

TÜRKİYE VE DÜNYADA FİZİK

Editör: Dr. Öğr. Üyesi Osman ARMAĞAN

yaz
yayınları

Türkiye ve Dünyada Fizik

Editör

Dr.Öğr.Üyesi Osman ARMAĞAN

yaz
yayınları

2025

Türkiye ve Dünyada Fizik

Editör: Dr.Öğr.Üyesi Osman ARMAĞAN

© YAZ Yayınları

Bu kitabın her türlü yayın hakkı Yaz Yayınları'na aittir, tüm hakları saklıdır. Kitabın tamamı ya da bir kısmı 5846 sayılı Kanun'un hükümlerine göre, kitabı yayınlayan firmanın önceden izni alınmaksızın elektronik, mekanik, fotokopi ya da herhangi bir kayıt sistemiyle çoğaltılamaz, yayınlanamaz, depolanamaz.

E_ISBN 978-625-8678-14-7

Aralık 2025 – Afyonkarahisar

Dizgi/Mizanpaj: YAZ Yayınları

Kapak Tasarım: YAZ Yayınları

YAZ Yayınları. Yayıncı Sertifika No: 73086

M.İhtisas OSB Mah. 4A Cad. No:3/3
İscehisar/AFYONKARAHİSAR

www.yazyayinlari.com

yazyayinlari@gmail.com

İÇİNDEKİLER

Nanotel Dizilerinde Histerezis Davranışının Etkin Alan Teorisi Kullanılarak İncelenmesi.....	1
<i>Ersin KANTAR</i>	
Investigation of the Impact of Halogen Lamp Distance on the Performance Efficiency of Silicon-Based Solar Cell.....	15
<i>Betül DEMİREZEN</i>	
Flexible Future: Chalcogenide Thin Films for Lightweight and Bendable Electronics.....	28
<i>Tuğba BAYAZIT</i>	
Talys Modelling Of ^{67}Ga Production Via $^{67}\text{Zn}(\text{p},\text{n})$ and $^{68}\text{Zn}(\text{p},2\text{n})$ Reactions Up to 30 MEV.....	44
<i>Murat DAĞ</i>	
Computation Of ^{111}In Production Cross Sections Via $^{111}\text{Cd}(\text{p},\text{n})$ and $^{112}\text{Cd}(\text{p},2\text{n})$ Reactions With Talys Up to 30 MEV	55
<i>Murat DAĞ</i>	
Boron Mine and Its Strategic Importance	65
<i>Özge ERDEM, Sümeyra CAN</i>	
Moleküler Modellemenin Temelleri	85
<i>Ercan TÜRKKAN</i>	
Çerçeve Materyalleri, Ergonomi ve Üretim Teknolojileri.....	101
<i>Sümeyra CAN, Özge ERDEM</i>	

Olağanüstü Akustik Geçirgenliğe Sahip Akustik Mercek Tasarımı	118
<i>Döne SAYARCAN, Nurettin KÖRÖZLÜ, Ahmet ÇİÇEK</i>	

Structure of Liquid Ni–Te Semiconductors: An Integral Equation Approach	139
<i>Fatma KOSOVALI ÇAVUŞ, Şükran YAMAN ATCI</i>	

Nematik Sıvı Kristallerde Surfaktan–Herbisit Etkileşimleri: 5CB–Hdtma–Glifosat Sisteminin Optik Davranışının İncelenmesi	159
<i>Yılmaz Can METE, Mustafa AKSOY, Gülnur ÖNSAL, Özge TÜZÜN ÖZMEN</i>	

Schottky Diodes and Semiconductor Interfaces: Physics, Fabrication, and Applications	172
<i>İlhan CANDAN, Sezai ASUBAY</i>	

Külçe Süperiletkenlerin Temel Özellikleri ve Mevcut Üretim Yöntemleri	188
<i>Murat ABDİOĞLU, Ufuk Kemal ÖZTÜRK</i>	

Süperiletken Mıknatısların Hastalık Teşhis ve Tedavisinde Kullanımı.....	207
<i>Ufuk Kemal ÖZTÜRK, Murat ABDİOĞLU</i>	

"Bu kitapta yer alan bölümlerde kullanılan kaynakların, görüşlerin, bulguların, sonuçların, tablo, şekil, resim ve her türlü içeriğin sorumluluğu yazar veya yazarlarına ait olup ulusal ve uluslararası telif haklarına konu olabilecek mali ve hukuki sorumluluk da yazarlara aittir."

NANOTEL DİZİLERİNDE HİSTEREZİS DAVRANIŞININ ETKİN ALAN TEORİSİ KULLANILARAK İNCELENMESİ¹

Ersin KANTAR²

1. GİRİŞ

Nanoyapılar, nanometre boyut aralığında sergiledikleri benzersiz özellikler nedeniyle son yıllarda bilimin ön saflarında yer almaktadır. Bu malzemeler, yığın (bulk) haldeki karşılıklarına kıyasla üstün özellikler gösterirler ki bu da potansiyel uygulamaları için artan bir ilgiyi beraberinde getirmiştir. Manyetik nanoyapılar arasında, özellikle manyetik nanoteller, ayarlanabilir manyetik özelliklere sahip olmaları nedeniyle büyük ilgi çekmektedir. Bu tek boyutlu (1D) yapılar, yüksek en-boy oranları (aspect ratio) sayesinde güçlü bir şekil anizotropisine sahiptir. Bu özellikleri, onları yüksek yoğunluklu manyetik kayıt ortamları, spintronik cihazlar, nano sensörler, biyo-tıbbi uygulamalar ve çok fonksiyonlu cihazlar için son derece çekici adaylar haline getirmektedir [1-5].

Tek bir nanotel, temel fiziksel olguları araştırmak için ideal bir sistem olsa da pratik cihaz uygulamaları bu yapıların düzenli diziler (array) halinde sentezlenmesini gerektirir. Ancak, nanoteller bir dizi içine yerleştirildiğinde, bireysel özellikler sistemin kolektif davranışı içinde karmaşık bir etkileşime girer. Bu dizilerde, tekil tellerin özellikleri (örneğin çekirdek/kabuk

¹ Bu çalışma, Yozgat Bozok Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinasyon Birimi tarafından desteklenmiştir. Proje Numarası: FED-2025-1576

² Prof. Dr., Yozgat Bozok Üniversitesi, Sorgun Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, ORCID: 0000-0001-9302-1078.

yapısı) ile komşu teller arasındaki etkileşimler manyetik özellikleri belirleyen temel faktörler haline gelir.

Bir nanotel dizisinin teknolojik potansiyelini belirleyen en kritik özelliklerden biri, manyetik histerezis davranışıdır. Histerezis eğrisi; koersivite (H_C) (zorlayıcı alan), ve remanans (kalıcı mıknatıslanma, M_R) gibi sistemin manyetik "hafızasını" tanımlayan temel parametreleri içerir. Bu histeretik özellikler, bir dizi faktörün karmaşık bir dengesimidir. Bunlar arasında; nanotel geometrisi (en-boy oranı), dizinin geometrisi (teller arası mesafe ve paketleme düzeni, örn. kare veya altıgen), malzeme bileşimi (alaşımlar, mozaik yapılar veya hibrit çekirdek/kabuk yapıları) bu anizotropilerin (şekil, magnetokristalin ve magnetostatik) birbiriyle olan rekabeti bulunmaktadır.

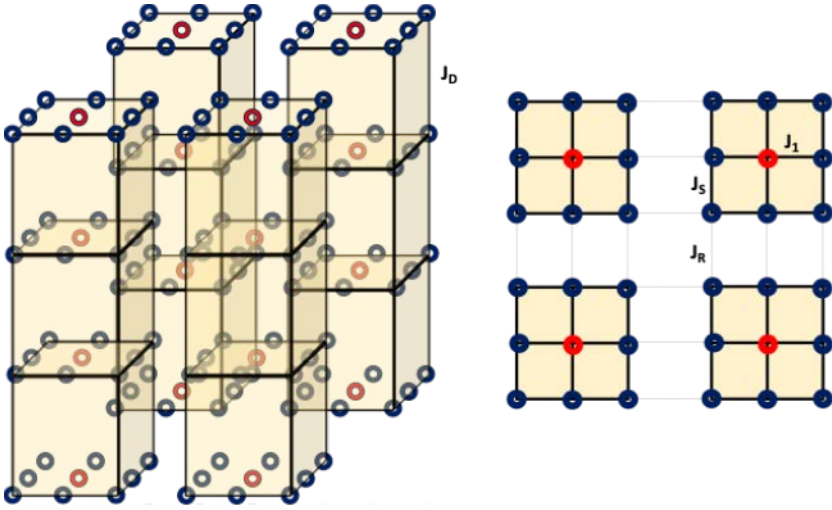
Bu karmaşık kolektif davranışları anlamak, deneysel çalışmaların yanı sıra güçlü teorik ve sayısal modelleme yaklaşımlarını da zorunlu kılar. Araştırmacılar, bu sistemleri incelemek için mikromanyetik simülasyonlar, atomistik spin modeli simülasyonları ve Monte Carlo (MC) yöntemleri gibi çeşitli ölçeklerde modeller kullanmıştır. Bu yaklaşımlara alternatif olarak, manyetik sistemlerdeki faz geçişlerini ve kritik olguları incelemek için yaygın olarak kullanılan teorik modellerden biri de Ising modelidir. Özellikle, korelasyonları dikkate alan Etkin Alan Teorisi (EFT) gibi istatistiksel mekanik yöntemler, nanoyapıların manyetik özelliklerini araştırmak için güçlü bir araç olarak kanıtlanmıştır [6-10].

Bu bölümde, kare bir örgü üzerinde düzenlenmiş, çekirdek/kabuk yapısına sahip bireysel Ising nanotellerinden oluşan bir dizinin histeretik özelliklerine odaklanılacaktır. EFT formalizmi kullanılarak, sistemin histerezis döngü alanı (HDA), H_C ve M_R üzerindeki etkiler incelenecektir. Temel amaç, bireysel nanoteller arasındaki değişim etkileşiminin (J_R), tel içi etkileşimlerin (J_1 ve J_s) ve sıcaklığın (T) bu histeretik davranışları

nasıl önemli ölçüde etkilediğini teorik bir bakış açısıyla ortaya koymaktır.

2. MODEL VE FORMÜLASYON

Nanoyapının geometrisi, Şekil 1’de gösterildiği gibi kare bir kafes üzerinde periyodik olarak düzenlenmiş, her biri kabuk (shell) ve çekirdek (core) tabakası içeren dikey nanotel dizilerinden oluşmaktadır. Spin-1/2 atomlar nanotellerin kafes noktalarını işgal eder. Tek bir nanotelin içinde kabuk-kabuk etkileşimi J_S , kabuk-çekirdek etkileşimi J_1 ve farklı segmentler arasındaki etkileşim J_D ile gösterilir. Ayrıca, nanoteller birbirleriyle kabuk atomları arasındaki J_R etkileşimi aracılığıyla etkileşir.



Şekil 1. Ising nanotel dizisinin şematik gösterimi. Daireler manyetik atomları göstermektedir. Ayrıca, mavi ve kırmızı renkler kabuk ve çekirdek atomlarının konumunu göstermektedir.

Sistemi tanımlayan Hamiltonyen aşağıdaki gibidir:

$$H = J_S \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_I \sum_{\langle ik \rangle} S_i \sigma_k - J_R \left(\sum_{\langle ii' \rangle} S_i S_{i'} + \sum_{\langle jj' \rangle} S_j S_{j'} \right) - J_D \left(\sum_{\langle kk' \rangle} \sigma_k \sigma_{k'} + \sum_{\langle ii' \rangle} S_i S_{i'} + \sum_{\langle jj' \rangle} S_j S_{j'} \right) - h \left(\sum_k \sigma_k + \sum_i S_i + \sum_j S_j \right) \quad (1)$$

Burada $\langle \dots \rangle$ indeksler, kabuk ve çekirdekdeki tüm komşu spin çiftleri üzerindeki toplamaları temsil eder. Dış manyetik alan h ile gösterilmiştir.

Bu çalışmada sistem EFT yaklaşımıyla çözülmüştür [11]. Kullanılan EFT yaklaşımı, van der Waerden özdeşliklerinin uygulanmasıyla elde edilen spin-spin korelasyonlarını hesaba katar [12]; ancak bu özdeşliklerin açılımı sırasında ortaya çıkan farklı spinler arasındaki korelasyonları ihmal eder. Ising nanoteller dizisi için manyetizasyonlar birbirine bağlı denklemler olarak elde edilir. Korelasyonlu EFT çerçevesinde sistemin bağlı denklemleri diferansiyel operatör formunda yazılabilir [11]:

$$m_c = [\cosh(A) + 2m_c \cosh(A)]^2 [\cosh(B) + 2m_{s1} \cosh(B)]^2 F(x+h) \Big|_{x=0} \quad (2a)$$

$$m_{s1} = [\cosh(B) + 2m_c \cosh(B)]^2 [\cosh(A) + 2m_{s1} \cosh(A)]^2 [\cosh(C) + 2m_{s2} \cosh(C)]^2 [\cosh(D) + 2m_{s1} \cosh(D)]^2 F(x+h) \Big|_{x=0} \quad (2b)$$

$$m_{s2} = [\cosh(C) + 2m_{s1} \cosh(C)]^2 [\cosh(D) + 2m_{s2} \cosh(D)]^2 F(x+h) \Big|_{x=0} \quad (2c)$$

Burada A , B , C ve D katsayıları sırasıyla ∇J_D , ∇J_I , ∇J_S , ve

∇J_R , şeklindedir. Ayrıca $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}$ diferansiyel operatörü olup

$F(x+h)$ fonksiyonu şu şekilde tanımlanır:

$$F(x+h) = \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{1}{2}\beta(x+h)\right]. \quad (3)$$

Burada $\beta = 1/k_B T$, T mutlak sıcaklık ve k_B Boltzmann sabitidir. Denklemler (2a)-(2c)'de verilen düzen parametreleri

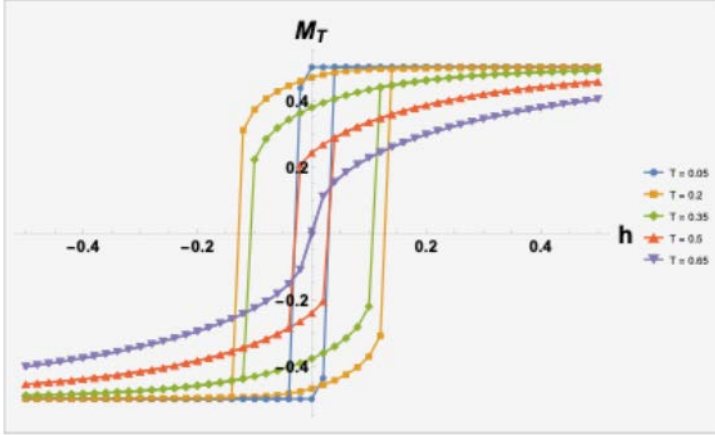
kullanılarak sistemin birim hücre başına toplam manyetizasyonu $M_T = \frac{(m_C + 4m_{S1} + 4m_{S2})}{5}$ olarak tanımlanabilir. Bu denklemler çözülerek faz diyagramları ve histerezis davranışları elde edilebilir.

3. NÜMERİK SONUÇLAR

Bu bölümde, Şekil 1 de verilen Ising nanotel dizisinde histeretik özellikleri, yani HDA, H_C ve M_R , incelenmiştir. Bu özelliklerin sistem parametrelerine (sıcaklık T , teller arası etkileşim J_R , çekirdek-kabuk etkileşimi J_1 ve kabuk-kabuk etkileşimi J_S) nasıl bağlı olduğu Şekil 2-9'da ayrıntılı olarak gösterilmiştir.

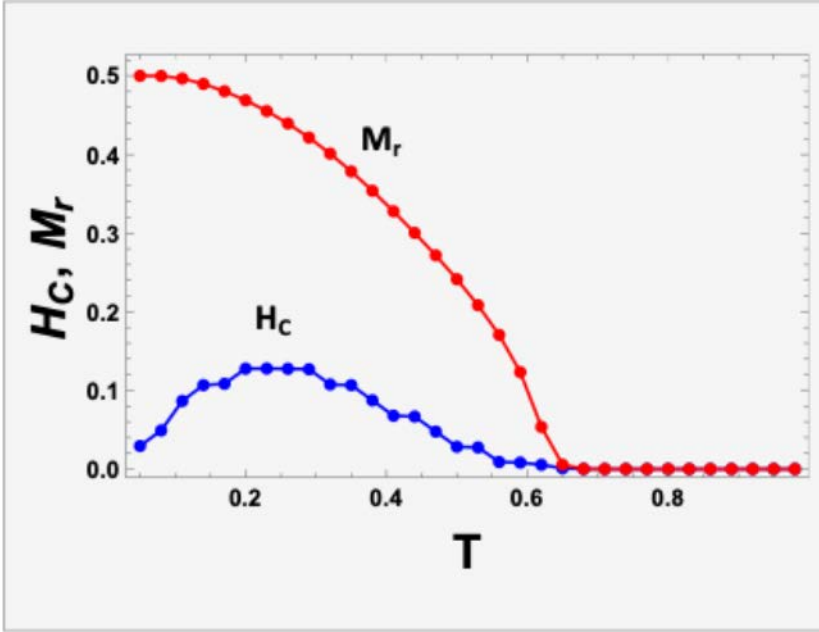
3.1. Sıcaklığın Nanotel Dizilerinin Histerezis Özellikleri Üzerine Etkisi.

Şekil 2 ve 3, sistemin histerezis özelliklerinin sıcaklığa (T) olan bağlılığını göstermektedir.



Şekil 2. Nanotel dizisinin sıcaklığa bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $J_R=-1,0$, $J_1=1,0$ ve $J_S=1,0$ sabit değerleriyle. $T=0,05$, $T=0,20$, $T=0,35$, $T=0,50$ ve $T=0,65$ için histerezis döngü alanları.

Histerezis Döngüleri: Şekil 2 de M_T - h eğrileri, $T=0.05$ 'ten $T=0.65$ 'e kadar farklı sıcaklıklar için çizilmiştir. Beklendiği gibi, sıcaklık arttıkça termal dalgalanmalar manyetik düzeni bozmaya başlar. Bunun sonucunda, histerezis döngüleri belirgin şekilde daralır (HDA azalır), döngünün eğimi düşer ve sistemin doyuma ulaşması için gereken alan azalır. $T=0.65$ değerinde döngü neredeyse tamamen kapanarak paramanyetik bir davranışa yaklaşıldığını göstermektedir.



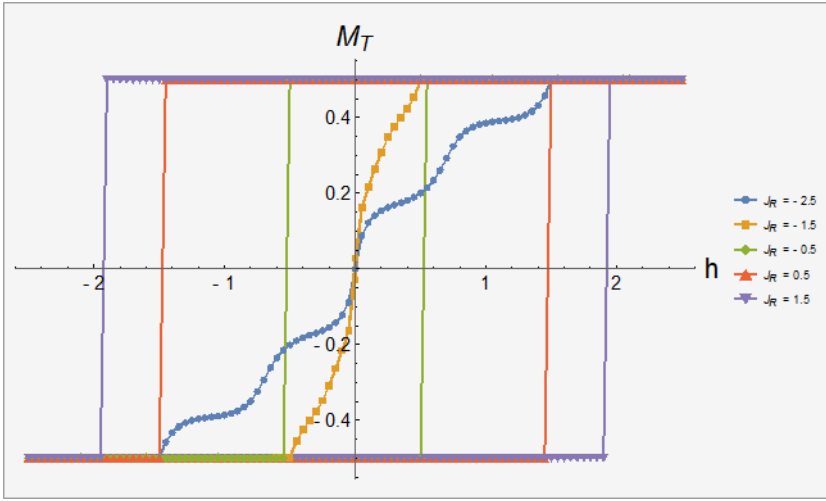
Şekil 3. Nanotel dizisinin sıcaklığa bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $J_R=-1,0$, $J_1=1,0$ ve $J_S=1,0$ sabit değerleriyle. Koersivite ve kalıcı mıknatıslanma eğrileri.

H_C ve M_R eğrileri: Şekil 3'de, H_C ve M_R değerlerinin sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Kırmızı eğri ile gösterilen M_R , $T=0.05$ gibi düşük sıcaklıklarda 0.5 değerinden başlar. Sıcaklık arttıkça sürekli bir düşüş sergiler ve $T \approx 0.68$ olan kritik sıcaklık (T_c) civarında sıfıra yaklaşır. Bu, sistemin bu sıcaklıkta ferromanyetik hafızasını kaybettiğini gösterir. Mavi eğri ile gösterilen H_C , M_R 'dan farklı olarak monoton bir davranış sergilemez. Çok düşük

sıcaklıklarda ($T=0.05$) düşük bir değerde başlar, $T=0.2$ civarında bir tepe noktasına (maksimum) ulaşır ve ardından kritik sıcaklığa kadar tekrar azalarak sıfırlanır.

3.2. Nanoteller Arası Etkileşimin Nanotel Dizilerinin Histerezis Özellikleri Üzerine Etkisi

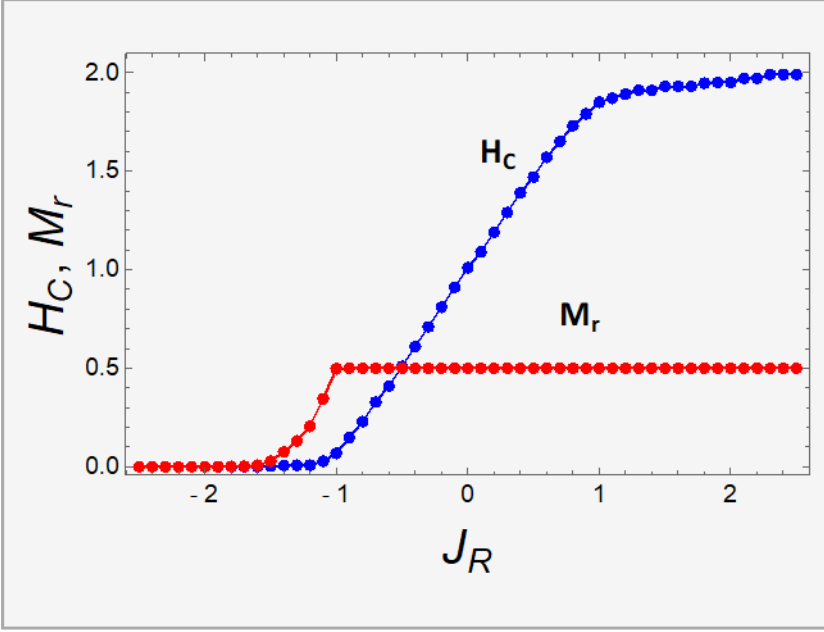
Şekil 4 ve 5, de bireysel nanoteller arasındaki değiş-tokuş etkileşiminin (J_R) histerezis özellikleri üzerindeki etkisini göstermektedir.



Şekil 4. Nanotel dizisinin J_R bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $T=0.1$, $J_1=1.0$ ve $J_S=1.0$ sabit değerleriyle. $J_R=-2.5$, $J_R=-1.5$, $J_R=-0.5$, $J_R=0.5$, ve $J_R=1.5$ için histerezis döngü alanları.

Histerezis Döngüleri: M_T - h eğrileri, J_R değerinin sistemin davranışını temelden değiştirdiğini göstermektedir. J_R negatiften (örn. -2.5, -1.5) pozitif (örn. 0.5, 1.5) doğru değiştiğinde, döngülerin "kareliği" (squareness) ve alanı (HDA) dramatik bir şekilde artar. $J_R < 0$ (**Antiferromanyetik**) iken $J_R = -1.5$ ve $J_R = -2.5$ gibi güçlü negatif değerlerde, döngüler çok adımlı bir yapı sergiler. Bu, teller arasında antiferromanyetik bir düzenin tercih edildiğini ve mıknatıslanma tersinmesinin kademeli olarak

gerçekleştiğini gösterir. $J_R > 0$ (**Ferromanyetik**) iken $J_R = 1.5$ gibi pozitif değerlerde, döngü neredeyse mükemmel bir kare şeklini alır. Bu, tüm tellerin bir arada, kolektif bir birim gibi davrandığı gösterir.



Şekil 5. Nanotel dizisinin sıcaklığa bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $T=0.1$, $J_1=1.0$ ve $J_S=1.0$ sabit değerleriyle. Koersivite ve kalıcı mıknatıslanma eğrileri.

H_C ve M_R eğrileri: Alt grafik, bu geçişin $J_R \approx -1.1$ civarında meydana gelen kritik bir davranış olduğunu doğrulamaktadır.

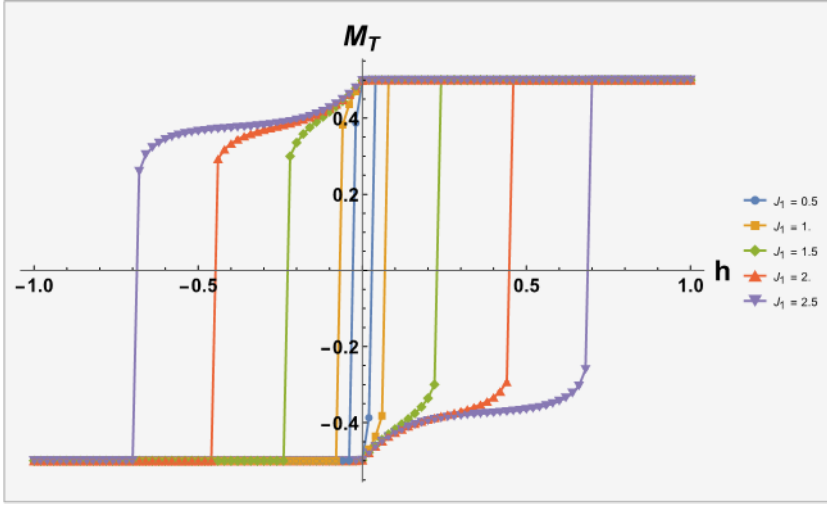
Kalıcı mıknatıslanma (M_R): Kırmızı eğri, $J_R < -1.0$ olduğu sürece M_R 'nin sıfır olduğunu gösterir. Bu, sistemin sıfır alanda net bir mıknatıslanma tutamadığı (antiferromanyetik düzen) anlamına gelir. $J_R = -1.0$ noktasında, M_R aniden 0.5 değerine sıçrar ve J_R artmaya devam ettikçe bu değerde sabit kalır.

Koersivite (H_C): Mavi eğri, H_C 'nin de $J_R = -1.1$ değerine kadar sıfır olduğunu gösterir. Bu kritik noktadan sonra H_C , J_R arttıkça hızla yükselir ve $J_R > 1.0$ bölgesinde doyuma ulaşmaya başlar.

Bu, ferromanyetik teller arası kuplajın, dizinin bir bütün olarak dış alana karşı direncini (sertliğini) büyük ölçüde artırdığını göstermektedir.

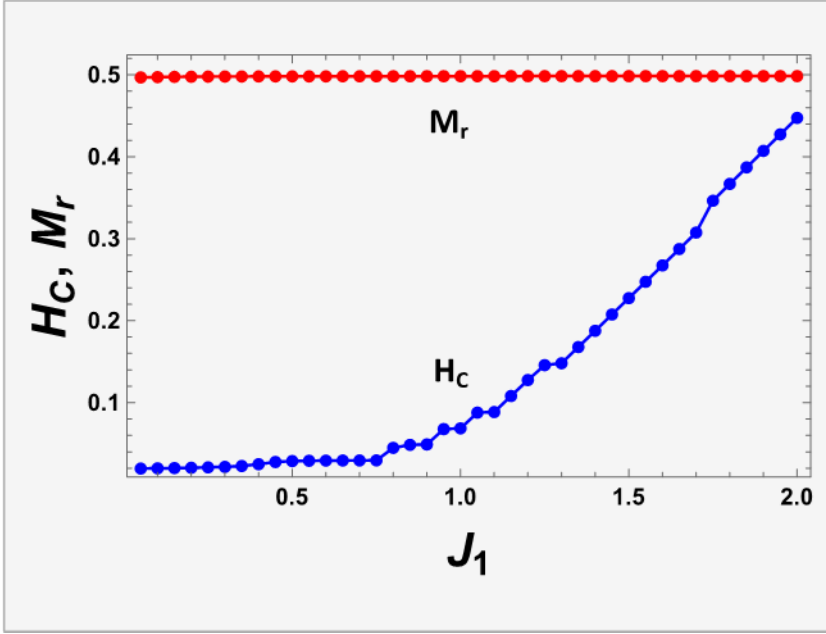
3.3. Çekirdek-Kabuk Etkileşiminin Nanotel Dizilerinin Histerezis Özellikleri Üzerine Etkisi

Şekil 6 ve 7, çekirdek-kabuk etkileşiminin (J_1) histerezis özellikleri üzerindeki etkisini göstermektedir.



Şekil 6. Nanotel dizisinin J_1 bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $T=0.1$, $J_R=-1.0$ ve $J_S=1.0$ sabit değerleriyle. $J_1=0.5$, $J_1=1.0$, $J_1=1.5$, $J_1=2.0$, ve $J_1=2.5$ için histerezis döngü alanları.

Histerezis Döngüleri: M_T - h eğrileri, J_1 değerinin ($J_1=0.5$ 'ten $J_1=2.5$ 'e) artmasının, histerezis döngülerinin belirgin bir şekilde genişlemesine (artan H_C) neden olduğunu göstermektedir¹. Düşük J_1 değerlerinde (örn. 0.5), döngü daha eğimli ve dardır. J_1 arttıkça, döngü daha sert ve geniş bir manyetik davranışı yansıtacak şekilde kareleşir.

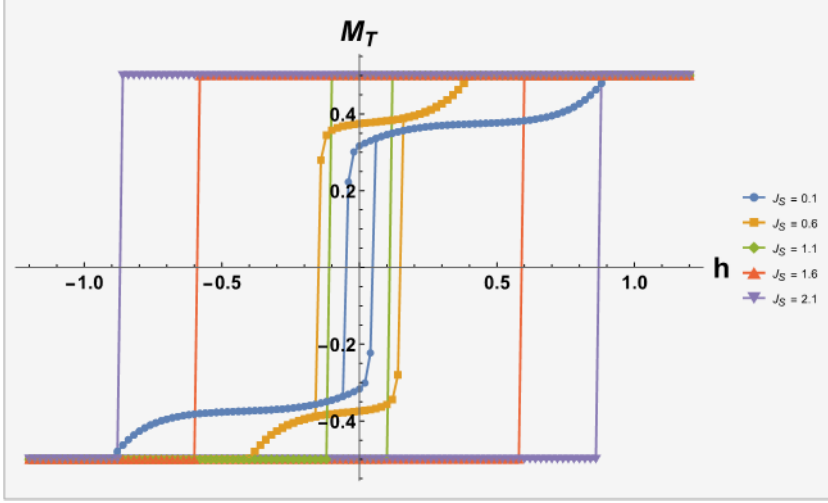


Şekil 7. Nanotel dizisinin J_1 bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $T=0.1$, $J_R=-1.0$ ve $J_S=1.0$ sabit değerleriyle. Koersivite ve kalıcı mıknatıslanma eğrileri.

H_c ve M_R eğrileri: Burada bu iki parametrenin J_1 'e karşı farklı tepkiler verdiğini ortaya koymaktadır. **Kalıcı mıknatıslanma (M_R):** Kırmızı eğri, M_R 'nin incelenen tüm J_1 aralığında (0.25'ten 2.0'a kadar) 0.5 değerinde mükemmel bir şekilde sabit kaldığını göstermektedir. Bu, (bu parametre seti için) çekirdek-kabuk etkileşiminin sistemin hafızasını etkilemediğini, ancak sertliğini etkilediğini gösterir. **Koersivite (H_c):** Mavi eğri, H_c 'nin J_1 parametresine güçlü bir şekilde bağlı olduğunu göstermektedir. $J_1 \approx 0.75$ değerine kadar H_c neredeyse sıfırdır. Bu eşik değerinden sonra, J_1 arttıkça H_c hızlanarak artar ve $J_1 = 2.0$ değerine ulaşıldığında $H_c \approx 0.45$ olur. Bu, güçlü bir çekirdek-kabuk etkileşiminin, nanotel dizisinin manyetik sertliği için kritik öneme sahip olduğunu gösterir.

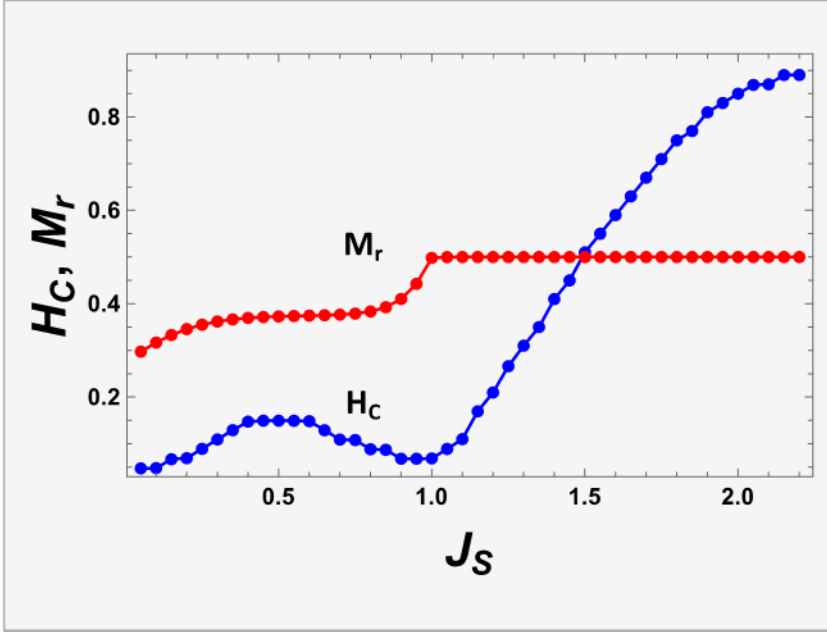
3.4. Kabuk-Kabuk Etkileşiminin Nanotel Dizilerinin Histerezis Özellikleri Üzerine Etkisi

Şekil 8 ve 9, kabuk içi (kabuk-kabuk) etkileşiminin (J_S) histerezis özellikleri üzerindeki etkisini göstermektedir.



Şekil 8. Nanotel dizisinin J_S bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $T=0.1$, $J_I=1.0$ ve $J_R=-1.0$ sabit değerleriyle. $J_S=0.1$, $J_S=0.6$, $J_S=1.1$, $J_S=1.6$, ve $J_S=2.1$ için histerezis döngü alanları.

Histerezis Döngüleri: M_T - h eğrileri, J_S arttıkça ($J_S=0.1$ 'den $J_S=2.1$ 'e) döngülerin belirgin şekilde genişlediğini (artan H_C) ve daha kare bir şekil aldığını göstermektedir. Düşük J_S değerleri (örn. 0.1, 0.6), çoklu adımlar içeren daha karmaşık, eğimli döngülere yol açar.



Şekil 9. Nanotel dizisinin J_S bağlı olarak histerezis karakteristikleri, $T=0.1$, $J_I=1.0$ ve $J_R=-1.0$ sabit değerleriyle. Koersivite ve kalıcı mıknatıslanma eğrileri.

H_C ve M_R eğrileri: Eğriler J_S parametresine karşı ilginç ve monoton olmayan bir davranış ortaya koyar. $J_S = 1.0$ noktası kritik bir eşik olarak görünmektedir. **Kalıcı mıknatıslanma (M_R):** Kırmızı eğri, $J_S=0.1$ civarında düşük bir M_R değeriyle (~ 0.3) başlar. $J_S=1.0$ değerine kadar yavaşça artar ve $J_S=1.0$ noktasında 0.5 değerine keskin bir sıçrama yapar. Bu değer üzerinde ($J_S > 1.0$), M_R sabit 0.5 olarak kalır. **Koersivite (H_C):** Mavi eğri, M_R 'den daha karmaşık bir davranış sergiler. Düşük J_S değerlerinde yavaşça artarken, M_R 'nin sıçradığı $J_S=1.0$ noktasında belirgin bir dip (azalma) gösterir. Bu kritik $J_S=1.0$ noktasından sonra ise H_C çok hızlı bir şekilde yükselir.

KAYNAKÇA

- [1] Huang, J. H., Su, X. F., & Li, Z. G. (2017). Metal ion detection using functional nucleic acids and nanomaterials. *Biosensors & Bioelectronics*, 96, 127–139.
- [2] Ambrosi, A., & Pumera, M. (2011). Amorphous carbon impurities play an active role in redox processes of carbon nanotubes. *Journal of Physical Chemistry C*, 115, 25281–25284.
- [3] Zhou, S., Guo, Y., & Zhao, J. J. (2016). Enhanced thermoelectric properties of graphene oxide patterned by nanoroads. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18, 10607–10615.
- [4] Jafary-Zadeh, M., & Zhang, Y. W. (2015). Molecular mobility on graphene nanoroads. *Scientific Reports*, 5.
- [5] Singh, A. K., & Yakobson, B. I. (2009). Electronics and magnetism of patterned graphene nanoroads. *Nano Letters*, 9, 1540–1543.
- [6] Lv, D., Jiang, W., Ma, Y., Gao, Z. Y., & Wang, F. (2019). Magnetic and thermodynamic properties of a cylindrical ferrimagnetic Ising nanowire with core/shell structure. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 106, 101–113.
- [7] Kaneyoshi, T. (2015). Cylindrical Ising nanowire and nanotube with a negative exchange interaction at the surface: Remarkable surface effects. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 71, 84–90.
- [8] Ertaş, M., & Kocakaplan, Y. (2014). Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire. *Physics Letters A*, 378, 845–850.

- [9] Kantar, E. (2015). Hexagonal-type Ising nanowire with core/shell structure designed with half-integer spins: Compensation behaviors and phase diagrams in the temperature and interaction planes. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 28, 2865–2873.
- [10] Htoutou, K., & Arbaoui, A. (2022). Effective-field theory with the probability distribution technique for a spin-3/2 core and spin-2 shell Ising nanowire: Thermodynamic properties and hysteresis behaviors. *Physica B: Condensed Matter*, 643.
- [11] Honmura, R., & Kaneyoshi, T. (1979). Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 12(19), 3979–3992.
- [12] Tucker, J. (1994). Generalized van der Waerden identities. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 27(3), 659–662.

INVESTIGATION OF THE IMPACT OF HALOGEN LAMP DISTANCE ON THE PERFORMANCE EFFICIENCY OF SILICON- BASED SOLAR CELL

Betül DEMİREZEN¹

1. INTRODUCTION

In today's world, the importance of sustainability and environmentally friendly technologies in energy production is increasingly recognized. Solar cells have become one of the most widely used renewable energy systems due to their ability to generate electricity directly through photovoltaic (PV) conversion. Solar cells have emerged as an alternative solution to mitigate the negative impacts associated with conventional electricity generation methods and have been used reliably as a power source for many years (Green et al., 2021). Environmental concerns have prompted a reevaluation of existing electricity generation technologies and accelerated efforts to develop new systems that are compatible with ecological sustainability. As a result, with advancements in power efficiency and the development of electronic auxiliary systems, solar cells have gained the capability to power nearly all electric devices used on Earth (Ojo et al., 2019). The global increase in solar panel installations during the 2020s reflects the growing interest in PV technologies (Tao et al., 2020). In 2000, global cumulative solar panel installations stood at 1.3 GWp, with an annual installation rate of 0.29 GWp. By the end of

¹ Öğr. Gör. Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Simav Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, ORCID: 0000-0003-3458-5847.

2020, these figures had surged to 750 GWp in total capacity, with nearly 150 GWp installed annually representing over a 500-fold increase and an average annual growth rate of approximately 37% over two decades (Tao et al., 2020). However, one of the main limiting factors for the widespread adoption of solar cells remains their low PV conversion efficiency. Despite rapid technological progress, insufficient conversion efficiency continues to be the major challenge faced by scientists and researchers in the field of photovoltaics (Wasfi, 2011). The efficiency of PV cells depends on numerous parameters such as material structure, ambient temperature, light spectrum, light intensity, and the distance between the light source and the cell (Wasfi, 2011 and Esen et al., 2017). Each of these factors plays a critical role in directly influencing the performance of solar cells and thus determining the overall system efficiency. In particular, the physical positioning of simulated light sources used in indoor laboratory conditions can significantly affect test outcomes. Halogen lamps are commonly employed in solar cell testing due to their ability to provide a spectrum close to that of sunlight and their stable light output at high temperatures (Kohraku et al., 2003). In this study, the effect of the distance between a halogen light source and a solar cell on the overall system efficiency is investigated experimentally (Wasfi, 2011).

Solar radiation in space undergoes energy loss due to interactions with atmospheric gases as it enters the Earth's atmosphere, resulting in a spectral and energetic difference compared to the original extraterrestrial radiation. Additionally, the intensity and characteristics of solar irradiance vary depending on geographic location, altitude, humidity, and ambient temperature (Guechi et al., 2007). The performance of PV cells is commonly evaluated in laboratory settings using artificial light sources calibrated to match the intensity of

sunlight. The type and duration of exposure to such indoor lighting can significantly influence the efficiency of solar cells (Kohraku et al., 2003).

Halogen lamps are among the prominent light sources used in solar cell performance testing due to their broad spectral output and similarity to natural sunlight. Their strong emission in the visible and infrared regions makes them ideal for simulating real-world solar conditions. Moreover, halogen lamps offer stable light output at high operating temperatures, are widely available, cost-effective, and easily controllable, making them a popular choice in experimental solar energy research (Esen et al., 2017).

Previous studies have extensively examined the impact of illumination intensity on PV cell performance. For instance, Ojo et al. identified a nonlinear decrease in short-circuit current (I_{sc}) and open-circuit voltage (V_{oc}) of amorphous silicon cells under varying light intensities (Ojo et al., 2019). Similarly, Ali et al. analyzed the effects of light intensity on fill factor (FF) and maximum power point (P_m), concluding that determining the optimal illumination level is crucial for enhancing overall system efficiency (Ali et al., 2019). Studies by Gueci et al. and Kohraku et al. also emphasize the critical influence of light source type and intensity on solar cell performance (Kohraku et al., 2003 and Guechi et al., 2007). In particular, the variation in light intensity with distance has been shown to produce an inverse relationship between the source-to-cell distance and PV efficiency.

This study aims to investigate the performance of an amorphous silicon solar cell at varying distances from a halogen lamp in an indoor setting. Halogen lamps, owing to their broad-spectrum and continuous light output, are well-suited for laboratory-scale solar simulation experiments. Within this

context, analyzing the I-V characteristics of the solar cell under illumination from a constant-power halogen lamp at different distances enables the identification of an optimal spatial configuration. This experimental approach offers a practical model for researchers developing low-cost PV analysis systems and contributes to a deeper understanding of the performance limitations of amorphous silicon cells. The findings may serve as a foundation for future advanced studies focused on optimizing amorphous solar cells through the integration of alternative light sources and optical systems.

Nomenclature	
PV	Photovoltaic
GWp	Global Warming Potential
I	Current
V	Voltage
I_{sc}	Short circuit current
V_{oc}	Open circuit voltage
P_m	Maximum power point
FF	Fill factor
η	Efficiency
V_m	Maximum voltage
I_m	Maximum current
P_{in}	Input power

Studies such as those by Fraas et al. and Tao et al. have developed various strategies aimed at improving the efficiency of solar cells (Fraas et al., 2010 and Tao et al., 2020). These investigations primarily focused on enhancing the structure of PV cells and the materials used in their fabrication. However, the findings presented in this study demonstrate that the distance of the light source has a direct impact on the efficiency of solar cells, thereby highlighting the significance of light source positioning in solar energy systems as an additional factor influencing overall performance. Studies conducted by Wasfi and Droz et al. have focused on other factors that influence the efficiency of solar cells (Wasfi, 2011 and Droz et al., 2008). Among these factors are parameters such as temperature, the

type of light source, and the distance between the light source and the PV cell.

This study further emphasizes the importance of light source distance by examining in greater detail the effects of halogen lamp positioning on the efficiency of solar cells. The obtained data, in alignment with previous studies involving halogen lamps, demonstrate that efficiency decreases as the distance increases, with maximum efficiency observed at an optimal distance.

In summary, while the results of this study are consistent with prior research, they offer a more specific investigation into the impact of light source distance on solar cell performance. Moreover, the findings confirm that these effects hold true across a broader range of light sources. These results reinforce the necessity of proper light source placement to maximize the efficiency of solar energy systems.

2. MATERIAL AND METHOD

I–V measurements are conducted either outdoors under natural sunlight or indoors in a controlled laboratory environment using a solar simulator (Droz et al., 2008). Under illumination, the current of the device is measured using a source meter with voltage sweeping capability. The current–voltage (I–V) curve of PV devices is crucial for determining characteristic parameters such as the short-circuit current (I_{sc}), open-circuit voltage (V_{oc}), and maximum power output (P_m). The current–voltage characteristic curve of a solar cell is presented in Figure 1.

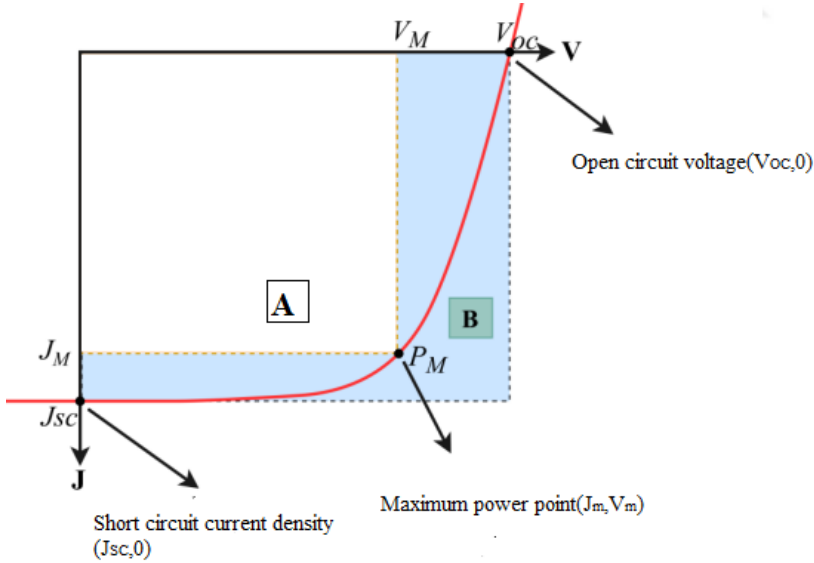


Figure 1. The I–V curve of the solar cell

The following terms are commonly used in the calculation of solar cell efficiency:

Short-Circuit Current (I_{sc}): This is the maximum current measured when no voltage is applied to the circuit.

Open-Circuit Voltage (V_{oc}): This is the maximum voltage measured when no current is flowing through the circuit, and it is widely cited in the literature (Lammert et al., 1997).

Maximum Power Point (P_m): The maximum output power of a cell is obtained by multiplying the current (I_m) and voltage (V_m) values at the point where the product of I and V is at its highest on the I-V curve. To determine the maximum values of I and V , the products of I and V are calculated at various points along the I-V curve, and the point where this product is maximized is identified. This point, where the power reaches its peak, is referred to as the Maximum Power Point (P_m).

$$P_m = V_m \times I_m \quad (1)$$

Fill Factor (FF): Since both V_{oc} and I_{sc} can be determined experimentally, the maximum power output can be expressed in terms of these quantities. The fill factor is a measure of the quality of the cell and is defined as the ratio of the maximum power to the product of the open-circuit voltage and the short-circuit current. It is given by the following relation (Cai et al., 2012).

$$FF = \frac{I_m \times V_m}{I_{sc} \times V_{oc}} \quad (2)$$

Efficiency (η): Efficiency is defined as the ratio of the maximum power output obtained from the cell to the power of the incident light on the cell. In other words, it is a measure of how effectively the cell converts light into electrical energy. The efficiency of a solar cell represents its overall performance (Singh et al., 2012).

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} \times 100 = FF \times \frac{I_{sc} \times V_{oc}}{P_{in}} \times 100 \quad (3)$$

In this study, the variation in the efficiency of a solar cell as a function of distance under halogen lamp illumination was investigated. The experiment was conducted in a laboratory environment without natural light exposure to prevent the solar cell from being affected by heat. The experimental setup used for the measurements consisted of a silicon solar cell with an area of 10.2 cm², a halogen lamp emitting white light with a power of 200 Watts and a voltage of 220 Volts, a variable resistor box, an ammeter, and a voltmeter. To measure the efficiency of the solar cell under halogen lamp illumination in a closed laboratory environment without ambient light, the experimental setup shown in Figure 2 was used to obtain the I-V characteristics. The variable resistor box and the ammeter were connected in series with the solar cell, while the voltmeter was connected in parallel.

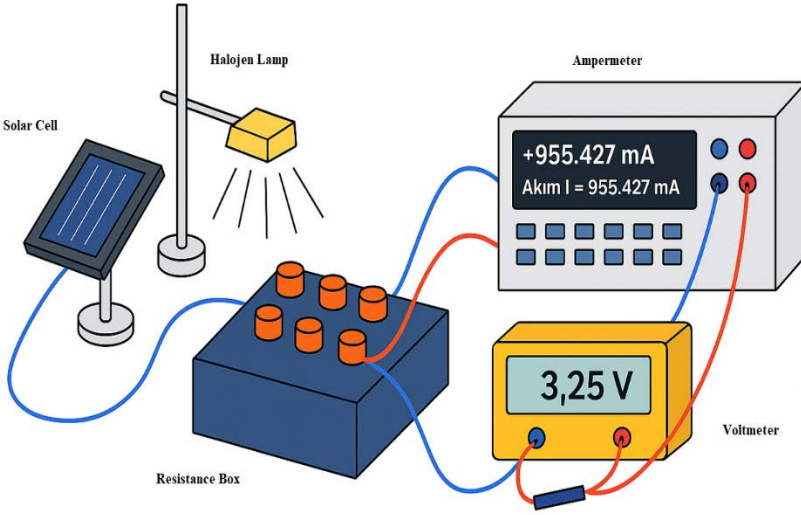


Figure 2. Experimental set up

Our experimental setup was placed on a flat surface. The halogen lamp was mounted on a suspension apparatus to allow adjustment at different distances, ensuring that the light was directed straight onto the solar cell. During the experiment, the distance between the solar cell and the halogen lamp was adjusted to approximately 12 cm, 17.5 cm, 21 cm, and 30 cm, respectively. Initially, a resistance was applied to the circuit in order to obtain the minimum current, and the corresponding maximum voltage was recorded. Similarly, the maximum current corresponding to the minimum voltage was measured using the ammeter. After obtaining the maximum current, the resistance was gradually increased until the maximum voltage was reached. Based on the data collected, the I-V characteristics were plotted, and the I-V curves for all distance values are presented in Figure 3. Subsequently, the light intensity under the halogen lamp was measured at different heights. The light intensity at a distance of 12 cm from the setup was measured to be 19.4 kLux. The maximum power point, fill factor, and power

conversion efficiency of the solar cell were calculated and are presented in Table 1.

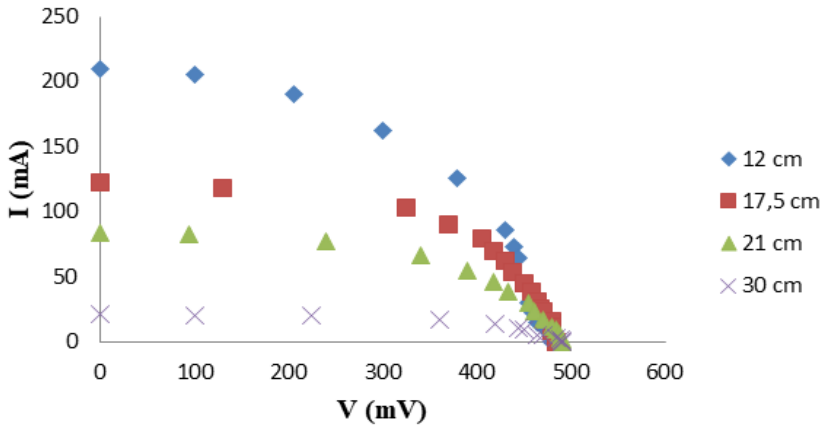


Figure 3. I-V curves at distances of 12 cm, 17.5 cm, 21 cm, and 30 cm

Table 1. Solar cell efficiency and fill factor at distances of 12, 17.5, 21, and 30 cm

Distance	I_{sc} (mA)	V_{oc} (mV)	FF	η (%)
12 cm	0,21	0,477	0,558	1,88
17,5 cm	0,121	0,484	0,590	1,84
21 cm	0,084	0,489	0,550	1,75
30 cm	0,021	0,490	0,590	0,89

Based on the obtained data, it was observed that as the distance between the light source and the solar cell increased, both the short-circuit current and the efficiency decreased

3. RESULTS AND DISCUSSION

The efficiency of a solar cell was calculated at various distances using a halogen lamp. The I-V characteristics of the solar cell were measured and recorded at distances of 12 cm, 17.5 cm, 21 cm, and 30 cm. At a distance of 12 cm, the short-

circuit current was measured as 0.21 mA with an efficiency of 1.88%. At 17.5 cm, the short-circuit current was 0.121 mA with an efficiency of 1.84%. At 21 cm, the short-circuit current was 0.084 mA and the efficiency was 1.75%. Finally, at 30 cm, the short-circuit current dropped to 0.021 mA.

These findings highlight the significance of distance as a factor that must be considered when testing photovoltaic systems in a laboratory environment. Moreover, the study experimentally demonstrates that the distance between the light source and the solar cell has a significant impact on the overall performance of the system. Similar studies in the literature have also shown a linear relationship between light intensity and photovoltaic efficiency (Guechi et al., 2012 and Droz et al., 2008). In particular, controlling the distance of the light source in indoor testing improves the reliability of the obtained data.

The heat emitted by halogen lamps, in addition to light intensity, can create thermal effects on the solar cell. Therefore, determining the optimal distance is important not only for maximizing efficiency but also for ensuring cell longevity and stability. The results of this study indicate that defining the distance of the lamp in simulated solar cell testing environments is essential for reliable comparisons and design optimization.

4. CONCLUSION AND SUGGESTIONS

In this study, the performance of a silicon-based solar cell under artificial lighting conditions was evaluated. The findings indicate that under low light intensity, the efficiency of solar cells is significantly lower compared to standard test conditions. This outcome demonstrates that the intensity and spectral characteristics of the illumination environment have a direct impact on the performance of solar cells.

Silicon solar cells typically achieve efficiencies between 15% and 22% under AM1.5 spectrum conditions with a light intensity of 1000 W/m². However, the results obtained in this study reflect the performance that may be encountered in real-world environments with low light levels. To obtain more accurate and comparable efficiency values, calibrated solar simulators that replicate the AM1.5G spectrum should be employed. Furthermore, the performance of silicon cells should be compared under various illumination intensities using different light sources such as LEDs, natural sunlight, and fluorescent lamps.

REFERENCES

- Ali, M. H., Moon, M. M. A., & Rahman, M. F. (2019). Study of ultra-thin CdTe/CdS heterostructure solar cell purveying open-circuit voltage ~ 1.2 V. *Materials Research Express*, 6(9), 095515.
- Cai, W., Chao, F., Long, T. J., Xiong, L. D., Fu, H. S., & Gang, X. Z. (2012). The influence of environment temperatures on single crystalline and polycrystalline silicon solar cell performance. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 55, 235–241.
- Droz, C., Roux, J., Rouelle, S. B., Valitutti, P., & Beljean, P. R. (2008). Mastering the spectrum in class A pulsed solar simulators. In 23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference.
- Esen, V., Sağlam, Ş., & Oral, B. (2017). Light sources of solar simulators for photovoltaic devices: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 77, 1240–1250.
- Fraas, L., & Partain, L. (2010). Solar cells: A brief history and introduction. In *Solar cells and their applications* (pp. 1–15).
- Green, M. A., Dunlop, E. D., Hohl-Ebinger, J., Yoshita, M., Kopidakis, N., & Hao, X. (2021). Solar cell efficiency tables (Version 58). *Progress in Photovoltaics*, 29(7).
- Guechi, A., & Chegaar, M. (2007). Effects of diffuse spectral illumination on microcrystalline solar cells. *Journal of Electron Devices*, 5, 116–121.
- Kohraku, S., & Kurokawa, K. (2003). New methods for solar cells measurement by LED solar simulator. In 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, Vol. 2, 1977–1980.

- Lammert, M. D., & Schwarts, R. J. (1997). The integrated back contact solar cell: A silicon solar cell for use in concentrated sunlight. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 24, 337–342.
- Ojo, A. A., Cranton, W. M., & Dharmadasa, I. M. (2019). Photovoltaic solar cells: Materials, concepts and devices. Next generation multilayer graded bandgap solar cells (pp. 17–40).
- Singh, P., & Ravindra, N. M. (2012). Temperature dependence of solar cell performance: An analysis. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 101, 36–45.
- Tao, M. (2008). Inorganic photovoltaic solar cells: Silicon and beyond. *The Electrochemical Society Interface*, 17(4), 30.
- Tao, M., Hamada, H., Druffel, T., Lee, J. J., & Rajeshwar, K. (2020). Research needs for photovoltaics in the 21st century. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 9(12), 125010.
- Wasfi, M. (2011). Solar energy and photovoltaic systems. *Journal of Selected Areas in Renewable and Sustainable Energy (JRSE)*, February Edition.

FLEXIBLE FUTURE: CHALCOGENIDE THIN FILMS FOR LIGHTWEIGHT AND BENDABLE ELECTRONICS

Tuğba BAYAZIT¹

1. INTRODUCTION

The historical evolution of electronics has long been driven by the demand for smaller, faster, and more efficient systems. In recent years, however, this progression has expanded beyond conventional expectations: electronic platforms are no longer confined to flat, rigid, and brittle substrates. Instead, they are rapidly transitioning into flexible, foldable, wearable, and even textile-integrated forms. This paradigm shift is redefining numerous sectors, including healthcare technologies, energy harvesting, consumer electronics, soft robotics, and aerospace applications.

Central to this transformation is the development of materials capable of sustaining functional stability under mechanical deformation while remaining compatible with lightweight, low-temperature, and large-area manufacturing. Among the emerging material families, chalcogenide thin films have attracted increasing attention due to their favorable optical and electronic characteristics, compatibility with diverse deposition strategies, and adaptability to unconventional substrates. These attributes make chalcogenide systems

¹ Dr., Central Research Laboratory, Recep Tayyip Erdogan University, 53100, Rize, Türkiye, ORCID: 0000-0002-8695-0298.

promising building blocks for next-generation flexible electronic architectures.

This chapter explores the emergence of chalcogenide thin films within the broader landscape of flexible electronics, examining their significance from historical, technological, and scientific perspectives. A comprehensive overview of their material behavior, fabrication strategies, and characterization approaches is provided, followed by an assessment of current applications, existing challenges, and future research directions.

2. PROPERTIES OF CHALCOGENIDE THIN FILMS

Traditional electronics have long been dominated by silicon-based platforms. Silicon remains indispensable due to its well-understood material properties and relatively high intrinsic carrier mobilities at room temperature approximately $1350 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ for electrons and $480 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ for holes as reported in standard semiconductor physics texts (Sze & Kwok, 2006). However, despite these advantages, silicon's inherent rigidity, brittleness, and reliance on high-temperature processing steps (often approaching $1000\text{-}1100^\circ\text{C}$) restrict its integration into flexible or deformable device architectures. Consequently, the rapid expansion of polymer-based substrates, biomedical micro-devices, implantable systems, and wearable electronics has prompted a reevaluation of the traditional silicon-centric design paradigm (Tallinen, Chung, Biggins, & Mahadevan, 2014; Trung & Lee, 2016).

In this context, research efforts have increasingly shifted toward materials that can be deposited at low temperatures while remaining thin, lightweight, and mechanically resilient. Organic semiconductors represent an important step in this direction; however, their limited environmental stability and modest

electronic performance still constrain their broader use in high-reliability systems (Bouachrine & Ayachi, 2025). Metal oxides offer advantages such as high transparency and mechanical robustness, yet they do not always provide optimal flexibility or tunable band-gap characteristics for next-generation device architectures (Yu, Marks, & Facchetti, 2016). At this point, chalcogenide semiconductors emerge as a compelling alternative, offering a balanced combination of device performance, manufacturability under mild processing conditions, and excellent mechanical flexibility (Phogat, Shreya, Jha, & Singh, 2024).

Chalcogenides have electronically advantageous properties such as strong covalent bonding, high dielectric constant, directional hybrid orbitals, and multiple crystal phase options. Band gaps narrow (0.9-1.1 eV) (Jafarov, st, & Nasirov, n.d.; Zhang, Zhong, & Tang, 2015), middle (1.2-1.6 eV) (Bayazıt, Olgar, Küçükömeroğlu, Bacaksız, & Tomakin, 2023) and wide (1.8-2.5 eV) (Whittles, 2017) they are suitable for optoelectronic applications operating in the visible and near-infrared regions.

One of the outstanding properties of these materials is their ability to largely maintain their electronic performance despite crystalline defects. Many chalcogenide semiconductors, even when structural defects occur, do not dramatically deteriorate their band structure, contributing to the preservation of device performance even in large-area, low-cost fabrications. The ability to transform between amorphous and crystalline phases facilitates device design on flexible platforms (Ahmad, 2015).

Furthermore, high optical absorption coefficients enable thin films to achieve sufficient photon-capturing capacity even with a thickness of only a few hundred nanometers, a critical

advantage for light weight and bendability (Amalathas & Alkaisi, 2019; Ghobadi, Ulusoy Ghobadi, Karadas, & Ozbay, 2019).

Temperature is a key parameter in the fabrication of flexible electronics. Common polymer substrates such as PET, PIG, and PEN generally exhibit thermal stability between 150–300 °C (Logothetidis, 2008; Zardetto, Brown, Reale, & Di Carlo, 2011). Chalcogenide thin films can be synthesized below this temperature range by many methods, making them ideal for flexible devices. Major fabrication methods include evaporation and thermal evaporation, RF/DC magnetron sputtering (Tanemura et al., 2003), spin coating, sol-gel (Kohoutek et al., 2007; Swami, Kumar, & Dutta, 2013) and ink-based printing techniques (Bernard et al., 2024), chemical bath deposition (CBD) (Kumar, Rao, & C, 2003; Shikha, Mehta, Sharma, & Chauhan, 2017), electrodeposition (Lopes et al., 2025), and spray pyrolysis (Balachandran, Thiyakarajan, & Sethuraman, 2025), a solution-based coating approach (Giri et al., 2018).

The common advantages of these techniques are their scalability, low manufacturing costs, and ability to be applied to large surface areas. Furthermore, their compatibility with roll-to-roll manufacturing technology significantly increases the potential for integrating these methods into industrial-scale flexible electronics.

A material's suitability for flexible electronics depends not only on its thickness but also on its ability to function under cyclic mechanical stress. Chalcogenide thin films are more resistant to cracking under bending due to their low Young's modulus, atomic layering, and shear planes in their crystalline structures (Shchurova & Savchenko, 2001).

The ability of a well-optimized chalcogenide thin film to largely maintain its electrical performance even after 1000 bending cycles makes it highly advantageous for wearable

sensors and electronic systems containing mobile components (Kim, 2025). In this context, mechanical characterizations evaluate parameters such as minimum bending radius, conductivity change after hundreds or even thousands of cycles, strain-induced defect formation, and film-substrate interface stability (Li et al., 2024).

The high detection efficiency of compounds such as ZnTe, Sb₂Se₃, and In₂Se₃ in flexible photodetectors in the visible-to-NIR range offers significant advantages for compact cameras, security systems, and health screening technologies (Kim, 2025). Their high absorption coefficients, coupled with the availability of very thin active layers, enable foldable solar cells to be evaluated as lightweight, portable, and durable energy solutions for emergency equipment, unmanned aerial vehicles, and space applications.

3. CHALCOGENIDE THIN FILMS FAMILY OVERVIEW

Chalcogenide semiconductors comprising sulphides (S), selenides (Se), and tellurides (Te) constitute one of the most versatile material families for next-generation flexible electronics. Their broad range of bandgaps, defect-tolerant bonding characteristics, high optical absorption coefficients, and compatibility with low-temperature processing make them ideal candidates for mechanically deformable devices (Adjogri & Meyer, 2021; Fu et al., 2019). Depending on composition, these materials can be engineered to operate across the visible, NIR, and mid-infrared spectral regions while maintaining stable electrical performance under bending or stretching.

In flexible platforms, chalcogenide thin films are utilized not only as active absorbers but also as channel layers, photodetector materials, thermoelectric modules, and memory-grade semiconductors. Their chemical tunability, particularly in

quaternary systems, allows precise control of optoelectronic properties without exceeding the thermal limits of polymeric substrates (Abdollahramezani et al., 2020).

A structural overview of the chalcogenide family frequently used in flexible electronics is presented in Table 1.

Tablo 1. A structural overview of the chalcogenide materials family

Group	Material	E _g Range (eV)	Crystal Structure	Key Relevance to Flexible Electronics
Sulfides (S-based)	SnS, SnS ₂ , MoS ₂ , WS ₂ , Sb ₂ S ₃	1.2-2.2	Layered (2D), orthorhombic, hexagonal	High flexibility, strong absorption, solution-processable; suitable for FETs, photodetectors
Selenides (Se-based)	Sb ₂ Se, SnSe, SnSe ₂ , In ₂ Se ₃ , Cu ₂ Se	1.0-1.9	Layered, defect-tolerant structures	Leading candidates for flexible PV, NIR photodetectors, thermoelectrics, memory devices
Tellurides (Te-based)	CdTe, Bi ₂ Te ₃ , PbTe, SnTe	0.15-1.5	Cubic/ rhombohedral	Thermoelectrics, IR detection, high bending durability in thin formats
Quaternary/ Multinary	CZTS, CZTS, CZTSSe, CBTS, CBTSe	1.0-2.1	Kesterite, orthorhombic	Bandgap-tunable absorber; compatible with low-temperature, large-area, roll-to-roll deposition

Flexible electronics demand semiconductors that can withstand mechanical deformation while maintaining stable optical and electronic characteristics. Chalcogenide thin films satisfy these requirements through their diverse bonding configurations, layered crystal structures, and tunable optoelectronic properties. Sulphides, selenides, and tellurides form the core of this family, each offering distinct advantages in terms of spectral activity, mechanical compliance, and device compatibility.

S-based materials such as SnS, MoS₂, and WS₂ provide wide spectral tunability and strong light–matter interaction,

making them attractive for ultrathin photodetectors and flexible transistor channels (Splendiani et al., 2010; Wang, Kalantar-Zadeh, Kis, Coleman, & Strano, 2012). Se-based compounds, including Sb_2Se_3 , SnSe , and In_2Se_3 , are widely used in photovoltaic and memory applications due to their defect-tolerant structures and ability to operate efficiently in the visible–NIR region (N. Madiha, Mohsin, Faryal, & Muhammad, 2019). Te-based systems such as Bi_2Te_3 and PbTe extend the functionality toward thermoelectric and mid-infrared platforms while preserving robust mechanical performance.

Multicomponent chalcogenides including kesterites (CZTS, CZTSe, CZTSSe) and Ba-based systems (CBTS, CBTSe) enable precision control over band structure and defect chemistry (Bayazit, Olgar, Küçükömeroğlu, Bacaksız, & Tomakin, 2019; Bayazit, Olgar, Tomakin, & Bacaksız, 2025). Their compatibility with low-temperature deposition and scalable coating processes further solidifies their role in roll-to-roll manufacturing of flexible photovoltaic and optoelectronic devices.

Together, these materials form a comprehensive and tunable platform capable of supporting the structural and functional demands of next-generation flexible electronics.

4. BASIC CHARACTERIZATION METHODS OF CHALCOGENIDE THIN FILMS

Understanding the performance of chalcogenide thin films used in flexible electronics is not limited to just electrical output; it requires a multi-dimensional analysis, from the material's crystal structure and surface topography to optical absorption behavior and mechanical strength. Therefore, the characterization process is carried out using a variety of complementary techniques. First, X-ray diffraction (XRD) and Raman spectroscopy are applied to determine the phase structure, degree

of crystallinity, and possible secondary phases. XRD patterns reveal the order and preferred orientations of the crystal lattice, while Raman analysis provides additional insights into chemical bonding and phase homogeneity by resolving lattice vibrational modes.

Scanning electron microscopy (SEM) and atomic force microscopy (AFM) are used to determine surface morphology, roughness distribution, and post-flexure cracking behavior. SEM provides high-resolution images of grain structure, film continuity, and fracture scars, while AFM precisely measures nanometer-scale surface topography and average roughness values.

UV-Vis spectroscopy is used to calculate the optical absorption edge and band gap of films. The optical band gap, obtained through Tauc analysis, plays a critical role in determining the suitability of the material for photodetector, solar cell, or optoelectronic applications.

One of the defining requirements of flexible electronics is the ability to maintain a stable electrical response even under mechanical deformation. Therefore, in-situ bending tests are performed, simultaneously monitoring the electrical resistance, carrier density, or photoresponse while the sample is bent to a specific radius. This allows for a direct understanding of the relationship between mechanical stress and electronic performance.

Finally, Hall measurements determine key electronic parameters such as carrier type, density, and mobility. These data are helpful in assessing whether the material meets device design expectations.

Using all these methods together and in a comparative manner provides a holistic understanding of the material-device-mechanical strength triangle. This allows the developed

chalcogenide thin films to be accurately evaluated for reliable performance not only in laboratory measurements but also in real-world usage scenarios.

5. CONCLUSION

The era when electronics were limited to flat, brittle, and rigid surfaces is over; today's technologies are moving towards devices that are flexible, portable, wearable, and able to interact with their environment. This transformation is not only a design evolution but also the result of new materials concepts. Chalcogenide thin films are at the core of this new electronics paradigm thanks to their tunable bandgaps, high optical absorption, defect tolerance, versatile manufacturing options, and low-temperature processability.

The reliable operation of these materials on flexible platforms is supported by the holistic use of advanced characterization approaches. Multidimensional analyses, ranging from crystal structure and surface morphology to optical behavior, mechanical strength, and electronic conduction, are critical for ensuring the robust performance of chalcogenide films not only in laboratory conditions but also in real-world environments

The accumulated scientific knowledge demonstrates that chalcogenide-based flexible electronics are beginning to mature across a wide range of applications, including health monitoring systems, photonic devices, portable energy solutions, smart textiles, and IoT-based platforms. This progress is consistent with the principles of sustainability and economical production; their low energy requirements, thin film structure, and common elemental composition offer strong environmental and industrial advantages.

However, long-term environmental stability, interface optimization, homogeneity in large-area production, and the establishment of standard mechanical testing protocols remain outstanding issues on the research agenda. In the near future, atomic layer engineering, hybrid heterostructures, encapsulation strategies, printing-based production techniques, and roll-to-roll processes are expected to be decisive in overcoming these obstacles.

Overall, chalcogenide thin films will not only meet current flexible electronics requirements but will also be a significant driving force in transforming this field into a scalable, sustainable, and technologically transformative ecosystem.

REFERENCES

- Abdollahramezani, S., Hemmatyar, O., Taghinejad, H., Krasnok, A., Kiarashinejad, Y., Zandehshahvar, M., Alu, Andrea, Adibi, A. (2020, May 1). Tunable nanophotonics enabled by chalcogenide phase-change materials. *Nanophotonics*, Vol. 9, pp. 1189–1241. De Gruyter Open Ltd. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2020-0039>
- Adjogri, S. J., & Meyer, E. L. (2021, December 1). Chalcogenide perovskites and perovskite-based chalcogenide as photoabsorbers: A study of their properties, and potential photovoltaic applications. *Materials*, Vol. 14. MDPI. <https://doi.org/10.3390/ma14247857>
- Ahmad, S. (2015). Device Applications of Band-Structure-Engineered Nanomaterials Current Status and Future Trend-Review. In *Int. J. Nanoelectronics and Materials* (Vol. 8). <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.2725.5286>
- Amalathas, A. P., & Alkaisi, M. M. (2019, September 1). Nanostructures for light trapping in thin film solar cells. *Micromachines*, Vol. 10. MDPI AG. <https://doi.org/10.3390/mi10090619>
- Balachandran, M., Thiyakarajan, C., & Sethuraman, K. (2025). Scrutinization of cobalt-doped CuGaS₂ thin films prepared by spray pyrolysis method for photodetection applications. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 36(5). <https://doi.org/10.1007/s10854-025-14425-7>
- Bayazıt, T., Olgar, M. A., Küçükömeroğlu, T., Bacaksız, E., & Tomakin, M. (2019). Growth and characterization of Cu₂SnS₃ (CTS), Cu₂SnSe₃ (CTSe), and Cu₂Sn(S,Se)₃ (CTSSe) thin films using dip-coated Cu–Sn precursor. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*,

30(13), 12612–12618. <https://doi.org/10.1007/s10854-019-01622-4>

- Bayazıt, T., Olgar, M. A., Küçükömeroğlu, T., Bacaksız, E., & Tomakin, M. (2023). Growth and characterization of CT(S,Se) thin films and Al/n-Si/p-CT(S,Se)/Mo heterojunction diode application employing a two-stage process. *Sensors and Actuators A: Physical*, 363. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2023.114679>
- Bayazıt, T., Olgar, M. A., Tomakin, M., & Bacaksız, E. (2025). Influence of Rapid Thermal Annealing Temperature on Cu₂BaSnSe₄ (CBTSe) Thin Films Prepared by Hybrid Spin Coating and Thermal Evaporation. *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters*. <https://doi.org/10.1002/pssr.202500197>
- Bernard, T., Malagutti, M. A., Lohani, K., D’Incau, M., Ataollahi, N., & Scardi, P. (2024). Environmentally friendly p-type CTS-based thin-film thermoelectric generator. *Journal of Materials Science*, 59(32), 15491–15503. <https://doi.org/10.1007/s10853-024-10104-w>
- Bouachrine, M., & Ayachi, S. (2025). Organic electronics: pioneering the future of sustainable and flexible technology. *RSC Advances*, 15(53), 45177–45195. <https://doi.org/10.1039/D5RA04656D>
- Fu, Y., Zhu, H., Chen, J., Hautzinger, M. P., Zhu, X. Y., & Jin, S. (2019, March 1). Metal halide perovskite nanostructures for optoelectronic applications and the study of physical properties. *Nature Reviews Materials*, Vol. 4, pp. 169–188. Nature Publishing Group. <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0080-9>
- Ghobadi, A., Ulusoy Ghobadi, T. G., Karadas, F., & Ozbay, E. (2019, July 18). Semiconductor Thin Film Based

- Metasurfaces and Metamaterials for Photovoltaic and Photoelectrochemical Water Splitting Applications. *Advanced Optical Materials*, Vol. 7. Wiley-VCH Verlag. <https://doi.org/10.1002/adom.201900028>
- Giri, A., Park, G., Yang, H., Pal, M., Kwak, J., & Jeong, U. (2018). Synthesis of 2D Metal Chalcogenide Thin Films through the Process Involving Solution-Phase Deposition. *Advanced Materials*, 30(25). <https://doi.org/10.1002/adma.201707577>
- Jafarov, M., Nasirov, E. F. & Jahangirova, S. A. (2014). Cu₂ZnSnS₄ thin film solar cells. *Physical Sciences*, 3(11). ISSN No 2277 – 8179.
- Kim, H. (2025, July 1). Recent Progress in Resistive Switching Memory Devices Covering Metal Oxides, Polymers, Bioinspired Materials, and Halide Perovskites. *Electronic Materials Letters*, Vol. 21, pp. 487–503. Korean Institute of Metals and Materials. <https://doi.org/10.1007/s13391-025-00579-3>
- Kohoutek, T., Wagner, T., Orava, J., Krbal, M., Fejfar, A., Mates, T., ... Frumar, M. (2007). Surface morphology of spin-coated As-S-Se chalcogenide thin films. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 353(13-15 SPEC. ISS.), 1437–1440. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2006.10.068>
- Tanusevski, A. (2003) Optical and photoelectric properties of SnS thin films prepared by chemical bath deposition. *Institute of Physics Publishing* (Vol. 18). <https://doi.org/10.1088/0268-1242/18/6/318>
- Li, S. Y., Li, J. T., Zhou, K., Yan, Y., Ding, G., Han, S. T., & Zhou, Y. (2024, July 1). In-sensor neuromorphic computing using perovskites and transition metal

- dichalcogenides. *JPhys Materials*, Vol. 7. Institute of Physics. <https://doi.org/10.1088/2515-7639/ad5251>
- Logothetidis, S. (2008, August 25). Flexible organic electronic devices: Materials, process and applications. *Materials Science and Engineering: B*, Vol. 152, pp. 96–104. Elsevier BV. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2008.06.009>
- Lopes, V., Monteiro, A., Mesquita, G., Sieira, B., Pinheiro, X. L., Perdomo, A., Silva, R. M. L., Correia, M. R., Teixeira, J. P., Salome, P. M. P. & Fernandes, P. A. (2025). Refining 2-step hydrothermal deposition of $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$ films for solar cell and photoelectrochemical device applications. *Journal of Materials Science*, 60(30), 12906–12923. <https://doi.org/10.1007/s10853-025-11176-y>
- Madiha, N., Mohsin, M., Faryal, M., & Muhammad, A. B. (2019). Simplistic development and characterization of S/Se based metal chalcogenides for energy applications. *16th International Bhurban Conference on Applied Science&Technology (IBCAST)*, 42–48. IEEE.
- Phogat, P., Shreya, S., Jha, R., & Singh, S. (2024). Chalcogenide Nanocomposites for Energy Materials. *Engineering and Technology Journal*, 09(07). <https://doi.org/10.47191/etj/v9i07.29>
- Sze, S. M. & Kwok, K. Ng. (2006). Physics of Semiconductor Devices. *Wiley Interscience. Third Edition*.
- Shchurova, T. N., & Savchenko, N. D. (2001). CORRELATION BETWEEN MECHANICAL PARAMETERS FOR AMORPHOUS CHALCOGENIDE FILMS. In *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* (Vol. 3).
- Shikha, D., Mehta, V., Sharma, J., & Chauhan, R. P. (2017). Effect of deposition temperature on structural, optical and electrical properties of nanocrystalline SnSe thin films.

Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 28(3), 2487–2493. <https://doi.org/10.1007/s10854-016-5822-5>

Splendiani, A., Sun, L., Zhang, Y., Li, T., Kim, J., Chim, C. Y., ... Wang, F. (2010). Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂. *Nano Letters*, 10(4), 1271–1275. <https://doi.org/10.1021/nl903868w>

Swami, S. K., Kumar, A., & Dutta, V. (2013). Deposition of kesterite Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) thin films by spin coating technique for solar cell application. *Energy Procedia*, 33, 198–202. Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.05.058>

Tallinen, T., Chung, J. Y., Biggins, J. S., & Mahadevan, L. (2014). Gyrfication from constrained cortical expansion. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 111(35), 12667–12672. <https://doi.org/10.1073/pnas.1406015111>

Tanemura, S., Koide, S., Senzaki, Y., Miao, L., Hirai, H., Mori, Y., ... Nabatova-Gabain, N. (2003). Fabrication and characterization of metal and semiconductor SmS thin films by rf/dc dual magnetron sputtering. *Applied Surface Science*, 212–213(SPEC.), 279–286. Elsevier. [https://doi.org/10.1016/S0169-4332\(03\)00113-2](https://doi.org/10.1016/S0169-4332(03)00113-2)

Trung, T. Q., & Lee, N. E. (2016). Flexible and Stretchable Physical Sensor Integrated Platforms for Wearable Human-Activity Monitoring and Personal Healthcare. *Advanced Materials*, 28(22), 4338–4372. <https://doi.org/10.1002/adma.201504244>

Wang, Q. H., Kalantar-Zadeh, K., Kis, A., Coleman, J. N., & Strano, M. S. (2012). Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides.

Nature Nanotechnology, Vol. 7, pp. 699–712. Nature Publishing Group.
<https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>

Whittles, T. J. (2017). *Electronic Characterisation Of Earth-Abundant Sulphides For Solar Photovoltaics*. Springer Cham. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-91665-1>

Yu, X., Marks, T. J., & Facchetti, A. (2016). Metal oxides for optoelectronic applications. *Nature Materials*, 15(4), 383–396. <https://doi.org/10.1038/nmat4599>

Zardetto, V., Brown, T. M., Reale, A., & Di Carlo, A. (2011). Substrates for flexible electronics: A practical investigation on the electrical, film flexibility, optical, temperature, and solvent resistance properties. *Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics*, 49(9), 638–648. <https://doi.org/10.1002/polb.22227>

Zhang, C., Zhong, J., & Tang, J. (2015, September 29). Cu₂ZnSn(S,Se)₄ thin film solar cells fabricated with benign solvents. *Frontiers of Optoelectronics*, Vol. 8, pp. 252–268. Higher Education Press.
<https://doi.org/10.1007/s12200-015-0539-2>

TALYS MODELLING OF ^{67}Ga PRODUCTION VIA $^{67}\text{Zn}(\text{p},\text{n})$ AND $^{68}\text{Zn}(\text{p},2\text{n})$ REACTIONS UP TO 30 MEV

Murat DAĞ¹

1. INTRODUCTION

Radiopharmaceuticals form the basis of modern nuclear medicine, enabling both non-invasive diagnosis and targeted radionuclide therapy by delivering radioactive nuclides to specific biological targets. Among these, Gallium-67 is a well-established SPECT radionuclide that is attracting interest as a potential therapeutic and theranostic agent, owing to its suitable half-life and Auger–electron emission characteristics. Gallium-67 (^{67}Ga) has a half-life of about 78 h and emits several γ -rays in the 90–300 keV range that are well matched to standard γ -camera systems. The 78.3 h half-life provides a practical time window for production, quality control, distribution, and imaging, while the photon energies near 93, 185, and 300 keV are compatible with conventional SPECT instrumentation. In addition, the emission of Auger and other low-energy electrons can enhance local dose deposition at the cellular level when ^{67}Ga is delivered to, or internalized within, tumor cells (Bailey, 2021).

Reliable nuclear data for cyclotron production of ^{67}Ga are essential for optimizing yield and radionuclidic purity in both clinical and preclinical settings. Among the available production routes, proton-induced reactions on enriched zinc targets,

¹ Asst. Prof. Dr., Kırşehir Ahi Evran University, Vocational School of Health Services, Department of Medical Services and Techniques, ORCID: 0000-0002-0503-6067.

particularly $^{67}\text{Zn}(p,n)^{67}\text{Ga}$ and $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$, play a central role. Early and subsequent studies have established these two channels as the principal reactions of interest for high-yield, high-purity ^{67}Ga production in the approximate 10–30 MeV proton energy range. In current practice, the majority of ^{67}Ga producers have adopted the $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$ reaction on highly enriched ^{68}Zn . However, some discrepancies persist among the available cross-section data sets, especially regarding the magnitude and position of the excitation-function maximum (IAEA, 2010; IAEA, 2011).

Nuclear reaction modeling codes provide a powerful complementary tool to interpret existing measurements, extrapolate to unmeasured energy regions, and support the design of new production schemes. In this context, TALYS is a widely used general-purpose nuclear reaction code that describes reactions from a few keV up to several hundred MeV within a single, consistent framework, combining optical-model calculations, Hauser–Feshbach compound-nucleus theory, level-density models, and pre-equilibrium formalisms. Previous studies (Noujaim, 1981; Aytekin et al., 2013) have employed previous version of TALYS and other related nuclear codes to calculate cross sections for the $^{67}\text{Zn}(p,n)^{67}\text{Ga}$ and $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$ reactions, often in the context of diagnostic radionuclide production, with mixed levels of agreement with experimental data.

In view of the theranostic interest in ^{67}Ga and the continuing need for consistent, high-quality nuclear data, the present work will focus on a systematic TALYS-based evaluation of the $^{67}\text{Zn}(p,n)^{67}\text{Ga}$ and $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$ reactions. These two reactions will be systematically investigated using the newest version of TALYS nuclear reaction code. The calculated cross sections with TALYS with different level density models (Constant Temperature Model - CTM, Back Shifted Fermi Gas Model - BSFGM, Generalized Superfluid Model - GSM and Microscopic Level Densities) will be compared the latest

experimental cross-section data from the literature for $^{67}\text{Zn}(p,n)^{67}\text{Ga}$ and $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$, as well as with evaluated nuclear data library (IAEA-MED). The ultimate objective of this study is to assess the predictive capability of TALYS for medical radionuclide production of ^{67}Ga using the $^{67}\text{Zn}(p,n)$ and $^{68}\text{Zn}(p,2n)$ reactions. More specifically, the main goals are: (i) to calculate excitation functions for ^{67}Ga production over a clinically relevant proton energy range, (ii) to benchmark these calculations against selected experimental data sets, and (iii) to analyze the impact of key nuclear-model parameters on the predicted cross sections, thereby assessing the stability of TALYS predictions for medical isotope production.

2. METHODS

TALYS is a general-purpose nuclear reaction code that models reactions induced by neutrons, photons, protons, deuterons, tritons, ^3He , and α particles on targets with mass number $A \geq 12$. It combines compound-nucleus and pre-equilibrium mechanisms, is continuously benchmarked against experimental data, and allows users to adjust model parameters to reproduce observables such as reaction and production cross sections in a relatively user-friendly way (Koning et al., 2008, Koning et al., 2021). In TALYS, the level density $\rho(E_x, J, \Pi)$ denotes the number of levels per MeV at excitation energy E_x for spin J and parity Π . The total level density is obtained by summing over all spins and parities,

$$\rho_{\text{tot}}(E_x) = \sum_{J, \Pi} \rho(E_x, J, \Pi) \quad (1)$$

A standard analytical reference is the Fermi-gas model (FGM), which gives the state density and the corresponding level density

$$\rho_F^{tot}(E_x) = \frac{\sqrt{\pi} \exp[2\sqrt{a}U]}{\sqrt{2\pi}\sigma 12 a^{1/4}U^{5/4}} = \frac{\omega_F^{tot}(E_x)}{\sqrt{2\pi}\sigma} \quad (2)$$

where Δ is an energy (pairing) shift, σ the spin cut-off parameter, and a the level-density parameter. Early formulations treated a as energy independent (Gilbert & Cameron, 1965; Dilg et al., 1973; Baba, 1970), whereas Ignatyuk et al. (Ignatyuk et al., 1975; Ignatyuk et al., 1993) introduced an explicit energy dependence to account for shell corrections (Eq. 3) with the asymptotic value (Eq. 4). Here δW is the shell-correction energy, γ a damping parameter, and α, β global constants chosen to reproduce average level-density systematics.

$$a = a(E_x) = \tilde{a} \left(1 + \delta W \frac{1 - \exp[\gamma U]}{U} \right) \quad (3)$$

$$\tilde{a} = \alpha A + \beta A^{2/3} \quad (4)$$

TALYS offers several level-density options, ranging from phenomenological approaches to models based on microscopic structure calculations. In this study, three phenomenological models are used: CTM, BSFGM and GSM along with Microscopic Level Densities. CTM (Gilbert & Cameron, 1965) assumes a constant nuclear temperature up to a matching energy E_M and a Fermi-gas form at higher excitation; BSFGM (Dilg et al., 1973; Demetriou and Goriely, 2001; Grossjean and Feldmeier, 1985) applies the Fermi-gas expression over the full energy range and treats the pairing (back-shift) as an adjustable parameter; GSM (Ignatyuk et al., 1975; Ignatyuk et al., 1993; Ignatyuk et al., 1979) incorporates Bardeen–Cooper–Schrieffer type pairing correlations and yields a smooth transition from a superfluid regime at low excitation energies to the Fermi-gas limit at high excitation energies.

3. RESULTS

For the $^{67}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{67}\text{Ga}$ reaction, as seen in Fig. 1, the EXFOR experimental data exhibit a single-peaked excitation function, with the cross section rising steeply above threshold and reaching $\approx 0.6\text{--}0.7$ b around 10–12 MeV before gradually decreasing towards 30 MeV. The various data sets are generally consistent within their uncertainties, aside from the 1997 Hermanne points, which lie systematically higher in the peak region. TALYS calculations with different level-density models reproduce the overall shape but differ in normalization and peak width. CTM systematically underestimates the maximum and high-energy tail, while BFGSM and GSM provide only a partial improvement. Quantitatively, χ^2 tests performed against all visible experimental points ($N = 176$) show that the Microscopic Level Density options perform best. Model 4 yields the lowest χ^2 ($\chi^2 = 1.435$) and highest R^2 (0.839), followed by microscopic Models 6 and 5 ($\chi^2 = 1.538$ and 1.590). In contrast, CTM and GSM exhibit the largest χ^2 values (2.285 and 2.103), indicating the weakest agreement. Thus, for $^{67}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{67}\text{Ga}$, the TALYS calculation employing Microscopic Level Density - Model 4 provides the most accurate description of the available EXFOR data and is therefore the preferred option for production-yield estimations.

For the $^{68}\text{Zn}(\text{p},2\text{n})^{67}\text{Ga}$ reaction, as seen in Fig. 2, the EXFOR data sets show a common behaviour: the cross section rises sharply above threshold at $\approx 12\text{--}13$ MeV, reaches a broad maximum of about 0.7–0.8 b around 19–21 MeV, and then decreases gradually towards higher energies. The different measurements are largely consistent within their error bars, with only moderate scatter in the peak region. TALYS calculations with the various level-density models reproduce the overall shape but differ in normalization. The phenomenological models (CTM, BFM and especially GSM) systematically underestimate the peak

and the high-energy tail. A χ^2 analysis of all experimental points ($N = 125$) shows that Microscopic Level Density options give the best agreement: Microscopic Level Density Model 4 yields the lowest χ^2 (0.966) and the highest R^2 (0.818), with Microscopic Level Density Model 6 only slightly worse ($\chi^2 = 1.018$, $R^2 = 0.808$). Thus, for $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$, TALYS with Microscopic Level Density Model 4 provides the most accurate description of the experimental excitation function.

Overall, the two reaction channels convey the same message: among the TALYS level-density models, the Microscopic Level Density implementations, especially Model 4, yield the most consistent description of ^{67}Ga production cross sections. The corresponding excitation functions provide a sound basis for defining practical energy windows and target-enrichment conditions in cyclotron applications. The remaining discrepancies with a few experimental data sets nevertheless indicate that further refinement of the nuclear-structure input and additional high-precision measurements would still be beneficial.

REFERENCES

- Aytekin, H., Artun, O., & Baldık, R. (2013). Cross-section calculations of proton induced (p,n) and (p,2n) reactions for production of diagnostic ^{67}Ga , ^{81}Rb , ^{111}In , ^{123}I , ^{123}Cs and ^{123}Xe radioisotopes. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 298, 95–103.
- Baba, H. (1970). A shell-model nuclear level density. *Nuclear Physics A*, 159, 625–634.
- Bailey, D. L., Sabanathan, D., Aslani, A., Campbell, D. H., Walsh, B. J., & Lengkeek, N. A. (2021). RetroSPECT: Gallium-67 as a Long-Lived Imaging Agent for Theranostics. *Asia Oceania journal of nuclear medicine & biology*, 9(1), 1–8.
- Blaser, J.-P., Boehm, F., Marmier, P., & Peaslee, D. C. (1951). Fonctions d'excitation de la réaction (p,n). I. *Helvetica Physica Acta*, 24, 3–38.
- Braccini, S., Carzaniga, T. S., Dellepiane, G., Grundler, P. V., Scampoli, P., van der Meulen, N. P., & Wüthrich, D. (2022). Optimization of ^{68}Ga production at an 18 MeV medical cyclotron with solid targets by means of cross-section measurement of ^{66}Ga , ^{67}Ga and ^{68}Ga . *Applied Radiation and Isotopes*, 186, 110252.
- Demetriou, P., & Goriely, S. (2001). Microscopic nuclear level densities for practical applications. *Nuclear Physics A*, 695, 95–108.
- Dilg, W., Schantl, W., Vonach, H., & Uhl, M. (1973). Level density parameters for the back-shifted Fermi gas model in the mass range $40 \leq A \leq 250$. *Nuclear Physics A*, 217, 269–298.

- Gilbert, A., & Cameron, A. G. W. (1965). A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Canadian Journal of Physics*, 43(8), 1446–1496.
- Grossjean, M. K., & Feldmeier, H. (1985). Level density of a Fermi gas with pairing interactions. *Nuclear Physics A*, 444, 113–132.
- Hermanne, A. (1997). Evaluated cross section and thick target yield data of Zn + p processes for practical applications [Unpublished data; private communication]. Brussels, Belgium.
- Hermanne, A., Szelecsényi, F., Sonck, M., Takács, S., Tárkányi, F., & Van den Winkel, P. (1999). New cross section data on $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$ and $\text{natZn}(p,xn)^{67}\text{Ga}$ nuclear reactions for the development of a reference data base. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 240(2), 623–630.
- IAEA. (2010). Nuclear data for the production of therapeutic radionuclides. Vienna: International Atomic Energy Agency.
- IAEA. (2011). Charged particle cross-section database for medical radioisotope production: Diagnostic radioisotopes and monitor reactions. Vienna: International Atomic Energy Agency.
- Ignatyuk, A. V., Smirenkin, G. N., & Tishin, A. S. (1975). Phenomenological description of energy dependence of the level density parameter. *Yadernaya Fizika*, 21, 485–495.
- Ignatyuk, A. V., Istekov, K. K., & Smirenkin, G. N. (1979). Role of collective effects in the systematics of nuclear level densities. *Soviet Journal of Nuclear Physics*, 29(4), 875–883.

- Ignatyuk, A. V., Weil, J. L., Raman, S., & Kahane, S. (1993). Density of discrete levels in ^{116}Sn . *Physical Review C*, 47(4), 1504–1510.
- Johnson, C. H., Trail, C. C., & Galonsky, A. (1964). Thresholds for (p,n) reactions on 26 intermediate-weight nuclei. *Physical Review*, 136(6B), B1719–B1739.
- Koning, A. J., Hilaire, S., & Goriely, S. (2008). Global and local level density models. *Nuclear Physics A*, 810, 13–76.
- Koning, A., Hilaire, S., & Goriely, S. (2021). TALYS-1.96/2.0: Simulation of nuclear reactions (User manual). Vienna, Austria: IAEA.
- Levkovskij, V. N. (1991). Activation cross sections for medium mass nuclei ($A = 40\text{--}100$) by medium energy protons and alpha particles ($E = 10\text{--}50$ MeV). Moscow, Russia: Inter-Vesi.
- Little, F. E., & Lagunas-Solar, M. C. (1983). Cyclotron production of ^{67}Ga : Cross sections and thick-target yields for the $^{67}\text{Zn}(p,n)$ and $^{68}\text{Zn}(p,2n)$ reactions. *Applied Radiation and Isotopes*, 34(3), 631–637.
- Noujaim, A. A. (1981). Gallium-67 and related elements. *International Journal of Nuclear Medicine and Biology*, 8(4), 215–388.
- Szelecsényi, F., Boothe, T. E., Takács, S., Tárkányi, F., & Tavano, E. (1998). Evaluated cross section and thick target yield data bases of $\text{Zn} + p$ processes for practical applications. *Applied Radiation and Isotopes*, 49(8), 1005–1032.
- Szelecsényi, F., Kovács, Z., Nagatsu, K., Fukumura, K., Suzuki, K., & Mukai, K. (2012). Investigation of direct production of ^{68}Ga with low energy multiparticle accelerator. *Radiochimica Acta*, 100(1), 5–11.

Tárkányi, F., Szelecsényi, F., Kovács, Z., & Sudár, S. (1990).
Excitation functions of proton induced nuclear reactions
on enriched ^{66}Zn , ^{67}Zn and ^{68}Zn : Production of ^{67}Ga
and ^{66}Ga . *Radiochimica Acta*, 50(1–2), 19–26.

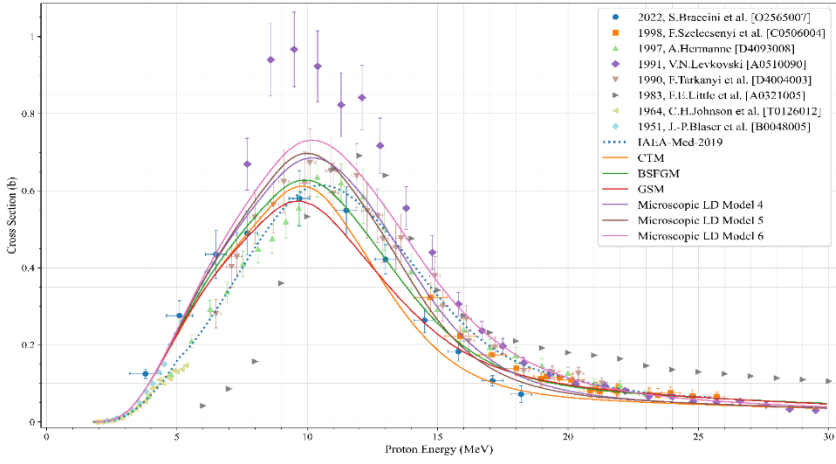


Fig. 1. Calculated Cross Section of the $^{67}\text{Zn}(p,n)^{67}\text{Ga}$ reaction compared with the available experimental data from EXFOR and the IAEA-MED Nuclear Data Library.

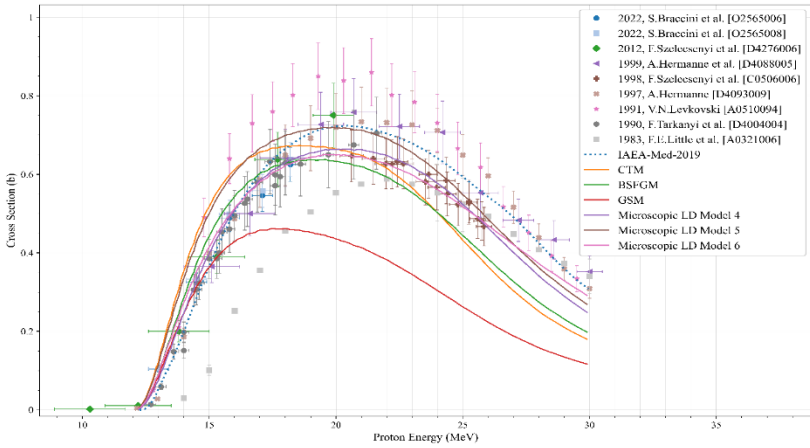


Fig. 2. Calculated Cross Section of the $^{68}\text{Zn}(p,2n)^{67}\text{Ga}$ reaction compared with the available experimental data from EXFOR and the IAEA-MED Nuclear Data Library.

COMPUTATION OF ^{111}In PRODUCTION CROSS SECTIONS VIA $^{111}\text{Cd}(\text{p},\text{n})$ AND $^{112}\text{Cd}(\text{p},2\text{n})$ REACTIONS WITH TALYS UP TO 30 MEV

Murat DAĞ¹

1. INTRODUCTION

The cyclotron production of radionuclides for diagnostic nuclear medicine relies on accurate nuclear data and a robust theoretical framework capable of interpreting the extensive body of experimental measurements accumulated over several decades. Reliable cross-section information underpins the production of medically essential radionuclides employed in diagnostic imaging and radiopharmaceutical development. Among established SPECT isotopes, Indium-111 (^{111}In) maintains long-standing clinical significance due to its 67-hour physical half-life and its characteristic γ -ray emissions at 171 and 245 keV, energies that are well suited to medium-energy collimation and facilitate high-quality delayed imaging. Clinically, ^{111}In is employed in detecting abdominal and soft-tissue infections, evaluating inflammatory processes, and assessing organ-transplant acceptance through antibody or leukocyte labelling. In combination with ^{67}Ga , it supports the identification of soft-tissue and bone-marrow infections, as well as the evaluation of hepatic and renal dysfunctions and organ-specific tracer uptake. Additional applications include monitoring white-blood-cell migration, conducting cell-based dosimetry studies, performing

¹ Asst. Prof. Dr., Kırşehir Ahi Evran University, Vocational School of Health Services, Department of Medical Services and Techniques, ORCID: 0000-0002-0503-6067.

myocardial imaging, assessing leukaemia risk, and visualizing selected tumours. These diverse and clinically important uses highlight the continuing need for reliable, high-purity cyclotron production routes (Tarkanyi et al., 1994; Otozai et al., 1966).

Two principal pathways support the cyclotron production of ^{111}In : the $^{111}\text{Cd}(p,n)^{111}\text{In}$ reaction, which is effective at proton energies below approximately 15 MeV and is therefore compatible with low- to medium-energy cyclotron facilities, and the $^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$ reaction, which becomes favourable at higher energies and can provide greater thick-target yields when enriched ^{112}Cd targets are available. Experimental cross-section data for these reactions have been reported in multiple studies, though the published measurements exhibit variations in threshold behaviour, peak positions of excitation functions, and absolute cross-section normalizations. These discrepancies highlight the need for complementary theoretical modelling to ensure reliable nuclear-data evaluations (IAEA, 2010; IAEA, 2011).

The TALYS nuclear-reaction code provides a coherent and systematic framework for simulating proton-induced reactions on medium-mass nuclei, integrating global optical potentials with pre-equilibrium and Hauser–Feshbach compound-nucleus formalisms. Of particular relevance to ^{111}In production, neutron-emission competition in the compound nuclei $^{111}\text{In}^*$ and $^{112}\text{In}^*$ is strongly modulated by the nuclear level density, making the choice of level-density prescription—whether phenomenological (Constant Temperature Model - CTM, Back Shifted Fermi Gas Model - BSFGM, Generalized Superfluid Model – GSM) models or Microscopic Level Density to the resulting excitation-function predictions.

The present study aims to investigate the theoretical behaviour of the $^{111}\text{Cd}(p,n)$ and $^{112}\text{Cd}(p,2n)$ reaction channels

across the 5–30 MeV energy range relevant to medical cyclotron operation. Using TALYS with multiple level-density models, the calculated excitation functions are systematically compared with the most recent experimental cross-section datasets and with the evaluated IAEA-MED nuclear-data library. The objectives are (i) to generate consistent excitation-function predictions for ^{111}In production across clinically relevant energies, (ii) to benchmark these calculations against selected experimental measurements, and (iii) to evaluate the sensitivity of predicted cross sections to nuclear-model inputs, thereby assessing the robustness and reliability of TALYS-based simulations for medical-isotope production.

2. METHODS

TALYS is a general-purpose nuclear reaction code that models reactions induced by neutrons, photons, protons, deuterons, tritons, ^3He , and α particles on targets with mass number $A \geq 12$. It combines compound-nucleus and pre-equilibrium mechanisms, is continuously benchmarked against experimental data, and allows users to adjust model parameters to reproduce observables such as reaction and production cross sections in a relatively user-friendly way (Koning et al., 2008, Koning et al., 2021). In TALYS, the level density $\rho(E_x, J, \Pi)$ denotes the number of levels per MeV at excitation energy E_x for spin J and parity Π . The total level density is obtained by summing over all spins and parities,

$$\rho_{\text{tot}}(E_x) = \sum_{J, \Pi} \rho(E_x, J, \Pi) \quad (1)$$

A standard analytical reference is the Fermi-gas model (FGM), which gives the state density and the corresponding level density

$$\rho_F^{tot}(E_x) = \frac{\sqrt{\pi} \exp[2\sqrt{a}U]}{\sqrt{2\pi}\sigma 12 a^{1/4}U^{5/4}} = \frac{\omega_F^{tot}(E_x)}{\sqrt{2\pi}\sigma} \quad (2)$$

where Δ is an energy (pairing) shift, σ the spin cut-off parameter, and a the level-density parameter. Early formulations treated a as energy independent (Gilbert & Cameron, 1965; Dilg et al., 1973; Baba, 1970), whereas Ignatyuk et al. (Ignatyuk et al., 1975; Ignatyuk et al., 1993) introduced an explicit energy dependence to account for shell corrections (Eq. 3) with the asymptotic value (Eq. 4). Here δW is the shell-correction energy, γ a damping parameter, and α, β global constants chosen to reproduce average level-density systematics.

$$a = a(E_x) = \tilde{a} \left(1 + \delta W \frac{1 - \exp[\gamma U]}{U} \right) \quad (3)$$

$$\tilde{a} = \alpha A + \beta A^{2/3} \quad (4)$$

TALYS offers several level-density options, ranging from phenomenological approaches to models based on microscopic structure calculations. In this study, three phenomenological models are used: CTM, BSFGM and GSM along with Microscopic Level Densities. CTM (Gilbert & Cameron, 1965) assumes a constant nuclear temperature up to a matching energy E_M and a Fermi-gas form at higher excitation; BSFGM (Dilg et al., 1973; Demetriou & Goriely, 2001; Grossjean and Feldmeier, 1985) applies the Fermi-gas expression over the full energy range and treats the pairing (back-shift) as an adjustable parameter; GSM (Ignatyuk et al., 1975; Ignatyuk et al., 1993; Ignatyuk et al., 1979) incorporates Bardeen–Cooper–Schrieffer type pairing correlations and yields a smooth transition from a superfluid regime at low excitation energies to the Fermi-gas limit at high excitation energies.

3. RESULTS

For the $^{111}\text{Cd}(\text{p},\text{n})^{111}\text{In}$ reaction, the excitation function shown in Fig. 1 indicates that all experimental data sets cluster around a single, well-defined maximum of about 0.75–0.80 b at ≈ 12 MeV, with a rapid rise from threshold and a smooth fall-off towards higher energies. TALYS calculations with the different level-density models reproduce this overall behaviour, but clear differences appear in the peak region and in the high-energy tail. Among the phenomenological options, the BSFGM performs best, whereas CTM and GSM tend to underpredict the cross section on the falling slope. The Microscopic Level-Density Models (Models 4–6) generally improve the agreement, with Model 4 providing the lowest χ^2 ($\chi^2 = 0.129$, $R^2 = 0.968$) and Model 5 yielding a very similar description ($\chi^2 = 0.135$, $R^2 = 0.967$); Model 6, by contrast, overestimates the high-energy tail and exhibits the poorest statistics ($\chi^2 = 0.398$, $R^2 = 0.902$). These findings indicate that, for $^{111}\text{Cd}(\text{p},\text{n})^{111}\text{In}$ in the 5–30 MeV range, TALYS calculations based on Microscopic Level-Density Model 4 (and, secondarily, Model 5) offer the most reliable representation of the available cross-section data and are therefore the preferred choice for quantitative yield estimations.

For the $^{112}\text{Cd}(\text{p},2\text{n})^{111}\text{In}$ reaction, the excitation function in Fig. 2 shows the expected behaviour for a threshold (p,2n) channel: the cross section increases steeply above ≈ 11 –12 MeV, reaches a broad maximum of about 1.0 b around 18–22 MeV, and then decreases smoothly towards 30 MeV. The different experimental data sets are mutually consistent within their uncertainties, defining a relatively narrow band in the peak and falling-slope regions. TALYS calculations with all six level-density models reproduce the global shape, but GSM clearly underestimates the cross section beyond ≈ 20 MeV, while Model

6 tends to overpredict the high-energy tail. When all available experimental series are included in the fit ($N = 68$), the χ^2 and R^2 values indicate a slight preference for CTM. Restricting the comparison to the clinically relevant 5–30 MeV interval and to the selected EXFOR sets ($N = 40$ – excluding the experimental data of Hermanne et al., 2014) leads to a lower χ^2 and higher R^2 for the Microscopic Level Density Model 4 ($\chi^2 = 0.290$, $R^2 = 0.914$), suggesting that this option offers the most robust description of $^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$ in the energy window of practical interest for medical cyclotrons.

Overall, the Microscopic Level Density, especially Model 4, provide the most consistent and accurate representation of the ^{111}In production cross sections within the 5–30 MeV cyclotron energy range. Compared with phenomenological models, Microscopic Level Density achieve lower χ^2 values and higher R^2 , making them the preferred choice for defining practical irradiation conditions, including proton-energy windows and target-enrichment strategies. Remaining discrepancies with certain experimental datasets indicate that further refinement of nuclear-structure inputs, together with new high-precision measurements, would enhance the predictive reliability of theoretical calculations for medical-isotope production.

REFERENCES

- Baba, H. (1970). A shell-model nuclear level density. *Nuclear Physics A*, 159, 625–634.
- Blaser, J.-P., Boehm, F., Marmier, P., & Peaslee, D. C. (1951). Excitation functions of the (p,n) reaction; I. *Helvetica Physica Acta*, 24, 3–38.
- Blosser, H. G., & Handley, T. H. (1955). Survey of (p,n) reactions at 12 MeV. *Physical Review*, 100, 1340–1346. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.1340>
- Demetriou, P., & Goriely, S. (2001). Microscopic nuclear level densities for practical applications. *Nuclear Physics A*, 695, 95–108.
- Dilg, W., Schantl, W., Vonach, H., & Uhl, M. (1973). Level density parameters for the back-shifted Fermi gas model in the mass range $40 \leq A \leq 250$. *Nuclear Physics A*, 217, 269–298.
- Gilbert, A., & Cameron, A. G. W. (1965). A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Canadian Journal of Physics*, 43(8), 1446–1496.
- Hermanne, A., Adam-Rebeles, R., Van den Winkel, P., Tarkanyi, F., & Takacs, S. (2014). Production of ^{111}In and $^{114\text{m}}\text{In}$ by proton induced reactions: An update on excitation functions, chemical separation–purification and recovery of target material. *Radiochimica Acta*, 102, 1111–1121. <https://doi.org/10.1515/ract-2013-2233>
- IAEA. (2010). Nuclear data for the production of therapeutic radionuclides. Vienna: International Atomic Energy Agency.
- IAEA. (2011). Charged particle cross-section database for medical radioisotope production: Diagnostic

radioisotopes and monitor reactions. Vienna: International Atomic Energy Agency.

- Ignatyuk, A. V., Smirenkin, G. N., & Tishin, A. S. (1975). Phenomenological description of energy dependence of the level density parameter. *Yadernaya Fizika*, 21, 485–495.
- Ignatyuk, A. V., Istekov, K. K., & Smirenkin, G. N. (1979). Role of collective effects in the systematics of nuclear level densities. *Soviet Journal of Nuclear Physics*, 29(4), 875–883.
- Ignatyuk, A. V., Weil, J. L., Raman, S., & Kahane, S. (1993). Density of discrete levels in ^{116}Sn . *Physical Review C*, 47(4), 1504–1510.
- Koning, A. J., Hilaire, S., & Goriely, S. (2008). Global and local level density models. *Nuclear Physics A*, 810, 13–76.
- Koning, A., Hilaire, S., & Goriely, S. (2021). TALYS-1.96/2.0: Simulation of nuclear reactions (User manual). Vienna, Austria: IAEA.
- Marten, M., Schuring, A., Scobel, W., & Probst, H. J. (1985). Preequilibrium neutron emission in $^{109}\text{Ag}(^3\text{He}, \text{xn})$ and $^{111}\text{Cd}(\text{p}, \text{xn})$ reactions. *Zeitschrift für Physik A*, 322, 93–105. <https://doi.org/10.1007/BF01412021>
- Nieckarz, W. J., & Caretto, A. A. (1969). Production of ^{111}In and $^{114\text{m}}\text{In}$ from the separated isotopes of cadmium using 70- to 400-MeV protons. *Physical Review*, 178, 1887–1898. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.178.1887>
- Nieckarz, W. J., Jr., & Caretto, A. A., Jr. (1970). Nuclear structure effects in $(\text{p}, 2 \text{ nucleon})$ reactions on the separated isotopes of cadmium at 400 MeV. *Physical Review C*, 2, 1917–1925. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.2.1917>

- Otozai, K., Kume, S., Mito, A., Okamura, H., Tsujino, R., Kanchiku, Y., Katoh, T., & Gotoh, H. (1966). Excitation functions for the reactions induced by protons on Cd up to 37 MeV. *Nuclear Physics*, 80, 335–348. [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(66\)90093-9](https://doi.org/10.1016/0029-5582(66)90093-9)
- Skakun, E. A., Iordachescu, A., Lutsik, V. A., Rakivnenko, Y. N., & Romany, I. A. (1979). Excitation functions and isomeric ratios for $^{111}\text{Cd}(p,n)^{113}\text{m,g}$ and $^{113}\text{Cd}(p,n)^{113}\text{m}$ reactions. In 29th Conference on Nuclear Spectroscopy and Nuclear Structure, Riga (p. 290). (Conference proceeding; NSR code 1979SKZZ)
- Skakun, E. A., Klyucharev, A. P., Rakivnenko, Y. N., & Romanii, I. A. (1975). Excitation functions of (p,n)- and (p,2n)-reactions on cadmium isotopes. *Izvestiya Rossiiskoi Akademii Nauk, Seriya Fizicheskaya*, 39, 24–30. (Also published in *Bulletin of the Russian Academy of Sciences – Physics*, 39(1), 18–23.)
- Tarkanyi, F., Szelecsenyi, F., Kopecky, P., Molnar, T., Ando, L., Mikecz, P., Toth, G., & Rydl, A. (1994). Cross sections of proton induced nuclear reactions on enriched ^{111}Cd and ^{112}Cd for the production of ^{111}In for use in nuclear medicine. *Applied Radiation and Isotopes*, 45, 239–253. [https://doi.org/10.1016/0969-8043\(94\)90018-3](https://doi.org/10.1016/0969-8043(94)90018-3)
- Wing, J., & Huizenga, J. R. (1962). (p,n) cross sections of V^{51} , Cr^{52} , Cu^{63} , Cu^{65} , Ag^{107} , Ag^{109} , Cd^{111} , Cd^{114} , and La^{139} from 5 to 10.5 MeV. *Physical Review*, 128, 280–292. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.128.280>

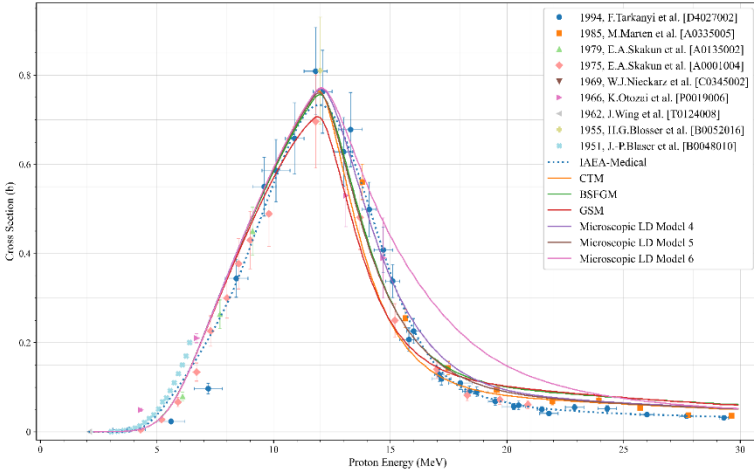


Fig. 1. Calculated Cross Section of the $^{111}\text{Cd}(p,n)^{111}\text{In}$ reaction compared with the available experimental data from EXFOR and the IAEA-MED Nuclear Data Library.

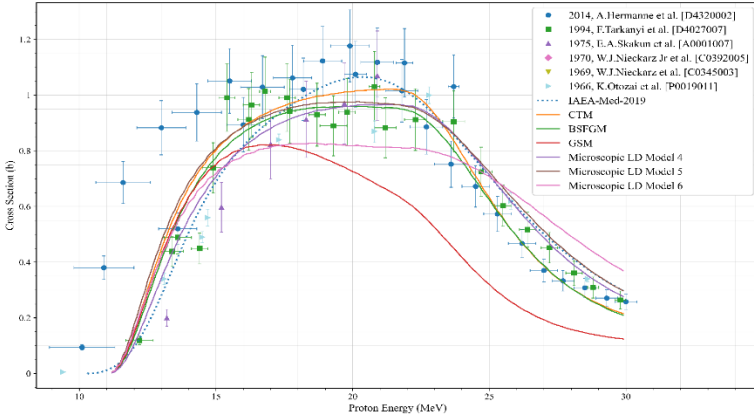


Fig. 2. Calculated Cross Section of the $^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$ reaction compared with the available experimental data from EXFOR and the IAEA-MED Nuclear Data Library.

BORON MINE AND ITS STRATEGIC IMPORTANCE

Özge ERDEM¹

Sümeysra CAN²

1. INTRODUCTION

In today's world, the rapidly growing population and the resulting rising energy demand are increasing the strategic importance of natural resources daily. Boron (B), a mineral with broad potential for use in technology, industry, and energy, stands out as a promising and globally strategic mineral in meeting these needs.

Boron, located in Group 3A of the periodic table, is a semiconductor with atomic number 5, exhibiting properties intermediate between those of a metal and a nonmetal. It is a brittle and lustrous metalloid in crystalline form and a brown powder in amorphous form. Boron, which does not occur in free form in nature, is usually found as boron minerals. The most common boron minerals are tincal (borax), colemanite, and ulexite. These minerals are used to produce various boron compounds (e.g., boric acid and borax).

Türkiye, which has approximately 73% of the world's boron reserves, is a strategic actor not only in boron production

¹ Assoc. Prof., Bayburt University, Vocational School of Health Services, Department of Medical Services and Techniques, Opticianry Program, ORCID: 0000-0003-4542-941X.

² Assist. Prof., Bayburt University, Vocational School of Health Services, Department of Medical Services and Techniques, Opticianry Program, ORCID: 0000-0002-2471-5786.

but also in the global boron market. Boron deposits concentrated in the provinces of Eskişehir, Kütahya, Balıkesir and Bursa in our country are operated by the state-controlled Eti Maden and offered to the world market.

This section examines the fundamental properties of boron and its uses in sectors such as energy, industry, and technology. Furthermore, considering boron's strategic role, boron potential in Türkiye and globally is evaluated in terms of production, use, and consumption dynamics.

2. BORON

Boron (B) is a low-density, solid chemical element with atomic number 5 and is classified as a semimetal (metalloid, gray area in Fig. 1) in the periodic table. Boron exhibits properties intermediate between those of metals and nonmetals. As can be seen from the periodic table in Fig. 1, boron is the first and lightest element of Group 3A (boron (B), aluminum (Al), gallium (Ga), indium (n), and thallium (Tl)), also known as the "boron group" or "earth metals group."

ACS
Chemistry for Life®

PERIODIC TABLE OF ELEMENTS

GROUP 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

PERIOD 1 2 3 4 5 6 7

Legend:

- Alkali Metals
- Alkaline Earth Metals
- Transition Metals
- Other Metals
- Non-metals
- Metalloids
- Noble Gases
- Lanthanides
- Actinides

Example element: Pt (Platinum), Atomic Number 78, Average Atomic Mass 195.084

American Chemical Society

www.acs.org/outreach

Fig. 1. Periodic Table of Elements [1]

Boron does not occur as a pure element in nature. The pure elemental form of boron was first obtained in 1808 by French chemists J.L. Gay-Lussac and Baron L.J. Thénard, and British Chemist H. Davy [2]. Pure boron, like carbon, is an electrical conductor. Boron has three valence electrons that form covalent bonds. By forming covalent bonds, it can form very hard boron crystals such as boron carbide (boron hydride) and boron nitride.

The element boron occurs in nature in the form of boron minerals, which have industrial significance. Boron minerals are naturally occurring compounds containing varying amounts of boron oxide, and there are over 230 varieties. Important boron minerals include tincal, colemanite, kernite, ulexite, pandermite, boracite, szaybelite, and hydroboracite. Among these, borax (tincal, sodium-based boron compounds), colemanite (calcium-based boron compounds) and ulexite (sodium-calcium-based boron compounds) are the most common commercially prominent boron minerals (see Fig. 2).

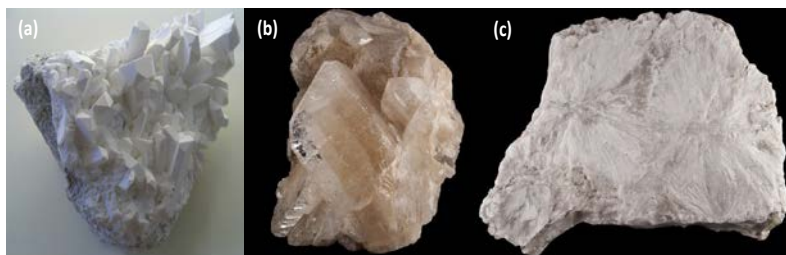


Fig. 2. (a) Borax [3], (b) Colemanite [4], (c) Ulexite [5]

The melting point of the element boron is 2076°C and its boiling point is 3927°C [6]. Amorphous boron occurs as a brown powder. Crystalline boron is silvery-gray in color and has a rhombohedral crystal structure. Boron has isotopes 8B , 10B , 11B , 12B , and 13B . Among these, 10B and 11B are the most stable. The 10B isotope exhibits high thermal neutron retention. Thanks to this feature, it is used in nuclear materials and nuclear power plants [7].

3. USAGE AREAS OF BORON

Boron is a strategic mineral with a wide variety of uses today. Its compounds with metals and nonmetals, in particular, are frequently used in industry. Looking at sectoral consumption, global boron usage accounts for 41% of insulation, fiberglass, and textile industries, 13% for ceramics and its compounds, 12% for the detergent and cleaning industry, 8% for the metallurgical industry, 7% for the agricultural industry, and 19% for other sectors [8].

3.1. Glass Industry and Glass Fiber

Boron mineral is used in the glass industry in the form of boron oxide (B_2O_3). Boron oxide is used in conjunction with silicon dioxide (SiO_2) in the production of borosilicate glass, which has high mechanical and chemical strength and thermal shock resistance. Borosilicate glass is one of the most important markets for boron products.

The typical composition of borosilicate glass is approximately 81% silica, 13% boron oxide, 4% sodium/potassium oxide and 2% aluminum oxide, although the boron oxide content varies between 5% and 30% [9].

Boron additives increase the optical clarity of glass, improving light transmittance. Borosilicate glass is used in laboratory equipment, kitchenware such as ovenware, optical components in microscopes, telescopes, and camera lenses, solar heating systems, LCD displays, and lighting products.

Boron is also used to produce textile-grade fiberglass and insulation fiberglass (glass wool). Boron products are used in both types of fiberglass to lower the melting point of the glass raw material (batch) and as a powerful flux. They control temperature, viscosity, and surface tension to ensure optimal fiberization [9]. Textile-grade fiberglass is used to increase the durability of

cement, rubber, plastic, and other materials. Insulating fiberglass is used in building insulation to prevent heat loss. Fiberglass is also used in wind turbines, airplanes, and automobiles.

3.2. Ceramic Industry and Wear-Resistant Material Production

Boron compounds are used in ceramic glazes (thin glassy coatings) and porcelain enamels. Boron oxide and colemanite ($2\text{CaO} \cdot 3\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$), added to glazes and enamels, prevent glass formation in the early stages of melting and reduce the coefficient of thermal expansion of the coating, ensuring good adhesion of the glaze or enamel to the surface. This increases the mechanical strength and scratch resistance of the ceramic, and improves color stability.

Boron carbide (B_4C) compound is used in the production of highly wear-resistant materials such as drill bits and cutting inserts.

3.3. Electronics and Magnetism

Boron's high temperature and radiation resistance increase its potential for use in advanced microelectronic components. In the electronics industry, boron is used as a silicon additive, particularly in the production of p-type semiconductors, and plays a critical role in microchip and integrated circuit designs.

In magnetism, boron-containing neodymium-iron-boron (Nd-Fe-B) magnets, due to their high magnetic energy density, are widely used in hard drives, electric vehicle motors, wind turbines, and magnetic resonance imaging (MRI) devices. MgB_2 , a boron-containing superconductor material, is used in the production of superconducting magnetic coils and in nuclear magnetic resonance (NMR) spectrometers, MRI systems, particle accelerators, and magnetic levitation (MAGLEV) systems.

3.4. Optics and Energy

Borosilicate glasses containing boron oxide are used in telescope lenses, laboratory glassware, and optical instruments due to their resistance to heat and chemicals.

Boron compounds are used to produce optical materials resistant to infrared and UV rays and to improve optical performance in optoelectronic systems such as LEDs and solar cells.

Boron-doped materials are used in military laser systems, sensors, night vision devices, and other advanced optical systems. Boron nitride (BN), in particular, is a high-temperature resistant and insulating material. Therefore, it is used in applications such as radar systems.

Boron-doped electrode materials are used to increase the energy density and lifespan of lithium-ion batteries in electric vehicles.

Boron-containing ceramics and electrolytes have potential for use in high-temperature fuel cells. Boron hydrides (such as sodium borohydride (NaBH_4)) are being investigated as high-capacity hydrogen storage materials.

Boron derivatives are used in the construction of control rods in nuclear reactors and as neutron scavengers, especially thanks to their neutron absorbing properties.

3.5. Defense Industry

Boron-doped composite materials are used in the defense industry in areas such as armor coatings on tanks and armored vehicles, helicopter and aircraft armor systems, ballistic protection plates and ballistic vests for military personnel, thanks to their properties such as lightness, hardness, heat and impact resistance.

Boron fiber is stronger, lighter, and more resistant to high temperatures than carbon fiber. These properties make it used in the internal skeletons of fighter jets, components of unmanned aerial vehicles (UAVs), armed unmanned aerial vehicles (UCAVs), and missile bodies. Boron compounds are also used in some specialized explosives and rocket fuels. Boron derivatives are also used in nuclear submarines and ships, as well as in nuclear-tipped missile systems.

3.6. Fire Extinguishing and Flame Retardant

Boric acid (H_3BO_3)-added glass fibers are used in the production of highly thermally insulating materials (such as mineral wool) in textiles. Borate compounds and boric acid are widely used in the production of materials such as flame retardants, fire extinguishers, fireproof fabrics, and paints. Fig. 3 compares the combustion areas of boron-added paints. As can be seen from the figure, the combustion area decreases as the amount of boron added increases [10].



Fig. 3. Comparison of burning areas of boron added paints. Samples from least to most doped, from left to right [10]

3.7. Agriculture

Boron is an essential micronutrient for plant growth. It is applied to the soil as a fertilizer in compounds such as borax

($\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$), boric acid, and sodium tetraborate ($\text{Na}_2[\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4] \cdot 8\text{H}_2\text{O}$). Boron fertilizer enriches the soil with boron minerals and increases plant productivity.

The nutrient called Etidot-67, which was developed as a result of the R&D study carried out by Eti Maden and used to increase the quality of fruits and seeds [11], is given in Fig. 4.



Fig. 4. Etidot-67 Boron Fertilizer 20 kg [12]

3.8. Medicine and Health

Boron compounds (especially boric acid) have antibacterial and antifungal properties. Some boron compounds are used in biomedical research and pharmaceutical production. They are used in eye drops, vaginal creams, and skin antiseptics.

Boron Neutron Capture Therapy (BNCT), an experimental targeted radiotherapy method used for brain tumors and some cancers such as melanoma, uses the B-10 isotope injected intravenously [13]. Boron-containing compounds are selectively administered to tumor cells, and neutron radiation is applied to destroy only the cancer cells. Furthermore, boron compounds are being developed for use in targeted drug delivery systems (such as boronate-containing nanoparticles) to ensure that cancer drugs reach only tumor cells.

The anti-inflammatory and analgesic effects of boron compounds make them potentially useful in alleviating the

symptoms of rheumatic diseases. They also support bone health in conditions such as osteoporosis.

3.9. Textiles and Hygiene

Boron compounds are used in textile dyeing processes to ensure better adhesion of the dye to the fabric and to maintain the pH balance.

Boron compounds have a microbial growth inhibitory effect. Thus, textile-grade fiberglass imparts antibacterial properties to textile surfaces. Fig. 5 shows glass wool and textile-grade fiberglass made from boron. It is particularly used in areas where hygiene is crucial, such as underwear, sportswear, and medical textiles.



Fig. 5. Boron glass wool and textile type glass fiber [14]

Boron compounds are also used in toothpastes and mouthwashes to support oral hygiene thanks to their antimicrobial properties.

3.10. Detergents and Cleaning Products

Borates are used as cleaning agents, particularly in powder detergents. Borax (Sodium Borate – $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$), a natural mineral, is effective in cleaning when combined with water. It is used in

laundry detergents (such as BORON and AQUA BOR, given in Fig. 6), stain removers, household cleaners, and deodorizers.



Fig. 6. BORON laundry detergents produced by Eti Maden [15]

Boric acid, with its slightly acidic structure, inhibits the growth of bacteria, fungi, and mold. It is used in antiseptic cleaning products, bathroom, toilet, and kitchen cleaners, and insecticides.

3.11. Cosmetic

Boric acid, with its mild antiseptic properties, is used in eye drops, foot powders, lotions, and skin cleansers for microbial purposes. It helps combat itching and fungal problems. In products for acne-prone skin, boric acid and its derivatives reduce bacterial growth. It's a preferred natural alternative in products free of parabens and synthetic preservatives.

Sodium borate (borax) is used as an emulsifier and stabilizer. It is used to combine water and oil phases in ointments, creams, and lotions. It also has a pH-regulating effect.

Boron nitride is used in foundations, powders, and blushes to provide a matte and smooth finish to the skin.

4. BORON IN TÜRKİYE AND THE WORLD

Boron, a critical resource like lithium and cobalt, holds economic and strategic value for both our country and the world.

Its importance, particularly in renewable energy, energy transformation, battery technologies, the defense industry, and nuclear energy, is growing daily.

In Türkiye, boron is classified as a Group 4 mineral and is considered a "strategic mineral." The state has special authority over minerals in this group. According to Law No. 2840 (Law No. 2840 dated 1983 on the "State Operation of Boron Salts, Trona, and Asphaltite Mines"), boron minerals are operated by the state and are not available to the private sector. Therefore, private companies cannot directly extract boron or export raw boron. The export, processing, and use of boron are regulated by the Ministry of Energy and Natural Resources and the Ministry of Environment, Urbanization and Climate Change. In Türkiye, the sole right to operate and export boron mines belongs to the state-owned company Eti Maden. The company's primary policy is to produce and sell high-value-added refined boron products. Thus, while the share of concentrated products in boron product exports is decreasing, the share of high value-added refined boron products is increasing [9, 16]. Türkiye is the world leader in boron reserves, boron production, and boron exports. Eti Maden has a 61% share of the global boron market as of 2024 [17].

Türkiye has the world's largest boron reserves. The primary boron minerals mined in Türkiye are colemanite, ulexite, and tincal. Türkiye holds 73.3% of the world's boron reserves (3.3 billion tons of B_2O_3 equivalent). Provinces with boron reserves in the country are Eskişehir-Kırka (tincal and colemanite), Balıkesir-Bigadiç, Dursunbey and Sındırgı (colemanite and ulexite), Kütahya-Emet (colemanite), and Bursa-Kestelek (colemanite). Russia accounts for 7.8% of the world's boron reserves, the United States for 6.2%, Chile for 3.2%, and China for 2.8% [9]. Small amounts of boron reserves are also found in Peru, Serbia, Bolivia, Kazakhstan, and Argentina.

Boron extracted from Türkiye takes its place in the world market both as raw material and as processed boron products (boric acid, borax, boron carbide). Export countries include the United States, China, India, European countries, South Korea, and Japan. The main products are boric acid, borax, colemanite, sodium perborate, and boron carbide. According to 2024 data, 2.5 million tons of boron products were sold in our country (97% of which were exports) and approximately 1.322 billion dollars of revenue was generated [17]. The most exported product is boric acid.

Efforts to develop our country's boron exports and boron-based technological products are continuing at full speed. Türkiye has boron facilities such as the Bandırma Boron and Acid Factories, Kırka Boron Enterprises, and Emet Boron Oxide. Türkiye opened a boron carbide production facility in Bandırma in 2023 and a ferrobore production facility in 2025. Work continues on opening a boron nitride facility and an amorphous boron oxide production facility.

In our country, there are companies that process boron minerals from Eti Maden and produce secondary products. These include ASELSAN, ROKETSAN, ŞİŞECAM, ASPİLSAN, the ETİ MADEN Boron Carbide Facility, TÜBİTAK MAM, and MTA. In these companies, studies are carried out especially in the fields of defense industry (boron carbide armor and explosive additives), glass and ceramics (boron glass and special glass products), energy and batteries (boron-based batteries), R&D and value-added products (boron carbide production, use of boron in industry and nanoboron studies). The high purity boric acid production technology developed by TÜBİTAK MAM has been registered with international patents, especially in the USA, and is internationally recognized [18]. In addition, boron-containing superconductor production and development studies are carried out in many universities in our country.

Boron carbide is both lightweight and super-hard. The Boron Carbide Facility in Bandırma is strategically important for the domestic production of tank armor and ballistic vests and for reducing imports. Since boron is a very light but harder material than steel, it is used in the defense industry and armor technology in institutions such as ASELSAN, ROKETSAN and TÜBİTAK in our country. In our country, studies are underway to develop armor plates, missile components, and lightweight yet durable ammunition using boron minerals. Boron-based materials are actively being researched for domestic defense vehicles such as the Altay tank, ANKA, Bayraktar TB2, and Akıncı, and R&D efforts are ongoing to improve their performance.

In our country, studies are being conducted on boron-derived products in the healthcare and pharmaceutical industries, agriculture, construction and insulation, and glass industries. Launched by Eti Maden in 2019, BORON (see Fig. 6) is the first boron-based cleaning product brand in Türkiye. There are also varieties such as laundry and dishwashing detergent, liquid soap, and surface cleaner. Additionally, borosilicate kitchenware (such as teapots and ovenware) is also produced in our country. Today, boron-based cleaning products, borosilicate glassware, and boron-based fertilizers that increase plant yields are readily available in many markets.

After Türkiye, the largest boron reserves in the world are located in Russia and the United States. Investments are being made in Russia related to boron reserves and production. In particular, applications of boron compounds in nuclear energy and the military industry are being investigated. Significant boron reserves are located in the U.S. states of California and Nevada. Boron is widely used in the glass and electronics, chemical, and agricultural (fertilizer) industries. Boron compounds are being researched by NASA for space and defense technologies. It has been reported that boron nitride nanotubes can be used as

structural components and heat shield materials in space missions due to their properties such as lightness, heat resistance, and radiation absorption [19]. Studies are underway in Argentina on boron-containing fertilizers for agricultural use and chemical industrial applications. China is a rapidly developing market for boron mineral extraction and processing. R&D studies on boron compounds are carried out in the fields of glass and ceramic industry, optoelectronics and energy storage, applied chemistry and medicine, and nanotechnology. In China, boron nitride quantum dots are being investigated for use in optoelectronic applications and imaging studies [20]. Biocompatible versions of boron nitride are also being investigated for targeted drug delivery to tumors and for antitumor effects [21].

Because of its strategic importance, boron minerals are mined and protected under government supervision in many countries. Furthermore, countries are investing in R&D to prevent excessive and unplanned exploitation of boron minerals, developing sustainable mining methods by researching boron recycling and efficient use, and implementing environmentally responsible mining policies. There are agreements in the world that indirectly address boron production and processing, boron mining and boron waste. Some of these are the Basel Convention (1989) [22], which regulates the transboundary movements and disposal of hazardous wastes; the Stockholm Convention [23], which includes regulations on persistent organic pollutants (POPs); the WTO-World Trade Organization Rules [24], which include anti-dumping, quota and subsidy rules that boron trading countries must comply with; the REACH Regulation (for the European Union) [25], which requires registration of chemical substances; the GHS-Globally Harmonized System [26], which standardizes the classification and labeling of chemical substances; and the ILO-International Labour Organization

Conventions [27], which regulate the health and safety of mine workers.

5. CONCLUSIONS

Boron, rare on Earth and a strategic mineral for many countries, is one of the most critical raw materials of the 21st century. Its functionality makes it vital to many sectors, from industry and nuclear energy to defense and medicine.

Türkiye holds a significant global position, possessing 73% of the world's boron reserves. This rich resource potential offers significant advantages to our country, both economically, strategically, and geopolitically. In addition to exporting boron as a raw material, efforts to transform it into high-value-added products are also ongoing.

The limited availability of natural resources, growing environmental awareness, and the pursuit of sustainable production are increasing the global importance of boron. This has led to boron-based solutions in areas such as energy efficiency, advanced material technologies, heat resistance, and environmentally friendly agricultural practices.

In this section, the usage areas of boron mineral, its reserve status in Türkiye and the world, its economic and strategic importance and current policies are discussed.

Global demand for boron is shifting from raw boron to refined boron products. Therefore, the most important issues that need to be addressed in our country in the future include limiting boron exports, developing boron ore processing facilities, increasing R&D investments, expanding domestic production technologies, executing international collaborations with a strategic perspective, and implementing policies to ensure the sustainable use of boron.

The potential of Türkiye to utilize a strategic resource like boron will not only support its future economic growth but also enable it to take a more active role on a global scale in the fields of energy and technology.

REFERENCES

- [1] American Chemical Society. (n.d.). *Periodic table of chemical elements*. Retrieved August 31, 2025, from <https://www.acs.org/education/whatischemistry/periodictable.html>
- [2] Gay-Lussac, J. L., Thenard, L. J., & Davy, H. (1808). Researches on the properties of boron. *Journal of Chemical Science*, 12(3), 210–225.
- [3] Wikipedia. (n.d.). *Borax*. Wikipedia. Retrieved September 14, 2025, from <https://tr.wikipedia.org/wiki/Boraks>
- [4] Çanakkale Onsekiz Mart University Museum of Earth Sciences and Natural History. (n.d.). *Kolemanit [Colemanite]*. Retrieved September 14, 2025, from <https://ybm.org.tr/ybm/product/kolemanit-10/>
- [5] Yüzey Bilim Müzesi (YBM). (n.d.). *Ulexite*. Retrieved September 14, 2025, from <https://ybm.org.tr/ybm/product/uleksit-3/>
- [6] Wikipedia. (n.d.). *Bor* [in Turkish]. Wikipedia. Retrieved August 31, 2025, from <https://tr.wikipedia.org/wiki/Bor>
- [7] Smith, R. D. (2010). Applications of boron isotopes in nuclear technology. *Journal of Nuclear Materials*, 402(1), 45–53.
- [8] TÜBİTAK MAM. (n.d.). *Uses of boron*. Retrieved September 19, 2025, from <https://www.mam.gov.tr/ybm/product/uleksit-3/>
- [9] Eti Maden. (2022). *2021 Bor sector report*. Retrieved September 19, 2025, from <https://www.etimaden.gov.tr/storage/2022/2021%20YILI%20BOR%20SEKTOR%20RAPORU.pdf>

- [10] Topçu, U., & Soyhan, H. S. (2022). Fire retardant effects of boron mineral. *Journal of Fuels, Fire, and Combustion in Engineering*, 10(1), 28–37.
- [11] Eti Maden. (2025, October 2). Etidot-67. Retrieved November 28, 2025, from <https://www.etimaden.gov.tr/etidot-67>
- [12] Garmak. (t.y.). Etidot 67 Bor Gübre 20 Kg. Erişim adresi: <https://www.garmak.com.tr/etidot-67-bor-gubre-20-kg-152897>
- [13] TENMAK. (n.d.). *Health* [Brochure]. Retrieved September 14, 2025, from <https://www.tenmak.gov.tr/Belgeler/brosur/SAGLIK.pdf>
- [14] Tesisat.org. (n.d.). *Bor cam yünü ve tekstil tipi fiberglass*. Retrieved September 14, 2025, from <https://www.tesisat.org/bor-cam-yunu-ve-tekstil-tipi-fiberglass.html>
- [15] Eti Maden. (n.d.). *Boron*. Retrieved October 4, 2025, from <https://www.etimaden.gov.tr/boron>
- [16] Kurt, Ü., Can, M., Yahşi, M., Adıgüzel, N., Özkul, H., Turhan, A., Doğan, M. B., & Üzer, S. (2023). What are boron minerals? Their uses, effects on the Turkish economy, and position in the world. *International Journal of Social and Humanities Sciences Research (JSHSR)*, 10(94), 937–946.
- [17] Anadolu Agency. (2025, April 29). *Eti Maden breaks all-time sales record with \$1.3 billion in 2024*. Anadolu Agency. Retrieved September 19, 2025, from <https://www.aa.com.tr/tr/enerjiterminali/maden/eti-maden-2024-sonunda-1-3-milyar-dolarlik-satisla-tum-zamanlarin-rekorunu-kirdi/48895>

- [18] TÜBİTAK MAM. (n.d.). *High purity boric acid production technology* [Yüksek saflıkta borik asit üretim teknolojisi]. Retrieved September 25, 2025, from <https://mam.tubitak.gov.tr/en/material/products/high-purity-boric-acid-production-technology/>
- [19] NASA. (2016). *Boron nitride nanotubes for space applications* [Spinoff 2016]. NASA Spinoff. Retrieved October 4, 2025, from https://spinoff.nasa.gov/Spinoff2016/t_3.html
- [20] Liu, B., Yan, S., Song, Z., Liu, M., Ji, X., Yang, W., & Liu, J. (2016). One-step synthesis of boron nitride quantum dots: Simple chemistry meets delicate nanotechnology. *Chemistry – A European Journal*, 22(1), 440–446.
- [21] Li, H., Qiao, W., Shen, Y., Xu, H., Fan, Y., Liu, Y., Lan, Y., Gong, Y., Chen, F., & Feng, S. (2023). Biomimetic boron nitride nanoparticles for targeted drug delivery and enhanced antitumor activity. *Pharmaceutics*, 15(4), 1269.
- [22] Basel Convention on the Control of Transboundary Movements of Hazardous Wastes and Their Disposal. (1989). United Nations Environment Programme. Retrieved October 4, 2025, from <https://www.basel.int>
- [23] Stockholm Convention on Persistent Organic Pollutants. (2001). United Nations Environment Programme. Retrieved October 4, 2025, from <https://www.pops.int>
- [24] World Trade Organization. (n.d.). *Understanding the WTO: The organization*. Retrieved October 4, 2025, from https://www.wto.org/english/thewto_e/whatis_e/tif_e/org1_e.htm
- [25] European Chemicals Agency. (n.d.). *REACH – Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals*.

Retrieved October 4, 2025, from
<https://echa.europa.eu/regulations/reach>

- [26] United Nations. (2019). *Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS), Seventh revised edition*. United Nations Economic Commission for Europe. Retrieved October 4, 2025, from <https://unece.org/about-ghs>
- [27] International Labour Organization. (1995). *Safety and Health in Mines Convention (No. 176)*. Retrieved October 4, 2025, from https://www.ilo.org/dyn/normlex/en/f?p=NORMLEXPUB:12100:0::NO::P12100_ILO_CODE:C176

MOLEKÜLER MODELLEMENİN TEMELLERİ

Ercan TÜRKKAN¹

1. GİRİŞ

Bilimsel araştırmaların atomik ve moleküler ölçeğe inmesi, kimyasal süreçlerin anlaşılmasında köklü bir dönüşüm yaratmıştır. Moleküllerin enerji düzeyleri, bağ yapıları, elektron dağılımları ve zaman içerisindeki davranışları, yalnızca deneysel tekniklerle tam anlamıyla ortaya konulamamaktadır. Mikroskobik düzeyde gerçekleşen bu süreçlerin çoğu, doğrudan gözlemlenemeyen, ancak matematiksel olarak modellenen karmaşık fenomenlerdir. Bu nedenle teorik ve hesaplamalı yöntemlerin bilimsel araştırmalardaki önemi her geçen yıl artmış; özellikle moleküler modelleme, modern kimya ve biyobilimlerin ayrılmaz bir bileşeni hâline gelmiştir (Leach, 2001).

Moleküler modelleme, atomik düzeydeki fiziksel ve kimyasal süreçlerin matematiksel yöntemlerle temsil edilmesi ve bilgisayar algoritmalarıyla simülasyonunun yapılması üzerine kuruludur. Moleküllerin üç boyutlu yapılarını, enerji dağılımlarını ve reaksiyon mekanizmalarını anlamaya yönelik bu yaklaşımlar hem teorik kimya hem de uygulamalı bilimlerde geniş bir kullanım alanına sahiptir. Güncel hesaplama teknolojileri sayesinde, büyük biyomoleküllerden nanomalzemelere kadar geniş bir yelpazede sistemlerin simülasyonları yapılabilmekte; bu durum deneysel çalışmalara kıyasla daha hızlı, düşük maliyetli ve kontrol edilebilir analizlere imkân tanımaktadır (Jensen, 2017; Cramer, 2013).

¹ Prof. Dr. Necmettin Erbakan Üniversitesi, Ahmet Keleşoğlu Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, ORCID: 0000-0003-4365-5544.

Bu bölümde, moleküler modelleme yöntemlerinin kuramsal temelleri ile ilgili genel bilgiler ve kavramlar verilecektir. Daha sonra matematiksel modelleme ilkeleri ve sayısal yaklaşımlar tanıtılacaktır. Bunun yanında, kuantum mekaniği temelli yaklaşımlar ve elektronik yapı teorisi tanıtılacaktır. Ardından buna bağlı olarak, kuantum kimyasında moleküler modelleme yapmak için kullanılan yöntemler genel olarak tanıtılacaktır. Moleküler modellemenin başlıca uygulama alanları tanıtıldıktan sonra, son kısımda moleküler modelleme alanının tarihsel gelişimi özetlenerek, günümüzde kullanılan yöntemlerin nasıl bir birikimin sonucu ortaya çıktığı gösterilecektir. Bu kitap bölümünde; verilen moleküler modelleme kavramları, yöntemleri, yaklaşımları daha sonra yazılacak olan bölümlerde detaylandırılacak, uygulamalar ve örneklerle okuyucunun bu konuda bilgi birikimine sahip olması ve gelişmesi sağlanacaktır.

2. MOLEKÜLER MODELLEMENİN KAVRAMSAL VE KURAMSAL TEMELLERİ

Moleküler modelleme, atomik ve moleküler düzeyde gerçekleşen fiziksel olayların matematiksel olarak ifade edilmesi ve bu yapıların bilgisayar ortamında simüle edilmesi esasına dayanır. Kimyasal sistemlerin geometrik yapılarının, potansiyel enerji yüzeylerinin, reaksiyon mekanizmalarının ve zaman içindeki davranışlarının anlaşılması için kullanılan bu yöntemler, teorik fizik, matematik ve kimyanın ortak bir çalışma alanı olarak ortaya çıkmıştır (Leach, 2001).

Moleküler modellemenin kuramsal yapısı üç temel kategoriye ayrılır:

1. Klasik (Newton) mekanik temelli yaklaşımlar
2. Matematiksel modelleme ve sayısal yöntemler

3. Kuantum Mekanikliği Temelli Yaklaşımlar ve Elektronik Yapı Teorisi

Bu yaklaşımlar, sistemin büyüklüğüne, hedeflenen doğruluk seviyesine ve hesaplama gücüne bağlı olarak ayrı ayrı veya birlikte kullanılabilir.

2.1. Klasik (Newton) Mekanik Temelli Yaklaşımlar

Klasik mekanik, atomların belirli bir kütleyle, konuma ve hıza sahip parçacıklar olarak ele alındığı ve hareketlerinin Newton'un hareket yasaları ile tanımlandığı bir yaklaşımı temel alır. Newton'un ikinci yasası:

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

Moleküler dinamik (MD) simülasyonlarının çıkış noktasıdır. Bu yaklaşımda bir atom üzerine etki eden net kuvvet belirlendikten sonra, atomun zaman içindeki ivmesi, hızı ve konumu hesaplanarak dinamik davranışı modellenir. MD simülasyonları, özellikle büyük biyomoleküllerin, polimerlerin ve karmaşık malzemelerin incelenmesinde hesaplama verimliliği nedeniyle sıkça tercih edilmektedir (McCammon et al., 1977; Rapaport, 2004).

Klasik moleküler modellerde bir sistemin potansiyel enerjisi çoğunlukla aşağıdaki fonksiyonun bileşenleri ile ifade edilir:

$$E_{\text{toplam}} = E_{\text{bağ}} + E_{\text{acı}} + E_{\text{torsiyon}} + E_{\text{van der Waals}} + E_{\text{Coulomb}}$$

Bağ enerjisi genellikle harmonik yaklaşım ile ifade edilir:

$$E_{\text{bağ}} = k_b(r - r_0)^2$$

Açısal gerilme enerjisi:

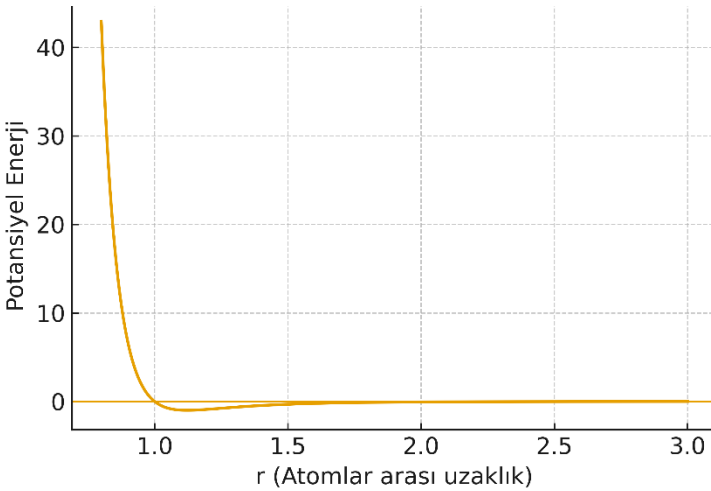
$$E_{\text{açı}} = k_\theta(\theta - \theta_0)^2$$

Torsiyon enerjisi, bağ etrafındaki dönme engellerini tanımlayan periyodik bir fonksiyondur:

$$E_{\text{torsiyon}} = \sum \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)]$$

Van der Waals etkileşimleri, çoğunlukla Lennard–Jones potansiyeli ile modellenir:

$$E_{LJ}(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right]$$



Bu potansiyel fonksiyon, atomların birbirine çok yaklaştığında güçlü bir itici, belirli bir mesafede ise çekici kuvvet uyguladığını gösterir (Cramer, 2013).

Şekil 2.1. Lennard–Jones Potansiyeli: Atomlar arası potansiyel enerji profilini gösterir.

Elektrostatik etkileşimler ise Coulomb yasası ile hesaplanır:

$$E_{\text{Coulomb}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

Bu klasik yaklaşım, kuantum mekanik hesaplamalar kadar detaylı bilgi sunmasa da büyük sistemlerin uzun simülasyon sürelerinde modellenmesine olanak tanıdığı için önemli bir rol oynar.

2.2. Matematiksel Modelleme İlkeleri Ve Sayısal Yöntemler

Moleküler modelleme yalnızca fiziksel prensiplerin uygulanmasını değil, aynı zamanda bu prensiplerin matematiksel denklemlere dönüştürülmesini ve sayısal algoritmalarla çözülmesini gerektirir. Bu nedenle matematiksel modelleme, moleküler simülasyonların hem doğruluğunu hem de hesaplama verimliliğini belirleyen en kritik aşamalardan biridir.

Enerji minimizasyonu, sistemin potansiyel enerji yüzeyi üzerinde en düşük enerjili kararlı geometriye ulaşmayı amaçlar. Matematiksel olarak bu durum:

$$\nabla E(\mathbf{r}) = 0$$

Koşulunun sağlanmasıyla ifade edilir. Sistem enerjisinin gradienti sıfırlandığında molekül dengededir.

Başlıca enerji minimizasyon algoritmaları şunlardır:

- Gradyan İnişi (Gradient Descent)
- Konjuge Gradyan (Conjugate Gradient)
- Newton–Raphson Yöntemi
- Metropolis Monte Carlo Teknikleri (Metropolis et al., 1953)

Moleküler dinamik (MD) simülasyonlarında hareket denklemlerinin çözümü için kullanılan başlıca integrasyon yöntemleri:

- Verlet integrasyonu
- Leapfrog yöntemi
- Velocity-Verlet algoritması

dır. Bu yöntemler, her zaman adımında atomların yeni konum ve hızlarını hesaplayarak sistemin gerçek zamanlı davranışını taklit ederler (Rapaport, 2004). Tablo 2.1. de moleküler modellemede yaygın olarak kullanılan matematiksel yöntemler verilmiştir.

Tablo 2.1. Moleküler Modellemede Yaygın Matematiksel Yöntemler

Yöntem / Algoritma	Açıklama
Gradyan İnişi (Gradient Descent)	Potansiyel enerji yüzeyinde en dik azalma yönünde ilerleyerek sistemin enerjisini minimize eden temel optimizasyon yöntemidir.
Konjuge Gradyan (Conjugate Gradient)	Gradyan inişine kıyasla daha kararlı ve hızlı yakınsayan bir yöntemdir; büyük sistemlerde tercih edilir.
Newton–Raphson Yöntemi	Enerji yüzeyinin ikinci türevini kullanarak minimuma ulaşır; yüksek doğruluk sağlar ancak maliyetlidir (Bu maliyet bilgisayar hızı, belleği ve hesaplama zamanı ile ilgili bir maliyettir.)

Quasi-Newton (BFGS, L-BFGS) Verlet İntegrasyonu	Newton yönteminin Hessian matrisi tahmin edilen hızlı yaklaşık versiyonudur. Moleküler dinamikte atom konumlarını zaman içinde güncelleyen temel integrasyon yöntemidir.
Leapfrog İntegrasyonu	Verlet'in bir türevidir; konum ve hız adımlarını yarım zaman kaymasıyla hesaplar.
Velocity-Verlet Algoritması	Konum ve hız değişimlerini aynı zaman adımında hesaplayan geliştirilmiş Verlet yöntemidir.
Metropolis Monte Carlo	Enerji yüzeyinde kararlı konfigürasyon bulmak için olasılık temelli kabul/red mekanizması kullanır.
Langevin Dinamiği	Klasik MD'ye sürtünme ve rastgele kuvvetler ekleyerek termal denge koşullarını modeller.
Normal Mod Analizi (NMA)	Moleküllerin düşük frekanslı titreşim modlarını analiz eder, özellikle proteinler için kullanılır.

2.3. Kuantum Mekanikliği Temelli Yaklaşımlar Ve Elektronik Yapı Teorisi

Kuantum mekaniğine göre, bir sisteme (atom, molekül, iyon veya radikal) ait Schrödinger denklemi çözülebilirse, sisteme ait dalga fonksiyonu ve sistemin enerji özdeğeri belirlenebilir. Dalga fonksiyonu belirlenen bir sistemin diğer fiziksel özellikleri (bu fiziksel özelliklere ait beklenen değerleri) hesaplanabilir. Sadece Hidrojen atomu ve hidrojen benzeri iyonlara ait Schrödinger denklemi tam olarak çözülebilir. Fakat çok elektronlu sistemler (çok elektronlu atom, molekül, iyon veya radikal) için Schrödinger denkleminin tam çözümü yapılamamaktadır. Bu çok elektronlu sistemlere ait Schrödinger denklemi yaklaşık yöntemlerle çözülebilir. Burada kullanılan “yaklaşık yöntemler” kavramı hassas olmayan iyi sonuç vermeyen yöntemler olarak algılanmamalıdır. Aslında yaklaşık yöntemler kuantum mekaniğinin ilkelerini ve üst düzey matematiksel yaklaşımları dikkate alarak yapılan detaylı, kullanışlı ve deneysel sonuçlarla uyumlu sonuçlar veren yöntemlerdir.

Elektronik yapı teorisi; çok elektronlu sistemlerde fizik ve kuantum mekaniğinin ilkeleri ve bazı matematiksel yaklaşımları kullanarak Schrödinger denklemine yaklaşık çözümler sağlamayı amaçlayan bir teoridir.

Elektronik yapı teorisinde hesaplama yöntemleri temel olarak ikiye ayrılır:

- Yarı deneysel yöntemler
- *Ab-initio* yöntemleri

Yarı deneysel yöntemlerde bilinen bazı deneysel parametreleri (örneğin potansiyel enerji parametreleri vb.) teorik hesaplamalarda kullanılarak Schrödinger denklemine yaklaşık çözümler elde edilmeye çalışılmaktadır. *Ab-initio* yöntemlerinde ise hiçbir deneysel veri kullanılmaksızın kuantum mekaniğinin ilkeleri ve matematiksel yaklaşımlar kullanılarak tamamıyla pür teorik hesaplamalar yapılmaktadır. *Ab-initio* yöntemleri, *Ab-initio* Moleküler Orbital Teori (*Ab-initio* MO) ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory, DFT) olmak üzere iki farklı teori ile oluşturulan yöntemlerden oluşur.

Schrödinger denklemi, hem kuantum mekaniği temelli yaklaşımlar ve hem de elektronik yapı teorisinin merkezinde yer alır (Schrödinger, 1926):

Kuantum mekaniğinin en temel postulatlarından bir tanesi sisteme ait fiziksel/kimyasal özelliklerin; sistemi tanımlayan Ψ dalga fonksiyonları tarafından belirlenebileceğini ifade etmektedir. Bütün kuantum mekaniksel problemlerin temelinde;

$$\hat{H} \Psi(r, R) = E \Psi(r, R)$$

Şeklindeki zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümü yatmaktadır. Bu son denklemdeki $\hat{H}$ hamiltoniyen operatörü, $\hat{T}$ kinetik enerji ve $\hat{V}$ potansiyel enerji operatörlerinin toplamından oluşmaktadır:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

Burada $\hat{T}$ ve $\hat{V}$ operatörleri de;

$$\hat{T} = -\sum_i -\frac{h^2}{8\pi^2 m_i} \nabla_i^2$$

$$\hat{V} = \sum_{i(j)} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

Şeklinde tanımlanır. Buradaki toplamlar bütün parçacıklar üzerindedir. Burada, m_i parçacıkların kütlesi, h Planck sabiti, r_{ij} iki parçacık arasındaki mesafe, q_i ve q_j sırasıyla i . parçacıkla j . Parçacıkların elektriksel yükleridir. Elektronlar için $q_i = -e$ (1.602×10^{-19} C), çekirdekler için ise $q_i = +Z_i e$ dir. Hidrojen atomu (veya hidrojen benzeri iyonlar) için SI birim sisteminde yazılan Schrödinger denklemi:

$$\left[-\frac{h^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi = \epsilon \psi$$

Şeklindedir. Bu denklem atomik birimler kullanılırsa (atomik birimlerde basitleşme yapmak için sabitlerin değeri 1 olarak alınır):

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} \right] \psi = \epsilon \psi$$

Şeklinde yazılır. Hidrojen atomu veya hidrojene benzer iyonlar için yazılan Schrödinger denkleminin tam çözümü yapılabilmektedir. Bu denklem bir diferansiyel denklemdir. Bir

diferansiyel denklem analitik olarak çözümlenebiliyorsa tam çözümü yapılabiliyor demektir. Çok elektronlu sistemler yani çok elektronlu atomlar ve moleküller için ise denklemin tam çözümü yapılamamaktadır.

Çok elektronlu sistemler incelenirken hamiltoniyen ifadesi çok elektronlu sisteme uygun olarak yazılmalıdır. N elektrondan ve M çekirdekten oluşan bir sistem için (molekül için) hamiltoniyen ifadesi atomik birimlerde:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \nabla_A^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}$$

Şeklinde yazılır. Burada $r_{iA} = |r_i - r_A|$, i. elektronla A. çekirdek arasındaki mesafe, $r_{ij} = |r_i - r_j|$, i. elektronla j. elektron arasındaki mesafe, $R_{AB} = |R_A - R_B|$, A ile B çekirdeği arasındaki uzaklık, M_A , A. çekirdeğin kütlesi, Z_A , A. çekirdeğin atom numarası ∇_i^2 ve ∇_A^2 de sırasıyla elektronların ve çekirdeklerin koordinatlarına bağlı laplasyen (nabla kare) operatörleridir. Bu hamiltoniyende ilk terim elektronların kinetik enerji operatörü, ikinci terim moleküldeki atomların çekirdeklerinin kinetik enerji operatörü, üçüncü terim elektronla atom çekirdekleri arasındaki Coulomb etkileşmesi terimi (elektiriksel potansiyeli), dördüncü terim elektron-elektron Coulomb etkileşmesi terimi (elektiriksel potansiyeli), beşinci ve son terim ise çekirdek-çekirdek Coulomb etkileşmesi (elektiriksel potansiyeli) terimidir.

2.4. Hesaplamalı Kimyada Moleküler Modelleme Yapmak İçin Kullanılan Yöntemler

Hesaplamalı kimyada/fizikte moleküler modelleme yapmak için kullanılan yöntemler dört ana kategoriye ayrılabilir;

I. Moleküler Mekanik (MM) Yöntemler

Elektronik yapı çözülmeyen, atomlar klasik kuvvet alanlarıyla modellenir (Leach, 2001).

II. Yarı Deneyisel Yöntemler

MNDO, AM1, PM3 ve PM6 gibi yöntemler, teorik ifadeleri deneyisel parametrelerle sadeleştirir (Dewar et al., 1985; Stewart, 2007).

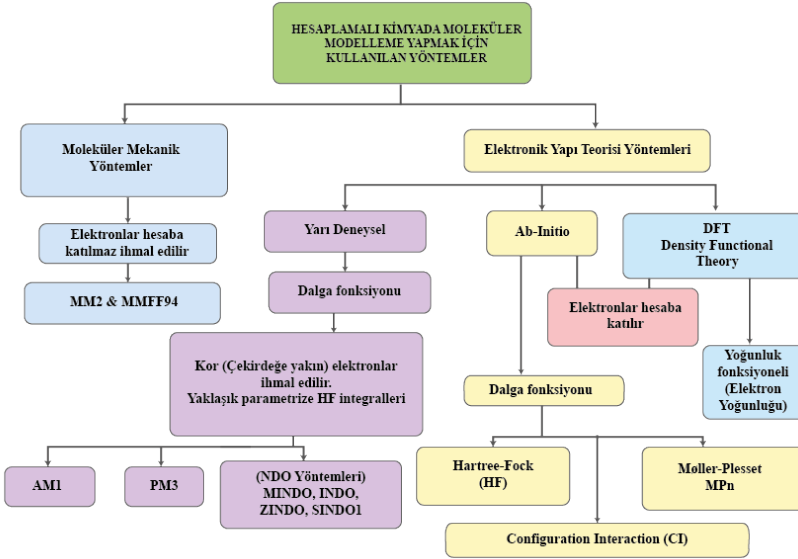
III. Hartree–Fock, Post-Hartree–Fock Yöntemleri

HF (Hartree–Fock), MP2, MP3, MP4 (Møller-Plesset pertürbasyon teorisi MPn), CI (Configuration Interaction) ve CCSD(T) (Coupled Cluster Single Double Triple) ile kısaltmalarla ifade edilen bu yöntemler, moleküler modelleme hesaplamalarında yüksek doğruluk sağlar (Szabo & Ostlund, 1996; Helgaker et al., 2000).

HF yöntemi elektronları, ortalama alan (potansiyel) yaklaşımıyla ele alırken; MP2, MP4, CI ve CCSD(T) gibi post-HF yöntemleri elektron korelasyonunu daha doğru temsil eden yöntemlerdir (Szabo & Ostlund, 1996; Helgaker et al., 2000).

IV. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT): Dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu temel alan DFT, günümüzde hesaplamalı kimyada en yaygın kullanılan yöntemdir. Doğruluk ve hesaplama verimliliği arasında genellikle en uygun dengeyi sunar. Elektron yoğunluğu temelli hesaplamalar sunan DFT, modern hesaplamalı kimyanın en yaygın yöntemidir (Parr & Yang, 1989; Koch & Holthausen, 2001). Hesaplamalı kimyada moleküler modelleme yapmak için kullanılan yöntemlerin sınıflandırılması Şekil 2.2 de özetlenmiştir.



Şekil 2.2. Hesaplamalı kimyada moleküler modelleme yapmak için kullanılan yöntemlerin sınıflandırılması.

3. MOLEKÜLER MODELLEMENİN BAŞLICA UYGULAMA ALANLARI

Moleküler modelleme, atomik ve moleküler seviyedeki olayları simüle edebilme yeteneği sayesinde modern bilim ve mühendisliğin pek çok dalında kullanılmaktadır. Leach (2001), bu tekniklerin özellikle biyokimyasal süreçlerin incelenmesinde kritik rol oynadığını vurgular. Başlıca uygulama alanları şunlardır:

İlaç Tasarımı ve Farmasötik Kimya: Yeni ilaç adaylarının hedef proteinlere bağlanma afinitelerini tahmin etmek ve aktif bölgeleri belirlemek (Cramer, 2013).

Malzeme Bilimi ve Polimer Araştırmaları: Yeni malzemelerin termodinamik, mekanik ve elektronik özelliklerini atomik düzeyde öngörmek.

Biyokimyasal Süreçlerin Modellenmesi: Protein katlanması, enzim katalizi ve membran dinamikleri gibi karmaşık sistemlerin etkileşimlerinin ve dinamik davranışlarının anlaşılması.

Kimyasal Reaksiyon Mekanizmalarının Belirlenmesi: Kuantum kimyası ile geçiş durumlarının enerjilerinin hesaplanması ve reaksiyon hızlarının aydınlatılması.

Nanoteknoloji Uygulamaları: Nano ölçekli yapıların stabilitesi ve reaktivitesi üzerine çalışmalar.

4. MOLEKÜLER MODELLEMENİN TARİHSEL GELİŞİMİ VE EVRİMİ

Moleküler modellemenin tarihsel evrimi, kimyanın teorik gelişimiyle paralel ilerlemiştir. 19. yüzyılın sonlarında atom kuramının kabul görmesi, moleküllerin matematiksel olarak temsil edilebilmesi için ilk adımların atılmasını sağlamıştır. Ancak gerçek anlamda moleküler modellemenin doğuşu, 20. yüzyılın başında kuantum mekaniğinin ortaya çıkmasıyla mümkün olmuştur.

4.1. Kuantum Mekaniğinin Doğuşu ve İlk Adımlar

1926'da Schrödinger'in yayımladığı dalga mekaniği çalışması (Schrödinger, 1926), atomların dalga fonksiyonlarıyla temsil edilebileceğini göstererek modern kuantum kimyasının temelini atmıştır. Bu çalışma, moleküler sistemlerin enerjilerinin ve özelliklerinin matematiksel olarak öngörülebileceği fikrini yerleştirmiştir.

1950'li yıllarda bilgisayarların geliştirilmesiyle birlikte teorik modeller sayısal olarak uygulanabilir hâle gelmiş, ilk *ab initio* hesaplamalar basit moleküller üzerinde gerçekleştirilmiştir. Ayrıca bu dönemde Metropolis ve arkadaşları (1953) tarafından geliştirilen yöntemler, karmaşık

sistemlerin istatistiksel mekanik simülasyonları için bir temel oluşturmuştur.

4.2. Moleküler Dinamiğin Başlangıcı

1977 yılında McCammon, Gelin ve Karplus tarafından yapılan ilk protein moleküler dinamik simülasyonu, hem biyokimya hem de hesaplamalı bilimler için bir dönüm noktası olmuştur (McCammon et al., 1977). Bu çalışma, biyomoleküllerin statik yapılar olmadığını, hareketli ve dinamik sistemler olduğunu kanıtlamış ve biyolojik süreçlerin atomik düzeyde incelenmesinin yolunu açmıştır.

4.3. Yöntemlerin Çeşitlenmesi Ve Modern Dönem

1980 ve 1990'lı yıllar, Amber, CHARMM ve OPLS gibi kuvvet alanlarının geliştirilmesi ile moleküler modellemenin standardize edildiği ve geniş kitlelere ulaştığı dönemdir. Bu dönemde ayrıca, MNDO, AM1 ve PM3 gibi yarı deneysel yöntemler geliştirilerek teorik ifadeler deneysel parametrelerle sadeleştirilmiş ve hesaplama hızı artırılmıştır (Dewar et al., 1985; Stewart, 2007).

Aynı süreçte, dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu temel alan Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT), doğruluk ve hesaplama verimliliği arasında sunduğu denge sayesinde modern hesaplamalı kimyanın en yaygın yöntemi haline gelmiştir (Parr & Yang, 1989; Koch & Holthausen, 2001).

2000'lerden itibaren GPU tabanlı hesaplamaların yaygınlaşması, çok daha büyük sistemlerin simüle edilebilmesini sağlamıştır (Jensen, 2017). Bugün geline nokta, klasik ve kuantum yöntemlerin birlikte kullanıldığı hibrit yaklaşımlar sayesinde nano ölçekten biyolojik makromoleküllere kadar geniş bir yelpazede hassas modellemeler yapılabilmektedir.

KAYNAKÇA

- Cramer, C. J. (2013). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). Wiley.
- Dewar, M. J. S., Zoebisch, E. G., Healy, E. F., & Stewart, J. J. P. (1985). Development and use of quantum mechanical molecular models. *Journal of the American Chemical Society*, 107(13), 3902–3909.
- Helgaker, T., Jørgensen, P., & Olsen, J. (2000). *Molecular Electronic-Structure Theory*. Wiley.
- Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). Wiley.
- Koch, W., & Holthausen, M. C. (2001). *A Chemist's Guide to Density Functional Theory* (2nd ed.). Wiley-VCH.
- Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd ed.). Prentice Hall.
- McCammon, J. A., Gelin, B. R., & Karplus, M. (1977). Dynamics of folded proteins. *Nature*, 267, 585–590.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., & Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1087–1092.
- Parr, R. G., & Yang, W. (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press.
- Rapaport, D. C. (2004). *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (2nd ed.). Cambridge University Press.
- Schrödinger, E. (1926). An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical Review*, 28(6), 1049–1070.

- Stewart, J. J. P. (2007). Optimization of parameters for semiempirical methods. *Journal of Molecular Modeling*, 13(12), 1173–1213.
- Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover.

ÇERÇEVE MATERYALLERİ, ERGONOMİ VE ÜRETİM TEKNOLOJİLERİ

Sümeyra CAN¹

Özge ERDEM²

1. GİRİŞ

1.1. Optik Sistemlerde Çerçevenin Rolü

Optik sistemler temel olarak ışığın kontrollü bir şekilde yönlendirilmesi, kırılması veya algılanması üzerine kuruludur; ancak bu süreçlerin güvenilir biçimde gerçekleşebilmesi için yalnızca optik elemanların kalitesi yeterli değildir. Optik bileşenlerin tamamı sistem bütünlüğünü sağlayan çerçeve yapısı tarafından desteklenir, konumlandırılır ve korunur. Çerçevenin sağladığı mekanik altyapı, sistem performansının çoğu zaman belirleyici unsurdur (Gross, 2016). Bir optik çerçevenin temel işlevleri şu şekilde özetlenebilir:

- **Hassas hizalama:** Lensler, aynalar, prizmatik elemanlar ve sensörler arasındaki mikron seviyesindeki mesafe ve açı toleranslarının korunması,
- **Mekanik dayanım:** Taşıma, titreşim, darbe ve sıcaklık değişimi altında boyutsal kararlılık,
- **Çevresel koruma:** Toz, nem, kimyasal etkenler ve elektromanyetik girişimlere karşı optik elemanların korunması,

¹ Dr. Öğr. Üyesi, Bayburt Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, ORCID: 0000-0001-9534-9106.

² Doç. Dr., Bayburt Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, ORCID: 0000-0003-4542-941X.

- **Isıl stabilite:** Termal genleşme nedeniyle oluşabilecek odak kaymalarının en aza indirilmesi.

Özellikle yüksek hassasiyet gerektiren spektroskopi, metroloji ve endüstriyel kalite kontrol sistemlerinde çerçevenin rijitlik ve stabilitesi optik performans kadar kritik kabul edilmektedir. Zhao ve Huang (2020), optik cihazlarda *thermal drift* ve *mechanical creep* gibi çerçeve kaynaklı deformasyonların ölçüm hatalarını dramatik şekilde artırabildiğini vurgulamıştır.

Günümüzde giyilebilir teknolojiler (AR/VR gözlükleri, akıllı optik kafalıklar), biyomedikal görüntüleme cihazları, drone tabanlı görüntüleme sistemleri ve savunma uygulamaları optik çerçevelerden çok daha fazlasını beklemektedir. Bu modern sistemlerde çerçeve yalnızca optik elemanların taşıyıcısı değil; aynı zamanda titreşim sönümleyici, ısı dağıtıcı, elektromanyetik kalkan, modüler elektronik platform, kullanıcı–cihaz arayüzü, gibi çok işlevli bir yapıya dönüşmüştür (Waldman ve ark., 2021).

Optik tasarım ile mekanik tasarım arasındaki bu yakın bağ çerçeve tasarımını tek başına mekanik bir görev olmaktan çıkarıp optomekanik mühendisliğin ayrılmaz bir bileşeni haline getirmiştir (Smith & Barton, 2018). Bu nedenle güncel optik sistem geliştirme süreçlerinde optik tasarımcı, makine mühendisi, malzeme bilimci, ergonomi uzmanı ve üretim teknolojisi ekibinin entegre çalışması kritik önem taşımaktadır.

1.2. Malzeme, ergonomi ve üretim ilişkisi

Optik sistemlerde çerçeve tasarımı malzeme seçimi, ergonomik gereksinimler ve üretim yöntemi arasındaki karşılıklı bağımlılığa dayanan bütünlük bir mühendislik sürecidir. Çerçevede kullanılan malzemenin yoğunluk, elastisite modülü, termal genleşme katsayısı, titreşim davranışı ve kimyasal dayanım gibi özellikleri yalnızca yapısal bütünlüğü değil, aynı zamanda optik bileşenlerin hizalama doğruluğunu ve çevresel koşullar altındaki performansını doğrudan belirler. Bu nedenle

malzeme seçimi sistemin optik tolerans gereksinimleri, kullanım senaryosu ve uzun dönem stabilite hedefleriyle birlikte değerlendirilmelidir. Diğer yandan, ergonomik tasarım özellikle giyilebilir optik sistemlerde kritik bir rol oynar; çerçevenin antropometrik uyumu, ağırlık dağılımı ve temas yüzeylerinin tasarımı hem kullanıcı konforunu hem de optik eksen stabilitesini etkileyerek cihaz performansını dolaylı biçimde şekillendirir.

Üretim yöntemi ise seçilen malzeme ve ergonomik gereksinimlerle doğrudan ilişkilidir; CNC işleme, lazer kesim, enjeksiyon kalıplama ve eklemeli imalat gibi tekniklerin her biri farklı tolerans seviyeleri, maliyet aralıkları ve geometrik özgürlükler sunar. Bu nedenle çerçeve tasarımı yalnızca mekanik dayanımı gözeten bir yaklaşım olmaktan ziyade malzeme bilimi, optomekanik tasarım, ergonomi ve üretim mühendisliğinin eşzamanlı olarak optimize edildiği disiplinlerarası bir süreçtir. Bu bütüncül tasarım anlayışı modern optik sistemlerde hem performansın sürdürülebilirliğini hem de üretim verimliliğini artıran temel yaklaşım hâline gelmiştir.

1.2.1. Malzeme seçiminin optik ve mekanik performansa etkisi

Optik çerçevelerde kullanılan malzemenin fiziksel ve kimyasal özellikleri sistemin dayanıklılığını, uzun vadeli stabilitesini ve üretilebilirliğini büyük ölçüde etkiler. Malzeme seçiminde yoğunluk, elastisite modülü, termal genleşme katsayısı, titreşim davranışı, korozyon direnci, işlenebilirlik, maliyet, biyouyumluluk (giyilebilir sistemler için) gibi özellikler birlikte değerlendirilir.

Örneğin:

- Alüminyum alaşımları, hafiflik ve işlenebilirlik avantajı ile yüksek doğruluk gerektiren çerçevelerde sıkça tercih edilir.

- Magnezyum alaşımları, daha da düşük yoğunlukları ile taşınabilir optik cihazlarda öne çıkar.
- Titanyum, biyouyumlu ve dayanıklı olması nedeniyle oftalmik çerçevelerde altın standardıdır (Ashby, 2011).
- Karbon fiber kompozitler, yüksek rijitlik/ağırlık oranı ve düşük termal genleşmeleri sayesinde havacılık ve savunma optiklerinde üstün performans sağlar.
- Polikarbonat ve ABS, seri üretime uygunlukları nedeniyle tüketici elektroniği optiklerinde yaygındır.

Malzeme seçimindeki küçük farklar bile optik sistemin uzun vadeli performansında büyük sonuçlar doğurabilir. Özellikle termal genleşme katsayısı yüksek bir malzeme sıcaklık değişimlerinde mikron mertebesinde optik kaymalara neden olarak sistem kalibrasyonunu bozabilir (Boresi & Schmidt, 2013).

1.2.2. Ergonomik tasarım: İnsan-optik sistem etkileşimi

Ergonomi özellikle giyilebilir optik sistemlerde çerçevenin başarısını belirleyen temel faktörlerden biridir. Kullanıcı ile temas eden yüzeylerin tasarımı, malzeme sertliği, ağırlık dağılımı ve temas noktalarının antropometrik uyumu cihazın uzun süreli kullanımında büyük fark yaratır.

Örneğin; AR/VR gözlüklerinde çerçevenin burna uyguladığı basınç, kulağa dağıttığı yük, kafa çevresine olan teması, lens-göz mesafesi, görüş alanını etkileyecek kayma miktarı optik performansı doğrudan etkileyebilir (Kroemer, 2017).

Ergonomik tasarımın optik performansa etkisi çoğu zaman göz ardı edilir; ancak kullanıcı konforu azaldığında cihazın kullanım süresi de düşer, bu da cihazın genel faydasını azaltır. Bu nedenle modern optik sistemlerde ergonomik tasarım, mühendislik sürecinin ayrılmaz bir parçasıdır.

1.2.3. Üretim teknolojisinin tasarıma etkisi

Malzemenin işlenebilirliği hangi üretim teknolojilerinin kullanılabileceğini belirler. Dolayısıyla üretim yöntemi tasarımın neredeyse tüm yönlerini etkiler.

- CNC işleme yüksek hassasiyet gerektiren metal çerçeveler için idealdir.
- Enjeksiyon kalıplama polimer bazlı seri üretimde en uygun yöntemdir.
- 3D baskı (FDM, SLA, SLS), prototip geliştirme ve karmaşık geometrilerin uygulanmasında büyük avantaj sağlar.
- Metal eklemeli imalat (SLM, DMLS) hafif ve kompleks optik taşıyıcıların üretiminde giderek yaygınlaşmaktadır (Kalpakjian & Schmid, 2019).

Optik çerçeve tasarımı artık çoğu zaman klasik üretim sınırlarını zorlayan, topoloji optimizasyonu ile hafifletilmiş, organik geometriler içeren yeni nesil yapılarla zenginleşmektedir. Bu gelişmeler özellikle AR/VR ve drone optikleri gibi alanlarda cihaz ağırlığını ciddi ölçüde azaltmakta ve performansı artırmaktadır (Gibson, 2020).

2. ÇERÇEVE MATERYALLERİ

2.1. Kullanılan temel malzemeler

Optik sistemlerin çerçeve yapılarında kullanılan temel malzemeler genellikle üç ana gruba ayrılır: metaller, polimerler ve kompozitler. Her bir malzeme grubu kendi içinde belirli avantajlar ve sınırlamalar taşır.

Metaller, özellikle alüminyum ve titanyum gibi hafif ve rijit alaşımlar, yüksek yapısal dayanım ve ısıl kararlılık sağladıkları için tercih edilmektedir. Alüminyum alaşımlar, CNC

ile hassas işlenebilirliği ve düşük maliyetleriyle öne çıkar. Titanyum ise daha pahalı olmakla birlikte biyouyumluluğu ve yüksek mekanik özellikleri sayesinde medikal ve askeri optik sistemlerde sıklıkla tercih edilmektedir (Yoder, 2008; Villalba ve ark., 2020).

Polimerler, özellikle taşınabilir optik sistemlerde hafiflik ve esneklik sağlamaları nedeniyle önemlidir. Polikarbonat ve ABS gibi mühendislik plastikleri, kırılmaya karşı dirençli olup, enjeksiyon kalıplama yöntemiyle yüksek hacimlerde üretilebilir (Pfeffer, 2010). Ayrıca bazı termo-optik polimerler, dalga kılavuzu sistemlerinde hem optik taşıyıcı hem de yapı malzemesi olarak kullanılmaktadır (Ma ve ark., 2002).

Kompozit malzemeler, farklı özelliklerin bir araya getirilmesini sağlar. Özellikle karbon fiber takviyeli polimerler (CFRP) düşük ağırlık, yüksek dayanım ve düşük termal genleşme katsayısı ile optik stabilite açısından idealdir. Uzay ve savunma uygulamalarında yüksek performanslı çerçeve sistemleri için sıklıkla kullanılır (Mohn & Vukobratovich, 1988; Villalba ve ark., 2020).

2.2. Malzeme seçimini etkileyen faktörler

Optik sistemlerde çerçeve malzemesi seçimi sadece mekanik dayanıklılık değil, aynı zamanda optik performans, çevresel dayanım ve üretim kabiliyeti gibi çok boyutlu kriterlere dayanır. Aşağıdaki temel faktörler bu süreci belirler:

- **Mekanik Özellikler:** Rijitlik, darbe dayanımı ve titreşim sönümleme kapasitesi sistemin doğruluğu için kritiktir. Özellikle hassas ayar gerektiren sistemlerde malzemenin düşük termal genleşme katsayısına sahip olması gereklidir (Kalpakjian & Schmid, 2019).
- **Optik Uyum:** Malzeme seçiminde çerçevenin optik bileşenlerle temas ettiği yüzeylerde reflektans, absorpsiyon ve

potansiyel deformasyon gibi optik etkiler de dikkate alınmalıdır. Örneğin bazı polimerler optik şeffaflık gerektiren durumlarda lens yuvalarında tercih edilir (Hu ve ark., 2013).

- **Termal Kararlılık:** Sıcaklık değişimleri altında boyutsal stabilitenin korunması özellikle uzay ve dış ortam uygulamaları için önemlidir. CFRP gibi kompozitler, düşük termal genleşme ve yüksek sıcaklık direnci sunarak bu gereksinimi karşılar (Chen ve ark., 2022).
- **Çevresel Dayanıklılık:** Nem, ultraviyole ışık, kimyasal etkenler gibi dış faktörlere karşı malzemenin dayanımı da seçimde önemlidir. Polimerlerde bu tip etkenlere karşı stabilizasyon katkı maddeleri kullanılır (Rajak ve ark., 2019).

3. ERGONOMİK TASARIM İLKELERİ

3.1. Kullanıcı konforu ve fiziksel uyum

Ergonomik tasarım, optik sistemlerin kullanıcıyla etkileşim düzeyini doğrudan etkileyen en kritik faktörlerden biridir. Özellikle uzun süreli kullanımda kullanıcı konforunu sağlayan unsurlar; ağırlık dağılımı, temas yüzeylerinin şekli ve malzeme özellikleridir. Kullanıcı konforu fiziksel yorgunluk, baskı hissi ve cilt tahrişi gibi negatif etkilerin minimize edilmesiyle sağlanır (Dunne ve ark., 2022).

Giyilebilir sistemlerde baş ve yüz anatomisine uygun tasarım, konfor açısından belirleyicidir. Örneğin gözlük çerçevelerinde burna ve kulak arkasına uygulanan basıncın dengeli olması gerekir. Bu basıncın ideal seviyede tutulması için çerçevenin temas alanları yumuşak ve esnek materyallerle desteklenmelidir (Sung ve ark., 2019).

Ergonomik uyumun belirlenmesinde antropometrik veri kullanımı da son derece önemlidir. Farklı yaş, cinsiyet ve coğrafi kökenlere sahip kullanıcı grupları için standart ölçülerin dışına

çıkılması gerekebilir. Bu noktada kişiselleştirilebilir tasarımlar ön plana çıkmaktadır (Weinschenk ve ark., 2023).

3.2. Gözlük, başa takılan optik sistemler ve portatif cihazlar için ergonomi

Başta takılan optik sistemler (Head-Mounted Displays - HMD), artırılmış gerçeklik (AR) ve sanal gerçeklik (VR) teknolojileriyle birlikte hayatın birçok alanında kullanılmaya başlanmıştır. Bu sistemlerin ergonomisi, sadece kullanıcı konforu açısından değil, optik hizalama doğruluğu ve görsel performans açısından da kritik bir role sahiptir (Kim & Park, 2021).

Bu tür sistemlerde en yaygın ergonomik problemler baş-boyun kaslarında aşırı yüklenme, göz yorgunluğu ve denge hissinde bozulmadır. Tasarım sürecinde ağırlık merkezinin başa mümkün olduğunca yakın yerleştirilmesi ve sistemin dengeli biçimde dağılması gereklidir. Ayrıca hava dolaşımını sağlayan açıklıklar ve terlemeyi azaltan malzemeler kullanıcı deneyimini olumlu etkiler (Chen ve ark., 2021).

Portatif optik cihazlarda ergonomi, el uyumu ve kontrol kolaylığı etrafında şekillenir. Tutma kollarının anatomik eğrilere uygun tasarlanması, malzemenin kaymaz yüzeylere sahip olması ve düğme yerleşiminin sezgisel olması gereklidir (Kozhevnikov ve ark., 2019).

4. ÜRETİM TEKNOLOJİLERİ

4.1. Geleneksel ve dijital üretim yöntemleri

Optik cihazların çerçeve üretiminde kullanılan üretim teknolojileri, malzeme türüne, tasarım karmaşıklığına, üretim adedine ve gerekli hassasiyet düzeyine göre değişiklik göstermektedir. Geleneksel yöntemlerin yanında dijital üretim teknolojilerinin de gelişmesi, özelleştirilmiş ve düşük hacimli üretimlere olanak tanımaktadır (Kalpakjian & Schmid, 2019).

CNC işleme özellikle metal ve yüksek mukavemetli plastiklerin işlenmesinde yüksek hassasiyet sağlaması nedeniyle optik çerçeve üretiminde yaygın olarak kullanılmaktadır. CNC karmaşık geometrileri, sıkı toleranslarla işleyebilme yeteneğine sahiptir ve optik hizalamanın kritik olduğu sistemlerde tercih edilmektedir (Yoder, 2008).

3D baskı son yıllarda hem prototipleme hem de nihai ürün üretimi için büyük bir esneklik sağlamaktadır. Özellikle polimer malzemelerle yapılan FDM (Fused Deposition Modeling) ve SLA (Stereolithography) gibi yöntemler çerçeve yapılarında özelleştirme ve hızlı üretim açısından avantaj sağlar. Ayrıca topoloji optimizasyonu gibi gelişmiş tasarım tekniklerinin üretime aktarılmasına olanak tanır (Singh ve ark., 2020).

Enjeksiyon kalıplama seri üretimde düşük maliyet ve yüksek üretim hızı sağlar. ABS, PC gibi termoplastik malzemelerle çalışmak için uygundur. Bu yöntemin sınırlayıcı faktörü ise yüksek kalıp maliyetidir; bu da küçük hacimli üretimler için dezavantaj oluşturur (Gibson ve ark., 2015).

4.2. Hassasiyet ve ölçeklenebilirlik açısından değerlendirme

Üretim yöntemlerinin seçiminde en belirleyici kriterlerden biri optik sistemin gerektirdiği hassasiyet düzeyidir. Optik bileşenlerin hizalanması, çerçevenin boyutsal kararlılığı ve yüzey pürüzlülüğü, sistemin performansını doğrudan etkiler. Bu nedenle mikron düzeyinde toleranslar gerektiren uygulamalarda CNC işleme veya yüksek çözünürlüklü 3D baskı teknolojileri tercih edilmektedir (Kozhevnikov ve ark., 2019).

CNC makineler yüksek tekrar edilebilirlik ile parça üretimi sağlarken, yüksek malzeme israfı ve uzun işlem süresi gibi dezavantajlara sahiptir. Buna karşılık enjeksiyon kalıplama, seri üretim için ideal olup her bir parça için minimum sapma ile binlerce ürün üretilebilir. Ancak bu yöntemde üretim öncesi

tasarım deęişiklikleri zordur ve kalıp tasarımı kritik hale gelir (Gibson ve ark., 2015).

3D baskı ise prototiplemede benzersiz esneklik sunsa da geniş ölçekli üretimlerde hız ve yüzey kalitesi açısından sınırlayıcı olabilir. SLA ve DLP gibi ışııkla kütleme teknolojileri yüzey kalitesini iyileştirse de üretim hızı ve dayanım açısından enjeksiyon kalıplamanın gerisindedir (Ngo ve ark., 2018).

Bu nedenle üretim yöntemi seçilirken tasarım karmaşıklıęı, üretim adedi, maliyet hedefleri ve gereken hassasiyet seviyeleri birlikte deęerlendirilmelidir. Hibrit üretim yaklaşımları bu açıdan giderek daha yaygın hale gelmektedir.

5. UYGULAMA ALANLARI VE ÖRNEK SİSTEMLER

5.1. Gözlükler, mikroskoplar, sensör sistemleri

Gözlükler çerçeve tasarımı açısından hem optik doğruluk hem de kullanıcı ergonomisi gerektiren temel uygulamalardan biridir. Oftalmik lensler için tasarlanan çerçeveler hafiflik, ciltle uyumluluk ve darbelere dayanıklılık gibi kriterlere göre seçilir. Son yıllarda 3D baskı ile kişiselleştirilmiş gözlük çerçeveleri üretilmesi mümkün hale gelmiş, böylece farklı yüz morfolojilerine özel çözümler yaygınlaşmıştır (Miletić ve ark., 2021).

Mikroskoplar için çerçeve sistemleri özellikle optik hizalama kararlılıęı açısından önemlidir. Yüksek büyütme oranlarında en küçük mekanik titreşimler bile görüntü kalitesini bozabileceęi için rijit ve düşük termal genleşme katsayısına sahip malzemeler kullanılmaktadır. Ayrıca kullanıcıyla etkileşim içinde olan bileşenlerde ergonomi giderek daha fazla önem kazanmaktadır (Gao ve ark., 2023).

Sensör sistemleri özellikle mobil veya dış ortama entegre optik çözümlerde hem çevresel dayanıklılığı hem de kompaktlığı gerektirir. Bu cihazların çerçeveleri su geçirmezlik, toz yalıtımı ve darbe emici özelliklerle desteklenir. Kompozit malzemeler bu bağlamda öne çıkar çünkü hem dayanıklı hem de hafif yapı sunarlar (Tang ve ark., 2020).

5.2. Ergonomik ve dayanıklı çerçeve tasarımlarından örnekler

Ergonomik ve dayanıklı çerçeve tasarımları kullanıcı ile cihaz arasında hem fiziksel hem işlevsel bir köprü kurar. Aşağıda birkaç dikkat çekici örnek üzerinden bu yaklaşım detaylandırılmıştır:

- a) Google Glass Enterprise Edition 2, başa takılan bir optik sistem olarak çerçeve ergonomisine odaklanan bir örnektir. Hafifliği (yaklaşık 46g), yüze dağıtılan dengeli ağırlığı ve göz hizasına tam oturan ekran modülü ile kullanıcı konforunu ön plana çıkarır (He ve ark., 2020).
- b) Carl Zeiss Primo Star mikroskobu öğrenciler ve laboratuvar kullanıcıları için ergonomik tutma yerleri, ayarlanabilir göz merceği açıları ve kompakt çerçevesi ile tasarlanmıştır. Aynı zamanda taşıma kolaylığı ve sağlam yapısı sayesinde eğitim ortamlarında dayanıklılığıyla öne çıkar.
- c) FLIR C5 termal kamera portatif sensör cihazı olarak dayanıklı çerçeve tasarımının güzel bir örneğidir. IP54 koruma standardına sahip olan bu cihazın dış çerçevesi darbeye dayanıklı kauçuk kaplama ile çevrilidir. Aynı zamanda el ergonomisine uygun olarak kavrama yüzeyleri kaymaz malzeme ile tasarlanmıştır.

Bu örneklerde ortak olarak görülen tasarım yaklaşımı, malzeme seçimi ile ergonomik ihtiyaçları bir arada ele alarak hem

kullanıcı deneyimini artırmak hem de cihazın ömrünü uzatmaktadır (He ve ark., 2020).

6. SONUÇ VE GELECEK YÖNELİMLERİ

6.1. Entegre tasarımın önemi

Günümüzde optik sistemlerde çerçeve yalnızca bir taşıyıcı yapı değil; aynı zamanda optik, elektronik ve mekanik bileşenlerin entegre biçimde çalışmasını sağlayan çok işlevli bir platform haline gelmiştir. Bu nedenle tasarım süreçlerinde disiplinler arası yaklaşım ve sistem mühendisliği kavramları öne çıkmaktadır (Cheng ve ark., 2022).

Entegre tasarım çerçevenin sadece mekanik bir bileşen değil, sistemin tamamlayıcı bir parçası olarak ele alınmasını sağlar. Örneğin, modern mikroskop sistemlerinde çerçeve; ışık yönlendirme kanallarını, sensörleri ve ısı yönetim birimlerini içerecek şekilde çok fonksiyonlu bir yapı olarak tasarlanmaktadır (Lee ve ark., 2021).

Ayrıca tasarım sürecinin erken aşamalarında, optik-mekanik eşzamanlı tasarım yaklaşımları benimsenerek; performans düşüşüne neden olabilecek hizalama hataları, titreşim kaynakları ve termal etkiler önceden analiz edilebilir. Bu da üretim sonrası kalibrasyon ihtiyacını ve maliyeti azaltır (Waldman ve ark., 2021).

6.2. Yeni nesil malzemeler ve üretim tekniklerine bakış

Optik sistemlerin geleceği yüksek performanslı, hafif, dayanıklı ve çok fonksiyonlu yeni nesil malzemelerin kullanımı ile şekillenmektedir. Özellikle kompozitler, grafen destekli yapılar, biyobozunur polimerler ve şekil hafızalı alaşımlar gibi ileri malzeme çözümleri çerçeve tasarımlarında giderek daha fazla kullanılmaktadır (Gao ve ark., 2023).

Grafen ve karbon nanotüpler yüksek mukavemet ve iletkenlik özellikleriyle hem elektromanyetik koruma hem de mekanik destek sunan ultra hafif yapılar geliştirilmesine olanak tanımaktadır. Ayrıca, bu malzemeler ısı yayılımı açısından da avantaj sağlar ve yüksek hassasiyet gerektiren optik sistemlerde kullanılmaya başlanmıştır (Yang ve ark., 2020).

Üretim tekniklerinde ise 4D baskı ve mikro-fabrikasyon gibi ileri yöntemler çerçeve tasarımına radikal yenilikler getirmektedir. Örneğin, kendini ortam sıcaklığına göre yeniden yapılandırabilen polimer iskeletler, optik cihazların taşınabilirliğini ve işlevselliğini artırmaktadır (Kim ve ark., 2021).

Ayrıca sürdürülebilir üretim yaklaşımları da önem kazanmakta; geri dönüştürülebilir biyomalzemelerin kullanımı ve enerji verimli üretim yöntemleri tasarım sürecinin ayrılmaz bir parçası haline gelmektedir (Rajak ve ark., 2019).

Sonuç olarak, optik sistemlerde çerçeve tasarımı; malzeme seçimi, ergonomi ve üretim teknolojilerinin eşzamanlı olarak optimize edilmesini gerektiren çok boyutlu bir mühendislik sürecidir. Güncel uygulamalarda çerçeveler yalnızca optik bileşenleri taşıyan pasif yapılar olmaktan çıkmış, performansı belirleyen aktif ve çok işlevli bileşenlere dönüşmüştür. Bu nedenle gelecekte, hafif ve dayanıklı yeni nesil malzemeler, hassas ve ölçeklenebilir üretim yöntemleri ile insan-cihaz uyumunu önceleyen ergonomik yaklaşımların bütünleşmesi, optik sistem tasarımının temel belirleyicileri olmaya devam edecektir. Bu bütüncül yaklaşım, hem yüksek performanslı optik çözümlerin geliştirilmesine hem de kullanıcı deneyiminin sürdürülebilir şekilde iyileştirilmesine olanak sağlayacaktır.

KAYNAKÇA

- Ashby, M. F. (2011). *Materials selection in mechanical design* (4th ed.). Butterworth-Heinemann.
- Boresi, A. P., & Schmidt, R. J. (2013). *Advanced mechanics of materials*. Wiley.
- Chen, J., Liu, X., Tian, Y., et al. (2022). 3D-printed anisotropic polymer materials for functional applications. *Advanced Materials*, 34(8).
<https://doi.org/10.1002/adma.202102877>
- Chen, Z., Li, M., & Gao, Q. (2021). Thermal comfort analysis of head-mounted displays using CFD simulation. *Applied Ergonomics*, 94, 103425.
<https://doi.org/10.1016/j.apergo.2021.103425>
- Cheng, S., Zhang, Z., & Wu, X. (2022). Integrated design in modern optical systems: A systems engineering perspective. *Applied Optics*, 61(13), 3784–3793.
<https://doi.org/10.1364/AO.456982>
- Dunne, L. E., Cunningham, B. P., & Walsh, M. P. (2022). Ergonomics of wearable systems: Review and implications for design. *Applied Ergonomics*, 103, 103801. <https://doi.org/10.1016/j.apergo.2022.103801>
- Gao, J., Tang, Y., & Liu, H. (2023). Advanced materials for optomechanical systems: A review of trends and applications. *Materials Today*, 66, 101136.
<https://doi.org/10.1016/j.mattod.2023.05.004>
- Gao, J., Wang, X., & Zhang, L. (2023). Mechanical stability in compact microscope systems: Frame design analysis. *Optics and Lasers in Engineering*, 167, 107516.
<https://doi.org/10.1016/j.optlaseng.2023.107516>

- Gibson, I. (2020). Additive manufacturing technologies in precision optics. *Journal of Manufacturing Processes*, 57, 121–135.
- Gibson, I., Rosen, D. W., & Stucker, B. (2015). *Additive manufacturing technologies*. Springer.
- Gross, H. (2016). *Handbook of optical systems: Volume 1 — Fundamentals of technical optics*. Wiley-VCH.
- He, Y., Wang, Y., & Sun, H. (2020). Ergonomics and usability analysis of head-mounted displays: Case study on Google Glass EE2. *Human–Computer Interaction*, 35(3), 289–305. <https://doi.org/10.1080/07370024.2020.1728981>
- Hu, J., Li, L., Lin, H., Zhang, P., & Zhou, W. (2013). Flexible integrated photonics: Where materials, mechanics and optics meet. *Optical Materials Express*, 3(9), 1313–1331. <https://doi.org/10.1364/OME.3.001313>
- Kalpakjian, S., & Schmid, S. R. (2019). *Manufacturing engineering and technology* (8th ed.). Pearson.
- Kim, H., & Park, Y. (2021). Ergonomic considerations for wearable AR/VR systems: A review. *Displays*, 67, 101977. <https://doi.org/10.1016/j.displa.2021.101977>
- Kim, K., Park, J., & Lee, S. (2021). 4D printing for adaptive optical components: A new paradigm. *Advanced Optical Materials*, 9(22), 2100658. <https://doi.org/10.1002/adom.202100658>
- Kozhevnikov, M., Wong, Y. Y., & Koo, M. (2019). Ergonomic user interface design for handheld optical devices. *Human Factors and Ergonomics in Manufacturing*, 29(6), 504–518.
- Kroemer, K. H. E. (2017). *Fitting the human: Introduction to ergonomics*. CRC Press.

- Lee, J., Kim, H., & Choi, D. (2021). Multidisciplinary design of precision microscope frames. *Optics Express*, 29(24), 39821–39835. <https://doi.org/10.1364/OE.438766>
- Ma, H., Jen, A. K. Y., & Dalton, L. R. (2002). Polymer-based optical waveguides. *Advanced Materials*, 14(19), 1339–1365. <https://doi.org/10.1002/adma.200290010>
- Miletić, M., Radanović, M., & Stojić, N. (2021). Personalized 3D-printed eyewear: Ergonomic considerations and materials. *Journal of Industrial Design and Engineering Graphics*, 16(31), 31–38.
- Mohn, W. R., & Vukobratovich, D. (1988). Recent applications of metal matrix composites in precision instruments and optical systems. *Optical Engineering*, 27(2). <https://doi.org/10.1117/12.7976651>
- Ngo, T. D., Kashani, A., Imbalzano, G., Nguyen, K. T. Q., & Hui, D. (2018). Additive manufacturing (3D printing): A review of materials, methods, applications and challenges. *Composites Part B: Engineering*, 143, 172–196. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.02.012>
- Pfeffer, M. (2010). *Optomechanics of plastic optical components*. Wiley. <https://doi.org/10.1002/9783527635443>
- Rajak, D. K., Menezes, P. L., & Linul, E. (2019). Fiber reinforced polymer composites: Manufacturing and sustainability. *Polymers*, 11(10), 1667. <https://doi.org/10.3390/polym11101667>
- Singh, R., Singh, S., & Prakash, C. (2020). Additive manufacturing of polymeric materials for customized optical frames. *Journal of Manufacturing Processes*, 56, 813–821. <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2020.05.016>
- Smith, J., & Barton, R. (2018). *Advanced materials in optical and photonic systems*. Springer.

- Sung, J., Kim, S., & Lee, J. (2019). Anthropometry-based ergonomic evaluation of spectacle frames. *Ergonomics*, 62(4), 568–577. <https://doi.org/10.1080/00140139.2018.1557733>
- Tang, Z., Chen, X., & Luo, Y. (2020). Compact and rugged housing design for embedded optical sensors. *Sensors and Actuators A: Physical*, 312, 112122. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2020.112122>
- Villalba, V., Kuiper, H., & Gill, E. (2020). Review on thermal and mechanical challenges in the development of deployable space optics. *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, 6(1). <https://doi.org/10.1117/1.JATIS.6.1.010902>
- Waldman, H., Chen, X., & Miller, T. (2021). Structural integration in wearable optical devices: Design and performance considerations. *Optical Engineering*, 60(10).
- Weinschenk, J. P., Maloney, M. R., & Zhang, Z. (2023). Personalized ergonomic design using 3D facial scanning for wearable technologies. *Journal of Design Research*, 21(1), 45–62.
- Yoder, P. R. (2008). *Opto-mechanical systems design* (3rd ed.). CRC Press.
- Yang, X., Chen, C., & Li, J. (2020). Graphene-based lightweight structures for optical and thermal applications. *Carbon*, 165, 190–202. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.04.045>
- Zhao, L., & Huang, Y. (2020). Mechanical stability requirements in high-precision optical instruments. *Journal of Optomechanical Systems*, 12(3), 215–230.

OLAĞANÜSTÜ AKUSTİK GEÇİRGENLİĞE SAHİP AKUSTİK MERCEK TASARIMI¹

Döne SAYARCAN²

Nurettin KÖRÖZLÜ³

Ahmet ÇİÇEK⁴

1. GİRİŞ

Akustik dalgaların soğurma, yönlendirme ve odaklama gibi yöntemlerle kontrol edilmesi; tıbbi görüntüleme, terapi, akustik yalıtım, su altı görüntüleme ve biyoparçacık manipülasyonu gibi birçok uygulamada oldukça önemli bir yer teşkil etmektedir (Maldovan, 2013). Bu amaçla yaygın olarak kullanılan fononik kristaller, malzeme özelliklerinin periyodik değişimi sayesinde negatif kırılma (Ke et al., 2005; Sukhovich, Jing, & Page, 2008; S. Yang, Page, Liu, Cowan, Chan, & Sheng, 2004; Zhang & Liu, 2004), değişken kırılma indisi (Deng, Ding, He, Zhao, Shi, & Liu, 2009; Huang & Sun, 2009; Martin, Nicholas, Orris, Cai, Torrent, & Sánchez-Dehesa, 2010; Peng et al., 2010) ve açısız simetriye sahip saçıcılar (Kaya, Cicek, & Ulug, 2011; Li, Fok, Yin, Bartal, & Zhang, 2009) gibi etkilerle odaklama ve görüntüleme sağlayabilmektedir. Ancak bu yapılar

¹ Bu kitap bölümü, Döne Öztürk'ün Burdur Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda tamamladığı “Olağanüstü Akustik Geçirgenlik Sergileyen Sıfıra Yakın Yoğunluklu Mercek” (Yüksek Lisans Tezi, 2019) çalışmasından üretilmiştir.

² Öğr. Gör. Dr., Burdur Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Gölhisar Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Optisyonluk Programı, ORCID: 0000-0001-7000-0354.

³ Prof. Dr., Burdur Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Nanobilim ve Nanoteknoloji, ORCID: 0000-0002-0899-0227.

⁴ Prof. Dr., Burdur Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Nanobilim ve Nanoteknoloji, ORCID: 0000-0002-7686-0045.

dalga boyu mertebesinde saçıcılar içerdiğinden, pratik uygulamalar için büyük boyutlar gerektirmektedir.

Bu sınırlamayı aşmak amacıyla daha küçük birim hücreler içeren akustik metamalzemeler geliştirilmiştir (Craster & Guenneau, 2012; Deymier, 2013; Fok, Ambati, & Zhang, 2008). Akustik metamalzemeler negatif etkin kütle (Z. Yang, Mei, Yang, Chan, & Sheng, 2008) ve negatif bulk modülü (Y. Ding, Liu, Qiu, & Shi, 2007; Fang et al., 2006; Li & Chan, 2004) gibi olağan dışı fiziksel özellikler gösterebilmekte, olağanüstü akustik geçirgenlik ve sifıra yakın yoğunluk gibi önemli fenomenler sunmaktadır. Sifıra yakın yoğunluk, faz hızının ve dalga boyunun artışına neden olarak metamalzemedен çıkan dalgaların eş fazlı olmasını sağlar; bu durum olağanüstü geçirgenlikle birleştirildiğinde ince akustik merceklerin tasarımını mümkün kılmaktadır.

Bu bölümde, membran kaplı dairesel kaviteilerin rezonans özellikleri incelenerek mevcut literatürdeki örneklerle kıyasla daha küçük hacimli ve ultra ince akustik mercekler sayısal yöntemlerle nasıl tasarlandığı izah edilmiştir. Kavitelerden çıkan akustik dalga bileşenleri arasındaki faz ilişkilerinden yararlanılarak dalga boyu mertebesinde yarıçapa sahip kompakt bir mercek elde edilmiştir. Geliştirilen tasarımın küçük boyutları pratik uygulanabilirliği artırmakta, ayrıca kavite yarıçapı ve membran kalınlığı değiştirilerek merceğin odak uzaklığı ayarlanabilmektedir.

2. GENEL BİLGİLER

2.1. Fononik Kristaller ve Akustik Metamalzemeler

Fononik kristaller, farklı malzemelerin periyodik olarak bir araya getirilmesiyle oluşturulan yapay yapılardır ve bir, iki veya üç boyutlu olabilirler. Dalga boyu mertebesindeki bu

yapıların en önemli özelliği, belirli frekanslardaki akustik veya mekanik dalgaların geçişine izin vermemeleridir. Bu yasaklı frekans aralığı “band aralığı” olarak adlandırılır ve kullanılan malzeme, yapı geometrisi ve periyodik dizilim değiştirilerek kontrol edilebilir (Körözlü, 2017; Liu & Fan, 2013). Bu özellikleri nedeniyle fononik kristaller çevresel gürültünün azaltılması, dalga kılavuzlama ve dalga yönlendirme gibi uygulamalarda kullanılmıştır (Khelif, Choujaa, Benchabane, Djafari-Rouhani, & Laude, 2004; Martínez-Sala, Rubio, García-Raffi, Sánchez-Pérez, Sánchez-Pérez, & Llinares, 2006; Vasseur et al., 2007).

Metamalzemeler ise doğal malzemelerden farklı olarak, dalga boyundan çok daha küçük boyutlara sahip yapay birim hücrelerin rezonans özelliklerinden yararlanılarak tasarlanır. Başlangıçta bu yapılar yüksek frekanslarda kullanılabilir sanılırken, daha sonra dalga boyundan çok küçük “meta-atomlar” ile düşük frekanslarda da dalga kontrolünün mümkün olduğu anlaşılmıştır. Böylece hem fononik kristaller hem de akustik metamalzemeler, dalgaların yayılımını yönlendirmek ve istenen özellikleri oluşturmak için güçlü araçlar hâline gelmiştir.

2.2. Akustik Metamalzemelerde Dalga Yayılım Rejimlerinin Etkin Parametrelere Bağlılığı

Fononik kristaller ve akustik metamalzemeler bağlamında öne çıkan en dikkat çekici fiziksel olgulardan biri negatif kırılma indisi fenomenidir. Negatif kırılma, dalga enerjisinin yayılma yönü ile dalga vektörünün ters yönlerde olmasıyla ortaya çıkar ve hem fononik kristallerde hem de metamalzemelerde gözlemlenmiştir (Ke et al., 2005; Sukhovich, Jing, & Page, 2008; S. Yang et al., 2004; Zhang & Liu, 2004). Akustik alanda bu etki, etkin kütle yoğunluğu ile bulk modülün belirli rezonans bölgelerinde negatif hâle gelmesiyle oluşur (Y. Ding et al., 2007; Fang et al., 2006; Li & Chan, 2004; Z. Yang et al., 2008). Etkin

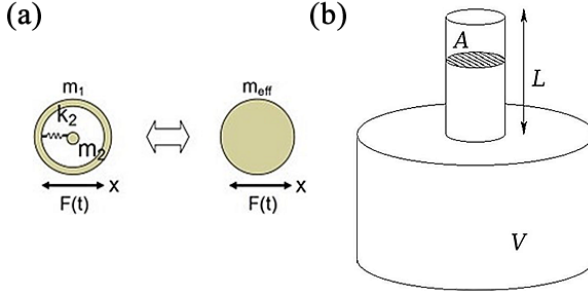
kütle yoğunluğu (ρ) ve bulk modülünün (β) çifte negatifliği, belirli bir monopolar ve dipolar rezonans frekans aralığında bir arada bulunmasından kaynaklanmaktadır. Bu iki parametreye bağlı kırılma indisi n ve empedans Z (D. Lee, Nguyen, & Rho, 2017) aşağıdaki ifadedeki gibidir.

$$n = \sqrt{\frac{\rho}{\beta}}, \quad Z = \sqrt{\rho\beta} \quad (1)$$

Kütle yoğunluğu, bir malzemenin birim hacimdeki kütlesini ifade eder ve doğal malzemelerde her zaman pozitifdir. Ancak akustik metamalzemelerde, yapı içindeki özel rezonatör düzenekleri nedeniyle kütle yoğunluğu belirli frekanslarda negatif olabilir (Z. Yang et al., 2008). Negatif etkin kütle, bir parçacığa itme kuvveti uygulandığında parçacığın kuvvet yönünün tersine ivmelenmesi anlamına gelir (Huang & Sun, 2009). Bu olgu, iç içe geçmiş iki kütle ve bir yaydan oluşan basit bir kütle–yay sistemi (Şekil 1(a)) ile açıklanabilir. Dıştan uygulanan bir kuvvet, sistem rezonans frekansına yakinken tüm yapıyı tek bir “etkin kütle” gibi davranmaya zorlar. Etkin kütle ifadesi:

$$m_{eff} = m_1 + \frac{m_2 k}{k - m_2 \omega^2} \quad (2)$$

olarak yazılabilir. Burada m_{eff} , sistemin dış kuvvet etkisi altındaki etkin kütlesidir ve rezonans frekansı civarında negatif değerlere ulaşabilir. m_1 , sistemin ana kütlesini temsil ederken, m_2 yay ile m_1 kütlesine bağlı küçük iç kütleyle gösterir. k parametresi, iki kütleyle birbirine bağlayan yay sabitini ifade eder ve sistemin elastik özelliklerini belirler. ω ise dış kuvvetin açısal frekansıdır ($\omega = 2\pi f$). Paydadaki ifade $k - m_2 \omega^2$, sistemin rezonans koşulunu belirler ve $\omega \approx \omega_0 = \sqrt{k/m_2}$ olduğunda etkin kütle negatif değer alabilir. Fiziksel olarak, bu durum küçük kütlenin ana kütleyle ters yönde hareket etmesi ve dış kuvvetin etkisiyle sistemin ters tepki vermesi anlamına gelir.

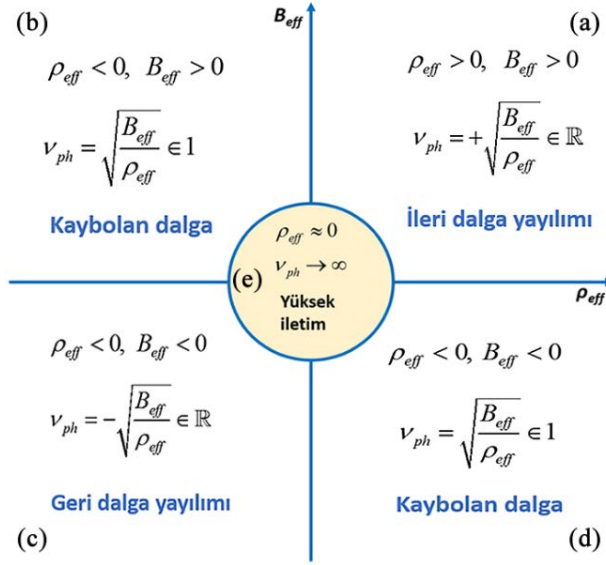


Şekil 1. (a) İç rezonatörlü kütle–yay sisteminin etkin kütle (m_{eff}) modeli (Huang & Sun, 2009). (b) Akustik metamalzeme birim hücreesine ait rezonatör–boşluk yapısının şematik gösterimi.

Negatif bulk modülü ise bir malzemenin dış basınca karşı genişlemesi anlamına gelir. Normal malzemelerde dış basınç uygulandığında hacim azalır ve bulk modülü pozitiftir. Fakat Helmholtz rezonatörü gibi akustik rezonatörler kullanıldığında, rezonans civarında dış basınç etkisi boşluğu genişletir ve etkin bulk modülü negatif olabilir (Fang et al., 2006; Li & Chan, 2004). Helmholtz rezonatörü (Şekil 1(b) için etkin bulk modülü:

$$B_{eff}^{-1} = B_0^{-1} \left[1 - \frac{F\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega} \right] \quad (3)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada B_{eff} , rezonans frekansı civarında negatif değer alabilen etkin bulk modülünü temsil eder. B_0 , malzemenin doğal bulk modülüdür ve normalde pozitif bir değere sahiptir. F , rezonatörün geometrisine bağlı bir katsayıdır ve sistemin yapısal özelliklerini yansıtır. ω_0 Helmholtz rezonatörünün doğal rezonans frekansını gösterir. Γ , rezonatördeki enerji sönümünü ifade eder ve karmaşık birim i ile birlikte sistemin faz kaymasını temsil eder. Fiziksel olarak, dış basınç rezonans frekansı civarında boşluğu genişleterek ters tepki oluşturur ve bu nedenle bulk modülü negatif görünür.



Şekil 2. Etkin parametrelere bağlı akustik dalga yayılım rejimleri.

Sonuç olarak, akustik metamalzemeler hem negatif etkin kütle hem de negatif bulk modülü gösterebildikleri için negatif kırılma ve olağanüstü akustik geçirgenlik gibi olağan dışı akustik davranışlara izin verirler. Akustik metamalzemeler için etkin kütle yoğunluğu ve bulk modülüne bağlı dalga yayılım davranışları Şekil 2’de (D. Lee, Nguyen, & Rho, 2017) gösterildiği gibi özetlenmiştir. Bu iki özellik bir arada bulunduğu "çift negatif" akustik ortam oluşur ve akustik dalgaların yayılımı tamamen kontrol edilebilir hâle gelir. Sıfıra yakın etkin kütle yoğunluğu sergileyen akustik metamalzemeler, herhangi bir yansıma ve faz değişikliği olmadan dalga yayılımına izin verir ve genellikle membran içeren yapılardır (Jing, Xu, & Fang, 2012; Xiao, Ma, Li, Yang, & Sheng, 2015). İnce delikli dairesel membranlar kullanılarak hem negatif yoğunluk hem de Helmholtz rezonatörleri ile negatif bulk modülü bir arada sağlanabilir; membranların gerginliği ve yarıçapları değiştirilerek bu parametreler ayarlanabilir (S. H. Lee, Park, Seo, Wang, & Kim, 2010). Bu sayede sıfıra yakın yoğunluk ve olağanüstü

akustik geçirgenlik gösteren metamateryaller elde edilir. Bu bölümde de benzer hedeflerle, düşük frekanslarda odak uzaklığı ayarlanabilen, membranlı dairesel delikler içeren kompakt bir akustik mercekle tasarlanmıştır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu çalışmada, sifıra yakın yoğunluk sergileyen membran kaplı dairesel kavitelere oluşan akustik metamateryale mercek tasarımı, Sonlu Elemanlar Yöntemi (FEM) (Yoon, Jensen, & Sigmund, 2007) kullanılarak sayısal olarak incelenmiştir. Tüm simülasyonlar COMSOL Multiphysics yazılımı kullanılarak üç boyutlu frekans alanında yürütülmüştür.

Akustik alanın modellenmesinde Pressure Acoustics, Frequency Domain arayüzü kullanılmıştır. Bu arayüz, akışkan ortamda yayılan harmonik akustik basınç dalgalarının frekans alanındaki davranışını tanımlamak üzere homojen olmayan Helmholtz denklemini çözer:

$$\nabla \left(-\frac{1}{\rho_c} (\Delta P - q) \right) - \frac{\omega^2 P}{\rho_c c_c^2} = 0 \quad (4)$$

Burada P akustik basınç, ρ_c ortam yoğunluğu, c_c ses hızı ve $\omega=2\pi f$ açısal frekans ve q hacimsel akustik kaynak terimini temsil etmektedir.

Membranların mekanik davranışı ise Solid Mechanics modülü kullanılarak modellenmiştir. Bu modül, doğrusal elastik katıların dinamik tepkisini tanımlayan hareket denklemini çözer:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \quad (5)$$

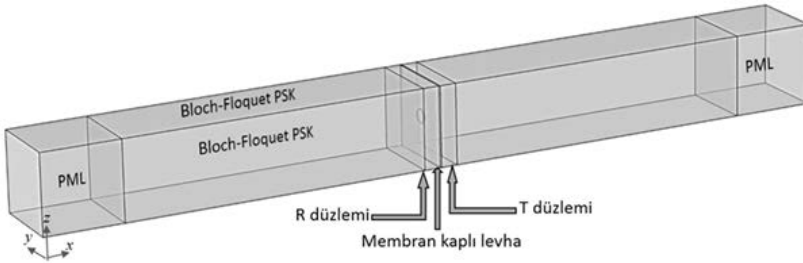
Burada $\boldsymbol{\sigma}$ gerilme tensörü, $\mathbf{f}$ hacimsel kuvvetler, ρ_s katı yoğunluğu ve $\mathbf{u}$ yer değiştirme vektörüdür. Gerilme–şekil değiştirme ilişkisi, doğrusal elastik ve izotropik malzeme

varsayımı altında Hooke yasası ile tanımlanmıştır. Membranlar alüminyum malzeme olarak kabul edilmiş ve frekans alanında dinamik analiz gerçekleştirilmiştir.

Akustik alan ile membranlar arasındaki etkileşim, akışkan-yapı etkileşimi (acoustic-structure interaction) çerçevesinde ele alınmış; akustik basınçtan kaynaklanan yükler membranlara aktarılırken, membran titreşimleri de akustik alanı geri beslemiştir. Bu sayede, rezonans etkileri ve sıfıra yakın etkin yoğunluk davranışı sayısal olarak analiz edilmiştir.

3.1. Sıfıra Yakın Yoğunluklu Dairesel Kavite Parametrelerinin Belirlenmesi

Dairesel kavitelerin akustik davranışlarını belirlemek için empedans tüpüne (C. Ding, Hao, & Zhao, 2010) sayısal olarak karşılık gelen dikdörtgen prizma biçiminde bir hesaplama hacmi (Şekil 3) kullanılmıştır. Sınır koşullarının doğru tanımlanabilmesi için hesaplama hacminin dış yüzeylerinde Perfectly Matched Layer (PML) uygulanmış, böylece geri yansımalar minimize edilmiştir. (Fang et al., 2006; Mei et al., 2008) Yan yüzeylerinde ise Bloch-Floquet periyodik sınır koşulları uygulanmıştır. Bu sayede sonsuz periyodik ortam koşulları sağlanmıştır.



Şekil 3. (a) Membran kaplı dairesel kavite için sıfıra yakın yoğunluğu göstermek için kullanılan hesaplama hacmi.

Mercek tasarımı için hedef rezonans frekansı $f_0 = 2190$ Hz olarak belirlenmiştir. Bu frekansta rezonans verecek şekilde, biri

membransız olmak üzere toplam beş farklı dairesel kavite geometrisi tasarlanmıştır. Membran kalınlıkları sırasıyla 70 µm, 100 µm, 150 µm ve 200 µm olarak seçilmiş (bu membran kalınlıkları ilerdeki deneysel çalışmalar göz önünde bulundurularak, piyasada bulabileceğimiz alüminyum levha kalınlıkları seçilmiştir.), her bir durum için uygun kavite yarıçapları frekans taraması ile belirlenmiştir. Membranlı yapıların temel titreşim kipine ait analitik rezonans frekansları Kirchhoff–Love ince levha teorisi (Denk. 6-7) kullanılarak doğrulanmıştır (Blevins, 2015).

$$f_{00} = \frac{\lambda_{00}^2}{2\pi r_c^2} \sqrt{\frac{E_{Al} t_m^3}{12\mu^{1-\nu_{Al}^2}}} \quad (6)$$

$$J_i(\lambda_\infty)I_{j+1}(\lambda_{00}) + I_i(\lambda_{00})J_{i+1}(\lambda_{00}) = 0 \quad (7)$$

Burada f_{00} temel titreşim kipinin rezonans frekansı, r_c , dairesel kavitenin merkezinden hesaplanan yarıçap, E_{Al} ve ν_{Al} sırasıyla alüminyum membranın Young modülü ve Poisson oranı, μ de membranın birim alan başına yoğunluğudur. J_i (Y_i) ve I_i (K_i) sırasıyla $i=0$ ve 1. mertebeden birinci (ikinci) tip Bessel ve modifiye Bessel fonksiyonlarıdır. Yukarıdaki membran kalınlıkları için Şekil 3'teki hesaplama modeli kullanılarak r_c yarıçapları FEM simülasyonları ile belirlenmiştir.

Her bir dairesel kavite için akustik iletim (T) ve yansıma (R) katsayıları hesaplanmış; bu değerler kullanılarak etkin kırılma indisi n_{eff} ve etkin empedans ζ_{eff} elde edilmiştir (Fokin, Ambati, Sun, & Zhang, 2007). Bunun için membran kaplı levhadan saçılan akustik basınç alanının Şekil 3'te R -düzlemi ve T -düzlemi olarak gösterilen alanlar üzerinde ortalaması alınmıştır. Sıfıra yakın yoğunluk davranışı, etkin parametrelerin rezonans frekansı çevresindeki değişimi üzerinden doğrulanmıştır. $r = \pm \sqrt{(R^2 - T^2 - 1) - 4T^2}$ ve $x = (1 - R^2 + T^2 + r)/2T$ olmak üzere,

$$n_{eff} = \frac{-i \log x + 2\pi m}{kd} \quad (8)$$

$$\xi_{eff} = \frac{r}{1-2R+R^2-T^2} \quad (9)$$

şeklinde hesaplanır (Fokin et al., 2007). Burada m ortam yoğunluklarının birbirine oranıdır. FEM simülasyonlarından elde edilen R ve T değişimleri Denklem 8 ve Denklem 9'u çözmek için yazılan MATLAB kodu kullanılarak elde edilmiş ve rezonans frekansı etrafında sıfıra yakın yoğunluk gösterilmiştir.

3.2. Kaviterin Mercek Üzerine Yerleştirilmesi ve Optimizasyonu

Kaviterin mercek üzerine yerleştirilmesi, Fresnel ilkesine dayandırılmıştır. Bu ilkeye göre, komşu iki açıklıktan yayılan dalgalar arasında bir dalga boyuna karşılık gelen yol farkının (yani 2π 'lik faz farkının) bulunması için Denklem 10'un sağlanması gerekir. Bu koşul yerine getirildiğinde, akustik enerji odak noktasında verimli bir biçimde yoğunlaştırılabilir. Bununla birlikte, mercek yapısında komşu açıklıklar arasında merceğin hemen üst bölgesinde $0 < \Delta\Phi < \pi/2$ aralığında bir faz farkı bulunduğundan, dairesel kaviterin merkezden uzaklıklarını ifade eden R_i yarıçapları buna göre belirlenmiştir.

$$R_i = \sqrt{\left(f_L + \left(\frac{\Delta\Phi}{360}\right)\lambda\right)^2 - f_L^2} \quad (10)$$

Burada f_L odak uzaklığını belirtir. $\Delta\Phi$ ise membranlı dairesel kaviterden membransız dairesel kavitenin faz farkını temsil etmekte olup $\Delta\Phi = \Phi_{membranlı} - \Phi_{membransız}$ şeklinde tanımlanmıştır. Membransız kavite, merceğin geometrik merkezine yerleştirilmiş ve faz hesaplarında referans olarak kabul edilmiştir. Kaviterin faz açıları, akustik basınç alanının frekans alanındaki sayısal çözümünden elde edilmiştir. Harmonik akustik basınç, karmaşık gösterimle $p = p_0 e^{i(kz - \omega t + \Phi)}$ şeklinde ifade edilmektedir. Buna karşılık akustik basıncın reel ve sanal

bileşenleri sırasıyla $Re(p) = \cos(kz - wt + \emptyset)$ ve $Im(p) = \sin(kz - wt + \emptyset)$ olarak tanımlanır. Her bir kaviteye ait faz açısı, ilgili konumdaki akustik basıncın reel ve sanal bileşenleri kullanılarak $\emptyset(z) = \tan^{-1}(Im(p(z))/Re(p(z)))$ ifadesiyle hesaplanmıştır. Bu yöntemle belirlenen faz farkları kullanılarak, aynı rezonans frekansında çalışan dört farklı dairesel kavitenin mercek üzerindeki konumlandırılması gerçekleştirilmiştir. Böylece akustik mercek geometrisi, farklı kavitelere yayılan dalgalar arasındaki faz ilişkileri dikkate alınarak oluşturulmuştur.

4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA

4.1. Membran Kaplı Dairesel Kaviteilerin İletim Özellikleri ve Etkin Parametreleri

Membransız dairesel kavite için 2190 Hz rezonans frekansına karşılık gelen yarıçap 20.4 mm olarak belirlenmiştir. Membranlı yapılarda ise alüminyum membran kullanılmış ve piyasada bulunabilen dört farklı kalınlık seçilmiştir (70 μm , 100 μm , 150 μm , 200 μm). Her bir membran kalınlığı için, 2190 Hz’de rezonans veren kavite yarıçapları hesaplanmıştır (Tablo 1).

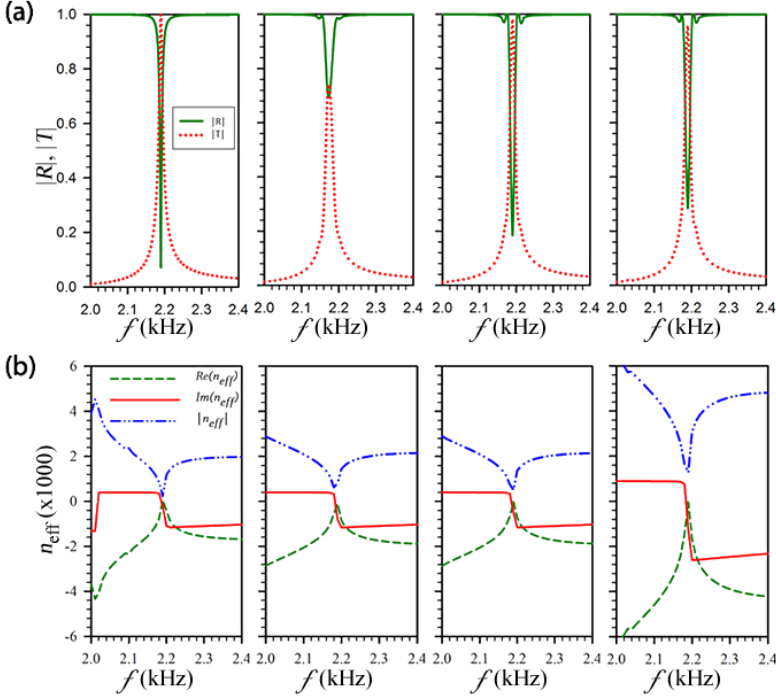
Tablo 1. Membran kaplı dairesel kaviteilerin 2190 Hz rezonans frekansı için hesaplanan yarıçap değerlerinin membran kalınlığı ile değişimi

$t_m (\mu\text{m})^a$	0	70	100	150	200
$r_c (\text{mm})^b$	20.4	8.8	10.6	13.0	15.0

^aMembran kalınlığı; ^bDairesel kavite yarıçapı

Tablo 1 sonuçlarına göre membran kalınlığı arttıkça, rezonans koşulunu sağlayan kavite yarıçapının da doğrusal şekilde arttığı görülmüştür. Ayrıca, tüm bu membran kaplı kavitelere ait iletim ve yansıma spektrumları incelenmiş ve her

bir yapının rezonans bölgesindeki akustik davranışları Şekil 4(a)'de gösterilmiştir. Bütün membran kalınlıkları için $f_0=2190$ Hz frekansında $|T|$, 1'e yaklaşırken $|R|$, 0'a yaklaşmaktadır. Rezonans iletim piki yarı genişliği 100 Hz mertebesinde. Bu durum f_0 'da olağanüstü akustik geçirgenliği göstermektedir.



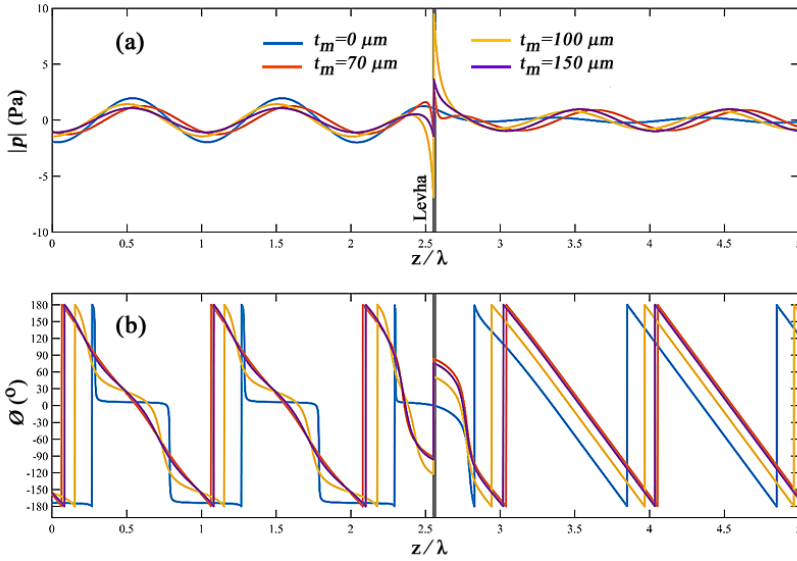
Şekil 4. Membranlı kavite için (a) iletim ve yansıma spektrumları ve (b) etkin kırılma indisinin frekans ile değişimi.

Şekilde 4(b), farklı membran kalınlıklarına sahip dairesel kavite için kırılma indisi n_{eff} 'nin frekansa bağlı değişimi gösterilmektedir; her panelde $Re(n_{eff})$, $Im(n_{eff})$ ve $|n_{eff}|$ birlikte sunulmuştur. Tüm yapılarda yaklaşık 2190 Hz civarında belirgin bir rezonans gözlenmekte olup bu frekans çevresinde $|n_{eff}|$ 'nin keskin bir minimuma indiği, $Re(n_{eff})$ 'nin hızla sıfıra yaklaştığı ve $Im(n_{eff})$ 'nin rezonans tepesine ulaştığı görülmektedir. Bu davranış, membran kaplı dairesel kavite için rezonans koşulunda sıfıra yakın yoğunluk (DNZ) rejimine girdiğini ve bu özelliğin

mercek tasarımının temel fiziksel mekanizmasını oluşturduğunu göstermektedir.

4.2. Membran Kaynaklı Faz Süreksizliğinin Gösterimi

Membran kaplı ve kaplı olmayan dairesel kaviterler için rezonans frekansında gerçekleştirilen FEM simülasyonlarının mutlak akustik basınç alanı sonuçları Şekil 5'te sunulmaktadır. Basınç alanı dağılımları incelendiğinde, membransız dairesel kavitede akustik dalgaların süreklilik göstererek ilerlediği, buna karşılık membran kaplı kaviterlerde geçişin süreksiz olduğu ve dalgaların kaviteyi geçerken belirgin bir faz değişimine uğradığı görülmektedir. Bu faz kayması davranışı, akustik mercekte tasarımında temel bir parametre olarak kullanılmıştır.



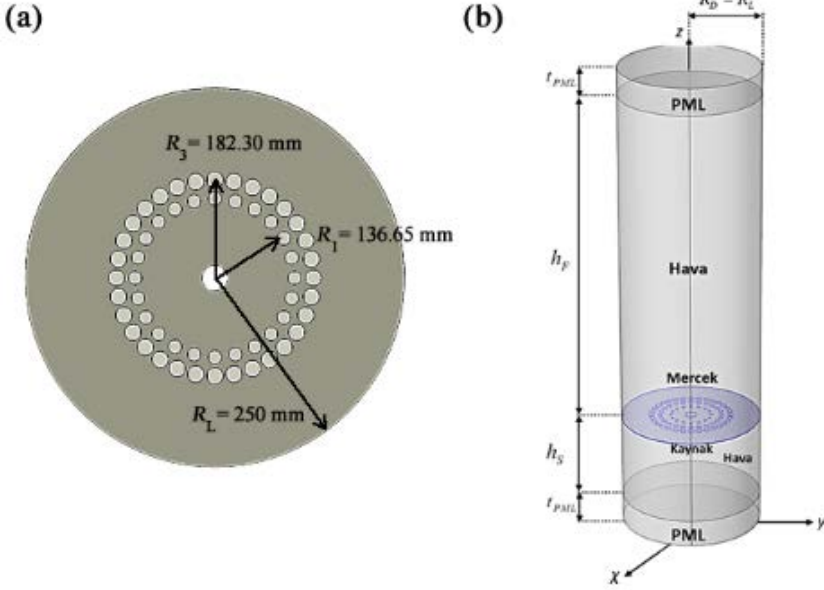
Şekil 5. Farklı membran kalınlıklarına sahip dairesel kaviterler boyunca normalize edilmiş konum z/λ ekseninde (a) mutlak akustik basınç genliği $|p|$ ve (b) faz açısı Φ dağılımları.

Şekil 5(a)'da membransız kavitede akustik basınç alanının uzaysal olarak sürekli değiştiği, membran kaplı kaviterlerde ise membran düzlemi civarında genlikte belirgin bir süreksizlik

oluştugu görölmektedir. Bu durum, membranın rezonansla birlikte dalga-yapı etkileşimini güçlendirdiğini göstermektedir. Şekil 5(b)'de membransız yapıda fazın sürekli ilerlediği, membran kaplı kavitelerde ise membran konumunda ani faz sıçramalarının meydana geldiği gözlenmektedir. Membran kalınlığına bağlı olarak değişen bu faz gecikmeleri, akustik dalganın kontrollü biçimde yönlendirilmesine olanak sağlamaktadır.

4.3. Faz İlişkilerine Dayalı Mercek Optimizasyonu ve Odaklama Davranışı

Akustik mercek kalınlığı 2 mm seçilmiş ve dairesel kaviteler, odak uzaklığı $f_L=200$ mm'de faz farkları dalga boyunun tam katlarına karşılık gelecek biçimde yerleştirilmiştir. Referans olarak alınan membransız dairesel kavite merceğin merkezine konumlandırılmış ($R_0=20,40$ mm) ve diğer membranlı kavitelerin merkezden uzaklıkları Denklem 10'a göre hesaplanmıştır. 70 μm , 100 μm , 150 μm ve 200 μm kalınlığında membrana sahip kavitelerin merkezden uzaklıkları sırası ile $R_1=136,3554$ mm, $R_2=173,2275$ mm, $R_3=182,2931$ mm ve $R_4=165,0125$ mm elde edilmiştir. Hesaplanan konumlar incelendiğinde, bazı kavitelerin geometrik olarak çakıştığı görölmüş; bu nedenle tasarımda yalnızca 70 μm membranlı kaviteler R_1 uzaklığa 24 adet, 150 μm membranlı kaviteler ise R_3 uzaklığa 32 adet olacak şekilde yerleştirilmiştir (Şekil 6(a)). Kavite sayıları, her bir halka üzerinde iletimi maksimize edecek biçimde seçilmiş ve mercek yarıçapı $R_L=250$ mm olarak belirlenmiştir.

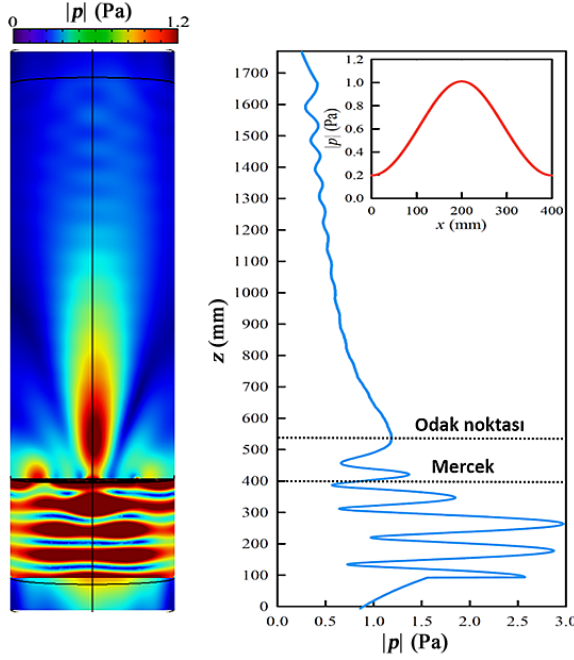


Şekil 6. (a) Tasarlanan akustik merceğin şematik görüntüsü. (b) tasarlanan akustik merceğin FEM simülasyon alanı.

Tasarlanan akustik merceğin belirli bir frekansta odaklama özelliklerini sayısal olarak incelemek için kullanılan hesaplama hacmi Şekil 6(b)'da görülmektedir. Burada mercek silindirik hesaplama hacmi tabanından $h_S = 2\lambda$ yukarıya konumlandırılmıştır. Ayrıca, merceğin üzerinde $h_F = 8\lambda$ yüksekliğinde hava bölgesi bulunmaktadır. Düzlem dalga uyarımı, merceğin alt bölgesinde tanımlanan bir arka plan basınç alanı aracılığıyla sağlanmıştır. Açık alan koşullarını doğru biçimde temsil edebilmek ve yapay yansımaları önlemek amacıyla, hesaplama hacmi z doğrultusunda PML ile sonlandırılmıştır. Radyal doğrultuda ise düzlem dalgalar için soğurucu sınır koşulları uygulanmıştır. Ağ yapısı, hesaplama alanının farklı bölgelerine uyarlamalı olarak atanmıştır. Hava bölgelerinde eleman boyutu dalga boyunun en fazla $\lambda/10$ 'u olacak şekilde seçilirken, membran ve kavite bölgelerinde daha sık bir ağ yapısı kullanılmıştır. Bu yaklaşım, sayısal doğruluğu artırırken hesaplama verimliliğinin korunmasını sağlamıştır.

4.4. Akustik Merceğin Odaklama Performansı

Fabry–Pérot rezonansı içeren ve dairesel kavitelere oluşan nihai mercek tasarımı akustik mercek performansı Şekil 6(a)'da verilen hesaplama hacmi içinde gerçekleştirilmiştir. Şekil 7(a)'da tasarlanan akustik merceğin 2190 Hz frekansında keskin bir odaklama davranışı sergilendiğini görülmektedir. Akustik ekseninden geçen kesit düzlemindeki basınç dağılımı ve eksen boyunca basınç değişimi birlikte incelendiğinde, odak noktasında normalize edilmiş basınç genliğinin yaklaşık $p/p_0 = 1.2$ olduğu hesaplanmıştır (Şekil 7(b)).



Şekil 7. Dairesel kavitelere oluşan ve Fabry–Pérot (FP) rezonansı içeren mercede, (a) akustik basıncın mutlak değerinin akustik ekseninden geçen kesit düzlemindeki dağılımı; (b) akustik basıncın akustik eksen boyunca ve odak düzlemindeki değişimi.

Elde edilen sonuçlar, klasik Fresnel merceklerinde mercek kalınlığı dalga boyunun yarısı mertebesinde iken, bu çalışmada tasarlanan merceğin dalga boyunun yaklaşık $1/78$ 'i kalınlığında

olduğunu göstermektedir. Ayrıca mercek yarıçapı, klasik Fresnel merceğine kıyasla yaklaşık %80 oranında küçültülmüştür.

Sonuç olarak bu çalışmada, membran kaplı dairesel kavitelere oluşan bir akustik mercek tasarlanmış ve periyodik kaviterlerin rezonans frekansında sıfıra yakın etkin yoğunluk ve olağanüstü akustik geçirgenlik sergilediği sayısal olarak gösterilmiştir. Faz analizleri, membran kaplı ve kaplı olmayan kaviterler arasında kontrollü faz farklarının oluştuğunu ve membran düzleminde meydana gelen faz süreksizliklerinin mercek tasarımında etkin biçimde kullanılabildiğini ortaya koymuştur. Merkez etrafında iki sıra dairesel kavite içeren yapı, kırınım limitine yakın odaklama performansı sergilemiş; geleneksel Fresnel merceklerle karşılaştırıldığında dalga boyuna göre oldukça küçük boyutlara sahip olduğu gösterilmiştir. Ayrıca, odak mesafesinin membran kalınlığı ve kavite yarıçapı gibi geometrik parametreler aracılığıyla ayarlanabileceği öngörülmektedir. Bu özellikler, tasarlanan akustik merceğin tıbbi görüntüleme, HIFU tabanlı tedaviler, su altı uygulamaları ve kontrollü ses yönlendirme gerektiren akustik sistemler için önemli bir potansiyele sahip olduğunu göstermektedir.

KAYNAKLAR

- Blevins, R. D. (2015). *Formulas for dynamics, acoustics and vibration*: John Wiley & Sons.
- Craster, R. V., & Guenneau, S. (2012). *Acoustic metamaterials: negative refraction, imaging, lensing and cloaking* (Vol. 166): Springer Science & Business Media.
- Deng, K., Ding, Y., He, Z., Zhao, H., Shi, J., & Liu, Z. (2009). Graded negative index lens with designable focal length by phononic crystal. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 42(18), 185505.
- Deymier, P. A. (2013). *Acoustic metamaterials and phononic crystals* (Vol. 173): Springer science & Business media.
- Ding, C., Hao, L., & Zhao, X. (2010). Two-dimensional acoustic metamaterial with negative modulus. *Journal of Applied Physics*, 108(7).
- Ding, Y., Liu, Z., Qiu, C., & Shi, J. (2007). Metamaterial with simultaneously negative bulk modulus and mass density. *Physical review letters*, 99(9), 093904.
- Fang, N., Xi, D., Xu, J., Ambati, M., Srituravanich, W., Sun, C., & Zhang, X. (2006). Ultrasonic metamaterials with negative modulus. *Nature materials*, 5(6), 452-456.
- Fok, L., Ambati, M., & Zhang, X. (2008). Acoustic metamaterials. *MRS bulletin*, 33(10), 931-934.
- Fokin, V., Ambati, M., Sun, C., & Zhang, X. (2007). Method for retrieving effective properties of locally resonant acoustic metamaterials. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 76(14), 144302.
- Huang, H., & Sun, C. (2009). Wave attenuation mechanism in an acoustic metamaterial with negative effective mass density. *New Journal of Physics*, 11(1), 013003.

- Jing, Y., Xu, J., & Fang, N. X. (2012). Numerical study of a near-zero-index acoustic metamaterial. *Physics Letters A*, 376(45), 2834-2837.
- Kaya, O. A., Cicek, A., & Ulug, B. (2011). Focusing with two-dimensional angular-symmetric circular acoustic lenses. *Acoustical Physics*, 57(3), 292-300.
- Ke, M., Liu, Z., Qiu, C., Wang, W., Shi, J., Wen, W., & Sheng, P. (2005). Negative-refraction imaging with two-dimensional phononic crystals. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 72(6), 064306.
- Khelif, A., Choujaa, A., Benchabane, S., Djafari-Rouhani, B., & Laude, V. (2004). Guiding and bending of acoustic waves in highly confined phononic crystal waveguides. *Applied physics letters*, 84(22), 4400-4402.
- Körözlü, N. (2017). FONONİK KRİSTAL KAPLAMA İLE GÖSTERİ SALONLARINDA AKUSTİK YALITIMIN SAYISAL İNCELENMESİ. *Dokuz Eylül Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fen ve Mühendislik Dergisi*, 19(56), 681-692.
- Lee, D., Nguyen, D. M., & Rho, J. (2017). Acoustic wave science realized by metamaterials. *Nano convergence*, 4(1), 3.
- Lee, S. H., Park, C. M., Seo, Y. M., Wang, Z. G., & Kim, C. K. (2010). Composite acoustic medium with simultaneously negative density and modulus. *Physical review letters*, 104(5), 054301.
- Li, J., & Chan, C. T. (2004). Double-negative acoustic metamaterial. *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 70(5), 055602.
- Li, J., Fok, L., Yin, X., Bartal, G., & Zhang, X. (2009). Experimental demonstration of an acoustic magnifying hyperlens. *Nature materials*, 8(12), 931-934.

- Liu, X.-J., & Fan, Y.-H. (2013). Band structure characteristics of T-square fractal phononic crystals. *Chinese Physics B*, 22(3), 036101.
- Maldovan, M. (2013). Sound and heat revolutions in phononics. *nature*, 503(7475), 209-217.
- Martin, T. P., Nicholas, M., Orris, G. J., Cai, L.-W., Torrent, D., & Sánchez-Dehesa, J. (2010). Sonic gradient index lens for aqueous applications. *Applied physics letters*, 97(11).
- Martínez-Sala, R., Rubio, C., García-Raffi, L. M., Sánchez-Pérez, J. V., Sánchez-Pérez, E. A., & Llinares, J. (2006). Control of noise by trees arranged like sonic crystals. *Journal of sound and vibration*, 291(1-2), 100-106.
- Mei, J., Hou, B., Ke, M., Peng, S., Jia, H., Liu, Z., . . . Sheng, P. (2008). Acoustic wave transmission through a bull's eye structure. *Applied physics letters*, 92(12).
- Peng, S., He, Z., Jia, H., Zhang, A., Qiu, C., Ke, M., & Liu, Z. (2010). Acoustic far-field focusing effect for two-dimensional graded negative refractive-index sonic crystals. *Applied physics letters*, 96(26).
- Sukhovich, A., Jing, L., & Page, J. H. (2008). Negative refraction and focusing of ultrasound in two-dimensional phononic crystals. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 77(1), 014301.
- Vasseur, J. O., Hladky-Hennion, A.-C., Djafari-Rouhani, B., Duval, F., Dubus, B., Pennec, Y., & Deymier, P. A. (2007). Waveguiding in two-dimensional piezoelectric phononic crystal plates. *Journal of Applied Physics*, 101(11).
- Xiao, S., Ma, G., Li, Y., Yang, Z., & Sheng, P. (2015). Active control of membrane-type acoustic metamaterial by electric field. *Applied physics letters*, 106(9).

- Yang, S., Page, J. H., Liu, Z., Cowan, M. L., Chan, C. T., & Sheng, P. (2004). Focusing of sound in a 3D phononic crystal. *Physical review letters*, 93(2), 024301.
- Yang, Z., Mei, J., Yang, M., Chan, N., & Sheng, P. (2008). Membrane-type acoustic metamaterial with negative dynamic mass. *Physical review letters*, 101(20), 204301.
- Yoon, G. H., Jensen, J. S., & Sigmund, O. (2007). Topology optimization of acoustic–structure interaction problems using a mixed finite element formulation. *International journal for numerical methods in engineering*, 70(9), 1049-1075.
- Zhang, X., & Liu, Z. (2004). Negative refraction of acoustic waves in two-dimensional phononic crystals. *Applied physics letters*, 85(2), 341-343.

STRUCTURE OF LIQUID NI-TE SEMICONDUCTORS: AN INTEGRAL EQUATION APPROACH

Fatma KOSOVALI ÇAVUŞ¹

Şükran YAMAN ATCI²

In this chapter, the static structures of liquid NiTe and liquid NiTe₂ semiconductors are discussed using the Vanishta–Raman type potential and Hypernetted-Chain approach within the framework of liquid-state theories. First, the results obtained for the liquid NiTe system are compared with the experimental data, and then a similar approach is applied to the NiTe₂ system. The chapter is completed with an evaluation of the common and different structural features of both systems.

1. INTRODUCTION

The physical properties of NiTe and NiTe₂ semiconductors remain largely unexplored. The static structures of both semiconductor compounds are examined in the liquid phase at a temperature close to the melting temperature.

While its static structure is vastly unlike that of basic metallic liquids, liquid tellurium shows electrical activity somewhat between metallic and semiconducting systems. Thus, an interesting class of liquid

¹ Dr. Öğr. Üyesi Haliç Üniversitesi, Meslek Yüksek Okulu, Elektronik Teknolojisi, ORCID: 0000-0003-2725-2876.

² Dr. Öğr. Üyesi, Haliç Üniversitesi, Meslek Yüksek Okulu, Bilgisayar Programcılığı, ORCID: 0000-0002-6600-4157.

semiconductors using transition metals are those based on tellurium.

Early experimental investigations of liquid NiTe and NiTe₂ were performed in 1981, V.T.Nguyen et al. (1982) examined the static structure of liquid NiTe and NiTe₂ by applying neutron scattering experiments. Beloshchenko and Ostrovsk (2005) reconsidered these liquid nickel tellurides and studied the structures of these systems using the inverse Monte Carlo simulation using the neutron scattering results of Nguyen et al. In their study, the interaction potential between Ni and Te ions was determined using experimental data and the pair distribution functions found as a result of the simulation were compared with the experimental results.

Research in the last decade has gained new momentum, especially with the identification of the NiTe₂ system as a 'Type-II Dirac Semimetal'. In their study published in Physical Review B, Dutta et al. (2021) examined the electronic state density (DOS) of this material, revealing the decisive role of the atomic arrangement in its crystal structure on electronic properties. Similarly, Wang and his team (2020) analyzed the high environmental stability and conductivity mechanisms of Ni-Te systems with modern spectroscopic methods. In terms of liquid state theories, published studies on tellurium-based alloys by researchers such as Tezgor (2020) have proven that the VMHNC and HNC approaches for determining static structure are highly correlated with experimental neutron scattering data and are indispensable in understanding the short-range order in the liquid phase.

2. THEORETICAL FOUNDATIONS AND MODELING

Several methods have been developed with different points of view to explain the structure of the liquid state. Time-independent or static expression is based not only on thermodynamic or equilibrium properties, but also on steady-state transport coefficients such as the self-diffusion coefficient and viscosity coefficient. These coefficients are measured over long times and distances on the molecular scale, and their values do not change over time. Dynamic expression is based on features whose measured values depend on the time scale or the frequency of the observation. (Akdere, 2006.; Çilli, 1992; Shimoji, 1977)

2.1. Integral Equation Approach Ornstein–Zernike (OZ) Equation and Direct Correlation Function $c(r)$

In general, three different types of correlation functions can be identified: the pair distribution function $g(r)$, the direct correlation particles $c(r)$, and the total correlation function $h(r)$. The direct correlation function $c(r)$ $\varphi(r)$ relates between the short-range portion of the interaction potential and the long-range portion of $h(r)^2$. The OZ equation expresses the total correlation function $h(r)$ in terms of the direct correlation function $c(r)$ as follows.

$$h(r) = c(r) + \rho \int c(|r - r'|)h(r'), dr' \quad (1)$$

(Öztek, 2005)

2.2. Hypernetted-Chain (HNC) Approach

To calculate thermodynamic quantities in terms of $c(r)$ and $g(r)$, a closing relationship is required in addition to the OZ equation. These relationships are called integral equation approximations. The Hypernetted-Chain (HNC) closure is given as follows

$$c(r) = h(r) - \ln[g(r)] - \beta\phi(r) \quad (2)$$

Or equivalently

$$g(r) = \exp[-\beta\phi(r) + h(r) - c(r)] \quad (3)$$

Here is $\beta = 1/k_B T$. The HNC approach is known for giving better results than the Percus-Yevick (PY) approach, especially in systems such as ionic liquids, where long-range forces dominate

2.3. Potential Model: The Potential of Vanishta-Raman (VR)

The study used the Vanishta-Raman (VR) potential, which partially considers ionic interactions, to study the static structures of molten NiTe and NiTe₂. VR potential is a generalization of the Inverse Power Potential (IPP) model, which is frequently used for metallic systems. The interaction potential between two ions is given by the following formula $\varphi_{\alpha\beta}(r)$ (Akdere, 2006)

$$\varphi_{\alpha\beta}(r) = \frac{H_{\alpha\beta}}{r^{\eta_{\alpha\beta}}} + \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}}{r} - \frac{P_{\alpha\beta}}{r^4} - \frac{C_{\alpha\beta}}{r^6} \quad (4)$$

Here

$$H_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha} + \sigma_{\beta})^{\eta_{\alpha\beta}} \quad (5)$$

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\alpha_{\alpha}Z_{\beta}^2 + \alpha_{\beta}Z_{\alpha}^2) \quad (6)$$

$$C_{\alpha\beta} = \frac{3}{2} \frac{\alpha_{\alpha}\alpha_{\beta}E_{\alpha}E_{\beta}}{E_{\alpha}+E_{\beta}} \quad (7)$$

2.4. Structure Factors: Faber-Ziman (FZ) and Bhatia-Thornton (BT) Partial Structure Factors

The total structure factor of a two-component fluid is written in terms of $S(Q)$, while the partial structure factors are written in terms of $S_{\{ij\}}(Q)$. These partial structure factors are

expressed in two different representations: Faber-Ziman (FZ) and Bhatia-Thornton (BT) partial structure factors

Faber-Ziman (FZ) notation focuses on the pairwise correlations between atoms (Ni-Ni, Ni-Te, and Te-Te) $S_{\{ij\}}^{\{FZ\}}(Q)$ is connected to the partial distribution function $h_{\{ij\}}$ by the following relationship.

$$S_{\{ij\}}^{\{FZ\}}(Q) = \delta_{\{ij\}} + \rho(c_i c_j)^{1/2} \int e^{-iQr} h_{\{ij\}}(r), dr \quad (8)$$

The Bhatia-Thornton (BT) notation,

The Bhatia–Thornton (BT) notation is utilized to identify density–density $S_{NN}(Q)$ density–composition $S_{NC}(Q)$ and concentration $S_{CC}(Q)$ fluctuations as its direct link with thermodynamic response functions makes it preferable for theoretical investigations of liquid alloys.

3. COMPUTATIONAL FRAMEWORK AND SYSTEM PARAMETERS

In this study, the static structures of liquid NiTe and NiTe₂ semiconductors are investigated by means of the Hypernetted-Chain (HNC) approach, one of the liquid state theories. The basic physical parameters (temperature, atomic density) used for the studied systems are taken from experimental studies.

3.1. Physical Parameters of the Systems Studied

A temperature close to the melting temperature was selected to investigate the static structures of liquid NiTe and NiTe₂ systems. The basic physical parameters for these systems, such as temperature (T) and average number density (ρ), are taken from experimental studies in the literature. These determined values are presented in the relevant Tables.

3.2. Vanishta-Raman (VR) Potential Parameters

Binary interactions in nickel telluride systems need to be modeled with an appropriate effective potential form. Since the experimental results showed that the bonding between ions in these systems was partially ionic, the Vanishta–Raman (VR) potential form was previously used, which models the interactions in partially ionic systems quite well. The effective charges and other parameters contained in the potential function are listed in detail in the Tables in the original text of the thesis.

3.3. Numerical Solution Method

The Ornstein-Zernicke (OZ) integral equation, which forms the basis of all liquid state theories, has been solved with the HNC approach, which is known to give good results for ionic systems. Fourier transforms are used to solve the OZ integral equation using the HNC closing relation. The solution of this equation was made by editing the computer program written earlier for these systems.

3.4. Calculation of the Number of Coordinations

From the pair distribution function $g_{ij}(r)$, which describes the pairwise correlations between atoms, the coordination number (n_{ij}) is obtained. The coordination number (n_{ij}) is found by integrating the pair distribution function $g_{ij}(r)$. In this calculation, the value of $r_{\min}$, which is the upper limit of the integral, is the distance at which the first minimum point of the curve $g_{ij}(r)$ after its first peak is located.

4. FINDINGS AND DISCUSSION

4.1. Static Structure of Liquid NiTe Semiconducto

In order to investigate the liquid structure of the NiTe semiconductor, the Vanishta–Raman (V–R) type potential

function was preferred to model the interactions. The reason for choosing this potential is to obtain the conclusion that NiTe forms a bond in the covalent structure from the experimental structure results. (Nguyen, Gay, Enderby, Newport, & Howe, 1982) However, in this approach, the treatment of ions as spherical particles that do not change shape stands out as an assumption that limits the sensitivity of cation-cation correlations.

The main parameters to be determined in this potential are the strength of the repulsive interaction $A_{\alpha\beta}$, hardness $\eta_{\alpha\beta}$, effective charges $Z_{\alpha,\beta}$ and ionic radii. $\sigma_{\alpha\beta}$ Ionic radii σ_+ and σ_- crystal structure are calculated from the crystal structure with the idea that anion-cation and anion-anion contact are calculated and given in Table 2.1. Assuming that the contribution of each ionic contact to the repulsive potential is the same, i.e. $A_{\alpha\beta} = A$ and $\eta_{\alpha\beta} = \eta$, the number of unknown parameters has been reduced and the three parameters to be determined are Z , A , and η . These can also be found from the analysis of the results of effective charge phonon scattering experiments. Since this potential is a semi-empirical potential, Z can also be treated as an adjust Table parameter (usually).

While there is no exact method for determining the other parameters, if one of them is set, the last remaining parameter, usually A , can be found by using only one or three of the following relationships:

$$E(a)=E(a_0) \quad (9)$$

$$\left| \frac{dE(a)}{da} \right|_{a=a_0} = 0 \quad (10)$$

$$\left| \frac{d^2E(a)}{da^2} \right|_{a=0} = \frac{1}{VK_T} \left(\frac{dV}{da} \right)^2 \quad (11)$$

where $E(a)$ is the energy per unit cell, equation 9 is cohesive energy, equation 10 is lattice stability, and equation 11 is the

relationship between lattice energy and compressibility at low temperatures .Parameter optimization has therefore been carried out to prioritize not only crystal phase stability but also the short-range behavior of experimental radial distribution functions obtained in the liquid phase. While determining the parameters here, the parameter combination that will give the best agreement with the experimental structure results was selected.

The strength, hardness, effective charges and ionic radii of the repulsive interaction to be determined in the potential are calculated from the crystal structure and given in Table 2.1. The potential parameters calculated using these data are presented in Table 2.2.

Table 2.1. NiTe and NiTe₂ System Data Table

Crystal structure lengths (Å)(Wyckoff, 1965)	$a_0 = 3.95$ $b_0 = 5.34$
$E_{NI}(e^2/A)$ (Kittel, 1996)	0.0
$E_{TE}(e^2/A)$	0.3694
$ Z_- $	0.5
α_α	0.0
α_β	14.0

Here $\alpha_{\alpha\beta}$, polarizability refers to E, electron affinity or ionization energy, and a_0 and b_0 to the primitive cell lengths of the crystal structure. The V-R potential parameters calculated from the data in this Table are presented in Table 2.2. In this study, it $|Z_+| = |Z_-| = 0.5$ was selected as one of the effective loads and was taken to meet the electrical neutrality requirement $c_+ = 1/2$ $c_- = 1/2$.The potential generated by the parameters given in Table 2.2 is shown comparatively in Figure 2.1 for different effective load value.The interaction potentials generated using the parameters given in Table 2.2 are presented in Figure 2.1. Likewise, for comparison, a second potential, also with the form Vashishta–Rahman (VR), shown by a dashed line, but with an effective charge value of $Z = 1.8$, was added to the figure. This

charge value was reported as the value in which the structural results obtained by Belashchenko and Ostrovsky using scattering data using the reverse Monte Carlo method provided the best agreement with the experimental data.

Table 2.2. NiTe System Potential Parameters

$\varphi_{\alpha\beta}$	$\eta_{\alpha\beta}$	$A_{\alpha\beta}$	$\sigma_{\alpha} + \sigma_{\beta}$	$H_{\alpha\beta}$	$P_{\alpha\beta}$	$C_{\alpha\beta}$
Ni-Ni	7	0.015	1.38	0.1	0.0	0.0
Te-Te	7	0.015	4.14	312.67	3.5	54.32
Ni-Te	7	0.015	2.76	18.3	1.75	0.0

When these graphs are examined, it is seen that Ni-Ni and Te-Te interactions are different at close range. This is because their atomic radii are different. However, since their effective charges are the same, charge symmetry is maintained over long distances and Coulomb interactions are dominant here. Therefore, the Ni-Ni and Te-Te potentials show a similar behavior. In addition, the distance value r when the potential is minimum is $2.35 \text{ \AA}$. As can be seen from this Table 2.2, this value is almost as much as the nearest anion-cation distance.

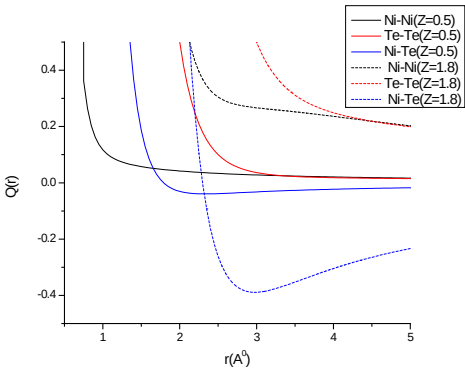


Figure 2.1. Comparison of potential values with different loads

The static structure of the molten NiTe system is obtained by solving the Ornstein–Zernike integral equation with the HNC

approximation. The calculations were performed just above the melting temperature of NiTe, at a temperature of $T = 1203$ K, and a number density of $n = 0.039$. The results obtained were compared with the neutron scattering experiment and Reverse Monte Carlo results. The double dispersion functions obtained from HNC are given in Figure 2.2 along with the neutron scattering experiment results.

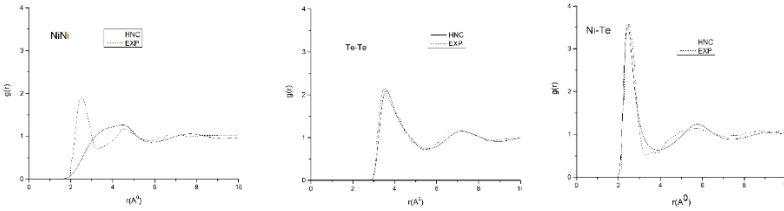


Figure 2.2. Radial distribution for experimental and HNC for NiTe systems Comparison of functions

These results reveal the agreement of Ni–Te and Te–Te pair correlations with experimental data, while showing that the structural order of the Ni–Ni pair exhibits a more complex character. As can be seen from Figure 2.2, the Te–Te and Ni–Te pair distribution functions are almost perfectly consistent with the experimental results. On the other hand, incompatibilities are observed in the Ni–Ni pair distribution function, especially in the region up to the middle range. While there are two distinct peaks in the experimental $g_{NiNi}(r)$ function at approximately 2.54 Å and 4.5 Å, HNC results reveal a large peak structure in which these two peaks are combined. Such combined peak behavior is consistent with a known limitation in the literature that shows that the HNC approach cannot adequately distinguish cation–cation correlations, especially in partially covalent fluids containing transition metal.

The coordination numbers are given in Table 2.3. The HNC results for the Ni–Te and Te–Te pairs appear to be quite

close to the experimental results. In contrast, for the Ni–Ni pair, the total coordination number of the two experimentally obtained peaks is about 15, while the value obtained in the HNC results is about 13. This shows that the large peak structure can be interpreted as the combination of two experimental peaks.

This difference may be associated with the fact that Ni atoms have higher mobility in the liquid phase, and their local environment becomes less pronounced in the time average.

Table 2.3. Coordination numbers

	Ni-Ni	Ni-Te	Te-Te
Solid	2	6	4
Liquid-Exp	1.Peak=2.9 2.Peak=12	1.Peak=4.5	1.Peak=10
Liquid-HNC	1.Peak=12.56	1.Peak=4.58	1.Peak=11.66

Figure 2.3 shows the HNC results obtained by taking the effective load $Z = 1.8$. The functions $g(r)$ calculated for this charge value appear to be incompatible with the experimental results and exhibit solid-state-like behavior over short distances. This points to the limitations of the effective load value or method used in Reverse Monte Carlo calculations. This is due to the fundamental difference between the inverse Monte Carlo method prioritize mathematical fit to experimental data, whereas the HNC approach requires a physically significant interaction potential.

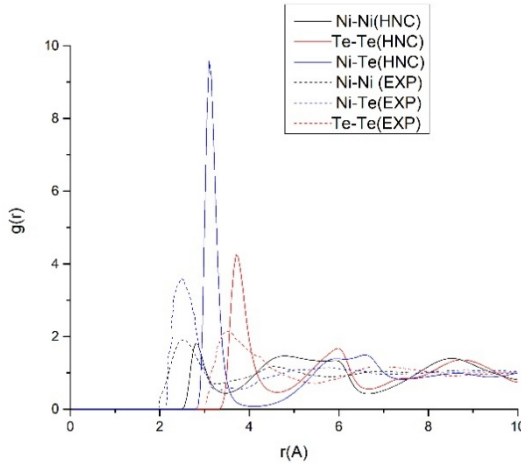


Figure 2.3 Experiment for NiTe systems taking $Z=1.8$ and radial distribution for HNC Comparison of functions

Partial structure factors were calculated by taking the fourier transform of the correlation function obtained by the HNC approach with the help of the Gilan method. The partial structure factors obtained are given in Figure 2.4. Here, we can say that Faber-Ziman structural factors are in harmony when compared. S_{++} and S_{--} its first pit coincides with the same distance r . S_{+-} corresponds to a value between them. It S_{++} fades to about $2.3 \text{ \AA}^0$. It fades at a distance of S_{--} approximately $5.8 \text{ \AA}^0$ r . S_{++} , S_{--} which is characteristic of such systems. At the same time, this is proof that cation ions are more mobile. According to the results compared with the experimental data, we see that there are differences in Ni-Ni systems and mismatch is the main problem. The V-R potential has not been able to provide a solution to this problem.

This behavior is a general structural feature that points to the cation sublattice exhibiting weaker short-range order in liquid semiconductors compared to the anion network.

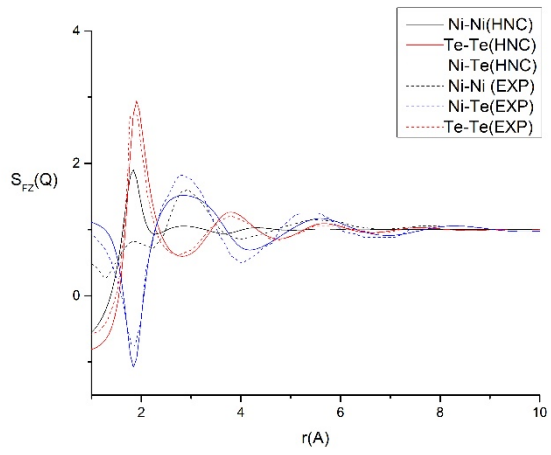


Figure 2.4 Comparison of FZ partial structure factors for experimental and HNC for NiTe systems

4.2. Static Structure of Liquid NiTe₂ Semiconductor

V–R type potential was also used to examine the liquid structure of the NiTe₂ semiconductor. The reason for this preference is that it is inferred from the experimental data that NiTe₂ forms covalent bonds, as in the NiTe system. The data used to determine the potential parameters are given in Table 2.1 and the calculated parameters are given in Table 2.5. In this study, it was selected as one of the effective loads $|Z_+| = |Z_-| = 0.5$ and was taken $c_+ = 1/3$ $c_- = 2/3$ to meet the electrical neutrality requirement.

Table 2.4. NiTe₂ System Potential Parameters

$\varphi_{\alpha\beta}$	$\eta_{\alpha\beta}$	$A_{\alpha\beta}$	$\sigma_{\alpha} + \sigma_{\beta}$	$H_{\alpha\beta}$	$P_{\alpha\beta}$	$C_{\alpha\beta}$
Ni-Ni	11	0.015	1.38	0.1	0.0	0.0
Te-Te	7	0.015	4.14	312.67	3.5	54.32
Ni-Te	9	0.015	2.76	18.3	1.75	0.0

The potential generated with the parameters given in Table 2.4 is shown in Figure 2.5 for the effective charge value $Z = 0.5$.

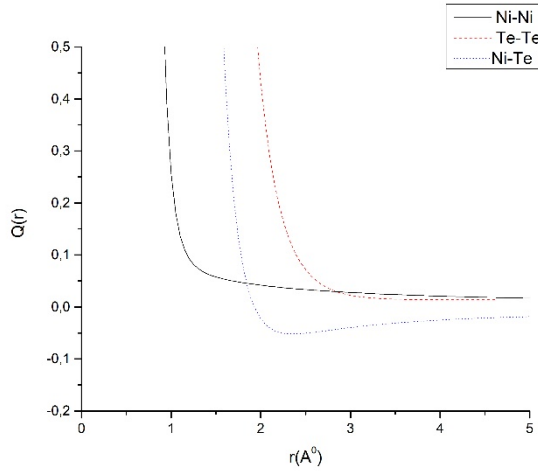


Figure 2.5. Potential values for NiTe 2 systems by taking $Z=0.5$

From this figure, it is seen that Ni-Ni and Te-Te interactions behave differently at short distances and similarly at long distances. The minimum potential is approximately $r = 2.26$ Å, which corresponds to the nearest anion–cation distance.

The static structure of the molten NiTe₂ system is obtained using the HNC approximation at a temperature of $T = 1203$ K and a number density of $n = 0.033$. The pair-distribution functions obtained from HNC are given in Figure 2.6 along with the experimental results. From this figure, it is seen that the Ni–Te pair reaches a higher peak value at a shorter distance, while the Ni–Ni pair has a lower peak value. This suggests that the short-distance correlations between oppositely charged ions are stronger.

These results for the liquid NiTe system reveal that cation-anion interactions play a dominant role in determining the short-range order in transition metal tellurides. In this context, it is important to examine the static structure of the NiTe₂ system, which has a similar chemical bond character, in terms of evaluating the generalizability of the findings.

Classical integral equation approaches (OZ–HNC, etc.) provide fast and low-cost means of calculating short-range ionic correlations and thermodynamic trends; However, it is limited in incorporating subtle effects from directional bonding, polarization, and electronic structure. (Hansen & McDonald, 2013; Shimoji, 1977). Ab initio molecular dynamics (AIMD) studies are able to offer high-fidelity comparisons with experimental $g(r)$ and thermodynamic quantities, especially at small cell sizes and short timescales, and provide reliable reference of short-range structural properties in transitional metallic fluids. (Marx & Hutter, 2009) However, AIMD calculations are limited at large cell and long time scales due to computational cost; therefore, current best practice is often to perform larger-scale MD simulations with machine-learning interatomic potentials (ML-IAP) that generate and learn from reference data ($g(r)$, force/energy) with AIMD; (Deringer, Caro, & Csányi, 2019; Behler, 2016). ML-IAPs significantly increase scalability while maintaining DFT accuracy. As a result, the power of HNC to provide rapid scanning and physical insights when combined with AIMD-obtained reference data and/or ML-based potentials (AIMD-referenced) constitutes the most powerful approach: HNC is practical for large-scale and parameter screening; AIMD and ML-IAP are necessary to verify and correct for sensitive structural elements such as polarization/directional-bond effects and Ni–Ni correlations that HNC leaves incomplete. (Behler, 2016; Deringer et al., 2019).

In addition, as in the NiTe system, the first two peaks observed in the experimental Ni–Ni pair distribution function in the NiTe₂ system appear as a single peak that is combined and more widespread in the HNC results.

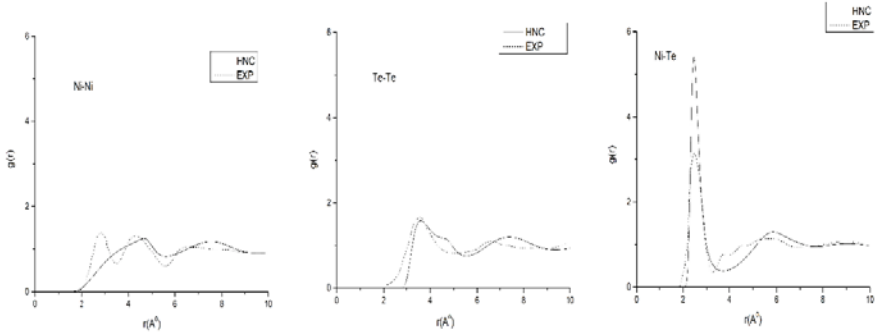


Figure 2.6 Comparison of radial distribution functions for experimental and HNC for NiTe₂ systems

The partial structure factors calculated for the NiTe₂ system are given in Figure 2.7. When the Faber–Ziman structure factors are compared, it is seen that there is an approximate agreement with the experimental results in general. The fact that the Ni–Ni structure factor is damped faster than other components suggests that cation ions are more mobile compared to anions.

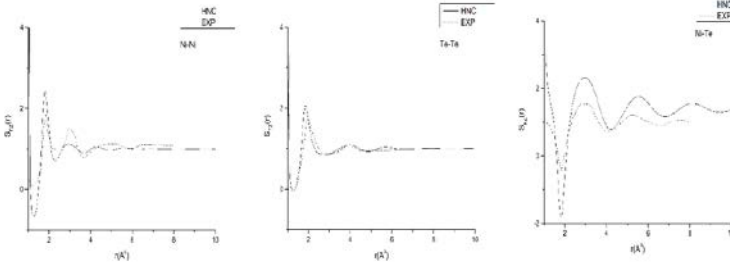


Figure 2.7 Comparison of FZ partial structure factors for experimental and HNC for NiTe₂ systems

When these systems are evaluated together, it is seen that the short-range structural order in both semiconductors is largely determined by Ni–Te interactions. However, it appears that the increase in the Te ratio affects the amplitude and damping behavior of structural correlations, and in particular, cation–cation correlations exhibit similar limitations in both systems.

These results highlight the decisive role of bond character in the liquid phase structure in transition metal tellurides.

5. GENERAL CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS

5.1. Conclusions

Although classical integral equation methods such as the Ornstein–Zernike equation coupled with the Hypernetted-Chain (HNC) closure offer an efficient and physically transparent framework for describing short-range order in liquid semiconductors, their accuracy is fundamentally restricted by the usage of effective pair potentials and the omission of higher-order correlation effects. Within spherically symmetric interaction models (Hansen & McDonald, 2013), particularly directional bonding, electronic polarization, and transition-metal d-orbital contributions—known to be critical for cation–cation correlations in telluride-based fluids—cannot be completely represented.

Based in density functional theory, *ab initio* molecular dynamics (AIMD) provides a supplemental path by expressly including electronic structure impacts and has been demonstrated to replicate experimental pair distribution functions and coordination environments in liquid semiconductors with great fidelity, particularly in systems showing mixed covalent–metallic bonding (Car & Parrinello, 1985; Marx & Hutter, 2009). AIMD's high computational cost, nevertheless, restricts its use to fairly tiny system sizes and short simulation durations.

Trained on AIMD reference data, recent advances in machine-learning interatomic potentials (ML-IAPs) offer a hopeful trade-off between accuracy and scalability. These

methods are especially fit for grabbing polarization effects and many-body interactions in liquid transition-metal chalcogenides (Behler, 2016; Deringer, Caro, & Csányi, 2019) since they allow large-scale simulations with almost *ab initio* precision. From this point of view, the current HNC-based results can be seen as an effective first-level description that may be systematically improved by AIMD benchmarking and ML-IAP-driven simulations to provide a more complete and quantitatively accurate understanding of liquid Ni–Te systems.

When the results obtained for both systems are evaluated together, it is seen that the theoretical calculations agree with the results obtained from neutron scattering experiments by choosing the effective charge around $Z = 0.5$. This supports the covalent structure dominant in liquid NiTe and NiTe₂ semiconductors and the interpretations made in the selection of potential.

At the same time, the correlation functions and structure factors obtained show that the mobility of cation ions is greater than the mobility of anion ions. Dynamics simulations are needed to better understand the systems.

REFERENCES

- Akdere, U. (2006). *Liquid structure of UO_2 and UCl_3 and freezing in halide salts* (PhD thesis). Yildiz Technical University, Graduate School of Natural and Applied Sciences, Istanbul, Turkey.
- Behler, J. (2016). Perspective: Machine learning potentials for atomistic simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 145(17), 170901. <https://doi.org/10.1063/1.4966192>
- Beloshchenko, V. A., & Ostrovski, O. I. (2005). Modeling of the structure of liquid nickel tellurides. *Russian Metallurgy (Metally)*, 2005(2), 108–113
- Car, R., & Parrinello, M. (1985). Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory. *Physical Review Letters*, 55(22), 2471–2474. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.22.2471>
- Çilli, A. (1992). *Analytic solution of the Percus–Yevick equation in one dimension* (Master's thesis). Yildiz Technical University, Graduate School of Natural and Applied Sciences, Istanbul, Turkey.
- Deringer, V. L., Caro, M. A., & Csányi, G. (2019). Machine learning interatomic potentials as emerging tools for materials science. *Advanced Materials*, 31(46), 1902765. <https://doi.org/10.1002/adma.201902765>
- Dutta, D., Ahammed, R., Salehi, H., Singh, B., & Jensen, A. (2021). Structural and electronic properties of $NiTe_2$: A type-II Dirac semimetal. *Physical Review B*, 103(3), 035133.
- Egelstaff, P. A. (1967). *An introduction to the liquid state*. New York, NY & London, England: Academic Press.

- Hansen, J. P., & McDonald, I. R. (2013). *Theory of simple liquids* (4th ed.). London, England: Academic Press.
- Kittel, C. (1996). *Introduction to solid state physics* (Trans. [Translator's Name]). Istanbul, Turkey: [Publisher Name].
- Marx, D., & Hutter, J. (2009). *Ab initio molecular dynamics: Basic theory and advanced methods*. Cambridge, England: Cambridge University Press.
- Nguyen, V. T., Gay, M., Enderby, J. E., Newport, R. J., & Howe, R. A. (1982). The structure and electrical properties of liquid semiconductors: I. The structure of liquid NiTe₂ and NiTe. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 15, 4627–4634. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/15/22/020>
- Öztek, H. Ö. (2005). *Single particle dynamics of liquid alkali metals* (Master's thesis). Yildiz Technical University, Graduate School of Natural and Applied Sciences, Istanbul, Turkey.
- Shimoji, M. (1977). *Liquid metals*. London, England: Academic Press.
- Tezgör, G. (2020). Structural properties of liquid K–Te alloys using VMHNC. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 22(3–4), 183–189
- Wang, Y., Chu, J., Yin, L., Cheng, R., Wang, F., Wen, Y., ... & He, J. (2020). Two-dimensional metallic NiTe_2 with ultrahigh environmental stability and conductivity. *ACS Nano*, 14(2), 2150–2159.
- Waseda, Y. (1980). *The structure of non-crystalline materials*. New York, NY: McGraw-Hill.
- Wyckoff, R. W. G. (1965). *Crystal structures* (2nd ed., Vol. 1, p. 125). New York, NY: John Wiley & Sons.

NEMATİK SIVI KRİSTALLERDE SURFAKTAN–HERBİSİT ETKİLEŞİMLERİ: 5CB–HDTMA–GLİFOSAT SİSTEMİNİN OPTİK DAVRANIŞININ İNCELENMESİ

Yılmaz Can METE¹

Mustafa AKSOY²

Gölnur ÖNSAL³

Özge TÜZÜN ÖZMEN⁴

1. GİRİŞ

Sıvı kristaller, katı ve sıvı fazların karakteristik özelliklerini aynı anda sergileyen; akışkanlık ile yönelim düzeninin birlikte bulunduğu özgün malzeme sistemleridir. Bu yapı, sıvı kristalleri hem temel fizik açısından hem de ekran teknolojileri ve sensör uygulamaları gibi mühendislik alanlarında kritik bir konuma taşımıştır (de Gennes ve Prost, 1993; Chandrasekhar, 1992). Nematik sıvı kristaller ise konumsal düzen içermeden belirli bir ortalama moleküler yönelim (direktör) sergilemeleriyle öne çıkar; optik anizotropileri ve dış uyaranlara karşı yüksek duyarlılıkları

¹ İzmir Bakırçay Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümü, ORCID: 0009-0000-3814-0509.

² İzmir Bakırçay Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Biyomedikal Mühendisliği Bölümü, ORCID: 0000-0002-6873-9595.

³ Doç. Dr., İzmir Bakırçay Üniversitesi, Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi, Temel Bilimler Bölümü, ORCID: 0000-0001-9884-3345, Sorumlu Yazar.

⁴ Prof. Dr., İzmir Bakırçay Üniversitesi, Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi, Temel Bilimler Bölümü, ORCID: 0000-0002-5204-3737.

nedeniyle model sistem olarak yaygın biçimde tercih edilir (de Gennes ve Prost, 1993; Dierking, 2003).

Nematik fazda sık kullanılan 4-pentil-4'-siyanobifenil (5CB), oda sıcaklığında kararlı nematik davranışı ve yüksek dielektrik anizotropisi sayesinde literatürde referans sıvı kristallerden biridir (Dierking, 2003; Oswald ve Pieranski, 2005). 5CB'nin moleküler hizalanması; yüzey ankraj koşulları, arayüz kimyası ve katkı maddeleri tarafından kolaylıkla değiştirilebilir. Bu özellik, özellikle Polarize Optik Mikroskop (POM) altında gözlemlenebilen Schlieren dokusu ve disklinasyon hatları gibi yapılar üzerinden, sistemdeki küçük değişimlerin dahi görünür hâle gelmesini sağlar (Dierking, 2003; Collings ve Hird, 1997).

Sıvı kristallerin yüzey/arayüz duyarlılığı, kimyasal algılama yaklaşımlarında “etiketsiz” bir okuma mekanizması olarak değerlendirilmektedir. Hedef analitin arayüzde adsorpsiyonu veya sıvı kristal içerisinde oluşturduğu yerel etkileşimler; direktör alanında bozulma, defekt yoğunluğu artışı ve doku homojenliğinde azalma gibi sonuçlar doğurarak optik kontrastı belirgin biçimde değiştirebilir (Collings ve Hird, 1997; Carlton, Gupta ve Abbott, 2012). Bu bağlamda sıvı kristal tabanlı sensörler; hızlı yanıt, basit optik okuma ve düşük maliyet potansiyeli nedeniyle çevresel kirleticilerin izlenmesinde giderek daha fazla ilgi görmektedir (Carlton, Gupta ve Abbott, 2012; Jang vd. 2017; Goodby vd., 2008; Yang ve Abbott 2011).

Glifosat, tarımsal uygulamalarda yaygın kullanılan bir herbisit olup çevresel taşınımı, sucul ortamlara karışma olasılığı ve ekotoksikolojik etkileri nedeniyle yakından izlenmesi gereken bir bileşiktir (World Health Organization, 2016; Myers vd., 2016). Analitik tespit yöntemleri yüksek hassasiyet sunmakla birlikte, sahada hızlı tarama gerektiren durumlarda pratik ve görsel olarak yorumlanabilir yaklaşımlar önem

kazanmaktadır (World Health Organization, 2016). Glifosatın sıvı kristal faza etkin biçimde etki edebilmesi çoğu durumda arayüz kimyasının düzenlenmesini gerektirir. Bu noktada katyonik surfaktanlar, hidrofobik/hidrofilik etkileşimleri ve yüzey yükü üzerinden hem glifosatın dağılımını hem de sıvı kristal moleküllerinin ankraj koşullarını değiştirebilir (Israelachvili, 2011; Langevin, 2000). Hexadecyltrimethylammonium bromide (HDTMA) gibi kuaterner amonyum bazlı surfaktanların, sıvı kristal sistemlerinde hizalanma düzenini dönüştürebildiği; belirli eşiklerin üzerinde ise faz düzenini zayıflatarak düzensiz doku oluşumunu artırabildiği rapor edilmiştir (Langevin, 2000; Beltrán ve Rey, 2010; Humar ve Mušević, 2011).

Bu çalışmanın amacı, 5CB–HDTMA–glifosat üçlü sisteminde katkı oranı, ultrasonik karıştırma süresi ve elektrik alan uygulamasının optik doku üzerindeki etkilerini karşılaştırmalı biçimde ortaya koymak; elde edilen doku değişimlerinin glifosat tespitine yönelik olası optik “sinyal” parametreleri (defekt alanı, doku homojenliği, yerel bozulma ölçekleri) olarak yorumlanabilirliğini tartışmaktır (Carlton, Gupta ve Abbott, 2012; Abbott ve Brake, 2003; Kim, Park ve Lee, 2017).

2. MALZEMELER VE YÖNTEM

Çalışmada sıvı kristal olarak, yüksek dielektrik anizotropiye (25°C’de $\Delta\epsilon' = +13.3$) sahip ve oda sıcaklığında nematik fazda bulunan 5CB (4-pentyl-4’cyanobiphenyl) kodlu sıvı kristal kullanıldı. Bilimsel araştırmalarda yaygın olarak kullanılan 5CB kodlu nematik sıvı kristal, Merck firmasından temin edildi. 5CB sıvı kristal, 90 µl ve 99 µl olarak 5ml’lik 2 viyal tüplere konuldu. Sonradan eklenecek glifosat oranı da dikkate alınarak içerisinde 90 µl 5CB bulunan viyal tüpe 50µg

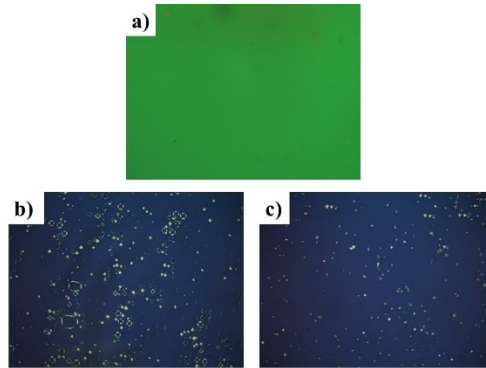
HDTMA, 99 µl 5CB bulunan viyal tüpe 5µg HDTMA eklenerek, 5 dakika boyunca oda sıcaklığında ultrasonik karıştırıcıda karıştırıldı. Ardından sırasıyla 10 µl ve 1 µl glifosat eklenen viyal tüpler 10 dakika boyunca ultrasonik karıştırıcıda karıştırıldı. İki ayrı viyal tüpe eklenen aynı karışım oranlarına sahip malzemeler yeniden hazırlanarak karışım süresinin tepkisini de analiz etmek amacıyla 2 saat boyunca 50°C sıcaklıkta ultrasonik karıştırıcıda karıştırıldı.

Hazırlanan karışımlar ve saf 5CB, INSTECH firmasından temin edilen 7,7 µm kalınlığında, 100 Ω/cm² yüzey direncine sahip Indium Tin Oxide (ITO) kaplı özel sıvı kristal hücrelere kılcallık yöntemi ile dolduruldu.

Motic BA310E Polarize Optik Mikroskop (POM) altında 40X objektif ile yapılan gözlemler Moticom 10.0MP mikroskop kamerası ile kayıt altına alındı.

2.1. Surfaktan–Herbisit Katkısının 5CB Dokusuna Etkisi

Bu bölümde sunulan POM görüntüleri, saf 5CB ve katkılı sistemler arasında doku karakteri bakımından net farklılıklar bulunduğunu göstermektedir.



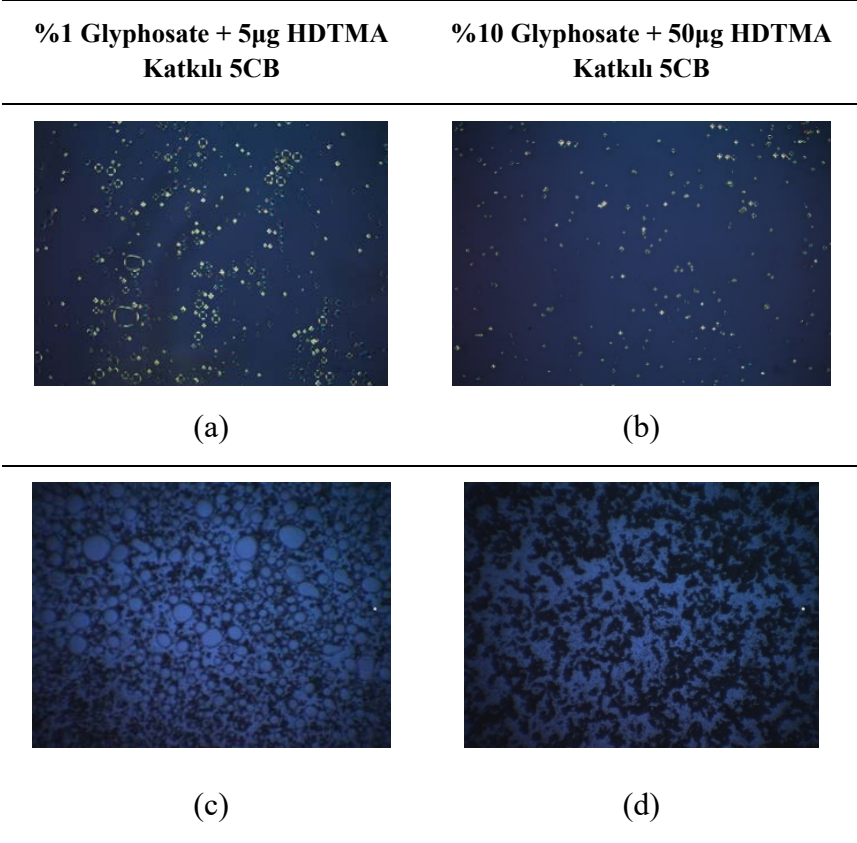
Şekil 1. a) Saf 5CB b) %1 Glyphosate + 5µg HDTMA katkılı 5CB ve c) %10 Glyphosate + 50µg HDTMA katkılı 5CB sıvı kristalin POM görüntüsü.

Saf 5CB, polarize optik mikroskop altında incelendiğinde, hücre yüzeyindeki ankraj koşullarının etkisiyle geniş alanlı homojen (monodomain) bir yönelim sergilemiştir (Şekil 1. a). Görüntüdeki düzgün ve tek renkli yapı, sıvı kristal moleküllerinin düzenli bir direktör alanına sahip olduğunu ve herhangi bir makroskopik optik defekt içermediğini doğrulamaktadır (Dierking, 2003; Collings ve Hird, 1997). %99 5CB – %1 glifosat + 5 µg HDTMA sisteminde bozulma daha sınırlı olsa da saf 5CB'ye göre defekt alanında artış ve yerel hizalanma bozuklukları gözlemlenmektedir (Şekil1.b). Bu karşılaştırma, optik doku üzerinde katkı konsantrasyonunun doz bağımlı etkisini desteklemekte; özellikle glifosat derişiminin artmasıyla bozulmanın daha makroskopik ölçeklere yayıldığını düşündürmektedir (Carlton, Gupta ve Abbott, 2012; Goodby vd., 2008; Vlasov vd., 2013). %90 5CB – %10 glifosat + 50 µg HDTMA bileşiminde, saf yapının aksine doku homojenliğinin bozulduğu görülmektedir (Şekil 1.c). Görüntülerde artan bozulma yoğunluğunun yanı sıra, mikroskopik ölçekte küresel faz ayrışması (phase separation) damlacıkları dikkat çekmektedir. Bu yapı, yüksek konsantrasyonlu glifosat ve surfaktan moleküllerinin nematik matris içinde yerel olarak kümелendiğini ve sıvı kristal düzenini bozarak izotropik adacıklar oluşturduğunu göstermektedir (Langevin, 2000; Beltrán ve Rey, 2010; Vlasov vd., 2013).

Bu noktada önemli bir çıkarım, glifosat tespitinde “tam faz geçişi” beklemek yerine, doku paternindeki istatistiksel değişimlerin (defekt yoğunluğu, karakteristik doku uzunluğu, kontrast dağılımı) daha güvenilir bir ölçüt olabileceğidir. Literatürde sıvı kristal tabanlı kimyasal algılamada bu tür nicel görüntü metriklerinin duyarlılığı artırdığı raporlanmıştır (Abbott ve Brake, 2003; Jang vd. 2017; Zhang vd., 2016).

2.2. Ultrasonik Banyo Süresinin Faz Davranışına Etkisi

Ultrasonik karıştırma, katkıların sıvı kristal içinde dağılımını hızlandıran ve agregasyon eğilimlerini azaltabilen yaygın bir yöntemdir. Bununla birlikte ultrasonik enerjinin süreye bağlı olarak mikroyapıyı ve arayüz etkileşimlerini farklı biçimlerde etkileyebileceği bilinmektedir (Mason ve Lorimer, 2002).



Şekil 2. Numunelerin (a) ve (b) 15 dk oda sıcaklığında, (c) ve (d) 2 saat 50 °C sıcaklıkta ultrasonik karıştırma sonrası POM Görüntüsü.

15 dakika ultrasonik banyo uygulanmış numunelerde, katkıların dağılımının görece yeterli olduğu; nematik düzenin nispeten korunduğu bir doku yapısı görülmektedir. Bu durum, katkıların belirli bir ölçüde homojenleştiğini fakat nematik elastikiyetin hâlâ baskın olduğunu düşündürür (Dierking, 2003; Mason ve Lorimer, 2002). 2 saat boyunca ultrasonik banyo uygulanan numunelerde doku bozulmasının dramatik biçimde arttığı gözlemlenmiştir. İşlem sıcaklığının (50°C), 5CB'nin nematik-izotropik geçiş sıcaklığının üzerinde olması, karışımın izotropik fazda emülsifiye olmasına neden olmuştur (Şekil 2.c ve 2.d). Soğuma sürecinde sistemin tekrar kararlı nematik faza dönememesi ve surfaktan moleküllerinin düzensiz toplanması, görüntülenen kaotik ve yüksek yoğunluklu defekt dokusunun temel sebebidir (Langevin, 2000; Mason ve Lorimer, 2002; Suslick, 1990).

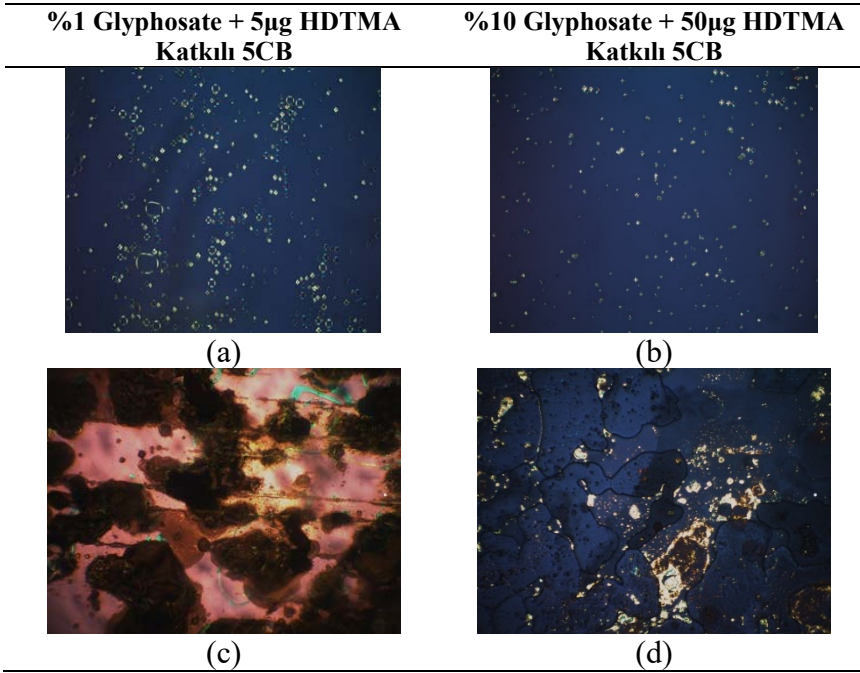
Bu sonuçlar, sensör tasarımı açısından “hazırlama koşullarının” (özellikle karıştırma süresi) bir kontrol parametresi olarak ele alınması gerektiğini göstermektedir. Optik sinyalin güvenilirliği için, katkıların homojen dağılması hedeflenirken nematik düzeni tamamen çökerten koşullardan kaçınmak gerekmektedir (Abbott ve Brake, 2003; Zhang vd., 2016).

2.3. Elektrik Alan Uygulamasının Dokuya Etkisi

Nematik sıvı kristaller, dielektrik anizotropileri nedeniyle uygulanan elektrik alana karşı yönelim değiştirebilir. Saf 5CB'de elektrik alan, uygun ankraj koşullarında hizalanmayı güçlendirerek doku kontrastını azaltabilir veya daha düzenli bir görünüm oluşturabilir (Dierking, 2003; Lavrentovich, 1999).

Katkılı numunelere ± 20 V DC elektrik alan uygulandığında, beklenen yönelimsel düzenlenmenin aksine doku karmaşıklığının arttığı tespit edilmiştir (Şekil 3.c ve 3.d). Bu durum, iyonik karakterdeki HDTMA ve glifosat

moleküllerinin elektrik alan altında sürüklenmesiyle tetiklenen elektrohidrodinamik (EHD) kararsızlıklar ile açıklanabilir. Elektrik alan, mevcut faz ayrışması damlacıklarını ve safsızlıkları hareket ettirerek optik kontrastı bozan bir türbülansa neden olmuştur. (Langevin, 2000; Lavrentovich, 1999; Mušević, Škarabot ve Tkalec, 2010). Bu davranış, katkılı sistemlerde elektrik alanın sensör sinyalinin güçlendirmek yerine “maskelenmiş” veya karmaşık bir optik yanıt doğurabileceğini göstermektedir. Dolayısıyla elektrik alanın, algılama modunda (pasif okuma mı, aktif modülasyon mu) kullanılacağına karar verirken, katkı konsantrasyonu ve arayüz ankraj türü birlikte optimize edilmelidir (Abbott ve Brake, 2003; Mušević, Škarabot ve Tkalec, 2010).



Şekil 3. Numunelerin (a) ve (b) 15 dk oda sıcaklığında ultrasonik karıştırma $V = 0$, (c) ve (d) 15 dk oda sıcaklığında ultrasonik karıştırma $V = \pm 20$ elektrik alan maruziyeti sonrası POM Görüntüsü

3. TARTIŞMA

Bu çalışmada sunulan POM görüntüleri, glifosat varlığının tespiti için sadece renk değişiminin değil, doku morfolojisindeki faz ayrışması ve damlacık oluşumunun da ayırt edici bir optik imza (fingerprint) olarak kullanılabileceğini ortaya koymaktadır.

Elde edilen bulgular, glifosatın tek başına değil; HDTMA varlığında 5CB nematik düzeni üzerinde daha görünür bir etki oluşturduğunu göstermektedir. Bu durum, surfaktanın arayüz kimyasını ve yük dağılımını değiştirerek glifosatın etkinliğini artırmasıyla açıklanabilir (Israelachvili, 2011; Langevin, 2000). Ancak aynı mekanizma, belirli bir eşik üstünde sistemin faz kararlılığını zayıflatarak “yararlı sinyal” ile “aşırı bozulma” arasındaki sınırı kritik hâle getirir (Beltrán ve Rey, 2010; Humar ve Mušević, 2011).

Glifosat tespiti açısından değerlendirildiğinde, POM görüntülerinde öne çıkan optik sinyaller şu başlıklarda toplanabilir: (i) Schlieren dokusunun sürekliliğinin bozulması, (ii) disklinasyon yoğunluğunun artması ve defekt alanlarının genişlemesi, (iii) yerel granüler/damlacık benzeri yapıların ortaya çıkması ve (iv) elektrik alan altında doku yanıtının saf 5CB'ye kıyasla farklılaşması (Carlton, Gupta ve Abbott, 2012; Jang vd., 2017; Zhang vd., 2016).

Literatürde sıvı kristal tabanlı pestisit/kimyasal algılamada yaygın yaklaşım arayüzde hizalanma değişimini kullanmaktır (Jákli ve Lavrentovich, 2014; Kleman ve Lavrentovich, 2003). Bu çalışmada ise hacimsel katkı (bulk doping) ve surfaktan aracılı etkileşim birlikte ele alınmış; böylece numune hazırlama koşulları, ultrasonik süre ve elektrik alan gibi parametrelerin sinyali nasıl etkilediği daha net biçimde ortaya konmuştur (Abbott ve Brake, 2003; Langevin, 2000; Zhang, 2016).

4. SONUÇLAR VE GELECEK PERSPEKTİFİ

Bu çalışma, 5CB nematik sıvı kristalinde glifosat ve HDTMA katkısının optik doku üzerinde belirgin ve karşılaştırılabilir değişimler oluşturduğunu göstermiştir. Yüksek glifosat–HDTMA bileşiminde doku bozulması daha güçlü olup, düşük katkı oranında ise nematik karakter kısmen korunmakla birlikte defekt yoğunluğunda anlamlı artış gözlenmiştir.

Ultrasonik banyo süresi uzadıkça doku düzensizliğinin artması, hazırlama protokolünün sensör çıktısı üzerinde doğrudan belirleyici olduğunu ortaya koymaktadır. Elektrik alan uygulaması ise katkılı sistemlerde çoğu durumda bozulmayı artırmış; bu da aktif modülasyonun ancak dikkatli optimizasyonla kullanılabileceğini göstermiştir (Mason ve Lorimer, 2002; Suslick, 1990; Lavrentovich, 1990; Mušević, Škarabot ve Tkalec, 2010).

Gelecek çalışmalar için öneriler şu şekilde özetlenebilir:

- (i) doku değişimlerinin nicel görüntü analizi ile metrikleştirilmesi (defekt yoğunluğu, kontrast histogramı, korelasyon uzunluğu), (ii) HDTMA'sız veya farklı surfaktanlarla arayüz kontrollü sensör geometrilerinin denenmesi, (iii) glifosat konsantrasyonunun alt sınırlarının kalibrasyon eğrileriyle belirlenmesi ve (iv) elektrik alanın sinyal/gürültü oranını artıracak biçimde optimize edilmesi.

KAYNAKÇA

- Abbott, N. L., ve Brake, J. M. (2003). Liquid crystals in chemical sensing. *Current Opinion in Colloid ve Interface Science*, 8(5), 407–412.
- Beltrán, E., ve Rey, A. (2010). Surfactant effects on nematic liquid crystal anchoring and texture. *Liquid Crystals*, 37(9), 1127–1138.
- Carlton, R. J., Gupta, J. P., ve Abbott, N. L. (2012). Liquid-crystal-based sensing platforms. *Annual Review of Analytical Chemistry*, 5, 95–118.
- Chandrasekhar, S. (1992). *Liquid crystals* (2nd ed.). Cambridge, UK: Cambridge University Press.
- Collings, P. J., ve Hird, M. (1997). *Introduction to liquid crystals: Chemistry and physics*. London, UK: Taylor ve Francis.
- de Gennes, P. G., ve Prost, J. (1993). *The physics of liquid crystals* (2nd ed.). Oxford, UK: Clarendon Press.
- Dierking, I. (2003). *Textured liquid crystals*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH.
- Goodby, J. W., vd. (2008). Liquid crystals and soft-matter sensors. *Chemical Society Reviews*, 37, 2102–2116.
- Humar, M., ve Mušević, I. (2011). Surfactant-mediated ordering and defects in nematic liquid crystals. *Soft Matter*, 7, 10163–10172.
- Israelachvili, J. N. (2011). *Intermolecular and surface forces* (3rd ed.). London, UK: Academic Press.
- Jákli, A., ve Lavrentovich, O. D. (2014). Liquid crystal interfaces and surface-driven ordering. *Soft Matter*, 10, 1581–1596.

- Jang, M. S., vd. (2017). Liquid crystal-based biosensors: A review. *Biosensors and Bioelectronics*, 96, 340–356.
- Kim, H., Park, S., ve Lee, J. (2017). Optical texture analysis for liquid crystal chemical sensing. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 240, 793–800.
- Kleman, M., ve Lavrentovich, O. D. (2003). *Soft matter physics: An introduction*. New York, NY: Springer.
- Langevin, D. (2000). Surfactants and liquid crystal interfaces. *Advances in Colloid and Interface Science*, 88, 209–222.
- Lavrentovich, O. D. (1999). Electric-field effects and director reorientation in nematic liquid crystals. In *Liquid crystals: Experimental study of physical properties and phase transitions*.
- Mason, T. J., ve Lorimer, J. P. (2002). *Applied sonochemistry: Uses of power ultrasound in chemistry and processing*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH.
- Mušević, I., Škarabot, M., ve Tkalec, U. (2010). Defects and fields in nematic liquid crystals. *Reports on Progress in Physics*, 73.
- Myers, J. P., vd. (2016). Concerns over glyphosate: Environmental transport and exposure. *Environmental Health*, 15, 1–13.
- Oswald, P., ve Pieranski, P. (2005). *Nematic and cholesteric liquid crystals: Concepts and physical properties illustrated by experiments*. Boca Raton, FL: CRC Press.
- Suslick, K. S. (1990). Sonochemistry. *Science*, 247(4949), 1439–1445.
- Vlasov, A. M., vd. (2013). Electrostatic interactions and defect formation in doped nematic liquid crystals. *Journal of Physical Chemistry B*, 117, 1234–1242.

- World Health Organization. (2016). *Glyphosate and health: Environmental and food safety considerations*. WHO Technical Report.
- Yang, S. Y., ve Abbott, N. L. (2011). Surface anchoring transitions and sensing responses in liquid crystals. *Langmuir*, 27, 5719–5726.
- Zhang, L., vd. (2016). Quantitative image metrics in liquid crystal sensors for environmental analytes. *Analytical Chemistry*, 88, 12345–12353.

SCHOTTKY DIODES AND SEMICONDUCTOR INTERFACES: PHYSICS, FABRICATION, AND APPLICATIONS

İlhan CANDAN¹

Sezai ASUBAY²

1. INTRODUCTION

The interface between a metal and a semiconductor has long been a cornerstone of device physics. In 1938, Walter Schottky and Nevill Mott independently formulated the concept of rectification at a metal–semiconductor junction, giving rise to what is now known as the Schottky diode (Schottky, 1938). Unlike the more common p–n junction diode, the Schottky diode relies on the Schottky barrier formed by the contact between a metal and a semiconductor, which controls electron flow across the junction (Al-Ahmadi, 2020).

The importance of Schottky diodes lies in their favorable characteristics:

- Low forward voltage drop (typically 0.2–0.3 V for silicon-based devices),
- Fast switching speed due to absence of minority-carrier injection,
- High-frequency performance in the GHz regime,
- High responsivity in optoelectronic detection.

¹ Dr. Öğr. Üyesi, Dicle Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, ORCID: 0000-0001-9489-5324.

² Prof. Dr., Dicle Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, ORCID: 0000-0003-2171-8479.

These properties have led to widespread use in RF circuits, rectifiers, solar cells, photodetectors, and gas sensors (Sze et al., 2021). With the advent of nanostructured semiconductors and advanced deposition methods, Schottky devices continue to find new applications in energy harvesting, flexible electronics, and quantum technologies.

Schottky diodes and metal–semiconductor interfaces constitute one of the most fundamental and widely exploited elements in modern electronic and optoelectronic systems. Unlike p–n junctions, Schottky contacts rely on the rectifying behavior that emerges from the junction between a metal and a semiconductor, where carrier transport is governed by interfacial band alignment, barrier formation, and charge redistribution. This distinctive operating principle enables fast switching speeds, low forward voltage drops, and compatibility with a broad range of semiconductor materials, making Schottky diodes indispensable in high-frequency, power, and sensing applications (Mathew & Rout, 2021).

The physics of metal–semiconductor interfaces is rooted in concepts such as work function differences, Fermi level alignment, interface states, and image force lowering. While early models such as the Schottky–Mott rule provide an idealized picture of barrier formation, practical devices often deviate significantly due to surface defects, interfacial oxides, chemical reactions, and metal-induced gap states. Understanding and controlling these effects is essential for tailoring Schottky barrier height, minimizing contact resistance, and achieving reliable device performance (Mönch, 1994).

From a fabrication perspective, advances in thin-film deposition, surface preparation, and nanoscale patterning have enabled precise control over metal–semiconductor interfaces. Techniques including molecular beam epitaxy, atomic layer

deposition, and van der Waals integration have opened pathways to form high-quality Schottky junctions in both conventional semiconductors and emerging materials such as two-dimensional crystals, wide-bandgap oxides, and halide perovskites. These developments have expanded the functional scope of Schottky diodes beyond rectification toward multifunctional and tunable device platforms (Kim et al., 2025).

In terms of applications, Schottky diodes play a central role in radio-frequency electronics, power conversion, photodetection, and energy harvesting. More recently, metal–semiconductor interfaces have become key enablers of next-generation technologies, including flexible electronics, neuromorphic systems, and optoelectronic devices that exploit coupled thermal, optical, and quantum effects. This chapter provides a comprehensive overview of the physics, fabrication strategies, and applications of Schottky diodes, highlighting both established principles and emerging research directions.

2. PHYSICS OF METAL–SEMICONDUCTOR INTERFACES

2.1. Formation of the Schottky Barrier

When a metal comes into contact with a semiconductor, charge redistribution occurs to align the Fermi levels. The resulting Schottky barrier height (Φ_B) determines the ease of carrier transport across the interface.

For an n-type semiconductor, the barrier height is approximately:

$$\Phi_B = \Phi_M - \chi$$

where Φ_M is the metal work function and χ is the semiconductor electron affinity (Yeboah et al., 2025).

For p-type semiconductors, the barrier height is:

$$\Phi_{Bp} = E_g - (\Phi_M - \chi)$$

where E_g is the bandgap.

2.2. Current Transport Mechanisms

Current conduction across the Schottky interface occurs mainly via:

1. *Thermionic emission*: Dominant in moderately doped semiconductors, where carriers surmount the barrier.
2. *Tunneling (field emission)*: Important for heavily doped semiconductors with narrow depletion widths.
3. *Thermionic field emission*: A mixed process where carriers both surmount and tunnel through the barrier.

The current–voltage relation for thermionic emission is given by:

$$I = I_0 \left(e^{\frac{qV}{n k T}} - 1 \right)$$

where I_0 is the reverse saturation current, q is the electron charge, V the applied voltage, n the ideality factor, k the Boltzmann constant, and T the absolute temperature (Pugh, 2001; Tsu & Esaki, 1973).

2.3. Fermi-Level Pinning

In practice, the barrier height often deviates from the Schottky–Mott rule due to interface states, defects, and metal-induced gap states (MIGS). This Fermi-level pinning limits tunability of Φ_B , complicating device design (Robertson, 2000). Strategies to overcome this include interface passivation, insertion of dielectric interlayers, and careful selection of metals.

2.4. Schottky vs. Ohmic Contacts

A Schottky contact forms a rectifying barrier, while an Ohmic contact allows bidirectional current with negligible resistance as seen in figure 1. Proper engineering of both types of contacts is essential for device performance, especially in integrated circuits and sensors (Green, 1995).

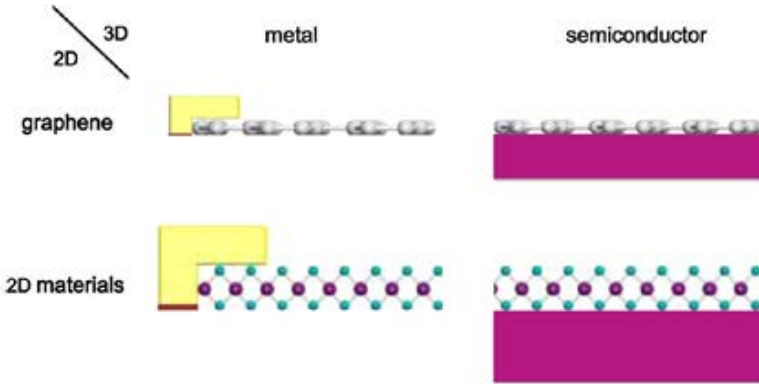


Figure 1. Depending on the nature and dimensionality of the materials involved (metal or semiconductor in either 2D or 3D form), the resulting contacts can be classified as Ohmic, Schottky, or p–n junctions (Xu et al., 2016).

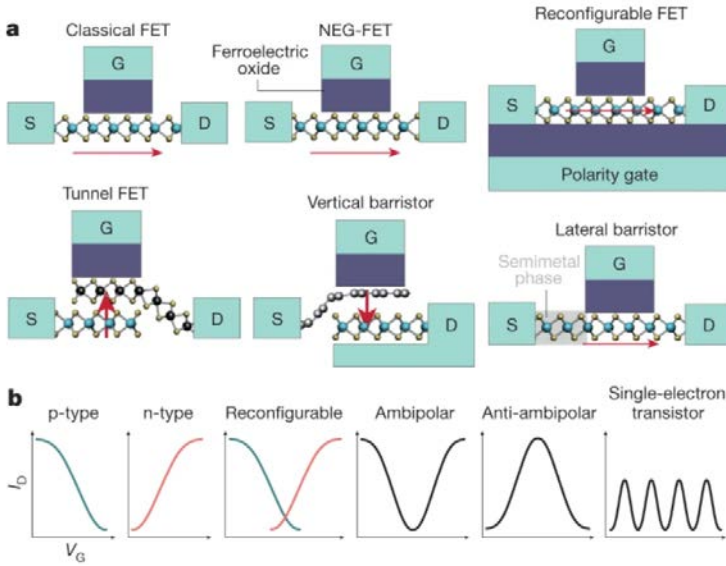


Figure 2. (a) Schematic representations of various two-dimensional (2D) planar device architectures that can be readily integrated at nearly any tier of a vertically stacked three-dimensional (3D) silicon chip are shown (S: source; G: gate; D: drain; NEG-FET: negative-capacitance field-effect transistor). The tunnel FET is based on a semiconductor–semiconductor heterojunction, whereas the barristor, in both vertical and lateral configurations, employs a semimetal–semiconductor interface. In reconfigurable FETs, an additional control electrode—referred to as the polarity gate—modulates the Schottky barrier at the metal–ambipolar semiconductor contact, enabling selective operation with either electron (n-type) or hole (p-type) conduction. The schematics are simplified for clarity. More advanced device implementations may incorporate self-aligned gate structures or intentional doping to reduce contact resistance, dual-gate configurations to enhance electrostatic control, and patterned polarity gates to lower parasitic capacitance. Arrows indicate the dominant carrier transport direction.

(b) The wide range of electrical behaviors achievable in 2D FETs, as reflected in their drain current (I_D) versus gate voltage (V_G) characteristics, arises from the choice of materials and the engineering of device geometry, contacts, and doping profiles. Single-electron transistors can be realized at cryogenic temperatures using nanoscale constrictions or highly resistive contacts. This broad functional diversity significantly expands the design space for next-generation 3D electronic systems (Akinwande et al., 2019).

3. FABRICATION OF SCHOTTKY DIODES

3.1. Choice of Materials

- *Metals:* Gold (Au), platinum (Pt), nickel (Ni), titanium (Ti), and aluminum (Al) are commonly used due to stable work functions and compatibility with silicon.
- *Semiconductors:* Silicon (Si), gallium arsenide (GaAs), gallium nitride (GaN), silicon carbide (SiC), and emerging 2D materials (MoS₂, graphene) are popular choices depending on target application (Taur & Ning, 2021).

3.2. Deposition Techniques

1. *Physical Vapor Deposition (PVD):* Thermal evaporation and sputtering are widely used for depositing metal contacts with controlled thickness.
2. *Chemical Vapor Deposition (CVD):* Employed for large-area deposition of thin films, especially in compound semiconductors.
3. *Pulsed Laser Deposition (PLD):* Provides high-purity metal films with controlled stoichiometry (Chrissey & Hubler, 1994; Haider et al., 2022).

4. *Atomic Layer Deposition (ALD)*: Used for ultra-thin dielectric interlayers to control barrier height.

3.3. Device Architectures

- *Planar Schottky Diodes*: Metal contacts deposited directly on the semiconductor surface.
- *Vertical Schottky Diodes*: Current flows vertically through the semiconductor, enabling higher current density.
- *Schottky Junction Transistors and FETs*: Employ Schottky barriers as source/drain contacts in advanced devices as shown in figure 2 (Schwarz et al., 2023).

3.4. Characterization Techniques

- *I-V measurements*: Reveal barrier height, series resistance, and ideality factor.
- *C-V profiling*: Provides information on doping concentration and interface states.
- *XPS and UPS*: Probe work function alignment and interface chemistry.
- *TEM and AFM*: Provide structural and morphological insights at the nanoscale (Aksoy et al., 2009).

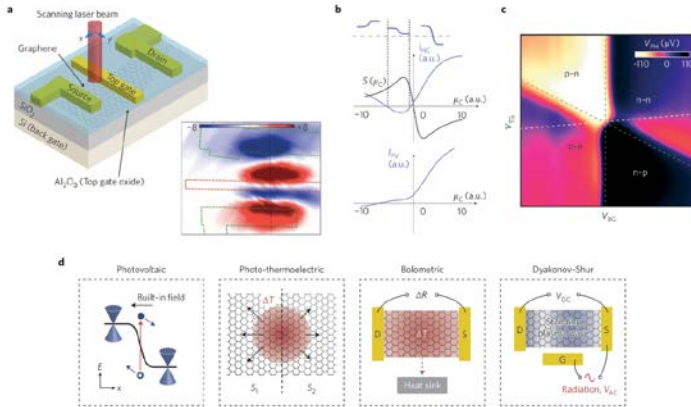


Figure 3. (a) Top: Schematic of the dual-gated device employed to investigate the photothermoelectric (PTE) effect in Ref. 30. Independent biasing of the top gate (VTG) and back gate (VBG) induces two graphene regions with distinct doping levels. Bottom: Scanning photocurrent map of the device [30], where dashed contours denote the metal contacts (green) and the top-gate region (red).

(b) Computed photocurrent contributions arising from hot-carrier (HC) and photovoltaic (PV) mechanisms. The PV component reverses sign upon inversion of the internal electric field, whereas the HC component undergoes two sign changes. The chemical potential μ_C , referenced to the Dirac point (grey dashed line), is shown in the upper panel.

(c) Photovoltage measured as a function of VBG and VTG, exhibiting a sixfold polarity reversal. Grey dashed lines correspond to regions of high resistance extracted from transport measurements.

(d) Schematic illustration of the four photocurrent generation mechanisms discussed in the main text. First panel: separation of photoexcited electron-hole pairs (solid and open circles) by an internal electric field. Second and third panels: the red-shaded region denotes locally elevated electron temperature, with ΔT representing the temperature gradient and ΔR the channel resistance; S_1 and S_2 are the Seebeck coefficients in graphene regions with different doping levels. Third and fourth panels: S and D denote the source and drain, respectively, G the gate, VDC the photogenerated dc voltage, and VAC the ac voltage applied to the gate (Koppens et al., 2014).

4. APPLICATIONS OF SCHOTTKY DIODES

4.1. Power Electronics

SiC- and GaN-based Schottky diodes are vital in high-power, high-temperature electronics. Their wide bandgap enables operation at higher voltages with reduced losses compared to Si-based diodes (Millan et al., 2013). Applications include power supplies, electric vehicles, and renewable energy systems.

4.2. High-Frequency Circuits

Due to their majority-carrier conduction, Schottky diodes switch in the picosecond range, making them ideal for RF mixers, detectors, and millimeter-wave communication systems (Nela et al., 2020).

4.3. Photodetectors

Metal–semiconductor–metal (MSM) photodetectors based on Schottky contacts provide fast response times and high sensitivity. Materials such as GaAs and GaN are employed for UV and visible photodetection, while graphene-based Schottky junctions extend detection into the infrared as seen in figure 3 (Koppens et al., 2014).

4.4. Solar Cells

Schottky diodes can function as photovoltaic devices by separating photogenerated carriers at the metal–semiconductor interface. Although efficiency is limited compared to p–n junction solar cells, hybrid Schottky/organic architectures and plasmon-enhanced designs are actively being explored (Polman & Atwater, 2012).

4.5. Sensors

Schottky diodes are sensitive to changes in barrier height induced by gas adsorption, biomolecular interactions, or

temperature variations. This has enabled their use in gas sensors, biosensors, and temperature sensors (Khanna, 2016).

5. CHALLENGES

Despite advantages, Schottky diodes face several limitations:

- *Barrier height inhomogeneity*: Variations at the nanoscale affect current transport [6].
- *High leakage current*: Especially problematic in small-bandgap semiconductors.
- *Thermal instability*: Metals can diffuse into semiconductors at high temperatures, degrading performance.
- *Fermi-level pinning*: Limits the ability to tune contact properties.

6. FUTURE OUTLOOK

The future of Schottky diodes lies in combining novel materials and advanced fabrication methods:

- *2D semiconductors (MoS_2 , WS_2 , graphene)*: Provide atomically sharp interfaces with tunable Schottky barriers (Novoselov et al., 2016).
- *Plasmonic Schottky devices*: Use metal nanostructures to enhance light absorption and hot-carrier injection for photodetection and photocatalysis (Brongersma et al., 2015).
- *Flexible and transparent electronics*: Schottky diodes fabricated on polymers and glass open new possibilities in wearable devices.

- *Quantum and neuromorphic systems:* Schottky contacts integrated with memristors and quantum dots enable novel computing paradigms.

7. CONCLUSION

Schottky diodes represent one of the most versatile and enduring device architectures in semiconductor technology. By harnessing the physics of metal–semiconductor interfaces, they provide low-power, high-speed rectification and photodetection capabilities. While traditional silicon-based devices remain widely used, the emergence of wide-bandgap semiconductors and 2D materials is extending their performance envelope into new frontiers. Continued research in interface engineering, plasmonics, and hybrid device architectures promises to unlock further applications in electronics, energy conversion, and sensing.

Schottky diodes and metal–semiconductor interfaces continue to play a pivotal role in both established and emerging electronic and optoelectronic technologies. As discussed throughout this chapter, their operation is governed by a rich interplay of interfacial physics, including Schottky barrier formation, carrier transport mechanisms, and the influence of interface states and defects. A comprehensive understanding of these phenomena is essential for optimizing rectification behavior, minimizing contact resistance, and ensuring device reliability across diverse material systems.

Advances in fabrication techniques have significantly expanded the capabilities of Schottky-based devices. Precise control over surface preparation, metal deposition, and interfacial engineering has enabled the realization of high-quality junctions in conventional semiconductors as well as in emerging platforms such as two-dimensional materials, wide-bandgap

semiconductors, and hybrid perovskites. Novel approaches, including van der Waals contacts and atomic-scale interface passivation, have proven particularly effective in mitigating Fermi-level pinning and enhancing tunability of the Schottky barrier height. These developments underscore the transition of Schottky interfaces from simple electrical contacts to actively engineered functional components.

From an application standpoint, Schottky diodes remain indispensable in high-speed electronics, power rectification, radio-frequency circuits, and photodetection. Beyond these traditional roles, metal–semiconductor interfaces are increasingly being exploited to harness coupled physical effects, such as photoelectric, thermoelectric, and spin-dependent transport, enabling innovative device concepts for sensing, energy harvesting, and neuromorphic computing. The versatility of Schottky junctions makes them particularly attractive for next-generation technologies that demand low power consumption, high scalability, and multifunctionality.

Despite notable progress, challenges persist in achieving reproducible, scalable, and defect-free interfaces, especially as devices approach atomic dimensions. Addressing these challenges will require continued advances in materials synthesis, interface characterization, and predictive modeling. In conclusion, Schottky diodes and semiconductor interfaces will remain a cornerstone of electronic and optoelectronic innovation, with ongoing research poised to unlock new functionalities and application domains.

REFERENCES

- Akinwande, D., Huyghebaert, C., Wang, C.-H., Serna, M. I., Goossens, S., Li, L.-J.,...Koppens, F. H. (2019). Graphene and two-dimensional materials for silicon technology. *Nature*, 573(7775), 507-518.
- Aksoy, S., Caglar, Y., Ilican, S., & Caglar, M. (2009). Effect of heat treatment on physical properties of CdO films deposited by sol–gel method. *International journal of hydrogen energy*, 34(12), 5191-5195.
- Al-Ahmadi, N. A. (2020). Metal oxide semiconductor-based Schottky diodes: a review of recent advances. *Materials Research Express*, 7(3), 032001.
- Brongersma, M. L., Halas, N. J., & Nordlander, P. (2015). Plasmon-induced hot carrier science and technology. *Nature nanotechnology*, 10(1), 25-34.
- Chrissey, D. B., & Hubler, G. (1994). *Pulsed laser deposition*.
- Green, M. A. (1995). Silicon solar cells: advanced principles & practice. (No Title).
- Haider, A. J., Alawsi, T., Haider, M. J., Taha, B. A., & Marhoon, H. A. (2022). A comprehensive review on pulsed laser deposition technique to effective nanostructure production: Trends and challenges. *Optical and Quantum Electronics*, 54(8), 488.
- Khanna, V. K. (2016). Integrated nanoelectronics. *NanoSci. Technol.*
- Kim, S. I., Moon, J. Y., Bae, S., Xu, Z., Meng, Y., Park, J. W.,...Bae, S. H. (2025). Freestanding Wide-Bandgap Semiconductors Nanomembrane from 2D to 3D Materials and Their Applications. *Small Methods*, 9(5), 2401551.

- Koppens, F., Mueller, T., Avouris, P., Ferrari, A., Vitiello, M. S., & Polini, M. (2014). Photodetectors based on graphene, other two-dimensional materials and hybrid systems. *Nature nanotechnology*, 9(10), 780-793.
- Mathew, M., & Rout, C. S. (2021). Schottky diodes based on 2D materials for environmental gas monitoring: a review on emerging trends, recent developments and future perspectives. *Journal of Materials Chemistry C*, 9(2), 395-416.
- Millan, J., Godignon, P., Perpiñà, X., Pérez-Tomás, A., & Rebollo, J. (2013). A survey of wide bandgap power semiconductor devices. *IEEE transactions on Power Electronics*, 29(5), 2155-2163.
- Mönch, W. (1994). Metal-semiconductor contacts: electronic properties. *Surface science*, 299, 928-944.
- Nela, L., Van Erp, R., Kampitsis, G., Yildirim, H. K., Ma, J., & Mاتيoli, E. (2020). Ultra-compact, high-frequency power integrated circuits based on GaN-on-Si Schottky barrier diodes. *IEEE Transactions on Power Electronics*, 36(2), 1269-1273.
- Novoselov, K. S., Mishchenko, A., Carvalho, A., & Castro Neto, A. (2016). 2D materials and van der Waals heterostructures. *Science*, 353(6298), aac9439.
- Polman, A., & Atwater, H. A. (2012). Photonic design principles for ultrahigh-efficiency photovoltaics. *Nature materials*, 11(3), 174-177.
- Pugh, D. (2001). Metal-Semiconductor Contacts. In *Spin Electronics* (pp. 199-203). Springer.
- Robertson, J. (2000). Band offsets of wide-band-gap oxides and implications for future electronic devices. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and*

- Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 18(3), 1785-1791.
- Schottky, W. (1938). Halbleitertheorie der sperrschicht. *Naturwissenschaften*, 26(52), 843-843.
- Schwarz, M., Vethaak, T. D., Derycke, V., Francheteau, A., Iniguez, B., Kataria, S.,...Snyder, J. P. (2023). The Schottky barrier transistor in emerging electronic devices. *Nanotechnology*, 34(35), 352002.
- Sze, S. M., Li, Y., & Ng, K. K. (2021). *Physics of semiconductor devices*. John wiley & sons.
- Taur, Y., & Ning, T. H. (2021). *Fundamentals of modern VLSI devices*. Cambridge university press.
- Tsu, R., & Esaki, L. (1973). Tunneling in a finite superlattice. *Applied Physics Letters*, 22(11), 562-564.
- Xu, Y., Cheng, C., Du, S., Yang, J., Yu, B., Luo, J.,...Ye, P. (2016). Contacts between two-and three-dimensional materials: Ohmic, Schottky, and p-n heterojunctions. *ACS nano*, 10(5), 4895-4919.
- Yeboah, L. A., Abdul Malik, A., Oppong, P. A., Acheampong, P. S., Morgan, J. A., Addo, R. A. A.,...Osei-Amponsah, S. (2025). Wide-Bandgap Semiconductors: A Critical Analysis of GaN, SiC, AlGaN, Diamond, and Ga₂O₃ Synthesis Methods, Challenges, and Prospective Technological Innovations. *Intelligent and Sustainable Manufacturing*, 2(1), 10011.

KÜLÇE SÜPERİLETKENLERİN TEMEL ÖZELLİKLERİ VE MEVCUT ÜRETİM YÖNTEMLERİ

Murat ABDİOĞLU¹

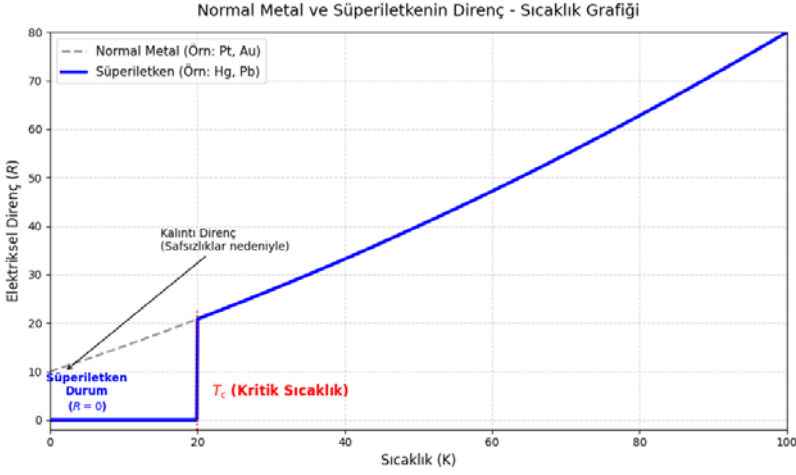
Ufuk Kemal ÖZTÜRK²

1. GİRİŞ VE TEMEL PRENSİPLER

Katı hal fiziğinde malzemelerin elektriksel özellikleri incelendiğinde, iletkenlik davranışı sıcaklığın bir fonksiyonu olarak değişmektedir. Bilinen metallerin (örneğin bakır, altın veya gümüş) elektriksel dirençleri, sıcaklık düştükçe azalma eğilimi gösterir. Bu davranış, sıcaklığın azalmasıyla kristal örgüsündeki atomik titreşimlerin (fononların) azalması ve dolayısıyla elektronların saçılma ihtimalinin düşmesi ile açıklanır. 20. yüzyılın başlarına kadar fizik dünyasındaki hâkim görüş, bir metalin direncinin ancak mutlak sıfır noktasında (0 K) tamamen ortadan kalkacağı veya safsızlıklar nedeniyle belirli bir kalıntı direnç (residual resistance) değerinde sabitleneceği yönündeydi. Ancak 1911 yılında yapılan bir keşif, bu bilginin tüm metaller için geçerli olmadığını ortaya koydu.

¹ Department of Mathematics and Science Education, Faculty of Education, Bayburt University, 69000, Bayburt, Türkiye. Electromagnetic Guidance and Acceleration

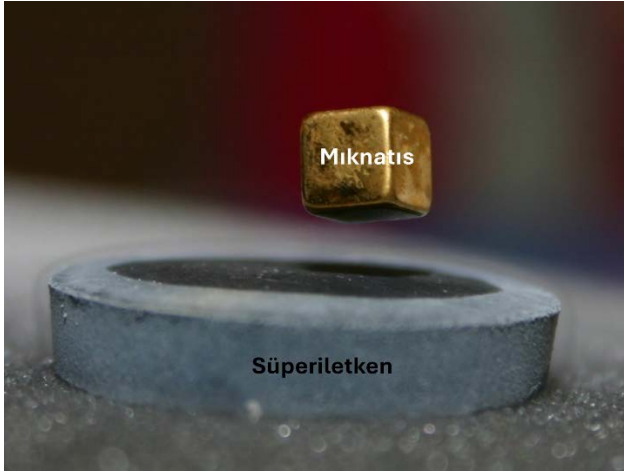
² Research Group (EMGA), Department of Physics, Faculty of Science, Karadeniz Technical University, 61080, Trabzon, Türkiye.



Şekil 1. Normal bir metal ile süperiletken malzemenin elektriksel dirençlerinin sıcaklığa bağlı değişiminin karşılaştırılması. Normal metallerde direnç, mutlak sıfıra yaklaşıırken safsızlıklardan kaynaklanan belirli bir "kalıntı direnç" değerine asimptotik olarak yaklaşır. Süperiletkenlerde ise malzeme belirli bir kritik sıcaklığa (T_c) soğutulduğunda direnç aniden ve tamamen sıfıra düşer.

Süperiletkenlik olgusunun keşfi, soğutma teknolojisindeki ve kriyojenik sistemlerdeki gelişmelerle doğrudan ilişkilidir. Danimarkalı fizikçi Heike Kamerlingh Onnes'in 1908 yılında helyumu sıvılaştırmayı başarması, maddelerin mutlak sıfıra çok yakın sıcaklıklardaki davranışlarının incelenmesine olanak tanımıştır. Onnes, 1911 yılında cıvanın (Hg) elektriksel direncini sıvı helyum sıcaklıklarında incelerken, 4,2 K sıcaklığına inildiğinde direncin kademeli olarak değil, aniden ve ölçülebilir limitlerin ötesinde sıfıra düştüğünü gözlemlemiştir [1]. "Süperiletkenlik" olarak adlandırılan bu faz geçişi, o güne kadar bilinen iletkenlik teorilerinden tamamen farklı bir mekanizmaya işaret etmekteydi. Cıva ile başlayan bu süreç, daha sonra kurşun (Pb) ve kalay (Sn) gibi elementlerin de benzer özelliklere sahip olduğunun bulunmasıyla devam etmiştir.

Bu malzemelerin karakterizasyonunda, kritik sıcaklık kadar önemli olan ikinci temel parametre manyetik alanla olan etkileşimleridir. 1933 yılında Meissner ve Ochsenfeld, bir süperiletkenin T_c değerinin altında soğutulduğunda, sadece dirençsiz bir iletken gibi davranmadığını, aynı zamanda uygulanan dış manyetik alanı bünyesinden mükemmel bir şekilde dışarladığını (ideal diyamanyetizma) keşfetmişlerdir [2]. "Meissner Olayı" olarak bilinen bu fenomen, süperiletken malzemelerin içindeki manyetik akı yoğunluğunun (B) sıfır olması prensibine dayanır ve bu durum yüzeyde indüklenen perdelme akımları sayesinde gerçekleşir. Bu indüklenen akımların sonucunda, bir mıknatıs Şekil 2'de görüldüğü gibi, süperiletken malzemenin üzerinde havada asılı kalabilir ve bu durum manyetik levitasyon (magnetic levitation) olarak adlandırılır.



Şekil 2. Bir kalıcı mıknatısın, kritik sıcaklığının altına soğutulmuş külçe süperiletken üzerinde temassız olarak havada asılı kalması (Manyetik Levitasyon) [3].

2. YÜKSEK SICAKLIK SÜPERİLETKENLİĞİ (HTS)

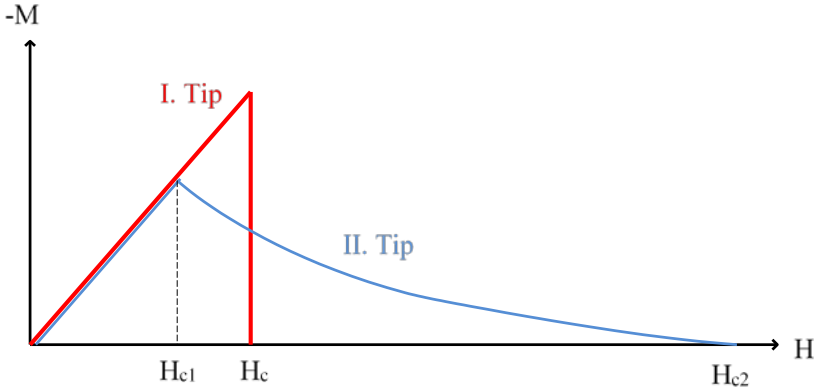
Süperiletkenliğin keşfinden 1980'li yıllara kadar geçen sürede, teknolojinin uygulanabilirliği önündeki en büyük engel "soğutma maliyeti" olmuştur. Niobium-Titanyum (NbTi) gibi metal alaşımların kullanıldığı Düşük Sıcaklık Süperiletkenleri (LTS: Low temperature superconductor), 23 K altındaki sıcaklıklarda çalışmakta ve bu süperiletkenlerin soğutulması için üretme ve saklama maliyeti yüksek olan sıvı helyuma ihtiyaç duyulmaktaydı.

Bu bariyer, 1986 yılında Bednorz ve Müller'in 30 K kritik sıcaklığa sahip La-Ba-Cu-O seramik sistemini keşfetmeleriyle aşılmıştır [4]. Hemen ardından 1987 yılında Wu ve ekibinin Yttrium-Barium-Copper-Oxide (YBCO) bileşiğini sentezleyerek kritik sıcaklığı 93 K seviyesine taşıması, alanda bir devrim yaratmıştır [5]. Sıvı azotun kaynama noktası olan 77 K'in üzerine çıkılması, soğutma işleminin çok daha ucuz ve pratik hale gelmesini sağlamış, böylece süperiletken teknolojisinin endüstriyel potansiyeli artmıştır.

3. SÜPERİLETKENLERDE AKI ÇİVİLENMESİ (FLUX PINNING)

Süperiletken mıknatısların çalışma prensibi, malzemenin belirli bir kritik sıcaklığın (T_c) altında doğru akıma (DC) sıfır elektrik direnci göstermesine dayanır. Külçe süperiletkenlerin mühendislik uygulamalarında yer bulması, onların "Tip II" süperiletken davranışa sahip olmalarından kaynaklanmaktadır. Tip I süperiletkenler kendilerine uygulanan manyetik alanı tamamen dışlarken (Meissner Etkisi), Tip II süperiletkenler, "karışık durum" (mixed state) adı verilen bir fazda çalışır. Tip I ve Tip II süperiletkenlerin dış manyetik alana tepkileri arasındaki bu temel fark ve Tip II süperiletkenlerde karışık durumun

başladığı alt kritik alan (H_{c1}) bölgesi Şekil 3'te gösterilmiştir. I. Tip süperiletkenler uygulanan alan H_c kritik alana ulaştığında aniden normal duruma geçerken; II. Tip süperiletkenler H_{c1} ve H_{c2} arasında manyetik akının malzeme içine girdiği "karışık durum" sergilerler. Bu fazda, dış manyetik alanın "kuantize akı tüpleri" (fluxons) veya girdaplar (vortices) şeklinde malzemenin içine girmesine izin verilir [6]. Bu manyetik akı çizgilerinin, malzeme içerisindeki safsızlıklar, dislokasyonlar, tane sınırları gibi kristal kusurları tarafından yakalanıp tuzaklanmasına "Akı Çivilenmesi" (Flux Pinning) denir. Akı çivilenmesi ne kadar güçlü olursa, süperiletkenin manyetik alan değişimine karşı gösterdiği direnç o kadar yüksek olur.



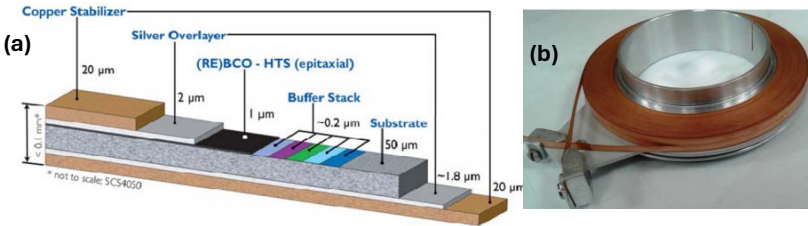
Şekil 3. I. Tip ve II. Tip süperiletkenlerin uygulanan manyetik alana (H) bağlı mıknatıslanma (-M) davranışlarının karşılaştırılması.

4. KÜLÇE (BULK) FORMA DUYULAN MÜHENDİSLİK İHTİYACI

Yüksek Sıcaklık Süperiletkenliğinin (HTS) 1986-1987 yıllarındaki keşfi, bilim ve mühendislik dünyasında büyük bir heyecan yaratmış ve bu malzemelerin enerji sektöründe devrim yapacağı beklentisini doğurmuştur. Bu dönemde yürütülen Ar-Ge

faaliyetlerinin ve stratejik yol haritalarının (örneğin ABD Enerji Bakanlığı'nın 1988 yılı HTS Programı) birincil odak noktası, süperiletken seramiklerin esnek, uzun metrajlı tel veya şerit (tape) formunda üretilmesi olmuştur [7, 8]. Bu ilk yönelimin temel motivasyonu, konvansiyonel bakır iletkenlerin yerini alarak kayıpsız enerji iletim hatları, yüksek verimli güç transformatörleri ve jeneratör bobinleri üretme hedefidir. Nitekim 1990'ların başında geliştirilen "Birinci Nesil (1G)" Bizmut tabanlı (BSCCO) şeritler, bu hedefin bir sonucu olarak ortaya çıkmış ve ilk HTS güç kablosu prototiplerinde kullanılmıştır [9].

Şekil 4'te detayları verilen şerit (tape) formundaki süperiletkenler, temel olarak elektrik akımının uzun mesafeler boyunca taşınması (enerji kabloları) veya yüksek manyetik alan üreten bobinlerin sarılması için tasarlanmıştır. Şekil 4(a)'dan görüldüğü üzere, bu malzemeler mekanik esneklik sağlamak amacıyla metalik bir alttaş (substrate) üzerine epitaksiyel olarak büyütülmüş çok katmanlı ve karmaşık bir mimariye sahiptir. Ancak bu şeritler bir bobin haline getirildiğinde (Şekil 4(b)), sargılar arasına giren yalıtım malzemeleri ve bakır stabilizörler, toplam kesit alanındaki süperiletken doluluk oranını düşürerek "mühendislik akım yoğunluğunu" (J_e) sınırlar.



Şekil 4. Enerji iletimi ve bobin uygulamaları için geliştirilen şerit (tape) formundaki süperiletken teknolojisi: (a) 2. Nesil (2G) REBCO şerit süperiletkenin çok katmanlı iç yapısının şematik gösterimi ve (b) bu şeritler kullanılarak sarılmış bir süperiletken bobin (coil) örneği [10].

Süperiletkenliğin sadece "akım taşıma" (iletim) özelliği değil, aynı zamanda "manyetik alan hapsedme" (tuzaklama) ve "diyamanyetik itme" (levitasyon) özellikleri de endüstriyel açıdan büyük bir potansiyel taşımaktaydı. Tel formundaki iletkenler, enerji nakli için ideal olsa da, üretim zorluklarının yanında, Maglev trenleri, manyetik yataklar (flywheel) ve kompakt motorlar gibi yüksek levitasyon kuvveti ve kararlılık gerektiren uygulamalarda, parçalı yapıları ve geometrik sınırlamaları nedeniyle yetersiz kalmıştır.

Bir süperiletken ile manyetik alan kaynağı (PMG: Permanent magnetic guideway) arasındaki manyetik kaldırma kuvveti (F_z), süperiletkenin manyetik momenti (m) ve manyetik alan gradyeni (dH/dz) ile doğru orantılıdır ($F_z = m \frac{dH}{dz}$). Süperiletkenin manyetik momenti ise şu parametrelere bağlıdır [11]:

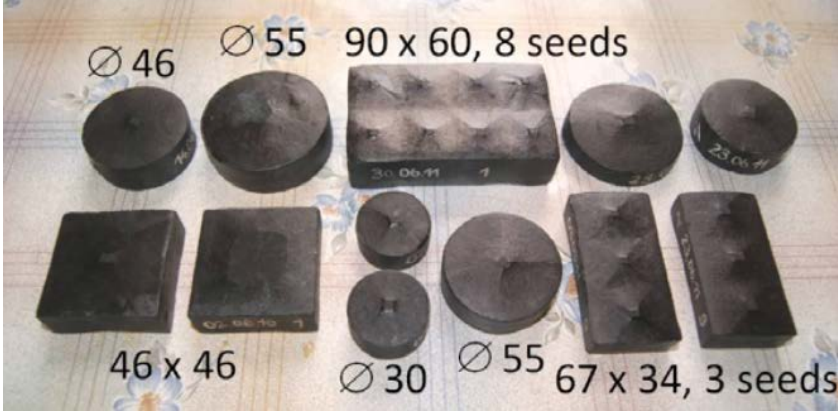
$$m = MV, M = AJ_{sc}r$$

Burada A geometrik bir sabit, J_{sc} süperiletkende indüklenen perdeleme akım yoğunluğu ve r ise perdeleme akım halkasının yarıçapıdır.

Şerit veya tel formundaki süperiletkenler, genellikle enerji iletim hatları (kablolar, busbarlar) veya uçak motorlarındaki sargılar gibi akımın uzun mesafeler boyunca taşınması gereken yerlerde kullanılır. Ancak bu yapıda, akım dar bir kesitten akar ve efektif akım döngüsü yarıçapı (r) şerit genişliği ile sınırlıdır. Tek domainli (single-domain) olarak üretilen külçe süperiletkenlerde (örneğin TSMG yöntemiyle üretilen YBCO), süperakımlar kristal sınırlarına takılmadan malzemenin tüm çapı boyunca (makroskobik ölçekte) kesintisiz döngüler halinde akar. r değerinin bu denli büyük olması, şerit bobinlere kıyasla çok daha yüksek bir manyetik moment ve dolayısıyla çok daha yüksek bir levitasyon kuvveti elde edilmesini sağlar.

Şerit formundaki süperiletkenlerin (veya geleneksel Nb-Ti tellerin) manyetik alan kaynağı olarak kullanıldığı sistemler, genellikle aktif bir güç kaynağına ve karmaşık kontrol mekanizmalarına ihtiyaç duyar. Örneğin, Japonya'daki SC-Maglev [12] tren projesinde kullanılan Nb-Ti bobinler, hem dışarıdan sürekli akımla beslenmeli hem de çok düşük sıcaklıklara (yaklaşık 10 K, sıvı helyum) soğutulmalıdır .

Buna karşın, REBCO tabanlı külçe süperiletkenler, "akı çivilenmesi" (flux pinning) özelliği sayesinde benzersiz bir avantaj sunar: Öz-Kararlılık (Self-Stabilization). Külçe süperiletkenler, manyetik akı çizgilerini içyapısal kusurlarda hapsederek, dış bir kontrol ünitesine ihtiyaç duymadan pasif olarak kararlı bir levitasyon sağlar. Bu özellik, Maglev araçlarının veya manyetik yatakların karmaşık güç aktarım ünitelerine ve sensörlere ihtiyaç duymadan, daha basit ve işletilmesi kolay yapılar olarak inşa edilmesine olanak tanır. Sistemin geometrik gereksinimlerine göre, Şekil 5'te görüldüğü gibi tek tohumlu silindirik disklerden çok tohumlu dikdörtgen bloklara kadar farklı formlarda üretilebilen bu külçe süperiletkenler, tasarım esnekliği açısından kritik bir rol oynar. Brezilya'daki Maglev-Cobra projesi, külçe süperiletkenlerin bu pasif kararlılık avantajını kullanarak inşa edilmiş ve NASA'nın Teknoloji Hazırlık Seviyesi (TRL) ölçeğinde 8. seviyeye ulaşarak ticarileşmeye en yakın örneklerden biri olmuştur.



Şekil 5. Endüstriyel ölçekli uygulamalar (Maglev ve manyetik yataklar) için eritme-dokulama-büyütme (melt-textured-growth) yöntemiyle üretilmiş, farklı geometri ve boyutlara sahip YBCO külçe süperiletken bloklar [13].

Şerit formundaki süperiletkenlerin birçoğu (özellikle 1. nesil ve LTS teller), performanslarını korumak için çok düşük sıcaklıklara (4.2 K - 20 K) ihtiyaç duyar. Bu da pahalı ve karmaşık sıvı helyum veya yüksek güçlü kriyojenik sistemleri gerektirir. Ancak Maglev ve motor uygulamalarında kullanılan YBCO külçe süperiletkenlerin kritik sıcaklığı 92 K civarındadır ve bu malzemeler, ucuz ve kolay temin edilebilen sıvı azot (77 K) içerisine daldırılarak (immersion cooling) son derece pratik ve ekonomik bir şekilde soğutulabilmektedir.

Külçe süperiletkenler, bir kez manyetize edildikten sonra, dış enerji kaynağını kesip manyetik alanı hapseden "Süper Kalıcı Mıknatıslar" (Trapped Field Magnets) gibi davranabilirler. Geleneksel NdFeB kalıcı mıknatısların üretebildiği manyetik akı yoğunluğu malzeme limitleri nedeniyle 1.5 Tesla civarında sınırlanırken, külçe süperiletkenlerde 17 Tesla'nın üzerinde manyetik alanlar hapsedilebilmektedir [14]. Türkiye'deki araştırma grupları da dahil olmak üzere dünya genelindeki çalışmalar, çok çekirdekli (multi-seeded) büyütme teknikleri gibi yöntemlerle külçe süperiletkenlerin yapısal özelliklerini ve akım

taşıma kapasitelerini (J_c) sürekli geliştirmektedir [15, 16]. Bu yüksek alan yoğunluğu, özellikle gemi itki motorları ve rüzgâr türbinleri gibi yüksek tork gerektiren uygulamalar için, şerit bobinlerin ulaşamayacağı bir güç yoğunluğu potansiyeline sahiptir.

Sonuç olarak; enerji iletimi için şerit formundaki malzemeler kritik bir role sahipken; manyetik kuvvet, kararlılık, sistem sadeliği ve soğutma verimliliği gerektiren ağır endüstriyel uygulamalarda, tek kristal külçe süperiletkenler teknolojik olarak daha üstün bir çözüm sunmaktadır.

5. KÜLÇE SÜPERİLETKEN ÜRETİM YÖNTEMLERİ

Süperiletken malzemelerin performansı, üretim yöntemine ve mikro yapısal özelliklerine sıkı sıkıya bağlıdır. Özellikle REBCO (Nadir Toprak - Baryum - Bakır - Oksit) ailesi süperiletkenlerin üretimi, hassas termal ve kimyasal süreçleri içerir [17]. Süperiletken malzeme üretimi sürecindeki temel hedef, akım taşıma kapasitesini düşüren engelleri ortadan kaldırmaktır. Külçe süperiletken malzeme üretiminde kullanılan beş temel yöntem aşağıda verilmiştir.

5.1. Katı Hal Sinterleme (Solid State Sintering) Yöntemi

HTS malzemelerin keşfinden hemen sonra kullanılan ilk yöntem, geleneksel seramik üretim tekniği olan "Katı Hal Sinterleme"dir. Bu yöntemde, metal oksit tozları karıştırılır, preslenir ve erime sıcaklığının altında ısıtılma tabi tutulur. Ancak bu yöntemle üretilen malzemelerde, rastgele yönelimli kristal tanecikleri arasında oluşan sınırlar süper akımın geçişine büyük direnç gösterir. "Zayıf Bağ" (Weak Link) problemi olarak bilinen bu durum, malzemenin kritik akım yoğunluğunu

düşürerek, yüksek manyetik alan uygulamaları için elverişsiz hale getirir.

5.2. Eriterek Dokulama Yöntemi (Melt Texture Growth - MTG)

Zayıf bağ problemini aşmak ve tanecikler arası uyumu sağlamak amacıyla 1988 yılında Jin ve ekibi tarafından "Eriterek Dokulama" (Melt Texture Growth - MTG) yöntemi geliştirilmiştir [17]. Bu yöntemin temel prensibi, REBCO malzemesini peritektik bozunma sıcaklığının üzerine çıkararak kısmi olarak eritmektir. Ardından yapılan çok yavaş soğutma işlemi sırasında, kontrollü katılaşma sağlanarak kristal taneciklerinin belirli bir kristalografik ekseninde (c-ekseni) hizalanması sağlanır. Bu hizalanma, akım taşıma kapasitesini katı hal yöntemiyle sinterlenmiş örneklerle göre binlerce kat artırır. Bu sürecin kimyasal altyapısı, süperiletken $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (Y-123) fazının peritektik bir reaksiyona girmesine dayanır. Malzeme ısıtıldığında, Y-123 fazı bozunarak daha kararlı olan katı Y_2BaCuO_5 (Y-211) fazına ve baryum-bakır zengini bir sıvı faza ayrışır. Kontrollü soğutma aşamasında ise, bu katı Y-211 partikülleri ile sıvı faz yeniden reaksiyona girerek süperiletken Y-123 matrisini tekrar oluşturur. Ancak bu yeniden oluşum sırasında, reaksiyona girmeyen ve süperiletken matrisin içerisine homojen olarak dağılan mikroskobik Y-211 partikülleri, malzemenin performansında kritik bir rol oynar. Süperiletken olmayan bu kalıntılar, manyetik akı çizgileri için doğal "çivileme merkezleri" (pinning centers) görevi görerek akı hareketini engeller ve kritik akım yoğunluğunu artırır. Sonuç olarak, MTG yöntemiyle üretilen malzemelerde, akım geçişini engelleyen büyük açılı tanecik sınırları (grain boundaries) elimine edilir ve malzeme makroskobik boyutlarda neredeyse tek bir kristal gibi davranan "tek-domain" (single-domain) yapısına kavuşur. Bu yapısal bütünlük, külçe süperiletkenlerin yüksek manyetik

alanları hapsedmesini ve güçlü levitasyon kuvvetleri üretmesini mümkün kılan temel faktördür.

5.3. Eritme-Tozlama-Eritme-Büyütme Yöntemi (Melt-Powder-Melt-Growth - MPMG)

Jin ve ekibinin öncülük ettiği MTG yönteminin başarısına rağmen, süreç içerisinde oluşan Y-211 parçacıklarının boyutlarının kontrol edilmesi ve homojen dağılımı, akı çivilenme performansı (dolayısıyla J_c) açısından kritik bir sorun olarak kalmıştır. Bu sorunu aşmak için Japonya'daki ISTEK laboratuvarlarında Murakami ve ekibi tarafından "Eritme-Tozlama-Eritme-Büyütme" (Melt-Powder-Melt-Growth, MPMG) yöntemi geliştirilmiştir [11]. Bu teknikte, başlangıç malzemeleri önce çok yüksek sıcaklıklarda (yaklaşık 1400°C) eritilip hızla oda sıcaklığına soğutulur (Quenching). Bu ani soğutma, malzemenin camsı bir yapıya dönüşmesini sağlar. Elde edilen bu yapı öğütülerek toz haline getirilir ve sonrasında preslenerek tablet (pellet) formuna getirilir. Bu ön işlem adımı, nihai süperiletken matris içerisindeki Y-211 partiküllerinin mikroskopik boyutlara inmesini ve çok daha homojen dağılmasını sağlar. Sonuç olarak MPMG yöntemi, akı çivilenme kuvvetini artırarak MTG yöntemine kıyasla çok daha yüksek levitasyon kuvvetlerine ulaşılmasının önünü açmıştır.

5.4. Üstten Tohumlamalı Eritme-Büyütme Yöntemi (Top-Seeded Melt Growth - TSMG)

MPMG yöntemi, mikroskopik ölçekte akı çivilenme merkezlerinin (Y-211 fazı) homojen dağılımını sağlayarak malzeme kalitesini artırsa da kristal çekirdeklenmesinin rastgele noktalardan başlaması (random nucleation) nedeniyle makroskopik boyutta kristal yöneliminin kontrol edilememesi ve "çoklu domain" (multi-domain) yapısının oluşması problemi tam olarak çözmemektedir. Bu kısıtlamayı aşmak ve malzemenin tamamını tek bir kristal gibi davranan "Tek Domain"

(Single-Domain) yapıya dönüştürmek amacıyla, günümüzde büyük çaplı ve yüksek performanslı külçelerin üretiminde endüstriyel standart haline gelen Üstten Tohumlamalı Eritme-Büyütme (Top-Seeded Melt Growth - TSMG) yöntemi geliştirilmiştir [18]. Bu yöntemin temel mekanizması ve süreç adımları şöyledir: Preslenmiş Y-123 peletinin tam merkezine, kristal büyümesini başlatmak ve yönlendirmek amacıyla bir "tohum kristali" (seed crystal) yerleştirilir. Bu tohum, genellikle üretilecek malzemeye aynı kristal yapısına sahip olan ancak erime noktası daha yüksek olan NdBCO (Nd-123) veya SmBCO (Sm-123) gibi Nadir Toprak tabanlı süperiletkenlerden veya MgO gibi tek kristallerden seçilir. Amaç, ana malzeme eridiğinde tohumun katı halini koruyarak kristalleşme için bir şablon görevi görmesidir. Numune, fırın içerisinde Y-123 fazının peritektik bozunma sıcaklığının (T_p) üzerine (yaklaşık 1000-1050°C), ancak tohum kristalinin erime sıcaklığının altına ısıtılır. Bu aşamada Y-123 matrisi yarı-sıvı bir faza dönüşürken tohum katı kalır. Ardından çok hassas ve yavaş bir soğutma sürecine (genellikle saatte 0.5 - 1°C soğutma hızıyla) geçilir. Kristalleşme, termodinamik olarak en kararlı nokta olan tohum kristalinin ara yüzeyinden başlar. Y-123 fazı, tohumun kristalografik yönelimini (genellikle c-ekseni yukarı bakacak şekilde) kopyalayarak, tohumdan radyal olarak dışa doğru katılaşır. Bu kontrollü büyüme sayesinde, rastgele çekirdeklenmeler bastırılır ve tüm külçe boyunca süperakımların kesintisiz dolaşabildiği, tane sınırlarının (grain boundaries) elimine edildiği tek parça bir yapı elde edilir. Sonuç olarak TSMG yöntemi; levitasyon kuvvetini düşüren zayıf bağları ortadan kaldırarak, 10-15 cm çapa kadar ulaşabilen ve 17 Tesla'nın üzerinde manyetik alan hapsedebilen süperiletken müknaatısların üretimine olanak tanır.

5.5. Sızdırma ve Büyütme Tekniği (Infiltration and Growth - IG)

TSMG yönteminde, Y-123 öncü malzemesi erime sıcaklığına ulaştığında viskozitesini kaybeder ve kendi ağırlığı altında çökerek geometrik formunu yitirir (slumping). Ayrıca, oluşan sıvı fazın bir kısmı altlık malzeme tarafından emilerek sistemden uzaklaşır, bu da nihai üründe şekil bozulmalarına (shrinkage) ve süperiletken fazın eksik oluşumuna neden olur. Bu yapısal problemleri aşmak ve geometrik hassasiyeti artırmak amacıyla alternatif bir yöntem olarak Sızdırma ve Büyütme (Infiltration and Growth - IG) tekniği geliştirilmiştir [19].

Bu yöntemde süreç, kimyasal olarak kararlı iki ayrı bileşenin hazırlanmasıyla başlar:

- i) Nihai ürünün hedef şekline ve boyutlarına sahip, yüksek erime noktalı ve gözenekli bir katı faz preformu (genellikle Y-211).
- ii) Bu preformun üzerine yerleştirilecek olan düşük erime noktalı bir sıvı faz kaynağı (Baryum ve Bakır oksitlerin karışımı).

Isıl işlem sırasında, sıvı faz kaynağı erir ancak katı Y-211 iskeleti formunu korumaya devam eder. Eriyen sıvı faz, kapiler (kılcal) kuvvetlerin etkisiyle Y-211 preformunun gözenekli yapısına nüfuz eder (infiltrasyon). Burada katı Y-211 partikülleri ile reaksiyona giren sıvı faz, süperiletken Y-123 fazını oluşturarak boşlukları doldurur. IG yönteminin en belirgin üstünlüğü, katı iskeletin işlem boyunca çökmemesi sayesinde başlangıç boyutlarının işlem sonunda neredeyse birebir korunmasıdır. Ayrıca, sıvı fazın gözenekleri tamamen doldurması sayesinde, TSMG yönteminde sıkça rastlanan makroskobik çatlaklar ve hava boşlukları (voids) minimize edilir. Sonuç olarak, IG yöntemiyle üretilen külçeler, standart yöntemlere göre çok daha yüksek yoğunluğa ve mekanik dayanıma sahip olur.

6. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME

Süperiletkenlik olgusunun 20. yüzyılın başındaki keşfinden günümüze uzanan süreçte, özellikle 1987 yılında YBCO gibi Yüksek Sıcaklık Süperiletkenlerinin (HTS) bulunması, bu teknolojiyi sadece bilimsel araştırma konusu olmaktan çıkarıp endüstriyel uygulamaların merkezine oturtmuştur. Soğutma için sıvı helyum gerekliliğinin ortadan kalkması ve ekonomik sıvı azot sıcaklıklarında (77 K) çalışılabilmesi, süperiletken sistemlerin mühendislik uygulamalarını artıran en kritik dönüm noktası olmuştur. Yukarıda detaylandırıldığı üzere, süperiletken teknolojisi yalnızca enerji iletim hatlarında kullanılan tel veya şerit formlarıyla sınırlı değildir. Özellikle akı çivilenmesi mekanizmasına sahip II. Tip külçe (bulk) süperiletkenler, manyetik alanı hapsedme ve güçlü levitasyon kuvveti oluşturma kapasiteleriyle geleneksel kalıcı mıknatıslardan ayrışır. Geleneksel NdFeB mıknatısların fiziksel limitlerinin çok ötesinde manyetik alanlar (17 T üzeri) üretebilen bu malzemeler, "süper kalıcı mıknatıs" olarak enerji depolama sistemleri (flywheel), kompakt elektrik motorları ve Maglev ulaşım sistemleri için benzersiz çözümler sunmaktadır.

Malzeme bilimindeki gelişmeler, külçe süperiletkenlerin üretim yöntemlerinde de belirgin bir değişime yol açmıştır. İlk dönemlerde kullanılan "Katı Hal Sinterleme" yönteminin neden olduğu "zayıf bağ" (weak-link) problemi, kristal yapının yönlendirilmesini sağlayan "Eriterek Dokulama" (MTG) ve "Eritme-Tozlama-Eritme-Büyütme" (MPMG) süreçleriyle aşılmıştır. Günümüzde endüstriyel standart haline gelen "Üstten Tohumlamalı Eritme-Büyütme" (TSMG) yöntemi sayesinde, kristal sınırlarının elimine edildiği büyük boyutlu "tek-domain" yapılar başarıyla üretilabilmektedir. Ayrıca, geometrik hassasiyeti artıran ve mekanik özellikleri iyileştiren "Sızdırma ve

Büyütme" (IG) gibi yenilikçi teknikler, bu malzemelerin ticari ürünlere entegrasyonunu daha da kolaylaştırmaktadır.

Sonuç olarak; mikro yapısal kontrolün sağlanması ve üretim maliyetlerinin optimize edilmesiyle birlikte, külçe süperiletkenler, yüksek verimlilik ve kararlılık gerektiren mühendislik ve teknoloji uygulamalarında vazgeçilmez bir bileşen olma yolunda hızla ilerlemektedir.

KAYNAKÇA

- [1] Onnes, H. K., 1911. Superconductivity and Magnetizm, 119-120, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden.
- [2] Meissner, W. H. ve Ochsenfeld, R., 1933. Upper Critical Field of High Tc Superconducting Y-Ba-Cu-O, Nature, 132, 931-935.
- [3] Peter nussbaumer - German Wikipedia, original upload 11:59, 20. Nov 2005 by Peter nussbaumer, CC BY-SA 3.0,
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=443141>
- [4] Bednorz, J. G., & Müller, K. A. (1986). Possible high Tc superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 64(2), 189-193.
- [5] Wu, M.K., Ashbum, J.R., Tomg, C.J., Hor, P.H., Meng, R.L., Huang, Z.J., Wang, Y.Q. and Chu, C.W., 1987. Superconductivity at 93K in a New Mixed Phase Y-Ba-Cu-O Compound System at Ambient Pressure, Physical Rev. Lett., 58, 908-910.
- [6] Bean, C.P. (1964). Magnetization of high-field superconductors. Reviews of Modern Physics, 31, 250-258.
- [7] US Department of Energy (DOE). (1988). High Temperature Superconductivity Program Plan. Washington DC: Office of Conservation and Renewable Energy.
- [8] Malozemoff, A. P., Mannhart, J., & Scalapino, D. (2005). High-temperature cuprate superconductors get to work. Physics Today, 58(4), 41-47.

- [9] Hassenzahl, W. V., Hazelton, D. W., Johnson, B. K., Komarek, P., Noe, M., & Reis, C. T. (2004). Electric power applications of superconductivity. *Proceedings of the IEEE*, 92(10), 1655-1674.
- [10] Krasnoperov, E. P., Sychugov, V. V., Guryev, V. V., Shavkin, S. V., Krylov, V. E., & Volkov, P. V. (2020). 2G HTS tape and double pancake coil for cryogen-free superconducting magnet. *Electrical Engineering*, 102(3), 1769-1774.
- [11] Murakami, M., Oyama, T., Fujimoto, H., Gotoh, S., Yamaguchi, K., Shiohara, Y., Koshizuoka, N., and Tanaka, S., 1991. Melt Processing of Bulk High Tc Superconductors and Their Application, *IEEE Trans. On Magnet*, 27, 1479.
- [12] Ono, M., Koga, S., & Ohtsuki, H. (2002). Japan's superconducting Maglev train. *IEEE Instrumentation & Measurement Magazine*, 5(1), 9-15.
- [13] Werfel, F. N., Floegel-Delor, U., Rothfeld, R., Riedel, T., Goebel, B., Wippich, D., & Schirrmeister, P. (2011). Superconductor bearings, flywheels and transportation. *Superconductor Science and Technology*, 25(1), 014007.
- [14] Tomita, M., & Murakami, M. (2003). High-temperature superconductor bulk magnets that can trap magnetic fields of over 17 tesla at 29 K. *nature*, 421(6922), 517-520.
- [15] Güner, S. B., Abdioğlu, M., Öztürk, K., & Çelik, Ş. (2020). The comparison of levitation and lateral force of bulk and cut-pasted bulk GdBCO samples at different temperatures. *Journal of Alloys and Compounds*, 822, 153637.

- [16] Guner, S. B., Celik, S., & Tomakin, M. (2017). The investigation of magnetic levitation performances of single grain YBCO at different temperatures. *Journal of Alloys and Compounds*, 705, 247-252.
- [17] Jin, S., Tiefel, T. H., Sherwood, R. C., Van Dover, R. B., Davis, M. E., Kammlott, G. W., & Fastnacht, R. A. (1988). Melt-textured growth of polycrystalline $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ with high transport J_c at 77 K. *Physical Review B*, 37(13), 7850.
- [18] Cardwell, D. A. (1998). Processing and properties of large grain (RE)BCO. *Materials Science and Engineering: B*, 53(1-2), 1-10.
- [19] Iida, K., Babu, N. H., Withnell, T. D., Shi, Y., Haindl, S., Weber, H. W., & Cardwell, D. A. (2006). High-performance single grain Y–Ba–Cu–O bulk superconductor fabricated by seeded infiltration and growth. *Physica C: Superconductivity and its applications*, 445, 277-281.

SÜPERİLETKEN MIKNATISLARIN HASTALIK TEŞHİS VE TEDAVİSİNDE KULLANIMI

Ufuk Kemal ÖZTÜRK¹

Murat ABDIOĞLU²

1. GİRİŞ

Tıbbi görüntüleme ve terapötik (tedavi edici) müdahaleler, 20. yüzyılın son çeyreğinde manyetik alan teknolojilerinin entegrasyonu ile devrim niteliğinde bir dönüşüm geçirmiştir. Özellikle Manyetik Rezonans Görüntüleme (MRI), iyonlaştırıcı radyasyon içermeyen yapısı ve yumuşak doku kontrastındaki üstünlüğü ile modern tıbbın vazgeçilmez bir parçası olmuştur [1]. Paul C. Lauterbur'un, manyetik alan gradyanlarını kullanarak NMR sinyallerine uzaysal konum bilgisi eklediği ve 1973 yılında yayınladığı çığır açıcı çalışma, modern tıbbi görüntülemenin temelini atmıştır. Lauterbur, bu teknik sayesinde teşhis tıbbında yarattığı devrimsel etki nedeniyle, görüntüleme tekniklerini daha da geliştiren Sir Peter Mansfield ile birlikte 2003 yılında Fizyoloji veya Tıp alanında Nobel Ödülü'ne layık görülmüştür. Manyetik rezonans prensibinin görüntülemeye uyarlanması ve ardından geliştirilen ilk prototipler, dirençli (rezistif) bakır bobinler kullanmaktaydı. Bu dönemin en çarpıcı mühendislik başarısı, Raymond Damadian ve ekibi tarafından inşa edilen ve 1977 yılında ilk insan vücudu

¹ Electromagnetic Guidance and Acceleration Research Group (EMGA), Department of Physics, Faculty of Science, Karadeniz Technical University, 61080, Trabzon, Türkiye.

² Department of Mathematics and Science Education, Faculty of Education, Bayburt University, 69000, Bayburt, Türkiye.

taramasını gerçekleştiren "Indomitable" (Boyun Eğmez) isimli cihazdır (Şekil 1).



Şekil 1. Dr. Raymond Damadian ve geliştirdiği dünyanın ilk tam vücut manyetik rezonans tarayıcısı "Indomitable" (1977) [2].

Süperiletken teknolojisi öncesinde inşa edilen bu devasa cihaz, gerekli manyetik alanı oluşturmak için tonlarca ağırlıkta dirençli bakır bobinler kullanıyordu.

Ancak Şekil 1'de görülen cihazın devasa boyutlarından da anlaşılacağı üzere, bu tür dirençli sistemlerin yüksek güç tüketimi, aşırı ısınma sorunları ve üretebildikleri manyetik alan şiddetinin sınırlı olması (genellikle <0.5 Tesla), klinik kullanımın yaygınlaşmasının önünde bir engel oluşturmuştur.

Danimarkalı Fizikçi Heike Kamerlingh Onnes tarafından 1911 yılında keşfedilen süperiletkenlik olgusu, ancak 1970'lerin sonunda yeterli teknolojik olgunluğa erişerek tıbbi cihazlarda kullanılmaya başlanmıştır. Süperiletken mıknatıslar, DC elektrik direncinin sıfır olması sayesinde, enerji kaybı olmaksızın çok yüksek ve zamanla değişmeyen kararlı (stable) manyetik alanlar üretebilmektedir. Günümüzde süperiletken teknolojisi, sadece

tanısal görüntülemelerde değil, aynı zamanda proton terapisi gibi ileri tedavi yöntemlerinde de kritik bir kolaylaştırıcı rol oynamaktadır [3].

2. SÜPERİLETKEN MİKNATIS TEKNOLOJİSİNİN TEMELLERİ

Tıbbi uygulamalarda kullanılan süperiletken malzemeler temel olarak Düşük Sıcaklık Süperiletkenleri (Low Temperature Superconductor: LTS) ve Yüksek Sıcaklık Süperiletkenleri (High Temperature Superconductor: HTS) olmak üzere iki ana kategoride incelenir. Günümüzde kullanılan klinik MRI sistemlerinin büyük çoğunluğunda, manyetik alan kaynağı olarak kritik sıcaklığı (T_c) yaklaşık 9.2 K olan Niyobyum-Titanyum (NbTi) alaşımından oluşan bobinlerden yararlanılmaktadır. Bu sistemlerin süperiletkenlik özelliğini koruyabilmesi için kritik sıcaklıklarının altına kadar soğutulmaları gerekir ki bu da 4.2 K sıcaklığındaki sıvı helyum kullanımını gerektirmektedir [4].

Süperiletkenliğin keşfinden sonra araştırmacıların bir kısmı bu yeni fenomenin altında yatan fizikle ilgili teorik çalışmalar yaparken bir kısmı da süperiletkenlik özelliği gösteren diğer element ve alaşımlar üzerinde çalışmaya başladı. Yeni süperiletken malzeme keşfinde en önemli kriterlerden bir tanesi de kritik sıcaklıktı. Çünkü, küresel helyum rezervlerinin sınırlı olması ve helyumun tedariki, saklanması ve taşınmasındaki zorlukların getirdiği yüksek maliyet, süperiletken teknolojisinin laboratuvar ortamından çıkarak yaygın klinik ve endüstriyel uygulamalara entegre edilmesini kısıtlamaktaydı. Bu ekonomik ve lojistik bariyer, araştırmacıları sıvı helyum sıcaklığına bağımlı kalmayan, daha yüksek sıcaklıklarda dirençsizlik özelliği gösterebilen yeni malzeme arayışlarına itti.

Bilim dünyasındaki bu arayış, uzun yıllar boyunca düşük sıcaklık süperiletkenleri (LTS) sınıfındaki metal alaşımlar ile

sınırlı kalsa da 1986 yılında Bednorz ve Müller'in bakır-oksit seramiklerinde 30 K kiritik sıcaklıkta süperiletkenliği keşfetmesiyle büyük bir ivme kazandı [5]. Bu keşfin hemen ardından, 1987 yılında, Yttrium-Barium-Copper-Oxide (YBCO) bileşiğinin 93 K civarında süperiletkenlik özelliği gösterdiğinin keşfedilmesi süperiletkenlik alanında büyük bir devrime yol açtı. Bu keşif, sıvı azotun kaynama noktası olan 77 K (-196 °C) sınırının aşılmasını sağlayan Yüksek Sıcaklık Süperiletkenleri (HTS) çağını başlattı. Sıvı azotun havadan kolayca ve düşük maliyetle elde edilebilmesi süperiletken teknolojisinin uygulanabilirliğini artırmıştır.

3. TEŞHİS (TANI) ALANINDA KULLANIM

3.1. Manyetik Rezonans Görüntüleme (MRI)

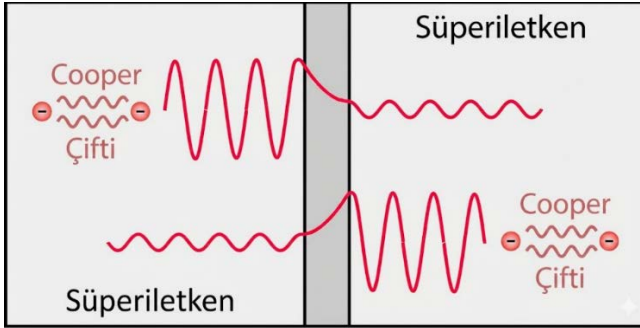
MRI teknolojisinde görüntü kalitesini belirleyen temel parametrelerden biri olan Sinyal-Gürültü Oranı (Signal-to-Noise Ratio: SNR), uygulanan manyetik alanın şiddeti (B_0) ile doğrusal bir ilişki içerisinde. Klinik standart olarak kabul edilen 1.5 T ve 3.0 T sistemlerin ötesinde, araştırma amaçlı kullanılan 7.0 T ve üzeri Ultra Yüksek Alan (Ultra High Field: UHF) sistemleri, süperiletken teknolojisinin sınırlarını zorlamaktadır. Vaughan ve arkadaşları, 7.0 T sistemlerin, özellikle beyin anatomisinin mikro yapılarının görüntülenmesinde ve fonksiyonel MRI (fMRI) çalışmalarında daha düşük alan şiddetlerine göre belirgin üstünlük sağladığını göstermiştir [6].

Ayrıca, klostrofobik hastalar ve obezite sorunu yaşayan bireyler için tasarlanan açık MRI sistemlerinde, geleneksel solenoid yapı yerine farklı geometriler gerekmektedir. Baig ve arkadaşları, MgB_2 tabanlı bobinlerin esnek tasarım imkanları sayesinde, “sıfır buharlaşma” (zero-boil-off) özelliğine sahip, hasta konforunu artıran sistemlerin geliştirilebileceğini raporlamıştır [7]. 11.7 T manyetik alan üretme kapasitesine sahip

Iseult/INUMAC projesi gibi örnekler ise NbTi ve Nb₃Sn süperiletkenlerinin hibrit kullanımı ile insan vücudu görüntülemeye ulaşılacak en yüksek çözünürlükleri hedeflemektedir [8]. Iseult/INUMAC projesi kapsamında geliştirilen 11.7 T tüm vücut MRI sistemi, üretim sürecinin tamamlanmasının ardından, 2024 yılı itibarıyla insan görüntülemesinde kullanılan dünyanın en yüksek manyetik alanlı sistemi olmuştur. Her ne kadar laboratuvar ölçeğindeki (küçük çaplı) sistemlerle daha yüksek alanlara ulaşılmış olsa da ve Çin'de 14 T insan sistemi üzerine çalışmalar başlasa da klinik boyutta operasyonel zirve noktası şu an için 11.7 T düzeyindedir.

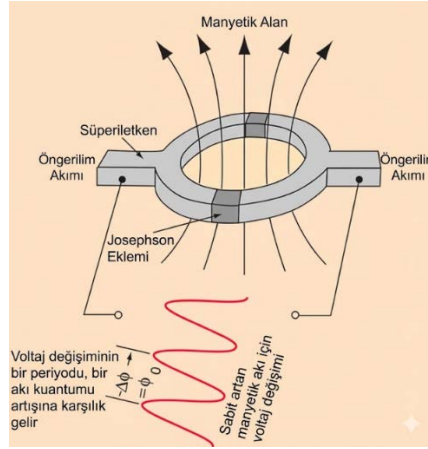
3.2. SQUID Sensörleri (MEG ve MCG)

Süperiletken sensör teknolojisinin kalbinde, iki süperiletken malzemenin arasına yerleştirilen çok ince (genellikle birkaç nanometre kalınlığında) bir yalıtkan veya normal metal tabaka ile oluşturulan "Josephson Eklemini" yer alır (Şekil 2). Brian Josephson'ın (1962) teorik olarak öngördüğü üzere, bu yapı, Cooper çiftlerinin yalıtkan engeli kuantum tünelleme yoluyla geçmesine olanak tanır [9].



Şekil 2. Bir Josephson eklemi şeması. İki süperiletken blok arasına yerleştirilen ince yalıtkan bariyer, Cooper çiftlerinin (Cooper Pairs) kuantum tünelleme yoluyla bariyeri aşmasına olanak tanır. Kırmızı dalga çizgileri, elektron çiftlerinin bariyerden geçişini temsil eden dalga fonksiyonlarıdır [10].

Normal şartlarda yalıtkan olan bu bariyerden, herhangi bir voltaj düşümü olmaksızın belirli bir kritik akım değerine (I_c) kadar süperakım geçebilir. Bu temel yapı taşının dünyanın en hassas manyetik alan dedektörüne dönüşmesi, iki adet Josephson eklemının paralel bağlanarak bir süperiletken halka (loop) oluşturulmasıyla gerçekleşir; bu konfigürasyona DC SQUID (Doğru Akım Süperiletken Kuantum Girişim Cihazı) adı verilir (Şekil 3). Brian Josephson'ın 1962'de süperiletkenlerde tünelleme akımları üzerine yaptığı teorik öngörülerin ardından [9], Jaklevic ve arkadaşları ilk kez süperiletken bir halka üzerindeki kuantum girişim etkilerini deneysel olarak göstermiş ve günümüz Süperiletken Kuantum Girişim Cihazlarının (SQUID) temelini atmışlardır [11]. SQUID sensörleri, femtotesla mertebesindeki son derece zayıf manyetik alanları ölçebilme yeteneğine sahiptir. Beynin nöronal aktivitesi sonucu oluşan ve femtotesla (10^{-15} T) mertebesindeki manyetik alanların tespit edilmesi, ancak süperiletken teknolojisinin sunduğu hassasiyetle mümkündür.



Şekil 3. DC SQUID devresinin temel yapısı. Paralel bağlı iki Josephson eklemi içeren bir süperiletken halka, içinden geçen manyetik akıdaki değişimlere karşı son derece duyarlı bir interferometre gibi davranır. Altındaki grafik, manyetik akı arttıkça cihaz üzerindeki voltajın periyodik değişimini göstermektedir [10].

SQUID sensörleri non-invaziv olarak beyin aktivitesinin haritalandığı Manyetoensefalografi (MEG) ve kalbin manyetik aktivitesinin incelendiği Manyetokardiyografi (MCG) cihazlarında kullanılmaktadır [12, 13]. Hämäläinen ve arkadaşlarının vurguladığı üzere, MEG sistemleri, EEG'nin aksine kafatası ve doku katmanlarından etkilenmeden milisaniye mertebesinde zamansal çözünürlük sunarak, epilepsi odaklarının tespitinde ve preserjikal planlamada kritik veriler sağlar [14].

4. TEDAVİ ALANINDA KULLANIM

4.1. Parçacık Terapisi (Hadron Terapisi)

Kanser tedavisinde kullanılan proton ve karbon iyon terapileri, X-ışınlarına kıyasla "Bragg piki" adı verilen fiziksel özellik sayesinde tümöre maksimum doz bırakırken çevre sağlıklı dokuyu korur [15]. Ancak, ağır yüklü parçacıkları yüksek enerjilere ulaştırmak ve hastanın etrafında istenen açıda yönlendiren gantry sistemlerinde devasa manyetik alanlar gerekmektedir (Şekil 4). Konvansiyonel dirençli mıknatıslarla yapılan gantry sistemleri yüzlerce ton ağırlığa (örneğin Heidelberg'de ~670 ton) ulaşabilirken, süperiletken teknolojisi bu bariyeri yıkmaktadır [16]. Süperiletken mıknatısların entegrasyonu ile Japonya'daki HIMAC merkezinde gantry ağırlığı 350 tona düşürülmüştür. Avrupa'da yürütülen SIG ve HITRIplus projeleri ise kavisli "Canted Cosine Theta (CCT)" mıknatıslar üzerinde yoğunlaşmaktadır [17]. Bu yarışa katılan en güncel çalışmalardan biri ise Çin'deki Lanzhou İyon Terapi Şirketi (LANITH) tarafından yürütülmektedir. Yang ve arkadaşları, 'Discrete Cosine Theta (DCT)' geometrisine sahip kombine fonksiyonlu süperiletken mıknatıslar kullanarak, karbon iyonu gantry sisteminin toplam ağırlığını 150 tonun altına düşürmeyi hedefleyen öncül bir tasarım sunmuştur [16]. 2027 yılında tamamlanması planlanan bu sistemde, hızlı manyetik alan

değişimleri (0.6 T/s) sırasında oluşan AC kayıplarını minimize etmek için 'altısı bir arada' (six-around-one) özel kablolama tekniği ve iletimle soğutma (conduction cooling) yöntemi tercih edilmiştir.



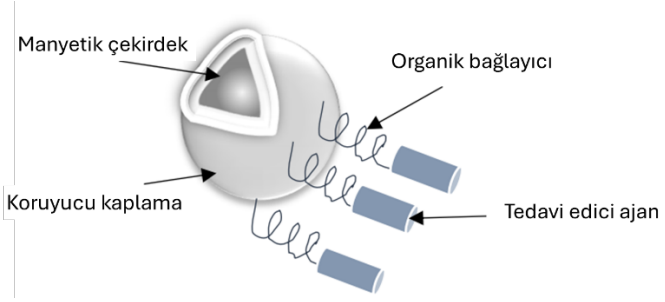
Şekil 4. Modern bir parçacık terapi (proton tedavisi) odasının genel görünümü [18]. Görüntüde, hastayı mikron hassasiyetinde konumlandıran robotik hasta masası ve ışın demetini tümöre istenen açıda yönlendirmek için hastanın etrafında 360 derece dönebilen Gantry başlığı (Nozzle) görülmektedir. Süperiletken mıknatıslar, tonlarca ağırlıktaki bu devasa yapının boyutlarını küçültmek ve enerji verimliliğini artırmak için kritik öneme sahiptir.

4.2. Manyetik İlaç Hedefleme (MDT)

Kanser, modern tıbbın kaydettiği tüm ilerlemelere rağmen, dünya genelinde morbidite ve mortalitenin en temel nedenlerinden biri olmaya devam etmektedir [19]. Dünya Sağlık Örgütü verilerine göre, dünya genelinde her yıl milyonlarca insan bu hastalık nedeniyle hayatını kaybetmekte ve mevcut tedavi protokollerinin sınırları, daha etkin çözümlerin arayışını zorunlu kılmaktadır [20]. Kemoterapi gibi geleneksel sistemik tedaviler,

kanserli hücreleri yok etmede etkili olsalar da "seçicilik" (selektivite) konusundaki yetersizlikleri nedeniyle ciddi bir handicap barındırırlar. Sistemik dolaşıma verilen ilaçlar, sadece tümör dokusunu değil, hızlı bölünen sağlıklı hücreleri de hedef olarak kemik iliği baskılanması, kardiyotoksisite ve nörotoksisite gibi hastanın yaşam kalitesini düşüren, hatta tedavinin devamlılığını engelleyen ağır yan etkilere yol açmaktadır [21, 22].

Bu klinik tablo, terapötik ajanların sadece hastalıklı bölgeye ulaştırılmasını sağlayacak, böylece tedavi etkinliğini maksimuma çıkarırken sağlıklı doku hasarını minimuma indirecek "akıllı" yaklaşımlara duyulan ihtiyacı artırmıştır. Bu noktada, nanoteknoloji ve biyomedikal mühendisliğinin kesişiminde yer alan Manyetik İlaç Hedefleme (Magnetic Drug Targeting: MDT), umut verici bir çözüm olarak öne çıkmaktadır [23]. MDT, biyoyumlu manyetik nanopartiküllere (Magnetic nanoparticles: MNP) yüklenmiş ilaçların, vücut dışından uygulanan manyetik alanlar yardımıyla doğrudan tümör bölgesine yönlendirilmesi ve orada tutulması prensibine dayanır. Bu sistemlerin temel yapı taşı olan ve Şekil 5'te genel yapısı gösterilen bir MNP; manyetik yönlendirmeyi sağlayan bir çekirdek, biyoyumluluğu artıran koruyucu bir kaplama ve terapötik ajanı taşıyan organik bağlayıcılardan oluşur. Bu strateji, ilacın tümör bölgesindeki konsantrasyonunu artırarak tedavi dozunu düşürmeye olanak tanır ve böylece sistemik toksisite riskini önemli ölçüde azaltır.

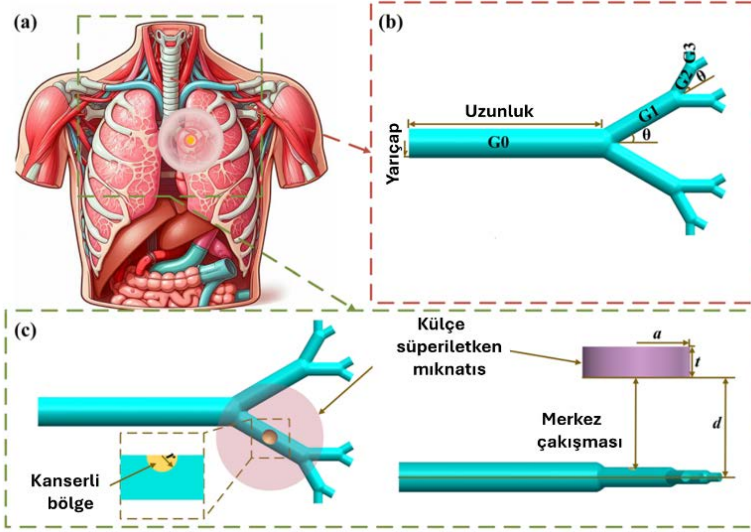


Şekil 5. Manyetik çekirdek, koruyucu kaplama ve terapötik (tedavi edici) maddeye bağlı organik bağlayıcılardan oluşan bir hastalık tedavi edici MNP'nin genel yapısı [24].

Ağızdan (oral), damar yolundan (intravenöz) veya kas içine (intramusküler) uygulanan ve terapötik ajanın vücudun tamamına kontrolsüzce yayıldığı standart yöntemleri kapsayan geleneksel ilaç taşıma sistemlerinin (Drug Delivery Systems: DDS) aksine; manyetik tabanlı sistemler, uzaktan kontrol edilebilirlik, yüksek doku penetrasyonu ve gerçek zamanlı görüntüleme (teranostik) potansiyeli gibi eşsiz avantajlar sunmaktadır [25]. Özellikle derin doku tümörlerinde ilacın hedefe ulaşması sırasında karşılaşılan kan akışı direnci ve vasküler bariyerler, yüksek gradyanlı manyetik alanlar üretebilen gelişmiş sistemlerin varlığını zorunlu kılmaktadır [26]. Ancak, geleneksel kalıcı mıknatıslarla oluşturulan manyetik alanların şiddeti, kaynaktan uzaklaştıkça hızla azalmaktadır. Bu fiziksel kısıtlama, cilt yüzeyine yakın lezyonların tedavisinde sorun yaratmasa da, insan vücudunun derinliklerinde (deep-seated tumors) yer alan hedef dokular üzerinde partikülleri tutacak yeterli manyetik kuvvetin oluşturulmasını imkânsız kılmaktadır [27]. Damar içerisindeki yüksek kan akış hızının yarattığı hidrodinamik sürüklenme kuvvetine karşı koyarak nanopartiküllerin hedef bölgede tutunabilmesi için gereken manyetik alan gradyanı (T/m), konvansiyonel dirençli elektromıknatısların da kapasitesini zorlamaktadır. Bu bariyeri aşmak ve manyetik kuvvetin etki derinliğini artırmak amacıyla,

yüksek akım yoğunluğu taşıma kapasitesine sahip süperiletken mıknatıs teknolojisine dayalı yeni nesil MDT sistemleri geliştirilmektedir.

Süperiletken teknolojisinin MDT alanındaki somut bir uygulaması, akciğer tümörlerinin hedeflenmesi senaryosu üzerinden Şekil 6'da şematize edilmiştir [28]. Bu konfigürasyonda, yüksek manyetik alan kaynağı olarak tek kristal yapıda, tam mıknatıslanmış Gd–Ba–Cu–O (GdBCO) külçe (bulk) süperiletken mıknatıs tercih edilmiştir. Sistemde mıknatıs, hastanın vücut yüzeyi ile doğrudan temas etmeyecek şekilde, uygun bir numune tutucu içerisinde, vakum ortamında ve kriyojenik soğutma altında konumlandırılır (Şekil 6a). Hedef bölge olan akciğerin karmaşık anatomik yapısını ve hava yollarındaki dallanmayı simüle etmek amacıyla, literatürde kabul gören Weibel Modeli kullanılmıştır [29]. Şekil 6b'de gösterilen bu model, ana bronştan başlayarak (G0), daha küçük bronşiolloere (G3) kadar uzanan farklı çap ve uzunluktaki dallanma seviyelerini temsil eder. Modellemede, hastalıklı tümör dokusu akciğerin derinliklerinde belirli bir bölgeye (sarı alan) yerleştirilmiştir (Şekil 6c). Bu çalışmada, süperiletken mıknatıs ile hedef doku (akciğer modelinin merkez düzlemi) arasındaki mesafe (d) 40 mm ile 130 mm arasında değiştirilerek, mıknatısın derin dokulardaki nanopartikülleri yakalama performansı analiz edilmiştir. GdBCO süperiletken mıknatısın sağladığı güçlü manyetik çekim kuvveti, nanopartiküllerin hava akımı ve fizyolojik engellere rağmen tümör bölgesine odaklanmasını sağlamaktadır [28]. Bu yaklaşım, kemoterapötik ajanların sadece kanserli hücrelerde yoğunlaşmasını sağlayarak tedavi verimliliğini artırmakta ve sağlıklı dokuların maruz kaldığı toksik etkileri minimize etmektedir.



Şekil 6. (a) Külçe süperiletken mıknatıs kullanılarak gerçekleştirilen Manyetik İlaç Hedefleme (MDT) işleminin, (b) akciğer anatomisini temsil eden Weibel modelinin ve (c) külçe süperiletken mıknatıs ile modifiye edilmiş Weibel modelinin şematik gösterimi [28].

5. GELECEK PERSPEKTİFLERİ VE ZORLUKLAR

Süperiletken teknolojinin tıptaki geleceği parlak olmakla birlikte, çözülmesi gereken ciddi mühendislik ve fizyolojik problemler mevcuttur. Teknolojik yarışta çıtayı yükselten en önemli gelişmelerden biri, Çin Bilimler Akademisi'ne bağlı Shenzhen İleri Teknoloji Enstitüsü (SIAT) tarafından yürütülen ve insan kullanımı için tasarlanan 14.0 Tesla tüm vücut MRI projesidir. Mevcut klinik sınırların (3 T ve 7 T) çok ötesinde olan bu ultra-yüksek manyetik alan hedefi, moleküler düzeyde benzersiz bir çözünürlük vaat etse de insan fizyolojisi için yeni riskleri beraberinde getirmektedir.

Manyetik alan şiddeti 7 Tesla ve üzerine çıktığında, "manyeto-hidrokinamik" etkiler ve Lorentz kuvvetleri nedeniyle insan vücudunda istenmeyen duyuşal yan etkiler gözlemlenmeye başlar. Özellikle iç kulaktaki (vestibüler sistem) endolenf sıvısı içerisinde indüklenen iyonik akımlar, beyne kişinin döndüğü sinyali göndererek şiddetli baş dönmesi (vertigo), mide bulantısı ve nistagmus (istemşiz göz hareketleri) gibi durumlara yol açabilmektedir [30]. Ayrıca, hastaların gözleri kapalıyken bile ışık çakmaları gördüğü "manyetofosfen" (magnetophosphenes) etkisi ve ağızda metalik tat oluşumu gibi fenomenler, 14 T ve üzeri sistemlerde hasta konforunu ve güvenliğini tehdit eden ana unsurlar olarak öne çıkmaktadır. Bu nedenle, geleceğin süperiletken mıknatıs tasarımları sadece daha yüksek alan şiddetine değil, aynı zamanda bu fizyolojik etkileri minimize edecek aktif perdeleme (shielding) ve hasta alıştırma protokollerine de odaklanmak zorundadır.

Özellikle HTS mıknatıslarda sönüm yayılma hızının düşük olması, bobinlerin yanma riskini artırmakta ve gelişmiş koruma sistemleri gerektirmektedir [31]. Gelecek vizyonunda ise, Cooley ve arkadaşları tarafından öngöröldüğü üzere, HTS şeritler kullanılarak üretilen, hafif, helyum gerektirmeyen ve hatta ambulanslara entegre edilebilecek taşınabilir MRI sistemleri yer almaktadır [32].

6. SONUÇ

Tıbbi uygulamalarda süperiletken manyetik teknolojilerin entegrasyonu, teşhisten tedaviye uzanan yelpazede modern tıbbın yeteneklerini köklü bir şekilde değiştirmiştir. Bu bölüm kapsamında incelenen gelişmeler, süperiletkenliğin sadece bir mühendislik başarısı olmadığını, aynı zamanda kişiselleştirilmiş tıp ve onkolojik tedavilerde belirleyici bir faktör haline geldiğini göstermektedir.

Görüntüleme alanında, Raymond Damadian'ın "Indomitable" cihazı ile başlayan serüven, bugün 7 Tesla ve üzeri Ultra Yüksek Alan (UHF) MRI sistemlerine evrilmiştir. Sinyal/Gürültü oranındaki (SNR) artış, nörolojik ve metabolik hastalıkların moleküler düzeyde ve erken evrede teşhisine olanak tanırken; Budinger ve arkadaşlarının işaret ettiği fizyolojik sınırlar (vertigo, manyetofosfen etkileri), gelecek nesil tasarımların sadece yüksek manyetik alan şiddetine değil, aynı zamanda hasta konforu ve güvenliğine de odaklanması gerektiğini ortaya koymaktadır. Ayrıca, Cooley ve ekibinin vizyonuyla şekillenen taşınabilir ve helyumsuz sistemler, bu teknolojinin sadece büyük hastanelerde değil, sahada ve acil durumlarda da erişilebilir olacağının sinyallerini vermektedir.

Tedavi modalitelerinde ise süperiletken mıknatıslar, proton ve karbon iyonu terapisi gibi ileri radyoterapi yöntemlerinin "demokratikleşmesi" önündeki en büyük engel olan boyut ve maliyet sorununa çözüm sunmaktadır. Dirençli mıknatıslara kıyasla Gantry sistemlerinin ağırlığını yüzlerce tondan 150 tonun altına düşüren CCT ve DCT gibi yenilikçi süperiletken bobin geometrileri, bu devasa tesislerin daha kompakt ve yönetilebilir hale gelmesini sağlamıştır. Benzer şekilde, Manyetik İlaç Hedefleme (MDT) teknolojisinde süperiletkenlerin sağladığı yüksek alan gradyanları, kan akışının yarattığı hidrodinamik direnci yenerek ilacın derin doku tümörlerinde toplanmasını mümkün kılmakta; böylece kemoterapinin sistemik yan etkileri minimize edilirken tedavi etkinliği maksimize edilmektedir.

Niobyum-Titanyum (NbTi) bazlı geleneksel Düşük Sıcaklık Süperiletkenlerinden (LTS), YBCO ve MgB₂ gibi Yüksek Sıcaklık Süperiletkenlerine (HTS) doğru yaşanan malzeme devrimi; kriyojenik soğutma maliyetlerini düşürerek ve sistem kararlılığını artırarak bu teknolojilerin sürdürülebilirliğini garanti altına almaktadır. Önümüzdeki on yıl içinde, süperiletken

mıknatıs teknolojilerinin, "teranostik" (teşhis ve tedavinin eş zamanlı yapıldığı) yaklaşımların merkezinde yer alarak insan sağlığına ve yaşam kalitesine katkı sunmaya artan bir ivmeyle devam edeceği öngörülmektedir.

KAYNAKÇA

- [1] Lauterbur, P. C. (1973). Image Formation by Induced Local Interactions: Examples Employing Nuclear Magnetic Resonance. *Nature*, 242, 190–191.
- [2] Armenian History. (n.d.). *Raymond Damadian – Inventor of the First MRI Scanning Machine*. Armenian History. <https://armenian-history.com/raymond-damadian-inventor-of-the-first-mri-scanning-machine/>
- [3] McRobbie, D. W., Moore, E. A., Graves, M. J., & Prince, M. R. (2017). *MRI from Picture to Proton*. Cambridge university press.
- [4] Iwasa, Y. (1994). *Case studies in superconducting magnets: design and operational issues*. Boston, MA: Springer US.
- [5] Bednorz, J. G., & Müller, K. A. (1986). Possible high T_c superconductivity in the Ba–La–Cu–O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 64(2), 189-193.
- [6] Vaughan, J. T., et al. (2001). 7T vs. 4T: RF power, homogeneity, and signal-to-noise comparison in head images. *Magnetic Resonance in Medicine*, 46(1), 24-30.
- [7] Baig, T., et al. (2017). Conduction cooled superconducting magnets for MRI systems. *Superconductor Science and Technology*, 30(4), 043002.
- [8] Vedrine, P., et al. (2014). Manufacturing of the Iseult/Inumac Whole Body 11.7 T MRI Magnet. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, 24(3), 1-5.
- [9] Josephson, B. D. (1962). Possible new effects in superconductive tunnelling. *Physics Letters*, 1(7), 251-253.

- [10] Nave, R. (n.d.). SQUID: Superconducting Quantum Interference Device. HyperPhysics. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Solids/Squid.html>
- [11] Jaklevic, R. C., Lambe, J., Silver, A. H., & Mercereau, J. E. (1964). Quantum interference effects in Josephson tunneling. *Physical Review Letters*, 12(7), 159.
- [12] Cohen, D. (1972). Magnetoencephalography: detection of the brain's electrical activity with a superconducting magnetometer. *Science*, 175(4022), 664-666.
- [13] Koch, H. (2002). SQUID magnetocardiography: Status and perspectives. *IEEE transactions on applied superconductivity*, 11(1), 49-59.
- [14] Hämäläinen, M., Hari, R., Ilmoniemi, R. J., Knuutila, J., & Lounasmaa, O. V. (1993). Magnetoencephalography—theory, instrumentation, and applications to noninvasive studies of the working human brain. *Reviews of modern Physics*, 65(2), 413.
- [15] Durante, M., Orecchia, R., & Loeffler, J. S. (2017). Charged-particle therapy in cancer: clinical uses and future perspectives. *Nature Reviews Clinical Oncology*, 14(8), 483-495.
- [16] Yang, W., Zhu, Y., Ma, L., Lei, Y., You, W., Liang, Y., ... & Shi, J. (2024). Preliminary design of superconducting gantry magnet for miniaturized heavy-ion facility. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, 34(5), 1-5.
- [17] Rossi, L., Barna, D., Carloni, A. G., De Matteis, E., Farinon, S., Felcini, E., ... & Tommasini, D. (2024). Magnet technology and design of superconducting magnets for heavy ion gantry for hadron therapy. In *Journal of*

Physics: Conference Series (Vol. 2687, No. 9, p. 092009).
IOP Publishing.

- [18] Paul Scherrer Institute. (t.y.). *Gantry 3*. Erişim adresi:
<https://www.psi.ch/en/protontherapy/gantry-3>
- [19] Santucci, C., Carioli, G., Bertuccio, P., Malvezzi, M., Pastorino, U., Boffetta, P., ... & La Vecchia, C. (2020). Progress in cancer mortality, incidence, and survival: a global overview. *European Journal of Cancer Prevention*, 29(5), 367-381.
- [20] World Health Organization. (2025, February 3). Cancer. <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer>
- [21] Senapati, S., Mahanta, A. K., Kumar, S., & Maiti, P. (2018). Controlled drug delivery vehicles for cancer treatment and their performance. *Signal Transduction and Targeted Therapy*, 3(1), 7. <https://doi.org/10.1038/s41392-017-0004-3>
- [22] Schirmacher, V. (2019). From chemotherapy to biological therapy: A review of novel concepts to reduce the side effects of systemic cancer treatment. *International journal of oncology*, 54(2), 407-419.
- [23] Ulbrich, K., Hola, K., Subr, V., Bakandritsos, A., Tucek, J., & Zboril, R. (2016). Targeted drug delivery with polymers and magnetic nanoparticles: covalent and noncovalent approaches, release control, and clinical studies. *Chemical reviews*, 116(9), 5338-5431.
- [24] Davis, M. E., Chen, Z., & Shin, D. M. (2008). Nanoparticle therapeutics: an emerging treatment modality for cancer. *Nature reviews Drug discovery*, 7(9), 771-782.
- [25] Tiwari, G., Tiwari, R., Sriwastawa, B., Bhati, L., Pandey, S., Pandey, P., & Bannerjee, S. K. (2012). Drug delivery

- systems: An updated review. *International journal of pharmaceutical investigation*, 2(1), 2.
- [26] Voltairas, P. A., Fotiadis, D. I., & Michalis, L. K. (2002). Hydrodynamics of magnetic drug targeting. *Journal of biomechanics*, 35(6), 813-821.
- [27] Pankhurst, Q. A., Connolly, J., Jones, S. K., & Dobson, J. J. (2003). Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. *Journal of physics D: Applied physics*, 36(13), R167.
- [28] Xu, Z., Mousavi, T., & Ainslie, M. (2025). Numerical simulation of magnetic drug targeting for lung cancer therapy using a bulk superconducting magnet. *Drug Delivery*, 32(1), 2490836.
- [29] Weibel, E. R., Cournand, A. F., & Richards, D. W. (1963). Morphometry of the human lung (Vol. 1). Berlin: Springer.
- [30] Budinger, T. F., Bird, M. D., Frydman, L., Long, J. R., Mareci, T. H., Rooney, W. D., ... & Wald, L. L. (2016). Toward 20 T magnetic resonance for human brain studies: opportunities for discovery and neuroscience rationale. *Magnetic Resonance Materials in Physics, Biology and Medicine*, 29(3), 617-639.
- [31] Iwasa, Y. (2005). Protection of HTS magnets. *Physica C: Superconductivity and its applications*, 426, 1348-1352.
- [32] Cooley, C. Z., McDaniel, P. C., Stockmann, J. P., Srinivas, S. A., Cauley, S. F., Śliwiak, M., ... & Wald, L. L. (2021). A portable scanner for magnetic resonance imaging of the brain. *Nature biomedical engineering*, 5(3), 229-239.

TÜRKİYE VE DÜNYADA

FİZİK

yaz
yayınları

YAZ Yayınları

M.İhtisas OSB Mah. 4A Cad. No:3/3

İscehisar / AFYONKARAHİSAR

Tel : (0 531) 880 92 99

yazyayinlari@gmail.com • www.yazyayinlari.com