

# Mn, Co, Ni, Cu ve Zn esansiyel-eser elementlerinin bileşikleri için kütle soğurma katsayıları, atomik, moleküler ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarının deneysel incelenmesi

**Burcu AKÇA\***

*Ardahan Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, Yenisey Kampüsü, Ardahan*

*Geliş Tarihi (Received Date): 04.03.2019*

*Kabul Tarihi (Accepted Date): 26.08.2019*

## Özet

*Bu çalışmada, canlıların yaşamında kilit rol oynayan Mn, Co, Ni, Cu ve Zn esansiyel-eser elementlerinin bileşiklerinin ( $MnF_3$ ,  $MnBr_2$ ,  $CoCl_2$ ,  $CoF_2$ ,  $Co(NO_3)_2$ ,  $NiF_2$ ,  $NiSO_4$ ,  $CuSO_4$ ,  $CuF_2$ ,  $CuI$ ,  $ZnC_4H_6O_4$  ve  $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$ ) kütle soğurma katsayıları Enerji Ayrımlı X-ışını Floresans Spektrometresi (EDXRFS), yüksek çözünürlüklü bir Si(Li) detektör ve 59,54 keV enerjiye sahip bir Am-241 nokta kaynak kullanılarak ölçülmüştür. Ölçülen kütle soğurma katsayıları kullanılarak atomik, moleküler, elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunlukları belirlenmiştir. Elde edilen deneysel sonuçlar WinXCom ve FFAST programlarının teorik değerleriyle karşılaştırılmıştır. Deneysel sonuçları, her iki teorik program sonuçlarıyla uyum gösterse de, karışım kuralı mantığına dayanmayan FFAST programının daha iyi sonuç verdiği gözlenmiştir.*

**Anahtar kelimeler:** *Esansiyel-eser elementler, EDXRFS, WinXCom, FFAST.*

Experimental investigation of the mass attenuation coefficients, atomic, molecular and electronic cross-sections, effective atomic numbers, and electron densities for compounds of Mn, Co, Ni, Cu and Zn essential-trace elements

\* Burcu AKÇA, burcuakca@ardahan.edu.tr, <http://orcid.org/0000-0003-2399-5971>

## Abstract

*In this study, the mass attenuation coefficients of compounds ( $MnF_3$ ,  $MnBr_2$ ,  $CoCl_2$ ,  $CoF_2$ ,  $Co(NO_3)_2$ ,  $NiF_2$ ,  $NiSO_4$ ,  $CuSO_4$ ,  $CuF_2$ ,  $CuI$ ,  $ZnC_4H_6O_4$  and  $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$ ) of Mn, Co, Ni, Cu and, Zn essential-trace elements which play a key role in the life of living organism have been measured by using Energy Dispersive X-ray Fluorescence Spectrometer (EDXRFS), a high-resolution Si(Li) detector and, an Am-241 point source with 59.54 keV energy. The atomic, molecular and electronic cross-sections, effective atomic numbers, and electron densities have been determined by using the measured mass attenuation coefficients. Obtained experimental results have been compared with theoretical values of WinXCom and FFAST programs. Although the results of the experiment were in agreement with the results of both theoretical programs, it was observed that gave better results of the FFAST program which was not based on the mixture rule logic.*

**Keywords:** *Essential-trace elements, EDXRFS, WinXCom, FFAST.*

## 1. Giriş

Kütle soğurma katsayısı, maddenin yüksek enerjili elektromanyetik radyasyon ile etkileşimini; fotoelektrik soğurma, Compton saçılması, Rayleigh saçılması ve çift oluşumu vasıtasıyla açıklayan çok önemli bir parametredir. Bu etkileşimler için 1 MeV enerjinin altındaki enerjilerde, baskın olan ana etkileşim süreçleri inkoherent (Compton), coherent (Rayleigh) ve fotoelektrik soğurmadır [1]. Özellikle biyolojik materyallerin, X-ışını ve  $\gamma$ -fotonlarının kütle soğurma katsayıları bilgisi endüstriyel, biyolojik, tarım ve dozimetri, radyografi ve bilgisayarlı tomografi gibi alanlar için önemli sonuçlar içermektedir [2,3]. Ayrıca kütle soğurma katsayısı, madde hakkında atomik ve moleküler seviyede geniş bir bilgi üretir. Maddede, alan birimi ve kütle başına etkileşen fotonun etkileşim olasılığını ölçer [3]. Kütle soğurma katsayısı ve etkin atom numarası kompozit veya bileşik malzemeler için iki temel parametredir. Etkin atom numarası temelde doz değerlendirmesi, koruma etkinliği ve biriktirme faktörlerinin değerlendirilmesinde kullanılan önemli parametredir [4]. Etkin atom numarası ve yoğunluk, malzemelerin ve bunların türevlerinin teknolojik ve işlevsel özelliklerini karakterize eden parametreler arasındadır. Temassız ölçümler, yüksek verimlilik, uygunluk ve ihtiyaç duyulan basit enstrümantasyon gibi özel nitelikler, malzemelerin radyoaktif kontrolüne ve foton radyasyon aktarımına dayanan yöntemlerin kullanımını genişletmiştir [5].

Kimyasal içeriğe bağlı olan kütle soğurma katsayısının, deneysel olarak tayin edilmesi çok önemlidir. Maddenin atomik ve moleküler seviyedeki bilgisini veren bu önemli parametre yardımıyla, diğer önemli parametreler olan atomik, moleküler ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunlukları da belirlenerek madde hakkında daha ayrıntılı bilgiler elde edilmektedir. Bundan başka bir ortamda ya da sistemde belirli sabitlerin bilinmesiyle enerji soğurulma değerleri ortalama olarak hesaplanabilmektedir. Bu hesap için gerekli en temel fiziksel parametreler etkin atom numarası ve etkin elektron yoğunluğudur. Etkin atom numarası, özellikle düşük ve orta atom numaralı materyaller için çok kullanışlı bir parametredir. Bu parametreye biyolojik ve medikal uygulamalarda sıkça rastlanmaktadır. Etkin atom numarasının içeriği X- ve  $\gamma$ -ışınlarının madde ile etkileşmesi temeline dayanmaktadır [6]. Biyolojik materyaller, plastik, toprak ve alaşımlar gibi kompozit malzemeler foton etkileşmesinin olduğu tüm enerji bölgesinde tek bir sayıyla temsil edilemezler ve kısmi süreçlerin her biri için bu

sayı farklı ağırlıklıdır [7]. Bu sayı kompozit materyaller için etkin atom numarası olarak adlandırılmaktadır ve bu parametre enerjiye bağlı değişim göstermektedir [8].

Kütle soğurma katsayısını elde etmek için deneysel teknikler temel olarak iletilen ışının soğurulma ölçüsünü ve numunenin yoğunluğunu kullanır. Bu metod transmisyon metodu olarak adlandırılır ve Beer-Lambert yasasının doğrudan kullanımındadır. Literatür incelendiğinde, kütle soğurma katsayısı ve soğurma üzerine birçok çalışma mevcuttur. Bu çalışmalar, inşaat malzemeleri, gaz karışımları, kompozit malzemeler, biyolojik malzemeler ve daha birçok farklı malzeme için yapılmıştır. Literatürde bahsi geçen bu çalışmalardan bazıları şunlardır; Kerur ve ark. [9], <sup>57</sup>Co ve <sup>65</sup>Zn radyoaktif kaynaklarını kullanarak, düşük enerjili X-ışını bölgesi için kütle soğurma katsayılarının doğru bir şekilde belirlenmesini sağlamak amacıyla bir metod geliştirmişlerdir. Gopinathan Nair ve ark. [10], birkaç amino asit için 661,6; 1173 ve 1332,5 keV enerjilerde dar-şua geometrisi oluşturarak ve yüksek saflıkta Germanyum detektör kullanarak toplam soğurma tesir kesitlerini ölçmüşlerdir. Bhandal ve Singh [11], toplam ve kısmi kütle soğurma katsayılarını ve etkin atom numaralarını 1 keV-10<sup>5</sup> MeV enerji bölgesinde, katihal nükleer iz dedektörleri (SSNTD: Solid State Nuclear Track Detectors) için hesaplamışlardır. Shivaramu ve Ramprasath [12], etkin atom numaraları ve kütle soğurma katsayılarını, 26,3; 33,2; 59,54 ve 661,6 keV enerjilerde bazı termoluminesans dozimetrik bileşikler için deneysel olarak elde etmişlerdir. Erzeneoğlu ve ark. [13], farklı konsantrasyonlarda holmiyum katkılanmış InSe yarıiletkeninin kütle soğurma katsayılarını, 15,746–40,930 keV enerji bölgesinde Si(Li) detektör kullanarak ölçmüşlerdir. İçelli ve ark. [14], TSW (Trommel Sieve Waste) ve bor bileşiklerinin kütle soğurma katsayılarını 15,74–40,93 keV enerji bölgesinde ölçerek, moleküler, atomik, elektronik tesir kesitlerini ve etkin atom numaralarını belirlemişlerdir. Raje ve Chaudhari [15], Hindistan'ın Maharashtra eyaletindeki farklı bölgelerden alınan toprak numuneleri için 0,662 keV enerjide kütle soğurma katsayıları ölçmüşlerdir. Gounhalli ve ark. [16], birkaç narkotik ilacın kütle soğurma katsayılarını, etkin atom numaralarını ve elektron yoğunluklarını, 1 keV-100 GeV enerji aralığında WinXCom kullanarak belirlemişlerdir. Akça ve Erzeneoğlu [17], bazı biyomedikal önemli elementlerin bileşiklerinin kütle soğurma katsayıları, atomik, moleküler ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarını 59,54 keV enerjide deneysel olarak belirlemişlerdir. Böke [18], insan kortikal kemik dokusunun foton etkileşim tesir kesitlerini belirlemiştir.

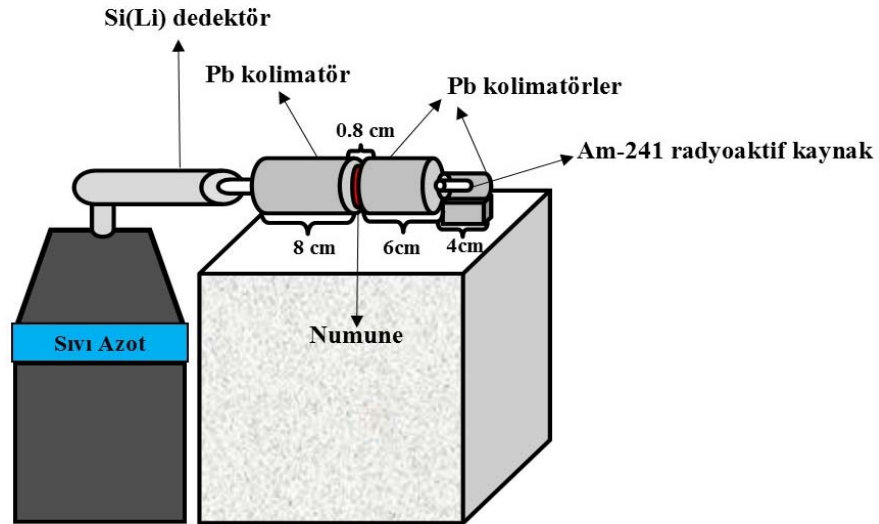
Çalışılan parametre kadar malzemede bir o kadar önemlidir. NCCLS'ye (National Commitee for Clinical Laboratory Standards) göre bazı elementler farklı ve önemli özelliklere sahiptir. NCCLS dikkate alınarak periyodik tablodaki elementler farklı renklerde gösterilmiştir. NCCLS'ye göre elementler vücutta, dokularda bulunma konsantrasyonları ve canlıların organizmasında kullanım amacına göre esansiyel-majör, esansiyel-eser, esansiyel-olmayan toksik ve tedavi amaçlı kullanılan elementler olarak dört grupta incelenmektedir [19]. Esansiyel-eser elementler vücut sıvılarında 10-10<sup>4</sup> µg/L iken, dokularda 0.01-100 µg/g konsantrasyon aralığındadır [20]. Esansiyel elementler; organizmanın normal fizyolojik fonksiyonlarını yerine getirebilmesi için gereklidirler. Esansiyel elementler olmadan organizma yaşam döngüsünü tamamlayamaz veya normal gelişimini gerçekleştiremez [21]. Esansiyel elementler metalloenzimlerin yapısında kilit rol oynarlar. Ayrıca oksijen taşınması, hormonal aktivitelerin düzenlenmesi, serbest radikallerin etkisiz hale getirilmesi gibi birçok önemli biyolojik fonksiyonun yerine getirilmesinde yine bu elementler karşımıza çıkmaktadır [19].

Literatüre bakıldığında bu atomik parametrelerle ilgili çok çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Fakat bu enerjide ve bu malzemeler için herhangi bir çalışmaya rastlanmamıştır. Bu çalışma ilk deneysel verileri oluşturması bakımından önemlidir. Bu çalışmanın amacı, atomik ve moleküler seviyede bilgi veren bu önemli atomik parametrelerin tayininin, canlılar için oldukça önemli olan esansiyel elementler ve bileşikleri için yapılmasıyla, bunları kullanan özellikle tıp, dozimetri, radyografi vb. gibi bilim dallarına katkı sağlamak ve temel oluşturmaktır. Madde ve foton etkileşiminin sonucunda meydana gelen soğurulma olayının açıklanmasında bu önemli parametreler kullanılmaktadır. Kütle soğurma katsayısı direkt olarak soğurucu materyalin tabiatını yansıttığı için ayrı bir öneme sahiptir. Bu sebeple canlı vücudunda bulunan bu esansiyel elementlerin kütle soğurma katsayılarının, atomik, moleküler, elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarının belirlenmesiyle radyasyonla etkileşim tabiatları hakkında bilgi sahibi olunacaktır.

## 2. Materyal ve metod

### 2.1. Deney düzeneği

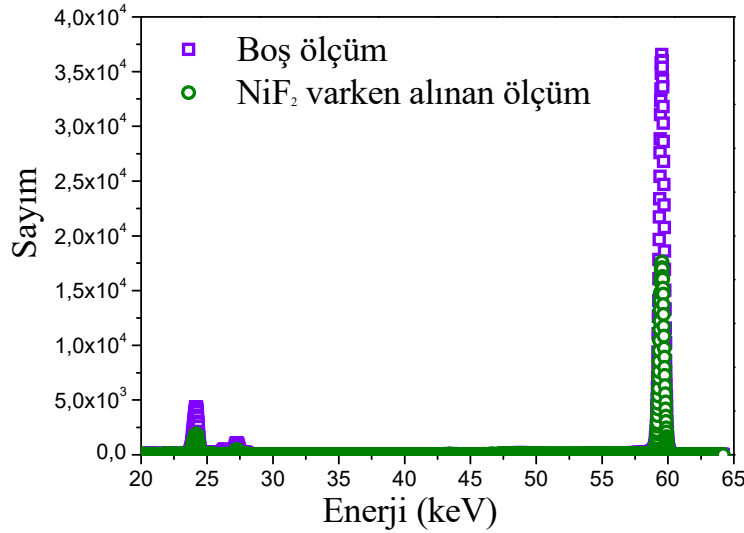
Çalışmada, ilk önce dar-şua geometrisi olarak adlandırılan deney düzeneği kurulmuştur. Bu düzeneğin amacı transmisyon deneylerinde, detektöre paralel ve az kayıplı ışın göndermektir. Deney geometrisi ya da dar-şua geometrisi kurşun kolimatörler kullanarak ve spektrumun en iyi şekilde görüldüğü mesafeler ayarlanarak oluşturulmuştur. Havadan gelen saçılma etkilerinin ortadan kaldırılması için, aynı deneysel şartlar altında numunesiz ölçümler alınarak, numuneli ölçümlerden çıkarılmıştır. Deney düzeneği Şekil 1’de gösterilmiştir. Çalışmada elde edilen örnek bir soğurma spektrumu da Şekil 2’de verilmiştir.



Şekil 1. Dar-şua geometrisi.

Deneyde, şiddeti 100 mCi olan Am-241 radyoaktif kaynağının 59,54 keV enerjili fotonları ve sayma sistemi olarak ise EDXRFs (enerji ayrımlı X-ışını floresans spektrometresi) kullanılmıştır. Analizör 4096 kanalda ve sayma süreleri 1800 s olarak

belirlenmiştir. Deneyde aktif çapı 3,91 mm, aktif alanı 12 mm<sup>2</sup> ve 5,9 keV’de yarı maksimumdaki tam genişliği (FWHM) 160 eV olan yüksek çözünürlüklü bir Si(Li) detektör kullanılmıştır. Deney süresince sayaç kristali ve FET (field effect transistor, alan etkili transistör) 30 litrelik bir sıvı azot kabına bağlı, sıvı azot sıcaklığında (-196 °C) tutulmuştur.



Şekil 2. NiF<sub>2</sub> için örnek bir soğurma spektrumu.

Spektrumlar “Genie 2000” programı kullanılarak alınmıştır. Alınan spektrumlar Matlab programı kullanılarak özel bir yazılımla sayısal veriye dönüştürülmüş ve Origin Pro 8 programına aktararak spektrum alanları belirlenmiştir.

Çalışmada, deneysel hataların azaltılabilmesi için çevresel şartların aynı kalmasına, deney geometrisinin en iyi soğurmayı verecek şekilde oluşturulmasına, deneyin en az üç kez tekrarlanmasına ve numunelerin düzgün pelletlenmesine özen gösterilmiştir. İdeal bir transimiyon deneyinde bütün fotonlar paralel bir şua gibi soğurucu materyale gönderilmelidir. Fakat deneysel çalışmalarda her durumda sistematik, operasyonel vb. hatalar vardır. Bu hatalar; sayma istatistiği, soğurucunun bütünselliğinin olmaması, numunelerin kirlilik içermesi ve saçılan fotonların detektöre ulaşmamasından kaynaklanmaktadır. Deneydeki hatalar için ortalama değerden sapmalar yüzde olarak  $I_0$  ve  $I$  (<% 2), numune kalınlığı (<% 1,5), numunenin kütlesi (<% 1), sistematik (<% 0,9), olarak tespit edilmiştir. Kütle soğurma katsayılarındaki maksimum hatalar gelen  $I_0$  ve  $I$  geçen foton şiddetleri ile numune kalınlığı ( $t$ ) kullanılarak aşağıdaki formülden hesaplanmıştır;

$$\Delta\left(\frac{\mu}{\rho}\right) = \frac{1}{t} \sqrt{\left(\frac{\Delta I_0}{I_0}\right)^2 + \left(\frac{\Delta I}{I}\right)^2 + \left(\ln \frac{I_0}{I}\right)^2 \left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2} \quad (1)$$

eşitlikte  $\Delta I_0$ ,  $\Delta I$  ve  $\Delta t$  sırasıyla  $I_0$ ,  $I$  ışın şiddetleri ile  $t$  numune kalınlığının hatalarını temsil etmektedir. Deneysel hatalar (1) eşitliği yardımıyla hesaplandıktan sonra  $\pm$  olarak Tablo 1’ de verilmiştir.

## 2.2. Numunelerin hazırlanması

Çalışmada, yüksek saflıkta Merck ve Sigma Aldrich marka element ve bileşikler kullanılmıştır. Bu bileşikler Ardahan Üniversitesi merkezi araştırma laboratuvarından ve

Atatürk Üniversitesi fizik bölümünden temin edilmiştir. Esansiyel-eser elementler olarak adlandırılan, bu elementler (Mn, Co, Ni, Cu ve Zn), NCCLS'ye (National Committee for Clinical Laboratory Standards) göre belirlenmiştir [19]. Deneydeki element ve bileşiklerin deney düzeneğine uygun olması için die-set kullanılarak ve 10 ton sabit basınç altında Beckman marka pres ile preslenerek 13 mm çapında 15 adet pellet hazırlanmıştır. Numunelerin kütleleri on binde bir hassasiyetli teraziyle tartılmıştır. Numunelerin kütlesi, yaklaşık 0,700 – 0,800 gr olacak şekilde hazırlanmışlardır.

### 3. Teorik temel

Teorik kütle soğurma katsayılarını hesaplamak için elementler ve kimyasal bileşikler için karışım kuralını temel alan WinXCom programı kullanılmıştır [22- 24]. Karışım kuralına göre kütle soğurma katsayısı,

$$(\mu/\rho) = \sum_i w_i (\mu/\rho)_i \quad (cm^2/g) \quad (2)$$

olmaktadır ve buradaki  $w_i$ ,  $(\mu/\rho)_i$  sırasıyla i. elementin ağırlık kesri ve kütle soğurma katsayısıdır. Bir kimyasal bileşiğin ağırlık kesri;

$$W_i = \frac{n_i A_i}{\sum_i n_i A_i} \quad (3)$$

olarak yazılabilir. Buradaki  $n_i$  ve  $A_i$  sırasıyla i. elementin atom sayısı ve atom ağırlığıdır. Teorik ve deneysel kütle soğurma katsayılarının değerleri;

$$\sigma_{t,m} = \left(\frac{\mu}{\rho}\right) \frac{M}{N_A} \quad (barn/atom) \quad (4)$$

eşitliğinde kullanılarak toplam moleküler tesir kesiti (barn/atom) teorik ve deneysel olarak elde edilmektedir. Eşitlikteki  $M$  moleküler ağırlık,  $N_A$  ise Avogadro sayısıdır. Teorik ve deneysel toplam atomik tesir kesiti;

$$\sigma_{t,a} = \frac{1}{N_A} \sum_i f_i A_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i = \frac{\sigma_{t,m}}{\sum_i n_i} \quad (barn/atom) \quad (5)$$

eşitliğinden hesaplanmaktadır. Eşitlikteki  $f_i$  i. elementin bolluk kesri ya da bir elementin atom sayısının bileşikteki toplam atom sayısına oranıdır. Teorik toplam elektronik tesir kesiti (barn/atom);

$$\sigma_{t,el} = \frac{1}{N_A} \sum_i \frac{f_i A_i}{Z_i} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \quad (barn/atom) \quad (6)$$

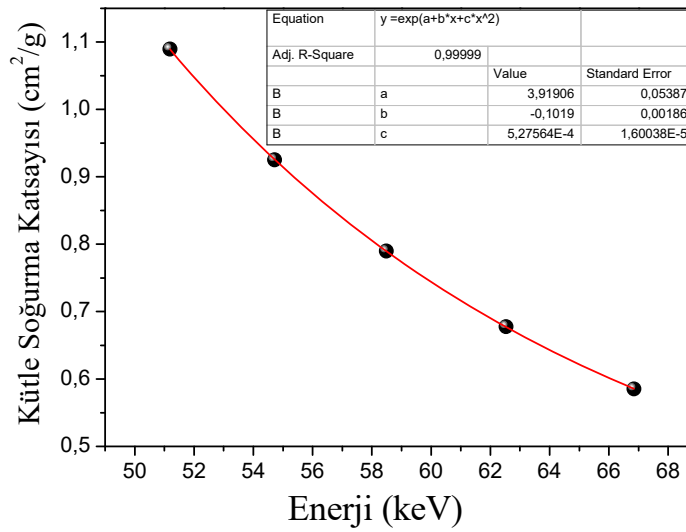
eşitliğinden hesaplanmaktadır. Teorik ve deneysel toplam atomik, toplam moleküler tesir kesitleri oranlanarak etkin atom numarası elde edilir;

$$Z_{et} = \frac{\sigma_{t,a}}{\sigma_{t,el}} \quad (7)$$

Teorik ve deneysel etkin elektron sayısı ya da elektron yoğunluğu (electron/g) [25],

$$N_e = \frac{N_A}{M} Z_{et} \sum_i n_i \text{ (electron/g)} \quad (8)$$

WinXCom programı teorik hesaplamalarda karışım kuralını kullanır, FFAST programı [26] ise veri setindeki değerleri WinXCom' dan farklı metotlarla hesaplar ve farklı sonuçlar üretebilir. WinXCom programı radyolojik fizik ve dozimetri için geliştirilmiştir, FFAST programı ise X-ışını kırınımı, interferometri ve kristalografi gibi alanlar için geliştirilmiştir. FFAST teorik programında 59,54 keV enerji için kütle soğurma katsayılarına karşılık gelen değerler bulunmadığı için yakın enerji değerleri dikkate alınarak Origin Pro 8 kullanılarak grafik çizilmiş ve interpolasyon yapılarak arada olan 59,54 keV enerji değeri için kütle soğurma katsayılarının doğru değerleri belirlenmiştir. Bu işlem için çizilmiş örnek bir grafik Şekil 3'de verilmiştir.



Şekil 3.  $ZnC_4H_6O_4$  için FFAST kütle soğurma katsayısı değeri interpolasyon grafiği.

#### 4. Sonuçlar ve tartışma

Bu çalışmada özellikle NCCLS'ye göre gruplandırılmış periyodik tablo dikkate alınarak yeşil renkle gösterilen ve esansiyel-eser elementler olarak adlandırılan Mn, Co, Ni, Cu ve Zn elementlerinin bazı bileşikleri dikkate alınarak, önemli fiziksel parametrelerin deneysel tayini yapılmıştır ve çok kullanışlı olduğu bilinen iki teorik program (WinXCom ve FFAST) sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Çalışmamızda dikkate alınan elementler yaşam için gereklidir ve yokluğunda ya ölüm ya da organizmanın birçok fonksiyonunun işlevselliğinde zararlarla karşılaşılır. Bu elementler, çeşitli hastalıkların tanı ve tedavisinde de önemli rol oynamaktadır. Mesela, sağlıklı ve tümörlü dokularda eser element konsantrasyonunun veya miktarının bilinmesi kanserin neden olduğuna cevap oluşturabilmektedir. Bu bakımdan çalışmamızın amacı, eser elementlerin bileşiklerinin foton etkileşmesinin, nasıl bir tabiata sahip olduğunu görmek ve canlılar için etkilerinin neler olabileceğini tahmin etmektir.

Mn, Co, Ni, Cu ve Zn esansiyel-eser elementlerinin bileşikleri için kütle soğurma katsayıları, atomik, moleküler ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve

elektron yoğunluklarının deneysel değerleri Tablo 1’de, WinXCom programı teorik değerleri Tablo 2’de ve FFAST programı teorik değerleri ise Tablo 3’de verilmiştir.

Tablo 1. Mn, Co, Ni, Cu ve Zn esansiyel-eser elementlerinin bileşikleri için kütle soğurma katsayıları, atomik, moleküler tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarının deneysel değerleri.

Numuneler	$\mu/\rho$ (cm <sup>2</sup> /g)	$\sigma_{t,m}$ (barn/atom)	$\sigma_{t,a}$ (barn/atom)	$Z_{et}$	$N_e \times 10^{23}$ (electron/g)
Mn	1,071±0,077	97,707±7,024	97,707±7,024	24,792±1,782	2,718±0,195
MnF <sub>3</sub>	0,650±0,056	120,776±10,409	30,194±2,602	20,229±1,743	4,353±0,375
MnBr <sub>2</sub>	2,142±0,048	763,682±17,117	254,561±5,706	31,877±0,714	2,682±0,060
CoCl <sub>2</sub>	0,926±0,039	199,602±8,409	66,534±2,803	25,120±1,058	3,495±0,147
CoF <sub>2</sub>	0,931±0,044	102,012±4,823	34,004±1,608	16,427±0,777	4,496±0,213
Co(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0,568±0,005	172,476±1,519	19,164±0,169	17,436±0,154	5,166±0,045
NiF <sub>2</sub>	1,025±0,051	164,575±8,188	54,858±2,729	24,514±1,220	4,580±0,228
NiSO <sub>4</sub>	0,785±0,018	201,669±4,625	33,612±0,771	21,735±0,498	5,075±0,116
CuSO <sub>4</sub>	0,815±0,028	216,134±7,421	36,022±1,237	21,944±0,753	4,968±0,171
CuF <sub>2</sub>	1,322±0,060	222,899±10,117	74,300±3,372	30,601±1,389	5,445±0,247
CuI	5,676±0,062	1795,009±19,607	897,505±9,804	48,956±0,535	3,096±0,034
Zn	1,878±0,026	203,964±2,824	203,964±2,824	31,298±0,433	2,882±0,040
ZnC <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	0,908±0,023	276,569±7,008	18,438±0,467	18,838±0,477	9,275±0,235
ZnSO <sub>4</sub> .7H <sub>2</sub> O	0,771±0,010	367,947±4,775	13,628±0,177	16,326±0,212	9,232±0,120
I (İyot)	7,513±0,051	1583,321±10,747	1583,321±10,747	51,516±0,350	2,445±0,017

Tablo 2. Mn, Co, Ni, Cu ve Zn esansiyel-eser elementlerinin bileşikleri için kütle soğurma katsayıları, atomik, moleküler ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarının WinXCom programı teorik değerleri.

Numuneler	$\mu/\rho$ (cm <sup>2</sup> /g)	$\sigma_{t,m}$ (barn/atom)	$\sigma_{t,a}$ (barn/atom)	$\sigma_{t,el}$ (barn/atom)	$Z_{et}$	$N_e \times 10^{23}$ (electron/g)
Mn	1,08	98,525	98,525	3,941	25,000	2,740
MnF <sub>3</sub>	0,629	116,917	29,229	1,493	19,582	4,214
MnBr <sub>2</sub>	2,240	798,771	266,257	7,986	33,341	2,805
CoCl <sub>2</sub>	0,852	183,693	61,231	2,649	23,118	3,217
CoF <sub>2</sub>	0,891	97,664	32,555	2,070	15,727	4,304
Co(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0,560	170,119	18,902	1,099	17,198	5,095
NiF <sub>2</sub>	1,010	162,163	54,054	2,238	24,155	4,513
NiSO <sub>4</sub>	0,749	192,469	32,078	1,546	20,743	4,843
CuSO <sub>4</sub>	0,807	213,885	35,647	1,642	21,716	4,916
CuF <sub>2</sub>	1,090	183,792	61,264	2,428	25,232	4,489
CuI	5,700	1802,623	901,311	18,333	49,164	3,109
Zn	1,800	195,506	195,506	6,517	30,000	2,762
ZnC <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	0,764	232,772	15,518	0,979	15,855	7,806
ZnSO <sub>4</sub> .7H <sub>2</sub> O	0,588	280,763	10,399	0,835	12,458	7,044
I (İyot)	7,730	1628,945	1628,945	30,735	53,000	2,515



Tablo 3. Mn, Co, Ni, Cu ve Zn esansiyel-eser elementlerinin bileşikleri için kütle soğurma katsayıları, atomik, moleküler ve elektronik tesir kesitleri, etkin atom numaraları ve elektron yoğunluklarının FFAST programı teorik değerleri.

Numuneler	$\mu/\rho$ (cm <sup>2</sup> /g)	$\sigma_{t,m}$ (barn/atom)	$\sigma_{t,a}$ (barn/atom)	$\sigma_{t,e}$ (barn/atom)	$Z_{et}$	$N_e \times 10^{23}$ (electron/g)
Mn	1,060	96,700	96,700	3,868	25,000	2,740
MnF <sub>3</sub>	0,619	115,058	28,765	1,489	19,323	4,158
MnBr <sub>2</sub>	2,220	791,639	263,880	7,908	33,367	2,807
CoCl <sub>2</sub>	0,839	180,891	60,297	2,610	23,100	3,214
CoF <sub>2</sub>	0,877	96,130	32,043	2,051	15,622	4,276
Co(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0,555	168,600	18,733	1,101	17,014	5,041
NiF <sub>2</sub>	0,998	160,237	53,412	2,223	24,031	4,490
NiSO <sub>4</sub>	0,741	190,414	31,736	1,541	20,593	4,808
CuSO <sub>4</sub>	0,798	211,499	35,250	1,633	21,592	4,888
CuF <sub>2</sub>	1,080	182,105	60,702	2,405	25,235	4,490
CuI	5,620	1777,323	888,661	18,081	49,148	3,108
Zn	1,770	192,247	192,247	6,408	30,000	2,762
ZnC <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	0,757	230,639	15,376	0,984	15,624	7,692
ZnSO <sub>4</sub> .7H <sub>2</sub> O	0,585	279,330	10,346	0,846	12,234	6,918
I (İyot)	7,630	1607,872	1607,872	30,337	53,000	2,515

Kütle soğurma katsayılarının deneysel ve teorik değerleri arasındaki rölatif fark (*RF*), Tablo 1’de yer alan  $\pm\sigma$  standart sapmaları da dikkate alınarak;

$$\text{Rölatif Fark (RF)} = \frac{(\mu/\rho_{\text{Teorik Değer}} - \mu/\rho_{\text{Deneyisel Değer}})}{\pm\sigma} \quad (9)$$

formülüyle hesaplanarak Tablo 4’de verilmiştir. Bundan başka, kütle soğurma katsayılarının teorik ve deneysel değerler arasındaki oranı da (*T/D*) Tablo 4’de verilmiştir.

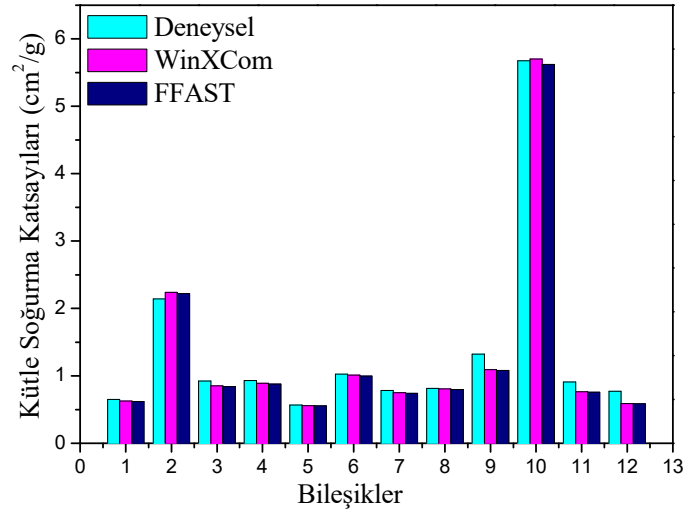
Tablo 1, 2 ve 3 incelendiğinde, Mn bileşiklerinde F elementinin bileşikte yer alması fotonun atomla etkileşme ihtimalini azaltırken, ağır bir element olan Br’ nin yer alması etkileşme ihtimalini artırmıştır. Yine Cu bileşiklerinde, CuF<sub>2</sub> ve CuI incelendiğinde, daha hafif ya da atom numarası düşük olan Florun (F), bileşiğin fotonla etkileşme ihtimalini azalttığı, atom numarası büyük olan İyotun (I) ise, etkileşme ihtimalini artırdığı görülmektedir. Bu ağır veya atom numarası büyük elementler için fotoelektrik etkinin baskın olması ve atomik tesir kesitlerinin de kütle soğurma katsayısıyla orantılı olmasından kaynaklanmaktadır. Bu durumda, ağır metallerin canlılar üzerine kendi etkileri dışında, radyasyon etkileşme ihtimalini artırması bakımından da sorun yaratacağı görülmektedir. Bileşikler grup olarak dikkate alındıklarında, Mn bileşikleri hariç, atom sayısı arttıkça, kütle numarasının azaldığı yani foton etkileşiminin daha az olduğu görülmektedir. Tıbbi görüntüleme ve radyasyon tedavisinde kullanılan etkin atom numarasının deneysel olarak belirlenmesi çok önemlidir. Tablolardaki etkin atom numaraları incelendiğinde  $Z_{et} > 10$  olduğu görülmektedir.  $Z_{et} \leq 10$  organik maddelerin göstergesi iken, büyük bir  $Z_{et}$  genel olarak inorganik bileşikler ve metallerin göstergesidir [27]. Bu durum dikkate alınır, çalışmamızdaki bileşikler inorganik ve metaldir. Mn ve Zn element ve bileşiklerinin kütle numarası değerleri dikkate alındığına, element halindeken daha büyük kütle soğurma katsayısına sahip oldukları, bileşik halinde ise

hafif veya atom numarası ( $Z$ ),  $30 \geq Z$  elementleri içeren bileşiklerinin kütle soğurma katsayılarının daha küçük olduğu görülmektedir. Bu durum bize, bu bileşikler için element halinde foton etkileşim ihtimalinin arttığını düşündürmektedir.

Tablo 4. Mn, Co, Ni, Cu ve Zn esansiyel-eser elementlerin bileşiklerinin kütle soğurma katsayıları için rölatif farklar ( $RF$ ) ve teorik, deneysel sonuçların oranı ( $T/D$ ).

Numuneler	$\mu/\rho$ (cm <sup>2</sup> /g)			
	$RF_{WinXCom}$	$RF_{FFAST}$	$T/D_{WinXCom}$	$T/D_{FFAST}$
Mn	0,116	-0,143	1,008	0,990
MnF <sub>3</sub>	-0,371	-0,549	0,968	0,953
MnBr <sub>2</sub>	2,050	1,633	1,046	1,037
CoCl <sub>2</sub>	-1,892	-2,225	0,920	0,906
CoF <sub>2</sub>	-0,901	-1,220	0,957	0,942
Co(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-1,552	-2,552	0,986	0,978
NiF <sub>2</sub>	-0,295	-0,530	0,985	0,974
NiSO <sub>4</sub>	-1,989	-2,433	0,954	0,944
CuSO <sub>4</sub>	-0,303	-0,625	0,990	0,979
CuF <sub>2</sub>	-3,865	-4,032	0,825	0,817
CuI	0,388	-0,902	1,004	0,990
Zn	-2,995	-4,149	0,959	0,943
ZnC <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	-6,250	-6,554	0,842	0,834
ZnSO <sub>4</sub> .7H <sub>2</sub> O	-18,259	-18,559	0,763	0,759
I (İyot)	4,245	2,284	1,029	1,016

MnF<sub>3</sub>, MnBr<sub>2</sub>, CoCl<sub>2</sub>, CoF<sub>2</sub>, Co(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, NiF<sub>2</sub>, NiSO<sub>4</sub>, CuSO<sub>4</sub>, CuF<sub>2</sub>, CuI, ZnC<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>4</sub> ve ZnSO<sub>4</sub>.7H<sub>2</sub>O bileşikleri için kütle soğurma katsayılarının ( $\mu/\rho$ ), deneysel ve teorik değerlerinin karşılaştırılması Şekil 4’de yapılmıştır. Bileşikler MnF<sub>3</sub> (1), MnBr<sub>2</sub> (2), CoCl<sub>2</sub> (3), CoF<sub>2</sub> (4), Co(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (5), NiF<sub>2</sub> (6), NiSO<sub>4</sub> (7), CuSO<sub>4</sub> (8), CuF<sub>2</sub> (9), CuI (10), ZnC<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>4</sub> (11) ve ZnSO<sub>4</sub>.7H<sub>2</sub>O (12) şeklinde numaralandırılmıştır.



Şekil 4. Bileşiklerin deneysel ve teorik kütle soğurma katsayılarının karşılaştırılması.

Tablolar ve Şekil 4 incelendiğinde, deneysel değerler ve teorik değerler arasında çok iyi bir uyum olduğu görülmektedir. Tablo 4'deki *RF* değerleri dikkate alınarak değerlendirme yapılırsa, genellikle FFAST teorik değerlerinin deneysel değerlere daha yakın olduğu görülmektedir. Bunun sebebi karışım kuralına dayanan WinXCom programının, kimyasal çevre ve moleküler bağların etkisini ihmal etmesidir. Tablolardaki tüm bileşiklerin atom sayıları göz önüne alındığında fiziksel parametrelerin değişiminde herhangi bir etkiye sahip olmadığı ve belirgin bir fark yaratmadığı görülmektedir. Bu bakımdan, karışım kuralının geçerliliği bir bileşikteki atom sayısına bağlı olarak açıklanamamaktadır. Herhangi bir bileşik için moleküler bağlar, kimyasal çevre gibi etkiler önemlidir, fakat bu etkiler karışım kuralı tarafından ihmal edilmektedir. Bileşikler bağlarla bir arada bulunan yapılar olmalarına rağmen karışım kuralı bağların etkisini ve kimyasal çevre etkisini dikkate almadan bir hesaplama sunmaktadır. Ayrıca kimyasal çevrenin, kütle soğurma katsayısı üzerine de etkisi olduğu kimyasal, moleküler ve termal ortamlardan etkilendiğine de inanılmaktadır. Yalıtılmış atom için teorik değer hesaplanmasında tesir kesiti hesabı dikkate alındığından dolayı deneysel kütle soğurma katsayısı değerinin sapmasına yol açmaktadır. Bu sapma karışım kuralının geçersizliği ya da kuralda aksaklık, bozulma olarak adlandırılır. Karışım kuralının geçersiz olması ve etkileri İçelli ve ark. [28, 29] tarafından yapılan çalışmalarda da gözlenmiştir. Hafif elementlerden oluşmuş bileşik içerisindeki ağır elementlerin varlığı da deneysel ve teorik kütle soğurma katsayıları arasında farklara sebep olmaktadır. Bunun sebebi kütle soğurma katsayısının yüksek olduğu 0,01 MeV-0,5 MeV enerji aralığında fotoelektrik olayın baskın olmasındandır.

Sonuç olarak, çalışmamızdaki esansiyel-eser elementler için tayin edilen atomik parametrelerin kullandığımız dar-şua geometrisiyle deneysel olarak hassas bir şekilde ölçüldüğünü, karşılaştırılan teorik programlarla gayet iyi uyumlu sonuçlar alındığını, fakat FFAST program değerlerinin uygunluk açısından WinXCom program değerlerinden daha iyi olduğunu, farklı önemli elementler, bileşikler, enerjiler ve yöntemlerle yeni deneysel çalışmalar yapılabileceğini, bu elementler ve bileşiklerin deneysel ve teorik değerlerinin özellikle tıpta kullanım yönünün farklı araştırma gruplarıyla da yapılan ortak çalışmalarla daha da geliştirilmesi gerektiğini söyleyebiliriz.

**Kaynaklar**

- [1] Preira M.O., Carvalho Conti C., Anjos M. J., Lopes R.T., Correction of radiation absorption on biological samples using Rayleigh to Compton scattering ratio, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, 280, 39–44, (2012).
- [2] Jackson D.F., Hawkes D.J., X-ray attenuation coefficients of elements and mixtures, **Physics Reports**, 70(3), 169-233, (1981).
- [3] Manohara S.R., Hanagodimath S.M., Studies on effective atomic numbers and electron densities of essential amino acids in the energy range 1 keV–100 GeV, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms**, 258(2), 321-328,(2007).
- [4] Vishwanath P. S., Badiger N. M., Effective atomic numbers of dosimetric interest organic compounds, **Indian Journal of Pure & Applied Physics**, 54, 333-338, (2016).
- [5] Athanassiadis K.N., Determination of the Effective Atomic Numbers of Light Composite Materials, I2MTC 2009 - **International Instrumentation and Measurement Technology Conference**, Singapore, 5-7 May (2009).
- [6] Manohara, S. R., Hanagodimath, S. M, Thing, K. S., Gerward, L., The effective atomic number revisited in the light of modern photon-interaction cross-section databases, **Applied Radiation and Isotopes**, 68(4-5), 784-787, (2010).
- [7] Kumar, T., K., Venkataratnam, S., Reddy, K., V., Effective atomic number studies in clay minerals for total photon interaction in the energy region 10 keV-10 MeV. **Radiation Physics and Chemistry**, 48(6), 707-710, (1996).
- [8] Parasad, S., G., Parthasaradhi, K., Bloomer, W., D., Effective atomic numbers for photoabsorption in alloys in the energy region of absorption edges. **Radiation Physics and Chemistry**, 53(5), 449-453, (1998).
- [9] Kerur B. R., Thontadarya S. R., Hanumaiah B., Measurement of X-ray mass attenuation coefficients using mixed radiation emitters, **Indian Journal of Physics**, 67A (2), 163-167, (1993).
- [10] Gopinathan Nair K. P., Umesh T. K., Gowda R., Total Attenuation Cross Sections Of Several Amino Acids At 661.6, 1173 And 1332.5 keV, **Radiation Physics and Chemistry**, 45(2), 231-233, (1995).
- [11] Bhandal G. S., Singh K., Total And Partial Mass Attenuation Coefficients And Effective Atomic Number Studies In Different Solid State Nuclear Track Detectors, **Radiation Physics and Chemistry**, Vol., 47(1), 109-116, (1996).
- [12] Shivaramu R.A., Ramprasath V., Effective Atomic Numbers and Mass Attenuation Coefficients of Some Thermoluminescent Dosimetric Compounds for Total Photon Interaction, **Nuclear Science And Engineering**, 132, 148–153, (1999).
- [13] Erzenoğlu S., İçelli O., Gürbulak B., Ateş A., Measurement of mass attenuation coefficients for holmium doped and undoped layered semiconductors InSe at different energies and the validity of mixture rule for crystals around the absorption edge, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, Volume 102(3), 343-347, (2006).
- [14] İçelli O., Erzenoğlu S., Boncukçuoğlu R., Determination of molecular, atomic, electronic cross-sections and effective atomic number of some boron compounds and TSW, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interaction with Materials and Atoms**, 266(14), 3226-3230, (2008).

- [15] Rajee D .V., Chaudhari L. M., Mass Attenuation Coefficients of Soil Samples in Maharashtra State (India) by Using Gamma Energy at 0.662 MeV, **Bulgarian Journal of Physics**, 37, 158–164, (2010).
- [16] Gounhalli S.G., Shantappa A., Hanagodimath S. M., Studies on Mass Attenuation Coefficient, Effective Atomic Numbers and Electron Densities of Some Narcotic Drugs in the Energy Range 1KeV -100GeV, **Journal of Applied Physics**, 2( 4), 40-48, (2012).
- [17] Akça B., Erzeneoğlu S., The Mass Attenuation Coefficients, Electronic, Atomic, and Molecular Cross Sections, Effective Atomic Numbers, and Electron Densities for Compounds of Some Biomedically Important Elements at 59.5 keV, **Science and Technology of Nuclear Installations**, 2014, 1-8, (2014).
- [18] Böke A., The photon interaction cross sections of human cortical bone tissue, **Chinese Journal of Physics**, 55( 6), 2165-2172, (2017).
- [19] Parsons P. J., Barbosa F. J., Atomic spectrometry and trends in clinical laboratory medicine, **Spectrochimica Acta**, 62(9), 992–1003, (2007).
- [20] Gillian, L., Jack, D., F., Benjamin, G., David, E., N., Patrick, J., P., John, S., NCCLS, Control of pre-analytical variation in trace element determinations; approved guideline. 19087 USA, (1997).
- [21] Zheng Y, Li X K, Wang Y, Cai L., The role of zinc, copper and iron in the pathogenesis of diabetes and diabetic complications: Therapeutic effects by chelators, **Hemoglobin**, 32(1-2), 135–145, (2008).
- [22] Jackson D.F., Hawkes D.J., X-ray attenuation coefficients of elements and mixtures. **Physics Reports**, 70, 169–233, (1981).
- [23] Gerward, L., Guilbert, N., Jensen, K. B., Levring, WinXCom-a program for calculating X-ray attenuation coefficients, **Radiation Physics and Chemistry**, 71, 653-654, (2004).
- [24] Gerward, L., Guilbert, N., Jensen, K. B., Levring, H., X-ray absorption in matter. Reengineering XCOM. **Radiation Physics and Chemistry**, 60(1-2), 23-24, (2001).
- [25] Gowda, S., Krishnaveni, S., Gowda, R., Studies on effective atomic numbers and electron densities in amino acids and sugars in the energy range 30-1333 keV, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, 239(4), 361-369, (2005).
- [26] Chantler, C. T., Olsen, K., Dragoset, R. A., Chang, J., Kishore, A. R., Kotochigova, S. A., Zucker, D. S., X-ray form factor, attenuation and scattering tables (Version 2.1). “<http://physics.nist.gov/ffast>”, National Institute of Standards and Technology (NIST) (2005).
- [27] Baltaş, H., Çevik, U., Determination of the effective atomic numbers and electron densities for YBaCuO superconductor in the range 59.5–136 keV, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms**, 266(7), 1127-1131, (2008).
- [28] İçelli, O., Erzeneoğlu, S., Boncukçuoğlu, R., Measurement of mass attenuation coefficients of some boron compounds and the trommel sieve waste in the energy range 15.746- 40.930 keV, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, 78, 203-210, (2003).
- [29] İçelli, O., Erzeneoğlu, S., The mass attenuation coefficients in some vanadium and nickel compounds, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radioactive Transfer**, 88, 519–524, (2004).