

KAHRAMANMARAŞ SÜTÇÜ İMAM ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ FİZİK ANABİLİM DALI

K TABAKASINDAN L TABAKASINA BOŞLUK GEÇİŞ İHTİMALLERİNİN ÖLÇÜLMESİ

Mehmet Türker TARAKÇIOĞLU

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KAHRAMANMARAŞ EKİM-2005

KAHRAMANMARAŞ SÜTÇÜ İMAM ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ FİZİK ANABİLİM DALI

K TABAKASINDAN L TABAKASINA BOŞLUK GEÇİŞ İHTİMALLERİNİN ÖLÇÜLMESİ

Mehmet Türker TARAKÇIOĞLU

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Kod No:

Bu tez/...... Tarihinde Aşağıdaki Jüri Üyeleri Tarafından Oy Birliği/Oy Çokluğu ile Kabul Edilmiştir.

İmza:	İmza:	İmza:
Doç.Dr. Ömer SÖĞÜT	Prof.Dr. Adnan KÜÇÜKÖNDER	Yrd.Doç. Dr. Hüseyin BİLGİÇ
DANIŞMAN	ÜYE	ÜYE

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

İmza ve Mühür

Prof. Dr. Özden GÖRÜCÜ

Enstitü Müdürü

Bu çalışma.....tarafından desteklenmiştir. Proje No:

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

İÇİNDEKİLER

İÇİNDEK	CILER	I
ÖZET		II
ABSTRA	СТ	.III
ÖNSÖZ.		.IV
ÇİZELG	ELER DİZİNİ	V
ŞEKİLLE	CR DİZİNİ	.VI
1.	GİRİŞ	1
1.1	Elektromanyetik Radyasyonun Madde ile Etkileşimi	3
1.1.1.	Elektromanyetik Radyasyonun Soğurulması	4
1.1.1.a	Fotoelektrik Olay	4
1.1.1.b	Çift Oluşumu	5
1.1.2.	Elektromanyetik Radyasyonun Saçılması	5
1.1.1.2.a.	Koherent Saçılma	6
1.1.1.2.b.	İnkoherent Saçılma	6
1.2.	Soğurma Katsayısı ve Soğurma Kıyısı	8
1.3.	Tesir Kesiti	10
1.3.1.	Koherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti	11
1.3.2.	İnkoherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti	12
1.4.	X-Işınlarının Meydana Gelmesi	12
1.5.	X-Işını Spektrumu	13
1.6.	X-Işını Enerji Seviyeleri	14
1.7.	X-Işını Spektrometresinin Genel Uygulama Alanları	17
1.8.	Atom ve Moleküllerde Elektronik Işıma Türleri	19
1.9.	Floresans Verimi ve Coster- Kronig Geçişleri	24
1.10.	Auger Olayı	28
2.	ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	31
3.	MATERYAL VE METOT	33
4.	BULGULAR VE TARTIŞMA	34
5.	SONUÇ VE ÖNERİLER	37
KAYNAK	LAR	39
ÖZGEÇM	ſİŞ	43

KAHRAMANMARAŞ SÜTÇÜ İMAM ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ÖZET

K TABAKASINDAN L TABAKASINA BOŞLUK GEÇİŞ İHTİMALLERİNİN ÖLÇÜLMESİ

Mehmet Türker TARAKÇIOĞLU

DANIŞMAN: Doç.Dr. Ömer SÖĞÜT

Yıl : 2005, Sayfa: 43

Jüri : Doç. Dr. Ömer SÖĞÜT : Prof. Dr. Adnan KÜÇÜKÖNDER : Yrd. Doç. Dr. Hüseyin BİLGİÇ

Bu çalışmada, floresans veriminin deneysel değerleri kullanılarak K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Sr, Mo, Ag, Cd, Ba, La ve Ce element ve bileşikleri için Auger veriminin ve K tabakasından L tabakasına toplam boşluk geçiş ihtimalleri deneysel olarak hesaplandı.

Numuneler Am-241 radyoizotop halka kaynağından yayımlanan 59.5 keV enerjili γışınları ile uyarılmıştır ve numunelerden yayımlanan K ve L X-ışınları rezolüsyonu 5.9 keV'de 155 eV olan Si(Li) dedektörü ile sayıldı.

Elde edilen değerler diğer araştırmacıların teorik ve deneysel değerleri ile karşılaştırıldı.

Anahtar Kelimeler: X-ışını, K ve L tabakası, floresans verim, Auger Olayı, boşluk geçiş ihtimali, Işımasız geçiş ihtimali

DEPARTMENT OF PHYSICS INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE UNIVERSITY OF KAHRAMANMARAŞ SÜTÇÜ İMAM

M.Sc. THESIS

ABSTRACT

K TABAKASINDAN L TABAKASINA BOŞLUK GEÇİŞ İHTİMALLERİNİN ÖLÇÜLMESİ

Mehmet Türker TARAKÇIOĞLU

Supervisor : Assist. Prof. Dr. Ömer SÖĞÜT

Year : 2005, Pages: 43

Jury : Assoc. Prof. Dr. Ömer SÖĞÜT : Prof. Dr. Adnan KÜÇÜKÖNDER : Assist. Prof. Dr. Hüseyin BİLGİÇ

In this study the experimental K shell Auger yield values for the elements K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Cr, Mo, Ag, Cd, Ba, La and Ce and their compounds are calculated via the measured fluorescence yield values of these taken from literature and the experimental values for total vacancy transfer probabilities are calculated.

These experimental values were obtained from samples excited by 59.5 keV γ -rays, which were emitted from a Am-241 radioisotope source. Also K and L x-rays emitted from samples were calculated by means of Si(Li) detector with a resolution of 155 eV at 5.9 keV.

At last the results obtained in this study are compared with the results of other studies.

Keywords: X-Ray, K and L shells, Fluorescence Yield, Auger Effect, Radiative Transfer Probability, Vacancy Transfer Probability

ÖNSÖZ

Bu çalışmada Si(Li) dedektörü ile K tabakasından L tabakasına boşluk geçiş ihtimalleri ve K tabakası Auger verimi K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Sr, Mo, Ag, Cd, Ba, La ve Ce elementleri için deneysel ve teorik olarak hesaplandı.

Genel olarak, X-ışınlarının maddeyle etkileşimi (soğurulması ve saçılması), Xışınlarının meydana gelmesi ve bunların spektrum ile enerji seviyeleri, soğurma kıyıları ve tesir kesitleri tartışıldı ve değişik uygulama alanları incelendi. Ayrıca floresans verimi, Coster-Kronig geçişleri ve Auger olayı hakkında da geniş bilgi sunuldu.

İkinci bölümde konuyla ilgili daha önce yapılmış olan çalışmalara yer verilmiş, üçüncü bölümde ise deneysel verilerin elde edilme şekli ve verilerin kaynakları sunuldu. Dördüncü bölümde deneysel ve teorik veriler kullanılarak gerekli hesaplamalar yapıldı ve sonuçlar tablolar ve grafikler halinde verildi. Çalışmanın son aşamasında elde edilen veriler tartışıldı ve bulgular değerlendirildi.

Yüksek Lisans Tezimin her aşamasında değerli görüş ve yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Sayın Doç.Dr. Ömer SÖĞÜT'te en içten saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca, her türlü destekte bulunan aileme de teşekkürü bir borç bilirim.

EKİM 2005 KAHRAMANMARAŞ Mehmet Türker TARAKÇIOĞLU

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>Sayfa</u>

Çizelge 1.1.	Karakteristik X-ışınlarının Gösterilmesi	15
Çizelge 4.1.	Hesaplanan a _K ve Teorik a _K Değerleri	34
Çizelge 4.2.	Deneysel ve Teorik η_{KL} Değerleri	36

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sayfa</u>

Şekil 1	l .1.	Fotoelektrik Olay	4		
Şekil 1	1.2.	Compton Olayı	7		
Şekil 1	l .3.	Soğurma Kıyıları	10		
Şekil 1	l .4.	X-Işını Spektrumu			
Şekil 1	l .5.	Atomda Elektron Geçişlerinin Ve Karakteristik X-Işını			
		Yayımlanmasının Şematik Olarak Gösterimi	16		
Şekil 1	l .6.	(a) Floresans ve (b) Fosforesans	21		
Şekil 1	l .7.	Atom ve Molekülde Işımalı Geçiş Türleri	23		
Şekil 1	l .8.	Floresans Olayı ve Coster-Kronig Geçişleri	27		
Şekil 3	8.1	Bazı detektörlerin ayırma güçleri	33		
Şekil 5.1. Auger veriminin atom numarasına göre değişimi					
Şekil 5.2. Teorik ve deneysel η_{KL} değerlerinin Atom numarasına göre değişimi 3					

1. GİRİŞ

Enerji dağılımlı X-ışını floresans teknolojisi (EDXRF) çeşitli materyallerin kimyasal bileşenlerinin saptanması için basit, doğru, ekonomik ve analitik bir metottur. XRF tekniği zararsız ve güvenilir olması sebebiyle çevre kirliliği, arkeoloji, tıp, adli tıp, kozmetik, endüstri kalite kontrol laboratuarları, madencilik, eczacılık, kimya, astronomi vs. birçok alanda kullanılmaktadır. Geniş bir kullanım sahasının yanı sıra X-ışını floresans teknolojisinin bir diğer avantajı çok az veya hiç denilecek kadar az numune hazırlığı gerektiriyor olmasıdır. Ayrıca katı, akışkan ve toz halindeki numuneler için de kullanılabilir. Sodyum (11)'den Uranyum (92)'ye kadar geniş bir element yelpazesi için kullanılabiliyor olması ve alt-ppm seviyesindeki deteksiyon sınırlarını sağlaması ayrı bir avantajdır. Bu teknolojiyle konsantrasyonlar eş zamanlı ve kolay bir şekilde %100'e yakın bir değerde ölçülebilir.

Atom, molekül ve radyasyon fiziği çalışmalarında, elemental X – ışını floresans analizleri, tıbbi araştırmalar ve kanser terapi gibi değişik uygulama alanlarında da doğru floresans verim bilgisine ihtiyaç vardır. Atomların verdikleri spektrumların incelenmesi sonucunda, atom içerisinde elektronların düzenlenmesi ve tabaklara bölüşümü hakkındaki en iyi bilgilere ulaşılır.

Atomlardan çeşitli yollarla sökülen iç tabaka elektronları, ışımalı (radiative) ve ışımasız (non-radiative) geçişler şeklinde ele alınabilir. Burada, atomdan herhangi bir metotla K-tabakasında meydana getirilmiş olan boşlukların, karakteristik X-ışınları yayımlanarak doldurulması ihtimaliyetine *K-tabakasına ait floresans verimi* denir. Atomdan yayımlanan K-tabakasına ait karakteristik X-ışınları yine aynı atomun üst tabakalarında bulunan bir elektronu sökerek boşluklar meydana getirebilir. Bu olay ışımalı veya ışımasız (*Auger*) geçişler şeklinde sonuçlanabilir. Her iki tür bozunmada atomun birinci iç tabakasında meydana gelen boşluklar kendisinden yüksek olan iç tabakalara veya bir dış tabakaya transfer edilir.

Bozunan K tabakası boşlukları başına üretilen L tabakası boşluklarının sayısı η_{KL} ve bozunan L tabakası boşlukları başına üretilen karakteristik L X-ışınlarının sayısı ω_L hakkındaki bilgiler, K kıyısı enerjisi üzerindeki bir enerji ile fotonlar tarafından uyarılması ile yayımlanan L X-ışınlarının ölçülmesinde de çok önemlidir. Uyarma enerjisinin, K kıyısından büyük olduğu durumlarda, üretilen L X-ışınlarının sayısının tahmin edilebilmesi için ω_L 'nin yanında, K tabakasında oluşturulan bir boşluğun L tabakasına geçme ihtimaliyeti olan η_{KL} 'nin de tam olarak bilinmesi gerekmektedir. Bu nedenle, ışımalı geçiş ihtimaliyeti olan η_{KL} gerek nükleer gerekse atomik çalışmalarda büyük önem taşımaktadır.

Bu çalışmada 19 $\leq Z \leq 58$ aralığındaki elementler için K tabakasından L tabakasına ışımalı geçişler, η_{KL} ve Auger verimleri (a_K) yarı-deneysel olarak hesaplanmıştır.

1.1. Elektromanyetik Radyasyonun Madde ile Etkileşimi

Monokromatik paralel bir X-ışını demeti bir maddeden geçirildiğinde çıkan ışın demetinin şiddetinde bir azalma olur. I_o şiddetinde bir X-ışını demeti, t kalınlığındaki bir maddeyi geçtikten sonra şiddetindeki azalma,

$$I(E) = I_0(E) \cdot e^{-\mu t}$$
(1.1)

olarak ifade edilir. Buna Lambert kanunu denir. Burada µ lineer soğurma katsayısıdır. Lineer soğurma katsayısı birim kalınlık başına düşen soğurulma olarak tanımlanır.

Madde içine giren elektromanyetik radyasyon, madde atomuna bağlı elektronlar, serbest elektronlar ve çekirdekle etkileşirler. Bunlar, fotoelektrik, çift oluşumu, Compton ve koherent olaylar olarak tanımlanır. Bu olayların meydana gelme ihtimali fotonun enerjisine bağlıdır. Örneğin; 0.001 MeV' den 0.5 MeV' e kadar fotoelektrik olay, 0.1 MeV' den 0.5 MeV' e kadar saçılma olayı daha etkili iken 1.02 MeV' den başlayan ve daha yüksek enerjili fotonlar için çift oluşumu olayı oluşur (Siegbahn, 1974).

Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşimi;

- 1. Elektromanyetik Radyasyonun Soğurulması (Fotoelektrik ve Çift Oluşumu) Olayı
- 2. Elektromanyetik Radyasyonun Saçılması (Koherent ve İnkoherent) Olayı

olmak üzere iki ana başlık altında incelenir.

1.1.1. Elektromanyetik Radyasyonun Soğurulması

Elektromanyetik radyasyonun soğurulması olayının en çok gözlemlenenleri

- 1. Fotoelektrik olayı
- 2. Çift oluşumu olayıdır.

Bu olayların meydana gelme ihtimalleri gelen fotonun enerjisine bağlı olup 0.001 MeV ile 0.5 MeV arasında fotoelektrik olayı, 1.02 MeV' den başlayarak artan foton enerjilerinde çift oluşumu olayı gözlenmesi ihtimali artar.

1.1.1.a. Fotoelektrik Olay

Madde üzerine düşen fotonun tüm enerjisini atoma bağlı elektrona vererek, elektronu atomdan sökmesine fotoelektrik olay denir. Yörüngeden koparak serbest hale gelen elektrona fotoelektron denir.



Şekil 1.1. Fotoelektrik Olay

Gelen fotonun enerjisi hv, elektronun bağlanma enerjisi E_B ve sökülen elektronun enerjisi E_K ise,

$$hv = E_B + E_K \tag{1.2}$$

ifadesi yazılır. Gelen fotonun hv enerjisi elektronun bağlanma enerjisine ne kadar yakınsa fotoelektrik olayın gerçekleşme ihtimali o kadar büyüktür.

1.1.1.b. Çift Oluşumu

Yüksek atom numaralı bir elementin çekirdeğine yakın yerden geçen fotonun enerjisini kaybederek bir elektron- pozitron çiftine dönüşmesine çift oluşum olayı denir. Elektronun ve pozitronun kütlelerinin eşit, yüklerinin ise zıt olduğu göz önüne alınırsa, çekirdeğe yakın yerde oluşan bu olayda hiçbir korunum yasası bozulmaz. Yani yük, çizgisel momentum ve toplam enerji korunur.

Elektronun ve pozitronun durgun kütle enerjileri $m_0c^2 = 0.51$ MeV ise, çift oluşum olayının gerçekleşmesi için gerekli eşik enerjisi 2 $m_0c^2 = 1.02$ MeV olması gerekir. Gelen fotonun enerjisi 1.02 MeV den düşük ise elektron- pozitron çifti meydana gelmez ve çift oluşumu olayı gözlenmez.

Çift oluşumu olayının tersi, bir elektron ile bir pozitronun yan yana gelerek, bir foton çifti oluşturduktan sonra yok olmasıdır. Bu olayın çekirdek etrafında gerçekleşme şartı yoktur.

1.1.2. Elektromanyetik Radyasyonun Saçılması

Elektromanyetik radyasyonun saçılması olayını saçılan ışının enerjisine göre

- 1. Koherent saçılma
- 2. İnkoherent saçılma

olmak üzere ikiye ayrılır.

1.1.2.a. Koherent Saçılma

Gelen fotonla saçılan foton arasında, enerji farkı olmadan meydana gelen saçılmaya koherent saçılma denir. Koherent saçılmada, gelen ve saçılan ışın aynı fazdadır. Bu durum, enerjisi elektronun bağlanma enerjisinden daha düşük enerjili fotonların elektron üzerinden saçılmasıyla da oluşur.

Koherent saçılma; Thomson, Delbrück, Rayleigh ve Nükleer Rezonans Saçılma olarak sınıflandırılabilir.

F(x,Z) atomik form faktörü ve σ_T Thomson saçılma tesir kesiti olmak üzere, atom başına koherent saçılma tesir kesiti;

$$\sigma_{coh} = \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} d\sigma_T [F(x,Z)]^2$$
$$= \frac{3}{8} \sigma_T \int_{-1}^{1} (1 + \cos\theta) [F(x,Z)]^2 d(\cos\theta)$$
(1.3)

ifadesiyle verilir.

1.1.2.b. İnkoherent Saçılma

Gelen fotonla saçılan foton arasında enerji farkı meydana gelen saçılmalara inkoherent saçılma denir. Gelen ve saçılan fotonların fazları farklıdır.

S(x,Z) inkoherent saçılma fonksiyonu ve d $\sigma_{KN}(\Phi)$ Klein- Nishina diferansiyel saçılma tesir kesiti olmak üzere, toplam inkoherent saçılma tesir kesiti,

$$\sigma_{incoh} = \int_{\Phi=0}^{\Phi=\pi} d\sigma_{KN}(\Phi) S(x, Z)$$
(1.4)

bağıntısı ile verilmektedir.

İnkoherent saçılma; Compton, Nükleer ve Raman saçılması olarak bilinir.

Compton olayında atomun dış yörüngesine zayıf olarak bağlı elektrona, elektronun bağlanma enerjisinden çok büyük enerjili fotonun çarparak saçılmasıdır.



Şekil 1.2. Compton Olayı

Gelen foton, saçılan foton ve elektron bir düzlemde ise enerji ve momentum korunacaktır. Enerji ve momentumun korunum yasası gereği

$$E' = \frac{E}{1 + \alpha (1 - \cos \theta)} \tag{1.5}$$

ifadesi yazılır.

E' saçılan fotonun enerjisi; E gelen fotonun enerjisi ve $\alpha = \frac{E}{m_0 c^2}$ 'a bağlı yazılmıştır. Burada m₀ elektronun durgun kütlesi ise m₀c² 'de elektronun durgun kütle enerjisi olur.

Geri tepen elektronun enerjisi E_K , gelen fotonun enerjisiyle saçılan fotonun enerjisi arasındaki farktır ve

$$E_{K} = E - E' \tag{1.6}$$

$$E_{K} = E - \frac{E}{1 + \alpha (1 - \cos \theta)}$$
 'den (1.7)

$$E_{K} = \frac{\alpha E (1 - \cos \theta)}{1 + \alpha (1 - \cos \theta)}$$
(1.8)

olarak verilir. (Karagöz, 2001)

1.2. Soğurma Katsayısı ve Soğurma Kıyısı

Bağıntı (1.1) de tanımlanan lineer soğurma katsayısı μ ' nün madde yoğunluğuna oranına kütle azaltma katsayısı denir. Kütle azaltma katsayısı μ/ρ ile ifade edilir. Hem fotoelektrik olay, hem saçılma hem de çift oluşum olayı madde ile etkileşen ışın demetinin şiddetinde azalmaya neden olmaktadır. Öyleyse bu olayların her birinin tesir kesitlerinin toplamı, toplam soğurma katsayısını verir (Jenkins,1981). Bu ifade

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{\tau}{\rho} + \frac{\sigma}{\rho} + \frac{\kappa}{\rho} + \dots$$
(1.9)

olarak yazılır. Yukarıdaki ifadede τ/ρ fotoelektrik kütle soğurma katsayısı, σ/ρ saçılma kütle soğurma katsayısı, κ/ρ ise çift oluşumu kütle soğurma katsayısını temsil etmektedir. τ/ρ toplam fotoelektrik soğurma katsayısı, atomun enerji seviyelerine bağlı olarak yazılırsa;

$$\left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E} = \left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E,K} + \left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E,L_{I}} + \left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E,L_{II}} + \left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E,L_{III}} + \cdots$$
(1.10)

$$\left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E} = \sum_{i} \left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E_{i}} \qquad (i = K, L_{I}, L_{II}, L_{III}, \cdots) \qquad (1.11)$$

bu bağıntı E enerjili bir foton için fotoelektrik soğurma katsayısını verir.

Fotoelektrik etkileşim ihtimaliyeti, gelen ışın demetinin enerjisi elektronun bağlanma enerjisine ne kadar yakın bir değerde ise o derecede artmaktadır. O halde bir elementin atomunun verilen bir seviyesinden bir elektronu sökebilmek için gerekli minimum foton enerjisi, o atomun soğurma kıyısı olarak adlandırılır. Her bir atomun çeşitli soğurma kıyıları vardır. Bir atomun K kabuğu için bir, L kabuğu için üç, M kabuğu için beş, N kabuğu için yedi soğurma kıyısı vardır. Her atomun soğurma kıyısı enerjisi, dış yörüngeden iç yörüngeye doğru artmaktadır (Jenkins,1981).



Şekil 1.3. Soğurma Kıyıları

1.3. Tesir Kesiti

Herhangi bir olayın meydana gelme ihtimaline tesir kesiti denir. I şiddetinde bir ışın demeti, t kalınlığında bir A yüzeyine gelsin. Maddenin birim hacmindeki atom sayısı n ve atomik tesir kesiti σ ise, ışına maruz kalan madde alanı An σ t olur. Bu ifadede n σ t etkin alan kesri adını alır. Etkin alan kesri f ile gösterilir ve levhadan geçen demetin şiddetindeki değişimin kesrini temsil eder. Gelen ışın demetindeki N parçacıktan N_s tanesi etkileşime giriyorsa, tesir kesitinin klasik ifadesi;

$$N_{\rm s} = \sigma \,\rm nNt \tag{1.12}$$

$$\sigma = \frac{N_s}{nNt}$$
(1.13)

olarak yazılır (Storm et al., 1970). Etkileşen ışın demeti, saçılma meydana geldikten sonra tesir kesiti farklı açılar için farklı değerler alır. Bunun için açıya bağlı başka bir tesir kesiti tanımlanır. Bu yeni tesir kesitine diferansiyel tesir kesiti denir ve birim katı açı başına düşen tesir kesiti olarak tanımlanır. Bir etkileşmede θ gelme açısı doğrultusundaki d Ω katı açısı içinde saçılan ışın sayısının, gelen ışın sayısına oranının ölçüsüdür. Diferansiyel saçılma tesir kesiti, gelen ışının birim katı açı başına saçılma ihtimali olarak da tanımlanır (Storm et. al., 1970).

1.3.1. Koherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti

Koherent saçılma diferansiyel tesir kesiti;

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_T(\theta)}{d\Omega} [F(x,Z)]^2$$
$$= \frac{1}{2} r_{e^2} (1 + \cos^2 \theta) [F(x,Z)]^2$$
(1.14)

olarak yazılır (Hubbell et al., 1975). Koherent saçılma diferansiyel tesir kesiti iki faktörden oluşur. İlk faktör elektron başına Thomson saçılma diferansiyel tesir kesiti olup;

$$\frac{d\sigma_T(\theta)}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_{e^2} \left(1 + \cos^2 \theta \right)$$
(1.15)

ifadesiyle verilir ve ikinci faktör ise atomik form faktörünün karesidir. Hubbell ve arkadaşları bu değerleri makalelerinde (Hubbell et at., 1975) tablolar halinde sunmuştur.

1.3.2. İnkoherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti

İnkoherent saçılma diferansiyel tesir kesiti teorik olarak,

$$\frac{d\sigma_{inc}(\theta)}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{KN}(\theta)}{d\Omega} S(x, Z)$$
(1.16)

yazılmaktadır. Bu ifadede $\frac{d\sigma_{KN}(\theta)}{d\Omega}$ Klein- Nishina diferansiyel tesir kesitidir. Klein-Nishina diferansiyel tesir kesiti;

$$\frac{d\sigma_{_{KN}}(\theta)}{d\Omega} = \frac{1}{2}r_{_{e^2}}\left[1 + \alpha(1 - \cos\theta)\right]^{-2}\left[1 + \cos^2\theta + \frac{\alpha^2(1 - \cos\theta)^2}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)}\right]$$
(1.17)

olarak ifade edilir. Burada α elektronun birim durgun kütle enerjisi başına düşen foton enerjisi, r_e klasik elektronun yarıçapıdır. S(x,Z) inkoherent saçılma fonksiyonu olup, değerleri Hubbell (Hubbell et al., 1975) ve arkadaşlarının makalesinde tablolar halinde verilmiştir.

1.4. X-Işınlarının Meydana Gelmesi

X-ışınları 10^{-5} ile 10^2 A° aralığındaki elektromanyetik dalgalardır. İki farklı yolla meydana gelirler.

Bu ışınlar yüksek enerjili elektronların yavaşlatılması veya atomun iç yörüngelerinde oluşan boşluklara elektron geçişlerinde yayımlanırlar. Yüksek enerjili bir parçacığın atom içerisinde adım adım yavaşlayarak X-ışını yayımlamasına, sürekli X-ışını veya Bremsstrahlung denir. Sürekli X-ışını spektrumuna örnekler; β ışınları, iç dönüşüm elektronları, Compton olayında geri tepen elektron ve Auger elektronunun oluşturduğu spektrumlar verilebilir.

1.5. X-Işını Spektrumu

Şekil 1.4' de tipik bir X-ışını spektrumu görülmektedir. Bu spektrumda, karakteristik Xışının pikleri, koherent saçılma pikleri, inkoherent saçılma pikleri, kaçak pikler ve üst üste binme (pile up) pikleri mevcuttur (Söğüt, 2000).

- a. Karaketristik X-ışını pikleri; İncelenen numunedeki elementlerden gelen ve elementler hakkında bize bilgi veren K α , K β , L α , L β , L γ ... gibi piklerdir.
- Koherent saçılma pikleri; Kaynaktan numuneye gelen primer gamma ışınlarının numune içerisindeki atomlardan enerjilerini kaybetmeden saçılmaları sonucu oluşurlar.
- c. Kaçak pik; İncelenen numuneden yayımlanan karakteristik X-ışını fotonları detektöre ulaştıklarında, detektör atomlarının birinden bir elektron sökerek elektron hol çifti oluşturur. Bu olay sonucunda yayımlanan karakteristik X-ışınları bir etkileşme yapmadan detektörü terk ederse, detektöre gelen fotonlar gerçek enerjilerinden daha az bir enerji ile sayılırlar. Bu şekilde düşük enerji bölgesinde bir pik meydana gelir. Bu pike kaçak pik denir.
- d. Pile up piki; Detektörde aynı anda iki veya daha fazla karakteristik X-ışını fotonunun detektör tarafından bir tek foton gibi sayılması sonucunda oluşan piktir.
- e. Compton piki; Kaynaktan numuneye gelen primer gamma ışınları numune içerisinde inkoherent saçılmaya uğradıkları zaman, enerjilerinin bir kısmını kaybederler. Bu şekilde saçılmaya uğrayan fotonlar Compton pikini oluştururlar. Enerji kaybından dolayı Compton piki, koherent pikten daha düşük enerjili bölgede oluşur.



Şekil 1.4. X-Işını Spektrumu

1.6. X-Işını Enerji Seviyeleri

Bir fotonla uyarılan atomun dış tabakasından bir elektron söküldüğünde oluşan boşluk, üst tabakalarda bulunan elektronlar tarafından (L, M, N kabukları) 10⁻¹²-10⁻¹⁴ saniye gibi kısa bir sürede doldurulur. Bu geçiş sırasında enerji düzeyleri arasındaki fark karakteristik Xışını olarak yayımlanır (Erdoğan, 1976).

K tabakasındaki boşluk L tabakası tarafından doldurulursa meydana gelen karakteristik Xışını Kα olarak adlandırılır. Bu şekilde boşluklar arası geçişlerde yayımlanan karakteristik X-ışınlarının adlandırılması çizelge (1.1) de verilmiştir. Çizelge (1.1) de Siegbahn ve International of Pure Applied Chemistry (IUPAC) gösterimi sunulmuştur. Ayrıca şekil (1.5) de atomdaki elektron geçişleri ve karakteristik X-ışını yayımlanması şematik olarak verilmiştir (Erdoğan, 1976).

Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC
Κα1	K-L ₃	Lα ₁	L ₃ -M ₅	Lγ ₁	L ₂ -N ₄	Μα ₁	M ₅ -N ₇
Κα ₂	K-L ₂	La ₂	L ₃ -M ₄	Lγ ₂	L ₁ -N ₂	Μα ₂	M ₅ -N ₆
Κβ1	K-M ₃	$L\beta_1$	L ₂ -M ₄	Lγ ₃	L ₁ -N ₃	Μβ	M ₄ -N ₆
Κβ2	K-N ₃	Lβ ₂	L ₃ -N ₅	Lγ ₄	L ₁ -O ₃	Μγ	M ₃ -N ₅
Κβ2	K-N ₂	Lβ ₃	L ₁ -M ₃	Lγ ₄	L ₁ -O ₂	$M\xi_1$	M ₅ -N ₃
Κβ3	K-M ₂	Lβ ₄	L ₁ -M ₂	Lγ ₅	L ₂ -N ₁	Μξ ₂	M ₄ -N ₂
Κβ4	K-N ₅	Lβ ₅	L ₃ -O _{4,5}	Lγ ₆	L ₂ -O ₄		
Κβ4	K-N ₄	Lβ ₆	L ₃ -N ₁	Lγ ₈	L ₂ -O ₁		
Kβ _{4x}	K-N ₄	Lβ ₇	L ₃ -O ₁	Lγ ₈	L ₂ -N ₆		
Κβ5	K-M ₅	Lβ ₇	L ₃ -N _{6,7}	Lη	L ₂ -M ₁		
Kβ5	K-M ₄	Lβ ₉	L ₁ -M ₅	Lλ	L ₅ -M ₁		
		$L\beta_{10}$	L ₁ -M ₄	Ls	L ₃ -M ₃		
		$L\beta_{15}$	L ₃ -N ₄	Lt	L ₃ -M ₂		
		$L\beta_{17}$	L ₂ -M ₃	Lu	L ₃ -N ₆		
				Lv	L ₂ -N ₆		

Çizelge 1.1. Karakteristik X-ışınlarının Gösterilmesi



Şekil 1.5. Atomda Elektron Geçişlerinin ve Karakteristik X-Işını Yayımlanmasının Şematik Olarak Gösterimi (Pious et.al., 1992)

1.7. X-Işını Spektrometresinin Genel Uygulama Alanları

İleri düzeydeki hassasiyetleri ve iyi derecedeki doğruluk paylarıyla birlikte muazzam fleksible (esnek) olmaları ve birçok değişik alan tipilerinin bulunması X-ışınları spektrometrelerini kantitatif (nicel) analizler için mükemmel birer araç kılmaktadır. Tekkanal dalga boyu dağılımlı spektrometreler (DXRS), demir içeren ve içermeyen alaşımlar, yağlar, cüruflar (ergimiş metalin yüzeyindeki pislik) ve sinterler, cevherler ve mineraller, ince tabakalar gibi geniş bir ürün yelpazesine hem rutin hem de rutin dışı olarak uygulanabilen yaygın bir kullanım alanına sahiptir (Jenkins et al., 2000). DXRS sistemleri çok hassastır, fakat çok kanallı spektrometrelere (EDXRS) kıyasla biraz yavaştırlar. Çok kanallı dalga boyu dağılımlı cihazlar genellikle sadece esnekliğin önem taşımadığı, fakat hızlı ve titiz analizlere ihtiyaç duyulan rutin yüksek geçiş analizlerinde kullanılmaktadır. Enerji dağılımlı spektrometreler (EDXRS) aynı anda tüm elementler hakkında bilgi sağlama gibi büyük bir avantaja sahiptir. Dalga boyu dağılımlı sistemlerin çözünürlüklere dair biraz eksiklikleri olmasına karşın, kalite kontrol ve hatalı veri sorunları gibi alanlarda mükemmel işlev göstermektedir. Bunlar adli tıp alanındaki ufak parça alaşımları ve element verilerinin alt element X-ışınları tozu sapma verilerinin sağlanmasında kısmen etkilidir.

Son zamanlarda X-ışınları teknikleri çevre kirliliğine yol açan maddelerin analizinde gün geçtikçe daha da yaygın olarak kullanılmaktadır (Dzubay, 1977). Yıllarca floresans metodunun hassasiyet özelliği ppm seviyesindeki kirletici düzeylerin doğrudan ölçümünde ancak yeterli gelmekteydi ve yoğunlaşma öncesi metotlara başvurma zorunluluğu bulunmaktaydı. Ancak son yıllardaki gelişmeler su ve hava numunelerindeki metal kalıntılarının analizinde sıkça karşılaşılan numune kütlelerinde yeterli derecede hassasiyet verimi sağladığından bu alanda yaygın kullanım kazanmaktadır X-ışını floresans metodunun uygulanmasına dair iyi bir örneği kağıt endüstrisi teşkil etmektedir; burada kireç ile alakalı birleşenlerin; kalsit; dolomit; silikat; silis cam kumu; alçı; MnO₂ ve demir cevherinin; pentaklorofenol ve amonikal bakır arsenat ile işlenmiş kerestelerin (ağaç); kağıt, kağıt hamuru, zift ve asfalttaki sülfür, klor, brom ile titanyumun ve kağıdın baskı ve

mürekkep dağılım kalitesinin ölçümü gibi çok geniş bir uygulama alanı söz konusudur (Kocman, et al., 1985).

Element analizinin belirli alanlarında sadece X-ışını floresansı uygulanmaktadır. Örneğin saçılmayan X-ışını floresansı Tc'nin K çizgisi kullanılarak çözeltilerindeki Teknetiyum analizlerinde uygulanmaktadır (Akopov, et al., 1986). Günümüzde Teknetiyum analizleri için hala iyi kimyasal analiz metotları yoktur. Doğrudan X-ışını floresans metotları ayrıca kısa ömürlü, süper ağır (super heavy) elementlerin incelenmesinde de kullanılmaktadır. XRF tekniğinin yegane, teknik olduğu bir başka alan ise biyolojik numunelerin doğrudan analizlerinde görülmektedir. Örneğin, radyoizotop X-ışını floresansı, insan aort ve dokularından sağlanan biyolojik numunelerin analizinde kullanılmaktadır. 10-20mCi gücünde çarpıştırılmış ¹⁰⁹Cd kaynağı 10¹⁵ atomu civarında bir hassasiyet vermektedir (Frank, et al., 1986) ve tümör büyümelerine dair incelemelerde ve ateroskleroz (Preiss, et al.,1986) araştırmalarında kullanılmaktadır. Floresans tekniğinin özgünce uygulandığı farklı çalışma alanları vardır. Bunlar jeoloji, tıp, metalürji ve sanatı kapsamaktadır.

Yukarıda bahsedilen teknikler ve uygulama alanları özetle aşağıdaki gibi sıralanabilir:

- Standart tiplerle analizler
- Metal ve alaşım analizleri üzerinde uygulamalar
- Cevher ve mineraller üzerinde uygulamalar
- Seramik materyallerin analizi
- Arkeometri uygulamaları
- Katalizatörlerin analizi
- Parçacık analizi
- Adli tıp uygulamaları
- Kaynak sularındaki kirliliğin analizi gibi çevresel çalışmalar (Jenkins et al., 2000).

1.8. Atom ve Moleküllerde Elektronik Işıma Türleri

Rezonans, floresans, Raman ışımaları ve ışımasız geçişler, elektrik dipol geçişleri sonucu oluşan ışımalardır.

Bir atom yada molekülden yapılabilecek en olası ışıma rezonans ışımadır. Rezonans ışımalarında bir ilk ve bir son seviye arasında geçişte soğurulan foton 10⁻⁸ s gibi bir süre sonra aynen salınır ve atom ya da molekül ilk enerji seviyesine tekrar döner (Aygün, et al., 1998). Rezonans geçişlerinde salınan ışığın frekansı ile soğurulan ışığın frekansı aynı olup;

$$V_{i,s} = V_{s,i} = \frac{E_i - E_s}{h}$$
 (1.18)

ile belirlenir. Bu tür ışımalar saçılma teorisinde Rayleigh saçılması olarak bilinir.

Floresans ışıma da rezonans ışıması gibi bir elektrik dipol geçişi sonucu oluşur. Ancak uyarılan atom ya da molekül yine pariteyi koruyarak fakat basamaklı olarak ilk seviyeye döner. Floresans ışımada daima $v_s < v_i$ olur. Bu tür ışımalara en iyi örnek cıva buharlı floresans lambalardır (Aygün, et al., 1998).

Fosforesans ışıma ise floresans ışımanın geciktirilmiş durumudur. Atom ya da molekül uyarıldıktan sonra bir metastabil seviyeye geçer. Bu seviyede 10⁻⁸ saniyeden çok daha uzun süre (dakika, saat mertebesinde) kalabilir ve oradan tekrar ilk seviyeye geçer. Tek foton soğuran atom biri gecikmeli olan iki foton salar. Fosforesans ışımalarda uyarıcı fotonla saçılan fotonlar arasındaki ilişki

$$v_i = v_{s1} + v_{s2} \tag{1.19}$$

olarak yazılabilir. Fosforesans ışımadan ossiloskopta, TV ekranlarında ve elektrik düğmelerinin karanlıkta görülmesini sağlamada yararlanılır. Floresans ve fosforesans ışımanın oluşumu şematik olarak şekil 1.6 da gösterilir.



Şekil 1.6. (a) Floresans ve (b) Fosforesans (Bransden, et al., 1994)

Şekil 1.6.a' da elektronik taban durumdaki bir molekülün en düşük titreşim durumundan, daha yüksek ¹A elektronik durumunda uyarılmış titreşim düzeyine geçişi gösterilmektedir. Molekül bundan sonra başka moleküllerle çarpışmalarla enerji kaybeder ve uyarılmış ¹A elektronik durumunun en düşük titreşim durumu v'=0 'a ulaşır. Bu süreç ışınımın kendiliğinden yayınlanmasından hızlıdır ve sonunda molekül yeniden ışık yayınladığında bu yayınlama v'=0 titreşim düzeyindedir. Sonuç olarak floresansda, yayınlanan ışınım gelen ışınımdan düşük frekanslıdır.

Şekil 1.6.b' de ¹X tekli taban durumundan tekli bir ¹A durumuna uyarıldığında. ¹A durumunun yaklaşık enerjili ve bağlaşık bir ³A durumunu olduğunu kabul edelim. ¹A durumunun merdiveninden aşağı gitmek yerine, molekül, sistemler arası kesişme yapar ve ışımasız bir geçişle ³A üçlü durumuna iletilir. Kesişme oluştuktan sonra sıcaklıkla bozunma, ³A kuyusu içinde, molekül ³A durumunun en düşük titreşim durumuna ulaşıncaya kadar sürer. Bu üçlü durum, ¹X tekli taban durumuna ışımalı geçiş yaparak bozunur. Bu olaya fosforesans denir (Bransden, et al., 1994).

Rezonans, floresans ve fosforesans olaylarının hepsinde çizgi spektrumu şeklinde gözlenir. Yani enerji seviyeleri arasındaki farklar ΔE = hv şeklinde kesindir.

Bunun dışında bir band spektrumu saçılma türü vardır. Spektroskopide sıkça rastlanan bu olaya raman olayı denir. Bu olayda uyarılan ve saçılan ışınların frekanslarının, molekülün kuantum seviyelerinin öz- frekansları ile bir bağlantısı yoktur. Molekülün ışınladığı keyfi bir frekans molekülü bir ilk ve son seviye arasında uyarmakla birlikte artan enerji de v_R (Raman frekansı) ile saçılır (Aygün, et al., 1998).

$$\boldsymbol{v}_{is} = \frac{\boldsymbol{E}_i - \boldsymbol{E}_s}{h} + \boldsymbol{v}_R \tag{1.20}$$

Bu şekilde çok değişik frekanslı Raman fotonları yayımlanacağı için saçılma spektrumu band şeklinde olur.

Elektrik dipol geçişlerinin yasak olduğu durumlar da vardır. Elektrik dipole yasak olan bu geçişlerde manyetik dipol veya elektrik kuadrupole geçişleri oluşur. Bunlara yüksek mertebeden ışımalar denir. Bu geçişlerde de bir foton gözlenir. Hiçbir ışıma olmaksızın , yasak bir geçişin gerçekleşmesi çarpışma yolu ile mümkündür. Bu tür uyarımlara çarpışma uyarmalı ışımasız geçişler denir. Atom ya da molekül, enerjisini çarptığı yüzeye veya söktüğü elektrona aktarır ve geçiş olduğu halde foton gözlenmez. Işımasız geçişler genellikle metastabil seviyelerde gözlenir (Aygün et al., 1998).



Şekil 1.7. Atom ve Moleklüde Işımalı Geçiş Türleri

1.9. Floresans Verimi ve Coster- Kronig Geçişleri

Atomun tabaka veya alt tabakalarında herhangi bir yolla meydana gelmiş bir boşluğun karakteristik X-ışını yayımlanarak doldurulması ihtimaline ilgili tabakanın veya alt tabakanın floresans verimi denir.

Uyarılmış bir atomun ortalama ömrü τ ve uyarılmış halin toplam seviye genişliği;

$$\Gamma = \frac{h}{\tau} \tag{1.21}$$

olarak yazılır. Işımalı kısmın toplam genişliği Γ_R ve toplam seviye genişliği Γ ise floresans verimi;

$$\omega_{i} = \frac{\Gamma_{R}(L_{i}X)}{\Gamma(L_{i})} \qquad (x = L_{i}, M, N, O \quad j > 1)$$
(1.22)

olarak ifade edilir (Bambynek, et al., 1972).

Ayrca K tabakasına ait floresans verim;

$$\omega_{K} = \frac{I_{K}}{n_{K}}$$
(1.23)

olmak üzere, n_K , K tabakasında oluşan boşluk sayısını ve I_K toplam yayımlanan karakteristik X-ışınlarının sayısıdır.

Bir atomda kabuklar arası geçiş $\Delta n \neq 0$, $\Delta l = \pm 1$ ve $\Delta j = \pm 1$, 0 şartlarına bağlıdır. Bunlar dışındaki geçişlere yasak geçişler denir. Alt tabakalar arasında $\Delta n = 0$ şartını sağlayarak yapılan geçişlere Coster-Kronig geçişleri denir.

Coster-Kronig geçiş ihtimali, herhangi bir x tabakasının x_i alt tabakasında meydana gelen bir boşluğun daha yüksek x_j alt tabakasına kaymasına denir ve f_{ij}^{x} ile gösterilir (Söğüt et al., 2001). Coster-Kronig geçişleri ışımalı ve ışımasız olmak üzere iki kısımdan oluşur. Işımalı kısım f_{ij}^{x} (R) ve ışımasız kısım f_{ij}^{x} (A) ile gösterilir ve f_{ij}^{x} (R)<< f_{ij}^{x} (A) dır. X kabuğunun i ve j alt tabakaları arasında meydana gelen Coster-Kronig geçişi için;

$$f_{ij}^{x} = f_{ij}^{x}(R) + f_{ij}^{x}(A)$$
(1.24)

ifadesi yazılır.

Coster-Kronig geçişlerinin oluşmadığı bir x kabuğu için ortalama floresans verimi;

$$\boldsymbol{\varpi}_{x} = \sum_{i=1}^{k} N_{i}^{x} \boldsymbol{\omega}_{i}^{x}$$
(1.25)

şeklinde yazılır.

Burada N_i^x , x tabaksının i. alt tabakasından sökülen elektronlardan dolayı oluşan boşlukların relatif sayısı ve ω_i^x x tabaksının i. alt tabakasının floresans verimidir. Bu iki değerin çarpım $N_i^x \omega_i^x$ ifadesi de i. alt tabakasından bir foton salınma ihtimalidir. Ayrıca;

$$N_i^x = \frac{n_i^x}{\sum n_i^x}$$
 ve $\sum_{i=1}^k N_i^x = 1$ (1.26)

O halde bütün alt tabakalardaki boşlukların toplam sayısı;

$$n_x = \sum_{i=1}^k n_i^x \tag{1.27}$$

dir.

Böylece I_x yayımlanmış fotonların sayısı olmak üzere, x tabakası için ortalama floresans verimi;

$$\boldsymbol{\varpi}_{x} = \frac{I_{x}}{n_{x}} \tag{1.28}$$

olarak ifade edilir (Bambynek et al., 1972).

Coster- Kronig geçişlerini göz önüne alarak ortalama floresans verimini bulmak için iki yol izlenebilir;

1. v_i^x , i. alt kabuktaki bir boşluk için bir foton yayımlanma ihtimali olmak üzere;

$$\boldsymbol{\sigma}_{x} = \sum_{i=1}^{k} N_{i}^{x} \mathbf{v}_{i}^{x}$$
(1.29)

olarak yazılır.

2. Alt kabuk floresans verimi ile v_i^x in lineer kombinasyonu olarak;

$$\boldsymbol{\varpi}_{x} = \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{\omega}_{i}^{x} \mathbf{v}_{i}^{x}$$
(1.30)

ifade edilebilir (Bambynek et al., 1972).



Şekil 1.8. Floresans Olayı ve Coster-Kronig Geçişleri

1.10. Auger Olayı

Kararsız halde bulunan bir atomda değişik geçişler gözlenebilir. Bunlar;

- Işımalı geçişler
- Auger geçişleri
- Coster- Kronig geçişleri
- Oto iyonizasyon (Kendiliğinden) geçişleri

Herhangi bir olay sonucu atomda meydana gelen boşluk üst tabakadaki başka bir elektron tarafından ışımalı veya ışımasız olarak doldurulabilir. Bunlardan Auger, Coster-Kronig ve Oto iyonizasyon geçişleri ışımasız olaylardır. Işımasız geçişlerin her biri ayrı ayrı isimlendirilmiş olsa da , aslında hepsi Auger olayıdır (Ferreira, 1987).

Auger olayı, atomda herhangi bir sebeple dış kabukta oluşan boşluk daha iç bir kabuktaki elektronla doldurulur. Salınan foton üst kabuktaki bir elektronu daha söker. Sökülen elektrona Auger elektronu denir. Coster-Kronig geçişi Auger geçişinin özel bir durumudur. Auger olayından farklı olarak boşluğun bulunduğu kabukla, bu boşluğu dolduran elektronun kabuk düzeyi aynıdır. Yani $\Delta n = 0$ dır. Bir kabuğun alt kabukları arasındaki enerji seviyelerinin farkları oldukça düşük olacağından, elektron, ilgili atomun en düşük seviyesinden koparacaktır. Böylece Coster-Kronig elektronun enerjisi de Auger elektronun enerjisine göre daha düşük olacaktır. Oto iyonizasyonda ise en üst seviyedeki iki elektron eş zamanlı olarak doldurulmamış daha yüksek bir seviyeye uyarılır. Elektronlar eski hallerine döndürüldüğünde diğer bir elektron sökülür. Bu işlemde ikiden fazla elektron da kullanılabilir (Ferreira, 1987).

Auger olayı daha ziyade düşük atom numaralı elementlerde yaygındır. Çünkü bu atomların değerlik elektronları daha gevşek bağlıdır ve karakteristik X-ışınlarını daha kolay soğururlar. Aynı nedenlerden dolayı, K serisinden çok L serisinde rastlanır (Ferreira, 1987).

Örneğin; K boşlukları Auger olayı olasılığı özellikle küçük atom numaralı elementlerı (Z=10-12) için yüksektir. L boşluğu için bu olasılık atom numarası 35-38 arası olan atomlarda yüksektir.

K tabakasında oluşan boşluk n_K sayısını ve N_{KX}, K tabakasından yayımlanan karakteristik X-ışınlarının sayısı, N_{KA} K tabakasındaki Auger elektronlarının sayısı, P ifadeleri karşılık gelme ihtimalleri, ω_K K kabuğu floresans verimi ve a_K Auger verimi olmak üzere;

$$\omega_{K} = \frac{N_{KX}}{N_{K}} = \frac{P_{KX}}{P_{KX} + P_{KA}}$$
 ve $a_{K} = \frac{N_{KA}}{N_{K}} = \frac{P_{KA}}{P_{KX} + P_{KA}}$ (1.31)

$$\omega_{\rm K} + a_{\rm K} = 1 \tag{1.32}$$

olur.

L tabakasındaki boşluklar için sadece Auger verimi değil Coster- Kronig geçişleri de olasıdır (Bambynek et al., 1972). Auger verimi, Floresans verimi ve Coster-Kronig verimi arasında;

$$\omega_i^x + a_i^x + \sum_{j=i+1}^k f_{ij}^x = 1$$
(1.33)

ifadesi yazılır. Bu denklemde a_i^x herhangi bir x tabakasının x_i tabakasına ait Auger verimi bu alt tabakada meydana getirilmiş bir boşluğun diğer üst tabaka elektronları tarafından ışımasız geçiş ile doldurulması ihtimali olarak ifade edilir (Bamynek et al., 1972).

L tabakası için;

$$f_{12} = \frac{N_{12}}{N_1}, \quad f_{13} = \frac{N_{13}}{N_1}, \quad f_{23} = \frac{N_{23}}{N_2}$$

$$\omega_1 + a_1 + f_{12} + f_{13} = 1$$

$$\omega_2 + a_2 + f_{23} = 1$$
 (1.34)

$$\omega_3 + a_3 = 1$$

dir.

Herhangi bir tabakadaki ortalama Auger verimi;

$$\overline{a}_x = \sum_{i=1}^k \mathbf{v}_i^x a_i^x \tag{1.35}$$

Burada v_i^x, x tabakası için i. alt tabakadaki Coster- Kronig geçişleriyle değiştirilmiş relatif boşluk sayısıdır (Bambynek, et al., 1972). L kabuğu için;

$$v_{1}^{L} = \omega_{1} + f_{12}\omega_{2} + (f_{13} + f_{12} + f_{23})\omega_{3}$$

$$v_{2}^{L} = \omega_{2} + f_{23}\omega_{3}$$

$$v_{3}^{L} = \omega_{3}$$
(1.36)

Belli bir boşluk dağılımı için bir tabakanın ortalama floresans verimi ile ortalama Auger verimi arasındaki bağlantı;

$$\boldsymbol{\varpi}_{\kappa} + \bar{a} = 1 \tag{1.37}$$

dir. (Bambynek et al., 1972).

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Scofield (1973) X-ışınları spektroskopisinde önemli bir yer tutan kaynak eserinde bir çok element için 1 keV'den 1500 keV'e kadar olan uyarma enerjilerinden K, L, M ve daha üst tabakalar için alt tabaka ve toplam fotoiyonizasyon tesir kesitleri ile ilgili yapılan teorik hesaplama sonuçları vermiştir.

Puri ve arkadaşları 1992 de atom numarası $37 \le Z \le 42$ aralığında bulunan Rb, Sr, Y, Zr, Nb ile Mo elementlerinde K tabakasından L tabakasına boşluk geçişlerini incelemişler ve bu makalede elde edilen sonuçlar Rao'nun (1972) sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır.

Rao ve arkadaşlarının 1995'deki çalışmasında, atom numaraları $78 \le Z \le 82$ aralığındaki elementlerin 6.47 ve 7.57 keV'lik foton kaynaklarla uyarılması ile floresans veriminin deneysel ve teorik hesaplama sonuçları mevcuttur.

Doğan (1995) Si(Li) katı hal detektörüyle $73 \le Z \le 92$ elementler bölgesinde K tabakasından L tabakasına boşluk geçiş ihtimallerini incelemiştir.

Söğüt (2000) ise doktora tezinde Hg, Pb ve Bi bileşiklerinde Coster-Kronig geçiş ihtimallerini incelemiş ve Ba, La ile Ce bileşiklerinde K ve L tabakası floresans tesir kesitleri ve floresans verimlerini ele almıştır. Bu çalışmada Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Sr, Mo, Ag ve Cd element ve bileşiklerinde K tabakası floresans verimleri ve tesir kesitleri üzerine kimyasal etkileri araştırmıştır.

Karagöz (2001) doktora çalışmasında $46 \le Z \le 55$ atom numarası aralığındaki dokuz elementin K tabakasından L tabakasına boşluk geçiş ihtimallerini ölçmüştür.

Ertuğrul (2001) Sm ve Tb elementlerinin K tabakasından L_i alt tabakalarına ışımalı ve ışımasız boşluk geçişlerini incelemiştir.

Ertuğrul'un 2002'deki çalışmasında ise K tabakasından L_i (i= 1, 2, 3) alt tabakalarına boşluk geçişlerini incelemiş ve bulunan sonuçları diğer araştırmacıların sonuçları ile karşılaştırarak değerlendirmiştir.

Ertuğrul (2005) ve ark. yüksek atom numaralı elementler için K tabakasından L tabakasına boşluk geçiş ihtimallerini ölçmüştür. Bu çalışmada numuneleri uyarmak için 25 mCi ⁵⁷Co filtre edilmiş bir kaynak kullanılmış ve atom numarası 57<Z<92 arasındaki 25 elementin şiddet oranı K_β/K_α için η_{KL} değerleri elde edilmiştir. Tm, Yb, Lu, Hf ve Ir elementlerinin ölçülen η_{KL} değerleri ilk kez bu makalede yayımlanmıştır.

3. MATERYAL VE METOT

Elementlere ait karakteristik X-ışını spektrumlarını elde etmek için, araştırma alanlarına bağlı olarak çeşitli detektörler kullanılmaktadır. Detektör seçiminde; detektör tipi, hassas olduğu enerji bölgesi ve ayırma gücü gibi bir takım faktörler göz önüne alınır. Şekil 3.1 de görüldüğü gibi rezolasyonu en yüksek detektörler yarı iletken detektörlerdir. Si (Li) yarı iletken detektöründe, bir pozitif (p-tipi) bölge ile bir negatif (n-tipi) bölge arasında bulunan bir intrinsik bölgeden oluşur. Detektör p-i-n tipi bir diyottur.



Şekil 3.1 Bazı detektörlerin ayırma güçleri

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

 ω_K değerleri (Söğüt,2000) den alınarak, K tabakası için a_K Auger verimi aşağıdaki ifadeler kullanılarak hesaplandı.

$$\mathbf{a}_{\mathbf{K}} + \mathbf{\omega}_{\mathbf{K}} = 1 \tag{3.1}$$

$$\mathbf{a}_{\mathbf{K}} = 1 - \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{K}} \tag{3.2}$$

Burada a_K K tabakası için Auger verimidir. ω_K 'nın Z= 22 ile 58 arası değerleri (Söğüt, 2000) den ve Z= 19 ve 20 değerleri ise (Küçükönder, 2005) den alınmıştır.

	Element	Deneysel $\omega_{\rm K}$	Hesaplanan	Toorik
Atom Numarası	ve	(Söğüt, 2000;	Deneysel	TCOTIK
	Bileşikler	Küçükönder, 2005)	a _K	a _K
19	KNO ₃	0.138 ± 0.012	0.862 ± 0.073	0.860
20	CaCl ₂ H ₂ O	0.179 ± 0.014	0.821 ± 0.074	0.837
22	Ti	0.221 ± 0.022	0.779 ± 0.071	0.786
23	V	0.273 ± 0.025	0.727 ± 0.065	0.757
24	Cr	0.265 ± 0.026	0.735 ± 0.065	0.725
25	Mn	0.297 ± 0.030	0.703 ± 0.056	0.692
26	Fe	0.366 ± 0.039	0.634 ± 0.052	0.660
27	Со	0.391 ± 0.039	0.609 ± 0.052	0.627
28	Ni	0.451 ± 0.045	0.549 ± 0.049	0.594
29	Cu	0.478 ± 0.047	0.522 ± 0.048	0.560
30	Zn	0.525 ± 0.050	0.475 ± 0.046	0.526
33	As	0.634 ± 0.060	0.366 ± 0.033	0.438
34	Se	0.570 ± 0.057	0.430 ± 0.043	0.411
38	SrCl ₂ x6H ₂ O	0.416 ± 0.041	0.584 ± 0.058	0.310
42	Мо	0.723 ± 0.065	0.277 ± 0.025	0.235
47	AgO	0.855 ± 0.068	0.145 ± 0.013	0.169
48	Cd	0.738 ± 0.058	0.262 ± 0.022	0.157
56	Ba(OH) ₂	0.972 ± 0.086	0.028 ± 0.002	0.098
57	La ₂ O ₃	0.787 ± 0.068	0.213 ± 0.020	0.093
58	Ce(NO ₃) ₃ x6H ₂ O	0.906 ± 0.084	0.094 ± 0.008	0.088

Çizelge 4.1. Hesaplanan a_K ve Teorik a_K Değerleri

Ayrıca; K kabuğundan L kabuğuna toplam boşluk geçişleri ihtimali η_{KL} aşağıdaki denklemle hesaplanır (Schönfeld et al., 1996).

$$\eta_{KL} = \frac{2 - \omega_K}{1 + \begin{pmatrix} I_{K\beta} \\ / I_{K\alpha} \end{pmatrix}}$$
(3.3)

Burada η_{KL} toplam boşluk geçişleri, ω_K K tabakası floresans verimi, $I_{K\alpha}$ ve $I_{K\beta}$ sırasıyla K α ve K β pikleri altındaki net alandır.

Gerekli $\omega_{\rm K}$ değerleri (Söğüt, 2000) ve (Küçükönder, 2005) den ve K_{β}/K_{α} 'in değeri Scofied 'in tablosundan alınmıştır (Scofield, 1974). Elde edilen sonuçlar Çizelge 4.2 'de (Rao et al.,1971) ın teorik değerleriyle birlikte verildi.

BULGULAR VE TARTIŞMA

	Element	Donovcol	Teorik
Atom Numarası	ve	Deneysei	η_{KL}
	Bileşikler	η _{KL}	(Rao et al.,1971)
19	KNO3	1.717 ± 0.154	1.660
20	CaCl ₂ H ₂ O	1.626 ± 0.130	1.595
22	Ti	1.586 ± 0.127	1.548
23	V	1.528 ± 0.122	1.518
24	Cr	1.538 ± 0.123	1.495
25	Mn	1.505 ± 0.120	1.452
26	Fe	1.442 ± 0.144	1.439
27	Со	1.420 ± 0.142	1.390
28	Ni	1.364 ± 0.123	1.375
29	Cu	1.342 ± 0.121	1.331
30	Zn	1.298 ± 0.104	1.316
33	As	1.185 ± 0.083	1.224
34	Se	1.235 ± 0.099	1.200
38	SrCl ₂ x6H ₂ O	1.341 ± 0.107	1.104
42	Мо	1.070 ± 0.097	1.030
47	AgO	0.940 ± 0.085	0.971
48	Cd	1.036 ± 0.104	0.952
56	Ba(OH) ₂	0.832 ± 0.083	0.887
57	La ₂ O ₃	0.975 ± 0.078	0.885
58	Ce(NO ₃) ₃ x6H ₂ O	0.879 ± 0.079	0.876

Çizelge 4.2. Deneysel ve Teorik η_{KL} değerleri

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada 19 $\leq Z \leq 58$ aralığındaki elementler için K tabakasından L tabakasına ışımalı geçişler, η_{KL} ve Auger verimleri a_K yarı-deneysel olarak hesaplanmıştır.

İlk aşamada K tabakası için a_K Auger verimi deneysel olarak hesaplanarak elde edilen deneysel sonuçlar teorik verilerle karşılaştırıldı. Sonuçlardaki uyum çizilen grafik 5.1. de görülmektedir.



Şekil 5.1. Auger veriminin atom numarasına göre değişimi

Grafik de görüldüğü gibi düşük atom numaralarına kadar deneysel a_K değerlerinin teorik değerlerle uyuştuğu görüldü. Daha yüksek atom numaraları için bazı küçük sapmalar gözlendi. Bu farklılıkların sebebi kullanılan numunelerin bileşik teorik verilerin ise saf elementler için olmasından kaynaklanabilir.

SONUÇ VE ÖNERİLER

Benzer şekilde K tabakasından L tabakasına toplam boşluk geçiş ihtimalleri için yapılan deneysel hesaplamalar elimizdeki teorik verilerle karşılaştırıldığında sonuçları Şekil 5.2 de görüldüğü gibi birbirine yakın çıkmıştır.



Şekil 5.2. Teorik ve deneysel nKL değerlerinin Atom numarasına göre değişimi

Atom numarası küçüldükçe Auger olayı ihtimali artarken X-ışını yayınlama ihtimali azalmaktadır. Bu hem Tablo 5.1 de atom numarası arttıkça Auger verimi azalmasında hemde Tablo 5.2 de atom numarası arttıkça boşluk geçişi ihtimallerinin azalmasında görüldü.

KAYNAKLAR

- AKOPOV, G.A., BERDIKOV, V.V., ZAITSEV, E.A., IOKHIN, B.S. and KRINITSYN, A.P., 1986. At. Energ., 60:64.
- AYGÜN, E., ZENGİN, D.M, 1998. Atom ve Molekül Fiziği. Ankara Üniversitesi, Ankara, 273s.
- BAMBYNEK, W., CRASEMAN, B., FINK, R.W., FREUND, H.U., MARK, H., SWIFT, C.D., PRICE, R.E. and RAOL, P.W., 1972, Review Mod. Phys., 44:716.
- BERTIN, E. P. 1978. Introduction To X-ray Spectrometric Analysis. Plenum Press. New York. 485s.
- BRANSDEN, B.H., JOACHAİN, C.J., 1994. Atom ve Molekül Fiziği. Bilim Yayıncılık, Ankara, 687s.

BUHRKE, V.E. 1998. A Practical Guide For The Preparation Of Specimens For X-ray Fluorescence. Wiley-VCH. New York. 219s.

- DOĞAN, O. 1995. Si(Li) Dedektörü İle Karakteristik X-Işınlarının Floresans Tesir Kesitlerinin Ve Boşluk Geçiş İhtimallerinin Ölçülmesi. Atatürk Üniversitesi, Yüksek Lisans Tezi, Erzurum, 79s (yayınlanmamış).
- DZUBAY, T.G., ed. 1977. X-Ray Fluorescence Analysis of Enviromental Samples. Ann Arbor Science, Ann Arbor, Michigan.
- ERDOĞAN, H. 1976. As, Cd, In, Sn, Pb, Te, V, I İçin Karakteristik X-Işını Şiddet Oranları. Atatürk Üniversitesi, Doktora Tezi, Erzurum, (yayınlanmamış).

- ERTUĞRUL, M. 2003. Determination Of Probalities For Vacancy Transfer From The K to The L_i Subshell Using L X-Ray Production Cross-Section. Journel of Physics B, I Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36 (2003) 2275-2282
- ERTUĞRAL, B., APAYDIN, G., BALTAŞ, H., ÇEVİK, U., KOBYA, A.İ., ERTUĞRUL,
 M. 2005. Measurment Of Vacancy Transfer Probabilies From K To L Shell For
 High Atomic Number Elements. Spectrochimica Acta, Part B.
 www.elsevier.com/locate/sab
- EYCİL, M. 2004. Toryum Ve Uranyum Bileşiklerinde Coster-Kronig Şiddetlendirme Faktörlerinin Hesaplanması. Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi, Yüksek Lisans Tezi, Kahramanmaraş, 45s (yayınlanmamış).
- FERREIRA, J.G. 1987. X-ray Spectroscopy In Atomic And Solid State Physics. Plenum Press. New York. 423s.
- FRANK, A.S., SCHAUBLE, M.K. and PREISS, I.L. 1986. Journal of American Pathology. 122:421.
- HUBBELL, J.H., VEIGLE, W.J., BRIGGS, E.A., BROWN, R.T., CROMER, D.T. and HOWERTON, R.J. 1975. J.Phys.Chem.Ref. Data. 4.3.
- JENKINS, R. 1986. An Introduction To X-Ray Spectrometry. Heyden and Son. New York. 226s.
- JENKINS, R., GOULD, R.W., GEDCKE, D. 2000. Applications Of X-Ray Spektrometri: In Applied Spectroscopy Reviews, www.dekker.com, 35 (1&2), s.129-150.

- KARAGÖZ, D. 2001. Bazı Elementlerin K Tabakasından L Tabakasına Boşluk Geçiş İhtimaliyetlerinin Ölçülmesi. Atatürk Üniversitesi, Doktora Tezi, Erzurum, 36s (yayınlanmamış).
- KOCMAN, W., FOLEY, L. and WOODGER, S.C., 1985. Adv. X-Ray Analysis. 28:195.
- KÜÇÜKÖNDER, A., 2005. Journal of Quntitative Spectroskopy and Radiative Transfer 90, 125-130.
- PERKINS, S.T., CULLEN, D.E., CHEN, M.H., HUBBELL, J.H., RATHKOPF, J., SCOFIELD, J.H., 1991. Tables And Graphics Of Atomic Subshell And Relaxation Data Derived From The CLNL Evalated. Atomic Data Library (EADL) Z=1-100. Lawrence Livermore National Laboratory, University of California, California, 181s.
- PREISS, I.L., PTAK, T. and FRANK, A.S. 1986. Nucl.Instrum.Meth.Phys. Res.Sect.A(3):539.
- RAO, P.V. CHEN, M.H. and CRASEMANN, B. 1971. Distributions Produced by Inner-Shell Ionization Atomic Vacancy. Physical Review A General Physics third series vol 5 no 3
- RAO, P.V. CHEN, M.H. and CRASEMANN, B. 1972. Phys.Rev. A5, 997s.
- RAO, P.V., CESAREO, R. and GIGANTE, G.E., 1995. L X-Ray Fluorescence Cross-Section, Fluorescene Yield and Intensity Ratios For Au and Pb At Excitation Energies. 21.56, 31.64 and 34.17, Rational Physics Chem., 46. 17-22.
- SCHÖNFELD,F. JANBEN, H., 1996. Evaluation of atomic shell data. Nucl.Instrum. Methods A 369, 527-533 s.

- SCOFIELD, J.H. 1973. Theoretical Photoionization Cross-Section From 1keV to 1500 keV. Lawrence Livermore Laboratory, UCRL 51326 Livermore, California, 374 s.
- SCOFIELD, J.H. 1974. Relativistic Hartree-Slater Values For K and L X-Ray Emission Rates, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14. Lawrence Livermore Laboratory, California 94550, 137s.
- SIEGBAHN, K. 1974. Alpha-Beta And Gamma-Ray Spectrometry. North-Holland Publishing Company, Netherlands, s.38-39.
- SÖĞÜT, Ö. 1995. K ve L X-Işını Şiddet Oranları Üzerine Kimyasal Etkiler. Atatürk Üniversitesi, Yüksek Lisans Tezi, Erzurum, 73s (yayınlanmamış).
- SÖĞÜT, Ö. 2000. Coster-Kronig Geçiş İhtimalleri, Flüoresans Tesir Kesitleri ve Flüoresans Verimler Üzerine Kimyasal Etkiler. Atatürk Üniversitesi, Doktora Tezi, Erzurum, 95s (yayınlanmamış).
- SÖĞÜT, Ö., BÜYÜKKASAP, E., ERTUĞRUL, M., KÜÇÜKÖNDER, A., 2001. Chemical Effect On Enhancement Of Coster-Kronig Transition Of L3 X-Rays. Journal of Quantitaive Spectroscopy&Radiative Transfer, 74 (2002) 395:400.
- STORM, E. and ISRAEL, H.I. 1970. Nuclear Data Tab, A7, 565s.

ÖZGEÇMİŞ

1977 yılında Treuchtlingen, Almanya'da doğdu. İlk öğrenimini Almanya'da, orta ve lise öğrenimini Kahramanmaraş ve Ankara'da tamamladı. 2001 yılında Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümünden mezun oldu. 2003 yılında Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisansa başladı.