

**GEÇİŞ METALLERİNİN VALENS ELEKTRON YAPILARININ
X-IŞINI ŞİDDET ORANLARI VASITASIYLA BELİRLENMESİ,
X-IŞINI ŞİDDET ORANLARININ TAVLAMA SICAKLIĞINA BAĞLI
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ, ALAŞIMLAR İÇİN ETKİN
ATOM NUMARALARI ve ELEKTRON YOĞUNLUKLARININ TAYİNİ**

İbrahim HAN

Doktora Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Prof. Dr. Lütfü DEMİR

2009

Her Hakkı Saklıdır

**ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA TEZİ

**GEÇİŞ METALLERİNİN VALENS ELEKTRON YAPILARININ
X-IŞINI ŞİDDET ORANLARI VASITASIYLA BELİRLENMESİ,
X-IŞINI ŞİDDET ORANLARININ TAVLAMA SICAKLIĞA
BAĞLI DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ,
ALAŞIMLAR İÇİN ETKİN ATOM NUMARALARI
ve ELEKTRON YOĞUNLUKLARININ TAYİNİ**

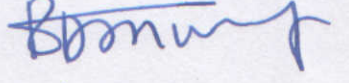
İbrahim HAN

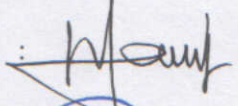
FİZİK ANABİLİM DALI

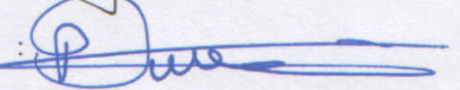
**ERZURUM
2009**

Her Hakkı Saklıdır

Prof. Dr. Lütfü DEMİR danışmanlığında, İbrahim HAN tarafından hazırlanan bu çalışma 05 / 05 / 2009 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından, Fizik Anabilim Dalı'nda Doktora Tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: PROF. DR. RECEP TAPRAMAZ İmza : 

Üye : PROF. DR. YAKUP KURUCU İmza : 

Üye : PROF. DR. LÜTFÜ DEMİR İmza : 

Üye : PROF. DR. ÜMİT TURGUT İmza : 

Üye : DOÇ. DR. ELİF BANDAŞ İmza : 

Yukarıdaki sonucu onaylarım

Prof. Dr. Ömer AKBULUT
Enstitü Müdürü

ÖZET

Doktora Tezi

GEÇİŞ METALLERİNİN VALENS ELEKTRON YAPILARININ X-IŞINI ŞİDDET ORANLARI VASITASIYLA BELİRLENMESİ, X-IŞINI ŞİDDET ORANLARININ TAVLAMA SICAKLIĞINA BAĞLI DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ, ALAŞIMLAR İÇİN ETKİN ATOM NUMARALARI ve ELEKTRON YOĞUNLUKLARININ TAYİNİ

İbrahim HAN

Atatürk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Lütfü DEMİR

Bu çalışma üç kısımdan oluşmaktadır. Bu kısımlardan ilki 3d geçiş metali alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı ölçümleri kullanılarak geçiş metalleri için valens elektron konfigürasyonlarının belirlenmesi ile ilgilidir. Valens elektron yerleşimlerini elde etmek amacıyla, ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları multikonfigürasyon Dirac-Fock hesaplamalarının sonuçları ile karşılaştırıldı. Alaşımlarda 3d geçiş metallerinin valens elektron yerleşimleri saf metallere göre farklılıklar göstermektedir. Bu farklılıklar alaşımlarda yeniden düzenlenme (delokalizasyon) ve/veya yük transfer olgularından kaynaklanmaktadır. Aynı grubun bazı alaşımları için delokalizasyon ve yük transferi diğerlerinden daha büyük ve zıt yönlüdür, bu yüzden bu alaşımlarda elektron yerleşimi farklıdır.

İkinci kısımda, 3d geçiş metallerinin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları üzerine tavlama sıcaklığının etkisi araştırıldı. Numuneler düzenli adımlarla artan sıcaklıklarda tavlandı ve her bir tavlama işleminden sonra numunelerin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ölçüldü. Bu ölçümlerin sonuçları $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının, tavlama sıcaklığına da bağlı olduğunu göstermiştir.

Bu çalışmanın üçüncü kısmında; çeşitli foton enerjileri için saf 3d geçiş metalleri ve onların farklı kompozisyonlarındaki alaşımlarının toplam kütle soğurma katsayıları ölçüldü ve teorik kütle soğurma katsayıları karışım kurallı dikkate alınarak da hesaplandı. Ardından toplam atomik ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunlukları bu kütle soğurma katsayıları kullanılarak deneysel ve teorik olarak belirlendi. Bu parametreler için alaşım kompozisyonlarına ve foton enerjilerine bağlı olarak farklı değerler elde edildi.

2009, 178 sayfa

Anahtar Kelimeler: $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı, valens elektron konfigürasyonu, alaşım, kütle soğurma katsayısı, atomik tesir kesiti, elektronik tesir kesiti, etkin atom numarası, elektron yoğunluğu.

ABSTRACT

Ph. D. Thesis

DETERMINATION of VALENCE ELECTRON CONFIGURATION of TRANSITION METALS with X-RAY INTENSITY RATIOS, INVESTIGATION of BEHAVIORS of X-RAY INTENSITY RATIOS DEPENDED on ANNEALING TEMPERATURE and DESIGNATION of EFFECTIVE ATOMIC NUMBER and ELECTRON DENSITIES for ALLOYS

İbrahim HAN

Atatürk University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Lütfü DEMİR

This thesis consists of three parts. First section discusses the determination of valance electronic configurations for 3d transition metals in alloys by $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratio measurements. Measured $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios are compared to the results of multiconfiguration Dirac–Fock calculations to obtain valance electronic configurations. Valance electronic configurations of 3d transition metals in alloys show significant differences from those of pure metals. These differences arise from delocalization and/or charge transfer phenomena in alloys. For some alloys, delocalization and charge transfer phenomena are opposite directions and larger than the others in the same group, therefore valance electronic configurations of these alloys are different.

In second part, the effects of annealing temperature on $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios of 3d transition metals were investigated. The samples are annealed at definite temperatures step determined systematically and after each annealing process, $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios for samples are measured. Results of these measurements show that $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios of 3d transition metals are dependent on the annealing temperature, too.

In third part of this thesis, the total mass attenuation coefficients for pure 3d transition metals and their alloys at different compositions had been measured and theoretically estimated using mixture rule for various photon energies. Later on, total atomic and electronic cross-sections, effective atomic number and electron densities for alloys are determined experimentally and theoretically using these mass attenuation coefficients. In values of these parameters, differences are observed depended on alloy compositions and photon energies.

2009, 178 Pages

Keywords: $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratio, 3d transition metal, valance electronic structure, alloy, mass attenuation coefficient, atomic cross section, electronic cross section, effective atomic number, electron density.

TEŞEKKÜR

Doktora tezi olarak sunduğum bu çalışma Atatürk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde yapılmıştır. Bu çalışmanın planlanması ve yürütülmesinde tecrübelerini ve kıymetli bilgilerini esirgemeyen çok değerli hocam Sayın Prof. Dr. Lütfü DEMİR'e en içten şükranlarımı arz ederim.

Çalışmalarım sırasında yapmış oldukları katkılardan dolayı kıymetli hocalarım Sayın Prof. Dr. Yakup KURUCU ve Sayın Prof. Dr. Ümit TURGUT'a teşekkür ederim.

Bu çalışmada hazırlanan bazı numuneler için; Sayın Prof. Dr. Yakup KURUCU'nun yöneticiliğini yaptığı Sayın Arş. Gör. Sevil PORİKLİ'nin araştırmacı olduğu 106T045 numaralı TÜBİTAK projesi kapsamında alınan kimyasallardan bazıları kullanılmıştır.

Fen Fakültesi Fizik Bölüm Başkanı Sayın Prof. Dr. Yusuf ŞAHİN'e ve tüm Fizik Bölümü elemanlarına sağlamış oldukları kolaylıklardan dolayı teşekkür ederim.

Şahsıma tahsis etmiş olduğu doktora bursu dolayısıyla TÜBİTAK'a teşekkür ederim.

Teşvik ve desteklerinden dolayı değerli aileme teşekkürlerimi sunarım.

İbrahim HAN

Nisan 2009

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	14
2.1. Geçiş Metallerinin Özellikleri.....	14
2.2. Alaşım.....	16
2.3. X-Işınları	18
2.3.1. Sürekli X-Işınları.....	20
2.3.2. Karakteristik X-Işınları.....	22
2.4. Moseley Kanunu.....	25
2.5. Tesir Kesiti	26
2.6. Floresans Verim, Auger Olayı ve Coster-Kronig Geçişleri.....	29
2.7. Elektromanyetik Radyasyonun Soğurulması	32
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	35
3.1. X-Işını Floresans Tekniği.....	35
3.2. Si(Li) Dedektörün Çalışma Prensibi.....	36
3.3. Sayma Sistemi.....	41
3.3.1. Yüksek Voltaj Kaynağı.....	42
3.3.2. Ön Yükseltici.....	42
3.3.3. Yükseltici.....	43
3.3.4. Analog Sayısal Dönüştürücü (ADC).....	43
3.3.5. Çok Kanallı Analizör (MCA).....	43
3.4. Ölçme Sistemleri ve Deney Geometrisi.....	44

3.5. Numunelerin Hazırlanması.....	45
3.6. X-Işını Şiddet Oranlarının Ölçülmesi.....	45
3.7. Kütle Soğurma Katsayılarının Ölçülmesi.....	47
3.8. Etkin Atom ve Elektron Sayılarının Belirlenmesi.....	49
4. ARAŞTIRMA BULGULARI ve TARTIŞMA.....	50
4.1. Fe_xNi_{1-x} Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	53
4.2. Ni_xCr_{1-x} Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	65
4.3. Fe_xCr_{1-x} Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	76
4.4. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	87
4.5. Ti_xNi_{1-x} Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	98
4.6. Co_xCu_{1-x} Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	109
4.7. Ti_xCo_{1-x} Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	120
4.8. $K\beta/K\alpha$ X-ışını Şiddet Oranlarının Tavlama Sıcaklığına Bağlı Davranışları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	131
4.9. Kütle Soğurma Katsayıları, Etkin Atom Numaraları ve Elektron Yoğunlukları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma.....	143
5. SONUÇ.....	165
KAYNAKLAR.....	170
ÖZGEÇMİŞ.....	179

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

α	İnce Yapı Sabiti
σ	Tesir Kesiti
c	Işık Hızı
$d\sigma/d\Omega$	Diferansiyel Tesir Kesiti
$d\sigma_{KN}(\theta)/d\Omega$	Klein-Nishina Tesir Kesiti
Dn_{3d}	3d Elektron Sayısındaki Değişim
e	Elektron Yüğü
$EDXRF$	Enerji Ayrımlı X-ışını Floresans Spektrometresi
h	Plank Sabiti
$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	Düzeltilmiş K X-ışını Şiddet Oranı
MCDF	Multi Configuration Dirac Fock
m_o	Elektronun Durgun Kütlesi
N	Avagadro Sayısı
n_{3d}	3d Elektron Sayısı
$n_{4s,4p}$	4s,4p Elektronlarının Toplam Sayısı
N_e	Elektron Yoğunluğu/Etkin Elektron Sayısı
$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	Düzeltilmemiş K X-ışını Şiddet Oranı
$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	Normalize Edilmiş K X-ışını Şiddet Oranı
$S(x,Z)$	İnkoherent Saçılma Faktörü
t	Numune Kalınlığı (gr/cm ²)
Tn_{3d}	Alaşımdaki 3d Elektronlarının Toplam Sayısı
$Tn_{4s,4p}$	Alaşımdaki 4s,4p Elektronlarının Toplam Sayısı
XRF	X-ışını Floresans
Z_e	Etkin Atom Numarası
β	Öz-Soğurma Düzeltme Parametresi
μ_e	Numuneden Yayımlanan Fotonlar İçin Kütle Azaltma Katsayısı
μ_i	Numuneye Gelen Fotonlar İçin Kütle Azaltma Katsayısı
μ_m	Kütle Soğurma Katsayısı
σ_e	Toplam Elektron Tesir Kesiti
σ_t	Toplam Atomik Tesir Kesiti
ω	Floresans Verim

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1.	Periyodik Tablo.....	15
Şekil 2.2.	X-ışını polarizasyonunu gösteren Barkla deneyi.....	19
Şekil 2.3.	Sürekli X-ışını oluşum mekanizması.....	21
Şekil 2.4.	Uyarma ve yayınlanma modeli.....	26
Şekil 2.5.	Bir atomda ilgili elektron geçişleri sonucu yayımlanan karakteristik K tabakası X-ışınları.....	24
Şekil 2.6.	Bazı spektral çizgiler için Moseley çizimi.....	25
Şekil 2.7.	Tesir kesiti ile gelen demetin şiddeti arasındaki ilişki ve tesir kesitinin geometrik yorumu.....	27
Şekil 2.8.	Floresans ve Auger olayları.....	32
Şekil 2.9.	X-ışınlarının bir madde ile etkileşmesi sırasında meydana gelebilecek temel olaylar.....	33
Şekil 2.10.	Samaryumun 0-25 keV arasında toplam kütle soğurma katsayılarının gösterimi.....	34
Şekil 3.1.	XRF tekniği ve tipik XRF analiz düzeneği.....	36
Şekil 3.2.	Bir Si(Li) katıhal dedektörünün şematik gösterimi.....	38
Şekil 3.3.	Si(Li) dedektörde X-ışını dedeksiyon işlemi.....	39
Şekil 3.4.	Sayma sistemi.....	42
Şekil 3.5.	Karakteristik K X-ışınlarını ölçmek için kullanılan deney geometrisi.....	44
Şekil 3.6.	Kütle soğurma katsayılarını belirlemek için kullanılan deney geometrisi.....	44
Şekil 4.1.	K X-ışını şiddet oranlarını hesaplamak için $I_0 G \varepsilon$ değerleri.....	52
Şekil 4.1.1.	Fe, Ni ve Fe_xNi_{1-x} alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.....	53
Şekil 4.1.2.	Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Fe ve Ni'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.....	54
Şekil 4.1.3.	Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Fe ve Ni için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.....	58
Şekil 4.1.4.	Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Fe ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.....	59
Şekil 4.1.5.	Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Fe ve Ni'nin 3d elektron sayılarındaki	

değişimlerin (pür metallere kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi....	60
Şekil 4.2.1. Ni, Cr ve Ni_xCr_{1-x} alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.....	65
Şekil 4.2.2. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında Ni ve Cr'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.....	66
Şekil 4.2.3. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında Ni ve Cr için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.....	70
Şekil 4.2.4. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında Ni ve Cr için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.....	71
Şekil 4.2.5. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında Ni ve Cr'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metallere kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi....	72
Şekil 4.3.1. Fe, Cr ve Fe_xCr_{1-x} alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.....	76
Şekil 4.3.2. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında Fe ve Cr'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.....	77
Şekil 4.3.3. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında Fe ve Cr için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.....	81
Şekil 4.3.4. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında Fe ve Cr için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.....	82
Şekil 4.3.5. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında Fe ve Cr'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metallere kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi....	83
Şekil 4.4.1. Fe, Cr, Ni ve $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.....	87
Şekil 4.4.2. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında ve Fe Ni'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.....	88
Şekil 4.4.3. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.....	92

Şekil 4.4.4. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.....	93
Şekil 4.4.5. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metallere kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.....	94
Şekil 4.5.1. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.....	98
Şekil 4.5.2. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Ni'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.....	99
Şekil 4.5.3. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Ni için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.....	103
Şekil 4.5.4. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.....	104
Şekil 4.5.5. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Ni'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metallere kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi....	105
Şekil 4.6.1. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.....	109
Şekil 4.6.2. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu'nun K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.....	110
Şekil 4.6.3. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.....	114
Şekil 4.6.4. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.....	115
Şekil 4.6.5. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu'nun 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metallere kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi....	116
Şekil 4.7.1. $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.....	120
Şekil 4.7.2. $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Co'nun K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına	

bağlı rölatif değişimleri.....	121
Şekil 4.7.3. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında Ti ve Co için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.....	125
Şekil 4.7.4. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında Ti ve Co için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.....	126
Şekil 4.7.5. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında Ti ve Co'nun 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metallere kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi....	127
Şekil 4.8.1. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimi.....	134
Şekil 4.8.2. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimi.....	137
Şekil 4.8.3. Co_xCu_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimi.....	141
Şekil 4.9.1. $Fe_{0,4}Ni_{0,6}$ alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	144
Şekil 4.9.2. $Fe_{0,4}Ni_{0,6}$ alaşımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	146
Şekil 4.9.3. $Fe_{0,4}Ni_{0,6}$ alaşımı için etkin N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.....	147
Şekil 4.9.4. $Fe_{0,4}Ni_{0,6}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	148
Şekil 4.9.5. $Ni_{0,5}Cr_{0,5}$ alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	149
Şekil 4.9.6. $Ni_{0,5}Cr_{0,5}$ alaşımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	151
Şekil 4.9.7. $Ni_{0,5}Cr_{0,5}$ alaşımı için etkin N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.....	152
Şekil 4.9.8. $Ni_{0,5}Cr_{0,5}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	153
Şekil 4.9.9. $Fe_{0,5}Cr_{0,2}Ni_{0,3}$ alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	154
Şekil 4.9.10. $Fe_{0,5}Cr_{0,2}Ni_{0,3}$ alaşımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	156
Şekil 4.9.11. $Fe_{0,5}Cr_{0,2}Ni_{0,3}$ alaşımı için etkin N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.....	157

Şekil 4.9.12. $\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	158
Şekil 4.9.13. $\text{Ti}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$ alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	159
Şekil 4.9.14. $\text{Ti}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$ alaşımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	161
Şekil 4.9.15. $\text{Ti}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$ alaşımı için etkin N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.....	162
Şekil 4.9.16. $\text{Ti}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.....	163

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. Geçiş metallerinin kullanıldığı bazı alaşımların adları ve kullanıldıkları yerler.....	17
Çizelge 2. 2. X-ışını diyagram çizgilerinin Siegbahn ve IUPAC gösterimleri.....	24
Çizelge 4.1.1. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.....	55
Çizelge 4.1.2. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları.....	56
Çizelge 4.1.3. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.....	57
Çizelge 4.2.1. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.....	67
Çizelge 4.2.2. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları.....	68
Çizelge 4.2.3. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.....	69
Çizelge 4.3.1. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.....	78
Çizelge 4.3.2. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları...	79
Çizelge 4.3.3. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.....	80
Çizelge 4.4.1. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.....	89
Çizelge 4.4.2. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları.....	90
Çizelge 4.4.3. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.....	91
Çizelge 4.5.1. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.....	100
Çizelge 4.5.2. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları.....	101
Çizelge 4.5.3. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.....	102
Çizelge 4.6.1. Co_xCu_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.....	111
Çizelge 4.6.2. Co_xCu_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları.....	112
Çizelge 4.6.3. Co_xCu_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.....	113
Çizelge 4.7.1. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi	

enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.....	122
Çizelge 4.7.2. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları.....	123
Çizelge 4.7.3. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.....	124
Çizelge 4.8.1. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının belirli tavlama sıcaklıklarından sonraki değerleri.....	133
Çizelge 4.8.2. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının belirli tavlama sıcaklıklarından sonraki değerleri.....	136
Çizelge 4.8.3. Co_xCu_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının belirli tavlama sıcaklıklarından sonraki değerleri.....	139
Çizelge 4.9.1. Fe, Ni ve Fe_xNi_{1-x} alaşımları için kütle soğurma katsayıları...	144
Çizelge 4.9.2. Fe_xNi_{1-x} alaşımları için atomik ve elektron tesir kesitleri.....	145
Çizelge 4.9.3. Fe_xNi_{1-x} alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları.....	147
Çizelge 4.9.4. Ni, Cr ve Ni_xCr_{1-x} alaşımları için kütle soğurma katsayıları...	149
Çizelge 4.9.5. Ni_xCr_{1-x} alaşımları için atomik ve elektron tesir kesitleri.....	150
Çizelge 4.9.6. Ni_xCr_{1-x} alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları.....	152
Çizelge 4.9.7. Fe, Cr, Ni ve $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımları için kütle soğurma katsayıları.....	154
Çizelge 4.9.8. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımları için atomik ve elektron tesir kesitleri.....	155
Çizelge 4.9.9. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları	157
Çizelge 4.9.10. Ti, Ni ve Ti_xNi_{1-x} alaşımları için kütle soğurma katsayıları...	159
Çizelge 4.9.11. Ti_xNi_{1-x} alaşımları için atomik ve elektron tesir kesitleri.....	160
Çizelge 4.9.12. Ti_xNi_{1-x} alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları	162

1. GİRİŞ

X-ışını soğurma ve yayınlanma süreçleri, çok çeşitli materyalin incelenmesinde, birçok analitik teknikte kullanılmaktadırlar. Son zamanlarda enerji ayrımlı X-ışını floresans (EDXRF) analizlerinde; bu metodun eşzamanlı multielement ölçüm kabiliyeti ve karakteristik X-ışınlarının yayınlanma ve soğurulmasını numunedeki elementlerin fiziksel ve kimyasal şartlarından bağımsız olarak basitçe tahmin etmesi sayesinde artış olmuştur. Bir atomun K tabakası elektronları γ -ışınları veya diğer enerjik parçacıklarla yerinden koparıldığında; atomun K X-ışınlı yayınlanma çizgilerinin iki ana bileşeni $K\alpha$ ve $K\beta$ X-ışını çizgileridir. X-ışını spektroskopinin ilk günlerinden beri elementler için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları deneysel olarak çalışılmıştır. Çünkü bu nicelik tatmin edici bir doğrulukla kolayca ölçülebilir. K X-ışınlarının rölatif şiddetlerinin doğru bir ölçümü atomik iç tabaka iyonizasyon süreçlerinin anlaşılması için ve mevcut teorileri test etmek için önemlidir. Özellikle Si(Li) gibi katıhal X-ışını detektörlerindeki son ilerlemelerle birlikte radyoaktif bozunmayı, foton ve parçacık uyarımını takiben yayınlanan K X-ışınları için $K\beta/K\alpha$ şiddet oranlarıyla ilgili çeşitli deneysel ve teorik veriler rapor edilmiştir (Arndt *et al.* 1982; Brunner *et al.* 1982; Mukoyama *et al.* 1986, 2000; Jankowski and Polasik 1989; Raghavaiah *et al.* 1992; Küçükönder *et al.* 1992, 1993, 1999, 2003, 2006; Büyükkasap 1993; Sarode 1993; Padhi *et al.* 1993; Dhall and Padhi 1994; Chang *et al.* 1994; Kawai *et al.* 1994, 2005; Söğüt *et al.* 1995, 2001, 2002; Rebohle *et al.* 1996; Hölzer *et al.* 1997; Be *et al.* 1998; Hajivaliei *et al.* 2000; Sawhney *et al.* 2000; Rao *et al.* 2001; Campbell 2001; Ertuğrul *et al.* 2001, Ertuğrul and Şimşek 2002; Castellano *et al.* 2002, Carreras *et al.* 2003; Deluigi *et al.* 2006; Ertuğral *et al.* 2007; Çevik *et al.* 2007; Han *et al.* 2007, 2008; Porikli *et al.* 2008; Gürol 2008). Bu çalışmalardan çeşitli element ve bileşiklerde farklı uyarma şekillerine

(radyoizotop kaynak, sinkrotron, X-ışını tüpü, elektron yakalama, parçacık uyarımı vb.) ve farklı uyarma enerjilerine bağlı olarak şiddet oranı, şiddet oranları üzerine kimyasal etki, oksidasyon sayısı, yük transfer etkisi gibi konularda farklı dedektör ve sayma sistemleri kullanılarak deneysel olarak yapılmış olanlar çoğunluktadır. Ayrıca şiddet oranlarını hesaplamak için multikonfigürasyon Dirac Fock (MCDF; Multi Configuration Dirac Fock) metodunun çeşitli versiyonlarının uygulandığı teorik çalışmalarda literatürde mevcuttur (Grant *et al.* 1974, 1980, 1984; Grant and McKenzie 1980; McKenzie *et al.* 1980; Hata and Grant 1983; Dyall *et al.* 1989; Jankowski and Polasik 1989).

Arndt *et al.* (1982) 3d elementlerinin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının uyarma biçimine (fotoiyonizasyon ve elektron yakalama) bağlı olarak değişimini incelediler. Mukoyama *et al.* (1986) bazı Mn ve Cr bileşikleri için şiddet oranları üzerine kimyasal etkileri hem teorik hem de deneysel olarak çalıştılar. Bu çalışmada K X-ışını spektrumlarını yüksek enerji rezolüsyonuna sahip çift kristalli spektrometreyle ölçtüler, teorik hesaplamaları ise kesikli-değişim $X\alpha$ (discrete-variational $X\alpha$: DV- $X\alpha$) moleküler orbital metodunu kullanarak yaptılar ve X-ışını şiddetlerini moleküler dalga fonksiyonlarını kullanan dipol yaklaşımında değerlendirdiler. Daha sonra, Mukoyama *et al.* (2000) yine DV- $X\alpha$ moleküler orbital metodunu kullanarak bazı 3d element bileşikleri için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını hesapladılar. V ve Cr bileşikleri için hesapladıkları sonuçların 3d elektronlarının efektif sayısı ile güçlü bir şekilde ilişkili olduklarını ve $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının lineer bir fonksiyonu olarak verilebileceğini belirttiler. Fakat doğrunun eğiminin farklı kristal simetrileri için farklı olduğunu rapor ettiler. Jankowski and Polasik (1989) Ti, Cr, Fe, Ni, Cu, Zn ve Ge için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını MCDF metodunun farklı versiyonlarını uygulayarak hesapladılar.

Dhall and Padhi (1994) katıhal etkilerini incelemek için Mn, Ni, Cu, Ga, Ge, Ag, Cd, Sn ve Sb elementlerinin; saf element, alaşım ve bileşik formlarında rölatif K X-ışını şiddetlerinin sistematik bir çalışmasını yaptılar. K tabakasındaki boşlukları oluşturmak için Am-241 radyoaktif kaynak ve X-ışınlarını saymak için bir Si(Li) dedektör kullandılar. $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları üzerine alaşım etkisinin ihmal edilebilir bir etki olduğunu rapor ettiler. Chang *et al.* (1994) bazı basit V bileşiklerinde (VO, V₂O₃, VO₂, V₆O₁₃, V₂O₅, VN ve VC) V için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını bir Si(Li) dedektör kullanarak ölçtüler. Güçlü kovalent bileşiklerin genellikle büyük $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarına sahip olduklarını ve bunun metal ile ligandlar arasındaki bant karışımlarından kaynaklanan non-diagram çizgiler dolayısıyla olabileceğini rapor ettiler. Kawai *et al.* (1994, 2005) Fe, FeO, Fe₂O₃, Fe₃O₄, K₃[Fe(CN)₆]·3H₂O ve K₄[Fe(CN)₆]’de yüksek rezolüsyonlu Fe $K\alpha$ X-ışını floresans spektrumlarını daha sonra bazı halidsler (NiF₂, K₂NiF₆, NiCl₂, NiBr₂), kompleks bileşikler ve metallerde Ni $K\alpha$ spektrumlarını iki farklı çift kristalli X-ışını floresans spektrometre ile çalıştılar. Bu çalışmalarda kimyasal durumdaki değişim nedeniyle meydana gelen pik kayması ve çizgi genişliği değişimlerini rapor ettiler.

3d geçiş metalleri modern teknolojinin gelişmesinde önemli bir rol oynamaktadır ve onların valens elektron yapılarının bilinmesi fiziksel özelliklerinin anlaşılması için çok önemlidir. 3d geçiş elementlerinin elektronik yapıları ile ilgili bazı araştırmalar yapılmasına karşın bu elementlerin tümünün valens elektron yapısını anlamak için yapılmış sistematik ve detaylı bir çalışmaya rastlanılmamıştır. 3d geçiş metalleri sahip oldukları çok çeşitli fiziksel özellikleri nedeniyle bu metaller, bunlardan yapılan bileşikler ve alaşımlar çok yaygın bir kullanım alanına sahiptirler. Örneğin; Prinz 1998’de *Science* dergisindeki makalesinde magnetoelektronik hızla ilerlemesi

nedeniyle, $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarının teknolojik açıdan çok önemli materyaller olarak ortaya çıktığını vurgulamıştır. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları sahip oldukları düşük direnç, yüksek geçirgenlik gibi farklı özellikleri nedeniyle manyetik kayıt cihazlarında, sensörlerde ve manyetik hafıza kartlarında kullanılmaktadırlar (Basa *et al.* 2002). Bu metallerden yapılmış bileşik ve alaşımların kullanıldığı çeşitli uygulamalarda bunların valens elektron yapılarının bilinmesi gerekmektedir. 3d geçiş metallerinde valens elektron yapısını belirlemek için çeşitli deneysel araştırmalar ve teorik hesaplamalar yapılmıştır (Berggren *et al.* 1973; Salem *et al.* 1973, 1974; Paakkari *et al.* 1975; Paakkari and Halonen 1978; Manninen and Paakkari 1976; Lasser *et al.* 1980; Franciosi 1982; Bauer *et al.* 1984; Polasik 1998). Papaconstantopoulos (1986) “Handbook of band structure of elemental solids” adlı kitabında APW bant yapısı hesaplaması (Augmented Plane-Wave (APW) Band Structure Calculation) adlı yöntemle geçiş metalleri için valens elektron yapılarını teorik olarak belirlemiştir. Berggren *et al.* (1973)’nın Compton profil çalışmaları, Ti için $3d^34s^1$ şeklinde bir valens elektron yapısı sunmuştur ki bu Papaconstantopoulos (1986)’un APW bant yapısı hesaplamalarının öngördüğü ile aynıdır. Bununla birlikte; Manninen and Paakkari (1976) ve Lasser *et al.* (1980) tarafından yapılan sonraki Compton profil çalışmalarında APW teorisinin öngördüğünün aksine $3d^24s^2$ şeklinde farklı bir valens elektron yapısı önerilmiştir. Franciosi *et al.* (1982) nikel silislerin (Ni_2Si , NiSi ve NiSi_2) elektron yapılarını sinkrotron radyasyon foto emisyon ile çalıştılar. Paakkari *et al.* (1975)’nin V için Compton profil çalışması $3d^34s^2$ şeklinde Papaconstantopoulos (1986)’un APW teorisinin verdiği yapı ile uyuşmayan bir valens elektron yapısı sunmuştur. Ayrıca Cr’nin valens elektron yapısı için de benzer uyuşmazlıklar söz konusudur. Paakkari *et al.* (1975) ile Bauer *et al.* (1984)’nin Cr için Compton profil çalışmaları $3d^44s^2$ şeklinde APW teori ile verilenden farklı bir valens elektron yapısı önermiştir.

3d geiş metali bileşiklerinde ve alaşımlarında, bileşik veya alaşımı oluşturan metaller için belirlenecek $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ilgilenilen sistemlerde 3d geiş metallerinin valens elektron konfigürasyonlarının deęişimi hakkında nicel bilgi sağlayabilir. Başka bir deęişle $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları 3d geiş metallerinin valens elektron yapılarını araştırmak için fiziksel bir parametre olarak kullanılabilir. Çünkü 3d geiş metallerinde valens elektron yapısında meydana gelen bir deęişikliğe baęlı olarak $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı da deęişecektir. $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının 3d metallerinin valens elektron yapılarına kuvvetlice baęlı olduęu rapor edilmiştir (Polasik 1998). Polasik (1998) 3d geiş metallerinde $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının valens elektronlarının konfigürasyonuna baęımlılıęını güvenilir olarak açıklamak için geiş etkileşmelerini ve kuantum elektrodinamik düzeltmeleri içeren çok geniř MCDF hesaplamaları yapmıştır. Polasik (1998), inceledięi tüm atomlarda $3d^{m-2}4s^2$ konfigürasyon tipi için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını; $3d^{m-1}4s^1$ için olan orandan daha büyük, $3d^m$ tipi için ise daha da küçük olarak elde etmiştir. Her bir elektron konfigürasyon tipi için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının atom numarası ile açıkça arttıęı ve $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının valens elektron konfigürasyonundaki deęişime çok duyarlı olduęu bulunmuştur.

Raj *et al.* (1998, 1999a, 1999b, 1999c, 2000, 2001) Ti, V, Cr ve Fe'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını saf metallerde, TiC, VC, CrB, CrB₂ ve FeB bileşiklerinde 200 mCi Am-241 nokta kaynaktan yayımlanan 59,54 keV γ -ışınlarını uyarıcı olarak kullanarak ölçtüler. Bu çalışmada elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının MCDF hesaplamaları ile kıyaslaması TiC'deki Ti ve CrB ile CrB₂'deki Cr'nin 3d elektron popölasyonunun saf metallerdeki deęerlerinden önemli miktarda farklı olduęunu gösterdi. VC'deki V ve FeB'deki Fe'nin 3d elektron konfigürasyonunda ise herhangi bir deęişim

gözlenmemiştir (1998). Çeşitli Si bileşiklerinde (Ni_2Si , NiSi , Ni_2Si_3 , NiSi_2 , Cu_2Si , CuSi , ve CuSi_2) Ni ve Cu'nun $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını ölçtüler ve Ni için şiddet oranlarının MCDF hesaplamalarıyla kıyaslanmasından hareketle Si konsantrasyonunun artışıyla 3d elektron popülasyonunun azaldığını belirttiler (1999a). Silisli bileşiklerde yük transfer ve yeniden düzenlenme (delocalization) fenomenlerini anlamak için saf metallerde ve V_3Si , Cr_3Si ve FeSi 'de V, Cr ve Fe'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını ölçtüler ve sonuçlarını MCDF hesaplamalarıyla karşılaştırdılar (1999b). Saf metaller ile onların disilisli bileşiklerinde Ti, V, Cr ve Co için (1999c) ve CrS , MnSe , MnS , CoS 'de Cr, Mn ve Co için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını ölçmüşlerdir. Tüm bu metallerin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının bileşiklerde, saf hallerindeki değerlerden daha küçük olduğunu belirtmişlerdir (2000). Mn, MnO_2 , LaMnO_3 ve $\text{La}_{0,7}\text{B}_{0,3}\text{MnO}_3$ (B=Ca, Sr ve Ce) de Mn'nin rölatif K X-ışını şiddetlerini ölçtüler ve bileşiklerde ölçülen sonuçların saf Mn'nin sonuçlarından anlamlı bir şekilde saptığını vurguladılar (2001). Raj *et al.* (1999d) farklı kompozisyonlarda hazırlanmış $\text{V}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x = 0,00; 0,10; 0,20; 0,35; 0,50; 0,75; 1,00$) alaşımlarında V ve Ni'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını ölçmüşlerdir. V ve Ni için alaşım kompozisyonlarında bulunan deneysel $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları saf metallerdekinden farklı olarak bulunmuştur. $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarındaki bu sapma çeşitli MCDF hesaplama sonuçları kullanılarak değerlendirilmiştir. Çalışmada V ve Ni için 3d elektronlarının sayısındaki rölatif değişimin, bu metallerin kendi konsantrasyonlarının bir fonksiyonu olarak düşünüldüğünde çok benzer olmaları vurgulanmıştır. V'nin 3d elektronlarının sayısındaki değişimin Ni'nin 3d elektronlarının sayısı ile kıyaslanması; $\text{V}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında V ve Ni'nin valens elektron konfigürasyonunda gözlenen değişimin, 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektronların yeniden düzenlenmesi gibi prosesler dikkate alınmadığında, V ve Ni arasında meydana gelen 3d elektronu transferi ile

açıklanabileceğini göstermiştir. Çalışmada 3d elektronlarının transferinin yüksek konsantrasyonlu bir elementin atomlarından düşük konsantrasyonlu bir elementin atomlarına (V veya Ni) doğru olduğunu tahmin etmenin çok ilginç olduğu belirtilmiştir. Raj *et al.* (2000, 2001, 2002) önce Fe ve Ni için, daha sonra Ti'den Cu'ya kadar olan 3d geçiş metalleri için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını ölçtüler ve ölçtükleri şiddet oranlarını MCDF hesaplamalarının sonuçlarıyla kıyaslayarak bu metallerin valens elektron yapılarını belirlediler.

Pawłowski *et al.* (2002) $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını Ti, Cr, Fe ve Co için saf metallerde ve $\text{Cr}_{0,26}\text{Fe}_{0,74}$, $\text{Cr}_{0,80}\text{Co}_{0,20}$ ve $\text{Ti}_{0,80}\text{Fe}_{0,20}$ alaşımlarında ölçtüler. Ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ve bu metallerin çeşitli elektron konfigürasyonları için yapılan MCDF hesaplamalarından hareketle Ti, Cr, Fe ve Co'nun valens elektron yapılarını elde ettiler. Ti, Cr, Fe ve Co saf metalleri için bulunan 3d elektron popülasyonlarının, Papaconstantopoulos (1986)'un bant yapısı hesaplamalarının sonuçları ile uyumlu olduğunu belirttiler. Bu çalışmada $\text{Cr}_{0,26}\text{Fe}_{0,74}$ 'deki Cr hariç alaşımlarda saf metallere kıyasla Ti, Cr ve Fe'nin 3d elektron popülasyonlarında kayda değer bir artış olduğu gözlenmiştir. $\text{Cr}_{0,26}\text{Fe}_{0,74}$ 'de Cr'nin ortalama 3d elektron popülasyonunun saf Cr'ye kıyasla bir miktar daha küçük olduğu bulunmuştur. Pawłowski *et al.* (2002)'a göre; alaşımlarda Ti, Cr, Fe ve Co'nun valens elektron yapılarında gözlenen değişikliği uygun bir şekilde açıklayabilmek için özgün metal atomlarının 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektronların yeniden düzenlenmelerini dikkate almak gerekmektedir. Bir elementten diğer bir elemente 3d elektronlarının transferi ise ihmal edilebilir. Basa *et al.* (2002) $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımının neden diğer Fe ve Ni alaşımlardan farklı özelliklere sahip olduğunu anlamak için Fe ve Ni'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını saf metallerde ve benzer kristal yapılar gösteren $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x = 0,20; 0,50; 0,58$) alaşımlarında ölçmüşlerdir. Bu çalışmada $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ 'nin valens elektron

yapısının diğer alaşımlardan tamamen farklı olduğu belirlenmiş ve onun özel manyetik özelliklerinin bu farklılıktan kaynaklandığı vurgulanmıştır. Bhuinya and Padhi (1992, 1993) Ti, Cr ve Ni'in $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını Ti_xNi_{1-x} ($x=1,0; 0,74; 0,55; 0,35; 0,0$) ve Cr_xNi_{1-x} ($x=1,0; 0,58; 0,20; 0,0$) alaşımlarında 59,54 keV γ -ışınlarını ve 4,07 MeV proton iyonlarını kullanarak ölçtüler. $Cr_{0,20}Ni_{0,80}$ alaşımında Cr'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranında saf halindeki değerine kıyasla yaklaşık %18 oranında bir artış buldular. Benzer durum Ti_xNi_{1-x} alaşımında da görülmüştür. $Ti_{0,35}Ni_{0,65}$ alaşımında Ti'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı saf halindeki değerinden daha büyük olarak elde edilmiştir. Diğer tüm konsantrasyonlarda her iki alaşımda da Ti ve Cr için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları saf hallerindeki değerler ile uyumludur. İlgili alaşımlarda Cr ve Ti'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarında görülen artışın sırası ile Cr'den Ni'ye ve Ti'den Ni'ye 3d elektronlarının transferi dolayısıyla olduğunu belirtmişlerdir. Bhuniya and Padhi yaptıkları bu çalışmalardan hareketle $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının alaşımlarda elektron transferi veya yeniden düzenlenmesi gibi fenomenleri çalışmak için duyarlı bir araç olarak kullanılabileceğini göstermişlerdir. Gregory and Moody (1975) ve Pal and Padhi (1992, 1993)'de Ti_xNi_{1-x} ve Cr_xNi_{1-x} alaşımlarının magnetizasyon ve Compton profil analizlerini yapmışlar ve bu çalışmalar ışığında Ti ile Cr metalleri Ni ile alaşım yapıldığında bu metaller arasında elektron transferi yada kendi içerilerinde elektron yeniden düzenlenmeleri meydana geldiğini belirtmişlerdir.

Yukarıda sıralanan çalışmalarda da bahsedildiği üzere 3d geçiş elementleri, son orbitallerindeki elektronlarından kaynaklanan özellikleri dolayısıyla bilimsel ve teknolojik açıdan çok büyük öneme sahiptirler. Bunlardan yapılan alaşımlar elektronik devrelerde ısı kontrolünde, manyetik kayıt ve hafıza cihazlarında v.b. birçok uygulamada kullanılmaktadırlar. 3d geçiş elementlerinden yapılmış

alaşımlarda alaşımı oluşturan elementlerin valens elektron yapılarının belirlenmesi son derece önemlidir. Valens elektron yapılarını belirlemek için kullanılan Compton profil analizleri ve Dirac-Fock hesaplamaları gibi deneysel ve teorik yöntemler oldukça zahmetlidir. 3d alaşımını oluşturan metallerin konsantrasyonlarındaki küçük değişikliklerin valens elektron yapılarında değişikliğe yol açacağı açıktır. Dolayısıyla farklı konsantrasyonlarda 3d geçiş metali içeren alaşımlar XRF spektrometrelerle incelenirse; metallerin valens elektron yapılarında meydana gelen bir değişimin X-ışını spektrumları üzerinde değişikliğe neden olacağı açıktır. Bu nedenle $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları 3d geçiş metallerinin valens elektron yapılarını araştırmak için fiziksel bir parametre olarak kullanılabilir. Çünkü 3d geçiş metallerinde valens elektron yapısında meydana gelen bir değişikliğe bağlı olarak numunelerden yayımlanan karakteristik X-ışını spektrumları dolayısıyla da $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı da değişecektir. Buna göre XRF tekniği kullanılarak çok kolay belirlenebilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ölçülerek 3d geçiş metallerinin valens elektron yapıları hakkında bilgi edinilebilir. 3d alaşımlarının valens elektron yerleşimi tayini için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarına bağlı bir metodun veya formülizasyonun geliştirilmesi mümkün olabilir. Valens elektron yapılarının basit bir metotla kolayca tespit edilebilmesi iş ve zaman kazancı sağlamanın yanı sıra 3d metallerinin kullanıldığı uygulamaların gelişmesine ve çeşitlenmesine imkân sağlayacaktır. Her bir uygulama için amaca en uygun alaşımı kolayca tespit etmek ve farklı kullanım alanları için yeni alaşımlar üretmek mümkün olacaktır. Dolayısıyla valens elektron yapılarını belirlemek için çok sayıda 3d alaşımı kullanılarak yapılacak sistematik bir çalışma neticesinde X-ışını şiddet oranlarına dayalı basit ama kullanışlı bir metot geliştirmek oldukça önemlidir.

Kütle soğurma katsayıları (μ_m) temel fizik ve uygulamalı alanlarda çok önemlidir. Nükleer ve radyasyon fiziği, radyasyon dozimetri, biyoloji,

eczacılık, ziraat ve endüstri gibi birçok alanda çeşitli materyallerin μ_m değerlerine ihtiyaç duyulur. Litaretürde çeşitli materyallerin X- veya γ - ışını etkileşimleri için μ_m değerlerinin farklı enerjilerde deneysel veya teorik olarak belirlendiği çalışmalar mevcuttur. (Millar and Greening 1974; Gerward 1981; Hubbell 1982; Berger and Hubbell 1987; Hubbell and Seltzer 1995; Wang *et al.* 1995; Khanna *et al.* 1996; Abdel-Rahman *et al.* 2000).

Millar and Greening (1974) C_2H_4 , CO_2 , N_2 , O_2 , CF_4 , Ne, H_2S , HCl, Ar, Hava (Air), Mg, Al, SiO_2 ve $(C_2H_5)_3PO_4$ için μ_m değerlerini belirlediler. Tek kristal silikonun X-ışını azaltma katsayısı enerji ayrımlı metod kullanılarak Gerward (1981) tarafından ölçülmüştür. Hubbell (1982) 40 element, 45 karışım ve bileşik için 1 keV–20 MeV enerji aralığında μ_m değerlerini tablolar halinde sunmuştur. Bu tablolar Berger and Hubbell (1987) ve Hubbell and Seltzer (1995) tarafından $1 \leq Z \leq 92$ atom numarası aralığındaki tüm elementler ve dozimetri ile ilgili ilave 48 madde için yeniden düzenlenmiştir. Wang *et al.* (1995) SiH_4 için 1,486–15,165 keV ve Si için 8,041–29,109 keV aralığındaki X-ışını enerjilerinde μ_m değerlerini sistematik bir biçimde çalışmışlardır. Khanna *et al.* (1996) 662 keV’de γ -ışını azaltma katsayılarını bazı ağır metal oksit borat camlarda ölçmüşlerdir. Abdel-Rahman *et al.* (2000) üç farklı γ -ışını enerjisinde (59,54; 661,6 ve 1332,5 keV) mika, bakalit, parafin, Al, Cu, Pb ve Hg için γ -ışını azaltma katsayılarını belirlediler. 81, 356, 511, 662, 835, 1274 ve 1332 keV enerjilerde γ -ışınlarının geçişi (transmissionu); pirinç, bronz, çelik, alüminyum-silikon ve kurşun-antimon alaşımlarında çalışılmıştır (El Kateb *et al.* 2000). Yüksek saflıktaki 22 element (C, Al, Ti, V, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Zr, Nb, Mo, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Ta, Pt, Au and Pb) için μ_m değerleri değişken enerjili bir X-ışını kaynağından elde edilen 13–50 keV aralığında enerjilere sahip X-ışınları için ölçülmüştür (Angelonea *et al.* 2001). Turgut *et al.* (2002, 2004, 2005) Co, Mn, Fe, Cu, Cr ve bunların bazı bileşikleri; Co_2O_3 , $CoCl_2 \cdot 6H_2O$, $CoSO_4$, $CoSO_4 \cdot 7H_2O$, $MnCl_2 \cdot 4H_2O$, $MnCO_3$, $KMnO_4$,

MnCl₂·2H₂O, FeF₃, Fe₂O₃, FeCl₂·4H₂O, FeCl₃·2NH₄Cl·H₂O, Cu₂O, CuC₂O₄, CuCl₂·2H₂O, Cu(C₂H₃O₂)₂·H₂O, Cr₂O₃, Cr(NO₃)₃, Cr₂(SO₄)₃·H₂O ve Cr₃(CH₃CO₇)(OH)₂ için μ_m değerlerini 4,508–11,210 keV arasındaki farklı erjilerde ikincil uyarıcı metodu kullanarak ölçtüler. n-tipi InSe, InSe:Gd, InSe:Ho, InSe:Er tek kristallerin ve farklı Ho konsantrasyonlarına sahip InSe'in μ_m değerleri bir Si(Li) dedektör ve enerji ayrımlı X-ışını floresans sistem kullanılarak 15,746–40,930 keV X-ışını enerji bölgesinde ölçülmüştür (İçelli *et al.* 2005; Erzeneoğlu *et al.* 2006). Ag'nin μ_m değerleri K kıyısından uzakta 15–50 keV enerji bölgesinde değerlendirilmiştir (Tran *et al.* 2005). H'den Ca'a kadar olan elementleri kapsayan materyaller için X-ışını azaltma katsayıları ikincil uyarıcı kaynak metodu kullanılarak elde edilen 32–66 keV arasındaki X-ışınları ve Tc radyoaktif kaynaktan yayınlanan 140 keV'lik γ -ışınları için ölçülmüştür (Midgley 2005). Rettschlag *et al.* (2007) Pu'nun μ_m değerlerini kolime edilmiş şua transmission metodunu kullanarak 60–2615 keV enerji aralığında belirlemişlerdir.

γ - ve X- ışınlarının bir element tarafından saçılması ve soğurulması elementin atom numarası ve yoğunluğuyla ilgilidir. Kompoze bir materyal için bunlar ayrıca etkin atom numarası (Z_e) ile ilgilidirler. Kısmi etkileşme tesir kesitleri elementlerden oluşan kompoze materyallerde elementlerin her birine bağlı olduğu için elementin karakteristikleri ile ilgili olan tek bir atom numarası geniş bir enerji bölgesi için kompoze materyalin atom numarasını tanımlayamaz. Bu durumda kompoze materyaller etkin atom numarası (Z_e) diye adlandırılan ve enerji ile değişen yeni bir sayı ile tanımlanırlar. Z_e kompleks bir ortamda X-ışınlarının azalmasını temsil etmek ve özellikle radyasyon dozimetrisinde dozun hesaplanmasında uygun bir parametredir (Jackson and Hawkes 1981). Kompoze materyallerin Z_e değerlerini belirlemek için yapılan bazı çalışmalar literatürde rapor edilmiştir. Hine (1952) kısmi foton etkileşme proseslerinde Z_e değerlerini elde etmek için teorik yaklaşım

önermiştir. Murty 1965’de *Nature*’da yayınlanan makalesinde heterojen materyallerde soğurma proseslerinin her biri için farklı Z_e ifadelerinin geçerliliklerini test etmiş ve bu materyaller için tek bir Z_e değeri önermiştir. Kumar and Reddy (1997) 1 keV – 20 MeV enerji bölgesinde toplam foton etkileşmesi için dozimetri ile ilgili farklı materyallerin Z_e değerlerini hesapladılar. Doku özelliğine sahip bileşikler, mika, polietilen, polikarbonat ve teflon için foton azaltma katsayıları 13,37; 17,44; 22,10; 32,06 ve 44,23 keV enerjilerde ölçülmüş ve bu bileşiklerde toplam foton etkileşmesi için Z_e değerleri ölçülen katsayılardan elde edilmiştir (Parthasaradhi *et al.* 1992). Murty *et al.* (2000) 60–380 keV enerji aralığında Hine’nin formülünü kullanarak elde ettikleri Z_e değerleri ile ölçtükleri değerler arasındaki uyumsuzlukları açıklamışlardır. Murty (2004) iki farklı kompozisyondaki W/Cu alaşımları için Z_e değerlerini 100–1400 keV foton enerji bölgesinde ölçmüştür. Dozimetri ile ilgili bazı düşük atom numaralı maddelerde foton etkileşmeleri için etkin atom numaraları 1 keV–20 MeV enerji bölgesinde hesaplanmıştır (Shivaramu *et al.* 2001). Manjunathaguru and Umesh (2006) H, C, N ve O elementlerini içeren biyolojik olarak önemli bazı bileşiklerin Z_e ve etkin elektron sayısı yâda elektron yoğunluğu (N_e) değerlerini belirlemişlerdir. Çevik *et al.* (2006, 2007) CuInSe₂ yarı iletkeni için kalınlık, μ_m ve Z_e değerlerini, BiPbSrCaCuO süper iletkeni için ise μ_m ve N_e değerlerini farklı enerjilerde ölçmüşlerdir. Baltaş *et al.* (2005, 2007) YBaCuO ve BiPbSrCaCuO süper iletkenleri için 511, 661 ve 1274 keV enerjilerinde ve MgB₂ süper iletkeni için 14,1–29,7 keV aralığındaki bazı enerjilerde μ_m ve Z_e değerlerini belirlemişlerdir. Bazı amino asitler ve şekerler için Z_e ve N_e değerleri 30,8; 35,0; 81,0; 145; 276,4; 302,9; 356; 383,9; 661,6; 1173 ve 1332,5 keV enerjilerinde ölçülen μ_m değerleri kullanılarak hesaplanmıştır (Gowda *et al.* 2005). Önemli amino asitlerden histidin (histidine), lösün (leucine), lizin (lysine), metionin (methionine), fenilalanin (phenylalanine), treonin (threonine), triptofan (tryptophan) ve valin (valine)’nin Z_e ve N_e değerleri 1

keV'den 100 GeV'e geniş bir enerji aralığında direkt metot ile WinXCOM kullanılarak hesaplanmıştır (Manohara and Hanagodimath 2007). Bazı Bor bileşikleri (H_3BO_3 , $Na_2B_4O_7$) ve trommel sieve waste (TSW) için moleküler, atomik ve elektronik tesir kesitleri ve etkin atom numaraları 15,74–40,93 keV enerji aralığında karışım kuralına göre belirlenmiştir (İçelli *et al.* 2008). Çeşitli alaşım, kristal ve doğal minareler için μ_m , Z_e ve N_e değerleri farklı enerjilerde ölçülmüştür (Han and Demir 2009a, 2009b, 2009c; Han *et al.* 2009).

Yukarıda sıralanan çalışmalar ışığında kompoze materyaller için kütle soğurma katsayılarının etkin atom numarası ve elektron yoğunluklarını tespit etmek için uygun ve duyarlı bir parametre olarak kullanılabileceği anlaşılmaktadır.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Geçiş Metallerinin Özellikleri

Geçiş elementleri (metalleri) periyodik tablonun d-bloğu olarak adlandırılan bölgesinde bulunurlar (Şekil 2.1). Geçiş elementlerinin hepsi, elektron konfigürasyonunda , en dışta her zaman d-orbitalinde elektron taşırlar. Bu metallerin kısmen dolu d-orbitalleri vardır. Geçiş metalleri en dıştaki bu d orbitali elektronlarından kaynaklanan çok çeşitli fiziksel özelliklere sahiptirler. Geçiş metalleri; sertlikleri, yüksek yoğunlukları, iyi ısı iletkenlikleri ve yüksek erime-kaynama sıcaklıkları gibi bazı karakteristik özellikleri ile periyodik tablodaki diğer elementlerden ayrılırlar. Birinci sıra (4. periyot) geçiş elementleri; $[\text{Ar}]3d^n4s^2$, ağır geçiş metalleri olarak da adlandırılan ikinci ve üçüncü sıra (5. ve 6. periyotlar) geçiş metalleri ise sırasıyla $[\text{Kr}]3d^n4s^2$ ve $[\text{Kr}]4f^{14}5d^n6s^2$ şeklinde bir elektron dizilişine sahiptirler.

Geçiş metalleri birden fazla farklı değeriğe sahip olabilirler. Geçiş metallerinin sahip olabilecekleri değerliklerin çok çeşitli olması d-orbitalindeki elektronlarından ileri gelmektedir. Periyodik tabloda geçiş metallerinin bulunduğu her bir satırda orta bölgedeki geçiş metalleri çok daha fazla sayıda değişik değeriğe sahiptir. Örneğin 1. satır geçiş metallerinde; ^{21}Sc yalnızca +3, ^{30}Zn ise yalnızca +2 değeriğe sahipken ^{25}Mn bileşiklerinde 8 farklı değerlik alabilmektedir. Geçiş metallerinin sahip olabilecekleri değerliklerle ilgili olarak ilgi çekici bir diğer durum ikinci ve üçüncü sıra geçiş metallerinde yüksek değerliklerin daha kararlı olmasıdır.

Geçiş metali bileşikleri hem iyonik hem kovalent karakterli olabilmektedirler. Ancak geçiş metalleri; basit iyon bileşiklerinden ziyade kovalent molekülerde veya makro moleküler yapılarda yüksek değerliklere sahip olmaktadırlar. Geçiş metallerinin d^0 ve d^{10} yapısına sahip iyonları hariç diğer iyonları genellikle renklidir. Renkli

2.2. Alařım

İki veya birkaç maddenin muhtelif oranlarda birlikte eritilmesi sonucu elde edilen karıřım alařım olarak adlandırılır. Alařımlar, yoęun olup maden parlaklıęındadırlar, ısı ve elektrięi iyi iletirler. Alařımların bazıları beyaz olmasına karřın bakır ve altın gibi renkli madenlerin yeterli miktarda bulunduęu alařımlar renklidirler. Deęerli madenlerle karıřtırıldıęında onlara, renk ve parlaklıklarını bozmaksızın sertlik ve dayanıklılık kazandıran Bakır (Cu) ok sayıda nemli alařımın bileřiminde bulunur. Bir ok alařımda kullanılan inko (Zn)'nun en nemli alařımları pirin, bronz ve beyaz metaldir. Bir Cu ve Zn alařımı olan pirinte bu iki metalin oranları ok deęiřebilmektedir. Fakat en ok kullanılan tipinde Cu %60, Zn %40 oranında bulunur. izelge 2.1'de geiř metallerinin bulunduęu bazı nemli alařımlar; ieriklerindeki elementler, adları ve kullanıldıkları yerlerle birlikte verilmiřlerdir.

Çizelge 2.1. Geçiş metallerinin kullanıldığı bazı alaşımların adları ve kullanıldıkları yerler.

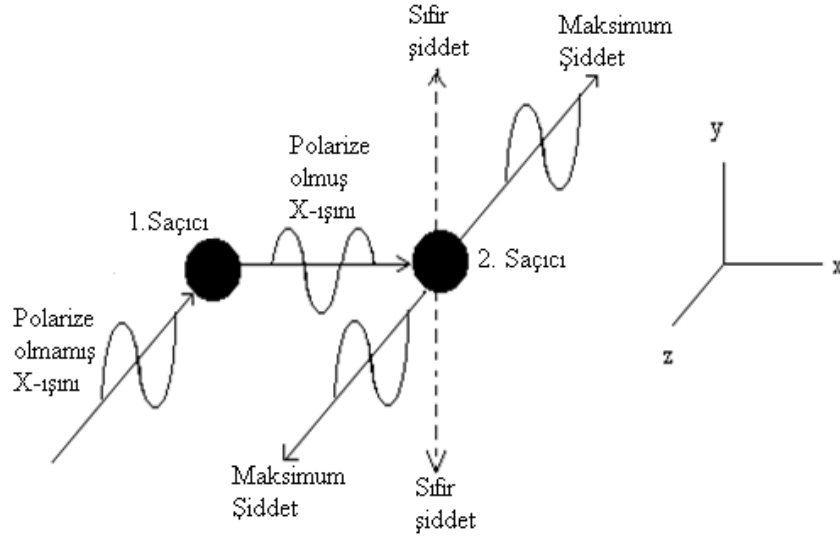
Alaşım	Adı	Kullanıldığı yerler
$\text{Cu}_{90}\text{Al}_{10}$	Alüminyum bronz	Fen aletlerinde
$\text{Cu}_{90}\text{Sn}_{10}$	Top metali	Top imalinde
$\text{Cu}_{75}\text{Sn}_{25}$	Çan metali	Çan imalinde
$\text{Cu}_{65}\text{Zn}_{35}$	Pirinç	Elektrik malzemesi yapımında
$\text{Cu}_{75}\text{Ni}_{25}$	Nikel para	Para basımında
$\text{Cu}_{82}\text{Sn}_{16}\text{Zn}_2$	Bronz	Madalya ve heykelerde
$\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{25}\text{Zn}_{25}$	Alman gümüşü	Elektrik reostalarında
$\text{Cu}_4\text{Al}_{95}\text{Mg}_1$	Duralumin	Uçak endüstrisinde
$\text{Cu}_{10}\text{Au}_{90}$	Altın para	Altın para basımında
$\text{Cu}_{25}\text{Au}_{75}$	18 ayar altın	Mücevhercilikte
$\text{Cu}_{10}\text{Ag}_{90}$	Gümüş para	Gümüş para basımında
$\text{Cu}_{37,5}\text{Au}_{67,5}$	Sterlin	İngiliz gümüş parası ve gümüş eşya yapımında
$\text{Cu}_2\text{Sn}_{45}\text{Sb}_{13}\text{Pb}_{40}$	Babıt metal	Makine yatağı yapımında
$\text{Mg}_{10}\text{Al}_{90}$	Magnalyum	Uçak endüstrisinde ve terazilerde
$\text{Fe}_{97}\text{Cr}_3$	Krom çeliği	Silindir yatağı ve tel yapımında
$\text{Fe}_{85}\text{Cr}_{15}$	Krom çeliği	Mutfak malzemesi
$\text{Fe}_{86}\text{Si}_{14}$	Sert demir	Asit tankı yapımında
$\text{Fe}_{64}\text{Ni}_{36}$	İnvar	Fen aletleri
$\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{14}$	Manganez çeliği	Kasa, dolap, taşıyıcı yapımında
$\text{Fe}_{95}\text{Mo}_5$	Molibden çeliği	Yüksek hızlı dökümde
$\text{Fe}_{94}\text{Ni}_6$	Nikel çeliği	Asma köprü yapımında
$\text{Fe}_{85}\text{Ni}_{15}$	Platinit	Ampul teli yapımında
$\text{Fe}_{97}\text{Si}_3$	Silisyum çeliği	Otomobil yayı
Fe_{92}W_8	Tungsten çeliği	Parça dökümünde
$\text{Ni}_{35}\text{Au}_{65}$	Beyaz altın	Mücevhercilikte
$\text{Ni}_{66}\text{Cu}_{34}\text{Fe}_6$	Monelmetal	Asit tankı yapımında
$\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{15}\text{Fe}_{25}$	Nikrom	Elektrik demiri ve ızgarası yapımında
$\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$	Perm alaşımı	Elektrik transformatörlerinde

2.3. X-Işınları

Wilhelm Conrad Röntgen 1895’de madde üzerine düşen hızlı elektronların, bilinmeyen tabiatlı son derece girici ışımlar meydana getirdiğini gözlemişti. Mahiyetleri tam olarak bilinmediği için X-ışınları diye adlandırılan bu ışınların giricilik ve şiddetlerinin başlangıçtaki elektronların hızlarıyla doğru orantılı olduğu yani elektronlar ne kadar hızlı ise oluşan X-ışınlarının da o kadar girici ve şiddetli olduğu tespit edilmişti. Bir madde üzerine düşen ışık etkisiyle maddeden elektron sökülmesi temeline dayanan fotoelektrik olay, fotonların elektronlara enerji aktarabileceğini ve bu enerjiyi soğuran elektronların serbest kalarak harekete geçebileceğini göstermiştir. X-ışınlarının keşfi ile bu olayın tersinin de mümkün olabileceği yani hareketli bir elektronun kinetik enerjisinin tümünün veya bir kısmının bir fotona dönüşebileceği anlaşılmıştır.

Elektromanyetik kuram, ivmeli bir elektrik yükünün elektromanyetik dalga yayımlamasını öngörür. Aniden durdurulan hızlı bir elektron da tabii ki ivmeli hareket yapar, dolayısıyla elektronun durdurulmasıyla oluşan X-ışınları da elektromanyetik dalgalardır. Bu elektromanyetik dalgaların yani X-ışınlarının; elektrik ve manyetik alanlar içinde bir sapmaya uğramadan doğru yollar boyunca ilerlediği, saydam olmayan maddeler içinden kolayca geçtiği, fosforlu maddelerin parlamasına yol açtığı ve fotoğraf plakalarına etki ettiği, keşiflerinden kısa süre sonra bulunmuştu. X-ışınlarının dalga tabiatı ilk kez 1906’da, bunların polarizasyonunu göstermeyi başaran Barkla tarafından ortaya konmuştur. Barkla’nın deney düzeneği Şekil 2.2’de çizilmiştir. Barkla’nın deneyi, X-ışınlarının elektromanyetik dalgalar olduğu kabulü altında çözümlenebilir. Deneyde -z yönünde kutuplanmamış (polarize olmamış) bir X-ışını demeti soldaki küçük bir karbon bloğu üzerine düşer. Bu ışınlar karbon tarafından saçılır; bu demektir ki, karbon atomları içerisindeki elektronlar X-ışınlarının elektrik vektörleri tarafından titreşime geçirilir ve sonra yeniden ışıma yaparlar. Bir elektromanyetik dalgadaki elektrik alan vektörü dalganın yayılma doğrultusuna dik olduğundan, ilk X-ışınları yalnızca x-y düzlemi içinde kalan

elektrik alan vektörleri ihtiva eder. $+x$ yönünde saçılan X-ışını, yalnızca y doğrultusunda elektrik vektörüne sahip olabilir ve bu nedenle düzlem polarize olmuştur. Bu polarizasyonu göstermek için, ışının yolu üzerine sağdaki gibi bir başka karbon blok konur. Bu bloktaki elektronlar, y doğrultusunda titreşmekle kısıtlanmıştır ve bu nedenle, yalnızca $x-z$ düzlemi içinde yayılan X-ışınları ışıır, y doğrultusunda ışınım olmaz. Saçılan X-ışınlarının $x-z$ düzlemi dışında gözlenemeyişi X-ışınlarının dalga özelliğini doğrular.



Şekil 2.2. X-ışını polarizasyonunu gösteren Barkla deneyi.

X-ışınlarının dalga boylarını ölçmek için bir kırınım deneyinin ideal olacağı düşünülmüştü. Optik fiziğinden bilindiği üzere; bir kırınım deneyinde doyurucu sonuçlar alabilmek için kırınım ağındaki iki komşu çizgi arasındaki mesafenin ışığın dalga boyu ile aynı mertebede olması gerekir. Fakat X-ışınları için önerilen dalga boyları çok küçük olduğu için X-ışınlarının gerektirdiği dar aralıklarla kırınım ağı yapmak o dönem için mevcut sistemlerle mümkün değildi. 1912’de Max von LAUE X-ışınları için önerilen dalga boylarının bir kristalde birbirine komşu iki atom arasındaki uzaklıkla kıyaslanabileceğini ileri sürdü ve örgüleri üç boyutlu bir kırınım ağı gibi davranacak olan kristallerin X-ışınlarını kırınımına uğratmak için

kullanılmalarını önerdi. Daha sonra yapılan deneylerde X-ışınlarının dalga tabiatı başarıyla gösterildi. X-ışınları için $1,3 \times 10^{-11}$ 'den $4,8 \times 10^{-11}$ metreye (0,13'den 0,48 Å'a) kadar dalga boyları bulunmuştur. Sınıflandırma amacı ile, bugün dalga boyları yaklaşık 10^{-12} – 10^{-8} m (0,01-100 Å) aralığında olan elektromanyetik ışımlar X-ışınları olarak dikkate alınmaktadır. Görünür ışığa kıyasla 10^{-4} kat daha küçük dalga boyuna sahip olan X-ışınları, görünür ışıktan 10^4 kat daha enerjiktirler.

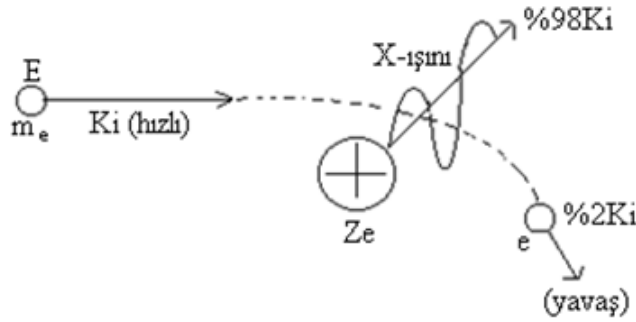
Elektromanyetik yayımlama kaynağına göre yapılan sınıflandırmaya göre gama (γ) ışınlarından radyo dalgalarına kadar yayılmış sürekli ışıma dizisine elektromanyetik spektrum denir. Elektromanyetik ışımların fiziksel özellikleri bütün spektrumda aynıdır. Aynı hız ve aynı elektromanyetik tabiata sahip olan bu ışımlar arasındaki fark dalga boylarıdır (frekanslarıdır). Spektrumda dalga boyları 0,01'den 100 Å'a kadar olan elektromanyetik ışımlar X-ışınları kategorisine girer. Elektromanyetik spektrumun yüksek enerjili kısmına düşen bu kategorinin sınırları keskin değildir, kısa dalga boyu ucu γ -ışınları ile uzun dalga boyu ucu ise morötesi ışıkla karışır. X-ışınları, nitelik itibarıyla sürekli X-ışınları ve karakteristik (veya çizgi) X-ışınları olmak üzere iki grupta incelenebilirler.

2.3.1. Sürekli X-ışınları

Sürekli X-ışınları; elektronlar, protonlar veya α parçacıkları gibi yüksek enerjili, yüklü parçacıkların ağır çekirdeklerin Coulomb alanından geçerken enerji kaybetmeleri bir başka deyişle nükleer saçılmalarla hedef içerisinde adım-adım yavaşlatılmaları sonucu meydana gelirler. Sürekli X-ışınlarının oluşumu Şekil 2.3'de şematik olarak gösterilmiştir.

Bu etkileşimde yüklü parçacığın ısıdığı enerji, sürekli spektrum veya Bremsstrahlung (frenleme radyasyonu) spektrumu olarak isimlendirilir. Sürekli X-ışını spektrumları geniş bir frekans aralığını kapsayan sürekli bir ışıma karşılık

gelmektedir. Bu nedenle sürekli X-ışınlarına beyaz X-ışınları da denir. Sürekli X-ışını emisyonu, klasik elektromanyetik teoriye göre şöyle açıklanabilir. İvmeli hareket eden yükler elektromanyetik ışıma da bulunurlar. Yüksek enerjili elektronlar bir hedefe çarptıkları zaman bu elektronların enerjilerinin %1'i sürekli X-ışınlarının oluşmasına yol açar. Sürekli X-ışınlarının üretilmesinde X-ışını tüpleri temel kaynaktır.



Şekil 2.3. Sürekli X-ışını oluşum mekanizması.

Hedefe (bir X-ışını tüpünde anoda) çarpan elektronlardan çok az bir kısmı enerjilerini bir defada ve tümüyle bir X-ışını fotonu olarak yayımlayabilir. Bu elektronlar maksimum frekanslı (minimum dalgaboylu) ışımaları oluştururlar. Minimum dalga boyu (λ_{min}) hedef üzerine gelen elektronun tüm kinetik enerjisini ($E = eV_o$) tek bir fotona vermesine karşılık geldiğine göre, $E_x = hc/\lambda_{min}$ yayımlanan X-ışınının enerjisi olmak üzere λ_{min} için;

$$\frac{hc}{\lambda_{min}} = eV_o \Rightarrow \lambda_{min} = \frac{hc}{eV_o} \quad (2.1)$$

yazılabilir. Bir X-ışını tüpünde elektronlarla meydana getirilen sürekli X-ışını spektrumu, uyarıcı elektronların maksimum enerjilerine karşılık gelen, λ_{min} kısa dalgaboyu sınırıyla karakterize edilir. Burada, h Planck sabiti ($6,62 \times 10^{-27}$ erg·s), c ışık hızı, e elektronun yükü ve V_o ise tüpe uygulanan potansiyeldir. Kısa dalgaboyu sınırı ile uygulanan potansiyel arasındaki bu ilişki Duane-Hunt kanunu olarak bilinir.

Sürekli ışıma ihtimali; $p \propto q^2 Z^2 T / M_o^2$ ifadesi ile verilir. Burada, q elektron yükü cinsinden parçacığın yükü, Z hedef maddesinin atom numarası, T parçacığın kinetik enerjisi ve M_o ise parçacığın durgun kütesidir. Protonlar ve ağır parçacıklar elektron kütesine göre daha büyük kütleye sahip olduklarından nispeten daha az ışırlar. Bu nedenle protonların meydana getirdiği sürekli X-ışını spektrumunun şiddeti elektronların meydana getirdiğinden dört milyon kez daha küçüktür. Bir X-ışını tüpünde toplam şiddet, tüp voltajı ve hedef maddesinin atom numarası (Z) ile orantılıdır. Bir X-ışını tüpünde elektronlar tarafından meydana getirilen sürekli X-ışını spektrumu λ_{min} ve λ_{max} ile karakterize edilir. Kısa dalga boyu limiti λ_{min} 'in altında radyasyon gözlenmez. Maksimum şiddetin dalgaboyu λ_{max} yaklaşık olarak λ_{min} 'in yarısı kadardır ($\lambda_{max} \sim \lambda_{min}/2$). Sürekli X-ışınları için şiddet dağılımı;

$$I(\lambda)d\lambda = KiZ \left[\frac{\lambda}{\lambda_{min}} - 1 \right] \frac{1}{\lambda^2} d\lambda \quad (2.2)$$

ifadesi ile verilir. Kramer formülü olarak bilinen bu ifadede; K orantı katsayısı ve i akımdır. Bu ifadeden görüldüğü gibi şiddet dağılımı tüp akımı (i) ve atom numarası (Z) ile orantılıdır.

2.3.2. Karakteristik X-Işınları

Bir atomda elektronlar atomun merkezinde bulunan çekirdek etrafında yörünge olarak adlandırılan enerji katmanlarında dolanırlar. Her bir elektronun hızından kaynaklanan bir kinetik enerjisi ve çekirdekten uzaklığına bağlı olarak da sahip olduğu bir potansiyel enerjisi vardır. Bu nedenle enerji düzeylerinde hareket eden elektronların kinetik ve potansiyel enerjilerinin toplamına eşit olan bir enerjileri vardır. Elektronların sahip oldukları enerji iç tabakalardan dış tabakalara doğru gidildikçe artar. Bu sayede çekirdek çevresindeki elektronlar yüksek hızlarla dönmelerine rağmen konumlarını muhafaza ederler. Bu elektronların uzaysal konumları herhangi bir enerji etkisi ile bozulursa; iç tabakalara veya dış tabakalara doğru elektron geçişleri olur. 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 enerji farkı bir X-ışını fotonu olarak yayımlanır. Bu foton yayımlandığı malzemeye has özellikler taşıdığı için o elementin karakteristik X-ışını diye adlandırılır.

Atomlar, elektron yörüngeleri arasındaki enerji farkına eşit enerjiyi soğurarak veya yayımlayarak kuantum mekaniği ile açıklanabilen izinli yörüngeler arasında geçişler yapabilirler. Atomun enerji soğurarak üst seviyelere çıkması uyarma (excitation), uyarılmış elektronun enerji yayımlayarak temel hale geçmesi ise uyarılmışlıktan kurtulma (de-excitation) olarak adlandırılır. Uyarılmışlıktan kurtulma tek bir basamakta olabileceği gibi birkaç basamakta da olabilir ve her bir geçişte seviyeler arası enerji farkına eşit değerde enerji taşıyan bir foton (karakteristik X-ışını) yayımlanır. Bunlar spektrumda karakteristik çizgiler denilen $K\alpha$, $K\beta$, $L\ell$, $L\alpha$, $L\beta$, $L\eta$, $L\gamma$, $M\alpha$, $M\beta$, ... çizgilerini oluştururlar. Herhangi bir tabaka veya alt tabakadaki bir boşluk üst tabakalardan bir elektron ile doldurulduğu zaman yayımlanan X-ışınlarının Siegbahn ve IUPAC gösterimleri Çizelge 2.2’de verilmiştir.

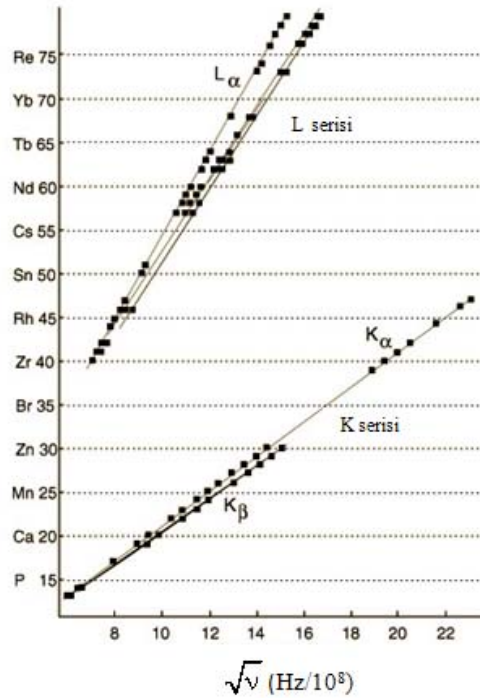
Bir atomun K kabuğunda meydana getirilen elektron boşluğu şayet L kabuğunda bulunan bir elektron tarafından doldurulacak olursa, böyle bir elektron geçişi sonucunda yayımlanan fotonun frekansı, karakteristik spektrumunun $K\alpha$ çizgisine karşılık gelir. K kabuğundaki boşluk M kabuğundaki bir elektron tarafından doldurulursa $K\beta$ 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 $L\ell$, $L\alpha$, $L\beta$, ..., M kabuğu için $M\alpha$, $M\beta$, $M\gamma$, ... ve N kabuğu için $N\alpha$, $N\beta$, ... çizgileri kısaca L, M ve N serileri ortaya çıkmış olur. İlgili elektron geçişleri sonucunda K tabakasından yayımlanan karakteristik X-ışınları Şekil 2.4’de gösterilmiştir.

2.4. Moseley Kanunu

Moseley 1913'te alüminyumdan altına kadar 39 elementin çizgisel spektrumunu araştırdı ve spektrumların tümünün dikkate değer bir biçimde birbirlerine benzer olduğunu belirledi. Çoğu durumlarda spektrum, K ve L serileri olmak üzere iki çizgi grubundan ibaretti. Belirli bir element için L çizgileri K çizgilerinden daha düşük frekansta oluşmakta daha ağır elementler için diğer seriler daha düşük frekanslarda görülmekte idi. Moseley her serinin n . çizgisinin ν_n frekansının hedef elementin Z atom numarası ile değiştiğini buldu ve Z 'ye karşı ν_n grafiğini çizerek,

$$\sqrt{\nu_n} = \sqrt{\frac{c}{\lambda}} = k(Z - \sigma) \quad (2.3)$$

ifadesini elde etti. (2.3) bağıntısı bir doğru denklemdir ve bütün X-ışını serileri için geçerlidir. Moseley Kanunu'na göre bazı spektral çizgileri için atom numarası ile frekans arasındaki ilişki Şekil 2.5'de gösterilmiştir.



Şekil 2.5. Bazı spektral çizgiler için Moseley çizimi.

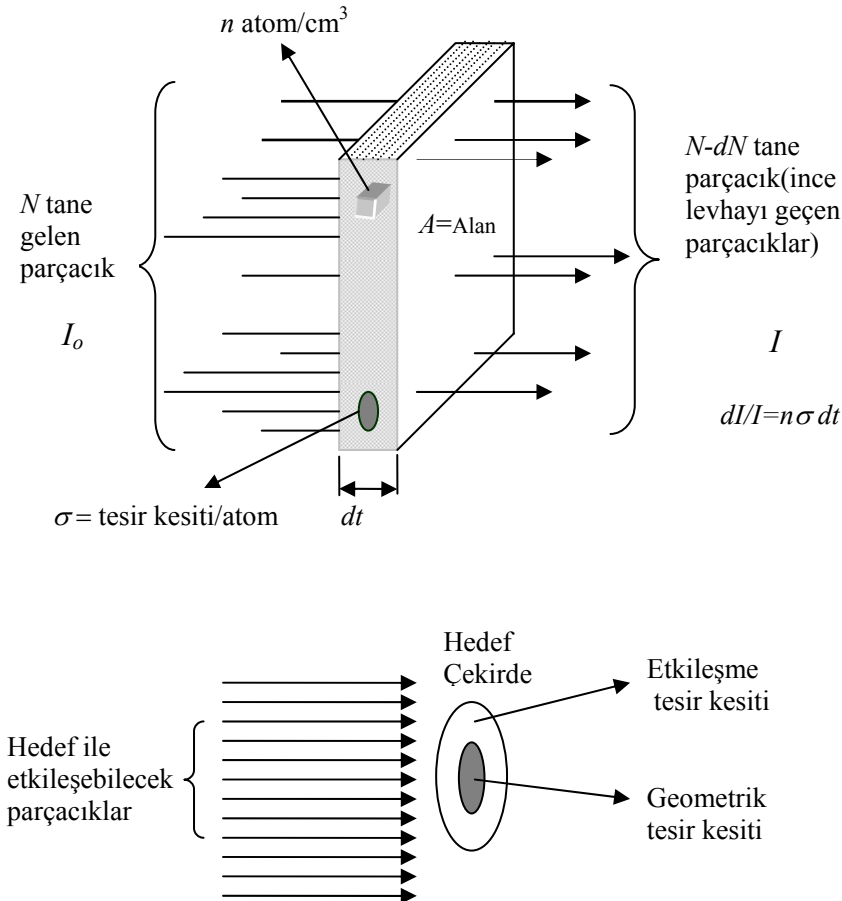
Bir X-ışını tüpünde ışıının yüksek enerjili elektronlarla bombardıman edilen bir hedeften yayınlanır. Moseley hedef atomlar yüksek enerjili elektronlarla bombardıman edildiğinde iç (yani sıkı bağlı) elektronların koparıldığını ileri sürdü. X-ışınları atomun iç elektron düzeylerinden birinde bu şekilde oluşturulan bir boşluk daha üst düzeydeki az sıkı bağlı bir elektron tarafından doldurulurken yayınlanırlar. Fakat boşluğun olduğu düzeyde veya daha alt düzeylerde bulunan elektronlar, boşluğu doldurmak için harekete geçen elektron ile çekirdek arasındaki çekim kuvvetinin küçülmesine neden olurlar. Çekirdeğin bir yörünge elektronuna uyguladığı çekimi, bu elektron ile çekirdek arasında kalan diğer elektronlar nedeniyle azaltan bu etkiye perdeleme denir. Perdeleme nedeniyle çekirdek kendi yükünden beklenen etkiyi göstermez ve sanki yükü bir miktar azalmış gibi davranır, bu yük ($Z - \sigma$) etkin yük olarak adlandırılır. Burada σ perdeleme sabitidir.

Moseley, Bohr teorisinden hareketle tüm elementler için çizgi ışıma frekansının karekökünün merkezi etkin yükün bir başka deyişle atom numarasının lineer fonksiyonu olduğunu göstermiş oldu. Buna göre doğrusal değişim eğrisinden yararlanarak çizgi spektrumunun frekansını ölçmek suretiyle ilgili elementin atom numarasını belirlemek mümkündür. Moseley kanunu elementlerin türlerini tayin etmede kullanılan nitel (kalitatif) analizlerin temelini oluşturur.

2.5. Tesir Kesiti

Bir işlemin gerçekleşme ihtimalini tanımlayan tesir kesiti kavramı; bir olay için deneysel olarak ölçülebilen değerleri ile onun teorik olarak hesaplanabilen değerlerinin karşılaştırılabilmesine imkân tanınması nedeniyle, atomik işlevlerin ayrıntılı olarak incelenebilmesini sağlar. Tesir kesiti, foton ile madde arasındaki etkileşmenin türüne göre isimlendirilir. Örneğin foton madde tarafından soğuruluyorsa soğurma tesir kesiti, madde tarafından saçılmaya uğratılıyorsa saçılma tesir kesiti ifadeleri kullanılır.

A yüzeyine ve dt kalınlığına sahip ince bir levha üzerine I şiddetiyle gelmekte olan bir foton demetini düşünelim. Bu foton demeti ince levhadan geçerken atomlardan birine çok yaklaşıyorsa, bu atom tarafından fotonun yutulma yada saçılma ihtimali vardır. σ 'nın bir atomu kuşatan etkin alan olduğunu varsayalım. Eğer gelen foton bu alana düşerse foton bu alanla etkileşme yapacaktır. Levhanın birim hacmi başına n tane hedef atomu olsun (Şekil 2.6). Levha o kadar ince olsun ki, hiçbir atom öteki atom üzerine binmesin ve böylece her atomun gelen fotonla aynı ölçüde etkileşme ihtimali olsun. Eğer maddenin birim hacminde n tane atom varsa Adt hacminde $nAdt$ tane atom bulunur. Birim yüzeye düşen atom sayısı ise ndt olur. Bir atomun işlem gördüğü etkin alan σ ise ndt sayıda atomun işlem gördüğü etkin alan $n\sigma dt$ olur. Buna göre toplam etkin alan $nA\sigma dt$ dir.



Şekil 2.6. Tesir kesiti ile gelen demetin şiddeti arasındaki ilişki ve tesir kesitinin geometrik yorumu.

Toplam etkin alan, madde üzerine gelen fotonun maddeyle etkileşmesi sonucu herhangi bir olayın meydana geldiği alandır. Toplam etkin alanın toplam yüzey alanına oranına etkin alan kesri denir. Etkin alan kesri F ile gösterilirse;

$$F = \frac{\text{Toplam etkin alan}}{\text{Toplam yüzey alanı}} = \frac{nA\sigma dt}{A}$$

$$F = n\sigma dt \quad (2.4)$$

olur. Bu nicelik I şiddetindeki şuanın ince levhadan geçerken şiddetinde meydana gelen değişiklik kesrini temsil eder. Buna göre şiddetteki dI değişimi;

$$dI = -(n\sigma dt)I \quad (2.5)$$

ifadesi ile verilir. İfadedeki (-) işareti t kalınlığı arttıkça I şiddetinin azalacağını gösterir. Bu ifadeden hareketle;

$$I = I_0 e^{-n\sigma t} \quad (2.6)$$

elde edilir. Gelen şuanın başlangıçtaki şiddeti I_0 , şuanın t kalınlığındaki malzemeyi geçtikten sonraki şiddeti ise I dir. Şuadaki parçacık sayısı şuanın şiddeti ile orantılı olduğundan (2. 6) ifadesi parçacıkların sayısı cinsinden;

$$N = N_0 e^{-n\sigma t} \quad (2.7)$$

şeklinde yazılabilir. Burada N_0 ; ince levhaya gelen parçacıkların sayısını N ise t kalınlığındaki levhayı geçen parçacıkların sayısını göstermektedir. Eğer $n\sigma t \ll 1$ ise bu durum hem levhanın geometrik olarak çok ince olmasını hem de σ 'nın çok küçük olmasını ifade eder. Buna göre; $e^{-n\sigma t} \ll 1$ ise $e^{-n\sigma t} = (1 - n\sigma t)$ yazılabilir ve (2. 7) ifadesi;

$$N = N_0(1 - n\sigma t) \quad (2.8)$$

şeklini alır. Böylece t kalınlığını geçerken herhangi bir işleme uğrayan (ilgilenilen etkileşmeye giren) parçacıkların sayısı N_s için;

$$N_s = N_0 - N = N_0 - N_0(I - n\sigma t)$$

$$N_s = N_0 n \sigma t \quad (2.9)$$

yazılabilir. Buradan da σ için,

$$\sigma = \frac{N_s}{N_0 n \sigma t} \quad (2.10)$$

ifadesi elde edilir. Tesir kesiti diye adlandırılan ve ilgilenilen olayın meydana gelme ihtimaliyetinin bir ölçüsü olan σ 'nın birimi barn'dır ($1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$). σ alan boyutundadır ve ilgilenilen olayın tabiatına göre hedefin birim yüzey alanından küçük veya büyük olabilir.

2.6. Floresans Verim, Auger Olayı ve Coster-Kronig Geçişleri

Bir atomdaki elektronlar, elektron yörüngeleri arasındaki enerji farkına eşit enerjiyi soğurarak veya yayımlayarak kuantum mekaniği ile izah edilebilen izinli yörüngeler arasında geçişler yapabilirler. Elektronun enerji soğurarak üst seviyelere çıkması uyarma (excitation), uyarılmış elektronun enerji yayımlayarak temel hale geçmesi ise uyarılmışlıktan kurtulma (de-excitation) olarak adlandırılır. İç tabakada oluşan elektron boşluğunun üst tabakalardan buraya elektron geçişiyle doldurulması sırasında, enerji farkı karakteristik X-ışını olarak yayımlanır. Bir spektral seviyeden yayımlanan X-ışını fotonlarının sayısının aynı seviyede oluşturulan boşlukların sayısına oranı floresans verim olarak adlandırılır. Buna göre bir atomun K tabakasında, herhangi bir yolla meydana getirilen bir boşluğun bir karakteristik X-ışını yayımlanarak doldurulması ihtimaline K tabakasına ait ortalama floresans verim denir.

$$\varpi_K = \frac{I_K}{\eta_K} = \frac{\sum n(K)}{\eta_K} = \frac{n(K_\alpha) + n(K_\beta) + \dots}{\eta_K} \quad (2.13)$$

I_K numuneden yayımlanan karakteristik K X-ışınlarının sayısıdır ve K tabakasına geçişlerin toplam sayısı $\sum n(K)$ 'ya eşittir. η_K ise K tabakasında meydana getirilen boşluk sayısıdır. Bir i tabakası için ortalama floresans verim;

$$\varpi_i = \frac{I_i}{\eta_i} \quad (2.14)$$

olur. Floresans verim $I_i = \eta_i$ olduğu durumda maksimum olur yani ϖ 'nın maksimum değeri 1'dir. Ortalama floresans verim seviye genişlikleri kullanılarak;

$$\varpi_i = \frac{\Gamma_R(L_i x)}{\Gamma(L_i)} \quad (2.15)$$

şeklinde de yazılabilir. Burada $\Gamma_R(L_i x)$ verilen tabakalar arası geçişlere göre ışımalı seviye genişliği, $\Gamma(L_i)$, L_i seviyesi için toplam seviye genişliğidir.

İç tabakalarından birinde bir elektron boşluğu meydana getirilmiş bir atomda bir dış tabaka elektronunun iç tabakadaki bu boşluğa düşmesi sırasında yayımlanan foton atomu terk etmeden bir diğer dış tabaka elektronu tarafından soğurulabilir ve fotonu soğuran bu elektron atomdan dışarı atılabilir. Böylece uyarılan atomun fazla enerjisi bir X-ışını yayımlanmaksızın bir elektron yayımlanması ile serbest bırakılabilir (Dolayısıyla bu olay bir bakıma bir iç fotoelektrik olayı gibi düşünülebilir). Bu sürece Auger olayı ve atomdan dışarı atılan elektrona da Auger elektronu denir. Auger elektronlarının enerjisi de tıpkı karakteristik X-ışınları gibi yayımlayıcı elementin karakteristikleridirler. Auger olayı elektronları daha zayıf bağlı ve karakteristik fotonların daha kolay soğurulabildiği küçük atom numaralı elementlerde daha yaygındır ve aynı sebepten dolayı bu olay L serisi için K serisinden daha baskındır. Atomların çoğunda Auger süreci karakteristik X-ışını yayımlanması ile rekabet halindedir. K tabakası için Auger olayının meydana gelme ihtimali;

$$a_K = \frac{I_{K(Auger)}}{\eta_K} \quad (2.16)$$

olur. Burada I_K ışımasız geçişlerin sayısı, η_K ise K tabakasında meydana getirilen boşluk sayısıdır. Floresans verimin maksimum değeri 1 olduğuna göre $(1-\omega)$ değeri Auger elektronu yayımlanması ile doldurulan boşlukların kesrini verir. Buna göre aynı boşluk dağılımı için ϖ_i i . tabakanın ortalama floresans verimi ve $\bar{a}_i$ ortalama Auger verimi olmak üzere;

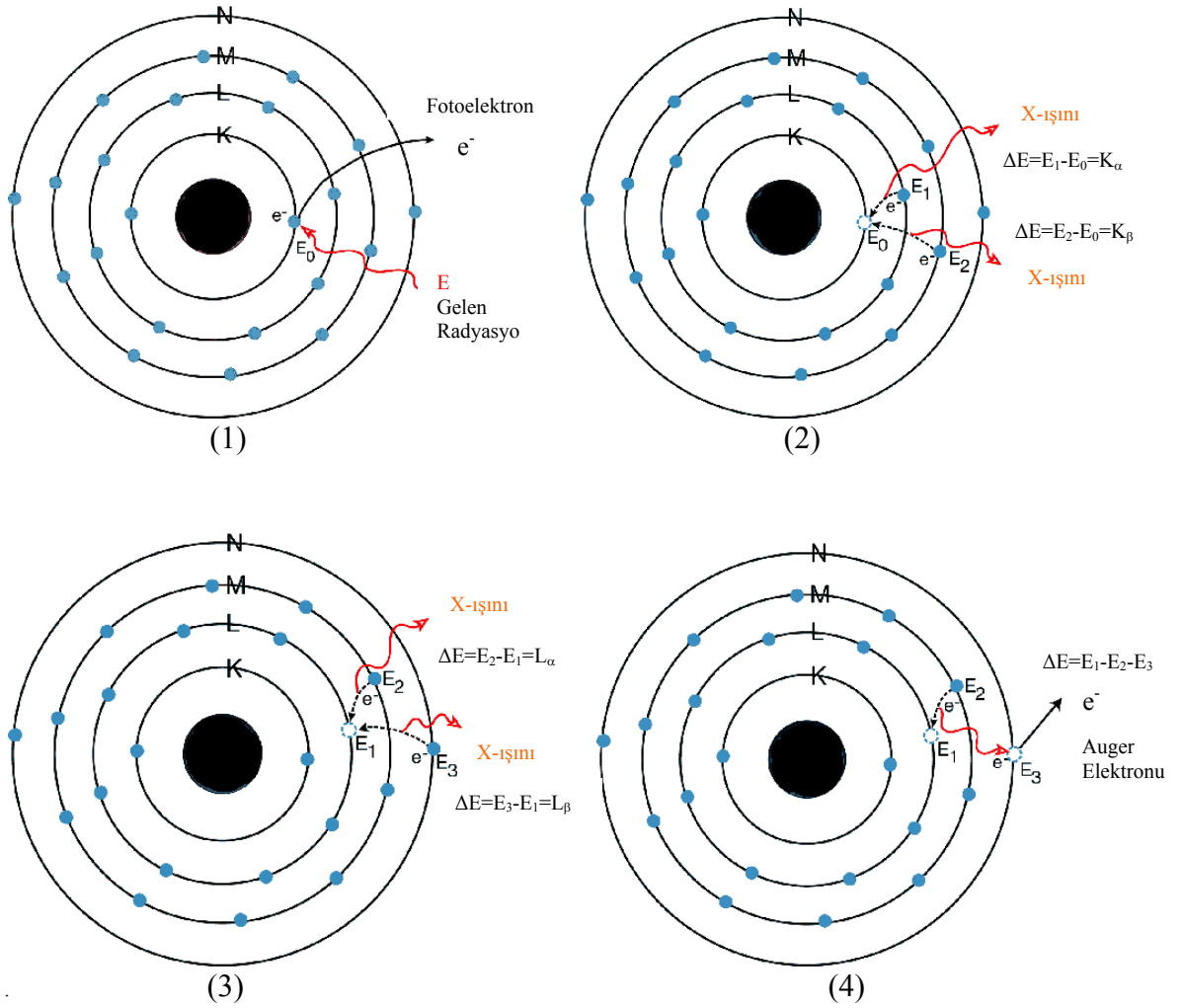
$$\varpi_i + \bar{a}_i = 1 \quad (2.17)$$

yazılabilir. X-ışını floresans olayı ve Auger olayı Şekil 2.7’de şematik olarak gösterilmiştir. Aynı tabaka içerisinde elektronlar bir alt tabakadan bir diğerine X-ışını yayımlamaksızın geçebilirler. Bu geçişlere Coster-Kroning geçişler adı verilir. K tabakasının alt tabakası bulunmadığından bu tabakada Coster-Kroning geçişleri oluşmaz. Herhangi bir i tabakası için $\omega_i = I_i/\eta_i$ şeklinde ifade edilen ortalama floresans verim Coster-Kronig geçişlerin varlığında doğru olmaz. Çünkü bir tabakada meydana getirilen boşluk daha yüksek tabakalardan geçişlerle doldurulmadan önce Coster-Kronig geçişlerle yer değiştirebilir. Bu durumda ϖ_i ortalama floresans verimi, Coster-Kronig geçişleri tarafından değiştirilen boşluk dağılımları V_i^x ve ω_i^x alt tabaka floresans verimlerinin lineer kombinasyonları olarak yazılabilir;

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

şeklinde ifade edilir. Burada V_i^x ; Coster-Kronig geçişleri olduktan sonra i alt tabakasındaki boşlukların rölatif sayısıdır (V_i^x ; Coster-Kronig geçişleri tarafından değiştirilmiş rölatif boşluk sayısı). Benzer şekilde herhangi bir tabakaya ait ortalama Auger verimi de aşağıdaki gibi verilir;

$$\bar{a}_i = \sum_{i=1}^k V_i^x a_i^x \quad (2.19)$$



Şekil 2.7. Floresans ve Auger olayları: Titanyum Atomu ($_{22}\text{Ti}$)^{*}.

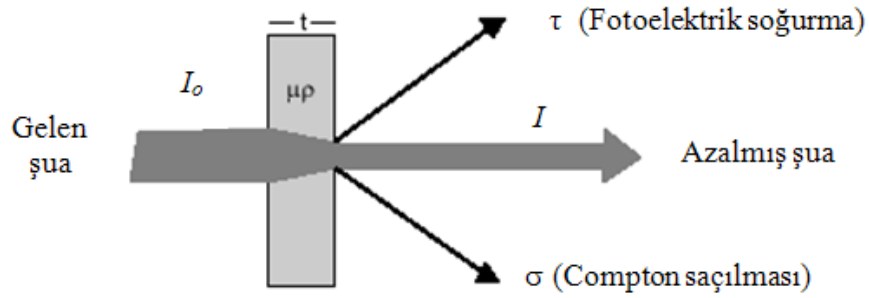
*1-Atom pirimer X-ışınları ile uyarıldığında, K tabakası elektronlarından birisi atomdan dışarı atılabilir, bunun sonucunda K tabakasında bir boşluk meydana gelir. 2-K çizgileri; L yada M tabakasından bir elektron K'da oluşan boşluğa düşebilir. Bu işlemde elementin karakteristik X-ışınları yayımlanır. Bunun sonucunda L yada M tabakasında bir boşluk üretilir. 3-L çizgileri; L tabakasında oluşan boşluk M yada N tabakasından elektron ile dolar bu işlem de elementin karakteristik X-ışını yayımlanır ve M yada N tabakasında bir boşluk oluşur. 4-Auger Elektronu; Atomun iç tabakasından yayımlanan foton daha dış tabakadaki bir elektrona aktarılabilir ve elektron atomdan dışarı atılır.

2.7. Elektromanyetik Radyasyonun Soğurulması

X-ışınlarının gözlemlenmesi onların enerji spektrumlarının ve madde ile etkileşmelerinin incelenmesi ile mümkündür. X-ışınlarının madde ile etkileşmeleri

etkileşme tarzlarına göre soğurma, saçılma ve çift oluşum olayları olarak incelenebilir.

Elektromanyetik radyasyonun soğurulmasının temel özelliği, belli bir kalınlıktaki maddeden geçerken radyasyon şiddetinde görülen azalmadır.



Şekil 2.8. X-ışınlarının bir madde ile etkileşmesi sırasında meydana gelebilecek temel olaylar.

Radyasyonun şiddetinde meydana gelen azalma Lambert Yasasına göre soğurucu malzemenin t kalınlığı ile orantılıdır. Başlangıçtaki şiddeti I_0 olan elektromanyetik radyasyonun bir soğurucu tabakasından geçtikten sonraki I şiddeti,

$$dI = -\mu I dt \Rightarrow I = I_0 e^{-\mu t} \quad (2.20)$$

olur. Bu ifade başlangıçtaki şiddeti I_0 olan bir X-ışını şuasının t kalınlıklı bir maddeyi geçtikten sonraki şiddetini verir. Lineer soğurma katsayısı olan μ (cm^{-1}) birim yüzeyde, birim kalınlık başına düşen enerji soğurma kesri olarak tarif edilir ve gelen fotonun enerjisine bağlıdır. (2.20) ifadesinden μ için;

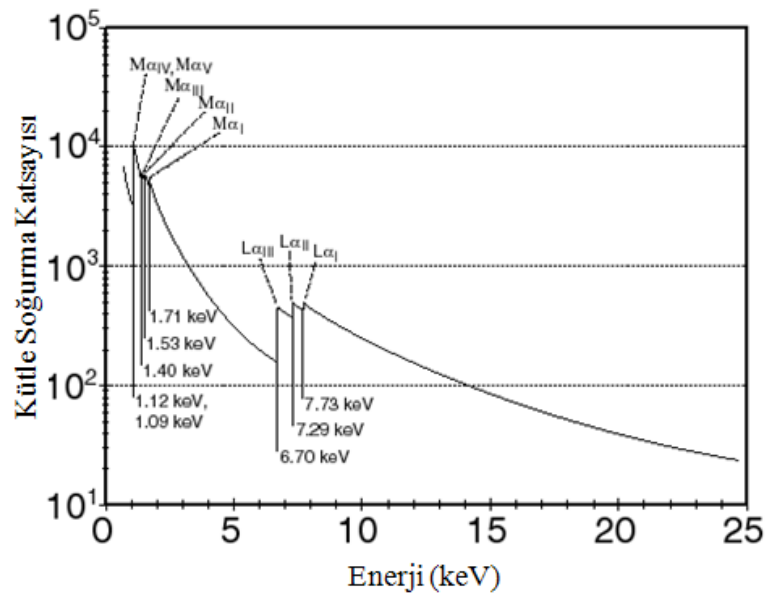
$$\mu = \frac{\ln(I/I_0)}{t} \quad (2.21)$$

yazılabilir. Lineer soğurma katsayısı μ 'nın soğurucu maddenin yoğunluğuna oranı birim zamanda birim kütle başına soğurma olarak tanımlanır ve kütle soğurma katsayısı ($\mu_m = \mu/\rho$) olarak adlandırılır.

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} = \frac{\ln(I/I_o)}{t\rho} \quad (2.22)$$

Kütle soğurma katsayısı μ/ρ 'nın değeri soğurucu materyalin fiziksel haline bağlı olmadığından dolayı lineer soğurma katsayısı μ 'den çok daha önemlidir. Kütle soğurma katsayısı direkt olarak soğurucu materyalin tabiatını yansıtır. Bu nedenle lineer soğurma katsayısından kütle soğurma katsayısını ölçmek çok daha uygundur.

Bir tabakada fotoelektrik olay meydana getirebilen minimum foton enerjisine o elementin o tabakasına ait soğurma kıyısı denir. Soğurma kıyıları ve kütle azaltma katsayılarının enerjinin fonksiyonu olarak değişimi şematik olarak Şekil 2.9'de görülmektedir.



Şekil 2.9. Samaryumun 0-25 keV arasında toplam kütle soğurma katsayılarının gösterimi. *İşaretlenmiş noktalar soğurma kıyılarıdır; her biri L ve M spektral serilerinde bir kritik uyarma potansiyeline karşılık gelir (K soğurma kıyısı 46,8 keV bölgesinin sağındadır).

3. MATERYAL ve YÖNTEM

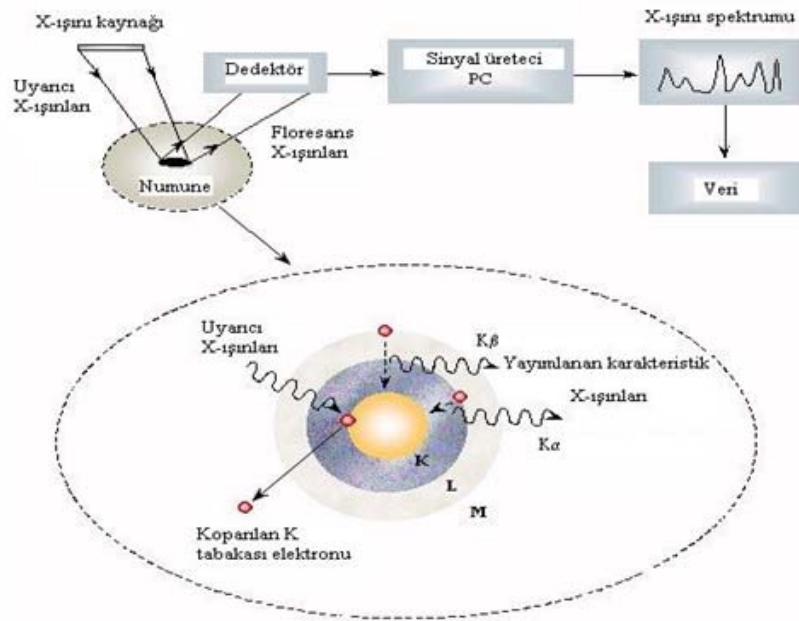
3.1. X-Işını Floresans Tekniği

X-ışını floresans (XRF) tekniği; analiz süresinin kısalığı, tahribatsız oluşu, değişik formlarda numune hazırlayabilme kolaylığı, periyodik tablodaki elementlerin hemen-hemen tamamının incelenebilmesine imkân tanınması, yüksek hassasiyet (ppm), ucuz maliyet ve otomasyon kolaylığı gibi avantajlara sahip olduğundan bilim ve teknolojide yaygın bir kullanım alanına sahiptir. XRF tekniği; atom-molekül, radyasyon ve astrofizik araştırmaları, çevre kirliliği analizleri, eczacılık, kimya ve tıbbi araştırmalar, endüstride kalite kontrol tespiti, arkeolojide çok kıymetli tarihi eserlerin incelenmesi ve yaşlarının belirlenmesi gibi çok farklı alanlarda kullanılmaktadır.

XRF spektrometreler çevresel, jeolojik, biyolojik, kimyasal, fiziksel, endüstriyel ve benzeri alanlarla ilgili numunelerin kantitatif (nicel) ve kalitatif (nitel) element analizleri için yaygın olarak kullanılırlar. Günümüzde XRF tekniği ile ilgili uygulamalar için pek çok spektrometre geliştirilmiştir. X-ışını spektrometrelerinin temel fonksiyonu karakteristik çizgi şiddetlerini ölçmek ve numuneden gelen çok enerjili şüayı ayırmaktır. Bir spektrometrenin karakteristik çizgileri ayırabilme kabiliyetine spektrometrenin rezolüsyonu (ayırma gücü) denir.

Bir spektrometre yeterli rezolüsyona sahip olmanın yanında özellikle eser element analizlerinde istatistik bakımdan önemli ölçümler yapabilmek için temel sayma üzerinde yeterince büyük bir cevap sağlamalıdır. Ayrıca spektrometre ilgilenilen enerji veya dalga boyu bölgesinde ölçüm yapabilme imkânı sunmalıdır. Bu yüzden spektrometre seçiminde rezolüsyon, cevap fonksiyonu (karakteristik pik), temel sayma seviyesi ve enerji veya dalga boyu aralığı faktörleri önemlidir. Bu faktörler birbirinden bağımsız değildir. Mesela rezolüsyonu sabit tutmak mutlak pik şiddetinin düşmesine sebep olur.

XRF tekniğinin temel prensibi Şekil 3.1’de gösterilmiştir. Bir atom herhangi bir yöntemle uyarıldığında atomun bir iç tabaka elektronu koparılabilir. Atomun temel hale geçişi (de-excitation) sırasında daha dış tabakadaki bir elektron bu iç tabakadaki boşluğu doldurur. İki tabaka arasındaki enerji farkı bir X-ışını fotonu olarak atomdan yayımlanır. Karakteristik piklerin sayısı bir karakteristik X-ışını spektrumu oluşturur. Piklerin enerjileri numunedeki elementlerin enerjilerini (kalitatif analiz), piklerin şiddeti ise elementlerin konsantrasyonlarını (semi-kantitatif yada kantitatif analiz) verir. Tipik bir XRF spektrometre; bir pirimer radyasyon kaynağı (genellikle bir radyoizotop kaynak veya X-ışını tüpü) ve numuneden yayımlanan karakteristik X-ışınlarını (sekonder X-ışınları) saymak için kullanılan bir dedektör grubundan oluşur.



Şekil 3.1. XRF tekniği ve tipik XRF analiz düzeneği.

3.2. Si(Li) Dedektörün Çalışma Prensibi

Dedektörler; X-ışını foton enerjisini; bu fotonların dedektörün aktif maddesi ile çeşitli yollarla etkileşmesi sonucu, voltaj pulsuna çeviren dönüştürücülerdir. X-ışını dedeksiyonunda kullanılan dedektörler (sayacılar); gazlı, sintilasyon ve katıhal dedektörleri olmak üzere üç gruba ayrılırlar.

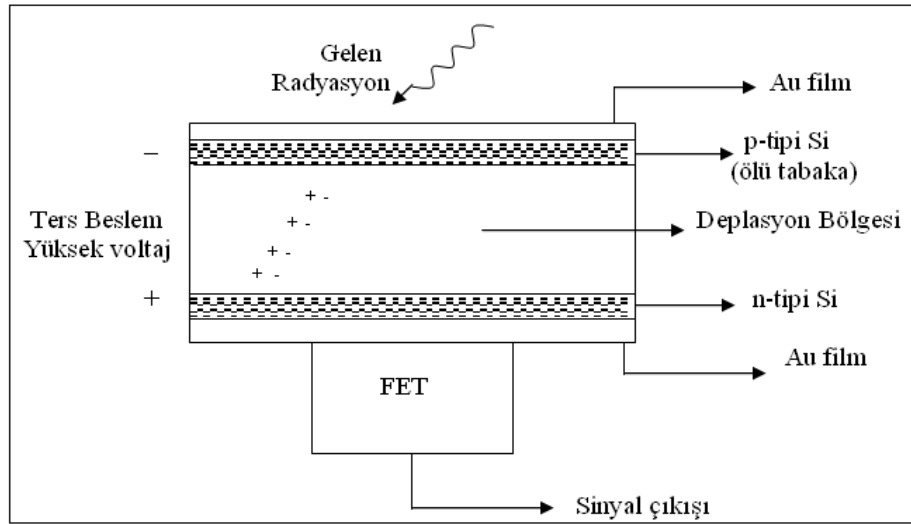
Yarı iletkenlerin düşük sıcaklıklarda iyi bir yalıtkan davranışı göstermesinden istifade ile yapılmış olan katıhal sayaçları ikincil X-ışınlarını ölçmek için yaygın olarak kullanılırlar. Karakteristik X-ışınlarının hem düşük enerji bölgesinde yer almalarından hem de enerjilerinin birbirlerine yakın olmasından dolayı bunların şiddetleri ölçülürken rezolüsyonu ve dedektör verimi çok iyi olan yarı iletken dedektörler tercih edilirler. Son yıllarda Si-PIN, HgI₂, Si-DRIFT ve CDZnTe gibi yüksek rezolüsyonlu yarı iletken dedektörler yapılmasına rağmen, Si(Li), Ge(Li) ve HPGe yarı iletken kristal dedektörler uygun şekil ve soğutma şartlarına sahip olduklarından daha yaygın olarak kullanılırlar.

Yarıiletkenlerde elektrik iletimini kontrol etmek için, az miktarda katkı maddesi ilave edilir. Katkı maddesi olarak 5 değerlik elektronlu atomlar kullanılırsa elektronlardan dördü komşu Si veya Ge ile kovalent bağ yapar ve beşinci elektron örgü içerisinde kolayca hareket edebilir. Negatif yük taşıyıcılarının fazla olduğu böyle bir yarı iletken materyale n-tipi yarı iletken denir. Eğer katkı maddesi olarak 3 değerlik elektronlu atomlardan biri kullanılırsa kristalde dört komşu atomla kovalent bağ oluşur ve pozitif yük fazlalığı meydana gelir. Pozitif yük fazlalığının olduğu böyle yarı iletken materyallere ise p-tipi yarıiletken denir. Bir sayaç kristali yapmak için p- ve n- tipi materyaller bir kontakla bir araya getirildiğinde eklem yakınındaki elektronlar ve boşluklar birleşerek yük taşıyıcılarının nötr hale geldikleri bir bölge oluştururlar. Saymada hassas olan ve alanı 30–1000 mm² olan bu bölgeye; deplasyon bölgesi, hassas bölge, tüketim bölgesi veya intristik bölge adı verilir. Yüksek dirençli bu bölgeye bir ters besleme potansiyeli uygulandığında bu bölge genişleyebilir ve gelen radyasyonlar için hassas hale gelir.

Ge(Li) ve Si(Li) dedektörler yapılırken en çok takip edilen işlem; önce p-tipi bir materyal almak ve sonra bunun yüzeyine Li atomlarını yaymaktır. Böylece n-tipi ince bir bölge oluşturulmuş olur. Ters beslem ve hafifçe artırılan sıcaklık altında Li geniş bir deplasyon bölgesi yaparak p-tipi bölgeye sürüklenir. Bu tür dedektörler Li sürüklenmiş Ge veya Li sürüklenmiş Si dedektörler olarak adlandırılırlar. Ters beslem voltajı iki etkiye sahiptir; birinci olarak deplasyon bölgesindeki elektrik alan büyüklüğünü, yük birikimini daha verimli yaparak artırır, ikinci olarak da bir tip materyalden diğerine

daha fazla yük taşıyıcısını sürükleyecek bir kuvvet uygulayarak deplasyon bölgesinin boyutlarını (dolayısıyla dedektörün duyarlı hacmini) artırır.

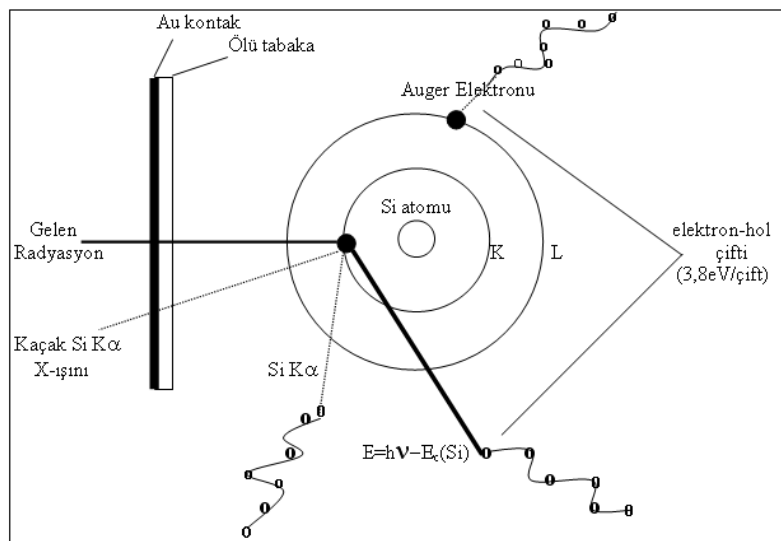
Ge(Li) veya Si(Li) dedektörlerin üretiminde oluşturulan n-tipi tabakanın kalınlığı 1mm civarındadır ve orta enerjili gamma ışınları bu kalınlığa kolayca nüfuz edebilirler. Ayrıca ince bir altın tabakası, elektriksel teması sağlamak için ön yüzeye buhar şeklinde püskürtülür (yaklaşık 200Å kalınlığında). Lityum sürüklenmiş silikon yüzeyine buharlaştırılan bu altın filimler elektrot görevi görürler. p-tipi bölgede (kristal sayacın girişinde) sayıma katkısı bulunmayan bölgeye ölü tabaka adı verilir. Bir Si(Li) dedektörün şematik gösterimi Şekil 3.2’de verilmiştir.



Şekil 3.2. Bir Si(Li) katıhal dedektörünün şematik gösterimi.

Dedektörün en önemli iki fiziksel özelliği; kalınlığı ve alanıdır. Soğurma verimliliği dedektör kalınlığı arttıkça artar. Sayım için önemli bir faktör olan geometrik verim ise dedektör alanı arttıkça artar, ancak bu rezolüsyonu azaltır. Katıhal sayacına fotonlar geldiğinde altın elektrot ve ölü tabakayı geçerek deplasyon bölgesinde Si atomlarını uyararak + ve – iyon çiftleri oluştururlar. Bu işlem sırasında fotonlar enerjilerinin büyük bir kısmını fotoelektronlara aktarırlar. Bu fotoelektronlar enerjileri bitinceye kadar yolları üzerinde elektron-hol çiftleri oluştururlar. Uygulanan ters beslem (-500V) nedeniyle meydana gelen elektrik alan elektron–hol çiftlerini toplar. Ters beslem

nedeniyle elektronlar n-tipi boşluklar (holler) p-tipi bölgeye yönelirler. Sonuçta dedektöre gelen foton enerjisi ile orantılı sayıda elektron-hol çifti oluşur. Sayaç maddesinin seçiminde elektron hol çifti veriminin büyük olması, yani elektron hol çifti başına düşen enerjinin küçük olması tercih edilir. Bir Si(Li) dedektörde bir elektron-hol çifti meydana getirebilmek için gerekli enerji 3,8 eV, Ge(Li) dedektörde ise 2,9 eV'dur. Aynı fotonun meydana getirdiği + ve - yükler çeşitli etkileşmelerden sonra tekrar birleşebilirler ki bu olaya rekombinasyon denir. Katıhal sayaçlarında sayaç içi bir amplifikasyon olmadığından bu sayaçlarda alçak gürültü ve yüksek kazançlı ön amplifikatöre ihtiyaç vardır. Bu iş için genellikle FET (field-effect-transistör) kullanılmaktadır. FET toplanan yükü akım pulslarına dönüştürmektedir. Dedektör elementi ve dedektör kapasitansındaki sızıntı akımı sistemin gürültüsüne ve rezolüsyonun düşmesine neden olur. Sızıntı akımından kaynaklanan gürültü sıvı azot sıcaklığında (-196°C) ihmal edilebilir bir dereceye düşmektedir. Mikrofonik gürültü üretilmesi de rezolüsyon genişlemesinin önemli bir kaynağıdır. FET'in sıvı azot sıcaklığında ve dedektöre yakın tutulması mikrofonikleri azaltmaktadır. Dedektörün sıvı azot içerisinde tutulması bulk materyal içindeki termal olarak uyarılmış taşıyıcılardan (lityum oda sıcaklığında çok yüksek difüzyon hızına sahiptir) kaynaklanan elektriksel gürültüyü de minimuma indirir. Bir Si(Li) dedektörün çalışma prensibi Şekil 3.3'de verilmiştir.



Şekil 3.3. Si(Li) dedektörde X-ışını dedeksiyon işlemi.

*Gelen radyasyon dedektördeki Si atomlarının iyonize olmasına neden olur. Gelen radyasyonun enerjisinin bir elektron hol çifti oluşturabilmek için gerekli olan $E_c=3,8\text{eV}$ 'dan büyük olması gerekir.

Katıhal sayaçlarının avantajları aşağıdaki gibi sıralanabilir:

1. Diğer sayaçlara göre enerji dönüşümü çok verimlidir. Si(Li) ve Ge(Li) için sırasıyla 3,8 ve 2,9 eV başına bir elektron hol çifti meydana gelmektedir.
2. Çok iyi rezolüsyona sahiptirler; 6–8 keV enerjili fotonlar için yarı maksimumdaki tam genişlik (FWHM) 130 eV'a kadar düşmektedir. Dolayısıyla atom numaraları birbirine çok yakın olan birçok elementin spektral çizgileri kolayca ayrılabilir.
3. ~1000 sayma/saniye ye kadar olan şiddetlerde puls-yükseklik kayması ve puls genişlemesi olmamaktadır.
4. Yeterli kalınlıktaki katıhal sayaçlarının kullanıldıkları spektral bölgedeki verimleri çok fazla olmaktadır.
5. Sayaç hacminin küçük olması bakımından numunenin istenildiği kadar yakınında kullanılabilme imkânı vardır (Kurucu 1990).

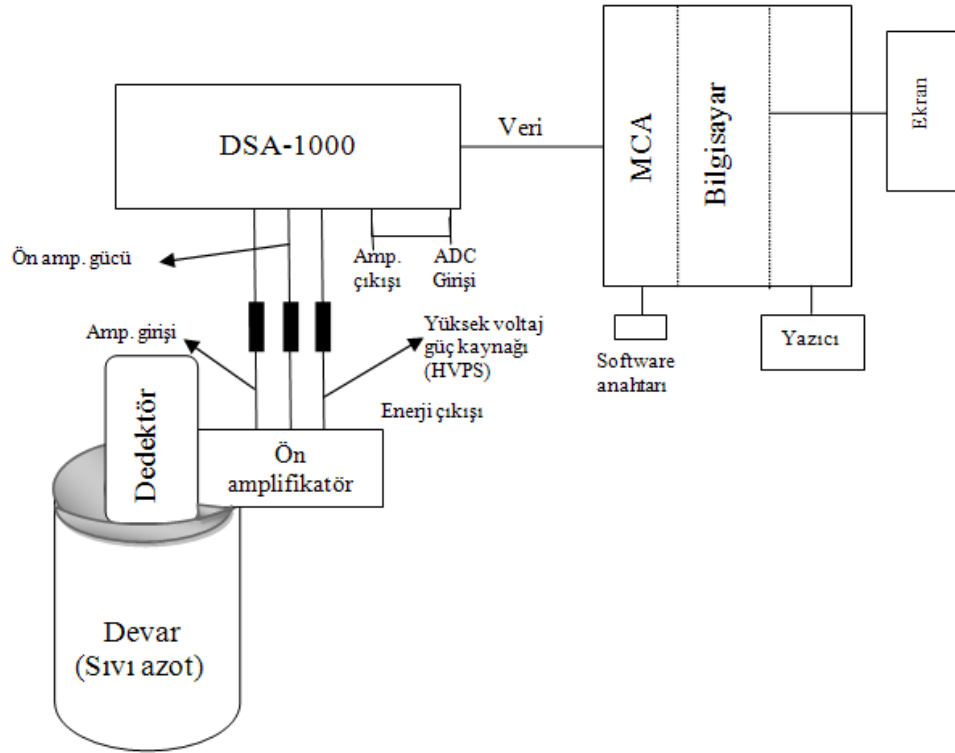
Katıhal sayaçlarının dezavantajları ise:

1. Lityumun yüksek mobilitesi önemli bir gürültü seviyesine sebep olmaktadır. Yüksek sıcaklıklarda dedektör karakteristikleri değişebileceğinden sıvı azot sıcaklığına ihtiyaç duyulmaktadır.
2. Sıvı azot sıcaklığında bile gürültü seviyesinin yüksek olmasından dolayı katıhal dedektörlerinin düşük atom numaralı elementlerle ilgili kullanımı sınırlıdır.
3. Saniyede ~ 20000 sayımdan fazla şiddetler için dedektör rezolüsyonu artan şiddetle hızla kötüleşmektedir.

4. Katıhal dedektörlerin rezolüsyonu küçük atom numaralı elementlerde sintilasyon dedektörlerine kıyasla düşüktür.
5. İyi rezolüsyon için etkin alanları küçüktür (Demir 2005).

3.3. Sayma Sistemi

Sayma sistemi bir dedektör (ön yükseltici ile birlikte), yükseltici, analog sayısal dönüştürücü (ADC), yüksek voltaj kaynağı, çok kanallı analizör (MCA) sistemin tüm birimlerini yöneten spektrumları alan ve değerlendirmede kullanılan Genie-2000 programının yüklü olduğu bir bilgisayar ile sistemin diğer birimleri arasında interface görevi yapan bir dangedan (software key) oluşmaktadır (Şekil 3.4). Kullandığımız DSA-1000 sayma sistemi, yüksek voltaj güç kaynağı, yükseltici, ADC ve MCA'yı ihtiva etmektedir. Yüksek voltaj güç kaynağı, amplifikatör ve ADC'nin koşulları Genie-2000 programı ile kontrol edilmektedir. DSA-1000, gelişmiş dijital sinyal proses teknikleriyle donanımlı çok kanallı bir analizördür. DSA-1000, sinyal prosesinin sonrasında sinyalleri sayısallaştıran dönüştürücü sistemlerden farklı olarak sinyal prosesinin öncesinde ön yükselticiden alınan sinyalleri sayısallaştırır. Analog devre sayısının azalmasıyla hassasiyet, yeniden üretilebilirlik ve kararlılığın artması sağlanmış olur. Dijital sinyal proseslerinin kullanımı pulsların daha hızlı ve hassas olarak işlenmesini sağlayarak sinyal toplama performansının ve spektrum rezolüsyonunun artmasını sağlar.



Şekil 3.4. Sayma sistemi.

3.3.1. Yüksek Voltaj Kaynağı

Dedektörde meydana gelen yükleri toplamak için dedektör üzerine yüksek gerilim uygulanmalıdır. En iyi çalışma gerilimi; çalışma öncesinde deneyci tarafından belirlenir ve bu gerilim küçük bir dedektör için birkaç yüz volt, büyük bir dedektör için beş bin volta kadar değişebilir. Bu çalışma boyunca dedektöre uygulanan gerilim -500V dur.

3.3.2. Ön Yükseltici

Yarı iletken dedektörler ile yüke hassas bir ön yükseltici kullanılır. Elektronik gürültüyü minimize etmek için, genellikle bir alan etkili transistör (FET) olan ön yükselticinin girişi dedektör ile birlikte sıva azot içerisinde muhafaza edilir. Ön yükseltici dedektörden gelen yükü voltaj pulsuna dönüştürür. Ön yükselticiden çıkan pulsların

yükseklikleri veya genlikleri dedektörde toplanan yük miktarı eğer fotonun bütün enerjisi dedektörde soğurulmuş ise fotonun enerjisi ile orantılı olmalıdır.

3.3.3. Yükseltici

Bir yükselticinin birinci görevi; ön yükselticinin çıkış puls genliklerini ayırt etmek ve sayılması için uygun voltaj seviyelerine yükseltmek, ikinci görevi ise; pulsları, puls genliği ve x-ışını fotonu arasındaki orantılı ilişkiyi aynen koruyarak işleme uygun bir hale getirmektir. Kullanıcı puls genişliğini belirleyen şekillendirme zamanı (shaping time) sabitinin seçimine dikkat etmelidir. Bir spektrumdaki pikler için en iyi rezolüsyon genellikle daha uzun zaman sabitiyle elde edilebilir çünkü sistem daha uzun bir zaman üzerinden gürültünün ortalamasını alabilir. Bununla birlikte, daha uzun zaman sabitleri yüklerin daha fazla rastgele toplanmasına neden olur (Debertin and Helmer 1988).

3.3.4. Analog Sayısal Dönüştürücü (ADC)

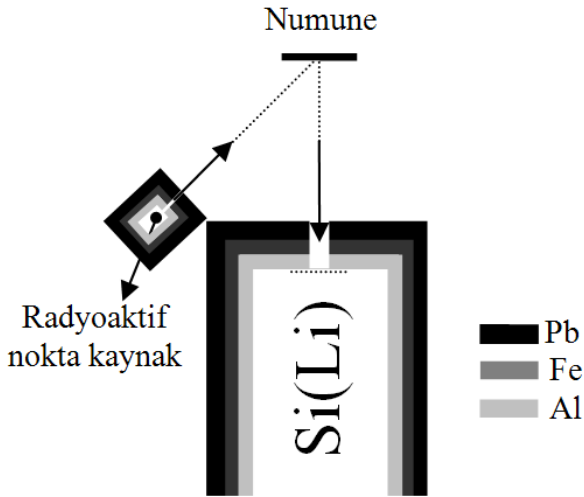
Analog sayısal dönüştürücünün (ADC) görevi yükselticiden gelen analog pulsunu, onun genliğiyle (dolayısıyla X-ışını fotonunun enerjisiyle) orantılı bir tam sayıya çevirmektir. Ön yükselticiden gelen potansiyel pulsları liner yükselticide büyültüldükten sonra ADC'ye gönderilirler. ADC'de analog işlemleri yapılan bu pulslar çok kanallı analizöre gönderilir ve orada enerjilerine karşılık gelen kanallarda sayılırlar. Bu sayımlar sonucu sayacın ayırma gücüyle ilgili olarak aynı enerjili karakteristik X-ışınları bir pik oluştururlar. Bu pikler bir araya geldiğinde enerjiye veya dalga boyuna karşı şiddeti desenleri oluştururlar ki bu desene X-ışını spektrumu denir.

3.3.5. Çok Kanallı Analizör (MCA)

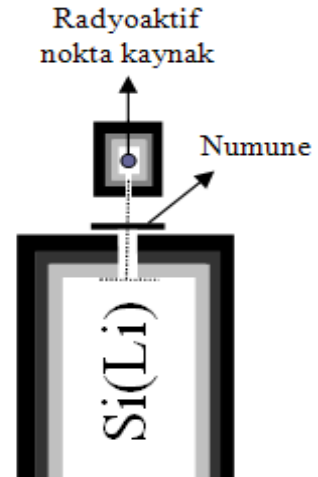
Çok kanallı analizör (MCA) sayısal hale getirilmiş pulsları uygun gelen kanallara yerleştirir ve bilgisayar hafızasına kaydeder. Her kanal kalibrasyon işlemiyle belirlenmiş olan belli bir enerji aralığına düşen pulsları sayar.

3.4. Ölçme Sistemleri ve Deney Geometrileri

Bu çalışmada dedektörün aktif çapı 3,91 mm, aktif alanı 12 mm² ve 5,9 keV’de FWHM’u 160 eV olan bir Si(Li) dedektör kullanılmıştır. Deney süresince sayaç kristali ve FET 30 litrelik bir sıvı azot kabında, sıvı azot sıcaklığında tutulmuştur. Dedektör dış ortamdan gelebilecek yüzey kirlenmelerini önlemek için 0,025 mm kalınlığında bir berilyum pencere ile koruma altına alınmıştır. Ölçümler sırasında dedektör penceresinin zarar görmesini önlemek ve temel sayım etkilerini azaltmak için en içte 1mm kalınlığında alüminyum, ortada 1,1 mm kalınlığında demir ve en dışta 4,2 mm kalınlığında kurşundan oluşan bir kolimatör kullanılmıştır. Dedektörün bulunduğu ölçüm laboratuvarı kurşun kaplıdır. Detektörün bu laboratuvar içindeki konumu mümkün olduğunca az saçılmış X-ışını alacak şekilde belirlenmiştir. Ölçü alma süresince çevresel şartların değiştirilmemesine dikkat edilmiştir. Numuneleri uyarmak için 10 mCi Cd-109 ve 100 mCi Am-241 radyoizotop nokta kaynaklar kullanılmıştır. Ölçümler için hazırlanan deney geometrileri Şekil 3.5 ve 6’da verilmiştir.



Şekil 3.5. Karakteristik K X-ışınlarını ölçmek için kullanılan deney geometrisi.



Şekil 3.6. Kütle soğurma katsayılarını belirlemek için kullanılan deney geometrisi.

MCA için Genie-2000 programında 4096 kanal seçilmiş Cd-109, Am-241, Ba-133 kaynakları ve bazı elementlerin enerjileri bilinen K X-ışını pikleri kullanılarak kalibrasyon işlemi yapılmıştır. Elde edilen kalibrasyon denklemi;

$$E(\text{keV}) = -8,146 \cdot 10^{-1} + 8,460 \cdot 10^{-3} \cdot K - 8,101 \cdot 10^{-7} \cdot K^2 + 1,374 \cdot 10^{-10} \cdot K^3 \quad (3.1)$$

şeklindedir. Burada K kanal sayısını göstermektedir. Genie-2000 programında alınan spektrumlar, Mathlab 7.0 programında yazılan ve Genie-2000 programının formatına göre elde edilmiş ham verileri bir text-dosyası formatına çeviren program vasıtasıyla tekst-dosyasına dönüştürülerek, Microcal Origin 7.5 programında çizdirilmiştir. Bu program kullanılarak piklerin enerjileri ve net alanları belirlenmiştir.

3.5. Numunelerin Hazırlanması

Numuneler hazırlanırken alaşım yapmak için kullanılan saf 3d geçiş metallerinden belli konsantrasyonlarda alınmış ve alaşım için toplam konsantrasyonun bir olması sağlanmıştır. Toz numuneler önce bir akik el havanı kullanılarak öğütülmüş daha sonra homojen bir dağılım elde etmek için numune mixerinde 30 dakika karıştırılmıştır. Böylece parçacık büyüklüğü ve soğurma etkileri imkânlar dâhilinde en aza indirilmiştir. Bu karışımlar, 0,65 cm yarıçaplı tabletler haline getirmek için 8 ton basınç altında preslenmiştir. Tabletlerin kütleleri 10^{-5} gram hassasiyete sahip bir terazi ile tartılmıştır.

3.6. X-Işını Şiddet Oranlarının Ölçülmesi

K tabakasının fotoiyonizasyonu ile oluşan boşlukların doldurulması sonucu yayımlanan karakteristik K X-ışınları için şiddet, K tabakasına ait atomik parametreler kullanılarak;

$$I_{K_i} = I_K(E) \omega_K F_{K_i} \quad i = \alpha, \beta \quad (3.2)$$

ifadesinden belirlenebilir. Burada $I_K(E)$; elementin K tabakası için E uyarma enerjisinde X-ışını şiddeti (Scofield 1973) ve ω_K ; K tabakası floresans verimidir (Hubbell 1994). F_{K_i} ; K_i X-ışınları için kısmi emisyon hızı olup K_α ve K_β X-ışınları için;

$$F_{K_\alpha} = [1 + (I_{K_\beta} / I_{K_\alpha})]^{-1} \quad F_{K_\beta} = [1 + (I_{K_\alpha} / I_{K_\beta})]^{-1} \quad (3.3)$$

şeklinde ifade edilirler. $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ değerleri Scofield (1973)'in tablosundan alınmıştır.

XRF tekniğinde herhangi bir karakteristik K_i X-ışını çizgi şiddeti deneysel olarak;

$$I_{K_i} = N_{K_i} [I_0 G \varepsilon_{K_i} \beta t]^{-1} \quad (3.4)$$

ifadesi ile belirlenebilir. Burada N_{K_i} ilgilenilen pikin altındaki net sayım, I_0 uyarıcı radyasyonun şiddeti, G geometri faktörü, ε_{K_i} K_i X-ışını grubu için dedektör verimi, t numunenin kütle kalınlığı (g/cm^2) ve β uyarıcı fotonlar ve yayımlanan K X-ışını fotonları için öz soğurma düzeltme faktörüdür ve aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$\beta_{K_i} = \frac{1 - \exp[-(\mu_i/\cos\theta_1 + \mu_e/\cos\theta_2)t]}{(\mu_i/\cos\theta_1 + \mu_e/\cos\theta_2)t} \quad (3.5)$$

Burada μ_i ve μ_e sırasıyla uyarıcı fotonlar ve yayımlanan karakteristik X-ışınları için kütle soğurma katsayılarıdır (cm^2/g). θ_1 ve θ_2 sırası ile uyarıcı fotonların ve yayınlanan X-ışınlarının çalışılan geometride numune yüzeyinin normali ile yaptıkları açılardır ve bu çalışmada $\theta_1=45^\circ$ ve $\theta_2=0^\circ$ dir. μ_i ve μ_e değerleri WinXCOM (Gerward *et al.* 2001) programı kullanılarak hesaplanabilir. (3.4) ifadesinde yer alan I_0 , G ve ε 'nin ayrı-ayrı ölçülmesi veya hesaplanması oldukça zor ve zaman alıcıdır. Fakat bunların çarpımı olan $I_0 G \varepsilon$, ilgili enerji bölgesinde çizgileri olan çeşitli elementlerin K X-ışınlarının şiddetleri ölçülmek suretiyle belirlenebilir. Bu ölçüler asıl ölçülerin alındığı deney geometrisi ve ortam şartları muhafaza edilerek alınmalıdır. (3.4) ifadesinden hareketle;

$$I_0 G \varepsilon_{K_i} = N_{K_\alpha} [I_{K_\alpha} \beta t]^{-1} \quad (3.6)$$

yazılabilir. I_{K_α} 'nın değerleri (3.6) ifadesinde farklı uyarma enerjileri için kullanılırsa, herhangi bir enerji için $I_0 G \varepsilon$ değeri belirlenebilir. Bu değerler uyarma enerjisi E 'nin bir fonksiyonu olarak çizilirse, bu grafikten asıl ölçülerde kullanılan uyarıcı foton enerjisindeki $I_0 G \varepsilon$ değeri bulunabilir. Esasen $I_0 G \varepsilon$ enerjinin fonksiyonu olarak

$$E_{K_\alpha}^3 \log(I_0 G \varepsilon) = A_0 + A_1 \cdot E_{K_\alpha} + A_2 \cdot E_{K_\alpha}^2 + A_3 \cdot E_{K_\alpha}^3 + A_4 \cdot E_{K_\alpha}^4 \quad (3.7)$$

bağıntısına fit edilebilir. İstenilen enerjideki $I_0 G \varepsilon$ değeri buradan kolaylıkla elde edilebilir. Burada $E_{K\alpha}$ $K\alpha$ X-ışını enerjisi A_0, A_1, A_2, A_3 ve A_4 en küçük kareler metodundan bulunabilecek sabitlerdir. Bu şekilde bulunan fit edilmiş değerlerle deneysel değerler arasındaki fark %2'den küçüktür. Aslında bu farkın önemli bir kısmı K veya $K\alpha$ tepesinin tek enerjili tepe olmamasından, dolayısıyla enerji için hesaplanan ortalama değerlerin enerjiyi tam temsil etmemesinden kaynaklanmaktadır (Demir 2005).

Buna göre $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ K X-ışını şiddet oranları için (3.4) ifadesinden hareketle;

$$\frac{I_{K\beta}}{I_{K\alpha}} = \frac{N_{K\beta}}{N_{K\alpha}} \frac{\beta_{K\alpha}}{\beta_{K\beta}} \frac{\varepsilon_{K\alpha}}{\varepsilon_{K\beta}} \quad (3.8)$$

eşitliği yazılabilir. Burada $N_{K\beta}, N_{K\alpha}$; ilgili piklerinin altındaki net sayım, $\beta_{K\beta}, \beta_{K\alpha}$ numunenin ilgilenilen çizgileri için öz soğurma düzeltme katsayıları ve $\varepsilon_{K\alpha}, \varepsilon_{K\beta}$ ilgili K X-ışınları için dedektör verimleridir.

3.7. Kütle Soğurma Katsayılarının Ölçülmesi

Farklı materyal ve enerjiler için kütle soğurma katsayıları transmission ile belirlenebilir. Bu işlem aşağıdaki eşitlik ile açıklanır (Han and Demir 2009).

$$I = I_0 e^{-\mu_m t} \quad (3.17)$$

Burada I_0 madde üzerine gelen fotonların soğurulma olmadan önceki şiddetini ve I maddeden soğurulmadan geçen fotonların şiddetini gösterir. $\mu_m = \mu/\rho$ (cm^2/g) kütle soğurma katsayısı ve t (g/cm^2) numunenin kütle kalınlığı (birim alan başına kütle) dir. Buna göre μ_m için;

$$\mu_m = \frac{\ln(I/I_0)}{t}$$

ifadesi yazılabilir. Herhangi bir enerjiye sahip X- veya γ - ışınları için t kütle kalınlığına sahip bir materyalin μ_m değeri başlangıçtaki şiddeti I_o ve maddeyi geçtikten sonraki şiddet I ölçülmek suretiyle belirlenebilir. Çok elementli kompoze bir materyal için toplam kütle soğurma katsayısı her bir elementin kütle soğurma katsayılarının karışım kuralına göre toplamıdır.

$$\mu_m = \sum_i \omega_i (\mu_m)_i \quad (3.18)$$

Burada ω_i i . elementin ağırlık kesri, $(\mu_m)_i$ ise i . elementin kütle soğurma katsayısıdır. Çok elementli bir materyal için ağırlık kesri;

$$\omega_i = \frac{n_i A_i}{\sum_j n_j A_j} \quad (3.19)$$

ifadesi ile verilebilir. Burada A_i i . elementin atom numarası ve n_i materyaldeki sayısıdır.

İlgilenilen materyallerin belli enerjilerdeki X- veya γ - ışınları için kütle soğurma katsayıları Berger and Hubbell (1987,1999) tarafından ilk versiyonu 1987 yılında hazırlanan ve 1999 yılında 3.01 versiyonu düzenlenen XCOM programının Windows altında çalışan versiyonu olan WinXCOM (Gerward *et al.* 2001) programı kullanılarak bulunabilir. Bu program tüm element, bileşik ve karışımlar için standart ve seçilen enerjilerde kısmi ve kütle soğurma katsayılarını hesaplamak için karışım kuralını kullanır.

Bu çalışmada hazırlanan alaşımlar için kütle soğurma katsayıları 10 mCi Cd-109 ve 100 mCi Am-241 radyoaktif nokta kaynaklardan yayımlanan 22,1; 25,0; 59,5 ve 88 keV enerjili fotonlar için ölçüldü. Her bir numune ve enerji için I_o ve I şiddetleri üçer kez bir Si(Li) dedektör kullanılarak ölçülmüştür. Ölçümler için hazırlanan deney geometrisi Şekil 3.6'da verilmiştir.

3.8. Etkin Atom ve Elektron Sayılarının Ölçülmesi

Kompoze bir materyal için toplam atomik tesir kesiti (σ_t) ilgilenilen enerji için toplam kütle soğurma katsayısı ölçülerek belirlenebilir. σ_t ve μ_m arasında;

$$\sigma_t = \frac{\mu_m N}{N_A} \quad (3.20)$$

şeklinde bir ilişki vardır (Wang *et al.* 1995). Burada N materyalin atomik kütlesi ve N_A Avagadro sayısıdır. İlgilenilen element için toplam elektronik tesir kesiti (σ_e);

$$\sigma_e = \frac{1}{N_A} \sum \frac{f_i N_i}{Z_i} (\mu_m)_i = \frac{\sigma_t}{Z_e} \quad (3.21)$$

ifadesinden hesaplanabilir (Singh *et al.* 2002). Burada f_i ; $f_1 + f_2 + f_3 + \dots + f_n = 1$ olacak şekilde atom numaralarına göre i . elementin kısmi bolluğudur. Z_i ise i . elementin atom numarasıdır. (3.21) ifadesinden görüldüğü üzere σ_t ve σ_e materyalin etkin atom numarası (Z_e) ile;

$$Z_e = \frac{\sigma_t}{\sigma_e} \quad (3.22)$$

şeklinde ilişkilidir (Singh *et al.* 2002). Buradan hareketle etkin elektron sayısı veya elektron yoğunluğu N_e için;

$$N_e = \frac{N_A}{N} Z_e \sum n_i = \frac{\mu_m}{\sigma_e} \quad (3.23)$$

ifadesi yazılabilir.

Bu çalışmada incelenen alaşımlar için toplam atomik ve elektronik tesir kesitleri (σ_t ve σ_e), etkin atom numaraları ve elektron sayıları (Z_e ve N_e) ölçülen toplam kütle soğurma katsayıları (μ_m) kullanılarak, (3.20-23) denklemlerinden elde edilmiştir.

4. ARAŞTIRMA BULGULARI ve TARTIŞMA

Bu çalışma üç kısımdan oluşmaktadır. Çalışmada farklı oranlarda 3d geçiş metalleri içeren çeşitli alaşım grupları hazırlanmıştır. Hazırlanan birinci gruptaki alaşımlar için K X-ışınları hemen, ikinci gruptaki alaşımlar için numuneler adım-adım artan belli sıcaklıklarda tavlaniş her bir sıcaklıktan sonra ölçülmüştür. Üçüncü gruptaki alaşımlar için ise farklı enerjilerde kütle soğurma katsayıları ölçülmüştür.

Çalışmanın birinci kısmında erişilen bulgular bu bölümde 4.1-7 başlıkları altında her bir alaşım grubu için ayrı ayrı verilmiştir. Ardından çalışmanın ikinci kısmında elde edilen bulgular 4.8 ve üçüncü kısmında elde edilen bulgular ise 4.9 başlıkları altında sunulmuşlardır.

Çalışmanın birinci kısmında;

Saf 3d geçiş metallerinde ve bunlardan farklı oranlarda kullanılarak hazırlanan mekanik alaşımlarda, ilgili 3d geçiş metalleri için $K\alpha$, $K\beta$ pik tepesi enerjilerinin, FWHM'lerinin, $K\alpha$, $K\beta$ ve tüm K pikleri altında kalan alanların değerleri tablolar halinde sunulmuştur.

Alaşıımı oluşturan geçiş metallerinin konsantrasyonlarındaki değişimlere bağlı olarak alaşımlardan elde edilen K X-ışını spektrumları saf metallerle kıyaslamalı olarak grafikler halinde verilmiştir. Ayrıca alaşıımı oluşturan geçiş metalleri için K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri çizilmiştir.

Tüm numuneler için K X-ışını şiddet oranlarının; herhangi bir düzeltme işlemine tabi tutulmamış değerleri ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$), gerekli düzeltme işlemleri yapıldıktan sonraki değerleri ($I_{K\beta}/I_{K\alpha}$) ve alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş değerleri ($R_{K\beta}/R_{K\alpha}$) çizelgeler halinde sunulmuştur.

Alaşımları oluşturan ilgili metaller için deneysel olarak elde edilen $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ şiddet oranları bu metallerin farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları sonucu elde edilmiş değerler ile karşılaştırmalı bir şekilde grafiksel olarak gösterilmiştir.

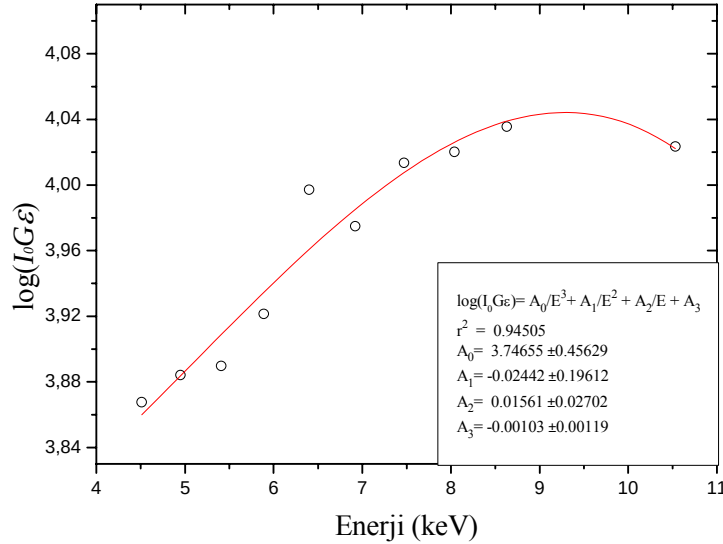
Alaşımları oluşturan geçiş metalleri için 3d elektronlarının sayısı (n_{3d}), 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı ($n_{4s,4p}$), saf metale kıyasla 3d elektron sayısındaki değişimler (Dn_{3d}); ölçülen $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenmiş ve çizelgeler halinde sunulmuştur. Ayrıca alaşımı oluşturan metaller için 3d elektron sayıları ve pür metallere kıyasla 3d elektron sayılarında meydana gelen rölatif değişimler elementlerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak çizilmiştir.

Alaşımlar için 3d ve 4s, 4p elektronlarının toplam sayıları Tn_{3d} ve $Tn_{4s,4p}$, saf metaller için ölçülen değerlerin alaşımlar için ağırlıklı toplamından elde edilen 3d ve 4s, 4p elektronlarının toplam sayıları Tn_{3d}^* ve $Tn_{4s,4p}^*$ ile birlikte çizelgeler halinde verilmiştir.

Çalışmanın birinci kısmında elde edilen bulgular; Fe_xNi_{1-x} ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımları için Şekil 4.1.1-5 ve Çizelge 4.1.1-3'de, Ni_xCr_{1-x} ($x=0,8; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,2$) alaşımları için Şekil 4.2.1-5 ve Çizelge 4.2.1-3'de Fe_xCr_{1-x} ($x=0,9; 0,7$ ve $0,5$) alaşımları için Şekil 4.3.1-5 ve Çizelge 4.3.1-3'de, $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ ($x=0,7-y=0,1; x=0,5-y=0,2; x=0,4-y=0,3; x=0,3-y=0,3; x=0,2-y=0,2$

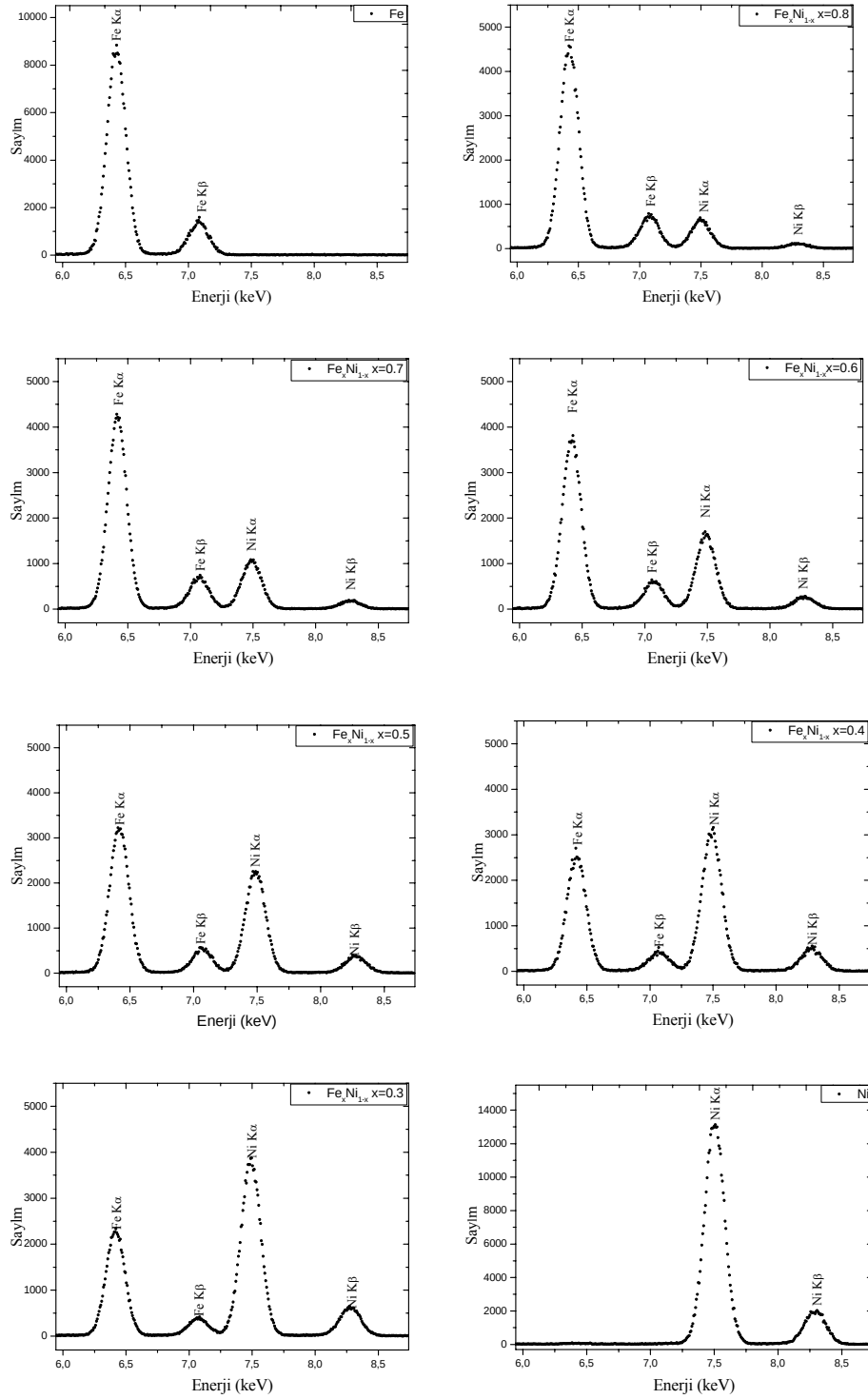
ve $x=0,1-y=0,2$) alaşımları için Şekil 4.4.1-5 ve Çizelge 4.4.1-3’de, Ti_xNi_{1-x} ($x=0,7; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,3$) alaşımları için Şekil 4.5.1-5 ve Çizelge 4.5.1-3’de, Co_xCu_{1-x} ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımları için Şekil 4.6.1-5 ve Çizelge 4.6.1-3’de ve Ti_xCo_{1-x} ($x=0,7; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,3$) alaşımları için Şekil 4.7.1-5 ve Çizelge 4.7.1-3’de alaşımları oluşturan ilgili 3d geçiş metalleri ile birlikte verilmişlerdir.

Şiddet oranlarını belirlemek için Scofield (1973, 1974) ile Hubbell (1994)’in tablolarından ve (3.10) denkleminde yararlanılmıştır. K X-ışını şiddet oranlarını hesaplamak için gerekli olan verim faktörünü ($I_0G\varepsilon$) elde etmek için ana ölçülerin alındığı deney geometrisinde aynı deney koşulları muhafaza edilerek ilgili enerji bölgesine düşen K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se ve Br K X-ışınları ölçülmüş ve elde edilen K X-ışını şiddetlerinden faydalanılmıştır. Bu şekilde elde edilen $I_0G\varepsilon$ değerlerinin enerjiye göre değişimi Şekil 4.1’de verilmiştir.

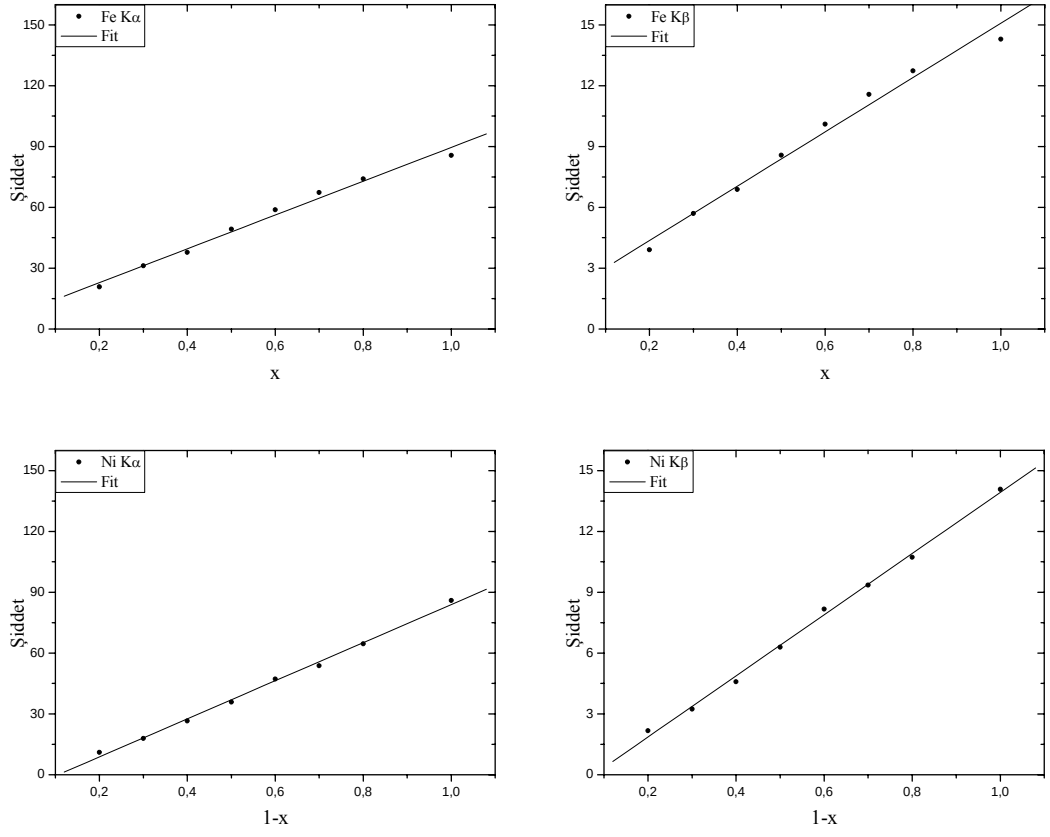


Şekil 4.1. K X-ışını şiddet oranlarını hesaplamak için $I_0G\varepsilon$ değerleri.

4.1. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma



Şekil 4.1.1. Fe, Ni ve $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.



Şekil 4.1.2. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.

Çizelge 4.1.1. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Kα ve Kβ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM’ları ve pik alanları N.

Element veya alaşım	E (keV)				FWHM (eV)				N (sayım)				
	Fe		Ni		Fe		Ni		Fe		Ni		K _T
	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	
Fe	6,405	7,056	—	—	3,401	3,578	—	—	163398,748	27264,098	—	—	190662,846
Fe _{0,8} Ni _{0,2}	6,403	7,055	7,471	8,257	3,413	3,627	3,589	4,207	121688,282	20905,876	18077,751	3560,975	164232,884
Fe _{0,7} Ni _{0,3}	6,404	7,054	7,472	8,258	3,387	3,601	3,594	3,934	112185,681	19288,890	29838,243	5407,293	166720,107
Fe _{0,6} Ni _{0,4}	6,404	7,056	7,473	8,256	3,407	3,641	3,514	3,855	99890,391	17160,768	44990,893	7792,625	169834,678
Fe _{0,5} Ni _{0,5}	6,403	7,055	7,473	8,259	3,423	3,605	3,569	3,811	86899,012	15141,990	63347,197	11108,467	176496,666
Fe _{0,4} Ni _{0,6}	6,405	7,058	7,475	8,264	3,424	3,872	3,555	3,836	68544,249	12485,890	85485,447	14822,271	181337,856
Fe _{0,3} Ni _{0,7}	6,404	7,059	7,475	8,261	3,431	3,802	3,554	3,815	61740,298	11281,581	106463,572	18510,995	197996,446
Fe _{0,2} Ni _{0,8}	6,405	7,059	7,474	8,261	3,407	3,848	3,544	3,749	44572,926	8356,939	138343,399	22995,526	214268,790
Ni	—	—	7,476	8,261	—	—	3,537	3,859	—	—	259645,347	42549,516	302194,863

Çizelge 4.1.2. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları).

Element veya Alaşım	Fe			Ni		
	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$
Fe	0,1658	0,1313	1,0000	—	—	—
$\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$	0,1607	0,1284	0,9778	0,1778	0,1369	1,0361
$\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	0,1615	0,1290	0,9826	0,1763	0,1365	1,0326
$\text{Fe}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	0,1632	0,1303	0,9927	0,1742	0,1350	1,0215
$\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	0,1645	0,1313	0,9997	0,1743	0,1353	1,0239
$\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	0,1669	0,1332	1,0147	0,1722	0,1347	1,0194
$\text{Fe}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	0,1677	0,1338	1,0190	0,1695	0,1339	1,0128
$\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$	0,1691	0,1350	1,0283	0,1643	0,1311	0,9916
Ni	—	—	—	0,1598	0,1322	1,0000

Çizelge 4.1.3. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.

Element veya Alaşım	Fe			Ni			Fe _x Ni _{1-x}			
	<i>n</i> _{3d}	<i>n</i> _{4s,4p}	<i>Dn</i> _{3d}	<i>n</i> _{3d}	<i>n</i> _{4s,4p}	<i>Dn</i> _{3d}	<i>Tn</i> _{3d}	<i>Tn</i> _{3d} [*]	<i>Tn</i> _{4s,4p}	<i>Tn</i> _{4s,4p} [*]
Fe	7,1491	0,8509	—	—	—	—	—	—	—	—
Fe _{0,8} Ni _{0,2}	8,6403	-0,6403	1,4912	7,8594	2,1406	-1,6624	8,4841	8,8166	0,0841	0,7764
Fe _{0,7} Ni _{0,3}	8,2290	-0,2290	1,0799	7,9715	2,0285	-1,5503	8,1518	8,9048	0,4483	0,7391
Fe _{0,6} Ni _{0,4}	7,5605	0,4395	0,4114	8,4202	1,5798	-1,1016	7,9044	8,9929	0,8956	0,7018
Fe _{0,5} Ni _{0,5}	7,1491	0,8509	0,0000	8,3265	1,6735	-1,1953	7,7378	9,0811	1,2622	0,6646
Fe _{0,4} Ni _{0,6}	6,4961	1,5039	-0,6530	8,5162	1,4838	-1,0056	7,7082	9,1692	1,4918	0,6273
Fe _{0,3} Ni _{0,7}	6,3135	1,6865	-0,8356	8,7500	1,2500	-0,7718	8,0191	9,2574	1,3810	0,5900
Fe _{0,2} Ni _{0,8}	5,9727	2,0273	-1,1764	10,0000	0,0000	0,4782	9,1945	9,3455	0,4055	0,5527
Ni	—	—	—	9,5218	0,4782	—	—	—	—	—

*n*_{3d}: Alaşımı oluşturan metaller için K X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenen 3d elektron sayıları,

*n*_{4s,4p}: Alaşımı oluşturan metaller için 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı,

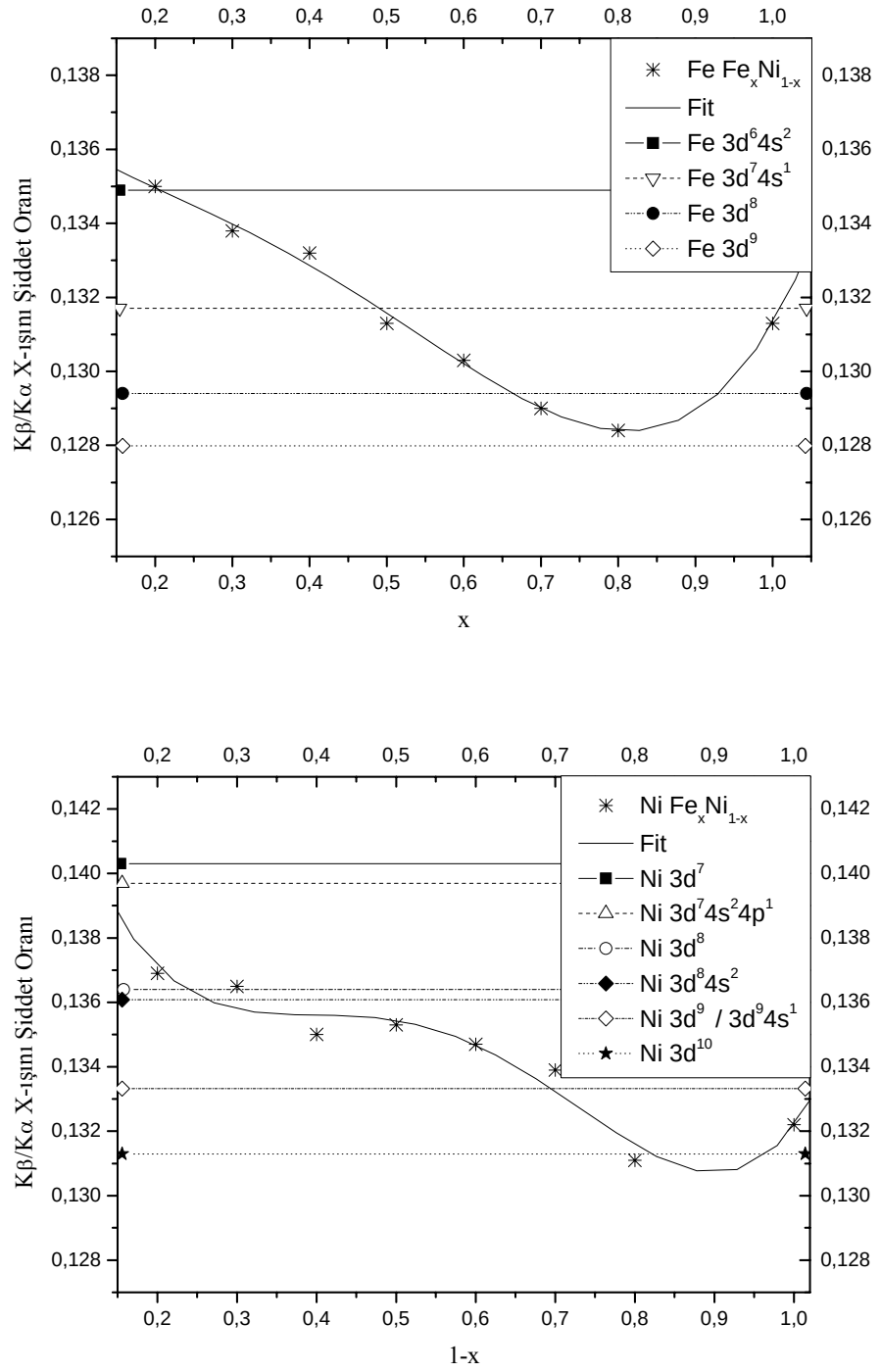
*Dn*_{3d}: İlgili metalin alaşımdaki 3d elektron sayısının saf halindeki ile kıyaslandığında 3d elektron sayısındaki değişim,

*Tn*_{3d}: Alaşımdaki 3d elektronlarının toplam sayısı,

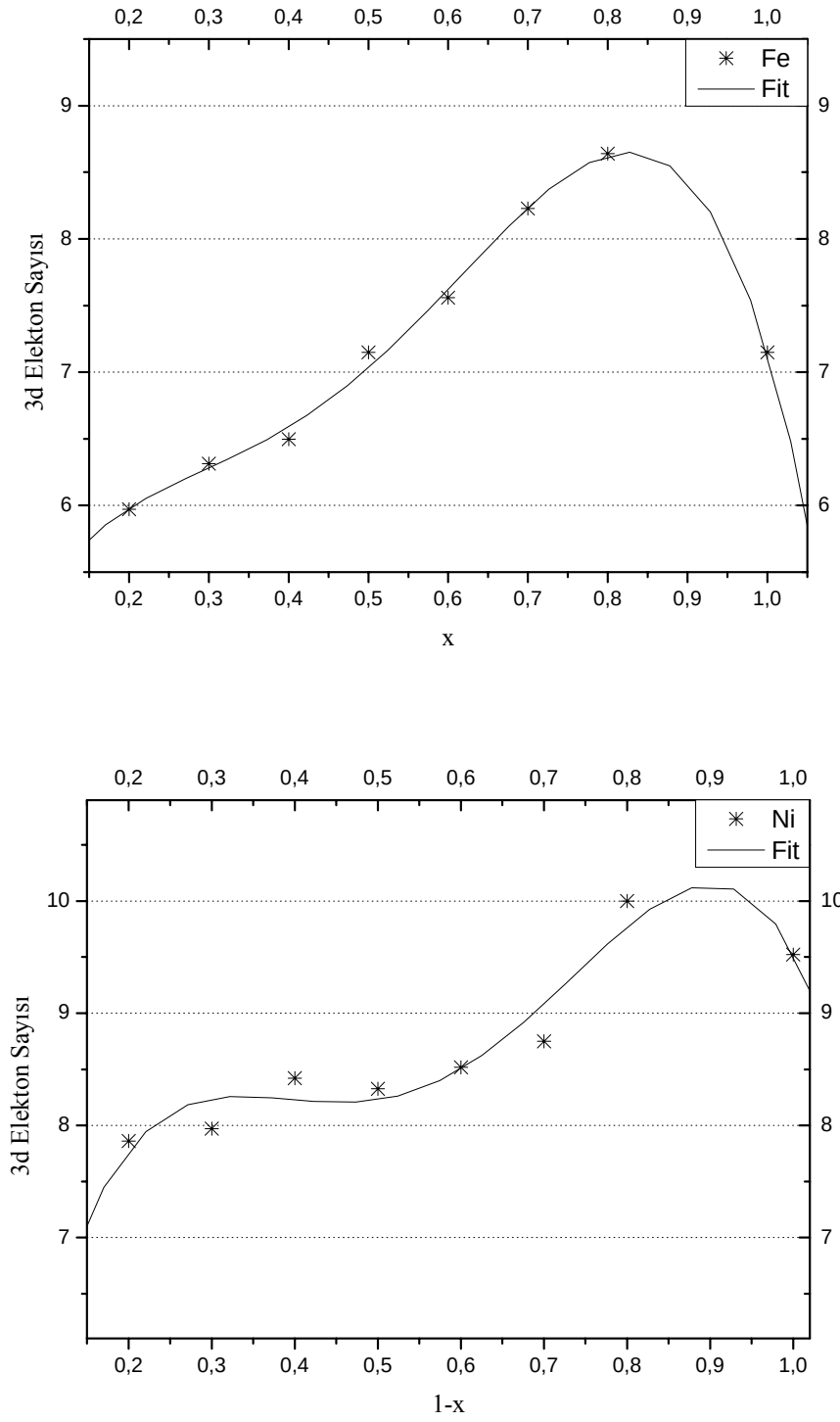
*Tn*_{3d}^{*}: Saf metaller için elde edilen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 3d elektronu sayısı,

*Tn*_{4s,4p}:Alaşımdaki 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı,

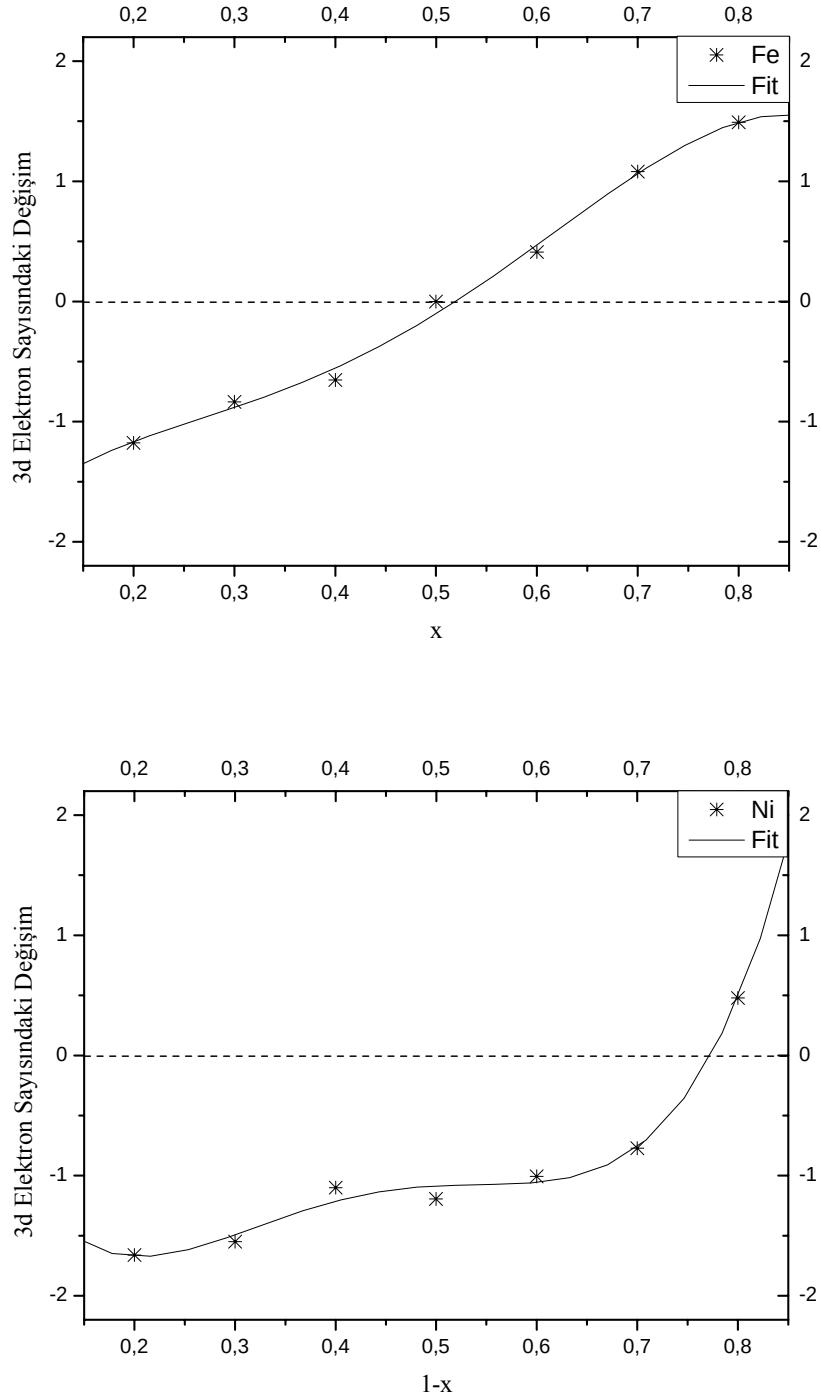
*Tn*_{4s,4p}^{*}:Saf metaller için elde edilen 4s, 4p elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 4s, 4p elektronu sayısı,



Şekil 4.1.3. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Fe ve Ni için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.



Şekil 4.1.4. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.



Şekil 4.1.5. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metaller ile kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.

Fe ve Ni saf metalleri ve $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları Şekil 4.1.1’de verilmiştir. Şekil 4.1.2 $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Fe ve Ni’nin ilgili alaşımdaki $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını piklerinin toplam şiddeti yüz olacak biçimde Origin 7.5 programı ile elde edilen değerler kullanılarak çizilmiştir. Fe, Ni saf metalleri ve $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni’nin $K\alpha$, $K\beta$ X-ışınlarının; tepe enerjileri, FWHM değerleri ve sayımları için elde edilen değerler Çizelge 4.1.1’de verilmiştir.

Saf metallerde ve $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında; $N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları Çizelge 4.1.2’de verilmiştir. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları alaşımlardaki Fe konsantrasyonunun değişimiyle ters yönlüdür. Çizelge 4.1.2’den de görüldüğü üzer yukardan aşağıya doğru inildikçe Fe’nin alaşımlardaki konsantrasyonları azalmakta buna karşın $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları artmaktadır. Ni için ise $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının artan Ni konsantrasyonu ile düzgün olmamakla birlikte azaldıkları söylenebilir. Çizelge 4.1.2 incelendiğinde $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,7; 0,6$ ve $0,5$) alaşımlarında Fe’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının saf Fe için olan değerden daha küçük, $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımlarında ise daha büyük olduğu görülmektedir. Ni için ise $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımı hariç diğer tüm alaşımlarda saf Ni’ninkinden daha büyük $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı değerleri elde edilmiştir. Saf Fe ve Ni için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları sırasıyla 0,1313 ve 0,1322 olarak elde edilmiştir. Raj *et al.* (2001) ise $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,58; 0,5$ ve $0,2$) alaşımlarında çalışırken saf Fe ve Ni için sırasıyla 0,1307 ve 0,1346 değerlerini elde etmişlerdir. Bu çalışmada, $\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$ alaşımında Fe için elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı saf Fe’nin ki ile aynıdır (0,1313) Ni için ise 0,1353 değeri bulunmuştur. $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımında Fe ve Ni’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları için bulunan değerler ise sırasıyla 0,1350 ve 0,1311 dir. Raj *et al.* (2001)’in $\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$ alaşımında Fe ve Ni için elde ettiği $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı değerleri sırasıyla 0,1321; 0,1371 ve $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımında ise sırasıyla

0,1326 ve 0,1314 dır. Bu çalışmada ilgili alaşımlarda her iki metal içinde bulunan değerler Raj *et al.* (2001)'in elde ettiği değerler ile uyumludurlar.

Fe, Ni saf metalleri ve $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları kullanılarak Fe ve Ni için hem saf hallerinde hem de alaşımlarda sahip oldukları 3d elektronlarının sayıları ve onların rölatif değişimleri belirlenerek Çizelge 4.1.3'de verilmiştir.

Saf Fe ve Ni'nin 3d elektron sayıları için sırasıyla $n_{3d}=7,1491$ ve $9,5218$ değerleri elde edilmiştir. Raj *et al.* (2001)'in saf Fe ve Ni'nin 3d elektron popülasyonları için elde ettiği değerler ise sırasıyla 7,39 ve 8,54 dır. Fe için; bu çalışmada elde edilen 3d elektron sayısı Raj *et al.* (2001)'in bulduğuyla çok yakın olmasına rağmen Ni için elde edilen değer onunkinden bir miktar büyüktür.

Çizelge 4.1.3'den $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni için elde edilen 3d elektron sayılarının bu metallerin saf halleri için elde edilen değerlerden farklılıklar gösterdiği görülmektedir. Alaşımlarda ilgili metallerin saf hallerine göre 3d elektron sayılarında meydana gelen değişim sadece metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektronlarının yeniden düzenlenmesinden ileri gelseydi, 4s, 4p durumlarının sahip olmaları gereken elektron sayıları Çizelge 4.1.3'ün 3 ve 6. sütunlarında görülmektedir. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,8$ ve $0,7$) alaşımlarında Fe için saf halindeki kıyasla 3d elektron sayısında çok büyük bir artış elde edilmiştir. Bu artışın Fe'nin 4s, 4p durumlarından karşılanması durumunda Çizelgeden de görüldüğü gibi 4s, 4p durumları negatif elektron sayılarına sahip olmalıdırlar. Buna göre $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,8$ ve $0,7$) alaşımlarında Fe'nin 3d elektron sayısında meydana gelen bu artışın sebebi sadece Fe'nin 3d ve 4s, 4p elektronlarının yeniden düzenlenmesi olamaz, aynı zamanda Ni'den de Fe'ye elektron transferi söz konusudur. Çizelgeden de görüldüğü üzer zaten bu alaşımlarda Ni'nin 3d elektron sayılarında saf Ni'ye nazaran bir azalma vardır. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,4$; $0,3$ ve

0,2) alaşımlarında Fe'nin 3d elektron sayısı saf Fe'ninkinden daha azdır. $\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$ alaşımında ise Fe için ilginç bir durum vardır. Bu alaşımda Fe için elde edilen 3d elektron sayısı saf Fe için olan değer ile aynıdır. Buna karşın bu alaşımda Fe'nin 3d elektron sayısı değişmezken Ni'nin 3d elektron sayısı bir miktar azalmaktadır. Ni'den Fe'ye doğru bir elektron transferi söz konusu olmadığına göre Ni'nin 3d elektron sayısında meydana gelen bu değişimin Ni'nin 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektron yerleşiminin yeniden düzenlenmesi olduğu düşünülebilir.

$\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında alaşımı oluşturan metallerin kendi 3d ve 4s, 4p elektronları arasındaki yeniden düzenlenme ve Fe ile Ni arasındaki 3d elektron transferi $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,7$ ve $0,6$) alaşımlarında Fe'nin 3d elektron sayısında artışa, $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,4; 0,3; 0,2$) alaşımlarında ise azalışa neden olmaktadır. Buna karşın $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımı hariç tüm alaşımlarda Ni'nin 3d elektron sayısında bir azalma söz konusudur. $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımında Ni'nin 3d elektron sayısı için $n_{3d}=10$ değeri elde edilmiştir. $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımında diğer tüm alaşımlara nazaran Ni'nin 3d elektron sayısında büyük bir artış söz konusudur. Raj *et al.* (2000)'de $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,58; 0,5$ ve $0,2$) alaşımlarını incelerken $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımında Ni'nin 3d elektron sayısındaki değişimin diğer iki alaşımla kıyaslandığında daha büyük ve zıt yönlü olduğunu belirtmişlerdir. $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımının sahip olduğu özel manyetik özelliklerinin bu alaşımın valens elektron yapısında gözlenen farklılıktan kaynaklandığını vurgulamışlardır.

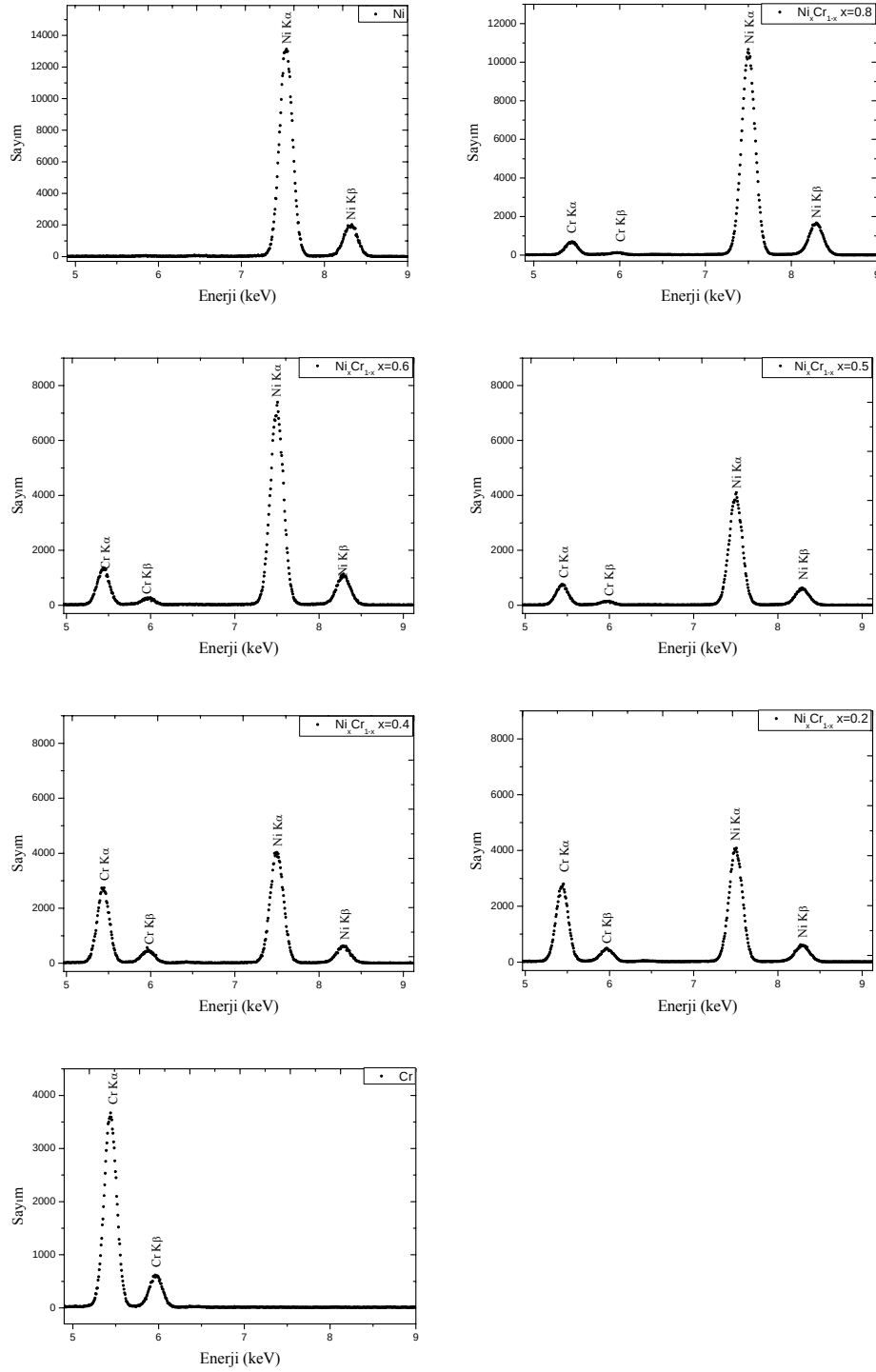
$\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında ölçülen K X-ışını şiddet oranları vasıtasıyla bulunan 3d elektron sayılarının ilgili alaşımlar için toplamaları (Tn_{3d}) ve saf metaller için belirlenen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamalarından yine ilgili alaşımlar için elde edilen toplam 3d elektron sayıları (Tn_{3d}^*) kıyaslama için Çizelge 4.1.3'de verilmişlerdir.

Şekil 4.1.3’de $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları, farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları ile elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırmalı olarak çizilmiştir. Fe ve Ni için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının alaşımlardaki konsantrasyonlarına bağlı olarak değişimlerinin benzerlik gösterdikleri söylenebilir. Her iki metal için de şiddet oranları alaşımdaki konsantrasyonları ile zıt yönlü olarak değişmektedir.

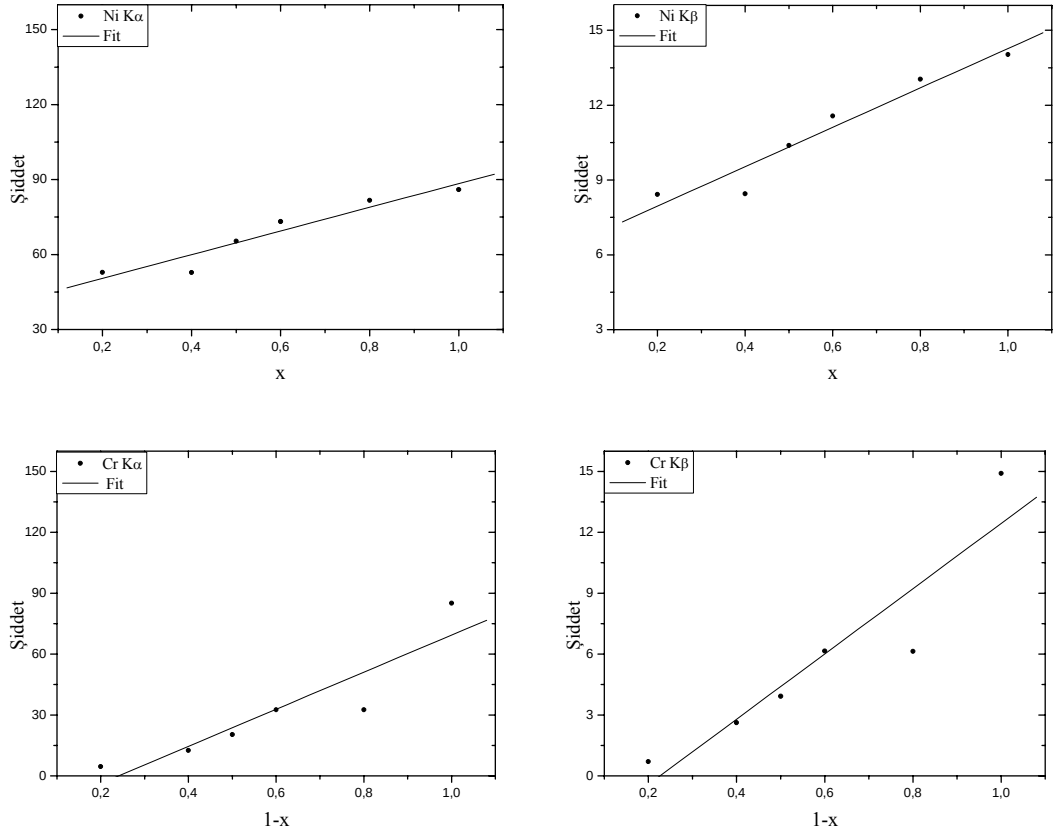
Şekil 4.1.4’de ise ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışınları kullanılarak $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni için elde edilen 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri verilmiştir. Şekilden alaşımda konsantrasyonu artan element için 3d elektron sayısının düzgün olamamakla birlikte arttığı görülmektedir. Bu sonuçlara göre $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni elementlerinin sahip oldukları 3d elektron sayısı arttıkça, bu elementler için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının azaldığı söylenebilir.

Şekil 4.1.5’de $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni’nin 3d elektron sayılarının saf Fe ve Ni 3d elektron sayılarına göre değişimleri, metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterilmektedir. Fe için 3d elektron sayısındaki değişim alaşımdaki Fe konsantrasyonuyla negatiften pozitif doğru artmaktadır. $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ alaşımı hariç Ni’nin 3d elektron sayısında saf Ni’ye göre bir azalma olmasına rağmen alaşımdaki Ni konsantrasyonu arttıkça 3d elektron sayısı, saf Ni’nin 3d elektron sayısına yaklaşmaktadır.

4.2. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma



Şekil 4.2.1. Ni, Cr ve $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.



Şekil 4.2.2. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Ni ve Cr'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.

Çizelge 4.2.1. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.

Element veya alaşım	E (keV)				FWHM (eV)				N (sayım)				
	Ni		Cr		Ni		Cr		Ni		Cr		K_T
	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	
Ni	7,503	8,291	—	—	3,537	3,859	—	—	1103492,72	180835,44	—	—	1284328,17
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	7,501	8,289	5,441	5,965	3,567	3,706	3,205	3,316	292106,238	46633,977	16325,846	2516,444	357582,505
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	7,500	8,289	5,440	5,969	3,554	3,759	3,311	3,783	196939,837	31104,984	33841,659	7052,960	268939,439
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	7,500	8,289	5,440	5,969	3,535	3,732	3,303	3,656	153230,359	24356,795	47745,935	9190,558	234523,647
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	7,500	8,289	5,439	5,969	3,547	3,793	3,262	3,702	112489,832	17993,924	69504,539	13100,031	213088,326
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	7,501	8,291	5,440	5,971	3,572	3,911	3,275	3,655	70051,634	13175,739	113664,70	18101,720	214993,799
Cr	—	—	5,439	5,969	—	—	3,289	3,422	—	—	92548,137	15935,518	108483,655

Çizelge 4.2.2. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları. ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları).

Element veya Alaşım	Ni			Cr		
	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$
Ni	0,1596	0,1321	1,0000	—	—	—
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	0,1678	0,1300	0,9848	0,1667	0,1291	0,9847
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	0,1786	0,1332	1,0076	0,1678	0,1301	0,9924
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	0,1839	0,1353	1,0227	0,1712	0,1323	1,0076
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	0,1889	0,1371	1,0379	0,1735	0,1344	1,0229
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	0,2006	0,1444	1,0909	0,1786	0,1383	1,0534
Cr	—	—	—	0,1695	0,1314	1,0000

Çizelge 4.2.3. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.

Element veya Alaşım	Ni			Cr			$\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$			
	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	Tn_{3d}	Tn_{3d}^*	$Tn_{4s,4p}$	$Tn_{4s,4p}^*$
Ni	9,3857	0,6143	—	—	—	—	—	—	—	—
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	9,9444	0,0556	0,5587	5,1581	0,8419	0,5883	8,9871	8,4225	0,2129	0,7781
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	8,8209	1,1791	-0,5648	4,8500	1,1500	0,2802	7,2325	7,4593	1,1675	0,9419
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	8,3273	1,6727	-1,0584	4,3111	1,6889	-0,2587	6,3192	6,9778	1,6808	1,0238
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	7,8814	2,1186	-1,5043	3,8422	2,1578	-0,7276	5,4579	6,4962	2,1421	1,1056
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	6,8831	3,1169	-2,5026	3,0368	2,9632	-1,5330	3,8061	5,5330	2,9939	1,2694
Cr	—	—	—	4,5698	1,4302	—	—	—	—	—

n_{3d} : Alaşımı oluşturan metaller için K X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenen 3d elektron sayıları.

$n_{4s,4p}$: Alaşımı oluşturan metaller için 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

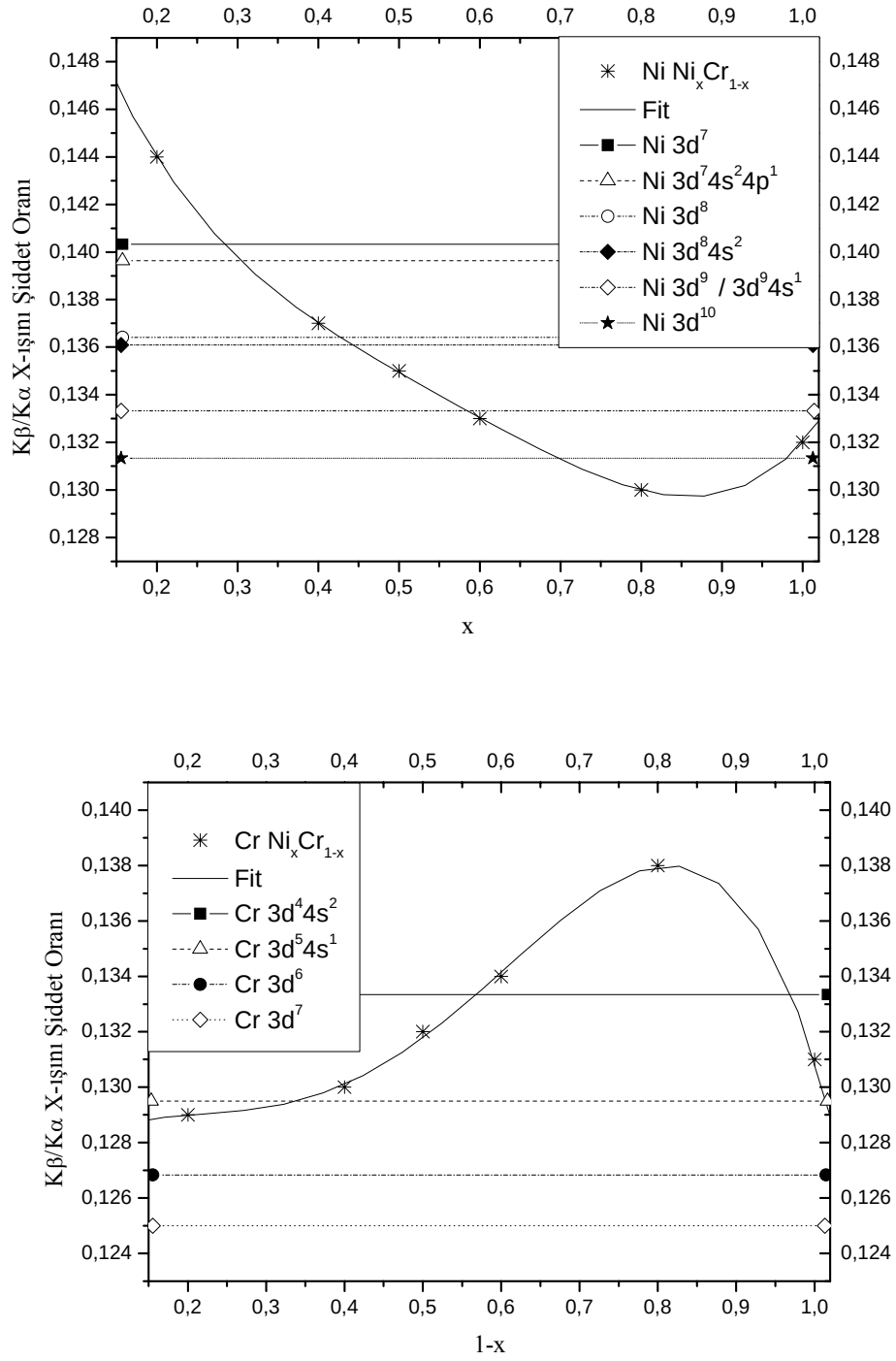
Dn_{3d} : İlgili metalin alaşımdaki 3d elektron sayısının saf halindeki ile kıyaslandığında 3d elektron sayısındaki değişim.

Tn_{3d} : Alaşımdaki 3d elektronlarının toplam sayısı.

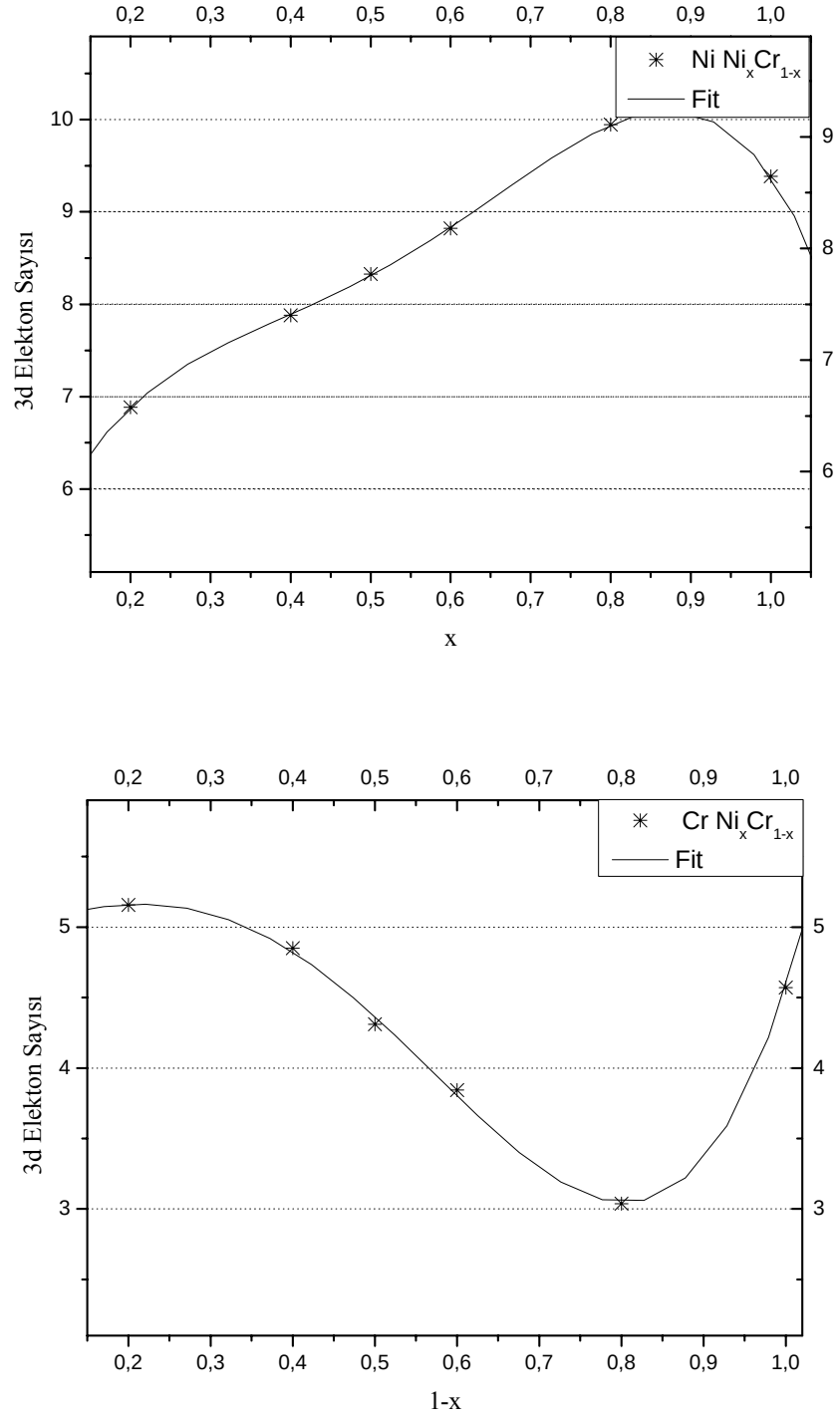
Tn_{3d}^* : Saf metaller için elde edilen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 3d elektronu sayısı.

$Tn_{4s,4p}$: Alaşımdaki 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

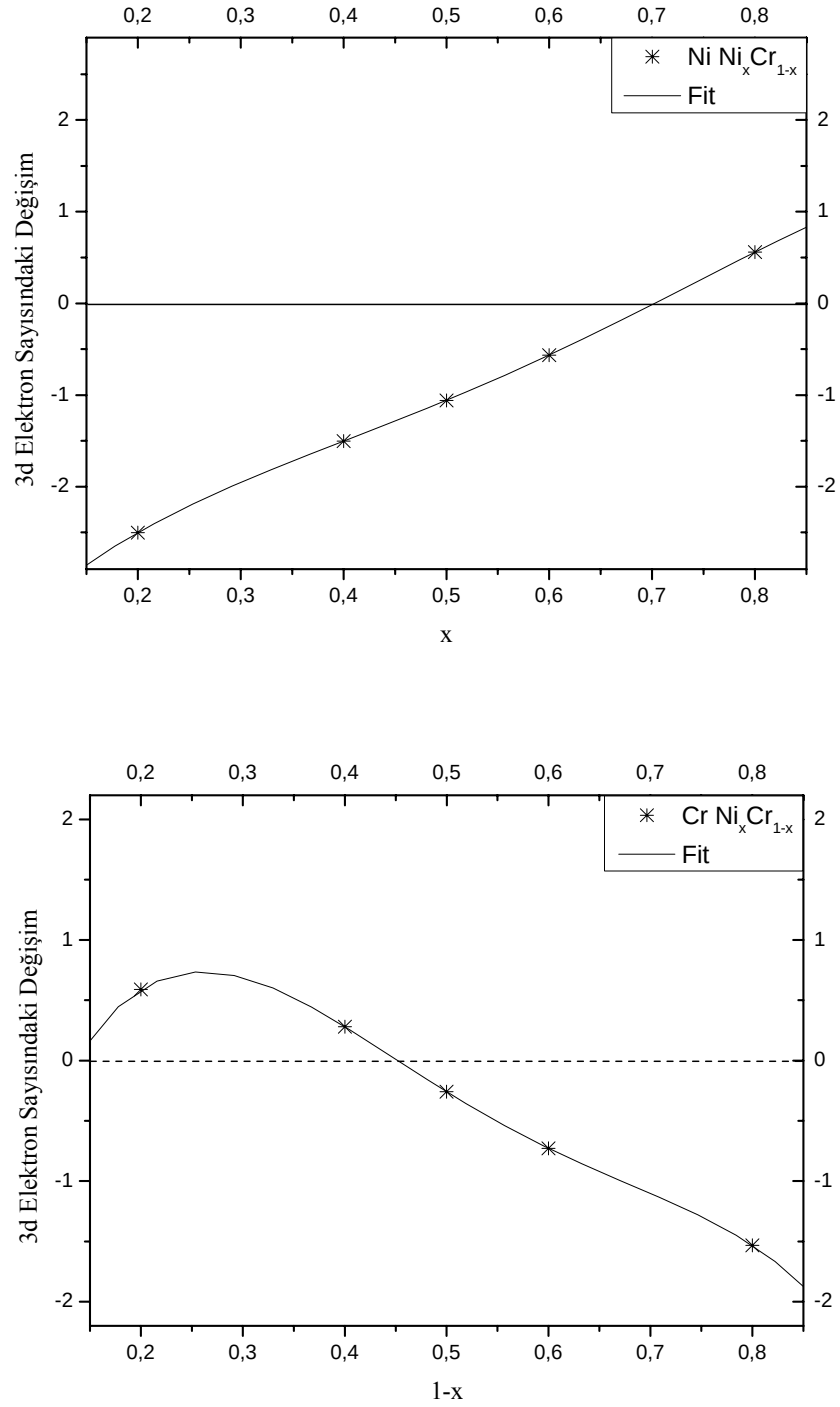
$Tn_{4s,4p}^*$: Saf metaller için elde edilen 4s,4p elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 4s, 4p elektronu sayısı.



Şekil 4.2.3. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında Ni ve Cr için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.



Şekil 4.2.4. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Ni ve Cr için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.



Şekil 4.2.5. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Ni ve Cr'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metaller ile kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.

Ni_xCr_{1-x} ($x=0,8; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,2$) alaşımları ve Ni, Cr saf metalleri için elde edilen K X-ışını spektrumları Şekil 4.2.1’de verilmiştir. Her bir Ni_xCr_{1-x} alaşımı için Ni ve Cr’nin ilgili alaşımdaki $K\alpha$ ve $K\beta$ X-ışını piklerinin toplam şiddeti yüz olacak şekilde Origin 7.5 programı ile elde edilen değerler kullanılarak Şekil 4.2.2 çizilmiştir. Ni ile Cr’nin saf hallerinde ve farklı kompozisyonlardaki Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında Ni ve Cr’nin $K\alpha$ ve $K\beta$ X-ışınları için tepe enerjileri, FWHM değerleri ve sayımları Çizelge 4.2.1’de verilmiştir.

Ni, Cr ve Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında; $N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları Çizelge 4.2.2’de verilmiştir. Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında; Ni için elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları Ni’nin alaşımdaki konsantrasyonu ile ters yönlü değişmektedir. Çizelgeden de görüldüğü gibi yukardan aşağıya doğru Ni konsantrasyonu (x) azalırken K X-ışını şiddet oranları artmaktadır. Alaşımlarda Cr konsantrasyonu arttıkça ise Cr $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları artmaktadır. Saf Ni ve Cr için bulunan $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları sırasıyla 0,1321 ve 0,1314 dür. Bhuinya and Padhi (1992)’nin Cr_xNi_{1-x} ($x=0,2; 0,58$) alaşımlarını incelerken saf Ni ve Cr için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını sırasıyla 0,1359 ve 0,1334 olarak elde etmişlerdir. Bu çalışmada her iki metal içinde elde edilen değerler Bhuinya and Padhi (1992)’nin değerleri ile uyumludurlar. Bhuinya and Padhi (1992)’nin $Cr_{0,2}Ni_{0,8}$ alaşımında Ni ve Cr için buldukları $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları sırasıyla 0,1374 ve 0,1585 dir. Bu çalışmada aynı formdaki alaşımda Ni ve Cr için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları 0,1300 ve 0,1291 olarak belirlenmiştir. Raj *et al.* (2002) ise saf Ni ve Cr’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları için sırasıyla 0,1346 ve 0,1314 değerlerini bulmuşlardır. Bu çalışmada Cr için elde edilen değer Raj *et al.* (2002)’in bulduğu değer ile aynıdır. $Ni_{0,8}Cr_{0,2}$ alaşımı hariç diğer tüm Ni_xCr_{1-x} alaşımlarında Ni’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları saf Ni’ninkinden daha büyüktür ve azalan Ni konsantrasyonu ile saf metalden olan fark büyümektedir.

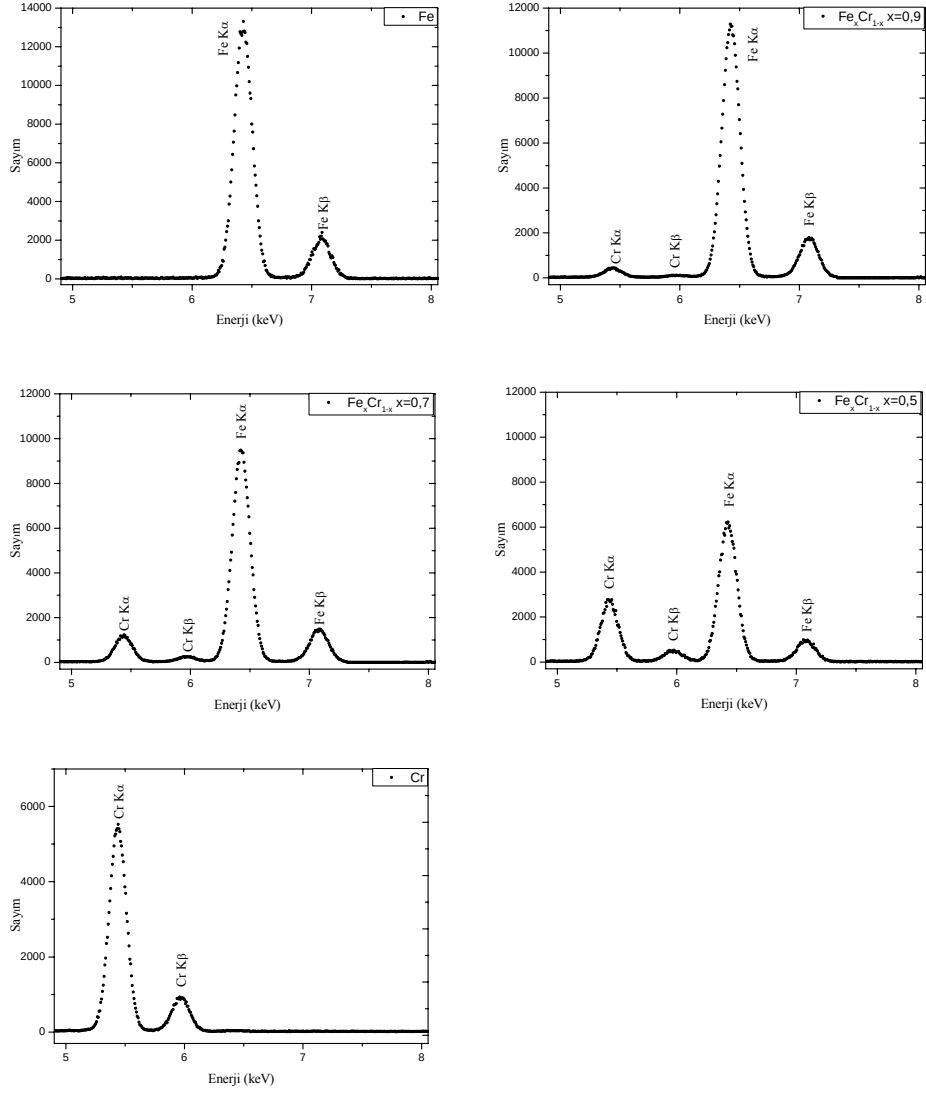
$\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ ($x=0,8$ ve $0,6$) alaşımlarında Cr'nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları saf Cr'ninkinden küçük, diğer alaşımlarda ise daha büyüktür.

Ölçülen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak Ni, Cr saf metalleri ve $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen 3d ve 4s, 4p elektron sayıları ve elektron sayılarının rölatif değişimleri Çizelge 4.2.3'de verilmiştir. Saf Ni ve Cr'nin 3d elektron sayıları için sırasıyla $n_{3d}=9,3857$; $n_{3d}=4,5698$ değerleri bulunmuştur. Çizelge 4.2.2 incelendiğinde alaşımlarda Ni ve Cr'nin 3d elektron sayılarının saf hallerindeki değerlerden farklı oldukları görülmektedir. Çizelge 4.2.3'ün 3. ve 6. sütunları $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Ni ve Cr'nin 3d elektron sayılarında meydana gelen değişim metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumu elektronlarının yeniden düzenlenmesinden kaynaklandığında 4s, 4p durumlarının sahip olmaları gereken elektron sayılarını göstermektedir. $\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$ alaşımında Ni'nin 3d elektron sayısında saf Ni'ye göre bir artış, diğer alaşımlarda ise azalış söz konusudur ve artan Ni konsantrasyonu ile bu azalma miktarı artmaktadır. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ ($x=0,8$ ve $0,6$) alaşımlarında Cr'nin 3d elektron sayısında saf Cr'ye nazaran bir artış $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ ($x=0,5$; $0,4$ ve $0,2$) alaşımlarında ise azalış söz konusudur. $\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$ alaşımında hem Ni'nin hem de Cr'nin 3d elektron sayıları saf hallerindeki 3d elektron sayılarına göre artmışlardır. $\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$ alaşımında alaşımı oluşturan metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumlarındaki elektronlarının yeniden düzenlenmesinin; 3d elektron sayılarında meydana gelen bu değişimin sebebi olduğu söylenebilir. $\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$ alaşımında Ni'nin 3d elektron sayısı saf halindeki nazaran azalırken Cr'nin 3d elektron sayısı artmaktadır. Bu alaşımda 3d elektron sayılarında görülen değişimler metallerin kendi 3d 4s,4p durumlarındaki elektronlarının yeniden düzenlenmesi yanı sıra metaller arasında gerçekleşen 3d elektron transferinden de kaynaklanabilir. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ ($x=0,5$; $0,4$ ve $0,2$) alaşımlarında hem Ni hem de Cr'nin 3d elektron sayıları aynı yönlü değişmektedir. Buna göre bu alaşımların valens elektron yerleşimlerinde; metaller arasında 3d elektron transferlerinin de etkili olabildiği ancak metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumlarındaki elektronlarının yeniden düzenlenmesinin daha baskın olduğu söylenebilir.

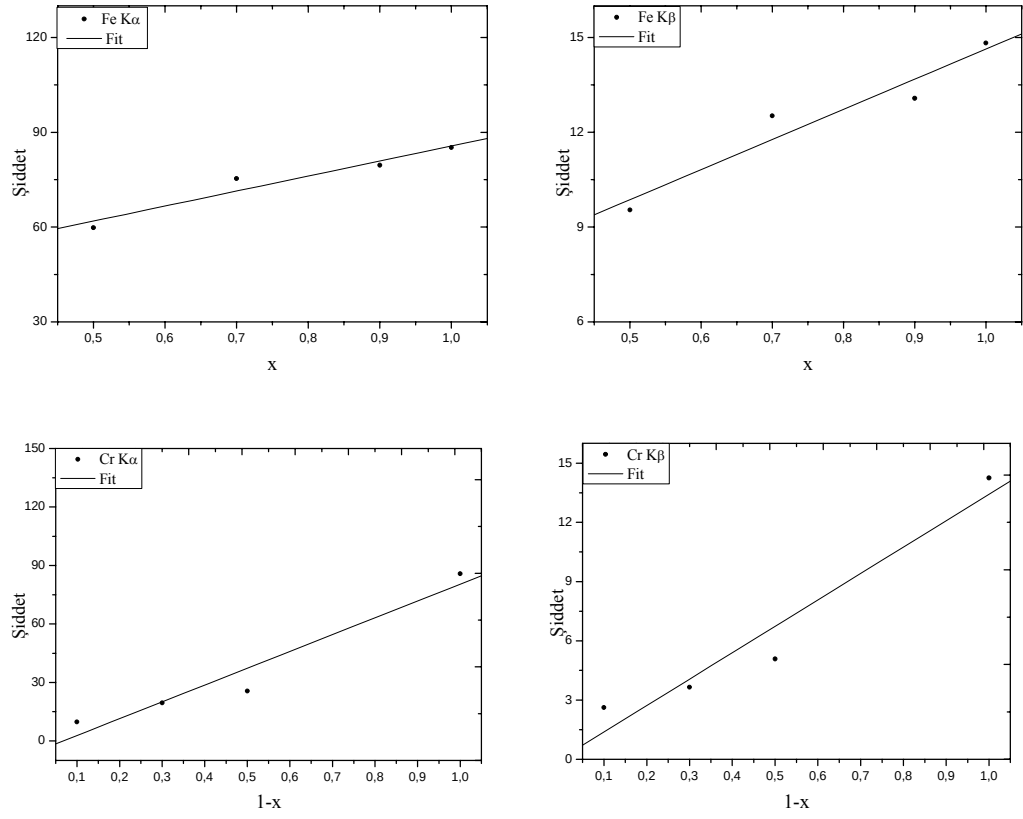
$\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için ölçülen K X-ışını şiddet oranları vasıtasıyla bulunan 3d elektron sayılarının ilgili alaşımlar için toplamaları (Tn_{3d}) ve saf metaller için belirlenen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamalarından yine ilgili alaşımlar için elde edilen toplam 3d elektron sayıları (Tn_{3d}^*) kıyaslama için Çizelge 4.2.3’de verilmişlerdir. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında metallerin 3d elektron sayılarında meydana gelen değişimler sadece metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumlarının elektron yerleşiminin yeniden düzenlenmesinden kaynaklansa idi 4s, 4p durumlarının sahip olmaları gereken toplam elektron sayıları ($Tn_{4s,4p}$ ve $Tn_{4s,4p}^*$) Çizelge 4.2.3’ün 3 ve 6. sütunlarındaki gibi olmalıdır.

Şekil 4.2.3’de $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Ni ve Cr için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları, farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları ile elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırmalı olarak gösterilmektedir. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının Ni için artan Ni konsantrasyonuyla azaldığı, buna karşın Cr için artan Cr konsantrasyonuyla arttığı şekilden görülmektedir. Şekil 4.2.4’de $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Ni ve Cr için 3d elektron sayılarının metallerin alaşımlardaki kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri verilmiştir. Şekilden Ni’nin 3d elektron sayısının artan Ni konsantrasyonu ile arttığı, Cr’un 3d elektron sayısının ise artan Cr konsantrasyonu ile azaldığı görülmektedir. Şekil 4.2.5’de $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Ni ve Cr’nin 3d elektron sayılarının saf Ni ve Cr 3d elektron sayılarına göre değişimleri, metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterilmektedir. $\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$ alaşımı hariç Ni’in 3d elektron sayısında saf Ni’ye göre bir azalma olmasına rağmen alaşımdaki Ni konsantrasyonu arttıkça 3d elektron sayısı, saf Ni’nin 3d elektron sayısına yaklaşmaktadır. Şekil 4.2.5’den görüldüğü üzere $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ ($x=0,8$ ve $0,6$) alaşımlarında Cr’nin 3d elektron sayılarında saf Cr’ye nazaran bir artma diğer alaşımlarda ise bir azalma söz konusudur. Bu azalma miktarı alaşımlardaki Cr konsantrasyonu arttıkça büyümektedir.

4.3. $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma



Şekil 4.3.1. Fe, Cr ve $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.



Şekil 4.3.2. $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Cr'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri,

Çizelge 4.3.1. $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.

Element veya alaşım	E (keV)				FWHM (eV)				N (sayım)				
	Fe		Cr		Fe		Cr		Fe		Cr		K_T
	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	
Fe	6,428	7,082			3,430	3,597			348319.687	57879.397			406199.085
$\text{Fe}_{0,9}\text{Cr}_{0,1}$	6,428	7,082	5,437	6,179	3,191	5,954	3,394	3,566	295108.358	48490.266	9728.814	17517.662	370845.102
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,3}$	6,427	7,081	5,439	5,977	3,449	4,914	3,420	3,667	250738.222	41645.528	31533.481	8807.271	332724.504
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	6,428	7,081	5,438	5,971	3,343	3,748	3,440	3,607	164725.327	26290.928	70561.452	14001.145	275578.854
Cr			5,460	5,969			3,288	3,452			139657.334	24303.826	163961.161

Çizelge 4.3.2. $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları. ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları).

Element veya Alaşım	Fe			Cr		
	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$
Fe	0,1605	0,1320	1,0000	—	—	—
$\text{Fe}_{0,9}\text{Cr}_{0,1}$	0,1597	0,1309	0,9922	0,1724	0,1327	1,0427
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,3}$	0,1602	0,1317	0,9988	0,1722	0,1294	1,0168
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	0,1644	0,1326	1,0050	0,1651	0,1265	0,9940
Cr	—	—	—	0,1701	0,1273	1,0000

Çizelge 4.3.3. $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.

Element veya Alaşım	Fe			Cr			$\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$			
	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	Tn_{3d}	Tn_{3d}^*	$Tn_{4s,4p}$	$Tn_{4s,4p}^*$
Fe	6,8928	1,1072	—	—	—	—	—	—	—	—
$\text{Fe}_{0,9}\text{Cr}_{0,1}$	7,3470	0,6530	0,4542	4,1447	1,8553	-1,6456	7,0268	6,7826	0,7014	1,0175
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,3}$	7,0000	1,0000	0,1072	5,0517	0,9483	-0,7386	6,4155	5,6660	0,9845	0,8380
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	6,6886	1,3114	-0,2042	6,1353	-0,1353	0,3450	6,4120	6,3416	0,5881	0,6585
Cr	—	—	—	5,7903	0,2097	—	—	—	—	—

n_{3d} : Alaşımı oluşturan metaller için K X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenen 3d elektron sayıları.

$n_{4s,4p}$: Alaşımı oluşturan metaller için 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

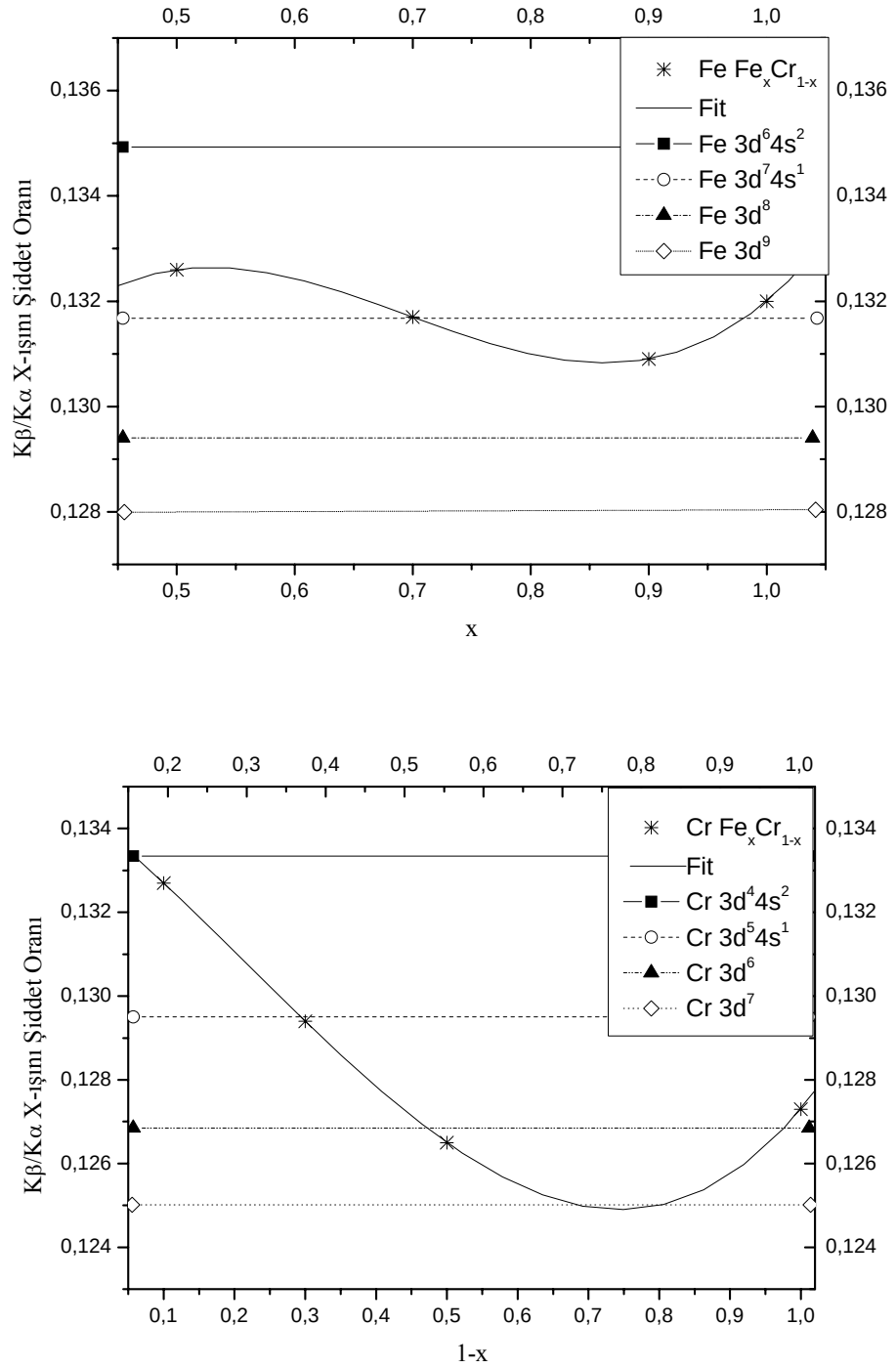
Dn_{3d} : İlgili metalin alaşımdaki 3d elektron sayısının saf halindeki ile kıyaslandığında 3d elektron sayısındaki değişim.

Tn_{3d} : Alaşımdaki 3d elektronlarının toplam sayısı.

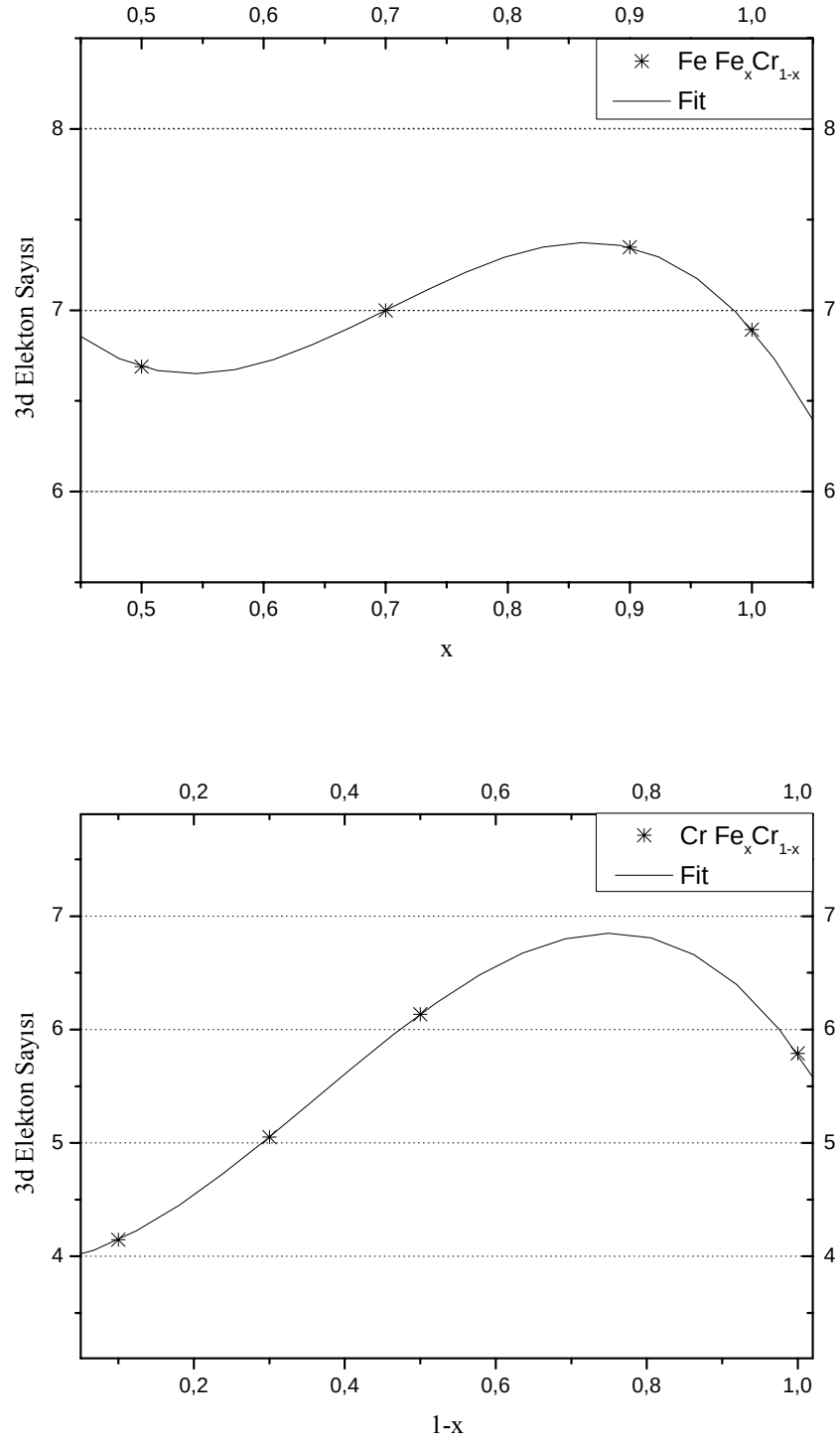
Tn_{3d}^* : Saf metaller için elde edilen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 3d elektronu sayısı.

$Tn_{4s,4p}$: Alaşımdaki 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

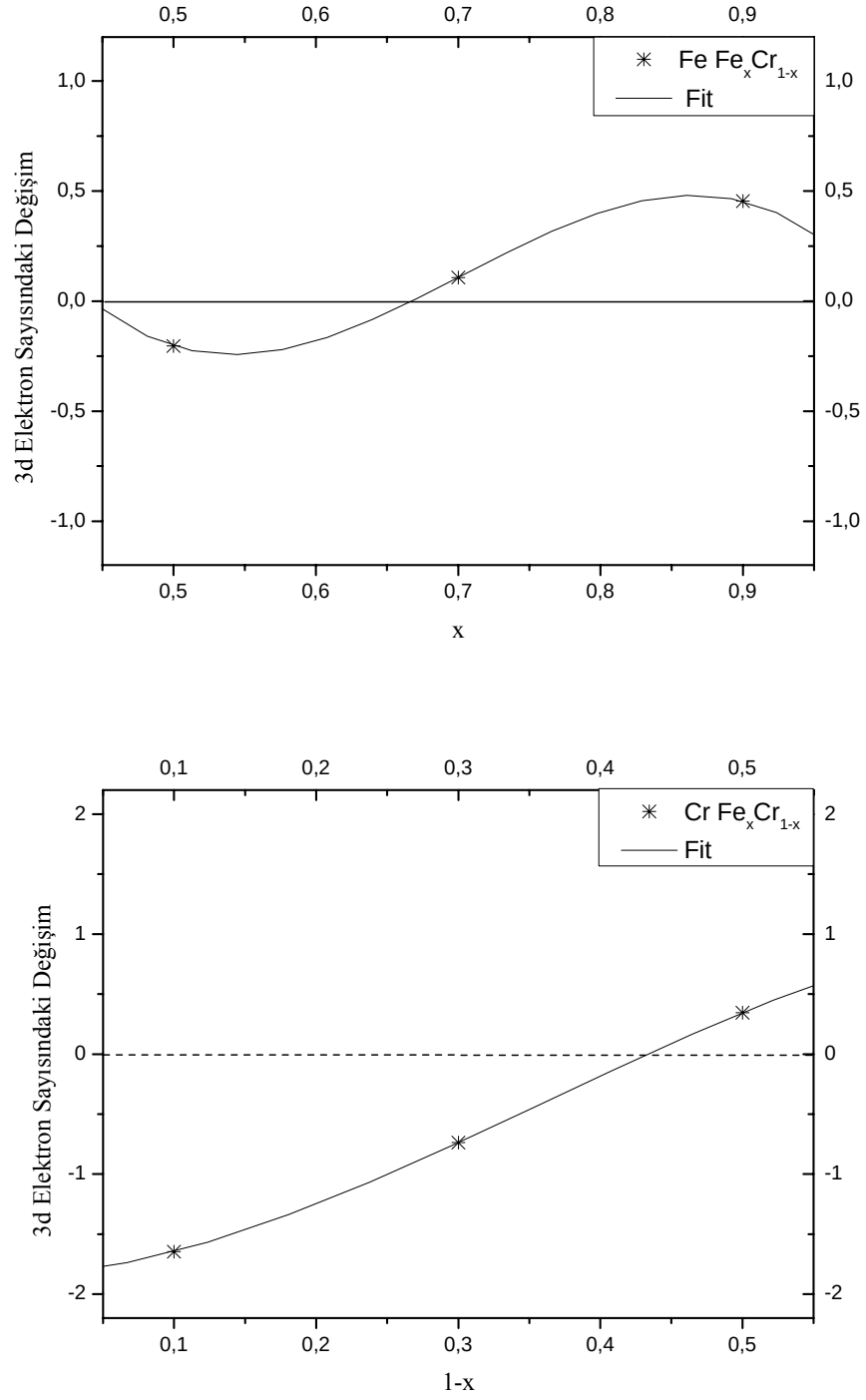
$Tn_{4s,4p}^*$: Saf metaller için elde edilen 4s, 4p elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 4s, 4p elektronu sayısı.



Şekil 4.3.3. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında Fe ve Cr için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.



Şekil 4.3.4. $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Cr için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.



Şekil 4.3.5. $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Cr'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metaller ile kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.

Saf Fe ve Cr metalleri ile $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları Şekil 4.3.1’de verilmiştir. Şekil 4.3.2 her bir $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımı için Fe ve Cr’nin ilgili alaşımdaki $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını piklerinin toplam şiddeti yüz olacak biçimde Origin 7.5 programı ile elde edilen değerler kullanılarak çizilmiştir. Fe, Cr saf metallerinde ve $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Cr’nin $K\alpha$, $K\beta$ X-ışınları için tepe enerjileri, FWHM değerleri ve pikler altında kalan alanlar Çizelge 4.3.1’de verilmiştir.

Saf Fe ve Cr ile $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında; $N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları Çizelge 4.3.2’de verilmiştir. Saf Fe ve Cr için elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları sırasıyla 0,1320 ve 0,1273 dür. Perujo *et al.* (1987) ve Powlowski *et al.* (2002) ise $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını, Fe için 0,1350 ve 0,1307, Cr için 0,1331 ve 0,1314 bulmuşlardır.

$\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında; alaşımdaki Fe konsantrasyonu azaldıkça Fe için K X-ışını şiddet oranları artmaktadır ve Cr konsantrasyonu arttıkça Cr için K X-ışını şiddet oranları azalmaktadır. Alaşımlar için normalize edilmiş şiddet oranları ($R_{K\beta}/R_{K\alpha}$) incelendiğinde $\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$ alaşımında Fe için elde edilen K X-ışını şiddet oranlarının saf Fe’ninkinden daha büyük diğer alaşımlarda ise daha küçük olduğu anlaşılmaktadır. Cr için ise ilgili alaşımlarda Fe’ninkinin tam tersi bir durum söz konusudur. $\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$ alaşımında Cr için elde edilen K X-ışını şiddet oranlarını saf Cr’ninkinden daha küçük iken diğer alaşımlarda daha büyüktür.

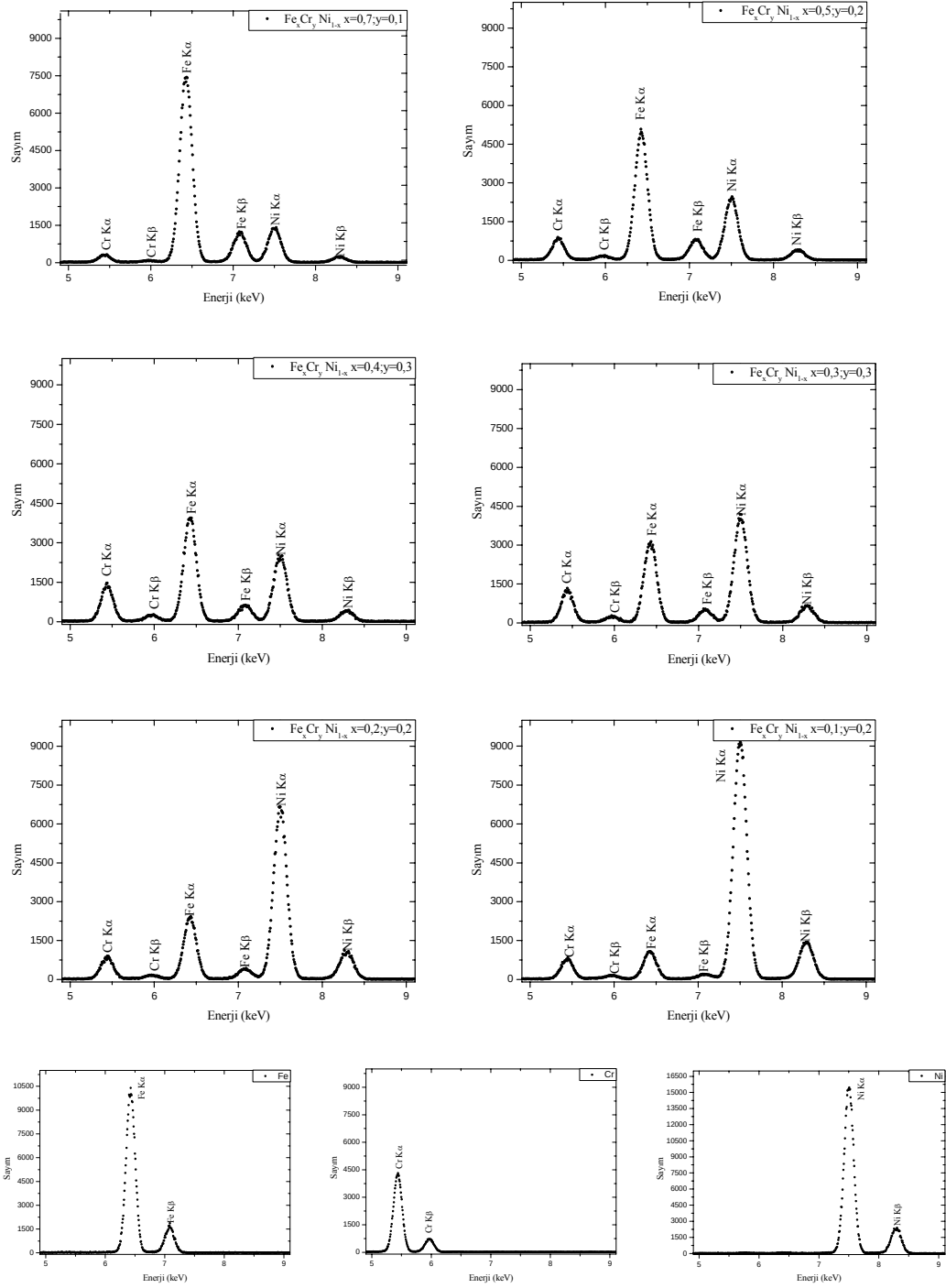
Çizelge 4.3.3’de Fe, Cr saf metalleri ile $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için ölçülen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak saf metaller ve alaşımlarda 3d ve 4s, 4p elektron sayıları ve elektron sayılarının rölatif değişimleri verilmiştir.

Saf Fe metalinin 3d elektron sayısı için $n_{3d}=6,8928$, değeri elde edilmiştir. $Fe_{0,9}Cr_{0,1}$ alaşımında saf Fe'ye göre Fe'nin 3d elektron sayısında 0,4542 kadar, $Fe_{0,7}Cr_{0,3}$ alaşımında ise 0,1072 kadar bir artış buna karşın $Fe_{0,5}Cr_{0,5}$ alaşımında ise 0,2042 kadar bir azalış görülmektedir. Bu değişimin Fe'nin 3d ve 4s, 4p durumlarının elektron yerleşimlerinin yeniden düzenlenmesinden ileri geldiği düşünüldüğünde Fe'nin 4s, 4p durumlarının sahip olması gereken elektron sayıları Çizelge 4.3.1'in 3. sütununda verildiği gibi olmalıdır. Saf Cr metalinin 3d elektron sayısı için $n_{3d}=5,7903$ değeri elde edilmiştir. Saf Cr'ye göre $Fe_{0,9}Cr_{0,1}$ alaşımında Cr'nin 3d elektron sayısında 1,6456 kadar, $Fe_{0,7}Cr_{0,3}$ alaşımında ise 0,7386 kadar bir azalma buna karşın $Fe_{0,5}Cr_{0,5}$ alaşımında ise 0,3450 kadar bir artış görülmektedir. Bu değişimin Cr'nin 3d ve 4s, 4p durumlarının elektron yerleşimlerinin yeniden düzenlenmesinden kaynaklandığı düşünüldüğünde Cr'nin 4s, 4p durumlarının sahip olması gereken elektron sayıları Çizelge 4.3.1'in 6. sütunundaki gibidir. $Fe_{0,9}Cr_{0,1}$ ve $Fe_{0,7}Cr_{0,3}$ alaşımlarında Fe'nin 3d elektron sayısı artarken Cr'nin 3d elektron sayısının azalması ve $Fe_{0,5}Cr_{0,5}$ ($x=0,5$) alaşımında ise Fe'nin 3d elektron sayısı azalırken Cr'nin 3d elektron sayısı artması bu alaşımlarda Fe ve Cr arasında elektron transferi olduğunu göstermektedir. Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında alaşımı oluşturan elementlerin valens elektron yerleşimleri sırasında 3d ile 4s, 4p durumları arasında elektronların yeniden düzenlenmesi ve bu metaller arasındaki 3d elektron transferleri etkili olabilmektedir.

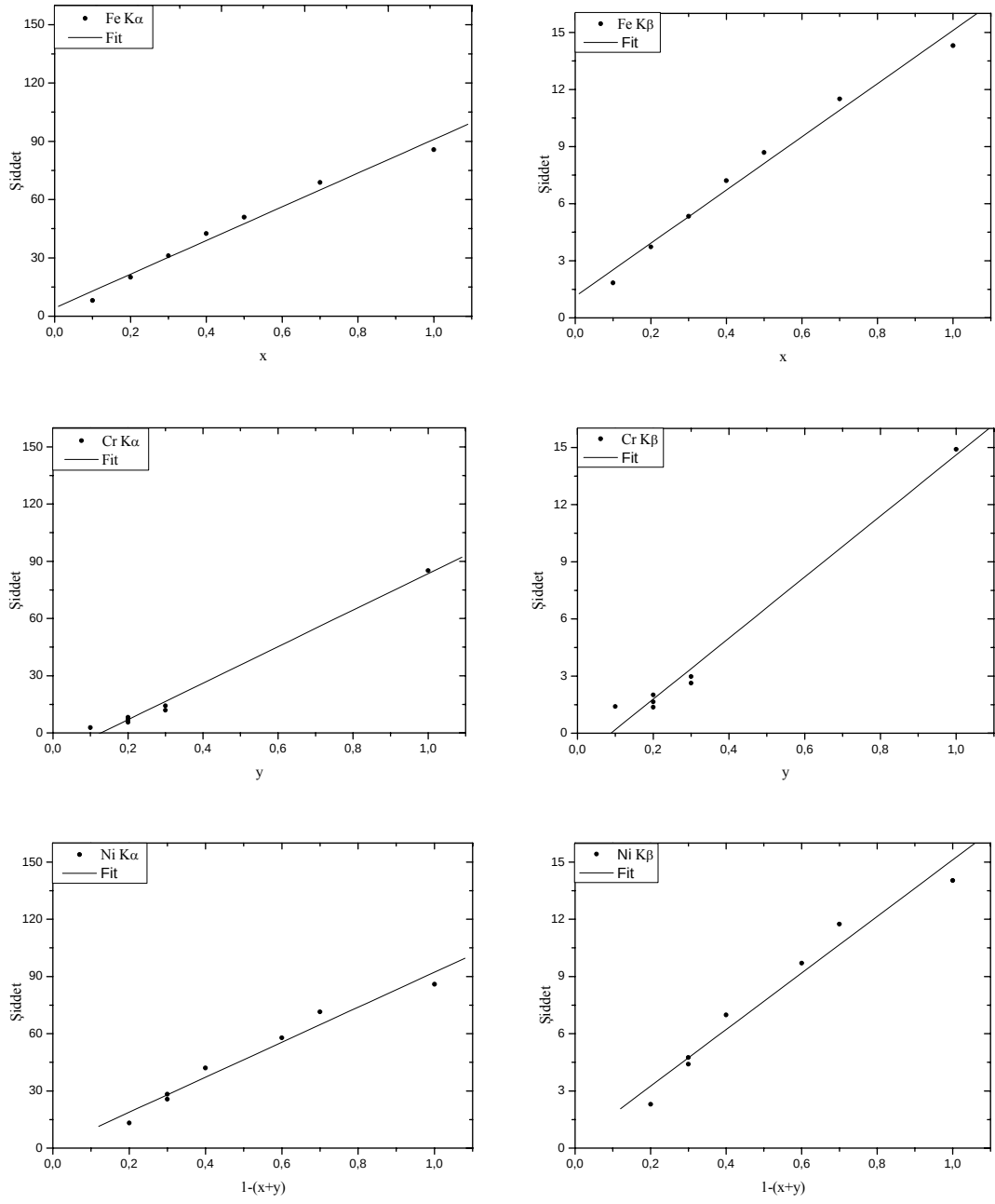
Çizelge 4.3.3'de Fe_xCr_{1-x} alaşımlarında Fe ve Cr için ölçülen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak elde edilen 3d ve 4s, 4p elektronlarının ilgili alaşımlar için toplam sayıları; Tn_{3d} ve $Tn_{4s,4p}$, ve saf metaller için ölçülen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak elde edilen değerlerin alaşımlar için ağırlıklı toplamından elde edilen yine ilgili alaşımlar için 3d ve 4s, 4p elektronlarının toplam sayıları; Tn_{3d}^* ve $Tn_{4s,4p}^*$ birlikte verilmişlerdir.

Şekil 4.3.3’de $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Cr için deneysel olarak elde edilen K X-ışını şiddet oranları, farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları ile elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırmalı olarak gösterilmektedir. Alaşımdaki metallerin konsantrasyonlarına bağlı olarak bu metaller için K X-ışını şiddet oranlarındaki değişimler şekilde görülmektedir. Şekil 4.3.4’de ise $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Cr için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri verilmiştir. Şekil 4.3.3 ve Şekil 4.3.4 ilgili metaller için birlikte incelendiğinde K X-ışını şiddet oranlarının arttığı yerde 3d elektron sayılarının azaldığı, K X-ışını şiddet oranlarının azaldığı yerde ise 3d elektron sayılarının arttığı görülmektedir. Buna göre metallerin sahip olduğu 3d elektron sayıları ile onların yayımladığı K X-ışınları için şiddet oranları arasında ters yönlü bir ilişki vardır. Metalin 3d elektron sayısı arttıkça, $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları azalmaktadır. Şekil 4.3.5’de $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Cr’nin 3d elektron sayılarının saf Fe ve Cr’nin 3d elektron sayılarına göre değişimleri, metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterilmektedir.

4.4. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma



Şekil 4.4.1. Fe, Cr, Ni ve $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.



Şekil 4.4.2. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.

Çizelge 4.4.1. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.

Element veya alaşım	E (keV)						FWHM (eV)					
	Fe		Cr		Ni		Fe		Cr		Ni	
	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ
Fe	6,428	7,082	—	—	—	—	3,432	3,610	—	—	—	—
Cr	—	—	5,439	5,969	—	—	—	—	3,297	3,471	—	—
Ni	—	—	—	—	7,503	8,291	—	—	—	—	3,565	3,874
Fe _{0,7} Cr _{0,1} Ni _{0,2}	6,428	7,082	5,438	6,026	7,502	8,290	3,409	3,620	3,154	8,793	3,543	3,867
Fe _{0,5} Cr _{0,2} Ni _{0,3}	6,427	7,080	5,440	5,974	7,501	8,291	3,422	3,668	3,328	4,552	3,552	3,808
Fe _{0,4} Cr _{0,3} Ni _{0,3}	6,427	7,082	5,440	5,971	7,501	8,290	3,434	3,784	3,304	4,102	3,629	3,781
Fe _{0,3} Cr _{0,3} Ni _{0,4}	6,428	7,081	5,442	5,972	7,501	8,289	3,470	3,802	3,316	4,114	3,569	3,782
Fe _{0,2} Cr _{0,2} Ni _{0,6}	6,427	7,083	5,440	5,968	7,501	8,290	3,436	3,972	3,433	4,863	3,564	3,796
Fe _{0,1} Cr _{0,2} Ni _{0,7}	6,427	7,089	5,441	5,960	7,500	8,289	3,502	4,803	3,365	4,957	3,576	3,795
N (sayım)												
	Fe		Cr		Ni		K _T					
	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ						
Fe	272354,70	45464,115	—	—	—	—	317818,82					
Cr	—	—	109252,07	19141,370	—	—	128393,44					
Ni	—	—	—	—	432501,49	70598,262	503099,75					
Fe _{0,7} Cr _{0,1} Ni _{0,2}	198263,22	33164,141	7976,4276	4057,0485	38105,955	6630,6892	288197,48					
Fe _{0,5} Cr _{0,2} Ni _{0,3}	131981,05	22491,506	21364,295	5216,9989	66492,496	11402,982	258949,33					
Fe _{0,4} Cr _{0,3} Ni _{0,3}	105639,11	17929,344	35449,862	7400,7916	70404,231	11836,591	248659,93					
Fe _{0,3} Cr _{0,3} Ni _{0,4}	83955,408	14410,917	32056,699	7105,7099	113477,18	18851,488	269857,41					
Fe _{0,2} Cr _{0,2} Ni _{0,6}	63733,379	11855,848	22296,297	5233,4978	183838,95	30828,905	317786,88					
Fe _{0,1} Cr _{0,2} Ni _{0,7}	28984,175	6583,5644	20168,955	4916,7626	256770,51	42254,030	359678,00					

Çizelge 4.4.2. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları. ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları).

Element veya Alaşım	Fe			Cr			Ni		
	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$
Fe	0,1488	0,1320	1,0000	—	—	—	—	—	—
Cr	—	—	—	0,1442	0,1273	1,0000	—	—	—
Ni	—	—	—	—	—	—	0,1488	0,1333	1,0000
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$	0,1503	0,1309	0,9915	0,1488	0,1317	1,0348	0,1647	0,1364	1,0231
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$	0,1530	0,1317	0,9976	0,1454	0,1284	1,0089	0,1632	0,1345	1,0088
$\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$	0,1540	0,1316	0,9972	0,1429	0,1265	0,9940	0,1632	0,1328	0,9962
$\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,4}$	0,1546	0,1325	1,0041	0,1444	0,1271	0,9983	0,1632	0,1332	0,9993
$\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,6}$	0,1556	0,1344	1,0182	0,1452	0,1278	1,0039	0,1606	0,1330	0,9978
$\text{Fe}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,7}$	0,1597	0,1376	1,0428	0,1467	0,1290	1,0134	0,1594	0,1321	0,9910

Çizelge 4.4.3. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.

Element veya Alaşım	Fe			Cr			Ni			$\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$			
	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	Tn_{3d}	Tn_{3d}^*	$Tn_{4s,4p}$	$Tn_{4s,4p}^*$
Fe	6,8928	1,1072	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Cr	—	—	—	5,7903	0,2097	—	—	—	—	—	—	—	—
Ni	—	—	—	—	—	—	9,0395	0,9605	—	—	—	—	—
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$	7,3063	0,6937	0,4135	4,3976	1,6024	-1,3927	7,9715	2,0285	-1,0680	7,1485	7,2119	1,0515	0,9881
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$	7,0000	1,0000	0,1072	5,3805	0,6195	-0,4098	8,5815	1,4185	-0,4580	7,1506	7,3163	1,0495	0,8837
$\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$	7,0366	0,9634	0,1438	6,1353	-0,1353	0,3450	9,2087	0,7913	0,1692	7,4178	7,2061	0,5822	0,7939
$\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,4}$	6,7218	1,2782	-0,1710	5,8721	0,1279	0,0818	9,0795	0,9205	0,0400	7,4100	7,4207	0,7900	0,7793
$\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,6}$	6,1394	1,8606	-0,7534	5,5965	0,4035	-0,1938	9,1615	0,8385	0,1220	7,8441	7,9603	0,9559	0,8397
$\text{Fe}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,7}$	5,3177	2,6823	-1,5751	5,1791	0,8209	-0,6112	9,5664	0,4336	0,5269	8,2641	8,1750	0,7359	0,8250

n_{3d} : Alaşımı oluşturan metaller için K X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenen 3d elektron sayıları.

$n_{4s,4p}$: Alaşımı oluşturan metaller için 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

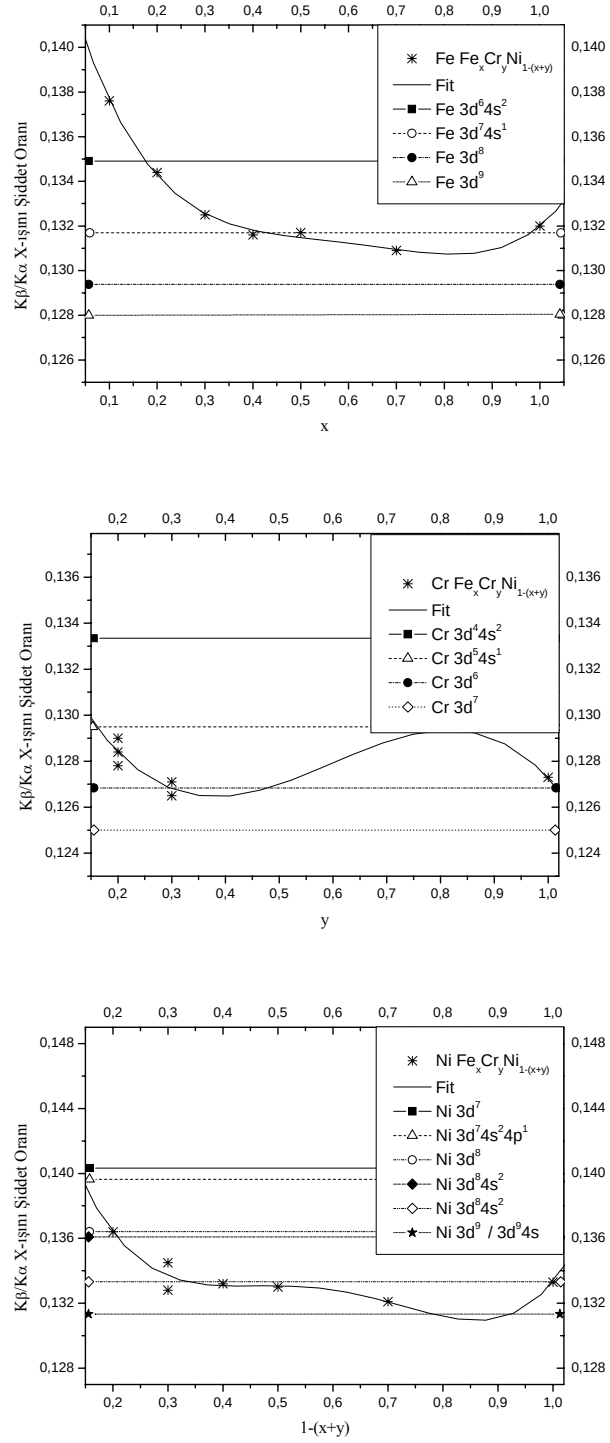
Dn_{3d} : İlgili metalin alaşımdaki 3d elektron sayısının saf halindeki ile kıyaslandığında 3d elektron sayısındaki değişim.

Tn_{3d} : Alaşımdaki 3d elektronlarının toplam sayısı.

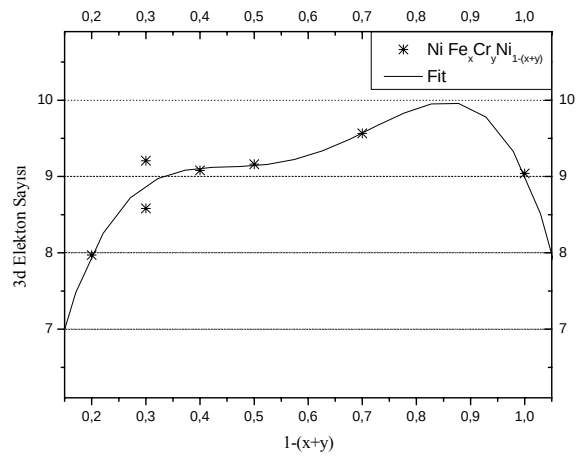
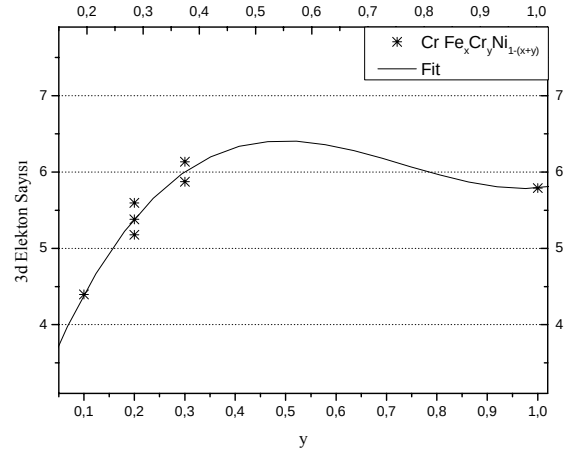
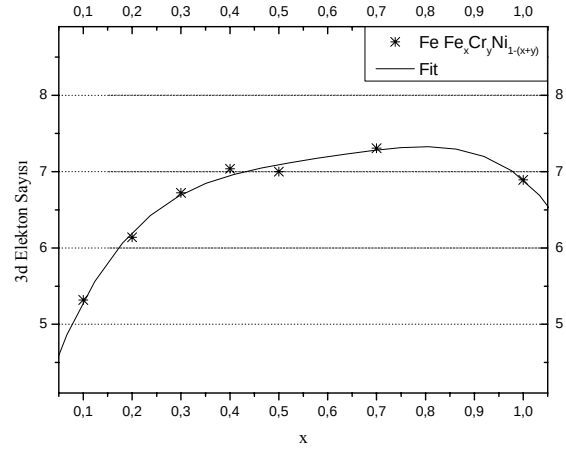
Tn_{3d}^* : Saf metaller için elde edilen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 3d elektronu sayısı.

$Tn_{4s,4p}$: Alaşımdaki 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

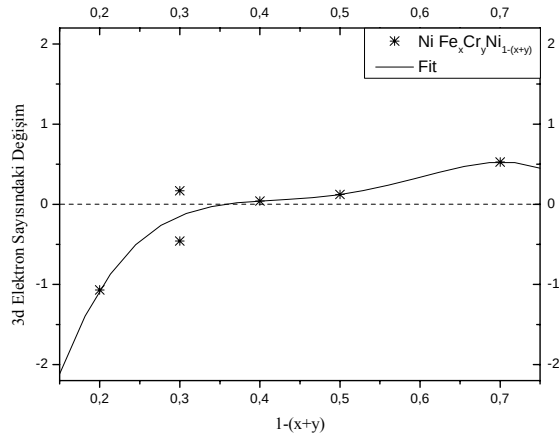
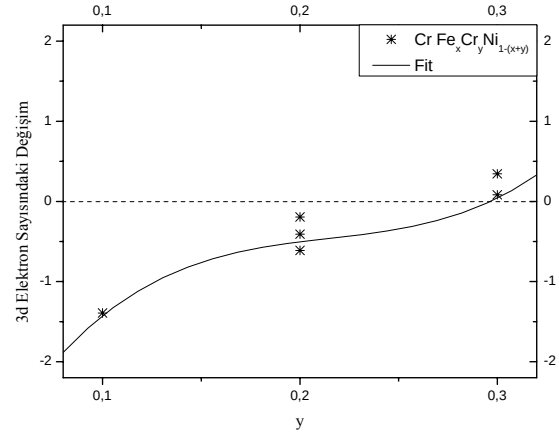
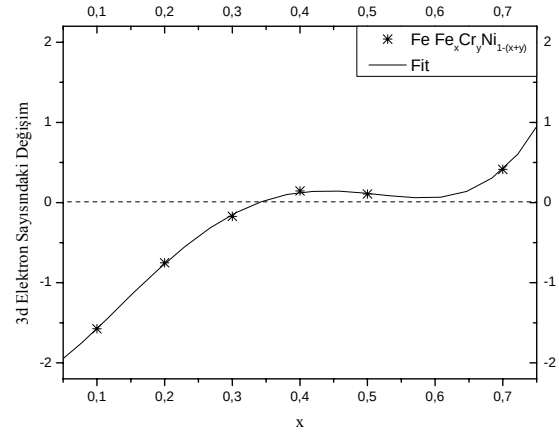
$Tn_{4s,4p}^*$: Saf metaller için elde edilen 4s, 4p elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 4s, 4p elektronu sayısı.



Şekil 4.4.3. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.



Şekil 4.4.4. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe Cr ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.



Şekil 4.4.5. Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)} alaşımlarında Fe, Cr ve Ni'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metaller ile kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.

Saf Fe, Cr ve Ni metalleri ile $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları Şekil 4.4.1’de verilmiştir. Her bir $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımı için Fe, Cr ve Ni’nin ilgili alaşımdaki $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını piklerinin toplam şiddeti yüz olacak biçimde Origin 7.5 programı ile elde edilen değerler kullanılarak Şekil 4.4.2 çizilmiştir. Fe, Cr ve Ni saf metallerinde ve $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni’nin $K\alpha$, $K\beta$ X-ışınları için tepe enerjileri, FWHM değerleri ve pikler altında kalan alanlar Çizelge 4.4.1’de verilmiştir.

Saf Fe, Cr ve Ni ile $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında; $N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları Çizelge 4.4.2’de verilmiştir. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ ($x=0,7-y=0,1$; $x=0,5-y=0,2$; $x=0,4-y=0,3$) alaşımlarında Fe için saf Fe’in $K\beta/K\alpha$ X-ışın şiddet oranlarından daha küçük buna karşın diğer alaşımlarda daha büyük $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları elde edilmiştir. $\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$ alaşımında, Fe için elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı, Fe konsantrasyonunun 0,4’e inip Cr konsantrasyonunun 0,3’e çıktığı $\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$ alaşımındaki değeri ile hemen hemen aynıdır. Buna göre Fe için K X-ışını şiddet oranlarının alaşımdaki değerleri Fe’nin alaşımdaki konsantrasyonu yanı sıra alaşımdaki diğer metallerin konsantrasyonlarına da bağlıdır. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarındaki Fe oranı azalırken Fe için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları artmaktadır. Cr için elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları Cr konsantrasyonunun 0,1 ve 0,2 ($y=0,1$; 0,2) olduğu alaşımlarda saf Cr için bulunan değerden daha büyük, Cr konsantrasyonunun 0,3 ($y=0,3$) olduğu alaşımlarda ise daha küçük dür. $\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$ alaşımında Ni için saf Ni’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranından daha büyük bir değer elde edilmiştir. Ni konsantrasyonlarının aynı olduğu $\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$ ve $\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$ alaşımlarından birincisinde Ni için saf Ni’ninkinden daha büyük ikincisinde ise daha küçük $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları elde edilmiştir. Buradan Ni K X-ışını şiddet oranlarının alaşımdaki diğer metallerin konsantrasyonlarındaki değişimlerden etkilenebileceği anlaşılmaktadır. Ni konsantrasyonun 0,4; 0,5 ve 0,6 olduğu diğer alaşımlarda ise artan Ni

konsantrasyonları ile azda olsa $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarında bir azalma meydana gelmektedir.

Çizelge 4.4.3’de Fe, Cr, Ni saf metalleri ile $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımları için ölçülen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak, saf metaller ve alaşımlarda elde edilen 3d ve 4s, 4p elektron sayıları ve bunların rölatif değişimleri verilmiştir. Saf Fe’nin 3d elektron sayısı için $n_{3d}=6,8928$, 4s, 4p elektron sayıları için $n_{4s,4p}=1,1072$, Saf Cr’nin 3d elektron sayısı için $n_{3d}=5,7903$, 4s, 4p elektron sayıları için $n_{4s,4p}=0,2097$, Saf Ni’nin 3d elektron sayısı için $n_{3d}=9,0395$, 4s, 4p elektron sayıları için $n_{4s,4p}=0,9605$ değerleri elde edilmiştir.

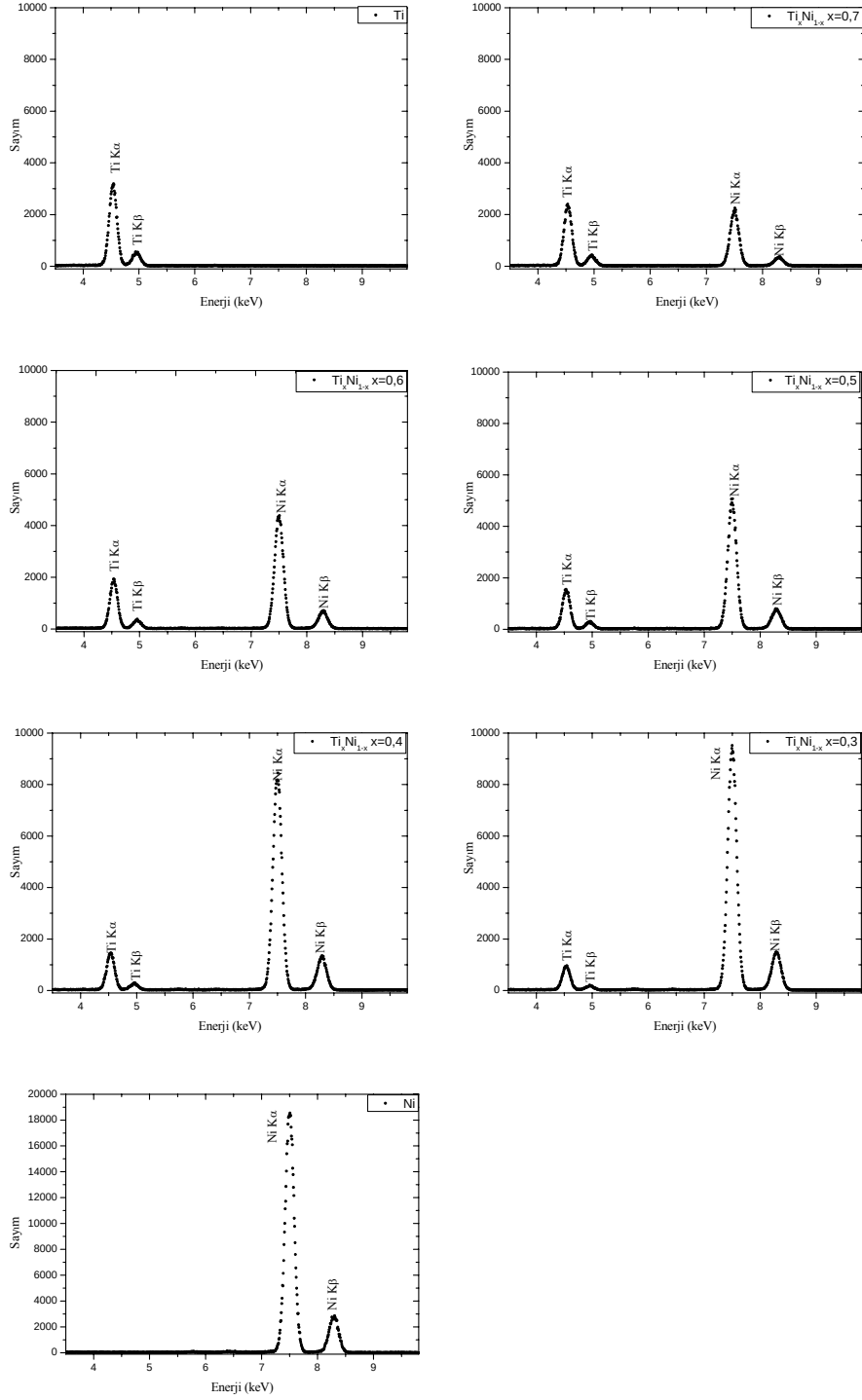
$Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ ($x=0,7-y=0,1$; $x=0,5-y=0,2$; $x=0,4-y=0,3$) alaşımlarında Fe’nin 3d elektron sayısı için bir artış, $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ ($x=0,3-y=0,3$; $x=0,2-y=0,2$; $x=0,1-y=0,2$) alaşımlarında ise bir azalış görülmektedir. Cr konsantrasyonunun $y=0,3$ olduğu iki alaşımda Cr’un 3d elektron sayısı saf Cr’a göre artarken diğer alaşımlarda azalmıştır. Ni için $Fe_{0,7}Cr_{0,1}Ni_{0,2}$ ve $Fe_{0,5}Cr_{0,2}Ni_{0,3}$ alaşımlarda saf Ni’e göre azalan 3d elektronları sayısı diğer alaşımlarda artmıştır. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarını oluşturan elementlerin 3d elektron yerleşimlerinde meydana gelen bu değişimin metallerin 3d ve 4s, 4p durumlarının elektron yerleşimlerinin yeniden düzenlenmesinden kaynaklandığı düşünüldüğünde; Fe, Cr ve Ni’nin 4s, 4p durumlarının sahip olması gereken elektron sayıları Çizelge 4.4.3’ün 3, 6 ve 9. sütunlarında verildiği gibi olmalıdır. $Fe_{0,7}Cr_{0,1}Ni_{0,2}$ ve $Fe_{0,5}Cr_{0,2}Ni_{0,3}$ alaşımlarda Cr ve Ni in 3d elektron sayıları azalırken Fe’nin 3d elektron sayılarının artması, bu alaşımlarda Fe’ye; Cr ve/veya Ni’den 3d elektron transferi olduğunu göstermektedir. $Fe_{0,4}Cr_{0,3}Ni_{0,3}$ alaşımında ise Cr’unin 3d elektron sayısı azalırken hem Fe hemde Ni’nin 3d elektronlarının sayısı artmıştır. $Fe_{0,3}Cr_{0,3}Ni_{0,4}$ alaşımında ise Fe’nin 3d elektron sayısı azalırken Cr ve Ni’ninkiler artmıştır. Önceki alaşımda Fe’ye doğru olan 3d elektron transferi bu alaşımda artık diğer metal/metallere doğrudur. Bu alaşımda Fe’nin 3d elektron sayısı 0,1710 kadar

azalırken Cr ve Ni'in 3d elektron sayılarında meydana gelen toplam artış 0,1218 (Cr için: 0,0818 ve Ni için: 0,0400) kadardır. Buradan bu alaşımda alaşımı oluşturan 3d geçiş metallerinin valens elektron yerleşiminde metallerin 3d ve 4s, 4p durumlarının elektronlarının yeniden düzenlenmesinin de etkili olduğu anlaşılmaktadır. $Fe_{0,2}Cr_{0,2}Ni_{0,6}$ ve $Fe_{0,1}Cr_{0,2}Ni_{0,7}$ alaşımlarında hem Fe hem de Cr'nin 3d elektron sayıları azalırken Ni'nin 3d elektron sayısı artmıştır.

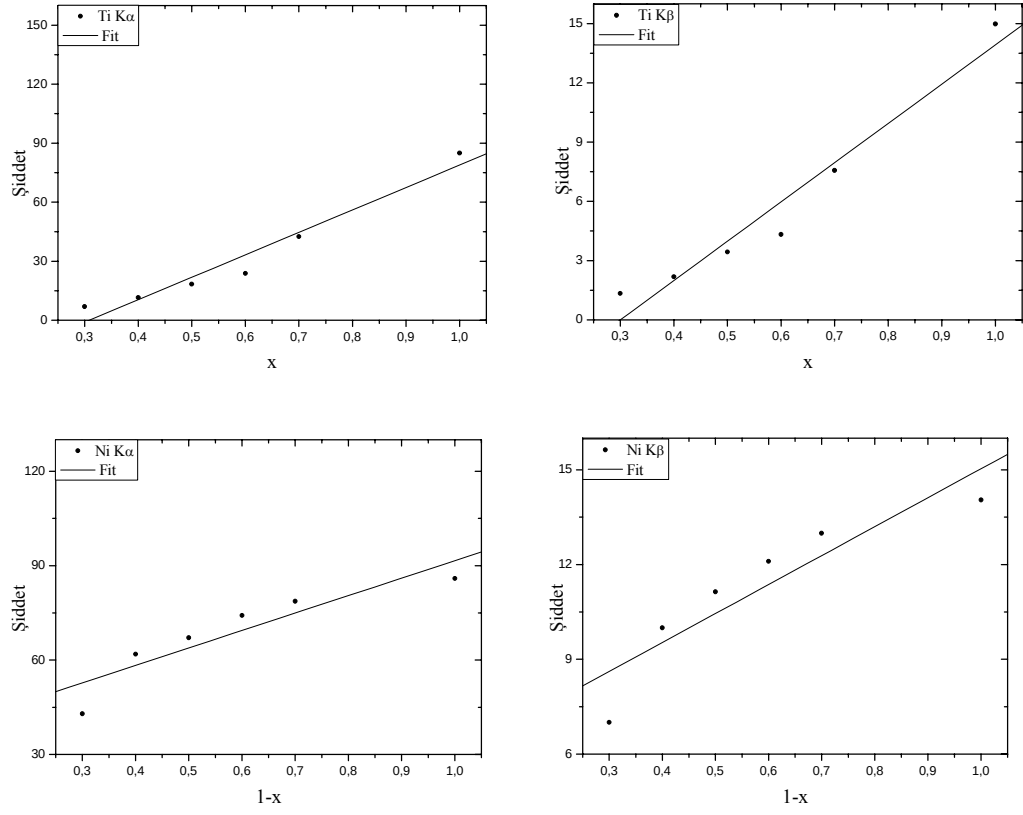
Şekil 4.4.3'de $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni için deneysel olarak elde edilen K X-ışını şiddet oranları, farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları ile elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırmalı olarak çizilmiştir. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında metallerin K X-ışını şiddet oranlarının alaşımlardaki kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri şekilden görülmektedir. Şekil 4.4.4'de ise $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri verilmiştir. Şekil 4.4.3 ve Şekil 4.4.4 ilgili metaller için birlikte incelendiğinde $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarını oluşturan her üç geçiş metali içinde K X-ışını şiddet oranları ile sahip oldukları 3d elektron sayıları arasında ters yönlü bir ilişki olduğu anlaşılmaktadır.

Şekil 4.4.5'de $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında; alaşımları oluşturan metallerin 3d elektron sayılarının bu metallerin safları için belirlenen 3d elektron sayılarına göre değişimleri, metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterilmektedir. Şekil 4.4.5'den her üç metal içinde alaşımlardaki 3d elektron sayısının saf metallerdekilere olan farklarının metallerin alaşımlardaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak hemen hemen aynı yönlü bir değişim gösterdikleri söylenebilir. $Fe_xCr_yNi_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe, Cr ve Ni için 3d elektronlarının sayısında saf metallere nazaran meydana gelen değişim ilgili metaller için konsantrasyonlarının en az olduğu alaşımlarda en fazladır.

4.5. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma



Şekil 4.5.1. Ti, Ni ve $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.



Şekil 4.5.2. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Ni'nin K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri.

Çizelge 4.5.1. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.

Element veya alaşım	E (keV)				FWHM (eV)				N (sayım)				
	Ti		Ni		Ti		Ni		Ti		Ni		K_T
	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	$K\alpha$	$K\beta$	
Ti	4,537	4,956	—	—	3,189	3,479	—	—	77458,486	13647,721	—	—	91106,2072
$Ti_{0,7}Ni_{0,3}$	4,536	4,955	7,501	8,290	3,200	3,477	3,574	3,815	58366,414	10395,403	58997,113	9622,084	137381,014
$Ti_{0,6}Ni_{0,4}$	4,537	4,957	7,501	8,290	3,187	3,435	3,573	3,785	46498,378	8460,418	120907,710	19529,971	195396,473
$Ti_{0,5}Ni_{0,5}$	4,537	4,955	7,500	8,290	3,186	3,439	3,571	3,918	37629,676	7036,555	137561,683	22842,098	205070,018
$Ti_{0,4}Ni_{0,6}$	4,537	4,955	7,500	8,289	3,222	3,588	3,584	3,794	36101,971	6827,623	232541,791	37920,741	313392,133
$Ti_{0,3}Ni_{0,7}$	4,537	4,957	7,500	8,290	3,224	3,586	3,572	3,787	23217,476	4466,860	262666,714	43365,257	333716,306
Ni	—	—	7,503	8,291	—	—	3,565	3,878	—	—	519121,522	84847,991	603969,515

Çizelge 4.5.2. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları).

Element veya Alaşım	Ti			Ni		
	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$
Ti	0,1714	0,1289	1,0000	—	—	—
$\text{Ti}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	0,1680	0,1268	0,9841	0,1706	0,1319	0,9956
$\text{Ti}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	0,1664	0,1254	0,9729	0,1697	0,1320	0,9962
$\text{Ti}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	0,1717	0,1291	1,0020	0,1753	0,1373	1,0359
$\text{Ti}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	0,1640	0,1232	0,9559	0,1711	0,1350	1,0190
$\text{Ti}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	0,1705	0,1279	0,9923	0,1745	0,1384	1,0446
Ni	—	—	—	0,1598	0,1325	1,0000

Çizelge 4.5.3. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.

Element veya Alaşım	Ti			Ni			Ti_xNi_{1-x}			
	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	Tn_{3d}	Tn_{3d}^*	$Tn_{4s,4p}$	$Tn_{4s,4p}^*$
Ti	2,3773	1,6227	—	—	—	—	—	—	—	—
$Ti_{0,7}Ni_{0,3}$	2,8502	1,1498	0,4729	9,5660	0,4340	0,2554	4,8649	4,4573	0,9351	1,3427
$Ti_{0,6}Ni_{0,4}$	3,2133	0,7867	0,8360	9,5218	0,4782	0,2112	5,7367	5,1506	0,6633	1,2494
$Ti_{0,5}Ni_{0,5}$	2,3356	1,6644	-0,0417	7,7500	2,2500	-1,5606	5,0428	5,8440	1,9572	1,1561
$Ti_{0,4}Ni_{0,6}$	3,9217	0,0783	1,5444	8,4202	1,5798	-0,8904	6,6208	6,5373	0,9792	1,0627
$Ti_{0,3}Ni_{0,7}$	2,5938	1,4062	0,2165	7,4617	2,5383	-1,8489	6,0013	7,2306	2,1987	0,9694
Ni	—	—	—	9,3106	0,6894	—	—	—	—	—

n_{3d} : Alaşımı oluşturan metaller için K X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenen 3d elektron sayıları.

$n_{4s,4p}$: Alaşımı oluşturan metaller için 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

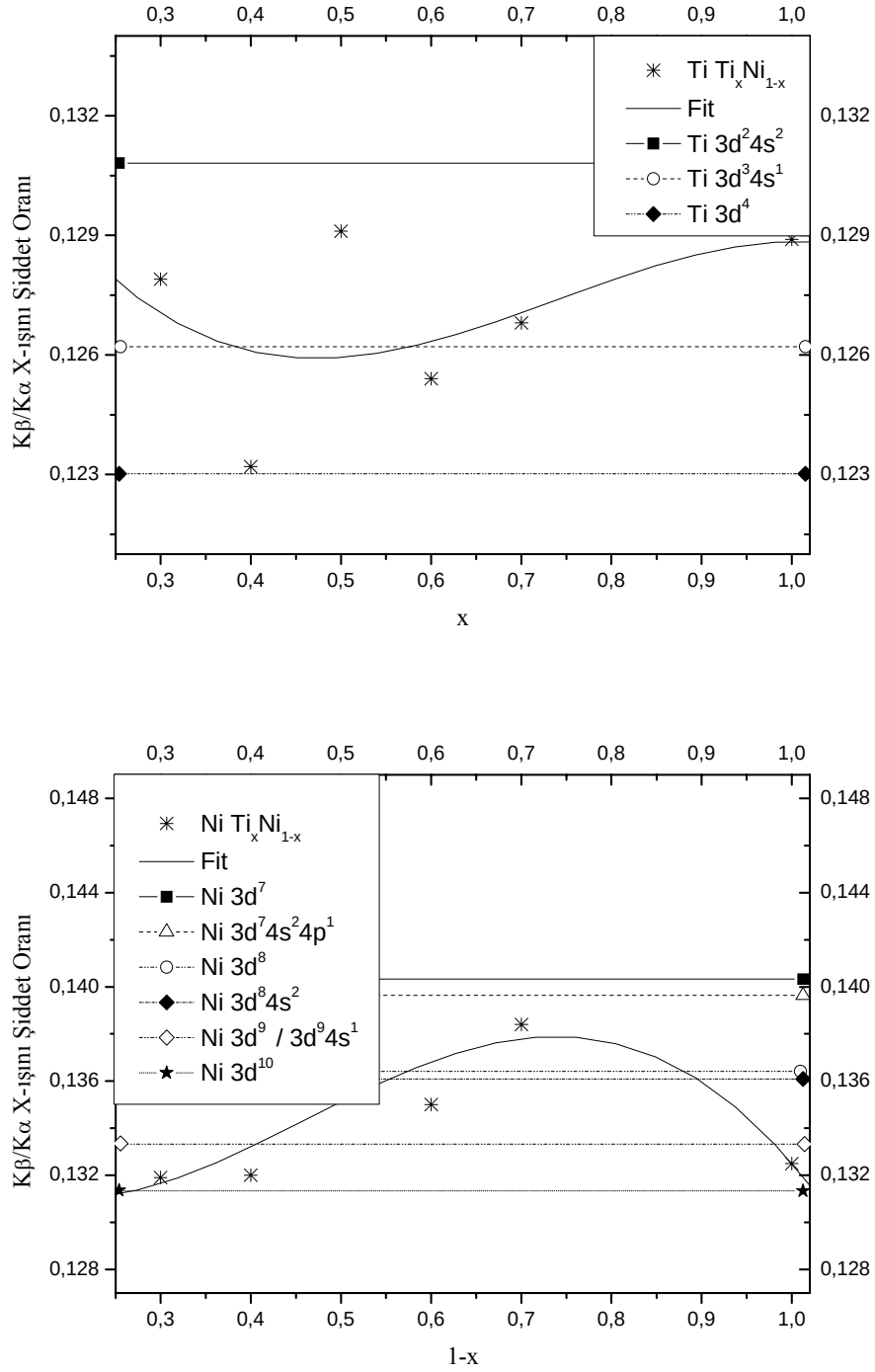
Dn_{3d} : İlgili metalin alaşımdaki 3d elektron sayısının saf halindeki ile kıyaslandığında 3d elektron sayısındaki değişim.

Tn_{3d} : Alaşımdaki 3d elektronlarının toplam sayısı.

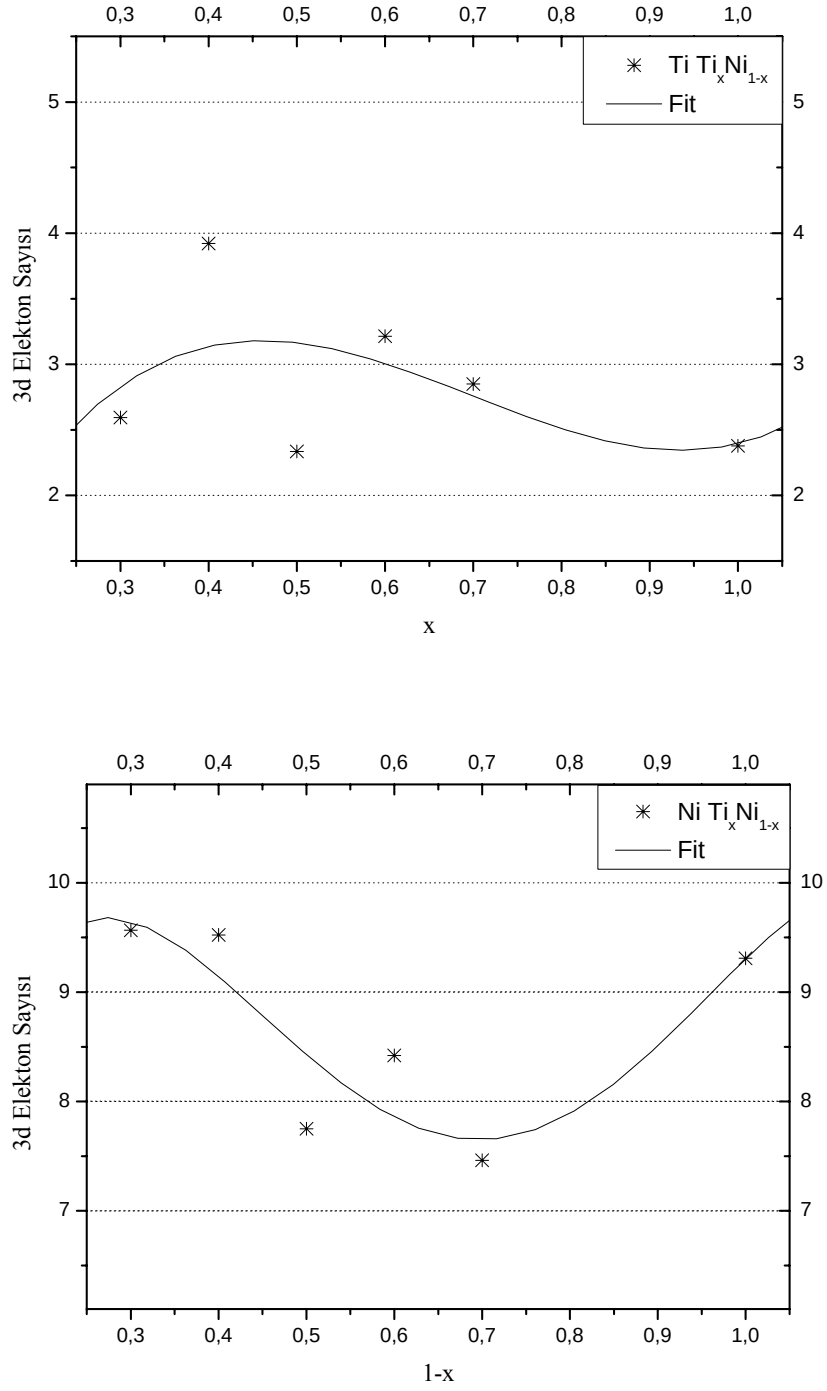
Tn_{3d}^* : Saf metaller için elde edilen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 3d elektronu sayısı.

$Tn_{4s,4p}$: Alaşımdaki 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

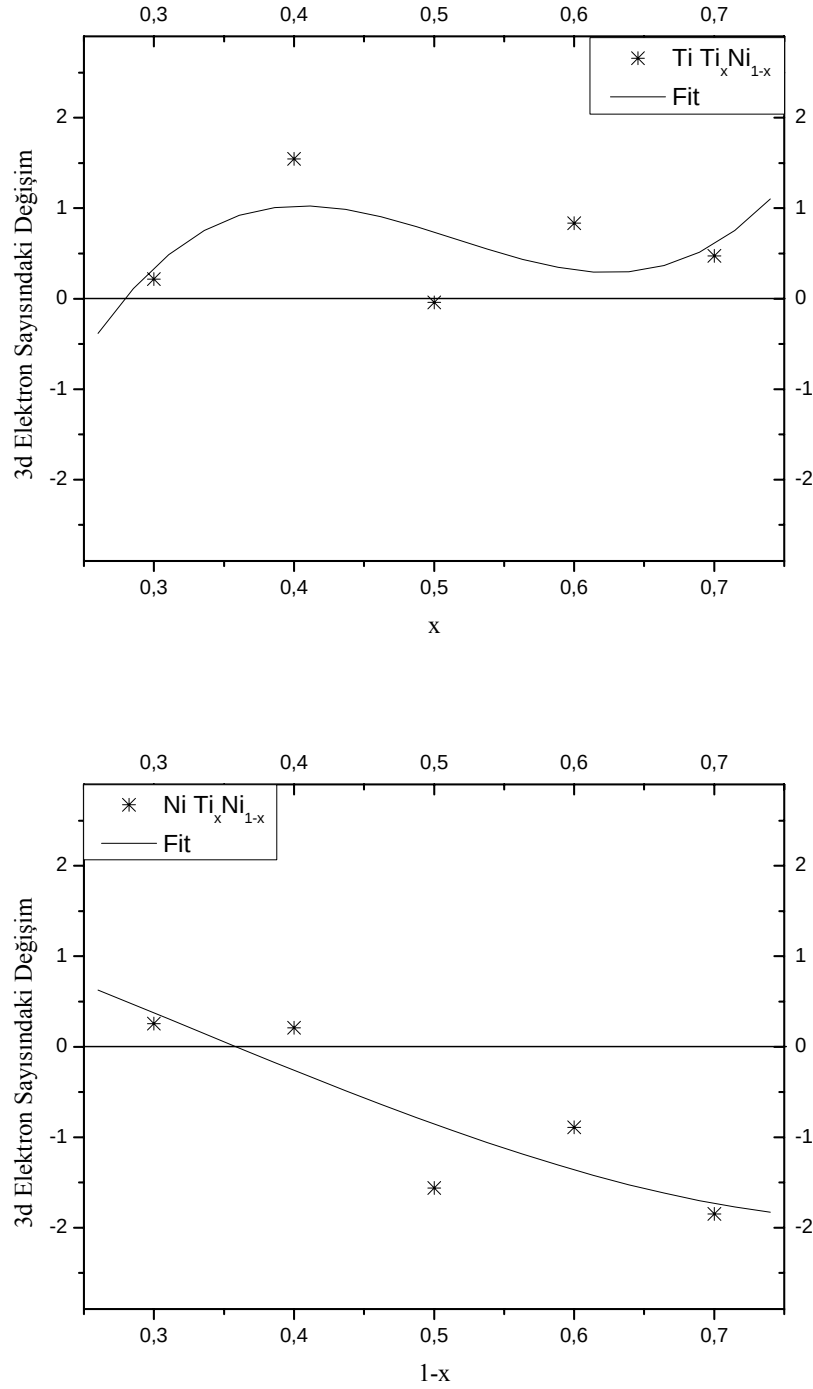
$Tn_{4s,4p}^*$: Saf metaller için elde edilen 4s, 4p elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 4s, 4p elektronu sayısı.



Şekil 4.5.3. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında Ti ve Ni için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.



Şekil 4.5.4. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında Ti ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.



Şekil 4.5.5. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında Ti ve Ni'nin 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metaller ile kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.

Saf Ti ve Ni metalleri ile Ti_xNi_{1-x} ($x= 0,7; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,3$) alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları Şekil 4.5.1’de verilmiştir. Şekil 4.5.2 her bir Ti_xNi_{1-x} alaşımı için Ti ve Ni’nin ilgili alaşımdaki $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını piklerinin toplam şiddeti yüz olacak biçimde Origin 7.5 programı ile elde edilen değerler kullanılarak çizilmiştir. Ti ve Ni’in $K\alpha$, $K\beta$ X-ışınlarının; tepe enerjileri, FWHM değerleri ve sayımları için saf Ti ve Ni ile Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında elde edilen değerler Çizelge 4.5.1’de verilmiştir.

Ti ile Ni için saf hallerinde ve Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında ölçülen; $N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları Çizelge 4.5.2’de verilmiştir. Saf Ti ve Ni için ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları sırasıyla 0,1289 ve 0,1325 dir. Bhuinya and Padhi (1992) farklı kompozisyonlardaki Ti_xNi_{1-x} ($x=0,35; 0,55$ ve $0,74$) alaşımları için yaptıkları çalışmada saf Ti ve Ni’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları için sırasıyla 0,1282 ve 0,1356 değerlerini elde etmişlerdir. Bu çalışmada Ti için elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranı Bhuinya and Padhi (1992)’nin bulduğu değer ile hemen hemen aynıdır. Raj *et al.* (2002) ise saf Ti ve Ni için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarını sırasıyla 0,1265 ve 0,1346 olarak bulmuşlardır. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında; Ti ve Ni için elde edilen K X-ışını şiddet oranları alaşımlardaki Ti ve Ni konsantrasyonlarına bağlı olarak düzenli olmamakla birlikte değişmektedirler. $Ti_{0,5}Ni_{0,5}$ alaşımında Ti için elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddeti oranı saf Ti’ninkinden büyük diğer alaşımlarda elde edilen değerler ise daha küçüktürler. Ni için ise Ti_xNi_{1-x} ($x=0,7$ ve $0,6$) alaşımlarında saf Ni için bulunandan daha küçük diğer alaşımlarda ise daha büyük $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları elde edilmiştir.

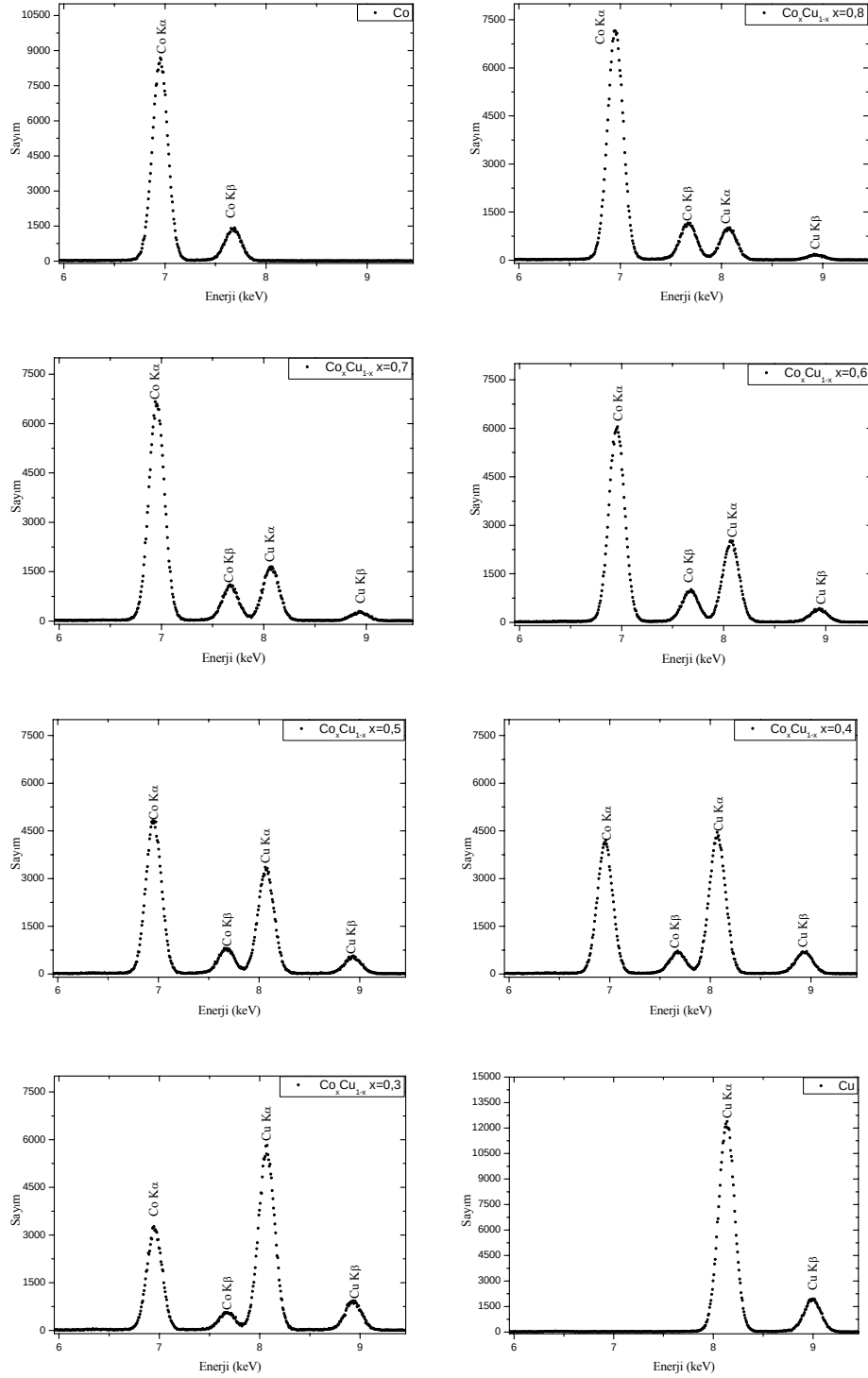
Ti, Ni ve Ti_xNi_{1-x} alaşımları için ölçülen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak saf metaller ve alaşımlarda 3d ve 4s, 4p elektron sayıları ve elektron sayılarının rölatif değişimleri Çizelge 4.5.3’de verilmiştir. Saf Ti metalinin 3d elektron sayısı için

$n_{3d}=2,3773$, saf Ni için ise $n_{3d}=9,3106$, değerleri elde edilmiştir. Çizelge 4.5.2 incelendiğinde alaşımlarında metallerin 3d elektron sayılarının saf hallerindekilerden farklı oldukları görülmektedir. Çizelgenin 3ve 6. sütunları bu değişimler ilgili metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumları arasındaki elektron düzenlenmelerinden kaynaklansaydı metallerin 4s, 4p durumlarının elektron sayılarının nasıl olması gerektiğini göstermektedir.

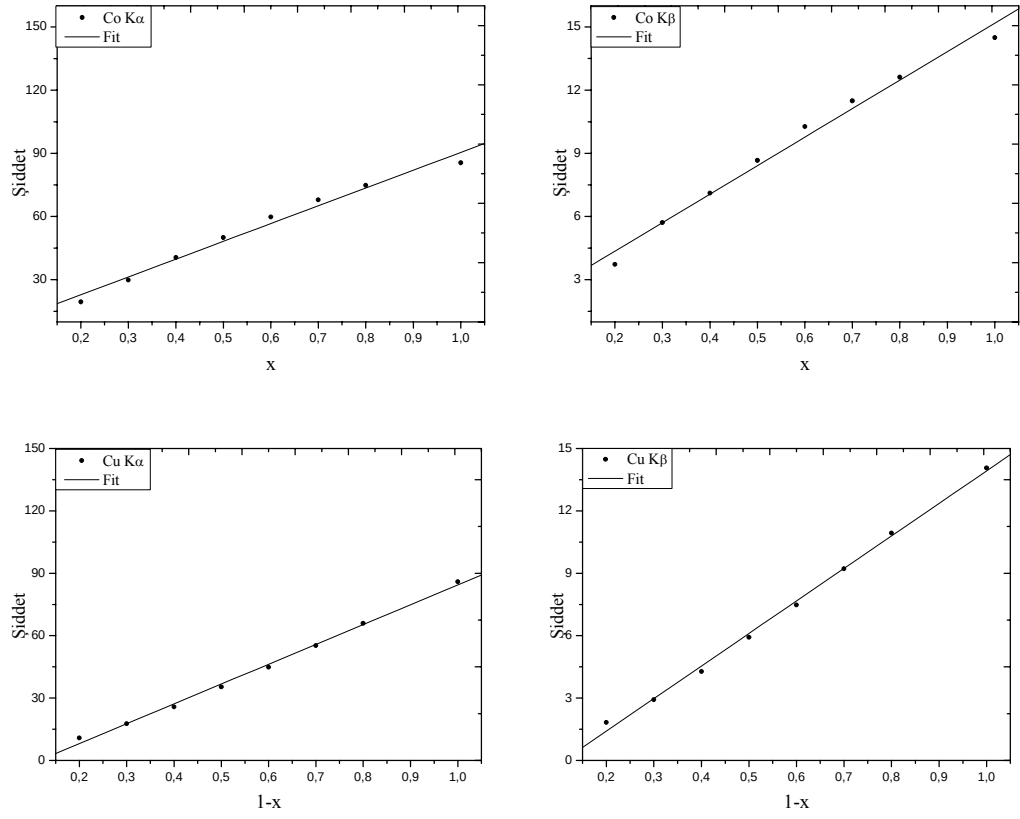
Ti_xNi_{1-x} ($x=0,7$ ve $0,6$) alaşımlarında hem Ti'nin hem de Ni'in 3d elektron sayılarında saf metallerde elde edilen 3d elektron sayılarına nazaran bir artış söz konusudur. Alaşımlardaki her iki element için de 3d elektron sayılarının birlikte artışı Ti ve Ni'nin 3d elektron sayılarında meydana gelen bu değişimin sebebinin metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektronlarının yeniden düzenlenmesi olduğunu gösterir. Ti_xNi_{1-x} ($x=0,7$ ve $0,6$) alaşımlarında, konsantrasyonu fazla olan Ti'nin 3d elektron sayısındaki artışlar, Ni'nin 3d elektron sayılarında meydana gelen artışlardan daha fazladır. $Ti_{0,5}Ni_{0,5}$ alaşımındaki durum ise ilgi çekicidir. Bu alaşımda hem Ti'nin hem de Ni'nin 3d elektron sayılarında saf metallerde ölçülenlere nazaran bir azalma görülmektedir. Ancak $Ti_{0,5}Ni_{0,5}$ alaşımında Ti için gözlenen azalma Ni'ninkinden çok daha küçüktür. Ti_xNi_{1-x} ($x=0,4$ ve $0,3$) alaşımlarında ise saf metaller için elde edilen değerlerle kıyaslandıklarında Ti'nin 3d elektron sayısında artış olurken Ni'nin 3d elektron sayısında azalma vardır. Buradan Ti_xNi_{1-x} ($x=0,4$ ve $0,3$) alaşımlarında; alaşımları oluşturan metallerin 3d elektron sayılarında meydana gelen bu değişimlerde, metaller arasında gerçekleşen 3d elektron transferlerinin etkili olduğu anlaşılmaktadır. $Ti_{0,4}Ni_{0,6}$ alaşımında Ni'nin 3d elektron sayısı 0,8904 kadar azalırken Ti'nin 3d elektron sayısı 1,5444 kadar artmıştır. $Ti_{0,3}Ni_{0,7}$ alaşımında ise Ni'nin 3d elektron sayısı 1,8489 kadar azalırken Ti'nin 3d elektron sayısı sadece 0,2165 kadar artmıştır. Buradan bu alaşımda alaşımları oluşturan metallerin valens elektron yerleşimlerinin tayininde; Ti ve Ni arasında gerçekleşen 3d elektron transferleri yanı sıra metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektron yerleşimi düzenlenmelerinin de etkili olduğu anlaşılmaktadır.

Şekil 4.5.3’de Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında Ti ve Ni için deneysel olarak elde edilen K X-ışını şiddet oranları, farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları ile elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırmalı olarak gösterilmektedir. Alaşımdaki metallerin konsantrasyonlarına bağlı olarak bu metaller için K X-ışını şiddet oranlarındaki değişimler şekilde görülmektedir. Şekil 4.5.4’de ise Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında Ti ve Ni için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri verilmiştir. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında Ti ve Ni’nin 3d elektron sayılarının saf Ti ve Ni’nin 3d elektron sayılarına göre değişimleri, metallerin alaşımlardaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak Şekil 4.5.5’de gösterilmektedir.

4.6. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma



Şekil 4.6.1. Co, Cu ve $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.



Şekil 4.6.2. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu'nun K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri,

Çizelge 4.6.1. Co_xCu_{1-x} alaşımlarında K α ve K β pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.

Element veya alaşım	E (keV)				FWHM (eV)				N (sayım)				
	Co		Cu		Co		Cu		Co		Cu		K _T
	K α	K β	K α	K β	K α	K β	K α	K β	K α	K β	K α	K β	
Co	6,953	7,673	—	—	3,491	3,722	—	—	232971,548	39468,194	—	—	272439,742
Co _{0,8} Cu _{0,2}	6,953	7,673	8,069	8,933	3,505	3,699	3,675	3,969	195289,702	32958,724	28224,4938	4779,3574	261252,278
Co _{0,7} Cu _{0,3}	6,955	7,674	8,070	8,936	3,491	3,690	3,665	3,911	179432,712	30331,882	46543,3599	7724,8250	264032,779
Co _{0,6} Cu _{0,4}	6,954	7,674	8,072	8,934	3,533	3,784	3,685	3,905	164401,094	28265,836	70814,4309	11755,881	275237,242
Co _{0,5} Cu _{0,5}	6,954	7,676	8,070	8,931	3,507	3,742	3,639	3,866	131925,337	22833,177	93164,6182	15604,551	263527,684
Co _{0,4} Cu _{0,6}	6,954	7,676	8,071	8,933	3,507	3,790	3,667	3,907	112239,180	19673,317	124076,864	20699,084	276688,446
Co _{0,3} Cu _{0,7}	6,954	7,676	8,070	8,932	3,496	3,879	3,643	3,804	86654,0305	16571,584	160201,700	26749,882	290177,198
Co _{0,2} Cu _{0,8}	6,953	7,677	8,077	8,931	3,517	3,984	3,654	3,860	63950,7443	12260,681	216583,859	35967,213	328762,499
Cu	—	—	8,071	8,932	—	—	3,654	3,863	—	—	350193,748	57324,567	407518,315

Çizelge 4.6.2. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları).

Element veya Alaşım	Co			Cu		
	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$
Co	0,1645	0,1342	1,0000	—	—	—
$\text{Co}_{0,8}\text{Cu}_{0,2}$	0,1597	0,1304	0,9718	0,1724	0,1345	0,9821
$\text{Co}_{0,7}\text{Cu}_{0,3}$	0,1602	0,1307	0,9743	0,1722	0,1349	0,9846
$\text{Co}_{0,6}\text{Cu}_{0,4}$	0,1604	0,1308	0,9746	0,1751	0,1378	1,0061
$\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5}$	0,1614	0,1318	0,9822	0,1764	0,1396	1,0193
$\text{Co}_{0,4}\text{Cu}_{0,6}$	0,1630	0,1330	0,9914	0,1766	0,1408	1,0277
$\text{Co}_{0,3}\text{Cu}_{0,7}$	0,1646	0,1343	1,0008	0,1771	0,1416	1,0339
$\text{Co}_{0,2}\text{Cu}_{0,8}$	0,1653	0,1348	1,0042	0,1774	0,1435	1,0476
Cu	—	—	—	0,1621	0,1370	1,0000

Çizelge 4.6.3. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.

Element veya Alaşım	Co			Cu			$\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$			
	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	Tn_{3d}	Tn_{3d}^*	$Tn_{4s,4p}$	$Tn_{4s,4p}^*$
Co	7,4339	1,5661	—	—	—	—	—	—	—	—
$\text{Co}_{0,8}\text{Cu}_{0,2}$	9,0000	0,0000	1,5661	9,7861	0,2139	0,9204	9,1572	7,7203	0,0428	1,4366
$\text{Co}_{0,7}\text{Cu}_{0,3}$	8,8391	0,1609	1,4052	9,6238	0,3762	0,7581	9,0745	7,8634	0,2255	1,4366
$\text{Co}_{0,6}\text{Cu}_{0,4}$	8,7878	0,2122	1,3539	8,6083	1,3917	-0,2574	8,7160	8,0066	0,6840	1,3934
$\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5}$	8,3238	0,6762	0,8899	8,0746	1,9254	-0,7911	8,1992	8,1498	1,3008	1,3502
$\text{Co}_{0,4}\text{Cu}_{0,6}$	7,8496	1,1504	0,4157	7,7467	2,2533	-1,1190	7,7879	8,2930	1,8121	1,3070
$\text{Co}_{0,3}\text{Cu}_{0,7}$	7,4013	1,5987	-0,0326	7,5383	2,4617	-1,3274	7,4972	8,4362	2,2028	1,2638
$\text{Co}_{0,2}\text{Cu}_{0,8}$	7,2422	1,7578	-0,1917	7,0707	2,9293	-1,7950	7,1050	8,5793	2,6950	1,2207
Cu	—	—	—	8,8657	1,1343	—	—	—	—	—

n_{3d} : Alaşımı oluşturan metaller için K X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenen 3d elektron sayıları.

$n_{4s,4p}$: Alaşımı oluşturan metaller için 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

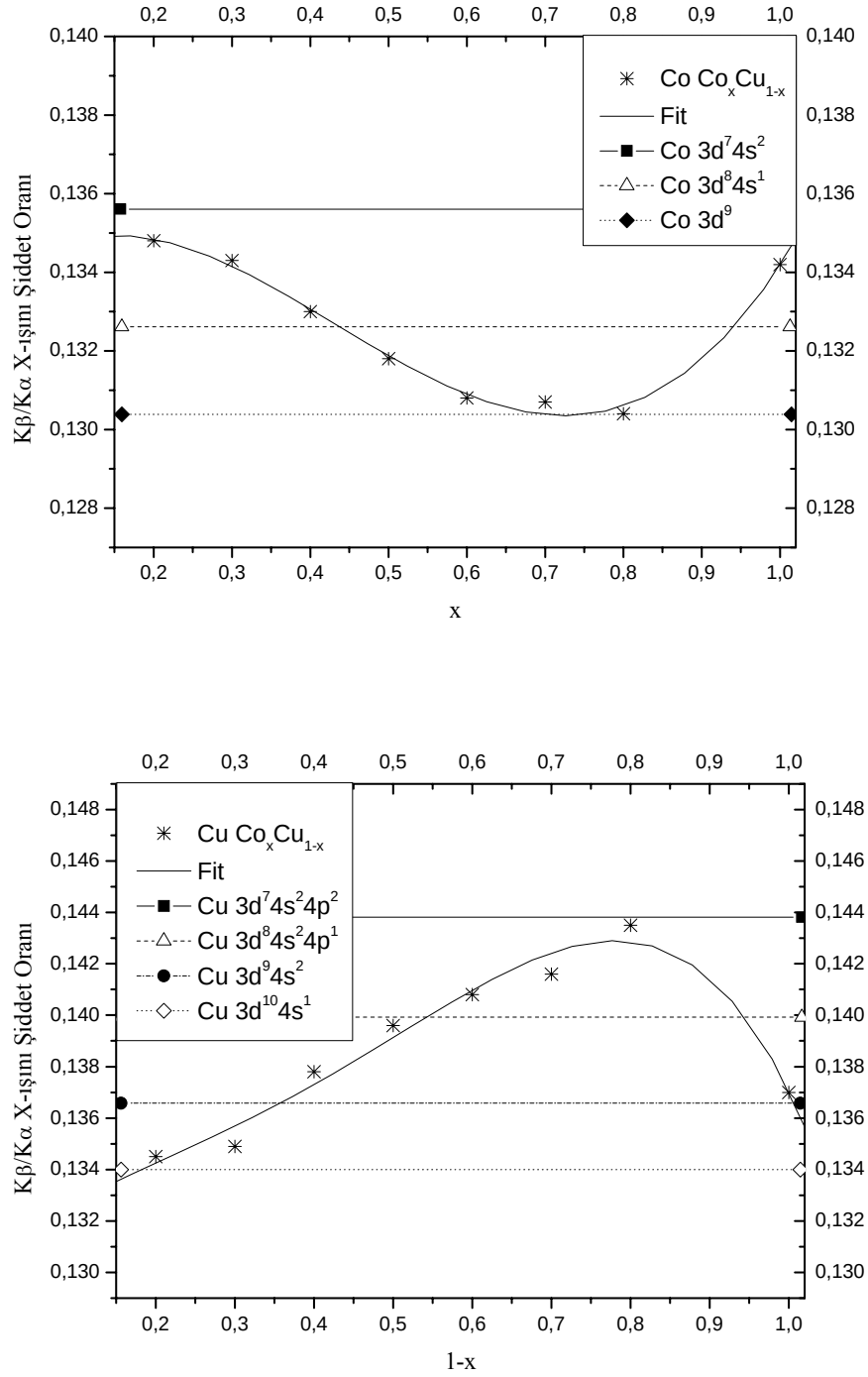
Dn_{3d} : İlgili metalin alaşımdaki 3d elektron sayısının saf halindeki ile kıyaslandığında 3d elektron sayısındaki değişim.

Tn_{3d} : Alaşımdaki 3d elektronlarının toplam sayısı.

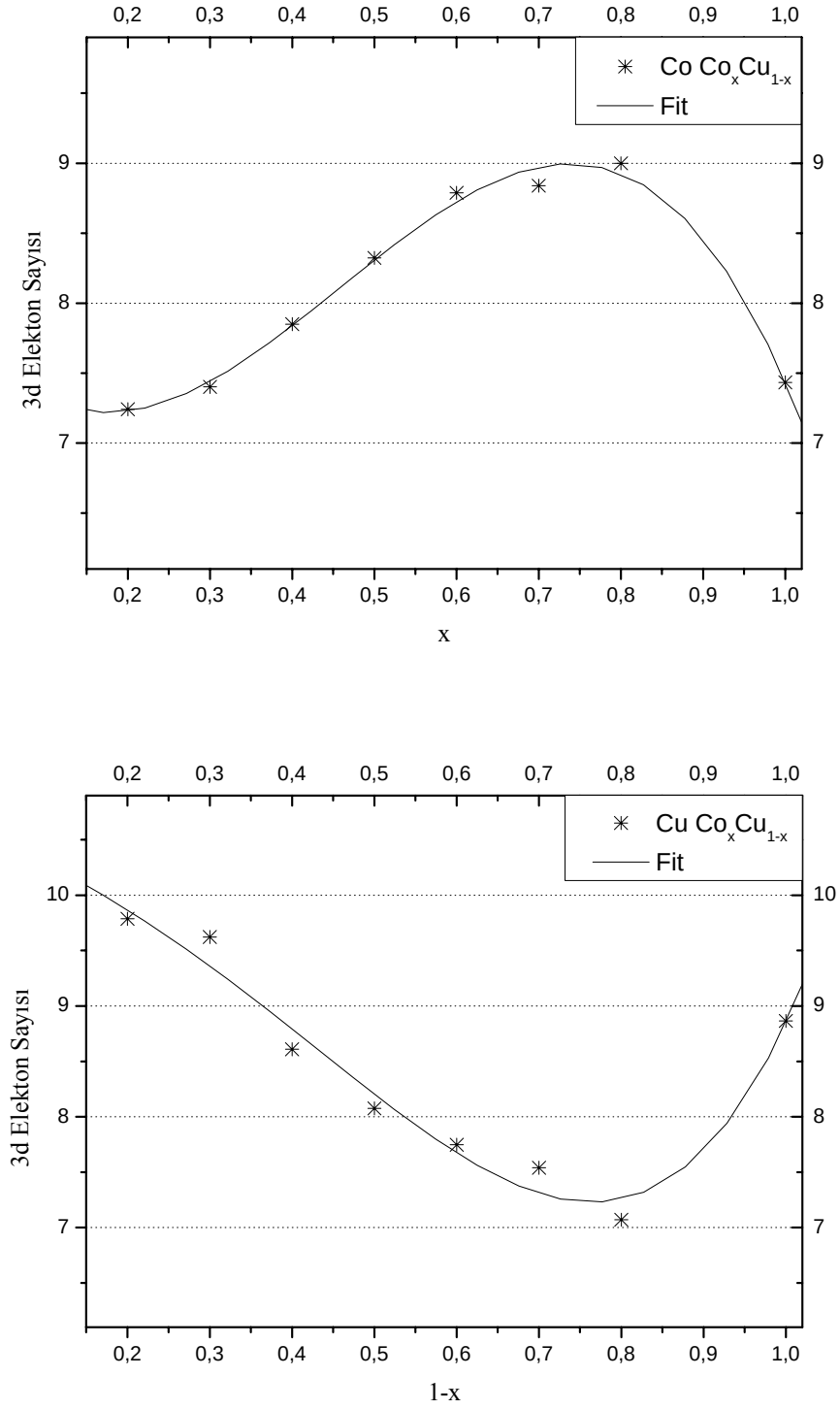
Tn_{3d}^* : Saf metaller için elde edilen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 3d elektronu sayısı.

$Tn_{4s,4p}$: Alaşımdaki 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

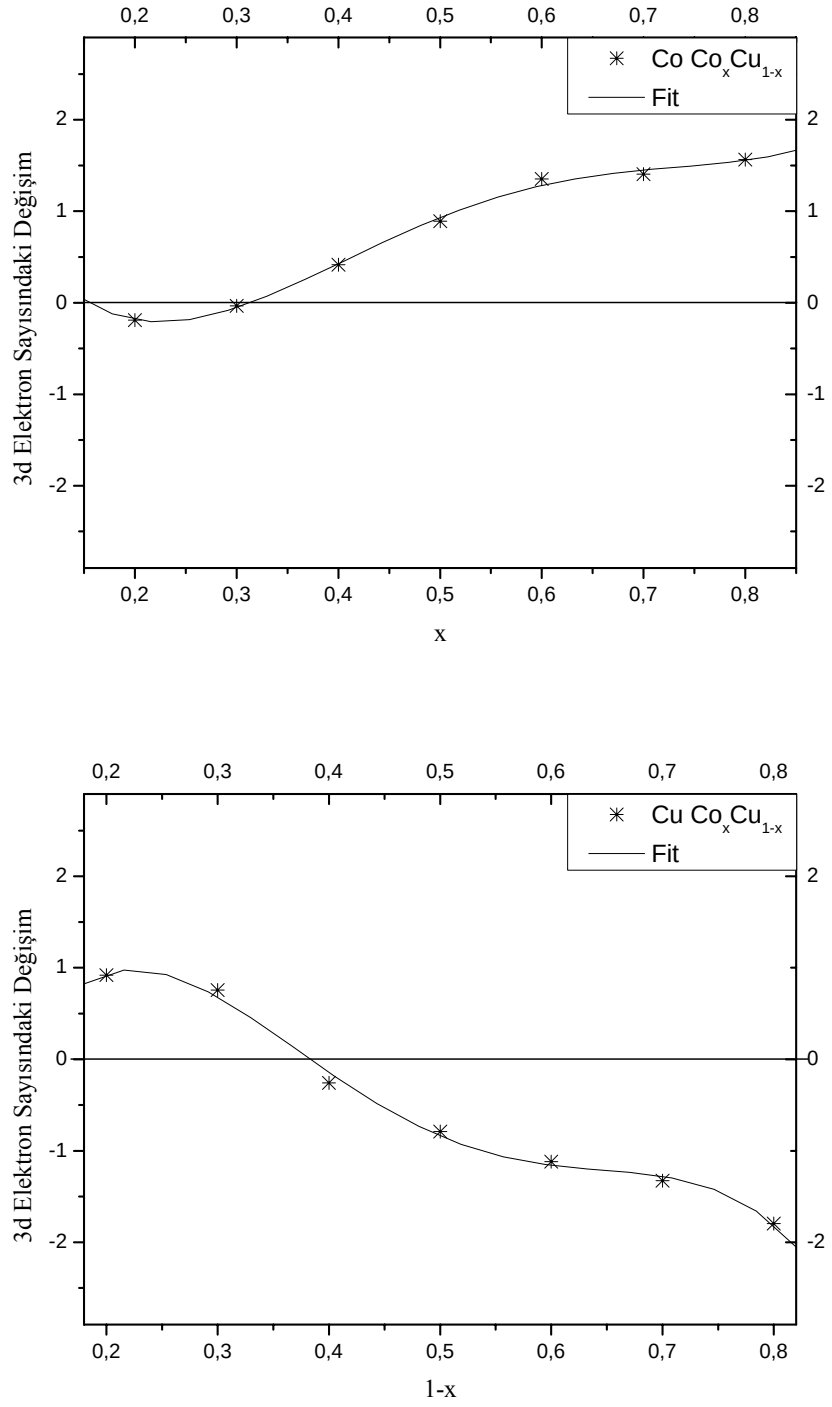
$Tn_{4s,4p}^*$: Saf metaller için elde edilen 4s, 4p elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 4s, 4p elektronu sayısı.



Şekil 4.6.3. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.



Şekil 4.6.4. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.



Şekil 4.6.5. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu'nun 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metaller ile kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.

Saf Co ve Cu metalleri ile $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları Şekil 4.6.1’de verilmiştir. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımları için Co ve Cu’nun ilgili alaşımdaki $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını piklerinin toplam şiddeti yüz olacak biçimde Origin 7.5 programı ile elde edilen değerler kullanılarak Şekil 4.6.2 çizilmiştir. Co ve Cu’nun $K\alpha$, $K\beta$ X-ışınlarının; tepe enerjileri, FWHM değerleri ve sayımları için Co, Cu saf metallerinde ve $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında elde edilen değerler Çizelge 4.6.1’de verilmiştir.

Co ve Cu’nun $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını pikleri için elde edilen sayımlar metallerin alaşımlardaki konsantrasyonlarıyla aynı yönlü değişmektedirler. Çizelge 4.6.1’de yukardan aşağıya doğru inildikçe alaşımlarda Co konsantrasyonu azalırken Cu konsantrasyonu artmaktadır. Bunun sonucu olarak çizelgenin son sütunundan da görüldüğü üzere aşağıya doğru gidildikçe $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında tüm K X-ışını pikleri için elde edilen toplam sayım artmaktadır. Çünkü Cu’nun atom numarası Co’nun kinden daha büyüktür ve doğal olarak alaşımda atom numarası daha büyük olan metalin konsantrasyonu artarken yayımlanan K X-ışınlarının sayısı da artmaktadır.

$\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımları ve saf Co ile Cu için; $N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları Çizelge 4.6.2’de verilmiştir. Saf Co ve Cu için ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları sırasıyla 0,1342 ve 0,1370 dir. Raj *et al.* (2002) ise saf Co ve Cu’nun $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları için sırasıyla 0,1335 ve 0,1343 değerlerini elde etmişlerdir.

$\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında; Co için elde edilen K X-ışını şiddet oranları artan Co konsantrasyonuyla azalmaktadır. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5$ ve $0,4$) alaşımlarında Co için elde edilen K X-ışını şiddet oranları saf Co için bulunan değerden daha küçüklerken, $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,3$ ve $0,2$) alaşımları için elde edilen

değerler saf Co'nunkinden daha büyüktürler. Cu için K X-ışını şiddet oranları da alaşımlarda artan Cu konsantrasyonu ile artmaktadırlar. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,8$ ve $0,7$) alaşımlarında Cu için elde edilen K X-ışını şiddet oranları saf Cu'nun K X-ışını şiddet oranlarından küçükken diğer alaşımlarda daha büyük değerler bulunmuştur.

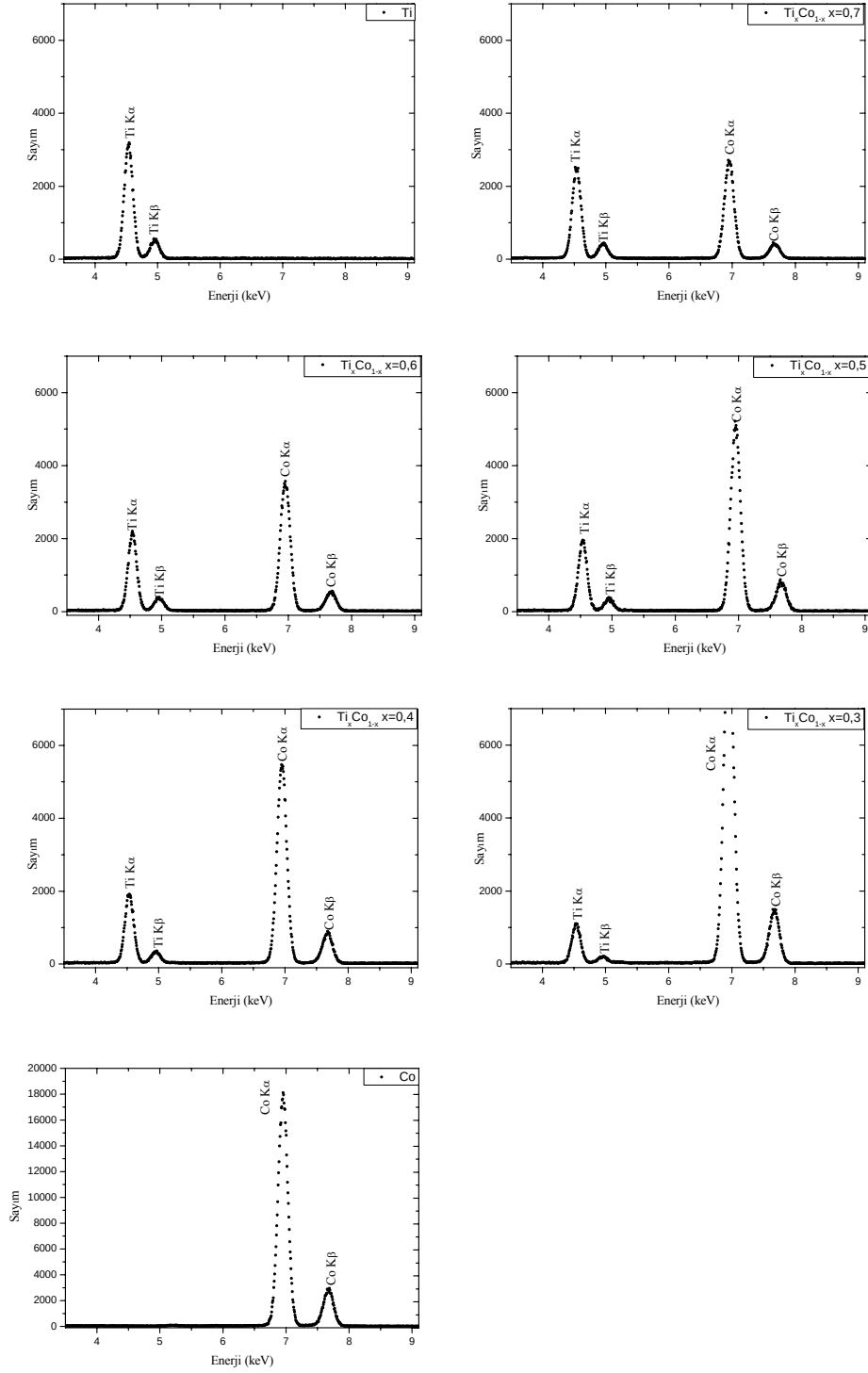
Çizelge 4.6.2'de verilen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak Co ve Cu için saf hallerinde ve alaşımlarda elde edilen 3d ve 4s, 4p elektron sayıları ve onların rölatif değişimleri Çizelge 4.6.3'de verilmiştir. Saf Co ve Cu için sırasıyla $n_{3d}=7,4339$, $n_{3d}=8,8657$ 3d elektron sayıları elde edilmiştir. Alaşımlarda Co ve Cu için elde edilen 3d elektron sayıları bu değerlerden farklıdır. $\text{Co}_{0,8}\text{Cu}_{0,2}$ alaşımında Co'nun 3d elektron sayısı saf Co'ya göre 1,5661 kadar artarak 9 olmuştur. Bu alaşımda Cu'nun da 3d elektron sayısının arttığı göz önüne alınırsa Co'nun 3d elektronu sayısında meydana gelen bu değişimin Co'nun 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektron yerleşiminin yeniden düzenlenmesi olduğu anlaşılmaktadır. Bu sonuçlara göre $\text{Co}_{0,8}\text{Cu}_{0,2}$ alaşımında Co'nun 4s, 4p durumlarındaki elektronlarının tamamı 3d durumuna geçmişlerdir ve 4s, 4p durumunda hiç elektron kalmamıştır.

$\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,7$; $0,6$; $0,5$ ve $0,4$) alaşımlarında Co'nun 3d elektron sayısı artarken Cu'nun 3d elektron sayısı azalmaktadır. $\text{Co}_{0,6}\text{Cu}_{0,4}$ alaşımında Co'nun 3d elektron sayısı 1,3539 kadar artarken Cu'nun elektron sayısı sadece 0,2574 kadar azalmıştır. $\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5}$ alaşımında ise Co ve Cu'nun 3d elektron sayılarında meydana gelen değişimler hemen hemen denktir. $\text{Co}_{0,4}\text{Cu}_{0,6}$ alaşımında ise Co'nun 3d elektron sayısında meydana gelen artış sadece 0,4157 kadarken Cu'nun 3d elektron sayısı 1,1190 kadar azalmıştır. Bu durum $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,7$; $0,6$; $0,5$ ve $0,4$) alaşımlarında Co ve Cu'nun valens elektron yerleşimlerinin düzenlenmesinde bu metaller arasındaki 3d elektronu transferi yanı sıra metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumları arasındaki elektron düzenlenmelerinin de etkili olduğunu gösterir. Alaşımlarda metallerin 3d elektron sayılarında saf durumlardakine nazaran

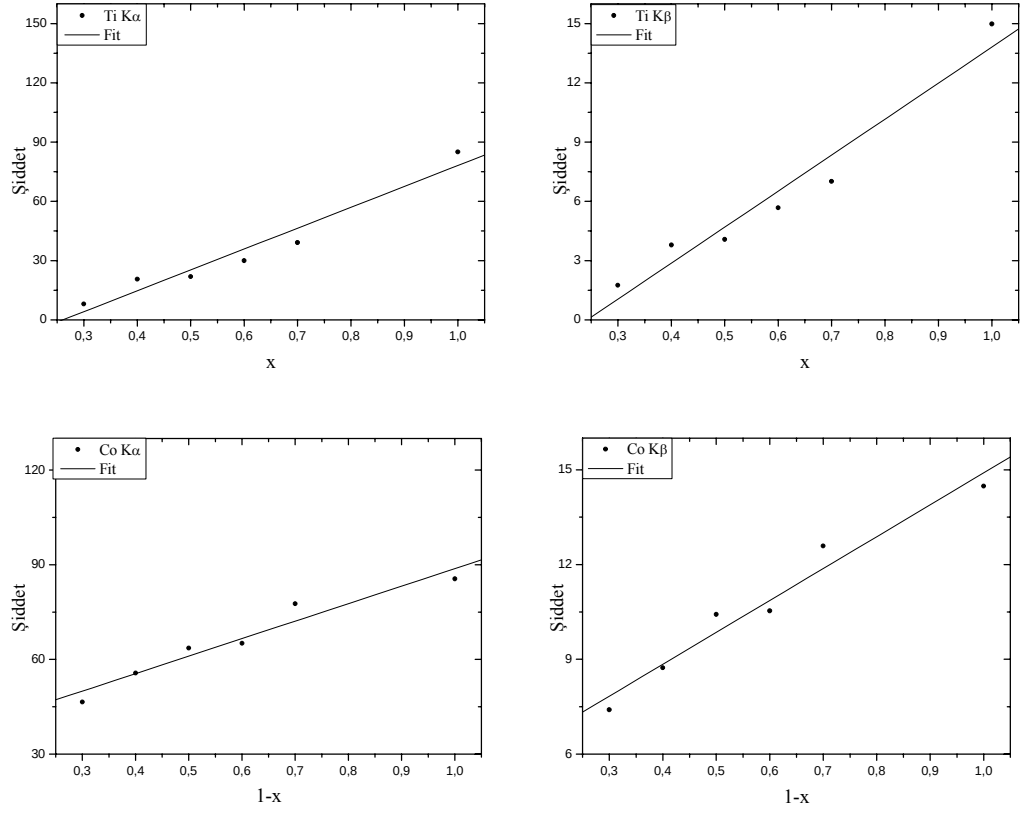
meydana gelen deęişimler incelendięinde alaşımdaki konsantrasyonu fazla olan metal için deęişimin daha fazla, az olan metal için daha az olduęu anlaşılmaktadır. Çizelge 4.6.3 incelendięinde de alaşımdaki konsantrasyonu artan metal için 3d elektron sayısının saf durumdaki elektron sayısından giderek uzaklaştıęı açıkça görölmektedir. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,3$ ve $0,2$) alaşımlarında hem Co'nun hem de Cu'nun 3d elektron sayıları saf metallere nazaran azalmaktadır ancak Cu'da meydana gelen azalma Co'dakinden çok daha azdır. Çizelge 4.6.3'de ayrıca $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için ölçölen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak bu metaller için elde edilen 3d elektronlarının sayıları (Tn_{3d}), saf metaller için ölçölen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak elde edilen 3d elektronu sayıları (Tn_{3d}^*) ile birlikte verilmişlerdir.

$\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için deneysel olarak elde edilen K X-ışını şiddet oranları, farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları ile elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırmalı olarak Şekil 4.6.3'de gösterilmektedir. Alaşımdaki metallerin konsantrasyonlarına baęlı olarak bu metaller için K X-ışını şiddet oranlarındaki deęişimler şekilde görölmektedir. Şekil 4.6.4'de ise $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına baęlı deęişimleri verilmiştir. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu'nun 3d elektron sayılarının saf Co ve Cu'nun 3d elektron sayılarına göre deęişimleri, metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına baęlı olarak Şekil 4.6.5'de gösterilmektedir.

4.7. $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ Alaşımları İçin Elde Edilen Bulgular ve Tartışma



Şekil 4.7.1. Ti, Co ve $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımları için elde edilen K X-ışını spektrumları.



Şekil 4.7.2. $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Co'nun K X-ışını şiddetlerinin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı rölatif değişimleri,

Çizelge 4.7.1. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında $K\alpha$ ve $K\beta$ pikleri için pik tepesi enerjileri E, WFHM'ları ve pik alanları N.

Element veya alaşım	E (keV)				FWHM (eV)				N (sayım)				
	Ti		Co		Ti		Co		Ti		Co		
	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	Kα	Kβ	K _T
Ti	4,537	4,956	—	—	3,189	3,479	—	—	77458,486	13647,72	—	—	91106,207
Ti _{0,7} Co _{0,3}	4,537	4,957	6,954	7,674	3,197	3,514	3,501	3,782	61212,583	10975,42	72785,985	11593,62	156567,62
Ti _{0,6} Co _{0,4}	4,538	4,958	6,954	7,674	3,152	3,650	3,533	3,773	52206,224	9900,777	97080,792	15226,73	174414,52
Ti _{0,5} Co _{0,5}	4,538	4,954	6,954	7,674	3,184	3,496	3,508	3,727	47563,808	8848,420	138177,71	22647,17	217237,11
Ti _{0,4} Co _{0,6}	4,536	4,956	6,953	7,674	3,182	3,545	3,491	3,728	47049,126	8662,889	148810,37	24084,96	228607,36
Ti _{0,3} Co _{0,7}	4,536	4,959	6,953	7,673	3,210	4,281	3,504	3,693	26619,648	5809,195	256934,89	41671,74	331035,49
Co	—	—	6,953	7,673			3,491	3,722	—	—	485357,39	82225,40	567582,79

Çizelge 4.7.2. $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları).

Element veya Alaşım	Ti			Co		
	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$	$N_{K\beta}/N_{K\alpha}$	$I_{K\beta}/I_{K\alpha}$	$R_{K\beta}/R_{K\alpha}$
Ti	0,1714	0,1288	1,0000	—	—	—
$\text{Ti}_{0,7}\text{Co}_{0,3}$	0,1652	0,1238	0,9616	0,1700	0,1308	0,9746
$\text{Ti}_{0,6}\text{Co}_{0,4}$	0,1661	0,1245	0,9671	0,1692	0,1307	0,9742
$\text{Ti}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$	0,1720	0,1290	1,0022	0,1732	0,1338	0,9973
$\text{Ti}_{0,4}\text{Co}_{0,6}$	0,1731	0,1298	1,0080	0,1724	0,1349	1,0055
$\text{Ti}_{0,3}\text{Co}_{0,7}$	0,1753	0,1315	1,0214	0,1709	0,1348	1,0043
Co	—	—	—	0,1645	0,1342	1,0000

Çizelge 4.7.3. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında 3d elektron sayıları ve rölatif değişimleri.

Element veya Alaşım	Ti			Co			Ti_xCo_{1-x}			
	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	n_{3d}	$n_{4s,4p}$	Dn_{3d}	Tn_{3d}	Tn_{3d}^*	$Tn_{4s,4p}$	$Tn_{4s,4p}^*$
Ti	2,3983	1,6017	—	—	—	—	—	—	—	—
$Ti_{0,7}Co_{0,3}$	3,7045	0,2955	1,3062	8,7878	0,2122	1,3539	5,2295	3,9090	0,2705	1,5910
$Ti_{0,6}Co_{0,4}$	3,4767	0,5233	1,0784	8,8391	0,1609	1,4052	5,6217	4,4125	0,3783	1,5875
$Ti_{0,5}Co_{0,5}$	2,3564	1,6436	-0,0419	7,5673	1,4327	0,1334	4,9619	4,9161	1,5382	1,5839
$Ti_{0,4}Co_{0,6}$	2,1936	1,8064	-0,2047	7,2111	1,7889	-0,2228	5,2041	5,4197	1,7959	1,5803
$Ti_{0,3}Co_{0,7}$	1,8702	2,1298	-0,5281	7,2422	1,7578	-0,1917	5,6306	5,9232	1,8694	1,5768
Co	—	—	—	7,4339	1,5661	—	—	—	—	—

n_{3d} : Alaşımı oluşturan metaller için K X-ışını şiddet oranları kullanılarak belirlenen 3d elektron sayıları.

$n_{4s,4p}$: Alaşımı oluşturan metaller için 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

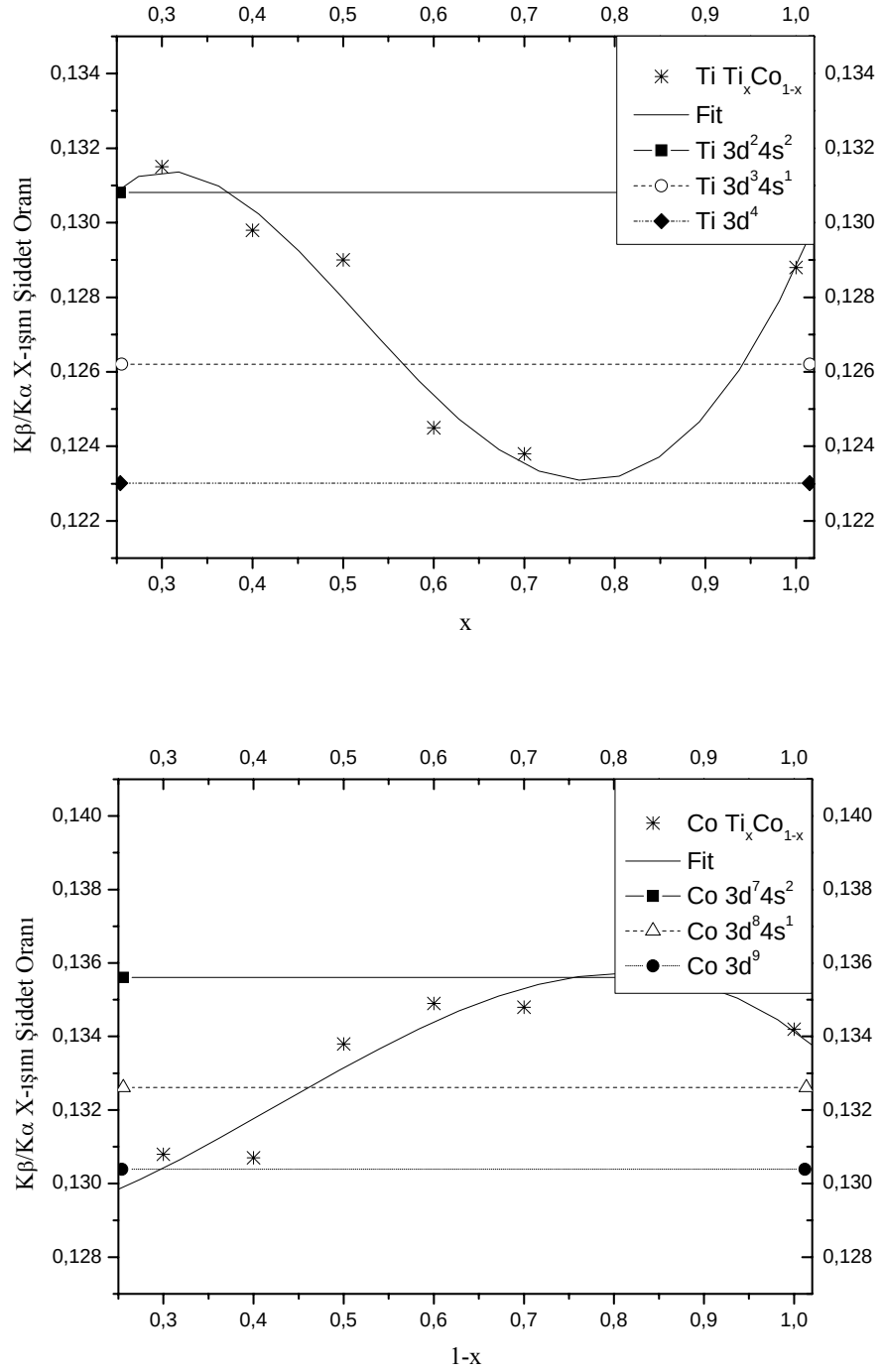
Dn_{3d} : İlgili metalin alaşımdaki 3d elektron sayısının saf halindeki ile kıyaslandığında 3d elektron sayısındaki değişim.

Tn_{3d} : Alaşımdaki 3d elektronlarının toplam sayısı.

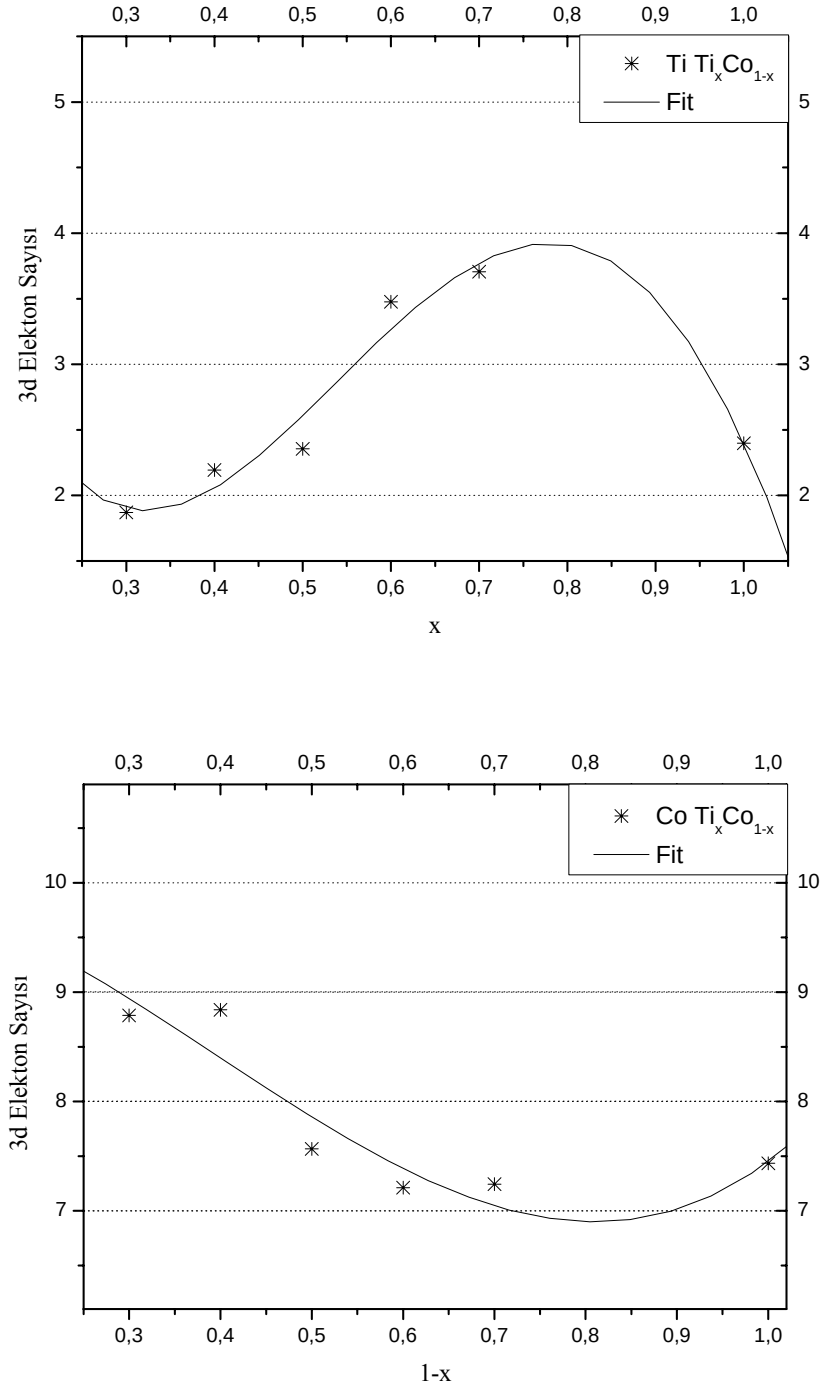
Tn_{3d}^* : Saf metaller için elde edilen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 3d elektronu sayısı.

$Tn_{4s,4p}$: Alaşımdaki 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı.

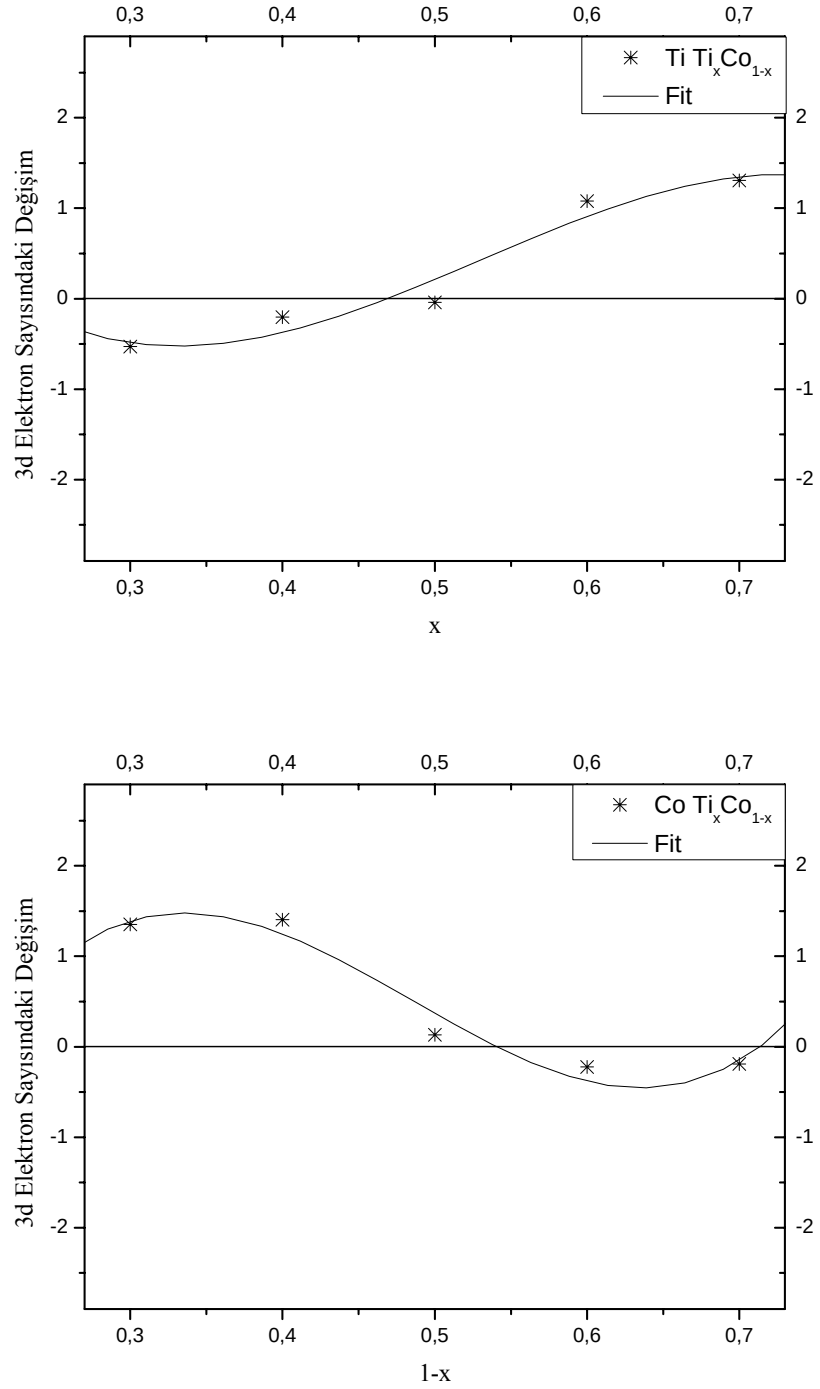
$Tn_{4s,4p}^*$: Saf metaller için elde edilen 4s, 4p elektron sayılarının ağırlıklı toplamından, alaşım için elde edilen toplam 4s, 4p elektronu sayısı.



Şekil 4.7.3. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında Ti ve Co için deneysel olarak elde edilen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının farklı elektron konfigürasyonları için elde edilmiş MCDF hesaplamaları ile karşılaştırmalı olarak gösterimi.



Şekil 4.7.4. $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Co için 3d elektron sayılarının metallerin kendi konsantrasyonlarına bağlı değişimleri.



Şekil 4.7.5. $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımlarında Ti ve Co'nun 3d elektron sayılarındaki değişimlerin (pür metaller ile kıyaslandığında) metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak gösterimi.

Ti ve Co için saf hallerinde ve Ti_xCo_{1-x} ($x= 0,7; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,3$) alaşımlarında elde edilen K X-ışını spektrumları Şekil 4.7.1’de görülmektedir. Ti_xCo_{1-x} alaşımları için Ti ve Co’nun ilgili alaşımdaki $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını piklerinin toplam şiddeti yüz olacak biçimde Origin 7.5 programı ile elde edilen değerler kullanılarak Şekil 4.7.2 çizilmiştir. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında ve saf metallerinde Ti ve Co’nun $K\alpha$, $K\beta$ X-ışınlarının; tepe enerjileri, FWHM değerleri ve sayımları için elde edilen değerler Çizelge 4.7.1’de verilmiştir.

Ti_xCo_{1-x} ($x= 0,7; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,3$) ve saf Ti, Co için; $N_{K\beta}/N_{K\alpha}$ düzeltilmemiş, $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ düzeltilmiş ve $R_{K\beta}/R_{K\alpha}$ alaşımlar için pür metallere göre normalize edilmiş şiddet oranları Çizelge 4.7.2’de verilmiştir. Saf Ti ve Co için ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları sırasıyla 0,1288 ve 0,1342 dir. Bhuinya and Padhi (1992) saf Ti ve Co’nun $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları için sırasıyla 0,1282 ve 0,1356 değerlerini elde etmişlerdir. İncelenen alaşımlarda Ti için elde edilen K X-ışını şiddet oranları Ti’nin alaşımdaki konsantrasyonu ile ters yönlü bir değişim göstermektedir. Co için ise konsantrasyon ile K X-ışını şiddet oranları arasında düzenli bir ilişki olduğu söylenemez.

Ölçülen K X-ışını şiddet oranları kullanılarak saf Ti ve Co ile onların incelenen alaşımlarında Ti ve Co’nun 3d elektron sayıları için bulunan değerler ve alaşımdaki değerlerde saf metallere nazaran meydana gelen değişimler Çizelge 4.7.3’de verilmiştir. Saf Ti ve Co için 3d elektron sayıları sırasıyla $n_{3d}=2,3983$ $n_{3d}=7,4339$ olarak elde edilmiştir. Çizelge 4.7.3 incelendiğinde alaşımlarında metallerin 3d elektron sayılarının saf hallerindekilerden farklı oldukları görülmektedir. Çizelgenin 3 ve 6. sütunları bu değişimler ilgili metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumları arasındaki düzenlenmelerden kaynaklansaydı metallerin 4s, 4p durumlarının sahip olması gereken elektron sayılarını göstermektedir.

Ti_xCo_{1-x} ($x=0,7$ ve $0,6$) alaşımlarında hem Ti'nin hem de Co'nun 3d elektron sayılarında saf metallerde elde edilen 3d elektron sayılarına nazaran bir artış söz konusudur. Alaşımlardaki her iki element için de 3d elektron sayılarının birlikte artışı Ti ve Co'nun 3d elektron sayılarında meydana gelen bu değişimin sebebinin metallerin kendi 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektronlarının yeniden düzenlenmesi olduğunu gösterir. $Ti_{0,7}Co_{0,3}$ alaşımında her iki metalin 3d elektron sayıları çok yakın değerlerde artmışlardır. $Ti_{0,5}Co_{0,5}$ alaşımında Ti'nin 3d elektron sayısı bir miktar azalırken Co'nun 3d elektron sayısı bir miktar artmıştır. Bu durum $Ti_{0,5}Co_{0,5}$ alaşımında metaller arasında gerçekleşen 3d elektron transferlerinin de etkili olduğunu göstermektedir. Ti_xCo_{1-x} ($x=0,4$ ve $0,3$) alaşımlarında ise saf metaller için elde edilen değerlerle kıyaslandıklarında hem Ti'nin hem de Co'nun 3d elektron sayılarında azalma olduğu anlaşılmaktadır. Bu alaşımlarda metallerin 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektron yapısının yeniden düzenlenmeleri daha belirleyicidir.

Alaşımlarda ölçülen K X-ışını şiddet oranları vasıtasıyla bulunan 3d elektron sayılarının ilgili alaşımlar için toplamaları (Tn_{3d}) ve saf metaller için belirlenen 3d elektron sayılarının ağırlıklı toplamalarından yine ilgili alaşımlar için elde edilen toplam 3d elektron sayıları (Tn_{3d}^*) kıyaslama için Çizelge 4.7.3'de verilmişlerdir.

Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında Ti ve Co için deneysel olarak elde edilen K X-ışını şiddet oranları, farklı elektron konfigürasyonları için MCDF hesaplamaları ile elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırmalı olarak gösterimi Şekil 4.7.3'de verilmiştir. Ti ve Co için K X-ışını şiddet oranlarında; bu metallerin alaşımlardaki konsantrasyonlarına bağlı olarak meydana gelen değişimler şekilde görülmektedir. Ti_xCo_{1-x} alaşımlarında Ti ve Co için; 3d elektron sayılarının ve onların saf metallere göre değişimlerinin metallerin alaşımlardaki kendi konsantrasyonlarına bağlı olarak çizimleri sırasıyla Şekil 4.7.4 ve Şekil 4.7.5'de verilmişlerdir.

Alaşımlar için elde edilen K X-ışını spektrumları ($\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.1.1’de, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.2.1’de, $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.3.1’de, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için Şekil 4.4.1’de, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.5.1’de, $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.6.1’de ve $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.7.1’de verilen) incelendiğinde alaşımları oluşturan 3d geçiş metallerinin $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını piklerinin büyüklüklerinin metallerin alaşımlardaki konsantrasyonlarıyla aynı yönlü değişiklikleri anlaşılmaktadır. Konsantrasyonu azalan metal için pikler küçülürken konsantrasyonu artan metal için büyümektedir

İncelenen alaşımlar için alaşımı oluşturan 3d geçiş metallerinin $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını şiddetlerinin alaşımlardaki konsantrasyonlarına göre rölatif olarak çizildiği grafiklerden ($\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.1.2’de, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.2.2’de, $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.3.2’de, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için Şekil 4.4.2’de, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.5.2’de, $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.6.2’de ve $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.7.2’de verilen) $K\beta$ X-ışını şiddetlerinin $K\alpha$ X-ışını şiddetlerine nazaran metallerin alaşımdaki kendi konsantrasyonlarındaki değişimlere bağlı olarak daha fazla değişiklikleri görülmektedir. $K\beta$ X-ışınlarının yayımlandıkları elementin alaşım içerisindeki konsantrasyonuna bağımlılıkları daha fazladır.

Alaşımları oluşturan 3d geçiş metalleri için saf hallerindeki ve alaşımlardaki $K\alpha$, $K\beta$ X-ışınlarının; tepe enerjileri, FWHM değerleri ve sayımları için elde edilen değerler ($\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.1.1’de, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.2.1’de, $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.3.1’de, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için Çizelge 4.4.1’de, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.5.1’de, $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.6.1’de ve $\text{Ti}_x\text{Co}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.7.1’de verilen) incelendiğinde şu sonuçlara ulaşılmaktadır. $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını tepe enerjileri; saf metallerde ölçülen değerlerinden kayda değer bir farklılık göstermemektedirler. Sadece $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımlarında Fe ve Ni’nin $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını tepe enerjileri

değişmezken Cr için tepe enerjileri saf Cr'ye nazaran bir miktar değişmişlerdir. İlgili metaller için alaşımlarda belirlenen FWHM değerleri saf metallerdeki değerlerden bir miktar sapmaktadırlar. Örneğin saf Fe'de $K\alpha$ ve $K\beta$ X-ışını pikleri için FWHM değerleri sırasıyla 3,401 ve 3,578 eV olarak elde edilmiştir. Buna karşın Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Fe için $K\alpha$ 'nın FWHM'ları 3,387 ile 3,431 eV değerleri arasında, $K\beta$ 'nın FWHM'ları 3,601 ile 3,872 eV değerleri arasında değişmektedirler. Yine saf Ni'de $K\alpha$ ve $K\beta$ X-ışını pikleri için FWHM değerleri sırasıyla 3,537 ve 3,859 eV iken Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında Ni için $K\alpha$ 'nın FWHM'ları 3,514 ile 3,594 eV değerleri arasında $K\beta$ 'nın FWHM'ları 3,749 ile 4,207 eV değerleri arasında değişmektedirler. İncelenen alaşımlarında alaşımı oluşturan 3d geçiş metalleri için elde edilen $K\alpha$, $K\beta$ X-ışını sayımları; bu metallerin alaşımdaki konsantrasyonları ile aynı yönlü bir değişim göstermektedirler. Bu alaşımlarda tüm K X-ışını pikleri için toplam sayım ise atom numarası büyük olan metalin alaşımdaki konsantrasyonu fazlalaştıkça artmaktadır.

4.8. X-ışını Şiddet Oranlarının Tavlama Sıcaklığına Bağlı Davranışları

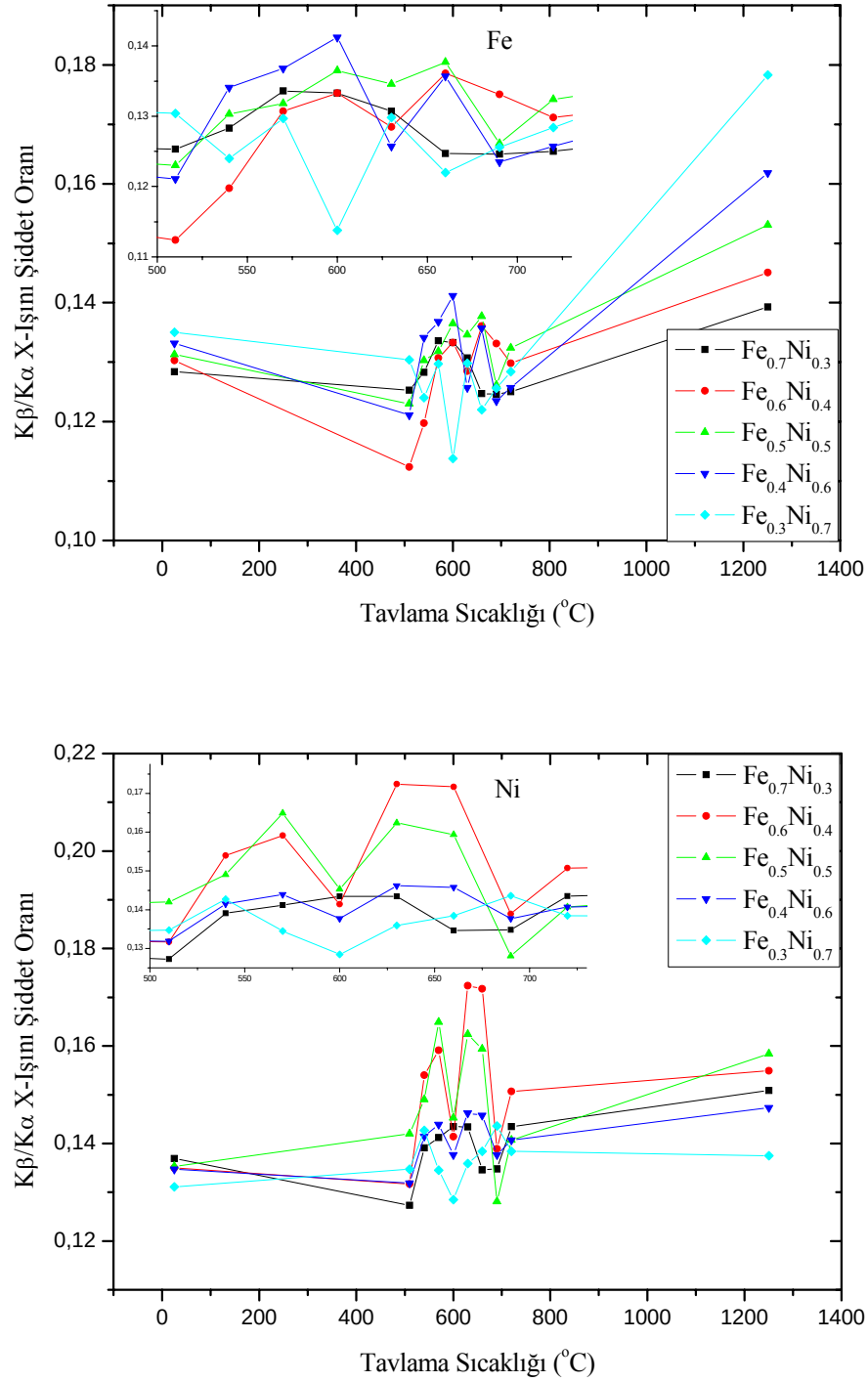
Çalışmanın bu kısmında; Fe_xNi_{1-x} ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$), Ti_xNi_{1-x} ($x=0,7; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,3$) ve Co_xCu_{1-x} ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımları için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları numuneler hiçbir ısıtma işlemine tabi tutulmadan, sonra belirli aralıklarla artan sıcaklıklarda tavlانarak her bir tavlama işleminden sonra ve direk 1250 °C de tavlandıktan sonra ölçülmüşlerdir. Tavlama sıcaklıkları; Fe_xNi_{1-x} alaşım grubu için: 500, 540, 570, 600, 630, 660, 690, 720, 1250°C, Ti_xNi_{1-x} alaşım grubu için: 720, 810, 900, 990, 1080, 1170, 1250°C ve Co_xCu_{1-x} alaşım grubu için: 600, 700, 800, 900, 1000, 1100 ve 1250°C

Farklı kompozisyonlardaki alaşımlarda alaşımları oluşturan 3d geçiş metallerinin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının belirli tavlama sıcaklıkları için ölçülen değerleri;

$\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alařımları iin izelge 4.8.1’de, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alařımları iin izelge 4.8.2’de ve $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alařımları iin izelge 4.8.3’de verilmiřlerdir. Ayrıca $K\beta/K\alpha$ X-ıřını řiddet oranlarının tavlama sıcaklıklarına baėlı davranıřları $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alařımları iin řekil 4.8.1’de, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alařımları iin řekil 4.8.2’de ve $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alařımları iin řekil 4.8.3’de grafiksel olarak gsterilmiřlerdir.

Çizelge 4.8.1. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının belirli tavlama sıcaklıklarından sonraki değerleri.

T (°C)	$K\beta/K\alpha$											
	Fe	$\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$		$\text{Fe}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$		$\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$		$\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$		$\text{Fe}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$		Ni
		Fe	Ni	Fe	Ni	Fe	Ni	Fe	Ni	Fe	Ni	
	0,1284	0,1284	0,1369	0,1303	0,1350	0,1313	0,1353	0,1332	0,1347	0,1350	0,1311	0,1311
510	0,1283	0,1253	0,1273	0,1124	0,1317	0,1230	0,1420	0,1211	0,1319	0,1304	0,1347	0,1347
540	0,1283	0,1283	0,1391	0,1197	0,1540	0,1303	0,1490	0,1341	0,1415	0,1240	0,1427	0,1427
570	0,1336	0,1336	0,1412	0,1307	0,1491	0,1318	0,1649	0,1368	0,1439	0,1297	0,1345	0,1345
600	0,1333	0,1333	0,1435	0,1333	0,1414	0,1365	0,1453	0,1412	0,1377	0,1138	0,1285	0,1285
630	0,1307	0,1307	0,1434	0,1285	0,1724	0,1346	0,1624	0,1257	0,1462	0,1298	0,1359	0,1359
660	0,1247	0,1247	0,1346	0,1361	0,1717	0,1377	0,1594	0,1357	0,1458	0,1220	0,1384	0,1384
690	0,1246	0,1246	0,1348	0,1331	0,1389	0,1261	0,1281	0,1235	0,1377	0,1256	0,1436	0,1436
720	0,1393	0,1250	0,1435	0,1298	0,1607	0,1324	0,1407	0,1257	0,1407	0,1284	0,1384	0,1384
1250	0,1411	0,1393	0,1509	0,1451	0,1549	0,1531	0,1584	0,1618	0,1473	0,1783	0,1375	0,1375



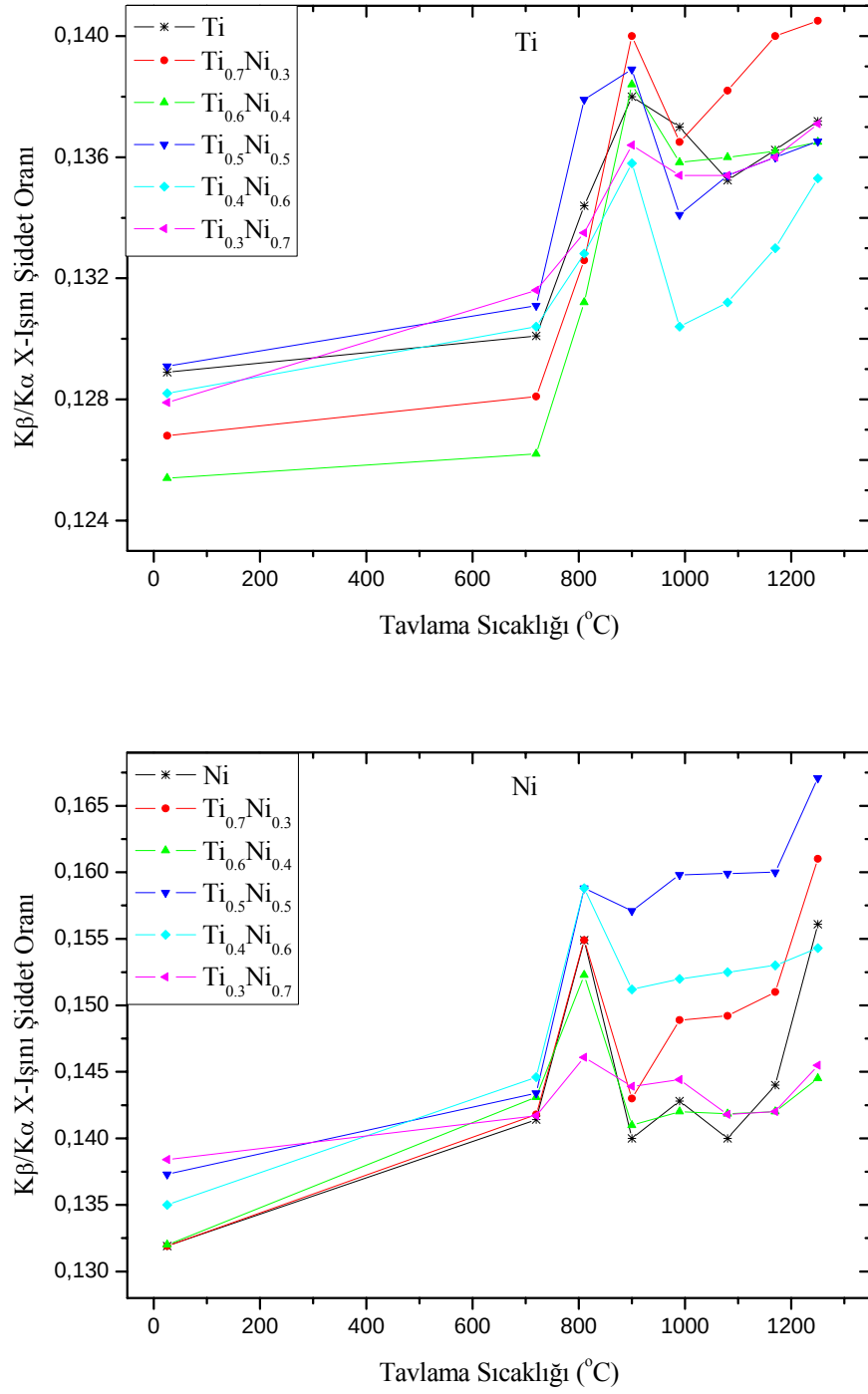
Şekil 4.8.1. Fe_xNi_{1-x} alaşımlarında K β /K α X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimleri.

$\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni için her bir tavlama sıcaklığından sonra ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları Çizelge 4.8.1’de verilmiştir. Ayrıca Fe ve Ni $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığına göre değişimleri Şekil 4.8.1’de grafiksel olarak çizilmiştir. Çizelge 4.8.1 ve Şekil 4.8.1’den de açıkça görüldüğü üzere $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında hem Fe hem de Ni için şiddet oranları düzgün bir biçimde olmamakla birlikte tavlama sıcaklığı ile değişmektedirler. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,6; 0,5$ ve $0,4$) alaşımlarında Fe’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığına göre değişim yönleri benzerdirler. Ancak $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,7$ ve $0,3$) alaşımlarında ise Fe için şiddet oranlarının tavlama sıcaklığına göre değişimleri diğer üç alaşımdan ve birbirlerinden farklıdır. Aynı durum ilgili alaşımlarda Ni için de geçerlidir. Tüm alaşımlarda Fe için şiddet oranları tavlama sıcaklığının 1250°C olduğu durumda en büyüktür.

Tüm alaşımlarda tavlama sıcaklığı 600°C iken Ni’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarında bir düşüş söz konusudur. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,6; 0,5$ ve $0,4$) alaşımlarında Ni’nin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları tavlama sıcaklığının 630°C olduğu durumda bir önceki tavlama sıcaklığındaki değerlerine göre keskin bir artış göstermektedirler. Buna karşın bir sonraki tavlama sıcaklığı olan 660°C ’de bu hemen hemen hiç değişmeyen şiddet oranları 690°C ’de çok keskin bir düşüş göstermektedirler. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,6; 0,5$ ve $0,4$) alaşımlarında hem Fe hem de Ni için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimlerinin benzer olması metallerin bu alaşımlardaki konsantrasyonlarının yakın olmasından kaynaklanabilir. Fe ve Ni’nin alaşımlardaki oranları arasındaki fark arttığında tıpkı $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,7$ ve $0,3$) alaşımlarında olduğu gibi şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimleri farklılıklar göstermektedirler. Fe ve Ni için şiddet oranları farklı tavlama sıcaklıklarında bir önceki sıcaklığa göre farklı miktarlarda artış veya azalış göstermektedirler. Ancak $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarında Fe ve Ni için şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile aynı veya zıt yönlü değiştikleri gibi bir ilişkiden bahsedilemez.

Çizelge 4.8.2. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında Ti ve Ni için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının belirli tavlama sıcaklıklarından sonraki değerleri.

T (°C)	$K\beta / K\alpha$											
	Ti	$Ti_{0,7}Ni_{0,3}$		$Ti_{0,6}Ni_{0,4}$		$Ti_{0,5}Ni_{0,5}$		$Ti_{0,4}Ni_{0,6}$		$Ti_{0,3}Ni_{0,7}$		Ni
		Ti	Ni	Ti	Ni	Ti	Ni	Ti	Ni	Ti	Ni	
	0,1284	0,1319	0,1369	0,1254	0,1320	0,1291	0,1373	0,1282	0,1347	0,1279	0,1381	0,1319
720	0,1301	0,1281	0,1418	0,1262	0,1431	0,1311	0,1434	0,1304	0,1446	0,1314	0,1417	0,1414
810	0,1344	0,1326	0,1549	0,1312	0,1523	0,1379	0,1588	0,1328	0,1588	0,1335	0,1461	0,1549
900	0,1380	0,1400	0,1430	0,1384	0,1410	0,1389	0,1571	0,1358	0,1512	0,1364	0,1439	0,1400
990	0,1370	0,1365	0,1489	0,1358	0,1414	0,1341	0,1598	0,1304	0,1520	0,1354	0,1444	0,1428
1080	0,1352	0,1382	0,1492	0,1360	0,1418	0,1354	0,1599	0,1312	0,1525	0,1354	0,1418	0,1401
1170	0,1362	0,1399	0,1511	0,1362	0,1420	0,1360	0,1601	0,1330	0,1530	0,1360	0,1420	0,1444
1250	0,1372	0,1405	0,1611	0,1365	0,1449	0,1365	0,1671	0,1350	0,543	0,1371	0,1455	0,1561



Şekil 4.8.2. Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimleri.

Saf Ti ve Ni ile bu elementlerden farklı oranlarda içeren Ti_xNi_{1-x} alaşımlarında her bir tavlama sıcaklığından sonra Ti ve Ni için ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları Çizelge 4.8.2’de verilmiştir. Şiddet oranlarının tavlama sıcaklığına göre değişimleri Şekil 4.8.2’de grafiksel olarak çizilmiştir. Ti için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları $900^{\circ}C$ ’ye kadar artan tavlama sıcaklığı ile giderek artmaktadırlar. Bu sıcaklıktan bir sonraki tavlama sıcaklığından yani $990^{\circ}C$ ’den sonra ölçülen şiddet oranları ise bir öncekine göre çok keskin bir şekilde azalmışlardır. Daha sonraki tavlama sıcaklıklarından sonra ölçülen şiddet oranları tekrar artan tavlama sıcaklığıyla artmaktadırlar. Ti için tavlama sıcaklığının $990^{\circ}C$ olduğu durumda $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları için görülen keskin azalma hariç artan tavlama sıcaklığı ile Ti $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının düzgün olmamakla birlikte arttıkları söylenebilir.

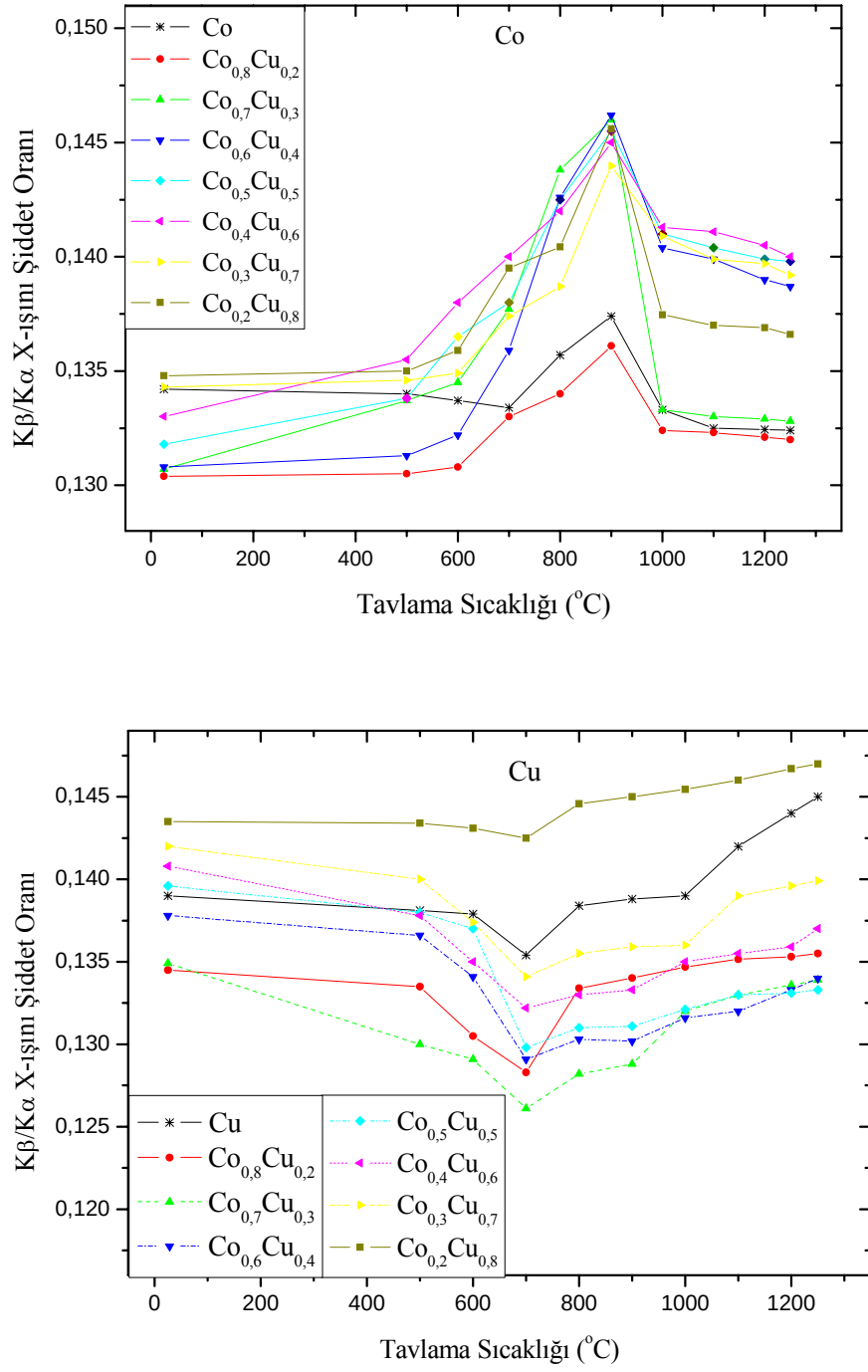
Ni için ölçülen şiddet oranları ise tavlama sıcaklığının $810^{\circ}C$ olduğu durumda keskin bir biçimde artıp bir sonraki tavlama sıcaklığı olan $900^{\circ}C$ ’de yine keskin bir biçimde azalmışlardır. Bundan sonraki tüm tavlama sıcaklıklarında Ni için artan tavlama sıcaklığıyla şiddet oranlarındaki artış devam etmektedir. Ni için de tıpkı Ti’de olduğu gibi tavlama sıcaklığının $900^{\circ}C$ olduğu durumda $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları için görülen keskin azalma hariç Ni $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının da artan tavlama sıcaklığıyla düzgün olmamakla birlikte arttıkları söylenebilir. Ti ve Ni için şiddet oranlarının keskin artış ve azalış gösterdikleri tavlama sıcaklıkları farklı olmasına karşın tavlama sıcaklığına göre değişimleri çok benzerdirler.

Çizelge 4.8.3. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının belirli tavlama sıcaklıklarından sonraki değerleri.

T (°C)	$K\beta / K\alpha$										
	Co	$\text{Co}_{0,8}\text{Cu}_{0,2}$		$\text{Co}_{0,7}\text{Cu}_{0,6}$		$\text{Co}_{0,6}\text{Cu}_{0,4}$		$\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5}$		$\text{Co}_{0,4}\text{Cu}_{0,6}$	
		Co	Cu	Co	Cu	Co	Cu	Co	Cu	Co	Cu
	0,1342	0,1304	0,1345	0,1307	0,1349	0,1308	0,1378	0,1318	0,1396	0,1330	0,1408
500	0,1340	0,1305	0,1335	0,1337	0,1300	0,1313	0,1366	0,1338	0,1380	0,1355	0,1378
600	0,1337	0,1308	0,1305	0,1345	0,1291	0,1322	0,1341	0,1365	0,1370	0,1380	0,1350
700	0,1334	0,1330	0,1283	0,1377	0,1261	0,1359	0,1291	0,1380	0,1298	0,1400	0,1322
800	0,1357	0,1340	0,1334	0,1438	0,1282	0,1426	0,1303	0,1425	0,1310	0,1420	0,1330
900	0,1374	0,1361	0,1340	0,1460	0,1288	0,1462	0,1302	0,1455	0,1311	0,1450	0,1333
1000	0,1333	0,1324	0,1347	0,1333	0,1320	0,1404	0,1316	0,1410	0,1321	0,1413	0,1350
1100	0,1325	0,1323	0,1351	0,1330	0,1330	0,1399	0,1320	0,1404	0,1330	0,1411	0,1355
1200	0,1324	0,1321	0,1353	0,1329	0,1336	0,1390	0,1333	0,1399	0,1331	0,1405	0,1359
1250	0,1324	0,1320	0,1355	0,1328	0,1339	0,1387	0,1340	0,1398	0,1333	0,1400	0,1370

Çizelge 4.8.3. devam

T (°C)	K β /K α				
	Co _{0,3} Cu _{0,7}		Co _{0,2} Cu _{0,8}		Cu
	Co	Cu	Co	Cu	
	0,1343	0,1420	0,1348	0,1435	0,1390
500	0,1346	0,1400	0,1350	0,1434	0,1381
600	0,1349	0,1374	0,1359	0,1431	0,1379
700	0,1374	0,1341	0,1395	0,1425	0,1354
800	0,1387	0,1355	0,1404	0,1446	0,1384
900	0,1439	0,1359	0,1456	0,1450	0,1388
1000	0,1409	0,1360	0,1374	0,1454	0,1390
1100	0,1399	0,1390	0,1370	0,1460	0,1422
1200	0,1397	0,1396	0,1369	0,1467	0,1444
1250	0,1392	0,1399	0,1366	0,1470	0,1450



Şekil 4.8.3. $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimi.

Saf Co ve Cu ile bu elementlerden farklı oranlarda içeren $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımları için her bir tavlama sıcaklığından sonra Co ve Cu için ölçülen $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları Çizelge 4.8.3’de verilmiştir. Şiddet oranlarının tavlama sıcaklığına göre değişimleri Şekil 4.8.3’de grafiksel olarak çizilmiştir. Co için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları 900°C ’ye kadar artan tavlama sıcaklığı ile giderek artmaktadırlar. Tüm alaşımlarda Co için şiddet oranları bu sıcaklıkta keskin bir artışla en büyük değerlerine ulaşmışlardır. Bu sıcaklıktan bir sonraki tavlama sıcaklığından yani 1000°C ’den sonra ölçülen şiddet oranları ise bir öncekine göre çok keskin bir şekilde azalmışlardır. Daha sonraki tavlama sıcaklıklarından sonra ölçülen şiddet oranları da çok az miktarda olmak üzere giderek azalmaktadırlar. Cu için ölçülen şiddet oranları ise 700°C ’ye kadar artan tavlama sıcaklığı ile giderek azalmaktadırlar. Bu sıcaklıktan sonra Cu için ölçülen şiddet oranları tüm alaşımlarda en küçüktür. Cu için tüm alaşımlarda 700°C ’ye gelene kadar yavaş yavaş, 700°C ’de ise keskin bir şekilde azalan şiddet oranları bir sonraki tavlama sıcaklığı olan 800°C ’de keskin bir şekilde artmışlardır. Bundan sonraki tüm tavlama sıcaklıklarında Cu için şiddet oranlarındaki artış devam etmektedir.

Şekil 4.8.3’den de görüldüğü üzere tavlama sıcaklığının 700°C olduğu durumda Cu için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarında görülen değişim (azalış) $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,7$ ve $0,6$) alaşımlarında en büyüktür. Tavlama sıcaklığının 900°C olduğu durumda ise Co için $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarında görülen değişim (artış) yine $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ ($x=0,7$ ve $0,6$) alaşımlarında en büyüktür. Co ve Cu için ölçülen şiddet oranlarının en büyük ve en küçük değerlerine ulaştıkları tavlama sıcaklıkları birbirlerinden farklı olmakla birlikte $\text{Co}_x\text{Cu}_{1-x}$ alaşımlarında Co ve Cu için ölçülen şiddet oranlarının tavlama sıcaklığı ile değişimlerinin birbirlerine göre ters yönlü oldukları söylenebilir. Yani alaşımları oluşturan elementlerden bir için tavlama sıcaklığı ile şiddet oranları artarken diğeri için azalmakta veya tam tersi durum söz konusu olabilmektedir. Ancak artış veya azalış miktarları farklıdır.

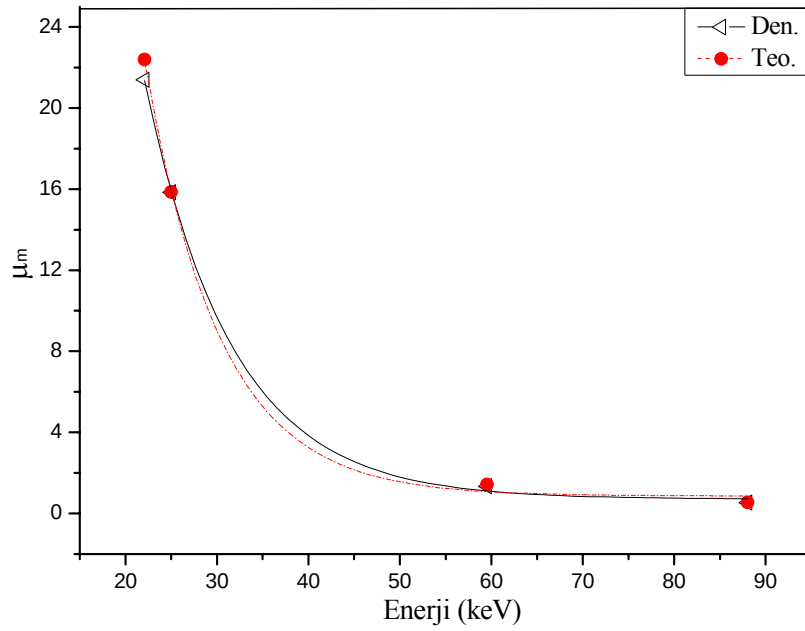
4.9. Alaşımların Kütle Soğurma Katsayıları, Etkin Atom Numaraları ve Elektron Yoğunlukları

Çalışmanın bu bölümünde; farklı kompozisyonlardaki 3d geçiş metali alaşımlarının çeşitli foton enerjileri için kütle soğurma katsayıları (μ_m) deneysel olarak belirlenmiş ayrıca WinXCOM programında karışım kuralı kullanılarak teorik olarak hesaplanmışlardır. Ölçülen μ_m değerleri kullanılarak alaşımlar için her bir enerjide toplam atomik tesir kesitleri (σ_t), toplam elektron tesir kesitleri (σ_e), etkin atom numaraları (Z_e) ve etkin elektron sayılarının (N_e) deneysel ve teorik değerleri belirlenmiştir. Elde edilen veriler $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,7; 0,6; 0,5; 0,4; 0,3$ ve $0,2$) alaşımları için Çizelge 4.9.1-3 ve Şekil 4.9.1-4’de, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ ($x=0,8; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,2$) alaşımları için Çizelge 4.9.4-6 ve Şekil 4.9.5-9’da, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ ($x=0,7-y=0,1; x=0,5-y=0,2; x=0,4-y=0,3; x=0,3-y=0,3; x=0,2-y=0,2$ ve $x=0,1-y=0,2$) alaşımları için Çizelge 4.9.7-9 ve Şekil 4.9.10-14’de, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,7; 0,6; 0,5; 0,4$ ve $0,3$) alaşımları için Çizelge 4.9.10-12 ve Şekil 4.9.15-19’da verilmiştir.

Grafikler her gruptan sadece bir alaşım için çizilmiştir. Grafiklerde incelenen parametrelerin (μ_m , σ_t , σ_e , Z_e ve N_e) enerjiye bağlı değişimlerinin yanı sıra ilgili alaşım için N_e değerlerinin, Z_e ’nin bir fonksiyonu olarak çizimleri de gösterilmiştir.

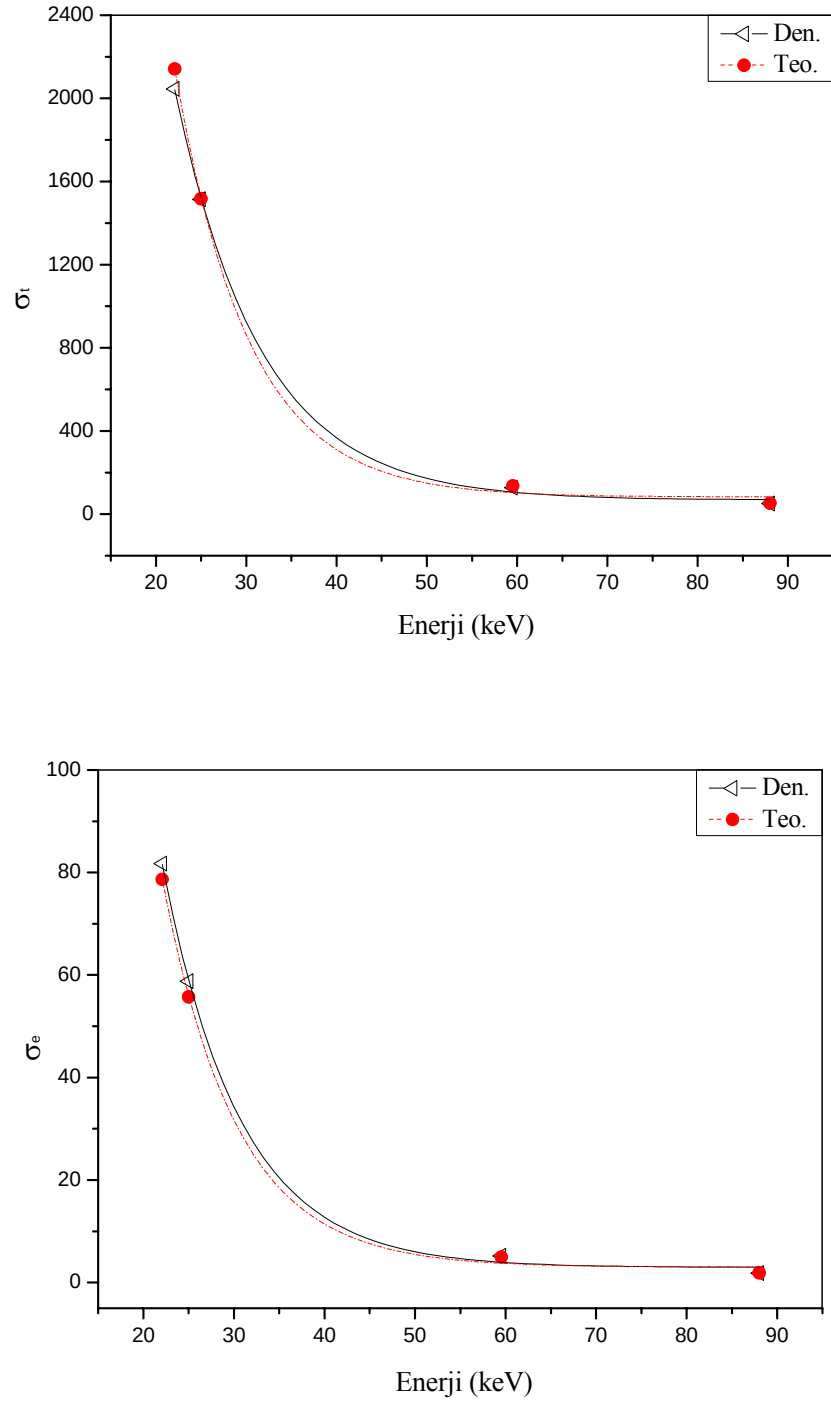
Çizelge 4.9.1. Fe, Ni ve $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için kütle soğurma katsayıları (μ_m).

Element veya Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
μ_m (cm ² /g)								
Fe	18,95	19,41	13,43	13,73	1,22	1,23	0,44	0,48
$\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$	21,65	20,48	14,56	14,42	1,14	1,29	0,48	0,50
$\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	21,62	20,92	14,44	14,78	1,39	1,32	0,52	0,51
$\text{Fe}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	20,90	21,45	14,24	15,14	1,25	1,35	0,51	0,52
$\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	21,24	21,92	14,91	15,53	1,28	1,39	0,52	0,54
$\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	21,39	22,44	15,84	15,86	1,33	1,42	0,53	0,55
$\text{Fe}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	21,55	22,92	16,24	16,22	1,34	1,45	0,51	0,56
$\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$	22,44	23,41	16,89	16,58	1,44	1,48	0,56	0,57
Ni	26,18	24,42	18,96	17,33	1,66	1,54	0,58	0,59

**Şekil 4.9.1.** $\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$ alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.2. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için atomik ve elektron tesir kesitleri (σ_t ve σ_e).

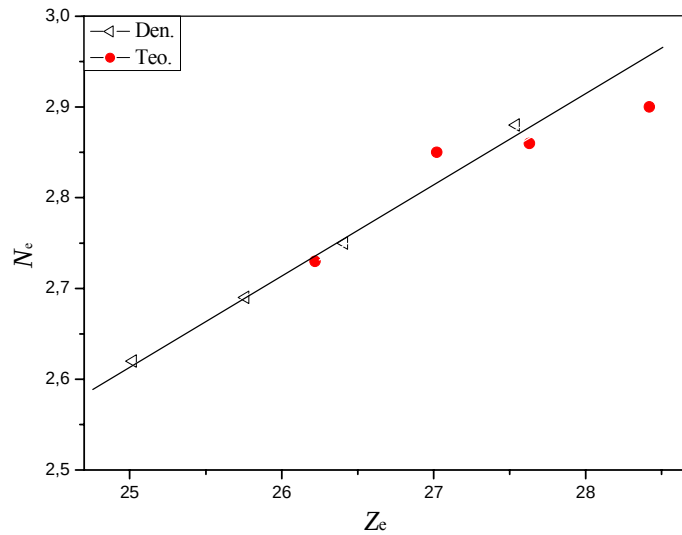
Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
σ_t (b/atom)								
$\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$	2028,89	1911,75	1364,46	1351,34	106,83	120,89	44,98	46,86
$\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	2036,30	1968,49	1360,05	1392,07	130,92	124,33	48,98	48,03
$\text{Fe}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	1978,38	2025,70	1347,95	1433,14	118,32	127,79	48,28	49,22
$\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	2020,61	2083,39	1418,42	1474,55	121,77	132,23	49,47	51,37
$\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	2044,99	2141,56	1514,39	1516,30	127,15	135,76	50,67	52,58
$\text{Fe}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	2070,49	2200,19	1560,31	1558,39	128,74	139,31	49,00	53,80
$\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$	2166,61	2259,30	1630,75	1600,82	139,03	142,90	54,07	55,03
σ_e (b/atom)								
$\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$	72,32	72,37	51,54	51,15	4,64	4,58	1,66	1,78
$\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	74,68	73,94	53,35	52,29	4,78	4,68	1,70	1,82
$\text{Fe}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	77,03	75,52	55,16	53,42	4,92	4,78	1,75	1,85
$\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	79,39	77,09	56,97	54,56	5,07	4,88	1,79	1,88
$\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	81,74	78,66	58,78	55,70	5,21	4,97	1,84	1,92
$\text{Fe}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	84,10	80,24	60,59	56,83	5,35	5,07	1,88	1,95
$\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$	86,45	81,81	62,40	57,97	5,49	5,17	1,93	1,99



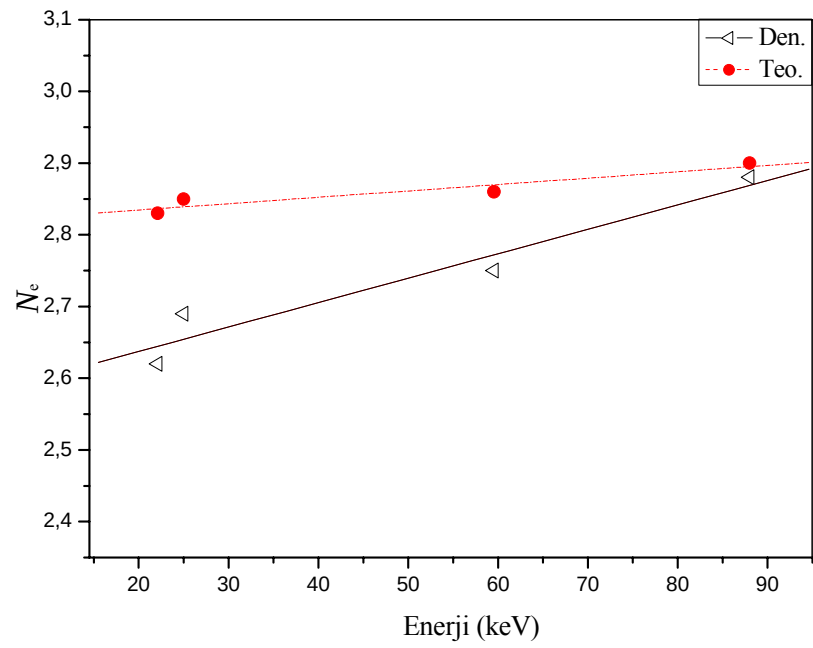
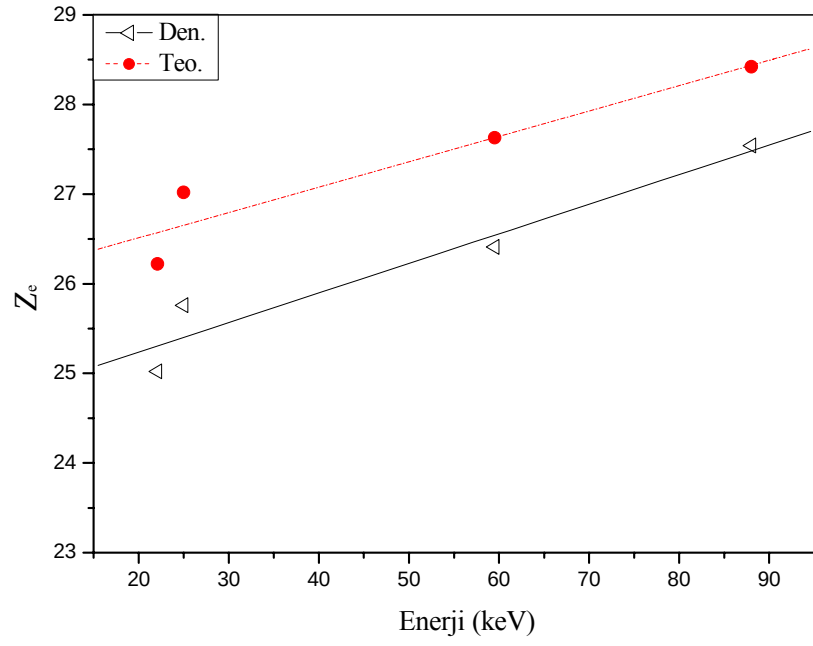
Şekil 4.9.2. $\text{Fe}_{0.4}\text{Ni}_{0.6}$ alaşımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.3. $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları (Z_e ve N_e).

Alaşım	22,1keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
Z_e								
$\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$	28,05	26,42	26,47	26,42	23,03	26,38	27,10	26,31
$\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	27,27	26,62	25,49	26,62	27,38	26,56	28,73	26,46
$\text{Fe}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	25,68	26,82	24,44	26,83	24,03	26,74	27,59	26,62
$\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	25,45	27,03	24,90	27,03	24,03	27,12	27,56	27,27
$\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	25,02	27,22	25,76	27,22	24,41	27,30	27,54	27,42
$\text{Fe}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	24,62	27,42	25,75	27,42	24,06	27,48	26,00	27,57
$\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$	25,06	27,62	26,13	27,62	25,30	27,65	28,02	27,71
N_e (* 10^{23} elektron/g)								
$\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$	2,99	2,82	2,83	2,82	2,46	2,81	2,89	2,81
$\text{Fe}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	2,90	2,83	2,71	2,83	2,91	2,82	3,05	2,81
$\text{Fe}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	2,71	2,83	2,58	2,83	2,54	2,83	2,91	2,81
$\text{Fe}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	2,68	2,84	2,62	2,84	2,53	2,85	2,90	2,87
$\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	2,62	2,85	2,69	2,85	2,55	2,86	2,88	2,87
$\text{Fe}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	2,56	2,85	2,68	2,85	2,50	2,86	2,71	2,87
$\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$	2,60	2,86	2,71	2,86	2,62	2,86	2,90	2,87



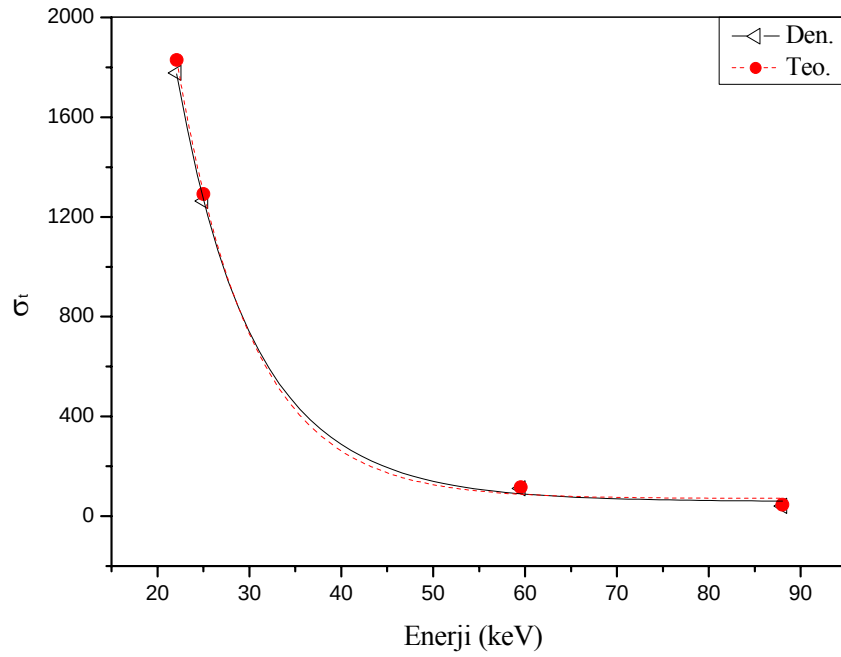
Şekil 4.9.3. $\text{Fe}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$ alaşımı için N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.



Şekil 4.9.4. $\text{Fe}_{0.4}\text{Ni}_{0.6}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

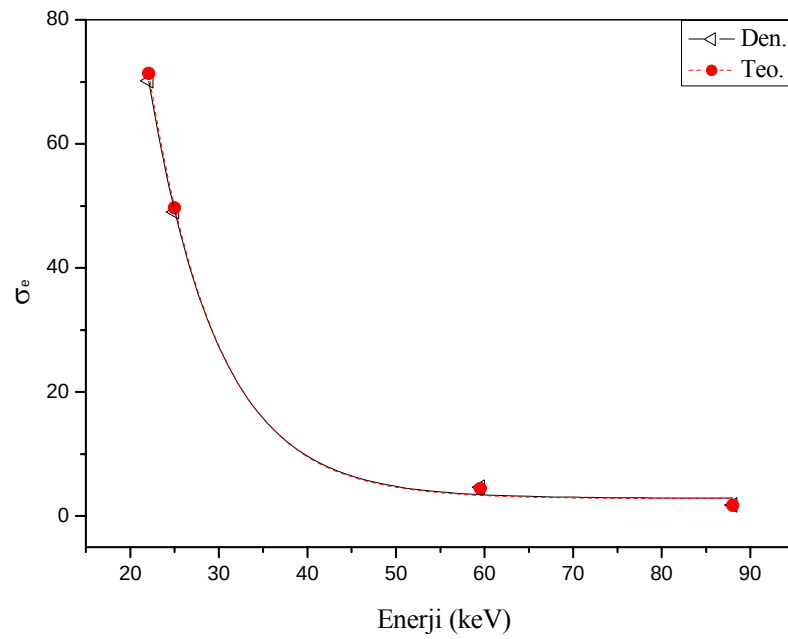
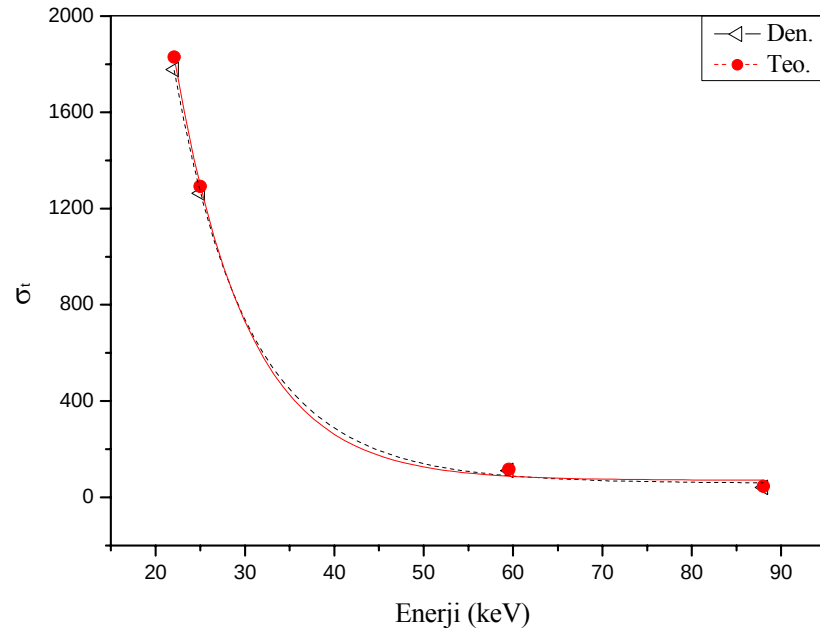
Çizelge 4.9.4. Ni, Cr ve $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için kütle soğurma katsayıları (μ_m).

Element veya Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
$\mu_m (\text{cm}^2/\text{g})$								
Ni	26,18	24,42	18,96	17,33	1,66	1,54	0,58	0,59
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	21,30	22,62	15,33	16,12	1,41	1,43	0,51	0,55
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	19,87	20,83	14,01	14,70	1,38	1,32	0,49	0,51
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	19,33	19,94	13,75	14,05	1,21	1,26	0,45	0,49
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	18,11	19,01	12,80	13,40	1,15	1,20	0,45	0,47
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	16,88	17,20	11,29	12,10	1,01	1,09	0,39	0,44
Cr	16,88	17,20	11,29	12,10	1,01	1,09	0,39	0,44

**Şekil 4.9.5.** $\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$ alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.5. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için atomik ve elektron tesir kesitleri (σ_t ve σ_e).

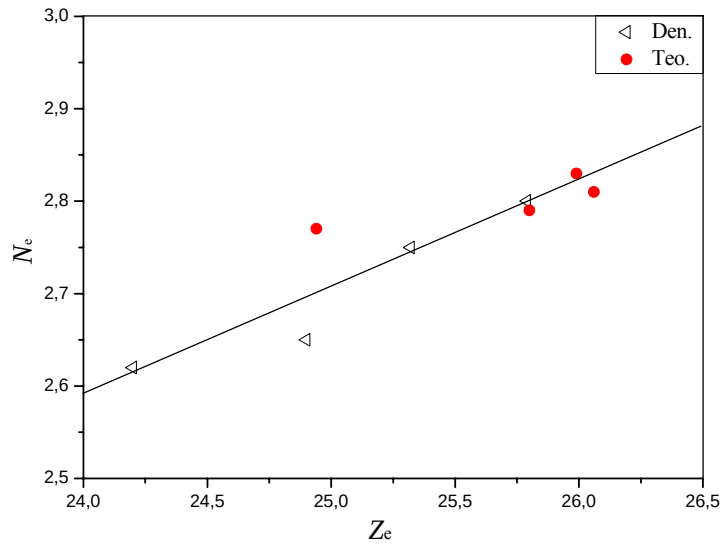
Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
σ_t (b/atom)								
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	2029,30	2153,15	1460,52	1524,36	134,33	136,05	48,59	52,29
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	1848,85	1935,38	1303,59	1367,80	128,41	122,45	45,59	47,60
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	1777,10	1829,50	1264,10	1291,68	111,24	115,84	41,37	45,32
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	1644,79	1725,62	1162,53	1217,02	104,45	109,35	40,87	43,09
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	1495,52	1523,87	1000,26	1072,03	89,48	96,75	34,55	38,73
σ_e (b/atom)								
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	82,77	79,05	59,22	56,19	5,33	5,00	1,93	1,93
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	74,37	73,15	52,42	51,86	4,88	4,63	1,83	1,81
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	70,18	71,36	49,02	49,69	4,65	4,44	1,78	1,75
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	65,98	67,83	45,63	47,53	4,43	4,26	1,74	1,69
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	57,59	62,65	38,83	43,20	3,98	3,89	1,64	1,56



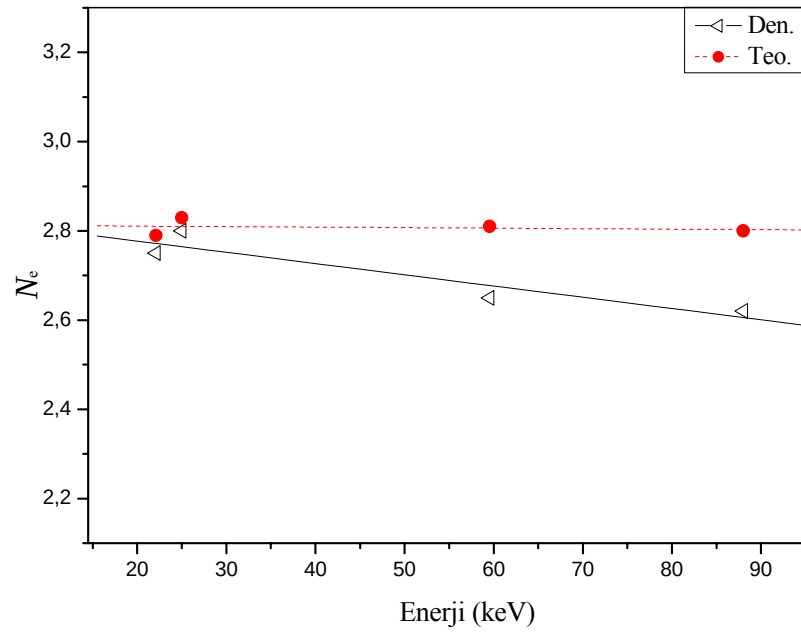
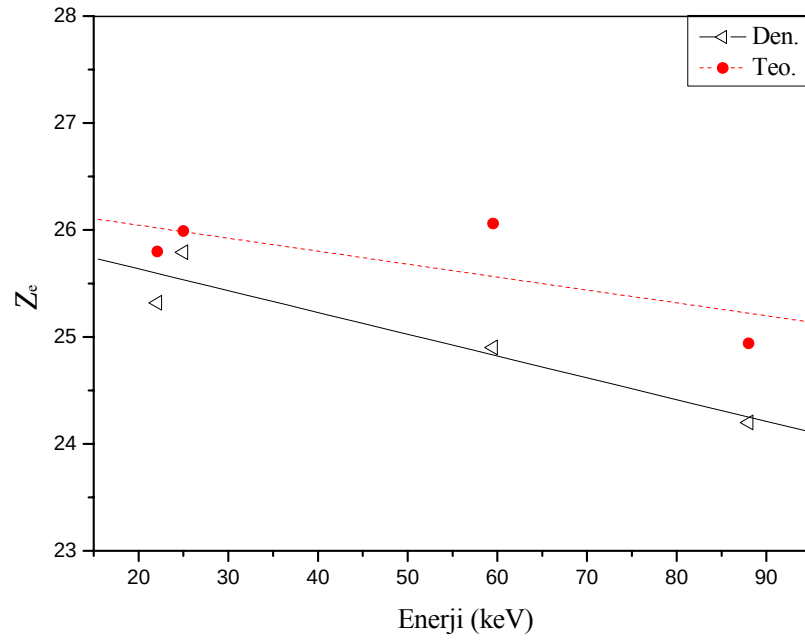
Çizelge 4.9.6. $\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$ alaşıımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.6. $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları (Z_e ve N_e).

Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
Z_e								
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	24,52	27,49	24,66	27,13	25,21	27,24	25,24	27,07
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	24,86	28,00	24,87	26,38	26,32	26,46	24,90	26,32
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	25,32	25,80	25,79	25,99	23,90	26,06	23,20	25,94
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	24,93	25,57	25,48	25,61	23,59	25,66	23,54	25,56
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	25,97	24,39	25,76	24,82	22,50	24,85	21,04	24,79
$N_e (* 10^{23} \text{ elektron/g})$								
$\text{Ni}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}$	2,57	2,86	2,59	2,85	2,83	2,86	2,65	2,84
$\text{Ni}_{0,6}\text{Cr}_{0,4}$	2,67	2,84	2,67	2,83	2,65	2,84	2,68	2,83
$\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$	2,75	2,79	2,80	2,83	2,60	2,83	2,52	2,82
$\text{Ni}_{0,4}\text{Cr}_{0,6}$	2,74	2,80	2,81	2,82	2,60	2,83	2,59	2,81
$\text{Ni}_{0,2}\text{Cr}_{0,8}$	2,93	2,75	2,91	2,80	2,54	2,80	2,38	2,80



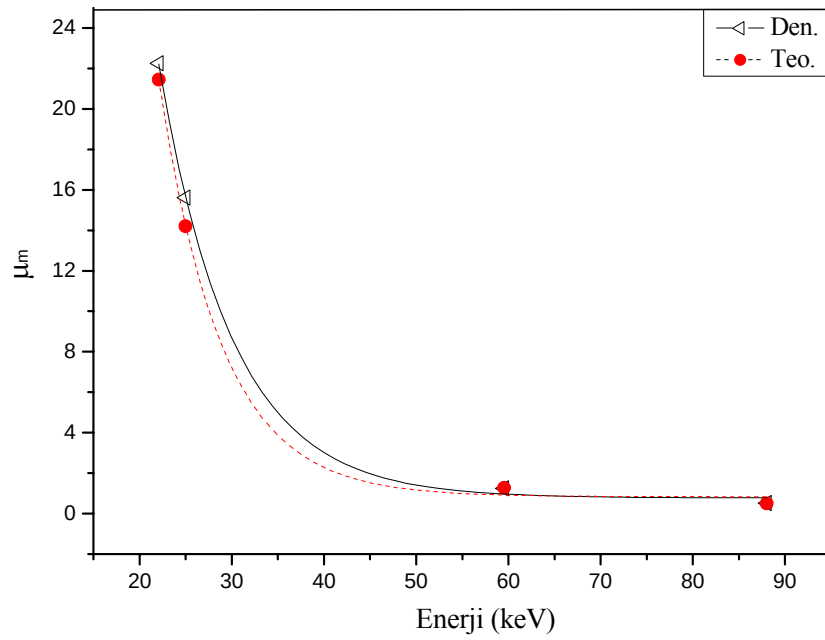
Şekil 4.9.7. $\text{Ni}_{0,5}\text{Cr}_{0,5}$ alaşımı için N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.



Şekil 4.9.8. $Ni_{0.5}Cr_{0.5}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.7. Fe, Cr, Ni ve $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için kütle soğurma katsayıları (μ_m).

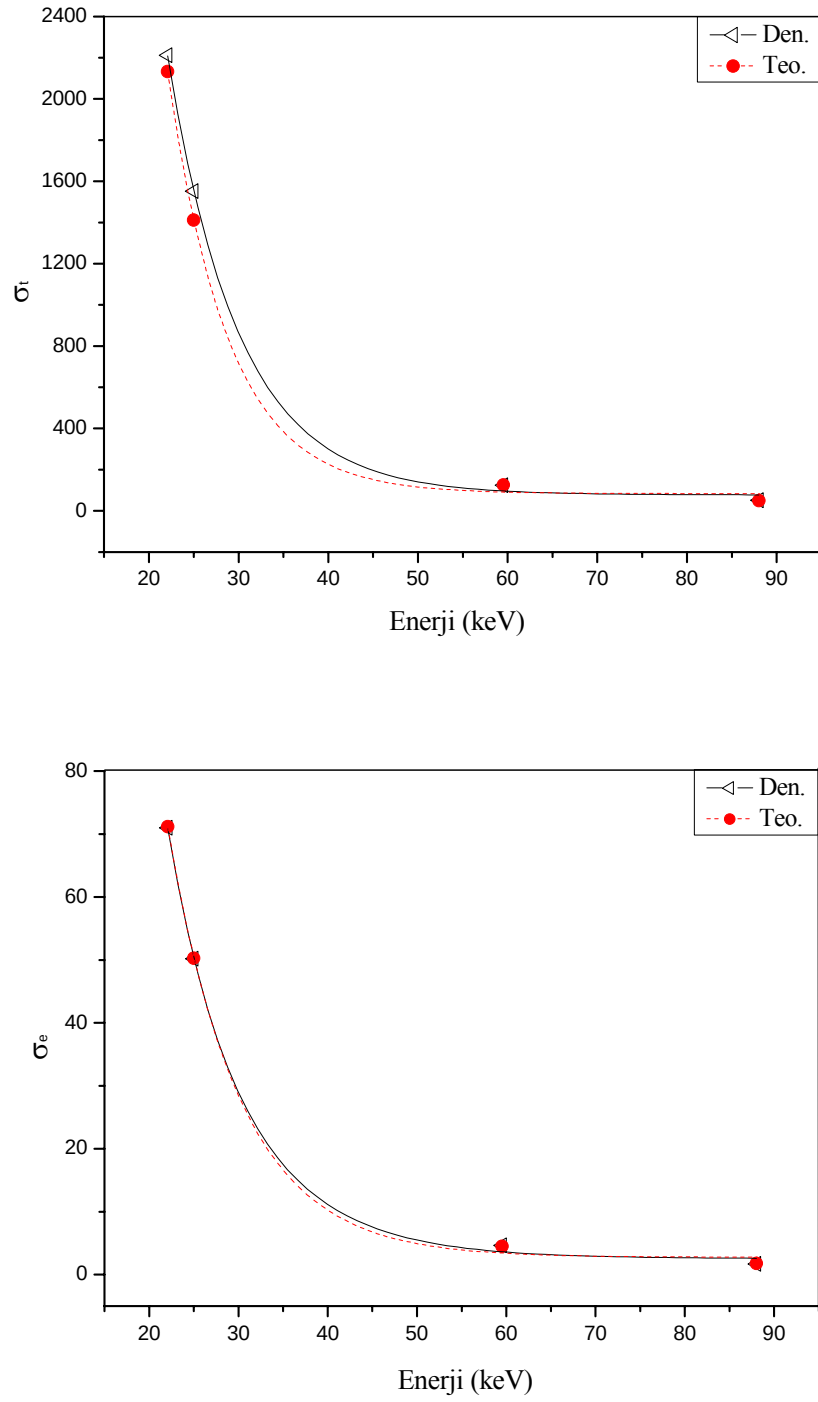
Element veya Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
$\mu_m (\text{cm}^2/\text{g})$								
Fe	18,95	19,41	13,43	13,73	1,22	1,23	0,44	0,48
Cr	13,67	15,44	8,93	10,81	0,98	0,98	0,43	0,41
Ni	26,18	24,42	18,96	17,33	1,66	1,54	0,58	0,59
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$	20,68	20,00	15,9	14,13	1,17	1,27	0,46	0,49
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$	22,25	21,46	15,61	14,21	1,25	1,27	0,52	0,50
$\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$	20,81	19,71	15,31	13,91	1,23	1,25	0,53	0,49
$\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,4}$	21,66	20,22	15,65	14,27	1,23	1,28	0,52	0,50
$\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,6}$	21,09	21,61	16,24	15,28	1,37	1,37	0,51	0,53
$\text{Fe}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,7}$	20,56	21,58	15,93	15,28	1,34	1,36	0,53	0,52



Şekil 4.9.9. $\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$ alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.8. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için atomik ve elektron tesir kesitleri (σ_t ve σ_e).

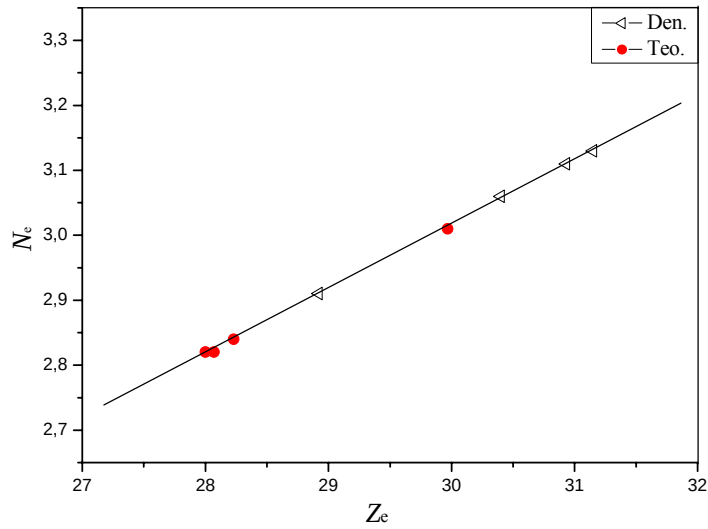
Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
σ_t (b/atom)								
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$	1924,76	1861,47	1479,87	1315,13	108,90	118,20	42,81	45,61
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$	2211,67	2133,14	1551,65	1411,49	124,25	126,24	51,69	49,70
$\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$	1919,17	1817,67	1412,62	1283,44	113,49	115,33	48,90	45,21
$\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,4}$	2008,76	1873,36	1451,39	1323,41	114,07	118,71	48,23	46,37
$\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,6}$	1989,34	2037,45	1531,86	1441,31	129,23	129,23	48,11	49,99
$\text{Fe}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,7}$	1879,99	1973,25	1456,62	1397,19	122,53	124,36	48,46	47,55
σ_e (b/atom)								
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$	70,48	70,99	49,95	50,15	4,56	4,50	1,66	1,75
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$	70,99	71,18	50,17	50,29	4,62	4,51	1,70	1,76
$\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$	69,15	69,80	48,58	49,28	4,53	4,42	1,70	1,73
$\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,4}$	71,51	71,38	50,39	50,42	4,68	4,52	1,74	1,77
$\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,6}$	78,06	75,91	55,60	53,69	5,04	4,80	1,84	1,86
$\text{Fe}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,7}$	78,92	75,58	56,49	53,50	5,07	4,78	1,83	1,85



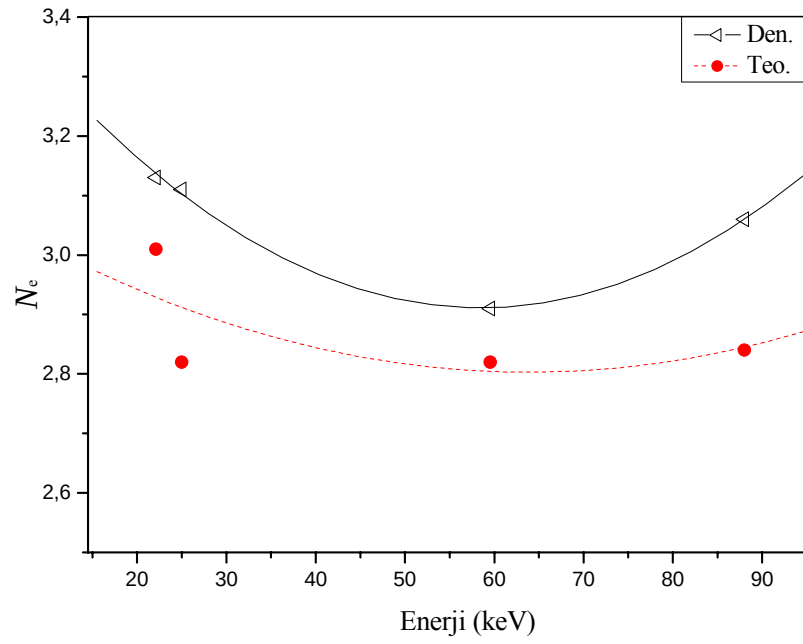
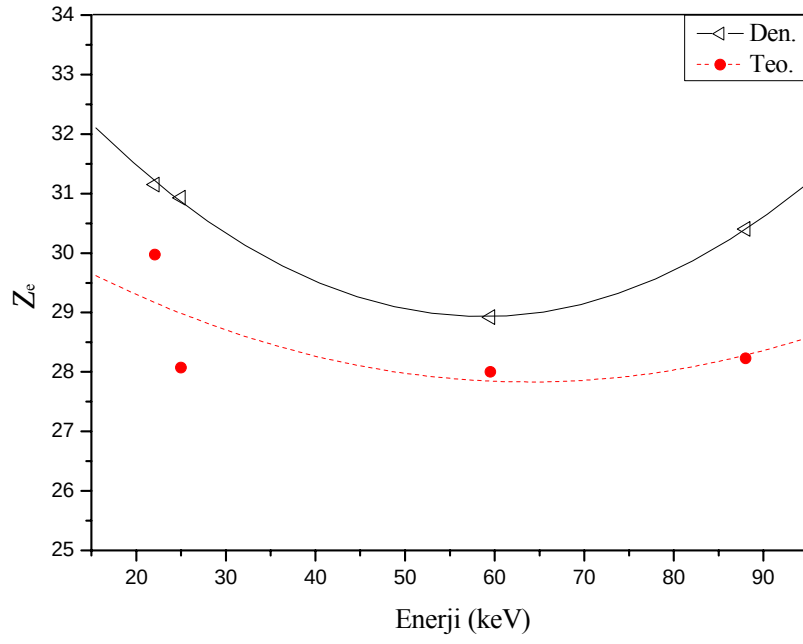
Şekil 4.9.10. $\text{Fe}_{0.5}\text{Cr}_{0.2}\text{Ni}_{0.3}$ alaşımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.9. $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları (Z_e ve N_e).

Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
Z_e								
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$	27,31	26,22	29,63	26,22	23,90	26,28	25,83	26,01
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$	31,15	29,97	30,93	28,07	26,92	28,00	30,40	28,23
$\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$	27,75	26,04	29,08	26,04	25,03	26,08	28,80	26,08
$\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,4}$	28,09	26,25	28,80	26,25	24,39	26,27	27,67	26,24
$\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,6}$	25,49	26,84	27,55	26,84	25,62	26,92	26,21	26,83
$\text{Fe}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,7}$	23,82	26,11	25,78	26,11	24,15	26,04	26,52	25,75
$N_e (* 10^{23} \text{ elektron/g})$								
$\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,1}\text{Ni}_{0,2}$	2,93	2,82	3,18	2,82	2,57	2,82	2,78	2,79
$\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$	3,13	3,01	3,11	2,82	2,71	2,82	3,06	2,84
$\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,3}$	3,01	2,82	3,15	2,82	2,71	2,83	3,12	2,83
$\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,3}\text{Ni}_{0,4}$	3,03	2,83	3,11	2,83	2,63	2,83	2,98	2,83
$\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,6}$	2,70	2,85	2,92	2,85	2,72	2,85	2,78	2,84
$\text{Fe}_{0,1}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,7}$	2,61	2,86	2,82	2,86	2,64	2,85	2,90	2,82



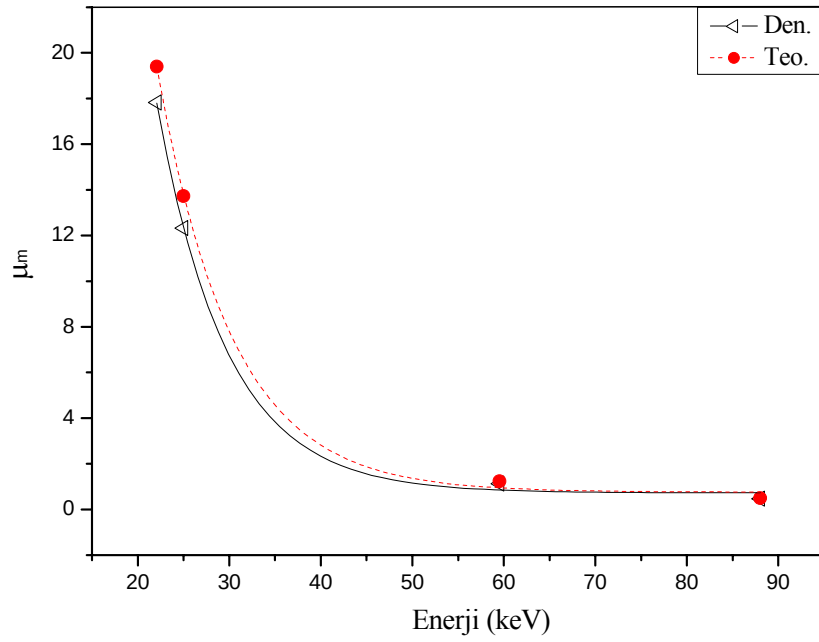
Şekil 4.9.11. $\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,2}\text{Ni}_{0,3}$ alaşımı için N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.



Şekil 4.9.12. $\text{Fe}_{0.5}\text{Cr}_{0.2}\text{Ni}_{0.3}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

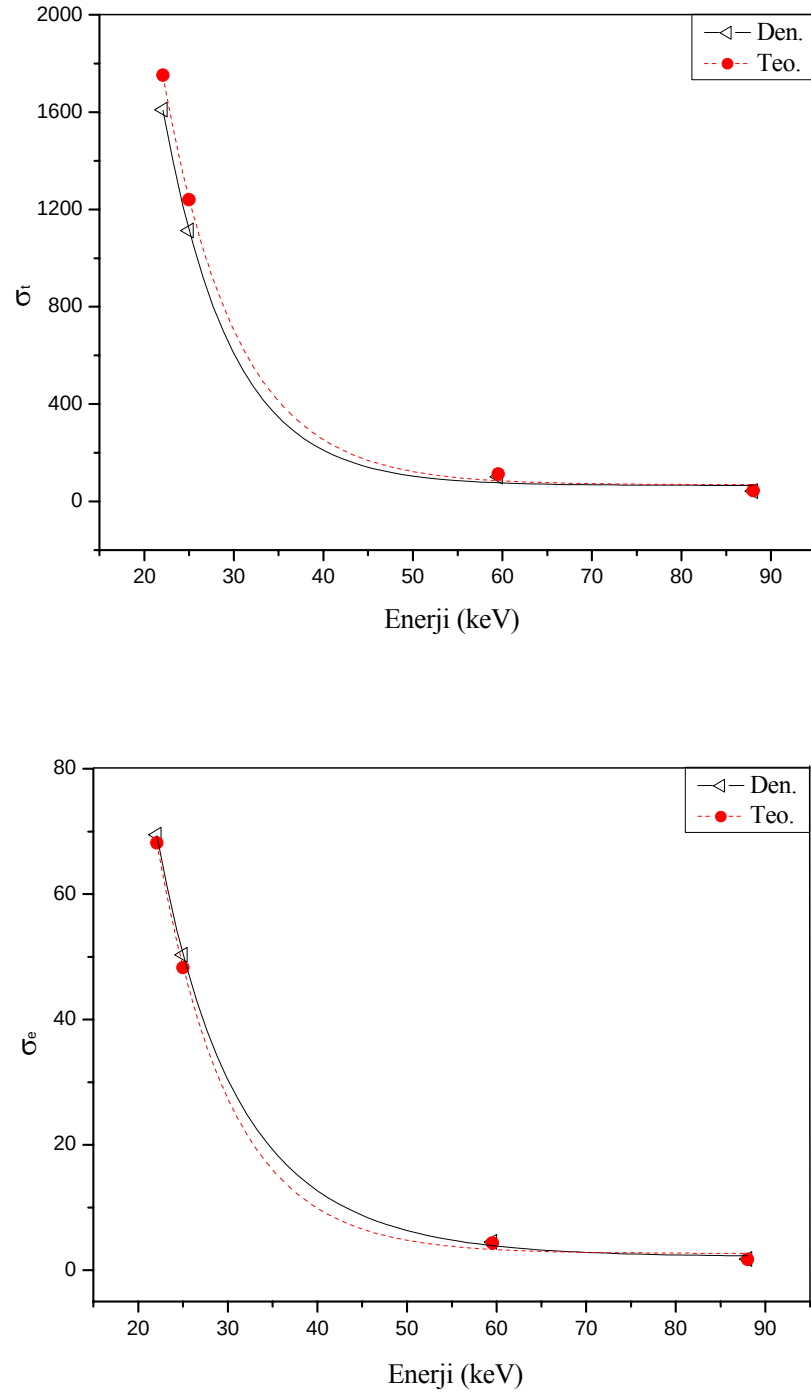
Çizelge 4.9.10. Ti, Ni ve Ti_xNi_{1-x} alaşımları için kütle soğurma katsayıları (μ_m).

Element veya Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
μ_m (cm ² /g)								
Ti	10,19	11,90	7,39	8,37	0,71	0,78	0,39	0,34
Ti _{0,7} Ni _{0,3}	14,40	15,65	10,24	11,05	0,93	1,01	0,42	0,41
Ti _{0,6} Ni _{0,4}	15,05	16,90	10,75	11,94	0,95	1,08	0,43	0,44
Ti _{0,5} Ni _{0,5}	16,44	18,15	11,01	12,84	1,07	1,16	0,46	0,46
Ti _{0,4} Ni _{0,6}	17,82	19,40	12,33	13,73	1,12	1,24	0,47	0,49
Ti _{0,3} Ni _{0,7}	19,54	20,65	13,88	14,62	1,27	1,31	0,52	0,51
Ni	26,18	24,40	18,96	17,30	1,66	1,54	0,58	0,59

**Şekil 4.9.13.** Ti_{0,4}Ni_{0,6} alaşımı için μ_m değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.11. $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için toplam atomik ve elektron tesir kesitleri (σ_t ve σ_e).

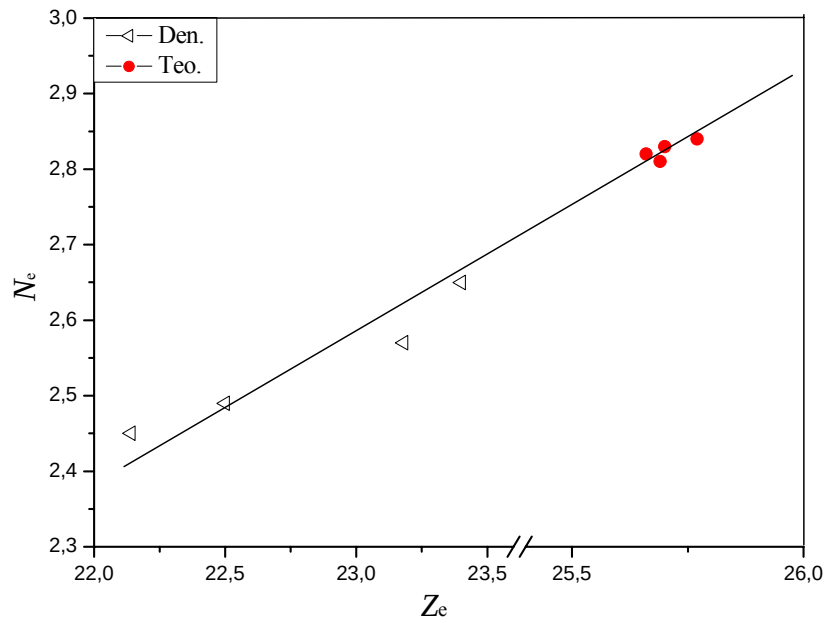
Alaşım	22,1 keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
σ_t (b/atom)								
$\text{Ti}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	1222,68	1328,82	869,46	938,24	78,96	85,76	35,66	34,81
$\text{Ti}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	1304,94	1465,35	932,10	1035,28	82,37	93,64	37,28	38,15
$\text{Ti}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	1455,03	1606,37	974,44	1136,41	94,70	102,67	40,71	40,71
$\text{Ti}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	1609,21	1751,89	1113,44	1239,87	101,14	111,98	42,44	44,25
$\text{Ti}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	1799,68	1901,91	1278,38	1346,53	116,97	120,65	47,89	46,97
σ_e (b/atom)								
$\text{Ti}_{0,7}\text{Ni}_{0,3}$	53,13	55,60	38,50	39,25	3,53	3,58	1,59	1,48
$\text{Ti}_{0,6}\text{Ni}_{0,4}$	58,56	59,79	42,43	42,25	3,85	3,84	1,65	1,56
$\text{Ti}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	63,99	63,99	46,36	45,25	4,17	4,09	1,71	1,64
$\text{Ti}_{0,4}\text{Ni}_{0,6}$	69,43	68,18	50,30	48,24	4,49	4,35	1,78	1,72
$\text{Ti}_{0,3}\text{Ni}_{0,7}$	74,86	72,38	54,23	51,24	4,82	4,60	1,84	1,81



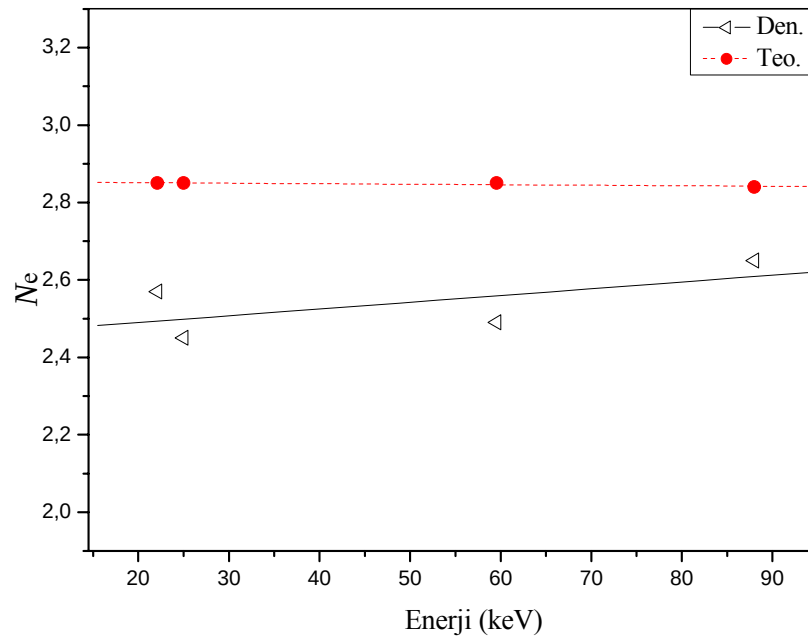
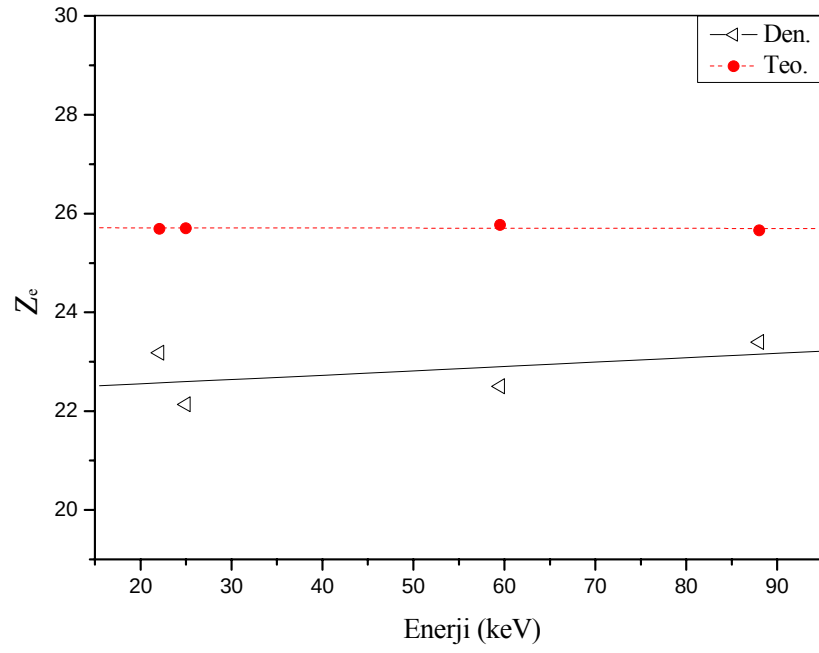
Şekil 4.9.14. $\text{Ti}_{0.4}\text{Ni}_{0.6}$ alaşımı için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

Çizelge 4.9.12. Ti_xNi_{1-x} alaşımları için etkin atom numaraları ve elektron sayıları (Z_e ve N_e).

Alaşım	22,1keV		25,0 keV		59,5 keV		88,0 keV	
	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.	Den.	Teo.
Z_e								
$Ti_{0,7}Ni_{0,3}$	23,01	23,90	22,58	23,91	22,37	23,94	22,39	23,58
$Ti_{0,6}Ni_{0,4}$	22,28	24,51	21,97	24,51	21,39	24,41	22,55	24,47
$Ti_{0,5}Ni_{0,5}$	22,74	25,11	21,02	25,12	22,69	25,10	23,74	24,80
$Ti_{0,4}Ni_{0,6}$	23,18	25,69	22,14	25,70	22,50	25,77	23,90	25,66
$Ti_{0,3}Ni_{0,7}$	24,04	26,28	23,57	26,28	24,29	26,23	26,08	26,00
$N_e (* 10^{23}$ elektron/g)								
$Ti_{0,7}Ni_{0,3}$	2,71	2,81	2,66	2,82	2,63	2,82	2,64	2,78
$Ti_{0,6}Ni_{0,4}$	2,57	2,83	2,53	2,83	2,47	2,82	2,60	2,82
$Ti_{0,5}Ni_{0,5}$	2,57	2,84	2,37	2,84	2,56	2,84	2,68	2,80
$Ti_{0,4}Ni_{0,6}$	2,57	2,85	2,45	2,85	2,49	2,85	2,65	2,84
$Ti_{0,3}Ni_{0,7}$	2,61	2,85	2,56	2,85	2,64	2,85	2,83	2,82



Şekil 4.9.15. $Ti_{0,4}Ni_{0,6}$ alaşımı için etkin N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak gösterimi.



Şekil 4.9.16. $Ti_{0.4}Ni_{0.6}$ alaşımı için Z_e ve N_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi.

İlgili çizelge ve şekillerden ($\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.1 ve Şekil 4.9.1'den, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.4 ve Şekil 4.9.5'den, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için Çizelge 4.9.7 ve Şekil 4.9.9'dan, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.10 ve Şekil 4.9.13'den) de görüldüğü üzere incelenen her bir alaşım için kütle soğurma katsayıları (μ_m) artan foton enerjisi ile azalmaktadırlar. Her bir foton enerjisinde alaşımda atom numarası büyük olan metalin konsantrasyonu artarken alaşımın kütle soğurma katsayısı büyümektedir. Alaşımları için deneysel olarak belirlenen μ_m değerleri WinXcom programında karışım kuralı temel alınarak hesaplanan teorik değerlerle uyumludurlar. Deneysel ve teorik sonuçlar arasındaki küçük farklılıklar ölçümler sırasında numunelerde meydana gelen oksitlenme, deney sistemi, sayma veya verim hatası gibi etkenlerden kaynaklanabilir. İncelenen alaşımları için μ_m değerleri foton enerjisine ve alaşım içerisindeki 3d geçiş metallerinin konsantrasyonlarına bağlı olarak değişmektedirler. Toplam atomik ve elektronik tesir kesitlerinin (σ_i ve σ_e) foton enerjisi ile değişimleri σ_i değerlerinin değişimi ile paralellik göstermektedirler ($\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.2 ve Şekil 4.9.2, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.5 ve Şekil 4.9.6, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için Çizelge 4.9.8 ve Şekil 4.9.10, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.11 ve Şekil 4.9.14). N_e değerlerinin Z_e değerlerinin bir fonksiyonu olarak foton enerjisine göre çizildiği grafiklerden ($\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.9.3, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.9.7, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için Şekil 4.9.11, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Şekil 4.9.15) N_e değerlerinin artan Z_e değerleri ile lineer bir biçimde arttığı açıkça görülmektedir. Alaşımlar için Z_e değerleri de foton enerjisi ile değişmektedirler. Z_e ile yakından ilişkili olan N_e değerleri de foton enerjisi ile Z_e değerleri ile aynı şekilde değişmektedirler ($\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.3 ve Şekil 4.9.4, $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.6 ve Şekil 4.9.8, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ alaşımları için Çizelge 4.9.9 ve Şekil 4.9.12, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları için Çizelge 4.9.12 ve Şekil 4.9.16).

5. SONUÇ

Bu çalışma üç kısımdan oluşmaktadır. Çalışmada ulaşılan bulgular ve bunlar için tartışma bir önceki bölümde; birinci kısım için 4.1-7, ikinci kısım için 4.8 ve üçüncü kısım için 4.9 başlıkları altında verilmiştir.

Çalışmanın birinci kısmında;

- a. Saf 3d geçiş metallerinde ve bunlardan farklı oranlarda kullanılarak hazırlanan mekanik alaşımlarda, ilgili 3d geçiş metalleri için $K\alpha$, $K\beta$ pik tepesi enerjilerinin, FWHM'lerinin, $K\alpha$, $K\beta$ ve tüm K pikleri altında kalan alanların durumu incelendi.
- b. Tüm numuneler için K X-ışını şiddet oranlarının; herhangi bir düzeltme işlemine tabi tutulmamış değerleri ($N_{K\beta}/N_{K\alpha}$), gerekli düzeltme işlemleri yapıldıktan sonraki değerleri ($I_{K\beta}/I_{K\alpha}$) ve alaşımlar için saf metallere göre normalize edilmiş değerleri ($R_{K\beta}/R_{K\alpha}$) belirlendi.
- c. Ölçülen $I_{K\beta}/I_{K\alpha}$ X-ışını şiddet oranları kullanılarak alaşımları oluşturan geçiş metalleri için 3d elektronlarının sayısı; n_{3d} , 4s, 4p elektronlarının toplam sayısı; $n_{4s,4p}$, saf metale kıyasla 3d elektron sayısındaki değişim; Dn_{3d} belirlendi.
- d. Alaşımlar için 3d ve 4s, 4p elektronlarının toplam sayıları; Tn_{3d} ve $Tn_{4s,4p}$, saf metaller için ölçülen değerlerin alaşımlar için ağırlıklı toplamından elde edilen 3d ve 4s, 4p elektronlarının toplam sayıları; Tn_{3d}^* ve $Tn_{4s,4p}^*$ hesaplandı.

Tüm alaşımlar için alaşımı oluşturan 3d geçiş metallerinin pik tepesi enerjilerinin metallerin saf hallerindeki pik tepesi enerjilerinden kayda değer bir sapma göstermediği tespit edilmiştir. Buna karşın alaşımı oluşturan 3d geçiş metalleri için FWHM değerleri bu metallerin saf halleri için elde edilen değerlerden farklılık göstermektedir ve metallerin alaşımdaki oranlarına bağlı olarak düzgün olmamakla birlikte değişmektedirler.

$K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları alaşımdaki metallerin oranlarına bağlı olarak değişmektedir. Bu değişim alaşımı oluşturan metallere bağlı olarak konsantrasyon değişimi ile aynı veya zıt yönlü olabilmektedir. Kıyaslama için alaşımlarda ölçülen şiddet oranları saf metaller için ölçülen şiddet oranların göre normalize edilmiştir. Alaşımlarda elde edilen şiddet oranları saf metallerdekinden büyük veya küçük olabilmektedir.

Alaşımlarda 3d geçiş metalleri için ölçülen şiddet oranları kullanılarak bu metaller için valens elektron yerleşimleri belirlendi. Bunun için ölçülen şiddet oranları ilgili metallerin farklı elektron yerleşimleri için multikonfigürasyon Dirac-Fock hesaplamaları sonucu elde edilmiş şiddet oranı değerleri ile kıyaslandı. Alaşımlarda 3d geçiş metallerinin valens elektron yerleşimlerinin saf metallerden farklılıklar gösterdiği anlaşıldı. 3d geçiş metallerinin alaşımlardaki kompozisyonlarında meydana gelen değişim, alaşımı oluşturan metallerin her birinin atomlarının sahip olduğu 3d elektronu popülasyonunda değişime sebep olmaktadır. Alaşımları oluşturan metallerin 3d elektron sayılarında meydana gelen değişimler kıyaslamalı olarak incelendiğinde bu değişimin iki sebepten kaynaklanabileceği görülmüştür. Bunlardan ilki elementin 3d ve 4s, 4p durumları arasında gerçekleşen elektron dağılımlarının yeniden düzenlenmesi (delokalizasyon) ve ikincisi alaşımı oluşturan metaller arasında gerçekleşen yük transferidir. [Raj et al. \(1999\)](#)'e göre alaşımlarda 3d elektron popülasyonlarında meydana gelen değişimin asıl sebebi alaşımı oluşturan elementler arasında

gerçekleşen 3d elektron transferidir. Ancak bu değişimin sebebi açıklanırken 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektronların yeniden düzenlenmesi de çok az da olsa etkilidir. [Powlowski *et al.* \(2002\)](#)'e göre alaşımlarda metallerin valens elektron yapılarında gözlenen değişimi açıklamak için ilgili metallerin 3d ve 4s, 4p durumları arasında elektronların yeniden düzenlenmesini hesaba katmak gerekirken bir elementten diğerine elektron transferi ihmal edilebilir. Buradan da anlaşılacağı üzere literatürdeki çalışmalarda; alaşımlarda 3d elektron popülasyonlarında gözlenen değişimin sebebiyle ilgili olarak net bir sonuca varılamamıştır. Bu çalışma sonucunda elde edilen bulgular alaşımı oluşturan elementlerin valens elektronlarının yerleşiminde her iki olayında (yük transferi ve yeniden düzenlenmesi) etkili olduğunu ve alaşımı oluşturan elementlerin cinsine ve alaşımdaki oranlarına bağlı olarak birinin diğerinden daha baskın olabildiğini göstermiştir.

Bu çalışmada aynı metallerden farklı oranlarda içeren bir alaşım grubunda bazı alaşımlar için delokalizasyon ve yük transferinin gruptaki diğer alaşımlardan daha büyük ve zıt yönlü olduğu tespit edilmiştir. Dolayısıyla bu alaşımlarda valens elektron yerleşimleri de diğer alaşımlardan farklıdır. Bu alaşımların sahip oldukları farklı fiziksel özellikler valens elektron yerleşimlerinden kaynaklanabilir. Amaca yönelik özelliklere sahip alaşımlar tasarlanırken bunların sahip oldukları/olmaları gereken elektron yerleşimleri $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları ölçülmek suretiyle belirlenebilir.

3d elektron transferi yüksek konsantrasyonlu elementten düşük konsantrasyonlu elemente doğru gerçekleşebileceği gibi bu transfer düşük konsantrasyonlu elementten yüksek konsantrasyonlu elemente doğru da gerçekleşebilir. Bununla birlikte bir elementin atomları tarafından verilen 3d elektronlarının sayısı ile ikinci elementin atomları tarafından alınanların sayısı arasında basit bir nicel ilişki yoktur. Ayrıca bir elementin 3d elektron sayısındaki değişim diğer elementin 3d

elektron sayısındaki değişime her zaman uygun olmamaktadır. Buna göre alaşımı oluşturan ilgili elementlerin atomlarının 3d ve 4s, 4p seviyeleri arasında elektronların yeniden düzenlenmesi, alaşımlarda elementlerin valens elektron konfigürasyonlarının değişimini etkileyen diğer bir etkidir.

Çalışmanın ikinci kısmında; 3d geçiş metallerinin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları üzerine tavlama sıcaklığının etkisi araştırılmıştır. Bunun için farklı oranlarda 3d geçiş metali içeren mekanik alaşımlar hazırlanmıştır. Hazırlanan numuneler düzenli adımlarla artan sıcaklıklarda tavllanmış ve her bir tavlama işleminden sonra numunelerin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları belirlenmiştir. Bu ölçümlerin sonuçları 3d geçiş metali alaşımlarında; $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranlarının, alaşımı oluşturan metallerin elektron yerleşiminin yanı sıra tavlama sıcaklığına da bağlı olduğunu göstermiştir.

Yapılan literatür taraması sonucunda 3d geçiş metallerinin $K\beta/K\alpha$ X-ışını şiddet oranları üzerine tavlama sıcaklığı etkilerinin incelendiği herhangi bir çalışmaya rastlanılmamıştır. Dolayısıyla bu çalışmada elde edilen bulguların başka çalışmaların sonuçları ile kıyaslanması mümkün olmamıştır.

Çalışmanın üçüncü kısmında; çeşitli foton enerjileri için saf 3d geçiş metalleri ve onların farklı kompozisyonlarındaki alaşımlarının toplam kütle soğurma katsayıları (μ_m) ölçüldü. Her bir alaşım için teorik kütle soğurma katsayıları karışım kuralı dikkate alınarak WinXcom programında hesaplandı. Alaşımlar için; toplam atomik ve elektronik tesir kesitleri (σ_t ve σ_e), etkin atom numaraları (Z_e) ve elektron yoğunlukları (N_e) ölçülen kütle soğurma katsayıları kullanılarak belirlenmiştir.

Alaşımlar için μ_m değerleri foton enerjisine, alaşımdaki elementlerin atom numaralarına, alaşımdaki oranlarına, fiziksel ve kimyasal durumlarına bağlıdır. Alaşımlar için σ_t ve σ_e değerlerinin foton enerjisi ile değişimi μ_m değerlerinin değişimi ile aynı şekildedir. Alaşımlar için N_e değerleri Z_e değerleri ile çok yakından ilişkilidirler ve enerjiye göre değişimleri Z_e ile aynıdır.

3d geçiş metalleri ve onların alaşımları modern teknolojinin gelişiminde önemli bir rol oynamaktadırlar. 3d geçiş metali alaşımları için valens elektron yerleşimlerinin yanı sıra kütle soğurma katsayıları, toplam atomik ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numarası ve elektron yoğunluğu gibi fiziksel parametrelerin bilinmesi onların fiziksel özelliklerinin anlaşılabilmesi için oldukça önemlidir.

Bir element için γ - ve X-ışınlarının soğurulması ve saçılması elementin atom numarası ve yoğunluğu ile ilgilidir. Elementlerden oluşan kompozit bir materyalde elementlerin atom numaraları tek başlarına kompozit materyalin atom numarasını temsil edemezler. Alaşım veya bileşikler gibi kompozit materyaller için bu işlemler etkin atom numarası ile ilgilidirler. Dolayısıyla 3d geçiş metali alaşımları için etkin atom numaralarının bilinmesi önemlidir. Bu çalışmada alaşımların etkin atom numaraları ve elektron yoğunlukları kütle soğurma katsayılarının ölçülmesine dayalı bir yöntemle belirlenmiştir. Çalışma, alaşımların etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarını belirlemek için kütle soğurma katsayılarının kullanışlı ve duyarlı bir parametre olduğunu göstermektedir. Yine bu çalışmanın sonuçları farklı kompozisyonlardaki 3d geçiş metali alaşımlarının atom ve elektron sayılarının değişimi ile kütle soğurma katsayılarının nasıl değiştiğinin daha iyi anlaşılmasına sağlamaktadır. 3d geçiş metali alaşımları için kütle soğurma katsayısı, toplam ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarının belirlendiği böyle bir araştırma literatürde mevcut değildir.

KAYNAKLAR

- Abdel-Rahman M.A., Badawi E.A., Abdel-Hady Y.L., Kamel N., 2000, Effect of sample thickness on the measured mass attenuation coefficients of some compounds and elements for 59.54, 661.6 and 1332.5 keV gamma-rays. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 447 432–436.
- Angelone M., Bubbab T., Esposito A., 2001, Measurement of the mass attenuation coefficient for elemental materials in the range $6 \leq Z \leq 82$ using X-rays from 13 up to 50 keV. Applied Radiation and Isotopes, 55, 505–511.
- Arndt E., Brunner G., Hartmann E., 1982, $K\beta/K\alpha$ intensity ratios for x-ray production in 3d elements by photoionisation and electron capture. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 15, L887–L889.
- Baltaş H., Çelik S., Çevik U., Yanmaz E., 2007, Measurement of mass attenuation coefficients and effective atomic numbers for MgB_2 superconductor using X-ray energies. Radiation Measurements, 42, 55–60.
- Baltaş H., Çevik U., Tirasoglu E., Ertuğral B., Apaydın G., Kobya A.I., 2005, Mass attenuation coefficients of YBaCuO and BiPbSrCaCuO superconductors at 511, 661 and 1274 keV energies. Radiation Measurements, 39, 33–37.
- Basa D.K., Raj S., Padhi H.C., Polasik M., Pawlowski F., 2002, Studies on the valence electronic structure of Fe and Ni in $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alloys. PRAMANA Journal of Physics, 58, 783–786.
- Bauer G.E.W., Schneider J.R., Welter J.M., 1984, The experimental isotropic difference Compton profile of Cr and $\text{Fe}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}$. Physics Letters A, 100, (4), 207–210.
- Be M.M., Lepy M.C., Plagnard, J., Duchemin B., 1998, Measurement of Relative X-ray Intensity Ratios for Elements in the $22 \leq Z \leq 29$ Region. Applied Radiation and Isotopes, 49, 1367–1372.
- Berger M.J., Hubbell J.H., 1987, 1999, (XCOM) Photon cross section on a personal computer (versiyon 1.2), NBSIR 87, 3597, National Bureau of Standards, Gaithersburg, MD, USA; versiyon 3.1, <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/Text/>.
- Berggren K.F., Manninen S., Paakkari T., 1973, Electron momentum distribution in Titanium and the Renormalized-Free-Atom Model. Physical Review B, 8, (6), 2516–2518.
- Bhuinya C.R., Padhi H.C., 1993, Alloying effect on $K\beta$ -to- $K\alpha$ X-ray intensity ratios in $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ and $\text{Cr}_x\text{Ni}_{1-x}$ alloys studied γ -ray fluorescence and fast proton ionization. Physical Review A, 47, (6), 4885–4890.

- Bhuinya C.R., Padhi H.C., 1992, Alloying effect on the $K\beta/K\alpha$ intensity ratios of Ti, Cr and Ni. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 25, 5283–5287.
- Brunner G., Nagel M., Hartmann E., Arndt E., 1982, Chemical sensitivity of the $K\beta/K\alpha$ x-ray intensity ratio for 3d elements. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 15, 4517–4522.
- Büyükkasap E., Küçükönder A., Şahin Y., Erdoğan H., 1993, $K\beta/K\alpha$ intensity ratios following radioactive decay and photoionization. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 186, (6), 471–475.
- Campbell J.L., 2001, Non-monotonic behaviour of the $K\beta_2/K\beta_1$ x-ray intensity ratio in the atomic number region $40 \leq Z \leq 50$. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 34, 3543–3553.
- Carreras A., Stutz G., Castellano G., 2003, Measurement of K-line transition rates for Ti, V, Cr, Mn, Fe and Co using synchrotron radiation. *Radiation Physics and Chemistry*, 67, 703–706.
- Castellano G., Bonetto R., Trincavelli J., Vasconcellos M., Campos C., 2002, Optimization of K-shell intensity ratios in electron probe microanalysis. *X-Ray Spectrometry*, 31, 184–187.
- Çevik U., Baltas H., 2007, The mass attenuation coefficients and electron densities for BiPbSrCaCuO superconductor at different energies. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 256, 619–625.
- Çevik U., Baltas H., Celik A., Bacaksiz E., 2006, Determination of attenuation coefficients, thicknesses and effective atomic numbers for CuInSe₂ semiconductor. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 247 173–179.
- Cevik U., Kaya S., Ertugral B., Baltas H., Karabıdak S.M., 2007, K-shell X-ray fluorescence cross-sections and intensity ratios for some pure metals at 59.5 and 123.6 keV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 262, 165–170.
- Chang C.N., Chen C.T., Yen C.C., Wu Y.H., Su C.W., Chiou S.K., 1994, The vanadium $K\beta/K\alpha$ intensity ratios of some vanadium compounds. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 27, 5251–5256.
- Debertin K. and Hemler, R. G. 1988, *Gamma and X-Ray Spectrometry with Semiconductor Detectors*, Elsevier Science Publishers, 94–97, New York, U.S.A.
- Deluigi M., Tirao G., Stutz G., Cusatis C., Riveros J.A., 2006, Dependence with the oxidation state of X-ray transition energies, intensities and natural line widths of CrK β spectra. *Chemical Physics*, 325, 477–484.
- Demir, D., 2005. Atatürk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, Erzurum (Yayımlanmamış).
- Dhall B.B., Padhi H.C., 1994, Relative K x-ray intensities in some selected elements between Mn and Sb following ionization by 59,54keV γ -rays. *Physical Review A*, 50, (2), 1096–1100.

- Dyall K.G., Grant, I.P., Johnson C.T., Parpia F.A., Plummer E.P., 1989, GRASP: A general-purpose relativistic atomic structure program. *Computer Physics Communications*, 55, 425–456.
- El-Kateb A.H., Rizk R.A.M., Abdul-Kader A.M., 2000, *Annals of Nuclear Energy*, 27, 1333–1343.
- Ertuğral B., Apaydın G., Cevik U., Ertuğrul M., Kobya A.I., 2007, $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios for elements in the range $16 \leq Z \leq 92$ excited by 5.9, 59.5 and 123.6 keV photons. *Radiation Physics and Chemistry*, 76, 15–22.
- Ertuğrul M., Şimşek Ö., 2002, Measurement of $K\beta_2/K\beta_1$ and $K\beta_2/K\alpha_1$ relative intensities with ^{57}Co for heavy elements. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 35, 601–604.
- Ertuğrul M., Söğüt Ö., Şimşek Ö., Büyükkasap E., 2001, Measurement of $K\beta/K\alpha$ intensity ratios for elements in the range $22 \leq Z \leq 69$ at 59.5 keV. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 34, 909–914.
- Erzeneoğlu S., İçelli O., Gürbulak B., Ateş A., 2006, Measurement of mass attenuation coefficients for holmium doped and undoped layered semiconductors InSe at different energies and the validity of mixture rule for crystals around the absorption edge. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 102, 343–347.
- Franciosi A., Weaver H., Schmidt F.A., 1982, Electronic structure of nickel silicides Ni_2Si , NiSi , and NiSi_2 . *Physical Review B*, 26, (2), 546–553.
- Gerward L., 1981, X-ray attenuation coefficients and atomic photoelectric absorption cross sections silicon. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 14, 3389–3395.
- Gerward, L., Guilbert, N., Bjorn J.K., Levring, H., 2001, X-ray absorption in matter, Reengineering XCOM, *Radiation Physics and Chemistry*, 60, 23–24.
- Gowda, S., Krishnaveni, S., Gowda, R., 2005, Studies on effective atomic numbers and electron densities in amino acids and sugars in the energy range 30–1333 keV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B* 239, 361–369.
- Grant I.P., 1974, Gauge invariance and relativistic radiative transitions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 7, 1458–1475.
- Grant I.P., 1984, Relativistic atomic structure theory: Some recent work. *International Journal of Quantum Chemistry*, 25, 23–46.
- Grant I.P., McKenzie B.J., 1980, The transverse electron-electron interaction in atomic structure calculations. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 13, 2671–2681.
- Grant, I.P., McKenzie B.J., Norrington P.H., Mayers D.F., Pyper N.C., 1980, An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package. *Computer Physics Communications*, 21, 207–231.
- Gregory I.P., Moody D.E., 1975, The low temperature specific heat and magnetization of binary alloys of nickel with titanium, vanadium, chromium and manganese. *Journal of Physics F - Metal Physics*, 5, 36–44.

- Gürol A. 2008, Measurements of the K X-ray intensity ratios by using energy-dispersive X-ray fluorescence spectrometry. *Applied Radiation and Isotopes*, 66, 372–376.
- Hajivaliei M., Puri S, Garg M.L., Mehta D., Kumar A., Chamoli S.K., Avasthi D.K. , Mandal A. , Nandi T.K. , Singh K.P., Singh N., Govil I.M., 2000, K and L X-ray production cross sections and intensity ratios of rare-earth elements for proton impact in the energy range 20-25 MeV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 160, 203–215.
- Han I., and Demir L., 2009, Determination of mass attenuation coefficients, effective atomic and electron numbers for Cr, Fe and Ni alloys at different energies. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 267, 3–8.
- Han I., and Demir L., 2009, Mass attenuation coefficients, effective atomic and electron numbers of Ti and Ni alloys *Radiation Measurements*, 10.1016/j.radmeas.2009.03.010
- Han I., and Demir L., 2009, Mass attenuation coefficients, effective atomic numbers and electron densities of undoped and differently doped GaAs and InP crystals. *Annals of Nuclear Energy*, 10.1016/j.anucene.2009.03.015.
- Han I., Demir L., Şahin M., 2009, Determination of mass attenuation coefficients, effective atomic and electron numbers for some natural minerals. *Radiation Physics and Chemistry*, 10.1016/j.radphyschem.2009.03.077.
- Han I., Şahin M., Demir L., 2008, Angular variations of K and L X-ray fluorescence cross sections for some lanthanides. *Canadian Journal of Physics*, 86, (2), 361–367.
- Han I., Şahin M., Demir L., 2007, Measurement of K X-ray fluorescence cross-sections, fluorescence yields and intensity ratios for some elements in the atomic range $22 \leq Z \leq 68$. *Applied Radiation and Isotopes*, 65, (6), 669–675.
- Hata J., Grant I.P., 1983, The representation of higher-order relativistic corrections in the MCDF-EAL method. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 16, 3713–3725.
- Hine G.J., 1952, The effective atomic numbers of materials for various gamma interactions. *Physics Review*, 85, 725–737.
- Hölzer G., Fritsch M., Deutsch M., Härtwig J., Förster E., 1997, $K\alpha_{1,2}$ and $K\beta_{1,3}$ x-ray emission lines of 3d transition metals. *Physical Review A*, 56, (6), 4554–4568.
- Hubbell J.H., 1982, Photon mass attenuation and energy-absorption. *International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, 33, 1269–1290.
- Hubbell J.H., Seltzer S.M., 1995, Tables of X-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 keV to 20 MeV for elements $1 \leq Z \leq 92$ and 48 additional substances of dosimetric interest. National Institute of Standards and Physics Laboratory, NISTIR 5632.
- Hubbell J.H., Trehan, P.N., Singh N., Chand B., Mehta D., Garg M.L., Garg R.R., Singh S., Puri S., 1994, A Review, Bibliography and tabulation of K, L

- and higher atomic shell X-ray fluorescence yields, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 23, (2), 339–364.
- İcelli O., Erzeneoğlu S., Boncukcuoğlu R., 2008, Determination of molecular, atomic, electronic cross-sections and effective atomic number of some boron compounds and TSW. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 266, 3226–3230.
- İcelli O., Erzeneoğlu S., Gürbulak B., 2005, Mass attenuation coefficients for n-type InSe, InSe:Gd, InSe:Ho and InSe:Er single crystals. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 90, 399–407.
- Jackson D.F., Hawkes D.J., 1981, X-ray attenuation coefficients of elements and mixtures. *Physics Reports*, 70, 169–233.
- Jankowski K., and Polasik M., 1989, On the calculation of $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 22, 2369–2376.
- Jankowski K., Polasik M., 1989, On the calculation of $K\beta/K\alpha$ x-ray intensity ratios. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 22, 2369–2376.
- Kawai J., Ohta M., Konishi T., 2005, Chemical effects in high-resolution Nickel $K\alpha$ X-ray fluorescence spectra. *Analytical Sciences*, 21, 865–868.
- Kawai J., Suzuki C., Adachi H., Konishi T., Gohshi Y., 1994, Charge-transfer effect on the linewidth of Fe $K\alpha$ x-ray fluorescence spectra. *Physical Review B*, 50, (16), 348–354.
- Khanna A., Bhatti S.S., Singh K.J., Thind K.S., 1996, Gamma-ray attenuation coefficients in some heavy metal oxide borate glasses at 662 keV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 114, 217–220.
- Küçükönder A., Büyükkasap E., Yilmaz R., Şahin Y., 1999, Chemical Effects on the $K\beta/K\alpha$ Intensity Ratios in First-row Transition Element compounds. *Acta Physica Polonica A*, 95, 243–250.
- Küçükönder A., Şahin Y., Büyükkasap E., Kobya A., 1993, Chemical effects on $K\beta/K\alpha$ x-ray intensity ratios in coordination compounds of some 3d elements. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 26, 101–105.
- Küçükönder A., Söğüt Ö., Sümbül F., Büyükkasap E., 2006, $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios in calcium and potassium compounds. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 270, (3) 695–698.
- Küçükönder A., Söğüt, O., Büyükkasap, E., Küçükönder E., Cam H., 2003, $K\beta/K\alpha$ x-ray intensity ratios for bromine and iodine compounds. *X-Ray Spectrometry*, 32, 60–63.
- Küçükönder A., Şahin Y., Büyükkasap E., 1992, Dependence of the $K\beta/K\alpha$ intensity ratio on the oxidation state. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 170, (1), 125–132.
- Kumar T.K., Reddy K.V., 1997, Effective atomic numbers for materials of dosimetric interest. *Radiation Physics and Chemistry*, 50, 545–553

- Kurucu, Y., 1990, Atatürk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, Erzurum (Yayınlanmamış).
- Lasser R., Lengler B., Arnold G., 1980, Compton profiles of FeTi and β -phase FeTi hydride Physical Review B, 22, 663–669.
- Manjunathaguru V., Umesh T.K., 2006, Effective atomic numbers and electron densities of some biologically important compounds containing H, C, N and O in the energy range 145–1330 keV. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 39, 3969–3981.
- Manninen S., Paakkari T., 1976, Bonding in titanium carbide. I. Experimental electron momentum distributions in polycrystalline Ti and TiC. Journal of Physics C: Solid State Physics, 9, 95–101.
- Manohara S.R., Hanagodimath S.M., 2007, Studies on effective atomic numbers and electron densities of essential amino acids in the energy range 1keV–100GeV. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B 258, 321–328.
- McKenzie B.J., Grant, I.P., Norrington P.H., 1980, A program to calculate transverse Breit and QED corrections to energy levels in a multiconfiguration Dirac-Fock environment. Computer Physics Communications, 21, 233–246.
- Midgley S.M., 2005, Measurements of the X-ray linear attenuation coefficient for low atomic number materials at energies 32, 66 and 140 keV. Radiation Physics and Chemistry, 72, 525–535.
- Millar R.H., Greening J.R., 1974, Experimental x ray mass attenuation coefficients for materials of low atomic number in the energy range 4 to 25 keV. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 7, 2332–2344.
- Mukoyama T., Taniguchi K., Adachi H., 1986, Chemical effect on $K\beta/K\alpha$ x-ray intensity ratios. Physical Review B, 34, (6), 3710–2716.
- Mukoyama T., Taniguchi K., Adachi H., 2000, Variation of $K\beta/K\alpha$ x-ray intensity ratios in 3d elements. X-Ray Spectrometry, 2000, 29, 426–429.
- Murty R.C., 1965, Effective atomic numbers of heterogeneous materials. Nature, 207, 398–399.
- Murty V.R.K., 2004, Effective atomic numbers for W/Cu alloy for total photon attenuation. Radiation Physics and Chemistry, 71, 667–669.
- Murty, V.R.K., Winkoun, D.P., Devan, K.R.S., 2000, Effective atomic number for W/Cu alloy using transmission experiments. Applied Radiation and Isotopes, 53 945–948.
- Paakkari T., Halonen V., 1978, Experimental Compton Profiles for Some Alkali Halides. Physica Scripta, 17, 433–437.
- Paakkari T., Manninen S., Berggren K.F., 1975, Compton profiles of transition metals: V, Cr, Fe, Ni, Cu and Zn. Physica Fennica, 10, (4), 207–214.
- Padhi H.C, Bhuinya CR., Dhal B.B. 1993, Influence of solid-state effects on the $K\beta/K\alpha$ intensity ratios of Ti and V in TiB₂, VB₂ and VN. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 26, 4465–4469.

- Pal D., Padhi H.C., 1992, Compton Profiles of $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$ Alloys. *Philosophical Magazine B*, 65, 553–558.
- Pal D., Padhi H.C., 1993, Compton Profile Studies of $\text{Cr}_x\text{Ni}_{1-x}$ Alloys. *Physica Status Solidi B*, 175, 507–512.
- Papaconstantopoulos D.A., 1986, *Handbook of Band Structure Elemental Solids*, Plenum Press, New York.
- Parthasaradhi K., Esposito A., Pelliccioni M., 1992, Photon attenuation coefficients in tissue equivalent compounds. *International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, 43, 1481–1484.
- Pawłowski F., Polasik M., Raj S., Padhi H.C., Basa D.K., 2002, Valence electronic structure of Ti, Cr, Fe and Co in some alloys from $K\beta$ -to- $K\alpha$ X-ray intensity ratio studies. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 195, 367–373.
- Perujo A., Maxwell J.A., Teesdale W.J., Campbell J.L., 1987, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 20, 4973–4982.
- Polasik M., 1998, Influence of changes in the valence electronic configuration on the $K\beta$ -to- $K\alpha$ x-ray intensity ratios of 3d transition metals. *Physical Review A*, 58, (3), 1840–1845.
- Porikli S., Demir D., Kurucu Y., 2008, Variation of $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratio and lineshape with the effects of external magnetic field and chemical combination. *The European Physical Journal D*, 47, 315–323.
- Prinz G.A., 1995, Spin-Polarized Transport. *Physics Today*, 48, 58–61.
- Prinz G.A., 1998, Magnetoelectronics. *Science*, 282, 1660–1663.
- Raghavaiah C.V., Rao N.V., Murty G.S.K., Rao M.V.S.C., 1992, $K\beta/K\alpha$ ratios and chemical effects in partially filled 3d-shell elements. *X-Ray Spectrometry*, 21, 239–243.
- Raj S., Padhi H.C., Polasik M., 1998, Influence of chemical effect on the $K\beta$ -to- $K\alpha$ X-ray intensity ratios of Ti, V, Cr and Fe in TiC, VC, CrB, CrB₂ and FeB. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 145, 485–491.
- Raj S., Dhal B.B., Padhi H.C., Polasik M., 1998, Influence of solid-state effects on the $K\beta$ -to- $K\alpha$ x-ray intensity ratios of Ni and Cu in various silicide compounds. *Physical Review B*, 58, (14), 9025–9029.
- Raj S., Padhi H.C., Polasik M., Basa D.K., 1999, Charge transfer studies in V_3Si , Cr_3Si and FeSi . *Solid State Communications*, 110, 275–279.
- Raj S., Padhi H.C., Basa D.K., Polasik M., Pawłowski F., 1999, $K\beta$ -to- $K\alpha$ X-ray intensity ratio studies on the changes of valence electronic structures of Ti, V, Cr, and Co in their disilicide compounds. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 152, 417–424.
- Raj S., Padhi H.C., Palit P., Basa D.K., Polasik M., Pawłowski F., 2002, Relative K x-ray intensity studies of the valence electronic structure of 3d transition metals. *Physical Review B*, 65, 193105, 1–3.

- Raj S., Padhi H.C., Polasik M., 1999, Influence of alloying effect on $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios of V and Ni in V_xNi_{1-x} alloys. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, 155, 143–152.
- Raj S., Padhi H.C., Polasik M., 2000, Influence of chemical effect on the $K\beta$ -to- $K\alpha$ x-ray intensity ratios of Cr, Mn and Co in CrSe, MnSe, MnS and CoS. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, 160, 443–448.
- Raj S., Padhi H.C., Polasik M., Pawłowski F., Basa D.K., 2001, $K\beta$ -to- $K\alpha$ x-ray intensity ratio studies of the valence electronic structure of Fe and Ni in Fe_xNi_{1-x} alloys. Physical Review B, 63, 073109, 1–4.
- Raj S., Padhi H.C., Powlowski F., Basa D.K., 2000, Valence electronic structure of Fe and Ni in Fe_xNi_{1-x} alloys from relative K X-ray intensity studies. Solid State Communications, 116, 563–567.
- Raj S., Padhi H.C., Raychaudhury P., Nigam A.K., Pinto R., Polasik M., Pawlowski F., Basa D.K., 2001, Valence electronic structure of Mn in undoped and doped lanthanum manganites from relative K X-ray intensity studies. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, 174, 344–350.
- Rao K.R., Krishna Y.R., Venkateswarlu P., Rao K.B., Rao V.S., Raju G.J.N., Reddy S.B., 2001, Measurement of K X-ray intensity ratios in Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu and Zn employing carbon and nitrogen projectiles - VTT method. The European Physical Journal D, 15, 283–286.
- Rebohle L., Lehnert U., Zschornack G., 1996, $K\beta/K\alpha$ intensities ratios and chemical effects of some 3d elements. X-Ray Spectrometry, 25, 295–300.
- Rettschlag M., Berndt R., Mortreau P., 2007, Measurement of photon mass attenuation coefficients of plutonium from 60 to 2615 keV. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 581, 765–771.
- Salem S. I., 1973, in Proceedings of the International Conference on Inner Shell Ionization Phenomena and Future Applications, edited by Fink R.W., Manson S.T., Palms J.M., Rao P.V., USAEC, Oak Ridge, Tenn., 285.
- Salem S.I., Panossian S.L., Kreuse R.A., 1974, Experimental K and L relative x-ray emission rates. Atomic Data Nuclear Data Tables, 14, 91–109.
- Sarode P.R., 1993, Effects of chemical combination on X-ray $K\alpha$ emission spectra of chromium. X-Ray Spectrometry, 22, 138–144.
- Sawhney K.J.S., Lodha G.S., Kataria S.K., Kulshreshtha S.K., 2000, Chemical effects in x-ray fluorescence by study of Fe, Pt and U compounds. X-Ray Spectrometry, 29, 173–177.
- Scofield, J.H., 1973, Theoretical photoionization cross-section from 1-1500 keV, Lawrence Livermore Laboratory Report No. UCRL-51326.
- Scofield, J.H., 1974, Relativistic Hartree-Slater values for K and L X-ray emission rates Lawrence Livermore Laboratory Report No. UCRL-94550 Atomic Data and Nuclear Data Tables, 14, 121–137.

- Shivaramu R., Vijayakumar R., Rajasekaran L., Ramamurthy N., 2001, Effective atomic numbers for photon energy absorption of some low-Z substances of dosimetric interest. *Radiation Physics and Chemistry*, 62, 371–377.
- Singh K Singh H Sharma V Nathuram R Khanna A Kumar R Bhatti S S and Sahota H S 2002, Gamma-ray attenuation coefficients in bismuth borate glasses. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 194, 1–6.
- Söğüt Ö., Büyükkasap E., Erdoğan H., 2002, Chemical-effect variation of $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios in 3d elements. *Radiation Physics and Chemistry*, 64, 343–348
- Söğüt Ö., Seven S., Baydaş E., Büyükkasap E., Küçükönder A., 2001, Chemical effects on $K\beta/K\alpha$ X-ray intensity ratios of Mo, Ag, Cd, Ba, La, Ce compounds and total mass attenuation coefficients of Fe and Cu. *Spectrochimica Acta Part B*, 56, 1367–1374.
- Söğüt Ö., Büyükkasap E., Küçükönder A., Ertuğul M., Şimşek Ö., 1995, Alloying Effect on $K\beta/K\alpha$ Intensity Ratios in $\text{Cr}_x\text{Ni}_{1-x}$ and $\text{Cr}_x\text{Al}_{1-x}$ Alloys. *Applied Spectroscopy Reviews*, 30, (3), 175 – 180.
- Tran C.Q., Chantler C.T., Barnea Z., de Jonge M.D., Dhal B.B., Chung C.T.Y., Paterson D, Wang J., 2005, Measurement of the x-ray mass attenuation coefficient of silver using the x-ray-extended range technique. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 38, 89–107.
- Turgut Ü., Büyükkasap E., Şimşek O., Ertuğrul M., 2005, X-ray attenuation coefficients of Fe compounds in the K-edge region at different energies and the validity of the mixture rule. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 92, 143–151.
- Turgut Ü., Şimşek O., Büyükkasap E., Ertuğrul M., 2004, X-ray attenuation coefficient measurements for photon energies 4.508–13.375 keV in Cu, Cr and their compounds and the validity of the mixture rule. *Analytica Chimica Acta*, 515, 349–352.
- Turgut Ü., Şimşek O., Büyükkasap E., Ertuğrul M., 2002, X-Ray attenuation coefficients at different energies and the validity of the mixture rule for compounds around the absorption edge. *Spectrochimica Acta Part B* 57, 261–266.
- Wang D.C., Ping L.A., Yang H., 1995, Measurement of the mass attenuation coefficients for SiH_4 and Si. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 95, 161–165.

ÖZGEÇMİŞ

1980 yılında Erzurum’da doğan İbrahim HAN orta ve lise öğrenimini Erzurum Atatürk Lisesinde tamamladı. 1998 yılında girdiği Atatürk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünden 2002 yılında mezun oldu. Aynı yıl Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü’nde Atom ve Molekül Fiziği Bilim Dalı’nda Yüksek Lisans’a başladı. Yüksek lisansını karakteristik X-ışınlarının açısal dağılımları üzerine yaptığı “Atom numarası $78 \leq Z \leq 92$ Aralığındaki Bazı Elementlerin L_I , L_{α} , L_{β} , L_{γ} X-ışını ve Compton Saçılma Diferansiyel Tesir Kesitlerinin Ölçümü” adlı tezle 2005 yılında sonuçlandırdı. Aynı yıl yine aynı bilim dalında doktora çalışmalarına başladı. Doktora çalışmasını “Geçiş Metallerinin Valens Elektron Yapılarının X-ışını Şiddet Oranları vasıtasıyla Belirlenmesi, X-ışını Şiddet Oranlarının Tavlama Sıcaklığına Bağlı Davranışlarının İncelenmesi, Alaşımlar için Etkin Atom Numaraları ve Elektron Yoğunluklarının Tayini” isimli tezle Nisan 2009’da tamamladı. 2005-2009 yılları arasında Atatürk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde Araştırma Görevlisi olarak çalışan İbrahim HAN TÜBİTAK tarafından yurt içi doktora bursu ile ödüllendirilmiştir.