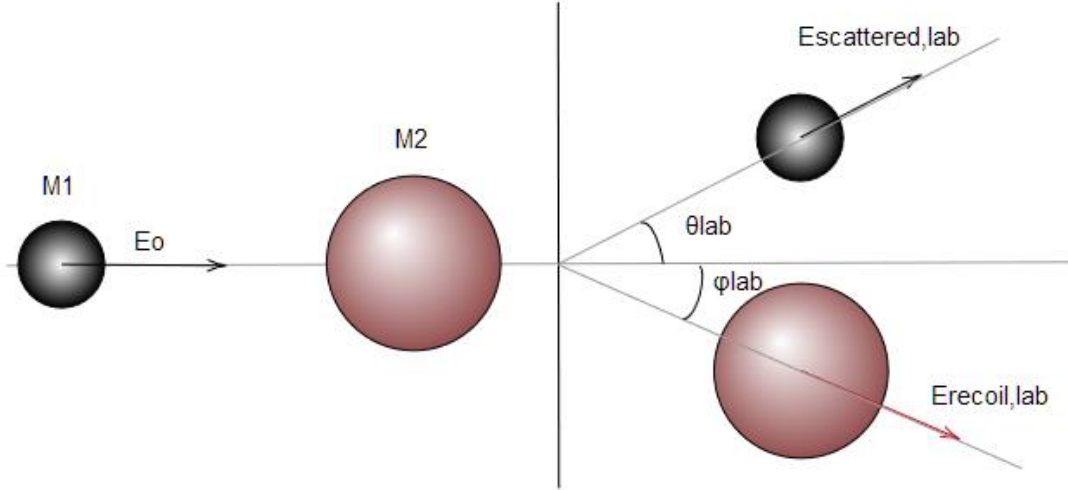
Οι μικρές γωνίες ανίχνευσης οδηγούν και σε περαιτέρω πρόβλημα, καθώς σε αυτές θα ανιχνεύονται και τα σκεδαζόμενα σωματίδια της δέσμης. Οι πυρήνες αυτοί αποτελούν θόρυβο στην προκειμένη περίπτωση και ξεπερνούν σε στατιστική τις επιθυμητές μετρήσεις. Τέλος, υπάρχει η περίπτωση της εμφάνισης σκέδασης Mott εάν το ισότοπο που επιλέχθηκε για τη δέσμη περιέχεται και στο εσωτερικό του στόχου. Η διαφορική ενεργός διατομή της σκέδασης Mott, αν και ελαστικής φύσης, παρουσιάζει μεγάλες αποκλίσεις από τη διαφορική ενεργό διατομή της σκέδασης Rutherford, η οποία αποτελεί το μεγαλύτερο μέρος των ελαστικών μετρήσεων. Οι διαφορές αυτές προκαλούν προβλήματα στη μετέπειτα ανάλυση των δεδομένων.

Ανάλογα με τα χαρακτηριστικά της πειραματικής διάταξης που χρησιμοποιείται οι μετρήσεις ERDA ομαδοποιούνται σε υποκατηγορίες. Η κλασική μεθοδολογία χρησιμοποιεί ένα λεπτό φύλλο μπροστά από τον ανιχνευτή. Αυτό δρα σαν απορροφητής των σκεδαζόμενων πυρήνων της δέσμης. Το φίλτρο αυτό επιλέγεται λαμβάνοντας υπ' όψιν το ισότοπο που χρησιμοποιείται για τη δέσμη. Εάν το πάχος του φύλλου είναι αρκετό, μπορεί να απορροφήσει και τα βαριά ανακρουόμενα στοιχεία του στόχου. Εάν ο σκοπός της μέτρησης είναι η μελέτη των ελαφρών στοιχείων, αυτό είναι θεμιτό καθώς η στατιστική των βαρέων στοιχείων μπορεί να είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτή των ελαφρών. Μία δεύτερη διαδεδομένη υποκατηγορία είναι η Ανάλυση δειγμάτων των Ελαστικά Ανακρουόμενων Πυρήνων μέσω Μέτρησης του Χρόνου Πτήσης (Time of Flight Elastic Recoil Detection Analysis, TOF - ERDA). Σε αυτήν, εκτός από την ενέργεια του ανακρουόμενου πυρήνα μετριέται και ο χρόνος που χρειάζεται αυτός για να διασχίσει ένα συγκεκριμένο διάστημα. Η πληροφορία αυτή δίνει την ταχύτητα του κάθε πυρήνα. Γνωρίζοντας την ταχύτητα και την ενέργεια κάθε πυρήνα υπολογίζεται η μάζα αυτού μέσω του τύπου της κινητικής ενέργειας. Ο συνδυασμός αυτών των δύο πληροφοριών επιτρέπει τη δημιουργία φάσματος για τη ταυτοποίηση όλων των στοιχείων του στόχου στο οποίο δεν υπάρχει υπόβαθρο θορύβου.

Όλες οι παραλλαγές της τεχνικής ERDA έχουν σχεδιαστεί με σκοπό την απαλοιφή των προβλημάτων τα οποία εμφανίζονται φυσικά σε αυτές τις μετρήσεις και ταυτόχρονα την ανάδειξη και ενίσχυση των πλεονεκτημάτων αυτής. Οι διαφορετικές προσεγγίσεις οδηγούν σε περιπλοκότερες πειραματικές διατάξεις σε σύγκριση με άλλες τεχνικές IBA, όμως προσφέρουν πολύ καλύτερα αποτελέσματα στην ανάλυση ελαφρών στοιχείων στην ακριβή ποσοτικοποίηση των οποίων υπολείπονται σε γενικές γραμμές οι υπόλοιπες τεχνικές. [Mayer_77]

2.3 Ελαστική Σκέδαση – Κινηματική

Η γενική περίπτωση της ελαστικής σκέδασης αναφέρεται στη σκέδαση μεταξύ δύο πυρήνων κατά την οποία διατηρείται η συνολική κινητική ενέργεια του συστήματος. Οι κινητικές ενέργειες των δύο πυρήνων μετά τη σκέδαση υπολογίζονται μέσω των γνωστών σχέσεων της κινηματικής δύο σωμάτων.



Εικόνα 3: Ελαστική Σκέδαση μεταξύ δύο πυρήνων μάζας M_1 και M_2 στο σύστημα του εργαστηρίου.

Στην περίπτωση όπου η μάζα του πυρήνα της δέσμης M_1 είναι μικρότερη ή ίση με τη μάζα του πυρήνα του στόχου M_2 τότε η σχέση μεταξύ των ενεργειών των πυρήνων μετά τη σκέδαση δίνεται από τον τύπο

$$E_{recoil,lab} = E_{0,lab} - E_{scattered,lab} \quad (1)$$

Οι όροι $E_{recoil,lab}$, $E_{scattered,lab}$ αναφέρονται στις κινητικές ενέργειες του ανακρουόμενου και σκεδαζόμενου σωματιδίου αντίστοιχα ενώ ο όρος $E_{0,lab}$ αναφέρεται στην αρχική κινητική ενέργεια του σωματιδίου της δέσμης. Η κινητική ενέργεια του σκεδαζόμενου σωματιδίου δίνεται από τη σχέση [Mayer_77]:

$$E_{scattered,lab} = E_{0,lab} \frac{\{x \cos(\theta_{lab}) + [1 - x^2 \sin^2(\theta_{lab})]^{1/2}\}^2}{(1+x)^2} \quad (2)$$

Στην παραπάνω σχέση ο όρος x αναφέρεται στο λόγο των μαζών των δύο πυρήνων $\frac{M_1}{M_2}$. Οι όροι θ_{lab} , ϕ_{lab} αναφέρονται αντίστοιχα στις γωνίες σκέδασης του σκεδαζόμενου και ανακρουόμενου πυρήνα στο σύστημα του εργαστηρίου. Ομοίως, οι όροι θ , ϕ θα συμβολίζουν στη συνέχεια τις γωνίες σκέδασης στο σύστημα του κέντρου μάζας. Οι γωνίες σκέδασης συνδέονται μεταξύ τους μέσω των παρακάτω σχέσεων [Mayer_77]

$$\theta = \pi - \phi = \pi - 2\phi_{lab} \quad (3)$$

$$\theta = \theta_{lab} + \sin^{-1}[x \sin(\theta_{lab})] \quad (4)$$

2.4 Ελαστική Σκέδαση Rutherford

Ο κύριος μηχανισμός ελαστικής σκέδασης μεταξύ δύο πυρήνων είναι η ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση αυτών μέσω δυνάμεων Coulomb. Σύμφωνα με το γνωστό τύπο του Rutherford, ο οποίος πρώτος μελέτησε αυτή τη σκέδαση, η διαφορική ενεργός διατομή του σκεδαζόμενου σωματιδίου στην περίπτωση όπου η μάζα του πυρήνα στόχου M_2 είναι πολύ μεγαλύτερη από τη μάζα του βλήματος M_1 ($M_1 \ll M_2$) δίνεται στο σύστημα του κέντρου μάζας της αντίδρασης από το τύπο

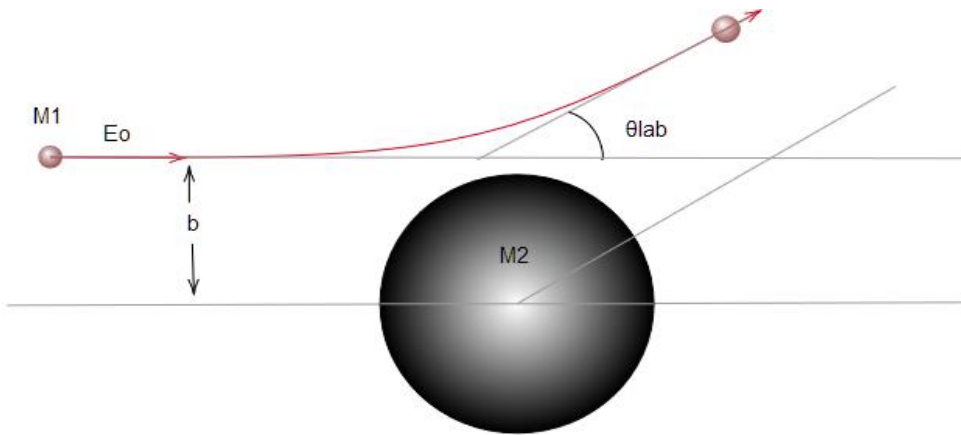
$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{Rutherford}} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{1}{4E_0}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (5)$$

Τα Z_1 και Z_2 αναφέρονται στον ατομικό αριθμό του κάθε πυρήνα. E_0 , όπως και προηγουμένως, είναι η κινητική ενέργεια του βλήματος στο σύστημα του κέντρου μάζας ενώ e είναι το ηλεκτρικό φορτίο ενός ηλεκτρονίου και ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά του κενού. Η συνθήκη $M_1 \ll M_2$ επιτρέπει να θεωρηθεί ότι ο πυρήνας – στόχος παραμένει ακίνητος στο σύστημα του κέντρου μάζας το οποίο διευκολύνει τις πράξεις για τον υπολογισμό της παραπάνω σχέσης. Παρόλα αυτά, η συνθήκη αυτή δεν μπορεί να εφαρμοστεί σε όλες τις ελαστικές σκεδάσεις. Ο γενικότερος τύπος της ενεργού διαφορικής διατομής του σκεδαζόμενου σωματιδίου στο σύστημα του εργαστηρίου κανονικοποιημένος ώστε να δίνει αποτελέσματα σε μονάδες $[mb/sr]$ δίνεται από το τύπο [Mayer_97]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{scattered,lab}} [mb/sr] = 5.1837 \times 10^6 \left(\frac{Z_1 Z_2}{E(keV)_{0,lab}}\right)^2 \frac{\{[M_2^2 - M_1^2 \sin^2(\theta_{lab})]^{\frac{1}{2}} + M_2 \cos(\theta_{lab})\}^2}{M_2 \sin^2(\theta_{lab}) [M_2^2 - M_1^2 \sin^2(\theta_{lab})]^{1/2}} \quad (6)$$

Ομοίως, ο αντίστοιχος τύπος για τη διαφορική ενεργό διατομή του ανακρουόμενου πυρήνα υπολογίζεται μέσω της κινηματικής της αντίδρασης και δίνεται από το τύπο [Mayer_97]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{recoil,lab}} [mb/sr] = 2.0731 \times 10^7 \frac{[Z_2 Z_1 (M_1 + M_2)]^2}{(2M_2 E(keV)_{0,lab})^2 \cos^2(\varphi_{lab})} \quad (7)$$



Εικόνα 4: Σκέδαση Rutherford. Σώμα μάζας M_1 κινείται προς ακίνητο πυρήνα M_2 στο σύστημα του εργαστηρίου. Λόγω των απωστικών δυνάμεων Coulomb αλλάζει η τροχιά του σώματος M_1 . Στη κλασική περίπτωση όπου $M_1 \ll M_2$ το σώμα M_2 παραμένει πρακτικά σχεδόν ακίνητο μετά τη σκέδαση.

2.5 Τα Συστήματα Εργαστηρίου και Κέντρου μάζας

Οποιαδήποτε αντίδραση μεταξύ δύο πυρήνων μπορεί να μελετηθεί σε δύο διαφορετικά συστήματα αναφοράς, το σύστημα του κέντρου μάζας (center of mass frame of reference, c.m) και το σύστημα του εργαστηρίου (laboratory frame of reference, lab). Στο σύστημα του κέντρου μάζας και οι δύο πυρήνες που συμμετέχουν στην αντίδραση έχουν κινητική ενέργεια. Αντίθετα στο σύστημα του εργαστηρίου ο πυρήνας του στόχου θεωρείται ακίνητος με τον πυρήνα – βλήμα της δέσμης να κινείται προς το στόχο. Οι θεωρητικοί υπολογισμοί συνήθως πραγματοποιούνται στο σύστημα του κέντρου μάζας της κάθε αντίδρασης. Γι' αυτό το λόγο οι γενικοί τύποι που χρησιμοποιούνται στη Φυσική συνήθως αναφέρονται σε αυτό το σύστημα αναφοράς. Παρόλα αυτά, όλες οι πειραματικές μετρήσεις πραγματοποιούνται στο σύστημα αναφοράς του εργαστηρίου, επομένως εμφανίζεται η ανάγκη για πραγματοποίηση υπολογισμών και σε αυτό το σύστημα. Η εναλλαγή μεταξύ των δύο συστημάτων στην περίπτωση διαφορικών ενεργών διατομών $\sigma(\theta)$ γίνεται εύκολα μέσω του παρακάτω τύπου

$$\sigma(\theta)_{lab} = \sigma(\theta)_{cm} \frac{d\Omega_{cm}}{d\Omega_{lab}} \quad (8)$$

Όπου η ποσότητα $\frac{d\Omega_{cm}}{d\Omega_{lab}}$ (μη λαμβάνοντας υπόψιν σχετικιστικά φαινόμενα) υπολογίζεται μέσω της σχέσης

$$\frac{d\Omega_{cm}}{d\Omega_{lab}} = \frac{(1+2\gamma\cos\theta + \gamma^2)^{3/2}}{|1+\gamma\cos\theta|} \quad (9)$$

Το γ στη παραπάνω σχέση αναφέρεται στο λόγο $\frac{v_{cm}}{v_{scattered}}$. Η ποσότητα v_{cm} αναφέρεται στην ταχύτητα του βλήματος στο σύστημα του κέντρου μάζας. Η ποσότητα $v_{scattered}$ αναφέρεται στην ταχύτητα του σκεδαζόμενου βλήματος στο σύστημα του κέντρου μάζας. Το γ μπορεί να υπολογιστεί και μέσω του τύπου 10 στη γενική περίπτωση μίας πυρηνικής αντίδρασης της μορφής $a+X \rightarrow b+Y$

$$\gamma = \left[\frac{m_a m_b}{m_x m_y} \frac{K_a}{K_a + Q \left(1 + \frac{m_a}{m_x} \right)} \right]^{1/2} \quad (10)$$

Όπου K_a είναι η κινητική ενέργεια του πυρήνα – βλήμα και Q το Q-value της αντίδρασης.

Πρέπει να σημειωθεί ότι στην παρούσα εργασία εάν τα μεγέθη δεν έχουν δείκτες που να προσδιορίζουν το σύστημα αναφοράς τότε συμβολίζουν την αντίστοιχη ποσότητα όπως αυτή μετράται στο κέντρο μάζας. Η κάθε αναφορά στο σύστημα του εργαστηρίου πάντα επισημαίνεται μέσω χρήσης του δείκτη lab.

2.6 Ελαστική Σκέδαση Mott

Η σκέδαση Mott αναφέρεται στην ελαστική σκέδαση 2 ταυτόσημων σωματιδίων λόγω της ηλεκτρομαγνητικής αλληλεπίδρασης μεταξύ τους. Τα σωματίδια αυτά έχουν την ίδια μάζα, ίδιο φορτίο, ίδια αρχική κινητική ενέργεια στο σύστημα του κέντρου μάζας και ασκούν μεταξύ τους απωστικές δυνάμεις Coulomb. Για μία τέτοιου είδους σκέδαση ο λόγος των μαζών είναι ίσος με 1 και το Q – value της αντίδρασης είναι ίσο με 0 καθώς πρόκειται για ελαστική σκέδαση. Οι ειδικές αυτές συνθήκες απλοποιούν τις εξισώσεις που περιγράφουν τη κινηματική μίας τέτοιας αντίδρασης. Αναλυτικότερα, για τη κινηματική της ελαστικής σκέδασης δύο ταυτόσημων σωματιδίων ισχύουν τα εξής:

$$\theta = 2\theta_{lab} \quad (11)$$

$$\theta_{lab} = \frac{\pi}{2} - \phi_{lab} \quad (12)$$

$$E_{scattered} = E_0 \cos^2(\theta_{lab}) \quad (13)$$

$$E_{recoil} = E_0 \sin^2(\theta_{lab}) = E_0 \cos^2(\phi_{lab}) \quad (14)$$

$$\gamma = 1 \quad (15)$$

$$\frac{d\Omega_{cm}}{d\Omega_{lab}} = 2^{3/2} \sqrt{1 + \cos\theta} \quad (16)$$

Σε κάθε πειραματική διάταξη, η γωνία ανίχνευσης, έστω ω , καθορίζεται από τη θέση του ανιχνευτή. Σε αυτή τη θέση ανιχνεύονται τόσο τα σωματίδια της δέσμης τα οποία σκεδάζονται σε γωνία ω όσο και οι ανακρουόμενοι πυρήνες του στόχου οι οποίοι σκεδάζονται και αυτοί με τη σειρά τους σε γωνία ω . Πρέπει να σημειωθεί ότι οι σκεδαζόμενοι πυρήνες δεν θα προέρχονται από τις ίδιες σκεδάσεις με τους ανακρουόμενους γι αυτό και δεν εφαρμόζεται η σχέση 12. Επομένως, εάν στις σχέσεις 13 και 14 αντικατασταθούν οι θ_{lab} και ϕ_{lab} με ω προκύπτει ότι η ενέργεια των σκεδαζόμενων σωματιδίων θα είναι η ίδια με αυτή των ανακρουόμενων. Άρα σε αυτού του είδους τη μέτρηση συμμετέχουν 2 σωματίδια ίδιας μάζας, ίδιου σπιν της θεμελιώδους τους στάθμης, και ίδιας κινητικής ενέργειας μετά τη σκέδαση. Ως αποτέλεσμα των παραπάνω, η ανίχνευση τους οδηγεί στη δημιουργία μίας κορυφής στο στην οποία συνεισφέρουν και οι σκεδαζόμενοι αλλά και οι ανακρουόμενοι πυρήνες. Δεν υπάρχει κάποια φυσική διεργασία για το διαχωρισμό των πυρήνων. Αυτό δεν οφείλεται σε πειραματικούς περιορισμούς αλλά επιβάλλεται από την ομοιότητα των αλληλοεπιδρώντων σωματιδίων και την κινηματική της αντίδρασης. Η διαφορική ενεργός διατομή που υπολογίζεται μέσω αυτής της μέτρησης αναμένεται να ισούται με το άθροισμα των επιμέρους διαφορικών διατομών στην κλασική προσέγγιση:

$$\frac{d\sigma_{total}}{d\Omega} = f_{scattered}^2 + f_{recoil}^2 \quad (17)$$

Όπου ο όρος $\frac{d\sigma_{total}}{d\Omega}$ αναφέρεται στη συνολική διαφορική ενεργό διατομή, ενώ τα $f_{scattered}$ και f_{recoil} είναι τα πλάτη σκέδασης του σκεδαζόμενου και ανακρουόμενου πυρήνα αντίστοιχα.

Παρ' όλα αυτά, η αρχή της απουσίας διακρισιμότητας (indistinguishability principle) της κβαντομηχανικής επιβάλλει στην περίπτωση ταυτόσημων σωματιδίων η πρόσθεση των διαφορικών διατομών να γίνει κβαντομηχανικά. Αυτό οδηγεί στην εμφάνιση ενός όρου συμβολής (interference term).

$$\frac{d\sigma_{total}}{d\Omega} = (f_{scattered} \pm f_{recoil})^2 \quad (18)$$

$$\frac{d\sigma_{total}}{d\Omega} = |f|_{scattered}^2 + |f|_{recoil}^2 \pm 2R|f|_{scattered}|f|_{recoil} \quad (19)$$

Το πρόσημο στις παραπάνω σχέσεις εξαρτάται από τη φερμιονική ή μποζονική φύση των πυρήνων ώστε να εξασφαλίζεται η συμμετρικότητα ή αντισυμμετρικότητα της κυματοσυνάρτησης.

Στην περίπτωση όπου το spin της θεμελιώδους στάθμης του πυρήνα είναι διάφορο του μηδενός (spin $\neq 0$) πρέπει να ληφθεί υπ' όψιν και η συνεισφορά του συνολικού spin του συστήματος ($S_{total} = S_{scattered} + S_{recoil}$) στην τελική κυματοσυνάρτηση. Το συνολικό spin του συστήματος ισούται με ένα μη συσχετισμένο άθροισμα (incoherent sum) όλων των πιθανών τελικών spin. Τα πρόσημα και οι παράγοντες ζύγισής (weighing factors) των επιμέρους όρων καθορίζονται από τη πολλαπλότητα του spin (spin multiplicity, l) και από τη συμμετρικότητα ή αντισυμμετρικότητα της κυματοσυνάρτησης στην εναλλαγή του spin. Η συνολική ενεργός διατομή είναι ένα συμμετρικό ή αντισυμμετρικό μη συσχετισμένο άθροισμα των πιθανών ενεργών διατομών των σκεδαζόμενων και ανακρουόμενων πυρήνων, τα βάρη και πρόσημα των οποίων καθορίζονται από το spin multiplicity. Παραδείγματος χάριν, έστω δύο φερμιόνια με spin θεμελιώδους στάθμης ίσο με $\frac{1}{2}$. Το συνολικό spin του συστήματος μπορεί να ισούται είτε με 0 (αντισυμμετρική συνάρτηση με δείκτη βάρους $\frac{1}{4}$) είτε με 1 (συμμετρική συνάρτηση με δείκτη βάρους $\frac{3}{4}$). Η διαφορική ενεργός διατομή δίνεται από τη σχέση

$$\frac{d\sigma_{total}}{d\Omega} = \frac{1}{4} \{ |f|_{scattered}^2 + |f|_{recoil}^2 + 2R|f|_{scattered}|f|_{recoil} \} + \frac{3}{4} \{ |f|_{scattered}^2 + |f|_{recoil}^2 - 2R|f|_{scattered}|f|_{recoil} \}$$

Έπειτα από απλές πράξεις ο δείκτης του όρου συμβολής προκύπτει ότι ισούται με -1 . Μεγαλύτερο spin multiplicity οδηγεί σε πιο περίπλοκα αθροίσματα, με αποτέλεσμα ο όρος της συμβολής να αποδυναμώνεται. Στη θεωρητική περίπτωση όπου $l \rightarrow \infty$ ο όρος συμβολής απαλείφεται.

Η γενική περίπτωση σκέδασης 2 ταυτόσημων σωματιδίων με spin θεμελιώδους στάθμης διάφορο του μηδενός μελετήθηκε πρώτη φορά από τον Mott στη δεκαετία του '30 ο οποίος υπολόγισε τον αναλυτικό τύπο ο οποίος δίνει τη συνολική διαφορική ενεργό διατομή της σκέδασης. Για πυρήνες με ατομικό αριθμό Z , όπου η θεμελιώδης τους στάθμη έχει spin s , η ενέργεια της δέσμης ισούται με E και η γωνία ανίχνευσης είναι θ , η διαφορική ενεργός διατομή της ελαστικής σκέδασης στο σύστημα του κέντρου μάζας δίνεται από τη σχέση: [Canto_14]

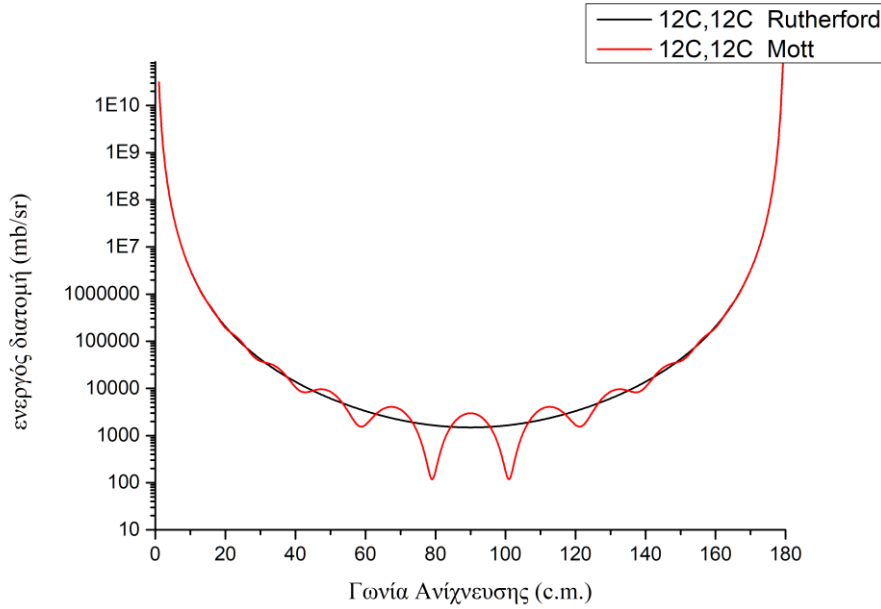
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{4E} \right)^2 \left\{ \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} + \frac{1}{\cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} + \frac{2(-1)^{2s} \cos[n_s \ln(\tan^2(\frac{\theta}{2}))]}{2s+1 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \right\} \quad (20)$$

Ο πρώτος όρος της άθροισης οφείλεται στη συνεισφορά του σκεδαζόμενου πυρήνα, ο δεύτερος σε αυτήν του ανακρουόμενου, ενώ ο τρίτος όρος είναι ο όρος συμβολής. Το πρόσημο του όρου συμβολής μεταβάλλεται ανάλογα με την τιμή του σπιν της θεμελιώδους στάθμης του πυρήνα. Για ακέραιες τιμές σπιν (μποζονικές κατανομές) το πρόσημο είναι θετικό, ενώ για ημιακέραιες (φερμιονικές κατανομές) αρνητικό. Η εναλλαγή αυτή εξασφαλίζει τη συμμετρικότητα ή αντισυμμετρικότητα της κυματοσυνάρτησης. Όλες οι παράμετροι στην παραπάνω έκφραση αναφέρονται στο σύστημα του κέντρου μάζας. Η παράμετρος n_s ονομάζεται παράμετρος Sommerfeld και δίνεται από τον τύπο [Canto_14]

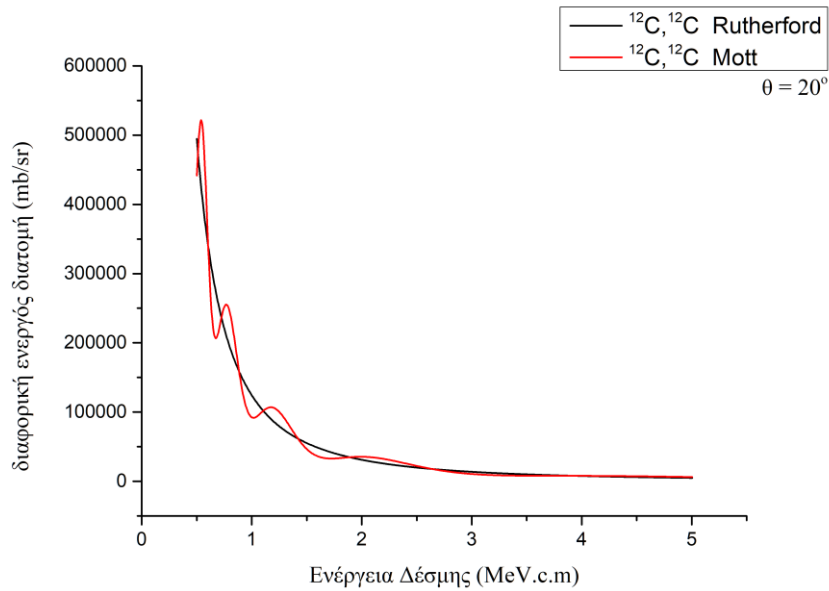
$$n_s = \frac{Z^2 e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m_{red}}{2E_{lab}}} \quad (21)$$

Ο όρος m_{red} είναι η ανηγμένη μάζα του συστήματος ενώ E_{lab} είναι η ενέργεια της δέσμης στο σύστημα του εργαστηρίου. Η ενεργός διατομή στο σύστημα του εργαστηρίου υπολογίζεται μέσω του τύπου (8).

Η διαφορική ενεργός διατομή που υπολογίζεται μέσω του τύπου του Mott (20) αποκλίνει από τις αντίστοιχες τιμές που δίνει ο τύπος του Rutherford. Η απόκλιση αυτή οφείλεται στον όρο συμβολής. Οι τριγωνομετρικοί αριθμοί στον όρο αυτό οδηγούν σε μία ταλαντωτική συμπεριφορά της ενεργού διατομής της σκέδασης γύρω από τις τιμές που υπολογίζονται μέσω του τύπου του Rutherford. Η συμπεριφορά αυτή παρατηρείται και σε γωνιακές και σε ενεργειακές κατανομές όπως φαίνεται στις εικόνες 5 και 6 που ακολουθούν. Ο όρος συμβολής καθορίζει το μέγεθος της απόκλισης από τις τιμές του τύπου του Rutherford όσο και τη συχνότητα της ταλαντωτικής συμπεριφοράς. Όπως γίνεται εμφανές από τη σχέση (20), ο όρος της συμβολής εξαρτάται από το σπιν της θεμελιώδους στάθμης του πυρήνα, τη γωνία ανίχνευσης θ , την ενέργεια της δέσμης E και τη μάζα του πυρήνα, μέσω της παραμέτρου Sommerfeld. Η κάθε μία από τις παραπάνω παραμέτρους επηρεάζει με διαφορετικό τρόπο και σε διαφορετικό βαθμό το μέγεθος της απόκλισης και τη συχνότητα των ταλαντώσεων. Ο τρόπος που επηρεάζουν οι παράμετροι αυτοί το φαινόμενο παρουσιάζονται παρακάτω.



Εικόνα 5: Γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης ^{12}C με ^{12}C κινητικής ενέργειας 3 MeV στο σύστημα του κέντρου μάζας. Με κόκκινο σημειώνεται η πραγματική διαφορική ενεργός διατομή, η οποία υπολογίζεται μέσω του τύπου του Mott, ενώ με μαύρο δίνεται η ενεργός διατομή που υπολογίζεται μέσω του τύπου του Rutherford.



Εικόνα 6: Ενεργειακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης ^{12}C με ^{12}C για γωνία ανίχνευσης ίση με 20° στο σύστημα του κέντρου μάζας. Με κόκκινο σημειώνεται η πραγματική διαφορική ενεργός διατομή η οποία υπολογίζεται μέσω του τύπου του Mott, ενώ με μαύρο δίνεται η ενεργός διατομή που υπολογίζεται μέσω του τύπου του Rutherford. Παρατηρείται η ταλαντωτική συμπεριφορά του φαινομένου γύρω από τις τιμές του τύπου του Rutherford, η οποία φθίνει σε μεγάλες ενέργειες.

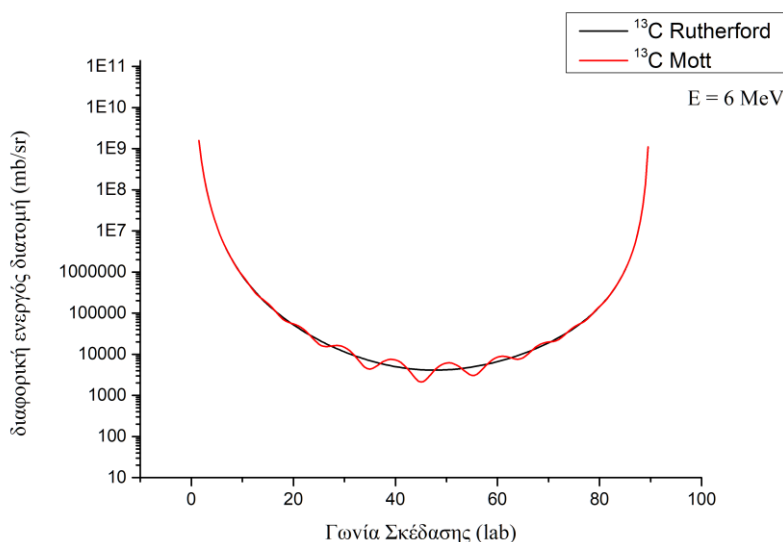
Στην περίπτωση ελαστικών σκεδάσεων σωματιδίων ίδιας μάζας η κινηματική επιβάλλει ένα πιθανό γωνιακό εύρος σκέδασης από τις $0^\circ < \theta < 180^\circ$ στο σύστημα c.m. (κάθε σκέδαση είναι επίσης συμμετρική ως προς τον άξονα διέλευσης της δέσμης). Στο

σύστημα lab το γωνιακό εύρος περιορίζεται μεταξύ 0° και 90° όπως προκύπτει και από τη σχέση (11). Στην περίπτωση σκέδασης Mott οι γωνίες 0° και 180° αποτελούν μαθηματικούς πόλους της σχέσης (20), καθώς οι γωνίες αυτές προκαλούν απειρισμό της σχέσης. Το ίδιο ισχύει για τις γωνίες 0° και 90° στο σύστημα του εργαστηρίου. Εκτός αυτού, η διαφορική ενεργός διατομή της σκέδασης Mott είναι συμμετρική γύρω από τις 90° στο σύστημα c.m. και αντίστοιχα γύρω από τις 45° στο σύστημα lab. Λόγω αυτού ισχύει ότι

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}_{Mott,cm} = \frac{d\sigma(\pi-\theta)}{d\Omega}_{Mott,cm} \quad (22)$$

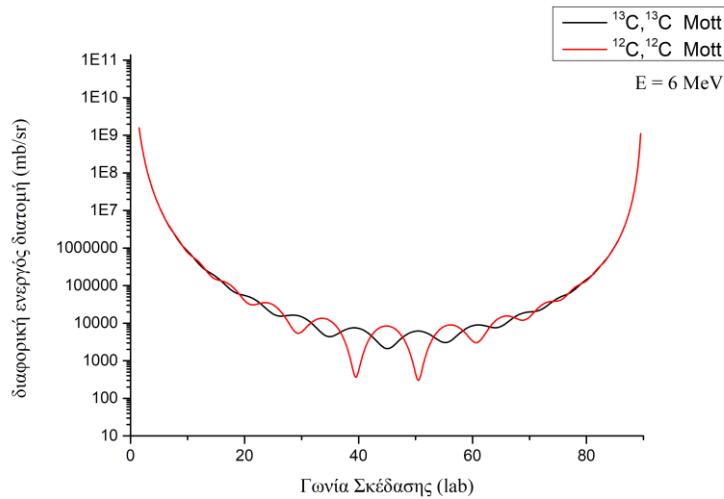
$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}_{Mott,lab} = \frac{d\sigma(\pi/2-\theta)}{d\Omega}_{Mott,lab} \quad (23)$$

Για γωνίες κοντά στους πόλους η ενεργός διατομή σκέδασης Mott τείνει στα αποτελέσματα της σκέδασης Rutherford. Η διαφοροποίηση μεταξύ των αποτελεσμάτων των δύο σκεδάσεων γίνεται όλο και πιο εμφανής όσο η γωνία ανίχνευσης πλησιάζει το συμμετρικό σημείο. Τα παραπάνω, τόσο για τη συμμετρικότητα της διαφορικής ενεργού διατομής όσο και για τα όρια αυτής και τη ταύτισή της με τις τιμές της σχέσης του Rutherford, γίνονται εμφανή στις εικόνες 5 και 7 οι οποίες αναφέρονται στην ίδια περίπτωση σκέδασης Mott στο σύστημα του κέντρου μάζας και εργαστηρίου αντίστοιχα.



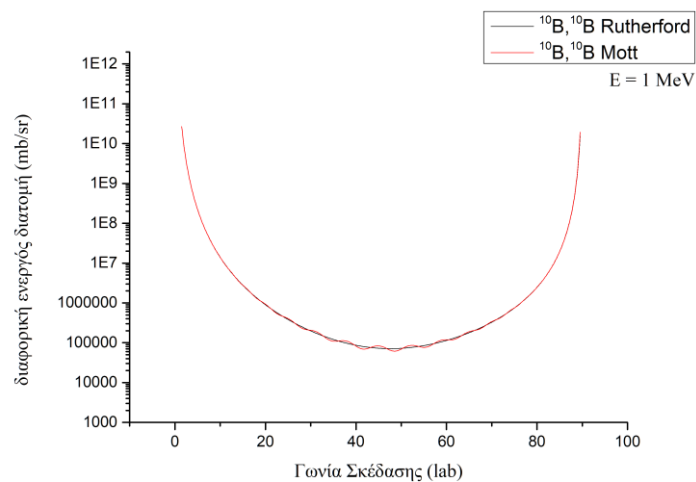
Εικόνα 7: Γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης Mott του ^{13}C κινητικής ενέργειας 6 MeV στο σύστημα του εργαστηρίου. Με κόκκινο σημειώνεται η διαφορική ενεργός διατομή της σκέδασης Mott, ενώ με μαύρο δίνεται η ενεργός διατομή του Rutherford. Η ταλαντωτική συμπεριφορά του φαινομένου γύρω από τις τιμές του τύπου του Rutherford είναι εμφανέστερη γύρω από το συμμετρικό σημείο στις 45° ενώ φθίνει όσο πλησιάζει στα ακρότατα 0° και 90° .

Η γωνία ανίχνευσης καθορίζει επιπλέον τα σημεία στα οποία εμφανίζονται ακρότατα. Όλες οι γωνιακές κατανομές της σκέδασης Mott επομένως σε συγκεκριμένη ενέργεια δέσμης παρουσιάζουν ακρότατα σε συγκεκριμένες σταθερές γωνίες.



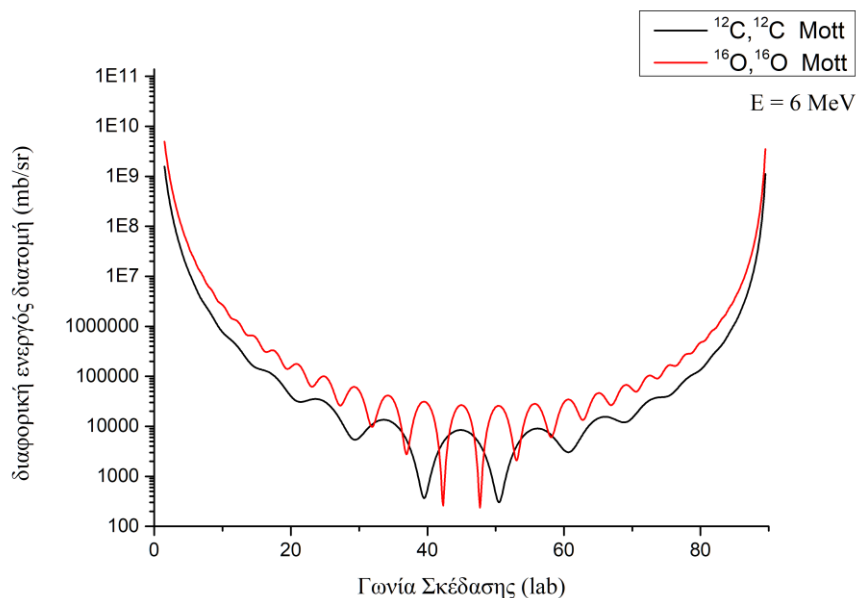
Εικόνα 8: Γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης Mott του ^{12}C και ^{13}C κινητικής ενέργειας 6 MeV στο σύστημα του εργαστηρίου. Με κόκκινο σημειώνεται η διαφορική ενεργός διατομή της σκέδασης Mott του ^{12}C ενώ με μαύρο του ^{13}C . Το σπιν της θεμελιώδης στάθμης του ^{12}C ισούται με 0 (μπόζονιο) ενώ του ^{13}C ισούται με $\frac{1}{2}$. Λόγω αυτού αν και οι δύο κατανομές παρουσιάζουν ακρότατα στις ίδιες γωνίες η φύση τους (μέγιστο ή ελάχιστο) είναι αντίθετη.

Η φύση των ακρότατων των κατανομών (μέγιστα ή ελάχιστα) εξαρτώνται από το εάν η θεμελιώδης στάθμη του πυρήνα έχει ημιακέραιο σπιν (φερμιόνιο) ή ακέραιο σπιν (μποζόνιο). Ως εκθέτης στο -1 (σχέση 20) το σπιν μεταβάλλει το πρόσημο του όρου και εξασφαλίζει τη συμμετρικότητα ή αντισυμμετρικότητα της κυματοσυνάρτησης, όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως. Αυτό με τη σειρά του αλλάζει ανάλογα τα ακρότατα της κατανομής. Το φαινόμενο αυτό παρατηρείται στην εικόνα 8. Επιπλέον, η παρουσία του σπιν στον παρονομαστή του όρου δηλώνει ότι η τιμή του σπιν είναι αντιστρόφως ανάλογη από το μέγεθος της απόκλισης. Η συμπεριφορά αυτή είναι σε συμφωνία με το γεγονός ότι το spin multiplicity του συστήματος μειώνει την επίδραση του όρου συμβολής στην ενεργό διατομή. Παρόλα αυτά ακόμα και σε πυρήνες με σπιν ίσο με 4.5 διατηρείται μία παρατηρήσιμη απόκλιση από τις τιμές της σκέδασης Rutherford όπως παρουσιάζεται στην εικόνα 9. Τα παραπάνω ισχύουν και για ακέραιες αλλά και για ημιακέραιες τιμές του σπιν.

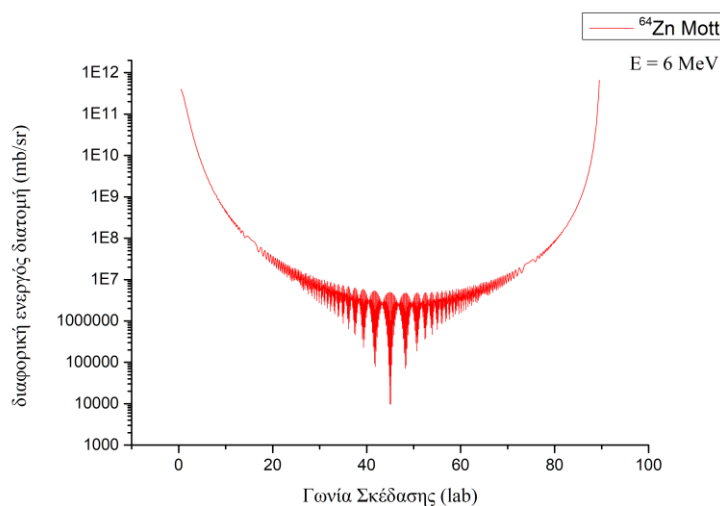


Εικόνα 9: Γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης Mott του ^{10}B . Με κόκκινο σημειώνεται η διαφορική ενεργός διατομή της σκέδασης Mott ενώ με μαύρο η Rutherford. Το σπιν της θεμελιώδους στάθμης του ^{10}B ισούται με 3. Λόγω αυτού το πλάτος των ταλαντώσεων είναι πολύ μικρό

Η μάζα των πυρήνων είναι ένας άλλος όρος ο οποίος επηρεάζει το φαινόμενο σε μη αμελητέο βαθμό. Η μάζα εισέρχεται στον όρο της συμβολής μέσω της παραμέτρου Sommerfeld, ο οποίος με τη σειρά του βρίσκεται στο εσωτερικό του συνημιτόνου. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η μάζα να επηρεάζει τη συχνότητα του φαινομένου, καθώς αυξάνοντας τη τιμή της αυξάνεται και η συχνότητα των ταλαντώσεων. Μικρή αύξηση στη τιμή της μάζας οδηγεί σε μη αμελητέα μεταβολή της συχνότητας της φαινομένου όπως φαίνεται στην εικόνα 10. Μεγάλες τιμές μάζας οδηγούν σε πολύ απότομες ταλαντωτικές συμπεριφορές (εικόνα 11).



Εικόνα 10: Γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης Mott του ^{12}C και ^{16}O κινητικής ενέργειας 6 MeV στο σύστημα του εργαστηρίου. Με κόκκινο σημειώνεται η διαφορική ενεργός διατομή της σκέδασης Mott του ^{16}O ενώ με μαύρο του ^{12}C . Το σπιν της θεμελιώδους στάθμης του ^{12}C και του ^{16}O ισούται με 0 (μποζόνια). Η μεγαλύτερη μάζα του οξυγόνου οδηγεί σε αύξηση της συχνότητας της ταλάντωσης.

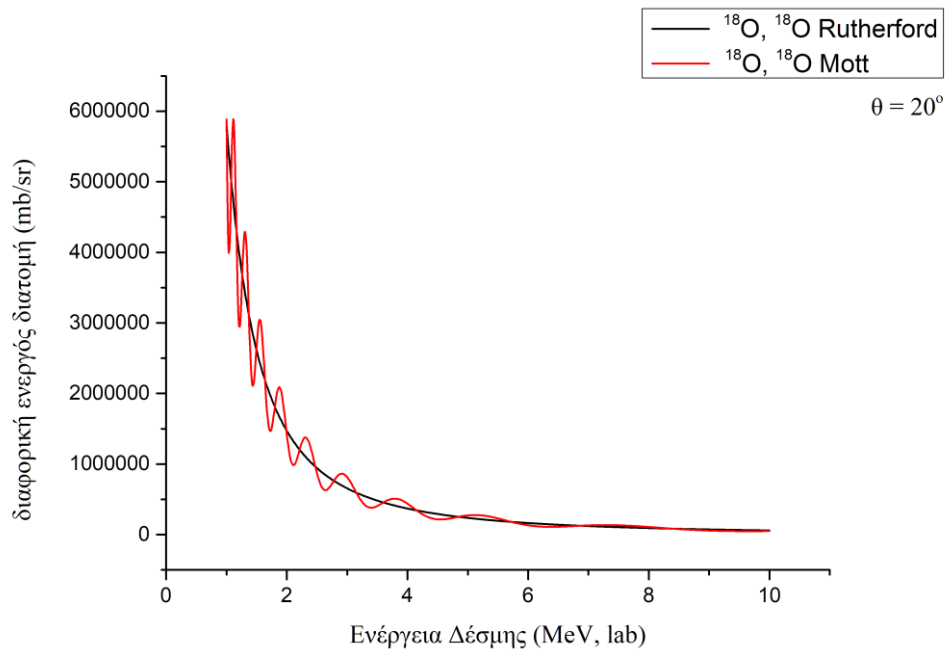


Εικόνα 11: Γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης Mott του ^{64}Zn κινητικής ενέργειας 6 MeV στο σύστημα του εργαστηρίου. Το σπιν της θεμελιώδους στάθμης του πυρήνα ισούται με 0 (μποζόνια) όπως στους πυρήνες ^{12}C και ^{16}O , όμως η μεγαλύτερη μάζα οδηγεί στην παραπάνω μορφή.

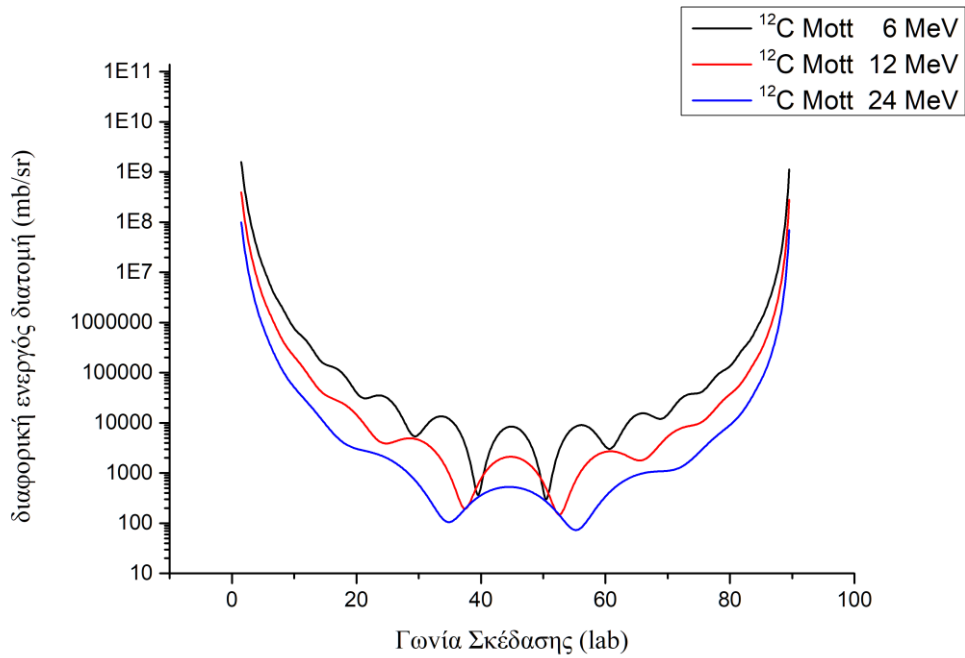
Σε συνδυασμό με τα παραπάνω, η αρχική ενέργεια της δέσμης μεταβάλλει σημαντικά τις τιμές της ενεργού διατομής της αντίδρασης. Η ελαστική σκέδαση Mott δεν είναι ο μοναδικός διαθέσιμος μηχανισμός αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο ταυτόσημων πυρήνων. Αύξηση της ενέργειας συνεπάγεται μείωση της πιθανότητας ηλεκτρομαγνητικής αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο πυρήνων, η οποία οδηγεί σε σκέδαση Mott, και αύξηση της πιθανότητας εμφάνισης πυρηνικών αντιδράσεων. Για ενέργειες μικρότερες από το φράγμα αλληλεπίδρασης Coulomb η ελαστική σκέδαση επικρατεί χωρίς να αποκλείει όμως τους άλλους τρόπους αλληλεπίδρασης. Ομοίως για μεγαλύτερες ενέργειες η ελαστική σκέδαση δεν εξαλείφεται. Το φράγμα αλληλεπίδρασης Coulomb δίνεται κατά προσέγγιση από τον τύπο

$$U_{Coulomb} = \frac{1.438 Z_1 Z_2}{0.5 + 1.36(A_1^{1/3} + A_2^{1/3})} \text{ (MeV)} \quad (24)$$

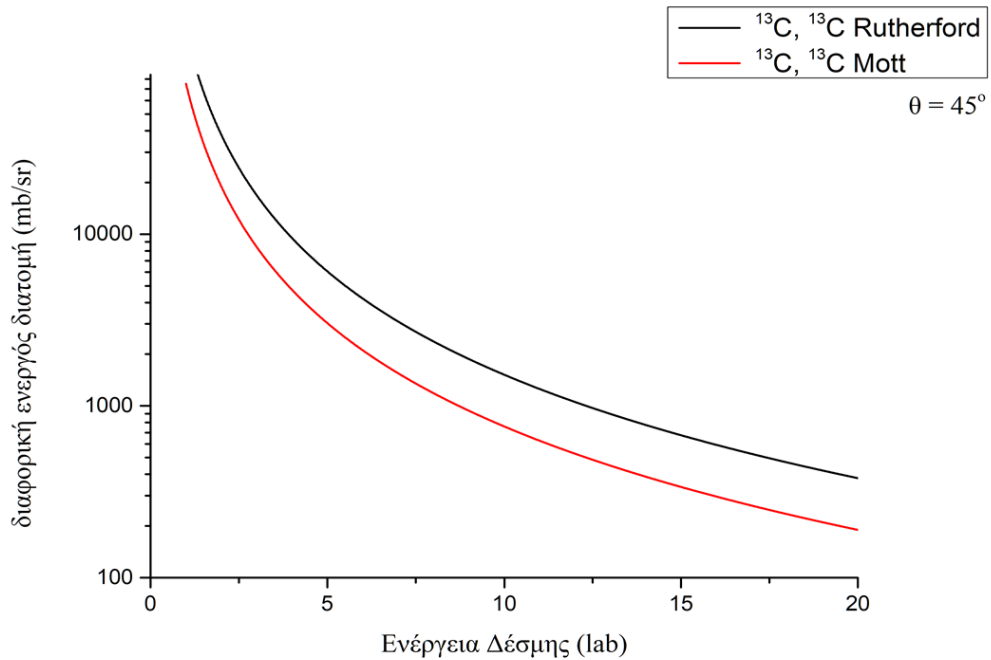
Το παραπάνω φαινόμενο αντικατοπτρίζεται στη σχέση (20), αφού αύξηση της ενέργειας οδηγεί σε πτώση των τιμών της διαφορικής ενεργού διατομής της αντίδρασης και μείωση της συχνότητας των ταλαντώσεων όπως γίνεται εμφανές στην εικόνα 12. Η επίδραση της ενέργειας στη συχνότητα του φαινομένου οφείλεται στη παράμετρο Sommerfeld. Μεγαλύτερες ενέργειες οδηγούν σε μικρότερες τιμές της παραμέτρου, η οποία με τη σειρά της οδηγεί σε μείωση της συχνότητας και σε μία διαπλάτυνση των ταλαντώσεων (εικόνα 13).



Εικόνα 12: Ενεργειακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης Mott του ^{18}O για γωνία σκέδασης 20° στο σύστημα του εργαστηρίου. Η αύξηση της ενέργειας οδηγεί σε αύξηση της συχνότητας των ταλαντώσεων.



Εικόνα 13: Γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της ελαστικής σκέδασης Mott του ^{12}C στο σύστημα του εργαστηρίου σε 3 διαφορετικές κινητικές ενέργειες. Η αύξηση της ενέργειας της δέσμης προκαλεί την μείωση της συχνότητας των ταλαντώσεων και διαπλάτυνση των κορυφών.



Εικόνα 14: Ενεργειακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής της σκέδασης Mott του ^{13}C στο σύστημα του εργαστηρίου σε γωνία ανίχνευσης 45° . Σε αυτή τη γωνία η ταλαντωτική συμπεριφορά εξαφανίζεται αλλά παραμένει διαφοροποίηση μεταξύ των τιμών του τύπου του Mott και του τύπου του Rutherford.

2.7 Το Φαινόμενο της Εγκάρσιας Ισοτροπίας (Transverse Isotropy)

Στη περίπτωση πυρήνων με ακέραιο σπιν (μποζονικές κατανομές) η σκέδαση Mott παρουσιάζει μία ιδιαίτερη συμπεριφορά. Για συγκεκριμένη τιμή ενέργειας δέσμης, η τιμή της οποίας εξαρτάται από την τιμή του σπιν της θεμελιώδους στάθμης, η ταλαντωτική συμπεριφορά του φαινομένου εξαφανίζεται πλήρως. Έναντι αυτής, η ενεργός διατομή της αντίδρασης παραμένει σταθερή για ένα μεγάλο γωνιακό εύρος. Παρ' όλα αυτά η απόκλιση από τις τιμές που υπολογίζονται μέσω του τύπου του Rutherford παραμένει. Για ενέργειες μεγαλύτερες από αυτό το όριο η γωνιακή κατανομή της ενεργού διατομής αποκτά ένα παραβολοειδές σχήμα, χωρίς την επανεμφάνιση της ταλαντωτικής συμπεριφοράς. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται (transverse isotropy).

Για να γίνει κατανοητό το φαινόμενο αυτό και η συμπεριφορά του πρέπει να μελετηθεί η σχέση η οποία δίνει τη διαφορική ενεργό διατομή της σκέδασης Mott. Η σχέση αυτή (20), παρουσιάζει διάφορα ακρότατα ανάλογα με τη γωνία ανίχνευσης και την ενέργεια της δέσμης. Από αυτά, το ακρότατο που εμφανίζεται στις 90 μοίρες, στο σύστημα του κέντρου μάζας, αποτελεί ειδική περίπτωση καθώς οι γωνιακές κατανομές της σκέδασης είναι συμμετρικές γύρω από αυτό. Εκτός αυτού, στη περίπτωση ακεραίου σπιν το ακρότατο αυτό αποτελεί το ολικό ελάχιστο της γωνιακής κατανομής ενώ στην περίπτωση ημιακεραίου σπιν, εκατέρωθεν αυτού εντοπίζονται τα δύο μικρότερα τοπικά ελάχιστα της κατανομής. Η μελέτη ενός ακρότατου επιτυγχάνεται μέσω της ανάλυσης της δεύτερης παραγώγου της εκάστοτε εξίσωσης. Καθώς όλα τα ακρότατα οφείλονται στον όρο της συμβολής αρκεί η παραγωγή μόνον αυτού. Μέσω της παραγωγής προκύπτουν τα εξής [Hussein_15]:

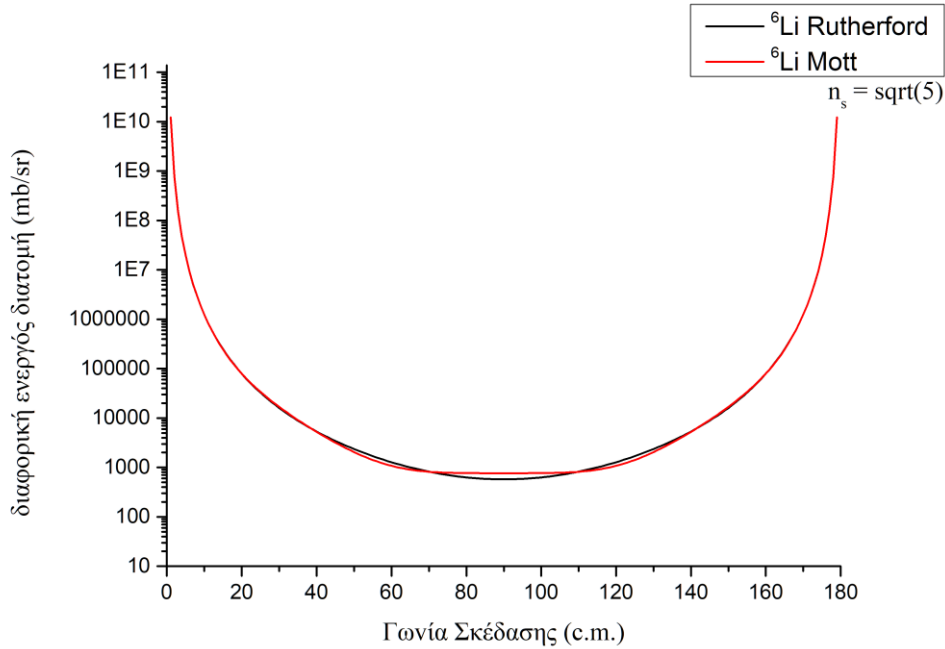
$$\frac{d^2}{d\theta^2} \left(\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \right)_{bosons, \theta=90} = \left[\frac{j+1}{2j+1} \right] n_s^4 (-n_s^2 + 3j + 2) \quad (25)$$

$$\frac{d^2}{d\theta^2} \left(\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \right)_{fermions, \theta=90} = \left[\frac{j+1}{2j+1} \right] n_s^4 (+n_s^2 + 3j + 2) \quad (26)$$

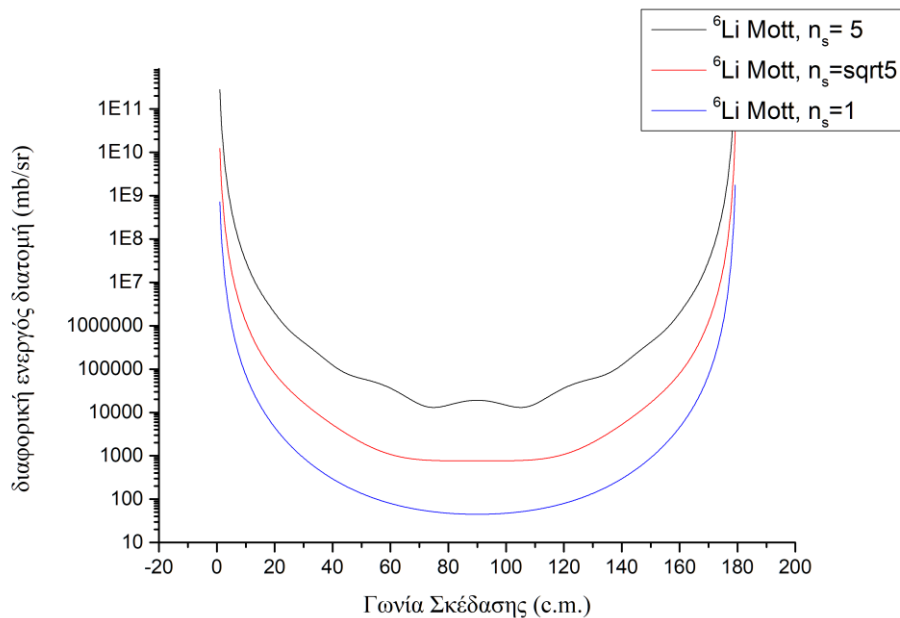
Σύμφωνα με τις παραπάνω σχέσεις η δεύτερη παράγωγος στην περίπτωση φερμιονίων είναι πάντα μεγαλύτερη του μηδενός γι' αυτό και αποτελεί ένα απλό τοπικό μέγιστο στην κατανομή της ενεργού διατομής. Στην περίπτωση όμως μποζονίων για παράμετρο Sommerfeld τέτοια ώστε

$$n_s = \sqrt{3j + 2} \quad (27)$$

η δεύτερη παράγωγος μηδενίζεται, κάτι το οποίο μετατρέπει το ακρότατο αυτό σε σημείο καμπής για τον όρο της συμβολής (εικόνα 15). Επομένως το φαινόμενο του transverse isotropy εμφανίζεται μόνο σε πυρήνες με ακέραιο σπιν, γιατί μόνο σε αυτούς μπορεί να επιτευχθεί μηδενισμός της δεύτερης παραγώγου. Ο μηδενισμός αυτός απαιτεί η παράμετρος Sommerfeld να λάβει συγκεκριμένη τιμή η οποία καθορίζεται από το σπιν της θεμελιώδους στάθμης του πυρήνα. Η παράμετρος Sommerfeld μεταβάλλεται αντιστρόφως ανάλογα με την ενέργεια (σχέση 21) επομένως για συγκεκριμένη ενέργεια δέσμης επιτυγχάνεται ο μηδενισμός της παραγώγου όπως φαίνεται στην εικόνα 16.



Εικόνα 15: Ελαστική σκέδαση Mott του ${}^6\text{Li}$ η θεμελιώδης στάθμη του οποίου έχει σπιν ίσο με 1. Για ενέργεια δέσμης τέτοια ώστε ο παράγοντας Sommerfeld να ισούται με $\sqrt{3 * 1 + 2} = \sqrt{5}$ εμφανίζεται το φαινόμενο του transverse isotropy. Με μαύρο συμβολίζεται η ενεργός διατομή κατά Rutherford ενώ με κόκκινο κατά Mott και εμφανίζεται το φαινόμενο.



Εικόνα 16: Γωνιακή κατανομή της σκέδασης Mott του ${}^6\text{Li}$ για διάφορες ενέργειες δέσμης. Το σπιν της βασικής στάθμης του ${}^6\text{Li}$ ισούται με 1. Για ενέργεια δέσμης τέτοια ώστε $n_s = \sqrt{5}$ παρατηρείται το φαινόμενο του transverse isotropy. Για ενέργειες δέσμης μεγαλύτερες από αυτή (άρα για $n_s < \sqrt{5}$) η ενεργός διατομή αποκτά ένα παραβολοειδές σχήμα.

2.8 Το Φαινόμενο ηλεκτρονικής θωράκισης του πυρήνα (Screening Effect)

Η σχέση για τον υπολογισμό της ενεργού διατομής της σκέδασης Mott αναπτύχθηκε θεωρώντας ότι μόνον οι δύο πυρήνες αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Σε πραγματικές συνθήκες όμως, τα ηλεκτρόνια των στοιβάδων των ατόμων του στόχου αλληλεπιδρούν εξίσου με το σκεδαζόμενο πυρήνα όσο και με τον ανακρουόμενο. Η παρουσία αυτών των ηλεκτρονίων έχει σαν αποτέλεσμα τη μείωση του 'πραγματικού' φορτίου των πυρήνων (effective nuclear charge) το οποίο με τη σειρά του οδηγεί στη μείωση της διαφορικής ενεργού διατομής της αντίδρασης. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται screening effect. Για να είναι δυνατή η σύγκριση μεταξύ θεωρητικών υπολογισμών και πειραματικών αποτελεσμάτων, η επίδραση αυτών των ηλεκτρονίων πρέπει να ληφθεί υπ' όψιν. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω ενός διορθωτικού παράγοντα f . Η διορθωμένη διαφορική ενεργός διατομή δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{corrected,projectile}} = f_{screening} \frac{d\sigma}{d\Omega_{projectile}} \quad (27)$$

Ο όρος $f_{screening}$ αναφέρεται στον διορθωτικό παράγοντα. Σύμφωνα με το μοντέλο του Andersen, στο σύστημα του κέντρου μάζας ο όρος αυτός ισούται με

$$f_{Andersen} = \frac{(1 + \frac{1}{2} \frac{V_1}{E})^2}{\{1 + \frac{V_1}{E} + [\frac{V_1}{2E \sin(\frac{\theta}{2})}]^2\}^2} \quad (28)$$

Στον παραπάνω τύπο, E είναι η αρχική ενέργεια της δέσμης και θ η γωνία ανίχνευσης στο σύστημα του κέντρου μάζας. Ο όρος V_1 αναφέρεται στην αύξηση της κινητικής ενέργειας των πυρήνων λόγω του screening. Η αύξηση αυτή υπολογίζεται μέσω του τύπου

$$V_1 (keV) = 0.04873 Z_{projectile} Z_{recoil} \sqrt{Z_{projectile}^{2/3} + Z_{recoil}^{2/3}} \quad (29)$$

Σύμφωνα με το μοντέλο του Andersen η διορθωμένη διαφορική ενεργός διατομή για τους ανακρουόμενους πυρήνες υπολογίζεται μέσω της κινηματικής και δίνεται από το τύπο

$$\sigma(\varphi_{lab})_{recoil,corrected} = 4 \frac{\sin^2(\theta_{lab}) \cos(\theta - \theta_{lab}) \cos(\varphi_{lab})}{\sin^2(\theta)} \sigma(\theta_{lab})_{corrected,scattered} \quad (30)$$

Στην περίπτωση της σκέδασης Mott οι παράγοντες που καθορίζουν τον διορθωτικό παράγοντα για το φαινόμενο (ενέργεια, γωνία σκέδασης, ταχύτητα) είναι ίδιοι και για τους δύο πυρήνες. Αυτό επιτρέπει την εφαρμογή του διορθωτικού παράγοντα απευθείας στη σχέση (20). Επομένως, η διορθωμένη διαφορική ενεργός διατομή για τη σκέδαση Mott υπολογίζεται μέσω της σχέσης

$$\sigma(\theta)_{Mott,corrected} = f_{screening}(E, \theta)_{Andersen} \sigma(\theta)_{Mott} \quad (23)$$

Η διορθωμένη διαφορική ενεργός διατομή στο σύστημα του εργαστηρίου υπολογίζεται μέσω της σχέσης (8). Σύμφωνα με αυτή ισχύει ότι

$$\sigma(\theta)_{Mott,lab,screened} = \sigma(\theta)_{Mott,cm,screened} \frac{d\Omega_{cm}}{d\Omega_{lab}} \quad (24)$$

Πρέπει να τονιστεί ότι όλα τα μοντέλα τα οποία περιγράφουν το screening είναι φαινομενολογικής φύσης. Η ακρίβεια του μοντέλου του Andersen μειώνεται σημαντικά για γωνίες και ενέργειες μικρότερες από 10° και 300 keV αντίστοιχα. Παρ' όλα αυτά η επίδραση του φαινομένου screening είναι εμφανέστερη σε μικρές γωνίες σκέδασης και χαμηλές σχετικά ενέργειες. Όσο αυξάνεται η γωνία σκέδασης ή και η ενέργεια του βλήματος, η επίδραση του φαινομένου γίνεται αμελητέα. [Andersen_77]

Κεφάλαιο 3: Το Φύλλο Excel MottCalc

3.1 Περιγραφή του φύλλου Excel

Το φύλλο Excel MottCalc αποτελεί ένα εργαλείο για την πραγματοποίηση αναλυτικών υπολογισμών για τη διαφορική ενεργό διατομή της ελαστικής σκέδασης Mott. Βασιζόμενο στον αναλυτικό τύπο της διαφορικής ενεργού διατομής της σκέδασης Mott (σχέση 20) και λαμβάνοντας υπ όψιν την επίδραση του φαινομένου screening (σχέση 23) το φύλλο Excel υπολογίζει γωνιακές και ενεργειακές κατανομές της διαφορικής ενεργού διατομής της σκέδασης. Τα αποτελέσματα δίνονται τόσο στο σύστημα του κέντρου μάζας όσο και στο σύστημα του εργαστηρίου. Οι υπολογισμοί που πραγματοποιεί το φύλλο καθώς και όλες οι υπόλοιπες λειτουργίες που προσφέρει υλοποιούνται μέσω της προγραμματιστικής γλώσσας Visual Basic, την οποία υποστηρίζει το Excel.

Οι υπολογισμοί του φύλλου βασίζονται στις σχέσεις που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο 2. Ο χρήστης επιλέγει το είδος της κατανομής που επιθυμεί, την αρχική και τελική τιμή αυτής και το βήμα μεταξύ των τιμών. Με απλές πράξεις καθορίζεται ο αριθμός των τιμών που θα περιέχονται στη κατανομή που ζητήθηκε. Μέσω της σχέσης (20) υπολογίζεται η διαφορική ενεργός διατομή και μέσω της σχέσης (28) ο διορθωτικός παράγοντας για το φαινόμενο screening για κάθε τιμή της κατανομής. Ο πολλαπλασιασμός του διορθωτικού παράγοντα με την τιμή της ενεργού διατομής δίνει τη διορθωμένη διαφορική ενεργό διατομή για τη σκέδαση Mott στο σύστημα του κέντρου μάζας. Ο τύπος (32) επιτρέπει τον υπολογισμό των διορθωμένων τιμών της διαφορικής ενεργού διατομής στο σύστημα του εργαστηρίου. Παράλληλα μέσω των τύπων (6) και (28) υπολογίζονται οι τιμές της διαφορικής ενεργού διατομής για τους σκεδαζόμενους πυρήνες κατά Rutherford, λαμβάνοντας υπ όψιν και την επίδραση του φαινομένου screening, ενώ μέσω του τύπου (30) υπολογίζονται οι διορθωμένες τιμές της ενεργού διατομής κατά Rutherford για τους ανακρουόμενους πυρήνες. Η άθροιση των δύο αυτών τιμών δίνει την ενεργό διατομή της αντίδρασης κατά Rutherford (σχέση 17) στο σύστημα του εργαστηρίου. Μέσω του τύπου (8) υπολογίζεται η αναμενόμενη τιμή κατά Rutherford στο σύστημα του κέντρου μάζας.

Το αρχείο αποτελείται από 4 φύλλα εργασίας που έχουν τα ονόματα “Quick Calculator” (Γρήγορος Υπολογισμός), “Angular Distribution” (Γωνιακή Κατανομή), “Energy Distribution” (Ενεργειακή Κατανομή) και “Table of Isotopes” (Βιβλιοθήκη Ισοτόπων). Το φύλλο εργασίας “Quick Calculator” αποτελεί το σημείο αλληλεπίδρασης μεταξύ του χρήστη και του προγράμματος. Σε αυτό επιλέγεται το είδος της κατανομής και καθορίζονται τα χαρακτηριστικά αυτής. Πατώντας το κουμπί “Angular Distribution” ή “Energy Distribution” παράγεται η αντίστοιχη κατανομή σύμφωνα με τα χαρακτηριστικά που όρισε ο χρήστης. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο σύστημα του εργαστηρίου και παρουσιάζονται και μέσω γραφήματος. Για γωνιακή κατανομή, στο φύλλο εργασίας “Angular Distribution” παρουσιάζονται τα αποτελέσματα στο σύστημα του εργαστηρίου αλλά και κέντρου μάζας. Επίσης δίνονται τα αποτελέσματα από τον τύπο του Rutherford και στα δύο συστήματα, καθώς και οι τιμές για τους διορθωτικούς παράγοντες για το φαινόμενο screening. Τα παραπάνω παρουσιάζονται και σε γραφική μορφή. Το φύλλο “Energy Distribution” προσφέρει τις ίδιες πληροφορίες στην περίπτωση ενεργειακής κατανομής. Τέλος το φύλλο “Table of Isotopes” περιέχει τον μαζικό (A) και ατομικό (Z) αριθμό, τη μάζα και το σπιν της βασικής κατάστασης των 314 ισοτόπων τα οποία είναι διαθέσιμα στον χρήστη. Στη λίστα αυτή περιέχονται όλα τα σταθερά ισότοπα και μερικά ασταθή. Στον χρήστη δίνεται η δυνατότητα να επεκτείνει αυτή τη λίστα με την προσθήκη περαιτέρω ισοτόπων. Οι λειτουργίες του κάθε φύλλου παρουσιάζονται αναλυτικά παρακάτω.

3.2 Χρήση του Φύλλου

3.2.1 Το φύλλο “Quick Calculator”

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω το φύλλο αυτό δρα ως το σημείο αλληλεπίδρασης μεταξύ του χρήστη και του προγράμματος. Για τη δημιουργία μίας κατανομής ο χρήστης

- Επιλέγει το ισότοπο το οποίο δρα σα βλήμα και στόχος
- Επιλέγει το είδος της κατανομής
- Καθορίζει τα χαρακτηριστικά της κατανομής

Τα κελιά τα οποία πρέπει να συμπληρωθούν ώστε να παραχθεί μία κατανομή έχουν έντονο σκούρο κίτρινο χρώμα.

3.2.1.α Επιλογή Ισοτόπου

Πρώτο βήμα είναι η επιλογή ενός ισοτόπου το οποίο δρα ως σωματίδιο της δέσμης (βλήμα) και στόχος. Η επιλογή γίνεται με τη συμπλήρωση του μαζικού (A) και ατομικού (Z) αριθμού του επιθυμητού ισοτόπου στα κελιά A3 και B3 αντίστοιχα. Ο αριθμός των νετρονίων συμπληρώνεται αυτόματα όπως επίσης η μάζα του ισοτόπου και το σπιν της βασικής στάθμης του πυρήνα. Τα διαθέσιμα ισότοπα είναι αποθηκευμένα στο φύλλο “Table of Isotopes”. Εάν το ισότοπο που επιλέχθηκε από το χρήστη δεν περιέχεται στη βιβλιοθήκη, εμφανίζεται μήνυμα το οποίο ενημερώνει τον χρήστη για το γεγονός. Η μάζα και το σπιν του συγκεκριμένου ισοτόπου τίθενται από το πρόγραμμα ίσα με το μηδέν, κάτι το οποίο μπορεί να οδηγήσει σε λάθος υπολογισμούς. Η εισαγωγή επιπλέον στοιχείων παρουσιάζεται σε επόμενη ενότητα.

	A	B	C	D
1	Input			
2	A of projectile/target	Z of projectile/target	N of projectile/target	
3	12	6	6	

Εικόνα 17: Τα κελιά για την επιλογή ισοτόπου στο φύλλο “Quick Calculator”. Η επιλογή του ισοτόπου γίνεται με τη συμπλήρωση των κελιών για το μαζικό και ατομικό αριθμό αυτού. Εάν δεν έχει γίνει επιλογή ισοτόπου δεν είναι δυνατή η δημιουργία κατανομής.

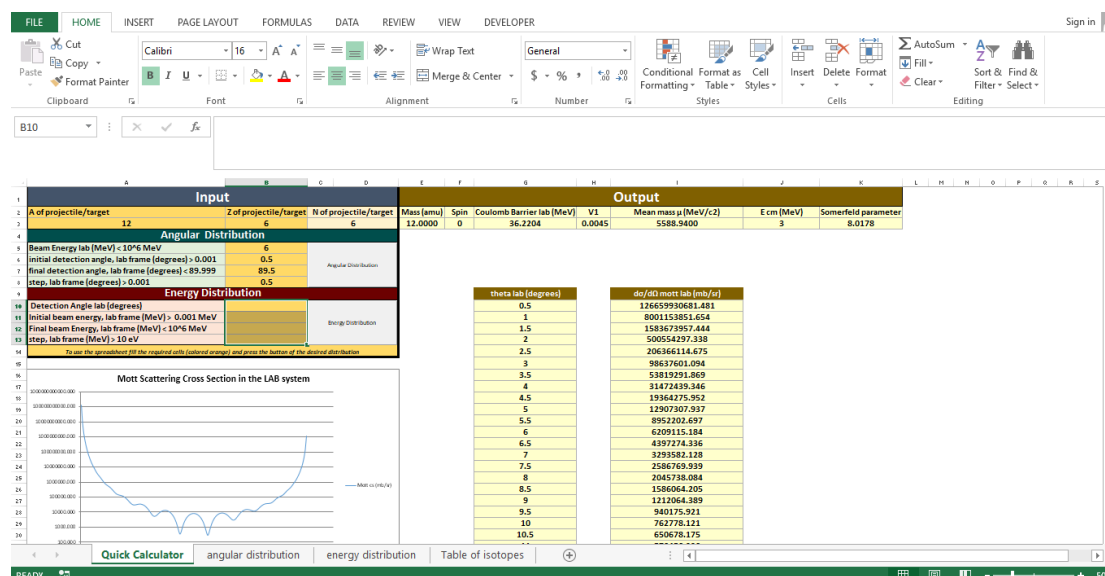
3.2.1.β Επιλογή και Καθορισμός Κατανομής

Έπειτα από την επιλογή ισότοπου, ο χρήστης μπορεί να καθορίσει τα χαρακτηριστικά της κατανομής. Στην περίπτωση γωνιακής κατανομής ο χρήστης συμπληρώνει τα κελιά B5 μέχρι B8. Τα χαρακτηριστικά αυτής είναι η ενέργεια της δέσμης (κελί B5), η αρχική και τελική γωνία ανίχνευσης σε μοίρες (κελιά B6 και B7 αντίστοιχα) και το βήμα μεταξύ κάθε γωνίας ανίχνευσης (κελί B8). Όλα τα χαρακτηριστικά αναφέρονται στο σύστημα του εργαστηρίου. Για κάθε ένα από τα παραπάνω δίνονται συγκεκριμένα κατώτατα και ανώτατα όρια για τις τιμές που δέχονται. Εάν αυτά τα όρια δεν τηρηθούν, οδηγούν σε overflow errors. Τα όρια στην ενέργεια της δέσμης και το βήμα οφείλονται στις δυνατότητες του ίδιου του Excel ενώ τα όρια στις αρχικές και τελικές γωνίες ορίζονται από τη κινηματική της σκέδασης Mott, καθώς οι γωνίες ανίχνευσης περιορίζονται μόνο σε μπροστά γωνίες, με τις 0° και 90° να αποτελούν μαθηματικούς πόλους της σχέσης (20). Λόγω των παραπάνω, ο χρήστης δεν επιτρέπεται να υπερβεί αυτά τα όρια.

Angular Distribution		
5	Beam Energy lab (MeV) < 10^6 MeV	6
6	initial detection angle, lab frame (degrees) > 0.001	0.5
7	final detection angle, lab frame (degrees) < 89.999	89.5
8	step, lab frame (degrees) > 0.001	0.5

Εικόνα 18: Τα κελιά για το καθορισμό των χαρακτηριστικών της γωνιακής κατανομής μαζί με τα όρια αυτών. Πατώντας το κουμπί δημιουργείται η εκάστοτε κατανομή.

Πατώντας το κουμπί “Angular Distribution” δημιουργείται μία γωνιακή κατανομή της διαφορικής ενεργού διατομής Mott με τα χαρακτηριστικά που καθορίστηκαν για το ισότοπο που έχει επιλεγεί στο σύστημα του εργαστηρίου. Παράλληλα παράγεται και ένα γράφημα της κατανομής.



Εικόνα 19: Το φύλλο εργασίας “Quick Calculator”. Τα κελιά αριστερά με το έντονο κίτρινο χρώμα κάτω από τη ταμπέλα “Input” επιτρέπουν την επιλογή ισότοπου και τον καθορισμό των χαρακτηριστικών των κατανομών.

Πατώντας το αντίστοιχο κουμπί παράγεται η εκάστοτε κατανομή μαζί με ένα γράφημα αυτής και κάποιες επιπλέον πληροφορίες.

Μαζί με τις τιμές της κατανομής εμφανίζονται και κάποιες επιπλέον πληροφορίες. Αναλυτικότερα, δίνονται η μάζα και το σπιν της βασικής στάθμης του ισότοπου που επιλέχθηκε, το φράγμα αλληλεπίδρασης Coulomb της αντίδρασης, η μεταβολή της κινητικής ενέργειας λόγω του φαινομένου screening, η μέση μάζα του συστήματος, η ενέργεια της δέσμης στο σύστημα κέντρου μάζας και η τιμή της παραμέτρου Sommerfeld.

Output						
Mass (amu)	Spin	Coulomb Barrier lab (MeV)	V1	Mean mass μ (MeV/c ²)	E _{cm} (MeV)	Somerfeld parameter
12.0000	0	36.2204	0.0045	5588.9400	3	8.0178

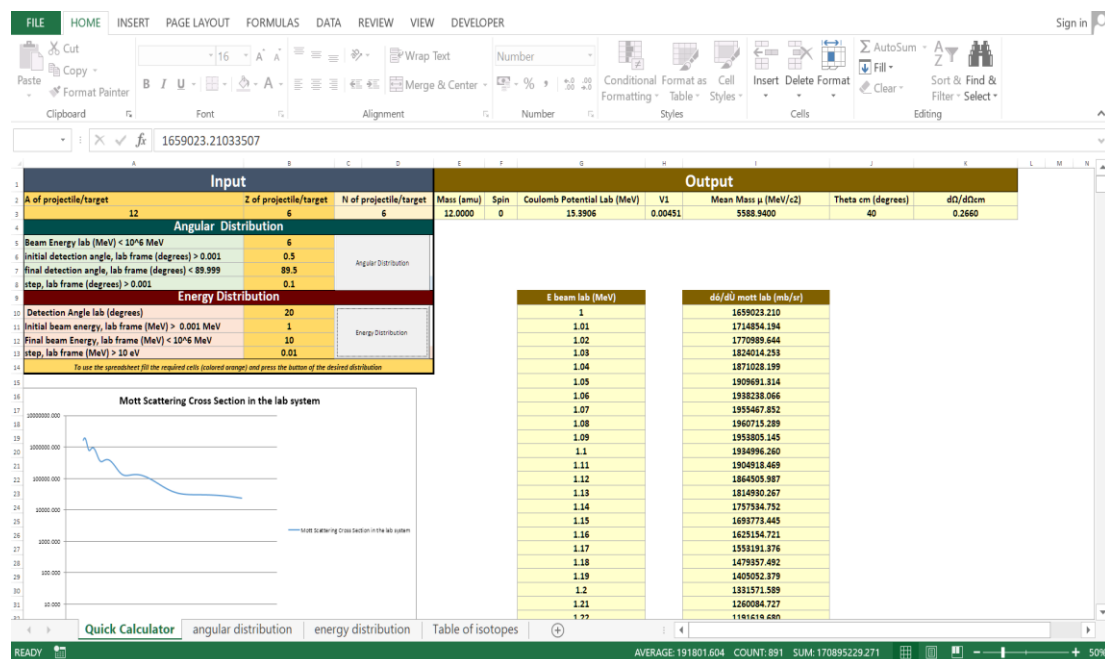
Εικόνα 20: Τα κελιά τα οποία παρουσιάζουν τις επιπλέον πληροφορίες για μία γωνιακή κατανομή στο φύλλο “Quick Calculator”

Τα παραπάνω βήματα ακολουθούνται και στην περίπτωση ενεργειακής κατανομής. Για τη δημιουργία της ο χρήστης απλά συμπληρώνει τα κελιά B10 μέχρι B13 με χαρακτηριστικά της κατανομής και πατάει το κουμπί “Energy Distribution.”

Energy Distribution	
Detection Angle lab (degrees)	12
Initial beam energy, lab frame (MeV) > 0.001 MeV	1
Final beam Energy, lab frame (MeV) < 10 ⁶ MeV	10
step, lab frame (MeV) > 10 eV	0.1

To use the spreadsheet fill the required cells (colored orange) and press the button of the desired distribution

Εικόνα 21: Τα κελιά για το καθορισμό των χαρακτηριστικών μίας ενεργειακής κατανομής και τα όρια αυτών. Πατώντας το κουμπί δημιουργείται η κατανομή.



Εικόνα 22: Το φύλλο “Quick Calculator” στην περίπτωση ενεργειακής κατανομής.

3.2.2 “Angular Distribution” και “Energy Distribution” φύλλα εργασίας

Ανάλογα με το είδος της κατανομής που έχει δημιουργηθεί, τα φύλλα εργασίας “Angular Distribution” και “Energy Distribution” περιέχουν επιπλέον πληροφορίες για την κατανομή. Σε αυτά αποθηκεύονται οι τιμές της διαφορικής ενεργού διατομής της σκέδασης Mott στο σύστημα του εργαστηρίου αλλά και στο σύστημα του κέντρου μάζας. Επιπλέον, σε αυτά τα φύλλα αποθηκεύονται οι τιμές του διορθωτικού παράγοντα για το φαινόμενο screening καθώς και οι τιμές του λόγου $d\Omega/d\Omega_{cm}$ οι οποίες χρησιμοποιούνται για τη μεταφορά από το ένα σύστημα αναφοράς στο άλλο.

Mott scattering CM			Mott scattering LAB		
theta cm (degrees)	screening factor	da/dQ mott cm (mb/sr)	theta lab (degrees)	dΩ/dΩcm	da/dQ mott lab (mb/sr)
1	0.9839	31666188421.79	0.5	0.2500095	1.27E+11
2	0.9948	2000593162.94	1	0.2500381	8.00E+09
3	0.9969	396054207.25	1.5	0.2500857	1.58E+09
4	0.9976	125214851.84	2	0.2501524	5.01E+08
5	0.9979	51640679.15	2.5	0.2502382	206366114.7
6	0.9981	24693241.50	3	0.2503431	98637601.09
7	0.9982	13479965.82	3.5	0.2504672	53819291.87
8	0.9983	7887322.96	4	0.2506105	31472439.35
9	0.9983	4856038.53	4.5	0.2507730	19364275.95
10	0.9984	3239152.94	5	0.2509550	12907307.94
11	0.9984	2248401.87	5.5	0.2511563	8952202.697
12	0.9984	1560829.18	6	0.2513771	6209115.184
13	0.9984	1106430.88	6.5	0.2516174	4397274.336
14	0.9984	829579.09	7	0.2518775	3293582.128
15	0.9984	652272.77	7.5	0.2521572	2586769.939
16	0.9984	516460.68	8	0.2524569	2045738.084
17	0.9984	400919.81	8.5	0.2527765	1586064.205
18	0.9985	306793.23	9	0.2531163	1212064.389
19	0.9985	238312.29	9.5	0.2534763	940175.9206
20	0.9985	193636.30	10	0.2538567	762778.1209
21	0.9985	165439.85	10.5	0.2542576	650678.1746
22	0.9985	145281.82	11	0.2546792	570450.3296
23	0.9985	127136.57	11.5	0.2551216	498337.0732
24	0.9985	108531.40	12	0.2555851	424638.9145
25	0.9985	89793.47	12.5	0.2560699	350660.0156

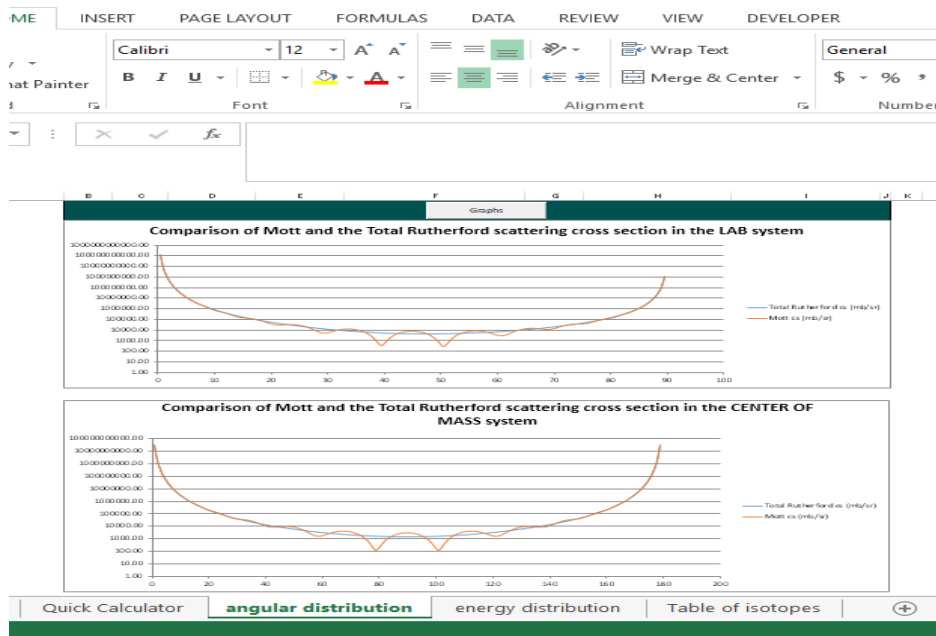
Εικόνα 23: Οι στήλες με τις τιμές της ενεργού διατομής για τη γωνιακή κατανομή της σκέδασης Mott στο σύστημα του κέντρου μάζας και εργαστηρίου στο φύλλο “Angular Distribution”. Ο λόγος $d\Omega/d\Omega_{cm}$ αλλάζει για κάθε διαφορετική γωνία ανίχνευσης της κατανομής, όμως η παράμετρος Sommerfeld παραμένει σταθερή καθώς εξαρτάται από την ενέργεια της δέσμης.

Επιπροσθέτως, οι αντίστοιχες τιμές σύμφωνα με το τύπο του Rutherford για τους σκεδαζόμενους και ανακρουόμενους πυρήνες, αλλά και για τη συνολική ενεργό διατομή, είναι επίσης διαθέσιμες και για τα δύο συστήματα αναφοράς.

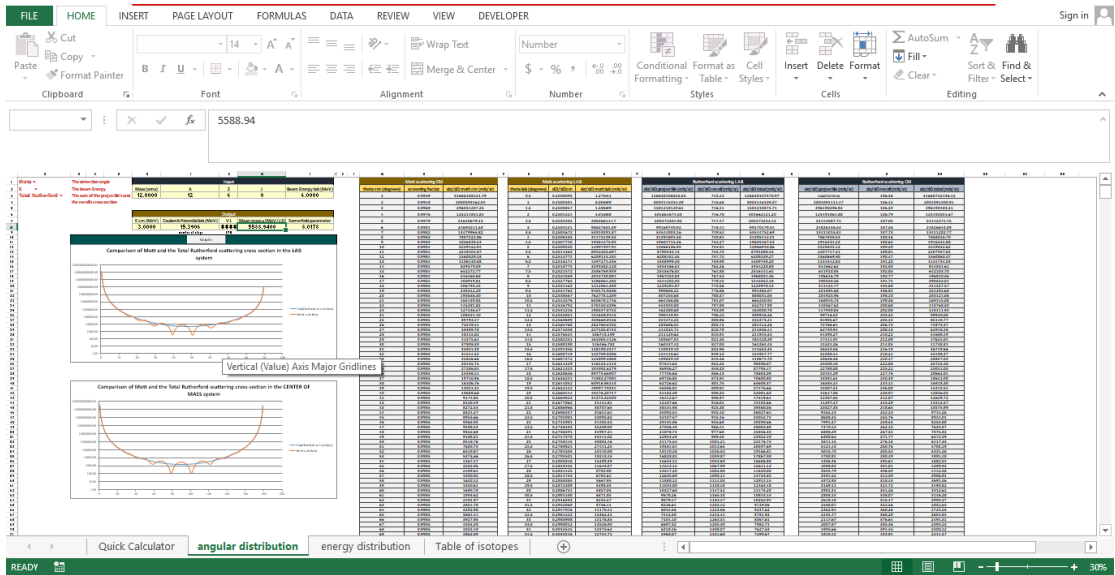
Rutherford scattering LAB			Rutherford scattering CM		
do/dΩ projectile (mb/sr)	do/dΩ recoil (mb/sr)	do/dΩ total (mb/sr)	do/dΩ projectile (mb/sr)	do/dΩ recoil (mb/sr)	do/dΩ total (mb/sr)
126638106825.55	745.42	126638107570.97	31660732250.08	186.36	31660732436.42
8003145354.39	745.68	8003146100.07	2001091114.47	186.45	2001091300.91
1584218129.61	746.11	1584218875.71	396190296.92	186.59	396190483.51
501661674.50	746.70	501662421.20	125491864.88	186.79	125492051.67
205572504.95	747.47	205573252.42	51442087.71	187.05	51442274.75
99169730.92	748.41	99170479.34	24826456.53	187.36	24826643.89
52544003.16	749.52	52544752.69	13411015.04	187.73	13411202.77
3194691.50	750.81	3195442.31	7867838.53	188.16	7868026.70
19604715.26	752.27	19605467.53	4916334.23	188.65	4916522.88
12866186.95	753.91	12866940.86	3228833.42	189.20	3229022.62
8790332.72	755.73	8791088.45	2207747.21	189.81	2207937.02
6208481.55	757.72	6209239.27	1560669.90	190.47	1560860.37
4508999.30	759.90	4509759.20	1134542.83	191.20	1134734.03
3353466.54	762.26	3354228.80	844662.62	192.00	844854.62
2545676.84	764.80	2546441.64	641910.85	192.85	642103.70
1967253.83	767.53	1968021.36	496646.79	193.77	496840.56
1544283.03	770.45	1545052.48	390358.26	194.75	390535.01
1229204.87	773.56	1229978.43	311131.77	195.80	311327.57
990608.21	776.86	991385.07	251095.68	196.92	251292.60
807250.68	780.37	808031.05	204925.96	198.10	205124.06
664466.86	784.07	665250.93	163945.73	199.36	163945.08
551940.00	787.98	552727.98	140567.62	200.68	140768.30
462288.69	792.09	463080.78	117939.85	202.08	118141.93
390149.94	796.42	390946.36	99716.53	203.55	99920.08
331572.25	800.96	332373.21	84905.67	205.10	85110.77

Εικόνα 24: Οι στήλες με τις τιμές της διαφορικής ενεργού διατομής της γωνιακής κατανομής για τους σκεδαζόμενους πυρήνες, τους ανακρουόμενους πυρήνες και το άθροισμα αυτών ($\frac{d\sigma}{d\Omega_{total}}$) στα συστήματα του εργαστηρίου και κέντρου μάζας.

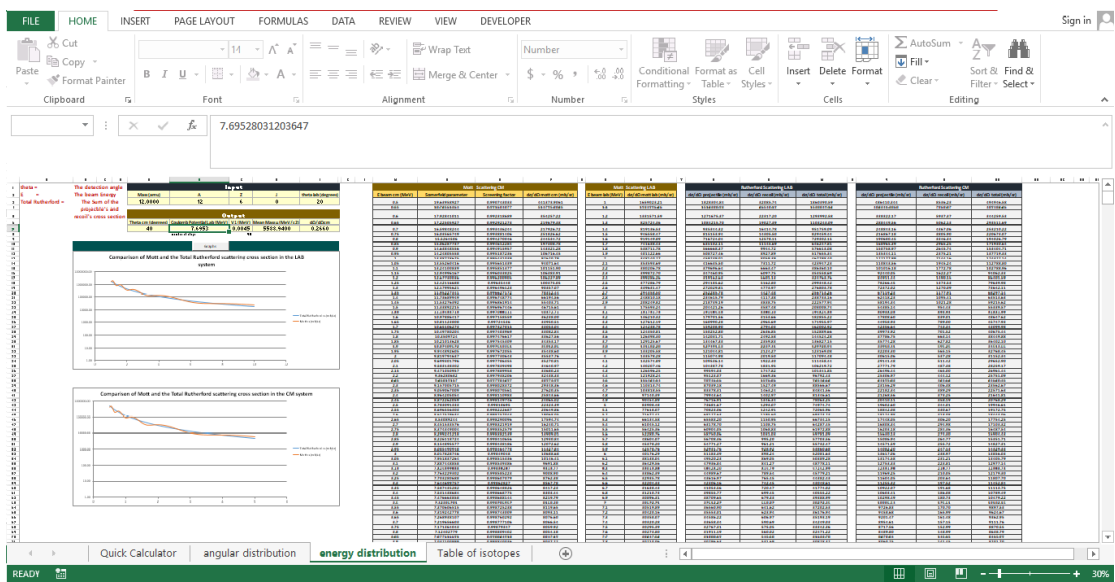
Πατώντας το κουμπί “Graphs” παράγονται 2 γραφήματα στα οποία γίνεται σύγκριση μεταξύ των τιμών του τύπου του Mott και Rutherford και στα δύο συστήματα αναφοράς για τη διευκόλυνση του χρήστη.



Εικόνα 25: Τα γραφήματα σύγκρισης των τιμών της γωνιακής κατανομής για τους τύπους του Mott και Rutherford για την ενεργό διατομή της σκέδασης στο φύλλο “Angular Distribution”. Το πρώτο γράφημα αφορά στο σύστημα του εργαστηρίου ενώ το δεύτερο στο σύστημα του κέντρου μάζας.



Εικόνα 26: Το φύλλο εργασίας “Angular Distribution” με τις τιμές Mott και Rutherford για την ενεργό διατομή της αντίδρασης στα συστήματα κέντρου μάζας και εργαστηρίου μαζί με τα αντίστοιχα γραφήματα.



Εικόνα 27: Το φύλλο εργασίας “Energy Distribution” με τις τιμές Mott και Rutherford για την ενεργό διατομή της αντίδρασης στα συστήματα κέντρου μάζας και εργαστηρίου μαζί με τα αντίστοιχα γραφήματα. Στην περίπτωση ενεργειακής κατανομής ο λόγος $d\Omega/d\Omega_{cm}$ παραμένει σταθερός ενώ η παράμετρος Sommerfeld μεταβάλλεται ανάλογα με την ενέργεια της δέσμης.

3.3.3 Το φύλλο εργασίας “Table of Isotopes” – Προσθήκη Ισοτόπου

Το φύλλο εργασίας “Table of Isotopes” λειτουργεί ως βιβλιοθήκη για τα 314 διαφορετικά ισότοπα (όλα τα σταθερά ισότοπα και μερικά ασταθή) τα οποία μπορεί να χρησιμοποιήσει ο χρήστης σαν πυρήνες δέσμης και στόχου. Αποτελείται από 5 διαφορετικές στήλες οι οποίες περιέχουν το σύμβολο του στοιχείου, τον ατομικό αριθμό (Z), το μαζικό αριθμό (A), τη μάζα και το σπιν της θεμελιώδους στάθμης του ισοτόπου. Το πρόγραμμα χρησιμοποιεί αυτή τη βιβλιοθήκη ώστε να λάβει τις απαραίτητες πληροφορίες για τους υπολογισμούς. Λόγω αυτού, το φύλλο αυτό είναι κλειδωμένο ώστε να μην μπορεί να αλλάξει κάποια πληροφορία κατά λάθος.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Symbol	Z	A	Mass (amu)	J					
2	n	0	1	1.008664916	-0.5					
3	p	1	1	1.007825032	0.5					
4	H	1	2	2.014101778	1					
5	H	1	3	3.016049278	0.5					
6	He	2	3	3.01602932	0.5					
7	He	2	4	4.002603254	0					
8	Li	3	6	6.015122887	1					
9	Li	3	7	7.016003437	1.5					
10	Be	4	9	9.012183065	1.5					
11	B	5	10	10.01293695	3					
12	B	5	11	11.00930536	1.5					
13	C	6	12	12	0					
14	C	6	13	13.00335484	0.5					
15	C	6	14	14.00324199	0					
16	N	7	14	14.003074	1					
17	N	7	15	15.0001089	0.5					
18	O	8	16	15.99491462	0					
19	O	8	17	16.99913176	2.5					
20	O	8	18	17.99915961	0					
21	F	9	19	18.99840316	0.5					
22	Ne	10	20	19.99244018	0					
23	Ne	10	21	20.99384669	1.5					
24	Ne	10	22	21.99138511	0					

Εικόνα 28: Το φύλλο “Table of Isotopes” στο οποίο οι πληροφορίες για κάθε ισότοπο είναι αποθηκευμένες.

Η λίστα των ισotόπων είναι δυνατό να επεκταθεί με την προσθήκη επιπλέον μη σταθερών ισotόπων, καθώς η σταθερότητα ή μη του πυρήνα δεν επηρεάζει τους θεωρητικούς υπολογισμούς. Για την προσθήκη επομένως ενός ισotόπου στη λίστα πρέπει να ακολουθηθούν τα παρακάτω βήματα

- Αρχικά, με τη χρήση του κωδικού **MottCalc** ξεκλειδώνεται το φύλλο “Table of Isotopes”.
- Τα χαρακτηριστικά του καινούργιου ισotόπου πρέπει να συμπληρωθούν στις 5 στήλες του φύλλου. Η θέση του καινούργιου ισotόπου στη λίστα δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα.

Στη συνέχεια, πρέπει να γίνουν ορισμένες αλλαγές στον κώδικα του αρχείου MottCalc. Για να επιτραπεί η πρόσβαση στο κώδικα πρέπει να γίνουν τα παρακάτω:

- Στη καρτέλα “Developer” να πατηθεί το “Design Mode”.
- Να γίνει διπλό κλικ στο κουμπί “Angular Distribution” ή “Energy Distribution”.

Μέσω των παραπάνω επιτυγχάνεται η πρόσβαση στον κώδικα του αρχείου.

The screenshot shows the Microsoft Excel interface with the Developer tab selected. The spreadsheet contains input parameters for a projectile/target, angular distribution settings, and energy distribution settings. A graph titled "Mott Scattering Cross Section in the lab system" is displayed, showing a decreasing trend of the cross-section as the beam energy increases. The bottom of the spreadsheet features a "Quick Calculator" bar with buttons for "angular distribution", "energy distribution", and "Table of isotopes".

Input						
A of projectile/target	Z of projectile/target	N of projectile/target	Mass (amu)	Spin	Coulomb Potential Lab (MeV)	
12	6	6	12.0000	0	15.3906	
Angular Distribution						
Beam Energy lab (MeV) < 10 ⁶ MeV	6	Angular Distribution				
initial detection angle, lab frame (degrees) > 0.001	0.5					
final detection angle, lab frame (degrees) < 89.999	89.5					
step, lab frame (degrees) > 0.001	0.5					
Energy Distribution						
Detection Angle lab (degrees)	20	Energy Distribution				
Initial beam energy, lab frame (MeV) > 0.001 MeV	1					
Final beam Energy, lab frame (MeV) < 10 ⁶ MeV	10					
step, lab frame (MeV) > 10 eV	0.1					
To use the spreadsheet fill the required cells (colored orange) and press the button of the desired distribution						

E beam lab (MeV)	
1	
1.1	
1.2	
1.3	
1.4	
1.5	
1.6	
1.7	
1.8	
1.9	
2	
2.1	
2.2	
2.3	
2.4	
2.5	

Εικόνα 29: Στη περίπτωση όπου η ιδιότητα Design Mode είναι επιλεγμένη, τα κουμπιά σε όλα τα φύλλα εργασίας είναι απενεργοποιημένα. Πατώντας το κουμπί “Angular Distribution” ή “Energy Distribution” επιτρέπεται η πρόσβαση στον κώδικα του αρχείου Excel ο οποίος εμφανίζεται σε καινούργιο παράθυρο.

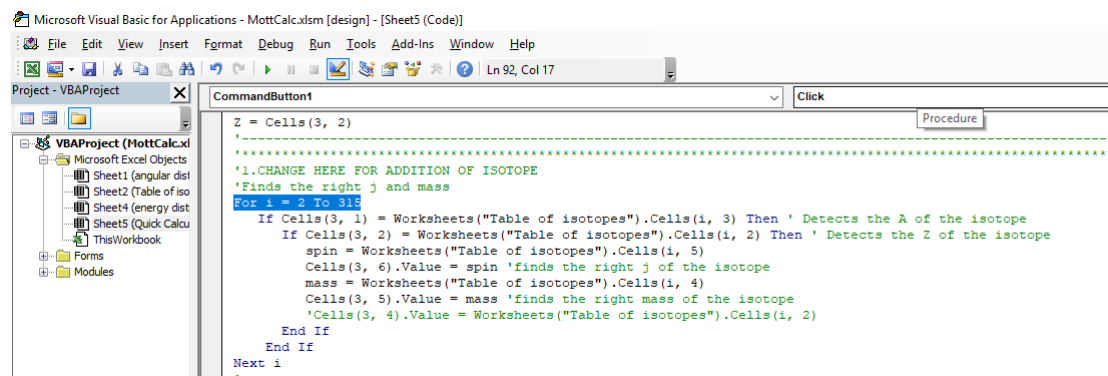
Ο κώδικας εμφανίζεται σε ένα καινούργιο παράθυρο. Σε αυτόν υπάρχουν 2 for loops με το σχολιασμό “change here for addition of isotope” στα οποία πρέπει να αλλαχθεί ο αριθμός των επαναλήψεων. Αναλυτικότερα πρέπει να γίνει η εξής αλλαγή, από

For i = 2 To 315

σε

For i = 2 To 316

και να σωθεί η αλλαγή.



Εικόνα 30: Το παράθυρο που περιέχει τον κώδικα του αρχείου Excel MottCalc σε ένα από τα δύο for loops στα οποία πρέπει να γίνει η αλλαγή.

Είναι απαραίτητο η αλλαγή να εφαρμοστεί και στα δύο ‘for loops’ διαφορετικά κάποιο από τα δύο κουμπιά “Angular Distribution” ή “Energy Distribution” δεν θα μπορεί να χρησιμοποιήσει το ισότοπο που προστέθηκε. Για να επιστρέψει το αρχείο σε κανονική λειτουργία πρέπει η ιδιότητα Design Mode να απενεργοποιηθεί.

Κεφάλαιο 4 : Η Εφαρμογή MottCalc

4.1 Περιγραφή της Εφαρμογής

Η εφαρμογή MottCalc είναι ένα πρόγραμμα για τη δημιουργία ASCII R33 αρχείων γωνιακών και ενεργειακών κατανομών της σκέδασης Mott. Τα αρχεία αυτής της μορφής μπορούν να χρησιμοποιηθούν από όλα τα διαδεδομένα προγράμματα που χρησιμοποιούνται στην ανάλυση IBA τεχνικών (SIMNRA, DF κλπ.). Διαθέσιμα ως πυρήνες βλήματος και στόχου είναι τα ίδια 314 ισότοπα όπως και στο φύλλο Excel, με τη δυνατότητα δημιουργίας επιπλέον ισotόπων από το χρήστη, όμως η εφαρμογή προσφέρει σαν έξοδο μόνο τις τιμές της εκάστοτε κατανομής στο σύστημα του εργαστηρίου και ένα γράφημα αυτής πάλι στο σύστημα του εργαστηρίου. Η εφαρμογή αποτελείται από το δικό της γραφικό περιβάλλον μέσω του οποίου ο χρήστης μπορεί να επιλέξει το ισότοπο, να καθορίσει τα χαρακτηριστικά και το είδος της κατανομής και να την αποθηκεύσει εάν επιθυμεί σε ένα R33 αρχείο.

Το πρόγραμμα έχει υλοποιηθεί χρησιμοποιώντας την προγραμματιστική γλώσσα C++. Το γραφικό του περιβάλλον υλοποιήθηκε μέσω χρήσης των βιβλιοθηκών της Qt Company. Το ότι η γλώσσα είναι αντικειμενοστρεφής χρησιμοποιήθηκε εκτενώς για την υλοποίηση του κώδικα. Η λειτουργία του βασίζεται σε δύο κλάσεις που υλοποιήθηκαν, την κλάση Nucleus και τη κλάση Distribution. Κάθε πυρήνας που επιλέγεται από το χρήστη αποτελεί ένα καινούργιο αντικείμενο της κλάσης Nucleus μέσα στο οποίο αποθηκεύονται όλα τα χαρακτηριστικά που είναι απαραίτητα για την πραγματοποίηση των θεωρητικών υπολογισμών. Ομοίως, κάθε κατανομή αποτελεί ένα καινούργιο αντικείμενο της κλάσης Distribution στο οποίο αποθηκεύονται το είδος της (γωνιακό ή ενεργειακό) και τα λοιπά χαρακτηριστικά της. Αυτό επιτρέπει τη δημιουργία πολλών κατανομών χωρίς την ανάγκη αποθήκευσης της κάθε μίας.

Με βάση τα παραπάνω και τη χρήση διαφορετικών γλωσσών προγραμματισμού, οι θεωρητικοί υπολογισμοί για τις ενεργές διατομές ακολουθούν ακριβώς την ίδια μεθοδολογία και στο φύλλο Excel και στην εφαρμογή. Μέσω της αρχικής και τελικής τιμής της μεταβλητής της εκάστοτε κατανομής, σε συνδυασμό με το βήμα μεταξύ των τιμών, υπολογίζεται ο ακέραιος αριθμός των σημείων που περιέχει. Μετέπειτα, μέσω του τύπου (20) υπολογίζεται η τιμή της διαφορικής ενεργού διατομής της σκέδασης Mott για κάθε σημείο της κατανομής, μέσω του τύπου (28) επιτυγχάνεται η διόρθωση για τη συνεισφορά του φαινομένου screening και τέλος μέσω του τύπου (32) μεταφέρονται τα αποτελέσματα στο σύστημα του εργαστηρίου. Τα παραπάνω επαναλαμβάνονται μέσω ενός 'for loop' ώστε να πραγματοποιηθούν για κάθε σημείο της κατανομής.

Τα αποτελέσματα μεταξύ των δύο υλοποιήσεων του προγράμματος MottCalc παρουσιάζουν πλήρη συμφωνία μεταξύ τους. Ο ιδιαίτερος σκοπός της εφαρμογής είναι η παραγωγή R33 αρχείων για μετέπειτα χρήση τους σε άλλα προγράμματα που χρησιμοποιούνται από τη κοινότητα. Για τη μελέτη του φαινομένου προτείνεται να χρησιμοποιείται το φύλλο Excel καθώς παρέχει περισσότερες πληροφορίες.

4.2 Οδηγίες Χρήσης της Εφαρμογής

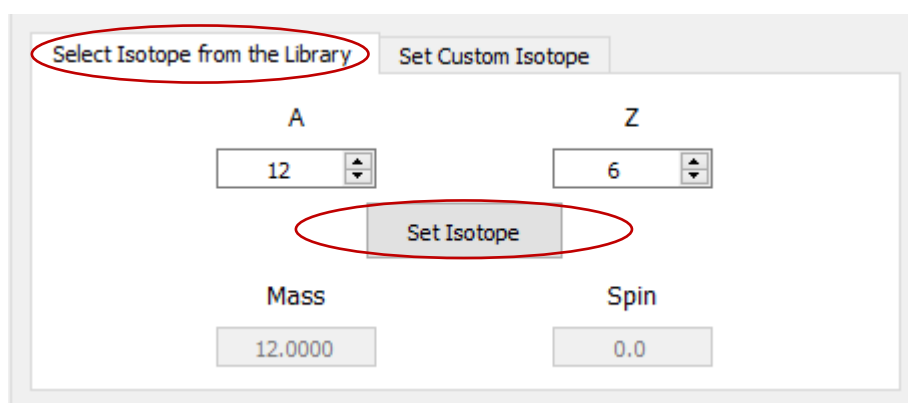
Για τη δημιουργία μίας κατανομής μέσω της εφαρμογής χρειάζεται

- Να επιλεγεί ένα ισότοπο ως πυρήνας της δέσμης και του στόχου
- Να επιλεγεί το είδος της κατανομής (ενεργειακή, γωνιακή ή απλός υπολογισμός)
- Να προσδιοριστούν τα χαρακτηριστικά της κατανομής

Όταν τα παραπάνω βήματα έχουν συμπληρωθεί, ένα γράφημα της κατανομής εμφανίζεται και οι τιμές αυτής αποθηκεύονται στη μνήμη του υπολογιστή. Σε αυτό το σημείο υπάρχει η επιλογή δημιουργίας ενός R33 αρχείου της κατανομής. Παρακάτω περιγράφονται αναλυτικά τα βήματα αυτά.

4.2.1 Επιλογή Ισοτόπου

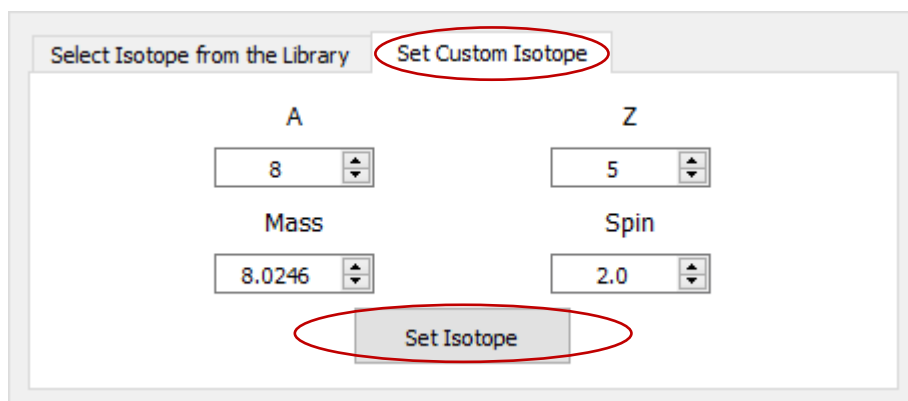
Υπάρχουν 2 διαφορετικοί τρόποι επιλογής ενός ισοτόπου. Στην καρτέλα “Select Isotope from Library” ο χρήστης μπορεί να επιλέξει ένα από τα 314 διαφορετικά ισότοπα της βιβλιοθήκης της εφαρμογής συμπληρώνοντας το μαζικό και ατομικό αριθμό (A και Z αντίστοιχα) αυτού και πατώντας το κουτί “Set Isotope”. Με την επιλογή του ισοτόπου εμφανίζεται ένα παράθυρο διαλόγου το οποίο επιβεβαιώνει την επιλογή του ισοτόπου και συμπληρώνονται οι τιμές της μάζας και της θεμελιώδους στάθμης του πυρήνα. Τα χαρακτηριστικά του πυρήνα αποθηκεύονται στη μνήμη του υπολογιστή. Για την αλλαγή ισοτόπου πρέπει να ακολουθηθούν τα ίδια βήματα από την αρχή. Πρέπει να τονιστεί ότι το ισότοπο δεν επιλέγεται απλά αλλάζοντας τις τιμές του μαζικού και ατομικού αριθμού. Το κουμπί “Select Isotope” πρέπει να πατηθεί υποχρεωτικά, διαφορετικά δεν θα αντικατασταθεί το παλιό ισότοπο στη μνήμη.



Εικόνα 31: Η καρτέλα “Select Isotope from Library” στην εφαρμογή MottCalc. Για την επιλογή ενός ισοτόπου πρέπει να συμπληρωθούν τα κουτιά A και Z με το μαζικό και ατομικό αριθμό του επιθυμητού ισοτόπου και να πατηθεί το κουμπί “Set Isotope”. Η μάζα και το σπιν της θεμελιώδους στάθμης του πυρήνα συμπληρώνονται αυτόματα. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα έχει επιλεγεί ο σταθερός πυρήνας ^{12}C .

Στην περίπτωση που ένα συγκεκριμένο ισότοπο δεν περιλαμβάνεται στη βιβλιοθήκη, ένα παράθυρο διαλόγου ενημερώνει το χρήστη για το γεγονός αυτό και η μάζα του πυρήνα τίθεται ίση με 0.0100 ενώ το σπιν της θεμελιώδους στάθμης ίσο με το μηδέν. Αυτό οδηγεί σε λανθασμένους υπολογισμούς. Εάν δεν έχει επιλεγεί ένα ισότοπο ο χρήστης δεν μπορεί να δημιουργήσει κατανομές. Οι πληροφορίες για τα διαθέσιμα ισότοπα είναι αποθηκευμένες στο αρχείο TableOfIsotopes.txt.

Για τη χρήση ενός ισότοπου που δεν συμπεριλαμβάνεται στη βιβλιοθήκη πρέπει να χρησιμοποιηθεί η καρτέλα “Set Custom Isotope”. Για τη δημιουργία ενός καινούργιου ισότοπου, εκτός από το μαζικό και ατομικό αριθμό (A και Z) του ισότοπου πρέπει να συμπληρωθούν επίσης η μάζα του πυρήνα και το σπιν της θεμελιώδους στάθμης και να πατηθεί το κουμπί “Set Custom Isotope”. Εάν το κουμπί “Set Custom Isotope” δεν πατηθεί, τα χαρακτηριστικά του καινούργιου πυρήνα δεν αποθηκεύονται στη μνήμη. Επιπροσθέτως, πρέπει να τονιστεί ότι το πρόγραμμα δεν έχει την δυνατότητα ελέγχου της εγκυρότητας ή ακόμα και της ύπαρξης των ισότοπων που δημιουργούνται από το χρήστη.



Εικόνα 32: Η καρτέλα “Set Custom Isotope”. Για τη δημιουργία ενός ισότοπου πρέπει να συμπληρωθούν ο μαζικός και ατομικός αριθμός του (A και Z αντίστοιχα), η μάζα του πυρήνα και το σπιν της θεμελιώδους στάθμης.

4.2.2 Επιλογή Κατανομής (Mode Selection)

Έπειτα από την επιλογή ισότοπου ακολουθεί η επιλογή του είδους της κατανομής η οποία γίνεται από το κουτί “Mode Selection”. Η επιλογή “Angular Distribution” ή “Energy Distribution” επιτρέπει στο χρήστη τον καθορισμό των χαρακτηριστικών των κατανομών. Στην περίπτωση γωνιακής κατανομής τα χαρακτηριστικά αυτά είναι η ενέργεια της δέσμης σε keV, η αρχική και τελική γωνία ανίχνευσης και το βήμα μεταξύ αυτών σε μοίρες. Όλα τα μεγέθη αναφέρονται στο σύστημα του εργαστηρίου. Για μία ενεργειακή κατανομή τα χαρακτηριστικά αυτά είναι η γωνία ανίχνευσης σε μοίρες, η αρχική και τελική ενέργεια και το βήμα μεταξύ αυτών σε keV, όλα στο σύστημα του εργαστηρίου.

Εικόνα 33: Με την επιλογή είδους κατανομής επιτρέπεται στο χρήστη να καθορίσει τα χαρακτηριστικά της κατανομής.

Πατώντας το κουμπί “Get Distribution” εμφανίζεται ένα γράφημα της εκάστοτε κατανομής και οι τιμές της ενεργού διατομής αποθηκεύονται στη μνήμη. Για τη δημιουργία καινούργιας κατανομής πρέπει να αλλαχθούν τα χαρακτηριστικά και να πατηθεί το κουμπί “Get Distribution”. Εάν δεν πατηθεί δεν θα αντικατασταθεί ούτε το γράφημα ούτε οι τιμές της ενεργού διατομής στη μνήμη.



Εικόνα 34: Πατώντας το κουμπί “Get Distribution” δημιουργείται η κατανομή τα χαρακτηριστικά της οποίας έχουν προσδιοριστεί. Οι τιμές της ενεργού διατομής αποθηκεύονται στη μνήμη ενώ παράλληλα εμφανίζεται και ένα γράφημα της κατανομής.

Η επιλογή “Quick Calculation” διαφέρει από τις άλλες δύο καθώς δεν οδηγεί στη δημιουργία μίας κατανομής αλλά υπολογίζει την διαφορική ενεργό διατομή της σκέδασης Mott για συγκεκριμένη ενέργεια δέσμης και γωνία ανίχνευσης.

Εικόνα 35: Η επιλογή “Quick Calculation” επιτρέπει τον υπολογισμό της διαφορικής ενεργού διατομής της σκέδασης Mott για συγκεκριμένη ενέργεια δέσμης και γωνία ανίχνευσης.

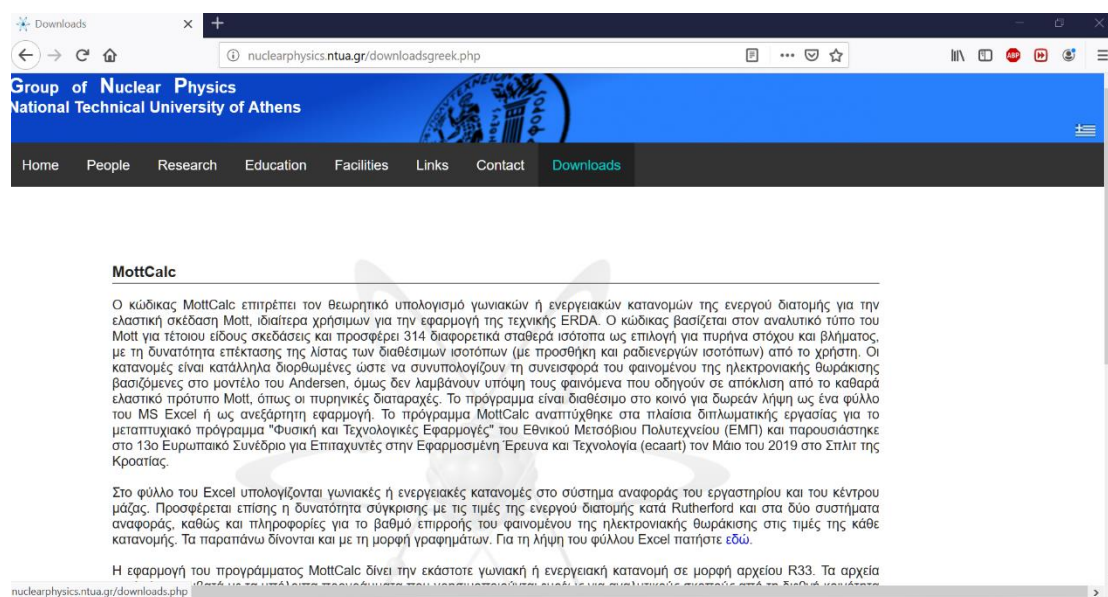
4.2.4 Δημιουργία ASCII R33 αρχείου

Για κάθε κατανομή που δημιουργείται υπάρχει η επιλογή αποθήκευσής της σε αρχείο τύπου ASCII R33, απλά πατώντας το κουμπί “Save as R33 file”. Ένα παράθυρο διαλόγου εμφανίζεται για τον καθορισμό της ονομασίας του αρχείου που αποθηκεύεται και του φακέλου στον οποίο θα γίνει η αποθήκευση.

Κεφάλαιο 5: Λήψη και Εγκατάσταση των προγραμμάτων
MottCalc

Τόσο το φύλλο Excel όσο και η εφαρμογή MottCalc αποτελούν open source προγράμματα τα οποία διατίθενται δωρεάν στο κοινό μαζί με πρόσβαση στον πηγαίο κώδικα αυτών. Όλα τα παραπάνω είναι διαθέσιμα στο site της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου nuclearphysics.ntua.gr. Στη καρτέλα “Downloads” ο χρήστης μπορεί να κατεβάσει το φύλλο Excel, την εφαρμογή MottCalc καθώς και txt αρχεία με τον πηγαίο κώδικα της εφαρμογής και ένα manual (οδηγό) για τη χρήση αυτών.

Το site της ομάδας αναβαθμίστηκε στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής ώστε να μπορεί να αποτελέσει σημείο διανομής του προγράμματος και είναι διαθέσιμο στα ελληνικά και στα αγγλικά. Εκτός από το πρόγραμμα το site περιέχει πληροφορίες για τις ερευνητικές και ακαδημαϊκές δραστηριότητες της ομάδας, τα μέλη που την αποτελούν και τρόπους επικοινωνίας. Τέλος σε αυτό υπάρχουν λίστες με τις διπλωματικές προπτυχιακού ή μεταπτυχιακού επιπέδου και διδακτορικές διατριβές που έχουν ολοκληρωθεί από μέλη της ομάδας και επιλεγμένες πρόσφατες δημοσιεύσεις.



Εικόνα 36: Η καρτέλα “Downloads” του site της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του Ε.Μ.Π.. Σε αυτή την καρτέλα είναι διαθέσιμα το φύλλο Excel, η εφαρμογή MottCalc καθώς και txt αρχεία με τον πηγαίο κώδικα της εφαρμογής και ένα manual (οδηγός) για τη χρήση αυτών.

Μόλις ολοκληρωθεί η λήψη του φύλλου Excel δεν χρειάζεται κάποια ειδική διαδικασία για την περαιτέρω εγκατάστασή του. Παρ’ όλα αυτά, για τη σωστή λειτουργία και χρήση του, πρέπει πρώτα να ακολουθηθούν τα παρακάτω βήματα στο φύλλο:

- Να επιτραπούν οι μακροεντολές.
- Ως σύμβολο διαχωρισμού μεταξύ του ακέραιου μέρους και των δεκαδικών ψηφίων ενός αριθμού να τεθεί η τελεία και όχι το κόμμα.

Στην περίπτωση της εφαρμογής, μετά την ολοκλήρωση της λήψης, χρειάζονται ορισμένα επιπλέον βήματα προτού μπορέσει να χρησιμοποιηθεί. Αρχικά, το αρχείο το οποίο λαμβάνει ο χρήστης είναι συμπιεσμένο σε μορφή rar. Πρέπει να γίνει εξαγωγή του φακέλου MottCalc-Release στο σκληρό δίσκο (C:\) ή σε κάποιο άλλο φάκελο αυτού. Ο φάκελος αυτός περιέχει αρχεία μορφής .dll τα οποία είναι απαραίτητα για τη λειτουργία της εφαρμογής, το αρχείο TableOfIsotopes.txt το οποίο περιέχει τις πληροφορίες για τα 314 διαθέσιμα ισότοπα και τέλος το εκτελέσιμο αρχείο MottCalc.exe το οποίο πρέπει να εκτελέσει ο χρήστης ώστε να ξεκινήσει η εφαρμογή. Για τη σωστή λειτουργία της εφαρμογής πρέπει:

- Τα αρχεία TableOfIsotopes.txt και MottCalc.exe να περιέχονται στο φάκελο MottCalc-Release μαζί με όλα τα .dll αρχεία.
- Το filepath για το directory του φακέλου MottCalc-Release δεν πρέπει να περιέχει ειδικούς χαρακτήρες όπως σύμβολα ή γράμματα από αλφάβητα άλλα εκτός του λατινικού, διαφορετικά η εφαρμογή δεν θα μπορεί να εντοπίσει και να χρησιμοποιήσει το αρχείο TableOfIsotopes.txt .

Εάν κάποιο από τα παραπάνω δεν ακολουθηθεί, η εφαρμογή είτε δεν θα μπορεί να δημιουργήσει το γραφικό της περιβάλλον είτε δεν θα μπορεί να εντοπίσει και να χρησιμοποιήσει το αρχείο TableOfIsotopes.txt, άρα δεν θα υπάρχει πρόσβαση στη βιβλιοθήκη των ισotόπων.

Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα και Προοπτικές

Στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας αναπτύχθηκε ένας κώδικας ο οποίος υλοποιήθηκε σαν ένα φύλλο Excel και ως ανεξάρτητη εφαρμογή με το όνομα MottCalc. Σκοπός αυτού είναι ο θεωρητικός υπολογισμός διαφορικών ενεργών διατομών για την ελαστική σκέδαση ταυτόσημων σωματιδίων η οποία είναι γνωστή και ως σκέδαση Mott. Λόγω της μη διαχωρισιμότητας των πυρήνων που συμμετέχουν στη σκέδαση οι ενεργές διατομές αυτής αποκλίνουν σημαντικά από τις θεωρητικές τιμές που υπολογίζονται μέσω του τύπου του Rutherford. Ο κώδικας MottCalc είναι ο πρώτος ο οποίος επιτρέπει αναλυτικούς υπολογισμούς για τέτοιου είδους ελαστικές σκεδάσεις. Στην υλοποίηση λήφθηκε υπ' όψιν και το φαινόμενο της ηλεκτρονιακής θωράκισης ώστε τα αποτελέσματα να μπορούν να συγκριθούν με πειραματικά δεδομένα. Ο κώδικας επίσης αναπαράγει το φαινόμενο της εγκάρσιας ισοτροπίας.

Το φύλλο Excel επιτρέπει την μελέτη μίας τέτοιας σκέδασης προσφέροντας τις τιμές της ενεργού διατομής στο σύστημα του εργαστηρίου αλλά και του κέντρου μάζας, τη συνεισφορά της ηλεκτρονιακής θωράκισης στις τιμές των διατομών, καθώς και σύγκριση με τις τιμές του τύπου του Rutherford. Η εφαρμογή από την άλλη πλευρά επιτρέπει τη δημιουργία ASCII R33 αρχείων με κατανομές (γωνιακές ή ενεργειακές) της σκέδασης Mott. Αυτού του είδους τα αρχεία μπορούν να χρησιμοποιηθούν από προγράμματα όπως το SIMNRA και άλλα παρόμοια με αυτό, τα οποία χρησιμοποιούνται σε IBA μετρήσεις.

Όλα τα παραπάνω δίνουν λύση στην περίπτωση εμφάνισης σκέδασης Mott σε μετρήσεις Ελαστικά Ανακρουόμενων πυρήνων (ERDA). Λόγω των μεγάλων αποκλίσεων από τις αναμενόμενες τιμές της ενεργού διατομής βάσει του τύπου του Rutherford δεν ήταν δυνατή η ανάλυση τέτοιων μετρήσεων σε αυτές τις περιπτώσεις στο παρελθόν. Μέσω του κώδικα MottCalc αυτή η περίπτωση δεν αποτελεί πλέον εμπόδιο.

Τόσο το φύλλο Excel όσο και η εφαρμογή MottCalc είναι διαθέσιμα δωρεάν στη επιστημονική κοινότητα και έτοιμα προς χρήση. Η χρήση αυτών και η σύγκριση των θεωρητικών αποτελεσμάτων τους με πειραματικά δεδομένα από διαφορετικά εργαστήρια και η συνεχής επικοινωνία των χρηστών με τον γράφοντα θα επιτρέψει την περαιτέρω βελτίωση του κώδικα και της εμπειρίας που λαμβάνει ο κάθε χρήστης όταν χρησιμοποιεί οποιοδήποτε από τα δύο αυτά εργαλεία. Επιπλέον η χρήση τους δεν περιορίζεται μόνο σε μετρήσεις Ελαστικά Ανακρουόμενων πυρήνων (ERDA) αλλά μπορεί να χρησιμοποιηθούν και σε πειράματα που στοχεύουν στη μελέτη του φαινομένου της Εγκάρσιας Ισοτροπίας.

Κεφάλαιο 7 : Βιβλιογραφία-Αναφορές

[Andersen_77]	H. H. Andersen and J. F. Ziegler. Hydrogen - Stopping Powers and Ranges in All Elements. Vol. 3. The Stopping and Ranges of Ions in Matter. New York: Pergamon Press, 1977
[Canto_14]	L. F. Canto, M. S. Hussein, W. Mittig, PHYSICAL REVIEW C 89, 024610 (2014). Disappearance of Mott oscillations in sub-barrier elastic scattering of identical heavy ions, and the nuclear interaction
[Mayer_77]	James Mayer E. Rimini - Handbook of Modern Ion Beam Material Analysis (1977)
[Mayer_97]	M. Mayer. SIMNRA User's Guide. Tech. rep. IPP 9/113. Garching: Max Planck-Institut für Plasmaphysik, 1997.
[Hussein_15]	M. S. Hussein, L. F. Canto, R. Donangelo, W. Mittig, Few-Body Systems 57(3) · December 2015 (2015) Disappearance of Mott Oscillations in Subbarrier Elastic Scattering of Identical Nuclei and Atomic Ions