

ΜΟΝΤΕΛΑ ΕΝΕΡΓΩΝ ΔΙΑΤΟΜΩΝ ΓΙΑ ΙΟΝΙΣΜΟ
ΤΟΥ ΝΕΡΟΥ ΣΤΗΝ ΥΓΡΗ ΦΑΣΗ ΑΠΟ
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑ ΣΤΟΝ ΚΩΔΙΚΑ MONTE CARLO
GEANT4



Στέφανος Μάργης

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Διπλωματική εργασία του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών στη Φυσική με
Ειδικεύσεις στη Θεωρητική και στην Πειραματική Φυσική

Ιούνιος 2022

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι ενεργές διατομές ιονισμού του υγρού νερού είναι απαραίτητες για την περιγραφή των ραδιοβιολογικών επιπτώσεων των ιοντιζουσών ακτινοβολιών στο κυτταρικό περιβάλλον καθώς περιγράφουν τον κύριο μηχανισμό ραδιόλυσης του μορίου νερού και της δημιουργίας ελευθέρων ριζών. Τα δημοφιλέστερα αναλυτικά μοντέλα ιονισμού από ηλεκτρόνια για την αέρια φάση έχουν αναπτυχθεί από τον Yong Ki-Kim (και συνεργάτες) στο ερευνητικό ινστιτούτο NIST των ΗΠΑ. Τα μοντέλα είναι γνωστά ως Binary-Encounter-Dipole (BED) και Binary-Encounter-Bethe (BEB) και αποδίδουν αξιόπιστα αποτελέσματα για πλήθος υλικών. Το μοντέλο BEB υιοθετείται από τον κώδικα Geant4-DNA (Option 6) του CERN για προσομοιώσεις δομής τροχιάς στο υγρό νερό. Σκοπός της εργασίας αυτής είναι η κατάλληλη τροποποίηση των μοντέλων BED και BEB ώστε να αποδοθούν συλλογικά φαινόμενα συμπεκνωμένης φάσης τα οποία δεν λαμβάνονται υπόψη λόγω της έντονης μεταβλητότητας των ενεργών διατομών καθώς προσεγγίζουμε τις ενέργειες σύνδεσης. Η προτεινόμενη διόρθωση αποτελεί τροποποίηση του παράγοντα Burgess, προκειμένου να έχουμε καλύτερη συμφωνία με το ενδεδειγμένο διηλεκτρικό μοντέλο του Geant4-DNA (Option 4) στις χαμηλές ενέργειες. Σε αναλογία με την ενεργό διατομή ελαστικής σκέδασης από δυναμικό Yukawa στα πλαίσια της 1^{ης} προσέγγισης Born, θα πρέπει να αυξηθεί ο παρονομαστής του παράγοντα Burgess. Η φυσική ερμηνεία της διόρθωσης σχετίζεται με την μείωση της εμβέλειας της αλληλεπίδρασης Coulomb λόγω του φαινομένου θωράκισης και με την πολωσιμότητα του στόχου. Τα μεγέθη που εξετάζονται είναι η διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού, η ολική ενεργός διατομή ιονισμού και η ισχύς ανάσχεσης για μη-σχετικιστικά ηλεκτρόνια στο υγρό νερό. Παρατηρείται μείωση της απόκλισης από την ολική ενεργό διατομή του Option 4, μικρότερη από 30% και 23% με το διορθωμένο BED και BEB αντίστοιχα. Οι υπολογισμοί της ισχύος ανάσχεσης από ιονισμό ήταν εντός του εύρους $\pm 10\%$ για όλες τις κινητικές ενέργειες των ηλεκτρονίων με τα διορθωμένα μοντέλα. Εν συνέχεια, εφαρμόζοντας την παρούσα διόρθωση στο μοντέλο Option 6 υπολογίσαμε βασικές ποσότητες σχετικά με τη διάχυση των ηλεκτρονίων. Με το παράδειγμα “spower”, υπολογίστηκε η ανελαστική ισχύ ανάσχεσης των ηλεκτρονίων στο υγρό νερό και συγκρίθηκε με όλα τα διαθέσιμα μοντέλα. Επιτυγχάνεται συμφωνία του διορθωμένου Option 6 με το Option 4 εντός 7% σε όλο το εύρος ενεργειών. Με το παράδειγμα “range”, υπολογίστηκε το μήκος τροχιάς (εμβέλεια), το μήκος διείσδυσης κατά της διεύθυνση πρόσπτωσης και η πλευρική η διείσδυση των ηλεκτρονίων στο υγρό νερό. Σε όλα τα μεγέθη η απόκλιση του διορθωμένου Option 6 από το Option 4 ήταν εντός του 10%. Συνοψίζοντας, η προτεινόμενη διόρθωση βελτιώνει δραστικά το μοντέλο Option 6 αποδίδοντας πλησιέστερα αποτελέσματα με το Option 4 σε όλες τις ποσότητες που υπολογίστηκαν.

ABSTRACT

Ionization cross sections in liquid water are important for the description of the radiobiological effects of ionizing radiation in cellular environment, since ionizations are the dominant process leading to the radiolysis of water molecule and the creation of free radicals. The most popular analytical models for electron impact ionization in the gas phase were developed by Yong Ki-Kim (and co-workers) at NIST (USA). These models are known as Binary-Encounter-Dipole (BED) and Binary-Encounter-Bethe (BEB) and give reliable results for a variety of targets. BEB model is adopted in Geant4-DNA (Option 6) of CERN for track structure simulations in liquid water. The aim of this work is to modify appropriately BED and BEB models to account for cumulative effects in condensed phase that are not considered, due to the variability of the cross sections when approaching the binding energies of the target. The proposed correction is a modification of Burgess term, to result in better agreement with the recommended dielectric model of Geant4 (Option 4) in the low energy region. In an analogy with the elastic scattering cross section from the Yukawa potential in the 1st Born approximation, the denominator of Burgess term should increase. The physical explanation of our correction is related to the reduction of the range of the Coulomb interaction due to the screening effect and the polarizability of the target. The examined quantities were the differential ionization cross section, the total ionization cross section and the ionization stopping power for non-relativistic electrons in liquid water. The deviation of the corrected BED and BEB models from Option 4 is reduced to less than 30% and 23% respectively. Ionization stopping power calculations of the corrected models were within the 10% range from Option 4 in the whole energy region. Furthermore, we applied the present correction in Option6 model and calculated basic quantities related with the diffusion of the electrons. With the “spower” example, the total inelastic stopping power in liquid water was calculated and compared with the available physics models. An agreement between the corrected Option 6 and Option 4 of 7% was achieved in the whole energy region. With the “range” example, we calculated the track length (range), the projected length and the penetration of the electrons in liquid water. In all calculated quantities the deviation from Option 4 was within 10 %. We conclude that our correction brings a closer agreement with Option 4 in all quantities that were calculated.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον κ. Κόκκα Παναγιώτη καθηγητή του τμήματος Φυσικής που δέχθηκε να αναλάβει την επίβλεψη της διπλωματικής μου εργασίας.

Η εργασία εμπνεύστηκε από τον κ. Εμφιετζόγλου Δημήτριο καθηγητή του τμήματος Ιατρικής και την κ. Κυριακού Ιωάννα επίκουρη καθηγήτρια του τμήματος Ιατρικής. Τους ευχαριστώ εγκάρδια για την συνεχή υποστήριξη αλλά και εμπιστοσύνη που μου έδειξαν.

Ως υπότροφος του Ιδρύματος Λοχαγού Φανουράκη δηλώνω ευγνώμων για την οικονομική υποστήριξη των μεταπτυχιακών μου σπουδών. Η συνεισφορά ήταν καταλυτική για την απερίσπαστη αφοσίωσή μου στα φοιτητικά μου καθήκοντα.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1.	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	1
1.1	Μέθοδος Monte Carlo	4
1.2	Προσομοίωση της διάχυσης ακτινοβολίας με μέθοδο Monte Carlo.....	4
1.3	Κώδικες δομής τροχιάς (Track Structure).....	6
1.4	Κώδικες συμπυκνωμένων ιστοριών (Condensed History)	8
2.	ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ	11
2.	Μοντέλα ενεργών διατομών ιονισμού	11
2.1	Διηλεκτρικά μοντέλα	11
2.1.1	Διηλεκτρική συνάρτηση και Energy-Loss-Function (ELF)	12
2.1.2	Δυναμικό ταλαντωτή (Oscillator Strength)	13
2.1.3	Μοντέλο Drude και διηλεκτρική συνάρτηση του Geant4-DNA	14
2.1.4	Ενεργές διατομές του διηλεκτρικού μοντέλου στον κώδικα Geant4-DNA	16
2.1.5	Διορθώσεις της 1 ^{ης} προσέγγισης Born στις χαμηλές ενέργειες.....	18
2.2	Αναλυτικά μοντέλα	19
2.2.1	Αναλυτικά μοντέλα Kim - Rudd	20
2.2.2	Μοντέλο BED (Binary Encounter Dipole).....	22
2.2.3	Μοντέλο BEB (Binary Encounter Bethe).....	24
2.2.4	Διόρθωση Burgess	26
2.2.5	Διόρθωση Vriens	31
2.2.6	Διόρθωση Guerra.....	32

2.2.7 Διόρθωση παρούσας εργασίας	35
2.2.8 Ελαστική σκέδαση από δυναμικό Yukawa	38
3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ.....	42
3.1 Διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού (DICS)	42
3.2 Ολική ενεργός διατομή ιονισμού (TICS).....	45
3.3 Ισχύς Ανασκέσεως ιονισμών (SP).....	48
3.4 Εφαρμογή της παρούσας διόρθωσης στο μοντέλο Option6 του Geant4-DNA	52
3.4.1 Εφαρμογή στο παράδειγμα “spower”	52
3.4.2 Εφαρμογή στο παράδειγμα “range”	54
3.4.3 Εφαρμογή στο παράδειγμα “TestEM12”	58
4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	63
5. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	65
6. ΠΙΝΑΚΕΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ.....	71

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 1. Κώδικες δομής τροχιάς.	8
Πίνακας 2. Κώδικες συμπυκνωμένων ιστοριών.	10
Πίνακας 3. Δεδομένα για την εφαρμογή στο μόριο του νερού στην υγρή φάση.	24
Πίνακας 4. Δεδομένα διόρθωσης Guerra για κάθε στιβάδα ιονισμού του μορίου του νερού στην υγρή φάση.	35

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1. Μέθοδος Monte Carlo έναντι αναλυτικών μεθόδων.	5
Σχήμα 2. Τροχιά ηλεκτρονίου με κώδικα δομής τροχιάς	7
Σχήμα 3. Τροχιά ηλεκτρονίου με μέθοδο συμπυκνωμένων ιστοριών.	9
Σχήμα 4. Κινηματική της ελαστικής σκέδασης.	39
Σχήμα 5. Ορισμοί για την εμβέλεια των ηλεκτρονίων	54

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΓΡΑΦΙΚΩΝ ΠΑΡΑΣΤΑΣΕΩΝ

Γραφική 1. Επίδραση διόρθωσης Burgess στην DICS των μοντέλων BED και BEB συναρτήσει της μεταφερόμενης ενέργειας στο στόχο.....	28
Γραφική 2. Επίδραση διόρθωσης Burgess στην TICS συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων.....	29
Γραφική 3. Επίδραση διόρθωσης Burgess στην SP ως προς την κινητική ενέργεια των αρχικών ηλεκτρονίων.....	30
Γραφική 4. Συνάρτηση φ του Vriens ως προς την κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου για όλες τις στιβάδες ιονισμού του μορίου του νερού στην υγρή φάση.....	31
Γραφική 5. Συναρτήσεις $k(T)$ για τις Εξ. (42) & (43) ως προς την κινητική ενέργεια T (eV). ..	38
Γραφική 6. Διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού των μοντέλων BED συναρτήσει της μεταφερόμενης ενέργειας για αρχική κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων .	44
Γραφική 7. Διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού των μοντέλων BEB συναρτήσει της μεταφερόμενης ενέργειας για αρχική κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων	45
Γραφική 8. Ολική ενεργός διατομή ιονισμού από ηλεκτρόνια συναρτήσει της κινητικής τους ενέργειας.....	47
Γραφική 9. Σχετική απόκλιση (%) ολικής ενεργού διατομής για ιονισμό της Γραφικής 8 με το Option4 ως βάση.....	48
Γραφική 10. Ισχύς ανασχέσεως ιονισμού συναρτήσει της κινητικής ενέργειας του αρχικού ηλεκτρονίου.....	50
Γραφική 11. Σχετική απόκλιση (%) ισχύος ανασχέσεως ιονισμού στη Γραφική 10 έχοντας ως αναφορά το Option4. a: Μοντέλα BED, b: Μοντέλα BEB.	51
Γραφική 12. Ανελαστική ισχύς ανασχέσεως υπολογισμένη με το παράδειγμα “spower” του Geant4-DNA συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων.....	52
Γραφική 13. Σχετική διαφορά (%) ανελαστικής ισχύος ανάσχεσης των ηλεκτρονίων συναρτήσει της κινητικής τους ενέργειας.....	53
Γραφική 14. Εμβέλεια των ηλεκτρονίων ως συνάρτηση της αρχικής κινητικής τους ενέργειας.....	55
Γραφική 15. Σχετική διαφορά (%) εμβέλειας ως συνάρτηση της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων από τη Γραφική 14, υπολογισμένη με βάση το μοντέλο Option4.....	55

Γραφική 16. Μήκος διείσδυσης κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων..	56
Γραφική 17. Σχετική διαφορά (%) μήκους διείσδυσης κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης (penetration) ως συνάρτηση της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων από τη Γραφική 16, υπολογισμένη με βάση το Option4.	56
Γραφική 18. Πλευρική διείσδυση συναρτήσει της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων.....	57
Γραφική 19. Σχετική διαφορά (%) πλευρικής διείσδυσης συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων, υπολογισμένη με το Option4 ως βάση.....	58
Γραφική 20. Dose point kernels μονο-ενεργητικών ηλεκτρονίων σε υγρό νερό συναρτήσει την ακτινικής απόστασης από το σημείο εκτόξευσης.....	60
Γραφική 21. Σχετική διαφορά (%), υπολογισμένη μέσω της Εξ. (58), μεταξύ των DPKs των διαφορετικών μοντέλων Φυσικής στην Γραφική 20.	61

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo που σχετίζονται με την διέλευση ηλεκτρονίων σε μέσο με κύριο συστατικό το μόριο νερού στην υγρή φάση αποτελούν ένα πολύ χρήσιμο θεωρητικό εργαλείο για την διερεύνηση των βιολογικών επιπτώσεων της ακτινοβολίας στα ανθρώπινα κύτταρα (El Naqa et al., 2012; Goodhead, 1989; Nikjoo & Goodhead, 1991). Στο ερευνητικό πεδίο της μικροδοσιμετρίας (ή νανοδοσιμετρίας), οι μελέτες που υιοθετούν την τεχνική Monte Carlo επεκτείνονται ακόμα και σε υποκυτταρικούς στόχους όπως το ανθρώπινο γονιδίωμα (Lampe et al., 2018; Liamsuwan et al., 2012; Margis et al., 2020; Nikjoo et al., 1997; Pater et al., 2014). Η χρησιμότητα της μεθόδου αυτής είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την αξιοπιστία των μοντέλων Φυσικής που υιοθετούνται για την θεωρητική περιγραφή των αλληλεπιδράσεων της ιοντίζουσας ακτινοβολίας με το υπό ακτινοβολή μέσο (Incerti et al., 2010; Uehara et al., 1999).

Οι κώδικες δομής τροχιάς (track structure) προσομοιώνουν τις πιθανές αλληλεπιδράσεις της ακτινοβολίας μία-προς-μία και έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως για την περιγραφή της δράσης της ακτινοβολίας με κύριο χαρακτηριστικό διαφοροποίησης των διαθέσιμων κωδίκων να είναι τα μοντέλα Φυσικής που υιοθετούν (Mehnaz et al., 2020; Nikjoo et al., 2006; Uehara et al., 1999). Εν γένει, μπορούμε να διαχωρίσουμε τα μοντέλα Φυσικής σε δύο κατηγορίες, τα διηλεκτρικά και τα αναλυτικά μοντέλα. Όλα τα διαθέσιμα διηλεκτρικά μοντέλα για προσομοιώσεις Monte Carlo στο υγρό νερό, υποθέτουν μια απλή και αναλυτική μορφή για τη διηλεκτρική συνάρτηση του μέσου σύμφωνα με το μοντέλο του Drude. Η προσέγγιση αυτή διαφοροποιείται ως προς την παραμετροποίηση των συναρτήσεων Drude στη διηλεκτρική συνάρτηση (Nikjoo et al., 2012; Sajo & Zygmanski, 2020). Τα πιο δημοφιλή διηλεκτρικά μοντέλα για προσομοιώσεις δομής τροχιάς στο υγρό νερό είναι το μοντέλο ORNL το οποίο αναπτύχθηκε από τους (Ritchie et al., 1991) και είναι διαθέσιμο στον κώδικα NOREC οποίος είχε αναπτυχθεί στα ερευνητικά κέντρα NIST και στο Oak Ridge (ΗΠΑ), το μοντέλο GSF δομημένο από τους (Dingfelder & Inokuti, 1999) στο ομώνυμο ερευνητικό κέντρο GSF (Γερμανία) και είναι διαθέσιμο στον κώδικα PARTRAC και το διηλεκτρικό μοντέλο ECN (Emfietzoglou-Cucinotta-Nikjoo) (Emfietzoglou et al., 2005) του κώδικα KURBUC ανεπτυγμένο στα πλαίσια συνεργασίας του Πανεπιστημίου Kyushu (Ιαπωνία) με την Επιτροπή Ιατρικών Ερευνών (Medical Research council) στην Οξφόρδη (Αγγλία). Ο

κώδικας Geant4-DNA αποτελεί επέκταση του υπολογιστικού πακέτου Geant4 (Agostinelli et al., 2003) ανεπτυγμένο στο CERN, σε χαμηλότερες ενέργειες (Incerti et al., 2010) για εφαρμογές που σχετίζονται με το πεδίο της Ιατρικής Φυσικής, της ακτινοπροστασίας και των διαστημικών αποστολών για την εκτίμηση του ρίσκου έκθεσης τόσο των αστροναυτών όσων και των υλικών που χρησιμοποιούνται (Bernal et al., 2015; Kyriakou et al., 2021). Στον κώδικα Geant4-DNA διατίθενται δύο διηλεκτρικά μοντέλα το Option 2 (default) και το Option 4 (Ioannina), τα οποία περιγράφουν τους ιονισμούς και τις διεγέρσεις στα πλαίσια της 1^{ης} προσέγγισης Born σύμφωνα με το μοντέλο των Εμφιετζόγλου και των συνεργατών (Emfietzoglou et al., 2003, 2005; Incerti et al., 2018; Kyriakou et al., 2016, 2017, 2021). Ειδικότερα, τα Option 2 και Option 4 υιοθετούν διηλεκτρική συνάρτηση σύμφωνα με το μοντέλο του Drude με μηδενικό συντελεστή απόσβεσης για τις ανελαστικές αλληλεπιδράσεις, τους ιονισμούς και τις διεγέρσεις (Kyriakou et al., 2015; Nikjoo et al., 2012). Η ποσότητα που σχετίζεται με την διαφορική ενεργό διατομή στην 1^η προσέγγιση Born είναι η Energy-Loss-Function (ELF) και μπορεί να υπολογιστεί ημι-εμπειρικά από πειραματικά δεδομένα στο οπτικό όριο ($q = 0$, όπου q : η μεταφερόμενη ορμή μέσω μιας αλληλεπίδρασης) και να επεκταθεί σε μη-μηδενικές τιμές της μεταφερόμενης ορμής ($q > 0$) στα πλαίσια της προσέγγισης impulse (impulse approximation) (Emfietzoglou et al., 2003; Kyriakou et al., 2016). Παρ' όλο που δεν λαμβάνονται υπόψη στην 1^η προσέγγιση Born φαινόμενα ανταλλαγής (exchange) και συσχέτισης (correlation) λόγω αλληλεπίδρασης Coulomb κατά της σκέδαση ηλεκτρονίων, οι διορθώσεις των (Emfietzoglou et al., 2013) έχουν εφαρμοστεί για να αποδοθούν και τα φαινόμενα αυτά (Kyriakou et al., 2016). Επιπρόσθετα, λόγω του πραγματικού μέρους της διηλεκτρικής συνάρτησης, φαινόμενα συμπεκνωμένης φάσης περιγράφονται ενδογενώς και έτσι αποφεύγονται πολύπλοκοι *ab-initio* υπολογισμοί, καθιστώντας τα διηλεκτρικά μοντέλα κατάλληλα για στόχους στην υγρή και την αέρια φάση (Inokuti, 1991; Nikjoo et al., 2012). Το κύριο μειονέκτημα των διηλεκτρικών μοντέλων είναι ότι χρειάζονται αξιόπιστα πειραματικά δεδομένα στο οπτικό όριο από πειράματα φωτοαπορρόφησης, τα οποία είναι διαθέσιμα για μικρό αριθμό υλικών που ενδιαφέρουν την Ιατρική Φυσική (Inokuti, 1991; Sajo & Zyganski, 2020).

Τα αναλυτικά μοντέλα είχαν εξ αρχής αναπτυχθεί για την περιγραφή των διεργασιών που οδηγούν σε ιονισμό ατόμων και μορίων στην αέρια φάση (Y. K. Kim, 1975; Y.-K. Kim & Rudd, 1994; Sajo & Zyganski, 2020). Η διαθεσιμότητα πειραματικών δεδομένων για ενεργές διατομές σκέδασης σε πληθώρα στόχων στην αέρια φάση ήταν καθοριστική για την ανάπτυξη εύχρηστων

εκφράσεων που πηγάζουν από θεωρία και μπορούν να εφαρμοστούν με ευκολία απαιτώντας πολύ βασικές παραμέτρους του υλικού. Ίσως τα πιο διαδεδομένα αναλυτικά μοντέλα είναι αυτά των Kim και Rudd (Y.-K. Kim & Rudd, 1994), γνωστά ως Binary-Encounter-Bethe (BEB) και Binary-Encounter-Dipole (BED). Και τα δύο μοντέλα εκφράζουν τις ενεργές διατομές σε διακριτούς όρους σκληρών (κοντινών) και ασθενών (μακρινών) αλληλεπιδράσεων, το οποίο ευνοεί την προσομοίωση των δευτερογενών ηλεκτρονίων. Ακόμα, έχουν τροποποιηθεί κατάλληλα για να την εφαρμογή τους και για σχετικιστικά ηλεκτρόνια, αντικαθιστώντας την ενεργό διατομή του Mott με την σχετικιστική της μορφή γνωστή ως ενεργό διατομή του Møller (Møller, 1932) και προσαρμόζοντας τον οπτικό όρο του Bethe για την περιγραφή της διπολικής αλληλεπίδρασης η οποία είναι σημαντική για δέσμια ηλεκτρόνια, και η θεωρία του Mott είναι ανεπαρκής να αποδώσει (Y.-K. Kim et al., 2000; Y.-K. Kim & Irikura, 2000). Ανάμεσα στα δύο αυτά μοντέλα, το BEB έχει κερδίσει το μεγαλύτερο ενδιαφέρον δεδομένου ότι για να εφαρμοστεί, χρειάζεται πολύ απλές παραμέτρους του υλικού αποφεύγοντας εμπειρικές παραμέτρους επιστρέφοντας αρκετά αξιόπιστες ενεργές διατομές για ουδέτερα άτομα, μόρια, ρίζες και θετικά φορτισμένα ιόντα (Hwang et al., 1996; Y.-K. Kim, 2004; Y.-K. Kim et al., 1996; Y.-K. Kim & Desclaux, 2002; Y.-K. Kim & Irikura, 2000; Nishimura et al., 1999). Το μοντέλο BEB είχε υιοθετηθεί από τον κώδικα CPA100 ανεπτυγμένο από τους Terrissol και συνεργάτες (Terrissol & Beaudré, 1990), από τον κώδικα TRAX (Wälzlein et al., 2014) και πρόσφατα από τον κώδικα Geant4-DNA από τους Bordage και συνεργάτες (Bordage et al., 2016; Kyriakou et al., 2021) στο μοντέλο Option 6 για προσομοιώσεις σε νερό στην υγρή φάση. Επιπλέον, το μοντέλο BEB έχει εφαρμοστεί και για υπολογισμούς ενεργών διατομών σκέδασης στις βάσεις του DNA (Mozejko & Sanche, 2003; Zein et al., 2021) και ακόμα και σε υλικά υψηλού ατομικού αριθμού όπως ο χρυσός για υποβοήθηση των ακτινοθεραπευτικών διεργασιών μέσω νανοσωματιδίων χρυσού (Sakata et al., 2016, 2018). Όμως, η αυθαίρετη επέκταση του μοντέλου BEB σε στόχους συμπτυκνωμένης φάσης χωρίς καμία τροποποίηση εγείρει ανησυχίες ιδιαίτερα στις χαμηλότερες ενέργειες (<1 keV) όπου η εξάρτηση από τη φάση του υλικού μπορεί να είναι σημαντική.

Σκοπός της εργασίας μας είναι να διερευνήσουμε κατά πόσο η παράβλεψη των φαινομένων συμπτυκνωμένης φάσης μπορεί να έχει επίδραση στις ενεργές διατομές των μοντέλων BEB και BED σε σύγκριση με το διηλεκτρικό μοντέλο του Geant4-DNA, Option 4. Και σε δεύτερο βήμα, να εξετάσουμε με ποιες διορθώσεις μπορούν τα αναλυτικά μοντέλα να αποδώσουν εξίσου καλά αποτελέσματα με τα διηλεκτρικά, για το μόριο του νερού στην υγρή φάση.

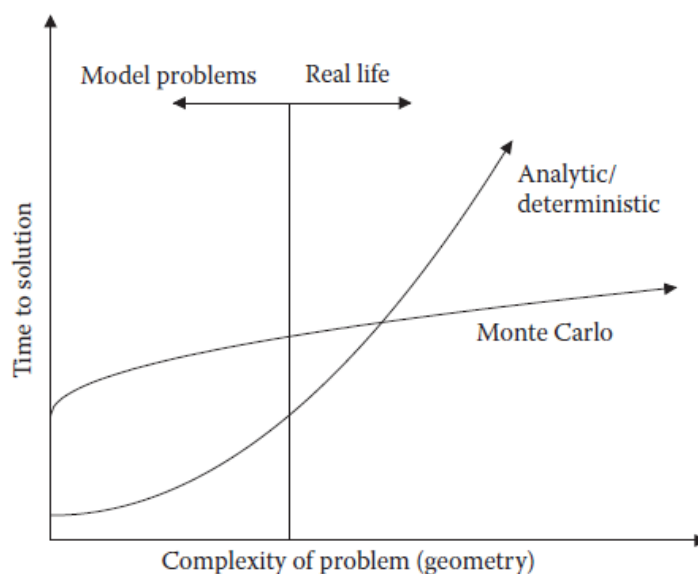
1.1 Μέθοδος Monte Carlo

Η μαθηματική μέθοδος Monte Carlo αποτελεί αριθμητική μέθοδο επίλυσης εξισώσεων ή ολοκληρωμάτων χρησιμοποιώντας τεχνική δειγματοληψία τυχαίων αριθμών. Ιστορικά, ο Ulam θεωρείται ο πρώτος που σκέφτηκε να εφαρμόσει την μέθοδο στοχαστικής δειγματοληψίας. Η έμπνευση για το εγχείρημα αυτό, του εμφανίστηκε κατά την ανάρρωσή του από κρυολόγημα όπου έπαιζε πασιέντζα επανειλημμένα και αναρωτήθηκε αν μπορούσε να υπολογίσει την πιθανότητα να κερδίσει (Seco & Verhaegen, 2016). Έχει ενδιαφέρον το σχόλιο του ίδιου του Ulam στην αυτοβιογραφία του (Ulam, 1991) (σελ. 196) *“The idea for what was latter called the Monte Carlo method occurred to me when I was playing solitaire during my illness”*. Το συμπέρασμά του ήταν ότι κάτι τέτοιο ήταν εφικτό παίζοντας ένα μεγάλο αριθμό παρτίδων και μετρώντας τον αριθμό των παρτίδων όπου νίκησε (Metropolis, 1987), υπολογίζοντας έτσι την πιθανότητα νίκης στο συγκεκριμένο παιχνίδι. Ο Ulam μοιράστηκε την ιδέα του με τους von Neumann και Metropolis, οι οποίοι συνεργάζονταν σε θεωρητικούς υπολογισμούς που αφορούσαν την ανάπτυξη θερμοπυρηνικών όπλων. Η ονομασία της μεθόδου Monte Carlo επινοήθηκε το 1947, στην αρχή της υπολογιστικής εποχής, όπου προτάθηκε για πρώτη φορά η εφαρμογή της μεθόδου για υπολογισμούς σχετικά με την αλληλεπίδραση της ακτινοβολίας σε ακτινοβολούμενους στόχους (Metropolis 1987). Η επιλογή της ονομασίας αυτής αποδίδεται κυρίως σε λόγους ρομαντισμού. Είναι αξιοσημείωτο το πως οδηγηθήκαμε σε μια τόσο σημαντική μέθοδο με εφαρμογή σχεδόν σε όλα τα πεδία έρευνας της Φυσικής. Σύμφωνα με τους Seco και Verhaegen (Verhaegen & Seco, 2021), μέχρι και το έτος 2020 έχουν δημοσιευθεί περίπου 900,000 επιστημονικές εργασίες οι οποίες κάνουν χρήση της μεθόδου Monte Carlo. Από αυτές ένα σημαντικό ποσοστό (~10-20%) αφορούν μελέτες σχετικά με εφαρμογές στην Ιατρική από το 1970 και μεταγενέστερα (Verhaegen & Seco, 2021).

1.2 Προσομοίωση της διάχυσης ακτινοβολίας με μέθοδο Monte Carlo

Οποιαδήποτε μορφή ιοντίζουσας ακτινοβολίας (φορτισμένα σωματίδια, νετρόνια, φωτόνια και ιόντα) που διαπερνά ένα ακτινοβολούμενο μέσο αλληλεπιδρά με τα δομικά άτομα του μέσου και τα ηλεκτρόνια αυτών που περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές έχουν στοχαστικό χαρακτήρα, δηλαδή υπακούουν μια κατανομή πιθανότητας με χαρακτηριστικό μέγεθος περιγραφής τους να είναι η ενεργός διατομή. Η

τυχαιότητα των αλληλεπιδράσεων, έχει ως αποτέλεσμα τη δυσκολία περιγραφής τους και μελέτης των αποτελεσμάτων τους με πειραματικές διαδικασίες και η μέθοδος Monte Carlo αποτελεί ένα πολύ χρήσιμο θεωρητικό εργαλείο. Επιπλέον οι προσομοιώσεις Monte Carlo απλοποιούν την επίλυση του προβλήματός μας σε σχέση με αναλυτικές μεθόδους όπως την λύση της εξίσωσης μεταφοράς του Boltzmann ή σε πολύπλοκα προβλήματα γεωμετρίας (ανιχνευτές, στόχοι κ.α.). Όπως φαίνεται στο Σχήμα 1, με τη μέθοδο Monte Carlo οδηγούμαστε και στην επιθυμητή λύση σε σημαντικά συντομότερο χρόνο σε σχέση με τις αναλυτικές μεθόδους επίλυσης των ρεαλιστικών προβλημάτων (Seco & Verhaegen, 2016).



Σχήμα 1. Μέθοδος Monte Carlo έναντι αναλυτικών μεθόδων (Seco & Verhaegen, 2016).

Η στοχαστική φύση, λοιπόν, των αλληλεπιδράσεων, μας επιτρέπει να προσομοιώσουμε την τροχιά της αρχικής ακτινοβολίας αλλά και των παραγόμενων σωματιδίων εντός του μέσου με κάποιο υπολογιστικό αλγόριθμο Monte Carlo. Όλοι οι αλγόριθμοι Monte Carlo που προσομοιώνουν τις αλληλεπιδράσεις της ακτινοβολίας χρειάζονται τα παρακάτω:

1. Τις ενεργές διατομές των πιθανών αλληλεπιδράσεων.
2. Μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών.
3. Ένα αλγόριθμο δειγματοληψίας, ο οποίος δέχεται ή απορρίπτει κατάλληλα τους τυχαίους αριθμούς που επιλέγονται.

Εφαρμόζοντας τα παραπάνω βήματα σχεδιάζουμε τη στοχαστική τροχιά της ακτινοβολίας με μέθοδο Monte Carlo. Αν όμως επαναλάβουμε τη διαδικασία είναι πολύ πιθανό να οδηγηθούμε σε

ένα διαφορετικό αποτέλεσμα, σχεδιάζοντας μια διαφορετική τροχιά λόγω της στοχαστικής φύσης των αλληλεπιδράσεων. Για το λόγο αυτό, είναι σύνηθες στις προσομοιώσεις να επαναλαμβάνουμε την προσομοίωση της τροχιάς χιλιάδες ή και εκατομμύρια φορές, μειώνοντας σημαντικά την αβεβαιότητα του αποτελέσματος της προσομοίωσης. Η αξιοπιστία της μεθόδου Monte Carlo συνδέεται άμεσα με την ακρίβεια των ενεργών διατομών, δηλαδή των θεωρητικών μοντέλων που υιοθετούνται από τους κώδικες Monte Carlo για την περιγραφή των πιθανών αλληλεπιδράσεων της ακτινοβολίας.

1.3 Κώδικες δομής τροχιάς (Track Structure)

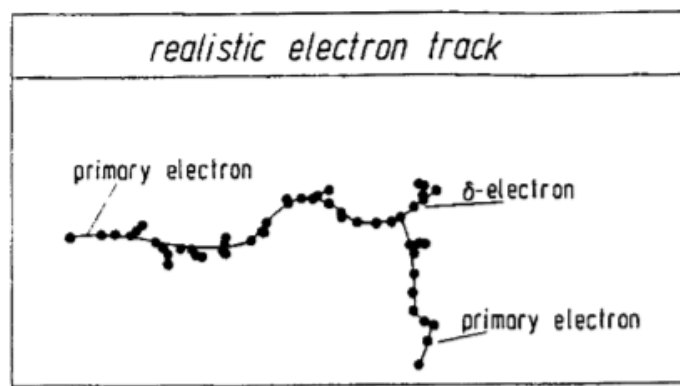
Οι κώδικες Monte Carlo διαχωρίζονται σε δύο βασικές κατηγορίες, τους κώδικες συμπυκνωμένων ιστοριών (Condensed History, CH) και τους κώδικες δομής τροχιάς (Track Structure, TS). Βασική διαφορά μεταξύ των κωδίκων δομής τροχιάς και συμπυκνωμένων ιστοριών είναι ο τρόπος που προσομοιώνουν τις αλληλεπιδράσεις της ιοντίζουσας ακτινοβολίας με τα ηλεκτρόνια του στόχου.

Οι κώδικες δομής τροχιάς ή αναλογικοί κώδικες, προσομοιώνουν όλες τις αλληλεπιδράσεις της ακτινοβολίας με τα δομικά άτομα ή μόρια της ύλης μία προς μία, σύμφωνα με τη θεωρία σκέδασης στην οποία βασίζονται τα μοντέλα τους (Incerti et al., 2010, 2018). Ως εκ τούτου, οι προσομοιώσεις με τους κώδικες δομής τροχιάς προσφέρουν αρκετά υψηλή χωρική διακριτική ικανότητα (τις τάξεως των nm) για ενέργειες ηλεκτρονίων στο σχετικιστικό όριο (~1 MeV) έως και στο ελάχιστο επίπεδο διέγερσης του μορίου του νερού (~7.4 eV). Έτσι, στοχαστικά φαινόμενα και μικροδοσιμετρικές ποσότητες που αφορούν το ερευνητικό πεδία της Ιατρικής Φυσικής και της ραδιοβιολογίας, υπολογίζονται κατά το καλύτερο δυνατό τρόπο. Το βασικότερο μειονέκτημα των προσομοιώσεων με κώδικες δομής τροχιάς είναι ότι αποτελούν αρκετά χρονοβόρα διαδικασία.

Η μεθοδολογία που ακολουθεί ένας τυπικός κώδικας δομής τροχιάς είναι η ακόλουθη (Nahum, 1999):

1. Προσδιορίζεται η θέση του σωματιδίου στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων του χώρου (x, y, z).

2. Προσδιορίζουμε το είδος της αλληλεπίδρασης και υπολογίζεται η ενεργός διατομή της πιθανής αλληλεπίδρασης, ανελαστικής (ιονισμοί και διεγέρσεις) ή ελαστικής σκέδασης για το άτομο στόχο για την εκάστοτε κινητική ενέργεια του σωματιδίου σύμφωνα με το μοντέλο Φυσικής που περιλαμβάνει ο κώδικας. Από τις ενεργές διατομές υπολογίζεται η μέση ελευθέρα διαδρομή, δηλαδή η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών αλληλεπιδράσεων.
3. Ανάλογα με το είδος της αλληλεπίδρασης σημειώνουμε σε αυτήν την ενέργεια που μεταφέρθηκε στο στόχο (ή την ενέργεια που έχασε το αρχικό σωματίδιο) προκειμένου να αναπαράγουμε και τυχόν δευτερογενή ηλεκτρόνια που μπορεί να δημιουργηθούν από τον ιονισμό των ατόμων ή μορίων του στόχου.
4. Επίσης για την εκτίμηση τυχόν γωνιακής εκτροπής της αρχικής ακτινοβολίας (ιδίως για την περίπτωση των ηλεκτρονίων όπου έχουν αρκετά μικρή μάζα) υπολογίζεται και η μεταφερόμενη ορμή σε κάθε αλληλεπίδραση.
5. Τα βήματα 1 - 4 επαναλαμβάνονται, μέχρι το σωματίδιο να έχει κινητική ενέργεια ίση με την ελάχιστη ενέργεια προσομοίωσης η οποία τίθεται ίση με την ελάχιστη ενέργεια ιονισμού ή διεγέρσης του υλικού που ακτινοβολούμε.



Σχήμα 2. Τροχιά ηλεκτρονίου με κώδικα δομής τροχιάς (Nahum, 1999).

Από τα παραπάνω διαπιστώνουμε αν κανείς είχε να επιλέξει τον ιδανικό τρόπο προσομοίωσης των αλληλεπιδράσεων της ακτινοβολίας, θα το έκανε με κάποιο κώδικα δομής τροχιάς. Εδώ και δεκαετίες έχουν αναπτυχθεί διάφοροι κώδικες Monte Carlo δομής τροχιάς και συγκεντρώνουμε τους δημοφιλέστερους στον Πίνακα 1. Η βασική διαφορά μεταξύ των κωδίκων δομής τροχιάς είναι ως προς την θεωρία Φυσικής στην οποία βασίζονται τα μοντέλα τους.

Πίνακας 1. Κώδικες δομής τροχιάς.

<i>Κώδικας</i>	<i>Σωματίδια</i>	<i>Μέσο</i>	<i>Ινστιτούτο</i>
Geant4-DNA	e^- , p, H, a, ιόντα	H ₂ O (I [*]), DNA, Au	CERN (Ελβετία)
KURBUC	e^- , p, a, C	H ₂ O (v ⁺ , I [*])	MRC και Kyushu Un. (Αγγλία και Ιαπωνία)
PARTRAC	e^- , e ⁺ , p, H, a, ιόντα	H ₂ O (I [*]), DNA	GSF (Γερμανία)
NOREC	e^-	H ₂ O (I [*])	NIST και Oak Ridge (ΗΠΑ)

*η υγρή φάση του νερού, +η αέρια φάση του νερού

1.4 Κώδικες συμπυκνωμένων ιστοριών (Condensed History)

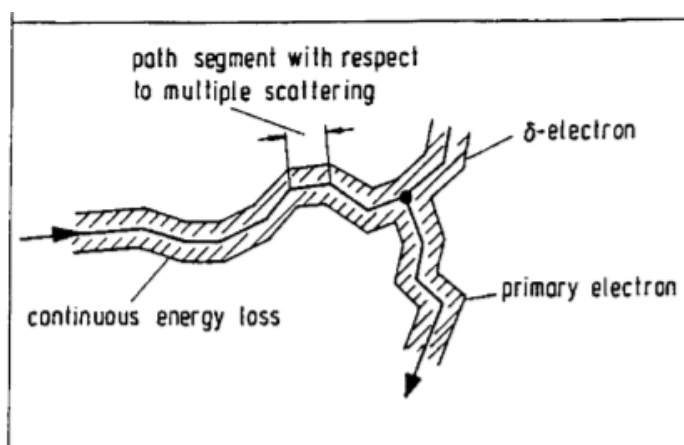
Οι κώδικες συμπυκνωμένων ιστοριών, βασίζονται σε θεωρίες πολλαπλών σκεδάσεων έχοντας ως μέγεθος αναφοράς την ανασχετική ισχύ της ακτινοβολίας (Stopping Power) και διαχωρίζουν την διαδικασία προσομοίωσης σε επιμέρους τμήματα (steps) της τροχιάς. Με αυτόν τον τρόπο, οι προσομοιώσεις είναι αρκετά σύντομες σε χρόνο και μπορούν να εφαρμοστούν σε πλήθος ατομικών στόχων οδηγώντας σε αρκετά αξιόπιστους υπολογισμούς. Όμως, στην περίπτωση όπου το μέγεθος του επιλεγμένου step είναι συγκρίσιμο ή μεγαλύτερο από τη μέση ελευθέρα διαδρομή της υπό μελέτη ακτινοβολίας τότε εγείρονται ερωτήματα σχετικά με την αξιοπιστία της προσομοίωσης μιας και οι σχετικές μελέτες οδηγούν σε υπερεκτίμηση των ποσοτήτων που υπολογίζουν (Lazarakis et al., 2018). Συνεπώς, μπορεί κανείς να πει ότι τα πλεονεκτήματα των κωδίκων συμπυκνωμένων αντισταθμίζονται από την κακή χωρική διακριτική ικανότητα που προσφέρουν για μελέτες που εκτείνονται και σε προσομοίωση στις χαμηλές ενέργειες.

Η βασική μεθοδολογία των κωδίκων συμπυκνωμένων ιστοριών είναι η εξής (Nahum, 1999):

1. Αρχικά, επιλέγεται κατάλληλα το μέγεθος του step που θα ακολουθήσει ο κώδικας κατά την προσομοίωση. Το μέγεθος του step θα πρέπει να είναι αυστηρά μεγαλύτερο από τη μέση ελευθέρα διατομή έτσι ώστε πάντα να εμπεριέχεται πολλαπλές αλληλεπιδράσεις στο εσωτερικό του και σαφώς μικρότερο από τις διαστάσεις του στόχου που μελετάμε.

2. Στο τέλος κάθε step, υπολογίζεται η ενέργεια που έχασε το σωματίδιο διανύοντας το συγκεκριμένο “μήκος” εξ’ ορισμού από το στην ισχύ ανασχέσεως (Stopping Power) η οποία εκφράζει το κλάσμα μεταφερομένης ενέργειας στο μέσο προς την απόσταση που διάνυσε σε αυτό. Εδώ χρησιμοποιείται κάποια θεωρία πολλαπλών σκεδάσεων.
3. Στα πλαίσια των ιδίων θεωριών, υπολογίζεται στο τέλος κάθε step και η αλλαγή κατεύθυνσης του σωματιδίου.

Μία συχνή θεωρία πολλαπλών σκεδάσεων όπου υιοθετούμε στους κώδικες συμπτκνωμένων ιστοριών είναι η CSDA (Continuously Slowing Down Approximation) στην οποία όπως υποδηλώνει η ονομασία, υποθέτουμε ότι η ακτινοβολία χάνει ενέργεια κατά τη διέλευσή της από ένα μέσο με συνεχή τρόπο. Οι πιο διαδεδομένοι κώδικες συμπτκνωμένων ιστοριών συγκεντρώνονται στον Πίνακα 2.



Σχήμα 3. Τροχιά ηλεκτρονίου με μέθοδο συμπτκνωμένων ιστοριών (Nahum, 1999).

Πίνακας 2. Κώδικες συμπυκνωμένων ιστοριών.

<i>Κώδικας</i>	<i>Σωματίδια</i>	<i>Μέσο</i>	<i>Ινστιτούτο</i>
MCNP	e^- , φωτόνια, n, ιόντα	Z=1-99	Los Alamos (ΗΠΑ)
ETRAN	e^- , φωτόνια	Z=1-99	NIST (ΗΠΑ)
PENELOPE	e^- , e^+	Z=1-99	Un. Barcelona (Ισπανία)
FLUKA	e^- , p, n, μεσόνια	Z=1-99	INFN (Ιταλία)

2. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

2. Μοντέλα ενεργών διατομών ιονισμού

2.1 Διηλεκτρικά μοντέλα

Τα διηλεκτρικά μοντέλα αποτελούν προτιμητέα προσέγγιση για στόχους συμπτυκνωμένης φάσης (υγρά και στερεά), κυρίως διότι φαινόμενα συμπτυκνωμένης φάσης περιγράφονται αυτομάτως. Συνοπτικά, τα διηλεκτρικά μοντέλα είναι ημι-εμπειρικά και βασίζονται σε πειραματικά δεδομένα της διηλεκτρικής συνάρτησης του υλικού σε υψηλές ενέργειες (optical limit, $q = 0$), εκφράζοντας στη συνέχεια τις ενεργές διατομές ανελαστικών σκεδάσεων στα πλαίσια της 1ης προσέγγισης Born με επίπεδα κύματα (Plane Wave Born Approximation, PWBA). Τα διηλεκτρικά μοντέλα που βασίζονται στην παραπάνω μεθοδολογία κατηγοριοποιούνται ως μοντέλα οπτικών δεδομένων (optical data models) και θεωρούνται ιδιαίτερος εκλεπτυσμένα, οδηγώντας σε αξιόπιστους υπολογισμούς των ενεργών διατομών ανελαστικής σκέδασης ηλεκτρονίων σε ενεργειακή περιοχή έως και κάτω από 1 keV. Όλα τα διαθέσιμα διηλεκτρικά μοντέλα στην βιβλιογραφία θεωρούν μια αναλυτική έκφραση για τη διηλεκτρική συνάρτηση σύμφωνα με το διορθωμένο μοντέλο Drude και διαφοροποιούνται ως προς την παραμετροποίηση των εμπλεκόμενων συναρτήσεων Drude. Η εφαρμογή τους εξαρτάται από τη διαθεσιμότητα των πειραματικών δεδομένων της διηλεκτρικής συνάρτησης για τα υλικά που μπορεί να ενδιαφέρουν την Ιατρική Φυσική. Μειονέκτημα των διηλεκτρικών μοντέλων αποτελεί η δυσκολία να ληφθούν υπόψη μεμονωμένες στιβάδες ιονισμού μιας και το ατομικό μοντέλο δεν συνάδει με το μοντέλο Drude το οποίο αποτελεί προσέγγιση των πραγματικών υλικών (μετάλλων) στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης. Ένας ακόμα παράγοντας που μπορεί να μας οδηγήσει σε αποφυγή χρήσης των διηλεκτρικών μοντέλων είναι ότι οι ενεργές διατομές υπολογίζονται μόνο αριθμητικά, ολοκληρώνοντας την διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης στον χώρο των ορμών. Τα δημοφιλέστερα διηλεκτρικά μοντέλα είναι το μοντέλο ORNL από τους Ritchie και συνεργάτες, το μοντέλο GSF από τους Dingfelder και συνεργάτες και το μοντέλο ECN από τους Emfietzoglou-Cucinotta-Nikjoo. Το μοντέλο ORNL έχει υιοθετηθεί από τον κώδικα NOREC (NIST – Oak Ridge Electron Code) ο οποίος αναπτύχθηκε στο ινστιτούτο Oak Ridge (ΗΠΑ) και συνέχεια συντηρήθηκε το NIST (National Institute of Standards and Technology) (ΗΠΑ). Το μοντέλο GSF

συναντάται στον κώδικα PARTRAC του ινστιτούτου GSF (Γερμανία) και το μοντέλο ECN είναι διαθέσιμο στον κώδικα KURBUC (Kyushu University and Radio-Biology Unit Code) ο οποίος δημιουργήθηκε στα πλαίσια συνεργασίας του Πανεπιστημίου Kyushu (Ιαπωνία) και της Επιτροπής Ιατρικών Ερευνών (Medical Research Council) της Οξφόρδης (Ηνωμένο Βασίλειο).

2.1.1 Διηλεκτρική συνάρτηση και Energy-Loss-Function (ELF)

Η διηλεκτρική συνάρτηση ενός υλικού αποτελεί βασικό μέγεθος για τον υπολογισμό των ενεργών διατομών ανελαστικής σκέδασης στη συμπτυκνωμένη φάση. Συγκεκριμένα, αποτελείται από πραγματικό και φανταστικό μέρος ως:

$$\varepsilon(E, q) = \varepsilon_1(E, q) + i\varepsilon_2(E, q) \quad (1)$$

Όπου :

- $\text{Re}[\varepsilon(E, q)] = \varepsilon_1(E, q)$, σχετίζεται με τα συλλογικά φαινόμενα (π.χ. φαινόμενα θωράκισης) των ηλεκτρονίων του στόχου.
- $\text{Im}[\varepsilon(E, q)] = \varepsilon_2(E, q)$, εκφράζει το φάσμα απορρόφησης του στόχου.
- $|\varepsilon(E, q)| \neq 1$, για συμπτυκνωμένη φάση.

Σημαντική ιδιότητα της διηλεκτρικής συνάρτησης για την εφαρμογή της στα διηλεκτρικά μοντέλα είναι ότι το πραγματικό και το φανταστικό μέρος, $\varepsilon_1(E, q)$ και $\varepsilon_2(E, q)$, δεν είναι ανεξάρτητα. Στην περίπτωση που γνωρίζουμε ένα εκ των δύο, μπορούμε να υπολογίσουμε το άγνωστο μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης μέσω των συναρτήσεων Kramers-Kronig:

$$\varepsilon_1(E, q) - 1 = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_2(E', q) \frac{dE'}{(E' - E)} \quad (2)$$

$$\varepsilon_2(E, q) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} (\varepsilon_1(E', q) - 1) \frac{dE'}{(E' - E)} \quad (3)$$

Συμβολίζοντας ως P , την κύρια τιμή του Cauchy για αόριστα ολοκληρώματα όπου οδηγούν σε απειρισμό όπως στην περίπτωση μας για τιμές μεταφερόμενης ενέργειας $E' = E$.

Από τη διηλεκτρική συνάρτηση του υλικού μπορεί κανείς να ορίσει την Energy-Loss-Function (ELF), ίσως το σημαντικότερο μέγεθος για τα διηλεκτρικά μοντέλα και εκφράζεται ως:

$$\text{ELF} = \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(E, q)} \right) = \frac{\varepsilon_2(E, q)}{|\varepsilon(E, q)|^2} = \frac{\varepsilon_2(E, q)}{\varepsilon_1^2(E, q) + \varepsilon_2^2(E, q)} \quad (4)$$

- E η ενέργεια που μεταφέρεται στο στόχο σε μια αλληλεπίδραση.
- Για ιονισμό, $E = W + B_n$.
- W η κινητική ενέργεια των δευτερογενών e^- .
- B_n η ενέργεια σύνδεσης για την n -στιβάδα.
- q η μεταφερόμενη ορμή στο στόχο σε μια αλληλεπίδραση.

Αν, έχουμε στη διάθεσή μας πειραματικά ή θεωρητικά δεδομένα της διπολικού δυναμικού ταλάντωσης (dipole oscillator strength), $\frac{df(E, q)}{dE}$, για το υλικό που μας ενδιαφέρει μπορούμε να υπολογίσουμε απευθείας την ELF σύμφωνα με την εξίσωση (5) (Nikjoo et al., 2012):

$$\text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(E, q)} \right) = \frac{\pi E_{\text{pl}}^2}{2} \frac{1}{E} \frac{df(E, q)}{dE} \quad (5)$$

2.1.2 Δυναμικό ταλαντωτή (Oscillator Strength)

Στην ατομική φυσική και γενικότερα στη φασματοσκοπία, μια ιδιαίτερα σημαντική ποσότητα είναι το γενικευμένο δυναμικό του ταλαντωτή (*generalized oscillator strength*), f_n , η οποία είναι αδιάστατη ποσότητα και εκφράζει την πιθανότητα απορρόφησης ή εκπομπής ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας κατά την μετάβαση από μία ενεργειακή στάθμη του ατόμου/μορίου σε μία άλλη. Έτσι λοιπόν το δυναμικό του ταλαντωτή δίνεται από την εξίσωση:

$$f_n = 2m_e \frac{(E_n - E_0)}{\hbar^2} \left| \langle n | \sum_{i=1,2,3} x_i | 0 \rangle \right|^2 \quad (6)$$

Με το bracket $\langle n | 0 \rangle$ να αποτελεί το στοιχείο πίνακα μεταξύ της κατάστασης n (τελικής) και της κατάστασης 0 (αρχικής) του ατομικού συστήματος. E_0 είναι η ιδιοτιμή της ενέργειας στη βασική κατάσταση 0 και E_n η ιδιοτιμή της ενέργειας στη διεγερμένη κατάσταση n . Ως x_i συμβολίζουμε την χωρική συνιστώσα της θέσης του ηλεκτρονίου η οποία αθροίζεται ως προς $i = 1, 2, 3$ για τις τρεις διαστάσεις και m_e είναι η μάζα του ηλεκτρονίου.

Ίσως αυτό είναι το κατάλληλο σημείο να αναφέρουμε ότι υπάρχουν δύο τρόποι που μπορεί κανείς να υπολογίσει το δυναμικό του ταλαντωτή, f_n . Ο πρώτος τρόπος είναι καθαρά θεωρητικά

μέσω αλγορίθμων (wave function codes) οι οποίοι υπολογίζουν τις κυματοσυναρτήσεις του συστήματος όπως περιγράφεται από τον ορισμό στην Εξ. (6). Το πρόβλημα με τους θεωρητικούς υπολογισμούς είναι η δυσκολία στο να καταλήξουμε τόσο σε αξιόπιστες κυματοσυναρτήσεις σε διαδικασίες σκέδασης αλλά και στην δυσκολία αναλυτικής επίλυσης της εξίσωσης του Schrödinger για πολύ-ηλεκτρονικά άτομα και μόρια. Η αποφυγή του προβλήματος αυτού επιτυγχάνεται μέσω πειραματικών ενεργών διατομών οι οποίες εξάγονται από πειράματα φωτο-απορρόφησης από τα οποία η ενεργός διατομή φωτο-απορρόφησης είναι ανάλογη του διαφορικού ή διπολικού δυναμικού του ταλαντωτή (dipole oscillator strength), $\frac{df(E,q=0)}{dE}$ (Nikjoo et al., 2012):

$$\sigma_{ph} = 4\pi a_0 Ry \frac{df(E, q = 0)}{dE} \quad (7)$$

Για να αντιληφθούμε την σπουδαιότητα των πειραμάτων αυτών αρκεί κανείς να σκεφτεί τις διεργασίες που υφίστανται κατά τη διέλευση της ιοντίζουσας ακτινοβολίας από το στόχο στον οποίο προσπίπτει η αρχική δέσμη. Οποιαδήποτε μορφή ιοντίζουσας ακτινοβολίας (φωτόνια, ηλεκτρόνια, πρωτόνια, σωματίδια α κτλ.) οδηγεί σε ιοντισμούς των ατόμων που δομούν το στόχο παράγοντας ένα μεγάλο αριθμό δευτερογενών ηλεκτρονίων στο εσωτερικό. Η μεταφερόμενη ενέργεια από τα δευτερογενή ηλεκτρόνια δεν είναι διακριτή, αλλά περιγράφεται από μια κατανομή και μπορεί κανείς να διατυπώσει ότι η μεταφερόμενη ενέργεια εκφράζεται από σχετική πιθανότητα. Η σχετική πιθανότητα για τις τιμές της μεταφερόμενης ενέργειας συνδέεται άμεσα με την πιθανότητα φωτο-απορρόφησης. Συνεπώς σε μια πειραματική διάταξη όπου προσπίπτει δέσμη στο υπό μελέτη στόχο και ανιχνεύοντας τις ενέργειες των εξαγόμενων (μεγάλης κινητικής ενέργειας) και ανακλώμενων σωματιδίων μπορούμε να εξάγουμε την ενεργό διατομή φωτο-απορρόφησης, η οποία οφείλεται στο φαινόμενο που περιγράψαμε εν συντομία.

2.1.3 Μοντέλο Drude και διηλεκτρική συνάρτηση του Geant4-DNA

Το μοντέλο του Drude αποτελεί μια απλή αναλυτική προσέγγιση της διηλεκτρικής συνάρτησης στόχων συμπεκνωμένης φάσης και κυρίως μετάλλων. Η βασική υπόθεση στο μοντέλο του Drude είναι ότι τα ηλεκτρόνια του υλικού είναι ελεύθερα και δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους αλλά οι πυρήνες των ατόμων είναι ακίνητοι σε συγκεκριμένες θέσεις, συνεπώς η συνήθης εικόνα του ατόμου καταρρίπτεται στην προκειμένη περίπτωση. Κατά τη διέλευση ενός φορτισμένου σωματιδίου από το μέσο, το σύστημα μας υφίσταται διαταραχή η οποία οδηγεί στην

πόλωση του υλικού και στην εμφάνιση διπόλων ακόμα και στην περίπτωση των μονωτών όπως είναι το υγρό νερό. Η πόλωση θα είναι τέτοια ώστε να γίνει απόπειρα «εξάλειψης» της διαταραχής που δέχεται το σύστημα λόγω αλληλεπίδρασης Coulomb (screening effect). Στην πραγματικότητα θα παρατηρήσει κανείς μια μετακίνηση φορτίων καθώς μεταφέρεται ενέργεια στα ηλεκτρόνια των ατόμων που το απαρτίζουν και κατά την απόπειρά τους να θωρακίσουν το διερχόμενο σωματίδιο διεγείρονται σε ενέργεια υψηλότερη από τη θέση ισορροπίας τους με αποτέλεσμα να εντοπίζουμε συλλογικές διεγέρσεις. Στο μοντέλο του Drude η επιπλέον ενέργεια τα εξαναγκάζει να διεγερθούν από τη ζώνη σθένους και να εκτελέσουν ταλαντωτική κίνηση με συχνότητα ίση με $\omega_{pl} = \sqrt{4\pi e^2 N_e / m}$. Όπου E_{pl} αποτελεί το ενεργειακό κβάντο της ταλάντωσης $E_{pl} = \hbar \omega_{pl}$, γνωστή και ως ενέργεια διέγερσης πλασμονίου που εξαρτάται μόνο από την πυκνότητα των ηλεκτρονίων του υλικού. Για το μόριο του νερού στην υγρή φάση μπορούμε να υπολογίσουμε την ενέργεια πλασμονίου μέσω της σχέσης $E_{pl} = Ry \sqrt{12/r_s^3} \xrightarrow{r_s=1.69} E_{pl,H_2O} = 21.4 \text{ eV}$ (Nikjoo et al., 2012). Στη συνέχεια, η ταλαντωτική κίνηση των ηλεκτρονίων του υλικού αποσβένεται από μια δύναμη η οποία αντιτίθεται στην κίνηση τους (όπως ακριβώς η τριβή στην κλασική μηχανική) και περιγράφεται από μια σταθερά απόσβεσης γ . Στα διηλεκτρικά μοντέλα που χρησιμοποιείται η διηλεκτρική συνάρτηση σύμφωνα με το μοντέλο του Drude θεωρούμε ότι κάθε ενέργεια σύνδεσης του υλικού ισοδυναμεί με μία αντίστοιχη ενέργεια πλασμονίου.

Όλα τα διηλεκτρικά μοντέλα που αναφέραμε στην εισαγωγή εκφράζουν την διηλεκτρική συνάρτηση ως γραμμική υπέρθεση των συναρτήσεων Drude (Sajo & Zygmanski, 2020). Δηλαδή:

$$\varepsilon(E, q) = 1 + \sum_{n=1}^5 f_n(q) \frac{E_{pl}^2}{E_n^2 - E^2 - iE\gamma_n(q)} \quad (8)$$

Όπου:

- $E_{pl} = 4Ry(\pi N Z a_0^3)^{1/2}$ η ενέργεια πλασμονίου του υλικού.
- f_n το γενικευμένο δυναμικό του ταλαντωτή (generalized oscillator strength) για μετάβαση στη στιβάδα n .
- E_n η ενέργεια μετάβασης στη στιβάδα n .
- γ_n η σταθερά απόσβεσης της μετάβασης στην στιβάδα n .

Στην περίπτωση των διηλεκτρικών μοντέλων του Geant4-DNA, η διηλεκτρική συνάρτηση υπολογίζεται βάσει των πειραματικών δεδομένων του Oak Ridge για το νερό στην υγρή φάση

(Heller et al., 1974) στο οπτικό όριο δηλαδή για υψηλές τιμές της κινητικής ενέργειας του αρχικού σωματιδίου όπου μπορούμε να υποθέσουμε ότι η πορεία του εντός του υλικού δεν παρεκκλίνει γωνιακά ($q = 0$). Συγκεκριμένα γίνεται fit του πραγματικού και του φανταστικού μέρους της διηλεκτρικής συνάρτησης $\varepsilon_1(E, 0)_{fit} \approx \varepsilon_1(E, 0)_{exp}$ και $\varepsilon_2(E, 0)_{fit} \approx \varepsilon_2(E, 0)_{exp}$ όπου οι $\varepsilon_1(E, 0)_{fit}$ και $\varepsilon_2(E, 0)_{fit}$ εκφράζονται αναλυτικά μέσω ενός γραμμικού συνδυασμού συναρτήσεων Drude μη-μηδενικής απόσβεσης σύμφωνα με των ακόλουθων εξισώσεων βασιζόμενες στην Εξ. (8) του διορθωμένου μοντέλου Drude για τη διηλεκτρική συνάρτηση:

$$\varepsilon_1(E, q = 0) = 1 + E_{pl}^2 \sum_{n=1}^5 f_n(q = 0) \frac{(E_n^2 - E^2)}{(E_n^2 - E^2)^2 + (E\gamma_n(q = 0))^2} \quad (9)$$

$$\varepsilon_2(E, q = 0) = E_{pl}^2 \sum_{n=1}^5 f_n(q = 0) \frac{E\gamma_n(q = 0)}{(E_n^2 - E^2)^2 + (E\gamma_n(q = 0))^2} \quad (10)$$

Για μη-μηδενικές τιμές της μεταφερόμενης ορμής ($q \neq 0$), και όσον αφορά τους ιονισμούς, οι συναρτήσεις Drude τροποποιούνται σύμφωνα με την προσέγγιση impulse approximation. Έτσι η μεταφερόμενη ενέργεια στα ηλεκτρόνια του στόχου επεκτείνεται ως :

$$E(q) = E(q = 0) + \frac{q^2}{2m} \approx B_n + \frac{q^2}{2m} \quad (11)$$

Παρ' όλο που η προσέγγιση impulse είναι ιδιαίτερα απλή, επιλέγεται διότι έχει την σωστή ασυμπτωτική συμπεριφορά στα όρια $q \rightarrow 0$ και $q \rightarrow \infty$.

2.1.4 Ενεργές διατομές του διηλεκτρικού μοντέλου στον κώδικα Geant4-DNA

Στον κώδικα Geant4-DNA, διατίθενται δύο διηλεκτρικά μοντέλα Option2 (default) το οποίο αναπτύχθηκε από τους Δ. Εμφιετζόγλου και συνεργάτες και το Option 4 (Ioannina) από τους Ι. Κυριακού και συνεργάτες. Και τα δύο διηλεκτρικά μοντέλα του Geant4-DNA αναπτύχθηκαν σε συνεργασία του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων και του ερευνητικού κέντρου CNRS της Γαλλίας. Και στις δύο περιπτώσεις, πρόκειται για ένα διηλεκτρικό μοντέλο το οποίο βασίζεται στο διορθωμένο μοντέλο του Drude συνδυάζοντας στοιχεία από όλα τα διαθέσιμα διηλεκτρικά μοντέλα (ORNL, GSF και ECN) αλλά έχοντας ως κύριο κορμό το μοντέλο των (Emfietzoglou et al., 2005). Ο υπολογισμός των ενεργών διατομών για ανελαστική διεργασία (ιονισμός και

διέγερση) γίνεται σύμφωνα με την $1^{\text{η}}$ προσέγγιση Born με επίπεδα κύματα (PWBA), στην οποία η διπλά διαφορική ενεργός διατομή (ως προς την εναποτιθέμενη ενέργεια και τη μεταφερόμενη ορμή στο στόχο) για μη-σχετικιστικά ηλεκτρόνια υπολογίζεται σύμφωνα με την ακόλουθη εξίσωση:

$$\frac{d^2\sigma_{\text{PWBA}}}{dE dq} = \frac{1}{NZ} \frac{1}{\pi\alpha_0 T} \frac{1}{q} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(E, q)} \right] \quad (12)$$

Όπως βλέπουμε η διαφορική ενεργός διατομή για ανελαστική αλληλεπίδραση είναι ανάλογη της ELF, το βασική ποσότητα υπολογισμού στο οπτικό όριο. Ολοκληρώνοντας στον χώρο των ορμών μπορούμε να εκφράσουμε την διαφορική ενεργό διατομή ιονισμού ως προς τη μεταφερόμενη ενέργεια μέσω μιας ανελαστικής αλληλεπίδρασης.

$$\frac{d\sigma_{\text{PWBA}}}{dE} = \frac{1}{NZ} \frac{1}{\pi\alpha_0 T} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{1}{q} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(E, q)} \right] dq \quad (13)$$

Με τα όρια ολοκλήρωσης να είναι, $q_{\min} = \sqrt{\frac{T}{Ry}} - \sqrt{\frac{T-E}{Ry}}$ και $q_{\max} = \sqrt{\frac{T}{Ry}} + \sqrt{\frac{T-E}{Ry}}$.

Σημαντικό μειονέκτημα όλων των διηλεκτρικών μοντέλων είναι ότι δεν έχουμε στη διάθεσή μας μία αναλυτική έκφραση για την ολική ενεργό διατομή σκέδασης, μολονότι η ELF εκφράζεται αναλυτικά όπως αναφέραμε παραπάνω. Ο μόνος τρόπος υπολογισμού της ολικής ενεργού διατομής είναι μέσω αριθμητικής ολοκλήρωσης της διαφορικής ενεργού διατομής της Εξ. (13) καθυστερώντας σημαντικά τις προσομοιώσεις μας. Η ολική ενεργός διατομή για κάθε στιβάδα ιονισμού υπολογίζεται μέσω της Εξ. (14):

$$\sigma_{\text{PWBA}} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{d\sigma_{\text{PWBA}}}{dE} \quad (14)$$

Με $E_{\min} = B$ ίση με την ενέργεια σύνδεσης της εκάστοτε στιβάδας που μελετάμε και $E_{\max} = \frac{T+B}{2}$. Επειδή το αρχικό και το εξαγόμενο σωματίδιο είναι ηλεκτρόνια, μπορεί υπό ορισμένες προϋποθέσεις να έχουν συγκρίσιμες ενέργειες ακριβώς πριν και μετά τον ιονισμό με αποτέλεσμα να μην ξεχωρίζει ο κώδικας πιο είναι το αρχικό και πιο το δευτερογενές ηλεκτρόνιο που εγκατέλειψε το άτομο. Με την κατάλληλη επιλογή του άνω ορίου ολοκλήρωσης στην ενεργό διατομή μπορούμε να αποφύγουμε φαινόμενα δυσκολίας διάκρισης μεταξύ του αρχικού και του δευτερογενούς σωματιδίου (indistinguishability effect).

2.1.5 Διορθώσεις της 1^{ης} προσέγγισης Born στις χαμηλές ενέργειες

Η 1^η προσέγγιση Born με επίπεδα κύματα (Plane Wave Born Approximation, PWBA) αποτελεί μια προσέγγιση υψηλών ενεργειών, δηλαδή σε περιπτώσεις όπου η κινητική ενέργεια του σωματιδίου βλήματος είναι πολύ μεγαλύτερη από την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων του στόχου. Το όριο περίπου που η 1^η προσέγγιση Born επιστρέφει αρκετά αξιόπιστα αποτελέσματα με την προϋπόθεση ότι έχουμε υπολογίσει καλά τις κυματοσυναρτήσεις όπου εμπλέκονται, είναι περίπου δέκα φορές από την ενέργεια σύνδεσης του ηλεκτρονίου-στόχου ($T \geq 10B$) (Y.-K. Kim, 2002). Σε αυτή την περίπτωση δεν χρειάζεται να εξετάσουμε το πρόσημο του σπιν (\uparrow ή \downarrow) μιας και δεν υφίστανται φαινόμενα ανταλλαγής (exchange effects) σε αυτή την περιοχή ενεργειών. Όταν όμως το ηλεκτρόνιο βλήμα προσεγγίζει την κινητική ενέργεια του στόχου ($T \sim 500$ eV), και με την προϋπόθεση ότι έχουν ομόρροπα σπιν όπως έχει περιγραφεί από τον Pauli, θα μπορούσαν τα δύο ηλεκτρόνια να αλλάξουν θέσεις. Συνεπώς μπορεί κανείς να διατυπώσει ότι η 1^η προσέγγιση Born περιγράφει στην καλύτερη περίπτωση, αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων με αντίρροπα σπιν ($\uparrow\downarrow$ ή $\downarrow\uparrow$) οδηγώντας σε υπερεκτίμηση της ενεργού διατομής (Inokuti, 1991). Επιπλέον, λόγω αλληλεπίδρασης Coulomb η δύναμη που ασκείται μεταξύ ηλεκτρονίων είναι απωστική. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να δημιουργείται μια «απαγορευμένη» περιοχή γύρω από το ηλεκτρόνιο στόχο που το ηλεκτρόνιο βλήμα δεν μπορεί να προσεγγίσει. Το φαινόμενο αυτό είχε αντιμετωπιστεί από τα μοντέλα των Mott ή Moller ως διόρθωση στην αρχική ενεργό διατομή του Rutherford. Δουλεύοντας κανείς στο ίδιο σκεπτικό μπορεί να προβεί σε σχετικές διορθώσεις, ώστε να συμπεριληφθούν στην 1^η προσέγγιση Born και φαινόμενα ανταλλαγής και συσχέτισης (exchange and correlation effects). Η πρώτη δουλειά που έχει να κάνει κανείς είναι να προβεί σε διορθώσεις δεύτερης τάξης μιας και δεν υπάρχουν διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα για ενέργειες μερικών εκατοντάδων eV. Πρώτο βήμα είναι να προβούμε στην διόρθωση του (Vriens, 1966, 1969) αντικαθιστώντας τον όρο T στην ενεργό διατομή με $T + U + B$, η οποία αποτελεί μια απλή διόρθωση του πεδίου Coulomb μεταξύ των δύο ηλεκτρονίων. Έτσι η διορθωμένη ενεργός διατομή για την περίπτωση αντίρροπων σπιν γράφεται:

$$\frac{d\sigma_{\text{eTe},n}^{\text{HO}}(E, T)}{dE} = \frac{d\sigma_{\text{eTe},n}(E, T + B_n + U_n)}{dE} = \frac{1}{\pi\alpha_0(T + B_n + U_n)} \int \frac{1}{q} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(E, q)} \right] dq \quad (15)$$

Και σε αναλογία με την ενεργό διατομή του Mott, η διόρθωση για το φαινόμενο ανταλλαγής μεταξύ ηλεκτρονίων με ομόρροπα σπιν αναπτύσσεται ως:

$$\frac{d\sigma_{\text{efel},n}^{\text{EX}}(E, T)}{dE} = \frac{d\sigma_{\text{efel},n}^{\text{HO}}(T - E + B_n, T)}{dE} - \left[\frac{d\sigma_{\text{efel},n}^{\text{HO}}(E, T)}{dE} \times \frac{d\sigma_{\text{efel},n}^{\text{HO}}(T - E + B_n, T)}{dE} \right]^{1/2} \quad (16)$$

Στην παραπάνω εξίσωση ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους αποτελεί τη διόρθωση για το φαινόμενο ανταλλαγής, ενώ ο δεύτερος όρος αποτελεί τον όρο συσχέτισης των δύο φαινομένων εις την $\frac{1}{2}$ για να διατηρούνται οι μονάδες της εξίσωσής μας. Συνολικά, η διορθωμένη ενεργός διατομή στην PWBA για τα φαινόμενα ανταλλαγής και συσχέτισης (exchange and correlation effects) αναγράφεται ως:

$$\frac{d\sigma_{\text{ioniz},n}^{\text{EX-HO}}(E, T)}{dE} = \frac{d\sigma_{\text{efel},n}^{\text{HO}}(E, T)}{dE} + \frac{d\sigma_{\text{efel},n}^{\text{EX}}(E, T)}{dE} \quad (17)$$

Οι διορθώσεις αυτές έχουν εφαρμοστεί στα διηλεκτρικά μοντέλα του Geant4-DNA, Option2 και Option4 για την βελτίωση της αξιοπιστίας τους στις περιπτώσεις όπου η κινητική ενέργεια του σωματιδίου γίνεται συγκρίσιμη με την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων του στόχου (Emfietzoglou et al., 2013, 2017).

2.2 Αναλυτικά μοντέλα

Οι πρώτοι κώδικες δομής τροχιάς βασίζονταν σε δεδομένα για το νερό στην αέρια φάση λόγω της διαθεσιμότητας πειραματικών δεδομένων όπου μέσω fit γινόταν scaling στην πυκνότητα του υγρού νερού $\left(1 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}\right)$ (Sajo & Zygmanski, 2020). Ένα σημαντικό πρόβλημα που αντιμετωπίζει κανείς μέσω αυτής της προσέγγισης είναι το γεγονός ότι τα πειραματικά δεδομένα καλύπτουν σχεδόν πάντα μικρό εύρος των εμπλεκόμενων παραμέτρων (όπως η κινητική ενέργεια του σωματιδίου). Το παραπάνω, αποτέλεσε έναυσμα για την ανάπτυξη αναλυτικών εκφράσεων για τις ενεργές διατομές οι οποίες πηγάζουν από τη θεωρία. Χαρακτηριστικό των αναλυτικών μοντέλων που βασίζονται στην θεωρία Binary Encounter είναι η υπόθεση ότι τα ηλεκτρόνια του ατόμου-στόχου, κινούνται σε τροχιά γύρω από τον πυρήνα με μέση κινητική ενέργεια η οποία είναι κβαντισμένη ανάλογα με την ενεργειακή κατάσταση στην οποία βρίσκονται. Ακόμα για την εφαρμογή τους χρειαζόμαστε πολύ βασικές ποσότητες του υλικού, όπως η ενέργεια σύνδεσης, η μέση κινητική ενέργεια και αριθμός κατάληψης κάθε στιβάδας. Οι τιμές για τις ποσότητες αυτές είναι διαθέσιμες στη βιβλιογραφία για πλήθος ατόμων και μορίων. Επιπλέον, τα αναλυτικά

μοντέλα περιγράφουν τις ισχυρές (κοντινές) και ασθενείς (μακρινές) αλληλεπιδράσεις σε διακριτούς όρους διευκολύνοντας την προσομοίωση των δευτερογενών ηλεκτρονίων:

$$\left(\frac{d\sigma_{\text{ioniz}}}{dW}\right)_{\text{total}} = \left(\frac{d\sigma_{\text{ioniz}}}{dW}\right)_{\text{hard}} + \left(\frac{d\sigma_{\text{ioniz}}}{dW}\right)_{\text{soft}} \quad (18)$$

Σημαντικό σχόλιο ότι η διάκριση μεταξύ ασθενών και ισχυρών αλληλεπιδράσεων γίνεται βάσει της μεταφερόμενης ορμής στο στόχο. Για την περίπτωση των ιονισμών, τα δημοφιλέστερα αναλυτικά μοντέλα ενεργών διατομών που έχουν αναπτυχθεί είναι τα μοντέλα των Deutsch-Mark, Weizsacker-Williams, Kim-Rudd και Miller-Wilson-Manson. Στο μοντέλο των Deutsch-Mark η διαφορική ενεργός διατομή βασίζεται στην εξίσωση του Gryzinski για σκέδαση σε άτομα με βασικό μειονέκτημα ότι η ολική ενεργός διατομή μπορεί να υπολογιστεί μόνο αριθμητικά, ολοκληρώνοντας την διαφορική εξίσωση. Εν αντιθέσει, τα λοιπά αναλυτικά μοντέλα προσφέρουν τη δυνατότητα να έχουμε αναλυτική έκφραση για την διαφορική και για την ολική ενεργό διατομή ιονισμού. Τα μοντέλα αυτά έχουν υιοθετηθεί από κώδικες δομής τροχιάς στο παρελθόν κυρίως για το νερό στην αέρια φάση, εκμεταλλευόμενοι το πλεονεκτήματος μειωμένου χρόνου υπολογισμού που οφείλεται στην αναλυτική φύση των μοντέλων αυτών. Το μοντέλο Weizsacker-Williams έχει υιοθετηθεί από τους κώδικες KURBUC_{vap} ο οποίος δημιουργήθηκε στα πλαίσια συνεργασίας του Πανεπιστημίου Kyushu (Ιαπωνία) και της Επιτροπής Ιατρικών Ερευνών της Οξφόρδης (Ηνωμένο Βασίλειο), και από τον κώδικα RETRACKS ανεπτυγμένος στη NASA (ΗΠΑ). Το αναλυτικό μοντέλο Miller-Wilson-Manson έχει χρησιμοποιηθεί στον κώδικα MOCA, τον πατρικό κώδικα Monte Carlo του PARTRAC για την περίπτωση του νερού στην αέρια φάση, ανεπτυγμένο στο ερευνητικό κέντρο GSF (German Research Center for Environment and Health) (Γερμανία). Τα μοντέλα των Kim-Rudd που θα μας απασχολήσουν, βρίσκονται στους κώδικες TRAX ανεπτυγμένο στο ινστιτούτο GSI (Γερμανία) και στον κώδικα Geant4-DNA (Option6) την επέκταση του κώδικα υψηλών ενεργειών Geant4, στα πλαίσια συνεργασίας του ινστιτούτου CNRS (National Center for Scientific Research) (Γαλλία) και του Πανεπιστημίου Paul Sebastier της Toulouse (Γαλλία).

2.2.1 Αναλυτικά μοντέλα Kim - Rudd

Τα αναλυτικά μοντέλα των Kim και Rudd βασίζονται στη θεωρία σκέδασης binary-encounter (Y.-K. Kim & Rudd, 1994). Η θεωρία binary-encounter χρησιμοποιείται για την

περιγραφή ιονισμών, διεγέρσεων και μεταφοράς φορτίου σε σκεδάσεις ηλεκτρονίου-ατόμου και ιόντος-ατόμου. Τα ιόντα που περιγράφονται στα πλαίσια αυτής της θεωρίας είναι πρωτόνια, σωματίδια-α και άλλοι πυρήνες. Οι βασικές υποθέσεις που εμπλέκονται στη θεωρία binary-encounter είναι (Vriens, 1969):

- i. Το αρχικό σωματίδιο αλληλεπιδρά με μόνο ένα σωματίδιο του στόχου (ηλεκτρόνιο ή πυρήνα) κάθε φορά.
- ii. Η αμοιβαία αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίου του ατόμου και του πυρήνα μπορεί να αγνοηθεί κατά την σκέδαση.

Θεωρούμε λοιπόν ότι τα ηλεκτρόνια του ατόμου και ο πυρήνας αποτελούν ανεξάρτητα κέντρα σκέδασης. Φυσικά για να ισχύει κάτι τέτοιο θα πρέπει η αλληλεπίδραση του σωματιδίου με το άτομο να γίνεται σε μια πολύ μικρή περιοχή, σαφώς μικρότερη από το μέγεθος του ατόμου. Στην περίπτωση αυτή η μεταφερόμενη ορμή σε ένα από τα σωματίδια του ατόμου θα πρέπει να είναι αρκετά μεγαλύτερη από την ορμή που ήδη έχει λόγω περιστροφικής κίνησης και κατά συνέπεια η μεταφερόμενη ενέργεια στο τροχιακό ηλεκτρόνιο να είναι σαφώς μεγαλύτερη από την ενέργεια σύνδεσης (Vriens, 1969).

Για την περίπτωση όπου θέλουμε να υπολογίσουμε τις ενεργές διατομές σκέδασης με την θεωρία binary-encounter, μπορούμε να προσεγγίσουμε το πρόβλημα μας είτε με κλασική φυσική είτε με κβαντική φυσική. Λόγω της φύσης της αλληλεπίδρασης Coulomb, και ιδιαίτερα στην περίπτωση ομοειδών σωματιδίων (e-e), η κλασική θεώρηση και η κβαντική θεώρηση του προβλήματος οδηγεί σε όμοιες εκφράσεις με τη μόνη διαφορά να οφείλεται στον διαταρακτικό όρο εξάρτησης των φαινομένων ανταλλαγής (exchange) και συσχέτισης (correlation). Συγκεκριμένα στα μοντέλα των Kim και Rudd, επιλέγεται η κβαντική θεώρηση του προβλήματος για την περίπτωση των σκληρών αλληλεπιδράσεων όπου η μεταφερόμενη ενέργεια μέσω της σκέδασης είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια σύνδεσης του ηλεκτρονίου του στόχου.

Ίσως το σημαντικότερο πλεονέκτημα της θεωρίας binary-encounter είναι ότι μας προσφέρει ένα απλό και άμεσο τρόπο εκτίμησης της ενεργού διατομής για την αλληλεπίδραση του ιονισμού.

2.2.2 Μοντέλο BED (Binary Encounter Dipole)

Το μοντέλο BED στη μη σχετικιστική του μορφή προτάθηκε από τους Kim και Rudd ως ένα θεωρητικό μοντέλο που μπορούσε να περιγράψει επιτυχώς την αλληλεπίδραση του ιονισμού συνδυάζοντας την ενεργό διατομή του Mott και τον οπτικό όρο του Bethe (Y.-K. Kim & Rudd, 1994; Y.-K. Kim, 2000). Ο οπτικός όρος του Bethe σχετίζεται με το ασυμπτωτικό μέρος της ενεργού διατομής του Bethe στα πλαίσια της 1^{ης} προσέγγισης Born χρησιμοποιώντας επίπεδα κύματα (plane waves) (Y.-K. Kim & Rudd, 1994). Ο όρος του Bethe περιγράφει τις ασθενείς ή μακρινές αλληλεπιδράσεις μεταξύ του αρχικού σωματιδίου και των τροχιακών ηλεκτρονίων των ατόμου-στόχου και η ενεργός διατομή του Mott τις ισχυρές ή κοντινές αλληλεπιδράσεις. Τα δεδομένα που χρειαζόμαστε για να κάνουμε υπολογισμούς με το μοντέλο BED, είναι η ενέργεια σύνδεσης (B), η μέση κινητική ενέργεια (U) και ο αριθμός κατάληψης (N) των ηλεκτρονίων κάθε στιβάδας και το διπολικό δυναμικό του ταλαντωτή (dipole-oscillator strength, $\frac{df(w,q)}{dw}$) η οποία μπορεί να υπολογιστεί από πειραματικά δεδομένα. Η μέση κινητική ενέργεια των τροχιακών ηλεκτρονίων αποτελεί μια θεωρητική ποσότητα και μπορεί να υπολογιστεί σύμφωνα με τους κανόνες του Slater (Wälzlein et al., 2014). Οι τιμές της ενέργειας σύνδεσης και της μέσης κινητικής ενέργειας για κάθε στιβάδα αναπαρίστανται συγκεντρωτικά στον Πίνακα. 3 και είναι οι ίδιες ακριβώς με αυτές που τέθηκαν στο Option 6 (Bordage et al., 2016) και βασίζονται στις δημοσιεύσεις των (Hwang et al., 1996) και (Dingfelder et al., 1998). Ακολούθως, η ισχύς διπολικού ταλαντωτή συνδέεται με την Energy Loss Function (ELF) σύμφωνα με την Εξ. (5) που αναλύσαμε στην ενότητα.

Ο υπολογισμός της ELF έγινε χρησιμοποιώντας το ίδιο μοντέλο με αυτό που χρησιμοποιείται στο Option4 (Kyriakou et al., 2015). Τότε, η διαφορική ενεργός διατομή ως προς την κινητική ενέργεια των δευτερογενών ηλεκτρονίων ανά στιβάδα ιονισμού του μορίου δίνεται από την Εξ. (19):

$$\frac{d\sigma}{dW_{BED}} = \frac{S}{B t} \left\{ \frac{N_i}{N} - 2 \left(\frac{1}{t+1} + \frac{1}{t-w} \right) + \left[2 - \frac{N_i}{N} \right] \left[\frac{1}{(w+1)^2} + \frac{1}{(t-w)^2} \right] + \frac{\ln(t)}{N(w+1)} \frac{df(w,q)}{dw} \right\} \quad (19)$$

Όπου, W η κινητική ενέργεια των δευτερογενών ηλεκτρονίων, B η ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων που βρίσκονται στην εκάστοτε στιβάδα, T η κινητική ενέργεια του αρχικού σωματιδίου, $U = \frac{\overline{p^2}}{2m}$ η μέση κινητική ενέργεια των τροχιακών ηλεκτρονίων του στόχου και N ο αριθμός κατάληψης κάθε στιβάδας, ο οποίος τέθηκε στην τιμή $N = 2$ για την περίπτωση του νερού στην υγρή φάση (Bordage et al., 2016). Τα «πεζά» σύμβολα στις εξισώσεις αποτελούν τις ελαχιστοποιημένες ποσότητες που προκύπτουν από κανονικοποίηση ως προς τις ενέργειες σύνδεσης. Ειδικότερα, $t = \frac{T}{B}$, $w = \frac{W}{B}$, και $u = \frac{U}{B}$. Ακόμα η συνάρτηση S , μπορεί να υπολογιστεί από την εξίσωση $S = 4\pi\alpha_0^2 N \left(\frac{Ry}{B}\right)^2$, όπου α_0 είναι η ακτίνα Bohr με τιμή 0.0529 nm και Ry είναι η σταθερά Rydberg ίση με 13.6 eV. Οι τιμές των N_i υπολογίζονται από την Εξ. (20) και όπως βλέπουμε είναι απαραίτητη η γνώση του dipole-oscillator strength:

$$N_i \equiv \int_0^\infty \frac{df(w)}{dw} dw \quad (20)$$

Η ενεργός διατομή για τον ιονισμό υπολογίζεται σύμφωνα με την αναλυτική έκφραση της Εξ. (21) για κάθε μία από της στιβάδες ιονισμού του μορίου-στόχου:

$$\sigma_{BED} = \frac{S}{t} \left[D(t) \ln(t) + \left(2 - \frac{N_i}{N} \right) \left(\frac{t-1}{t} - \frac{\ln(t)}{t+1} \right) \right] \quad (21)$$

Στην Εξ. (23), η συνάρτηση $D(t)$ συνδέεται με την ισχύ διπολικού ταλαντωτή μέση της εξίσωσης (22):

$$D(t) = N^{-1} \int_0^{(t-1)/2} \frac{1}{w+1} \frac{df(w)}{dw} dw \quad (22)$$

Ένας επιπλέον τρόπος υπολογισμού της ολικής ενεργού διατομής είναι αριθμητικά, μέσω ολοκλήρωσης της διαφορικής ενεργού διατομής σε όλο το φάσμα της κινητικής ενέργειας των δευτερογενών ηλεκτρονίων $W \in \left[0, \frac{T-B}{2} \right]$. Για τον υπολογισμό της ολικής ενεργού διατομής αρκεί απλά να προσθέσουμε το αποτέλεσμα της ολοκλήρωσης για όλες τις στιβάδες.

Ένα σημαντικό σχόλιο είναι πως το βασικότερο μέγεθος που περιορίζει την εφαρμογή του μοντέλου BED είναι η ισχύς διπολικού ταλαντωτή $\left(\frac{df(w)}{dw} \right)$.

Πίνακας 3. Δεδομένα για την εφαρμογή στο μόριο του νερού στην υγρή φάση.

Ionization shells	Binding energy (eV)	Mean kinetic energy (eV)	Occupation number
1b ₁	10.79	61.91	2
3a ₁	13.39	59.52	2
1b ₂	16.05	48.36	2
2a ₁	32.30	70.71	2
Oxygen K-shell	539.00	796.20	2

2.2.3 Μοντέλο BEB (Binary Encounter Bethe)

Όταν η ισχύς διπολικού ταλαντωτή (dipole-oscillator strength) είναι άγνωστη για το υπό μελέτη υλικό, χρειαζόμαστε μια απλούστερη μορφή για την ενεργό διατομή. Αυτή ακριβώς είναι η περίπτωση του μοντέλου Binary-Encounter-Bethe (BEB), όπου η ενεργός διατομή του Mott συνδυάζεται με έναν επιπλέον αναλυτικό όρο ο οποίος ανταποκρίνεται στην πλάτυνση της κατανομής ενεργειακής απώλειας του σωματιδίου λόγω της ενδογενούς ορμής που έχουν τα ηλεκτρόνια του στόχου λόγω της περιστροφικής τους κίνησης (Y.-K. Kim & Rudd, 1994; Y.-K. Kim, 2000; Guerra et al., 2015, 2012; Wälzlein et al., 2014). Σε αντίθεση με το μοντέλο BED, το BEB μπορεί να εφαρμοστεί χρησιμοποιώντας μόνο την ενέργεια σύνδεσης και τη μέση κινητική ενέργεια των τροχιακών ηλεκτρονίων. Το διπολικό δυναμικό ταλάντωσης για απλούς υδρογονοειδείς στόχους όπως H, H₂ ή He έχει προσεγγισθεί να έχει την μορφή:

$$\frac{df}{dw} \cong \frac{N}{(w+1)^2} \quad (23)$$

Τότε από την Εξ. (23) θα έχουμε $N_i \equiv \int_0^\infty \frac{df(w)}{dw} dw = \int_0^\infty \frac{N}{(w+1)^2} dw = N$ (Y.-K. Kim & Rudd, 1994). Η προσέγγιση αυτή απλοποιεί ιδιαίτερα το μοντέλο BED και προσδίδει ένα σημαντικό πλεονέκτημα στο BEB, καθιστώντας το κατάλληλο για εφαρμογή σε πληθώρα υλικών. Η διαφορική ενεργός διατομή για τον ιονισμό από ηλεκτρόνια ορίζεται σύμφωνα με την Εξ. (24):

$$\frac{d\sigma}{dW_{\text{BEB}}} = S \sum_{n=1}^3 F_n(t) [(w+1)^{-n} + (t-w)^{-n}] \quad (24)$$

Στην Εξ. (24), οι συναρτήσεις $F_n(t)$ ορίζονται ως:

$$\begin{aligned} F_1(t) &= -\frac{F_2(t)}{t+1} \\ F_2(t) &= \frac{2-Q}{t} \\ F_3(t) &= \frac{Q \ln(t)}{t} \end{aligned} \quad (25)$$

Q ορίζεται ως το κλάσμα $\frac{N_i}{N}$ και η προτεινόμενη τιμή του για απλούς στόχους είναι $Q = 1$ (Y.-K. Kim & Rudd, 1994). Η αναλυτική έκφραση για την ενεργό διατομή των ιονισμών με το μοντέλο BEB για κάθε στιβάδα δίνεται από την Εξ. (26):

$$\sigma_{\text{BEB}} = \frac{S}{t} \left\{ \frac{1}{2} Q \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) \ln(t) + (2-Q) \left[\left(1 - \frac{1}{t} \right) - \frac{\ln(t)}{t+1} \right] \right\} \quad (26)$$

Ομοίως με το μοντέλο BED, οι τιμές των εμπλεκόμενων παραμέτρων για την εφαρμογή του μοντέλου BEB αναπαρίστανται στον Πίνακα. 1. Και ένας επιπλέον τρόπος επαλήθευσης της ολικής ενεργού διατομής είναι αριθμητικά, ολοκληρώνοντας την διαφορική ενεργό διατομή της Εξ. (24) ως προς την κινητική ενέργεια των δευτερογενών ηλεκτρονίων η οποία παίρνει τιμές μεταξύ $W \in \left[0, \frac{T-B}{2} \right]$.

Σύμφωνα με τις διαλέξεις του ίδιου του Kim (Y.-K. Kim, 2002) ο ιονισμός των μορίων είναι πολύ πιο δύσκολο να αντιμετωπιστεί από τον ιονισμό των ατόμων. Στην περίπτωση των μορίων συστήνεται η εφαρμογή του μοντέλου BEB έναντι του μοντέλου BED λόγω της εξάρτησής του από πολύ απλές παραμέτρους. Οι λόγοι που οδηγούμαστε σε αυτή την οδό είναι διότι τα άτομα έχουν διακριτά επίπεδα διέγερσης και στιβάδες ιονισμού που απέχουν αρκετά μεταξύ τους σε αντίθεση με τα μόρια. Επίσης, στα μόρια παρατηρούνται δονητικές και περιστροφικές διεγέρσεις μεταξύ ιονισμών και διεγέρσεων. Ακόμα ο συνολικός αριθμός κατάληψης των στιβάδων ιονισμού σε ένα μόριο είναι πολύ μεγαλύτερος από το συνολικό αριθμό κατάληψης των ατομικών στιβάδων και ως εκ τούτου η ενέργειες σύνδεσης μεταξύ διαδοχικών στιβάδων είναι πλησιέστερες μεταξύ τους για την περίπτωση των μορίων. Οι παραπάνω διαφορές τείνουν να θολώνουν τις περιπτώσεις «ισχυρού» ιονισμού και υπό μία έννοια αποδίδουν τα χαρακτηριστικά των μοριακών τροχιακών

πιο αποτελεσματικά απ' ότι σε ένα άτομο (Y.-K. Kim, 2002). Το μοντέλο BEB επιστρέφει αρκετά αξιόπιστες ενεργές διατομές τόσο για μικρά μόρια όπως H₂ όσο και για μεγαλύτερα όπως SF₆.

2.2.4 Διόρθωση Burgess

Οι εξισώσεις για την διαφορική και ολική ενεργό διατομή (19) (21) (24) (26), εκφράζονται όπως είχαν πρωτο-διατυπωθεί χωρίς τη διόρθωση του Burgess (και Vriens). Ο Burgess εισήγαγε μια εμπειρική διόρθωση με στόχο να μειώσει τη ροή των σωματιδίων κατά το φαινόμενο του ιονισμού, μειώνοντας εν τέλει την ενεργό διατομή. Πρακτικά αντικατέστησε τον όρο $\frac{1}{t}$ στα μοντέλα των Kim και Rudd με $\frac{1}{t+u+1}$. Από τη σκοπιά της Φυσικής η διόρθωση αυτή συνδέεται με την επιτάχυνση που θα δεχθεί το αρχικό ηλεκτρόνιο λόγω της ελκτικής δύναμης του πυρήνα (Y.-K. Kim & Rudd, 1994; Llovet et al., 2014). Όπως αναφέραμε η προσθήκη του όρου $(u + 1)$ ήταν κυρίως ως προϊόν αριθμητικού fit παρά θεωρητικής διόρθωσης και μέχρι στιγμής η προέλευση του δεν έχει δικαιολογηθεί επαρκώς με φυσικά επιχειρήματα (Guerra et al., 2012; Y.-K. Kim, 2001). Για παράδειγμα η διαφορική ενεργός διατομή των μοντέλων BED και BEB με τη διορθωτικό παράγοντα Burgess παρατίθενται παρακάτω:

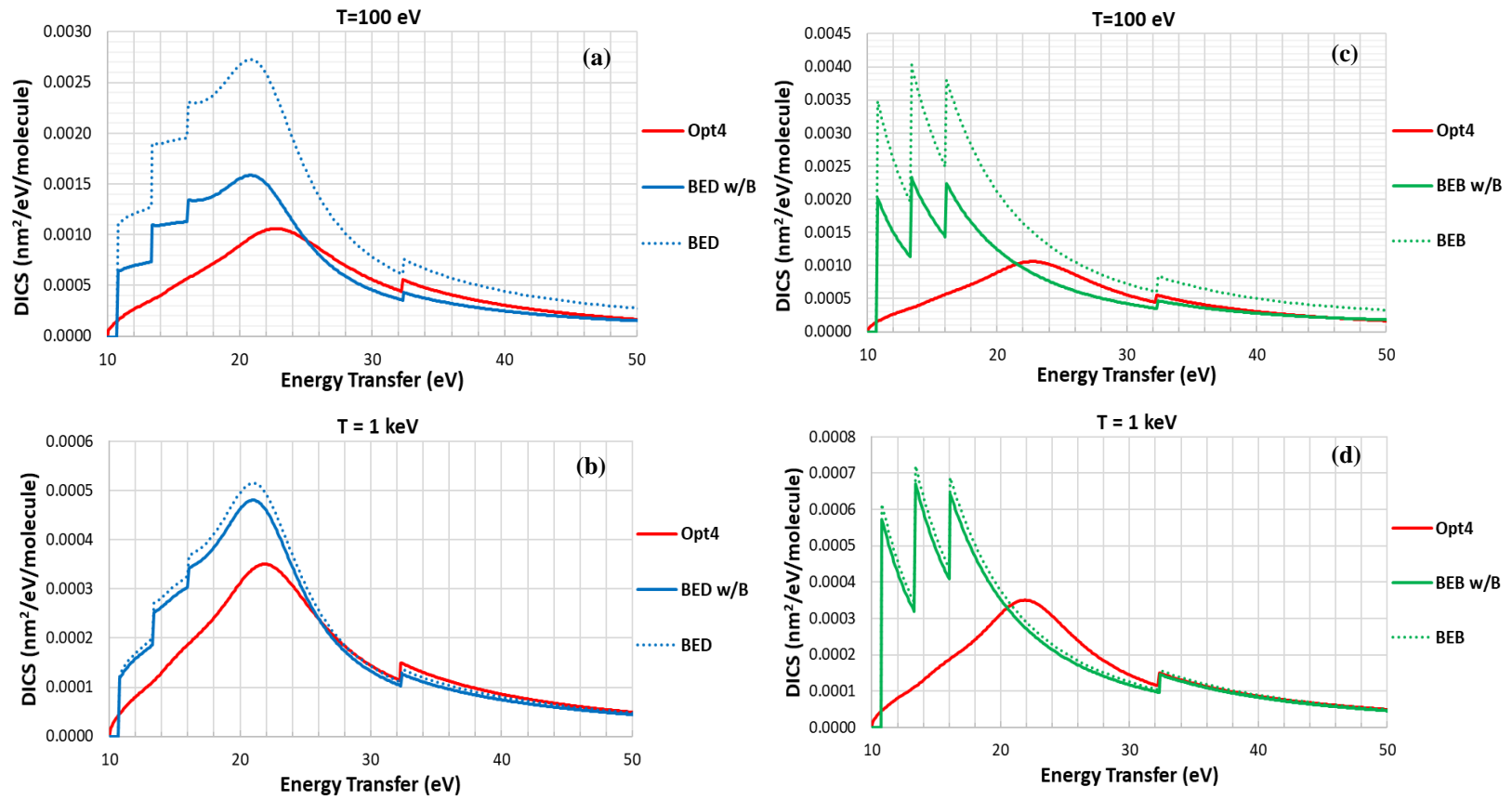
$$\frac{d\sigma}{dW_{BED}} = \frac{S}{B(t+u+1)} \left\{ \frac{N_i}{t+1} - 2 \left(\frac{1}{w+1} + \frac{1}{t-w} \right) + \left[2 - \frac{N_i}{N} \right] \left[\frac{1}{(w+1)^2} + \frac{1}{(t-w)^2} \right] + \frac{\ln(t)}{N(w+1)} \frac{df(w, q)}{dw} \right\} \quad (27)$$

$$\frac{d\sigma}{dW_{BEB}} = \frac{S}{B(t+u+1)} \left\{ \frac{N_i}{t+1} - 2 \left(\frac{1}{w+1} + \frac{1}{t-w} \right) + \left[2 - \frac{N_i}{N} \right] \left[\frac{1}{(w+1)^2} + \frac{1}{(t-w)^2} \right] + \ln(t) \left[\frac{1}{(1+w)^3} + \frac{1}{(t-w)^3} \right] \right\} \quad (28)$$

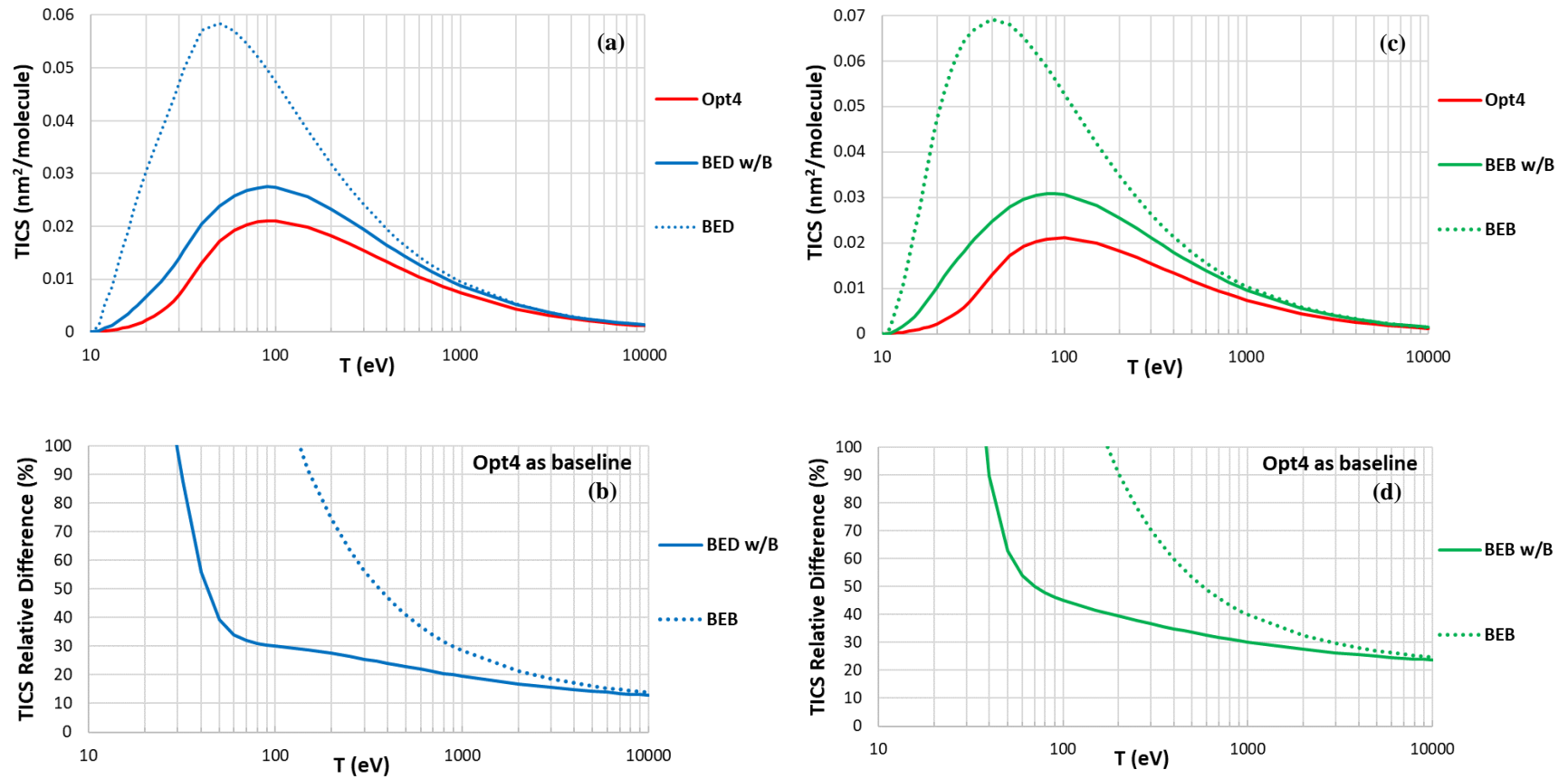
Προκειμένου να διερευνηθεί η επίδραση του διορθωτικού παράγοντα του Burgess παρουσιάζουμε στις ακόλουθες γραφικές παραστάσεις τη διαφορική ενεργό διατομή ιονισμού (Differential Ionization Cross Section, DICS) συναρτήσει της μεταφερόμενης ενέργειας στο

στόχο, την ολική ενεργό διατομή ιονισμού (Total Ionization Cross Section, TICS) και την ισχύ ανασχέσεως (Stopping Power) συναρτήσει της κινητικής ενέργειας του αρχικού ηλεκτρονίου. Στη Γραφική 1 παρουσιάζεται η διαφορική ενεργός διατομή για τα μοντέλα BED (αριστερή στήλη) και BEB (δεξιά στήλη) για κινητικές ενέργειες του αρχικού ηλεκτρονίου 100 eV και 1 keV. Επιπλέον, στη Γραφική 2 και στη Γραφική 3 σχεδιάζουμε την ολική ενεργό διατομή ιονισμού και την ισχύ ανάσχεσης συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των αρχικών ηλεκτρονίων. Κοινή παρατήρηση για όλες τις ποσότητες που υπολογίζουμε είναι πως ο εμπειρικός παράγοντας Burgess έχει ως αποτέλεσμα τη σημαντική μείωση των αρχικών μοντέλων BED και BEB διατηρώντας την μορφή των καμπύλων και οδηγώντας σε υπολογισμούς που προσεγγίζουν καλύτερα την τιμή του Option 4. Σημειώνεται επίσης και μετατόπιση του μεγίστου στην καμπύλη της TICS και της SP σε υψηλότερες κινητικές ενέργειες (~90 eV) πλησιάζοντας αλλά όχι τελείως τη θέση του μεγίστου του Option 4. Όμως, βλέπουμε ότι η απόκλιση των μοντέλων των Kim-Rudd ακόμα και με τη διόρθωση του Burgess, εξακολουθεί να αποκλίνει αρκετά από το Option4 και εγείρει ερωτήματα για το αν είναι αρκετή η διόρθωση αυτή και αν μπορεί με κάποιο τρόπο να μειωθούν περαιτέρω. Ειδικότερα, η απόκλιση των διορθωμένων μοντέλων (BED w/B και BEB w/B) στο TICS είναι μεγαλύτερη από ~ 15% για το BED και ~25% για το BEB. Για την ισχύ ανασχέσεως (SP), παρατηρείται σχετικά καλή συμφωνία για ενέργειες ηλεκτρονίων μεγαλύτερες από ~1 keV σε ποσοστό εντός του 10 % από το Option 4 αλλά για χαμηλότερες κινητικές ενέργειες η απόκλιση των μοντέλων από το Option 4 αγγίζει έως και ~230% για το (BED w/B) και ~376% για το (BEB w/B).

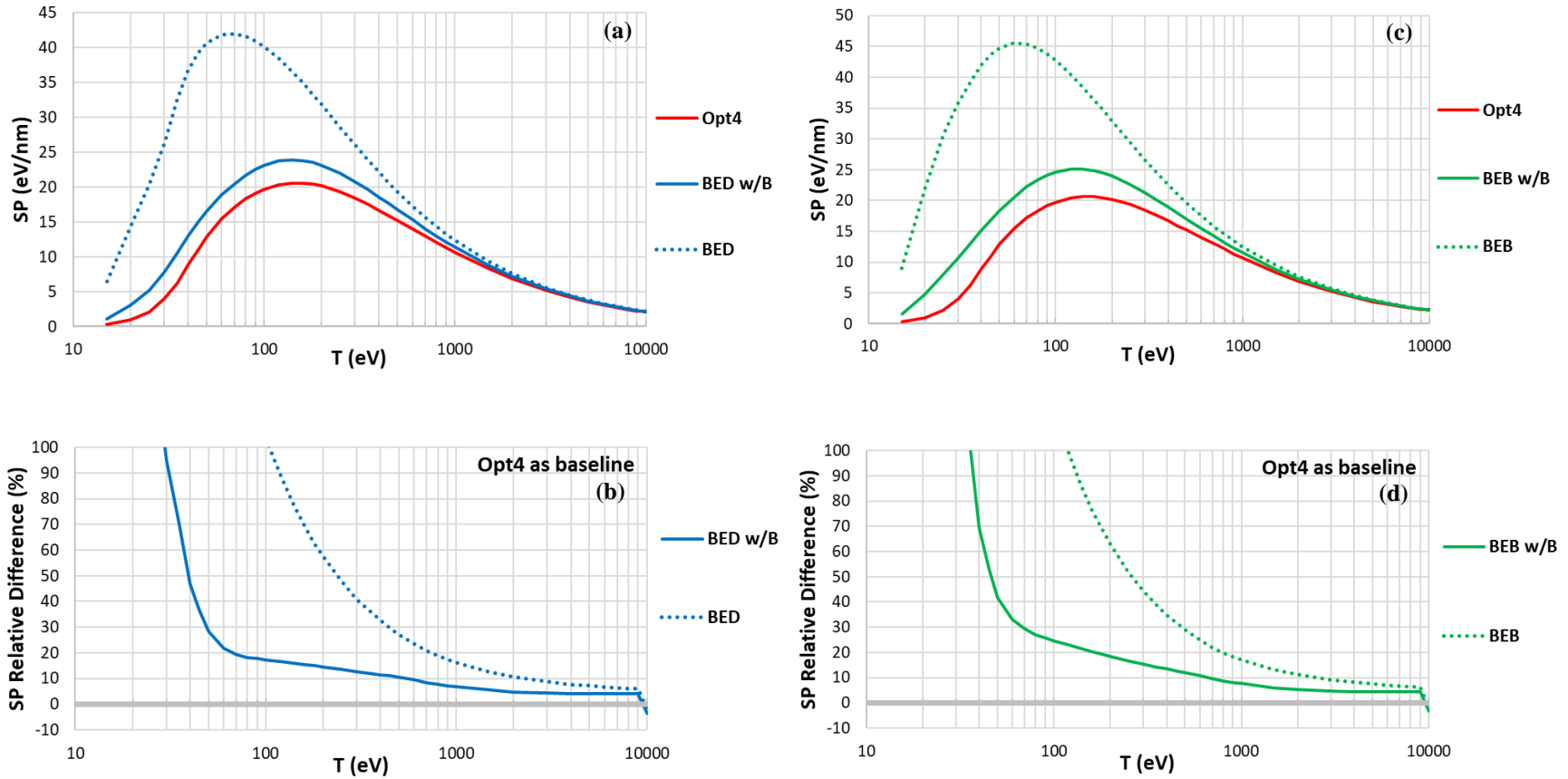
Από τα παραπάνω μπορούμε να συνοψίσουμε ότι όλοι οι υπολογισμοί της διαφορικής ενεργού διατομής, της ολικής ενεργού διατομής και της ισχύος ανασχέσεως οδηγούν σε υπερεκτίμηση από το μοντέλο Option4 ακόμα και με τη διόρθωση του Burgess. Η υπερεκτίμηση αυτή είναι ιδιαίτερα σημαντική για ενέργειες χαμηλότερες από 1 keV, με απόκλιση πολύ μεγαλύτερη από 20%. Κατά την άποψή μας, η υπερεκτίμηση αυτή οφείλεται στο φαινόμενο θωράκισης (screening effect) στην συμπυκνωμένη φάση του νερού, το οποίο δεν περιγράφεται από τα μοντέλα BED και BEB.



Γραφική 1. Επίδραση διόρθωσης Burgess στην DICS των μοντέλων BED και BEB συναρτήσεως της μεταφερόμενης ενέργειας στο στόχο. a: DICS μοντέλων BED για $T=100$ eV, b: DICS μοντέλων BED για $T=1$ keV, c: DICS μοντέλων BEB για $T=100$ eV, d: DICS μοντέλων BEB για $T=1$ keV.



Γραφική 2. Επίδραση διόρθωσης Burgess στην TICS συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων. a: TICS των μοντέλων BED, b: Σχετική απόκλιση (%) μοντέλων BED από το Option 4. c: TICS μοντέλων BEB, d: Σχετική απόκλιση (%) μοντέλων BEB από το Option 4.



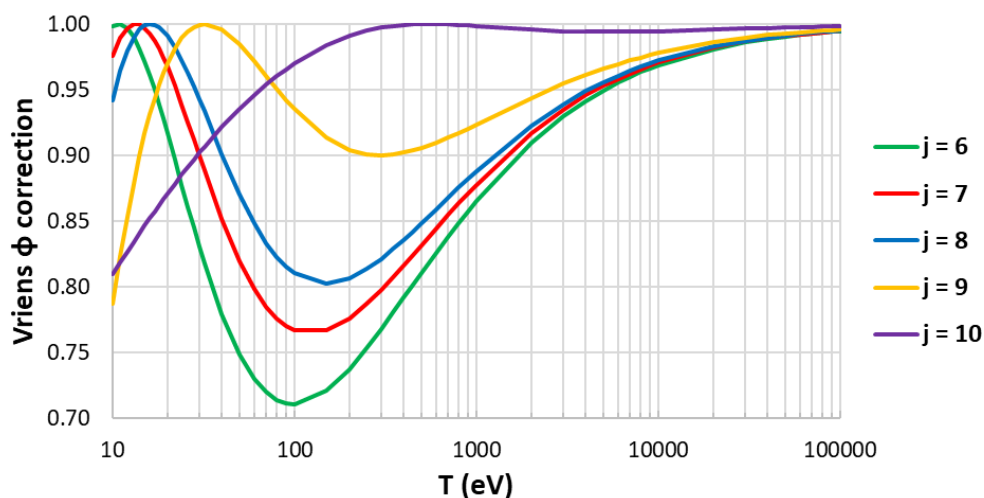
Γραφική 3. Επίδραση διόρθωσης Burgess στην SP ως προς την κινητική ενέργεια των αρχικών ηλεκτρονίων. a: SP των μοντέλων BED, b: Σχετική απόκλιση (%) μοντέλων BED από το Option 4, c: SP των μοντέλων BEB, d: Σχετική απόκλιση (%) των μοντέλων BEB από το Option 4.

2.2.5 Διόρθωση Vriens

Όπως έχει περιγραφεί από τους Llovet (Llovet et al., 2014) και Guerra (Guerra et al., 2012, 2015), μια πιο ακριβής «έκδοση» των αναλυτικών μοντέλων των Kim και Rudd θα ήταν πολλαπλασιάζοντας τον όρο συσχέτισης που οφείλεται στα φαινόμενα ανταλλαγής (exchange) και συσχέτισης (correlation) με την συνάρτηση φ του Vriens για κάθε στιβάδα ιονισμού. Στην μη-σχετικιστική της μορφή η συνάρτηση φ του Vriens για κάθε στιβάδα ιονισμού ορίζεται ως (Guerra et al., 2015; Vriens, 1969):

$$\varphi = \cos \left[\sqrt{\frac{Ry}{B(t+1)}} \ln(t) \right], \text{ με } \varphi \leq 1 \quad (29)$$

Η διατύπωση των μοντέλων BED και BEB αγνοώντας την συνάρτηση Vriens αποτελεί καλή προσέγγιση για υψηλές ενέργειες κινητικής ενέργειας όπου η συνάρτηση Vriens έχει ασυμπτωτική μορφή τείνοντας στην τιμή $\varphi = 1$, αλλά για τις ενέργειες που μας ενδιαφέρουν θα έπρεπε να ληφθεί υπόψη. Για να γίνει πιο ξεκάθαρο το παραπάνω σχόλιο αρκεί να χαράξουμε τη γραφική παράσταση της συνάρτησης φ ως προς την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων για κάθε μία από τις στιβάδες ιονισμού με τις ενέργειες σύνδεσης του Πίνακα 1:



Γραφική 4. Συνάρτηση φ του Vriens ως προς την κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου για όλες τις στιβάδες ιονισμού του μορίου του νερού στην υγρή φάση.

2.2.6 Διόρθωση Guerra

Μια αρκετά εκλεπτυσμένη διόρθωση των μοντέλων των Kim και Rudd προτάθηκε από τους Guerra και συνεργάτες στις σχετικές δημοσιεύσεις (Guerra et al., 2012, 2015) τόσο για τις μη-σχετικιστικές όσο και για τις σχετικιστικές εκδόσεις των μοντέλων αυτών στα πλαίσια της θεωρίας Binary Encounter. Πρακτικά, οι ερευνητές προέβησαν σε πλήρη αντικατάσταση του εμπειρικού παράγοντα Burgess με μία συνάρτηση η οποία σχετίζεται με το ενεργό φορτίου του πυρήνα του ατόμου που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια κάθε στιβάδας λόγω του φαινομένου της θωράκισης (screening effect) και του φαινομένου της πόλωσης του ατόμου/μορίου που υφίσταται κατά την αλληλεπίδραση του με το φορτισμένο σωματίδιο που αλληλεπιδρά με αυτό. Αυτό επετεύχθη αντικαθιστώντας τον όρο $(u + 1)$ στον πολλαπλασιαστικό παράγοντα Burgess με μία συνάρτηση, $C_{nlj}(Z)$, η τιμή της οποίας εξαρτάται από τον ατομικό αριθμό του στόχου και από την στιβάδα κατάληψης των ηλεκτρονίων με την βασική υπόθεση ότι ο στόχος μας σύμφωνα με το μοντέλο του υδρογόνου συμπληρώνοντας απλώς περισσότερες στιβάδες ηλεκτρονίων που περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα (Guerra et al., 2012). Οι ίδιοι ερευνητές έχουν εφαρμόσει την διόρθωση για πλήθος ατομικών στόχων με ατομικό αριθμό μεταξύ $Z = 6 - 86$, αλλά όχι για την περίπτωση των μορίων (Guerra et al., 2012). Οι υποθέσεις στις οποίες βασίστηκαν για την διόρθωσή τους, τους επέτρεψαν να υιοθετήσουν τη μέθοδο του Αυτό-Συνεπούς-Πεδίου (Self-Consistent-Field, SCF) όπως έχει επεξηγηθεί από τους Clementi και συνεργάτες (Clementi et al., 1967; Clementi & Raimondi, 1963) για την περιγραφή των τροχιακών ηλεκτρονίων, με μία χαρακτηριστική συνάρτηση ξ η οποία σχετίζεται με την ενεργό φορτίο του πυρήνα και ορίζεται από τη σχέση $\xi = (Z - \sigma_s)/n$, όπου Z ο ατομικός αριθμός του στόχου, σ_s είναι η σταθερά θωράκισης (screening) και n σχετίζεται με τον κύριο κβαντικό αριθμό της στιβάδας (Clementi & Raimondi, 1963). Οι Clementi και συνεργάτες (Clementi et al., 1967; Clementi & Raimondi, 1963) έχουν παραθέσει αναλυτικούς πίνακες για την τιμή της ξ για κάθε στιβάδα του εκάστοτε ατομικού αριθμού Z και καταλήγουν ακόμα και σε αναλυτικές εκφράσεις της σταθεράς θωράκισης, σ_s , ανάλογα με τη στιβάδα την οποία καταλαμβάνουν τα ηλεκτρόνια. Για τον υπολογισμό της σταθεράς θωράκισης επιλέξαμε να ακολουθήσουμε τις παρακάτω εξισώσεις παρά απευθείας από τις τιμές του πίνακα εντός της σχετικής δημοσίευσης. Οι εξισώσεις για τη σταθερά θωράκισης διατυπώνονται ως εξής:

$$\sigma_s(1s) = 0.3(1s - 1) + 0.0075(2s + 2p) + 0.0158(3s + 3p + 4s + 3d + 4p) \quad (30)$$

$$\sigma_s(2s) = 1.7208 + 0.3601(2s - 1 + 2p) + 0.2062(3s + 3p + 4s + 3d + 4p) \quad (31)$$

$$\sigma_s(2p) = 2.5787 + 0.3326(2p - 1) - 0.0773(3s) - 0.0161(3p + 4s) - 0.0048(3d) + 0.0085(4p) \quad (32)$$

Όπου εντός των εξισώσεων, αντικαθιστούμε στους όρους ένδειξης της στιβάδας την τιμή για τον αριθμό κατάληψης των ηλεκτρονίων και στην περίπτωση του μορίου του νερού όπου δεν υπάρχει στιβάδα ανώτερη της 2p απλώς αγνοούμε τους αντίστοιχους όρους, δηλαδή $(1s) = (2s) = 2$ και $(2p) = 6$. Οι τιμές συγκρίνονται και με τις προτεινόμενες τιμές του ξ από τον Πίνακα 1 της δημοσίευσης (Clementi & Raimondi, 1963) στον Πίνακα 4. Ως συμπέρασμα, δείχνουμε εν ολίγης ότι όποια μέθοδο και αν επιλέξει κανείς για τον υπολογισμό της ξ , είτε μέσω αναλυτικού υπολογισμού από τις εξισώσεις (32-34) είτε απευθείας από σχετικούς πίνακες, η τιμή της διόρθωσης c δεν επηρεάζεται διότι οι διαφορές σημειώνονται στο τέταρτο δεκαδικό ψηφίο.

Ως συνέπεια των παραπάνω μπορούμε να δούμε πώς η διόρθωση του Guerra σχετίζεται με την ηλεκτρονιακή θωράκιση του φορτίου του πυρήνα από τα δέσμια ηλεκτρόνια και με την πολωσιμότητα του ακτινοβολούμενου μέσου (Guerra et al., 2012, 2015). Η διόρθωσή του Guerra εκφράζεται ως:

$$C_{nlj} = a \frac{Z_{\text{eff},nlj}^2}{2n^2} + b \frac{Z_{\text{eff},n'l'j'}^2}{2n'^2} \quad (33)$$

Όπου a και b είναι σταθερές με προτεινόμενες τιμές $a = 0.3$ και $b = 0.7$ και $n'l'j'$ εκφράζει την ακριβώς επόμενη στιβάδα ιονισμού από αυτή που μελετάμε. Τότε ο όρος $(u + 1)$ του Burgess μπορεί να αντικατασταθεί με μία συνάρτηση που εξαρτάται από τη στιβάδα, $c \equiv c_{nlj} = \left(C_{nlj} / B \right) 2Ry$. Οι τιμές του όρου c για κάθε μία από τις στιβάδες βάσει των δεδομένων για την ενέργεια σύνδεσης του Πίνακα 3 παρατίθενται στον Πίνακα 4. Τότε, τα μοντέλα BED και BEB με τις διορθώσεις των Vriens και Guerra (BEBV) για κάθε στιβάδα ιονισμού θα γράφεται ως:

$$\frac{d\sigma}{dW_{\text{BEDVGuerra}}} = \frac{S}{B(t+c)} \left\{ \frac{N_i - 2}{t+1} \left(\frac{1}{w+1} + \frac{1}{t-w} \right) \varphi \right. \\ \left. + \left[2 - \frac{N_i}{N} \right] \left[\frac{1}{(w+1)^2} + \frac{1}{(t-w)^2} \right] + \frac{\ln(t)}{N(w+1)} \frac{df(w, q)}{dw} \right\} \quad (34)$$

$$\sigma_{\text{BEDVGuerra}} = \frac{S}{t+c} \left[D(t) \ln(t) + \left(2 - \frac{N_i}{N} \right) \left(\frac{t-1}{t} - \frac{\ln(t)}{t+1} \right) \varphi \right] \quad (35)$$

$$\frac{d\sigma}{dW_{\text{BEBVGuerra}}} = \frac{S}{B(t+c)} \left\{ \frac{Q-2}{t+1} \left(\frac{1}{w+1} + \frac{1}{t-w} \right) \varphi \right. \\ \left. + [2-Q] \left[\frac{1}{(w+1)^2} + \frac{1}{(t-w)^2} \right] + \ln(t) \left[\frac{1}{(1+w)^3} + \frac{1}{(t-w)^3} \right] \right\} \quad (36)$$

$$\sigma_{\text{BEBVGuerra}} = \frac{S}{t+c} \left\{ \frac{1}{2} Q \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) \ln(t) + (2-Q) \left[\left(1 - \frac{1}{t} \right) - \frac{\ln(t)}{t+1} \right] \varphi \right\} \quad (37)$$

Από τα παραπάνω μπορούν προκύψουν κάποια θολά σημεία σχετικά με την εφαρμογή της διόρθωσης Guerra σε μοριακούς στόχους. Το γεγονός ότι αντιμετωπίζουμε τις τρεις εξωτερικές στιβάδες ιονισμού ($1b_1, 3a_1, 1b_2$) του μορίου ως μία στιβάδα κατάληψης ($2p$) δεν αποτελεί ακριβή προσέγγιση. Μια μικρή αύξηση της τιμής της ενέργειας σύνδεσης μεταξύ αυτών των στιβάδων ιονισμού (όπως υφίσταται), ενδεχομένως να συνεπαγόταν με κίνηση των δέσμιων ηλεκτρονίων σε τροχιά εγγύτερα στον πυρήνα. Κάτι τέτοιο θα μπορούσε να οδηγήσει σε επιπρόσθετη συνεισφορά στη θωράκιση του φορτίου του πυρήνα, το φαινόμενο στο οποίο η διόρθωση αυτή βασίζεται. Επομένως, παρ' όλο που η διόρθωση του Guerra αναπαράγει εξαιρετικά καλά τις ενεργές διατομές για ιονισμό ατόμων σε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα και με άλλα θεωρητικά μοντέλα, η εφαρμογή της σε μοριακούς στόχους δεν αποτελεί τόσο απλή διαδικασία.

Πίνακας 4. Δεδομένα διόρθωσης Guerra για κάθε στιβάδα ιονισμού του μορίου του νερού στην υγρή φάση.

Στιβάδα ιονισμού	ξ^*	$\xi_s = \frac{Z - \sigma_s}{n}$	$c(\xi_s)$
1b ₁	2.8792	2.8791	10.4483
3a ₁	2.8792	2.8791	8.4195
1b ₂	2.8792	2.8791	7.0241
2a ₁	2.8792	2.8792	3.4904
K-shell Οξυγόνου	9.6421	9.6424	0.8502

* από table 1. (Clementi & Raimondi, 1963)

2.2.7 Διόρθωση παρούσας εργασίας

Παρ' όλο που έχουν γίνει απόπειρες στο παρελθόν να τροποποιηθούν τα μοντέλα των Kim και Rudd από τους Guerra και συνεργάτες (Guerra et al., 2012, 2015), οι προτεινόμενες διορθώσεις επηρεάζουν θεωρία στην οποία έχουν βασιστεί τα μοντέλα αυτά. Όπως έχει περιγραφεί από τον ίδιο τον Kim (Y.-K. Kim, 2001) η αποτελεσματικότητα του παρονομαστή στον παράγοντα Burgess ($t + u + 1$) “*is too universal to be a coincidence*” καθώς βελτιώνει προς την σωστή κατεύθυνση όλα τα μοντέλα στα οποία εφαρμόζεται. Η δική μας διόρθωση βασίζεται στην τροποποίηση του παράγοντα Burgess χωρίς να προβούμε σε οριστική αντικατάστασή του όπως στην περίπτωση της διόρθωσης του Guerra. Κίνητρο για τον προσδιορισμό της διόρθωσής μας αποτέλεσε η δημοσίευση (Kim 2001) στην οποία προτείνονται διάφορες τροποποιήσεις των ενεργών διατομών διέγερσης ουδέτερων ατόμων από ηλεκτρόνια στο πλαίσιο της 1^{ης} προσέγγισης Born με επίπεδα κύματα. Δεδομένου ότι οι διεγέρσεις και ιονισμοί αποτελούν και οι δύο ανελαστικές αλληλεπιδράσεις και μάλιστα είναι δύσκολο να διαχωριστούν μιας και περιγράφονται με ακριβώς την ίδια θεωρία, μπορούμε να εργαστούμε με τον ίδιο τρόπο και να τροποποιήσουμε την ενεργό διατομή ιονισμού. Παρακάτω αναλύουμε τα φαινόμενα που πρέπει να ληφθούν υπόψη για να υποστηρίξουμε το εγχείρημά μας και να προσδώσουμε φυσική ερμηνεία στη διόρθωσή μας.

Όπως έχει ήδη σημειωθεί από τον Kim στην εξίσωση (6) της δημοσίευσης (Y.-K. Kim, 2001), η ολική ενεργός διατομή για ελαστική σκέδαση από το θωρακισμένο δυναμικό Yukawa $V_Y = -\frac{Zq_e^2}{r} e^{-(r/\beta)}$ στα πλαίσια της 1^{ης} προσέγγισης Born με επίπεδα κύματα εκφράζεται ως:

$$\sigma_{el} = 4\pi\alpha_0^2 RyZ^2 b^2 \frac{1}{T + Ry/4b^2} \quad (38)$$

Η Εξ. (38) προκύπτει από την Εξ. (56) κάνοντας αντικατάσταση των σχέσεων $\beta = b\alpha_0$ και $(k\alpha_0)^2 = T/Ry$. Μπορούμε την ακόλουθη διαπίστωση με βάση την Εξ. (38). Λαμβάνοντας υπόψη το φαινόμενο θωράκισης (screening effect) όπως συμβαίνει στην περίπτωση στόχων συμπυκνωμένης φάσης περιμένουμε να έχουμε μείωση της εμβέλειας αλληλεπίδρασης β και κατά συνέπεια μείωση του συντελεστή b . Συνεπώς, ο όρος $Ry/4b^2$ που προστίθεται με την κινητική ενέργεια του αρχικού σωματιδίου θα αυξηθεί και μάλιστα σημαντικά μιας και είναι εις το τετράγωνο. Προς επαλήθευση, αν εξετάσουμε την ακραία περίπτωση ενός στόχου με πάρα πολλά ηλεκτρόνια ώστε να υφίσταται πλήρης θωράκιση του φορτίου του πυρήνα και η εμβέλεια αλληλεπίδρασης να είναι μηδενική ($b \rightarrow 0$), τότε η πιθανότητα ελαστικής σκέδασης μηδενίζεται ($\sigma_{el} \rightarrow 0$).

Δουλεύοντας υπό αυτό το σκεπτικό, μπορούμε να αυξήσουμε την επίδραση του όρου του Burgess ($u + 1$) στα μοντέλα των Kim και Rudd, προκειμένου να συμπεριλάβουμε φαινόμενα συμπυκνωμένης φάσης που εμπλέκονται στην περίπτωση του υγρού νερού. Επίσης, η διόρθωσή μας μπορεί να συσχετισθεί και με την πολωσιμότητα του μέσου. Ας θεωρήσουμε το ηλεκτρικό διπολικό δυναμικό πόλωσης (electric-dipole polarization potential) $V_p = -e^2 \frac{\alpha_d}{2r^4}$ όπου α_d είναι η ηλεκτρική διπολική πολωσιμότητα του ατόμου/μορίου στόχου (Y.-K. Kim, 2001; Mozejko & Sanche, 2003; Padial & Norcross, 1984), και συχνά προστίθεται στην χαμιλτονιανή του συστήματος:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_p = \frac{q^2}{2m} - e^2 \frac{\alpha_d}{2r^4} \quad (39)$$

Τότε μπορεί κανείς να αναπτύξει το δυναμικό Yukawa κατά Taylor δεδομένου ότι το ανάπτυγμα Taylor της εκθετικής συνάρτησης είναι $\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$, σύμφωνα με την Εξ. (40):

$$V_Y \propto - \left[r \exp\left(\frac{r}{\beta}\right) \right]^{-1} = - \left[\frac{1}{r} + \frac{\beta}{r^2} + \frac{2\beta^2}{r^3} + \frac{6\beta^3}{r^4} + \dots \right] \quad (40)$$

Αν συγκρίνουμε τις Εξ. (39) και (40), και απομονώσουμε τους όρους ίδιας τάξης $\left(\frac{1}{r^4}\right)$ τότε παρατηρούμε ότι η εμβέλεια της αλληλεπίδρασης (β) μπορεί να συσχετιστεί με την ηλεκτρική διπολική πολωσιμότητα (α_d) ως $\beta^3 \propto \alpha_d \xrightarrow{\beta=b\alpha_0} b^2 \propto \alpha_d^{2/3}$.

Η διόρθωση μας, λοιπόν αποτελεί αύξηση του όρου $(u + 1)$ με κατάλληλη σταθερά $k > 1$, η οποία από τη σκοπιά της Φυσικής οδηγεί σε μείωση της εμβέλειας της αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ του πυρήνα και του αρχικού ηλεκτρονίου λόγω του φαινομένου της θωράκισης. Ο νέος παράγοντας Burgess θα είναι:

$$\frac{1}{t + k(u + 1)}, \text{ με } k > 1 \quad (41)$$

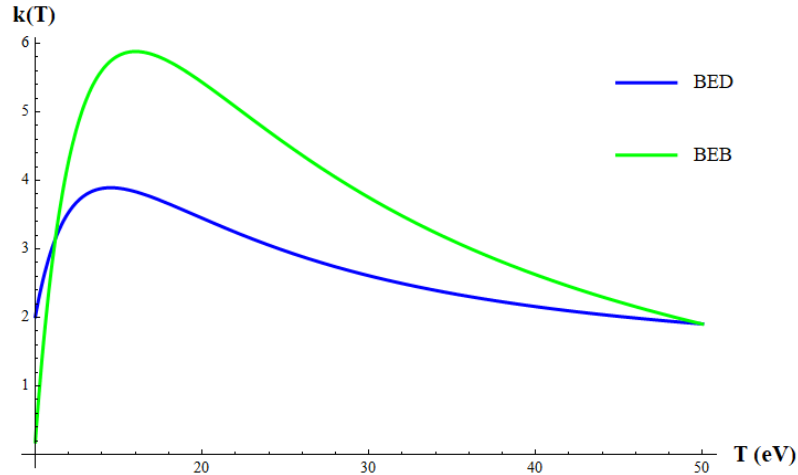
Η τιμή $k = 1.9$, αποδείχθηκε να δουλεύει αρκετά καλά μειώνοντας τα μοντέλα BED και BEB για την περίπτωση του μορίου του νερού στην υγρή φάση. Η επίδραση της διόρθωσης είναι σημαντικότερη στις χαμηλότερες ενέργειες (κάτω από 1 keV) διατηρώντας την ασυμπτωτική συμπεριφορά των μοντέλων σε συμφωνία με τη θεωρία του Bethe όταν η ενέργεια του σωματιδίου είναι αρκετά μεγαλύτερη από 1 keV.

Επιπρόσθετα, για την περίπτωση ηλεκτρονίων με κινητική ενέργεια συγκρίσιμη με την ενέργεια σύνδεσης των εξωτερικών στιβάδων ιονισμού του μορίου (1b₁, 3a₁, 1b₂), ~ (10 – 50] eV πρέπει να προβούμε σε επιπλέον διορθώσεις της ολικής ενεργού διατομής. Είναι εν γένει αποδεκτό πως τα μοντέλα αυτά αλλά και οι θεωρίες στις οποίες βασίζονται δίνουν αρκετά αβέβαια αποτελέσματα οδηγώντας σε υπερεκτίμηση. Η υπερεκτίμηση αυτή οφείλεται κατά κύριο λόγο επειδή αντιμετωπίζουμε τις στιβάδες του στόχου μεμονωμένα, κάτι που σε τόσο χαμηλές ενέργειες φαίνεται να αποτελεί απλοποίηση (Emfietzoglou & Nikjoo, 2007). Για να προσδιορίσουμε την συμπεριφορά που πρέπει να έχουν τα μοντέλα σε αυτή την ενεργειακή περιοχή, κάναμε fit στα δεδομένα της TICS ανά στιβάδα ιονισμού με τα αντίστοιχα δεδομένα του διηλεκτρικού μοντέλου Option4 για να προσεγγίσουμε τις διάφορες τιμές του k συναρτήσει της κινητικής ενέργειας T , $k(T)$. Μια αρκετή καλή συμπεριφορά επετεύχθη με μία πολυωνυμική συνάρτηση 3^{ου} βαθμού για την $k(T)$ για τα μοντέλα BED και BEB διατηρώντας συμφωνία $k(50 \text{ eV}) = 1.9$. Η πολυωνυμική συνάρτηση $k(T)$ για το μοντέλο BED περιγράφεται από την Εξ. (42) και για το μοντέλο BEB από την Εξ. (43):

$$k_{\text{BEDV}}(T) = -5.5 \left(\frac{\text{Ry}}{T}\right)^3 + 7.3 \left(\frac{\text{Ry}}{T}\right)^2 + 0.8 \left(\frac{\text{Ry}}{T}\right) + 1.26, \quad 10 < T \leq 50 \text{ eV} \quad (42)$$

$$k_{\text{BEBV}}(T) = -9.1 \left(\frac{\text{Ry}}{T}\right)^3 + 6.0 \left(\frac{\text{Ry}}{T}\right)^2 + 9.5 \left(\frac{\text{Ry}}{T}\right) - 0.94, \quad 10 < T \leq 50 \text{ eV} \quad (43)$$

Για να δούμε καλύτερα τη συμπεριφορά της πολυωνυμικής συνάρτησης $k(T)$ που προτείνουμε στις Εξ. (42) και (43) χαράσσουμε τη γραφική παράσταση των συναρτήσεων αυτών ως προς την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων στη Γραφική 5.



Γραφική 5. Συναρτήσεις $k(T)$ για τις Εξ. (42) & (43) ως προς την κινητική ενέργεια T (eV).

2.2.8 Ελαστική σκέδαση από δυναμικό Yukawa

Το δυναμικό Yukawa αποτελεί το ανάλογο ενός θωρακισμένου (screened) δυναμικού Coulomb και ορίζεται μέσω της Εξ. (44) (Joachain, 1975; Y.-K. Kim, 2001):

$$V_Y = V_c e^{-(r/\beta)} = -\frac{Zq_e^2}{r} e^{-(r/\beta)} \quad (44)$$

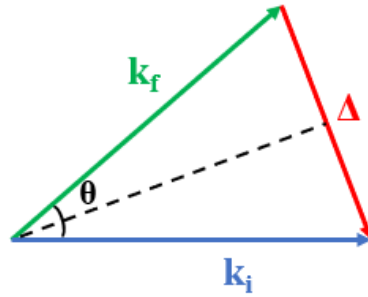
Όπου Z ο ατομικός αριθμός του στόχου, q_e το φορτίο των ηλεκτρονίων, r η σχετική θέση μεταξύ του ηλεκτρονίου βλήματος και του δέσμιου ηλεκτρονίου στο άτομο/μόριο στόχο και β η εμβέλεια της αλληλεπίδρασης η οποία εκφράζεται σε διαστάσεις της ακτίνας Bohr ($\beta = b\alpha_0$, με $b =$ σταθερά και $\alpha_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$). Ειδικότερα, η εμβέλεια της αλληλεπίδρασης μπορεί να εκτιμηθεί σύμφωνα με το ατομικό μοντέλο των Thomas-Fermi: $\beta \cong \frac{1}{Z^{1/3}}\alpha_0$, και για την περίπτωση του μορίου του νερού να έχει τιμή ίση με $\beta \cong 0.46\alpha_0$ (Joachain, 1975).

Το πλάτος σκέδασης για το δυναμικό Yukawa στα πλαίσια της $1^{η}$ προσέγγισης Born με επίπεδα κύματα, δηλαδή περιγραφή των σωματιδίων πριν και μετά τη σκέδαση με κυματοσυναρτήσεις της μορφής $\Phi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp [i\vec{k} \cdot \vec{r}]$, ορίζεται ως:

$$f_{\text{PWBA}} = -2\pi^2 \langle \Phi_{k_f} | V | \Phi_{k_i} \rangle \quad (45\alpha)$$

$$\Rightarrow f_{\text{PWBA}} = -\frac{1}{4\pi} \int \exp[i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{r}] V(r) dr \quad (45\beta)$$

Στην παραπάνω εξίσωση συνδέεται εξ ορισμού, η διαφορά των κυματανυσμάτων πριν και μετά τη σκέδαση $\vec{\Delta} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ με την μεταφερόμενη ορμή στο ηλεκτρόνιο του ατόμου $\hbar\vec{\Delta} = \hbar(\vec{k}_i - \vec{k}_f) = \vec{q}_i - \vec{q}_f = \mathbf{q}$. Επίσης θυμίζουμε ότι $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.



Σχήμα 4. Κινηματική της ελαστικής σκέδασης.

Για την περίπτωση της ελαστικής σκέδασης μπορούμε να υποθέσουμε ότι $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f| = k$ και το μέτρο της διαφοράς των κυματανυσμάτων θα ισούται με $\Delta = 2k \sin \frac{\theta}{2}$. Έτσι μπορούμε να αναγράψουμε το πλάτος ελαστικής σκέδασης για δοθείσα κατεύθυνση (θ, φ) ως:

$$f_{\text{PWBA}}(k, \theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int \exp[i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}] V(r) dr \quad (46)$$

Στο σημείο αυτό μπορούμε να δούμε από την Εξ. (46) ότι το πλάτος σκέδασης της $1^{\text{ης}}$ προσέγγισης Born με επίπεδα κύματα είναι ανάλογο του μετασχηματισμού Fourier του δυναμικού στο οποίο οφείλεται η αλλαγή του κυματανύσματος κατά την σκέδαση. Τότε η διαφορική ενεργός διατομή για ελαστική σκέδαση είναι ανεξάρτητη από το αν το δυναμικό είναι ελκτικό (< 0) ή απωστικό (> 0) και μπορεί να υπολογιστεί σύμφωνα με τη Εξ. (47) και η ολική ενεργός διατομή μπορεί απλά να υπολογιστεί ολοκληρώνοντας ως προς τη στερεά γωνία όπως στην Εξ. (48):

$$\frac{d\sigma_{\text{PWBA}}}{d\Omega} = |f_{\text{PWBA}}(k, \theta, \varphi)|^2 \quad (47)$$

$$\sigma_{\text{PWBA}}(k) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin(\theta) |f_{\text{PWBA}}(k, \theta, \varphi)|^2 d\theta \quad (48)$$

Για την περίπτωση όπου έχουμε κεντρικό δυναμικό (ανεξάρτητο από το φ) όπως στο δυναμικό Yukawa χρησιμοποιούμε τις Εξ. (49) (50):

$$f_{\text{PWBA}}^c(k, \theta) = -\frac{1}{\Delta(k, \theta)} \int_0^\infty r \sin[\vec{\Delta} \cdot \vec{r}] V(r) dr \quad (49)$$

$$\sigma_{\text{PWBA}}^c(k) = 2\pi \int_0^\pi \sin(\theta) |f_{\text{PWBA}}^c(k, \theta)|^2 d\theta \quad (50)$$

Συνεπώς εφαρμόζοντας τα παραπάνω για ελαστική σκέδαση από το κεντρικό δυναμικό Yukawa καταλήγουμε στις σχέσεις:

$$f_Y(k, \theta) = -\frac{V_c}{\Delta} \int_0^\infty \sin[\vec{\Delta} \cdot \vec{r}] e^{-(r/\beta)} dr = \frac{V_c}{\Delta^2 + \beta^2} \quad (51)$$

$$\sigma_Y(k) = \frac{2\pi}{k^2} V_c^2 \int_0^{2k} \frac{\Delta}{(\Delta^2 + \beta^2)^2} d\Delta = 4\pi V_c^2 \beta^2 \frac{1}{(\beta^2 + 4k^2)} \quad (52)$$

Συνοψίζοντας όλα τα παραπάνω και κάνοντας αντικατάσταση όλων των όρων μπορούμε να γράψουμε για ελαστική σκέδαση μεταξύ ηλεκτρονίου και ατόμου για δυναμικό Yukawa σε υψηλές ενέργειες μπορούμε να γράψουμε προσεγγιστικά ότι:

$$f_Y = \frac{2Z}{\alpha_0 \left(\beta^{-2} + 4k^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right)} \quad (53)$$

$$\frac{d\sigma_Y}{d\Omega}(k) = \frac{4Z^2}{\alpha_0^2 \left(\beta^{-2} + 4k^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right)^2} \quad (54)$$

$$\sigma_Y(k) = \frac{16\pi Z^2 \beta^4}{\alpha_0^2 (1 + 4k^2 \beta^2)} \quad (55)$$

Εφαρμόζοντας λοιπόν την ενεργό διατομή ελαστικής σκέδασης στο δυναμικό Yukawa σύμφωνα με την 1^η προσέγγιση Born μπορεί κανείς να δει πως παρ' όλου που αποτελεί προσέγγιση για να οδηγηθούμε σε απλούστερες εκφράσεις, συνοδεύεται με μαθηματικά κομψή φυσική

ερμηνεία ως μετασχηματισμό Fourier του δυναμικού αλληλεπίδρασης. Μια ακόμα σημαντική ιδιότητα της 1^{ης} προσέγγισης Born είναι ότι μας δίνει τη δυνατότητα λύσης του προβλήματος σκέδασης ακόμα και σε δυναμικά όπου δεν είναι σφαιρικά συμμετρικά.

Προκειμένου να καταλήξουμε στην τελική μορφή της ενεργού διατομής ελαστικής σκέδασης όπως τη χρησιμοποιήσαμε για να προσδώσουμε φυσική ερμηνεία στη διόρθωσή μας μέσω της Εξ. (38), αρκεί να αντικαταστήσουμε κατάλληλα τις ποσότητες της εμβέλειας αλληλεπίδρασης (β) και του κυματανύσματος (k). Όπως διατυπώθηκε από τον Kim αντικαθιστώντας $\beta = b\alpha_0$ και $(k\alpha_0)^2 = T/Ry$, καταλήγουμε σε μια πιο ευανάγνωστη έκφραση για την ενεργό διατομή ελαστικής σκέδασης από το δυναμικό Yukawa, και διατυπώνεται στην Εξ. (56):

$$\sigma_Y(T) = \frac{16\pi Z^2 (b\alpha_0)^4}{\alpha_0^2 [1 + 4k^2 (b\alpha_0)^2]} = \frac{16\pi Z^2 \alpha_0^2 b^4}{1 + 4b^2 \frac{T}{Ry}} = \frac{16\pi Z^2 \alpha_0^2 b^4}{T + \frac{Ry}{4b^2}} \frac{Ry}{4b^2}$$

$$\Rightarrow \sigma_Y(T) = 4\pi Z^2 \alpha_0^2 Ry b^2 \frac{1}{T + \frac{Ry}{4b^2}} \quad (56)$$

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

3.1 Διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού (DICS)

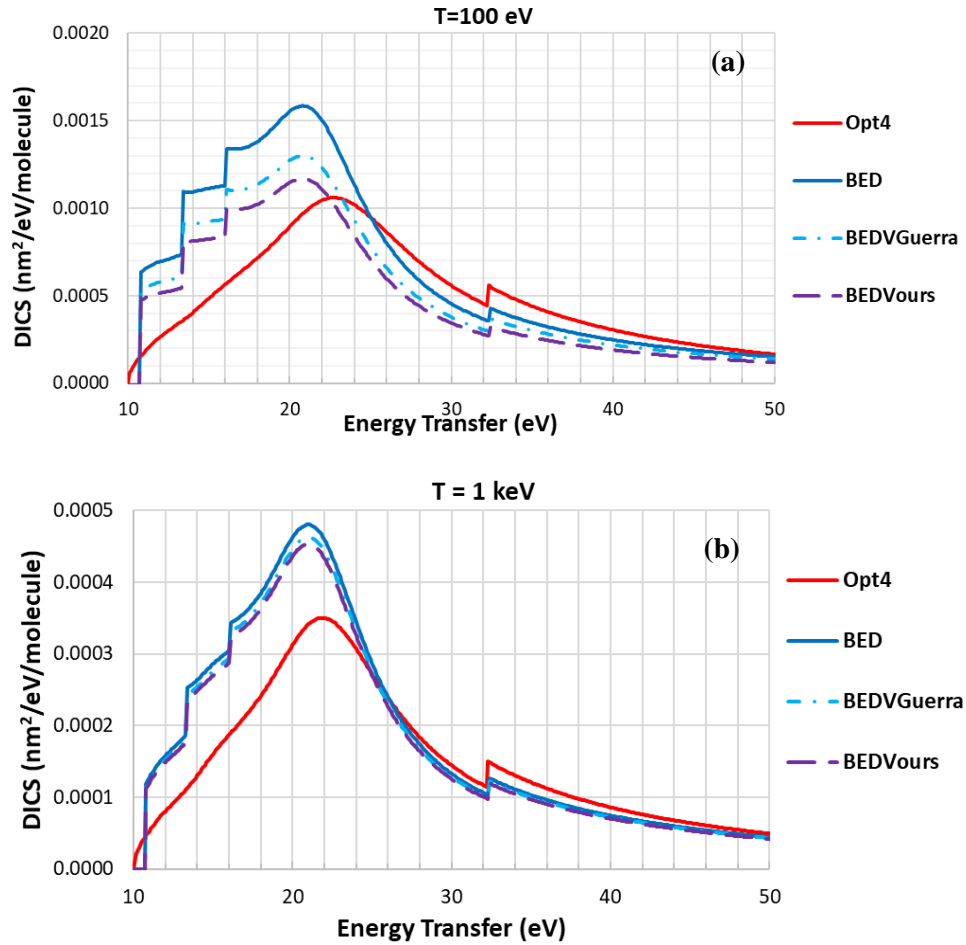
Η διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού (DICS) συναρτήσσει της μεταφερόμενης ενέργειας στο ηλεκτρόνιο του στόχου παρουσιάζεται στη Γραφική 6 και Γραφική 7. Στη Γραφική 6, αναπαρίσταται η DICS για ηλεκτρόνια με αρχική κινητική ενέργεια ίση με $T = 100$ eV (Γραφική 6a) και για $T = 1$ keV (Γραφική 6b) για το μοντέλο BED. Στη Γραφική 7, ομοίως με την προηγούμενη γραφική παράσταση αλλά για το μοντέλο BEB. Η μεταφερόμενη ενέργεια σε κάθε στιβάδα μέσω της διεργασίας του ιονισμού ορίζεται ως $E = W + B_n$, όπου B_n η ενέργεια σύνδεσης της στιβάδας n και W η κινητική ενέργεια των δευτερογενών ηλεκτρονίων. Στις Γραφικές 6 και 7, συγκρίνουμε τα μοντέλα των Kim – Rudd με το ενδεδειγμένο διηλεκτρικό μοντέλο του Geant4-DNA (Option 4). Επιπλέον, συγκρίνουμε τη διόρθωση του Guerra και τη δική μας όταν εφαρμόζονται στα μοντέλα BEDV και BEBV, δηλαδή λαμβάνοντας υπόψη και τη διόρθωση του Vriens ως μια ορθότερη προσέγγιση.

Εστιάζοντας στη Γραφική 6, διαπιστώνουμε ότι όλα τα μοντέλα έχουν την ίδια μορφή με το Option 4. Η ομοιότητα οφείλεται στο γεγονός ότι στο μοντέλο BED εμπλέκεται το διαφορικό δυναμικό ταλάντωσης διπόλου (differential dipole oscillator strength) το οποίο συνδέεται με την ELF. Στην προκειμένη περίπτωση υπολογίστηκε ακριβώς με το ίδιο μοντέλο που υπολογίζεται για το Option4, με την μόνη διαφορά να είναι οι τιμές της ενέργειας σύνδεσης και της μέσης κινητικής ενέργειας για κάθε στιβάδα του μορίου. Ένα γενικό συμπέρασμα που μπορεί να εξάγει κανείς είναι ότι για $T = 100$ eV, τα συγκρινόμενα μοντέλα δείχνουν μεγαλύτερες αποκλίσεις και η επίδραση των διορθώσεων που προτείνουμε είναι πιο εμφανής. Για τιμές της μεταφερόμενης ενέργειας μικρότερες από ~ 30 eV (ασθενείς αλληλεπιδράσεις), η διόρθωση του Guerra και η δική μας διόρθωση μειώνουν σημαντικά την καμπύλη της DICS για το μοντέλο BED επιτυγχάνοντας καλύτερη συμφωνία με το Option 4. Από τις δύο αυτές διορθώσεις η δική μας διόρθωση (BEDVours) οδηγεί σε λίγο καλύτερη συμφωνία έναντι του Guerra (BEDVGuerra). Για μεταφερόμενη ενέργεια στο στόχο μεγαλύτερη από ~ 30 eV, η μείωση του αρχικού μοντέλου BED διατηρείται αλλά είναι σαφώς μικρότερη και μάλιστα για κινητική ενέργεια $T = 1$ keV είναι ακόμη δυσκολότερο να παρατηρηθεί. Οι κορυφές που μπορεί να παρατηρήσει κανείς στις

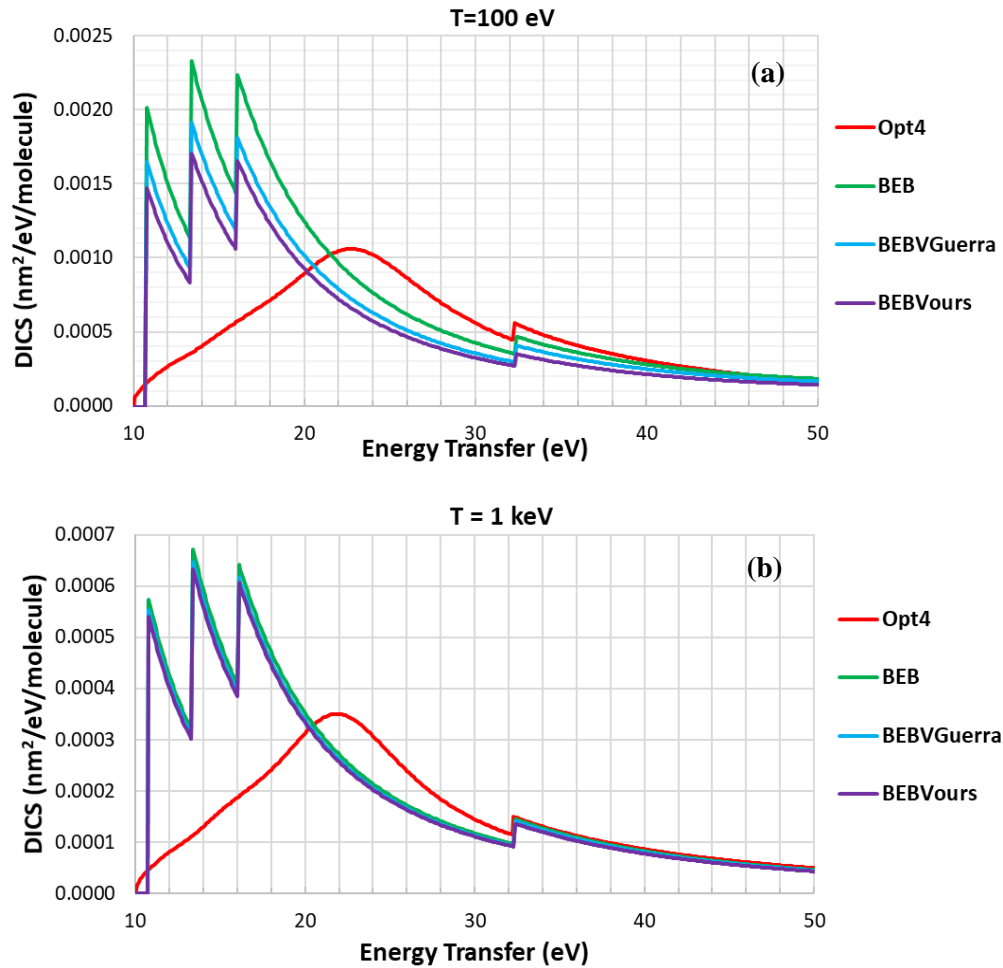
γραφικές παραστάσεις της DICS είναι τοπικά μέγιστα τα οποία συνδέονται με αύξηση της πιθανότητας ιονισμού όταν η μεταφερόμενη ενέργεια είναι συγκρίσιμη με την ενέργεια σύνδεσης της εκάστοτε στιβάδας. Για την ακρίβεια στη θεωρία κρούσεων binary-encounter, υποθέτουμε ότι ο ιονισμός υφίσταται υπό την προϋπόθεση ότι η μεταφερόμενη ενέργεια στο ηλεκτρόνιο-στόχο πρέπει να είναι τουλάχιστον ίση με την ενέργεια σύνδεσης, $E_{\min} = B_n$. Για μεταφερόμενη ενέργεια μικρότερη από την ενέργεια σύνδεσης της εκάστοτε στιβάδας, η διαφορική ενεργός διατομή μηδενίζεται και επομένως πέφτει απότομα.

Στη Γραφική 7, παρατηρούμε μια διαφορετική μορφή για τα μοντέλα που βασίζονται στο μοντέλο BEB σε σύγκριση με το Option 4 αλλά και με το BED, και οφείλεται στο ότι το μοντέλο BEB δεν εξαρτάται από το ELF. Όπως και στη Γραφική 6, οι κορυφές που παρατηρούνται συνδέονται με αυξημένη πιθανότητα εξαγωγής δευτερογενών ηλεκτρονίων όταν η μεταφερόμενη ενέργεια είναι μεγαλύτερη ή ίση από την ενέργεια σύνδεσης της εκάστοτε στιβάδας του μορίου. Η επίδραση της διόρθωσης του Guerra και της δικής μας στο μοντέλο BEBV, είναι εμφανής για ενέργειες αρχικών ηλεκτρονίων χαμηλότερες από 1 keV και αφορά κυρίως την περιοχή των ασθενών αλληλεπιδράσεων με μεταφερόμενη ενέργεια $\sim 10 - 30$ eV. Σε αυτή την περιοχή επιτυγχάνεται σημαντική μείωση της DICS και οδηγούμαστε σε καλύτερη συμφωνία με το Option4. Και σε αυτή την περίπτωση, η διόρθωσή μας φαίνεται να μειώνει παραπάνω την καμπύλη της DICS έναντι της διόρθωσης του Guerra, ιδίως στην περίπτωση όπου $T = 100$ eV.

Αποτελέσματα



Γραφική 6. Διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού των μοντέλων BED συναρτήσει της μεταφερόμενης ενέργειας για αρχική κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων $T=100 \text{ eV}$ (a) και $T=1000 \text{ eV}$ (b). Κόκκινη γραμμή (Opt4): διηλεκτρικό μοντέλο Option 4 του Geant4-DNA. Μπλε γραμμή (BED): μοντέλο BED με την διόρθωση του Burgess. Γαλάζια διακεκομμένη γραμμή με τελείες (BEDVGuerra): μοντέλο BED με τις διορθώσεις Vriens και Guerra (Guerra et al., 2012, 2015). Μωβ διακεκομμένη γραμμή (BEDVours): μοντέλο BED με τη διόρθωση του Vriens και τη δική μας.



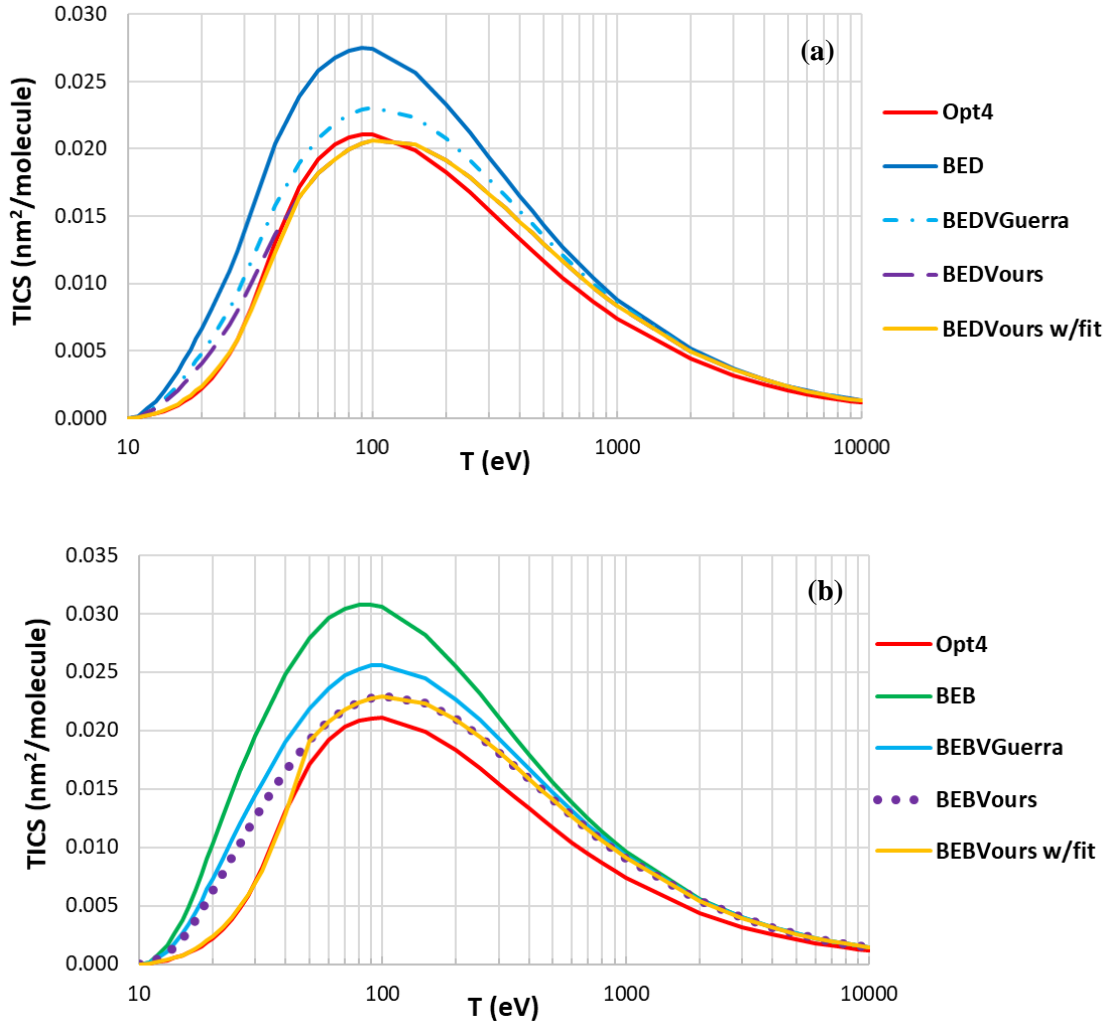
Γραφική 7. Διαφορική ενεργός διατομή ιονισμού των μοντέλων BEB συναρτήσει της μεταφερόμενης ενέργειας για αρχική κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων $T=100 \text{ eV}$ (a) και $T=1000 \text{ eV}$ (b). Κόκκινη γραμμή (Opt4): διηλεκτρικό μοντέλο Option 4 του Geant4-DNA. Πράσινη γραμμή (BEB): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τη διόρθωση του Burgess. Γαλάζια γραμμή (BEBVGuerra): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τις διορθώσεις του Vriens και Guerra (Guerra et al., 2012, 2015). Μωβ γραμμή (BEBVours): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τη διόρθωση του Vriens και τη δική μας.

3.2 Ολική ενεργός διατομή ιονισμού (TICS)

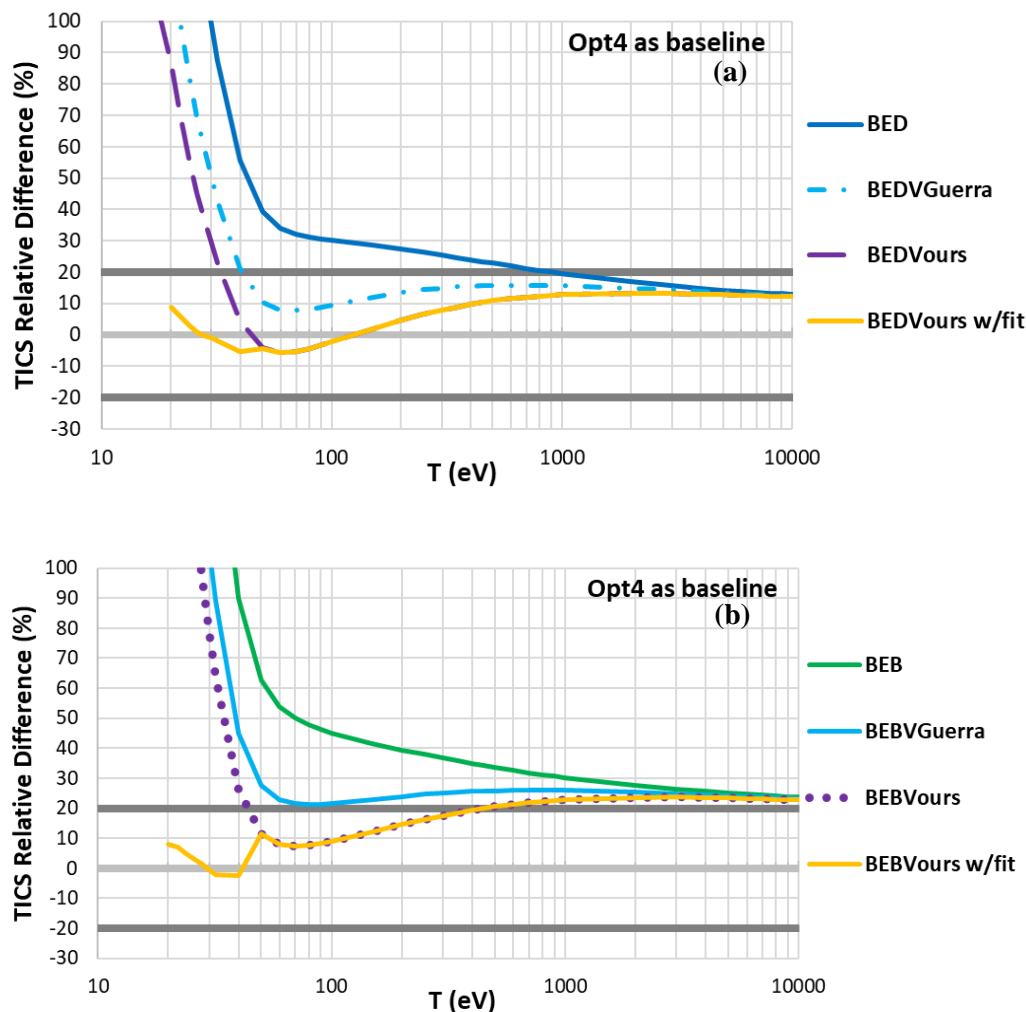
Στη Γραφική 8, χαράσσουμε την ολική ενεργό διατομή για ιονισμό (TICS) συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των αρχικών ηλεκτρονίων για ενέργειες που κυμαίνονται μεταξύ 10 eV έως και 10 keV, για το μοντέλο BED (Γραφική 8a) και το μοντέλο BEB (Γραφική 8b). Όταν υιοθετούμε οποιαδήποτε διόρθωση μεταξύ των διορθώσεων του Guerra και της δικής μας, επιτυγχάνεται μείωση της καμπύλης της TICS χωρίς να επηρεάζεται η μορφή της καμπύλης. Επιπλέον, σημειώνεται μετατόπιση του μεγίστου σε υψηλότερη ενεργειακή περιοχή ($T = 100 \text{ eV}$) σε πλήρη συμφωνία με το Option 4 και για τις δύο διορθώσεις.

Για το μοντέλο BED, επιτυγχάνεται καλύτερη συμφωνία με το Option4 μέσω της δικής μας διόρθωσης. Όπως βλέπουμε στη Γραφική 9a, το αρχικό μοντέλο BED οδηγεί σε υπερεκτίμηση της ενεργού διατομής ιονισμού του Option 4 η οποία κυμαίνεται μεταξύ ~13-300%. Η διόρθωση του Guerra αποκλίνει από το Option 4 κατά ~8-170% και η δική μας διόρθωση ($k = 1.9$) κατά ~6-127%. Τα μοντέλα που δείχνουμε αποτυγχάνουν να αναπαράγουν την μορφή του Option4 στην ενεργειακή περιοχή (10, 50] eV, όταν δηλαδή το αρχικό ηλεκτρόνιο αποκτά ενέργεια συγκρίσιμη με την ενέργεια σύνδεσης των εξωτερικών τροχιακών του μορίου του νερού, λόγω του φαινομένου των μεμονωμένων στιβάδων. Όταν συνδυάζουμε την Εξ. (42) για τη σταθερά k με την τιμή $k = 1.9$ για κινητικές ενέργειες μεγαλύτερες από 50 eV, μπορούμε να μειώσουμε την υπερεκτίμηση από το Option 4 σε λιγότερο από 20% σε όλο το εύρος ενεργειών ακόμα και για κινητικές ενέργειες μόλις μερικών δεκάδων eV. Για την ακρίβεια στο διάστημα μεταξύ [20-50] eV, η απόκλιση του διορθωμένου BED από το Option 4 είναι χαμηλότερη του 10%.

Όμοια συμπεράσματα εξάγουμε και για το μοντέλο BEB, όπου επιτυγχάνεται καλύτερη συμφωνία με το Option 4 με τη δική μας διόρθωση έναντι της διόρθωσης του Guerra ιδιαίτερα για ενέργειες ηλεκτρονίων μεταξύ 50-10.000 eV. Για ακόμη μια φορά, σημειώνουμε μείωση της καμπύλης της TICS και μετατόπιση του μεγίστου προς υψηλότερες κινητικές ενέργειες με τη διόρθωση του Guerra και τη δική μας, σε συμφωνία με το Option 4. Η σχετική απόκλιση (%) των μοντέλων που βασίζονται στο BEB από το μοντέλο Option 4 αναπαρίσταται στη Γραφική 9b. Η απόκλιση του αρχικού μοντέλου BEB από το Option 4 κυμαίνεται μεταξύ 24-409%. Η διόρθωση του Guerra μειώνει την υπερεκτίμηση του μοντέλου BEB σε 21-255%, και η δική μας διόρθωση σε 7-197%. Σε όλες τις περιπτώσεις τα μεγαλύτερα ποσοστά σημειώνονται για αρκετά χαμηλές κινητικές ενέργειες. Όταν συνδυάζουμε την Εξ. (43) για το k με την τιμή $k = 1.9$, η σχετική απόκλιση (%) έχοντας ως βάση το Option 4 μειώνεται σε ποσοστό χαμηλότερο από ~24%. Ομοίως με τα παραπάνω, στο διάστημα μεταξύ [20-50] eV, η απόκλιση του διορθωμένου BEB από το Option 4 είναι χαμηλότερη του 10%.



Γραφική 8. Ολική ενεργός διατομή ιονισμού από ηλεκτρόνια συναρτήσει της κινητικής τους ενέργειας. **a:** Κόκκινη γραμμή (Opt4): διηλεκτρικό μοντέλο Option 4 του Geant4-DNA. Μπλε γραμμή (BED): μοντέλο BED με τη διόρθωση Burgess. Γαλάζια διακεκομμένη γραμμή με τελείες (BEDVGuerra): μοντέλο BED με τις διορθώσεις του Vriens και Guerra (Guerra et al., 2012, 2015). Μωβ διακεκομμένη γραμμή (BEDVours): μοντέλο BED με τη διόρθωση Vriens και τη δική μας. Κίτρινη γραμμή (BEDVours w/fit): μοντέλο BED με τη διόρθωση Vriens και τη δικής μας σε συνδυασμό με την Εξ. (42). **b:** Κόκκινη γραμμή (Opt4): διηλεκτρικό μοντέλο Option 4 του Geant4-DNA. Πράσινη γραμμή (BEB): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τη διόρθωση Burgess. Γαλάζια γραμμή (BEBVGuerra): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τις διορθώσεις Vriens και Guerra (Guerra et al., 2012, 2015). Μωβ κύκλοι (BEBVours): μοντέλο BEB με $Q=1$, τη διόρθωση Vriens και τη δικής μας; Κίτρινη γραμμή (BEBVours w/fit): μοντέλο BEB με τη διόρθωση Vriens και τη δική μας σε συνδυασμό με την Εξ. (43).



Γραφική 9. Σχετική απόκλιση (%) ολικής ενεργού διατομής για ιονισμό της Γραφικής 8 με το Option 4 ως βάση. **a:** Μοντέλα BED, **b:** Μοντέλα BEB.

3.3 Ισχύς Ανασχέςσεως ιονισμών (SP)

Έχοντας κάνει σύγκριση των αρχικών και των διορθωμένων μοντέλων BED και BEB για τη διαφορετική ενεργό διατομή ιονισμού (DICS) και για την ολική ενεργό διατομή ιονισμού, στη συνέχεια υπολογίζουμε μια τρίτη ποσότητα που μας ενδιαφέρει σχετικά με την αλληλεπίδραση του ιονισμού. Αυτή η ποσότητα είναι η ισχύς ανασχέςσεως (Stopping Power, SP) και υπολογίζεται ολοκληρώνοντας το γινόμενο της μεταφερόμενης ενέργειας στο στόχο με την διαφορετική ενεργό διατομή για ιονισμό για κάθε μία από τις στιβάδες ως προς την κινητική ενέργεια των δευτερογενών ηλεκτρονίων, σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση:

$$SP_{\text{ioniz}} = \sum_{n=1}^5 \int_0^{\frac{T-B_n}{2}} (W + B_n) \times \frac{d\sigma_{\text{ioniz},n}}{dW} dW \quad (57)$$

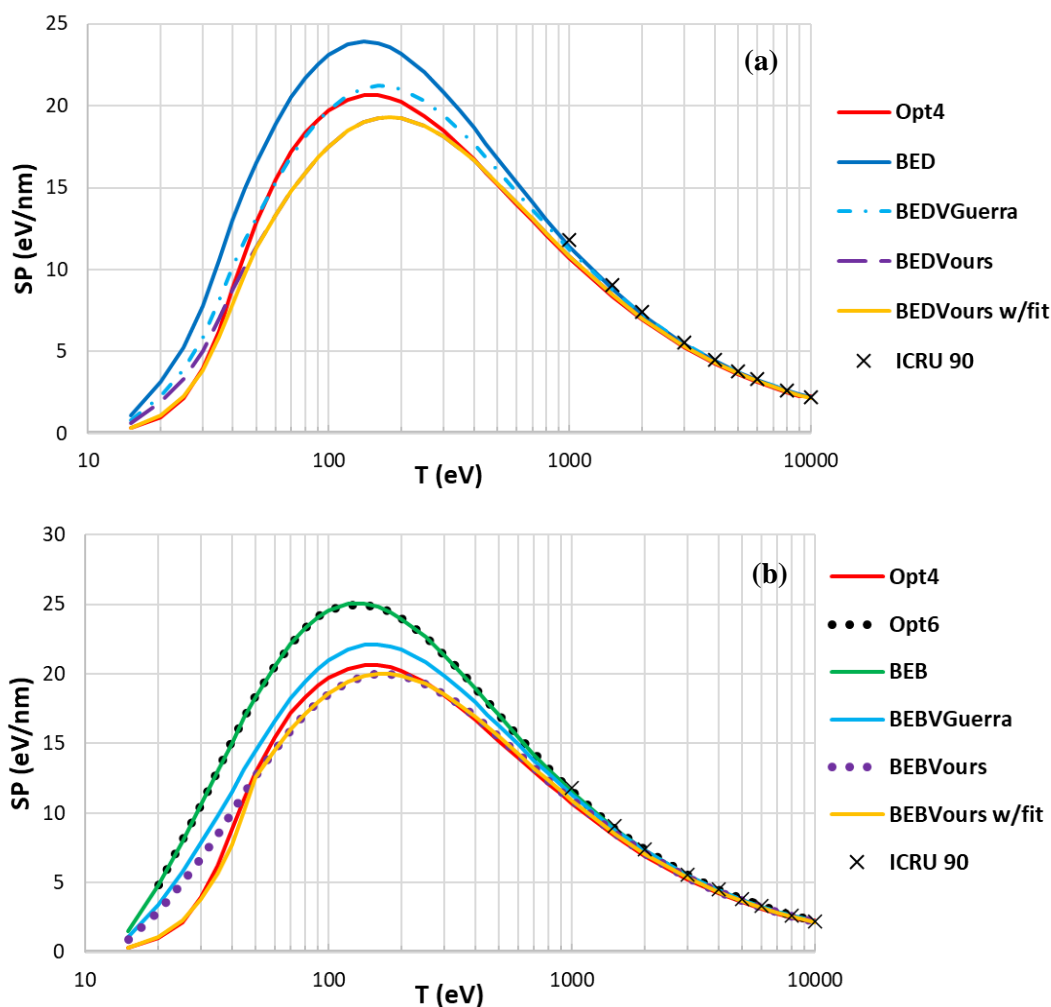
Σημαντικό σχόλιο στην Εξ. (57) είναι ότι για τον υπολογισμό της ολικής ισχύος ανασχέσεως αρκεί να αθροίσουμε το αποτέλεσμα που προκύπτει για κάθε μία στιβάδα ξεχωριστά. Επιπλέον τα όρια ολοκλήρωσης δεν είναι κυμαίνονται από $[0, \infty]$ αλλά θέτουμε άνω όριο στην κινητική ενέργεια του δευτερογενούς ηλεκτρονίου την τιμή $\frac{T-B_n}{2}$ για να αποφύγουμε το φαινόμενο μη διακρισιμότητας μεταξύ αρχικού και δευτερογενούς ηλεκτρονίου όπως και στην περίπτωση της DICS.

Στη Γραφική 10, σχεδιάζουμε την SP για τον ιονισμό συναρτήσει της κινητικής ενέργειας του αρχικού ηλεκτρονίου για τα μοντέλα που βασίζονται στο BED (Γραφική 10a) και BEB (Γραφική 10b). Και στις δύο περιπτώσεις, οι καμπύλες που σχεδιάζουμε έχουν ακριβώς την ίδια μορφή με το Option 4 και οι διορθώσεις που προτείνουμε για κάθε μοντέλο δεν αλλάζουν την μορφή της καμπύλης. Με μαύρες τελείες συμβολίζουμε το SP όπως αναπαράγεται από το μοντέλο Option 6 του Geant4-DNA, προκειμένου να διασφαλίσουμε ότι το μοντέλο BEB συμπεριφέρεται ακριβώς όπως το Option 6.

Για το μοντέλο BED (Γραφική 11a), η διόρθωση του Guerra και η δική μας διόρθωση μειώνουν την καμπύλη του SP πλησιέστερα σε αυτή του Option 4. Η υπολογισμένη SP με το μοντέλο BED έχει σχετική απόκλιση (%) σε απόλυτη τιμή μεταξύ ~4-230% από το Option 4. Η διόρθωση του Guerra επιτυγχάνει να μειώσει την υπερεκτίμηση αυτή σε ~3-131% και η δική μας διόρθωση με $k = 1.9$, σε ~14-93% έχοντας το Option 4 ως βάση. Αν συνδυάσουμε την Εξ. (42) για κινητικές ενέργειες μεταξύ (10, 50] eV με την τιμή $k = 1.9$ για ενέργειες μεγαλύτερες από 50 eV, επιτυγχάνεται σχετική απόκλιση (%) χαμηλότερη από 14% από το Option 4 σε όλο το εύρος ενεργειών.

Για το μοντέλο BEB (Γραφική 11b), η σχετική απόκλιση του αρχικού μοντέλου από το Option4 κυμαίνεται μεταξύ ~3-379%. Η διόρθωση του Guerra μειώνει την υπερεκτίμηση σε ~3-237% και η δική μας διόρθωση με $k = 1.9$ σε ~7-187%. Όπως είδαμε και στην TICS η μεγαλύτερη υπερεκτίμηση σημειώνεται για κινητικές ενέργειες συγκρίσιμες με τις ενέργειες σύνδεσης των εξωτερικών τροχιακών. Συνδυάζοντας την τιμή $k = 1.9$ με την Εξ. (43) οδηγούμαστε σε πολύ σημαντική μείωση της υπερεκτίμηση με σχετική απόκλιση να μην υπερβαίνει το $\pm 10\%$ από το Option4.

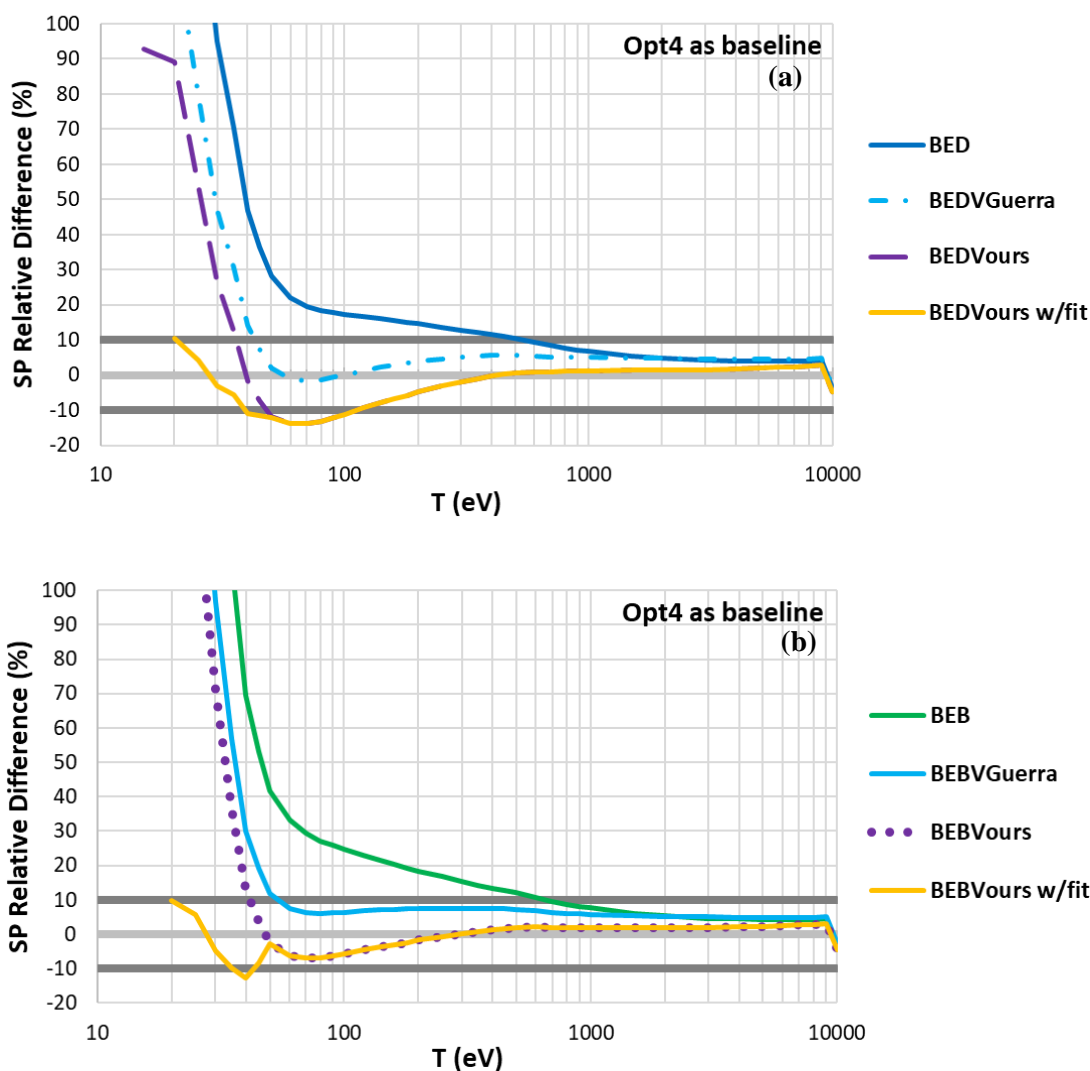
Ένα γενικό συμπέρασμα είναι ότι τα δεδομένα της ICRU (ICRU 90, 2014), παρουσιάζουν πολύ καλή συμφωνία με τα μοντέλα των Kim και Rudd κυρίως διότι τα δεδομένα του SP υπολογίζονται μέσω της ενεργού διατομής του Møller (Møller, 1932), τη σχετικιστική επέκταση της ενεργού διατομής του Mott. Για τις ενέργειες ηλεκτρονίων που μας ενδιαφέρουν, τα μοντέλα των Møller και Mott θα πρέπει να αποδίδουν ίδια αποτελέσματα κι αυτό φαίνεται να αρκεί για να εξηγήσει που οφείλεται η πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των δεδομένων της ICRU με τα μοντέλα BED και BEB. Επιπρόσθετα, όταν οι παραπάνω διορθώσεις συγκρίνονται με τα δεδομένα της ICRU, η πολύ καλή συμφωνία διατηρείται λαμβάνοντας υπόψη ότι τα δεδομένα της ICRU συνοδεύονται με σχετική τυπική απόκλιση 5% για ηλεκτρόνια ενέργειας 1 keV και 1.5% για ηλεκτρόνια ενέργειας 10 keV (ICRU 90, 2014).



Γραφική 10. Ισχύς ανασχέσεως ιονισμού συναρτήσει της κινητικής ενέργειας του αρχικού ηλεκτρονίου. **a:** κόκκινη γραμμή (Opt4): διηλεκτρικό μοντέλο Option 4 του Geant4-DNA. Μπλε γραμμή (BED w/B): μοντέλο BED με τη διόρθωση Burgess. Γαλάζια διακεκομμένη γραμμή με τελείες (BEDVGuerra): μοντέλο BED με τις διορθώσεις των

Αποτελέσματα

Burgess, Vriens και Guerra (Guerra et al., 2012, 2015). Μωβ διακεκομμένη γραμμή (BEDVours): μοντέλο BED με τις διορθώσεις Burgess, Vriens και τη δική μας. Κίτρινη γραμμή (BEDVours w/fit): μοντέλο BED με τις διορθώσεις Vriens και τον συνδυασμό των δικών μας ($k(T)$ από Εξ. (42) & $k = 1.9$). x-σύμβολα (ICRU 90): Δεδομένα ανασχετικής ισχύος ιονισμού από ηλεκτρόνια της ICRU. **b**: Κόκκινη γραμμή (Opt4): διηλεκτρικό μοντέλο Option 4 του Geant4-DNA. Πράσινη γραμμή (BEB): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τη διόρθωση Burgess. Γαλάζια γραμμή (BEBVGuerra): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τις διορθώσεις Vriens και Guerra (Guerra et al., 2012, 2015). Μωβ τελείες (BEBVours): μοντέλο BEB με $Q=1$ και τις διορθώσεις Vriens και τη δική μας. Κίτρινη γραμμή (BEBVours w/fit): μοντέλο BEB με τις διορθώσεις Vriens και τον συνδυασμό των δικών μας ($k(T)$ από Εξ. (43) & $k = 1.9$).

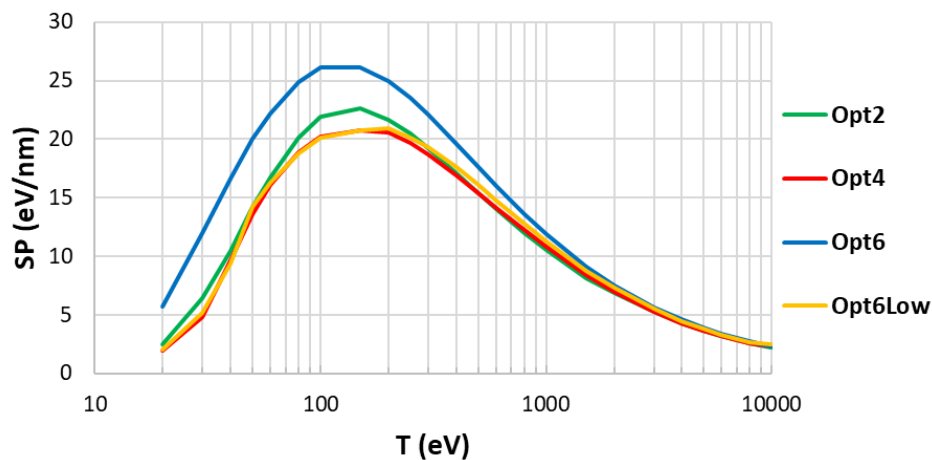


Γραφική 11. Σχετική απόκλιση (%) ισχύος ανασχέσεως ιονισμού στη Γραφική 10 έχοντας ως αναφορά το Option 4. **a:** Μοντέλα BED, **b:** Μοντέλα BEB.

3.4 Εφαρμογή της παρούσας διόρθωσης στο μοντέλο Option6 του Geant4-DNA

3.4.1 Εφαρμογή στο παράδειγμα “spower”

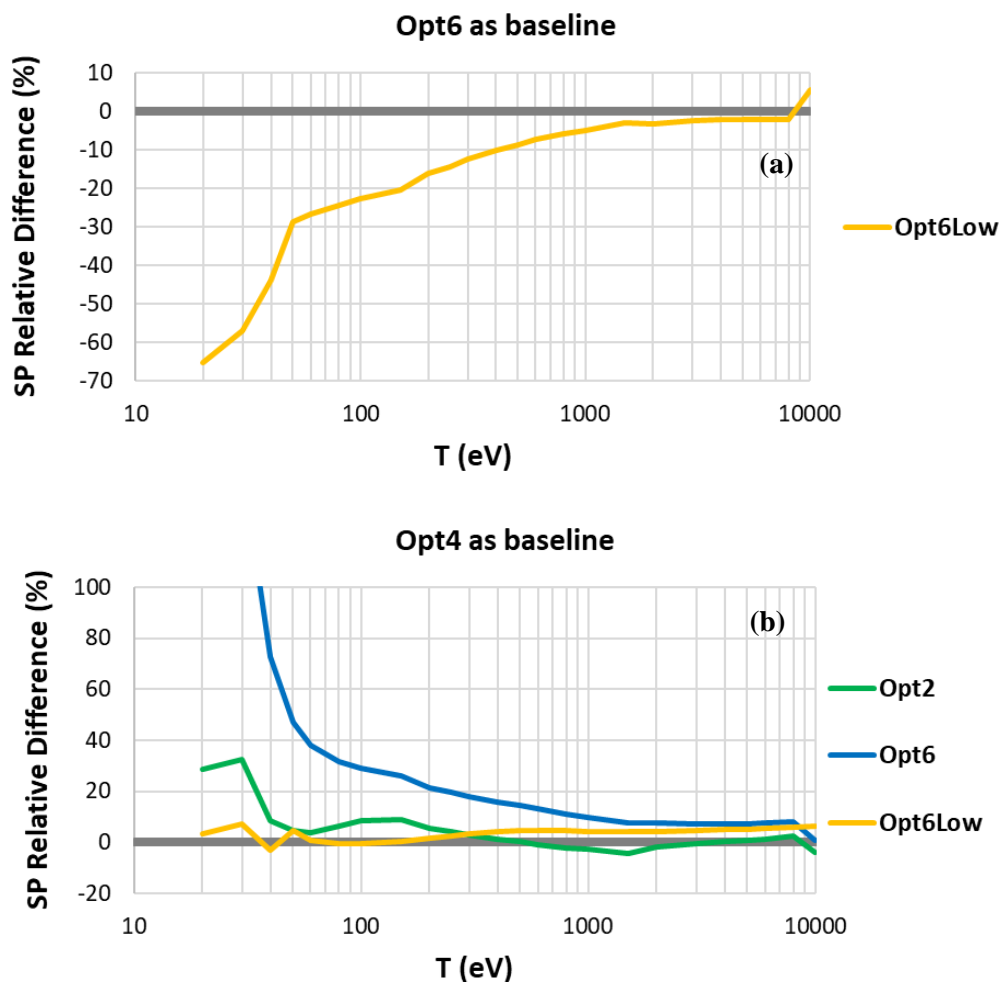
Το παράδειγμα “spower” αποτελεί ένα πρακτικό αλγόριθμο υπολογισμού της ανελαστικής ισχύος (Stopping Power) ηλεκτρονίων σε νερό στην υγρή φάση για τις ανελαστικές αλληλεπιδράσεις, ιονισμοί και διεγέρσεις (Incerti et al., 2017, 2018). Οι τροχιές των σωματιδίων προσομοιώνονται εκτοξευόντάς τα προς τυχαίες διευθύνσεις από το κέντρο σφαιρικού περιβάλλοντος με διάμετρο 1 m, προκειμένου να εξασφαλίσουμε ότι όλες οι τροχιές θα αποσβεσθούν στο εσωτερικό της. Όλες οι μετρήσεις έγιναν για 10^5 τροχιές ηλεκτρονίων με την έκδοση 10.7(patch 01) του Geant4-DNA. Προκειμένου να εξετάσουμε την συμπεριφορά του μοντέλου μας όταν αυτό εφαρμοστεί στον κώδικα Geant4-DNA, αντικαταστήσαμε το μοντέλο ιονισμών του Option6 με το δικό μας ενώ το μοντέλο των διεγέρσεων παρέμεινε αμετάβλητο από αυτό που υιοθετείται από το Option6. Τα αποτελέσματα της ισχύος ανάσχεσης παρουσιάζονται στη Γραφική 12:



Γραφική 12. Ανελαστική ισχύς ανάσχεσης υπολογισμένη με το παράδειγμα “spower” του Geant4-DNA συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων. Πράσινη γραμμή (Opt2): μοντέλο Option 2 (default model), κόκκινη γραμμή (Opt4): μοντέλο Option 4 (Ioannina model), μπλε γραμμή (Opt6): μοντέλο Option 6 (όπως ο κώδικας CPA100), κίτρινη γραμμή (Opt6Low): διορθωμένο μοντέλο Option 6 με τη δική μας διόρθωση για τους ιονισμούς. Σύμβολα-X, δεδομένα της ICRU.

Στη Γραφική 12, παρατηρούμε ότι η ανελαστική ισχύς ανάσχεσης των ηλεκτρονίων διαφέρει σημαντικά ανάλογα με το μοντέλο Φυσικής που υιοθετείται. Εν γένει η μορφή των καμπύλων είναι όμοια με αυτή που παρατηρήσαμε στη Γραφική 10, σημειώνοντας μικρή αύξηση στην περιοχή ενεργειών χαμηλότερες από 1 keV μιας και η συνεισφορά των διεγέρσεων

αναμένεται να μην είναι αμελητέα. Παρ' όλα αυτά, το διορθωμένο μοντέλο Option6 (Opt6Low) βελτιώνει σημαντικά τα αποτελέσματα του αρχικού Option 6 αποδίδοντας αποτελέσματα πλησιέστερα στο Option 4. Η σχετική διαφορά (%) της ανελαστικής ισχύος ανάσχεσης από τον κώδικα Geant4-DNA αναπαρίσταται στη Γραφική 13.



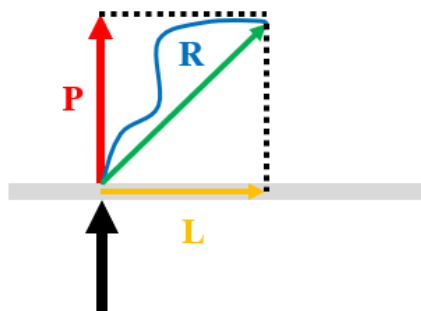
Γραφική 13. Σχετική διαφορά (%) ανελαστικής ισχύος ανάσχεσης των ηλεκτρονίων συναρτήσει της κινητικής τους ενέργειας. **a:** Απόκλιση (%) του διορθωμένου Option 6 (Opt6Low) από το αρχικό μοντέλο Option6. **b:** Απόκλιση (%) του διορθωμένου μοντέλου Option 6 από το διηλεκτρικό μοντέλο Option 4.

Από τη Γραφική 13, συμπεραίνουμε ότι εφαρμόζοντας τη διόρθωσή μας στο μοντέλο ιονισμών του Option 6, μειώνουμε την υπερεκτίμηση του SP έως και κατά 65% για ενέργειες χαμηλότερες από 1 keV. Στις υψηλότερες ενέργειες διατηρείται συμφωνία εντός του 4% το οποίο είναι εντός του σφάλματος που συνοδεύεται η μέτρηση λαμβάνοντας υπόψη τη στοχαστικότητα της μεθόδου αλλά και το σφάλμα με το οποίο συνοδεύονται οι εμπλεκόμενες θεωρίες.

Συγκρίνοντας το διορθωμένο μοντέλο Option 6 (Opt6Low) με το μοντέλο Option 4 παρατηρούμε ότι επιτυγχάνεται συμφωνία εντός του 7% σε όλο το εύρος ενεργειών, διορθώνοντας σημαντικά την υπερεκτίμηση που είχε το αρχικό μοντέλο λόγω της αγνόησης του φαινομένου θωράκισης όπως προαναφέραμε παραπάνω.

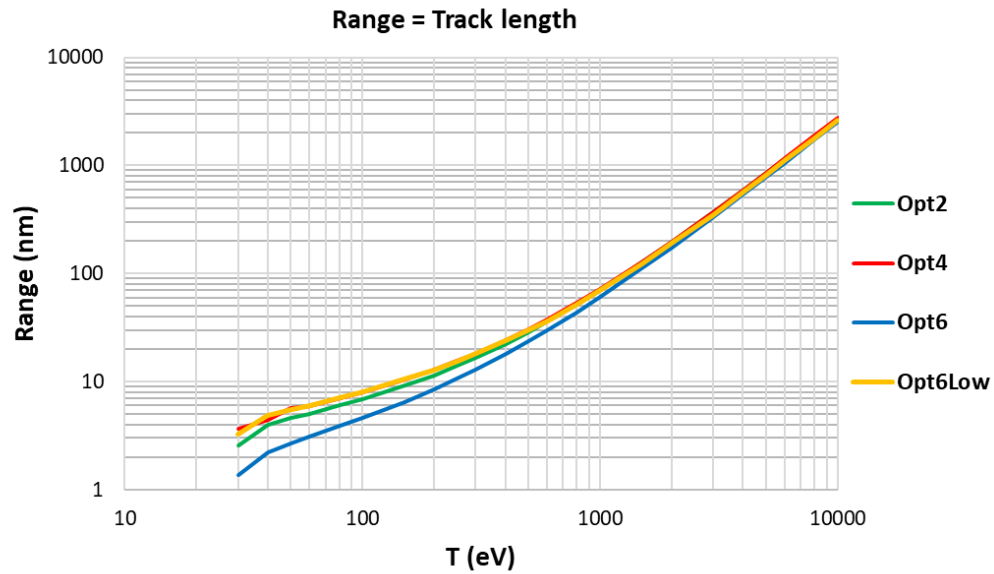
3.4.2 Εφαρμογή στο παράδειγμα “range”

Με παράδειγμα “range” του Geant4-DNA, έχουμε τη δυνατότητα προσομοίωσης της διάχυσης των ηλεκτρονίων σε μέσο υγρού νερού και να υπολογίσουμε την εμβέλεια τους. Ομοίως με το παράδειγμα “spower” γίνεται εκτόξευση των ηλεκτρονίων από το κέντρο σφαίρας υγρού νερού με διάμετρο 1 m σε τυχαίες διευθύνσεις (Bernal et al., 2015; Francis et al., 2011; Incerti et al., 2018). Η ελάχιστη ενέργεια προσομοίωσης τέθηκε ίση με 20 eV για όλα τα μοντέλα Φυσικής, μιας και σε χαμηλότερες ενέργειες πλησιάζουμε τις ενέργειες σύνδεσης των εξωτερικών τροχιακών που εξ’ ορισμού έχουν διαφορετικές τιμές. Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν για 10^5 τροχιές αποδίδοντας αποτελέσματα με σχετική απόκλιση μικρότερη από 0.2%. Τα εξαγόμενα αποτελέσματα από τον κώδικα Geant4-DNA αφορούν το μήκος τροχιάς των ηλεκτρονίων (range), το μήκος διείσδυσης κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης (penetration) στο υλικό από το σημείο εισόδου έως και το τέλος της τροχιάς και από την πλευρική διείσδυση (projected length) η οποία προκύπτει χαράσσοντας το διάνυσμα που ενώνει το πρώτο και το τελευταίο σημείο αλληλεπίδρασης και στη συνέχεια προβάλλοντάς το στον οριζόντιο άξονα. Όλα τα παραπάνω απεικονίζονται ποιοτικά στο Σχήμα 5:

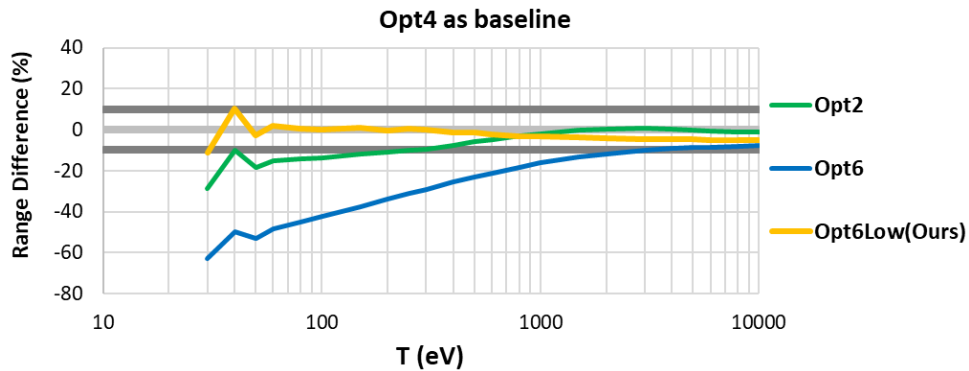


Σχήμα 5. Ορισμοί για την εμβέλεια των ηλεκτρονίων. Μπλε γραμμή R (range): η τροχιά ή εμβέλεια της ακτινοβολίας, κόκκινο διάνυσμα P (penetration) το διάνυσμα διείσδυσης κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης, κίτρινο διάνυσμα L (projected length) η πλευρική διείσδυση της ακτινοβολίας.

Η εκτιμώμενη εμβέλεια των ηλεκτρονίων συναρτήσει της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων σχεδιάζεται στο Γραφική 14:



Γραφική 14. Εμβέλεια των ηλεκτρονίων ως συνάρτηση της αρχικής κινητικής τους ενέργειας. Πράσινη γραμμή (Opt2): μοντέλο Option 2 (default model), κόκκινη γραμμή (Opt4): μοντέλο Option 4 (Ioannina model), μπλε γραμμή (Opt6): μοντέλο Option 6 και κίτρινη γραμμή (Opt6Low): το διορθωμένο μοντέλο Option 6.

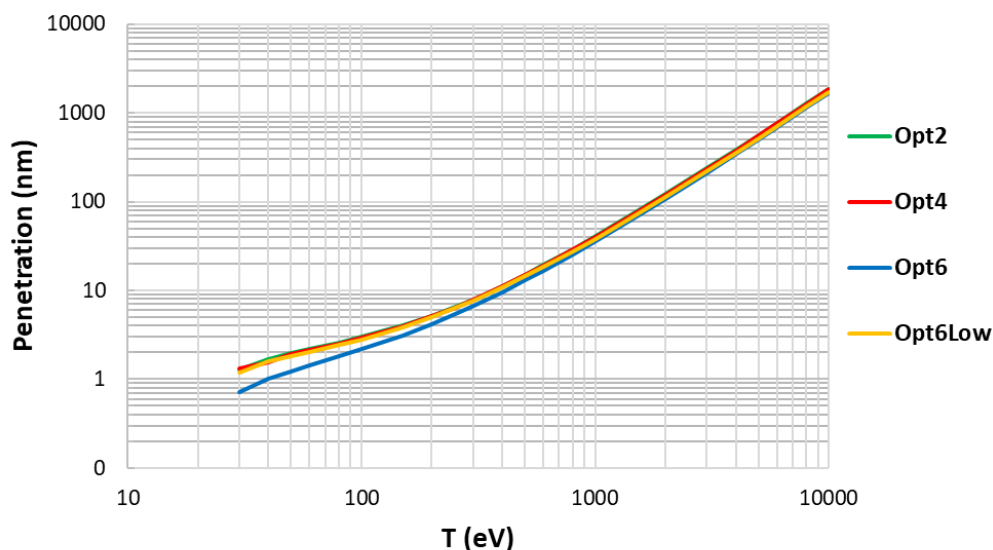


Γραφική 15. Σχετική διαφορά (%) εμβέλειας ως συνάρτηση της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων από τη Γραφική 14, υπολογισμένη με βάση το μοντέλο Option 4.

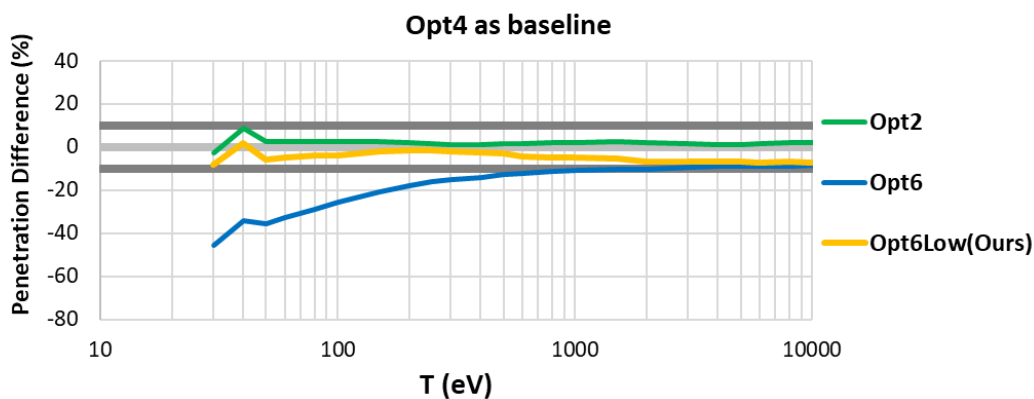
Μελετώντας το Γραφική 14, βλέπουμε ότι καθώς πλησιάζουμε την ενέργεια των 10 keV όλα τα μοντέλα τείνουν σε συμφωνία και αναπαράγουν σχεδόν αυτούσια αποτελέσματα. Οι διαφορές μεταξύ των μοντέλων γίνονται αντιληπτές σε χαμηλότερες ενέργειες (≤ 1 keV). Για περιοχή ενεργειών μεγαλύτερη από 30 eV, το μοντέλο Option 6 υποεκτιμά την εμβέλεια των ηλεκτρονίων σε σχέση τόσο με το Option 2 όσο και με το Option 4. Από τη Γραφική 15, είναι εμφανές ότι η διόρθωσή μας είναι απαραίτητη για τη μείωση της υποεκτίμησης αυτής.

Επιτυγχάνεται λοιπόν σημαντική βελτίωση του Option 6 (Opt6Low) στις χαμηλές ενέργειες διατηρώντας αμετάβλητη την τιμή της εμβέλειας για την ενέργεια των 10 keV. Η απόκλιση του διορθωμένου Option 6 (Opt6Low) είναι εντός του 10% και σε αυτή την περίπτωση.

Ακολούθως σχεδιάζουμε τη γραφική παράσταση της διείσδυσης των ηλεκτρονίων (penetration) κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης συναρτήσει της κινητικής τους ενέργειας για όλα τα διαθέσιμα μοντέλα φυσικής για προσομοιώσεις δομής τροχιάς.

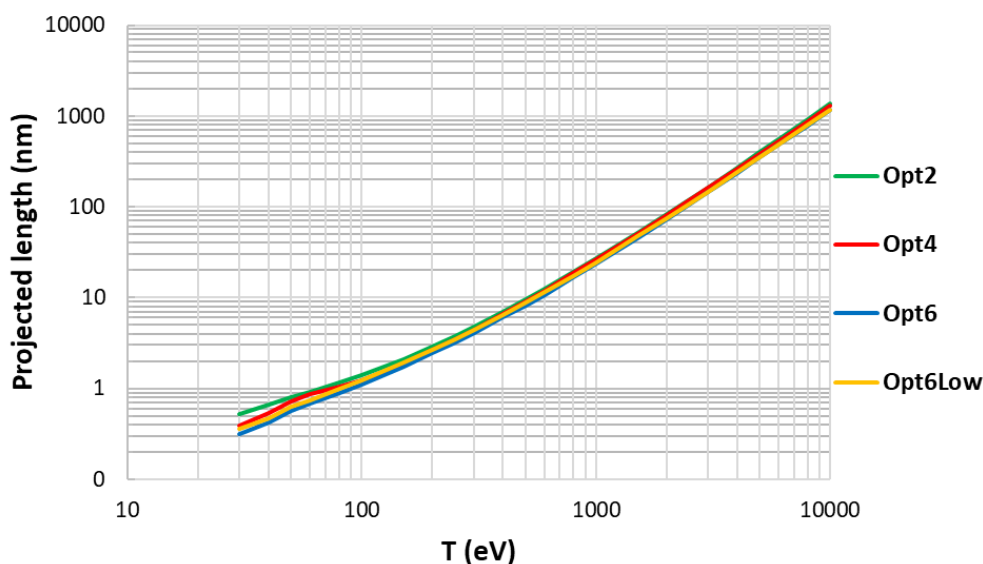


Γραφική 16. Μήκος διείσδυσης κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων. Πράσινη γραμμή (Opt2): μοντέλο Option 2 (default model), κόκκινη γραμμή (Opt4): μοντέλο Option 4 (Ioannina model), μπλε γραμμή (Opt6): μοντέλο Option 6 και κίτρινη γραμμή (Opt6Low): το διορθωμένο μοντέλο Option 6.

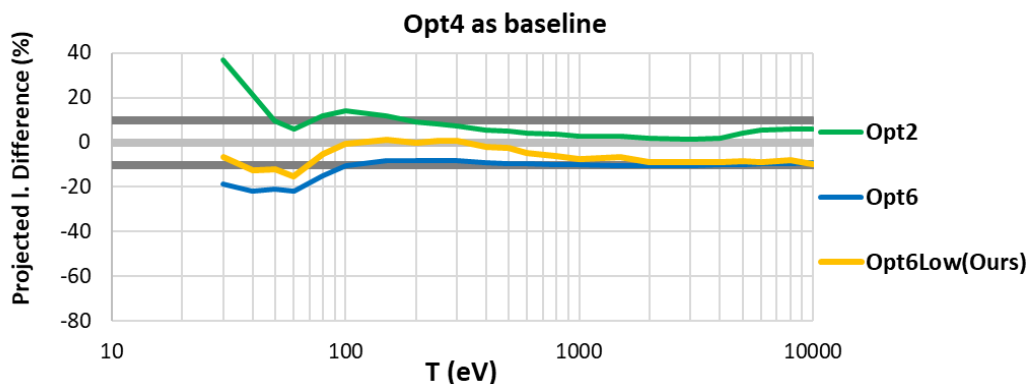


Γραφική 17. Σχετική διαφορά (%) μήκους διείσδυσης κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης (penetration) ως συνάρτηση της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων από τη Γραφική 16, υπολογισμένη με βάση το Option 4.

Οι παρατηρήσεις μας σχετικά με τις διαφορές μεταξύ των διαθέσιμων μοντέλων Φυσικής είναι σε συμφωνία με τη Γραφική 17. Το Option 2 εκτιμά την υψηλότερη τιμή για την εμβέλεια των ηλεκτρονίων στις χαμηλές κινητικές ενέργειες, ενώ το Option 6 την χαμηλότερη τιμή. Με το διορθωμένο Option 6 (Opt6Low) επιτυγχάνεται σημαντική βελτίωση σε σύγκριση με το μοντέλο Option 4 διατηρώντας την απόκλιση εντός του 10% (κατά απόλυτη τιμή). Ομοίως με πριν τα μοντέλα δεν παρουσιάζουν σημαντικές αποκλίσεις για κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων άνω του 1 keV. Σημαντικό σχόλιο είναι ότι το μήκος τροχιάς είναι περίπου 2 φορές μεγαλύτερη από το μήκος διείσδυσης κατά τον άξονα πρόσπτωσης στο ακτινοβολούμενο υλικό. Το τρίτο μέγεθος που υπολογίζεται με το παράδειγμα “range” είναι η πλευρική διείσδυση (projected length) στον οριζόντιο άξονα (κίτρινο διάνυσμα στο Σχήμα 5) και σχεδιάζεται συναρτήσε της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων στο Γραφική 18.



Γραφική 18. Πλευρική διείσδυση συναρτήσε της αρχικής κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων. Πράσινη γραμμή (Opt2): μοντέλο Option 2 (default model), κόκκινη γραμμή (Opt4): μοντέλο Option 4 (Ioannina model), μπλε γραμμή (Opt6): μοντέλο Option 6 και κίτρινη γραμμή (Opt6Low): το διορθωμένο μοντέλο Option 6.



Γραφική 19. Σχετική διαφορά (%) πλευρικής διείσδυσης συναρτήσει της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων, υπολογισμένη με το Option 4 ως βάση.

Η συμπεριφορά των μοντέλων είναι ακριβώς η ίδια με τις προηγούμενες γραφικές παραστάσεις και η ορθότητά τους ελέγχθηκε και συμφωνεί πλήρως με τα δημοσιευμένα αποτελέσματα των (Bordage et al., 2016; Incerti et al., 2018). Και στην περίπτωση της πλευρικής διείσδυσης με το διορθωμένο Option6 (Opt6Low) επιτυγχάνεται καλύτερη συμφωνία με το διηλεκτρικό μοντέλο Option4 μειώνοντας σημαντικά την υποεκτίμηση του αρχικού μοντέλου Option6. Ένα γενικό συμπέρασμα που έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον να συγκρατήσει κανείς από τους υπολογισμούς αυτούς είναι ότι το μήκος τροχιάς είναι περίπου 2 φορές μεγαλύτερο από το μήκος διείσδυσης κατά τη διεύθυνση πρόσπτωσης και 3 φορές μεγαλύτερο από την πλευρική διείσδυση (Range >> Penetration>> Projected Length).

3.4.3 Εφαρμογή στο παράδειγμα “TestEM12”

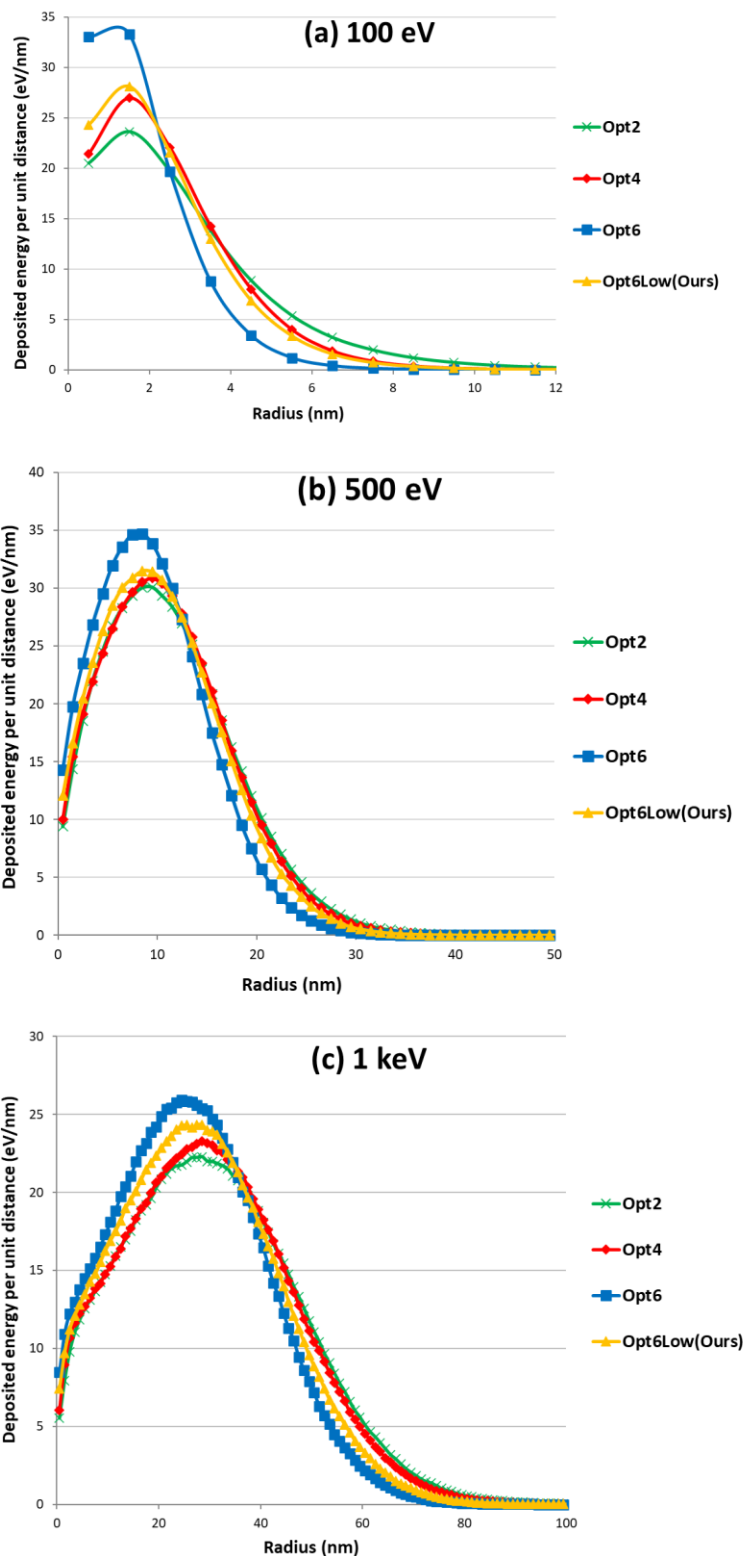
Ο κώδικας Geant4 διαθέτει ένα έτοιμο αλγόριθμο στο παράδειγμα “TestEM12” για τον υπολογισμό των dose point kernels (DPKs) ηλεκτρονίων σε μια ομοιογενή σφαίρα υγρού νερού η οποία μπορεί να διαιρεθεί σε σφαιρικά κελύφη τα οποία παίζουν το ρόλο του βήματος στο παραγόμενο ιστόγραμμα. Έγιναν προσομοιώσεις ηλεκτρονίων με αρχικές κινητικές ενέργειες 100 eV, 500 eV and 1 keV για 10^5 τροχιές προκειμένου να εξασφαλίσουμε χαμηλή στατιστική αβεβαιότητα όπως και στα παραπάνω παραδείγματα. Η εναποτιθέμενη ενέργεια των ηλεκτρονίων αν μονάδα μήκους ως συνάρτηση της ακτίνας από το σημείο εκτόξευσης των ηλεκτρονίων αναπαρίσταται στη Γραφική 20 για όλα τα διαθέσιμα μοντέλα Φυσικής του Geant4-DNA. Ομοίως με άλλες μελέτες (Bordes et al., 2017; Kyriakou et al., 2019), η σύγκριση μεταξύ μη

κανονικοποιημένων DPKs από διαφορετικά μοντέλα Φυσικής σε σύγκριση με το μοντέλο Option 4 γίνεται βάσει της ακόλουθης έκφρασης κανονικοποίησης:

$$\Delta_i(\%) = \frac{DPK_{\text{model},i} - DPK_{\text{Opt4},i}}{\text{Max}\{DPK_{\text{Opt4}}\}} \times 100 \quad (58)$$

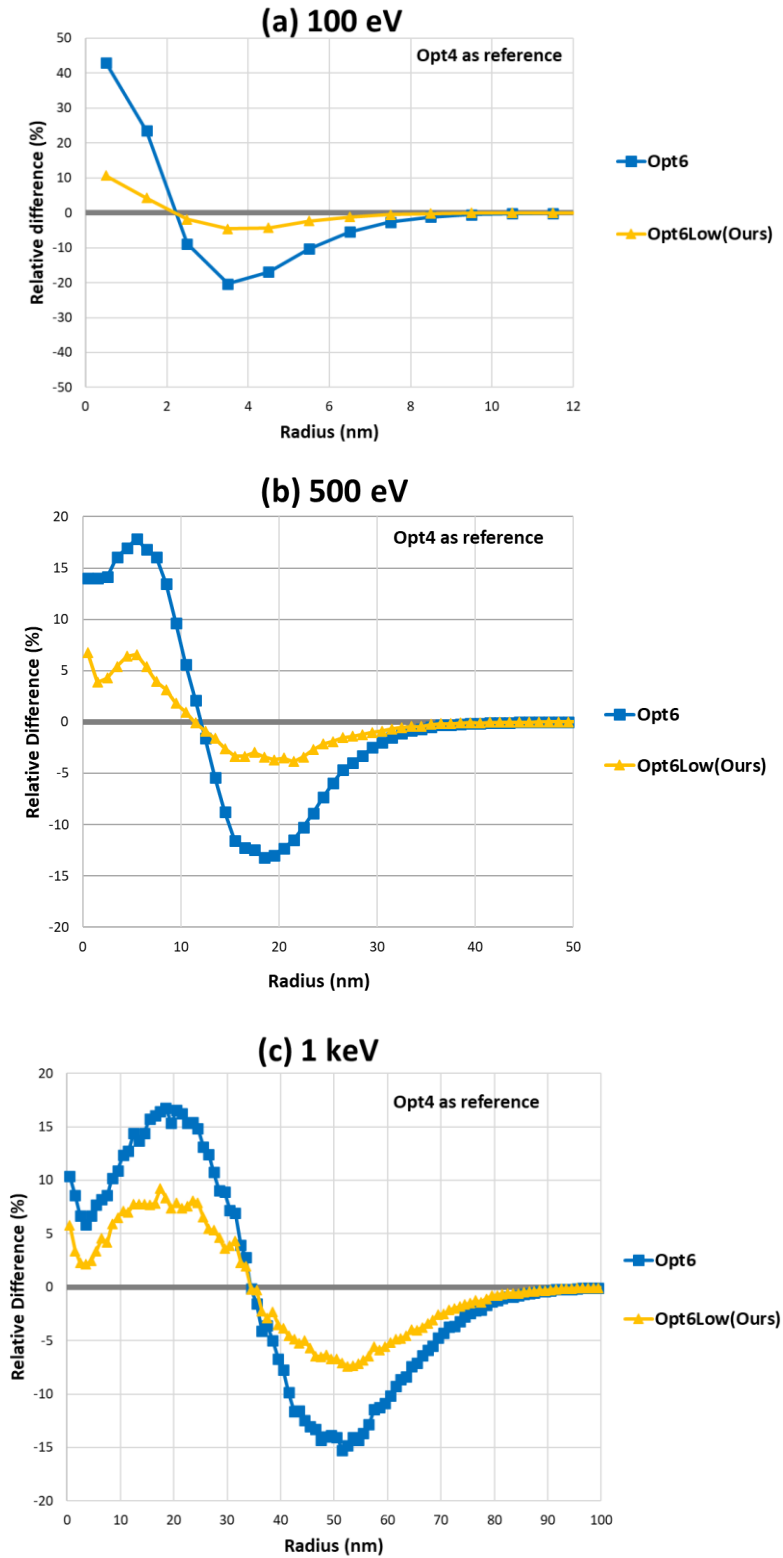
όπου $DPK_{\text{model},i}$ η τιμή του DPK σε ένα συγκεκριμένο σφαιρικό κέλυφος (i) από το σημείο εκτόξευσης των ηλεκτρονίων υπολογισμένο με ένα από τα διαθέσιμα μοντέλα Φυσικής του Geant4-DNA και $DPK_{\text{Opt4},i}$ η τιμή του DPK values στο συγκεκριμένο βήμα (i) υπολογισμένη με το Option 4. Ο παρονομαστής στην Εξ. (58) εξασφαλίζει ότι μεγάλες τιμές της σχετικής απόκλισης σε μακρινά βήματα (σφαιρικά κελύφη) από το κέντρο της σφαίρας δεν υποεκτιμώνται. Τα αποτελέσματα των DPK αναπαρίστανται στην Γραφική 20 και οι σχετικές αποκλίσεις όπως υπολογίζονται από την Εξ. (58) στην Γραφική 21.

Αποτελέσματα



Γραφική 20. Dose point kernels μονο-ενεργητικών ηλεκτρονίων σε υγρό νερό συναρτήσει την ακτινικής απόστασης από το σημείο εκτόξευσης για $T=100$ eV (a), $T=500$ eV (b) and $T=1$ keV (c). Πράσινα σύμβολα-x: μοντέλο Option 2; Κόκκινοι ρόμβοι: μοντέλο Option 4; Μπλε τετράγωνα: το υπάρχον Option 6; Κίτρινα τρίγωνα: μοντέλο Option 6 με το δικό μας BEBVours μοντέλο ιονισμών.

Αποτελέσματα



Γραφική 21. Σχετική διαφορά (%), υπολογισμένη μέσω της Εξ. (58), μεταξύ των DPKs των διαφορετικών μοντέλων Φυσικής στην Γραφική 20. Μπλε τετράγωνα: το υπάρχον Option 6; Κίτρινα τρίγωνα: Option 6 με το δικό μας BEBVours μοντέλο ιονισμών.

Αποτελέσματα

Από τη Γραφική 20 και τη Γραφική 21, παρατηρούμε μια πολύ καλύτερη συμφωνία μεταξύ του νέου/διορθωμένου μοντέλου Option 6 (Opt6Low) και του μοντέλου Option 4. Ειδικότερα, αποκλίσεις της τάξεως του 15-50% μεταξύ του υπάρχοντος Option 6 και του Option 4, μειώνονται πλέον κατά πολύ λιγότερο του 10%. Η επίδραση της νέας διόρθωσης είναι πιο εμφανής στις χαμηλές κινητικές ενέργειες (π.χ., $T=100$ eV) το οποίο είναι συνεπές και με τα λοιπά αποτελέσματα που παρουσιάσαμε.

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Προκειμένου να αξιολογήσουμε την καταλληλότητα των διορθωμένων μοντέλων BED και BEB για προσομοιώσεις ηλεκτρονίων στην υγρή φάση του νερού, υπολογίσαμε τη διαφορική ενεργό διατομή ιονισμού, την ολική ενεργό διατομή ιονισμού και την ισχύ ανασχέσεως στην περιοχή των μη σχετικιστικών ενεργειών. Η εμπειρική τροποποίηση του πολλαπλασιαστικού παράγοντα Burgess όπου προτείνουμε αποτελεί ένα απλό αλλά συνάμα άμεσο τρόπο να συμπεριλάβουμε το φαινόμενο της θωράκισης του φορτίου του πυρήνα ως αποτέλεσμα της πόλωσης του υλικού καθώς αυτό διαπερνάτε από δέσμη ιονίζουσας ακτινοβολίας. Τα φαινόμενα αυτά δεν περιγράφονται από τα αρχικά μοντέλα των Kim και Rudd αλλά και γενικότερα από τη θεωρία binary-encounter δεδομένου ότι είχαν εξ' αρχής αναπτυχθεί για εφαρμογή σε στόχους που βρίσκονται στην αέρια φάση που ενδιαφέρουν περισσότερο την περιγραφή του ιονισμού σε αντιδραστήρες σύντηξης Tokamak ή την μελέτη σχετικά με την ατμόσφαιρα της Γης ή και άλλων πλανητών (Irikura, 2017; Y.-K. Kim et al., 1997). Η δική μας διόρθωση οδηγεί σε σημαντική μείωση της ενεργού διατομής ιονισμού, ιδιαίτερα για ενέργειες χαμηλότερες από 1 keV φέρνοντας σε καλύτερη συμφωνία τα μοντέλα BEB και BED με το διηλεκτρικό μοντέλο του Geant4-DNA (Option4). Από τη διαφορική ενεργό διατομή ιονισμού των μοντέλων BED και BEB με τη δική μας διόρθωση συμπεράναμε ότι η διόρθωσή μας επιδρούσε κυρίως στις ασθενείς αλληλεπιδράσεις (για εναποτιθέμενη ενέργεια ~10-30 eV) διατηρώντας πλήρως την μορφή της καμπύλης. Επιπρόσθετα, το γεγονός ότι στη θεωρία binary-encounter αντιμετωπίζουμε τον ιονισμό από κάθε στιβάδα μεμονωμένα αναμένεται να οδηγεί σε υπερεκτίμηση της ενεργού διατομής ιονισμού όταν η ενέργεια του αρχικού ηλεκτρονίου προσεγγίζει την ενέργεια σύνδεσης της εκάστοτε στιβάδας. Για να μειώσουμε την υπερεκτίμηση αυτή, προτείνουμε μια πολυωνυμική συνάρτηση για την σταθερά k συναρτήσει της κινητικής ενέργειας του ηλεκτρονίου-βλήματος στην περιοχή (10, 50] eV και για τα δύο μοντέλα (BED και BEB). Όταν, λοιπόν, συνδυάζουμε τις Εξ. (42) και (43) του $k(T)$ για (10, 50] eV και $k = 1.9$ για (50, 10000] eV η απόκλιση της ολικής ενεργού διατομής για τον ιονισμό από το μοντέλο Option4 μειώνεται σε λιγότερο από 30% για το μοντέλο BED και σε λιγότερο από 23% για το μοντέλο BEB για όλο το εύρος ενεργειών. Οι υπολογισμοί της ισχύος ανασχέσεως (SP) από ιονισμό οδήγησαν σε συμφωνία με το Option4 εντός του εύρους $\pm 10\%$ και

για τα δύο μοντέλα BED και BEB με τον συνδυασμό που εφαρμόσαμε και στην ολική ενεργό διατομή ιονισμού. Εν κατακλείδι, δείχνουμε ότι η απλή διόρθωση που προτείνουμε όχι μόνο αποδίδει καλύτερα αποτελέσματα από την πιο εκλεπτυσμένη διόρθωση του Guerra (Guerra et al., 2012, 2015) αλλά είναι και πιο εύκολο να εφαρμοστεί σε μοριακό στόχο κάνοντας λιγότερες υποθέσεις σχετικά με τη δομή του στόχου.

Προκειμένου να μελετήσουμε την επίδοση του διορθωμένου μοντέλου BEB στις προσομοιώσεις διάχυσης ηλεκτρονίων, αντικαταστήσαμε το μοντέλο ιονισμών του μοντέλου Option6 με το δικό μας και διατηρήσαμε αμετάβλητο το μοντέλο διεγέρσεων. Με το παράδειγμα “spower” υπολογίστηκαν οι τιμές ανελαστικής ισχύος ανάσχεσης για όλα τα διαθέσιμα μοντέλα για προσομοιώσεις δομής τροχιάς. Σημειώσαμε απόκλιση του διορθωμένου μοντέλου Option 6 από το Option4 ~7% (εντός του 10% όπου ήταν ο επιθυμητός στόχος) και απόκλιση από το υπάρχον Option 6 η οποία έφτανε το -65% για ενέργεια ηλεκτρονίου συγκρίσιμη με την ενέργεια σύνδεσης των τροχιακών ηλεκτρονίων του μορίου του νερού στην υγρή φάση, και μειωνόταν σε λιγότερο από $\pm 4\%$ έως τα 10 keV. Εξίσου ικανοποιητικά αποτελέσματα παρατηρήθηκαν και με το παράδειγμα “range” όπου η υποεκτίμηση της εμβέλειας των ηλεκτρονίων από το αρχικό Option 6 σε σύγκριση με το Option 4, αντιμετωπίζεται επιτυχώς μέσω της διόρθωσης που εισάγουμε. Αλλά και με το παράδειγμα “TestEM12” για τον υπολογισμό της εναποτιθέμενης ενέργειας ανά μονάδα μήκους των ηλεκτρονίων συναρτήσει της ακτινικής μετατόπισής τους, το διορθωμένο μοντέλο Opt6Low αποδίδει αποτελέσματα πλησιέστερα με το Option 4 μειώνοντας την υπερεκτίμηση του αρχικού Option 6 κατά πολύ χαμηλότερα του 10%.

Πιστεύουμε ότι η προτεινόμενη τροποποίηση για το μόριο του νερού στην υγρή φάση μπορεί να οδηγήσει στη βελτίωση της αξιοπιστίας των προσομοιώσεων δομής τροχιάς οι οποίες υιοθετούν τα αναλυτικά μοντέλα των Kim and Rudd και ειδικότερα από το μοντέλο Option 6 του Geant4-DNA.

5. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., Asai, M., Axen, D., Banerjee, S., Barrand, G., Behner, F., Bellagamba, L., Boudreau, J., Broglia, L., Brunengo, A., Burkhardt, H., Chauvie, S., Chuma, J., Chytracek, R., ... Zschesche, D. (2003). Geant4—A simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3), 250–303. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8)
- Bernal, M. A., Bordage, M. C., Brown, J. M. C., Davídková, M., Delage, E., El Bitar, Z., Enger, S. A., Francis, Z., Guatelli, S., Ivanchenko, V. N., Karamitros, M., Kyriakou, I., Maigne, L., Meylan, S., Murakami, K., Okada, S., Payno, H., Perrot, Y., Petrovic, I., ... Incerti, S. (2015). Track structure modeling in liquid water: A review of the Geant4-DNA very low energy extension of the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit. *Physica Medica*, 31(8), 861–874. <https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2015.10.087>
- Bordage, M. C., Bordes, J., Edel, S., Terrissol, M., Franceries, X., Bardiès, M., Lampe, N., & Incerti, S. (2016). Implementation of new physics models for low energy electrons in liquid water in Geant4-DNA. *Physica Medica*, 32(12), 1833–1840. <https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2016.10.006>
- Bordes, J., Incerti, S., Lampe, N., Bardiès, M., & Bordage, M.-C. (2017). Low-energy electron dose-point kernel simulations using new physics models implemented in Geant4-DNA. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 398, 13–20. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.02.044>
- Clementi, E., & Raimondi, D. L. (1963). Atomic Screening Constants from SCF Functions. *The Journal of Chemical Physics*, 38(11), 2686–2689. <https://doi.org/10.1063/1.1733573>
- Clementi, E., Raimondi, D. L., & Reinhardt, W. P. (1967). Atomic Screening Constants from SCF Functions. II. Atoms with 37 to 86 Electrons. *The Journal of Chemical Physics*, 47(4), 1300–1307. <https://doi.org/10.1063/1.1712084>
- Dingfelder, M., Hantke, D., Inokuti, M., & Paretzke, H. G. (1998). Electron inelastic-scattering cross sections in liquid water. *Radiation Physics and Chemistry*, 53(1), 1–18. [https://doi.org/10.1016/S0969-806X\(97\)00317-4](https://doi.org/10.1016/S0969-806X(97)00317-4)
- Dingfelder, M., & Inokuti, M. (1999). The Bethe surface of liquid water. *Radiation and Environmental Biophysics*, 38(2), 93–96. <https://doi.org/10.1007/s004110050143>
- El Naqa, I., Pater, P., & Seuntjens, J. (2012). Monte Carlo role in radiobiological modelling of radiotherapy outcomes. *Physics in Medicine and Biology*, 57(11), R75-97. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/57/11/R75>
- Emfietzoglou, D., Cucinotta, F. A., & Nikjoo, H. (2005). A complete dielectric response model for liquid water: A solution of the Bethe ridge problem. *Radiation Research*, 164(2), 202–211.
- Emfietzoglou, D., Karava, K., Papamichael, G., & Moscovitch, M. (2003). Monte Carlo simulation of the energy loss of low-energy electrons in liquid water. *Physics in Medicine and Biology*, 48(15), 2355–2371.

- Emfietzoglou, D., Kyriakou, I., Garcia-Molina, R., & Abril, I. (2017). Inelastic mean free path of low-energy electrons in condensed media: Beyond the standard models: Low-energy electron inelastic mean free paths. *Surface and Interface Analysis*, 49(1), 4–10. <https://doi.org/10.1002/sia.5878>
- Emfietzoglou, D., Kyriakou, I., Garcia-Molina, R., Abril, I., & Nikjoo, H. (2013). Inelastic Cross Sections for Low-Energy Electrons in Liquid Water: Exchange and Correlation Effects. *Radiation Research*, 180(5), 499–513. <https://doi.org/10.1667/RR13362.1>
- Emfietzoglou, D., & Nikjoo, H. (2007). Accurate Electron Inelastic Cross Sections and Stopping Powers for Liquid Water over the 0.1-10 keV Range Based on an Improved Dielectric Description of the Bethe Surface. *Radiation Research*, 167(1), 110–120. <https://doi.org/10.1667/RR0551.1>
- Francis, Z., Incerti, S., Capra, R., Mascialino, B., Montarou, G., Stepan, V., & Villagrasa, C. (2011). Molecular scale track structure simulations in liquid water using the Geant4-DNA Monte-Carlo processes. *Applied Radiation and Isotopes*, 69(1), 220–226. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2010.08.011>
- Goodhead, D. T. (1989). The Initial Physical Damage Produced by Ionizing Radiations. *International Journal of Radiation Biology*, 56(5), 623–634. <https://doi.org/10.1080/09553008914551841>
- Guerra, M., Amaro, P., Machado, J., & Santos, J. P. (2015). Single differential electron impact ionization cross sections in the binary-encounter-Bethe approximation for the low binding energy regime. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 48(18), 185202. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/48/18/185202>
- Guerra, M., Parente, F., Indelicato, P., & Santos, J. P. (2012). Modified binary encounter Bethe model for electron-impact ionization. *International Journal of Mass Spectrometry*, 313, 1–7. <https://doi.org/10.1016/j.ijms.2011.12.003>
- Heller, J. M., Hamm, R. N., Birkhoff, R. D., & Painter, L. R. (1974). Collective oscillation in liquid water. *The Journal of Chemical Physics*, 60(9), 3483–3486. <https://doi.org/10.1063/1.1681563>
- Hwang, W., Kim, Y. -K., & Rudd, M. E. (1996). New model for electron-impact ionization cross sections of molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 104(8), 2956–2966. <https://doi.org/10.1063/1.471116>
- ICRU 90. (2014). *KEY DATA FOR IONIZING-RADIATION DOSIMETRY: MEASUREMENT STANDARDS AND APPLICATIONS* (No. 90). <https://www.icru.org/report/icru-report-90-key-data-for-ionizing-radiation-dosimetry-measurement-standards-and-applications/>
- Incerti, S., Ivanchenko, A., Karamitros, M., Mantero, A., Moretto, P., Tran, H. N., Mascialino, B., Champion, C., Ivanchenko, V. N., Bernal, M. A., Francis, Z., Villagrasa, C., Baldacchino, G., Guèye, P., Capra, R., Nieminen, P., & Zacharatou, C. (2010). Comparison of GEANT4 very low energy cross section models with experimental data in water. *Medical Physics*, 37(9), 4692–4708. <https://doi.org/10.1118/1.3476457>
- Incerti, S., Kyriakou, I., Bernal, M. A., Bordage, M. C., Francis, Z., Guatelli, S., Ivanchenko, V., Karamitros, M., Lampe, N., Lee, S. B., Meylan, S., Min, C. H., Shin, W. G., Nieminen, P., Sakata, D., Tang, N., Villagrasa, C., Tran, H. N., & Brown, J. M. C. (2018). Geant4-DNA example applications for track structure simulations in liquid water: A report from the Geant4-DNA Project. *Medical Physics*, 45(8), e722–e739. <https://doi.org/10.1002/mp.13048>

- Incerti, S., Kyriakou, I., & Tran, H. N. (2017). Geant4-DNA simulation of electron slowing-down spectra in liquid water. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 397, 45–50. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.02.034>
- Inokuti, M. (1991). How is radiation energy absorption different between the condensed phase and the gas phase? *Radiation Effects and Defects in Solids*, 117(1–3), 143–162. <https://doi.org/10.1080/10420159108220607>
- Irikura, K. K. (2017). Partial Ionization Cross Sections of Organic Molecules. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 122, 28. <https://doi.org/10.6028/jres.122.028>
- Joachain, C. J. (1975). *Quantum Collision Theory, Chapter 8*. North Holland.
- Kim, Y. K. (1975). Energy distribution of secondary electrons. *Radiation Research*, 64(1), 96–105.
- Kim, Y.-K. (2000). *Electron correlation in Electron-Impact Ionization of Hydrogen-Like Atoms* (Vol. 13, pp. 473–479). Physics Essays.
- Kim, Y.-K. (2001). Scaling of plane-wave Born cross sections for electron-impact excitation of neutral atoms. *Physical Review A*, 64(3), 032713. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.64.032713>
- Kim, Y.-K. (2002). *PRACTICAL ATOMIC STRUCTURE AND COLLISION THEORY*. Lecture notes.
- Kim, Y.-K. (2004). Total Ionization Cross Sections of Molecules by Electron Impact. In L. G. Christophorou, J. K. Olthoff, & P. Vassiliou (Eds.), *Gaseous Dielectrics X* (pp. 3–12). Springer US. https://doi.org/10.1007/978-1-4419-8979-6_1
- Kim, Y.-K., & Desclaux, J.-P. (2002). Ionization of carbon, nitrogen, and oxygen by electron impact. *Physical Review A*, 66(1), 012708. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.012708>
- Kim, Y.-K., Hwang, W., & Rudd, M. E. (1996). New model for electron-impact ionization cross sections of atoms and molecules. *AIP Conference Proceedings*, 381, 93–106. <https://doi.org/10.1063/1.51339>
- Kim, Y.-K., Hwang, W., Weinberger, N. M., Ali, M. A., & Rudd, M. E. (1997). Electron-impact ionization cross sections of atmospheric molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 106(3), 1026–1033. <https://doi.org/10.1063/1.473186>
- Kim, Y.-K., & Irikura, K. K. (2000). Electron-impact ionization cross sections for polyatomic molecules, radicals, and ions. *AIP Conference Proceedings*, 543, 220–241. <https://doi.org/10.1063/1.1336281>
- Kim, Y.-K., & Rudd, M. E. (1994). Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization. *Physical Review A*, 50(5), 3954–3967. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.50.3954>
- Kim, Y.-K., Santos, J. P., & Parente, F. (2000). Extension of the binary-encounter-dipole model to relativistic incident electrons. *Physical Review A*, 62(5), 052710. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.62.052710>
- Kyriakou, I., Emfietzoglou, D., Ivanchenko, V., Bordage, M. C., Guatelli, S., Lazarakis, P., Tran, H. N., & Incerti, S. (2017). Microdosimetry of electrons in liquid water using the low-energy models of Geant4. *Journal of Applied Physics*, 122(2), 024303. <https://doi.org/10.1063/1.4992076>
- Kyriakou, I., Incerti, S., & Francis, Z. (2015). Technical Note: Improvements in GEANT4 energy-loss model and the effect on low-energy electron transport in liquid water. *Medical Physics*, 42(7), 3870–3876. <https://doi.org/10.1118/1.4921613>

- Kyriakou, I., Ivanchenko, V., Sakata, D., Bordage, M. C., Guatelli, S., Incerti, S., & Emfietzoglou, D. (2019). Influence of track structure and condensed history physics models of Geant4 to nanoscale electron transport in liquid water. *Physica Medica*, 58, 149–154. <https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2019.01.001>
- Kyriakou, I., Sakata, D., Tran, H. N., Perrot, Y., Shin, W.-G., Lampe, N., Zein, S., Bordage, M. C., Guatelli, S., Villagrasa, C., Emfietzoglou, D., & Incerti, S. (2021). Review of the Geant4-DNA Simulation Toolkit for Radiobiological Applications at the Cellular and DNA Level. *Cancers*, 14(1), 35. <https://doi.org/10.3390/cancers14010035>
- Kyriakou, I., Šefl, M., Nourry, V., & Incerti, S. (2016). The impact of new Geant4-DNA cross section models on electron track structure simulations in liquid water. *Journal of Applied Physics*, 119(19), 194902. <https://doi.org/10.1063/1.4950808>
- Lampe, N., Karamitros, M., Breton, V., Brown, J. M. C., Sakata, D., Sarramia, D., & Incerti, S. (2018). Mechanistic DNA damage simulations in Geant4-DNA Part 2: Electron and proton damage in a bacterial cell. *Physica Medica*, 48, 146–155. <https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2017.12.008>
- Lazarakis, P., Incerti, S., Ivanchenko, V., Kyriakou, I., Emfietzoglou, D., Corde, S., Rosenfeld, A. B., Lerch, M., Tehei, M., & Guatelli, S. (2018). Investigation of track structure and condensed history physics models for applications in radiation dosimetry on a micro and nano scale in Geant4. *Biomedical Physics & Engineering Express*, 4(2), 024001. <https://doi.org/10.1088/2057-1976/aaa6aa>
- Liamsuwan, T., Emfietzoglou, D., Uehara, S., & Nikjoo, H. (2012). Microdosimetry of low-energy electrons. *International Journal of Radiation Biology*, 88(12), 899–907. <https://doi.org/10.3109/09553002.2012.699136>
- Llovet, X., Powell, C. J., Salvat, F., & Jablonski, A. (2014). Cross Sections for Inner-Shell Ionization by Electron Impact. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 43(1), 013102. <https://doi.org/10.1063/1.4832851>
- Margis, S., Magouni, M., Kyriakou, I., Georgakilas, A. G., Incerti, S., & Emfietzoglou, D. (2020). Microdosimetric calculations of the direct DNA damage induced by low energy electrons using the Geant4-DNA Monte Carlo code. *Physics in Medicine & Biology*, 65(4), 045007. <https://doi.org/10.1088/1361-6560/ab6b47>
- Mehnaz, Yang, L. H., Zou, Y. B., Da, B., Mao, S. F., Li, H. M., Zhao, Y. F., & Ding, Z. J. (2020). A comparative study on Monte Carlo simulations of electron emission from liquid water. *Medical Physics*, 47(2), 759–771. <https://doi.org/10.1002/mp.13913>
- Metropolis, N. (1987). The beginning of Monte Carlo method. *Los Alamos Science (Special Issue)*, 125–130.
- Møller, Chr. (1932). Zur Theorie des Durchgangs schneller Elektronen durch Materie. *Annalen der Physik*, 406(5), 531–585. <https://doi.org/10.1002/andp.19324060506>
- Mozejko, P., & Sanche, L. (2003). Cross section calculations for electron scattering from DNA and RNA bases. *Radiation and Environmental Biophysics*, 42(3), 201–211. <https://doi.org/10.1007/s00411-003-0206-7>
- Nahum, A. E. (1999). Condensed-history Monte-Carlo simulation for charged particles: What can it do for us? *Radiation and Environmental Biophysics*, 38(3), 163–173. <https://doi.org/10.1007/s004110050152>
- Nikjoo, H., & Goodhead, D. T. (1991). Track structure analysis illustrating the prominent role of low-energy electrons in radiobiological effects of low-LET radiations. *Physics in Medicine and Biology*, 36(2), 229–238. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/36/2/007>

- Nikjoo, H., O'Neill, P., & Goodhead, D. T. (1997). Computational modelling of low-energy electron-induced DNA damage by early physical and chemical events. *International Journal of Radiation Biology*, 71(5), 467–483. <https://doi.org/10.1080/095530097143798>
- Nikjoo, H., Shuzo, U., & Emfietzoglou, D. (2012). *Interaction of radiation with matter*. CRC PRESS.
- Nikjoo, H., Uehara, S., Emfietzoglou, D., & Cucinotta, F. A. (2006). Track-structure codes in radiation research. *Radiation Measurements*, 41(9–10), 1052–1074. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2006.02.001>
- Nishimura, H., Huo, W. M., Ali, M. A., & Kim, Y.-K. (1999). Electron-impact total ionization cross sections of CF₄, C₂F₆, and C₃F₈. *The Journal of Chemical Physics*, 110(8), 3811–3822. <https://doi.org/10.1063/1.478270>
- Padial, N. T., & Norcross, D. W. (1984). Parameter-free model of the correlation-polarization potential for electron-molecule collisions. *Physical Review A*, 29(4), 1742–1748. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.29.1742>
- Pater, P., Seuntjens, J., El Naqa, I., & Bernal, M. A. (2014). On the consistency of Monte Carlo track structure DNA damage simulations: Consistency of MCTS DNA damage simulations. *Medical Physics*, 41(12), 121708. <https://doi.org/10.1118/1.4901555>
- Ritchie, R. H., Hamm, R. N., Turner, J. E., Wright, H. A., & Bolch, W. E. (1991). Radiation Interactions and Energy Transport in the Condensed Phase. In W. A. Glass & M. N. Varma (Eds.), *Physical and Chemical Mechanisms in Molecular Radiation Biology* (pp. 99–135). Springer US. https://doi.org/10.1007/978-1-4684-7627-9_4
- Sajo, E., & Zygmanski, P. (2020). *Nanoparticle enhanced radiation therapy: Principles, methods and applications, Chapter 5*.
- Sakata, D., Incerti, S., Bordage, M. C., Lampe, N., Okada, S., Emfietzoglou, D., Kyriakou, I., Murakami, K., Sasaki, T., Tran, H., Guatelli, S., & Ivantchenko, V. N. (2016). An implementation of discrete electron transport models for gold in the Geant4 simulation toolkit. *Journal of Applied Physics*, 120(24), 244901. <https://doi.org/10.1063/1.4972191>
- Sakata, D., Kyriakou, I., Okada, S., Tran, H. N., Lampe, N., Guatelli, S., Bordage, M., Ivantchenko, V., Murakami, K., Sasaki, T., Emfietzoglou, D., & Incerti, S. (2018). Geant4-DNA track-structure simulations for gold nanoparticles: The importance of electron discrete models in nanometer volumes. *Medical Physics*, 45(5), 2230–2242. <https://doi.org/10.1002/mp.12827>
- Seco, J., & Verhaegen, F. (2016). *Monte carlo techniques in radiation therapy*. CRC Press.
- Terrissol, M., & Beaudré, A. (1990). Simulation of Space and Time Evolution of Radiolytic Species Induced by Electrons in Water. *Radiation Protection Dosimetry*, 31(1–4), 175–177. <https://doi.org/10.1093/oxfordjournals.rpd.a080660>
- Uehara, S., Nikjoo, H., & Goodhead, D. T. (1999). Comparison and assessment of electron cross sections for Monte Carlo track structure codes. *Radiation Research*, 152(2), 202–213.
- Ulam, S. M. (1991). *Adventures of a mathematician* (1991 edition). University of California Press.
- Verhaegen, F., & Seco, J. (Eds.). (2021). *Monte Carlo techniques in radiation therapy: Introduction, source modelling and patient dose calculations* (Second edition). CRC Press.
- Vriens, L. (1966). Electron exchange in binary encounter collision theory. *Proceedings of the Physical Society*, 89(1), 13–21. <https://doi.org/10.1088/0370-1328/89/1/304>
- Vriens, L. (1969). *Binary-encounter and classical collision theories In: Case Studies in Atomic Collision Physics* (1st ed.). North Holland.

Βιβλιογραφία

- Wälzlein, C., Scifoni, E., Krämer, M., & Durante, M. (2014). Simulations of dose enhancement for heavy atom nanoparticles irradiated by protons. *Physics in Medicine and Biology*, 59(6), 1441–1458. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/59/6/1441>
- Zein, S. A., Bordage, M.-C., Francis, Z., Macetti, G., Genoni, A., Dal Cappello, C., Shin, W.-G., & Incerti, S. (2021). Electron transport in DNA bases: An extension of the Geant4-DNA Monte Carlo toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 488, 70–82. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2020.11.021>

6. ΠΙΝΑΚΕΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

TICS του μοντέλου BED (Γραφική 8a)

T (eV)	Opt4_Ioniz (nm ² /molecule)	BED (nm ² /molecule)	BEDVours (nm ² /molecule)	BEDVours w/fit (nm ² /molecule)	BEDVGuerra (nm ² /molecule)
10	0	0	0	0	0
11	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
12	0.0002	0.0008	0.0004	0.0002	0.0005
13	0.0003	0.0013	0.0007	0.0004	0.0009
14	0.0005	0.0020	0.0011	0.0006	0.0014
15	0.0007	0.0027	0.0016	0.0008	0.0019
16	0.0010	0.0034	0.0020	0.0011	0.0024
17	0.0013	0.0043	0.0026	0.0014	0.0031
18	0.0015	0.0051	0.0031	0.0017	0.0037
19	0.0019	0.0059	0.0036	0.0020	0.0042
20	0.0022	0.0067	0.0041	0.0024	0.0048
22	0.0030	0.0081	0.0050	0.0031	0.0059
24	0.0038	0.0095	0.0060	0.0040	0.0070
26	0.0048	0.0109	0.0070	0.0049	0.0082
28	0.0059	0.0124	0.0080	0.0058	0.0093
30	0.0070	0.0139	0.0090	0.0069	0.0105
32	0.0082	0.0154	0.0101	0.0080	0.0117
40	0.0131	0.0204	0.0137	0.0124	0.0158
50	0.0171	0.0239	0.0164	0.0164	0.0189
60	0.0192	0.0258	0.0181	0.0181	0.0207
70	0.0203	0.0268	0.0192	0.0192	0.0219
80	0.0208	0.0273	0.0199	0.0199	0.0225
90	0.0210	0.0275	0.0204	0.0204	0.0229
100	0.0211	0.0274	0.0206	0.0206	0.0231
150	0.0199	0.0256	0.0203	0.0203	0.0223
200	0.0183	0.0233	0.0192	0.0192	0.0208
250	0.0168	0.0212	0.0179	0.0179	0.0192
300	0.0154	0.0194	0.0167	0.0167	0.0177
350	0.0143	0.0178	0.0156	0.0156	0.0165
400	0.0133	0.0165	0.0146	0.0146	0.0154
450	0.0124	0.0153	0.0137	0.0137	0.0144

Παράρτημα

500	0.0117	0.0143	0.0129	0.0129	0.0135
600	0.0104	0.0127	0.0116	0.0116	0.0121
700	0.0094	0.0114	0.0106	0.0106	0.0109
800	0.0086	0.0104	0.0097	0.0097	0.0100
900	0.0080	0.0095	0.0090	0.0090	0.0092
1000	0.0074	0.0088	0.0083	0.0083	0.0085
2000	0.0044	0.0051	0.0050	0.0050	0.0050
3000	0.0032	0.0037	0.0036	0.0036	0.0036
4000	0.0025	0.0029	0.0028	0.0028	0.0029
5000	0.0021	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024
6000	0.0018	0.0020	0.0020	0.0020	0.0020
7000	0.0016	0.0018	0.0018	0.0018	0.0018
8000	0.0014	0.0016	0.0016	0.0016	0.0016
9000	0.0013	0.0014	0.0014	0.0014	0.0014
10000	0.0012	0.0013	0.0013	0.0013	0.0013

Παράρτημα

TICS του μοντέλου BEB (Γραφική 8b)

T (eV)	Opt4_Ioniz (nm ² /molecule)	BEB (nm ² /molecule)	BEBVours (nm ² /molecule)	BEBVours w/fit (nm ² /molecule)	BEBVGuerra (nm ² /molecule)
10	0	0	0	0	0
11	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
12	0.0002	0.0009	0.0005	0.0002	0.0006
13	0.0003	0.0016	0.0009	0.0004	0.0011
14	0.0005	0.0026	0.0015	0.0005	0.0018
15	0.0007	0.0038	0.0022	0.0008	0.0026
16	0.0010	0.0049	0.0029	0.0010	0.0035
17	0.0013	0.0063	0.0037	0.0013	0.0044
18	0.0015	0.0077	0.0046	0.0016	0.0054
19	0.0019	0.0090	0.0054	0.0020	0.0064
20	0.0022	0.0103	0.0062	0.0024	0.0073
22	0.0030	0.0126	0.0077	0.0032	0.0090
24	0.0038	0.0147	0.0091	0.0040	0.0106
26	0.0048	0.0165	0.0103	0.0050	0.0120
28	0.0059	0.0181	0.0115	0.0059	0.0133
30	0.0070	0.0195	0.0125	0.0070	0.0145
32	0.0082	0.0208	0.0134	0.0080	0.0155
40	0.0131	0.0248	0.0165	0.0128	0.0190
50	0.0171	0.0279	0.0191	0.0191	0.0219
60	0.0192	0.0296	0.0208	0.0208	0.0236
70	0.0203	0.0304	0.0218	0.0218	0.0247
80	0.0208	0.0308	0.0224	0.0224	0.0253
90	0.0210	0.0308	0.0228	0.0228	0.0255
100	0.0211	0.0306	0.0229	0.0229	0.0256
150	0.0199	0.0282	0.0223	0.0223	0.0245
200	0.0183	0.0255	0.0209	0.0209	0.0227
250	0.0168	0.0231	0.0195	0.0195	0.0209
300	0.0154	0.0211	0.0181	0.0181	0.0193
350	0.0143	0.0194	0.0169	0.0169	0.0179
400	0.0133	0.0179	0.0159	0.0159	0.0167
450	0.0124	0.0167	0.0149	0.0149	0.0156
500	0.0117	0.0156	0.0141	0.0141	0.0147
600	0.0104	0.0138	0.0127	0.0127	0.0131
700	0.0094	0.0124	0.0115	0.0115	0.0119
800	0.0086	0.0113	0.0106	0.0106	0.0109
900	0.0080	0.0104	0.0098	0.0098	0.0100
1000	0.0074	0.0096	0.0091	0.0091	0.0093

Παράρτημα

2000	0.0044	0.0056	0.0054	0.0054	0.0055
3000	0.0032	0.0040	0.0039	0.0039	0.0040
4000	0.0025	0.0032	0.0031	0.0031	0.0031
5000	0.0021	0.0026	0.0026	0.0026	0.0026
6000	0.0018	0.0022	0.0022	0.0022	0.0022
7000	0.0016	0.0020	0.0019	0.0019	0.0020
8000	0.0014	0.0017	0.0017	0.0017	0.0017
9000	0.0013	0.0016	0.0016	0.0016	0.0016
10000	0.0012	0.0014	0.0014	0.0014	0.0014

Παράρτημα

TICS Relative Difference (%) για το BED με βάση το Option4 (Γραφική 9α)

T (eV)	BED (%)	BEDVours (%)	BEDVours w/fit (%)	BEDVGuerra (%)
11	99.2	11.8	-27.5	34.8
12	300.5	126.7	26.5	172.9
13	281.7	118.5	14.5	162.7
14	279.7	119.7	12.8	163.8
15	269.4	116.1	11.2	159.2
16	246.8	105.1	7.2	145.7
17	243.1	104.8	9.6	143.9
18	233.3	100.9	10.5	138.2
19	219.3	94.2	10.1	129.5
20	203.7	86.4	8.9	119.7
22	173.3	70.4	5.9	100.1
24	147.4	56.3	3.0	83.1
26	127.1	45.2	1.0	69.6
28	111.4	36.4	-0.2	59.1
30	98.6	29.2	-1.1	50.3
32	87.6	22.9	-2.0	42.7
40	55.8	4.5	-5.5	21.0
50	39.3	-4.1	-4.3	10.4
60	34.0	-5.6	-5.6	7.9
70	32.0	-5.2	-5.2	7.7
80	31.0	-4.3	-4.3	8.2
90	30.5	-3.2	-3.2	8.8
100	30.1	-2.2	-2.2	9.5
150	28.7	2.0	2.0	12.0
200	27.5	4.7	4.7	13.5
250	26.4	6.6	6.6	14.4
300	25.5	7.9	7.9	14.9
350	24.7	8.9	8.9	15.3
400	24.0	9.7	9.7	15.5
450	23.4	10.3	10.3	15.6
500	22.9	10.8	10.8	15.7
600	21.9	11.6	11.6	15.8
700	21.2	12.0	12.0	15.8
800	20.5	12.4	12.4	15.8
900	20.0	12.6	12.6	15.7
1000	19.5	12.8	12.8	15.7
2000	16.9	13.3	13.3	14.9
3000	15.7	13.2	13.2	14.3

Παράρτημα

4000	14.9	13.0	13.0	13.9
5000	14.3	12.8	12.8	13.5
6000	13.9	12.7	12.7	13.3
7000	13.6	12.5	12.5	13.0
8000	13.3	12.3	12.3	12.8
9000	13.1	12.2	12.2	12.7
10000	12.9	12.1	12.1	12.5

Παράρτημα

TICS Relative Difference (%) για το BEB με βάση το Option4 (Γραφική 9 b)

T (eV)	BEB (%)	BEBVours (%)	BEBVours w/fit (%)	BEBVGuerra (%)
11	97.7	11.0	-22.3	33.8
12	357.1	158.6	20.0	211.3
13	379.9	174.1	7.0	229.5
14	401.2	188.9	4.2	246.8
15	409.3	196.0	3.4	255.0
16	396.1	190.8	1.0	248.3
17	403.3	197.3	4.5	254.0
18	400.3	197.8	6.9	252.9
19	387.7	192.4	8.0	245.2
20	369.3	183.4	8.1	233.6
22	325.8	160.7	6.9	205.3
24	282.2	137.0	4.9	176.4
26	243.2	115.2	3.0	150.3
28	209.1	95.9	1.2	127.1
30	179.2	78.7	-0.6	106.6
32	153.5	63.7	-2.1	88.8
40	89.8	26.3	-2.4	45.2
50	62.9	11.6	11.4	27.6
60	54.0	8.0	8.0	22.9
70	50.0	7.4	7.4	21.6
80	47.7	7.6	7.6	21.3
90	46.2	8.2	8.2	21.4
100	45.1	8.9	8.9	21.6
150	41.6	12.1	12.1	23.0
200	39.5	14.5	14.5	24.0
250	37.9	16.2	16.2	24.6
300	36.7	17.6	17.6	25.1
350	35.7	18.6	18.6	25.4
400	34.9	19.4	19.4	25.6
450	34.2	20.0	20.0	25.7
500	33.7	20.6	20.6	25.9
600	32.6	21.4	21.4	26.0
700	31.8	21.9	21.9	26.0
800	31.2	22.3	22.3	26.0
900	30.6	22.6	22.6	26.0
1000	30.1	22.9	22.9	25.9
2000	27.5	23.6	23.6	25.4
3000	26.3	23.7	23.7	24.9

Παράρτημα

4000	25.6	23.6	23.6	24.5
5000	25.0	23.4	23.4	24.2
6000	24.7	23.3	23.3	23.9
7000	24.3	23.2	23.2	23.7
8000	24.0	23.0	23.0	23.5
9000	23.9	23.0	23.0	23.4
10000	23.7	22.9	22.9	23.3

Παράρτημα

SP του μοντέλου BED (Γραφική 10a)

T (eV)	Opt6_ioniz (eV/nm)	Opt4_ioniz (eV/nm)	BED (eV/nm)	BEDVours (eV/nm)	BEDVours w/fit (eV/nm)	BEDVGuerra (eV/nm)
15		0.34	1.12	0.66	0.34	0.79
20	4.87	1.01	3.13	1.92	1.12	2.25
25		2.17	5.26	3.34	2.26	3.90
30	10.65	3.99	7.78	5.06	3.87	5.87
35		6.23	10.60	7.00	5.89	8.12
40	15.10	8.89	13.06	8.75	7.91	10.15
45		10.99	14.99	10.19	9.74	11.80
50	18.35	12.91	16.54	11.40	11.36	13.16
60	20.53	15.47	18.87	13.32	13.32	15.31
70	22.10	17.17	20.51	14.79	14.79	16.91
80	23.24	18.35	21.69	15.94	15.94	18.12
90	24.10	19.14	22.53	16.82	16.82	19.04
100	24.61	19.72	23.12	17.52	17.52	19.74
120	24.94	20.37	23.76	18.46	18.46	20.63
140	24.97	20.62	23.93	18.98	18.98	21.07
160	24.79	20.63	23.83	19.23	19.23	21.22
180	24.44	20.48	23.55	19.29	19.29	21.18
200	23.97	20.22	23.18	19.24	19.24	21.01
250	22.71	19.39	22.04	18.77	18.77	20.30
300	21.33	18.48	20.84	18.11	18.11	19.42
350	20.15	17.57	19.69	17.38	17.38	18.51
400	19.00	16.71	18.63	16.65	16.65	17.64
450	18.00	15.92	17.67	15.95	15.95	16.82
500	17.11	15.20	16.80	15.29	15.29	16.06
600	15.55	13.98	15.30	14.11	14.11	14.75
700	14.31	12.98	14.07	13.10	13.10	13.66
800	13.24	12.11	13.05	12.23	12.23	12.72
900	12.34	11.36	12.17	11.48	11.48	11.92
1000	11.58	10.69	11.42	10.82	10.82	11.22
1500	8.86	8.36	8.82	8.47	8.47	8.76
2000	7.37	6.93	7.26	7.03	7.03	7.26
3000	5.55	5.24	5.46	5.32	5.32	5.48
4000	4.51	4.25	4.43	4.33	4.33	4.45
5000	3.83	3.60	3.75	3.68	3.68	3.77
6000	3.34	3.14	3.26	3.21	3.21	3.28
7000	2.98	2.79	2.90	2.85	2.85	2.92

Παράρτημα

8000	2.69	2.51	2.61	2.58	2.58	2.63
9000	2.46	2.29	2.38	2.35	2.35	2.40
10000	2.27	2.28	2.19	2.17	2.17	2.21

Παράρτημα

SP του μοντέλου BEB (Γραφική 10b)

T (eV)	Opt6_ioniz (eV/nm)	Opt4_ioniz (eV/nm)	BEB (eV/nm)	BEBVours (eV/nm)	BEBVours w/fit (eV/nm)	BEBVGuerra (eV/nm)
15		0.34	1.54	0.89	0.31	1.07
20	4.87	1.01	4.82	2.91	1.11	3.42
25		2.17	7.98	4.98	2.29	5.78
30	10.65	3.99	10.64	6.82	3.79	7.85
35		6.23	12.97	8.50	5.62	9.77
40	15.10	8.89	15.06	10.04	7.76	11.55
45		10.99	16.82	11.40	10.09	13.11
50	18.35	12.91	18.31	12.59	12.56	14.46
60	20.53	15.47	20.60	14.52	14.52	16.63
70	22.10	17.17	22.20	15.99	15.99	18.24
80	23.24	18.35	23.31	17.11	17.11	19.44
90	24.10	19.14	24.07	17.96	17.96	20.33
100	24.61	19.72	24.57	18.60	18.60	20.97
120	24.94	20.37	25.03	19.43	19.43	21.75
140	24.97	20.62	25.05	19.85	19.85	22.07
160	24.79	20.63	24.81	20.01	20.01	22.11
180	24.44	20.48	24.42	20.00	20.00	21.98
200	23.97	20.22	23.95	19.87	19.87	21.73
250	22.71	19.39	22.63	19.27	19.27	20.86
300	21.33	18.48	21.31	18.51	18.51	19.87
350	20.15	17.57	20.07	17.71	17.71	18.88
400	19.00	16.71	18.95	16.93	16.93	17.95
450	18.00	15.92	17.94	16.19	16.19	17.09
500	17.11	15.20	17.03	15.50	15.50	16.29
600	15.55	13.98	15.48	14.27	14.27	14.93
700	14.31	12.98	14.22	13.23	13.23	13.80
800	13.24	12.11	13.16	12.34	12.34	12.84
900	12.34	11.36	12.27	11.57	11.57	12.02
1000	11.58	10.69	11.50	10.90	10.90	11.31
1500	8.86	8.36	8.86	8.52	8.52	8.81
2000	7.37	6.93	7.29	7.06	7.06	7.29
3000	5.55	5.24	5.48	5.34	5.34	5.50
4000	4.51	4.25	4.44	4.34	4.34	4.46
5000	3.83	3.60	3.76	3.69	3.69	3.78
6000	3.34	3.14	3.27	3.22	3.22	3.29
7000	2.98	2.79	2.91	2.86	2.86	2.92

Παράρτημα

8000	2.69	2.51	2.62	2.58	2.58	2.64
9000	2.46	2.29	2.39	2.36	2.36	2.40
10000	2.27	2.28	2.20	2.17	2.17	2.21

Παράρτημα

SP Relative Difference (%) του μοντέλου BED με βάση το Option4 (Γραφική 11a)

T (eV)	BED (%)	BEDVours (%)	BEDVours w/fit (%)	BEDVGuerra (%)
15	230.0	92.9	-0.7	131.4
20	208.8	89.2	10.6	122.5
25	142.5	54.0	4.4	79.7
30	95.0	26.7	-3.0	47.0
35	70.3	12.4	-5.5	30.4
40	46.9	-1.6	-11.0	14.2
45	36.4	-7.3	-11.4	7.3
50	28.1	-11.7	-12.0	2.0
60	21.9	-13.9	-13.9	-1.1
70	19.5	-13.8	-13.8	-1.5
80	18.2	-13.1	-13.1	-1.2
90	17.7	-12.1	-12.1	-0.5
100	17.2	-11.2	-11.2	0.1
120	16.7	-9.4	-9.4	1.3
140	16.1	-7.9	-7.9	2.2
160	15.5	-6.8	-6.8	2.9
180	15.0	-5.8	-5.8	3.4
200	14.6	-4.9	-4.9	3.9
250	13.7	-3.2	-3.2	4.7
300	12.8	-2.0	-2.0	5.1
350	12.1	-1.1	-1.1	5.4
400	11.5	-0.4	-0.4	5.6
450	11.0	0.2	0.2	5.7
500	10.5	0.6	0.6	5.7
600	9.4	0.9	0.9	5.5
700	8.5	1.0	1.0	5.2
800	7.7	1.0	1.0	5.1
900	7.2	1.1	1.1	5.0
1000	6.8	1.2	1.2	5.0
1500	5.5	1.3	1.3	4.8
2000	4.8	1.4	1.4	4.7
3000	4.3	1.6	1.6	4.6
4000	4.1	1.8	1.8	4.6
5000	4.0	2.0	2.0	4.6
6000	4.0	2.2	2.2	4.6
7000	4.0	2.4	2.4	4.6
8000	4.0	2.5	2.5	4.6
9000	4.2	2.8	2.8	4.7

Παράρτημα

10000	-3.6	-4.8	-4.8	-3.1
-------	------	------	------	------

Παράρτημα

SP Relative Difference (%) του μοντέλου BEB με βάση το Option4 (Γραφική 11b)

T (eV)	BEB (%)	BEBVours (%)	BEBVours w/fit (%)	BEBVGuerra (%)
15	353.1	163.2	-8.0	215.8
20	376.2	187.4	9.7	237.4
25	268.1	129.5	5.7	166.4
30	166.6	70.8	-4.9	96.8
35	108.4	36.5	-9.7	56.9
40	69.4	13.0	-12.7	29.9
45	53.0	3.7	-8.2	19.2
50	41.8	-2.5	-2.7	12.0
60	33.1	-6.2	-6.2	7.4
70	29.3	-6.9	-6.9	6.3
80	27.1	-6.7	-6.7	6.0
90	25.8	-6.2	-6.2	6.2
100	24.6	-5.7	-5.7	6.3
120	22.9	-4.6	-4.6	6.8
140	21.5	-3.7	-3.7	7.0
160	20.3	-3.0	-3.0	7.2
180	19.2	-2.3	-2.3	7.3
200	18.4	-1.7	-1.7	7.5
250	16.7	-0.6	-0.6	7.6
300	15.3	0.2	0.2	7.5
350	14.3	0.8	0.8	7.5
400	13.4	1.3	1.3	7.5
450	12.7	1.7	1.7	7.4
500	12.0	2.0	2.0	7.2
600	10.7	2.1	2.1	6.8
700	9.5	2.0	2.0	6.3
800	8.7	1.9	1.9	6.1
900	8.0	1.9	1.9	5.9
1000	7.6	2.0	2.0	5.8
1500	6.0	1.9	1.9	5.4
2000	5.3	1.8	1.8	5.2
3000	4.6	1.9	1.9	5.0
4000	4.4	2.1	2.1	5.0
5000	4.3	2.3	2.3	4.9
6000	4.3	2.5	2.5	4.9
7000	4.3	2.7	2.7	4.9
8000	4.3	2.8	2.8	4.9
9000	4.5	3.1	3.1	5.0

Παράρτημα

10000	-3.3	-4.5	-4.5	-2.8
-------	------	------	------	------

Παράρτημα

SP από το example “spower” (Γραφική 12)

T (eV)	SF_col_ICRU90 (eV/nm)	G4Opt2 (eV/nm)	G4Opt4 (eV/nm)	G4Opt6 (eV/nm)	G4Opt6Low (eV/nm)
20		2.49	1.93	5.71	1.99
30		6.38	4.82	11.99	5.16
40		10.44	9.64	16.66	9.36
50		14.23	13.60	20	14.26
60		16.72	16.11	22.21	16.25
80		20.14	18.90	24.85	18.79
100		21.93	20.19	26.08	20.13
150		22.60	20.73	26.13	20.78
200		21.68	20.54	24.96	20.91
250		20.52	19.66	23.55	20.16
300		19.26	18.72	22.06	19.32
400		17.11	16.90	19.59	17.58
500		15.39	15.36	17.59	16.07
600		14.00	14.12	15.97	14.79
800		11.94	12.22	13.57	12.77
1000	11.81	10.50	10.78	11.86	11.26
1500	9.06	8.08	8.43	9.07	8.79
2000	7.44	6.86	6.98	7.53	7.29
3000	5.56	5.24	5.27	5.66	5.52
4000	4.50	4.29	4.28	4.60	4.50
5000	3.81	3.66	3.63	3.90	3.82
6000	3.32	3.21	3.16	3.40	3.33
8000	2.66	2.60	2.53	2.74	2.68
10000	2.24	2.20	2.29	2.31	2.44

Παράρτημα

SP Relative Difference (%) από example “spower” (Γραφική 13)

T (eV)	G4Opt6Low vs G4Opt6 (%)	G4Opt6Low vs G4Opt4 (%)
20	-65.1	3.2
30	-56.9	7.1
40	-43.8	-2.9
50	-28.7	4.8
60	-26.8	0.9
80	-24.4	-0.6
100	-22.8	-0.3
150	-20.5	0.2
200	-16.2	1.8
250	-14.4	2.6
300	-12.4	3.2
400	-10.3	4.0
500	-8.7	4.6
600	-7.4	4.7
800	-5.9	4.5
1000	-5.1	4.4
1500	-3.0	4.3
2000	-3.2	4.4
3000	-2.5	4.7
4000	-2.2	5.0
5000	-2.1	5.2
6000	-2.1	5.4
8000	-2.1	6.0
10000	5.6	6.5

Παράρτημα

Range (nm) με το example “range” (Γραφική 14)

T (eV)	Opt2 (nm)	Opt4 (nm)	Opt6 (nm)	Opt6Low (nm)
30	2.6	3.6	1.4	3.2
40	4.0	4.4	2.2	4.9
50	4.6	5.6	2.6	5.5
60	5.0	5.9	3.1	6.0
80	6.0	7.0	3.9	7.1
100	6.9	8.0	4.6	8.0
150	9.1	10.4	6.5	10.5
200	11.5	12.9	8.5	12.8
250	13.9	15.4	10.6	15.5
300	16.5	18.2	12.9	18.1
400	22.2	24.0	17.9	23.8
500	28.6	30.5	23.4	30.0
600	35.7	37.6	29.6	36.7
800	51.8	53.5	43.7	51.9
1000	70.3	71.7	60.1	69.5
1500	127.3	127.6	110.4	123.0
2000	197.0	196.2	172.9	188.4
3000	371.5	369.5	332.5	353.2
4000	590.1	588.5	535.2	562.5
5000	850.9	851.4	778.2	810.7
6000	1152.6	1157.7	1060.6	1098.0
8000	1869.4	1891.7	1735.1	1792.0
10000	2727.9	2755.9	2549.4	2610.0

Παράρτημα

Range relative difference (%) with Option4 as baseline (Γραφική 15)

T (eV)	Opt2 vs Opt4 (%)	Opt6 vs Opt4 (%)	Opt6Low vs Opt4 (%)
30	-28.9	-62.8	-11.0
40	-10.0	-49.6	10.3
50	-18.3	-52.9	-2.7
60	-15.1	-48.2	1.8
80	-14.0	-45.0	0.6
100	-13.5	-42.4	0.0
150	-12.1	-37.5	1.2
200	-11.1	-33.9	-0.5
250	-9.8	-31.1	0.5
300	-9.3	-29.1	-0.1
400	-7.6	-25.6	-1.2
500	-6.0	-23.2	-1.5
600	-5.0	-21.1	-2.4
800	-3.2	-18.3	-3.0
1000	-1.9	-16.2	-3.1
1500	-0.2	-13.5	-3.6
2000	0.4	-11.9	-4.0
3000	0.6	-10.0	-4.4
4000	0.3	-9.1	-4.4
5000	-0.1	-8.6	-4.8
6000	-0.4	-8.4	-5.2
8000	-1.2	-8.3	-5.3
10000	-1.0	-7.5	-5.3

Παράρτημα

Penetration (nm) με το example “range” (Γραφική 16)

T (eV)	Opt2 (nm)	Opt4 (nm)	Opt6 (nm)	Opt6Low (nm)
30	1.3	1.3	0.7	1.2
40	1.7	1.6	1.0	1.6
50	2.0	1.9	1.2	1.8
60	2.2	2.1	1.4	2.0
80	2.6	2.5	1.8	2.4
100	3.0	2.9	2.2	2.8
150	4.0	3.9	3.1	3.9
200	5.2	5.1	4.2	5.0
250	6.5	6.4	5.4	6.3
300	8.0	7.9	6.7	7.7
400	11.3	11.1	9.6	10.8
500	15.1	14.8	12.9	14.4
600	19.3	19.0	16.7	18.2
800	29.3	28.7	25.4	27.3
1000	40.9	40.0	35.6	38.0
1500	77.3	75.5	67.7	71.3
2000	122.2	119.9	107.7	111.7
3000	236.6	233.3	211.2	217.6
4000	381.8	378.1	343.9	353.1
5000	559.8	553.4	504.5	515.7
6000	771.0	759.0	690.6	703.2
8000	1273.5	1249.7	1138.1	1163.0
10000	1875.4	1835.1	1682.5	1698.0

Παράρτημα

Penetration relative difference (%) with Option4 as baseline (Γραφική 17)

T (eV)	Opt2 vs Opt4 (%)	Opt6 vs Opt4 (%)	Opt6Low vs Opt4 (%)
30	-2.7	-45.8	-8.2
40	8.8	-34.2	2.0
50	2.4	-35.8	-6.1
60	2.4	-32.7	-5.0
80	2.4	-29.1	-4.2
100	2.6	-25.8	-3.8
150	2.5	-20.8	-1.9
200	1.9	-18.0	-1.7
250	1.7	-16.2	-1.5
300	1.1	-15.3	-2.0
400	1.0	-14.1	-2.7
500	1.5	-13.0	-3.1
600	1.6	-12.3	-4.2
800	2.2	-11.5	-4.8
1000	2.2	-11.0	-5.1
1500	2.3	-10.4	-5.6
2000	1.9	-10.2	-6.8
3000	1.4	-9.5	-6.7
4000	1.0	-9.0	-6.6
5000	1.1	-8.9	-6.8
6000	1.6	-9.0	-7.4
8000	1.9	-8.9	-6.9
10000	2.2	-8.3	-7.5

Παράρτημα

Projected Length (nm) με το example “range” (Γραφική 18)

T (eV)	Opt2 (nm)	Opt4 (nm)	Opt6 (nm)	Opt6Low (nm)
30	0.5	0.4	0.3	0.4
40	0.7	0.5	0.4	0.5
50	0.8	0.7	0.6	0.6
60	0.9	0.9	0.7	0.7
80	1.2	1.0	0.9	1.0
100	1.4	1.2	1.1	1.2
150	2.1	1.9	1.7	1.9
200	2.9	2.6	2.4	2.6
250	3.8	3.5	3.2	3.5
300	4.7	4.4	4.1	4.5
400	7.0	6.6	6.0	6.5
500	9.5	9.1	8.2	8.9
600	12.4	11.9	10.8	11.4
800	19.1	18.4	16.6	17.3
1000	27.0	26.2	23.6	24.3
1500	52.0	50.6	45.4	47.3
2000	83.0	81.5	72.8	74.2
3000	162.9	160.5	143.6	146.0
4000	266.1	261.9	235.5	238.4
5000	401.0	385.2	346.9	353.3
6000	556.7	528.7	477.1	482.0
8000	924.6	873.6	789.2	802.8
10000	1362.4	1288.6	1170.2	1165.0

Παράρτημα

Projected length relative difference (%) with Option4 as baseline (Γραφική 19)

T (eV)	Opt2 vs Opt4 (%)	Opt6 vs Opt4 (%)	Opt6Low vs Opt4 (%)
30	36.8	-18.5	-6.7
40	21.5	-21.6	-12.6
50	9.6	-21.0	-11.9
60	6.1	-22.0	-15.2
80	11.8	-14.9	-5.2
100	14.0	-10.2	-0.8
150	12.0	-8.0	1.2
200	9.3	-8.3	-0.2
250	8.1	-8.0	0.7
300	7.1	-8.0	0.6
400	5.4	-9.2	-2.2
500	5.2	-9.4	-2.3
600	4.1	-9.7	-4.6
800	3.6	-9.9	-6.2
1000	2.9	-10.1	-7.3
1500	2.8	-10.2	-6.4
2000	1.8	-10.6	-8.9
3000	1.5	-10.5	-9.0
4000	1.6	-10.1	-9.0
5000	4.1	-9.9	-8.3
6000	5.3	-9.8	-8.8
8000	5.8	-9.7	-8.1
10000	5.7	-9.2	-9.6