



**BAZI GAZLARIN COMPTON
PROFİLLERİNE BASINÇ ETKİSİ**

Erdem ŞAKAR

**Doktora Tezi
Fizik Anabilim Dalı
Genel Fizik Bilim Dalı
Prof. Dr. Ali GÜROL
2017
Her hakkı saklıdır**

**ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA TEZİ

BAZI GAZLARIN COMPTON PROFİLLERİNE BASINÇ ETKİSİ

Erdem ŞAKAR

**FİZİK ANABİLİM DALI
Genel Fizik Bilim Dalı**

**ERZURUM
2017**

Her Hakkı Saklıdır



T.C.
ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü



TEZ ONAY FORMU

BAZI GAZLARIN COMPTON PROFİLE'LERİNE BASINÇ ETKİSİ

Prof. Dr. Ali GÜROL danışmanlığında, Erdem ŞAKAR tarafından hazırlanan bu çalışma, 12/06/2017 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Genel Fizik Bilim Dalı'nda Doktora tezi olarak **oybirliği / oy çokluğu (.../...) ile kabul edilmiştir.**

Başkan: Prof. Dr. Telhat ÖZDOĞAN

İmza :

Üye : Prof. Dr. Ali GÜROL

İmza :

Üye : Prof. Dr. Demet YILMAZ

İmza :

Üye : Prof. Dr. Mustafa BÖYÜKATA

İmza :

Üye : Prof. Dr. Elif BOYDAŞ

İmza :

Yukarıdaki sonuç;

Enstitü Yönetim Kurulu'nun **13.07/2017** tarih ve **28/.../34** nolu kararı ile onaylanmıştır.

Prof. Dr. Caviz KAZAZ
Enstitü Müdürü

Bu çalışma Atatürk Üniversitesi BAP projeleri kapsamında desteklenmiştir.
Proje No: PRJ2015/090

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

ÖZET

Doktora Tezi

BAZI GAZLARIN COMPTON PROFİLLERİNE BASINÇ ETKİSİ

Erdem ŞAKAR

Atatürk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı
Genel Fizik Bilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ali GÜROL

Yüksek enerjili fotonların, atom veya moleküllerle yapmış olduğu inelastik çarpışma neticesince, spektrumlarda meydana gelen Doppler genişlemesinin (Compton profil) ölçülmesi, bu maddelerin elektron momentum dağılımlarının belirlenmesi için oldukça önemlidir. Literatürde Compton profil ile ilgili olarak çok sayıda çalışma bulunmasına rağmen, maddelerin elektronik yapılarına basıncın etkisinin olduğunu gösteren çok az sayıda çalışma mevcuttur. Özellikle, gazların elektron momentum dağılımlarının basınca bağlı değişimi ile ilgili herhangi bir çalışma bulunmamaktadır. Bu çalışmada farklı basınçlarda He, Ar, O₂, N₂ ve CO₂ gazlarının Compton profil ölçümleri 5 Ci'lik ²⁴¹Am radyoizotop kaynak ve HPGe dedektöre sahip bir Compton profil spektrometresi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Deney sonuçlarımız He hariç diğer gazların Compton profillerinin 1,0 bar basınçta ölçülen değerlere göre artan basınç ile değiştiğini göstermektedir.

2017, 96 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Compton saçılması, Compton profil, Basınç, Gazlar, Compton profil spektrometreleri

ABSTRACT

Ph. D. Thesis

PRESSURE EFFECT ON THE COMPTON PROFILE OF THE SOME GASES

Erdem ŞAKAR

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

Supervisor: Prof. Dr. Ali GÜROL

As a result of inelastic collisions of high energy photons with atoms or molecules, the measurements of the Doppler expansion (Compton profile) in the spectra is very important to determine electron momentum distributions of those materials. Although there are a large number of studies in the literature on Compton profile, there are only a few studies demonstrating the effect of the pressure on the electronic structures of matters. Especially, there are no studies related to the pressure-dependent change of electron momentum distributions of gases. In this study, Compton profile measurements of He, Ar, O₂, N₂ and CO₂ gases at different pressures were carried out using a Compton profile Spectrometer having a 5 Ci ²⁴¹Am radioisotope source and HPGe detector. Our experimental results show that the Compton profiles of gases except for He change with increasing pressure relative to the values measured at 1.0 bar pressure.

2017, 96 Pages

Keywords: Compton scattering, Compton profile, Pressure, Gases, Compton profile spectrometers.

TEŞEKKÜR

Doktora tezi olarak sunduğum bu çalışmanın planlanması ve yürütülmesinde bilgi ve tecrübeleriyle her zaman yanımda olan çok kıymetli danışman hocam Sayın Prof. Dr. Ali GÜROL'a en içten şükranlarımı sunarım.

Çalışmalarımı gerçekleştirdiğim laboratuvarı bölümümüze hibe eden sayın emekli Prof. Dr. Dr. Wolf WEYRICH'e, bu laboratuvarın kurulmasında Sayın Prof. Dr. Ali GÜROL ile birlikte emeği geçen değerli hocalarım Sayın Prof. Dr. Yusuf ŞAHİN'e ve Sayın Prof. Dr. Demet YILMAZ'a teşekkür ederim.

Doktora çalışmalarım sürecinde yoğun teşvik ve destekleriyle her zaman yanımda olan kıymetli eşim Sayın Betül CEVİZ ŞAKAR'a ve aileme teşekkürlerimi sunarım.

Erdem ŞAKAR
Haziran 2017

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	xi
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	9
2.1. Elektromanyetik dalganın madde ile etkileşmesi	9
2.1.1. Fotoelektrik olay	10
2.1.2. Compton saçılması	10
2.1.3. Çift oluşumu	12
2.2. Tesir kesiti	14
2.2.1. Koherent saçılma diferansiyel tesir kesiti	15
2.2.2. İnkoherent saçılma diferansiyel tesir kesiti	15
2.2.3. İkinci dereceden diferansiyel tesir kesiti ve Compton saçılmasının teorisi	17
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	28
3.1. Deneysel yöntem	28
3.1.1. Kaynaklar	28
3.2. Dedektörler	30
3.2.1. Yarıiletken dedektörler	30
3.3. Zırlama, kolimatörler ve deney geometrisi	32
3.4. Elektronik	35
3.4.1. Sayma sistemi	35
3.4.2. Yüksek voltaj güç kaynağı	36
3.4.3. Ön yükseltici	36
3.4.4. Yükseltici	36
3.4.5. Analog dijital dönüştürücü (ADC)	37
3.4.6. Çok kanallı analizör (MCA) ve kalibrasyon	37

3.5. Numuneler	38
3.6. Compton profilin deneysel olarak elde edilmesi	41
3.7. Hata analizi	43
3.7.1. Boş ölçüm hatası	44
3.7.2. Lineerlikten sapmadan kaynaklanan hata	44
3.7.3. Skala hatası	44
3.7.4. Kayma hatası	45
3.7.5. Dekonvülyasyon hatası	45
3.8. Yüzde değişim hesabı	45
4. ARAŞTIRMA BULGULARI	46
4.1. Farklı basınçlarda He, N ₂ , O ₂ , Ar ve CO ₂ gazlarının Compton profil ölçümleri	46
4.1.1. He gazının Compton profil ölçümleri	48
4.1.3. N ₂ gazının Compton profil ölçümleri	59
4.1.4. O ₂ gazının Compton profil ölçümleri	66
4.1.5. CO ₂ gazının Compton profil ölçümleri	73
4.2. İstatistik hatalar	80
4.3. Hata analiz sonuçları	83
5. TARTIŞMA ve SONUÇ	84
KAYNAKLAR	94
ÖZGEÇMİŞ	97

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

A	Numunenin yüzey alanı
a	İç kabuk orbital yarıçapı
a	Van der Waals sabiti
$\text{\AA}$	Angstrom
$A(w)$	Numune öz soğurma düzeltmesi
B	Spin faktörü
B_e	Bağlanma enerjisi
$B(w)$	Boş sayım
c	Işık hızı
C_i	Curie
$d\Omega$	Diferansiyel katı açısı
$d\sigma_{coh}/d\Omega$	Koherent saçılma tesir kesiti
$d\sigma_T(\varphi)/d\Omega$	Thomson saçılma tesir kesiti
$d\sigma_{KN}/d\Omega$	Klein-Nishina tesir kesiti
$d\sigma_{incoh}/d\Omega$	İnelastik saçılma tesir kesiti
$d\sigma/d\Omega$	Diferansiyel tesir kesiti
$d^2\sigma/d\Omega dw$	İkinci mertebe diferansiyel tesir kesiti
E	Enerji
E_i	Taban durum enerjisi
E_f	Uyarılmış durum enerjisi
E_γ	Gama ışını enerjisi
E_γ'	Saçılan fotonların enerjisi
e	Elektron yükü
E_{BO}	Orbital bağlanma enerjisi

E_0	Sistemin karakteristik enerjisi
F	Fano faktörü
$F(q, Z)$	Atomik form faktörü
$G(w)$	Verim faktörü
h	Planck sabiti
$I(p)$	Compton profil şiddet dağılımı
$J(q)$	Compton profil
$J'(q)$	Düzeltilmemiş Compton profil
j	Sistemin tüm saçıcı parçacıklarının sayısı
K_k	Kritik sıcaklık
$\vec{k}_1$	Gelen fotonun dalga vektörü
$\vec{k}_2$	Saçılan fotonun dalga vektörü
m	Kütle
m_0	Elektronun durgun kütlesi
m_e	Elektronun hareketli kütlesi
$M(w)$	Ölçülen spektrum
N	Kristalde oluşturulan elektron-hol çifti sayısı
n_m	Madde miktarı
n_{atom}	Maddenin birim hacmindeki atom sayısı
N_i	Madde üzerine gelen foton sayısı
$n(p)$	Compton profil olasılık dağılımı (Elektron momentum dağılımı)
N_s	Madde ile etkileşime giren parçacık sayısı
$n_{\vec{p}}$	Bir parçacığın $\vec{p}$ momentumuna sahip olma ihtimaliyeti
$n_2(\vec{r}, \vec{r}', t)$	Zamana bağlı iki parçacık yoğunluk korelasyon fonksiyonu
p^b	Basınç
$\vec{p}$	Momentum
P_1	Gelen fotonun ilk momentumu

P_2	Saçılan fotonun momentumu
$\vec{r}$	Uzaysal ilk konum
R	Gaz sabiti
$\vec{r'}$	Uzaysal son konum
r_c	Parçacıklar arası mesafe
r_0	Klasik elektron yarıçapı
$R(q, \sigma)$	Hata analizi çözünürlük fonksiyonu
$R(w)$	Dedektör çözünürlük fonksiyonu
$S(k, w)$	Dinamik saçılma fonksiyonu
$S(q, Z)$	İnelastik saçılma fonksiyonu
T_s	Sıcaklık
t	Numune kalınlığı
T	Geri tepen elektronların kinetik enerjisi
T_{e^-}	Çift oluşumunda ortaya çıkan elektronun enerjisi
T_{e^+}	Çift oluşumunda ortaya çıkan pozitronun enerjisi
q_g	Momentumun geri aktarılma olasılığı
q	Skaler momentum değişeni
V_h	Hacim
w	Hedef malzemeye aktarılan enerji
w_1	Gelen foton enerjisi
w_2	Saçılan foton enerjisi
w_p	Plasma frekansı
w_{ph}	Fonon frekansı
Z	Atom numarası
$\rho(\vec{p})$	Elektronun momentum yoğunluğu
$FWHM$	Yarı yükseklikteki tam genişlik
$X(w)$	Compton tesir kesiti
η_1	Numune yüzeyiyle gelen fotonlar arasındaki açı

η_2	Numune yüzeyiyle saçılan fotonlar arasındaki açı
*	Konvülyasyon
σ	Genişlik
δ	Rastgele hata
ε	Hata analizi için tanımlanan değişken
ΔE	Enerji farkı
ν	Çizgisel frekans
λ	Dalgaboyu
φ	Saçılma açısı
λ_c	Compton dalgaboyu
λ_c	Uzaysal düzensizlik
$\langle \rangle$	Yoğunluk momentum operatörünün temel durum beklenen değeri
$ i\rangle$	Temel durum
$ f\rangle$	Son durum
$\psi(\vec{r})$	Konum uzayındaki dalga fonksiyonu
$\chi(\vec{p})$	Momentum uzayındaki dalga fonksiyonu
σ_{tk}	Tesir kesiti
$\sigma_{toplaml}$	Toplam tesir kesiti
$\sigma_{fotoelektrik}$	Fotoelektrik tesir kesiti
$\sigma_{elastik}$	Elastik saçılma tesir kesiti
$\sigma_{inelastik}$	İnelastik saçılma tesir kesiti
$\sigma_{çift}$	Çift oluşumu tesir kesiti

Kısaltmalar

ADC	Analog dijital dönüştürücü
CP	Compton profil
DDCS	İkinci mertebe diferansiyel tesir kesiti
eV	Elektronvolt
HV	Yüksek voltaj

GPa	Gigapaskal
keV	Kiloelektronvolt
LDA	Yerel yoğunluk yaklaşımı
MCA	Çok kanallı analizör
MeV	Mega elektronvolt
NIM	Nükleer cihaz modülü
SEM	Taramalı elektron mikroskobu
SSRF	Shanghai Synchrotron Radiation Facility
TEM	Transmisyon (geçirmeli) elektron mikroskobu
VEX	Değişken enerjili X-ışını kaynağı
XPS	X-ışını foto elektron spektroskopisi
XRD	X-ışını kırınımı
XRFA	X-ışını flöresans analizi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Compton saçılmasının klasik gösterimi.....	10
Şekil 2.2. Elektromanyetik dalganın madde ile etkileşmesinin enerji ve atom numarasına bağlı olarak değişimi.....	12
Şekil 2.3. K-N tesir kesitinin saçılma açısına bağlılığı.....	16
Şekil 2.4. Hareketli elektron ile foton arasında meydana gelen Compton saçılması.....	18
Şekil 2.5. Uyarma spektrumlarının şematik gösterimi.....	26
Şekil 2.6. Genel bir Compton spektrumu	26
Şekil 3.1. Katıhal dedektörünün şematik görünümü.....	31
Şekil 3.2. Deney sisteminin içyapısının şematik görünümü.....	33
Şekil 3.3. Deneylerde kullanılan gaz hücresi.....	34
Şekil 3.4. Sayma sistemi	35
Şekil 3.5. VEX kaynak şematik görünümü.....	38
Şekil 4.1. 5 bar basınçta ölçülen CO ₂ gazının genel spektrumu	47
Şekil 4.2. 1,0 bar'da ölçülmüş He gazının Compton ve koherent pikleri.....	48
Şekil 4.3. Helyum gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	49
Şekil 4.4. Helyum gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	49
Şekil 4.5. Helyum gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	50
Şekil 4.6. Helyum gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	50
Şekil 4.7. He gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması.....	51
Şekil 4.8. He gazının Compton profillerinin basınçla bağlı değişimleri.....	51
Şekil 4.9. 1,0 bar'da ölçülmüş Ar gazının Compton ve koherent pikleri	53
Şekil 4.10. Argon gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	54
Şekil 4.11. Argon gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	54
Şekil 4.12. Argon gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	55
Şekil 4.13. Argon gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	55
Şekil 4.14. Argon gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	56
Şekil 4.15. Ar gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması.....	57

Şekil 4.16. Ar gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri	57
Şekil 4.17. N ₂ molekülünün Lewis yapısı.....	59
Şekil 4.18. N ₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı	59
Şekil 4.19. 1,0 bar'da ölçülmüş N ₂ gazının Compton ve koherent pikleri	60
Şekil 4.20. N ₂ gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	61
Şekil 4.21. N ₂ gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	61
Şekil 4.22. N ₂ gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	62
Şekil 4.23. N ₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	62
Şekil 4.24. N ₂ gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	63
Şekil 4.25. N ₂ gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması	64
Şekil 4.26. N ₂ gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri	64
Şekil 4.27. O ₂ molekülünün Lewis yapısı.....	66
Şekil 4.28. O ₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı	66
Şekil 4.29. 1,0 bar'da ölçülmüş O ₂ gazının Compton ve koherent pikleri	67
Şekil 4.30. O ₂ gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	68
Şekil 4.31. O ₂ gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	68
Şekil 4.32. O ₂ gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	69
Şekil 4.33. O ₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	69
Şekil 4.34. O ₂ gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri	70
Şekil 4.35. O ₂ gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması	71
Şekil 4.36. O ₂ gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri	71
Şekil 4.37. CO ₂ molekülünün Lewis yapısı	73
Şekil 4.38. CO ₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı	73
Şekil 4.39. 1,0 bar'da ölçülmüş CO ₂ gazının Compton ve koherent pikleri.....	74
Şekil 4.40. CO ₂ gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	75
Şekil 4.41. CO ₂ gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	75
Şekil 4.42. CO ₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	76
Şekil 4.43. CO ₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	76
Şekil 4.44. CO ₂ gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri.....	77

Şekil 4.45. CO ₂ gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması	78
Şekil 4.46. CO ₂ gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri	78
Şekil 4.47. Sabit basınçta ölçüm süresi ile Compton pik alan değişimi	80
Şekil 4.48. Numune hazırlamadan kaynaklanan kullanıcı kaynaklı hataların tespiti	82



ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. Fiziksel niceliklerin SI* ve atomik birimlerdeki değerleri	18
Çizelge 3.1. VEX kaynak hedef element enerjileri.....	38
Çizelge 3.2. Tez çalışmasında kullanılan gazların Van der Waals sabitleri	40
Çizelge 3.3. Tez çalışmasında kullanılan gazların kritik sıcaklık ve kritik basınç değerleri.....	41
Çizelge 3.4 Farklı basınçlarda gaz hücresinde bulunan tanecik sayıları	41
Çizelge 4.1. Farklı basınçlarda helyum gazının ölçülmüş Compton profil değerleri	52
Çizelge 4.2. Farklı basınçlarda argon gazının ölçülmüş Compton profil değerleri	58
Çizelge 4.3. Farklı basınçlarda N ₂ gazının ölçülmüş Compton profil değerleri.....	65
Çizelge 4.4. Farklı basınçlarda O ₂ gazının ölçülmüş Compton profil değerleri.....	72
Çizelge 4.5. Farklı basınçlarda CO ₂ gazının ölçülmüş Compton profil değerleri	79
Çizelge 4.6. Ölçüm süresi ve alan değerleri	81
Çizelge 4.7. Numune hazırlamadaki hataların tespiti için kullanılan veriler.....	82
Çizelge 4.8. $q = 0$ 'da % 1'lik hataya neden olan β, α, μ ve π katsayıları.....	83

1. GİRİŞ

X ve γ -ışınlarının, serbest ve durgun kabul edilen elektronlardan inelastik saçılması Compton saçılması olarak adlandırılır. Bu saçılma sonucunda elektron, belirli bir kinetik enerjiyle hareket eder ve foton enerji kaybederek saçılmaya uğrar. Klasik olarak serbest ve durgun olarak kabul edilen elektronlar normal koşullar altında serbest olmayıp bir atoma bağlıdırlar. Ancak birkaç keV veya daha yüksek enerjili fotonlar madde üzerine geldiğinde, eV mertebesinde bağlanma enerjisine sahip olan elektronları koparabilir. Bu durumda gelen fotonun enerjisi, atomlardaki elektronların bağlanma enerjilerinden çok büyük olduğu için, atomlardaki bu elektronlar, serbest elektron olarak kabul edilmektedirler. Ayrıca Compton saçılması, durgun elektronlardan saçılma olayı olarak açıklansa da elektronlar gerçekte durgun olamazlar. İmpuls yaklaşımına göre, foton-elektron arasında meydana gelen bu olayda etkileşim süresi $\sim 10^{-18}$ s'dir. Bu da elektronların çarpışma sürecinde konum değişiminin ihmal edilebilecek kadar küçük olduğunu, dolayısıyla durgun kabul edilebileceğini söylemektedir. Ancak çarpışma öncesi ve sonrasında elektronlar mutlak bir harekete sahiptirler. Elektronların hareketli olmaları, çarpışma sonucu elde edilen spektrumlarda, Doppler etkisinden ötürü, bir çizgi genişlemesine sebep olur. Bu genişlemiş çizgi şekli Compton profil (CP) olarak adlandırılmaktadır.

Compton saçılması ile elde edilen spektrumlar, doğrudan hedef malzemelerin birer karakteristikleridir. Bir malzemenin Compton spektrumu, onun tüm elektronik özelliklerini yani elektron yoğunluk bilgilerini içermektedir. Hedef malzeme içinde farklı uzaysal konumlarda yer alan elektronlar, uyarıcı fotonları farklı açılarda saçarlar. Numune üzerine gönderilen bu tek enerjili fotonlar, numune elektronlarının tamamıyla etkileşirler. Bu etkileşimlerin her birisi, Compton spektrumunda rölatif bir dağılıma neden olur ki bu dağılım, numune elektronlarının momentum yoğunluklarına doğrudan bağlıdır.

Bir maddenin kristal yapısının ve elektronik özelliklerinin belirlenmesi için madde, foton ya da yüklü ağır parçacıklarla (elektron, proton veya nötron gibi) etkileşmeler sonuçlarının analiz edilmesi gerekmektedir. Bu etkileşimler, madde üzerinde tahribat bırakmaması ve maddenin yapısı üzerinde değişiklik yapmamasından dolayı genellikle yüksek enerjili fotonlar kullanılarak yapılmaktadır.

Son yıllarda teknolojik gelişmelerle birlikte, birçok alanda yeni malzemeler geliştirilmiştir. Bunun sonucu olarak bu malzemelerin detaylı kristal yapısını ve elektronik özelliklerinin ortaya çıkarılacağı karakterizasyon işlemleri yapılmalıdır. Yüksek enerjili fotonlar karakterizasyon sürecinde çok önemli bir yere sahiptirler. X-ışını kırınımı (XRD), x-ışını foto-elektron spektroskopisi (XPS) ve x-ışını flöresans analizi (XRFA) gibi yaygın metotlar doğrudan X-ışınlarını kullanırken, taramalı elektron mikroskobu (SEM) ve tünellemeli elektron mikroskobu (TEM) gibi yüksek maliyetli cihazlarda doğrudan elektron demetleri ile meydana gelen etkileşimleri kullanılmaktadırlar. Compton profil (CP) metodu da, numunelerin, elektronlarının momentum durumlarını yansıttığı için; atom ve molekül fiziğinde, katıhal fiziğinde ve malzeme bilimlerinde yaygın olarak kullanılmaktadır (Aguilar *et al.* 2013). CP metodu, elektron momentum dağılımının hesabı için diğer metotların sahip olmadığı özel ve önemli karakteristik özelliklere sahiptir. Bu özellikler aşağıda sıralanmıştır.

- CP ölçümleri, Katıhal Fiziği ve Kuantum Kimyasında çok büyük öneme sahip olan dış yörünge elektronlarının momentum durumlarını yansıtır. Çünkü burada iç kabuk elektronlarının deney sonuçlarına olan etkisi ihmal edilebilir düzeydedir.
- Her bir elektronun saçılması diğer elektronların saçılmalarından bağımsız olduğu için, saf olmayan bir numuneden alınan sonuçlar saf bir numuneden alınan sonuçlarla aynıdır. Bu da numune hazırlamayı büyük ölçüde kolaylaştırır.
- Profil çizgisinden direk olarak elde edilebilen kalitatif sonuçlar moleküllerde ve katılarda bulunan elektronların özelliklerini yansıtır. Bu önemli özellikleri nedeniyle CP ölçümleri son yıllarda geniş alanlarda uygulanmaktadır (Yang and Hamilton 1996).

Günümüz bilimsel arařtırmaları, çok yüksek doğruluk derecelerine sahip teorilerle desteklenmektedir. 1900'lü yılların bařında Max Planck'ın siyah cisim ışımasını açıklaması ile bařlayan kuantum fizięi, 1960'lı yıllara kadar çok büyük gelişmeler göstermiştir. Kuantum mekanięinin en temel elemanları, atom ya da molekülleri temsil eden dalga fonksiyonları ve madde içinde yer alan elektronların yoğunluk durumlarıdır. İncelenen sistemler genelde çok atomlu yapıda olduklarından dolayı, bu sistemlerin dalga fonksiyonlarını belirlemek çok zordur. Günümüzde bu dalga fonksiyonlarını doğru bir şekilde hesaplayabilen birçok yazılım bulunmaktadır. Bir dalga fonksiyonun uygun kořullar altında çözümlerinden, sistem içinde meydana gelebilecek tüm geçişler (ışmalı ve ışısız), enerji bant diyagramları, hal durumlarının yoğunluęu ve elektronların momentum dağılımları gibi çok önemli özellikler elde edilmektedir. Dalga fonksiyonunun çözümlüne dayanan Hartree-Fock metodu ve elektronların yoğunluklarına baęlı olan Yoęunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) bu sistemleri analiz etmek için kullanılan en önemli iki teoridir. Bu teorik hesaplamalar çeřitli avantaj ve dezavantajlara sahiptirler. Ayrıca bu teorik hesapların yapılabilmesi için bir bilgisayar kümesine ihtiyaç duyulmaktadır. Bilgisayar kümeleri, incelenen sistemlerin karmařıklıęına göre, sistemi temsil eden dalga fonksiyonunun elde edilmesi ve bunun çözümleri için geçen süreyi azaltmaktadır ancak bu kümeler yüksek çalıştırma maliyetine sahiptirler. Dięer taraftan deneylerle aynı sonuçları bulmak çoęu zaman daha az zaman almakta ve maliyeti daha düşüktür.

Compton (1923)'te inelastik X-ışını saçılmasını elektronun serbest ve durgun olduęu kabullenimiyle inceledikten sonra Du Mond (1929), berilyum atomu üzerinde inelastik saçılma deneylerini gerçekleřtirdi. Bu deneyler, güçlü X-ışını kaynaklarının ve yüksek hassasiyetli dedektörlerin olmadıęı dönemde yapılan en önemli çalışmalardandır. DuMond bu çalışmasında, berilyum atomuna ait sonuçlarının, klasik Maxwell-Boltzman dağılımı yerine o dönemlerde yeni geliştirilen Fermi istatistięine uyduęunu gösterdi (Schülke 2007).

Teorik Compton saçılması impuls yaklaşımı ile ilk kez Dumond (1933) tarafından incelendi. Duncanson and Coulson (1945)'te H atomundan bařlayarak Ne atomuna

kadar olan atomlar için teorik CP değerlerini hesapladılar. Kilby (1965)'te Compton çizgi şiddet dağılımına ait bir dalga mekaniği türetimi yaptı. Eisenberger and Platzman (1970) ve Currat *et al.* (1971a, b)'deki çalışmalarıyla, 1960'lardaki tüm deneysel CP çalışmalarını teorik olarak açıkladılar. CP hesaplamaları Hartree-Fock ve DFT gibi iki önemli teori ile hesaplanabilmektedir. Biggs *et al.* (1975) Hartree-Fock metodunu kullanarak $Z=104$ 'e kadar tüm serbest atomların CP'lerini hesapladı. Erba *et al.* (2010) ve Pisani *et al.* (2011a, b) çalışmalarında çeşitli malzemelerin CP'lerini hesaplamak için farklı değişim-korelasyon fonksiyonlarını DFT ile birlikte kullandılar. Huotari *et al.* (2010) ve Holzmann *et al.* (2011) kuantum Monte Carlo metodunu CP çalışmalarında kullandılar. Olevano *et al.* (2012) ab initio Green fonksiyon yaklaşımını kullanarak CP hesaplamalarını gerçekleştirdiler.

1930'lı yıllarda Compton saçılması, teorik olarak ispatlanmış ve bazı deneylerle doğrulanmış olsa da deneyler yüksek enerjili γ -ışınları yerine X-ışınları ile yapılmaktaydı. Tipik bir radyoizotop foton kaynağı, bir X-ışını tüpünden $\sim 10^4$ kez daha az ışın yapar. Ayrıca bu dönemlerde γ -ışınlarını dedekte edebilecek yüksek hassasiyetli dedektör bulunmamaktaydı. (Cooper 1985).

Compton saçılması deneylerinde kristal spektrometreleri yüksek çözünürlük ($E/\Delta E \sim 10^4$) sağlarken, fotoğrafik film kayıtları ve iyonlaşma odaları çözünürlük bakımından iyi değildiler. Düşük foton akısı problemini çözebilmek için, DuMond and Kirkpatrick (1930) bükülmüş kristalleri kullanarak çoklu kristal spektrometresi tasarladılar. Bu sistemde fotonlar belirli noktalara odaklanmaktaydı. Odaklayıcı spektrometre olarak adlandırılan bu tip spektrometreler yansıtıcı ve geçirici olmak üzere iki sınıfa ayrılırlar. Johann (1931) ilk yansıtıcı bükülmüş kristal spektrometresini, Couchois (1932) ise bükülmüş kristal spektrometresini tasarlamıştır. Johann ve Couchois tipi spektrometreler uzun yıllar boyunca Compton saçılması deneylerinde kullanıldı. Bu iki spektrometrenin farkı kristallerinin yansıtıcı ve geçirgen olmalarıdır. Kirkpatrick and Ross (1933) maksimum foton akısı üretebilmek için halka anotlu X-ışını tüpünü icat ettiler. Bu anot sistemi hem yüksek foton akısı üretmekte hem de saçılma açısının daha iyi tanımlanmasına olanak sağlamaktaydı. Ayrıca bu çalışmada kullanılan geometri

daha sonraki yıllarda γ -ışınları içinde kullanılmıştır (Cooper 1985). Cooper *et al.* (1965) döner anotlu X-ışını tüpü ve yüksek verimli sintilasyon sayacı kullanarak yaptığı saçılma deneyleri ile inelastik X-ışını saçılma deneylerinin yeniden canlanmasına yol açtı. Phillips and Weiss (1968) Compton saçılma deneylerinde kaynak olarak karakteristik X-ışınlarını ve Johann-Compton spektrometresini kullanmışlardır. Eisenberger and Reed (1972), uyarıcı olarak monokromatik karakteristik X ve γ -ışınlarını, saçılan radyasyonların enerjilerinin ölçülmesi için ise katıhal dedektörlerini kullanmışlardır. Bu teknik, takip eden 20 yıl boyunca Compton saçılma deneylerinde ve dolayısıyla elektron momentumunun çalışmalarında kullanılmasına rağmen, bu çalışmalarda momentum çözünürlükleri oldukça düşüktür (Cooper 1985).

İnelastik X-ışını saçılması deneylerindeki en büyük dönüm noktalarından birisi de, 1970'li yıllarda güçlü sinkrotron kaynakların kullanımıyla atıldı. Eisenberger *et al.* (1976 a, b)'da Compton saçılması deneylerinde ilk kez sinkrotron kaynaklarını kullanmışlardır. Louprias and Petiau (1980) sinkrotron kaynaklarını ile yaptıkları deneylerde saçılan fotonları ölçmek için katıhal dedektörlerini kullandılar.

Compton saçılması deneylerinde, öncelikli olarak foton kaynağı seçilmelidir. CP ölçümlerinde X-ışını tüpleri foton kaynağı olarak yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. X-ışını tüpleri özellikle yüksek erime noktasına ve yüksek termal iletkenliğe sahip Mo, Ag, W, Pt ve Au gibi anotlara sahiptirler. Bu tüpler ortalama 60-100 kV aralığında çalıştırılırlar. Ancak bir X-ışını kaynağı kullanıldığında CP ölçümlerinin hassas bir şekilde yapılması için dalgaboyu ayırımının yapılması gerekmektedir ki bu durum, deney ölçümlerinin süresini uzatmaktadır (Williams 1977).

Yüksek çözünürlüklü spektrometrelerin gerekliliği 1980'lerin başında ortaya çıktığında geliştirilen Johann-Compton Spektrometresi (Pattison *et al.* 1986 a, b; Suortti *et al.* 1986 a, b, c) III. Nesil Syncrotron kaynaklardan biri olan European Syncrotron Radiation Facilities (ESRF) ID15B Beam Line'ında kullanılan Compton spektrometresinin temelini oluşturmaktadır (Hiraoka *et al.* 2005). Diğer taraftan Hiraoka *et al.* (2001) Super Storage Ring 8 GeV (Spring8, Japonya)'da yer alan bir

Beamline'da Cauchoiss tipi bir Compton Spektrometresi tasarladılar. III. nesil bu iki Synchrotron merkezindeki Compton spektrometreleri hala kullanılmaya devam etmektedir.

Litertürde, katı ve sıvıların CP'lerinin belirlenmesi için çok fazla çalışma yer almaktadır (Cooper 1985; Schülke 2007; Williams 1977). Diğer yandan gazların CP ölçümleri ile ilgili az sayıda çalışma bulunmaktadır. Eisenberger and Platzman (1970) He atomu ve H₂ molekülünün elektron momentum dağılımlarını Compton saçılmasıyla belirledi. Bu çalışmada He atomu için hem gaz hem de sıvı fazda ölçümler yapılmıştır. Eisenberger'in bu çalışmasındaki sıvı ve gaz fazındaki He için deneysel sonuçlar Hartree-Fock hesaplaması ile çok iyi bir uyum içerisinde iken H atomuna ait deneysel sonuçlar ile teorik sonuçlar arasında bir uyum yoktur. Eisenberger'e göre bu durumun sebebi elektron-elektron etkileşimleridir. Eisenberger (1972) gümüş ve molibden X-ışınlarını kullanarak N₂, O₂ ve Ne gazlarının CP'lerini hesapladı. Ayrıca deneysel sonuçlarını Hartree-Fock metodu ile hesaplanan teorik sonuçlarla kıyasladı. Bu deneylerde saçılma açısı 170° idi. Eisenberger and Reed (1972) tarafından bir Ge(Li) dedektör ve ¹²³Te kaynaktan yayınlanan 160 keV'luk gama ışınları kullanılarak yapılan deneylerde He, N₂, Ar ve Kr gazlarının Compton profilleri ölçülmüştür. Ayrıca He ve N₂'nin sonuçları daha önceden yapılan teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Deney sonucunda γ -ışını kullanımı ile elde edilen sonuçların X-ışını kullanımından elde edilen sonuçlara göre daha güvenilir olduğu sonucuna vardılar. Çünkü düşük enerjilerde fotoelektrik tesir kesiti çok yüksektir. Ar ve Kr için Hartree-Fock hesaplamaları ve deneysel sonuçlar $q=0$ 'da %1'den daha az farklılık göstermektedir. Tong and Lam (1978) Ne, Ar ve Kr asal gazları için CP ölçümleri yapmıştır. Deney sonuçları Hartree-Fock dalga fonksiyonları kullanılarak hesaplanan teorik sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Ayrıca deney sonuçlarını, yerel yoğunluk yaklaşımını (LDA) kullanarak elde edilen teorik sonuçlarla karşılaştırmışlardır. Buna göre LDA metodu büyük atom numaralı elementlerde çoklu saçılmaların etkilerini içeren kuyruk bölgesi hariç diğer bölgelerde iyi sonuçlar vermiştir. Paakkari and Merisalo (1978) kaynak olarak ²⁴¹Am kaynağından yayınlanan 59.54 keV lik γ -ışınlarını, dedektör olarak da Ge(Li) kullanarak metan gazı için CP ölçümleri yaparak sonuçlarını teorik sonuçlarla karşılaştırdılar.

Kobayashi *et al.* (2011)'de 121,7 keV'lik sinkrotron x-ışını kullanarak N₂ gazının Compton ölçümlerini yaptılar. Bu çalışmalarının daha önceki yıllarda yapılmış olan çalışmalarla karşılaştırıldığında $q=0$ 'da %1 ve %0.05'lik farklar olduğu gösterildi. Sakurai *et al.* (2011) aynı spektrometreyi kullanarak bazı asal gazların CP'lerini ölçtüler. Deney sonuçlarını Dirac-Hartree-Dirac hesaplamaları ile karşılaştırdılar. Bu karşılaştırmada ortaya çıkan en ilginç sonuç artan atom numarasıyla deney ve teori arasında meydana gelen uyumsuzluktu. Bu çalışma rölativistik hesaplamalarda elektron korelasyonlarının dikkate alınmasının öneminin altını çizmektedir. Ma *et al.* (2015)'te NO ve C₂H₂ gazlarının CP ölçümlerini 20 keV'lik uyarıcı fotonlarla yaptılar. Bu deney BL15U1 Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF) merkezinde yapılmıştır. Ayrıca bu çalışmadaki numuneler için Hartree-Fock ve DFT ile teorik hesaplamalar da yapılarak ve deneylerin güçlü sinkrotron kaynakları ile yapılmasının daha doğru sonuçları ortaya çıkaracağı sonucuna varıldı.

Literatürde, farklı basınçlarda katı numunelerin CP ölçümleri ile ilgili az sayıda çalışma bulunmaktadır. Bu çalışmalar daha çok DFT ve Hartree-Fock teorilerini kullanan hesaplamalardır. Oomi *et al.* (1998)'te Compton saçılma deneyleri için yüksek basınç sistemi geliştirdiler. Li elementi üzerine yaptıkları deneyde, Fermi momentumunun basınca bağlılığının serbest elektron modeli ile elde edilen sonuçlarla çok iyi bir uyum içinde olduğunu tespit etmişlerdir. Hamalainen *et al.* (2000)'de III. nesil elektron hızlandırıcı kullanarak, farklı basınç değerlerinde metalik sodyumun Compton profil ölçümlerini gerçekleştirmişlerdir. Bu çalışmada basınç değeri 42 kbar'a kadar artırılmıştır. Deney sonuçlarına göre basıncın artırılması elektronlar arasındaki ortalama mesafenin azalmasına Fermi momentumunu değiştirerek elektron-iyon ve elektron-elektron etkileşmelerinin değişmesine neden olmaktadır. Ayrıca bu çalışmada Compton Profille sonuçları arasındaki farklılıklar Daniel and Vosko (1960) tarafından geliştirilen Random Phase Approximation (RPA) metoduna göre açıkladı. Tse *et al.* (2005) elektron hızlandırıcı kullanarak yüksek basınç altında Silisyum elementinin elektronik yapısını çalıştılar. Bu çalışmada özel bir Laue monokromatörü ve yeni tasarlanmış kırıcı lensler kullanıldı. Deneyde silisyum üzerindeki basınç 20 GPa değerine kadar artırılarak Compton profil ölçümü gerçekleştirildi. Compton profil sonuçlarındaki farklılıklar

teorik hesaplama sonuçları ile karşılaştırıldı. Joshi *et al.* (2012) CRYSTAL06 programını kullanarak çok kristal yapıdaki MgO kristalinin elektronik özelliklerini basınca bağlı olarak incelendi. Bu çalışmada hem Compton profil hem de otokorelasyon fonksiyonlarının sonuçları sunuldu. Bu çalışmaya göre; artırılan basınç, kristalin valans elektronlarının Compton Profilleri üzerinde bir etkiye sahipken iç yörünge elektronları üzerinde bir etkiye sahip değildir. Bu çalışmadaki basınç değerleri 0, 25, 42 ve 75 GPa olarak ayarlandı. Bu çalışmaya göre $q=0$ değeri artan basınçla birlikte azalmaktadır.

Bildiğimiz kadarıyla literatürde, gazların Compton Profillerine basıncın etkisini inceleyen herhangi bir çalışma bulunmamaktadır. Bu nedenle, bu tez çalışmasında basınç altında gazların temel durum elektronik yapılarının nasıl bir değişim gösterdiği araştırılmıştır. CP metodu spektrumda meydana gelen Doppler kaymasının sonuçlarını incelemektedir. Bu Doppler kaymasının ana nedeni, hedef malzemedeki elektronların durgun değil hareketli olmalarıdır. Hedef malzemede bulunan elektronlar kendi çekirdeklerine farklı bağlanma enerjileriyle bağlandıklarından dolayı, bu elektronların her birisi ile çarpışan tek enerjili fotonlar bu elektronların spektrumda farklı enerji bölgelerinde saçılmalarına neden olurlar. Herhangi bir Compton spektrumunun tepe bölgesi valans elektronlarından kaynaklanırken, yüksek ve düşük enerjili bölgelerde, çekirdek veya iç yörünge elektronlarından saçılmalarından kaynaklanır. Bu nedenle CP çizgi şeklinin doğru ve hassas analizi doğrudan hedef malzemenin elektronik yapısını içerecektir.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Elektromanyetik dalganın madde ile etkileşmesi

Fotonlar, x-ışını veya γ -ışını olarak adlandırılabilen yüksek enerjili elektromanyetik dalgalarıdır. Parçacık olarak göz önüne alındıklarında, kütsüz ve yüksüz olarak ışık hızında hareket eden parçacıklardır. Bir fotonun enerjisi ile dalgaboyu (λ) ve frekansı (ν) arasındaki ilişki

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.1)$$

ile verilir. X-ışınları ve γ -ışınlarını birbirinden ayıran kesin bir enerji sınırı bulunmamakla birlikte onlar arasındaki temel fark meydana geliş biçimlerinden kaynaklanmaktadır. X-ışınları, yüklü parçacıkların frenlenmesi sonucu veya atomik enerji seviyeleri arasındaki elektron geçişleriyle yayınlanırken, γ -ışınları çekirdek içerisinde nükleer enerji seviyeleri arasındaki geçişlerden yayınlanır. Karakteristik x-ışınları ve γ -ışınları tek enerjili iken, frenleme ışınımı sürekli spektruma sahiptirler (Tsoulfanidis 1995).

Yüksek enerjili fotonlar madde üzerine gönderildikleri zaman etkilenmeden geçiş, yansıma, kırılma, kutuplanma, kırınım, koherent saçılma, inkoherent saçılma (Compton saçılması veya inelastik saçılma), fotoelektrik olay ve çift oluşumu gibi çok farklı olaylar meydana gelebilir (Şahin ve Demir 2013). Bu olaylar, etkileşmeye giren maddelerin türlerine ve üzerlerine gelen fotonların enerjilerine bağlıdır. X ve γ -ışını spektroskopisi çalışmalarında, bu etkileşmelerden, fotoelektrik olay, Compton saçılması ve çift oluşumu hedef malzeme hakkında da detaylıca bilgi verebildiği için daha fazla öneme sahiptirler (Knoll 1989).

2.1.1. Fotoelektrik olay

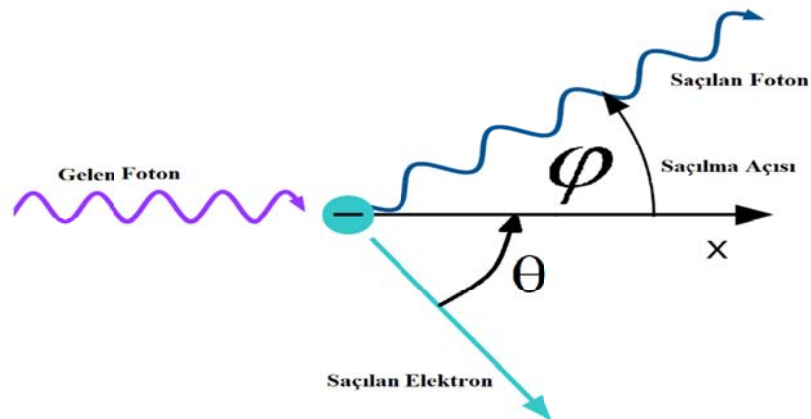
Fotoelektrik soğurma olarak da adlandırılan fotoelektrik olay, fotonun bağlı atomik elektronla etkileşmesi neticesinde gerçekleşir. Bu olayda foton tamamen soğrulur ve atomik elektronlardan bir tanesi serbest elektron olarak atomdan ayrılır. Atomdan kopan bu elektrona fotoelektron adı verilir. Bağlanma enerjisi B_e olan bir elektronun üzerine E_γ enerjili foton düştüğünde kopan elektronun kinetik enerjisi (T)

$$T = E_\gamma - B_e \quad (2.2)$$

eşitliği ile belirlenir. Fotoelektrik olay, Compton saçılması ve çift oluşumu olaylarına nazaran daha düşük enerjilerde meydana gelir.

2.1.2. Compton saçılması

Elektronun hareketini dikkate alarak gerekli kavramlar tanımlandıktan sonra Compton saçılması, kısım 2.2.3'te ele alınacaktır. Şekil 2.1'de gösterilen Compton saçılması, yüksek enerjili fotonların serbest ve durgun kabul edilen elektronlardan inelastik olarak saçılmasıdır.



Şekil 2.1. Compton saçılmasının klasik gösterimi

Compton saçılması; inkoherent saçılma, inelastik saçılma veya esnek olmayan saçılma gibi isimlerde verilmektedir. Bu olayda foton enerji kaybederek hareket doğrultusunu değiştirir. Çarpışma sonrasında saçılan fotonun ve elektronun toplam enerjisi, gelen fotonun ilk enerjisine eşittir. Böylece Compton saçılması için enerjinin korunumu yasası kullanılırsa

$$T = E_{\gamma} - E_{\gamma}' \quad (2.4)$$

elde edilir. Burada E_{γ} ve E_{γ}' sırasıyla, gelen ve saçılan fotonların enerjilerini, T ise geri tepen elektronun kinetik enerjisini belirtmektedir (Tsoulfanidis 1995). Compton saçılmasında saçılan fotonun enerjisi sadece φ saçılma açısına bağlı olarak değişmektedir. Enerji ve momentum korunum denklemleri kullanılarak, saçılan fotonların enerjisi ile gelen fotonların enerjisi,

$$E_{\gamma}' = \frac{E_{\gamma}}{1 + \frac{E_{\gamma}}{m_0 c^2} (1 - \cos \varphi)} \quad (2.5)$$

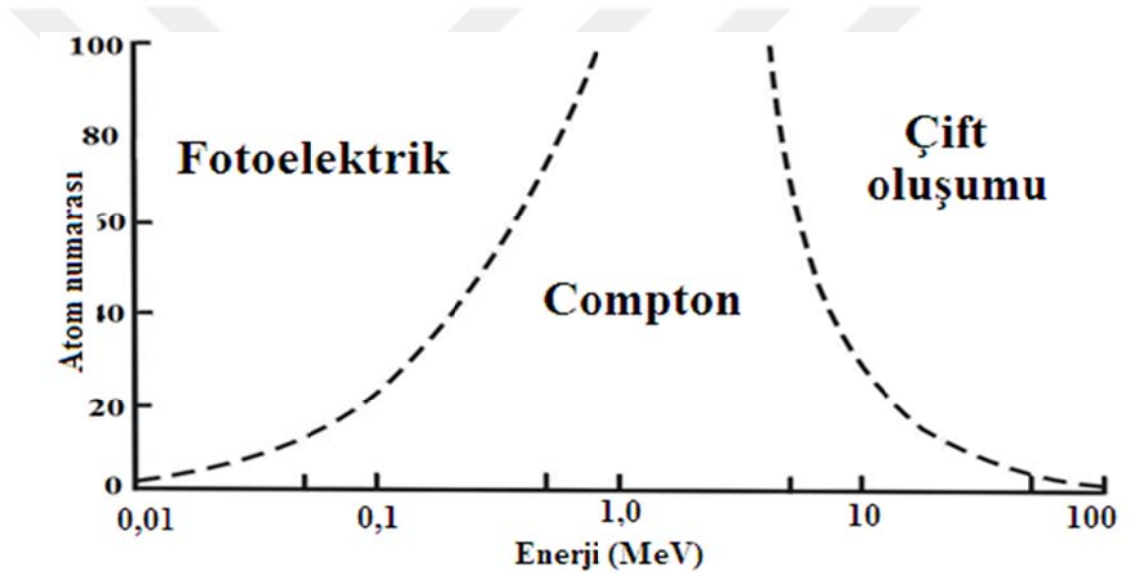
ve geri tepen elektronun enerjisi

$$T = \frac{h\nu}{1 + \frac{m_0 c^2}{h\nu(1 - \cos \varphi)}} \quad (2.6)$$

eşitlikleri ile verilir.

Compton saçılmasında gelen ve saçılan fotonlar ile saçılan elektronlar daima aynı düzlemedirler. Eşitlik 2.5'de görüldüğü üzere; mümkün olan en büyük enerji değişimi, $\varphi = 180^\circ$ 'de meydana gelmektedir (Knoll 1989).

Şekil 2.2’de, fotoelektrik olay, Compton saçılması ve çift oluşumu olaylarının baskın olduğu enerji bölgeleri gösterilmiştir. Bu grafiğe göre fotoelektrik olay düşük enerjilerde meydana gelirken, Compton saçılması ve çift oluşumu olayları, fotoelektrik olaya nazaran daha yüksek enerjilerde meydana gelmektedir. Ayrıca bu şekil, foton madde etkileşmesindeki üç ana olayın hedef malzemenin atom numarasına bağlı olduğunu da göstermektedir. Hafif elementlerde Compton saçılması 20-30 keV civarında baskın olmaya başlarken, ağır elementlerde 1 MeV’den önce bu durum gerçekleşmez.



Şekil 2.2. Elektromanyetik dalganın madde ile etkileşmesinin enerji ve atom numarasına bağlı olarak değişimi

2.1.3. Çift oluşumu

Çift oluşumu fotonun çekirdek ya da elektronların etrafındaki Coulomb alanı ile etkileşmesi sonucu gerçekleşir. Bu etkileşimde gelen foton yok olur ve bir elektron-pozitron (pozitif yüklü elektron) çifti meydana gelir (Tsoulfanidis 1995). Çift oluşumu olayında elektromanyetik enerji maddeye dönüşmektedir. Çift oluşumu olayının meydana gelebilmesi için, gelen fotonun enerjisi, $2m_0c^2$ ’den yani 1,02 MeV’den büyük olmalıdır. Enerji korunumu yasasına göre

$$T_{e^-} + T_{e^+} = E_{\gamma} - (mc^2)_{e^-} - (mc^2)_{e^+} = E_{\gamma} - 1,022 \text{ MeV} \quad (2.3)$$

elde edilir. Bu eşitlikte, T_{e^-} ve T_{e^+} sırasıyla elektron ve pozitronun kinetik enerjilerini, E_{γ} gelen fotonun enerjisini simgelemektedir.

Çift oluşumu olayında herhangi bir korunum ilkesi çiğnenmez. Çift oluşumu olayı enerji ve lineer momentumun aynı anda korunamaması, nedeniyle boş uzayda gerçekleşmemektedir. Eğer gelen foton enerjisi 2,044 MeV den daha büyükse, elektronun Coulomb alanında da çift oluşumu meydana gelebilir (Knoll 1989).

Compton saçılmasının izahında kabul edildiğinin aksine, madde içinde yer alan elektronlar, asla durgun veya serbest olamazlar. Elektronlar gerçekte madde içinde farklı atomik yörüngelerde yüksek hızlarda hareket eden ve yörüngeden yörüngeye değişen farklı bağlanma enerjileri (birkaç eV'den onlarca keV'e kadar) ile atoma bağlıdırlar. Bu nedenle bağlanma enerjileri, gelen foton enerjisi yanında ihmal edilebilecek düzeyde olduğunda elektronlar durgun kabul edilmektedirler.

Compton saçılması "impuls yaklaşımı" (IA) ile açıklanmaktadır. Bu yaklaşıma göre foton ve elektron arasında meydana gelen Compton saçılmasında, etkileşim süresi çok kısadır ($\sim 10^{-12}$ - 10^{-18} s). Ayrıca saçılma sürecince, atomdaki diğer elektronların potansiyelleri aynı kalır. Bir başka deyişle bu elektronlar sadece seyirci gibi davranmaktadırlar. Bu nedenle Compton saçılması izah edilirken potansiyel enerji terimi, enerji korunumu denkleminde kullanılmamaktadır (Cooper 1985).

Elektronların serbestlik durumları ve impuls yaklaşımı göz önüne alındığında gerçekte Compton saçılması, tek enerjili bir fotonun, hareketli bir elektrondan inelastik olarak saçılmasıdır. Bu saçılma sonucunda foton, ilk gelme enerjisinden daha düşük bir enerji ile saçılırken, belli bir ilk momentuma sahip olan elektron da farklı bir doğrultuda saçılır. Elektronların bu şekilde hareketli olmaları, saçılma sürecinde bir Doppler etkisi

ortaya çıkarmaktadır. Bu Doppler etkisi Compton saçılma spektrumunda bir çizgi genişlemesine neden olmaktadır. Bu çizgi şeklinin detaylı analizine Compton profil (CP) denir (Cooper 1985).

2.2. Tesir kesiti

Herhangi bir olayın meydana gelme olasılığının bir ölçüsüne tesir kesiti denir. Şiddeti I olan bir foton demeti, kalınlığı t ve yüzey alanı A olan bir numune yüzeyine geldiğinde, ışına maruz kalan maddenin alanı $A\sigma n_{atom}t$ ile verilir. Burada n_{atom} maddenin birim hacmindeki atom sayısını σ_{tk} ise atomik tesir kesitini simgelemektedir. Madde üzerine gelen N_i sayıdaki parçacıktan N_s tanesi etkileşime giriyorsa tesir kesiti

$$\sigma_{tk} = \frac{N_s}{n_{atom}N_i t} \quad (2.7)$$

ile verilir. Saçılan fotonlar şayet açısal bir dağılım gösteriyorsa buna diferansiyel tesir kesiti denilir. Bu tesir kesiti, gelen fotonların birim katı açı başına düşen saçılma olasılıkları olarak da tanımlanır (Storm and Israel 1970).

Foton-madde arasında oluşabilecek tüm olayların tesir kesitlerinin toplamı, foton ile madde arasındaki toplam etkileşmelerin ihtimaliyetini verir. Yani

$$\sigma_{toplam} = \sigma_{fotoelektrik} + \sigma_{elastik} + \sigma_{inelastik} + \sigma_{çift} \quad (2.8)$$

dir. Şimdi Compton saçılma teorisini daha iyi anlayabilmek için saçılma ile ilgili diferansiyel tesir kesitlerini inceleyelim.

2.2.1. Koherent saçılma diferansiyel tesir kesiti

Fotonların madde üzerine geldikleri zaman enerji kaybetmeden saçılmalarına koherent (elastik) saçılma adı verilir. Bu saçılmada gelen foton ile saçılan fotonlar arasında herhangi bir faz farkı oluşmamaktadır. Koherent saçılma tesir kesiti

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_0^2 (1 + \cos^2 \varphi) [F(q_g, Z)]^2 = \frac{d\sigma_T(\varphi)}{d\Omega} [F^2(q_g, Z)] \quad (2.9)$$

ile verilir. Burada r_0 klasik elektron yarıçapını, $F(q, Z)$, atomik form faktörünü yani momentum geri aktarılma olasılığını ve q_g Z atom numaralı elementin elektronlarına herhangi bir enerji soğurması olmadan aktarılan momentum miktarını göstermektedir. Thomson saçılma tesir kesiti ise

$$\frac{d\sigma_T(\varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_0^2 (1 + \cos^2 \varphi) \quad (2.10)$$

ile verilmektedir (Storm and Israel 1970).

2.2.2. İnkoherent saçılma diferansiyel tesir kesiti

Klein-Nishina (1929) serbest ve durgun olarak kabul edilebilen elektronlardan inkoherent saçılma (Compton saçılması) için bir tesir kesiti ifadesi türetti. Bu ifade

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_0^2 Z [1 + \alpha(1 - \cos \varphi)]^2 [1 + \cos^2 \varphi + \alpha^2 (1 - \cos \varphi)^2 (1 + \alpha(1 - \cos \varphi))^{-1}] \quad (2.11)$$

ile verilir. Bu eşitliğe göre tesir kesiti açıya ve enerjiye bağlı olup atomlardaki elektronlar gerçekte bağlı ve hareketli olduklarından dolayı düzeltilmelidir. $S(q_g, Z)$ düzeltme terimi olmak üzere inkoherent saçılma tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma_{incoh}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} S(q_g, Z) \quad (2.12)$$

ile verilir. Böylece Klein-Nishina (1929) deney ve teori arasındaki uyumsuzluğu ortadan kaldırmıştır. Birim katı açı başına düşen tesir kesiti olarak tanımlanan bu ifade $d\Omega$ diferansiyel katı açı içinde φ saçılma açısıyla fotonların saçılma ihtimaliyetlerinin bir ölçüsünü vermektedir. Bu ifadelerde yer alan α foton enerjisinin elektronun durgun kütle enerjisine oranıdır ve

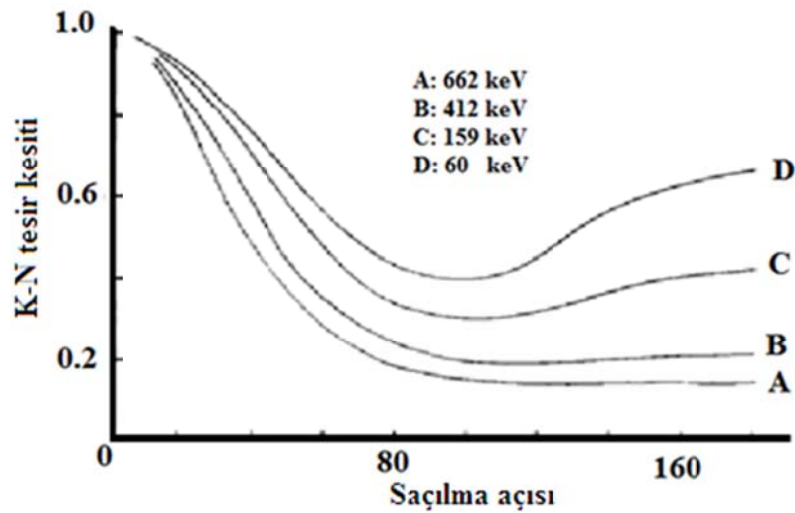
$$\alpha = \frac{h\nu}{m_0 c^2} \quad (2.13)$$

ile verilir. İnkohherent saçılma fonksiyonunun bağımsız değişkenlerinden biri olan q_g ise,

$$q_g = \sin(\varphi / 2) / \lambda \quad (2.14)$$

dir (Storm and Israel 1970).

Şekil 2.3'te farklı uyarıcı foton enerjilerinde saçılma açısının bir fonksiyonu olarak Klein-Nishina tesir kesitlerinin değişimleri gösterilmiştir.



Şekil 2.3. K-N tesir kesitinin saçılma açısına bağlılığı (Cooper 1985).

2.2.3. İkinci dereceden diferansiyel tesir kesiti ve Compton saçılmasının teorisi

Saçılma deneylerinde detektörde ölçülebilecek toplam akı, diferansiyel tesir kesiti Eşitlik (2.12) ifadesi ile elde edilir. Eğer inelastik saçılma deneyleriyle spektral dağılım incelenecekse; birinci derece diferansiyel tesir kesiti yerine, saçılan fotonları ölçmede kullanılan fotonların sonlu ömürlerinden dolayı, ikinci derece diferansiyel tesir kesitleri kullanılmalıdır. Bu amaçla birinci dereceden diferansiyel tesir kesiti ifadesine eklemeler yapılmalıdır. İkinci dereceden diferansiyel saçılma tesir kesitleri (DDSCS), $(w)-(w+dw)$ enerji aralığında ve $(\Omega)-(\Omega+d\Omega)$ katı açı aralığında saçılma ihtimaliyetinin bir ölçüsüdür. DDSCS $(\Omega)-(\Omega+d\Omega)$ katı açı aralığında hedef malzemeye enerji transferi olan $w = w_1 - w_2$ ifadesine bağlıdır. Bu bağlılık onun KN tesir kesitinden farklı olarak hedef malzemenin karakteristik özelliklerini yansıttığını gösterir. Bu nedenle de DDSCS ölçümleri tüm inelastik saçılma deneylerinde (foton, nötron vs) hedef malzemelerin özelliklerini yansıtır. Compton saçılma deneylerinde kullanılan fotonlar, hedef malzeme elektronundan farklı enerjilerde saçılmaya uğradığından dolayı, yani $(w)-(w+dw)$ aralığında değişim olduğundan dolayı, CP metodu doğrudan DDSCS ile orantılıdır. Compton saçılma deneylerinde ölçülen DDSCS $(d^2\sigma/d\Omega dw)$, Compton profille yani $J(q)$ ile orantılıdır. Yani,

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dw} \sim J(q) \quad (2.15)$$

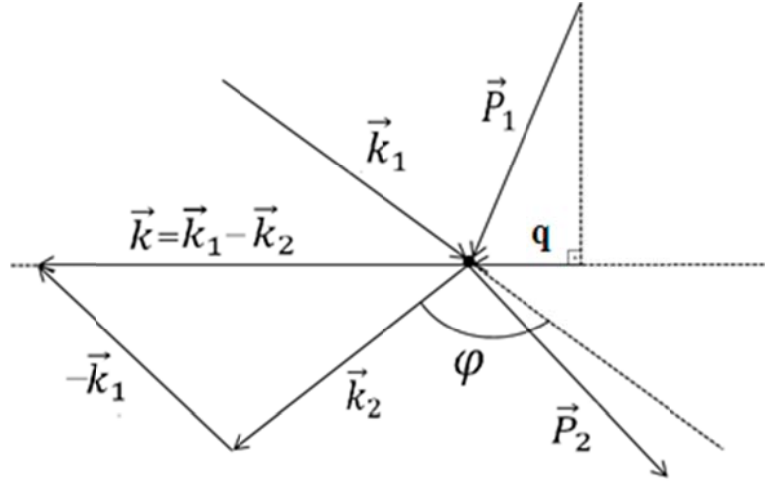
ifadesi yazılabilir. Enerjisi w_1 ve dalga vektörü $\vec{k}_1$ olan bir foton ile ilk momentumu $\vec{P}_1$ olan hareketli bir elektronun çarpışması Şekil 2.4'te gösterilmiştir. Şekilde $\vec{k}_2$ saçılan fotonun dalga vektörünü ve $\vec{P}_2$ geri tepen elektronun momentumunu, w_2 saçılan fotonun enerjisini, φ saçılma açısını ve q ise hareketli gelen elektronun ilk momentumunun (temel durum) z eksenini üzerindeki izdüşümünü göstermektedir. Deneylerde elektronun $\vec{P}_1$ momentumunu doğrudan ölçmek hemen hemen imkânsızdır. Bu nedenle, $\vec{P}_1$ ilk momentumu yerine elektronun Z eksenini üzerindeki izdüşümünün hesaplanması ve

ölçülmesi, gelen elektronun momentum hakkında detaylı bilgi vermektedir. Bu tez çalışmasında Compton profil hesaplamaları atomik birimlerde yapılmaktadır. Atomik birimler Çizelge 2.1.'de verilmiştir.

Çizelge 2.1. Fiziksel niceliklerin SI* ve atomik birimlerdeki değerleri

Fiziksel Nicelik	Atomik Birimler	SI
Elektron yükü (e)	1	$1,6 \times 10^{-19} C$
Elektron kütlesi (m_e)	1	$9,1 \times 10^{-31} kg$
Planck sabiti ($\hbar$)	1	$1,054 \times 10^{-34} Js$
Enerji (eV)	$Hartree / 27,2116$	$1,6 \times 10^{-19} J$
İnce yapı sabiti (α)	$e^2 / \hbar c = 1/137$	1/137
Bohr yarıçapı (a_0)	$\hbar^2 / (m_e e^2) \equiv 1 Bohr$	$5,29 \times 10^{-11} m$
Işık hızı (c)	$1 / \alpha = 137$	$3,0 \times 10^8 m/s$

*SI: Uluslararası Birim Sistemi



Şekil 2.4. Hareketli elektron ile foton arasında meydana gelen Compton saçılması (Weyrich 1975)

Hareketli elektron ile foton arasında meydana gelen Compton saçılmasını gösteren Şekil 2.4'e göre, saçıcı parçacığın dinamiğini tanımlayan oto-korelasyon fonksiyonu (veya dinamik yapı faktörü), $S(k, w)$ kullanılarak DDSCS,

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dw} = \frac{d\sigma_T(\varphi)}{d\Omega} S(k, w) \quad (2.16)$$

ifadesinden hesaplanabilir. Burada $d\sigma_T(\theta)/d\Omega$ tek bir serbest elektrondan saçılma için Thomson tesir kesitidir. Tipik olarak bir X-ışını fotonunun enerjisi, elektron momentumu ile kıyaslandığında çok büyüktür, yani ışığın hızı saçıcıdaki parçacıkların hızlarından (elektronun hızından) çok büyüktür. Bu durum ilk yaklaşımın, çarpışma sırasında momentum transferi $k = |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$ 'nin, saçılma açısıyla çok doğru bir şekilde belirlenebilmesi için $|\vec{k}_1| \approx |\vec{k}_2|$ olması gerektiğini gösterir. Bu durumda momentum transferi

$$k = 2k_1 \sin(\varphi / 2) \quad (2.17)$$

ile verilir. Böylece φ , fotonun gelme doğrultusundan (ki bu durumda momentum transferi olmaz) 180° 'deki maksimum momentum transferine doğru taranır.

Saçılma fiziği kabaca sistemin uzaysal düzgünlüğünü (unhomojenitesi) tanımlayan bir karakteristik uzunluğun (λ_c 'nin) tersine momentum transferinin büyüklüğü ile iki kategoriye ayrılabilir. Bunlar

- i. $k\lambda_c \ll 1$ olduğunda; çok sayıda parçacıktan saçılmalar gerçekleşir ve saçılma genliklerinin girişi çok önemlidir. Bu bölgede spektrum özellikleri çok sayıda elektronun toplu hareketleri tarafından domine edilme eğilimindedir ve saçılmanın doğru ve hassas bir tanımını veren basit bir eşitlik bulmak imkânsızdır. Böyle bir spektrum çok sayıda elektronun hareketi tarafından belirlendiğinden basit bir

formülasyon yapmak mümkün değildir. Bu nedenle saçılma için doğru ve iyi tanımlama yapılamamaktadır. Bu durumda saçıcılar tarafından olan girişim önemlidir.

- ii. Yüksek momentum transferi olan $k\lambda_c \gg 1$ durumunda girişim etkileri önemsizdir ve sistemin tek parçacık özellikleri belirleyici olur. CP bu kategoriye girer (Williams 1977).

Şekil 2.4.'e göre momentum transferi $\vec{k}$ olduğunda sisteme aktarılan enerji miktarı w

$$w = \frac{(\vec{p} + \vec{k})^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \frac{k^2}{2m} + \frac{\vec{p} \cdot \vec{k}}{m} \quad (2.18)$$

ile verilir. Bu ifadede sağ taraftaki ilk terim Compton kayması ve ikinci terim ise saçıcı elektronun ilk momentumuna bağlı olan Doppler kayması terimidir. n_p , bir elektronun $\vec{p}$ momentumuna sahip olma ihtimaliyeti olup farklı elektronlardan saçılma genlikleri girişim yapmamışsa

$$\frac{d\sigma}{d\Omega dw} \propto \int n_p \delta(w - k^2 / 2m - \vec{p} \cdot \vec{k} / m) d^3 p \quad (2.19)$$

ile verilir. Bu denklem tüm Compton ölçümlerinin temelini oluşturur. Bu eşitlik, saçılmanın tek elektrondan olduğunu kabul etmektedir (Williams 1977). Ancak kalitatif (nitel) yaklaşımla bu denklemdeki orantı katsayısı bulmak imkansızdır. Bu nedenle eşitlik 2.16'da verilen dinamik yapı faktörünün ele alınması gerekir. $S(k, w)$ 'nin değeri,

$$S(k, w) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(-iwt) \int d^3 r' \int d^3 r \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) n_2(\vec{r}, \vec{r}', t) \quad (2.20)$$

ile verilir. Bu ifadede $n_2(\vec{r}, \vec{r}', t)$ zamana bağlı iki parçacık korelasyon fonksiyonu olup

$$\rho(\vec{r}, t) \equiv \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) \text{ olmak üzere}$$

$$n_2(\vec{r}, \vec{r}', t) \equiv \langle \rho(\vec{r}', t=0) \rho(\vec{r} + \vec{r}', t) \rangle \quad (2.21)$$

ile verilir. Burada $\langle \rangle$ T=0 temel durumunun beklenen değerini temsil etmektedir ve sonlu sıcaklıklar için (T>0) istatistiksel ortalamayı gösterir. Toplama ise sistemin tüm saçıcı parçacıkları üzerinden yapılır. Böylece, $\vec{r}$ konumunda t=0 anında bir elektron dedekte edilmişse (aynı elektron ya da başka bir tane) $n_2(\vec{r}, \vec{r}', t)$, $\vec{r}' + \vec{r}$ konumunda t anında elektron bulunma ihtimaliyetidir.

Eşitlik (2.20) ve (2.21) zaman bağlı elektron dalgalanmalarından kaynaklanan saçılma ile Compton saçılması arasında ilişki kurmaktadır. Bu dalgalanma-yayılm teorisi olarak bilinir ve bu teoreme göre DDSCS sistemin E_i enerjili $|i\rangle$ temel halinden E_f bütün uyarılmış son enerji seviyeleri ile de olabilir ve

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_2 d\hbar\omega_2} = r_0^2 (\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2)^2 \left(\frac{w_2}{w_1}\right) \sum_{i,f} p_i \left| \langle f | \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (2.22)$$

ile verilir (Schülke 2007). Burada p_i , ilk durumda bulunma ihtimaliyetidir. Eğer ters örgü momentum transferinin k^{-1} saçıcı sistemin karakteristik uzunlukları yanında (parçacıklar arası mesafe gibi) çok büyük olduğu farz edilirse faz faktörü $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j}$ sistemin farklı parçacıklarının birlikte hareketini (correlated motion) tanımlar. Eğer ters örgü momentum transferi k^{-1} saçıcı sistemin karakteristik uzunlukları (parçacıklar arası mesafe gibi) yanında çok küçük olduğu kabul edilirse farklı parçacıklardan saçılmış fotonların genlikleri arasındaki girişim $S(k, \omega)$ üzerinde ihmal edilebilir bir etkiye olur. Bu durumda sistem tek parçacık özelliğine sahiptir. Daha ayrıntılı olarak çok küçük zaman aralıklarında tek parçacığın konumları arasındaki ilişki gözlemlenir. Bunun

anlamı kalan sistemin yeniden düzenlenebilmesinin önlenmesi için zaman skalası yeterince kısa olduğunda ya da enerji transferi w yeterince büyük olduğunda elektron momentum yoğunlukları (EMD) hakkında daha hassas bilgiler elde edilebilir. Bunlar Compton sınırını tanımlarken kullanılan IA'nın ön koşullarıdır (Schülke 2007). Compton etkileşimi sınırında momentum transferi $\vec{k}$ doğrultusunda EMD'nin, $n_{\vec{p}}$ 'nin izdüşümü yani CP ve DDSCS arasındaki ilişki

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dw} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \left(\frac{w_2}{w_1}\right) \int d^3p n(\vec{p}) \delta(\vec{p} \cdot \vec{k} - \frac{k^2}{2} - w) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \left(\frac{w_2}{w_1}\right) \frac{1}{k} J(q) \quad (2.23)$$

şeklindedir.

CP, $J(q)$, momentum uzayındaki dalga fonksiyonları cinsinden elde edilebilir. Konum uzayındaki dalga fonksiyonu $\psi(\vec{r})$ ile momentum uzayındaki dalga fonksiyonu $\chi(\vec{p})$ birbirlerine Dirac Transformasyonu ile

$$\chi(\vec{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} \quad (2.24)$$

eşitliği kullanılarak dönüştürülebilir. Böylece $\rho(\vec{p})$, $\rho(\vec{p}) = \chi^*(\vec{p}) \chi(\vec{p})$ olarak bulunur ki böylece CP,

$$J(q) = \int \int_{p_x p_y} n(\vec{p}) dp_x dp_y = \int \int_{p_x p_y} \chi^*(\vec{p}) \chi(\vec{p}) dp_x dp_y \quad (2.25)$$

ile verilir. Bu eşitlik CP ve EMD arasındaki ilişkiyi tanımlamaktadır. Eğer momentum dağılımı küresel simetrik ise

$$J(q) = \int_{p_x} \int_{p_y} \chi^* (\vec{p}) \chi (\vec{p}) dp_x dp_y = 2\pi \int_{|q|}^{\infty} p n(\vec{p}) dp \quad (2.26)$$

dir.

Hem $n(\vec{p})$ hem de $J(q)$ olasılık dağılımı olduğundan bunlar küresel simetrik olmalıdır.

Her iki nicelikte elektronların momentum uzayındaki dağılımları ile ilgili olduklarından

$$\int_{-\infty}^{+\infty} J(q) dq = Z \quad (2.27)$$

normalizasyonu ile ifade edilirler (Weyrich 1975). Burada Z hedef atomun veya molekülün birim hücresinde yer alan elektron sayısıdır. q değeri parçacık kinematiği ile yani enerji ve momentum korunumu yasaları ile elde edilebilir.

Enerji ve momentum korunum yasalarını Şekil 2.4'teki saçılmaya uygulayalım.

$$\hbar k_1 + p_1 = \hbar k_2 + p_2 \quad (2.28)$$

$$\hbar \omega_1 + E_1 = \hbar \omega_2 + E_2 \quad (2.29)$$

elde edilir. Eşitlik 2.28'de p_2 yalnız bırakılır ve her iki tarafın karesi alınırsa Eşitlik 2.30 elde edilir.

$$(p_2)^2 = (p_1)^2 + \hbar^2 k^2 - 2\hbar k q \quad (2.30)$$

Eşitlik 2.29'da transfer edilen enerji miktarı yalnız bırakılır ve $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ ifadesi bu denklemde yerine yazılırsa 2.31 Eşitliği elde edilir.

$$\hbar(w_1 - w_2) = m_0 c^2 \left[\left(1 + \frac{p_1^2}{m_0^2 c^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{m_0^2 c^2} - \frac{2\hbar k q}{m_0^2 c^2} \right)^{1/2} - \left(1 + \frac{p_1^2}{m_0^2 c^2} \right)^{1/2} \right] \quad (2.31)$$

$p_1^2 \ll m_0^2 c^2$ olduğundan dolayı $p_1^2 / m_0^2 c^2$ terimi 1 yanında ihmal edilebilir. Buna göre;

$$\hbar(w_1 - w_2) = m_0 c^2 \left[\left(1 + \frac{p_1^2}{m_0^2 c^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{m_0^2 c^2} - \frac{2\hbar k q}{m_0^2 c^2} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (2.32)$$

ifadesi elde edilir. Saçılma vektörü olan $k = k_2 - k_1$ ifadesinin karesi alınarak enerji cinsinden yazılırsa Eşitlik 2.33 ve 2.34 elde edilir.

$$k^2 = k_2^2 + k_1^2 - 2k_1 k_2 \cos \phi \quad (2.33)$$

$$k^2 = \frac{1}{c^2} (w_1^2 + w_2^2 - 2w_1 w_2 \cos \phi) \quad (2.34)$$

Bu ifadeler düzenlenirse;

$$\hbar(w_1 - w_2) = m_0 c^2 \left[\left(1 + \frac{\hbar^2}{m_0^2 c^4} (w_1^2 + w_2^2 - 2w_1 w_2 \cos \phi) - \frac{2\hbar q}{m_0^2 c^3} (w_1^2 + w_2^2 - 2w_1 w_2 \cos \phi)^{1/2} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (2.35)$$

olur. Bu ifade de düzenlenirse; elektronlara yapılan momentum transfer büyüklüğü olan q niceliği için, gelen ve saçılan fotonların enerjileri cinsinden Eşitlik 2.36 elde edilir.

Burada

$$q = \frac{2\hbar^2 w_1 w_2 (1 - \cos \phi) - 2\hbar(w_1 - w_2)m_0 c^2}{2\hbar c (w_1^2 - w_2^2 - 2w_1 w_2 \cos \phi)^{1/2}} \quad (2.36)$$

olup, eşitlik 2.36 atomik birimler kullanılarak tekrar düzenlenirse

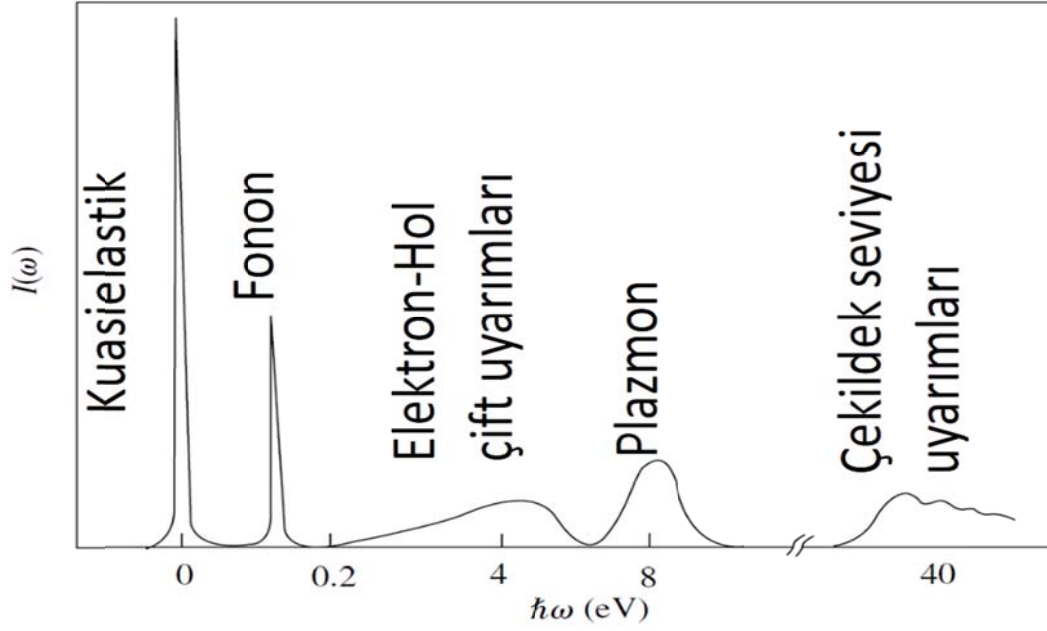
$$q = c \frac{w_2 - w_1 + w_1 w_2 (1 - \cos \phi) / c^2}{(w_1^2 - w_2^2 - 2w_1 w_2 \cos \phi)^{1/2}} \quad (2.37)$$

eşitliği elde edilir.

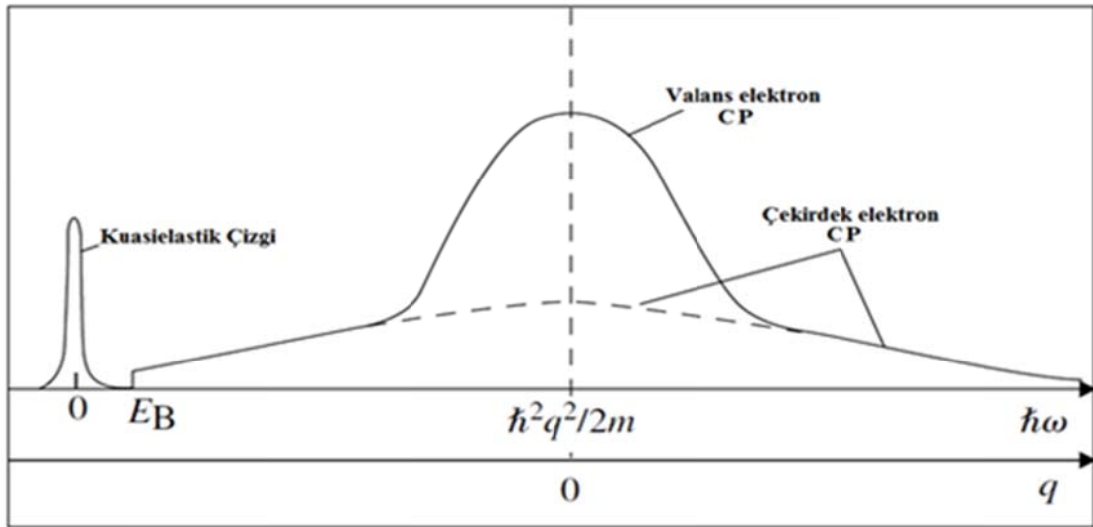
q ve w niceliklerini dikkate alarak nonrezonans inelastik saçılma deneylerini hem fiziksel bilginin önemini anlamamıza hem de deneysel gerekleri tanımlamamıza yardımcı olacak şekilde 4 gruba ayırabiliriz (Schülke 2007).

- i. $qr_c \approx 1$ ve $w \approx w_p$ olduğunda; dalgalanma-yayılım teoremi bakımından valans elektron uyarımları araştırılır ki burada r_c parçacıklar arası mesafe ve w_p plasma frekansıdır.
- ii. $qa \leq 1$ ve $\hbar w \approx E_{BO}$ olduğunda; iç yörünge elektron uyarımları (X-ışını Raman saçılma bölgesi) araştırılır. Burada a iç kabuk orbital yarıçapı ve E_{BO} orbital bağlanma enerjisidir.
- iii. $qd \approx 1$ ve $w \approx w_{ph}$ olduğunda; saçılma iyon uyarımları (fonon) tarafından gerçekleşir. Burada d iyonlar arası boşluk ve w_{ph} fonon frekansıdır.
- iv. $qr_c \geq 1$ ve $\hbar w \geq E_0$ olduğunda; Compton saçılma (Compton Limit) bölgesi olarak adlandırılır. Burada deneyin ana amacı elektronlar momentum dağılımının araştırılmasıdır. E_0 sistemin karakteristik enerjisini göstermektedir (Schülke 2007).

Şekil 2.5 ve 2.6 farklı kategorilerde yer alan nonrezonant inelastik X-ışını saçılma spektrumlarını göstermektedir. Şekil 2.5 düşük momentum transferi ($qr_c \leq 1$) bölgelerini gösteriyorken Şekil 2.6 yüksek momentum transferi bölgesi ($qr_c \gg 1$) olan Compton sınırını göstermektedir. Her iki şekilde de yer alan kuasielastik piki spektrumun başlangıç noktası olup momentum transferinin olmadığı bölge manasına gelmektedir. Şekil 2.5'ten görüldüğü üzere artan momentum transferi ile birlikte elde edilen bilgiler farklı atomik parametrelere (dönme, titreşim, akustik mod, elektronik yapı vb) aittir.



Şekil 2.5. Uyarma spektrumlarının şematik gösterimi



Şekil 2.6. Genel bir Compton spektrumu

Şekil 2.6'da gösterilen spektrumda; $q=0$ etrafındaki bölge, hedef malzemenin değerlilik (valans) elektronlarından kaynaklanmaktadır. Bu bölgelerde bulunan elektronlar iç yörünge elektronlarına nazaran daha düşük hızlara sahip olduklarında daha az miktarda Doppler etkisine maruz kalırlar. $q>0$ olan bölgeler ise iç yörünge

elektronlarından kaynaklanmaktadır. İç yörünge elektronlarının yüksek hızlı olmalarından dolayı Doppler etkisi daha fazla ortaya çıkar. Hedef malzemedeki tüm elektronlar sahip oldukları farklı hızlardan dolayı teorik olarak bu spektrumda rölâtif olarak $q=0$ ve $q=\infty$ değerleri arasına yerleşmesi gerekirken deneysel olarak bir $q=q_{maks}$ değerinde sınırlandırılmalıdır. Bu spektrum doğrudan hedef malzemenin elektronlarının hızlarına bağlı olduğundan dolayı hedef malzemenin elektronlarının momentum dağılımlarının ölçülmesine izin verir.



3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. Deneyisel yöntem

3.1.1. Kaynaklar

CP ölçümlerine başlamadan önce belirlenecek ilk önemli adım foton kaynağı seçimidir. CP ölçümlerinde yaygın olarak kullanılan foton kaynakları şunlardır.

- X-ışınları (farklı anotlu X-ışını tüpleri numunenin atom numarasına göre tercih edilir.
- Radyoaktif kaynaklar
- Sinkrotron kaynaklar

X-ışını kaynaklarının kullanıldığı Compton spektrometrelerinin çözünürlüğü çok iyi olmasına rağmen dalgaboyu ayrımının yapılması hem ölçüm süresini artırır hem de spektrometrenin hassaslığını azaltır (Williams 1977). Yüksek çözünürlüklü spektrometrelere duyulan ihtiyaç 1980'li yılların başında planlanan ve Konstanz Üniversitesi (Almanya) Kimya Bölümünden tamamlanan yüksek çözünürlüklü ve helezonik bükülmüş kristaller ile primer X-ışınlarını odaklayan ilk Johann-Compton spektrometresi Pattison *et al.* (1986 a, b); Suortti *et al.* (1986 a, b, c) III. Nesil sinkrotronlardan olan European Synchrotron Radiation Facilities (ESRF) ID15B Beam Line'ında geliştirilen Johann-Compton spektrometresinin temelini oluşturmuştur (Hiraoka *et al.* 2005). Diğer taraftan (Hiraoka *et al.* 2001) Super Storage Ring 8 GeV (Spring8, Japonya)'da yer alan bir Beamline'da Cauchoiss tipi bir Compton Spektrometresi tasarladılar. III. nesil bu iki sinkrotron merkezindeki Compton spektrometresi hala kullanılmaya devam etmektedir.

CP spektrometrelerinde foton kaynağı olarak sadece birkaç radyoaktif kaynak kullanılmaktadır. Bu radyoizotopların temel özellikleri şunlardır (Williams 1977).

- Kaynaktan yayınlanan toplam radyasyonun büyük bir kısmının izole edilmiş ve enerjisi 40 ile 662 keV aralığında olan gama kaynaklarıdır.
- Kaynakların yarı ömürleri 100 günden daha büyüktür.
- Kaynak şiddetleri ~ 1 Ci'den daha büyüktür.

En yaygın kullanılan radyoaktif kaynaklar ^{241}Am (59.54 keV), $^{123\text{m}}\text{Te}$ (159 keV), ^{198}Au (412 keV) ve ^{137}Cs (662 keV) dir. Bu kaynaklardan ^{241}Am kaynağı 432 yıllık yarı ömründen dolayı %0,1'lik istatistik hatayla CP ölçümleri yapmaya imkân vermektedir. Ge(Li) ve HPGe dedektörlerin verimlerinin 30-60 keV aralığında yaklaşık $\sim 1,0$ olması da bu kaynakların yaygın biçimde kullanılmasının nedenlerindendir. Am-241 kaynağının en büyük dezavantajı 59,54 keV enerjili γ -ışınlarını sadece $\sim 36\%$ ihtimalle yayınlamalarıdır. Nispeten küçük enerjili bu radyoaktif kaynak tarafından şiddetli bir şekilde soğrulmaktadır. Örneğin; 5 mm çaplı ve 1.12 cm derinlikli toplam $\sim 1,3$ Ci şiddetli silindirik kaynak sadece 0,3 Ci şiddetinde ışınları silindir eksenini boyunca yaymaktadır. Weyrich (1975) ilk kez Kirkpatrick ve Ross (1933) tarafından keşfedilen halka kaynak geometrisini kullanarak kaynak iç soğurma problemini minimize etti. Bu kaynaklar disk kaynaklara göre daha şiddetli γ -ışını üretirler. ^{241}Am kaynaklarının diğer bir dezavantajı ise 59,54 keV'luk fotonlar için fotoelektrik-Compton tesir kesiti oranının $Z > 15$ olan elementler için yüksek olmasıdır. Bu nedenle bu numunelerde ölçüm süresi artmaktadır. $^{123\text{m}}\text{Te}$ kaynakları bu sorunu ortadan kaldırır. Ancak Te kaynaklarının fiyatlarının yüksek ve yarı ömürleri ^{241}Am 'a göre çok kısadır. Ancak $^{123\text{m}}\text{Te}$ kaynaklarından yayınlana γ -ışınları yüksek enerjilerinden dolayı numune içine daha iyi nüfuz ederler ve fotoelektrik-Compton tesir kesiti oranları daha küçüktür. Ayrıca geri tepen yüksek enerjili elektronlar nedeniyle IA hesaplamaları deneyde daha iyi uyuşmaktadır. Son zamanlarda sık sık kullanılan ^{137}Cs hem tek enerjili 662 keV'lik γ -ışınları yayınlamaları ki bu periyodik cetvelde yer alan bütün elementlerin CP ölçümleri için onu elverişli kılar. Ancak yüksek enerjili γ -ışınları zırlamanın zorluğu kullanımın kısıtlanmasına neden olur (Williams 1977).

Bu çalışmada, uyarı kaynak olarak dış yarıçapı 46,6 mm, kalınlığı 8,5 mm olan 185 GB aktiviteli ^{241}Am halka kaynak kullanıldı. Bu kaynağın özellikle kaynak içi saçılımlarının

bilinmesi (Weyrich 1975) ve ortama yaydığı γ -ışınlarının zırlama kolaylığından dolayı bu kaynağın tercih edilme nedeni olmuştur.

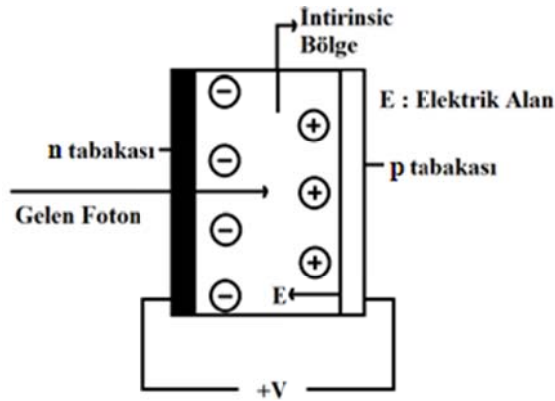
3.2. Dedektörler

X-ışını çalışmalarında kullanılan en yaygın dedektörler; sintilasyon sayaçları (NaI(Tl) ve CsI(Tl)) ve yarıiletken (Si(Li), Ge(Li), HPGe) detektörleridir. Bu çalışmada bir HPGe dedektör saçılmış fotonları dedekte etmek için kullanılmıştır.

3.2.1. Yarıiletken dedektörler

Yarıiletken dedektörler, kristalin aktif bölgesi içinde bir fotonun soğrulması esasına göre çalışırlar. Dedektöre gelen fotonlar, dedektör kristali önünde yer alan altın elektrot ve ölü tabakayı geçerek deplasyon bölgesinde bulunan Ge veya Si atomlarını iyonlaştırır. Böylece iyon çiftleri oluşturulur. Katıhal dedektörüne uygulanan ters beslem gerilimi nedeniyle oluşan elektrik alan, bu elektron-hol çiftlerini toplar. Ters beslemeden ötürü elektronlar n-tipi, holler ise p-tipi bölgeye yönelirler (Şekil 3.1). Sonuç olarak dedektör içine giren foton enerjisiyle orantılı sayıda elektron-hol çifti meydana gelir. Dedektörlerde kullanılan sayaç maddesinde elektron-hol çifti veriminin büyük olması tercih edilir. Bu verim elektron-hol çifti başına düşen enerji miktarı olarak tanımlanmaktadır. Katıhal sayaçlarında bir amplifikasyon olmadığından bu sayaçlarda alçak gürültülü ve yüksek kazançlı ön amplifikatöre ihtiyaç duyulmaktadır. Bu işlem genellikle FET (alan etkili tranzistör) kullanılarak yapılmaktadır. FET, toplanan yükleri potansiyel pulslarına dönüştürmektedir. Katıhal dedektörünün hassas hacminde soğrulan fotonlar, enerjileriyle orantılı olarak elektrik sinyallerine çevrildikten sonra ön yükselticiye gelirler. Ön yükselticiden geçen elektrik sinyalleri sırasıyla önce ana yükselticiye sonrada çok kanallı analizöre ulaşırlar. Buraya gelen sinyallerde, elektronik gürültü, yük taşıyıcılarının sayısındaki istatistiki dalgalanmalar ve tamamlanmamış yük toplanmalarından dolayı genişlemiş çizgi spektrumu oluştururlar.

Yarıiletken dedektörlerinin kristalleri oda sıcaklıklarında sızıntı akımlarına neden olmaktadır. Bu sızıntı akımı spektrumda istenmeyen piklere neden olduğu gibi spektrumun çözünürlüğünü de ciddi oranda etkilemektedir. Bu nedenle yarıiletken dedektörler sıvı azot sıcaklığında (-196°C) çalıştırılırlar. Ayrıca bu dedektörler nem, toz gibi dış etkilere korunmak adına daima vakum altında tutulurlar. Bu tip dedektörlerin çözünürlükleri yarı iletken malzemenin yasak enerji aralığına, kusur oranına ve kristalin boyutuna bağlıdır. Kristalde oluşturulan elektron-hol çifti sayısı N radyasyon enerjisi ε ve elektron hole çifti oluşturmak için gerekli minimum enerji olan Δ ile ilişkilidir. $N \approx \varepsilon / \Delta$ ve çözünürlük $R(FWHM) = 2.355(F\varepsilon\Delta)^{1/2}$ 'dir. Burada iyi bir Ge dedektör için Fano Faktörü olan F 'nin $\sim 0,1$ olması gerekir. Özellikle yüksek enerjilerde, kristaldeki kusurlar ve kirlilikler çözünürlüğü etkileyen parametrelerdendir. Çünkü bazı gelen fotonlar kristalde Compton saçılmasına uğradıktan sonra kristalden ayrılır. Sadece geri tepen elektronlar ölçülebilirler. Diğer süreçler ise kristalin yüzeyinden elektron kaçması, elektron ve hollerin yeniden birleşmeleridir (rekombinasyon) (Williams 1977). Şekil 3.1 dedektör kristaline ulaşan bir fotonun, yarıiletken malzeme ile etkileşimini göstermektedir.



Şekil 3.1. Katıhal dedektörünün şematik görünümü

Silisyum ve germanyum kristalleri kullanılarak elde edilen yarıiletken dedektörlerden, Si kristalli dedektörler, Ge kristalli dedektörlere göre düşük enerjilerde daha verimlidirler. Ge dedektörlerin verimleri 40-60 keV aralığında yaklaşık olarak %99 mertebelerindedir. Ge kristali kullanılarak elde edilen iki tür dedektör mevcuttur. Bunlar yüksek saflıktaki germanyum dedektörleri (HPGe) ve Li sürüklenmiş Ge(Li) dedektörleridir. Bu

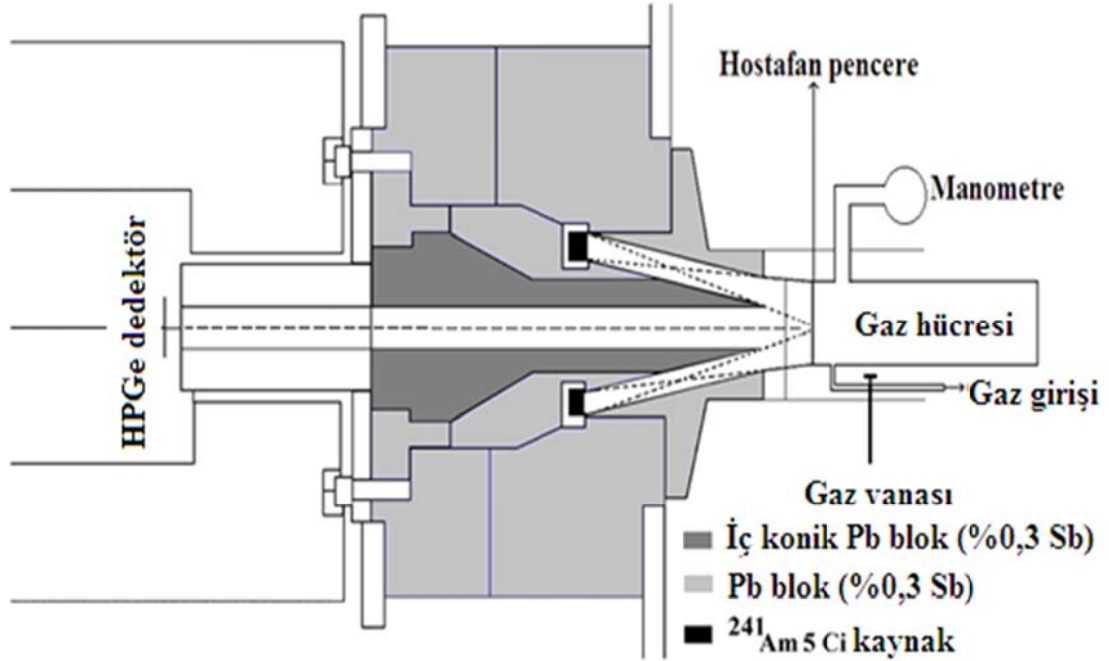
dedektörler; eş eksenli (Coaxial), düzlemsel (Planar) ve kuyu tipi (Well type) gibi geometrilere sahiptirler. Bu tür dedektörler, X-ışını deneylerinde farklı verim, enerji aralığı ve enerji çözünürlüğü değerleri sunmaktadır.

Bu tez çalışmasında saçılan fotonları ölçmek için bir HPGe (Yüksek saflık Germanyum) dedektörü kullanıldı. Çünkü 59,54 keV enerjili γ -ışınlarının pikleri bu dedektörün en verimli olduğu enerji aralığında olduğundan, hesaplamalarda dedektör verimi düzeltilmesine ihtiyaç duyulmamaktadır. Bu dedektör, çevresel etkileri elimine etmek için kurşun kolimatör içine konulmuştur. Dedektörün ön yüzeyinde kalınlığı 0,127 mm ve yarıçapı 13,97 mm olan hassas berilyum pencere bulunmaktadır. Ölü tabaka kalınlığı ise 500 Å, kristalinin kalınlığı 7 mm ve yarıçapı 7,981 mm'dir. HPGe dedektörün çalışma gerilimi ise -1500 V'dur.

3.3. Zırlama, kolimatörler ve deney geometrisi

Compton saçılma deneylerinde, fotonun saçılma açısı 180^0 olduğu zaman, maksimum enerji kayması Δw elde edilir ve yine bu açı değerinde profil genişliğinin dedektör çözünürlüğüne oranı en yüksek değerdedir. Bu nedenle CP deneylerinde saçılma açısı mümkün olduğunca 180^0 'ye yakın olmalıdır. Saçılma açısını 180^0 'ye yakın tutmaya çalışmak Compton spektrometreleri üzerine önemli kısıtlamalar getirmektedir. Bu tez çalışmasındaki ortalama saçılma açısı $\sim 165^0$ olarak belirlenmiştir. Saçılma açısının 180^0 civarında olduğu bir Compton spektrometresinde, numune odasından ve fotonların geçtiği tüm optik yollardan istenmeyen saçılmalar meydana gelmektedir. Bu istenmeyen etkilerden kurtulmak için, deney sistemine ait tüm parçalar (kaynak tutucu, kolimatörler, zırlama malzemeleri, numune tutucu, vb) iyi bir soğurucu olan kurşundan yapılmalıdır. Kaynak şiddetine göre yapılacak bir hesaplama ile kullanılması gereken kurşun kalınlığı hesaplanabilir. Ancak Compton spektrometrelerinde istenmeyen etkileri yok etmek için deney geometrisinde herhangi bir değişme yapmaksızın numune olmadan bir boş ölçüm (background) alınmalıdır. İstenmeyen etkileri yok etmenin diğer bir yolu ise Monte-Carlo simülasyonunu ile çevresel etkilerin ve istenmeyen saçılmaların tahmin edilmesidir.

Numune odası, atmosferin etkilerini ortadan kaldırmak için vakuma alınmalıdır. İnce berilyum foil ya da mylar film, numune odasının penceresi (γ -ışınlarının soğrulmadan girip çıkması için) olarak kullanılabilir. Vakum odasının ve blokların tasarımı toplam çözünürlüğe geometrik katkı olarak ekleneceğinden bunların doğru ve hassas biçimde yapılması oldukça önemlidir (Williams 1977). Şekil 3.2’de deney geometrisinin şematik görünümü verilmiştir. Bu şekilde gösterilen bazı kurşun bloklara belirli yüzdelerde Sb katılarak Pb blokların sertlikleri artırılmıştır. Bu deney geometrisi klasik 2π geometrisi olarak adlandırılmaktadır. Bu geometrideki en önemli noktalardan birisi numune, kaynak ve dedektörün eş eksenli (concentric) olmasıdır. Yine bu şekilde yer alan Hostafan pencere organik tabanlı bir malzeme olup çok az miktarda radyasyon soğurmasına sahiptir. Bu pencere, gaz hücresinin dışarı ile olan ilişkisini keserek sadece yüksek enerjili fotonların bu odaya girmesine imkân vermektedir. Bu deney geometrisinde ki en büyük zorluklardan birisi, numune merkezinin net olarak bilinmemesidir. Gaz hücresinin uzunluğu 24 cm olduğundan dolayı numune merkezi belirlemek oldukça zordur.



Şekil 3.2. Deney sisteminin iç yapısının şematik görünümü

Şekil 3.3'te gaz hücresi görülmektedir. Gaz girişine bağlanan bir tüp yardımıyla alınan gazın basıncı sisteme bağlanmış olan bir analog manometre ile ölçülmüştür. İlk yapılan deney planlamalarında 20-25 bar gibi yüksek basınçlara ulaşılması amaçlanmaktaydı. Ancak gaz hücresinin üst kısmında yer alan Hostafan pencere 6 bar basınç değerinde patlamıştır. Bu nedenle deneyler 1-5 bar aralığında 1 bar aralıklarla yapılmıştır. Hostafan tamiri sonrası sistemde bağlantı noktalarından çok sayıda gaz kaçaqları olduğu tespit edildi. Bu gaz kaçaqları özel yapıştırıcı malzemeler ile giderilmeye çalışılsa da, sistemdeki gaz basıncı zamanla düşmekteydi. Gaz hücresi içerisindeki basıncın sabit kalması için sisteme bağlı olan tüp daima istenilen basınç değerinin üstünde tutulmuştur. Sisteme bağlı olan manometrenin değeri ise istenilen değere ayarlanmıştır. Bu şekilde sistemde eksilen gaz miktarı manometrenin izin verdiği oranda gaz odasına alınarak basıncın sabit tutulması sağlanmıştır.



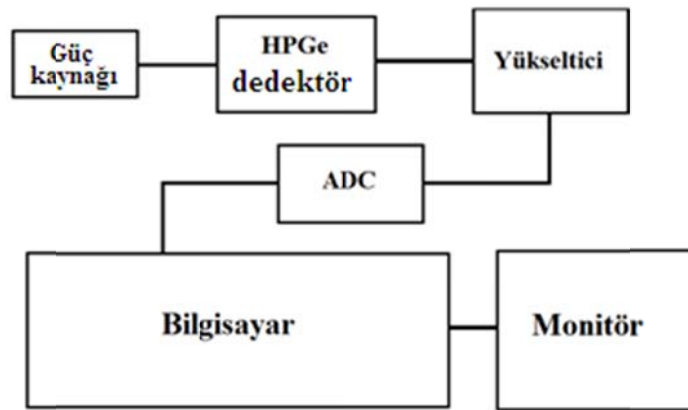
Şekil 3.3. Deneylerde kullanılan gaz hücresi

3.4. Elektronik

Spektrometrelerde kullanılan elektronik kısımlar NIM (Nuclear Instruments Modul) modülleridir. Ön yükseltici daima dedektörün bir parçası olarak satılır. Çünkü ön yükseltici yükseltmenin ilk kısmıdır ve Ge kristal ile aynı blok içine konulur ve o da Ge kristal gibi soğutulur. Elektronik kısmın geri kalan parçaları dedektör güç kaynağı (HV), yükseltici (amplifier), analog dijital dönüştürücü (ADC) ve çok kanallı analizör (MCA)'dır. Ön yükselticiler farklı üreticiler tarafından üretildiklerinden dolayı birbirleriyle en iyi uyumu sağlayan dedektör, ön yükseltici ve yükseltici kullanılmalıdır. Tüm durumlarda yükseltici mükemmel lineerliğe, sabitliğe ve düşük gürültüye sahip olmalıdır. Aynı zamanda dedektör güç kaynağı da düşük gürültüye ve sabit duruma sahip olmalıdır. ADC ve MCA genel olarak birbirleriyle uygun olacak şekilde olmalıdır. Birçok spektrometre kanal başına 40-60 eV'lik kazancı kullanırlar (Williams 1977).

3.4.1. Sayma sistemi

Bu çalışmada Şekil 3.4'te görüldüğü üzere bir sayma sistemi, güç kaynağı, dedektör (ön yükseltici ile birlikte), yükseltici, analog dijital dönüştürücü (ADC) ve Bilgisayar'dan oluşan sistem kullanıldı. ORTEC firması tarafından Windows işletim sistemleri için üretilen "Maestro" yazılımı ile spektrometreden veri alma işlemi ve spektrumların ön değerlendirmeleri yapıldı.



Şekil 3.4. Sayma sistemi

3.4.2. Yüksek voltaj güç kaynağı

Dedektör kristali üzerinde meydana gelen elektron-hol çiftlerini toplamak için bir elektrik alana, bunun içinde yüksek bir gerilime ihtiyaç vardır. Tüm dedektörler farklı enerji seviyelerinde farklı verim değerlerine sahiptir. Ayrıca her dedektörün optimum çalışma gerilimi vardır ki, bu gerilim değeri üretici firma tarafından belirlenir. Bu değer birkaç yüz volttan -4000 V'a kadar değişebilir. Bu tez çalışmasında, Tennelec TC 950 model güç kaynağı kullanılarak HPGe dedektöre -1500 V'luk bir gerilim uygulanmıştır.

3.4.3. Ön yükseltici

Yeni nesil katıhal dedektörleri, yüke duyarlı bir ön yükseltici ile kullanılırlar. Ön yükselticiler, dedektörden gelen yük pulsunu potansiyel pulsuna dönüştürürler. Ön yükselticiden çıkan pulsların genlikleri, dedektörde toplanan yük miktarı ile doğru orantılı olmalıdır. Şayet dedektöre gelen fotonlar tam olarak dedektör içinde soğurulmuş ise bu genlik değeri yine fotonun enerjisiyle orantılı olmalıdır. Ön yükselticilerde tıpkı dedektörler gibi sıvı azot sıcaklığında tutulmalıdırlar ancak sistemin daha verimli olması adına ön yükseltici dedektörden biraz daha sıcak tutulabilir.

3.4.4. Yükseltici

Ön yükselticiden gelen pulsların genlikleri yeterince büyük olmadığı için ek bir yükseltme ihtiyacı ortaya çıkmaktadır. Hemen hemen tüm deney sistemlerinde yer alan yükseltici ünitesinin ana görevleri; ön yükselticinin çıkış puls genliklerini ayırmak ve bunları uygun voltaj seviyelerine yükseltmek, puls genliğiyle uyarıcı foton arasındaki ilişkiyi bozmadan işlemi düzenli bir hale sokmaktır. Bu tez çalışmasında Tennelec marka TC 244 modellenli yükseltici kullanılmıştır. Çıkış sinyalleri pozitif polariteli olacak şekilde ayarlanmıştır. Ayrıca puls genişliğini belirleyen en önemli parametlerden birisi olan “Shaping time” sabiti 12 μ s olarak ayarlanmıştır.

3.4.5. Analog dijital dönüştürücü (ADC)

ADC cihazının sayma sistemlerinde kullanım amacı yükselticiden gelen analog pulsu, onun genliğiyle dolayısıyla da uyarıcı X-ışını fotonunun enerjisiyle orantılı olarak tam sayıya dönüştürmektir. Sayılmış olan tüm pulslar yükseklikleri kadar sayı analizörün hafızasına birikir. Bu tez çalışmasında ORTEC 926 model ADC kullanılmıştır.

3.4.6. Çok kanallı analizör (MCA) ve kalibrasyon

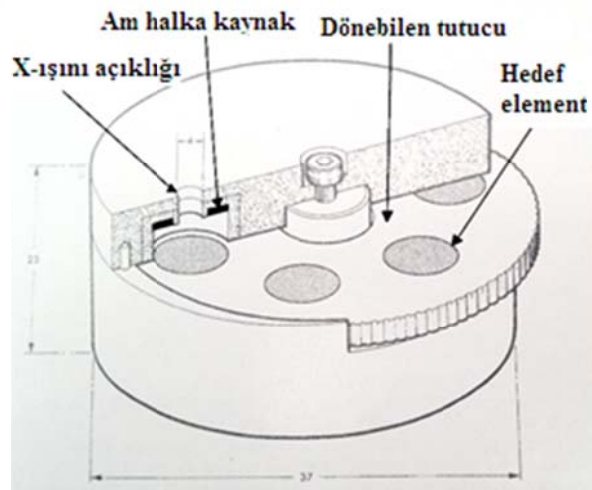
ADC tarafından sayısal hale getirilen pulslar çok kanallı analizör tarafından enerjilerine uygun olacak şekilde kanallara yerleştirilirler. Gerçekte, her kanal depolama yapmak için kullanılan bir kutudur. X-ışını deneylerinde, bu kanallara düşen fotonların enerjileri kalibrasyon işlemi ile tanımlanır. Kalibrasyon işlemi deney başlamadan önce uygun enerjideki elementlerin karakteristik X-ışını pikleriyle veya test kaynaklarından yayınlanan γ -ışınları ile yapılır.

Bu tez çalışmasında kalibrasyon işlemlerinde ^{241}Am kaynağının yayınladığı fotonlara ilave olarak VEX (Variable Energy X-ray Source) adı verilen ve farklı X-ışını enerjilerini tek kaynaktan yayınlayan özel bir kaynak kullanılmıştır. VEX kaynak tabanda 10 mCi'lik bir ^{241}Am radyoaktif kaynak ve bunun üzerinde ikincil X-ışınlarını yayımlanan hareketli bir sistemden ibarettir. X-ışını penceresinin önüne getirilen element alt tabakada bulunan ^{241}Am radyoaktif kaynağının 59,54 keV'lik karakteristik fotonları tarafından uyarılarak farklı X-ışınlarının yayımlanması sağlanır. Burada kullanılan VEX kaynağın enerji aralığı 8,04 keV'dan 50,65 keV'a kadardır. Kalibrasyon işleminde VEX kaynak enerjilerine ilave olarak ^{241}Am elementinin yaydığı 17,80, 26,35 ve 59,537 keV'lik gama ışınları ile Ba elementinin 32,195 keV'lik gama ışınları kullanılmıştır. Deneylerde kullanılan spektrometrenin yapımı aşamasında numune ve dedektör arasındaki kolimatörün iç çeperlerine sürülen çok az miktarda BaSO_4 bileşiğinden yayınlanan Ba K α X-ışını referans pik olarak kullanılmaktadır. Bu X-ışınları aynı zamanda dedektörün kalibre edilmesinde büyük öneme sahiptir.

Kalibrasyonda kullanılan VEX kaynaktaki elementlerin enerjileri Çizelge 3.1’de, VEX kaynağın şematik görünümü ise Şekil 3.5’te verilmiştir.

Çizelge 3.1. VEX kaynak hedef element enerjileri

Hedef Element	Enerji (keV)	
	K_{α}	K_{β}
Cu	8,04	8,91
Rb	13,37	17,97
Mo	17,44	19,63
Ag	22,10	26,99
Ba	32,19	36,55
Tb	44,23	50,65



Şekil 3.5. VEX kaynak şematik görünümü

3.5. Numuneler

Bu tez çalışmasında He, Ar, N₂, CO₂ ve O₂ gazları kullanılmıştır. Gazların saflığı %99,9’dan daha büyüktür. Gazlar numune odasına alınarak içerideki basınç 1, 2, 3, 4 ve 5 bar’a ayarlanmıştır. Gaz numuneler, katı ve sıvı numunelere oranla daha az kararlı

olduklarından dolayı basınç değeri sürekli değişim gösterme eğilimindedir. Gaz hücresindeki basıncın sabit tutulması adına uygulanan işlem adımları daha önce ifade edimişti.

Bu tez çalışması sırasında kullanılan numune odası önce vakuma alınarak içindeki hava boşaltıldı. Ardından gaz hücresine bağlanan tüp yardımıyla gazlar numune odasına alınmışlardır. Gazların basınç değeri istenilen değere ayarlanarak Compton spektrumları $4,2 \times 10^5$ s ölçüldü. Bu süreçte numune odasının basıncı düzenli zaman aralıkları ile kontrol edilmiş ve bu süreçte ortam sıcaklığı Goerz marka bir termoscript ile düzenli olarak ölçüldü. Ortam sıcaklığının bütün ölçümler boyunda aynı olduğu tespit edildi.

Görüldüğü gibi sıcaklık sabit olduğundan sabit hacimli numune odası içerisinde hapsolan atom veya molekül sayısı basınç değiştiğinde değişmelidir. Her bir basınç değerindeki tanecik sayısını bulmak için Van Der Walls eşitliği kullanılır ki gerçek gazlar için bu eşitlik

$$(P^b + \frac{n_m^2 a}{v_h^2})(v_h - n_m b) = n_m R T_s \quad (3.1)$$

ile verilir. Burada ; P^b basınç, v_h hacim, T_s sıcaklık, n_m madde miktarı (mol cinsinden) ve R gaz sabitidir. a ve b değerleri ise Van Der Walls sabitleridir. Bu sabitler Çizelge 3.2’de verilmiştir. Ayrıca bu sabitler kullanılan gazların birer karakteristiği olup sıcaklıktan bağımsızdırlar.

Çizelge 3.2. Tez çalışmasında kullanılan gazların Van der Waals sabitleri (Reid *et al.* 1987)

Gaz	a (Pa m ⁶ /mol ²)	b (m ³ /mol)
He	0.00346	0,0000238
Ar	0.13550	0,0000320
CO₂	0.36580	0,0000429
O₂	0.13820	0,0000319
N₂	0.13700	0,0000387

Çizelge 3.2’de verilen birimler SI birim sistemine dönüştürülmek istenirse a katsayısı için $1 \text{ bar.l}^2 / \text{mol}^2 = 0.1 \text{ Pa m}^6 / \text{mol}^2$ ve b katsayısı içinse $1 / \text{mol} = 0.001 \text{ m}^3 / \text{mol}$ dönüşümleri kullanılabilir.

Her bir gaz için farklı değerde olan öyle bir sıcaklık vardır ki bu sıcaklığın üzerinde bulunan gaz hiçbir basınç altında sıvılaştırılamaz. Her gaz için ayrı olan bu sıcaklığa kritik sıcaklık adı verilir. Kritik sıcaklık, bir gazın basınç uygulanarak sıvılaştırılabileceği en yüksek sıcaklıktır ve K_k ile gösterilir. O halde kritik sıcaklığın manası şudur: Bu sıcaklığın altındaki sıcaklıklarda, gaz halindeki bir cismin basıncı artırılmak üzere sıvılaştırılabilir. Kritik sıcaklığın üzerinde gaz halinde bulunan cisim, çok büyük basınçlar uygulansa bile sıkıştırılamaz. Tez çalışmasında kullanılan gazların kritik sıcaklık ve kritik basınç değerleri Çizelge 3.3’de verilmiştir.

Çizelge 3.3. Tez çalışmasında kullanılan gazların kritik sıcaklık ve kritik basınç değerleri (Weast 1971)

	Kritik Sıcaklık (K _k)	Kritik Basınç (Pa)
He	5,2000	2,37E+05
Ar	150,75	4,94E+06
CO₂	304,15	7,63E+06
O₂	154,65	5,12E+06
N₂	126,25	3,45E+06

Van Der Walls eşitliği kullanılarak hesaplanan gaz hücresindeki hapsolmuş tanecik sayıları Çizelge 3.4'te verilmiştir. Burada gaz hücresi ve ortam şartları için $T_s = 297,15$ K, $v_h = 0,00042731 \text{ m}^3$ ve $R = 8,3144621 \text{ J}/(\text{mol.K})$ 'dir.

Çizelge 3.4. Farklı basınçlarda gaz hücresinde bulunan tanecik sayıları

	Tanecik sayısı ($\times 10^{22}$)				
	Basınç (bar)				
	1	2	3	4	5
He	1,040486	2,078979	3,115486	4,150012	5,182563
Ar	1,040137	2,077586	3,112359	4,144464	5,173914
CO₂	1,039688	2,075798	3,108347	4,137354	5,162837
O₂	1,040144	2,077615	3,112423	4,144578	5,174091
N₂	1,039837	2,076391	3,109677	4,139710	5,166507

3.6. Compton profilin deneysel olarak elde edilmesi

Compton profil deneylerinde ölçülen Compton spektrumu DDSCS ile orantılıdır. Bu tesir kesiti daha önce tanımlandığı gibi birim katı açı içinde ve birim enerji aralığında saçılan fotonların sayısıdır. Bu değer doğrudan hedef malzemenin elektronlarının

momentum yoğunluğunu belirten CP ile doğru orantılıdır. Eşitlik (2.16) bu iki nicelik arasındaki orantıyı göstermektedir.

CP değerlerini elde etmek için ölçülen ham spektrum $M(w)$ için düzeltmeler yapılmalıdır. Buna göre düzeltilmiş spektrum $C(w)$ dır. Eşitlik 3.2 de $B(w)$ boş ölçüm, $A(w)$ numune öz soğurması, $G(w)$ verim ve $X(w)$ Compton tesir kesitidir

$$C(w) = G(w)X(w)A(w)[M(w) - B(w)] \quad (3.2)$$

$A(w)$ numune öz soğurma düzeltme faktörü, numune içine giren ışınların şiddetlerinin azaltılması ve saçılan ışınların ayrılmalarından dolayı gereklidir (Weyrich 1975) ve

$$A(w_2) = \frac{[\mu(w_2) \csc n_1 + \mu(w_1) \csc n_2]t}{1 - \exp\{-t[\mu(w_2) \csc n_1 + \mu(w_1) \csc n_2]\}} \quad (3.3)$$

ifadesiyle verilir. Burada t numune kalınlığı, μ lineer soğurma katsayısı ve n_1 ve n_2 sırasıyla numune yüzeyine göre gelme ve saçılma açılarıdır. Enerjiye bağlı olan lineer soğurma katsayıları WinXCOM'dan alınabilir.

$X(w_1, \varphi, q)$ çarpmanı rölativistik Compton tesir kesiti düzeltme terimidir. Bu terim, gelen elektronun saçılmna doğrultusundaki momentum bileşeni q ve CP'i değiştiren tek saçılma ihtimaliyetini temsil eder ve bunun üzerindeki belirsizlik, elektronun bağlı olmadığı varsayımı ile rölativistik düzeltme terimi ile ortadan kaldırılmıştır. Bu terim

$$X(w_1, \varphi, q) = \frac{1}{2c^2} \frac{w_2}{w_1} [c\sqrt{w_1^2 + w_1^2 - 2w_1w_2 \cos \varphi + q(w_1 - w_2)}]^{-1} . B \quad (3.4)$$

ile verilir. Burada

$$B = \frac{w_1(1+q/c)}{w_2(1-q/c)} + \frac{w_2(1-q/c)}{w_1(1+q/c)} + 2c^2 \left[\frac{1}{w_1(1+q/c)} - \frac{1}{w_2(1-q/c)} \right] + c^4 \left[\frac{1}{w_1(1+q/c)} - \frac{1}{w_2(1-q/c)} \right]^2 \quad (3.5)$$

ile verilir.

Yapılan tüm düzeltme işlemlerinden sonra bulunan $C(w)$ terimi dedektör çözünürlük fonksiyonu olan $R(w)$ ile dekonvüle edilir. Dekonvülyasyon işlemi yapıldıktan sonra elde edilen değerler normalize edilerek CP yani $J(q)$ değerleri elde edilir. Bu eşitlikte T normalizasyon sabiti olup * konvolüsyon işlemini gösterir.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} J(q) dq = \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} (C(w) * R(w)) dw \frac{dq}{dw} = N \quad (3.6)$$

Compton profil eğrisi altında kalan alan numunenin birim hücresindeki elektron sayısına eşittir (Weyrich 1975).

3.7. Hata analizi

Compton profil hesaplamalarında hata analizi nispeten daha karmaşıktır. Sonuç Profil üzerindeki hatalar çok farklı etmenlerden kaynaklanmaktadır. Bu etmenler boş ölçüm, lineerlikten sapma, skala, kayma ve dekonvülyasyon hatalarıdır. Bu hatalar

- Boş ölçüm hatası : $J'(q) = J(q) + \beta J(0)$ (3.7)

- Lineerlikten sapma hatası : $J'(q) = (1 - \alpha q)(Jq)$ (3.8)

- Skala hatası : $J'(q) = J[(1 + \mu)q]$ (3.9)

- Kayma hatası : $J'(q) = J(\pi + q)$ (3.10)

- Dekonvülyasyon hatası : $J'(q) = J(q) * R(q, \sigma) + \delta(q)$ (3.11)

ile verilir. Bu denklemlerdeki $J(q)$ doğru profili, $J'(q)$ hatalı ölçülen profili, β, α, μ ve π küçük sabit nicelikleri, $R(q, \sigma)$ standart sapmayı ve δ rastgele hatasına sahip olan çözünürlük fonksiyonunu simgelemektedir (Williams 1977). Bu beş denklemden ilk dört tanesi $q=0$ daki profil değeri referans alınarak normalize edilebilir:

$$\frac{N'}{2} = \int_0^{q_m} J(q) dq \quad (3.12)$$

$$\varepsilon = \Delta J(0) / J(0) \quad (3.13)$$

İfadeleri dikkate alınarak yukarıdaki hata kaynakları aşağıdaki gibi yazılabilir.

3.7.1. Boş ölçüm hatası

$$\frac{N''}{2} = \int_0^{q_m} J(q) dq + \int_0^{q_m} \beta J(0) dq = \frac{N'}{2} \beta J(0) q_m \quad (3.14)$$

olup buradan

$$\varepsilon_\beta = \frac{N'' - N'}{N'} = \frac{2\beta J(0) q_m}{N'}$$

(3.15)

olarak elde edilir.

3.7.2. Lineerlikten sapmadan kaynaklanan hata

$$\frac{N''}{2} = \int_0^{q_m} J(q) dq + \alpha \int_0^{q_m} q J(q) dq \cong \frac{N'}{2} + \frac{\alpha N < q >}{4} \quad (3.16)$$

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\alpha < q >}{2} \quad (3.17)$$

ile verilir. Burada ε_α , $< q >$ ifadesinin beklenen değer probleminden yola çıkılarak çözülür.

3.7.3. Skala hatası

$$\frac{N''}{2} = \int_0^{q_m} J[(1+\mu)q] dq = \frac{N'}{2(1+\mu)} \quad (3.18)$$

olacak şekilde yazıldığında

$$\varepsilon_\mu \cong \mu \quad (3.19)$$

olarak elde edilir.

3.7.4. Kayma hatası

$$\frac{N''}{2} = \frac{N'}{2} - \int_0^\pi J(q) dq \cong \frac{N'}{2} - \pi J(0) \quad (3.20)$$

olarak yazıldığında

$$\varepsilon_\pi = \frac{2J(0)}{N'} \quad (3.21)$$

bulunur.

3.7.5. Dekonvülyasyon hatası

Compton profil deneylerindeki dekonvülyasyon hatasının tahmini oldukça zor ve karmaşık bir problemdir. Bu işlemdeki hatalar σ standart sapması veya δ 'dan kaynaklanmaktadır. σ standart sapması çözünürlük fonksiyonunun tam olarak bilinmemesinden kaynaklanır. γ emisyon çizgisinin ölçülmesi, γ -ışını çalışmalarında kuyruk bölgesinin çıkarılması, X-ışını çalışmalarında α -doublet'in tahmini ve her iki durumda da gelen fotonların açısal dağılımı $R(q, \sigma)$ belirsizliğine neden olur. δ belirsizliği ise rastgele hatalardan kaynaklanmaktadır (Williams 1977).

3.8. Yüzde değişim hesabı

Basıncın hedef malzeme üzerindeki etkisini ortaya koymak adına yapılan yüzde değişim grafikleri

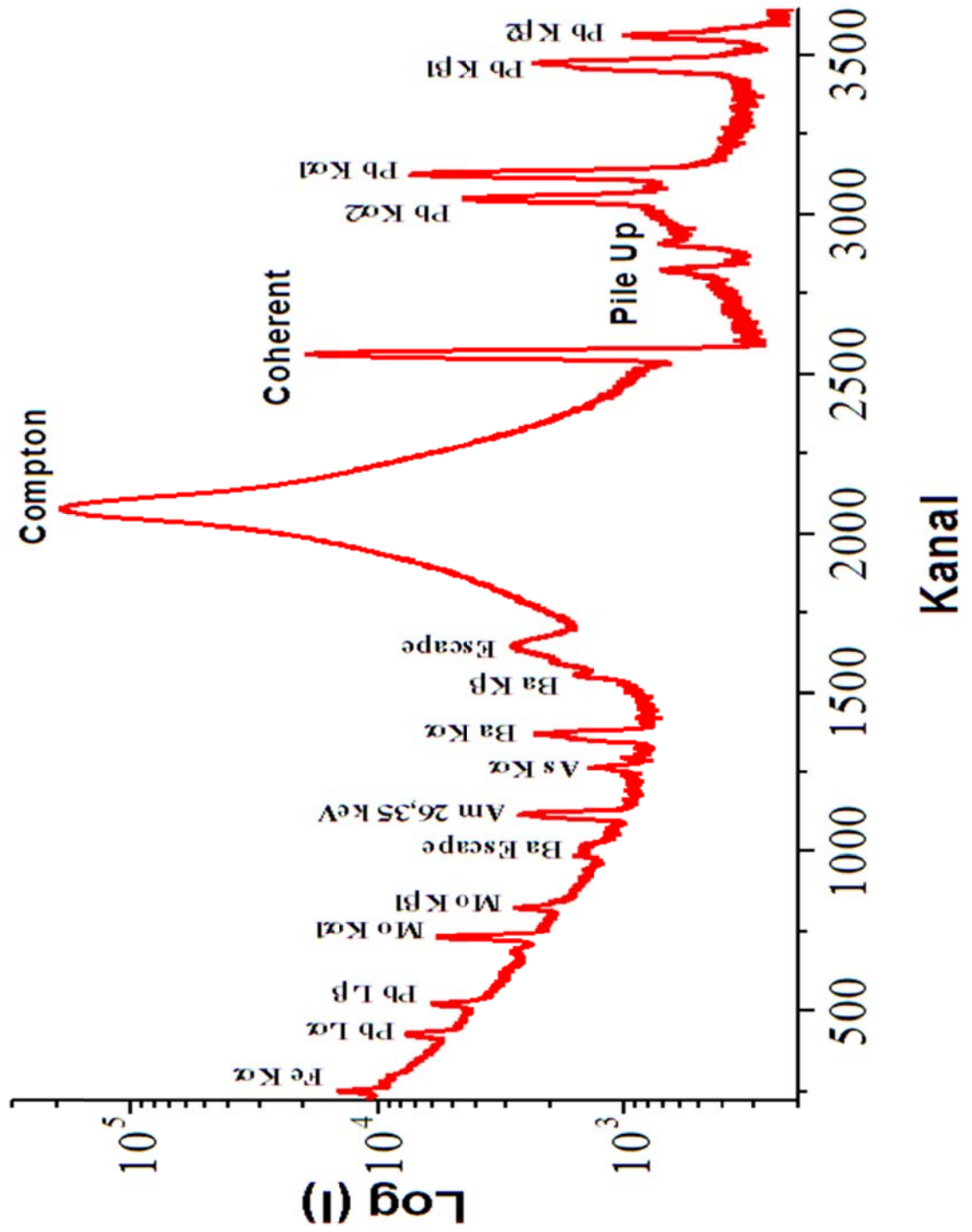
$$\Delta J(q) = \frac{J(q)_n - J(q)_{1bar}}{J(0)_{1bar}} \times 100 \quad (3.22)$$

eşitliği kullanılarak çizilmiştir.

4. ARAŞTIRMA BULGULARI

4.1. Farklı basınçlarda He, N₂, O₂, Ar ve CO₂ gazlarının Compton profil ölçümleri

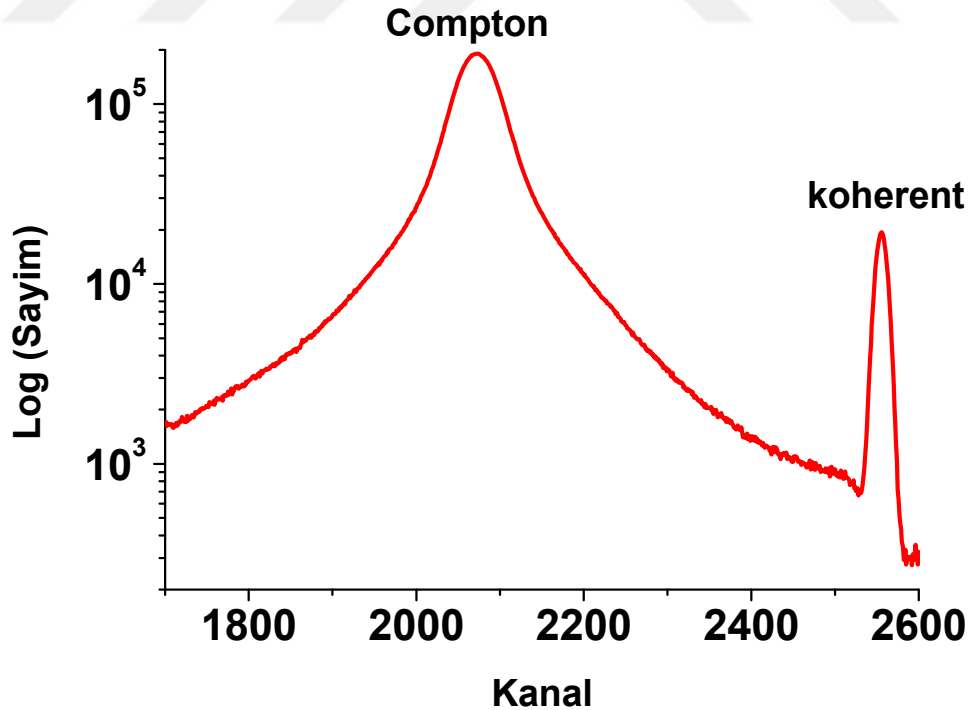
18,5x10¹⁰ Bq'lik ²⁴¹Am radyoaktif kaynak kullanılarak yapılan bu tez çalışmasında He, N₂, O₂, Ar ve CO₂ gazlarının 1, 2, 3, 4 ve 5 bar basınç altındaki Compton profilleri ölçülerek basıncın, bu gazların Compton Profillerine olan etkisi incelenmiştir. Şekil 4.1'de 5 barlık basınç altında 639434s süreyle ölçülen CO₂ gazının genel X-ışını spektrumu verilmiştir. Bu spektrum üzerinde yer alan piklerden Pb K X-ışınları (K_{α1}, K_{α2}, K_{β1} ve K_{β1}) ²⁴¹Am radyoizotop kaynağı içerisinde yer alan 98,97 (0,0203 %) keV ve 102,98 (0,0195 %) keV'lik gama ışınları tarafından uyarılmasıyla oluşmuştur. Spektrum üzerinde yer alan Fe, Ba, Mo ve As elementlerine ait karakteristik X-ışını pikleri gaz hücresinden ve etrafta yer alan kolimatörlerden kaynaklanmaktadır. Bu tez çalışmasında alınan tüm spektrumlar, ²⁴¹Am radyoaktif kaynağından yayınlanan 26.35 keV ve 59.54 keV'lik gama ışınlarına ilave olarak, numune ve dedektör arasındaki kolimatör içerisine yerleştirilmiş az miktardaki BaSO₄ bileşiğinden yayınlanan Ba K_α ve kolimatörlerden yayınlanan kullanılarak kalibre edilmiştir.



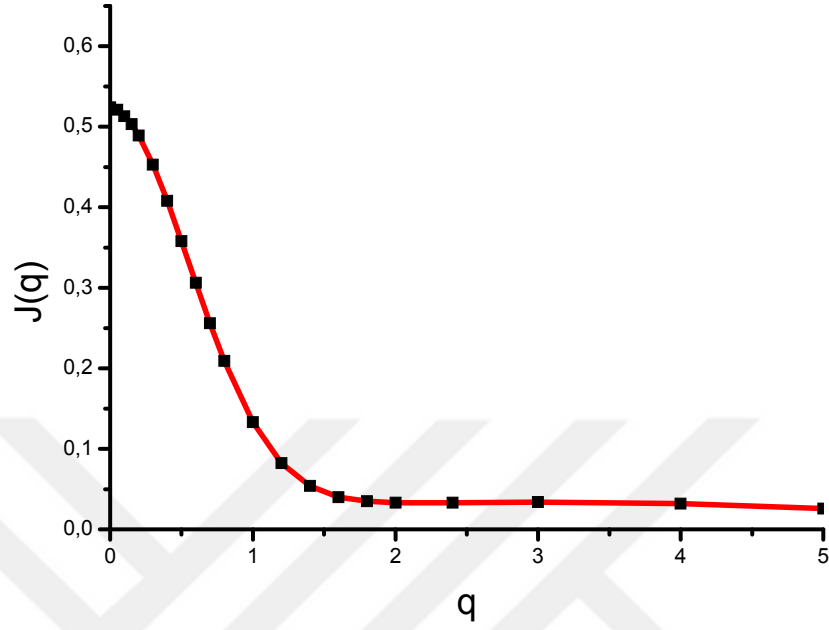
Şekil 4.1. 5 bar basınçta ölçülen CO₂ gazının genel spektrumu

4.1.1. He gazının Compton profil ölçümleri

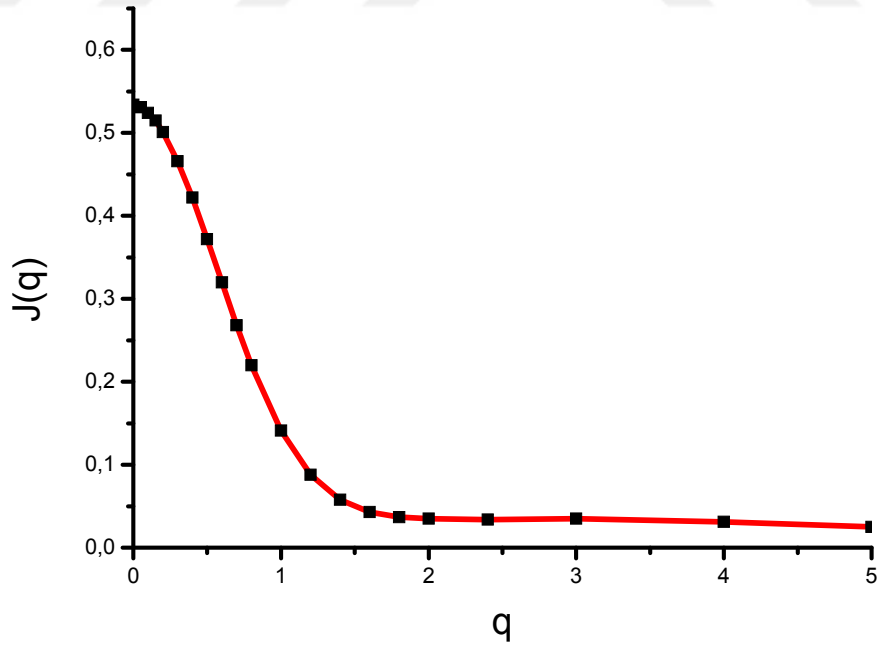
Şekil 4.2 He gazı için 1 barlık basınç altında elde edilen Compton ve koherent piklerini göstermektedir. He gazına ait bu Compton spektrumu pik tepesi etrafında oldukça simetriktir. Çünkü He gazı sadece 2 elektrona sahip olup bu elektronlar K tabakasında yani 1s orbitalinde yer almaktadırlar. Ayrıca bu gazın 2 elektronu da aynı yörünge hızına sahiptir. Bu da yüksek enerjili fotonla bu elektronlar arasında meydana gelen çarpışmanın spektrumda aynı miktarda Doppler genişlemesine neden olacağı dolayısıyla spektrumun simetrik olmasına neden olur. Ayrıca bu gazın atom numarasının düşük olması da çoklu saçılma etkisini minimum düzeye getirir. Bu gazın farklı basınçlarda hesaplanan CP değerleri Şekil 4.3-6'da verilmiştir. Bu grafiklerde CP değerleri, $q > 5$ değerinden sonra hemen hemen sıfıra gittiğinden bu grafikler, $q = 5$ değerinde sonlandırılmıştır. Çizelge 4.1 farklı basınçlarda $q = 0$ ile $q = 10$ arasındaki He gazının CP değerlerini vermektedir.



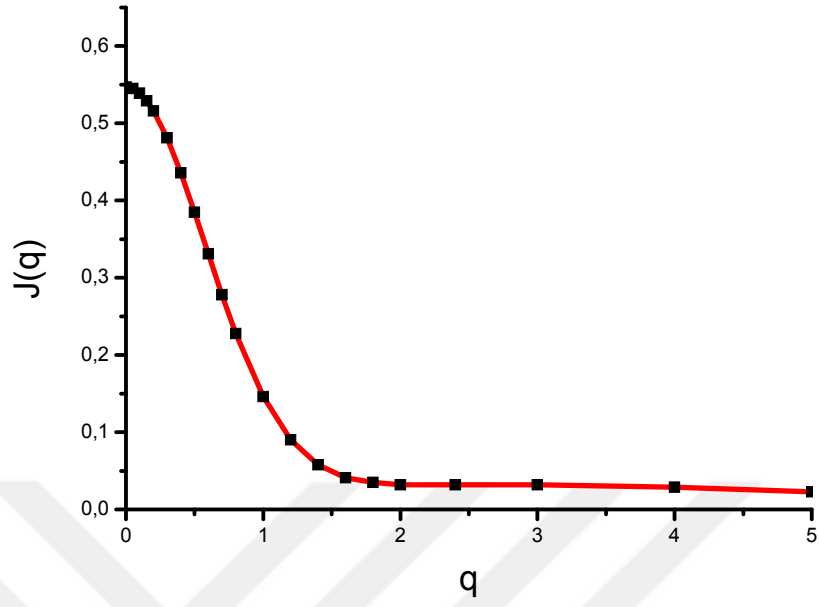
Şekil 4.2. 1,0 bar'da ölçülmüş He gazının Compton ve koherent pikleri



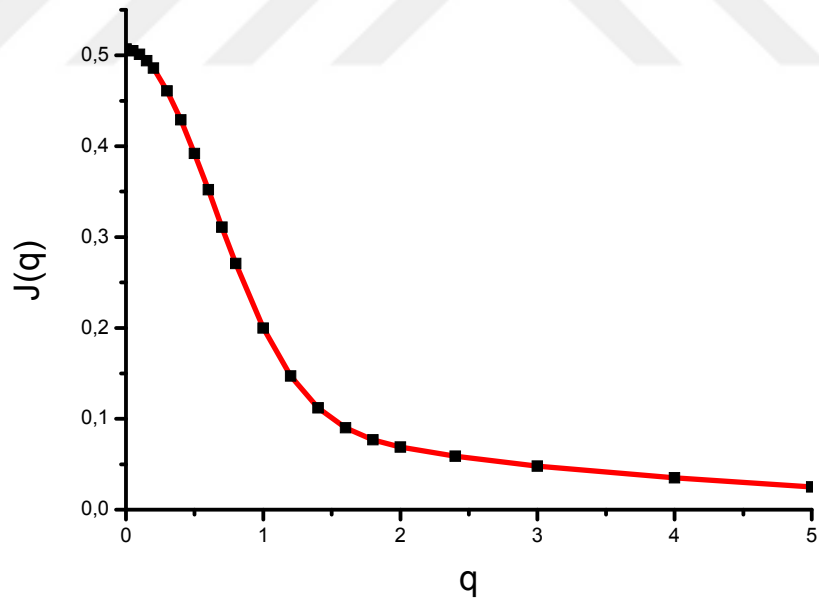
Şekil 4.3. Helyum gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



Şekil 4.4. Helyum gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

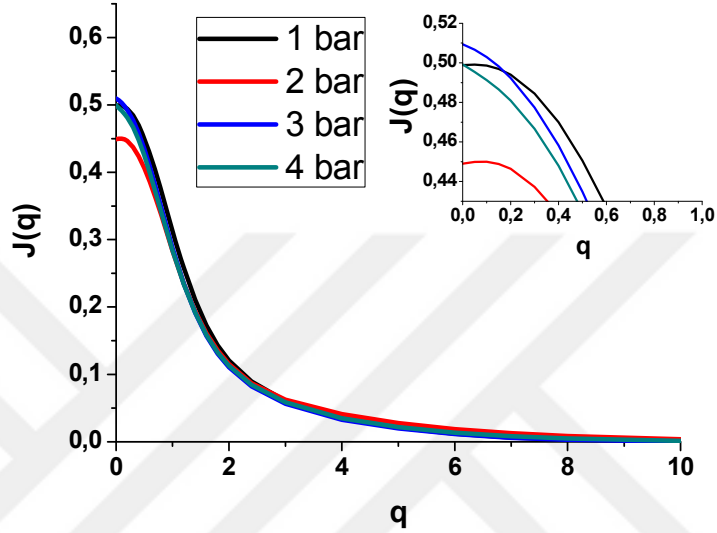


Şekil 4.5. Helyum gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

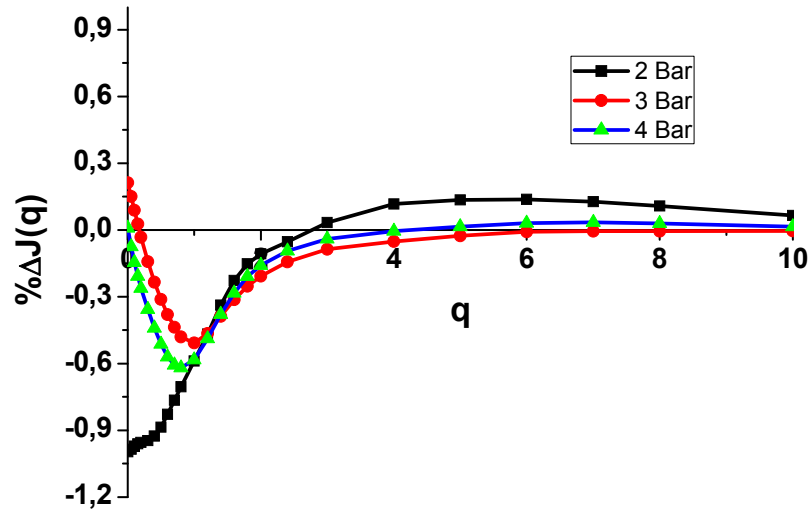


Şekil 4.6. Helyum gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

Farklı basınçlarda helyum gazının ölçülmüş Compton profilleri Şekil 4.7’de kıyaslanmıştır. Ayrıca Şekil 4.8 1,0 bar’da ölçülmüş değerlere göre Compton profillerin nasıl değiştiği görülmektedir.



Şekil 4.7. He gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması



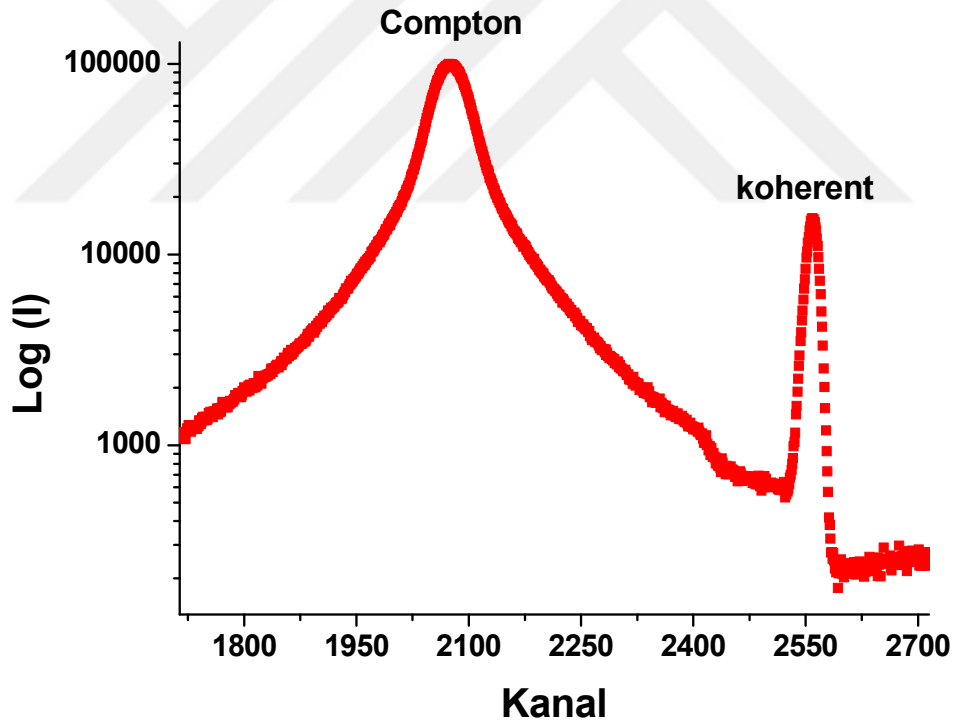
Şekil 4.8. He gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri

Çizelge 4.1. Farklı basınçlarda helyum gazının ölçülmüş Compton profil değerleri

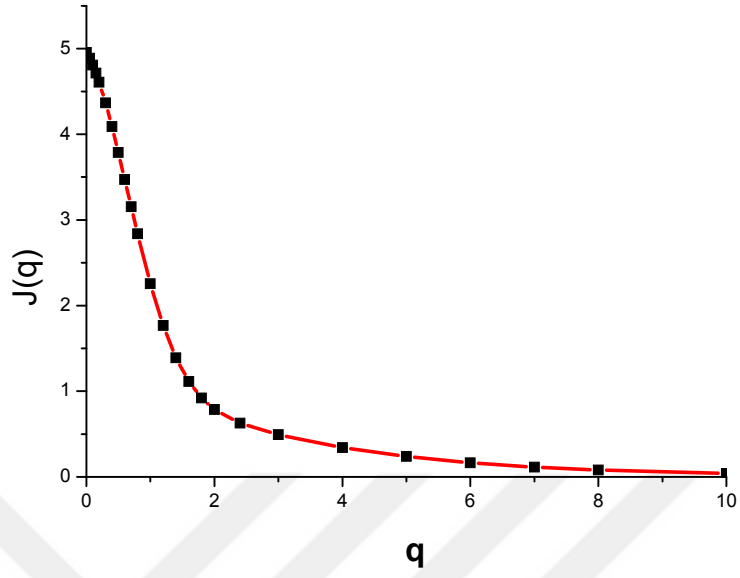
Basınç (bar)				
q (a.u.)	1,0	2,0	3,0	4,0
0,00	0,524	0,534	0,547	0,507
0,05	0,521	0,531	0,545	0,505
0,10	0,513	0,524	0,539	0,501
0,15	0,503	0,515	0,529	0,494
0,20	0,489	0,501	0,516	0,486
0,30	0,453	0,466	0,481	0,461
0,40	0,408	0,422	0,436	0,429
0,50	0,358	0,372	0,385	0,392
0,60	0,306	0,320	0,331	0,352
0,70	0,256	0,268	0,278	0,311
0,80	0,209	0,220	0,228	0,271
1,00	0,133	0,141	0,146	0,200
1,20	0,082	0,088	0,09	0,147
1,40	0,054	0,058	0,058	0,112
1,60	0,040	0,043	0,041	0,090
1,80	0,035	0,037	0,035	0,077
2,00	0,033	0,035	0,032	0,069
2,40	0,033	0,034	0,032	0,059
3,00	0,034	0,035	0,032	0,048
4,00	0,032	0,031	0,029	0,035
5,00	0,026	0,025	0,023	0,025
6,00	0,018	0,018	0,016	0,018
7,00	0,011	0,011	0,01	0,012
8,00	0,006	0,006	0,005	0,009
10,00	0,001	0,001	0,001	0,004

4.1.2. Ar gazının Compton profil ölçümleri

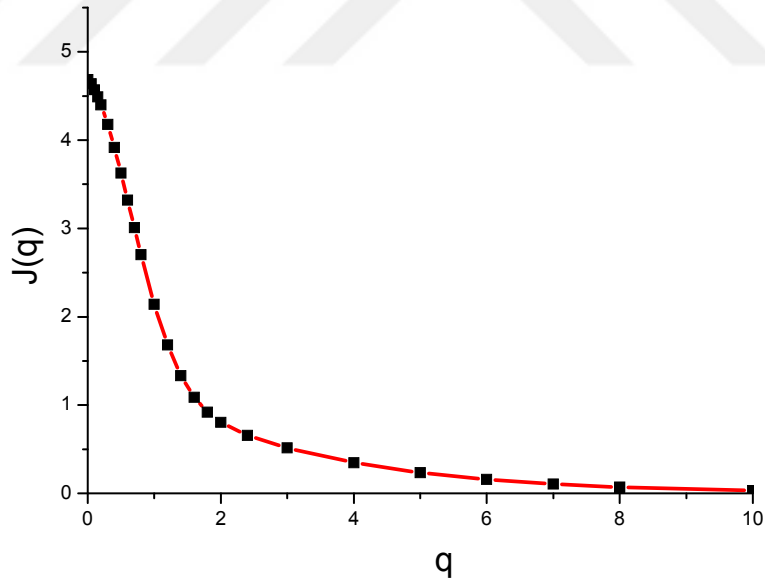
Şekil 4.9’da Ar gazının Compton ve koherent pikleri gösterilmektedir. Ar elementi 18 elektrona sahip olup, tüm orbitalleri doludur. Argon gazının Compton spektrumu incelendiği zaman spektrumun bir pik tepesi bölgelerinin Gaussian olduğu, kuyruk bölgelerinin ise yaklaşık lineer formda olduğu görülmektedir. Bunun nedeni bu gazın farklı orbitallerinde yer alan elektronlar, farklı dolanma hızlarına sahiptirler. Bu nedenle de bu elektronlar uyarıcı foton ile etkileştiklerinde de farklı oranlarda Doppler genişlemesine maruz kalırlar. Farklı basınçlarda ölçülmüş Ar gazının Compton profil sonuçları Şekil 4.10 – 4.14’de verilmiştir.



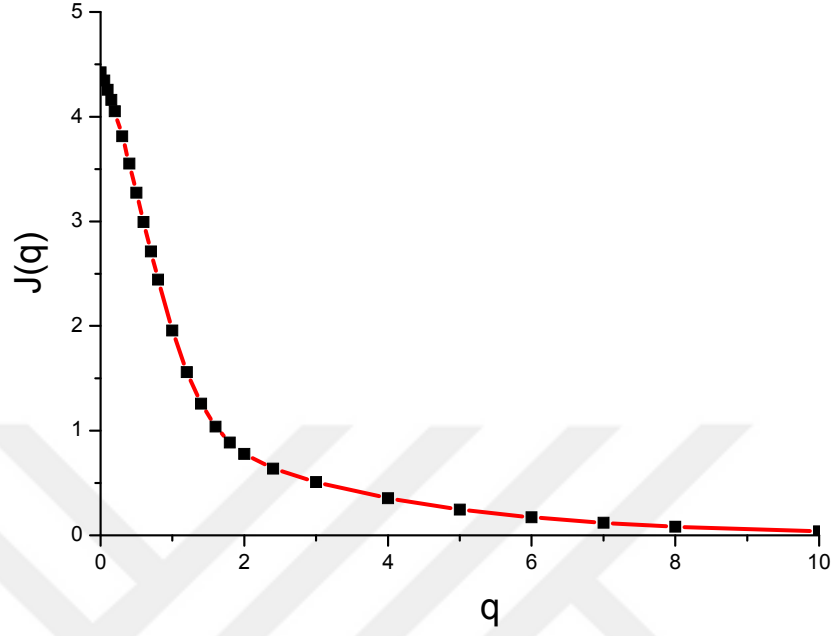
Şekil 4.9. 1,0 bar’da ölçülmüş Ar gazının Compton ve koherent pikleri



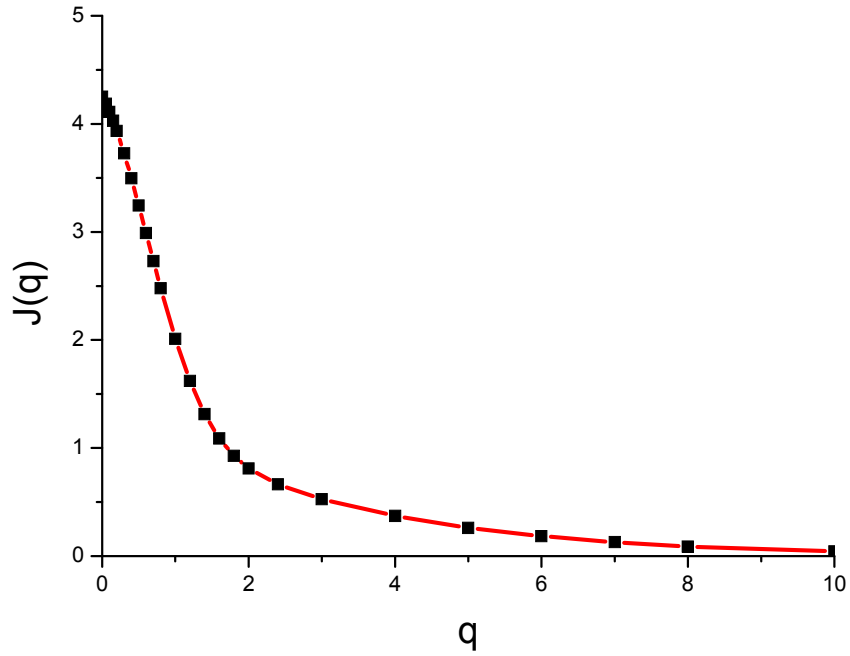
Şekil 4.10. Argon gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



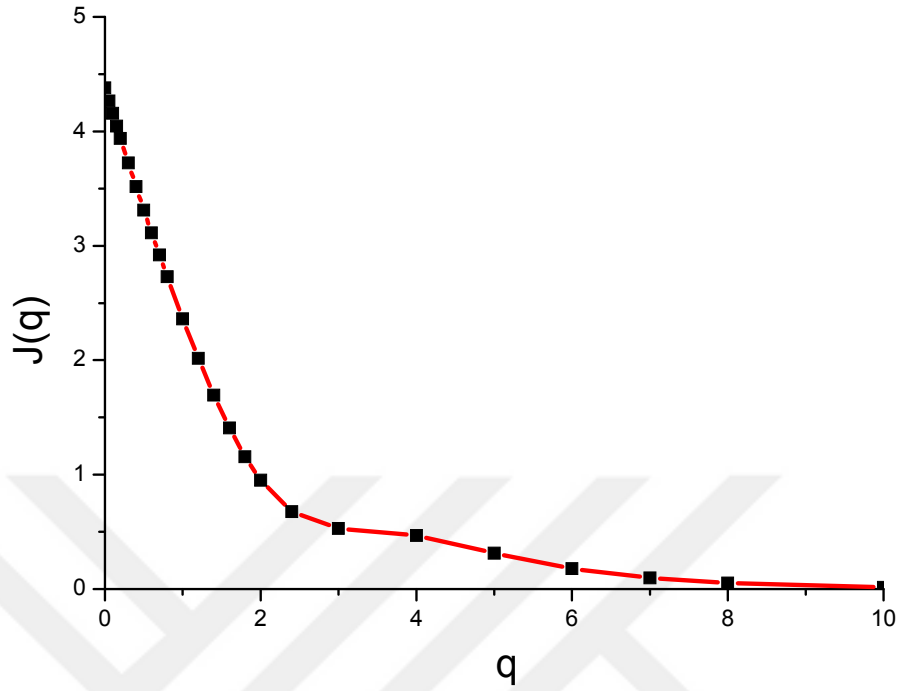
Şekil 4.11. Argon gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



Şekil 4.12. Argon gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

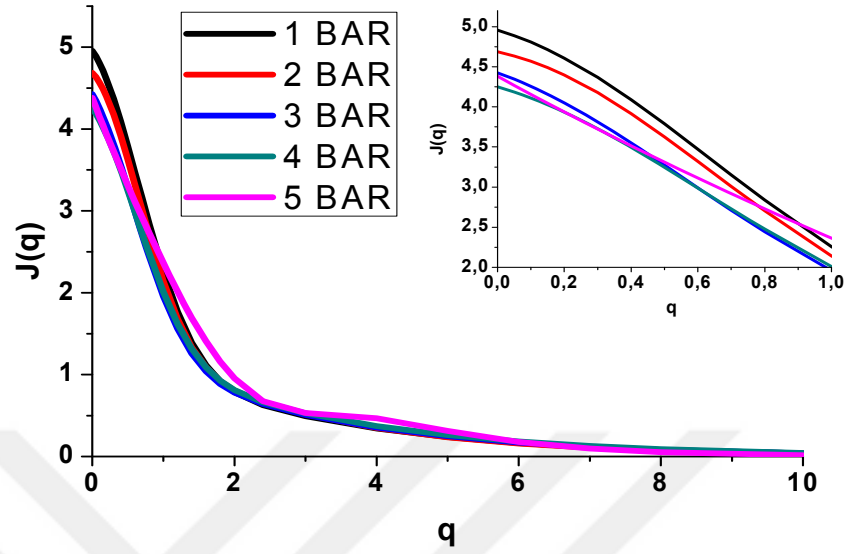


Şekil 4.13. Argon gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

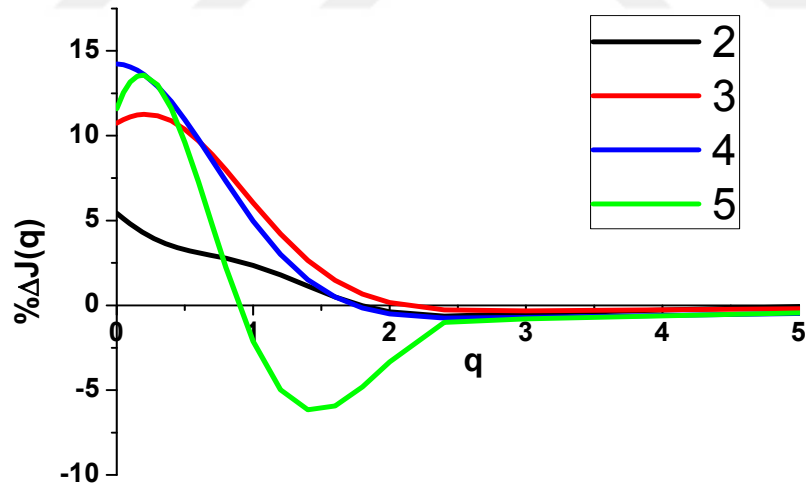


Şekil 4.14. Argon gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

Ar gazı için elde edilen CP ölçümlerinin basınca bağlı değişimleri Şekil 4.15'te ve 1,0 barlık ölçümlere göre belirlenen Compton profillerin basınca bağlı değişimleri Şekil 4.16'da verilmiştir. Şekil 4.15'ten görüldüğü üzere artırılan basınç Ar gazının dış yörünge elektronlarının hızları üzerinde bir etkiye sahip olup CP değerlerini değiştirmektedir. Ancak artırılan basınç bu gazın iç yörünge elektronlarının Compton profil değerleri üzerinde bir etkiye sahip değildir. Özellikle de Şekil 4.16 incelendiği zaman bu değişimin $q = 0$ 'da %15 düzeylerine ulaşan bir etkiye sahip olduğu görülmektedir. Ar gazı için hesaplanan CP değerleri Çizelge 4.3'de verilmiştir.



Şekil 4.15. Ar gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması



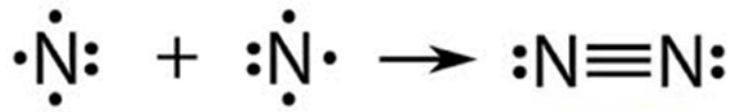
Şekil 4.16. Ar gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri

Çizelge 4.2. Farklı basınçlarda argon gazının ölçülmüş Compton profil değerleri

Basınç (bar)					
q (a.u.)	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
0,00	4,956	4,687	4,424	4,251	4,381
0,05	4,889	4,636	4,346	4,186	4,267
0,10	4,808	4,570	4,257	4,112	4,156
0,15	4,715	4,491	4,159	4,028	4,045
0,20	4,610	4,398	4,051	3,935	3,937
0,30	4,368	4,177	3,813	3,728	3,724
0,40	4,091	3,916	3,551	3,495	3,516
0,50	3,789	3,627	3,275	3,246	3,312
0,60	3,473	3,320	2,993	2,989	3,113
0,70	3,154	3,008	2,713	2,730	2,919
0,80	2,839	2,702	2,444	2,477	2,729
1,00	2,257	2,140	1,957	2,011	2,362
1,20	1,768	1,679	1,560	1,620	2,015
1,40	1,389	1,333	1,258	1,315	1,694
1,60	1,112	1,088	1,039	1,088	1,406
1,80	0,919	0,920	0,886	0,926	1,157
2,00	0,786	0,805	0,778	0,811	0,951
2,40	0,626	0,658	0,639	0,663	0,676
3,00	0,491	0,515	0,508	0,527	0,531
4,00	0,342	0,349	0,354	0,371	0,468
5,00	0,238	0,235	0,247	0,260	0,312
6,00	0,165	0,159	0,172	0,183	0,178
7,00	0,114	0,107	0,119	0,128	0,098
8,00	0,079	0,071	0,082	0,089	0,053
10,00	0,038	0,032	0,039	0,043	0,015

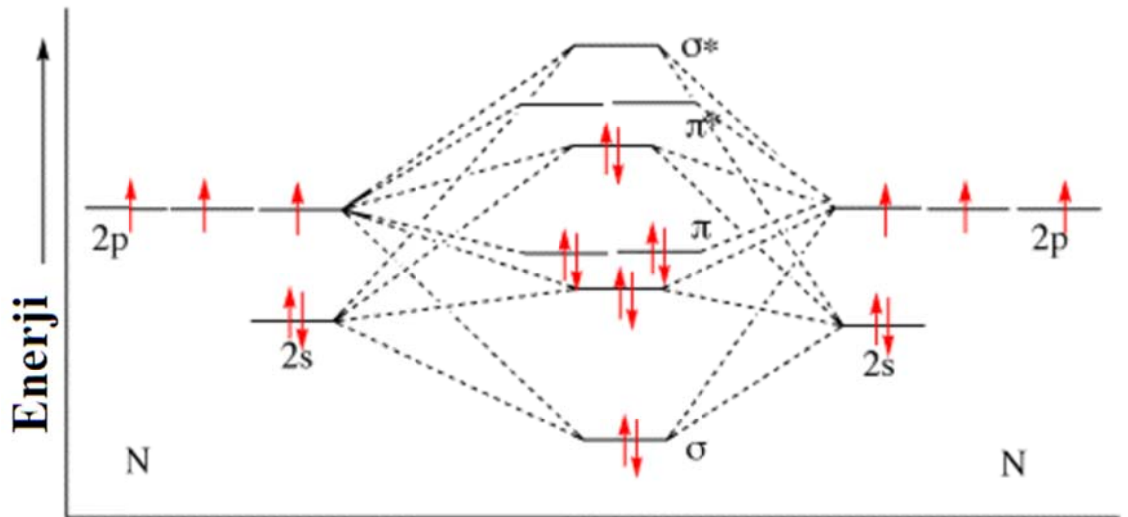
4.1.3. N₂ gazının Compton profil ölçümleri

Şekil 4.17 N₂ molekülünün Lewis yapısını göstermektedir. Bu yapıya göre, N₂ molekülü aralarında üçlü bağı olan iki Azot atomundan meydana gelmektedir. Bu Azot atomlarının her ikisinde de ikişer adet bağ yapmamış serbest kabul edilebilecek elektronu bulunmaktadır. N₂ molekülü D_{∞h} nokta grubuna sahip olup lineer yapıdadır.



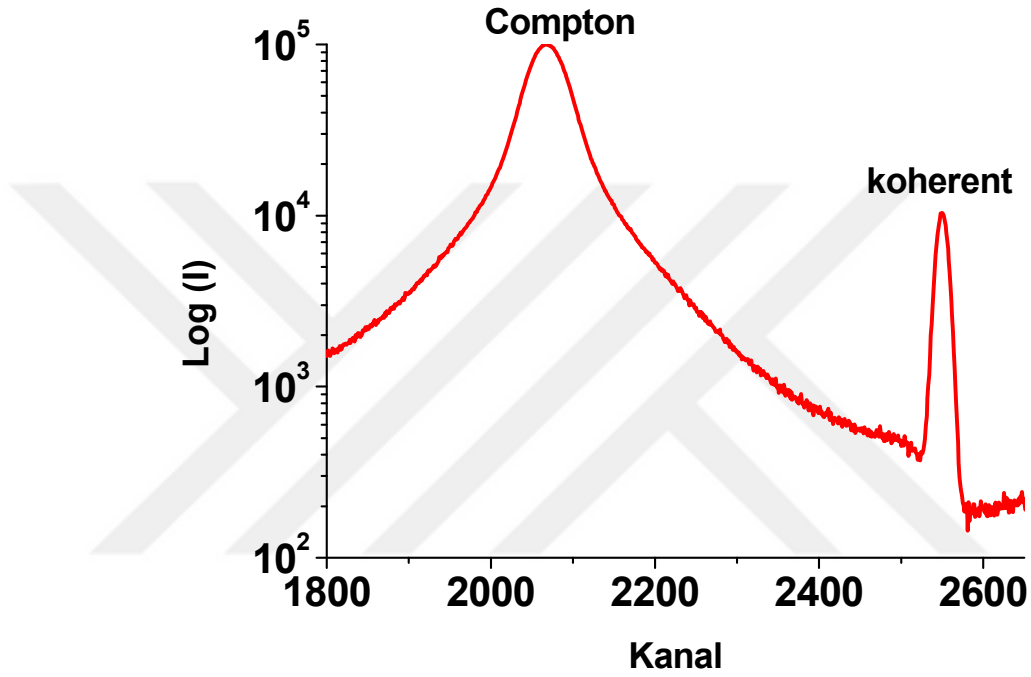
Şekil 4.17. N₂ molekülünün Lewis yapısı

Atomik Azot 5 valans elektronu ve 4 valans orbitale (2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z) sahiptir. İki Azot atomunun üçlü bağ yapması sonucu oluşan N₂ molekülünde toplam 10 adet valans elektronu vardır. Bu valans elektronlarının moleküler orbitallere yerleşimi ve bağ durumları Şekil 4.18’de verilmiştir.



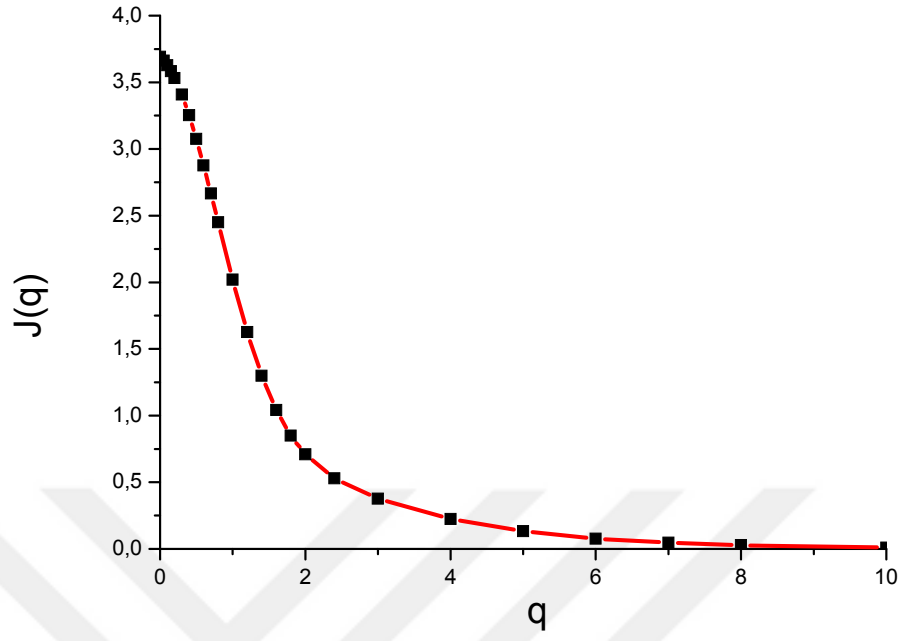
Şekil 4.18. N₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı

Şekil 4.19’da N_2 gazının Compton ve koherent pikleri gösterilmiştir. Bu spektrumun Compton pikinin tepe bölgesi Gaussian dağılıma uyarken, kuyruk bölgeleri lineer biçimdedir. Bu iki bölge arasındaki dönüm noktası N_2 molekülünün valans elektronları ile iç yörünge veya bağ durumunda olan elektronlarının ayırım noktasıdır.

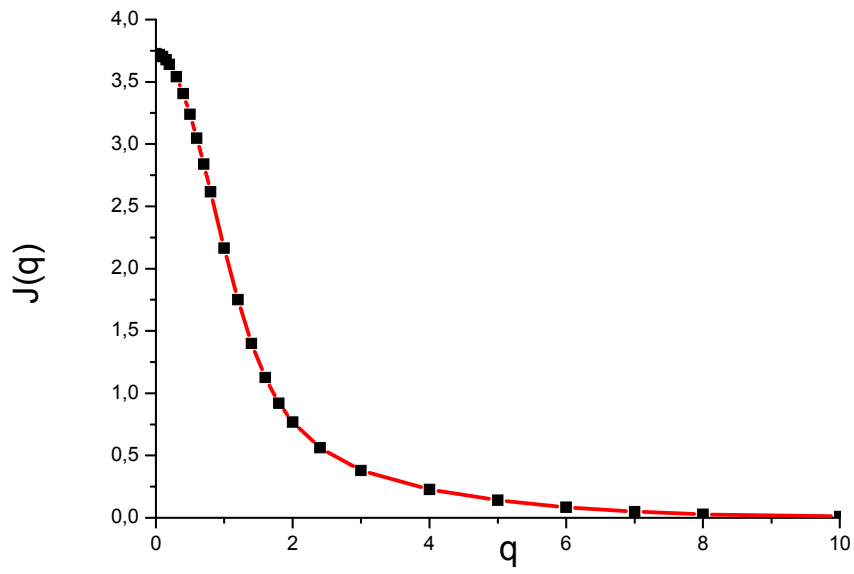


Şekil 4.19. 1,0 bar’da ölçülmüş N_2 gazının Compton ve koherent pikleri

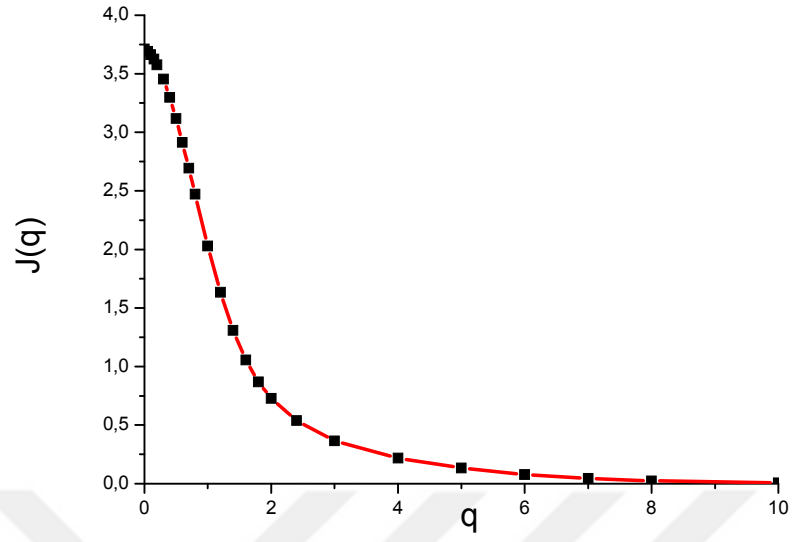
Şekil 4.20-24 1 bardan 5 bara kadar olan aralıkta ölçülen CP grafiklerini vermektedir. N_2 molekülü için yapılan hesaplamalarda CP değerlerinin artan basınçla birlikte $q = 0$ ’da 3,69 ile 3,88 arasında değiştiği belirlenmiştir.



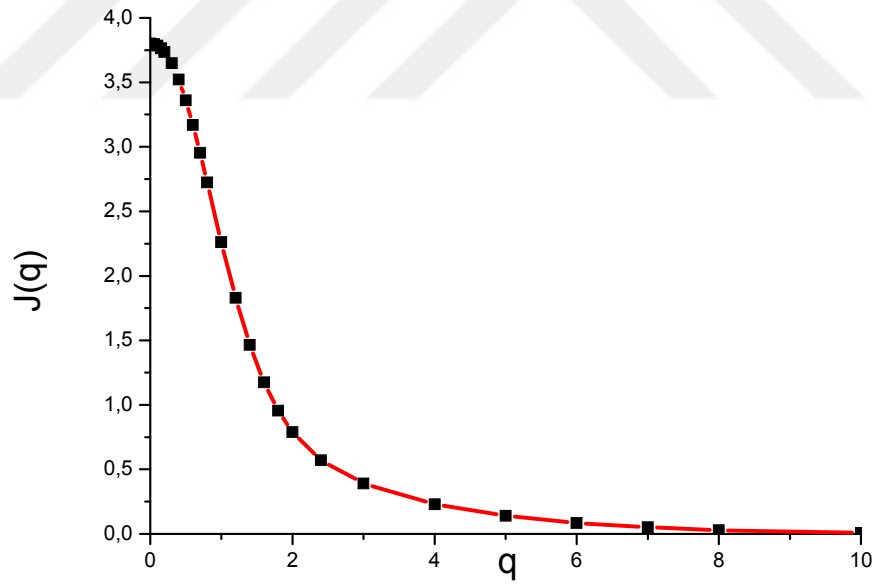
Şekil 4.20. N_2 gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



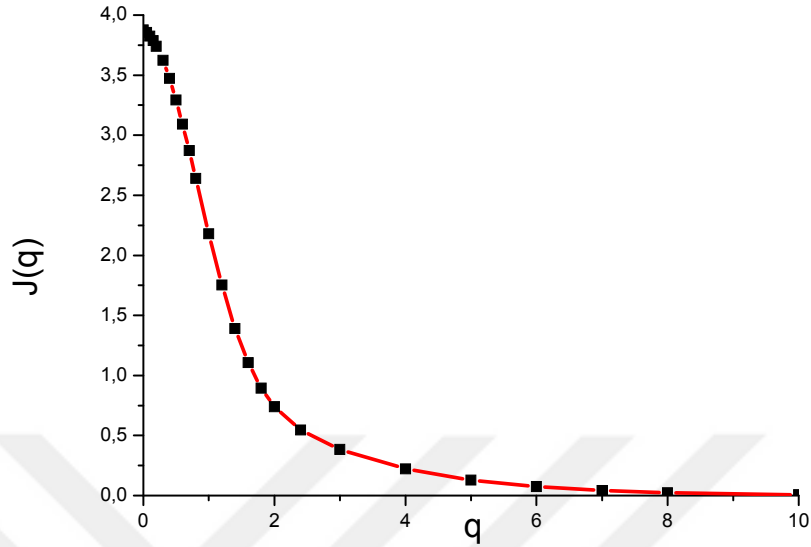
Şekil 4.21. N_2 gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



Şekil 4.22. N₂ gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

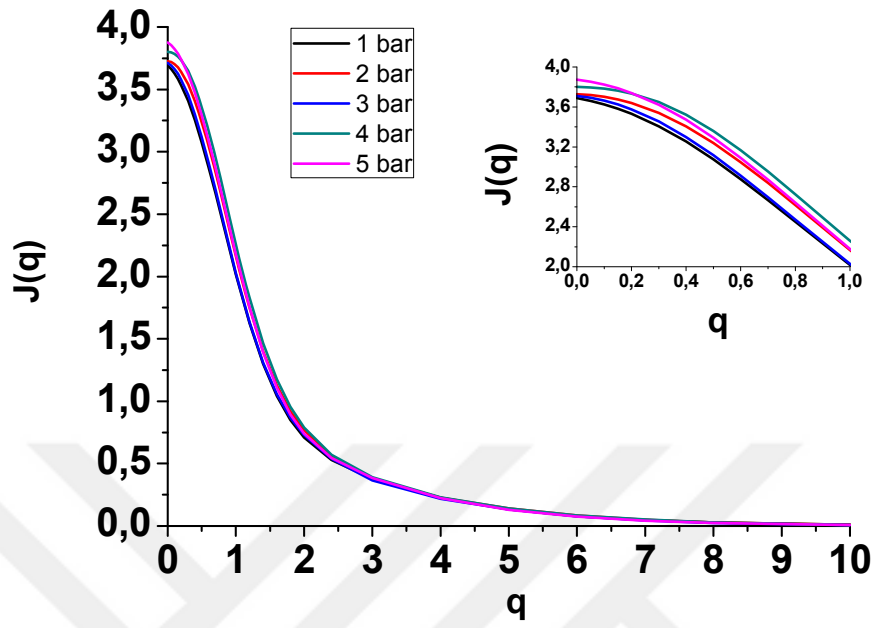


Şekil 4.23. N₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

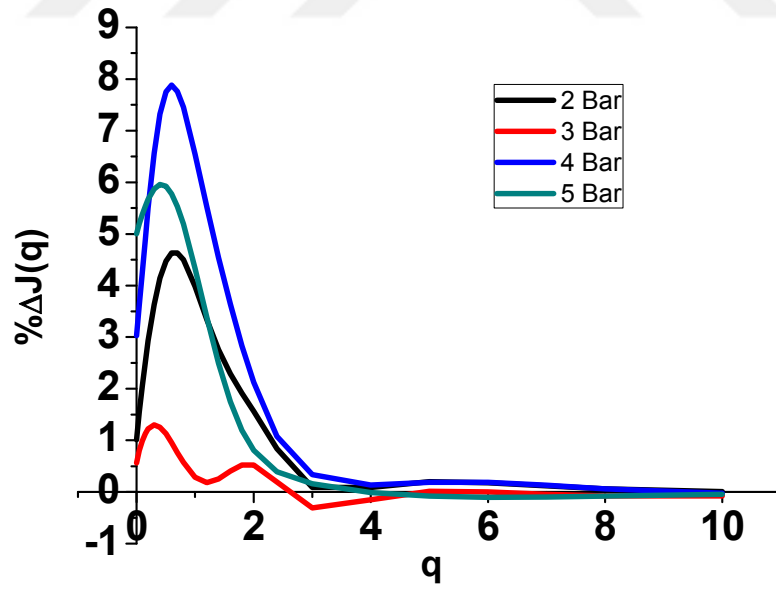


Şekil 4.24. N₂ gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

Farklı basınçlarda N₂ ölçülen Compton profillerinin karşılaştırılması Şekil 4.25'te görülmektedir. Bu grafik üzerinde $q = 0$ ile $q = 1$ arasındaki bölge daha iyi karşılaştırma yapılabilmesi için genişletilmiştir. Görüldüğü üzere artan basıncın N₂ gazının CP'leri üzerinde bir etkisi vardır. 1,0 bar'da ölçülmüş CP değerlerine göre, artan basıncın oluşturduğu değişim Şekil 4.26'da görülmektedir. Bu grafiğe göre artan basınç N₂ gazının CP değerini $q = 0$ 'da 1,0 bar'da ölçülen değere göre ~%5'e kadar değiştirebilmektedir. Yine $q \approx 1$ değerine kadar farklı basınçlarda 1,0 bar'da ölçülen değere göre bir maksimum değişime sahiptir. Bu grafikten $q \approx 1$ bölgesinde tüm basınç değerlerinin maksimum değişim değerine sahip olduğu görülmektedir. Ayrıca N₂ gazı için ölçülen CP değerleri Çizelge 4.3'te verilmiştir.



Şekil 4.25. N_2 gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması



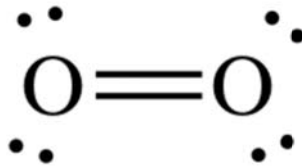
Şekil 4.26. N_2 gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri

Çizelge 4.3. Farklı basınçlarda N₂ gazının ölçülmüş Compton profil değerleri

q (a.u.)	Basınç (bar)				
	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
0,00	3,690	3,727	3,711	3,802	3,875
0,05	3,662	3,720	3,692	3,796	3,854
0,10	3,627	3,703	3,663	3,784	3,825
0,15	3,583	3,676	3,625	3,764	3,788
0,20	3,532	3,640	3,577	3,735	3,741
0,30	3,407	3,541	3,455	3,649	3,623
0,40	3,253	3,406	3,299	3,523	3,473
0,50	3,075	3,240	3,117	3,361	3,293
0,60	2,877	3,048	2,913	3,168	3,091
0,70	2,667	2,838	2,695	2,953	2,871
0,80	2,450	2,616	2,471	2,725	2,641
1,00	2,019	2,166	2,030	2,261	2,179
1,20	1,627	1,750	1,634	1,831	1,752
1,40	1,299	1,400	1,308	1,466	1,391
1,60	1,041	1,126	1,056	1,176	1,106
1,80	0,849	0,920	0,868	0,954	0,893
2,00	0,709	0,767	0,729	0,788	0,739
2,40	0,530	0,561	0,538	0,570	0,545
3,00	0,377	0,380	0,366	0,390	0,383
4,00	0,224	0,227	0,218	0,229	0,223
5,00	0,133	0,140	0,133	0,140	0,129
6,00	0,078	0,085	0,078	0,085	0,074
7,00	0,046	0,050	0,044	0,051	0,042
8,00	0,027	0,029	0,024	0,029	0,024
10,00	0,009	0,009	0,006	0,008	0,007

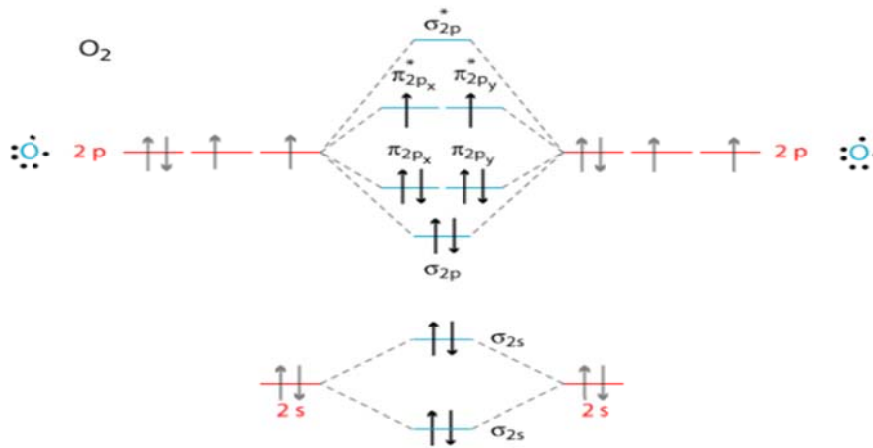
4.1.4. O₂ gazının Compton profil ölçümleri

Şekil 4.27’de O₂ molekülünün Lewis yapısı verilmiştir. D_{∞h} nokta grubuna sahip olan bu molekülde yer alan Oksijen atomlarının ikişer adet bağ yapmamış ve serbest olarak kabul edilebilecek elektronu mevcuttur.



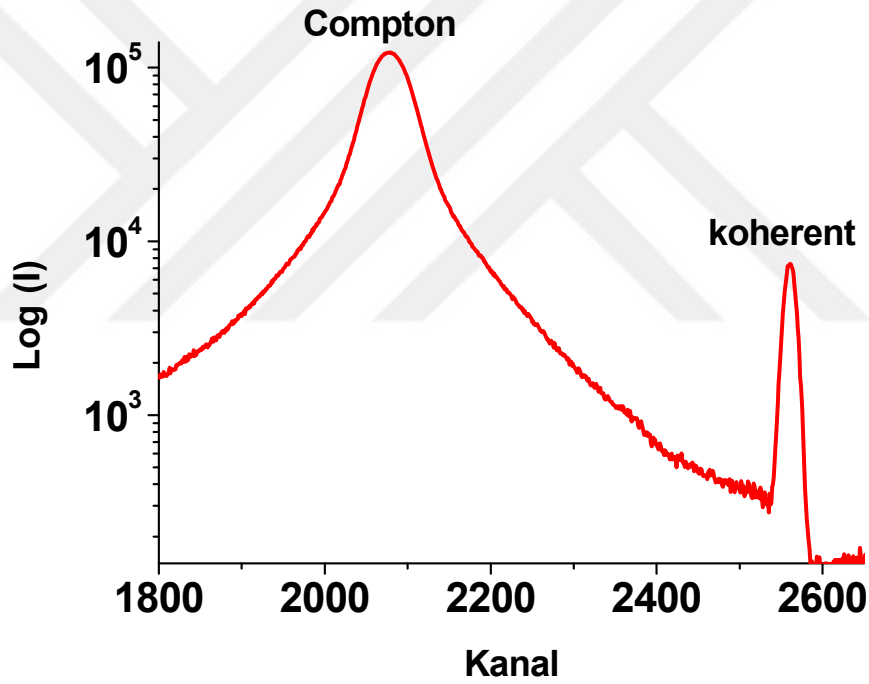
Şekil 4.27. O₂ molekülünün Lewis yapısı

Atomik halde bulunan Oksijen atomunun elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^4$ olup O₂ molekülüne dönüştüğü zaman $(\sigma 2s)^2 (\sigma 2s^*)^2 (\sigma 2p)^2 (\pi 2p)^4 (\pi 2p^*)^2$ elektronik konfigürasyonuna sahip olur. O₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı Şekil 4.28’de verilmiştir. Bu diyagramda enerjiye bağlı olarak oluşan sigma (σ) ve pi (π) bağları gösterilmiştir.



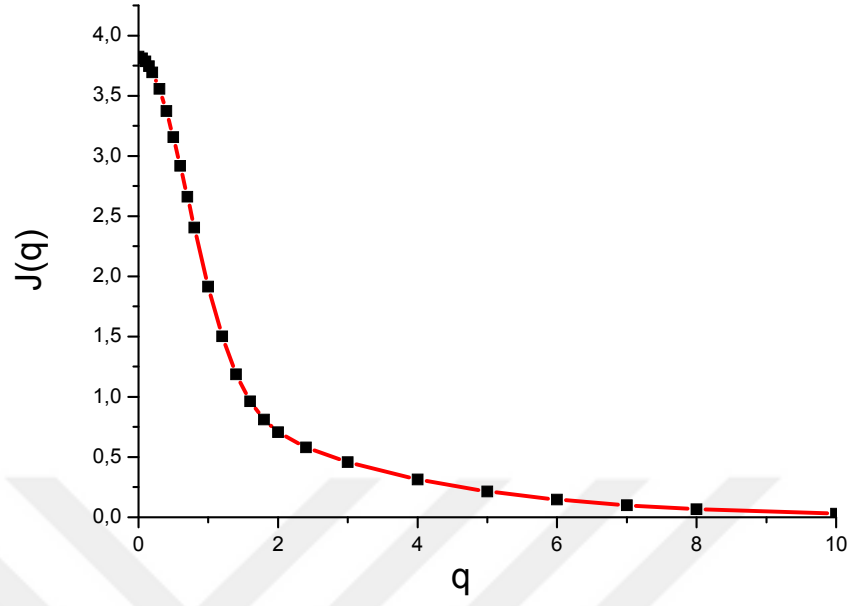
Şekil 4.28. O₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı

Şekil 4.29’da O_2 gazının Compton ve koherent pikleri gösterilmiştir. Compton ve koherent piklerini sayımları arasında çok yüksek fark bulunmaktadır. Compton ve koherent piklerini aynı şekil üzerinde göstermek adına şiddet eksenini logaritmik ölçekte verilmiştir. Şekilde yer alan Compton pikininin tepe bölgesi O_2 gazının dış yörüngelerinde yer alan ve nispeten iç yörüngede ki elektronlara göre daha yavaş hareket eden elektronlardan oluşturulmuştur. Bu elektronlar yavaş hareketleri nedeniyle daha az miktarda Doppler genişlemesi oluşturmaktadırlar. Compton pikinin lineer görünümlü kuyruk bölgeleri ise iç yörünge elektronlarından oluşmuştur.

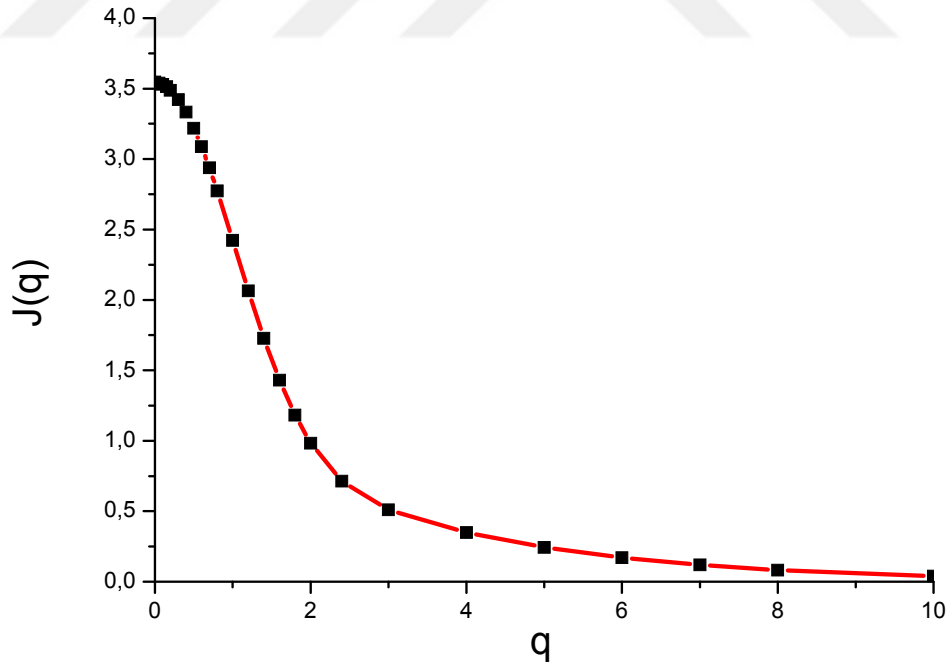


Şekil 4.29. 1,0 bar’da ölçülmüş O_2 gazının Compton ve koherent pikleri

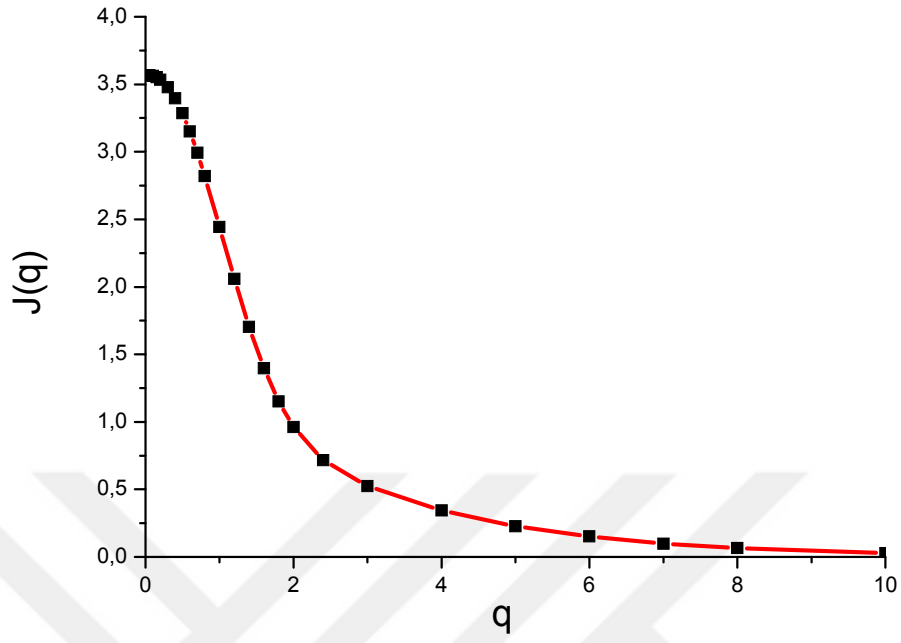
Farklı basınçlarda ölçülen O_2 gazının CP değerleri Şekil 4.30-34’de verilmiştir.



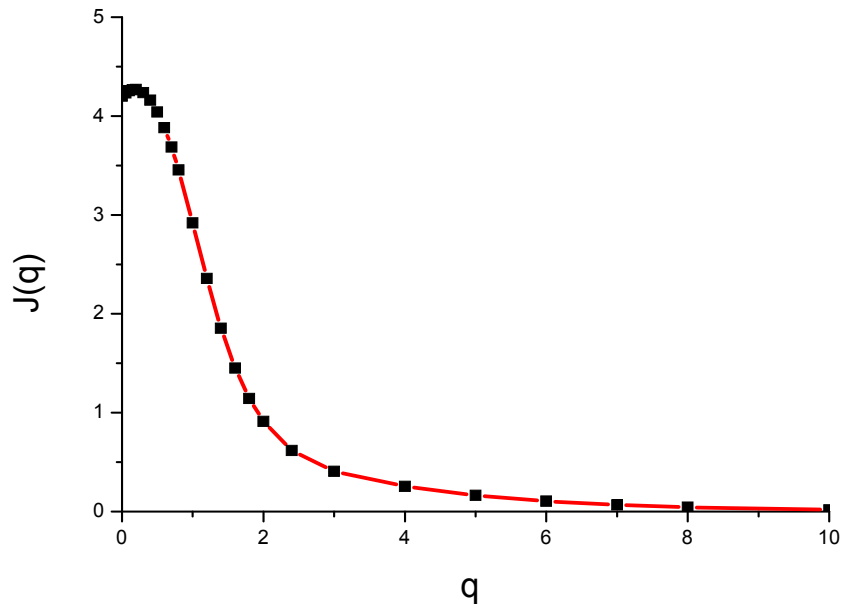
Şekil 4.30. O₂ gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



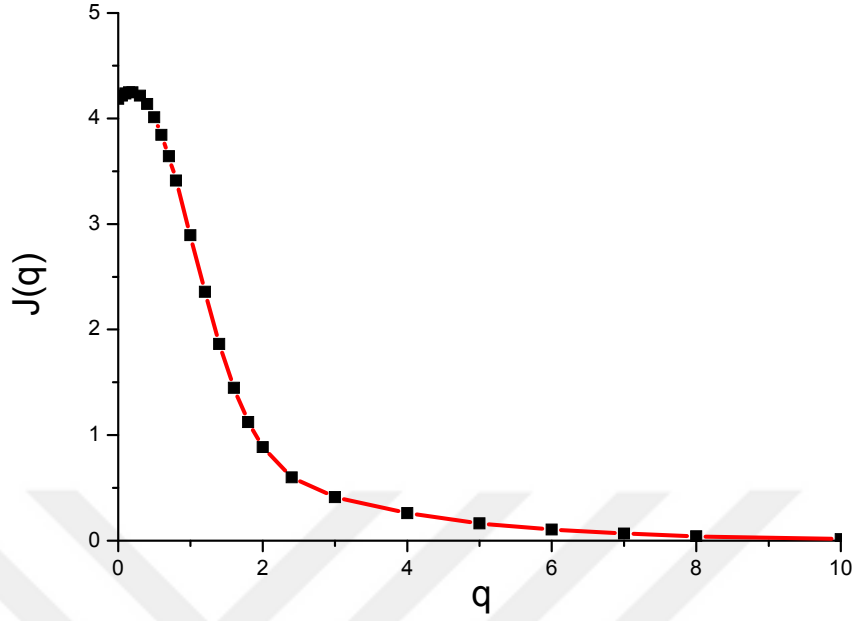
Şekil 4.31. O₂ gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



Şekil 4.32. O₂ gazının 3,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

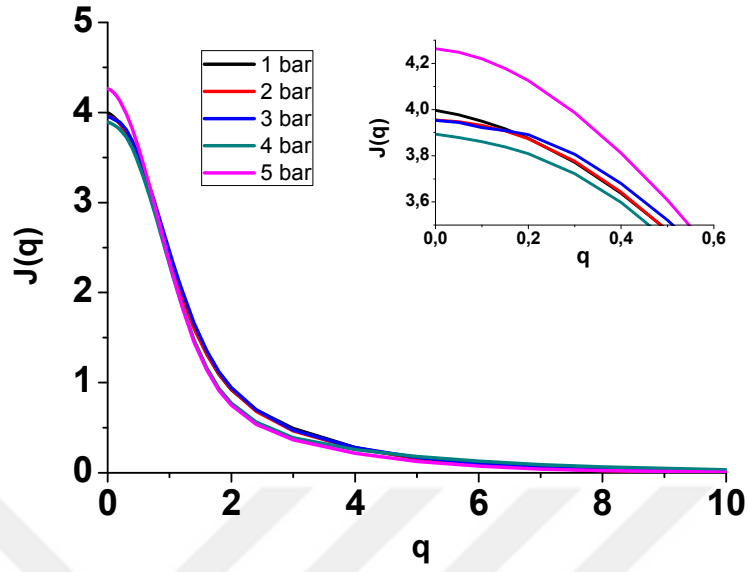


Şekil 4.33. O₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

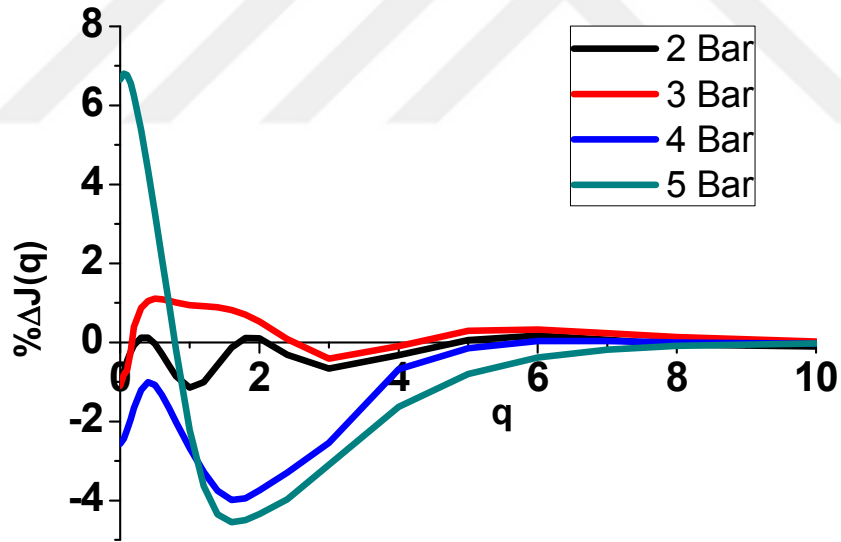


Şekil 4.34. O₂ gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

Şekil 4.35 farklı basınçlarda ölçülen CP değerlerinin karşılaştırılmasını göstermektedir. İlaveten 1,0 bar'da ölçülen değerlere göre artan basınçlarda ölçülen CP değişimleri Şekil 4.36'da verilmiştir. $q \leq 2,5$ olduğunda CP değerleri önemli bir değişime sahiptir. Ayrıca artan basınç bu değeri azaltırken $q > 4$ olduğunda her basınç değerinde önemsiz değişimler ortaya çıkmaktadır. O₂'nin CP değerleri Çizelge 4.4'te verilmiştir.



Şekil 4.35. O_2 gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması



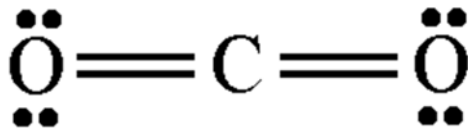
Şekil 4.36. O_2 gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri

Çizelge 4.4. Farklı basınçlarda O₂ gazının ölçülmüş Compton profil değerleri

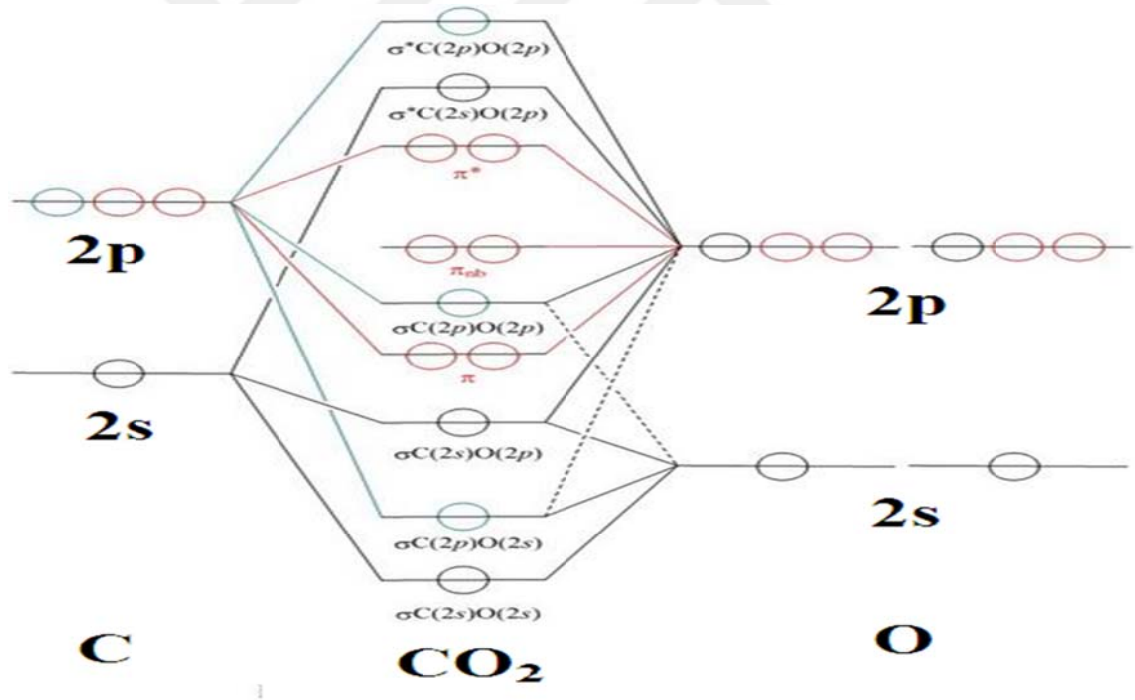
Basınç (bar)					
q (a.u.)	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
0,00	3,997	3,955	3,953	3,894	4,263
0,05	3,977	3,947	3,944	3,879	4,249
0,10	3,95	3,931	3,922	3,861	4,22
0,15	3,916	3,907	3,908	3,838	4,178
0,20	3,875	3,873	3,891	3,809	4,125
0,30	3,772	3,776	3,806	3,723	3,986
0,40	3,638	3,643	3,68	3,598	3,812
0,50	3,477	3,475	3,521	3,434	3,607
0,60	3,291	3,279	3,335	3,238	3,376
0,70	3,086	3,063	3,128	3,02	3,125
0,80	2,868	2,834	2,909	2,788	2,862
1,00	2,42	2,374	2,457	2,313	2,331
1,20	1,993	1,953	2,03	1,862	1,848
1,40	1,622	1,599	1,658	1,472	1,448
1,60	1,323	1,318	1,356	1,164	1,141
1,80	1,094	1,098	1,122	0,936	0,914
2,00	0,923	0,927	0,944	0,773	0,749
2,40	0,695	0,683	0,699	0,563	0,537
3,00	0,491	0,464	0,474	0,389	0,367
4,00	0,282	0,269	0,278	0,257	0,216
5,00	0,159	0,162	0,171	0,182	0,127
6,00	0,089	0,096	0,102	0,129	0,073
7,00	0,049	0,051	0,058	0,091	0,041
8,00	0,026	0,024	0,032	0,065	0,023
10,00	0,007	0,003	0,008	0,032	0,006

4.1.5. CO₂ gazının Compton profil ölçümleri

CO₂ molekülünün Lewis yapısı Şekil 4.37’de verilmiştir. Bu molekülde merkezde yer alan C atomu O atomlarına çift bağ ile bağlanmıştır. O atomları etrafında yer alan elektronlar serbest olarak kabul edilebilir. CO₂ molekülü D_{∞h} nokta grubuna sahiptir. Şekil 4.38’de CO₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı yer almaktadır.



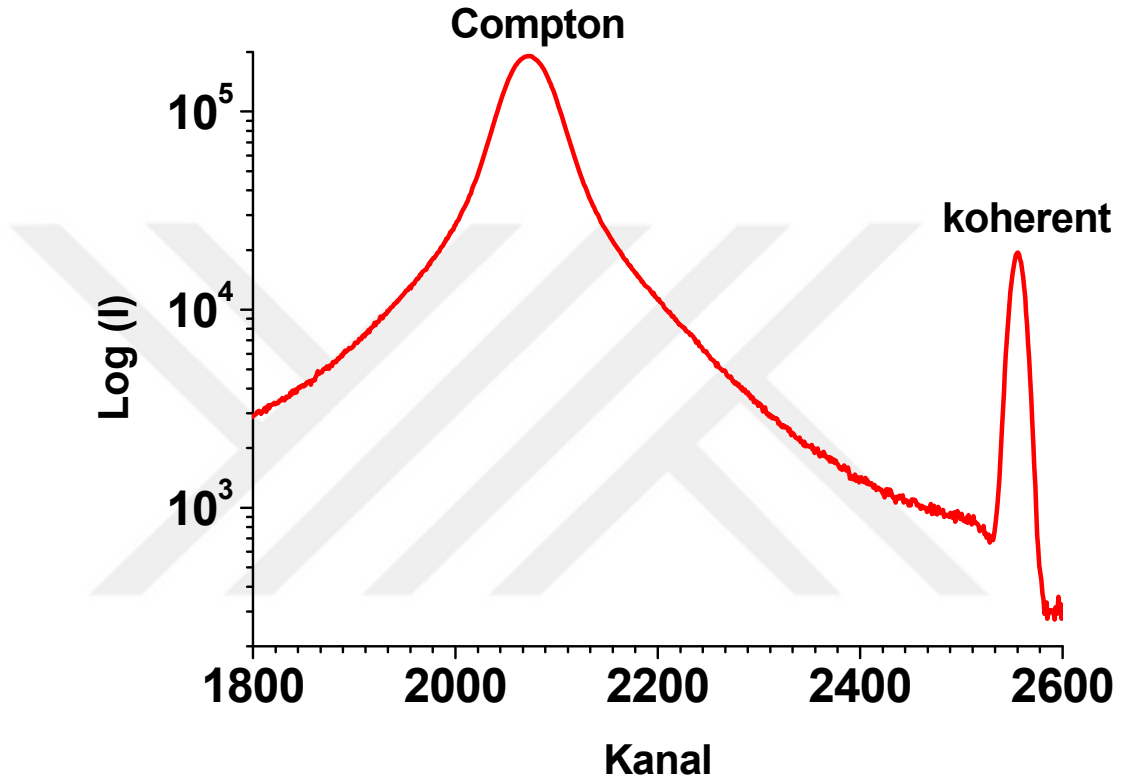
Şekil 4.37. CO₂ molekülünün Lewis yapısı



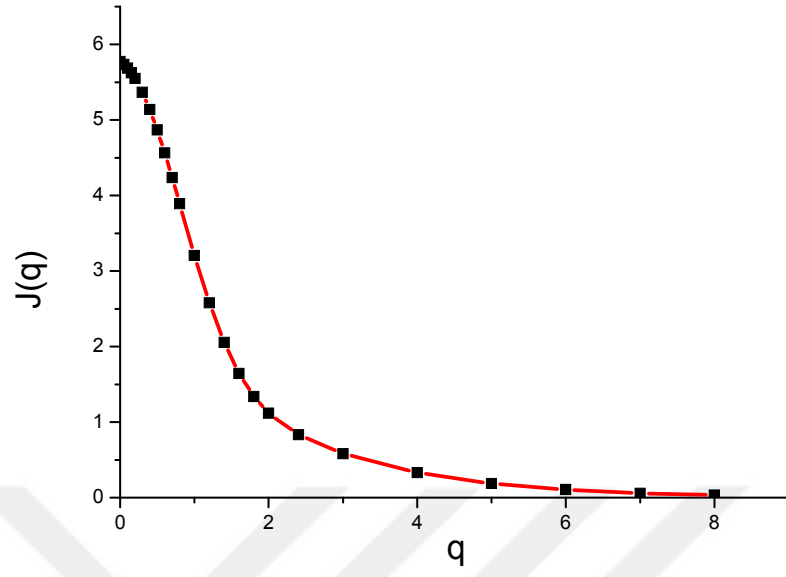
Şekil 4.38. CO₂ molekülünün moleküler orbital diyagramı

Şekil 4.39’da CO₂’nin Compton ve koherent pikleri verilmiştir. Compton piki incelendiği zaman, spektrumun pik tepesinde Gaussian bir dağılıma sahipken kuyruk bölgelerinde spektrum lineer forma girmektedir. Spektrumun Gaussian bölgesi CO₂ molekülünde yer alan Oksijen atomu etrafındaki bağ yapmamış elektronlardan

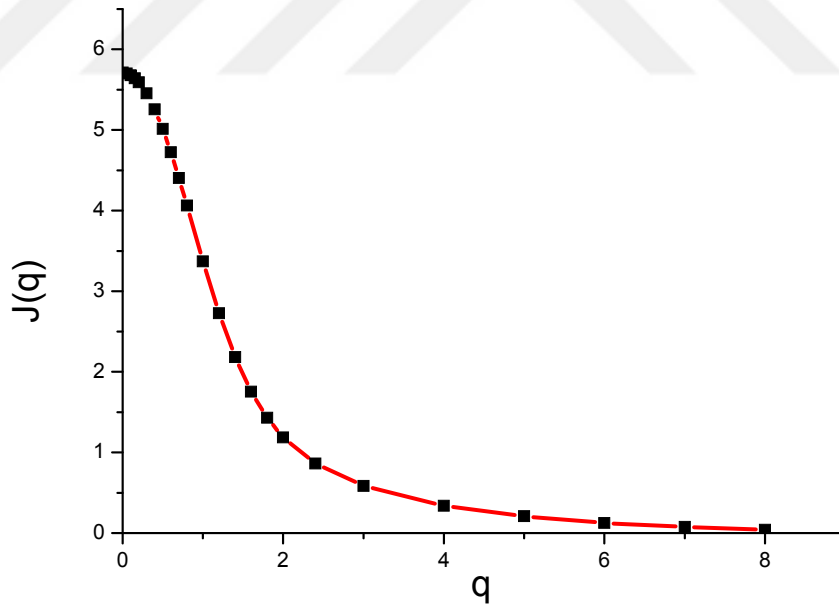
oluşturulmuştur. Çünkü bu elektronlar molekülün diğer elektronlarına göre nispeten daha düşük hızlara sahiptirler ve daha az Doppler genişleme etkisi oluştururlar. Farklı basınçlarda ölçülen CO₂ gazının Compton profilleri Şekil 4.40-.44’de verilmiştir.



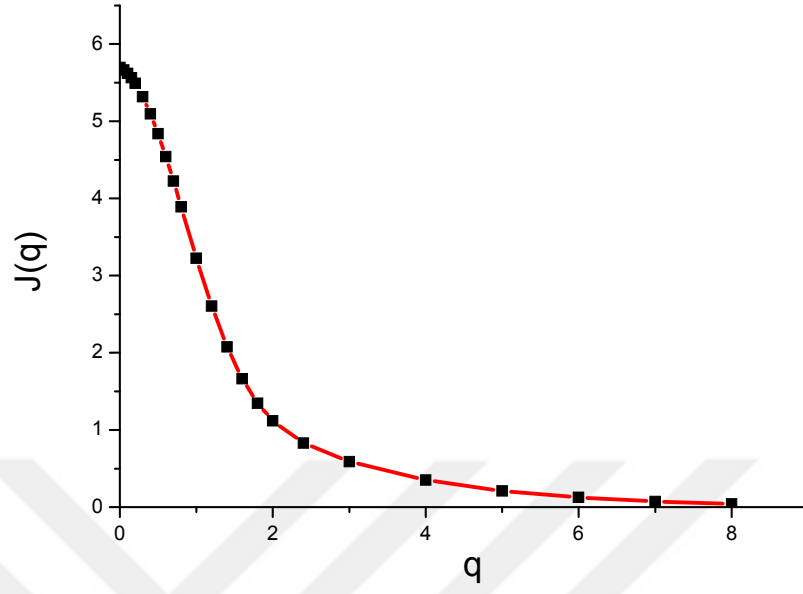
Şekil 4.39. 1,0 bar’da ölçülmüş CO₂ gazının Compton ve koherent pikleri



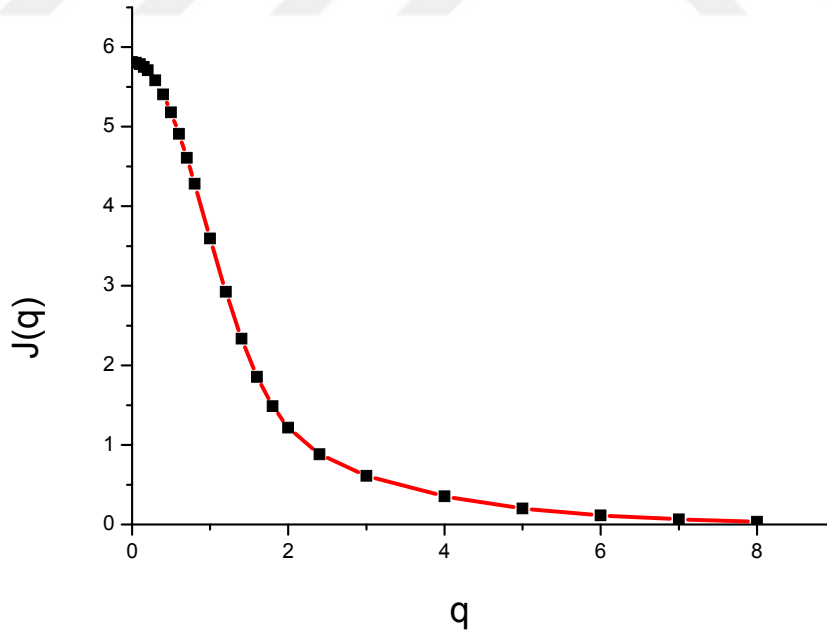
Şekil 4.40. CO_2 gazının 1,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



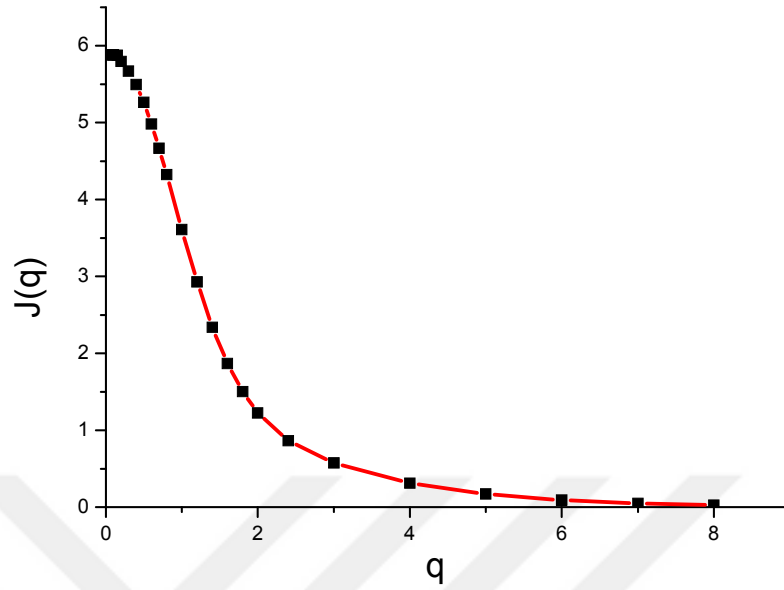
Şekil 4.41. CO_2 gazının 2,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri



Şekil 4.42. CO₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

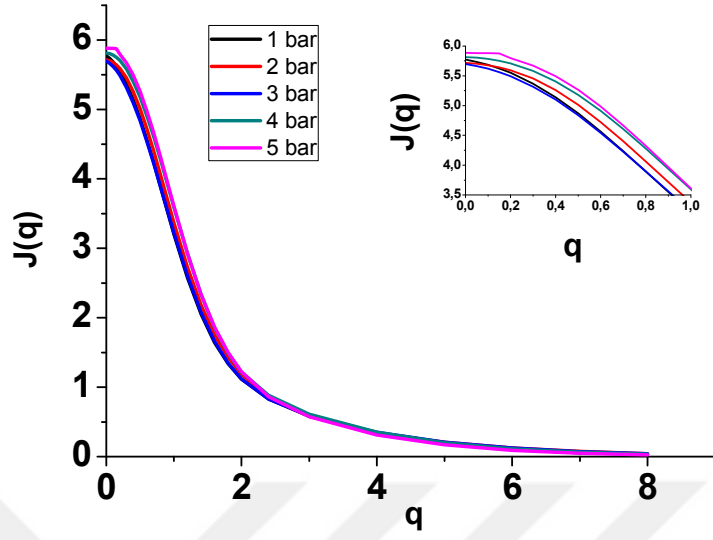


Şekil 4.43. CO₂ gazının 4,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

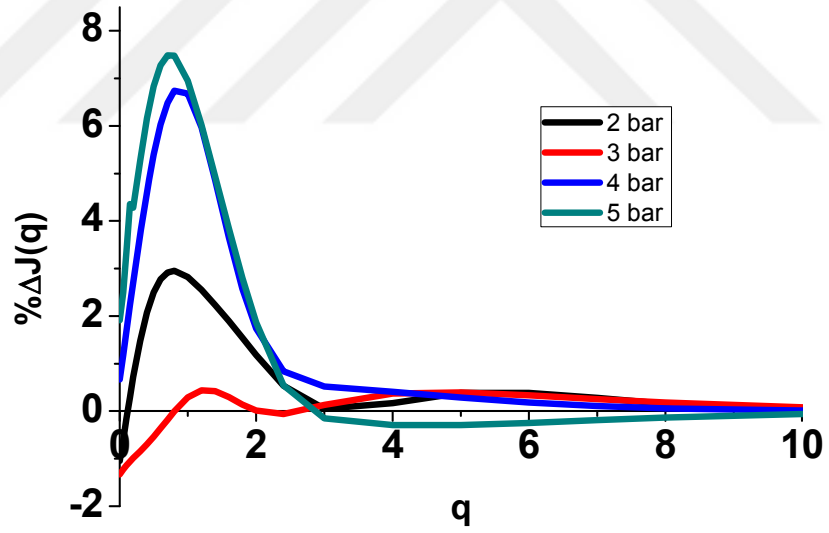


Şekil 4.44. CO₂ gazının 5,0 bar basınçta ölçülmüş Compton profilleri

CO₂ gazı için elde edilen CP ölçümlerinin basınçla bağlı değişimleri ve 1,0 barlık ölçümlere göre farklı basınçlarda CP değerlerinde belirlenen değişimler sırasıyla Şekil 4.45 ve 4.46'da verilmiştir. Şekil 4.39 incelendiği zaman CO₂ gazı üzerine uygulanan basınç bu gazın CP değerlerini $q = 2,5$ değerine kadar değiştirmiştir. Çünkü bu bölge CO₂ molekülünde yer alan O atomu etrafındaki bağ yapmamış ve diğer elektronlara nazaran daha yavaş hızlarda hareket eden elektronlardan kaynaklanmaktadır. Basınç değeri 2, 3, 4, 5 bar olduğunda $q = 0$ 'daki CP sonuçları sırasıyla %1,05, % 1,09, %2,56 ve % 6,65 oranında değiştirmiştir. CO₂ gazı için hesaplanan CP değerleri Çizelge 4.5'te sunulmuştur.



Şekil 4.45. CO_2 gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profillerinin kıyaslanması



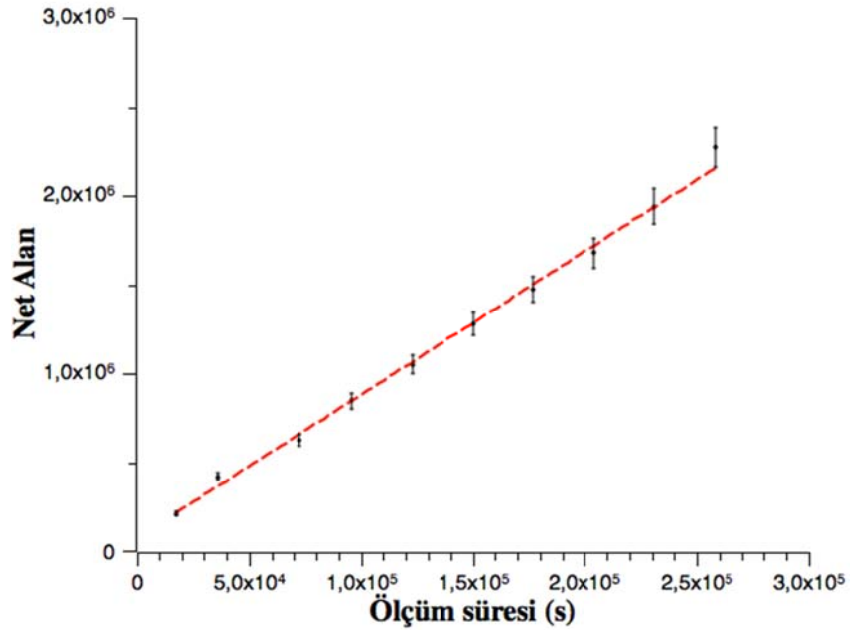
Şekil 4.46. CO_2 gazının Compton profillerinin basınca bağlı değişimleri

Çizelge 4.5. Farklı basınçlarda CO₂ gazının ölçülmüş Compton profil değerleri

q (a.u.)	Basınç (bar)				
	1 bar	2 bar	3 bar	4 bar	5 bar
0,00	5,775	5,714	5,698	5,813	5,885
0,05	5,736	5,701	5,665	5,804	5,88
0,10	5,686	5,677	5,62	5,784	5,88
0,15	5,624	5,641	5,563	5,752	5,876
0,20	5,551	5,592	5,494	5,708	5,798
0,30	5,368	5,453	5,319	5,582	5,672
0,40	5,138	5,258	5,098	5,405	5,494
0,50	4,868	5,012	4,837	5,18	5,263
0,60	4,564	4,724	4,543	4,912	4,984
0,70	4,235	4,403	4,225	4,61	4,667
0,80	3,893	4,063	3,893	4,282	4,324
1,00	3,207	3,37	3,224	3,593	3,609
1,20	2,58	2,727	2,605	2,924	2,927
1,40	2,054	2,183	2,078	2,335	2,339
1,60	1,644	1,753	1,661	1,855	1,866
1,80	1,339	1,428	1,347	1,488	1,501
2,00	1,118	1,186	1,119	1,219	1,226
2,40	0,833	0,864	0,829	0,881	0,864
3,00	0,581	0,584	0,589	0,611	0,573
4,00	0,33	0,34	0,351	0,354	0,313
5,00	0,187	0,209	0,21	0,203	0,17
6,00	0,105	0,127	0,124	0,116	0,091
7,00	0,059	0,075	0,074	0,065	0,048
8,00	0,033	0,042	0,043	0,036	0,025
10,00	0,01	0,011	0,015	0,011	0,007

4.2. İstatistik hatalar

CP spektrometrelerinde en önemli problemlerden biri spektrometrenin kararlılığı ve istatistiki hataların araştırılmasıdır. İlk olarak spektrometrenin kararlılığının belirlenmesi için vakuma alınarak içerisindeki gaz tamamen boşaltılan gaz hücresine 2,0 bar basınçlı Ar gazı yerleştirildi. Sistemin kararlılığını belirleyebilmek için $1,8 \times 10^4$ s zaman aralıklarıyla Compton pikleri ölçüldü. Zamana bağlı olarak Compton tepesinin altında kalan alanın değişimi Şekil 4.47’de görülmektedir. Alandaki lineer artış spektrometrenin kararlılığının zamanla değişmediğini göstermektedir. Buradan aynı zamanda sisteme konulan gazın, sistem içinde stabil olduğu ve basıncın ölçüm süresinde sabit kaldığı sonucuna da ulaşılmıştır. Çizelge 4.6 ölçüm süresi ve alan değerlerini vermektedir.

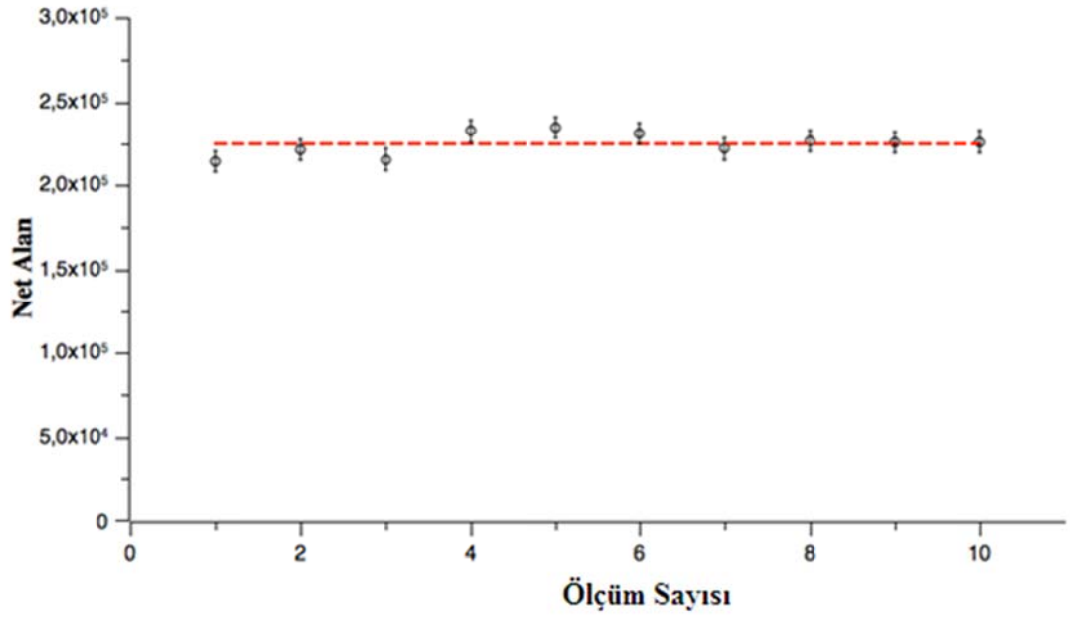


Şekil 4.47. Sabit basınçta ölçüm süresi ile Compton pik alan değişimi

Çizelge 4.6. Ölçüm süresi ve alan değerleri

Ölçüm süresi (s)	Net Alan	Standart Sapma
18000	2,11E+05	0,0022
36000	4,18E+05	0,0015
72000	6,23E+05	0,0013
96000	8,46E+05	0,0011
123000	1,05E+06	0,0010
150000	1,28E+06	0,0009
177000	1,47E+06	0,0008
204000	1,68E+06	0,0008
231000	1,94E+06	0,0007
258000	2,27E+06	0,0007

Gaz hücresine ilk defa gaz doldurulurken gaz basıncı bir manometre ile kontrol edilmesine rağmen gazın doldurulması işleminin ne kadar doğru yapıldığı da kontrol edildi. Bunun için Ar gazı gaz hücresine 2,0 bar basınçta yerleştirildi ve $1,8 \times 10^4$ s'lik bir ölçümle Compton tepesi kaydedildi. Daha sonra odadaki gaz boşaltılarak numune odası boşaltıldı (vakuma alındı). Sonra tekrar numune odasına 2,0 barlık argon gazı dolduruldu ve yine $1,8 \times 10^4$ s'lik Compton piki kaydedildi. Bu işlem 10 kez tekrar edildi ve her bir ölçümde ölçülen pik alanları belirlendi. Bu alanlar Çizelge 4.7'de ve Şekil 4.48'de sunulmuştur.



Şekil 4.48. Numune hazırlamadan kaynaklanan kullanıcı kaynaklı hataların tespiti

Çizelge 4.7. Numune hazırlamadaki hataların tespiti için kullanılan veriler

Ölçüm sayısı	Net alan (x10 ⁵)	Standart Sapma
1	2,143	0,000683
2	2,213	0,000672
3	2,154	0,000681
4	2,325	0,000656
5	2,346	0,000653
6	2,311	0,000658
7	2,217	0,000672
8	2,265	0,000664
9	2,256	0,000666
10	2,259	0,000665

4.3. Hata analiz sonuçları

Bölüm 3'te tartışılan hata analizi yönetimi ile belirlenen β, α, μ ve π katsayıları Çizelge 4.6'da verilmiştir. Bu değerlerin her birisi $q = 0$ 'da CP'nin %1'den daha küçük hataya sahip olduğu kabul edilerek hesaplanmıştır. Hesaplamalarda Biggs *et al.* (1975) tarafından Hartree Fock teorisi kullanılarak elde edilen teorik hesaplamalar doğru değer olarak kabul edilmiştir. Biggs bu çalışmasında atomları serbest atom olarak ele aldığından N₂ ve O₂ moleküllerinin teorik Compton profilleri 2 ile çarpılarak elde edilmiştir. Literatürde daha önceden CO₂ gazının teorik Compton profil sonucu yer almadığından dolayı CO₂ gazı için hata analizi yapılamamıştır. Ayrıca He gazı için yapılan deneylerde sistemde maksimum 4 bar basınca kadar ölçüm alındığından bu gazında 5 barlık sonucu verilmemiştir.

Çizelge 4.8. $q = 0$ 'da % 1'lik hataya neden olan β, α, μ ve π katsayıları

		1 Bar	2 Bar	3 Bar	4 Bar	5 Bar
Ar	β	0,00861	0,00908	0,00957	0,00992	0,00962
	α	0,01059	0,01049	0,01046	0,01018	0,00949
	μ	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01
	π	-0,0172	-0,0182	-0,0191	-0,0198	-0,0192
N ₂	β	0,00683	0,00656	0,00729	0,00781	0,00779
	α	0,01452	0,00109	0,00117	0,00138	0,00141
	μ	-0,0099	-0,0099	-0,0099	-0,0099	-0,0099
	π	-0,0137	-0,0131	-0,0146	-0,0156	-0,0156
He	β	0,0092	0,009	0,0088	0,0094	-
	α	0,0139	0,0121	0,0117	0,012	-
	μ	-0,0099	-0,0099	-0,0099	-0,0099	-
	π	-0,0183	-0,018	-0,0177	-0,0188	-
O ₂	β	0,00766	0,01053	0,0105	0,00909	0,00913
	α	0,01059	0,00885	0,00892	0,00928	0,0093
	μ	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01
	π	-0,0153	-0,0211	-0,021	-0,0182	-0,0183

5. TARTIŞMA ve SONUÇ

Bu tez çalışmasında en basit tek atomlu He ve Ar gazlarının, iki aynı cins atoma sahip N_2 ve O_2 gazlarının ve iki farklı cins atomu olan üç atomlu CO_2 gazının Compton Profillerinin basınca bağlı olarak nasıl değiştiği araştırıldı. Tek atomlu soy gazlardan He atomu her iki elektronu da 1s orbitalinde olduğu için seçilirken Ar gazı 18 tane elektrona sahip olduğu için seçildi. Çünkü literatürde, soy gazların elektron sayıları arttıkça teori ile deney arasında uyumsuzluk olduğu ve bunun temel nedeninin ise elektronlar korelasyon etkileri olduğu belirlenmiştir (Sakurai *et al.* 2011). Elektron sayısı Ar'dan daha fazla elektronu olan Xe ve Rn gazları atom numaraları 30'dan daha büyük olduğu için bunlar ^{241}Am radyoizotopundan yayınlanan 59,537 keV enerjili γ -ışınları ile etkileştikleri zaman esas etkileşme Compton saçılması değil fotoelektrik soğrulma olacağı için Compton tepesinin yeterli sayma istatistiğine ulaşması çok daha uzun süreler gerektirecektir. Atom numarası 10 olan Ne gazı ise Ar'a göre nispeten daha az elektrona sahip olduğu için bu çalışmada kullanılmamıştır. Aynı cins iki atoma sahip N_2 ve O_2 gazları ise bu çalışmada valans elektron sayılarının çok olmasından ve bağ yapılarından dolayı ele alınmıştır. Yaygın kullanıma sahip üç atomlu CO_2 gazı ise yine bağ yapısından dolayı seçilmiştir.

Bu çalışmada incelediğimiz gazlar hem günlük hayatta hem de birçok bilimsel çalışmada kullanılmaktadır. Özellikle metal oksit yarıiletkenlerin oksitlenme düzeyleri, üretilen yarıiletken aygıtların elektrik, manyetik ve optik özelliklerini önemli ölçüde etkilemektedir. Bu nedenle, N_2 ve Ar gazları yarıiletkenlerin üretim aşamasında malzemenin hava ile temasını engellemek için kullanılmaktadır. “Glove box” olarak adlandırılan sistemlerde, ortam belirli bir basınç değerinde Ar veya N_2 gazı ile doldurularak, üretilen malzemelerin oksijenle temas etmesinin önüne geçilmek istenmektedir. Ayrıca Ar gazı pek çok gazlı radyasyon sayacının aktif maddesi olarak kullanılmaktadır. He, N_2 ve CO_2 gazlarının yüksek basınçlarda sıvı faza geçmeleri, sıcaklıklarının $-190\text{ }^{\circ}C$ gibi çok düşük değerlere ulaşmasını sağlar. Buda yüksek soğutma gerektiren uygulamalarda bu gazların sıvı ve katı fazlarının kullanımını gerektirmektedir.

Gaz sensörü arařtırmaları da son yıllarda fen bilimleri alanında oldukça büyük önem kazanmıřtır. Bilim insanları gazları dedekte edebilmek için çeřitli yarıiletken tabanlı malzemeler üretmeyi hedeflemektedir. Üretilen yarıiletken tabanlı malzeme gaz ile bir hücre içerisinde belirli bir süre etkileřimde bulundurulurken, malzemenin elektriksel özelliklerindeki deęiřimler incelenir. Gazlarda basınca baęlı olarak ortaya çıkabilecek olan yapısal deęiřiklik, gaz sensörü ölçümlerinde basıncın dikkate alınması gereklilięini ortaya koymaktadır.

Bu tez çalışmasında farklı basınçlı He, N₂, O₂, Ar ve CO₂ gazlarının Compton profillerine artan basınç nedeniyle nasıl deęiřtięi belirlenmeye çalışılmıřtır. Compton profil metodu ile elde edilen sonuçlar doğrudan hedef malzemenin elektronik yapısı ile ilgili olduęundan, bu gazların elektronik yapılarının artan basınçla birlikte nasıl bir deęiřime sahip olduęunu belirleyecek profil deęerleri ölçülmüřtür. Artan basınç gaz atom yahut molekülleri arasındaki çarpıřma sayısının artıřına neden olacak ve her bir çarpıřmada gerçekteřen momentum alıřveriři taneciklerin momentumlarında bir deęiřime neden olacaktır. Özellikle valans elektronlarının momentumları bu çarpıřmalar neticesinde deęiřeceęi için valans elektronlarının Compton profillerinin artan gaz basıncı ile deęiřeceęi öngörülmektedir. řekil 2.6’da gösterildięi üzere alınan bir Compton spektrumunda, pik tepesi ($q = 0$) ve onun etrafında logaritmik skalada Gaussian görülen kısım genellikle valans elektronlarından saçılmaya uğrayan fotonlar tarafından oluřturuluyorken, pikin kuyruk bölgeleri de genellikle iç yörünge elektronlarında saçılmıř fotonlardan kaynaklanmaktadır. Yani saçılan fotonlar gelen elektronun momentumunun z bileřeninin sıfır olduęu bir deęerden ($q = 0$) maksimum olduęu deęerlere ($q = q_{mak}$) kadar Compton profilleri incelememize olanak saęlamaktadır. Teoride bu q ’nun maksimum deęerleri $-\infty$ ve $+\infty$ olmalıdır. Ancak biz yapılan ölçümlerde q ’nun üst deęeri için bazı sınırlamalar koymak zorundayız. Çünkü Compton tepesinde $q = 0$ deęerine sahipken biz q ’nun her artan deęerleri için Compton profil hesaplamalarını kolayca yapabiliriz ancak gaz atomlarından koherent olarak saçılmıř 59,537 keV enerjili γ -ışınlarından kaynaklanan pik tepesinin varlıęından dolayı q_{mak} ’ın sonlu bir deęere sahip olmasını zorunlu kılmaktadır. İç yörünge

elektronları, dış yörünge elektronlarına nazaran atom çekirdeklerine daha sıkı bağlı olduklarından dolayı daha yüksek hızlara sahiptirler ve bu durum iç yörünge elektronlarından meydana gelen Compton saçılmasında daha fazla Doppler etkisinin ortaya çıkmasına sebep olmaktadır.

Bir gazın taneciklerinin enerjisinde bir değişim meydana getirebilecek herhangi bir parametrede meydana gelecek bir değişim (sıcaklık ve basınç gibi) o taneciğin atomik elektronlarının momentumunda da bir değişim ortaya çıkartacağı aşîkardır. Bu değişim özellikle bağlanma enerjileri küçük olan dış yörünge elektronlarında daha fazla etkisini gösterecektir. Zayıf bağlı bu elektronların enerjilerindeki küçük değişimler bile onların hızlarında (dolayısıyla da momentumlarında) önemli değişimlere neden olacaktır. Bu da bu elektronlardan inkoherent saçılan yüksek enerjili γ -ışınlarının daha farklı bir Doppler genişlemesine maruz kalmasına neden olur. Daha öncede belirtildiği gibi alınan bir Compton spektrumunda pikin tepe bölgesi ($q=0$) genellikle valans elektronlarından saçılmış fotonlar tarafından oluşturulduğu için Compton profil değişimlerinin özellikle $q=0$ 'a yakın bölgelerde olacağı öngörülmektedir.

Yapılan bu tez çalışmasında toplam deneysel momentum çözünürlüğü 0,564 a.u. olarak hesaplanmıştır. Bu toplam momentum çözünürlüğüne, deneylerde kullanılan radyoaktif kaynak, detektör ve oluşturulan geometri etki etmektedir. Bu her bir etmenden gelen momentum çözünürlük değerleri sırasıyla 0,056 a.u., 0,532 a.u. ve 0,179 a.u. olarak hesaplanmıştır.

Şekil 4.2, 4.9, 4.19, 4.29 ve 4.39 sırasıyla He, Ar, N₂, O₂ ve CO₂ gazlarının Compton ve koherent tepelerini göstermektedir. Özellikle metallerin Compton profilleri dikkatlice incelenirse, Compton Profillerinde bir davranış değişiminin gözlemlendiği keskin bir değişim noktası görülmektedir. Bu ayrım noktası, logaritmik skalada pikin tepesi ile başlayan ve Gaussian olan dağılımın aniden doğrusal bir değişime dönüştüğü noktadır. Bu nokta valans elektronlarından saçılmanın baskın olmaya başladığı sınırı göstermektedir. Eğer Şekil 2.6 tekrar incelenirse bu ayrım noktası kolayca fark

edilebilir. Bizim numunelerimiz gaz fazında olduklarından Şekil 2.6'da görüldüğü gibi keskin bir değişim gözlememiz mümkün değildir.

İki elektronu olan He gazının Compton profilinin tamamı Şekil 4.3-4.6'da görüldüğü gibi neredeyse ideal bir Gaussian'dır. Çünkü He atomunun iki elektronu da 1s orbitalinde olduğundan He atomunda iç yörünge ya da valans elektronu gibi bir ayırım yapamayız. Netice olarak He gazının Compton Profilleri beklenildiği gibi ideal bir Gaussian'a uyar. Ancak incelenen diğer gazlarda $q = 2,0 - 2,5$ civarında tüm gazlarda bu ayırım noktası açıkça görülmektedir. O halde gazların valans elektronlarının momentumunun saçılma doğrultusunda bileşeni atomik birimlerde $\approx 2,0 - 2,5$ arasında değişmektedir. Compton profillerin diğer bölgesi ise iç yörünge elektronlarından saçılmanın daha baskın olduğu bölgeleri temsil etmektedir.

Şekil 4.3-6'da 1, 2, 3 ve 4 bar basınca sahip He gazlarından ölçülen Compton profiller görülmektedir. 1 barlık He gazının $q=0$ değeri referans alınarak normalize edilen fark profillerinin değişimi Şekil 4.8'de görülmektedir. Bu şekle göre He gazı için artan basınç değeri, $q=0$ 'da maksimum %0,09'luk bir değişim meydana getirdiği görülmektedir. He gazı elektronlarının bulunduğu küresel simetrik 1s atomik orbitali tam dolu olduğundan dolayı, uygulanan maksimum 4 barlık basınç bile bu gazın elektronlarından Compton saçılması üzerine Doppler genişlemesinden dolayı herhangi bir etki oluşturmamaktadır. Yani basıncın, He gazının Compton profillerine etkisinin deneysel olarak belirlenebilmesi için çok yüksek basınçlar uygulanmalıdır.

1, 2, 3, 4 ve 5 barlık basınç altında ölçülen Argon gazının Compton profil sonuçları sırasıyla Şekil 4.10-14'de verilmiştir. 59,54 keV'lik γ -ışınlarının Ar gazının elektronlarından saçılması ile $q=0$ 'da ölçülen Compton profilleri $\sim 4,251-4,956$ a.u. arasındadır. Tüm orbitalleri tam dolu olan Ar gazının elektron konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ biçimindedir. Şekil 4.15 dikkatlice incelendiğinde $q=2$ değerine kadar profil çizgisi Gaussian iken, bu noktadan sonra lineer biçimde değiştiği görülmektedir. $q=0$ ile $q=2$ aralığında Compton saçılması baskın olarak 3s ve 3p

orbitallerinde bulunan elektronlardan gerçekleşmektedir. Çünkü bu elektronlar iç yörüngelerde yer alan elektronlara göre daha yavaşlar, bu nedenle de daha az Doppler genişlemesine neden olurlar. $q > 2$ olduğunda, Compton saçılması Ar gazının iç orbitalleri 1s, 2s ve 2p bulunan elektronlardan daha baskın bir biçimde gerçekleşmektedir.

Argon gazının artan basıncının Compton profillerine etkisi Şekil 4.16'da görülmektedir. Burada, 1,0 bar basınçlı Ar gazının $q=0$ 'da ölçülen Compton profil değerine göre normalize edilen farklı basınçta Ar gazının Compton profillerinin nasıl değiştiği görülmektedir. Ar gazının basıncı sadece 1,0 bar arttığında bile $q=0$ 'da Compton profil değeri %5,0 kadar değişmiştir. Artan gaz basıncı ile Compton profil değerleri %15'e kadar artan oranlarda değişmektedir. Ayrıca Şekil 4.16'ya göre $q > 2$ değerinden sonra 2, 3, 4 ve 5 bar basınçtaki Ar gazının Compton profillerinin 1,0 bara göre istatistiksel olarak anlamlı bir farka sahip değildirler. Çünkü bu bölgede iç yörünge elektronlarından saçılmalar daha baskın olup Compton profil değerlerinde basınçla bir farklılık ortaya çıkmaması iç yörünge elektronlarının momentum dağılımlarının basınçtan etkilenmediğini göstermektedir. Deneysel sonuçlar her bir çarpışmada bir Ar atomunun momentum değişiminin öncelikle dış yörünge elektronlarının enerji ve momentumlarını değişimini göstermektedir.

Tek atomlu soy gaz olan He ve Ar gazlarının Compton profillerinin basınçla değişimi incelendiğinde görüldüğü gibi He atomunun Compton profilleri basınçtan etkilenmezken Ar gazının Compton profilleri basınçla değişmektedir. Literatürde soy gazların Compton profillerinin ölçülen değerleri ile teorik sonuçları kıyaslandığında elektron sayısı arttıkça gazın ölçülen Compton profillerinin teorik sonuçlardan farklılaştığı görülmektedir. Bunun en muhtemel nedeninin elektronlar korelasyon etkileri olduğu belirlenmiştir (Sakurai *et al.* 2011). Elektron korelasyon etkileri eğer ölçülen profillerin serbest atomlar için hesaplanan Compton profillerden farklılaşmasına neden oluyorsa basıncın artması soy gazın elektronları arasındaki korelasyon etkileşmelerinin daha da karmaşıklaşmasına neden olacak ve bu da açıkça bir soy gazın Compton profillerini basınca karşı daha hassas hale getirecektir.

Şekil 4.20-24 N_2 gazının Compton profillerini sunmaktadır. Bu şekillere göre; N_2 gazının $q=0$ 'daki Compton profili 3,690 a.u. ile 3,875 a.u. arasındadır. N_2 gazının elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^3$ olduğundan 5 valans elektronuna sahiptir. İki Azot atomunun bir araya gelmesiyle oluşan N_2 molekülünde bu beş valans elektronundan 3 tanesi kullanılır ve iki Azot atomu üçlü bağ yapar. N_2 molekülünün Lewis yapısı Şekil 4.17'de verilmiştir. Bu şekilden de görüldüğü üzere N_2 molekülünden azot atomları etrafında bağ yapımında kullanılmamış ve serbest kabul edilebilecek ikişer valans elektronu mevcuttur.

Farklı basınçlı N_2 gazlarının Compton profilleri sırasıyla Şekil 4.20-24 arasında verilmiştir. Tüm basınçlarda ki Compton profil eğrilerini veren Şekil 4.25 incelendiğinde $q=0$ 'dan başlayan Compton profil çizgisi $q=2,5$ değerine kadar yaklaşık Gaussian'dır. Bu da $q=0$ ile $q=2,5$ aralığındaki saçılmaların genellikle N_2 molekülünün bağ yapmamış 4 valans elektronundan meydana geldiğini göstermektedir. Çünkü bu elektronlar dış yörüngelerde olduklarından daha yavaş hızlarla atom etrafında dönmektedirler dolayısıyla bu elektronlardan meydana gelen Compton saçılmasında, daha az Doppler genişlemesi gözlenir.

1,0 bar basınçta sahip N_2 gazının ölçülen Compton profil değerlerine göre hesaplanmış farklar Şekil 4.26.'da verilmiştir. Bu grafikte, artan basınç değeri, $q=2,5$ değerine kadar Compton profil sonuçlarını değiştirdiğini açıkça ortaya koymaktadır. Özellikle 4,0 bar basınçlı azot gazı için $q=1$ 'de Compton profil değerlerinde %~8,0'lık bir değişim olduğu belirlendi. Artan q değerleri iç yörünge elektronlarından saçılmanın baskın olduğu durumu gösterdiğinden, artan gaz basıncı N_2 gazının bu bölgelerdeki Compton profillerini etkilememektedir.

Oksijen atomunun elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^4$ olup 6 valans elektronuna sahiptir. Lewis yapısı Şekil 4.27'de verilen O_2 molekülünde yer alan oksijen atomları çift bağ ile birbirlerine bağlı iken, her iki atomunda bağ yapmamış durumda dört elektronu mevcuttur. Yani O_2 molekülünde 8 adet valans elektronu mevcuttur.

O₂ gazının farklı basınçlarda ölçülmüş Compton profilleri Şekil 4.30-34 arasında gösterilmiştir. O₂ gazının $q=0$ 'daki Compton profilleri farklı basınçlarda farklı değerlere sahip olup $\sim 3,894-4,263$ a.u. aralığında değişmektedir. Şekil 4.35 dikkatlice incelenirse, tüm Compton profil çizgilerinin $q=2$ değerine kadar neredeyse ideal bir Gaussian olduğu ve bu değerden sonra ise lineer olarak değiştiği görülebilir. Açıkça $q=0$ ile $q=2$ değerleri arasında yer alan Compton profiller, neredeyse tamamı O₂ molekülünün valans elektronlarından saçılmış fotonlar ölçülerek belirlenmişken diğer bölgelerdeki Compton profiller genellikle diğer elektronlardan saçılan fotonlar ölçülerek hesaplanmıştır. Şekil 4.36'da 1,0 bar basınca sahip oksijen gazının Compton profilleri referans alınarak belirlenmiş Compton profil değişimleri 1,0 bar basınçlı oksijen gazının $q=0$ değerine göre normalize edilmiştir. Özellikle basınç 5,0 bar olduğunda bu değişim $\sim 6,65\%$ olmaktadır. $q > 2,0$ olduğunda Compton profil değerlerinin değişimi artan basınç ile önemsiz hale gelmektedir. Sonuç olarak O₂ gazının üzerine uygulanan basıncın bu gazın serbest elektronlarının hız dağılımları üzerinde bir etkiye sahip olduğu ancak iç yörünge elektronları üzerinde bir etkisinin olmadığı görülmektedir.

Son yörüngesinde dört elektron bulunan azot gazı ile son yörüngesinde sekiz elektronu bulunan oksijen gazının Compton profilleri karşılaştırıldığında her iki gazın basıncı arttığında Compton profilleri önemli derecede değiştiği görülmektedir. Toplam elektron sayıları farkı iki olan bu iki gazdan azotun Compton profilleri $q > 2,5$ değerine kadar basınçtan etkilenirken oksijen gazındaki bu etkileşim $q = 2,0$ değerinde sona ermektedir. Oksijen atomundaki spin-yörünge etkileşimleri ve iki gazın bağ yapılarındaki farklılaşmalar bu küçük değişimin temel nedenini oluşturmaktadır.

Şekil 4.37'de CO₂ gazının Lewis yapısı verilmiştir. CO₂ molekülü lineer yapıda olup merkezde bulunan karbon atomu yanında birer adet oksijen atomu bulunmaktadır. Karbon atomu 2 valans elektronuna sahipken oksijen atomu 6 valans elektrona sahiptir. Bu iki atom arasında oluşan olan kimyasal bağda toplam 8 elektron kullanılmaktadır. Merkezde bulunan C atomu, O atomları ile çift bağ yaptığından tüm valans elektronları kullanılmıştır ve geriye O atomlarından bağ yapmamış 8 elektronu kalmıştır. Bu

nedenle bu molekülde yer alan bu bağ yapmamış elektronlar serbest elektron olarak kabul edilirler. Basınca bağlı olarak ölçülen Compton profil sonuçları bu 8 elektrondan saçılmış fotonlarla daha fazla ilişkili olacaktır.

Şekil 4.40-44 sırasıyla 1, 2, 3, 4 ve 5 bar basınçtaki CO₂ gazının Compton profil grafiklerini göstermektedir. Bu grafiklere göre CO₂ gazının $q=0$ 'da Compton profil değerleri 1, 2, 3, 4 ve 5 bar basınç için sırasıyla 5,775, 5,714, 5,698, 5,813 ve 5,885 a.u. olarak belirlenmiştir. Şekil 4.45 tüm farklı basınçlı CO₂ gazlarından ölçülmüş Compton profillerin bir kıyaslamasını sunmaktadır. Bu şekil incelendiğinde spektrumların hepsinin benzer eğrilere sahip olduğu ve hepsinin $q=2,5$ değerinden sonra lineer olarak değiştiği görülmektedir. Bu nedenle $q=2,5$ noktası bu molekülün valans elektronlarının ayırım noktası olarak alınmaktadır. Şekil 4.46'da görülen değerler, 1,0 bar basınca sahip karbon dioksit gazının ölçülmüş profillerinden farkı alınmış farklı basınçlarda ölçülmüş profillerin farkını göstermektedir. Üstelik bu değerler 1,0 bar basınçlı gazın $q=0$ 'da ölçülmüş profil değerine göre normalize edilmiştir. Bu grafiğe göre, $q=0$ ile $q=2,5$ arasında kalan kısım O atomunun bağ yapmamış olan 8 elektrondan kaynaklanıyorken $q>2,5$ olan bölge molekülde yer alan diğer elektronlardan saçılan fotonlardan dolayı ortaya çıkmıştır. Grafikten artan basıncın $q=0$ 'da Compton profilleri arttırdığını ve bu artışın $q=1$ değerinde maksimum olduğu görülmektedir. $q=2,5$ değerinden sonra ise molekülün Compton profil sonuçlarında beklendiği üzere bir değişim gözlenmemiştir. Bu grafik CO₂ molekülünün basınçla elektronik yapısının değiştiğini ve bu değişimin sadece valans elektronları bölgesinde olduğunu göstermektedir.

Yapılan bu tez çalışmasında incelenen gazların her biri için ortalama 7 gün süren deneyler yapılmıştır. Ortam sıcaklığının deneyler süresince değişmediği yapılan ölçümlerle tespit edilmiştir. Diğer yandan ölçüm süresinin bu denli uzun olması sistemin kararlılığını test etmemizi zorunlu kılmıştır. Bu nedenle, 2,0 bar basınca sahip Ar gazından saçılmış Compton tepelerinin alanları her $1,8 \times 10^4$ s'lik zaman artışı ile ölçülmüş ve zaman bağlı olarak Compton tepesinin alanının değişimi Şekil 4.47'de

sunulmuştur. Bu Şekilde görüldüğü gibi ölçüm süresinin artmasıyla Compton tepesinin altında kalan alanın lineer olarak arttığı görülmektedir. Bu spektrometrenin ölçüm süresi boyunca kararlılığının değişmediğini kanıtlamaktadır. Esas itibariyle bu hem spektrometredeki HPGe dedektörün kararlılığının hem de gaz odasındaki gazın basıncının zaman içerisinde değişmediğini ispatlamaktadır.

Gaz hücresine ilk defa gaz doldurulurken gaz basıncı analog bir manometre ile ayar edilmesine rağmen gazın doldurulması işleminin ve manometreden okunan değerin de ne kadar doğru olarak ölçüldüğünü belirlemek için bir takım ilave deneyler yapıldı. Bunun için Ar gazı gaz hücresine 2,0 bar basınçta yerleştirildi ve $1,8 \times 10^4$'s'lik bir ölçümle Compton tepesinin alanı belirlendi. Daha sonra gaz hücreden dışarı alındı (vakumlandı). Bu işlem on kez tekrar edilerek bulunan alanlar Şekil 4.48'de verilmiştir. Bu Şekilde ayrıca bu on değerin ortalaması kesikli çizgi ile gösterilmektedir. Şekilde ayrıca her bir ölçümün rölatif standart sapması hata çubuğu olarak eklenmiştir. Şekilden görüldüğü gibi pik alanları istatistik olarak ortalama değer esnasında dalgalanmakta ve net alandaki değişim maksimum %0,1 mertebesinde olmaktadır. Bu da kullanıcı araştırmacı kaynaklı ortaya çıkabilecek hatalarımızı minimize edildiğini göstermektedir.

Biz gaz odasının Hostaphan penceresi 5,0 bar'dan daha büyük basınçlara dayanmadığı için bu tez çalışmasında daha yüksek basınçlarda deneyler gerçekleştirilemedi. Hostaphan pencere yerine alternatif olarak kullanılabilecek 0,015 mm kalınlığına sahip bir Be pencere yüksek basınçlarda gazlar ile ölçümlerde aktif olduğu için uzun süre kullanılamamaktadır. Özellikle uyarıcı kaynak olarak kullandığımız ^{241}Am kaynaktan yayınlanan α -parçacıkları gaz hücresine girmek için Hostaphan yerine kullanılacak Be pencereden geçmek zorundadır. Aktifliği $\sim 5,0$ Ci olan bu kaynaktan yayınlanan alfa parçacığı şuası $\sim 1,9 \times 10^{11}$ parçacık/s'dir. Bu yüksek α -parçacığı akısından dolayı kullanılacak Be pencerede 10^6 α -parçacığı başına ~ 70 tane nükleer reaksiyon meydana gelecek ve buda Be pencerenin çok kısa sürede delinmesine ve dolayısıyla da vakumun bozulmasına neden olacaktır. Bu nedenle yüksek basınca dayanaklı Be pencereler gaz hücresinde kullanılamamış ve ölçümlerimiz Hostaphan pencere ile 5,0 bar basınca kadar gerçekleştirilebilmiştir.

Basınca bağılı olarak ölçülen Compton profil değerleri, malzemelerin elektronik yapılarının dolayısıyla dalga fonksiyonlarının basınç ile olan değişimlerinin nasıl olabileceği ile ilgili önemli ipuçları ortaya çıkarmıştır. Bulduğumuz sonuçlar, atomik ve moleküler yapıdaki maddelerin valans elektron yapılarının basınca bağlılığını anlaşılmasında önemli katkılar sağlayacaktır. Ancak bu çalışmalar çok daha yüksek basınç değerlerinde daha şiddetli uyarıcı kaynaklar ve daha hassas ölçüm sistemleri kullanılarak tekrar edilerek geniş bir basınç aralığı için daha faydalı veriler elde edilebilecektir.



KAYNAKLAR

- Aguiar, J.C., Di Rocco, H.O., Mitnik, D., 2013. Experimental Compton profiles of Be, Al and Ti and comparisons to generalized gradient approximation calculations. *J Phys Chem Solids*, 74 (10), 1341-1348.
- Biggs, F., Mendelsohn, L.B., Mann, J.B., 1975. Hartree-Fock Compton profiles for the elements. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 16 (3), 201-309.
- Compton, A.H., 1923. A Quantum theory of the scattering of X-rays by light elements. *Physical Review*, 21 (5) 483-502.
- Cooper, M., Leake, J.A., Weiss, R.J., 1965. The compton profile of lithium. *Philosophical Magazine*, 12 (118), 797-800.
- Cooper, M.J., 1985. Compton-Scattering and electron momentum determination. *Rep Prog Phys*, 48 (4), 415-481.
- Couchois, Y., 1932. Spectroscopy of x-rays by transmission of a non-canalized beam by a curved crystal. II. *Compt. rend.* 194, 1479-1482.
- Curat, R., Decicco, P.D., Kaplow, R., 1971a. Compton scattering and electron momentum density in beryllium. *Phys Rev B*, 3 (2), 243-251.
- Curat, R., Decicco, P.D., Weiss, R.J., 1971b. Impulse approximation in compton scattering. *Phys Rev B*, 4 (12), 4256-4261.
- Daniel, E., Vosko, S.H., 1960. Momentum distribution of an interacting electron gas. *Physical Review*, 120 (6), 2041-2044.
- Du Mond, J.W.M., 1929. Compton modified line structure and its relation to the electron theory of solid bodies. *Physical Review*, 33 (5), 643-658.
- Dumond, J.W.M., 1933. The Linear momenta of electrons in atoms and in solid bodies as revealed by X-ray scattering. *Reviews of Modern Physics*, 5 (1), 1-33.
- DuMond, J.W.M., Kirkpatrick, H.A., 1930. The multiple crystal x-ray spectrograph. *Review of Scientific Instruments*, 1 (2), 88-105.
- Duncanson, W.E., Coulson, C.A., 1945. Theoretical shape of the compton profile for atoms from H to Ne. *Proceedings of the Physical Society*, 57 (3), 190-198.
- Eisenberger, P., Platzman, P.M., 1970. Compton Scattering of X-rays from bound electrons. *Phys Rev A*, 2 (2), 415-423.
- Eisenberger, P., Reed, W.A., 1972. Gamma-Ray Compton-scattering - experimental Compton profiles for He, N₂, Ar, and Kr. *Phys Rev A*, 5 (5), 2085-2093.
- Eisenberger, P., 1972. Compton-profile measurements of N₂, O₂, and Ne using silver and molybdenum X-Rays. *Phys Rev a-Gen Phys*, 5 (2), 628-634.
- Eisenberger, P., Platzman, P.M., Winick, H., 1976a. Resonant X-ray Raman scattering studies using synchrotron radiation. *Phys Rev B*, 13 (6), 2377-2380.
- Eisenberger, P., Platzman, P.M., Winick, H., 1976b. X-ray resonant Raman scattering: observation of characteristic radiation narrower than the lifetime width. *Phys Rev Lett*, 36 (11), 623-626.
- Erba, A., Pisani, C., Casassa, S., Maschio, L., Schutz, M., Usvyat, D., 2010. MP2 versus density-functional theory study of the Compton profiles of crystalline urea. *Phys Rev B*, 81 (16), 1-11.

- Hamalainen, K., Huotari, S., Laukkanen, J., Soininen, A., Manninen, S., Kao, C.C., Buslaps, T., Mezouar, M., 2000. Free electron gas under high pressure. *Phys Rev B*, 62 (2), 735-R738.
- Weast, R.C., 1971. CRC handbook of chemistry and physics, 52rd Edition. The Chemical Rubber Co., USA.
- Hiraoka, N., Ishii, H., Jarrige, I., Cai, Y.Q., 2005. Inelastic x-ray scattering studies of low-energy charge excitations in graphite. *Phys Rev B*, 72 (7), 75-103.
- Hiraoka, N., Itou, M., Ohata, T., Mizumaki, M., Sakurai, Y., Sakai, N., 2001. A new X-ray spectrometer for high-resolution Compton profile measurements at SPring-8. *J Synchrotron Radiat*, 8, 26-32.
- Holzmann, M., Bernu, B., Pierleoni, C., McMinis, J., Ceperley, D.M., Olevano, V., Delle Site, L., 2011. Momentum distribution of the homogeneous electron gas. *Phys Rev Lett*, 107 (11), 1-5.
- Huotari, S., Soininen, J.A., Pylkkanen, T., Hamalainen, K., Issolah, A., Titov, A., McMinis, J., Kim, J., Esler, K., Ceperley, D.M., Holzmann, M., Olevano, V., 2010. Momentum distribution and renormalization factor in sodium and the electron gas. *Phys Rev Lett*, 105 (8), 1-4.
- Johann, H.H., 1931. Die Erzeugung lichtstarker röntgenspektren mit hilfe von konkavkristallen. *Zeitschrift für Physik*, 69 (3-4), 185-206.
- Joshi, K.B., Sharma, B.K., Paliwal, U., Barbiellini, B., 2012. Pressure-dependent electronic properties of MgO polymorphs: a first-principles study of Compton profiles and autocorrelation functions. *J Mater Sci*, 47 (21), 7549-7557.
- Kilby, G.E., 1965. A wave-mechanical derivation of the intensity distribution of the Compton line. *Proceedings of the Physical Society*, 86 (5), 1037-1040.
- Kirkpatrick, P., Ross, P.A., 1933. A ring-target x-ray generator adapted to scattering, fluorescence and irradiation experiments. *Review of Scientific Instruments*, 4 (12), 645-648.
- Knoll, G.F., 1989. Radiation detection and measurement. John Wiley & Sons, 754, USA.
- Kobayashi, K., Itou, M., Hosoya, T., Tsuji, N., Sakurai, Y., Sakurai, H., 2011. Accurate Compton scattering measurements for N₂ molecules. *J Phys B-at Mol Opt*, 44 (11), 1-4.
- Loupas, G., Petiau, J., 1980. Anisotropic Compton-Scattering in LiF Using Synchrotron Radiation. *J Phys-Paris*, 41 (3), 265-271.
- Ma, Y.P., Zhao, X.L., Liu, Y.W., Xu, L.Q., Kang, X., Ni, D.D., Yan, S., Zhu, L.F., Yang, K., 2015. Investigation of Compton profiles of NO and C₂H₂. *Acta Phys Sin-Ch Ed*, 64 (15), 1-7.
- Olevano, V., Titov, A., Ladisa, M., Hamalainen, K., Huotari, S., Holzmann, M., 2012. Momentum distribution and Compton profile by the ab initio GW approximation. *Phys Rev B*, 86 (19), 1-13.
- Oomi, G., Honda, F., Kagayama, T., Itoh, F., Sakurai, H., Kawata, H., Shimomura, O., 1998. High-pressure system for Compton scattering experiments. *J Synchrotron Radiat*, 5, 932-934.
- Paakkari, T., Merisalo, M., 1978. Compton profile of CH₄ Gas. *Chem Phys Lett*, 53 (2), 313-316.

- Pattison, P., Suortti, P., Weyrich, W., 1986. An X-ray spectrometer for inelastic-scattering experiments .3. design and performance. *J Appl Crystallogr*, 19, 353-363.
- Pattison, P., Weyrich, W., Suortti, P., 1986. Design and performance of an x-ray compton spectrometer. *Chem Scripta*, 26 (3), 503-503.
- Phillips, W.C., Weiss, R.J., 1968. X-ray determination of electron momenta in Li, Be, B, Na, Mg, Al, and LiF. *Physical Review*, 171 (3), 790-800.
- Pisani, C., Erba, A., Casassa, S., Itou, M., Sakurai, Y., 2011a. Anisotropy of the electron momentum distribution in alpha-quartz investigated by Compton scattering and ab initio simulations. *Phys Rev B*, 84 (24), 1-12.
- Pisani, C., Itou, M., Sakurai, Y., Yamaki, R., Ito, M., Erba, A., Maschio, L., 2011b. Evidence of instantaneous electron correlation from Compton profiles of crystalline silicon. *Phys Chem Chem Phys*, 13 (3), 933-936.
- Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Poling, B.E., 1987. The properties of gases and liquids. McGraw-Hill. USA.
- Sakurai, H., Ota, H., Tsuji, N., Itou, M., Sakurai, Y., 2011. Accurate Compton scattering measurements of noble gases: the importance of electron correlations in heavy atoms. *J Phys B-at Mol Opt*, 44 (6), 1-4.
- Schülke, W., 2007. Electron dynamics by inelastic X-ray scattering. Oxford University Press, 591, New York.
- Storm, L., Israel, H.I., 1970. Photon cross sections from 1 keV to 100 MeV for elements $Z=1$ to $Z=100$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 7 (6), 565-681.
- Suortti, P., Pattison, P., Weyrich, W., 1986. Curved crystal optics for conventional X-ray Sources. *Chem Scripta*, 26 (3), 503-503.
- Suortti, P., Pattison, P., Weyrich, W., 1986. An X-Ray Spectrometer for Inelastic-Scattering Experiments .1. Curved-Crystal X-Ray Optics. *J Appl Crystallogr*, 19, 336-342.
- Suortti, P., Pattison, P., Weyrich, W., 1986. An X-ray spectrometer for inelastic-scattering experiments .2. spectral flux and resolution. *J Appl Crystallogr*, 19, 343-352.
- Şahin, Y., Demet, D., 2013. X-ışını spektroskopisi. Çimke Yayınları, 260, Türkiye
- Tong, B.Y., Lam, L., 1978. Compton profiles of Ne, Ar, and Kr. *Phys Rev A*, 18 (2), 552-558.
- Tse, J.S., Klug, D.D., Jiang, D.T., Sternemann, C., Volmer, M., Huotari, S., Hiraoka, N., Honkimaki, V., Hamalainen, K., 2005. Compton scattering of elemental silicon at high pressure. *Appl Phys Lett*, 87 (19), 1-3.
- Tsoufanidis, N., 1995. Measurement and detection of radiation, 2nd Edition. Taylor & Francis Group, USA.
- Weyrich, W., 1975. Electron momentum distribution in solid potassium fluoride, studied by Compton-scattering. *Ber Bunsen Phys Chem*, 79 (11), 1085-1095.
- Williams, B.G., 1977. Compton Scattering: The investigation of electron momentum distributions. McGraw-Hill International.
- Yang, F., Hamilton, J.H., 1996. Modern atomic and nuclear physics. McGraw-Hill, 791. Singapore

ÖZGEÇMİŞ

1986 yılında Erzurum’da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Erzurum'da tamamladı. 2004 yılında eğitime başladığı Atatürk Üniversitesi Fen-Edebiyat fakültesinden 2008 yılında mezun olarak aynı yıl Genel Fizik bilim dalında yüksek lisans eğitimine başladı. "Seçilmiş yıldız kümelerinde değişen yıldızlar" isimli yüksek lisans tez çalışmasını 2012 yılında tamamlayarak doktora eğitime başladı. Evli ve bir erkek çocuk babasıdır.

Ocak 2010’dan itibaren Atatürk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik bölümünde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaktadır.