



İSKENDERUN TEKNİK

ÜNİVERSİTESİ

MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Kadriye KÜNDEYİ

METALURJİ VE MALZEME MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

**YÜKSEK
LİSANS
TEZİ**

**ATOM NUMARASI $21 \leq Z \leq 30$ ARASINDA
DEĞİŞEN BAZI ELEMENTLERİN
AUGER ELEKTRONU YAYMA ORANI,
 $K\alpha$, KLL ÇİZGİ GENİŞLİKLERİ VE
L ALT KABUK SEVİYE
GENİŞLİKLERİNİN HESAPLANMASI**

Kadriye KÜNDEYİ

**METALURJİ VE MALZEME MÜHENDİSLİĞİ
ANABİLİM DALI**

HAZİRAN 2019

HAZİRAN 2019



**ATOM NUMARASI $21 \leq Z \leq 30$ ARASINDA DEĞİŞEN 3d GURUBU GEÇİŞ
ELEMENTLERİNİN AUGER ELEKTRONU YAYMA ORANI, $K\alpha$, KLL
ÇİZGİ GENİŞLİKLERİ ve L ALT KABUK SEVİYE GENİŞLİKLERİNİN
HESAPLANMASI**

Kadriye KÜNDEYİ

**YÜKSEK LİSANSTEZİ
METALURJİ ve MALZEME MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

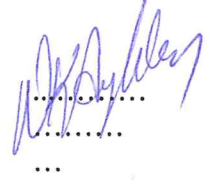
**İSKENDERUN TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

HAZİRAN 2019

Kadriye KÜNDEYİ tarafından hazırlanan “ATOM NUMARASI $21 \leq Z \leq 30$ ARASINDA DEĞİŞEN BAZI ELEMENTLERİN AUGER ELEKTRONU YAYMA ORANI, $K\alpha$, KLL ÇİZGİ GENİŞLİKLERİ ve L ALT KABUK SEVİYE GENİŞLİKLERİNİN HESAPLANMASI” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ / OY ÇOKLUĞU ile İskenderun Teknik Üniversitesi Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman:Dr. Öğr. Üye. Nuray KÜP AYLIKCI
Enerji Sistemleri Mühendisliği Anabilim Dalı, İskenderun Teknik Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum/onaylamıyorum.

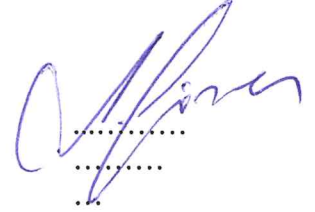


Başkan:Prof. Dr. Yusuf NUR
Fizikokimya Anabilim Dalı, Hatay Mustafa Kemal Üniversitesi
Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum/onaylamıyorum.



Üye:Dr.Öğr.Üye. Ali GÜNEN
Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalı, İskenderun Teknik Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum/onaylamıyorum.



TezSavunmaTarihi: 10.06.2019

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.


Prof. Dr. Tolga DEPCİ
Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü




ETİK BEYAN

İskenderun Teknik Üniversitesi Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez üzerinde Yükseköğretim Kurulu tarafından hiçbir değişiklik yapılamayacağı için tezin bilgisayar ekranında görüntülediğinde asıl nüsha ile aynı olması sorumluluğunun tarafıma ait olduğunu,
- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

İmza
Kadriye KÜNDEYİ
10.06.2019


ATOM NUMARASI $21 \leq Z \leq 30$ ARASINDA DEĞİŞEN 3d GURUBU GEÇİŞ
ELEMENTLERİNİN AUGER ELEKTRONU YAYMA ORANI, $K\alpha$, KLL ÇİZGİ
GENİŞLİKLERİ VE L ALT KABUK SEVİYE GENİŞLİKLERİNİN HESAPLANMASI
(Yüksek Lisans Tezi)

Kadriye KÜNDEYİ

İSKENDERUN TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Haziran 2019

ÖZET

3d gurubu geçiş elementleri kullanılarak üretilen alaşım ve bileşikler otomotiv sanayi, opto-elektronik uygulamalar, biyo-sensörler gibi pek çok kullanım alanına sahiptir. Bilim ve teknolojinin gelişmesinde geniş bir ürün yelpazesi sunan bu elementlerin dâhil olduğu malzeme yapısında oluşturacağı değişimler hakkında bilgi sahibi olabilmek için elementlerin elektronik yapısının incelenmesi gerekmektedir. Bunun sebebi, malzemeyi oluşturan atomların kimyasal bağ oluşturmasında en etkin faktörün valans (değerlik) bandı elektronik yapısının olmasıdır. 3d gurubu geçiş elementlerinin valans bandı elektronik yapısının incelenmesinde K kabuğu floresans parametrelerinin ölçülmesi önemli bir yere sahiptir. Valans bandı M kabuğunda bulunan 3d gurubu geçiş elementlerinin kimyasal bağlanma olaylarında olduğu gibi elektronik yapıdaki herhangi bir değişim L kabuğunu ve buna bağlı olarak L kabuğundan K kabuğuna olan X-ışını geçişlerini etkileyecektir. Böylece X-ışını geçişlerindeki değişimler incelenerek atomların elektronik yapıları hakkında dolaylı olarak bilgi sahibi olunabilmektedir. Bu tez çalışmasında, Auger elektronu yayma oranı, $K\alpha$ ve KLL çizgi genişlikleri ile L alt kabuk enerji seviyelerinin genişlikleri enerji ayrımlı X-ışını floresans yöntemi kullanılarak belirlenmiştir. Parametrelerin hesaplanması için elementler önce 59,5 keV'de γ ışınları yayan ^{241}Am radyoaktif kaynak ile uyarılmış ve numunelerden yayınlanan X-ışınları, çözünürlüğü, 5,9 keV'de 150 eV olan Ultra-LEGe dedektörü yardımıyla sayılmıştır. Elde edilen foto-piklerin altında kalan alanlar parametrelerin hesaplamalarında kullanılmıştır. Yapılan çalışmalardan elde edilen bulgular önceki çalışmalarla karşılaştırılmıştır. Ayrıca tez kapsamında yapılan çalışmalar sonucu elde edilen parametreler, atomun karmaşık yapısının anlaşılmasında ortaya atılacak olan teorilerin geliştirilmesinde ve XRD ile XRF gibi malzeme karakterizasyonunda kullanılan cihazların üretimi ve tasarımında önemli rol oynamaktadır.

Anahtar Kelimeler : Floresans verim, Çizgi genişliği, Seviye genişliği, Auger elektronu, K X-ışını Şiddet Oranı

Sayfa Adedi : 73

Danışman : Dr.Öğr. Üyesi Nuray KÜP AYLKCI

THE CALCULATION OF THE AUGER ELECTRON EMISSION RATES, $K\alpha$, KLL
LINE WIDTHS AND L SUB-SHELL LEVEL WIDTHS OF ELEMENTS WITHIN THE
RANGE OF ATOMIC NUMBERS $21 \leq Z \leq 30$

Kadriye KÜNDEYİ

ISKENDERUN TECHNICAL UNIVERSITY
ENGINEERING AND SCIENCE INSTITUTE

June 2019

ABSTRACT

The produced alloys and compounds by using 3d transition elements have many applications such as automotive industry, opto-electronic applications and bio-sensors. The electronic structure of these elements should be examined in order to have information about the changes in the structure of materials which offer a wide range of products in the developments of science and technology. The reason of this study is that the valence shell electronic structure is the most effective factor which constitute the chemical bonds. The measurement of K shell fluorescence parameters has an important position in the examination of the outer shell electronic structure of 3d transition elements. Any change in the electronic structure, as in the chemical binding effects occurred in M shell of the 3d transition elements will affect the L sub-shells and consequently, the X-ray transitions from L to K shell. Thus, it can be get indirect information about the electronic structure of atoms by using the changes in X-ray transitions. In this thesis, the Auger electron emission rates, $K\alpha$ and KLL X-ray line widths and L sub-shell level widths were determined by using energy dispersive X-ray fluorescence method. First, the elements were irradiated by annular ^{241}Am radioactive source which emitted γ -ray photons at 59,5 keV and the emitted X-rays were counted by Ultra-LEGe detector had a resolution 150 ev at 5,9 keV. The areas under the detected photo-peaks were used for the measurement of X-ray fluorescence parameters.

The obtained results were compared with previous studies in the literature. Also, the measured parameters are important for the development of new theories to understand the complex structure of M shell and the designing and production of new devices for material characterisation such as XRD and XRF.

KeyWords : Fluorescence yield, Line width, Level width, Auger electron, K X-Ray Intensity Ratio

PageNumber : 73

Supervisor : Assist Prof. Nuray KÜP AYLIKCI

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tezi olarak sunduğum bu çalışmanın ortaya çıkmasında deneysel ve teorik bilgi yönünden yararlandığım, öğrenciliğimin her aşamasında görüş ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocam Sayın Dr. Öğretim Üyesi Nuray KÜP AYLIKCI'ya en içten duygularıyla saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmada kullanılan numunelerin spektroskopik ölçümleri, Karadeniz Teknik Üniversitesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi sayın Prof. Dr. Engin TIRAŞOĞLU hocamın desteğiyle Spektroskopi Laboratuvarı'nda yapılmıştır. Saygıdeğer TIRAŞOĞLU hocama teşekkür ederim.

Ayrıca tüm çalışmalarımın yardım ve desteğinden dolayı, kıymetli hocam sayın Doç. Dr. Volkan AYLIKCI'ya ve yine ilgisini, desteğini esirgemeyen İskenderun Teknik Üniversitesi Dörtüol Meslek Yüksekokul Müdürü Öğretim Görevlisi Bahattin GÖZÜBENLİ, Afyon Kocatepe Üniversitesi Öğretim Görevlisi Sayın Abdullah KÜNDEYİ ve teknik yardım ve desteklerinden dolayı Rehberlik Psikolojik Danışma öğretmeni İbrahim Halil KOCAMAN hocalarıma teşekkürü bir borç bilir, saygılarımı sunarım.

Bu günlere gelmemde maddi ve manevi destekleriyle sürekli olarak yanımda olan aileme, eşim Erkut KÜNDEYİ, oğlum Cem ve kızım Nisan'a sabırları için teşekkür eder minnetlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. GENEL BİLGİLER	12
2.1. Atomik Verilerin Önemi	12
2.2. Elektromanyetik Radyasyonun Madde ile Etkileşmesi.....	13
2.2.1. Fotoelektrik olayı	15
2.2.2. Çift oluşumu.....	17
2.2.3. Elektromanyetik radyasyonun saçılması.....	18
2.2.4. Karakteristik x-ışınlarının oluşumu	20
2.2.5. Floresans verim ve Coster-Kronig geçişleri.....	22
2.2.6. Auger geçişleri	23
2.3. Atomun Uyarılması	25
2.3.1. ²⁴¹ Am radyoizotop kaynağı	25
2.4. Enerji Ayrımlı X-ışını Floresans Spektrokopisi (ED-XRF).....	26
2.5. EDXRF Tekniğinde Kullanılan Temel Parametre Tanımları	28
2.5.1. Tesir kesiti.....	28

	Sayfa
2.5.2. K kabuğu x-ışını üretim tesir kesiti teorik ve deneysel hesabı.....	28
2.5.3. K x-ışını şiddet oranı teorik ve deneysel hesabı.....	31
2.5.4. K kabuğu floresans veriminin belirlenmesi	32
2.5.5. K kabuğu ve L altkabuk seviye genişlikleri ile karakteristik K x-ışını çizgi ve KLL Auger genişliklerinin belirlenmesi.....	32
2.6. Ultra-LEGe Yarıiletken Dedektörü ve Çalışma Prensibi.....	33
2.7. Sayma Sistemi	37
2.7.1. Yüksek voltaj kaynağı.....	38
2.7.2. Ön yükseltici	38
2.7.3. Yükseltici	39
2.7.4. Analog dijital dönüştürücü.....	39
2.7.5. Çok kanallı analizör (MCA)	39
2.8. Dedektör Verimi.....	39
2.8.1. Dedektör verimliliğinin ölçülmesi	40
2.9. Geçiş Elementlerinin Genel Özellikleri	41
2.10. Deney Geometrisi.....	43
2.11. Numunelerin Hazırlanması	43
2.12. Numunelerin Uyarılması ve Sayılması	43
3. ARAŞTIRMA BULGULARI	46
4. SONUÇ VE ÖNERİLER	62
KAYNAKLAR	63
ÖZGEÇMİŞ	72
DİZİN.....	73

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. X-ışını diyagram çizgilerinin eski (Siegbahn) ve yeni UPAC) gösterimleri	21
Çizelge 3.1. 3d gurubuelementleri için Auger elektronları yayımlanma ihtimaliyetlerinin oranı	46
Çizelge 3.2. 3d geçiş elementleri için deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları	47
Çizelge 3.3. 3d geçiş elementleri için deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları	48
Çizelge 3.4. 3d geçiş elementleri için yarı-deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları	49
Çizelge 3.5. 3d geçiş elementleri için yarı-deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları	49
Çizelge 3.6. 3d geçiş elementlerinin K kabuğu seviye genişlikleri ve K kabuğu floresans verimleri	51
Çizelge 3.7. 3d geçiş elementlerinin L ₁ kabuğu seviye genişlikleri	53
Çizelge 3.8. 3d geçiş elementlerinin L ₂ kabuğu seviye genişlikleri	54
Çizelge 3.9. 3d geçiş elementlerinin L ₃ kabuğu seviye genişlikleri	55
Çizelge 3.10. 3d geçiş elementlerinin KLL Auger çizgi genişlikleri	56
Çizelge 3.11. 3d geçiş elemetlerinin K _α X-ışını çizgi genişlikleri	59

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşmesi.....	13
Şekil 2.2. Fotoelektrik, Çift oluşumu ve Compton saçılma olaylarının baskın olduğu bölgeler.....	15
Şekil 2.3. Fotoelektrik olayın şematik gösterimi	16
Şekil 2.4. Çift oluşumu olayı	17
Şekil 2.5. Compton saçılması	19
Şekil 2.6. Karakteristik x ışınlarının oluşumu	21
Şekil 2.7. Auger olayının meydana gelişi	23
Şekil 2.8. EDXRF sisteminin bölümleri	27
Şekil 2.9. $I_0G\varepsilon$ 'nin enerji ile değişim grafiği	30
Şekil 2.10. Ge yarı iletken diyotunun basit görünümü ve diğer kısımlar	37
Şekil 2.11. Zn elementine ait Genie 2000 programı ile elde edilen ham pikler	38
Şekil 2.12. X-ışınları fluoresans (EDXRF) ölçümleri için deney geometrisi	43
Şekil 2.13. Fe elementinin K x-ışını pikleri ve rezidü spektrumu	45
Şekil 3.1. KLX/KLL oranlarının Z atom numarasına göre değişimi.....	50
Şekil 3.2. KXY/KLL oranlarının Z atom numarasına göre değişimi	50
Şekil 3.3. K kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi	52
Şekil 3.4. L_1 alt kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi	53
Şekil 3.5. L_2 alt kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi	54
Şekil 3.6. L_3 alt kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi	55
Şekil 3.7. KL_1L_1 Auger çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi.....	57
Şekil 3.8. KL_1L_2 Auger çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi.....	57
Şekil 3.9. KL_2L_3 Auger çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi.....	58

Şekil**Sayfa**

Şekil 3.10. $K\alpha_1$ çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi	59
Şekil 3.11. $K\alpha_2$ çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi	60



SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
E	Gelen foton enerjisi
E_{fe}	Sökülen foton enerjisi
f_{ij}	Coster-Kronig geçişleri
f_g	Geometrik faktör
f_R	Açıya bağlı dedektör verimi için düzeltme faktörü
F	Fano faktör
F_{Ki}	Ki X-ışınlarının kısmi emisyon hızı (i=α1,α2, β1, β2)
F_{ij}	L X-ışını kısmi emisyon hızı (i=1,2,3 ve j= l, α, β,γ,η)
G	Geometrik faktör
h	Planck sabiti
I₀	Gelen gama veya X-ışını demeti
I_{Ki}	i. K X-ışını grubunun şiddeti (i=α1,α2, β1, β2)
L_i	(i=1,2,3) L alt tabakaları
m₀	Durgun kütle
Q	Yük
S(x,Z)	İnkoherent saçılma fonksiyonu
X	Kalınlık(cm)
Z	Atom numarası
B_{K,L,i}	Soğurma düzeltme faktörü
ε	Elektron-boşluk çifti oluşturmak için gerekli enerji
ε_I	İntiristik verim
ε_{K,L,i}	Dedektör verimi
μ	Toplam kütle soğurma katsayısı (cm ² /g)
v	Foton frekansı
Γ	Seviye genişliği
Γ_{Li}	Li alt tabakalara olan ışımalı geçiş ihtimaliyeti

τ	Fotoelektrik soğurma katsayısı
η_{KLi}	K tabakasından Li alt tabakasına boşluk geçiş ihtimali
λ	Gelen fotonun dalga boyu
λ'	Saçılan fotonun dalga boyu
ρ	Yoğunluk
ρD	Numune kalınlığı
$\Phi_{K,L,M}$	K, L ve M kabuğunun bağlanma enerjisi
Ω_0	Katı açısı
ω_i	(i=1,2,3) L alt kabuğu floresans verimi
$\bar{\omega}_x$	Ortalama floresans verim
ω_K	K kabuğu floresans verim
a_K	K tabakası için Auger olayının meydana gelme ihtimali
σ_R	Atom başına toplam koherent saçılma tesir kesiti
\bar{a}_x	Ortalama Auger verimi
$IK\beta/IK\alpha$	K X-ışını şiddet oranları
R	Dedektör rezölasyonu
σ_R	Atom başına toplam koherent saçılma tesir kesiti
σ_K	K kabuğu için üretim tesir kesiti
$\sigma_K(E)$	Toplam K kabuğu X-ışını iyonizasyon tesir kesiti
$\sigma_{M\alpha\beta}$	M _{4,5} alt kabukları üretim tesir kesiti
$\sigma_{Mi}(E)$	(i=1-5) M alt kabuğu X-ışını iyonizasyon tesir kesiti
σ_C	İnkoherent saçılma tesir kesiti
$\sigma(x,Z)$	Atomik saçılma tesir kesiti
W	Yarı maksimumdaki puls genişliği
$\varepsilon(E)$	E enerjili bir foton için dedektör verimi
η_K	K tabakasından oluşturulan boşluk sayısı
Φ	Koherent saçılma açısı
η_K	K tabakasından oluşturulan boşluk sayısı

Kısaltmalar**ADC****²⁴¹Am****EDXRF****FWHM****HV****MCA****XRF****XRP****Açıklamalar**

Yüksek voltaj kaynağı

Amersiyum radyoizotop kaynak

Enerji Ayrımlı X-ışını Floresans Spektroskopisi

Bir pulsun yarı maksimumdaki tam genişliği

Yüksek voltaj kaynağı

Çok Kanallı Analizör

X ışını floresans spektroskopisi

X ışını üretimi



1. GİRİŞ

3d gurubu geiş elementleri kullanılarak üretilen alaşım ve bileşikler otomotiv sanayi, opto-elektronik uygulamalar, biyo-sensörler gibi pek çok kullanım alanına sahiptir. Bilim ve teknolojinin gelişmesinde geniş bir ürün yelpazesi sunan bu elementlerin dâhil olduğu malzeme yapısında oluşturacağı deęişimler hakkında bilgi sahibi olabilmek için elementlerin elektronik yapısının incelenmesi gerekmektedir. Bunun sebebi, malzemeyi oluşturan atomların kimyasal bağ oluşturmada en etkin faktörün valans (deęerlik) bandı elektronik yapısının olmasıdır. 3d gurubu geiş elementlerinin valans bandı elektronik yapısının incelenmesinde, K kabuęu floresans parametrelerinin ölçülmesi önemli bir yere sahiptir. Valans bandı M kabuęunda bulunan 3d gurubu geiş elementlerinin kimyasal bağlanma olaylarında olduğu gibi elektronik yapıdaki herhangi bir deęişim L kabuęunu ve buna baęlı olarak L kabuęundan K kabuęuna olan X-ışını geişlerini etkileyecektir. Böylece X-ışını geişlerindeki deęişimler incelenerek atomların elektronik yapıları hakkında dolaylı olarak bilgi sahibi olunabilmektedir.

X-ışını spektroskopisi, atomların genel yapıları hakkında daha kesin ve güvenilir bilgilerin elde edilmesini sağlar. Özellikle metal, yarıiletken ve yalıtkanların genel elektronik yapısının belirgin özelliklerinin aydınlatılmasında güçlü bir araçtır. Atomik veya iyonik yapıdaki elektronik kabuk yapısı hakkındaki bilgiler farklı spektroskopik yöntemlerle elde edilebilir. Elektronların, iyonların, X-ışınlarının elastik veya inelastik saçılması ve atomdan yayınlanan fotoelektron enerjilerinden elde edilen veriler atomik veya iyonik yapının aydınlatılmasında etkilidir. Floresans verimler, soęurma kıyılarının enerjileri, farklı X-ışını geişlerinin baęlı şiddetleri ve X-ışını geiş enerjileri gibi parametrelerden elde edilen veriler X-ışını kullanarak yapı hakkındaki bilgileri açığa kavuşturmaktadır.

K ve L kabuęuna ait X-ışını floresans parametreleri farklı dedektörler, uyarıcılar ve çeşitli yöntemler kullanılarak pek çok araştırmacı tarafından çalışılmaktadır. Cu, Zr, Ag, Sn, Ta, Au ve Pb elementlerinin 145-keV ve 411,8 keV'lik γ ışınlarıyla etkileşmesinden kaynaklanan elektron spektrumu plastik-sintilatör spektrometresi kullanılarak elde edilmiştir. Elde edilen K-kabuęu foto-elektrik tesir kesiti deęerlerinin Schmickley, Pratt ve Scofield'in hesaplanan deęerleri ile uyumlu olduğu gözlenmiş ve çalışmada background spektrum düzeltmesi yapabilmek için fotoelektrik katsayısı küçük olan

alüminyum elementinin piklerinden faydalanılmıştır [1-2]. Atom numarası $33 \leq Z \leq 74$ aralığında bulunan bazı elementler için 37 ve 74 keV'lik enerjili gama ışınları ve X-ışınları kullanılarak, K ve L kabuğu fotoelektrik tesir kesitleri, deneysel olarak ölçülmüştür. Ölçümlerde NaI(Tl) dedektörü kullanılmıştır [3]. Fotoelektrik tesir kesitleri 323 keV γ ışınları kullanılarak, atom numarası $50 \leq Z \leq 90$ arasında olan elementler için ölçülmüş ve yapılan çalışmada verimliliği %100'e yakın olan bir NaI(Tl) dedektörü ile sintilasyon spektrometresi kullanılmıştır. Sonuçlar mevcut ölçülen değerler ve teorik olarak elde edilen tesir kesiti değerleri ile karşılaştırılmıştır [4]. Tb, Ho, Er ve Pt elementlerinin 84,26 keV'lik γ ışınları ile K kabuğu fotoelektrik tesir kesitleri ölçülmüştür. Sonuçlar mevcut teorik ve deneysel değerlerle karşılaştırıldığında iyi bir uyumluluk olduğu görülmüş ve iyi bir dedektör geometrisine sahip yüksek çözünürlüklü HPGe dedektörü kullanılmıştır [5].

Başka bir çalışmada ise atom numarası 34 ile 46 arasında değişen bazı elementlerin K kabuğu fotoelektrik tesir kesiti değerleri ölçülmüştür. Yapılan çalışmada NaI(Tl) dedektörü kullanılmış olup, uyarıcı kaynak olarak ^{241}Am radyoizotopu kullanılmıştır. Elde edilen deneysel sonuçlar literatürde bulunan benzer çalışmalarla karşılaştırılmış ve özellikle Scofield'in teorik değerleri ile oldukça iyi bir uyum gösterdiği tespit edilmiştir [6]. Sr ve Mo elementleri için L kabuğu X-ışını üretim tesir kesitleri 3 MeV'den 200 keV'e kadar olan enerji aralığında proton etkisiyle ölçülmüştür [7]. L kabuğu X-ışını şiddet oranları L_i/L_α ($i=1, \beta$ ve γ), ve σ_{L_i} ($i=1, \alpha, \beta$ ve γ) ve L_3 alt kabuk floresans verimleri (ω_{L_3}), ftalosiyonin kompleksleri içindeki Pb elementi için incelenmiştir. Ölçümler ^{241}Am radyoaktif kaynak ve Ultra-LEGe dedektörü ile gerçekleştirilmiştir. Deneysel sonuçlar saf Pb elementinin teorik değerleri ile karşılaştırılmıştır [8]. $K_\beta-K_\alpha$ X-ışını şiddet oranları, Ni-B alaşımlı kaplamaların içindeki Ni elementi için çalışılmıştır. Numuneler 59,5 keV enerjili gama ışınları yayan ^{241}Am radyoaktif halka kaynak ile uyarılmış ve numunelerin sayımında Ultra-LEGe dedektörü kullanılmıştır. Elde edilen sonuçlar arasındaki sapmalar Ni-B alaşımlı kaplamalarda Ni'nin değerlik elektronik yapısındaki değişim ile açıklanmıştır [9].

Bir diğer çalışmada, σ_{L_1} , σ_{L_2} , σ_{L_3} alt kabuk X-ışını üretim tesir kesitleri U, Th, Bi, Pb, Tl, Hg, Au, Pt, Os, W, Ta, Lu, Yb ve Er elementleri için 22,6 keV foton enerjisinde ölçülmüştür. Ölçümler ^{109}Cd radyoizotop kaynak ve Si(Li) dedektörü ile gerçekleştirilmiştir. L_i alt kabuk floresans verimleri ($\omega_1, \omega_2, \omega_3$), ölçülen σ_{L_1} , σ_{L_2} ve σ_{L_3}

alt kabuk X-ışını üretim tesir kesitlerinden elde edilmiştir [10]. Farklı kristal yapılarıdaki 3d metallerinin d elektron popülasyonlarını hesaplamak için lineer muffin-tin-orbital (LMTO) yöntemi kullanılmıştır. Değerlik elektronik yapı ve dolayısıyla 3d metallerinin K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranlarının kristal yapı ile değiştiği bulunmuştur [11]. Atom numarası $57 \leq Z \leq 68$ aralığındaki elementlerin K, L ve daha üst kabuklar için fotoiyonizasyon tesir kesitleri 59,5 keV enerjili fotonlar kullanılarak ölçülmüş ve çalışmada Si(Li) yarı iletken dedektörü kullanılmıştır. Elde edilen deneysel değerlerin teorik değerlerle uyumlu olduğu görülmüştür [12]. K kabuğu floresans verimi, floresans tesir kesiti ve ışımali geçiş genişliği ile Auger geçiş genişliği arasındaki oran $30 \leq Z \leq 50$ ve $62 \leq Z \leq 82$ aralığındaki elementler için ölçülmüştür. Ölçümler 2π geometrisi kullanılması ve elementlerin ^{57}Co , ^{109}Cd , ^{137}Cs ve ^{241}Am radyoaktif kaynaklar ile uyarılması sonucu elde edilen fotoelektronların NaI dedektörü ile sayılması ile elde edilmiştir [13-14].

Atom numaraları $22 \leq Z \leq 52$ arasında olan elementlerin K kabuğu floresans verimleri, ^{57}Co kaynağından yayımlanan 14,4 ve 122 keV enerjili fotonlarla uyarılarak ölçülmüştür. Çalışmada X-ışını yoğunluğunu belirlemek için yüksek çözünürlüklü Si-PIN diyot dedektörü kullanılmıştır. Ölçülen değerler teorik, yarı deneysel ve diğer mevcut sonuçlarla karşılaştırılmıştır [15]. K_i ($i = \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$) ve Li ($i = \alpha, \beta, \beta_1, \beta_2, \gamma$) X-ışını floresans tesir kesitleri, X-ışını şiddet oranları ve ortalama L kabuğu floresans verimleri farklı bileşiklerdeki iyodinin için yüksek çözünürlüklü Si(Li) X-ışını dedektörü ile ölçülmüştür. Deneysel sonuçlar element iyot için hesaplanan teorik değerlerle karşılaştırılmıştır [16].

L kabuğuna ait tesir kesitleri, floresans verimleri ve şiddet oranları literatürde çok geniş bir yer tutmaktadır. Bunun temel sebebi genelde kullanılan radyoaktif kaynakların periyodik cetveldeki birçok elementin L kabuğunu uyarabilecek enerjiye sahip olmasıdır. Gelişen dedektör teknolojisinin yardımıyla L alt kabuğuna ait piklerin daha kolay ayrılabilmesi de bu parametrelerin araştırmalarda tercih edilme sebeplerindedir. L kabuğu fotoelektrik tesir kesitleri Ta, W, Au, Pb, Th ve U için Sood'un mutlak ölçme yönteminin üç farklı versiyonu kullanılarak belirlenmiş ve çalışmada 59,5 keV'lik enerjide ^{241}Am radyoaktif kaynak kullanılmıştır [17].

Atom numarası 45 olan Rodyum elementinin L alt kabuk floresans verimleri ve ortalama L kabuğu floresans verimi ölçülmüştür. Çalışmada Si(Li) ve Ge(Li) dedektörleri ile ^{103}Pd radyoaktif kaynağı kullanılmıştır [18]. Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Er, Yb ve Lu elementlerinin

L X-ışını tesir kesitleri 10,005, 17,781, 25,77 ve 32,89 keV enerjili fotonlar kullanılarak belirlenmiştir. Deneysel değerlerle hesaplanan değerler arasında oldukça iyi bir uyum olduğu tespit edilmiştir [19].

L_1 , L_α , L_β ve L_γ X-ışını üretim tesir kesitleri Cs'den Er'ye kadar olan elementler için 59,54 keV enerjili γ ışınları yayan ^{241}Am nokta kaynak kullanılarak ölçülmüştür. L X-ışını üretim tesir kesitleri ve ortalama L kabuğu floresans verimleri için elde edilen değerler mevcut deneysel değerler, teorik tahminler ve yarı deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır [20].

1994 yılından 2011 yılına kadar literatürde bildirilen, ölçülmüş K-kabuğu floresans verim değerleri (yaklaşık 341 yeni ölçüm) bir tablo şeklinde incelenmiş ve sunulmuştur. Geniş bir element aralığında ($56 \leq Z \leq 64$) yeni deneysel K kabuğu floresans verimleri elde etmek için ağırlıklı ortalama deneysel veri değerleri analitik fonksiyonla fit edilmiştir. Sonuçlar diğer teorik, deneysel ve yarı deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır [21].

L kabuğu floresans verimleri Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm ve Gd ($56 \leq Z \leq 64$) elementleri için Ge(Li) dedektörü kullanılarak ölçülmüştür. Hedefler 59,5 keV enerjide γ ışınları yayan ^{241}Am radyoaktif kaynak kullanılarak uyarılmıştır. Elde edilen sonuçlar teorik değerler ve literatürde yer alan mevcut değerlerle kıyaslanmıştır [22]. 50-250 keV enerjili protonlar tarafından uyarılan ^{70}Yb , ^{81}Tl ve ^{82}Pb elementlerinin M_k ($k=M_\xi, M_{\alpha\beta}, M_\gamma, M_{ml}$) X-ışını üretimi için tesir kesitleri ölçülmüştür [23].

K_α ve K_β X-ışını floresans tesir kesitleri ve K_β/K_α şiddet oranları atom numarası $22 \leq Z \leq 29$ aralığında olan elementler için 10 keV enerjili protonlar ile ikincil uyarma metodu kullanılarak elde edilmiştir. Numunelerden yayımlanan K X-ışınları, çözünürlüğü 5,9 keV'de 160 eV olan Si(Li) dedektörü ile sayılmıştır. Elementlerin deneysel olarak elde edilen değerlerinin hesaplanan değerler ile uyumlu olduğu tespit edilmiştir [24]. Ni elementinin K kabuğu X-ışını üretim tesir kesitleri, alfa parçacığı ve proton ile uyarılarak ölçülmüştür. K_β/K_α X-ışını şiddet oranları teorik ve literatürdeki mevcut deneysel değerler ile karşılaştırılmıştır. Çalışmada 5,9 keV'de 148 eV çözünürlüğe sahip Si(Li) dedektörü kullanılmıştır [25]. Ce, Nd, Sm, Eu, Gd ve Dy elementlerinin L alt kabuğu X-ışını üretim tesir kesitleri 5,25 MeV ve 6,75 MeV arasında enerjiye sahip 9Be^{2+} iyonları ile ışınlanma yoluyla uyarılarak ölçülmüştür [26]. L alt kabuk iyonizasyon tesir kesitleri

W, Au, ve Bi elementleri için 31,6 keV enerjili Cs $K\alpha$ X-ışınları kullanılarak ölçülmüştür. Çalışmada Si(Li) dedektörü kullanılmış ve elde edilen sonuçlar teorik sonuçlar ile karşılaştırılmıştır [27].

Cr'den Bi'ye kadar olan elementlerin K, L ve M kabuğu X-ışını üretimleri 105, 131, 157, 183 ve 210 MeV enerjili ksenon (Xe) iyonları tarafından uyarılarak ölçülmüştür [28]. Atom numarası $11 \leq Z \leq 99$ aralığındaki bazı elementlerin 1978–1993 yılları arasında yayınlanan deneysel K kabuğu floresans verim değerleri toplanarak atom numarasına bağlı fit değerleri elde edilmiştir. Elde edilen değerler teorik ve literatürde mevcut olan fit değerleri ile karşılaştırılmıştır [29]. Mevcut deneysel verilerden elde edilen K-kabuğu floresans verimleri, atom numarası $6 \leq Z \leq 99$ aralığında bulunan saf elementler için hesaplanmış ve çalışmada K kabuğu floresans verim değerleri bir araya getirilerek elde edilen fit denklemlerinden floresans parametreleri için güncel veriler elde edilmiştir. Sonuçlar literatürde bulunan teorik ve deneysel değerler ile kıyaslanmıştır [30]. Argon atomunun farklı atomik konfigürasyonları için floresans verim değerleri (ω_K ve ω_{L23}) istatistiksel bir ağırlıklandırma işlemi ile hesaplanmıştır. Floresans verim değerlerinde gözlenen değişikliklere farklı kabuklardaki çoklu boşlukların neden olduğu sonucuna ulaşılmıştır [31].

Yine başka bir çalışmada, atom numarası $28 \leq Z \leq 96$ arasında olan elementlerin L alt kabuk floresans verimleri, radyoaktif kaynak olarak iyon bombardımanı kullanılarak, hesaplanmış ve Z atom numarasına bağlı bir fit denklemi elde edilmiştir [32]. Atom numarası $55 \leq Z \leq 92$ aralığında olan bazı elementlerin L alt kabuk floresans ve Auger verimleri, 59,54 keV enerjide γ ışınları yayan ^{241}Am radyoaktif kaynak ve ayırma gücü 5,9 keV'de 188 eV olan Si(Li) dedektörü kullanılarak ölçülmüştür. L-alt kabuk Auger verimleri a_1 , a_2 ve a_3 deneysel olarak, L-alt kabuk floresans verimleri (ω_1 , ω_2 ve ω_3) ve Coster-Kronig geçiş ihtimaliyetleri kullanılarak hesaplanmıştır [33].

$K_{\alpha 2}/K_{\alpha 1}$ X-ışını şiddet oranları $_{51}\text{Sb}$ ile $_{95}\text{Am}$ arasındaki 36 element için Caushois tipi kristal spektrometre ve Ge(Li) dedektörü ile [34], bazı basit vanadyum bileşiklerinin K_{β}/K_{α} şiddet oranları ise Si(Li) X-ışını spektrometresi kullanılarak ölçülmüştür. Yapılan çalışmada güçlü kovalent bileşiklerin genel olarak daha büyük K_{β}/K_{α} şiddet oranına sahip olduğu gözlenmiştir [35]. Au, Pb, Th ve U elementlerinin L kabuğu X-ışını şiddet oranları bu

elementlerin çeşitli foton enerji değerleri ($15 \leq E \leq 60$ keV) kullanılarak ölçülmüştür. Yapılan çalışmada değerlerin foton enerjisine bağımlılığı araştırılmıştır [36]. Talyum elementinin, radyoaktif kaynak olarak 10 MeV'lik karbon (C) ve 12 MeV azot (N) iyonları kullanılarak, farklı L X-ışını bileşenlerinin enerji kayması ve şiddet oranları çalışılmıştır. Ölçülen şiddet oranı değerlerinin mevcut teorik değerlerden daha yüksek olduğu tespit edilmiş ve çözünürlüğü 5,9 keV enerjide 160 eV olan Si(Li) dedektörü kullanılmıştır [37]. Atom numarası $36 \leq Z \leq 92$ arasında olan elementlerin L X-ışını şiddet oranı değerlerinin enerjiye ve atom numarasına bağılılığı araştırılmış ve tablo halinde sunulmuştur [38]. K kabuğu floresans verimleri, ortalama L kabuğu floresans verimleri, X-ışını yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları, Auger elektronlarının yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları ve boşluk transfer olasılıkları (η_{KL}), literatürden toplanarak değerlendirilmiş ve fit değerleri elde edilmiştir [39]. Ta, W, Re, Au, Hg, Tl, Pb, Th ve U ($73 \leq Z \leq 92$) elementleri için L_3 alt kabuk X-ışını şiddet oranları ^{241}Am radyoizotop kaynağı kullanılarak ölçülmüştür. L_3 'den M_i , N_i ve O_i 'ye ($i=3-5$) olan ışımali geçiş ihtimaliyetleri L_3 X-ışını şiddet oranları ve L_i alt kabuk floresans verimleri kullanılarak ölçülmüştür. Deneysel sonuçlar rölativistik (göreceli) Scofield'in Hartree-Slater değerleri ile karşılaştırılmıştır [40].

Başka bir çalışmada Trans-uranyum elementleri: Np, Pu ve Am'un L kabuğu iyonizasyon ve X-ışını üretim tesir kesitleri 5,00-20,00 MeV enerjili protonlar tarafından uyarılarak hesaplanmıştır. Hedeflerin tesir kesitleri ECPSSR teorisine dayanan bilgisayar kodları kullanılarak elde edilmiştir [41]. Başka bir çalışmada ise, ^{57}Co radyoaktif kaynağından yayımlanan 122 ve 136 keV'lik foton enerjileri kullanılarak, Tantalum (73) ve Platin (79) arasında bulunan saf elementler ve bu elementlerin bileşikleri uyarılmış çözünürlüğü 5,9 keV'de 150 keV olan bir Ultra- LEGe dedektörü kullanılarak K X-ışını üretim tesir kesitleri, floresans verimleri, şiddet oranları ve K tabakasından L tabakasına boşluk geçiş ihtimaliyetleri deneysel olarak hesaplanmıştır. Ayrıca ^{241}Am radyoizotop kaynağı kullanılarak L kabuğu X-ışını üretim tesir kesitleri, ortalama floresans verimleri, L_3 alt kabuk floresans verimleri, şiddet oranları ve L_3 tabakasından M, N ve O alt kabuklarına olan boşluk geçiş ihtimaliyetleri hesaplanmıştır [42].

Bir diğer çalışmada L_i ($i=1-3$) alt kabuk integral X-ışını floresans (XRF) kesitleri, Mn K X-ışınları ($E_k=5,96$ keV) ile fotoiyonizasyon sonrası $33 \leq Z \leq 51$ arası 17 element için ölçülmüştür. L_i ($i=1-3$) alt kabuk X-ışınları, $w=125$ emisyon açısında düşük enerjili bir Ge(LEGe) dedektörü kullanılarak elde edilmiştir. XRF kesitleri, mevcut teorik L_i ($i=1-3$)

alt kabuk fotoiyonizasyon kesitleri, radyatif geçiş olasılıkları ve atomik boşluk bölünme parametreleri olan floresans (ω_i) ve Coster-Kronig verimleri (f_{ij}) açısından yorumlanmıştır [43].

L_α ve $L_{\beta_{1,3,4}}$ floresans tesir kesitleri 4 lantanoid element için (L_α , Ce, Pr ve Nd) 7,01 keV ve 8,75 keV foton enerjileri arasında ölçülmüştür. Deney sonuçları fotoelektrik tesir kesitlerinin bilinen tablolarını kullanarak tahmin edilen teorik tesir kesitleri ile karşılaştırılmıştır. Deney ve tablo verileri arasında kabul edilebilir bir eşleşme bulunmuştur [44]. K_α ve K_β X-ışını floresans tesir kesitleri 5,96 keV'den 59,54 keV'e kadar olan on uyarma enerjisinde atom numarası $20 \leq Z \leq 56$ aralığındaki elementler için hesaplanmış ve deneysel olarak elde edilen sonuçlar teorik değerlerle karşılaştırılmıştır. Elde edilen floresans X-ışını spektrumları, çözünürlüğü 5,9 keV'de 170 eV olan Si(Li) dedektörü ile kaydedilmiştir [45]. L alt kabuk floresans verimleri ve L kabuğu Coster-Kronig geçiş ihtimaliyet değerleri ve ölçülen L X-ışını üretim tesir kesitleri, şiddet oranları ve L alt kabuk floresans verim değerleri atom numarası, $50 \leq Z \leq 92$ aralığındaki elementler için deneysel ve yarı deneysel olarak elde edilmiştir. Deney düzeneğinde 50 mCi ^{55}Fe ve 50 mCi ^{241}Am radyoaktif kaynaklar kullanılmıştır. Numunelerden yayılan L X-ışınları çözünürlüğü 5,9 keV'de 150 eV olan Ultra-LEGe dedektörü ile sayılmıştır [46].

Enerji ayrımlı X-ışını floresans spektroskopisi yöntemi kullanılarak, 38-80 keV enerji bölgesinde ikincil uyarımla, K_α ve K_β X-ışını üretim tesir kesitlerinin enerjiye bağımlılığı araştırılmış ve K_β X-ışını üretim tesir kesitleri atom numarası $42 \leq Z \leq 68$ aralığında olan elementler için çalışılmıştır [47]. Atom numarası $40 \leq Z \leq 53$ aralığında olan 9 element için, (Zr, Nb, Mo, Ag, Cd, In, Sn, Sb ve I) toplam L X-ışını ve L_α , L_β L X-ışını floresans tesir kesitleri ölçülmüştür [48].

1955-2016 yılları arasında yayınlanan çalışmalarda elde edilmiş olan L_i alt kabuk floresans verimleri (ω_{L1} , ω_{L2} ve ω_{L3}) çizelge halinde sunulmuştur. Bu verilerin ağırlıklı ortalama değerleri kullanılarak yapılan deneysel ve yarı-deneysel hesaplamalar sonucunda $40 \leq Z \leq 96$ ve $23 \leq Z \leq 96$ aralığındaki elementler için yeni bir deneysel L_i alt kabuk floresans verim değerleri elde edilmiştir. Deneysel olarak hesaplanan L_i alt kabuk floresans verimleri mevcut diğer teorik ve deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır [49]. L_i , L_α , L_β and $L_{\gamma 1}$ X-ışını floresans tesir kesitleri Ba, La ve Ce elementleri için 7, 8, 9 ve 10 keV enerjili sikratron

radasyonunda ölçülmüştür. Deneyde çözünürlüğü 5,96 keV'de 138 eV olan Peltier soğutmalı Vortex katı hal dedektörü (SII Nano Technology, USA) kullanılmıştır. Deneysel sonuçlar teorik değerlerle karşılaştırıldığında uyumlu oldukları gözlenmiştir [50].

Saf Fe, Se, Te elementleri ve FeSe, FeTe, TeSe bileşikleri için K_{β}/K_{α} şiddet oranları ve floresans tesir kesitleri (σ_{KI}) incelenmiştir. Numuneler 59,5 keV enerjili γ ışınları ve X-ışınları yayan ^{241}Am radyoaktif kaynak ile uyarılmış ve çözünürlüğü 5,9 keV'de 150 eV olan bir Ultra-LEGe dedektörü kullanılarak sayılmıştır. Saf elementler için elde edilen sonuçlar teorik olarak hesaplanan değerlerle karşılaştırılmıştır. Ölçülen sonuçlar elementlerin elektron etkileşmeleri açısından birbirlerini nasıl etkilediğini göstermiştir [51]. $22 \leq Z \leq 69$ aralığındaki elementlerin K_{β}/K_{α} şiddet oranlarının ölçümleri, K karakteristik radyasyon salınımını 59,5 keV enerjili monokromotik (tek renkli) fotonlar ile uyarılarak gerçekleştirilmiştir. Çalışmada Si(Li) dedektörü (160 eV FWHM at 5,9 keV) kullanılmış ve deneysel sonuçlar literatürdeki deneysel ve teorik değerlerle karşılaştırılmıştır [52].

Atom numaraları $16 \leq Z \leq 92$ aralığındaki 59 element için K_{β}/K_{α} şiddet oranları 5,9, 59,5 ve 123,6 keV enerjili fotonlar kullanılarak ölçülmüştür. Numunelerden yayılan K X-ışınları Si(Li) dedektörü ile sayılmıştır [53]. Başka bir çalışmada da Zr ve Sb elementleri ve bileşikleri için K kabuğu X-ışını şiddet oranları, üretim tesir kesitleri, ortalama K kabuğu floresans verimleri ölçülmüştür. Numuneler 59,5 keV enerjili γ ışınları yayan ^{241}Am radyoaktif kaynak kullanılarak uyarılmış ve çözünürlüğü 5,9 keV'de 150 eV olan bir Ultra-LEGe dedektörü yardımıyla sayılmıştır. Sonuçlar mevcut deneysel ve teorik değerlerle karşılaştırılmıştır [54].

$40 \leq Z \leq 50$ atom numarası aralığındaki bazı elementler için K kabuğundan L kabuğuna boşluk geçiş ihtimaliyetleri (η_{KL}), K kabuğu seviye genişlikleri (Γ_K), K kabuğu X-ışını şiddet oranları ($I_{K\beta}/I_{K\alpha}$), floresans verimleri (ω_K) ve K kabuğu üretim tesir kesitleri (σ_{KI}) ölçülmüştür. Numuneler ^{133}Ba radyoaktif kaynak ile uyarılmış ve yayımlanan K X-ışınları CdTe dedektörü ile sayılmıştır. Ayrıca parametreler teorik olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan deneysel değerler teorik ve yarı-deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır. Deneysel değerlerin diğer deneysel ve teorik değerlerle çok uyumlu olduğu görülmüştür [55].

$28 \leq Z \leq 40$ aralığındaki bazı elementler için K kabuğu X-ışını üretim tesir kesitleri ve K kabuğu floresans verimleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar teorik ve deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır [56]. $28 \leq Z \leq 39$ atom numarası aralığındaki bazı elementler için K_{α} , K_{β} X-ışını üretim tesir kesitleri ve K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranları incelenmiş ve literatürde bulunan farklı değerlerle kıyaslanmıştır [57]. Zr, Mo, Cd, Er elementleri için K kabuğu X-ışını floresans tesir kesitleri, floresans verimleri, seviye genişlikleri ve ışımali boşluk geçiş ihtimaliyetleri incelenmiş ve sonuçların literatürde yer alan diğer değerlerle uyumlu olduğu tespit edilmiştir [58].

Fe elementinin K kabuğu seviye genişliği, floresans verimi ve K_{β}/K_{α} şiddet oranı Dirac-Fock (MCDF) metodu kullanılarak belirlenmiştir [59]. Başka bir çalışmada hem deneysel hem de teorik yöntemler kullanılarak $K_{\alpha 2}/K_{\alpha 1}$ değeri Zn için ölçülmüştür. Çalışmada yüksek çözünürlüğe sahip bir çift- kristal spektrometre kullanılmıştır. Teorik hesaplamalar relativistik ve QED (quantum electrodynamics) düzeltmeleri içeren MCDF (multi configuration Dirac Fock) metodu ile gerçekleştirilmiş olup sonuçların deneysel ve teorik değerlerle çok uyumlu olduğu görülmüştür [60]. K X- ışını çizgi genişlikleri ve geçiş ihtimaliyetleri Yb ve Er, Dy, Gd, Sm ve Nd elementlerinin yüksek iyon yüklü durumları için teorik olarak hesaplanmıştır. Hesaplamalarda QED düzeltmeleri içeren Dirac-Fock (MCDF) metodu kullanılmıştır [61].

${}_{74}\text{W}$ ve ${}_{76}\text{Os}$ elementlerinin sikratron radyasyonu kullanılarak L_1 , L_2 , L_3 alt kabuk soğurma kıyıları enerjisinde X-ışını üretim tesir kesitleri ölçümü yapılmıştır. Ölçülen X-ışını fotoiyonizasyon tesir kesitleri, farklı fiziksel parametrelerin IPA (Independent Particle Approximation) modellerine dayanarak hesaplanan teorik değerlerle karşılaştırılmıştır [62]. $4 \leq Z \leq 92$ atom numarası aralığındaki elementler için foton kaynaklı K kabuğu iyonizasyon tesir kesitleri, güncellenmiş deneysel veri ve ECPSSR (Corrections for energy loss(E), Coulomb deflection (C), perturbed state (PSS), and relativistic (R) effects) teorisi kullanılarak yarı deneysel olarak hesaplanmıştır. Yarı deneysel değerlerin yüksek foton enerjisi için ECPSSR modelinin sonuçları ile çok uyumlu olduğu görülmüştür [63].

${}_{66}\text{Dy}$ elementi için L_k ($k=1, \alpha, \eta, \beta_{2,6,7,15}, \beta_{1,6}, \beta_{1,3,4,6}, \beta_{2,7,15}, \gamma_{1,5}, \gamma_{2,3}$) yayınlanma çizgileri X-ışını üretim (XRP) tesir kesitleri 7,8-9,2 keV enerji aralığı ve yaklaşık 10-370 eV üzerinde enerjiyle L_i ($i=1-3$) soğurma kıyıları, sikratron radyasyonu kullanılarak ölçülmüştür. Ölçülen $L_{\gamma_{2,3}}$ X-ışını üretim tesir kesitlerinin teorik değerlerin farklı bölümlerinden önemli

ölçüde yüksek olduğu bulunmuştur. Buna karşılık, genel olarak gözlenen diğer X-ışını üretim tesir kesitleri ve bağıl yoğunluk değerlerinin teorik değerlerle uyumlu olduğu görülmüştür [64]. $70 \leq Z \leq 78$ atom numarası aralığındaki bazı elementler için $L_{2,3}$ alt kabukları X-ışını üretim tesir kesitleri ve $L_{2,3}$ alt kabuk ortalama floresans verim değerleri ölçülmüştür. Ortalama alt kabuk floresans verim değerleri, toplam $L_{2,3}$ X-ışını üretim tesir kesitleri kullanılarak belirlenmiştir. Ölçülen değerler teorik ve yarı-deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır [65].

Cr, Mn, Fe ve Co elementleri için 8,735 keV uyarma enerjisi ile K_{α} ve K_{β} X-ışını üretim tesir kesitleri ve K kabuğu floresans verim değerleri ölçülmüştür. Sonuçlar diğer araştırmacıların yarı deneysel ve teorik olarak hesaplanan değerleri ile kıyaslanmış ve elde edilen sonuçların literatürde mevcut olan diğer teorik ve deneysel değerler ile uyum içinde olduğu gözlenmiştir [66]. Te elementinden Y elementine kadar olan seçilmiş elementler için K_{α} ve K_{β} uyarma faktörlerinin ölçümleri yapılmıştır. Bunun için K kabuğu X-ışını üretim tesir kesitleri ve toplam soğurma fotoelektrik tesir kesitlerinin deneysel değerleri kullanılmıştır. Ölçümler Si(Li) dedektör ile birlikte 2048 çok kanallı analizör ve 59,54 keV enerjide γ fotonları yayan ^{241}Am halka radyoizotop kaynak kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Yapılan çalışmada K_{α} uyarma faktörlerinin K_{β} uyarma faktörlerinden 5-6 kat daha büyük olduğu gözlenmiştir. K_{α} ve K_{β} uyarma faktörlerinin mevcut deneysel ve teorik değerlerle uyumlu olduğu görülmüştür [67].

20. yy'ın başlarından günümüze kadar spektroskopik yöntemler aracılığıyla deneysel, yarı deneysel ve teorik yöntemler kullanılarak farklı enerjilerde ve periyodik tabloda bulunan çok sayıdaki element için K, L ve M kabuğuna ait çok sayıda floresans parametrelerinin hesaplanması ile ilgili çalışmalar yapılmıştır. Yukarıda verilen literatür bilgisinden de anlaşılacağı üzere çalışmalar çoğunlukla K_{α} , K_{β} X-ışını üretim tesir kesitleri, K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranları, K kabuğu floresans verimi ve yüksek atom numaralı elementlerde L kabuğu X-ışını parametreleri üzerine yoğunlaşmıştır. Bu parametreler atomların sahip olduğu elektronik yapıların anlaşılması için öne sürülen teorik varsayımların kabulü için bir zemin hazırlamakta ve ayrıca literatürde var olan veriler ışığında daha hassas spektroskopik analiz cihazlarının tasarlanmasında önem arz etmektedir. Bu sebeple literatürde var olmayan ya da daha az çalışılan elementler ve parametreler belirlenmiş ve bu tez konusu oluşturulmuştur. Bilinmektedir ki EDXRF cihazlarında düşük çözünürlük değerinden dolayı K_{α} piki $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$ piklerine ayıramamaktadır. Ayrıca 3d elementlerinde Auger

olayları baskın olmasına rağmen EDXRF yöntemi ile hesaplanmış olan Auger parametre değerleri literatürde az sayıda bulunmaktadır ve geçiş elementlerinin dış kabuk elektronik yapısının anlaşılmasında, Auger parametreleri önemli bir yere sahiptir. Bundan başka geniş bir element aralığı için 59,5 keV’de çalışılmış L alt kabuk seviye genişlikleri ile ilgili az sayıda çalışma vardır.

Bu çalışmanın amacı, hem atomların elektronik yapılarının anlaşılmasında gelecekte öne sürülecek olan teorik varsayımlar için hem de daha hassas spektroskopik analiz cihazlarının tasarımı için bir veri oluşturacaktır. EDXRF yönteminde düşük çözünürlükten dolayı K_{α} piklerinin birbirinden ayıramaması problemi ise yarı-deneysel hesaplamalarla çözülecektir ve literatürde çalışma kapsamında yapılan hesaba benzer herhangi bir örneği bulunmamaktadır.

2. GENEL BİLGİLER

2.1. Atomik Verilerin Önemi

Bir elementin atom numarası ve atoma ait X-ışınlarının geçiş frekanslarının arasındaki bağıntı ilk olarak Moseley tarafından açıklanmıştır. Bu yasa kullanılarak, periyodik tabloda var olan elementlerin sıralanmasının Mendeleev'in periyodik tablosu ile uyum içinde olduğu görülmüştür. Bu sebeple Moseley, periyodik tabloda yer almayan ve yarı ömrü çok kısa olan teknesyum, prometyum, astatin ve fransiyum gibi radyoaktif elementlerin konumunu belirlemiştir. Hafniyum ve renyum elementleri yayınladıkları X-ışını enerjileri kullanılarak keşfedilmiştir.

Metallerin iletim bandından kopan elektronlara ait X-ışını enerjileri kullanılarak iletim bandında bulunan elektronların dalga fonksiyonları hakkında bilgi elde edilebilir. Elektronların atomik orbitallere bağlanma enerjileri çok az da olsa çekirdek hacminin belirlenmesinde kullanılabilir. Çünkü ağır element atomlarında iç kabukta oluşturulan boşlukların yaşam süresi çoğu çekirdeğin yaşam süresinden daha küçüktür. Uyarılmış çekirdeğin yarıçapı β bozunumu sonucunda yayımlanan X-ışınlarının aracılığıyla hesaplanır. Bundan başka X-ışınları büyük moleküllerin yapı analizini sağlar. İnsülin, hemoglobin ve DNA gibi moleküllerin yapılarının analizi X-ışınları kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

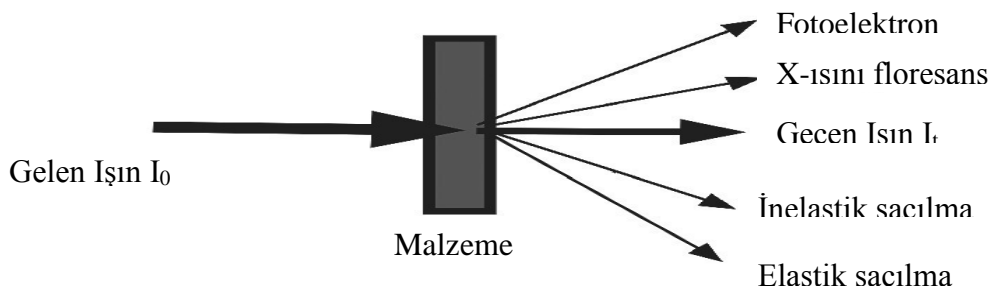
Yukarıda belirtilen durumlardan başka X-ışını teknikleri farklı alanlarda kullanılmıştır. Biyomedikal araştırmalarda, metalürjide, jeofizik bilimi alanındaki incelemelerde, uzay araştırmalarında, adli tıpta, endüstride, arkeolojide ve çevre araştırmalarında sıklıkla kullanılmaktadır. Özellikle metalürjide difüzyon biçimi ve bağ yapılarının analizinde, alaşımların kalitatif ve kantitatif analizinde, yüksek basınçlarda örgü yapılarının incelenmesinde farklı X-ışını teknikleri kullanılmıştır. Aynı zamanda katı hal ve yarı-iletken ile ilgili çalışmalarda, yarı-iletken elementlerin yapısındaki kusurların araştırılmasında ve üretilen malzemedeki safsızlıkların incelenmesinde önemli bir yere sahiptir [68].

2.2. Elektromanyetik Radyasyonun Madde ile Etkileşmesi

Spektroskopik yöntemler kullanılarak yapı analizi çıkarılacak olan bir malzemenin, öncelikle elektromanyetik radyasyona maruz bırakılması gerekmektedir. Fotonlar yüksüz, durgun, kütlesi sıfır fakat ışık hızında ilerleyen bir elektromanyetik radyasyon türüdür. Yüksüz olduklarından dolayı, fotonlar elektronlarla Coulomb etkileşmeleri sonucunda yüklü parçacıklarda olduğu gibi enerji kaybetmezler. Ayrıca aynı enerjiye sahip yüklü parçacıklara kıyasla fotonlar, malzemeye daha çok nüfuz ederler. Fotonların incelenecek olan malzemenin elektron bulutları ile etkileşmesi sonucu üç temel olay meydana gelebilir.

- a.) Malzemedan gelen ve saçılan fotonların aynı enerjiye sahip olduğu elastik saçılma olayı, Rayleigh saçılmasıdır. Kırınım olayı kristal malzemeler için elastik saçılmanın özel bir durumudur.
- b.) Elastik saçılmadan başka malzeme içinde inelastik saçılma meydana gelebilir. Bu durumda saçılan foton enerjisi gelen fotonun enerjisine kıyasla daha küçük yani daha uzun dalga boyludur. Bu durum, görünür veya yakın kızıl-ötesi bölgede fotonlarla moleküllerin dönme ve titreşme enerji seviyelerini inceleyen Raman spektroskopisi ile benzerlik göstermektedir.
- c.) Saçılma olaylarından başka, yapısal analizi yapılacak malzemede soğurma olayı gerçekleşebilir. Soğurma olayı fotoelektrik etki aracılığıyla gerçekleşmektedir. Fotoelektrik etki iç kabukta oluşturulan boşluğun daha dış kabuktaki elektron geçişiyle doldurulması sonucu yayınlanan X-ışını geçişlerini içermektedir [69].

Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşmesi sonucu gerçekleşen olaylar şematik olarak Şekil 2.1’de gösterilmiştir.



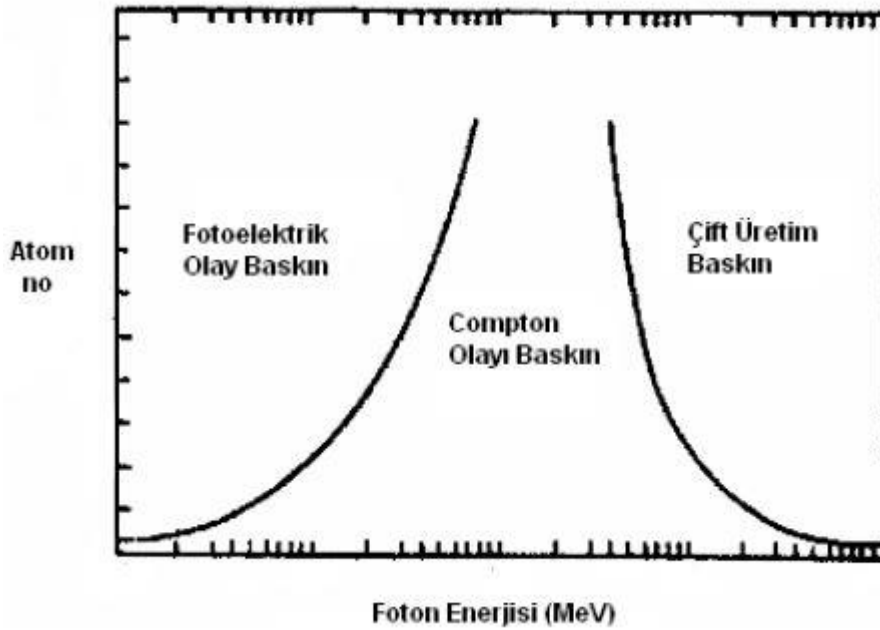
Şekil 2.1. Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşmesi

Şekil 2.1’de malzemeyi geçen ışının şiddeti malzemenin cinsine, kalınlığına ve gelen ışının şiddetine bağlı olarak değişim gösterir ve bu değişim Lambert-Beer yasası olarak bilinen

$$I_t = I_0 \cdot e^{-\mu t} \quad (2.1)$$

eşitliği [77] ile ifade edilmektedir. Lambert-Beer yasası birim kalınlıkta malzemeyi geçen elektromanyetik radyasyon demetinin şiddetindeki azalmanın soğurucu malzemenin kalınlığına bağlı olarak üstel olarak azalacağını göstermektedir. Eş. 2.1’de gelen ışının şiddeti I_0 , soğurulan demetin şiddeti I , lineer soğurma katsayısı μ ve maddenin kalınlığı t olarak temsil edilmiştir. Maddenin içerisine gelen radyasyon, maddenin atomlarının bağlı bulunan elektronları, serbest halde bulunan elektronları ve atom çekirdeği ile etkileşir.

Elektromanyetik radyasyonun yapısı analiz edilecek malzeme ile etkileşimi sonucunda gerçekleşen olaylar iki ana başlık altında toplanmaktadır. Bunlardan birincisi soğurma bir diğeri ise saçılma olaylarıdır. Soğurma olayına örnek olarak fotoelektrik etki veya floresans ışına ile çift oluşumu olayları verilir. Saçılma olaylarına örnek olarak Compton, Rayleigh, Thomson ve Rezonans Raman saçılmaları verilir. Fakat elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşmesi sonucu baskın olarak görülen olaylar fotoelektrik etki, çift oluşumu ve Compton saçılmasıdır. Şekil 2.2’de foton enerjisinin değişimiyle soğurucu malzemenin atom numarasına göre baskın olduğu olaylar gösterilmiştir. Bu çalışma kapsamında kullanılan ^{241}Am halka kaynağından yayımlanan 59,5 keV foton enerjisi ve 3d gurubu elementlerinin atom numaraları göz önüne alındığında Şekil 2.2’den fotoelektrik etkinin baskın olduğu tespit edilmiştir.



Şekil 2.2. Fotoelektrik, Çift oluşumu ve Compton saçılma olaylarının baskın olduğu bölgeler [70]

2.2.1. Fotoelektrik olayı

Düşük foton enerjilerinde baskın olarak görülen bu süreç, gelen foton enerjisi atomun bir elektronunu koparabilecek yeterli enerjiye sahip olduğunda gerçekleşir. Gelen foton enerjisi ile koparılan bir elektron pozitif yüklü bir iyon bırakır. Böylece fotonun soğurularak, koparılan elektronun serbest hale geçmesi olayına fotoelektrik olay denir ve koparılan elektron fotoelektron olarak tanımlanır. Süreç sonunda açığa çıkan fotoelektron;

$$E_K^e = E_\gamma - I \quad (2.2)$$

kadarlık kinetik enerjiye sahip olur. Eş. 2.2'de [71] gelen fotonun enerjisi E_γ ve elektronun kabuğa bağlanma enerjisi I olarak gösterilir [71].

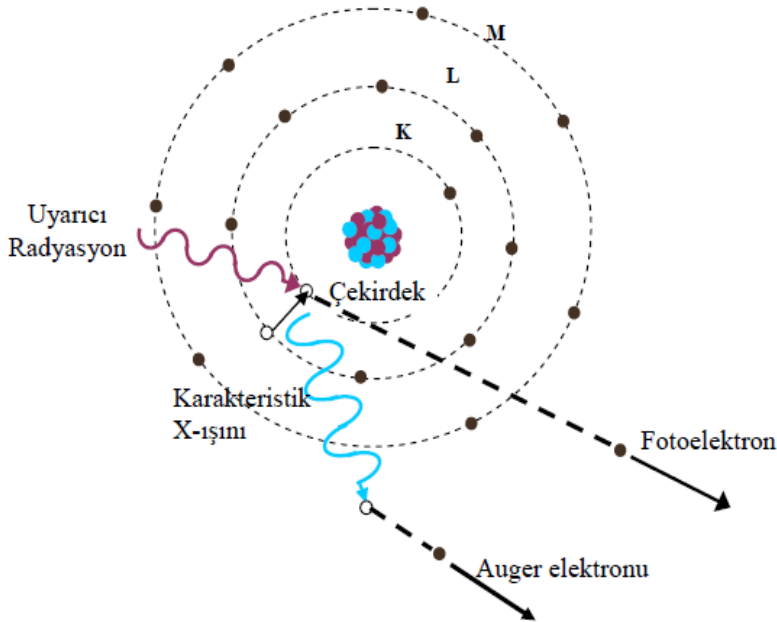
Bir malzemede bulunan atom elektromanyetik radyasyonla etkileştiğinde fotoelektrik olayın meydana gelme olasılığı aynı zamanda fotoelektrik tesir kesiti ya da soğurma katsayısı olarak adlandırılır. Bu olayda gelen fotonun enerjisi elektronun bulunduğu kabuğa bağlanma enerjisine ne kadar yakın ise soğurulma ihtimali de o kadar yüksektir. Foton enerjisi elektronun bağlanma enerjisinden daha küçük olduğunda fotoelektrik olayın meydana gelme

olasılığı da azalır. Atom numarası Z olan bir madde ve enerjisi E_γ olan bir foton için fotoelektrik tesir kesiti;

$$\tau = \text{sabit} \cdot Z^{4,5} \cdot E_\gamma^{-3} \quad (2.3)$$

eşitliği ile gösterilmektedir [72]. Bu eşitlik, fotonların soğurulabilmesi için yüksek atom numaralı elementlerin daha etkili olduğunu kanıtlar. Bununla birlikte fotoelektrik etkinin düşük enerjilerde baskın, ancak yüksek enerjilerde gözardı edilebilir olmasının sebebini foton enerjisine bağlılık olarak ifade eder [72].

Elektronun durgun kütleğine eşdeğer olan enerji m_0c^2 'dir ve yaklaşık olarak 0,51 MeV değerine sahiptir. Foton enerjisi 0,51 MeV'den daha küçük değere sahip olduğunda elektron, gelen fotonla göre daha büyük açıyla saçılır. Ancak foton enerjisi 0,51 MeV değerine yakın enerjiye sahip olduğunda elektron ve gelen foton demeti birbirine paralel olarak saçılacaktır. Şekil 2.3'de K tabakasından bir elektronun koparılmasıyla oluşan fotoelektrik olay gösterilmiştir.



Şekil 2.3. Fotoelektrik olayın şematik gösterimi [73]

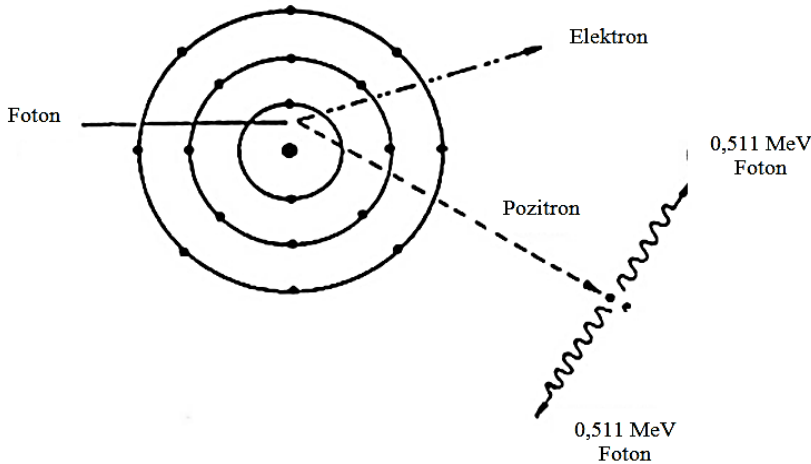
2.2.2. Çift oluşumu

Çift oluşumu fotonun maddeye dönüştüğü durumdur ve Einstein'ın kütle-enerji eş değeri teorisi ile uyumludur. Şekil 2.4'te gösterildiği gibi çekirdek tarafından üretilen bir Coulomb alanı gibi güçlü bir elektromanyetik alanın varlığında gama ışını yok olur bir elektron ve bir pozitron olmak üzere iki parçacık oluşur. Bu parçacıklar eşit miktarda fakat zıt yüklü parçacıklar olduğu için, öncesinde olduğu gibi reaksiyon sonrasında da net yük sıfır olur. Böylece yük korunumu kanunu sağlanır. Toplam oluşan kütle elektronun kütle enerjisinin iki katıdır ve bunun anlamı bu reaksiyonun, gama ışınının enerjisinin en az 1,02 MeV olması durumunda gerçekleşebileceğidir.

Enerjisi 1,02 MeV'den daha büyük olan fotonlar için fazla enerji, elektron-pozitron arasında kinetik enerji olarak eşit oranda ($E_{K^{e^+}} = E_{K^{e^-}}$) paylaşılır:

$$E_K^{çift} = E_K^{e^+} + E_K^{e^-} = E_\gamma - 2E_0 \quad (2.4)$$

Momentum korunumu dikkate alındığında, pozitron ve elektronun foton doğrultusuna göre ileri yönde hareket ettiği görülür. Şekil 2.4'te görüldüğü gibi elektron ve pozitron birleştiğinde yok olurlar ve toplam enerjisi 1,02 MeV olan iki yeni gama ışını yayımlanır. Momentum korunumu ilkesine göre iki foton zıt yönlerde yayımlanır. İki yüksek enerjili fotonun çarpışarak elektron-pozitron çifti oluşturduğu ters sürecin, büyük patlamadan (Big-Bang) sonraki ilk zamanlarda yaygın olduğuna inanılmaktadır [71].



Şekil 2.4. Çift oluşumu olayı [74]

2.2.3. Elektromanyetik radyasyonun saçılması

Elektromanyetik radyasyon, saçılan ışının sahip olduğu enerjiye göre koherent ve inkoherent saçılma olarak iki gruba ayrılır. Koherent saçılmada, elektronlar ve fotonlar arasında gerçekleşen çarpışma rastgeledir. Bu saçılma serbest veya bağlı elektronlarla meydana gelir ayrıca elektronların zayıf bir şekilde bağlı olduğu düşük atom numaralı elementlerde yüksek oranda meydana gelir. Bu saçılma tipinde gelen ve saçılan fotonların fazları arasında bir ilişki vardır. Atom içindeki her bir elektron tarafından saçılan radyasyonun genliklerinin toplamından yararlanılarak, atom tarafından saçılan radyasyonun toplam şiddeti bulunur. Bu saçılma türüne örnek olarak; Thomson, Delbrück, Rayleigh ve Nükleer Rezonans saçılmalar verilebilir. Atom tarafından saçılan radyasyonun şiddetini elde etmek için her elektron tarafından saçılan radyasyonun genlikleri toplanır. Atom başına düşen toplam koherent saçılma tesir kesiti;

$$\sigma_R^z = \pi r_e^2 \int_0^\pi [F(x, Z)]^2 (1 + \cos^2 \phi) \sin \phi \quad (2.5)$$

ile verilmektedir [75]. Bu eşitlikte $F(x, Z)$, elektron dağılım modellerine (Hartree-fock veya Thomas-Fermi modelleri) dayanarak teorik olarak hesaplanan ve Z yörünge elektronları tarafından saçılan dalgalar arasındaki faz farklarını açıklayan atomik form faktörü; ϕ , koherent saçılma açısı; x ise dalga boyu ile açığa bağlı olan bir parametredir.

İnkoherent saçılma ise inelastik saçılmanın bir sonucudur ve elektronların sıkıca bağlı olduğu yüksek atom numaralı elementlerde yüksek oranda gerçekleşir. Bu saçılmada gelen foton ile saçılan foton arasında faz farkı vardır. Atomlar arası etkileşimi dikkate almadan herhangi bir yönde ortalama saçılma şiddetini hesaplayabiliriz. Ortalama şiddet;

- ✓ Gelen fotonun $h\nu$ enerjisine,
- ✓ Saçılma açısı ϕ 'ye ve
- ✓ Elementin Z atom numarasına

bağlıdır. ϕ açısında bir elektronun inkoherent saçılma tesir kesiti Klein-Nishina eşitliği ile verilir.

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_e^2 \left(\frac{h\nu}{h\nu'} \right) \left(\frac{h\nu}{h\nu'} - \frac{h\nu'}{h\nu} - \sin^2 \phi \right) \quad (2.6)$$

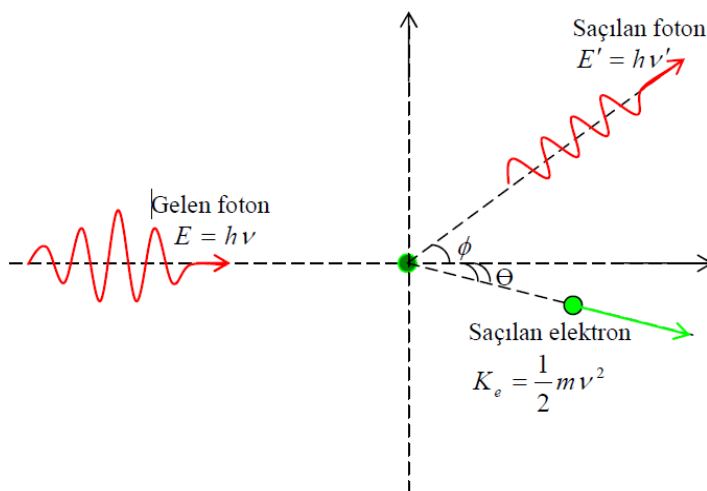
Burada σ_c , inkoherent saçılma tesir kesiti; Ω , katı açıdır. Toplam saçılma tesir kesiti ise;

$$\sigma_c^Z = \pi r_e^2 \int_0^\pi S(x, Z) H(\alpha, \phi) \sin \phi d\phi \quad (2.7)$$

olarak verilir [75]. Burada σ_c^Z , Z atom numaralı elementin tesir kesiti; S(x,Z), atomik saçılma tesir kesiti; $r_e = e^2/mc^2$ klasik elektron çapı; H(α, ϕ) ise;

$$H(\alpha, \phi) = [1 + \alpha(1 - \cos \phi)]^{-2} \left[1 + \cos^2 \phi + \frac{\alpha^2 (1 - \cos \phi)^2}{1 + \alpha(1 - \cos \phi)} \right] \quad (2.8)$$

eşitliği ile verilir [75]. İnkoherent saçılma; Compton saçılması, Nükleer saçılma ve Raman saçılması olmak üzere üç gruba ayrılır. Bu saçılmaların en etkin olanı Compton saçılmasıdır Compton olayı ışığın tanecikli yapıda olduğunu gösteren olaylardan biridir. Bu olayda yüksek enerjili bir foton serbest haldeki bir elektronla esnek olarak çarpışma yapar. Böylece gelen foton, enerjisinin bir kısmını kaybeder ve geliş doğrultusundan saparak belli bir açı ile saçılır. Bu arada foton ile çarpışan elektron da belli bir açı ile saçılır. Compton olayında çarpışma öncesindeki enerji ile çarpışma sonrasındaki toplam enerji eşittir. Bu durum enerjinin korunduğunu gösterir. Compton saçılması, elektronun bağlanma enerjisinin, gelen fotonun sahip olduğu enerjiye göre ihmal edilecek kadar küçük olduğu durumda etkili bir şekilde gerçekleşir. Şekil 2.5'te görüldüğü gibi ϕ saçılan fotonun geliş doğrultusuyla, Θ ise geri tepen elektronun geliş doğrultusuyla yaptığı açıdır.



Şekil 2.5. Compton saçılması [73]

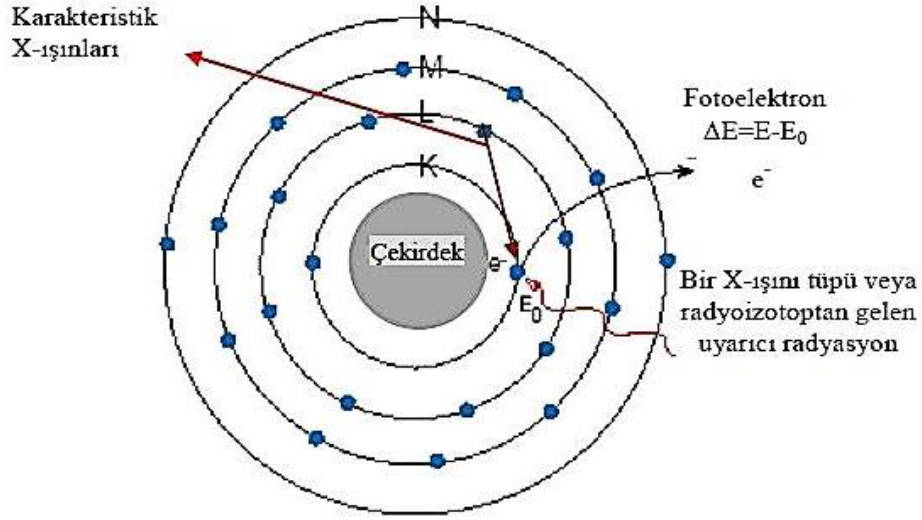
Bu olayda, saçılan fotonun dalga boyu λ ise, gelen fotonun dalga boyu

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda' = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos \theta) \quad (2.9)$$

şeklinde [73] ifade edilir. Bu eşitlikte m_0 : elektronun durgun kütlesi, θ : fotonun saçılma açısı, c : ışık hızı, h ise Planck sabitidir. Fotoelektrik olay genellikle K ve L tabakalarına ait elektronlarda baskın olmasına rağmen, Compton olayı dış tabaka elektronlarında daha etkilidir.

2.2.4. Karakteristik x-ışınlarının oluşumu

Klasik atom modeli; orbitallerde veya kabuklarda gruplanmış elektronlarla, pozitif yüklü protonlar ve yüksüz nötronlardan oluşmaktadır. En içteki kabuk K kabuğu olarak adlandırılır ve dışarı doğru gidildikçe sırasıyla L kabuğu, M kabuğu ve benzeri olarak adlandırılır. L kabuğunun L_1 , L_2 ve L_3 olmak üzere 3 alt kabuğu mevcuttur ve M kabuğunun M_1 , M_2 , M_3 , M_4 ve M_5 olmak üzere 5 alt kabuğu bulunmaktadır. K kabuğunda 2, L'de 8 ve M kabuğunda 18 elektron bulunabilir. Bir elektronun enerjisi bulunduğu kabuğa ve ait olduğu elemente bağlıdır. Bir atom yeteri kadar enerjiye sahip elektronlar veya X-ışını fotonlarıyla etkileştiği zaman atomdan bir elektron koparılabilir. Bir kabuk içerisinde örneğin K kabuğunda, bir boşluk oluşturularak, atom daha yüksek enerjili kararsız bir duruma getirilir. Atom orijinal konfigürasyonlu eski haline geri dönmek ister ve bunu K kabuğundaki bir boşluğun L kabuğundaki elektronlarla doldurulduğu gibi, daha dışarıdaki kabuklardan bir elektron geçişiyle de yapabilir. L kabuğundaki bir elektron K kabuğuna geçtiği zaman enerji fazlalığı X-ışınları olarak yayımlanır. Yayımlanan X-ışınlarının enerjisi, boşluğun bulunduğu kabuğun enerjisi ile boşluğu dolduran elektronun bulunduğu kabuğun enerji farkına bağlıdır. Her atom kendine özgü bir enerji seviyesine sahiptir. Bu sebeple yayımlanan radyasyon atom için ayırt edici bir özelliktir. Yayımlan çizgilerin toplamı element için karakteristiktir ve aşağı yukarı elementin parmak izidir [76]. Karakteristik X-ışınlarının oluşumu Şekil 2.6'da gösterilmektedir.



Şekil 2.6. Karakteristik x ışınlarının oluşumu [42]

K ve L X-ışınlarının Siegbahn ve International Union of Applied and Pure Chemistry (IUPAC) gösterimleri Çizelge 2.1’de gösterilmiştir.

Çizelge 2.1. X-ışını diyagram çizgilerinin eski (Siegbahn) ve yeni (IUPAC) gösterimleri [42]

Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC
$K\alpha_2$	K-L _{II}	$L_{\gamma 2}$	L _I -N _{II}	$L\alpha_2$	L _{III} -M _{IV}
$K\alpha_1$	K-L _{III}	$L_{\gamma 3}$	L _I -N _{III}	$L\alpha_1$	L _{III} -M _V
$K\beta_3$	K-M _{II}	$L_{\gamma 4}$	L _I -O _{II}	$L\beta_6$	L _{III} -N _I
$K\beta_1$	K-M _{III}	$L_{\gamma 4}$	L _I -O _{III}	$L\beta_{15}$	L _{III} -N _{IV}
$K\beta_5$	K-M _{IV,v}	$L_{\gamma 13}$	L _I -P _{II,III}	$L\beta_2$	L _{III} -N _V
$K\beta_2$	K-N _{II,III}	L_{η}	L _{II} -M _I	$L\beta_7$	L _{III} -O _I
$K\beta_5$	K-N _{III}	$L\beta_1$	L _{II} -M _{IV}	$L\beta_5$	L _{III} -O _{IV,v}
$K\beta_4$	K-N _{IV,v}	$L_{\gamma 5}$	L _{II} -N _I		
$L\beta_4$	L _I -M _{II}	$L_{\gamma 1}$	L _{II} -N _{IV}		
$L\beta_3$	L _I -M _{III}	$L_{\gamma 8}$	L _{II} -O _I		
$L\beta_{10}$	L _I -M _{IV}	$L_{\gamma 6}$	L _{II} -O _{IV}		
$L\beta_9$	L _I -M _V	L _I	L _{III} -M _I		

2.2.5. Floresans verim ve Coster-Kronig geçişleri

Bir atomun herhangi bir tabakasinda oluřturulan bořluęun ıřımalı geçiřle doldurulma ihtimaliyeti floresans verim olarak adlandırılır. K tabakasinda oluřturulan bir bořluęun üř tabakalardan gelen bir elektronla karakteristik X-ıřını yayımlayarak doldurulması olasılıęı K tabakasına ait floresans verim olarak adlandırılır ve

$$\omega_K = \frac{I_K}{\eta_K} \quad (2.10)$$

eřitlięi ile verilir [68]. Burada, I_K numuneden yayımlanan karakteristik X- ıřınlarının sayısı; η_K ise K tabakasinda oluřturulan bořluk sayısıdır. Floresans verim aynı zamanda seviye geniřlięi cinsinden;

$$\omega = \frac{\Gamma_R(L_i X)}{\Gamma(L_i)} \quad (2.11)$$

olarak ifade edilmektedir [68]. Bu baęıntıda, $\Gamma_R(L_i X)$ alt tabakaları arasındaki geçiřlere göre ıřımalı seviye geniřlięi ve $\Gamma(L_i)$, L_i seviyesi için toplam seviye geniřlięini tanımlamaktadır. Eř. 2.11'de gösterilen X ise $X=L_j, j>i$ ile verilir. Floresans verim parametresinin tanımı daha yüksek atomik kabuklar için daha karmařıktır. Bunun sebebi ise K kabuęunun üzerindeki kabukların birden fazla alt kabuklara ayrılmasından kaynaklanmaktadır. Çünkü ortalama floresans verim, alt kabukların nasıl iyonize olmasına baęlıdır ve aynı zamanda alt kabuklarda meydana gelen Coster-Kronig geçiřler floresans verim parametresinin deęerini etkiler [68].

Bir atomda gerçekleřen floresans ıřıma elektrik dipol seçim kurallarına baęlı olarak gerçekleřir ve $\Delta l = \pm 1$ ve $\Delta j = \pm 1, 0$ şartlarını saęlayamayan geçiřler yasaklıdır. $\Delta n = 0$ olan durum alt tabakalarda gerçekleřen Coster-Kronig geçiřlerini temsil etmektedir. $j > i$ olmak üzere i. alt kabukta oluřturulan bořluęun j. alt kabuęa geçme ihtimali f_{ij} ile gösterilir. Coster-Kronig geçiřleri ıřımalı $f_{ij}(R)$ ve ıřımasız $f_{ij}(A)$ olmak üzere iki kısımdan oluřur ve bu durumda Coster-Kronig geçiřleri için;

$$f_{ij} = f_{ij}(R) + f_{ij}(A) \quad (2.12)$$

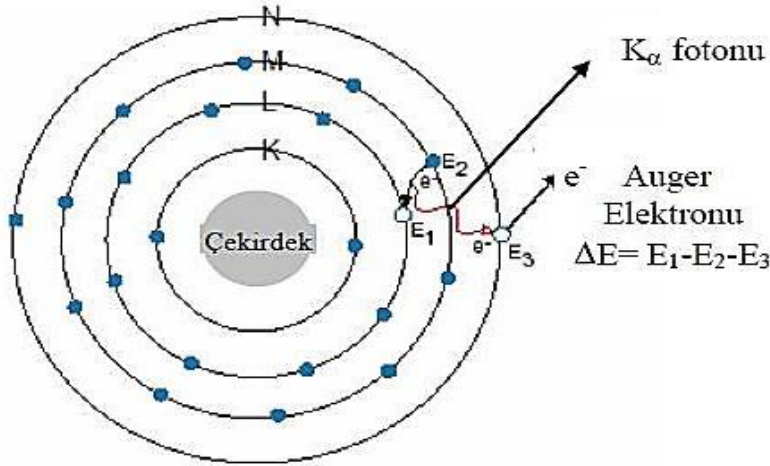
eşitliği geçerlidir [77]. Işımalı Coster-Kronig geçişleri ışısız Coster-Kronig geçişlerinden çok küçük olduğu için $f_{ij}(R)$, $f_{ij}(A)$ yanında ihmal edilebilir. Bu nedenle f_{ij} ,

$$f_{ij} = \frac{\Gamma_A(L_i L_j X)}{\Gamma(L_i)} \quad X=M, N, O \text{ ve } j>i \quad (2.13)$$

olarak yazılabilir. Bu eşitlikte Γ_A Auger kısmi genişliğini (Auger geçiş hızlarının toplamı) temsil etmektedir [77].

2.2.6. Auger geçişleri

Bir atomda iç yörüngelerin uyarılmasıyla meydana getirilen bir boşluk üst tabakalardan elektron geçişi ile doldurulur. Bu işlem sırasında açığa çıkan enerji genellikle X-ışını fotonu şeklinde yayımlanır. Bununla beraber, uyarılan atom fazla enerjisini bir elektronunu yayımlayarak serbest bırakabilir. Bu olay ışısız geçişler, iç dönüşüm ve Auger olayı gibi isimlerle bilinmektedir. X-ışını fotonu gibi, Auger elektron enerjisi de yayımlayıcı elemente ait bir karakteristiktir. Şekil 2.7’de Auger olayının meydana gelişi gösterilmiştir.



Şekil 2.7. Auger olayının meydana gelişi [42]

Auger olayı, düşük atom numaralı elementlerde elektronlar atoma daha zayıf bağlı olduğu ve karakteristik fotonlar daha kolay soğurulduğu için daha yaygın görülür. Aynı şekilde elektronlar daha zayıf bağlı olduğu için Auger olayı L serisi için K serisine nazaran daha etkilidir. K kabuğu için Auger olayının meydana gelme ihtimali a_K , ışısız geçiş sayısı I_{KA}

ve ortaya çıkan boşluk sayısı η_K olmak üzere;

$$a_K = \frac{I_{KA}}{\eta_K} \quad (2.14)$$

kesriyle ifade edilir [72-78]. Auger verimi, floresans verim ve Coster-Kronig verim arasındaki ilişki için;

$$\omega_i^x + a_i^x + \sum_{j=i+1}^k f_{ij} = 1 \quad (2.15)$$

eşitliği geçerlidir [72-78]. Yazılan bu eşitlikten yararlanarak bir atomun L tabakası için aşağıdaki eşitlikler elde edilebilir.

$$w_1 + a_1 + f_{12} + f_{13} = 1 \quad (2.16)$$

$$w_2 + a_2 + f_{23} = 1 \quad (2.17)$$

$$w_3 + a_3 = 1 \quad (2.18)$$

Belli bir seviyenin boşluk dağılımı için ortalama floresans verimi ($\bar{\omega}_x$) ve ortalama Auger verimi (\bar{a}_x) toplamı bire eşit olur ve

$$(\bar{\omega}_x) + (\bar{a}_x) = 1 \quad (2.19)$$

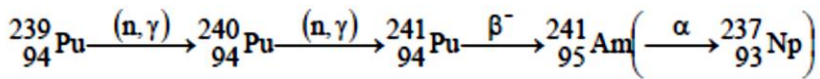
şeklinde yazılır [72-78]. Işımalı ve ışımasız olayların tek başına görüldüğü durumların yanı sıra her iki olay da aynı anda bir atomda gerçekleşebilir. İç kabukta oluşturulan bir boşluğun daha üst tabakadaki bir elektronla doldurulması esnasında yayımlanan karakteristik X-ışını aynı atomda başka bir elektronu uyarabilir. Hem fotoelektronun hem de X-ışınının aynı anda yayımlandığı bu olay ışımalı Auger olayı olarak tanımlanır. Yarıiletken kristal dedektörlerde bu olay temel karakteristik piklerin düşük enerji kenarında bir kuyruklanmaya neden olur [72-78].

2.3. Atomun Uyarılması

Bir atomun çekirdeğe yakın elektronik seviyelerinden elektronun sökülüp daha üst seviyelere geçmesi durumu uyarma, fakat sürekli enerji bölgesine geçmesi durumu ise iyonlaşma olarak tanımlanmaktadır. Uyarılan atom, daha kararlı bir duruma geçerken yörünge elektronlarının yeniden düzenlenmesi ile birlikte foton açığa çıkar ve bu fotona karakteristik X-ışını floresans fotonu denir. Karakteristik X-ışını fotonu olarak tanımlanmasının sebebi karakteristik X-ışınlarının her element için farklı enerji değerlerine sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Bu ışınların spektrumlarına X-ışını floresans spektrumu denir. Bu nedenle karakteristik X-ışınlarının her element için farklı değerde olmasından yararlanarak bilinmeyen bir numune içindeki elementlerin analizi yapılmaktadır. Eğer bir madde doğrudan radyoaktif bir kaynaktan yayımlanan X-ışınları ile bombardıman edilip uyarılıyorsa bu ışınlar primer (birincil) ışınlar fakat atom tarafından yayımlanan floresans ışınları ile uyarılıyorsa sekonder (ikincil) X-ışınları olarak tanımlanır. Tez kapsamında yapılan deneylerde uyarma işlemi için ^{241}Am radyoizotop kaynağı kullanılmıştır.

2.3.1. ^{241}Am radyoizotop kaynağı

^{241}Am radyoizotopu, plutonyumdan yapay olarak elde edilmiş kararsız bir izotoptur. Bu elementin ortaya çıkış reaksiyonunda oluşan zincir nötron yakalama ve β bozunumundan oluşur ve reaksiyon sonucu oluşan ürünler aşağıda gösterildiği gibidir.



Yarı ömrü 432 yıl olan bu izotop α bozunumu geçirerek neptünyum radyoaktif elementine dönüşür ve bozunma sonunda kararlı bizmut elementi oluşur. Bu süreç neptünyum serisi olarak adlandırılır. Nükleer bir reaksiyon olan nötron yakalama, atomik çekirdeğin ağır bir çekirdek oluşturmak için bir ya da daha çok nötronla çarpışması olayıdır. Nötronlar çekirdeğin içine yüklü olmadıkları için rahatça girerler. β bozunumunda gerçekleşen zayıf etkileşme, bir antinötrino yayımlarken aynı zamanda bir nötronu bir protona dönüştürür. Bir atomik çekirdeğin alfa parçacığı yayımladığı bozunma çeşidi olan alfa bozunumuna uğrayan çekirdeğin kütle numarası 4 azalırken atom numarası 2 azalır. Gama bozunumu proton ve

nötron sayısının değişmediği çekirdeğin yüksek enerjili durumdan düşük enerjili duruma geçtiği bozunma çeşididir [70].

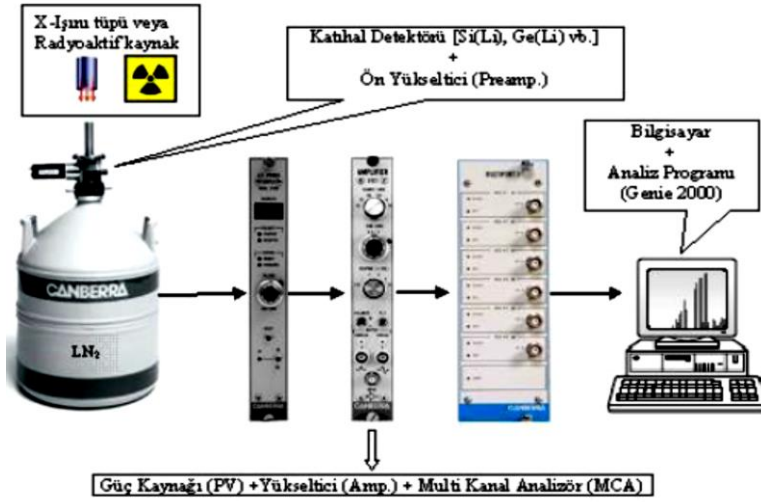
2.4. Enerji Ayrımlı X-ışını Floresans Spektrokopisi (ED-XRF)

Atom ağırlığı $Z > 4$ yüksek olan elementlerin kalitatif ve kantitatif analiz sonuçlarını milyonda bir hassasiyetle belirlemede kullanılan EDXRF yöntemi pratik, ucuz, tahribatsız ve ölçümlerin tekrarlanabildiği analitik metodlardan biridir. XRF metodunun bir diğer avantajı da numune hazırlamak için çok az miktarda örnek gerektirmesidir. XRF, jeolojide demirli ve demirsiz alaşımlar, yağlar, maden cevheri, minareller gibi numunelerin analiz çalışmalarında tercih edilen bir yöntemdir [79]. Analitik laboratuarlarda EDXRF spektrometrelerinin kullanım alanının oldukça geniş bir yer tuttuğu görülmektedir. Bunun nedeni günümüzde bilinen AAS ve ICP'nin yerini EDXRF'nin almasıdır. Endüstride ve bilim dallarında EDXRF'nin kullanımı olduğu söylenebilmektedir [80].

Oda sıcaklıklarında radyasyonu belirlemek için çok sayıda katıhal malzeme bulunmaktadır. Düşük akımdan dolayı oluşan gürültü düzeyi için kullanılan malzeme geniş bir enerji aralığında ve yük geçişi özellikleri de yüksek olmalıdır. Galyum arsenik (GaAs), Kadmiyum tellur (CdTe) ve Civa iyodür (HgI₂) yaygın olarak kullanılan katı hal malzemelerdir. HgI₂ dedektörleri ticari yönden ve EDXRF cihazlarında kullanımı nedeniyle en uygun olanıdır. CdTe gama spektroskopisinde durdurucu gücü sebebiyle oda sıcaklığında kullanılmaktadır. Bu dedektörler son yıllarda enerji rezülasyonundaki gelişme nedeniyle EDXRF metodu için tercih edilmeye başlamıştır. GaAs dedektörlerinin gelişiminde belirgin bir değişim 1973 yılından sonra olmamıştır.

EDXRF yönteminde en büyük gelişme lityum sürüklenmiş silikon dedektörlerin Si(Li) gelişmesiyle başlamıştır. EDXRF cihazları daha önceleri sınırlı rezülasyonu olan gaz ayrımlı veya sintilasyon sayaçlarından oluşuyordu. Bundan dolayı bu dedektörler yalnızca üst üste binmiş 2 veya 3 elementin karakteristik sinyallerini belirleyebiliyordu. Üst üste binmiş pikleri ayırmada katıhal dedektörlerinde daha az sorunla karşılaşılmasıdır.

Günümüzde EDXRF cihazlarını temel alan pek çok laboratuarlarda, katıhal dedektör olarak Si(Li) ya da HPGe dedektörleri kullanılmaktadır. EDXRF spektrometreleri, X-ışını tüpü veya radyoaktif kaynak, katıhal dedektörü ve destekleyici elektronik kısımdan oluşmaktadır. Bu kısımlar Şekil 2.8'de gösterilmiştir.



Şekil 2.8. EDXRF sisteminin bölümleri [42]

X-ışını kaynağından bir fotonun numuneye çarpmasıyla foton ya soğurulur ya da saçılmaya uğrar. Kaynaktan yayılan ışık numuneye çarptığında tüm enerjisini elektrona aktarır ve dışarı elektron yayar. Bu olaya fotoelektrik etki denir. Bu olayda X ışınının enerjisi elektronu sökebilecek seviyede ise elektron sökülür ve sökülün elektronların yerinde boşluklar oluşur. Böylece atom kararsız duruma geçer ve kararlı hale dönebilmesi için atomun dış kabuklarından iç kabuklarına elektron geçişi olur. Bu esnada kabuklar arasındaki bağlanma enerjisi farkı kadar enerjide karakteristik X-ışınları yayımlanır. Yayımlanan X-ışınlarının üretimine “X-ışını floresans” ya da XRF adı verilir. X-ışınları ile yapılan elemental analiz işlemlerinde genellikle K ve L kabukları dikkate alınır ve bu yöntem X-ışını floresans analiz yöntemi olarak isimlendirilir.

XRF alanındaki analiz çalışmalarında genel olarak dalga boyu büyük, girginlikleri az olan X-ışınları (yumuşak X-ışınları) kullanılır. Bunun sebebi kimyasal yapı analizlerinde yumuşak X-ışını piklerinin salınmış atomun etrafındaki kimyasal bağlanmayı doğrudan gösteren ince yapının görünümünü sağladıkları içindir. Bu durum piklerin pozisyonlarından kaynaklanan değişimlerin farklı kimyasal olaylarla ilişkilendirilmesine olanak sağlar [81-82].

2.5. EDXRF Tekniğinde Kullanılan Temel Parametre Tanımları

2.5.1. Tesir kesiti

Herhangi bir parçacığın başka bir parçacıkla etkileşime girme olasılığını ifade eden tesir kesiti, deneysel olarak ölçülebilir özelliği taşıdığı için nükleer süreçlerin titizlikle araştırılmasını sağlar. t kalınlığında A yüzey alanına sahip bir levhanın birim hacmindeki atom sayısı n ve atomik tesir kesiti σ ise, işlem gören madde alanı $A.n.t.\sigma$ olur. Maddede işlem gören yüzeyde $n.\sigma.t$ ifadesi etkin alan kesri (f) ile adlandırılır ve levhadan geçen ışın demetinin şiddetindeki değişimin oranını ifade eder. Gelen demetteki N parçacıktan N_s tanesi reaksiyona giriyorsa tesir kesiti ifadesi,

$$\sigma = \frac{N_s}{n \cdot N \cdot t} \quad (2.20)$$

eşitliği ile verilir [83].

2.5.2. K kabuğu x-ışını üretim tesir kesiti teorik ve deneysel hesabı

Bir atomun K tabakası soğurma kıyasına yakın ya da daha büyük enerjili fotonlarla uyarılması sonucu elementlerin K kabuğu fotoiyonizasyonu ile doldurulması durumunda yayımlanan karakteristik X-ışınlarının üretim tesir kesitleri şöyle hesaplanır:

$$\sigma_{K_{\alpha,\beta}} = \sigma_K^P(E) \omega_K F_{K_{\alpha,\beta}} \quad (2.21)$$

Burada $\sigma_K^P(E)$ bir elementin E uyarma enerjisindeki K kabuğu fotoiyonizasyon tesir kesiti [84], ω_K K kabuğu floresans verimi [85], $F_{K_{\alpha,\beta}}$ X-ışını grubunun kısmi emisyon hızı olup aşağıda gösterilmiştir.

$$F_{K_{\alpha}} = \left(1 + \frac{I_{K\beta}}{I_{K\alpha}} \right)^{-1} \quad (2.22)$$

$$F_{K\beta}=1-F_{K\alpha} \quad (2.23)$$

Burada $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ K_β ve K_α çizgilerinin K_β/K_α şiddet oranıdır. $F_{K\alpha}$ değerleri Broll'un makalesinden alınmıştır [86].

Tesir kesitinin deneysel hesabında ise, çalışılan elementlerin uyarılmasında kullanılan radyasyonun şiddeti, analiz için kullanılan numune miktarı, kullanılan deneysel sisteme ait geometrik faktör, uyarma sonucunda açığa çıkan X-ışınlarının madde içinden geçerken yeniden soğurulmasını tanımlayan soğurma düzeltmesi ve dedektör verimliliği önem arz etmektedir. Yapılan çalışmada deneysel K kabuğu X-ışını üretim tesir kesiti değerleri;

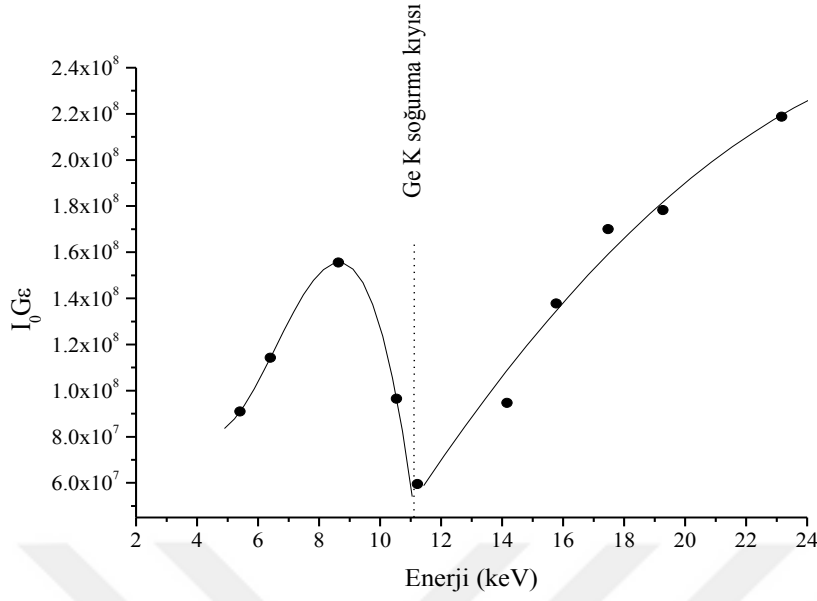
$$\sigma_{K_i} = \frac{N_{K_i}}{I_0 G \varepsilon_{K_i} \beta_{K_i} m} \quad (i=\alpha, \beta) \quad (2.24)$$

eşitliği [87] ile belirlenmiştir. Burada N_{K_i} numuneden yayımlanan karakteristik X-ışını şiddetini, I_0 numuneye uyarıcı kaynak tarafından birim zamanda gelen radyasyon şiddetini, G kaynak-numune-dedektör konumuna bağlı geometrik faktör, ε_{K_i} yayımlanan karakteristik X-ışını enerjisinde dedektörün çalışma verimini, β_{K_i} soğurma düzeltmesi faktörünü ve son olarak m numune içindeki analitin madde miktarıdır.

Dedektör verimi; deney geometrisi ve uyarıcı kaynak enerjisine bağlı olarak farklı değerler alacağından dolayı, deney için hesaplanması gereken bir unsurdur. Yapılan çalışma kapsamında, incelenen parametrelerin deneysel olarak belirlenebilmesi için öncelikle $I_0 G \varepsilon$ çarpanının belirlenmesi gerekmektedir. Tez kapsamında ^{241}Am halka kaynağı için Cr, Fe, Zn, As, Se, Sr, Zr, Mo, Cu ve Cd elementlerinin uyarılmasıyla yayımlanan karakteristik X-ışını enerjileri için $I_0 G \varepsilon$ çarpanı;

$$I_0 G \varepsilon = \frac{N_{K_i}}{\sigma_{K_i} \beta_{K_i} m} \quad (2.25)$$

İfadesiyle [87] belirlenmiş ve elde edilen değerlerin karakteristik X-ışını enerjilerine bağlı olarak değişim grafiği Şekil 2.9'daki gibi çizilmiştir.



Şekil 2.9. I_0Ge 'nin enerji ile değişim grafiği

Elde edilen grafiğin Ge soğurma kıyısına kadar olan enerji bölgeleri için deneysel olarak K X-ışını üretim tesir kesiti değerlerinin hesaplanmasında I_0Ge değeri için;

$$Y = A + B_1 \times X + B_2 \times X^2 + B_3 \times X^3 \quad (2.26)$$

eşitliği [87] kullanılmıştır. Ge elementinin soğurma kıyısından sonraki enerji bölgeleri için ise;

$$Y = A + B_1 \times X + B_2 \times X^2 \quad (2.27)$$

eşitliği [87] I_0Ge değerinin belirlenmesinde kullanılmıştır. K kabuğu X-ışını üretim tesir kesiti hesabında kullanılan β soğurma düzeltmesi faktörünün belirlenmesinde;

$$\beta_{(i)} = \frac{1 - \exp \left[- \left(\frac{(\mu/\rho)_{(\gamma)}}{\cos\theta_1} + \frac{(\mu/\rho)_{(i)}}{\cos\theta_2} \right) \rho D \right]}{\left(\frac{(\mu/\rho)_{(\gamma)}}{\cos\theta_1} + \frac{(\mu/\rho)_{(i)}}{\cos\theta_2} \right) \rho D} \quad i=K, L \quad (2.28)$$

eşitliği kullanılmıştır [87]. Radyoaktif bir kaynağın madde ile etkileşmesi sonucu yayımlanan X-ışınları numune içinden geçerken madde atomları tarafından yeniden soğurulmaktadır. Bu sebeple, radyoaktif kaynaktan yayımlanan X-ışınları miktarı soğurulan miktardan farklı olacaktır ve dedektörde ölçülen ve radyoaktif kaynaktan yayımlanan X-ışınlarının oranı soğurma düzeltmesi faktörü olarak tanımlanır. Eş. 2.28’de kaynaktan gelen radyasyon ve numuneden yayımlanan karakteristik X-ışınları için toplam kütle azaltma katsayıları sırasıyla $(\mu/\rho)(\gamma)$ ve $(\mu/\rho)(i)$ olarak gösterilmiştir [87]. Ayrıca θ_1 ve θ_2 sembolleri sırasıyla kaynaktan gelen γ ışını fotonları ve çalışılan numunelerden yayımlanan karakteristik X-ışını fotonlarının numunenin yüzey normali ile yaptıkları ortalama açılarıdır. Tez kapsamında yapılan çalışmada kullanılan deney geometrisine göre θ_1 geliş açıları 45° ve numuneden çıkan X-ışınlarının numune yüzeyi ile yaptığı açı 0° olarak ayarlanmış ve tüm 3d gurubu elementleri için bu değer sabit tutulmuştur.

2.5.3. K x-ışını şiddet oranı teorik ve deneysel hesabı

$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ şiddet oranı teorik ifadesi çalışmamızda K X-ışını tesir kesitlerinin oranı yardımıyla hesaplanmıştır. Bu da,

$$\frac{I_{K\beta}}{I_{K\alpha}} = \frac{\sigma_{K\beta}}{\sigma_{K\alpha}} \quad (2.29)$$

şeklinde ifade edilir. Bu eşitlikte, $\sigma_{K\alpha}$ ve $\sigma_{K\beta}$ üretim tesir kesitleri olup Eş. 2.24’den hesaplanmıştır. K X-ışını şiddet oranı değerlerinin deneysel hesabında aşağıda yazılan eşitlik kullanılmıştır.

$$\frac{I_{K\beta}}{I_{K\alpha}} = \frac{N_{K\beta}}{N_{K\alpha}} \cdot \frac{\varepsilon_{K\alpha}}{\varepsilon_{K\beta}} \cdot \frac{\beta_{K\alpha}}{\beta_{K\beta}} \quad (2.30)$$

Eşitlikte [70] yazılan $N_{K\alpha}$ ve $N_{K\beta}$ karakteristik K_α ve K_β X-ışınlarının dedektörde ölçülen şiddetleridir. Karakteristik K_α ve K_β X-ışını enerjilerinde dedektör verimi $\varepsilon_{K\alpha}$ ile $\varepsilon_{K\beta}$ sembolleri ile gösterilmiştir. Son olarak $\beta_{K\alpha}$ ve $\beta_{K\beta}$ sembolleri yayımlanan karakteristik X-ışınları için soğurma düzeltmesini temsil etmektedir [70].

2.5.4. K kabuğu floresans veriminin belirlenmesi

Her bir element atomunun K kabuğuna ait toplam iyonizasyon tesir kesiti $\sigma_K^P(E)$ ve floresans verim ω_K olmak üzere, karakteristik X-ışını tesir kesiti bu iki değerden çarpımından oluşmaktadır. Bu sebeple K kabuğuna ait floresans verim,

$$\omega_K = \frac{\sum \sigma_{K_i}}{\sigma_K^P(E)} \quad (2.31)$$

eşitliği ile verilir [88]. Burada $\sum \sigma_{K_i}$ elementin K kabuğuna ait toplam X-ışını tesir kesiti, $\sigma_K^P(E)$ ise bir elementin E uyarma enerjisindeki K kabuğu iyonizasyon tesir kesitidir [88].

2.5.5. K kabuğu ve L altkabuk seviye genişlikleri ile karakteristik K x-ışını çizgi ve KLL Auger genişliklerinin belirlenmesi

K kabuğu seviye genişlikleri ile $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$ çizgi genişlikleri yarı deneysel olarak aşağıda verilen eşitliklerle hesaplanmıştır.

$$\Gamma_K = \frac{\Gamma_K(R)}{\omega_K} \quad (2.32)$$

$$\Gamma_{K_{\alpha 1}} = \Gamma_{L_3} + \Gamma_K \quad (2.33)$$

$$\Gamma_{K_{\alpha 2}} = \Gamma_{L_2} + \Gamma_K \quad (2.34)$$

Bu eşitliklerde $\Gamma_K(R)$ ışımalı geçiş oranı olup Scofield'in tablo değerleri kullanılmıştır [89]. ω_K floresans verim olup hesaplamalarda deneysel değerler kullanılmıştır. $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$ çizgi genişlikleri için Γ_{L_2} ve Γ_{L_3} değerleri Krause ve Oliver'in çizelge değerlerinden alınmış ve yarı deneysel olarak hesaplanmıştır [90]. Ayrıca tez kapsamında çalışılan 3d gurubu elementleri için L altkabuk seviye genişlikleri;

$$\Gamma_{L_3} = \Gamma_{K_{\alpha 1}} - \Gamma_K \quad (2.35)$$

$$\Gamma_{L_2} = \Gamma_{K_{\alpha_2}} - \Gamma_K \quad (2.36)$$

$$\Gamma_{L_1} = \Gamma_{K_{\alpha_3}} - \Gamma_K \quad (2.37)$$

eşitlikleri kullanılarak hesaplanmıştır. L altkabuk seviye genişlikleri aynı zamanda Eş. 2.32'ye benzer bir eşitlik yardımıyla da hesaplanabilir fakat K_{α} karakteristik X-ışını çizgilerinin mevcut dedektör sisteminde ayrılması mümkün olmadığından, Eş. 2.35, 2.36 ve 2.37 L altkabuk seviye genişliklerinin hesaplanmasında kullanılmıştır. Bu üç eşitlikte bulunan Γ_K , K kabuğuna ait yarı deneysel değerleri temsil etmekte olup Eş. 2.32'den hesaplanmıştır. Ayrıca karakteristik K X-ışını çizgi genişlikleri $\Gamma_{K_{\alpha_1}}$, $\Gamma_{K_{\alpha_2}}$ ve $\Gamma_{K_{\alpha_3}}$ olarak gösterilmiş ve Perkins'in tablo değerleri kullanılmıştır [96].

Auger çizgi genişlikleri Γ_{KLL} ;

$$\Gamma_{KLL} = \Gamma_K + \Gamma_{L_k} + \Gamma_{L_l} \quad (2.38)$$

eşitliği ile belirlenmiştir. K kabuğu seviye genişlikleri Eş. 2.32'den yarı deneysel olarak tez kapsamında hesaplanmış olup Γ_{L_k} ve Γ_{L_l} alt kabuk seviye genişlikleri için Krause ve Oliver'in tablo değerleri kullanılmıştır [90].

2.6. Ultra-LEGe Yarıiletken Dedektörü ve Çalışma Prensibi

Germanyum dedektörler, intirinsik bölgesi (I), iyonize radyasyona özellikle X- ve γ -ışınlarına duyarlı olan bir p-i-n yapıya sahip yarı iletken diyotlardır. Ters besleme altında, bir elektrik alan intiristik bölge boyunca geçer. Fotonlar dedektörün intiristik hacmi içindeki materyalle etkileştiği zaman, yük taşıyıcıları (elektronlar ve deşikler) üretilir ve elektrik alan yardımı ile p ve n elektrotlarına süpürülür. Gelen foton tarafından dedektörde depolanan enerji ile orantılı olan bu yük, bir ön yükseltici tarafından bir voltaja dönüştürülür.

Germanyum oldukça düşük yasak bant aralığına sahip olduğu için, bu dedektörlere ait yük taşıyıcıların ısı üretimini kabul edilebilir bir seviyeye indirmek için (kaçak akımı engellemek için) soğutma işleminin uygulanması gerekmektedir. Aksi halde gürültü üreten kaçak akım,

dedektörün enerji rezolüsyonunu bozar. 77 °K sıcaklığına sahip olan sıvı azot, katı hal yarı iletken kristal dedektörlerini soğutmak için yaygın olarak kullanılan bir malzemedir. Dedektör bir LN2 duvarına yerleştirilen vakum çemberine bağlanır. Böylece duyarlı dedektör yüzeyi nemden ve diğer kirleticilerden korunur. Germanyum dedektörler kullanılımsalar bile sıvı azot sıcaklığında tutulmalıdır. Çünkü lityum yayılmış n+ kontak, oda sıcaklığında mükemmel bir istikrara sahip değildir [42]. Özellikle düşük enerji bölgesinde çalışmak için yapılan geleneksel Ge dedektörler, 3 keV'un altındaki enerjilerde verimden ve zayıf pik biçiminden muzdariptirler. Canberra, Ultra-LEGe dedektörü üreterek düşük enerji bölgesinde iyi çözünürlük, pik biçimi ve pik temel sayım oranı sağlayarak, yarı iletken dedektörler için ulaşılamaz olduğu düşünülen bir kaç yüz elektron volt aşağı Ge dedektörlerin performans aralığını genişletmiştir. Ultra-LEGe, büyük atom numarasından dolayı germanyum dedektörlere yüksek enerjili bölgede de iyi bir verim sağlar ve böylece geniş bir enerji aralığında ölçüm imkânı sağlar [42].

Enerji ölçümleri için kullanılan bir dedeksiyon sisteminin performansının kalitesi, tek enerjili parçacıklarlarla elde edilen puls-yükseklik dağılımının genişliği ile karakterize edilir. Her parçacık dedektörde tamamıyla aynı enerjide depolansa da puls-yükseklik dağılımları tek bir çizgi şeklinde değil belirli bir sonlu genişliğe sahip olacaktır. Puls yükseklik dağılımlarının sonlu bir genişliğe sahip olmasının başlıca sebepleri; dedektörde üretilen elektrondeşik çifti gibi yük taşıyıcıların sayısındaki istatistiksel dalgalanmalar, dedektör ve dedektör sisteminden kaynaklanan elektronik gürültü ve yük taşıyıcılarının eksik toplanması olarak sıralanmaktadır. Puls yükseklik dağılımında meydana gelen genişlik dedektörün enerji rezolüsyonunu etkilemektedir. Enerji rezolüsyonu üzerine istatistiksel dağılımın etkisini araştırmak için bir Ge dedektör tarafından dedekte edilen yüklü parçacıkların tek enerjili bir kaynağını düşünelim. Pik genişliğine istatistiksel dağılımın etkisi, üretilen yük taşıyıcıları farklı bağlanma enerjilerine sahip olduğundan dolayı her bir dedektör materyaline özgüdür. Tek kristal germanyumda yasak bant genişliği E_g , 77 K'de 0,67 eV'dur. Ge kristalinde serbest elektrondeşik çifti oluşturmak için gerekli olan ortalama enerji ise $\epsilon=2,96$ eV'tur. E_g ve ϵ arasındaki bu fark gösterir ki gelen parçacıkların enerjisinin bir kısmı yük taşıyıcı üretmeyen süreçlerde harcanır. Elektrondeşik çifti üretmeksizin enerji tüketen herhangi bir süreç, dedektör sinyalinin üretimine katkıda bulunmaz. Dedektörde depo edilen enerji E ise, yük taşıyıcıların ortalama sayısı E/ϵ 'dir. Elektrondeşik çifti üretimi tamamen istatistiksel ise, Poission istatistiği uygulanır ve çift sayılarının ortalama sayısı

$$\sigma = \sqrt{\frac{FE}{\varepsilon}} \quad (2.39)$$

şeklinde ifade edilir [91]. Eşitlikte yer alan F, istatistiksel dalgalanmaları temsil etmektedir ve Fano faktörü olarak tanımlanır. Fano faktörü 0 ile 1 arasında değerler almaktadır. F=0 ise üretilen çiftlerin sayısında hiçbir istatistiksel dalgalanma yoktur ve bu tür durumlarda tüm enerji yük çiftlerinin üretimi için kullanılmaktadır. F=1 ise üretilen elektron-deşik çiftlerin sayısı Poission istatistiği ile uyuşmaktadır fakat F<1 ise elektron-deşik çiftinin üretimi Poission istatistiğine uymamaktadır. Yarıiletken kristal dedektörler için F yaklaşık olarak 0,06'dır ve böylece istatistiksel dalgalanmadan dolayı pik genişliğine katkı;

$$W_f = 2\sqrt{2(\ln 2)\varepsilon FE} \quad (2.40)$$

eşitliği ile elde edilir [91]. Dedektörü takip eden tüm elektronik bileşenlerin sebep olduğu elektronik gürültü pik genişlemesine sebep olur. Enerji rezolüsyonu üzerine gürültü etkisini görmek için sabit V yükseklikli pulsları düşünelim. Gürültünün yokluğunda bu pulsların dağılımının FWHM'si sıfırdır. Eğer gürültü var ise, pulslar gürültünün üzerine eklenecektir ve;

$$W_n = 2\sqrt{2(\ln 2)\sigma_n} \quad (2.41)$$

genişlikli bir Gaussian dağılımına sahip olacaktır. Gürültüden kaynaklanan temel X-ışını pikindeki genişleme, istatistiksel etkiden dolayı kaynaklanan genişlemenin yanında çok küçüktür. Yarı iletken dedektörlerde üretilen elektron-deşik çiftlerinin eksik toplanması, yük taşıyıcıların tuzaklanmasından kaynaklanmaktadır. Tuzaklanan yük miktarı dedektörde depolanan enerji ile dolayısı ile gelen parçacığın enerjisi ile orantılıdır. Bu sebeple yüksek enerjilerde yük tuzaklanma etkileri düşük enerjilerdekine nazaran daha etkindir. Ayrıca tuzaklanma etkileri dedektörün yapıldığı materyale bağlı olarak değişim göstermektedir [91].Yarı iletken dedektörlerde gözlenen toplam pik genişliğinin karesi

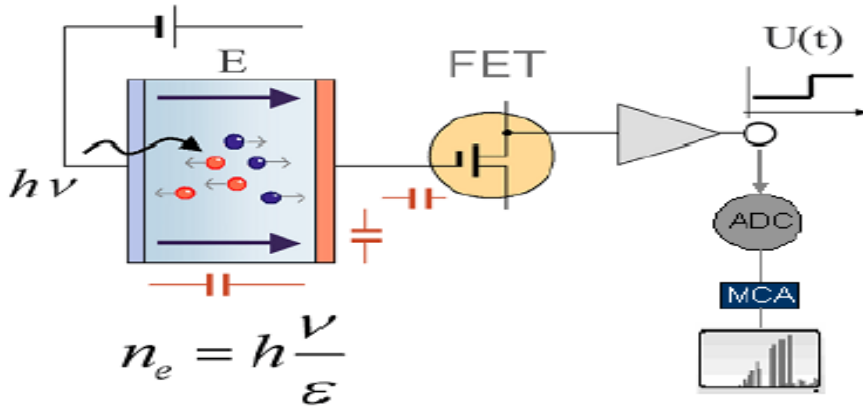
$$W^2 = W_f^2 + W_n^2 + W_x^2 \quad (2.42)$$

[42] eşitliği ile verilir ve denklemde W_x , eksik yük toplanmasından dolayı kaynaklanan pik genişlemesidir.

Bir X-ışını fotonu intiristik bölgeye (yük taşıyıcılarından arınmış bölge) girdiği zaman bu bölgedeki Germanyum atomlarını iyonlaştırır (Şekil 2.10). İntirinsik bölgeye gelen X-ışını fotonları enerjisinin tamamını fotoelektronların üretiminde harcar. Üretilen fotoelektronlar, enerjisi bitinceye kadar dedektör malzemesi içinde ilerlediği yol boyunca elektron-boşluk çifti meydana getirerek sayaç içinde hareket eder. Ultra-LEGe dedektöründe her bir iyon çiftini oluşturmak için fotoelektrondan yaklaşık 2,96 eV harcanır. X-ışını tespiti için, gelen bir X-ışını fotonu ile ilişkili her bir akım pulsu bir bir ölçülmektedir. Tek bir pulsun ani akım değeri, gelen X-ışınının enerjisi ile ilgilidir ve bu enerji değeri kullanılarak akım pulsunun dalga boyu ölçülebilir. Germanyumun karakteristik X-ışını enerjilerinin dedektör içerisinde fotoelektrik etki yolu ile harcandığı düşünülürse, uygulanan ters gerilim vasıtasıyla elektrik alanı tarafından toplanan Q yükünün dedektöre giren karakteristik X-ışınının E_x enerjisi ile orantılı olduğu anlaşılır ve toplanan Q yükü;

$$Q = \left(\frac{E_x}{2,96} \right) 1,6 \times 10^{-19} \text{ Coulomb} \quad (2.43)$$

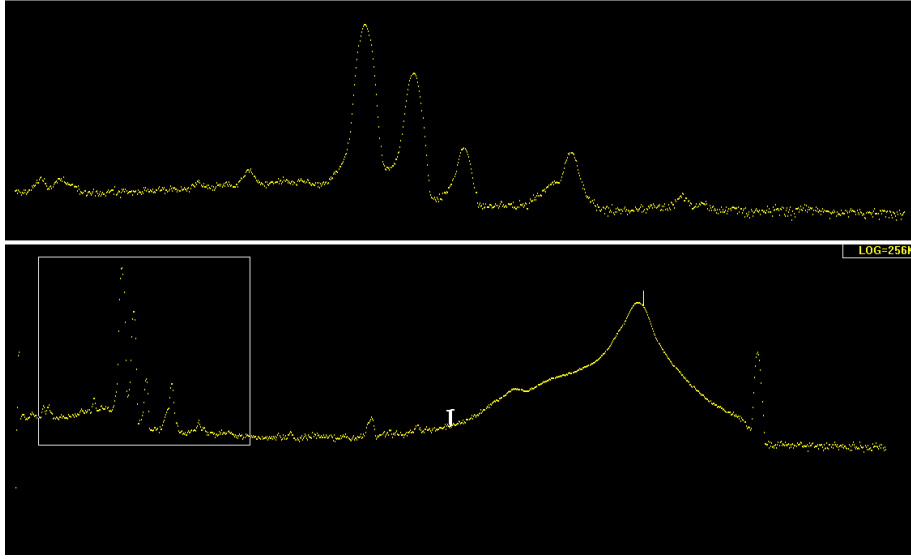
şeklinde [42] ifade edilir. Katıhal dedektörlerinde, üretilen pulslar milivolt mertebesinde olduğundan ve dedektör içi bir yükseltme olmadığından alçak gürültülü ve yüksek kazançlı ön yükselticilere ihtiyaç vardır. Gürültü seviyesinin azaltılmasında sıvı azot kullanımı Ge dedektörlerinde etkili bir yöntemdir ve dedektörün yüksek kazançlı olması için Field-Effect-Transistor olarak bilinen FET'ler yani alan etkili tranzistörler kullanılmaktadır. Alan etkili tranzistörler akım pulsunu büyütürken potansiyel pulsuna dönüştürmektedir. Ön yükselticiden gelen potansiyel pulsları lineer yükselticide lineer olarak büyütüldükten sonra ADC (Analog Digital Converter) olarak tanımlanan analog dijital dönüştürücüye gönderilir. Analog dijital dönüştürücü sisteminde analog işlemleri yapılan bu pulslar çok kanallı analizöre (Multi Channel Analyzer) gönderilir ve orada enerjilerine karşılık gelen kanallarda sayılırlar. Bu sayımlar sonucu, dedektörün ayırma gücüyle alakalı olarak aynı enerjili karakteristik X-ışını fotonları bir pik oluşturur. Bu tür pikler bir araya geldiğinde, enerjiye karşı şiddet dağılımlarının çizildiği spektrumlar oluşur.



Şekil 2.10. Ge yarı iletken diyotunun basit görünümü ve diğer kısımlar [42]

2.7. Sayma Sistemi

Radyoaktif bir kaynak kullanılarak uyarılan numunelerden yayımlanan X-ışını fotonların sayılmasında, dedektörlerin tek başına kullanımı yeterli değildir ve bu nedenle bir sayma sistemine ihtiyaç duyulur. Bir dedektör, ön yükseltici, yükseltici, analog dijital dönüştürücü (ADC), yüksek voltaj kaynağı, çok kanallı analizör ve bilgisayar sayma sistemini oluşturmaktadır. Dedektörden alınıp sayma sistemi vasıtasıyla bilgisayara ulaşan veriler “Genie 2000” programı yardımıyla görünür ve değerlendirilebilir hale getirilir. Programın kurulu olduğu bilgisayar ve sistemin diğer kısımları arasında interface görevi yapan bir aparattan oluşmaktadır. Bilgisayarda piklerin görünümü için kullanılan Genie 2000 programı, aynı zamanda yüksek voltaj, ADC, yükseltici gibi sistemleri de kontrol edebilmektedir. Şekil 2.11, Genie 2000 programı yardımıyla değerlendirilebilir duruma getirilen Zn elementine ait ham pikleri göstermektedir.



Şekil 2.11. Zn elementine ait Genie 2000 programı ile elde edilen ham pikler

2.7.1. Yüksek voltaj kaynağı

Dedektör malzemesine gelen X-ışını fotonlarının etkisiyle oluşan elektron-deşik çiftlerini toplamak için yüksek voltaj kaynağı kullanılır ve dedektör üzerine uygulanır. Fotonları dedekte etmekte kullanılan bir dedektör için uygun çalışma voltajı üretici firma tarafından belirlenir. Ayrıca dedektöre uygulanan gerilim değeri tespit edilecek ışınların enerjisine göre değişim göstermektedir. Bu değer X-ışını dedektörleri için birkaç yüz volt değerinde iken γ -ışınları dedektörleri için 3000 V'un üzerine çıkabilir [72].

2.7.2. Ön yükseltici

Ön yükselticinin temel amacı, dedektör tarafından üretilen pulslar ile sayma sisteminin geri kalan kısmı arasında iyi bir bağlantı sağlamaktır. Ayrıca ön yükseltici, sinyali değiştirebilen elektronik gürültüyü en aza indirmek içinde gereklidir. Dedektörden çıkan sinyal zayıftır ve bu sinyal kaydedilmeden önce yükseltmek zorundadır. Dedektörde üretilen milivoltlar mertebesindeki zayıf sinyalin, yükselticiye gelmeden önce kablo içinden geçerken kaybolmaması için ön yükseltici mümkün olduğunca dedektör yakınlıklarına yerleştirilmelidir. Çünkü kablo boyunca herhangi bir sinyalin taşınması, onu belirli bir miktar zayıflatır. Ön yükseltici, sinyali biçimlendirir ve yükselticinin öz direnci ile dedektörün öz direncini eşitleyerek sinyalin zayıflatılmasını azaltmada etkindir [91].

2.7.3. Yükseltici

Yükseltici bir sayma sisteminde sinyal yükseltme birimi olarak görev yapar. Ayrıca sinyal yükseltmenin yanında, ön yükseltici çıkışındaki sinyali gerekli ölçümler için uygun bir forma dönüştürür. Pek çok yükseltici unipolar ve bipolar olarak isimlendirilen iki çıkış türüne sahiptir [91]. Unipolar iyi bir sinyal-gürültü yüzdesi elde etmek için kullanılır. Ayrıca puls genişliğini veren "shaping time" sabiti seçilmelidir. Spektrumdaki piklerin en iyi çözünürlüğü uzun zaman sabiti ile tespit edilebilir bununla birlikte uzun zaman sabitleri daha gelişigüzel toplamaya sebep olur. Bu yüzden sistem $2,000 \text{ s}^{-1}$ 'lik frekans hızlarında çalıştırılacaksa kısa zaman sabitleri de tercih edilebilir.

2.7.4. Analog dijital dönüştürücü

Analog sayısal dönüştürücü (ADC), yükselticiden gelen bir sinyali bilgisayar ya da mantık sistemlerinin kullanabilmesi için ona eşdeğer bir dijital sinyale çeviren devrelerdir. Sayılmış olan her bir sinyalin frekansı kadar sayı analizör hafızasında depolanır. Böylece bir enerji spektrumu olarak monitöre aktarılır.

2.7.5. Çok kanallı analizör (MCA)

X-ışını spektrum analizinin kolay bir şekilde yapılmasına olanak sağlayan bir sistemdir. MCA'da sinyaller kanal adı verilen hafıza bölümlerinde saklanır ve hafızada saklanan spektrum ekranda gözlenir, analiz yapılır ve bilgisayara aktarılır.

2.8. Dedektör Verimi

X-ışını floresans sistemi ile yapılan çalışmalarda dedektör veriminin bilinmesi gerekir ve verim dedektörde puls üretebilen fotonların yüzde oranı olarak ifade edilir. Ayrıca dedektör verimi, dedektörde sayılabilir nicelikte puls üreten foton sayısının dedektöre gelen tüm fotonların sayısına oranı olarak da tanımlanır. Kalibre edilmiş kaynaklar dedektör verimliliğinin belirlenmesinde en önemli faktörlerden biridir. Bu tür kaynakların bozunmalarında foton yayımlama ihtimali değerleri bilinmelidir. Kolimatör faktörü, dedektörün yapıldığı malzeme, dedektörün hassasiyeti, imalat durumu gibi faktörler dedektör verimliliğini etkilemektedir.

2.8.1. Dedektör verimliliğinin ölçülmesi

Dedektör verimliliğinin belirlenmesinde nokta kaynaklar kullanılmaktadır. Kullanılan radyoaktif kaynak farklı şekle sahip olduğunda, homojen olarak foton yayımlayamayacağı için bu durum dedektör verimini olumsuz etkileyecektir. Dedektör verimliliği için diğer önemli bir nokta ise dedektöre gelen ve dedektörde sayılan foton adedidir. Elde edilen verim tüm geometri ve soğurma faktörlerini içinde barındırır. Kullanılan kaynağın verim şiddeti (I);

$$I = I_0 \exp(-\lambda t) \quad (2.44)$$

eşitliği ile hesaplanır [78]. Burada kaynağın ilk şiddeti I_0 , bozunma katsayısı λ , t ise kaynağın üretiminden ölçümüne kadar geçen süredir. Fotonların enerjileri farklı değerlerde ise yayımlanan fotonların her enerjideki yayımlanma oranı belirlenmelidir. Yayımlanan foton sayısı belirlenen enerjide (I_{E_x});

$$I_{E_x} = [I_0 \exp(-\lambda t)] \cdot W_{E_x} \quad (2.45)$$

eşitliği ile verilmektedir [78]. Burada W_{E_x} , E_x enerjisinde yayımlanan fotonların kesridir. (2.45) eşitliğinden bulunan şiddet, 360° lik geometrik sayımda olduğundan dolayı dedektörün bu enerjideki verimi,

$$E_{fEx} = \frac{I_d}{I_{E_x}} \quad (2.46)$$

eşitliği ile verilir [78]. Bu eşitlikte dedektörün ilgili enerjide saydığı foton sayısı I_d , dir. Deneysel biçimde E enerji değerinde fotopik verimliliği,

$$\varepsilon(E) = \frac{4\pi N_E}{\Omega_0 TRP_E} \quad (2.47)$$

eşitliği ile verilmektedir [78]. Bu eşitlikte T süresinde dedektörde sayılan foton sayısı N_E , Kaynağın bozunma hızı sırasıyla R, P_E ve E enerji değerine sahip fotonun kaynaktan yayımlanma olasılığıdır. Sayma işlemi için etkin olan katı açı Ω_0 ise;

$$\Omega_0 = \frac{\pi r^2}{(d + Z)^2} \quad (2.48)$$

eşitliği ile verilir [78]. Mutlak verimliliğin belirlenmesinde katı açılı düzeltmesi olmaz. Bundan dolayı mutlak verimlilik,

$$\varepsilon(E) = \frac{N_E}{TRP_E} \quad (2.49)$$

şeklinde ifade edilebilir [78]. Kaynaktan gelebilecek hataları ortadan kaldırmak için, bağıl verimlilik tayininin yapılması daha uygundur. Dedektör yapısının bozulmasından dolayı verimliliğin zamanla değişeceği de önemsenmelidir. Ultra-LEGe dedektörü için verimlilik eğrisi belirlenirken farklı yöntemler kullanılabilir [78]. Mutlak verimlilik, intrinsik verimlilik, bağıl verimlilik, fotopik ve radyal verimlilik, dedektör veriminin hesabında kullanılan farklı yöntemlerdir. Mutlak verimlilik kaynak sayaç uzaklığına bağlı olarak değişir ve sayaçta sayılan fotonların, kullanılan radyoaktif kaynağın tüm doğrultuda yayımladığı fotonlara oranı mutlak verimliliği belirlemektedir.

İntrinsik verimlilik ise dedektörün intrinsik bölgesinde sayılan fotonların, bu bölgeye gelen fotonlara oranı ile belirlenir. Belirli bir enerjideki sayaç verimliliğinin diğer enerjilerdeki sayaç verimliliğine oranı bağıl verimlilik olarak tanımlanırken, çalışılan enerjide sayaçta sayılabilir büyüklükte puls meydana gelme ihtimaliyeti fotopik verimlilik olarak ifade edilmektedir. Herhangi bir enerjide dedektör verimliliğinin dedektör yarıçapına bağlı olarak değişimi ise Radyal verimlilik ile açıklanır.

2.9. Geçiş Elementlerinin Genel Özellikleri

Periyodik çizelgede IIA grubu ile IIIA grubu arasında kalan, on altı grup oluşturan elementlere geçiş elementleri denir. Bu elementler kısmen dolu d yörüngelerine sahiptir. Birinci sıra geçiş elementleri $[Ar]3d^n4s^2$ şeklinde elektron dizilimine ve ağır geçiş elementleri olarak adlandırılan ikinci ve üçüncü sıra geçiş elementleri de, $[Kr]4d^n5s^2$ ve $[Xe]4f^{14}5d^n6s^2$ şeklinde elektron dizilişine sahiptir. Metallerde atomlar arası etkileşimin daha kuvvetli olmasının gerekliliği ikinci ve üçüncü sıra geçiş metallerinin atomlaşma

enerjilerinin birinci sıra elementlere göre daha yüksek enerji değerine sahip olmalarına bağlanır. Ayrıca ikinci ve üçüncü sıra metallerinin bileşiklerinde metalik bağlara, birinci sıra geçiş metallerine göre daha çok rastlanır.

Geçiş metallerinin çoğu iyi elektriksel iletkenliğe sahiptir, dövülebilir, çekilebilir, parlaktır ve gümüş beyazı renktedir, ana grup elementlerine göre genel olarak daha yüksek erime ve kaynama noktasına sahiptir. Birkaç istisna, oda sıcaklığında sıvı olacak kadar düşük erime noktalı civa, kırmızı-kahverengi bakır ve sarı renkli altındır [92]. Birden fazla değerlikte bulunabilen geçiş metallerinin bileşikleri genellikle renklidir. Bu tür elementlerin oluşturduğu bileşikler paramanyetik özelliğe sahiptir. Geçiş metal iyonları kompleks bileşik veya iyon oluşturabilirler ve bu bileşikler katalitik etki gösterirler.

d orbitallerinde bulunan elektronları verebilmeleri, geçiş metallerinin sahip oldukları değerliklerinin çeşitli olmasına dayanır. Periyodik cetvelin orta sırasında bulunan geçiş metallerinin daha fazla sayıda farklı değerlere sahip olabildiği görülmektedir. Ayrıca ikinci ve üçüncü sıra geçiş metallerinde yüksek değerlikler daha kararlı yapıdadır. Düşük değerliklerinde ise metal-metal bağları vardır.

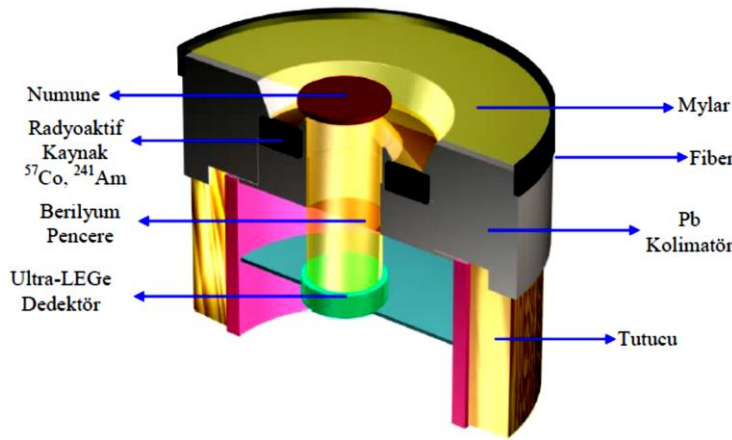
Geçiş metallerinin d^0 ve d^{10} dışındaki iyonları genellikle renklidir. Renkli olmalarının nedeni d orbitallerindeki elektron geçişlerine bağlanır. Bu geçişler iki çeşittir: Bunlardan birincisinde atomdan atoma elektron geçişi olmaz. d-d geçişleri bu geçişlerin birincisidir. İkinci tür geçişler yük transfer geçişleri olarak adlandırılır. Yük transfer geçişlerinde atomların ilk ve son hallerindeki yüklerinde büyük oranda değişiklik olur.

Işık soğurulması çok şiddetli olan yük transfer geçişleri izinli geçişler olduğu için ihtimali fazladır. Buna karşın d-d geçişleri yasaklı geçişlerdir ve ışık soğurması bu yüzden zayıftır. d-d geçişleri soluk renklere, yük transferi geçişleri ise belirgin renklere neden olur.

Elektronun spininden kaynaklanan manyetik moment dış manyetik alandan etkilenir ve geçiş metallerinin kısmen dolu d orbitallerindeki elektronlar paramanyetik, diyamanyetik, ferromanyetik yada antiferromanyetik özelliklere sahip maddelerin oluşmasına neden olur. Bu nedenle elektronların orbitallere dağılımı maddenin manyetik özelliğini belirler. Geçiş elementlerinden oluşan bileşiklerin manyetik özelliklerinin bilinmesi, bize maddenin yapısı hakkında detaylı bilgi verir [93].

2.10. Deneysel Geometri

Deneysel geometri, sayma ve uyarma bakımından karakteristik X-ışınlarının şiddet oranını etkileyen unsurlardan biridir. Karakteristik X-ışınlarının elde edilmesi için atomların uyarılması gerekmektedir. Bu çalışmada dedektör, radyoaktif kaynak ve numune arasındaki ölçüm geometrisi Şekil 2.12’de gösterildiği gibidir. Bu geometri, uyarıcı radyasyonun numune yüzeyi ile yaptığı açı 45° ve numuneden yayımlanan X-ışını floresans radyasyonunun da numune yüzeyi ile yaptığı açı 90° olacak biçimde hazırlanmıştır.



Şekil 2.12. X-ışınları floresans (EDXRF) ölçümleri için deneysel geometri [42]

2.11. Numunelerin Hazırlanması

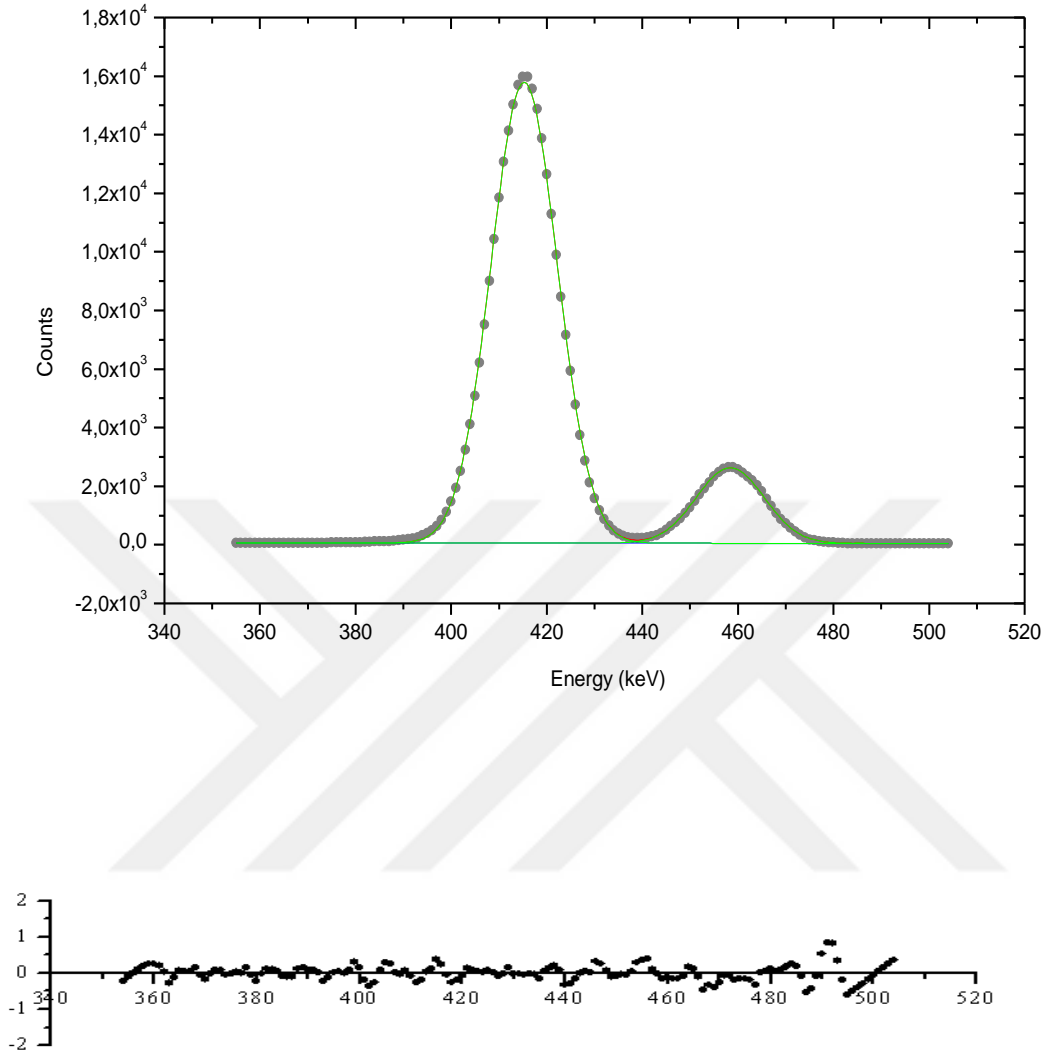
İncelenmek istenilen numuneler toz olarak temin edilmiş ve mylar film üzerine $1,44 \text{ cm}^2$ 'lik bir alana olabildiğince homojen olarak dağıtılarak radyoaktif kaynaklarla uyarılmak ve meydana gelen karakteristik X-ışınlarının sayılması için deneysel geometrisine yerleştirilmişlerdir. Ayrıca numunelerin kütlelerinin tartılması için 10^{-4} duyarlılığa sahip Sartorius Bp 110 s terazisi kullanılmıştır [94].

2.12. Numunelerin Uyarılması ve Sayılması

Yapılan çalışmada hazırlanan saf elementler filtre edilmiş 50 mCi 'lik bir ^{241}Am radyoaktif kaynaktan yayımlanan $59,5 \text{ keV}$ enerjiye sahip olan γ -ışınları ile uyarılmıştır. Böylece elementlerin K tabakası soğurma kıyısından büyük bir enerjiyle uyarılması sağlanmıştır. Bununla birlikte numuneden yayımlanan karakteristik K X-ışınlarının, spektrumdaki temiz bölgelere düşmesine dikkat edilmiştir. Uyarma sonucunda numunelerden yayımlanan

karakteristik X-ışınları, yarı maksimumdaki tam genişliği (FWHM) 5,9 keV'de 150 eV olan Canberra marka bir Ultra-LEGe dedektörle sayılmıştır.

Karakteristik X-ışınları ölçümü çalışmalarında numunelerin uyarılması ile elde edilen karakteristik spektrumların, dolayısıyla da spektrumu oluşturan pik şiddetlerinin doğru olarak ölçülmesi çok önemlidir. İncelenen elementlerin karakteristik piklerinin dışında, satallite pikleri, kaçak pikler, üst üste binme pikleri, çoklu saçılmalardan kaynaklanan kuyruklanmalar, sayaç atomlarının karakteristik X-ışını gibi pikler de incelenmeli ve bu piklerin analizi yapılarak numuneye ait olan gerçek karakteristik X-ışını piklerinin elde edilmesi gerekmektedir. Yapılan çalışmada bu tip piklerin ayırımını yapabilmek için Origin Pro 7.5 SRO (Demo Version) programı ve bu program içerisinde yer alan, PFM (Peak Fitting Module) modülü yardımıyla K X-ışını pikleri analiz edilmiştir. Bu programın tercih edilmesinin amacı Genie 2000 programının pikleri tam olarak ayırmamasıdır. Şekil 2.13 tez kapsamında kullanılan program yardımıyla Fe elementine ait karakteristik K X-ışını pikleri rezidü spektrumu ile birlikte verilmiştir.



Şekil 2.13. Fe elementinin K x-ışını pikleri ve rezidü spektrumu

3. ARAŞTIRMA BULGULARI

Yapılan çalışmada 3d gurubu geçiş elementleri için KLX/KLL ve KXY/KLL olarak ifade edilen Auger elektronu yayma olasılığı oranları, K_{α} X-ışını ve KLL Auger genişlikleri ile L alt kabuk seviye genişlikleri enerji ayrımlı X-ışını floresans yöntemi ile 59,5 keV enerjide deneysel ve yarı deneysel olarak hesaplanmıştır. Bilinmektedir ki 3d gurubu geçiş elementlerine ait valans bandı elektronik yapısı $3d^n4s^m$ olarak ifade edilir ve bu enerji seviyesindeki elektronlar metalik yapı boyunca kolaylıkla hareket edebilir. Bu nedenle 3d gurubu geçiş elementleri farklı değerlikler alabilmektedir. Auger oranları ve Auger genişlikleri 3d gurubu geçiş elementlerinin valans elektronik yapısının incelenmesi ve yorumlanmasında önemli parametreler arasında yer almaktadır.

Tez kapsamında yapılan çalışmada elementlerin KLX/KLL ve KXY/KLL Auger elektronlarının yayılma olasılıklarının oranı deneysel olarak ölçülen ve deneysel, yarı deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranı değerlerinden elde edilmiştir. Çizelge 3.1 enerji ayrımlı X-ışını floresans spektroskopisi yöntemi kullanılarak ölçülen şiddet oranı değerlerinden elde edilen Auger elektronlarının yayılma olasılık değerlerini göstermektedir.

Çizelge 3.1. 3d gurubu elementleri için Auger elektronları yayılma ihtimaliyetlerinin oranı

Z	Element	$K\beta/K\alpha$ (deneysel) [95]	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$ [39]	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$ [39]
21	Sc	0,1215±0,0062	0,243±0,012	0,264	0,0148±0,0007	0,0174
22	Ti	0,1233±0,0063	0,247±0,012	0,265	0,0152±0,0007	0,0176
23	V	0,1232±0,0063	0,246±0,012	0,267	0,0151±0,0007	0,0178
24	Cr	0,1222±0,0062	0,244±0,012	0,269	0,0149±0,0007	0,0181
25	Mn	0,1262±0,0064	0,252±0,013	0,272	0,0159±0,0008	0,0185
26	Fe	0,1267±0,0065	0,253±0,013	0,274	0,0161±0,0008	0,0187
27	Co	0,1273±0,0065	0,255±0,013	0,274	0,0162±0,0008	0,0188
28	Ni	0,1283±0,0065	0,257±0,013	0,276	0,0165±0,0008	0,0190
29	Cu	0,1258±0,0064	0,252±0,013	0,278	0,0158±0,0008	0,0193
30	Zn	0,1278±0,0065	0,256±0,013	0,283	0,0163±0,0008	0,0201

Auger elektronları yayımlanma ihtimaliyetleri oranı olarak tanımlanan $p(KLX)/p(KLL)$ ve $p(KXY)/p(KLL)$ oranları literatürde yer alan Schönfeld ve Janssen'in fit edilmiş değerleri [39] ile kıyaslanmıştır. Yapılan kıyaslamalar sonucunda KLX/KLL oranlarının %7-%10 ve KXY/KLL oranlarının ise %13-%19 değerleri arasında uyumlu olduğu tespit edilmiştir.

Enerji ayrımlı X-ışını floresans spektroskopisi ile ölçüm yönteminden başka K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranları, oluşturulan fit denklemlerinden yola çıkarak ağırlıklı ve ağırlıksız olarak deneysel ve yarı deneysel hesaplamalar yapılarak elde edilmiştir. Elde edilen toplam dört şiddet oranı değerlerinden yola çıkarak hesaplanan KLX/KLL ve KXY/KLL Auger elektronları oranı Çizelge 3.2, 3.3, 3.4 ve 3.5'de gösterilmiştir.

Çizelge 3.2. 3d geçiş elementleri için deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayımlanma ihtimaliyetlerinin oranları

Z	Element	K_{β}/K_{α} (Ağırlıklı) [95]	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$ [39]	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$ [39]
21	Sc	0,1287	0,257	0,264	0,0166	0,0174
22	Ti	0,1288	0,258	0,265	0,0166	0,0176
23	V	0,1297	0,259	0,267	0,0168	0,0178
24	Cr	0,1311	0,262	0,269	0,0172	0,0181
25	Mn	0,1327	0,265	0,272	0,0176	0,0185
26	Fe	0,1341	0,268	0,274	0,0180	0,0187
27	Co	0,1350	0,270	0,274	0,0182	0,0188
28	Ni	0,1351	0,270	0,276	0,0183	0,0190
29	Cu	0,1341	0,268	0,278	0,0180	0,0193
30	Zn	0,1316	0,263	0,283	0,0173	0,0201

Çizelge 3.2'de, deneysel olarak hesaplanan ağırlıklı K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronları yayımlanma oranları olan, u ve v değerlerinin sırasıyla, %1-%7 ve %3-%14 değerleri arasında uyumlu olduğu görülmektedir.

Çizelge 3.3. 3d geçiş elementleri için deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları

Z	Element	K_{β}/K_{α} (Ağırlıksız) [95]	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$ [39]	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$ [39]
21	Sc	0,1276	0,255	0,264	0,0162	0,0174
22	Ti	0,1270	0,254	0,265	0,0161	0,0176
23	V	0,1277	0,255	0,267	0,0163	0,0178
24	Cr	0,1292	0,258	0,269	0,0166	0,0181
25	Mn	0,1312	0,262	0,272	0,0172	0,0185
26	Fe	0,1332	0,266	0,274	0,0177	0,0187
27	Co	0,1349	0,270	0,274	0,0182	0,0188
28	Ni	0,1358	0,272	0,276	0,0184	0,0190
29	Cu	0,1356	0,271	0,278	0,0183	0,0193
30	Zn	0,1339	0,268	0,283	0,0179	0,0201

Ağırlıklı olmayan K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranlarından elde edilen u ve v değerleri Çizelge 3.3'te gösterilmiştir. Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları u değerleri için %2-%5 ve v değerleri için %3-%11 arasında çizelgede gösterilen literatürdeki değerlerle uyumlu olduğu gözlenmiştir.

Çizelge 3.4 ve 3.5'da ise yarı deneysel olarak hesaplanan ağırlıklı ve ağırlıklı olmayan K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranlarından elde edilen, $p(KLX)/p(KLL)$ ve $p(KXY)/p(KLL)$ değerleri gösterilmiştir. Ağırlıklı K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranlarından elde edilen u ve v değerlerinin literatürde var olan değerlere nazaran sırasıyla %2-%10 ve %5-%19 değerleri aralığında uyumlu olduğu bulunmuştur. Aynı parametreler (u ve v) yine yarı deneysel olarak hesaplanan ağırlıklı olmayan K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranları değerlerinden elde edildiğinde, literatüre göre hesaplanan uyumluluk yüzdelerinin u için %2-%6 ve v için %5-%13 değerleri içinde olduğu Çizelge 3.5'den görülebilir.

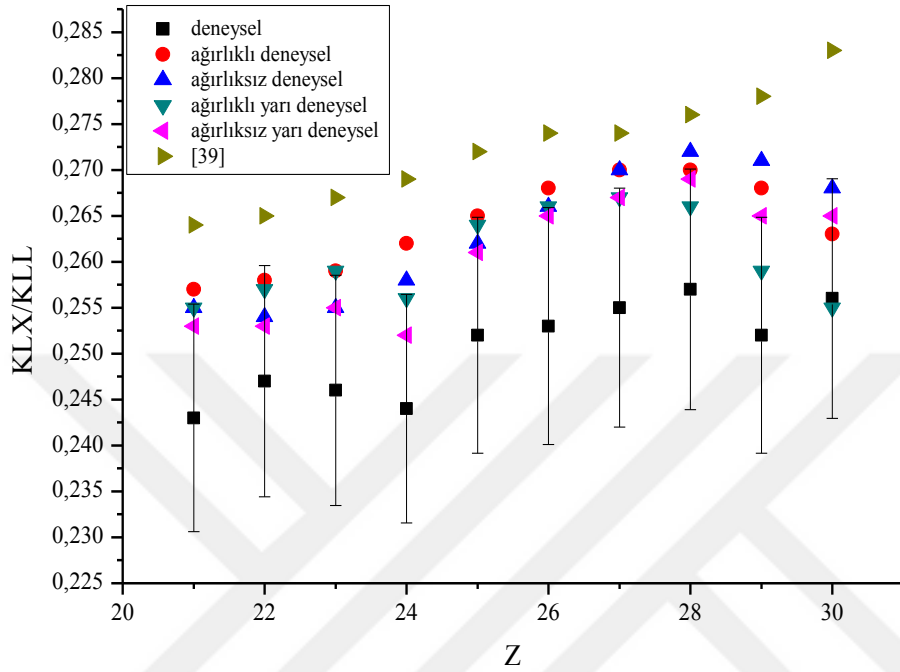
Çizelge 3.4. 3d geçiş elementleri için yarı-deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları

Z	Element	K_{β}/K_{α} (Ağırlıklı) [95]	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$ [39]	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$ [39]
21	Sc	0,1274	0,255	0,264	0,0162	0,0174
22	Ti	0,1283	0,257	0,265	0,0165	0,0176
23	V	0,1294	0,259	0,267	0,0167	0,0178
24	Cr	0,1278	0,256	0,269	0,0163	0,0181
25	Mn	0,1321	0,264	0,272	0,0175	0,0185
26	Fe	0,1332	0,266	0,274	0,0177	0,0187
27	Co	0,1336	0,267	0,274	0,0178	0,0188
28	Ni	0,1331	0,266	0,276	0,0177	0,0190
29	Cu	0,1293	0,259	0,278	0,0167	0,0193
30	Zn	0,1276	0,255	0,283	0,0163	0,0201

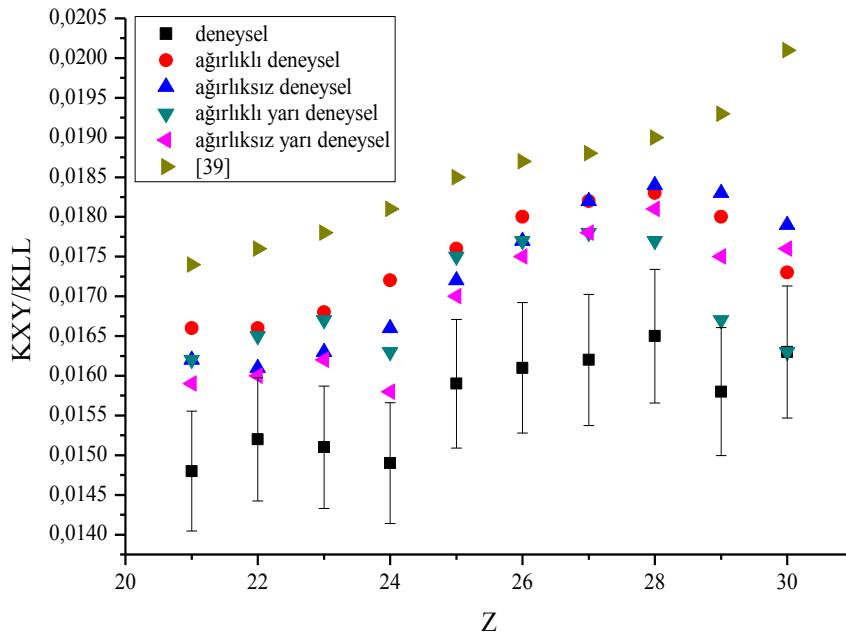
Çizelge 3.5. 3d geçiş elementleri için yarı-deneysel olarak hesaplanan K X-ışını şiddet oranlarından elde edilen Auger elektronu yayınlanma ihtimaliyetlerinin oranları

Z	Element	K_{β}/K_{α} (Ağırlıksız) [95]	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$	$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)}$ [39]	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$	$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)}$ [39]
21	Sc	0,1264	0,253	0,264	0,0159	0,0174
22	Ti	0,1266	0,253	0,265	0,0160	0,0176
23	V	0,1274	0,255	0,267	0,0162	0,0178
24	Cr	0,1258	0,252	0,269	0,0158	0,0181
25	Mn	0,1304	0,261	0,272	0,0170	0,0185
26	Fe	0,1323	0,265	0,274	0,0175	0,0187
27	Co	0,1337	0,267	0,274	0,0178	0,0188
28	Ni	0,1345	0,269	0,276	0,0181	0,0190
29	Cu	0,1323	0,265	0,278	0,0175	0,0193
30	Zn	0,1326	0,265	0,283	0,0176	0,0201

Çizelgelerden elde edilen değerleri birbiriyle kıyaslamak için Şekil 3.1 ve Şekil 3.2’de, KLX/KLL ve KXY/KLL Auger elektronlarının yayımlanma ihtimaliyetlerinin oranı Z atom numarasına bağlı olarak değişimi sunulmuştur.



Şekil 3.1. KLX/KLL oranlarının Z atom numarasına göre değişimi



Şekil 3.2. KXY/KLL oranlarının Z atom numarasına göre değişimi

Şekil 3.1 ve 3.2'den elde edilen bilgilere göre, EDXRF yöntemiyle elde edilen KLX/KLL değerlerinin KXY/KLL değerlerine nazaran, fit denklemleriyle elde edilen değerlerle daha fazla uyum içinde olduğu söylenebilir. Bunun sebebi, fit denklemlerinden elde edilen değerlerin, deneysel hata sınırları içinde değişmesidir. Şekil 3.2 yeniden incelendiğinde fit denklemlerinden elde edilen değerlerin deneysel ölçümler sonucunda elde edilen değerlerin hata sınırları dışında olduğu görülebilmektedir. Deneysel hata sınırları dışındaki bu değerlerin sebebi, 3d gurubu elementlerinin valans (değerlik) bandınının açık bir kabuğa sahip olması, valans bandındaki elektronların dış kabuktaki enerji seviyelerine kolaylıkla hareket etmesi ve sonuç olarak bu elementlerin kolaylıkla polarize olabilme özelliğine sahip olmasından kaynaklanabilir.

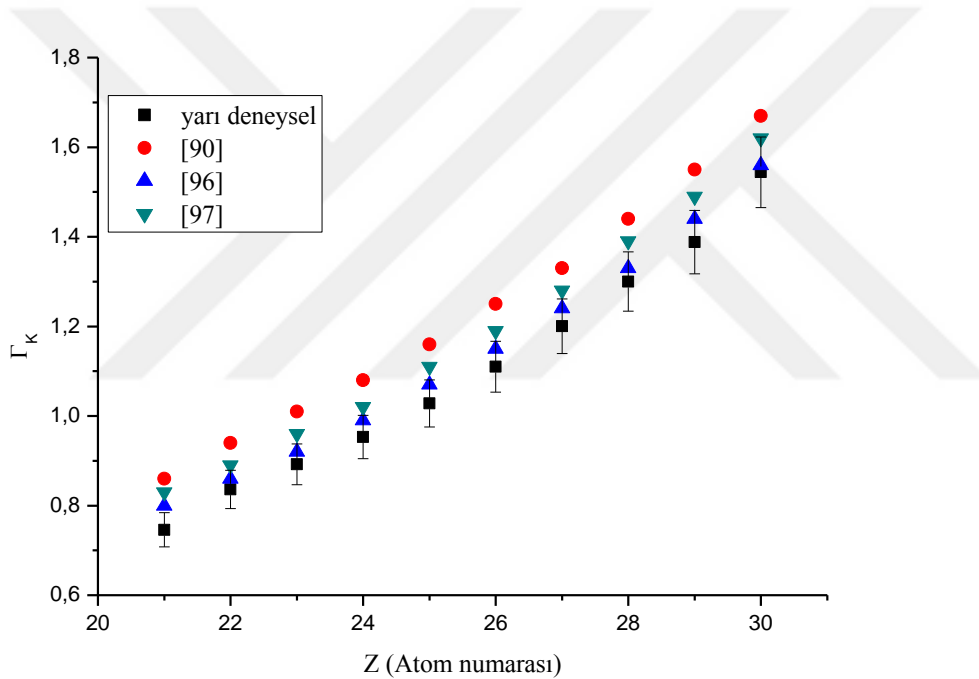
Çizelge 3.6 ve 3.11 arasında K kabuğu floresans verimlerinin elde edilen değerleri; K kabuğu ve L alt kabuğu seviye genişlikleri, KLL Auger ve K_{α} X-ışını çizgi genişlikleri gösterilmiştir. X-ışını çizgi, Auger ve K ile L kabuklarının seviye genişliklerini belirlemede istatistiksel hataları gidermek amacıyla tekrar ölçüm alınmış ve Origin 7.5 programı yardımıyla çizilen piklerin alanları kullanılarak K kabuğu floresans verimleri Eş. 2.31 kullanılarak hesaplanmıştır.

Çizelge 3.6. 3d geçiş elementlerinin K kabuğu seviye genişlikleri ve K kabuğu floresans verimleri

Z	Element	ω_K	Γ_K (eV)	Γ_K (eV) [90]	Γ_K (eV) [96]	Γ_K (eV) [97]
21	Sc	0,2011±0,0102	0,7459±0,0380	0,86	0,80	0,83
22	Ti	0,2224±0,0113	0,8363±0,0426	0,94	0,86	0,89
23	V	0,2556±0,0130	0,8920±0,0455	1,01	0,92	0,96
24	Cr	0,2897±0,0147	0,9531±0,0486	1,08	0,99	1,02
25	Mn	0,3240±0,0165	1,0278±0,0524	1,16	1,07	1,11
26	Fe	0,3567±0,0182	1,1102±0,0566	1,25	1,15	1,19
27	Co	0,3907±0,0199	1,2004±0,0612	1,33	1,24	1,28
28	Ni	0,4238±0,0216	1,3001±0,0663	1,44	1,33	1,39
29	Cu	0,4633±0,0236	1,3879±0,0707	1,55	1,44	1,49
30	Zn	0,4838±0,0246	1,5440±0,0787	1,67	1,56	1,62

Çizelge 3.6'da K kabuğu floresans verimleri ve K kabuğu seviye genişlikleri 3d geçiş elementleri için gösterilmiştir. Bu çizelgede K kabuğu seviye genişliklerinin literatürde

mevcut olan diğer değerlerle daha tutarlı olduğu gözlenmiştir. Krause ve Oliver'in çalışmasıyla [90], tez kapsamında elde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında uyumluluk oranının Sc elementi için %13, Ti için %11, Mn ve Fe için %12, V ve Cr için %10, Co, Ni, Cu için %10 ve son olarak Zn için %8 olduğu görülebilir. Ayrıca Campbell ve Papp'ın sonuçlarıyla elde edilen değerler kıyaslandığında Sc'den Zn'ye kadar olan elementler için uyumluluk oranı %10 ve %5 arasında değişmektedir [97]. Daha somut bilgilere ulaşmak için K kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı olarak değişimi Şekil 3.3'de gösterilmiştir. Şekilden de görüleceği gibi Perkins'in değerleri ile [96] tez kapsamında elde edilen değerler tamamen uyum içindedir.



Şekil 3.3. K kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi

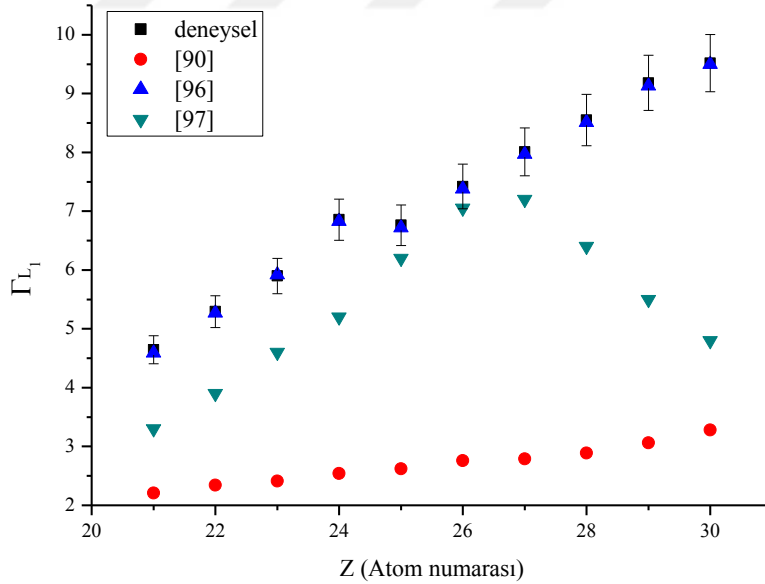
Çizelge 3.7, 3.8 ve 3.9'da L alt kabuğu seviye genişliklerinden elde edilen sonuçlar sunulmuştur. Literatürde yer alan diğer atomik veri değerleri ile karşılaştırıldığında önemli sonuçlar elde edilmiştir.

Çizelge 3.7 ve Şekil 3.4'de 3d geçiş elementleri için yarı deneysel olarak belirlenen L₁ alt kabuk seviye genişlik değerleri yer almaktadır. Şekil 3.4 EDXRF yöntemi ile elde edilen yarı deneysel verilerin, literatürde yer alan mevcut değerlerle kıyaslanmasında daha somut

bilgiler sunmaktadır. Şekilden görüldüğü üzere elde edilen yarı deneysel değerler sadece Perkins'in değerleri [96] ile uyum göstermektedir.

Çizelge 3.7. 3d geçiş elementlerinin L_1 kabuğu seviye genişlikleri

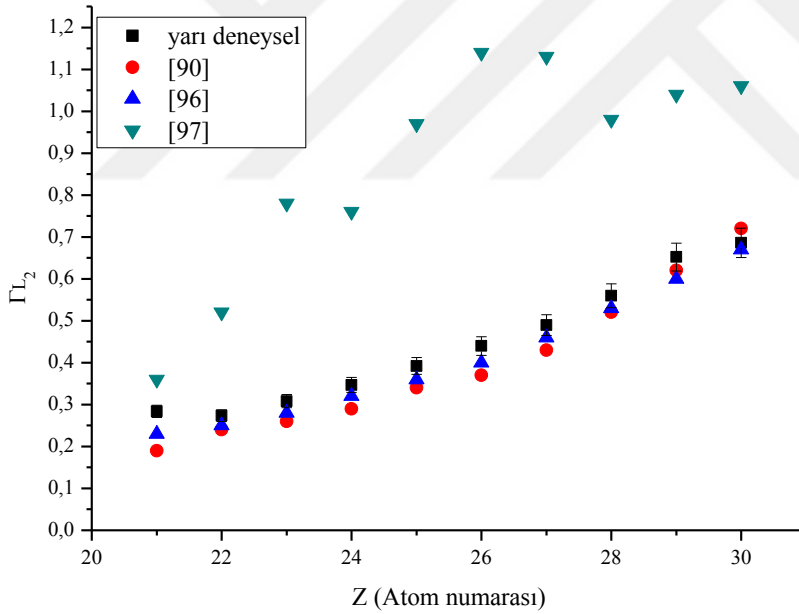
Z	Element	Γ_{L_1} (eV)	Γ_{L_1} (eV) [90]	Γ_{L_1} (eV) [96]	Γ_{L_1} (eV) [97]
21	Sc	4,6441±0,2368	2,21	4,59	3,30
22	Ti	5,2937±0,2699	2,34	5,27	3,9
23	V	5,8980±0,3007	2,41	5,92	4,60
24	Cr	6,8569±0,3497	2,54	6,83	5,20
25	Mn	6,7622±0,3448	2,62	6,72	6,20
26	Fe	7,4198±0,3784	2,76	7,38	7,05
27	Co	8,0096±0,4084	2,79	7,97	7,20
28	Ni	8,5499±0,4360	2,89	8,51	6,40
29	Cu	9,1821±0,4682	3,06	9,13	5,50
30	Zn	9,5160±0,4853	3,28	9,50	4,80



Şekil 3.4. L_1 alt kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi

Çizelge 3.8. 3d geçiş elementlerinin L_2 kabuğu seviye genişlikleri

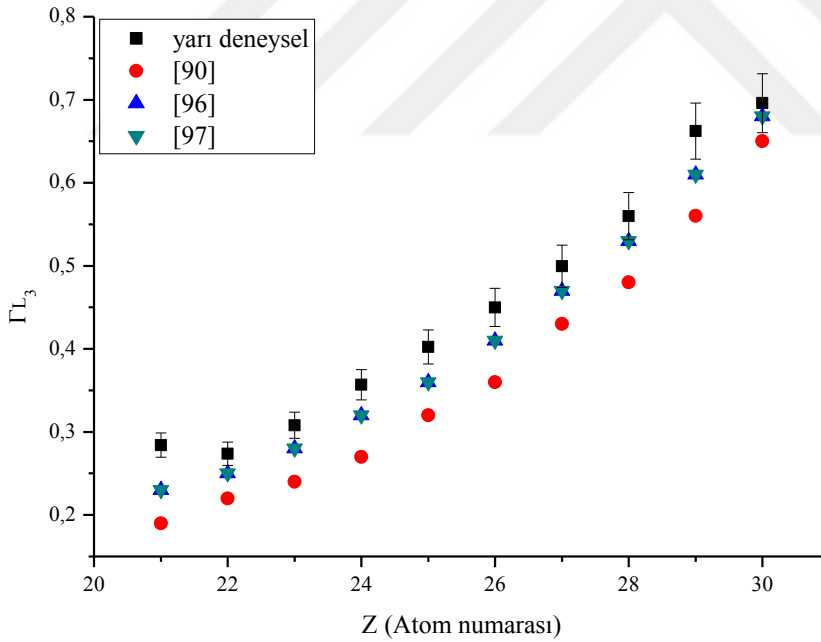
Z	Element	Γ_{L_2} (eV)	Γ_{L_2} (eV)		
			[90]	[96]	[97]
21	Sc	0,2841±0,0144	0,19	0,23	0,36
22	Ti	0,2737±0,0139	0,24	0,25	0,52
23	V	0,3080±0,0157	0,26	0,28	0,78
24	Cr	0,3469±0,0177	0,29	0,32	0,76
25	Mn	0,3922±0,0200	0,34	0,36	0,97
26	Fe	0,4398±0,0224	0,37	0,40	1,14
27	Co	0,4896±0,0249	0,43	0,46	1,13
28	Ni	0,5599±0,0285	0,52	0,53	0,98
29	Cu	0,6521±0,0332	0,62	0,60	1,04
30	Zn	0,6860±0,0349	0,72	0,67	1,06

Şekil 3.5. L_2 alt kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi

Şekil 3.5’de L_2 alt kabuğuna ait seviye genişliklerinin literatürde mevcut olan değerlerle değişimini göstermektedir. Elde edilen değerler Krause [90] ve Perkins’in [96] değerleri ile atom numarasına bağlı olarak benzer değişimlerin gözlenmesine rağmen Papp’ın değerlerine [97] kıyasla farklı değişimler gözlenmiştir.

Çizelge 3.9. 3d geçiş elementlerinin L_3 kabuğu seviye genişlikleri

Z	Element	Γ_{L_3} (eV)	Γ_{L_3} (eV) [90]	Γ_{L_3} (eV) [96]	Γ_{L_3} (eV) [97]
21	Sc	0,2841±0.0144	0,19	0,23	0,23
22	Ti	0,2737±0.0139	0,22	0,25	0,25
23	V	0,3080±0.0157	0,24	0,28	0,28
24	Cr	0,3569±0.0182	0,27	0,32	0,32
25	Mn	0,4022±0.0205	0,32	0,36	0,36
26	Fe	0,4498±0.0229	0,36	0,41	0,41
27	Co	0,4996±0.0254	0,43	0,47	0,47
28	Ni	0,5599±0.0285	0,48	0,53	0,53
29	Cu	0,6621±0.0337	0,56	0,61	0,61
30	Zn	0,6960±0.0354	0,65	0,68	0,68

Şekil 3.6. L_3 alt kabuğu seviye genişliklerinin atom numarasına bağlı değişimi

Şekil 3.6'dan da görülmektedir ki elde edilen yarı deneysel L_3 alt kabuk seviye genişlikleri literatürde var olan tüm değerlerle benzer değişimleri göstermektedir. L alt kabuk seviye genişliklerinin yarı deneysel hesaplarının literatürde var olan kıyaslamalarından elde edilen sonuçlara göre, bu değerlerin belirlenmesinde kullanılan farklı modeller etkilidir. L alt kabuk

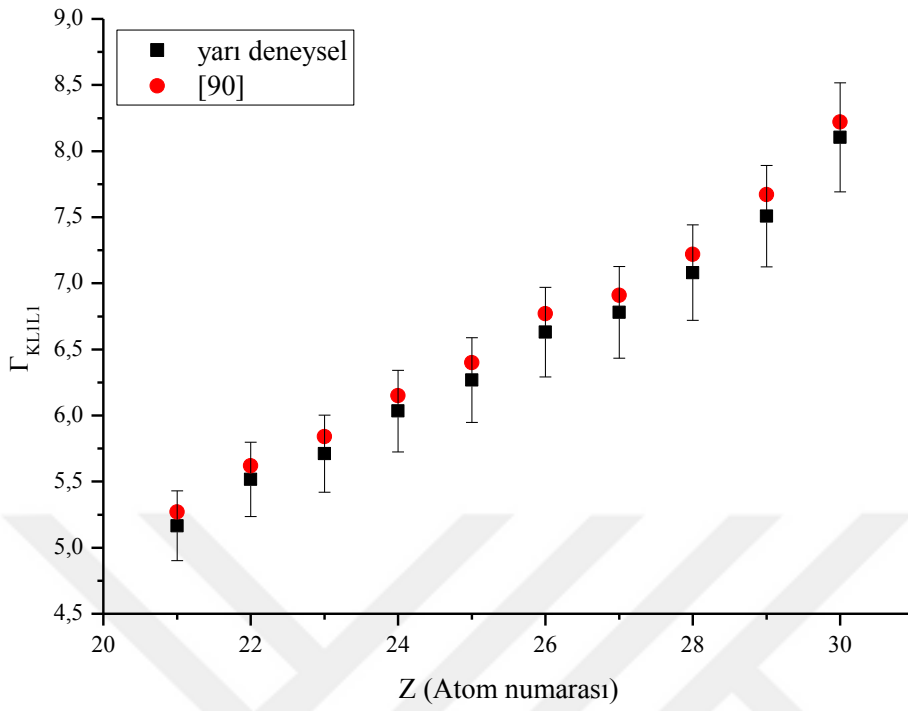
seviye genişliklerinin hesaplanmasında, Eş. 2.35, 2.36 ve 2.37 kullanılmıştır. Denklemlerdeki K_{α} X-ışını çizgilerinin enerjileri Perkins'in değerlerinden alınmıştır ve elde edilen değerler en çok Perkins'in [96] değerleri ile uyum içindedir.

Çizelge 3.10 tez kapsamında sadece K kabuğu floresans verimlerinin kullanılmasıyla yarı deneysel olarak hesaplanan L alt kabuğu seviye genişlikleri kullanılarak elde edilen Auger çizgi genişliklerinin değerlerini vermektedir.

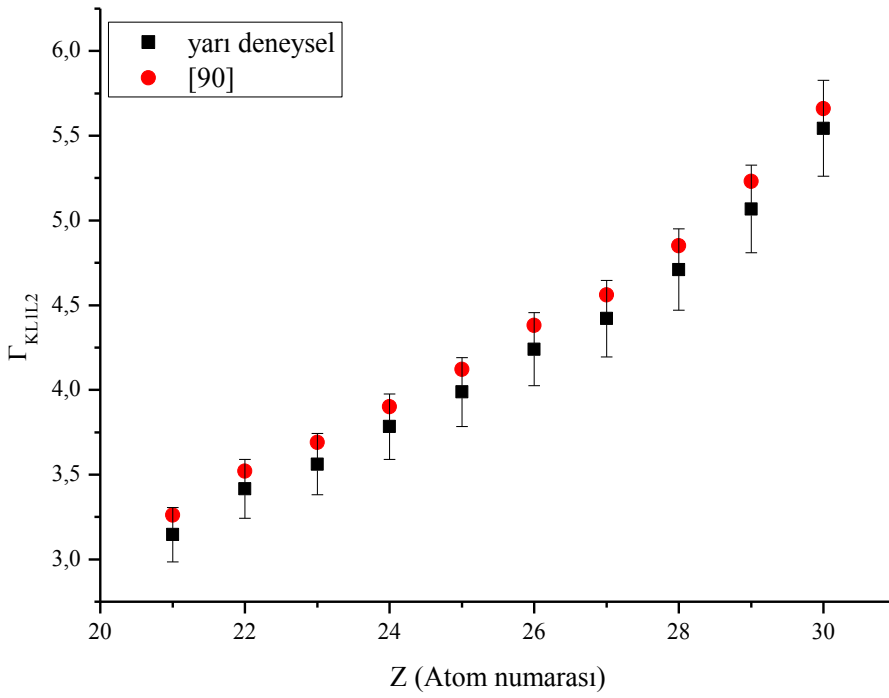
Çizelge 3.10. 3d geçiş elementlerinin KLL Auger çizgi genişlikleri

Z	Element	$\Gamma_{KL_1L_1}$ (eV)	$\Gamma_{KL_1L_1}$ (eV) [90]	$\Gamma_{KL_1L_2}$ (eV)	$\Gamma_{KL_1L_2}$ (eV) [90]	$\Gamma_{KL_2L_3}$ (eV)	$\Gamma_{KL_2L_3}$ (eV) [90]
21	Sc	5,1659±0,2634	5,27	3,1459±0,1604	3,26	1,1259±0,0574	1,25
22	Ti	5,5163±0,2813	5,62	3,4163±0,1742	3,52	1,2963±0,6661	1,40
23	V	5,7120±0,2913	5,84	3,5620±0,1816	3,69	1,3920±0,0709	1,52
24	Cr	6,0331±0,3076	6,15	3,7831±0,1929	3,90	1,5131±0,0771	1,64
25	Mn	6,2678±0,3196	6,40	3,9878±0,2033	4,12	1,6878±0,0860	1,82
26	Fe	6,6302±0,3381	6,77	4,2402±0,2162	4,38	1,8402±0,0938	1,99
27	Co	6,7804±0,3458	6,91	4,4204±0,2254	4,56	2,0604±0,1050	2,19
28	Ni	7,0801±0,3610	7,22	4,7101±0,2402	4,85	2,3001±0,1173	2,44
29	Cu	7,5079±0,3829	7,67	5,0679±0,2584	5,23	2,5679±0,1309	2,73
30	Zn	8,1040±0,4133	8,22	5,5440±0,2827	5,66	2,9140±0,1486	3,04

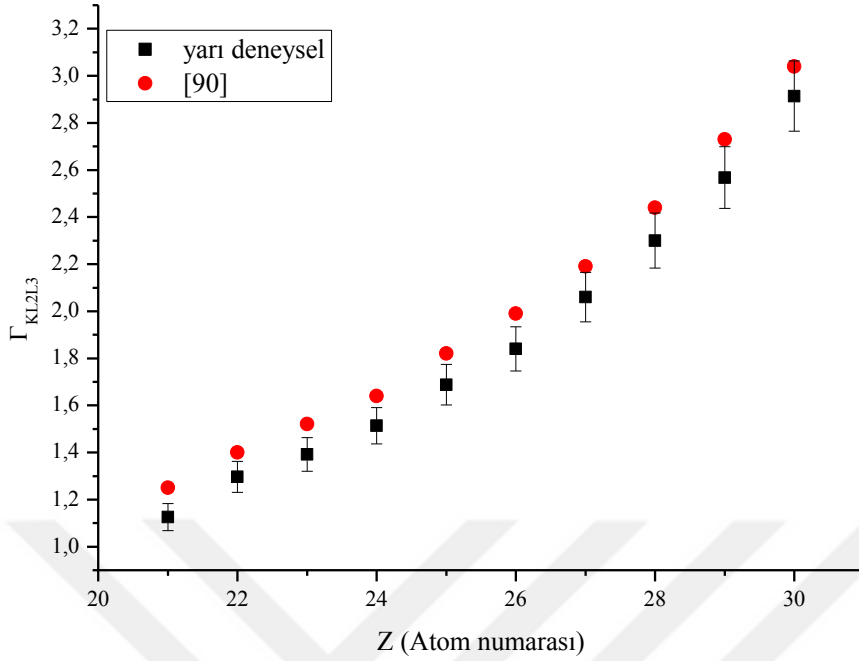
Literatürde [90] teorik olarak hesaplanan değerlerle karşılaştırmalı olarak kıyaslanmasının daha somut bir şekilde görülebilmesi için Şekil 3.7, 3.8 ve 3.9 çizilmiştir. Şekillerde tüm KLL Auger geçişleri için yarı deneysel olarak hesaplanan çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi gösterilmektedir. Şekillerden de görüleceği gibi yarı deneysel olarak elde edilen KL_2L_3 Auger çizgi genişlik değerleri hariç diğer değerler teorik eşdeğerleri ile uyuşmaktadır. Grafikte KL_1L_1 ve KL_1L_2 Auger çizgi genişlikleri için mevcut olan teorik verilerin, yarı deneysel değerlerin hata sınırları içinde kaldığı açıkça görülebilmektedir. Fakat KL_2L_3 Auger çizgi genişlik değerleri teorik verilerle kıyaslandığında yüzde değişimin, Zn elementi hariç, deneysel hata sınırları dışında kaldığı Şekil 3.9'da açıkça görülmektedir.



Şekil 3.7. KL_1L_1 Auger çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi



Şekil 3.8. KL_1L_2 Auger çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi



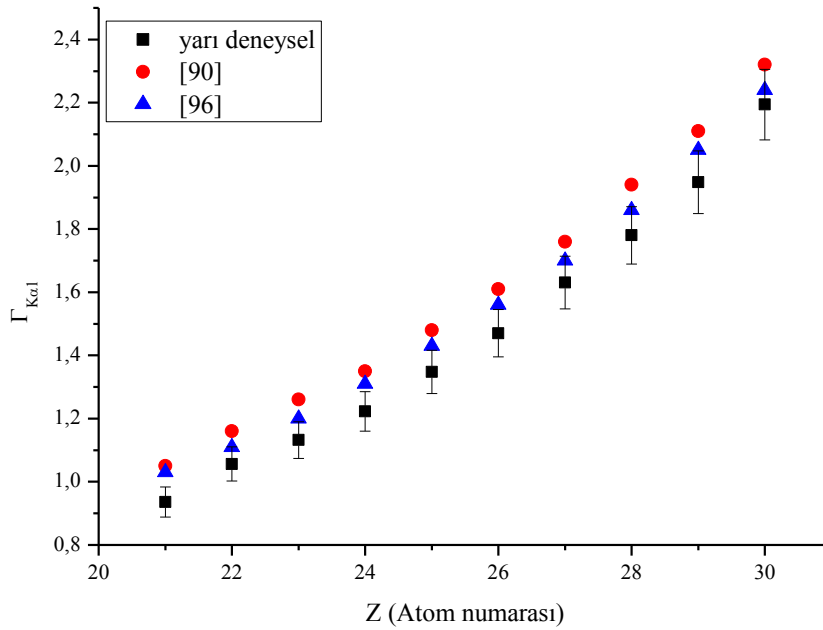
Şekil 3.9. KL_2L_3 Auger çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi

3d geçiş elementlerinin en belirgin özelliklerinden biri, dış kabuk elektronlarının kolaylıkla valans (değerlik) bandı boyunca hareket edebilmeleridir. Bu özelliklerinden dolayı geçiş elementleri farklı değerlikler alabilir ve kolaylıkla polarize olabilirler. Kolaylıkla polarize olan elementlerin enerji seviyeleri çekirdekten uzağa itilir ve enerjileri azalır. Auger olayı elektronların bulunduğu tabakalara zayıf bağlı olduğu durumlarda X-ışını geçişlerine göre daha baskındır. Ancak teorik hesaplamalar yapılırken, enerji seviyelerinin çekirdekten sabit bir uzaklıkta bulunduğu varsayılmıştır. Günümüzde ise perdeleme, görelilik ve farklı elektron konfigürasyonları ile farklı iyonize durumlar göz önüne alınarak spektroskopik hesaplamalar yapılmaktadır. L_1 ve L_2 alt kabukları K kabuğuna daha yakın olduğundan dış elektronik yapıdaki değişimlerden etkilenmemiş olabilir. Bu nedenle L_3 alt kabuğu, 3d gurubu geçiş elementlerinin valans bandının bulunduğu M kabuğuna daha yakın olduğu için, dış kabuk elektronik yapının değişiminden daha fazla etkilenmiş olabilir. Çünkü valans bandındaki elektronların metalik yapı boyunca kolaylıkla hareket edebildiği bilinmektedir ve Şekil 3.9 bu durumu doğrulamaktadır. Zn elementinin teorik değerle uyum göstermesinin (teorik değere kıyasla deneysel değerinin yüzde değişim oranının deneysel hata sınırı içinde kalması durumu) nedeni valans bandının tam dolu olmasından kaynaklanmış olabilir.

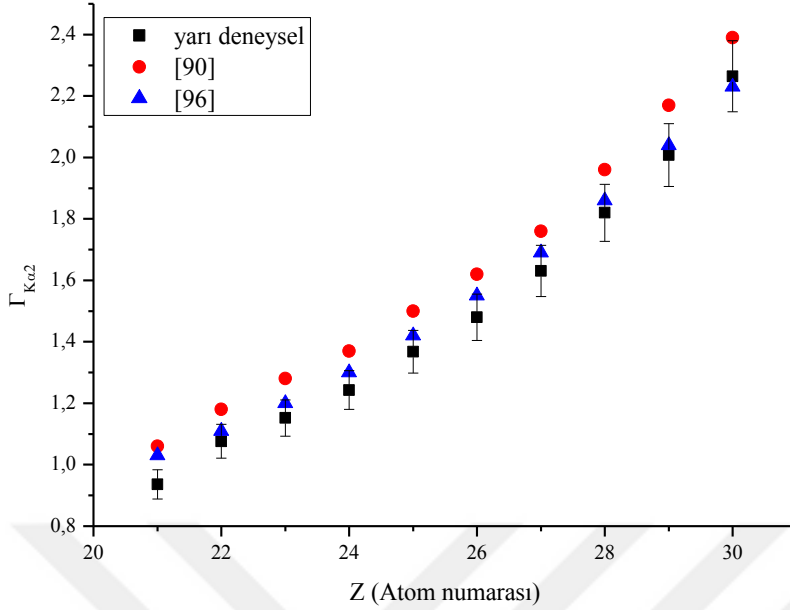
Yapılan çalışmada Auger geçişlerinin çizgi genişliklerinden başka K_{α} çizgi genişliklerinin yarı deneysel hesabı yapılmış ve elde edilen değerler Çizelge 3.11’de sunulmuştur. Elde edilen değerlerin literatürdeki mevcut değerlerle kıyaslanması için Şekil 3.10 ve Şekil 3.11 çizilmiştir.

Çizelge 3.11. 3d geçiş elementlerinin K_{α} X-ışını çizgi genişlikleri

Z	Element	$\Gamma_{K\alpha 1}$ (eV)	$\Gamma_{K\alpha 1}$	$\Gamma_{K\alpha 1}$	$\Gamma_{K\alpha 2}$ (eV)	$\Gamma_{K\alpha 2}$	$\Gamma_{K\alpha 2}$
			(eV)	(eV)		(eV)	(eV)
			[90]	[96]		[90]	[96]
21	Sc	0,9359±0,0477	1,05	1,03	0,9359±0,0477	1,06	1,03
22	Ti	1,0563±0,0538	1,16	1,11	1,0763±0,0549	1,18	1,11
23	V	1,1320±0,0577	1,26	1,20	1,1520±0,0587	1,28	1,20
24	Cr	1,2231±0,0623	1,35	1,31	1,2431±0,0633	1,37	1,30
25	Mn	1,3478±0,0687	1,48	1,43	1,3678±0,0697	1,50	1,42
26	Fe	1,4702±0,0749	1,61	1,56	1,4802±0,0754	1,62	1,55
27	Co	1,6304±0,0831	1,76	1,70	1,6304±0,0831	1,76	1,69
28	Ni	1,7801±0,0907	1,94	1,86	1,8201±0,0928	1,96	1,86
29	Cu	1,9479±0,0993	2,11	2,05	2,0079±0,1024	2,17	2,04
30	Zn	2,1940±0,1119	2,32	2,24	2,2640±0,1154	2,39	2,23



Şekil 3.10. $K_{\alpha 1}$ çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi



Şekil 3.11. $K_{\alpha 2}$ çizgi genişliklerinin atom numarasına göre değişimi

Şekil 3.10 ve 3.11 incelendiğinde elde edilen yarı deneysel değerlerin Krause ve Oliver'ın [90] teorik verilerinden ziyade Perkins'in değerleri [96] ile uyum içindedir. Yarı deneysel olarak elde edilen $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$ değerlerinin Krause ve Oliver'ın teorik verilerine [90] kıyasla yüzde değişim oranı deneysel hata sınırları dışında kaldığından dolayı bu verilerle uyum içinde olduğu söylenemez. Ancak Z atom numarasına göre verilerin değişimi benzer eğilim göstermektedir. Ayrıca Zn elementinin hem $K_{\alpha 1}$ hem de $K_{\alpha 2}$ değerlerinin literatürdeki mevcut iki veri ile uyum içinde olduğu tespit edilmiştir.

Yapılan çalışmada yarı deneysel olarak elde edilen seviye genişliklerinin literatürdeki eşdeğerlerine oranla daha büyük olduğu tespit edilmiştir. Bu durumun sebebi seviye genişlemesine yol açan farklı etkilerden kaynaklanmaktadır. Çoklu yarılma ve çoklu iyonizasyon etkileri hafif elementler hariç diğer elementler için baskın olarak görülür. Diğer genişleme etkileri ise dedektör sisteminden kaynaklanan enstrümental genişleme ve katı hal olarak belirtilmektedir. Zn elementi değerlerinin mevcut diğer değerlerle kıyaslandığında uyumluluk yüzdesinin deneysel hata sınırları içinde kalmasının d orbitalinin tam dolu olmasından kaynakladığı belirtilmiştir. Çalışmada en büyük uyumluluk yüzdesi tüm parametre değerleri için en yüksek çıkmıştır. Bu durumun sebebi ise Sc elementinin en dış kabuğunun açık kabuk olmasıyla açıklanabilir. M kabuğunda bulunan valans orbitallerinin

tam dolu olmaması buradaki elektronların daha dış kabuklara geçişini kolaylaştırır ve bu durumdan M kabuğundan olan geçişler etkilenir. M kabuğuna yakın alt kabuklar da katı hal etkisi olarak tanımlanan bu etkinin tesiri altında kalacağından atomik durumlar için hesaplanan değerlerin çalışmamızda hesaplanan yarı deneysel değerlerden farklı olacağı açıktır.

Son olarak, atom numarası 30'dan küçük elementler için baskın olan Coster-Kronig türü geçişlerin de çalışmamızda hesaplanan çizgi ve seviye genişlik değerlerini etkileyebileceğini belirtmek gerekir [98]. $L_1L_3M_x$ ($x=1,2,3$), $L_2L_3M_y$ ($y=4,5$) ve $M_1M_2M_y$ ($y=4,5$) geçişlerinin çalışmamızda hesaplanan Auger geçişlerinin değerlerini etkilemiş olabilir. Bu nedenle X-ışını çizgi ve Auger genişliklerinin literatürdeki mevcut değerlerden farklı olduğu durumlar bu geçişlerin varlığı ile açıklanabilir.

4. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışma, XRF yöntemiyle elemental analiz yapılan ve XRD yöntemiyle kristal yapıların belirlendiği cihazların tasarımında kullanılmak üzere bir veri tabanı oluşturmak amacıyla gerçekleştirilmiştir. Ayrıca yapılan teorik modellemeler kullanılarak hesaplanan değerler, modellemenin doğruluğunun ispatlanabilmesi için deneysel veya yarı deneysel değerlerle kıyaslamaya gereksinim duymaktadır. Bu çalışmada Auger ve K X-ışını pikleri ayrı ayrı tam olarak ayrılamasa bile sadece K kabuğu floresans verimi kullanılarak K kabuğu seviye genişliği hesaplanmış ve sonra seviye ile pik genişlik değerleri yarı-deneysel olarak belirlenmiş ve böylece EDXRF yöntemi kullanılarak çalışmada yarı deneysel olarak elde edilen değerler literatüre güncel değerler olarak sunulmuştur [99-100].

Yapılan çalışmada elde edilen sonuçlar daha çok Perkins'in değerleri ile en iyi uyumluluk göstermektedir. Literatürde mevcut olan diğer değerlerle kıyaslandığında elde edilen değerlerin hata sınırlarının dışında uyumluluk yüzdesine sahip olması, enstrümental genişlemeye, katı hal etkilerine, çoklu iyonizasyonlara, çoklu yarılmalara ve Coster-Kronig türü geçişlere atfedilmiştir. Tez çalışması kapsamında literatüre kazandırılan bu değerler aynı zamanda bir gurup araştırmacı tarafından derlenip fit denklemi elde edilerek güncel parametre değerlerinin elde edilmesi sağlanmaktadır. Bu nedenle 3d geçiş elementleri için hesaplanan parametreler farklı radyoaktif kaynaklar kullanılarak farklı enerjiler için hesaplanmalıdır. Atom numarasına göre değişimin incelendiği çalışma, enerjiye göre parametrelerin değişimi şeklinde incelenebilir.

KAYNAKLAR

1. Gowda, R. ve Sanjeevaiah, B. (1973). K- Shell Photoelectric Cross Sections for 145 keV Gamma Rays. *Physical Review A*, 8, 2425-2428.
2. Gowda, R. ve Sanjeevaiah, B. (1974). K- Shell Photoelectric Cross Sections of Cu, Zr, Ag, Sn, Ta, Au, and Pb for 279,1 and 411,8 keV gamma rays. *Physical Review A*, 10, 1188-1191.
3. Allawadhi, K. L., ve Sood, B. S. (1975). K- Shell Photoelectric Cross Sections for Intermediate Z elements at 37 and 73 keV. *Physical Review A*, 11, 1928-1932.
4. Ranganathaiah, C., Gowda, R. ve Sanjeevaiah, B. (1979). K-shell Photoionisation Cross Sections for 514, 661,6, 765,8 and 1115,5 keV Gamma Rays. *Journal Physical B: Atom Molecul Phys.*, 12, 1965-1971.
5. Prakhya, R. S., Prathasaradhi, K., Lakshminarayana, V. ve Narasimham, K. L. (1986). Measurement of K- Shell Photoelectric Cross Sections by the Indirect method. *Physical Review A*, 33, 2440-2443.
6. Kumar, S., Singh, N., Allawadhi, K.L. ve Sood, B.S. (1986). K- Shell Photoelectric Cross Sections for Intermediate Z Elements at 26 keV. *Physical Review. A*, 34, 1571.
7. Perez, P. D., Rodriguez Cabello, T. P., Trincavelli, J. C., Suarez, S. (2018). L shell X-ray production cross sections for Sr and Mo by proton impact. *Radiation Physics and Chemistry*. doi:10.1016/j.radphyschem.2018.02.004.
8. Doğan, M., Cengiz, E., Nas, A., Tıraşoğlu, E., Kantekin, H., Aylıkçı, V. (2015). L shell X-ray fluorescence parameters of Pb in phthalocyanine complexes. *Applied Radiation and Isotopes*, 104, 43–48.
9. Cengiz, E., Köksal, O. K., Apaydın, G., Karahan, İ. H., Ünal, E. (2019). Determination of valence electronic structure of Ni in Ni-B alloy coatings using $K\beta$ -to- $K\alpha$ X-ray intensity ratios. *Applied Radiation and Isotopes*, 144, 24–28.
10. Kacal, M. R., Han, I., Akman, F., Durak, R. (2012). Measurement of L subshell fluorescence yields for high-Z elements excited by 22,6 keV photons. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 113(5), 373–381.
11. Dagistanli, H., Mutlu, R. H. (2012). Effect of the crystal structure on the X-ray intensity ratios of 3d metals. *Radiation Physics and Chemistry*, 81(7), 796–797.
12. Ertuğrul, M. (2003). Measurement of K, L and Higher Shell Photoionisation Cross-Sections at 59,5 keV. *Analytica Chimica Acta*, 491, 239-244.

13. Gudennavar, S. B., Badiger, N. M., Thontadarya, S. R. ve Hanumaiah, B. (2003a). K-Shell Fluorescence Parameters of Medium Z Elements. *Radiation Physical Chemistry*, 68,721-726.
14. Gudennavar, S. B., Badiger, N. M., Thontadarya, S. R. ve Hanumaiah, B. (2003b). A Method for Measuring K-Shell Fluorescence Parameters in a 2π Geometrical Configuration. *Radiation Physical Chemistry*, 68, 745-750.
15. Yashoda, T., Krishnaveni, S. ve Gowda, R. (2005). Measurement of K-shell fluorescence yield yields for the elements in the range $22 \leq Z \leq 52$ excited by 14,4 and 122keV photons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 240, 607-611.
16. Durdu, B. G., Kucukonder, A. (2014). Measurement of some K and L X-rays parameters of halogen iodine compounds. *Radiation Physics and Chemistry*, 96, 140–147.
17. Arora, S.K., Allawadhi, K. L. ve Sood, B. S. (1981). L shell Photoelectric Cross Section Measurements. *Journal of Physics B: At. Mol. Opt. Phys.*, 14, 1423-1432.
18. Markevich, D., Budick, B. (1982). Fluorescence yields for the rhodium L shell. *Journal Physics, B: At Mol. Phys.*, 14, 1553-1563.
19. Singh, N., Mittal, R., Allawadhi, K. L. ve Sood, B. S. (1987). Measurement of $L\text{I}+\alpha$, $L\beta$ and $L\gamma$ X-ray Production Cross Sections in Some Rare-Earth Elements by 10, 18, 26 and 33 keV Photons. *Journal Physics B: At. Mol. Opt. Phys.*, 20, 5639-5645.
20. Durak, R. ve Özdemir, Y. (2000). $L\text{I}$, $L\alpha$, $L\beta$ and $L\gamma$ X-ray Production Cross Sections and Yields of Some Selected Elements Between Cesium and Erbium Following Ionization by 59,54 keV γ Rays. *Spectrochimica Acta Part B*, 55, 177-184.
21. Kahoul, A., Aylikci, V., Aylikci, N. K., Cengiz, E., Apaydın, G. (2012). Updated data base and new empirical values for K-shell fluorescence yields. *Radiation Physics and Chemistry*, 81, 713–727.
22. Şimşek, Ö., Doğan, O., Turgut, Ü. ve Ertuğrul, M. (1999). Measurement of L Shell Fluorescence Yields of Some Elements in the Atomic Range $56 \leq Z \leq 64$ Using Photoionisation. *Radiation Physical Chemistry*, 54, 229-233.
23. Shehla, Mandal, A., Kumar, A., Roy Chowdhury, M., Puri, S., Tribedi, L. C. (2018). Low-energy proton induced M X-ray production cross sections for 70 Yb, 81 Tl and 82 Pb. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 426, 34–40.
24. Baydaş, E., Şahin, Y. ve Büyükkasap, E. (2003). Measurement of $K\alpha$ ve $K\beta$ Fluorescence Cross Sections and the $K\beta/K\alpha$ Intensity Ratios for Elements in the Range $22 \leq Z \leq 29$ by 10 keV Photons. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 77, 87-93.

25. Bertol, A. P. L., Hinrichs, R., Vasconcellos, M. A. Z. (2015). K-shell X-ray production cross sections of Ni induced by protons, alpha- particles, and He⁺. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 363, 33-36.
26. Miranda, J., Murillo, G., Mendez, B., Villasenor, P. (2018). Measurement of L X-ray production cross sections of Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, and Dy by impact of ⁹Be²⁺ ions with energies in the interval 5,25 MeV to 6,75 MeV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 434, 93–96.
27. Ertuğrul, M. (2002). Measurement of Li Subshell Photoionization Cross-Sections of W, Au, and Bi at 31,6 keV. *Radiation Physics and Chemistry*, 65, 123-126.
28. Gorlachev, I., Alexandrenko, V., Gluchshenko, N., Ivanov, I., Kireyev, A., Krasnopyorova, M., Kurakhmedov, A., Platov, A., Zdorovets, M. (2018). K-, L- and M-shell x-ray productions induced by xenon ions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 430, 31–35.
29. Hubbell, J. H., Trehan, P. H., Singh, N., Chand, B., Metha, D., Garg, M. L., Singh, S. ve Puri, S. (1994). A Review, Bibliography, and Tabulation of K, L, and Higher Atomic Shell X-ray Fluorescence Yields. *Journal of Physical Chemical. Reference Data*, 23, 339-364.
30. Kahoul, A., Abassi, A. ve Nekkab, M. (2011). K-shell Fluorescence Yields for Elements with $6 \leq Z \leq 99$. *Radiation Physics and Chemistry*, 80, 369-377.
31. Larkins, F. K. (1971). Dependence of Fluorescence Yield on Atomic Configuration. *Journal Physics B: Atomic Molecular Physics*, 4, L29-L32.
32. Cohen, D. D. (1987). Average L Shell fluorescence Yields. *Nuclear Instruments and Methods B*, 22, 55-58.
33. Özdemir, Y. (2003). Photon Induced L Subshell Auger Yields for Some Elements in the Atomic Number Range $55 \leq Z \leq 92$ Using a Si(Li) Detector. *Radiation Physics and Chemistry*, 66, 317-322.
34. Nelson, G. C. ve Saunders, B. G. (1969). Widths $K\alpha_2/K\alpha_1$ X-ray Intensity Ratios for $Z > 50$. *Physical Review*, 188, 108-112.
35. Chang, C. N., Chen, C. T., Yen, C. C., Wu, Y. H., Su, C.W. ve Chiou, S. K. (1994). The Vanadium $K\beta/K\alpha$ X-ray Intensity Ratios of Some Vanadium Compounds. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 27, 5251-5256.
36. Shadendra, K., Allawadhi, K. L. ve Sood, B. S. (1983). Energy Dependence of Photon-induced L Shell X-ray Intensity Ratios in Some High Z Elements. *Journal of Physics B: Atomic Molecular Physic*, 16, 4313-4322.
37. Ramakrishna, Y., Rao, K. R., Nagu Raju, G., Rao, K. B., Rao, V. S., Venkateswarlu, P. ve Reddy, S. B. (2002). L X-ray Energy Shifts and Intensity Ratios in Tantalum with C and N Ions- multiple Vacancies in M, N and O Shells, *Pramana. Journal of Physics*, 59, 685-691.

38. Kumar, A., Chauhan, Y. ve Puri, S. (2010). Incident Photon Energy and Z Dependence of L X-ray Relative Intensities. *Atomic Data Nuclear Data Tables*, 96, 567-585.
39. Schönfeld, E. ve Janssen, H. (1996). Evaluation of Atomic Shell Data, *Nuclear Instruments and Methods A*, 369, 527-533.
40. Doğan O. ve Ertuğrul, M. (2004). Measurement of the L3 to Mi, Ni and Oi Subshells Radiative Transition Probabilities of Elements in the Atomic Range $73 \leq Z \leq 92$. *Physica Scripta*, 70, 283-287.
41. Olise, F. S., Aladese, A. D., Ugwumadu, C. E. (2018). Calculation of L-shell ionisation and x-ray production cross sections for some trans-uranium elements induced by protons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 436, 156–162.
42. Cengiz, E. (2011). 3. Sıra Geçiş Elementi Bilesiklerinin K ve L X-ışını Floresans Parametreleri, Doktora Tezi, *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon*.
43. Duggal, H., Sharma, V., Kainth, H. S., Kumar, S., Shahi, J. S., Mehta, D. (2018). Measurement of L XRF cross sections for elements with $33 \leq Z \leq 51$ and their interpretation in terms of Li ($i = 1-3$) subshell vacancy decay parameters. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 429, 19-26.
44. Reyes-Herrera, J., Miranda, J. (2016). Measurement of $L\alpha$ and $L\beta_{1,3,4}$ fluorescence cross sections of La, Ce, Pr and Nd induced by photons of energies between 7,01 keV and 8,75 keV. *Radiation Physics and Chemistry*, 123, 122-128.
45. Garg, M. L., Mehta, D., Kumar, S., Mangal, P. C. ve Trehan, P. N. (1985). Energy Dependence of Photon-Induced $K\alpha$ and $K\beta$ X-Ray Fluorescence Cross-Sections for Some Elements with $20 \leq Z \leq 56$. *X-Ray Spectrometry*, 14, 165-169.
46. Aylikci, V., Kahoul, A., Aylikci, N. K., Tıraşoğlu, E., Karahan, İ. H., Abassi, A., Dogan, M. (2015). Empirical and semi-empirical interpolation of L X-ray fluorescence parameters for elements in the atomic range $50 \leq Z \leq 92$. *Radiation Physics and Chemistry*, 106, 99-125.
47. Seven, S., Erdoğan, H. (2015). Energy dependence of photon-induced $K\alpha$ and $K\beta$ X-ray production cross-sections for some elements with $42 \leq Z \leq 68$ in energy range 38-80 keV. *Radiation Physics and Chemistry*, 117, 1-6.
48. Han, I., Porikli, S., Sahin, M. and Demir, L. (2010). Measurement of $L\alpha$, $L\beta$ and Total L X-ray fluorescence Cross-sections for some elements with $40 \leq Z \leq 53$. *Radiation Physics and Chemistry*, 79, 393-396.

49. Sahnoune, Y., Kahoul, A., Kasri, Y., Deghfel, B., Medjadi, D. E., Khalfallah, F., Daoudi, S., Aylikci, V., Aylikci, N. K., Nekkab, M. (2016). L1, L2 and L3 subshell fluorescence yields: Updated database and new empirical values. *Radiation Physics and Chemistry*, 125, 227-251.
50. Kumar, R., Rani, A., Singh, R. M., Tiwari, M. K. (2019). L X-ray fluorescence cross sections measurements for elements Ba, La and Ce at synchrotron radiation energies 7, 8, 9 and 10 keV. *Radiation Physics and Chemistry*, 156, 283-291.
51. Saydam, M., Aksoy, C., Cengiz, E., Alaşalvar, C., Tıraşoğlu, E., & Apaydın, G. (2012). Determination of K shell fluorescence cross-section and $K\beta/K\alpha$ intensity ratios for Fe, Se, Te, FeSe, FeTe and TeSe. *Radiation Physics and Chemistry*, 81, 1837–1841.
52. Ertuğrul, M., Sogut, O., Simsek, O., Buyukkasap, E. (2001). Measurement of $K\beta/K\alpha$ Intensity Ratios for Elements in the Range $22 \leq Z \leq 69$ at 59.5 keV. *Journal of Physics B*: 34, 909–914.
53. Ertuğral, B., Apaydın, G., Cevik, U., Ertuğrul, M. ve Kobya, A. İ. (2006). $K\beta/K\alpha$ X-Ray Intensity Ratios for Elements in the Range $16 \leq Z \leq 92$ Excited by 5,9, 59,5 and 123,6 keV Photons. *Radiation Physics and Chemistry*, 76, 15-22.
54. Aksoy, C., Doğan, M., Tıraşoğlu, E. (2014). The fluorescence parameters of Zr and Sb compounds. *Radiation Physics and Chemistry*, 107, 178-182.
55. Önder, P., Turşucu, A., Demir, D. (2013). K shell X-ray fluorescence parameters of some elements in the atomic range $40 \leq Z \leq 50$. *Science and Tecnology of Nuclear Installatons*, 2013, 285190. 6 pages.
56. Yılmaz, R., Tunç, H., Özkartal, A. (2015). Measurements of K- shell X-ray production cross-sections and fluorescence yields for some elements in the atomic number range $28 \leq Z \leq 40$. *Radiation Physics and Chemistry*, 112, 83-87.
57. Yılmaz, R. (2017). $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios for some elements in the atomic number range $28 \leq Z \leq 39$ at 16,896 keV. *Journal of Radiation Research and Applied Sciences*. 10, 172-177.
58. Turhan, F. M., Akman, F., Kaçal, M. R., Durak, R. (2015). Measurements of K-X-ray fluorescence cross-section, fluorescence yields, level widths and radiative vacancy transition probabilities for the elements Zr, Mo, Cd, Er at 59,54 keV. *Meterials Science and Engineering*, 282, 012015.
59. Marques, J. P., Guerra M., Parente F., Santos J. P., Indelicato P., and Sampaio J. M. (2015). K-shell width, fluorescence yield, and $K\beta/K\alpha$ intensity ratio calculation for Fe in the Dirac-Fock approach. *Journal of Physics: Conference Series*, Sep 07, Volume 635, Number 9, p.092094.

60. Ito, Y., Tochio, T., Fukushima, S., Toborda, A., Sampaio, J. M., Marques, J. P., Parente, F., Indelicato, P., Santos, J. P. (2015). Experimental and theoretical determination of the $K\alpha_2/K\alpha_1$ intensity ratio for zinc. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 151, 295-299.
61. Marques, J. P., Martins, M. C., Costa, A. M., Indelicato, P., Parente, F., Santos, J. P. (2018). Theoretical determination of K X-ray transition energy and probability values for highly charged (He- through B-like) Nd, Sm, Gd, Dy, Er, and Yb ions. *Radiation Physics and Chemistry*, 154, 17-20.
62. Kaur, R., Kumar, A., Tiwari, M., Puri, S. (2016). Measurements of X-ray production cross sections at photon energies across the Li ($i=1-3$) sub-shell absorption edges of ^{74}W and ^{76}Os using synchrotron radiation. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 213, 22-31.
63. Deghfel, B., Kahoul, A., Abdellatif, A., Nekkab, M. (2014). Proton induced K- shell ionization cross sections for a wide range of elements ($4 \leq Z \leq 92$) within ECPSSR theory and updated experimental data. *Journal of Radiation Research and Applied Sciences*, 7, 607-613.
64. Kaur, R., Kumar, A., Czyzycki, M., Miglicri, A., Karydas, A.G., Puri, S. (2017). Measurements of fluorescence and Coster-Kronig yields for ^{6}Dy using synchrotron radiation induced selective photoionization method. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 407, 210-216.
65. Yılmaz, R. (2012). Measurements of $L_{2,3}$ subshells X-ray production cross-sections and average $L_{2,3}$ subshells fluorescence yield values of some elements in the atomic number range $70 \leq Z \leq 78$. *Radiation Physics and Chemistry*, 81, 1539-1542.
66. Yılmaz, R. (2014). Measurements of K-shell X-ray production cross-sections and fluorescence yields for Cr, Mn, Fe and Co elements. *Radiation Physics and Chemistry*, 96, 1-4.
67. Akman, F., Akdemir, F., Durak, R., Kaçal, M. R., Aksakal, O., Araz, A. (2016). Determination of $K_{\alpha,\beta}$ excitation factors in thin target for selected elements from Y to Te at 59,54 keV excitation energy. *Applied Radiation and Isotopes*, 107, 366-371.
68. Zschornack, G. (2007). *Handbook of X-ray Data*. Springer Berlin Heidelberg Press, Newyork.
69. Evans, J. (2017). *X-ray Absorption Spectroscopy for the Chemical and Materials Sciences*. Wiley Press, United Kingdom.
70. Aylikci, N. K. (2009). Zn ve Co Elementlerinin Oluşturduğu Alaşımların X-Işını Floresans Parametreleri Üzerine Alaşım Etkisi, Yüksek Lisans Tezi, *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, Trabzon.

71. Murray, R., Holbert, K. (2015). *Nükleer Süreçlerin Kavramları, Sistemleri ve Uygulamalarına Giriş* (7. Basımdan Çeviri). Nobel Yayınevi, Ankara.
72. Debertin, K. ve Helmer, R. G. (1988). Gamma and X-ray Spectrometry with Semiconductor Detectors. *Elsevier Science Publishes*, New York, U.S.A., 1-100.
73. Kaya, S. (2007). Bazı Saf Metaller İçin K_{β}/K_{α} Şiddet Oranı ve Floresans Tesir Kesitlerinin Tayini, Yüksek Lisans Tezi, *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, Trabzon.
74. Yavuz, İ. (2012). Atom Numarası $38 \leq Z \leq 101$ Olan Elementler İçin N Tabakasına Ait Ortalama Floresans Verimlerinin Hesaplanması, Yüksek Lisans Tezi, *Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara.
75. Tertian, R. ve Claisse, F. (1982). Principles of Quantitative X-ray Fluorescence Analysis. *Heyden and Son Ltd.*, London, U. K., 3-24.
76. Brower, P. (2003). Theory of XRF- Getting Acquainted with the Principles. *Panalytical B. W. Netherlands*.
77. Aylikci, V. (2006). Hf Elementi Bileşiklerinin X-Işını Floresans Parametreleri Üzerine Kimyasal Etki, Yüksek Lisans Tezi, *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, Trabzon.
78. Ertuğral, B. (2004). K Tabakasından L Tabakasına Boşluk Geçiş İhtimaliyetinin Ölçülmesi ve Hesaplanması, Doktora Tezi, *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, Trabzon.
79. Lemberge, P. (2000). Quantitative X-Ray Fluorescence Analysis Using Partial Least Squares and Monte Carlo Simulations, Universiteit Antwerpen, Faculteit Wetenschappen, Departement Scheikunde, *Phd Thesis*.
80. Schramm, R. (2000). Why Using XRF for Analysis?, *Spectro Analytical Instruments*.
81. Brundle, C. R., Ewens, C. A. ve Wilson Jr. S. (1992). Encyclopedia of Materials Characterization, *Butterworth-Heineman*, Newyork.
82. Apaydın, G. (2006). $65 \leq Z \leq 92$ Bölgesinde Bazı Elementlerin K ve L X-ışını Floresans Parametrelerinin Ölçülmesi, Doktora Tezi, *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, Trabzon.
83. Çolak, S. (1992). Zr ve Nb'a ait K Tabakası Floresans Tesir Kesitlerinin Enerji ile Değişiminin Araştırılması, Y. Lisans Tezi, *Atatürk Üni. Fen Bil. Enstitüsü*, Erzurum.

84. Scofield, J. H. (1973). Exchange Corrections of K X-ray Emission Rates. *Physical Review A*, 9, 1041-1049.
85. Krause, M. O. (1979). Atomic radiative and radiationless yields for K and L shells. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8(2), 307-327.
86. Broll, N. (1986). Quantitative X-Ray Fluorescence Analysis. Theory and practice of the fundamental coefficient method. *X-Ray Spectrometry*, 15, 271-285.
87. Berger, M. J., Hubbell, J. H. (1999). XCOM: Photon cross sections on a personnel computer (version 1.2), NBSIR85-3597, National Bureau of Standards, Gaithersburg, MD, USA, for version 3.1, see <[http:// physics.nist.gov/](http://physics.nist.gov/)>.
88. Öztürk, O. (2012). Yarıiletken Dedektörler, *Fen Bilimleri Enstitüsü*, Yüksek Lisans Tezi. S. (26-27), Kilis.
89. Scofield, J. H. (1974). Relativistic Hartree-Slater Values for K and L Shell X-ray Emission Rates, *Atomic Data and Nuclear Data Table*, 14, 121-137.
90. Krause M. O. ve Oliver, J. H. (1979). Natural Widths of Atomic K and L Levels, K X-Ray Lines and Several KLL Auger Lines, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8, 329-338.
91. Tsoufanidis, N. (1995). Measurement and Detection of Radiation, *Taylor&Francis*, Washington.
92. Atkins, P. ve Jones, L. (1999). Temel Kimya, Kılıç, E., Köseoğlu, F. ve Yılmaz, H., 2. Cilt, Third Edition, *W. H. Freeman and Company*, Newyork, USA.
93. Tunalı, N. K. ve Özkar, S. (2009). *Anorganik Kimya*, (Yedinci Baskı). Türkiye: Gazi Kitabevi, Ankara.
94. Aylıkçı, V. (2012). Bazı Elementlerin Bileşiklerinn K ve M X-ışını Floresans Parametreleri Üzerine Kimyasal etki, Doktora Tezi, *Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, Trabzon.
95. Aylıkçı, V., Kahoul, A., Aylıkçı, N. K., Tıraşoğlu, E., Karahan, İ. H. (2014). Empirical, Semi-Empirical and Experimental Determination of K X-Ray Fluorescence Parameters of Some Elements in the Atomic Range $21 \leq Z \leq 30$. *Spectroscopy Letters*, 48(5), 331-342.
96. Perkins, S. T., Cullen, D. E., Chen, M. H., Hubbell, J. H, Rathkopf, J., Scofield, J. H. (1991). Tables and Graphs of Atomic Subshell Relaxation Data Derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library $Z=1-100$, *Lawrence Livermore National Laboratory Report, UCRL 50400*, vol. 30, Livermore.

97. Campbell, J. L., Papp, T. (2001). Widths of the atomic K–N7 levels. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 77, 1–56.
98. Cooper, J. N. (1944). Auger Transitions and Widths of X-Ray Energy Levels. *Physical Review*; 65, 155.
99. Kündeyi, K., Aylıkçı, N. K., Tıraşoğlu, E., Kahoul, A., Aylıkçı, V. (2017). The ratios of emission probabilities of Auger electrons for 3d transition elements at 59,5 keV. doi:10.1063/1.4976358.
100. Kündeyi, K., Aylıkçı, N. K. (2019). The Semi- Empirical Determination of $K\alpha$ X-ray, KLL Auger Line and L subshell level widths for 3d transition elements at 59,5 keV. Celal Bayar University, *Journal of Science*, 15, 57-64.



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : KÜNDEYİ Kadriye
 Uyuşu : T.C.
 Doğumtarhiveyeri : 08.07.1983, Dörtıyol
 Telefon : -----
 Faks : -----
 e-mail : kadriye.cem.kk@gmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Yükseklisans	İskenderun Teknik Üniversitesi/ Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalı	Devam ediyor
Lisans	Erciyes Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2008
Lise	Yabancı Dil Ağırlıklı Lise(Dörtıyol)	2001

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2016-Halen	TEK KAMPÜS OKULLARI	Fizik Öğretmeni

Yabancı Dil: İngilizce

Yayınlar

1. Kündeyi Kadriye, KÜP AYLKCI NURAY, TIRAŞOĞLU ENGİN, Kahoul Abdelhalim, AYLKCI VOLKAN; The ratios of emission probabilities of Auger electrons for 3d transition elements at 59,5 keV; TFD 32; doi: 10.1063/1.4976358.
2. Kündeyi Kadriye, KÜP AYLKCI NURAY, TIRAŞOĞLU ENGİN, Kahoul Abdelhalim, AYLKCI VOLKAN; Determination of natural line widths of $K\alpha$ X-ray lines for some elements in the atomic range $50 \leq Z \leq 65$ at 59,5 keV; TFD32; doi: 10.1063/1.4976359.
3. Kündeyi Kadriye, KÜP AYLKCI NURAY; The semi-empirical determination of $K\alpha$ X-ray, KLL Auger Line-Widths and the L subshell level widths of 3d transition elements at 59,5 keV; Celal Bayar Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi; 2019.

DİZİN

A	K
ABSTRACT, v, 72	K kabuğu, 9, 10, 20, 28, 32, 51, 53, 54, 55
ARAŞTIRMA BULGULARI, 46, 72	KAYNAKLAR, 63, 72
Auger Geçişleri, 23, 72	Koherent saçılma, 18
	K_{β}/K_{α} , 9, 29, 47, 48, 64, 65, 67
C	L
Compton saçılma, 15	L alt kabuk, 5, 11
Coster-Kronig Geçişleri, 22, 72	LMTO, 3
Ç	Ö
Çift Oluşumu, 17	ÖZET, iv, 72
ÇİZELGELERİN LİSTESİ, ix	ÖZGEÇMİŞ , 72
çizgi genişlikleri, iv, 9, 32, 51, 56, 59	
E	S
ECPSSR, 6, 9, 68	seviye genişlikleri, 8, 9, 11, 32, 51
EDXRF, 10, 28, 43	SİMGELER VE KISALTMALAR, 72
ETİK BEYAN , 3	SONUÇ VE ÖNERİLER, 62
F	Ş
floresans verim, xiii, 5, 7, 10, 22, 24, 32	ŞEKİLLERİN LİSTESİ, x, 72
Fotoelektrik olayı, 72	şiddet oranı, 31
FWHM, xiv, 8, 35, 44	
G Şekil	T
Sayfa	tesir kesiti, 2, 18, 19, 28, 32
	TEŞEKKÜR, 72
Geçiş Elementlerinin Genel Özellikleri, 41, 72	U
GENEL BİLGİLER, 72	Ultra-LEGe, 33, 34, 36, 41
GİRİŞ, 1, 72	
I	X
IPA, 9	X- ışını, 49
	X-ışını, xiv, 1, 10, 12, 13, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28,
İ	31, 32, 36, 39, 43, 44, 47, 48, 49, 51, 59
İÇİNDEKİLER, vii	X-ışını şiddet oranları, xiii, 5, 6, 8, 9, 72
inkoherent saçılma, 18	XRF, iv, xiv, 26, 27, 69, 72
	XRP, xiv, 9



TEKNOVERSITE





teknoversite **AYRICALIĞINDASINIZ**

İSTE

