



MODELLING OF THERMOLUMINESCENCE TRAP ENERGY LEVELS OF SEYDİŞEHİR ALUMUNA

Erdem UZUN*¹, Yasemin YILDIZ YARAR²

¹*Karamanoğlu Mehmetbey Üniversitesi, Kamil Özdağ Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, KARAMAN*

²*Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Esenler-İSTANBUL*

Received/Geliş: 28.07.2010 Revised/Düzeltilme: 11.01.2011 Accepted/Kabul: 14.01.2011

ABSTRACT

Thermoluminescence dosimeters (TLDs), have been commonly utilized to measure of radiation doses. Nowadays, these kinds of detectors have been used in medicine and industry, routinely. Most important factors to influence of usefulness and reliability of TLDs are trap energy levels and thermoluminescence trap parameters. In this work, a new mathematical model of energy band diagram of Seydişehir alumina was asserted and numerical solutions of this model were performed. Theoretical and experimental results were compared to each other. Results show that they are in a good agreement and energy band diagram of Seydişehir alumina has been represents by this new model.

Keywords: Seydişehir alumina, thermoluminescence, TLD, trap parameters.

PACS numbers/numaraları: Thermoluminescence, 78.60.Kn, Traps, 37.10.Ty, Numerical Methods, 02.30-x

SEYDİŞEHİR ALÜMİNASININ TERMOLÜMİNESANS TUZAK ENERJİ SEVİYELERİNİN MODELLENMESİ

ÖZET

Termolüminesans dozimetreler (TLDs) radyasyon dozlarının ölçülmesinde yaygın olarak kullanılmaktadırlar. Günümüzde bu tür detektörlerden tıpta ve endüstride rutin olarak faydalanılmaktadır. Bu detektörlerin kullanımını ve güvenilirliğini etkileyen en önemli faktörler ise tuzak enerji seviyeleri ve termolüminesans tuzak parametreleridir. Bu çalışmada, Seydişehir alüminasının tuzak enerji seviyeleri ve diğer tuzak parametreleri matematiksel olarak modellenmiş, bu modelin sayısal çözümleri yapılmış ve elde edilen sonuçlar deneysel bulgular ile kıyaslanmıştır. Teorik ve deneysel verilerin çok iyi bir uyum içerisinde olduğu görülmüş ve ileri sürülen yeni modelin Seydişehir alüminasının enerji bant diyagramını temsil ettiği sonucuna ulaşılmıştır.

Anahtar Sözcükler: Seydişehir alümina, termolüminesans, termolüminesans dozimetri, tuzak parametreleri.

1. GİRİŞ

Hızla artan dünya nüfusu, beraberinde günlük yaşamı kolaylaştıran teknolojilere olan gereksinimi, gıda ve enerjiye olan ihtiyacı arttırmıştır. Bu ihtiyaçların karşılanabilmesi ve yaşam standardının yükseltilebilmesi, ancak bunlar yapılırken de çevre dostu teknolojilerin geliştirilmesi bir zorunluluktur. Teknolojinin gelişimine paralel olarak, toplumdaki çevre bilinci de artmıştır. Toplum tarafından, her yeni teknolojinin çevre ve doğa dostu olmasına özen gösterilmesini

*Corresponding Author/Sorumlu Yazar: e-mail/e-ileti: erdemuzun@kmu.edu.tr, tel: (338) 226 23 73

sağlayacak bir baskı unsuru oluşturulmuştur. Bu baskı sonucu, yeni arayışlar içerisine giren bilim adamları radyasyon ve radyoaktif izotopların kullanımıyla birçok ileri ve çevreye duyarlı teknolojiler geliştirebilmişlerdir. Bu tür teknolojiler kullanılarak, otomobil lastiklerinden yiyeceklere, telefon kablolarından baca gazlarına, ambalaj sanayinde kullanılan plastik filmlerden hastane gereçlerine kadar yüzlerce değişik özellik, yapı ve görünüşteki malzemelerin üretiminde nükleer teknikler uygulanmaktadır. Böylece diğer mevcut teknolojilere göre kimyasal madde ve ısı işlem gereksinimi en aza indirilmiş olmaktadır. Dolayısıyla günümüzün en önemli sorunlarından biri olan çevre kirliliği, nükleer tekniklerin kullanımı ile mümkün olan en alt seviyeye indirgenebilmektedir.

Günümüzde son derece yaygın kullanım alanına sahip olan nükleer teknolojilerin ve uygulamalarının en önemli ve hassas noktası, canlı ya da cansız, hedefe uygulanan ve çevreye yayılan radyasyonun sürekli olarak kontrol altında tutulmasıdır. Bilindiği gibi radyasyon canlı hücre ve organizmalarda yapıcı etkisinin yanı sıra zararlı etkilere de sahiptir. Nükleer tekniklerin uygulanmasında dikkat edilmesi gereken en önemli faktör, bilinçli ya da bilinçsiz uygulanan radyasyon dozunun kontrol altından tutulmasıdır. Radyasyona maruz kalan, canlı ya da cansız, tüm çevrenin radyasyon güvenliğini sağlamak amacıyla gerekli ölçümlerin yapılması ve radyasyonun denetimli bir biçimde kullanılması çok büyük önem taşımaktadır. Termolüminesans dozimetri (TLD) radyasyon dozlarının ölçülmesinde yaygın olarak kullanılan pasif bir doz ölçme yöntemidir [1, 2].

Uygulama alanı bu kadar geniş olan TLD konusunda bu güne kadar birçok çalışma yapılmıştır. Bu çalışmalardan bir kısmı yeni termolüminesans malzemelerin araştırılması üzerine yoğunlaşırken diğer kısmı, var olan termolüminesans dozimetrelere özelliklerini geliştirmeye yöneliktir [3]. Termolüminesans malzemelerin en önemli özellikleri, radyasyona karşı hassasiyetinin yüksek olması, doğrusal doz cevabına sahip olması ve taşıdığı doz bilgisini termolüminesans okuma işlemine kadar saklayabilmesidir. TLD malzemelerinin TL özelliklerini belirleyen tuzak parametrelerinin bilinmesi bu dozimetrelere hassasiyetini, güvenilirliğini ve kullanılabilirliğini arttıracaktır.

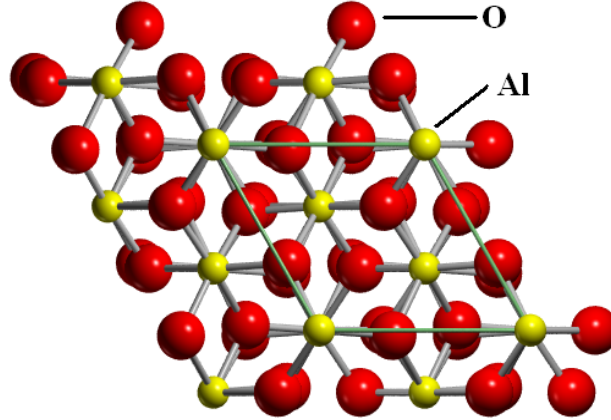
Bu çalışma, ülkemizde bol miktarda bulunan ve üretilen Seydişehir alüminasının TLD malzemesi olarak kullanılabilmesi projesi kapsamında gerçekleştirilmiştir. Bu amaçla, Seydişehir alüminasının termolüminesans özelliklerini belirleyen tuzak enerji seviyeleri ve diğer tuzak parametreleri matematiksel olarak modellenmiş ve deney sonuçları ile kıyaslanmıştır.

2. ALÜMİNA

Alümina, oksit bir seramik malzemedir ve tabiatta kararlı halde bulunan formu, “Korund ($\alpha - Al_2O_3$)” olarak isimlendirilmiştir. Korund, elmas ve elmas formundaki sentetik birkaç bileşikten sonra en sert yapıdadır. Bazı safsızlıklar ihtiva eden şekli “zımpara taşı” olarak bilinmektedir. Alümina doğada değişik kristal yapılarda bulunabilmesine rağmen, üstün mekanik ve elektriksel özelliklerinden dolayı ticari kullanım alanına sahip olan $\alpha - Al_2O_3$ 'dir.

$\alpha - Al_2O_3$ hegzagonal - rombohedral kristal yapısına sahiptir. Bu örgü yapısı, oksijen iyonlarının hegzagonal sıkı paketlenmesi şeklinde ortaya çıkmaktadır. $\alpha - Al_2O_3$ birim hücresi rombohedral yapıya sahiptir ve her birim hücre 4 alüminyum, 6 oksijen atomu ihtiva etmektedir. Her alüminyum iyonu, 6 adet oksijen iyonu tarafından oktahedral olarak sarılmıştır. Şekil 1'de alüminyum atomlarının oksijen atomları tarafından oktahedral olarak sarılması görülmektedir.

Türkiye alümina üretiminde kullanılan boksit cevheri açısından zengin bir ülkedir. Dünyadaki boksit rezervleri yaklaşık 55 - 75 milyar ton olarak tahmin edilmektedir. Türkiye'nin boksit rezervindeki payı ise yaklaşık 400 - 430 milyon ton civarındadır ancak henüz aranmamış bölgeler mevcuttur. Ülkemizde alümina üreten en büyük tesis Seydişehir Alüminyum Tesisleridir (Eti Alüminyum A.Ş. 29.07.2005 tarihinde özelleştirilmiştir) ve yılda 200.000 ton kalsine alümina üretim kapasitesine sahiptir [4].

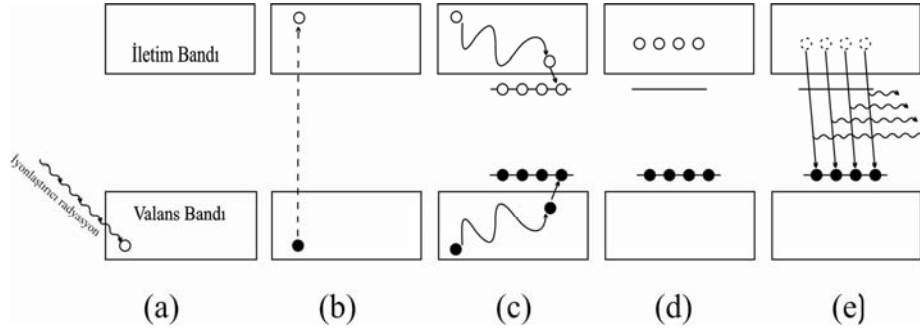


Şekil 1. Alümina kristali ve birim hücresi

3. TERMOLÜMİNESANS OLAY

Termolüminesans olay, termodinamik denge durumunda bulunan bir sistemin dış enerji kaynağından enerji soğurarak uyarılması sonucunda yarı kararlı duruma geçmesi ve ardından ısı enerjisi yardımıyla sistemdeki fazla enerjinin yayınlanarak sistemin denge durumuna dönmesi olarak tanımlanabilir. Burada uyarılmaya neden olan dış enerji kaynağı iyonlaştırıcı radyasyondur.

Şekil 2’de TL olayın basamakları grafik halinde sunulmuştur. Bir yalıtkan ya da yarıiletken kristal, iyonlaştırıcı radyasyona maruz kaldığında enerji soğurur (Şekil 2a). Bu soğurulma, valans bandındaki elektronların bir kısmının serbest kalmasına ve kristal içerisinde serbest elektron-boşluk çiftlerinin meydana gelmesine neden olur (Şekil 2b). Serbest kalan elektronlar iletim bandında ve boşluklar valans bandında hareket ederler. Bu hareket sırasında serbest yük taşıyıcılar zıt işaretli başka yük taşıyıcılar ile yeniden birleşebilir ya da kristal içerisindeki kusur ve safsızlıklar tarafından meydana getirilmiş olan yük taşıyıcı tuzakları (tuzak durumları, trapping states) tarafından yakalanabilirler (Şekil 2c). Tuzaklara yakalanan elektronlar, ortamın sıcaklığı ve tuzak seviyesinin aktivasyon enerjisine (tuzak derinliği) bağlı olarak tuzaklarda bir süre kalırlar. İyonlaştırıcı radyasyonun ortamdaki uzaklaştırılmasının ardından kristal kontrollü bir şekilde ısıtılır. Isıtma sürecinde tuzaklardaki yük taşıyıcılar yakalandıkları tuzaklardan kaçabilecek kadar ısı enerjisi kazandıklarında serbest kalarak yeniden iletim bandına geçerler (Şekil 2d). Serbest kalan elektronlar, kristal içerisinde hareket ederken zıt işaretli yük taşıyıcıları ile yeniden birleşirler ve eğer yeniden birleşme olayı ışınımlı ise lüminesans bir foton yayınlanır (Şekil 2e). Bu süreç TL mekanizmasının en basit açıklamasıdır.



Şekil 2. Termolüminesans olay

Isı enerjisi yardımıyla sistem denge durumuna dönerken yayınlanan lüminesans ışınım tüm süreç boyunca izlenir. Kristalden yayınlanan lüminesans ışınım, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak kaydedilir ve ışınım eğrisi (glow curve) grafiği elde edilir. Bu ışınım, sistemin denge durumuna dönme hızıyla orantılıdır.

Termolüminesans özellik gösteren kristaller, radyasyona maruz kaldıktan sonra, ısıtıldıklarında ışınım yaparlar; ancak bu ışınım siyah cisim ışınımından farklıdır. Bilindiği gibi doğadaki bütün cisimler, sıcaklıklarına bağlı olarak, elektromanyetik ışınım yaparlar ve bu ışınım siyah cisim ışınımı olarak bilinmektedir. Cismin sıcaklığına bağlı olarak siyah cisim ışınımının yoğunluğu da değişmektedir [5]. TL olayda ise yalnızca iyonlaştırıcı radyasyona maruz kalan cisim TL ışınımı yapabilir ve bu süreç sonunda cismin yeniden TL ışınımı yapabilmeye için tekrar ışınlanması gerekmektedir.

Termolüminesans mekanizmayı açıklayıp, enerji seviyeleri arasındaki yük taşıyıcı trafiğini belirlemek için bazı tanımlamalar ve kabuller yapmak gerekmektedir.

- Sadece yük taşıyıcılarının (elektron, boşluk) valans ve iletim bantlarından yük taşıyıcı tuzaklarına geçişleri veya bunun tam tersi geçişler ile ilgilenecektir. Tuzaklar arası yük taşıyıcı geçişleri yalnızca bazı malzemelerde ortaya çıktığı ve düşük düzeylerde gerçekleştiği için basitlik açısından dikkate alınmayacaktır.
- Bir yük taşıyıcısının ısı olarak uyarılıp tuzaktan kurtularak kendi delocalize enerji bandına (delocalized band) geçme olasılığı, zıt işaretli bir serbest yük taşıyıcısı ile karşılaşarak yeniden birleşme olasılığından büyüktür.
- Tuzaktaki bir yük taşıyıcısının, zıt işaretli başka bir yük taşıyıcısı ile yeniden birleşme olasılığının ısı uyarılma olasılığından büyük olduğu merkezlere yeniden birleşme merkezleri (recombination center) denir.
- Yeniden birleşme olasılığı ile delocalize banda geçme olasılığının birbirine eşit olduğu enerji seviyesine demarkasyon seviyesi (demarcation level) denir. Her iki tip yük taşıyıcısı için demarkasyon seviyeleri tanımlanmaktadır. (Elektronlar için E_{Dn} , boşluklar için E_{Dp} .)
- İletim bandında bulunan bir elektronun (enerjisi $\geq E_c$), E enerjili $E_c > E \geq E_{Dn}$ bir tuzaka geçişi ışınımsızdır ve sadece örgü titreşimi (fonon) yayınlanır. Benzer şekilde, valans bandındaki bir boşluğun (enerjisi $\leq E_v$), E enerjili $E_{Dp} > E \geq E_v$ bir tuzaka geçişi ışınımsızdır ve sadece fonon yayınlanır.
- $E \geq E_c$, yani iletim bandındaki serbest elektronların, $E_f > E > E_{Dp}$ bölgesinde bulunan tuzaklara yakalanmış boşluklarla yeniden birleşmesi ışınımlıdır ve foton yayınlanır.
- $E \leq E_v$ olan serbest boşlukların serbest elektronlarla yeniden birleşmesi ışınımlıdır ve foton yayınlanır.



Şekil 3. Delokalize enerji seviyeleri

Herhangi bir keyfi durum yoğunluğu fonksiyonu $N(E)$ için iletim ve valans bantlarındaki elektron ve boşluk konsantrasyonlarında meydana gelen değişim sırasıyla (1) ve (2) eşitlikleri ile verilebilir.

$$\frac{dn_c}{dt} = \int_{E_{Dn}}^{E_c} p_n(E) \cdot N(E) \cdot f(E) \cdot dE - n_c \cdot \nu_n \int_{E_{Dn}}^{E_c} \sigma_n(E) \cdot N(E) \cdot (1-f(E)) \cdot dE - n_c \cdot \nu_n \int_{E_{Dp}}^{E_F} \sigma_{mn}(E) \cdot N(E) \cdot (1-f(E)) \cdot dE \quad (1)$$

$$\frac{dn_v}{dt} = \int_{E_v}^{E_{Dp}} p_p(E) \cdot N(E) \cdot (1-f(E)) \cdot dE - n_v \cdot \nu_p \int_{E_v}^{E_{Dp}} \sigma_p(E) \cdot N(E) \cdot f(E) \cdot dE - n_v \cdot \nu_p \int_{E_F}^{E_{Dn}} \sigma_{np}(E) \cdot N(E) \cdot f(E) \cdot dE \quad (2)$$

Yük taşıyıcıların tuzaklardan kurtulma olasılığı (3) eşitliği ile tanımlanabilir.

$$p = s \cdot \exp\left(\frac{-E}{k \cdot T}\right) \quad (3)$$

Burada k Boltzmann sabiti ($k = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J / K}$), T sıcaklık ve s , kaçmaya teşebbüs etme frekansdır (attemp to escape). s 'nin değerinin örgü titreşimi ile aynı mertebede olduğu ($10^6 - 10^{14} \text{ s}^{-1}$) kabul edilir [6].

4. TUZAK PARAMETRELERİ BELİRLEME YÖNTEMLERİ

Termoluminesans deneylerin genel amacı, belirli koşullar altında, deneysel verileri kullanarak TL ışımaya neden olan yük taşıyıcı trafiğini ve tuzak parametrelerini tayin etmektir. Bu parametreler elektron tuzaklarının aktivasyon enerjisi (E), frekans faktörü (s), kinetik mertebesi (b), TL ışımaya neden olan tuzak ve yeniden birleşme merkezlerinin konsantrasyonudur.

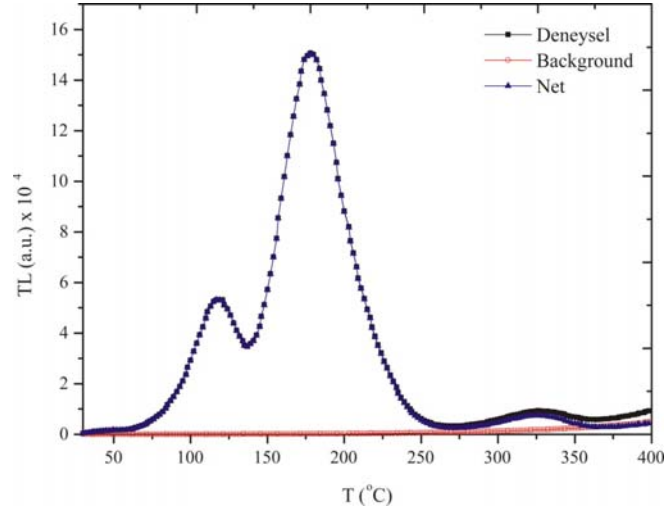
Artan Doz Yöntemi temel olarak, farklı doz değerlerinde radyasyona maruz bırakılan termoluminesans malzemenin, ışımaya piklerinin maksimumuna karşı gelen sıcaklık değerindeki değişiminin izlenmesine dayanır. İzotermal bozunum yönteminde malzeme belirli bir sıcaklığa (T) kadar kontrollü olarak ısıtılır ve sıcaklık T değerinde sabit tutularak yayınlanan ışımaya zamanın bir fonksiyonu olarak izlenir. Bu durumda yayınlanan ışımaya fosforesans ışımaya olacaktır. Yöntem fosforesans ışımaya neden olan tuzak parametreleri ile ilişkisi yardımıyla bu parametrelerin hesaplanmasına dayanır. Pik pozisyonu yönteminde malzeme, görece düşük sıcaklık bölgesinde bulunan pikin maksimumuna karşı gelen sıcaklığı bir miktar geçerek şekilde ısıtılarak bu pikte neden olan elektron tuzaklarının boşaltılarak pikin ortadan kaldırılması esasına dayanmaktadır. Daha sonra

örnek oda sıcaklığına kadar soğutulur ve tüm ışıma eğrisi elde edilir. Pik şekli yöntemi ile tuzak parametrelerinin belirlenmesi için ışıma eğrisinin geometrik şeklini belirleyen bazı deneysel niceliklerin ölçülmesi gerekmektedir. Bu nicelikler; pik maksimumuna karşı gelen sıcaklık (T_m), düşük sıcaklık bölgesindeki pik maksimum yarı kalınlığına karşı gelen sıcaklık (T_1) ve yüksek sıcaklık bölgesindeki pik maksimum yarı kalınlığına karşı gelen sıcaklık (T_2)'dir. Bu deneysel ölçümler kullanılarak tuzak parametreleri hesaplanır. IR yönteminde termolüminesans okuma işlemi sırasında sıcaklık kontrollü bir şekilde arttırılmaya devam ederken malzeme içerisinde tuzaklara yakalanmış halde bulunan elektronlar, buldukları tuzaklardan yeteri kadar ısı enerjisi alarak serbest kalırlar. Bu durumda termolüminesans ışıma yoğunluğu artar. IR yöntemi termolüminesans ışıma yoğunluğundaki bu artıştan faydalanarak tuzak parametrelerini tayin etmektedir. VHR yönteminde, bir malzemenin termolüminesans ışıma eğrisi, aynı koşullarda fakat farklı ısıtma hızlarında elde edilir ve pik yoğunluğunun maksimum olduğu sıcaklık değişiminden faydalanılarak tuzak parametreleri belirlenir. Bilgisayarlı ışıma eğrisi analizi yöntemi; termolüminesans ışımayı ifade eden teorik denklemin kullanılması ile elde edilen ışıma eğrisinin, deneysel ışıma eğrisine fit edilmesine dayanır. Deneysel sonuç ile en iyi uyum içerisinde olan fit eğrisinin elde edilmesinde kullanılan parametreler malzemenin tuzak parametreleri olarak kabul edilir.

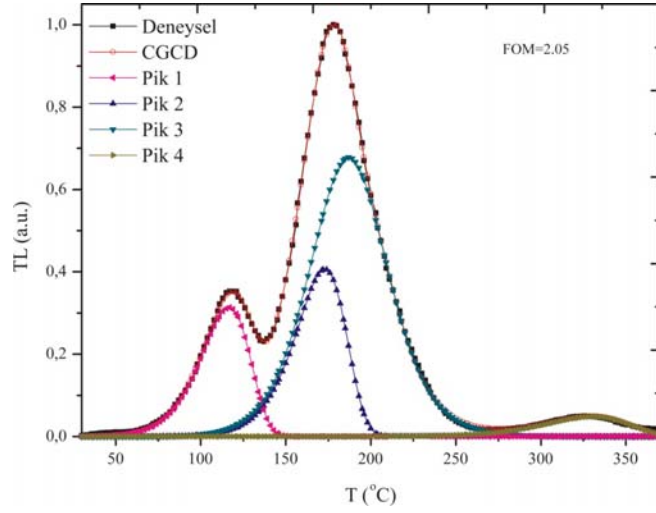
5. SEYDİŞEHİR ALÜMİNASININ IŞIMA EĞRİSİNİN ELDE EDİLMESİ VE IŞIMA PİKLERİNİN BELİRLENMESİ

Deneysel çalışmalara Seydişehir alüminasının ışıma eğrisi elde edilerek başlanmıştır. Bu çalışmada Seydişehir Alüminyum tesislerinde üretilen ve toz boyutu $0,45\mu < \eta < 0,63\mu$ aralığında bulunan toz formundaki Seydişehir alüminası kullanılmıştır [7]. Toz formundaki malzeme, üzerinde bulunması muhtemel radyasyon kalıntılarının temizlenebilmesi için tavlama işlemine tabi tutulmuş ve ardından $4,45\text{Gy}$ 'lik β radyasyonuna maruz bırakılmıştır. Işınlamanın hemen ardından termolüminesans ışıma eğrisi elde edilmiştir. Işınlamanın sonlandırılması ile termolüminesans okuma işleminin başlaması arasında, güvenlik ve sistemin hazırlanması nedeniyle yaklaşık 60 s süre bulunmaktadır. Termolüminesans okuma işlemi $1\text{ }^\circ\text{C/s}$ sabit ısıtma hızında gerçekleştirilmiştir. Elde edilen ilk ışıma eğrisi Şekil 4'de sunulmuştur [7].

Şekil 4 çıplak göz ile incelendiğinde, ışıma eğrisinin birbirinden bağımsız üç ışıma pikinden meydana geldiği görülmektedir. Birinci pik $117 \pm 1,8\text{ }^\circ\text{C}$ 'de, ikinci pik ana dozimetrik pik olup $177 \pm 1,8\text{ }^\circ\text{C}$ 'de ve üçüncü pik ise $326 \pm 1,8\text{ }^\circ\text{C}$ civarında yerleşmiştir. Ancak literatürde yapılan çalışmalar [7] incelendiğinde ve CGCD yöntemi ile ışıma eğrisi analiz edildiğinde ana dozimetrik pikin ($177 \pm 1,8\text{ }^\circ\text{C}$) gerçekte birbirine yakın iki farklı pikin üst üste binmesi sonucu oluştuğu ortaya konmuştur (Şekil 5). Böylelikle Seydişehir alüminasının ışıma eğrisinin, incelenen sıcaklık aralığında, 4 ışıma pikine sahip olduğu tespit edilmiştir.



Şekil 4. Seydişehir alüminasının ışıma eğrisi



Şekil 5. CGCD yöntemi ile analiz edilen ışıma eğrisi

Buna göre; 1. ışıma piki $117 \pm 1,8$ °C'de, 2. ışıma piki $175 \pm 1,8$ °C, 3. ışıma piki $196,6 \pm 1,8$ °C ve 4. ışıma piki $326 \pm 1,8$ °C'de yerleşmiştir.

6. SEYDİŞEHİR ALÜMİNASININ TUZAK ENERJİ SEVİYELERİNİN VE DİĞER PARAMETRELERİNİN DENEYSEL OLARAK BELİRLEMESİ

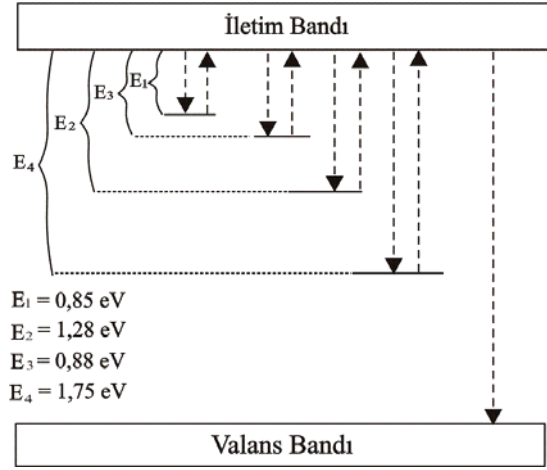
Seydişehir alüminasının tuzak parametreleri artan doz (AD), izotermal bozunum (ID), pik pozisyonu ($T_M - T_S$), pik şekli (PS), ilk yükseliş (IR), farklı ısıtma hızları (VHR) ve bilgisayarlı ışıma eğrisi analizi (CGCD) yöntemleri ile hesaplanmış ve her bir tuzak parametresi için elde edilen sonuçların ortalama değeri Çizelge 1'de sunulmuştur.

Çizelge 1. Seydişehir alüminasının TL tuzak parametreleri [7]

	Pik maksimum Sıcaklığı (°C)	E (eV)	ln [s] (s ⁻¹)	τ (gün)
Pik 1	117.0±1.8	0,85	22,2	1
Pik 2	175.0±1.8	1,28	26,5	360017
Pik 3	196.6±1.8	0,88	18,4	158
Pik 4	326.0±1.8	1,75	28,3	7.4x10 ¹²

7. SEYDİŞEHİR ALÜMİNASININ TUZAK ENERJİ SEVİYELERİNİN MODELLENMESİ

Yapılan deneysel çalışmalar Seydişehir alüminasının birbirinden bağımsız 4 adet tuzak enerji seviyesinin olduğunu göstermektedir. Şekil 6'da bu enerji seviyeleri ve termoluminesans ışınım prosesindeki yük taşıyıcı trafiği şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 6. Seydişehir alüminasının tuzak enerji seviyeleri ve termoluminesans ışınım prosesindeki yük taşıyıcı trafiği.

Çalışmanın bu kısmında, deneysel veriler sonucu elde edilen tuzak enerji seviyeleri matematiksel olarak modellenmiştir. Bunun yanı sıra, birbirinden bağımsız bu 4 enerji seviyesi ile valans ve iletim bantları arasındaki yük taşıyıcı trafiğini kontrol eden ve enerji seviyelerindeki yük taşıyıcı konsantrasyonlarını da belirleyen diferansiyel denklem sistemleri oluşturulmuştur.

$$\frac{dn_1}{dt} = -S_1 \cdot n_1 \cdot \exp\left(-\frac{E_1}{k.T}\right) + n_c \cdot (N_1 - n_1) \cdot Gc_1$$

$$\frac{dn_2}{dt} = -S_2 \cdot n_2 \cdot \exp\left(-\frac{E_2}{k.T}\right) + n_c \cdot (N_2 - n_2) \cdot Gc_2$$

$$\frac{dn_3}{dt} = -S_3 \cdot n_3 \cdot \exp\left(-\frac{E_3}{k.T}\right) + n_c \cdot (N_3 - n_3) \cdot Gc_3$$

$$\frac{dn_4}{dt} = -S_4 \cdot n_4 \cdot \exp\left(-\frac{E_4}{k.T}\right) + n_c \cdot (N_4 - n_4) \cdot Gc_4$$

$$\frac{dn_v}{dt} = n_c \cdot (n_1 + n_2 + n_3 + n_4) \cdot Gr$$

$$\frac{dn_c}{dt} = S_1 \cdot n_1 \cdot \exp\left(-\frac{E_1}{k.T}\right) + S_2 \cdot n_2 \cdot \exp\left(-\frac{E_2}{k.T}\right) + S_3 \cdot n_3 \cdot \exp\left(-\frac{E_3}{k.T}\right) + S_4 \cdot n_4 \cdot \exp\left(-\frac{E_4}{k.T}\right)$$

$$-n_c \cdot (N_1 - n_1) \cdot Gc_1 - n_c \cdot (N_2 - n_2) \cdot Gc_2 - n_c \cdot (N_3 - n_3) \cdot Gc_3 - n_c \cdot (N_4 - n_4) \cdot Gc_4$$

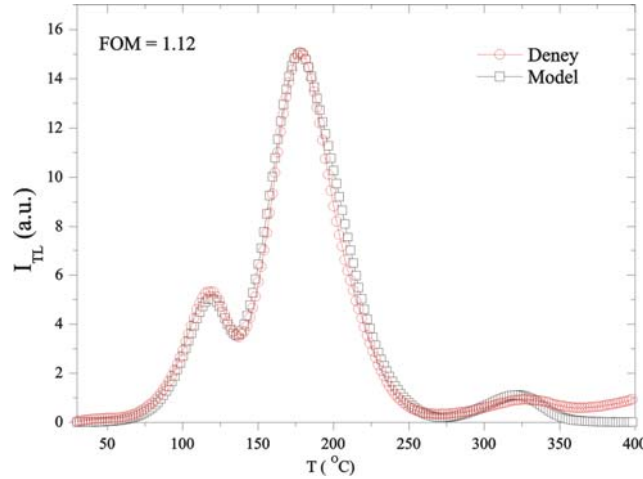
$$T = T_o + \beta \cdot t$$

Burada, S, n ve E sırasıyla, alt indis ile verilen tuzak enerji seviyelerinin frekans faktörü, anlık elektron konsantrasyonu ve tuzak derinliğidir.

Elde edilen bu denklem sistemi, termoluminesans ışına sürecinde sıcaklığa ve zamana bağlı olarak nümerik yöntemler ile çözülmüştür. Çözüm sırasında kullanılan matematiksel parametreler Çizelge 2'de ve elde edilen ışına eğrisi şekil 7'de sunulmuştur. Deneysel ışına eğrisi ile diferansiyel denklemlerin nümerik çözümü sonucunda elde edilen ışına eğrisinin birbiri ile oldukça iyi bir uyum içerisinde olduğu görülmüştür (FOM=1,12). Buradan yapılan matematiksel modelin fiziksel sistemi oldukça başarılı bir şekilde temsil etmekte olduğu düşünülmüştür.

Çizelge 2. Model yardımı ile hesaplanan TL tuzak parametreleri

	Pik maksimum Sıcaklığı (°C)	E (eV)	ln [s] (s ⁻¹)
Pik 1	117.0±1.8	0,95±0,1	26,3±1
Pik 2	175.0±1.8	1,22±0,1	29,8±1
Pik 3	196.6±1.8	0,88±0,1	19,8±1
Pik 4	324.4±1.8	1,63±0,1	29,5±1



Şekil 7. Seydişehir alüminasının deneysel ve teorik ışına eğrileri.

8. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada TLD malzemesi olarak kullanılması planlanan Seydişehir alüminasının, termoluminesans tuzak enerji seviyeleri ve ilgili diğer tuzak parametreleri, hem deneysel ve hem

de oluşturulan yeni bir matematiksel enerji bant diyagramı yardımı ile hesaplanmıştır. Bu amaçla, öncelikle malzemenin termoluminesans ışıma eğrisi deneysel olarak elde edilmiş ve tüm diğer TL tuzak parametreleri artan doz, izotermal bozunum, pik pozisyonu, pik şekli, ilk yükseliş, farklı ısıtma hızları ve bilgisayarlı ışıma eğrisi analizi gibi deneysel yöntemler ile karşılaştırmalı olarak hesaplanmıştır. Birbirinden farklı deneysel yöntemler ile elde edilen sonuçların, deneysel hata sınırları içerisinde kalmak koşulu ile, uyumlu oldukları gözlemlenmiştir. Bu bilgiler ışığında, Seydişehir alüminasının enerji bant diyagramı yeniden oluşturulmuştur. Diğer taraftan, termoluminesans ışıma prosesi sırasında bu enerji seviyeleri arasında meydana gelmesi muhtemel yük taşıyıcı geçişleri belirlenmiş ve bunları temsil eden geçiş olasılıkları ayrı ayrı hesaplanmıştır. Buna ilave olarak, termoluminesans ışıma sürecindeki yük taşıyıcı trafiğini kontrol eden diferansiyel denklemler oluşturulmuştur. Son olarak, oluşturulan bu modelin sayısal yöntemler ile çözümlenmesi sonucunda elde edilen ışıma eğrisi deneysel ışıma eğrisi ile kıyaslanmıştır (Şekil 7). Yapılan kıyaslama sonucu deneysel ve teorik ışıma eğrilerinin birbirleri ile iyi bir uyum içerisinde oldukları görülmüştür (FOM=1,12). Bu çalışma kapsamında Seydişehir alüminasının tuzak enerji seviyelerini, yük taşıyıcı trafiğini ve termoluminesans ışıma prosesini temsil eden yeni bir matematiksel enerji bant modeli ileri sürülmüştür. İleri sürülen bu modelin sayısal olarak çözümlenmesi sonucu elde edilen ışıma eğrisi ve deneysel olarak elde edilen ışıma eğrisinin iyi bir uyum içerisinde oldukları ortaya konulmuştur. Aynı zamanda, modelin sayısal çözümlenmesi için başlangıç aşamasında kabul edilen tuzak enerji seviyelerinin ve diğer tuzak parametrelerinin birbirleri ile uyum içerisinde oldukları gözlemlenmiştir. Yapılan deneysel çalışmalar ve elde edilen sayısal bulgular bir bütün olarak ele alındığında, ileri sürülen yeni modelin Seydişehir alüminasının termoluminesans ışıma prosesini ve yük taşıyıcı trafiğini açıkladığı sonucuna ulaşılmıştır.

Buradan hareketle, Seydişehir alüminasının bir TLD detektör malzemesi olarak kullanılabilmesi için yapılması gerekli diğer çalışmaların da önü açılmış olmaktadır.

REFERENCES / KAYNAKLAR

- [1] Milman, I. I., Kortov, V. S. ve Nikiforov, S.V., (1998), "An Interactive Process in the Mechanism of the Thermally Stimulated Luminescence of Anion-Defective $\alpha - Al_2O_3$ Crystals", Radiation Measurements Vol. 29. No. 3 - 4: 401 - 410.
- [2] Kulkarni, M. S., Mishra, D. R., Muthe, K. P., Ajay Singh, Royc, M., Gupta, S.K. ve Kannan, S. (2005), "An Alternative Method of Preparation of Dosimetric Grade $\alpha - Al_2O_3:C$ by Vacuum - Assisted Post - Growth Thermal Impurification Technique", Radiation Measurements 39 : 277 - 282.
- [3] Chen, R., ve Lockwood, D. J., (2002), "Developments in Luminescence and Display Materials Over the Last 100 Years as Reflected in Electrochemical Society Publications", Journal of The Electrochemical Society, 149 (9): 69 - 78.
- [4] Demirci, A., Bahçeci, A., Elevli, S., Nazlı, R. ve Mordoğan, H., (2001), Sekizinci Beş Yıllık Kalkınma Planı, Metal Madenler Alt Komisyonu Boksit Çalışma Grubu Raporu, Ankara.
- [5] Burgh, W. M., (1967), "Thermoluminescence, Low Radiation Dosage and Black - Body Radiation", Physics in Medicine and Biology, Vol. 12, No. 4: 523-530
- [6] Chen R. ve McKeever S. W. S. (1997), Theory of thermoluminescence and Related Phenomena, Word Scientific, Singapore.
- [7] Uzun, E, (2008), "Seydişehir Alüminasının Termoluminesans Özelliklerinin Karakterizasyonu ve Doz-Cevap Özelliklerinin Araştırılması", Yıldız Teknik Üniversitesi, Doktora Tezi, İstanbul.