



**MİKRO DESENLİ GAZLI DETEKTÖRLERDE
İYON-İYONİK KÜMELERİN SİNYAL OLUŞUMUNA ETKİLERİ**

Yalçın KALKAN



T.C.
ULUDAĞ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**MİKRO DESENLİ GAZLI DETEKTÖRLERDE
İYON-İYONİK KÜMELERİN SINYAL OLUŞUMUNA ETKİLERİ**

Yalçın KALKAN

Prof. Dr. İlhan TAPAN
(Danışman)

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİMDALI

BURSA–2015

Her Hakkı Saklıdır

TEZ ONAYI

Yalçın KALKAN tarafından hazırlanan “Mikro Desenli Gazlı Detektörlerde Sinyal Oluşumunu Etkileyen Fiziksel Süreçler” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Uludağ Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda **DOKTORA TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. İlhan TAPAN

Başkan:	Prof. Dr. İlhan TAPAN U. Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Anabilim Dalı	İmza
Üye:	Doç. Dr. Ercan PİLİÇER U. Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Anabilim Dalı	İmza
Üye:	Prof. Dr. Metin ÖZTÜRK U. Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Anabilim Dalı	İmza
Üye:	Prof. Dr. Haluk DENİZLİ A. İ. B. Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Anabilim Dalı	İmza
Üye:	Doç. Dr. Cüneyt ÇELİKTAŞ E. Ü. Fen Fakültesi Fizik Anabilim Dalı	İmza

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr. Ali Osman DEMİR
Enstitüsü Müdürü

.../.../.....

U.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- tez içindeki bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda ilgili eserlere bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu,
- atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapmadığımı,
- ve bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversite veya başka bir üniversitede başka bir tez çalışması olarak sunmadığımı,

beyan ederim.

..../..../.....

Yalçın KALKAN

ÖZET

Doktora Tezi

MİKRO DESENLİ GAZLI DETEKTÖRLERDE İYON-İYONİK KÜMELERİN SİNYAL OLUŞUMUNA ETKİLERİ

Yalçın KALKAN

Uludağ Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. İlhan TAPAN

Detektörlerin aktif gaz hacimlerinde, yüklü parçacıkların gaz moleküllerini iyonlaştırması ile ilk iyon grubu üretilmiş olur. Birçok gazlı detektörün içerisinde, elektronlar ve iyonlardan indüklenen sinyaller, genelde kullanılan elektronik cihazlar ile gözlenemeyecek kadar küçüktür. Bu durum elektronların yüksek elektrik alan vasıtasıyla, sinyalin alındığı elektrota yakın bir bölgeye transferi ile giderilir, burada elektronlar bol miktarda ikincil elektronlar ve iyonlar üretirler ki; bu olay çığ olarak adlandırılır.

İyonlar hızlarının düşük olmasından dolayı uzun süre ortamda kalırken, elektronlar yalıtkan bir ortam söz konusu olmadığı için hızla bölgeyi terkeder. TPC gibi geniş gaz hacmine sahip detektörlerde birikmiş iyon yükü, önemli elektrik alan bozulmalarına neden olabilir. Bu bozulmaların üstesinden gelmek için, iyon mobilitesinin doğru olarak bilinmesi gereklidir.

Magboltz gaz karışımları içerisinde elektron transferini simüle edebilir ama bilindiği kadarıyla iyonlar için böyle bir program yoktur. Bazı gazlar içerisinde iyonların mobilite değerlerini içeren bazı derlemeler mevcuttur ve bunlar temel hesaplamalar yapmak için oldukça caziptir. Bu veriler üzerinde, düşük iyonizasyon potansiyeline sahip olan gaz bileşeninin iyonlaşması sayesinde iyonların oluşacağı varsayımı hakimdir. Bu tez kapsamında gösterildiği üzere, bu yanlış bir varsayımdır: Alkan

iyonları tekrar tekrar alkan molekülleri ile reaksiyona girer, giderek daha büyük moleküller meydana getirirler; soygaz iyonları ise soygaz atomları ile bağlanabilir. Ancak tüm bu süreçlere rağmen sonuçta CO_2^+ ve H_2O^+ iyonik kümeleri meydana gelir. Bu reaksiyonlar tipik olarak 1 nanosaniye içerisinde gerçekleşir ve bu süre, iyonların detektör içerisindeki transfer süresi ile kıyaslandığında çok hızlı reaksiyonlardır. Sonuçta daha büyük ve yavaş iyonik kümeler meydana gelir.



Anahtar kelimeler: İyonik kümeler, uzaysal yük, mobilite, Garfield⁺⁺
2015, xi + 87 Sayfa

ABSTRACT

PhD Thesis

EFFECTS OF IONS-CLUSTERS ON THE SIGNAL FORMATION IN MICRO PATTERN GAS DETECTORS

Yalçın KALKAN

Uludağ University
Graduate School of Natural and Applied Science
Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. İlhan TAPAN

In detectors where gas is the active medium, a first set of ions is produced when charged particles ionise gas molecules. In most gas-based detectors, the signals induced by the ionisation electrons and ions are too small to be visible with common read-out electronics. This is remedied by transferring the ionisation electrons to a high-field region, in the vicinity of the read-out electrodes, where the electrons generate copious amounts of secondary electrons and ions - the so-called avalanche. The electrons are evacuated rapidly, provided they do not land on dielectric media (as is the case in GEMs) while ions, owing to their lower speed, stay around longer. In detectors with large drift volumes, such as TPCs, the accumulated ion charge can cause significant field distortions. In order to correct off-line for these space-charge distortions, one needs to know the ion mobility accurately.

Magboltz can simulate electron transport in gas mixtures but there is, to the best of my knowledge, no such program for ions. Compilations do exist of the mobility of some ions in some gases and it is tempting to base calculations on these values, assuming that the gas component with the lowest ionisation potential supplies the ions. As I show in this thesis, this is an incorrect assumption: alkane ions repeatedly react with alkane molecules, forming larger and larger molecules; noble gas ions bind with noble gas atoms; CO_2^+ and H_2O^+ form clusters. These reactions typically take ns and hence are fast compared with ion transport in detectors. The reaction products are larger and heavier, hence slower than the originally produced ions.

Key words: Cluster ions, space charge, mobility, Garfield⁺⁺

2015, xi + 87 Pages

TEŞEKKÜR

Tez çalışmam sırasında destek ve tecrübelerini her zaman yanıbaşımnda hissettiğim ve akademik geleceğimi şekillendiren fırsatları kendisini tanıdığım andan itibaren tarafıma sunan danışman hocam Sayın Prof. Dr. İlhan Tapan'a, tez izleme komitesinde bulunan Prof. Dr. Metin Öztürk, Doç. Dr. Ercan Piliçer'e ve çalışmalarımnda yardımlarını esirgemeyen kıymetli arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Tez taslağı için harcadığı emeği ve tecrübelerini paylaşan Dr. Özkan Şahin'e, tezin Kimya ile ilgili ayağında emeklerini manevi destekleriyle sunan dostum Dr. Yunus Kaya'ya, tüm tez kapsamında gerek grafiklerin hazırlanması, değerlendirilmesi, yorumlanması ve tartışılması hususunda yardımlarını esirgemeyen Dr. Rob Veenhof'a teşekkür ederim. Tez çalışmamı kendi sistemlerini kullanarak deneysel olarak destekleyen; Dr. André Cortez başta olmak üzere Coimbra Üniversitesi grubuna, Dr. Rainer Renfordt başta olmak üzere NA49 TPC grubuna, Dr. Mesut Arslanok başta olmak üzere ALICE TPC grubuna, CERN RD51 projesi ve bu proje kapsamında gerçekleştirdiğimiz yurt dışı bilimsel ziyaretler için finansal destekte bulunan Türkiye Atom Enerjisi Kurumu'na teşekkür ederim.

Ayrıca, fedakarlık, sabır ve destekleriyle ayakta kaldığım kıymetli annem, babam ve biricik kızıma sonsuz teşekkürlerimi bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	i
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR	iv
İÇİNDEKİLER	v
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ	xi
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL TEMELLER	3
2.1. Langevin Teorisi	3
2.2. Sert Küre (Hard Sphere) Modeli	5
2.3. Mason-Schamp Teorisi	7
2.4. Etkisiz-Çarpışma (Null-Collision) Modeli	8
2.5. İyonik Kümeler	10
2.6. Blanc yasası	11
3. MATERYAL ve YÖNTEM	13
3.1. İyon–Gaz Etkileşmeleri	13
3.2. Kutuplanabilirlik Etkisi	18
3.3. Programlama Aşamasının Bilimsel Temelleri	20
3.3.1. Etki parametresi için rastlantısal sayılar üretilmesi	20
3.3.2. Saçılma açısı için rastlantısal sayılar üretilmesi	23
3.3.3. Azimütal açı için rastlantısal sayılar üretilmesi	24
3.3.4. İyonun hız vektörünün döndürülmesi ve rotasyon vektörleri	24
3.4. Programlama Aşamasının İlk Test Sonuçları	26
3.4.1. İyon Sınıf'ının “çarpışma ve saçılmalar” için ilk test sonuçları	26
3.4.2. İyon class'ının “serbest zaman” için ilk test sonuçları	30
3.5. Etkisiz-Çarpışma (Null-Collision) Modeli'nin Probleme Uygulanması	38
3.6. İyonun Ortalama Serbest Zamanı için Matematiksel Sonuçlar	40
3.7. İyonun Serbest Yolu ve Ortalama Serbest Yolu	42
3.8. Deneysel Kurulum ve Mobilite Ölçüm Yöntemi	44

3.9. İyonik Kümelerin Oluşumu	45
3.9.1. Çığ oluşumu	45
3.9.2. Argon ve Neon iyonik kümelerinin oluşumları	47
3.9.3. Karbondioksit iyonik kümelerinin oluşumu	48
3.9.4. Ar-CO ₂ karışımı içerisinde birincil iyonik kümelerinin oluşumu	49
3.9.5. İyonik kümelerin oluşumu ve bozunumu	51
3.10. Mobilite	52
3.10.1. Karbondioksit iyonunun Karbondioksit içerisindeki mobilitesi	52
3.10.2. Karbondioksit iyonik kümesinin Karbondioksit içerisindeki mobilitesi	53
3.10.3. Karbondioksit iyonik kümesinin Argon ve Neon içerisindeki mobilitesi	55
3.10.4. Soygazlar içerisinde iyon mobilitesi	57
4. ARAŞTIRMA BULGULARI	59
4.1. Mobilite İçin Geliştirilen Modeller	59
4.2. İyonun Hızı, Sürüklenmesi ve Difüzyonu Hakkındaki İlk Bulgular	62
4.2.1. Enine ve Boyuna sıcaklık parametreleri	64
4.3. Tesir kesitlerinin gözden geçirilmesi	65
4.4. Deneysel Sonuçlar	68
4.4.1. Coimbra'da elde edilen mobilite değerleri	68
4.4.2. G. Schultz ve ark. tarafından alınan ölçümler	71
4.4.3. NA49 TPC verileri (kuru gaz)	72
4.4.4. ALICE TPC (Nemli ortam)	75
4.4.5. ALICE TPC detektöründen alınan veriler (Azot gazı)	77
5. TARTIŞMA ve SONUÇ	79
KAYNAKLAR	80
ÖZGEÇMİŞ	87

SİMGELELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

Simge	Açıklama
r_A	A reaktantının yarıçapı
P_{AB}	A ve B molekülleri arasında kimyasal bir reaksiyon meydana gelme olasılığı
m_A	A molekülünün kütlesi
r_a	Anot yarıçapı
V	Anot ve katot arasındaki gerilim
N_e	Anotta biriken elektronların toplam sayısı
Ar	Argon
C_2H_2	Asetilen
M	Atom veya molekül kütlesi
v	Atom veya molekülün anlık hızı
\bar{v}	Atom veya molekülün ortalama hızı
λ	Atom veya molekülün ortalama serbest yolu
τ	Atom veya molekülün ortalama çarpışma süresi
d	Atom veya molekülün çapı veya anot ve katot arasındaki uzaklık
N_A	Avogadro sayısı
N_2	Azot
r_B	B reaktantının yarıçapı
m_B	B molekülünün kütlesi
N	Birim hacimde bulunan atom sayısı
k_B	Boltzmann sabiti
$T_{//}$	Boyuna sıcaklık parametresi
e	Elemanter yük
T_{\perp}	Enine sıcaklık parametresi
R	Evrensel gaz sabiti
T_{eff}	Efektif sıcaklık
Ω_D	Elastik çarpışma tesir kesiti
b	Etki parametresi
C_2H_6	Etan
T_{gaz}	Gazın sıcaklığı

Simge	Açıklama
$m_g,$	Gaz molekülünün kütlesi
m_{gaz}, m_1	
σ_i	Gazın iyonlaşma tesir kesiti
σ^{itoplam}	Gazın toplam iyonlaşma tesir kesiti
w_g, w	Gazın çarpışma öncesi hızı
W_g, W	Gazın çarpışma sonrası hızı
He	Helyum
$f(v)$	Hızların dağılım fonksiyonu
r	İyon ve molekül arasındaki bağıl mesafe
v_d	İyonun sürüklenme hızı
v_{termal}	İyonun termal hızı
v_i, v	İyonun çarpışma öncesi hızı
V_i, V	İyonun çarpışma sonrası hızı
ν	İyonun ortalama çarpışma frekansı
m_i, m_i, m_1	İyonun molekül kütlesi
CO ₂	Karbondioksit
CF ₄	Karbon–tetraflorür
r_c	Katot yarıçapı
L	Klasik açısal momentum
E_k	Kinetik enerji
Kr	Kripton
$f(v)$	Maxwell - Boltzman hız dağılım fonksiyonu
CH ₄	Metan
μ	Moleküllerin indirgenmiş kütleleri
Ne	Neon
d_{12}	Ortalama çap
Rn	Radon
n_0	Sayaç içinden geçen yüklü bir parçacık tarafından başlangıçta üretilen elektron sayısı
T	Sıcaklık
σ	Tesir kesiti
α	Townsend katsayısı, açı değeri, Nötr molekülün kutuplanabilirlik katsayısı
A*	Uyarılmış durumdaki A atomu
Xe	Zenon

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 2.1. <i>Sol:</i> CO_2^+ iyonları ve $\text{CO}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ iyonik kümelerinin, CO_2 içerisindeki mobilitelerine ait ölçümlerinin bir profili. <i>Sağ:</i> Bazı mobilite ölçümleri için E/N grafikleri.	12
Şekil 3.1. İyon ve gaz atomunun çarpışması temsili.	15
Şekil 3.2. Etki parametresi için rastlantısal sayılar üretilebilmesi için kullanılan yöntem için yardımcı şema.	21
Şekil 3.3. Etki parametresi için kümülatif yoğunluk fonksiyonu grafiği.	22
Şekil 3.4. İyon ve gaz atomunun çarpışması durumunda açılar.	23
Şekil 3.5. İyonun radyal hız dağılımı spektrumu.	29
Şekil 3.6. Çeşitli sıcaklık değerleri için polar açının dağılımı.	30
Şekil 3.7. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki çarpışma frekansının değişimi.	31
Şekil 3.8. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zamanlarının dağılım spektrumu.	32
Şekil 3.9. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zamanlarının dağılım spektrumu.	33
Şekil 3.10. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zamanlarının dağılım spektrumu.	34
Şekil 3.11. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zaman dağılım spektrumu ve çarpışma frekansının zamanla değişimi.	36
Şekil 3.12. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest yolunun dağılım spektrumu.	37
Şekil 3.13. İyonların serbest yollarınının, a) $\nu' < \nu$ b) $\nu' > \nu$ şartları için histogramlar.	39
Şekil 3.14. İlk çarpışmayı gerçekleştirecek gaz atomunun serbest zaman dağılımının elde edilmesini içeren yöntemi açıklamak için yardımcı şema.	40
Şekil 3.15. Ar % 90- CO_2 % 10 (<i>sol</i>) ve Ne % 90- CO_2 % 10 (<i>sağ</i>) karışımı içerisindeki iyonizasyon oranları.	45
Şekil 3.16. <i>Sol:</i> Ar- CO_2 karışımı içerisindeki iyonik kümelerin oluşumunu gösteren diyagram ve takip eden geçişler. <i>Sağ:</i> İyon veya iyonik kümelerin birbirine dönüşümü sırasında sayılarının değişimi.	50
Şekil 3.17. Bazı iyonların Ar ve Ne içerisindeki, 10 Td indirgenmiş elektrik alandaki indirgenmiş mobiliteleri.	55
Şekil 3.18. <i>Sol:</i> CO_2 içerisinde, 10 Td'a extrapole edilmiş indirgenmiş mobilite değerleri. <i>Sağ:</i> Ar, Ne (eğriler) ve CO_2 (data noktaları) elektron etkisi ile tesir kesiti değerleri.	57

Şekil 4.1. Çeşitli elektrik alan değerlerinde, iyon hızının olasılık yoğunluğu spektrumu.	63
Şekil 4.2. Kovalent ve van der Waals yarıçaplarının şekil ile temsili.	66
Şekil 4.3. <i>Sol</i> : İyon veya iyonik kümeler, $p = 1070$ Pa basınç altında, zamanın bir fonksiyonu olarak sayılmıştır. <i>Sağ</i> : Ar-CO ₂ karışımı için Blanc diyagramı.	69
Şekil 4.4. <i>Sol</i> : Ne-CO ₂ için $E/N = 20$ Td alan altında çizilmiş Blanc diyagramı. <i>Sağ</i> : Soldaki diyagramın yakınlaştırılmış bir gösterimi.	70
Şekil 4.5. <i>Sol</i> : NA49 VTPC-1 içerisinde lazer ile elde edilen iyonların anod telinden katot teline doğru ilerlerken indüklenen sinyal. <i>Sağ</i> : ALICE iç ve dış detektöründen, anod-katot arası geçiş süresinden faydalanarak elde edilmiş iyon mobilitesi değerleri (Rossegger ve Riegler 2010).	72
Şekil 4.6. TPC çalışma prensibinin anlaşılması için basitçe çizilmiş bir şema.	73



ÇİZELGELER DİZİNİ

Sayfa

Tablo 4.1. Gazlı detektörler içerisinde sıklıkla kullanılan gazlara ait iyonların, bu gazlar içerisindeki tesir kesitlerinin deneysel ve atomik yarıçaplar dikkate alınarak hesaplanmış değerleri (Ellis <i>ve ark.</i> 1976 <i>b</i>), (Ellis <i>ve ark.</i> 1978), (Ellis <i>ve ark.</i> 1984), (Viehland <i>ve Mason</i> 1995). . . .	65
Tablo 4.2. Gazlı detektörler içerisinde sıklıkla kullanılan gazlara ait iyonların, bu gazlar içerisindeki tesir kesitlerinin deneysel ve van der Waals yarıçapları dikkate alınarak hesaplanmış değerleri (Winter 2010), (Ellis <i>ve ark.</i> 1978), (Ellis <i>ve ark.</i> 1984), (Viehland <i>ve Mason</i> 1995). . . .	66
Tablo 4.3. Bazı gaz iyonları ve gazlar arasındaki reaksiyonlar ve hız sabitleri (Anicich <i>ve Huntress Jr.</i>).	68
Tablo 4.4. NA49 veya ALICE içerisinde, iyonların anod telinden katot veya alan teline geçiş süresi (t_{exp}).	77

1. GİRİŞ

Bir gazlı detektörün temel bileşenleri olarak bilinen elektronlar ve iyonların detektör içerisindeki davranışları, şüphesiz detektörün ve elde edilecek sinyalin kalitesini etkiler. Gazlı detektörlerin çalışma prensibi, birçok tez ve bilimsel yayında açıklanmış olduğundan bu çalışmada bu konuya yer verilmeyecektir ama biraz daha ayrıntılı düşünüldüğünde, aslında bir gazlı detektörün çalışması sırasında gerçekleşen fiziksel olayların daha karmaşık olduğu yargısına ulaşılmaktadır. Sonuçta iyonizasyonların sonucunda oluşan elektronlar ve iyonlar aynı gaz ortamında bulunmakta olup, kendi aralarında ve birbirleri ile etkileşmeleri kaçınılmazdır. Elektronların sebep olduğu etkileşimler, sinyale ve gaz kazancına olan etkileri ile ilgili literatürde bilimsel yayımlar bulunmaktadır. Ancak iyonların detektör içerisinde yol açtığı olaylar, sinyale etkileri ve detektörün kalitesini nasıl etkiledikleri bu tez çalışmasına kadar neredeyse hiç tartışılmamıştır. Oldukça yoğun bir bilimsel kitle tarafından kullanılan, hatırı sayılır birçok simülasyon programının iyonların etkilerini tamamen görmezden geldiği açıktır. Hatta bilimsel çevrelerce çok defa iyonların detektör içerisinde hiçbir etkiye sahip olmadıkları yönünde görüşler belirtilmiştir.

Bu tez çalışması, temel olarak iyonların bir detektörün çalışmasını nasıl etkilediğini anlamak üzere kurgulanmıştır. Bu kapsamda Garfield⁺⁺ simülasyon programının bir alt programı olarak kullanılmak üzere bir program hazırlanmış ve testleri tamamlanmıştır. Böylece bahsedilen simülasyon programının iyonların etkilerini de gözetecek, hesaplamalar yapması amaçlanmıştır. Başlangıçta tezin ana konusu olarak seçilen bu simülasyon programının testlerinden elde edilen ilk sonuçlar ışığında deneysel çalışmalar, detektör hacminde bulunan iyonların beklenildiği gibi gaz karışımının bileşenlerinin iyonları olmadığı şüphesi ile karşı karşıya kalınmıştır. Yani tezin ana konusu daha ilginç bir odağa kaymıştır. Bu ip ucundan yola çıkarak, 30 yılı aşkın bir süredir gazlı detektörler içerisinde iyonların, sinyali ve detektör içerisindeki elektrik alan düzenini önemli ölçüde etkiledikleri halde, simülasyon çalışmalarında dikkate

alınmadıkları yönünde tespitler yapılmıştır. Ayrıca bu iyonların sadece birkaç nano-saniye sonra başkalaşım geçirerek sonuçta gaz karışımının cinsine bağlı olarak ortamda tek tip iyonik kümelerin (cluster) kaldığı, bu tez çalışması kapsamında ilk defa ispatlanmıştır. Birçok bilimsel yayınlarda, iyon mobilitesi ölçtüğünü iddia eden bilim insanlarının, iyon değil iyonik kümelerin mobilitelerini ölçtüklerine dair kanıtlar bu tez kapsamında yer bulmuştur. 2015 yılında, son teknolojiler kullanılarak yapılmış ölçümler de dahil olmak üzere neredeyse hiçbir ölçümde kütle spektrometresinin kullanılmamış olması bu yanlışın süregelmesinin ana sebebi olarak belirlenmiştir.

Tezin “Kuramsal Temeller” kısmında gaz atomları ve iyonlarının, kendi aralarında veya birbirleri ile etkileşimlerine oldukça ayrıntılı olarak yer verilmiştir. Ayrıca bunların elektronlar ile etkileşimleri de göz önünde tutularak, ilgili etkileşimler ele alınmıştır. Modelleme veya ispatlarda kullanılacak temel kuram ve teorilerin açıklamaları, uygulamaları, bazı açıkları, bu tez kapsamında kullanılırken bazı matematiksel püf noktalar da bu bölümde yerini bulmuştur.

“Materyal ve Yöntem” kısmında iyonların gaz ortamındaki davranışlarını açıklığa kavuşturmak adına ortaya atılmış fikirler, modellemeler, ve ispatlar yer almaktadır.

“Araştırma Bulguları” kısmı, hazırlanan alt programın ilk olarak elde edilmiş bazı önemli test sonuçları ile birlikte, iyonik kümelerin gazlı detektörler içerisindeki etkinlikleri ile ilgili önemli bulguları sunmak için hazırlanmıştır.

“Tartışma ve Sonuç” kısmında gazlı detektörler açısından iyonik kümelerin ve onların davranışlarının nelere yol açabileceği tartışılmış, bulgular hakkında genel bir analiz yapılmıştır.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Langevin Teorisi

Çarpışma Teorisi, termodinamik büyüklüklerin hesaplanmasında standart istatistik mekaniğe bir alternatif oluşturur ve tepkimeye giren maddeler hakkındaki diğer tüm gerçel parametreleri göz ardı ederek, kimyasal reaksiyonları sert kürelerin çarpışarak etkileşmesi olarak ele alan basitleştirilmiş bir yaklaşım olarak bilinir. Bu türlü bir etkileşme için tesir kesiti aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\sigma = \pi d^2 = \pi(r_A + r_B)^2 \quad (2.1)$$

Burada $d=(r_A+r_B)$, etkileşmeye giren A ve B reaktantlarının yarıçapları toplamıdır. Bu model A ve B gibi iki molekül arasında kimyasal bir reaksiyon meydana gelme olasılığını, moleküller arasındaki mesafenin yarıçaplar toplamından küçük olması durumunda ($r_{AB} \leq d$), $P_{AB} = 1$ ve büyük olması durumunda ($r_{AB} \geq d$), $P_{AB} = 0$ olarak kabul eder. Söz konusu model için reaksiyon hızı aşağıdaki gibi tanımlanmıştır;

$$k(T) = \int v \sigma f(v) dv \quad (2.2)$$

Burada v , A ve B moleküllerinin relatif hızını ($v = |v_A - v_B|$) ve $f(v)$ hızların dağılım fonksiyonunu göstermektedir. Denklem-2.1, Denklem-2.2 içerisinde dikkate alınrsa ve ayırt edilebilir bağımsız tanecikler için alışlagelmiş kinetik enerji dağılım fonksiyonu olan Maxwell-Boltzmann dağılımı hızların dağılım fonksiyonu olarak seçilirse, Denklem-2.3 aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$k(T) = \sqrt{\frac{8\pi k_B T}{\mu}} d^2 \quad (2.3)$$

burada k_B Boltzmann sabitini, T sıcaklığı ve μ moleküllerin indirgenmiş kütlelerini göstermektedir.

$$\mu = \frac{m_A \cdot m_B}{m_A + m_B} \quad (2.4)$$

Ancak bilinmelidir ki; reaksiyona giren maddeleri sert küreler olarak düşünmek ve geriye kalan tüm moleküllerin etkileşme potansiyellerini ihmal etmek, bir kimyasal reaksiyonu gerçeğe uygun olarak tanımlama imkânı vermez. Diğer kinetik modellerle karşılaştırıldığında gaz fazındaki reaksiyonların hız sabitleri için oldukça abartılı değerler elde edildiği hakkındaki bilgiler literatürde yer almaktadır.

Eğer bir kimyasal reaksiyonu gerçeğe daha uygun olarak tanımlamak istiyorsak, moleküler etkileşme potansiyellerini de hesaba katmalıyız. Bunun için genellikle, çekici van der Waals terimi (r^{-6}) ve kısa menzilli moleküler etkileşmeler için (r^{-12}) daha baskın olan ve deneysel bir kısım olarak karşımıza çıkan itici etkileri içeren Lennard-Jones Potansiyeli kullanılır. Bunun yanında iyon-molekül etkileşmeleri ile ilgili ilk teori 1905 yılında P. Langevin tarafından ortaya atılmıştır. Langevin teorisi kısaca kutuplanmamış bir molekül ve bir iyon arasındaki etkileşmeyi tanımlar. Buna göre, efektif etkileşme potansiyeli aşağıdaki gibi verilebilir:

$$V(r) = U(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} = -\frac{1}{2} \frac{\alpha e^2}{r^4} + \frac{L^2}{2\mu r^2} \quad (2.5)$$

burada α nötr molekülün kutuplanabilirlik katsayısını, e elementer yükü, r iyon ve molekül arasındaki bağıl mesafeyi ve L klasik açısal momentumu gösterir.

2.2. Sert Küre (Hard Sphere) Modeli

İyon ve gazın birer sert küre olarak düşünüldüğü ve kütle merkezi çerçevesinde çarpışmaları halinde, iyonun bu çarpışma sonrası herhangi bir yöne saçılabilme ihtimalinin, diğer herhangi bir yönde saçılabilme ihtimaline eşit olarak düşünülebildiği bir modeldir. Mason ve McDaniel iyonun ortalama enerjisi için aşağıdaki gibi bir denklem ortaya atmışlardır (Mason ve McDaniel 1988).

$$\frac{1}{2} \overline{m_i v^2} = \frac{1}{2} \overline{m_g V^2} + \frac{1}{2} \overline{m_i v_d^2} + \frac{1}{2} \overline{m_g v_d^2} \quad (2.6)$$

Burada v_d iyonun sürüklenme hızını belirtmektedir. $\frac{1}{2} \overline{m_g V^2}$ ifadesi gazın ortalama kinetik enerjisini gösterir. $\frac{1}{2} \overline{m_i v_d^2}$ terimi, iyonun dış elektrik alandan dolayı kazanacağı ortalama kinetik enerjidir ve son olarak $\frac{1}{2} \overline{m_g v_d^2}$ ifadesi ise nötr gaz atomlarının rastgele hareketleri sırasında kazanmış olabilecekleri muhtemel ortalama kinetik enerjidir. Ağır bir iyonun hafif moleküllerden oluşmuş bir gaz ortamında hareket etmesi durumunda, bu son terim genellikle ihmal edilir. Sonuçta ortalama görelî enerji, efektif sıcaklık (T_{eff}) ve iyonun rastgele sahip olduğu kinetik enerjilerinin, ortalama bir ölçüsü olarak kabul edilebilir. Böylece termal hareketlilik ve dış elektrik alanın katkıları aşağıdaki denklemde olduğu gibi belirtilebilir:

$$\frac{3k_B T_{eff}}{2} = \frac{3k_B T}{2} + \overline{m_g V^2} \quad (2.7)$$

Literatür incelendiğinde termal denge halindeki bir iyonun, gaz ortamı içerisindeki mobilitesi ile ilgili aşağıdaki denkleme rastlamak oldukça muhtemeldir (Mason ve McDaniel 1988), (Mason 1984), (Revercomb ve Mason 1975).

$$K = \left(\frac{3e}{16N} \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\mu k_B T_{eff}}} \left[\frac{(1+a)}{\Omega_D(T_{eff})} \right] \quad (2.8)$$

Mobilite-hız ilişkisi ışığında Denklem-2.8 kullanılarak mobilite için,

$$K = \left(\frac{3e}{16N} \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\mu k_B T_{eff}}} \left[\frac{1}{\Omega_D} \right] \quad (2.9)$$

Burada Ω_D elastik çarpışma tesir kesiti, μ indirgenmiş kütle, a düzeltme faktörü, e , k ve N ifadeleri bu çalışma içerisinde daha önce açıklanmış ve kullanılmış olup, ayrıca kısaltmalar listesinde de bulunabilir. Denklem-2.7 ve Denklem-2.9 bir iyonun nötr bir gaz ortamındaki mobilitesinin toplam momentum transferi ile açıklanmasının bir temsidir (Eiceman ve Karpas 2005). Aslında bu bölümün bu çalışmada yer almasının temeli simülasyon ile deney arasında bir köprü oluşturmaktır. Bilindiği üzere bu çalışma kapsamında, gazlı detektörlerde kullanılan önemli gaz kombinasyonları ile ilgili ölçümler alınmış veya işbirliği içerisinde bulunulan gruptan ilgili deneysel veriler temin edilmiştir. Bu deneysel veriler elde edilirken yapılan deneylerin sınırlarını belirleyen bazı etkenler yukarıda sıralanan bilgiler ışığında aşağıdaki gibi sıralanabilir:

- Verilen bir efektif sıcaklık değeri için mobilite, gaz yoğunluğu ile ters orantılı olarak değişir.
- İyonların belirli bir sıcaklıktaki sürüklenme hızları, mobiliteleri ve bu şartlar altındaki efektif sıcaklık ile indirgenmiş elektrik alan değerine bağlıdır. İlgili bilimsel yayınlar incelendiğinde, bu bağımlılıkları belirlemek için özel MatLab “script”lerinin hazırlandığı görülür.
- Sistemin mükemmel derecede simetrik olduğu kabul edilmelidir (Mason ve McDaniel 1988).

Simülasyon için hazırlanmış olan Sınıf, “Sert Küre Modeli” baz alınarak hazırlanmıştır. Yukarıdaki bilgiler ışığında bunun uygun bir seçim olduğu kanısına varılabilir.

2.3. Mason-Schamp Teorisi

Zayıf elektrik alanlar etkisi altındaki gaz iyonlarının mobilitesi ilgili orataya atılan bu teori, bazı eksik ve zayıf kalan yönleri göz önüne alınarak, kendisinden önce bu konuda ortaya atılan teoriler yeniden düşünülerek geliştirmiştir. Öyle ki, bu teoriler küçük elektrik alan değerlerinde geçerli olan sınırlı teorilere ve dikkate alınan fiziksel süreç için geçersiz kuvvet yasalarına dayanmaktaydılar. İyon-molekül etkileşmeleri için, dördüncü dereceden bir çekme terimi ve bir sert küre itme terimi içeren bir potansiyel fonksiyonu meydana getirilmiş, daha sonra aynı çekme terimi sekizinci dereceden bir itme terimi ile birlikte kullanılmıştır. Söz konusu dördüncü dereceden çekme terimi, iyon üzerindeki yük ile dipol arasındaki etkileşmeyi hesaba katan bir teoriyi temel alır. Kullanılan itme terimleri ile ilgili olarak yapılan bazı deneylerin sonuçları göstermiştir ki; sert küre çekme modeli oldukça fazla, sekizinci derecen terim ise hafif kalmıştır.

Bu teoride çekme potansiyeli olarak dördüncü ve altıncı dereceden olmak üzere iki terim kullanılmıştır. Ayrıca gazların transfer parametreleri dikkate alındığında, itme potansiyeli sert küre modeline göre daha hafif, sekizinci dereceden terime göre daha fazla etkiye sahip olması gerektiği tahmin edilebilir. Buna bağlı olarak on ikinci dereceden bir terim, itme potansiyeli için uygun görülmüştür.

2.4. Etkisiz-Çarpışma (Null-Collision) Modeli

Bu çalışmada, iyonun gaz içerisindeki mobilitesine dayalı iki farklı fiziksel durum için iki model üretilmiş ve elastik çarpışmaları simüle edecek bir bilgisayar programı tasarlanmıştır. Ancak hazırlanan bu program sadece tek bir çarpışma sonrası iyonun hızını vermekteydi. Bu programa iyonun katoda ulaşmaya kadar yapabileceği tüm saçılmaları hesaba katan bir fonksiyon yazıp ekleme gereği hissedilmiş ve sonuçta çarpışmalar sonucunda iyonun toplamda ne kadar sürede katoda ulaşacağı, söz konusu program ile hesaplanması planlanmıştır. Bundan sonra detektör içerisindeki elektrik alanın da bilinmesi halinde iyonun mobilitesi elde edilerek modellerin doğruluğu sınanmıştır.

Gaz ortamında ilerleyen bir iyonun hareketi için “sürüklenme” tanımının kullanılması pek uygun olmaz. Çünkü iyon, atalet kütesinden dolayı gaz atomları arasında sürekli sıçramalar yapacak ve kendisinden elektrik alan yönünde parabolik de olsa düzgün bir sürüklenme beklenemeyecektir. Bazen beklendiği gibi katoda yönelmek yerine ters yönde geri saçılmalar bile yapabilir. Sabit elektrik alanda, gaz ortamında hareket eden bir iyonun yörüngesi, katoda ulaşma süresi, katoda ulaşmaya kadar yapacağı toplam çarpışma sayısı gibi fiziksel nicelikler, iyonların gaz içindeki akıbeti ve sebep oldukları olaylar zincirinin anlaşılması açısından önemlidir.

Bir iyonun gaz ortamına girdiğinde, gaz atomları ile yapacağı çarpışma frekansı zamanla değişen bir niceliktir. Ayrıca bu frekans iyonun hızına, gazın sayıca yoğunluğuna, tesir kesitinde bağlıdır. Ayrıca gaz atomlarının sayı yoğunluğunun, gazın sıcaklığı ve basıncı ile değiştiğinin de belirtilmesi gerekir. Bu kadar çok parametreyi içeren bir fiziksel olay için hesaplamalar yapmak oldukça zordur. Skullerud, 1968 yılında bu durumdaki bir iyonun herhangi bir çarpışma yapmadan ilerleyebileceği serbest zamanı hesaplamak adına bir model geliştirmiş ve bu zorluğa bir çare bulmuştur. Ayrıca çalışmasında bu problemin çözülmesi için bazı fikirler sunarak bir de algoritma ortaya koymuştur. Başlangıç hızı v_i olan bir iyonun hızına bağlı

olarak ortalama çarpışma frekansı;

$$\nu(v) = Nv_i\sigma(v) \quad (2.10)$$

olarak verilmiş olup, burada N birim hacimde bulunan gaz atomu sayısı, v iyonun hızı, $\sigma(v)$ ise çarpışma tesir kesitidir. Bu noktadaki problem şudur ki; elektrik alandan dolayı iyon sürekli hızlanmaktadır. Hızlanma ivmesini a ile gösterirsek hız değişimi için;

$$v = v_i + at \quad (2.11)$$

yazılabilir. Böyle bir ivme, iyonun parabolik bir yörüngede hareket etmesine sebep olacaktır. herhangi bir serbest zamanın, ortalama (gerçek) serbest zamandan büyük olma ihtimali;

$$P(t) = \exp\left(-\int_{t=0}^{\tau} \nu(|v_i + at|)dt\right) \quad (2.12)$$

Bu ihtimal için bilgisayar ile (0,1) aralığında uniform rastlantısal bir S sayısı üretilebilir.

$$P(t) = S \quad (2.13)$$

Ancak hıza bağımlı çarpışma frekansına dayalı bir bilgisayar simülasyonu, çarpışmaların sayısı ve kapsamı bakımından oldukça sınırlı olacaktır. Bu sınırlılığı ortadan kaldırmak, hızdan bağımsız bir çarpışma frekansı düşünmekle mümkün olup, bu durumda olayın bilgisayarla simülasyonu da daha kolay olacaktır. Yukarıdaki iki denklem τ 'yu elde etmek için birlikte çözülürse ;

$$\tau = \nu^{-1} \log S \quad (2.14)$$

elde edilmiş olur. Ayrıca herhangi bir $[0, \tau]$ aralığında gerçekleşecek çarpışma sayısı basitçe,

$$K = \int_0^{\tau} \nu(t)dt \quad (2.15)$$

ile gösterilebilir. Ayrıca τ kadarlık bir zaman diliminde, gerçekleşen çarpışma sayısı eksponansiyel bir dağılıma sahiptir. Hatırlanmalıdır ki; eksponansiyel dağılım, kendisinden önceki fiziksel süreçlere bağlı olmaksızın dağılım gösteren olayları temsil

eder. Şu aşamada tartışılması gereken, söz konusu fiziksel olay, kendisinden önceki olaylardan gerçekten bağımsız mıdır? Yoksa Sklerrud'un bu çalışmanın bel kemiği mahiyetindeki denklemi olayı temsil etmemekte midir? Üzerinde düşünüldüğünde, herhangi bir τ zaman diliminde gerçekleşen çarpışma sayısı, iyonun kesinlikle kendisinden önce kaç çarpışma yaptığı ile ilgili değildir. Dolayısıyla Denklem-2.12, rahatlıkla çözümlenmesi gereken problem için kullanılabilir.

2.5. İyonik Kümeler

İyonik kümeler, bir çekirdek iyon ve bir veya birden fazla nötr atom veya molekülden meydana gelir. İyon yükü ve indüklediği dipoller arasında oluşan çekici kuvvet iyonik kümeleri bir arada tutar. 0,1 - 1,5 eV aralığında bir bağlanma enerjisine sahip olan bu yapılar, klasik kimyasal bağlar ile "van der Waals" etkileşmesi arasında bir bağ enerjisine sahiptir. $\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2$ iyonik kümelerinin oluşumu için belirlenen hız sabitleri oldukça büyüktür ve böyle iyonik kümelerin CO_2 bazlı gaz karışımları içerisinde bol miktarda buldukları bu tez çalışması kapsamında ispatlanmıştır.

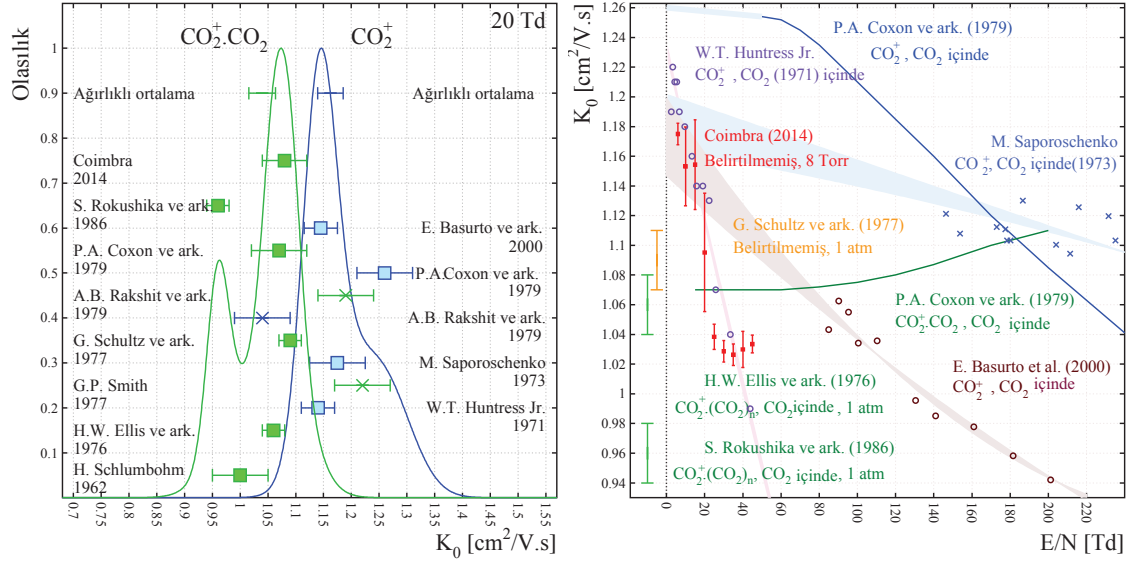
Literatürde iyon hareketi ve iyon kimyası ile ilgili oldukça fazla sayıda kaynak bulunmasına rağmen, gazlı detektör simülasyon programları, iyonların etkilerini görmezden gelirler. Bazıları ise ikincil gazların (quencher) iyonlarını yok sayarak sadece soygaz atomlarının iyonlarını dikkate alırlar. Buna rağmen simülasyon programlarının alınan ölçümler ile neredeyse uyum içinde olduğundan bahsedilebilir (Bkz. Bölüm 4.4.3) ama yaklaşım kesinlikle fiziksel değildir. Örneğin; atmosferik basınçta, Ar^+ ve Ne^+ iyonları, yüklerini sadece birkaç nano-saniye içerisinde CO_2 molekülüne aktarırlar (Bölüm 3.9) ve bunu izleyen birkaç 10 ns içerisinde gerçekleşen kimyasal reaksiyonlar, $\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2$ iyonik kümelerinin, nasıl dominant iyon olarak gaz ortamında kaldığını açıklar. Böyle iyonik kümeler bazı şartlar altında büyüyerek $\text{CO}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ iyonik kümelerini meydana getirebilirler. Bir iyon olan bu kümenin çekirdeği değişebilir ama en azından birkaç μs sonra iyonik kümeler ortama hakim olacaktır. Bölüm 3.10 iyon ve iyonik kümelerin mobiliteleri için literatürden elde edilmiş bilgiler içermektedir. Bölüm 4.4 iyonik kümelerin TPC detektörlerinde,

düzgün elektrik altında, mobilite kavramından yola çıkarak detektör içerisinde nasıl ortaya çıktıklarını gösterir.

2.6. Blanc yasası

Blanc Yasası (Blanc 1908) bir iyonun bir gaz karışımı içerisindeki mobilitelerinin hesaplanmasını sağlar. Bir iyonun karışım içerisindeki mobilitelerinin tersi, karışıma katılan gazlar içerisindeki mobilitelerinin terslerinin ağırlıklı ortalamalarının toplamına eşittir. Gereken toplam süre $\sum_i d_i(E/K_i)$ ile belirlenebilir, burada d_i gaz ortamının kalınlığıdır. Blanc yasasına göre bu ifade, $d(E/K_{\text{mix}})$ ifadesi ile aynıdır. Burada $d = \sum_i d_i$ ve K_{mix} iyonun karışım içerisindeki mobilitesidir. Bu yasa karışıma katılan gazların birbiri ile etkileşime girmesi dikkate alınmırsa geçersiz kalır. Benzer olarak, iyonik kümeler taşıyıcı gazlar tarafından meydana getirildiğinde, bazı sapmalar beklenmelidir.

T. Holstein 'e göre (Biondi ve Chanin 1961), (Holstein 1955) Blanc yasasının bazı noktalarda doğrulamaya muhtaç olduğundan bahsetmektedir. Yasanın zayıf yanları Stanley I. Sandler ve E.A. Mason (Sandler ve Mason 1968) tarafından daha ayrıntılı olarak açıklanmaktadır. Bu yazarlar, çok hafif bir gaz ile çok ağır bir gazın karıştırılma durumunda \sim % 5 gibi bir hata payı olduğu hakkında görüş bildirmişlerdir. Yasanın bu yazarlar tarafından bahsedilen en vahim hatası budur. Bu çalışma kapsamında kullanılan gazlar kalıcı dipol özelliğine sahip değildir. CO₂ molekülünün çok düşük titreşim modları, 80 meV enerjili bükülme modları, oda sıcaklığında % 4, 5 oranında mevcuttur ve böyle salınımlı dipoller, öteki gaz atomları ile zayıf London etkileşimleri yaparsalar da ayrıca CO₂ molekülünün kuadropol momenti, sadece küçük bir kuvvet üretir. Buradan çıkarılacak sonuç şudur ki; bu düşük ihtimallere dayanan kompleks durumlara rağmen, Blanc yasası bu çalışma için kullanılmaya uygundur.



Şekil 2.1. Sol: CO_2^+ iyonları ve $CO_2^+ \cdot (CO_2)_n$ iyonik kümelerinin, CO_2 içerisindeki mobilitelerine ait ölçümlerinin bir profili. Sağ: Bazı mobilite ölçümleri için E/N grafikleri.

Şekil 2.1 (sol)'da görüldüğü gibi, G. Schultz ve ark. (Schultz ve ark. 1977) ve P.M.C.C. Encarnaçao ve ark. (Encarnacao ve ark. 2015), iyon mobilitesi ölçtüklerini iddia etselerde, iyonik kümelere ait mobiliteler ölçtükleri oldukça açıktır. A.B. Rakshit ve P. Warneck (Rakshit ve Warneck 1979) ve G.P. Smith (Smith ve ark. 1977) tarafından yapılan mobilite ölçümleri ağırlıklı ortalamaları içermemektedir. Tahmini hatalar herhangi bir düzeltme yapılmadan direk olarak yayınlarda olduğu gibi yansıtılmıştır. Yanlış ekstrapolasyonlar birkaç durumda düzeltilmiştir.

Şekil 2.1 (sağ)'da ise kırmızı ve turuncu data, kütle spektrometresi kullanılmadan elde edilmiştir. Zayıf görüntüleme kalitesinden dolayı, bazı data noktaları kaybolmuş veya kaymıştır.

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. İyon–Gaz Etkileşimleri

İyonların, detektör içindeki elektrik alan düzenini bozarak, detektörden alınan sinyali etkilediği daha önce bu çalışma kapsamında bahsedilmişti. Günümüze kadar ihmal edilmiş bu etkiyi iyi anlamak için, iyonların üretildikten sonra diğer iyonlarla, nötr gaz atom ve molekülleriyle hatta detektörün iç elemanları ile ne tür etkileşimler yaptığını bilmek oldukça önemlidir. Şüphesiz bu etkileşimlerden en muhtemel olanlarından birisi elastik çarpışmalardır. Detektör içerisinde üretilmiş bir iyonun çarpışma yapmadan serbest bir yol aldıktan sonra detektörün içerisinde bulunan gaz atomlarından birisi ile çarpışması olayı da elastik bir çarpışma olarak ele alınırsa, çarpışan parçacıkların momentum ve enerjilerinin korunduğu kabul edilir. Çarpışmadan önce iyonun $v(v_x, v_y, v_z)$ hızı ile gelip bir gaz atomuna $w(w_x, w_y, w_z)$ çarpması sonucunda hızının ne olacağı, kademeli olarak çözülmesi planlanan bir düğümün zorlu adımlarından birisi olarak dikkat çekmektedir. Bu problemin çözülmesi halinde, çarpışma sonrası iyonun sahip olacağı hız bileşenleri $v'(v_x', v_y', v_z')$ tespit edilmiş olacak ki, çözüm için dört tane bilinmeyen söz konusudur. Bunların üç tanesi, her üç boyut için yazılabilecek momentum korunum denklemlerinden ve bir tanesi kinetik enerji korunum denkleminde gelir. Momentum korunumu için aşağıdaki denklem yazılabilir:

$$\begin{aligned} & m_i \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} + m_g \sqrt{2E_k} \cos b \\ & = m_i \sqrt{v_x'^2 + v_y'^2 + v_z'^2} + m_g \sqrt{w_x'^2 + w_y'^2 + w_z'^2} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Ancak momentum korunumu her bir eksen doğrultusu için ayrı ayrı yazılabilir:

$$m_i v_x + m_g w_x = m_i v_x' + m_g w_x'$$

$$m_i v_y + m_g w_y = m_i v_y' + m_g w_y'$$

$$m_i v_z + m_g w_z = m_i v_z' + m_g w_z' \quad (3.2)$$

Çarpışmanın iki boyutta gerçekleşeceğini düşünürsek bu denklemlerden her hangi birisi mutlaka kullanılamayacak ve sadece bilinmeyenleri bulmak için iki denklem kalacaktır. Çarpışma sonrası iyonun momentumunun her üç eksen üzerindeki bileşenlerinin bulunması için üçüncü bir denkleme ihtiyaç vardır ki bu denklem aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\frac{1}{2}m_i v^2 + \frac{1}{2}m_g w^2 = \frac{1}{2}m_i v'^2 + \frac{1}{2}m_g w'^2 \quad (3.3)$$

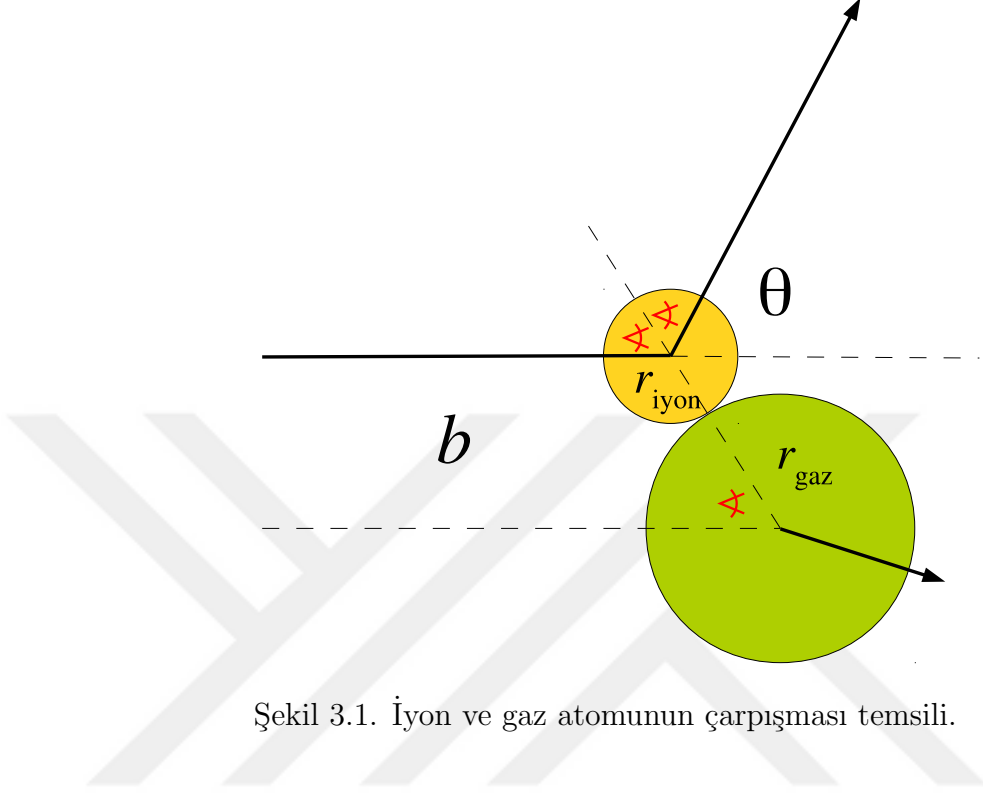
Burada E_k gazın çarpışma öncesi sahip olduğu kinetik enerji, b ise söz konusu çarpışma için etki parametresidir (impact parameter). Bu çarpışma için etki parametresinin alabileceği değer aralığı belirlenebilir. İyonun bir gaz molekülüne kafa kafaya (kütle merkezleri aynı doğrultu üzerinde olması durumu) çarpması durumunda, etki parametresinden bahsedilmesi mümkün olamayacaktır ($b = 0$). Öte yandan iyon gaz molekülüne neredeyse sıyrarak (teğet) geçmesi durumunda ise etki parametresi maksimum değerine kavuşur dolayısıyla etki parametresi için;

$$0 \leq b \leq r_{gaz} + r_{iyon} \quad (3.4)$$

yazılabilir. Açıkçası bir iyon ve gaz atomunun çarpışması olayının fiziksel olarak açıklanması bu kadar basit değildir ama basite indirgenebilir. Bunun için kütle merkezi çerçevesine (Center of mass frame) geçilmesi şarttır. Bundan sonra bu çerçevede yazılacak fiziksel büyüklükler için “KM” alt indisi kullanılacaktır. Kütle merkezi çerçevesine geçmek için öncelikle kütle merkezinin hızının hesaplanması gerekir. Bunun için aşağıdaki işlem basamaklarının izlenmesi gerekir:

$$\begin{aligned} \sum P &= m_i v_i + m_g v_g \neq 0 \\ \sum P_{(KM)} &= m_i(v_i + V_{(KM)}) + m_g(v_g + v_{(KM)}) = 0 \\ v_{(KM)} &= -\frac{m_i v_i + m_g v_g}{m_i + m_g} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Kütle merkezi çerçevesine geçildiğinde çarpışma esnasında toplam momentumun yani kütle merkezi momentumunun sıfır olduğu kabul edilir.



Şekil 3.1. İyon ve gaz atomunun çarpışması temsili.

Dolayısıyla iyon ve gaz atomu çarpışma sonrası Şekil-3.4'deki gibi eşit momentumlarla ve zıt yönlerde geliş doğrultuları ile θ açısı yapacak biçimde saçılırlar. Çünkü kütle merkezinin hızı sıfırdır. Dolayısıyla;

$$\underbrace{m_1 v_1 + m_2 w_2}_0 = m_1 V \cos \theta + m_2 W \cos \theta \quad (3.6)$$

Burada V iyonun, W ise gaz atomunun çarpışma sonrası hızlarıdır. Ayrıca kütle merkezi çerçevesinde çözüm için ihtiyacımız olan iki momentum korunumu denklemini aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\begin{aligned} m_1 V_x + m_2 W_x &= 0 \\ m_1 V_y + m_2 W_y &= 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

Çarpışmanın x - y düzleminde gerçekleştiği varsayılarak bu simgeler kullanılmıştır.

Dikkat edilmelidir ki; çarpışma üç eksenenden herhangi ikisinin oluşturduğu bir düzlemde gerçekleşebilir. Dolayısıyla eksenlerden birisi için momentum korunumu denklemi yazmak mümkün olmayacaktır. Enerji vektörel bir büyüklük olmadığı için enerji korunumu denklemi adına herhangi bir değişiklik söz konusu değildir.

$$m_1 |v| = m_2 |w|$$

$$m_1 |V| = m_2 |W|$$

$$|v| = \frac{m_2 |w|}{m_1}$$

$$|V| = \frac{m_2 |W|}{m_1}$$

Ayrıca iyon ve gazın hızlarının yönü ve şiddeti çarpışma ya da etkileşme ihtimalini önemli derecede etkileyecektir. Çalışma sırasında bu önemli ayrıntıya dikkat edilmemiş ve bunun sonucunda az da olsa deneysel verilerden uzak Monte-Carlo sonuçlarına ulaşılmıştır. İyonun ve gazın hız vektörlerinin aynı yönde olması ve gazın termal hızının iyonun hızından fazla olması durumunda çarpışma veya etkileşmenin gerçekleşme ihtimali oldukça azalacak, tersi durumda yani iyon ve gazın hız vektörlerinin zıt yönde olması durumunda ise etkileşme ihtimali oldukça artacaktır. Bu durumu hazırlayacağımız programda dikkate alınması için bazı istatistiksel hesaplamaların yapılması kaçınılmaz hale gelmiştir. Gazın hızının Maxwell dağılımı göstereceğini düşünerek yapılan mobilite hesaplamalarının deneysel verilerle yine tam olarak uyuşmadığı gözlenmiştir. Problemi basite indirgemek adına tek boyutlu olarak düşünülecek olursa, iyon ve gazın vektörel hızlarının aynı olması durumunda çarpışmanın gerçekleşmesi mümkün değildir. Ancak eşitliğin olmadığı durumlarda çarpışmanın gerçekleşmesi beklenir. Bu duruma uyan bir matematiksel fonksiyon olarak mutlak değer fonksiyonu düşünülmüş, çarpışmanın gerçekleştiği durumlar için gaz hızının dağılımı için bu fonksiyon aşağıda yazıldığı gibi kullanılmış ve tek boyut için bu problem çözüme kavuşmuştur.

$$f(v) = \left(\frac{m}{2 \pi k_B T} \right)^3 4\pi |v_g - v_i| e^{-\frac{mv^2}{2 k_B T}} \quad (3.8)$$

Açıkçası bu çözüme, ayrıca hazırlanan bir bilgisayar programı ile ulaşılmıştır. Ancak matematiksel analiz yöntemiyle de bu sonuca ulaşılmaya çalışılmıştır. Doğrusal bir yörünge üzerinde sıralanmış ve Maxwell dağılımına göre hızlara sahip olan gaz atomlarının içerisinde belirli stabil bir hızla hareket eden iyonu bıraktığımızda, ilk olarak hangi gaz atomu ile çarpışacağını belirlemek ile matematiksel analiz işlemine başlayabiliriz. Bu durumda çarpışma ihtimali devreye girer ki, iyon ve çarpışacağı gaz atomunun konumları, hızlarının şiddeti ve yönü bu ihtimal üzerinde etkilidir. Örneğin; tek boyutlu faz uzayında zıt doğrultularda birbirlerine doğru hareket eden iyon ve gaz atomunun çarpışma ihtimalinin yüzde yüz olduğu gibi aynı doğrultularda gitmeleri durumunda hızlarının büyüklüklerinin kıyası bu ihtimali etkiler. Ancak, bir genelleme yapabilmek adına bu basitleştirilmiş düşünceden ayrılıp, hız dağılımları üzerine düşünülmelidir. Sonuçta iyonun serbest zamanı için bir dağılım elde edilmek istenmektedir. Ayrıca iyonun gerçekleştirdiği her bir esnek çarpışma sonrası hızının belirlenmesi momentum korunum yasalarına bağlı kalarak hesaplanmaktadır. Ancak gaz moleküllerinin hız dağılımları için Maxwell dağılımı yeteriz kalmıştır. Çünkü yukarıdaki cümlelerde açıklandığı üzere, gaz molekülleri her yöne ve tam olarak eşit (homojen) olmayan hızlarla hareket ettikleri için onların hızlarının yön ve büyüklükleri çarpışma ihtimalini ve süresini önemli ölçüde etkileyecektir. Dolayısıyla daha önce de bahsedildiği gibi, önemli olan iyon ile ilk kez çarpışma yapacak gaz molekülünün hız dağılımının bulunabilmesidir. Bunun için tek boyutlu faz uzayında $x = 0$ noktasında ilk hızı olmayan bir iyon ve termal hızlarıyla hareket eden k ve l gaz atomlarının hız dağılımlarının sırasıyla $f(k)$ ve $f(l)$ olduğu durumda bu hız dağılımlarının toplamı olan $f(x) = f(k) + f(l)$ dağılımını elde etmek için Delta dağılımı kullanılabilir.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dl \int_{-\infty}^{+\infty} dk f(l) f(k) \delta(k + l - x) = f(x) \quad (3.9)$$

Delta fonksiyonundan kurtulmak istenirse,

$$= - \int_{-\infty}^{+\infty} dl f(l) f(x - l) \quad (3.10)$$

elde edilmiş olunur. Sonuçta elde edilen, dağılımların toplamının bir dağılımıdır ve ayrıca matematikte evrişim (convolution) integralinin tanımıdır. Şimdiye kadar özeti

sunulan matematiksel kural, karşı karşıya bulunulan fiziksel duruma kolaylıkla uygulanabilir. Konumları x_1 ve x_2 hızları v_1 ve v_2 olan iki tane gaz atomu düşünülürse, bu gaz atomlarının iyon ile çarpışma süreleri aşağıdaki gibi tanımlanabilir.

$$\tau_1 = -\frac{x_1}{v_1} \quad , \quad \tau_2 = -\frac{x_2}{v_2}$$

Denklemlerdeki negatif ifadeler, iyonun konumu ve ilk hızının sıfır olduğu varsayımı ile aşağıdaki denklemlerden anlaşılabilir.

$$x_{ion} + \tau_1 v_{ion} = x_1 + \tau_1 v_1$$

$$x_{ion} + \tau_2 v_{ion} = x_2 + \tau_2 v_2$$

Sonuçta ilk olarak iyona çarpacak olan gazın çarpma süresini aşağıdaki gibi elde edebiliriz.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dv_2 f(x_1) f(v_1) f(x_2) f(v_2) \delta\left(\frac{x}{v} - \left(\frac{x_1}{v_1}, \frac{x_2}{v_2}\right)\right) \quad (3.11)$$

Bu integralin sonucunda elde edilen değer ise sadece $|v|$, yani ilk olarak çarpışma gerçekleştirecek gaz atomunun hızının mutlak değeridir. Monte-Carlo yöntemi ile yukarıda ulaşılan sonuca, matematiksel bir analiz ile de ulaşılarak ispatı gerçekleştirilmiştir. Bu problemi üç boyutlu uzay için genelleştirmeye kalktığımızda, tesir kesiti ile karşılaşırız. Çok boyutlu çarpışmalarda tesir kesiti kesinlikle belirleyici bir fiziksel niceliktir.

3.2. Kutuplanabilirlik Etkisi

Gazlı detektörler içerisinde, başka amaçların varlığı ile birlikte özellikle foton geri besleme etkisini (Photon feed-back effect) önemli ölçüde azaltmak için bir soygaz ile birlikte, moleküler bir gazın da (Quencher Gas) kullanılmak durumunda olduğu bilinmektedir. Kullanılan bu moleküler gazın kutuplanabilirliği, olası iyon-molekül

etkileşmelerini önemli ölçüde etkiler. Öyle ki; moleküler gazın kutuplanması durumunda, iyon ve molekül esnek çarpışma yapmazlar, birbirlerinin etrafında dönerler ve sonuçta birbirlerine paralel doğrultularda ve zıt yönlerde saçılırlar. Ayrıca bu olayda momentum değişiminin olmadığı bilinmektedir. Kutuplanabilirlik etkisini daha net gözden geçirmek için küçük bazı hesaplamalar yapılabilir.

Herhangi iki atom arasındaki ortalama mesafenin ne kadar olduğunu yaklaşık olarak hesaplayabilmek, kutuplanma etkisinin anlaşılması için önemli bir başlangıç adımı olabilir. Bu soru, moleküler gazın kutuplandığı durumda, iyon ve molekül arasında oluşacak elektromanyetik kuvvet ve elektrik alan büyüklüklerinin nasıl değiştiğini ve bu değişimlerin süreci nasıl etkilediğinin anlaşılabilmesi adına cevaplanmaya muhtaçtır. Öncelikle 1 cm^3 gaz hacmi içerisinde $2,7 \cdot 10^{19}$ atom / cm^3 (Loschmidt constant) atom bulunur. Bu hacim içerisinde atom veya moleküller arasındaki mesafe, $\sqrt[3]{2,7 \cdot 10^{19}} \approx \text{nm}$ olarak hesaplanır. Yani kabaca bir hespla iyon ve gaz atomu veya molekülü arasında bu kadar mesafe söz konusudur.

Detektör içerisinde kutuplanabilirliği olan bir molekül, örneğin Metan ve soygaz olarak Metan gazının sık kullanılan bir partneri olan Argon gazının kullanıldığı varsayılp, Argon atomunun ortalama yarıçapının 70 pm ve Metan molekülünün ortalama yarıçapının 200 pm olduğu da göz önünde bulundurularak basit bir hesaplama yapılmıştır. Tahmin edileceği üzere iyon, molekülün kutuplanmasına sebep olacak ve aralarında bir Coulomb alanı meydana gelecektir. Bundan dolayı birbirlerine uygulayacakları kuvvet $\frac{1}{r^2}$ ile orantılı olarak değişecektir.

Elektrik alan ile ilgili olarak;

$$E \propto \frac{1}{(r + \epsilon)^2} - \frac{1}{(r - \epsilon)^2} E \propto \frac{-4\epsilon}{r^3} \quad (3.12)$$

ϵ niceliği, iyon ve molekül arasındaki uzaklık ile kıyaslandığında çok küçük kaldığı için ihmal edilebilir. Elektromanyetik kuvvetin, elektrik alan ile orantılı olduğu düşünülürse bu durumda elektriksel kuvvet de $\frac{1}{r^2}$ ile değilde $\frac{1}{r^3}$ ile orantılı olarak değişecektir. Yani iyonun, bir gaz atomu veya kutuplanmasına sebep olamadığı bir molekülle etkileşmesi ile kutuplanmasına sebep olabildiği bir molekülle etkileşmesi

çok farklı süreçlerdir. Biraz daha ayrıntılı düşünülürse bu etkinin daha fazla olduğu görülebilir. Bilindiği üzere dipol moment (μ), elektrik alan ile doğru orantılıdır, dolayısıyla elektriksel kuvvet;

$$F = q E = q \frac{\mu}{r^3} \quad (3.13)$$

Ayrıca temel olarak biliniyor ki;

$$\mu \propto E \propto \frac{1}{r^2} \quad (3.14)$$

bu ilişkiyi kutuplanabilirlik katsayısı (α) ile gösterebilir ;

$$\mu = \alpha E = \alpha \frac{1}{r^2} \quad (3.15)$$

sonuç olarak iyon ve dipol arasındaki elektriksel kuvvet;

$$F = \frac{q \mu}{r^3} = \frac{q \alpha}{r^5} \quad (3.16)$$

Bütün bu ispatlar ve açıklamalar eşliğinde söylenebilir ki; eğer iyon kutuplanabilmesine sebep olduğu bir gaz molekülü ile etkileşirse birbirlerinin etrafında dönerler. Sonuçta aynı doğrultuda zıt yönlerde, momentumlarında bir değişiklik söz konusu olmadan saçılırlar. Buna bağlı olarak kendiliğinden polarize olabilen, yani kutuplanabilmesi için yakınında bir iyona ihtiyaç duymayan moleküler gazların detektör içerisinde kullanılması sakıncalı olarak değerlendirilebilir.

3.3. Programlama Aşamasının Bilimsel Temelleri

3.3.1. Etki parametresi için rastlantısal sayılar üretilmesi

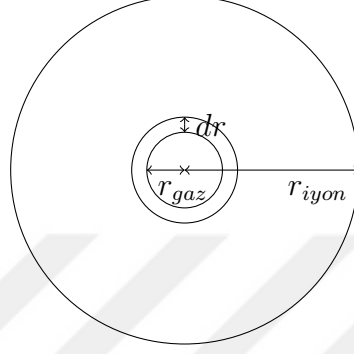
Etki parametresinin $0 \leq b \leq (r_{gaz} + r_{iyon})$ aralığında değerlere sahip olabileceği daha önce de belirtilmişti. Normalizasyon koşulu bu durum için yazılacak olursa;

$$\int_0^{r_g+r_i} f(r)dr = c \int_0^{r_g+r_i} 2\pi r dr = 1c = \frac{1}{\pi(r_g + r_i)^2} \quad (3.17)$$

olarak normalizasyon katsayısını elde etmiş oluruz. Çok küçük (dr) yarıçaplı bir alan seçilerek hesaplandığında

$$\pi(r + dr)^2 - \pi r^2 = 2\pi r dr$$

elde edilir. Sonuç olarak, etki parametresi için olasılık yoğunluğu fonksiyonu;



Şekil 3.2. Etki parametresi için rastlantısal sayılar üretilebilmesi için kullanılan yöntem için yardımcı şema.

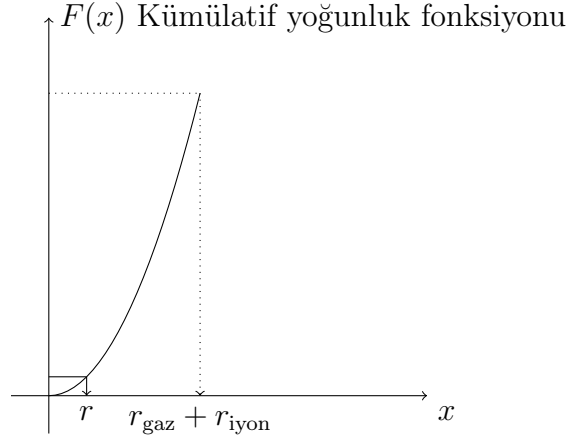
$$f(r) = \frac{2\pi r}{\pi(r_g + r_i)^2} = \frac{2r}{(r_g + r_i)^2} \quad (3.18)$$

olarak hesaplanmış olur. Buna bağlı olarak kümülatif fonksiyon ise;

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_0^x f(r) dr \\ &= \int_0^x \frac{2r}{(r_g + r_i)^2} dr \\ &= \frac{x^2}{(r_g + r_i)^2} \end{aligned} \quad (3.19)$$

olarak elde edilir. Etki parametresi için üretilecek rastlantısal sayı x , kümülatif fonksiyon u ile gösterilirse;

$$u = F(x) = \frac{x^2}{(r_g + r_i)^2} x = \sqrt{u}(r_g + r_i) \quad (3.20)$$



Şekil 3.3. Etki parametresi için kümülatif yoğunluk fonksiyonu grafiği.

Sonuç olarak etki parametresine atanacak rastlantısal sayılar için;

$$b = \sqrt{\text{gRandom} \rightarrow \text{Uniform}(0, 1)}(r_g + r_i)$$

olarak bir ROOT([ROOT n.d.](#)) satırı elde edilmiş olunur.

Bunun yanında ispat edilebilir ki; iyonun veya gazın yarıçap büyüklüklerinin etki parametresi üzerinde hiçbir etkisi yoktur. Denklem-3.25'de toplam yarıçap olarak R kullanılırsa,

$$\sin \frac{\pi - \theta}{2} = \frac{b}{R} \quad (3.21)$$

elde edilir. Dolayısıyla,

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{b}{R} \quad (3.22)$$

Ayrıca trigonometrik bağıntılardan faydalanarak,

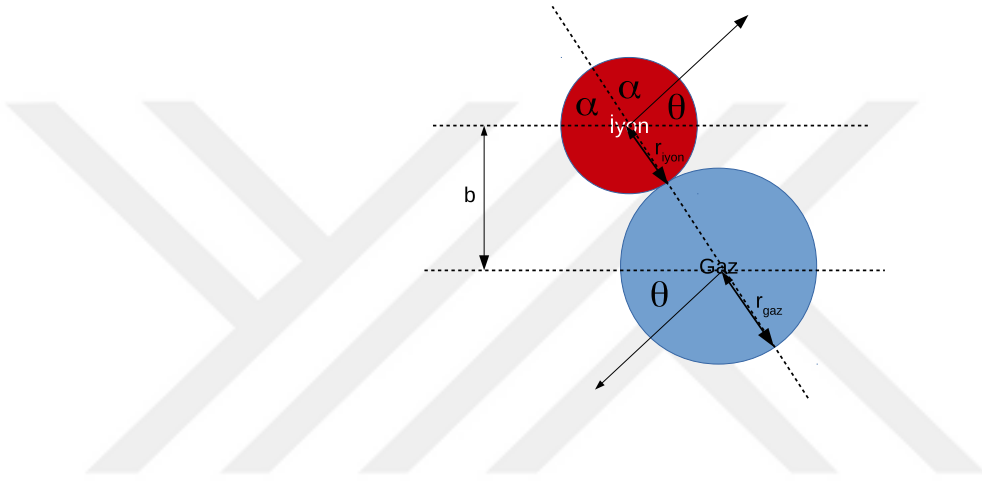
$$\cos (2\theta) = \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta) \quad (3.23)$$

$$\cos (\theta) = 2\cos^2\frac{\theta}{2} - 1 \quad (3.24)$$

yazılabilir. Denklem-3.24, Denklem- 3.20 ve Denklem-3.22 kullanılarak $\cos \theta$ 'nın dağılımı için $[0, 1]$ aralığında uniform bir dağılım gösterdiği, ayrıca iyon ve gazın yarıçapından tamamen bağımsız olduğu ispatlanmış olunur.

3.3.2. Saçılma açısı için rastlantısal sayılar üretilmesi

İyonun bir gaz molekülüne çarparak saçılması durumunda saçılma açısı (θ) ile ilgili yapılacak hesaplamalar, programlamanın eksenlerin döndürülmesi ile ilgili kısmında oldukça önem kazanacaktır. Şekilde görüldüğü üzere;



Şekil 3.4. İyon ve gaz atomunun çarpışması durumunda açılar.

$$\sin \alpha = \frac{b}{r_g + r_i} \quad (3.25)$$

$$\cos \alpha = \frac{\sqrt{(r_g + r_i)^2 - b^2}}{(r_g + r_i)} \quad (3.26)$$

$$\sin \theta = \sin 2\alpha = 2 \sin \alpha \cos \alpha \quad (3.27)$$

$$\sin \theta = 2b \frac{\sqrt{(r_g + r_i)^2 - b^2}}{(r_g + r_i)} \quad (3.28)$$

yazılabilir.

3.3.3. Azimütal açı için rastlantısal sayılar üretilmesi

İyon ve bir gaz molekülünün esnek çarpışmaları durumunda, azimütal açı için elde edilecek rastlantısal sayının belirlenmesi için özel bir fizik kuralına ihtiyaç yoktur. Bilindiği gibi bu açı, $(0, 2\pi)$ aralığında her değere sahip olabilir. O halde azimütal açı atanacak rastlantısal sayılar için;

$$\text{phi} = \text{gRandom} \rightarrow \text{Uniform}(0, 2 * \text{TMATH} :: \text{Pi}())$$

olarak bir ROOT komut satırının yazılması yeterli olacaktır.

3.3.4. İyonun hız vektörünün döndürülmesi ve rotasyon vektörleri

Kartezyen koordinat sisteminde iyonun hız bileşenleri aşağıdaki gibi yazılabilir :

$$v_x = |v| \cos \theta \quad (3.29)$$

$$v_y = |v| \sin \theta \sin \varphi \quad (3.30)$$

$$v_z = |v| \sin \theta \cos \phi \quad (3.31)$$

İyonun gaz atomu ile elastik çarpışması olayını incelemek için, olaya basitleştirmek adına kütle merkezi çervesinden bakılmıştı. Bu hamle, olayı incelemeyi mümkün kılacak kadar basitleştiremez. Ayrıca rotasyon matrislerini kullanarak, iyonun hız vektörü tek bir eksen üzerine döndürülmelidir. Örneğin; önce y eksenini etrafında α kadar döndürülüp, $x-y$ düzlemine çekilmesi için gerekli dönüşüm matrisi;

$$\mathbf{ROT1} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & -\sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

ardından z eksenini etrafında β kadar döndürerek, yalnızca x eksenini üzerine yerleştirilmesi için gerekli dönüşüm matrisi ise;

$$\mathbf{ROT2} = \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta & 0 \\ -\sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

şeklinde yazılabilir. Bu işlemler problemi büyük ölçüde kolaylaştıracaktır. Ayrıca bu işlem basamakları Şekil 3.4.2'de ayrıntılı olarak temsil edilmiştir. Program için kod yazmak ve programı sadeleştirmek amacıyla, iki ayrı döndürme işlemini tek seferde gerçekleştirecek bir matris elde edilebilir:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & -\sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta & 0 \\ -\sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta & \sin \beta & \cos \beta \sin \alpha \\ -\cos \alpha \sin \beta & \cos \beta & -\sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

ayrıca sistemin çözümünde kullanılacak trigonometrik ifadeler;

$$\begin{aligned} \sin \alpha &= \frac{V_{i(KM)}(Z)}{\sqrt{V_{i(KM)}(Z)^2 + V_{i(KM)}(X)^2}} \\ \cos \alpha &= \frac{V_{i(KM)}(X)}{\sqrt{V_{i(KM)}(Z)^2 + V_{i(KM)}(X)^2}} \\ \sin \beta &= \frac{V_{i(KM)}}{\sqrt{V_{i(KM)}(X)^2 + V_{i(KM)}(Y)^2 + V_{i(KM)}(Z)^2}} \end{aligned} \quad (3.34)$$

şeklinde olacaktır.

3.4. Programlama Aşamasının İlk Test Sonuçları

3.4.1. İyon Sınıf'ının "çarpışma ve saçılmalar" için ilk test sonuçları

İyonların gazlı detektörler içerisindeki davranışlarını simülasyon yoluyla ortaya koymak adına hazırlanan Sınıf, iyonların gaz atomları veya molekülleri ile çarpışması sonucunda saçılmaları durumunu da dikkate almak durumundadır. Buna bağlı olarak iyonun çarpışma sonrası hızının radyal bileşenlerinin bir spektrumu elde edilmiştir. Bu spektrum; z ekseninde hareket eden bir iyonun çarpışmadan sonra saçılma hızının radyal bileşenlerini göstermektedir. Bu bileşenlerin simetrik olması, disk şeklinde bir iki boyutlu histogram elde edilmesinde sebep olmuştur.

İlk olarak göze çarpan; maksimumlar hariç dağılımın olabildiğince düz bir yüzey meydana getirdiğidir. İstatiksel dalgalanmalar göz önüne alındığında, "n" kutulamadaki adet ya da olay sayısı olmak üzere; kutulamaların %30 undaki giriş adedi, bir kutulamadaki ortalama olay sayısından \sqrt{n} kadar sapma gösterdiği sürece değişim sabittir. Bu durum dağılımın oldukça düzgün olduğunu gösterir. Bunun yanında iyon ve gaz kütleleri eşit kabul edildiğinde elde edilen histogramın yarıçapı yani iyonun çarpışma sonrası sahip olabileceği maksimum hız, gaz kütlesi iyonun kütlesinin 10^{10} katı büyük olduğu kabul edilirse, bu durumda elde edilecek yarıçaptan yani iyonun bu durumdaki çarpışma sonrası sahip olabileceği maksimum hızından çok daha küçük olmaktadır. Bu durum da iyonun çarpışma sonrası hızının büyüklüğünün spektrumu sabit bir hız değeri gösterir ki; bu hız iyonun çarpışma öncesi hızından başka bir şey değildir. Yani gaz kütlesi çok fazla ise iyon momentumunu (veya enerjisini) aktarmadan, çarpışma sonrası aynı hızıyla devam eder. Bu durum fizik kurallarına olabildiğince uygundur. İyon ve gaz kütleleri eşit alındığında ise, çemberin yarıçapı iyonun çarpışma sonrası hızının yarısını göstermektedir. Eşit kütleli çarpışan cisimlerin, elastik çarpışma sonucu toplam momentumu yarı yarıya paylaşmalarını da fizik kuralları ile örtüşür. Hatta gaz kütlesinin iyon kütlesinin iki katı olması durumunda, momentumu aynı oranda paylaştıkları tespit edilmiştir. Dolayısıyla hazırlanan Sınıf, elastik çarpışma testlerinden geçmiştir denilebilir.

Şüphesiz disk şeklindeki iki boyutlu histogramın keskin kenarları da kaçınılmaz sorulara yol açacaktır. Kısa bir araştırma sonunda literatürde bu şekilde bir probleme rastlanmamıştır. Ancak, etki parametresinin sıfıra yaklaştığı, yani neredeyse kafa kafaya çarpışmaların meydana geldiği durumda momentum aktarımı fazla olacaktır. Bunun yanında etki parametresinin daha fazla olduğu, yani kafa kafaya sayılamayacak çarpışmalar meydana geldiği durumda ise momentum aktarımı oldukça az olacak, iyonun momentumu dolayısıyla hızı önemli bir kayba uğramayacaktır. Alan olarak düşünüldüğünde, etki parametresinin küçük olduğu, kafa kafaya çarpışma ihtimali oldukça düşüktür. Bu durum basitçe bir hesapla ispatlanabilir.

Kanıt. İyonun z eksenine doğrultusunda gelip durgun gaz atomu veya molekülüne çarptığı düşünülürse, etki parametresi b , $R = r_{\text{gas}} + r_{\text{iyon}}$, θ saçılma açısı (çarpışma sonrası hızın z eksenine ile yaptığı açı) olmak üzere,

$$\frac{b}{R} = \cos \frac{\theta}{2} \quad (3.35)$$

elde edilir. Ayrıca etki parametresinin olasılık yoğunluğu Kesim-3.3.1’de tartışılmıştı. Çarpışma sonrası hızın radyal bileşenleri s ve $\frac{b}{R}$ oranı p ile gösterilirse, p ’nin dağılımı, hızın s dağılımına dönüştürülecek olursa ki; bu adım olasılık aritmetiğinde “Değişken değiştirme” adıyla anılır. Burada p ve s ile aritmetik işlemler yapılacağından, bunların birimsiz olmaları şartını sağladıklarına dikkat edilmelidir. s , p ’nin fonksiyonu olarak yazılırsa ($s = g(x)$),

$$g(x) = \sin (2 \arccos x) \quad (3.36)$$

elde edilir. İşlemi kolaylaştırmak için fonksiyon trigonometrik ifadelerden kurtulmalıdır.

$$g(x) = \sin (2 \arccos x) \quad (3.37)$$

Bu fonksiyonun tersinden, $\frac{b}{R}$ oranına ulaşmak istenirse, bu denklemin dört farklı çözümü mevcuttur. Bunlardan ikisi negatif sonuçlar doğurduğundan, bu değerler fiziksel bir anlam taşımazlar çünkü etki parametresi negatif değer alamaz, dolayısıyla

kullanılabilir iki çözüm aşağıdaki gibidir:

$$\frac{\sqrt{1 - \sqrt{1 - s^2}}}{\sqrt{2}}, \quad \frac{\sqrt{1 + \sqrt{1 - s^2}}}{\sqrt{2}} \quad (3.38)$$

Bu çözümler fiziksel olarak, hızın radyal bileşenine göre ileri doğru ve geriye doğru olmak üzere iki ihtimalin var olduğunu matematiksel olarak açıklığa kavuşturur. Etki parametresinin sıfır olduğu durumda yani kafa kafaya çarpışmalarda ve etki parametresinin gaz yarıçapına eşit olduğu durumda yani iyonun gaza sadece dokunup geçtiği durumda, radyal hız bileşeninin sıfır olduğuna dikkat edilmelidir. Bu arada g fonksiyonunun türevine de ihtiyaç duyarız. Bu durumda değişken değiştirme sonucunda;

$$f(s) = \frac{f(g^{\text{ters}}(s))}{|g'(g^{\text{ters}}(s))|} \quad (3.39)$$

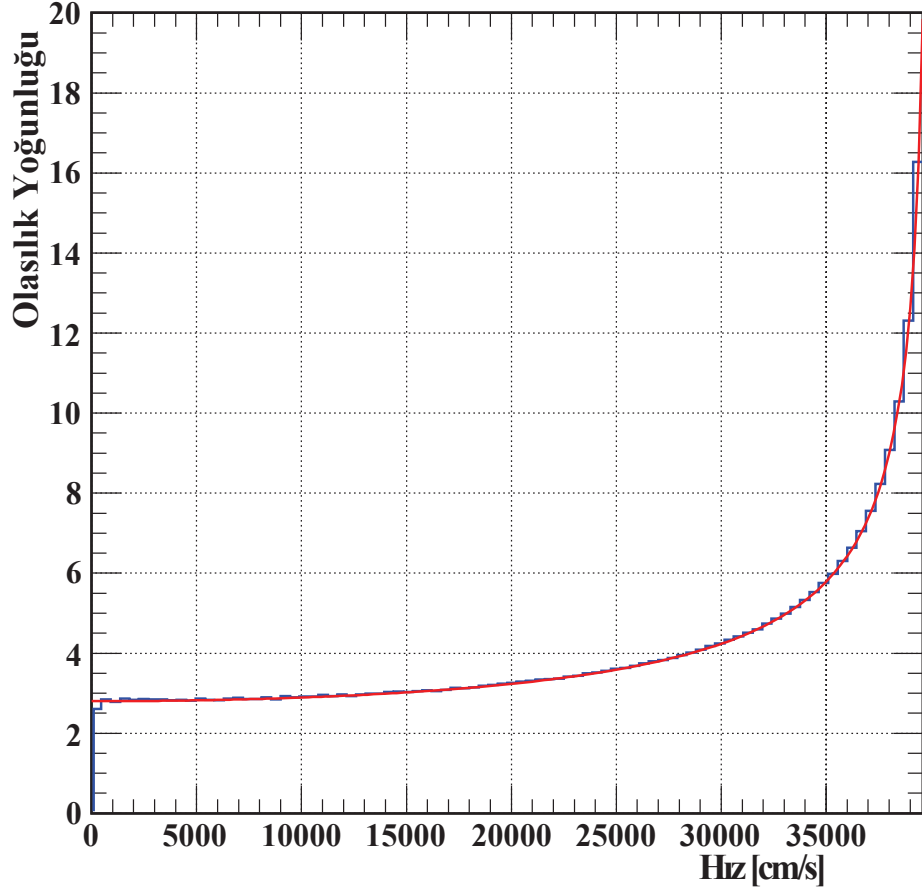
elde edilir. Bu durumda $g^{\text{ters}}(y)$ iki çözüme sahip olmuş olur. Bu yüzden iki çözümün toplamını ele almak zorunlu hale gelmiş olur. Sonuçta çözüm olarak;

$$f(s) = \frac{1}{2} \frac{s}{\sqrt{1 - s^2}} \quad (3.40)$$

elde edilir. Son olarak azimütal açıya göre bir integrasyon alındığında, s lineer bağımlılığı ortadan kalkmış olur. Bu çözüm; ortası yaklaşık olarak düz, kenarları Denklem-3.40 de görülen fonksiyona göre keskin olan, bahsekonu dağılımı matematiksel olarak açıklar. \square

Bu matematiksel çözümün, disk şeklindeki iki boyutlu histogramın keskin kenarlarını açıkladığını aşağıdaki grafik açıkça göstermektedir. Görüldüğü gibi grafik, histogram üzerine mükemmel oturmaktadır. Şekil 3.5' de mavi renkle belirtilen histogram radyal hız dağılımı spektrumunu, kırmızı ile gösterilen grafik ise Denklem-3.40' da belirtilen fonksiyonun grafiğini gösterir. Ayrıca histogram, gaz kütlesinin iyon kütlesine göre çok büyük olduğu varsayımına dayalı olarak çizilmiştir.

Şimdiye kadar yapılan testlerde gaz atomu veya molekülü tamamen hareketsiz olarak düşünüldü. Gaz atomunun termal enerji ile (Maxwell-Boltzmann parçacık hız dağılı-

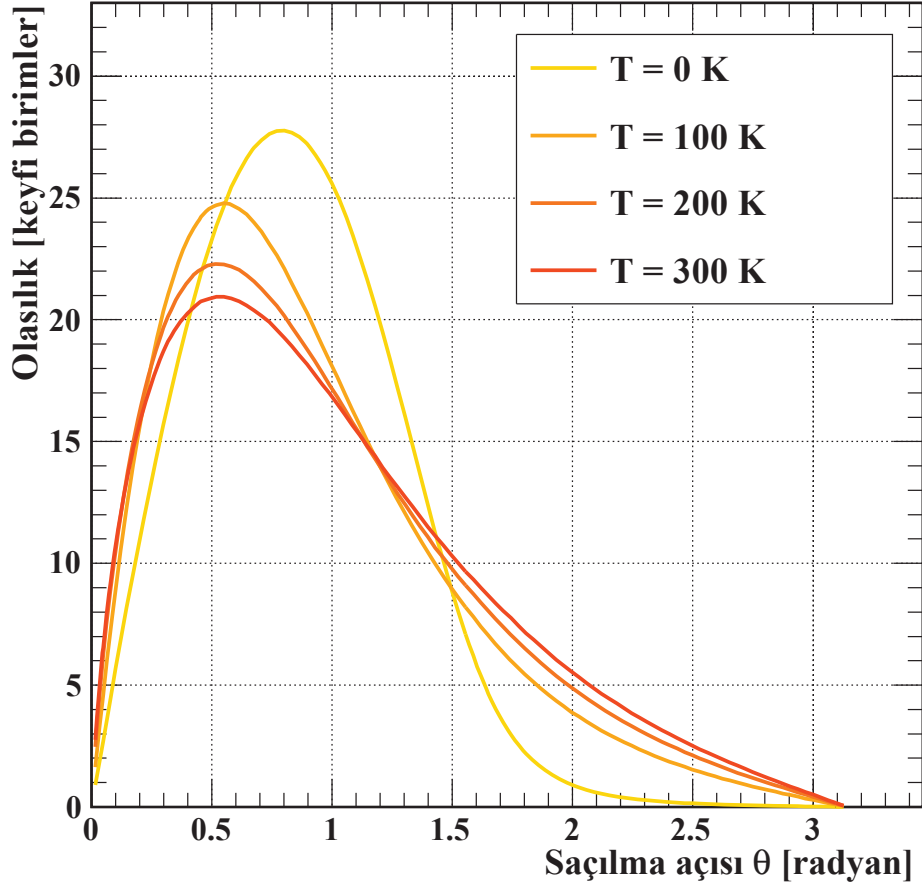


Şekil 3.5. İyonun radyal hız dağılımı spektrumu.

mına göre) üç boyutlu uzaydaki hız denklemi aşağıdaki gibi olacaktır.

$$v_{thermal} = \frac{3 k_B T}{m} \quad (3.41)$$

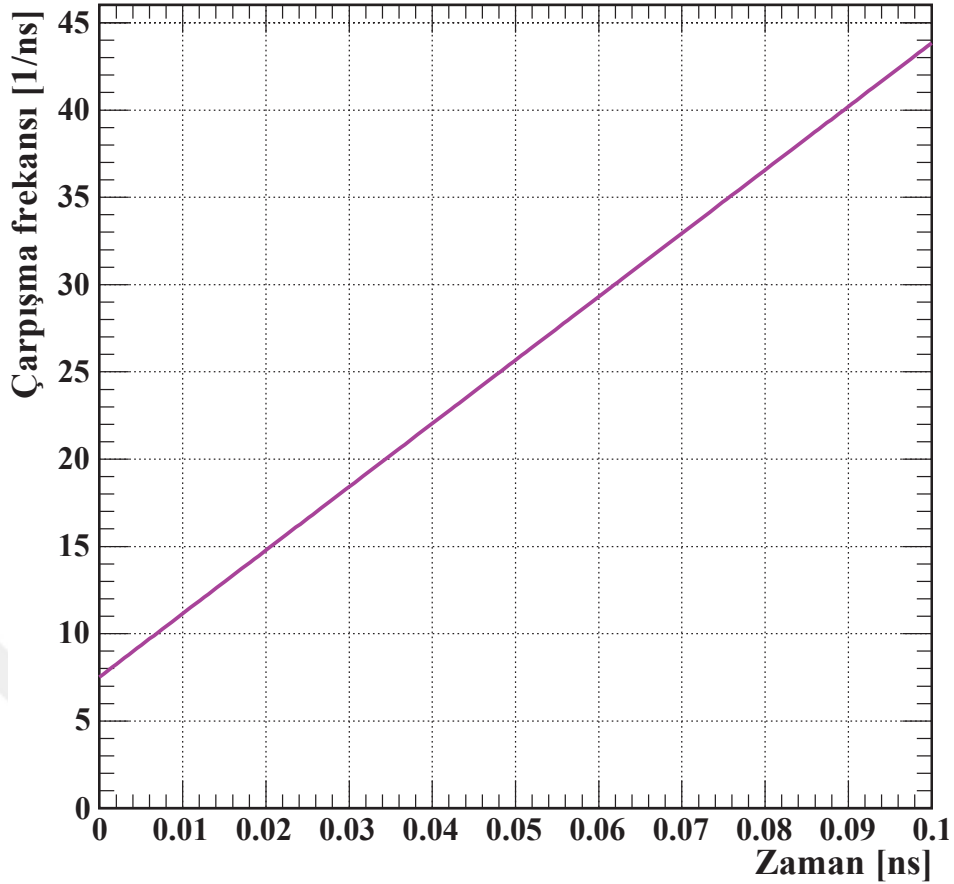
Bu durumda polar açının (iyonun saçılma açısının) dağılımı için bir test yapılmıştır. Bu testler sırasında iyon ve gaz kütlelerinin eşit olduğu ve öncelikle sıcaklığın 0 K olduğu düşünülürse; kafa kafaya çarpışma durumunda bu açı sıfır değerini alacaktır ki; bu ihtimal çok düşüktür. Polar açının maksimum değeri $\frac{\pi}{2}$ radyan olacak ve bu durumun gerçekleşme ihtimali yine oldukça zayıftır. Sıcaklık arttıkça gazın iyona çarpma hızı artacak ve bu durum iyonun geri saçılma ihtimali yani saçılma açısının π radyan dereceye yaklaşma ihtimalini artıracaktır. Bu dağılım hazırlanan Sınıf'tan aşağıdaki gibi elde edilmiştir. Gaz kütlesi Ar^+ iyonunun kütlesine eşit kabul edilmiştir ($6,63 \cdot 10^{-26}$ kg). İyonun ilk hızı 40000 cm/s olarak ele alınmıştır.



Şekil 3.6. Çeşitli sıcaklık değerleri için polar açının dağılımı.

3.4.2. İyon class'ının “serbest zaman” için ilk test sonuçları

Garfield⁺⁺ benzetim programı altında çalışacak ayrıca iyonların gaz ortamı içerisindeki davranışlarını açıklayabilmek adına hazırlanan Sınıf'ın ilk sonuçları oldukça olumlu olarak değerlendirilebilir. İyonun gaz atomları ile çarpışma frekansının, Skullerud yaklaşımına göre sadece zamana bağlı olduğu belirtilmişti. Test sürecinde hazırlanan program ile farklı elektrik alanlarda, farklı hızlarda, farklı iyonlar için yapılan hesaplamalar ortaya koymuştur ki; çarpışma frekansı birçok fiziksel parametreye bağlıdır. Ancak değişik fiziksel durumlar için elde edilen çarpışma frekansı spektrumlarının hepsi, Skullerud yaklaşımını kullanırken ortaya koyup kullandığımız bir gerçeği açıkça doğrulamaktadır. Çarpışma frekansı için elde edilmiş bu histogramlar aşağıdaki gibidir. Bu dağılım elde edilirken, Ar⁺ iyonu yarıçapı 71 pm (Winter 2010), tesir kesiti sert küre çarpışma modeli dikkate alınarak 615 Mb,

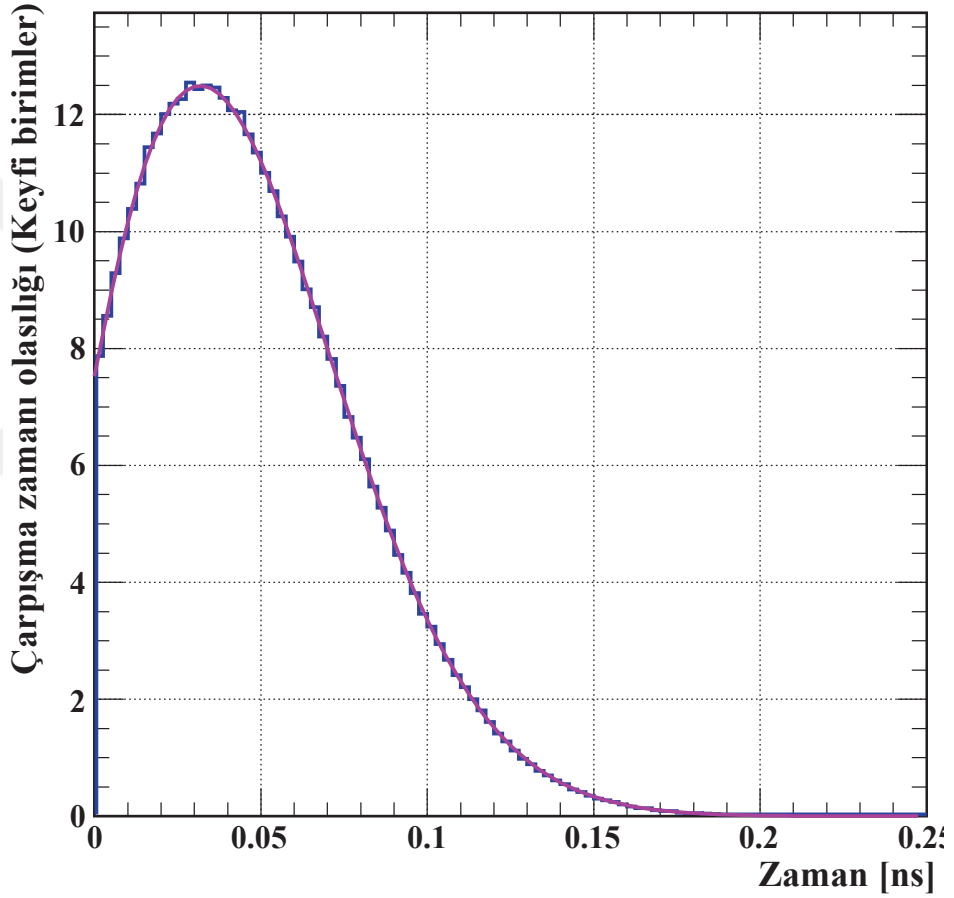


Şekil 3.7. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki çarpışma frekansının değişimi.

sıcaklık 300 K ve basınç 101, 225 Torr olarak alınmıştır. Ayrıca gazın sayı yoğunluğu (n_0), referans basıncı (P_0) ve referans sıcaklığı (T_0) sabitler kısmında verilmiştir. İyonun ilk hızı $5 \mu\text{m/ns}$, elektrik alan 10^6 Volt/cm , iyonun kütlesi 37240 MeV, iyonun yükü 1 elementer yük olup, iyonun çizgisel yörüngede hareket ettiği kabul edilmiştir.

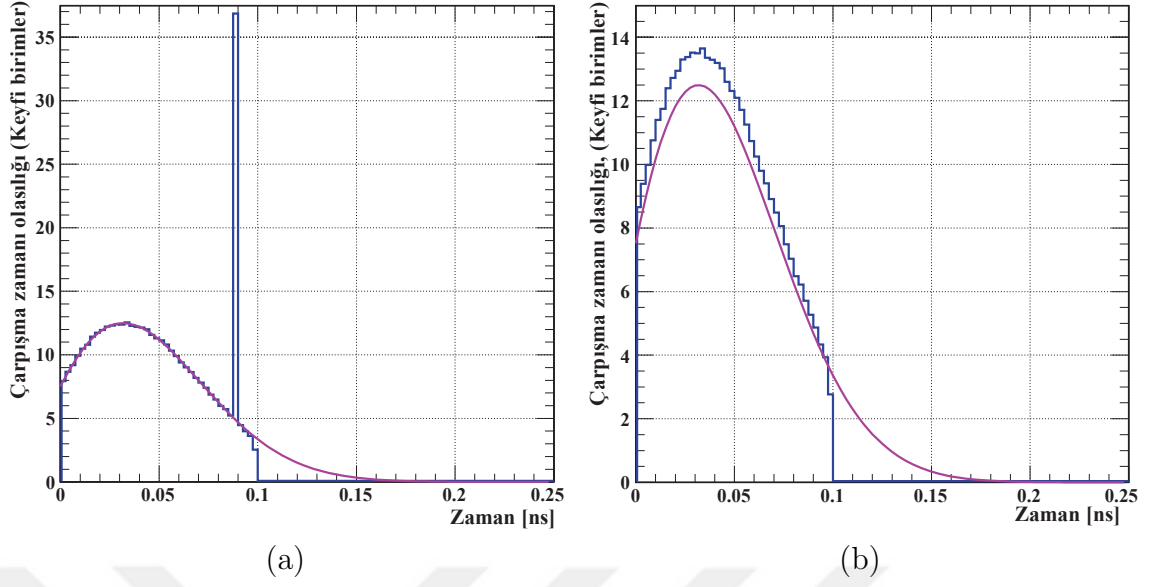
Ayrıca çarpışmalar için Skullerud yaklaşımı kullanılarak elde edilen serbest zamanın dağılım spektrumu Şekil-3.8'deki gibi elde edilmiştir. Maksimum çarpışma frekansı ile herhangi bir zamandaki çarpışma frekansı arasındaki ilişki hakkında daha önce Bölüm-3.13 'de bahsedilmişti. Hatırlanacağı gibi iyonların gaz atomları ile çarpışma frekansının, maksimum çarpışma frekansından küçük olması durumunda süreç olağan akışını sürdürüyordu. Ancak tam tersi durumda momentum aktarımı yapmayan (etkisiz) çarpışmaları simülasyon hesabında göz önünde bulundurulamıyor ve bu durumda iki farklı yöntem kullanılıyordu. Birincisi serbest çarpışma süresinin yeniden üretilmesidir. Bu durumda fazladan üretilen olaylar

Şekil-3.9(b) da gösterildiği gibi bir fazlalık meydana getiriyor ve Skullerud metoduna göre çizilen mor eğriye uymamaktadır. İkinci yöntem olarak maksimum çarpışma frekansının küçük kaldığı durumlarda, maksimum çarpışma frekansı ile çarpışma frekansının eşit olduğu zamana geri dönülerek yeniden bir serbest zaman üretilmesi sağlanır. Bu durumda ise Şekil-3.9(a)'deki gibi fazladan üretilen olaylar bu eşitlik noktasına toplanır. Maksimum frekansın belirlenmesi eğer serbest zamanın üretildiği döngü içerisine yerleştirilirse, bu şekilde bir problemle karşılaşılması kaçınılmazdır. Maksimum çarpışma frekansı 40 GHz olarak seçilmiştir. Mor renkli çizgi Skullerud



Şekil 3.8. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zamanlarının dağılım spektrumu.

yaklaşımına göre, mavi renkli spektrum ise Monte-Carlo yaklaşımına göre hazırlanılan Sınıf'tan alınan sonuçları gösterir. Ortalama çarpışma frekansının çarpışma frekansından büyük olduğu durum göz önüne alınmıştır. Maksimum çarpışma frekansı yine 40 GHz olarak seçilmiştir. Mor renkli çizgi Skullerud yaklaşımına göre, mavi renkli spektrum ise Monte-Carlo yaklaşımına göre hazırlanılan Sınıf'tan alınan sonuçları

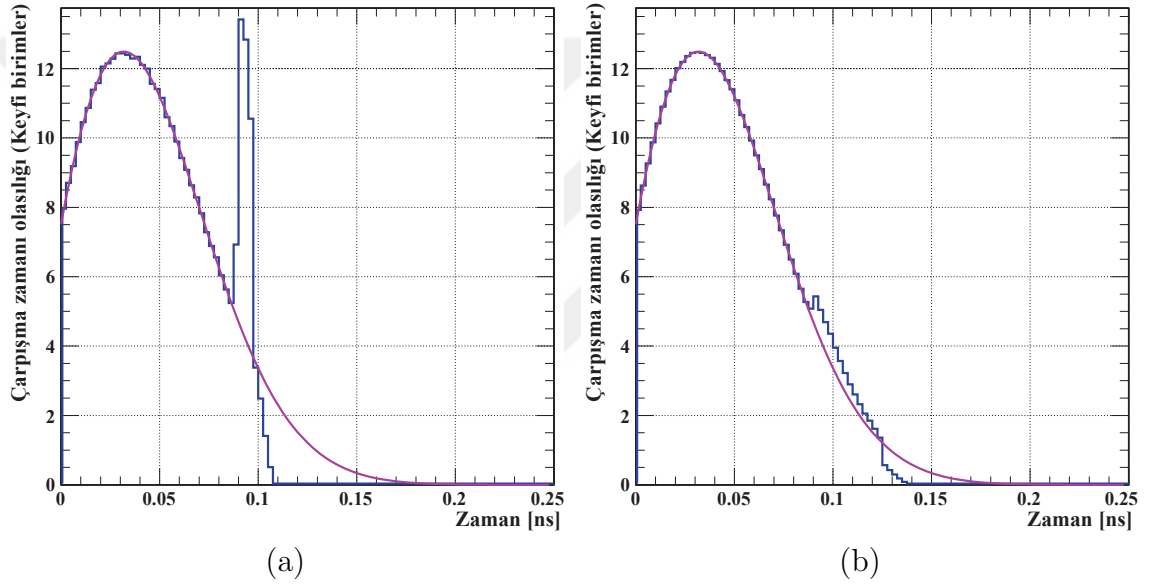


Şekil 3.9. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zamanlarının dağılım spektrumu.

gösterir. Çarpışma frekansının maksimum çarpışma frekansından büyük olduğu ve başlangıçta seçilen maksimum çarpışma frekansının döngü içerisinde her adımda yeniden tanımlanması durumu göz önüne alınmıştır. Skullerud yaklaşımına göre ihmal edilen zaman aralıkları için yeniden üretilen olayların fazlalığının eşitlik noktasında toplanması durumu soldaki şekilde görülmektedir. Sağdaki şekil ise Skullerud yaklaşımına göre ihmal edilen zaman aralıkları için yeniden üretilen olayların fazlalığının normalize edilmesi durumunu göstermek için hazırlanmıştır.

Maksimum çarpışma frekansının çarpışma frekansından küçük olduğu durumlarda eşitlik anına geri dönülüp, maksimum çarpışma frekansının artırılması durumu Skullerud yaklaşımından gelmektedir. Ancak maksimum çarpışma frekansının hangi ölçüde artırılacağı oldukça önemlidir. Örneğin 1,000001 oranında bir artış oranı belirlendiğinde, üretilen 10^6 olay için Şekil 3.10(a) 'de görüldüğü gibi ihmal edilen olaylar yerine üretilen fazladan olaylar yine eşitlik noktasında toplanarak bir pik meydana getirmiştir. Maksimum çarpışma frekansının, çarpışma frekansından küçük kaldığı her durum için, geri dönülerek maksimum çarpışma frekansının çok küçük oranda artırılması sonuca eşitlik noktası sağa doğru kayacaktır. Bu durum istenmeyen (fiziksel durumu temsil etmeyen) pikin genişlemesine ve büyümesine sebep olacaktır. Bu durumda eğer üretilen olay sayısı artırılsa bu istenmeyen pikin

küçülüp kaybolduğu ve spektrumun fiziksel duruma uyduğu göslenir. Bu durum ise maksimum çarpışma frekansı için yine 1,000001 oranında bir artış oranı belirlendiğinde, üretilen 10^7 olay için Şekil 3.10(b)'de olduğu gibi bir durum meydana gelecektir. Bunun sebebi ise fazladan ötelenen olaylardan dolayı spektrumun çok az kayarak ve büyüyerek istenmeyen pik'i içine almasıdır. Özetle Skullerud yaklaşımı, maksimum çarpışma frekansının artış oranını net olarak tanımlamadığı için eksik olarak kabul edilebilir ancak bu eksiklik hazırlanan Sınıf'tan gerçeğe uygun sonuçlar elde edilebilmesi için problemi çözecek bir yöntem elde edilmiştir. Maksimum çarpışma frekansı 40 GHz olarak seçilmiştir. Mor renkli çizgi Skullerud



Şekil 3.10. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zamanlarının dağılım spektrumu.

yaklaşımına göre, mavi renkli spektrum ise Monte-Carlo yaklaşımına göre hazırlanan Sınıf'tan alınan sonuçları gösterir. Çarpışma frekansının maksimum çarpışma frekansından küçük olduğu ve maksimum çarpışma frekansının artış oranının çok küçük ($1,000001$) olduğu durumda elde edilen spektrumdur. Solda üretilen 10^6 olay için elde edilen serbest zaman spektrumu, sağda ise üretilen 10^7 olay için elde edilen serbest zaman spektrumu görülmektedir.

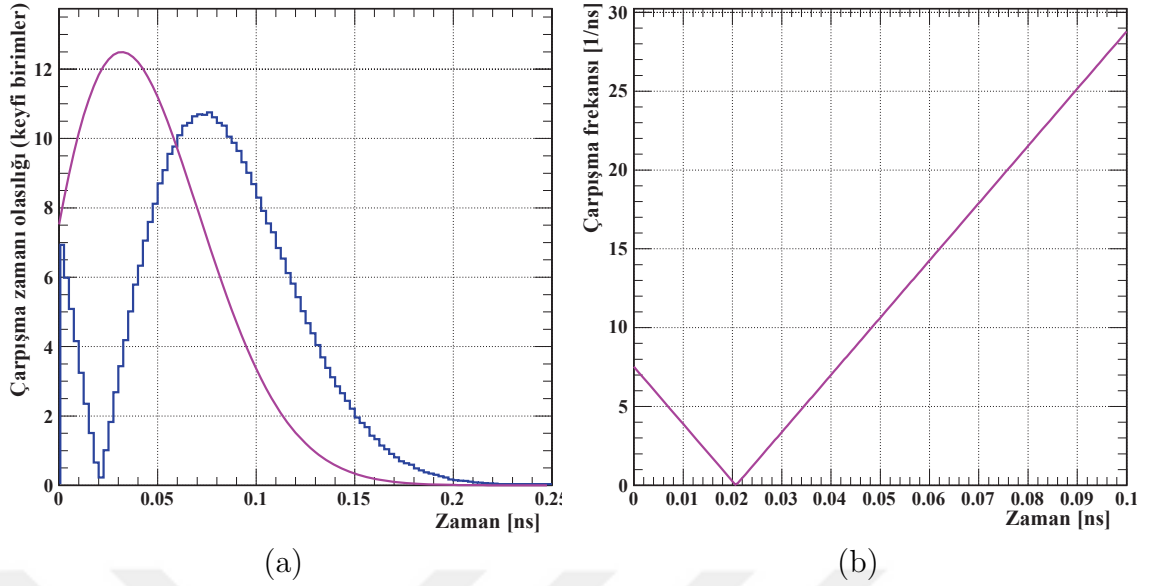
Bu yönteme göre; iyon serbest zamanı içerisindeki bir anda ($0 < t < \tau$) maksimum çarpışma frekansı, ani çarpışma frekansından büyük olursa, bu frekansların eşit olduğu andaki çarpışma frekansı (τ_{yeni}), maksimum çarpışma frekansı olarak kabul

edilir($\nu(\tau_{\text{yeni}})$). Ardından maksimum çarpışma frekansı bir önceki durumda uygun olmayan an için güncellenir yani artırılır ($\nu(\tau_{\text{eski}})$). Bu durumda elde edilen çarpışma frekansı Şekil 3.8'de görüldüğü gibi tamamen fiziksel duruma uymaktadır. Maksimum çarpışma frekansı bu spektrum için de 40 GHz olarak seçilmiştir. Mor renkli çizgi Skullerud yaklaşımına göre, mavi renkli spektrum ise Monte-Carlo yaklaşımına göre hazırlanan Sınıf'tan alınan sonuçları gösterir.

Skullerud yaklaşımında dikkat edilmesi gereken çok önemli bir nokta ise iyonun hızının büyüklüğünün kullanılması gerekliliğidir. Çarpışma frekansı Denklem 3.42 'e göre iyonun hızının bir fonksiyonudur. İyonun hızının negatif bir değer alması halinde, çarpışma frekansı da negatif değer alacaktır. Bu durum fiziksel olarak mümkün değildir. Bu problem Şekil 3.11(a)'de açıkça görülmektedir. Bu şekilde mavi renkle gösterilen Monte-Carlo simülasyonu doğrudur, ancak Skullerud yaklaşımına göre çizilen doğrulama eğrisi yanlış hesaplanmıştır. Şekil 3.11(b)'de bunun sebebi görülebilir. Görüldüğü gibi frekans grafiği kırılmıştır. Program içerisinde hızın bileşenlerinin karesi kullanıldığı için negatif kısım, x eksenine göre simetrik bir konuma geçmiştir. Buradan anlaşılmaktadır ki; iyonun hızı 0,02 ns civarına kadar negatif bir değerde seyretmektedir ve ancak aynı anda Skullerud yaklaşımına göre çizilen eğrinin maksimum noktası artmaktadır. Dolayısıyla kesinlikle iyonun hızının şiddeti kullanılmalı ve buna bağlı olarak program içerisinde mutlak değer ifadesi kullanılmıştır. Mor renkli çizgi Skullerud yaklaşımına göre, mavi renkli spektrum ise Monte-Carlo yaklaşımına göre hazırlanan Sınıf'tan alınan sonuçları gösterir. Solda iyon hızının negatif olduğu durum için elde edilen serbest zaman spektrumu ve sağda ise iyon hızının negatif olduğu durum için elde edilen çarpışma frekansının zamanla değişim grafiği görülmektedir.

Diğer bir sonuç olarak gaz ortamında hareket eden iyonun serbest yolunun dağılımı incelendiğinde bu dağılımın üstel bir dağılım olması gerektiği önceden tahmin edilebilir. Bu tahminin altını matematiksel olarak doldurmamız gerekirse Skullerud'un ortaya attığı denklem 3.42 ile başlanabilir;

$$P(t) = \exp\left(-\int_{t=0}^t \nu(|v_i + at|)dt\right) \quad (3.42)$$



Şekil 3.11. Ar^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest zaman dağılım spektrumu ve çarpışma frekansının zamanla değişimi.

Burada iyonun ivmesi a ile gösterilmiş ve t süre sonra iyonun hız değişimi at ile gösterilmiştir. Bu t süre sonraki hız değişimi programda kullandığımız birim sistemine uygun olarak düzenlenirse;

$$\Delta v = \frac{Ec^2t(10^{-6})}{m}t \quad (3.43)$$

elde edilir. İspatın devamı için iki varsayımda bulunulmalıdır. İyonun sabit elektrik alanda ve ilk hızı olmadan harekete geçtiği düşünülmelidir. Bu varsayımlar ispatı sınırlandırma- makla beraber sadece işlemleri kolaylaştırmak maksatlıdır.

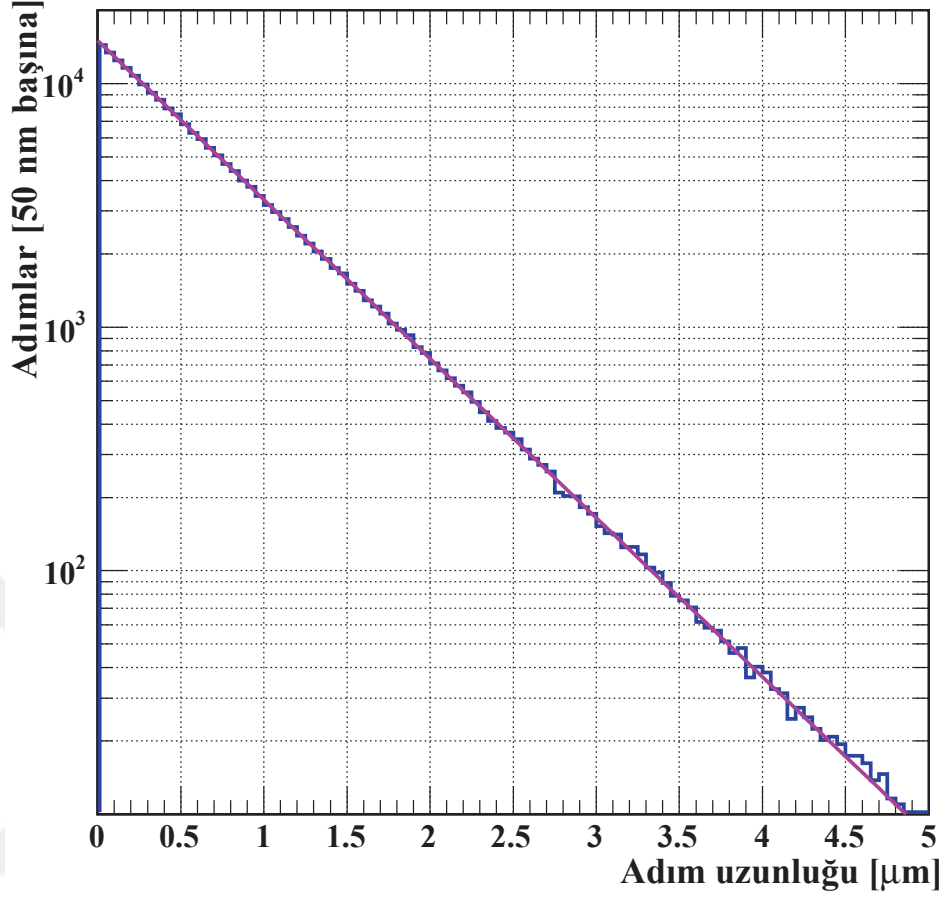
$$P(t) = \frac{N\sigma Ec^2 10^{-6}t}{m} e^{-\frac{1}{2}Ec^2 10^{-6}t^2 \sigma N} \quad (3.44)$$

Olasılık yoğunluğunun dağılımını göstermek adına sabitler görmezden gelindiğinde;

$$P(t) = te^{-t^2} \quad (3.45)$$

elde edilir. Bu sonuç ile iyonun serbest yolunun dağılımının üstel bir dağılım olduğu matematiksel olarak kanıtlanmış olur. Bu sonucu anlamlı bir netlikle doğrulayan dağılım spektrumu aşağıdaki gibi elde edilmiştir ve bu şekil için kullanılan paramet-

reler Şekil-3.7 ile aynıdır.



Şekil 3.12. Ar⁺ iyonlarının Argon gazı içerisindeki serbest yolunun dağılım spektrumu.

Bu dağılımın üstel olmasını beklenen bir sonuç haline getiren daha belirgin bir sebep şudur ki; herhangi bir gaz ortamı için serbest yolun olasılık yoğunluğu;

$$f(\lambda) = \sigma N e^{-\lambda \sigma N} \quad (3.46)$$

şeklinde değişir. Görüldüğü üzere üstel bir dağılım beklenmektedir. Şekil-3.12 de bu fonksiyonun grafiği mor renkli bir grafik ile belirtilmiştir. Bu sonucun önemli bir uzantısı olarak iyonun serbest yolu, gazın sayı yoğunluğu (N) ve tesir kesitinden (σ) başka hiçbir şeye bağlı değildir. Böylece bu sonuç, oldukça kompleks bir yol izlenerek tekrar ispat edilmiştir.

3.5. Etkisiz-Çarpışma (Null-Collision) Modeli'nin Probleme Uygulanması

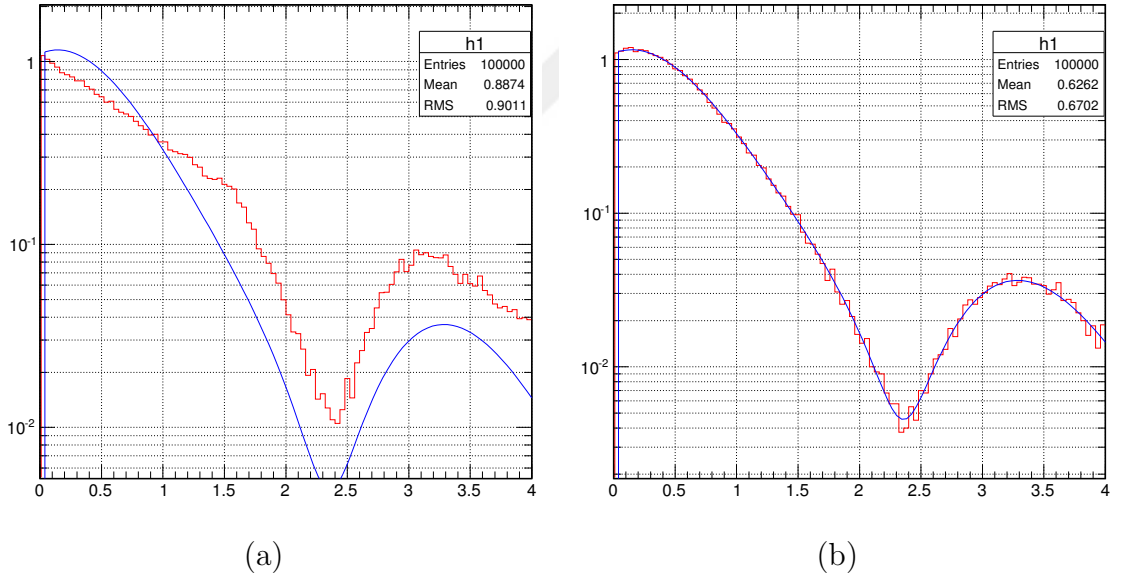
Denklemler-2.15 zamandan bağımsız bir çarpışma frekansı (ν) için çözümlerse,

$$P(\tau) = \exp\left(-\int_0^\tau \nu dt\right) \sim \exp(-\nu\tau) \quad (3.47)$$

sonucuna ulaşırız. Bu sonuç τ niceliği $[0, \infty]$ aralığında $[1, 0]$ aralığında değerler aldığı için kümülatif fonksiyonun 1'den farklı olduğu gerçeğini gösterir. Buna dayalı olarak τ için rastlantısal sayılar üretilmiş ve söz konusu alt program için kullanılmıştır. Skellerud'a göre iyonun yolu boyunca gerçekleştireceği çarpışmaların bazıları momentum transferine sebep olamayacak, dolayısıyla iyonun serbest yolunu etkileyecektir. Yapılan simülasyon hesaplamalarında bu tip çarpışmaların hesaba katılması oldukça zordur. Söz konusu teori literatürde; "Null-Collision Method" olarak anılmaktadır. Bu metoda göre çarpışma frekansı değeri için rastlantısal bir sayı üretilmelidir (ν'). Bu çarpışma frekansı kuşkusuz gerçek çarpışma frekansından (ν) büyük olmalıdır. Diyelim ki; seçilen deneme frekansı gerçek frekansın iki katı olsun. Dolayısıyla üretilen serbest zaman (τ'), gerçek serbest zamanın (τ) yarısı kadar olacaktır. Bu söylem şu anlama gelir ki; serbest yollar olması gerektiğinden daha kısa hesaplanmıştır, hatta bu örnek için yarısı kadar hesaplanmıştır. Buradan simüle edilen çarpışmaların yarısının etkisiz, yarısı ise gerçek (momentum transferine sebep olarak iyonun yolunu değiştirebilen) çarpışmalar olduğu kanısına varılır. Sonuç olarak bu örnek için, toplam çarpışma sayısının yarısını hesaba katmamız gerekecektir. Durumu genelleyecek olursak, rastlantısal olarak üretilen çarpışma frekansının gerçek çarpışma frekansından büyük olduğu her t değeri için, Skellerud'un metodu doğrudur. Skellerud bu zorluğun, matematiksel bir ustalıklarla, elde ettiği çözümü hıza bağımlı durum üzerine genelleştirerek bu zorluğun üstesinden gelmiştir: Özetle çarpışma frekansı için sabit bir deneme frekansı seçmiş (ν') ve seçilen bu deneme frekansının gerçek hıza bağımlı çarpışma frekansından ($\nu(v)$) büyük olması şartı, kurgulanan simülasyon algoritmasında gözetilmiştir.

Skellerud metodu bir örnekle açıklanabilir. $\tau(t) = 1, 1 + \sin(2t)$ şeklinde değişen bir fonksiyona sahip olduğunu ve rastlantısal olarak üretilecek çarpışma frekansı sabit

$\nu' = 2,5$ Hz olarak ele alındığında, $[0,4]$ zaman aralığında çarpışma frekansı belirlenmek isteniyor olsun. Bu zaman aralığında gerçekleşecek çarpışmaların serbest zamanlarını iki boyutlu bir histogram ile gösterecek olursak Şekil-3.13(a) ve Şekil-3.13(b)'deki gibi bir görünüm elde edilir. Verilen fonksiyona göre dağılım gösteren noktaların birleştirilmesi ile oluşturduğumuz bir çizgi ile dağılımın, dolayısıyla yöntemin doğruluğu sınanmıştır. Şekil-3.13(a)'da rastlantısal olarak üretilen çarpışma frekansı değeri ($\nu' = 1,1$ Hz), gerçek çarpışma frekansı değerinin maksimum değerinden ($\nu = 2,1$ Hz) küçük olarak seçilmiştir. Görüldüğü gibi teori doğrulanmamaktadır. Şekil-3.13(b)'de ise rastlantısal olarak üretilen çarpışma frekansı değeri ($\nu' = 3,1$ Hz), gerçek çarpışma frekansı değerinin maksimum değerinden ($\nu = 2,1$ Hz) büyük olarak seçilmiştir. Görüldüğü gibi bu durumda teori doğrulanmaktadır. Bu örnekten de görüldüğü gibi Skullerud'un teorisi ($\nu' > \nu$) şartı sağlandığı ölçüde, her türlü zaman değeri için sağlanmaktadır.



Şekil 3.13. İyonların serbest yollarınının, a) $\nu' < \nu$ b) $\nu' > \nu$ şartları için histogramlar.

3.6. İyonun Ortalama Serbest Zamanı için Matematiksel Sonuçlar

Bu çalışmanın birçok kısmında çarpışma süresinin eksponansiyel bir dağılıma sahip olduğundan bahsedilmiştir. Ayrıca Skullerud'un yaklaşımını baz alarak Kısım-3.4.2'de ortalama serbest zamanın belirlenmesi için bazı yöntemler geliştirilmiş ve bu yöntemler ışığında İyon Sınıf'ı için gerekli satırlar yazılmıştır. Sonuçları da yine aynı kısımda ayrıntıları ile tartışılmıştır. Ancak bu noktaya kadar çalışma kapsamında ilk gerçekleşecek çarpışma için ortalama çarpışma süresi bilinmemektedir.

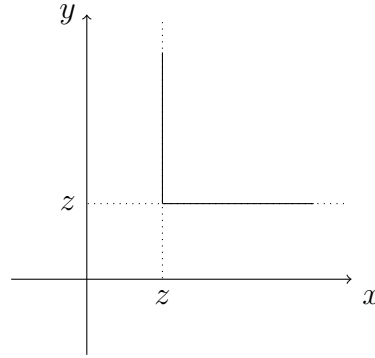
Meseleyi basitleştirmek adına Şekil-3.14'de görüldüğü gibi, iki gaz atomunun olduğu tek boyutlu bir faz uzayı üzerinde ortalamaları λ ve μ olan,

$$f_x(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{x}{\lambda}}$$

ve

$$f_y(y) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{y}{\mu}}$$

fonksiyonlarına göre eksponansiyel dağılımlar olan $f_x(x)$ ve $f_y(y)$, gaz atomlarının hız dağılımları olsun. Ayrıca z eksponansiyel dağılımının, x ve y dağılımlarının



Şekil 3.14. İlk çarpışmayı gerçekleştirecek gaz atomunun serbest zaman dağılımının elde edilmesini içeren yöntemi açıklayan yardımcı şema.

minimumu olduğu düşünüldüğünde, z dağılımının ne olacağını bulmak için Kısım-3.1'in sonunda yer verilen matematiksel bazı yöntemler de kullanılarak aşağıdaki

integraller ve sonuçları ortaya konulmuştur.

$$f_x(z) \int_z^{+\infty} dy f_y(y) = \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{z}{\lambda}} e^{-\frac{z}{\mu}} = \frac{1}{\mu} e^{-z(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\lambda})} \quad (3.48)$$

$$f_y(z) \int_z^{+\infty} dx f_x(x) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{z}{\mu}} e^{-\frac{z}{\lambda}} = \frac{1}{\lambda} e^{-z(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\lambda})} \quad (3.49)$$

Yukarıdaki integrallerin sonuçlarının toplamı aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$f_y(z) \int_z^{+\infty} dx f_x(x) = \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\lambda} \right) e^{-z(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\lambda})} \quad (3.50)$$

$\mu = \lambda$ varsayımı için ilk çarpışma süresinin, ortalama çarpışma süresinin yarısı yani gaz atomu sayısı kadar olacağını gösterir. Örneğin, problem n atomlu bir sistem için çözmeye kalkılsa, ilk çarpışmanın gerçekleşeceği süre, ortalama çarpışma süresi/ n olarak bulunacaktı. Bir cm^3 hacimli bir gaz ortamında $2,7 \cdot 10^{25}$ tane gaz atomunun varlığı düşünüldüğünde ilk çarpışma süresinin çok çok küçük olacağı ortaya çıkar. Ancak bu sürenin ortalama çarpışma süresi ile kıyaslanabilir büyüklükte olması beklenir. Ayrıca bir iyonun, bulunduğu ortamda bulunan bir gaz atomu ile ortalama çarpışma süresi için bu çalışmanın önceki bölümlerinde de sıkça yer verilen;

$$\tau = \lambda/v = \frac{v}{(N\sigma)} \quad (3.51)$$

ifadeleri üzerinde de düşünülecek olursa, n gaz atomunun bulunduğu bir ortamda ortalama gerçek süre $\frac{\tau}{n}$ ile tanımlanabilir. Yukarıda da ifade edildiği gibi gerçekte gaz atomu sayısı (n) oldukça büyük bir rakamdır ve bu durumda ortalama serbest zaman çok çok küçük bir zaman olarak beklenir. Bu sonuç ilk bakışta yanlış algılanmaya oldukça elverişlidir. Ortalama serbest zaman zaten ilk çarpışmanın gerçekleşmesi için geçen zaman değil midir? Peki o halde neden yukarıdaki sonuç, daha önce elde edilen ortalama serbest zaman ile kıyaslanamayacak kadar küçüktür? Ancak hatırlanmalıdır ki ortalama serbest zaman bir dağılımın ortalama değeridir ve bu dağılım içerisinde sifıra çok yakın değerler de mevcuttur. Minimum çarpışma süresinde bu değerlerin civarında olması oldukça normal bir sonuçtur.

3.7. İyonun Serbest Yolu ve Ortalama Serbest Yolu

Bir parçacığın bir ortama girdiğinde sahip olacağı serbest yolu ve ortalama serbest yolu (λ) sıkça karıştırılan kavramlardır. İyon bir gaz ortamına girdiğinde etkileşme yapmadan gidebildiği yoldur, her defasında değişebilir, tamamen olasılıklara bağlıdır. Ortalama serbest yol ise iyonun gaz ortamı içerisinde sahip olabileceği serbest yolların bir ortalamasıdır. Ortalama serbest yol için bir olasılık fonksiyonu üretilebilir. Bunun için iyonun etkileşme yapmadan çok çok küçük bir mesafe (δ) veya bunun a katı kadar bir mesafe kateddiği düşünülürse,

$$f(x + \delta) = (1 - \delta a)f(x)$$

$$\begin{aligned} & f(x + \delta) - f(x) \\ &= (1 - \delta a)f(x) - f(x) \frac{f(x + \delta) - f(x)}{\delta} = \frac{\delta a f(x)}{\delta} \end{aligned} \quad (3.52)$$

türevin tanımına ulaşırız. İşte a değeri, ortalama serbest yolu ifade etmektedir. Dolayısıyla sonucun $f'(x) = -af(x)$ şeklinde olduğu sonucuna varılmıştır. Bu diferansiyel deklemin çözümünden olasılık fonksiyonu;

$$f(x) = e^{-\lambda x} \quad (3.53)$$

şeklinde ifade edilmiştir.

Daha önce de belirtildiği üzere bu çalışmanın temel amaçlarından birisi Garfield⁺⁺ simülasyon programı için bir alt program hazırlamak (Sınıf), dolayısı ile gazlı detektörlerin simülasyonu yapıldığında, iyon etkilerini de katarak gerçeğe daha yakın sonuçlar elde edilmesini sağlamaktır. Bunun için öncelikle yapılması gereken, hesaplamalar içinde kullanacağımız fiziksel niceliklere, rastlantısal sayılar atamaktır. Hazırlanan alt program, Garfield⁺⁺ simülasyon programının ROOT arayüzü ile çalışacağından dolayı, atanacak rastlantısal sayıların Monte-Carlo Yöntemi ile üretileceği bilinimelidir. Tartışılan fiziksel olaylara karışmış olan fiziksel niceliklere rastlantısal değerler atamak belirli kurallara tâbidir. Bu kuralları “Fizik” ortaya koyar. Böylece

çalışmanın bu bölümünde hangi fiziksel niceliğe, hangi fiziksel kurala veya kural-lara dayalı olarak, nasıl bir ROOT komut satırı ile rastlantısal değerler atanacağı, açıklamalı olarak yer alacaktır.

Bir fiziksel nicelik için rastlantısal sayı üretmek, öncelikle onun için bir “Olasılık Yoğunluğu Fonksiyonu” yazabilmek ile mümkün olur($f(x)$). Bu fonksiyonun ters integrali hesaplanarak bir Kümülatif Fonksiyon ($F(x)$) elde edilmiş olur :

$$F(y) = \int_0^y f(x)dx \quad (3.54)$$

Normalizasyon koşulu gereği $f(\infty) = 1$ olmalıdır. Ayrıca $(0, 1)$ aralığında rastgele atanacak bir değer (y) için, kümülatif fonksiyon u ve olasılık yoğunluğu fonksiyonu ξ ile gösterildiğinde,

$$P(u < \xi) = \xi P(u < f(b)) = f(b)$$

$$P(\underbrace{F_{\text{ters}}(u)}_{\text{Rastgele bir b}} < y) = F(y) \quad (3.55)$$

kuralının hatırdta tutulması önemlidir.

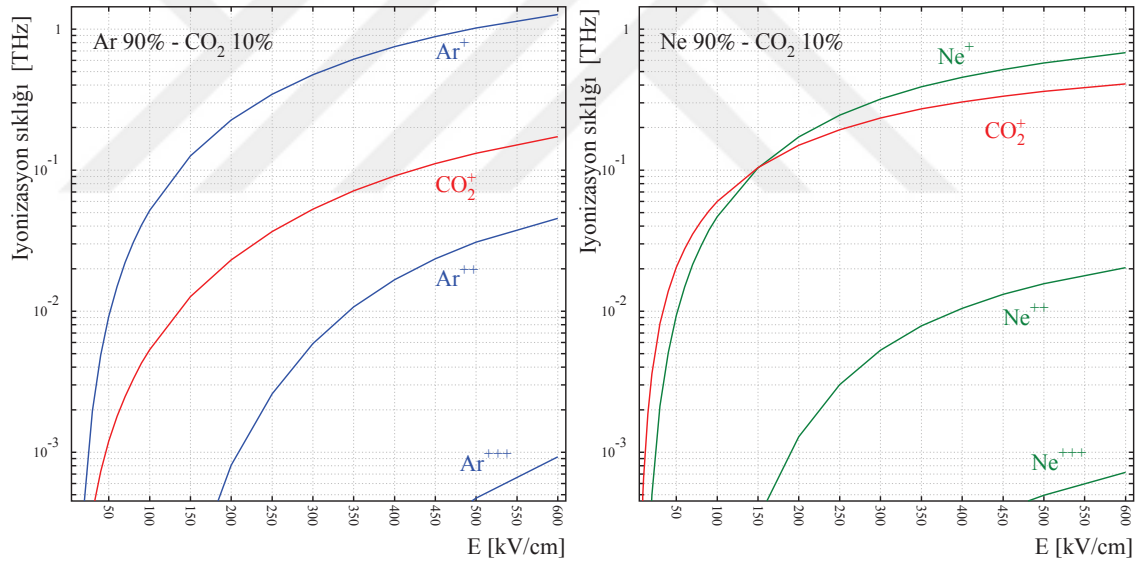
3.8. Deneysel Kurulum ve Mobilite Ölçüm Yöntemi

Bu çalışma kapsamında Portekiz'in Coimbra şehrinde bulunan Coimbra Üniversitesi'ne bizzat gidilerek, işbirliği halinde çalışılan bir grup ile birlikte, hazırlanan Sınıf 'dan Monte-Carlo Yöntemi ile elde edilen sonuçlar ile kıyaslanması için bazı iyonların bazı gazlar ve gaz karışımları içerisindeki mobilitelerinin ölçümü gerçekleştirilmiştir. Literatür gözden geçirildiğinde iyonların gaz ortamlarındaki mobilitelerini ölçmek için çeşitli yöntemler ile karşılaşılmış olup, CERN RD51 projesi kapsamında, Uludağ Üniversitesi ile ortak çalışma grubunda bulunan söz konusu grup bilim insanı tarafından geliştirilen bir yöntem ile bu mobilite ölçümleri oldukça hassas bir şekilde ölçülebilmektedir. Bu yöntemin temelinde, silindir şeklinde ve paslanmaz çelikten yapılmış bir tüp içerisine yerleştirilmiş bir GEM (Gas Electron Multiplier) detektörü yaprağı vardır. Ancak bu yaprak klasik bir GEM yaprağının üzerine 250 nm kalınlığında Sezyum İyodür (CsI) ile kaplanması suretiyle modifiye edilmiştir. Sezyum iyodür tabakası, kullanılan bir UV Flash lambadan gelen fotonlardan kaynaklı "Fotoelektrik Etki" ile elektron üretilmesi için kullanılmaktadır. GEM yaprağının alt ve üst metal plakalarına uygulanan 30 V civarındaki potansiyel farktan kaynaklanan elektrik alan eşliğinde elektronlar GEM holleri içerisine sürüklenerek enerji kazanacak ve sonuçta holler içerisindeki gaz ortamı içerisinde iyonlaşmalara sebep olacaktır. Elde edilen bu iyonlar üst GEM yaprağı ile üstünde bulunan ızgara arasına uygulanan elektrik alandan dolayı bu ızgaraya doğru sürüklenecektir. Birinci ızgarayı geçtikten sonra sadece 0,5 mm'lik bir mesafe sonra sinyalin alındığı ikinci ızgaraya kadar elektrik alan etkisi olmadan sürüklenecek ve sinyalin alındığı bu ızgara üzerinde yük indükleyerek, sinyal oluşumuna sebep olacaklardır. Sistemde iki ayrı ızgara kullanılmasının önemli bir sebebi mevcuttur. İyon, neredeyse sabit hızla, bir denge halinde sürükleneceğinden dolayı sinyalin alındığı ızgara üzerinde sabit akım oluşmasına sebep olur. Bu sabit akım iyonun ızgaraya ulaşması ile bir süre sonra hızla azalır ve son bulur. Sinyalin alındığı ızgaranın önünde başka bir ızgaranın da kullanılması suretiyle, sinyalin alındığı ızgara perdelenmiş olur ve sadece iyon iki ızgara arasında iken yük indükler ve sinyal oluşumu gerçekleşir. Oluşan bu sinyal, çok kısa ve bilinen (0,5 mm) bir mesafede iyonun ilerleme süresini dolayısıyla iyonun sürüklenme hızının

bilinmesine yardımcı olur. Özetle; osiloskopta birbirinden tamamen bağımsız iki pik gözlenir. Bunlardan ilki UV flash lambadan gelen fotonların, sinyalin alındığı ızgara civarındaki gaz atomlarını iyonlaştırması sonucu oluşan iyonların bu ızgara üzerinde yük indüklemesinden ileri gelir. Bu pik önemlidir çünkü iyonizasyonun başladığı zamanın habercisidir. Bundan sonra asıl pik gözlenir ki; bu pikin maksimumunun gösterdiği zaman ile iyonizasyonun başladığı zaman arasındaki fark sürüklenme süresini gösterir. Bu süre ve uygulanan voltajın meydana getirdiği elektrik alanın indirgenmiş değeri kullanılarak mobilite değerine ulaşılır.

3.9. İyonik Kümelerin Oluşumu

3.9.1. Çığ oluşumu

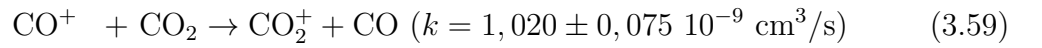
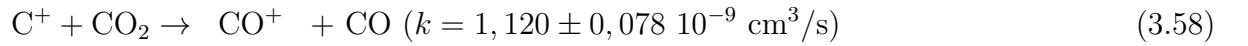
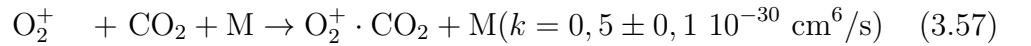
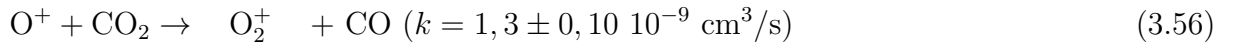


Şekil 3.15. Ar % 90-CO₂ % 10 (*sol*) ve Ne % 90-CO₂ % 10 (*sağ*) karışımı içerisindeki iyonizasyon oranları.

Öncelikle Magboltz v.10.6 kullanılarak hesaplanmış veriler tartışılmalıdır (Biagi 1999; Sahin 2015) (Bkz. Şekil 3.15). Atmosferik basınçta ve oda sıcaklığında, Ar-CO₂ karışımı içerisinde meydana gelen çığ ve ilk olarak daha fazla Ar⁺ ve çok daha az sayıda CO₂ iyonları üretilir. Ne-CO₂ karışımları için diğer karışıma oranla, Neon gazının iyonlaşma potansiyelinin daha yüksek olmasına bağlı olarak daha az oranda Ne⁺ iyonları ortaya çıkar. Soygazların iyonlaşması oldukça basit olmakla beraber,

çoklu iyonizasyon ve daha iç kabuklardan elektron koparmak suretiyle iyonizasyonun meydana gelmesi birşey değiştirmez. Aksine CO₂ ortamının 20 - 100 eV enerjili elektronlarla bombardıman edilmesi sonucunda, basınca bağlı olarak iyonlaşma süreci başlar. Bu durum H.W. Ellis ve Ark. tarafından gösterilmiştir (Ellis ve ark. 1976a). 0,013 Pa basınç altında, % 98 oranında CO₂⁺ iyonları elde edilebilir. Ancak bu durumda ortamda C⁺, O⁺ ve CO⁺ gibi iyonların varlığından bahsetmek kaçınılmaz olur. Aslında bu iyonlar 0.13 Pa basınç altında gözlenemezler. 0.26 Pa basınç altında, O₂⁺ iyonları ortaya çıkmaya başlar ve sayıları basınca da bağlı olarak gittikçe artar.

Bu iyonların kökeni, bilimsel deneylerde ortaya çıkma sıklığı ile orantılı olarak tartışma konusu olmuştur ancak Denklem (3.57)'de belirtilen reaksiyon bu olayı açıklar (Schildcrout ve ark. 1970). 8 Pa basınç altında, daha büyük iyonlar, ilk iyonik kümeler de dahil olmak üzere, ortaya çıkarlar ve 100 Pa basınçta en yaygın olarak görülen iyonlar (% 98), O₂⁺ iyonları ve O₂⁺ · CO₂ iyonik kümeleridir. Bunlar atmosferik basınç altında da ortaya çıkabilirler ama gözlenemezler. Çünkü hızlıca CO₂ ile etkileşime gireceklerdir. (Literatürden alınan hız sabitleri ve ağırlıklı ortalamalar ((Anicich ve Huntress Jr.; Boris 1992a)):



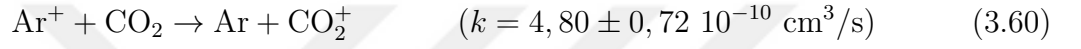
Atmosferik basınçta ve % 10 CO₂ ile hazırlanmış bir karışım içerisinde iki reaktantlı (two-body) reaksiyon süresi¹ yaklaşık 370 ps civarındadır. O₂⁺ iyonları ise, üç reaktantlı reaksiyonlar sonrasında, CO₂ molekülleri ile iyonik kümeler meydana getirirler. Fazla kinetik enerji ve bağlanma enerjisi “yardımcı” molekül (M) tarafından emilir. Eğer sadece CO₂ molekülü yardımcı olarak rol üstlenirse, bu olay 300 ns sürer ve

¹Reaksiyon süresi, τ , kalan reaktant miktarının $1/e$ oranına düşmesi için geçen süre olarak anlaşılmalıdır. Bu süre, gazın oda sıcaklığında sayı yoğunluğunun $N = 2,45 \cdot 10^{19}/\text{cm}^3$ olduğu varsayılarak, reaksiyonun hız sabitinden hesaplanır.

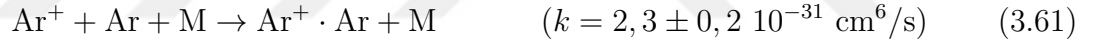
diğer gaz molekülleri de yardımcı olarak rol almaları durumunda 10 kat hızlanabilir. Dolayısıyla sadece iyonik kümeler ve belki O_2^+ iyonları atmosferik basınç altında detekte edilebilirler.

3.9.2. Argon ve Neon iyonik kümelerinin oluşumları

Argon atomu CO_2 molekülüne göre daha yüksek bir iyonizasyon potansiyeline sahiptir ve Ar^+ iyonları, CO_2 oranının % 10 olduğu varsayılırsa, $\sim 0,85$ ns içerisinde yüklerini CO_2 molekülüne aktaracaklardır ([Anicich 1993](#)):



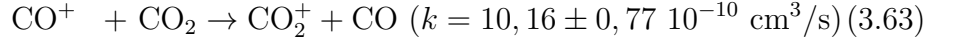
Alternatif olarak, Ar^+ iyonları, 1951 yılında John Hornbeck tarafından da ispat edildiği gibi moleküler iyonlar olabilirler ([Hornbeck 1951](#)). Ayrıca yüksek basınçlarda, üç reaktantlı reaksiyonlar içerisinde de bulunabilirler:



burada M, Ar veya CO_2 olabilir ve daha önce de bahsedildiği gibi enerji-momentum korunumunu sağlarlar. Reaksiyonun hız sabiti, Wei-cheng F. Liu ve D.C. Conway'den alınmıştır ([Liu ve Conway 1975](#)). Benzer bir değeri ($k = 2,0 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$) K. Hiraoka and T. Mori yayınlamıştır ([Hiraoka ve Mori 1989](#)). B.M. Smirnov ([Boris 1992b](#)) $k = 2,2 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$ gibi bir değer önermiştir. % 90 Ar kullanılarak hazırlanmış bir karışımda, Argon atomları yardımcı rolünü üstlenir ve reaksiyon yaklaşık $8,9 \pm 0,8$ ns sürer.

Ar^+ iyonunun Ar atomu ile rezonans yük transferi için hız sabiti $k = 4,6 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ olarak elde edilmiştir ([Martin 2010](#)) ve böyle reaksiyonlar 100 ps zaman alır. Bu süre moleküler iyon oluşumu için gerekli süreye göre çok daha kısadır. Böylece, bu çalışmanın amaçları için bu reaksiyon sadece, Ar^+ iyonlarının Ar gazı içerisindeki mobilitesi çok küçük olduğunda önem kazanır. Aynı durum Ne^+ iyonlarının Ne gazı içerisindeki durumu için de geçerlidir. Bkz. Bölüm 3.10.3.

CO₂ oranının % 10 larda kaldığı durumda Ne bazlı karışımlar içerisinde, yük transferi iki basamaklı bir reaksiyondan ibarettir ve bu reaksiyon toplamda ~ 8 ns içerisinde gerçekleşir:

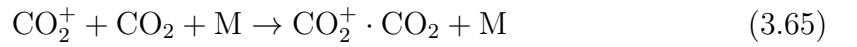


CO₂⁺ iyonları, Bölüm 3.9.3'de açıklandığı üzere, iyonik kümeler oluşturmaya doğru giderler. Hız sabitleri ve ağırlıklı ortalamalar V.G. Anicich and W.T. Huntress Jr. tarafından hazırlanmış makalelerden derlenerek elde edilmiştir ([Anicich ve Huntress Jr.](#)).



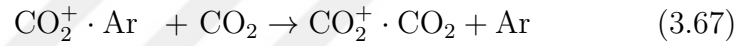
3.9.3. Karbondioksit iyonik kümelerinin oluşumu

Esasen bu çalışma kapsamında öneminin en çok vurgulanması gereken reaksiyon, CO₂⁺ iyonunun CO₂ gaz molekülleri ile üç reaktantlı bir reaksiyona girmesi suretiyle CO₂⁺ · CO₂ iyonik kümelerin oluşumudur:

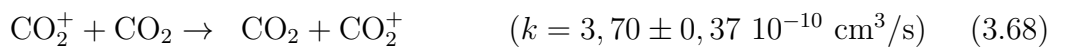


B.M. Smirnov tarafından yapılan bir derleme ([Boris 1992c](#)), bu reaksiyon için bir hız sabiti verir: $k = 2,4 \cdot 10^{-28} \text{ cm}^6/\text{s}$. Bu değer A.B. Rakshit and P. Warneck tarafından önerilen $k = 2,1 \cdot 10^{-28} \text{ cm}^6/\text{s}$ değerine oldukça yakındır ([Rakshit ve Warneck 1979](#)). P. Coxon and J.L. Moruzzi de bir takım ölçümlerde bulunmuş ve elektrik alana bağlı olarak $k = 0,8 \pm 0,2 \cdot 10^{-28} \text{ cm}^6/\text{s}$ değerini $k = 10^{-14} - 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{s}$ olarak ortaya atmışlardır ([Coxon ve Moruzzi 1977](#)).

Eğer sadece CO₂ molekülü yardımcı olarak rol alırsa ve CO₂ oranının % 10 olduğu varsayılırsa, iyonik kümelerin karakteristik oluşum süresi 0,7 - 2,0 ns olarak hesaplanmıştır. Eğer yardımcı molekül olarak Ar rol oynarsa bu reaksiyon 100 defa daha hızlıdır. Karışımdaki CO₂ oranı çok az olsa bile, bu reaksiyonun oluşum hızı gazlı detektörler içerisinde gerçekleşen iyon transferinden daha hızlıdır. Tipik olarak 100 ns - 100 μs aralığında bir reaksiyon süresinden bahsedilebilir. Ayrıca CO₂⁺ iyonunun Argon atomu ile iki reaktantlı, yarı uyarılmış bir durumla sonuçlanan bir reaksiyona girdiği literatürde bildirilmiştir. CO₂ molekülü bu durumu Ar ile değiştirebilir (Illies *ve ark.* 1985) ve sonuçta yine CO₂⁺ · CO₂ iyonik kümeleri oluşur. Bu mekanizmaların hız sabitlerine literatürde rastlanmamıştır.

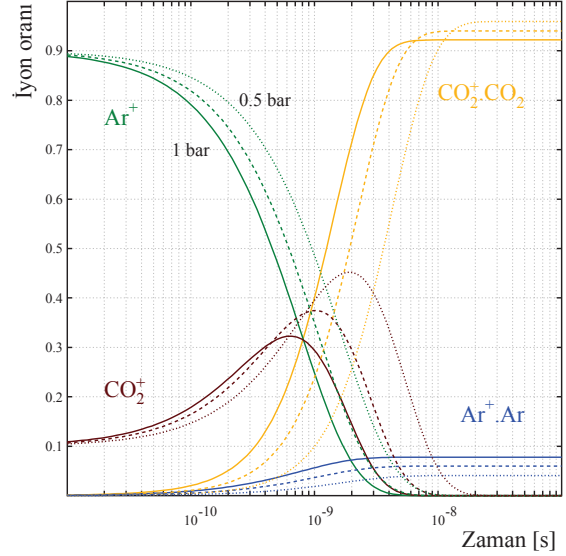
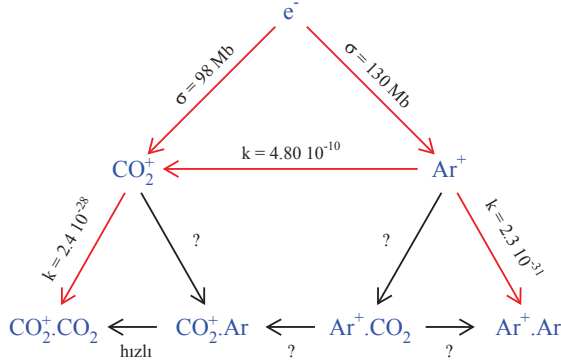


Sadece CO₂ gazının bulunduğu bir ortamda rezonans yük transferi ~ 110 ps gibi bir zaman aralığına sahiptir (Anicich 1993) ve bu değer aynı ortamdaki üç reaktantlı bir reaksiyon için gereken süre olan 7 - 20 ps süresinden daha uzundur. Mobilite üzerindeki etki, bu nedenle soygazlarla karşılaştırıldığında daha küçüktür. Bkz. 3.17 ve 3.18:



3.9.4. Ar-CO₂ karışımı içerisinde birincil iyonik kümelerinin oluşumu

Şekil 3.16 (sol)'da iyonik kümelerin oluşumu şema ile gösterilmiştir. Ayrıca başlangıçta oluşan iyonların % 90'ı Ar⁺ olmakla birlikte, bunların çoğu özellikle düşük basınçlarda yüklerini CO₂⁺ moleküllerine aktardıkları görülür. CO₂⁺ iyonları, CO₂ molekülleri ile iyonik kümeler meydana getirme eğilimindedir. Gaz basınçları olarak 1 bar (sürekli), 0,75 bar (kesikli) ve 0,5 bar (noktalı) olarak gösterilmiştir. Hız sabitleri Mathematica (Wolfram Research 2014) programı kullanılarak hesaplanmıştır. Süreç Ar⁺ iyonlarının oluşumu ile başlamış olsa bile çok yüksek ihtimalle CO₂⁺ · CO₂



Şekil 3.16. *Sol:*Ar-CO₂ karışımı içerisindeki iyonik kümelerin oluşumunu gösteren diyagram ve takip eden geçişler. *Sağ:* İyon veya iyonik kümelerin birbirine dönüşümü sırasında sayılarının değişimi.

iyonik kümelerinin oluşumu ile son bulur. $\text{Ar}^+ \cdot \text{Ar}$ yapılarının oluşumu (dimer), Şekil 3.16 (sağ)' da görüldüğü üzere, karışımdaki Ar oranının yüksek olması ve ayrıca basıncın atmosferik basınçtan çok yüksek olması koşuluyla, yük değiştirme reaksiyonlarının gölgesinde mümkündür (3.60). Şekilde bilinen geçişler kırmızı ile gösterilmiştir, ayrıca cm^3/s veya cm^6/s hız sabiti birimleri geçerlidir.

İlk adım, moleküller arası yük değiştirme reaksiyon tarafından maskelenmekte (3.60), CO₂ molekülünün yüksek oranda kutuplanabilirliği ile desteklenmekte ama $\text{Ar}^+ \cdot \text{Ar}$ iyonik kümelerinin yüksek kararlılığı ile engellenmektedir. İkinci adımdaki ligand anahtarı, A. Illies ve arkadaşları tarafından tartışıldığı gibi, homonükleer iyonik kümelerin yüksek bağlanma enerjisinden faydalanır (Illies ve ark. 1985) ama küme içi $\text{Ar}^+ \cdot \text{CO}_2$ 'dan $\text{Ar} \cdot \text{CO}_2^+$ 'a yük değişimi ile rekabet edip edemeyeceği şüphe altındadır. Literatürde kendisinden hiç bahsedilmemesine rağmen, CO₂ molekülünün düşük iyonlaşma potansiyelinden kaynaklı olarak hızla gerçekleşebileceği üzere küçük de olsa bir ihtimal mevcuttur.

3.9.5. İyonik kümelerin oluşumu ve bozunumu

van 't Hoff diyagramlarına göre $\text{CO}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ iyonik kümeleri (Hiraoka *ve ark.* 1988; Illies 1988), 300 K sıcaklık ve düşük basınç altında (70 - 400 Pa) çok fazla büyüyemez. Bir çekirdek iyon beraberinde ne kadar çok gaz molekülünü indükleyerek beraberinde sürüklüyorsa, o kadar genişler. Aynı durum $\text{Ar}^+ \cdot (\text{Ar})_n$ iyonik kümeleri için de geçerlidir (Turner *ve Conway* 1979; Hiraoka *ve Mori* 1989). Yüksek basınç altında ise, iyonik kümeler, atmosferik basınç altında ve oda sıcaklığında gerçekleştirilmiş, ayrıca bu çalışma kapsamında kullanılan iki deneyde görüldüğü gibi, giderek genişler. H.W. Ellis ve arkadaşları (Ellis *ve ark.* 1976a) tarafından ortaya konmuş pozitif iyon kütle spektrumu, bir HCO^+ iyonunun bir $n\text{CO}_2$ molekülü ile çevrenmesi şeklinde yorumlanabilir. Burada $n = 2 - 8$ aralığında kalacaktır. Hidrojen atomu hava kirliliğinden kaynaklanır. Bu verilerin bir analizi olarak Z. Berant ve arkadaşları (Berant *ve ark.* 1989), iyonik kümelerin boyutunu $n \approx 4,3$ olarak buldular. Z. Berant ve arkadaşları ayrıca kütleleri 46 - 522 Da , sıcaklıkların 90 - 250 °C aralığında kalacak şekilde, bir dizi 18 molekülden bahseder. Burada $n \propto \exp(-T_0/T)$ şeklinde bir ilişki verilmiştir. Sıcaklık oda sıcaklığına ekstrapole edilirse, çok büyük iyonik kümelerle karşılaşılabilceği ortaya çıkar ($n \approx 12$).

Y. Ikezoe ve arkadaşları (Shimizu *ve ark.* 1982) 200 μs boyunca iki tip iyonik küme gözlemlediklerini vurgulamışlardır: $\text{CO}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ ($n = 0 - 4$) ve $\text{CO}^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ ($n = 2, 3$) 200 μs . Böyle iyonik kümeler ilk 100 μs içerisinde meydana gelir ve yaygın bir zaman sabiti olan 190 μs içerisinde kaybolurlar. 200 μs 'den itibaren böyle iyonik kümeler artık gözlemlenemezler. Onların yerini başka bir iyonik küme ailesi alır. Bunların tamamı H_2O , CO veya ikisini de içerirler.

Bunların hızlı oluşumu ile paralel olarak, $\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2$ iyonik kümeleri oldukça büyük bir entalpi değerine sahiptir. ($0,68 \pm 0,04$ eV,9 (Mautner *ve Lias* retrieved May 4, 2015) ve bu yüzden oluşumun uzun zaman alacağı beklenebilir. Entalpi, karışıma biraz daha CO_2 molekülü eklenmesi durumunda kademeli olarak azalır (Hiraoka *ve ark.* 1988). Y. Ikezoe ve arkadaşları ve ayrıca P.C. Engelking'in buldukları ışığında (Engelking 1987), $\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2$ iyonik kümesinin yaşam ömrünün onlarca veya yüzlerce

μs olduğunu varsaymak doğru kabul edilebilir. İyonik kümelerin bozunumu bu yüzden CO_2^+ iyonlarının oluşum sebepleri arasında rahatlıkla gösterilemez. $\text{Ar}^+ \cdot \text{Ar}_n$ iyonik kümelerinin yaşam ömrü kümenin büyüklüğüne göre değişir ve 60 - 75 μs aralığındadır (Lepère ve ark. 2005).

3.10. Mobilite

3.10.1. Karbondioksit iyonunun Karbondioksit içerisindeki mobilitesi

CO_2^+ iyonunun CO_2 içerisindeki mobilitesinin ölçülmesi, birçok zorlukla karşılaşılacağı anlamına gelmektedir: Çünkü CO_2^+ iyonları kendi gaz atomları, ortama karışmış diğer moleküller (örneğin su) veya ortamda bulunan oksijen ile hızlıca iyonik kümeler meydana getirirler (Ellis ve ark. 1976a). Kütle spektrometresi olmadan yapılan deneylerde CO_2^+ iyonlarını iyonik kümelerden ayırmak imkansızdır ve Langevin teorisi kullanılarak elde edilmiş değerler ($\sim 1,8 \text{ cm}^2/\text{V.s}$) güvenilir değildir (Bkz. Bölüm 3.10.3).

Bu mobilite değeri ilk olarak W.T. Huntress Jr. tarafından 1972 yılında, 1 Pa basınçtan daha küçük bir basınç altında ölçüldü. Bu ölçümden, elektrik alanın sıfır olduğu vurgulanmak üzere, $1,21 \pm 0,02 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değeri elde edildi (Huntress Jr.). Bu değer 1979 yılında P.A. Coxon ve J.L. Moruzzi tarafından doğrulandı. Onlar $1,26 \pm 0,05 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerini, $p = 3,5 - 13 \text{ Pa}$ gibi bir basınç altında elde etmişlerdi (Coxon ve Moruzzi 1979). Bu deney L.A. Viehland ve E.A. Mason tarafından yapılan bir seri ölçüm içerisinde yer almıştır (Viehland ve Mason 1995). M. Saporoschenko (Saporoschenko 1973), $E/N > 140 \text{ Td}$ indirgenmiş elektrik alanda ve 77 Pa basınç altında ölçümler almış ancak bu çalışma için ihtiyaç duyulan 20 Td 'a doğruluk payı yüksek bir extrapolasyon yapılması mümkün değildir, Bkz. Şekil 2.1 (sağ). Ayrıca bu deneyde ortamda bulunan potansiyel Oksijen seviyesinin yüksek olmasından yakınılmaktadır. Son zamanlarda, E. Basurto ve arkadaşları (Basurto ve ark. 2000), $p = 0,66 - 20 \text{ Pa}$ basınç altında ve oda sıcaklığında mobilite ölçümünü gerçekleştirmiş ve bu deney $E/N > 85 \text{ Td}$ indirgenmiş bir elektrik alan varlığında

yapıldığından, M. Saporoschenko'nun verilerinin bu çalışmada kullanılması için yapılması gereken extrapolasyondan daha az işlem gerektirir. Dolayısıyla daha kullanışlı olduğu söylenebilir.

Bu dört deneyden elde edilen mobilite değerleri düşük değerdeki elektrik alana ekstrapole edildiğinde, bir ölçüde kabul edilebilir sonuçlar elde edilir, Bkz. Şekil 2.1 (sağ).

A.B. Rakshit ve P. Warneck ([Rakshit ve Warneck 1979](#)), tarafından yapılmış bir çalışma, öncelikle hız sabitleri ile ilgili olmasına rağmen, iyon ve iyonik kümelerin düşük basınçtaki mobilitelerini içermektedir.

3.10.2. Karbondioksit iyonik kümesinin Karbondioksit içerisindeki mobilitesi

P.A. Coxon and J.L. Moruzzi, $p = 53 - 67$ Pa basınç altında, iyonun yanı sıra $n = 1$ büyüklüğündeki iyonik kümeleri tanımlamışlardır ([Coxon ve Moruzzi 1979](#)). Düşük basınç altında elde ettikleri bu sonuç $1,07 \pm 0,04$ cm²/V.s aralığında değişen bir derlemeden ibarettir ([Viehland ve Mason 1995](#)).

Hem S. Rokushika ve ark. ([Rokushika ve ark. 1986](#)) hem de H.W. Ellis ve ark. ([Ellis ve ark. 1976a](#)), atmosferik basınçta tüm pozitif iyonik kümeler için yaklaşık olarak aynı mobilite değerleri elde etmişlerdir. CO₂ molekülü, kutuplanabilirliği sayesinde kolayca iyonik kümeler oluşturacak ve bu süreçte bazı iyon çekirdeklerinin rolü oldukça küçük kalacaktır. İyonik kümelerin detektör içerisindeki gaz ortamında ilerlerken, defalarca ortamda bulunan gaz moleküllerini çekmesi ve tekrar serbest bırakması suretiyle zamanla değişik gaz atomları ile etkileşime girmesi muhtemeldir. Sonuç olarak mobilitesi ölçülürken aynı zamanda kütle spektrometresi ile kütlesi de ölçülen iyonik kümelerin kütesinin doğru ölçüldüğü söylenemez. Hatta bu deneyler aynı basınç ve sıcaklık altında gerçekleştirilmiş olsa bile, bu iki deneyde elde edilen sonuçlar birbirine çok yakınlık göstermemektedir: $0,96 \pm 0,02$ cm²/V.s ve $1,06 \pm$

0,02 cm²/V.s. Bu verileri yayımlayan bilim insanları bu farkı deney ortamında yabancı atomların bulunabileceği kuşkusu ile açıklamışlardır.

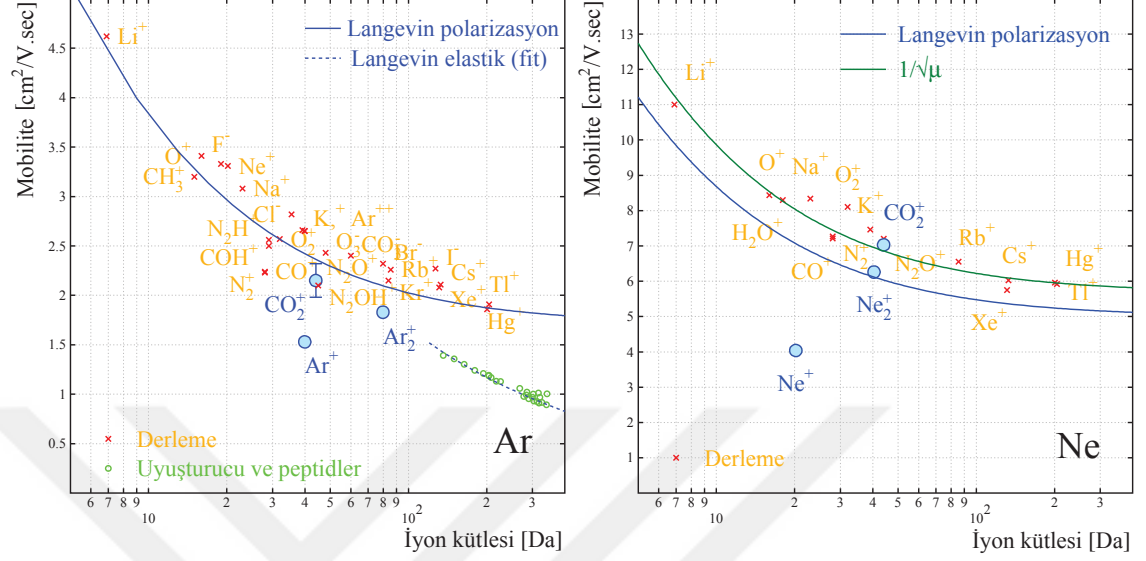
G. Schultz ve ark. (Schultz *ve ark.* 1977), kütle spektrometresi kullanmadıklarından iyonları hassas olarak tespit edememişlerdir ama onların atmosferik basınçta çalıştıkları düşünülürse, aslında iyonik kümeleri ölçtükleri ihtimali kuvvetlidir. Aynı durum H. Schlumbohm'un $p = 1,3 - 130$ kPa basınç altında yaptığı deney için de geçerlidir (Schlumbohm 1962).

Ayrıca, $p = 1$ kPa basınç altında, P.M.C.C. Encarnaçao ve ark. (Encarnacao *ve ark.* 2015) tarafından yapılan en son ölçümlerde de kütle spektrometresi kullanılmamıştır. Bölüm 4.4.1'de görülebileceği üzere, bu deneyde de kuvvetle muhtemel olarak iyonik kümelerin mobiliteleri ölçülmüştür. Bu deneyde ölçülen mobilite $E/N \approx 20$ Td değerinde basamak şeklinde bir düşüş göstermektedir. Daha yüksek elektrik alanlarda, K değeri diğer değerlerde iyonik kümeler için elde edilmiş mobilite değerlerine oldukça yakındır. Çok düşük basınçlarda lineer bir yükseliş bulan T. Huntress Jr. (Huntress Jr.) hariç, diğer tüm deneylerde 25 Td değerinin altında mobilite ölçümlerinin yapıldığı görülmektedir.

PDG'den elde edilmiş mobilite değerleri ile hazırlanmış bir grafik (Olive *ve ParticleDataGroup* 2014), Şekil 2.1 (sol)'daki gibidir. A.B. Rakshit ve P. Warneck ve G.P. Smith ve ark. (Smith *ve ark.* 1977) tarafından elde edilmiş değerler, bu grafiğe eklenmemiştir. Çünkü onlar, iyonik küme mobilitelerini O_3^- iyonunun mobilitesi olarak tahmin etmişlerdir. Ölçümün zorluklarına rağmen, CO_2^+ mobilitesi $CO_2^+ \cdot (CO_2)_n$ mobilitesinden daha fazla bilimsel literatürde yer bulmuştur. İyon ve iyonik kümelerin, doğru varsayılarak yayınlanan mobiliteleri birbirine aykırı değerlerdir. Hata oranları $S = 1,3$ ve $S = 2,3$ olarak bulunmuştur.

Bu kadar tartışma içerisinde bir hatırlatma olarak söylenmelidir ki, bu çalışma için L.A. Viehland ve E.A. Mason tarafından yapılmış olan derleme dikkate alınmıştır (Viehland *ve Mason* 1995).

3.10.3. Karbondioksit iyonik kümesinin Argon ve Neon içerisindeki mobilitesi



Şekil 3.17. Bazı iyonların Ar ve Ne içerisindeki, 10 Td indirgenmiş elektrik alandaki indirgenmiş mobiliteleri.

$\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2$ iyonik kümesinin Ar içerisindeki mobilitesine literatürde rastlanmamıştır. Bu nedenle 1905 yılında Langevin tarafından ortaya atılmış bir yaklaşım (Langevin 1905; Davies *ve ark.* 1966) kullanılarak mobilitte hesaplanmıştır. İyon ve gaz etkileşmeleri için yük-indüklenmiş dipol kuvvetinin baskın olduğu durumda mobilitte, kutuplanabilirlik (α) ile tanımlanır. Gaz atomları kutuplanabilir değilse veya molekül büyükse Langevin formülü sert-küre modelini dikkate alarak yeniden düzenlenir. İndirgenmiş kütle μ , iyon ve gaz molekülünün yarıçapları toplamının d olarak gösterildiği limit:

$$K \propto \frac{1}{\sqrt{\alpha\mu}} \quad \dots \quad \frac{1}{d^2\sqrt{\mu}} \quad (3.69)$$

şeklindedir.

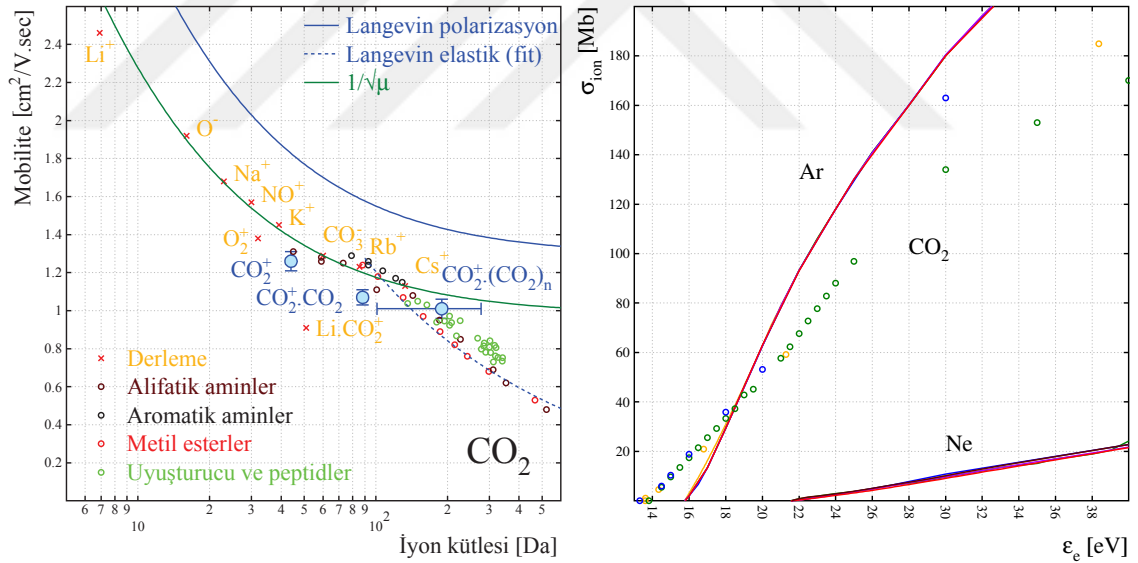
Prensip olarak, Langevin'in formülü, kutuplanabilirlik limiti içerisinde mutlak tahminleri verir. Çünkü α değeri bu çalışma kapsamında kullanılan gazlar için yüksek doğruluk oranlarıyla bilinmektedir. Şekil 3.17, Ar içerisinde iyonların mobilitelerini, iyi tanımlanmış bir polarizasyon limitinden faydalanarak ortaya koyar. Bu şekil için dayanak olarak ele alınan derleme, 300 K veya benzer sıcaklıklarda yapılmış

deneylerden seçilmiştir (Ellis *ve ark.* 1976b, 1978, 1984; Viehland *ve Mason* 1995); Zeev Karpas *ve ark.* tarafından alınmış, alifatik ve aromatik Amin'lerin 250 °C sıcaklıktaki mobiliteleri, kütlelerin mobilite üzerine etkisinin gözlenmesi ve kıyaslanmanın yapılabilmesi için eklenmiştir (Karpas *ve ark.* 1989); Metil Ester'lerin mobiliteleri, belirtilmemiş bir sıcaklıkta, Souji Rokushika *ve ark.* (Rokushika *ve ark.* 1986) ve bazı uyuşturucu ve peptit bileşenlerinin 250 °C sıcaklıkta, Laura M. Matz *ve ark.* (Matz *ve ark.* 2002) tarafından elde edilmiş mobilite değerleri yine aynı maksatla grafiğe dahil edilmiştir. Bu çalışma için gerekli görülmüş iyon mobiliteleri mavi renkte, hata oranları ile birlikte gösterilmiştir. Mavi eğrilerden kesiksiz olanı polarizasyon limitini ve kesikli olanı ise elastik limitini gösterir (Bkz. Denklem 3.69). Elastik limit için çizilen eğriler, iyon kütlelerinin ve gaz moleküllerinin kütlelerinin kendi yarıçaplarının küpü ile orantılı oldukları düşünülerek çizilmiştir. Sert-küre (hard-sphere) modeline göre çizilmiş eğriler ise yeşil ile gösterilmiştir.

Ar⁺ iyonlarının kendi gazı içerisindeki mobilitelerinin düşük olduğuna dikkat edilmiştir. Bu durum rezonans yük transferi ile açıklanabilir ve genel olarak tüm gazlar için geçerlidir. Ayrıca CO₂ içindeki mobilite değeri % 20 - 25 oranında daha fazla hesaplanmıştır (Bkz. Şekil 3.18). CO₂ içerisinde saçılma kısmen elastik değildir. Bu durumun kaynağı sayısız iç serbestlik derecelerinin varlığıdır. Bu durum, Edward A. Mason tarafından da belirtildiği gibi mobiliteleri sadece % 10 oranında değiştirir. Diğer bir faktör, ölçümlerde iyonik kümeler olarak belirtilmese de, CO₂ molekülünün iyonik kümeler oluşturma eğilimi olabilir. Polarizasyon limiti Ne içerisinde de hassas olarak verilmemiştir. Elastik limit içerisinde, Langevin'in formülü ile mutlak tahminlere ulaşamaz çünkü *d* hassas olarak bilinmemektedir. Mobilitenin kütleyle bağılılığı, organik moleküllerin mobilitelerinin ölçümü ile kıyaslanarak doğrulanmıştır. Böylece, büyük iyonik kümelerin mobilitelerinin, önerilen polarizasyon limitinden daha küçük olması beklenebilir.

3.10.4. Soygazlar içerisinde iyon mobilitesi

Bu çalışmada ihtiyaç duyulan birçok mobilite değeri aşağıda gösterildiği şekilde literatürden alınmış ve kullanılmıştır: Ar içerisinde Ar^+ : $1,51 \pm 0,02 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve Ar içerisinde Ar_2^+ : $1,83 \pm 0,02 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerleri H.W. Ellis ve ark. (Ellis ve ark. 1976b) tarafından; Ar içerisinde CO_2^+ : $2,15 \pm 0,17 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerleri W. Lindinger ve D.L. Albritton tarafından (Lindinger ve Albritton 1975); Ne içerisinde Ne^+ : $3,91 \pm 0,04 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, Ne içerisinde Ne_2^+ : $6,34 \pm 0,12 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve Ne içerisinde CO_2^+ : $7,26 \pm 0,15 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerleri ise H.W. Ellis ve ark. (Ellis ve ark. 1976b, 1978; Viehland ve Mason 1995) tarafından derlenmiş ve bu tahminlerin en yenisi olarak Ne_2^+ (Beatty ve Patterson 1968; Orient 1973) olarak ele alınmıştır. Tüm bu mobilite değerleri $E/N = 20 \text{ Td}$ alanı baz alınarak derlenmiştir. Bu indirgenmiş alan değeri deneylerde temel olarak baz alınmış bir değer olarak göze bakmakta olup, Bölüm 4.4'de ayrıntılı olarak ele alınmıştır. Şekil 3.18 (sol)'da görüldüğü gibi geniş



Şekil 3.18. Sol: CO_2 içerisinde, 10 Td 'a extrapole edilmiş indirgenmiş mobilite değerleri. Sağ: Ar, Ne (eğriler) ve CO_2 (data noktaları) elektron etkisi ile tesir kesiti değerleri.

yatay bir hata oranı göze batmakta ve $\text{CO}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ iyonik kümesinin atmosferik basınçta büyüklüğünün belirsizliğini vurgulamaktadır (Bölüm 3.9.5). Şekil 3.17 altında yapılan açıklamalarda ayrıntılı bilgi mevcuttur. Şekil 3.18 (sol)'da ise 19 Aralık 2014 ve 27 Şubat 2015 tarihlerinde LXCat (Pitchford n.d.)'dan elde edilmiştir.

Argon veritabanları: Magboltz 8.9 (Steve Biagi), Hayashi (Makoto Hayashi ([Hayashi 2003](#))), IST-Lisbon (D. Rapp ve P. Englander-Golden ([Rapp ve EnglanderGolden 1965](#))), Morgan (W. Lowell Morgan, Kinema Research Software) ve Phelps (C. Yamabe ve ark. ([Yamabe ve ark. 1983](#))). Neon veritabanları: Morgan (W. Lowell Morgan, Kinema Research Software), SIGLO ([Meunier ve ark. 1995](#)), Phelps ([Phelps last updated in 2010](#)), Magboltz 7.1 ve 8.9 (Steve Biagi), Puech ([Puech ve Mizzi 1991](#)). CO₂ veritabanları: Hayashi (([Pitchford ve ark. 1985](#))), Itikawa (kaynak belirtilmemiş) ve Morgan (W. Lowell Morgan, Kinema Research Software).



4. ARAŞTIRMA BULGULARI

4.1. Mobilite İçin Geliştirilen Modeller

İyonun gaz içerisindeki mobilitesi hakkında iki farklı fiziksel durum için ayrı ayrı iki model geliştirilmiştir. Bu modellerden ilki sıcaklığın 0 K olduğu düşünüldüğünde, iyonun termal etkilerle sürüklenmesi durumu söz konusu olmayacağı yargısıdır. Bu durumda tamamen elastik olmayan çarpışmalar hakimdir. İyonun ortalama serbest yolu için;

$$\lambda = \frac{1}{N\sigma} \quad (4.1)$$

yazılabilir. Burada N, gazın sayıca yoğunluğu, σ ise toplam tesir kesitidir ve

$$\sigma = \pi(r_g + r_i)^2 \quad (4.2)$$

olarak tanımlanabilir. Ayrıca elektrik alan etkisinde hızlanan bir iyonun ivmesi;

$$a = \frac{qE}{m} \quad (4.3)$$

olarak belirlenir. Bir ortalama serbest yolu alması için geçen süre;

$$\lambda = \frac{1}{2} \frac{qE}{m} t^2 \quad t = \sqrt{\frac{2\lambda m}{qE}} \quad (4.4)$$

şeklindedir. λ değeri yerine yazılırsa;

$$t = \sqrt{\frac{2m}{qEN\sigma}} \quad (4.5)$$

elde edilir. Buradan iyonun ortalama hızı;

$$\bar{v} = \frac{\lambda}{t} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{q}{L\sigma m}} \frac{\sqrt{E}}{E} \quad (4.6)$$

şeklinde olur. Buna bağlı olarak iyonun gaz içerisindeki mobilitesi;

$$\mu = \frac{\bar{v}}{E} \quad (4.7)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{q}{N\sigma m}} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (4.8)$$

olarak elde edilmiş olur. Yukarıda kaba taslak olarak yapılan hesabı daha hassas bir denklem elde etmek için kullanabiliriz. Ortalama serbest yolun eksponansiyel bir dağılıma sahip olduğunu ele alarak integral hesabı aşağıdaki gibi yapılabilir.

$$x = \int_0^\infty \frac{qE}{2m} t^2 \frac{e^{-x/\lambda}}{\lambda} dx \quad (4.9)$$

Denklem-4.7, Denklem-4.4 ve Denklem-4.5 kullanılarak mobilite;

$$\mu = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{q}{\sigma m E N} \quad (4.10)$$

olarak elde edilir. Burada σ tesir kesiti, m iyonun kütlesi, k_B Boltzman sabiti, N gazın sayı yoğunluğu ve q iyonun yüküdür.

İkinci bir fiziksel model; çok zayıf elektrik alanda termal etki ile sürüklenen bir iyonun mobilitesi için geliştirilmiştir. İyonun termal sürüklenme hızı, Boltzman yasasına göre;

$$v_t = \sqrt{8k_b T m \pi} \quad (4.11)$$

şeklinde olacaktır. Burada k_b Boltzman sabitidir. Çok küçük bir şiddette elektrik alan etkisi altında termal etki altında sürüklenen bir iyon için;

$$dE = \int_0^\infty \underbrace{dx}_{\text{serbest Yol}} \frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{qE}{m}\right)}_{\text{ivme}} \underbrace{\left(\frac{x}{v_t}\right)^2}_{\text{zaman}} \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}$$

yazılabilir. Burada ayrıca $e^{-x/\lambda}$ ifadesi serbest yolun olasılık yoğunluk fonksiyonudur.

Bu integralin çözümünden ;

$$dE = \frac{qE\lambda^2}{mv_t^2} \quad (4.12)$$

elde edilmiş, buna bağlı olarak mobilite ifadesi ;

$$\mu = \frac{dE}{\left(\frac{\lambda}{v_t}\right) E} = \frac{\lambda q}{m v_t} \quad (4.13)$$

olarak bulunmuştur. Termal hız ve ortalama serbest yol ifadeleri yerine yazılırsa;

$$\mu = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{1}{\sqrt{k_B T}} \frac{q}{N \sigma} \frac{1}{\sqrt{m}} \quad (4.14)$$

gibi bir ifadeye ulaşılmış olur. Bu ifade Mason-Schamp teorisi ile uyum içerisindedir.

Bu model için farklı bir yöntemle mobilite hesaplanabilir. Yukarıdaki yöntemde mobilite hesabı yapılırken, iyonun ilk hızı hesaba katılmamıştı. Bu defa iyonun ilk hızını hesaba katarak mobilite ifadesine ulaşılması hedeflenmiştir. İyonun anlık hızı v iken, küçük şiddetteki elektrik alan altında alacağı yol için;

$$x = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} v_0 \frac{x}{v_{\text{termal}}} + \frac{1}{2} \frac{qE}{m} \frac{x}{v_{\text{termal}}} \frac{2 e^{-x/\lambda}}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \text{RMS}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{v_0}{\text{RMS}}\right) dx dv_0 \quad (4.15)$$

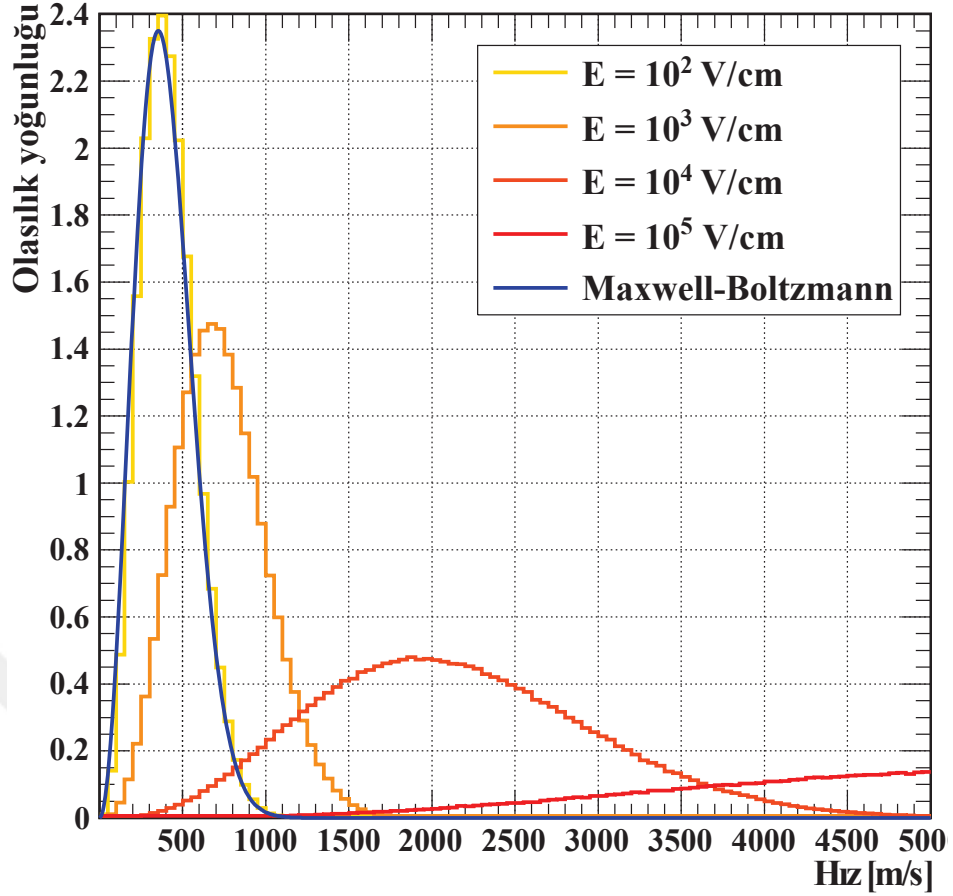
Yukarıdaki integral ile iyonun $\frac{\lambda}{v_{\text{termal}}}$ kadar bir sürede alacağı mesafe hesaplanmıştır. Denklem-4.7 ve Denklem-4.11 kullanılarak mobilite;

$$\mu = \frac{\sqrt{\frac{\pi}{8}} q}{2 \sigma N \sqrt{k_B m T}} \quad (4.16)$$

olarak elde edilir. Burada m iyonun kütlesi ve q iyonun yüküdür. Elde edilen bu mobilite denkleminde ilk hız terimine rastlanılmamaktadır. Zaten kullanılan matematiksel yöntem gözden geçirildiğinde ilk hızın dağılımı için Gauss dağılımı kabul edilmiştir. Gauss dağılımının ortalaması sıfır değerine eşit olduğu için bu integralin toplam alınan yola, dolayısıyla mobiliteye etki etmemesi doğal karşılanmalıdır. Ayrıca elde edilen mobilite denklemi içerisinde, elektrik alan ifadesi de yoktur. Buradan yola çıkarak, düşük elektrik alan eşliğinde hareket eden iyonun mobilitesi, elektrik alanın şiddetinden bağımsızdır denilebilir. Elde edilen bu sonuç, deneysel veriler ile de bire bir örtüşmektedir. Ayrıca bu sonuç, daha önce elde edilen sonuç ile yani aslında yine Mason-Schamp teorisi ile uyumaktadır.

4.2. İyonun Hızı, Sürüklenmesi ve Difüzyonu Hakkındaki İlk Bulgular

Serbest zaman ve çarpışmalar için ayrı ayrı yazılmış olan fonksiyonlar birleştirilerek, sonunda bir iyonun sürekli olarak çarpışma ve çarpışma sonrası serbest yolu boyunca saçılma, ardından tekrar çarpışması simüle edilebilecektir. Ancak, programlar birleştirildikten sonra herhangi bir aksaklığın olup olmadığını anlayabilmek için her bir fonksiyon ayrı ayrı tekrar testlerden geçirilmiştir. Öncelikle fiziksel sürecin simüle edilmesi için olayın bir yerden başlaması gerekir. Gerçekte iyonun ortaya çıkma anı yani iyonizasyon, detektörün etkileşme bölgesinde herhangi bir yerde meydana gelebilir ve bu esnada iyonlaşmak üzere olan gaz atomu veya molekülünün hızı da termal etkilere bağlı olmakla birlikte istatistiksel olarak değişkendir. Özetle olayın başlangıcını simüle etmek olabildiğince zordur. Bunun için iki farklı yöntem mevcuttur. Birincisi; “Maxwell Dağılımı” na uygun olarak başlangıç koşulları için “Monte-Carlo Yöntemi“ ile rastantısal sayılar üretilmesidir. İkincisi ise bilimsel çevrelerce daha çok tercih edilen bir yöntem olmakla birlikte, mobilite gibi bir fiziksel niceliği simüle etmek için çok daha uygundur. Literatürde bu yöntem ”Ergodic Principle (Ergodik Prensip)“ olarak bilinir. Olay herhangi bir yerden başlatılır. Belirli bir süre sonra hız, serbest zaman, serbest yol gibi fiziksel nicelikler tamamen ilk değerlerle istatistiksel olarak ilişkisiz olarak kabul edilinceye kadar devam edilir. Bu yöntem literatürde her türlü fiziksel durum için olmasa da, deneyler ve simülasyon çalışmalarında sıklıkla kullanılmaktadır. Sürecin önemli bir kısmının görmezden gelinmesi temeline dayanır. Etan iyonlarının Etan gazı içerisindeki mobilitelerinin ölçümünü yapan Cortez ([Cortez ve ark. 2013](#)) tarafından, deneysel ölçümlerde iyonların oluşumundan sonra 42, 73 mm boyunca gelişen süreç görmezden gelinip, sadece son 0,5 mm ilerlemeleri süreci dikkate alınarak mobilite ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Amaç ölçümün, istatistiksel bağımlılık bakımından olabildiğince başlangıç şartlarından arındırılmasıdır. Literatürde bu tip örneklere sıklıkla rastlanır. İyonun hızının değişik elektrik şiddetteki elektrik alanlar eşliğinde nasıl değiştiğini gösteren bir spektrum Şekil-4.1’da verilmiştir. Görüldüğü gibi 100 V/cm gibi düşük bir elektrik alan varlığında iyon neredeyse elektrik alandan hiç etkilenmeyip



Şekil 4.1. Çeşitli elektrik alan değerlerinde, iyon hızının olasılık yoğunluğu spektrumu.

sadece termal etkilerle hareket etmektedir. Bu durum, spektrumun neredeyse tamamen Maxwell-Boltzmann dağılımı ile örtüşmesinden anlaşılabilir. Elektrik alanın, spektrumu Maxwell-Boltzmann dağılımından saptıramayacak kadar düşük değerlere sahip olduğu durumlarda, şekilde de görüldüğü gibi difüzyon dominant bir rol üstlenmektedir. Elektrik alan şiddeti arttıkça, iyonun ortalama hızında arttığı gözlenmektedir. Bu durum gerçeğe uygun bir sonuç olmakla birlikte hız değerleri ispata muhtaçtır. Elde edilen bu hız değerlerinin doğruluğunun test edilmesi için öncelikle, iyon için serbest zamanın bir spektrumuna ihtiyaç duyulur ki; bu spektrum Şekil 3.10'da görülebilir.

4.2.1. Enine ve Boyuna sıcaklık parametreleri

Gaz içerisinde sürüklenen iyonun hareketine sebep olan en baskın iki sebep elektrik alan ve termal etkidir. Bu etkiler eşliğinde hareket eden bir iyonun hareketi süresince sahip olacağı anlık hızların ortalaması alınırsa sürüklenme hızına ulaşılmış olunur ($\bar{v} = v_d$). Ancak iyonun istatistiksel olarak yayılma hızı ile ilgili bilgi edinmek adına, iyonun her bir adımda sahip olduğu anlık hız ile sürüklenme hızı arasındaki farklarının bir ortalaması düşünülmelidir. Ancak aşağıda gösterildiği gibi bunun sonucu olarak sıfır elde edilmektedir.

$$\overline{v - v_d} = \bar{v} - v_d = 0 \quad (4.17)$$

Bu sonuç fiziksel bir anlam taşımamaktadır. Bu durumda RMS (Root Mean Square) değerinin tercih edilmesi bu durumdan kurtarabilir.

$$\overline{(v - v_d)^2} = \bar{v}^2 - 2\bar{v}v_d + v_d^2 = \bar{v}^2 - v_d^2 \quad (4.18)$$

Elektrik alan etkisinden kaynaklı hız sürüklenme hızıdır. Dolayısıyla anlık hızın sürüklenme hızından farkı, elektrik alan ile ilişkili olarak düşünülemez. Dolayısıyla $v - v_d$ değeri termal etkiden kaynaklanır. Bu hızdan kaynaklı enerji aşağıdaki gibi yazılabilir ve Boltzman yasası ile ilişkilendirilebilir.

$$\frac{1}{2}m\overline{v_{\text{termal}}^2} = \frac{1}{2}k_B T_{//} \quad (4.19)$$

Bu denklem içerisinde yer alan sıcaklık değeri boyuna sıcaklık değeridir ($T_{//}$). Elektrik alan doğrultusundaki nicelikler boyuna olarak nitelendirilmektedir.

Elektrik alan doğrultusu dışındaki doğrultulardaki anlık hızların vektörel toplamalarının sıfır olacağı söylenebilir ($\bar{v} = 0$). Bu anlık hızların RMS değeri için doğruca,

$$\frac{1}{2}m\overline{v_{\text{termal}}^2} = \frac{1}{2}k_B T_{\perp} = \bar{v}^2 \quad (4.20)$$

Bu denklem içerisinde yer alan sıcaklık değeri ise enine sıcaklık değeridir ($T_{//}$).

4.3. Tesir kesitlerinin gözden geçirilmesi

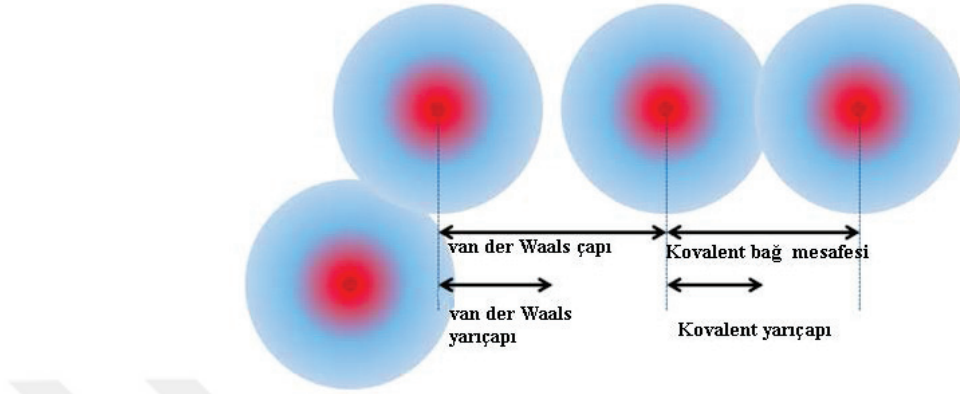
İyonun gaz ortamında esnek veya esnek olmayan çarpışma yapması ihtimali, elastik veya elastik olmayan tesir kesitleri ile belirlenir. Bu tesir kesitlerini ayrı ayrı düşünmeden önce toplam tesir kesiti hakkında biraz tartışılması gerekir. Aşağıdaki tabloda literatürden ve atomik yarıçaplar dikkate alınarak elde edilen tesir kesitleri gösterilmiştir.

Çizelge 4.1. Gazlı detektörler içerisinde sıklıkla kullanılan gazlara ait iyonların, bu gazlar içerisindeki tesir kesitlerinin deneysel ve atomik yarıçaplar dikkate alınarak hesaplanmış değerleri (Ellis *ve ark.* 1976b), (Ellis *ve ark.* 1978), (Ellis *ve ark.* 1984), (Viehland *ve Mason* 1995).

	He	Ne	Ar	Xe
He ⁺	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=73,4$ $\sigma_{\text{geometrik}}=1,2$ Oran = 61,17			
Ne ⁺	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=28,8$ $\sigma_{\text{geometrik}}=1,5$ Oran = 19,2	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=82,5$ $\sigma_{\text{geometrik}}=1,8$ Oran = 45,83	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=294 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=88,7$ $\sigma_{\text{geometrik}}=3,7$ Oran = 23,97	
Ar ⁺	$T_{\text{Eff}}=293 \text{ K}, T=325 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=26,4$ $\sigma_{\text{geometrik}}=3,3$ Oran = 8	$T_{\text{Eff}}=175 \text{ K}, T=077 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=58,1$ $\sigma_{\text{geometrik}}=3,7$ Oran = 15,70	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=157,0$ $\sigma_{\text{geometrik}}=6,3$ Oran = 24,92	
Xe ⁺	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=295 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=32,9$ $\sigma_{\text{geometrik}}=6,1$ Oran = 5,39	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=44,6$ $\sigma_{\text{geometrik}}=6,7$ Oran = 6,66	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}, T=294 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=93,2$ $\sigma_{\text{geometrik}}=10$ Oran = 9,32	$T_{\text{Eff}}=325 \text{ K}, T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=249$ $\sigma_{\text{geometrik}}=15$ Oran = 16,6

Çizelge incelendiğinde literatürden elde edilen deneysel tesir kesitlerinin, geometrik olarak hesaplanan tesir kesitlerinin yaklaşık olarak 100 katı kadar daha büyük değerlere sahip olduğu görülür. Hesaplamalarda atomik yarıçapların kullanılması bu sonucun elde edilmesinde etkili olabilir. Bu kuşku ile geometrik hesaplamalar için farklı bir yarıçap tanımı kullanılarak tekrar bir değerlendirme yapılması uygun görülmüştür. Literatüre bakıldığında bu işlem için atomik yarıçaplar dışında iki tür yarıçap tanımı daha mevcuttur. Bunlardan ilki “Kovalent Yarıçap” ötekisi ise “van der Waals Yarıçapı” olarak karşımıza çıkar. Kovalent yarıçap, etkileşme (kovalent bağ) halindeki birbirinin aynısı olan iki atomun çekirdekleri arasındaki mesafenin yarısı olarak tanımlanabilir. van der Waals yarıçapı ise birbirine bağlı olmayan atomların

çekirdekleri arasındaki mesafenin yarısı olarak ele alınabilir (Housecroft ve Sharpe 2008),(Oxtoby ve ark. 2008),(Chang 2005). Bu yarıçaplar Şekil-4.2’da görülebilir. (Şekil <http://chemwiki.ucdavis.edu> web sitesinden alınmıştır.) Birbirine bağlı atom-



Şekil 4.2. Kovalent ve van der Waals yarıçaplarının şekil ile temsili.

lardan bahsetmediğimize göre van der Waals yarıçaplarının kullanılmasının daha doğru olabileceği düşünülebilir. Geometrik hesapların bu yarıçap tanımını dikkate alınarak hesaplanması durumunda elde edilen tablo aşağıdaki gibidir.

Çizelge 4.2. Gazlı detektörler içerisinde sıklıkla kullanılan gazlara ait iyonların, bu gazlar içerisindeki tesir kesitlerinin deneysel ve van der Waals yarıçapları dikkate alınarak hesaplanmış değerleri (Winter 2010), (Ellis ve ark. 1978), (Ellis ve ark. 1984), (Viehland ve Mason 1995).

	He	Ne	Ar	Xe
He ⁺	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=73,4$ $\sigma_{\text{geometrik}}=25$ Oran = 2,94			
Ne ⁺	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=28,8$ $\sigma_{\text{geometrik}}=27$ Oran = 1,07	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=82,5$ $\sigma_{\text{geometrik}}=30$ Oran = 2,75	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=294 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=88,7$ $\sigma_{\text{geometrik}}=37$ Oran = 2,39	
Ar ⁺	$T_{\text{Eff}}=293 \text{ K}$, $T=325 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=26,4$ $\sigma_{\text{geometrik}}=34$ Oran = 0,78	$T_{\text{Eff}}=175 \text{ K}$, $T=077 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=58,1$ $\sigma_{\text{geometrik}}=37$ Oran = 1,57	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=157,0$ $\sigma_{\text{geometrik}}=44$ Oran = 3,57	
Xe ⁺	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=295 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=32,9$ $\sigma_{\text{geometrik}}=40$ Oran = 0,82	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=44,6$ $\sigma_{\text{geometrik}}=43$ Oran = 1,04	$T_{\text{Eff}}=300 \text{ K}$, $T=294 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=93,2$ $\sigma_{\text{geometrik}}=51$ Oran = 1,83	$T_{\text{Eff}}=325 \text{ K}$, $T=300 \text{ K}$ $\sigma_{\text{deneysel}}=249$ $\sigma_{\text{geometrik}}=59$ Oran = 4,22

Çizelge-4.1 ve 4.2 incelendiğinde görülebilir ki; bir iyon kendi gazı içerisinde yaklaşık iki kat daha fazla tesir kesitine sahiptir. Hornbeck bu olayı “Kuantum Mekaniksel Simetri Etkisi” olarak açıklamıştır. Bir iyonun gaz ortamı içerisindeki

sürüklenme hızı üç şeye bağlıdır. Bunlar; iyon ve gazın çarpışma anındaki etkileşme kuvvetleri, gazın sıcaklığı ve elektrik alan şiddeti olarak sayılabilir. Böyle bir durumda iyon ve gaz arasındaki etkileşme kuvvetleri arasında kinetik çekim ve polarizasyon etkisi oldukça dominanttır. Bunlardan ilki için, iyon ve gaz atomu (veya molekülü) sert elastik birer küre olarak düşünülmüş ve bunların birbirine çok yaklaştığı anda aradaki mesafe, yaklaşık olarak bunların yarıçapları toplamı kadar olacağı belirtilmiştir. Bu modele literatürde “Hard Sphere Model” olarak rastlanılır. Polarizasyon çekim etkisi, iyonun gaz atomunu kutuplaştırması ve çekmesi marifetiyle meydana gelir. Bu iki kuvvetin haricinde başka bir etkileşim kuvvetinden bahsedilebilir. Bu üçüncü etki çekirdeklerin etkileşmesi ile meydana gelir ve etkileşen çekirdeklere bağlıdır. Eğer etkileşen çekirdekler simetrik ise bu etki gözlenir. Bu etkiyi oluşturan kuvvet rezonans çekiminden doğar. Bunun yanında rezonans itmesinden doğan ters işaretli bir kuvvetin varlığından da bahsedilmektedir. Çarpışma sırasında iyon-gaz arasında elektron alışverişi yoluyla yük transferi gerçekleştirilir. bütün bu ekstra etkiler çarpışma teorisinden ayrı olatacak düşünülemez ve sonuç olarak tesir kesitini artırır. Özetle simetrik çekirdeklerden oluşan iyon-gaz ikilileri için çarpışma tesir kesitleri diğerlerine göre çok daha büyük olacaktır (Hornbeck 1951).

Mevcut tesir kesiti tablolarında görülen bazı boşlukların doldurulması için yapılması gereken ölçümler ilk bakışta oldukça zor oldukları için yapılmadığı düşünülebilir. Buna karar verebilmek için reaksiyon sürelerine bakılması, bir fikir edinilmesi açısından yeterli olacaktır. Örneğin; He^+ iyonlarının Neon gazı içerisindeki mobilitesinin ölçüldüğü düşünüldüğünde, He^+ iyonunun enjekte edildiği; Ne, Ar, Xe gibi gazlar içerisinde iyon haliyle, mobilite ölçümünü mümkün kılacak süre kalması çok düşük bir ihtimaldir ve dikkat edilmelidir ki He^+ iyonunun iyonlaşma enerjisi (24,8 eV), Neon gazının iyonlaşma enerjisinden (21,6 eV) daha fazladır. Söz konusu gazların iyonlaşma enerjileri daha düşüktür ve He^+ iyonuna çok kısa bir sürede elektronlarını kaptıracaklar böylece kendileri iyon haline geleceklerdir. Dolayısıyla iyonlaşma enerjisi büyük olan bir gazın iyonunun, iyonlaşma enerjisi daha düşük olan bir gaz içerisinde mobilitesinin ölçümü çok ama çok zordur. Çizelgede bu zorluğa rağmen alınan ve literatürden derlenen bazı değerler mevcuttur. Anicich ve Huntress bu

tip reaksiyonların hız sabitlerini ölçmüşlerdir. Bu konudaki çıkarımlar yapılırken Çizelge-4.3'de belirtilmiş veriler kullanılacaktır. Bu duruma göre reaksiyon süreleri Çizelge 4.3. Bazı gaz iyonları ve gazlar arasındaki reaksiyonlar ve hız sabitleri (Anicich ve Huntress Jr.).

Reaksiyon	Hız Sabiti [cm^3/s] \pm Hata oranı	Reaksiyon Süresi [s]
$\text{He}^+ + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}$	$5, 10^{-10} \pm \%10$	$75, 4.10^{-12}$
$\text{He}^+ + \text{Ne} \rightarrow \text{Ne}^+ + \text{He} + \gamma$	$1, 2.10^{-15} \pm \%30$	$31, 4.10^{-6}$
$\text{He}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Reaksiyon Yok}$	$\leq 10^{-13}$	
$\text{He}^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{Reaksiyon Yok}$	$\leq 10^{-11}$	
$\text{He}^+ + \text{Xe} \rightarrow \text{Xe}^+ + \text{He}$	$7, 10^{-12} \pm \%20$	$5, 39.10^{-9}$
$\text{Ne}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar} + \text{Ne}$	$6, 10^{-15} \pm \%50$	$6, 29.10^{-6}$
$\text{Ne}^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{Reaksiyon Yok}$	$\leq 10^{-14}$	
$\text{Ar}^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{Reaksiyon Yok}$	$\leq 10^{-14}$	
$\text{Kr}^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{Kr}^+ + \text{Kr}$	$8, 3.10^{-10} \pm \%20$	$45, 43.10^{-12}$

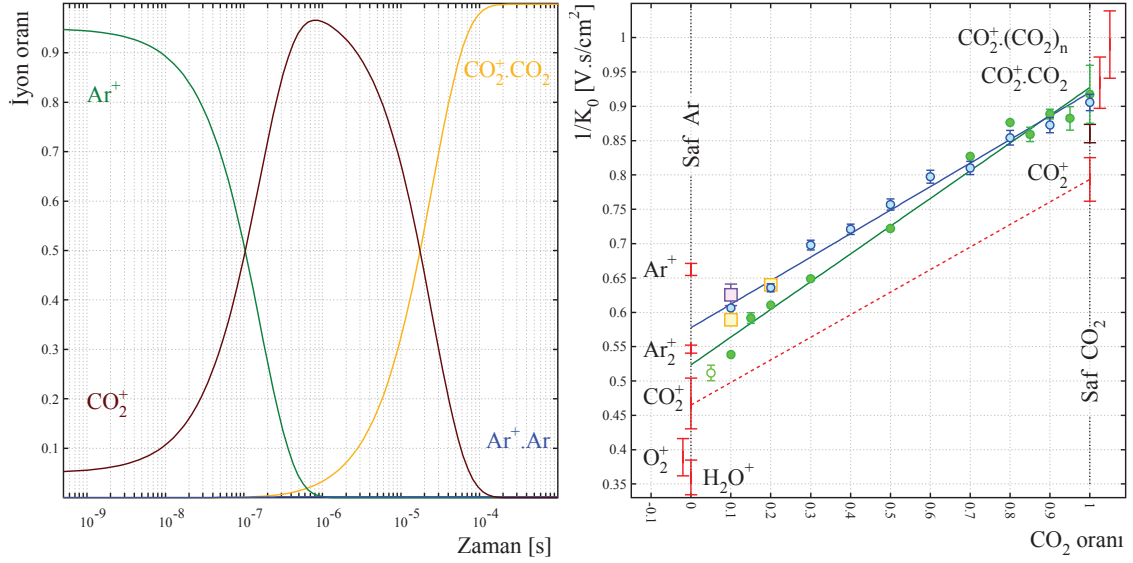
gözden geçirildiğinde Çizelge-4.1'deki boş alanlardan sadece He^+ iyonlarının Neon gazı içerisindeki ve Ne^+ iyonlarının Argon gazı içerisindeki mobilitelerinin ölçülmesi daha muhtemel görünmektedir. İkinci ölçüm sonuçları zaten mevcuttur.

4.4. Deneysel Sonuçlar

Bölüm-3 içerisinde sıkça belirtildiği gibi, bu çalışmanın tamamlanabilmesi için literatürde mevcut olan veya teorik hesaplamalarla elde edilebilen veriler yetersiz kalmıştır. Dolayısıyla çalışma sırasında ihtiyaç duyulan deneysel veriler, dünyanın çeşitli laboratuvarlarında elde edilmiş ve ortak bir yayınlı literatüre kazandırılmıştır (Kalkan ve ark. 2015).

4.4.1. Coimbra'da elde edilen mobilite değerleri

P.M.C.C. Encarnação ve ark. (Encarnacao ve ark. 2015), iyonların Ar-CO₂ içerisindeki indirgenmiş mobilitelerini, $p = 1, 07$ kPa basınç altında, $E/N = 20$ Td indirgenmiş elektrik alanda, oda sıcaklığında ve CO₂ oranını 0,05'den 1'e kadar değiştirerek ölçmüşlerdir. Aynı grup, Ne-CO₂ karışımları için de böyle ölçümler almışlardır. İyonlar, kütle spektrometresi olmadığı için hassas olarak tespit edilememiştir.



Şekil 4.3. Sol: İyon veya iyonik kümeler, $p = 1070$ Pa basınç altında, zamanın bir fonksiyonu olarak sayılmıştır. Sağ: Ar- CO_2 karışımı için Blanc diyagramı.

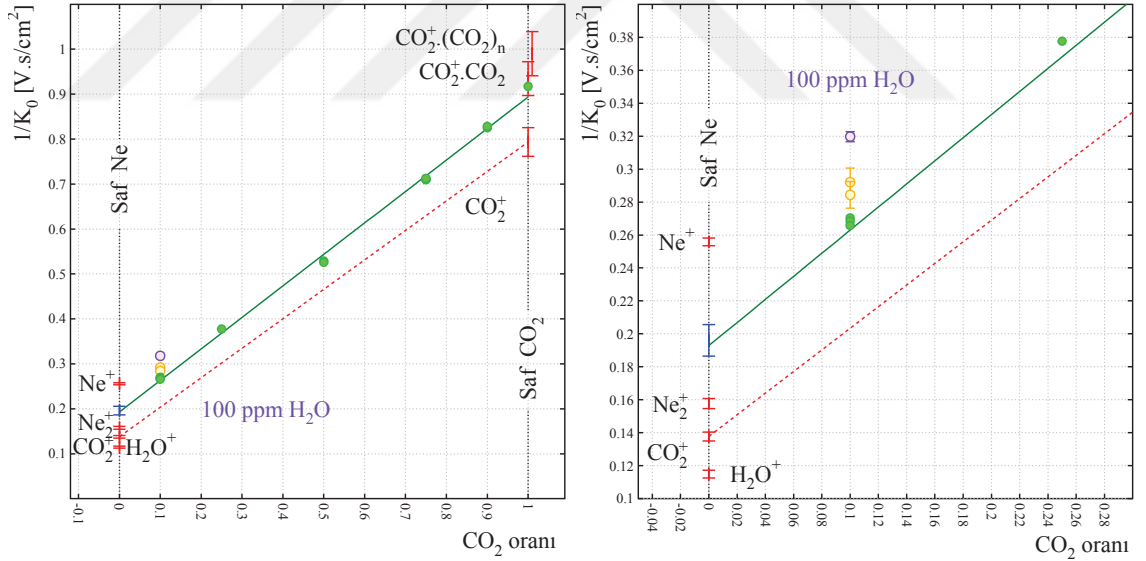
Deneyde kullanılan gazların 25 eV için elektron etkisi tesir kesitleri: $\sigma_{CO_2} = 98 \pm 3$ Mb, $\sigma_{Ar} = 130 \pm 1$ Mb ve $\sigma_{Ne} = 3,7 \pm 0,3$ Mb, (Bkz. Şekil 3.18). Ar^+ iyonları daha öncede bahsedildiği gibi yüklerini CO_2^+ molekülüne aktaracaklardır Bkz. Reaksiyon (3.60) veya moleküler iyonlar haline geleceklerdir (Bkz. Reaksiyon (3.61)). Yük transferi iki reaktantlı bir reaksiyondur ve 1,07 kPa basınçta gerçekleşecek reaksiyonların gerçekleşme ihtimalleri karşılaştırılırsa, bu reaksiyon ezici bir üstünlükle muhtemel görülecektir. % 95 oranında kullanılsa bile $Ar^+ \cdot Ar$ iyonik kümelerinin meydana gelmesi çok önemli değildir. Yük transferi Ne bazlı karışımlar içinde baskındır, Bkz. Bölüm 3.9.2.

İyonların % 99'unun $CO_2^+ \cdot CO_2$ iyonik kümelerine dönüşümü, sadece CO_2 bulunan ortamda $\sim 0,3 \mu s$ gibi bir zaman alır. CO_2 oranının % 5 olması durumunda bu süre $\sim 120 \mu s$ kadar zaman almaktadır (Şekil 4.3, sol). Başlangıçta üretilen iyonların % 95'i Ar^+ olsa bile $Ar^+ \cdot Ar$ iyonik kümelerinin üretilmesi oldukça zordur. Çünkü Ar^+ iyonu düşük basınçta yükünü CO_2 molekülüne transfer eder.

Şekil 4.3, sağ'da mavi noktalar ile G. Schultz ve ark. (Schultz ve ark. 1977) tarafından alınmış veriler gösterilmiştir. Mavi çizgi bu datalara yapılmış lineer fit olarak çizilmiştir. Yeşil noktalar P.M.C.C. Encarnação ve ark. (Encarnacao ve ark. 2015) tarafından elde edilmiştir. Yeşil çizgi yine bu noktalar için yapılmış lineer fit olarak eklenmiş

olup, açık yeşil nokta hesaba katılmamıştır (sebebi metin içerisinde açıklanmıştır). Mor nokta ALICE TPC içerisinde bu çalışma için ölçülmüştür. Ortamda nem mevcuttur (Bölüm 4.4.4) ve turuncu noktalar bir ALICE prototipinden elde edilmiştir (“Praktikum”, Bölüm 4.4.3). Kırmızı işaretçiler ve hata barları, saf gazlar için elde edilmiş mobilitelerdir (Bölüm 3.10). Kırmızı çizgi, CO_2^+ iyonunun hesaplanmış (beklenen) mobilitesidir. Kahverengi hata barları, Şekil 2.1 üzerinden ağırlıklı ortalama olarak hesaplanmıştır. TPC’den elde edilen data, 999 hPa ve 25 °C üzerinden indirgenmiştir.

İyonun geçiş süresi 350 - 940 μs aralığında kaldığında, en yüksek Ar oranında olduğu durumda alınan data, CO_2^+ kalıntılarından etkilenir. Bu sebeple, Ar oranının % 5 olduğu durumda alınan data fit yapılırken dikkate alınmamıştır. Yapılan fit işlemi $E/N = 20$ Td alanda alınmış datalar için yapılmıştır. Çünkü bu deneyi yapan bilim insanları bu elektrik alan altında, saf CO_2 içerisinde CO_2^+ mobilitesi ölçtüklerine inanmaktadırlar, Bkz. Bölüm 3.10.2.



Şekil 4.4. Sol: Ne- CO_2 için $E/N = 20$ Td alan altında çizilmiş Blanc diyagramı. Sağ: Soldaki diyagramın yakınlaştırılmış bir gösterimi.

Şekil 4.3 (sağ) Argon için Blanc diyagramını gösterir. CO_2^+ için ölçüldüğü iddia edilen mobiliteler, bu iyonlar için hesaplanmış mobilitelerle uyumsuzdur ama $n = 1$ iyonik kümeleri ile uyumludur. İyonik kümelerin büyüklüğü yüksek basınca bağlı

olduğundan dolayı (Bölüm 3.9.5) burada büyük iyonik kümelerin bulunması beklenmez. $\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2$ iyonik kümesinin saf Argon içerisindeki mobilitesi literatürden elde edilmiş ve bilinmektedir. Fit işlemi $K = 1,9 \pm 0,1 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ aralığında bir değeri işaret etmektedir. Bu kabul Langevin formülünün polarizasyon limiti dikkate alınarak yapılan bir kabul içerisinde 200 Da kütleli bir iyon için, Bkz. Şekil 3.17 ve Bölüm 3.10.3 geçerlidir. Deneysel veriler, saf Argon'a doğru gidildikçe doğrusallıktan sapma eğilimindedir. Bu durum muhtemelen ortamda kalan CO_2^+ iyonlarından kaynaklanmaktadır. G. Schultz ve arkadaşları tarafından alınan datalar için böyle bir çıkış gözlenmemektedir.

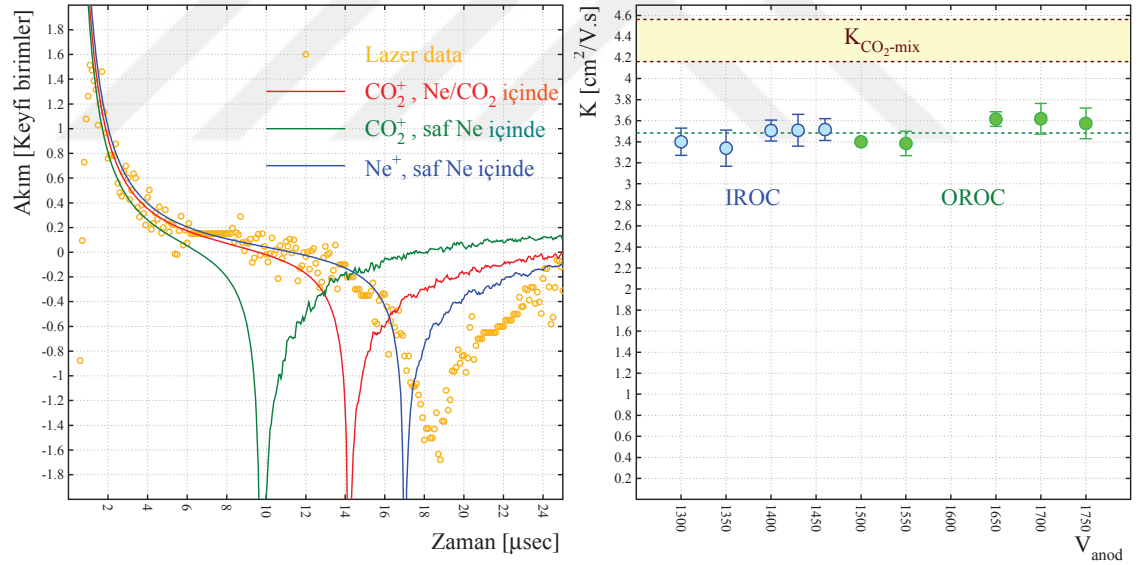
Şekil 4.4 Neon için hazırlanmış Blanc diyagramıdır. Solda, Yeşil noktalar, Coimbra'da ölçülmüş değerlerdir, Bölüm 4.4.1. CO_2 oranının % 10 olduğu noktada bazı istatistiksel eksiklikler mevcuttur. Turuncu noktalar, (örtüşüyor) VTPC-1 ve VTPC-2 içerisinde % 10'luk karışım için alınan mobilite verileridir. Bu veriler, 1010 hPa ve 21 °C üzerinden indirgenmiştir. Kırmızı çizgi, CO_2^+ iyonlarının Blanc yasası ile hesaplanmış (beklenen) mobilitesidir. Mavi işaretçi, kütle-mobilite diyagramı içerisindeki polarizasyon limitine göre 3.17, kütlesi 250 Da olan bir iyonun Neon gazı içerisindeki ters mobilitesini gösterir. Ayrıca mor nokta, ortamda su buharının bulunduğu durumda ALICE tarafından ölçülmüştür, Bkz. Bölüm 4.4.4. Doğrusallıktan sapma dışında Neon için yapılabilecek çıkarımlar, Argon için yapılanlara çok yakındır.

4.4.2. G. Schultz ve ark. tarafından alınan ölçümler

G. Schultz ve ark. (Schultz ve ark. 1977), iyonların indirgenmiş mobilitelerini, Argon bazlı birkaç karışım için, atmosferik basınçta ve oda sıcaklığında ölçmüşlerdir. Benzer bir problem olarak, kütle spektrometresinin olmamasından dolayı iyonları belirleyememişlerdir. Mobilite verileri, düzenli $E/N \leq 20 \text{ Td}$ büyüklüğünde indirgenmiş elektrik alanda, iyonların 1,95 cm uzunluğunda bir mesafeyi geçiş sürelerine göre elde edilmiştir. Bu indirgenmiş alan Coimbra grubunun kullandığı değere çok yakındır.

Bu şartlar altında, en basit yapıya sahip iyonik kümelerin oluşum süresi sadece birkaç ns civarındadır, Bkz. Şekil 3.16 (sağ), Buna karşılık iyonların belirtilen mesafeyi geçiş süreleri ~ 1 ms olarak görülmüştür. $\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2$ iyonik kümelerinin, bu yüzden $\text{CO}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ şeklinde büyümeleri için yeterli zaman mevcuttur. Muhtemelen katoda ulaştıklarında, zaten H_2O ve CO iyonik kümeleri de oluşmuş olacaktır, Bkz. Bölüm 3.9.5. Muhtemelen bu insanlar, ortamda bulunan yabancı maddelerin (su buharı gibi) oluşturduğu iyonik kümelerin mobilitelerini ölçtüklerinin farkında değillerdir, ama bu iyonik kümelerin P.M.C.C. Encarnaçao (Encarnacao ve ark. 2015) ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada ölçülen iyonik kümelerden daha büyük ve yavaş oldukları kuşkusuz görülmektedir. Bu durum Şekil 4.3 (sağ)'de görülen Blanc diyagramını doğrular niteliktedir.

4.4.3. NA49 TPC verileri (kuru gaz)

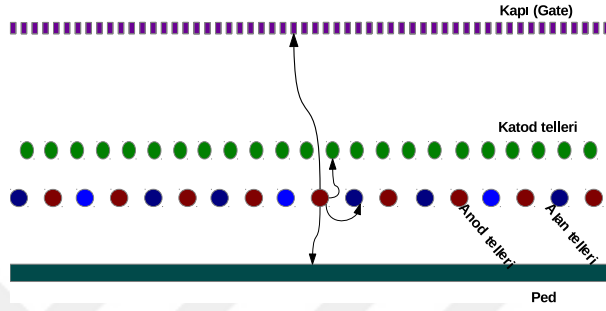


Şekil 4.5. *Sol*: NA49 VTPC-1 içerisinde lazer ile elde edilen iyonların anod telinden katot teline doğru ilerlerken indüklenen sinyal. *Sağ*: ALICE iç ve dış detektöründen, anod-katot arası geçiş süresinden faydalanarak elde edilmiş iyon mobilitesi değerleri (Rossegger ve Riegler 2010).

NA49 (Afanasiev ve ark. 1999), dört adet TPC detektörüne sahiptir ve ayrıca NA61 tarafından VTPC-1, VTPC-2, MTPC-L and MTPC-R detektörleri kullanılmaktadır. İyonizasyon elektronları anod tellerine çarpar ve hareket eden iyon ve elektronlardan

dolayı pedler üzerinde sinyal indüklenir. İyonların bir çoğu anod telleri arasında bulunan alan tellerine ulaşır. İyonların hızlanarak ped üzerinde bir sinyal kıvılcımı ürettiği yaklaşımları mevcuttur. Anod ve katot telleri üzerinde oluşan kıvılcımlar arasındaki gecikme süresi, mobilite hakkında bilgi verir, Şekil 4.6. Veri alımı süresin-

TPC



Şekil 4.6. TPC çalışma prensibinin anlaşılması için basitçe çizilmiş bir şema.

ce, VTPC detektörlerinde Ne % 90 - CO₂ % 10 karışımı mevcuttur ama puls şekillerinin ölçümleri için ayrıca Ar % 90 - CO₂ % 10 karışımı kullanılmıştır. Gaz karışımı 20 ppm oranından daha az nem içermektedir. MTPC detektörleri, Ar % 90 - CO₂ % 5 - CH₄ % 5 karışımı ile çalıştırılmıştır. Bu karışımlar bu çalışmanın kapsamı dışındadır çünkü CO₂⁺ iyonları hızlıca yüklerini CH₄ ve HCO₂ atomlarına aktarıp CH₄⁺ ve HCO₂⁺ iyonlarını meydana getirirler (Anicich ve Huntress Jr.) ve böylece gözlenen sinyalden sorumlu tutulamazlar:



CO₂⁺ iyonları, Ne % 90 - CO₂ % 10 ve Ar % 90 - CO₂ % 10 karışımları içerisinde iyonik kümeler meydana getirecektir, Bkz. Bölüm 3.9. CO₂⁺ iyonlarına neler olduğunu Şekil 4.5 (sol) ve tablo 4.4'den görebiliriz. Şekilde turuncu işaretçiler: Rainer Renfordt (Renfordt Data taken in 1998, communicated in 1999 and 2014) tarafından elde edilen lazer sinyali şekli (bu ölçüm bu çalışma için özel olarak yapılmıştır); kırmızı: Ne-CO₂ karışımı içerisinde CO₂⁺ iyonları için Blanc yasası kullanılarak (4.23

hesaplanmış sinyal; yeşil: saf Ne içerisinde CO_2^+ , (taşıyıcı gazın CO_2 bileşeni ihmal edilmiştir); mavi: saf Ne içerisinde Ne^+ , (yük değiştirme reaksiyonlarından gelen katkı ihmal edilmiştir) (3.62) and (3.63). Sinyal iyonları, VTPC-1 için $4,3 \pm 0,5 \mu\text{s}$, VTPC-2 için ise $4,7 \pm 0,5 \mu\text{s}$ sonra ulaşıyor. Bu süreler indirgenmiş elektrik alana bağlı olarak Blanc yasasından faydalanarak hesaplanan (beklenen) süreden daha fazladır. Bu hesaplama literatürden elde edilen mobilitelerin yasada kullanılması ile elde edilmiştir (Ellis *ve ark.* 1978; Viehland *ve Mason* 1995):

$$\frac{1}{K_{\text{CO}_2^+-\text{mix}}} = \frac{0.9}{K_{\text{CO}_2^+-\text{Ne}}} + \frac{0.1}{K_{\text{CO}_2^+-\text{CO}_2}}, \quad K_{\text{CO}_2^+-\text{mix}}^{20 \text{ Td}} = 4,91 \pm 0,20 \text{ cm}^2/\text{V.s} \quad (4.23)$$

Blanc yasası kullanılan gazlar ve düşük elektrik alanlar dikkate alınarak, % 5 oranında bir doğrulamaya muhtaçtır (Bkz. Bölüm 3.10).

Mobilitenin elektrik alana bağlılığı, bir tek zaman ölçümü ile ortaya konulamaz. Ancak zayıf alandaki mobilite değeri ($K_{\text{ion-mix}}^0$) tahmin edilebilir. Anod-katot telleri arasındaki elektrik alanın, bu mesafenin % 90'ı için 5 - 50 Td aralığında kaldığı verilmiştir. Genel olarak bu bölgede iyonların mobiliteleri < % 10 oranında değişmektedir.

Mobilitenin sabit olduğu düşünülürse, $K_{\text{ion-mix}} \approx 3.75 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ olacaktır. Sistematik hata hakkında fikir sahibi olabilmek için, Ne içinde Ne^+ iyonlarının sinyal şekilleri için kullanılan yaklaşımın aynısı tekrarlanmıştır. Bu yaklaşımda mobilite, indirgenmiş alanın (E/N) bir fonksiyonu olarak ele alınmıştı ve CO_2^+ iyonlarının Ne içerisindeki mobilitesi düşünülmüştür. Sonuçta, 20 Td alan altında $\sim 3,65 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ve $\sim 3,90 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ gibi mobilite değerleri elde edilir.

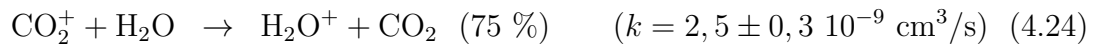
Sinyaldeki kıvılcımdan sorumlu olan iyonun, CO_2^+ iyonuna göre oldukça yavaş olduğu söylenebilir (4.23). Ashında, Blanc diagram (Şekil 4.4, sinyal oluşturan iyonun iyonik küme ile oldukça uyumlu olduğunu gösterir. İçerisinde Ar % 90 - CO_2 % 10 karışımı bulunan “Praktikum” detektörü ile alınmış ölçümlerden, Argon için olanlar Blanc diyagramında yer bulmuştur, Şekil 4.3 (Renfordt Data taken in 1998, communicated in 1999 and 2014).

4.4.4. ALICE TPC (Nemli ortam)

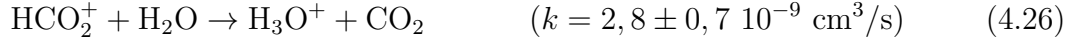
ALICE detektöründe de NA49 ile benzer sonuçlar elde edilmiştir ancak ALICE IROC iç veri okuma sistemi kullanılmıştır (inner readout chambers ([Alme ve ark. 2013](#))). Böyle detektörlerde alan telleri mevcut değildir ama katoda ulaşan iyonlar gözlenebilir. NA49 detektörünün ALICE ile diğer bir farkı ise ALICE'in 100 ppm su buharı içermesidir. Sadece eser miktarda su buharının bulunması durumunda bile bazı gazlar için iyon mobilitesini düşürdüğü uzun zamandan beri bilinmektedir ([Erikson 1927](#)).

R.J. Munson ve yardımcıları ([Munson ve Tyndall 1939](#); [Munson ve Hoselitz 1939](#); [Munson 1939](#); [David ve Munson 1941](#); [Hoselitz 1941](#)) su buharının etkisinde alkali iyonların mobilitesini, soygazlar içerisinde ölçmüşlerdir. Bu bilim insanları, H₂O moleküllerinin, iyonların alkali yüklerini çektiği yönünde gözlemlerini yorumlamışlardır. H₂O molekülünün polar bir molekül olduğunu ve çekim kuvvetinin olduğunu, indüklenmiş dipol durumunda bulunursa bu kuvvetin $\propto 1/r^5$ yerine $\propto 1/r^3$ olarak hesaplanması gerektiğini vurgulamışlardır. CO₂⁺ iyonu, alkali iyonların aksine yükünü H₂O ile değiştirecektir, bu durumun altında yatan mekanizma TPC den alınan datalara uygulanmalıdır.

Bu etki ayrıca hava içerisinde, nem seviyesini belirlemek için kullanılan IMS ölçümlerinden de bilinmektedir ([Hauck ve ark. 2014](#)). Hava içerisinde iyonik kümelerin oluşumunun, daha fazla su molekülü ile reaksiyona girerek H₃O⁺ oluşturan ve yüklerini H₂O⁺ molekülüne aktaran N₂⁺ iyonlarının oluşumu ile başladığı düşünülmektedir. Bu çalışmada kullanılan gaz karışımları içinde böyle adımlar, CO₂⁺ ve H₂O arasındaki elektron veya protonların yer değiştirmesidir:



H₃O⁺ molekülü, başka bir H₂O molekülü ile etkileşiminden kaynaklanır:



100 ppm oranında su buharının varlığında, iki reaksiyon için de 0,15 - 0,16 μs gibi karakteristik bir süre söz konusudur (Anicich ve Huntress Jr.). Bu süre iyonik kümelerin oluşum süresinden üç kat daha fazladır, Bkz. Denklem (3.65).

Su molekülü içeren ve büyüklükleri $n = 20$ civarında olan 120 K sıcaklıkta iyonik kümeler hakkında bazı bilgiler literatürde mevcuttur ama oda sıcaklığında en sık rastlanan iyonik kümenin büyüklüğü $n \approx 5$ olarak belirtilmiştir (Lau ve ark. 1982; Likholyot 2000). Su moleküllerinin kalıcı dipol özelliklerinden kaynaklı bazı avantajlar sağladıkları düşünülmektedir. Kendi kendilerine CO₂-bazlı iyonik kümelere doğru çekilir ve yaklaşır ve böylece karışım içerisinde bir iyonik kümenin meydana gelmesine sebep olurlar (Hiraoka ve ark. 1986; Inokuchi ve ark. 2009). Su molekülü içeren iyonik kümelerin büyüklükleri tartışılabilir ve kuru gaz içerisinde üretilmiş CO₂⁺ · CO₂ iyonik kümelere göre daha yavaş hareket ettikleri düşünülebilir.

NA49'dan alınan data için sabit bir mobilite değeri olarak, Ne % 90/CO₂ % 10 oranında bir karışım için $K_{\text{ion-mix}} = 3,40 \pm 0,03 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerine ulaşılmıştır. Bu değer daha önce bulunan değerden (Bölüm 4.4.3) daha küçüktür. Aynı artış Ar % 90/CO₂ % 10 için de gözlenmiştir, Bkz. Şekil 4.3, Şekil 4.4 ve Tablo 4.4. % 10'luk bu fark belki de literatürden elde edilen (beklenen) değerden büyük bile olabilir. $K_{\text{ion-mix}}$, iyonik kümeleşmenin olmadığı durumda Blanc yasası kullanılarak yapılan tahminlerin altında olacaktır.

Yukarıdaki tabloda, Şekil 4.5'deki sinyal şekillerinden çıkarılmıştır. Ayrıca t_{mix} değerleri listelenmiştir, CO₂⁺ iyonlarının karışım içerisinde yer alma süreleri Blanc yasası ve t_{fixed} zamanına göre (4.23), Bu sürede mobilite sabit $K = 1 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ değerinde olmalıdır. Hesaplanmış süreler ~ 2 % oranında bir sistematik ve < 1 % oranında istatistiksel hataya sahiptir. IROC ölçümleri özellikle bu çalışma için yapılmıştır. Üçüncü satır literatürden alınmıştır (Afanasiev ve ark. 1999), literatürde yanlışlıkla MTPC olarak belirtilmiştir. Öteki data Rainer Renfordt (Renfordt Data

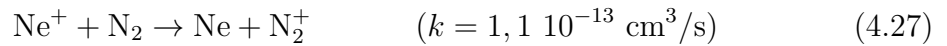
TPC	V_{anod} [V]	Karışım	H ₂ O [ppm]	t_{exp} [μs]	t_{mix} [μs]	t_{fixed} [μs]	K [cm ² /V.s]
VTPC-1	1110	Ne % 90/CO ₂ % 10	< 20	18,5 ± 0,5	14,2	68,2	3,7 ± 0,1
VTPC-2	970	Ne % 90/CO ₂ % 10	< 20	22,5 ± 0,5	17,8	84,9	3,8 ± 0,1
VTPC-2	970	Ne % 90/CO ₂ 1% 0	< 20	22,3 ± 0,5	17,8	84,9	3,8 ± 0,1
IROC	1263	Ne % 90/CO ₂ % 10	100	25,7 ± 0,2	18,2	87,4	3,40 ± 0,03
Praktikum	1250	Ar % 90/CO ₂ % 10	< 20	63,6 ± 0,5	59,7	119,6	1,88 ± 0,01
IROC	1327	Ar % 90/CO ₂ % 10	100	47 ± 1	41,5	83,1	1,77 ± 0,04
Praktikum	1453	Ar % 80/CO ₂ % 20	< 20	59,6 ± 0,5	54,7	102,9	1,72 ± 0,01

Çizelge 4.4. NA49 veya ALICE içerisinde, iyonların anod telinden katot veya alan teline geçiş süresi (t_{exp}).

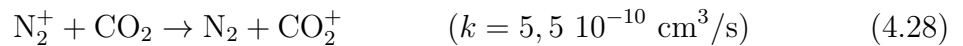
taken in 1998, communicated in 1999 and 2014) tarafından alınmıştır.

4.4.5. ALICE TPC detektöründen alınan veriler (Azot gazı)

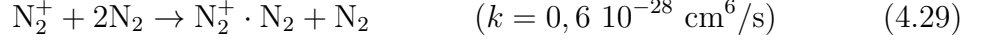
S. Rossegger ve W. Riegler, ALICE TPC detektörünü, Ne % 85,7 - CO₂ %9,5 - N₂ % 4,8 gazları ile doldurarak iyonların anod-katod arası geçiş sürelerini ölçmüşlerdir (Rossegger ve Riegler 2010). Karışımın tüm bileşenleri iyonlaştırılmıştır. Ortamda meydana gelen çığ içerisinde, Ne⁺ iyonları ilk olarak CO₂ ile $\tau \sim 8$ ns içerisinde etkileşime girme eğiliminde olacaktır (Reaksiyon 3.62) ve (Reaksiyon 3.63). Ne⁺ ayrıca $\tau = 38$ ns içerisinde dimer yapısına da eğilim gösterebilir (Reaksiyon 3.64) ama bu ihtimal daha önce de açıklandığı üzere ilkinde göre çok daha küçüktür. N₂'den yük transferi $\tau = 7,7 \mu\text{s}$ içerisinde gerçekleşecektir ancak bu durum daha önce de açıklanan sebeple dikkate alınmaz (Anicich ve Huntress Jr.):



N₂⁺ ise yüksek ihtimalle yükünü 0.78 ns içerisinde CO₂ molekülüne aktarmak isteyecektir (Anicich ve Huntress Jr.):



Azot dimer yapılarının, neredeyse $\tau = 12$ ns zaman diliminde bile oluşmaları muhtemel değildir (Boris 1992c):



Böylece 10 ns sonra sadece CO_2^+ iyonları ortamda bulunabilir, bu süre iyonların geçiş süresi (20 μs) ile karşılaştırıldığında çok kısa bir süre olarak göze çarpmaktadır. CO_2 düşük iyonizasyon potansiyeline sahip bir bileşendir ve daha önce de bu çalışma kapsamında tartışıldığı gibi sadece kendisi ile iyonik kümeler meydana getirmesi beklenmektedir. Bu eğilim aslında karışım içerisinde CO_2^+ iyonlarının hesaplanmış mobilitesi ile karşılaştırılarak görülebilir:

$$\frac{1}{K_{\text{CO}_2^+ \text{-mix}}} = \frac{0.857}{K_{\text{CO}_2^+ \text{-Ne}}} + \frac{0.095}{K_{\text{CO}_2^+ \text{-CO}_2}} + \frac{0.048}{K_{\text{CO}_2^+ \text{-N}_2}}, \quad K_{\text{CO}_2^+ \text{-mix}}^{20 \text{ Td}} = 4,64 \pm 0,20 \text{ cm}^2/\text{V.s} \quad (4.30)$$

görüldüğü gibi bu değer, deneyden elde edilen mobilite değeri ile uyusmaktadır, $K_{\text{ion-mix}} = 3,49 \pm 0,03 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, Bkz. Şekil 4.5 (sağ). Şekil 4.5 (sağ)'da mobilitenin E/N 'e bağlı olduğu varsayılmıştır. Data üzerindeki hata, pikin yerinin saptanmasının zorluğundan kaynaklanmaktadır. Turuncu bant, CO_2 iyonlarının hesaplanmış düşük alandaki mobilitelerini belirtmektedir, Bkz. Bölüm 4.4.5. Bu tip detektörler içerisindeki mobilite, Ne oranının düşük olmasından ve N_2 molekülünün varlığından dolayı, NA49 içerisinde ölçülenden daha düşüktür. İyonik kümelerin indüklemesine bağlı olarak mobilite % 20 - 25 oranında azalır, bu oran NA49 için Bölüm 4.4.3'de bulunan değer ile aynıdır.

5. TARTIŞMA ve SONUÇ

Literatürde gaz karışımları içerisinde iyon transferini simüle edebilen bir program bilinmemektedir. Alanda, gazlı detektörlerin simülasyon çalışmalarında elektron transferi, Magboltz ile simüle edilirken, iyon transferini de hesaba katan bir programa ihtiyaç duyulmaktadır. Bu çalışma kapsamında bu program için bir temel atılmış ve temel testler yapılarak sonuçları tartışılmıştır. Bu programın karşılaşılan yeni bir durum olarak iyonik kümelerin varlığı ve etkileri çerçevesinde güncellenmesi zaman alacaktır.

Literatürde iyon-molekül etkileşmeleri üzerine, Ar ve Ne gazlarının CO₂ gazının ikincil gaz olarak kullanıldığı karışımlarında, sinyal iyonları yıllardır sanıldığı gibi CO₂⁺ veya soygaz iyonları değil, CO₂⁺ · (CO₂)_n iyonik kümeleridir. Deneysel kanıtlar bu tezi doğrulamaktadır. İyonik kümeler CO₂⁺ iyonlarına göre daha ağır ve yavaştır- lar. Ar-CO₂ ve Ne-CO₂ karışımları içerisindeki mobiliteleri Blanc yasası ile hesapla- nabilir. Bu gaz karışımları içerisinde bulunacak su buharı iyon mobilitelerini artırır. İyonların detektör içerisindeki davranışlarının daha iyi anlaşılmasının anahtarı kütle spektrometresidir.

KAYNAKLAR

Afanasiev, S., Alber, T., Appelshäuser, H., Bächler, J., Barna, D., Barnby, L. S., Bartke, J., Barton, R. A., Betev, L., Bialkowska, H., Bieser, F., Billmeier, A., Blyth, C., Bock, R., Bormann, C., Bracinik, J., Brady, F. P., Brockmann, R., Brun, R., Buncic, P., Caines, H., Cebra, D., Cooper, G. E., Cramer, J. G., Csato, P., Cyprian, M., Dunn, J., Eckardt, V., Eckhardt, F., Empl, T., Eschke, J., Ferguson, M. I., Fessler, H., Fischer, H., Flierl, D., Fodor, Z., Frankenfeld, U., Foka, P., Freund, P., Friese, V., Ftacnik, J., Fuchs, M., Gabler, F., Gal, J., Ganz, R., Gaździcki, M., Gladysz, E., Grebieszko, J., Günther, J., Harris, J., Hegyi, S., Henkel, T., Hill, L., Hlinka, V., Huang, I., Hmmler, H., Igo, G., Irmscher, D., Ivanov, M., Janik, R., Jacobs, P., Jones, P. G., Kadija, K., Kolesnikov, V. I., Kowalski, M., Lasiuk, B., Lévai, P., Liebicher, K., Lynen, U., Malakhov, A. I., Margetis, S., Markert, C., Marks, C., Mayes, B., Melkumov, G. L., Mock, A., Molnár, J., Nelson, J. M., Oldenburg, M., Odyniec, G., Palla, G., Panagiotou, A. D., Pestov, Y., Petridis, A., Pikna, M., Pimpl, W., Pinsky, L., Piper, A., Porter, R. J., Poskanzer, A. M., Poziombka, S., Prindle, D. J., Pühlhofer, F., Rauch, W., Reid, J. G., Renfordt, R., Retyk, W., Ritter, H. G., Röhrich, D., Roland, C., Roland, G., Rudolph, H., Rybicki, A., Sammer, T., Sandoval, A., Sann, H., Schäfer, E., Schmidt, R., Schmischke, D., Schmitz, N., Schönfelder, S., Semenov, A. Y., Seyboth, J., Seyboth, P., Seyerlein, J., Sikler, F., Sitar, B., Skrzypczak, E., Squier, G. T. A., Stelzer, H., Stock, R., Strmen, P., Ströbele, H., Struck, C., Susa, T., Szarka, I., Szentpetery, I., Szymanski, P., Sziklai, J., Trainor, T. A., Trentalange, S., Ullrich, T., Vassiliou, M., Veres, G., Vesztergombi, G., Vranic, D., Wang, F. Q., Weerasundara, D. D., Wenig, S., Whitten, C., Wieman, H., Wienold, T., Wood, L., Yates, T., Zimanyi, J., Zhu, X. Z., Zybert, R. 1999. The NA49 large acceptance hadron detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, (430): 210–244.

Alme, J., Andres, Y., Appelshäuser, H., Bablok, S., Bialas, N., Bolgen, R., Bonnes, U., Bramm, R., Braun-Munzinger, P., Campagnolo, R., Christiansen, P., Dobrin, A., Engster, C., Fehlker, D., Foka, Y., Frankenfeld, U., Gaardhøje, J., Garabatos, C., Glässel, P., Gutierrez, C. G., Gros, P., Gustafsson, H. A., Helstrup, H., Hoch, M., Ivanov, M., Janik, R., Junique, A., Kalweit, A., Keidel, R., Kniege, S., Kowalski, M., Larsen, D., Lesenechal, Y., Lenoir, P., Lindegaard, N., Lippmann, C., Mager, M., Mast, M., Matyja, A., Munkejord, M., Musa, L., Nielsen, B., Nikolic, V., Oeschler, H., Olsen, E. K., Oskarsson, A., Osterman, L., Pikna, M., Rehman, A., Renault, G., Renfordt, R., Rossegger, S., Röhrich, D., Røed, K., Richter, M., Rueschmann, G., Rybicki, A., Sann, H., Schmidt, H. R., Siska, M., Sitár, B., Soegaard, C., Soltveit, H. K., Soyk, D., Stachel, J.,

Stelzer, H., Stenlund, E., Stock, R., Strmen, P., Szarka, I., Ullaland, K., Vranic, D., Veenhof, R., Westergaard, J., Wiechula, J., Windelband, B. 2013. The ALICE TPC, a large 3-dimensional tracking device with fast readout for ultra-high multiplicity events. *Journal of Instrumentation*, (622): 316–367.

Anicich, V. G. 1993. Evaluated Bimolecular Ion-Molecule Gas Phase Kinetics of Positive Ions for Use in Modeling Planetary Atmospheres, Cometary Comae, and Interstellar Clouds. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, (22): 1469–1569.

Anicich, V. G., Huntress(Jr.), W. T. 1986. A survey of bimolecular ion-molecule reactions for use in modeling the chemistry of planetary atmospheres, cometary comae, and interstellar clouds. *Astrophysical Journal Supplement Series*, (62): 553–672.

Basurto, E., deUrquijo, J., Alvarez, I., Cisneros, C. 2000. Mobility of He^+ , Ne^+ , Ar^+ , N_2^+ , O_2^+ , and CO_2^+ in their parent gas. *Physical Review E*, (61): 3053–3057.

Beaty, E. C., Patterson, P. L. 1968. Mobilities and Reaction Rates of Neon Ions in Neon. *Physical Review*, (170): 116–121.

Berant, Z., Karpas, Z., Shahal, O. 1989. Effects of temperature and clustering on mobility of ions in carbon dioxide. *The Journal of Physical Chemistry*, (93): 7529–7532.

Biagi, S. F. 1999. Monte Carlo simulation of electron drift and diffusion in counting gases under the influence of electric and magnetic fields. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, (421): 234–240.

Biondi, M. A., Chanin, L. 1961. Blanc's Law-Ion Mobilities in Helium-Neon Mixtures. *Physical Review*, (122): 843–847.

Blanc, A. 1908. Recherches sur les mobilités des ions dans les gaz. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, (7): 825–839.

Boris, M. S. 1992. *Cluster Ions and Van der Waals Molecules*. Gordon and Breach Science Publishers. chapter 3.2, p. 81.

Boris, M. S. 1992. *Cluster Ions and Van der Waals Molecules*. Gordon and Breach Science Publishers. chapter 3.2, p. 74.

Boris, M. S. 1992. *Cluster Ions and Van der Waals Molecules*. Gordon and Breach Science Publishers. chapter 3.2, p. 77.

Chang, R. 2005. *Physical Chemistry for the Biosciences. First Edition*. University Science Books: Sausalito, CA.

- Cortez, A. F. V., Garcia, A. N. C., Neves, P. N. B., Santos, F. P., Borges, F. I. G. M., Barata, J. A. S., Conde, C. A. N. 2013. Experimental measurement of the mobility of ions originated in ethane in their parent gas. *Journal of Instrumentation*, (8): 1–10.
- Coxon, P. A., Moruzzi, J. L. 1979. Positive ion mobilities in carbon dioxide. *Journal de Physique Colloques*, (40): C7–117–C7–118.
- Coxon, P., Moruzzi, J. L. 1977. Ion-molecule reactions in CO₂ and CO₂-CO mixtures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, (10): 969–977.
- David, H. G., Munson, R. J. 1941. The Mobility of Alkali Ions in Gases. IV. Measurements in Gaseous Mixtures. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, (177): 192–199.
- Davies, P. G., Dutton, J., LlewellynJones, F., Williams, E. M. 1966. Critical Review. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, (259)(1100): 302–320.
- Eiceman, G. A., Karpas, Z. 2005. *Ion Mobility Spektrometry, Second Edition, Section 2: Mobility of Ions in the Gas Phase*. CRC Press. pp. 39–66.
- Ellis, H. W., McDaniel, E. W., Albritton, D. L., Viehland, L. A., Lin, S. L., Mason, E. A. 1978. Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. Part II. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, (22): 179–217.
- Ellis, H. W., Pai, R. Y., Gatland, I. R., McDaniel, E. W., Wernlund, R., Cohen, M. J. 1976. Ion identity and transport properties in CO₂ over a wide pressure range. *The Journal of Chemical Physics*, (64): 3935–3941.
- Ellis, H. W., Pai, R. Y., McDaniel, E. W., Mason, E. A., Viehland, L. A. 1976. Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, (17): 177–210.
- Ellis, H. W., Thackston, M. G., McDaniel, E. W., Mason, E. A. 1984. Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. Part III. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, (31): 113–151.
- Encarnacao, P. M. C. C., Cortez, A. F. V., Pinto, M. G. A., Neves, P. N. B., Trindade, A. M. F., Escada, J., Santos, F. P., Borges, F. I. G. M., Barata, J. A. S., Conde, C. A. N. 2015. Experimental Ion Mobility measurements in Ar-CO₂ mixtures. *Journal of Instrumentation*, (10): P01010.
- Engelking, P. C. 1987. Determination of cluster binding energy from evaporative lifetime and average kinetic energy release: Application to (CO₂)_n⁺ and Ar_n⁺ clusters. *The Journal of Chemical Physics*, (87): 936–940.
- Erikson, H. A. 1927. On The Effect of the Medium on Gas Ion Mobility. *Physical Review*, (30): 339–348.

Hauck, B. C., Davis, E. J., Clark, A. E., Siems, W. F., Harden, C. S., McHugh, V. M., Hill(Jr.), H. H. 2014. Determining the water content of a drift gas using reduced ion mobility measurements. *International Journal of Mass Spectrometry*, (368): 37–44.

Hayashi, M. 2003. Bibliography of Electron and Photon Cross Sections with Atoms and Molecules Published in the 20th Century–Argon.

Hiraoka, K., Genei, N., Shoda, S. 1988. Determination of the stabilities of $\text{CO}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ and $\text{O}_2^+ \cdot (\text{CO}_2)_n$ clusters with $n = 1 - 6$. *Chemical Physics Letters*, (146): 535–538.

Hiraoka, K., Mori, T. 1989. Formation and stabilities of cluster ions Ar_n^+ . *The Journal of Chemical Physics*, (90): 7143–7149.

Hiraoka, K., Shoda, T., Morise, K., Yamabe, S., Kawai, E., Hirao, K. 1986. Stability and structure of cluster ions in the gas phase: Carbon dioxide with Cl^- , H_3O^+ , HCO_2^+ , and HCO^+ . *The Journal of Chemical Physics*, (84): 2091–2096.

Holstein, T. 1955. Mobility of Positive Ions in Gas Mixtures. *Physical Review*, (100): 1230. Abstract of paper B6 presented at the Eighth Annual Gaseous Electronics Conference Held at Schenectady, New York, October 20–22, 1955. Complete paper not found. See Biondi ve Chanin (1961).

Hornbeck, J. 1951. The Drift Velocities of Molecular and Atomic Ions in Helium, Neon, and Argon. *Physical Review*, (84): 615–620.

Hoselitz, K. 1941. The Mobility of Alkali Ions in Gases. V. Temperature Measurements in the Inert Gases. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, (177): 200–204.

Housecroft, C. E., Sharpe, A. G. 2008. *Inorganic Chemistry, Third Edition*. Pearson / Prentice Hall: Essex, UK.

Huntress(Jr.), W. T. 1971. Ion Cyclotron Resonance Power Absorption: Collision Frequencies for CO_2^+ , N_2^+ , and H_3^+ Ions in Their Parent Gases. *The Journal of Chemical Physics*, (55): 2146–2155.

Illies, A. J. 1988. Thermochemistry for the gas-phase ion-molecule clustering of CO_2^+CO_2 , SO_2^+CO_2 , $\text{N}_2\text{O}^+\text{N}_2\text{O}$, O_2^+CO_2 , NO^+CO_2 , $\text{O}_2^+\text{N}_2\text{O}$ and $\text{NO}^+\text{N}_2\text{O}$: description of a new hybrid drift tube/ion source with coaxial electron beam and ion exit apertures. *The Journal of Physical Chemistry*, (92): 2889–2896.

Illies, A. J., Jarrold, M. F., Wagner-Redeker, W., Bowers, M. T. 1985. Photoinduced Intramolecular Charge Transfer: Photodissociation of $\text{CO}_2^+ \cdot \text{Ar}$ Cluster Ions. *Journal of the American Chemical Society*, (107): 2842–2849.

Inokuchi, Y., Kobayashi, Y., Muraoka, A., Nagata, T., Ebata, T. 2009. Structures of water- CO_2 and methanol- CO_2 cluster ions: $[\text{H}_2\text{O} \cdot (\text{CO}_2)_n]^+$ and $[\text{CH}_3\text{OH} \cdot (\text{CO}_2)_n]^+$ ($n = 1-7$). *The Journal of Chemical Physics*, (130)(15): 154304.

- Kalkan, Y., Arslanok, M., Cortez, A. F. V., Kaya, Y., Tapan, I., Veenhof, R. 2015. Cluster ions in gas-based detectors. *Journal of Instrumentation*, (10)(07): P07004.
- Karpas, Z., Berant, Z., Shahal, O. 1989. Effect of temperature on the mobility of ions. *Journal of the American Chemical Society*, (111): 6015–6018.
- Langevin, P. 1905. Une formule fondamentale de théorie cinétique. *Annales de chimie et de physique*, (5): 245–288.
- Lau, Y. K., Ikuta, S., Kebarle, P. 1982. Thermodynamics and kinetics of the gas-phase reactions $\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1} + \text{water} = \text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_n$. *Journal of the American Chemical Society*, (104): 1462–1469.
- Lepère, V., Ismail, I. M., Barat, M., Fayeton, J. A., Picard, Y. J., Wohrer, K., Juvet, C., Martrenchard, S. 2005. Lifetime and yield of metastable Ar_2^+ ions. *The Journal of Chemical Physics*, (123): 174307 1–5.
- Likholyot, A. 2000. Experimental and Theoretical Study of Ionic Clustering Reactions Involving Water. PhD thesis. Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Switzerland.
- Lindinger, W., Albritton, D. 1975. Mobilities of various mass-identified positive ions in helium and argon. *The Journal of Chemical Physics*, (62): 3517–3522.
- Liu, W. F., Conway, D. C. 1975. Ion-molecule reactions in Ar at 296, 195, and 77 K. *The Journal of Chemical Physics*, (62): 3070–3073.
- Martin, P. M. 2010. *Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings: Science, Applications and Technology*. William Andrew (Elsevier). chapter 2, p. 43.
- Mason, E. A. 1984. *Ion mobility: its role in plasma chromatography*. Plenum Press; New York, NY (USA). pp. <http://dx.doi.org/10.1002/3527602852.fmatter43-93>.
- Mason, E. A., McDaniel, E. W. 1988. *Front Matter*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. pp. i–xvi.
- Matz, L. M., Hill(Jr.), H. H., Beegle, L. W., Kanik, I. 2002. Investigation of drift gas selectivity in high resolution ion mobility spectrometry with mass spectrometry detection. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, (13): 300–307.
- Mautner, M. M., Lias, S. G. retrieved May 4, 2015. Binding Energies Between Ions and Molecules, and The Thermochemistry of Cluster Ions. In P.J. Linstrom and W.G. Mallard (Ed.). NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899.
- Meunier, J., Belenguer, P., Boeuf, J. P. 1995. Numerical model of an ac plasma display panel cell in neon-xenon mixtures. *Journal of Applied Physics*, (78): 731–745.

- Munson, R. J. 1939.** The Mobility of Alkali Ions in Gases. III. The Mobility of Alkali Ions in Water Vapour. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, (172): 51–54.
- Munson, R. J., Hoselitz, K. 1939.** The Mobility of Alkali Ions in Gases. II. The Attachment of Inert Gas Atoms to Alkali Ions. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, (172): 43–50.
- Munson, R. J., Tyndall, A. M. 1939.** The Mobility of Alkali Ions in Gases. I. The Attachment of Water Molecules to Alkali Ions in Gases. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, (172): 28–42.
- Olive, K. A., ParticleDataGroup 2014.** Review of Particle Physics. *Chinese Physics C*, (38): 14–16.
- Orient, O. J. 1973.** Mobility of mass-identified ions in neon and reaction rate coefficient for $\text{Ne}^+ + 2\text{Ne} \rightarrow \text{Ne}_2^+ + \text{Ne}$. *Chemical Physics Letters*, (23): 579–581.
- Oxtoby, D. W., Gillis, H. P., Champion, A. 2008.** *Principles of Modern Chemistry Sixth Edition*. Thomson Brooks/Cole: United States.
- Phelps, A. V. last updated in 2010.** A compilation of atomic and molecular data, assembled and evaluated by A.V. Phelps and collaborators: <http://jilawww.colorado.edu/avp/>.
- Pitchford, L. C.** LXCat, a web-based, community-wide project on data needed in modeling low temperature plasmas, www.lxcat.net.
- Pitchford, L. C., McKoy, B. V., Chutjian, A., Trajmar, S. 1985.** *Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions*. Satellite Meetings of the XIVth ICPEAC.
- Puech, V., Mizzi, S. 1991.** Collision cross sections and transport parameters in neon and xenon. *Journal of Physics D: Applied Physics*, (24): 1974–1985.
- Rakshit, A., Warneck, P. 1979.** Rate Coefficients and Product Ion Distributions for Reactions of $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$ Ions with Neutral Molecules at 300 K. *Z. Naturforsch.*, (34a): 1410–1423. An erratum has been published, but does not concern the mobilities. <http://www.znaturforsch.com/aa/v35a/35a0256.pdf>.
- Rapp, D., EnglanderGolden, P. 1965.** Total Cross Sections for Ionization and Attachment in Gases by Electron Impact. I. Positive Ionization. *The Journal of Chemical Physics*, (43): 1464–1479.
- Renfordt, R. Data taken in 1998, communicated in 1999 and 2014.** Private communication.
- Revercomb, H. E., Mason, E. A. 1975.** Theory of plasma chromatography/-gaseous electrophoresis. Review. *Analytical Chemistry*, (47)(7): 970–983.

Rokushika, S., Hatano, H., Hill(Jr.), H. H. 1986. Ion mobility spectrometry in carbon dioxide. *Analytical Chemistry*, (58): 361–365.

ROOT Data Analysis Framework.

Rossegger, S., Riegler, W. 2010. Signal shapes in a TPC wire chamber. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, (623): 927–930.

Sahin, O. 2015. Private communication.

Sandler, S. I., Mason, E. A. 1968. Kinetic-Theory Deviations from Blanc’s Law of Ion Mobilities. *The Journal of Chemical Physics*, (48): 2873–2875.

Saporoschenko, M. 1973. Drift Velocities of O_2^+ , CO_2^+ , and CO_4^+ Ions in CO_2 Gas. *Physical Review A*, (8): 1044–1047.

Schildcrout, S. M., Collins, J. G., Franklin, J. L. 1970. Mass Spectrometric Study of Ion-Neutral Reactions in Radio-Frequency Discharges in Carbon Dioxide. *The Journal of Chemical Physics*, (52): 5767–5774.

Schlumbohm, H. 1962. Elektronenlawinen in elektronegativen Gasen. *Zeitschrift für Physik*, (166): 192–206.

Schultz, G., Charpak, G., Sauli, F. 1977. Mobilities of positive ions in some gas mixtures used in proportional and drift chambers. *Revue de Physique Appliquée (Paris)*, (12): 67–70.

Shimizu, Y. S., Sato, S., Matsuoka, S., Nakamura, H., Tamura, T. 1982. Ions in carbon dioxide at an atmospheric pressure. *Radiation Physics and Chemistry*, (20): 253–257.

Smith, G. P., Cosby, P. C., Moseley, J. T. 1977. Photodissociation of atmospheric positive ions. I. 5300–6700 Å. *The Journal of Chemical Physics*, (67): 3818–3828.

Turner, D. L., Conway, D. C. 1979. Study of the $2Ar + Ar_2^+ = Ar + Ar_3^+$ reaction. *The Journal of Chemical Physics*, (71): 1899–1901.

Viehland, L. A., Mason, E. A. 1995. Transport Properties of Gaseous Ions over a Wide Energy Range, IV. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, (60): 37–95.

Winter, M. 2010. [The periodic table on the web](#).

Wolfram Research, I. 2014. Mathematica, version 10.6.

Yamabe, C., Buckman, S., Phelps, A. 1983. Measurement of free-free emission from low-energy-electron collisions with Ar. *Physical Review A*, (27): 1345–1352.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Yalçın KALKAN
Doğum Yeri ve Tarihi : Van – 27.11.1982
Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Van Kâzım Karabekir Lisesi - 1999
Lisans : G.O.P.Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü -
2004
Yüksek Lisans : Y.Y.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü OFMAE Fizik
Eğitimi - 2007

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl : Muş Alparslan Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik
Bölümü 2009-2011
U.Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü 2011 ...

İletişim : yalcinkalkan@gmail.com

Yayımları

Kalkan, Y., Arslanok M., Cortez, A.F.V., Kaya, Y., Tapan, İ., Veenhof, R. 2015. Cluster ions in gas-based detectors. *JINST*, (P7004): 1–19.