

JURİ ÜYELERİ

Yrd.Doç.Dr.Rıdvan DURAK

Rıdvan Durak

Yrd.Doç.Dr.Gökhan BUDAK

Gökhan Budak

Yrd.Doç.Dr.Abdulhalik KARABULUT

Abdulhalik Karabulut

11.08.2000 tarihinde 16/142 kararla kurulan jürimiz iş bu Y.Lisans tezini 14.09.2000 tarihinde kabul etmiştir.

16/142

**TC. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ**

ÖZET

Hf, Ta, W, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Th ve U elementlerinden yayınlanan karakteristik L X-ışınları bir Si(Li) yarı iletken detektör kullanılarak ölçüldü. Numuneleri uyarmak için 100 mCi şiddetinde ^{241}Am nokta kaynaktan yayınlanan 59,5 keV enerjili γ -ışınları kullanıldı.

Elde edilen spektrumlar Microcal Origin (Version: 3.5) programı kullanılarak analiz edildi ve $\sigma_{L\alpha}$, $\sigma_{L\gamma_1}$, $\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$, $\sigma_{L\gamma_{4,4'}}$ ve $\sigma_{L\gamma_5}$ floresans tesir kesitleri hesaplandı. Hesaplanan $\sigma_{L\alpha}$, $\sigma_{L\gamma_1}$ ve $\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$ floresans tesir kesitleri, floresans verimler, Coster-Kronig geçiş ihtimalleri ve L X-ışını geçiş hızları kullanılarak L alt tabaka fotoelektrik tesir kesitleri elde edildi. Bunlardan toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitleri bulundu.

Hesaplanan L_1 , L_2 ve L_3 alt tabaka fotoelektrik tesir kesitleri Scofield'in teorik Hartree-Slater fotoelektrik tesir kesiti değerleriyle ve toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitleri Scofield'in teorik Hartree-Slater fotoelektrik tesir kesiti değerleriyle ve Arora et al.'in (1981) mevcut deneysel sonuçlarıyla karşılaştırıldı. Hesaplanan değerler ile teorik ve diğer deneysel değerler arasında iyi bir uyumun olduğu gözlemlendi.

SUMMARY

Characteristic L X-rays emitted from Hf, Ta, W, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Th, and U were measured by using a Si (Li) semiconductor detector. To excite the samples, γ -rays emitted from a 100 mCi ^{241}Am point source were used.

$\sigma_{L\alpha}$, $\sigma_{L\gamma_1}$, $\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$, $\sigma_{L\gamma_{4,4'}}$, and $\sigma_{L\gamma_5}$ fluorescence cross sections were calculated by analysing the spectra with Microcal Origin (Version: 3.5) software programme. Calculated $\sigma_{L\alpha}$, $\sigma_{L\gamma_1}$, and $\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$ fluorescence cross sections were converted to L subshell photoeffect cross sections by using fluorescence yields, Coster-Kronig transition probabilities, and L X-ray transition rates. Total L shell photoeffect cross sections were determined as sum of the L subshell photoeffect cross sections.

Determined L subshell photoeffect cross sections were compared with the theoretical Hartree-Slater L subshell photoeffect cross sections of Scofield, and L shell photoeffect cross sections were compared with the theoretical Hartree-Slater L shell photoeffect cross sections of Scofield and present experimental results of Arora et al. (1981).

TEŞEKKÜR

Yüksek Lisans tezimin hazırlanmasında görüş ve yardımlarını esirgemeyen değerli tez hocam Yrd. Doç. Dr. Abdulhalik KARABULUT'a en içten şükran ve saygılarımı sunarım.

Çalışmalarım boyunca yardımlarını eksik etmeyen Doç. Dr. Mehmet ERTUĞRUL'a, Yrd. Doç. Dr. Gökhan BUDAK'a, Yrd. Doç. Dr. Önder ŞİMŞEK'e ve Arş. Gör. Recep POLAT'a teşekkür ederim. Çalışmalarım boyunca bana destek olan Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Yusuf ŞAHİN'e, bölüm elemanlarına ve Kâzım Karabekir Eğitim Fakültesi Fizik Eğitimi Ana Bilim Dalı elemanlarına teşekkür ederim.



Ali GÜROL

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
SUMMARY	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
1. GİRİŞ	1
2. TEORİ	5
2.1. Gama ve X-Işınlarının Madde ile Etkileşmesi.....	5
2.1.1. Fotoelektrik Olayı.....	7
2.1.2. Compton Olayı.....	7
2.1.3. Çift Oluşumu Olayı.....	9
2.3. Karakteristik X-Işınlarının Oluşumu.....	12
2.4. X-ışını Spektrumlarının İncelenmesi.....	13
2.4.1. Koherent Pikler.....	17
2.4.2. Compton Pikleri.....	18
2.4.3. Karakteristik X-Işını Pikleri.....	18
2.4.4. Auger Pikleri.....	18
2.4.5. Üst Üste Binme (Pile-Up) Pikleri.....	19
2.4.6. Kaçak (Escape) Pikler.....	19
2.4.7. Satellite Çizgileri.....	20
2.5. Floresans Verimler ve Coster-Kronig Geçişler.....	20
2.6. Auger Olayı.....	24

3. PİK ANALİZİ.....	27
3.1. Floresans Çizgilerin Tanımı.....	27
3.2. Gaussian Fonksiyonlar.....	28
3.3. Spektral Temel Sayma.....	29
3.4. Düzeltilmiş Gaussianlar.....	29
4. DENEY SİSTEMİ VE VERİLERİN DEĞERLENDİRİLMESİ.....	32
4.1. Si(Li) Detektörlerin Çalışma Prensibi.....	32
4.2. Detektör Verimi.....	34
4.3. Enerji Kalibrasyonu.....	35
4.4. Numunelerin Hazırlanması.....	36
4.5. Deneyin Yapılışı ve Ölçümlerin Alınması.....	37
4.6. Tesir Kesitleri.....	37
4.6.1. L X-ışını floresans (L XRF) Tesir Kesitleri.....	40
4.6.2. L XRF Tesir Kesitlerinin Teorik Olarak Hesaplanması.....	42
4.6.3. L XRF Tesir Kesitlerinin Deneysel Olarak Hesaplanması.....	44
4.7. L Alt Tabaka Fotoelektrik Tesir Kesitleri.....	45
5. ÖLÇÜM VE HESAPLAMALAR.....	48
6. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	58
7. EK AÇIKLAMALAR.....	60
8.KAYNAKLAR.....	71

1. GİRİŞ

Herhangi bir atomun herhangi bir yörüngesindeki elektronlardan biri bir elektromanyetik radyasyon veya hızlandırılmış parçacıklarla etkileşerek atomdan kopabilir. İyonlaşma olarak da bilinen bu olay elektromanyetik radyasyonun veya hızlandırılmış yüklü parçacıkların maddeyle etkileştiği önemli bir olay olup, iyonizasyon tesir kesiti bu olayın meydana gelme ihtimalinin bir ölçüsü olarak tanımlanır.

Uyarıcı kaynak olarak elektromanyetik radyasyon veya foton kullanıldığında meydana gelen olaya fotoelektrik olay denir. Fotoelektrik tesir kesiti ise fotoelektrik olayın meydana gelme ihtimalinin bir ölçüsü olarak tanımlanır. Fotoelektrik olay özellikle düşük enerjilerde (0,1 MeV'e kadar) ve yüksek atom numaralı elementlerde diğer olaylara nispeten daha baskındır.

Fotoelektrik tesir kesitlerinin radyasyon fiziğindeki, nükleer fizikteki ve enerji taşınması ve depolanması hesaplamalarındaki öneminden dolayı fotoelektrik olay yıllardır araştırılan bir konudur. Birçok araştırmacı tarafından fotoelektrik tesir kesitlerinin teorik hesaplamaları arasında; toplam ve alt tabaka fotoelektrik tesir kesitleri için Scofield'ın nümerik değerleri en doğru teorik değer olarak kabul edilir¹. Scofield, elektronların bir foton soğurmadan önce ve sonra aynı Hartree-Slater merkezi potansiyel alanında rölativistik olarak hareket ettiğini kabul ederek 1-1500 keV enerji aralığında atom numarası 1 ile 101 arasında olan elementler için fotoelektrik tesir kesitlerini hesapladı¹.

Hızlandırılmış parçacıklar ile elektronların temel etkileşmesi Düzlem Dalga Born Yaklaşımı [Plane Wave Born Approximation (PWBA)] veya yarı-klâsik yaklaşım [Semiclassical Approximation (SCA)] ile tanımlanır². Bununla birlikte her iki yaklaşımda dikkate alınmayan bazı temel fiziksel etkileri hesaba katmak için bir takım düzeltmelere ihtiyaç vardır. Brandt ve Lapicki, Born yaklaşımını kullanarak ECPSSR teorisini geliştirdi ve enerji kaybı için düzeltmeler (E), Coulomb saçılması için düzeltmeler (C), pertürbe olmuş durgun hâl yaklaşımı [Perturbed Stationary State

Approximation (PSS)]'ndaki bağlanma-polarizasyon etkileri ve rölativistik etkileri (R) PWBA yaklaşımına dahil etti².

Deneysel iyonizasyon tesir kesitlerini belirlemek için iki farklı metot kullanılabilir: (i) Direkt metot ve (ii) indirekt metot veya çekme tekniği. Direkt metotta yayınlanan elektronlar bir elektron detektörü ile sayılır. İndirekt metot veya çekme tekniğinde ise numuneden yayınlanan X-ışınları bir foton detektörü ile sayılarak X-ışını floresans (XRF) tesir kesitleri belirlenir. Daha sonra bu XRF tesir kesitleri, floresans verim, Coster-Kronig geçiş ihtimaliyetleri ve ışımali geçiş hızları kullanılarak iyonizasyon tesir kesitlerine dönüştürülür. Çekme tekniği fotoelektrik olayının baskın olduğu bölgede daha sağlıklı sonuçlar vermektedir³.

Son yıllarda K tabakası ve L tabaka ve alt tabakaları iyonizasyon tesir kesitleri hakkında birçok çalışma yapılmıştır. Karabulut et al. atom numarası 58 ile 68 arasında olan elementleri ²⁴¹Am radyoizotop kaynaktan yayınlanan 59,5 keV'lik γ -ışınları ile uyatarak K tabakasının toplam atomik fotoelektrik tesir kesitlerini belirlediler⁴. Budak et al. Zr, Nb, Mo, Ag, In, Sn ve Te elementlerini 59,5 keV'lik γ -ışınları ile uyatarak K tabakası toplam atomik fotoelektrik tesir kesitlerini hesapladılar⁵. Ertuğrul et al. Gd, Tb, Dy ve Er elementlerinin K tabakası toplam atomik fotoelektrik tesir kesitlerini transmission faktörünü ölçerek belirlediler⁶. Arora et al. 59,5 keV'lik fotonlarla Fe, Ni, Cu, Zn, As, Se, Br, Zr, Nb, Mo, Ag, In, Sn ve I'un K tabakası fotoelektrik tesir kesitlerini bir NaI(Tl) detektörü ile iki farklı metot kullanarak hesapladılar⁷. Jahagirdar et al. bir NaI(Tl) spektrometresi kullanarak 52,4 keV enerjili fotonlarla uyarılan Hg, Sn ve Ba elementlerinin yayınladığı karakteristik X-ışınlarını sayarak, K XRF tesir kesitlerini belirlediler⁸. Bu tesir kesitlerini K tabakası sıçrama oranlarını, floresans verimleri ve K X-ışını emisyon hızlarını kullanarak K tabakası fotoelektrik tesir kesitlerine çevirdiler⁸. Pajek et al. 0,6-3,6 MeV enerjili ³He iyonları için Al, P, Ar, Ti, Cr, Fe, Ni, Ge, Se, Nb ve Pd'un K tabakası iyonizasyon tesir kesitlerini ölçtüler. Deneysel sonuçları teorik PWBA, SCA, ECPSSR yaklaşımlarının sonuçları ile karşılaştırdılar².

Geretschlager et al. enerjileri 1,1 ile 8 MeV arasında olan oksijen iyonları ile Al, Si, S, Ca ve Zn elementlerine ait K XRF tesir kesitlerini tespit ettikten sonra onları K tabakası iyonizasyon tesir kesitlerine evirdiler. Buldukları sonuçları ECPSSR ve modified ECPSSR (MECPSSR) yaklaşımlarının sonuçları ile karşılaştırdılar⁹. Horvat et al. 30 MeV/akb enerjili H, N, Ne ve Ar iyonları ile Al'dan Sn'a kadar olan dokuz elementi uyararak yayınlanan K X-ışınlarını bir Si(Li) yarıiletken detektör ile saydılar. K XRF tesir kesitlerini tespit ederek, onları K tabakası iyonizasyon tesir kesitlerine evirdiler. Buldukları sonuçların ECPSSR yaklaşımının sonuçları ile uyum içerisinde olduğunu buldular¹⁰. Tribedi ve Tandon, 0,5-2,5 MeV enerjili protonlar ile atom numarası $11 \leq Z \leq 22$ arasında olan sekiz element için K tabakası iyonizasyon tesir kesitlerini belirlediler¹¹. Lægsgaard et al. uyarıcı kaynak olarak protonları kullanarak Ti, Fe, Cu, Se, Zr ve Ag için K tabakası iyonizasyon tesir kesiti ölçümlerini gerçekleştirdiler. Numuneden yayınlanan karakteristik X-ışınlarını ve saçılan protonları iki ayrı detektör ile sayarak buldukları şiddet oranlarını iyonizasyon tesir kesitlerini belirlemede kullandılar¹².

Arora et al. bir NaI(Tl) spektrometresiyle üç farklı metot ile 59,5 keV'da Ta, W, Au, Pb, Th ve U elementleri için toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitlerini üç farklı metot kullanarak tespit ettiler¹³. Semaniak et al. 0,4-1,8 MeV/akb enerjili karbon ve azot iyonları ile uyarılan Hf, Ta, W, Os, Ir, Pt, Au, Bi ve Th elementlerinden yayınlanan karakteristik L X-ışınlarını sayarak L XRF tesir kesitlerini belirledikten sonra bu tesir kesitlerini L alt tabaka iyonizasyon tesir kesitlerine evirdiler. Buldukları sonuçları daha önce deneysel olarak hesaplanan iyonizasyon tesir kesiti sonuçları¹⁴⁻¹⁵, ECPSSR ve SCA teorilerinin sonuçlarıyla karşılaştırdılar¹⁶. Ayrıca Semaniak et al. 0,9-3,0 MeV enerjili $^3\text{He}^+$ ve 0,8-4,0 MeV enerjili $^4\text{He}^+$ iyonları tarafından uyarılan Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au ve Bi elementleri için L XRF tesir kesitlerini ölçtüler. Bunları L alt tabaka iyonizasyon tesir kesitlerine evirerek ECPSSR ve SCA teorilerinin sonuçları ile karşılaştırdılar¹⁷. Bogdanović et al. 0,22-0,83 MeV/akb enerjili ^{12}C iyonları ile uyarılan Cd, In, Sb, Te, Ba, Tb ve Yb'nin L XRF tesir kesitlerini ölçtüler. Bu tesir kesitlerini floresans verimler, Coster-Kronig geçiş ihtimaliyetleri ve X-ışını emisyon oranlarını kullanarak iyonizasyon tesir kesitlerine evirdiler¹⁸. Padhi et al. 3,0-5,7 MeV enerjili ^{19}F ve 3,6-8,4 MeV enerjili ^{28}Si iyonları ile uyarılan Au ve Bi'un L XRF tesir kesitlerini

ölçtüler. Bu L XRF tesir kesitlerini L alt tabaka iyonizasyon tesir kesitlerine çevirerek ECPSSR ve SCA teorilerinin sonuçlarıyla karşılaştırdılar¹⁹. Dhal et al.²² Pb ve Bi'ü 2,2-8,2 MeV enerjili α -parçacıkları ile bombardıman ederek L XRF tesir kesitlerini belirlediler. Bu tesir kesitlerini iyonizasyon tesir kesitlerine çevirmek için iki farklı atomik parametre seti kullandılar. Birinci set Krause'un²⁰ ve ikinci set ise Xu ve Xu'nun²¹ floresans verim ve Coster-Kronig geçiş ihtimaliyeti değerleridir. Krause'un değerleri kullanılarak elde edilen L_1 ve L_3 alt tabaka iyonizasyon tesir kesiti değerlerinin ve Xu ve Xu'nun değerleriyle elde edilen L_2 alt tabak iyonizasyon tesir kesiti değerlerinin teoriyle daha iyi uyum içinde olduğunu buldular²². Budnar 0,5-0,9 MeV enerjili protonlarla uyarılan Lu, W, Au, Tl, Pb, Th ve U için L alt tabaka iyonizasyon tesir kesitlerini, deneysel L XRF tesir kesitlerini kullanarak belirlediler. Bu değerleri deneysel olarak bulunmuş diğer iyonizasyon tesir kesiti değerleri ve teorik yaklaşımlardan elde edilen sonuçlar ile karşılaştırdılar²³. Hippler et al. 6-14 keV enerjili elektronlarla serbest Xe atomlarını uyararak onlardan yayınlanan karakteristik L X-ışınlarını 5,9 keV'de 200 V rezölusyona sahip bir Si(Li) detektörü ile saydılar. L XRF tesir kesitlerini belirledikten sonra bunları L alt tabaka iyonizasyon tesir kesitlerine çevirdiler²⁴.

Bu çalışmada, L_1 , L_2 ve L_3 alt tabaka fotoelektrik tesir kesitleri ve toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitleri 59,5 keV'lik γ -ışınları ile uyarılan Hf, Ta, W, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Th ve U elementleri için hesaplandı. Sonuçlar Scofield'ın¹ sonuçları ve diğer mevcut deneysel değerler ile karşılaştırıldı. Bildiğimiz kadarıyla L alt tabaka iyonizasyon tesir kesitleri için bu çalışma, numunelerin radyoizotop kaynakla uyarıldığı ve numuneden yayınlanan karakteristik X-ışınlarını saymada bir Si(Li) detektörünün kullanıldığı ilk çalışmadır.

2. TEORİ

2.1. Gama ve X-ışınlarının Madde ile Etkileşmesi

I_0 şiddetindeki monokromatik paralel bir X-ışını veya γ -ışını demeti bir maddenin t kalınlığını geçtikten sonra şiddetinde bir azalma olur. Bu azalma maddenin kalınlığına ve demetin I_0 şiddetine bağlı olarak

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

ile verilir. Burada μ lineer soğurma katsayısı olup birim kalınlık başına düşen soğurulma olarak tarif edilmektedir. I demetin madde içerisinde t yolunu aldıktan sonraki şiddetidir. t cm, gr/cm^2 , $\text{elektron}/\text{cm}^2$ olarak alınabileceğinden soğurma katsayısı μ , cm^{-1} , cm^2/gr , cm^2/atom , $\text{cm}^2/\text{elektron}$ olarak alınabilir. μ , X-ışınlarının veya γ -ışınlarının etkileştiği madde ve ışının enerjisine bağlıdır.

Maddeyle γ -ışınlarının etkileşmesi her bir etkileşme için ya tam bir soğurmaya ya da saçılmaya neden olur. Maddeyle elektromanyetik radyasyonun etkileşmesini tanımlamak için fotonların,

- i. Bağlı atomik elektronlarla,
- ii. Serbest elektronlar ile,
- iii. Çekirdeğin veya elektronların Coulomb alanıyla,
- iv. Çekirdek ile (sadece nükleonlar ile veya bütün çekirdekle)

etkileştiğini söyleyebiliriz. Bu etkileşmelerin aşağıdaki üç olaydan birine neden olduğunu söyleyebiliriz:

1. Bir fotonun tamamen soğurulması,
2. Elastik saçılma,

3. İnelâstik saçılma.

10 MeV'e kadar olan enerjilerde etkileşmelerin çoğunluğu aşağıdaki olaylardan birisi ile sonuçlanır²⁵:

1. Düşük enerjilerde fotoelektrik olayı baskındır (0,01 MeV' den 0,5 MeV' e kadar). Bir foton bağlı bir elektrona bütün enerjisini verir. Elektron bu enerjinin bir kısmını atomla olan bağını koparmada kullanırken geriye kalan kısmı ise elektrona kinetik enerji olarak aktarılır.
2. Foton serbest ya da serbest olarak kabul edilebilecek bir elektrondan enerji kaybederek farklı bir doğrultuda saçılır. Bu olay; foton, elektronun bağlanma enerjisinden çok büyük enerjiye sahip ise ve elektron serbest ve durgun kabul edilebilirse meydana gelir. Bu olaya Compton olayı denir ve 1,022 MeV'a kadar baskındır.
3. Gelen fotonun enerjisi 1,022 MeV'den daha büyükse çift oluşumu olayı baskın olur. Yüklü bir parçacık veya foton, bir elektronun ve bir pozitronun durgun kütle enerjilerinin toplamına eşit bir kinetik enerji sahip olursa bir elektron pozitron çifti oluşabilir ($2m_0c^2=1,022$ MeV).

Meydana gelme ihtimali daha az ve ilgilendiğimiz enerji aralığında daha az öneme sahip olan diğer etkileşmelerden bazıları şunlardır: Bağlı elektronlardan *Rayleigh saçılması* ve serbest elektronlardan *Thomson saçılması*'dır. Bu saçılmalarda foton enerji kaybetmez, sadece doğrultusunda bir değişim meydana gelir. Yani atom ne iyonlaşır ne de uyarılır. Foton sadece atomik elektronlarla değil atomun çekirdeği ile de etkileşebilir. Örneğin *nükleer rezonans saçılma* ve *Delbrück saçılması* gibi. Nükleer rezonans saçılmada foton enerjisinin tamamını çekirdeğe aktarır ve çekirdek uyarılmış durumda kalır. Delbrück saçılmasında foton çekirdeğin Coulomb potansiyel ile etkileşebilir. Bu etkileşmelerin etkisi birçok durumda ihmal edilebilecek kadar küçüktür.

2.1.1 Fotoelektrik Olayı

$h\nu$ enerjili bir fotonun, atomun baęlı elektronlarından biri tarafından soęurularak elektronun serbest hale geęmesi olayına fotoelektrik olayı, serbest hale geęen elektrona da fotoelektron denilmektedir. Bu iřlem sırasında foton tamamen soęurulur ve baęını koparan elektronun kinetik enerjisi,

$$K_e = h\nu - I_b \quad (2.2)$$

ile verilir. Burada I_b yörünge elektronunun baęlanma enerjisidir. Serbest bir elektronun fotoelektrik olayını meydana getirmesi imkansızdır. Çünkü bu durumda momentum ve enerji korunamaz. Halbuki elektron baęlı ise geri teper ve böylece enerji korunmuş olur.

Primer fotonun enerjisi, elektronun K, L ve M yörüngelerine ait baęlanma enerjisine eřit enerjilerde, fotoelektrik etkileřme ihtimaliyetinde keskin bir süreksizlik olmaktadır. Enerjik olarak mümkün olmasına raęmen, fotoelektrik etkileřmelerin yaklaşık %80'i K tabakasında geręekleřmekte ve kalan %20'nin büyük bir kısmı L tabakasında meydana gelmektedir.

Sonuç olarak, fotoelektrik olay düşük enerjili fotonların ağır elementler tarafından soęurulmasında baskın olmaktadır.

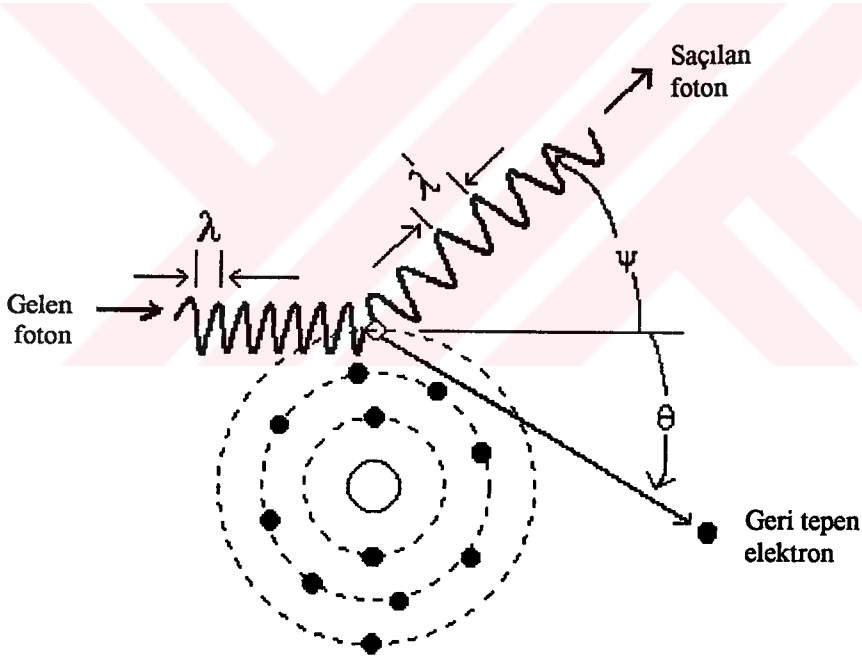
2.1.2 Compton Olayı

Compton saęılması, gelen fotonun çok zayıf olarak baęlı yada serbest bir elektronla inkoherent çarpıřmasıdır. Gelen ve saęılan fotonlar arasında bir enerji farkı vardır. Yani, gelen ve saęılan fotonların dalga boyları birbirinden farklıdır. Bu durumda atom tarafından saęılan radyasyonun toplam řiddeti, atomun her bir elektronu tarafından saęılma řiddetleri toplanarak bulunur. Kısaca Compton olayı, fotondan elde edilen enerji yanında atomik baęlanma enerjisinin ihmal edildięi durumlarda, bir fotonun

başlangıçta durgun ve serbest olan veya olduğu kabul edilen bir elektrondan inkoherent olarak saçılması olarak bilinir.

Compton saçılmasına uğrayan foton enerjisinin bir kısmını kaybeder ve doğrultu değiştirir.

Şekil 2.1'de görüldüğü gibi $h\nu$ enerjili bir foton durgun kütlesi m_0 olan bir serbest elektron ile çarpıştığı zaman etkileşme, fotonun $h\nu'$ ($h\nu' < h\nu$) enerjisiyle ilk doğrultusu ile ψ açısı yapacak şekilde saçılması, elektronun ise K_e enerjisi ve θ açısı ile saçılması şeklinde olur.



Şekil 2.1 Compton olayı.

Momentumun ve enerjinin korunumu kanununa göre saçılan fotonun enerjisi

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \left(\frac{h\nu}{m_0c^2}\right)(1 - \cos\psi)} \quad (2.3)$$

olarak verilir. Burada m_0 elektronun durgun kütlesi ve m_0c^2 (0,511 MeV) elektronun durgun kütle enerjisidir.

Saçılan elektronun T kinetik enerjisi, gelen fotonun enerjisi ile saçılan fotonun enerjilerinin farkına eşittir ve $\alpha = E/m_0c^2$ olmak üzere,

$$T = \frac{\alpha E(1 - \cos\psi)}{1 + \alpha(1 - \cos\psi)} \quad (2.4)$$

ile verilir. Saçılan fotonun minimum enerjisi ise $\psi = 180^\circ$ için

$$T_m = \frac{E}{1 + \frac{1}{2\alpha}} = \frac{E}{1 + \frac{1}{2} \frac{m_0c^2}{E}} \quad (2.5)$$

ifadesi yazılabilir.

Gelen foton, saçılan foton ve geri tepen elektron daima bir düzlemedir. θ ve ψ arasındaki bağıntı

$$\cot\theta = (1 + \alpha)\tan\frac{\psi}{2} \quad (2.6)$$

olarak verilir²⁵.

2.1.3 Çift Oluşumu Olayı

Bu olayının meydana gelebilmesi için eşik enerjisi $2m_0c^2$ yani 1,02 MeV'dir. Bazen 1,02 MeV'den daha büyük enerjili bir foton, yüksek atom numaralı bir elementin çekirdeğinin yakınından geçerken yok olur ve bir elektron pozitron çifti meydana gelir.

Momentumun korunumu prensibi ağır bir parçacığın varlığını gerektirir. Hafif parçacıklarla da çift oluşması mümkündür. Ancak bu durumda eşik enerjisi artar.

Bu olayda soğurulan enerji, oluşan çiftin toplam enerjisine eşittir:

$$hv = (T_- + m_0c^2) + (T_+ + m_0c^2) \quad (2.7)$$

Burada hv gelen fotonun enerjisi, T_- ve T_+ sırasıyla elektron ve pozitronun kinetik enerjileri, m_0c^2 ise elektronun durgun kütle enerjisidir.

Çift oluşumu, hole teorisi ile izah edilebilir. Dirac'a göre, bir serbest elektronun enerjisi $+m_0c^2$ 'den daha büyük veya $-m_0c^2$ 'den daha küçüktür. Bu iki limit arasında elektronların mümkün durumları yoktur. Dirac teorisine göre, $2m_0c^2$ 'den daha büyük bir enerjiye sahip olan bir foton, bir elektronu negatif enerjili bir durumdan pozitif enerjili bir duruma yükseltebilir. Bu, pozitif enerji durumunda gözlenebilir bir elektron ile, negatif enerji durumunda Dirac deliği denilen ve pozitif yüklü bir parçacık gibi hareket eden bir boşluk (hole) meydana getirir. Bu boşluk bir pozitrona karşılık gelmektedir. Böylece bir elektron-pozitron çifti meydana gelmiş olur²⁶.

2.2. Kütle Soğurma Katsayısı ve Soğurma Kırılımları

Bir X-ışını demeti bir soğurucuyu geçerken şiddeti azalır. Azalan şiddetin derecesi saçılmaya ve çeşitli soğurma işlemlerine bağlıdır. Bu işlemlerin detayına girmeksizin Lambert kanunu, aynı soğurucu madde içinde eşit yollarda radyasyonun eşit miktarlarda soğurulacağını söyler. Maddeyi geçen ışın demetindeki azalma (2.1) bağıntısındaki μ lineer soğurma katsayısı olarak tanımlanmıştı. Bu lineer soğurma katsayısı yukarıda bahsedilen üç olayda demetin şiddetinde azalmaya sebep olduğu için ayrı ayrı soğurma katsayılarının toplamına eşittir ve

$$\mu = \tau + \sigma + \chi \quad (2.8)$$

şeklinde verilir. Burada τ fotoelektrik soğurma katsayısı, σ Compton soğurma katsayısı ve χ çift oluşumu soğurma katsayısıdır.

(2.1) denklemindeki niceliklerin μ hariç hepsi ölçülebilir. Böyle ölçümler μ 'nün materyalin haline (katı, sıvı ve gaz) bağlı olduğunu gösterir. Bu yüzden materyalin özel bir fazına bağlı olmayan kütle soğurma katsayısını μ_m 'yi tanımlamak faydalı olur. Lineer soğurma katsayısının yoğunluğa oranı kütle soğurma katsayısı olarak adlandırılır ve üç olayın kütle soğurma katsayılarının toplamı olarak yazılır.

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} = \frac{\tau}{\rho} + \frac{\sigma}{\rho} + \frac{\chi}{\rho} \quad (2.9)$$

şeklinde ifade edilir. Burada τ/ρ fotoelektrik kütle soğurma katsayısı, σ/ρ Compton kütle soğurma katsayısı ve χ/ρ ise çift oluşumu kütle soğurma katsayısıdır ve cm^2/g birimindedirler²⁷.

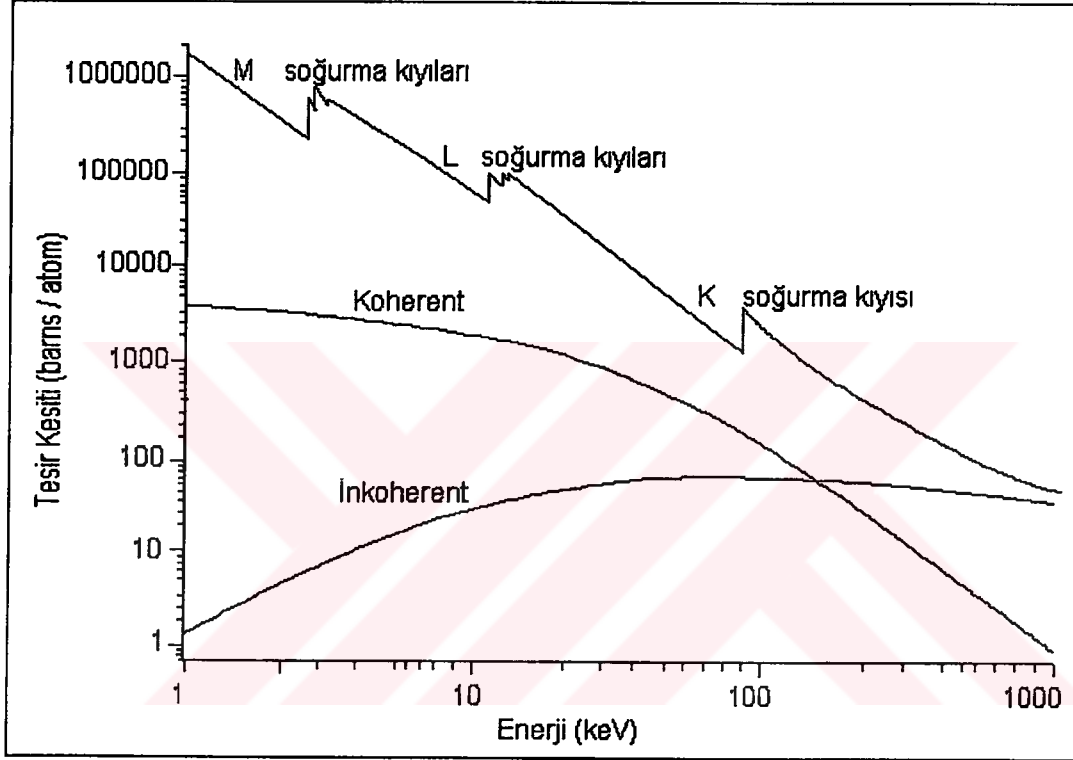
Toplam fotoelektrik kütle soğurma katsayısı, atomdaki bütün kabukları kapsadığından, her bir kabuğun kütle soğurma katsayılarının toplamı olarak yazılabilir.

$$\left(\frac{\tau}{\rho}\right)_E = \sum_i \left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E,i} \quad (2.10)$$

Burada $\left(\frac{\tau}{\rho}\right)_{E,i}$ i. elektron seviyesinin ($i = K, L_1, L_2, L_3, \dots$) E enerjili foton için

fotoelektrik kütle soğurma katsayısıdır. Fotoelektrik etkileşme ihtimali, gelen fotonun enerjisi elektronun bağlanma enerjisine yaklaştıkça artmaktadır. Bu nedenle gelen X-ışınlarının enerjisi elektronların bağlanma enerjisine eşit olduğunda X-ışınlarının soğurulması en fazladır.

Bir tabakada fotoelektrik olay meydana getirebilen minimum foton enerjisine o elementin o tabakasına ait soğurma kıyısı denir. Soğurma kıyıları ve kütle soğurma katsayılarının enerjinin fonksiyonu olarak değişimi şematik olarak Şekil 2.2'de görülmektedir.



Şekil 2.2. Pb için gelen foton enerjisinin fonksiyonu olarak kütle soğurma katsayısı.

2.3. Karakteristik X-ışınlarının Oluşumu

Herhangi bir yolla atomun iç tabaka elektronlarından biri veya birkaçı söküldüğü zaman atom uyarılmış olur. Bu uyarma değişik metotlarla olabilir. Atomda meydana gelen boşluk diğer üst tabaka elektronları tarafından 10^{-12} - 10^{-14} saniye içerisinde doldurulur. Bu esnada enerji düzeyleri arasındaki fark karakteristik X-ışını olarak yayımlanır.

X-ışını oluşumu esasen iki şekilde meydana gelmektedir:

1. Yüksek hızlı yüklü parçacıkların durdurulması veya yavaşlatılması ile yayımlanan X-ışınları ki bunlar X-ışını spektrumlarında sürekli bir bölge oluştururlar ve dolayısıyla sürekli X-ışınları olarak adlandırılırlar.

2. Atomun herhangi bir iç tabakasından sökülen elektronun yerinde kalan boşluk, üst tabakadaki elektronlar tarafından belli geçiş kurallarına ve enerjinin minimumluğu prensibine uygun olarak doldurulur. Böyle bir doldurma sırasında yayımlanan fotona o elementin karakteristik X-ışını denir. Bunlar spektrumda karakteristik çizgiler denilen $K\alpha, \beta, L\alpha, \beta, \gamma, M\alpha, \beta, \dots$ çizgilerini oluştururlar.

Farklı atomlar farklı sayıda elektrona sahip ve bu geçişlerden yayımlanan foton enerjisi, esasen tüm elektronların sayısına ve durumuna bağlıdır. Çünkü her bir elektron bir etkin merkezi yükün tesiri altında bulunmakta, ancak bu etkin yükün değeri söz konusu elektronla çekirdek arasındaki elektronların sayısı ile değişmektedir. Etkin yükün bu şekilde azaltılmasına perdeleme denilmektedir. Moseley, Bohr teorisinden hareketle tüm elementler için çizgi ışınma frekansının karekökünün merkezi etkin yükün bir başka deyişle atom numarasının lineer fonksiyonu olduğunu ve değişimin

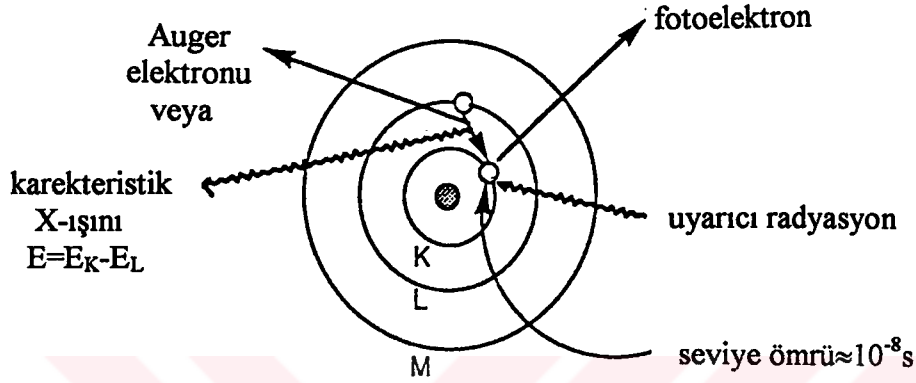
$$v(K_\alpha) = \frac{3}{4} \frac{2\pi^2 m e^2 Q^2}{h^3} \quad (2.11)$$

ile verilebileceğini gösterdi. Burada h Planck sabiti, m ve e elektronun kütlesi ve yükü, Q ise etkin yüküdür.

2.4. X-ışını Spektrumlarının İncelenmesi

Şekil 2.3'te görüldüğü gibi bir atomda K, L, M, \dots gibi iç tabakaların elektronları daha üst tabakalara uyarılırsa veya herhangi bir olayla (elektron, proton, α -parçacığı, yeterli

enerjiye sahip γ -ışını veya X-ışınlarıyla) iç tabakada elektron boşluğu meydana getirilip, üst tabakalardan buraya elektron geçerse, enerji farkı karakteristik X-ışını olarak yayımlanır.



Şekil 2.3. X-ışını floresans olayı.

Bir atomun K-kabuğunda meydana getirilen elektron boşluğu şayet L-kabuğunda bulunan bir elektron tarafından doldurulacak olursa, böyle bir elektron geçişi sonucunda yayımlanan fotonun frekansı, karakteristik X-ışını spektrumunun $K\alpha$ -çizgisine karşılık gelir. K kabuğundaki boşluk M kabuğundaki bir elektron tarafından doldurulursa $K\beta$ -çizgisi, N kabuğundaki elektronlardan biri tarafından doldurulursa $K\gamma$ -çizgisine karşılık gelen fotonlar yayımlanır. Şayet hedef metali üzerine çarpan elektronların

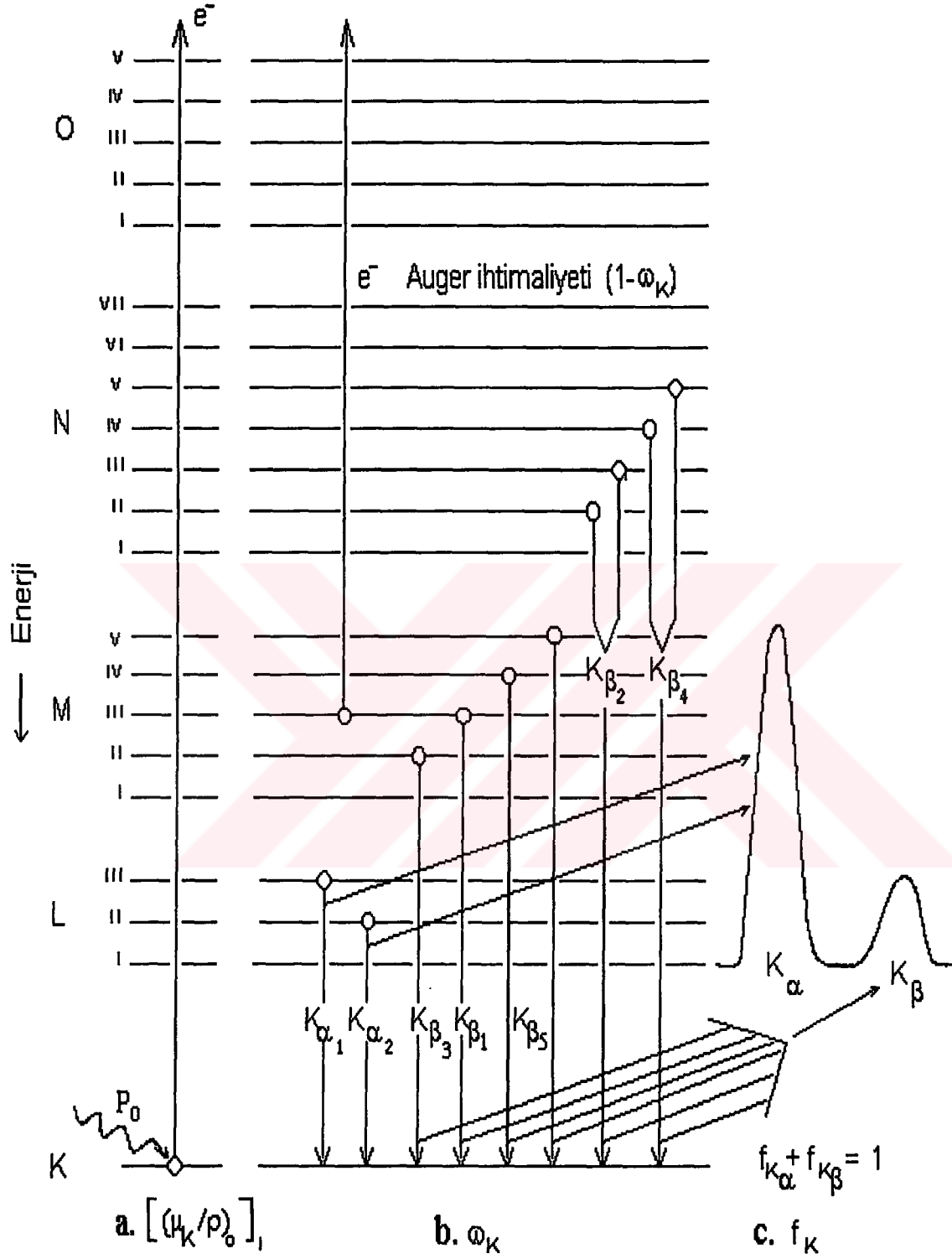
enerjileri K-kabuğundan elektron sökecek kadar büyük değilse, L, M, N,... kabuklarından birinden bir elektron sökülebilir ve bu kez K-kabuğuna benzer olarak L-kabuğunda meydana gelen boşluğun M, N,... kabuklarındaki elektronlarla doldurulması esnasında $L\ell$, $L\alpha$, $L\beta$, $L\gamma$ ışınları, M-kabuğu için $M\alpha$, $M\beta$, $M\gamma$ ve N kabuğu için $N\alpha$, $N\beta$, $N\gamma$ -çizgileri kısaca L, M ve N serileri ortaya çıkmış olur. Herhangi bir tabaka veya alt tabakadaki bir boşluk üst tabakalardan bir elektron ile

doldurulduğu zaman yayımlanan X-ışınlarının Siegbahn ve IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) gösterimleri Tablo 2.1’de verilmektedir.

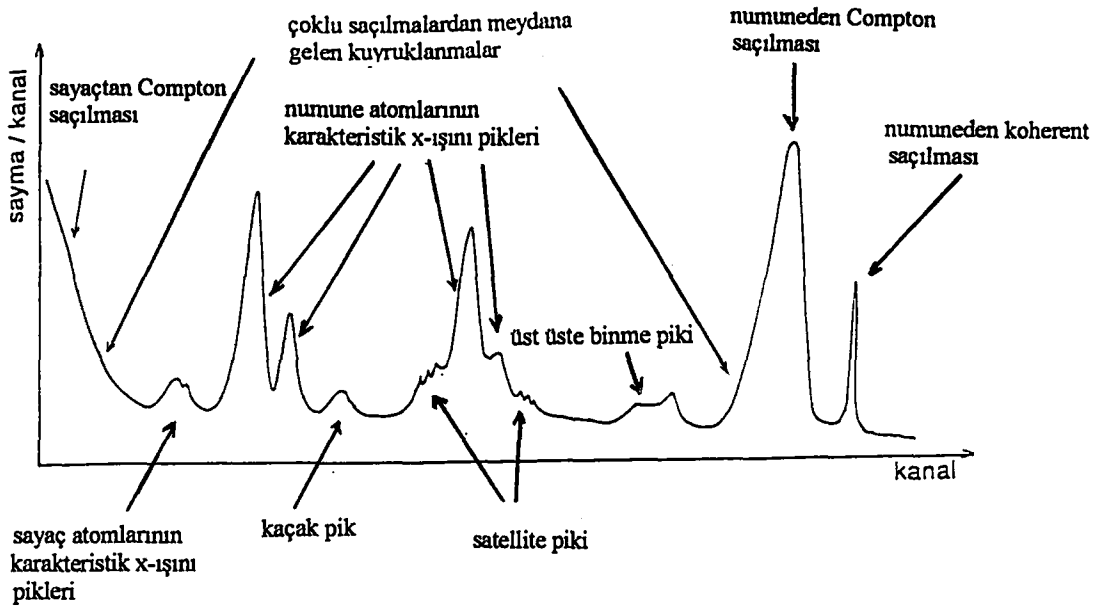
Bu geçişler Şekil 2.4’te şema halinde gösterilmiştir.

Tablo 2.1. X-ışını diyagram çizgilerinin eski [Siegbahn] ve yeni [IUPAC] gösterimleri.

Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC
$K\alpha_1$	K-L ₃	$L\alpha_1$	L ₃ -M ₅	$L\gamma_1$	L ₂ -N ₄	$M\alpha_1$	M ₅ -N ₇
$K\alpha_2$	K-L ₂	$L\alpha_2$	L ₃ -M ₄	$L\gamma_2$	L ₁ -N ₂	$M\alpha_2$	M ₅ -N ₆
$K\beta_1$	K-M ₃	$L\beta_1$	L ₂ -M ₄	$L\gamma_3$	L ₁ -N ₃	$M\beta$	M ₄ -N ₆
$K\beta_2'$	K-N ₃	$L\beta_2$	L ₃ -N ₅	$L\gamma_4$	L ₁ -O ₃	$M\gamma$	M ₃ -N ₅
$K\beta_2''$	K-N ₂	$L\beta_3$	L ₁ -M ₃	$L\gamma_4'$	L ₁ -O ₂	$M\xi_1$	M ₅ -N ₃
$K\beta_3$	K-M ₂	$L\beta_4$	L ₁ -M ₂	$L\gamma_5$	L ₂ -N ₁	$M\xi_2$	M ₄ -N ₂
$K\beta_4'$	K-N ₅	$L\beta_5$	L ₃ -O _{4,5}	$L\gamma_6$	L ₂ -O ₄		
$K\beta_4''$	K-N ₄	$L\beta_6$	L ₃ -N ₁	$L\gamma_8$	L ₂ -O ₁		
$K\beta_5'$	K-M ₅	$L\beta_7$	L ₃ -O ₁	$L\gamma_8'$	L ₂ -N ₆		
$K\beta_5''$	K-M ₄	$L\beta_9$	L ₁ -M ₅	$L\eta$	L ₂ -M ₁		
		$L\beta_{10}$	L ₁ -M ₄	$L\ell$	L ₃ -M ₁		
		$L\beta_{15}$	L ₃ -N ₄	Ls	L ₃ -M ₃		
		$L\beta_{17}$	L ₂ -M ₃	Lt	L ₃ -M ₂		
				Lu	L ₃ -N ₆		
				Lv	L ₂ -N ₆		



Şekil 2.4. Atomda elektron geçişlerinin ve karakteristik X-ışını yayımlanmasının şematik olarak gösterimi.



Şekil 2.5. Bir X-ışını spektrumunun şematik gösterimi.

Şekil 2.3. de görüldüğü gibi X-ışını spektrometresiyle elde edilen bir spektrumda, incelenen elementin karakteristik piklerinden başka pikler de meydana gelebilir. Bunları şu şekilde gruplandırabiliriz²⁸.

2.4.1 Koherent Pikler

Uygun bir deney geometrisiyle uyarıcı kaynaktan çıkan primer fotonların doğrudan doğruya sayacı görmeleri önlenbilmesine rağmen spektrumda uyarıcı kaynak ışınlarının enerjilerine karşılık gelen enerjide spektrum pikleri meydana gelmektedir. Bu pikler kaynak ışınlarının numuneden koherent bir şekilde yani enerjilerini kaybetmeden aynı fazlı olarak saçılması neticesinde meydana gelmektedir.

2.4.2 Compton Pikleri

Uyarıcı kaynaktan çıkan ve numuneden veya spektrometrenin diğer bileşenlerinden Compton saçılmasına uğrayarak bir miktar enerji kaybeden fotonlara ait pik koherent saçılma pikinin düşük enerjili bölgesinde meydana gelir. Numunenin iç kısmında

meydana gelen karakteristik X-ışınlarında bir veya birkaç Compton saçılmasına uğramaları mümkündür. Ayrıca sayaca ulaşan fotonlar da sayaç kristalinde Compton saçılmasına uğrayabilirler. Numune ve sayaçtaki saçılmalar ve sayaçtaki tuzaklanmalardan dolayı gerek Compton pikinin gerekse diğer piklerin düşük enerjili yamaçları, yüksek enerjili yamaçlarına kıyasla daha az diktir. Sayaçta meydana gelen Compton saçılmasından dolayı spektrumun en düşük enerjili kısmında yüksek temel saymalı bir bölge meydana gelir.

Yine sayaç içi Compton'lardan, üst üste binmelerden ve tamamlanmamış yük toplanmalarından dolayı spektrumda bir baştan diğer başa bir temel sayma meydana gelir.

2.4.3 Karakteristik X-ışını Pikleri

Uyarılma sonucu numuneden yayımlanan karakteristik X-ışını pikleri, kolimatör ve kaynak maddesinin karakteristik X-ışını pikleri enerjilerine bağlı olarak numunenin koherent saçılma tepesinin düşük enerjili tarafında meydana gelir. Detektöre gelen X-ışınları, ölü tabakadaki sayaç atomlarını uyarabilir. Buradan yayımlanan sayaç atomlarının karakteristik çizgileri, numuneden gelenler gibi sayılabilir ve detektör maddelerinin karakteristik çizgileri olarak kaydedilirler.

2.4.4 Auger Pikleri

Uyarılmış bir atomun yayımladığı karakteristik X-ışını yine aynı atomun daha dıştaki kabuklarından elektron sökebilir. Numunenin Auger elektronlarının spektrumu soğurulan X-ışını tepesinin düşük enerji kısmında yer alır. Bu olay elektronları daha az bağlanma enerjisi ile bağlı bulunan düşük atom numaralı elementlerde, büyük atom numaralılarından daha çok meydana gelir²⁹.

2.4.5 Üst Üste Binme (Pile-Up) Pikleri

İki foton aynı anda veya elektronik sistemin puls değerlendirme zamanından daha kısa bir zaman aralığı ile sayaca gelirse sistem bu iki foton için tek puls verir. Bu pulsün büyüklüğü bunu meydana getiren foton pulslarının ayrı ayrı büyüklüklerinin toplamına iki puls arasındaki zaman ne kadar küçükse o kadar yaklaşır. İkinci veya daha yüksek mertebelerden de üst üste binme pulslarının meydana gelmesi mümkündür. Tamamlanmış yük toplanması ve üst üste binme etkileri, keskin piklerin genişlemesine ve kaymasına sebep olur.

Aynı geometride üst üste binme etkilerini azaltmak için ölçümler, düşük sayma hızlarında (10^3 sayım/saniye) ve düşük ölü zamanlarda (%2'den daha az) yapılmalıdır.³⁰

2.4.6 Kaçak (Escape) Pikler

Sayaca gelen herhangi bir foton sayaç atomunun iç kabuklarından bir elektron söküncce bu fotoelektron elektron-hole çiftleri meydana getirerek ilerlerken bu atomun kendi karakteristik X-ışını da yayımlanır. Eğer bu olay sayaç yüzeylerine yakın bölgelerde olursa bu karakteristik ışın başka etkileşmelere girmeden sayaçtan kaçabilir. Dolayısıyla sayaç gelen fotonu gerçek enerjisinden daha düşük enerjili bir foton olarak sayar. Böylece oluşan kaçak pikler asıl piklerin düşük enerjili tarafında yer alırlar.

Kaçak pik alanının asıl pik alanına oranı, asıl piklerin düşük enerjili bölgelerinden sayaç maddesinin soğurma kıyılarına yaklaştıkça artar.

2.4.7 Satellite (Auger) Çizgileri

Auger olayının bir başka neticesi de geride kalan iki kere iyonlaşmış, yani iç kabuklarında iki boşluk oluşmuş, bir atomdur. Atomda önce K kabuğunda bir boşluk

oluşturduğunu, bunun L'den geçen elektronla doldurulduğunu, ve bu esnada $K\alpha$ fotonunun yayımlandığını, bu fotonun L kabuğundan bir başka elektron koparmasıyla Auger olayının vuku bulunduğunu düşünelim. Böylece L kabuğunda iki boşluk oluşur. İki kere iyonlaşmış atom sadece Auger olayında meydana gelmez. Primer yada sekonder fotonlarla veya elektronlarla da atom aynı anda iki kere iyonlaştırılabilir. Ancak bir X-ışını halinin yarı ömrünün $\sim 10^{-16}$ saniye gibi çok kısa ve uyarıcı şudaki elektron yoğunluğunun hedef atomdakine kıyasla az olmasından dolayı elektronlarla iyonlaştırmada, aynı atom için ard arda iki kez çarpışma ve iki kez iyonlaşmış halde bulunma hemen hemen mümkün değildir. İki kere iyonlaşmış atomlardan yayımlanan çizgilerin dalga boyları, bir kere iyonlaşmış atomlardan yayımlanan çizgilerin dalga boylarından birazcık farklıdır. Bu tür çizgiler Satellite veya non-diyagram çizgileri olarak adlandırılmaktadır.

2.5. Floresans Verimler ve Coster-Kronig Geçişler

Atomun tabaka veya alt tabaka floresans verimi, o tabaka veya alt tabakada herhangi bir yolla meydana getirilmiş bir boşluğun karakteristik X-ışını yayımlanarak doldurulması ihtimalidir. Atomda bir boşluk meydana getirilmiş ise o atom uyarılmış haldedir. Uyarılmış halin ortalama ömrü τ ise, halin toplam seviye genişliği belirsizlik ilkesine göre $\Gamma = h/\tau$ ile verilir. Γ toplam seviye genişliği olup $\Gamma = \Gamma_R + \Gamma_A + \Gamma_{CK}$ şeklinde ifade edilir. Burada Γ_R ışıklı kısmın genişliği, Γ_A ışımsız kısmın genişliği ve Γ_{CK} Coster-Kronig genişliğinin toplamıdır. Bu nedenle ω floresans verimi³¹,

$$\omega = \frac{\Gamma_R}{\Gamma} \quad (2.9)$$

ile verilir.

Bir atomda, herhangi bir yolla K tabakasındaki oluşturulan bir boşluğun karakteristik X-ışını yayımlanarak doldurulması ihtimaliyetine, K tabakasındaki floresans verim denir ve

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

ile verilir. Burada I_K , numuneden yayımlanmış K X-ışınlarının toplam sayısı ve n_K , K tabakasında meydana gelen boşlukların sayısıdır. Daha yüksek atomik tabakaların ortalama floresans verimlerinin tarifi, iki sebepten dolayı daha karmaşıktır³¹.

- i. K tabakasının yukarısındaki tabakalar, elektronlar farklı açisal momentum kuantum sayılarına sahip olduğu için birden fazla alt tabakadan oluşmuşlardır. Böylece farklı iyonizasyon metotları farklı primer boşluk dağılımı oluşturduğu için ortalama floresans verimi tabakanın nasıl iyonlaştığına bağlıdır.
- ii. Aynı baş kuantum sayısına sahip bir tabakanın alt tabakaları arasında geçişler olan Coster-Kronig geçişler, boşluk başka bir geçiş ile doldurulmadan önce alt tabakalardan birinde oluşturulan bir primer boşluğun daha üst bir alt tabakaya geçişini sağlar.

Herhangi bir yol ile, X tabakasının ($X=L, M, N, \dots$) x_i alt tabakasında meydana getirilmiş bir boşluğun, daha yüksek x_j alt tabakasına kayması ihtimali f_{ij}^X ile gösterilir. Örneğin, f_{12}^L Coster-Kronig geçişi, $2P_{1/2}$ 'den (L_2 alt tabakası) $2S_{1/2}$ 'ye (L_1 alt tabakası) bir elektronun geçiş ihtimalidir. Coster-Kronig geçişleri ışıklı ve ışısız olmak üzere iki kısımdan ibarettir. Bunlar f_{ij}^X 'in ışıklı kısmı olan $f_{ij}^X(R)$ ve f_{ij}^X 'in ışısız kısmı olan $f_{ij}^X(A)$ 'dir. $f_{ij}^X(R) \ll f_{ij}^X(A)$ 'dır ve X tabakasının i ve j alt tabakaları arasındaki Coster-Kronig geçişi,

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

ile verilmektedir³¹. Coster-Kronig geçişlerinin olmaması durumunda, X tabakası için ortalama floresans verimi,

$$\bar{\omega}_X = \sum_{i=1}^k N_i^X \omega_i^X \quad (2.13)$$

olarak yazılabilir. Burada, N_i^x X tabakasının i. alt tabakasındaki primer (başlangıçta elektron sökülmesi veya elektronların üst tabakalara uyarılması ile meydana gelen) boşlukların rölatif sayısı; ω_i^x X tabakasının i. alt tabakasına ait floresans verim olup $N_i^x \omega_i^x$, i. alt tabakadan bir ışın yayımlanması ihtimalidir. Ayrıca bu denklemdeki,

$$N_i^x = \frac{n_i^x}{\sum n_i^x} \quad \text{ve} \quad \sum_{i=1}^k N_i^x = 1 \quad (2.14)$$

dir. Denklem (2.13) ve (2.14)'deki toplamlar, X tabakasının bütün alt tabakaları üzerindedir. X tabakası boşluklarının toplam sayısı,

$$n_x = \sum_{i=1}^k n_i^x \quad (2.15)$$

ile verilir. Bu durumda X tabakası ortalama floresans verimi,

$$\bar{\omega}_x = \frac{I_x}{n_x} \quad (2.16)$$

şeklinde verilir. I_x , X tabakasından yayımlanmış karakteristik X-ışını fotonlarının sayısıdır. Eğer bir tabakada oluşturulan boşluklar daha yüksek tabakalardan geçişlerle doldurulmadan önce Coster-Kronig geçişler ile yer değiştirirlerse yukarıda bahsettiğimiz denklemler kullanılmaz. Bu durumda Coster-Kronig geçişleri dikkate alan iki farklı yaklaşım kullanılabilir.

a. Şayet V_i^x , i. alt tabakadaki bir boşluk için bir ışın yayımlanması ihtimaliyeti ise,

$$\bar{\omega}_x = \sum_{i=1}^k N_i^x V_i^x \quad (2.17)$$

olarak yazılabilir.

b. $\bar{\omega}_x$ ortalama floresans verimi, Coster-Kronig geçişler tarafından değiştirilmiş V_i^x boşluk dağılımı ile ω_i^x alt tabaka floresans verimlerinin lineer kombinasyonu olarak aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\bar{\omega}_x = \sum_{i=1}^k V_i^x \omega_i^x \quad (2.18)$$

Burada V_i^x Coster-Kronig geçişleri olduktan sonra x_i alt tabakasındaki boşlukların rölatif sayısını göstermektedir. Dolayısıyla,

$$\sum_{i=1}^k V_i^x > 1 \quad (2.19)$$

dir. Başlangıçtaki rölatif boşlukların sayısı olan N_i^x Coster-Kronig geçişlerden sonraki rölatif boşluk sayısı olan V_i^x cinsinden aşağıdaki gibi yazılır.

$$\begin{aligned} V_1^x &= N_1^x \\ V_2^x &= N_2^x + f_{12}^x N_1^x \\ V_3^x &= N_3^x + f_{23}^x N_2^x + (f_{13}^x + f_{12}^x f_{23}^x) N_1^x \\ &\vdots \\ V_k^x &= N_k^x + f_{k-1,k}^x N_{k-1}^x + (f_{k-2,k-1}^x f_{k-1,k}^x) N_{k-2}^x \\ &\quad + \dots + (f_{1k}^x + f_{12}^x f_{2k}^x + f_{12}^x f_{23}^x f_{3k}^x + \dots) N_1^x \end{aligned} \quad (2.20)$$

alternatif bir yaklaşım olarak X tabakasının ortalama floresans verimi

$$\bar{\omega}_x = \sum_{i=1}^k N_i^x v_i^x$$

olarak tanımlanır. Burada v_i^x katsayıları (2.20) denklemini sağlayacak şekilde tanımlanan katsayılardır. v_i^x katsayıları ile alt tabaka floresans verimleri olan ω_i^x arasındaki dönüşüm denklemleri,

$$\begin{aligned}
 v_1^x &= \omega_1^x + f_{12}^x \omega_2^x + (f_{13}^x + f_{12}^x f_{23}^x) \omega_3^x + \dots \\
 &\quad + (f_{1k}^x + f_{12}^x f_{2k}^x + f_{13}^x f_{3k}^x + \dots + f_{1,k-1}^x f_{k-1,k}^x + \dots) \omega_k^x \\
 &\quad \vdots \\
 v_{k-1}^x &= \omega_{k-1}^x + f_{k-1,k}^x \omega_k^x \\
 v_k^x &= \omega_k^x
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

şeklindedir.

(2.20) ve (2.21) genel denklemleri L tabakası için,

$$\begin{aligned}
 V_1^L &= N_1^L \\
 V_2^L &= N_2^L + f_{12}^L N_1^L \\
 V_3^L &= N_3^L + f_{23}^L N_2^L + (f_{13}^L + f_{12}^L f_{23}^L) N_1^L
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

ve

$$\begin{aligned}
 v_1^L &= \omega_1^L + f_{12}^L \omega_2^L + (f_{13}^L + f_{12}^L f_{23}^L) \omega_3^L \\
 v_2^L &= \omega_2^L + f_{23}^L \omega_3^L \\
 v_3^L &= \omega_3^L
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

şeklinde yazılabilir³¹.

2.6. Auger Olayı

Atomda herhangi bir yolla, meydana getirilen bir boşluk diğer üst tabaka elektronları tarafından, ışımalı olarak doldurulabildiği gibi ışımaz olarak da doldurulabilir. Auger olayında yayımlanan ışın, atomun üst tabaka elektronlarından birini daha söker ve böylece atom iki defa uyarılmış duruma geçer. Bu olay bir iç dönüşüm olayı olup, sökülen elektrona Auger elektronu denir.

Herhangi bir X tabakasının, x_i alt tabakasına ait Auger verimi, bu alt tabakada meydana getirilmiş bir boşluğun, diğer üst tabaka elektronları tarafından, ışımaz geçiş ile doldurulması ihtimali olarak tarif edilir ve a_i^X şeklinde gösterilir. Buna göre floresans verim, Auger verimi ve Coster-Kronig verimleri arasında,

$$\omega_i^X + a_i^X + \sum_{j=i+1}^k f_{ij}^X = 1 \quad (2.24)$$

ile verilen bir bağıntı vardır⁽⁸⁾. Bu olayların meydana gelişi şematik olarak Şekil 2.4'de gösterilmiştir. (2.24) bağıntısı K tabakası için,

$$\omega_K + a_K = 1 \quad (2.25)$$

ve L tabakası için ise,

$$\begin{aligned} \omega_1 + a_1 + f_{12} + f_{13} &= 1 \\ \omega_2 + a_2 + f_{23} &= 1 \\ \omega_3 + a_3 &= 1 \end{aligned} \quad (2.26)$$

şeklinde yazılır. Herhangi bir tabakaya ait ortalama Auger verimi (\bar{a}_x)

$$\bar{a}_x = \sum_{i=1}^k V_i^x a_i^x \quad (2.27)$$

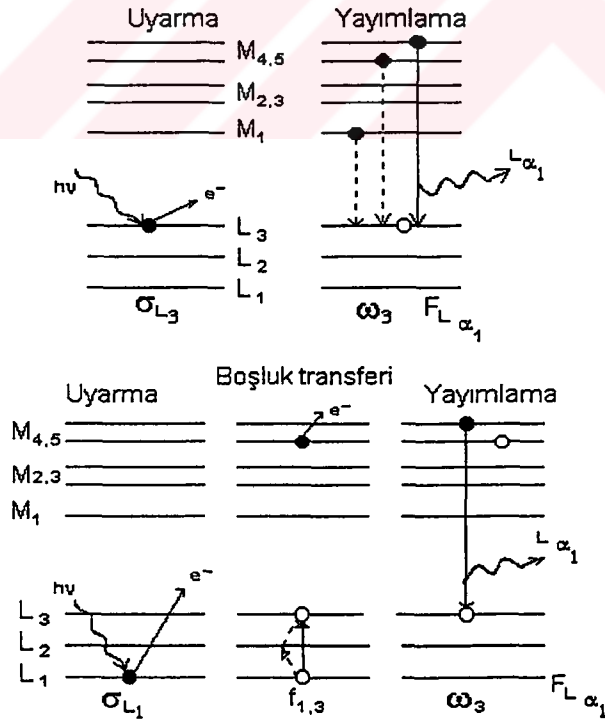
şeklindedir. Burada V_i^x Coster-Kronig geçişler ile değiştirilmiş rölatif boşluk sayısıdır. Belli bir boşluk dağılımı için bir tabakanın ortalama floresans verimi ($\bar{\omega}_x$) ile ortalama Auger verimi (\bar{a}_x) arasındaki bağıntı,

$$\bar{\omega}_x + \bar{a}_x = 1 \quad (2.28)$$

şeklindedir. Bu bağıntı bir misal olması açısından L tabakası için,

$$\bar{\omega}_L + \bar{a}_L = 1 \quad (2.29)$$

şeklinde yazılabilir³¹.



Şekil 2.5. Floresans olayı ve Coster-Kronig geçişleri.

3. PİK ANALİZİ

Spektrum değerlendirme, X-ışını analizinde numune hazırlama ve nicelleştirme kadar önemli bir adımdır. Enerji Ayrımlı X-ışını Floresans Spektroskopisi (EDXRF) analizlerinde spektrum değerlendirme, kullanılan katı hal detektörler nispeten daha düşük rezölusyona sahip olduğundan dolayı Dalgaboyu Ayrımlı X-ışını Floresans Spektroskopisi (WDXRF) analizlerindeki spektrum değerlendirmeden kesinlikle daha kritiktir³². Spektrum değerlendirmenin amacı, spektrumun bir modelini kurmak ve en iyi fit edilmiş deneysel spektrum değerini buluncaya kadar onu parametrelerine ayırmaktır. Fitin iyiliği kalanların karelerinin ağırlıklı toplamıyla $[\chi^2]$ ölçülür.

$$\chi^2 = \frac{1}{n - m} \sum_i \frac{[f_i - f(i)]^2}{f_i} \quad (3.1)$$

Burada n veri noktalarının sayısı (kanal), m fitte kullanılan parametrelerin sayısı ve n – m serbestlik derecesidir. f_i ve $f(i)$ sırasıyla i. kanalda hesaplanan ve ölçülen sayımlardır. Fitin iyiliği kurulan matematiksel modele bağlıdır³³.

3.1 Floresans Çizgilerin Tanımı

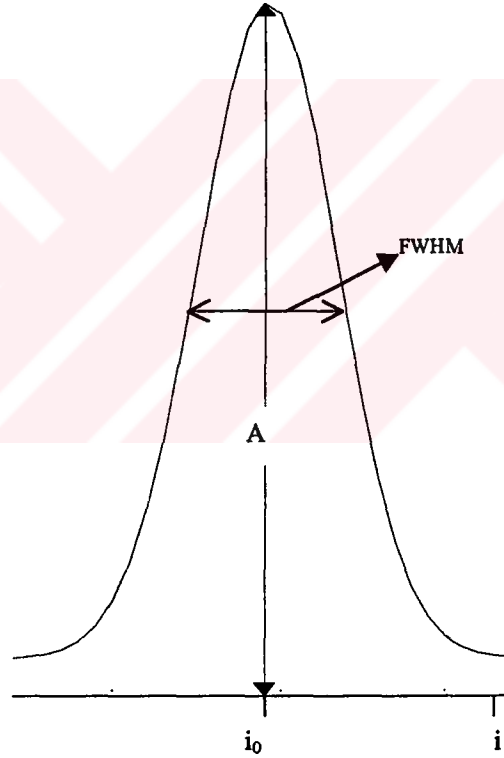
İdeal olarak Si(Li) detektörlerin cevap fonksiyonları Gaussian olduğu için X-ışını spektrumunu tanımlayan bütün matematiksel modellerin bu fonksiyon ile ilgili olacağı açıktır. Dolayısıyla ideal bir pikin şeklini bir Gaussian fonksiyon ve pik altında kalan bir temel sayma fonksiyonu ile temsil edebiliriz.

3.2 Gaussian Fonksiyonlar

Bir Gaussian pik üç parametre ile karakterize edilir: Pik merkezi, çizgi genişliği ve genlik. Bir pikin profili ilk adımda

$$G(i) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(i-i_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.2)$$

şeklinde verilir. Burada A genlik (sayım cinsinden), σ standart sapma ve i kanal numarası ve i_0 pik maksimumuna karşılık gelen kanaldır.



Şekil 3.1 Tipik bir Gaussian dağılımı.

Standart sapma olan σ , $2\sqrt{2\ln 2}$ 'lik bir faktörle spektrokopistler için daha cazip bir faktör olan FWHM (Full Weight at Half Maximum) ile ilgilidir (veya $FWHM = 2,35\sigma$). Sadece pik alanı doğrusal bir parametredir; hem çizgi genişliği hem de konum doğrusal olmayan parametrelerdir³⁴.

3.3 Spektral Temel Sayma

Bir EDXRF spektrumunun temel sayma şeklini, primer uyarma spektrumu (excitation spektrum), numuneden primer X-ışınlarının saçılması ve soğurulması, detektörde etkileşmeler ve mümkün difraksiyon etkileri ve tabii radyasyon gibi bazı etkiler belirler. Temel saymaya en önemli katkı numuneden saçılmış primer spektrumdan gelir. Tabii radyasyondan gelen temel saymayı azaltmak için detektör zırhlanmalıdır. Temel sayma şekli ve bölgesine bağlı değişik temel sayma fit modelleri kullanılabilir³³.

- Yaklaşımlardan biri, temel saymayı tanımlamak için bir analitik fonksiyon kullanmaktır. İstatistik dalgalanmalar dışında bir pik veya pik demeti altındaki temel saymayı, sürekli ve enerjinin (ya da kanalın) düzgün değişen bir fonksiyonu olduğundan, lineer bir polinom ile temsil etmek yeterlidir:

$$f_B(i) = \sum_j^n a_j(i)^j \quad (3.3)$$

Burada $f_B(i)$ i. kanaldaki temel saymadır ve genellikle $n=2$ seçilir. Ancak pik bölgesinde kaçak pikler, satellite pikler, pile-up pikler gibi etkiler yoksa temel saymayı lineer bir polinom ile temsil etmek uygun olur.

Eğer pik bölgesinde kaçak pikler, pile-up pikler, saçılmadan kaynaklanan sayımlar gibi etkiler varsa temel sayma olarak bir basamak fonksiyonu da alınabilir.

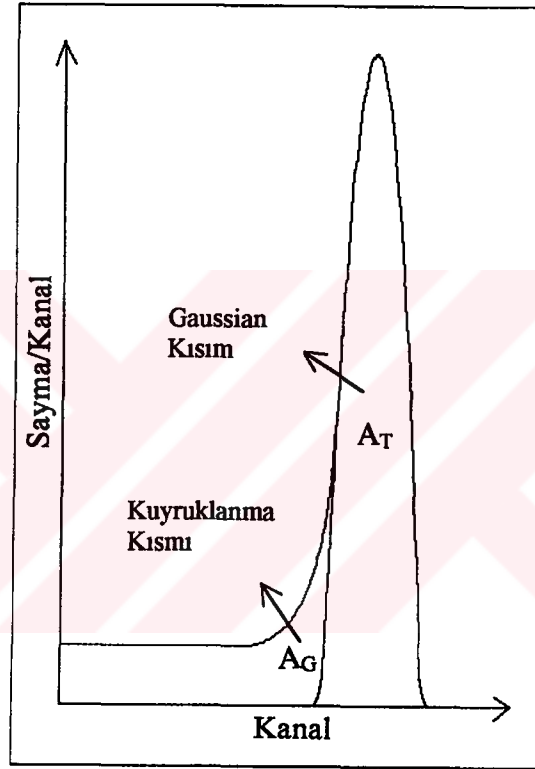
- Diğer bir yaklaşım, numuneye benzer bir standarttan alınmış bir spektrumla ölçülmüş spektrumu karşılaştırmaktır.
- Temel sayma tayini için faydalı bir metot tekrarlı soyma (iterative stripping) metodudur. Bu yaklaşımda temel fikir, uygun temel sayma seviyesine pik sayımını içeren kanalların yüksekliklerini tekrarlı olarak aşağıya çekmektir. Temel sayma şekli iterasyon sayısı ile tayin edilir.

3.4 Düzeltilmiş Gaussianlar

Bir Si(Li) X-ışını detektörünün cevap fonksiyonu Şekil 3.2’de görüldüğü gibi pikin düşük enerjili kısmında bir kuyruklanma ile birleştirilmiş bir Gaussian’dır.

Düzeltilmiş Gaussian fonksiyonlarının tipik bir temsili “Hypermet” fonksiyonudur³⁴:

$$F(i) = G(i) + S(i) + D(i) \quad (3.4)$$



Şekil 3.2 Gaussian kısımdaki A_G sayımına ve kuyruk kısmındaki A_T sayımına sahip iyi bir X-ışını piki.

Burada $G(i)$ A genlikli Gaussian fonksiyonudur. $S(i)$ Gaussian ile konvolasyonu (convulation) yapılan H_s genlikli bir basamak fonksiyonudur:

$$S(i) = \frac{H_s}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{i - i_0}{\sigma\sqrt{2}} \right] \quad (3.5)$$

ve $D(i)$ Gaussian ile konvolasyonu yapılan H_D genlikli bir üstel kuyruktur:

$$D(i) = \frac{H_D}{2} \exp\left(\frac{i-i_0}{\beta}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{i-i_0}{\sigma\sqrt{2}} + \frac{\sigma}{\beta\sqrt{2}}\right] \quad (3.6)$$

Bu denklemlerde, i kanal sayısını, i_0 pik merkezini, σ pikin çizgi genişliğini ve β üstel kuyruklanmanın çizgi genişliğini temsil eder. Basamak ve kuyruğu konvule etmede kullanılan hata fonksiyonun tamamlayıcısı

$$\operatorname{erfc}(u) = 1 - \operatorname{erf}(u) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-t^2} dt \quad (3.7)$$

olarak tanımlanır ve seri açılımlarıyla hesaplanabilir³⁴.

Ana Gaussian kısım, gürültünün ve yük oluşumu istatistiğinin genişleme etkisini temsil eder. Üstel kuyruklanma ve basamak (shelf) yapısı, detektör kusurlarından kaynaklanan tamamlanmamış yük toplanmasının etkilerinin gösterildiği deneysel temsilidir³⁵. Bu fonksiyonlardaki tamamlayıcı hata fonksiyonları $i=i_0$ 'da fiziksel olmayan keskin kıyıları önlemek için birim alanlı Gaussian ile basit düz basamak ve üstel basamakların konvolasyonundan kaynaklanır.

Kuyruklanma terimi, dedektör muhafazasındaki Compton saçılmasını hesaba katmayı gerektirmez. Böyle saçılmaların etkisi gelen şua iyi kolime edilemediği zaman açık olur.

L_x ve L_y piklerini incelerken bu piklerin altındaki temel sayma lineer bir fonksiyon ile temsil edilebildiği için $S(i)$ basamak fonksiyonu dikkate alınmadı³⁵.

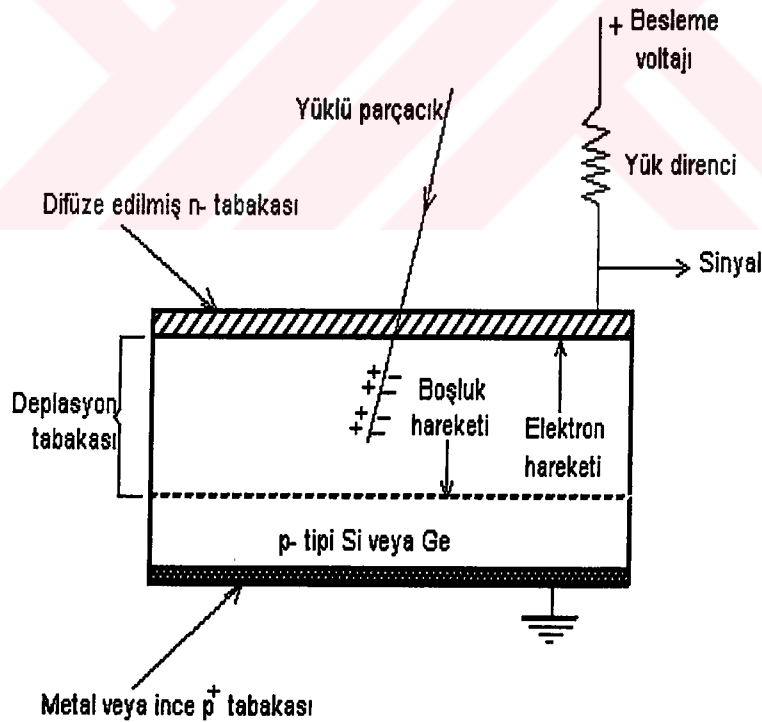
4 DENEY SİSTEMİ VE VERİLERİN DEĞERLENDİRİLMESİ

4.1. Si(Li) Detektörlerinin Çalışma Prensipleri

Karakteristik X-ışınları, hem enerjileri birbirine yakın hem de, genel olarak düşük enerji bölgesinde yer almaktadırlar. Bundan dolayı, bu enerji bölgesinde detektör verimi ve ayırma gücü çok iyi olan yarı iletken detektörler tercih edilmektedir. X-ışını şiddet ölçümlerinde en önemli gelişmelerden birini Si(Li), Ge(Li), HPGe gibi yüksek rezülosyona sahip yarı iletken katı hal detektörlerinin yapılması teşkil eder. Lityum sürüklenmiş katıhal detektörü pozitif ve negatif (p-tipi ve n-tipi) bölgeleri arasında intrinsik (i-tipi) bölgeye sahip bir kristalden ibarettir. Dolayısıyla böyle bir sayaç p-i-n tipi bir diyottur. Sürüklenme bölgesi p-tipi germanyuma veya silisyuma uygun şartlar altında lityum sürüklenerek elde edilir. Detektör yüzeyinin ince p-tipi tabakası aktif değildir. Dedeksiyon işlemine katkısı olmayan bu tabakaya ölü tabaka denir. Bu ölü tabaka genellikle üretim işlemlerine atfedilir. Goulding, bu tabakanın kalınlığı için başka yerlerde daha kalın ölü tabakaların varlığının (örneğin Wood et al. tarafından $1,89 \mu\text{m}^{36}$) bildirilmesine rağmen, yaklaşık olarak $0,3 \mu\text{m}$ 'lik bir limit kalınlığın bu tabakayı temsil edeceğini önerdi³⁷. Şekil 4.1 de görülen detektörün, en önemli iki fiziksel özelliği, kalınlığı ve alanıdır. Sayım için önemli bir faktör olan geometrik verim, detektör alanı arttıkça artar. Ancak bu, ayırma gücünü (rezolüsyonu) azaltır. Soğurma verimliliği de detektör kalınlığı arttıkça artar.

Kullandığımız Si(Li) detektörün aktif alanı 12 mm^2 ve kalınlığı 3 mm 'dir. Elektrotlar, lityum sürüklenmesiyle elde edilmiş silisyum yüzeyine yaklaşık 200 \AA kalınlığında altın buharlaştırılmasıyla elde edilir. Altın tabakanın kalınlığı üretim sırasında kontrol edilir. Ancak buharlaştırılmış tabakalar çoğu kez düzgün değildir ve bu yüzden düzgün buharlaştırılmış bir tabakayı temel alan hesaplamalar ile uyuşmayan bir zayıflatma üretir³⁸. Detektör, en uygun ayırma gücünü elde etmek ve gürültüyü azaltmak için sıvı azot kaynama sıcaklığında (-196°C) tutulmaktadır. Bunun için sayaç kristali ve FET (alan etkili transistör) 30 lt sıvı azot alabilecek bir kaba (dewar) yerleştirilmiştir. Detektör, dış ortamdan gelebilecek yüzey kirlenmesini önlemek için $25 \mu\text{m}$ kalınlığında

bir berilyum pencere ile koruma altına alınmıştır. Berilyum pencerenin ortalama kalınlığı üretici firma tarafından verilmesine rağmen düzgünlük sağlanamaz³⁸. E enerjili bir foton sayacın aktif bölgesine düştüğünde silisyum atomlarını iyonlaştırır. Foton, enerjisinin tamamını fotoelektronlara verir. Fotoelektronlar, enerjileri bitinceye kadar yolu boyunca elektron-hole çifti oluşturarak detektör kristali içinde hareket ederler. Si(Li) detektörüne yaklaşık 500 voltluk (DC) ters besleme potansiyeli uygulanır. Meydana gelen elektrik alan, fotonların oluşturduğu elektron-boşluk çiftlerini toplar. Ters beslenmeden dolayı elektronlar n-tipi bölgeye, boşluklar ise p-tipi bölgeye yönelirler. Sonuçta detektör üzerine gelen fotonun enerjisi ile orantılı sayıda elektron-hole çifti oluşur. p- ve n-tipi bölgelerde elektrik alan vasıtasıyla toplanan yükler, bir FET devresiyle akım pulsendan potansiyel pulsuna dönüştürülür. Deney sisteminde kullanılan elektronik sistem vasıtasıyla potansiyel pulsu, puls yükseklik analizöründe enerjisine karşılık gelen kanala atanır.



Şekil 4.1 Yarı iletken detektörün şematik gösterimi.

4.2. Detektör Verimi

X-ışını spektroskopik çalışmalarında, detektör veriminin bilinmesi ve verim eğrisinin belirlenmesi gerekmektedir. Detektör verimliliği aşağıdaki gibi sınıflandırılabilir:

- Fotopik (sayma) verimi: Detektörde, ilgili enerjide, sayılabilir büyüklükte puls meydana gelme ihtimalidir.
- Mutlak verim: Detektörde sayılan fotonların, radyoizotop kaynak tarafından tüm doğrultularda yayımlanan fotonlara oranıdır ve kaynak detektör uzaklığına bağlıdır.
- Bağıl verim: Herhangi bir enerjideki detektör verimliliğinin, diğer enerjideki detektör verimliliğine oranı olarak tanımlanır.
- İntristik verim: Detektörün intristik bölgesinde sayılan fotonların, bu bölgeye gelen fotonların sayısına oranıdır.
- Radyal verim: Herhangi bir enerjide, detektör verimliliğinin detektör yarıçapına bağlı olarak değişimini ifade eder.

Enerjisi E olan bir foton için yarı iletken detektörün sayma verimi

$$\varepsilon_E = \varepsilon_R G(E) \quad (4.1)$$

ile verilir. Burada G(E) geometri faktörüdür. ε_R ise rölatif sayma verimidir ve gerçek verim ile çeşitli düzeltme faktörlerinin çarpımı olarak

$$\varepsilon_R = \varepsilon_A f_a f_{Au} f_d f_e f_c \varepsilon_s \quad (4.2)$$

şeklinde verilir³⁹. Burada ε_A tüm yükün toplanmış olduğu kabul edilen detektörün hassas hacminin intristik verimidir. Ayrıca f_a detektör yüzeyinin dışında bulunan maddelerdeki soğurma için düzeltme faktörü, f_{Au} altın elektrotlardaki soğurma için düzeltme faktörü, f_d altın elektrot ve hassas hacim arasında bulunan ölü tabakadaki

soğurma için düzeltme faktörü, f_c kolimasyon etkileri için düzeltme faktörü ve f_e de hassas hacimden kaçan silisyuma ait karakteristik X-ışınları için düzeltme faktörüdür. ϵ_s ise toplam yük toplanması verimidir.

Bir detektörün bir enerjideki sayma verimi, detektörden sabit bir uzaklıkta bulunan standart kaynaktan birim zamanda detektöre gelip sayılan fotonların sayısını bilmekle de tayin edilebilir. Bu şekilde elde edilen verim bütün geometri ve soğurma faktörlerini içine almaktadır. Sayma verimi

$$\epsilon_E = \frac{C_E}{(N_E D)} \quad (4.3)$$

şeklinde de yazılabilir. Burada C_E , E enerjisinde birim zamanda kaynaktan gelip detektörde sayılan fotonların sayısı, N_E kaynakta bozunma başına E enerjisinde yayımlanmış fotonların kesri (yayımlanma ihtimali) ve D standart kaynağın parçalanma hızıdır⁴⁰.

4.3. Enerji Kalibrasyonu

Karakteristik X-ışınları ve saçılan radyasyonun enerjileri birbirinden farklıdır. Analizör, sayma sırasında gelen fotonları, foton enerjisine göre ayırmakta ve bu enerjilere karşılık gelen kanallara yerleştirmektedir. Dolayısıyla, kalibrasyon eğrisi enerji ile kanal arasında bir fonksiyon ile verilebilir. Bu çalışmada bu fonksiyonlardan kuadratik olanı tercih edildi. Enerji ve kanal arasındaki kuadratik fonksiyon

$$E(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad (4.4)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada a_0, a_1 ve a_2 uygun sabitler, x kanal ve E(x) x. kanaldaki enerjidir.

Bu çalışmada, 1024 kanal aralığındaki enerji kalibrasyonunda kullanılan; ^{241}Am ve ^{55}Fe radyoizotop kaynaklarının yayınladığı fotonların ve ^{241}Am kaynağı ile uyarılan Zn atomunun yayınladığı fotonların enerjisi ve kanal değerleri Tablo 4. 1'de verilmiştir.

Tablo 4. 1. ^{241}Am nokta kaynakla yapılan kalibrasyon değerleri.

Kaynak	X-ışını	Enerji	Kanal
^{241}Am	NpL ℓ	11,890	431
	NpL α	13,850	582
	NpL β_2	16,837	625
	NpL β_1	17,740	659
	NpL γ	20,774	777
	ZnK α	8,626	298
^{55}Fe	MnK α	5,893	185
	MnK β	6,490	210

4.4. Numunelerin Hazırlanması

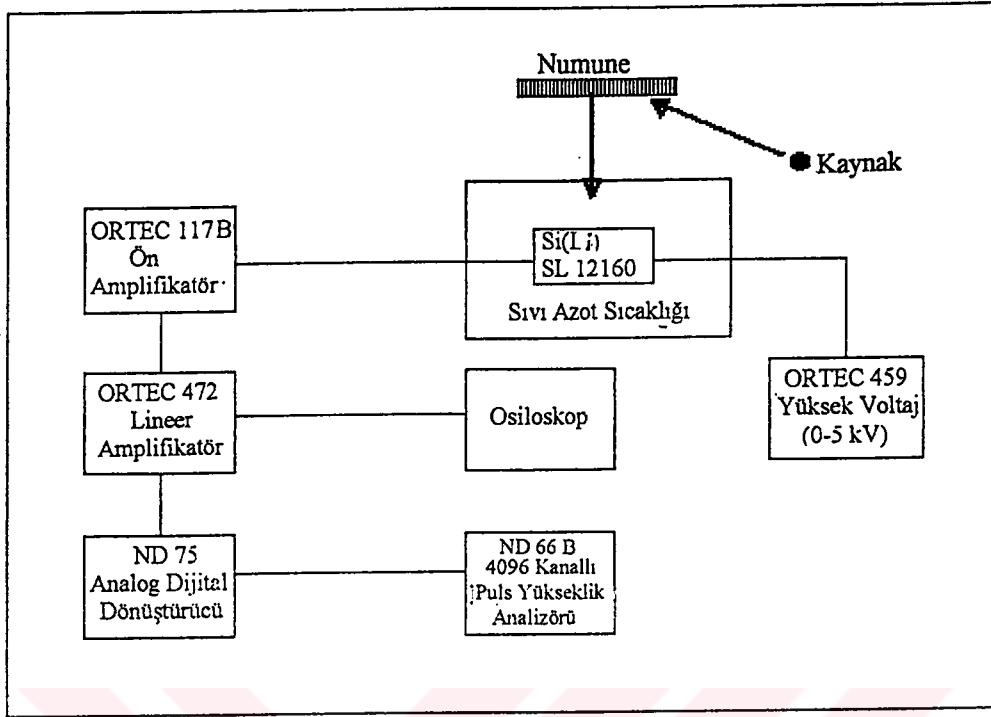
Kullanılan elementler ve özellikleri Tablo 4.2'de verilmiştir. Pb, Au, W ve Ta'un 8 mm çapında foil numuneleri kullanılmıştır. Bu numuneler sayılmadan önce alkolle temizlenmiştir. Diğer numunelerden Bi toz ve 100 mesh'lik elekten geçirilmiş olarak hazır temin edildi. U, Th, Tl, Hg ve Hf bir akik havanda iyice ezildikten sonra 400 mesh'lik eleklerden geçirilmiştir. Bu numuneler asetat maskeler kullanarak bant üzerinde 10 mm çaplı ince film numuneler haline getirilmiştir. Numune kütleleri 10^{-5} hassasiyetli Mettler H10 terazisiyle doğrudan ölçülmüştür. Ayrıca kütleleri yarıçap ve alanlarına bağlı olarak hesaplanarak kontrol edilmiştir.

Tablo 4.2 Kullanılan numuneler ve teknik özellikleri.

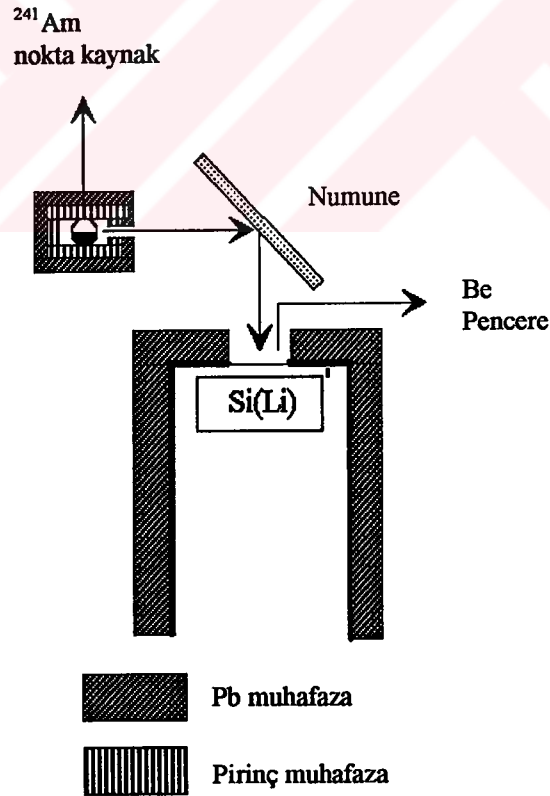
Element	Kimyasal formülü	Numune formu	Parçacık büyüklüğü (mesh)	Saflığı
U	(CHCOO) ₂ .UO ₂ .2H ₂ O	Toz	400<	%99,90
Th	Th(NO ₃) ₄ .5H ₂ O	Toz	400<	%99,90
Bi	Saf	Toz	100<	%99,90
Pb	Saf	Foil		%99,99
Tl	Tl ₂ O ₃	Toz	400<	%99,90
Hg	Hg ₂ (NO ₃) ₂ .2H ₂ O	Toz	400<	%99,00
Au	Saf	Foil		%99,99
W	Saf	Foil		%99,99
Ta	Saf	Foil		%99,99
Hf	Saf	Toz	400<	%99,90

4.5. Deneyin Yapılışı ve Ölçümlerin Alınması

Spektrumların alınmasında kullanılan deney sisteminin temel bileşenleri Şekil 4.2’de verilmiştir. Deney geometrisi ise Şekil 4.3’te görülmektedir. Uyarıcı kaynak olarak 100 mCi şiddetinde ²⁴¹Am nokta kaynaktan yayınlanan 59,5 keV enerjili fotonlar kullanılmıştır. Numunelerden yayınlanan karakteristik X-ışınları 4096 kanallı ND66 çok kanallı analizöre bağlı 3,91 mm aktif çaplı, hassas derinliği 3 mm olan ve 25 µm kalınlıklı Be pencereye sahip bir Si(Li) detektör ile ölçülmüştür. Radyoizotop kaynak bir piriç ve kurşun kolimatör ile kolime edilerek dar bir uyarıcı şua elde edilmiş ve böylelikle uyarıcı radyasyonun doğrudan detektörü görmesi de önlenmiştir. Spektrumlar sayma istatistiğine bağlı olarak 10 saat sayılarak alınmıştır. Düşük sayma hızlarında en iyi puls şekillendirme zamanı 6µs olduğu için amplifikatörün “shaping time” düğmesi 6µs ye ayarlanmıştır.



Şekil 4.2. Deney sistemi şeması.



Şekil 4.3 Deney geometrisi.

Ölçümler alınmadan önce ve sonra ortamın tabii temel sayımını belirlemek için 10 saatlik boş sayım alınmıştır.

4. 6. Tesir Kesitleri

Mikroskopik fizik sahasında teoriler genellikle kesinlik ifade etmez. Yani meydana gelen herhangi bir olay belirli ihtimaliyetler ile açıklanır. Örneğin herhangi bir atomun herhangi bir t anında bozunması ihtimaliyetle ile verilir. Yine benzer olarak herhangi bir parçacığın herhangi bir t anındaki konumu, bir nükleer reaksiyonun meydana gelmesi vb. olaylar belirli ihtimaliyetler ile verilir.

Bir numuneden geçen şuanın soğurulmasını açıklamak için kullanılan tesir kesiti kavramı, herhangi bir olayın meydana gelme ihtimaliyetinin bir ölçüsü olarak tanımlanır ve σ ile gösterilir. Tesir kesitinin birimi barn'dır ve

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$$

olarak tarif edilir. Barn'ın alt birimi milibarn'dır ve $1 \text{ mbarn} = 10^{-3} \text{ barn}$ 'dır. Tesir kesitleri şuanın madde ile etkileşmesine göre farklı şekillerde adlandırılırlar. Saçılma tesir kesiti, soğurulma tesir kesiti, çift oluşumu tesir kesiti vb. Parçacık numune üzerine geldiğinde sadece bir olay değil birden fazla olay meydana gelecektir. Yani numuneden saçılır, yansır, soğurulur, çift oluşur, fotoelektrik olayı meydana getirir vs. İşte bu olayların her birine ait tesir kesitlerine kısmi tesir kesitleri denir ve toplam tesir kesiti bunların toplamı olacaktır⁴¹. Toplam tesir kesitlerinin tam olarak bilinmesi,

- a) reaktör zırhlama,
- b) endüstriyel radyografi,
- c) tıbbî fizikte enerji taşıma ve depolama ve
- d) radyasyon soğurma katsayılarının hesaplanması

gibi çeşitli sahalarda büyük öneme sahiptir⁴².

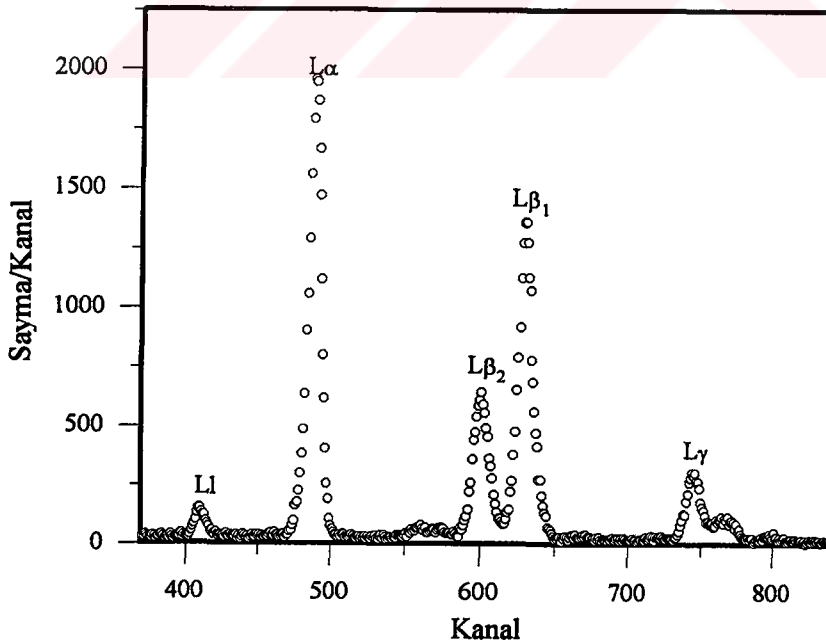
4.6.1 L X-ışını floresans (L XRF) Tesir Kesitleri

X-ışını floresans tesir kesiti floresans olayının meydana gelme ihtimaliyetinin bir ölçüsü olarak tanımlanır ve σ_x ($x=K, L, M, \dots$) ile gösterilir. Elementlerin karakteristik X-ışını floresans tesir-kesitleri;

- atomların yapılarının araştırılmasında,
- yaş tayininde,
- tahribatsız madde analizinde,
- ilaç sanayinde

ve daha birçok sahada kullanılmaktadır. Ayrıca karakteristik X-ışını floresans tesir kesiti her element için ayrı uyarıcı enerjilerinde ve ayrı uyarıcı radyasyon tipinde ayırt edici bir özelliktir⁴².

Tipik bir L X-ışını spektrumu dört ana bileşene sahiptir: $L\ell$, $L\alpha$, $L\beta$ ve $L\gamma$ (Şekil 4.4)



Şekil.4.4 Tipik bir L X-ışını spektrumu.

Burada $L\ell$ ve $L\alpha$ grupları L_{III} alt tabakası X-ışınlarından ibarettir; yani, bunlar L_{III} alt tabakası boşluklarının doldurulmasından kaynaklanır. $L\gamma$ grubu L_I ve L_{II} alt tabaka X-ışınlarından ibarettir ve $L\beta$ grubu bu üç tabakadan yayınlanan X-ışınlarından oluşur. Bu grupları oluşturan geçişler Tablo 2.1'de verilmiştir⁴³.

4.6.2 L XRF Tesir Kesitlerinin Teorik Olarak Hesaplanması

$L\ell$, $L\alpha$, $L\beta$ ve $L\gamma$ floresans tesir kesitleri, X-ışını ve Auger elektronlarının yayınlanmasına neden olan temel nükleer ve atom fiziği çalışmalarında ve iç tabaka iyonizasyonunu tanımlayan daha güvenilir teoriler tanımlamak için kullanıldığından dolayı oldukça önemlidir⁴⁴. Bu nicelikler teorik olarak alt tabaka fotoiyonizasyon tesir kesitleri, floresans verimler, Coster-Kronig geçiş ihtimaliyetleri ve geçiş hızı ihtimaliyetleri kullanılarak aşağıdaki bağıntılardan hesaplanabilir⁴⁵:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{L\ell} &= \left[(\sigma_{L_3} + \sigma_K \eta_{KL_3}) + (\sigma_{L_2} + \sigma_K \eta_{KL_2}) f_{23} + (\sigma_{L_1} + \sigma_K \eta_{KL_1}) (f_{13} + f_{12} f_{13}) \right] \omega_3 F_{3\ell} \\
 \sigma_{L\alpha} &= \left[(\sigma_{L_3} + \sigma_K \eta_{KL_3}) + (\sigma_{L_2} + \sigma_K \eta_{KL_2}) f_{23} + (\sigma_{L_1} + \sigma_K \eta_{KL_1}) (f_{13} + f_{12} f_{13}) \right] \omega_3 F_{3\alpha} \\
 \sigma_{L\beta} &= (\sigma_{L_1} + \sigma_K \eta_{KL_1}) \omega_1 F_{1\beta} + \left[(\sigma_{L_2} + \sigma_K \eta_{KL_2}) + (\sigma_{L_1} + \sigma_K \eta_{KL_1}) \right] \omega_2 F_{2\beta} \\
 &\quad + \left[(\sigma_{L_3} + \sigma_K \eta_{KL_3}) + (\sigma_{L_2} + \sigma_K \eta_{KL_2}) f_{23} + (\sigma_{L_1} + \sigma_K \eta_{KL_1}) (f_{13} + f_{12} f_{23}) \right] \omega_3 F_{3\beta} \\
 \sigma_{L\gamma} &= (\sigma_{L_1} + \sigma_K \eta_{KL_1}) \omega_1 F_{1\gamma} + \left[(\sigma_{L_2} + \sigma_K \eta_{KL_2}) + (\sigma_{L_1} + \sigma_K \eta_{KL_1}) f_{12} \right] \omega_2 F_{2\gamma}
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

59,5 keV uyarıcı enerjisi $72 \leq Z \leq 92$ aralığındaki elementlerin K tabakasını uyaramadığı için σ_K sıfır olur ve denklem sistemi

59,5 keV uyarıcı enerjisi $72 \leq Z \leq 92$ aralığındaki elementlerin K tabakasını uyaramadığı için σ_K sıfır olur ve denklem sistemi

$$\begin{aligned}
 \sigma_{L\ell} &= (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{3\ell} \\
 \sigma_{L\alpha} &= (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{3\alpha} \\
 \sigma_{L\beta} &= \sigma_{L_1} \omega_1 F_{1\beta} + (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) \omega_2 F_{2\beta} + (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{3\beta} \\
 \sigma_{L\gamma} &= \sigma_{L_1} \omega_1 F_{1\gamma} + (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) \omega_2 F_{2\gamma}
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

şekline dönüşür. Burada σ_1 , σ_2 ve σ_3 sırasıyla L_I , L_{II} ve L_{III} alt tabakalarına ait foto iyonizasyon tesir kesitleri olup Scofield'in tablosundan $\ln \sigma = k \ln E$ doğru denklemi yardımı ile hesaplanabilir¹. ω_1 , ω_2 ve ω_3 sırasıyla L_I , L_{II} ve L_{III} alt tabakalarına ait floresans verimler; f_{12} , f_{13} ve f_{23} Coster-Kronig geçiş ihtimaliyetleri olup Krause'un tablolarından alınmıştır²⁰. $F_{3\ell}$, $F_{3\alpha}$, $F_{3\beta}$, $F_{2\beta}$, $F_{2\gamma}$, $F_{1\beta}$ ve $F_{1\gamma}$ değerleri ise geçiş hızı ihtimaliyetleri olup

$$\begin{aligned}
 F_{3\ell} &= [\Gamma_3 (M_{IV} - L_{III}) + \Gamma_3 (M_V - L_{III})] / \Gamma_3 \\
 F_{3\alpha} &= [\Gamma_3 (M_I - L_{III})] / \Gamma_3 \\
 F_{3\beta} &= \left[\frac{\Gamma_3 (N_I - L_{III}) + \Gamma_3 (N_{IV} - L_{III}) + \Gamma_3 (N_V - L_{III})}{+ \Gamma_3 (O_I - L_{III}) + \Gamma_3 (O_{IV,V} - L_{III})} \right] / \Gamma_3 \\
 F_{2\beta} &= (\Gamma_2 (M_{II} - L_{II})) / \Gamma_2 \\
 F_{2\gamma} &= [\Gamma_2 (N_I - L_{II}) + \Gamma_2 (N_{VI} - L_{II}) + \Gamma_2 (O_I, O_{IV} - L_{II})] / \Gamma_2 \\
 F_{1\beta} &= [\Gamma_1 (M_{II}, M_{III} - L_I) + \Gamma_1 (M_{VI}, M_V - L_I)] / \Gamma_1 \\
 F_{1\gamma} &= \left[\frac{\Gamma_1 (N_{II} - L_I) + \Gamma_1 (N_{III} - L_I) + \Gamma_1 (O_{II} - L_I) + \Gamma_1 (O_{III} - L_I)}{+ \Gamma_1 (P_{II} - L_I) + \Gamma_1 (P_{III} - L_I)} \right] / \Gamma_1
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

bağıntılarından hesaplanmıştır. Burada Γ_i geçiş ihtimaliyetlerini gösterir ve Scofield'ın tablosundan alınmıştır⁴⁶. η_{KL_i} değerleri L_i alt tabakasına K alt tabakasından boşluk geçiş ihtimaliyeti olup K- L_1 geçişi yasaklı bir geçiş olduğundan dolayı

$$\begin{aligned}\eta_{KL_1} &= \eta_{KL_1}(A) \\ \eta_{KL_2} &= \eta_{KL_2}(A) + \eta_{KL_2}(R) \\ \eta_{KL_3} &= \eta_{KL_3}(A) + \eta_{KL_3}(R)\end{aligned}\quad (4.8)$$

şeklinde verilir. η_{KL_i} değerleri Rao et al.'in makalesinden alınmıştır⁴⁷.

L XRF tesir kesitlerinin teorik hesaplamalarında kullanılan ω_i değerlerinde %3-15 arasında ve f_{ij} değerlerinde %10-20 arasında bir hata vardır. İşte bu belirsizlikler yüzünden teorik olarak hesaplanmış L XRF tesir kesitlerindeki belirsizlik %20'den daha büyük olur. Fotoiyonizasyon tesir kesitlerinin tablo değerlerindeki belirsizlik ise %0,1'den daha küçüktür. Dolayısıyla bu terimden teorik hesaplanan L XRF tesir kesitlerindeki hatalara önemli bir katkı gelmez⁴⁸.

4.6.3 L XRF Tesir Kesitlerinin Deneysel Olarak Hesaplanması

Deneysel olarak L XRF tesir kesitleri;

$$\sigma_{Li} = \frac{I_{L_i}}{I_0 G \epsilon_{L_i} \beta t} \quad (4.9)$$

denklemini kullanılarak hesaplanabilir⁴⁸. Burada I_{L_i} L_i X-ışını grubuna uygun pikin altındaki alan, I_0 gelen radyasyonun şiddeti, ϵ_{L_i} L_i X-ışını grubu için detektör verimi ve β gelen fotonlar ile yayınlanan karakteristik X-ışınlarının numunede soğurulmalarını hesaba katan öz-soğurma düzeltmesi faktörüdür. β ;

$$\beta = \frac{1 - \exp[-h_z(E_i)t]}{h_z(E_i)} \quad (4.10)$$

burada

$$h_z(E_i) = \left[\frac{\mu_{inc}}{\cos(\theta_1)} + \frac{\mu_{emit}}{\cos(\theta_2)} \right] \quad (4.11)$$

ile verilir. Burada μ_{inc} ve μ_{emit} sırasıyla gelen fotonların ve yayınlanan karakteristik X-ışınlarının kütle soğurma katsayılarıdır ve Hubbel ve Seltzer'in makalesinden alınmıştır⁴⁹. Numune yüzeyinin normaline göre gelen fotonların ve yayınlanan karakteristik X-ışınlarının açıları (θ_0 ve θ_2) deney düzeneğinde 45^0 'dir ve t g/cm² olarak numunenin kalınlığıdır. Böylece $I_0 G \epsilon_{Li}$ biliniyorsa X-ışını floresans tesir kesitlerinin değerleri hesaplanabilir. Bununla birlikte; gelen foton akısı, geometrik faktör ve X-ışını detektörünün mutlak verimi ile ilgili terimleri içeren $I_0 G \epsilon_{Li}$ faktörünün değeri,

$$I_0 G \epsilon_{K\alpha} = \frac{I_{K\alpha}}{\sigma_{K\alpha} \beta_{K\alpha} t} \quad (4.12)$$

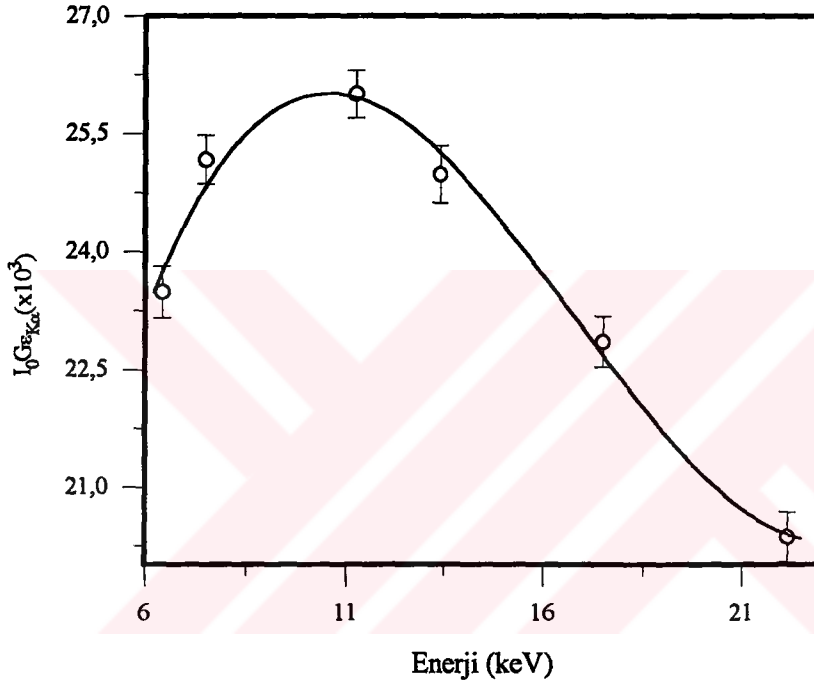
denklemleri kullanılarak Fe, Ni, Se, Rb, Mo ve Ag elementlerinin $K\alpha$ X-ışınları sayılarak tespit edilmiştir. Burada $I_{K\alpha}$, $\beta_{K\alpha}$ ve $\epsilon_{K\alpha}$ Li X-ışını grubu yerine $K\alpha$ X-ışınına uygun olması dışında denklem (3.5)'teki ile aynı anlamdadır. ($\sigma_{K\alpha}$) X-ışını floresans tesir kesitlerinin teorik değerleri

$$\sigma_{K\alpha} = \sigma_K \omega_K F_{K\alpha} \quad (4.13)$$

denklemleri kullanılarak hesaplanmıştır. Burada $\sigma_K(E)$ uyarma enerjisi E' de uygun element için K-tabakası foto iyonizasyon tesir kesitidir¹, ω_K K-tabakası floresans verimi, ve $F_{K\alpha}$ $K\alpha$ X-ışınları için kısmi X-ışını emisyon hızıdır ve

$$F_{K\alpha} = \left[1 + \frac{I_{K\beta}}{I_{K\alpha}} \right]^{-1} \quad (4.14)$$

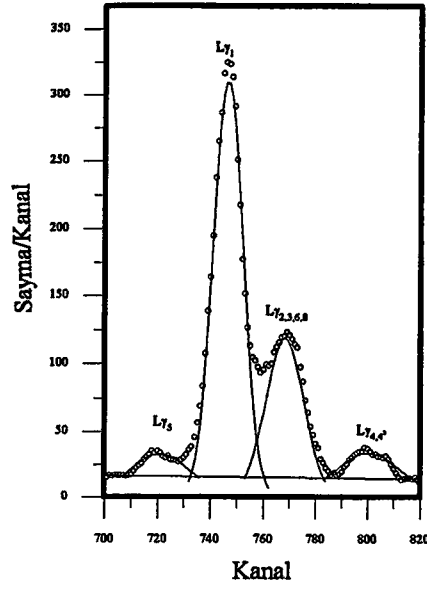
olarak tanımlanır. Burada $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ şiddet oranıdır ve Scofield'ın tablolarından alınmıştır⁵⁰. $I_0 G_{\epsilon_{K\alpha}}$ 'nın enerjile değişimi Şekil 4.5'te verilmiştir.



Şekil 4.5 Enerjinin fonksiyonu olarak $I_0 G_{\epsilon_{K\alpha}}$ 'nın değişimi.

4.7 L Alt Tabaka Fotoelektrik Tesir Kesitleri

Fotoelektrik tesir kesitleri X-ışını floresans analizinde önemli bir parametredir. Fotonların fotoelektrik soğurulması atomdan bir karakteristik X-ışını yayınlanmasına neden olur⁸. Çünkü atomun iç tabakalarından yayınlanan bir fotoelektronun o tabakada oluşturduğu boşluk 10^{-8} s gibi kısa bir sürede üst tabakalardaki bir elektron tarafından doldurulur ve bu esnada bir karakteristik X-ışını yayınlanır.



Şekil 4.6 Tipik bir $L\gamma$ piki.

Bir $L\gamma$ piki Şekil 4.6'da görüldüğü gibi dört ana bileşene ayrılabilir: $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$. Eğer (4.6) denklem sistemindeki son eşitliği $L\gamma_1$ ve $L\gamma_{2,3,6,8}$ piki için düzenleyip σ_{L_1} ve σ_{L_2} çekersek ve (4.6) denklem sistemindeki 2. eşitlikten σ_{L_3} 'ü çekersek²²,

$$\begin{aligned}\sigma_{L_1} &= \left[\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}} - \sigma_{L\gamma_1} \frac{\Gamma_{L\gamma_{6,8}}}{\Gamma_{L\gamma_1}} \right] \frac{\Gamma_1}{\Gamma_{L\gamma_{2,3}}} \frac{1}{\omega_1} \\ \sigma_{L_2} &= \sigma_{L\gamma_1} \frac{1}{\omega_2} \frac{\Gamma_2}{\Gamma_{L\gamma_1}} - f_{12} \sigma_{L_1} \\ \sigma_{L_3} &= \frac{\sigma_{L\alpha} \Gamma_3}{\omega_3 \Gamma_{L\alpha}} - (f_{13} + f_{12} f_{23}) \sigma_{L_1} - f_{23} \sigma_{L_2}\end{aligned}\quad (4.15)$$

elde edilir. Görüldüğü gibi (4.15) denklemleri ile $L\alpha$, $L\gamma_1$ ve $L\gamma_{2,3,6,8}$ XRF tesir kesitleri L alt tabaka fotoelektrik tesir kesitlerine çevrilebilir¹⁶. Daha önce de belirtildiği gibi burada $\sigma_{L\alpha}$ ve $\sigma_{L\gamma_i}$ L XRF tesir kesitleri, ω_i ($i=1,2,3$) L alt tabaka floresans verimleri, f_{ij} Coster- Kronig geçiş ihtimaliyetleri ve toplam Γ_i ve tek $\Gamma_{L\alpha}$, $\Gamma_{L\gamma_i}$ geçiş hızı ihtimaliyetleridir.

Toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitleri ise

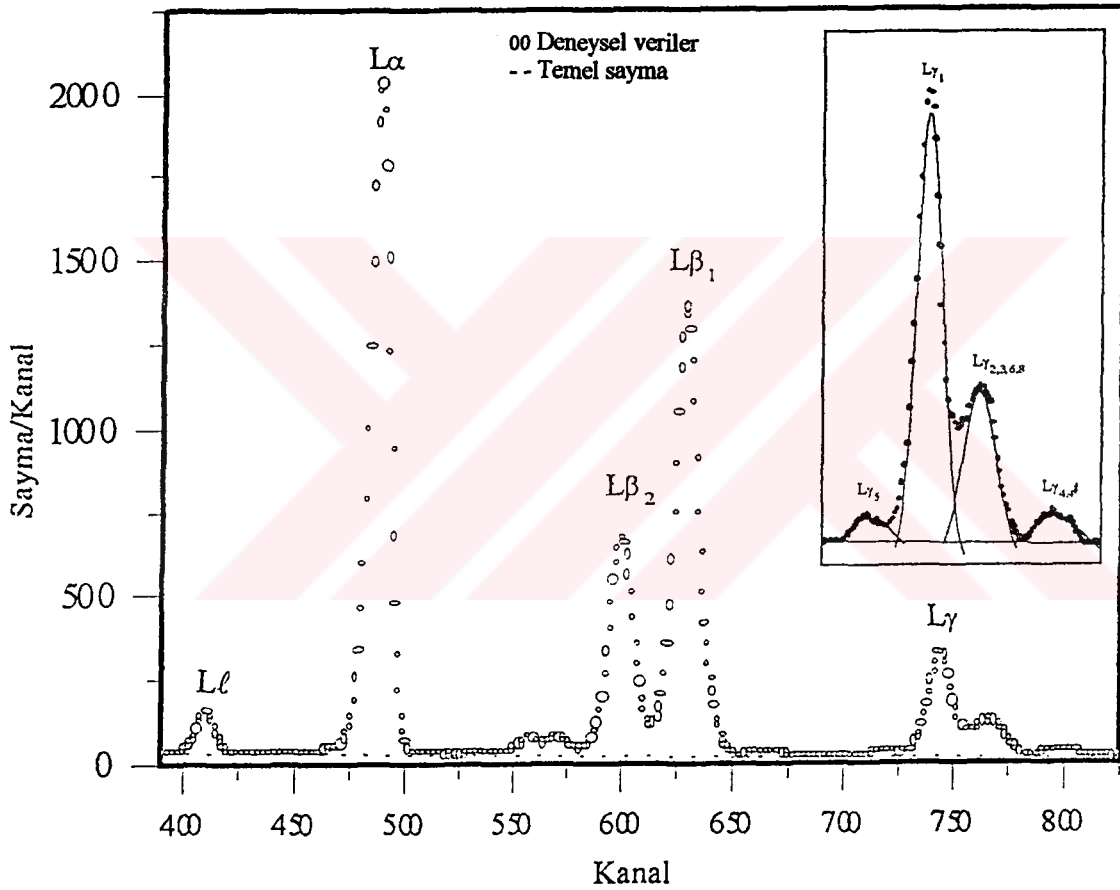
$$\sigma_{L_T} = \sum_i \sigma_{L_i} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4.16)$$

şeklinde verilir.

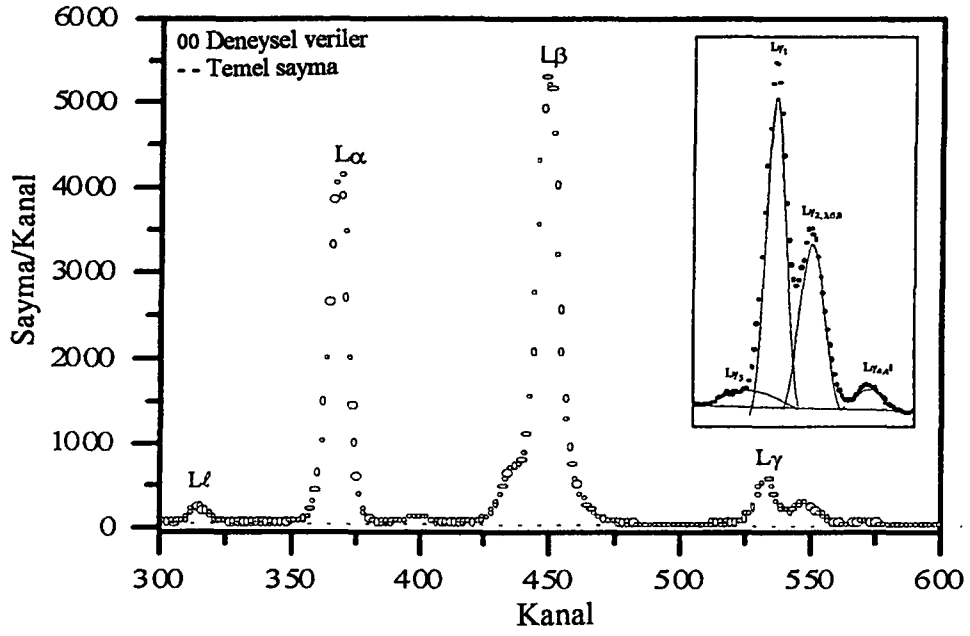


5. ÖLÇÜM VE HESAPLAMALAR

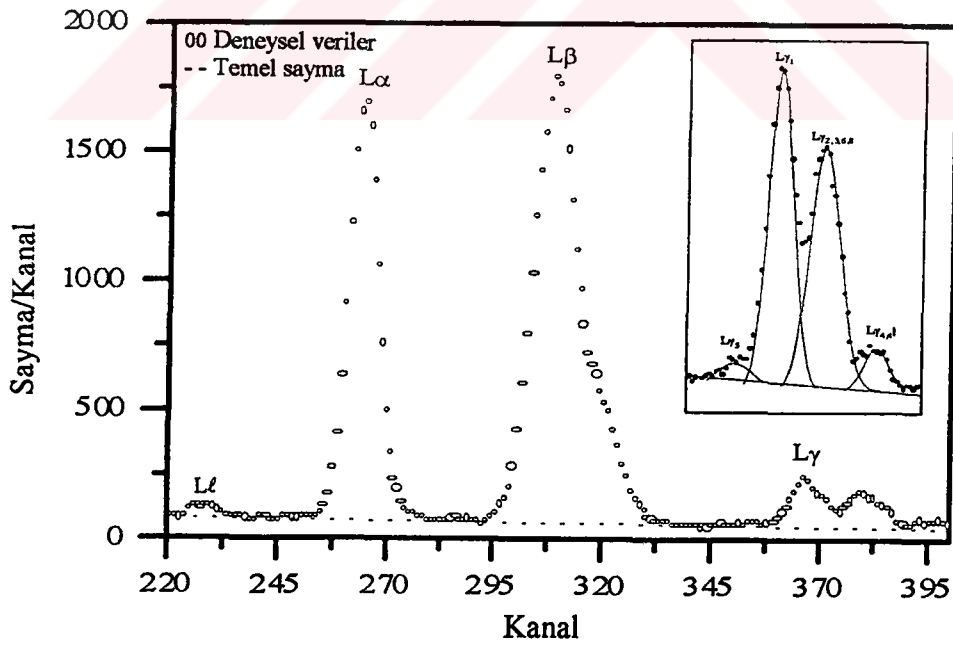
Hazırlanan numuneler, Şekil 4.3'te verilen deney geometrisinde 36000 saniyelik sürelerle 100 mCi'lik bir ^{241}Am nokta kaynak ile uyarılmıştır. Numuneden yayınlanan karakteristik X-ışınları, özellikleri daha önce belirtilen, bir Si(Li) detektör ile sayılmıştır. Bu şekilde alınmış spektrumlardan üçü Şekil 5.1, Şekil 5.2 ve Şekil 5.3'te görülmektedir.



Şekil 5.1 U'un L X-ışını spektrumu.



Şekil 5.2 Pb'un L X-ışını spektrumu.



Şekil 5.3 Hf'un L X-ışını spektrumu.

$L\gamma$ pikini oluşturan $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ piklerinin net alanları Microcal Origin (Version: 3.5) programında deneysel veriler Gaussian'a fit edilerek tespit edilmiştir. $L\gamma$ piklerinin altındaki temel saymayı temsil eden fonksiyonlar lineer fonksiyonlardır. Çünkü bu piklerin bulunduğu bölgede pile-up pikleri, escape pikler bulunmadığından ve Satellite piklerin sayısı da yok denecek kadar az olduğundan bu bölgede temel saymayı lineer bir fonksiyon ile temsil etmek uygun olur. Temel sayma fonksiyonları Tablo 5.1'de görülmektedir.

Tablo 5.1 Temel sayma fonksiyonları

Element	Fonksiyon
U	$y = 30,81 - 0,02.x$
Th	$y = 53,63 - 0,05.x$
Bi	$y = 60,48 - 0,07.x$
Pb	$y = 72,32 - 0,08.x$
Tl	$y = 54,35 - 0,07.x$
Hg	$y = 68,38 - 0,09.x$
Au	$y = 76,06 - 0,07.x$
W	$y = 70,76 - 0,10.x$
Ta	$y = 86,76 - 0,15.x$
Hf	$y = 99,24 - 0,13.x$

Deneysel olarak piklerin altındaki net sayımlar bulunduktan sonra $L\alpha$, $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ XRF tesir kesitleri (4.9) denklemi kullanılarak belirlenmiştir. Burada uygun enerji değeri için $I_0G\epsilon_{L_i}$ değerleri, Şekil 4.5'te verilen verim eğrisinden,

$$I_0G\epsilon_{K\alpha} = 7067,55 + 4246,16.E - 293,82.E^2 + 5,84.E^3 \quad (5.1)$$

ile verilen bir fit denklemi kullanılarak belirlendi. Teorik olarak (4.6) denklemi kullanılarak hesaplanan $L\alpha$, $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ XRF tesir kesitleri ve deneysel olarak belirlenen $L\alpha$, $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ XRF tesir kesitleri Tablo 5.2'de verilmiştir.

Tablo 5.2 L XRF tesir kesitleri (barn/atom)

	$\sigma_{L\alpha}$		$\sigma_{L\gamma_1}$		$\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$		$\sigma_{L\gamma_{4,4'}}$		$\sigma_{L\gamma_5}$	
	D*	T**	D	T	D	T	D	T	D	T
U	375,68 ±30,05	410,24	54,12 ±5,95	54,19	32,51 ±3,58	33,42	5,96 ±0,89	5,43	3,26 ±0,49	1,84
Th	359,91 ±28,79	370,02	48,17 ±5,30	50,79	19,29 ±2,12	20,32	4,92 ±0,74	4,59	3,46 ±0,52	1,73
Bi	201,62 ±16,13	209,44	26,52 ±2,92	25,47	16,76 ±1,84	16,94	2,45 ±0,37	2,27	0,92 ±0,14	0,88
Pb	197,43 ±15,79	193,76	27,46 ±3,02	23,78	15,24 ±1,68	14,12	2,58 ±0,39	2,04	1,05 ±0,16	0,82
Tl	151,56 ±12,12	177,53	20,05 ±2,21	21,65	11,96 ±1,32	12,29	1,76 ±0,26	1,83	0,89 ±0,13	0,75
Hg	148,74 ±11,90	161,57	18,94 ±2,08	19,41	11,17 ±1,23	11,50	1,65 ±0,25	1,70	0,44 ±0,07	0,27
Au	154,18 ±12,33	145,10	17,92 ±1,97	17,62	10,60 ±1,17	10,67	1,68 ±0,25	1,58	0,64 ±0,10	0,61
W	77,87 ±6,23	72,18	11,57 ±1,27	10,24	10,53 ±1,16	10,40	1,67 ±0,25	1,58	0,31 ±0,05	0,37
Ta	72,61 ±5,81	65,13	10,45 ±1,15	9,16	10,17 ±1,12	9,18	1,34 ±0,20	1,31	0,39 ±0,06	0,33
Hf	59,18 ±4,73	58,44	8,76 ±0,96	8,12	8,89 ±0,98	8,13	1,13 ±0,17	1,12	0,40 ±0,06	0,29

* Deneysel sonuçlar, ** Teorik sonuçlar

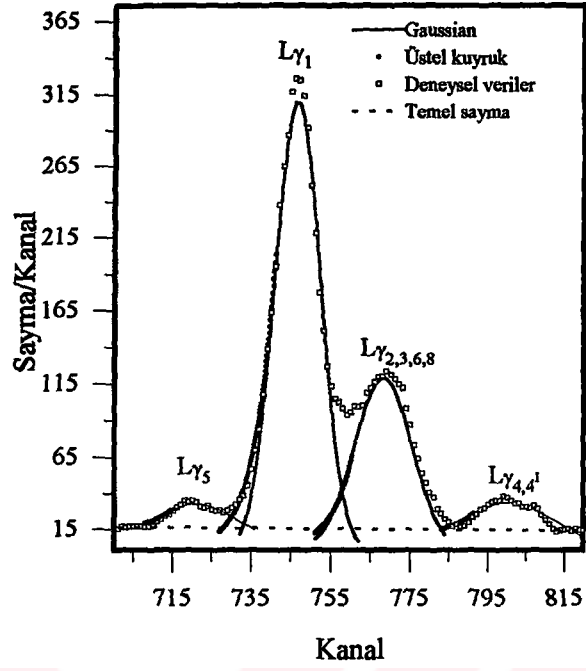
Deneysel olarak hesaplanan $L\alpha$, $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$ XRF tesir kesitleri (4.15) denklemleri kullanılarak L alt tabaka fotoelektrik tesir kesitlerine çevrildi. Scofield'ın tablolarından bulunan ve (4.15) denkleminde elde edilen L alt tabaka fotoelektrik tesir kesitleri, (4.16) denklemi kullanılarak hesaplanan toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesiti değerleri ve deneysel olarak Arora et al.'in hesapladığı toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitleri Tablo 5.3'te verildi.

Tablo 5.3 L tabakası ve alt tabakaları fotoelektrik tesir kesitleri (barn/atom)

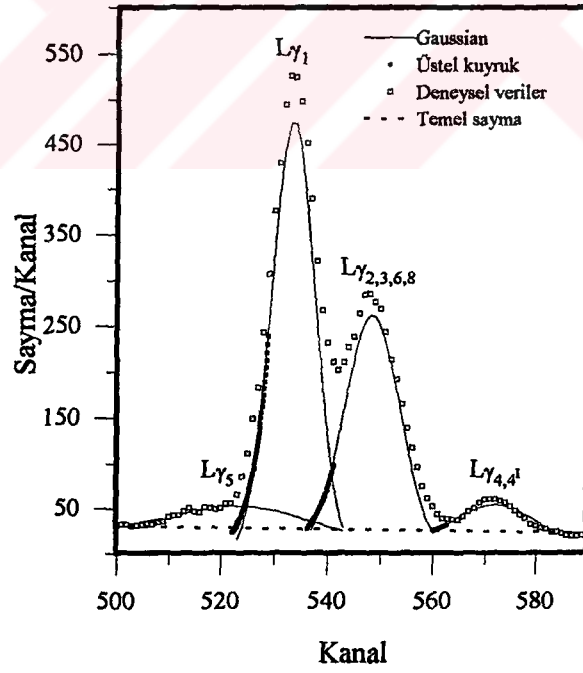
	σ_{L_1}		σ_{L_2}		σ_{L_3}		σ_{L_T}		Arora et al. ¹⁰
	D*	T**	D	T	D	T	D	T	
U	644,39 ±44,06	671,29	639,37 ±44,76	638,91	551,05 ±88,17	622,38	1834,81 ±344,13	1933	2060(I.metot) 2110(II.metot) 2090(III.metot)
Th	605,98 ±53,17	635,41	536,34 ±26,37	565,84	633,26 ±31,66	619,22	1775,58 ±199,43	1763	1680(I) 1720(II)
Bi	493,04 ±49,30	511,43	368,07 ±27,97	360,21	470,10 ±45,83	381,57	1331,21 ±212,99	1253	
Pb	547,03 ±54,73	494,41	391,45 ±36,58	336,42	399,35 ±40,15	359,76	1337,83 ±227,18	1191	1180(I) 1220(II) 1260(III)
Tl	470,85 ±28,25	477,52	287,09 ±34,45	313,94	250,04 ±62,31	338,87	1007,98 ±225,26	1130	
Hg	446,94 ±32,30	460,71	285,95 ±25,44	292,74	278,43 ±36,20	318,87	1011,32 ±171,92	1072	
Au	439,53 ±32,09	444,10	279,13 ±19,83	272,70	339,89 ±40,62	299,78	1058,49 ±179,94	1017	980(I) 1010(II)
W	368,55 ±26,97	365,34	219,99 ±23,98	188,09	239,10 ±24,98	216,54	827,64 ±140,70	770,06	770(I) 790(II)
Ta	356,85 ±21,41	350,36	194,62 ±23,52	174,06	220,35 ±21,96	202,20	771,82 ±129,16	726,70	740(I) 750(II)
Hf	366,93 ±36,36	335,73	172,29 ±18,75	160,85	181,40 ±12,81	188,58	720,62 ±117,64	685,23	

* Deneysel sonuçlar, ** Teorik sonuçlar

İkinci olarak, her bir pikin düşük enerjili bölgesinde bir kuyruklanmanın olduğunu farz ederek $L\alpha$, $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ XRF tesir kesitlerini hesapladık. Şekil 5. 4 ve Şekil 5.5'deki $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ piklerin kuyruklanmaya sahip biçimleri görülmektedir. Bu kuyruklanma göz önüne alınarak bölüm 3.2'de bahsedildiği şekilde piklerin net alanları hesaplanır. Yalnız temel sayma fonksiyonu lineer bir fonksiyon olduğundan dolayı $S(i)$ basamak fonksiyonu dikkate alınmaz. Piklerin düşük enerjili bölgesindeki kuyruklanma dikkate alındığı zaman hesaplanan $L\alpha$, $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ XRF tesir kesitleri Tablo 5.4'te verilmektedir.



Şekil 5.4 U'un $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ pikleri.



Şekil 5.5 Pb'nun $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$, $L\gamma_{4,4'}$ ve $L\gamma_5$ pikleri.

Tablo 5.4 Kuyruklanmanın olduğu durumda hesaplanan L XRF tesir kesitleri (barn/atom)

	σ_{La}		$\sigma_{L\gamma_1}$		$\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$		$\sigma_{L\gamma_{4,4'}}$		$\sigma_{L\gamma_5}$	
	D*	T**	D	T	D	T	D	T	D	T
U	394,65 ±27,63	410,24	55,07 ±5,51	54,19	33,08 ±3,31	33,42	6,12 ±0,80	5,43	3,91 ±0,51	1,84
Th	371,90 ±26,03	370,02	49,60 ±4,96	50,79	21,17 ±2,12	20,32	5,05 ±0,66	4,59	2,93 ±0,38	1,73
Bi	201,96 ±14,14	209,44	28,12 ±2,81	25,47	18,36 ±1,84	16,94	2,68 ±0,35	2,27	1,11 ±0,14	0,88
Pb	197,80 ±13,85	193,76	28,01 ±2,80	23,78	15,88 ±1,56	14,12	2,67 ±0,35	2,04	1,07 ±0,14	0,82
Tl	175,65 ±12,30	177,53	21,56 ±2,16	21,65	12,68 ±1,27	12,29	2,03 ±0,26	1,83	0,95 ±0,12	0,75
Hg	155,65 ±10,90	161,57	19,49 ±1,95	19,41	11,23 ±1,12	11,50	1,97 ±0,26	1,70	0,50 ±0,07	0,27
Au	154,73 ±10,83	161,57	18,04 ±1,80	17,62	10,74 ±1,07	10,67	1,71 ±0,22	1,58	0,69 ±0,09	0,61
W	78,64 ±5,51	72,18	11,72 ±1,17	10,24	10,86 ±1,09	10,40	1,70 ±0,22	1,58	0,34 ±0,04	0,37
Ta	73,64 ±5,15	65,13	10,81 ±1,08	9,16	10,25 ±1,03	9,18	1,44 ±0,19	1,31	0,47 ±0,06	0,33
Hf	59,69 ±4,18	58,44	9,14 ±0,91	8,12	9,23 ±0,92	8,13	1,22 ±0,16	1,12	0,41 ±0,05	0,29

* Deneysel sonuçlar, ** Teorik sonuçlar

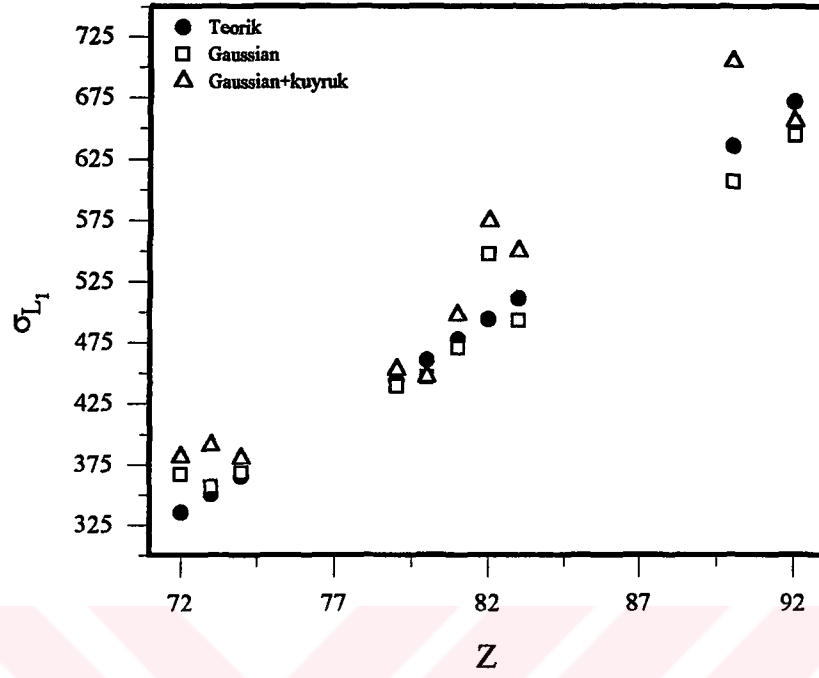
Hesaplanmış bu $L\alpha$, $L\gamma_1$, $L\gamma_{2,3,6,8}$ XRF tesir kesitleri (4.15) denklemleri kullanılarak L alt tabaka fotoelektrik tesir kesitlerine çevrildi. Bu fotoelektrik tesir kesiti değerleri Tablo 5.5'te verilmiştir.

Tablo 5.5 L tabaka ve alt tabaka fotoelektrik tesir kesitleri (barn/atom).

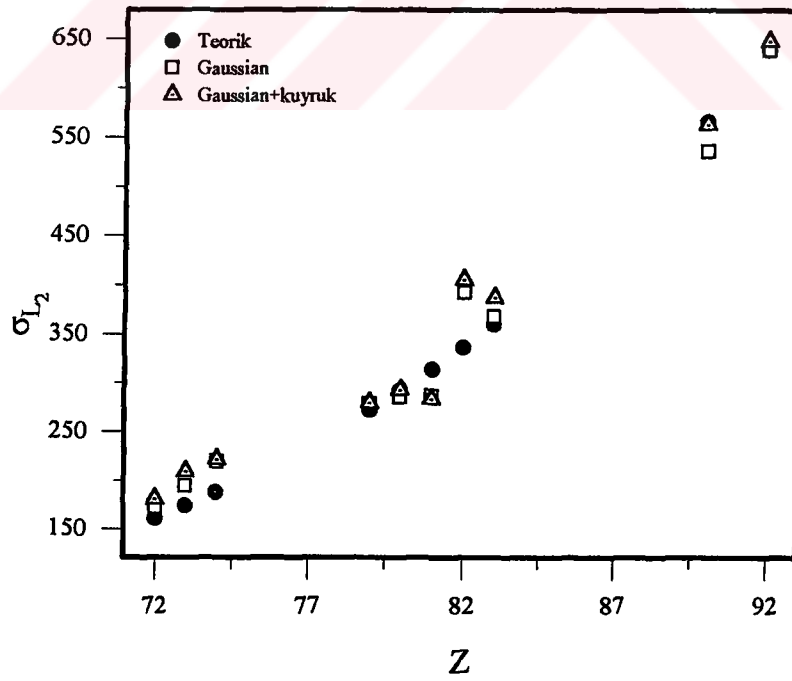
	σ_{L_1}		σ_{L_2}		σ_{L_3}		σ_{L_T}		Arora et al. ¹³
	D*	T**	D	T	D	T	D	T	
U	655,68 ±26,51	671,29	637,68 ±12,89	638,91	596,84 ±25,37	622,38	1890,20 ±117,27	1933	2060(I. metot) 2110(II. metot) 2090(III. metot)
Th	704,03 ±58,78	635,41	554,57 ±13,76	565,84	609,17 ±13,39	619,22	1867,77 ±167,78	1763	1680(I) 1720(II)
Bi	549,25 ±38,59	511,43	387,37 ±28,12	360,21	435,98 ±36,28	381,57	1372,60 ±179,65	1253	
Pb	573,72 ±57,37	494,41	397,40 ±43,71	336,42	384,25 ±36,71	359,76	1355,37 ±239,50	1191	1180(I) 1220(II) 1260(III)
Tl	497,38 ±39,82	477,52	309,88 ±28,03	313,94	320,75 ±10,42	338,87	1128,01 ±144,74	1130	
Hg	446,89 ±20,04	460,71	295,95 ±15,97	292,74	303,74 ±19,89	318,87	1046,58 ±100,44	1072	
Au	452,80 ±31,26	444,10	279,56 ±11,75	272,70	332,38 ±33,09	299,78	1064,74 ±136,54	1017	980(I) 1010(II)
W	380,37 ±29,77	365,34	221,65 ±24,10	188,09	239,06 ±22,84	216,54	841,08 ±138,40	770,06	770(I) 790(II)
Ta	390,49 ±39,05	350,36	209,47 ±23,04	174,06	228,63 ±17,90	202,20	828,59 ±139,21	726,70	740(I) 750(II)
Hf	380,94 ±38,09	335,73	180,63 ±19,87	160,85	178,80 ±10,69	188,58	740,37 ±118,63	685,23	

* Deneysel sonuçlar, ** Teorik sonuçlar

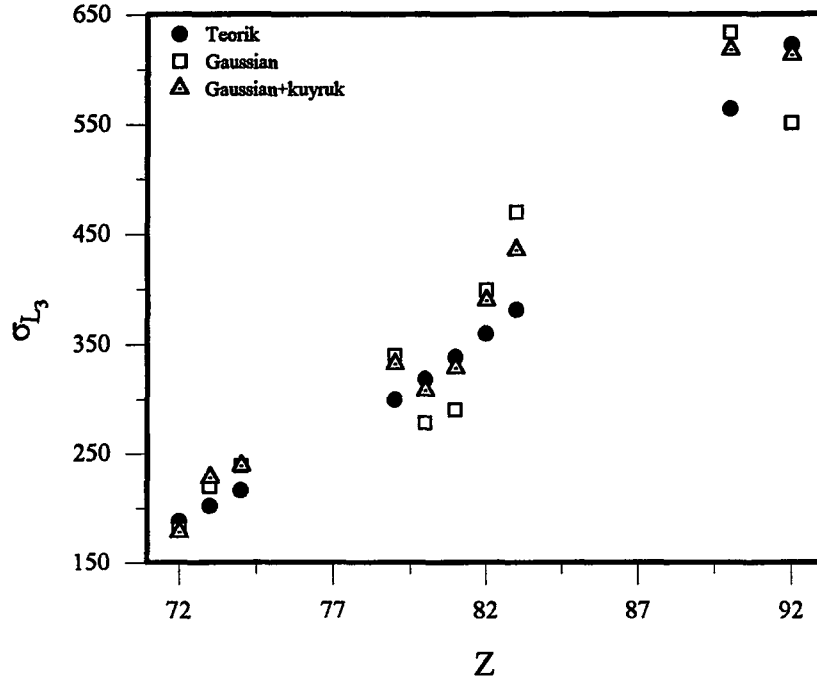
Şekil 5.6, 5.7, 5.8 ve 5.9'da deneysel ve teorik olarak hesaplanan σ_{L_1} , σ_{L_2} , σ_{L_3} ve σ_{L_T} 'nin atom numarasına bağımlılığı görülmektedir. Şekil 5.9'da deneysel ve teorik olarak hesaplanan σ_{L_1} , σ_{L_2} , σ_{L_3} ve σ_{L_T} değerlerine ilaveten Arora et al.'in deneysel olarak iki farklı metot ile hesapladıkları toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitlerinin değerleri de verilmiştir.



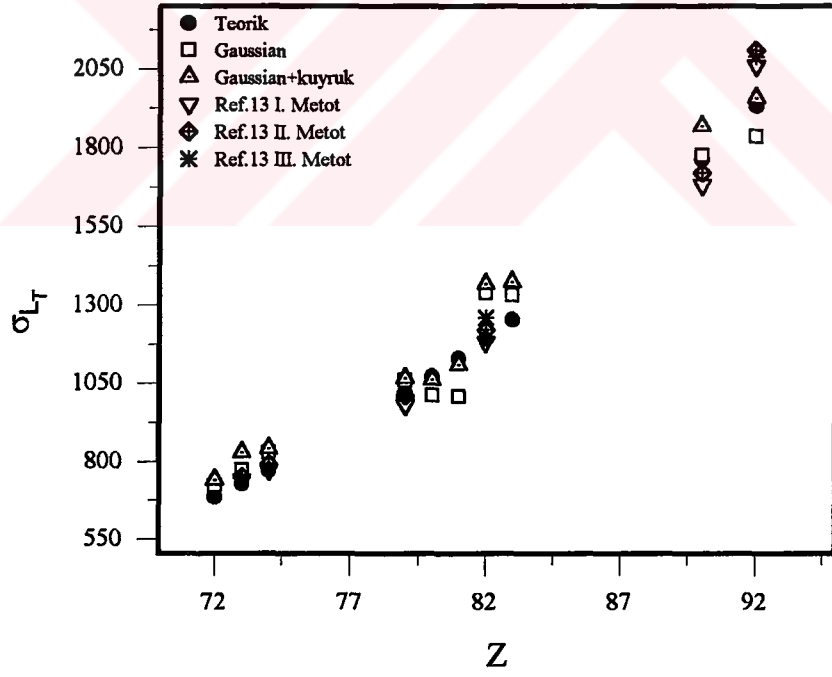
(a) σ_{L_1} 'in deneysel ve teorik deęerlerinin karřılařtırılması.



(b) σ_{L_2} 'nin deneysel ve teorik deęerlerinin karřılařtırılması.



(c)



(d)

Şekil 5.6 c) σ_{L_3} 'ün ve d) σ_{L_T} 'in deneysel, teorik ve literatür değerlerinin karşılaştırılması.

6. SONUÇ ve TARTIŞMA

Bu çalışmada, 59,5 keV'lik fotonlarla uyarılan Hf, Ta, W, Au, Hg, Tl, Pb, Th ve U için L alt tabaka fotoelektrik tesir kesitleri hesaplandı. Teorik ve deneysel olarak hesaplanan fotoelektrik tesir kesiti değerleri Tablo 5.3 ve 5.5'te verildi. Teorik ve deneysel olarak hesaplanan L alt tabaka ve toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesitlerinin atom numarasına bağlılığı Şekil 5.6'da verilmiştir. Ayrıca hesaplanan değerler Şekil 5.6 d' de Arora et al.'ün¹³ deneysel olarak iki ayrı metotla ölçtüğü toplam L tabakası fotoelektrik tesir kesiti değerleriyle mukayeseli olarak verildi.

Tablo 5.3 ve 5.5'ten görüldüğü gibi deneysel olarak hesaplanan fotoelektrik tesir kesiti değerleri ile Scofield'ın Hartree-Slater değerleri arasında pikler Gaussian alındığında % 2-15 (Tl σ_{L_3} ve σ_{L_t} hariç) ve pikin düşük enerjili bölgesinde bir kuyruklanma olduğu kabul edildiğinde % 1-14 arasında bir uyum olduğu gözlemlendi. Pikler Gaussian kabul edilerek deneysel olarak hesaplanan L alt tabaka fotoelektrik tesir kesiti değerlerindeki hataların σ_{L_1} için % 6-10, σ_{L_2} için % 7-12, σ_{L_3} için % 5-19 (Tl hariç Tl için % 25) ve σ_{L_T} için % 8-20 (Tl hariç Tl için % 22) arasında olduğu bulundu. Piklerin düşük enerjili bölgesinde bir kuyruklanma olduğunu göz önüne aldığımızda, yani Gaussian'a bir kuyruklanma terimi ilâve yapıldığında fotoelektrik tesir kesitlerinin σ_{L_1} için % 4-10, σ_{L_2} için % 2-11, σ_{L_3} için % 2-10 ve σ_{L_T} için % 6-17 arasında hatalara sahip oldukları bulundu. Bu hatalar σ_{L_1} , σ_{L_2} ve σ_{L_3} 'ü hesaplamada kullanılan $\sigma_{L\alpha}$, $\sigma_{L\gamma_1}$ ve $\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$ floresans tesir kesitlerinin hesaplanmasında ortaya çıkan hatalardan kaynaklanmaktadır. Bunlarda yapılan maksimum hatalar: pik Gaussian kabul edildiğinde $L\alpha$ pikinin alanını belirlemede % 6, $L\gamma_1$ ve $L\gamma_{2,3,6,8}$ piklerinin net alanlarını belirlemede % 10 piklerin kuyruklanmaya sahip olduğu kabul edildiğinde $L\alpha$ pikinin alanını belirlemede % 5, $L\gamma_1$ ve $L\gamma_{2,3,6,8}$ piklerinin net alanlarını belirlemede % 9, $I_0G_{\epsilon Li}$ ($i=\alpha, \gamma$) faktörünü belirlemede kullanılan parametrelerden % 5, deney geometrisinden % 1, β 'nın belirlenmesinden %1, numunenin düzgün (uniform) olmamasından % 1. Bu belirsizliklerden dolayı pik şeklinin Gaussian olduğu kabul edildiğinde $\sigma_{L\alpha}$

değerlerinde maksimum % 8, $\sigma_{L\gamma_1}$ ve $\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$ değerlerinde maksimum % 11; piklerin düşük enerjili bölgesinde bir kuyruklanma olduğu kabul edildiği durumda ise σ_{La} değerlerinde maksimum % 7, $\sigma_{L\gamma_1}$ ve $\sigma_{L\gamma_{2,3,6,8}}$ değerlerinde maksimum % 10 hatalar meydana gelmektedir. Toplam L tabakası tesir kesiti değerleri ile Arora et al.¹³'ün üç farklı metottan bulunduğu değerler Tablo 5.3 ve 5.5 ile Şekil 5.6 d'de görüldüğü gibi uyum içerisindedir. Arora et al.¹³'ün I. metodu ile bulduğumuz değerler pikler Gaussian kabul edilerek yapılan hesaplamalarda %8-13, piklerin düşük enerjili bölgelerinde bir kuyruklanma olduğu kabul edilerek yapılan hesaplamalarda %5-12; Arora et al.¹³'ün II. metodu ile bulduğumuz değerler pikler Gaussian kabul edilerek yapılan hesaplamalarda %5-12, piklerin düşük enerjili bölgelerinde bir kuyruklanma olduğu kabul edilerek yapılan hesaplamalarda %3-15 ve Arora et al.¹³'ün III. metodu ile bulduğumuz değerler pikler Gaussian kabul edilerek yapılan hesaplamalarda %7-11, piklerin düşük enerjili bölgelerinde bir kuyruklanma olduğu kabul edilerek yapılan hesaplamalarda %6-14 olarak bulundu.

Temel sayma temsili için lineer fonksiyonlar kullandık. Çünkü temel saymanın üç ana sebebi vardır: diğer kaynakların radyasyonu ile ilgili pulslar (yani, labrotuvar koşullarından kaynaklanan pulslar), kullanılan kaynağın daha büyük enerjili γ -ışınlarından kaynaklanan pulslar ve kaynağın kullanılan γ -ışınlarından kaynaklanan pulslar (özellikle escape ve pile-up pikler). İlk iki katkı düşük mertebeli bir polinom ile temsil edilebilir (çoğunlukla lineer bir polinom ile). Üçüncü katkı ise bir basamak fonksiyonu ile temsil edilir⁵¹. Bizim ilgilendiğimiz enerjilerde ekstra bir katkı (yani pile-up, escape pikler v.b.) bulunmadığı için temel sayma fonksiyonu olarak lineer bir fonksiyon kullanmanın uygun olacağına karar verildi. Ayrıca pik sınırlarını tespit etmede pikin her iki tarafından on kanal ortalaması kullanıldı⁵²⁻⁵⁴.

Fotoelektrik tesir kesitleri radyasyon fiziğinde, nükleer fizikte ve enerji taşıma ve depolama hesaplamaları gibi alanlarda kullanılmaktadır. Bu çalışma; araştırdığımız kadarıyla radyoizotoplarla uyarmada 59,5 keV'de L_1 , L_2 ve L_3 alt tabakası fotoelektrik tesir kesitleri hesaplamaları ile ilgili ilk araştırmadır.

7. EK AÇIKLAMALAR

7.1 Teorik Fotoelektrik Tesir Kesiti Hesaplamaları

Tesir kesiti hesaplamalarında elektronun rölativistik olarak hareket ettiği ve fotonun soğurulmasından hem önce hem de sonra aynı Hartree-Slater merkezi potansiyelinde hareket ettiğini farz edelim.

$\hbar\omega$ enerjili, $\hbar\mathbf{k}$ momentumlu ve polarizasyon faktörü ϵ olan bir foton şuasının soğurulması için tesir kesitleri

$$\sigma = \frac{4\pi\alpha\hbar c^2}{\omega} \sum_{\text{son durumlar}} \left| \langle B | \sum_i \tilde{\alpha}_i \cdot \tilde{\epsilon} e^{i\mathbf{k}\cdot\tilde{\mathbf{r}}}_i | A \rangle \right|^2 \delta(E_B - \hbar\omega - E_A)$$

ile verilir. Burada α ince yapı sabitidir. Uzay dalgası radyasyon alanı multipol alanlara genişletilebilir:

$$\tilde{\epsilon} e^{i\mathbf{k}\cdot\tilde{\mathbf{r}}} = (2\pi)^{3/2} \sum_{\substack{LM \\ \lambda=e,m}} i^L \vec{A}_{LM}^{(\lambda)}(\tilde{\mathbf{r}}) \tilde{\epsilon} \cdot \vec{Y}_{LM}^{(\lambda)*}(\hat{\mathbf{k}})$$

Sadece \mathbf{k} 'ya dik ϵ 'ye sahip elektrik (e) ve manyetik (m) multipoller genişlemeye girer.

Y 'ler ortonormal vektör küresel harmonikleridir.

$$\int \vec{Y}_{LM'}^{(\lambda')}(\tilde{\mathbf{r}}) \vec{Y}_{LM}^{(\lambda)}(\tilde{\mathbf{r}}) d\Omega = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{LL'} \delta_{MM'}$$

ve

$$\begin{aligned}\vec{Y}_{LM}^{(e)}(\vec{r}) &= \frac{1}{[L(L+1)]^{1/2}} \vec{r} \vec{\nabla} Y_{LM}(\vec{r}) \\ \vec{Y}_{LM}^{(m)}(\vec{r}) &= \frac{1}{[L(L+1)]^{1/2}} \vec{r} \times \vec{\nabla} Y_{LM}(\vec{r}) \\ \vec{Y}_{LM}^{(0)}(\vec{r}) &= \vec{r} Y_{LM}(\vec{r})\end{aligned}$$

olarak ifade edilebilir. $\vec{L} = -i\vec{r} \times \vec{\nabla}$ olmak üzere A'lar

$$\begin{aligned}\vec{A}_{LM}^{(e)}(\vec{r}) &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{k[L(L+1)]^{1/2}} \vec{\nabla} \times \vec{L} J_L(kr) Y_{LM}(\vec{r}) \\ \vec{A}_{LM}^{(m)}(\vec{r}) &= i \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{J_L(kr)}{[L(L+1)]^{1/2}} \vec{L} Y_{LM}(\vec{r})\end{aligned}$$

şeklinde verilir. A'lar belirli açısal momentum ve parite ile

$$(\nabla^2 + k^2)\vec{A} = 0$$

vektörel Helmutz denklemlerinin diferansiyelsiz çözümleridir.

Burada fotonun polarizasyonu ve doğrultusu üzerinden ortalama alacağız ve böylece fotonlarla, polarizasyonla veya doğrultuyla korelasyonları ele almayacağız. Toplam tesir kesitleri için

$$\sigma = \frac{4\pi\alpha\hbar c^2}{\omega} \sum_{\lambda=e,m} \sum_{L=1}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \left| \langle B | \sum_i \vec{a}_i \cdot \vec{A}_{LM}^{(\lambda)}(\vec{r}_i) | A \rangle \right|^2 \delta(E_B - \hbar\omega - E_A)$$

ifadesini elde ederiz. Bu hesaplamalarda, ilk ve son durumlardaki elektronların aynı merkezi potansiyelde bağımsız bir şekilde hareket ettiği kabul edilir. İyonlaştırılmış elektronların tek parçacık durumlarını a ve b ile gösterelim.

Tek-parçacık dalga fonksiyonları Dirac denklemini sağlar ($m=\hbar=c=1$ kullanarak):

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + V(r) + B)\psi = E\psi$$

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \text{ ve } \beta = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$$

2x2 matrislere göre temsili kullanarak

$$\psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) & \chi_{\kappa}^{\mu}(\hat{r}) \\ iF(r) & \chi_{-\kappa}^{\mu}(\hat{r}) \end{pmatrix}$$

ile verilen belirli açisal momentumlu dalga fonksiyonları yazabiliriz. Burada $\chi_{\kappa}^{\mu}(\hat{r})$ değerleri

$$\chi_{\kappa}^{\mu}(\hat{r}) = \sum C \left(\ell \frac{1}{2} j; \mu - m, m \right) Y_{\ell \mu - m} \chi_{1/2}^m$$

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2} \ell \quad \ell = \kappa, \quad \kappa > 0$$

$$\ell = -\kappa - 1, \quad \kappa < 0$$

ile verilir. $\chi_{1/2}^m$ spin $\frac{1}{2}$ spinörleridir. G ve F radyal Dirac denklemlerini sağlar:

$$\frac{dG}{dr} + \frac{\kappa}{r} G = (E - V + 1)F$$

$$-\frac{dF}{dr} + \frac{\kappa}{r} F = (E - V - 1)G$$

Bu temel hal enerjileri için bir eigen değer eşitliğidir. Temel hâller için radyal dalga fonksiyonları

$$\int [G^2(r) + F^2(r)] dr = 1$$

olarak normalize edilebilir.

Büyük r 'lerde sürekli haller için G ve F $p(r) = [(E - V)^2 - 1]^{1/2}$ olmak üzere

$$G(r) \sim \left(\frac{E+1}{2E} \right)^{1/2} \sin \left[\int p(r') dr' + \delta \right]$$

$$F(r) \sim \left(\frac{E-1}{2E} \right)^{1/2} \cos \left[\int p(r') dr' + \delta \right]$$

değerine yaklaşır; yani $(G^2 + F^2)$ 'nin ortalama değerleri $1/2$ 'e gider. Bu normalizasyon ile son durumlar üzerinden toplam

$$\sum \delta(E_B - \hbar\omega - E_A) = \sum_{\kappa_b} (2j_b + 1) \frac{2E_b}{\pi p_b}$$

dir. Burada E_b ve p_b son elektron enerjisi ve momentumudur.

Matris elemanları

$$\langle b | \vec{\alpha} \cdot \vec{A}^{(\lambda)} | a \rangle = i \int dr d\Omega \left[G_b \chi_{\kappa_b}^{\mu_b^+} \vec{\sigma} \cdot \vec{A}_{LM}^{(\lambda)} F_a \chi_{-\kappa_a}^{\mu_a} - F_b \chi_{-\kappa_b}^{\mu_b^+} \vec{\sigma} \cdot \vec{A}_{LM}^{(\lambda)} G_a \chi_{\kappa_a}^{\mu_a} \right]$$

şeklindedir. Açık tensör analizi dokuz-j sembollerine (nine-j symbols) göre açılmalı ve spin kısımları verecek; sonuç olarak onlar için basit ifadeler bulunur. Orijinal matris elemanı ifadelerini basitleştirebiliriz ve altı-j sembole (six-j symbols) göre sonuçlarını kabul edebiliriz.

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \chi_{\kappa} = -(\kappa + 1) \chi_{\kappa}$$

ve

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{r} \chi_{\kappa} = -\chi_{-\kappa'}$$

ifadelerini kullanarak

$$\left[\chi_{-\kappa_b}^{\mu_b^+} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} (Y_{LM}) \chi_{\kappa_a}^{\mu_a} \right] = (\kappa_a + \kappa_b) \left(\chi_{-\kappa_b}^{\mu_b^+} Y_{LM} \chi_{\kappa_a}^{\mu_a} \right)$$

elde edriz.

$$i r^2 \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{L} = \vec{\sigma} \cdot \vec{r} \vec{\sigma} \cdot L (r \cdot \vec{\nabla} + 1) - i \vec{\sigma} \cdot \vec{r} \vec{L} \cdot \vec{L}$$

olarak

$$r^2 \vec{\nabla} \times \vec{L} = \vec{r} \times \vec{L} (r \cdot \vec{\nabla} + 1) + i \vec{r} \vec{L} \cdot \vec{L}$$

olduğuna dikkat edelim. Böylece

$$\begin{aligned} \chi_{-\kappa_b}^{\mu_b^+} i \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{L} [Y_{LM}(\hat{r}) j_L(kr)] \chi_{\kappa_a}^{\mu_a} &= \left(\chi_{-\kappa_b}^{\mu_b^+} Y_{LM}(\hat{r}) \chi_{\kappa_a}^{\mu_a} \right) \frac{1}{r} \\ &\times [(\kappa_b - \kappa_a) (r \cdot \vec{\nabla} + 1) - L(L+1)] j_L(kr) \end{aligned}$$

olur.

$$\begin{aligned} \chi_{-\kappa_b}^{\mu_b^+} Y_{LM}(\hat{r}) \chi_{\kappa_a}^{\mu_a} &= (-1)^{j_b+1/2} \left[\frac{(2\ell_a + 1)(2\ell_b + 1)(2j_a + 1)(2L + 1)}{4\pi} \right]^{1/2} \\ &\times \begin{Bmatrix} L & \ell_a & \ell_b \\ \frac{1}{2} & j_b & j_a \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} L & \ell_a & \ell_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} C(L j_a j_b; M \mu_a) \end{aligned}$$

olduğundan dolayı tesir kesitleri için son ifade

$$\sigma = \frac{4\pi\alpha}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \sum_a \frac{N_a E_b}{P_n} \sum_{\kappa_b} (2j_b + 1) \sum_L \frac{(2L+1)}{L(L+1)} \\ \times \left[X(\kappa_a, \kappa_b, L) R_e^2 + X(\kappa_a, -\kappa_b, L) R_M^2 \right]$$

olur. Burada

$$R_e = \int \frac{dr}{dk} (F_b G_a - G_b F_a) L(L+1) J_L(kr) + (\kappa_b - \kappa_a) (F_b G_a + G_b F_a) \left(r \frac{d}{dr} + 1 \right) j(kr)$$

$$R_M = (\kappa_a + \kappa_b) \int dr j_L(kr) (F_b G_a + G_b F_a)$$

$$X = (2\ell_a + 1)(2\ell_b + 1) \begin{pmatrix} \ell_a & \ell_b & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left\{ \begin{matrix} L & \ell_a & \ell_b \\ \frac{1}{2} & j_b & j_a \end{matrix} \right\}^2$$

ile verilir. X , $J = \ell_a + \ell_b + L$ ve L, j_a, j_b bir üçgen biçiminde olsa bile sıfır olmaz; bu şartlarla karşılaşıncı

$$\begin{pmatrix} \ell_a & \ell_b & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = \frac{(J-2L)!(J-2\ell_a)!(J-2\ell_b)!}{(J+1)!} \times \left[\frac{(J/2)!}{(J/2-L)!(J/2-\ell_a)!(J/2-\ell_b)!} \right]^2$$

ve

$$\left\{ \begin{matrix} L & \ell_a & \ell_b \\ \frac{1}{2} & j_b & j_a \end{matrix} \right\}^2 = \left| \frac{(L + \kappa_a + \kappa_b + 1)(\kappa_a + \kappa_b - L)}{4\kappa_a \kappa_b (2\kappa_a + 1)(2\kappa_b + 1)} \right|$$

ifadelerine sahip oluruz.

7.2 Merkezi Potansiyel

Hesaplamalar için kullanılan merkezi potansiyel

$$V_s(r) = -1,5e^2(\epsilon\rho/\pi)^{1/3}$$

ile deęişim etkilerini hemen hemen doęru olması için Slater tarafından sunuldu. Burada ρ elektron yük yoğunluęudur. Potansiyelin daha dıřarıdaki bölgelerin daha farklı bir şekilde olacaęı $-e^2/r$ deęerinin yukarı çıkmasına izin verilmedi. Dıř alt tabakaların kısmen dolu olmasından dolayı durumların kesirli doldurulmasının merkezi potansiyele katkıda bulunduęu farz edildi. Alt tabakaların belli durumları için yani alt tabakaların doluluk oran ve biçimlerine göre öz-uyumlu (self-consistent) potansiyel bulundu. Atomdan yayınlanan elektronların baęlı elektronlarla aynı potansiyeli gördüęü kabul edildi.

7.3 Merkezi Potansiyelin Hesaplanması

Merkezi potansiyel hesaplamaları r 'nin eksponansiyel olarak deęiřtięi düşünülerek yapıldı yani $r_{j+1} = \exp(h)r_j$. Hesaplamalar bir Thomas-Fermi potansiyeli ile başlar.

Baęlı-hal enerji eigen deęerleri ve dalga fonksiyonları belli bir potansiyel için hesaplanır. Dalga fonksiyonları için eksponansiyel olarak azalan bölgeden başlayarak, radyal Dirac eřitlięi $G(r)$ 'deki ilk maksimuma doęru integre edilir; daha sonra orijinden aynı noktaya kadar integral alınır. Enerji için birinci mertebeden düzeltmeler ařaęıdaki ifadeden bulunur.

$$\delta E = \frac{F_0(r_M)/G_0(r_M) - F_i(r_M)/G_i(r_M)}{\left[\int_0^{r_M} (G_0^2 + F_0^2) dr / G_0^2(r_M) + \int_{r_M}^{\infty} (G_i^2 + F_i^2) dr / G_i^2(r_M) \right]}$$

Burada i ve 0 alt indisleri içeriye doğru (inward) ve dışarıya doğru (outward) integre edilmiş bileşenleri gösterir. Bileşenlerin istenilen düğüm sayısında birleşmesini sağlamak için istenilen doğruluk elde edilene kadar E' nin düzeltilmiş değerleriyle integral tekrar alınır.

Doldurulan seviyeler nedeniyle yük dağılımı yeni bir potansiyel oluşturur. $U(r)$ şu şekilde verilir:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} U(r)$$

öyle ki $U(0)=Z$ ve herhangi bir değerden daha büyük r 'ler için $U(r)=1$.

$$Q(r) = \sum_a N_a [G_a^2(r) + F_a^2(r)]$$

yazarak $r \rightarrow \infty$ için

$$\frac{d^2 U_Q(r)}{dr^2} = 0$$

olduğundan dolayı $U_Q(r) = 0$ olmak üzere $U_Q(r)$

$$\frac{d^2}{dr^2} U_Q(r) = Q(r)/r$$

$U_Q(r)$ 'nin bileşenleridir. Değişirme katkısı

$$U_x(r) = \frac{3}{2} \left(\frac{3Qr}{4\pi^2} \right)^{1/3}$$

ile verilir. Sonuç olarak $U(r) \geq 1$ olmak şartıyla

$$U(r) = U_x(r) + U_Q(r)$$

elde edilir.

Öz-uyumlu potansiyeli elde edebilmek için elektronların hareket ettiği kabul edilen potansiyeller ve onlar tarafından belirlenen potansiyel arasında ortalama alınır. Daha sonra Dirac denklemleri bu potansiyel için çözülür ve prosedür ilk ve son potansiyel arasında istenilen uyum elde edilene kadar tekrarlanır.

7.4 Matris Elemanları İçin Dalga Fonksiyonlarının Hesaplanması

Matris elemanları r 'nin lineer olduğu integrallerle hesaplanır. Elektronların bağlanma enerjileri ne olursa olsun aynı büyüklük mertebesindeki foton enerjileri için bağlı hallerin dalga fonksiyonları yukarıda gösterildiği gibi hesaplanır. Bağlanma enerjilerinden çok büyük enerjiler için bağlı durumların dalga fonksiyonları eksponansiyel olarak azalan bölgenin dışında olmayı gerektirmez, böylece orijinde dalga fonksiyonlarının hareketi ve potansiyel hesaplamalarında türetilen bağlanma enerjileri kullanılır, Dirac denklemleri sadece orijinden dışa doğru integrallenir.

Sürekli durumlar için, Dirac denklemleri asimtotik hareketleri bulmak ve matris elemanlarına katkıları bulmak için yeterince uzakta integrallenir. Sadece iyonizasyon sınırının hemen üstündeki enerjiler için asimtotik sınırı bulmada bir güçlük vardır. Sınırı bulma metodumuz WKB genişlemesine dayanır.

$$\chi = (E - V + 1)^{1/2} G$$

ile ve

$$y = (E - V)^2 - 1 - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^2} - (E - V + 1)^{1/2} \frac{d^2}{dr^2} (E - V + 1)^{-1/2}$$

olmak üzere

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi = -y\chi$$

denklemini χ 'yı sağlar.

$$\chi(r) = \chi_1 e^{is} + \text{c.c.}$$

veya

$$\chi(r) = \chi_\infty \exp\left(-\int_\infty^r \text{Im } \dot{s} dr'\right) \cos\left(\int_{r_0}^r \text{Re } \dot{s} dr' + \delta\right)$$

$$\chi_\infty^2 = \left[\exp\left(\int_\infty^r \text{Im } \dot{s} dr'\right)\right]^2 \left\{ \chi^2 + [(\chi' + \chi \text{Im } \dot{s})^2 / (\text{Re } \dot{s})^2] \right\}$$

olmak üzere WKB genişlemesi

$$\text{Im } \dot{s} = 1/4 \dot{y}/y + \dots$$

$$\text{Re } \dot{s} = y^{1/2} \left[1 + \frac{1}{8} (\dot{y}^2 / y^3) + \dots \right]$$

ile verilir. Radyal Dirac denklemleri ve benzer denklemler j 'ler ile sağlanabilir. Yani,

$$\left(\frac{d}{dx} + \frac{\ell+1}{x}\right) j_\ell(x) = j_{\ell-1}(x)$$

$$\left(-\frac{d}{dx} + \frac{\ell-1}{x}\right) j_{\ell-1}(x) = j_\ell(x)$$

muhtemelen türemiş terimlerle değişen integrallerle matris elemanları için farklı ifadeler üretmek için kullanılabilir

İntegraller bağlı durumların dalga fonksiyonlarının bir bileşeninin, sürekli dalga fonksiyonlarının birinin, bir küresel Bessel fonksiyonunun ve muhtemelen r 'nin kuvvetlerine bağlı bir fonksiyonun veya kullanıma şekline bağlı olarak onun

türevlerinin çarpımından ibarettir. Bir halin bağlanma enerjisinden çok daha büyük foton enerjileri için, foton enerjileri elektronun durgun kütle enerjisi ile karşılaştırıldığında ihmal edilebilecek kadar küçük ise bağlı durumların dalga fonksiyonlarındaki değişimler ile karşılaştırıldığında sürekli dalga fonksiyonları Bessel fonksiyonunda olduğu gibi süratle salınır.

r 'nin küçük değerleri için yukarıda verilen integran şekilleri kullanıldı. Daha büyük r değerleri için, $1/r^2$ faktörlerine sahip integran biçimleri büyük foton enerjileri için integrallerin yapılabildiği r değerlerini azaltmak için kullanılır. İntegranların bu şekilleri iki dalga fonksiyonunun ve Bessel fonksiyonunun çarpımlarının türevlerine uygun ifadeleri ters çevirerek oluşturulur; türev terimleri son noktalarında katkılar oluşturur. İntegralin dış sınırında, ilave bir $1/r$ faktörüne sahip bir integrana dönüşümden dolayı son-nokta katkısını içerir.

7.5 Radyasyon Alanının Açısız Momentumu Üzerinden Toplam

Toplam tesir kesitleri radyasyon alanının multipollerini üzerinden sonsuz bir toplam ve sürekli durumların açısız momentumları üzerinden bir toplam olarak verilir. Radyasyon alanının belli bir açısız momentumu için sürekli durumun açısız momentumu gerekli üçgen ile sınırlıdır. Daha büyük multipol katkıları potansiyelin veya bağlı durumların fonksiyonlarının küçüklüğünün bu değerlerin azalmasına neden olduğu daha büyük r değerlerinden kaynaklanır. Hesaplamalarda belli bir hassasiyet (accuracy) için gerekli terim sayısı deney ile belirlenir.

Hesaplamalar için bilgisayar programının geliştirilmesi esnasında en azından %0,1'lik bir hassasiyet toplam soğurma tesir kesitlerinin hesaplanmasında sağlandı. Bu hassaslık seviyesi istenildi ama tek alt tabaka katkıları için sağlanamadı. Hesaplamalar tamamlandıktan sonra 10, 100 ve 1000 keV'lik enerjiler için $Z=4$, 50 ve 92'de tesir kesiti değerleri sistem noktalarının sayısının artırılmasıyla ve programdaki diğer parametreler değiştirilerek kontrol edildi.

8. KAYNAKLAR

1. Scofield, J. H., 1973, UCRL Report No: 51326
2. Pajek, M., Kobzev, A. P., Trautmann, D. and Kauer, Th., 1990, Nucl. Instr. and Meth. B52, 109-116.
3. Umesh, T. K. and Ranganathaiah, C., 1984, Nucl. Instr. and Meth.. B5, 472-479.
4. Karabulut, A., Budak, G. and Ertuğrul, M., 1999, Nucl. Instr. and Meth. B152, 202-206.
5. Budak, G., Karabulut, A., Şimşek, Ö. and Ertuğrul, M., 1999, Nucl. Instr. and Meth. B149, 379-382.
6. Ertuğrul, M., Şimşek, Ö., Doğan, O. and Turgut, Ü., 1996, J. Radioanal. Nucl. Chem. Letters, 213(1), 37-44.
7. Arora, S. K., Allawadhi, K. L. and Sood, B. S., 1981, Phys. Rev. A23, 1147-1151.
8. Jahagirdar, H. A., Hanumaiah, B. and Thontadarya, S. R., 1993, X-Ray Spectrom., 22, 163- 165.
9. Geretschläger, M., Šmit, Ž. and Steinbauer, E., 1992, Phys. Rev. A45, 2842- 2849.
10. Horvat, V., Sampoll, G., Wohrer, K., Chabot, M. and Watson, R. L., 1992, Phys. Rev A46, 2572- 2580.
11. Tribedi, L. C. and Tandon, P. N., 1992, Phys. Rev. A45, 7860- 7867.
12. Lægsgaard, E., Andersen, J. U. and Høgedal, F., 1980, Nucl. Instr. and Meth. 169, 293- 300.
13. Arora, S. K., Allawadhi, K. L. and Sood, B. S., 1981, J. Phys. B14, 1423- 1432.

14. Sarkadi, L. and Mukoyama, T., 1980, J. Phys. B13, 2255-2268.
15. Malhi, N. B. and Gray, T. J., 1991, Phys. Rev. A44, 7199-7205.
16. Semaniak, J., Braziewicz, J., Pajek, M., Czyżewski, T., Głowacka, L., Jaskóła, M., Haller, M., Karschnik, R., Kretschmer, W., Halabuka, Z. and Trautmann, D., 1996, Phys. Rev. A52, 1125- 1136.
17. Semaniak, J., Braziewicz, J., Pajek, M., Kobzev, A. P. and Trautmann, D., 1993, Nucl. Instr. and Meth. B75, 63- 67.
18. Bogdanović, I., Fazinić, S., Jakšić, M. and Šmit, Ž., 1997, Phys. Rev. A56, 2860-2867.
19. Padhi, H. C., Dhal, B. B., Nanal, V., Prasad, K. G., Tandon, P. N. and Trautmann, D., 1996, Phys. Rev. A54, 2014- 3021.
20. Krause, M. O., 1979, J. Phys. Chem. Ref. Data, 8, 207- 327.
21. Xu, J. Q. and Xu, X. J., 1992, J. Phys. B25, 695.
22. Dhal, B. B., Nandi, T. and Padhi, H. C., 1994, Phys. Rev. A49, 329- 337.
23. Budnar, M., 1984, Nucl. Instr. and Meth. B4, 303- 310.
24. Hippler, R., McGregor, I., Aydinol, M. and Kleinpoppen, H., 1981, Phys. Rev. A23, 1730-1736.
25. Adams, F. and Dams, R., 1970, Applied Gamma Ray Spectrometry, Pergamon Press, Oxford, p8.
26. Polat, R., 1999, Aşkale Çimento Fabrikası Baca Külünün EDXRF tekniği ile Kalitatif ve Kantitatif Analizi, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi, Erzurum, s8-9 (Yayımlanmamış).

27. Agarwal, B. K., 1989, X- Ray Spectroscopy: An Introduction, Springer- Verlag Berlin Heidelberg, New York, USA., p144.
28. Şahin, Y., 1979, Enerji Dispersiv X- Işını Floresans Tekniğinde Matris Şiddetlendirme Etkilerinin Düzeltilmesi Üzerine Bir Model, Doktora Tezi, Erzurum, s10 (yayımlanmamış).
29. Bertin, E. P., 1975, Principles and Practise of X- Ray Spectrimetric Analysis, Plenum Press, New York, (2. Ed)., p252.
30. Dojo, M., 1974, Nucl. Instr. and Meth. 115, 426.
31. Bambynek, W., Crasemann, B., Fink, R. W., Freund, H. U., Mark, H., Swift C. D., Price, R. E. and Rao, P. V., 1972, Rev. Mod. Phys. 44, 4, 716- 813.
32. Van Griekenn, R. E. and Markowicz, A. A., 1993, Handbook of X-Ray Spectrometry: Methods and Techniques, Marcel Dekker, Inc., New York, p225.
33. Durak, R., 1993, XRS'le Yapılan Analizlerde Gözlenen Temel Sayma, Escape, Pile-up, Satellite ve Saçılma Piklerinin İncelenmesi, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Doktora Tezi, Erzurum, s8-9 (yayımlanmamış).
34. Van Griekenn, R. E. and Markowicz, A. A., 1993, Handbook of X-Ray Spectrometry: Methods and Techniques, Marcel Dekker, Inc., New York, p226.
35. Campbell, J. L. and Wang, J. X., 1991, X-Ray Spectrom., 20, 191-197.
36. Wood, R. E., Rao, P. V., Puckett, O. H. and Palms, J. M., 1971, Nucl. Instr. and Meth. 94, 245.
37. Goulding, F. S., 1977, Nucl. Instr. and Meth. 142, 213.
38. Barfoot, K. M., Mitchell, I. V., Avaldi, L. and Eschbach, H. L., 1984, Nucl. Instr. and Meth. B5, 534-544.

39. Cohen, D. D., 1980, Nucl. Instr. and Meth., 178, 481-490.
40. Ertuğrul, M., 1994, Si(Li) detektörü ile karakteristik X- Işınlarının Açılma Dağılımlarının, Polarizasyonlarının, Tesir Kesitlerinin ve Şiddet Oranlarının Ölçülmesi, Doktora Tezi, Erzurum, s19-20 (yayımlanmamış).
41. Şahin, Y., 1999, Çekirdek Fizikinin Esasları, Aktif Yayıncılık, Erzurum, s123.
42. Doğan, O., 1995, Si(Li) detektörü ile Karakteristik X-Işınlarının Floresans Tesir Kesitlerinin ve Boşluk Geçişi İhtimaliyetlerinin Ölçülmesi, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi, Erzurum, s26,31-32 (yayımlanmamış).
43. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 1987, CRC Press, USA, p.E.- 1369-153.
44. Rao, D. V., Cesaro, R. and Giganta, G. E., 1995, Physica Scripta, 51, 252- 256.
45. Mann, K. S., Singh, N., Mittal, R., Sood, B. S. and Allawadhi, K. L., 1994, X- Ray Spectrom, 23, 208- 217.
46. Scofield, J. H., 1973, UCRL Report No: 51231.
47. Rao, P. V., Chen, M. H. and Crasemann, B., 1972, Phys. Rev. A5, 997- 1012.
48. Rao, D. V., Cesaro, R. and Gigante, G. E., 1993, Phys. Rev. A47, 1087- 1092.
49. Hubbel, J. H. and Seltzer, S. M., 1995, U. S. Department of Commerce Technology Administration National Institute of Standards and Technology Physics Laboratory Ionizing Radiation Division Gaithersburg, MD 20899.
50. Scofield, J. H., 1974, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 14, 121- 174.
51. Helmer, R. G. and Lee, M. A., 1980, Nucl. Instr. and Meth. 178, 499-512.

52. Karabulut, A., 1992, Üstüste Binmiş İkili Pik Analizleri İçin Yeni Bir Yaklaşım, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi, s43- 45 (yayımlanmamış).
53. Şahin, Y., Karabulut, A. and Budak, G., 1996, Appl. Spectrosc. Rew. 31, 333-345.
54. Delbrouck-Habaru, J. M, Robaye, G., Weber, G., Roelandts, I. and Idelouali H., 1984, Nucl. Instr. and Meth. B3, 315-318.

