T.C.
İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Doktora Tezi

MALZEME YAPISININ RADYASYONDAN KORUNMADAKİ ETKİSİNİN MONTE CARLO SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Tuğba MANİCİ

Fizik Anabilim Dalı

Nükleer Fizik Programı

DANIŞMAN
Prof. Dr. Bayram DEMİR

II. DANIŞMAN
Dr. Öğr. Üyesi Yaşar KARABUL

Ağustos, 2024

İSTANBUL

Bu çalışma, 14.08.2024 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı, Nükleer Fizik Programında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

Prof. Dr. Bayram DEMİR (Danışman)
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi

Doç. Dr. Gökhan ALGÜN
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi

Dr. Öğr. Üyesi Ahmet Murat Şenışık
Altınbaş Üniversitesi
SHMYO

Prof. Dr. Doğan YAŞAR
Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi
Fen Edebiyat Fakültesi

Doç. Dr. Namık AKÇAY
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi

İntihal Programı Beyanı

20.04.2016 tarihli Resmi Gazete'de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince; Bu Lisansüstü teze, İstanbul Üniversitesi'nin abonesi olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Fen Bilimleri Enstitüsü'nün belirlemiş olduğu ölçütlere uygun rapor alınmıştır.

Tezden Üretilmiş Yayınların Künye Bilgileri

Manici, T., Algün, G., Akçay, N., & Demir, B., 2024, The Effect of Particle Size of Polyvinyl Alcohol/Bentonite Clay Mixture on the Radiation Shielding: A Monte Carlo Study, Süleyman Demirel University Faculty of Arts and Science Journal of Science, 19(1), 63–74**.**

ÖNSÖZ

Akademik hayatımda anlayışı, bilgi ve tecrübesi ile bana yol gösteren, desteğini ve inancını her zaman hissettiğim tez danışmanım Prof. Dr.Bayram Demir'e teşekkürlerimi sunarım. İkinci danışmanım Dr. Öğretim Üyesi Yaşar Karabul ile yardım ve desteklerini esirgemeyen Doç. Dr. Gökhan Algün ve Doç. Dr. Namık Akçay'a teşekkür ederim.

Bu doktora tezinin tamamlanması, birçok kişinin değerli katkıları ve desteği sayesinde mümkün olmuştur. Hayatımın hiçbir aşamasında beni yalnız bırakmayan çok değerli dostlarım Neslihan Erdem, Tutku Karakoç, Nazlı Gizem Döner, Nazlıcan Özen, Buşra Kasarcı, Merve Civelek, Melek Civelek ve Kübra Didar başta olmak üzere bu süreçte yardımlarını esirgemeyen, her sorunumda benimle birlikte çözüm arayan, varlıklarını her zaman hissetiğim çok sevgili arkadaşlarıma teşekkürlerimi sunarım. İyi ki varsınız…

Son olarak sevgili aileme her şey için teşekkür ederim…

Ağustos 2024 Tuğba MANİCİ

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖNSÖZ ..... **iv**
İÇİNDEKİLER ..... **v**
ŞEKİL LİSTESİ ..... **vii**
TABLO LİSTESİ ..... **xi**
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ ..... **xv**
ÖZET ..... **xvi**
SUMMARY ..... **xviii**
1. GİRİŞ **1**
2. GENEL KISIMLAR **6**
2.1. RADYASYON 6
2.1.1. Elektromanyetik Spektrum 6
2.1.2. İyonizasyon Olayı 9
2.2. RADYOAKTİVİTE 9
2.2.1. Alfa Bozunumu (α) 11
2.2.2. Beta Bozunumu (β) 12
2.2.3. Elektron Yakalaması 14
2.2.4. Gama ışıması 14
2.3. FOTONLARIN MADDE İLE ETKİLEŞİMLERİ 15
2.3.1. Rayleigh Saçılması 15
2.3.2. Fotoelektrik Olay 16
2.3.3. Compton Olayı 18
2.3.4. Çift Oluşumu 19
2.4. RADYASYONUN BİYOLOJİK ETKİLERİ 21
2.4.1. LET (Lineer Enerji Transferi) 22
2.4.3. Deterministik Etkiler 24
2.4.4. Stokastik Etkiler 25
2.5. RADYASYONDA KORUNMA PRENSİPLERİ 26
2.5.1. Zaman 27
2.5.2. Mesafe 27
2.5.3. Zırhlama 28

2.6. RADYASYONDAN KORUNMADA GEREKLİ ÖNEMLİ PARAMETRELER 29
2.7. KRİSTAL YAPI.....34
2.7.1. Bravais Örgüleri (Latisleri) 38
2.7.2. Kristal Yapı ve Yoğunluk Bağlantısı 40
2.8.2.1. Teorik Yoğunluk.....*40*
2.7.3. Wyckoff Pozisyonları.....41
2.7.4. Atomik Dolgu Faktörü (Atomic Packing Factor – APF) 42
3. MALZEME VE YÖNTEM.....45
3.1. MATERİALS PROJECT (MP): MALZEME BİLİMİNE YENİ BİR YAKLAŞIM 45
3.2. MONTE CARLO SİMÜLASYONU.....49
3.2.1. MCNP Kodu.....51
3.2.1.1 MCNP Girdi Dosyası.....*52*
3.3. RADYASYONDAN KORUNMADA PBO, WO_3 VE BI_2O_3 BİLEŞİKLERİNİN ZIRH MALZEMESİ OLARAK SEÇİLMESİ.....57
3.4 TEZ ÇALIŞMASINDA YER ALAN BİLEŞİKLERE AİT BİLGİLER.....58
3.5 TEZDE YER ALAN BİLEŞİKLERE AİT KRİSTAL YAPILARIN FARKLI AÇILARINA AİT GÖRSELLERİ.....64
3.6 MCNPX (2.4.0) MONTE CARLO KODU KULLANILARAK OLUŞTURULAN SİMULASYON.....71
4. BULGULAR.....75
4.1 SİMÜLASYON VALİDASYON SONUÇLARI 75
4.2: FARKLI ATOMİK DÜZENLERE PBO, WO_3 VE BI_2O_3 BİLEŞİKLERİNE AİT DOĞRUSAL ZAYIFLATMA KATSAYISI, YARI DEĞER KALINLIĞI, ORTALAMA SERBEST YOL VE ONDA BİR DEĞER KALINLIĞI DEĞERLERİ.....76
4.3: SIRADAN BETON VE PVA İÇERİSİNE PBO, WO_3 İLE BI_2O_3 KATKILANARAK ELDE EDİLEN KARIŞIMLARA AİT LAC, HVL, MFP VE TVL DEĞERLERİ.....87
5. TARTIŞMA VE SONUÇ 91
KAYNAKLAR.....119
ÖZGEÇMİŞ 127

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 2. 1: Elektromanyetik dalgayı oluşturan manyetik alan ve elektrik alan [35] 7

Şekil 2. 2: Elektromanyetik spektrumda yer alan dalgalara ait frekans ve dalga boyları [36]. 8

Şekil 2. 3: Nükleer tabloda yer alan çekirdeklerin sahip oldukları bozunum tiplerinin genel dağılımı [38] 10

Şekil 2. 4: Yaygın olarak kullanılan radyoaktif kaynaklar olan Co-60 (a), Cs-137 (b), I-131 (c) ve Tc-99m (d)'ye ait bozunum şemaları [38] 11

Şekil 2. 5: Fotoelektrik olay 16

Şekil 2. 6: Compton olayı 18

Şekil 2. 7: Çift oluşum olayı 20

Şekil 2. 8: Fotonların madde ile etkileşim olaylarının enerjiye bağlı değişim grafiği 20

Şekil 2. 10: İyonize radyasyonun DNA üzerine doğrudan ve dolaylı yoldan etkileşimi 23

Şekil 2. 11: PbO bileşiğine ait enerjiye bağlı etkileşim türüne göre zayıflatma katsayısı [48] 30

Şekil 2. 12: WO_3 bileşiğine ait enerjiye bağlı etkileşim türüne göre zayıflatma katsayısı [48] 31

Şekil 2. 13: Bi_2O_3 bileşiğine ait enerjiye bağlı etkileşim türüne göre zayıflatma katsayısı [48] 31

Şekil 2. 14: Dar demet ışın geometrisi 32

Şekil 2. 15: Kristal yapıda yer alan örgü ve baz 36

Şekil 2. 16: Birim hücre türleri : (a) Primitif birim hücre , (b) Konvansiyonel birim hücre 37

Şekil 2. 17: Birim hacim türleri: (a) basit kübik, (b) hacim merkezli kübik ve (c) yüzey merkezli kübik [53] 42

Şekil 3. 1: Materials Project sistemi [19] 45

Şekil 3. 2: Nötron ve malzeme içerisinde izlediği fizyon reaksiyonu 51

Şekil 3. 3: MCNP Input dosyası genel yapısı 53

Şekil 3. 4: Yüzeyleri gösterilen küp.....53

Şekil 3. 5: 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....64

Şekil 3. 6: 8,37 g/cm^3 yoğunluğa 88.53 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu $P4_2/mmc$ uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....64

Şekil 3. 7: 8,81 g/cm^3 yoğunluğa 84.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....65

Şekil 3. 8: 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....65

Şekil 3. 9: 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3 'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....66

Şekil 3. 10: 6,98 g/cm^3 yoğunluğa 55.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu $Pm\bar{3}m$ uzay grubu ve $m\bar{3}m$ nokta gruplu kübik WO_3 'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34] 66

Şekil 3. 11: 7,11 g/cm^3 yoğunluğa 216.61 Å^3 hacme sahip olan 16 atomlu P4/ncc uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....67

Şekil 3. 12: 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....67

Şekil 3. 13: 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....68

Şekil 3. 14: 8,70 g/cm^3 yoğunluğa 355.68 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu Pccn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....68

Şekil 3. 15: 8,86 g/cm^3 yoğunluğa 174.58 Å^3 hacme sahip olan 10 atomlu $Pn\bar{3}m$ uzay grubu ve $m\bar{3}m$ nokta gruplu kübikik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34] 69

Şekil 3. 16: 8,94 g/cm^3 yoğunluğa 346.19 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu Pbcn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34].....69

Şekil 3. 17: 9,37 g/cm^3 yoğunluğa 660.56 Å^3 hacme sahip olan 40 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3,'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34] 70

Şekil 3. 18: 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34] 70

Şekil 3. 19: MCNPX kodunda oluşturulan simülasyon geometrisinin görselleştirilmesi.....71

Şekil 3. 20: MCNP4C'den alınan simülasyon geometrisine ait ekran görüntüsü.....72

Şekil 3. 21: %50 oranda yoğunluğu 2,3 g/cm^3 olan sıradan beton ile sırasıyla %50 oranda 9,14 g/cm^3 PbO, 6,88 g/cm^3 WO_3 ve 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3 eklenmesi ile oluşan yeni malzemelere ait yoğunluk değerleri 73

Şekil 3. 22: %50 oranda yoğunluğu 1,19 g/cm^3 olan Polivilin Alkol (PVA) ile sırasıyla %50 oranda 9,14 g/cm^3 PbO, 6,88 g/cm^3 WO_3 ve 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3 eklenmesi ile oluşan yeni malzemelere ait yoğunluk değerleri 74

Şekil 3. 23: 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip PbO için kullanılan simulasyon input dosyası 74

Şekil 4. 1: PbO bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması 77

Şekil 4. 2: WO_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması.....77

Şekil 4. 3: Bi_2O_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması 78

Şekil 4. 4: PbO bileşiklerine ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması 79

Şekil 4. 5: WO_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması 79

Şekil 4. 6: Bi_2O_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması.....80

Şekil 4. 7: PbO bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması 81

Şekil 4. 8: WO_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması.....81

Şekil 4. 9: Bi_2O_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması 82

Şekil 4. 10: PbO bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması 83

Şekil 4. 11: WO_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması 83

Şekil 4. 12: Bi_2O_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması 84

Şekil 4. 13: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması 85

Şekil 4. 14: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması.....86

Şekil 4. 15: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması 86

Şekil 4. 16: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması.....87

TABLO LİSTESİ

Sayfa No

Tablo 2. 1: Bazı radyasyon türlerine ait LET değerleri [45] 22

Tablo 2. 2: Bazı deterministik değerler için yetişkinlerin eşik doz değerleri [45] 25

Tablo 2. 3: Kristal yapılar ve Bravais kafesleri [52] 38

Tablo 2. 4: Kristal yapıların birim hücrelerine ait kenar uzunlukları ve iç açıları [52].....40

Tablo 3. 1: Çalışmada yer alan tüm bileşiklerin deneysel olarak gözlenebilirlikleri [19-34].....59

Tablo 3. 2: PbO bileşiklerinin parametreleri [19-34] 60

Tablo 3. 3: WO_3 bileşiklerinin parametreleri 60

Tablo 3. 4: Bi_2O_3 bileşiklerinin parametreleri [19-34] 60

Tablo 3. 5: Kübik kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98] 61

Tablo 3. 6: Tetragonal kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98].....61

Tablo 3. 7: Ortorombik kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98] 61

Tablo 3. 8: Monoklinik kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98] 62

Tablo 3. 9: Tez çalışmasında yer alan bileşiklere ait Wyckoff pozisyonları [19-34].....62

Tablo 3. 10: Monte Carlo Simülasyonunda kullanılan malzeme tanımları 72

Tablo 4. 1: MCNPX, XCOM ve mevcut olan deneysel çalışmalar ile elde edilen doğrusal zayıflatma katsayıları ve % fark değerleri 75

Tablo 4. 2: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları 76

Tablo 4. 3: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları 76

Tablo 4. 4: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları 76

Tablo 4. 5: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait yarı değer kalınlığı değerleri.....78

Tablo 4. 6: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlığı değerleri 78

Tablo 4. 7: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlığı değerleri 78

Tablo 4. 8: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerleri 80

Tablo 4. 9: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerleri 80

Tablo 4. 10: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerleri 80

Tablo 4. 11: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerleri 82

Tablo 4. 12: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerleri 82

Tablo 4. 13: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerleri 83

Tablo 4. 14: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait doğrusal zayıflatma katsayıları 84

Tablo 4. 15: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait yarı değer kalınlığı değerleri 84

Tablo 4. 16: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait ortalama serbest yol değerleri 85

Tablo 4. 17: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait onda bir değer kalınlığı değerleri 85

Tablo 4. 18: Sıradan beton (SB) içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait LAC değerleri 87

Tablo 4. 19: SB içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait HVL değerleri 88

Tablo 4. 20: SB içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait MFP değerleri 88

Tablo 4. 21: SB içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait TVL değerleri 88

Tablo 4. 22: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait LAC değerleri 89

Tablo 4. 23: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait HVL değerleri 89

Tablo 4. 24: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait MFP değerleri 89

Tablo 4. 25: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait TVL değerleri 90

Tablo 5. 1: PbO bileşiklerine LAC değerleri ve aralarındaki %fark değerleri 93

Tablo 5. 2: PbO bileşiklerine ait HVL değerleri ve aralarındaki %fark değerleri..... 93

Tablo 5. 3: PbO bileşiklerine ait MFP değerleri ve aralarındaki %fark değerleri 94

Tablo 5. 4: PbO bileşiklerine ait TVL değerleri ve aralarındaki % fark değerleri 95

Tablo 5. 5: WO_3 bileşiklerine ait LAC değerleri ve arasındaki %fark değerleri..... 97

Tablo 5. 6: WO_3 bileşiklerine ait HVL değerleri ve arasındaki % fark değerleri 98

Tablo 5. 7: WO_3 bileşiklerine ait MFP değerleri ve arasındaki %fark değerleri..... 99

Tablo 5. 8: WO_3 bileşiklerine ait TVL değerleri ve arasındaki %fark değerleri..... 99

Tablo 5. 9: Bi_2O_3 bileşiklerine ait LAC değerleri ve arasındaki %fark değerleri 102

Tablo 5. 10: Bi_2O_3 bileşiklerine ait HVL değerleri ve arasındaki %fark değerleri 102

Tablo 5. 11: Bi_2O_3 bileşiklerine ait MFP değerleri ve arasındaki %fark değerleri 103

Tablo 5. 12: Bi_2O_3 bileşiklerine ait TVL değerleri ve arasındaki %fark değerleri..... 104

Tablo 5. 13: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin LAC değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması 106

Tablo 5. 14: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin HVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması 107

Tablo 5. 15: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin MFP değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması 108

Tablo 5. 16: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin TVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması..... 109

Tablo 5. 17: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait LAC değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması.....111

Tablo 5. 18: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait HVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması.....111

Tablo 5. 19: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait MFP değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması.....111

Tablo 5. 20: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait TVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması.....112

Tablo 5. 21: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait LAC değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması 113

Tablo 5. 22: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait HVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması 113

Tablo 5. 23: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait MFP değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması 113

Tablo 5. 24: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait TVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması 114

Tablo 5. 25: Literatürde yer alan çalışmalara ait LAC değerleri.....115

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler **Açıklama**

μ : Doğrusal Zayıflatma Katsayıları sembolü
Å : Ångström
Bi_2O_3 : Bizmut(III) oksit
Co : Kobalt
Cs : Sezyum
I : İyot
keV : kilo elektron volt
PbO : Kurşun Oksit
Tc : Teknesyum
WO_3 : Tungsten trioksit

Kısaltmalar **Açıklama**

HVL : Yarı Değer Katmanı (Half Value Layer)
LAC : Doğrusal Zayıflatma Katsayıları (Linear Attenuation Coefficient)
MCNPX : Monte Carlo N-Particle extended
MFP : Ortalama Serbest Yol (Mean Free Path)
MP : Materials Project
TVL : Onda Bir Değer Katmanı (Tenth Value Layer)

ÖZET

DOKTORA TEZİ

MALZEME YAPISININ RADYASYONDAN KORUNMADAKİ ETKİSİNİN MONTE CARLO SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Tuğba MANİCİ

İstanbul Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman : Prof. Dr. Bayram DEMİR

II. Danışman : Dr. Öğr. Üyesi Yaşar KARABUL

Yüksek doğrusal zayıflatma katsayısına sahip malzemeler, iyonize radyasyonun daha fazla etkileşim gerçekleştirip enerjisini bırakması sebebiyle daha iyi radyasyon absorbsiyonu sağlamaktadır. İyonize radyasyondan korunmak en önemli parametre olan doğrusal zayıflatma katsayısının (LAC) yoğunlukla doğru orantılı olarak artmaktadır ve bu sebeple yüksek doğrusal zayıflatma katsayısına sahip olan malzemeler radyasyon zırhlaması için daha uygun olmaktadır. Bir bileşiğe ait yoğunluğun bileşiğin kristal yapısı ile doğrudan bağlantılıdır.

Bu tez çalışmasında 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO, 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO, 8,37 g/cm^3 yoğunluğa 88.53 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu $P4_2/mmc$ uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO, 8,81 g/cm^3 yoğunluğa 84.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO, 6,98 g/cm^3 yoğunluğa 55.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu $Pm\bar{3}m$ uzay grubu ve $m\bar{3}m$ nokta gruplu kübik WO_3, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3, 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3, 7,11 g/cm^3 yoğunluğa 216.61 Å^3 hacme sahip olan 16 atomlu P4/ncc uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3, 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3, 9,37 g/cm^3 yoğunluğa

660.56 Å³ hacme sahip olan 40 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3, 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å³ hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3, 8,86 g/cm^3 yoğunluğa 174.58 Å³ hacme sahip olan 10 atomlu $Pn\bar{3}m$ uzay grubu ve $m\bar{3}m$ nokta gruplu kübik Bi_2O_3, 8,70 g/cm^3 yoğunluğa 355.68 Å³ hacme sahip olan 20 atomlu Pccn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3, 8,94 g/cm^3 yoğunluğa 346.19 Å³ hacme sahip olan 20 atomlu Pbcn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3 bileşikleri incelenmiştir. Her biri için doğrusal zayıflatma katsayıları (LAC), yarı değer kalınlıkları (HVL), ortalama serbest yol (MFP) değerleri ve onda bir değer kalınlığı (TVL) değerleri Monte Carlo Simülasyonu MCNPX kodu kullanarak 140 keV (Tc-99m), 364 keV (I-131), 662 keV (Cs-137), 1332 keV (Co-60) monoenerjetik gama kaynakları için elde edilmiş olup kristal yapısı ile zırh malzemesi etkinliği arasındaki bağlantı değerlendirilmiştir. PbO bileşikleri arasında en yüksek radyasyon tutuculuğunu ortalama %13,67 farkla 9,14 g/cm^3 yoğunluklu ortorombik PbO sağlamaktadır, Bi_2O_3 bileşikleri arasında en yüksek korumayı ortalama % 23,05 farkla 9,44 g/cm^3 yoğunluklu monoklinik Bi_2O_3 ve WO_3 bileşikleri arasında en yüksek korumayı %5,45 farkla 7,25 g/cm^3 yoğunluklu kübik WO_3 'ün sağladığı görülmüştür. Bu bileşikler birbirleri ile karşılaştırıldığında ise en yüksek radyasyon absorbsiyonunu 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan monoklinik Bi_2O_3'ün, en düşük korumayı ise 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan kübik WO_3 'ün sağladığı ve %20,67 yoğunluk farkı ile 140 keV'de %47,7844, 364 keV'de %42,2442, 662 keV'de %34,7134 ve 1332 keV'de %26,7954 LAC farkı bulunduğu sonucu elde edilmiştir.

Bileşiklerin katkı malzemesi olarak kullanıldığında ortaya çıkarabilecekleri sonuçların değerlendirilebilmesi için sıradan beton (SB) ve Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan ortorombik PbO, 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan monoklinik Bi_2O_3 ve 6,88 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan tetragonal WO_3 katkılanmıştır. LAC, HVL, MFP ve TVL değerleri MCNPX kodu kullanarak Tc-99m, 364 I-131, Cs-137, Co-60 gama kaynakları için elde edilmiş elde edilmiş olup % farklar açısından değerlendirilmiştir. Yoğunluğu 2,3 g/cm^3 olan SB içerisine eklenen bileşiklerin yeni yoğunlukları hesaplanmış olup en yüksek yoğunluk değerini 3,6988 g/cm^3 ile %50 SB-%50 9,44 g/cm^3 yoğunluklu monoklinik Bi_2O_3 bileşiği; en düşük yoğunluk değerini 3,4474 g/cm^3 ile 6,88 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan tetragonal WO_3 sağlamaktadır. 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip monoklinik Bi_2O_3 ile hazırlanan SB/Bi_2O_3 kompoziti ile 6,88 g/cm^3 WO_3 ile hazırlanan SB/WO_3 kompoziti arasında 140 keV'de %34,4557, 364 keV'de %22,3211, 662 keV'de %12,9755ve 1332 keV'de %8,7736 fark yer almaktadır. Yoğunluğu 1,19 g/cm^3 olan PVA içerisine eklenen bileşiklerin yeni yoğunlukları hesaplanmış olup en yüksek yoğunluk değerini 2,1135 g/cm^3 ile %50 PVA-%50 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan monoklinik Bi_2O_3 bileşiği; en düşük yoğunluk değerini 2,029 g/cm^3 ile 6,88 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan tetragonal WO_3 sağlamaktadır. 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip monoklinik Bi_2O_3 ile hazırlanan PVA kompozit ile 6,88 g/cm^3 WO_3 ile hazırlanan PVA kompozit arasında 140 keV'de %32,54, 364 keV'de %20,61, 662 keV'de %11,98 ve 1332 keV'de %4,93 fark yer almaktadır. Bu sonuçlar ile kristal yapının malzeme yoğunluğu üzerindeki etkisinin radyasyondan korunmada malzeme seçimini nasıl etkilediği ilişkilendirilmiştir ve özelikle fotoelektrik olayın baskın olduğu enerji değerlerinde bu etkinin önemli olduğu sonucuna ulaşılmıştır.

Ağustos 2024, 148 sayfa.

Anahtar kelimeler: Gama ışını zırhlaması, Monte Carlo Simülasyonları, Kristal Yapı, Doğrusal Zayıflatma Katsayısı, Yarı Değer Katmanı, Ortalama Serbest Yol, Onda Bir Değer Katmanı

SUMMARY

Ph.D. THESIS

INVESTIGATION OF THE EFFECT OF MATERIAL STRUCTURE ON RADIATION PROTECTION BY MONTE CARLO SIMULATION METHOD

Tuğba MANİCİ

İstanbul University

Institute of Graduate Studies in Sciences

Department of Physics

Supervisor : Prof. Dr. Bayram DEMİR

Co-Supervisor : Assist. Prof. Dr. Yaşar KARABUL

Materials with high linear attenuation coefficients facilitate better radiation absorption by enabling increased interaction and energy deposition of ionizing radiation. The linear attenuation coefficient (LAC) which is the most important parameter for protection against ionizing radiation, increases proportionally with density, making materials with high LAC more suitable for radiation shielding.

In this thesis study, compounds of orthorhombic PbO with space group $Pca2_1$ and point group mm2, density of 7.89 g/cm³ and volume of 188.00 Å³, orthorhombic PbO with space group Pbcm and point group mmm, density of 9.14 g/cm³ and volume of 162.16 Å³, tetragonal PbO with space group $P4_2/mmc$ and point group 4/mmm, density of 8.37 g/cm³ and volume of 88.53 Å³, tetragonal PbO with space group P4/nmm and point group 4/mmm, density of 8.81 g/cm³ and volume of 84.14 Å³, cubic WO_3 with space group $Pm\bar{3}m$ and point group $m\bar{3}m$, density of 6.98 g/cm³ and volume of 55.14 Å³, cubic WO_3 with space group $Im\bar{3}$ and point group $m\bar{3}$, density of 7.25 g/cm³ and volume of 424.57 Å³, tetragonal WO_3 with space group P4/nmm and point group 4/mmm, density of 6.88 g/cm³ and volume of 111.85 Å³, tetragonal WO_3 with space group P4/ncc and point group 4/mmm, density of 7.11 g/cm³ and volume of 216.61 Å³, monoclinic Bi_2O_3 with space group $P2_1/c$ and point group 2/m, density of 9.44 g/cm³ and

volume of 327.92 Å³, monoclinic Bi_2O_3 with space group $P2_1/c$ and point group 2/m, density of 9.37 g/cm³ and volume of 660.56 Å³, cubic Bi_2O_3 with space group I23 and point group 23, density of 7.30 g/cm³ and volume of 1271.50 Å³, cubic Bi_2O_3 with space group $Pn\bar{3}m$ and point group $m\bar{3}m$, density of 8.86 g/cm³ and volume of 174.58 Å³, and orthorhombic Bi_2O_3 with space group Pccn and point group mmm, density of 8.70 g/cm³ and volume of 355.68 Å³ have been investigated. For each compound, LAC, half-value layer (HVL), mean free path (MFP), and tenth value layer (TVL) values have been obtained using Monte Carlo Simulation MCNPX code for monoenergetic gamma sources at 140 keV (Tc-99m), 364 keV (I-131), 662 keV (Cs-137), and 1332 keV (Co-60). The connection between crystal structure and shielding effectiveness of the shielding material has been evaluated. Among PbO compounds, the highest radiation protection is provided by orthorhombic PbO, density of 9.14 g/cm³ and with an average 13.67% higher protection. Among Bi_2O_3 compounds, the highest protection is provided by monoclinic Bi_2O_3, density of 9.44 g/cm³ and with an average 23.05% higher protection. Among WO_3 compounds, the highest protection is provided by cubic WO_3, density of 7.25 g/cm³, with an average 5.45% higher protection. When these compounds are compared with each other, it is found that monoclinic Bi_2O_3, density of 9.44 g/cm³ and, provides the highest radiation absorption, while cubic WO_3, density of 7.25 g/cm³, provides the lowest protection. The difference in LAC is found to be 47.7844% at 140 keV, 42.2442% at 364 keV, 34.7134% at 662 keV, and 26.7954% at 1332 keV, with a density difference of 20.67%.

To evaluate the potential effects of using compounds as additives in ordinary concrete (OC) and Polyvinyl Alcohol (PVA), a composition of 50% by weight includes Orthorhombic PbO, density of 9.14 g/cm³, Monoclinic Bi_2O_3, density of 9.44 g/cm³, and Tetragonal WO_3, density of 6.88 g/cm³. The LAC, HVL, MFP and TVL values were obtained using MCNPX code for Tc-99m, I-131, Cs-137, and Co-60. These values were evaluated in terms of percentage differences. The densities of compounds added to OC with a density of 2.3 g/cm³ have been calculated. The compound with the highest density is achieved by mixing 50%OC-50% monoclinic Bi_2O_3, density of 9.44 g/cm³ resulting in a new density of 3.6988 g/cm³. The compound with the lowest density is achieved by mixing 50% OC-50% tetragonal WO_3, density of 6.88 g/cm³, resulting in a new density of 3.4474 g/cm³. There is a difference of 34.4557% at 140 keV, 22.3211% at 364 keV, 12.9755% at 662 keV, and 8.7736% at 1332 keV between the OC/Bi_2O_3 composite prepared with monoclinic Bi_2O_3 having a density of 9.44 g/cm³ and the OC/WO_3 composite prepared with tetragonal WO_3 having a density of 6.88 g/cm³. The densities of compounds added to PVA, density of 1.19 g/cm³ have been calculated. The compound with the highest density is achieved by mixing 50%PVA-50% monoclinic Bi_2O_3, density of 9.44 g/cm³ resulting in a new density of 2.1135 g/cm³. The compound with the lowest density is achieved by mixing 50%PVA-50% tetragonal WO_3, density of 6.88 g/cm³, resulting in a new density of 2.029 g/cm³.There is a difference of 32.54% at 140 keV, 20.61% at 364 keV, 11.98% at 662 keV, and 4.93% at 1332 keV between the PVA composite prepared with monoclinic Bi_2O_3, density of 9.44 g/cm³ and the PVA composite prepared with tetragonal WO_3, density of 6.88 g/cm³. These results have been correlated with the effect of crystal structure on material density concerning radiation shielding material selection, particularly emphasizing the significance of this effect at energies where the photoelectric effect predominates.

August 2024, 148 pages.

Keywords: Gamma ray shielding, Monte Carlo Simulations, Crystal Structure, Linear Attenuation Coefficient, Half-Value Layer, Mean Free Path, Tenth Value Layer

1. GİRİŞ

Gama ışınları bir ortama ihtiyaç duymadan dalga şeklinde yayımlanan radyasyonlardandır. Elektromanyetik spektrumun en düşük dalga boyuna dolayısıyla en yüksek enerjisine sahip olan ve bir radyoaktif kaynaktan yayınlanan iyonize edici gama ışınları, iyonizasyon kabiliyetleri sebebiyle karşılaştığı canlı dokuda büyük hasarlara sebep olma potansiyeline sahiptir. Bu özelliği ile belirli koşullar altında medikal alanda tanı ve tedavide sıklıkla kullanılan radyoaktif gama kaynakları bir cihaza bağlı olmaksızın sürekli olarak radyasyon yaymaları sebebiyle bulundukları alanların ya da saklı tutuldukları bölümlerin iyonize radyasyona karşı çok iyi zırhlandırılmış olması gerekmektedir [1].

Radyasyondan korunmada doz sınırlamalarının yanı sıra zaman, mesafe ve zırhlama olmak üzere 3 temel yöntem bulunmaktadır. Bu yöntemler mümkün olan en az sürede radyasyon ile etkileşimde kalmayı, radyasyon kaynağından ne kadar uzakta kalınırsa alınacak dozun mesafeye bağlı olarak üstel biçimde azaldığını ve kaynakla canlı doku arasına zırh konulması gerektiğini anlatmaktadır.

Tanı ve tedavi gibi medikal uygulamalar sırasında kaynak mesafesi ve kaynağın kullanılma zamanı optimum seçilmektedir. Bu sebeple medikal alan içerisinde tedavi gören hasta dışarısındaki insanları gereksiz doz alımından koruyacak olan radyasyondan korunma yöntemi zırhlama olmaktadır [2][3]. Gama radyasyonunun maddeye giricilik gücü oldukça yüksektir ve karşılaştığı madde ya da canlı dokuda enerjisine bağlı olarak uzun mesafelere ilerleyebilmektedir. Giricilik gücünün yüksek olması sebebiyle zırhlama için seçilecek malzemenin radyasyonu tutuculuğunun yüksek olması yani yüksek doğrusal zayıflatma katsayısına (LAC) sahip olması gerekmektedir.

İyonize olan gama ışınları bir ortama fotoelektrik olay, compton olayı ve çift oluşumu olmak üzere fotonların maddeyle etkileşim mekanizmalarıyla enerji aktararak bulunduğu ortam içerisinde soğurulmaktadır. Bu etkileşimlerin gerçekleşme olasılıkları gelen gama fotonlarının enerjisi hv ile karşılaştıkları maddenin Z atom numarasına bağlıdır ve etkileşim olasılıkları Z ye üstel olarak bağlılık göstermektedir. Fotonlar, etkileştikleri ortamın yoğunluğu ne kadar fazla ise o kadar etkili soğurulmaktadır çünkü yoğunluk birim hacim içerisinde ne kadar madde olduğunu, dolayısıyla bulunan atom yoğunluğunu anlatmaktadır. Atom yoğunluğunun artması

fotoelektrik olay, compton olayı ve çift oluşum olaylarının gerçekleşme olasılıklarında artışa sebep olmaları sebebiyle zırhlama malzemesi olarak yüksek atom numaralı dolayısıyla yüksek yoğunluğa sahip materyallerin seçilmesi oldukça önemlidir.

Kurşun, yüksek yoğunluğa sahip oluşu ve yüksek atom numarasına sahip olması dolayısıyla en sık kullanılan iyonize radyasyon zırh malzemedir. Ucuz, kolay ulaşılabilir ve işleme tabi tutulabilmesi sebebiyle yaygın olarak kullanılmasına olanak sağlamıştır. Ancak kurşun malzemenin radyasyona maruziyetinin zamanla toksik etki ortaya çıkartması kullanılmasının en büyük dezavantajıdır [4]. Bu dezavantajı ortadan kaldırabilmek için yeni malzeme arayışları sürmektedir. Hedef malzemenin yüksek doğrusal zayıflatma katsayısına sahip olması, ucuz olması kolay ulaşılabilir olması ve en önemlisi toksik etki göstermemesi gibi özelliklerde olması beklenmektedir. Yüksek atom numarası, yüksek yoğunluğa sahip olması zamanla toksik etki yaratmaması açısından bakıldığında WO_3 ile Bi_2O_3 bileşikleri dikkat çekmektedir [5].

Zırh malzemesi arayışı için yapılan bilimsel çalışmalara bakıldığında genel olarak çeşitli kompozitler üzerine çalışıldığı görülmektedir [6-10]. B.Ahmed vd.'nin [11] yaptığı çalışmada silikon içerisine tungten (W) eklenerek oluşturulan kompozitlerin radyasyondan korunma parametreleri incelenmiştir ve yapılan kompozitin yoğunluğu arttığında radyasyondan korunmada daha efektif olduğu ayrıca bu kompozitlerin eldivenler, güvenlik ayakkabıları gibi uygulamalarda kullanılabileceği sonucunu sunmuşlardır. W. Poltabtim ve arkadaşları [12] ise EPDM içerisine metal oksitler karıştırarak kurşun kadar etkili ancak toksisiteden uzak yeni kompozit denemeleri gerçekleştirmiş ve sonuçlara baktıklarında katkılanan metal yoğunluğu arttıkça radyasyondan korumada etkilerinin arttığı ve Bi_2O_3'ün en iyi etkiyi sağladığı sonucuna ulaşmışlardır.

Bunların dışında parçacık nanoteknoloijinin gelişmesi ve uygulamaların yaygınlaşması ile radyasyon zırh malzemesi oluştururken parçacıkların nano boyutta üretilip katkılanmasının malzemenin doğrusal zayıflatma katsayısını nasıl değiştirdiği ile ilgili çalışmalar deneysel olarak ve Monte Carlo simülasyonu kullanarak yapılmıştır. Yüzey alanına etkisi ve belirli bir hacim içerisinde daha yoğun bir karışım oluşturması sebebiyle katkılanan parçacık boyutunun mikro boyutlardan nanometrelere düştüğünde daha iyi bir doğrusal zayıflatma katsayısı sunduğu sonucuna ulaşılmıştır [13-16]. Ancak parçacıkların nano ve mikro boyutlarda üretilmesi maliyetli olmasının yanı sıra sabit bir parçacık boyutu elde edilmemesi, topaklanma gibi sorunlar açığa çıkartmaktadır. Ek olarak eklenecek malzemenin katkı oranının iyi hesap

edilmesi, malzemenin o boyutlarda beklenen etkiyi verip vermemesi hangi enerji aralığında daha efektif olacağı gibi sorular deneysel olarak uğraş, zaman ve maddi olanak gerektirmektedir.

Bu alanda yapılan çalışmalara bakıldığında genel yaklaşımın bir kompoziti yüksek yoğunluğa sahip başka bir bileşikle düzenli bir karışım halinde ya da nano boyutlarda karıştırılarak oluşturulması olduğu görülmektedir. Burada amaç gelen radyasyonun daha çok etkileşim yapıp enerjisini daha çok kaybetmesine sebep olmak için birim hacim içerisine daha fazla atom yerleştirilmesi ile daha yüksek yoğunluklu malzeme elde etmektir. Bu yaklaşımın yanı sıra yapılan hiçbir radyasyondan korunmada kullanılacak zırh malzemesi inceleme çalışmalarında hiçbir bileşiğin atomik düzenine dair inceleme yapılmadığı görülmektedir.

Bir kristal yapısında, 3 boyutta tekrarlanan ve yapının tüm simetrisini gösteren en küçük birime Birim Hücre denmektedir ve her bir kristal sınıfında atomların farklı düzenlenmesi ile Bravais Örgüleri adı verilen 14 farklı kristal örgüsü oluşur. Geometrilerine göre gruplandırılmış kübik, tetragonal, hegzagonal, ortorombik, rombohedral, monoklinik ve triklinik olmak üzere 7 kristal sistemi bulunmaktadır [17].

Teorik olarak atomik dolgu faktörü dikkate alındığında malzemenin kristal yapısı, yani birim hacminin içerisinde ne kadar atom yer aldığı, doğrusal zayıflatma katsayısı üzerine oldukça etkili olduğu anlaşılmaktadır. E. Halliwell vd. [18] doğrusal zayıflatma katsayısının kristal yapı ile nasıl değiştiğini inceledikleri çalışmada kristal yapı değiştirmek yerine kübik yapıya sahip bileşikleri basit kübik yapıdan hacim merkezli ve yüzey merkezli kübik yapı şeklinde değiştirip ve yoğunluk artışı ile LAC arasında bir bağlam aramışlar ve sabit hacim içerisinde atom sayısının fazla olmasının daha sıkı yapılı bir atomik birim elde ettiğini dolayısıyla daha yüksek bir LAC elde edildiği sonucunu sunmuşlardır.

Bu tez çalışmasında radyasyondan korunmada en sık kullanılan bileşikler olan PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 üzerine malzeme yapılarının radyasyondan korunadaki etkinlikleri üzerine etkisinin araştırıldığı bir simülasyon Monte Carlo Simülasyonu MCNPX kodu kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Bu bileşiklerin sahip olduğu farklı kristal yapılara ait datalar Material Project Database'inden elde edilmiştir [19-34]. Monte Carlo Simülasyonu MCNPX kodu kullanılarak yapılan çalışmada 140 keV (Tc-99m), 364 keV (I-131, 662 keV (Cs-137), 1332 keV (Co-60) olmak üzere fotonların maddeyle etkileşim mekanizmalarının Z ye bağlı etkisinin

incelenebilmesi için medikal alanda yaygın olarak kullanılan 4 farklı gama enerjileri seçilmiştir. Yapılan çalışmada sadece gama enerjisine karşı koruyuculuk incelenmiştir.

Çalışmada 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO, 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO, 8,37 g/cm^3 yoğunluğa 88.53 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu $P4_2/mmc$ uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO, 8,81 g/cm^3 yoğunluğa 84.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO, 6,98 g/cm^3 yoğunluğa 55.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu $Pm\bar{3}m$ uzay grubu ve $m\bar{3}m$ nokta gruplu kübik WO_3, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3, 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3, 7,11 g/cm3 yoğunluğa 216.61 Å^3 hacme sahip olan 16 atomlu P4/ncc uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3, 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3, 9,37 g/cm^3 yoğunluğa 660.56 Å^3 hacme sahip olan 40 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3, 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3, 8,86 g/cm^3 yoğunluğa 174.58 Å^3 hacme sahip olan 10 atomlu $Pn\bar{3}m$ uzay grubu ve $m\bar{3}m$ nokta gruplu kübik Bi_2O_3, 8,70 g/cm^3 yoğunluğa 355.68 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu Pccn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3, 8,94 g/cm^3 yoğunluğa 346.19 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu Pbcn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3 bileşikleri incelenmiş olup her biri için doğrusal zayıflatma katsayıları, yarı değer kalınlıkları (HVL) ve ortalama serbest yol (MFP) değerleri hesaplanmış olup kristal yapısı ile zırh malzemesi etkinliği arasındaki bağlantı değerlendirilmiştir.

Homojen malzeme olarak tek tek simüle edilerek incelenen bu kristal yapıların daha sonra bir katkı malzemesi olarak kullanıldığında radyasyondan korunma üzerine ne kadarlık bir pozitif etki sağladıklarının anlaşılabilmesi için her bileşiğin en sıkı ve en boşluklu atomik yapıda olan türleri sıradan beton ve Polivilin Alkol (PVA) olmak üzere 2 farklı baz malzemesi içerisine %50 - %50 oranda olacak şekilde katkılanarak yeni karışımlar oluşturulmuştur. LAC, HVL, MFP ve TVL değerleri hesaplanan bu yeni karışımların yarattıkları fark yüzdesel olarak Bölüm 5'te yer almaktadır.

Tez içerisinde yer alan Bölüm 2 ‘de tez çalışmasının dayandığı teorik bilgilerin yer aldığı genel kısımlar yer almaktadır. İyonize radyasyon ve malzeme ile etkileşim mekanizmalarının yanı sıra malzeme yapısına dair temel bilgiler bu bölümde bulunmaktadır.

Bölüm 3’ te tez çalışmasının gerçekleşme için gerekli olan dataların alındığı Material Project Database’i ve kullanılan Monte Carlo Simülasyonu ile MCNPX kodu anlatılmıştır. Buna ek olarak, çalışmada kullanılan simülasyon geometrisi ayrıntılı olarak anlatılmıştır.

Bölüm 4’te Bulgular yer almaktadır. Bulgular tez geometrisinin validasyonunun yapıldığı bir simülasyon sonucunun incelenmesi ile yapılan simülasyonlar sonucunda elde edilen doğrusal zayıflatma katsayıları, yarı değer kalınlıkları ve ortalama serbest yol değerlerini tablolar halinde gösterilmektedir ve grafikler ile sonuçların karşılaştırılması yer almaktadır.

Bölüm 5’te ise Tartışma ve Sonuç yer almaktadır. Burada Monte Carlo Simülasyonu çalışması sonucunda elde edilen bulguların fiziksel önemi, literatür katkısından ve radyasyondan korunma sistemlerine uyumundan söz edilirken mevcut literatür bilgisiyle karşılaştırılması yapılmıştır.

Bu tez çalışmasında birden fazla sayıda atomdan oluşan aynı kimyasal bileşime sahip fakat farklı kristal yapıya sahip olan polimorf malzemelerin radyasyonla etkileşimler gerçekleştirmesi sonucu radyasyon geçirgenliklerinin Monte Carlo Simülasyonu MCNPX kodu ile incelenmiştir. Literatürde ilk kez bu tez çalışmasında malzeme yapısının malzeme yoğunluğu ile ilişkisi incelenmiş olup bu yapı farkının radyasyondan korunmada malzeme seçimi üzerine etkilerinin sonuçlarını sunmaktadır.

2. GENEL KISIMLAR

Radyasyonun bir madde ile etkileşim gerçekleştirdiğinde ortaya çıkacak olan sonuçlar gelen radyasyonun cinsine, enerjisine, iyonizasyon kabiliyetine ve karşılaştığı maddeye bağlı değişiklik göstermektedir. Radyasyondan korunma çalışmaları ifadesi kullanıldığında iyonize radyasyondan bahsedilmektedir ve karşılaşılan iyonize radyasyonu bir zırh maddesi ile durdurmak yani radyasyonun bir madde içerisinde etkileşimler gerçekleştirmesi dolayısıyla enerjisini maddede bırakarak sönümlenmeni sağlamak anlaşılmaktadır. Canlı bir organizma ile karşılaşan iyonize radyasyonun ortaya çıkarabileceği biyolojik hasarların bilinmesi radyasyondan korunmayı çok önemli bir konuma getirmiştir. Radyasyonun cinsi, hangi radyasyonların madde ile nasıl bir etkileşim sergilediğinin anlaşılması ve zırh malzemesinin seçilmesinde önemli olan parametrelerin incelenmesi, doğru bir zırh malzeme seçilmesinde dolayısıyla radyasyondan korunma sağlamak için kritik öneme önemlidir. Bu bölümde tez çalışmasının dayandığı teorik bilgiler yer almaktadır.

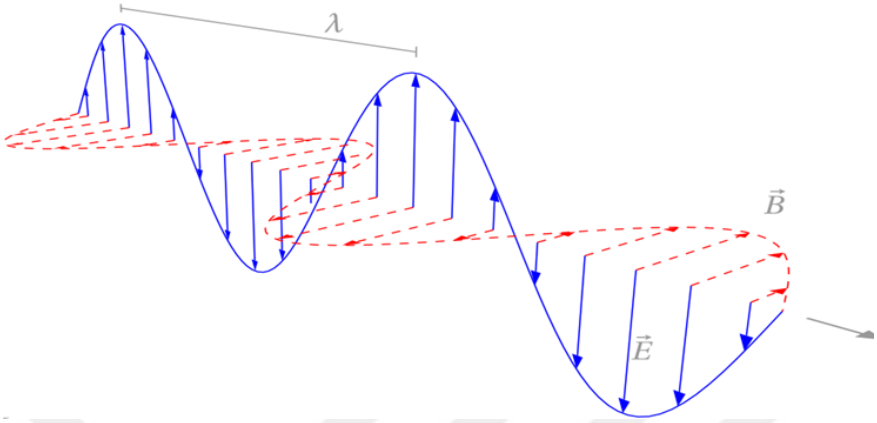
2.1. RADYASYON

Radyasyon, bir kaynaktan yayımlanan ve bir ortama ihtiyaç duymadan hareket edebilen dalga veya parçacık biçimindeki enerjidir. Dünyadaki yaşamın bir parçası olmakla beraber yeryüzündeki canlılar sürekli olarak radyasyona maruz kalmaktadır. Radyasyonların %88'lik bölümü doğal kaynaklardan gelmektedir, %12'lik yüzdesi ise yapay kaynaklar olarak da adlandırılan insan yapımı sistemlerde elde edilmektedir. Doğal radyasyon, arka plan radyasyonu olarak da adlandırılmaktadır. Radyasyonlar yayımlanma şekillerine göre ve maddeyle iyonizasyon olayı gerçekleştirebilme yetilerine göre ayrılmaktadır. Parçacık şeklinde olan radyasyonlara alfa parçacıkları, nötronlar, beta parçacıkları örnek verilebilirken dalga şeklindeki radyasyonlar elektromanyetik spektrumda sıralı halde görülebilmektedir

2.1.1. Elektromanyetik Spektrum

Yüklü bir parçacık kendi etrafında bir elektrik alana sahiptir. Bu yük aynı zamanda ivmeli olarak hareket ettiğinde hızı arttığında ya da azaldığında hızına bağlı olarak artan ya da azalan elektrik alanına ek olarak bir manyetik alan oluşturmaktadır. Şekil 2.1'de görüldüğü gibi birbirine dik şekilde oluşan bu dalgalar bir elektromanyetik dalga oluşturmaktadır.

Elektromanyetik dalgalar ile mekanik dalgalar arasındaki en temel fark elektromanyetik dalgaların yayılmak için bir ortama ihtiyaç duymamalarıdır.



Şekil 2. 1: Elektromanyetik dalgayı oluşturan manyetik alan ve elektrik alan [35]

Elektromanyetik dalgalar hem parçacık hem de dalga özelliği taşımaktadır. Elektromanyetik dalgalar foton adı verilen yüksüz enerji paketçikleri tarafından taşınmaktadır. Boşlukta ışık hızıyla hareket eden bu dalgaların enerjisi denklem 2.1'de yer aldığı şekilde hesaplanmaktadır.

$$E = h.v \tag{2.1}$$

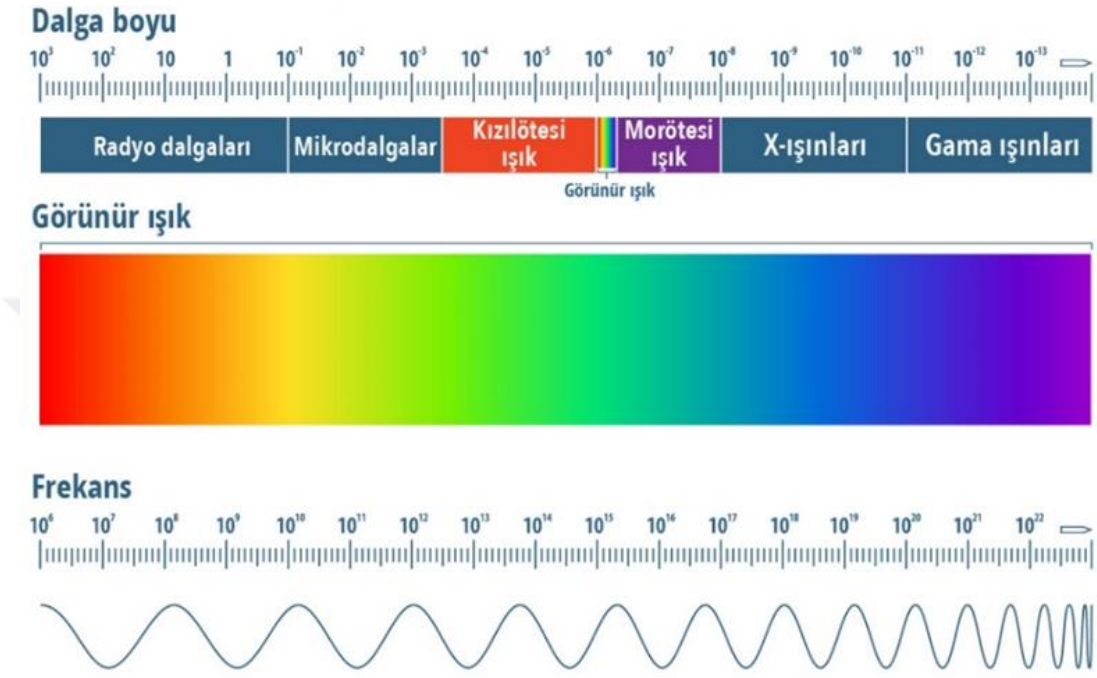
Burada E enerji, h Planck sabiti v ise frekansı temsil etmektedir. Planck sabiti 6,626 070 15 × 10^{-34} J.s 'dir. Birimi Hertz olan dalga frekansı, dalganın hızını temsil etmektedir yani 1 saniyede hareketini kaç kez tekrarladığını anlatmaktadır. Dolayısıyla denkleme bakıldığında EMD'nin enerjisi direkt olarak frekansı ile doğru orantılı olarak değişim göstermektedir. Yüksek frekansa sahip bir dalganın düşük frekansa sahip dalgaya göre daha yüksek enerjiye sahip olduğu anlamına gelmektedir.

Frekans aynı zamanda hız ve dalga boylarına göre denklem 2.2'deki gibi açıklanabilmektedir.

$$E = h.\frac{c}{\lambda} \tag{2.2}$$

Burada c ışık hızını temsil etmektedir ve değeri 2,99792458 × 10^{8} m/s olan sabit bir sayıdır. λ dalga boyunu göstermektedir ve ardışık iki dalga arasındaki mesafe anlamına gelmektedir. Denkleme bakıldığında h Planck sabiti ve c ışık hızı sabit değerlere sahip olduğu için EMD' nin enerjisi dalga boyu ile ters orantılı şekilde değişmektedir, dalga boyu arttığında enerji azalmakta ya da dalga boyu büyük olduğunda enerji düşük değerde olmaktadır.

Elektromanyetik dalgalar, spektruma dalga boylarına enerjilerine ya da frekanslarına göre sıralı şekilde dizilebilmektedir ve farklı bölgeleri bu değerlere göre adlandırılmaktadır. Şekil 2.2'de yer alan elektromanyetik spektruma bakıldığında spektrumun bir ucunda radyo dalgaları diğer ucunda ise gama ışınları yer almaktadır.



Şekil 2. 2: Elektromanyetik spektrumda yer alan dalgalara ait frekans ve dalga boyları [36].

Radyo dalgaları en büyük dalga boyu ile en düşük frekansa sahipken gama ışınları en küçük dalga boyu ile en yüksek frekansa dolayısıyla en yüksek enerjiye sahip olmaktadır. Buna göre elektromanyetik spektrum incelendiğinde radyo dalgalarından sırasıyla gama ışınlarına doğru enerji açısından inceleme yapıldığında enerjinin arttığı görülmektedir.

Enerjinin artması, elektromanyetik radyasyonun karşılaştığı maddeyle ne tür bir etkileşimde bulunabileceğini direkt olarak ilgilendirmektedir. Radyo dalgaları, mikro dalgalar, kızılötesi, görünür ışık ile mor ötesi ışınlar maddenin atomlarında doğrudan bir etki oluşturamayacak enerji aralığına sahiplerdir yani elektronların yerini değiştirmeden maddeden sıçrayabilir veya geçebilmektedir. Bu radyasyonlara iyonize olmayan radyasyonlar denmektedir ve iyonize olmayan radyasyonların zararları henüz net olarak ortaya konmamakla beraber iletişimden yemek pişirmeye, bir şeyleri görebilmeye birçok alanda fayda sağlamakta ve aktif olarak kullanılmaktadır. X-ışınları ve gama ışınları ise çok küçük dalga boylarına ve dolayısıyla çok yüksek enerji değerlerine sahiptirler. Bu enerjileri dolayısıyla karşılaştıkları maddenin atomları

ile doğrudan etkileşimde bulunabilmektedir diğer bir deyişle iyonizasyon olarak adlandırılan atomun elektronlarını yörüngelerinden sökebilme işlemini gerçekleştirebilmektedir.

2.1.2. İyonizasyon Olayı

Atom, içerisinde proton ve nötronların bulunduğu çekirdek ile çekirdek etrafında yer alan yörüngelere E_B bağlanma enerjisi ile tutunan elektronlardan oluşmaktadır. Atomların proton sayıları ile elektron sayıları birbirine eşit olmaktadır ve bu atomlar nötr atomlar olarak adlandırılmaktadır. Dışarıdan gelen EMD'nin sahip olduğu hf enerjisi eğer yeterli ise ile karşılaştığı maddenin atomlarına çarparak yörüngede yer alan atom ile karşılaşıp enerji aktarımı sonucu E_B enerjisini kırarak yörüngede yer alan elektronu söküp atom dışarısına gönderebilmektedir. Bu olay sonucunda atom bir elektron kaybettiği için pozitif yüklü hale gelmektedir. Bu olay iyonizasyon olayı olarak adlandırılmaktadır [37].

Tüm parçacık radyasyonları iyonize özellik göstermekle beraber elektromanyetik dalgalardan yalnızca x-ışınları ve gama ışınları bu özelliğe sahiptir. İyonize radyasyonlar endüstri sanayi enerji gibi alanlarda sıklıkla kullanılmakla beraber sağlık alanında da gelişen teknoloji sayesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Ancak iyonize radyasyon maddeyle etkileşip maddenin yapısında kimyasal değişim meydana getirebilmesi sebebiyle oldukça tehlikeli olabilmektedir. Dolayısıyla iyonize radyasyonun biyolojik hasarlarını bilmek ve bu hasarların oluşmasını engellemek amacıyla radyasyondan korunma çalışmaları yürütülmektedir.

2.2. RADYOAKTİVİTE

Atom, pozitif yüklü protonlar ile elektriksel olarak nötr yani yüksüz olan nötronların bulunduğu çekirdek ve etrafında yörünge olarak adlandırılan enerji seviyelerinde yer alan negatif yüklü elektronlardan oluşmaktadır. Sahip olduğu elektron sayısı proton sayısına eşit olan atomlar nötr atomlar olarak adlandırılmaktadır. Proton sayısı Z ile temsil edilmektedir, nötron sayısı ise N ile temsil edilmektedir ve yer aldıkları nükleus olarak da adlandırılan çekirdek, atomun kütlesinin büyük çoğunluğunu oluşturmaktadır.

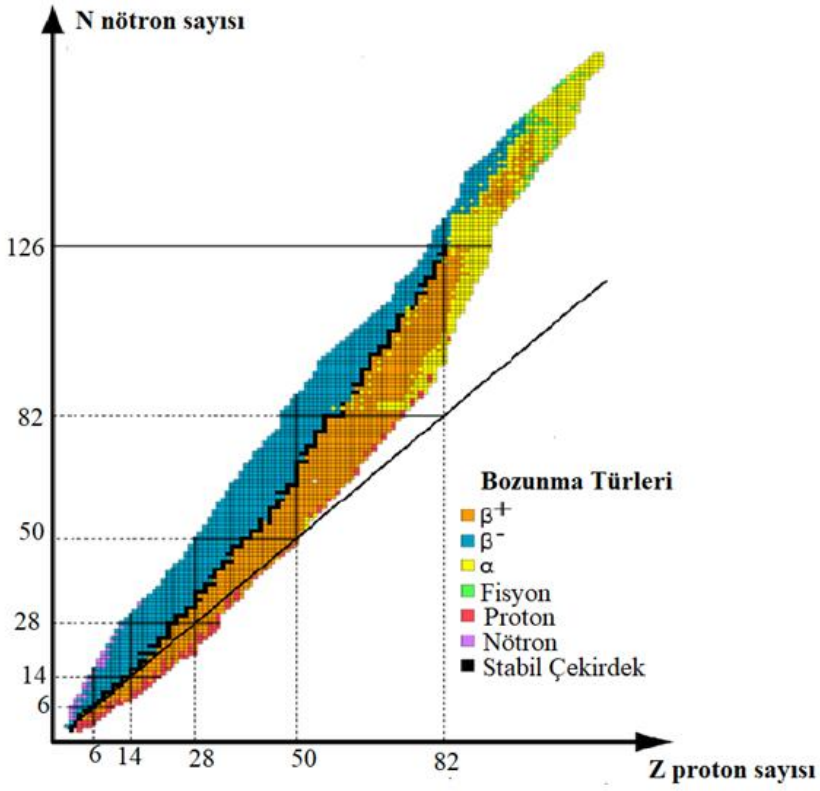
Denklem 2.3'te de görüldüğü üzere bir çekirdeğin toplam kütlesi, içerisinde yer alan protonların ve nötronların kütlesinin toplamından daha azdır. Çekirdek oluşumu sırasında oluşan radyasyon ya da kinetik enerji olarak açığa çıkan bu kütle farkı, nükleer bağlanma enerjisi olarak adlandırılmaktadır yani N tane nötron ile Z tane proton bir araya getirildiğinde açığa çıkan

enerjidir. Oluşan çekirdek yeniden protonlarına ve nötronlarına ayrılmak istenirse bağlanma enerjisi kadar bir enerjiye maruz kalmaları gerekmektedir.

$$m_{çekirdek}(Z,N) = Zm_{proton} + Nm_{nötron} - B(Z,N)/c^2 \quad (2.3)$$

Burada m_{proton} proton kütlesini, $m_{nötron}$ nötron kütlesini, $m_{çekirdek}(Z,N)$ Z tane protona ve N tane nötrona sahip olan çekirdeğinin kütlesini c ise ışık hızını temsil etmektedir.

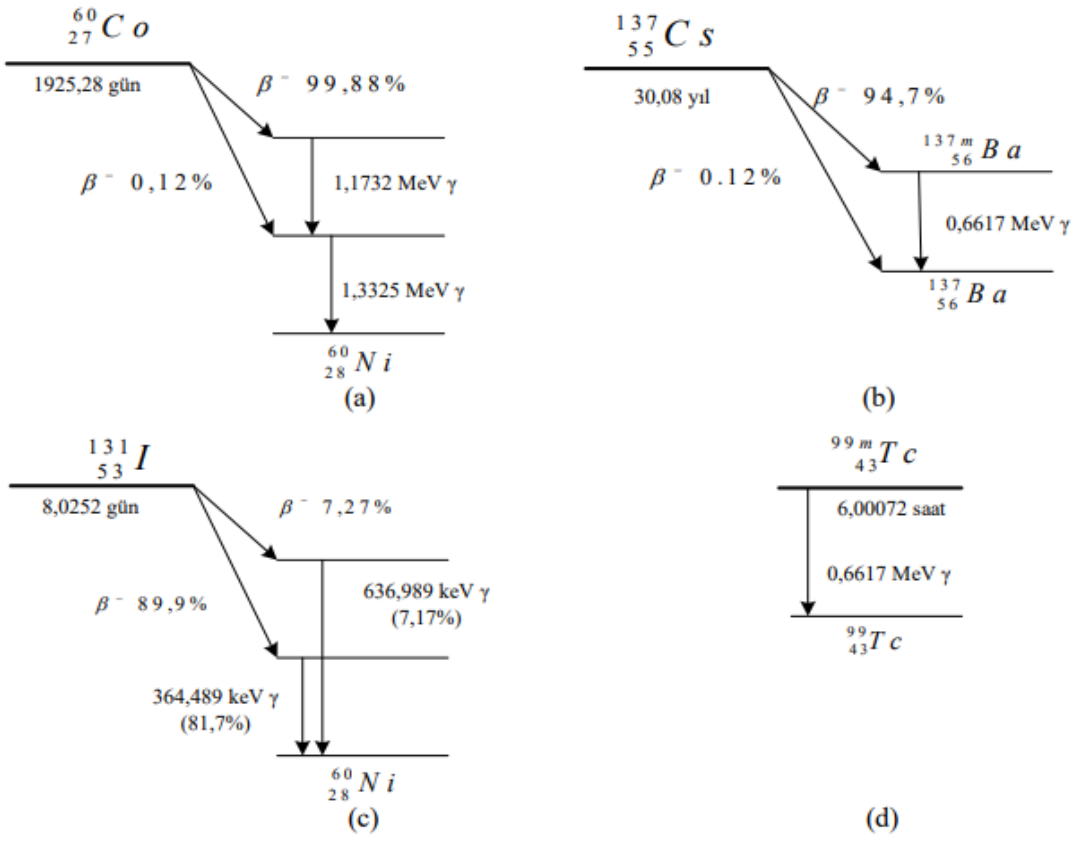
Nükleer bağlanma enerjisi ne kadar yüksek olursa çekirdek o kadar kararlı durumda olmaktadır. Bağlanma enerjisi azaldıkça çekirdek daha kararsız hale gelmektedir yani enerjetik olarak dengede bulunamaz ve denge durumuna gelme isteği içerisindedir. Radyoaktivite, kararsız halde bulunan atomların yani proton ve nötronları arasında dengesizlik bulunan atom çekirdeklerinin dışarıya enerji atması olayıdır. Böyle kararsız durumda bulunan çekirdekle radyoaktif çekirdek olarak adlandırılmaktadır. Radyoaktif çekirdekler Şekil 2.3'te yer alan nükleer kararsızlık eğrisinde yer almaktadır.



Şekil 2. 3: Nükleer tabloda yer alan çekirdeklerin sahip oldukları bozunum tiplerinin genel dağılımı [38]

Radyoaktif çekirdek stabil duruma geçebilmek amacıyla bozunmalar gerçekleştirmekte ve dışarıya enerji atmaktadır. Sahip olduğu kararsızlık derecesine bağlı olarak alfa (α), beta (β) ya da gama(γ) bozunmalarından bir ya da bir kaçını gerçekleştirip enerjisini atarak daha kararlı hale gelebilmektedir. Bu enerji kaybı ise radyasyon olarak açığa çıkmaktadır.

Proton sayısı aynı nötron sayıları farklı dolayısıyla kütle numaraları farklı olan atomlara izotop atom denildiği gibi radyoaktif özellik gösteren proton sayıları farklı nötron sayıları aynı olan atomlara da radyoizotop denmektedir. Ensdüstride, tıpta sıklıkla kullanılan bu radyoizotopların sahip olduğu bilgileri detaylı olarak anlayabilmek için bozunma şemalarını incelemek gerekmektedir. Şekil 2.4 (a)'da Kobalt-60, Şekil 2.4(b)'de Sezyum-137, Şekil 2.4 (c)'de İyot-131 ve Şekil 2.4(d)'de ise Teknesyum-99m ' ait bozunma şemaları yer almaktadır [38].



Şekil 2. 4: Yaygın olarak kullanılan radyoaktif kaynaklar olan Co-60 (a), Cs-137 (b), I-131 (c) ve Tc-99m (d)'ye ait bozunum şemaları [38]

2.2.1. Alfa Bozunumu (α)

Alfa bozunması kararsız bir çekirdekten 2 proton ve 2 nötron yani bir ^4_2He atılması olayıdır. ^4_2He çekirdeği α parçacığı olarak adlandırılmaktadır. Alfa bozunması yapan bir atomdan 2

proton atıldığı için çekirdek önceki durumuna oranla daha kararlı olan farklı bir çekirdek haline gelmektedir. Radyoaktif bozunmaya uğrayan çekirdeğe anne çekirdek denirken oluşan ürün kız çekirdek olarak adlandırılmaktadır ve bu iki ürün birbirinden farklı proton sayılarına sahip olan farklı çekirdekler olduklarından dolayı kimyasal olarak birbirinden farklı özellikler taşımaktadır. Denklem 2.4'te örnek olarak görüldüğü üzere ağır çekirdekler hızla stabil duruma geçmek istedikleri için genellikle alfa bozunması gerçekleştirmektedir ve kurşundan (Pb) daha büyük olan atomlar genellikle bu bozunma ile enerji salınımı sağlamaktadır.

$$^{210}_{84}Po = ^{206}_{82}Pb + ^{4}_{2}He \tag{2.4}$$

Alfa bozunmasına uğrayan bir çekirdeğin bağlanma enerjisindeki değişiklik, Helyum çekirdeğinin ve ürün çekirdeğin kinetik enerjisi olarak ortaya çıkmaktadır. Bu iki çekirdeğin eşit ve zıt momentuma sahip olması gerekmesi ve bağlanma enerjisi bu iki parçacığa dağıtılacağı sebebiyle kinetik enerjinin büyük çoğunluğu helyum çekirdeğine yani alfa parçacığına kalmaktadır [39,40].

Alfa parçacıkları elektrik yüklerinin fazla olan büyük ve ağır parçacıklar oldukları için hızlı bir iyonizasyon sağlamaktadırlar. Dolayısıyla ince bir kağıt ile bile durdurulabilen bu parçacıklar, canlı dokusu ile etkileşime girdiklerinde oldukça zararlı bir sonuç ortaya çıkarabilmektedir.

2.2.2. Beta Bozunumu (β)

Beta parçacıkları, radyoaktif bozunma sonucunda çekirdekten dışarı atılan negatif yüklü elektronlar (e^-) ya da pozitif yüklü pozitronlardır (e^+). Alfa bozunması gibi bir parçacık bozunması olan beta bozunmaları, çekirdekte çok fazla proton ya da çok fazla nötron bulunması durumunda gerçekleşmektedir ve bozunma sonucunda fazla durumda bulunan parçacık az olan diğer parçacığa dönüşmektedir. Bu dönüşüm, yük korunumu ve lepton korunumu yasasına uygun olarak β^- ve β^+ olmak üzere iki şekilde gerçekleşmektedir.

β^- bozunması, çekirdekte nötron fazlalığı olması sonucunda gerçekleşmedir. Bozunma sonucunda fazla olan nötron kendisini proton p, elektron e^- ve anti nötrino $\bar{\nu}$ 'ya dönüştürmektedir. β^- bozunması aşağıda yer alan denklem 2.5'teki gibidir:

$$n \rightarrow p + e + \bar{\nu} \tag{2.5}$$

Yük korunumu yasası gereğinde nötr olan nötron, pozitif yüklü bir protona dönüştüğünde onun yüküne eşit ama zıt olan elektrona ve lepton sayısı korunumu yasası gereği lepton sayısı sıfır olan nötron yine lepton sayısı 0 olan protona dönüşmektedir. Ancak yük korunumu gereği oluşan elektronun lepton sayısı -1 olduğu için onu dengeleyecek lepton sayısı 1 olan anti nötrino oluşmaktadır. Bozunma sonucunda ortaya çıkan proton çekirdek içerisinde kalmaktadır ancak elektron çekirdek dışarısına fırlatılmaktadır. Çekirdeğin proton sayısı artarken kütle numarası değişim göstermemektedir [39, 49]. Bozunma sonucunda proton sayısı değişiklik gösterdiği için bozunmaya uğrayan çekirdek farklı bir atom haline gelmektedir ve denklem 2.5'te görülmektedir.

$$^{14}_{6}C \rightarrow {}^{14}_{7}N + e^{-} + \bar{\nu} \tag{2.6}$$

Çekirdekte proton fazlalığı olduğu durumda ise β^{+} bozunması gerçekleşmedir. Burada fazla olan proton kendisini nötrona dönüştürmektedir ve β^{-} bozunmasında da olduğu gibi yük korunumu ve lepton sayısı korunumu gereği pozitif yüklü bir elektron olan pozitron ve nötrino oluşturmaktadır ve bozunma eşitliği denklem 2.7'de yer almaktadır.

$$p \rightarrow n + e^{+} + v \tag{2.7}$$

Denklem 2.8'de görüldüğü üzere β^{+} bozunması sonucunda kütle numarası değişim göstermezken, oluşan nötron çekirdek içerisinde tutulmaktadır ve proton sayısı azaldığı için bozunmaya uğrayan çekirdek farklı bir atom haline gelmektedir. Leptonlar ve β parçacıkları çekirdekte yer almazlar, bozunmalar sırasında oluşup çekirdek dışarınına atılmaktadırlar.

$$^{12}_{7}N \rightarrow {}^{12}_{6}C + e^{+} + v \tag{2.8}$$

β bozunmaları sonucunda gerçekleşen bağlanma enerjisindeki değişim, beta parçacığının kütle enerjisi ve kinetik enerjisi, nötrinonun enerjisi ve oluşan çekirdeğinin kinetik enerjisi olarak ortaya çıkmaktadır. Bozunmadan sonra çekirdekten atılan bir beta parçacığının enerjisi, enerji ve momentim korunumu gereğince üç parçacık arasında paylaşılacağı için farklı değerler alabilmektedir.

Beta parçacıklarının maddeye giricilikleri alfa parçacıklarından daha fazladır ve madde içerisinde iyonizasyona sebep olmaktadır ve doğada birçok radyoaktif çekirdek tarafından salınmaktadır.

2.2.3. Elektron Yakalaması

Fazla protona sahip olması dolayısıyla kararsız yapıda bulunan atomlar, β^+ bozunması dışında başka bir işlemle de kararlı hale gelebilmektedir. Kararsız yapıda bulunan atomun bir yörünge elektronunu çekirdeğe çekerek bir protonla birleşmesini sağlayarak nötron oluşturmaktadır. Bu olay, elektron yakalama olayı olarak adlandırılmaktadır. Bu dönüşüm sırasında oluşan nötrino çekirdek tarafından dışarı atılmaktadır. Olay sonucunda çekirdek uyarılmış seviyede kalmaktadır ve bu enerjisini gama radyasyonu ile serbest bırakıp taban duruma geçmektedir [39, 40].

Elektron yakalama olayı sonucunda atomun proton sayısı değiştiği için oluşan kız çekirdek kimyasal olarak farklı bir atomdur ve denklem 2.9'da görülmektedir.

Elektron yakalama olayı sırasında iç yörünge elektronu çekirdeğe çekildiği için yörüngede boşluk oluşmaktadır. Bu boşluk, daha yüksek bir yörünge elektronunun geçişi ile doldurulmakta ve elektronun geçiş sağladığı iki yörüngenin karakteristiği olan elektromanyetik radyasyon yani x-ışını yayınlanmaktadır.

$$ {}^{A}_{Z}X + e^{-} \rightarrow {}_{Z-1}{}^{A}Y + v + hv(x - ışını) + \gamma \tag{2.9} $$

2.2.4. Gama ışıması

Alfa ve beta bozunmalarından sonra oluşan yeni çekirdek çoğunlukla uyarılmış seviyede kalarak taban duruma geçememektedir. Böyle durumlarda çekirdek kendisinden dalga şeklindeki elektromanyetik radyasyon olan yüksüz ve kütlesi olmayan foton yayınlayarak stabil enerjiye geçiş sağlamaktadır. Bu elektromanyetik radyasyon salınımı gama ışıması olarak adlandırılmaktadır**.** İyonize radyasyon olan gama ışınları yalnızca çekirdekten yayımlanmaktadır ve dalga boyları oldukça düşüktür. Denklem 2.10'da görüldüğü üzere çekirdekten en yüksek enerjiye sahip elektromanyetik radyasyon olan gama ışınları yayımlanması sonucu proton ve nötron sayısında bir değişim gerçekleşmediği için çekirdek ışıma öncesi ve sonrası aynı kimyasal özellikleri taşımaktadır [40].

$$ {}^{12}_{6}C^{*} \rightarrow {}^{12}_{6}C + \gamma \tag{2.10} $$

Gama ışınları kütlesi olmadığı ve elektrik yükü taşımadığından, etkileşime girmeden önce malzemeler boyunca büyük mesafelere nüfuz edebilmektedirler. İyonize radyasyon olan gama

ışınların maddeye giricilik güçlerinin yüksek olması ve aynı zamanda tıpta yaygın olarak kullanılması sebebiyle gama radyasyonundan korunma oldukça önem arz etmektedir. Genellikle beton ve kurşun ile gerçekleştirilen zırhlama işlemleri için alternatif malzeme arayışları sürmektedir.

2.3. FOTONLARIN MADDE İLE ETKİLEŞİMLERİ

Fotonlar, kütlesiz yüksüz ve ışık hızında hareket eden elektromanyetik radyasyonlardır. Yüklü parçacıklar elektonlarla Coulombik etkileşimlerle madde içerisinde enerjilerini kaybetmektedir ancak fotonlar elektriksel olarak nötr oldukları için farklı etkileşim yollarıyla madde içerisinde ilerleyerek enerji kaybına uğramaktadır. Fotonlar, enerjilerine benzer olan yüklü parçacıklara kıyasla daha nüfus edici olmaktadır.

Sahip oldukları enerjilerine ve karşılaştıkları malzemenin atom numarasına bağlı olarak, fotonlar bir bütün olarak bir soğurucu atomla, bir soğurucu atomun çekirdeğiyle veya soğurucu atomun yörünge elektronuyla etkileşime girebilmektedir. Belirli bir etkileşimin meydana gelme olasılığı, foton enerjisinin yanı sıra soğurucunun yoğunluğuna ve atom numarasına bağlıdır ve genellikle bir etkileşim kesiti şeklinde ifade edilir [40].

2.3.1. Rayleigh Saçılması

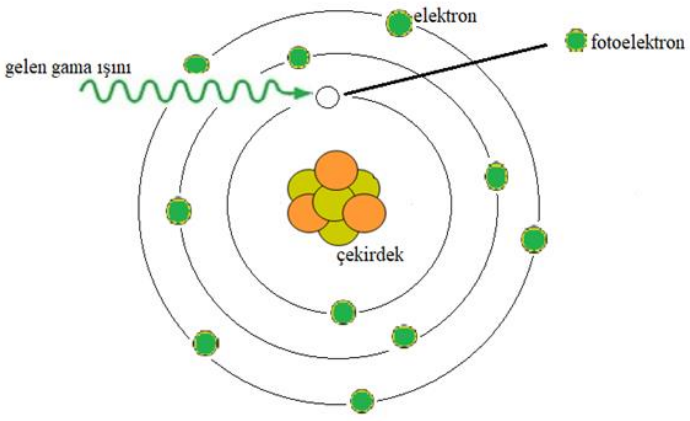
hv enerjisine sahip olan bir foton ile karşılaşılan malzemenin atomu ile gerçekleşen etkileşim türüdür. Rayleigh saçılmasında iyonizasyon olayından söz edilemez. Burada gerçekleşen olay atomun tüm yörünge elektronlarının hep birlikte gelen fotonu saçmasıdır ve bu olaya aynı zamanda koherent saçılma da denilmektedir. Yüksek atom numarasına sahip elementler ile 10 keV'den daha düşük enerjiye sahip fotonlar arasında gerçekleşebilmektedir. Foton ile elektronları arasında net bir enerji aktarımı olamamakla beraber gelen foton küçük bir saçılma açısı ile yeniden yönlendirilmektedir. Foton enerjisi azaldıkça saçılma açısında artış gerçekleşmektedir.

Atomik Rayleigh atenüasyon katsayısı ${}_a\sigma_R$ gelen foton enerjisi hv'nin karesi ($\frac{1}{hv^2}$) ile ters orantılı şekilde değişim göstermektedir. Aynı zamanda bu katsayısı Z^2 ile bağlantılıdır. Buradan görüleceği üzere enerjinin artması ile katsayıda bir azalma, atom numarası arttığında yani daha ağır çekirdeklerle karşılaştığında ise katsayıda bir artış bulunmaktadır [39,41].

Rayleigh saçılmasının toplam atenuasyon katsayısı üzere katkısı oldukça düşüktür. Bunun yanı sıra tıpta radyasyon dozimetrisinde etkisi olmamasına rağmen, tıbbi tanı işlemleri sırasında görüntülerdeki kontrast üzerinde olumsuz etkiler bırakabilmektedir bu sebeple radyolojik görüntülemede önemlidir.

2.3.2. Fotoelektrik Olay

Enerjisi hv olan bir fotonun madde ile karşılaştığında o maddenin atomuna ait bağlı bir elektronla geçirdiği etkileşimdir. Olay sonucunda fotonun kendisi tüm enerjisini bağlı olan elektrona aktarır ve elektrona kinetik enerjisi kazandırır. Tüm enerjisini elektrona kinetik enerji kazandırmak için harcayan foton olay sonucunda kaybolmaktadır. Şekil 2.5'de görüldüğü üzere kinetik enerji kazanıp atomdan kopan elektrona fotoelektron adı verilmektedir ve kazandığı enerji ile madde ortamı içerisinde diğer molekülleri iyonize edebilmektedir. Bağlanma enerjisi ile gelen foton enerjileri arasında $E_b > hv$ durumu söz konusu olduğunda fotoelektrik olay gerçekleşmesi söz konusu değildir. Elektron koparılamadığı için iyonizasyon olayı gerçekleşmemektedir. Gelen foton enerjisi hv, bağlanma enerjisi E_b'ye yaklaştıkça fotoelektrik etki gerçekleşme ihtimalinde bir artış meydana gelmektedir ancak $E_b = hv$ olduğunda fotoelektrik etki oluşum olasılığında ani bir düşüş meydana gelmektedir ve buna absorbsiyon eşiği denmektedir.



Şekil 2. 5: Fotoelektrik olay

Fotoelektrik etkileşimin, gelen fotonun enerjisi, etkileşime girdiği elektronun bağlanma enerjisinden biraz daha büyük olması durumunda meydana gelme ihtimali oldukça yüksektir. Yeterli enerjiye sahip fotonların en olası fotoelektron oluşturdukları kabuk elektronların en sıkı

bağlı bulunduğu K kabuğudur. Foton enerjisi $h\nu$, karşılaştığı atomun K-kabuk bağlanma enerjisi $E_b(K)'yi$ aştığında yani $h\nu \geq E_b(K)$ olduğu durumda, fotoelektrik absorpsiyonların yaklaşık %80'i soğurucunun K-kabuk elektronları ile gerçekleşmektedir. Elektron atılması sonucunda K kabuğunda oluşan boşluk daha sonra daha yüksek bir yörünge elektronu ile doldurulur ve elektronik geçiş sırasında oluşan fark enerjisi karakteristik bir foton şeklinde ya da bir Auger elektronu şeklinde açığa çıkmaktadır. Fotoelektrik olay suda ya da dokuda yaklaşık olarak 100 keV ve daha düşük bir enerjiye sahip radyasyon için en önemli olan absorpsiyon işlemidir ve karşılaştığı madde ortamının elektron yoğunluğuna göre önemli ölçüde değişim göstermektedir. Yüksek atom numaralarına sahip atomlar içeren malzemeler fotoelektrik etki nedeniyle güçlü radyasyon absorpsiyonu sağlamaktadır. Tıpta tanı işlemleri sırasında yaygın olarak kullanılan radyasyonla etkileşim türüdür.
Fotoelektrik olay sonucu açığa çıkan fotoelektronun enerjisi denklem 2.11'deki gibidir

$$E_{f.e.} = h\nu - E_b(K) \tag{2.11}$$

$E_b(K)$, elektronun K kabuğundaki bağlanma enerjisini, $E_{f.e.}$ ise fotoelektronun sahip olduğu kinetik enerjiyi temsik etmektedir. Buradan anlaşılacağı üzere fotoelektrona aktarına enerji, fotonun kendi enerjisi ile elektronun yörüngeye bağlanma enerjisi arasındaki farka eşit olmaktadır.

Fotoelektrik süreç, nispeten düşük foton enerjilerinde ve yüksek atom numarası Z'de foton etkileşiminin baskın olarak görülmektedir.τ (tau) ile sembolize edilen fotoelektrik absorpsiyon olasılığı aşağıdaki denklem 2.12'deki gibidir;

$$\tau \propto \frac{Z^n}{(h\nu)^3} \tag{2.12}$$

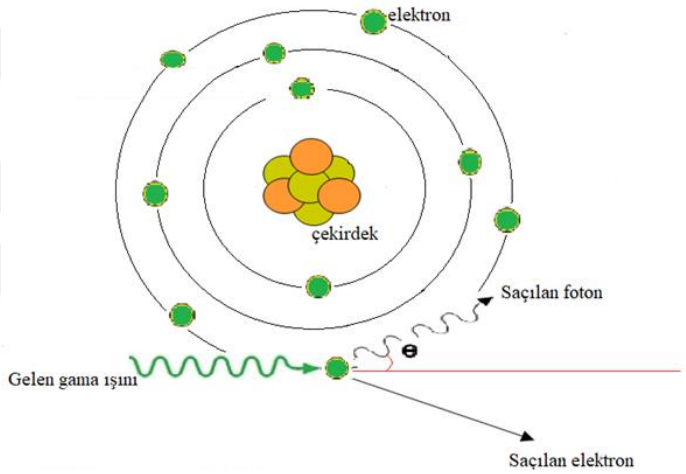
Burada atom numarasına ve enerjiye bağlılık görülmektedir. Enerji arttığında fotoelektrik etkinin gerçekleşme olasılığında üstel olarak biz azalma gerçekleşmektedir.

Atomik fotoelektrik atenuasyon katsayısı ${}_a\tau$, düşük atom numaralı absorbe edici malzemeler için Z^5, yüksek atom numaralı malzemeler için Z^4 şeklinde değişim göstermektedir. Kütle fotoelektrik atenuasyon katsayısı $\tau_m = \tau/\rho$ için ise düşük atom numaralı malzemeler için Z^4, yüksek atom numaralı malzemeler için ise Z^3 şeklindedir [39, 41].

Fotoelektrik absorpsiyon olasılığının soğurucunun atom numarasına olan bu ciddi bağımlılığı, gama ışını zırhlarında yüksek atom numarasına sahip malzemelerin (kurşun gibi) baskınlığının birincil nedeni olmaktadır.

2.3.3. Compton Olayı

Bağlanma enerjisi E_b olan orbital elektronu olarak da adlandırılan serbest elektron ile hv enerjili foton arasında, foton enerjisi bağlanma enerjisinden çok çok büyük olduğu durumda ($hv \gg E_b$) gerçekleşen madde ile etkileşim olayıdır. Şekil 2.6'de görülen Compton olayı, suda ya da dokuda 100 keV ile 10 MeV arasında baskın olarak gerçekleşen etkileşim türü olmaktadır.



Şekil 2. 6: Compton olayı

Fotoelektrik etkiden farklı olarak gelen foton, enerjisinin tümünü elektrona aktarıp sönümlenmemektedir. Enerjisi bağlanma enerjisinden çokça fazla olan foton, sahip olduğu enerjinin bir kısmını elektrona aktarmaktadır ve iyonizasyon olayı gerçekleştirmektedir ve denklem 2.13'de görülmektedir.

$$hv = hv' + E_k \tag{2.13}$$

Burada hv gelen foton enerjisi, E_k saçılan elektronun kinetik enerjisi hv' ise gelen fotonun enerjisinin birazını elektrona aktardıktan sonraki değeridir. Buraya bakıldığında toplam enerjinin korunumu yasası gereğince, recoil elektronu ile son durumdaki fotonun enerjilerinin toplamının ilk durumda gelen fotonun enerjisine eşit olduğu görülmektedir.

hv enerjili gelen foton aktarım sonucunda kalan yeni enerjisi hv' ile madde içerisinde etkileşim yapmaya devam etmektedir. Recoil elekton olarak da adlandırılan enerji aktarımı ile koparılan

elektron da benzer şekilde sahip olduğu kinetik enerjisi E_k ile etkileşim yapmayı sürdürmektedir. İki enerjinin bağıl dağılımı, gelen foton enerjisine $h\nu$ ve saçılan fotonun saçılma açısına θ bağlı olmaktadır. Gelen foton enerjisi arttıkça, saçılma açısı θ da artmaktadır. Bazı enerji değerlerinde geri saçılma olarak da atlandırılan θ değerinin 180 derece olması durumu gerçekleşebilmektedir. Bu olay sonucunca elektrona aktarılan enerji en büyük değerini alırken fotona kalan $h\nu'$ değeri en düşük değerinde olmaktadır. Saçılan foton enerjisinin açıya bağlı denklemi ile saçılan elektronun açıya bağlı enerjisi sırasıyla Denklem 2.14 ve Denklem 2.15'teki gibidir

$$h\nu' = h\nu \frac{1}{1+\varepsilon(1-\cos\theta)} \tag{2.14}$$

$$E_k = h\nu \frac{\varepsilon(1-\cos\theta)}{1+\varepsilon(1-\cos\theta)} \tag{2.15}$$

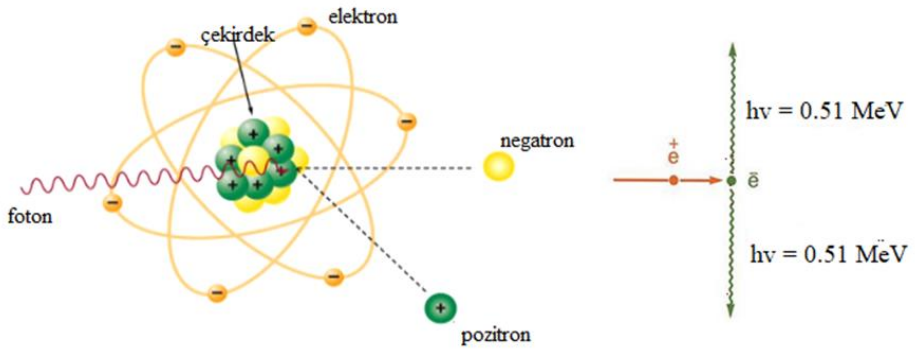
Denklemlerde yer alan $\varepsilon = \frac{h\nu}{m_e c^2}$ 'dir. $m_e c^2$ elektronun durgun enerjisini temsil etmektedir.

Compton saçılma olasılığı σ (sigma) ile sembolize edilmektedir. Elektronik Compton atenuasyon katsayısı ${}_e\sigma_C$ ile kütle Compton atenuasyon katsayısı σ_C/ρ , absorbe edici malzemenin Z atom numarasından bağımsızdır. Atomik Compton atenuasyon katsayısı ${}_a\sigma_C$, absorbe edici malzemenin Z atom numarası ile doğru orantılıdır ancak hem atomik hem de kütle Compton atenuaston katsayısı gelen foton enerjisi ile ters orantılıdır ($\frac{1}{h\nu}$) yani enerji arttıkça katsayıda azalma gerçekleşmektedir [39,41]. Radyoizotop kaynaklarına özgü gama ışını enerjileri için çoğunlukla baskın etkileşim mekanizmasıdır.

2.3.4. Çift Oluşumu

$h\nu$ enerjili bir foton ile karşılaştığı atomun çekirdeğinin Coulomb alanı ile yaptığı etkileşimdir. Bu etkileşimin gerçekleşebilmesi için gelen foton enerjisinin en az $2m_ec^2$ yani 1.022 MeV değerine sahip olması gerekmektedir. Foton, Coulomb alanı ile etkileşimi sonucunda yok olur ve enerji kütle dönüşümü ile beraber negatif yüklü elektron ve pozitif yüklü pozitron olarak ortaya çıkar. Açığa çıkan elektron malzeme içerisinde sahip olduğu enerji ile beraber iyonizasyon, Bremmstrahlung gibi etkileşimlerle enerjisini aktarırken pozitron, malzeme içerisinde yer alan serbest bir elektronla çarpışarak yok olma olayı gerçekleştirir. Bu olay sonucunda aralarında 180 derece açı bulunan 511 keV enerjisine sahip iki adet foton ortaya

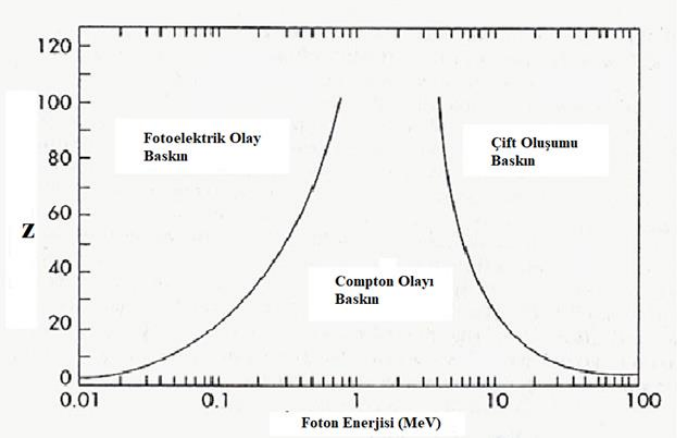
çıkar. Bu olaya çift oluşumu denmektedir Şekil 2.7'de görülmektedir.. Enerji eşik değeri olan $4m_ec^2$=2.044 MeV değerini aştığında iste üçlü üretim olayı gerçekleşebilmektedir.



Şekil 2. 7: Çift oluşum olayı

Eşik değerini aşan foton enerjileri için, gelen foton enerjisi $h\nu$ ile çift üretim olasılığı artmaktadır. Çift oluşum olasılığı κ (kappa) ile temsil edilmektedir. Atomik çift oluşum atenuasyon katsayısı ${}_a\kappa$, yaklaşık olarak Z^2 ile değişiklik göstermektedir. Kütle çift oluşum atenuasyon katsayısı $\kappa_m = \kappa/\rho$, absorbe edici malzemenin atom numarası Z ile değişiklik göstermektedir [39, 41].

Şekil 2.8'de madde ile etkileşim olaylarının enerji ve atom numarasına bağlı grafiği yer almaktadır. Buna göre enerji değişirken keskin bir geçişin olmadığı baskınlık durumunda değişim söz konusu olduğu bazı enerji değerlerinde genellikle birden fazla etkileşim gerçekleştiği ve radyasyonun madde içerisinde enerjisini bu etkileşimler ile kaybettiği anlaşılmaktadır.



Şekil 2. 8: Fotonların madde ile etkileşim olaylarının enerjiye bağlı değişim grafiği

2.4. RADYASYONUN BİYOLOJİK ETKİLERİ

Genel olarak radyasyon ve radyasyondan korunma dendiğinde anlaşılan iyonize edici olan radyasyondur. Bu radyasyon ister parçacık ister dalga formunda olsun enerjisi dolayısıyla karşılaştığı maddenin atomlarıyla etkileşim yapabilmekte ve iyonizasyon olayı gerçekleştirebilmektedir. İyonize radyasyonun canlı organizmalar üzerine etkilerinin incelendiği bilim dalı radyobiyoloji olarak adlandırılmaktadır. Bu alan radyasyonun biyolojik sistemler üzerine etkilerini moleküler, hücresel, doku ve organizma seviyelerinde anlamayı amaçlamaktadır.

Doğal radyasyon kaynaklarına ek olarak teknoloji ile beraber yapay radyasyon olarak adlandırılan cihazlarda radyasyon üretimin gerçekleşmesi ve bu radyasyonların yaygın olarak kullanılması sonrasında radyasyona maruziyetin canlılar üzerinde ortaya çıkarttığı etkiler dikkat çekmiştir. İlk olarak Henry Becquerel'in radyoaktivite keşfi ve bu süreç ile ciltte farkettiği eritem ile başlayan ve ilerleyen zamanla atom bombasının yıkıcı sonuçları gibi çok daha büyük enerjilerin kalıtsal hasar bırakması hatta ölümle sonuçlanabileceği ortaya çıktığı için, radyasyonun biyolojik etkilerinin araştırılması hayati bir öneme sahip olmuştur [42].

İyonize edici olmayan radyasyonların enerjileri madde ile karşılaştığında, o maddenin atomundan elektron sökecek enerjiye sahip olmamakta sadece enerji ile orada titreşim sağlayarak ısınmaya yol açabilmektedir. Bu sebeple çok tehlikeli olarak kabul edilmemektedir. Ancak elektromanyetik spektruma bakıldığında keskin bir geçiş olmadığı görülmektedir. Bu sebeple Mor ötesi ışınlar x ve gama ışınlarına benzer davranışlar sergileyebilmektedirler.

İyonize radyasyon tıpta tanı ve tedavide etkin olarak kullanılmaktadır. İyonize radyasyonun biyolojik etkileri radyoloji, radyoterapi ve nükleer tıp alanlarında hastalık tanı ve tedavileri için etkin olarak kullanılmasına olarak sağlamakta aynı zamanda radyasyondan korunmanın da önemini vurgulamaktadır.

İyonize radyasyon olan parçacık ve dalgaların karşılaştıkları doku ile yapacakları etkiler birbirlerinden farklıdır ve bu karşılaştıkları bir madde içerisinde ne kadar enerji bırakarak ilerlediklerini temsil eden lineer enerji transferi (LET) ile tanımlanmaktadır [43].

2.4.1. LET (Lineer Enerji Transferi)

İyonize edici radyasyonlar madde ile karşılaşıp penetre olduğunda ilerlediği derinlik boyunca fotoelektrik olay, compton olayı veya çift oluşumu gibi çeşitli etkileşim süreçleri yoluyla yavaş yavaş enerjilerini kaybetmektedir. Etkileşimler sonucu gerçekleşen enerji kaybının oranı, belirli bir madde için radyasyonun türüne, enerjisine ve maddenin yoğunluğuna bağlıdır. Birimi keV/µm olan Lineer Enerji Transferi (LET), ICRU tarafından yüklü bir parçacığın dl'lik mesafe boyunca bıraktığı enerji dE olarak tanımlananmaktadır.

İyonize edici bir radyasyon demetinin kalitesini tanımlamak için yararlı olan fiziksel nicelik olmakla beraber, radyasyonun maddede gerçekleştirebilecekleri etkileri algılamada oldukça önemli olmaktadır.

Yüksek LET değerine sahip olan alfa, beta, nötron gibi partiküler radyasyonlar kısa mesafe içerisinde yüksek iyonizasyon gerçekleştirdikleri için biyolojik etkileri ya da maddeyi bozma güçleri oldukça fazladır.

Düşük LET değerine sahip elektromanyetik radyasyon olan x ışınları ve gama ışınları enerjilerini dokuya yüksek LET değerine sahip iyonize radyasyonların yaptıkları gibi kısa mesafede bırakmamakta, dolayısıyla doku içerisinde göreli olarak daha derinlere ilerleyerek daha az zararlı etkiye neden olmaktadır [44].

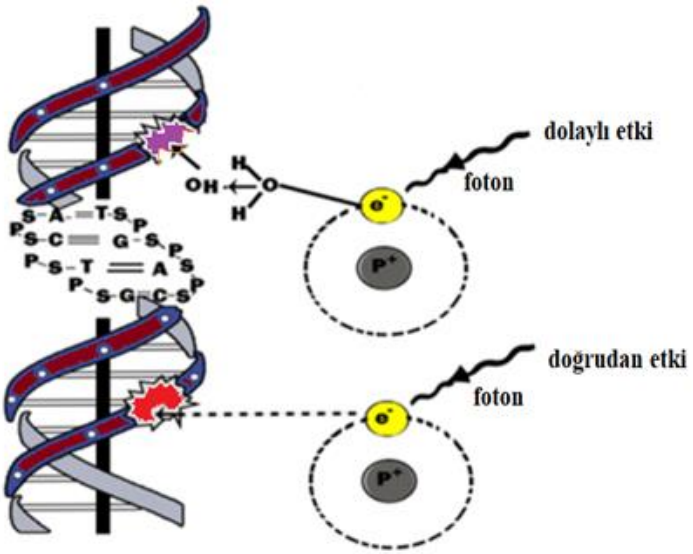
Tablo 2. 1: Bazı radyasyon türlerine ait LET değerleri [45]

Radyasyon	LET değeri
250 kVp X-ışınları	: 2 keV/µm
Kobalt-60 Gama ışınları	: 0,3 keV/µm
3 MeV X ışını	: 0,3 keV/µm
1 MeV elektron	: 0,25 keV/µm
14 MeV nötron	: 12 keV/µm
Ağır yüklü parçacıklar (alfa)	: 100–200 keV/µm
1 keV elektron	: 12.3 keV/µm
10 keV elektron	: 2.3 keV/µm

2.4.2. Radyasyonun Hücre ve DNA İle Etkileşimleri

İyonize radyasyon canlı bir doku ile karşılaştığında doğrudan ya da dolaylı yoldan etkileşim yapabilmektedir. Radyasyonun direkt etkileri, iyonize radyasyonun hücrelerin DNA'sı ve diğer makro molekülleri üzerinde doğrudan yaptığı fiziksel hasarları ifade etmektedir. Bu etkiler, radyasyonun doğrudan DNA molekülü ile etkileşime girerek iyonizasyon ve uyarılma yoluyla

moleküler hasara neden olmasını içermektedir. Bu etkileşimler sonucunda DNA'da kırıklar, baz değişiklikleri ve diğer moleküler bozulmalar meydana gelmektedir. İyonizasyon ile radyasyonun enerjisi, DNA'daki atomların elektronlarını koparak pozitif yüklü iyonlar oluşturup kimyasal bağları kırarak DNA'da fiziksel hasara yol açmaktadır. Uyarılma ile radyasyon, DNA molekülündeki elektronları daha yüksek enerji seviyelerine çıkarabilmekte ve gerçekleşen bu enerji transferi, DNA molekülünde yapısal değişikliklere neden olabilmektedir. Şekil 2.9'da iyonize radyasyonun DNA sarmalı üzerine yapabileceği dolaylı ve doğrudan etki mekanizması temsili olarak görülmektedir [44].



Şekil 2. 9: İyonize radyasyonun DNA üzerine doğrudan ve dolaylı yoldan etkileşimi

Radyasyonun direkt etkileri, hücre tarafından göreli olarak kolayca onarılabilecek olan tek zincir kırıkları, hücre için letal olan ya da onarımı zor olan DNA'nın her iki zincirinde de aynı anda meydana gelen çift zincir kısırları, mutasyonlara yol açabilecek baz değişiklikleri ve DNA'nın normal işlevini engelleyebilecek DNA zincirleri yada proteinleri arasında çapraz bağların oluşması gibi çeşitli DNA hasarlarına neden olabilmektedir.

Radyasyonun direkt etkileri daha çok yüksek LET değerine sahip olan alfa, beta, nötron gibi parçacık radyasyonları ile yüksek enerjideki gama ışınlarında görülmektedir. Maruz kalınan dozla eksponansiyel olarak değişiklik gösterek direkt etki, doz hızından bağımsızdır ve iyon yoğunluğu ile orantılıdır.

Hücrelerde %75-%80 oranlarında su molekülleri bulunmaktadır ve radyasyon indirekt etkide bol miktarda bulunan su moleküllerini iyonize eder veya uyarır. Bu etkileşimler sonucunda reaktif kimyasal türler ve serbest radikaller oluşmaktadır ve bu serbest radikaller, oldukça reaktif moleküller olup, hücresel bileşenlerle etkileşerek biyolojik hasara neden olmaktadır. Radyobiyolojik açıdan bu etkiler, radyasyonun doğrudan DNA ile etkileşime girmeden, dolaylı yollardan biyolojik hasara neden olması anlamına gelmektedir. Bu etkiler, fiziksel, ön-kimyasal ve kimyasal olaylar zincirini başlatmakta ve 1 mikrosaniyeden daha kısa sürede sonlanmaktadır. İyonize radyasyon su molekülleri ile etkileştiğinde H_2O su moleküllerini H^+ve OH^-olarak iyonlarına ayırabilmektedir. Serbest radikaller olarak adlandırılan bu iyonlar daha sonra birleşerek H^2O^2 molekülü oluşturabilirler. Oluşan hidrojen peroksit molekülü H^2O^2 toksik etki göstermektedir. İndirekt etkiler DNA da tek zincir kırıkları, çift zincir kırıkları, baz değişiklikleri, çapraz bağlanmalara sebep olurken protein hasarı, hücre zarında bozunmalar ve hücrede ölüm ya da fonksiyon kaybına neden olabilmektedir [43, 44].

İndirekt etkilerin anlaşılması, radyasyonun biyolojik sistemler üzerindeki genel etkilerini değerlendirmek ve radyasyonun tıbbi, çevresel ve endüstriyel uygulamalarında güvenliği sağlamak açısından oldukça önemlidir.

2.4.3. Deterministik Etkiler

Radyobiyolojide deterministik etkiler, radyasyonun dozuna bağlı olarak ortaya çıkan ve genellikle belirli bir eşik dozun üzerinde meydana gelen biyolojik hasarlardır. Eşik doz değerinin altında genellikle bu tür etkiler ortaya çıkmamakla birlikte bu sınır, etkilenen doku veya organın radyasyon duyarlılığına bağlı olarak değişmektedir. Bu etkiler, maruz kalınan radyasyon miktarına doğrudan bağlıdır ve doz arttıkça etkilerin şiddeti de artar bu ilişki deterministik etkilerin en temel özelliklerindendir [43,44].

Radyasyonun tek doz şeklimde alınması ile fraksiyonlar şeklinde alınması arasında farklılık bulunmaktadır. Fraksiyonlar şeklinde alınan dozun eşik değeri, tek seferde alınan dozların eşik değerinden daha yüksek değerdedir. Bazı deterministik değerler için yetişkinlerin eşik doz değerleri Tablo 2.2'de verilmiştir.

Tablo 2. 2: Bazı deterministik değerler için yetişkinlerin eşik doz değerleri [45]•

Doku ve Etki	Tek Işınlamada Toplam Doz(Sv)	Zaman Aralıklı[1] Işınlamalarda Toplam Doz Eşdeğeri (Sv)	Yıllık Doz Hızı[2] Sv/yıl	Etkinin Ortaya Çıkacağı Süre
Testisler				
Sürekli Kısırlık	6,0[3]	<6	2,0	3 hafta
Geçici Kısırlık	0,13	GD2	0,4	3-9 hafta
Overler				
Kısırlık	3[3]	6,0	>0,2	<hafta
Göz lensi[4]				
Katarakt	0,5[3]	0,5[3]	0,5[3]/yıl	>20 yıl
Kemik iliği				
Kan hücre üretiminin azalması	0,5	GD	>0,4	1 – 2 ay
Deri				
Kızarıklık	3 – 6	30	GD	1 – 4 hafta
Deri kaybı	5 – 10	35	GD	1 – 4 hafta
Doku ve Etki	Tek Işınlamada Toplam Doz (Sv)	Zaman Aralıklı[1] Işınlamalarda Toplam Doz Eşdeğeri (Sv)	Yıllık Doz Hızı[2]Sv/yıl	Etkinin Ortaya Çıkacağı Süre
Geçici saç kaybı	4	GD	GD	2 – 3 hafta
Telenjiektazi	10	40	GD	> 1 yıl

Deterministik etkiler, hücre ölümü veya hücre fonksiyonlarının kaybı gibi sonuçlarla karakterizedir ve özellikle hızlı bölünen hücrelerde daha belirgin olabilmektedir. Deterministik etkiler arasında cilt yanıkları, radyasyon hastalığı, katarakt oluşumu, sterilite ve organ hasarları gibi durumlar yer almaktadır. Cilt yanıkları radyasyona maruz kaldıktan kısa bir süre sonra akut etki olarak ortaya çıkarken katarak kronik etkiler olarak radyasyon etkileşiminden uzun bir süre sonra ortaya çıkmaktadır.

Deterministik etkiler, genellikle iş yeri güvenliği, radyasyon terapisi ve nükleer kazalar gibi durumlarda önemli bir endişe kaynağıdır. Bu etkilerin önlenmesi ve kontrol altına alınması, radyasyon güvenliği protokollerinin ve düzenlemelerinin temel amaçlarından biridir [46].

2.4.4. Stokastik Etkiler

Radyobiyolojide radyasyonun neden olduğu ve rastgele olarak ortaya çıkan biyolojik hasarlara stokastik etkiler denmektedir. Deterministik etkilerden farklı olan stokastik etkilerde bir eşik dozu bulunmamaktadır ve herhangi bir dozda meydana gelebilmektedir. Stokastik etkilerin, doz

• GD: Geçerli değil.
[1] Her bir ışınlamada yaklaşık 2 Gy
[2] Işınlamanın bir yıl içerisinde sık aralıklarla ya da yıllara dağılmış olarak yapılması sonucunda eşik dozlar.
[3] Yaklaşık olarak
[4] Bu değerler ICRP 118 tarafından 0,5 gy olarak yeniden belirlenmiştir. Zamana dağılmış ışınlamalar için de aynı değer verilmektedir. Lens opasitelerine yönelik ayrı değerler önerilmemiştir. Opasitelerin, belirli bir zaman geçmesinin ardından görme sorununa neden olacağı öngörülmüştür. Opasiteler yüksek dozlarda (> 1Gy) birkaç yıl içerisinde, katarakt ise düşük doz ve doz hızlarına maruz kalınması sonucu yıllar sonra ortaya çıkmaktadır

arttıkça ortaya çıkma olasılığı artmaktadır ancak düşük de olsa hiçbir doz tamamen risksiz değildir. Etkilerin şiddeti ise dozdan bağımsızdır.

Stokastik etkiler genellikle uzun bir dönemden sonra ortaya çıkmaktadır. Bu, radyasyona maruz kaldıktan sonra yıllar veya on yıllar sonra etkilerin görülebileceği anlamına gelmektedir. Genellikle kanser ve genetik mutasyonlar şeklinde kendini gösteren stokastik etkiler, maruz kalınan radyasyonun DNA'ya zarar vererek hücrelerin kontrolsüz bir şekilde bölünmesine neden olması sonucu ortaya çıkmaktadır. Lökemi, tiroid kanseri, akciğer kanseri, meme kanseri ve diğer kanser türleri radyasyona maruz kalma sonucu gelişebilmektedir ve kanser riski, maruz kalınan dozla artmaktadır. Kanserin ortaya çıkma zamanı ve gelişen kanser türü bireysel farklılıklara bağlı olarak değişiklik göstermektedir.

İyonize radyasyon, germ hücrelerinde yani sperm ve yumurta hücrelerinde mutasyonlara neden olabilmektedir. Bu mutasyonlar, gelecek nesillere geçebilmekte ve genetik hastalıkların görülme sıklığını artırabilmektedir. Bu etkiler, özellikle üreme çağındaki bireyler için önemli olmaktadır.

Stokastik etkiler, radyasyona maruz kalma durumlarında uzun vadeli risklerin değerlendirilmesi ve yönetilmesi açısından önem arz etmektedir. Bu etkilerin önlenmesi ve riskin azaltılması, radyasyon güvenliği ve korunma stratejilerinin geliştirilmesinde temel hedeflerden biridir. Özellikle medikal radyasyon kullanımı, nükleer enerji üretimi ve radyolojik acil durumlar gibi alanlarda stokastik etkilerin gözlemlenmesi ve kontrol altına alınması gerekmektedir [46].

2.5. RADYASYONDA KORUNMA PRENSİPLERİ

Yüksek enerji seviyelerine sahip ve hücrelerle etkileşime girerek DNA’ya zarar verebilecek türde olan iyonize radyasyona uzun süre maruz kalmak, kanser riskini artırabilmekte ve diğer sağlık sorunlarına neden olabilmektedir. Dolayısıyla, radyasyondan korunmak, bu tür sağlık risklerini azaltmak için son derece önemlidir.

İyonize radyasyon tıbbi, endüstriyel veya araştırma amaçları için çalışanlar için özellikle risklidir. Bu nedenle, bu tür çalışma ortamlarında çalışanların uygun önlemler alması ve radyasyondan korunmaları gerekmektedir. İyonize edici radyasyonun yayılması veya sızması, çevreye ve geniş topluluklara zarar verebilmekte, nükleer kazalar veya radyasyon

kaynaklarından sızan radyasyonun etkileri toplumsal ve ekolojik olarak ciddi sonuçlara yol açabilmektedir. Bu nedenle, bu tür olayların önlenmesi veya etkilerinin minimize edilmesi için korunma önlemlerinin alınması gereklidir.

Radyasyondan korunmada, zaman, mesafe ve zırhlama prensipleri önemli bir rol oynamaktadır. Bu prensipler, radyasyonun kaynaklarından, seviyelerinden ve sürelerinden kaçınmayı, uygun koruyucu ekipmanların kullanılmasını ve maruz kalma süresini minimize etmeyi içeren, çalışanların radyasyona maruziyetini minimize etmek ve sağlık risklerini azaltmak için kullanılan temel stratejilerdir [44].

2.5.1. Zaman

Zaman prensibi, radyasyona maruz kalan sürenin en aza indirilmesini anlamına gelmektedir. Radyasyona maruz kalma süresi (t) ile alınan radyasyon dozu (D) arasında doğrusal bir ilişki vardır; maruz kalma süresi arttıkça alınan radyasyon dozu da artmaktadır. Bu nedenle, radyasyonla çalışanların, mümkün olduğunca maruz kalma sürelerini kısaltmaları gerekmektedir. Zaman prensibini ifade eden denklem 2.16'de görüldüğü gibidir

$$D \propto t \tag{2.16}$$

Buna göre; radyasyonla çalışma süresi, mümkünse kısaltılmalı ve gereksiz radyasyondan kaçınılmalı, iyonize edici radyasyon kaynaklarıyla çalışanlar, işlerini mümkün olduğunca hızlı bir şekilde ve etkili bir planlama ile gerçekleştirmeli, radyasyon kaynaklarının kullanımı ve maruz kalma süresi mümkün olduğunca sınırlı tutulmalıdır. Ayrıca belirlenen radyasyon sınırlarını aşmamak için periyodik olarak radyasyon dozlarına maruz kaldıklarını kontrol etmelidir [47].

2.5.2. Mesafe

Mesafe prensibi, radyasyon kaynaklarından uzak durmanın ve maruz kalma mesafesini artırmanın önemini vurgulamaktadır. Radyasyon kaynağından uzaklaşmak, alınan radyasyon dozunu azaltmaktadır. Özellikle nükleer santraller, tıbbi radyasyon cihazları, endüstriyel radyasyon kaynakları gibi potansiyel olarak tehlikeli yerlerden uzak durmak gerekmektedir. Mesafe ile doz arasında ters kare ilişkisi söz konusu olmaktadır yani radyasyon şiddeti, kaynağa

olan mesafenin karesiyle ters orantılıdır; mesafe arttıkça radyasyonun etkisinin azaldığını anlatmaktadır. Bu ilişki aşağıda yer alan denklem 2.17'de verilmektedir.

$$I_1 d_1^2 = I_2 d_2^2 \tag{2.17}$$

Burada d_1 radyasyon kaynağı ile 1. konum arasındaki mesafe, I_1 kaynaktan d_1 mesafede yer alan 1. konumda maruz kalınan doz; d_2 radyasyon kaynağı ile 2. Konum arasındaki mesafe, I_2 ise kaynak ile d_2 mesafesinde yer alan 2. Konumda maruz kalınan doz anlamına gelmektedir.

Buna göre; etkin bir koruma sağlanması amacıyla radyasyon kaynaklarına mümkün olduğunca uzak durulmalı, radyasyon kaynaklarıyla çalışırken, işlem yapma mesafesi maksimum seviyede tutulmalıdır. Radyasyon salınımı yüksek olan cihazlar veya kaynaklar, koruyucu engellerin arkasında veya uzaktan kontrol edilebilecek mesafelerde çalıştırılmalıdır [47].

2.5.3. Zırhlama

Zırhlama prensibi, radyasyon kaynaklarını veya maruz kalma alanlarını koruyucu bariyerlerle kapatmanın ve radyasyona karşı koruyucu zırhlar kullanmanın önemini anlatmaktadır. Zırhlama, radyasyonu azaltarak veya engelleyerek maruz kalma riskini azaltmaktadır. X-ışını ve gama ışını yayan radyasyon kaynakları, uygun kalınlıkta ve kurşun, beton gibi uygun materyallerle yapılmış koruyucu zırhlarla çevrilmektedir. Gerekli olan zırh malzemesi kalınlığı monoenerjetik kaynak ile dar demet geometrisi için aşağıdaki denklem 2.18 yardımıyla hesaplanmaktadır:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \tag{2.18}$$

Burada I_0 kaynaktan gelen radyasyon miktarı, I zırh materyalinden geçtikten sonra kalan radyasyon miktarı, x zırh malzemesinin kalınlığı μ ise doğrusal zayıflatma katsayısıdır**.**

İyonize radyasyona maruz kalmadan çalışmak veya radyasyon kaynaklarıyla çalışırken uygun koruyucu ekipmanlar kullanmak çok önemlidir. Bu ekipmanlar kullanılan radyasyon kaynağına, ortama ve uygulamaya göre seçilmektedir. Radyolojik görüntülemeler sırasında çalışan teknikerler kurşun kaplı önlükler, radyasyon koruyucu gözlükler veya başlıklar gibi malzemeler kullanırken radyoterapi uygulamalarında radyasyon zırhlaması radyoterapi odasının duvarları ile sağlanmaktadır. Nükleer tıpta ise radyoaktif kaynaklar kullanıldığı için kaynağın enerjisine ve aktivitesine bağlı uygun kalınlıklarda zırhlı kaplar kullanılmaktadır [47].

Zaman, mesafe ve zırhlama prensipleri, radyasyonla çalışanların, radyasyon bulunan ortamda bulunan insanların güvenliğini ve sağlığını sağlamak için temel stratejilerdir. Bu temel prensipler dikkate alarak radyasyonla çalışma ortamlarını güvenli hale getirmektedir. Ayrıca, radyasyonla çalışma konusunda eğitimli ve bilinçli personel, bu prensipleri etkili bir şekilde uygulayabilmekte ve radyasyon risklerini minimize edebilmektedir.

Bunların yanı sıra, iyonize edici radyasyondan korunma, birçok ülkede insanları ve çevreyi radyasyonun zararlı etkilerinden korumak amacıyla yasal düzenlemeler ve yönergelerle desteklenmektedir.

Radyasyon kaynaklarıyla çalışılan alanlar iyi havalandırılmalı ve bu alanlarda çalışanlar düzenli olarak radyasyon seviyeleri kontrol edilmelidir. Tıbbi amaçlarla radyasyon uygulanan kişiler, aldıkları radyasyon dozlarını kontrol etmeli ve önerilen güvenlik sınırlarını aşmamalıdır. Radyasyonla çalışanlar, radyasyon güvenliği konusunda eğitilmelidir. Bu eğitim, radyasyonun etkileri, koruyucu ekipmanların nasıl kullanılacağı ve radyasyondan kaçınma stratejilerini içermelidir. Radyasyon seviyeleri düzenli olarak ölçülmeli ve izlenmelidir. Bu sayede olası radyasyon tehlikeleri erken tespit edilebilir ve önlemler alınabilir. Ülkeler, radyasyonla çalışma standartlarını belirleyen yasal düzenlemeler ve kurallar oluşturmalıdır. Bu standartlar, radyasyondan korunma ve güvenliği sağlamak için önemlidir.

İyonize radyasyondan korunma, hem bireysel çalışanların hem de genel toplumun sağlığı için önemli bir konudur ve bu tür koruyucu önlemler etkili bir şekilde uygulanmalıdır.

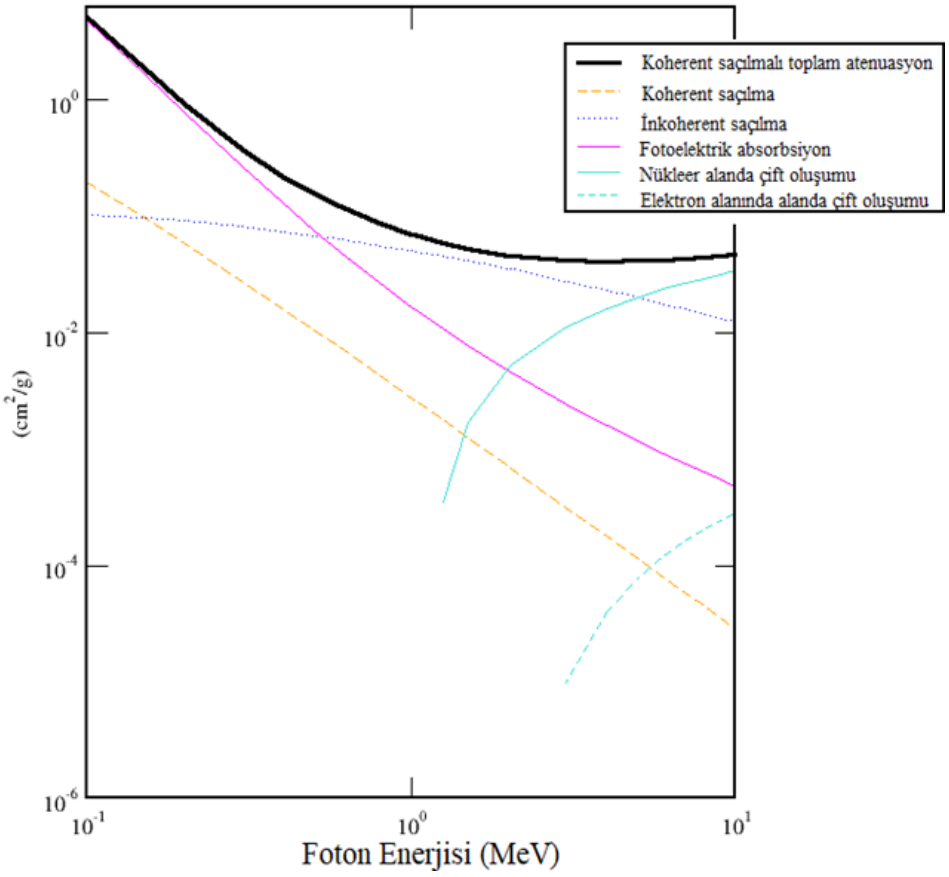
2.6. RADYASYONDAN KORUNMADA GEREKLİ ÖNEMLİ PARAMETRELER

Gama ışınlarından korunma çalışmaları sırasında sıklıkla kullanılan radyasyon kaynaklarının madde ile gerçekleştirdiği etkileşim olayları baskın olarak fotoelektrik etki, compton olayı, koherent saçılma ve çift oluşumudur. Bu etkileşimlerin meydana gelme olasılıkları tesir kesiti olarak adlandırılmaktadır. Denklem 2.19'de yer aldığı üzere σ ile temsil edilen tesir kesitinin birimi cm^2 ya da barn ile verilmektedir ($1b = 10^{24}\ cm^2$).

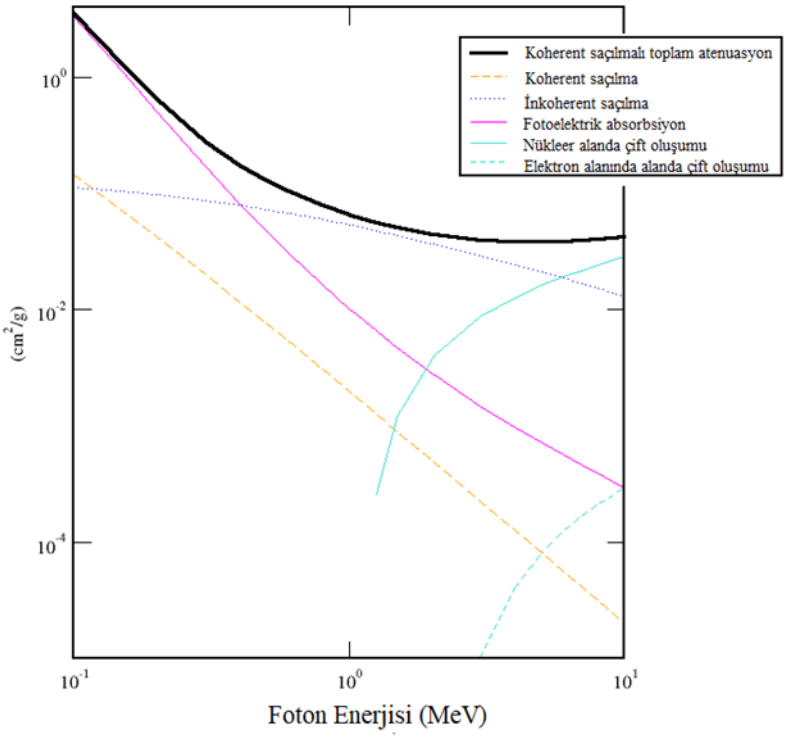
$$\sigma = \sigma_{f.e} + \sigma_{koh} + \sigma_{ink} + \sigma_{ç.o} \tag{2.19}$$

Burada $\sigma_{f.e}$ fotoelektrik olayın tesir kesiti, σ_{koh} koherent saçılmanın tesir kesiti, σ_{ink} inkoherent saçılmanın yani compton olayının tesir kesiti ve $\sigma_{ç.o}$ ise çift oluşum olayının tesir kesitini temsil etmektedir [39].

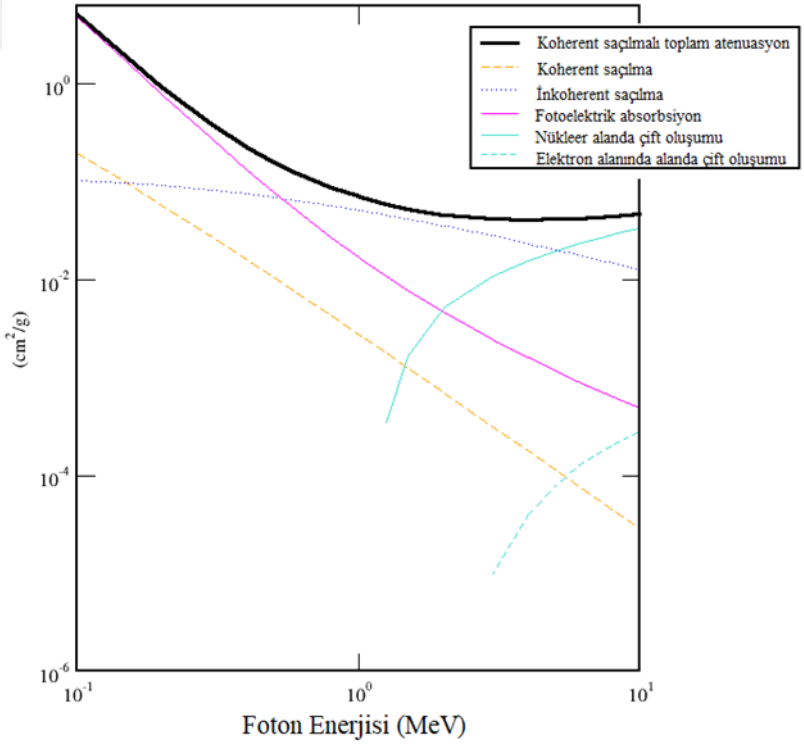
Şekil 2.10'da PbO, Şekil 2.11'de WO_3 ve Şekil 2.12'de Bi_2O_3'e ait madde ile etkileşim olaylarının enerjiye bağlı atenuasyon grafikleri yer almaktadır.



Şekil 2. 10: PbO bileşiğine ait enerjiye bağlı etkileşim türüne göre atenuasyon katsayısı [48]



Şekil 2. 11: WO_3 bileşiğine ait enerjiye bağlı etkileşim türüne göre atenuasyon katsayısı [48]



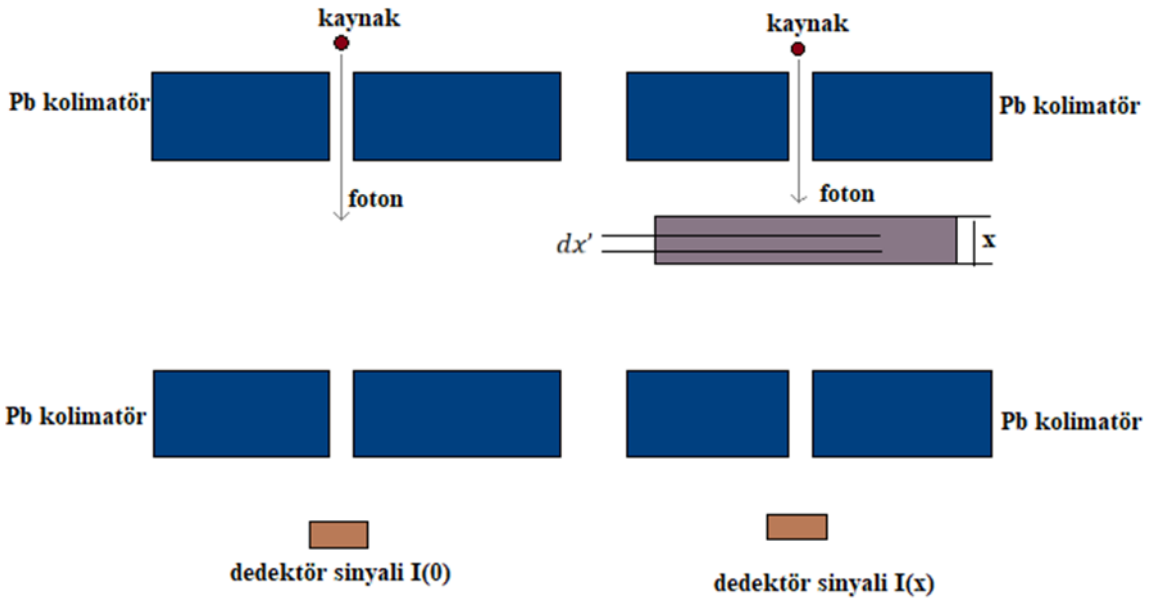
Şekil 2. 12: Bi_2O_3 bileşiğine ait enerjiye bağlı etkileşim türüne göre atenuasyon katsayısı [48]

İyonize fotonları karakterize edebilmede kullanılan en önemli parametre doğrusal zayıflatma katsayısı (LAC) dır ve μ ile temsil edilmektedir. Doğrusal zayıflatma katsayısı, fotonların maddeyle karşılaştıklarında yaptıkları etkileşimlerin her biri tarafından birim yol uzunluğu başına etkileşim olasılıklarının toplamıdır. Doğrusal zayıflatma katsayısı, fotonun sahip olduğu $h\nu$ enerjisine ve karşılaştığı malzemenin atom numarası Z'ye bağlıdır ve bir fotonun soğurucu ile etkileşime girme olasılığının birim yol uzunluğu başına olasılığı olarak tanımlanmaktadır. Tesit kesiti ile doğrusal zayıflatma katsayısı arasında denklem 2.20'deki bağlantı bulunmaktadır

$$\mu = \sigma . N \tag{2.20}$$

Burada μ doğrusal zayıflatma katsayısı, σ toplam tesir kesiti ve N ise birim hacimdeki atom sayısını temsil etmektedir. Birimi ise cm^{-1} 'dir.

Doğrusal zayıflatma katsayısı μ 'nün belirlenebilmesi için, dar bir şekilde kolime edilmiş bir mono enerjik foton kaynağı ve ile yine aynı şekilde kolime edilen detektör anlamına gelen dar ışın geometrisi tekniği kullanılmaktadır [39]. Absorbe edici malzeme, kaynak ile dedektör arasına yerleştirilmektedir. Şekil 2.13'te dar demet geometrisi görülmektedir.



Şekil 2. 13: Dar demet ışın geometrisi

Kaynak ile dedektör arasına absorbe edici malzeme konulmadan alınan toplam radyasyon $I(0)$, absorbe edici malzeme kullanıldıktan sonra detektöre ulaşan radyasyon miktarına ise $I(x)$ olarak temsil edilmektedir. x ise kullanılan absorbe edici malzemenin kalınlığıdır ve detektöre ulaşacak radyasyon miktarı malzeme kalınlığı x e bağlı değişim göstermektedir. Malzeme kalınlığı x arttıkça, kalınlık içerisinde gerçekleşecek etkileşim olasılıkları artacak dolayısıyla daha çok radyasyon enerjisini orada kaybedecek ve detektöre bu azalma sonucunda kalanlar ulaşabilecektir ve ya tamamı orada absorbe olacaktır.

Şekle bakıldığında emici içindeki bir kalınlık dx' tabakası, ışın yoğunluğunu dI azaltır ve ve yoğunluktaki kesirli azalma, $-dI/I$, doğrusal zayıflatma μ ara kat kalınlığı dx' ile orantılıdır. Bu bağıntı denklem 2.21'deki gibi yazılabilmektedir;

$$-dI/I = \mu dx' \tag{2.21}$$

Denklem 2.22'deki bağıntı 0 dan x e alındığında denklem 2.22'deki hali almaktadır

$$\int_{I(0)}^{I(x)} \frac{dI}{I} = -\int_0^x \mu dx' \tag{2.22}$$

Buradan düzenlendiğinde denklem 2.23'teki hali almaktadır

$$I(x) = I(0)e^{-\int_0^x \mu dx'} \tag{2.23}$$

Homojen bir ortam için μ sabit bir sayıdır ve monoenerjetik foton ışınları için geçerli olan standart üstel şekilde ifade edilebilmektedir. Son durumda bu ilişki denklem 2.24'teki gibidir;

$$I(x) = I(0)e^{-\mu x} \tag{2.24}$$

Şeklinde ifade edilmektedir.

X kalınlığının belirlenmesi için kullanılan özel parametreler bulunmaktadır. Bunlar yarı değer kalınlığı (HVL), ortalama serbest yol (MFP) ve Onda Bir değer kalınlığı (TVL) 'dır.

Yarı değer kalınlığı HVL, dar demet ışın yoğunluğu $I(0)$ 'ı, yarı değerine düşürecek yani 0.5 $I(0)$ yapacak homojen malzeme kalınlığı anlamına gelmektedir. $x_{1/2}$ olarak da gösterilebilen HVL'nin birimi cm'dir ve doğrusal zayıflatma katsayısı μ arasında denklem 2.25 yer alan bağıntı bulunmaktadır:

$$\mu = \frac{ln2}{x_{1/2}} = \frac{0,693}{x_{1/2}} \quad (2.25)$$

MFP, ortalama serbest yoldur ve bir fotonun malzeme içerisine girdiğinde herhangi bir etkileşim gerçekleştirmeden önce alabileceği ortalama mesafeyi ifade etmektedir. $\bar{x}$ şeklinde ifade edilmektedir ve birimi cm'dir. doğrusal zayıflatma katsayısı ile arasında denklem 2.26'deki bir bağıntı bulunmaktadır [49, 50].

$$\bar{x} = \frac{1}{\mu} \quad (2.26)$$

Onda Bir değer kalınlığı TVL ise gelen ışın yoğunluğunu $I(0)$ orijinal yoğunluğunun onda biri değerine düşüren homojen malzeme kalınlığını ifade etmektedir. Birimi cm olan TVL $x_{1/10}$ şeklinde gösterilebilir, birimi cm'dir ve doğrusal zayıflatma katsayısı ile aralarında denklem 2.27'deki bağıntı yer almaktadır [49, 50].

$$x_{1/10} = \frac{2,303}{\mu} \quad (2.27)$$

Onda Bir değer kalınlığı genellikle radyasyon tedavisi gerçekleştirilen alanların zırhlamalarının hesaplamalarında radyasyondan korunmak amacıyla kullanılmaktadır.

2.7. KRİSTAL YAPI

Kütlesi ve hacmi olan, boşlukta yer kaplayan ve eylemsizlik özelliğine sahip olan her şeye madde denmektedir. Madde, evrendeki tüm fiziksel nesnelerin temel bileşenidir ve çeşitli şekillerde bulunabilirken üç temel hali katı, sıvı ve gazdır.

Maddenin katı, sıvı ve gaz halleri, atomik düzeyde farklı düzenlenme ve hareket özelliklerine sahiptir. Katılarda atomlar veya moleküller belirli bir düzen içinde sıkıca paketlenmiştir ve genellikle kristal bir yapıya sahiptirler. Bu atomlar yerel titreşim hareketleri yapmakta, ancak yer değiştirmemektedir. Katılardaki atomlar arasında güçlü çekim kuvvetleri bulunur, bu nedenle katılar belirli bir şekil ve hacme sahiptir, sıkıştırılamazlar ve genellikle serttirler.

Sıvılarda ise atomlar veya moleküller daha düzensizdir, ancak yine de birbirlerine yakındır. Sıvılarda atomlar birbirleri üzerinden kayarak hareket edebilirler, bu hareket sıvının akışkanlığını sağlar. Atomlar arasındaki çekim kuvvetleri katılara göre daha zayıftır, ancak atomları bir arada tutmaya yetecek kadar güçlüdür. Sıvılar belirli bir hacme sahipken, belirli bir

şekle sahip değildir; içinde bulundukları kabın şeklini alırlar ve sıkıştırılamazlar, ancak akışkandırlar.

Gazlarda atomlar veya moleküller çok düzensiz ve birbirlerinden uzaktır. Atomlar yüksek hızda ve serbestçe hareket ederler, bu hareket doğrusal ve rastgele çarpışmalarla yön değiştirir. Gaz halindeki atomlar arasındaki çekim kuvvetleri ihmal edilebilir derecede zayıftır, bu nedenle gazlar kolayca genişlemekte ve yayılmaktadır. Gazlar ne belirli bir hacme ne de belirli bir şekle sahiptir; bulundukları kabın tamamını doldururlar ve sıkıştırılabilirler. Bu farklılıklar, maddenin katı, sıvı ve gaz halleri arasındaki temel farkları oluşturur ve maddenin makroskopik özelliklerini belirlemektedir.

Katılar, atomların veya moleküllerin düzenlenme şekline göre kristal ve amorf yapılı olarak ikiye ayrılmaktadır. Kristal yapılı katılarda atomlar veya moleküller, belirli ve düzenli bir geometrik dizilim içinde sıralanırlar. Bu düzen, belirli bir desen veya motifin üç boyutlu uzayda tekrarlanmasıyla oluşmaktadır. Kristal yapılar, belirli bir erime noktasına sahiptir, mekanik olarak dayanıklıdır. Elektriksel ve termal iletkenlikleri de düzenli yapılarından dolayı tutarlılık göstermektedir. Amorf yapılı katılarda ise atomlar veya moleküller düzensiz bir şekilde yerleşmiştir ve belirli bir uzun menzilli düzen bulunmamaktadır [17].

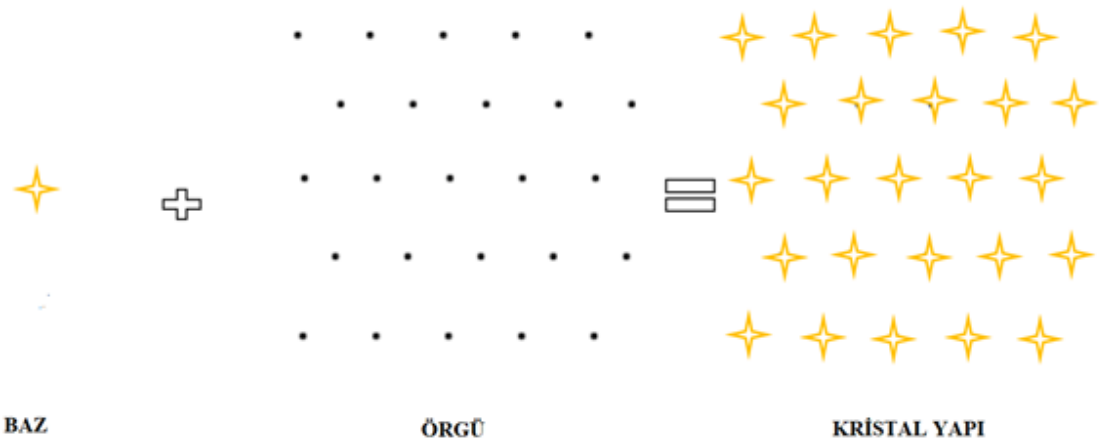
Bu iki yapı türü, katı maddelerin geniş bir yelpazede çeşitli özellikler sergilemesine neden olmakta ve farklı endüstriyel ve teknolojik uygulamalarda kullanım alanı bulmaktadır. Aynı kimyasal bileşime fakat farklı kristal yapıya sahip olan ve tek tip atomdan oluşan malzemelere allotrop denmektedir. Elmas ve Grafit allotrop malzemelerdir. Her ikisi de karbon atomundan oluşmakta ancak farklı kristal yapıda bulunmaktadırlar. Birden fazla sayıda atomdan oluşan aynı kimyasal bileşime sahip fakat farklı kristal yapıya sahip olan malzemelere polimorf denmektedir. Sıcaklık ve basınç gibi dış faktörlerde meydana gelen değişime bağlı olarak polimorfik dönüşümler meydana gelmektedir [51].

Kristal yapıların atomik düzenlemelerini ve simetrisini anlamak için geliştirilmiş bir bilim dalı olan kristallografide, hacim kafesi veya birim hücre, kristal yapıyı oluşturan tekrarlanan en küçük yapı birimidir. Birim hücre, kristalin tüm uzay dolduran yapısal ve simetrik özelliklerini içermektedir. Kristalin düzenli tekrarlanan yapısını tanımlamak için kullanılmaktadır ve üç boyutlu uzayda üç kenar uzunluğu a,b,c ve üç iç açı α, β ve γ ile belirlenmektedir. Kristaldeki atomların veya moleküllerin düzenli ve tekrar eden şekilde düzenlendiği geometrik bir

modeldir. Bir kristaldeki tüm atomların düzenini ve kristal yapılarının simetrisini anlamak için birim hücre kavramı temeldir [17].

Kristal yapıda, örgü ve baz, bir kristalin temel yapı taşlarını oluşturan kavramlardır. Örgü, üç boyutlu uzayda düzenli aralıklarla tekrarlanan noktaların topluluğunu ifade etmektedir. Bu noktalar, örgü noktaları olarak adlandırılmakta ve kristaldeki düzenin temelini oluşturmaktadır. Örgü, belirli bir geometrik şekle ve simetriye sahiptir ve kristalin genel yapısal özelliklerini tanımlamaktadır.

Baz ise, bu örgü noktalarına yerleştirilen atom, molekül veya iyon gruplarıdır. Her bir örgü noktası üzerinde belirli bir düzenle bulunan bazlar, kristalin kimyasal bileşimini ve atomik düzenini belirlemektedir. Örgü ve bazın oluşturduğu kristal yapı Şekil 2.15'te yer almaktadır



Şekil 2. 14: Kristal yapıda yer alan örgü ve baz

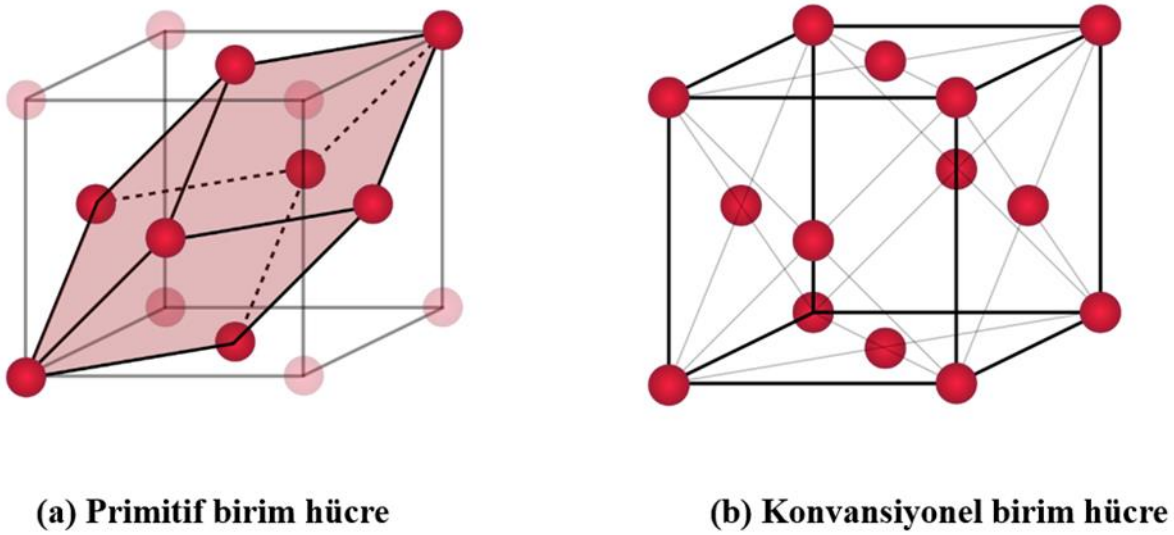
Örgü ve baz kavramları birlikte kullanılarak, kristal yapıların simetrisi, atomik düzeni ve fiziksel özellikleri detaylı bir şekilde analiz edilebilmektedir. Bu kavramlar, kristalografi, malzeme bilimi ve mühendislik alanlarında kristallerin özelliklerinin anlaşılmasında temel bir rol oynamaktadır.

Kafes noktası bir kristal yapı içindeki belirli bir pozisyondaki atom, iyon veya molekülün olası konumunu ifade etmektedir. Kristal yapı içindeki her bir kafes noktası, hacim kafesinin köşelerinde veya merkezlerinde bulunabilir ve bu noktalar, kristalin düzenli ve tekrarlanan yapısal düzenini tanımlayan noktalardır. Kafes noktaları, kristalin simetrisini ve düzenini anlamak için önemlidir ve kristallografik analizlerde kullanılmaktadır. Birim hücre, kristalin en küçük tekrarlanan birimini temsil ederken, kafes noktaları ise bu yapı içindeki atomların veya

moleküllerin konumlarını belirtmektedir. Birim hücre ilkel ve konvansiyonel olmak üzere 2 başlık altında incelenebilmektedir.

Kristal yapıda ilkel birim hücre (primitive unit cell), kristal kafesin en temel ve basit tekrarlanan birimidir. İlkel birim hücre, kafesin tüm simetri ve yapısal özelliklerini içerir ancak en az sayıda atom, iyon veya molekül içermektedir. İlkel birim hücre, bir kristalin en küçük hacimli birimidir ve bu birim, kristalin tüm yapısını oluşturmak için üç boyutlu uzayda tekrarlanmaktadır. İlkel birim hücre, sadece köşe noktalarında kafes noktalarına sahiptir ve her köşe noktası, birden fazla birim hücre tarafından paylaşılmaktadır. Aynı kristalin diğer birim hücre türlerine göre en küçük hacme sahip olan ilkel birim hücre, kristalin en basit şekilde temsil edilmesini sağlamaktadır. İlkel birim hücredeki her köşe noktasında bir atom bulunmaktadır ve bu atomlar birden fazla birim hücre arasında paylaşılması sebebiyle hücredeki toplam atom sayısı genellikle 1 atom olarak kabul edilmektedir.

Kristal yapıda konvansiyonel birim hücre (conventional unit cell), kristal sistemin simetri özelliklerini daha iyi yansıtmak ve görselleştirmek için kullanılan, ilkel birim hücreden genellikle daha büyük olan birim hücredir. Bu hücre, ilkel birim hücreden daha fazla sayıda atom, iyon veya molekül içerebilir, kristalin tam yapısını ve simetrisini göstermek için seçilmektedir. Şekil 2.15'te birim hücre türleri görülmektedir.



Şekil 2. 15: Birim hücre türleri : (a) Primitif birim hücre , (b) Konvansiyonel birim hücre

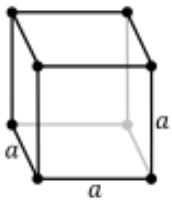
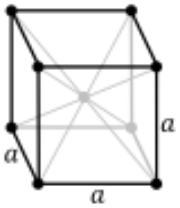
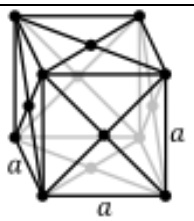
Konvansiyonel birim hücre, kristalin simetri elemanlarını ve yapısal özelliklerini daha net bir şekilde tanımlamaktadır ve bu durum kristal yapının analizini ve anlaşılmasını kolaylaştırmaktadır. X-ışını difraksiyonu ve diğer kristalografik yöntemlerle yapılan analizlerde, konvansiyonel birim hücreler kullanılarak elde edilen veriler, kristalin tam simetrisini ve içyapısını daha doğru bir şekilde temsil etmektedir [17, 51].
Birim hücreler birbirleri ardına dizilmiş olup aralarında boşluk bulunamaz. Bütün birim hücreler aynıdır ve birim hücreler yapının tüm simetrisine sahip olmaktadır. Aksi duruma sahip olan hücre birim hücre diye adlandırılamamaktadır.

2.7.1. Bravais Örgüleri (Latisleri)

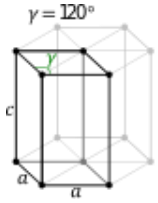
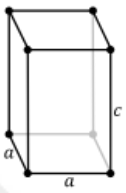
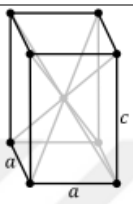
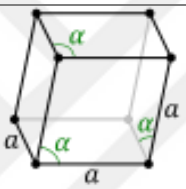
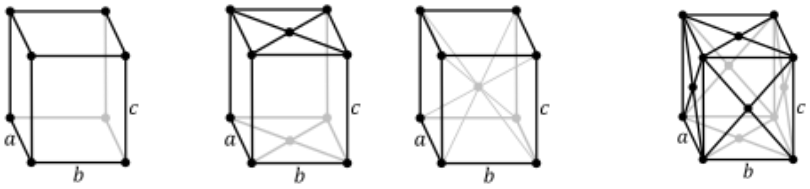
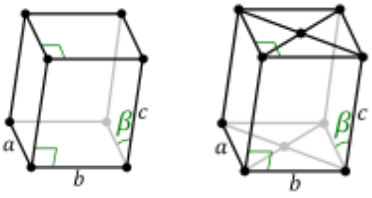
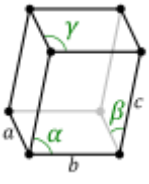
Bravais örgüleri kristal yapıların üç boyutlu düzenlemelerini tanımlamaktadır. Kristalografi alanında temel bir kavram olan Bravais örgüleri Fransız kristalograf Auguste Bravais tarafından 1848 yılında tanımlanmışlardır. Bravais örgüleri, kristal yapıların düzenli ve periyodik şekilde nasıl düzenlendiğinin anlaşılmasına olanak sağlamakla birlikte 7 kristal sistemi ve toplamda 14 Bravais örgüsü bulunmaktadır.

Bravais örgüleri, tüm maddeyi temsil eden ve kristallerin atomik düzenlemelerini tanımlayan idealize edilmiş yapılar olarak kabul edilmektedir ve basit, hacim merkezli (body-centered), yüzey merkezli (face-centered) ve taban merkezli (base-centered) olmak üzere dört temel türde sınıflandırılmaktadır. Her bir tür, birim hücre içindeki atomların konumlandırılması ve bu konumların matematiksel ilişkileriyle belirlenmektedir. Bu örgüler, kristal yapıların simetrisini ve atomların düzenlenme prensiplerini anlamada temel bir araç olarak kullanılır ve malzemelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini anlamak için kritik öneme sahiptirler. Tablo 2.3'te kristal yapılarının sahip oldukları Bravais örgüleri yer almaktadır [17].

Tablo 2. 3: Kristal yapılar ve Bravais kafesleri [52]

Kristal Sistemi	Bravais Kafesi		
	Basit	Hacim Merkezli	Yüzey Merkezli	Hacim Merkezli
Kübik			

Tablo 2. 1 (devam): Kristal yapılar ve Bravais kafesleri [52]

Kristal Sistemi	Bravais Kafesi			
	Basit	Hacim Merkezli	Yüzey Merkezli	Hacim Merkezli
Hegzagonal				
Tetragonal				
Rombohedral				
	Basit	Taban merkezli	Hacim merkezli	Yüzey merkezli
Ortorombik				
	Basit	Taban merkezli		
Monoklinik				
Triklinik				

Tablo 2. 4: Kristal yapıların birim hücrelerine ait kenar uzunlukları ve iç açıları [52]

Kristal Sistemi	Kenar Uzunlukları	İç Açılar
Kübik	a = b = c	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
Hegzagonal	a = b ≠ c	$\alpha = \beta = 90^o$ ve $\gamma = 120^o$
Tetragonal	a = b ≠ c	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
Rombohedral	a = b = c	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^o$
Ortorombik	a ≠b ≠ c	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
Monoklinik	a ≠ b ≠ c	$\alpha \neq 90^o$ ve $\beta = \gamma = 90^0$
Triklinik	a ≠b ≠ c	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^o$

2.7.2. Kristal Yapı ve Yoğunluk Bağlantısı

Birim hücredeki atom sayısı ve bu atomların düzenlenme şekli, malzemenin yoğunluğunu belirmektedir. Daha fazla atom içeren ve yüzey merkezli kübik yapılar gibi sıkı paketlenmiş yapılara sahip kristaller genellikle daha yüksek yoğunluklara sahiptir.

Kenar uzunlukları ve açılara göre belirlenen birim hücrenin hacmi da yoğunluk üzerine etkilidir. Daha küçük birim hücre hacmine sahip yapılar, aynı atom sayısına sahip olduklarında daha yüksek yoğunluklara sahip olmaktadır.

Malzemede bulunan atomların türü ve atomik kütlesi de yoğunluk açısından oldukça önemli bir parametredir. Daha ağır atomlar, birim hücrede daha yüksek bir kütleye ve dolayısıyla daha yüksek bir yoğunluğa sebep olmaktadır.

2.8.2.1. Teorik Yoğunluk

Yoğunluk ve kristal yapı arasında, kristalin birim hücresinde bulunan atom sayısı, atomların düzenlenme şekli ve birim hücre hacmi üzerinden kurulan bir bağlantı bulunmaktadır. Kristal yapı, atomların nasıl düzenlendiğini ve bu düzenlenmenin birim hücre hacmini nasıl etkilediğini belirlerken, yoğunluk, bu düzenlenmenin birim hacimdeki kütleye nasıl katkıda bulunduğunu ifade etmektedir. Dolayısıyla, kristal yapı bilgisi, malzemenin yoğunluğu hakkında önemli bilgiler sağlamaktadır. Denklem 2.27'de teorik yoğunluğun hesaplanma bağıntısı yer almaktadır

$$\rho = \frac{n.M}{N_A V_C} \tag{2.27}$$

Burada ρ teorik yoğunluk, n birim hücredeki atom sayısı, M bir atomun molar kütlesi, N_A Avogadro sayısı (yaklaşık 6.022×10^{23} atom/mol) ve V_C birim hücre hacmini temsil etmektedir.

2.7.3. Wyckoff Pozisyonları

Wyckoff pozisyonları, kristallerin içyapısındaki atomların konumlarını tanımlamak için kullanılan kristalografinin önemli bir kavramıdır. Wyckoff pozisyonları, her bir uzay grubu için belirli bir noktada ya da bir dizi eşdeğer noktalarda bulunan atomların yerlerini göstermektedir ve bir kristal yapısının simetrik özelliklerini ve atomların düzenlenmesinin anlaşılmasına yardımcı olmaktadır.

Her Wyckoff pozisyonu, belirli bir simetri grubuna ait bir dizi eşdeğer noktadan oluşmaktadır ve bu, bir atomun belirli bir pozisyonda olması halinde diğer eşdeğer noktalarda da aynı tür atomların bulunacağı anlamına gelmektedir

Her uzay grubu, atomların belirli simetri işlemlerine göre düzenlendiği farklı pozisyonlara sahiptir. Bu pozisyonlar, genellikle a, b, c, ... gibi harflerle tanımlanmaktadır ve her pozisyonun kendine özgü bir sembolü ve koordinatları bulunmaktadır. Bu koordinatlar, genellikle x, y, z değerleriyle ifade edilmekte ve simetriye bağlı olarak farklılık gösterebilmektedir.

Uzay grubunun dönme, yansıma, inversiyon gibi işlemlerini içeren simetri operasyonlarına göre belirlenmekte olan Wyckoff pozisyonları, kristal yapısının toplam hacmi üzerinde doğrudan etkili olmaktadır. Birim hücrede kaç atomun bulunduğu, atomların yerleşimi ve bu pozisyonların simetrik dağılımı, birim hücrenin hacmini ve dolayısıyla kristalin genel yoğunluğunu belirlemektedir. Kristal yoğunluğu, bir kristalin belirli bir hacimdeki toplam kütlesinin birim hacme bölünmesiyle hesaplanmaktadır. Kristal yoğunluğunu belirlemek için atomların kütleleri, birim hücre hacmi ve atomların birim hücredeki yerleşimleri önemli faktörlerdir. Atomlar belirli Wyckoff pozisyonlarına yerleştiğinde, bu pozisyonların simetrik dağılımı kristalin yoğunluğunu etkilemektedir. Genellikle daha fazla sayıda atomun birim hücrede sıkı bir şekilde paketlenmesiyle yüksek yoğunluklu kristaller oluşmaktadır. Buna göre, yüzey merkezli kübik yapıya sahip bir kristal yapıda, atomlar Wyckoff pozisyonlarına sıkı bir şekilde yerleşerek yüksek bir atomik dolgu faktörü sağlamaktadır. Bu da birim hücrenin daha dolu olmasına dolayısıyla daha yüksek yoğunluk elde edilmesine olanak tanımaktadır.

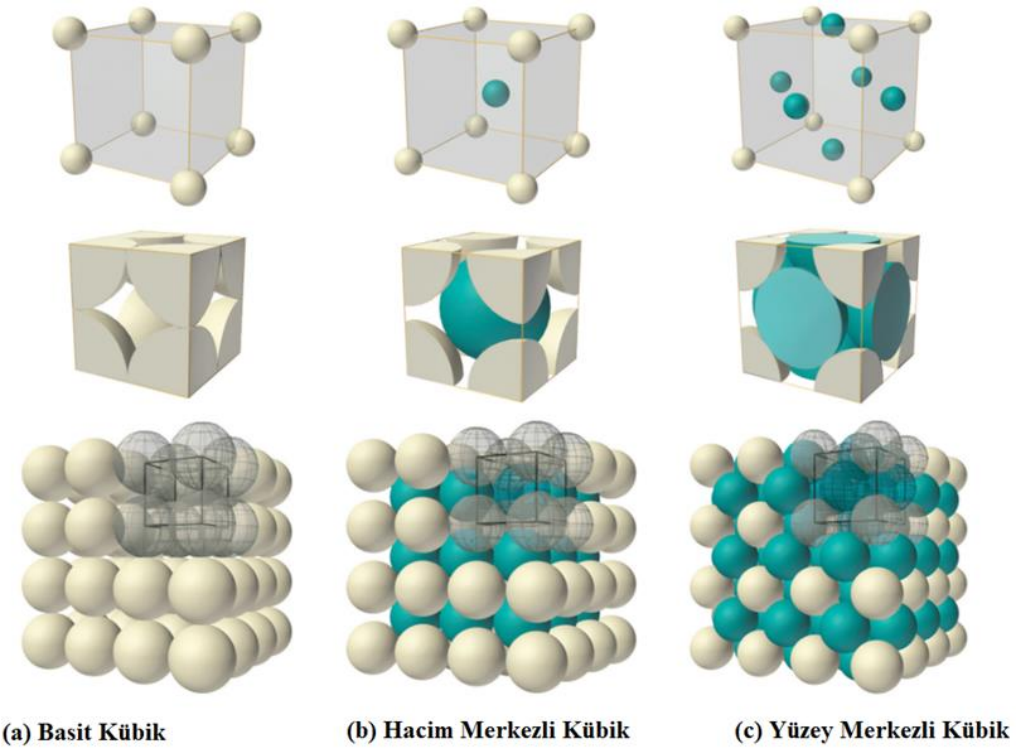
Bunların yanı sıra Wyckoff pozisyonları, kristalin mekanik, termal gibi fiziksel özelliklerini anlamada da oldukça önemlidir. Atomların düzenlenmesi ve bu düzenlenmenin hacim üzerindeki etkisi, malzemenin davranışını belirlemektedir. Bir malzemenin sertliği, termal

genleşme katsayısı ve elektriksel iletkenliği, atomların Wyckoff pozisyonlarına göre düzenlenmesiyle doğrudan ilişkilidir [51, 52].

2.7.4. Atomik Dolgu Faktörü (Atomic Packing Factor – APF)

Atomik Dolgu Faktörü (Atomic Packing Factor - APF), bir kristal yapı içerisinde bulunan atomların, kristal birim hücresinde kapladığı hacmin, toplam hücre hacmine oranıdır. Bu oran, kristal yapıların sıkılığını ve atomların nasıl paketlendiğini anlamak için kullanılmaktadır.

Bir kristal yapının ne kadar sıkı paketlendiğini gösteren APF değerinin yüksek olması, atomların daha sıkı ve verimli bir şekilde paketlendiğini ve dolayısıyla malzemenin yoğunluğunun yüksek olacağını göstermektedir. Malzemelerin mekanik, termal ve elektriksel özelliklerini anlamada kritik bir rol oynamaktadır. Yüzey merkezli kübik yapılar genellikle daha yumuşak, hacim merkezli kübik yapılar ise daha sert ve kırılgan yapıda olmaktadır.



Şekil 2. 16: Birim hacim türleri: (a) basit kübik, (b) hacim merkezli kübik ve (c) yüzey merkezli kübik [53]

APF'yi Denklem 2.28'da gösterildiği gibi hesaplamak için, birim hücre içindeki atom sayısını, atomun hacmini ve birim hücrenin hacmini bilmek gerekmektedir. Atomun hacmi, bir küre için

temel hacim denklemi ile sonuçlanan sert küresel bir şekil olduğu varsayılmaktadır ve tüm kristal yapılar boyunca geçerlidir [53].

$$APF = \frac{\text{Atomların kapladığı hacim}}{Birim\ hücrenin\ toplam\ hacmi} \tag{2.28}$$

Bu formülü kullanarak, farklı kristal yapılarda APF hesaplanabilmektedir.

Basit Kübik (Simple Cubic - SC) yapıya sahip bir kristalin köşelerinde yer alan 8 atomun her biri birim hücreye 1/8 oranında katkı sağlaması sebebiyle atomlarının sayısı 1'dir ve her bir birim hücre kenar uzunluğu a'dır. Atomun yarıçapı r ve atom hacmi küresel yapı kabul edilmesi sebebiyle $\frac{4}{3}\pi r^{3\prime}$tür. Birim hücre hacmi a^3 ve birim hücre kenar uzunluğu ile atom yarıçapı $a = 2r$ ilişkisi bulunduğu için APF değeri Denklem 2.29'daki gibidir.

$$APF = \frac{Atomların\ sayısı \times Atom\ hacmi}{Birim\ hücre\ hacmi} = \frac{1x\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3} = \frac{\pi}{6} \cong 0.52 \tag{2.29}$$

Hacim merkezli Kübik (Body-centered Cubic - BCC) yapıya sahip bir kristalin köşelerdeki 8 atomun her biri 1/8 oranında katkı sağlaması ve merkezde yer alan 1 atom olması sebebiyle atomlarının sayısı 2'dir ve her bir birim hücre kenar uzunluğu a'dır. Atomun yarıçapı r ve atom hacmi küresel yapı kabul edilmesi sebebiyle $\frac{4}{3}\pi r^{3\prime}$tür. Birim hücre hacmi a^3 ve birim hücre kenar uzunluğu ile atom yarıçapı $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$ ilişkisi bulunduğu için APF değeri Denklem 2.30'daki gibidir.

$$APF = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi r^3}{(\frac{4r}{\sqrt{3}})^3} = \frac{2x\frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{64r^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{2x\frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{64r^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \cong 0.68 \tag{2.30}$$

Yüzey Merkezli Kübik (Face-centered Cubic - FCC) yapıya sahip bir kristalin köşelerdeki 8 atomun her biri 1/8 ve yüzeylerdeki 6 atomun her biri 1/2 oranında katkı sağlaması sebebiyle atomlarının sayısı 4'tür ve her bir birim hücre kenar uzunluğu a'dır. Atomun yarıçapı r ve atom hacmi küresel yapı kabul edilmesi sebebiyle $\frac{4}{3}\pi r^{3\prime}$tür. Birim hücre hacmi a^3 ve birim hücre kenar uzunluğu ile atom yarıçapı $\boldsymbol{a} = 2\sqrt{2}r$ ilişkisi bulunduğu için APF değeri Denklem 2.31'daki gibidir.

$$APF = \frac{4x\frac{4}{3}\pi r^3}{(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{16\pi r^3}{48\sqrt{2}r^3} = \frac{16\pi}{48\sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \cong 0.74 \tag{2.31}$$

Atomlar için sert bir küresel kabuk varsayılarak denklem çözüldüğünde, basit kübik yapı için APF'nin 0.52 olduğu yani % 52 dolu olduğu görülmektedir. Hacim merkezli kübik yapı için atomik dolgu faktörü 0.68'dir ve yüzey merkezli kübik yapı için atomik dolgu faktörü 0.74'tür. Sonuçlar karşılaştırıldığında en verimli ve maksimum ulaşılabilir paketleme faktörün yüzey merkezli kübik yapı olduğu görülmektedir ve bu sonuç Thomas C. Hales tarafından kanıtlanmıştır [54, 55].

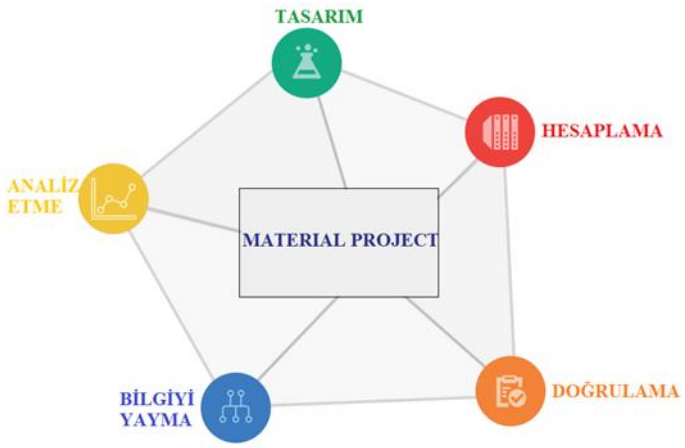
Atomlar arasında yer alan boşluğu mümkün olan oranda en aza indirmek için bu yöntemi kullanarak, basit bir kübik yapıya sahip bileşikler, daha yüksek bir yoğunluk ve dolayısıyla daha büyük bir atenuasyon yetisi elde etmek için teorik olarak sıkıca düzenlenebilir olduğu görülmektedir.

3. MALZEME VE YÖNTEM

Bu tez çalışması sırasında kullanılan bileşiklere ait bilgiler Materials Project Database'inden alınmış olup Monte Carlo Simülasyonu MCNPX (2.4.0) kodu ile simüle edilmiştir. Teknolojik gelişmelerin gerçek dünyaya entegresini ve bilimsel çalışmaların hızlı ve efektif olarak kullanımı da yansıtan bu data-simülasyon yaklaşımı sayesinde, radyasyondan korunmada yeni malzemelerin keşfinin daha hızlı sonuca ulaşmasında, efektif, az maliyetli bir çözüm yolu sunmaktadır. Bölüm 3.1 de Material Project, Bölüm 3.2'de Monte Carlo simülasyonu tanıtılmış olup tez çalışmasında kullanılan Monte Carlo Simülasyonuna ve datalara ait detaylar Bölüm 3.3' te yer almaktadır.

3.1. MATERİALS PROJECT (MP): MALZEME BİLİMİNE YENİ BİR YAKLAŞIM

Materials Project, Malzemeler Genomu Girişimi (The Materials Genome Initiative)'nin bir parçasıdır. Yeni malzemelerin keşfini hızlandırmaya yardımcı olmak için büyük, kapsamlı bir malzeme özellikleri veri tabanı ve hesaplama araçlarını açık erişime sunan çok paydaşlı bir bilimsel girişimdir. MP, Şekil 3.1'de yer alan hesaplamalı malzeme tasarımı sürecinin veri oluşturma, doğrulama, yayma, analiz etme ve tasarımdan oluşan her adımını hedefleyen açık, işbirliğine dayalı sistemler oluşturarak malzeme tasarımını hızlandırmayı amaçlamaktadır [19].



Şekil 3. 1: Materials Project sistemi [19]

Günümüzde malzeme keşfi hala önemli miktarda deneme yanılma gerektirmektedir. Teknolojik bir uygulama için uygun bir malzemeyi belirlemek onlarca yıllık araştırmayı gerektirebilmekte ve bu malzemeyi ticarileştirme için optimize etmek daha da uzun sürebilmektedir. Bu uzun

sürecin temel nedeni, malzeme tasarımının karmaşık, çok boyutlu bir optimizasyon problemi olması ve hangi malzemelere odaklanılacağı ve hangi deneylerin gerçekleştirileceği konusunda bilinçli seçimler yapmak için gereken verilerin genellikle mevcut olmamasıdır. Yeni ve gelişmiş malzemelerin piyasaya sürülmesi 10-20 yıl gibi uzun bir zaman gerektirmektedir. Bu nedenle yeni malzemelerin hızlı bir şekilde sanal ortamda geliştirilip oluşturulmasını sağlayarak süreci ve maliyeti en aza indirgemeyi hedefleyen MP, malzemelerin özelliklerini hesaplamak için kuantum mekaniğine dayalı ilk prensipler yöntemlerini kullanarak yüksek çıktılı hesaplamalar yapmaktadır [56].
MIT'deki Malzemelerin Genom Projesi, deneysel verilere dayanan ve başlangıçtan itibaren hesaplamalarla genişletilen bir kimyasal uzay, toplu hesaplamaların otomatik olarak çalıştırılması için bilgi işlem ortamı, tüm verileri depolamak için gelişmiş bir veri tabanı ve kullanıcıların arama yapmasına olanak tanıyan analiz araçları olmak üzere dört ana bileşenden oluşmaktadır [57].

Resmi olarak 2011 yılında Massachusetts Teknoloji Enstitüsü (MIT) ve Lawrence Berkeley Ulusal Laboratuvarı (LBNL) arasında ortak bir işbirliği olarak gerçekleşen MP'nin çalışmalarının bir bölümü 2010 yılından önce başlatılmıştır [57, 58]. Oluşturulan sistemin büyüdükçe, gelişimi ABD Enerji Bakanlığı, Gelişmiş Ulaşım Teknolojileri için Bataryalar (BATT) ve LBNL'den Laboratuvar Yönlendirmeli Araştırma ve Geliştirme hibesi tarafından desteklenmektedir. Malzemelerin incelenmesi ve yeni malzemelerin geliştirilmesinde hesaplama yöntemlerinin kullanımında önemli bir adımı temsil eden ve malzeme bilimi topluluğunda yenilik için güçlü bir platform sunan MP, dünya çapında ondan fazla kuruluşta ortaklara sahiptir [59] ve çevrimiçi açık kaynak platformu GitHub aracılığıyla daha fazla geliştiriciyi projeye dahil etmektedir. Kullanıcılar, belirli araştırma problemlerini çözmek için kullanılabilir hesaplama kaynaklarını kullanarak, MP kaynak kodlarını kendi çalışma ortamlarında ücretsiz olarak indirebilir, değiştirebilir ve yeniden derleyebilmektedir. Kaynak kodlarında herhangi bir hata bulunursa veya yeni bir işlev geliştirilirse, kullanıcılar revize edilmiş kodları Materials Project'e yükleyerek kullanıcı topluluğuna fayda sağlayabilmektedir. Bu açık kaynak mekanizması, daha profesyonel kullanıcıların dahil olmasıyla versiyon evriminin hızını önemli ölçüde artırmaktadır.

Kullanıcılar, belirli kriterlere göre malzemeleri arayabilecekleri, malzemeler hakkında detaylı bilgi görebilecekleri ve verileri daha fazla analiz için indirebilecekleri bir web ara yüzü

aracılığıyla veri tabanına erişebilmektedir. Veri tabanı, kristal yapılar, elektronik bant yapıları, termodinamik özellikler, yüzey enerjileri gibi geniş bir malzeme özellikleri yelpazesinde bilgiler içermektedir. Bu bilgi, malzeme bilimi, fizik, kimya ve mühendislik alanlarındaki araştırmacılar için son derece değerlidir ve enerji depolama ve dönüşümü, elektronik ve fotovoltaikler gibi çeşitli uygulamalar için yeni malzemeler tasarlamalarına ve keşfetmelerine olanak tanımaktadır [19].

MP, malzemelerin özelliklerini ve performansını tahmin etmek için bir dizi gelişmiş simülasyon ve hesaplama yöntemi kullanılmaktadır. Bu yöntemlerin temelinde, malzemenin atomik ve elektronik yapısını ilk prensiplerden (yani temel fizik yasalarından) çıkaran kuantum mekaniksel hesaplamalar yer alır. Bu simülasyonlar için en yaygın kullanılan yöntemlerden biri malzemelerin elektronik yapısını hesaplamak için kullanılan en popüler kuantum mekaniksel yöntemlerden biri olan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (Density Functional Theory, DFT)'dir. Materials Project'in hesaplama süreci, genellikle malzemenin kristal yapı bilgisinden başlamaktadır. Bir malzemenin kristal yapısı, atomlarının uzaydaki düzenlenişi hakkında bilgi vermektedir. DFT kullanılarak, bu atomik yapıya dayanarak malzemenin temel elektronik ve enerji özellikleri hesaplanır. Bu özellikler arasında bant yapısı, enerji bant aralığı, ferromanyetizm gibi manyetik özellikler ve termal özellikler bulunmaktadır. Hesaplamalar, malzemenin mekanik (örneğin, elastik modüller) ve termal özellikleri (örneğin, özgül ısı) gibi makroskopik özelliklerinin tahmin edilmesi için de kullanılabilmektedir [19].

Materials Project, hesaplamalarını gerçekleştirmek için çeşitli yazılım araçları kullanılmaktadır. Bu araçlar arasında VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package), Quantum ESPRESSO ve ABINIT gibi DFT tabanlı simülasyon yazılımları bulunmaktadır. Bu yazılımlar, malzemelerin elektronik yapısını ve diğer ilgili özelliklerini hesaplamak için gerekli altyapıyı sağlamaktadır.

Materials Project altyapısı, Pymatgen, Fireworks ve Custodian olmak üzere üç ana modülden oluşmaktadır. Bu yazılım çerçevesi tarafından toparlanan, zaman alıcı ab initio hesaplamalarının çoğu, Lawrence Berkeley Ulusal Laboratuvarı'nın NERSC Bilimsel Hesaplama Merkezi ve Hesaplama Araştırma Bölümü'ndeki süper bilgisayar kümelerine gönderilmektedir. Ekim 2015'e kadar 58.122 bileşik, 40.809 bant yapıları, 1244 elastik tensörler, 2185 Li interkalasyon elektrotları ve 18.226 Li dönüşüm elektrotları hesaplanmıştır. Tüm bu hesaplanmış verilere, Apache, Python ve Django çerçeveleri tarafından desteklenen

web sitesi üzerinden ücretsiz olarak erişim sağlanabilmektedir [59]. Ayrıca, Pymatgen, Fireworks, Custodian ve diğer eklentileri içeren tüm yazılım çerçevesi, kapsamlı belgelendirme desteğiyle GitHub'da açık kaynak olarak sunulmaktadır [60] .

MP'de yer alan Python Materials Genomics (Pymatgen) modülü, kristal yapılar, moleküller, hesaplanmış girdiler, yoğunluk durumları, bant yapıları vb. dahil olmak üzere Python nesnelerini oluşturmakla başlıca sorumludur. Bunlara ek olarak, Pymatgen çeşitli türde giriş/çıkış dosyaları için zengin bir IO arayüzü sağlamaktadır. Standart Kristalografi Bilgi Dosyası (CIF) formatının yanı sıra, VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package), ABINIT, NwCHEM, Gaussian ve ASE giriş/çıkış dosyalarını da kabul etmektedir[61,62]. Aynı zamanda, Pymatgen de kapsüllenmiş Python nesneleri üzerinde güçlü yapı manipülasyonları sağlamakta ve hesaplanmış sonuçlar üzerinde son işlem analizleri yapmaktadır. Diğer bir modül olan Fireworks, otomatik HT-DFT hesaplama özelliğini etkinleştiren hesaplama iş akışlarını çalıştırmaya yardımcı olmaktadır. Zaman alıcı DFT hesaplaması sırasında gereksiz kesintileri önlemek için, Custodian hata kontrolü, iş yönetimi ve hata iyileştirme işlevlerini gerçekleştirmek üzere tasarlanmıştır. Farklı uygulamalar için özel iş yönetimi iş akışları geliştirmek için kullanıcıya izin veren basit bir eklenti çerçevesine sahiptir. Tüm bu kodlar Python dilinde yazılmıştır ve bu nedenle mevcut standart ve bilimsel programlama kütüphanelerinden yararlanılmaktadır [59].

MP tarafından üretilen veriler çoğunlukla belge odaklı olmakla beraber anahtar-değer metin formatında düz bir şekilde biçimlendirilmiştir. Bu, MongoDB'nin gereksinimleriyle uyumlu olup özellikle hesaplanan bileşik sayısı arttıkça MongoDB'nin mükemmel ölçeklenebilirliğinden yararlanmaktadır. Ayrıca, MongoDB, herhangi bir öznitelik üzerinde tam indeks desteği, zengin belge tabanlı sorgulamakta ve hızlı depolama/sorgu hızını desteklemektedir, bu da Materials Project'in performansını önemli ölçüde artırmaktadır[xmat].

Materials Project ayrıca malzeme analizi için bir dizi web tabanlı araç ve API (Uygulama Programlama Arayüzü) sağlayarak RESTful servisi desteklemektedir. RESTful tasarım altında, veri üzerindeki her istek veya eylem, karmaşık bir kullanıcı arayüzü yerine benzersiz bir URL aracılığıyla gerçekleştirilebilmektedir ve bir HTTP fiili bu nesne üzerinde işlem yapmak için kullanılabilmektedir. URL'yi aldıktan sonra, Materials Project'in veri sunucusu, genellikle JavaScript Object Notation (JSON) dosyası olarak yapılandırılmış veriyi istemciye isteğin veya eylemin cevabı olarak geri göndermektedir. Bu RESTful servis, Pymatgen yapı nesneleri,

oluşum enerjileri, hesaplanmış VASP enerjileri vb. gibi bilgilere veri sunucusundan etkili bir şekilde erişim sağlamaktadır. Bu, mevcut malzemeler verilerini Materials Project sunucusundan özelleştirilmiş malzemeler araştırma kodlarına entegre etme talebi olan bilim insanları için güçlü bir hizmet sunmaktadır [62].

3.2. MONTE CARLO SİMÜLASYONU

İstatistiksel bir yaklaşım olan Monte Carlo yöntemi, bilgisayar simulasyonlarında kullanılan ve özellikle karmaşık veya deneysel olarak maliyet zaman vs. gibi sebepler sebebiyle çözüme ulaştırılması zor olan problemleri çözmek için kullanılmaktadır. Bu yöntem, belirli bir problemdeki değişkenlerin davranışını modellemek için rastgele sayılar kullanmaktadır. Parçacıkların sahip olduğu parçacık akışı gibi beklenen özelliklerinin, bilgisayar tarafından simüle edilen çok sayıda bireysel parçacık geçmişini örnekleyerek tahmin edildiği istatistiksel bir yöntemi ifade etmektedir. Özellikle nükleer mühendislik, radyasyon taşınımı, zırhlama analizi, nötron fiziği gibi nükleer uygulamalarda Monte Carlo yöntemi önemli bir rol oynamaktadır [63].

Tarihsel olarak, Monte Carlo yöntemi Enrico Fermi'nin nötron yavaşlaması üzerine yaptığı istatistiksel çalışmalarla başlamıştır ancak bu yöntem, dijital bilgisayarların gelişmesiyle birlikte 20. yüzyılın ortalarında bilimsel ve mühendislik alanlarında yaygın olarak kullanılmaya başlanmıştır. Adını Monako'daki Monte Carlo Casino'sundan simulasyon, Stanislaw Ulam, John von Neumann ve Nicholas Metropolis tarafından geliştirilmiştir. Özellikle nükleer silah projelerinde ve nükleer enerji çalışmalarında Monte Carlo yöntemi, fiziksel sistemlerin karmaşıklıklarını ve etkileşimlerini simüle etmek için vazgeçilmez bir araç haline gelmiştir [64].

Monte Carlo yöntemi, belirsizlikleri ve karmaşıklıkları çözümlemede son derece etkili olmaktadır. Özellikle deterministik yöntemler kullanılarak çözümlenmesi zor olan problemlerde başarıyla kullanılmaktadır. Bu yöntem, birçok tekrarlanan deneme yoluyla istatistiksel sonuçlar elde ederek, sistemlerin davranışlarını modelmektedir ve bu modeller, gerçek hayatta karşılaşılabilen belirsizlikleri ve değişkenlikleri temsil etmektedir. Deterministik yöntemler, sayısal tekniklerin çalışması ve sürekli enerji kesit verileri yerine çok gruplu grup yaklaşımlarını kullanması için oldukça basit geometrilere ihtiyaç duyarken Monte Carlo teknikleri, çok gruplu verilere sahip basit geometrilerin yanı sıra karmaşık geometrileri ve

sürekli enerji kesit verilerini de işleyebilmektedir. Monte Carlo, analitik açıklamaya sayısal bir yaklaşım denemek yerine sistemi birkaç yaklaşımla istatistiksel olarak değerlendirdiği için daha iyi performans göstermektedir.

Monte Carlo tekniklerinin Boltzmann taşıma denkleminin sayısal çözümü gibi deterministik tekniklere göre temel avantajı, Monte Carlo'nun geometriyi ve nükleer verileri deterministik tekniklere göre daha doğru temsil etmesidir. Monte Carlo'nun dezavantajı ise verilerin istatistiksel nitelikte olması ve soruna kesin bir çözüm sağlamamasıdır. Tüm sonuçlar, ilgili belirsizliklerle birlikte tahminleri temsil etmektedir. Deterministik yöntemler problemin yaklaşık versiyonuna rağmen kesin sonuç verisi sağlamaktadır ancak Monte Carlo yöntemi birebir problem geometrisi tasarlanabilmesine olanak sağlarken yaklaşık sonuç verileri sağlamaktadır [65].

Monte Carlo yöntemi, bilgisayar tarafından üretilen rastgele sayılarla çok sayıda parçacığın davranışını modellemektedir ve her bir parçacık, sisteme özgü etkileşimleri göz önünde bulundurarak simüle edilmektedir. Bu sayede, karmaşık geometriler, sürekli enerji kesit verileri ve diğer detaylar hesaba katılarak gerçekçi sonuçlara ulaşılmaktadır.

Monte Carlo bitleri anlamlı rasyonel sayılara dönüştürmektedir. Simülasyon başarılı (1) ya da başarısız (0) olarak sonuçlar üretmektedir ve bu sistem N kere tekrarlanmaktadır. Burada N parçacık hikayelerininin sayısını temsil etmektedir. Daha sonra S ile temsil edilen başarı ile sonuçlanan denemelerin sayısı, N başarı sayısına bölünmektedir. Eğer N büyük ise S/N sonucu deney simulasyonunun ortalama değere ya da beklenen deney sonucuna iyi bir yaklaşım sunmaktadır. Her bir parçacık hikayesi 1 ya da 0 şeklinde bit halindedir sonuç ise rasyonel bir sayıdır [64].

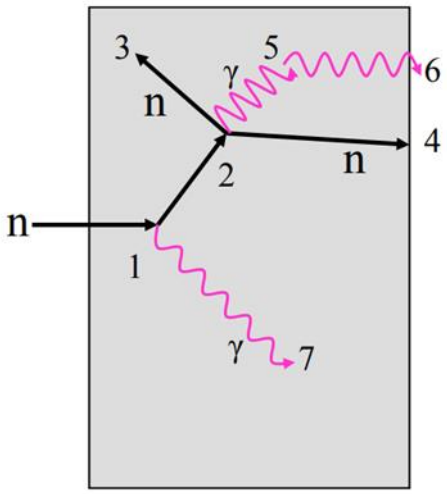
Monte Carlo yöntemleri, parçacık fiziği, çevre bilimleri, finansal market simulasyonları, moleküler modelleme gibi birçok alanda kullanılmakta olup, bilgisayar simülasyonları için özel olarak tasarlanmış Monte Carlo Simuasyon yazılımları bulunmaktadır. Nükleer radyasyon alanında en yaygın kullanılan Monte Carlo simulasyon kodlarından biri MCNP (Monte Carlo N-Particle) kodudur. Bu yazılım, karmaşık nükleer sistemlerin davranışlarını modellemekte ve endüstriyel uygulamalarda güvenilir sonuçlar sağlamaktadır.

3.2.1. MCNP Kodu

MCNP Kodu, Los Alamos Ulusal Laboratuvarıda üretilen ve geliştirilen, nötronların ve gama ışınlarının Monte Carlo yöntemi ile taşınımını analiz etmek için uluslararası kabul görmüş simülasyon kodudur. Nötronların, gama ışınlarının, nötron etkileşimlerinden kaynaklanan ikincil gama ışınlarının, birincil kaynak elektronları ile gama ışını etkileşimlerinde oluşturulan ikincil elektronlar olan elektronların taşınmasını simüle edebilmektedir [63].

MCNP kodu, fotonları ve nötronları, çarpışmalar arasında düz bir çizgide hareket eden parçacıklar olarak ele almaktadır.0 ile 1 arasındaki sayılar rastgele şekilde, eğer gerçekleşiyorsa bu gerçekleşen etkileşimin ne olduğunu ve nerede gerçekleşeceğini belirlemek amacıyla, ilgili süreçleri ve malzemeleri yöneten fiziksel kurallara ve olasılıklara dayalı olarak seçilmektedir.

Bir parçacığın oluşumdan itibaren geçirdiği etkileşimler ile birlikte sönümlenmesi ile son bulan sürece, o parçacığın hikayesi denmektedir. Şekilde 3.2'de fisyona maruz kalabilecek bir malzeme içerisindeki nötron olayının rastgele geçmişini yer almaktadır.



Şekil 3. 2: Nötron ve malzeme içerisinde izlediği fizyon reaksiyonu

Maddeyle radyasyonun ilk karşılaştığı 1. Olayda bir nötron çarpışması meydana gelmektedir ve nötron, fiziksel saçılma dağılımından rastgele seçilen yönde saçılmaktadır. Bu çarpılma sonucunda bir foton da üretilmekte ve daha sonraki γ analizi için geçici olarak depolanmaktadır. 2. olayda, fisyon meydana gelmektedir. Gelen nötronun sona ermesi ve giden iki nötron ve bir fotonun doğmasıyla sonuçlanmaktadır. Bir nötron ve foton daha sonraki analiz için bir kenara

bırakılmaktadır. 3. Olayda ilk fisyon nötronu yakalanmakta ve sonlandırılmaktadır. Birikmiş nötron bu adımdan sonra geri alınır ve rastgele örnekleme yoluyla 4. Olayda görüldüğü üzere levhadan dışarı sızmaktadır. Fisyon tarafından üretilen foton, 5. Olayda çarpışır ve 6.olayda dışarı sızar. Olay 1'de üretilen ve kenarda kalan foton 7. Olayda incelenmeye başlamakta ve yakalanmaktadır. Bu nötron etkileşimi bu şekilde tamamlanmaktadır [66].
MCNP kodu, kümelenmiş parçacıkları, kümede depolanan son parçacık ilk olarak çıkarılacak şekilde ele almaktadır. Bu tür geçmişler giderek daha fazla takip edildikçe nötron ve foton dağılımları daha iyi bilinir hale gelmektedir.

MCNP kodunun çalıştırılabilmesi için bir girdi dosyası gerekmektedir. Bu girdi dosyası içerisinde çözülmesi istenen probleme dair oluşturulacak simülasyon sistemine ait tanımlar bulunmaktadır. Problem geometrisinin tanımlanması, yer alan malzemelerin tanımı ve kesit değerlendirmelerinin seçimi, kaynağın konumu ve özellikleri, istenen sayımların türü ve kullanılacaksa verimliliği artırmak için bir sapma azaltma tekniği, simülasyonun hangi parçacık için çalıştırılacağı yani çalışma modu burada yer almaktadır. ancak bu dosya hazırlanırken simülasyon tanımlamalarının doğruluğundan özellikle emin olmak gerekmektedir. Her simülasyon verilen geometriye uygun olarak sonuç vermektedir dolayısıyla yapılması istenenden farklı bilgilere yer verildiğinde sonuç istenenden uzak olacaktır. Dolayısıyla bir hata fark edildiğinde simülasyonu durdurup gerekli düzenlemeleri gerçekleştirmek ve daha sonra tekrar çalıştırmak gerekmektedir. Simülasyon sonucunda elde edilen verilerinin sonuçlarının güvenirliği de mutlaka kontrol edilmelidir. Simülasyonda çalıştırılan parçacık sayısı, sonuçta elde edilen verilerinin niteliğini etkilememektedir.

3.2.1.1 MCNP Girdi Dosyası

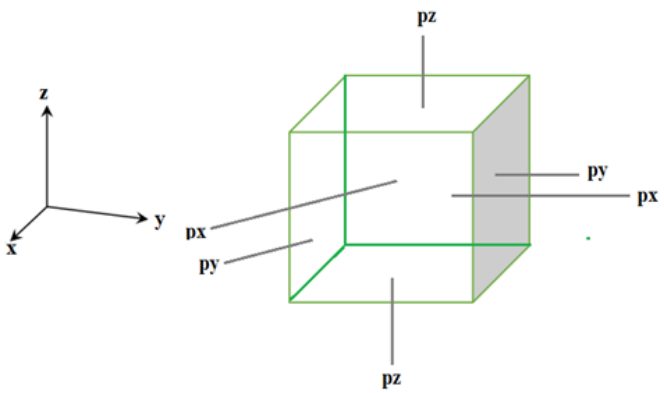
MCNP girdi dosyasında yer alan her satır maksimum 80 karakterden oluşmaktadır ve bu maksimum 80 karakterden oluşan 1 satıra ‘’kart’’ denmektedir. MCNP girdi dosyası hücre kartları, yüzey kartları ve data kartları olmak üzere 3 ana bölümden oluşmaktadır. Hücre kartı bölümünden önce tek satırlık bir başlık kartı bulunmaktadır. Bu başlıkta probleme dair bilgiler yer alabilmektedir ve genellikle çalışılan sistemin ne olduğunun anlaşılmasına yarayacak şekilde bilgiler içermektedir. Her bölüm bir veya daha fazla karttan oluşabilmektedir. Her bölüm arası yalnızca 1 boşluk bırakılmalıdır. Fazla boşluk olması halinde simülasyon hata vermekte ve çalışmamaktadır. MCNP girdi dosyası Şekil 3.3’de görülmektedir.

Başlık Kartı
Hücre Kartları (Bölüm 1)
..... (Ayırıcı Boşluk)
Yüzey Kartları (Bölüm 2)
..... (Ayırıcı Boşluk)
Data Kartları (Bölüm 3)
..... (Opsiyonel Ayırıcı Boşluk)

Şekil 3. 3: MCNP Input dosyası genel yapısı

Girdi dosyasında yer alan üç bölümdeki kartlar herhangi bir düzen aranmaksızın istenilen şekilde sıralanabilmektedir. Bu kartlarda yer alan harfler, büyük harf, küçük harf ya da aynı satırda hem büyük hem de küçük olacak şekilde yer alabilmektedir. Her bölüm üzerine yer alan bilgileri daha anlaşılır kılabilmek adına yorum kartları eklenebilmektedir. Bu kartlar ilk olarak ‘’C’’ ya da ‘’c’’ harfi ve ardından bir boşluk bırakılıp istenilen bilginin eklenmesi ile oluşturulmaktadır. Bunu yaparken yine maksimum 80 karakterden oluşturulduğundan emin olmak gerekmektedir. Yorum kartları başlık şeklinde verilebileceği gibi kartların sonlarına da eklenebilmektedir. Eğer kart sonuna eklenecekse önce ‘’$’’ eklenip ardından istenen bilgi eklenmektedir. Eğer bir kartta karakter sayısının 80 karakterden daha fazla ise o zaman satır sonuna ‘’&’’ eklenip alt satıra geçilmesi ve simülasyon yazımına devam edilmesi şeklinde bu sorun giderilmektedir [66].

3 boyutlu (x, y, z) Kartezyen koordinat sistemi kullanılan MCNP kodunda her boyut santimetre (cm) cinsinden ifade edilmektedir. Her hücre tek ya da birden çok yüzey tarafından sınırlandırılmaktadır. Geometride hiçbir boşluk bulunmamalıdır ve her x,y ve z noktası ya bir hücreye ait olmalı ya da hücreye ait bir yüzey üzerinde bulunmalıdır.



Şekil 3. 4: Yüzeyleri gösterilen küp

3.2.1.1.1. Hücre kartları

Girdi dosyasında ilk kart olan başlık kartından sonra gelen ilk bölüm hücre kartları bölümüdür. Hücre kartları bölümün ile başlık arasında boşluk yer almamaktadır. Simülasyon geometrisi, içerisinde yer alan yapılar ve bu yapılara ait malzeme atamaları ilk olarak bu bölmede gerçekleşmektedir. Tanımlanması gereken ilk geometri, simülasyonun gerçekleşmesi istenen evrendir. Bu alan içerisine bir malzeme tanımlanabilir ya da vakumlu ortam olarak seçilebilmektedir. Her hücre, etrafını çevreleyen yüzeyler ile tanımlanmaktadır. Hücre kartlarının genel yapısı aşağıdaki gibidir:

J m d geom param

Burada j, hücre numarasını, m materyal numarasını temsil etmektedir ve her ikisi de 1 ile 9999 arasında herhangi bir tamsayı ile temsil edilebilmektedir. Eğer seçilen hücre içerisine bir malzeme atanmayacaksa m yerine 0 yazılmaktadır. d tanımlanan hücrede bulunan malzemenin yoğunluğudur ancak hücreye tanımlanan bir malzeme bulunmuyorsa bu sütuna herhangi bir giriş yapılmamaktadır. Eğer aynı malzemeye ait 2 farklı hücre bulunuyorsa her hücre farklı numaraları almalı ancak malzeme numarası aynı kalmalıdır. Malzemenin yoğunluğu eğer atom yoğuluğu (atom/b-cm) cinsinden verilecekse pozitif, kütle yoğunluğu (gram/cm^3) cinsinden verilecek ise negatif olarak yazılmaktadır. geom hücreyi tanımlamada kullanılan tüm yüzey numaraları ve Boolean operatörlerini temsil etmektedir. Son olarak param hücre parametrelerinin tanımlanmasına kullanılmaktadır. Simülasyon geometrisinde yer alması istenen parçacığı belirten önem kartı ‘’imp’’ ise isteğe bağlı olarak data kartları yerine hücre kartının sonunda yer alabilmektedir [65].

1 ile 9999 arasında herhangi bir tam sayı ile belirtilen hücre numarası ve materyal numarası hücre kartlarında yer alırken bu hücrelerin yüzeylerine ait boyut parametreleri yüzey kartlarında, materyalin elemental içerik detayları data kartlarında tanımlanmaktadır. Aşağıda örnek bir hücre kartı görülmektedir.

C hücre kartı aluminyum küp

3 1 -2.7 -10 imp:p 1 $Alküp

Verilen hücre kartı örneğinde ilk kart başlık kartı olmaktadır. Geriye dönük koda bakıldığında içeriğin ne olduğunun anlaşılmasına yardımcı olması amacıyla isteğe bağlı olarak

yazılabilmektedir. ‘’c ‘’ ile başlamış ve ardından bir boşluk sonrası yapılan yorum yer almaktadır. İkinci satırda 3 rakamı ile belirtilen ilk sütun hücrenin numarasını ardından gelen 1 rakamı ise malzemenin numarasını temsil etmektedir. -2.7 olarak belirtilen sütun ise kullanılan malzemenin yoğunluğunu göstermektedir. Bu örnekte Aluminyum (Al) kullanıldığı için malzeme yoğunluğu 2.7 olarak verilmiştir. Negatif olarak yazılmasının sebebi daha önce de belirtildiği gibi gram/cm^3 cinsinden yazılmasından dolayıdır. Küre oluşturmak için tek bir yüzeye ihtiyaç bulunmaktadır ve yoğunluğun ardından gelen sütunda yer alan -10 ise hücreyi çevreleyen yüzeyi temsil etmektedir. Her yüzey kartının bir pozitif bir de negatif tarafı bulunmaktadır. Bu sütunda yer alan negatif ya da pozitif detayı, ortaya çıkarılmak istenen hücrenin bu yüzeye göre bulunduğu konumu temsil etmektedir. $f(x, y, z)>0$ olan herhangi bir nokta pozitif (+) kısımda, $f(x, y, z)<0$ ise bir nokta negatif (-) kısımda bulunmaktadır. Buna göre küresel yüzey içerisinde bulunan bir hücre yüzeye göre negatifte yer almaktadır. Kürenin dışarıdında yer alan bölge ise pozitif olmaktadır. Bu detaylar ışığında verilen örneğe bakıldığında oluşturulan alüminyum kürenin 10 ile tanımlanan yüzeyin iç kısmında bulunduğu anlaşılmaktadır [63].

3.2.1.1.2. Yüzey Kartları

Yüzeyler, simule edilecek problemi oluşturmada kullanılan geometrik yapılardır ve burada yer alan her yüzey Kartezyen koordinat sistemine uygun olarak oluşturulmaktadır. Bir yüzey fonksiyonel olarak $f(x,y,z)=0$ şeklinde denklem 3.1’deki gibi temsil edilmektedir. Orijine yerleştirilen R yarıçaplı bir küre için bu fonksiyon;

$$F(x,y,z)= x^2 + y^2 + z^2 - R^2 =0 \quad (3.1)$$

ile gösterilmektedir.

J a list

Burada j yüzey numarasıdır ve 1 ile 9999 arasında herhangi bir tam sayı ile temsil edilebilmektedir. 2. Sütunda yer alan a, problem geometrisinin düzlem, küre, silindir vb. olduğunu belirten ve hangi koordinatı kestiğini gösteren yüzey belirleyicisidir. Son sütunda yer alan list ise kullanılan yüzeylerin cm cinsinden uzunluklarını, konumlarını ve varsa yarıçaplarının yer aldığı bölümdür.

C yüzey kartı

10 sz -8 2 $Alküre

Yukarıda hücre kartında örneklendirilen alüminyum küreye ait yüzey kartı örneği yer almaktadır. Buraya bakıldığında 10 rakamı ile verilen yüzey kartı z düzlemi üzerinde -8 noktasında bulunan 2 cm yarıçapa sahip olan küre tanımlanmaktadır. Yüzey kartlarından sonra da isteğe bağlı şekilde o kartı tanımlayacak bir yorum $ eklenerek yazılabilmektedir [63].

3.2.1.1.3. Data Kartları

Girdi dosyasının son ana bloğu olan data kartlarının formatı diğer bölümlerle aynıdır. Data kartlarında problemde yer alan parçacıkların türleri, sistemde yer alan ve ilk bölümde yoğunlukları verilerek sayılar ile belirtilen materyallerin tanımlanmaları, alınacak sayım, simülasyonda takip edilecek parçacık sayısı ya da simülasyonun çalışma süresi, kullanılacak radyasyon kaynağının türü, konumu, enerjisi gibi birçok temel tanımlama bu bölümde yer almaktadır. “MODE” kod kartı, problemde hangi parçacıkların oluşturulabileceğini ve izlenebileceğini belirtmektedir. Hücre kartlarında yer alan materyalin elemental tanımlaması m(1-9999) olarak yapılmaktadır. Burada önemli olan ilk bölümde materyale tanımlanan numara ile data kartlarında o materyale verilen sayının aynı olmasıdır. Materyal numarası m(1-9999) dan sonra bir boşluk bırakılarak o materyalin elemental bileşimi bulunmaktadır.

Materyal tanımlaması yapılırken elementin atom numarasının bilinmesi gerekmektedir. Eğer kullanılan malzeme bileşik ya da karışım ise hem elementlerin atom numaraları hem de kütle kesirlerinin blinmesi gerekmektedir.

M1 13000 1 $Aluminyum

İlk bölümde yer alan alüminyum küre için materyal tanımlaması yukarıdaki gibi yapılmaktadır. 13 Aluminyum elementinin atom numarasıdır. 1 ise kürenin kütle kesrini göstermektedir. Ancak malzeme olarak alüminyum yerine kurşun oksit (PbO) kullanılması durumunda materyal tanımlaması aşağıdaki gibi olacaktır.

M1 8000 0.071682 $oksijen

82000 0.928318 $kurşun

MCNP kodunda kaynak tanımlamaları SDEF komutu ile yapılmaktadır. Bu komutun birçok farklı parametresi bulunmaktadır. Kaynağa ait olan ve oldukça karmaşık olan SDEF komutu, çok çeşitli kaynak tanımlaması yapmaya olanak sağlamaktadır. Kaynağın konumu, enerjisi, kaynaktan çıkan parçacıkların türü ve yayılma yönleri ve açıları gibi özellikler bu komutta yer almaktadır. Dolayısıyla doğru bir simülasyon gerçekleştirebilmek oldukça önemli olmaktadır.

Bu bölümde yer alan bir diğer önemli adım ise dedektör tanımlamasının yapılması yani sayım tanımlamalarıdır. Birçok farklı sayım türü bulunmakla beraber en sık kullanılan sayım türlerinden olan F1 bir yüzeyden geçen akıyı, F2 bir yüzeyden geçen ortalama akıyı, F4 bir hücre içerisinde bulunan ortalama akıyı, F5 ise bir noktadan geçen akıyı temsil etmektedir [66].

3.3. RADYASYONDAN KORUNMADA PBO, WO_3 VE BI_2O_3 BİLEŞİKLERİNİN ZIRH MALZEMESİ OLARAK SEÇİLMESİ

Yüksek atom numaralı elementler, elektromanyetik radyasyon olan X-ışınları ve gama ışınlarını daha etkin bir şekilde soğurmaktadır. Kurşun, periyodik cetvelde yüksek bir atom numarasına sahiptir (Z=82).Bu özelliği, kurşunu radyasyondan korunmada ideal kılmaktadır. Atom numarasının yanı sıra, yüksek yoğunluğa sahip bir elementtir. Yoğunluk, radyasyonun zayıflatılmasında kritik bir rol oynamaktadır çünkü daha yoğun malzemeler radyasyonu daha iyi absorbe etmekte ve yayılmasını engellemektedir. Radyasyondan korunmada seçilen malzemenin uzun süre kullanılabilir olması işlevsellik açısından oldukça önemlidir. Kurşun oksit (PbO), kararlı bir kimyasal bileşiktir. Zamanla bozulmaya veya oksidasyona karşı direnç göstermektedir ve bu direnç uzun vadeli koruma sağlamasına olanak sağlamaktadır. Kurşun, kolay işlenebilir ve şekillendirilebilir bir malzemedir. PbO üretiminin ve uygulanmasının ekonomik açıdan da avantajlı olması geniş çaplı koruma gereken alanlarda etkin bir çözüm sunmaktadır. Tüm bu özellikler, PbO'nun radyasyondan korunmada yaygın olarak tercih edilmesini sağlamaktadır. Radyasyon güvenliği ve koruma uygulamalarında PbO kullanımı, özellikle sağlık sektörü, nükleer enerji tesisleri ve endüstriyel uygulamalarda yaygın durumdadır [67].

Ancak yüksek enerjili iyonize radyasyon, PbO malzemesinin yapısında bozulmalara neden olabilmektedir. Bu bozulmalar, malzemenin yüzeyinden kurşun tozlarının serbest kalmasına yol açabilmekte, bu da toksik maruziyeti artırabilmektedir. Bunun yanı sıra radyasyon, PbO'nun kimyasal yapısını değiştirebilir ve daha reaktif veya biyolojik olarak daha erişilebilir

formlar oluşturabilmektedir. Yine bu etki de kurşunun toksik etkilerini artırabilmektedir. Bu sebeple radyasyondan korunma için kullanılabilecek PbO'ya alternatif olabilecek malzeme arayışları gerçekleşmektedir.

Tungsten (W) periyodik tabloda yüksek bir atom numarasına sahiptir (Z=74). Yüksek atom numaralı elementlerin gama ışınları gibi yüksek enerjili fotonları etkin bir şekilde soğurmaları sebebiyle WO_3, gama radyasyonunu zayıflatmada etkili olduğu görülmektedir. WO_3, yüksek yoğunluğa sahip bir olan bir bileşiktir. Bu da yine radyasyonu daha iyi absorbe etmesine olanak sağlamaktadır. WO_3, PbO gibi kararlı bir kimyasal bileşiktir ve çevresel koşullara karşı da dayanıklılık göstermektedir. Bu dayanıklılığı uzun süreli radyasyon koruması sağlayabilmesine yardımcı olmaktadır. Bunların yanı sıra WO_3, yüksek erime noktası ve iyi mekanik özelliklere sahiptir. Bu özellikler, yüksek sıcaklık ve zorlu çalışma koşullarında bile yapısal bütünlüğünü korumasını sağlamaktadır. Uygulanabilirlik açısından da oldukça elverişli olan WO_3, seramikler, camlar ve polimer kompozitler gibi çeşitli malzemelerle birleştirilebilmektedir. Bu, farklı uygulamalarda kullanılmasını ve çok yönlü bir malzeme olmasını desteklemektedir. W, Pb'nin aksine toksik olmayan bir alternatiftir. Bu, sağlık ve çevre açısından daha güvenli bir seçenek olmasını sağlamaktadır. Ayrıca, tungstenin geri dönüşümü mümkündür ve bu W'nin sürdürülebilirliği artırmaktadır [68].

Bizmut trioksit (Bi_2O_3), gama radyasyonundan korunmada kullanılan bir malzeme olarak dikkat çekmektedir. Gama radyasyonuna karşı korunmada etkili bir malzeme olarak kullanılmasında PbO ve WO_3 'te olduğu gibi yüksek atom numarasına (Z=83), yüksek yoğunluğa, kimyasal olarak stabililiteye ve çevresel koşullara karşı dayanıklılığa sahip olması etkili olmaktadır. Ayrıca, W gibi toksik olmayan bir alternatiftir, bu da yine sağlık ve çevre açısından daha güvenli bir opsiyon olmasına olanak sağlamaktadır.Bi_2O_3, WO_3 gibi seramikler, camlar ve polimer kompozitler gibi çeşitli malzemelerle birleştirilebilmekte, çok yönlü bir malzeme olmasına ve farklı uygulamalarda kullanılmasını sağlamaktadır. WO_3 'e benzer şekilde Bi_2O_3, yüksek erime noktası ve iyi mekanik özelliklere sahiptir. Bu özellikleriyle Bi_2O_3, PbO yerine kullanılabilecek bir alternatif olarak görülmektedir [69].

3.4 TEZ ÇALIŞMASINDA YER ALAN BİLEŞİKLERE AİT BİLGİLER

PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşikleri polimorf yapıya sahip olan bileşikler olup sıcaklık/basınç gibi etkiler ile beraber birden fazla kristal yapıda bulunabilmektedir. Tablo 3.1'de bu tez

çalışmasında yer alan farklı kristal yapılara ve atomik düzene sahip olan bileşiklerin deneysel olarak gözlemlenme durumları yer almaktadır. Bileşiklerin üretiminin mümkün olması, bu çalışma sonuçlarının uygulanabilir olması anlamına gelmektedir ve beklenen uygun, daha efektif radyasyondan korunma zırhı malzemesine ulaşılabileceğini göstermektedir. Bunlara ek olarak her bileşiğe ait birer adet deneysel olarak henüz gözlemlenmemiş kristal yapı yer almaktadır. Teorik olarak elde edilen bu kristal yapıların radyasyondan korunmada etkinliğinin de araştırılması eğer uygunsa deneyler ile elde edilmeye çalışılması önemlidir. Ancak bu şekilde bileşiklerin önceden Monte Carlo simülasyonu ile denenebilir olmasının etkinliği gözler önündedir. Tablo 3.2'de PbO bileşiklerinin, Tablo 3.3'de WO_3 bileşiklerinin ve Tablo 3.4'te Bi_2O_3 bileşiklerinin parametreleri yer almaktadır. Tablolarda yer alan Hacim/Atom sayısı ise bir atom başına ortalama hacim anlamına gelmektedir ve atomun ne kadar sıkı yapıda olduğunu tanımlamada kullanılmıştır. Simetri parametreleri olan uzay grubu ve nokta grupları o bileşiğin birim hücresinin atomik yapısının ne olduğunu göstermektedir. Kristallerin basit birim hücre, yüzey merkezli birim hücre, hacim merkezli birim hücre ya da taban merkezli birim hücre oldukları bu bilgilerle anlaşılmaktadır. Tablo 3.5'te kübik kristal yapıya, Tablo 3.6'da tetragonal kristal yapıya, Tablo 3.7'de ortorombik kristal yapıya ve Tablo 3.8'de monoklinik kristal yapıya ait uzay grupları ve nokta grupları yer almaktadır. Tez çalışmasında yer alan bileşiklere ait Wyckoff pozisyonları ise Tablo 3.9'da yer almaktadır. Atom içerisinde bulunan atomların konumlarını anlatan Wycoff pozisyonları atom yoğunluğu ve birim hacim genişliği açısından önemli olup yoğunluk üzerine etkili olmaktadır.

Tablo 3. 1: Çalışmada yer alan tüm bileşiklerin deneysel olarak gözlenebilirlikleri [19-34]

Bileşik	Krisyal Yapısı	Yoğunluk	Uzay Grubu	Nokta Grubu	Deneysel Olarak Gözlemlenme
PbO	Ortorombik	7,89 g·cm^{-3}	$Pca2_1$	mm2	Evet [70]
PbO	Ortorombik	9,14 g·cm^{-3}	Pbcm	mmm	Evet [71-75]
PbO	Tetragonal	8,37 g·cm^{-3}	$P4_2/mmc$	4/mmm	Hayır [76-79]
PbO	Tetragonal	8,81 g·cm^{-3}	P4/nmm	4/mmm	Evet
WO_3	Tetragonal	6,88 g·cm^{-3}	P4/nmm	4/mmm	Evet [80-82]
WO_3	Tetragonal	7,11 g·cm^{-3}	P4/ncc	4/mmm	Evet [82,83]
WO_3	Kübik	6,98 g·cm^{-3}	$Pm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	Evet [80,84,85]
WO_3	Kübik	7,25 g·cm^{-3}	$Im\bar{3}$	$m\bar{3}$	Hayır
Bi_2O_3	Kübik	7,3 g·cm^{-3}	I23	23	Evet [86]
Bi_2O_3	Kübik	8,86 g·cm^{-3}	$Pn\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	Evet [86-88]
Bi_2O_3	Ortorombik	8,7 g·cm^{-3}	Pccn	mmm	Evet [89-90]
Bi_2O_3	Ortorombik	8,94 g·cm^{-3}	Pbcn	mmm	Hayır [87]
Bi_2O_3	Monoklinik	9,37 g·cm^{-3}	$P2_1/c$	2/m	Evet [91]
Bi_2O_3	Monoklinik	9,44 g·cm^{-3}	$P2_1/c$	2/m	Evet [92-97]

Tablo 3. 2: PbO bileşiklerinin parametreleri [19-34]

Bileşik	PbO	PbO	PbO	PbO
Atom Sayısı	8	8	4	4
Yoğunluk	7.89 g·cm⁻³	9.14 g·cm⁻³	8.37 g·cm⁻³	8.81 g·cm⁻³
a	5.45 Å	4.73 Å	3.64 Å	4.00 Å
b	5.79 Å	5.62 Å	3.64 Å	4.00 Å
c	5.96 Å	6.10 Å	6.68 Å	5.26 Å
α	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
β	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
ɣ	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
Hacim	188.00 Å³	162.16 Å³	88.53 Å³	84.14 Å³
Kristal Yapısı	Ortorombik	Ortorombik	Tetragonal	Tetragonal
Latis Yapısı	Ortorombik	Ortorombik	Tetragonal	Tetragonal
Uzay Grubu	$Pca2_1$	Pbcm	$P4_2/mmc$	P4/nmm
Nokta Grubu	mm2	mmm	4/mmm	4/mmm
Hacim/Atom sayısı	23,5	20,27	22,1325	21,035

Tablo 3. 3: WO_3 bileşiklerinin parametreleri

Bileşik	WO_3	WO_3	WO_3	WO_3
Atom Sayısı	4	32	8	16
Yoğunluk	6.98 g·cm⁻³	7.25 g·cm⁻³	6.88 g·cm⁻³	7.11 g·cm⁻³
a	3.81 Å	7.52 Å	5.32 Å	5.24 Å
b	3.81 Å	7.52 Å	5.32 Å	5.24 Å
c	3.81 Å	7.52 Å	3.94 Å	7.90 Å
α	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
β	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
ɣ	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
Hacim	55.14 Å³	424.57 Å³	111.85 Å³	216.61 Å³
Kristal Yapısı	Kübik	Kübik	Tetragonal	Tetragonal
Latis Yapısı	Kübik	Kübik	Tetragonal	Tetragonal
Atom Sayısı	4	32	8	16
Uzay Grubu	$Pm\bar{3}m$	$Im\bar{3}$	P4/nmm	P4/ncc
Nokta Grubu	$m\bar{3}m$	$m\bar{3}$	4/mmm	4/mmm
Hacim/Atom sayısı	13,785	13,2678125	13,98125	13,538125

Tablo 3. 4: Bi_2O_3 bileşiklerinin parametreleri [19-34]

Bileşik	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
Atom Sayısı	20	40	60	10	20	20
Yoğunluk	9.44 g·cm⁻³	9.37 g·cm⁻³	7.30 g·cm⁻³	8.86 g·cm⁻³	8.70 g·cm⁻³	8.94 g·cm⁻³
a	5.87 Å	9.21 Å	10.83 Å	5.59 Å	5.06 Å	5.20 Å
b	8.12 Å	7.30 Å	10.83 Å	5.59 Å	5.57 Å	5.52 Å
c	7.45 Å	10.07 Å	10.83 Å	5.59 Å	12.63 Å	12.04 Å
α	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
β	112.48 º	102.54 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º
ɣ	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º	90.00 º

Tablo 3.4 (devam): Bi_2O_3 bileşiklerinin parametreleri [19-34]

Bileşik	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
Hacim	327.92 Å³	660.56 Å³	1271.50 Å³	174.58 Å³	355.68 Å³	346.19 Å³
Latis Yapısı	Monoklinik	Monoklinik	Kübik	Kübik	Ortorombik	Ortorombik
Uzay Grubu	$P2_1/c$	$P2_1/c$	I23	$Pn\bar{3}m$	Pccn	Pbcn
Nokta Grubu	2/m	2/m	23	$m\bar{3}m$	mmm	mmm
Hacim/Atom sayısı	16,39	16,51	21,19	17,45	17,78	17,309

Tablo 3. 5: Kübik kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98]

Nokta Grubu	Uzay Grubu		
Hermann–Mauguin sembolü	Basit	Yüzey Merkezli	Hacim Merkezli
23	P23	F23	I23
	$P2_13$		$I2_13$
$2/m\bar{3}$ ($m\bar{3}$)	$Pm\bar{3}$, $Pn\bar{3}$	$Fm\bar{3}$, $Fd\bar{3}$	$I\bar{3}$
	$Pa\bar{3}$		$Ia\bar{3}$
432	P432, $P4_232$	F432, $F4_132$	I432
	$P4_332$, $P4_132$		$I4_132$
$4\bar{3}m$	$P4\bar{3}m$	$F4\bar{3}m$	$I4\bar{3}m$
	$P4\bar{3}n$	$F4\bar{3}c$	$I4\bar{3}d$
$4/m\bar{3}2/m$ ($m\bar{3}m$)	$Pm\bar{3}m$,$Pn\bar{3}n$, $Pm\bar{3}n$,$Pn\bar{3}m$	$Fm\bar{3}m$, $Fm\bar{3}c$, $Fd\bar{3}m$, $Fd\bar{3}c$	$Im\bar{3}m$, $Ia\bar{3}d$

Tablo 3. 6: Tetragonal kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98]

Nokta Grubu	Uzay Grubu	
Hermann–Mauguin sembolü	Basit	Hacim Merkezli
4	P4, $P4_1$, $P4_2$, $P4_3$	I4, $I4_1$
4^{-}	$P4^{-}$	$I4^{-}$
4/m	P4/m, $P4_2/m$, P4/n, $P4_2/n$	I4/m, $I4_1/a$
422	P422, $P42_12$, $P4_122$, $P4_12_12$, $P4_222$, $P4_22_12$, $P4_322$, $P4_32_12$	I422, $I4_122$
4mm	P4mm, P4bm, $P4_2cm$, $P4_2nm$, P4cc, P4nc, $P4_2mc$, $P4_2bc$	I4mm, I4cm, $I4_1md$, $I4_1cd$
$4\bar{2}m$	$P4\bar{2}m$, $P4\bar{2}c$, $P4\bar{2}_1m$, $P4\bar{2}_1c$, $P4\bar{m}2$, $P4\bar{c}2$, $P4\bar{b}2$, $P4\bar{n}2$	$I4\bar{m}2$, $I4\bar{c}2$, $I4\bar{2}m$, $I4\bar{2}d$
4/mmm	P4/mmm, P4/mcc, P4/nbm, P4/nnc, P 4/mbm, P4/mnc, P4/nmm, P4/ncc, $P4_2/mmc$, $P4_2/mcm$, $P4_2/nbc$, $P4_2/nnm$, $P4_2/mbc$, $P4_2/mnm$, $P4_2/nmc$, $P4_2/ncm$	I4/mmm, I4/mcm, $I4_1/amd$, $I4_1/acd$

Tablo 3. 7: Ortorombik kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98]

Nokta Grubu	Uzay Grubu			
Hermann–Mauguin sembolü	Basit	Taban Merkezli	Yüzey Merkezli	Hacim Merkezli
222	P222, $P222_1$, $P2_12_12$, $P2_12_12_1$	$C222_1$, C222	F222	I222, $I2_12_12_1$
mm2	Pmm2, $Pmc2_1$, Pcc2, Pma2, $Pca2_1$, $Pnc2$, $Pmn2_1$, Pba2, $Pna2_1$, Pnn2	Cmm2,$Cmc2_1$Ccc2, mm2,Aem2,Ama2,Aea2	Fmm2, Fdd2	Imm2, Iba2, Ima2

Tablo 3.7 (devam): Ortorombik kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98]

Nokta Grubu	Uzay Grubu			
Hermann–Mauguin sembolü	Basit	Taban Merkezli	Yüzey Merkezli	Hacim Merkezli
mmm	Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnnm, Pmmn, Pbcn, Pbca, Pnma	Cmcm,Cmca,Cmmm,Cccm, Cmme, Ccc	Fmmm, Fddd	Immm, Ibam, Ibca, Imma

Tablo 3. 8: Monoklinik kristal yapısına ait nokta grubu ve uzay grubu [98]

Nokta Grubu	Uzay Grubu	
Hermann–Mauguin sembolü	Basit	Hacim Merkezli
2	P2, $P2_1$	C2
m	Pm, Pc	Cm, Cc
2/m	P2/m, $P2_1$/m	C2/m
	P2/c, $P2_1$/c	C2/c

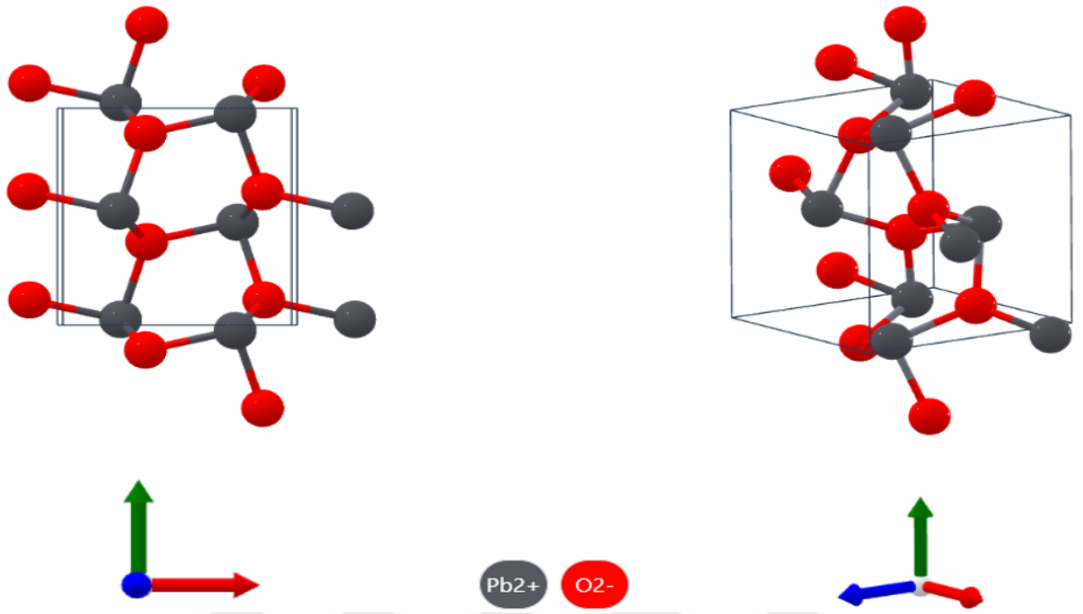
Tablo 3. 9: Tez çalışmasında yer alan bileşiklere ait Wyckoff pozisyonları [19-34]

Bileşik	Yoğunluk	Wyckoff	Element	X	Y	Z
PbO	7.89 g·cm⁻³	4a	Pb	0.752484	0.474081	0.278627
		4a	O	0.86705	0.115667	0.384477
PbO	9.14 g·cm⁻³	4d	Pb	3/4	0.015337	0.222951
		4d	O	3/4	0.904993	0.871502
PbO	8.37 g·cm⁻³	2c	O	0	1/2	0
		2e	Pb	0	0	3/4
PbO	8.81 g·cm⁻³	2a	O	1/2	1/2	0
		2c	Pb	1/2	0	0.225975
WO_3	6.98 g·cm⁻³	1a	W	0	0	0
		3d	O	0	0	1/2
WO_3	7.25 g·cm⁻³	8c	W	3/4	1/4	1/4
		24g	O	0	0.218929	0.7222
WO_3	6.88 g·cm⁻³	2c	W	0	1/2	0.934818
		2c	O	0	1/2	0.489177
		4d	O	1/4	1/4	0
WO_3	7.11 g·cm⁻³	4c	W	0	1/2	0.216658
		4c	O	0	1/2	0.99419
		8f	O	0.29705	0.29705	3/4
Bi_2O_3	9.44 g·cm⁻³	4e	Bi	0.460339	0.543342	0.223791
		4e	Bi	0.977269	0.686725	0.633036
		4e	O	0.229718	0.531789	0.488508
		4e	O	0.264223	0.550607	0.875655
		4e	O	0.722333	0.703144	0.791874
Bi_2O_3	9.37 g·cm⁻³	4e	Bi	0.288583	0.098396	0.928358
		4e	Bi	0.923016	0.592311	0.317841
		4e	Bi	0.425849	0.873366	0.337187

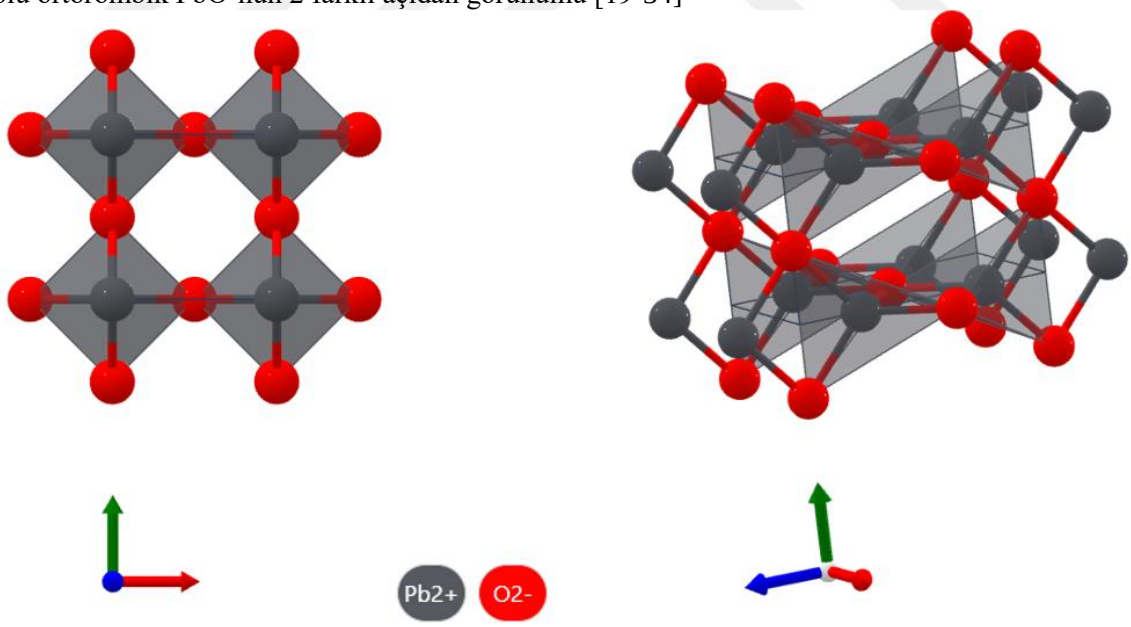
Tablo 3.9 (devam): Tez çalışmasında yer alan bileşiklere ait Wyckoff pozisyonları [19-34]

Bileşik	Yoğunluk	Wyckoff	Element	X	Y	Z
		4e	Bi	0.205496	0.617517	0.069539
		4e	O	0.432095	0.632009	0.176059
		4e	O	0.925478	0.651975	0.531566
		4e	O	0.724416	0.050116	0.845988
		4e	O	0.221718	0.803101	0.883282
		4e	O	0.281321	0.064841	0.426115
		4e	O	0.188821	0.141296	0.715816
		12d	O	0	0.231066	0
Bi_2O_3	7.30 g·cm⁻³	24f	Bi	0.344474	0.937364	0.147774
		24f	O	0.25072	0.580703	0.820928
Bi_2O_3	8.86 g·cm⁻³	4b	Bi	1/4	3/4	3/4
		6d	O	0	0	1/2
		4c	O	1/4	0.480427	1/4
Bi_2O_3	8.70 g·cm⁻³	8e	Bi	0.961381	0.318544	0.626138
		8e	O	0.386774	0.323437	0.058405
		4c	O	0.548866	3/4	0
Bi_2O_3	8.94 g·cm⁻³	8d	Bi	0.70964	0.050817	0.124633
		8d	O	0.874719	0.58754	0.699604

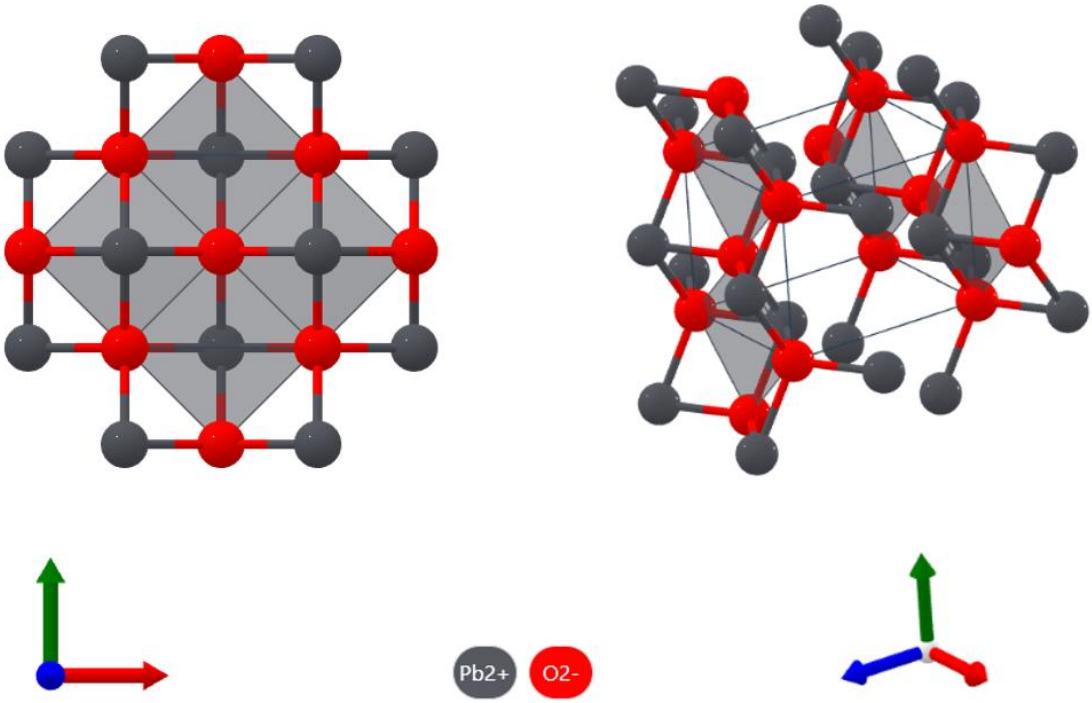
3.5 TEZDE YER ALAN BİLEŞİKLERE AİT KRİSTAL YAPILARIN FARKLI AÇILARINA AİT GÖRSELLERİ



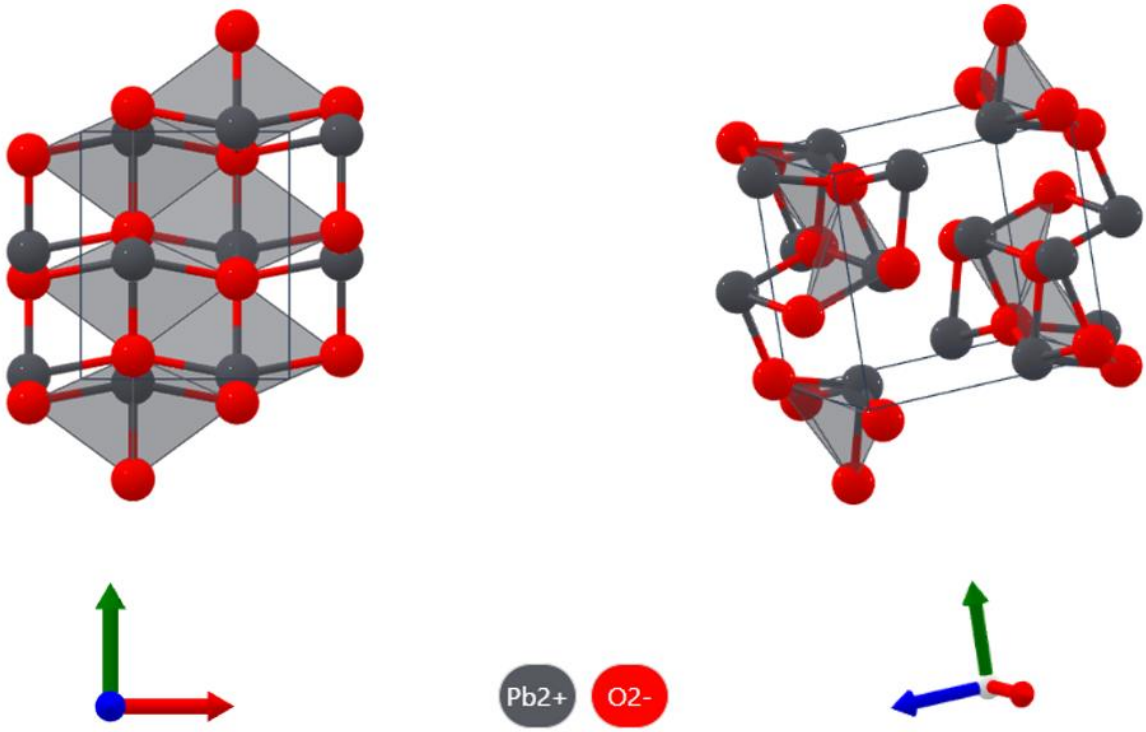
Şekil 3. 5: 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



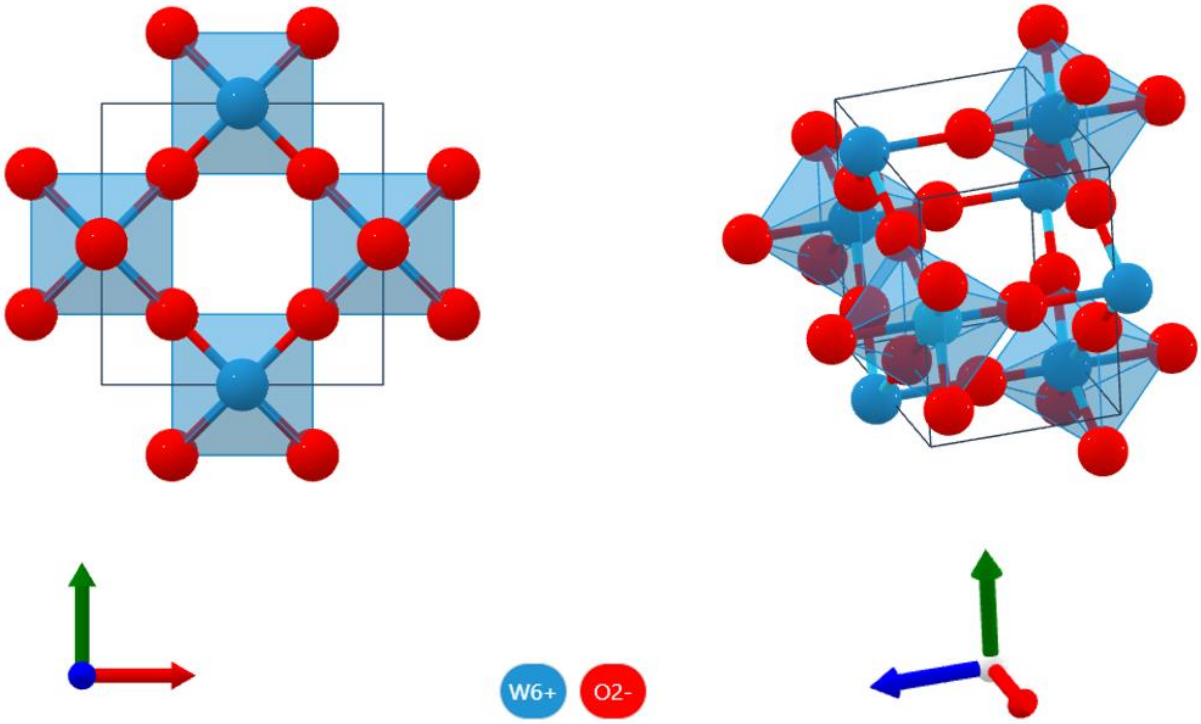
Şekil 3. 6: 8,37 g/cm^3 yoğunluğa 88.53 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu $P4_2/mmc$ uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



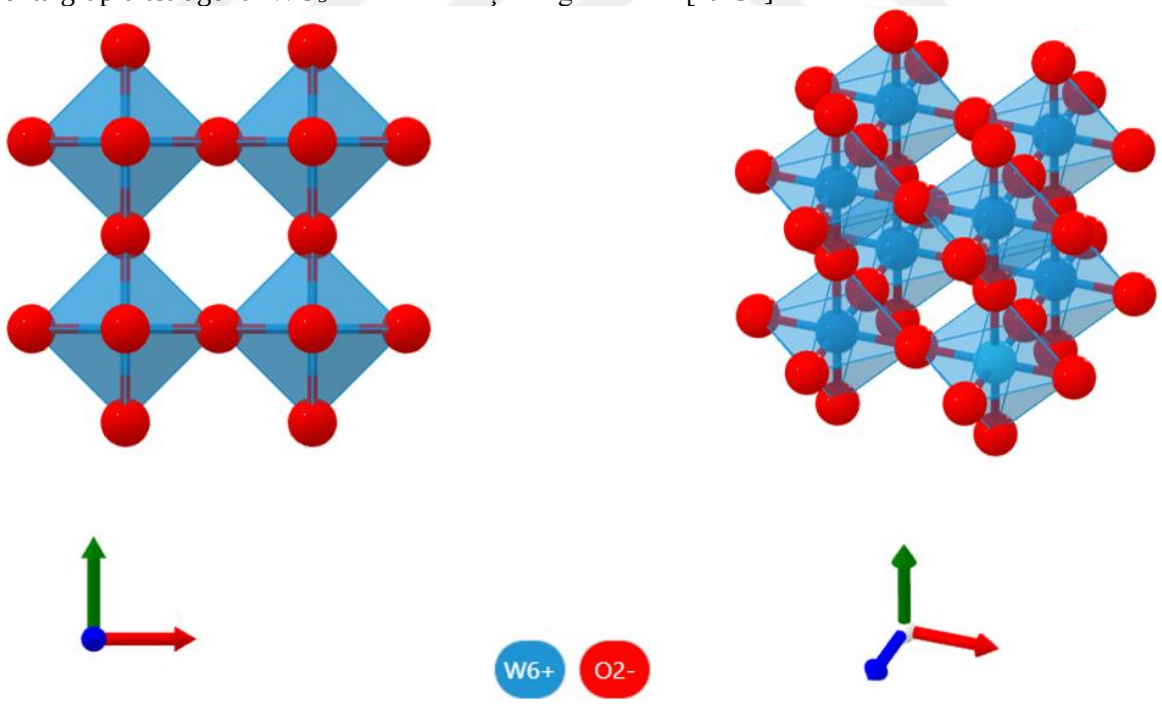
Şekil 3. 7: 8,81 g/cm^3 yoğunluğa 84.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



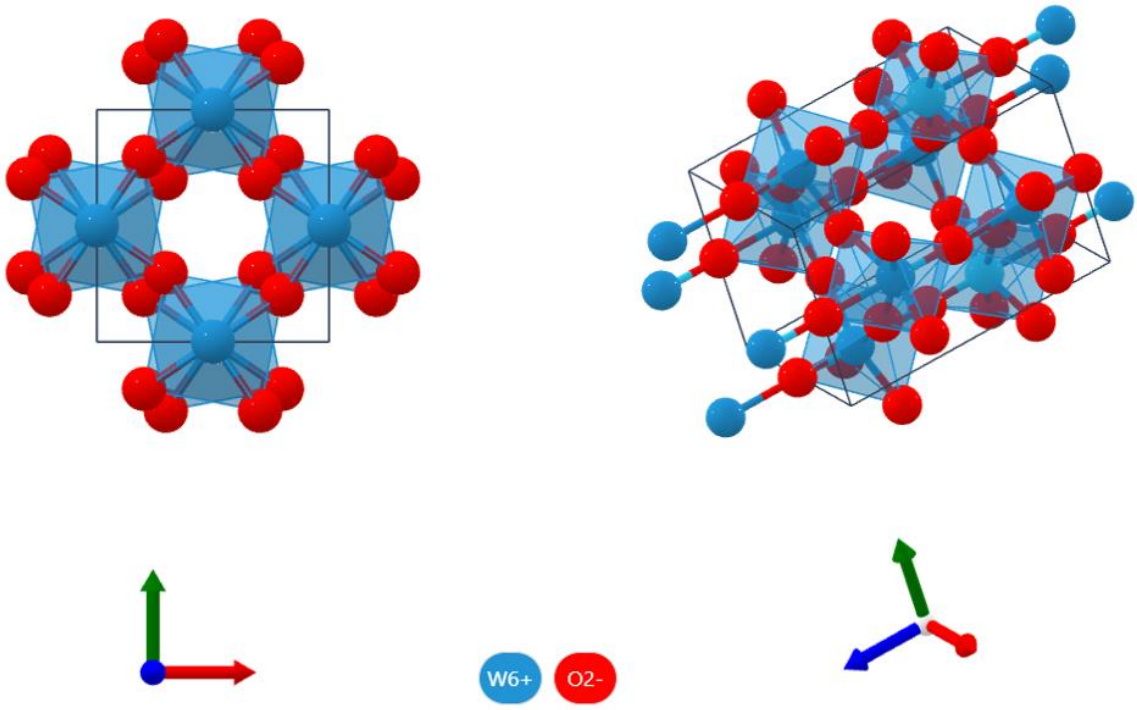
Şekil 3. 8: 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'nun 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



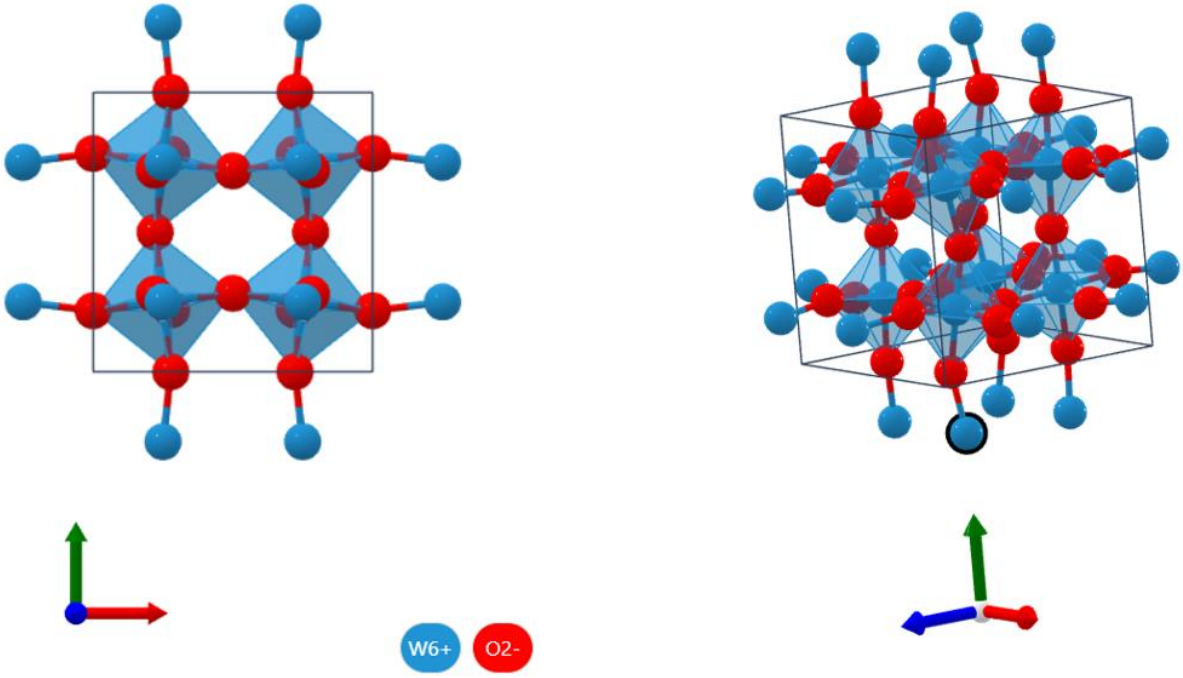
Şekil 3. 9: 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3 'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



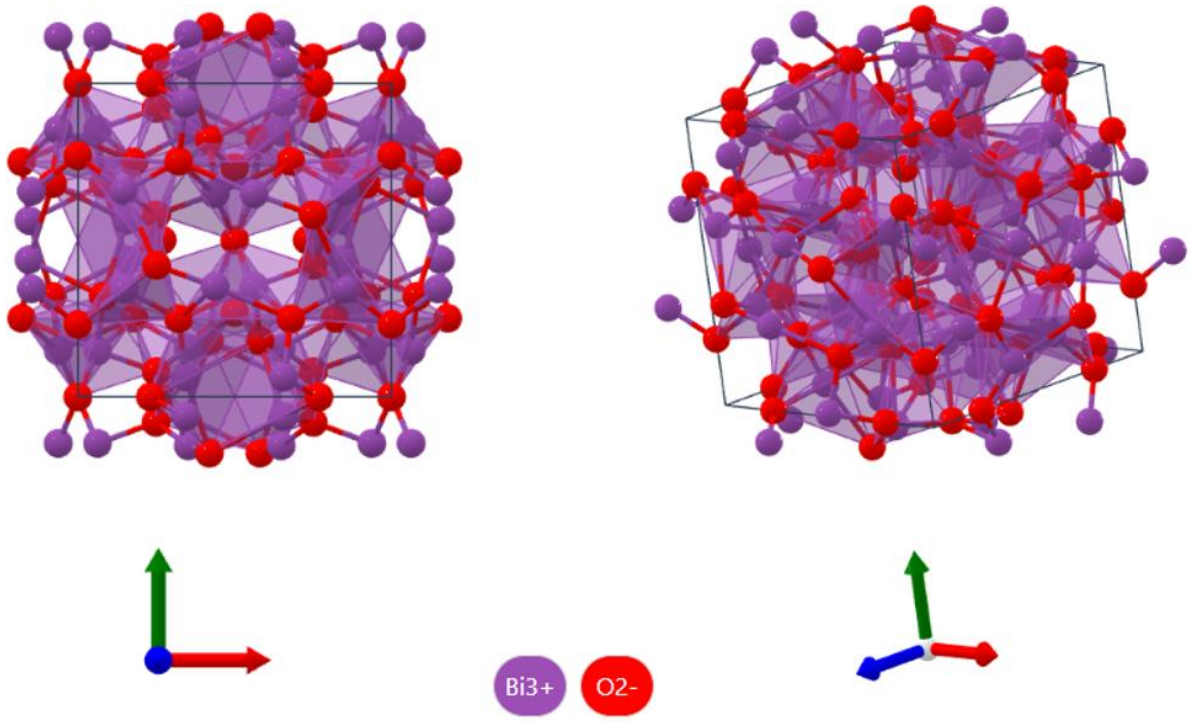
Şekil 3. 10: 6,98 g/cm^3 yoğunluğa 55.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu Pm$\bar{3}$m uzay grubu ve m$\bar{3}$m nokta gruplu kübik WO_3 'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



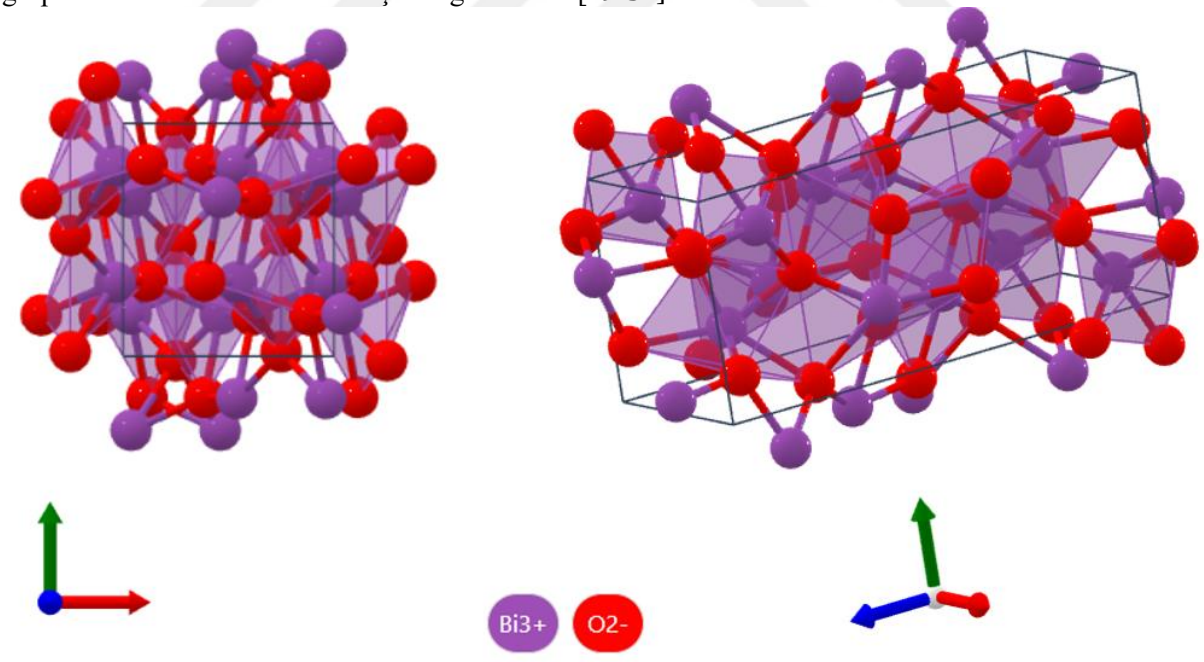
Şekil 3. 11: 7,11 g/cm^3 yoğunluğa 216.61 Å^3 hacme sahip olan 16 atomlu P4/ncc uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



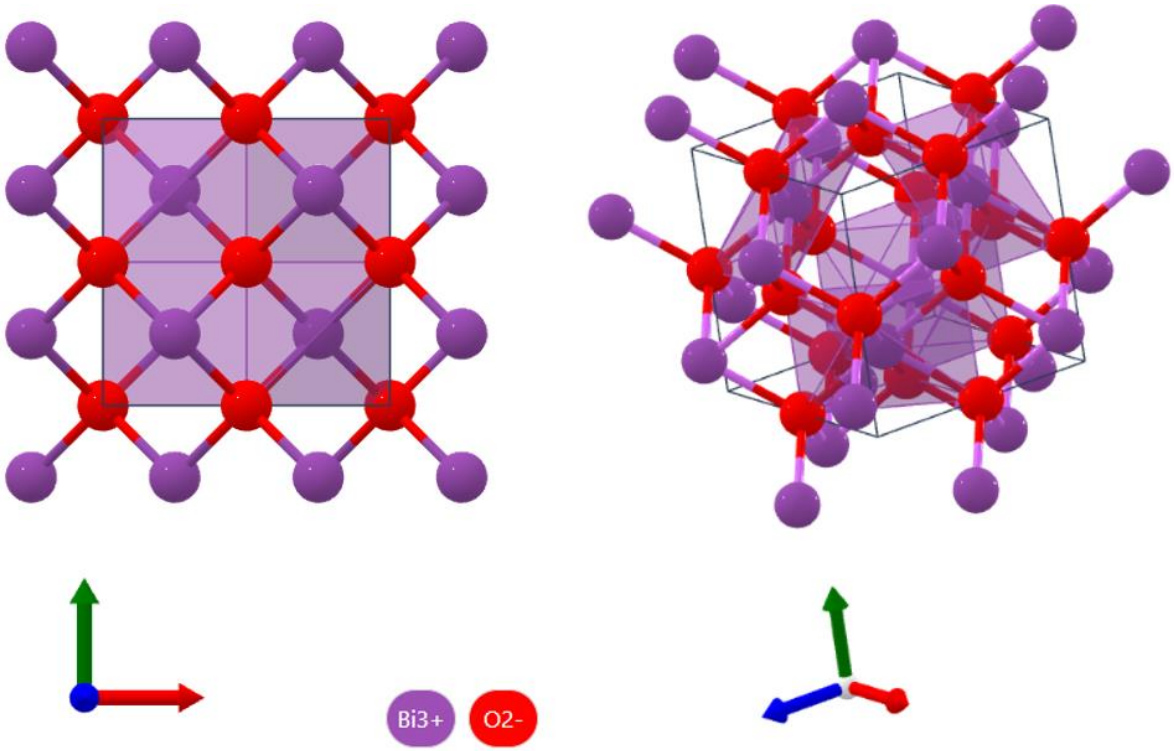
Şekil 3. 12: 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu Im$\bar{3}$ uzay grubu ve m$\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



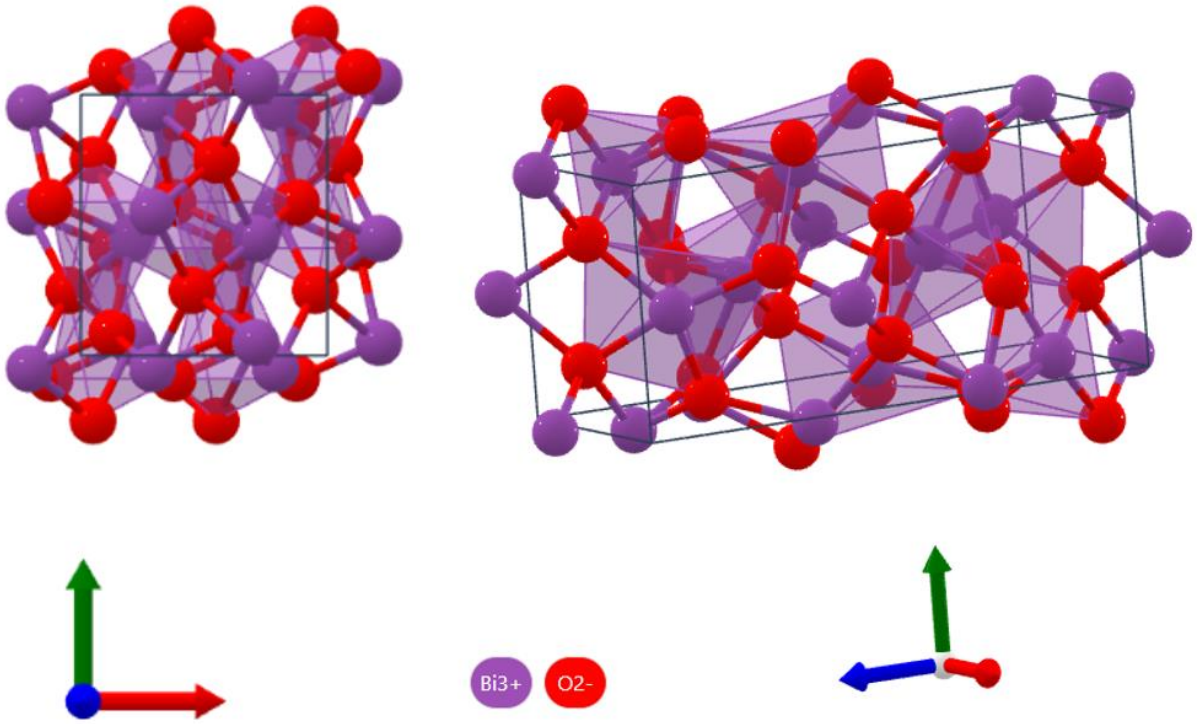
Şekil 3. 13: 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



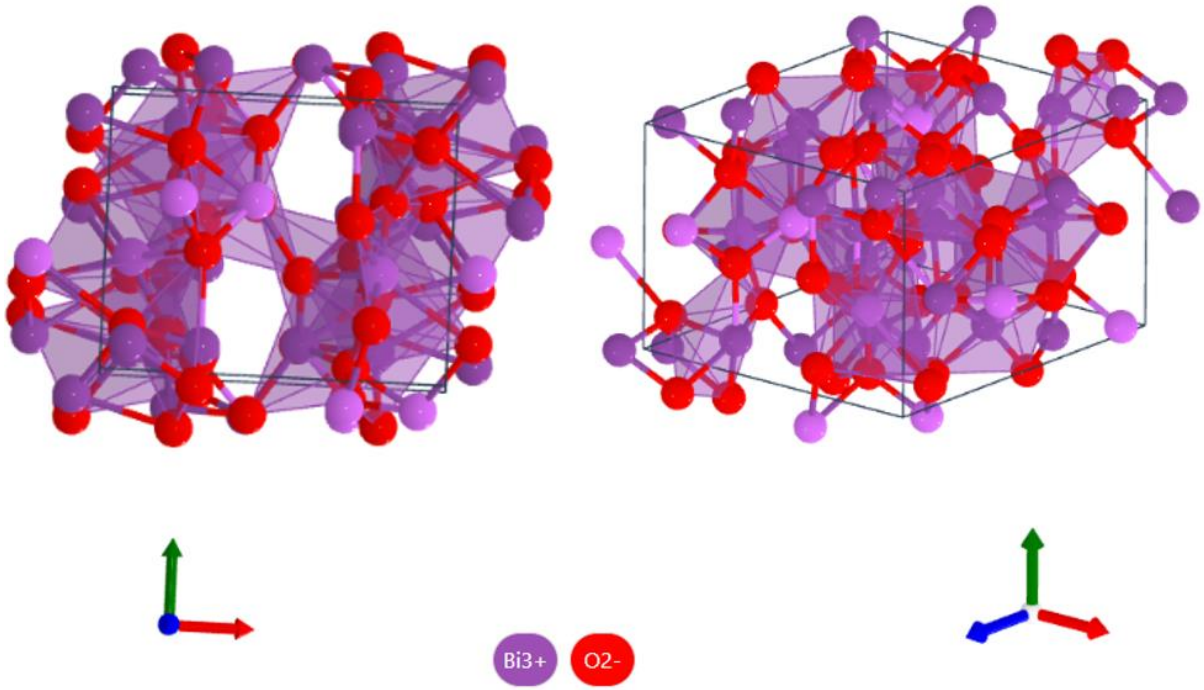
Şekil 3. 14: 8,70 g/cm^3 yoğunluğa 355.68 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu Pccn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



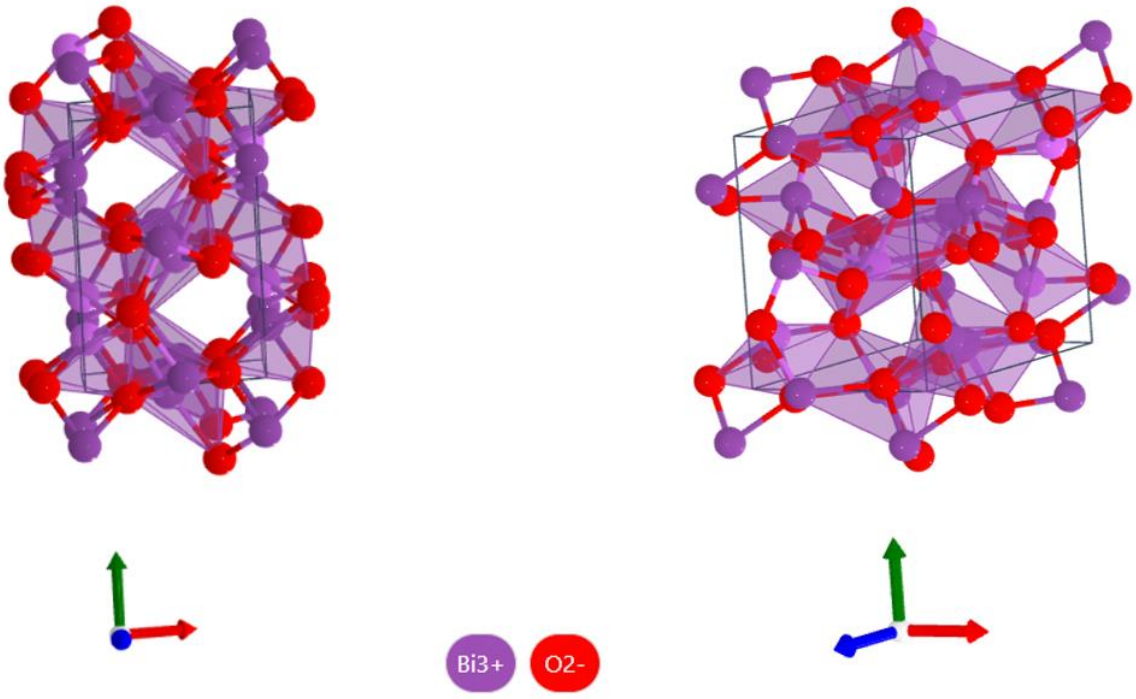
Şekil 3. 15: 8,86 g/cm^3 yoğunluğa 174.58 Å^3 hacme sahip olan 10 atomlu Pn$\bar{3}$m uzay grubu ve m$\bar{3}$m nokta gruplu kübikik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



Şekil 3. 16: 8,94 g/cm^3 yoğunluğa 346.19 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu Pbcn uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



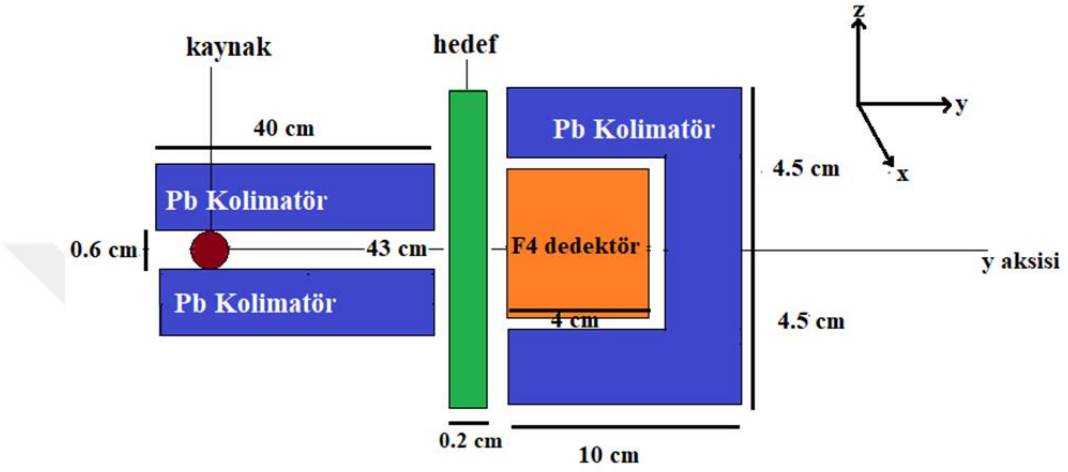
Şekil 3. 17: 9,37 g/cm^3 yoğunluğa 660.56 Å^3 hacme sahip olan 40 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3,'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]



Şekil 3. 18: 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ün 2 farklı açıdan görünümü [19-34]

3.6 MCNPX (2.4.0) MONTE CARLO KODU KULLANILARAK OLUŞTURULAN SİMULASYON

Bu tez çalışmasında literatür verilerine uygun biçimde [99] Şekil 3.19'da yer alan simülasyon geometrisi tasarlanmış olup yalnızca p foton modunda çalıştırılmıştır.

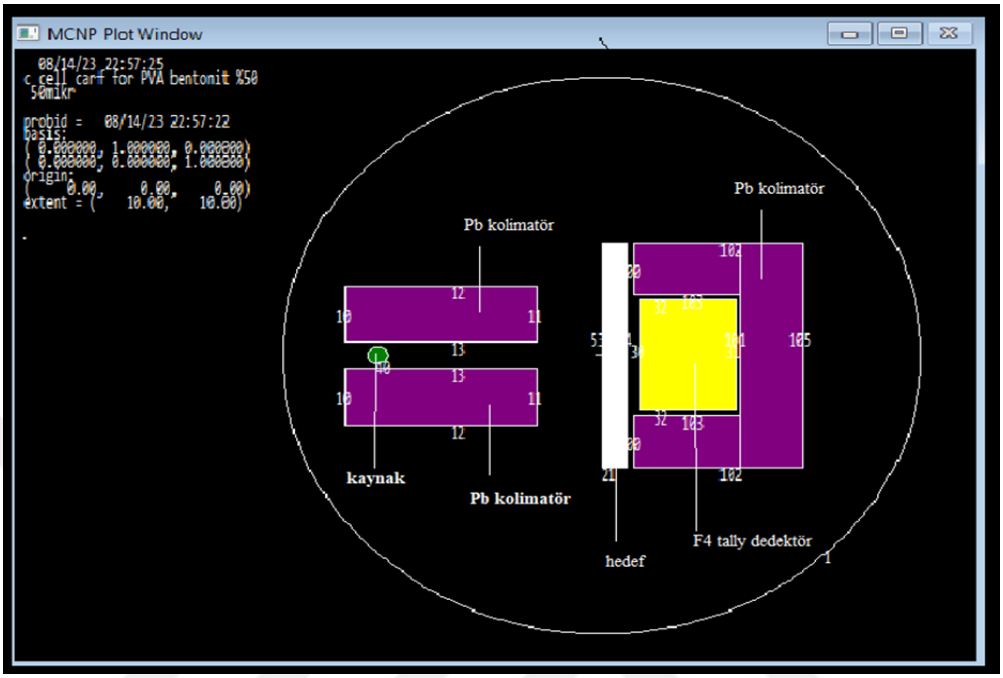


Şekil 3. 19: MCNPX kodunda oluşturulan simülasyon geometrisinin görselleştirilmesi

Simülasyon SDEF, AXS, POS, PAR, ERG ve CELL kartları kullanılarak gerçekleştirilmiştir. 4 farklı kristal yapıya sahip PbO, 4 farklı kristal yapıya sahip WO_3 ile 6 farklı kristal yapıya sahip Bi_2O_3 bileşiği ve bu bileşiklerin sıradan beton ile PVA (polivinilin alkol reçine) içerisine eklenerek oluşturulan karışımlarının iyonize radyasyona karşı nasıl bir durdurma gücüne sahip olduklarının anlaşılması için gerekli olan doğrusal zayıflama katsayısını belirlemek için tek enerjili ışınlar kullanılarak simülasyon çalıştırılmıştır. Tek enerjili ışınlar için 81 keV (Ba-133), 140 keV (Tc-99m), 662 keV (Cs-137), 1173 keV ve 1332 keV (Co-60) gama yayan radyoaktif kaynaklardan seçilmiştir.

Dar ışın demeti geometrisi oluşturulmuş olup simülasyon için 3 mm yarıçaplı küresel bir kaynak, kurşun kolimatörler ve bir hedef Şekilde gösterildiği gibi dizayn edilmiştir. Foton kaynağı, yarıçapı 3 mm ve uzunluğu 40 cm olan silindirik bir kurşun kolimatörün içine yerleştirilmiştir. Dedektör aynı eksende kaynaktan 43 cm uzakta konumlandırılmış olup 3x3x4 cm^3 boyutlarındadır. Dedektör kolimatörü yine kurşun olup ise 4,5 cm çapında ve 10 cm uzunluğundadır. İçerisine bileşikler atanan hedef materyal ise radyoaktif gama kaynağından 40 cm uzağa yerleştirilmiştir ve boyutları 4×4×0,2 cm^3 olarak tasarlanmıştır.

MCNPX versiyon 2.4.0'da çalıştırılan ve Şekil 3.19'da görülen biçimde tasarlanan simülasyon geometrisinin MCNP4C'den alınmış ekran görüntüsü Şekil 3.20'daki gibidir.



Şekil 3. 20: MCNP4C'den alınan simülasyon geometrisine ait ekran görüntüsü

Bu çalışma sırasında hedef tanımlamasında kullanılan bileşiklere ait malzeme tanım bilgileri Tablo 3.10'da yer almaktadır.

Tablo 3. 10: Monte Carlo Simülasyonunda kullanılan malzeme tanımları

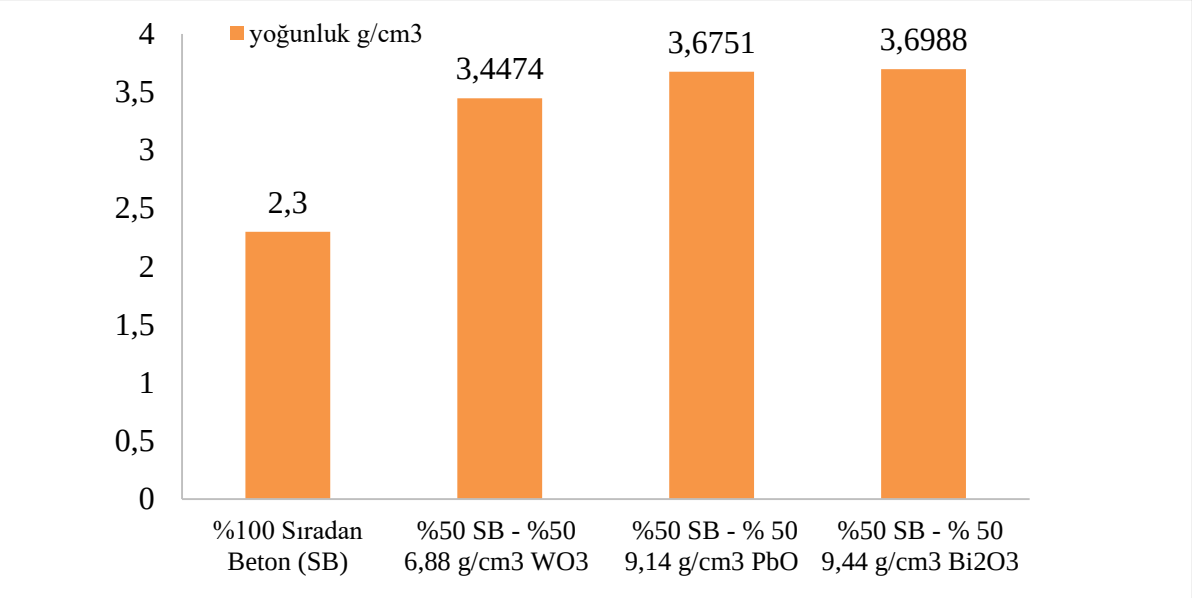
Element	Sıradan Beton (SB)	Polivilin Alkol (PVA)	PbO	WO_3	Bi_2O_3
H	0,0094	0.091520	-	-	-
C	0,0009	0.545296	-	-	-
O	0,5366	0.363184	0,071682	0,207024	0,10301
Na	0,0046	-	-	-	-
Mg	0,0012	-	-	-	-
Al	0,0132	-	-	-	-
Si	0,3674	-	-	-	-
S	0,0008	-	-	-	-
K	0,0031	-	-	-	-
Ca	0,0565	-	-	-	-
Fe	0,0063	-	-	-	-
Pb	-	-	0,928318	-	-
W	-	-	-	0,792976	
Bi	-	-	-	-	0,89699

Bileşiklerin saf halde bulunan durumlarında sahip oldukları yoğunluk değerleri kullanılırken, karışım halinde kullanılan yeni malzemeler için yeni yoğunluk değerleri bulunmaktadır. Karışımlara ait yoğunluk hesapları için denklem 3.1'den yararlanılmaktadır.

$$d_{son} = \frac{100}{\frac{d_1}{\rho_{d_1}} + \frac{d_2}{\rho_{d_2}}} \quad (3.1)$$

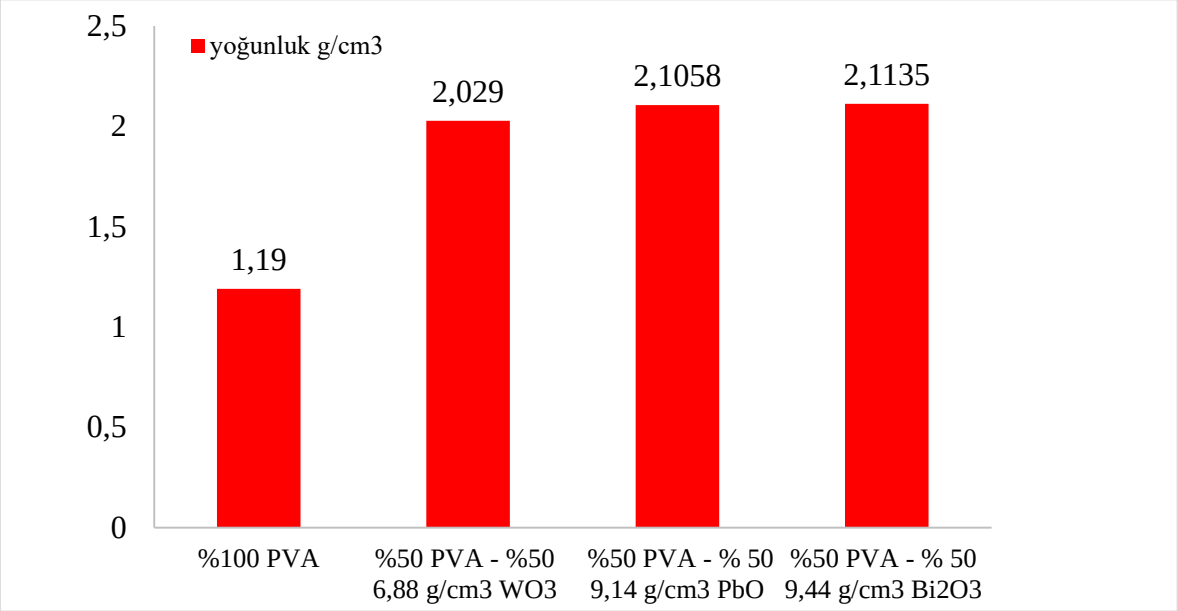
Burada d_{son} son durumdaki yoğunluk, d_1 birinci malzemenin katkı oranı, ρ_{d_1} birinci malzemenin yoğunluğu; d_2 ikinci malzemenin katkı oranı ve ρ_{d_2} ikinci malzemenin yoğunluğunu temsil etmektedir.

%50 oranda yoğunluğu 2,3 g/cm^3 olan sıradan beton ile sırasıyla %50 oranda 9,14 g/cm^3 PbO, 6,88 g/cm^3 WO_3 ve 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3 eklenmesi ile oluşan yeni malzemelere ait yoğunluk değerleri Şekil 3.21'de yer almaktadır.



Şekil 3. 21: %50 oranda yoğunluğu 2,3 g/cm^3 olan sıradan beton ile sırasıyla %50 oranda 9,14 g/cm^3 PbO, 6,88 g/cm^3 WO_3 ve 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3 eklenmesi ile oluşan yeni malzemelere ait yoğunluk değerleri

%50 oranda yoğunluğu 1,19 g/cm^3 olan Polivilin Alkol (PVA) ile sırasıyla %50 oranda 9,14 g/cm^3 PbO, 6,88 g/cm^3 WO_3 ve 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3 eklenmesi ile oluşan yeni malzemelere ait yoğunluk değerleri Şekil 3.22'de yer almaktadır.



Şekil 3. 22: %50 oranda yoğunluğu 1,19 g/cm^3 olan Polivilin Alkol (PVA) ile sırasıyla %50 oranda 9,14 g/cm^3 PbO, 6,88 g/cm^3 WO_3 ve 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3 eklenmesi ile oluşan yeni malzemelere ait yoğunluk değerleri

Şekil 3.23 'de örnek bir input dosyası bulunmaktadır. Buraya bakıldığında input dosyasının 3 ana bölümden oluştuğu, hangi bölümde nelerin tasvir edildiği görülmektedir. İncelenecek zırh materyaline ait yoğunluk değerinin girilmesi malzeme tanımı aşamasında zorunlu olması dolayısıyla karışımlar için de yoğunluk hesaplaması yapılması gerekmektedir.

```
c cell cards for PbO 9.14
1 0 1 imp:p 0
2 0 -1 #3 #4 #5 #6 #7 #8 imp:p 1
3 1 -9.14 -2 3 -4 5 -6 7 imp:p 1
4 0 -8 imp:p 1
6 3 -11.34 -9 10 -11 12 imp:p 1
7 3 -11.34 -13 14 15 -16 imp:p 1
8 3 -11.34 16 -17 -18 imp:p 1
5 0 -20 21 -22 23 24 -25 imp:p 1

mode p
sdef pos=0 -38 0 erg=1.332 axs=0 1 0 par=2 cell=4
f4:p 5
m1 82000 0.928318 8000 0.071682
m3 82000 1
ctme 1

1 so 100
2 py 0.1
3 py -0.1
4 px 4
5 px -4
6 pz 4
7 pz -4
8 sy -38 0.3
9 cy 5
10 cy 0.3
11 py -1
12 py -41
13 cy 9
14 cy 2
15 py 1
16 py 5.1
17 py 10
18 cy 9
20 pz 1.5
21 py 1
22 py 5
23 pz -1.5
24 px -1.5
25 px 1.5
```

Şekil 3. 23: 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip PbO için kullanılan simulasyon input dosyası

4. BULGULAR

Bölüm 3.5'de detaylı olarak bahsedilmiş olan, 4 farklı atom düzenine sahip PbO bileşiği, 4 farklı atom düzenine sahip WO_3 bileşiği ile 6 farklı düzenine sahip Bi_2O_3 bileşiğine ait Monte Carlo Simülasyonu sonuçları Tablolarda yer almaktadır. Her bileşiğe ait en sıkı ve en boşluklu duruma sahip olan yapılarının sahip oldukları LAC, HVL, MFP ve TVL değerleri birbirleriyle karşılaştırılmış olup tüm sonuçlar Grafikler şeklinde sunulmuştur.

Bunlara ek olarak en sıkı ve en boşluklu dolayısıyla en yüksek ve en düşük yoğunluğa sahip bileşiklerin bir malzeme içerisinde nasıl bir etkisi olduğunun anlaşılması amacıyla simülasyon çalışması bu malzemelerin radyasyondan korunmada yaygın olarak kullanılan baz malzeme olan sıradan beton ve polivilin alkol reçine (PVA) içerisine %50 oranda katkılanması ile gerçekleştirilmiş olup LAC, HVL, MFP ve TVL değerleri elde edilmiştir.

4.1 SİMÜLASYON VALİDASYON SONUÇLARI

Monte Carlo kodu kullanılarak tasarlanan geometri ile elde edilen sonuçların güvenilirliğini test etmek amacıyla yoğunluğu 2,3 g/cm^3 olan sıradan betona ait farklı enerji değerlerinde doğrusal zayıflama katsayıları MCNPX kodu ile hesaplanmıştır.

Dar demet geometrisi oluşturularak 140 keV, 662 keV, 1173 keV ve 1332 keV gama enerjileri için elde edilen doğrusal zayıflama katsayıları Ulusal Standartlar ve Teknoloji Enstitüsü (NIST) verileri [47] ve K. Mokhtari vd. [100] tarafından gerçekleştirilen çalışmada yer alan deneysel veriler ile karşılaştırılmıştır.

Tablo 4. 1: MCNPX, XCOM ve mevcut olan deneysel çalışmalar ile elde edilen doğrusal zayıflatma katsayıları ve % fark değerleri

Enerji (keV)	MCNPX	XCOM NIST [47]	K.Mokhtari vd. [100]	MCNPX ile XCOM % FARK	MCNPX ile K.Mokhtari vd. arasında % fark
140	0,3367	0,3383	-	0,4729	-
364	0,2301	0,2313	-	0,5188	-
662	0,178	0,1791	0,1782	0,6141	0,1122
1332	0,127452	0,127811	0,1256	0,280883	-1,4745

4.2: FARKLI ATOMİK DÜZENLERE PBO, WO_3 VE BI_2O_3 BİLEŞİKLERİNE AİT DOĞRUSAL ZAYIFLATMA KATSAYISI, YARI DEĞER KALINLIĞI, ORTALAMA SERBEST YOL VE ONDA BİR DEĞER KALINLIĞI DEĞERLERİ

Tez çalışmasında yer alan farklı atomik düzenlere sahip olan bileşiklere ait radyasyondan korunmada en önemli parametre olan, malzemenin radyasyonu ne kadar tutabildiğini ifade eden LAC değerleri Tablo 4.2-4.4, radyasyon şiddetinin yarıya düşmesi için gerekli malzeme kalınlığı olan HVL değerleri Tablo 4.5-4.7, radyasyonun bir medyum içerisinde herhangi bir etkileşim yapmadan ilerleyebileceği ortalama mesafeyi ifade eden MFP değerleri Tablo 4.8-4.10'da ve gelen radyasyon şiddetini onda bir değerine indirmek için gerekli malzeme kalınlığını ifade eden TVL Tablo 4.11-4.13'te yer almaktadır. Tablo 4.2-Tablo 4.4 'de yer alan verilerin karşılaştırılması Şekil 4.1-Şekil 4.3, Tablo 4.5-Tablo 4.7'da yer alan verilerin karşılaştırılması Şekil 4.4-4.6, Tablo 4.8-Tablo 4.10'da yer alan verilerin karşılaştırılması Şekil 4.7-4.9 ve Tablo 4.11-Tablo 4.13'te yer alan verilerin karşılaştırılması Şekil 4.10-Şekil 4.12'de yer almaktadır.

Tablo 4. 2: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları

Polimorf PbO	PbO	PbO	PbO	PbO
	Tetragonal	Tetragonal	Ortorombik	Ortorombik
Enerji (keV)	LAC			
140	18,5107	19,4775	17,4592	20,1887
364	2,2012	2,3214	2,0695	2,4145
662	0,9032	0,9496	0,8513	0,9865
1332	0,4689	0,4963	0,4400	0,5116
Yoğunluk (g/cm^3)	8,37 g/cm^3	8,81 g/cm^3	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3

Tablo 4. 3: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları

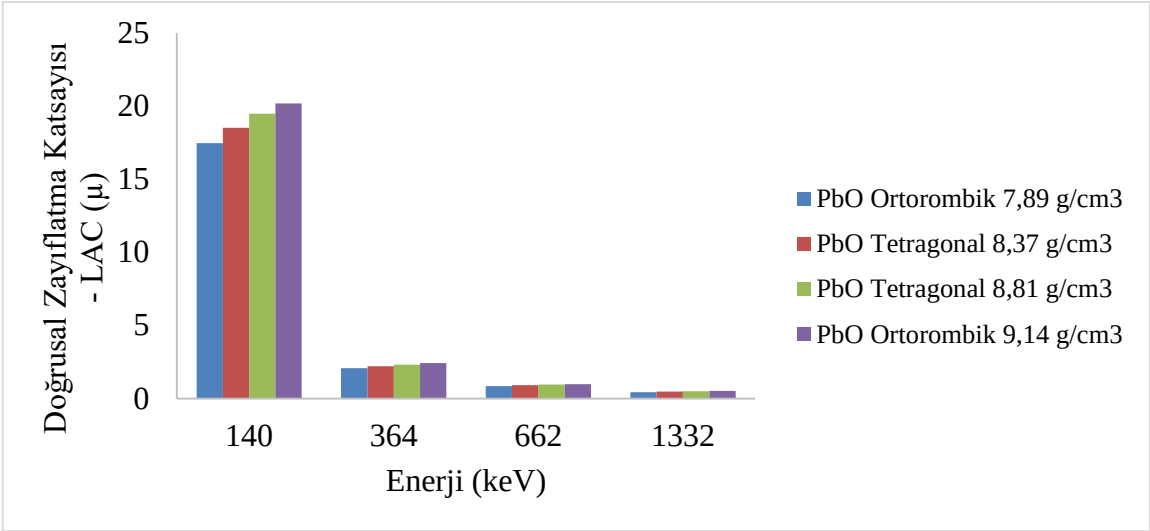
Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	WO_3	WO_3
	Tetragonal	Tetragonal	Kübik	Kübik
Enerji (keV)	LAC			
140	10,3711	10,73963	10,5295	10,9603
364	1,3694	1,4179	1,3901	1,4458
662	0,6387	0,6596	0,6484	0,6733
1332	0,3702	0,3824	0,3768	0,3904
Yoğunluk (g/cm^3)	6,88 g/cm^3	7,11 g/ cm^3	6,98 g/cm^3	7,25 g/cm^3

Tablo 4. 4: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları

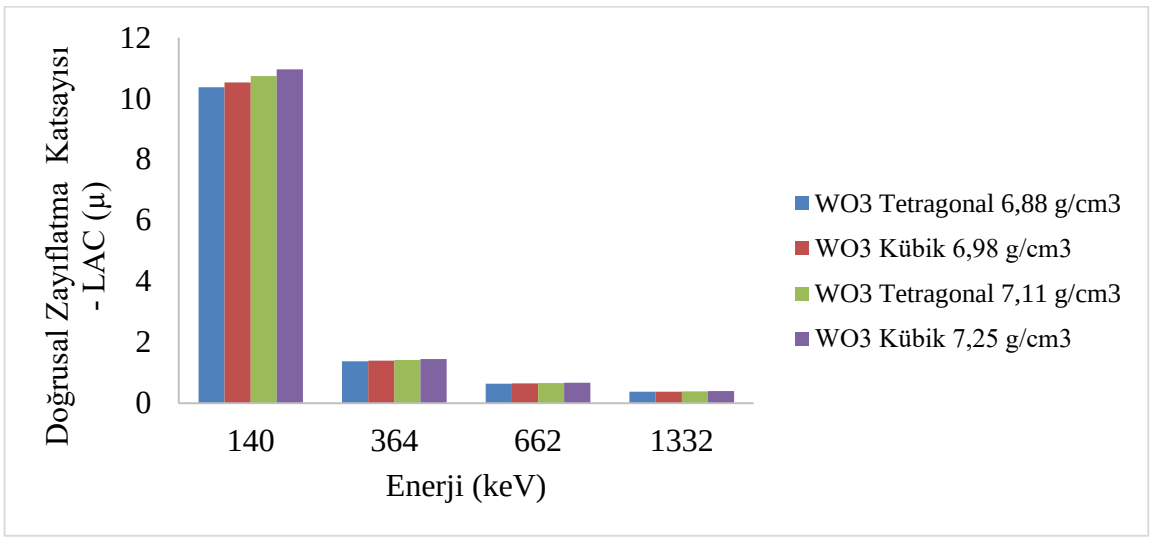
Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
	Kübik	Kübik	Ortorombik	Ortorombik	Monoklinik	Monoklinik
Enerji (keV)	LAC					
140	16,1364	19,6197	19,8124	19,2290	20,8171	20,9905

Tablo 4.4 (devam): Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları

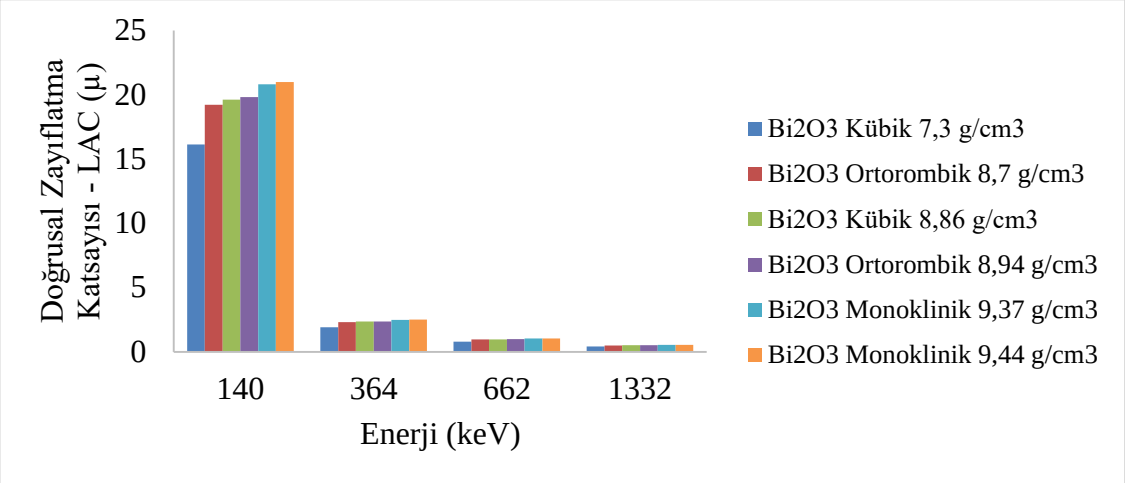
Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3 Kübik	Bi_2O_3 Kübik	Bi_2O_3 Ortorombik	Bi_2O_3 Ortorombik	Bi_2O_3 Monoklinik	Bi_2O_3 Monoklinik
Enerji (keV)	LAC					
364	1,9188	2,3434	2,3654	2,2983	2,4826	2,5033
662	0,7949	0,9669	0,9747	0,9494	1,0231	1,0313
1332	0,4116	0,5024	0,5056	0,4957	0,5275	0,5333
Yoğunluk (g/cm^3)	7,3 g/cm^3	8,86 g/cm^3	8,94 g/cm^3	8,7 g/cm^3	9,37 g/cm^3	9,44 g/cm^3



Şekil 4. 1: PbO bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması



Şekil 4. 2: WO_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması



Şekil 4. 3: Bi_2O_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması

Tablo 4. 5: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait yarı değer kalınlığı değerleri

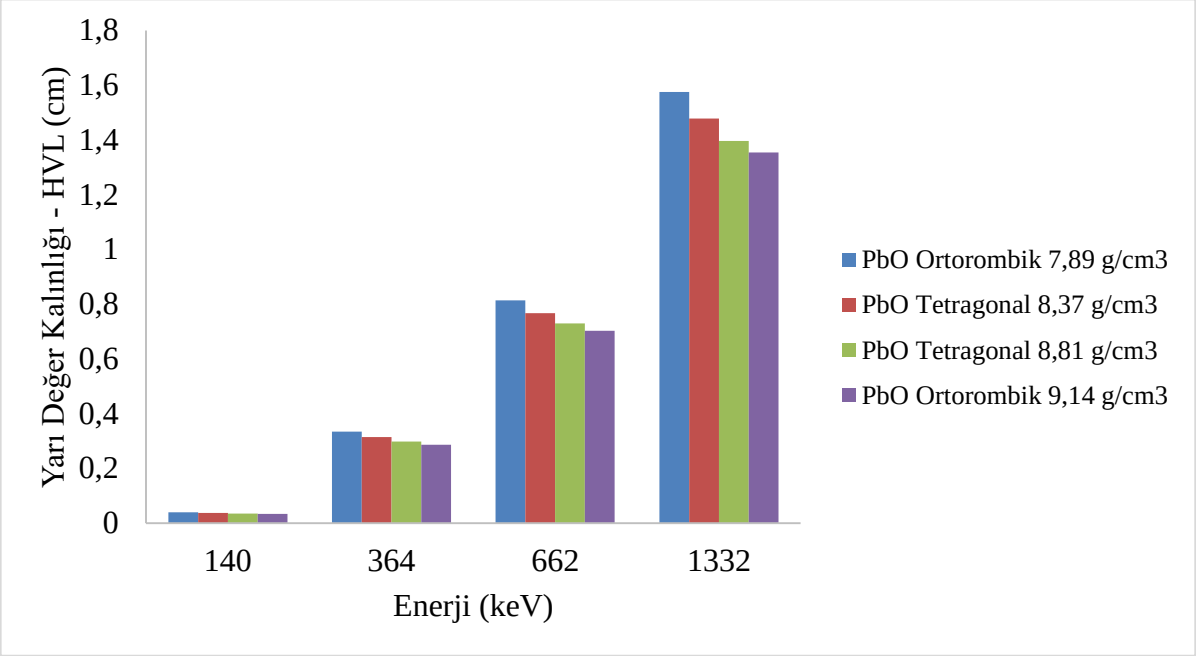
Polimorf PbO	PbO	PbO	PbO	PbO
	Tetragonal	Tetragonal	Ortorombik	Ortorombik
Enerji (keV)	HVL			
140	0,0374	0,0355	0,0396	0,0343
364	0,3148	0,2985	0,3348	0,2870
662	0,7671	0,7297	0,8140	0,7024
1332	1,4778	1,3962	1,5748	1,3543
Yoğunluk (g/cm^3)	8,37 g/cm^3	8,81 g/cm^3	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3

Tablo 4. 6: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlığı değerleri

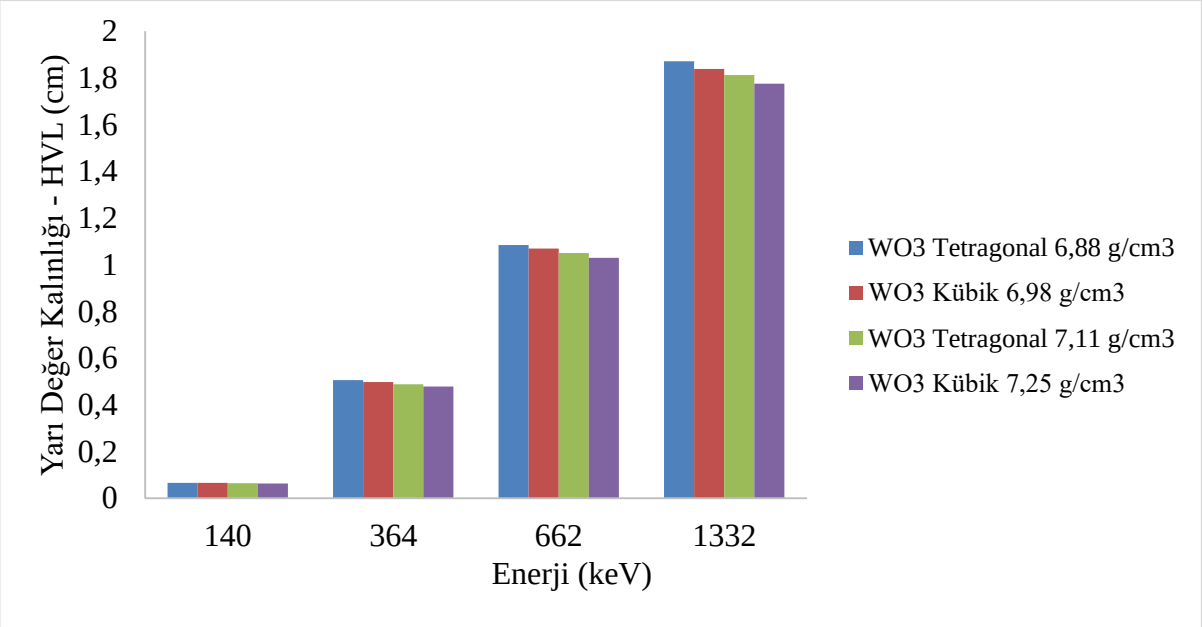
Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	WO_3	WO_3
	Tetragonal	Tetragonal	Kübik	Kübik
Enerji (keV)	HVL			
140	0,0668	0,0645	0,0658	0,0632
364	0,5060	0,4887	0,4985	0,4792
662	1,0848	1,0506	1,0687	1,0292
1332	1,8715	1,8119	1,8387	1,7748
Yoğunluk (g/cm^3)	6,88 g/cm^3	7,11 g/cm^3	6,98 g/cm^3	7,25 g/cm^3

Tablo 4. 7: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlığı değerleri

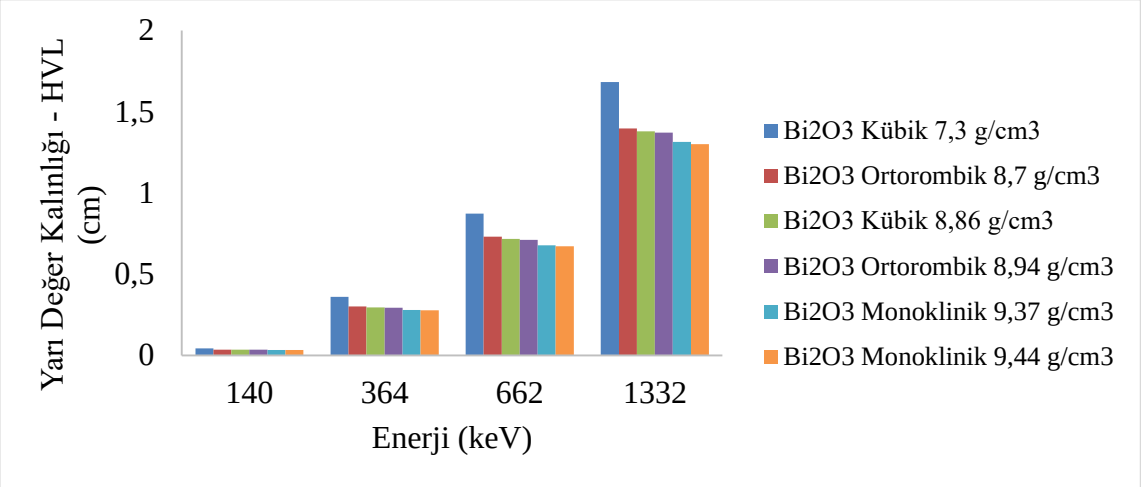
Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
	Kübik	Kübik	Ortorombik	Ortorombik	Monoklinik	Monoklinik
Enerji (keV)	HVL					
140	0,0429	0,0353	0,0349	0,0360	0,0332	0,0330
364	0,3611	0,2957	0,2929	0,3015	0,2791	0,2768
662	0,8717	0,7167	0,7109	0,7298	0,6773	0,6719
1332	1,6835	1,3791	1,3706	1,3978	1,3135	1,2993
Yoğunluk (g/cm^3)	7,3 g/cm^3	8,86 g/cm^3	8,94 g/cm^3	8,7 g/cm^3	9,37 g/cm^3	9,44 g/cm^3



Şekil 4. 4: PbO bileşiklerine ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması



Şekil 4. 5: WO_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması



Şekil 4. 6: Bi_2O_3 bileşiklerine ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması

Tablo 4. 8: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerleri

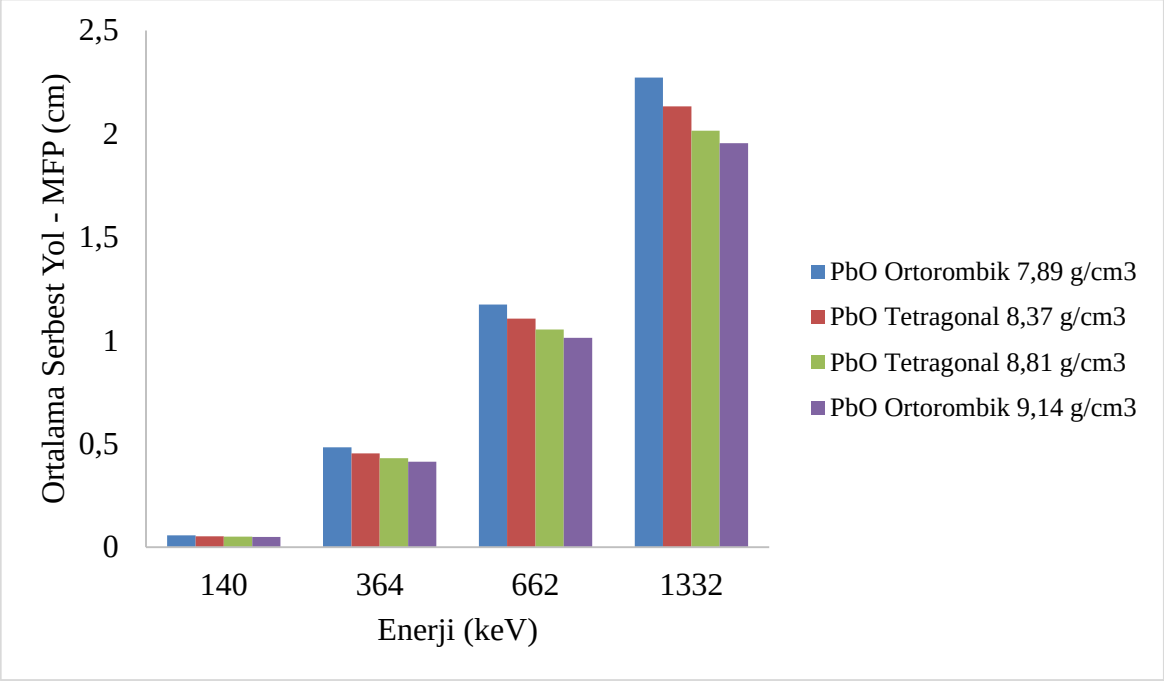
Polimorf PbO	PbO	PbO	PbO	PbO
	Tetragonal	Tetragonal	Ortorombik	Ortorombik
Enerji (keV)	MFP			
140	0,0540	0,0513	0,0572	0,0495
364	0,4542	0,4307	0,4831	0,4141
662	1,1070	1,0530	1,1746	1,0136
1332	2,1324	2,0148	2,2724	1,9543
Yoğunluk (g/cm^3)	8,37 g/cm^3	8,81 g/cm^3	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3

Tablo 4. 9: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerleri

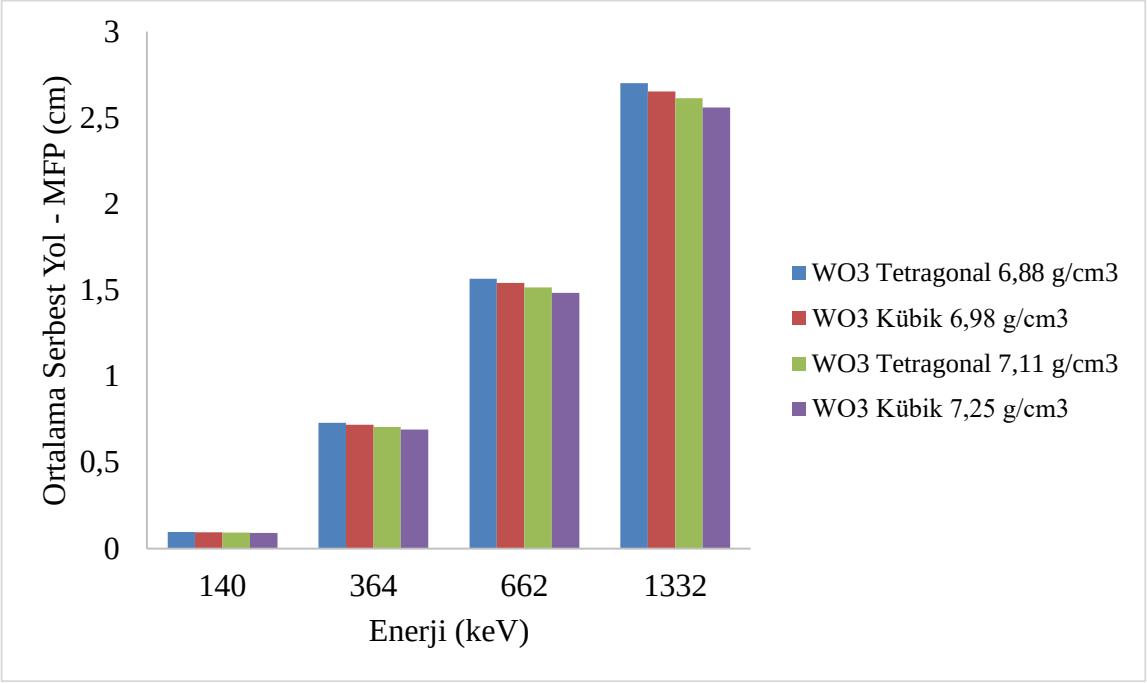
Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	WO_3	WO_3
	Tetragonal	Tetragonal	Kübik	Kübik
Enerji (keV)	MFP			
140	0,0964	0,0931	0,0949	0,0912
364	0,7302	0,7052	0,7193	0,6916
662	1,5654	1,5160	1,5421	1,4851
1332	2,7007	2,6147	2,6533	2,5611
Yoğunluk (g/cm^3)	6,88 g/cm^3	7,11 g/cm^3	6,98 g/cm^3	7,25 g/cm^3

Tablo 4. 10: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerleri

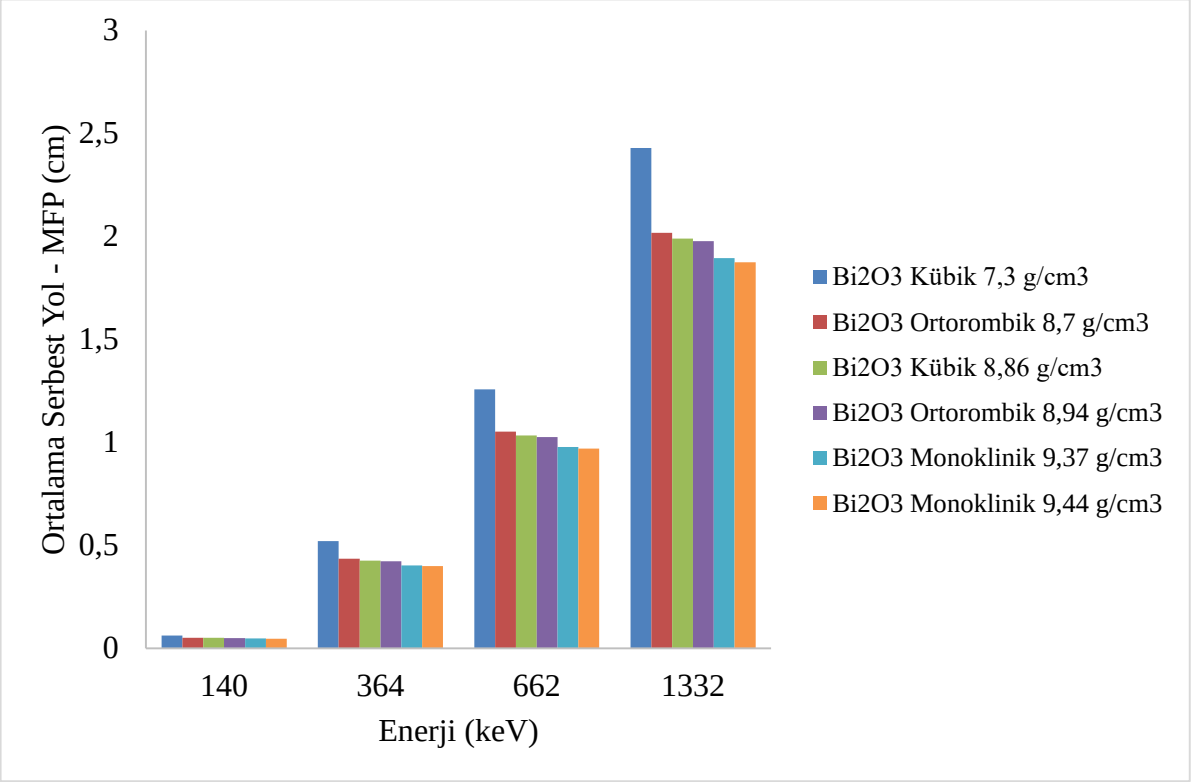
Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
	Kübik	Kübik	Ortorombik	Ortorombik	Monoklinik	Monoklinik
Enerji (keV)	MFP					
140	0,0619	0,0509	0,0504	0,0520	0,0480	0,0476
364	0,5211	0,4267	0,4227	0,4350	0,4027	0,3994
662	1,2580	1,0342	1,0258	1,0531	0,9774	0,9695
1332	2,4293	1,9900	1,9778	2,0170	1,8954	1,8750
Yoğunluk (g/cm^3)	7,3 g/cm^3	8,86 g/cm^3	8,94 g/cm^3	8,7 g/cm^3	9,37 g/cm^3	9,44 g/cm^3



Şekil 4. 7: PbO bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 4. 8: WO_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 4. 9: Bi_2O_3 bileşiklerine ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4. 11: Farklı atomik düzenlere sahip PbO bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerleri

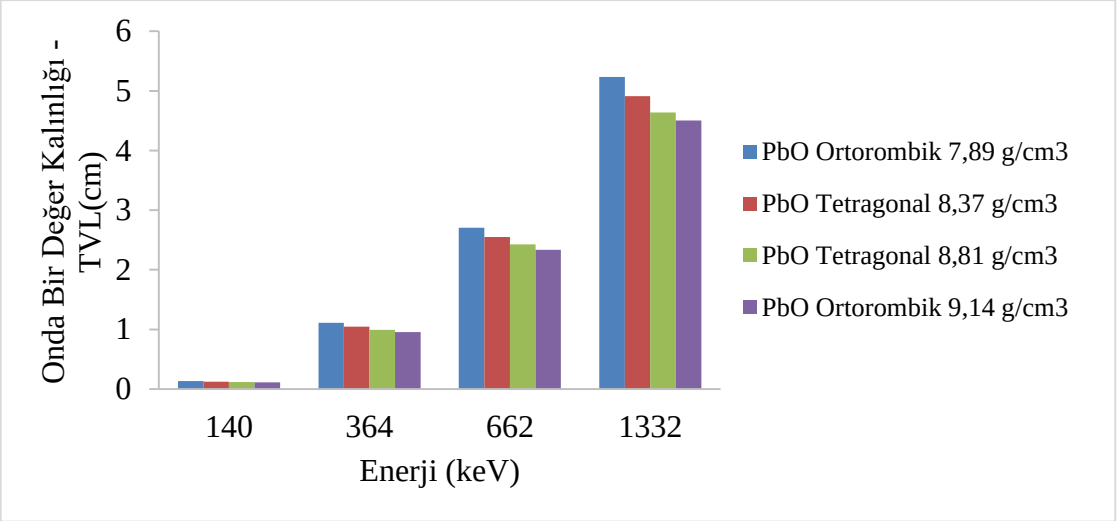
Polimorf PbO	PbO	PbO	PbO	PbO
	Ortorombik	Tetragonal	Tetragonal	Ortorombik
Enerji (keV)	TVL			
140	0,1319	0,1244	0,1182	0,1140
364	1,1128	1,0462	0,9920	0,9538
662	2,7052	2,5498	2,4252	2,3345
1332	5,2340	4,9114	4,6403	4,5015
Yoğunluk (g/cm^3)	7,89 g/cm^3	8,37 g/cm^3	8,81 g/cm^3	9,14 g/cm^3

Tablo 4. 12: Farklı atomik düzenlere sahip WO_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerleri

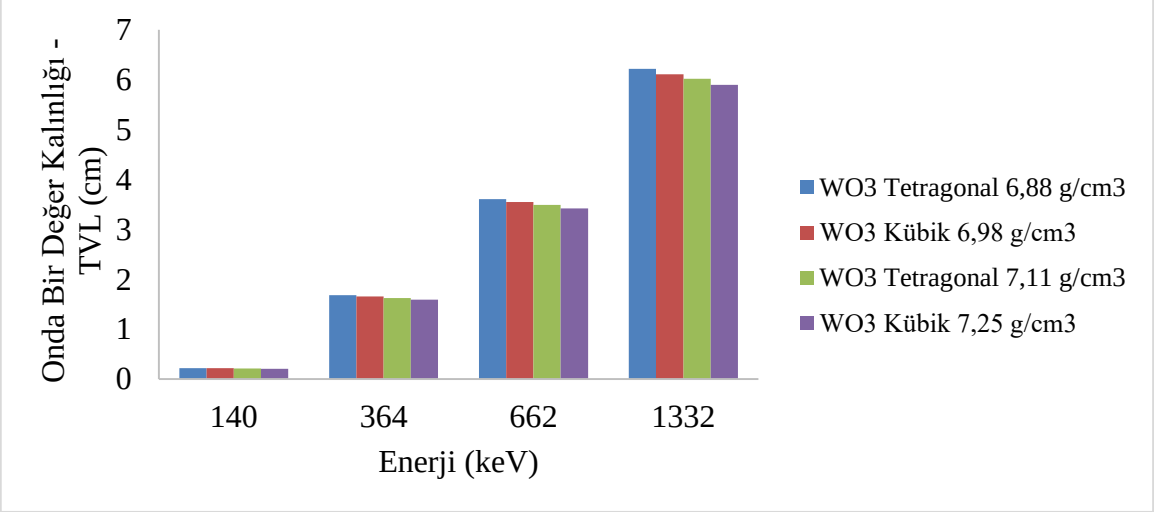
Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	WO_3	WO_3
	Tetragonal	Kübik	Tetragonal	Kübik
Enerji (keV)	TVL			
140	0,2220	0,2187	0,2144	0,2101
364	1,6817	1,6567	1,6242	1,5928
662	3,6057	3,5518	3,4915	3,4204
1332	6,2209	6,1119	6,0224	5,8990
Yoğunluk (g/cm^3)	6,88 g/cm^3	6,98 g/cm^3	7,11 g/ cm^3	7,25 g/cm^3

Tablo 4. 13: Farklı atomik düzenlere sahip Bi_2O_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerleri

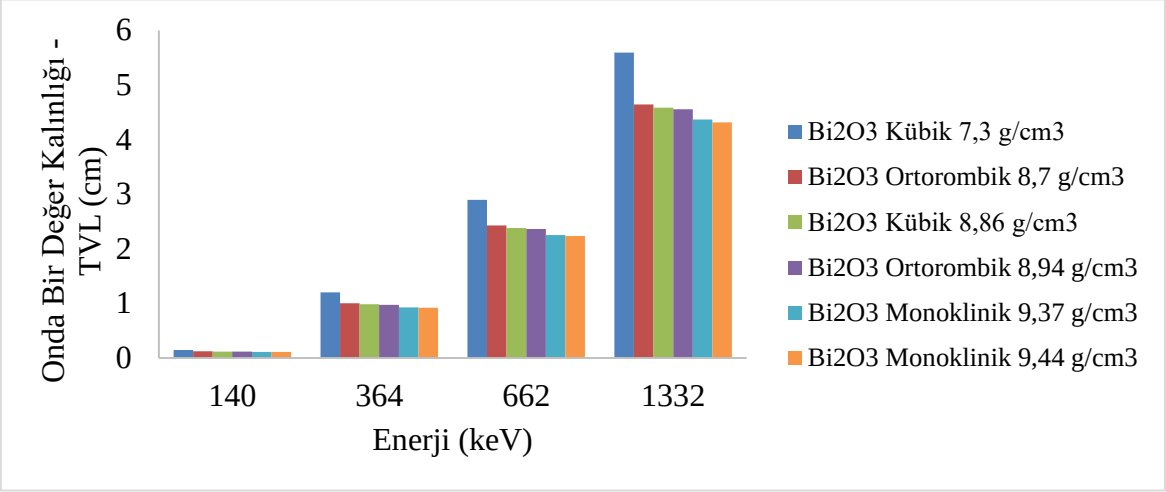
Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3 Kübik	Bi_2O_3 Ortorombik	Bi_2O_3 Kübik	Bi_2O_3 Ortorombik	Bi_2O_3 Monoklinik	Bi_2O_3 Monoklinik
Enerji (keV)	TVL					
140	0,1427	0,1197	0,1173	0,1162	0,1106	0,1097
364	1,2002	1,002	0,9827	0,9736	0,9276	0,9199
662	2,8972	2,4257	2,3818	2,3627	2,2510	2,2331
1332	5,595	4,6459	4,5839	4,5549	4,3658	4,3183
Yoğunluk (g/cm^3)	7,3 g/cm^3	8,7 g/cm^3	8,86 g/cm^3	8,94 g/cm^3	9,37 g/cm^3	9,44 g/cm^3



Şekil 4. 10: PbO bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 4. 11: WO_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 4. 12: Bi_2O_3 bileşiklerine ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması

PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait LAC, HVL, MFP ve TVL değerleri Tablo 4.14 - 4.17 de yer almaktadır. Tablo 'ye ait verilen Şekil 4.13-4.16'te karşılaştırılmalı olarak görülmektedir.

Tablo 4. 14: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait doğrusal zayıflatma katsayıları

Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO En Boşluklu	PbO En Sıkı	WO_3 En Boşluklu	WO_3 En Sıkı	Bi_2O_3 En Boşluklu	Bi_2O_3 En Sıkı
	Ortorombik	Ortorombik	Tetragonal	Kübik	Kübik	Monoklinik
Enerji (keV)	LAC					
140	17,4592	20,1887	10,3711	10,9603	16,1364	20,9905
364	2,0695	2,4145	1,3694	1,4458	1,9188	2,5033
662	0,8513	0,9865	0,6387	0,6733	0,7949	1,0313
1332	0,4400	0,5116	0,3702	0,3904	0,4116	0,5333
Yoğunluk (g/cm^3)	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3

Tablo 4. 15: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait yarı değer kalınlığı değerleri

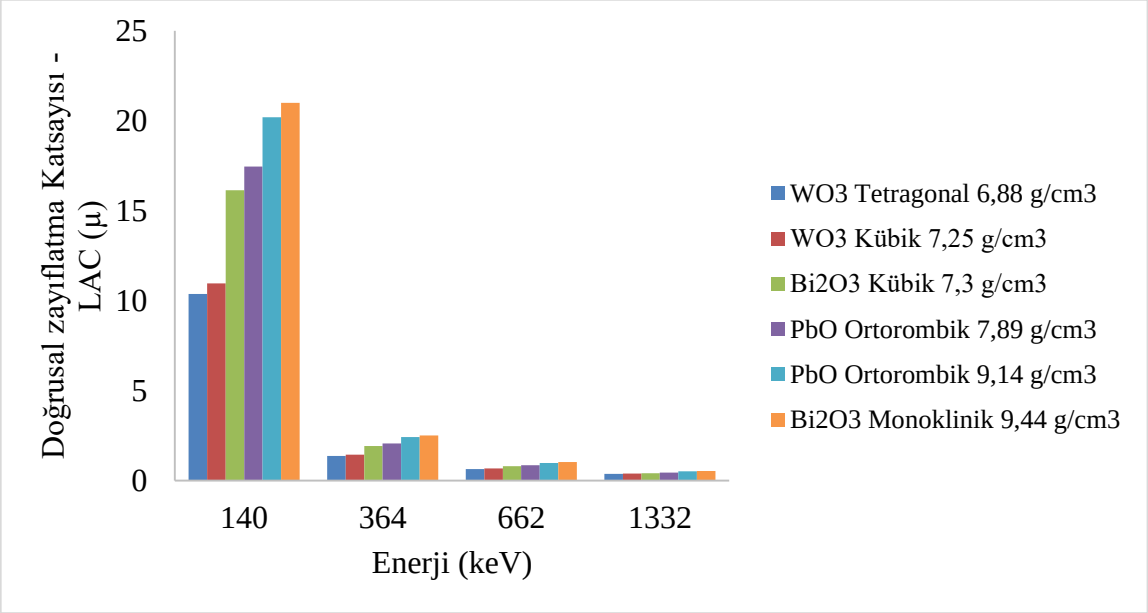
Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	PbO	WO_3	WO_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
	Ortorombik	Ortorombik	Tetragonal	Kübik	Kübik	Monoklinik
Enerji (keV)	HVL					
140	0,0396	0,0343	0,0668	0,0632	0,0429	0,033
364	0,3348	0,287	0,506	0,4792	0,3611	0,2768
662	0,814	0,7024	1,0848	1,0292	0,8717	0,6719
1332	1,5748	1,3543	1,8715	1,7748	1,6835	1,2993
Yoğunluk (g/cm^3)	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3

Tablo 4. 16: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait ortalama serbest yol değerleri

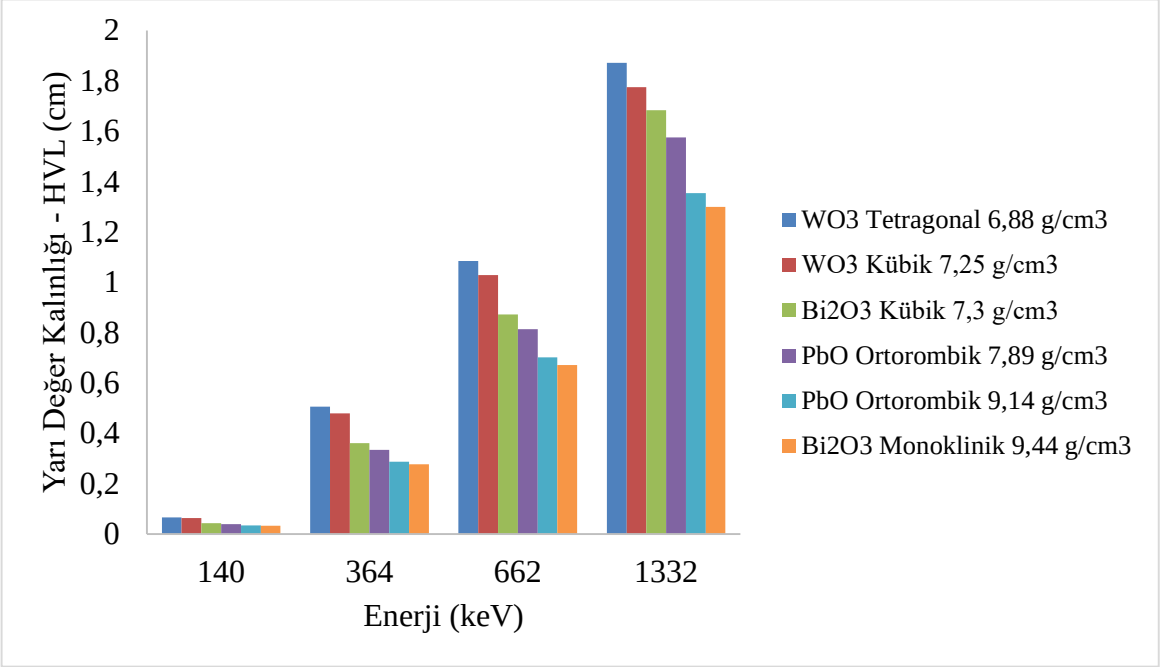
Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	PbO	WO_3	WO_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
	Ortorombik	Ortorombik	Tetragonal	Kübik	Kübik	Monoklinik
Enerji (keV)	MFP					
140	0,0572	0,0495	0,0964	0,0912	0,0619	0,0476
364	0,4831	0,4141	0,7302	0,6916	0,5211	0,3994
662	1,1746	1,0136	1,5654	1,4851	1,258	0,9695
1332	2,2724	1,9543	2,7007	2,5611	2,4293	1,875
Yoğunluk (g/cm^3)	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3

Tablo 4. 17: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait onda bir değer kalınlığı değerleri

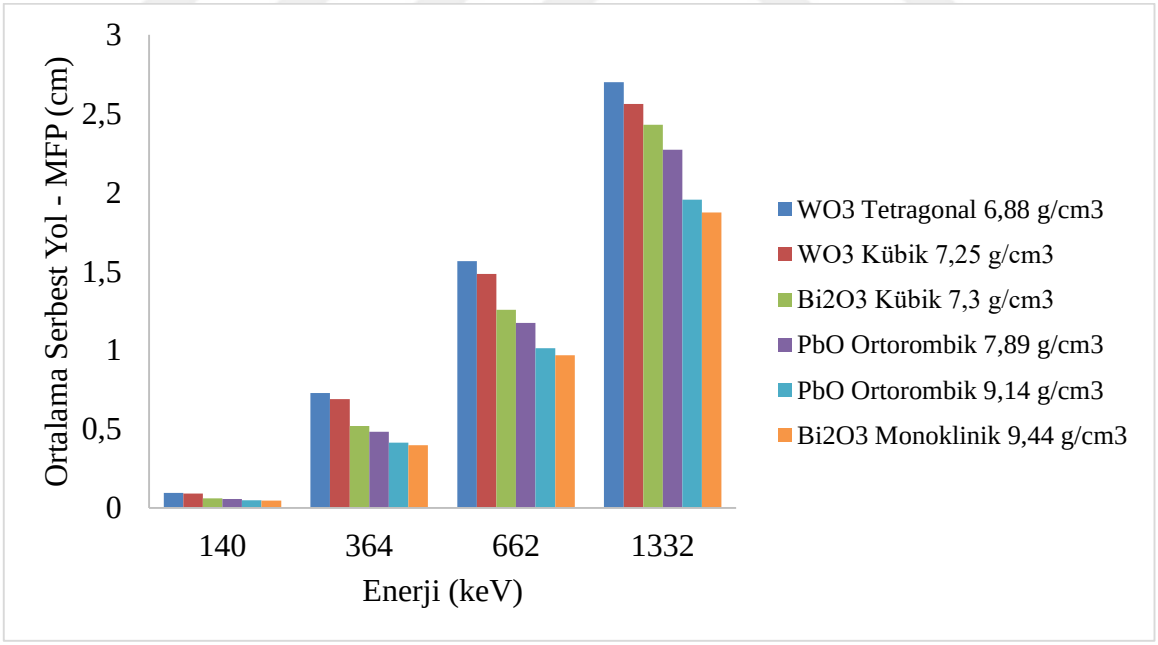
Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	PbO	WO_3	WO_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3
	Ortorombik	Ortorombik	Tetragonal	Kübik	Kübik	Monoklinik
Enerji (keV)	TVL					
140	0,1319	0,1140	0,2220	0,2101	0,1427	0,1097
364	1,1128	0,9538	1,6817	1,5928	1,2002	0,9199
662	2,7052	2,3345	3,6057	3,4204	2,8972	2,2331
1332	5,2340	4,5015	6,2209	5,8990	5,5952	4,3183
Yoğunluk (g/cm^3)	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3



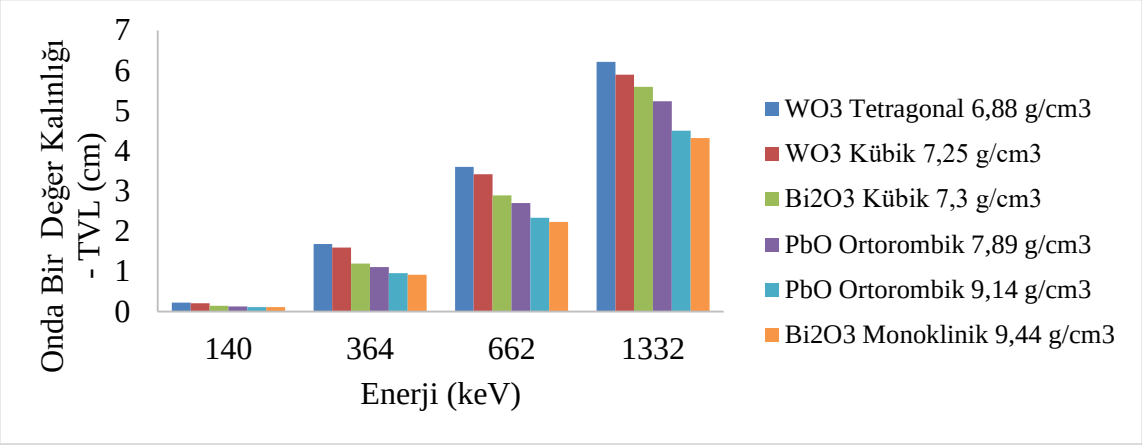
Şekil 4. 13: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait doğrusal zayıflatma katsayılarının karşılaştırılması



Şekil 4. 14: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait yarı değer kalınlıklarının karşılaştırılması



Şekil 4. 15: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait ortalama serbest yol değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 4. 16: PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerine ait en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait onda bir değer kalınlığı değerlerinin karşılaştırılması

4.3: SIRADAN BETON VE PVA İÇERİSİNE PBO, WO_3 İLE BI_2O_3 KATKILANARAK ELDE EDİLEN KARIŞIMLARA AİT LAC, HVL, MFP VE TVL DEĞERLERİ

Radyasyona karşı koruma malzemesi olarak kullanılan sıradan beton içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait Monte Carlo Simülasyonu MCNPX (2.4.0) kodu ile elde edilen LAC, HVL, MFP ve TVL değerleri Tablo 4.18-4.21, Polivilin Alkol reçine içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait LAC, HVL, MFP ve HVL değerleri Tablo 4.22-4.25'de yer almaktadır.

Tablo 4. 18: Sıradan beton (SB) içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait LAC değerleri

Sıradan beton - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 7,89 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 9,14 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Tetragonal 6,88 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,25 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,3 g g/cm³ Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Monoklinik 9,44 g/cm³ Bi_2O_3
Enerji (keV)	LAC					
140	4,1923	4,3328	2,8399	3,6497	4,1541	4,3973
364	0,6407	0,6626	0,5147	0,5204	0,6383	0,6771
662	0,3287	0,3391	0,2951	0,2984	0,3260	0,3459
1332	0,1978	0,2063	0,1882	0,1906	0,1956	0,2096
Yoğunluk (g/cm³)	3,5617 g/cm³	3,6751 g/cm³	3,4474 g/cm³	3,4921 g/cm³	3,4979 g/cm³	3,6988 g/cm³

Tablo 4. 19: SB içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait HVL değerleri

Sıradan beton - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 7,89 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 9,14 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Tetragonal 6,88 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,25 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,3 g/cm³ Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Monoklinik 9,44 g/cm³ Bi_2O_3
Enerji (keV)	HVL					
140	0,1653	0,1599	0,2440	0,1898	0,1668	0,1575
364	1,0815	1,0458	1,3462	1,3315	1,0856	1,0234
662	2,1079	2,0432	2,3480	2,3222	2,1253	2,0032
1332	3,5029	3,3577	3,6816	3,6354	3,5420	3,3061
Yoğunluk (g/cm³)	3,5617 g/cm³	3,6751 g/cm³	3,4474 g/cm³	3,4921 g/cm³	3,4979 g/cm³	3,6988 g/cm³

Tablo 4. 20: SB içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait MFP değerleri

Sıradan beton - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 7,89 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 9,14 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Tetragonal 6,88 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,25 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,3 g/cm³ Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Monoklinik 9,44 g/cm³ Bi_2O_3
Enerji (keV)	MFP					
140	0,2385	0,2307	0,3521	0,2739	0,2407	0,2274
364	1,5607	1,5091	1,9426	1,9214	1,5666	1,4768
662	3,0417	2,9484	3,3881	3,3510	3,0669	2,8907
1332	5,0547	4,8452	5,3125	5,2459	5,1112	4,7707
Yoğunluk (g/cm³)	3,5617 g/cm³	3,6751 g/cm³	3,4474 g/cm³	3,4921 g/cm³	3,4979 g/cm³	3,6988 g/cm³

Tablo 4. 21: SB içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait TVL değerleri

Sıradan beton - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 7,89 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Ortorombik 9,14 g/cm³ PbO	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Tetragonal 6,88 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,25 g/cm³ WO_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Kübik 7,3 g g/cm³ Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm³ Sıradan beton - %50 Monoklinik 9,44 g/cm³ Bi_2O_3
Enerji (keV)	TVL					
140	0,5493	0,5315	0,8109	0,6310	0,5543	0,5237
364	3,5945	3,4757	4,4744	4,4254	3,6080	3,4012
662	7,0063	6,7915	7,8041	7,7178	7,0644	6,6579
1332	11,6430	11,1633	12,2369	12,0828	11,7740	10,9875
Yoğunluk (g/cm³)	3,5617 g/cm³	3,6751 g/cm³	3,4474 g/cm³	3,4921 g/cm³	3,4979 g/cm³	3,6988 g/cm³

Tablo 4. 22: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait LAC değerleri

PVA - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Ortorombik 7,89 g/cm³ PbO	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm³ PbO	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm³ WO_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Kübik 7,25 g/cm³ WO_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Kübik 7,3 g g/cm³ Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm³ Bi_2O_3
Enerji (keV)	LAC					
140	2,4529	2,4972	1,6770	1,6900	2,4059	2,4862
364	0,3812	0,3887	0,3104	0,3128	0,3789	0,3910
662	0,19712	0,2005	0,1792	0,1806	0,1973	0,2036
1332	0,119579	0,1219	0,1155	0,1169	0,1188	0,1215
Yoğunluk (g/cm³)	2,0680 g/cm³	2,1058 g/cm³	2,0290 g/cm³	2,0444 g/cm³	2,0464 g/cm³	2,1135 g/cm³

Tablo 4. 23: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait HVL değerleri

PVA - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Ortorombik 7,89 g/cm³ PbO	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm³ PbO	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm³ WO_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Kübik 7,25 g/cm³ WO_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Kübik 7,3 g/cm³ Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm³ Bi_2O_3
Enerji (keV)	HVL					
140	0,2825	0,2775	0,4132	0,4100	0,2880	0,2787
364	1,8178	1,7824	2,2325	2,2148	1,8289	1,7721
662	3,5156	3,4550	3,8658	3,8363	3,5121	3,4034
1332	5,7953	5,6829	5,9977	5,9252	5,8290	5,6994
Yoğunluk (g/cm³)	2,0680 g/cm³	2,1058 g/cm³	2,0290 g/cm³	2,0444 g/cm³	2,0464 g/cm³	2,1135 g/cm³

Tablo 4. 24: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait MFP değerleri

PVA - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Ortorombik 7,89 g/cm³ PbO	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm³ PbO	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm³ WO_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Kübik 7,25 g/cm³ WO_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Kübik 7,3 g/cm³ Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm³ PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm³ Bi_2O_3
Enerji (keV)	MFP					
140	0,4076	0,4004	0,5962	0,5916	0,4156	0,4022
364	2,6231	2,5721	3,2215	3,1959	2,6391	2,5572
662	5,0730	4,9856	5,5784	5,5358	5,0680	4,9112
1332	8,3626	8,2005	8,6547	8,5500	8,4112	8,2243
Yoğunluk (g/cm³)	2,0680 g/cm³	2,1058 g/cm³	2,0290 g/cm³	2,0444 g/cm³	2,0464 g/cm³	2,1135 g/cm³

Tablo 4. 25: PVA içerisine %50 oranında en sıkı ve en boşluklu atomik düzene sahip durumlarına ait PbO, Bi_2O_3 ve WO_3 bileşiklerinin eklenmesi ile oluşturulan karışımlara ait TVL değerleri

PVA - Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 karışımları	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Ortorombik 7,89 g/cm^3 PbO	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Kübik 7,25 g/cm^3 WO_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Kübik 7,3 g g/cm^3 Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3
Enerji (keV)	TVL					
140	0,9388	0,9222	1,3732	1,3627	0,9572	0,9263
364	6,0414	5,9248	7,4194	7,3625	6,0781	5,8900
662	11,6832	11,4862	12,8515	12,7519	11,6725	11,3113
1332	19,2592	18,8925	19,9393	19,7005	19,3855	18,9547
Yoğunluk (g/cm^3)	2,0680 g/cm^3	2,1058 g/cm^3	2,0290 g/cm^3	2,0444 g/cm^3	2,0464 g/cm^3	2,1135 g/cm^3

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışma Monte Carlo Simülasyonu MCNPX kodu kullanılarak gerçekleştirilmiş ve tez çalışması sırasında herhangi bir deneysel çalışma gerçekleştirilmemiştir. Bu şekilde yapılan teorik çalışmaların daha önce gerçekleştirilmiş olan deneysel çalışmalarla ya da doğruluğu kabul edilmiş veriler ile karşılaştırılması yapılarak sistemin doğru çalıştığına dair test edilmiş olması gerekmektedir. Monte Carlo sonuçlarının test edilmesi için literatür karşılaştırması yapılabilmesi amacıyla 2,3 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan sıradan beton malzemesinin 140 keV, 364 keV, 662 keV ve 1332 keV monoenerjetik kaynaklara karşı doğrusal zayıflatma katsayıları MCNPX kodu ile elde edilmiştir. Simülasyon çalışmasının ardından sıradan betona ait XCOM NIST dataları sistemden elde edilmiştir. Deneysel veriler ile karşılaştırılması yapılabilmesi adına K.Mokhtari ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmadan tez çalışmasında yer alan ortak enerji değerleri 662 keV ve 1332 keV'e karşılık elde edilen doğrusal zayıflatma katsayısı alınmış olup tüm veriler Tablo 4.1'de yer almaktadır. Görüldüğü üzere Monte Carlo Simülasyonu sonuçlarının yer alan diğer veriler ile arasında yakın bir uyum bulunmaktadır. Veriler arasındaki farkın hesaplanmasında aşağıda Denklem 5.1'te yer alan yüzde hesap formülü kullanılmıştır.

$$\Delta = \left(\frac{Veri_1 - Veri_2}{Veri_1}\right) \times 100 \qquad (5.1)$$

Denklem 5.1 ile yapılan hesap sonucunda MCNPX ile XCOM NIST verileri arasındaki yaklaşık fark maksimum %0,57 civarındadır. MCNPX ile K.Mokhtari vd. yaptıkları deneysel çalışma ile arasında maksimum yaklasık %1,47'lik fark bulunmaktadır. Monte Carlo simulasyonlarında hata payı için sınır değer %2'dir ve bu hata payının altında yer alan değerler geçerli/kullanılabilir anlamına gelmektedir. Bu sebeple, oluşturulan Monte Carlo modelinin çalışmadaki simülasyonlar için doğrulanması sağlanmıştır. Daha sonra farklı atomik düzenlere sahip olan bileşiklere ait radyasyondan korunmada en önemli parametre olan, malzemenin radyasyonu ne kadar tutabildiğini ifade eden doğrusal zayıflatma katsayısı (LAC) değerleri elde edilmiştir ve PbO bileşiklerine ait değerler Tablo 4.2'de, WO_3'e ait değerler Tablo 4.3'te ve Bi_2O_3'e ait değerler Tablo 4.4'te görülmektedir.

Tablo 4.2'deki verilere bakıldığında PbO bileşiğine ait 4 farklı atomik düzenin 4 farklı yoğunluk ve bunlara bağlı olarak doğrusal zayıflatma katsayısı verdikleri görülmektedir. En

yüksek doğrusal zayıflatma katsayısını sağlayan PbO bileşiğinin 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO olduğu görülmektedir. Bu sonucun sebeplerini anlamak için Tablo 3.2'de PbO bileşiklerinin yer aldığı tablo incelendiğinde hacim/atom sayısı açısından en düşük değere sahip olduğu görülmektedir. Birim hacim ve içerisinde bulunan atom sayısı bakımından en sıkı yapıya sahip olması en yüksek yoğunluğu elde etmesine olanak sağlamıştır böylece tüm enerji değerlerinde radyasyonla geçireceği etkileşim olasılıklarını arttırmıştır. Radyasyonla etkileşiminin artması, radyasyonu daha çok absorbe edeceği anlamını taşıdığı için sonuç olarak da en yüksek doğrusal zayıflatma katsayısı değerini sağlamıştır. Benzer şekilde en düşük değere bakıldığında 7,89 g/cm^3 ile en düşük yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO olduğu görülmektedir. İki bileşik birbiri ile karşılaştırıldığında iki kristalin de basit olduğu ve birim hacimde aynı sayıda atom barındırdıkları görülmektedir ancak en düşük yoğunluğa sahip ortorombik PbO'nun, en yüksek yoğunluğa sahip olan ortorombik PbO ya göre daha geniş bir birim hacme sahip olduğu görülmektedir. Bunun sebebi birim hacim içerisinde yer alan atomların sahip oldukları simetrilere göre atom içerisinde bulundukları Wyckoff pozisyonlarıdır. Buradaki genişlik hacim/atom sayısı açısından karşılaştırıldığında atom başına düşen hacmi en geniş sağlayanın yine 7,89 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan ortorombik PbO olduğu görülmektedir.

Yoğunluğa bağlı olarak elde edilen ve gelen radyasyon yoğunluğunu yarıya indirmek için gerekli olan kalınlık değerini belirten PbO bileşiklerine ait HVL değerlerinin yer aldığı Tablo 4.5 incelendiğinde en az kalınlık değeriyle en etkili azaltmayı sağlayanın en yüksek yoğunluğa sahip olan ortorombik PbO olduğu görülmektedir. Sebebi ise yine yoğunluğa bağlı olarak açıklanan hacim/atom sayısı durumudur. Atomların sıkı bağlı olması sebebiyle daha çok etkileşim gerçekleştirilmesine olanak sağlanmakta ve radyasyon kısa bir alanda tutulabilmektedir.

Bir radyasyonun madde içerisinde etkileşim yapmadan ilerleyebileceği mesafeyi anlatan PbO bileşiklerine ait MFP değerleri ise Tablo 4.8'de yer almaktadır. Buraya bakıldığında görülen radyasyonun en hızlı etkileşimi 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan Ortorombik PbO'da gerçekleştirdiği görülmektedir. Bu durum atom düzeninin sık olmasının etkileşim olasılığında artışa neden olduğu sonucunu desteklemektedir. 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO ile 7,89

g/cm^3 ile en düşük yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun sahip oldukları doğrusal zayıflatma katsayı değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark Tablo 5.1'de yer almaktadır.

Tablo 5. 1: PbO bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları ve aralarındaki % fark değerleri

Polimorf PbO	PbO	PbO	% Fark
	Ortorombik	Ortorombik	
Uzay Grubu	Pbcm	$Pca2_1$	
Nokta Grubu	mmm	mm2	
Enerji	LAC		
140	20,1887	17,4592	13,5199
364	2,4145	2,0695	14,2886
662	0,9865	0,8513	13,7050
1332	0,5116	0,44	13,9953
Hacim/Atom Sayısı	20,27	23,5	-15,9348
Yoğunluk (g/cm^3)	9,14 g/cm^3	7,89 g/cm^3	13,6761

Tablo 5.1'de yer alan iki bileşik hacim/atom sayısı açısından karşılaştırıldığında 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan PbO'nun yaklaşık %15,93 daha sıkı bir kristal yapıya sahip olduğu ve bu sıkı yapının iki bileşik arasında %13,67 lik bir yoğunluk farkı sağladığı görülmektedir. Bu yoğunluk artışının etkisi LAC, HVL, MFP ve TVL değerlerinde kendisini göstermektedir. İki farklı kristal yapıda olan PbO bileşikleri arasındaki LAC % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %13,87 lik fark olduğu ve 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'nun ortalama %13,87'lik farkla 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'dan daha etkili bir radyasyon tutuculuğu sergilediği anlaşılmaktadır.

Tablo 5. 2: PbO bileşiklerine ait HVL değerleri ve aralarındaki % fark değerleri.

Polimorf PbO	PbO	PbO	% Fark
	Ortorombik	Ortorombik	
Uzay Grubu	$Pca2_1$	Pbcm	
Nokta Grubu	mm2	mmm	
Hacim/Atom Sayısı	23,5	20,27	
Yoğunluk	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3	
Enerji (keV)	HVL		
140	0,0396	0,0343	13,3838
364	0,3348	0,287	14,2771
662	0,814	0,7024	13,7100
1332	1,5748	1,3543	14,0017

Tablo 5.2'de 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO ile 7,89 g/cm^3 ile en düşük yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun sahip oldukları HVL değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki PbO bileşikleri arasındaki HVL % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %13,84 lük fark bulunduğu görülmektedir. 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun gelen radyasyon enerjisini yarı değerine düşürebilmek için gerekli kalınlığının 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'nun sahip olduğu sahip olduğu malzeme kalınlığından ortalama %13,84 fazla olması gerektiği anlaşılmaktadır. Buradan anlaşıldığı üzere 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan PbO kullanıldığında radyasyon tutuculuğu aynı kalınlıkta 7,89 g/cm^3 olan PbO'dan çok daha etkili olmaktadır.

Tablo 5. 3: PbO bileşiklerine ait MFP değerleri ve aralarındaki % fark değerleri

Polimorf PbO	PbO	PbO	% Fark
	Ortorombik	Ortorombik	
Uzay Grubu	$Pca2_1$	Pbcm	
Nokta Grubu	mm2	mmm	
Hacim/Atom Sayısı	23,5	20,27	
Yoğunluk	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3	
Enerji (keV)	MFP		
140	0,0572	0,0495	13,4615
364	0,4831	0,4141	14,2827
662	1,1746	1,0136	13,7067
1332	2,2724	1,9543	13,9984

Tablo 5.3'te 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO ile 7,89 g/cm^3 ile en düşük yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun sahip oldukları MFP değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki PbO bileşikleri arasındaki MFP % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %13,86 lık fark bulunduğu görülmektedir. Radyasyonun 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu

ortorombik PbO'nun içerisinde ilk etkileşim yapmadan alacağı yol ile 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'nun içerisinde etkileşim yapmadan alacağı yol arasında ortalama %13,86 fazla mesafe bulunmaktadır. Radyasyonun enerjisini ortama bırakması yapacağı etkileşimler ile gerçekleşmesinden dolayı etkileşim yapma mesafesinin artması malzemenin tutuculuğunda azalış anlamını taşımaktadır. Buradan anlaşıldığı üzere 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan PbO kullanıldığında radyasyon tutuculuğu aynı kalınlıkta 7,89 g/cm^3 olan PbO'dan çok daha etkili olmaktadır.

Tablo 5. 4: PbO bileşiklerine ait TVL değerleri ve aralarındaki % fark değerleri

Polimorf PbO	PbO	PbO	% Fark
	Ortorombik	Ortorombik	
Uzay Grubu	$Pca2_1$	Pbcm	
Nokta Grubu	mm2	mmm	
Hacim/Atom Sayısı	23,5	20,27	
Yoğunluk	7,89 g/cm^3	9,14 g/cm^3	
Enerji (keV)	TVL		
140	0,1319	0,114	13,5708
364	1,1128	0,9538	14,2882
662	2,7052	2,3345	13,7032
1332	5,234	4,5015	13,9950

Tablo 5.4'te ise 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO ile 7,89 g/cm^3 ile en düşük yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun sahip oldukları TVL değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki PbO bileşikleri arasındaki TVL % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %13,88 lük fark bulunduğu görülmektedir. 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'nun gelen radyasyon enerjisini onda bir değerine düşürebilmek için gerekli kalınlığının 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'nun sahip olduğu sahip olduğu malzeme kalınlığından ortalama %13,88 fazla olması gerektiği anlaşılmaktadır.

Deneysel olarak gözlemlenmiş olan bu iki kristal yapıdan en sıkı atomik yapıya sahip olan 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO bileşiğinin kullanılması radyasyondan korunmada 7,89 g/cm^3 yoğunluğa 188.00 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO'ya oranla çok daha etkili olacağı sonucuna ulaşılmaktadır.

Tablo 4.3'de yer alan verilere bakıldığında WO_3 bileşiğine ait 4 farklı atomik düzenin yine 4 farklı yoğunluk ve bunlara bağlı olarak doğrusal zayıflatma katsayısı verdikleri görülmektedir. En yüksek doğrusal zayıflatma katsayısını sağlayan WO_3 bileşiğinin 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 olduğu görülmektedir. Bu sonucun sebeplerini anlamak için Tablo 3.3'de WO_3 bileşiklerinin yer aldığı tablo incelendiğinde hacim/atom sayısı açısından en düşük değere sahip olduğu görülmektedir. PbO bileşiğinde de olduğu gibi birim hacim ve içerisinde bulunan atom sayısı bakımından en sıkı yapıya sahip olması en yüksek yoğunluğu elde etmesine olanak sağlamıştır. Böylece tüm enerji değerlerinde radyasyonla geçireceği etkileşim olasılıklarını arttırmıştır. Radyasyonla etkileşiminin artması, radyasyonu daha çok absorbe edeceği anlamını taşıdığı için sonuç olarak da en yüksek doğrusal zayıflatma katsayısı değerini sağlamıştır. Benzer şekilde en düşük değere bakıldığında 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3 olduğu görülmektedir.

En sıkı ve en geniş atom düzenine sahip bu iki bileşik birbiri ile karşılaştırıldığında 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3' ün hacim merkezli kristal yapıya, 6,88 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3 kristalin ise basit kristal yapıya olduğu görülmektedir. E. Halliwell vd. [18] yaptıkları teorik çalışmada bir bileşiğin kristal yapısında atomik dolgu faktörü açısından gerçekleştirilecek değişimin karşılaştırıldığında hacim merkezli kübik yapının en sıkı düzeni ortaya çıkaracağı sonucunu öne sürmektedir. E. Halliwell ve arkadaşlarının ulaştıkları sonuç matematiksel olarak belirli bir akışı belirtse de bu çalışmada bu durumun direkt sonucu görülememektedir. Yapılan çalışmada atomik dolgu faktörleri değiştirilmiştir dolayısıyla birim hacmi daha dolu bir yapıya dönüştürdükleri için matematiksel katsayı ile oranlayarak sundukları doğrusal zayıflatma katsayıları artış göstermektedir. Ancak bu çalışmada da görüldüğü üzere kristal yapıda atom düzenleri birçok farklı parametreye bağlı olarak oldukça çeşitlilik göstermektedir. Birim hacim içerisinde yer alan atom sayısı kadar o atomların nerede konumlandığı son derece önemlidir. Bunun sebebi atom konumlarının birbirinden

uzaklaşmasının geniş bir hacme yayılmasının birim hacimde de bir genişlemeye sebep olmasıdır. Bu tez çalışmasında yer alan ve basit kristal yapıda olan 6,98 g/cm^3 yoğunluğa 55.14 Å^3 hacme sahip olan 4 atomlu Pm$\bar{3}$m uzay grubu ve m$\bar{3}$m nokta gruplu kübik WO_3 ile karşılaştırıldığında yine 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu Im$\bar{3}$ uzay grubu ve m$\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'ün daha yüksek bir doğrusal zayıflatma katsayısına sahip olduğu görülmektedir. Hacmi daha küçük olan 6,98 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan basit WO_3'ün daha düşük bir radyasyondan koruma sağlamasının sebebi hacim/atom sayısı olarak açıklanabilmektedir.

Yoğunluğa bağlı olarak elde edilen ve gelen radyasyon yoğunluğunu yarıya indirmek için gerekli olan kalınlık değerini belirten WO_3 bileşiklerine ait HVL değerlerinin yer aldığı Tablo 4.6 incelendiğinde en az kalınlık değeriyle en etkili azaltmayı sağlayanın en yüksek yoğunluğa sahip olan kübik WO_3 olduğu görülmektedir. Sebebi ise yine hacim/atom sayısına bağlı olarak açıklanan yoğunluk durumudur. Atomların sıkı bağlı olması sebebiyle daha çok etkileşim gerçekleştirilmesine olanak sağlanmakta ve radyasyon kısa bir alanda tutulabilmektedir.

Bir radyasyonun madde içerisinde etkileşim yapmadan ilerleyebileceği mesafeyi anlatan WO_3 bileşiklerine ait MFP değerleri ise Tablo 4.9'de yer almaktadır. Buraya bakıldığında görülen radyasyonun en hızlı etkileşimi 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan kübik WO_3'de gerçekleştirdiği görülmektedir. Bu durum atom düzeninin sık olmasının etkileşim olasılığında artışa neden olduğu sonucunu desteklemektedir.

Tablo 5. 5: WO_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları arasındaki % fark değerleri

Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	% Fark
	Kübik	Tetragonal	
Uzay Grubu	Im$\bar{3}$	P4/nmm	
Nokta Grubu	m$\bar{3}$	4/mmm	
Enerji (keV)	LAC		
140	10,9603	10,3711	5,3757
364	1,4458	1,3694	5,2842
662	0,6733	0,6387	5,1388
1332	0,3904	0,3702	5,1741
Hacim/Atom Sayısı	13,26	13,98	-5,4298
Yoğunluk	7,25 g/cm^3	6,88 g/cm^3	5,1034

Tablo 5.5'de yer alan iki bileşik hacim/atom sayısı açısından karşılaştırıldığında 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3'ün yaklaşık %5,42 daha sıkı bir kristal yapıya sahip olduğu ve bu

sıkı yapının iki bileşik arasında %5,10 lk bir yoğunluk farkı sağladığı görülmektedir. Bu yoğunluk artışının etkisi LAC, HVL, MFP ve TVL değerlerinde kendisini göstermektedir. İki farklı kristal yapıda olan WO_3 bileşikleri arasındaki LAC % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %5,24 lük fark olduğu ve 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'ün ortalama %15,24'lük farkla 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'den daha etkili bir radyasyon tutuculuğu sergilediği anlaşılmaktadır.

Tablo 5. 6: WO_3 bileşiklerine ait HVL arasındaki % fark değerleri

Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	% Fark
	Tetragonal	Kübik	
Uzay Grubu	P4/nmm	$Im\bar{3}$	
Nokta Grubu	4/mmm	$m\bar{3}$	
Hacim/Atom Sayısı	13,98	13,26	
Yoğunluk	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	
Enerji (keV)	HVL		
140	0,0668	0,0632	5,3892
364	0,506	0,4792	5,2964
662	1,0848	1,0292	5,1253
1332	1,8715	1,7748	5,1669

Tablo 5.6'da 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün sahip oldukları HVL değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki WO_3 bileşikleri arasındaki HVL % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %5,24 lük fark bulunduğu görülmektedir. 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün gelen radyasyon enerjisini yarı değerine düşürebilmek için gerekli kalınlığının 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 'ün sahip olduğu malzeme kalınlığından ortalama %5,24 fazla olması gerektiği anlaşılmaktadır. Buradan anlaşıldığı üzere 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3 kullanıldığında radyasyon tutuculuğu aynı kalınlıkta 6,88 g/cm^3 olan WO_3'dan çok daha etkili olmaktadır.

Tablo 5. 7: WO_3 bileşiklerine ait MFP arasındaki % fark değerleri

Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	
	Tetragonal	Kübik	
Uzay Grubu	P4/nmm	$Im\bar{3}$	
Nokta Grubu	4/mmm	$m\bar{3}$	% Fark
Hacim/Atom Sayısı	13,98	13,26	
Yoğunluk	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	
Enerji (keV)	MFP		
140	0,0964	0,0912	5,3941
364	0,7302	0,6916	5,2862
662	1,5654	1,4851	5,1296
1332	2,7007	2,5611	5,1690

Tablo 5.7'te 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün sahip oldukları MFP değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki WO_3 bileşikleri arasındaki MFP % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %5,24 lük fark bulunduğu görülmektedir. Radyasyonun 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün içerisinde ilk etkileşim yapmadan alacağı yol ile 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'ün içerisinde etkileşim yapmadan alacağı yol arasında ortalama %5,24 fazla mesafe bulunmaktadır. Radyasyonun enerjisini ortama bırakması yapacağı etkileşimler ile gerçekleşmesinden dolayı etkileşim yapma mesafesinin artması malzemenin tutuculuğunda azalış anlamını taşımaktadır. Buradan anlaşıldığı üzere 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3 kullanıldığında radyasyon tutuculuğu aynı kalınlıkta 6,88 g/cm^3 olan WO_3'den çok daha etkili olmaktadır.

Tablo 5. 8: WO_3 bileşiklerine ait TVL arasındaki % fark değerleri

Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	
	Tetragonal	Kübik	
Uzay Grubu	P4/nmm	$Im\bar{3}$	
Nokta Grubu	4/mmm	$m\bar{3}$	% Fark
Hacim/Atom Sayısı	13,98	13,26	
Yoğunluk	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	
Enerji (keV)	TVL		
140	0,222	0,2101	5,3603

Tablo 5.8 (devam): WO_3 bileşiklerine ait TVL arasındaki % fark değerleri

Polimorf WO_3	WO_3	WO_3	% Fark
	Tetragonal	Kübik	
Uzay Grubu	P4/nmm	$Im\bar{3}$	
Nokta Grubu	4/mmm	$m\bar{3}$	
Hacim/Atom Sayısı	13,98	13,26	
Yoğunluk	6,88 g/cm^3	7,25 g/cm^3	
Enerji (keV)	TVL		
364	1,6817	1,5928	5,2863
662	3,6057	3,4204	5,1390
1332	6,2209	5,899	5,1744

Tablo 5.8'de ise 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün sahip oldukları TVL değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki WO_3 bileşikleri arasındaki TVL % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %13,88 lük fark bulunduğu görülmektedir. 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün gelen radyasyon enerjisini onda bir değerine düşürebilmek için gerekli kalınlığının 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'ün sahip olduğu sahip olduğu malzeme kalınlığından ortalama %5,24 fazla olması gerektiği anlaşılmaktadır.

Zırh malzemelerin kalınlığını belirlemede bu parametreler oldukça önemli olduklarından dolayı 6,88 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3 yerine 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3 bileşiğini kullanmak, aynı radyasyon enerjisinden korunmak için daha kalın yapıda malzeme kullanılmasını gerektirmektedir. Bu da kullanılacak alan, iş gücü gibi durumlar değerlendirildiğinde 7,25 g/cm^3 yoğunluk değerine sahip olan WO_3'ün zırh malzemesi olarak kullanılması avantaj sağlamaktadır.

Tablo 3.1'e bakıldığında 7,25 g/cm^3 hacme sahip olan hacim merkezli kübik yapıya sahip WO_3'ün henüz deneysel olarak gözlemlenmediği görülmektedir. Radyasyona karşı korumada sağladığı katkı göz önüne alındığında bundan sonraki çalışmaların WO_3 bileşiğinin 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 elde edilmesi üzerine yoğunlaşması önerilmektedir.

Tablo 4.4'de ise Bi_2O_3 bileşiğine ait 6 farklı atomik düzenin yine 6 farklı yoğunluk ve bunlara bağlı olarak doğrusal zayıflatma katsayısıları yer almaktadır. En yüksek doğrusal zayıflatma katsayısını sağlayan Bi_2O_3 bileşiğinin 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 olduğu görülmektedir. Bu sonucun sebeplerini anlamak için Tablo 3.4'de yer alan Bi_2O_3 bileşiklerine ait bilgiler incelendiğinde hacim/atom sayısı açısından en düşük değere sahip olduğu görülmektedir. PbO ve WO_3 bileşiklerine olduğu gibi birim hacim ve içerisinde bulunan atom sayısı bakımından en sıkı yapıya sahip olması en yüksek yoğunluğu elde etmesine dolayısıyla tüm enerji değerlerinde radyasyonla geçireceği etkileşim olasılıklarının artmasına sebep olmaktadır. En düşük doğrusal zayıflatma katsayısı veren değere bakıldığında 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3 olduğu görülmektedir.

En sıkı ve en geniş atom düzenine sahip bu iki bileşik yapı olarak birbirleri ile karşılaştırıldıklarında 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan monoklinik Bi_2O_3'ün basit, 7,30 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan kübik Bi_2O_3'ün ise hacim merkezli kristal yapıda olduğu görülmektedir.

E.Halliwell ve arkadaşları'nın çalışması tekrar ele alındığında 8,86 g/cm^3 yoğunluğa 174.58 Å^3 hacme sahip olan 10 atomlu $Pn\bar{3}m$ uzay grubu ve $m\bar{3}m$ nokta gruplu basit kübik Bi_2O_3 ile 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu hacim merkezki kübik Bi_2O_3'ün karşılaştırılması önemlidir. Tablo 4.4'te yer alan doğrusal zayıflatma katsayılarına bakıldığında 8,86 g/cm^3 yoğunluğa sahip basit Bi_2O_3 'ün 7,30 g/cm^3 yoğunluğa sahip hacim merkezli kübik yapıda olan Bi_2O_3'e oranla daha iyi bir değer sağladığı görülmektedir. Çalışma sonucuna göre basit kübik yapının hacim merkezli kübik yapıya göre daha düşük yoğunluğa sahip olması beklenirken, bu çalışma verilerinde öyle olmadığı görülmektedir. Bunun sebebi yine hacim/atom sayısı oranıdır.

Yoğunluğa bağlı olarak elde edilen ve gelen radyasyon yoğunluğunu yarıya indirmek için gerekli olan kalınlık değerini belirten Bi_2O_3 bileşiklerine ait HVL değerlerinin yer aldığı Tablo 4.7 incelendiğinde en az kalınlık değeriyle en etkili azaltmayı sağlayanın en yüksek yoğunluğa sahip olan 9,44 g/cm^3 monoklinik Bi_2O_3 olduğu görülmektedir. Sebebi PbO ve WO_3'te olduğu gibi yoğunluğa bağlı olarak açıklanan hacim/atom sayısı durumudur. Atomların sıkı bağlı olması sebebiyle daha çok etkileşim gerçekleştirilmesine olanak sağlanmakta ve radyasyon kısa bir alanda tutulabilmektedir.

Bi_2O_3 bileşiklerine ait MFP değerleri ise Tablo 4.10'de yer almaktadır. Veriler incelendiğinde radyasyonun en hızlı etkileşimi 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan monoklinik Bi_2O_3'de gerçekleştirdiği görülmektedir. Bu durum atom düzeninin sık olmasının etkileşim olasılığında artışa neden olduğu sonucunu desteklemektedir.

Tablo 5. 9: Bi_2O_3 bileşiklerine ait doğrusal zayıflatma katsayıları arasındaki % fark değerleri

Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	% Fark
	Monoklinik	Kübik	
Uzay Grubu	$P2_1/c$	I23	
Nokta Grubu	2/m	23	
Enerji (keV)	LAC		
140	20,9905	16,1364	23,1252
364	2,5033	1,9188	23,3492
662	1,0313	0,7949	22,9225
1332	0,5333	0,4116	22,8202
Hacim/Atom Sayısı	16,39	21,19	-29,2861
Yoğunluk	9,44 g/cm^3	7,3 g/cm^3	22,6694

Tablo 5.9'da yer alan iki bileşik hacim/atom sayısı açısından karşılaştırıldığında 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan Bi_2O_3'ün yaklaşık %29,28 daha sıkı bir kristal yapıya sahip olduğu ve bu sıkı yapının iki bileşik arasında %22'lik bir yoğunluk farkı sağladığı görülmektedir. Bu yoğunluk artışının etkisi LAC, HVL, MFP ve TVL değerlerinde kendisini göstermektedir. İki farklı kristal yapıda olan Bi_2O_3 bileşikleri arasındaki LAC % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama % 23,05'lik fark olduğu ve 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 ortalama % 23,05'lik farkla 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'den daha etkili bir radyasyon tutuculuğu sergilediği anlaşılmaktadır.

Tablo 5. 10: Bi_2O_3 bileşiklerine ait HVL değerleri arasındaki % fark değerleri

Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	% Fark
	Kübik	Monoklinik	
Uzay Grubu	I23	$P2_1/c$	
Nokta Grubu	23	2/m	
Hacim/Atom Sayısı	21,19	16,39	
Yoğunluk	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3	
Enerji (keV)	HVL		
140	0,0429	0,033	23,0769
364	0,3611	0,2768	23,3453

Tablo 5.10 (devam): Bi_2O_3 bileşiklerine ait HVL değerleri ıarasındaki % fark değerleri

Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	
	Kübik	Monoklinik	
Uzay Grubu	I23	$P2_1/c$	
Nokta Grubu	23	2/m	% Fark
Hacim/Atom Sayısı	21,19	16,39	
Yoğunluk	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3	
Enerji (keV)	HVL		
662	0,8717	0,6719	22,9207
1332	1,6835	1,2993	22,8215

Tablo 5.10'da 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 ile 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'ün sahip oldukları HVL değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki Bi_2O_3 bileşikleri arasındaki HVL % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %23,04 lük fark bulunduğu görülmektedir. 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'ün gelen radyasyon enerjisini yarı değerine düşürebilmek için gerekli kalınlığının 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 'ün sahip olduğu malzeme kalınlığından ortalama %24,03 fazla olması gerektiği anlaşılmaktadır. Buradan anlaşıldığı üzere 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan Bi_2O_3 kullanıldığında radyasyon tutuculuğu aynı kalınlıkta 7,30 g/cm^3 olan Bi_2O_3'dan çok daha etkili olmaktadır.

Tablo 5. 11: Bi_2O_3 bileşiklerine ait MFP değerleri arasındaki % fark değerleri

Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	
	Kübik	Monoklinik	
Uzay Grubu	I23	$P2_1/c$	
Nokta Grubu	23	2/m	% Fark
Hacim/Atom Sayısı	21,19	16,39	
Yoğunluk	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3	
Enerji (keV)	MFP		
140	0,0619	0,0476	23,1018
364	0,5211	0,3994	23,3544
662	1,258	0,9695	22,9332
1332	2,4293	1,875	22,8173

Tablo 5.11'de 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 ile 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'ün sahip oldukları MFP değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki Bi_2O_3 bileşikleri arasındaki MFP % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %23,05 lik fark bulunduğu görülmektedir. Radyasyonun 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O'ün içerisinde ilk etkileşim yapmadan alacağı yol ile 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ün içerisinde etkileşim yapmadan alacağı yol arasında ortalama %23,05 fazla mesafe bulunmaktadır. Radyasyonun enerjisini ortama bırakması yapacağı etkileşimler ile gerçekleşmesinden dolayı etkileşim yapma mesafesinin artması malzemenin tutuculuğunda azalış anlamını taşımaktadır. Buradan anlaşıldığı üzere 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan Bi_2O_3 kullanıldığında radyasyon tutuculuğu aynı kalınlıkta 7,30 g/cm^3 olan Bi_2O_3'den çok daha etkili olmaktadır.

Tablo 5. 12: Bi_2O_3 bileşiklerine ait TVL değerleri arasındaki % fark değerleri

Polimorf Bi_2O_3	Bi_2O_3	Bi_2O_3	% Fark
	Kübik	Monoklinik	
Uzay Grubu	I23	$P2_1/c$	
Nokta Grubu	23	2/m	
Hacim/Atom Sayısı	21,19	16,39	
Yoğunluk	7,3 g/cm^3	9,44 g/cm^3	
Enerji (keV)	TVL		
140	0,1427	0,1097	23,1254
364	1,2002	0,9199	23,3544
662	2,8972	2,2331	22,9221
1332	5,5952	4,3183	22,8213

Tablo 5.12'de 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 ile 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'ün sahip oldukları TVL değerlerinin yüzde olarak birbirleri ile aralarında bulunan fark yer almaktadır.

İki farklı kristal yapıdaki Bi_2O_3 bileşikleri arasındaki TVL % fark değerlerine bakıldığında her enerji değerinde ortalama %23,05 lik fark bulunduğu görülmektedir. 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å^3 hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O'ün gelen radyasyon enerjisini onda bir değerine düşürebilmek için gerekli kalınlığının 9,44 g/cm^3

yoğunluğa 327.92 Å³ hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ün sahip olduğu sahip olduğu malzeme kalınlığından ortalama %23,05 fazla olması gerektiği anlaşılmaktadır.

Tablo 3.1'e bakıldığında 9,44 g/cm^3 hacme sahip olan basit monoklinik yapıya sahip Bi_2O_3'ün deneysel olarak gözlemlendiği görülmektedir. Radyasyona karşı korumada sağladığı katkı göz önüne alındığında radyasyondan korunma için Bi_2O_3 bileşiği kullanılacaksa eğer sağladığı yüzde farklar da göz önüne alındığında 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å³ hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ün kullanılması maliyet, yer ve radyasyondan koruma açısından çok büyük avantajlar sağlayacaktır.

Bu çalışma temel olarak bileşiklerin sahip oldukları kristal yapının, yoğunluk üzerine direkt etkili olduğunu ve bu bağımlılığın radyasyondan korunma parametreleri üzerindeki etkisinin incelenmesi amacıyla yapılmıştır ve daha önce benzer bir çalışma yürütülmemiştir. Yapılan çalışmalar incelendiğinde bileşiklerin kristal yapılarıyla ilgili bilgi verilmemiş ve bu sebeple bileşiklerin kristal yapılarının nasıl farklar yarattığı gözlemlenememiştir. Bu çalışma sayesinde görülmüştür ki tüm bileşikler karşılaştırıldıklarında direkt olarak bir bileşiğin başka bir bileşikten daha etkili koruma yaptığının söylenemeyeceği anlaşılmaktadır. Burada söylenmesi gereken hangi kristal yapıya ait olan bileşiğin daha etkin olduğudur. Tablo 4.14'da PbO, WO_3 Bi_2O_3 bileşiklerinin en sıkı ve en boşluklu kristal yapıya sahip durumların doğrusal zayıflatma katsayıları yer almaktadır. Buraya bakıldığında PbO ve Bi_2O_3 bileşikleri karşılaştırıldığında hem Bi_2O_3 PbO'dan daha iyi hem de PbO Bi_2O_3'ten daha iyidir denilebilecek veriler yer almaktadır. Doğru yaklaşım ise kristal yapılarının bilgileri sunularak bir karşılaştırılma yapılmasıdır.

9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å³ hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 en yüksek radyasyondan korunma sağlarken ardından en iyi etkiyi 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å³ hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO bileşiği sağlayabilmektedir. Ayrıca 7,89 g/cm^3 ile en düşük yoğunluğa 188.00 Å³ hacme sahip olan 8 atomlu $Pca2_1$ uzay grubu ve mm2 nokta gruplu ortorombik PbO, 7,30 g/cm^3 yoğunluğa 1271.50 Å³ hacme sahip olan 60 atomlu I23 uzay grubu ve 23 nokta gruplu kübik Bi_2O_3'ten daha iyi bir radyasyondan koruma sağlamaktadır demek daha doğru bir bilgi sağlamaktadır. Buna göre bakıldığında tez çalışmasında yer alan bu 3 bileşiğe ait kristal yapılar karşılaştırıldığında en iyi etkiyi 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å³

hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 sağlamaktadır. PbO'nun toksik etkisinden uzak kalınması amacıyla gerçekleştirilen radyasyondan korunmaya uygun malzeme için bu kristal yapının oldukça uygun olduğu görülmektedir.

Tablo 5. 13: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin LAC değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	WO_3	Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3
	Ortorombik	Kübik	Monoklinik			
Enerji (keV)	LAC			% Fark		
140	20,1887	10,9603	20,9905	45,7107	3,8198	47,7844
364	2,4145	1,4458	2,5033	40,1201	3,5473	42,2442
662	0,9865	0,6733	1,0313	31,7486	4,3440	34,7134
1332	0,5116	0,3904	0,5333	23,6903	4,0690	26,7954
Yoğunluk	9,14 g/cm^3	7,25 g/cm^3	9,44 g/cm^3	20,6783	3,1779	23,1991

Tablo 5.13'te her bileşiğin en yüksek yoğunluk değerini veren kristal yapılarının 140 keV, 364 keV, 662 keV ve 1332 keV gama enerjisine karşı sahip oldukları doğrusal zayıflatma katsayıları ve birbirleri ile aralarında bulunan %fark değerleri yer almaktadır. Buna göre, 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 ile 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO arasında % 3,1779'luk yoğunluk farkı bulunmaktadır. LAC değerlerine bakıldığında ise %3,945'lük farkla 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 daha güçlü radyasyon tutuculuğuna sahip olduğu görülmektedir. 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO ile 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 arasında %20,6783'lük bir yoğunluk farkı bulunmaktadır ve bu yoğunluk farkının direkt olarak etkili olduğu LAC değerine bakıldığında 140 keV'de %45,7107, 364 keV'de %40,1201, 662 keV'de %31,7486 ve 1332 keV'de %23,6903'lük farkla 9,14 g/cm^3 yoğunluğa sahip PbO, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3'ten etkili radyasyon tutuculuğu sağlamaktadır. Özellikle 140 keV ve 364 keV gibi fotoelektrik olayın baskın olduğu yerlerde bu fark çok belirgin olmaktadır.

9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 ile 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 arasında %23,1991'lük bir yoğunluk farkı

bulunmaktadır ve bu yoğunluk farkının direkt olarak etkili olduğu LAC değerine bakıldığında 140 keV'de %47,7844, 364 keV'de %42,2442, 662 keV'de %34,7134 ve 1332 keV'de %26,7954'lük farkla 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip Bi_2O_3, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3'ten etkili radyasyon tutuculuğu sağlamaktadır.

Tablo 5. 14: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin HVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	WO_3	Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3- Bi_2O_3
	Ortorombik	Kübik	Monoklinik			
Yoğunluk	9,14 g/cm^3	7,25 g/cm^3	9,44 g/cm^3			
Enerji (keV)	HVL			% Fark		
140	0,0343	0,0632	0,033	45,7278	3,7900	47,7848
364	0,287	0,4792	0,2768	40,1085	3,5540	42,2370
662	0,7024	1,0292	0,6719	31,7528	4,3422	34,7162
1332	1,3543	1,7748	1,2993	23,6928	4,0611	26,7917

Tablo 5.14'te her bileşiğin en yüksek yoğunluk değerini veren kristal yapılarının 140 keV, 364 keV, 662 keV ve 1332 keV gama enerjisine karşı sahip oldukları yarı değer kalınlıkları ve birbirleri ile aralarında bulunan %fark değerleri yer almaktadır.
HVL değerlerine bakıldığında ise 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO 'nun 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 'den %3,93 daha kalın olması gerekmektedir.

7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'ya ait HVL değerlerinin arasındaki %fark'a bakıldığında 140 keV'de %45,7278, 364 keV'de %40,1085, 662 keV'de %31,7528ve 1332 keV'de %23,6928 olduğu görülmektedir. Bu durum gelen radyasyonu yarı değerine indirmek için gerekli olan kalınlık olmasıdan dolayı görülmektedir ki aynı radyasyon enerjisini 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'dan daha ince malzeme ile durdurabilmektedir.

7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'e ait HVL değerlerinin arasındaki %fark'a

bakıldığında 140 keV'de %47,7848, 364 keV'de %42,2370, 662 keV'de %34,7162 ve 1332 keV'de %26,7917 olduğu görülmektedir. Bu durum gelen radyasyonu yarı değerine indirmek için gerekli olan kalınlık olmasıdan dolayı görülmektedir ki aynı radyasyon enerjisini 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'dan daha ince malzeme ile durdurabilmektedir.

Tablo 5. 15: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin MFP değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	WO_3	Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3- Bi_2O_3
	Ortorombik	Kübik	Monoklinik			
Yoğunluk	9,14 g/cm^3	7,25 g/cm^3	9,44 g/cm^3			
Enerji (keV)	MFP			% Fark		
140	0,0495	0,0912	0,0476	45,7236	3,8383	47,8070
364	0,4141	0,6916	0,3994	40,1243	3,5498	42,2498
662	1,0136	1,4851	0,9695	31,7487	4,3508	34,7182
1332	1,9543	2,5611	1,875	23,6929	4,0577	26,7892

Tablo 5.15'te her bileşiğin en yüksek yoğunluk değerini veren kristal yapılarının 140 keV, 364 keV, 662 keV ve 1332 keV gama enerjisine karşı sahip oldukları ortalama serbest yol değerleri ve birbirleri ile aralarında bulunan %fark değerleri yer almaktadır.

MFP değerlerine bakıldığında 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO 'nun 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 'den ortalama %3,93 daha kalın olması gerekmektedir.

7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'ya ait MFP değerlerinin arasındaki %fark'a bakıldığında 140 keV'de %45,7236, 364 keV'de %40,1243, 662 keV'de %31,7487 ve 1332 keV'de %23,6929 olduğu görülmektedir. Bu durum gelen radyasyonun madde içerisinde ilk etkileşimini yapmadan alabileceği ortalama mesafeyi temsil etmekte olduğundan dolayı aynı radyasyon enerjisinin 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'nun içerisinde, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'dan daha kısa

mesafede enerjisini ortama bıraktığını göstermektedir. Bu da kullanılan malzemenin radyasyon absorbsiyonunun yüksek olduğunu yani koruyucu özelliğinin yüksek olduğunu göstermektedir.

7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ya ait MFP değerlerinin arasındaki %fark'a bakıldığında 140 keV'de %47,8070, 364 keV'de %42,2498, 662 keV'de %34,7182 ve 1332 keV'de %26,7892 olduğu görülmektedir. Bu durum gelen radyasyonun madde içerisinde ilk etkileşimini yapmadan alabileceği ortalama mesafeyi temsil etmekte olduğundan dolayı aynı radyasyon enerjisinin 99,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'nun içerisinde, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'dan daha kısa mesafede enerjisini ortama bıraktığını göstermektedir. Bu da kullanılan malzemenin radyasyon absorbsiyonunun yüksek olduğunu yani koruyucu özelliğinin yüksek olduğunu göstermektedir.

Tablo 5. 16: En yüksek yoğunluk değerine sahip PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin TVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

Polimorf PbO, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	WO_3	Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3- Bi_2O_3
	Ortorombik	Kübik	Monoklinik			
Yoğunluk	9,14 g/cm^3	7,25 g/cm^3	9,44 g/cm^3			
Enerji (keV)	TVL			% Fark		
140	0,114	0,2101	0,1097	45,7401	3,7719	47,7867
364	0,9538	1,5928	0,9199	40,1180	3,5542	42,2463
662	2,3345	3,4204	2,2331	31,7477	4,3435	34,7123
1332	4,5015	5,899	4,3183	23,6904	4,0697	26,7960

Tablo 5.16'da her bileşiğin en yüksek yoğunluk değerini veren kristal yapılarının 140 keV, 364 keV, 662 keV ve 1332 keV gama enerjisine karşı sahip oldukları onda bir değer kalınlıkları ve birbirleri ile aralarında bulunan %fark değerleri yer almaktadır.

TVL değerlerine bakıldığında 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO 'nun 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 'den ortalama %3,93 daha kalın olması gerekmektedir.

7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'ya ait TVL değerlerinin arasındaki %fark'a

bakıldığında 140 keV'de %45,7401, 364 keV'de %40,1180, 662 keV'de %31,7477 ve 1332 keV'de %23,6904 olduğu görülmektedir. Bu durum gelen radyasyonu onda bir değerine düşürecek malzeme kalınlığını temsil etmesinden dolayı aynı radyasyon enerjisini 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu Im$\bar{3}$ uzay grubu ve m$\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'dan daha ince malzeme ile durdurabilmektedir anlamına gelmektedir.

7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu Im$\bar{3}$ uzay grubu ve m$\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 ile 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ya ait TVL değerlerinin arasındaki %fark'a bakıldığında 140 keV'de %47,7867, 364 keV'de %42,2463, 662 keV'de %34,7123 ve 1332 keV'de %26,7960 olduğu görülmektedir. Bu durum gelen radyasyonu onda bir değerine düşürecek malzeme kalınlığını temsil etmesinden dolayı aynı radyasyon enerjisini 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3, 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu Im$\bar{3}$ uzay grubu ve m$\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3'dan daha ince malzeme ile durdurabilmektedir anlamına gelmektedir.

Bu bileşiklerin kristal yapılarına ait elde edilen LAC, HVL, MFP ve TVL değerlerinin önemi büyüktür ancak radyasyondan korunmada malzemeler bir karışım haline getirilerek güçlendirici olarak kullanılmaktadır. Dolayısıyla bu bileşiklerin bir karışım içerisinde ne kadarlık bir iyileştirme sağladıkları çok değerlidir. Bu durumun anlaşılabilmesi adına radyasyonda sıklıkla başvurulan ve yapı malzemesi olan sıradan beton ve Polivilin alkol reçine kullanılmıştır. Sıradan beton içerisine %50 oranında Tablo 4.14'te yer alan bileşiklerin katkılanması ile oluşturulan kompozitlerin sağladığı yeni LAC değerleri Tablo 4.18'te yer almaktadır. Buraya bakıldığında en yüksek LAC değerinin 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ün katkılanması ile sağlandığı görülmektedir. Beton karışımlarına ait yoğunluk değerleri denklem 3.1 ile hesaplanmış olup Şekil 3.21'de yer almaktadır. Saf halde 2,3 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan sıradan beton içerisine katkılanması ile sıradan betonun yoğunluğunda %37,66'lık bir artışa sebep olmaktadır. En düşük LAC değeri ise beton içerisine 6,88 g/cm^3 yoğunluğa 111.85 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu P4/nmm uzay grubu ve 4/mmm nokta gruplu tetragonal WO_3'ün katkılanması

sağlamaktadır. Katkılanma sonucunda sıradan betonun yoğunluğunda %33'lük bir fark gerçekleşmiştir. Bu iki kompozitin LAC değerleri birbirleri ile karşılaştırıldığında Tablo 5.17'daki gibidir.

Tablo 5. 17: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait LAC değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

SB - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm^3 SB-%50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 2,3 g/cm^3 SB - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 2,3 g/cm^3 SB - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3
Enerji (keV)	LAC			% Fark		
140	4,3328	2,8399	4,3973	34,4557	1,4668	35,4171
364	0,6626	0,5147	0,6771	22,3211	2,1414	23,9846
662	0,3391	0,2951	0,3459	12,9755	1,9658	14,6863
1332	0,2063	0,1882	0,2096	8,7736	1,5744	10,2099
Yoğunluk	3,6751 g/cm^3	3,4474 g/cm^3	3,6988 g/cm^3	6,1957	0,6407	6,7967

Tablo 5. 18: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait HVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

SB - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm^3 SB-%50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 2,3 g/cm^3 SB - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 2,3 g/cm^3 SB - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	% Fark PbO-WO_3	% Fark PbO-Bi_2O_3	%Fark WO_3-Bi_2O_3
Enerji (keV)	HVL			% Fark		
140	0,159942762	0,244022677	0,157596707	34,4557	1,4668	35,4171
364	1,045879867	1,346415388	1,023482499	22,3211	2,1414	23,9846
662	2,043644942	2,348356489	2,003469211	12,9755	1,9658	14,6863
1332	3,359185652	3,682252922	3,30629771	8,7736	1,5744	10,2099
Yoğunluk	3,6751 g/cm^3	3,4474 g/cm^3	3,6988 g/cm^3	6,1957	0,6407	6,7967

Tablo 5. 19: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait MFP değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

SB - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm^3 SB-%50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 2,3 g/cm^3 SB - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 2,3 g/cm^3 SB - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	% Fark PbO-WO_3	% Fark PbO-Bi_2O_3	%Fark WO_3- Bi_2O_3
Enerji (keV)	MFP			% Fark		
140	0,2307	0,3521	0,2274	34,4788	1,4304	35,4160
364	1,5092	1,9428	1,4768	22,3183	2,1468	23,9859
662	2,9489	3,3886	2,891	12,9758	1,9634	14,6845
1332	4,8473	5,3134	4,7709	8,7721	1,5761	10,2100
Yoğunluk	3,6751 g/cm^3	3,4474 g/cm^3	3,6988 g/cm^3	6,1957	0,6407	6,7967

Tablo 5. 20: Sıradan beton içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait TVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

Sıradan Beton - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm^3 Sıradan beton-%50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 2,3 g/cm^3 Sıradan beton - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 2,3 g/cm^3 Sıradan beton - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3- Bi_2O_3
Enerji (keV)	TVL			% Fark		
140	0,5315	0,81094	0,5237	34,4587	1,4675	35,4206
364	3,4757	4,4744	3,4012	22,3203	2,1434	23,9853
662	6,7915	7,8041	6,6579	12,9752	1,9671	14,6871
1332	11,1633	12,2369	10,9875	8,7734	1,5748	10,2101
Yoğunluk	3,6751 g/cm^3	3,4474 g/cm^3	3,6988 g/cm^3	6,1957	0,6407	6,7967

Kurşuna alternatif olabilmesi açısından 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3'ün katkılanması ile 9,14 g/cm^3 ile en yüksek yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO bileşiğinin katkılanması sonucunda oluşan kompozitlerin LAC değerleri açısından karşılaştırması Tablo 5.17'de yer almaktadır. Bi_2O_3'ün PbO'ya göre 140 keV'de %1,46, 364 keV'de %2,14, 662 keV'de %1,96 ve 1332 keV'de %1,57'lik daha iyi etkiye sahip oldukları sonucuna ulaşılmaktadır. Kompozit olarak da çalışmada yer alan en yüksek yoğunluğa sahip PbO'ya alternatif olacağı sonucu burada görülmektedir. 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip monoklinik Bi_2O_3 ile hazırlanan SB/ Bi_2O_3 kompoziti ile 6,88 g/cm^3 WO_3 ile hazırlanan SB/ Bi_2O_3 kompoziti arasında 140 keV'de %34,4557, 364 keV'de %22,3211, 662 keV'de %12,9755ve 1332 keV'de %8,7736 fark yer almaktadır. HVL, MFP ve TVL değerlerinin yer aldığı Tablo 5.18, Tablo 5.19 ve Tablo 5.20'deki değerler de bu sonucu desteklemektedir.

Sıradan beton ile hazırlanan kompozitler benzer şekilde %50 oranda PVA içerisine PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşikleri katkılanarak simüle edilmiştir ve oluşturulan kompozitlere ait yoğunluk değerleri denklem 3.1 ile hesaplanmış olup Şekil 3.22'de yer almaktadır. 1,19 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan PVA ile içerisine %50 oranında 9,44 g/cm^3 monoklinik Bi_2O_3 eklenmesiyle oluşturulan kompozitin yoğunluğu arasında %43,68, 9,17 g/cm^3 ortorombik PbO eklenmesiyle oluşturulan kompozitin yoğunluğu arasında %43,46 ve 6,88 g/cm^3 tetragonal WO_3 eklenmesiyle oluşturulan kompozitin yoğunluğu arasında %41,08'lik fark bulunmaktadır. Kompozitlere ait LAC değerlerinin %fark değerleri Tablo 5.21'de görülmektedir.

Tablo 5. 21: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait LAC değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

PVA - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3
Enerji (keV)	LAC			% Fark		
140	2,4972	1,677	2,4862	32,8447	-0,4424	32,5476
364	0,3887	0,3104	0,391	20,1440	0,5882	20,6138
662	0,2005	0,1792	0,2036	10,6234	1,5225	11,9842
1332	0,1219	0,1155	0,1215	5,2502	-0,3292	4,9382
Yoğunluk	2,1058 g/cm^3	2,029 g/cm^3	2,1135 g/cm^3	3,6470	0,3643	3,9981

Tablo 5. 22: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait HVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

PVA - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3
Enerji (keV)	HVL			% Fark		
140	0,2775	0,4132	0,2787	32,8447	-0,4424	32,5476
364	1,7828	2,2326	1,7723	20,1440	0,5882	20,6138
662	3,4563	3,8671	3,4037	10,6234	1,5225	11,9842
1332	5,6849	6	5,7037	5,2502	-0,3292	4,9382
Yoğunluk	2,1058 g/cm^3	2,029 g/cm^3	2,1135 g/cm^3	3,6470	0,3643	3,9981

Tablo 5. 23: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait MFP değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

PVA - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3
Enerji (keV)	MFP			% Fark		
140	0,4004	0,5963	0,4022	32,8447	0,4404	32,5476
364	2,5726	3,2216	2,5575	20,1440	0,5882	20,6138
662	4,9875	5,5803	4,9115	10,6234	1,5225	11,9842
1332	8,2034	8,6580	8,2304	5,2502	-0,3292	4,9382
Yoğunluk	2,1058 g/cm^3	2,029 g/cm^3	2,1135 g/cm^3	3,6470	0,3643	3,9981

Tablo 5. 24: Polivilin Alkol (PVA) içerisine %50 oranda PbO, WO_3 ve Bi_2O_3 bileşiklerinin katkılanmasıyla oluşan kompozitlere ait TVL değerlerinin % fark açısından karşılaştırılması

PVA - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3- Bi_2O_3
Enerji (keV)	TVL			% Fark		
140	0,9222	1,3732	0,92631	32,8447	0,4404	32,5476
364	5,9248	7,4194	5,8900	20,1440	0,5882	20,6138
662	11,4862	12,8515	11,3113	10,6234	1,5225	11,9842
1332	18,8925	19,9393	18,9547	5,2502	-0,3292	4,9382
Yoğunluk	2,1058 g/cm^3	2,029 g/cm^3	2,1135 g/cm^3	3,647	0,3643	3,9981

Tablo 5.10'da yer aldığı gibi LAC değerleri karşılaştırıldığında sıradan beton içerisine katkılanmasında olduğu gibi 9,17 g/cm^3 ortorombik PbO ile 9,44 g/cm^3 monoklinik Bi_2O_3 çok yakın sonuçlar sunarken; 9,44 g/cm^3 yoğunluğa sahip monoklinik Bi_2O_3 ile hazırlanan PVA kompozit ile 6,88 g/cm^3 WO_3 ile hazırlanan PVA kompozit arasında 140 keV'de %32,54, 364 keV'de %20,61, 662 keV'de %11,98 ve 1332 keV'de %4,93 fark yer almaktadır.

Radyasyonla etkileşim mekanizmaları olan Fotoelektrik olay, Compton olayı ve Çift oluşumu Z ye üstel şekilde bağımlıdır. Pb elementinin atom numarası 82, kurşununki ise 83'tür. W elementi 72 olan atom numarası ile diğerlerine göre düşük seviyededir. Pb ve Bi'da bulunan atom bolluğu etkileşim açısından önemli olduğu ve radyasyonlarla daha çok etkileşerek enerji aktarımı sağlamaları sebebiyle bu farklar özellikle fotoelektrik ve compton olaylarının baskın olduğu 140 keV ile 662 keV aralığında net görülebilmektedir. Özellikle düşük yoğunluktaki malzemelere katkılanmalar sonucunda oluşturulan kompozitlerin enerjiye bağlı olarak değişen etkileşim türlerinin etkisi daha net olarak görülebilmektedir. Sıradan beton ile ve PVA ile hazırlanan kompozitlerin sonuçlarına bakıldığında düşük enerjiler için malzeme seçiminin özellikle değerli olduğu ve ciddi farklar ortaya çıkarttığı sonucuna ulaşılmaktadır.

Tablo 5.25'de literatürde yer alan bazı çalışmalar yer almaktadır ve yüzde fark değerleri denklem 5.1 kullanılarak hesaplanmıştır. Bu çalışmalarda dolgu malzemesi olarak kullanılan Bi_2O_3, PbO ve WO_3' e ait kristal yapı ve yoğunluk bilgileri verilmemiştir ancak son durumda hazırlanmış olan kompozitlere ait yoğunlukları yer almaktadır. K.Verdipoor vd. 'in 2018'de yaptıkları çalışmada [101] silikon reçine içerisine %50 oranda Bi_2O_3, PbO ve WO_3 bileşikleri eklenmesi ile kompozit oluşturulmuştur ve en yüksek yoğunluğu %50 Silikon Reçine - % 50 Bi_2O_3 ile %50 Silikon Reçine - % 50 PbO karışımı sahipken %50 Silikon Reçine - % 50 WO_3

ile aralarında %2,6315 fark bulunmaktadır. Doğrusal zayıflatma katsayısı farkı incelendiğinde ise %50 Silikon Reçine - % 50 Bi_2O_3 ile %50 Silikon Reçine - % 50 PbO karışımlarının daha iyi absorbsiyon sağladığı görülmektedir. Gusti Atika Urfa vd. 'nin 2023 yılında yaptıkları çalışmada [102] WO_3 ve Bi_2O_3 bileşikleri yer almaktadır. En yüksek yoğunluğa ve dolayısıyla en yüksek LAC değerini Bi_2O_3 bileşiği sağlarken en düşük etkiyi WO_3 bileşiğinin sağladığı görülmektedir. Çalışmaya bakıldığında Bi_2O_3 bileşiği daha iyidir sonucuna ulaşılmaktadır ancak kristal yapıları hakkında bilgi verilmediği için bu sonuç ile ilgili bir genelleme yapılamayacağı bu tez çalışması sonuçları ile ortaya çıkmaktadır. R. Malekzadeh vd.'nin 2020'de yaptıkları çalışmada [103] silikon kauçuk içerisine %20 oranda PbO ve WO_3 ekleyerek 2 farklı kompozit oluşturulmuştur ve yoğunluk farklarına bakıldığında %1,37 lik farkla PbO'nun daha yoğun olduğu görülmektedir. İki yoğunluk değerinin birbirine yakınlığı dikkat çekmektedir ancak bu bileşiklerin kristal yapıları ve sahip oldukları yoğunluklar hakkında bilgi verilmediği için tez çalışmasında yer alan verilerle karşılaştırması yapılamamıştır. Y.Karabul ve O.Içelli 'nin 2021 yılında yaptıkları çalışmada [104] ise %80 Epoksi-%20 nano Bi_2O_3 ve %80 Epoksi -%20 nano WO_3 kompozitleri karşılaştırılmıştır. Sonuçlar incelendiğinde % 2,8358 ile %80 Epoksi -%20 nano WO_3 karışımının daha yüksek yoğunluk değeri sağladığı görülmektedir. Ancak sonuçlar incelendiğinde 356 keV'de %80 Epoksi-%20 nano Bi_2O_3 daha etkili bir LAC sağlarken 662 keV ve 1332 keV'de %80 Epoksi -%20 nano WO_3 kompozitinin sağladığı görülmektedir. Bu çalışmaların dışında, Kazemi F.1 vd. 2019 yılında yaptığı çalışmada [105] 7,16 g/cm^3 yoğunluğa sahip olan WO_3 'ten kompozit elde edip atenuasyon katsayılarını hesaplamış, K. Mokhtari vd. 'nin 2021 yılında yaptıkları çalışmada ise 2,3 g/cm^3 sıradan beton içerisine %5 oranda PbO katkılayarak yeni kompozitin yoğunluğunu 2,39 g/cm^3 hesaplamışlardır. Ancak bu hesaplama sırasında PbO'ya ait yoğunluk değerine yer verilmemiştir.

Tablo 5. 25: Literatürde yer alan çalışmalara ait LAC değerleri

K. Verdipoor vd. [101]						
(μ)	%50 Silikon Reçine - % 50 PbO	%50 Silikon Reçine - % 50 WO_3	%50 Silikon Reçine - % 50 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3- Bi_2O_3
Enerji (keV)	LAC			% Fark		
364 keV	0,20862	0,202945	0,20881	2,7202	0,0909	2,8087
662 keV	0,16074	0,15614	0,16055	2,8617	-0,1183	2,7468
1332 keV	0,11476	0,111555	0,11514	2,7927	0,3300	3,1136
Yoğunluk	1,9 g/cm^3	1,85 g/cm^3	1,9 g/cm^3	2,6315	0	2,6315

Tablo 5. 25 (devam): Literatürde yer alan çalışmalara ait LAC değerleri

Gusti Atika Urfa vd. [102]			
(μ)	WO_3	Bi_2O_3	WO_3- Bi_2O_3
Enerji	LAC		% Fark
662 keV	0,491	0,71	30,8450
Yoğunluk	7,16 g/cm^3	8,9 g/cm^3	19,5505

R. Malekzadeh vd. [103]			
(μ)	%80 Silikon kauçuk - %20 PbO	%80 Silikon kauçuk - %20 WO_3	% Fark PbO-WO_3
Enerji	LAC		% Fark
662 keV	0,146	0,13	10,9589
Yoğunluk	1,45 g/cm^3	1,43 g/cm^3	1,3793

Y.Karabul ve O.Içelli [104]			
(μ)	%80 Epoksi-%20 nano Bi_2O_3	%80 Epoksi -%20 nano WO_3	WO_3- Bi_2O_3
Enerji	LAC		%Fark
356 keV	0,1927	0,17822	-8,1247
662 keV	0,11848	0,11926	0,6540
1332 keV	0,08072	0,08174	1,2478
Yoğunluk	1,302 g/cm^3	1,34 g/cm^3	2,8358

Bu tez çalışması (Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3) - Tablo 5.13						
Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	PbO	WO_3	Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3
	Ortorombik	Kübik	Monoklinik			
Enerji (keV)	LAC			% Fark		
140	20,1887	10,9603	20,9905	45,7107	3,8198	47,7844
364	2,4145	1,4458	2,5033	40,1201	3,5473	42,2442
662	0,9865	0,6733	1,0313	31,7486	4,3440	34,7134
1332	0,5116	0,3904	0,5333	23,6903	4,0690	26,7954
Yoğunluk	9,14 g/cm^3	7,25 g/cm^3	9,44 g/cm^3	20,6783	3,1779	23,1991

Bu tez çalışması (Sıradan Beton - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3) –Tablo 5.17						
Sıradan Beton - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 2,3 g/cm^3 Sıradan beton- %50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 2,3 g/cm^3 Sıradan beton - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 2,3 g/cm^3 Sıradan beton - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3
Enerji (keV)	LAC			% Fark		
140	4,3328	2,8399	4,3973	34,4557	1,4668	35,4171
364	0,6626	0,5147	0,6771	22,3211	2,1414	23,9846
662	0,3391	0,2951	0,3459	12,9755	1,9658	14,6863
1332	0,2063	0,1882	0,2096	8,7736	1,5744	10,2099
Yoğunluk	3,6751 g/cm^3	3,4474 g/cm^3	3,6988 g/cm^3	6,1957	0,6407	6,7967

Bu tez çalışması (PVA - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3)- Tablo 5.21						
PVA - Polimorf Pbo, WO_3 ve Bi_2O_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Ortorombik 9,14 g/cm^3 PbO	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Tetragonal 6,88 g/cm^3 WO_3	%50 1,19 g/cm^3 PVA - %50 Monoklinik 9,44 g/cm^3 Bi_2O_3	PbO-WO_3	PbO-Bi_2O_3	WO_3-Bi_2O_3

Tablo 5. 25 (devam): Literatürde yer alan çalışmalara ait LAC değerleri

Enerji (keV)	LAC			% Fark		
140	2,4972	1,677	2,4862	32,8447	-0,4424	32,5476
364	0,3887	0,3104	0,391	20,1440	0,5882	20,6138
662	0,2005	0,1792	0,2036	10,6234	1,5225	11,9842
1332	0,1219	0,1155	0,1215	5,2502	-0,3292	4,9382
Yoğunluk	2,1058 g/cm^3	2,029 g/cm^3	2,1135 g/cm^3	3,6470	0,3643	3,9981

Gusti Atika Urfa vd. [102] ile Bu tez çalışmasında yer alan bileşiklerin karşılaştırılması						
(μ)	WO_3 [102]	Bi_2O_3 [102]	WO_3 [Tablo 5.13]	Bi_2O_3 [Tablo 5.13]	WO_3 [102]-WO_3 [Tablo 5.13]	Bi_2O_3 [102]-Bi_2O_3 [Tablo 5.13]
Enerji (kev)	LAC				% Fark	
662	0,491	0,71	0,6733	1,0313	27,0756	31,1549
Yoğunluk	7,16 g/cm^3	8,9 g/cm^3	7,25 g/cm^3	9,44 g/cm^3	1,241379	5,72034

Bunların yanı sıra tabloda bu tez çalışmasında yer alan Tablo 5.13, Tablo 5.17 ve Tablo 5.21'deki bileşiklere ait LAC değerleri yer almaktadır. Literatürde yer alan Gusti Atika Urfa vd. [102]'nin çalışmasında yer alan bileşiklerin LAC değerleri ve yoğunluk değerlerine bakıldığında Bi_2O_3 bileşiğinin %19,5505 daha yüksek yoğunluğa sahip olduğu ve LAC değerleri karşılaştırıldığında %30,8450 daha yüksek atenuasyon sağladığı görülmektedir. Bu tez çalışmasında yer alan bileşikler ile Gusti Atika Urfa vd.'nin çalışmasında yer alan bileşikleri karşılaştırıldığında 662 keV gama enerjisinde Tablo 5.13'te yer alan Bi_2O_3 bileşiğinin %5,72 daha yüksek yoğunluğa sahip olduğu ve %31 daha yüksek atenuasyon sağladığı görülmektedir. WO_3 bileşikleri karşılaştırıldığında ise yoğunluk 1,24'lük bir yoğunluk farkı bulunurken Tablo 5.13'te yer alan WO_3 bileşiği %27 daha yüksek atenuasyon sağlamaktadır.

Bu tez çalışmasında yer alan karışımlar incelendiğinde ise diğer malzemeler ile gerçekleştirilen karışımlarla göre daha yüksek yoğunlukta kompozitler oluşturdukları görülmektedir. Yoğunluklarına paralel olarak radyasyon koruyuculuk durumlarını incelendiğinde K. Verdipoor vd. [101]'nin malzeme yoğunlukları aynı katkı oranına sahip ancak farklı matrix malzemesi ve yüksek yoğunluğa sahip polimorf bileşikler kullanıldığından dolayı radyasyondan korunmada pozitif anlamda fark yaratmaktadır yani çok daha etkili bir koruma sağlamaktadır**.** Bu sonuçlara bakıldığında görülmektedir ki radyasyon zırh malzemesi seçileceği zaman bileşiklere ait kristal yapılara dikkat edilmesi özellikle 140 keV gibi fotoelektrik olayın baskın olduğu enerji değerlerinde büyük etkiler göstermektedir. Bu tez çalışmasında yer alan bileşikler için bir karşılaştırma yapıldığında en iyi tutuculuğu sağlaması için 9,44 g/cm^3 yoğunluğa 327.92 Å^3 hacme sahip olan 20 atomlu $P2_1/c$ uzay grubu ve 2/m nokta gruplu monoklinik Bi_2O_3 ün kullanılması önerilmektedir. Ancak PbO kullanılacak ise en

iyi değeri sağlayan 9,14 g/cm^3 yoğunluğa 162.16 Å^3 hacme sahip olan 8 atomlu Pbcm uzay grubu ve mmm nokta gruplu ortorombik PbO'un kullanılması yine yüksek koruma etkisi gösterecektir. WO_3'ler arasında ise 7,25 g/cm^3 yoğunluğa 424.57 Å^3 hacme sahip olan 32 atomlu $Im\bar{3}$ uzay grubu ve $m\bar{3}$ nokta gruplu kübik WO_3 bileşiği en yüksek etkiyi sağlayacaktır. Bu bileşikler katkı malzemeleri olarak kullanıldıklarında ise enerjiye bağlı etkileri daha belirgin şekilde yansıtmakta olup tüm değerler bu bölümde Tablolar halinde verilmiştir. Literatürde mevcut olan çalışmalar incelendiğinde malzeme yapısının değiştirilerek daha yoğun malzemeler üretilebildiği ve bu çalışmada yer alan bileşiklerin daha önce hiç incelenmediği görülmektedir. Bu çalışma ile malzeme yapısının radyasyondan korunmada çok etkin olduğunu tespit edilmiş ve ilk kez bu tez çalışmasında kristal yapıya bağlı olarak gerçekleşen yağunluk değişiminin radyasyondan korunmadaki etkinliğini Monte Carlo Simülasyonu MCNPX kodu ile teorik olarak incelenip sonuçlarla desteklenmiştir. Bu tez çalışması daha etkin radyasyon korunması sağlayacak malzeme üretimi açısından yeni bir çalışma niteliği taşımaktadır.

Bunun yanı sıra bu tez çalışması radyasyondan korunma çalışmaları sırasında zırh malzemesi olarak malzeme seçimi işlemlerine derinlik sağlamaktadır. Aynı zamanda simülasyon tekniklerinin efektifliğini, uygulamada sağladığı kolaylıkları da gözler önüne sermektedir. Alternatiflerin incelenmesinde ve doğru alternatifin etkin şekilde kullanılabilmesine de olanak sağlayan bu simülasyon yaklaşımının kullanılması teknolojik ilerlemeler açısından da oldukça değerlidir. Bir malzemenin keşfi çok uzun zamanlar alabilmektedir dolayısıyla teorik olarak ihtiyaca uygun malzemelerin keşfi ve parametreler ile beraber etkilerinin kanıtlanması ve uygunluğu onaylandığında üretim aşamasına geçilmesi bilim dünyasını olukça farklı bir noktaya taşıyacaktır. Bu teorik yaklaşımlar sayesinde özellikle radyasyondan korunma için malzeme seçimi sırasında doğru katkı malzemesinin seçilmesi, hangi oranda katkılanırsa en yüksek etkiyi vereceği gibi deneysel olarak incelenmesi uzun zaman, deneysel olanak, maddi imkan gerektiren işlemlerin hızla gerçekleşmesine ve kısa zamanda yeni malzemelerin zırh malzemesi olarak literatüre kazandırılmasına olanak sağlamaktadır.

KAYNAKLAR

[1] El-Khatib, A. M., Abbas, M. I., Hammoury, S. I., & et al. 2022, Effect of PbO nanoparticles on dimethyl polysiloxane for use in radiation shielding applications, Scientific Reports, 12, 15722.

[2] Umeh, C. D., Agwu, K. K., Okoye, C. M. I., Ahia, C. C., & Ikegbu, G. O. 2021, Characterization of the radiation shielding properties of fired lead sample for X-ray shielding applications. Progress in Nuclear Energy, 137, 103765.

[3] Erdem, M., Baykara, O., Doğru, M., & Kuluöztürk, F. ,2010, A novel shielding material prepared from solid waste containing lead for gamma ray. Radiation Physics and Chemistry, 79(9), 917-922.

[4] McCaffrey, J.P., Shen, H., Downton, B. and Mainegra-Hing, E., 2007, Radiation attenuation by lead and nonlead materials used in radiation shielding garments. Med. Phys., 34: 530-537.

[5] Urfa, G. A., Wianto, T., Manik, T. N., & Nasrulloh, A. V., 2023, Study of alternative radiation material shielding for gamma radiation using Monte Carlo simulation. Jurnal Teknologi Reaktor Nuklir Tri Dasa Mega, 25(3).

[6] AbuAlRoos, J., & Nadin, et al., 2020, Tungsten-based material as promising new lead-free gamma radiation shielding material in nuclear medicine. Physica Medica: European Journal of Medical Physics, 78, 48-57.

[7] AbuAlRoos, N. J., Baharul Amin, N. A., & Zainon, R., 2019, Conventional and new lead-free radiation shielding materials for radiation protection in nuclear medicine: A review. Radiation Physics and Chemistry, 165, 108439.

[8] Almurayshid, M., Alssalim, Y., Aksouh, F., Almsalam, R., ALQahtani, M., Sayyed, M. I., & Almasoud, F., 2021, Development of new lead-free composite materials as potential radiation shields. Materials, 14(17), 4957.

[9] Atashi, P., Rahmani, S., Ahadi, B., et al., 2018, Efficient, flexible and lead-free composite based on room temperature vulcanizing silicone rubber/W/Bi2O3 for gamma ray shielding application. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 29(15), 12306–12322.

[10] Reda, A. M., & El-Daly, A. A. 2020,. Gamma ray shielding characteristics of Sn-20Bi and Sn-20Bi-0.4Cu lead-free alloys. Progress in Nuclear Energy, 123, 103304.

[11] Ahmed, B., Shah, G. B., Malik, A. H., Aurangzeb, & Rizwan, M., 2020, Gamma-ray shielding characteristics of flexible silicone tungsten composites. Applied Radiation and Isotopes, 155, 108901.

[12] Poltabtim, W., Wimolmala, E., & Saenboonruang, K., 2018, Properties of lead-free gamma-ray shielding materials from metal oxide/EPDM rubber composites. Radiation Physics and Chemistry, 153, 1-9.

[13] Alsaab, A. H., & Zeghib, S., 2023, Study of prepared lead-free polymer nanocomposites for X- and gamma-ray shielding in healthcare applications. Polymers, 15(9), 2142.

[14] Muthamma, M. V., Prabhu, S., Bubbly, S. G., & Gudennavar, S. B. ,2021, Micro and nano Bi2O3 filled epoxy composites: Thermal, mechanical and γ-ray attenuation properties. Applied Radiation and Isotopes, 174, 109780.

[15] Asgari, M., Afarideh, H., Ghafoorifard, H., & Amirabadi, E. A., 2021, Comparison of nano/micro lead, bismuth and tungsten on the gamma shielding properties of the flexible composites against photon in wide energy range (40 keV–662 keV). Nuclear Engineering and Technology, 53(12), 4142-4149.

[16] Alabsy, M. T., Abbas, M. I., El-khatib, A. Y., et al., 2024, Attenuation properties of poly methyl methacrylate reinforced with micro/nano ZrO2 as gamma-ray shields. Scientific Reports, 14, 1279.

[17] Kittel, C. (2005). Introduction to solid state physics (8th ed.). John Wiley & Sons

[18] Halliwell, E., Couch, C., Begum, R., Li, W., & Maqbool, M., 2021, Increase in linear attenuation coefficient by changing crystal structure of materials for radiation shielding and biomedical devices safety. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 622, 126646.

[19] Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., & Persson, K. A., 2013, Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. APL Materials, 1(1), 011002.

[20] Petousis, I., Mrdjenovich, D., Ballouz, E., et al., 2017, High-throughput screening of inorganic compounds for the discovery of novel dielectric and optical materials. Scientific Data, 4, 160134.

[21] Munro, J. M., Latimer, K., Horton, M. K., et al., 2020, An improved symmetry-based approach to reciprocal space path selection in band structure calculations. npj Computational Materials, 6, 112.

[22] Singh, A. K., Zhou, L., Shinde, A., Suram, S. K., Montoya, J. H., Winston, D., Gregoire, J. M., & Persson, K. A., 2017, Electrochemical Stability of Metastable Materials. Chemistry of Materials, 29(23), 10159-10167.

[23] Patel, A. M., Nørskov, J. K., Persson, K. A., & Montoya, J. H., 2019, Efficient Pourbaix diagrams of many-element compounds. Physical Chemistry Chemical Physics, 21(45), 25323-25327.

[24] Persson, K. A., Waldwick, B., Lazic, P., & Ceder, G., 2012, Prediction of solid-aqueous equilibria: Scheme to combine first-principles calculations of solids with experimental aqueous states. Physical Review B, 85(23), 235438.

[25] Horton, M. K., Montoya, J. H., Liu, M., et al., 2019, High-throughput prediction of the ground-state collinear magnetic order of inorganic materials using Density Functional Theory. npj Computational Materials, 5, 64.

[26] Ding, H., Dwaraknath, S. S., Garten, L., Ndione, P., Ginley, D., & Persson, K. A., 2016, Computational approach for epitaxial polymorph stabilization through substrate selection. ACS Applied Materials & Interfaces, 8(20), 13086-13093.

[27] Jain, A., Hautier, G., Ong, S. P., Moore, C. J., Fischer, C. C., Persson, K. A., & Ceder, G., 2011, Formation enthalpies by mixing GGA and GGA + U calculations. Physical Review B, 84(4), 045115.

[28] Wang, A., Kingsbury, R., McDermott, M., Horton, M., Jain, A., Ong, S. P., et al. , 2021, A framework for quantifying uncertainty in DFT energy corrections. ChemRxiv.

[29] Aykol, M., Dwaraknath, S., Sun, W., et al. 2018, Thermodynamic limit for synthesis of metastable inorganic materials. Science Advances, 4, eaaq0148.

[30] Tran, R., Xu, Z., Radhakrishnan, B., et al. 2016, Surface energies of elemental crystals. Scientific Data, 3, 160080.

[31] De Jong, M., Chen, W., Angsten, T., et al. , 2015, Charting the complete elastic properties of inorganic crystalline compounds. Scientific Data, 2, 150009.

[32] De Jong, M., Chen, W., Geerlings, H., et al., 2015, A database to enable discovery and design of piezoelectric materials. Scientific Data, 2, 150053.

[33] Latimer, K., Dwaraknath, S., Mathew, K., et al. , 2018, Evaluation of thermodynamic equations of state across chemistry and structure in the materials project. npj Computational Materials, 4, 40.

[34] Zheng, H., Li, X.-G., Tran, R., Chen, C., Horton, M., Winston, D., Persson, K. A., & Ong, S. P. , 2020, Grain boundary properties of elemental metals. Acta Materialia, 186, 40-49.

[35] Kudling, L. 2010. Electromagnetic wave [Image]. In Wikimedia Commons. Erişim tarihi: Temmuz 16, 2024, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Electromagnetic_wave.svg

[36] NASA. (t.y.). The electromagnetic spectrum: The physics of waves. Erişim tarihi: 16 Temmuz 2024, https://science.nasa.gov/ems/02_anatomy

[37] Turner, J. E. , 2004, Interaction of radiation with matter. Health Physics, 86(3), 273.

[38] National Nuclear Data Center. (t.y.). Erişim tarihi: 16 Temmuz 2024, https://www.nndc.bnl.gov/

[39] Podgorsak, E.B., 2005. Radiation Physics for Medical Physicist, Springer-Verlag Berlin Heidenberg 2006, s.87-350, Germany.

[40] Serway, R. A., & Beichner, R. J. , 2011, Fen ve Mühendislik İçin Fizik 3 (Prof. Dr. Kemal Çolakoğlu, Çev.). Ankara: Palme Yayıncılık. (Orijinal çalışma yayımlanma tarihi: 5. baskıdan çeviri). s. 1450-1480

[41] Davisson, C. M. , 1968,. Interaction of γ-radiation with matter. In K. Siegbahn (Ed.), Alpha-, Beta- and Gamma-Ray Spectroscopy (s. 37-78). Elsevier.

[42] Bor, D. ,2016, Radyasyon: Sağlık riskleri ve tanısal incelemelerde korunma. Ankara: Dünya Tıp Kitapevi.

[43] Arslan, N., 2017, Radyasyonun biyolojik sistemler üzerindeki etkileri. Nuclear Medicine Seminars, 3, 178-183

[44] IAEA. , 2010, Radiation biology: A handbook for teachers and students (s. 2-24). Vienne.

[45] ICRP. , 2007, The 2007 recommendations of the International Commission on Radiological Protection. ICRP Publication 103. Annals of the ICRP, New York

[46] Bor, D., 2016, Radyasyon: Sağlık riskleri ve tanısal incelemelerde korunma. Ankara: Dünya Tıp Kitapevi

[47] International Atomic Energy Agency, 2002, Radiation protection and safety of radiation sources: International basic safety standards (General Safety Requirements Part 3, IAEA Safety Standards Series No. GSR Part 3). Vienna

[48] Berger, M. J., Hubbell, J. H., Seltzer, S. M., Chang, J., Coursey, J. S., Sukumar, R., ... Olsen, K. (2010). XCOM: Photon cross section database. National Institute of Standards and Technology (NIST). Erişim Tarihi: 20 Mart 2024, http://physics.nist.gov/xcom

[49] Tekin, H. O., Sayyed, M. I., Altunsoy, E. E., & Manici, T. , 2017, Shielding properties and effects of WO_3 and PbO on mass attenuation coefficients by using MCNPX code. Retrieved from https://api.semanticscholar.org/CorpusID:220623692

[50] Tekin, H. O., Sayyed, M. I., Manici, T., & Altunsoy, E. E., 2018, Photon shielding characterizations of bismuth modified borate-silicate-tellurite glasses using MCNPX Monte Carlo code. Materials Chemistry and Physics, 211, 9-16.

[51] Hook, J. R., & Hall, H. E., 1991, Solid state physics. Wiley.

[52] Callister, Jr., William D. , 2007, Material science and engineering: An introduction. John Wiley & Sons, Inc.

[53] Penn State University. (n.d.). Introduction to inorganic chemistry. LibreTexts. Retrieved July 16, 2024, from https://LibreTexts.org

[54] Joseph, E., & Nasiru, R. , 2013, Geometry correction in efficiency of a sodium iodide (Thallium Activated), NaI(Tl) detector. Advances in Applied Science Research, 4, 400–406.

[55] Higaki, T., Zeng, C., Chen, Y., Hussain, E., & Jin, R., 2016, Controlling the crystalline phases (FCC, HCP and BCC) of thiolate-protected gold nanoclusters by ligand-based strategies. CrystEngComm, 18, 6979–6986.

[56] Lin, Lianshan. Materials Databases Infrastructure Constructed by First Principles Calculations: A Review. United States.

[57] Ceder, G., 2010, Opportunities and challenges for first-principles materials design and applications to Li battery materials. MRS Bulletin, 35(9), 693-701

[58] Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., & Persson, K. A., 2013, The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. Applied Physics Letters: Materials, 1, 0110

[59] The Materials Project, 2015, Materials Project website https://www.materialsproject.org/

[60] GitHub, 2014, Materials Project GitHub source. https://github.com/materialsproject

[61] Pymatgen, 2011, Pymatgen online documentation. http://pymatgen.org/

[62] Ong, S. P., Richards, W. D., Jain, A., Hautier, G., Kocher, M., Cholia, S., Gunter, D., Chevrier, V. L., Persson, K. A., & Ceder, G., 2013, Python Materials Genomics (pymatgen): A robust, open-source Python library for materials analysis. Computational Materials Science, 68, 314-319.

[63] Shultis, J. K., & Faw, R. E., 2011, An MCNP primer (ss. 1-16)

[64] Dunn, W. L., & Shultis, J. K., 2010, Exploring Monte Carlo methods (ss. 1-7). Los Alamos National Laboratory, USA.

[65] Brewer, R., 2009, Criticality calculations with MCNP5: A primer (ss. 10-14, 123-124). Los Alamos National Laboratory. LA-UR-09-00380

[66] Kulesza, J. A., Adams, T. R., Armstrong, J. C., Bolding, S. R., Brown, F. B., Bull, J. S., ... Zukaitis, A. J., 2022, MCNP® code version 6.3.0 theory & user manual (Rev. 1). Los Alamos National Laboratory

[67] Smith, J. F., & Foster, W. R., 1993, Lead as a radiation shielding material. Journal of Radiation Protection Dosimetry, 48(1), 63-68

[68] Culvert, T., & Spencer, K., 2010, Evaluation of tungsten-based materials for radiation shielding. Journal of Radiation Protection Dosimetry, 142(2-4), 123-130

[69] Sardar, S. A., Kaur, P., & Singh, M., 2020, Evaluation of gamma-ray shielding properties of Bi2O3-based glass systems. Radiation Physics and Chemistry, 170, 108619.

[70] Bystroem, A., 1943, X-ray studies on orthorhombic PbO. Arkiv foer Kemi, Mineralogi och Geologi, B, 17, 1-6.

[71] Kay, M. I., 1961, A neutron diffraction study of orthorhombic PbO. Acta Crystallographica, 14, 80–81.

[72] Coussaert, R., Leroy, J.-M., Thomas, D., & Tridot, G., 1968, Chimie minerale: Sur la transformation de phases du monoxyde de plomb. Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Sciences, Serie C, Sciences Chimiques, 266, 1496–1498.

[73] Hill, R. J., 1985, Refinement of the structure of orthorhombic PbO (massicot) by Rietveld analysis of neutron powder diffraction data. Acta Crystallographica, Section C: Crystal Structure Communications, 41, 1281–1284.

[74] Leciejewicz, J., 1961, Neutron-diffraction study of orthorhombic lead monoxide. Acta Crystallographica, 14, 66–66.

[75] Garnier, P., Moreau, J., & Gavarri, J. R., 1990, Analyse de Rietveld de la structure de Pb(1-x)Ti(x)O(1+x) par diffraction des neutrons. Materials Research Bulletin, 25, 979–986.

[76] Hart, G., & Forcade, R., 2009, Generating derivative structures from multilattices: Algorithm and application to hcp alloys. Physical Review B, 80, 014120.

[77] Bergerhoff, G., Hundt, R., Sievers, R., & Brown, I. D., 1983, The inorganic crystal structure data base. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, 23(2), 66–69.

[78] FIZ Karlsruhe. (n.d.). Inorganic Crystal Structure Database. Retrieved July 16, 2024, from http://icsd.fiz-karlsruhe.de

[79] Akimov, A. I., & Savchuk, G. K., 2008, Structure and physical properties of tetragonal (PbMg1/3Nb2/3O3)-(PbTiO3) solid solutions. Inorganic Materials (USSR), 44, 1244–1250

[80] Zhong, Q., Dahn, J. R., & Colbow, K. , 1992, Lithium intercalation into WO_3 and the phase diagram of Li_xWO_3. Physical Review B - Condensed Matter, 46(18), 2554–2560.

[81] Kehl, W. L., Hay, R. G., & Wahl, D., 1952, The structure of tetragonal tungsten trioxide. Journal of Applied Physics, 23, 212–215.

[82] Locherer, K. R., & Salje, E. K. H., 1999, The refinement of a tetragonal phase of WO_3 using a novel PSD high temperature x-ray powder diffractometer. Phase Transitions, 69, 85–93.

[83] Vogt, T., Woodward, P. M., & Hunter, B. A., 1999, The high-temperature phases of WO_3. Journal of Solid State Chemistry, 144, 209–215

[84] Suetin, D. V., Shein, I. R., & Ivanovskii, A. L., 2011, Structural, electronic and magnetic properties of tungsten oxycarbides WC1-xOx and WO_3-xCx from first principles calculations. Physica Status Solidi B - Basic Solid State Physics, 248, 2884–2892.

[85] Palatnik, L. S., Obol'yaninova, O. A., Naboka, M. N., & Gladkikh, N. T., 1973, New modifications of tungsten oxides. Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Neorganicheskie Materialy, 9, 718–720

[86] Sillen, L. G., 1938, X-ray studies on bismuth trioxide. Arkiv för Kemi, Mineralogi och Geologi A, 12, 1–15

[87] Matsumoto, A., Koyama, Y., & Tanaka, I., 2010, Structures and energetics of Bi2O3 polymorphs in a defective fluorite family derived by systematic first-principles lattice dynamics calculations. Physical Review B - Condensed Matter, 81, 094117–1–094117–11.

[88] Zav'yalova, A. A., & Imamov, R. M., 1972, Special features of the crystal structure of bismuth oxides. Zhurnal Strukturnoi Khimii, 13, 869–873

[89] Kumada, N., & Kinomura, N. , 2009, A new allotropic form of Bi2O3. Materials Research Society Symposia Proceedings, 547, 227–232.

[90] Cornel, N., Tancret, N., Abraham, F., & Mentre, O., 2006, New epsilon-Bi2O3 metastable polymorph. Inorganic Chemistry, 45, 4886–4888.

[91] Ghedia, S., Locherer, T., Dinnebier, R., Prasad, D. L. V. K., Wedig, U., Jansen, M., & Senyshyn, A., 2010, High-pressure and high-temperature multianvil synthesis of metastable polymorphs of Bi2O3: Crystal structure and electronic properties. Physical Review B - Condensed Matter, 82, 024106–1–024106–12.

[92] Ivanov, S. A., Tellgren, R., Rundlof, H., & Orlov, V. G., 2001, Structural studies of alpha-(Bi2O3) by neutron powder diffraction. Powder Diffraction, 16, 227–230.

[93] Pereira, A. L. J., Errandonea, D., Beltran, A., Gracia, L., Gomis, O., Sans, J. A., Garcia-Domene, B., Miquel-Veyrat, A., Manjon, F. J., Munoz, A., & Popescu, C., 2013, Structural study of alpha-Bi2O3 under pressure. Journal of Physics: Condensed Matter, 25, 475402–1–475402–12.

[94] Prekajski, M., Kremenovic, A., Babic, B., Rosic, M., Matovic, B., Radosavljevic Mihajlovic, A., & Radovic, M., 2010, Room-temperature synthesis of nanometric alpha-Bi2O3. Materials Letters, 64, 2247–2250.

[95] Malmros, G., 1970, The crystal structure of alpha-Bi2O3. Acta Chemica Scandinavica, 24, 384–396.

[96] Harwig, H. A., 1978, On the structure of bismuthsesquioxide: The alpha, beta, gamma and delta-phase. Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie, 444, 151–166.

[97] Sillen, L. G., 1941, On the crystal structure of monoclinic alpha-Bi2O3. Zeitschrift für Kristallographie, Kristallgeometrie, Kristallphysik, Kristallchemie, 103, 274–290.

[98] Liboff, R. L., 2004, Primer for Point and Space Groups. Springer.

[99] Manici, T., Algün, G., Akçay, N., & Demir, B., 2024, The Effect of Particle Size of Polyvinyl Alcohol/Bentonite Clay Mixture on the Radiation Shielding: A Monte Carlo Study. Süleyman Demirel University Faculty of Arts and Science Journal of Science, 19(1), 63–74.

[100] Mokhtari, K., Kheradmand Saadi, M., Ahmadpanahi, H., & Jahanfarnia, Gh., 2021, Fabrication, characterization, simulation and experimental studies of the ordinary concrete reinforced with micro and nano lead oxide particles against gamma radiation. Nuclear Engineering and Technology, 53(9), 3051-3057.

[101] Khatibeh Verdipoor, A., Alemi, A., & Mesbahi, A., 2018, Photon mass attenuation coefficients of a silicon resin loaded with WO3, PbO, and Bi_2O_3 Micro and Nano-particles for radiation shielding. Radiation Physics and Chemistry, 147, 85-90.

[102] Urfa, G. A., Wianto, T., Manik, T. N., & Nasrulloh, A. V., 2023, Study of alternative radiation material shielding for gamma radiation using Monte Carlo simulation. Tri Dasa Mega, 25(3), 101-106.

[103] Malekzadeh, R., Sadeghi Zali, V., Jahanbakhsh, O., Okutan, M., & Mesbahi, A., 2020, The preparation and characterization of silicon-based composites doped with $BaSO_4$, WO_3, and PbO nanoparticles for shielding applications in PET and nuclear medicine facilities. Nanomedicine Journal, 7(4), 324-334.

[104] Karabul, Y., & İçelli, O., 2021, The assessment of usage of epoxy based micro and nano-structured composites enriched with Bi2O3 and WO_3 particles for radiation shielding. Results in Physics, 26, 104423.

[105] F, K., S, M., & M A, H., 2019, A Monte Carlo Study on the Shielding Properties of a Novel Polyvinyl Alcohol (PVA)/WO_3 Composite, Against Gamma Rays, Using the MCNPX Code. Journal of biomedical physics & engineering, 9(4), 465–472.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler	
Adı Soyadı	Tuğba MANİCİ
Doğum Yeri	
Doğum Tarihi	Tarih girmek için tıklayın veya dokunun.
Uyruğu	☑ T.C. ❒ Diğer:
E-Posta Adresi	
Web Adresi	

Eğitim Bilgileri	
Lisans	
Üniversite	Marmara Üniversitesi
Fakülte	Fen Edebiyat Fakültesi
Bölümü	Fizik
Mezuniyet Yılı	15.07.2015

Yüksek Lisans	
Üniversite	Isparta Süleyman Demirel Üniversitesi
Enstitü Adı	Fen Bilimleri Enstitüsü
Anabilim Dalı	Fizik Anabilim Dalı
Programı	Fizik Programı

Doktora	
Üniversite	İstanbul Üniversitesi
Enstitü Adı	Fen Bilimleri Enstitüsü
Anabilim Dalı	Fizik Anabilim Dalı
Programı	Nükleer Fizik Programı

Makale ve Bildiriler

Makaleler

1. H.O.Tekin, V.P.Singh, T.Manici. Effects of micro-sized and nano-sized WO3 on mass attenuation coefficients of concrete by using MCNPX code. Applied Radiation and Isotopes. Vol 121 (2017) pp. 122-125. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.apradiso.2016.12.040
2. H.O.Tekin, T.Manici. Calculations of mass attenuation coefficients for shielding materials by using monte carlo code MCNPX. Nuclear Science and Techniques. Vol 28 (2017) No 7. :95 DOI:10.1007/s41365-017-0253-4
3. H. O. Tekin, M. I. Sayyed, E. E. Altunsoy, T. Manici. Shielding Properties and Effects of WO3 and PbO on Mass Attenuation Coefficients by using MCNPX Code. Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures. Vol. 12 No.3 July-September 2017. pp 861-867.

4. H.O.Tekin, U. Kara, T.Manici, E.E. Altunsoy, T.T. Erguzel. A Prediction Study on Bremsstrahlung Photon Flux of Tungsten as a Radiological Anode Material by using MCNPX and ANN Modeling. Acta Physica Polonica A. Vol. 132 (2017) No:3 doi: 10.12693/APhysPolA.132.433
5. H.O.Tekin, E.E. Altunsoy, T.Manici, B. Yilmaz. Quantitative Characteristic X-Ray Analysis for Different Compound Samples by Using Monte Carlo Method. Acta Physica Polonica A. Vol. 132 (2017) No:3 doi:10.12693/APhysPolA.132.439
6. H.O.Tekin, T.Manici, E.E. Altunsoy, K. Yilacioglu, B. Yilmaz. An Artificial Neural Network-Based Estimation of Bremsstarahlung Photon Flux Calculated by MCNPX. Acta Physica Polonica A. Vol. 132 (2017) No:3-II. doi:10.12693/APhysPolA.132.967
7. H.O.Tekin, M.I.Sayyed, T.Manici, E.E.Altunsoy. Photon shielding characterizations of bismuth modified borate–silicate–tellurite glasses using MCNPX Monte Carlo code. Materials Chemistry and Physics. Volume 211, 1 June 2018, Pages 9-16. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2018.02.009
8. T.Erguzel, H.O. Tekın, T.Manıcı, Ee Altunsoy, N Tarhan. Comparıson Of Multıple Lınear Regressıon Analysıs And Artıfıcıal Neural Network Approaches In The Estımatıon of Monte Carlo Mean Glandular Dose Calculatıons Of Mammography. Digest Journal Of Nanomaterials And Biostructures , Vol. 13, No. 1, January - March 2018, P. 163 – 176.
9. V.P.Singh, H.O.Tekin, N.M.Badiger, T.Manici, E.E.Altunsoy. Effect of Heat Treatment on Radiation Shielding Properties of Concrete. Journal of Radiation Protection and Research.2018; 43(1):20-28
10. B Güçlü, EE Altunsoy, T Manici, HO Tekin. Effect of Humeral Locking Plate System on Absorbed Energy in Breast Tissue with Different Radiological Energies Using MCNPX Code. Journal of Testing and Evaluation. 2019;49(1). Doi: https://doi.org/10.1520/JTE20180389.
11. T. Manici, G. Algün, N. Akçay, ve B. Demir, "The Effect of Particle Size of Polyvinyl Alcohol/Bentonite Clay Mixture on the Radiation Shielding: A Monte Carlo Study", Süleyman Demirel University Faculty of Arts and Science Journal of Science, c. 19, sy. 1, ss. 63–74, 2024, doi: 10.29233/sdufeffd.1371161.
12. H.O.Tekin, **T. Manici**, C.Ekmekci. Investigation of Backscattered Dose in a Computerized Tomography (CT) Facility during Abdominal CT Scan by Considering Clinical Measurements and Application of Monte Carlo Method. *Journal of Health Science* 4(2016) DOI: 10.17265/2328-7136/2016.02.001
13. H.O.Tekin, V.P. Singh, U.Kara **T. Manici,** E.E. Altunsoy. Investigation of Nanoparticle Effect on Radiation Shielding Property Using Monte Carlo Method. *CBU Journal of Science*, Vol 12, No 2 (2016). DOi: http://dx.doi.org/10.18466/cbujos.15586
14. H.O.Tekin, **T. Manici**, V. P. Singh. An Investıgatıon On Shıeldıng Effect Of Bısmuth On Lung Ct Scan Usıng Monte Carlo Sımulatıon. *Journal of Polytechnic*, 2016; 19 (4) : 617-620. (DOI) : 10.2339/2016.19.4 617-622

15. H.O.Tekin**,** E.E. Altunsoy, **T. Manici**, U.Kara, B.Cavli. Abdomen Bilgisayarlı Tomografi (Bt) Görüntülemesinde Geri Saçılan X Işını Miktarlarının Farklı Eksenlerde İncelenmesi. *Aydın Journal of Health*, Vol 2 No (2), 2016. 13-21.
16. H.O. Tekin, A. Mesbahi, V.P. Singh, U. Kara, **T. Manici,** E.E. Altunsoy. Assessment of MCNPX Monte Carlo Code for Absorbed Dose Calculations in Mammogarphy Examination. AKU J. Sci. Eng (2017). doi: 10.5578/fmbd.53950
17. H.O. Tekin, V.P. Singh, E.E. Altunsoy, **T. Manici**, M.I. Sayyed. Mass Attenuation Coefficients of Human Body Organs using MCNPX Monte Carlo Code. Iranian Journal of Medical Physics. Available Online: 04 June 2017. doi: 10.22038/ijmp.2017.23478.1230
18. H.O. Tekin**,** V.P. Singh, **T. Manici**, E.E. Altunsoy**.** Validation of MCNPX with Experimental Results of Mass Attenuation Coefficients for Cement, Gypsum and Mixture. Journal of Radiation Protection and Research. 42 (3): 1-4, (2017). doi: https://doi.org/10.14407/jrpr.2017.42.3.154
19. Manici, T., Algün, G., Akçay, N., & Demir, B. (2024). The Effect of Particle Size of Polyvinyl Alcohol/Bentonite Clay Mixture on the Radiation Shielding: A Monte Carlo Study. Süleyman Demirel University Faculty of Arts and Science Journal of Science, 19(1), 63–74. https://doi.org/10.29233/sdufeffd.1371161