



TC.

KAHRAMANMARAŞ SÜTÇÜ İMAM ÜNİVERSİTESİ
FENBİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**K ve Ca BİLEŞİKLERİ İÇİN K- L BOŞLUK GEÇİŞ
İHTİMALİYETLERİNE KİMYASAL ETKİLERİN
BELİRLENMESİ**

Medine ERGÜVEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANA BİLİM DALI

KAHRAMANMARAŞ 2019

T.C.
KAHRAMANMARAŞ SÜTÇÜ İMAM ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**K ve Ca BİLEŞİKLERİ İÇİN K- L BOŞLUK GEÇİŞ
İHTİMALİYETLERİNE KİMYASAL ETKİLERİN
BELİRLENMESİ**

Medine ERGÜVEN

Bu tez,

Fizik Ana Bilim Dalında

YÜKSEK LİSANS

derecesi için hazırlanmıştır.

KAHRAMANMARAŞ 2019

Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü öğrencisi Medine ERGÜVEN tarafından hazırlanan “K ve Ca Bileşikleri için K-L Boşluk Geçiş İhtimaliyetlerine Kimyasal Etkilerin Belirlenmesi” adlı bu tez, jürimiz tarafından 21 /08/2019 tarihinde oy birliği / oy-çokluğu ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof.Dr.AdnanKÜÇÜKÖNDER(DANIŞMAN)



Fizik, Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi

Doç.Dr. Burhanettin Göker DURDU (ÜYE)



Fizik, Kilis 7 Aralık Üniversitesi

Dr.Öğr.Üyesi Erdal KÜÇÜKÖNDER (ÜYE)

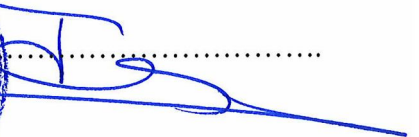
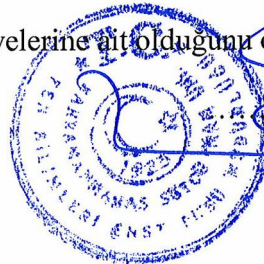


Fizik, Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylım.

Prof. Dr. Mustafa YAZICI

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü



TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada, alıntı yapılan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Medine ERGÜVEN

Bu çalışma K ve Ca bileşikleri için K-L boşluk geçiş ihtimaliyetlerinin kimyasal etkilerin belirlenmesi KSÜ BAP tarafından desteklenmiştir.

Proje No:2018/1-2 YLS

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaktan yapılan bildirişlerin, çizelge, şekil ve fotoğrafların kaynak gösterilmeden kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

K ve Ca BİLEŞİKLERİ İÇİN K-L BOŞLUK GEÇİŞ İHTİMALİYETLERİNE

KİMYASAL ETKİLERİN BELİRLENMESİ

(YÜKSEK LİSANS TEZİ)

MEDİNE ERGÜVEN

ÖZET

K ve Ca bileşikleri için K tabakasından L tabakasına boşluk geçiş ihtimaliyetleri ve Auger elektronlarının yayınlama ihtimaliyetlerinin oranı ve K tabakası flüoresans verimi X-ışınları çizgi şiddetleri kullanılarak çalışıldı. Bu çalışmada K tabakası flüoresans verimleri ve deneysel şiddet oranları kullanıldı. Bulunan değerler K ve Ca elementlerinin teorik değerleriyle karşılaştırıldı. K ve Ca bileşikleri için literatürde herhangi bir çalışmaya rastlanmadığından dolayı sonuçlarla ilgili karşılaştırma yapılamadı. Yapılan çalışmada K ve Ca bileşikleri için Auger elektronlarının K-L boşluk geçiş ihtimaliyetlerinin kimyasal etkiye hassas olduğu görüldü. K ve Ca bileşikleri için Auger elektron emisyon ihtimaliyetleri oranı ve boşluk geçiş ihtimaliyetleri bu çalışmada ilk kez rapor edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Flüoresan verim, Auger elektron, Coster Kronig geçiş, Boşluk geçişi

Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı, Ağustos / 2019

Sayfa Sayısı: 36

DANIŞMAN: Prof. Dr. Adnan KÜÇÜKÖNDER

DETERMINATION OF RATIOS of CHEMICAL EFFECTS ON K–L SHELL VACANCY TRANSFER PROBABILITY FOR K AND Ca COMPOUNDS

(M.Sc.THESIS)

MEDİNE ERGÜVEN

ABSTRACT

Ratios of emission probabilities of Auger electrons and the vacancy transfer probabilities from K to L shell for K ve Ca compounds were studied using X-rays line intensities and the K shell fluorescence yields. We were used the experimental intensity ratios and K shell fluorescence yields .The obtained values were compared with the other theoretical values of K ve Ca elements.We could not make any comparison of the results of the K ve Ca compounds since there are no experimental and theoretical values for these compounds in the literature. The Ratios of emission probabilities of Auger electrons and the vacancy transfer probabilities for K ve Ca compounds are being reported here for the first time .

Keywords: Fluorescence yield, Auger electrons , Vacancy transfer , Coster Kronig

University of Kahramanmaraş Sütçü Imam

Institute of Natural and Applied Sciences

Department Of Physics

Pages: 36

Supervisor: Prof. Dr. Adnan KÜÇÜKÖNDER

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tezimin hazırlanması sürecinde tecrübe ve bilgisi ile bana yol gösteren değerli tez hocam Prof. Dr. Adnan KÜÇÜKÖNDER'e çok teşekkür ederim. Ayrıca öğretim görevlisi Saniye TEKEREK'e en içten teşekkürlerimi sunarım. Bilim yolunda yol alan ve makalelerinden faydalandığım tüm bilim insanlarına, teşekkür ederim. Eğitim ve öğretim hayatı boyunca bana yol gösteren tüm öğretmenlerime çok teşekkür ederim. Arkadaşıma, öğrencilerime teşekkür ederim. Dünyada varlığımdan dolayı ilk önce Allah'a şükreder sonra da anne ve babama teşekkür ederim.

Medine ERGÜVEN
Kahramanmaraş 2019

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	ii
İÇİNDEKİLER	iv
ÇİZELGELER DİZİNİ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
SEMBOLLER DİZİNİ	viii
1.GİRİŞ	1
1.1. Elektromanyetik Dalgaların Spektrumu	1
1.1.1. Radyo dalgaları	2
1.1.2. Mikrodalgalar	2
1.1.3. Kızılötesi dalgalar	2
1.1.4. Görünür dalgalar	3
1.1.5. Morötesi dalgalar	3
1.1.6. X-Işınları	3
1.1.6. 1. Karakteristik X-ışınları	4
1.1.6.1.1. Karakteristik X-ışınlarının sayılması	5
1.1.7. Gama (γ) Işınları	7
1.1.8. Kozmik Işınlr	7
1.2. Kuantum Sayıları	7
1.3. Moseley Kanunu	9
1.4. Elektromağnetik Radyasyonun Madde ile Etkileşimi	11
1.4.1. Elektromağnetik Radyasyonun Soğurulması	11
1.4.1.1. Fotoelektrik olay	11
1.4.1.2. Çift oluşumu	12
1.4.2. Elektromağnetik Radyasyonun Saçılması	13
1.4.2.1. Koherent saçılma	13
1.4.2.2. İnkoherent saçılma (Compton saçılma)	13
1.5. Auger Olayı	14
1.6. X-ışınlarının Özellikleri ve Madde ile Etkileşmesi	15
1.7. Kimyasal Bağlar	15
1.7.1. Bağ çeşitleri	16
1.7.1.1. İyonik bağ	16
1.7.1.2. Kovalent bağ	17
1.7.1.3. Metalik bağ	17
1.7.1.4. Koordinatif bağ ve koordinasyon bileşikleri	17
1.7.2. Bağ enerjileri ve bağ uzunlukları	18
1.7.3. Bağ açıları	18
1.7.4. Hibritleşme	19

1.8. Kimyasal Durumun X-Işınları Üzerine Etkileri	20
1.8.1. Kimyasal kayma	20
1.8.2. Kimyasal etki.....	21
1.9. Flöresans Verim ve Coster-Kronig Geçişler	22
1.10. Tesir Kesitleri	23
1.11. Atomik Tabakalar Arası Boşluk Geçışı	23
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	25
3. MATERYAL VE METOT.....	26
5. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	27
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	29
KAYNAKLAR.....	31
ÖZGEÇMİŞ.....	36

ÇİZELGELER DİZİNİ

Sayfa No

Çizelge 1.1. X-ışını diyagram çizgilerinin eski (Siegbahn) ve yeni (IUPAC) gösterimleri (Van Grieken ve Markowicz,1993).	10
Çizelge 4.1. K bileşiklerinin K tabakasından L tabakasına η_{KL} boşluk geçişi ve Auger yayımlanma ihtimaliyeti.....	27
Çizelge 4.2. Ca bileşiklerinin K tabakasından L tabakasına η_{KL} boşluk geçişi ve Auger yayımlanma ihtimaliyeti	28



ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

Şekil 1.1. Karakteristik X-ışını oluşumu.....	4
Şekil 1.2. Orbitaler arasındaki elektron geçişi ve oluşan X-ışınlarının isimlendirilmesi ...	5
Şekil 1.3. K ve LX Işınlarını oluşturan elektron geçişleri.....	6
Şekil 1.4. Elektromanyetik spektrumlar	8
Şekil 1.5. Fotoelektrik olay	11
Şekil 1.6. Çift oluşumu.....	12
Şekil 1.7. Compton olayı.....	13
Şekil 1.8. Auger Elektron oluşumu	14
Şekil 1.9. K tabakasında boşluk oluşturulması	24
Şekil 1.10. K tabakasındaki boşluğun L tabakasına geçmesi.....	24

SEMBOLLER DİZİNİ

c	: Işık hızı
e	: Elektronun yükü
G	: Geometrik faktör
h	: Plank sabiti
I	: Radyasyon şiddeti
m₀	: Durgun kütle
M	: Atomik kütle
N	: Avagadro sayısı
t	: Birim yüzeydeki numune kalınlığı
Z	: Atom numarası
k	: Sabit
λ	: Dalga boyu
λ'	: Saçılan fotonun dalga boyu
μ	: Lineer soğurma katsayısı
μ/ρ	: Kütle soğurma katsayısı
ν	: Frekans
σ_{Kα}	: K tabakası fotoionizasyon tesir kesiti
σ_{ts}	: Toplam atomik saçılma tesir kesiti
σ_t	: Toplam atomik soğurma tesir kesiti
Ψ	: Dalga Fonksiyonu
ω_K	: K Tabakası Flüoresans Verimi
f_{ijx}	: Coster-Kronig Geçiş İhtimaliyeti
η_{KL}	: L Tabakasından K Tabakasına Boşluk Geçiş İhtimaliyeti
I₀	: Gelen Radyasyon şiddeti
σ_K	: K Tabakası Fotoiyonizasyon Tesir Kesiti
f_{Ki}	: i=α,β K X-ışını Yayılma Kesri
E_F	: Fermi Enerjisi
CK	: Coster-Kronig

1.GİRİŞ

Atom rastgele bir yolla uyarıldığı zaman atomun elektronları ışımalı ve ışımasız geçişler yaparak yeniden düzenlenirler. Elektronların tekrar düzenlenmesi atom numarası, enerji seviyelerinin ortalama ömürleri ve tabakalar arası boşluk geçişi ihtimaliyeti gibi bazı parametrelere bağlıdır. Elektronların düzenlenmesi sırasında atomdan karakteristik X ışınları yayımlanmaktadır. Yayımlanan karakteristik X ışınlarına ait şiddet oranları, atomun yapısı elektronların düzenlenişi, enerji seviyeleri, kimyasal etkileri, ışımalı-ışımasız geçiş ihtimaliyetleri boşluk geçiş ihtimaliyetleri hakkında bilgi verir (Ertuğral, 2004).

Atomik seviye genişliği ile ilgili güvenilir veriler flüoresans verim, Auger verimi, Coster-Kronig verim, ışımalı ve ışımasız boşluk geçiş ihtimalleri, soğurma kıyısı ve seviye ömürleri gibi flüoresans parametrelerin belirlenmesi için oldukça önemlidir. Parametrelerin tam bilinmesi nükleer fiziğin temel çalışmalarında, element analizleri, kanser terapisi, atom ve molekül fiziği, tarım, adli tıp ve radyasyon fiziği gibi pek çok alanda gerekli ve önemlidir (Turhan, 2011).

1.1. Elektromanyetik Dalgaların Spektrumu

Işığın renginin dalga boyuna göre dizilmesi anlamında kullanılan spektrum, en genel manada, parçacık ve fotonların enerjilerine, frekanslarına, dalga boyuna veya saçılma açılarna göre şiddet dağılımlarının oluşturduğu desenler olarak tanımlanır. Elektromanyetik dalgalar periyodik olarak değişen, hem elektriksel hem de manyetik bileşenlerden oluşur. Dalgaların 1 saniyedeki titreşimine frekans denir ve Hertz (Hz) birimi ile ifade edilir. Kiloherz (KHz = bin Hertz), Megahertz (MHz = milyon Hz) ve Gigahertz (GHz = Milyar Hz) olarak katları ifade edilir (Bilgili ve ark., 2006). İnsanların maruz kaldığı Elektromanyetik dalgalar güçlerine bağlı olarak enerjilerini, fotonlar yoluyla, değişik oranlarda canlıya aktarmaktadır. Dokuya etki derecesine göre, iyonlaştıran (ionizing) ve iyonlaştırmayan (non-ionizing) ışınım olarak iki sınıfta incelenir. Noniyonize radyasyonların foton enerjileri 12 elektron volttan daha düşük olup iyonize radyasyonun sınırı olarak kabul edilir. Bu enerji, moleküllerin iyonizasyonunu indüklemek için çok düşük olup aynı zamanda kimyasal bağların kırılması için de zayıftır (Verschaeve ve Maes, 1998). Elektromanyetik titreşimler dalga boylarına göre radyo dalgaları, kızılötesi, görülebilen ışık, mor ötesi, X ve gama ışını ve kozmik ışın adını alırlar. Elektromanyetik spektrumu gösteren elektromanyetik dalgaların çeşitleri, dalga boyu, enerji ve frekanslara göre Şekil 1.1 verilmiştir.

SPEKTRUM		ENERJİ (eV)	FREKANS	DALGABOYU (m)	
X I Ş I N L A R I	Kozmik Işınlr	10^{13}	10^{27}	10^{-19}	
		10^{12}	10^{26}	10^{-18}	
		10^{11}	10^{25}	10^{-17}	
		10^{10}	10^{24}	10^{-16}	
	γ Işınları	10^9	10^{23}	10^{-15}	
		10^8	10^{22}	10^{-14}	
		10^7	10^{21}	10^{-13}	
		10^6	10^{20}	10^{-12}	
	10^5	10^{19}	10^{-11}		
	(XRS)	10^4	10^{18}	10^{-10}	
Mor Ötesi Işık(UV)		10^3	10^{17}	10^{-9}	Mor (4×10^{-7} - $4,5 \times 10^{-7}$)
		10^2	10^{16}		Mavi ($4,5 \times 10^{-7}$ - 5×10^{-7})
Görünür Işık		10	10^{15}	10^{-8}	Yeşil (5×10^{-7} - $5,75 \times 10^{-7}$)
				10^{-7}	Sarı ($5,8 \times 10^{-7}$ - $5,9 \times 10^{-7}$)
Kırmızı Ötesi Işık (IR)		1	10^{14}	10^{-6}	Turuncu ($5,9 \times 10^{-7}$ - $6,5 \times 10^{-7}$)
		10^{-1}	10^{13}	10^{-5}	Kırmızı ($6,5 \times 10^{-7}$ - $7,5 \times 10^{-7}$)
		10^{-2}	10^{12}	10^{-4}	
		10^{-3}	10^{11}	10^{-3}	
Mikro.Dalgalar		10^{-4}	10^{10}	10^{-2}	
		10^{-5}	10^9	10^{-1}	
D	TV,FM				
A	Kısa Dalga	10^{-6}	10^8	10^0	
R	L	10^{-7}	10^7	10^1	
A	G	10^{-8}	10^6	10^2	
D	A	10^{-9}	10^5	10^3	
Y	L		10^4	10^4	
O	A	Orta Dalga	10^{-10}		
	R	Uzun Dalga	10^{-11}	10^3	
	I			10^6	
Elektrik Dalgaları					

Şekil 1.1.Elektromanyetik spektrumlar

1.1.1. Radyo Dalgaları

En uzun dalga boyuna sahip olduklarından en düşük enerjiye ve sıcaklığa da sahipler. Radyo dalgaları her yerde bulunabilir: Bu dalgaların kaynakları elektrik titreşimleridir. Telefon, televizyon ve radyoda bağlantı kablosu gerektirmeden kullanımı sağlar. Önemli biyolojik etkileri yoktur (Palamutcu ve ark., 2009).

1.1.2. Mikrodalgalar

0,3 m'den 10^{-3} m'ye kadar dalga boylarına ve 10^9 Hz'den 3×10^{11} Hz'e kadar frekanslara sahiptirler. Bu dalgalar, atomik ve moleküler yapının ayrıntılarının çözülmesinde olduğu kadar, radarlar ve diğer iletişim sistemlerinde de kullanılırlar. Bu dalgalar da elektronik aygıtlar tarafından üretilir. Mikrodalga bölgesine UHF (ultra high frequency) adı da verilir (Orhun ve Tanışlı, 2007). Mikrodalgaların insan vücudu üzerindeki olumsuz etkileri arasında göz merceğinde saydamlığın bozulması, sinir sisteminde ve dolayısı ile EEG (Elektroensefalografi) desenlerinde değişimler sayılabilir. Çevrede 10 mW/cm^2 'den şiddetli mikrodalga ışımlar varsa, bu ışımların canlılar için uygun olmadığı kabul edilmektedir. Bu olumsuz etkileri yanında, frekansı 2,45 GHz olan mikrodalgalar, ısıtma amacı ile fizik tedavide kullanılmaktadırlar (Düzgün, 2009).

1.1.3. Kızılötesi Dalgalar

10^{-3} m'den $7,8 \times 10^{-7}$ m'ye kadar dalga boylarına ve 3×10^{11} Hz'den 4×10^{14} Hz'e kadar frekanslara sahiptirler. Bu bölge üçe ayrılır: 10^{-3} m'den 3×10^{-5} m'ye uzak kızılötesi bölgesi, 3×10^{-5} m'den 3×10^{-6} m'ye orta kızılötesi bölgesi, 3×10^{-6} m'den $7,8 \times 10^{-7}$ m'ye yakın kızılötesi adı verilir. Bu dalgalar, moleküller ve sıcak cisimler tarafından üretilir. Endüstri, tıp, astronomi tarım v.b. alanlarda çoklukla kullanılırlar (Orhun ve ark, 2007).

1.1.4. Görünür Dalgalar

İnsan gözünün görebildiği spektrum kısmı olarak tanımlanmaktadır. Işık, atom ve moleküllerdeki elektronların yeniden düzenlenmeleri ile oluşur. Görünür ışığın bazı dalga boyları, mordan ($\lambda \sim 4 \times 10^{-7}$ m) kırmızıya ($\lambda \sim 7,5 \times 10^{-7}$ m) değişen renklerle sınıflandırılır. Gözün duyarlılığı dalga boyunun bir fonksiyonudur. Duyarlılık $5,8 \times 10^{-7}$ m (sarı-yeşil) civarındaki bir dalga boyunda maksimum olmaktadır (Ertuğral, 2004).

1.1.5. Morötesi Dalgalar

Dalga boylan 60nm (6×10^{-8} m) - 380nm (3.8×10^{-7} m) arasında olan bu ışınlar güneş spektrumunda bulunurlar. Gaz boşalma tüpleri ile, metallere orta hızda elektron çarpması ile elde edilirler. Atomlarda elektronik enerji düzeyleri arasındaki geçişlerle ilgili olan morötesi ışınları, fotoğraf plakları ile elektronik devre elemanları üzerine etkileri ile dedekte edilirler.

Dünyadaki ilk organik moleküllerin sentezinden, o zamanlar ozonsuz olan atmosfer tabakasını geçip yere ulaşan güneş ışığındaki morötesi ışınların sorumlu olduğu ileri sürülmektedir. Sonraları oluşan ozon tabakasının, güneşten gelen morötesi ışınları büyük oranda soğurarak, yerküre üzerindeki hayatı koruyan bir kılıf olduğu bilinmektedir. Ancak son yıllarda, çevre kirliliğinin bir sonucu olarak ozon tabakasının yer delindiği, yerküredeki hayatın morötesi ışınların tehdidi altında olduğu kabul edilmektedir.

Uzmanlarca az miktarda morötesi ışın alınması, D vitamini sentezi ve kemik gelişimi için gerekli görülmektedir. Ancak fazla alınmaları zararlıdır Protein ve nükleik asitler, morötesi ışınları karakteristik bir şekilde soğurduklarından, şiddetli morötesi ışınlarının bazı deri kanserlerine neden olduğu saptanmıştır. Civa, arklambalarından elde edilen morötesi ışınlar kliniklerde, yiyecek endüstrisinde virüs ve bakteri öldürmede kullanılmaktadır (Düzgün, 2009).

1.1.6. X-Işınları

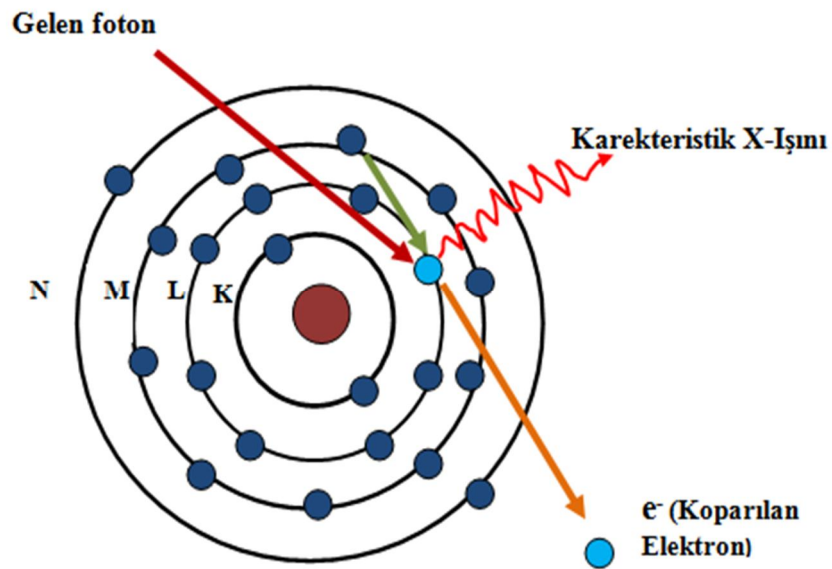
1895 yılında Alman fizikçi Wilhelm Conrad Röntgen gaz deşarj tüpünden yayılan ve ışık geçirmez bir kılıf içindeki fotoğraf filmini karartan yeni bir ışın keşfetti ve o zamanlarda nitelikleri bilinmediği için bunlara X-ışınları adı verildi.

X-ışınları 10^{-8} m ile 10^{-13} m aralığında dalga boylarına sahip olan elektromanyetik dalgalar veya foton demetidir. X-ışınlarının genel kaynağı bir metal hedefi bombardımana tabi tutan yüksek enerjili elektronların yavaşlamasıdır. Birçok kullanım alanının yanı sıra X-ışınları tıpta bir tanı aracı olarak ve belirli kanser türlerinin tedavisinde kullanılmaktadır. X-ışınları canlı dokulara ve organizmalara zarar verici veya öldürücü etki yapmaktadır. X ışınları, dalga boylarının katı cisimlerde atomlar arası uzaklığı (0,1 nm) mertebesinde olmasından dolayı, kristal yapının incelenmesinde de kullanılır (Şahin, 2013).

1.1.6. 1. Karakteristik X-Işınları

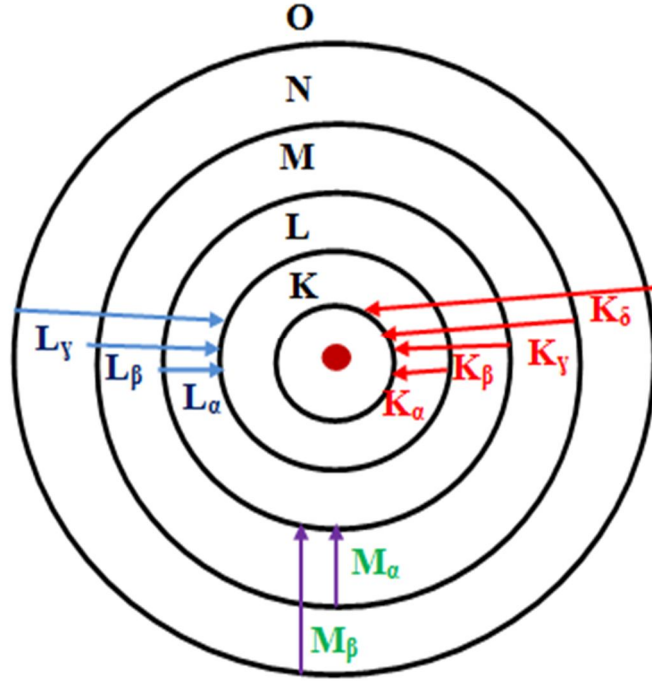
Uyarılan bir atomun, alt tabakasından bir elektron söküldüğünde meydana gelen boşluk, daha yüksek tabakalardaki bir elektron tarafından 10^{-8} ile 10^{-13} saniye arasında doldurulur. Elektronların bu geçişleri sırasında yayımlanan fotonlar karakteristik X ışınları adını alır (Bkz. şekil 1.2). Karakteristik X-ışınları, elektronik geçişlere göre farklı enerji ve isime sahiptir. Eğer elektron doldurulan tabaka K tabakası elektron boşluklarının doldurulması ile oluşan K X-ışınları adını alırken, L tabakasına elektron geçişleri ile oluşan ışınlar L X-ışınları adını alır. Ayrıca K'da meydana gelen boşluğun L tabakası elektronu doldurmuş ise K_{α} , M tabakası elektronu tarafından doldurulmuş ise K_{β} X-ışınları adını alır (Küçükönder ve ark, 1999).

Bu geçişler ile ilgili Siegbahn gösterimler çizelge 1.1, elektron geçişleri'nin şematik gösterimi şekil 1.3 ve şekil 1.4 verilmiştir.



Şekil 1.2. Karakteristik X-ışını oluşumu

Yayımlanan tüm X-ışını fotonlarının enerjileri elektronik seviyeler arasındaki enerji farkı ile orantılı olduğundan verilen bir elementten elde edilen karakteristik X-ışını spektrumunda ki çizgiler o elementi karakterize ederler. K_{α} X-ışınlarının şiddetinin, K_{β} X-ışınlarının şiddetine göre daha yüksek olmasının sebebi K tabakasında oluşacak bir elektron boşluğunun L tabakasından gelecek bir elektronla doldurulma olasılığının, M tabakasından gelecek bir elektronla doldurulma olasılığından daha yüksek olmasıdır (Tuzluca, 2007).



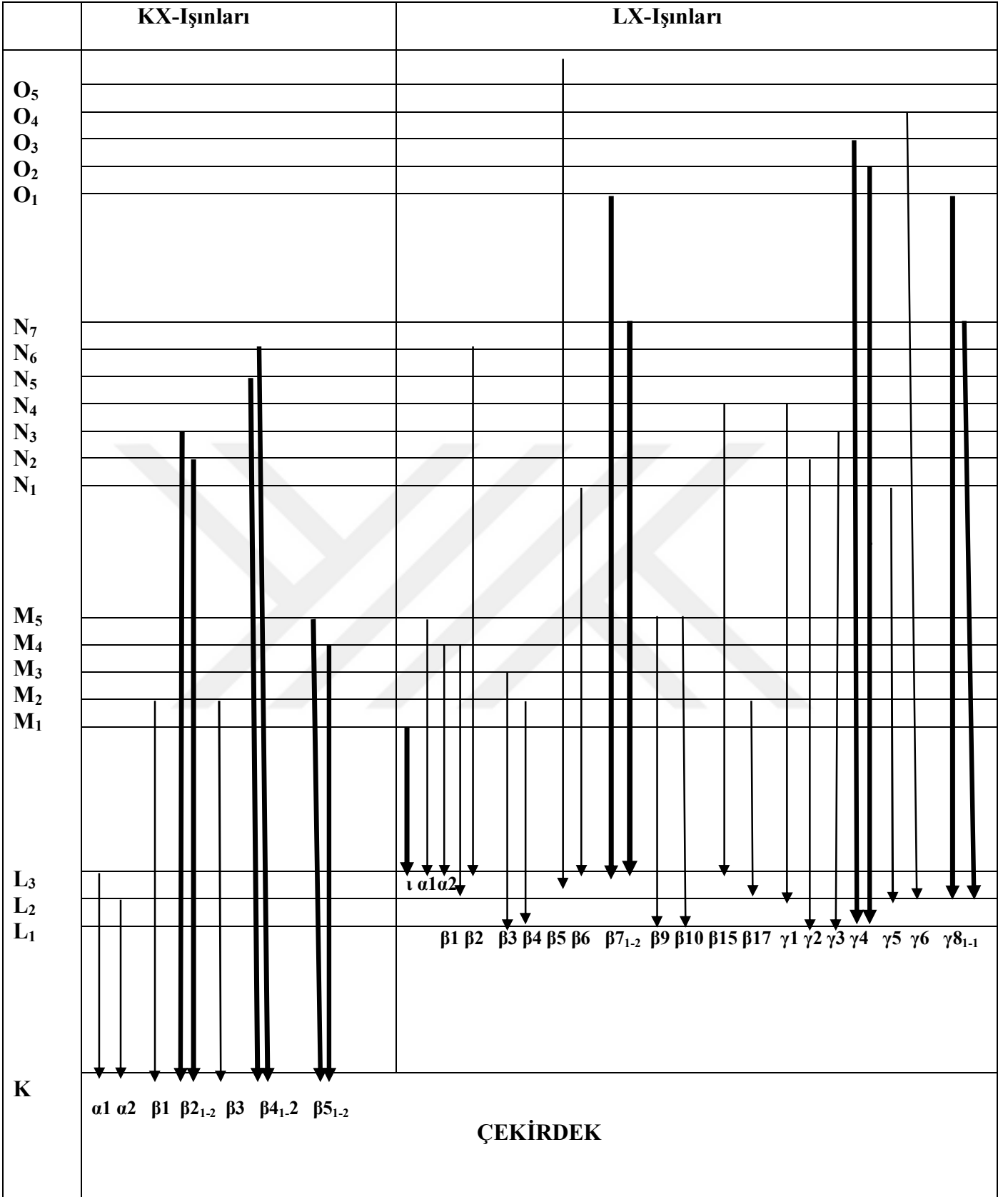
Şekil 1.3. Orbitaler arasındaki elektron geçişi ve oluşan X-ışınlarının isimlendirilmesi

1.1.6.1.1. Karakteristik X-Işınlarının Sayılması

Elementlerin karakteristik X-ışınlarının sayılması birçok araştırma alanı için önemlidir. X-ışını spektrumlarını elde etmek için çeşitli detektörler kullanılmaktadır. Sayaç seçiminde bazı faktörler önemlidir; bunlar dedektör tipi, ayırma gücü ve hassas olduğu enerji bölgesidir. Bunlardan; ayırma gücü en yüksek sayaçlar, yarı iletken sayaçlardır. Elementler tarafından yayımlanan karakteristik X-ışınları sintillasyon veya orantılı sayaçlarla sayılabilir. Fakat yarı iletken sayaçlarda ayırma gücünün büyük olması, istenilen geometrik şeklin verilebilmesi, iyon çifti hasıl etmek için harcanan enerjinin düşük olması bunlara olan ilgiyi ve kullanım alanını arttırmıştır (Durdu, 2010).

1.1.7. Gama (γ) Işınları

Radyoaktif izotopların çekirdek dönüşümlerinde ortaya çıkan ışınlarının dalga boyları 10^{-14} - 10^{-10} m arasındadır. Girginlikleri çok fazladır. İyonlaşma odaları ve fotoğraf kağıtlarına etkileri ile saptanabilirler. Gama ışınlarının özellikleri ve etkileri X ışınları ile hemen hemen aynıdır (Pehlivan, 1989).



Şekil 1.4. K ve L X-Işınlarını oluşturan elektron geçişleri

1.1.8. Kozmik Işımlar

Bu ışınların, enerjileri oldukça büyük ve yoğunluğu yüksektir. Uzaydan atmosfere her saniyede, yaklaşık 10^9 eV enerjili ve hepsi proton olan 2×10^8 civarında kozmik ışın parçacıkları gelir. Bunlar atmosferdeki azot ve oksijen gibi atomlarla etkileşerek ikincil parçacıklar meydana getirirler. Uzaydan gelen orjinal kozmik ışın parçacıklarının hemen hepsi deniz seviyesinde kaybolur. Yeryüzündeki kozmik ışın dozu ikincil parçacıklardan meydana gelir (Şahin, 2013).

1.2. Kuantum Sayıları

Elektronlar çekirdekte uzaklık sıralamasına göre K, L, M, N,... olarak adlandırılan tabakalarda toplanmışlardır. Aynı enerjiye sahip elektronlar aynı tabakada bulunurlar. Herhangi bir tabakadaki elektronlar alt tabaka, açısal momentumu ve spin yönüyle sınıflandırılırlar. Bu parametrelere kuantum sayıları denir. Atomda aynı kuantum sayısına sahip iki elektron bulunmaz. Bu şart Pauli prensibi olarak bilinir (Beiser, 1995). (n) baş kuantum sayısıdır. 1, 2, 3, ... gibi tam değerler alır. Bu değerler aynı zamanda çekirdekte uzaklığın da bir ölçüsüdür. ℓ elektronun çekirdek çevresindeki yörünge açısal momentum kuantum sayısıdır. 0,1,2,3,...($n-1$) değerlerini alır. (m_ℓ) ise magnetik yörünge açısal momentum kuantum sayısıdır. (-10....+1) arasında ($2\ell+1$) tane tam değer alır. (s) elektronun spin açısal kuantum sayısı olduğundan +1/2 ile -1/2 değerlerini alır.

Baş kuantum sayısı için (optik gösterime göre);

$n = 1$ e K tabakası

$n = 2$ ye L tabakası

$n = 3$ e M tabakası

$n = 4$ e N tabakası

karşılık gelir. Yörünge açısal momentum kuantum sayıları da bir harf ile sembolize edilir. Eğer yörünge açısal momentum kuantum sayısı 0 ise s , 1 ise p , 2 ise d , 3 ise f , 4 ise g harfleri ile gösterilir (Agarwal, 1991).

1.3. Moseley Kanunu

Kimyasal analiz çalışmalarında X-ışını flüoresans (XRF) spektrometreleri çok önemli bir yer tutmaktadır. Her bir elementin yayımlandığı X-ışınları enerji itibarı ile bir diğerinden farklıdır. Bu fark insanlardaki parmak izlerine benzer. Bu farklılıktan, analizler yapılabilir. Elementin (bileşiğin) türünü oluşturmaya yarayan analize kalitatif analiz denir. Miktar analizi (kantitatif analiz) ise analizi yapılacak numunede element (bileşik) veya elementlerin (bileşiklerin) yüzde miktarlarını bulmaya yarar.

XRF'nin kalitatif uygulamasının temeli olan Moseley kanunu;

$$\sqrt{\nu} = \sqrt{\frac{c}{\lambda}} = k(Z - \sigma) \quad (1.1)$$

şeklindedir. Burada ν frekans (Hz), c ışık hızı (m/s), λ dalga boyu (m), k verilen bir seri için bir sabit ve σ ise perdeleme sabitidir (Şahin, 2013).

Moseley kanunu sistematik X-ışını spektral çalışmalarında önemli rol oynar. Bu spektral çizgilerin relatif şiddetleri sabit değildir çünkü spektral çizgiler hem elektronik geçiş ihtimaliyetlerine hem de numunelerin bileşimine bağlıdır (Van Grieken ve Markowicz, 1993).

Bir dış tabaka elektronun atomdan kopartılması temelde pozitif yüklü çekirdekten ne kadar etkilendiği ile yakından ilgilidir. Fakat dış elektronlar tamamen (Z) atom numarasına karşılık gelen yükün tam olarak etkisinde değildir. Daha çok etkin çekirdek yükü (Z^*) mevcuttur (Agarwal, 1991).

Çizelge 1.1. X-ışını diyagram çizgilerinin eski (Siegbahn) ve yeni (IUPAC) gösterimleri
(Van Grieken ve Markowicz, 1993)

Siegbahn Gösterimi	(IUPAC) Gösterimi	Siegbahn Gösterimi	(IUPAC) Gösterimi	Siegbahn Gösterimi	(IUPAC) Gösterimi
$K\alpha_1$	K-L ₃	$L\alpha_2$	L ₃ -M ₄	$L\beta_{17}$	L ₂ -M ₃
$K\alpha_2$	K-L ₂	$L\beta_1$	L ₂ -M ₄	$L\gamma_1$	L ₂ -N ₅
$K\beta_1$	K-M ₃	$L\beta_2$	L ₃ -N ₅	$L\gamma_2$	L ₁ -N ₂
$K\beta_2^1$	K-N ₃	$L\beta_3$	L ₁ -M ₃	$L\gamma_3$	L ₁ -N ₃
$K\beta_2^2$	K-N ₂	$L\beta_4$	L ₁ -M ₂	$L\gamma_4$	L ₁ -O ₃
$K\beta_3$	K-M ₂	$L\beta_5$	L ₃ -O _{4,5}	$L\gamma_4^1$	L ₋₁ O ₂
$K\beta_4^1$	K-N ₅	$L\beta_6$	L ₃ -N ₁	$L\gamma^5$	L ₂ -N ₁
$K\beta_4^2$	K-N ₄	$L\beta_7$	L ₃ -O ₁	$L\gamma^6$	L ₂ -O ₄
$K\beta_5^1$	K-M ₅	$L\beta_7^1$	L ₃ -N _{4,7}	$L\gamma^8$	L ₂ -O ₁
$K\beta_5^2$	K-M ₆	$L\beta_9$	L ₁ -M ₅	$L\gamma_8^1$	L ₂ -N ₄₍₇₎
L1	L ₃ -M ₁	$L\beta_{10}$	L ₁ -M ₄		
$L\alpha_1$	L ₃ -M ₅	$L\beta_{15}$	L ₃ -N ₄		

1.4. Elektromanyetik Radyasyonun Madde ile Etkileşimi

1.4.1. Elektromanyetik Radyasyonun Soğurulması

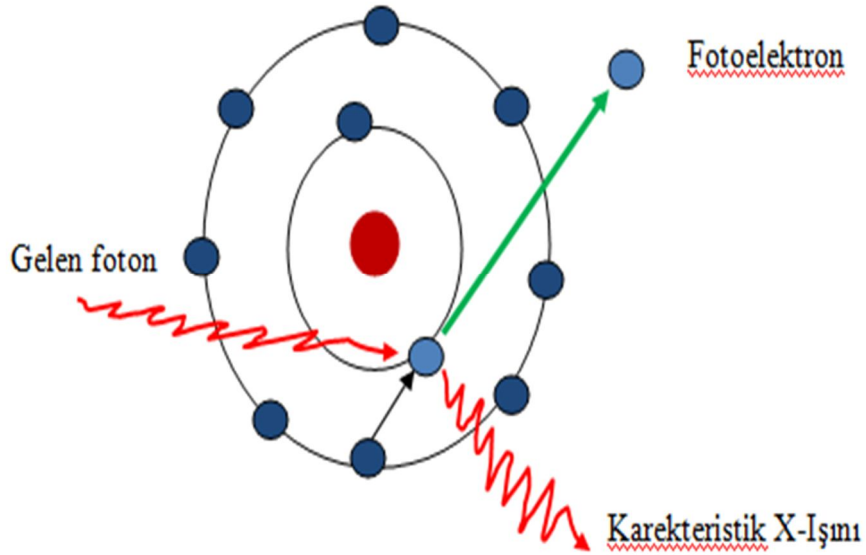
Elektromanyetik radyasyonun soğurulması çeşitli olaylar sonucu oluşur. Bu olayların içerisinde en baskın olanı fotoelektrik olay ve çift oluşumdur (Ertuğral, 2004).

1.4.1.1. Fotoelektrik Olay

Fotoelektrik olay ışığa duyarlı bir yüzeye fotonlarla vurularak oradan elektron sökmek ve bu elektronları bir akıma dönüştürerek belirli maksatlar için kullanmak demektir, şekil 1.5 gösterilmiştir. Elektronlu kolay söken maddeler genellikle alkali atomlardır (Aygün ve ark, 2003).

Fotoelektrik olay deneysel olarak analiz edildiğinde şu durumlar gözlenir:

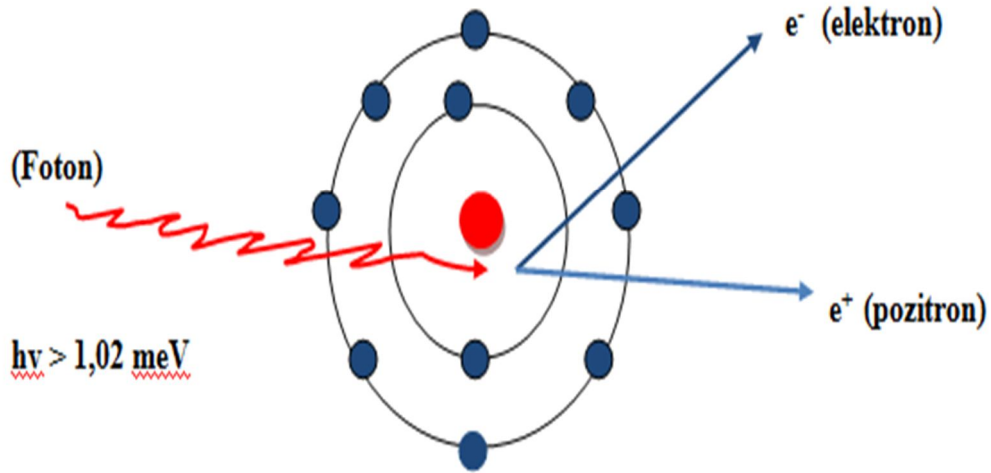
- 1) $v = \text{sabit iken } i_p, \text{ ışık şiddeti (genliğinin karesi) ile orantılıdır.}$
- 2) Foto duyar yüzeyde 10^{-8} saniyede uyum gözlenir.
- 3) $v \geq v_0 = \text{eşik frekanstan yukarı frekanslarda olay ancak gözlenir.}$
- 4) $K = eV_0 = 1/2 mv_{\text{mak}}^2$ ışık şiddetinden bağımsızdır.



Şekil 1.5. Fotoelektrik Olay

1.4.1.2. Çift Oluşumu

Elektromanyetik radyasyonun enerjilerini kaybettiği olaylardan bir tanesinde çift oluşumdur. Çift oluşumu olayı fotoelektrik olay ve Compton olayından daha az görülür. Bu olayın oluşabilmesi için gelen fotonun enerjisinin 1,02 MeV den yüksek olması gerekir. Çift oluşumunda atom çekirdeğinin çevresindeki güçlü elektrik alana giren yüksek enerjili (1,02 MeV den yüksek) bir foton bir elektron ve bir pozitron haline dönüşür , şekil 1.6 da gösterilmiştir. Burada enerji kütleye dönüşmüştür. Elektronun ve pozitronun durgun kütle enerjileri $m_0c^2= 0,51$ MeV ise, çift oluşum olayının gerçekleşmesi için gerekli eşik enerjisi $2m_0c^2= 1,02$ MeV olması gerekir. Gelen fotonun enerjisi 1,02 MeV den düşük ise elektron-pozitron çifti meydana gelmez ve çift oluşumu olayı gözlenmez. Bu olay meydana gelirken hem yük hem çizgisel momentum ve toplam enerji korunur. Foton enerjisinin daha büyük olduğu durumlarda ise bu enerjinin arta kalan kısmı elektron ve pozitrona kinetik enerji olarak aktarılır (Özalpan, 2001).



Şekil 1.6. Çift Oluşumu

1.4.2. Elektromanyetik Radyasyonun Saçılması

Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşmesi olaylarından bir tanesi olan saçılmayı, saçılan ışının enerjisine göre koherent ve inkoherent saçılma olmak üzere iki grupta tanımlanabilir.

1.4.2.1. Koherent Saçılma

Fotonun atoma sıkı bağlı olan elektronlarla olan çarpışmasıdır ve bu elektron bulunduğu yörüngeden kopmaz. Yani atom iyonize olmaz veya uyarılmış duruma doğru geçmez. Gelen fotonlar, değişmeyen bir frekans ile geri saçılırlar.

Atom tarafından saçılan radyasyonun şiddeti her bir bağlı olan atomdan koherent olarak saçılan radyasyonun genliklerinin toplamı alınarak hesaplanır (Williams, 1987).

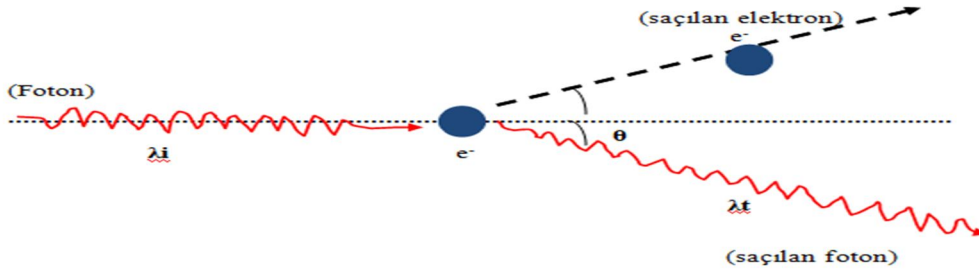
1.4.2.2. İnkohherent Saçılma (Compton Saçılma)

Işığın yani elektromanyetik radyasyonların tanecik karakteri ile izah edilebilen Compton olayı, genellikle 0,5 MeV'den büyük enerji değerine sahip fotonunun, serbest elektronla veya atomun dış yörüngesindeki bağ enerjisi çok küçük olan bir elektronla etkileşmesinde gözlenen bir olaydır, şekil 1.7 de gösterilmiştir. Gelen foton, enerjisinin bir kısmını yolu üzerinde rastlayan elektrona devreder ve ona, devrettiği enerjiye eşit bir kinetik enerji kazandırır.

Gelen foton, ilk doğrultusundan sapar ve enerjisi azalır, yani farklı bir foton halinde yoluna devam eder. Bu olayda λ gelen fotonun, λ' ise saçılan fotonun dalga boyu olmak üzere gelen fotonun dalga boyunda değişim,

$$\Delta\lambda = h/m_0c (1-\cos\theta) , \Delta\lambda = \lambda' - \lambda \quad (1.2)$$

ile verilir. Burada m_0 elektronun durgun kütlesi, θ fotonun saçılma açısı, c ışık hızı, h ise planck sabitidir. Eşitlikte görüldüğü gibi dalga boyundaki değişim gelen fotonun λ dalga boyundan bağımsızdır (Grieken, 2002).

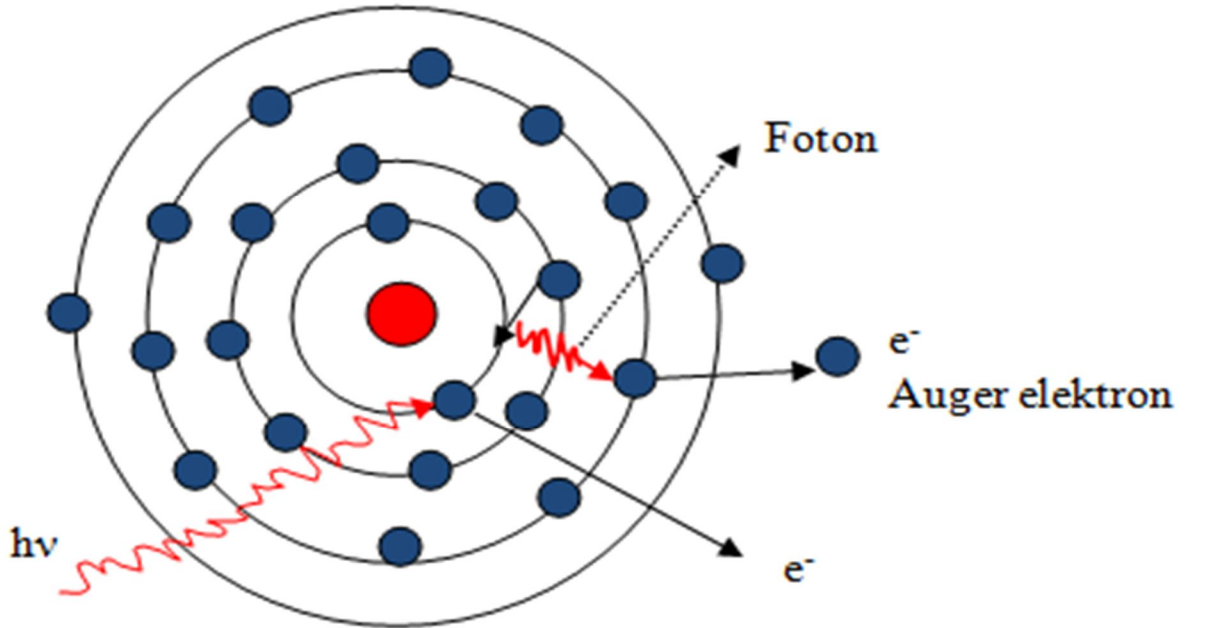


Şekil 1.7. Compton Olayı

1.5. Auger Olayı

Atomlarda herhangi bir yolla meydana getirilen boşluk, diğer üst katmanındaki elektronlar tarafından ışımali olarak doldurulabildiği gibi ışımaz olarak da doldurulabilir. Atomdan yayınlanmış olan K tabakasına ait karakteristik X-ışınları tekrar aynı atomun üst tabakalarda bulunan bir elektronu sökerek boşluk meydana getirebilirler, bu olaya Auger olayı, yayınlanan elektrona da Auger elektronu denir, şekil 1.8 de gösterilmiştir. Herhangi bir seviyede oluşan boşluğun ışımaz bir geçişle doldurulması ihtimaline Auger verimi denilmektedir (Ertuğral, 2004).

Auger, fotoelektron ve Auger elektronu aynı noktada (yada atomda) belirdiği noktada kopan Auger elektronunun yönünün fotoelektronun yönünden bağımsız olduğuna, gelen X-ışını enerjisinin artmasıyla fotoelektron aralığının arttığı fakat Auger elektronu yayılma sayısının değişmediği görülmüştür. Auger elektron sayısının atom numarası Z ile arttığını, bütün fotoelektronlara Auger elektronu eşlik etmediği sonuçlarına ulaşmıştır. (Agarwal, 1991).



Şekil 1.8. Auger Elektron Oluşumu

1.6. X-ışınlarının Özellikleri ve Madde ile Etkileşmesi

X-ışınları sürekli, spektrum karakteristik çizgi spektrumu, karakteristik bant spektrumu ve karakteristik soğurma spektrumu oluştururlar. Işık hızında, doğru çizgiler boyunca, madde transfer etmeden yayılırlar, gözle görünmez ve duyularımızla hissedilmezler.

X ışınları madde ile karşılaştıklarında meydana gelebilecek olaylar;

- a) Etkilemeden geçiş
- b) Yansıma
- c) Kırılma
- ç) Kutuplanma
- d) Koherent saçılma
- e) İnkoherent saçılma
- f) Fotoelektrik soğurulma
- g) Çift oluşumdur.

X ışınları madde ile etkileştiğinde ortaya çıkacak radyasyon türleri parçacık özellikte olanlar ve elektromanyetik özellikte olanlar olmak üzere iki ana başlıkta incelenir. X ışınları, fotoelektrik soğurulma, inkoherent saçılma, gaz iyonlaştırma ve sintilasyon meydana getirmede parçacık özelliği gösterirken; yansıma, kırılma, kırınım ve koherent saçılmada ise dalga özelliği göstermektedir (Şahin, 2013).

1.7. Kimyasal Bağlar

Tanecikler arası etkileşmeler sonucu yeni maddeler oluşur. Özellikleri farklı yeni maddelerin oluşumuna götüren böyle etkileşmelere kimyasal bağlar denir; diğer bir ifadeyle, iki atom veya atom grubu aralarındaki herhangi bir kuvvetle tutunuyor ve belirli uzaklıkta kalıyorsa, bu kuvvete kimyasal bağ denir. Kimyasal tepkimelerde atomlar farklı şekillerde düzenlenerek yeni moleküller oluşturur. Atomların bağlarla birbirlerine bağlanarak molekülleri oluşturmalarının sebebi, molekülün kendisini oluşturan atomlardan daha kararlı ve daha düşük enerjiye sahip olmasıdır. Atomların elektronik yapıları ile kimyasal bağ arasında önemli bir ilişki vardır (Tunay, 2004).

Atomlar üç farklı şekilde, elektron kaybederek, elektron kazanarak veya elektron ortaklaşarak kararlı elektronik yapıya ulaşabilirler. Bu açıdan elementler üç gruba ayrılabilir.

1. Kolaylıkla bir veya daha fazla elektron verebilen elektropozitif (düşük iyonlaşma enerjili) elementler.

2. Elektron alabilen elektronegatif (yüksek elektron ilgili) elementler.

3. Elektron alma veya verme eğilimi düşük olan elementler.

Atomların elektropozitif veya elektronegatif karakterli oluşlarına göre, üç farklı cins bağ mümkündür.

1. İyonik Bağ : Elektropozitif element + Elektronegatif element

2. Kovalent Bağ : Elektronegatif element + Elektronegatif element

3. Metalik Bağ : Elektropozitif element + Elektropozitif element

1.7.1. Bağ Çeşitleri

Kimyasal bağlar, iyonik bağ, kovalent bağ, koordinatif bağ ve metal bağ olmak üzere dört grupta toplanır.

1.7.1.1. İyonik Bağ

Aktif bir metal ile elektronegativitesi büyük bir ametal arasında elektron geçişi ile oluşan bağa denir. Metal ile ametalin elektronegativite farkı ne kadar büyük olursa, oluşan bileşik o derece iyonik karaktere sahip olur. Elektronegativitesi sıfır olan bir metal olmadığı için %100 iyonik karaktere sahip bir bileşik yoktur. İyonik bağ iki zıt yüklü olan anyon ve katyonlar arasındaki karşılıklı Coulomb çekmesinden kaynaklanmaktadır. Birçok metal iyonik valansa sahiptir ve buna metalin oksidasyonu denir. Bu oksidasyon kademesi terimi genel olarak metal iyonu üzerindeki yükü gösterir. Buna göre metal atomundan uzaklaştırılan elektron sayısına oksidasyon kademesi denir (Miessler ve Tarr, 1999).

1.7.1.2. Kovalent Bağ

Atomlar arası elektron geçişi olmadan valans elektronlarının kullanılmasından oluşan kovalent bağda, iki atomik orbitalin birbirine etki ederek bağda bulunması gereken elektronları ihtiva eden yeni orbitalleri meydana getirmeleridir. Kovalent bağda atomların elektronegatiflikleri birbirine çok yakındır. Aynı zamanda da valans bağı oluşturan elektronlar her iki atomada aynı derecede ait olurlar. Dolayısıyla elektron bulutunun atomlardan herhangi birine doğru kayması söz konusu değildir (Durdu, 2010).

1.7.1.3. Metalik Bağ

Bir metalik kristaldeki atomları bir arada tutan bağlara metalik bağ denir. Metalik kristallerde kristal örgüdeki boşluklar pozitif iyonlar tarafından doldurulur ve bu pozitif iyonlar hareketli iyonlar tarafından bir arada tutulurlar. Bu sebeple metalik kristaller aralarında rastgele dolaşan elektronların bulunduğu pozitif iyonlar topluluğu olarak düşünülebilir. Metallerde yalnız en dışta bulunan atoma en zayıf bağ ile bağlı elektronlar bağ yapımına katılırlar. Fakat, geçiş metallerinde en dış elektronlardan başka dıştan ikinci durumda olan d orbitallerindeki elektronlarda bağlanmaya katılırlar. İç elektronların çekirdeğe çok kuvvetli bir bağla bağlanmış olması bu elektronların kristalin tümüne ait olmadığını gösterir. Bunlar kristaldeki tek tek pozitif iyonlara aittirler. Hareketli elektronlar ise dış elektronlardır (Küçükönder, 1992).

1.7.1.4. Koordinatif Bağ ve Koordinasyon Bileşikleri

Koordinatif bağda iki ayrı atom orbitalinden iki yeni orbital oluşmaktadır. Fakat burada merkez atomun atomik orbitali tamamen boştur. Bağa katılan iki elektronda ligandlardan alınır. Yani bağın oluşmasına elektron katkısı yoktur. Komplekslerde etkin olan bağ koordine kovalent bağdır. İki veya daha fazla türden atomun birleşerek oluşturduğu dışarıya kapalı ama yüklü olan atom topluluklarına, yani moleküllere kompleks iyon (kompleks) denir. Bu tanıma göre NO_3^- gibi moleküller birer kompleksdir. Ayrıca kompleks iyon terimi, tanımlamayı kısıtlamak açısından, bir metal iyonuna koordinasyon bağlarıyla bağlanan nötral moleküllerden veya anyonlardan oluşmuş yüklü birimler $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{+2}$ gibi için kullanılmaktadır. Kompleks iyonu oluşturan metal atomuna merkez atomu denir. Merkez atomuna koordinasyon bağlarıyla bağlanan ligand sayısına, dolayısıyla merkez atomunun yapmış olduğu koordinasyon bağ sayısına koordinasyon sayısı denir. Bağı teşkil eden her iki elektronun bir ve aynı atomdan alındığı bağ çeşidine koordinatif bağ denir. Ortaklanmamış elektron çiftine sahip moleküllere veya anyonlara (yüksüz ve eksi moleküller) Ligand denir. İlke olarak, böyle herhangi bir molekül ortaklanmamış elektron çiftini bir merkez iyonuna vererek bir kompleks oluşturabilir. Ortaklanmamış elektron çiftine sahip olan atomlar genellikle elektronegatif elementlerdir (Zeren, 1998).

Werner teorisine göre atomlar, belirli sayıda başka atom, molekül veya radikallerle birleşebilirler. Werner bu sayıya koordinasyon sayısı demiştir. Bu sayı merkez atomuna bağlı olarak bazen 6, bazen 4 seyrek olarak 2 veya 8 olabilir. Merkez atomuna kimyasal bağlarla bağlı ligandların meydana getirdiği bölgeye birinci tesir bölgesi denir. Bu bileşikler formülleri yazılırken birinci tesir sahasını oluşturan atom ve moleküller köşeli parantez içine alınır. Birinci tesir sahası dışında çözücü moleküllerin meydana getirdiği ikincil üçüncül tesir sahaları da vardır (Miessler ve Tarr, 1999).

1.7.2. Bağ Enerjileri ve Bağ Uzunlukları

Kimyasal bağların kuvveti bağ uzunluğu veya bağ enerjisi ile ölçülür. Kimyasal bağ ne kadar kuvvetli ise bağ uzunluğu o kadar kısa ve bağ enerjisi o kadar büyüktür. Bağ enerjisi kimyasal bağların koparılması için gereken enerjidir. Kimyasal bağlar içinde buldukları molekülün geometrisine ve bağdaki diğer atomların konumları, büyüklükleri ve elektronegatiflik gibi özelliklerine bağlıdır. Bir bileşiği oluşturan atomlar arasındaki uzaklık, atomların titreşim hareketi nedeniyle sürekli olarak değişir. Fakat belli bir bileşikte tam olarak belirli olan ortalama bir uzunluktan (ortalama bir bağ uzunluğundan) söz edilebilir. Başka bir bileşiğin atomları arasında da farklı bir ortalama uzunluk vardır (Durdu, 2010).

Atom spektrumlarının incelenmesiyle elektronların bulunduğu enerji düzeyleri hakkında bilgi edinilirken, molekül spektrumlarının incelenmesinden molekülde bulunan atomların çekirdeklerinin moleküldeki yeri belirlenir ve böylece molekülün ayrıntılı bir resmi oluşturulur. Birbiriyle ilişkili molekül gruplarında (halojen, hidrojen halojenürleri vb.) atom numarası arttıkça bağ uzunlukları artar. Bunun iki nedeni vardır. Birincisi büyük atom numaralı atomlarda değerlik elektronları çekirdekte daha uzakta olan alt tabakalarda bulunur, ikincisi atom numarası büyüdükçe çekirdek yükü büyür ve iki çekirdek arasındaki itme kuvveti artarak atomların birbirine daha fazla yaklaşmasını engeller. Bağ uzunlukları, bağ enerjisinde olduğu gibi, molekülün yapısından bağımsız olup, yalnızca bağı oluşturan atomlara bağlı olan bir yapıdır (Zeren, 1998).

1.7.3. Bağ Açıları

Bir molekülde bir merkez atomuna bağlanan diğer iki atomun çekirdeklerini birleştiren doğruların arasındaki açıya bağ açısı denir. Yalnızca iki atomun birbirine bağlanmış olduğu hallerde bağ açısından söz edilemeyeceği açıktır. Bağ açısı, titreşim hareketinden dolayı kesin bir değere sahip olmayıp ortalama bir değerdir (Durdu, 2010).

Bağ açısı yalnızca merkez atomunun elektron dizilişi ile ilgilidir bağlanan diğer atomları özellikleri açığı pek etkilemez. Bunun en iyi kanıtı periyodik cetvelde aynı grupta bulunan elementlerin benzer bileşiklerinin bağ açılarının birbirine yakın olmasıdır. Dolayısıyla bağ açısı değerlik elektronlarının sayısı ile ilişkilidir (Rodgers, 1994).

1.7.4. Hibritleşme

Atom orbitallerinin karıştırılarak yeni orbitaller oluşturmaya hibritleşme ve oluşturulan melez orbitallerde hibrit orbitaller denir. Hibrit orbitallerin sayısı kendini oluşturan orbitallerin sayısına eşittir (Ballhausen ve ark., 1964).

Hibritleşmenin olabilmesi için hibritleşmeye katılan orbitallerin enerjilerinin birbirine yakın olması gerekir. Bu nedenle genellikle baş kuantum sayısı aynı olan orbitaller (2s, 2p, gibi) hibritleşirler. Ama bazı hallerde baş kuantum sayısı bir farklı olan orbitallerde (örneğin, d orbitalleri) hibritleşmeye katılır. Burada, (n-1) d orbitalinin s orbitalini enerjisine yakın olduğu bilinmektedir (Ballhausen ve ark., 1964). Matematiksel olarak düşünüldüğünde hibrit orbitaller, atom orbitallerinin doğrusal birleşmesiyle elde edilir, sp hibritleşmesinde 2s ve 2p orbitallerinin oluşturduğu melez orbitallerin dalga fonksiyonu

$$\Psi = \Psi(2s) \pm \lambda \Psi(2p) \quad (1.3)$$

şeklinde yazılabilir. λ 'nın önündeki işaret elektron yoğunluğunun merkezi çekimin sağında ve solunda yoğunlaştığını gösterir (Ballhausen ve ark., 1964). Bir melez orbital daima kendisinin oluşmasına katılan düşük enerjili atomik orbitalden daha yüksek enerjilidir. Yani $W(2s) < W(\text{melez}) < W(2p)$ dir. sp^2 Hibritleşmesinde s^2p elektron düzeninde olan 3. grup elementlerinde görülür. $AlCl_3$ hariç ML_3 şeklinde gösterilen halojenür, alkiler, trigonal düzlem (eşkenar üçgen) yapı gösterir. s^2p elektron düzenine enerji verilirse sp^2 valans düzenini alır ve bunlar trigonal düzlemde bileşik oluşturur. sd^3 hibritleşmesi sp^3 gibi tetrahedral bileşikler meydana getirir (Shriver ve ark., 1994). (s) ve (p) orbitallerinin (d) orbitalleri ile hibritleşmesi de mevcuttur. Özellikle $d_{x^2-y^2}$ ve d_z^2 orbitalleri ile hibritleşmede, önceki atomik orbitallerin aynı enerjiye sahip olması ve sıklıkla atomik orbitallerin aynı kuantum seviyesinde olması gerekir. Bununla birlikte d orbitalleri içerildiğinde bunlar ya s ve p orbitallerindeki gibi aynı kuantum seviyesinde olmalı yada sıklıkla geçiş metali bileşiklerinde olduğu gibi bir önceki kuantum seviyesinde olabilir. Örneğin 4p orbitalleri 4d yada 3d orbitalleri ile hibritleşebilirler (Duffy, 1974).

1.8. Kimyasal Durumun X-Işımları Üzerine Etkileri

1.8.1. Kimyasal Kayma

Kompleks ve kristallerin molekül yapıları karakteristik X-ışını çizgisinin durumunu etkiler. Kimyasal bağa bir atom katılması onun elektron yoğunluğunda bir değişime sebep olarak, valans elektron yoğunluğu önemli derecede değişir. Kristaldeki veya moleküldeki atomların bir birine yakınlığı ile bağın tipine bağlı olarak elektron yoğunluğu artar veya azalır (Küçükönder, 1993c).

İç seviyelerin enerjisi ve dolayısıyla X-ışınlarının enerjileri atomda oluşan elektron yoğunluğuna kuvvetli olarak bağlıdır. Bu maksatla genellikle kimyasal bileşiklerin bazı serilerinde ilgilenilen atomun K X-ışını çizgisinin enerjisindeki değişim kimyasal kayma olarak adlandırılır (Agarwal, 1991).

İki atom bir kristal yapıda bir araya gelirken oluşturduğu komşu atomlardaki en dış tabaka elektronlarının dalga fonksiyonları üst üste biner. Yani aslında bir çekirdeğe bağlı olan dış tabaka elektronları komşu çekirdeğin potansiyelini hissetmeye başlar. Böylece dış seviyeler N. mertebeden dejenere olmuştur. Her bir atomik seviye Pauli dışarlama ilkesine göre iki elektron ihtiva eder. Böylece belirli bir enerji bandının genişliği $2N$ seviyesinden ibaret olmalıdır. Eğer her bir atom 1 valans elektronuna sahip olursa, mutlak sıfır sıcaklıkta enerji bandının (Valans Bandı) düşük enerji seviyeli olan alt yarısı elektronlar tarafından işgal edilirken yüksek enerjili olan üst yarısı boş kalır. Elektronlar tarafından işgal edilen en yüksek enerji Fermi Enerjisi (E_F) olarak adlandırılır (Taylor ve Zafaritos, 1991).

Bağ yapımı durumunda valans yükler değişir. Bundan dolayı olarak perdeleme azalır. Katyon, çekirdek elektronu olarak adlandırılan çekirdeğe yakın bölgelerdeki elektronları (K ve L gibi) çekirdeğe doğru daha güçlü bir şekilde çekilmeye başlar ve bu yörüngelerde bağlanma enerjisi daha negatif olur (bağlanma enerjisi büyür). Valans elektronları iyonların iç kısımlarına etkide bulunur. Valans elektronlarının çekirdeğe yakın bölgelerde bulunması valans yüklerinin çekirdeğe yakın tabakalardaki elektronları itmesine neden olur. Böylece çekirdeğe yakın bölgelerde oluşan valans yükü etkisi, elektron-çekirdek çekim etkisini kısmen perdeler bu durum iç tabaka elektronlarının (K ve L) bağlanma enerjisini azaltır (Durdu, 2010).

1.8.2. Kimyasal Etki

Kimyasal etki maddenin kimyasal durumuna bağılı olarak analitik X-ışını çizgisinin biçiminde ve X-ışını şiddetinin mutlak ve relatif şiddetlerinde bazı değişiklikler meydana getirir. Kimyasal etki her ana gurup için farklıdır. En fazla kimyasal etki olan 3d grubu elementlerinde gözlenmiştir. Kimyasal etki, kısmen doldurulmuş olan valans orbitalleri ve çiftlenmemiş d elektronlarının sayısı ile ilgilidir (Küçükönder, 1993c).

Kimyasal durumun değişmesi K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranlarını da değiştirecektir. K_{β}/K_{α} valansın artmasıyla artar. K_{β} X-ışını şiddeti valans elektronları sayısı ile yani elektron yoğunluğu ile ilgilidir. 3d elementlerinin bileşiklerinde 3p orbitalleri kimyasal bağa katılmazlar. Bu yüzden dolayı 3p seviyesinin yoğunluğu valans durumunun değişmesi ile değişmez (Möser, 1985). Kimyasal etki K X-ışınları kadar L X-ışınlarının yayılma ihtimaliyetlerini de etkilemektedir. L tabakası için kimyasal etki K tabakası için ifade edilen kimyasal etkinin sebeplerine dayandırılabilir. Fakat bilindiği gibi L X-ışınlarının yayılma ihtimaliyetleri K X-ışınlarından bazı noktalarda farklılıklar göstermektedir ve bu nedenle L X-ışınları ile ilgili kimyasal etkileri incelerken bazı ilave noktaları dikkate almak gerekmektedir (Dürdu, 2010). L katmanı flüoresans verimleri ve tesir kesitleri üzerine kimyasal etkilerin nedeni Coster-Kronig geçişleri üzerine kimyasal etkilerdir. Farklı moleküller farklı enerjiye sahip olduğundan dolayı, bunların enerjileri ligandların ve merkez atomlarının arasında oluşan bağların mesafesi hakkında bilgi verir. L_{α} , L_{β} ve L_{γ} flüoresans tesir kesitleri değişen bağ enerjisi ile değişir (Jitschin ve ark., 1995).

Coster- Kronig geçişlerinin $L_i = (i=1,2,3)$ alt tabakalar arasındaki birinci boşluk dağılımının değiştirmesi, L_i alt tabakasına flüoresans verimlerinin değişmesi tesir kesitlerinin değişmesi sebebiyledir. Özellikle L_1 ve L_2 ile L_2 ve L_3 alt tabakaları arasında oluşan Coster-Kronig geçişleri ile oluşan L_3 alt tabakasının ek olarak uyarılmasına ve şiddetlendirilmesine sebep olur (Küçükönder, 1992). Kimyasal Etkiler; valans elektronları L tabakasında bulunan hafif elementlerde daha fazladır (Dyson ve ark.,1990, Jakson, 1982 ; Misel ve ark., 1977) ve bu elementler için K ve L X-ışınları üzerine kimyasal etkiler incelenebilir. Yüksek atom numaralı elementlerde ise L X-ışınları üzerine kimyasal etkiler ile K X-ışınları üzerine kimyasal etkilerden daha fazladır. L X-ışınları üzerine kimyasal etkilerin, K X-ışınları üzerine kimyasal etkilerden daha büyük olduğu gözlenmiştir. Bu L X-ışınları üzerine kimyasal etkiler daha karmaşık ve zordur (Küçükönder, 1993c).

1.9. Flüoresans Verim ve Coster-Kronig Geçişler

Bir atomun herhangi bir yolla, tabakadaki veya alt tabakadaki oluşturulan bir boşluğun ışımalı geçişle doldurulması ihtimaliyetine bu atomun flüoresans verimi, o esnada yayımlanan ışına da karakteristik X-ışını denir.

K tabakasına ait flüoresans verimi;

$$\omega_K = \frac{I_K}{\eta_K} \quad (1.4)$$

Şeklinde yazılır. Burada ω_K , K tabakasına ait flüoresans verimini gösterirken, I_K yayımlanan toplam K X-ışınları sayısı ve η_K K tabakasında meydana getirilen boşlukların sayısıdır. K tabakasından daha yüksek tabakada birden fazla alt tabakaya sahip olmaları nedeninden dolayı ortalama flüoresans verimi bu tabakaların iyonize edilmesine göre değişeceğinden ancak belli boşluk dağılımları için ortalama flüoresans verimi tarif edilebilir. Ayrıca bu alt tabakalardaki boşluk dağılımı, aynı baş kuantum sayısına sahip alt tabakalar arasındaki ışımsız CK geçişlerinden dolayı farklılık göstermektedir. Bu iki sebepten dolayı yüksek atomik seviyelerdeki flüoresans verimi karmaşık bir hal almaktadır.

Bir atomda izinli geçişler $\Delta n \neq 0$, $\Delta l = \pm 1$ ve $\Delta j = 0, \pm 1$ gibi şartları sağlar. Bunun dışındaki geçişler yasak geçişlerdir. $\Delta n = 0$ olduğu alt katmanlar arasındaki geçişlere ya da boşluk transferine CK geçişler denilir. CK geçiş ihtimaliyetleri gösterimi f_{ij}^x şeklinde olup alt ve üst olarak iki indis taşımaktadır. Alt indis geçisi olduğu alt tabakaları, üst indis ise ana tabakası göstermektedir. Örneğin f_{ij}^x , herhangi bir yolla x tabakasının x_i alt tabakasında meydana getirilen bir boşluğun daha yüksek x_j alt tabakasına geçme ihtimalidir. CK geçişler ışımalı $f_{ij}^x(R)$ ve ışımsız $f_{ij}^x(A)$ olmak üzere iki kısımdan oluşur ve $f_{ij}^x(R) \gg f_{ij}^x(A)$ yazılabilir (Dözen, 2006).

X katmanının i ve j alt katmanları arasında CK geçişleri için;

$$f_{ij}^x = f_{ij}^x(R) + f_{ij}^x(A) \text{ yazılabilir.}$$

1.10. Tesir Kesitleri

Tesir kesiti, bir numune üzerine gelen foton ya da parçacıkla hedef numunedeki her bir parçacığın ilgilenilen herhangi bir olayı meydana getirme ihtimalinin bir ölçüsüdür. Bir hedef parçacığın ya da fotonun tesir kesiti, ilgili olayın tabiatına ve gelen parçacığın enerjisine bağlıdır. X-ışını üretimi tesir kesiti ise, verilen bir enerjide X-ışınlarının oluşma ihtimaliyetinin bir ölçüsüdür. Numune üzerine gönderilen bir fotonun X-ışını meydana getirme ihtimaliyeti, atomik enerji tabakalarının gelen foton ile etkileşmesi sonucu oluşan boşluklara ve bu boşlukların ışımali geçişler ile doldurulma kesrine, yani flüoresans verimlerine bağlıdır. Gelen foton ile atomik seviyelerdeki elektronların enerji alışverişi sonucu elektronun atomdan koparılması ve atomik seviyelerde boşluk meydana gelme ihtimaliyetinin bir ölçüsü de fotoelektrik tesir kesiti olarak bilinir (Durdu, 2010).

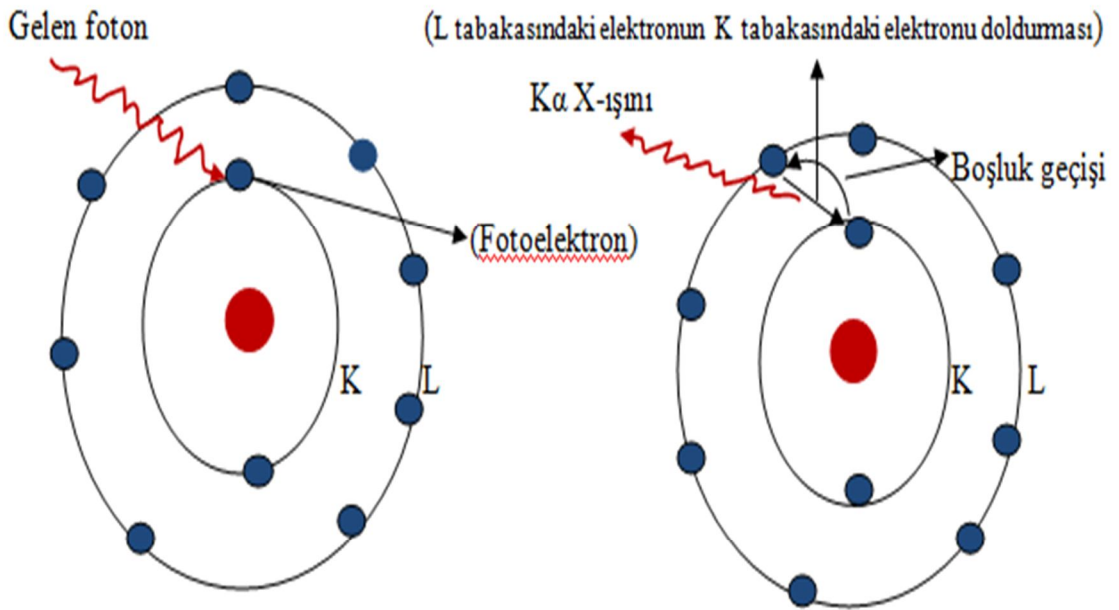
1.11. Atomik Tabakalar Arası Boşluk Geçışı

Atomdan elektron söküp, iyonlaşma meydana getiren olay bir uyarmadır. Atomun bağlı iç yörünge elektronları, hızlandırılmış elektron, proton, nötron veya parçacıklarıyla, X-ışını tüpünden yayımlanan X-ışınları ile, radyoizotop kaynak tarafından yayımlanan fotonlarla ve ikinci X-ışınları gibi uyarıcılarla dış yörüngelere uyarılması neticesinde şekil 1.9 ve şekil 1.10 görüldüğü gibi yerlerinde boşluklar bırakır. Bu olay ışımali geçiş denilen karakteristik X-ışınlarının meydana gelmesi ve ışımalsız geçişler (Auger) şeklinde sonuçlanabilir.

Her iki olayda da atomun birinci iç tabakasında meydana gelen boşluklar kendisinden yüksek olan alt tabakalara veya bir üst tabakaya geçerek, üst tabakadaki veya yüksek alt tabakalarda ilave boşluklar meydana getirirler.

Tüm bu olaylar göz önüne alındığında, şekilde gösterildiği gibi alt tabakalardaki bir boşluğun üst tabakaya geçmesi olayı boşluk geçiş olarak adlandırılır. Böylece alt tabakalardan üst tabakaya olan boşluk geçışı üst tabakaların boşluk bakımından zenginleşmesine kadar kademeli bir şekilde devam eder (Ertuğral, 2004).

K tabakasında ki boşlukların L tabakasında ki elektronlar tarafından ışımatsız geçişle doldurulmasını K-LL geçişleri ve K-LX (X=M,N,...) geçişleri olmak üzere iki şekilde incelenir. K-LL geçişlerinde L iç tabakasının bir elektronunu K tabakasından bir boşluğu doldururken yayımlanan karakteristik X-ışını yine bir L tabakasındaki bir elektronu koparır (L_{III}'den elektron K'da ki boşluğu doldururken yayımlanan karakteristik X-ışını L_{II}'den bir elektron koparır). K-LX (X=M,N,...) geçişlerinde ise dış tabaka elektronları aniden dışarı atılır. Her iki durumda da atom iki kere iyonize edilmiş olur ki sadece birinci durumda her iki boşlukta L tabakasına geçer (Ertuğral, 2004).



Şekil 1.9. K tabakasında boşluk oluşturulması

Şekil 1.10. K tabakasındaki boşluğun L tabakasına geçmesi.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

K tabakasından L tabakasına boşluk geçişi ihtimaliyetleri ile ilgili pek çok çalışma mevcut olmakla birlikte K ve Ca bileşikleri üzerine yapılan çalışmalar oldukça sınırlıdır. K, L₁, L₂ ve L₃ tabakalarının boşluk geçişi ihtimaliyetleri Cs, Ba, La (Ertuğrul, 2002a), Sm, Tb (Ertuğrul,2002b), Ho, Er (Ertuğrul, 2002c) ve Zn, As, Se, Rb, Sr, Y, Zr (Ertuğrul, 2002d) elementleri için 59.5 keV foton enerjisinde K_{β}/K_{α} şiddet oranları kullanılarak Ertuğrul ve arkadaşları tarafından ölçülmüştür.

Şimşek ve Ark. (2003) tarafından , 5.96 ve 59.5 keV uyarma enerjisinde L X-Işınlarını kullanılarak $46 \leq Z \leq 55$ aralığındaki elementler için K dan L'ye boşluk geçişi ihtimaliyeti ölçülmüştür.

Demir ve Şahin (2007) tarafından, Nd, Eu, Gd, Dy ve Ho elementleri için dış manyetik alanın $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $K_{\beta 1}$ ve $K_{\beta 2}$ X ışını üretim kesitleri üzerindeki etkisi ve K tabakadan L₂ ve L₃ alt tabakalarına ve M tabakasına boşluk geçişi ihtimaliyetleri ölçülmüştür.

Söğüt ve Ark., (2009) tarafından K'dan L'ye boşluk geçişi ihtimaliyetleri, η_{KL} , $19 \leq Z \leq 58$ aralığındaki elementler için 59.5keV'de K-tabaka flüoresan verimi değerleri kullanılarak hesaplanmıştır.

Ertuğral ve Ark. (2010) tarafından, 5.96 keV' de K' dan L tabakasına boşluk geçişi ihtimaliyetleri, $16 \leq Z \leq 22$ aralığında K_{β}/K_{α} şiddet oranları kullanılarak ölçülmüştür.

3d geçiş metallерindeki K'dan L'ye boşluk geçiş ihtimaliyeti (η_{KL}) üzerine alaşım etkisi X-Işını floresans yöntemi ile Han ve Demir (2010) tarafından incelenmiştir.

Tursucu ve Ark. (2012) tarafından, $40 \leq Z \leq 50$ atom aralığında 9 element için K tabakası şiddet oranları (K_{β}/K_{α}), ve boşluk geçişi ihtimaliyetleri 80.997 keV uyarma enerjisinde ölçülmüştür.

Apaydın ve Tıraşođlu (2012) tarafından, onbir yüksek atom numaralı elementi için 123.6 keV'de K ve L tabaka X-Işını üretim kesitleri ve K'dan L tabakasına boşluk geçişi ihtimaliyetleri (η_{KL}), ölçülmüştür.

Küçükönder ve Durdu (2013) Brom ve İyot bileşikleri için Auger Elektronu yayımlanma oranlarını ve K tabakasından L tabakasına boşluk geçişi ihtimaliyetlerini 59.543keV uyarma enerjisinde deneysel olarak belirlediler.

Anand ve Ark. (2014) tarafından 2π -geometrisinde zayıf gama ışınları kullanılarak Platin (Pt), Altın (Au) ve Kurşunun(Pb) elementleri için K tabaka X-Işını şiddet oranları ve K dan L ye toplam boşluk geçişi ihtimaliyetleri ölçülmüştür.

Mirji ve Ark. (2015) tarafından bazı 3d elementlerin K-L toplam boşluk geçişi ihtimaliyeti (η_{KL}), Indus-2 senkron radyasyonu kullanılarak ölçülmüştür.

Mirji ve Ark. (2015) tarafından Cr, Cu ve Zn ve bunların bileşikleri için K-L boşluk transfer olasılığı, Indus - 2 senkrotron ışını kullanılarak ölçülmüştür.

Akman ve Ark. (2016) tarafından, K tabakası floresans veriminin yarı ampirik değerleri ve K_{β}/K_{α} X-Işın şiddet oranının deneysel değerleri kullanılarak atom numarası $30 \leq Z \leq 58$ 'deki bazı elementler için K dan L ye boşluk geçişi ihtimaliyeti ölçülmüştür. Ayrıca, aynı elementler için KLX/KLL ve KXY/KLL Auger elektron yayımlanma oranları da bu çalışmada ölçülmüştür.

Krishnananda ve Ark. (2016) tarafından, Gd, Tb, Ho ve bileşikler gibi bazı 4f elementlerin $I_{L\alpha}/I_{L\beta}$, $I_{L\alpha}/I_{L\gamma}$, $I_{L\alpha}/I_{L\gamma}$ ve L_{3-M} ışınalı boşluk geçişi ihtimaliyetleri ve L X-Işını şiddet oranları kullanılarak ölçülmüştür.

Akman (2016) tarafından, 59.54keV uyarma enerjisinde, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy ve Er için K tabakasından L_i ($i= 2,3$) alt tabakalarına ve K tabakasından L ve M tabakalarına boşluk geçişi ihtimaliyetleri belirlenmiştir.

3. MATERYAL VE METOT

Bu çalışmada K ve Ca bileşikleri için Auger elektronlarının emisyon olasılıklarının oranları [$u(p=KLX)/P(KLL)$, $v(p=KXY)/P(KLL)$] ve K tabakasından L tabakasına boşluk geçişi ihtimaliyetleri üzerine kimyasal etkiler incelenmiştir.

Auger elektronlarının emisyon olasılıklarının oranları aşağıdaki denklemler kullanılarak hesaplanmıştır (Schönfeld ve JanBen, 1996).

$$x = \frac{IK\beta}{IK\alpha} \quad (3.1)$$

$$v = \frac{p(KXY)}{p(KLL)} = x^2 \quad (3.2)$$

$$u = \frac{p(KLX)}{p(KLL)} = 2x \quad (3.3)$$

Burada $p(KXY)$, $p(KLL)$, $p(KLX)$ ve $p(KLL)$ K tabakasından oluşan bir boşluk sonrası L, X ve Y (X, Y = M, N, ...) tabakalarından Auger elektronu yayımlanma ihtimaliyetlerini ifade etmektedir.

Aynı bileşikler için K tabakasından L tabakasına Boşluk geçiş ihtimaliyetlerinin η_{KL} belirlenmesinde aşağıdaki eşitlik kullanılmıştır.

$$\eta_{KL} = \frac{2-\omega_K}{1+\frac{IK\beta}{IK\alpha}} \quad \eta_{KL} = \frac{2-\omega_K}{1+x} \quad (3.4)$$

Burada (ω_K), K tabakası flüoresan verimi, $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranıdır.

Bu çalışmada deneysel K tabakası flüoresan verimi ve $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları önceki çalışmalardan alınmıştır (Kucukonder, 2005; Tıraşoğlu ve ark.,2008; Durdu, 2010; Tıraşoğlu ve ark., 2005; Küçükönder ve ark., 2006; Sünbül, 2002; Ertuğral ve ark., 2007; Schönfeld ve JanBen., 1996; Sole ve ark., 1993).

4.BULGULAR VE TARTIŞMA

Çizelge 4.1 , K bileşiklerinin K tabakasından L tabakasına η_{KL} boşluk geçişi ve Auger yayımlanma ihtimaliyeti, ($v = p(KXY)/p(KLL)$, $u = p(KLX)/p(KLL)$)

K Bileşikler	ω_K	K_β/K_α	v		u		η_K	
			Present Studies	Schönfeld	Present Studies	Schönfeld	Present Studies	Schönfeld
K	0,144 ^[k]	0,1126 ^[g]	0,0126	0,015 ^[h]	0,225	0,245 ^[h]	1,6681	1,654 ^[h]
KNO ₂	0,116 ^[a]	0,0961 ^[e]	0,0092		0,192		1,7188	
KNO ₃	0,138 ^[a]	0,0842 ^[e]	0,0070		0,168		1,7173	
KClO ₃	0,121 ^[a]	0,0975 ^[e]	0,0095		0,195		1,7120	
KCl	0,029 ^[b]	0,0966 ^[d]	0,0093		0,193		1,7973	
KHCO ₃	0,145 ^[a]	0,0865 ^[e]	0,0074		0,173		1,7073	
KH ₂ PO ₄	0,148 ^[a]	0,116 2 ^[e]	0,0135		0,232		1,6592	
KHC ₂ O ₄	0,026 ^[b]	0,0929 ^[d]	0,0086		0,185		1,8062	
KHSO ₄	0,158 ^[a]	0,1172 ^[e]	0,0137		0,234		1,6487	
K ₂ S ₂ O ₄	0,137 ^[a]	0,1232 ^[e]	0,0151		0,246		1,6586	
K ₂ S ₂ O ₇	0,118 ^[a]	0,1010 ^[e]	0,0102		0,202		1,7093	
K ₂ S ₂ O ₈	0,156 ^[a]	0,1085 ^[e]	0,0117		0,217		1,6635	
K ₂ SO ₄	0,029 ^[b]	0,0961 ^[d]	0,0092		0,192		1,7981	
K ₂ MnO ₄	0,024 ^[b]	0,0958 ^[d]	0,0091		0,191		1,8032	
K ₂ Cr ₂ O ₇	0,022 ^[b]	0,0989 ^[d]	0,0097		0,197		1,8003	
KI	0,014 ^[b]	0,0688 ^[d]	0,0047		0,137		1,8581	
KIO ₃	0,019 ^[b]	0,0784 ^[d]	0,0061		0,156		1,8369	
K ₄ (FeCN) ₆	0,048 ^[b]	0,0865 ^[d]	0,0074		0,173		1,7965	
K ₄ [Fe(CN) ₆].3H ₂ O	0,171 ^[b]	0,090 2 ^[d]	0,0081		0,180		1,6776	
KOH	0,036 ^[b]	0,0977 ^[d]	0,0095		0,195		1,7891	
KBr	0,012 ^[b]	0,0965 ^[e]	0,0093		0,193		1,8130	

Çizelge 4.2 , Ca bileşiklerinin K tabakasından L tabakasına η_{KL} boşluk geçişi ve Auger yayımlanma ihtimaliyeti, ($v = p(KXY)/p(KLL)$, $u = p(KLX)/p(KLL)$)

Ca Bileşikler	ω_K	K_β/K_α	v		u		η_K	
			Present Studies	Schönfeld	Present Studies	Schönfeld	Present Studies	Schönfeld
Ca	0,162 ^[e]	0,109 ^[e]	0,0113	0.0168 ^[h]	0,218	0.259 ^[h]	1,6573	1.621 ^[h]
CaO	0,166 ^[a]	0,0683 ^[d]	0,0046		0,136		1,7167	
CaCl ₂ .H ₂ O	0,179 ^[a]	0,1197 ^[e]	0,0143		0,239		1,6263	
Ca(OH) ₂	0,192 ^[a]	0,0901 ^[e]	0,0081		0,180		1,6585	
CaSO ₄ .2H ₂ O	0,218 ^[a]	0,0972 ^[e]	0,0094		0,194		1,6241	
Ca(PH ₂ O ₂) ₂	0,217 ^[a]	0,0957 ^[e]	0,0091		0,191		1,6272	
CaF ₂	0,217 ^[a]	0,081 ^[f]	0,0065		0,162		1,6493	
CaBr ₂	0,182 ^[e]	0,123 ^[e]	0,0151		0,246		1,6188	
Ca(CO) ₃	0,040 ^[b]	0,1112 ^[d]	0,0123		0,222		1,7638	
Ca(CH ₃ COO) ₂	0,046 ^[b]	0,1106 ^[d]	0,0122		0,221		1,7594	
Ca(NO ₃) ₂ .4H ₂ O	0,024 ^[b]	0,0918 ^[d]	0,0084		0,183		1,8098	

[a] Kucukonder, (2005)

[b] Tirasoglu ve ark., (2008)

[c] Durdu, (2010)

[d] Traşoğlu ve ark., (2005)

[e] Kuçukonder ve ark., (2006)

[f] Sünbül, (2002)

[g] Ertuğral ve ark., (2007)

[h] Schönfeld ve JanBen, (1996)

[k] Sole ark., (1993)

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Auger elektronlarının ($u = p(KLX) / p(KLL)$, $v = p(KXY) / p(KLL)$) emisyon ihtimaliyetleri ve çeşitli Ca ve K kimyasal bileşikleri için η_{KL} emisyon olasılıkları çizelge 4.1 ve 4.2'de verilmiştir. Çizelgede gösterilen sonuçlara göre, K ve Ca bileşiklerinin v değerleri saf elementlerinden farklıdır. Bu farklılıklar K bileşikleri için % 7-63, Ca bileşikleri için % 8-60'dır. Sonuç olarak, K ve Ca bileşiklerindeki Auger elektron emisyon ihtimaliyetleri sonuçları, saf elementlerinden farklıdır. Bu farklılıklar K bileşikleri ve % 1-37 Ca bileşikleri için % 3-39'dur.

Boşluk geçiş ihtimaliyetleri çizelgedeki sonuçlara göre saf K 'nın değerinden % 0,27-11 arasında farklılık göstermektedir. Saf Ca'nın değerinden Ca bileşikleri % 0,07-9 arasında farklılık göstermektedir.

K ve Ca bileşikleri için (η_{KL}) boşluk geçiş ihtimaliyeti ve elde edilen Auger elektronları emisyon ihtimaliyetleri oranları (u, v), Schönfeld'in saf element değerleri ile karşılaştırıldı.

Auger elektronlarının emisyon ihtimaliyetleri oranı (u, v) ve boşluk geçiş ihtimaliyetleri oranı ve K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranı üst kabuklardan K kabuğuna geçişinden dolayı atomların kimyasal ortamından kuvvetle etkilenir.

Kimyasal bağlanma tipi (iyonik, metalik ve kovalent) K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranını etkiler. Moleküllerin, komplekslerin ve kristallerin yapısının (polarite, değerlik ve atomların elektronegatifliği, koordinasyon sayısı, kovalent bağın iyoniklikleri, vb.) temel karakteristikleri temel olarak K_{β}/K_{α} X-ışını şiddet oranını etkiler. Kimyasal bağdaki bir değişim, molekül veya kristal içindeki bitişik atomlarla bağlanmada bir değişikliğe yol açar. Çizelge 4.1 ve 4.2'de görülebileceği gibi, potasyum (K) ve kalsiyum (Ca) bileşikleri Auger elektronlarının emisyon ihtimaliyetleri, (u, v) ve boşluk geçiş ihtimaliyetleri (η_{KL}) potasyum (K) ve kalsiyum (Ca) elementinin kimyasal yapısına dayanmaktadır. Çizelge 4.1 ve 4.2'de görüldüğü gibi, Auger elektronlarının emisyon ihtimaliyetleri oranı ve boşluk geçiş ihtimaliyetleri oranı (η_{KL}) kimyasal etkileri, K ve Ca bileşikleri için daha önce çalışılmamıştır. Bu yüzden K ve Ca bileşikleri emisyon ihtimaliyetleri oranı ve boşluk geçiş ihtimaliyeti oranının kimyasal etkisi üzerine yapılan ilk çalışmadır.

Yapılan bu çalışma güvenilir teorik modellerin geliştirilmesinde avantaj sağlayacağından çalışmamdan faydalanılmasını öneririm.

KAYNAKLAR

- Agarwal, B.K. (1991). *X-Ray Spectroscopy an Introduction, Second Edition, Springer Verlag, Newyork, 418.*
- Akman, F., (2016). Experimental values of K to Li sub-shell, K to L, and K to M shell vacancy transfer probabilities for some rare earth elements, *Appl. Radiat. Isot*, 115, 295-303.
- Akman, F., (2016). K to L shell vacancy transfer probabilities and Auger electron emission ratios for elements in the atomic range $30 \leq Z \leq 58$, *Can.J.Phys.*, 94, 679-686.
- Anand, L.F.M., Gudennavar, S.B., Bubbly, S.G., Kerur, B.R.,(2014). K-shell X-ray intensity ratios and vacancy transfer probabilities of Pt, Au, and Pb by a simple method, *J.Exp.Theo.Phys.*, 119, 392-397.
- Apaydin, G., Tirasoglu, E., (2012). Calculation of vacancy transfer probabilities from K to L shell using the X-ray fluorescence parameters, *Radiat.Phys.Chem.*, 81, 1593-1594.
- Aygün, E., Zengin, M., (2003). *Kuantum Fiziği Ders Kitabı*. Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü. Ankara, Bilim Yayınevi. Sf:293.
- Beiser, A., (1995). Concepts of Modern Physics, *Sixth Edition, McGraw Hill, International Edition, 765s.*
- Bilgili, D., Akıncı, E., Olgun, H., Özmen, A., (2006), *Elektromanyetik Alanın Canlı Sistemler Üzerindeki Etkilerinin Allium Test Sistemi ile Araştırılması*, 1. Basım,. Nobel Yayın, Ankara, p.250-251.
- Ballhausen, C.J., (1964). Molecular Orbital Theory, An Introductory Lecture Note and Reprint Volume, *W.A Benjamin. Inc. New York. 271.*
- Demir, D., Şahin, Y., (2007). *Measurements of K-shell X-ray production cross sections and K to L and M-shell radiative vacancy transfer probabilities for Nd, Eu, Gd, Dy and Ho at excitation with 59.5 keV photons in an external magnetic field. X-ray Spectrom.* 36, 178- 184.
- Dözen,C.,(2006).*M Tabaka X Işınları Üretim Tesir Kesitlerinin Hesaplanması*. Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, Kahramanmaraş, 74s.
- Durdu, B.G., (2010). *Bazı elementlerin X-ışını floresans tesir kesiti şiddet oranı ve flüorasans verimleri üzerine halojen etkileri*. Doktora Tezi. Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü. 104 sf.
- Duffy, J.A. (1974). *General Inorganic Chemistry*. Second Edition, Longman Group Limited, Bristol. 320.
- Düzgün.,S.,(2009). *Elektromanyetik Alanların İnsan Sağlığı üzerine zararlı etkileri*. Yüksek lisans tezi. Çukurova Üniversitesi ,Fen Bilimleri Enstitüsü,135 s.

- Dyson, N. A., (1990). *X - Ray in Atomic and Nuclear Physics*, Second Edition Cambridge University Press, Cambridge, 400s.
- Ertuğrul, M., (2002a). Measurement of total, radiative and radiationless (Auger) vacancy transfer probabilities from K to Li sub-shells of Cs, Ba and La. *J. Anal. At. Spectrom.* 17, 64-68.
- Ertuğrul, M., (2002b). Measurement of total, radiative and radiationless (Auger) vacancy transfer probabilities from K to Li subshells of Sm and Tb. *J. Radioanal. Nucl. Ch.* 252, 545-550.
- Ertuğrul, M., (2002c). *Measurement of total, radiative and radiationless (Auger) vacancy transfer probabilities from K to Li (i=1,2,3) subshell of Ho and Er. Spectrochim. Acta B57*, 63-71.
- Ertuğrul, M., (2002d). Measurement of K shell radiative transition probabilities and K, L₂ and L₃ shell/subshell fluorescence yields of some elements in the atomic number range 30 ≤ Z ≤ 40 *Analytica Chimica Acta Volume 454, Issue 2, 11 March 2002, Pages 327-334.*
- Ertuğral, B., (2004). *K tabakasından L tabakasına boşluk geçiş ihtimaliyetinin ölçülmesi ve hesaplanması.* Doktora Tezi. Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü 92 s.
- Ertuğral, B. G Apaydın, U Çevik, M Ertuğrul, A. İ. Kopya , (2007) . K_β/K_α X-ray intensitiy ratios for elements in the range 16 ≤ Z ≤ 92 excited by 5.9, 59.5 and 123.6 keV photons. *Radiation Physics and Chemistry* 76, 15-22
- Ertuğral, B., Baltas, H., Celik, A., Kobya, Y., (2010). Vacancy Transfer Probabilities from K to L Shell for Low Atomic Number Elements at 5.96 keV, *Acta Phys. Polonica A*, 117, 900-903.
- Han, I., Demir, L., (2010). Alloying effect on K to L shell vacancy transfer probabilities in 3d transition metals, *Radiat. Phys. Chem.*, 79, 1174-1179.
- Jitschin, W., Stötzel, R., Papp, R., Sarkar, M. (1999). Coster-Kronig, Fluorescence and Auger Yields of the ⁴⁷Ag, L Subshell Measured through Synchrotron Photoionisation, *Physics Review A*, 59, 5, 3408-3411
- Krishnananda, Mirji, S., Badiger, N.M., Tiwari, M.K., (2016). Measurement of the radiative L₃-M vacancy transfer probabilities of some 4f elements and compounds using Indus-2 synchrotron radiation, *Chem. Phys. Lett.*, 658, 192-196.
- Kucukonder, A., Durdu, B.G., (2013). Measurement of ratios of Auger electrons emission probabilities and K–L shell vacancy transfer probability for bromine and iodine compounds *Radiat. Phys. Chem.*, 579, 132-135.
- Küçükönder, A., Söğüt, Ö., Sümbül, F., Büyükkasap, E. (2006). K_β/K_α X-Ray Intensity Ratios in Calcium and Potassium Compounds. *J. Radioanalytical and Nuclear Chem.*, 270, (3): 695-698.

- Küçükönder, A., (1992). *K /K X-Işını Şiddet Oranlarına Kimyasal Etkiler*, Doktora Tezi Atatürk Üniversitesi, Erzurum, 87s, yayımlanmamış.
- Küçükönder, A., Şahin, Y., Büyükkasap, E., Kopya, A., (1993c). Chemical effects on K_{β}/K_{α} X-ray intensity ratios in coordination compounds of some 3d elements. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 26, 101-105.
- Küçükönder A., (2005). K-Shell Fluorescence Yields For Potassium And Calcium Compounds. *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.* 90 (1): 125-130
- Küçükönder, A., Buyukkasap, E., Yılmaz, R., Şahin Y., (1999). Chemical effects on the K beta /K alpha intensity ratios in first-row transition element compounds. *Acta Physica Polonica A* 95 (2) 243-250.
- Miessler, G.L., Tarr, D.A., (1999). *Inorganic Chemistry*, Second Edition, Prentice Hall Upper Saddle River, New Jersey, USA, 642.
- Mirji, S., Bennal, A.S., Badiger, N.M., Tiwari, M.K., Lodha, G.S., (2015). Chemical sensitivity of K-L vacancy transfer probability in compounds of 3d atoms using synchrotron radiation, *Chem.Phys.Lett.*, 634, 271-276.
- Mirji, S., Bennal, A.S., Krishnananda, Badiger, N.M., Tiwari, M.K., Lodha, G.S., (2015). Determination of K-L vacancy transfer probabilities of some 3d elements using synchrotron radiation, *Can.J.Phys.*, 93, 760-764.
- Misel, G., Leonhardt, G. And Sz. argen R.(1977). *Röntgen Spektren and Chemische Bindug, Greest and Parting*,Leipzig.
- Möser, B.,(1985). *Dependence of the $K_{\beta}:K_{\alpha}$ Intensity Ratio on the Oxidation State*. *Cryst.Res. Technol*, 20, (11): 1503-1508.
- Orhun,Ö ve Tanışlı, M., (2007). Elektromanyetik Dalgalar. (<http://www.auf.edu.tr/kitap/unite11.pdf>)
- Öz ,E.,(2006). Determination of emission probabilities of Auger electrons and K-L shell radiative vacancy transfer probabilities for 17 elements from Mn to Mo at 59.5 keV. *Journal of Quantitative Spectroscopy,Radiative Transver* 97(2006) 41-50.
- Özalpan, A., (2001). *Temel Radyo Biyoloji Kitabı*, Haliç Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Moleküler Biyoloji ve Genetik Bölümü, Haliç Üniversitesi Yayınları 342 sf.
- Palamutcu S., Dağ N. (2009). Elektromanyetik kalkanlama amaçlı tekstil yüzeyleri .*Tekstil Teknolojileri Elektronik Dergisi*, Cilt: 3, No: 1, 87-101.
- Pehlivan, F. (1989), *Biyofizik*, Pelin Ofset Matbası, Ankara. Pehlivan, 1989.
- Rodgers, G.E. (1994). *Intoduction to Coordination, Solid-State and descriptive Inorganic Chemistry*. Mc Graw-Hill International Editions Chemistry Series. 546.
- Shriver, D.F., Atkins, P.W., Langford, C.H., (1994). *Inorganic Chemistry*, Second Edition, Oxford Universty Pres, Oxford. 870

- Schönfeld, E. H. JanBen, (1996) . *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A* 369 527., *W. Bambynek. Proc. 2nd Int. Summer School Low-Level Measurements of Man-Made Radionuclides in the Environment*. La Rabida, Huelva. Spain, 1990. p. 157.
- Sogut, O., (2010). *Investigation of the K shell fluorescence yields of Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Ag, Cd, Ba, La, Ce and their compounds*. Vol.48, No.2. O .
- Söğüt, O., Büyükkasap, E., Küçükönder, A., Tarakçıoğlu, T.,(2009). Measurement of vacancy transfer probability from K to L shell using K-shell fluorescence yields, *Pramana-J. Phys.* 73, 711-718.
- Sole, V.A., Denecke, B., Grosse, G., Bambynek, W., (1993). Measurement of K shell fluorescence yields of some elements in the atomic range $22 \leq Z \leq 30$ using photoionisation. *Nucl. Instrum. Meth. A* 329,418-422.
- Fatih Sünbül,(2002), *Potasyum ve Kalsiyum elementlerinin K X-ışını tesir kesiti ve şiddet oranları üzerine kimyasal etkileri*. Yüksek Lisans Tezi. Kahraman Maraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü 39 s.
- Şahin, Y., (2013). *X-ışını spektroskopisi ders kitabı*. Çimke Yayınları.
- Şimşek, Ö., Karagöz, D., Ertuğrul, M., (2003). Measurement of K to L shell vacancy transfer probabilities for the elements $46 \leq Z \leq 55$ by photoionization. *Spectrochim. Acta B* 58, 1859-1865.
- Taylor, J. R., Zafaritos, C., (1991), *Modern Physics for Scientists and Engineers*, Çeviri Bekir Karaoğlu, 1996, Arte Bilgitek, Maslak, İstanbul, 434.
- Tıraşoğlu, E., Tekbıyık, A. (2005). Influence of Chemical Effect on the K /K α X-ray Intensity Ratios for Calcium and Potassium Compounds. *Spectrochimica Acta Part B*, 60, (4): 549-553.
- Tirasoglu, E.; Sogut, O., (2008). Determination of experimental K-shell fluorescence yield for potassium and calcium compounds. *Pramana-Journal of Physics* ,70(2008), 471-477.
- Turhan, M.F., (2011). *Atom Numarası $67 \leq Z \leq 83$ Aralığındaki Bazı Elementler İçin L Alt Tabaka Seviye Genişlikleri ve Işımalı Boşluk Geçiş İhtimaliyetlerinin Ölçülmesi*, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi,Erzurum,104s.
- Tunay, P., (2004), *Ba, La ve Ce Bileşiklerinde Coster-Kronig Şiddetlendirme Faktörlerinde Kimyasal Etkilerin Ölçülmesi*, Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi, Denizli, 88s.
- Tursucu, A., Onder, P., Eroglu, M., Demir, D., (2012). Determination of K-L total vacancy transfer probabilities using a weak gamma source in 2π geometrical configuration, *Appl.Radiat.Isot*, 70, 1509-1511.
- Tuzluca, F.N., (2007). *Bazı elementlerin L tabakasından M ve N tabakasına boşluk geçiş ihtimaliyetlerinin ölçülmesi*. Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 30

Grieken, Van., Markowicz, R. E., A. A., (2002) .Handbook of X-Ray Spectrometry 2nd ed.; *Marcel Dekker Inc.:* New York,; Vol. 29; ISBN 0-8247-0600-5.

Grieken, Van., Markowicz, R., A. A., (1993). Handsbook of X- Ray Spectrometry, *Marcel Dekker, New York*, 704.

Verschaeve, L., Maes, A., (1998), Genetic, cacinogenic and teratogenetic effects of radio frequency fields, *Mutation Research*, 410:141- 165.

Williams, K. L., (1987). An Introduction to X-Ray Spectrometry: X-ray fluorescence and electron microprobe analysis, *Allen and Unwin, London*.

Zeren, M.A. (1998). *Atomlar ve Moleküller*. Birsen Yayın Evi, İstanbul. 566.



ÖZ GEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler : Medine ERGÜVEN
Uyruğu : T.C
Doğum Tarihi ve Yeri : 30.05.1989 Türkoğlu
Medeni Hali : Bekar
Telefon :
Fax :
e-posta : ergmdjfkmt@gmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	ÇOMÜ/Mühendislik-Mimarlık Fakültesi/ Jeofizik Mühendisliği Bölümü	2013
Ön Lisans	İnönü Üniversitesi/HMYO/ Jeoteknik Teknikerliği Bölümü	2010
Lise	Türkoğlu Lisesi	2005

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. Determination of ratios of Auger electrons emission probabilities and K–L shell vacancy transfer probability for K and Ca compounds.

Hobiler

Spor yapmak (doğa sporları ,yüzme, basketbol ve voleybol), müzik dinlemek, kitap okumak (felsefe,bilim kurgu, dinler tarihi, psikoloji, tasavvuf), filim izlemek, seyahat etmek ,kitap yazmak (şiir,roman,masal,hikaye) .

