
AKADEMİK PERSPEKTİFTEN KİMYA

Editör: Doç.Dr. Zafer Ömer ÖZDEMİR



yaz
yayınları

Akademik Perspektiften Kimya

Editör

Doç.Dr. Zafer Ömer ÖZDEMİR

yaz
yayınları

2025

Akademik Perspektiften Kimya

Editör: Doç.Dr. Zafer Ömer ÖZDEMİR

© 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 978-625-5596-53-6

Haziran 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

info@yazyayinlari.com

İÇİNDEKİLER

İki Yeni O-Hidroksi Schiff Bazının Tautomerik Yapılarının Kristalografik, Spektroskopik ve Hesaplamalı Yöntemlerle İncelemesi	1
<i>Başak KOŞAR KIRCA, Çiğdem ALBAYRAK KAŞTAŞ, Sultan BAŞAK, Gökhan KAŞTAŞ</i>	
Katı-Sıvı Faz Sistemleri	29
<i>Sevilay DEMİRCİ, Vedat ADIGÜZEL</i>	
Biyoatıklardan Katma Değere: Antep Fıstığı Kabuğunun Poliüretan Kompozitlerde Katkı Maddesi Olarak Kullanımı	37
<i>Yusuf YILMAZ</i>	
Kimya Öğretiminde Artırılmış Gerçeklik Teknolojisi Kullanımı.....	48
<i>Merve YILDIZ, Senem ÇOLAK YAZICI</i>	
Meyve Aromalarının Kimyası: Ester Yapıları ve Koku Profilleri	75
<i>Zafer Ömer ÖZDEMİR</i>	
Meyve Aromalarının Kimyası: Ester Yapıları ve Sentezi.....	93
<i>Zafer Ömer ÖZDEMİR</i>	
Sürdürülebilir Enerji Kaynağı: Yeşil Hidrojen	110
<i>Merve KAZAK, Zehra Nur ÖZER, Mehmet ÖZKAN</i>	
Antibakteriyel Polikarbazoller.....	133
<i>Fatma ÇOBAN</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."

İKİ YENİ O-HİDROKSİ SCHIFF BAZININ TAUTOMERİK YAPILARININ KRİSTALOGRAFİK, SPEKTROSKOPİK VE HESAPLAMALI YÖNTEMLERLE İNCELEMESİ

Başak KOŞAR KIRCA¹

Çiğdem ALBAYRAK KAŞTAŞ²

Sultan BAŞAK³

Gökhan KAŞTAŞ⁴

1. GİRİŞ

Farklı yapısal ve elektronik özelliklere sahip Schiff bazları, malzeme bilimi, kataliz ve medikal kimya gibi çeşitli bilimsel alanlardaki önemli uygulamaları nedeniyle kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. İmin grubu ($-C=N-$) içeren bu bileşikler, fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini doğrudan etkileyen dikkat çekici tautomerik davranışlar sergilemektedir. Schiff bazlarında tautomerizmayı belirleyen yapısal ve elektronik faktörlerin anlaşılması, işlevselliği özel olarak tasarlanmış yeni malzemelerin geliştirilmesi açısından büyük önem taşımaktadır.

¹ Prof. Dr., Sinop Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, bkosar@sinop.edu.tr, 0000-0001-7754-9059.

² Prof. Dr., Sinop Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, cigdemkastas@gmail.com, 0000-0003-0235-7460.

³ Uzman., Sinop Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, sultaan.basaak@gmail.com, 0000-0003-0541-3667.

⁴ Prof. Dr., Samsun Üniversitesi, Özdemir Bayraktar Havacılık ve Uzak Bilimleri Fakültesi, Havacılık ve Uzak Mühendisliği Bölümü, gokhan.kastas@samsun.edu.tr, 0000-0002-5956-405X.

Bu çalışmada, iki yeni o-hidroxy Schiff bazı üzerine odaklanılarak, bu bileşiklerin yapısal ve elektronik özellikleri spektroskopik (UV-Vis), kristalografik (XRD) ve kuantum kimyasal (DFT, PES, HOMA) yaklaşımların bir arada kullanılmasıyla araştırılmıştır. Fenol-imin ve keto-amin formları arasındaki tautomerik denge, bu bileşiklerin kararlılığı ve reaktivitesi üzerinde belirleyici bir rol oynamaktadır. X-ışını kırınımı analiziyle katı hâlde baskın olan tautomerik form doğrulanmış, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) hesaplamaları ise bu bileşiklerin elektronik yapısı ve aromatikliği hakkında daha derinlemesine bilgiler sunmuştur. Ayrıca, sentezlenen bileşiklerin potansiyel biyolojik etkileşimlerini araştırmak amacıyla moleküler yerleştirme çalışmaları yapılmış ve bu bileşiklerin ilaç tasarımı ve biyomoleküler uygulamalardaki olası rollerine ışık tutulmuştur.

Bu çalışma, deneysel ve hesaplamalı yöntemleri entegre ederek moleküler yapı ile işlevsellik arasındaki ilişkiyi ortaya koymayı amaçlamakta ve Schiff bazı kimyasının temel yönlerine dair değerli bilgiler sunmaktadır. Elde edilen bulgular, o-hidroxy Schiff bazlarında tautomerizmanın temel düzeyde anlaşılmasına katkı sağlamanın yanı sıra, bu bileşiklerin malzeme bilimi ve biyolojik olarak aktif molekül tasarımı gibi alanlardaki gelecekteki uygulamaları için bir temel oluşturmaktadır.

2. DENEYSEL VE HESAPLAMALI YÖNTEMLER

2.1. Sentez

(E)-2-[(4-bromo-3-metilfenilamino)metil]fenol (1) bileşiğinin sentezi için, etanol (20 mL) içerisinde çözülmüş 2-hidroksibenzaldehit (0.5 g, 4.1 mmol) ile yine etanol (20 mL) içerisinde çözülmüş 4-bromo-3-metilanilin (0.76 g, 4.1 mmol)

karışımı, geri soğutucu altında 1 saat boyunca karıştırılmıştır. Bileşiklerin tek kristalleri, etanolün yavaş buharlaştırılması yardımıyla elde edilmiştir. Aynı yöntem, bileşik 2'nin sentezi için de kullanılmış; bu süreçte 2-hidroksi-4-metoksibenzaldehit ile 4-bromo-3-metilanilin kullanılmıştır.

2.2. Spektroskopik ve Kristalografik Yöntemler

UV-Vis spektrumları, Thermo Scientific BioGenesis UV-Vis spektrometresi kullanılarak kaydedilmiştir. Bileşiklerdeki tautomerik davranışın çözücü bağımlılığını ortaya koymak amacıyla farklı dielektrik sabitlerine sahip üç çözücü kullanılmıştır ($\epsilon = 1.9$, Hekzan; $\epsilon = 24.5$, Etanol; $\epsilon = 46.7$, DMSO). Erime noktalarının belirlenmesinde Stuart MP30 cihazı kullanılmıştır. Tek kristal X-ışını kırınımı (yani XRD) sürecindeki veriler $\text{MoK}\alpha$ ışıması kullanılarak 298 K sıcaklıkta Bruker difraktometresi ile toplanmıştır. Bileşiklerin kristal yapılarının çözümü için kristalografide doğrudan yöntemler olarak tanınan yöntem SHELXT (Sürüm 2018/2) [1] yazılımı yardımıyla kullanılmıştır. Hidrojen dışındaki tüm atomlar, SHELXL (Sürüm 2018/3) [2] programı ile tam matris en küçük kareler yöntemi kullanılarak anizotropik olarak rafine edilmiştir. H1 atomları dışında kalan tüm hidrojen atomları geometrik olarak yerleştirilmiş ve $U_{\text{iso}}(\text{H})=1.2U_{\text{eq}}(\text{C})$ ile, metil grubu hidrojenleri için $U_{\text{iso}}(\text{H}_{\text{metil}})=1.5U_{\text{eq}}(\text{C})$ olacak şekilde riding model kullanılarak rafine edilmiştir. H1 atomları ise tautomerik formu tanımladığı için fark Fourier haritasından bulunmuş ve koordinatları ile $U_{\text{iso}}(\text{H})$ değerleri serbest olarak rafine edilmiştir. Moleküler yapılar ait çizim ve görsellerin oluşturulmasında WinGX (Sürüm 2018.3) [3], ORTEP-3 [3] ve MERCURY [4] yazılımları kullanılmıştır. Bileşik 1 ve bileşik 2 için Tablo 1'de iki ayrı sütunda deneysel koşullar ve diğer detaylar görülmektedir.

Tablo 1. XRD Deneysel Koşulları ve Kristal Verileri

	Bileşik 1	Bileşik 2
Formül	C ₁₄ H ₁₂ NOBr	C ₁₅ H ₁₄ NO ₂ Br
Formül ağırlığı	290.16	320.18
Kristal sistemi	Monoklinik	Monoklinik
Uzay grubu	C2/c	C2/c
Z	8	8
a (Å)	16.2916(18)	28.8009(18)
b (Å)	6.5496(7)	7.0634(4)
c (Å)	23.079(2)	15.7921(14)
α (°)	90	90
β (°)	93.897(7)	120.821(5)
γ (°)	90	90
V (Å ³)	2456.9(4)	2758.9(4)
Radyasyon tipi	MoK _{α}	MoK _{α}
μ (mm ⁻¹)	3.328	2.977
T _{max} , T _{min}	0.7457, 0.3628	0.7457, 0.2982
Okunan yansıma	36207	43296
Eşsiz yansıma	2285	2566
I>2 σ (I) olan yansıma	1914	2286
Aritılan parametre	160	175
θ_{max} , θ_{min}	28.34, 2.97	26.55, 2.99
h, k, l	-19/19, -7/7, -27/27	-34/34, -8/8, -19/19
R[F ₂ >2 σ (F ₂)]	0.0820	0.0986
wR(F ₂)	0.1230	0.2042
S	1.2390	1.4040

2.3. Hesaplamalı Yöntemler

Kuantum kimyasal hesaplamaların tümü Gaussian 03W yazılımı [5] kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Hesaplanan yapıların moleküler görselleştirmeleri için GaussView programı kullanılmıştır [6]. Gaz fazındaki iki tautomerin geometrik optimizasyonları, DFT düzeyinde B3LYP hibrit fonksiyoneli [7] ve 6-311G(d,p) temel seti [8] kullanılarak yapılmıştır. Potansiyel enerji yüzeyi (PES) taramaları, bileşiklerin optimize edilmiş fenol-imin formlarından başlatılarak gerçekleştirilmiştir. PES tarama sürecinde O1–H1 bağ uzunlukları artık iç koordinatlar olarak seçilmiş ve 0.9 Å ile 1.80 Å aralığında, 0.05 Å artışlarla

değiştirilmiştir [9]. Moleküler yerleştirme çalışmaları için Autodock Vina 1.5.6 programı kullanılarak simülasyonlar gerçekleştirilmiştir [10]. Elde edilen veriler Discovery Studio programı ile görselleştirilmiştir [11].

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

3.1. Kristalografik Değerlendirme

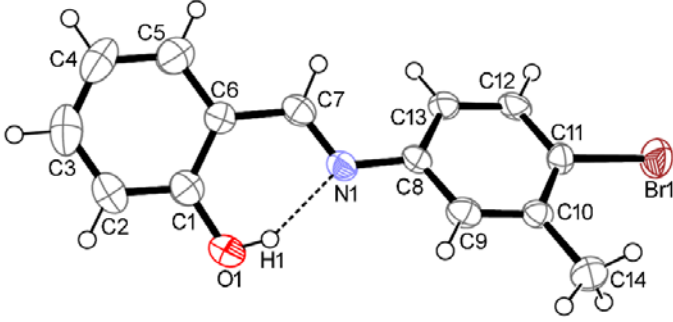
Katı hâlde bir o-hidroksy Schiff bazının iki farklı tautomerik formda bulunabildiği bilinmektedir: fenol-imin formu ve keto-amin formu. Bu iki tautomerik yapı arasındaki en temel farklar, tautomerik protonun konumu ile aromatik halkadaki ve C–N, C–O bağlarındaki uzunluk değişiklikleridir. Fenol-imin formunda tautomerik hidrojen atomu oksijen atomuna bağlı iken, keto-amin formunda azot atomuna bağlıdır [12–21]. Bu çalışmada, bileşiklerin katı hâlde moleküler yapılarını ve supramoleküler ağlarını aydınlatmak amacıyla iki yeni Schiff bazı sentezlenmiştir. Bileşik 1 ve 2 için kristalografik olarak elde edilen moleküler yapılar sırasıyla Şekil 1 ve 2'de verilmiştir. Kristalografik analizlerine göre, her iki bileşikte de tautomeriye karar veren proton (H1) oksijen atomu (O1) üzerinde yer almaktadır.

Fenol-imin formunda C1–O1 bağ uzunluğu tek bağ karakteri gösterirken, keto-amin formunda bu bağ çift bağ karakterine sahiptir. Aynı şekilde, C7–N1 bağ uzunluğu fenol-imin formunda çift bağ karakterindeyken, keto-amin formunda bu bağ uzamakta ve tek bağ karakteri kazanmaktadır [12–21]. 1 numaralı bileşikte C1–O1 bağ uzunluğu 1.3455 Å, 2 numaralı bileşikte ise 1.347 Å olarak ölçülmüş ve her iki değer de tek bağ uzunluğuna karşılık geldiği belirlenmiştir. Ayrıca, 1 numaralı bileşikteki C1–O1 bağı, 2 numaralı bileşiğe göre daha kısa bulunmuştur. Diğer taraftan, her iki bileşikteki N1–C7 bağı da uzunlukları itibari ile çift bağ karakterine sahiptir ve bu

uzunluklar bileşik 1 ve 2 için sırasıyla 1.279 Å ve 1.271 Å olarak belirlenmiştir. C1'den C6'ya kadar olan atomların tanımladığı halkalar (bundan sonra R(C1–C6) olarak anılacaktır), tautomerizmaya bağlı yapısal değişikliklere en duyarlı halkalar olarak değerlendirilmektedir. Tablo 2'de verilen bağ uzunlukları, bu halkaların aromatik karakterde olduğunu göstermektedir [22, 23]. Yani, 1 ve 2 numaralı bileşikler katı hâlde fenol-imin formunda bulunmaktadır. Belirteç konumundaki bazı özel bağ uzunlukları Tablo 2'de verilmiştir.

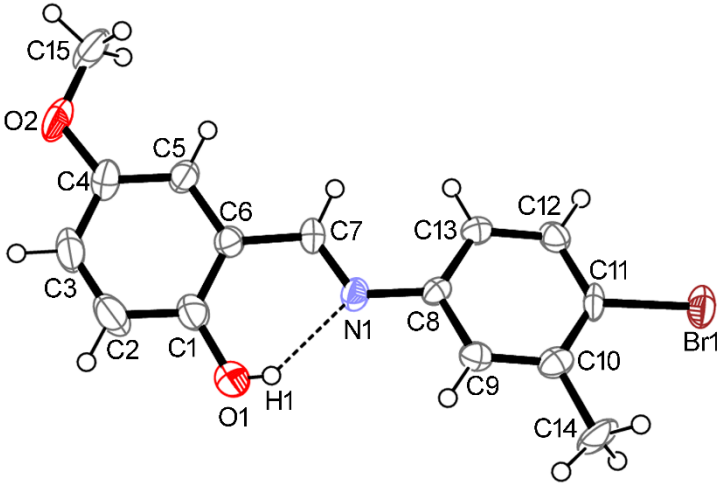
Tablo 2. Bileşikler İçin Karakterize Edici Bazı Bağ Uzunluklarının Deneysel ve Teorik Değerleri (Å)

Bağ Uzunlukları	Bileşik 1			Bileşik 2		
	XRD	DFT		XRD	DFT	
		Phenol-imine	Keto-amine		Phenol-imine	Keto-amine
C1-C2	1.383(2)	1.401	1.443	1.403(2)	1.403	1.448
C2-C3	1.366(2)	1.386	1.365	1.350(2)	1.380	1.359
C3-C4	1.382(2)	1.401	1.427	1.384(2)	1.407	1.433
C4-C5	1.369(2)	1.383	1.363	1.364(2)	1.384	1.364
C5-C6	1.387(2)	1.408	1.428	1.401(2)	1.414	1.437
C6-C1	1.412(2)	1.422	1.471	1.391(1)	1.415	1.468
C6-C7	1.446(2)	1.448	1.393	1.450(2)	1.447	1.389
C1-O1	1.345(1)	1.338	1.258	1.347(2)	1.342	1.256
C7-N1	1.278(1)	1.289	1.332	1.271(1)	1.289	1.337
C8-N1	1.405(2)	1.406	1.402	1.421(1)	1.406	1.399
C8-C9	1.384(2)	1.400	1.399	1.386(1)	1.400	1.400
C9-C10	1.380(2)	1.396	1.395	1.382(1)	1.396	1.395
C10-C11	1.394(2)	1.402	1.401	1.379(1)	1.402	1.401
C11-C12	1.377(2)	1.391	1.391	1.402(1)	1.391	1.390
C12-C13	1.373(2)	1.389	1.388	1.377(2)	1.389	1.388
C13-C8	1.393(2)	1.401	1.398	1.399(1)	1.401	1.399
C11-Br1	1.902(2)	1.923	1.920	1.889(1)	1.923	1.921
C10-C14	1.494(2)	1.506	1.505	1.504(2)	1.506	1.505
C4-O2	-	-	-	1.371(2)	1.367	1.367
O2-C15	-	-	-	1.406(2)	1.418	1.417



Şekil 1.1. Numaralı Bileşiğin Moleküler Yapısı

Aromatik halkalar arasındaki dihedral açı 1 numaralı bileşik için 32.62° , 2 numaralı bileşik için ise 15.39° olarak belirlenmiştir. Özellikle 1 numaralı bileşik düzlemsellikten belirgin bir şekilde sapma göstermektedir.



Şekil 2.2. Numaralı Bileşiğin Moleküler Yapısı

O-hidroksi Schiff bazlarında en sık gözlemlendiği üzere, hem bileşik 1 hem de bileşik 2’de fenolik oksijen atomu (O1) ile imin azotu (N1) arasında güçlü intramoleküler hidrojen bağı mevcuttur (Şekil 1 ve 2). Bu hidrojen bağları, Etter notasyonuna

göre S(6) ile gösterilen altı üyeli düzlemsel halkalar oluşturmaktadır [24] ve şu geometrik parametrelerle tanımlanabilir: $d(O1 \cdots N1) = 2.606 \text{ Å}$ (1) ve $2.594(13) \text{ Å}$ (2); $\theta(O1-H1 \cdots N1) = 140^\circ$ (1) ve 150° (2). 2 numaralı bileşikte bulunan elektron verici sübstitüent, azot ve oksijen arasındaki mesafenin sübstitüe edilmemiş 1 numaralı bileşiğe kıyasla daha kısa olmasına neden olmuştur. Her iki bileşikteki $d(O1 \cdots N1)$ uzunluk değerlerinin azot ve oksijen atomları için tanımlanan van der Waals yarıçaplarının toplamından daha kısa olduğu görülmektedir [25]. RAHB (rezonans destekli hidrojen bağı) modeli perspektifinden değerlendirildiğinde [26], bileşiklerdeki $O1-H1 \cdots N1$ intramoleküler hidrojen bağlarının $d(O1 \cdots N1)$ mesafeleri, RAHB sınıfındaki $O-H \cdots N$ etkileşimleri için bildirilen 2.656 Å değerinden daha kısa bulunmuştur [27].

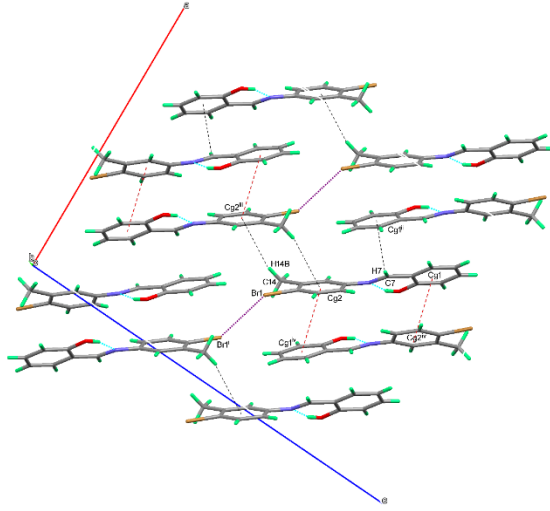
Her iki bileşiğin kristal yapılarında $Br \cdots Br$, $\pi \cdots \pi$, $O \cdots Br$ ve $C-H \cdots C$ gibi çeşitli türlerde kovalent olmayan moleküllerarası etkileşimler gözlenmiştir. Ayrıca, her iki bileşik farklı türlerde etkileşimler sergilemektedir. Genellikle halojen $\cdots$ halojen etkileşimleri, Tip 1 (trans veya cis geometrilili) ve Tip 2 (L-geometrilili) olmak üzere iki sınıfta incelenmektedir [28, 29]. 1 numaralı bileşikte gözlenen $Br \cdots Br$ etkileşimi, trans geometriye sahip bir Tip 1 etkileşimidir. Bu etkileşimler Van der Waals kuvvetlerine dayanmaktadır ve $\theta_1 = C11-Br1 \cdots Br1^i$ ile $\theta_2 = Br1 \cdots Br1^i-C11^i$ açılarının her ikisi için yaklaşık 147.18° olması ve halojenler arasındaki 3.507 Å 'lık $Br1 \cdots Br1$ mesafesiyle karakterize edilmektedir (i: $1/2-x$, $3/2-y$, $1-z$).

Buna ek olarak, kristal yapının oluşumunda karşılıklı gerçekleşen $Cg1 \cdots Cg2^{iv}$ ve $Cg2 \cdots Cg1^{iv}$ (iv: $1-x$, y , $3/2-z$) ile imino grubuna ait H7 ve alifatik H14B hidrojen atomları ile $Cg1^{ii}$ (ii: $1.5-x$, $1/2+y$, $1.5-z$) ve $Cg2^{iii}$ (iii: $1-x$, $1-y$, $1-z$) aromatik halkaları arasındaki etkileşimler de yer almaktadır (Şekil 3). $\pi \cdots \pi$ etkileşimlerinde halkaların merkezleri arası mesafe 3.925 Å olarak belirlenirken, imino grubuna ait hidrojen atomu (H7) ile

Cg1 arasındaki mesafe 3.0413 Å olarak ölçülmüştür. Kovalent olmayan etkileşimler için elde edilen detaylı bilgiler karşılaştırmalı olarak Tablo 3'te sunulmuştur.

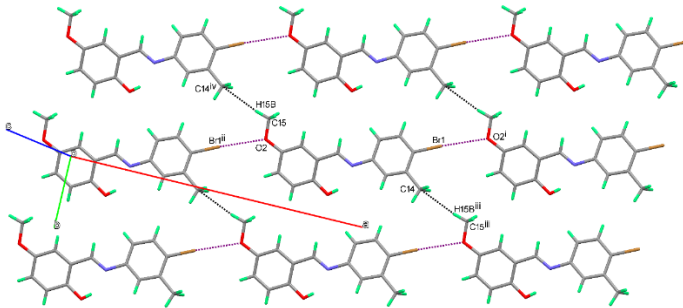
Tablo 3. Bileşik 1 ve 2 İçin Kovalent Olmayan Etkileşimler

	D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	θ(D-H...A)	Symmetry
1	O1-H1...N1	0.81(7)	1.88(8)	2.606(6)	150(8)	-
	C-X...X-C	d (X...X)	θ1(C-X1...X2)	θ2(X1...X2-C)		
	C11-Br1...Br1 ^I C11 ^I	3.507	147.18	147.18		1/2-x, 1,5-y, 1-z
	X-H...Cg	d (X-H)	d(X-Cg)	θ(X-H...Cg)		
	C7-H7... Cg1 ^{II}	0.93	3.0413	127.53		1,5-x, 1/2+y, 1,5-z
	C14-H14B... Cg2 ^{III}	0.96	3.3133	167.08		1-x, 1-y, 1-z
	Cg...Cg	d (X-H)	CgI_perp	CgJ_perp		
	Cg1...Cg2 ^{IV}	3.925(3)	3.716	3.557		1-x, y, 1,5-z
	Cg2...Cg1 ^{IV}	3.925(3)	3.556	3.716		1-x, y, 1,5-z
	D-H...A	d (D-H)	d(H...A)	d(D...A)	θ(D-H...A)	
2	O1-H1...N1	0.71(12)	2.02(11)	2.594(13)	140(12)	
	C14...C15-H15B ^{III}	0.96	2.810	3.759	169.69	1/2+x, 1/2+y, z
	C15-H15B... C14 ^{IV}	0.96	2.810	3.759	169.69	-1/2+x, - 1/2+y, z
	Br ...O	d (Br...O)	θ1(C-Br...O)	θ2(Br...O-C)		
	Br1...O2 ^I	3.170	175.03	133.20		1/2+x, -1/2+y, z
	O2...Br1 ^{II}	3.170	175.03	133.20		-1/2+x, 1/2+y, z
	X-H...Cg	d (X-H)	d(X-Cg)	θ(X-H...Cg)		
	C14-H14B... Cg1 ^V	0.96	2.92	134		1- x, y, 1,5-z
	C15-H15A... Cg1 ^{VI}	0.96	2.77	148		1/2-x, 1/2-y, 1-z
	C ...C	d (C...C)	θ1(C-C...C)	θ2(C...C-C)		
	C13 ... C13	3.364	114.64	93.76		1-x, y, 1,5-z



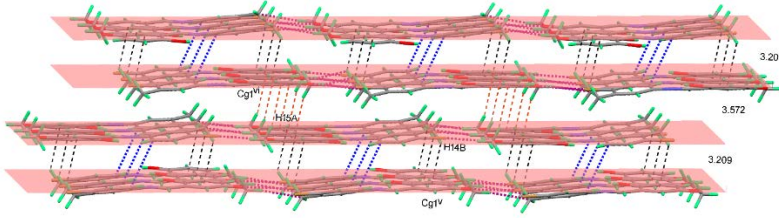
Şekil 3.1. numaralı bileşiğin tüm etkileşimlerini içeren kristal yapısı

2 numaralı bileşikte, $\text{Br1} \cdots \text{O2}$ temasları (3.170 Å) 1D yapının oluşumundan sorumludur. Moleküller, $\text{Br} \cdots \text{O}$ temasları aracılığıyla doğrusal zincirler oluşturacak şekilde birbirleriyle etkileşime girmektedir. 2D yapının oluşumunda ise metil ve metoksi grupları arasında gerçekleşen $\text{C14} \cdots \text{C15}$ – H15B_{iii} (iii: $1/2+x, 1/2+y, z$) ve C15 – $\text{H15B} \cdots \text{C14}_{\text{iv}}$ (iv: $-1/2+x, -1/2+y, z$) etkileşimleri yer almaktadır (Şekil 4). Bu etkileşimler, (001) düzleminde yayılan tabakalar oluşturmaktadır.



Şekil 4.2. numaralı bileşiğin $\text{Br} \cdots \text{O}$ ve $\text{C-H} \cdots \text{C}$ temaslarıyla oluşan 2D kristal yapısı.

Katmanlar, 3.364 Å mesafedeki C···C temasları ve C14–H14B···Cg1_v (v: 1–x, y, 1.5–z) etkileşimleri yoluyla birbirine bağlanarak 3D kristal mimarisini oluşturmaktadır (Şekil 5). Katmanlar arası mesafe 3.209 Å olarak ölçülmüştür. Bu çift katmanlar ise, 3.572 Å mesafeye sahip C15–H15A···Cg1_{vi} (vi: 1/2–x, 1/2–y, 1–z) etkileşimleriyle birbirine bağlanmaktadır.



Şekil 5.2. numaralı bileşiğin C···C ve C–H···Cg1 temaslarıyla oluşan 3D kristal yapısı.

3.2. Hesaplamalı kimyasal analiz

Moleküler yapılarda tautomerizmaya bağlı değişimleri ortaya koymak amacıyla, alternatif bir yaklaşım olarak DFT yöntemi de kullanılmıştır. Ortohidroksi Schiff bazlarının iki farklı tautomerik yapıdan birine veya her ikisine sahip olabileceğinden, düşük enerjili stabil formu bulabilmek için her iki bileşiğe ait fenol-imin ve keto-amin yapıları B3LYP/6-311G(d,p) düzeyinde geometrik olarak optimize edilmiştir. Optimize edilen iki tautomerik yapı arasında, bileşiklerin fenol-imin formlarının keto-amin formlarına kıyasla daha düşük moleküler enerjiye sahip olduğu belirlenmiştir. Prototropik tautomerizmden en fazla etkilenen geometrik parametreler olmaları nedeniyle yalnızca C–O, C–N ve aromatik halka bağ uzunluklarına ilişkin hesaplamalı veriler karşılaştırmalı olarak Tablo 2’de sunulmuştur. Hesaplanan değerler, fenol-imin formundaki bileşiklerde C–O bağlarının tek bağ, C–N bağlarının ise çift bağ karakterine sahip olduğunu; keto-amin formu tercih edilseydi bunun tersinin geçerli olacağını göstermektedir. Tautomerik halkalardaki bağ uzunlukları

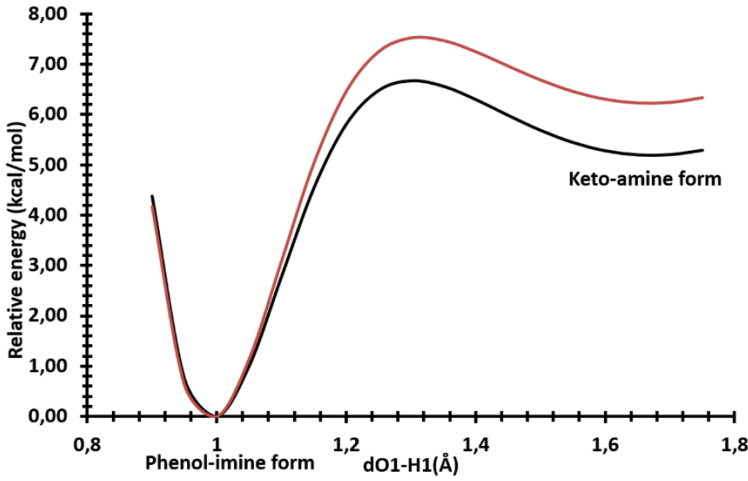
optimize edilen fenol-imin ve keto-amin yapıları arasında farklılık göstermektedir. C–O, C–N ve tautomerik halka bağ uzunlukları açısından değerlendirildiğinde, fenol-imin formlarına ait sonuçların deneysel verilerle en iyi uyumu gösterdiği belirlenmiştir.

Tautomerik süreç, homo- ve heteroatomik sistemlerdeki π -elektron delokalizasyonunun belirlenmesi yoluyla geometrik olarak da değerlendirilebilmektedir. Bu nedenle çalışmanın temel amacıyla uyumlu olan ve geometri tabanlı bir yapısal yaklaşım sunan Harmonik Osilatör Aromatiklik Modeli (HOMA) uygulanmıştır. HOMA modelinde, bağ uzunluklarının ideal değerden sapması aromatiklik indeksi ile ifade edilir ve bu indeks aşağıdaki denklemle tanımlanır:

$$\text{HOMA} = 1 - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \alpha_j (R_j - R_{\text{opt}})^2$$

Denklemde n bağ sayısını, R_j her bir bağın uzunluğunu, α_j ise normalizasyon sabitini ifade etmektedir; bu sabit C–C bağları için 257.7, C–N bağları için 93.52 ve C–O bağları için 157.38 olarak alınmıştır. R_{opt} bağın sahip olması gereken ideal uzunluğudur ve C–C için 1.388 Å, C–N için 1.334 Å, C–O için ise 1.265 Å'dır. HOMA indeksinin değeri, tamamen aromatik sistemler için 1, aromatik olmayan sistemler için 0'dır [30–33]. Bu çalışmada, 1 ve 2 numaralı bileşiklerdeki tautomerik halkalar olan R(C1–C6) için HOMA değerleri sırasıyla 0.937 ve 0.895 olarak hesaplanmıştır. Bu durum, 2 numaralı bileşikte yer alan elektron verici metoksi grubunun, tautomerik halkada saf aromatik yapıdan bir miktar saptmaya neden olduğunu göstermektedir. Öte yandan, R(C8–C13) aromatik halkaları için hesaplanan HOMA değerleri sırasıyla 0.979 (1) ve 0.976 (2) olup, bu halkaların belirgin aromatik karaktere ve güçlü π -elektron delokalizasyonuna sahip olduğunu ortaya koymaktadır.

R(C1–C6) halkasına bağlı olan sübstitüentin tautomeri sürecindeki etkisini ortaya koymak için bu kez doğrudan potansiyel enerji yüzeyi (PES) değerlendirilmiştir. PES üzerinde, bileşiklere ait iki farklı düşük enerjili geometriye karşılık gelen iki minimum nokta (bir global ve bir lokal) gözlenmiştir. Global minimumlar, bileşiklerin en düşük enerjili fenol-imin formlarını temsil ederken; lokal minimumlar keto-amin formlarına karşılık gelmektedir (Şekil 6). Toplam moleküler enerjiler dikkate alındığında, optimize edilmiş fenol-imin tautomerlerinin keto-amin formlarına kıyasla daha kararlı olduğu görülmektedir. Bu durum, fenol-imin formunun daha yüksek aromatikliğe sahip olmasının, onu daha düşük enerjili bir yapı hâline getirmesiyle açıklanabilir.



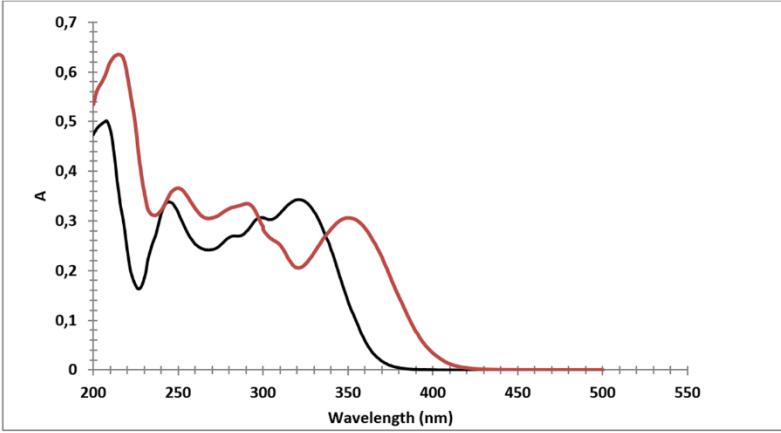
Şekil 6.1. (siyah) ve 2 (kırmızı) numaralı bileşiklere ait PES tarama profili.

Ek olarak fenol-imin formundan keto-amin forma geçiş için gereken aktivasyon enerjisini hesaplamak için de PES tarama sürecinden elde edilen veriler kullanılmıştır ki bu sayede, sübstitüentin prototropi üzerindeki etkisi incelenmiştir. Aktivasyon enerjileri sırasıyla 1 numaralı bileşik için 6.67

kcal/mol ve 2 numaralı bileşik için 7.52 kcal/mol olarak elde edilmiştir (Şekil 6). Elektron verici metoksi grubunu içeren 2 numaralı bileşikte, 1 numaralı bileşiğe kıyasla aktivasyon enerjisinde bir artış gözlenmiştir. Dolayısıyla, R(C1–C6) halkasında yer alan elektron verici sübstitüentin, proton transfer süreci için gerekli olan aktivasyon enerjisini artırarak tautomerizasyonu zorlaştırdığı önerilebilir.

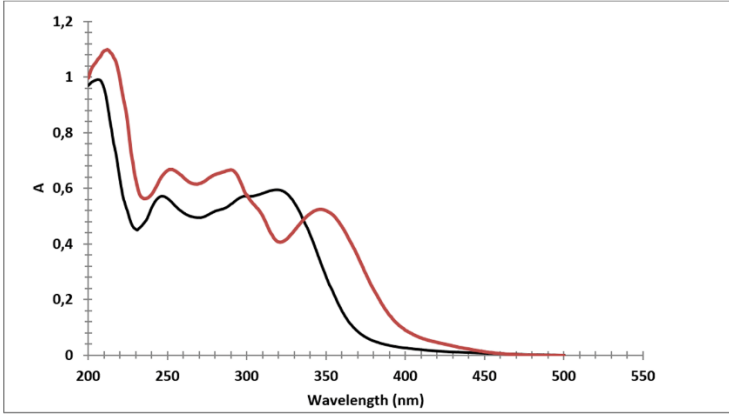
3.3. UV-Vis Spektroskopisi ile Sübstitüent ve Çözücü Faktörlerinin Prototropi Üzerindeki Etkisi

UV-Vis spektroskopisi, o-hidroksy Schiff bazlarının tautomerik davranışlarını karakterize etmede temel bir teknik olarak uzun süredir kullanılmaktadır; çünkü bu yöntem, tautomerik formların varlığını ve deneysel koşullardan kaynaklanan değişimleri açıkça ortaya koymaktadır. Önceki çalışmalar, fenol-imin formuna ait absorpsiyonun 300–400 nm aralığında, keto-amin formuna ait absorpsiyon bantlarının ise 400–500 nm aralığında gözlemlendiğini göstermektedir. Tautomerizm, bileşiğin fiziksel hâli (katı ya da çözelti), sübstitüent tipi ve konumu kadar, çözücünün tipiyle de etkilenmektedir. Polar çözücülerde, çözeltileşme ile sağlanan kararlılık nedeniyle keto formunun ortaya çıkma olasılığı vardır; buna karşın apolar çözücülerde bu forma rastlanmamaktadır [34, 35]. Farklı dielektrik sabitleri olan dört farklı çözücü kullanılarak bileşik 1 ve 2 için UV-Vis spektrumları kaydedilmiştir ($\epsilon = 1.9$, Hekzan; $\epsilon = 24.3$, Etanol; $\epsilon = 47$, DMSO). Bileşiklerin hekzan, etanol ve DMSO çözücülerindeki UV-Vis spektrumları sırasıyla Şekil 7, 8 ve 9’da sunulmuştur.



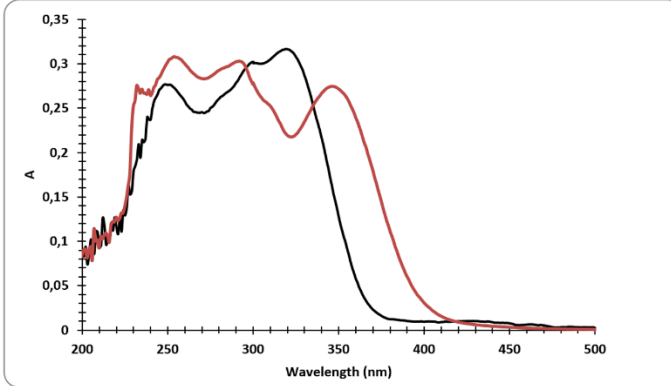
Şekil 7. Bileşiklerin hekzan çözücüsündeki UV-Vis spektrumları: 1 (siyah) ve 2 (kırmızı)

Hekzan ve etanol çözücülerinde kaydedilen spektrumlarda, her iki bileşiğin de fenol-imin tautomerine karşılık gelen HOMO–LUMO geçişleriyle ilişkili olarak 300–400 nm aralığında bir absorpsiyon bandına sahip olduğu açıkça görülmektedir. Ancak, 400 nm üzerindeki bölgede herhangi bir absorpsiyon bandı gözlenmemiştir. Hekzan ve etanol spektrumları dikkate alındığında, bileşiklerin yalnızca fenol-imin formunda bulunduğu söylenebilir. Gözlenen bir diğer önemli bulgu ise, 2 numaralı bileşikte yer alan elektron verici metoksi grubunun, fenol-imin formuna ait absorpsiyon bandının dalga boyunu sübstitüe edilmemiş 1 numaralı bileşiğe kıyasla daha uzun dalga boyuna kaydırmasıdır; bu kayma 2 numaralı bileşik için 350 nm’de, 1 numaralı bileşik için ise 322 nm’de gözlenmiştir.



Şekil 8. Bileşiklerin EtOH çözücüsündeki UV-Vis spektrumları: 1 (siyah) ve 2 (kırmızı)

Bileşiklerin DMSO'daki spektrumları, hekzan ve etanol çözücülerinde elde edilen spektrumlara benzerlik göstermektedir (Şekil 9). Spektrumlarda keto forma ait herhangi bir absorpsiyon bandı gözlenmemiştir. Bu durum, çözücü polaritesi artsa dahi elektron verici grubun keto-amin formunun oluşumunu kolaylaştırmadığını göstermektedir. Hesaplanan PES tarama sonuçlarının, deneysel verilerle uyumlu olduğu açıkça görülmektedir.



Şekil 9. Bileşiklerin DMSO çözücüsündeki UV-Vis spektrumları: 1 (siyah) ve 2 (kırmızı)

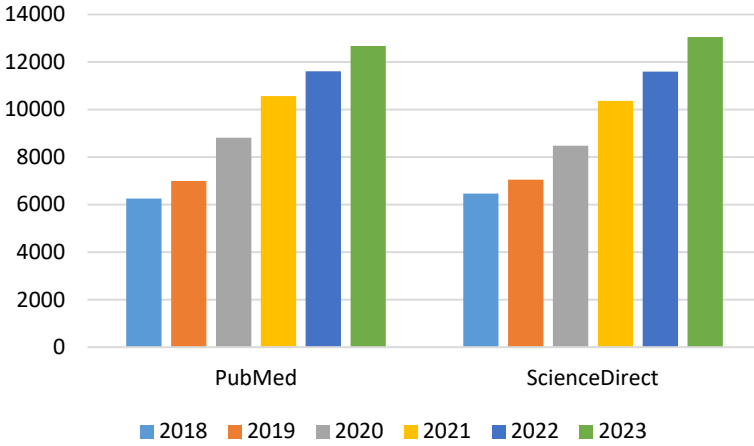
3.4. Moleküler Yerleştirme

Vücudun temel işlevleri, proteinler, karbonhidratlar, lipidler, sinyal yolları ve diğer yapısal ve fonksiyonel bileşenler gibi çeşitli biyolojik mekanizmalar aracılığıyla kesintisiz bir şekilde yerine getirilir. Ancak bu mekanizmaların düzgün bir şekilde çalışabilmesi için, onları aktif veya inaktif hâle getirebilecek küçük moleküllere ihtiyaç vardır. Bu mekanizmalardaki herhangi bir bozulma, vücuttaki bazı rutin işlevlerin sorunsuz bir şekilde yürütülmesini engelleyebilir ve vücudun sürdürmeye çalıştığı homeostazın bozulmasına neden olabilir [36]. Homeostazın korunabilmesi, bu yapılarla onların ligandları veya ligand kompleksleri arasındaki kesintisiz etkileşimin sürdürülmesini gerektirir. Ancak çevresel faktörler, ligandın hedef yapısında anomali oluşmasına neden olabilir ve bu durum homeostazın bozulmasıyla sonuçlanır. Bu dengenin bozulmasının yol açtığı hasarı gidermek için, hedef alınan hasarlı yapıya bağlanabilecek yeni küçük molekül ligandlar laboratuvar ortamında sentezlenmektedir. Sentezlenen yeni ligandın vücut içerisindeki hedefiyle olan etkileşimini incelemek amacıyla, ligandın hedefle olan etkileşim mekanizmasını simüle etmeye olanak tanıyan moleküler modelleme yaklaşımları kullanılmaktadır.

Literatürde sıklıkla kullanılan moleküler modelleme yaklaşımlarından biri olan moleküler yerleştirme (molecular docking), hedef yapı ile ligand arasındaki bağlanma yönelimi ve geometrisinin hesaplamalı olarak simüle edilmesine olanak tanır [37]. Bu bağlanma yönelimi ve geometrisi analiz edilerek, protein-ligand etkileşiminin kuvveti ve bağlanma afinitesi çeşitli skarlama fonksiyonları aracılığıyla belirlenebilir [38]. Bağlanma afinitesi, hedef yapı ile ligand arasında oluşan hidrojen bağları, hidrofobik etkileşimler ve elektrofilik etkileşimler tarafından etkilenmektedir. Yüksek bağlanma afinitesi, güçlü bir hedef-ligand etkileşimini ve etkili bir mekanizma varlığını gösterir [39].

Moleküler yerleştirme, özellikle bilgisayar destekli ilaç tasarımı (CADD) çalışmalarında oldukça kritik bir yere sahiptir ve yazılımlarının erişilebilirliği ve kullanıcı dostu oluşu nedeniyle yaygın olarak tercih edilmektedir. Bu yazılımların farklı uygulamalara olanak tanınması, onları bu alandaki temel araçlardan biri hâline getirmiştir. Ayrıca, moleküler yerleştirme ile ilgili yapılan çalışmaların sayısı her geçen yıl artmaktadır; bu durum, “molecular docking” anahtar kelimesi ile PubMed ve ScienceDirect veri tabanlarında yapılan aramalardan elde edilen verilerle desteklenmekte olup, söz konusu eğilim Şekil 10’da sunulmuştur.

Önceki bölümlerde de ele alındığı üzere, moleküler yerleştirme çalışmalarındaki temel zorluk, hedef yapıya bağlanan ligandın en kararlı ve optimize konformasyonunun belirlenmesidir. Reseptör-ligand ilişkisi, temel bir analogi ile açıklanabilir: Nasıl ki bir anahtar, yalnızca kendine özgü bir kilide uymak üzere tasarlanmışsa; reseptör-ligand etkileşimi de kilit-anahtar modeline uygun şekilde gerçekleşir [39]. Bu sistemin temel amacı, hedef yapı ya da reseptörün uygun bağlanma bölgesinde, ligand tarafından en uygun konformasyonla bağlanmasının sağlanmasıdır. Ligand(lar)ın konformasyonları, bağlandıkları bölgeye göre değişiklik gösterebilir. Bağlanma bölgesinde yer alan amino asit kalıntıları, ligandla çeşitli kimyasal etkileşimler kurmaya hazır durumdadır. Bu nedenle, etkin bir etkileşim elde edebilmek için en uygun yerleştirme protokolünün seçilmesi büyük önem taşımaktadır.



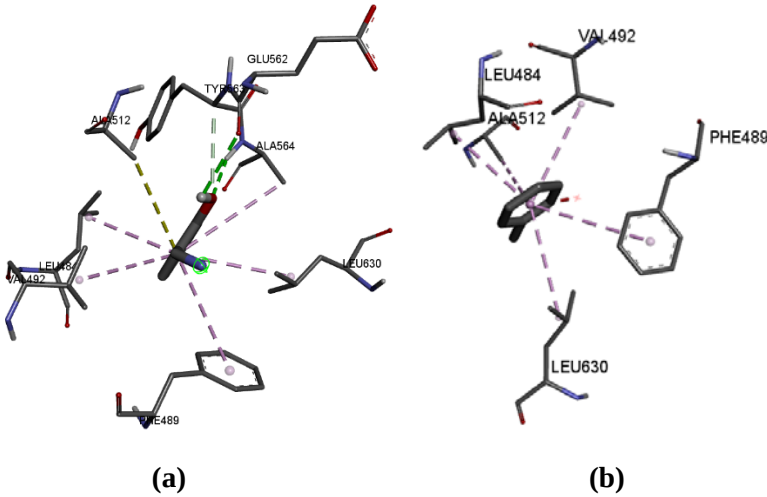
Şekil 10. 'Molecular docking' anahtar kelimesi kullanılarak PubMed ve ScienceDirect veri tabanlarında yapılan aramaların sonuç verileri.

Schiff bazlarının yapısında bulunan $-C=N$ (imin) bağı, bu bileşiklere özgün fiziksel, kimyasal ve biyolojik özellikler kazandırmakta ve bu da onların seçiciliğine katkı sağlamaktadır. Bu özgün yapı, Schiff bazlarının farmakolojik, biyolojik, fiziksel, kimyasal ve analitik alanlarda yoğun şekilde araştırılmasına neden olmuştur. Schiff bazları, $-Cl$, $-OH$ ve $-F$ gibi elektron verici gruplarla etkileşime girerek antiviral ve antikanser özellikler kazanabilirler [40, 41].

Bu çalışmada, iki farklı Schiff bazı molekülü (Bileşik 1 ve Bileşik 2) ile FGFR1 proteini (PDB ID: 4V05) [42] arasında moleküler yerleştirme simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Bu etkileşimlere ait veriler Tablo 4'te sunulmuş, etkileşimlerin moleküler geometrileri ise Şekil 11'de görselleştirilmiştir. Tablo 4 ve Şekil 11'in analizi, 1 numaralı bileşiğin Glu562, Tyr563 ve Ala564 amino asitleriyle hidrojen bağları kurduğunu göstermektedir. Hidrojen bağları, biyolojik etkileşimlerin neredeyse tamamında hayati bir rol oynamaktadır [43]. Biyomoleküler yapılarda bulunan hidrojen bağları, termal

dalgalanmalardan etkilenecek oluşabilir ya da bozulabilir; bu durum, protein-ligand etkileşimleri açısından kritiktir çünkü ligandın proteinin aktif bölgesine bağlanmasını kolaylaştırır [44]. Ayrıca, etkileşimde yer alan hidrojen bağları, bağlanma afinitesini anlamlı derecede artırmaktadır [45, 46].

1 numaralı bileşik ile Glu562 amino asidi arasında konvansiyonel bir hidrojen bağı oluşmuştur; bu bağda Glu562'deki oksijen (O) atomu alıcı, 1 numaralı bileşikteki hidrojen (H) atomu ise verici konumundadır. Bu hidrojen bağının uzunluğu 2.855 Å olarak hesaplanmıştır. Tyr563'teki karbon (C) atomu (verici) ile 1 numaralı bileşikteki oksijen (O) atomu (alıcı) arasında C-H $\cdots$ O tipi bir etkileşim gözlenmiş ve bu bağın uzunluğu 3.772 Å olarak belirlenmiştir. Buna ek olarak, Ala564'teki amid grubuna ait N-H grubu (verici) ile 1 numaralı bileşikteki oksijen atomu (alıcı) arasında N-H $\cdots$ O tipi bir etkileşim meydana gelmiş ve bu bağın uzunluğu 2.649 Å olarak hesaplanmıştır.



Şekil 11. (a) 1 numaralı bileşiğin FGFR1 proteini ile bağlanma geometrisi
(b) 2 numaralı bileşiğin FGFR1 proteini ile bağlanma geometrisi

Bu bulgulara göre, 1 ile Tyr563 arasındaki hidrojen bağının daha uzun mesafeye sahip olması nedeniyle göreceli olarak daha zayıf olduğu anlaşılmaktadır. Buna karşılık, 1 ile Glu562 ve Ala564 arasında oluşan hidrojen bağlarının daha kısa mesafeli ve dolayısıyla daha güçlü etkileşimler olduğu, bu bağların ligand-protein etkileşimini kolaylaştırıcı nitelikte olduğu sonucuna varılabilir.

Tablo 4. Bileşik 1 ve 2 için moleküler yerleştirme skorları

	Bağlanma Enerjisi (kcal/mol)	Hidrofobik Etkileşme	Hidrojen Bağları
1	-9.3	Ala564 Leu630 Phe489 Leu484 Val492 Ala512	Glu562 Tyr563 Ala564
2	-9.4	Leu484 Val492 Phe489 Leu530	-

Hidrofobik etkileşimler, kimyasal ve biyolojik etkileşimlerin anlaşılmasında bir diğer önemli faktördür [47, 48]. Bu etkileşimler, genellikle proteinin suyu iten hidrofobik bölgelerinde meydana gelir ve bu sayede protein-ligand bağlanmasını stabilize eder [48].

Bileşik 1 ile Ala564, Leu630, Phe489, Leu484, Val492 ve Ala512 amino asitleri arasında hidrofobik etkileşimler gözlenmiştir. Benzer şekilde, 2 numaralı bileşik Leu484, Val492, Phe489 ve Leu530 amino asitleriyle hidrofobik etkileşim kurmuştur. Bu etkileşimlerin tamamında amino asitler verici, 1 ve 2 numaralı bileşikler ise alıcı olarak rol almıştır.

Hidrofobik etkileşimlerin protein-ligand bağlanmasını stabilize edici etkisi iyi bilinmektedir. Bu stabilizasyon, bağlanma etkileşiminin daha güçlü olmasına katkı sağlamakta ve bu durum

çalışmada elde edilen düşük bağlanma afinitesi değerleriyle de doğrulanmaktadır. 1-FGFR1 etkileşimi için hesaplanan bağlanma afinitesi -9.3 kcal/mol, 2-FGFR1 etkileşimi için ise -9.4 kcal/mol'dür. Bu sonuçlar, daha düşük bağlanma afinitesinin daha güçlü etkileşime karşılık geldiğini ve ligand-protein kompleksinin kararlılığı ile etkinliğini desteklediğini göstermektedir.

4. SONUÇ

İki adet o-hidroksy Schiff bazına ait yapısal, spektroskopik ve hesaplamalı özellikler; X-ışını kristalografisi (XRD), UV-Vis spektroskopisi, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) ve moleküler yerleştirme çalışmaları kullanılarak kapsamlı biçimde araştırılmıştır. Kristalografik analizler, her iki bileşiğin de katı hâlde fenol-imin tautomerik formda bulunduğunu doğrulamıştır. DFT tabanlı bağ uzunluğu analizleri ve Harmonik Osilatör Aromatiklik Modeli (HOMA) indekslerini içeren teorik hesaplamalar, bu tautomerik tercihi desteklemiştir. Potansiyel Enerji Yüzeyi (PES) taramaları, sübstitüentlerin proton transferi için gerekli aktivasyon enerjisini etkileyerek tautomerik denge üzerinde belirleyici rol oynadığını ortaya koymuştur. UV-Vis spektroskopisi ile gerçekleştirilen çalışmalar, çözücü polaritesinin tautomerik form üzerinde herhangi bir etkisinin bulunmadığını; hem polar hem de apolar çözeltilerde yalnızca fenol-imin formunun mevcut olduğunu göstermiştir. Ayrıca, moleküler yerleştirme simülasyonları, sentezlenen bileşiklerin etkileşim mekanizmalarına dair değerli bilgiler sunmuş ve bu bileşiklerin biyolojik olarak aktif moleküller olma potansiyeline sahip olduğunu ortaya koymuştur.

Teşekkür

Yazarlar Bruker D8 QUEST difraktometresinin kullanımı için Sinop Üniversitesi Merkez Laboratuvarına teşekkür eder.

KAYNAKÇA

- [1] G.M. Sheldrick, ActaCryst. A71 (2015) 3-8.
- [2] G.M. Sheldrick, Acta Cryst. C71 (2015) 3-8.
- [3] L.J. Farrugia, J. Appl. Cryst. 45 (2012) 849-854.
- [4] C. F. Macrae, I. J. Bruno, J. A. Chisholm, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, L. Rodriguez-Monge, R. Taylor, J. van de Streek and P. A. Wood, Mercury CSD 2.0, J. Appl. Cryst. 41 (2008) 466-470.
- [5] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, J.A. Montgomery, T.J. Vreven, K.N. Kudin, J.C. Burant, J.M. Millam, S.S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J.E. Knox, H.P. Hratchian, J.B. Cross, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, P.Y. Ayala, K. Morokuma, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, V.G. Zakrzewski, S. Dapprich, A.D. Daniels, M.C. Strain, O. Farkas, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, Q. Cui, A.G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, C. Gonzalez, J.A. Pople, Gaussian 03, Revision E.01. Gaussian, Inc., Wallingford CT (2004).
- [6] R. Dennington II, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 4.1.2. Semichem Inc, Shawnee mission, KS, (2007).

- [7] P.J. Stephens, F.J. Devlin, C.F. Chabalowski, M.J. Frisch, J. Phys. Chem. 98 (1994) 11623-11627.
- [8] M. J. Frisch, J. A. Pople, J.S. Binkley, J. Chem. Phy. 80 (1984) 3265-3269.
- [9] C. Peng, P.Y. Ayala, H.B. Schlegel, M.J. Frisch, J. Comp. Chem. 17 (1996) 49-56.
- [10] Trott, O., Olson, A. J. (2010). AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading. Journal of Computational Chemistry, 31(2), 455–461.
- [11] Biovia, D., Berman, H., Westbrook, J., Feng, Z., Gilliland, G., Bhat, T., Richmond, T. J., Dassault Systèmes. (2016). Discovery Studio Visualizer (Version 17.2). Dassault Systèmes.
- [12] Avadanei, M., Cozan, V., Shova, S., Paixão, J. A. (2014). Chemical Physics, 444, 43–51.
- [13] Minkin, V. I., Tsukanov, A. V., Dubonosov, A. D., Bren, V. A. (2011). Journal of Molecular Structure, 998, 179–191.
- [14] Sıdır, İ, Sıdır, Y. G., Góbi, S., Berber, H., Fausto, R. (2021). Molecules, 26, 2814.
- [15] Hadjoudis, E., Mavridis, I. M. (2004). Chemical Society Reviews, 33, 579–588.
- [16] Filarowski, A., Koll, A., Karpfen, A., & Wolschann, P. (2004). Chemical Physics, 297, 323–332.
- [17] İ. Sıdır, Y.G. Sıdır, H. Berber, R. Fausto J. Mol. Struct., 1292 (2023), 136191
- [18] Kanaani, A., Ajloo, D., Ghasemian, H. et al. Struct Chem 26, 1095–1113 (2015).

- [19] S. Asha, Anup Thomas , S. Sumaa,, Rethesh K , K.S. Sandhya, B. Siddlingeshwar, M.R. Sudarsanakumar, Journal of Molecular Structure, Volume 1285, (2023) 135468
- [20] Ç. Albayrak Kaştaş, G. Kaştaş, M. Gür, H. Muğlu, O. Büyükgüngör, Spectrochim. Acta, Part A 151, 731-738 (2015). DOI: 10.1016/j.saa.2015.07.030
- [21] Ç. Albayrak Kaştaş, G. Kaştaş, M. Odabaşoğlu, O. Büyükgüngör, Spectrochim. Acta, Part A 120, 201-207 (2014). DOI:10.1016/j.saa.2013.10.022
- [22] B. Koşar, Ç. Albayrak, M. Odabaşoğlu, O. Büyükgüngör, Acta Crystallogr. E61, o1097- o1099 (2005). doi:10.1107/S160053680500807X
- [23] B. Koşar, Ç. Albayrak, M. Odabaşoğlu, O. Büyükgüngör, Int. J. Quantum Chem. 111, 3654-3663 (2011). DOI 10.1002/qua.22789
- [24] M.C. Etter, Acc. Chem. Res. 23, 120-126 (1990). DOI: 10.1021/ar00172a005
- [25] A. Bondi, J. Phys. Chem. 68 (1964) 441-451.
- [26] G. Gilli, F. Bellucci, V. Ferretti, V. Bertolasi, J. Am. Chem. Soc. 111 (1989) 1023-1028.
- [27] G. Gilli, P. Gilli, J. Mol. Struct. 552 (2000) 1-15.
- [28] V.R. Hathwar, S.M. Roopan, R. Subashini, F.N. Khan, T.N.G. Row, J. Chem. Sci. 122, 677-685 (2010). <https://doi.org/10.1007/s12039-010-0056-1>
- [29] F.F. Awwadi, R.D. Willett, K.A. Peterson, B. Twamley, Chem. - Eur. J. 12, 8952-8960 (2006). <https://doi.org/10.1002/chem.200600523>

- [30] J. Kruszewski, T.M. Krygowski, Tetrahedron Lett. 13 (1972) 3839-3842.
- [31] T.M. Krygowski, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 33 (1993) 70-78.
- [32] A. Filarowski, A. Koll, T. Glowiak, J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2 (2002) 835-842.
- [33] A. Filarowski, A. Kochel, M. Kluba, F.S. Kamounah, J. Phys. Org. Chem. 21 (2008) 939-944.
- [34] K.A. Abbas, S.R. Salman, S.M. Kana'n, Z.A. Fataftah, Can. J. Appl. Spectroscopy 41 (1996) 119-122.
- [35] T. Dziembowska, E. Jagodzińska, Z. Rozwadowski, M. Kotfica, J. Mol. Struct. 598 (2001) 229-234.
- [36] Özyurt, R. (2022). Hücre sinyal yolları ve kanser. Kanser Genetiği ve Moleküler Biyolojisi (İ. Değirmenci, pp. 69-122). Nobel.
- [37] Başak, S. (2023). Antitümör ve antikanserojen etkili bazı Schiff bazı moleküllerinin moleküler yerleştirme yöntemi ile incelenmesi (Yüksek Lisans Tezi). Sinop Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [38] Anwar, T., Kumar P., Khan A. U. (2021). Modern tools and techniques in computer- aided drug design. Molecular docking for computer-aided drug design (Mohann S. Koumar, pp. 1-22). Academic Press.
- [39] Meng, X.-Y., Zhang, H.-X., Mezei, M., & Cui, M. (2012). Molecular docking: A powerful approach for structure-based drug discovery. Current Computer-Aided Drug Design. <https://doi.org/10.2174/157340911795677602>
- [40] Schiff, H., (1869). Untersuchungen über Salicinderivate. Justus Liebig's Annalen der Chemie. 150(2), 193-200 s.

- [41] Uddin, M. N., Siddique, Z. A., Mase, N., Uzzaman, M., & Shumi, W. (2019). Oxotitanium(IV) complexes of some bis-unsymmetric Schiff bases: Synthesis, structural elucidation, and biomedical applications. *Applied Organometallic Chemistry*, 33(5), e4876. <https://doi.org/10.1002/aoc.4876>
- [42] Tucker, J. A., Klein, T., Breed, J., Breeze, A. L., Overman, R., Phillips, C., & Norman, R. A. (2014). Structural insights into FGFR kinase isoform selectivity: Diverse binding modes of AZD4547 and ponatinib in complex with FGFR1 and FGFR4. *Structure*, 22(11), 1764. <https://doi.org/10.1016/j.str.2014.09.019>
- [43] Fersht, A., Shi, J. P., Knill-Jones, J., et al. (1985). Hydrogen bonding and biological specificity analysed by protein engineering. *Nature*, 314(6011), 235–238. <https://doi.org/10.1038/314235a0>
- [44] Panigrahi, S. K., & Desiraju, G. R. (2007). Strong and weak hydrogen bonds in the protein–ligand interface. *Proteins*, 67(1), 128–141. <https://doi.org/10.1002/prot.21253>
- [45] Ross, G. A., Morris, G. M., & Biggin, P. C. (2012). Rapid and accurate prediction and scoring of water molecules in protein binding sites. *PLOS ONE*, 7(3), e32036. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0032036>
- [46] Barillari, C., Taylor, J., Viner, R., & Essex, J. W. (2007). Classification of water molecules in protein binding sites. *Journal of the American Chemical Society*, 129(9), 2577–2587. <https://doi.org/10.1021/ja066980q>
- [47] Tanford, C. (1980). *The hydrophobic effect: Formation of micelles and biological membranes* (2nd ed.). <https://ncbi.nlm.nih.gov>

- [48] Hummer, G., Garde, S., García, A. E., Paulaitis, M. E., & Pratt, L. R. (1998). The pressure dependence of hydrophobic interactions is consistent with the observed pressure denaturation of proteins. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 95(4), 1552–1555.
<https://doi.org/10.1073/pnas.95.4.1552>

KATI-SIVI FAZ SİSTEMLERİ

Sevilay DEMİRCİ¹

Vedat ADIGÜZEL²

1. GİRİŞ

Özellikle malzeme bilimi, kimya ve fizik alanlarında önemli bir konudur ve çözeltiler, alaşımlar, seramikler, polimerler ve diğer kompozit malzemelerin davranışını anlamak için kritik öneme sahiptir. Bu sistemler, bir malzemenin katı ve sıvı fazları arasındaki birbirleriyle etkileşimde bulunduğu ve denge koşulları altında bir takım özelliklerinin değiştiği sistemlerdir. Katı ve sıvı fazlar, sıcaklık ve basınçla bağlı olarak farklı denge koşullarına sahip olabilirler. Bu denge, çözünürlük eğrisiyle tanımlanabilir. Bu eğrilerde çözeltinin doygunluk noktası, katı madde miktarının daha fazla artamayacağı durumu gösterir.

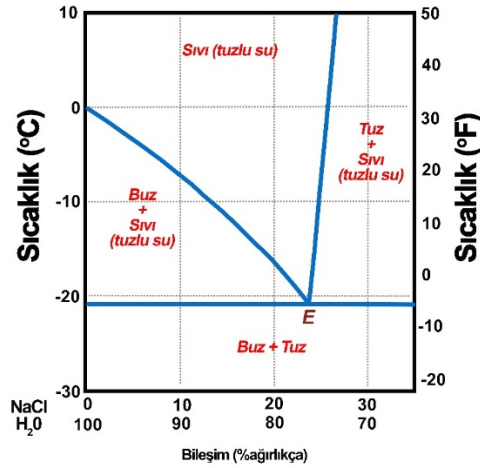
Faz geçişi ve denge, genellikle Le Chatelier ilkesi ile açıklanır. Le Chatelier ilkesi, bir denge sistemi üzerinde bir dış etki uygulandığında (sıcaklık, basınç, konsantrasyon gibi), sistemin bu etkiyi dengede kalacak şekilde karşılayacağını ifade eder. Bu ilke, faz geçişleri ve denge üzerinde de uygulanabilir: Örneğin, bir çözeltinin sıcaklığı arttığında, katı madde daha fazla çözünür ve çözünürlük eğrisine göre çözünürlük artar. Ancak, sistem dengesini bulduğunda, katı madde ve çözeltinin arasındaki denge korunacaktır (Smith vd.,2005; Walas, 1985).

¹ Dr. Öğr Üyesi, Kafkas Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, incesevilay@gmail.com, ORCID: 0000-0003-4028-5699.

² Doç. Dr., Kafkas Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, vedatnursen@gmail.com , ORCID: 0000-0001-7514-7144.

1.1. Katı-Sıvı Çözünürlük Eğrisi (Faz Diyagramları)

Bir bileşiğin katı-sıvı çözünürlük özelliklerini görselleştiren diyagramlar, özellikle çözünürlük eğrisi olarak bilinir. Bu tür diyagramlar genellikle iki fazın (katı-sıvı veya sıvı-sıvı gibi) dengede olduğu ve çözünürlük miktarlarının sıcaklıkla değiştiği durumları gösterir. Faz diyagramı, bir bileşiğin farklı fazlarının (katı, sıvı ve gaz) hangi sıcaklık ve basınç koşullarında dengeye girdiğini gösterir. Katı-sıvı faz diyagramları, katı ve sıvı fazların bir arada bulunduğu koşulları anlamada kullanılır. Bu koşullar, belirli bir bileşiğin erime sıcaklığına ve çözünürlük özelliklerine bağlıdır. Örneğin, su ve tuz çözeltilerinde, katı ve sıvı fazların hangi koşullarda dengeye gireceğini gösteren faz diyagramları bulunmaktadır (Atkins ve Paula, 2010).



Şekil 1. Bir su-tuz sistemine ait çözünürlük eğrisi

Bir Katı-Sıvı Çözünürlük Eğrisinin davranışının yorumlanmasında aşağıdaki kavramlardan yararlanır.

1. **Erime Sıcaklığı:** Katı bir madde, sıvı hale geçmeden önce belirli bir sıcaklıkta erir. Erime sıcaklığı, bileşiğin

doğasına bağlıdır. Örneğin, suyun erime noktası 0°C , ancak tuzlu suyun erime noktası daha düşüktür.

2. **Çözünürlük:** Katı ve sıvı faz arasındaki etkileşim, çözünürlükle belirlenir. Çözünürlük, katı bir maddenin sıvı fazda çözünmesi durumudur. Bir katı maddenin çözünürlük miktarı, sıcaklık ve sıvı fazın kimyasal yapısına bağlıdır.
3. **Denge ve Faz Geçişleri:** Katı-sıvı sistemlerinde denge, katı ve sıvı fazın birbirleriyle dengede olduğu ve net bir faz değişiminin olmadığı bir durumdur. Katıdan sıvıya geçiş (ergime) ve sıvıdan katıya geçiş (donma) belirli sıcaklık ve basınç koşullarına bağlıdır. Bu geçişler, faz diyagramları ve Clausius-Clapeyron denklemleriyle analiz edilir. Clausius-Clapeyron denklemi, bir faz geçişinin (genellikle buharlaşma, erime ya da donma gibi) sıcaklık ve basınç ile nasıl ilişkilendiğini açıklayan bir denklemdir. Bu denklem, özellikle buharlaşma ve süblimleşme gibi olayları anlamada önemli bir araçtır. Clausius-Clapeyron denklemi, genellikle sıvı ile gaz arasındaki faz geçişleri için kullanılır, ancak katı ile sıvı veya katı ile gaz arasındaki geçişleri incelemek için de uygulanabilir (Tüfekçi ve Karaböcek, 2014).
4. **Ötonik Nokta:** bir madde için katı, sıvı ve gaz fazlarının aynı anda dengede bulunduğu noktadır. Bu nokta, özellikle bir maddeyi tanımlayan faz diyagramı üzerinde kritik bir yer tutar. Ötonik noktada, maddede herhangi bir faz geçişi gerçekleşmez; üç faz da birbirine dönüşmeden bir arada bulunur. Örneğin, su için ötonik nokta, katı (buz), sıvı (su) ve gaz (buhar) fazlarının aynı anda var olabileceği bir koşuldur (Porter, D.A. vd., (2009).
5. **Bileşen Sayısı:** Katı-sıvı sistemlerinde genellikle tek bileşenli (örneğin saf su) veya çok bileşenli (örneğin bir

çözeltilinin katı ve sıvı fazları) sistemler bulunabilir. Çok bileşenli sistemlerde, farklı bileşenlerin çözünürlükleri birbirinden farklıdır ve bu durum, çözünürlük eğrilerinde farklılıklar yaratır.

1.2. Faz Sistemlerinin Endüstriyel Uygulamaları

1. **Ayırma-Saflaştırma:** Özellikle tuz gölleri veya acı su gölleri gibi yüksek tuz konsantrasyonuna sahip su kaynaklarının arıtılması için tuzun sudan ayrıştırılması ve suyun yeniden kullanılabilir hale getirilmesi süreçlerinde faz sistemlerinden yararlanılmaktadır (Towler, G., and Sinnott, R., 2008).
2. **Metal Döküm:** Alaşımların katılaşma süreçleri, katı-sıvı faz dengelerine dayanır. Metalurji ve döküm sanayisinde katı-sıvı faz geçişi, metalin sıvı hale getirilip döküm kalıplarına dökülmesiyle ilgili bir süreçtir. Sıvı metalin katı hale dönüşümü, istenen ürün şekillerini oluşturmak için önemlidir. Ve bu uygulamalarda faz sistemlerinden yararlanılmaktadır. Örneğin, bakır-çinko alaşımı (pirinç) katı-sıvı faz dengesi yardımı ile üretilir (Chandler, H.,2006).
3. **Kristalizasyon:** Endüstriyel kimya ve ilaç sanayilerinde, katı-sıvı çözeltilerinden kristaller elde etme süreci yaygındır. Bu, çözeltilinin belirli bir sıcaklık ve basınçta soğutulması veya buharlaştırılması ile gerçekleşir. Katı-sıvı çözeltilerin yanında, sıvı-sıvı çözeltiler de çözünürlük özelliklerini etkileyebilir. Bu tür sistemlerde, çözünürlük özellikleri ve çözünme oranları, sıvı fazlar arasında meydana gelen etkileşimler tarafından belirlenir (Towler, G., and Sinnott, R., 2008).
4. **Gıda endüstrisi:** Gıda endüstrisinde dondurma işlemleri, çikolata gibi bazı gıda maddelerinin eritilip

katılaştırılması gibi katı-sıvı faz geçişlerinde kullanılır (Towler, G., and Sinnott, R., 2008).

5. **Çevre Mühendisliğinde:** Atık su arıtımında katı-sıvı ayrımı, özellikle kışın yol temizleme işlemlerinde, buzun tuzlu su içinde çözünmesi ile ilişkili olduğu alanlarda faz sistemlerinden yardım alınır.

1.3. Katı Sıvı Faz Dengeleriyle İlgili Son Yıllarda Yapılan Bazı Çalışmalar:

✓ NaH_2PO_2 ve NaCl Tuzlarının Ayrılması

Bu çalışmada, NaH_2PO_2 ve NaCl tuzlarını içeren bir çözeltinin, 298.15 K'deki faz dengeleri ve fizikokimyasal özellikleri incelenmiştir. Ötonik noktada, çözeltinin yoğunluğu, viskozitesi, iletkenliği ve tuzluluğu ölçülmüş ve katı fazda $\text{NaH}_2\text{PO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ve NaCl tuzları tespit edilmiştir. (Adıgüzel, V., vd. 2017)

✓ $\text{ZnSO}_4\text{-Na}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{-H}_2\text{O}$ Sisteminde Katı-Sıvı Faz Dengesi

Bu yüksek lisans tezinde, çinko borat sentezi için $\text{ZnSO}_4\text{-Na}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{-H}_2\text{O}$ sisteminin katı-sıvı faz dengesi incelenmiştir. Çalışma, çinko borat üretimi için uygun koşulların belirlenmesine yardımcı olmuştur (Noktacı, V., 2014).

✓ Seyreltik Sıvı-Katı Karışımlarının Akış Özellikleri

Bu çalışmada, eş-merkezli iki boru arasında yukarı doğru akan seyreltik sıvı-katı karışımlarının akış özellikleri incelenmiştir. DeneySEL veriler, farklı katı parçacık boyutları ve konsantrasyonları altında akışkanın davranışını anlamaya yönelik önemli bilgiler sunmuştur (Özbelge, A.T., Beyaz, A., 1999)

✓ Su-Metanol- KH_2PO_4 Sistemi Üzerine Termodinamik Modelleme

Bu çalışmada, su-metanol-potasyum dihidrojen fosfat (KH_2PO_4) üçlü sisteminin katı-sıvı faz dengesi, karışım çözücüsü elektrolit

(MSE) modeli kullanılarak termodinamik olarak modellenmiştir. Bu tür modeller, çözünürlük ve faz geçişlerinin daha iyi anlaşılması için önemlidir (Wu, J., vd. (2023).

✓ **N,N'-Diethylthiourea'nın Farklı Solvent Sistemlerindeki Katı-Sıvı Faz Dengesi**

Çalışmada, N,N'-diethylthiourea'nın farklı solvent sistemlerindeki katı-sıvı faz dengesi ve termodinamik analizleri yapılmıştır. Çalışma, kristalleşme süreçlerinin tasarımı ve optimizasyonu için temel veriler sunmaktadır (Yao, M., vd. 2019).

✓ **Organik Bileşiklerin Katı-Sıvı Faz Dengesiyle, Termal ve Fizikokimyasal Çalışmaları**

Bu çalışmada, ikili organik sistemin katı-sıvı faz dengesi verileriyle çeşitli hesaplamalar kullanılarak termal ve fizikokimyasal özellikleri incelenmiştir (Reddi, R.S.B. 2012).

✓ **Farmakoloji alanındaki çalışmalar**

Katı sıvı faz dengelerinin kullanıldığı başka bir çalışmada parasetamol içeren üç bileşiğin ikili sistemlerde katı-sıvı faz dengelerini incelenmiş ve ötektik sıcaklıklar ve bileşimler tespit edilmiştir (Leitner, J., vd. 2022).

2. SONUÇ

Katı-sıvı faz sistemleri; faz değişimlerini, çözünürlükleri ve çözünürlük bölgelerini, çözeltinin bileşenlerinin etkileşimlerini ve bu etkileşimlerin endüstriyel uygulamalardaki önemini ortaya koyan çalışmalardır. Sıcaklık ve basınç gibi etkenlere bağlı olarak, bu sistemlerin analizi birçok mühendislik ve kimya prosesinin temelidir. Bu tür sistemlerde denge noktalarını ve faz geçişlerini doğru bir şekilde yönetmek, süreç verimliliğini artırmak için oldukça önemlidir.

KAYNAKÇA

- Adıgüzel, V., Demirci, S., Şahin, Ö., (2017), Çözelti Ortamından Katı-Sıvı Faz Dengeleri Yardımıyla NaH_2PO_2 ve NaCl Tuzlarının Ayrılması, *Iğdır Üni. Fen Bilimleri Enst. Dergisi*, 7(3): 137-142.
- Atkins, P., Paula, J., (2010), *Physical Chemistry*, New York, W. H. Freeman and Company.
- Chandler, H.,(2006), *Metallurgy for the Non-Metallurgist*, ASM International.
- Leitner, J., Horníková, K., Studničková, N., Sedmidubský, D., (2022), Solid–liquid phase equilibria in binary systems with paracetamol, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 147, 13949–13959.
- Noktacı, V., (2014), Çinko borat sentezi için $\text{ZnSO}_4\text{-Na}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{-H}_2\text{O}$ sisteminde katı sıvı faz dengesinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi.
- Özbelge, A.T., Beyaz, A., (1999), Seyreltik sıvı katı karışımlarının akış özellikleri, Proje no: İntag-822, TÜBİTAK Projesi.
- Porter, D.A., Easterling, K.E., and Sherif, M.Y., (2009), *Phase Transformations in Metals and Alloys*, Taylor & Francis Group.
- Reddi, R.S.B., Kumar Satuluri, V.S.A., Rai, R.N., (2012), Solid–liquid equilibrium, thermal and physicochemical studies of organic eutectics, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 107, 183–188)
- Smith, J.M., Van Ness, H.C. and Abbott M.M. (2005), *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, Mc-Graw Hill.

- Towler, G., and Sinnott, R., (2008), *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*, Elsevier.
- Tüfekçi, M., Karaböcek, S., (2014), *Kimya-Chemistry*, Nobel yayıncılık.
- Walas, S.M. (1985), *Phase Equilibria in Chemical Engineering*, Butterworth-Heinemann.
- Wu, J., Wu, J., Xu, D., Wang, X., Zhang, Z., Yan, Z., (2023), Thermodynamic Modeling the Solid–Liquid Phase Equilibrium of a Water–Methanol–Potassium Dihydrogen Phosphate Ternary System with a Mixed-Solvent Electrolyte (MSE) Model, *Thermodynamics, Transport, and Fluid Mechanics*, 62, 25, 9876–9885.
- Yao, M., Li, W., Shi, P., Li W., Wang, L., Zhou, L., Tang, W., (2019), Solid–Liquid Phase Equilibrium and Thermodynamic Analysis of N,N'-Diethylthiourea in Different Solvent Systems, *Journal of Chemical & Engineering Data*, 64, 12, 6031–6040.

BİYOATIKLARDAN KATMA DEĞERE: ANTEP FISTIĞI KABUĞUNUN POLİÜRETAN KOMPOZİTLERDE KATKI/DOLGU MADDESİ OLARAK KULLANIMI

Yusuf YILMAZ¹

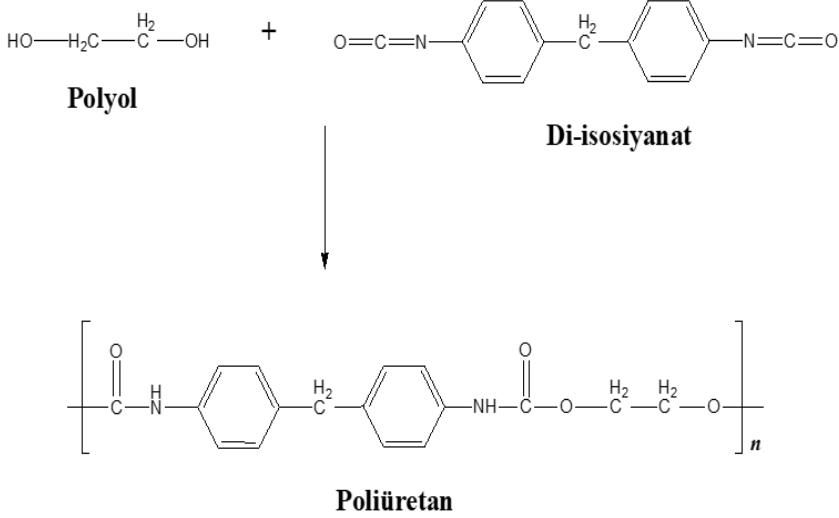
1. GİRİŞ

Poliüretanlar (PU), ilk olarak 1937 yılında Otto Bayer ve çalışma arkadaşları tarafından bir poliestere diol ve bir di-izosiyanatın reaksiyonu ile sentezlenmiş olup, başlangıçta polimer kimyasının yeni bir kolunu oluşturmuş termoset polimerlerdendir (Hepburn, 1992). Bu polimerler, izosiyanat bileşenleri ile hidroksil grubu taşıyan polioller arasında gerçekleşen ekzotermik bir polikondenzasyon tepkimesi sonucunda elde edilmektedir. Tepkime, uretan gruplarının (-NH-CO-O-) oluşmasıyla sonuçlanır (Şekil 1).

Gelişim süreci boyunca, PU malzemeler farklı türde polioller (örneğin poliestere, polieter, biyobazlı polioller) ve çeşitli di-izosiyanatlar (örneğin TDI, MDI) kullanılarak geniş bir ürün yelpazesine ulaşmıştır. Poliüretanın potansiyeli, İkinci Dünya Savaşı sırasında kağıt emdirme ve hardal gazına dayanıklı giysiler, yüksek parlaklıkta uçak cilaları, kimyasal ve korozyona dayanıklı kaplamalar üretiminde kullanıldığında fark edilmiş daha sonra metal, ahşap ve duvar işçiliğini korumak için kullanılmıştır. Nispeten kısa bir geçmişi olan poliüretanlar, en dinamik polimer gruplarından biri haline gelmiş ve uygulama alanları polimer kullanımının hemen hemen tüm alanlarını

¹ Doç. Dr., Gaziantep Üniversitesi, ysfyilmaz60@gmail.com , ORCID: 0000-0003-4363-0427.

kapsamaktadır. Bu çok yönlülük, PU'ların sert köpüklerden esnek liflere kadar çok çeşitli uygulamalarda kullanılmasına olanak tanımaktadır (Randall & Lee, 2002).



Şekil 1. Poliüretanların genel sentez şeması

Günümüzde poliüretanlar yaşamın hemen hemen her alanında kullanılmakta ve üstün özellikleri sayesinde insanların yaşam kalitesini artırmaktadır. Yatak / yastık malzemeleri, mobilya, otomotiv, ayakkabı tabanları, terlik, tıbbi cihazlar, ahşap aksesuarları, elektronik ve paketlenme, günlük yaşamda kullanılan poliüretanların sadece birkaç yaygın örneği olarak görülmektedir. Tarihsel olarak PU üretimi, petrol kökenli hammaddelere bağımlı olmakla beraber çevresel baskılar ve yenilenebilir kaynaklara yönelim, biyolojik kökenli polioller ve yeşil sentez yaklaşımlarına odaklanılmasına neden olmuştur (Petrović, 2008). Diğer taraftan poliüretan malzemelerin hem maliyetini düşürmek hem de bir takım mekanik özelliklerini iyileştirmek için dolgu/katkı maddeleri geliştirilmektedir. Bu katkılar arasında organik kökenli dolgular inorganik türlere göre polimerle daha

uyumlu olması nedeniyle son zamanlarda araştırmacıların ve firmaların ilgi odağı haline gelmiştir.

2. POLİÜRETAN TÜRLERİ

Poliüretanlar yapılarına, özelliklerine ve kullanım amaçlarına göre çeşitli türlerde üretilmektedir. Bunlar arasında esnek köpükler, sert köpükler, elastomerler, kaplamalar, yapıştırıcılar ve lifler ön plana çıkmaktadır.

2.1. Esnek Poliüretan Köpükler

Bu tür genellikle oturma grupları, yataklar, otomotiv koltukları, ayakkabı tabanları ve terlik gibi esnek ürünlerin üretiminde tercih edilmektedir (Şekil 2). Polieter / poliester polyoller ile MDI veya TDI bazlı izosiyanatlar kullanılarak üretilmektedir. Düşük yoğunlukları ve açık hücre yapıları sayesinde yumuşak ve elastik bir yapı sunmaktadırlar (Herrington & Hock, 1998).



Şekil 2. Esnek poliüretan kullanılarak üretilen farklı yoğunluklu ayakkabı tabanları

2.2. Sert Poliüretan Köpükler

Isı yalıtımı uygulamalarında, özellikle inşaat ve beyaz eşya sektörlerinde kullanılmaktadırlar. Polyester poliollerle hazırlanan bu köpükler, kapalı hücre yapıları sayesinde yüksek mekanik dayanım ve düşük ısı iletkenliği sağlamaktadır (Lee & Ramesh, 2004).

2.3. Poliüretan Elastomerler

Yüksek dayanıklılık ve esneklik gerektiren uygulamalarda (örneğin endüstriyel tekerlekler, TPU ayakkabı tabanı gibi) tercih edilir. Termoplastik veya termoset yapıda olabilirler. Sert ve yumuşak segmentlerin oranı elastomerin performansını belirlemede önemli bir parametre olarak görülmektedir (Zia et al., 2007).

2.4. Kaplamalar ve Vernikler

Koruyucu film tabakaları oluşturmak amacıyla kullanılan bu PU türleri, yüksek yapışma, kimyasal direnç ve UV dayanımı gibi özellikler sergiler (Wicks et al., 2007).

2.5. Yapıştırıcılar ve Sızdırmazlık Malzemeleri

PU bazlı yapıştırıcılar ahşap, metal, cam ve plastik yüzeyler arasında güçlü bağlar oluşturmaktadır. Esnek yapı ve suya dayanıklılık bu türü avantajlı kılıp uygulama alanlarını genişletmektedir (Saunders & Frisch, 1964). Özellikle ayakkabı ve terlik sektöründe saya malzemesini her çeşit tabana yapıştırmada alnernatifsiz bir yapıştırıcı olarak piyasada yer almaktadır.

3. POLİÜRETANLARDA KULLANILAN KATKILAR/DOLGULAR

PU sistemlerine çeşitli katkı ve dolgu malzemeleri ilave edilerek hem ekonomik hem de performans açısından iyileştirme

sağlanmaktadır. İnorganik dolgulardan kalsiyum karbonat, alümina, kil ve silika gibi mineraller yaygın olarak kullanılırken, organik katkıları arasında lignin, selüloz, nişasta gibi biyo-bazlı malzemeler yer almaktadır (Xue et al., 2015).

Dolgu malzemeleri, mekanik dayanımı artırmanın yanı sıra, poliüretanlara termal ve akustik izolasyon, alev geciktiricilik gibi işlevsel özellikler de kazandırmaktadır. Ancak bu malzemelerin matriksle uyumu, morfolojik dağılımı ve işlenebilirliği göz önünde bulundurulmalı, poliüretan matriksine ekleme oranları önceden optimize edilerek seri üretim aşamasına geçilmelidir (Zheng et al., 2014).

4. BİYO ATIKLARIN POLİÜRETANLARDA KATKI/DOLGU OLARAK KULLANILMASI

Son yıllarda çevresel sürdürülebilirlik anlayışı doğrultusunda, tarımsal ve gıda endüstrisine ait biyolojik atıkların PU kompozitlerde dolgu olarak değerlendirilmesi ilgi görmektedir. Örneğin, fındık kabuğu, hindistancevizi lifi, pirinç kepeği, zeytin çekirdeği ve buğday sapı gibi atıklar farklı PU matrislerine başarıyla entegre edilmiştir (Matuana et al., 2001; Gama et al., 2018). Bu biyo-atıklar yenilenebilir olmaları, düşük maliyetli ve biyoçözünür olmaları nedeniyle öne çıkmaktadır. Ayrıca karbon ayak izinin azaltılmasına ve döngüsel ekonomi hedeflerine katkı sağlamaktadır (Pathania & Sharma, 2017).

5. ANTEP FISTIĞI KABUĞU VE POLİÜRETANLARDA KULLANIMI

Antep fıstığı kabuğu, tarımsal sanayi atıkları arasında önemli bir yere sahiptir. Yüksek oranda lignoselülozik yapıya sahip bu kabuklar, selüloz, hemiselüloz ve lignin içeriğiyle dikkat çekmektedir (Nasir et al., 2021). Ayrıca fenolik bileşikler

bakımından da zengin olması, kabuğa doğal antioksidan özellik kazandırmaktadır (Bozkurt et al., 2016).



Şekil 3. Öğütülmüş Antep Fıstığı kabuğu
(<https://yelisangroup.com/fistik-kabugu-granulu/>)

Antep fıstığı kabuğu, ön işlemden geçirilerek (örneğin kurutma, öğütme, alkalın modifikasyon) PU matrisine dolgu olarak entegre edilebilme potansiyeli taşımaktadır (Şekil 3). Yapılan çalışmalar, bu tür atıkların PU'ın mekanik özelliklerini artırabileceğini ve aynı zamanda çevresel performansını da iyileştirdiğini göstermektedir (Kurańska et al., 2020).

Bu kabukların PU yapısına katılmasıyla elde edilen kompozitlerin sertliği, ısı dayanımı ve yapı stabilitesi artabilir. Bunun yanında, bu uygulama hem tarımsal atıkların geri kazanımına bir alternatif hem de PU endüstrisine yeni ve çevreci çözümler sunma potansiyeli barındırmaktadır.

6. SONUÇ

PU'lar sahip oldukları çok yönlü özellikler sayesinde otomotivden tekstile, inşaatın tıbbi cihazlara kadar geniş bir alanda kullanılmaktadır. Otomotiv sektöründe özellikle araç içi döşemelerde ve yalıtım sistemlerinde yaygındır. Yapı sektöründe,

enerji verimliliği sağlayan yalıtım köpükleri şeklinde karşımıza çıkar (Ashida, 2007). Tekstil sektöründe PU'lar elastik lifler ve kaplamalar olarak kullanılmaktadır. Ayrıca, PU bazlı biyomedikal uygulamalar (örneğin yara örtüleri, kalp kapakçıkları) da giderek artmaktadır (Santerre et al., 2005). PU sistemlerine hem organik hem de inorganik katkı/dolgu malzemeleri ilave edilerek hem ekonomik hem de performans açısından iyileştirme sağlamak mümkündür. Bu katkı/dolgu malzemeleri arasında organik esaslı olanlar polimer matriksi ile daha uyumlu olacağından dolgu/katkıdan beklenen performansın alınması daha muhtemeldir. Organik atıkların, Antep Fıstığı Kabuğu gibi, bir takım ön işlemlerden geçirilerek katma değeri yüksek ürünlere dönüştürülmesi hem çevresel risklerin azaltılması hem de petrol türevli ürünlerden kaynaklı karbon ayak izinin azaltılması açısından oldukça önem arz etmektedir.

KAYNAKÇA

- Ashida, K. (2007). Polyurethane and Related Foams: Chemistry and Technology. CRC Press.
- Bozkurt, S. S., Tokgöz, M., & Aydın, F. (2016). Evaluation of pistachio shells as bioadsorbent for the removal of heavy metals. *Desalination and Water Treatment*, 57(26), 12232-12239.
<https://doi.org/10.1080/19443994.2015.1046174>
- Członka, S., Kurańska, M., & Prociak, A. (2020). Sustainable rigid polyurethane foams modified with egg shell waste. *Polymer Testing*, 85, 106438.
<https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2020.106438>
- Gama, N. V., Ferreira, A., & Barros-Timmons, A. (2018). Polyurethane foams: Past, present, and future. *Materials*, 11(10), 1841. <https://doi.org/10.3390/ma11101841>
- Gniado, K., & Sienkiewicz, N. (2021). The influence of natural fillers on polyurethane composite performance. *Composites Part B: Engineering*, 219, 108876.
- Herrington, R., & Hock, K. (1998). Flexible Polyurethane Foams: Chemistry and Applications. The Dow Chemical Company.
- Hepburn, C. (1992). Polyurethane Elastomers (2nd ed.). Elsevier Applied Science.
- Ionescu, M. (2005). Chemistry and Technology of Polyols for Polyurethanes. Smithers Rapra Technology.
- Javni, I., Petrovic, Z. S., & Guo, A. (2000). Biodegradable thermoplastic polyurethanes from soybean oil. *Polymer*, 41(24), 8705–8711.
- Kabir, M. M., Wang, H., Lau, K. T., & Cardona, F. (2012). Chemical treatments on plant-based natural fibre

- reinforced polymer composites: An overview. *Composites Part B: Engineering*, 43(7), 2883–2892.
- Kurańska, M., Barczewski, M., & Prociak, A. (2020). Open-cell polyurethane foams synthesized using pistachio shell-based polyol. *Polymers*, 12(6), 1308.
- Lee, S. T., & Ramesh, N. S. (2004). *Polymeric Foams: Science and Technology*. CRC Press.
- Li, G., John, M., & Ma, X. (2000). Thermoplastic polyurethane reinforced with natural fibers. *Journal of Applied Polymer Science*, 75(2), 272–280.
- Lim, H., & Kim, S. H. (2000). Thermoplastic polyurethane elastomers synthesized from MDI and H12MDI: structure–property relationships. *Journal of Applied Polymer Science*, 78(7), 1381–1387.
- Malucelli, G., Camino, G., & Costa, L. (2009). Flame-retardant polyurethane foams. *Polymer Degradation and Stability*, 94(2), 246–252.
- Matuana, L. M., Balatinecz, J. J., & Park, C. B. (2001). Cell morphology and property relationships of microcellular foamed PVC/Wood-fiber composites. *Journal of Vinyl and Additive Technology*, 7(3), 140–147.
- Nasir, M. J., Aftab, R. A., & Iqbal, Z. (2021). Pistachio shells as sustainable lignocellulosic biomass: Chemical composition and thermal analysis. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 11, 357–366.
- Pathania, D., & Sharma, G. (2017). Utilization of agricultural waste biomass in polymer composites. *Environmental Chemistry Letters*, 15(1), 135–146.
- Petrović, Z. S. (2008). Polyurethanes from vegetable oils. *Polymer Reviews*, 48(1), 109–155.

- Randall, D., & Lee, S. (2002). *The Polyurethanes Book*. Wiley.
- Rosu, D., Cascaval, C. N., Rosu, L., & Ciobanu, C. (2010). Cure kinetics of epoxy resins: An overview. *Thermochimica Acta*, 497(1-2), 1–12.
- Ryszkowska, J. (2012). Natural fillers in rigid polyurethane foams. *Materials Science Forum*, 726, 39–42.
- Santerre, J. P., Woodhouse, K., Laroche, G., & Labow, R. S. (2005). Understanding the biodegradation of polyurethanes: From classical implants to tissue engineering materials. *Biomaterials*, 26(35), 7457–7470.
- Saunders, J. H., & Frisch, K. C. (1964). *Polyurethanes: Chemistry and Technology Vol. I: Chemistry*. Interscience Publishers.
- Saunders, J. H., & Frisch, K. C. (1965). *Polyurethanes: Chemistry and Technology Vol. II: Technology*. Interscience Publishers.
- Shah, A. A., & Hasan, F. (2015). Biodegradation of polyurethanes: A review. *International Biodeterioration & Biodegradation*, 103, 178–191.
- Simón, D., Borreguero, A. M., & Rodríguez, J. F. (2010). Synthesis of phase change materials for their application in rigid polyurethane foams. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(12), 5181–5188.
- Wicks, Z. W., Jones, F. N., Pappas, S. P., & Wicks, D. A. (2007). *Organic Coatings: Science and Technology* (3rd ed.). Wiley-Interscience.
- Xue, B., Zhang, J., & Yang, R. (2015). Effects of inorganic fillers on the flame retardancy and mechanical properties of polyurethane composites. *Journal of Applied Polymer Science*, 132(14), 41753.

- Yeganeh, H., & Mehdizadeh, M. R. (2004). Novel polyurethane networks derived from castor oil and isocyanates. *European Polymer Journal*, 40(6), 1233–1241.
- Zheng, Y., Liu, Y., & Wang, A. (2014). The use of lignocellulosic materials in the preparation of rigid polyurethane foams. *Cellulose Chemistry and Technology*, 48(7-8), 613–620.
- Zia, K. M., Bhatti, H. N., & Bhatti, I. A. (2007). Methods for polyurethane and polyurethane composites, recycling and recovery: A review. *Reactive and Functional Polymers*, 67(8), 675–692.

KİMYA ÖĞRETİMİNDE ARTIRILMIŞ GERÇEKLİK TEKNOLOJİSİ KULLANIMI

Merve YILDIZ¹

Senem ÇOLAK YAZICI²

1. GİRİŞ

Yapay zekânın öğretmenlik mesleğini nasıl dönüştüreceği üzerine tartışmalarının alevlendiği günümüzün hızla değişen eğitim ortamlarında, teknolojik gelişmelerin öğretim süreçlerine entegre edilmesi bir ihtiyaçtan ziyade gereklilik hâline gelmiştir. Bu bağlamda teknolojinin eğitim materyali olarak kullanımına imkân tanıdığı materyalleri daha yakından tanımak ve kullanmalarını sağlamak öğretmenlerin öğretme süreçlerine katkı sağlayacaktır. Bu teknolojilerden biri olan artırılmış gerçeklik teknolojisi, öğrenme süreçlerini daha etkileşimli ve görsel hâle getirerek öğrencilerin bilişsel, duyuşsal ve psikomotor gelişimlerine katkı sunmaktadır. Özellikle soyut kavramların yoğun olduğu kimya eğitimi, AR teknolojisinin sunduğu olanaklarla yeniden şekillenmekte; öğrencilerin moleküler yapılar, kimyasal bağlar ve reaksiyon mekanizmaları gibi kavramları üç boyutlu ve etkileşimli biçimde deneyimlemesine imkân tanımaktadır. Bu kitap bölümü, artırılmış gerçeklik teknolojisinin kimya ve fen öğretiminde nasıl kullanıldığını, pedagojik ve teknik avantajlarını, sınırlılıklarını ve geleceğe yönelik uygulama alanlarını eleştirel bir yaklaşımla incelemeyi

¹ Yüksek Lisans Öğrencisi, Düzce Üniversitesi, mervetblc@gmail.com, ORCID: 0000-0003-3183-5054.

² Dr. Öğr. Üyesi, Düzce Üniversitesi, scolakyazici@gmail.com, ORCID: 0000-0002-2326- 8996.

amaçlamaktadır. Bu kapsamda söz konusu teknolojinin kullanımına yönelik deneysel yöntem içeren birçok makale incelenmiş ve elde edilen bulgular son okuyucuya eleştirel bakış açısı ile sunulmaya çalışılmıştır.

1.1. Artırılmış Gerçeklik (AR) Nedir?

Artırılmış gerçeklik, gerçek dünyaya dijital görüntülerin veya bilgilerin eklenmesiyle çalışan bir teknolojidir. Yani çevremizde gördüğümüz nesnelerin üzerine, telefon, tablet ya da özel gözlüklerle baktığımızda ek bilgiler, animasyonlar ya da 3 boyutlu görseller eklenir. Bu teknoloji, bizi tamamen sanal bir dünyaya götüren sanal gerçeklikten farklıdır. Artırılmış gerçeklik teknolojisi, kullanıcıların gerçek ortamdan kopmadan hem fiziksel nesneleri hem de dijital öğeleri aynı anda deneyimlemesine olanak tanımaktadır. Zhou, Oveissi ve Langrish (2024), bu teknolojinin kimya mühendisliği eğitimi bağlamında etkileşimli ve bütüncül öğrenme ortamları sunduğunu vurgulamaktadır. Söz konusu teknolojiyi daha önce kullanmayanlar için birkaç farklı tanıma yer vermek faydalı olacaktır.

Azuma (1997), artırılmış gerçekliği üç temel özelliklerle tanımlamıştır: gerçek ve sanal içeriklerin bir arada sunulması, gerçek zamanlı etkileşimin sağlanması ve içeriklerin üç boyutlu olarak yerleştirilmesi. Bu nitelikler, AR' yi yalnızca teknik bir yenilikten öte, eğitimde etkili bir öğretim stratejisi hâline getirmektedir. Özellikle görselleştirme gerektiren alanlarda, AR' nin bu üç özelliği öğrencilerin öğrenme süreçlerini destekleyici biçimde devreye girmektedir. Benzer biçimde, AR' nin fiziksel çevre ile sanal içeriği birleştirerek öğrencilerin görsel-işitsel deneyimlerini zenginleştirdiğini ve öğrenme süreçlerine etkileşimli bir boyut kazandırmaktadır (**Görsel 1**) Böylece, öğrencilerin yalnızca görsel ve işitsel yollarla değil, aynı zamanda etkileşimli deneyimlerle öğrenme sürecine aktif biçimde

katılmalarını sağlayarak çoklu duyu organına hitap etmektedir. Böylece soyut kavramlar, öğrencinin zihninde daha somut ve anlamlı hâle gelecek, öğrencilerin anlamlandırmalarının artması dikkat ve motivasyonu artırırken, bilgilerin uzun süreli bellekte yapılandırılmasını da artıracaktır. Böylece öğrencinin yaparak yaşayarak tecrübe edinme imkanı olmayan durumlarda artırılmış gerçekliğin sunduğu etkin katılım sayesinde öğrenme, sadece bilgi edinme değil, aynı zamanda keşfetme ve içselleştirme süreci hâline gelmektedir.



Görsel 1: Artırılmış Gerçeklik (AR) Kullanılarak Sınıf Tahtasında DNA Sarmalının Görselleştirilmesi (OpenAI, 2025)

Görsel 1 Artırılmış gerçeklik ile zenginleştirilmiş bir sınıf ortamı örneğidir ve DNA modelinin mobil cihaz ekranında üç

boyutlu olarak görüntülenmesini temsil etmektedir ancak DNA'nın yapısı burada basitleştirilmiş şekilde sunulmuştur ve detaylı bilimsel modelleme içermemekte, AR teknolojisinin çalışma prensibini açıklamak amacı ile üretilmiş bir içeriktir. Bu kapsamda artırılmış gerçeklik gerçek dünya üzerine sürekli biçimde üst üste bindirilen bilgisayar üretimi görsellerin oluşturduğu bir sistem olarak tanımlanmış; bu sistemin doğal ve gerçekçi bir insan-makine etkileşimi sağladığını belirtmiştir. Bu yönüyle AR, yalnızca bilgi sunan bir teknoloji değil, aynı zamanda deneyim odaklı bir öğrenme ortamı olarak da değerlendirilmektedir (Mazzuco ve ark., 2022). Bu teknolojinin, özellikle soyut kavramların öğretiminde etkili olduğu ifade edilmiştir. Yılmaz ve Göktaş (2018) ise AR'nin başlıca özelliklerini sanal ve gerçek nesnelerin eş zamanlı kullanımı, üç boyutlu yapılandırma ve çoklu platform desteği olarak özetlemiş ve bu sistemin özellikle eğitim ortamlarında önemli bir potansiyel taşıdığını belirtmiştir.

AR sistemlerinin temel işleyişinde, kullanıcılar genellikle bir kamera veya AR gözlüğü yardımıyla fiziksel ortamı taramakta ve bu ortam üzerine yerleştirilmiş sanal nesnelerle etkileşime geçmektedir. Bu sayede kullanıcılar, hem fiziksel hem de sanal bilgiyi aynı anda gözlemlene ve kullanma şansı elde etmektedir (Cai ve ark., 2014). Örneğin, *bir kimya öğrencisi, artırılmış gerçeklik ortamında bir molekülün üç boyutlu modelini döndürerek farklı açılardan inceleyebilmekte, atomların uzaydaki konumlarını gözlemleyebilmekte ve böylece somut olarak deneyimle imkanı olmadığı molekülün yapısal özelliklerini daha somut bir şekilde kavrayabilme imkanına sahip olmaktadır. Ayrıca, sistem tarafından sunulan gerçek zamanlı geri bildirimler sayesinde yaptığı gözlemleri anında değerlendirme fırsatı bulabilmektedir. Bu da hem kavramsal anlamayı güçlendirir hem de öğrenmeyi daha etkileşimli ve kalıcı hâle getirerek olası kavram yanlışlarının önüne geçme imkanı sağlamaktadır.*

Farklı bir anlatımla, artırılmış gerçeklik teknolojisi özellikle soyut kavramların görsel olarak üç boyutlu biçimde modellenmesini mümkün kılması, öğrencilerin zihinsel temsillerini güçlendirmektedir. Bu bağlamda AR, yalnızca görsel bir destek sunmamakta, aynı zamanda öğrencinin kavramsal yapı kurma ve anlam oluşturma süreçlerini destekleyen pedagojik bir araç işlevi görmektedir (Tarng ve ark., 2022).

Sonuç olarak artırılmış gerçeklik teknolojisi, fiziksel ve dijital dünyayı bütünleştiren, kullanıcıya çok boyutlu ve gerçek zamanlı bir etkileşim deneyimi sunan yenilikçi bir yapıya sahiptir. Bu yapısı sayesinde, özellikle eğitimde soyut ve karmaşık içeriklerin daha anlaşılır ve etkileşimli biçimde sunulmasını mümkün kılmakta; öğrencilerin dikkat, motivasyon ve anlam kurma düzeylerine olumlu katkılar sağlamaktadır.

1.2. Artırılmış Gerçekliğin Tarihsel Gelişimi

Artırılmış gerçeklik (AR) teknolojisi, her ne kadar günümüzde bir eğitim aracı olarak kullanılmakta olsa da kökleri oldukça eskiye dayanmaktadır. Artırılmış gerçeklik (AR) kavramının düşünsel temelleri, ilk olarak 1901 yılında L. Frank Baum'un The Master Key adlı eserinde yer alan "Character Marker" adlı kurgusal cihaz aracılığıyla ortaya konmuştur. Bu cihaz, kullanıcıya karşısındaki kişilerin karakter özelliklerini alınlarında beliren harflerle görme imkânı tanımakta ve böylece gerçek dünyaya dijital bilgilerin katmanlar hâlinde entegre edilebileceği fikrini erken bir örnek olarak temsil etmektedir (Marsh, 2021). Bu kuramsal çerçeveyi izleyen süreçte, 1950'li ve 1960'lı yıllarda geliştirilen Sensorama ve başa takılan ekranlar gibi teknolojiler, AR'nin somut temsillerini oluşturmuştur. Ancak teknolojinin günümüzdeki anlamıyla şekillenmesi, 1990'lı yıllarda Caudell ve Mizell'in Boeing fabrikalarında yürüttüğü çalışmayla mümkün olmuştur. Bu çalışmada AR, üretim sürecinde çalışanlara dijital yönergeler sunmak amacıyla

kullanılmakta ve fiziksel ortamla sanal içeriği aynı düzlemde sunarak verimliliği artırmayı hedeflemişlerdir (Chen & Xue, 2021).

Bu dönemden itibaren artırılmış gerçeklik sistemleri, yalnızca mühendislik ve üretim alanlarında değil; eğitim gibi uygulama alanlarında da gelişim göstermeye başlamıştır. Özellikle 2000’li yılların başından itibaren AR teknolojisi, eğitim alanına daha bütüncül bir yaklaşımla dâhil olmuş ve karma gerçeklik spektrumunda yerini almıştır. Bu süreçte AR, eğitimde soyut kavramların görselleştirilmesi, deneysel öğrenme fırsatlarının artırılması ve bireysel öğrenme yollarının desteklenmesi amacıyla çeşitli öğretim teknolojileriyle bütünleştirilmiştir (Macariu ve ark., 2020).

AR teknolojisinin kimya öğretiminde kullanımı da bu tarihsel gelişim süreciyle paralel bir şekilde hayatımızda yerini almaya başlamıştır. İlk uygulamalar daha çok sanal laboratuvar araçları ve simülasyon tabanlı içeriklerle sınırlı kalırken, günümüzde artırılmış kimya (Augmented Chemistry) arayüzleri, HoloLens gibi başa takılan cihazlar ve mobil tabanlı uygulamalarla çok daha etkileşimli, erişilebilir ve pedagojik yönden zengin bir hâle gelmiştir. Bu dönüşüm, yalnızca teknik bir yeniliği değil, aynı zamanda öğretim süreçlerinde kavramsal anlamayı destekleyen nitelikli bir dönüşümü de beraberinde getirmiştir (Fombona-Pascual ve ark., 2022).

Bu bağlamda AR, Milgram ve Kishino’nun tanımladığı karma gerçeklik sürekliliği içerisinde konumlanmakta; fiziksel ve dijital dünya öğelerinin gerçek zamanlı, bütüncül ve üç boyutlu bir etkileşimle kullanıcıya sunulmasını mümkün kılmaktadır. Azuma’nın tanımladığı ölçütlere göre bir sistemi artırılmış gerçeklik (AR) olarak kabul edebilmek için; fiziksel ve sanal içerikleri eş zamanlı sunmak, bu içerikleri etkileşimli hâle getirmek ve üç boyutlu olarak hizalamak gerekmektedir (Chen &

Xue, 2021). Bu özelliklerin sistem içinde işlevsel hâle gelmesini sağlamak için çeşitli teknolojilerden yararlanmak gerekmektedir. **Takip sistemlerini kullanmak**, sanal nesneleri fiziksel ortama doğru şekilde yerleştirmek için önem taşımaktadır. Örneğin, *bir öğrencinin kimya kitabındaki belirli bir görsele mobil cihaz kamerasıyla bakarak sayfa üzerinde o yapıya karşılık gelen 3D molekül modelini doğru konuma yerleştirmek, öğrencinin fiziksel ve sanal bilgiyi bir arada görerek, bunlar arasında bağ kurma ve kavramları zihninde daha somut hâle getirmek yoluyla öğrenmeyi derinleştirmelerine katkı sağlamaktadır.* **Görüntüleme sistemlerini kullanmak**, sanal içerikleri öğrenciye ulaştırmak için gereklidir. Örneğin, *artırılmış gerçeklik gözlüğü ya da telefon ekranı aracılığıyla bir molekülün üç boyutlu yapısını görmek mümkündür. Bu tür içerikleri görselleştirmek, soyut yapıları zihinsel olarak canlandırmak ve özellikle öğrencinin konuyu zihninde canlandırmasını kolaylaştırarak bilgiyi içselleştirmeyi destekler ve konuyu daha iyi kavramak için öğrenene destek sunmak anlamına gelmektedir.* **Etkileşim teknolojilerinden yararlanmak**, öğrencinin sanal içerikle daha doğal ve anlamlı bir ilişki kurmasını sağlamak için gereklidir. Örneğin, *ekrandaki bir molekülü döndürmek, atomları yakınlaştırmak ya da bağ yapılarını değiştirmek için kullanıcı arayüzüyle doğrudan etkileşime geçmek mümkündür. Bu sayede öğrenci sürece aktif katılım sağlayabilir, deneyerek öğrenme imkanına sahip olur ve kendi öğrenme hızına göre ilerleyerek bireysel öğrenmeyi destekleyen fırsatlardan yararlanma şansına sahip olacaktır.* Zamandan ve mekandan bağımsız kullanılabilir olması da bireysel öğrenmeyi destekleyen bir diğer unsurdur.

Sonuç olarak, AR teknolojisinin tarihsel gelişimi yalnızca teknik bir ilerleme olarak değil; aynı zamanda bilgiye erişim, öğretim ve kavramsal anlama süreçlerinde dönüşüm yaratan bir süreç olarak değerlendirilmelidir. Bu dönüşüm, özellikle kimya

gibi soyut kavramlarla yüklü alanlarda, öğretim süreçlerinin daha etkileşimli ve deneyim temelli hâle gelmesini sağlamaktadır.

2. EĞİTİMDE ARTIRILMIŞ GERÇEKLİK TEKNOLOJİSİNİN ÖNEMİ

Eğitimde teknolojinin entegrasyonu, öğrenme sürecine aktif katılımı teşvik eden yenilikçi yaklaşımların gelişmesini sağlamaktadır. Bu bağlamda artırılmış gerçeklik (AR) teknolojisi; fiziksel ortamı dijital içeriklerle bütünleştirilmesi, çoklu duyuşsal etkileşim sağlaması ve bireyselleştirilmiş öğrenme deneyimi sunması gibi özellikleriyle eğitimde dönüştürücü bir potansiyele sahiptir (Azuma, 1997; Yılmaz ve Göktaş, 2018). Örneğin, Kimya mühendisliği özelinde yapılan bir çalışmada ise, Zhou ve ark., (2024), AR teknolojisinin öğrencilerin deneysel süreçlere aktif katılımını sağladığını ve karmaşık sistemleri üç boyutlu olarak anlamalarına yardımcı olduğunu belirtmiştir.

Geleneksel öğretim yöntemleri çoğunlukla bilgi aktarımı odaklıdır ve öğrencinin öğrenme sürecindeki etkileşimini sınırlı düzeyde desteklemekte ve hazır bilgi sunmaktadır. Çoğunlukla öğrencinin bilgiyi anlamlandırmasına ve bilgi üzerinde düşünmesine imkan tanıyacak ortamlar sunmada oldukça sınırlı kalmaktadır. AR teknolojisi, öğrencilerin öğrenme materyalleriyle doğrudan etkileşime geçmesini sağlayarak pasif öğrenmeden aktif deneyimlemeye geçişi kolaylaştırma konusunda öğrenciyi kitaba bağımlı halde kurtarır ve bilgiyi yapılandırmasına imkan tanınması ile öne çıkmaktadır. Bu durum, öğrenme sürecinin daha anlamlı, kalıcı ve bireysel ihtiyaçlara uygun hâle gelmesini sağlamaktadır. Özellikle bilimsel disiplinlerde, deneysel uygulamaların güvenli biçimde simüle edilmesi, zaman ve mekân kısıtlarının aşılması ve bireysel öğrenme hızına uyum sağlanması AR'nin sunduğu önemli avantajlar arasında yer almaktadır (Mazzuco ve ark., 2022).

Azuma (1997), artırılmış gerçekliği insanın bilişsel kapasitesini destekleyen bir araç olarak tanımlamış ve bu teknolojinin öğreneni yalnızca bilgi alıcısı olmaktan çıkararak deneyimleyici bir pozisyona taşıdığını ifade etmiştir. Bu yönüyle AR, insan-bilgisayar etkileşimini geliştiren ve bilgiyi çok duyu organına hitap edecek şekilde sunan etkileşimli öğrenme ortamlarının kurulmasını mümkün kılmaktadır.

STEM disiplinlerinde uygulamalı öğrenme önemli bir yer tutmasına rağmen, birçok eğitim kurumunda laboratuvar altyapısının yetersiz olması, öğrencilere deneyim temelli öğrenme fırsatları sunmayı güçleştirmektedir. Bu soruna çözüm üretmek amacıyla Lu ve arkadaşları (2024), artırılmış gerçeklik ve sanal gerçeklik teknolojilerini bir araya getirerek kimya eğitimine yönelik yenilikçi bir öğretim sistemi geliştirmiştir. Geliştirilen bu sistemde öğrenciler, dijital ortamda deney düzenekleri oluşturabilmekte, deney süreçlerini gözlemleyebilmekte ve sistemden anlık geri bildirimler alabilmektedir. Bu sayede deneysel etkinlikler hem fiziksel risklerden arındırılmış hem de öğrencinin tekrar ederek öğrenmesine olanak sağlayacak biçimde yapılandırılmıştır. Ayrıca, sistemin öğrencilerin öğrenmeye olan ilgisini artırdığı, kavramsal anlamayı desteklediği ve bireysel farklılıklara duyarlı yapısıyla bilişsel süreçleri geliştirdiği de ifade edilmiştir. Bu bulgular, teknolojik destekli öğrenme ortamlarının yalnızca içerik sunmakla kalmayıp, öğrenme sürecine daha derinlemesine bir katılımı teşvik ettiğini göstermektedir.

AR sistemlerinin bireyselleştirilmiş öğrenmeye sunduğu katkılar, öğrencilerin kendi öğrenme hızlarına uygun bir şekilde materyalle etkileşim kurmasına olanak tanımaktadır. Taçgın ve arkadaşları (2021), AR'nin doğal kullanıcı arayüzleriyle (NUI) el hareketleri üzerinden gerçekleşen etkileşimlerinin, öğrenenin çevresiyle kurduğu bağlantıyı güçlendirdiğini ve deneyim temelli öğrenmeyi desteklediğini vurgulamaktadır.

Artırılmış gerçeklik teknolojisinin öğrencilerin dikkatini çekme, öğrenme sürecine aktif katılım sağlama ve kavramsal anlamayı destekleme gibi yönleri, farklı seviyelerdeki öğrenenler için olumlu etkiler doğurmaktadır. Tarng ve arkadaşları (2022) tarafından yapılan çalışmada, AR'nin öğrencilerin kimyasal bağlar, moleküler etkileşimler ve dinamik süreçlere yönelik kavramsal gelişimini artırdığı gösterilmiştir. Khairani ve Prodjosantoso (2023), AR teknolojisinin öğrencilerin motivasyonunu artırdığını, öğrenme sürecine daha aktif katılım sağladığını ve başarı düzeyini anlamlı biçimde yükselttiğini ifade etmektedir. Bu çalışmada, AR'nin sunduğu görsel ve işitsel destekle birlikte öğrencilerin yalnızca gözlemci değil, aynı zamanda üretici ve yorumlayıcı bir pozisyona yerleştirildiği belirtilmiştir.

Nishihama ve arkadaşları (2010) tarafından geliştirilen ARChemistry sisteminde ise, öğrencilerin yaptıkları deneysel hataların sistem tarafından tanımlanarak geri bildirim sağlanması, öğrenme sürecinin değerlendirme boyutunu da destekleyici bir özellik olarak ortaya çıkmıştır. Bu yapı, yalnızca öğretimin değil, ölçme ve değerlendirmenin de etkileşimli biçimde yürütülebildiği öğrenme ortamları sunmaktadır.

Başka bir çalışmada ise, öğrencilerin AR içerikli dersleri ilgi çekici bulduğu, bu derslerde eğitsel doyum yaşadığı ve öz-yönelimli öğrenme becerilerinde artış gözlemlendiği rapor edilmiştir. Öğrenciler, içerikle fiziksel olarak etkileşime geçebildiklerinde, bilgiyi daha etkin yapılandırabilmekte ve üst düzey bilişsel beceriler geliştirebilmektedir (Low ve ark. 2022).

Sonuç olarak, artırılmış gerçeklik teknolojisinin eğitimdeki önemi, öğrenme ortamlarını daha etkileşimli, bireysel ihtiyaçlara duyarlı ve çok boyutlu hâle getirmesinden kaynaklanmaktadır. Bu teknoloji; yalnızca öğretimi değil, öğrenenin aktifliğini, bilişsel süreci, motivasyonu ve öğrenme

kalitesini de destekleyen bütüncül bir öğrenme ortamı sunmaktadır.

3. KİMYA ÖĞRETİMİNDE ARTIRILMIŞ GERÇEKLİK TEKNOLOJİSİNİN KULLANIMININ ÖNEMİ

Kimya eğitimi, soyut kavramların ağırlıklı olduğu ve öğrencilerin mikroskobik düzeydeki yapılarla zihinsel temsiller oluşturmalarını gerektiren bir alan olarak, öğretim sürecinde çeşitli zorluklar barındırmaktadır. Bu zorlukların başında moleküler yapılar, kimyasal bağlar ve reaksiyon mekanizmaları gibi kavramların geleneksel yöntemlerle açıklanmasında yaşanan sınırlılıklar yer almaktadır. Özellikle düşük başarı düzeyine sahip öğrenciler için soyut bilgilerin somut hale getirilememesi, öğrenme süreçlerini olumsuz etkilemektedir (Cai ve ark., 2014; Sari ve ark., 2021).

Artırılmış gerçeklik (AR) teknolojisi, kimya öğretiminde bu kavramsal soyutluğu ortadan kaldırmak amacıyla etkili bir araç olarak öne çıkmaktadır. Moleküler yapılar, atom modelleri, kimyasal bağlar ve reaksiyon süreçleri gibi öğelerin üç boyutlu olarak görselleştirilmesini sağlayan AR uygulamaları, öğrencilerin uzamsal düşünme becerilerini geliştirmekte ve kimyasal kavramlar arasında anlamlı bağlantılar kurmalarına olanak tanımaktadır (Mazzuco ve ark., 2022; Khairani ve Prodjosantoso, 2023).

Zhou ve arkadaşları (2024) tarafından yapılan çalışmada, kimya mühendisliği öğrencilerine yönelik geliştirilen AR uygulamaları sayesinde hava akış düzeneği ve püskürtmeli kurutucu gibi karmaşık sistemler üç boyutlu olarak modellenmiş ve öğrencilerin bu sistemleri hem iç hem de dış yapılarıyla birlikte anlamaları kolaylaşmıştır. Bu tür deneyimlerin, öğrenci güvenliğini artırmasının yanı sıra kavramsal anlama üzerinde de

olumlu etkiler yarattığı görülmüştür. Benzer şekilde, Lu ve arkadaşlarının (2024) geliştirdiği simülasyon sisteminde, öğrenciler sanal ortamda deneyler yaparak bireysel geri bildirimler almakta ve öğrenme sürecine aktif olarak katılmaktadır.

Kimya dersinde laboratuvar deneyleri büyük önem taşısa da, okullarda laboratuvar olanaklarının sınırlılığı, deneysel süreçlerin güvenliği ve maliyet gibi etmenler öğretimi genellikle teorik düzeyde sınırlandırmaktadır. Bu bağlamda AR destekli öğretim ortamları, öğrencilere laboratuvar deneyimlerini sanal olarak sunarak, deneyim temelli öğrenmeyi desteklemektedir (Chen ve Liu, 2020). Özellikle reaksiyon hızı, çökeltme, sabunlaşma gibi konuların üç boyutlu ortamda canlandırılması, öğrencilerin deney sürecini daha güvenli ve hatasız biçimde deneyimlemesini sağlamaktadır (Cheng ve ark., 2024).

AR teknolojisinin kimya öğretiminde önem kazandığı bir diğer alan, öğrencilerin kavramsal bütünlük geliştirmesidir. Liu ve arkadaşlarının (2023) geliştirdiği ArAtom uygulaması, makroskobik, submikroskobik ve sembolik düzeyde temsilleri bir araya getirerek, öğrencilerin maddenin yapısını katmanlı biçimde öğrenmelerine olanak tanımaktadır. Aynı şekilde, Keller, Rumann ve Habig (2021) tarafından yürütülen çalışmada, AR uygulamasının stereokimya ve perisiklik reaksiyonlar gibi uzamsal zihinsel dönüşüm gerektiren konularda öğrencilerin kavramsal anlayışını artırdığı gösterilmiştir.

Ayrıca, kimyasal yapılarla ilgili bilgilerin yalnızca statik görsellerle değil, etkileşimli biçimde sunulması da öğrenme sürecine önemli katkı sağlamaktadır. Smith ve Friel (2021), öğrencilerin ACE inhibitörleri veya protein-ligand bağlanmaları gibi karmaşık biyokimyasal etkileşimleri üç boyutlu ortamda incelediklerinde kavrayışlarının daha derinleştiğini vurgulamıştır. Bu tür uygulamalar, özellikle geleneksel

yöntemlerle aktarılması güç olan konuların öğretimini kolaylaştırmaktadır.

Artırılmış gerçeklik, yalnızca bilgi sunumu açısından değil; aynı zamanda öğrencilerin aktif katılımını teşvik etmesiyle de pedagojik olarak değerli bir araçtır. Öğrenciler, AR ortamlarında nesnelerle fiziksel olarak etkileşime geçmekte, molekülleri birleştirerek yapılar oluşturmakta ve deney sürecine doğrudan müdahil olmaktadır (Nishihama ve ark., 2010; Taçgın ve ark., 2021). Bu durum, öğrenmenin kalıcılığını artırmakta ve öğrencilerin kimya dersine yönelik ilgisini yükseltmektedir.

Sonuç olarak, kimya öğretiminde AR teknolojisinin kullanımı, soyut kavramların görselleştirilmesini, deneyim temelli öğrenmenin desteklenmesini ve öğrencilerin aktif katılımını sağlayarak öğretim sürecine çok yönlü katkılar sunmaktadır. Teknolojinin sağladığı bu olanaklar, özellikle geleneksel öğretim yöntemlerinin yetersiz kaldığı alanlarda kimya öğreniminin daha anlamlı, erişilebilir ve motive edici hale gelmesini mümkün kılmaktadır.

4. KİMYA ÖĞRETİMİNDE ARTIRILMIŞ GERÇEKLİK TEKNOLOJİSİNİN AVANTAJLARI

Kimya eğitimi, doğası gereği soyut kavramların ve mikroskobik düzeydeki yapıların öğrenimini gerektirmektedir. Artırılmış gerçeklik (AR) teknolojisi, bu soyut kavramları üç boyutlu görselleştirme, etkileşimli hâle getirme ve deneyimleme imkânı sunarak kimya öğretiminde pedagojik, bilişsel ve teknik açıdan önemli avantajlar sağlamaktadır. AR destekli öğrenme ortamları, yalnızca bilginin aktarımıyla sınırlı kalmayıp, öğrencilerin aktif katılımını destekleyen, yapılandırmacı bir öğrenme deneyimi sunmaktadır.

AR teknolojisi, özellikle güvenlik açısından riskli deneylerin sanal ortamda gerçekleştirilmesine olanak tanımakta; bu sayede hem maddi kayıplar önlenmekte hem de öğrencilerin deneysel süreçleri tehlikesiz biçimde öğrenmeleri sağlanmaktadır. Zhou ve ark., (2024) tarafından geliştirilen uygulamada, AR destekli sistemler sayesinde öğrenciler, kimyasal sistemlerin iç yapılarını inceleme, adım adım yönlendirmelerle montaj yapma ve akış örüntülerini simüle etme olanağı bulmuştur. Bu uygulama, laboratuvar güvenliğini artırmanın yanı sıra deneysel süreci anlaşılır hâle getirmiştir.

Mazzuco ve arkadaşları (2022), artırılmış gerçekliğin kimya öğretiminde bilişsel, duyuşsal ve psikomotor alanlarda çok boyutlu kazanımlar sunduğunu ifade etmektedir. Öğrencilerin kavramsal anlamaları, uzamsal becerileri ve motivasyonları üzerinde olumlu etkiler gözlemlenmiş; ayrıca öğrenme süreçlerine aktif katılım düzeyleri artmıştır. Özellikle düşük başarı düzeyindeki öğrencilerde AR uygulamalarının öğrenme kazancı üzerindeki etkisi daha belirgin olmuştur (Cai ve ark., 2014; Tarng ve ark., 2022).

Görselleştirme, AR'nin öne çıkan pedagojik avantajlarından biridir. Öğrenciler, soyut kavramları üç boyutlu yapılarla ilişkilendirerek moleküler geometri, bağ açıları ve kimyasal etkileşimleri doğrudan gözlemleyebilmekte; böylece zihinsel modellerini daha sağlam temellere oturtabilmektedir (Khairani ve Prodjosantoso, 2023; Yılmaz ve Göktaş, 2018). Örneğin, ARChemistry sisteminde öğrenciler, farklı elementleri sanal ortamda birleştirerek reaksiyonları izleyebilmekte ve tepkimelerin ürünlerini analiz edebilmektedir (Nishihama ve ark., 2010).

Taçgın ve ark., (2021) tarafından geliştirilen AR uygulamasında, öğrencilerin elementleri el hareketleriyle seçip moleküller oluşturduğu doğal etkileşimli bir öğrenme ortamı

sunulmuştur. Bu uygulama, bireysel ve işbirlikli öğrenme fırsatlarını destekleyerek öğrenci merkezli bir eğitim deneyimi sağlamıştır. Benzer şekilde, Smith ve Friel (2021) tarafından yapılan uygulamada öğrenciler, protein-ligand bağlanmaları gibi karmaşık moleküler yapıları üç boyutlu olarak inceleyerek soyut konuları daha somut biçimde anlamışlardır.

Artırılmış gerçekliğin sağladığı anlık geri bildirimler ve etkileşimli yönlendirmeler, öğrencilerin hatalarını anında fark etmelerini ve düzeltmelerini kolaylaştırmakta; bu da öğrenmenin pekişmesini sağlamaktadır (Low ve ark., 2022). Ayrıca, öğrencilerin öğrenme sürecini kendi hızlarında sürdürebilmeleri, AR uygulamalarının tekrar edilebilir yapısıyla mümkün hale gelmektedir. Bu özellik, hem bireysel öğrenme kontrolünü artırmakta hem de öz düzenlemeyi desteklemektedir (Tarnig ve ark., 2022).

AR teknolojisi, yalnızca bilişsel gelişimi değil, aynı zamanda öğrencilerin öğrenmeye yönelik tutumlarını da olumlu yönde etkilemektedir. Öğrenciler, artırılmış gerçeklik içeren dersleri daha eğlenceli, motive edici ve anlamlı bulmakta; uygulamalara yönelik olumlu tutumlar geliştirmektedirler (Abdinejad ve ark., 2021; Chen ve Liu, 2020). Görsel temsillerin çeşitliliği ve etkileşimli içerikler sayesinde öğrencilerin dikkat ve ilgileri artmakta; bu da öğrenmenin kalıcılığını desteklemektedir (Liu ve ark., 2023).

Fombona-Pascual ve arkadaşlarının (2022) vurguladığı gibi, AR teknolojisi moleküler yapılar gibi üç boyutlu kavramların öğrenimini kolaylaştırarak öğrencilerin mekânsal düşünme becerilerini geliştirmektedir. Aynı zamanda öğrenciler, karmaşık kimyasal süreçleri adım adım izleyerek hem ürünleri hem de süreçleri bütüncül biçimde kavrayabilmektedirler (Keller ve ark., 2021). Bu durum, kavramsal yanılgıların azalmasına ve bilimsel düşünme becerilerinin gelişimine katkı sağlamaktadır.

Sonuç olarak, artırılmış gerçeklik teknolojisinin kimya öğretiminde sunduğu avantajlar; soyut kavramların görselleştirilmesi, deneysel süreçlerin güvenli simülasyonu, öğrencilerin motivasyon ve dikkat düzeylerinin artırılması, etkileşimli öğrenmenin teşviki ve bireyselleştirilmiş öğrenme olanaklarının sunulması gibi çok yönlü boyutları kapsamaktadır (Tablo 1). Bu bağlamda AR, kimya eğitiminde pedagojik olarak dönüştürücü bir araç olarak değerlendirilmektedir.

Tablo 1. AR teknolojinin eğitimde sunduğu avantajlar

Avantaj	Kaynak
Soyut kavramların somutlaştırılması ve 3B görselleştirme	Khairani & Prodjosantoso (2023), Cai ve ark., (2014), Smith & Friel (2021), Fombona-Pascual ve ark., (2022), Keller ve ark., (2021)
Düşük başarı düzeyindeki öğrenciler için öğrenme kazanımı	Cai ve ark., (2014), Tarng ve ark., (2022), Liu ve ark., (2023)
Öğrenci motivasyonunun ve ilgisinin artması	Mazzuco ve ark., (2022), Low ve ark., (2022), Macariu ve ark., (2020), Chen & Liu (2020), Abdinejad ve ark., (2021)
Kavramsal anlama ve öğrenmenin kalıcılığı	Mazzuco ve ark., (2022), Liu ve ark., (2023), Smith & Friel (2021), Tarng ve ark., (2022), Keller ve ark., (2021)
Deneysel süreçlerin güvenli ve tekrar edilebilir biçimde simülasyonu	Zhou ve ark., (2024), Nishihama ve ark., (2010), Tarng ve ark., (2022), Cheng ve ark., (2024)
Etkileşimli ve bireyselleştirilmiş öğrenme ortamları	Taçgın ve ark., (2021), Macariu ve ark., (2020), Tarng ve ark., (2022), Liu ve ark., (2023), Low ve ark., (2022)
İşbirlikli öğrenme ve grup içi iletişimin desteklenmesi	Nishihama ve ark., (2010), Macariu ve ark., (2020), Taçgın ve ark., (2021)
Öğrencinin öz düzenleme, kontrol ve geri bildirim alma becerisinin gelişimi	Tarng ve ark., (2022), Liu ve ark., (2023), Low ve ark., (2022), Smith & Friel (2021)
Problem çözme ve bilimsel süreç becerilerinin gelişmesi	Khairani & Prodjosantoso (2023), Sari ve ark., (2021), Keller ve ark., (2021)
Zihinsel yükün azaltılması ve dikkat yönetimi	Keller ve ark., (2021), Fombona-Pascual ve ark., (2022), Liu ve ark., (2023), Yılmaz & Göktaş (2018)

5. KİMYA ÖĞRETİMİNDE ARTIRILMIŞ GERÇEKLİK TEKNOLOJİSİNİN SINIRLILIKLARI VE ZORLUKLARI

Artırılmış gerçeklik teknolojileri kimya öğretiminde pek çok avantaj sunmasına rağmen, bu teknolojilerin sınıf içi uygulamalarında karşılaşılan çeşitli sınırlılık ve zorluklar da göz ardı edilemez. Özellikle öğrencilerin teknik sorunlarla karşılaştığı durumlar, AR'nin öğrenme süreçlerindeki potansiyelini sınırlayabilmektedir. Cai ve ark., (2014) tarafından yapılan çalışmada, öğrencilerin AR yazılımı kullanırken model kararsızlığı, görüntü titremesi ve ışık koşullarına duyarlılık gibi teknik sorunlar yaşadığı; bu sorunların kullanım kolaylığını olumsuz etkilediği bildirilmiştir. Ayrıca yazılı kılavuzların etkisizliği, öğrencilerin yönlendirme eksikliği yaşamasına ve uygulama sırasında hatalar yapmasına neden olmuştur.

Benzer şekilde, Low ve ark., (2022) tarafından yürütülen araştırmada, bazı AR uygulamalarının yalnızca yüksek performanslı cihazlarda sağlıklı çalıştığı ve bu durumun teknolojinin tüm öğrencilere eşit erişim sağlamasını engelleyebileceği belirtilmiştir. Ayrıca içerik sunumunda yalnızca metne dayalı anlatım yerine sesli yönlendirmelerin tercih edilmesi gerektiği vurgulanmıştır. Bu durum, kullanıcı deneyiminde pedagojik çeşitliliğin önemini ortaya koymaktadır.

Fombona-Pascual ve ark., (2022) tarafından yürütülen çalışmada ise AR yazılımlarının teknik karmaşıklığı, yüksek donanım gereksinimi ve sınırlı etkileşim özellikleri gibi faktörler teknolojiye yönelik eleştirilerin merkezinde yer almıştır. Özellikle üniversite düzeyindeki öğrencilerin bazı konularda geleneksel yazılımları daha işlevsel bulduğu ve AR uygulamalarının hız ve hassasiyet açısından sınırlı olduğu belirtilmiştir.

Öğrencilerin ilk kez AR uygulamalarıyla karşılaştıklarında yaşadıkları güçlükler, Smith ve Friel (2021) tarafından da dile getirilmiştir. True AR modunda içerikle doğrudan etkileşime geçmeden önce kullanıcı arayüzünü tanımakta zorluk çeken öğrenciler, sınıf düzeninden kaynaklanan fiziksel kısıtlar nedeniyle uygulamayı etkin kullanamamıştır. Bu bağlamda, uygulama öncesinde tanıtıcı bir oturum yapılmasının gerekliliği vurgulanmıştır.

Liu ve ark., (2023) tarafından geliştirilen AR uygulamasında da benzer sınırlılıklar gözlemlenmiş; özellikle öğrencilerin teknolojiye odaklandıkları için kavramsal içeriği ikinci planda bıraktıkları belirtilmiştir. Bu durumun, öğrenme çıktıları üzerinde sınırlayıcı bir etkisi olduğu ifade edilmiş ve öğretmen rehberliğinde yürütülen ön hazırlıkların önemine dikkat çekilmiştir.

Cheng ve ark., (2024) ise geliştirdikleri ARLS-STE sisteminde, bazı açılardan görüntü tanıma kartlarının algılanmasında teknik sorunlar yaşandığını ve ilk kullanımda öğretmen desteğinin zorunlu olduğunu vurgulamıştır. Öğrencilerin sistemin tüm işlevlerinden faydalanabilmesi için kullanım deneyimlerinin yapılandırılmış biçimde sunulması gerektiği sonucuna ulaşılmıştır.

Donanımsal sınırlılıklar, yalnızca cihaz erişimini değil, aynı zamanda uygulamaların platform bağımlılığını da kapsamaktadır. Örneğin, Abdinejad ve ark., (2021) tarafından geliştirilen ARchemy uygulamasının yalnızca Android cihazlarda çalıştığı, bu nedenle iOS kullanıcılarının uygulamaya erişemediği belirtilmiştir. Bu durum, erişilebilirlik açısından önemli bir sınırlılık olarak değerlendirilmiştir.

Chen ve Liu (2020) ise uygulamaya yönelik teknik sorunlar arasında, işaretleyici kartların doğru konumlandırılmaması durumunda simülasyonların hatalı

çalışabileceğini ifade etmiş; ayrıca öğrencilerin uygulamayı ilk kez kullanmaları nedeniyle yönlendirme eksikliği yaşadıklarını ve bu nedenle kavramsal hedeflere ulaşmakta zorlandıklarını belirtmiştir.

Sonuç olarak, artırılmış gerçeklik teknolojilerinin kimya eğitimine entegre edilmesinde teknik altyapı, kullanıcı dostu tasarım, öğretmen rehberliği, eşit erişim ve pedagojik yönlendirme gibi faktörlerin bütüncül biçimde ele alınması gerekmektedir. Bu sınırlılıkların giderilmesi, AR'nin sunduğu potansiyelin daha etkili bir şekilde kullanılmasını mümkün kılacaktır.

6. GELECEĞE YÖNELİK EĞİTİMLER VE ARAŞTIRMA ÖNERİLERİ

Kimya öğretiminde artırılmış gerçeklik (AR) teknolojisinin giderek artan bir şekilde kullanılması, bu alanda geleceğe yönelik araştırma ve uygulama eğilimlerini de gündeme getirmektedir. Mevcut çalışmalar, AR teknolojisinin etkili biçimde uygulanabilmesi için hem pedagojik hem teknik yönden geliştirilmesi gerektiğine işaret etmektedir. Özellikle Cai ve ark., (2014) tarafından önerildiği gibi, öğrenme sürecinde sesli yönlendirme gibi etkileşimli öğelerin artırılması, öğrencilerin uygulamalarda daha etkin rol almasını sağlayabilir. Aynı çalışmada, kontrol gruplu deneysel desenlerin yaygınlaştırılması ve uzun vadeli öğrenme çıktılarının ölçülmesi amacıyla gecikmeli son testlerin kullanılması önerilmektedir.

Khairani ve Prodjosantoso (2023) tarafından yapılan sistematik inceleme, AR'nin hâlen belirli kimya konularında (özellikle moleküler yapı ve organik kimya) yoğunlaştığını, buna karşın temel kimya yasaları, stökiyometri, çözeltiler, kimyasal denge ve tepkime hızları gibi konuların yeterince ele alınmadığını göstermektedir. Bu durum, AR teknolojisinin kimya eğitiminin

tüm alanlarında daha kapsayıcı biçimde uygulanması gerektiğine işaret etmektedir. Aynı zamanda öğretmenlerin teknolojik pedagojik alan bilgisi (TPACK) düzeylerinin artırılması, öğretmenlerin AR destekli içerik geliştirme becerilerinin desteklenmesi ve farklı öğrenme düzeylerinde etkili kullanımı için ölçeklenebilirlik araştırmalarının yapılması gerekliliği vurgulanmaktadır.

Low ve ark., (2022) tarafından yürütülen araştırma, öğrencilerin AR uygulamalarını geleneksel içeriklerin tamamlayıcısı olarak değerlendirdiğini ortaya koymuştur. Katılımcıların büyük çoğunluğu, bu teknolojinin ders içeriğine ek olarak sunulmasından memnuniyet duyduklarını ve değerlendirme süreçlerine entegrasyonunu desteklediklerini belirtmiştir. Bu doğrultuda, ilerleyen süreçte AR içeriklerinin sesli anlatım, 3B kayıtlar ve VR dönüşüm gibi teknolojilerle bütünleştirilmesi önerilmektedir. Böylece farklı öğrenme stillerine sahip öğrenciler için daha kapsayıcı öğrenme ortamları oluşturulabilecektir.

Sari ve ark., (2021) tarafından yapılan derlemede, AR teknolojisinin yalnızca kavramsal öğrenmeye değil, aynı zamanda eleştirel düşünme, yaratıcı düşünme ve karar verme gibi üst düzey bilişsel becerilere hizmet edecek şekilde yeniden tasarlanması gerektiği belirtilmiştir. Bunun sağlanabilmesi için yapılandırmacı öğrenme kuramı ile bütünleşen öğretim tasarımlarına ihtiyaç duyulmaktadır. Ayrıca, AR destekli öğrenme ortamlarının yalnızca laboratuvar simülasyonları değil, problem temelli öğrenme, oyunlaştırma ve deneysel öğrenme yaklaşımlarıyla da bütünleştirilmesi gerektiği ifade edilmiştir.

Fombona-Pascual ve ark., (2022), gelecekte AR teknolojisinin yapay zekâ, büyük veri ve bulut sistemleri gibi ileri teknolojilerle entegre edilerek öğretim süreçlerinin bireyselleştirilmesini sağlayabileceğini ileri sürmektedir. Bu tür

entegrasyonlar, öğrencilerin bireysel öğrenme hızlarına göre içerik sunumu yapılmasına ve öğrenme analitiği yoluyla öğretim süreçlerinin optimize edilmesine katkı sağlayacaktır. Ayrıca protein etkileşimleri ve moleküler yüzey simülasyonları gibi ileri düzey kimyasal konulara AR'nin entegrasyonu, bu teknolojinin lisansüstü düzeyde de kullanılabilirliğini artıracaktır.

Keller ve ark., (2021) tarafından yapılan çalışmada, AR'nin uzun vadeli öğrenme çıktıları üzerindeki etkisinin henüz yeterince araştırılmadığı, bu nedenle ileriye dönük çalışmaların büyük örneklemeler ve gecikmeli testler yoluyla kalıcılık etkilerini değerlendirmesi gerektiği ifade edilmiştir. Aynı zamanda, öğrencilerin mekânsal becerilerinin sürdürülebilir şekilde gelişip gelişmediğini ortaya koyan boylamsal araştırmalara da ihtiyaç duyulmaktadır.

Smith ve Friel (2021), öğretim elemanlarının ve öğrencilerin teknolojik yeterliklerini artırmaya yönelik yazılım eğitimlerinin planlanması gerektiğini vurgulamaktadır. Özellikle AR'nin öğretim tasarımlarına entegre edilebilmesi için sadece teknik altyapının değil, aynı zamanda pedagojik bakış açısının da güçlendirilmesi gerekmektedir.

Liu ve ark., (2023) tarafından geliştirilen üç katmanlı deneyimsel öğrenme modelinin diğer kimya konularına ya da farklı disiplinlere uyarlanabilirliği üzerine yeni çalışmalar önerilmektedir. Ayrıca, bu tür modellerin kavramsal gelişime olan etkilerinin sadece nicel değil, nitel verilerle de değerlendirilmesi gerektiği, bilgi entegrasyonuna dayalı kapsamlı analizlerin yapılmasının önem taşıdığı ifade edilmektedir.

Cheng ve ark., (2024), AR'nin farklı öğrenci gruplarına uyarlanabilirliğini artırmak üzere sistemlerin daha etkileşimli ve esnek hâle getirilmesi gerektiğini belirtmişlerdir. Özellikle kullanıcıların farklı el hareketleriyle sistemle iletişim

kurabilmesi, teknolojinin çoklu öğrenme yollarına hitap etmesini sağlayacaktır.

Macariu ve ark., (2020), sesli yanıt sistemlerinin (örneğin Amazon Alexa gibi) AR uygulamalarına entegre edilerek öğrenci katılımının artırılabilceğini ve bu tür sistemlerin fizik, biyoloji gibi diğer disiplinlerde de etkili biçimde kullanılabileceğini önermektedir. Bu yaklaşım, disiplinler arası geçişi kolaylaştırarak STEM alanlarında AR'nin yaygınlaştırılmasını destekleyecektir.

Yang ve ark., (2018) ise artırılmış gerçeklik destekli öğretimin öğretmen yetiştirme programlarına entegre edilmesi gerektiğini vurgulamışlardır. Özellikle öğretmen adaylarının pedagojik bilgi, alan bilgisi ve teknolojik bilgi bileşenlerini birlikte kullanabilecekleri öğretim içerikleri oluşturulması, etkili AR uygulamalarının geliştirilmesine katkı sağlayacaktır.

Son olarak, Abdinejad ve ark., (2021) ile Chen ve Liu (2020), gelecekte AR içeriklerinin işaretli (markerless), cihazlar arası uyumlu ve öğrencilerin çizimlerine duyarlı sistemlerle zenginleştirilmesi gerektiğini ifade etmişlerdir. Bu yönde yapılacak geliştirmeler, hem öğrenme süreçlerinin etkililiğini artıracak hem de AR uygulamalarının daha geniş öğrenci kitlesine ulaşmasını sağlayacaktır.

7. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME

Artırılmış gerçeklik teknolojisi, kimya öğretiminin karşılaştığı pek çok yapısal ve pedagojik zorluğu aşmada güçlü bir araç olarak öne çıkmaktadır. Öğrencilerin öğrenme süreçlerine aktif biçimde katılımını sağlayan, soyut kavramları somutlaştıran ve deneyim temelli öğrenmeyi destekleyen bu teknoloji, öğretim etkinliklerinin niteliğini artırmakta ve bireysel öğrenme farklarını gözeten esnek ortamlar sunmaktadır. Bununla birlikte, AR uygulamalarının sınıf içi entegrasyonunda

karşılaşılan teknik sınırlılıklar, erişim eşitsizlikleri ve pedagojik tasarım eksiklikleri de dikkatle ele alınmalı; öğretim tasarımları etik, erişilebilir ve sürdürülebilir bir bakış açısıyla yapılandırılmalıdır. Bu bölümde sunulan araştırma bulguları ve uygulama örnekleri, artırılmış gerçekliğin kimya eğitimi bağlamında nasıl daha etkili ve kapsayıcı biçimde kullanılabileceğine dair kapsamlı bir perspektif sunmakta; öğretmen eğitiminden müfredat tasarımına kadar geniş bir yelpazede katkı sağlamayı amaçlamaktadır.

KAYNAKÇA

- Abdinejad, M., Talaie, B., Qorbani, H. S. ve Dalili, S. (2021). Student perceptions using augmented reality and 3D visualization technologies in chemistry education. *Journal of Science Education and Technology*, 30(1), 87–96. <https://doi.org/10.1007/s10956-020-09880-2>
- Azuma, R. T. (1997). *A survey of augmented reality. Presence: Teleoperators and Virtual Environments*, 6(4), 355–385. <https://www.cs.unc.edu/~azuma/ARpresence.pdf>
- Cai, S., Wang, X. ve Chiang, F.-K. (2014). A case study of Augmented Reality simulation system application in a chemistry course. *Computers in Human Behavior*, 37, 31–40. <https://doi.org/10.1016/j.chb.2014.04.018>
- Chen, K., & Xue, F. (2021). The renaissance of augmented reality in construction: History, present status and future directions. *Smart and Sustainable Built Environment*, 11(3), 575–592. <https://doi.org/10.1108/SASBE-08-2020-0124>
- Chen, S.-Y. ve Liu, S.-Y. (2020). Using augmented reality to experiment with elements in a chemistry course. *Computers in Human Behavior*, 111, 106418. <https://doi.org/10.1016/j.chb.2020.106418>
- Cheng, Y., Lee, M. H., Yang, C. S. ve Wu, P. Y. (2024). Hands-on interaction in the augmented reality (AR) chemistry laboratories enhances the learning effects of low-achieving students: a pilot study. *Interactive Technology and Smart Education*, 21(1), 44–66. <https://doi.org/10.1108/ITSE-04-2022-0045>
- Fombona-Pascual, A., Fombona, J. ve Vicente, R. (2022). Augmented reality, a review of a way to represent and manipulate 3D chemical structures. *Journal of Chemical*

- Information and Modeling*, 62(8), 1863–1872.
<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c01255>
- Keller, S., Rumann, S. ve Habig, S. (2021). Cognitive load implications for augmented reality supported chemistry learning. *Information*, 12(3), 96.
<https://doi.org/10.3390/info12030096>
- Khairani, R. N. ve Prodjosantoso, A. K. (2023). Application of augmented reality on chemistry learning: A systematic review. *Jurnal Penelitian Pendidikan IPA*, 9(11), 1221–1228. <https://doi.org/10.29303/jppipa.v9i11.4412>
- Liu, Q., Ma, J., Yu, S., Wang, Q. ve Xu, S. (2023). Effects of an augmented reality-based chemistry experiential application on student knowledge gains, learning motivation, and technology perception. *Journal of Science Education and Technology*, 32(1), 153–167.
- Low, D. Y. S., Poh, P. E. ve Tang, S. Y. (2022). Assessing the impact of augmented reality application on students' learning motivation in chemical engineering. *Education for Chemical Engineers*, 39, 31–43.
<https://doi.org/10.1016/j.ece.2022.02.004>
- Macariu, C., Iftene, A. ve Gîfu, D. (2020). Learn chemistry with augmented reality. *Procedia Computer Science*, 176, 2133–2142. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2020.09.250>
- Marsh, A. (2021, November 1). *L. Frank Baum's cautionary tale about the gifts of electricity*. IEEE Spectrum. <https://spectrum.ieee.org/l-frank-baum> (Erişim tarihi: 11 Nisan 2025)
- Mazzuco, A., Krassmann, A. L., Reategui, E., & Gomes, R. S. (2022). A systematic review of augmented reality in chemistry education. *Review of Education*, 10, e3325. <https://doi.org/10.1002/rev3.3325>

- Nishihama, D., Takeuchi, T., Horiuchi, Y., Inoue, T., & Okada, K. (2010). ARChemistry: Building up augmented reality for learning chemical experiment. *International Journal of Informatics Society*, 2(2), 43–48. http://www.infsoc.org/journal/vol02/IJIS_02_2_043-048.pdf
- OpenAI. (2025). *Augmented reality concept visual created using DALL·E*. <https://openai.com/dall-e>
- Sari, I., Sinaga, P. ve Hernani. (2021). Augmented reality technology as a tool to support chemistry learning: A scoping review. *Journal of Physics: Conference Series*, 1806(1), 012191. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1806/1/012191>
- Smith, C., & Friel, C. J. (2021). Development and use of augmented reality models to teach medicinal chemistry. *Currents in Pharmacy Teaching and Learning*, 13(8), 1010–1017. <https://doi.org/10.1016/j.cptl.2021.06.008>
- Taçgın, Z., Uluçay, N., & Özüağ, E. (2021). Designing and developing an augmented reality application: A sample of chemistry education. *Journal of Technology and Computer Science in Chemistry*, 1(1), 147–164.
- Tarng, W., Tseng, Y.-C. ve Ou, K.-L. (2022). Application of augmented reality for learning material structures and chemical equilibrium in high school chemistry. *Systems*, 10(5), 141. <https://doi.org/10.3390/systems10050141>
- Yang, S., Mei, B. ve Yue, X. (2018). Mobile augmented reality assisted chemical education: Insights from Elements 4D. *Journal of Chemical Education*, 95(6), 1060–1062. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.8b00017>

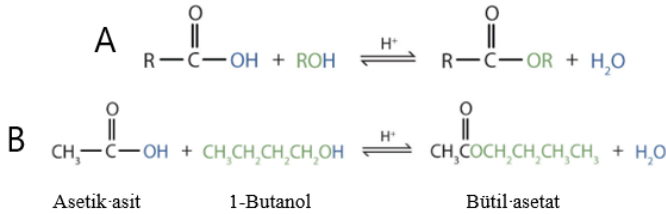
- Yılmaz, R. M., & Gökteş, Y. (2018). Using Augmented Reality Technology in Education. *Çukurova Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 47(2), 510-537.
- Zhou, Z., Oveissi, F., & Langrish, T. (2024). Applications of augmented reality (AR) in chemical engineering education: Virtual laboratory work demonstration to digital twin development. *Computers and Chemical Engineering*, 188, 108784. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108784>

MEYVE AROMALARININ KİMYASI: ESTER YAPILARI VE KOKU PROFİLLERİ

Zafer Ömer ÖZDEMİR¹

1. GİRİŞ

Meyve aromaları, hem doğrudan tüketilen gıdalarda hem de çeşitli endüstriyel ürünlerde (örneğin içecekler, tatlılar, sakızlar ve kozmetik formülasyonlar) algısal kaliteyi doğrudan etkileyen temel bileşenlerdir. Bu aromalar; tüketici tercihlerini, ürün kabulünü ve pazar başarısını büyük ölçüde belirler. Taze, tatlı ve karakteristik meyve kokularının önemli bir bölümü, uçucu organik bileşikler sınıfına giren esterlerden kaynaklanır (Abbas vd., 2023; Jiang & Wang, 2023; Schwab, Davidovich-Rikanati, & Lewinsohn, 2008). Esterler, karbonil grubuna bağlı bir alkol bileşeni içeren organik bileşiklerdir. Genel kimyasal formülleri $R-COO-R'$ şeklindedir; burada R bir alkil ya da aril grubunu, COO ise karboksilat fonksiyonel grubunu temsil eder. Bu yapısal özellik, esterlere kendine özgü koku ve uçuculuk özellikleri kazandırır.



Şekil 1. A Karboksilik asit ve alkol genel reaksiyonu, B Asetik asit ve 1-Butanol reaksiyonu ([https://chem.libretexts.org/11.2 Ester Oluşumu](https://chem.libretexts.org/11.2_Ester_Oluşumu))

¹ Doç. Dr., Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Hamidiye Eczacılık Fakültesi, ozdemirz@gmail.com, ORCID: 0000-0002-8362-3136.

Meyve aromalarının en yaygın ve belirleyici kimyasal sınıfı olan esterler, özellikle muz (izoamil asetat), ananas (etil butirat), çilek (etanol asetat), elma (bütanol asetat) gibi kokuların kaynağıdır. Bu bileşikler, genellikle kısa zincirli karboksilik asitlerin ve alkollerin asidik esterleşme reaksiyonları sonucu oluşur (Abouelenein vd., 2023; de Melo Pereira vd., 2019; El Hadi, Zhang, Wu, Zhou, & Tao, 2013; Zhang & Yin, 2023). Her esterin kendine özgü bir koku profili vardır ve bu profil, molekülün zincir uzunluğu, dallanma yapısı ve fonksiyonel gruplar gibi yapısal özelliklerinden doğrudan etkilenir. Bu nedenle, esterlerin kimyasal yapıları ile duyuşal özellikleri arasındaki ilişkilerin araştırılması, gıda aromaları kimyasında temel bir çalışma alanıdır.

Aroma bileşikleri yalnızca duyuşal haz sağlamaz; aynı zamanda kalite algısını şekillendiren ve ürünün pazar değerini artıran önemli faktörlerdir. Bu bileşiklerin analitik olarak tanımlanması, genellikle gaz kromatografisi-kütle spektrometrisi (GC-MS) ve duyuşal analiz teknikleri kullanılarak yapılır (Berćík, Neomániová, Muřinská, & Pšurný, 2022; Caille vd., 2023; de Melo Pereira vd., 2019; Ferrão vd., 2022; Issaoui vd., 2021). Yapı-koku ilişkisi (Structure–Odor Relationship, SOR) üzerine yapılan çalışmalar, moleküler düzeyde hangi deęişikliklerin hangi koku özellikleri ortaya çıkardığını anlamaya yöneliktir. Bu da hem yeni aroma tasarımlarında hem de sentetik aromaların geliştirilmesinde yol göstericidir.

Gıda sektörünün yanı sıra, ilaç endüstrisinde de ester bazlı meyve aromaları, özellikle pediatrik ve geriatrik formülasyonlarda büyük önem taşır. Çocuklara yönelik şuruplar, çiğneme tabletleri veya pastiller gibi ürünlerde doğal olmayan tadı ve kokuyu maskelemek amacıyla meyve aromaları eklenir. Etanol bazlı çözeltilerde esterlerin çözünürlüğü ve uçuculuğı, bu bileşiklerin aromatik stabilitesini artırır (Belali & Chaerunisaa, 2019; Faisal, Farag, Abdellatif, & Abbas, 2017; Sharma & Lewis,

2010; Wagh & Ghadlinge, 2009). Ayrıca bazı ester bileşikleri, hem aromatik özellik sunarken hem de taşıyıcı ya da yardımcı madde olarak görev yapabilir. Bu durum, ilaç formülasyonunda işlevsel çok yönlülük sağlar.

Sonuç olarak, meyve esterleri yalnızca gıdalarda değil; ilaç endüstrisinde de hasta uyumunu artırıcı ve algısal kaliteyi yükseltici önemli katkı maddeleri olarak kullanılmaktadır. Kimyasal yapılarının duyuusal etkilerle ilişkilendirilmesi, hem bilimsel hem de uygulamalı alanlarda derinlemesine incelenmeye devam etmektedir.

2. ESTERLERİN KOKU SINIFLANDIRILMASI

Ester bileşikleri, karbonil grubuna bağlı bir alkoksi grubunun yer aldığı organik moleküllerdir ve çoğunlukla hafif, tatlı, meyvemsi kokulara sahiptir. Bu koku profili, yapılarındaki alkil ve asil zincir uzunluğu ile dallanma derecesine doğrudan bağlıdır. Kısa zincirli esterler genellikle keskin, meyvemsi ve tatlı kokular üretirken, daha uzun zincirli ve dallanmış esterler daha yumuşak ve balmumsu notalar gösterebilir (Poivet vd., 2018).

Koku sınıflandırması yapılırken esterlerin algılanan kokuları, hem moleküler yapı hem de konsantrasyona bağlı olarak kategorize edilir. Örneğin, izoamil asetat (muz kokusu), etil bütirat (ananas kokusu), metil antranilat (üzüm kokusu) ve etil heksanoat (elma kokusu) gibi esterler, meyve aromalarının ana temsilcileri olarak bilinir. Bu bileşiklerin koku profili genellikle esterin alkol kısmının karbon sayısı ile doğrudan ilişkilidir. Karbon sayısı 2–6 arası olan esterler tipik olarak meyvemsi, 7–12 arasında olanlar daha çiçeksi veya yağlımsı olarak algılanır (Costello, Wiczorek, & Drabinska, 2023).

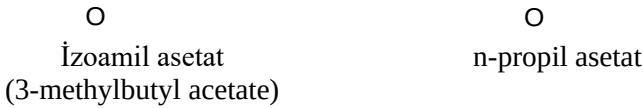
Günümüzde, koku sınıflandırmaları hem gaz kromatografisi–olfaktometri (GC–O) teknikleriyle hem de

eğitimli panelistler aracılığıyla duyuşal analizlerle desteklenmektedir. Bu sınıflamalar, gıda endüstrisinde aroma optimizasyonu ve doğal kaynaklardan aroma üretimi stratejilerinin geliştirilmesi için kritik bir rol oynar.

3. MOLEKÜLER YAPI-KOKU İLİŞKİSİ

Esterlerin koku özellikleri, yapılarındaki alkil ve asil grupların uzunluğu, dallanması, fonksiyonel grupların pozisyonu ve elektron yoğunluğu gibi faktörlerden etkilenmektedir. Özellikle karbon zinciri uzunluğu, doymamışlık derecesi ve fonksiyonel grup pozisyonları, molekülün uçuculuğunu ve reseptör etkileşimini belirleyerek koku profiline doğrudan yansır (Van Gemert, 2003).

Örneğin, etil asetat gibi kısa zincirli esterler yüksek uçuculukları sayesinde keskin ve tatlı kokular verirken; daha uzun zincirli esterlerde volatilité azalır, kokular daha yağlımsı ve balmumsu bir hal alır. İzooamil asetat ve n-propil asetat arasında yalnızca zincir yapısında görülen küçük bir fark bulunmasına rağmen, bu farklılık muz ve armut aromaları gibi oldukça ayrı koku profillerine yol açmaktadır.



Şekil 2. İzooamil asetat (3-methylbutyl acetate) ve n-propil asetat'ın kimyasal yapıları

Bu fark, molekülün koku reseptörlerine bağlanma şeklini etkileyen üç boyutlu yapısal uyumlulukla açıklanır (De Mello Castanho Amboni, Da Silva Junkes, Yunes, & Fonseca Heinzen, 2000; Feng vd., 2020; Rossiter, 2005; Rugard, Jaylet, Taboureau, Tromelin, & Audouze, 2021).

Yapı–koku ilişkisi çalışmaları genellikle 'structure–odor relationship' (SOR) analizleri ile gerçekleştirilir. Bu analizlerde, belirli bir kokuya sahip moleküllerin ortak yapısal motifleri incelenerek, bu yapıların hangi kokuları tetiklediği anlaşılır. Modern teknikler arasında, hesaplamalı moleküler modelleme ve koku reseptörü simülasyonları da yer almaktadır (Buck, L. B., Axel, 1992; Keller & Vosshall, 2016).

Bu bilgiler, yeni aroma maddelerinin tasarımında ve doğal kaynaklardan elde edilen uçucu bileşiklerin tanımlanmasında önemli rol oynar.

4. YAYGIN MEYVE ESTERLERİ VE KOKU PROFİLLERİ

Meyve aromalarının karakteristik profilleri, büyük oranda ester bileşiklerine dayanmaktadır. Bu esterler genellikle kısa zincirli alkol ve karboksilik asit kombinasyonlarından oluşur. Aşağıda yaygın meyve kokularına karşılık gelen bazı önemli esterler, yaygın adı, IUPAC adı ve aromatik özellikleriyle birlikte sunulmuştur:

Tablo 1. Ester Yapılı Uçucu Bileşikler ve Karakteristik Meyve Kokuları

Yaygın Adı	IUPAC Adı	Meyve Kokusu
İzoamil asetat	3-methylbutyl ethanoate	Muz
Etil bütirat	Ethyl butanoate	Ananas
Metil antranilat	Methyl 2-aminobenzoate	Üzüm
Etil heksanoat	Ethyl hexanoate	Elma
Metil butirat	Methyl butanoate	Çilek
Etil asetat	Ethyl ethanoate	Tatlı, meyvemsi
Butil asetat	Butyl ethanoate	Armut
Propil etanoat	Propyl ethanoate	Kiraz
Etil 2-metilbütanoat	Ethyl 2-methylbutanoate	Yeşil elma
İzoamyl bütirat	3-Methylbutyl butanoate	Kayısı
Metil salisilat	Methyl 2-hydroxybenzoate	Kış yeşili (wintergreen)

Bu esterler, meyvelerin olgunlaşması sırasında doğal olarak oluşur veya gıdalara aroma katkısı amacıyla sentetik olarak eklenebilir. Kokunun algılanması yalnızca kimyasal yapıya değil, aynı zamanda esterin konsantrasyonuna, matris içindeki diğer bileşiklerle etkileşimine ve tüketicinin duyuşsal algısına da bağılıdır (Fischer, 2007; Forney, Qiu, Jordan, Munro Pennell, & Fillmore, 2023; Klee, 2010; Lasekan, Hashim, & Lasekan, 2022; Schwieterman vd., 2014).

5. KOKUYA ETKİ EDEN YAPISAL FAKTÖRLER

Esterlerin koku özelliklerini belirleyen başlıca yapısal faktörler arasında karbon zinciri uzunluğu, dallanma, fonksiyonel grupların pozisyonu, doymamışlık derecesi ve molekülün genel konformasyonu yer alır. Bu faktörler, esterin volatilitesini, hidrofobikliğini ve reseptörlerle olan etkileşim kabiliyetini doğrudan etkiler (Abraham, Sánchez-Moreno, Cometto-Muñiz, & Cain, 2007; Liu vd., 2022).

Örneğin, dallanmış zincirli esterler genellikle daha keskin ve belirgin kokular üretirken, düz zincirli homologları daha yumuşak ve tatlı aromalar verir. Aynı zamanda, cis-trans izomerliği de koku algı üzerinde etkili olabilir; örneğin cis-3-heksenil asetat yeşil yaprak kokusu verirken, trans izomeri daha hafif ve çiçeksi algılanır.

Zincir uzunluğu arttıkça molekülün uçuculuğu genellikle azalır, bu da kokunun yoğunluğunu ve yayılma hızını azaltabilir. Ancak bu azalma bazı durumlarda daha kalıcı ve 'alt notalar' şeklinde algılanan kokular oluşturur. Ayrıca, fonksiyonel grup pozisyonları da koku reseptörlerine bağlanma şeklini ve kokuya neden olan uyarım şiddetini etkileyebilir (Belhassan, Chtita, Lakhli, & Bouachrine, 2017).

Bu yapısal faktörlerin kombinasyonu, belirli bir esterin duyuşal profilini belirler. Bu nedenle yeni aroma bileşikleri tasarlanırken, yalnızca fonksiyonel grupları değil, aynı zamanda molekülün üç boyutlu yapısı ve dinamik özellikleri dikkate alınmalıdır.

6. DUYUSAL ANALİZ VE AROMA OPTİMİZASYONUNDA ESTERLERİN ROLÜ

Ester bileşiklerinin duyuşal analizleri, aroma maddelerinin etkili biçimde karakterize edilmesinde kritik öneme sahiptir. Bu analizler genellikle eğitimli panelistler aracılığıyla yapılan üçgen testler, tanımlayıcı analizler (DA) ve aroma profileme yöntemleriyle gerçekleştirilir. Bu yöntemler, esterin hem yoğunluğunu hem de koku karakterini değerlendirmek için kullanılır (Heymann, 1981; Kilcast, 1998; Lawless & Heymann, 2010).

Gaz kromatografisi-olfaktometri (GC-O) analitik ve duyuşal yöntemlerin birleştirilmiş halidir ve esterin koku katkısının belirlenmesinde önemli bir araçtır.

Gaz kromatografisi-olfaktometri (GC-O), uçucu bileşiklerin kimyasal analizini insan duyuşal algısıyla birleştiren bir tekniktir. Bu yöntem, gaz kromatografisinde ayrıştırılan bileşiklerin kokusal etkilerini doğrudan değerlendirmek amacıyla insan panelistlerin, dedektör çıkışına bağlı bir olfaktometrik port üzerinden koklamasına dayanır. Böylece hem bileşiğin kimliği hem de algılanan kokusu eşzamanlı olarak saptanabilir. GC-O, özellikle aroma bileşenlerinin belirlenmesi, kokusal katkısı düşük olan ancak algı eşiği düşük bileşiklerin tespiti ve koku profili oluşturmada büyük önem taşır (Dellacassa & Minteguiga, 2024; Ma, Xu, & Tang, 2024).

Özellikle meyve özütlerinde bulunan çok sayıdaki ester arasında, yalnızca düşük eşik değere sahip olanların gerçek aroma etkisi oluşturduğu belirlenebilir (d'Acampora Zellner, Dugo, Dugo, & Mondello, 2008; De-La-fuente-blanco & Ferreira, 2020; Gong vd., 2017; Sasaki vd., 2017; Van Ruth, 2001).

Aroma optimizasyonu, genellikle belirli bir tat veya koku profiline ulaşmak için esterlerin karışım oranlarının değiştirilmesini veya yeni ester bileşiklerinin sentezlenmesini içerir. Bu optimizasyon süreci, duyuusal test sonuçlarının istatistiksel analizleriyle yönlendirilir. Örneğin, üzüm aromalı bir içecek geliştirirken metil antranilat oranı %0.02'den %0.05'e çıkarıldığında, tüketici beğenisinde anlamlı bir artış elde edilebilmektedir (Guth, 1997).

Bu tür uygulamalar, sadece gıda sektöründe değil, kozmetik, parfümeri ve aromaterapi alanlarında da büyük önem taşımaktadır. Bu nedenle esterlerin duyuusal analizleri ve bunlara bağlı optimizasyon stratejileri, aromatik formülasyon geliştirme süreçlerinde temel bir yapı taşıdır.

7. GENEL DEĞERLENDİRME VE GELECEK PERSPEKTİFLERİ

Ester bileşikleri, meyve aromalarının karakteristik özelliklerini belirleyen temel kimyasal gruplardan biridir. Bu bileşiklerin yapısal farklılıkları, uçuculukları, koku eşik değerleri ve reseptör etkileşimleri sayesinde oldukça çeşitli koku profilleri oluşturabildiği görülmektedir. Giriş bölümünde ele alındığı üzere, esterlerin meyve aromalarındaki ağırlığı yalnızca duyuusal etkiyle sınırlı kalmamakta; aynı zamanda ürün kalitesi, tüketici tercihleri ve pazarlama stratejileri üzerinde de belirleyici bir rol üstlenmektedir.

Bu bölümde ele alınan yaygın ester örnekleri, moleküler yapı-koku ilişkileri ve yapıdaki küçük değişimlerin duyuşal etkileri üzerindeki sonuçlar, hem temel aroma bilimi araştırmalarına hem de endüstriyel ürün geliştirme süreçlerine önemli katkılar sunmaktadır. Özellikle GC-O (Gaz Kromatografisi-Olfaktometri) ve duyuşal analiz tekniklerinin birlikte kullanımı, doğal veya sentetik esterlerin koku değeriinin daha doğru belirlenmesini sağlamaktadır.

Esterlerin bu geniş kullanım potansiyeli, ilaç kimyası alanında da kendini göstermektedir. Özellikle çocuklara ve yaşlılara yönelik farmasötik formülasyonlarda tat ve koku, ilacın kullanım kolaylığını ve hasta uyumunu doğrudan etkilemektedir. Bu nedenle birçok şurup, pastil ve çiğneme tableti, içerdikleri etkin maddelerin acı veya metalik tadını maskelemek amacıyla meyve aromalarıyla zenginleştirilir. İzöamil asetat (muz aroması), etil butirat (ananas aroması) gibi esterler bu amaçla yaygın şekilde kullanılmaktadır. Ayrıca bazı esterler yalnızca yardımcı madde olarak değil, aynı zamanda ilaç etkisini doğrudan etkileyen prodrug (ön ilaç) yapılarında da yer alabilir. Ester bağları, organizmadaki enzimatik reaksiyonlarla parçalanarak aktif forma dönüşebilen ilaç sistemlerinin geliştirilmesinde kullanılır. Örneğin, aspirin (asetilsalisilik asit), karboksilik asit grubunun esteri olup vücutta hidrolizle aktif salisilik asit formuna dönüşmektedir. Bu tür ester yapılar, farmakokinetik parametreleri iyileştirmek, biyoyararlanımı artırmak veya kontrollü salım sağlamak gibi çeşitli avantajlar sunar (Rautio vd., 2008; Stella & Nti-Addae, 2007; Testa & Mayer, 2006; Xiao vd., 2023).

Gelecekte, aroma tasarımında biyoteknolojik yaklaşımların daha yaygın hale gelmesi beklenmektedir. Enzimatik sentez yolları, fermentatif üretim teknikleri ve genetik mühendislikle optimize edilmiş aroma üretimi, sürdürülebilir ve doğal kaynaklı esterlere olan ilgiyi artıracaktır (Ben Akacha &

Gargouri, 2015; Felipe, Oliveira, & Bicas, 2017; Sales, Paulino, Pastore, & Bicas, 2018; Soares-Castro, Soares, & Santos, 2021).

Sonuç olarak, esterlerin kimyasal özelliklerinin duysal etkilerle ilişkilendirilmesi, hem akademik arařtırmalar hem de gıda, kozmetik, parfümeri ve ilaç gibi uygulamalı sektörler için stratejik bir öneme sahiptir. Bu bilgiler ışığında, yeni nesil aroma ve ilaç formülasyonlarının daha etkin, doğal ve tüketici odaklı biçimde geliştirilmesi mümkündür.

KAYNAKÇA

- Abbas, F., Zhou, Y., O'Neill Rothenberg, D., Alam, I., Ke, Y., & Wang, H. C. (2023). Aroma Components in Horticultural Crops: Chemical Diversity and Usage of Metabolic Engineering for Industrial Applications. *Plants*, C. 12. <https://doi.org/10.3390/plants12091748>
- Abouelenein, D., Acquaticci, L., Alessandroni, L., Borsetta, G., Caprioli, G., Mannozi, C., ... Mustafa, A. M. (2023). Volatile Profile of Strawberry Fruits and Influence of Different Drying Methods on Their Aroma and Flavor: A Review. *Molecules*, C. 28. <https://doi.org/10.3390/molecules28155810>
- Abraham, M. H., Sánchez-Moreno, R., Cometto-Muñiz, J. E., & Cain, W. S. (2007). A quantitative structure-activity analysis on the relative sensitivity of the olfactory and the nasal trigeminal chemosensory systems. *Chemical Senses*, 32(7). <https://doi.org/10.1093/chemse/bjm038>
- Belali, N. G., & Chaerunisaa, A. Y. (2019). Solvent Evaporation as an Efficient Microencapsulating Technique for Taste Masking in Fast Disintegrating Oral Tablets. *Indonesian Journal of Pharmaceuics*, 1(3). <https://doi.org/10.24198/idjp.v1i3.23491>
- Belhassan, A., Chtita, S., Lakhlifi, T., & Bouachrine, M. (2017). QSPR study of the retention/release property of odorant molecules in water using statistical methods. *Orbital*, 9(4). <https://doi.org/10.17807/orbital.v9i4.978>
- Ben Akacha, N., & Gargouri, M. (2015). Microbial and enzymatic technologies used for the production of natural aroma compounds: Synthesis, recovery modeling, and bioprocesses. *Food and Bioproducts Processing*, C. 94. <https://doi.org/10.1016/j.fbp.2014.09.011>

- Berčík, J., Neomániová, K., Mušínská, K., & Pšurný, M. (2022). Use of Consumer Neuroscience in the Choice of Aromatisation as Part of the Shopping Atmosphere and a Way to Increase Sales Volume. *Applied Sciences (Switzerland)*, 12(14).
<https://doi.org/10.3390/app12147069>
- Buck, L. B., Axel, R. (1992). A novel multigene family may encode odorant receptors. *Society of General Physiologists series*, 47.
- Caille, C., Boukraâ, M., Rannou, C., Villière, A., Catanéo, C., Lethuaut, L., ... Prost, C. (2023). Analysis of Volatile Compounds in Processed Cream Cheese Models for the Prediction of “Fresh Cream” Aroma Perception. *Molecules*, 28(20).
<https://doi.org/10.3390/molecules28207224>
- Costello, B. de L., Wieczorek, M. N., & Drabinska, N. (2023). Editorial: The use of volatile compounds analysis for the assessment of food and beverage quality. *Frontiers in Nutrition*, C. 10.
<https://doi.org/10.3389/fnut.2023.1250634>
- d’Acampora Zellner, B., Dugo, P., Dugo, G., & Mondello, L. (2008). Gas chromatography-olfactometry in food flavour analysis. *Journal of Chromatography A*, C. 1186.
<https://doi.org/10.1016/j.chroma.2007.09.006>
- De Mello Castanho Amboni, R. D., Da Silva Junkes, B., Yunes, R. A., & Fonseca Heinzen, V. E. (2000). Quantitative structure - Odor relationships of aliphatic esters using topological indices. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 48(8). <https://doi.org/10.1021/jf991039u>
- de Melo Pereira, G. V., de Carvalho Neto, D. P., Magalhães Júnior, A. I., Vásquez, Z. S., Medeiros, A. B. P.,

- Vandenberghe, L. P. S., & Soccol, C. R. (2019). Exploring the impacts of postharvest processing on the aroma formation of coffee beans – A review. *Food Chemistry*, C. 272. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.08.061>
- De-La-fuente-blanco, A., & Ferreira, V. (2020). Gas chromatography olfactometry (Gc-o) for the (semi)quantitative screening of wine aroma. *Foods*, C. 9. <https://doi.org/10.3390/foods9121892>
- Dellacassa, E., & Minteguiaga, M. A. (2024). Gas Chromatography-Olfactometry (GC-O) of Essential Oils and Volatile Extracts. İçinde *Essential Oils: Extraction Methods and Applications*. <https://doi.org/10.1002/9781119829614.ch21>
- El Hadi, M. A. M., Zhang, F. J., Wu, F. F., Zhou, C. H., & Tao, J. (2013). Advances in fruit aroma volatile research. *Molecules*, C. 18. <https://doi.org/10.3390/molecules18078200>
- Faisal, W., Farag, F., Abdellatif, A. A. H., & Abbas, A. (2017). Taste Masking Approaches for Medicines. *Current Drug Delivery*, 15(2). <https://doi.org/10.2174/1567201814666171013145958>
- Felipe, L. de O., Oliveira, A. M. de, & Bicas, J. L. (2017). Bioaromas – Perspectives for sustainable development. *Trends in Food Science and Technology*, C. 62. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2017.02.005>
- Feng, T., Hu, Z., Chen, L., Chen, D., Wang, X., Yao, L., ... Wang, H. (2020). Quantitative structure-activity relationships (QSAR) of aroma compounds in different aged Huangjiu. *Journal of Food Science*, 85(10). <https://doi.org/10.1111/1750-3841.15421>

- Ferrão, L. F. V., Sater, H., Lyrene, P., Amadeu, R. R., Sims, C. A., Tieman, D. M., & Munoz, P. R. (2022). Terpene volatiles mediates the chemical basis of blueberry aroma and consumer acceptability. *Food Research International*, 158. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.111468>
- Fischer, U. (2007). Flavours and Fragrances: Chemistry, Bioprocessing and Sustainability. İçinde *Flavours and Fragrances: Chemistry, Bioprocessing and Sustainability*.
- Forney, C. F., Qiu, S., Jordan, M. A., Munro Pennell, K., & Fillmore, S. (2023). Impact of species, growing location and cultivar on flavor chemistry of blueberry fruit. *Acta Horticulturae*, 1357. <https://doi.org/10.17660/ActaHortic.2023.1357.29>
- Gong, X., Han, Y., Zhu, J. C., Hong, L., Zhu, D., Liu, J. H., ... Xiao, Z. B. (2017). Identification of the aroma-active compounds in Longjing tea characterized by odor activity value, gas chromatography- olfactometry, and aroma recombination. *International Journal of Food Properties*, 20. <https://doi.org/10.1080/10942912.2017.1336719>
- Guth, H. (1997). Quantitation and Sensory Studies of Character Impact Odorants of Different White Wine Varieties. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 45(8). <https://doi.org/10.1021/jf970280a>
- Heymann, H. T. L. · H. (1981). Sensory Evaluation of Food Principles and Practices Second Edition. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 53(9).
- Issaoui, M., Delgado, A. M., Caruso, G., Micali, M., Barbera, M., Atrous, H., ... Chammem, N. (2021). Phenols, flavors, and the mediterranean diet. *Journal of AOAC*

- International*, 103(4).
<https://doi.org/10.1093/JAOCINT/QSZ018>
- Jiang, H., & Wang, X. (2023). Biosynthesis of monoterpenoid and sesquiterpenoid as natural flavors and fragrances. *Biotechnology Advances*, C. 65.
<https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2023.108151>
- Keller, A., & Vosshall, L. B. (2016). Olfactory perception of chemically diverse molecules. *BMC Neuroscience*, 17(1).
<https://doi.org/10.1186/s12868-016-0287-2>
- Kilcast, D. (1998). Sensory evaluation of food—Principles and practices 1998. *Food Quality and Preference*, 9(4).
[https://doi.org/10.1016/s0950-3293\(98\)00004-4](https://doi.org/10.1016/s0950-3293(98)00004-4)
- Klee, H. J. (2010). Improving the flavor of fresh fruits: Genomics, biochemistry, and biotechnology. *New Phytologist*, C. 187. <https://doi.org/10.1111/j.1469-8137.2010.03281.x>
- Lasekan, O., Hashim, N., & Lasekan, A. (2022). Flavour chemistry of dehydrated exotic fruits. *International Food Research Journal*, 29(6).
<https://doi.org/10.47836/ifrj.29.6.03>
- Lawless, H. T., & Heymann, H. (2010). Sensory evaluation of food: principles of good practice. İçinde *Sensory Evaluation of Food*.
- Liu, Y., Xi, H., Fu, Y., Li, P., Sun, S., & Zong, Y. (2022). Effects of Organic Acids on the Release of Fruity Esters in Water: An Insight at the Molecular Level. *Molecules*, 27(9). <https://doi.org/10.3390/molecules27092942>
- Ma, Y., Xu, Y., & Tang, K. (2024). Molecular descriptors of icewine odorants: A first insight into their relationship with metabolism and olfactory perception. *Journal of*

- Food Science*, 89(2). <https://doi.org/10.1111/1750-3841.16914>
- Poivet, E., Tahirova, N., Peterlin, Z., Xu, L., Zou, D. J., Acree, T., & Firestein, S. (2018). Functional odor classification through a medicinal chemistry approach. *Science Advances*, 4(2). <https://doi.org/10.1126/sciadv.aao6086>
- Rautio, J., Kumpulainen, H., Heimbach, T., Oliyai, R., Oh, D., Järvinen, T., & Savolainen, J. (2008). Prodrugs: Design and clinical applications. *Nature Reviews Drug Discovery*, 7. <https://doi.org/10.1038/nrd2468>
- Rossiter, K. (2005). Quantitative relationships between structure and the fruity odor of esters. *Perfumer and Flavorist*, 21.
- Rugard, M., Jaylet, T., Taboureau, O., Tromelin, A., & Audouze, K. (2021). Smell compounds classification using UMAP to increase knowledge of odors and molecular structures linkages. *PLoS ONE*, 16(5 May). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0252486>
- Sales, A., Paulino, B. N., Pastore, G. M., & Bicas, J. L. (2018). Biogenesis of aroma compounds. *Current Opinion in Food Science*, 19. <https://doi.org/10.1016/j.cofs.2018.03.005>
- Sasaki, T., Koshi, E., Take, H., Michihata, T., Maruya, M., & Enomoto, T. (2017). Characterisation of odorants in roasted stem tea using gas chromatography–mass spectrometry and gas chromatography–olfactometry analysis. *Food Chemistry*, 220. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.09.208>
- Schwab, W., Davidovich-Rikanati, R., & Lewinsohn, E. (2008). Biosynthesis of plant-derived flavor compounds. *Plant Journal*, 54. <https://doi.org/10.1111/j.1365-313X.2008.03446.x>

- Schwieterman, M. L., Colquhoun, T. A., Jaworski, E. A., Bartoshuk, L. M., Gilbert, J. L., Tieman, D. M., ... Clark, D. G. (2014). Strawberry flavor: Diverse chemical compositions, a seasonal influence, and effects on sensory perception. *PLoS ONE*, 9(2). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0088446>
- Sharma, S., & Lewis, S. (2010). Taste masking technologies: A review. *International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*, C. 2.
- Soares-Castro, P., Soares, F., & Santos, P. M. (2021). Current advances in the bacterial toolbox for the biotechnological production of monoterpene-based aroma compounds. *Molecules*, C. 26. <https://doi.org/10.3390/MOLECULES26010091>
- Stella, V. J., & Nti-Addae, K. W. (2007). Prodrug strategies to overcome poor water solubility. *Advanced Drug Delivery Reviews*, C. 59. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2007.05.013>
- Testa, B., & Mayer, J. M. (2006). Hydrolysis in drug and prodrug metabolism: Chemistry, biochemistry, and enzymology. İçinde *Hydrolysis in Drug and Prodrug Metabolism: Chemistry, Biochemistry, and Enzymology*. <https://doi.org/10.1002/9783906390444>
- Van Gemert, L. J. (2003). Odour thresholds. *Compilations of odour threshold values in air, water and other media*.
- Van Ruth, S. M. (2001). Methods for gas chromatography-olfactometry: A review. *Biomolecular Engineering*, C. 17. [https://doi.org/10.1016/S1389-0344\(01\)00070-3](https://doi.org/10.1016/S1389-0344(01)00070-3)
- Wagh, V. D., & Ghadlinge, S. V. (2009). Taste Masking Methods and Techniques in Oral Pharmaceuticals:

Current Perspectives. *Journal of Pharmacy Research*, 2(6).

Xiao, Z. P., Liao, M., Huang, X. J., Wang, Y. T., Lan, X. C., Wang, X. Y., & Li, X. T. (2023). Design, synthesis and evaluation of a series of potential prodrugs of a Bruton's tyrosine kinase (BTK) inhibitor. *Frontiers in Pharmacology*, 14. <https://doi.org/10.3389/fphar.2023.1162216>

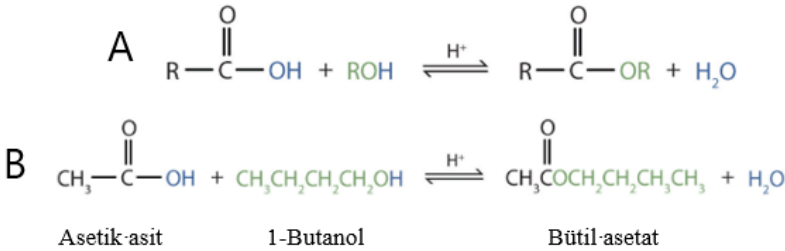
Zhang, Z., & Yin, Z. (2023). The Aroma Volatile in 'Nanguo' Pear: A Review. *Horticulturae*, C. 9. <https://doi.org/10.3390/horticulturae9030339>

MEYVE AROMALARININ KİMYASI: ESTER YAPILARI VE SENTEZİ

Zafer Ömer ÖZDEMİR¹

1. GİRİŞ

Ester bileşikler, meyve aromalarının temel yapı taşlarından biridir ve gıda, kozmetik, parfümeri ve ilaç sanayii gibi birçok sektörde yüksek katma değerli bileşenler olarak kullanılmaktadır. Bu bileşikler genellikle karakteristik meyvemsi, çiçeksi ya da tatlı kokularıyla tanınır ve tüketici tercihlerinde belirleyici rol oynarlar. Esterlerin kimyasal yapısı, bir karboksilik asidin bir alkolle yaptığı kondensasyon tepkimesi sonucu oluşur. Bu yapı, hem doğal yollarla hem de sentetik olarak üretilbilme esnekliği ile dikkat çeker (Lee & Trinh, 2020; Schwab, Davidovich-Rikanati, & Lewinsohn, 2008).



Şekil 1. A Karboksilik asit ve alkol genel reaksiyonu, B Asetik asit ve 1-Butanol reaksiyonu ([https://chem.libretexts.org/11.2 Ester Oluşumu](https://chem.libretexts.org/11.2%20Ester%20Oluşumu))

¹ Doç. Dr., Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Hamidiye Eczacılık Fakültesi, ozdemirz@gmail.com, ORCID: 0000-0002-8362-3136.

Doğal olarak meyve dokularında oluşan esterler, genellikle enzimatik yollarla sentezlenir. Bu süreçler, lipaz gibi biyokatalizörlerin yardımıyla gerçekleşir ve biyoteknolojik uygulamalarda sürdürülebilir, çevre dostu sentez yolları açısından büyük potansiyele sahiptir. Örneğin elma, muz, çilek ve üzüm gibi yaygın meyvelerin aroma profillerinde önemli miktarda ester bulunur. Bu esterlerin biyosentezi, bitkideki metabolik yollarla yakından ilişkilidir ve çevresel faktörlerden etkilenebilir (Aprea, Biasioli, & Gasperi, 2015; Li vd., 2023; Rowan, 2011; Yu vd., 2023).

Endüstriyel ölçekte ester üretimi, geleneksel olarak kimyasal sentez yöntemleriyle gerçekleştirilir. Bu yöntemler, karboksilik asit ve alkollerin asit katalizörleri eşliğinde ısıtılmasıyla gerçekleşen Fischer esterifikasyonu başta olmak üzere, çeşitli klasik tepkimelere dayanır. Ancak bu yöntemler genellikle yüksek enerji gereksinimi, çevreye zararlı yan ürünlerin oluşumu ve saflaştırma zorlukları gibi dezavantajlar taşır. Bu nedenle yeşil kimya ilkeleri çerçevesinde daha çevreci üretim süreçlerine yönelik araştırmalar artmıştır (Sheldon, 2017).

Burada, meyve esterlerinin sentez yolları ele alınacak; doğal ve sentetik üretim teknikleri, biyoteknolojik gelişmeler, reaksiyon koşulları ve kullanılan katalizörler açısından karşılaştırmalı bir değerlendirme sunulacaktır. Aynı zamanda elde edilen esterlerin karakterizasyonunda kullanılan modern analitik teknikler de incelenerek, sentezden kalite kontrol süreçlerine kadar olan zincir bütüncül bir bakış açısıyla aktarılacaktır.

2. DOĞAL ESTER BİYOSENTEZ YOLLARI

Meyve ve bitki dokularında ester bileşiklerinin biyosentezi, temel olarak ikincil metabolit yolları aracılığıyla gerçekleşir. Bu süreçlerde enzimler, özellikle alkol

asetiltransferazlar (AAT'ler), anahtar rol oynar. AAT enzimleri, çeşitli alkollerin ve asetil-CoA'nın birleşerek esterlere dönüşmesini katalizler. Bu reaksiyonlar genellikle meyve olgunlaşması sırasında hız kazanır ve farklı meyve türlerinde spesifik ester profilleri oluşur (Mayobre vd., 2024; Singh, Srivastava, & Sane, 2013).

Örneğin elma (*Malus domestica*) ve çilek (*Fragaria × ananassa*) gibi meyvelerde AAT aktivitesi meyvenin aromatik profiline doğrudan etki eder. Elmalarda 2-metilbütanol ve etanol gibi kısa zincirli alkoller, asetil-CoA ile birleşerek karakteristik meyvemsi kokular veren esterleri oluşturur. Benzer şekilde, çileklerde C6–C8 arası alkollerin esterleşmesiyle hoş, çiçeksi kokular meydana gelir (Pott, Osorio, & Vallarino, 2019).

Ayrıca lipid yıkımı sonucu ortaya çıkan alifatik asitler ve bunların alkol türevleri de ester sentezinde rol oynar. Lipoksijenaz (LOX) ve alkol dehidrogenaz (ADH) gibi enzimlerle başlayan lipid yıkım zinciri, aroma öncüllerinin üretimi için kritik öneme sahiptir. Bu zincirin sonunda oluşan alkol ve asitlerin AAT tarafından esterleştirilmesiyle karakteristik aroma bileşikleri sentezlenmiş olur (Schwab vd., 2008).

Biyosentez yolları sadece enzimlerin varlığıyla değil, meyvenin genetik yapısı, çevresel koşullar (sıcaklık, ışık, besin) ve olgunluk düzeyiyle de kontrol edilir. Bu nedenle aromatik kalite, aynı türün farklı çeşitlerinde ya da farklı yetiştirme koşullarında önemli farklılıklar gösterebilir. Genetik mühendislik ve genom düzenleme teknikleriyle, yüksek ester üretimli hatlar geliştirmek mümkün hale gelmiştir (Farneti vd., 2017; Hinge vd., 2022; Zorrilla-Fontanesi vd., 2012).

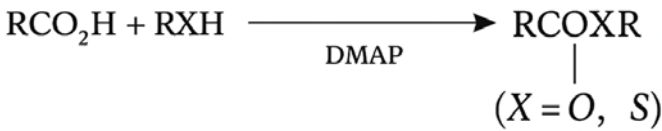
Doğal ester biyosentezi, sürdürülebilir aroma üretimi ve sağlıklı gıda tasarımları açısından büyük önem taşımakta; bu doğal yollar, aynı zamanda tüketici beklentilerine uygun “doğal

aroma” etiketli ürünlerin üretiminde vazgeçilmez hale gelmektedir.

3. ENDÜSTRİYEL ESTER SENTEZİ: KİMYASAL VE ENZİMATİK YÖNTEMLER

Ester üretimi, gıda ve parfümeri endüstrilerinde aroma maddesi temini açısından kritik öneme sahiptir. Endüstriyel üretimde en yaygın yaklaşım, kimyasal sentez ve biyokatalitik (enzimatik) yöntemlerdir. Her iki yöntemin de avantajları ve sınırlamaları bulunmaktadır.

Kimyasal Sentez: En geleneksel yöntem, Fischer esterifikasyonu olarak bilinir. Şekil 1 de verilen reaksiyon Fischer esterifikasyonudur. Bu yöntemde bir karboksilik asit ile bir alkol, genellikle H₂SO₄ (sülfürik asit) gibi güçlü bir asit katalizör eşliğinde ısıtılarak ester oluşturur. Bu reaksiyon yüksek verim sağlar ancak yan ürünlerin oluşumu, enerji tüketimi ve saflaştırma zorlukları gibi dezavantajlar taşır. Diğer yaygın yöntemler arasında Steglich esterifikasyonu ve dizi reaksiyonlarla gerçekleştirilen asidik klorürlerin alkol ile tepkimesi de yer alır (Khan vd., 2021; Neises & Steglich, 1978).



Şekil 2. Steglich Esterleşme reaksiyonu

Steglich Esterleşme reaksiyonu karboksilik asitlerin alkol veya tiol gruplarıyla, hafif ve kontrollü koşullarda reaksiyona sokularak esterlere veya tioesterlere dönüştürülmesini sağlayan verimli bir organik sentez yöntemidir. Bu yöntem, klasik Fischer esterifikasyonundan farklı olarak yüksek sıcaklık, güçlü asit katalizörleri veya uzun süreli ısıtmaya ihtiyaç duymaz. Oda sıcaklığında gerçekleştirilebilmesi, özellikle ısıya ve aside duyarlı

bileşiklerle çalışırken önemli bir avantaj sağlar. DMAP (4-Dimetilaminopiridin) güçlü bir nükleofilik katalizör olarak kullanılır.

Enzimatik Sentez: Biyokatalizör olarak en sık kullanılan enzimler lipazlardır (özellikle *Candida antarctica* lipaz B). Bu yöntem, daha düşük sıcaklık ve nötr pH koşullarında çalışarak çevresel dostluk sağlar. Enzimatik yöntemler ayrıca stereo-selektivite ve ürün seçiciliği açısından üstünlük sağlar. Örneğin, doğal kaynaklı yağ asitleri ve kısa zincirli alkollerden esterin üretimi lipaz ile yüksek verimle sağlanabilir (Divakar & Manohar, 2007; Sun, Lee, & Liu, 2014).

Enzimatik sentez, aynı zamanda çözücüsüz ortamlarda veya alternatif 'green solvent' sistemlerinde de uygulanabilmektedir. Bu sayede çevre dostu bir üretim süreci sağlanırken, aroma bileşiklerinin “doğal” olarak sınıflandırılmasına olanak tanınır. Ayrıca, lipazlar immobilize edilerek tekrar tekrar kullanılabilir, bu da üretim maliyetlerini düşürür ve prosesi ekonomik hale getirir (Gotor-Fernández, Busto, & Gotor, 2006).

Bu bağlamda, endüstriyel ester üretiminde kullanılan yöntemlerin seçimi; hedef bileşiğin saflık gerekliliği, kullanılacak hammaddelerin doğallığı, enerji tüketimi ve çevresel sürdürülebilirlik gibi faktörlere bağlı olarak optimize edilir. Giderek artan tüketici bilinci ve “temiz etiket” (clean label) talepleri, enzimatik üretim teknolojilerinin önemini daha da artırmaktadır.

4. YEŞİL KİMYA YAKLAŞIMLARI İLE ESTER ÜRETİMİ

Günümüzde sürdürülebilir üretim hedefi doğrultusunda, yeşil kimya yaklaşımları ester sentezinde ön plana çıkmaktadır.

Geleneksel yöntemlerde kullanılan organik çözücüler, enerji yoğun koşullar ve çevresel atık problemleri, daha çevreci alternatiflerin geliştirilmesini zorunlu kılmıştır. Bu çerçevede, çözücüsüz reaksiyon sistemleri, alternatif yeşil çözücüler (örneğin su, etanol, süperkritik CO₂) ve enzim-katalizli reaksiyonlar önemli avantajlar sunmaktadır (Anastas & Warner, 1998; De Carvalho & Da Fonseca, 2019; Hernández-Fernández, De Los Ríos, Lozano-Blanco, & Godínez, 2010; Hernández-Fernández vd., 2010; Itoh, 2017; Sheldon, 2017; Yang & Huang, 2012).

Biyoteknolojik Üretim ve Mikrobiyal Esterifikasyon: Son yıllarda, genetik olarak modifiye edilmiş mikroorganizmalar aracılığıyla ester üretimi yönelik çalışmalar artmıştır. Özellikle *Escherichia coli*, *Saccharomyces cerevisiae* ve *Yarrowia lipolytica* gibi mikroplar, doğal veya modifiye edilmiş enzim sistemleri sayesinde ester üretebilmektedir. Bu mikroorganizmalar, glikoz, gliserol veya yağ asidi gibi yenilenebilir substratlardan ester sentezi yapabilecek şekilde tasarlanmıştır (Layton & Trinh, 2014).

Saccharomyces cerevisiae kullanılarak yapılan fermantasyon süreçlerinde, etil asetat, izoamil asetat ve etil kaproat gibi esterlerin yüksek verimle üretildiği gösterilmiştir. Bu tür mikrobiyal sistemler, hem gıda güvenliği açısından hem de doğal aroma sınıfına girme özellikleri nedeniyle ticari olarak caziptir (Layton & Trinh, 2016; Menendez-Bravo, Comba, Sabatini, Arabolaza, & Gramajo, 2014; Rodriguez, Tashiro, & Atsumi, 2014).

Yeşil Solvent Sistemleri: Esterifikasyon reaksiyonlarında toksik çözücüler yerine etanol, su veya iyonik sıvılar gibi çevre dostu çözücüler kullanılarak daha sürdürülebilir bir üretim gerçekleştirmek mümkündür. Örneğin etanol-su karışımları, hem

doğrudan gıdaya uygunluk hem de artan çözünürlük avantajları sağlar (Clark & Tavener, 2007; Sheldon, 2014).

Mikrodalga Destekli Sentez: Isıtmanın hızlı ve homojen şekilde gerçekleştiği mikrodalga ortamında esterifikasyon veriminin arttığı gözlemlenmiştir. Mikrodalga destekli yöntemler, reaksiyon sürelerini dakikalara indirebilir ve enerji verimliliğini artırır (Kappe & Dallinger, 2009).

Sonuç olarak, yeşil kimya ilkeleriyle yürütülen ester üretimi, hem çevresel etkileri azaltmak hem de ekonomik ve fonksiyonel ürünler geliştirmek açısından önemli bir araştırma alanı haline gelmiştir. Bu stratejiler, gelecekteki aroma endüstrisinin temel üretim modellerinden biri olacaktır.

5. ESTER SENTEZİNDE KULLANILAN REAKTÖRLER VE REAKSİYON ŞARTLARI

Ester sentezinde kullanılan reaktör tipleri ve işlem parametreleri, hem verimi hem de ürün kalitesini doğrudan etkileyen temel faktörlerdir. Reaksiyonun türü (kimyasal ya da enzimatik), kullanılacak hammadde türü ve üretim ölçeği göz önünde bulundurularak uygun reaktör sistemi seçilir.

1. Geleneksel Cam Reaktörler: Laboratuvar ölçeğinde en yaygın kullanılan reaktör tipidir. Isıtmalı manyetik karıştırıcılı sistemlerle donatılmış bu reaktörlerde, Fischer esterifikasyonu gibi asit katalizli kimyasal tepkimeler kolayca gerçekleştirilebilir. 70–130 °C sıcaklık aralığında, genellikle 4–8 saat arasında reaksiyon süresi uygulanır (Baek, Minakawa, Yamada, Han, & Uozumi, 2016).

2. Biyoreaktörler: Mikrobiyal veya enzimatik ester sentezinde tercih edilen sistemlerdir. pH, sıcaklık ve çözünmüş oksijen kontrolü gibi parametrelerin hassas takibi mümkündür. Tipik enzimatik esterifikasyonlar 35–60 °C aralığında ve hafif

kariřtırma altında yapılır. İmmobilize enzimler ieren sabit yataklı biyoreaktörler, sürekli üretim iin uygundur (Gotor-Fernández vd., 2006).

3. Mikrodalga Reaktörleri: Mikrodalga ışıını kullanarak reaksiyon ortamı ok hızlı ısıtılır. Bu sistemlerde esterifikasyon tepkimeleri dakikalar iinde tamamlanabilir. Örneğın, 600 W'lık bir sistemde, 120 °C'ye ulařılarak 5–10 dakika iinde yüksek verimli reaksiyonlar saėlanabilir (Kappe & Dallinger, 2009).

4. Süperkritik Akıř Reaktörleri: Özellikle süperkritik CO₂ ortamında gerekleřtirilen esterifikasyonlar, özücü kullanılmaksızın yüksek difüzyon kabiliyeti ve seicilik sunar. Bu reaktörler evreci üretim aısından büyük avantajlara sahiptir.

5. Akıřkan Yataklı ve Mikroreaktör Sistemleri: Endüstriyel proseslerde daha hızlı, modüler ve sürekli üretime olanak tanır. Mikroreaktörler, küçük hacimli kanallar iinde daha kısa difüzyon yolları ve ısı transfer avantajlarıyla verimliliğı artırır.

Her reaktör tipi, hedef ester türü, üretim hacmi ve evresel gerekliliklere baėlı olarak optimize edilmelidir. Aynı zamanda reaksiyon řartlarının (sıcaklık, süre, molar oran, katalizör tipi) iyi belirlenmesi, hem verim hem de ürün saėlığı aısından kritik önemdedir.

6. KARAKTERİZASYON VE SAFLIK ANALİZİ YÖNTEMLERİ (GC-MS, IR, NMR VB.)

Ester bileřiklerinin sentezinden sonra ürünün doėrulanması ve saėlık düzeyinin belirlenmesi kritik öneme sahiptir. Bu amaçla modern analitik teknikler, hem niteliksel hem de niceliksel veriler sunarak sentez sürecinin deėerlendirilmesine olanak tanır.

Gaz Kromatografisi–Kütle Spektrometrisi (GC-MS): Uçucu ve yarı uçucu esterlerin analizinde en yaygın kullanılan yöntemdir. GC ile bileşiklerin ayrımı sağlanırken, MS kısmı moleküler ağırlık, yapı fragmanları ve kütle spektrumu aracılığıyla tanımlama sunar. Örneğin, izoamil asetat gibi esterlerin karakteristik 130 m/z moleküler iyon piki kolayca gözlenebilir (Liu vd., 2022; Padilla-Jiménez vd., 2021).

Infrared Spektroskopisi (IR): Ester fonksiyonel grubunun varlığı, IR spektrumunda 1735–1750 cm⁻¹ aralığındaki güçlü C=O gerilme bandı ile tanımlanır. Ayrıca C–O gerilme bantları da 1000–1300 cm⁻¹ aralığında gözlenir. Bu teknik, yapı doğrulama açısından hızlı ve maliyet etkin bir yöntemdir (Deelepojananan, Zhou, & Grassian, 2024).

Nükleer Manyetik Rezonans (NMR) Spektroskopisi: Hem ¹H hem de ¹³C NMR ile esterlerin moleküler yapısı ayrıntılı şekilde belirlenebilir. ¹H-NMR’de metil (–CH₃) ve metilen (–CH₂–) gruplarına ait kimyasal kaymalar ve spin-spin etkileşimleri ile yapı hakkında bilgi elde edilir. Özellikle karbonil karbonuna bağlı –CH₃ gruplarının 1.9–2.2 ppm aralığındaki kaymaları tanılayıcıdır (Claridge, 2016).

Yüksek Performanslı Sıvı Kromatografisi (HPLC): Uçucu olmayan veya termal olarak kararsız esterler için HPLC, özellikle ters faz C18 kolon kullanılarak ayırım sağlar. UV deteksiyon ile esterlerin miktar tayini yapılabilir. Luteolin-7-glukuronid asetat gibi kompleks esterlerin analizinde tercih edilen yöntemdir (Abdykerimova vd., 2020).

Bu yöntemler çoğunlukla birbirini tamamlayıcı olarak kullanılır. Örneğin sentez sonrası GC-MS ile bileşiğin varlığı doğrulanırken, IR ile fonksiyonel grup gözlenebilir, NMR ile yapısal doğrulama sağlanabilir. Analitik doğrulama, hem akademik araştırmalarda hem de endüstriyel üretim süreçlerinde ürün kalitesinin kontrolü açısından vazgeçilmezdir.

7. SONUÇ VE UYGULAMA PERSPEKTİFLERİ

Ester bileşikler, meyve aromalarının kimyasal temelini oluşturarak gıda, kozmetik ve farmasötik endüstrilerde geniş uygulama alanı bulmaktadır. Bu kitap bölümünde ele alınan bilgiler, esterlerin yalnızca lezzet ve koku gibi duyuşal özelliklerle sınırlı kalmayıp; aynı zamanda sürdürülebilir, doğal kaynaklı ve kontrollü sentez yaklaşımları ile de büyük potansiyele sahip olduğunu göstermektedir.

Doğal ester biyosentez yollarının aydınlatılması, mikroorganizmaların metabolik mühendisliği ile aroma profillerinin hedefe yönelik düzenlenmesine imkan vermektedir. Aynı zamanda enzimatik ve yeşil kimya esaslı sentez yöntemleri, çevresel etkileri azaltırken, 'temiz etiketli' ürünlere olan talebi karşılamak açısından önem arz etmektedir.

Endüstriyel üretimde kullanılan reaktör sistemlerinin çeşitliliği, mikrodalga destekli sentezden biyoreaktörlere kadar uzanmakta; bu da ester üretimini farklı ölçeklerde ve farklı hedeflerle gerçekleştirmeyi mümkün kılmaktadır. Karakterizasyon tekniklerinin (GC-MS, IR, NMR) sağladığı ayrıntılı analiz verileri, ürün kalitesinin doğrulanmasını ve yasal düzenlemelere uygunluk sağlanmasını mümkün kılmaktadır.

Gelecek perspektifinde, biyoteknolojik yöntemlerin daha da gelişmesiyle birlikte gıda güvenliği ve doğallık taleplerini karşılayan, özelleştirilmiş ester bileşiklerinin üretimi mümkün hale gelecektir. Ayrıca sentetik biyoloji ve yapay zeka destekli reaktör optimizasyonu gibi disiplinlerarası yaklaşımlar, hem sentez koşullarının hem de aroma profillerinin daha hassas kontrolünü sağlayacaktır.

Sonuç olarak, ester sentezi ve uygulama alanları, hem bilimsel gelişmeler hem de artan tüketici talepleri doğrultusunda sürekli değişim geçirmektedir. Meyve aromalarının ardındaki kimyasal temelin anlaşılması, doğal aroma üretiminde hem

arařtırmacılar hem de ilgili endüstriler için yol gösterici nitelikte bilgiler sunmakta; sürdürülebilir, güvenli ve işlevsel ürün geliştirme çabalarına katkı sağlamaktadır.

KAYNAKÇA

- Abdykerimova, S., Sakipova, Z., Nakonieczna, S., Koch, W., Biernasiuk, A., Grabarska, A., ... Kukula-Koch, W. (2020). Superior antioxidant capacity of berberis iliensis—HPLC-Q-TOF-MS based phytochemical studies and spectrophotometric determinations. *Antioxidants*, 9(6). <https://doi.org/10.3390/antiox9060504>
- Anastas, P. T., & Warner, J. C. (1998). Green Chemistry: Theory and Practice. *Green Chemistry: Theory and Practice*, Oxford University Press, New York.
- Aprea, E., Biasioli, F., & Gasperi, F. (2015). Volatile compounds of raspberry fruit: From analytical methods to biological role and sensory impact. *Molecules*, C. 20. <https://doi.org/10.3390/molecules20022445>
- Baek, H., Minakawa, M., Yamada, Y. M. A., Han, J. W., & Uozumi, Y. (2016). In-water and neat batch and continuous-flow direct esterification and transesterification by a porous polymeric acid catalyst. *Scientific Reports*, 6. <https://doi.org/10.1038/srep25925>
- Claridge, T. D. W. (2016). High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry: Third Edition. İçinde *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry: Third Edition*. <https://doi.org/10.1016/C2015-0-04654-8>
- Clark, J. H., & Tavener, S. J. (2007). Alternative solvents: Shades of green. *Organic Process Research and Development*, 11(1). <https://doi.org/10.1021/op060160g>
- De Carvalho, C. C. C. R., & Da Fonseca, M. M. R. (2019). Biotransformations. İçinde *Comprehensive Biotechnology*. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809633-8.09083-X>

- Deeleepojananan, C., Zhou, J., & Grassian, V. H. (2024). Heterogeneous interactions and transformations of dibasic esters with indoor relevant surfaces. *Environmental Science: Processes and Impacts*, 26(3). <https://doi.org/10.1039/d3em00542a>
- Divakar, S., & Manohar, B. (2007). Use of lipases in the industrial production of esters. İçinde *Industrial Enzymes: Structure, Function and Applications*. https://doi.org/10.1007/1-4020-5377-0_17
- Farneti, B., Khomenko, I., Grisenti, M., Ajelli, M., Betta, E., Algarra, A. A., ... Giongo, L. (2017). Exploring blueberry aroma complexity by chromatographic and direct-injection spectrometric techniques. *Frontiers in Plant Science*, 8. <https://doi.org/10.3389/fpls.2017.00617>
- Gotor-Fernández, V., Busto, E., & Gotor, V. (2006). Candida antarctica lipase B: An ideal biocatalyst for the preparation of nitrogenated organic compounds. *Advanced Synthesis and Catalysis*, C. 348. <https://doi.org/10.1002/adsc.200606057>
- Hernández-Fernández, F. J., De Los Ríos, A. P., Lozano-Blanco, L. J., & Godínez, C. (2010). Biocatalytic ester synthesis in ionic liquid media. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, C. 85. <https://doi.org/10.1002/jctb.2453>
- Hinge, V. R., Shaikh, I. M., Chavhan, R. L., Deshmukh, A. S., Shelake, R. M., Ghuge, S. A., ... Kadam, U. S. (2022). Assessment of genetic diversity and volatile content of commercially grown banana (*Musa* spp.) cultivars. *Scientific Reports*, 12(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-022-11992-1>

- Itoh, T. (2017). Ionic liquids as tool to improve enzymatic organic synthesis. *Chemical Reviews*, C. 117. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00158>
- Kappe, C. O., & Dallinger, D. (2009). Controlled microwave heating in modern organic synthesis: Highlights from the 2004-2008 literature. *Molecular Diversity*, C. 13. <https://doi.org/10.1007/s11030-009-9138-8>
- Khan, Z., Javed, F., Shamair, Z., Hafeez, A., Fazal, T., Aslam, A., ... Rehman, F. (2021). Current developments in esterification reaction: A review on process and parameters. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 103. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2021.07.018>
- Layton, D. S., & Trinh, C. T. (2014). Engineering modular ester fermentative pathways in *Escherichia coli*. *Metabolic Engineering*, 26. <https://doi.org/10.1016/j.ymben.2014.09.006>
- Layton, D. S., & Trinh, C. T. (2016). Expanding the modular ester fermentative pathways for combinatorial biosynthesis of esters from volatile organic acids. *Biotechnology and Bioengineering*, 113(8). <https://doi.org/10.1002/bit.25947>
- Lee, J. W., & Trinh, C. T. (2020). Towards renewable flavors, fragrances, and beyond. *Current Opinion in Biotechnology*, C. 61. <https://doi.org/10.1016/j.copbio.2019.12.017>
- Li, R., Yan, D., Tan, C., Li, C., Song, M., Zhao, Q., ... Liu, C. (2023). Transcriptome and Metabolomics Integrated Analysis Reveals MdMYB94 Associated with Esters Biosynthesis in Apple (*Malus × domestica*). *Journal of*

- Agricultural and Food Chemistry*, 71(20).
<https://doi.org/10.1021/acs.jafc.2c07719>
- Liu, R., Liu, Y., Zhu, Y., Kortensniemi, M., Zhu, B., & Li, H. (2022). Aromatic Characteristics of Passion Fruit Wines Measured by E-Nose, GC-Quadrupole MS, GC-Orbitrap-MS and Sensory Evaluation. *Foods*, 11(23).
<https://doi.org/10.3390/foods11233789>
- Mayobre, C., Domingo, M. S., Özkan, E. N., Fernández-Borbolla, A., Ruiz-Lasierra, J., Garcia-Mas, J., & Pujol, M. (2024). Genetic regulation of volatile production in two melon introgression line collections with contrasting ripening behavior. *Horticulture Research*, 11(3).
<https://doi.org/10.1093/hr/uhae020>
- Menendez-Bravo, S., Comba, S., Sabatini, M., Arabolaza, A., & Gramajo, H. (2014). Expanding the chemical diversity of natural esters by engineering a polyketide-derived pathway into *Escherichia coli*. *Metabolic Engineering*, 24. <https://doi.org/10.1016/j.ymben.2014.05.002>
- Neises, B., & Steglich, W. (1978). Simple Method for the Esterification of Carboxylic Acids. *Angewandte Chemie International Edition in English*, 17(7).
<https://doi.org/10.1002/anie.197805221>
- Padilla-Jiménez, S. M., Angoa-Pérez, M. V., Mena-Violante, H. G., Oyoque-Salcedo, G., Montañez-Soto, J. L., & Oregel-Zamudio, E. (2021). Identification of organic volatile markers associated with aroma during maturation of strawberry fruits. *Molecules*, 26(2).
<https://doi.org/10.3390/molecules26020504>
- Pott, D. M., Osorio, S., & Vallarino, J. G. (2019). From central to specialized metabolism: An overview of some secondary compounds derived from the primary metabolism for

- their role in conferring nutritional and organoleptic characteristics to fruit. *Frontiers in Plant Science*, C. 10. <https://doi.org/10.3389/fpls.2019.00835>
- Rodriguez, G. M., Tashiro, Y., & Atsumi, S. (2014). Expanding ester biosynthesis in *Escherichia coli*. *Nature Chemical Biology*, 10(4). <https://doi.org/10.1038/nchembio.1476>
- Rowan, D. D. (2011). Volatile metabolites. *Metabolites*, C. 1. <https://doi.org/10.3390/metabo1010041>
- Schwab, W., Davidovich-Rikanati, R., & Lewinsohn, E. (2008). Biosynthesis of plant-derived flavor compounds. *Plant Journal*, C. 54. <https://doi.org/10.1111/j.1365-313X.2008.03446.x>
- Sheldon, R. A. (2014). Green and sustainable manufacture of chemicals from biomass: State of the art. *Green Chemistry*, C. 16. <https://doi.org/10.1039/c3gc41935e>
- Sheldon, R. A. (2017). The: E factor 25 years on: The rise of green chemistry and sustainability. *Green Chemistry*, 19(1). <https://doi.org/10.1039/c6gc02157c>
- Singh, R. K., Srivastava, S., & Sane, V. A. (2013). Biology and biotechnology of fruit flavor and aroma volatiles. *Stewart Postharvest Review*, 9(4). <https://doi.org/10.2212/spr.2013.4.2>
- Sun, J., Lee, L. W. W., & Liu, S. Q. (2014). Biosynthesis of flavour-active esters via lipase-mediated reactions and mechanisms. *Australian Journal of Chemistry*, C. 67. <https://doi.org/10.1071/CH14225>
- Yang, Z., & Huang, Z. L. (2012). Enzymatic synthesis of sugar fatty acid esters in ionic liquids. *Catalysis Science and Technology*, C. 2. <https://doi.org/10.1039/c2cy20109g>

- Yu, W., Yang, L., Zhang, J., Jiang, F., Zhang, M., Wang, Y., & Sun, H. (2023). Research progress on the mechanism of flavor formation and regulation in apricot. *Journal of Fruit Science*, C. 40. <https://doi.org/10.13925/j.cnki.gsxb.20230266>
- Zorrilla-Fontanesi, Y., Rambla, J. L., Cabeza, A., Medina, J. J., Sánchez-Sevilla, J. F., Valpuesta, V., ... Amaya, I. (2012). Genetic analysis of strawberry fruit aroma and identification of O-methyltransferase FaOMT as the locus controlling natural variation in mesifurane content. *Plant Physiology*, 159(2). <https://doi.org/10.1104/pp.111.188318>

SÜRDÜRÜLEBİLİR ENERJİ KAYNAĞI: YEŞİL HİDROJEN

Merve KAZAK¹

Zehra Nur ÖZER²

Mehmet ÖZKAN³

Günümüz dünyasında nüfus artışı gün geçtikçe çoğalmaktadır. Bu artış insanların tüketim ihtiyacını da doğru oranda arttırmakta, kullanılan sürdürülemez enerji kaynaklarının gün geçtikçe azalması, çevreye verdikleri zarar ve ekonomik nedenlerden dolayı daha sürdürülebilir, kullanışlı ve ekonomik olarak daha az maliyetli enerji kaynağı arayışı doğurmaktadır.

Hidrojen diğer yakıtlara göre yüksek enerji içeriği ve doğada yüksek bulunma oranıyla diğer elementlere göre öne çıkmıştır. Hidrojen hafif bir elementtir. Yakıt olarak kullanılıp yandığında da sadece su buharı çıktığı içinde sürdürülebilirlik açısından mükemmel bir tercihtir. İstenilen ekonomik kalkınmayı karşılamak için önemli enerji kaynaklarına da ihtiyaç duyulmaktadır.

Toplam enerji talebinin 2040 yılına kadar dünya çapında %28 oranında artması beklenmektedir. Tüm enerji sektörleri arasında, esas olarak sıvı yakıtlara dayanan ulaşım sektörü enerjinin en büyük bölümünü tükenmekte ve 2040 yılına kadar

¹ Yüksek Lisans Öğrencisi, Afyon Kocatepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, mrvkuzu03@gmail.com, ORCID: 0009-0005-4462-8953.

² Doç. Dr., Afyon Kocatepe Üniversitesi, Afyon Meslek Yüksek Okulu, zehraerengil@aku.edu.tr, ORCID: 0000-0002-5887-4486.

³ Doçent Doktor, Afyon Kocatepe Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, mozkan@aku.edu.tr, ORCID: 0000-0001-8346-1459.

dünya çapında yaklaşık 3,3 milyar tona ulaşması öngörülmektedir. Sıvı yakıt talebini azaltabilecek elektrikli araçlarda (araba ve otobüs) veya güneş enerjisiyle çalışan araçlarda önemli bir artış olacağı öngörülmektedir, ancak uçaklar, uzun mesafeli kamyonlar ve gemiler gibi yüksek güçlü ulaşım araçları yine de yüksek enerji yoğunluklu yakıtlara ihtiyaç duyulacaktır. Bu nedenle, enerji ihtiyacını karşılamak için sıvı yakıtlara potansiyel alternatifler gerekmektedir. (Kumar, R.; Strezov, V.,2021)

Hidrojen yakıt türleri ile kıyaslandığında en yüksek enerji içeriğine sahiptir. 1kg hidrojen petrolün 2,8 katına ve doğalgazın 2,1 katı enerjiye denk gelmektedir. (Nesrin Dursun, Hakki Gülşen;2019)

Hidrojen doğada atmosferde, organik bileşiklerde, fosil yakıtlar gibi birçok alanda bulunmaktadır. Hidrojen üretiminde birçok yöntem kullanılabilir. Bunlar biyolojik ve kimyasal olmak üzere iki kısımda incelenebilir.

1. BİOKÜTLE NEDİR?

Biokütlenin kimyasal yapısı ve temel bileşenleri biokütlerdeki kimyasal yapı ve temel organik bileşenler, türetilmiş yakıtlar ve kimyasallar üretme süreçlerinin geliştirilmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Biokütle genellikle karbon, oksijen, hidrojen ve nitrojenden oluşan herhangi bir hidrokarbon malzeme olarak tanımlanabilir. Örneğin; Kuru odunun tipik bir analizi karbon (%52), hidrojen (%6,3), oksijen (%40,5) ve nitrojen (%0,4) verir. Odun ve kabuğun yaklaşık analizi bileşenleri şu şekilde gösterilmektedir: Uçucu madde (%80,0, %74,7), sabit karbon (%19,4, %24,0) ve kül (%0,65, %1,3). Odun yapısı ağacın türüne göre farklılık gösterir. (Mustafa Balat*, Mehmet Balat, Elif Kırtay, Havva Balat,2009)

2. BİYOHİDROJEN ÜRETİM TEKNİKLERİ

Biyolojik hidrojen üretimi en sürdürülebilir hidrojen üretim yöntemidir. Biokütle, gelişmekte olan ülkelerde birincil enerji tüketiminin %35'ini oluşturmaktadır ve dünya toplamını birincil enerji tüketiminin %14'üne çıkarır. Biokütle kaynakları arasında odun ve odun atıkları, tarımsal ürünler ve bunların atık yan ürünleri, belediye katı atıkları, hayvansal atıklar, gıda işleme atıkları ve su bitkileri ve algler bulunur. Biokütle enerjisinin ortalama çoğunluğu odun ve odun atıklarından (%64) üretilir, bunu belediye katı atıkları (%24), tarımsal atıklar (%5) ve çöp gazı (%5) takip eder. (Mustafa Balat*, Mehmet Balat, Elif Kırtay, Havva Balat,2009)

2.1. Karanlık Fermantasyon

Karanlık fermantasyon da anaerobik bakteriler kullanılır. Anaerobik bakteriler oksijene ihtiyaç duymayan oksijensiz ortamda büyüeyebilen bakterilerdir. Genellikle toprak, çamur, sindirim sitemi gibi ortamda yaşarlar.

Bu yöntemde hidrojen yüksek ısılara gerek kalmadan yaklaşık 30-80°C'de üretilebilirler. Karanlık fermantasyonda içerisinde karbon içeren her madde olarak kullanılır. Biokütleyle gerekli ise ön işlem uygulanır, daha sonra fermantasyon işlemi gerçekleşir. Fermantasyon sonucu yan ürünler (uçucu yağ asitleri, etanol vb.), H₂ ve CO₂ gazları ortaya çıkar. En son aşama olarak da gazlar ayrıştırılarak H₂ gazı elde edilir.

Avantajları:

- Düşük sıcaklar kullanılabilir.
- Işık gerektirmez
- Yüksek teknolojiye gerek duyulmaz.
- Organik atıklar değerlendirildiği için hammadde sorunu yoktur.

Dezavantajları:

- Mikroorganizma seçimi verim için önemlidir.
- Verim maksimum. 4 mol H₂
- Yan ürünler oluştuğu için ayrıştırma işlemine gerek duyulur.

2.2. Fotofermantasyon

Foto fermentasyon tekniği ışık kullanılarak organik maddelerin foto sentetik bakteriler ile H₂ ve CO₂ gazına dönüştürmesidir. Foto sentetik bakteriler ışığa gerek duymadan organik ve inorganik maddelerden besin üretebilen prokaryot bakterilerdir.

Bu teknikte de karanlık fermentasyon da olduğu gibi çok yüksek sıcaklıklara gerek duyulmaz. Burada da sıcaklık 30-35°C olarak belirlenmiştir. Nötr(pH:7,0) ortamda yapılabilir.

Fotoototrof bakteriler, fotosentez için organik ve inorganik elektron kaynakları gerektirmekte ve kurutulmuş deniz yosunu, agarlar, gözenekli cam, poliüretan köpük vb. birçok pahalı olmayan bileşiklerle çalışmaya izin vermektedir. (Bica'kova'.;Straka,2012) Enerjinin güneş ışığından elde edildiği bu foto fermentasyon sürecinde elektronlar tarafından salınmasını içermektedir. Güneş ışığı kullanılarak su; elektronlara, protonlara ve oksijene dönüştürülür. Proseste nitrojenaz katalizörü kullanılarak protonlar ve elektronlar nitrojen ve ATP ile reaksiyona girerek ADP, H₂ ve amonyak oluşmaktadır. (Sorensen,2012)

3. KARANLIK FERMANTASYON VE FOTOFERMANTASYON KARŞILAŞTIRILMASI

Karanlık fermantasyon da ortaya çıkan organik asitler foto fermantasyon da hammadde olarak kullanılabilir. Örneğin karanlık fermantasyonda ürünler kısmında ortaya çıkan CH_3COOH burada girenler kısmında olup ışık ile parçalanıp H_2 ve CO_2 gazına dönüşebilir.

Foto fermantasyonda karanlık fermantasyona göre daha çok hidrojen eldesi sağlanır. Karanlık fermantasyonda 4 mol olan H_2 eldesi burada 8 mol'e kadar çıkabilmektedir. Eğer iki yöntem bir arada kullanılırsa verim 12 mol H_2 ne kadar çıkar. Son 10 yıldır biyolojik hidrojen üretiminde en çok karanlık fermantasyon ve foto fermantasyon yolları öne çıkmaktadır.

4. BİYOFOTOLİZ

Biyofotoliz yöntemi yenilenebilir kaynaklardan temiz enerji üretmek için sürdürülebilir ve çevre dostu proseslerdir. (Nesrin Dursun ve Hakki Gülşen,2019)

Bu proseslerde siyanobakteriler ve yeşil mikro algler kullanılmaktadır. Işık kullanılarak suyu özel koşullarda hidrojen ve oksijene ayrılması sağlanmaktadır.

Biyofotoliz doğrudan Biyofotoliz ve dolaylı biyofotoliz üzere iki grupta incelenir.

4.1. Doğrudan Biyofotoliz

Direkt biyofotoliz ile hidrojen üretimini gerçekleştirmek için güneş enerjisi kimyasal enerjiye çevrilir. Süreçte bulunan iki foto sentetik sistem fotosentez sürecinden sorumludur. Bu sistemler: CO_2 miktarını azaltmak için kullanılan indirgeyici üretecek foto sistem I (PSI) ve oksijen miktarını açığa çıkaran

ve suyu ayırıştırıcı foto sistem II (PSII)'dir. Yeşil bitkilerde karbon azalığının görülmesi hidrogenaz eksikliğinden kaynaklanır. Mavi-yeşil algler ve yeşil algler hidrogenaz içerir.

Bu sayede hidrojen üretebilirler. Hidrogenaz oksijene duyarlıdır. Hidrojen üretiminin sürekli hale getirilmesi için oksijen miktarını %0.1' in altındaki seviyelerde tutmak gerekmektedir (Bolatkhan vd., 2019).

Doğrudan biyofotoliz avantajları maliyet açısından düşük ve kolay bulunabilir olmasıdır. Dezavantajları ise verim açısından düşük olmasıdır fakat verim artırımı için çalışmalar yapılmaya devam edilmektedir. Örneğin: Son zamanlarda, *Scenedesmus obliquus* gibi mikroorganizmaların mutaları mikro alglerden elde edilmiştir; mutantlar oksijen varlığında (hidrojen üretimini olumsuz etkileyebilecek durumun aksine) bile daha iyi etki göstererek hidrojen üretimini artırmıştır. (Bica'kova' and Straka, 2012; Rahman et al., 2016).

4.2. Dolaylı Biyofotoliz

Bu teknikte siyanobakteriler ve mikro algler kullanılır. Örneğin *Anabaena variabilis*, *Nostoc muscorum* vb.

Fotosentez ile güneşten gelen enerjiyi H_2 'ye çevirme işlemidir. İki aşamada gerçekleşir.

Birinci aşama içerisinde bolca karbonhidrat bulunan biyokütle arttırmak için fotosentez kullanılarak büyük miktarda biyokütle üretimidir.

İkinci aşamada fermantasyonda depolanmış içerisinde bol miktarda karbonhidrat bulunduran biyokütle kullanılarak hidrojen üretimidir. (Rahman et al.,2016)

Avantajları:

- Çevre dostudur.
- Kullanılan siyonobakteriler türleri genetik olarak değiştirilmeye açıktır bu da elde edilen hidrojenin miktarının artırılmasında olumlu rol oynar.

Dezavantajları:

- Üretilen hidrojen verimi yüksek değildir. Bu da endüstriyel alanda yetersiz kalır.
- Süreç iki aşamalı gerçekleştiği için karmaşıktır.
- Kullanılan nitrojenaz ve hidrogenaz enzimlerin çalışması fotosentezde ortaya çıkan oksijen ile engellenebilir.

5. HİBRİT SİSTEM

Fermantif ve foto fermantasyon sistemlerini birleştiren ortak sistemlerdir. (Kothari et al.,2012) C.butyricum bakterisi, karbonhidratları hidrojene dönüştürmektedir. Bu bakteri, ışık kullanmadan karbonhidratların parçalanması ile hidrojen üretmekte ve ortaya çıkan organik asitler foto fermantasyon bakterilerinin hidrojen üretimi için kaynak olabilmektedir (Kothari ve ark., 2012; Das ve Veziroğlu, 2001).

6. BİYOHİDROJENİN ÜRETİMİNDE BİYOREAKTÖRLERİN KULLANIMI

Biyoreaktörler kullanılacak mikroorganizmaların uygun besin, sıcaklık, pH şartlarında büyümesi ve üremesini sağlayan koşullardır. Biyoreaktörler kesikli veya sürekli olmak üzere ikiye ayrılır.(Nesrin Dursun ve Hakki Gülşen,2019)

6.1. Kesikli Biyoreaktörler

Bu reaktör tipinde besinler ve mikroorganizmalar reaktöre başlangıçta konulur ve süreç boyunca giriş çıkış olmaksızın bu şekilde kullanılan mikroorganizmalar hammadde büyütür tüketir ve istenilen ürün elde edilir. Her uygulama sonrası sterilizasyon icap eder. Kesikli reaktörler biyohidrojen üretiminde sıklıkla kullanılır.

6.2. Sürekli Beslemeli Biyoreaktörler

Bu biyo reaktör tipinde besinler ve mikroorganizmalar reaktöre konulur fakat süreç içerisinde reaktöre ekleme ve çıkarma yapılabilir. Bu biyoreaktör tipinde ürünler ve atıklar sürekli olarak dışarıya alınabildiği için yüksek hidrojen verimi sağlama konusunda başarılı bir reaktör olarak kabul edilir. Örneğin;

Kulpan BEKBENBETOVA tarafından 2013 yılında yapılmış hayvan gübresinden hidrojen üretimi çalışmasında sürekli beslemeli biyoreaktör kullanılmıştır. Bu çalışmada anaerobik sürekli beslemeli biyoreaktöre hayvan gübresi konulmuş uygun pH, sıcaklık ölçümleri yapılmış en uygun pH 6,0 olarak ölçülmüştür. Ekonomiklik ve üretilen birlik açısından da test edilmiştir. (Kulpan BEKBENBETOVA,2013)

Sürekli beslemeli biyoreaktör tipleri askıda büyütme biyoreaktörleri ve immobilize biyoreaktörleri olmak üzere iki temel bölümde incelenmektedir.

6.3. Askıda Büyüme Biyoreaktörler

Bu biyoreaktör tiplerinde hücreler veya mikroorganizmalar sıvı bir ortamda bağımsız şekilde askıda tutulur ve üretilir.

Belli bitki hücrelerinde, hayvan hücrelerinde maya veya bakterilerde kullanılır.

Askıda büyüme biyoreaktörleri yüksek mahsul ve oranlara bilirlik avantajları sağlarken, dezavantajları ile ilgili de gaz çıkışından ötürü köpük oluşumu ve işlem sırasında bazı hücrelerin zarar görmesi söylenebilir.

6.4. Sürekli Karıştırılmalı Tank Biyoreaktörler

Sürekli karıştırılmalı tank reaktörlerde asıl amaç homojenlik sağlamaktır. Bu reaktörlerde sürekli besin girişi olurken bir yandan da devamlı ürün çıkışı olur. Bu reaktörlerde tam verim elde etmek amacıyla yuvarlak veya kare tanklar tercih edilebilir (Nesrin Dursun ve Hakki Gülşen,2019)

Bu reaktör tipi kullanılarak hidrojen prodüksiyonu ile ilgili çalışmalar yapılmıştır. Örneğin;2009 yılında Nuri Azbar'ın yayınladığı makalede peynir işleme atık suyundan H₂ üretimi ile alakadar çalışmalarında sürekli karıştırılmalı tank reaktörü kullanılmıştır. (Nuri azbar,2009)

6.5. Anaerobik Mebran Reaktörler

Tümel olarak membran reaktörler seçici geçirgenlik sağlayan reaktör tipidir. Membran biyoreaktörler atık suların arıtımında organik ve askıda katı madde giderilmesi için kullanılır. (Elif GÜRSU,2020) Anaerobik mebranlar H₂ üretilmesinde genellikle yüksek organik içerikli atık sulardan H₂ üretilmesinde tercih edilmektedir. Bu reaktör tipinin dezavantajı maliyet açısından yüksek olmasıdır. (Aslan,2016) Bu reaktörlerde %47,4 metan dönüşümü ve %28,1 hidrojen geri kazanım faktörü ile 873 K ve 500 kPa olarak belirlenmiştir. (Yağmur Nalbant Atak,2023)

Bu reaktör tip kullanılarak yapılan çalışmalardan aşağıda bahsedilmiştir;

- Clostridium thermocellum (termofilik selülotik bakteri) ile yapılan çalışmada yüzde 63' e varan verim elde edilmiştir. (Environmental Science,2018,11. Sayı)

- Yemek atıklarından hidrojen üretimi ile ilgili çalışmada 5. Günde 110,9 mL H₂/g UKM olarak elde edilmiştir. (Okan BOSTANCI,2013)
- İzmit Pak maya fabrikası maya üretim prosesinin konsantre akımından alınan örneklerle yapılan çalışmada pH 5.5 -6 da yüksek hidrojen verimi gözlenmiştir. (Hazal YILDIZ,2013)

Biyo hidrojen üretiminde biyolojik yöntemler dışında termokimyasal ve elektrokimyasal yöntemlerde tercih edilmektedir. Hidrojen üretimin yollarından %96'sı yenilenemez enerji kaynakları ile oluşur. Bunlar %30 petrol, %48 doğalgaz, %18 kömür gazlaştırma en fazla tercih edilen yöntemleridir. (IEA,2015).

7. TERMOKİMYASAL DÖNÜŞÜM

Bu yöntemde genellikle sudan ve hidrokarbonlardan hidrojen üretimi kullanılmaktadır. (Dong vd, 2017) Biyokütleden termokimyasal metotlar olarak hidrojen üretim teknikleri 3 temel başlıkta incelenir. Bunlar;

- Piroliz
- Gazlaştırma
- Süper kritik su olarak belirtilir. (Al.; Bayraktar Ateş,2022)

7.1. Piroliz

Piroliz sözcüğü Yunanca 'da ortamda gaz olmadan gerçekleştirilen ısıl bozulma anlamına gelmektedir. Piroliz, organik maddelerin oksijensiz ortamda ısıtılarak gaz, katı ve sıvı ürünlere ayrılması işlemidir. (İbrahim ÜÇGÜL, Ufuk ELİBÜYÜK,2014) Piroliz işlemi diğer doğrudan doğruya yanma işlemlerine göre daha fazla tercih edilir. Çünkü burada

elde edilebilen enerji daha verimli olurken maliyet açısından da düşüktür. (Özlem Onay,2001)

Piroliz sadece özgün bir dönüştürücü olarak değil, aynı zamanda yanıcı bir madde olmadan katı yakıtın gaza ve sıvıya parçalanmasıyla oluşturulan gazlaştırma ve yanmanın bir bölümüdür. (Jahirul,2012) Piroliz işleminde çoğunlukla orman mahsulleri ve tarımsal mahsuller kullanılır. Çünkü bu hammaddelerin içerisinde yüksek miktarda lifli yapı ve selüloz gibi bileşenler vardır. Bu sayede dayanıklı, esnek özellikler gösterir. Piroliz işlemi 500-800K sıcaklıkta ve 100-500kPa basınç altında ve oksijensiz ortamda gerçekleşmektedir.

Piroliz işlemi 3 Modda gerçekleştirilebilir. Bunlar;

1.Yavaş Mod: Bu modda sıcaklık 55°C- 950°C arasındadır. Yavaş modda kalma zamanı uzundur. (5-30dk) Isıtma hızı düşüktür. Çıkan ana ürünlerde gazlar, char, biyoyağlardır.

2.Hızlı Mod: Bu modda sıcaklık 850°C-1250°C arasındadır. Hızlı modda kalma zamanı kısadır. (0.5-2s) Isıtma hızı fazladır. Çıkan ara ürünlerde biyoyağ, gazlar, chardır

3.Flaş Mod: Bu modda sıcaklık 1050°C-1300°C arasındadır. Flaş modda kalma zamanı çok kısadır. (<0.5s) Isıtma hızı çok yüksektir. Çıkan ana ürünlerde gazlar ve biyoyağlardır. (Al.; Bayraktar Ateş,2022, Balat vd.,2009)

Piroliz yöntemi ile hidrojen üretiminde genellikle hızlı mod tercih edilir çünkü hızlı modda kalma süresi kısadır. Bu sayede yüksek hidrojen verimi elde edilir. Hızlı modda çıkan ürünler katı, sıvı, gaz halde bulunabilir. Çıkan gazlar H_2 , CO, CO_2 , CH_4 ve diğer gazlardan oluşur. Hızlı modda yan ürün olarak kömür ve katran oluşumu meydana gelebilir bu oluşumu engellemek içinde flaş mod tercih edilebilir. (Al.; Bayraktar Ateş,2022)

8. PİROLİZ İLE HİDROJEN ÜRETİM AŞAMALARI

İlk önce kullanılacak hammadde belirlenir uygun sıcaklık analiz edilir. Daha sonra nem ayarlamaları yapılır. Hammaddenin boyutu ayarlanır 1-5 mm arası ayarlanması işlem sırasında ısı transferleri için uygundur. Hammadde oksijensiz ortamda uygun sıcaklığa kadar ısıtılır. Belirlenen ısıtma hızı ve reaktör ortamında oluşan ürünler katı sıvı gaz olarak ayrıştırılır. Gazlar reaktörden çıkarken yoğuşmamasına dikkat edilerek sıvı ve katı fazda olan ürünlerden ayrılarak elde edilmektedir. Çıkan gazlardan örneğin CH₄den buhar reforming ile yeniden işlenerek H₂ gazı elde edilebilir. Son olarak da çıkan gaz saflaştırılarak yüksek verimde H₂ gazı elde edilmiş olur.

8.1. Gazlaştırma

Gazlaştırma yöntemi hem verim yüksekliği hem de maliyet düşüklüğü gibi avantajları sayesinde tercih edilen bir yöntemdir. Biyokütle gazlaştırmasına katalizör katılması, süreci hızlandırırken atık oluşumunu en aza indirmeye yardımcı olur. H₂ üretimini etkileyen parametreler, özellikle farklı biyokütle hammaddeleri ve katalizörler kullanıldığında çok komplekstir. Tepkimenin endotermik temelinin bir sonucu olarak, gazlaştırma ayrıca büyük mablağda enerjiye ihtiyaç duyulur. Isıl verimlilik ve gazlaştırıcı dizaynı üzerindeki önemli bir sınırlama, gazlaştırma için ihtiyaç duyulan enerjidir. Bu nedenle, biyokütlenin yenilenebilir doğal kaynağının sürdürülebilir bir biçimde kullanılması, mevcut gazlaştırma sürecinin temel ölçüde geliştirilmesini ve optimize edilmesini gerekmektedir. (Nowlin James Rubinsinet al,2023)

Yakın zamanda Nikel yüklü kaolin (Al₂Si₂O₅(OH))₄ ve bentonit katalizörüyle çay, bakla ve ayçiçeği çekirdeği hamurunun tarım atığı karışımından katalitik gazlaştırma yoluyla hidrojen üretimini araştırıldı ve süreçte test edildi.

Sonuçlar %30 Ni/Kalsine Kaolinin en yüksek hidrojen verimine sahip olduğunu göstermektedir. Bu çalışmada kullanılan bentonitin ve nikelle birarada kullanılmasının nedeni bentonit metal bazlı elementleri yüzeyde tutarak ısıya devamlı maruz kalmasını sağlamasıdır. (Elif Ece Çağlı ve Nezihe Ayas,2022)

Gazlaştırma yöntemi hava gazlaştırma, oksijen gazlaştırma, buhar gazlaştırma olarak üç şekilde yapılabilir. Hava gazlaştırma da yüksek verim elde edilir.900-1100°C sıcaklık kullanılır. Maliyet düşüktür. Oksijen gerekmeden tek ürün olduğu için en çok tercih edilen yöntemdir. Oksijen gazlaştırma da 1000-1400°C sıcaklık kullanılır ve daha kaliteli hidrojen prodüksiyonu sağlanır fakat maliyetli ve işlem meşakkatli olduğu için tercih edilmeyebilir. Buharla gazlaştırma da 700-1200°C sıcaklık kullanılır. Orta derecede maliyetidir. İşlem sırasında H₂ gazı çıkışı yüksek verimde olsa dahi işlemde katran ve hidrokarbonlar oluşur bu meydana gelen maddelerin ayrılması için ekstra işlem gerekir bu yüzden de tercih edilmeyebilir.

Biyokütleden biyo hidrojen üretiminde gazlaştırma yöntemi kullanarak yapılan birçok çalışma vardır. Bu çalışmalardan bazıları şunlardır.

1. Lv et al'ın 2004 yılında pirinç kabuğu buhar gazlaştırması çalışmasında Ni bazlı katalizör kullanarak katran oluşumu azaltılmış sıcaklık arttıkça h₂ oranı artmış maksimum %35 hidrojen gazı elde edilmiştir. (Lv et al,2004)
2. Rapagna et al'ın 2000 yılında odun yongalarının buhar gazlaştırma ile yaptığı çalışmada Ni katalizörü kullanılarak yapılmış ve %35-45 arası hidrojen verimi elde edilmiştir. (Rapagna et al,2000)
3. Minowa&Inoure'nin 1999 yılında kanalizasyon çamuru ile süper kritik sudan gazlaştırarak hidrojen üretimi

çalışmalarında 500°C ve 30MPa kriterleri kullanılmış ve %30-40 oranında hidrojen verimi elde edilmiştir. (Minowa&Inoure,1997)

8.2. Süper Kritik Su

Süper kritik su gazlaştırması geleneksel gazlaştırma yöntemine homolog gazlar üretebilir. Bu süper kritik su gazlaştırması 600-800°C sıcaklıkta ve yüksek basınçta uygulanır. (sawai&Yamamoto,2014) Süper kritik su ile gazlaştırma yöntemi ile geleneksel gazlaştırma yöntemini ayıran en belirgin faktör süper kritik su ile yönteminde kurutma evresine ihtiyaç olmayışıdır. (Lu ve ark. 2006) Gazlaştırma işleminin tamamlanamaması durumunda, sıvı fazda fenoller, furfurallar, organik asitler, aldehit gibi bileşikler oluşmaktadır. Bunun yanı sıra ortamda katı ürünler de çıkabilirler (Sınağ ve ark. 2010) (Elif Demirel,2015) Süper kritik suda apolar çözücü kullanıldığından organik bileşenleri sıvı haldeki sudan daha iyi çözme becerisine sahip olmaktadır.(Elif Demirel,2015)Süper kritik su ortamında yapılan hidrojen üretimlerinde yüksek verim elde edilebilir. Örneğin Williams ve Onwudilli'nin 2006 yılında yaptığı atık plastiklerden hidrojen üretimi çalışması 374°C sıcaklık ve 22 MPa basınç ortamında yapılmış olup plastiklerin diğer yöntemlere göre daha hızlı parçalandığı gözlemlenmiştir. Katalizör olarak nikel kullanılmış olup bu da hidrojen verimini arttırmıştır. (Williams ve Onwudilli,2006)

Süper kritik su gazlaştırmasında suyun hem reaktan hem de ortam olarak kullanılması da hidrojen verimini artırır. Aynı zamanda katalizör olarak alkali veya geçiş metalleri kullanılır. Bu metallerin çeşitlerinin ürün ile kullanılabilir olması da hidrojen verimini olumlu yönde etki eder. Örneğin Lu vd.'nin 2019 yılında yaptığı çalışmasında buğday samanı kullanılmış ve bu hammaddenin hangi katalizörde daha yüksek verim oluşturduğu test edilmiş. Katalizör olarak Cu/MgO ile Fe/MgO

test edilmiş, aynı koşullar(450°C,23-28MPa,20dk) sağlanmış ve sonuç olarak Cu/MgO kullanılan deney düzeneğinde 8,13 mol kg⁻¹ H₂ verimi elde edilirken Fe/MgO deney düzeneğinde 9,20mol kg⁻¹ H₂ verimi elde edilmiştir.(Al&Bayraktar,2008)

9. BİYOHİDROJENİN UYGULAMA ALANLARI

9.1. Enerji

Elektrik ve ısı üretmek için kullanılabilir. Örneğin; Japonya’da ki Toshiba’nın H₂O sistemi

9.2. Ulaşım

Araçlarda hidrojen yakıt hücreleri olarak kullanılabilir. Örneğin; Toyota Mirai(Hidrojen yakıt hücreli araba), Alstom Coradia İlint(Almanya da hidrojen ile çalışan tren)

9.3. Endüstriyel Uygulamalar

Kimya endüstrisinde amonyak ve metanol gibi maddelerin üretiminde, Petrol rafinesinde

Örneğin; Yara’nın yeşil hidrojen üretim projeleri: Norveç’te inşa edilen yeşil hidrojen üretim alanıdır. Bu tesis şu an da Avrupa’da kurulan en büyük tesistir. Elektroliz yöntemi kullanılarak suyu ayırarak elde edilen yeşil hidrojen, amonyak üretiminde kullanılarak yıllık yaklaşık 41.000 ton CO₂ emisyonu engellenmeyi hedeflemektedir. Ayrıca, Yara, Statkraft ve Aker Horizons ile birlikte Norveç’in Porsgrunn şehrinde Avrupa’nın ilk büyük alanlı yeşil amonyak projesini başlatmıştır. Bu proje, deniz taşımacılığı, tarım ve endüstriyel alanlarda uygulanmak üzere yeşil hidrojen ve amonyak üretimini amaçlanmaktadır. (Yara,2024)

Shell'in rafinerileri esnasında hidrojen kullanımı;

Shell Rheinland Rafinerisi (Almanya) → Avrupa'nın en büyük PEM elektrolizörü (megawatt ölçeğinde) ile yeşil hidrojen elde etmeye başlandı.

Shell Scotford (Kanada) → Karbon yakalama ve depolama projesiyle mavi hidrojen kullanımını büyütüyor.

Ayrıca Shell, bazı rafinerilerini gelecekte enerji ve kimya alanlarına dönüştürmeyi ve karbon ayak izini azaltmayı hedefliyor. Bu dönüşümde düşük karbonlu hidrojen büyük bir etkiye sahip olacak.

10. DÜNYADA BİYOHİDROJEN ÜRETİMİ

Uluslararası Enerji Ajansının “Küresel Hidrojen Görünümü 2022” raporuna göre 2021 senesinde yaklaşık 20 milyon ton hidrojen diğer gazlardan ayrışmadan demir-çelik sektöründe ve metan üretiminde kullanılmaktadır. Çin 2021 yılında 28 milyon ton hidrojen talebinde bulunmuş, dünyada ABD ise 12 milyon tonla ikinci sıradadır. Mevcut çalışmalara göre bu değerlerin 2030 yılına kadar artacağı hedeflenmektedir. (ETKB,2023)

Avrupa Birliği'nin uzun süredeki hedefleri arasında Avrupa'daki enerji eldesinin %13-14 oranlarına çıkması hedeflenmektedir. (Energy,2020)

Belirlenen hedefler doğrultusunda İspanya, Danimarka ve Almanya ilk üçtedir. Bu ülkeler hidrojen üretiminin yaklaşık %50 lik bölümünü oluşturmaktadır. Avrupa Kalkınma ve Yatırım Bankası hidrojen üretimi ile ilgili çalışmalara öz sermaye yatırımı, garantiler, harman finansı gibi finansal konularda destek sağlamaktadır. (Gülbahar Bilgiç Tüzemen,2024)

11. TÜRKİYEDE BİYOHİDROJEN ÜRETİMİ VE GELECEK PLANLAMASI

Türkiye’de şu anda gözle görülür bir yeşil hidrojen üretimi henüz mevcut değildir. Ancak çok sayıda kurum ve uzmanın analizleri, büyük yenilenebilir enerji kaynağı imkânlarının sağlayacağı avantajlarla Türkiye için orta vadede oldukça yüksek bir potansiyeli göstermektedir. Kamu yönetimi de yeşil hidrojen konusun da Türkiye’nin dünyanın önde gelen ülkeleri arasında yer alması için girişimlerini sürdürüyor. Diğer yabancı ülkelerle paralel olarak Türkiye de yeşil hidrojen hedefleri 2030 ve 2050 yıllarını baz alarak yapılmaktadır. (STM ThinkTech Raporu Yeşil Hidrojen Türkiye,2023)

Türkiye’nin Potansiyel Yeşil Hidrojen Talebi SHURA Enerji Dönüşüm Merkezinin, Bilkent Enerji Politikaları Araştırma Merkezi ve Alman Enerji Ajansı iş birliği ile hazırladığı “Türkiye’nin Yeşil Hidrojen Üretim ve İhracat Potansiyelinin Teknik ve Ekonomik Açıdan Değerlendirilmesi” raporuna göre, imalat sanayii, doğalgaz ve ulaştırma sektörlerinde fosil yakıtların sadece yüzde 10’unun yeşil hidrojen kullanılmasıyla , 2050 yılında Türkiye’de yıllık 1,9 milyon ton yeşil hidrojen yurtiçi ihtiyacı olabileceği düşünülmektedir. Bu rapordaki verilere göre yıllık yurt içi ihtiyacının yarısının otomotiv sektörü tarafından kullanılacağı öngörülmektedir. Türkiye de zamanın gelişmesi sürdürülemez kaynakların zamanla tükenmesi ile yeşil hidrojen üretim sürecini hızlandırmayı hedeflenmektedir. Bilhassa Ocak 2023 de yayınlanan Türkiye Enerji ve Tabii Kaynaklar Bakanlığı’nın Türkiye’nin Ulusal Hidrojen Teknolojileri Stratejisi ve Yol Haritası, Türkiye’yi önde gelen yeşil hidrojen ekonomilerinden biri olarak küresel dünyaya çıkarmaktadır. Ulusal hidrojen stratejisine göre, Türkiye 2030’a kadar 2 gigawatt (GW), 2035’e kadar 5 GW ve 2053’e kadar 70 GW hidrojen üretim kapasitesi

kurmayı hedeflenmektedir. (PwC&EPDK Türkiye'nin Yeşil Hidrojen Yolculuğu ,2023)

12. TÜRKİYEDE KURULAN HİDROJEN VADİSİ

Türkiye’de 2022 yılında Balıkesir ve Bandırmada EnerjiSA tarafından hidrojen vadisi pilot bölgesi kurulmuştur.

Amaç: Güney Marmara bölgesinde yenilenebilir enerji kaynaklarından yeşil hidrojen üretilen sanayi sektöründe özellikle cam, seramik, hidrojen peroksit gibi alanlarda işlevlendirilerek dışa bağımlılığı azaltıp Türkiye’de yeşil hidrojen üretimini teşvik etmek.

13. YERLİ PEM ELEKTROLİZÖR ÜRETİMİ PROJESİ

TÜBİTAK tarafından yürütülen bu projede yerli PEM Elektrolizörü üreterek yeşil hidrojen üretiminde dışa bağımlılığı azaltmak amaçlanmaktadır. Geliştirilen elektrolizör, saatte minimum 5 standart m³ yeşil hidrojen üretebilme becerisine sahiptir. Üretilen hidrojen, Enerjisa'nın Bandırma'daki doğalgaz santralinde türbin jeneratörlerinin soğutulmasında kullanılmaktadır. Bu teknoloji, sanayi ve medikal alanlarda da kullanılabilir.

KAYNAKÇA

- Acar, C.; Dincer I. (2018). Hydrogen Production.Comprehensive Energy Systems
- Ağbaba M.; Levent M.;Şahin Y.(2015) Production of Synthesis Gases from Catalytic Steam Reforming of Ethanol and Propane Processes
- Ahmad ,T. Et Al.(2023).Renewable Energy Revies
- Al K.; Bayraktar Ateş E.(2022).Sürdürülebilir hidrojen üretim teknolojileri:biyokütle temelli yaklaşımlar
- Aslan M,(2016).Mebran Teknolojileri,T.C. Çevre ve Şehircilik Bakanlığı Türkiye Çevre Korunma Vakfı ,s200 Ankara
- Azbar N.; Çetinkaya Dokgöz F.T.; Keskin T.; Korkmaz K.S.; Syed H.M..(2009).Continuos fermentative hydrogen production from cheese whey wastewater underthermophilic anaerobic conditions
- Balat M.;Balat M.;Kırtay.;Balat.H;(2009).Main routes fort he thermo-conversion of biomass into fuels and chemicals.Part 1:Pyrolysis systems.Energy Conversion and Management
- Balat M.(2010).Thermochemical Routes for Biomass-based Hydrogen Production.Energy
- Bekbenbetova K.(2013). Gübre Kullanarak Anaerobik Bir Reaktörde Biyolojik Hidrojen Üretimi
- Bostancı O.(2013).Yemek Atığından Anaerobik Mebran Reaktörler Kullanarak Hidrojen Üretimi
- Budhreja H.;Pal A.; Mishra R.S. (2023) Plasma reforming for hydrogen production: Pathways, reactors and storage
- Dangc.; Liu L.; Yang G.; Cai W .; Long J .; Yu H.(2020) Mg-promoted Ni-CaO microsphere as bi-functional catalyst

for hydrogen production from sorption-enhanced steam reforming of glycerol

Demirbaş,A.(2009).Thermochemical conversion of mosses and algae to gaseous products.Energy Sources,Part A

Dursun N.(2018). Anaerobik Reaktörler Atık Çörek Otundan(Nigella Sativa) Biyohidrojen Eldesi Verimliliği

Dursun N.;Gülşen H.(2019).Biyohidrojen üretime yöntemleri ve biyohidrojen üretiminde biyoreaktörlerin kullanımı

Elliott,D.C.;Bechmand.;Bridwater,A.V;Dieboldj.P.;Gevert.S.B.; SOLANTAUSTA.Y.(1991).Developments in direct thermochemical liquefaction of biomass:1983-1990.Energy&Fuels

Guo L.; Cao C.(2010) Supercritical Water Gasification of Biomass and Organic Wastes

Gürsu E.(2020)Mebran Biyoreaktörler”Yüksek lisans tezi”

Hamidhamid Z.; Ghornammezhad P.; Ketabchi M.C .; Yeganeh B..(2023) Biomass-derived biochar and its application in agriculture

İleri R,(2000).Çevre Biyoteknolojisi.Değişim Yayınları

Isahak W.; Pudukudy M.(2024) An overview of the enhanced biomass gasification for hydrogen production

Jahirulm.I., Rasulm.G.; Chowdhury A.A.;Ashwath,N.(2012).Biofuels production through biomass pyrolysis-a technological review

Khanna H.; Das D. (2012). Biohydrogen production by dark fermentation

Kırcı H.;Ateş S.; Akgül M.(2001) Selüloz Türevleri Ve Kullanım Yerleri

- Kova B.; Straka O.; (2012).Production of hydrogen from renewable resources and its effectiveness.Internotional Journal of Hydrogen Energy
- Kumar G.; Butrin G.(2017) Fermentative biohydrogen production in fixed bed reactors using ceramic and polyethylene carries as supporting material.-Energy Procedia
- Kumar,R.;Strzov V.(2021).Thermochemical production of bio-oil:A review of of downstream processing Technologies for bio-oil upgrading, production of hydrogen and high value-added productss.
- Lay C.H.; Sen B.; Chen C.C .; Wu J.H.; Lee S.C.; Lin C.Y. (2013). Co-fermentation of water hyacinth and beverage wastewater in powder and pellet form for hydrogen production
- Lou B.Y.;Fan Z.;Friedmann J.; Corbeau A.S.; AGRAWAL M.; KHARTRI A. (2022). The Potential Role Of Biohydrogen in Creating A Net-Zero World: The Production And Applications of Carbon-Negative Hydrogen
- Nalbant Atak Y.(2023). Hidrojen Üretimi ve CO2 Yakalanmasını Aynı Cihazda Sağlayan Bir Membran Reaktörün Matematiksel Modelinin Geliştirilmesi
- Novais B.;Ramos A.;Rouboa A.;Monteiro E.(2023) Air-Blown Biomass Gasification Process Intensification for Green Hydrogen Production: Modeling and Simulation in Aspen Plus
- Özdemir Z.Ö.; Mutlubaş H.(2019). Enerji Taşıyıcısı Olarak Hidrojen ve Hidrojen Üretim Teknikleri
- Rahman Sna.;Masdar Ms.;Rosli Mı.;Majlan Eh.;Husaini T.;Kamarudin Sk.;Daud Wrw.(2016).Overview

- biohydrogen Technologies and application in fuel cell technology.-Renewable and Sustainable Energy Reviews
- Schneider S.; Bajohr S.; Graf F.; Kolb T.(2020) State of the Art of Hydrogen Production via Pyrolysis of Natural Gas
- Song H. ,Yang G.,, Xue P. , Li Y. ; Zou J. , Wang S. , Yang H.; , Chen H.(2022) Recent development of biomass gasification for H₂ rich gas production
- Song Zx.;Li Xh.;Li Ww.;Bai Yx.;Fan Yt.;Hou Hw.(2014).Direct bioconversion of raw corn stalk to hydrogen by a new strain *Clostridium* sp FS3.Bioresource Technology
- Sources Part A:Recovery.Utilization, and Environmental Effects.
- STM ThinkTech Raporu Yeşil Hidrojen Türkiye,2023
- Subin Kalu Et Al.(2022) Long-term potential of biochar to reduce greenhouse gas emissions and increase nitrogen use efficiency in boreal arable soils
- Tophanecioğlu.;Öztürk S.2009). Tarımsal Atıklardan Hızlı Piroliz Yöntemiyle Sentetik Sıvı Yakıt Eldesinde Piroliz Parametrelerinin Etkisi
- Üçgül İ.;Elibüyük U.(2014). Tekstil Atıklarının Piroliz ile Değerlendirilmesi
- Zhang Y. Et Al.(2021). Carbon
- Zhu H.;Parker W.;Basnar R.;Proracki A.;Faletta P.;Nelant M.;Seto P.(2008) Biohydrogen production by anaerobic co-digestion of municipal food waste and sewage sludges.Interbational Journal of Hydrogen Energy
- Wang C.; Li L.; Chen Y.;Ge Z.; Jin H.(2021) Supercritical water gasification of wheat straw: Composition of reaction products and kinetic study

Wu, C.;Williams P. T. (2010). Hydrogen from waste plastics by way of pyrolysis–gasification. Energy & Fuels

ANTİBAKTERİYEL POLİKARBAZOLLER

Fatma ÇOBAN¹

1. GİRİŞ

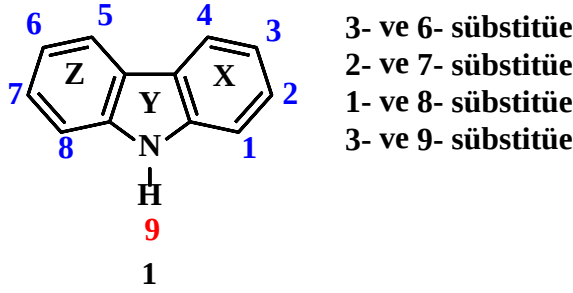
Polikarbazol, yapısındaki karbazol ünitesi nedeniyle yüksek kimyasal ve termal kararlılığa sahip bir polimerdir. Bu özellikleri nedeniyle organik elektronik, sensör teknolojileri ve enerji depolama uygulamaları alanında ilgi görmektedir. Polikarbazolün antibakteriyel özelliklerini iyileştirmeye yönelik çalışmalar çevre ve sağlık alanlarında büyük uygulama potansiyeline sahiptir. Antibakteriyel malzemeler mikroorganizmaların büyümesini durdurmak veya yok etmek için tasarlanmıştır. Geleneksel antibakteriyel ajanlara karşı direncin gelişmesiyle yeni nesil antibakteriyel polimerlerin önemi artmıştır. Bu alanda polikarbazol, antibakteriyel aktiviteye sahip fonksiyonel grupları bağlanarak veya altın, çinko ve titanyum gibi nanopartiküllerle nanokompozitler oluşturarak geniş bir antibakteriyel uygulama potansiyeli göstermektedir. Bu bölümde antibakteriyel polikarbazol bileşiklerinin yapısal özellikleri, antibakteriyel mekanizmaları ve uygulama alanları ayrıntılı olarak incelenecektir.

¹ Doktor Öğretim Üyesi: Burdur Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, fatmaakkus@mehmetakif.edu.tr, ORCID:0000-0003-4266-211X.

2. POLİKARBAZOL SENTEZİ VE YAPISAL ÖZELLİKLERİ

2.1. Karbazol

Karbazol, bir pirrol halkası ve iki kaynaşmış hidrokarbon benzen halkası içeren 14π elektron halka sistemine sahip bir trisiklik heterosiklik bileşiktir. Karbazol, indol ve pirolden daha az baziktir ve farmasötik öneme sahip çeşitli türevleri bulunmaktadır (Ji Ram et al. 2019). 1872'de, 150 yıldan fazla bir süre önce, Graebe ve Glaser, antraseni kömür katranı fraksiyonundan elde edilen ana bileşik 9H-karbazol'u (1) (Şekil 1) tanımlayan ilk kişilerdi. 180 yıl sonra, Murraya koenigii L. Spreng bitkisinden izole edilen murrayanin (3-formil-1-metoksikarbazol) bileşiğinin antimikrobiyal özelliklerinin açıklanması kimyagerler ve biyologlar arasında güçlü bir ilgi uyandırdı. O zamandan beri, bu doğal ürünlerin ilgi çekici yapısal özellikleri ve ümit verici farmakolojik aktiviteleri, çok sayıda sentez, derleme ve incelemeyle vurgulanan karbazol kimyasında muazzam bir gelişmeye yol açmıştır (Schmidt, Reddy, and Knölker 2012). Geleneksel olarak, trisiklik karbazol halka sistemleri X, Y ve Z ile gösterilir ve numaralandırma Şekil 1'de gösterildiği gibi halka X'den başlar. Bu incelemede kullanılan karbazol terimi, 9H-karbazol'ü ifade eder. Elektron bakımından zengin azot atomlarının orta ve para yönlendirmesi nedeniyle karbazol kolayca 3- ve 6- pozisyonlarından sübstitüentler bağlanıp reaksiyon vermektedir (Şekil 1). 3- ve 6- pozisyonlar sübstitüe olmuşsa 1- ve 8- konumundan fonksiyonel gruplar bağlanabilir. (Akbayrak and Önal 2016). Ek olarak, 2-, 7-, 3-, 9- sübstitüe edilmiş karbazol molekülleri ayrıca bulunmaktadır (Carbas 2025).



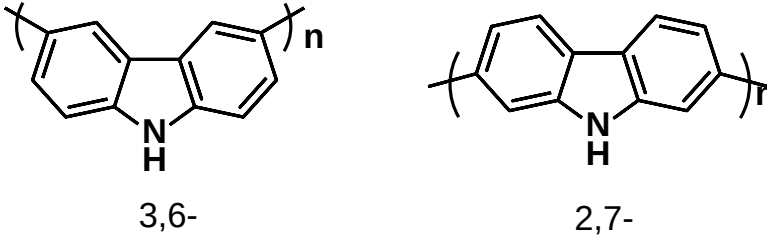
Şekil 1. Karbazol

2.2. Polikarbazol

Polikarbazol (PCz), pi-konjuge hetero aromatik bir yapı olan karbazol ünitesinin polimerleşmesi yoluyla ortaya çıkan yarı iletken bir organik polimerdir. Şekil 2’de karbazolün polimerleşme pozisyonlarından birkaçı verilmiştir. Karbazol içeren polimerlere olan ilgi ilk olarak H. Hoegl tarafından poli (N-vinilkarbazol) (PVK) içindeki fotoiletkenliğin keşfedilmesiyle ortaya çıkmıştır. 1957’de, uygun elektron alıcılarıyla duyarlılaştırılmış PVK’nın elektrofotografı gibi pratik uygulamalarda kullanışlı olacak kadar yüksek fotoiletkenlik seviyeleri gösterdiğini tespit edilmiştir. 1970’te poli-N-vinilkarbazolün 4,7-trinitrofluorenon (TNF) ile yük geçiş kompleksi olan organik bir fotoiletkenin ilk kez kullanıldığı Copier I serisini tanıtmıştır. Bu seri fotoiletken olup, 13 mm’lik tek tabakalı bir cihaz içermektedir. PVK ve TNF içeren bir tetrahidrofuran (THF) çözeltisinin bir alüminyum alt tabaka üzerine dökülmesiyle hazırlanmıştır (Grazulevicius et al. 2003). O zamandan bu yana çok sayıda karbazol türevli polimer bilimsel makalelerde ve ayrıca patent olarak tanımlanmaktadır.

Elektron açısından zengin olan hetereosiklik polikarbazol, organik elektronik, sensör teknolojileri ve elektroaktif kaplamalar gibi birçok ileri teknoloji alanında son yıllarda ilgi odağı haline gelmektedir (Czichy et al. 2021), (Ajeev et al. 2025). Bir azot atomu içeren üç halkalı konjuge yapı, karbazol çekirdeği için

elektriksel iletkenlik ve yüksek termal kararlılık özelliklerini sağlar (Zhou, Yang, and You 2012). İletken polimerler sınıfında yer alan polikarbazol, saf haliyle düşük iletkenliğe sahip olsa da uygun doping (dış katkı) işlemleri kullanılarak iletkenliğini artırabilir. Bunun yanı sıra, hole (delik) iletkenliği yüksek olan polikarbazol türevleri, OFET (Organic Field-Effect Transistor - Organik Alan Etkili Transistör), OLED (Organic Light Emitting Diode- Organik Işık Yayan Diyot), ve PSC (Perovskite Solar Cell- Perovskit Güneş Pili) gibi organik yarı iletken cihazlarda yaygın olarak kullanılmaktadır (Harun et al. 2007), (Malik et al. 2023), (Hoven et al. 2008).



Şekil 2. Polikarbazol

9H-karbazol çekirdeğinin elektro- ya da kimyasal polimerizasyonu, polikarbazol üretmek için kullanılır. Üç çeşit sentez yöntemi bulunmaktadır. Oksidatif kimyasal polimerizasyon, elektrokimyasal polimerizasyon ve katalitik çapraz eşleşme reaksiyonları, yaygın yöntemleridir (Roncali 1997).

2.2.1. Oksidatif Kimyasal Polimerizasyon

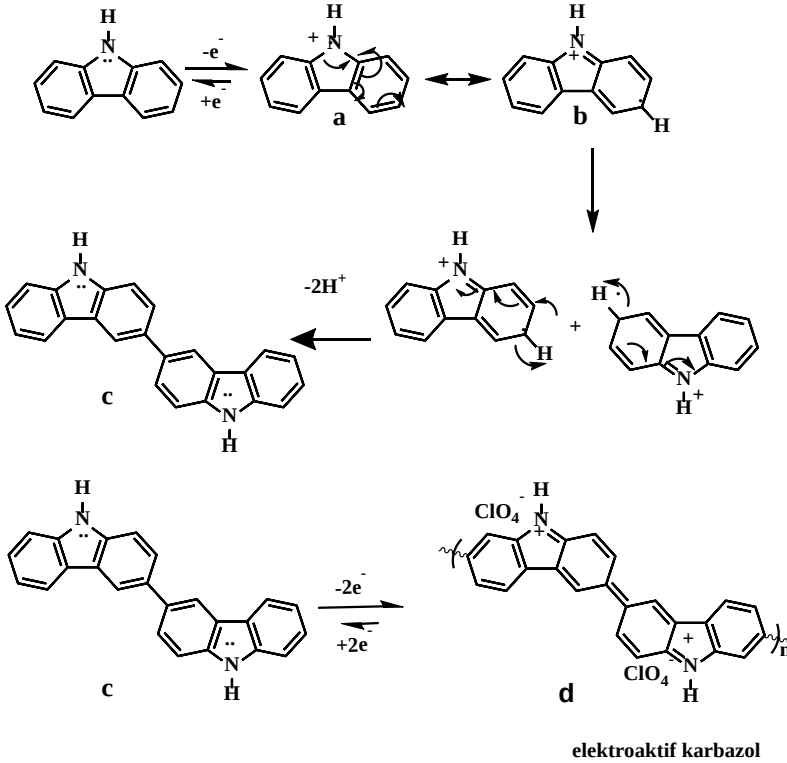
9H-karbazol gibi elektron zengin aromatik bileşiklerin bir oksidasyon ajanı kullanılarak (genellikle FeCl_3 , CuCl_2 , $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$) serbest radikal katyonları oluşturması sonucu polimerleşme gerçekleşir. Polimer zincirleri, ortamda oluşan radikal katyonlar tarafından oluşturulurken özellikle karbazolün 3- ve 6- pozisyonlarından bağlanarak polimer zincirlerini oluşturmaktadır (Chen and Han 2018).

2.2.2. Elektrokimyasal Polimerizasyon

Karbazol monomerinin bir elektrot yüzeyi üzerinde uygun solvent ve elektrolit (dopant) çözeltisinde üç elektrot içeren bir sistem yardımıyla (çalışma elektrodu, referans ve karşıt elektrotlar) elektrokimyasal yükseltgenme ile polimerleştirilme gerçekleşmektedir. Dönüşümlü voltametri tekniği kullanılarak monomer polimere yükseltgenmektedir. Yükseltgenen karbazol molekülünün radikal katyonları, elektrot yüzeyinde elektrokimyasal polimerleşerek ince film tabakalar oluşturur.

Elektronun hızlı transferi nedeniyle elektrokimyasal polimerleşme kimyasal polimerleşmeden daha iyidir. Ayrıca, reaksiyonun oda koşullarında gerçekleştirilmesi, homojen ve saf film üretilmesi, elektrot yüzeyinde polimer filmin birikmesi, film kalınlığının potansiyel ayarlanarak kontrol edilebilmesi gibi ek avantajları bulunmaktadır. (Hu et al. 2016), (Hsiao and Lin 2016), (Kuo et al. 2021).

Hückel Moleküler Orbital (HMO) teorisi, karbazol molekülünün reaksiyon bağlanma bölgelerinin 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8- ve 9- pozisyonlar olduğunu göstermektedir. Bu pozisyonlardan 3-, 6- ve 9-, molekülün birleşme yerleri olarak kimyasal reaksiyonlara açıkken, 1- ve 8- pozisyonlar karbazolün oldukça sert (rijit) yapısı nedeniyle sterik olarak engellediğinden reaksiyon zor gerçekleşmektedir. 3, 6 ve 9 pozisyonlarının bloke edilmesiyle nispeten kararlı katyon radikallerinin oluşacağı öngörülmektedir; (Şekil 3). (Ambrose, Carpenter, and Nelson 1975), (Mallick et al. 2019).

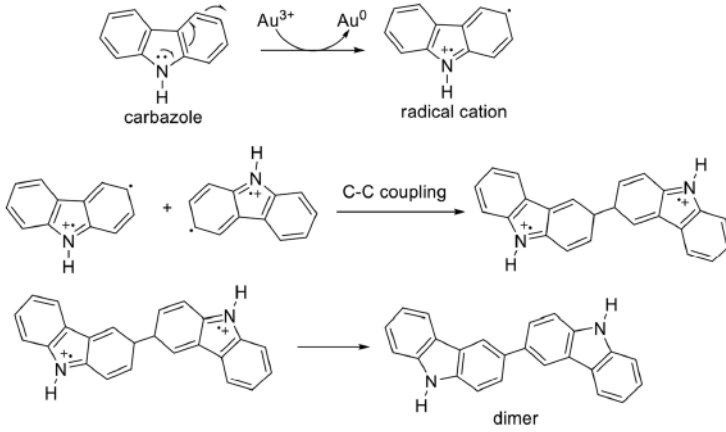


Şekil 3. Karbazolün elektrokimyasal polimerizasyonu.

Karbazolün elektrokimyasal polimerizasyonu, monomer her okside olduğunda molekül başına birer elektron içeren Elektrokimyasal-Kimyasal (EC) mekanizmasının tüm özelliklerini içerir. Bu durum ilk kez Ambrose ve arkadaşı tarafından açıklanmıştır. Karbazolün oksidasyon rezonans formları, *a* ve *b* katyon radikale ait Şekil 3'te verilmiştir (Ambrose and Nelson 1968). Bu iki bilim insanına göre, ortamda piridin gibi bir proton toplayıcı olmadığında karbazol katyon radikalleri (*a*) 3. pozisyonda dimerleşir ve 3,3'-dikarbazil bileşiği (*b*) oluşturmaktadır. Bu bileşik, karbazole kıyasla daha kolay oksitlenir ve elektrokimyasal hücrede kinon yapısına sahip bikatyon formu (*d*) şeklinde bulunmaktadır.

2.2.3. Katalitik çapraz eşleşme reaksiyonları

Katalitik çapraz-eşleşme reaksiyonları, karbon-karbon ve karbon-heteroatom bağlarının oluşmasını sağlayan organik sentez tekniklerindendir. Şekil 4'deki karbazolün oksidasyonu ile AuNP (altın nanopartikül) oluşumuna ilişkin önerilen mekanizmanın şematik gösterimi verilmiştir (Ajeev et al. 2025). Polikarbazol üyelerinin sentezinde monomer zincirlerin uzatılması ve fonksiyonel grupların türevlendirmesini mümkün hale getirmektedir. Suzuki-Miyaura, Sonogashira Stille, ve Buchwald-Hartwig çapraz-bağlantı reaksiyonları ile, karbazolün 3,6 veya 2,7 pozisyonlarına iyodo, bromo ve ya boronik asit bileşiklerinin bağlanması ile polimer zincirlerini sentezlemek veya çeşitli antibakteriyel işlevleri birleştirmek için yaygın olarak kullanılmaktadır (Zhang et al. 2022), (Zhou et al. 2016). Bu şekilde, Pd (0), Pd (II) veya Ni (0) gibi katalizör varlığında yüksek verimlilik, kontrollü zincir uzunluğu ve birden fazla fonksiyonel grup bağlama avantajlarına sahip olmaktadır. Örneğin, Suzuki-Miyaura reaksiyonu kullanılarak 3,6-dibromokarbazol ve aril boronik asidin paladyum katalizli konjuge yapılarını koruyan ve optoelektronik ve biyolojik uygulamalar için uygun tekniklere izin veren kopolimerler üretmektedir (Zhou et al. 2016). Ek olarak, çapraz eşleşme reaksiyonları geleneksel oksidatif polimerizasyona kıyasla polikarbazol sentezi için daha kontrollü, esnek, kalıcı ve özelleştirilebilir bir yöntem olabilmektedir.



Şekil 4. Karbazolün oksidasyonu ile AuNP'nin oluşumuna ilişkin önerilen mekanizması (Ajeev et al. 2025).

3. ANTİBAKTERİYEL MALZEMELERİN ÖNEMİ

Antibakteriyel malzemeler, mikroorganizmaların büyümesini durduran veya tamamen ortadan kaldıran maddeleri içerir. Bu malzemelerin, özellikle sağlık, gıda, tekstil, tıbbi cihazlar ve su arıtma gibi alanlar için mikrobiyal kontaminasyonu azaltma yetenekleri nedeniyle çok önemlidir.

Antibiyotik direncinin günümüzde giderek yaygınlaşmasıyla birlikte, bakterileri aktif veya pasif olarak etkisiz hale getirebilen yüzeylerin ve sistemlerin geliştirilmesi çok önemli hale gelmektedir (Chen et al., 2012).

3.1. Enfeksiyonların Önlenmesi

Hastane kaynaklı enfeksiyonlar veya HAI'ler (Healthcare-Associated Infection- Sağlık Hizmetleriyle İlişkili Enfeksiyonlar) özellikle bağışıklık sistemi zayıf olan insanlar için ölümcül olabilmekte ve ciddi sağlık sorunlarına neden olabilir. Dünya Sağlık Örgütü'ne göre dünya çapında hastane enfeksiyonları %7 ila %15 arasındadır (WHO, 2022). Dünya

Sağlık Örgütü'nün 2024 IPC (Infection Prevention and Control- Enfeksiyonların Önlenmesi ve Kontrolü) raporuna göre, düşük ve orta gelirli ülkelerde her 100 hastadan 15'i, yüksek gelirli ülkelerde her 100 hastadan 7'si enfeksiyon kapmaktadır. Hastane ortamlarında patojenlerin yayılmasını azaltmak için antibakteriyel yüzeyler ve kaplamalar kullanılabilmektedir.

3.2. Antibiyotik Direncine Alternatif

Antibiyotik direnci arttıkça, bakterilere karşı alternatif savunma mekanizmaları geliştirilmelidir. Antibakteriyel ajanlar, klasik antibiyotiklerin aksine fiziksel veya kimyasal mekanizmalar yoluyla direnç geliştirme potansiyelini azaltmaktadır (Pelgrift and Friedman 2013). Örneğin, kuantum noktaları, nano-gümüş, kitosan ve bazı geçiş metal kompleksleri hücre zarını bozarak bakterileri öldürebilmektedir.

3.3. Gıda Güvenliği

Gıda paketleme sistemlerinde sıklıkla kullanılan antibakteriyel malzemeler mikrobiyal bozulmayı önler ve ürünlerin raf ömrünü uzatır. Özellikle gıdaların yüzeyindeki kirlilik, halk sağlığını ciddi şekilde tehlikeye atabilir. Bu nedenle, toksik olmayan ve çevre dostu biyobozunur antibakteriyel malzemelerin geliştirilmesi hem sağlık açısından hem de ekonomik açıdan kritik öneme sahiptir (Appendini and Hotchkiss 2002).

3.4. Su ve Hava Arıtımı

İçme suyu ve havalandırma sistemlerinde, antibakteriyel filtreler bakteri, virüs ve mantarı temizler. Bu tür uygulamalarda kullanılan materyallerin kimyasal dayanıklılığı ve uzun süreli antibakteriyel özelliklerinin olması gerekmektedir. Bu alanda güm fotokatalitik özellik gösteren titanyum dioksit kaplamalar veya gümüş kaplamalı membranlar yaygın olarak kullanılır (Li et al. 2014).

3.5. Malzeme Ömrünü Uzatma ve Koku Giderimi

Birçok malzemenin bozulması sebebi ürün yüzeyinde bakteriyel biyofilm oluşumudur ve buda kötü kokuya neden olmaktadır. Antibakteriyel katkılı malzemelerin kullanımı, yapı ve tekstil malzemeleri gibi birçok alanda ürünlere hijyen sağlarken uzun ömürlü olmasını sağlamaktadır (Gao and Cranston 2008).

4. ANTİBAKTERİYEL POLİMERLERİN TERCİH EDİLME SEBEPLERİ

Antibakteriyel polimerler, uzun süreli antimikrobiyal etki, yüzeyde kalıcı koruma ve istenilen fiziksel-kimyasal özelliklerle kolayca modifiye edilebilme özellikleri nedeniyle geleneksel yöntemlere kıyasla çok daha avantajlı malzemelerdir. Polimer yapılarında bulunan antibakteriyel maddeler kontrollü bir şekilde salınarak uzun süre bakteri üremesini önleyebilirken, bu maddeler polimer matrislerine sıkı bağlanmaları sayesinde yüzeydeki etkilerini kaybetmeden kalıcılık sağlarlar. Ayrıca antibakteriyel polimer türevleri, gümüş iyonları, kuaterner amonyum bileşikler ve doğal antimikrobiyaller gibi hücre zarını doğrudan etkileyen yapılara sahip olduğundan antibiyotiklere kıyasla direnç geliştirme riski oldukça düşüktür (Ana and Luceño-s 2021). Gıda ambalajları, tekstiller, tıbbi cihazlar, su arıtma sistemleri ve yüzey kaplama ürünleri gibi birçok alanda kullanılabilen bu malzemeler, biyouyumluluk, esneklik ve çevre dostu üretim gibi çok yönlü özellikler sunmaktadır. Selüloz ve kitosan türevleri gibi doğal, biyolojik olarak kolay parçalanabilen polimerlerle çevre dostu çözümler oluşturmaktadır Tüm bu nedenlerden dolayı malzeme yüzeyinde hijyenini sağlamak, enfeksiyon riskini azaltmak, ve antibiyotik kullanımını en aza indirmek amacıyla antibakteriyel polimerler, modern malzeme

biliminin en önemli araştırma alanlarından biri olmaktadır (Bryaskova et al. 2025).

5. POLİKARBAZOLUN ANTİBAKTERİYEL UYGULAMALARDA POTANSİYELİ

Polikarbazol ve türevleri, konjuge π -elektron sistemleri sayesinde, termal ve kimyasal stabiliteleri ve kolayca değiştirilebilir yapıları nedeniyle son zamanlarda elektronik uygulamalarda ve biyomedikal alanda önemli bir potansiyele sahiptir. İletken polimerlerin, özellikle antibakteriyel uygulamalarda bakteriyel hücre zarını bozarak hücre ölümüne neden olabileceği çok sayıda çalışmada gösterilmiştir (Pan et al. 2024) (Bryaskova et al. 2025). Polikarbazolün, düzlemsel aromatik yapısı ve gözenekli delik taşıyıcı özellikleri nedeniyle yüzeylerde kolayca modifiye edilebilen güçlü fiziksel ve elektrostatik temaslar oluşturabilmektedir. Zhou ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada, Gram pozitif ve Gram negatif bitkilere karşı aktivite, polikarbazolün yapısına katlanabilen pozitif yüklü gruplar (örneğin kuarterner amonyum tuzları veya halkalı piridinyum bileşikler) tarafından daha da artırılabilirdiği gösterilmiştir (Zhou vd., 2019). Polikarbazole gümüş nanoparçacık grupları eklenmesiyle sadece iletkenlik değil aynı zamanda bakterisidal etki açısından sinerjik bir avantaj sağlamaktadır. Bu tür hibrit sistemler özellikle tıbbi cihaz kaplamaları, yara pansumanları ve antimikrobiyal tekstillerde kullanım için uygundur. Elektrokimyasal metotla yüzeye ince film kaplanmasıyla elde edilen polikarbazolün yüzey aktifliği artırılarak antimikrobiyal aktiviteyi desteklemektedir. Bu nedenle, polikarbazol, kimyasal işlenebilirlik yanı sıra işlevsel esneklik açısından antibakteriyel ürünlerin geliştirilmesi için umut vadeden bir platform sunmaktadır.

6. ANTİBAKTERİYEL MEKANİZMALAR,

Antibakteriyel polikarbazol ve polikarbazol esaslı kompozit malzemeler mikroorganizmalara karşı etkilerini iki ana mekanizma yoluyla göstermektedirler; fiziksel/kimyasal etkileşimler ve elektriksel etkileşimler.

6.1. Fiziksel/Kimyasal Etkileşimler

Özellikle gümüş (Ag), çinko oksit (ZnO) ve titanyum dioksit (TiO₂) gibi metal oksit nanoparçacıklarıyla doplenmiş (katkılanmış) polikarbazol kompozitleri, fiziksel ve kimyasal etkileşimler yoluyla bakterinin hücre duvarında yapısal bozulmalara ve hücre ölümüne neden olur (Rai, Yadav, and Gade 2009), (Rai et al. 2009), (Bryaskova et al. 2025), (Rai et al. 2012). Bununla birlikte, bu nanoparçacık türevleri reaktif oksijen üreterek (ROS) bakterilerin lipid zarlarını, protein yapılarını ve genetik kodlarını oksidatif strese sokmaktadır, bu da bakterinin DNA'sında ciddi zararlar vermektedir (Hajipour et al. 2012).

6.2. Elektriksel Etkileşimler

Polikarbazolün özel iletken yapısı nedeniyle elektriksel etkileşimler meydana gelir. Polikarbazol türevleri genellikle pozitif yüklü fonksiyonel gruplar ve halkalı siklik yapılar içermektedir. Polikarbazoldeki yüzey pozitif yükleri, bakteriyel hücre zarındaki fosfolipitlerdeki negatif yüklerle elektrostatik çekime girerek etkileşim sağlamaktadır. Bu, hücre membranının yapısal bütünlüğünü, iyon dengesini ve hücre içi denge sistemini bozmaktadır (Lichter, Vliet, and Rubner 2009). Gram-pozitif ve Gram-negatif bakterilerin hücre zarı yapıları, antibakteriyel aktif malzemeler etkileyebilir. Örneğin, daha kalın peptidoglikan katmanlarına sahip Gram pozitif bakteriler genellikle ROS üretimine karşı daha dirençlidir. Bununla birlikte, Gram-negatif bakterilerin dış membranları, özellikle iyonik etkileşimlere ve nanoparçacık girişine daha duyarlı hale gelmektedir (Slavin et al. 2017), (Xue et al., 2015). Sonuç olarak, polikarbazolün

antibakteriyel etkinliđi, kullanılan katkı maddesine ve hedeflenen bakteri türüne göre en iyi şekilde ayarlanmalıdır.

7. POLİKARBAZOL BAZLI ANTİBAKTERİYEL MALZEMELERİN ETKİLİ OLDUĞU BAKTERİLER

Polikarbazol bazlı antibakteriyel malzemeler, özellikle iletken yapıları ve yüzeylerine entegre edilen fonksiyonel gruplar sayesinde Gram-pozitif ve Gram-negatif bakterilerine karşı *geniş spektrumlu antimikrobiyal etki* gösterebilirler. Aşağıda bu tür malzemelerin etkili olduđu başlıca bakteriler listelenmiş ve kısaca açıklanmıştır:

7.1. *Staphylococcus aureus* (Gram-pozitif)

Patojen bakterilerinden biri olan *Staphylococcus aureus* sıklıkla hastane enfeksiyonlarına sebep olmaktadır. Polikarbazol bileşikleri, hücre duvarına zarar vererek bozmaktadır ve reaktif oksijen üretimi ile bakteriyel DNA'ya zarar vererek *S. aureus*'a karşı güçlü antibakteriyel etki göstermektedir (Wang, Hu, and Shao 2017).

7.2. *Escherichia coli* (Gram-negatif)

İdrar yolu ve gıda kaynaklı enfeksiyonlarda yaygındır. Polikarbazol kompozitleri, özellikle ZnO veya AgNP içeren bileşiklerde *E. coli*'ye karşı yüksek düzeyde bakterisit etki göstermektedir (Rai et al. 2009).(Ashmore et al. 2018), (Rai et al. 2012), (Gumienna and Gorna 2021).

7.3. *Pseudomonas aeruginosa* (Gram-negatif)

Yoğun bakım ünitelerinde ciddi enfeksiyonlara neden olur; antibiyotik direnci yüksek olup hastanelerin yoğun bakım odalarında ciddi enfeksiyona sebebiyet vermektedir. polikarbazol türevli yüzeyler yüksek elektriksel iletkenliğe sahip olduğundan,

P. aeruginosa hücre zarını bozmaktadır (Pachori, Gothwal, and Gandhi 2019).

7.4. *Bacillus subtilis* (Gram-pozitif, sporlu bakteri)

Spor forma sahip olduğu için zorlu çevre şartlarına dirençlidir. Polikarbazoller, özellikle kuaterner amonyum grubu içeren bileşiklerle etkili zar geçirgenliği oluşturabilmektedir.

7.5. *Klebsiella pneumoniae* (Gram-negatif)

Solunum yolu enfeksiyonları ve pnömoni vakalarında sıklıkla görülür. ROS üretimi ve polikarbazolün iyonik etkileşimleri bu dirençli bakteriye karşı aktivite sağlar.

7.6. *Listeria monocytogenes* (Gram-pozitif)

Ciddi gıda kaynaklı enfeksiyonlara neden olur. Fonksiyonel polikarbazol yüzeylerin bakteriyel büyüme üzerinde inhibitör etkileri olduğu gösterilmiştir.

8. GÜNCEL ARAŞTIRMALAR VE GELECEK PERSPEKTİFLERİ

Son yıllarda, küresel ölçekte antibakteriyel direnç sorununun artmasıyla birlikte, polikarbazol ve türevleri üzerindeki araştırmalar önemli ölçüde yoğunlaşmıştır. Polikarbazol, iletken yapısı, kimyasal kararlılığı ve kolay değiştirilebilirliği nedeniyle hem biyomedikal uygulamalarda hem de gıda ve yüzey koruma teknolojilerinde çekici bir polimer haline gelmiştir.

Son incelemelerde ilgi çeken bir diğer alan ise uyaranlara duyarlı (adaptif) antibakteriyel polimer sistemleridir. Bu sistemler, antibakteriyel durumları aktive etmek için pH, sıcaklık, ışık veya elektriksel uyaranlara yanıt vererek hedefli olarak aktive edilebilmektedir. Örneğin, ışıkla aktive olan polimer filmler, ışık altında ROS üretimi yoluyla bakterisit etkiler göstermektedir.

Ayrıca, biyolojik olarak parçalanabilir polimerlerle hibritlenmiş polikarbazol nanofiberler, yara örtüsü ve doku mühendisliği uygulamaları için potansiyel olabilmektedir. Aşağıda son yıllarda yapılan çalışmalar gözden geçirilmiş ve bu incelemeye eklenmiştir.

Organik çözücülerin kullanımını içeren ticari polimer kaplamaların işlenmesi ve uygulanması, uçucu organik bileşikler üretmesi ve bu da ciddi sağlık tehlikelerine ve fosil yakıtların tükenmesine sebep olmaktadır. Bu gibi sorunların çözebilmek için araştırmacılar, uçucu organik bileşen içermeyen sürdürülebilir oleo-polimer kaplamalar geliştirmek için birçok çaba sarfetmektedirler. Abu Darda ve Weqar Ahmad Siddiqi (2025) polikarbazol (PCz), PCz-kaplı MWCNT hibrit (PCz@CNT) nano dolgu maddeleri ve Pithecellobium dulce yağı polyester amid (PDPEtA) malzemesini elde etmişlerdir ve kaplama bileşiği *P. aeruginosa*, *B. Subtilis*, *E. coli*, ve *S. aureus* bakterilerine karşı antimikrobiyal ve antibiyofilm etkinliği gösterdiğini bulmuşlardır (Darda and Siddiqi 2025).

Chen ve grubu (2023) görünür ışığa duyarlı ve suda çözünür foto başlatıcılar olan 5,12-dihidroindolo[3,2-a] karbazol alkaloidler sentezlenmiştir. Işıkla başlatılan süreç sayesinde hızlı jelasyon ve homojen 3B yapı oluşumu sağlanmıştır. Hidrojeller, yüksek antibakteriyel aktivite gösterdiği bulunmuştur (Chen et al. 2023).

War ve Chisti (2022) tarafından yürütülen çalışmada, polikarbazol-çinko oksit (PCz/ZnO) nanokompozitinin sentezine ve bunun in vitro antibakteriyel biyomalzeme aktifliğine ve in silico DNA bağlanma kapasitesi araştırılmıştır. Sonuçlara göre PCz/ZnO nanokompozitinin, saf PCz'ye göre daha yüksek termal stabiliteye sahip ve ZnO nanoparçacıklarıyla PCz arasında daha güçlü yüzey etkileşimlerinin olduğunu gözlenmiştir. Antibakteriyel aktivitesi agar difüzyon yöntemi ile belirlenmiştir

ve nanokompozitin *E. coli*, *P. aeruginosa*, *K. pneumoniae* ve *S. aureus* gibi önemli patojenlere karşı yüksek inhibisyon göstermiştir (War and Chisti 2022).

Kausar ve ekibinin yaptığı (2021) makale mükemmel asetaldehit algılama yeteneği gösteren polikarbazol-çok duvarlı karbon nanotüp nanokompoziti (PCz/MWCNT) kimyasal oksidatif polimerizasyon tekniği ile hazırlanmıştır. Nanokompozitin (PCz ve PCz/MWCNT) hem Gram pozitif hem de Gram negatif bakterilere üzerine antibakteriyel aktivitelerinin karşılaştırmalı sonuçları, PCz/MWCNT nanokompozitinin önemli antibakteriyel aktivitesini göstermektedir. Benzer şekilde, PCz/MWCNT nanokompoziti de saf PCz polimerinden daha iyi antihelmintik aktivite gösterdiği de bulunmuştur (Kausar et al. 2021).

Zia ve arkadaşlarının (2020) mevcut çalışmasında, *Brassica oleracea*'nın (lahana) doğal bir özütü kullanılarak α -MnO₂ nanorodlarının polikarbazol ile birleştirilerek elde edilen α -MnO₂/PCz nano hibritlerini yani α -MnO₂/PCz'yi açıklamaktadır. Ayrıca Bactrim DS ilacının (trimetoprim + sulfametoksazol) fotokatalitik bozulmasını hidroksil radikalleri ($\cdot$ OH) ve süperoksit ($\cdot$ O₂⁻) radikalleri neden olduğu tespit edilmiştir (Zia, Aazam, and Riaz 2020).

Iram ve arkadaşlarının (2015) gerçekleştirdiği bu çalışmada TiO₂ nanopartiküllerinin varlığında oksitleyici madde olarak amonyum peroksidisülfat (APS) ile oksidatif polimerizasyon yöntemiyle polikarbazol-titanyum dioksit (PCz/TiO₂-8) nanokompoziti sentezlenmiştir. PCz/TiO₂-8 nanokompoziti antimikrobiyal aktivite açısından test edilmiştir ve mikromolar konsantrasyonlarda Gram negatif ve Gram pozitif bakterilere karşı aktivite gösterdiği bulunmuştur (Iram et al. 2015).

Shakir ve arkadaşlarının (2014) çalışmasında, elektriksel olarak iletken polikarbazol-titanyum dioksit nanokompoziti (PCz/TiO₂), titanyum dioksit (TiO₂) nanopartiküllerinin varlığında karbazolün (Cz) kimyasal oksidatif polimerizasyonu gerçekleştirilmiştir. PCz/TiO₂ FT-IR (Fourier Transform Infrared Spectroscopy-Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi), SEM (Scanning Electron Microscopy- Taramalı Elektron Mikroskobu), TEM (Transmission Electron Microscopy-Geçirimli Elektron Mikroskobu), XRD (X-Ray Diffraction-X-Işını Kırınımı), TGA (Thermogravimetric Analysis-Termogravimetrik Analiz), DTA (Differential Thermal Analysis-Diferansiyel Termal Analiz) gibi karakterizasyon sonuçları, PCz ve TiO₂ nanopartikülleri arasında güçlü bir etkileşim olduğunu ve nanokompozitlerin saf PCz'den daha yüksek termal kararlılık gösterdiği doğrulanmıştır. PCz'nin, PCz/TiO₂-7 nanokompozitinin ve siprofloksasin ilacının farklı bakteriler üzerindeki karşılaştırmalı antimikrobiyal aktiviteleri de incelenmiştir ve sonuçta PCz/TiO₂ nanokompozit malzeme, nanokompozitteki TiO₂ ile bu grupların elektron verici gruplarının koordinasyonu yoluyla mikroorganizmaların hücresel enzimlerini ve DNA'sını etkisiz hale getirerek kusurlara neden olabileceği bulunmuştur (Shakir et al. 2014).

Zhuo ve diğerlerinin yaptığı (2013) çalışma, polikarbazol (PCz) küreleri ve Ag/polikarbazol kompozitleri (Ag/PCz), ilk kez polivinilpirolidion (PVP) destekli hidrotermal yöntemle basit çevre dostu ve düşük maliyetle başarıyla sentezlenmiştir. PCz ile karşılaştırıldığında, Ag/PCz'nin sinerjik lüminesans davranışları mor ve mavi bölgede göstermiştir. PCz ve Ag/PCz sırasıyla mavi ve yeşil ışık emisyon malzemeleri olarak kullanılabilir (Zhuo et al. 2013).

Wang ve ekip arkadaşları (2005) diprenil grubu bağlı indol türevi, (E)-3-(3-hidroksimetil-2-bütenil)-7-(3-metil-2-bütenil)-1H-indol (1) ve karbazol alkaloidi, Glycosmis montana

Pierre'in (Rutaceae) dallarından ve yapraklarından izole etmişlerdir ve bu makale sonuçlarına göre alkaloidler (1-3), C8166 hücrelerinde HIV replikasyonuna karşı zayıf ila orta düzeyde in vitro inhibitör aktivite gösterdi ve ayrıca (karbalexin A ve B ile birlikte) insan lösemi hücresinde CCRF-CEM'e karşı sitotoksik etki gösterdiğini tespit etmişlerdir (Wang et al. 2005).

Meralgelman, Mackee, ve Boyd (2000) Murraya siamensis bitkisinin organik ekstraktından, biyoyönlendirilmiş fraksiyonlama yöntemi kullanılarak üç karbazol alkaloidi izole edilmiştir. Moleküler formülü $C_{18}H_{19}NO$ olan siamenol, 3-hidroksi-6-metil-2-prenilkarbazol olarak tanımlanmıştır. Ekstraktlar, XTT-tetrazolium temelli anti-HIV testinde değerlendirilmiş; siamenol bileşiği, EC_{50} değeri $2.6 \mu g/mL$ ile en yüksek aktiviteyi göstermiştir. Mahanimbilol daha düşük etkinlik gösterirken ($EC_{50} = 8.6 \mu g/mL$), mahanimbine anti-HIV etkisi göstermemiştir. Bu, siamenol'ün karbazol türevleri içinde anti-HIV özelliğe sahip nadir doğal ürünlerden biri olduğunu tespit etmişlerdir (Meragelman, Mckee, and Boyd 2000).

9. SONUÇ

Antibakteriyel özelliğe sahip polikarbazoller, organik iletken polimerlerin eşsiz elektronik ve kimyasal özelliklerini etkili antibakteriyel işlevlerle birleştiren yeni malzemelerdir. Bu malzemeler, nanokompozitlerin ve işlevsel modifikasyonların yardımıyla tıbbi, çevresel ve endüstriyel alanlarda büyük potansiyele sahiptir. Gelecek yıllarda daha çevreci, biyomodifiye ve yüksek performanslı antibakterisid polikarbazol ürünlerin geliştirilmesi için disiplinler arası çalışmalar artırılmalıdır. Bu, antibakteriyel direnç sorununa karşı sürdürülebilir çözümler üretmek için kullanılabilir.

KAYNAKÇA

- Ajeev, Arya, Sara Maslaczynska-salome, Saeideh Alipoori, Colton Duprey, and Evan K. Wujcik. 2025. "From the Synthesis of Wearable Polymer Sensors to Their Potential for Reuse and Ultimate Fate." *Chemical Science* 16:9056–75. doi: 10.1039/d5sc01634g.
- Akbayrak, Merve, and Ahmet M. Önal. 2016. "Synthesis and Electrochemical Polymerization of Diketopyrrolopyrrole Based Donor-Acceptor-Donor Monomers Containing 3,6 and 2,7 Linked Carbazoles." *Polymer Chemistry* 7:6110–19. doi: <https://doi.org/10.1039/C6PY01489E>.
- Ambrose, J. F., and Robert F. Nelson. 1968. "Anodic Oxidation Pathways of Carbazoles." *Journal of the Electrochemical Society* 115(11):1159–68. doi: 10.1149/1.2410929.
- Ambrose, James F., Lawrence L. Carpenter, and Robert F. Nelson. 1975. "Electrochemical and Spectroscopic Properties of Cation Radicals: III . Reaction Pathways of Carbazolium Radical Ions." *Journal of The Electrochemical Society* 122(7):876–94. doi: 10.1149/1.2134365.
- Ana, M. D., and A. Luceño-s. 2021. "Antibacterial Activity of Polymer Nanocomposites Incorporating Graphene and Its Derivatives : A State of Art." *Polymers* 13(13):2105. doi: <https://doi.org/10.3390/polym13132105>.
- Appendini, Paola, and Joseph H. Hotchkiss. 2002. "Review of Antimicrobial Food Packaging." *Innovative Food Science and Emenrging Technologies* 3:113–26. doi: [https://doi.org/10.1016/S1466-8564\(02\)00012-7](https://doi.org/10.1016/S1466-8564(02)00012-7).
- Ashmore, D. Andrea, Atul Chaudhari, Brandi Barlow, Brett Barlow, Talia Harper, Komal Vig, Michael Miller, Shree Singh, and Edward Nelson. 2018. "Evaluation of E. Coli

- Inhibition by Plain and Polymer-Coated Silver Nanoparticles.” *Rev Inst Med Trop Sao Paulo* 60(18):1–78. doi: 10.1590/s1678-9946201860018.
- Bryaskova, Rayna, Nikoleta Philipova, Ventsislav Bakov, and Nikolai Georgiev. 2025. “Innovative Antibacterial Polymer Coatings.” *Applied Sciences* 15(4):1–20. doi: 10.3390/app15041780.
- Carbas, Buket Bezgin. 2025. “Disruptive Electrochromic Materials: Carbazole-Based Conjugated Polymers.” *ACS Applied Polymer Materials* 7:4051–76. doi: 10.1021/acsapm.4c03585.
- Chen, Hong, Timur Borjigin, Christophe Regeard, Pu Xiao, Frédéric Dumur, and Jacques Lalevée. 2023. “Soluble Photoinitiators for 3D Antibacterial Hydrogels Preparation.” *Nano- Micro Small* 19(50):2300772. doi: 10.1002/sml.202300772.
- Chen, Qi, and Bao Hang Han. 2018. “Microporous Polycarbazole Materials: From Preparation and Properties to Applications.” *Macromolecular Rapid Communications* 39(9):1–11. doi: 10.1002/marc.201800040.
- Czichy, Malgorzata, Patryk Janasik, Pawel Wagner, David L. Officer, and Mieczyslaw Lapkowski. 2021. “Electrochemical and Spectroelectrochemical Studies on the Reactivity of Perimidine–Carbazole–Thiophene Monomers towards the Formation of Multidimensional Macromolecules versus Stable π -Dimeric States.” *Materials* 14(9):2167. doi: 10.3390/ma14092167.
- Darda, Abu, and Weqar Ahmad Siddiqi. 2025. “Mechanically Robust Bifunctional Hydrophobic Polycarbazole-Decorated Multiwall Carbon Nanotube-Pithecellobium Dulce Oil Polyester Amide Nanocomposite Coatings:

- Fabrication{,} Characterization{,} Anticorrosive and Antimicrobial Studies.” *J. Mater. Chem. A* 13(7):4881–98. doi: 10.1039/D4TA06332E.
- Gao, Yuan, and Robin Cranston. 2008. “Recent Advances in Antimicrobial Treatments of Textiles.” *Textile Research Journal* 78(1):60–72. doi: 10.1177/0040517507082332.
- Grazulevicius, J. V, P. Strohriegl, J. Pielichowski, and K. Pielichowski. 2003. “Carbazole-Containing Polymers : Synthesis , Properties and Applications.” *Progress in Polymer Science* 28:1297–1353. doi: 10.1016/S0079-6700(03)00036-4.
- Gumienna, Malgorzata, and Barbara Gorna. 2021. “Antimicrobial Food Packaging with Biodegradable Polymers.” *Molecules* 26(3735). doi: 10.3390/molecules26123735.
- Hajipour, Mohammad J., Katharina M. Fromm, Ali Akbar Ashkarran, Dorleta Jimenez De Aberasturi, Idoia Ruiz De Larramendi, and Teofilo Rojo. 2012. “Antibacterial Properties of Nanoparticles.” *Trends in Biotechnology* 30(10):499–511. doi: 10.1016/j.tibtech.2012.06.004.
- Harun, Mohd Hamzah, Elias Saion, Anuar Kassim, Noorhana Yahya, and Ekramul Mahmud. 2007. “Conjugated Conducting Polymers : A Brief Overview.” *JASA* 2 2(May 2016):63–68.
- Hoven, Corey V., Andres Garcia, Guillermo C. Bazan, and Thuc Quyen Nguyen. 2008. “Recent Applications of Conjugated Polyelectrolytes in Optoelectronic Devices.” *Advanced Materials* 20(20):3793–3810. doi: 10.1002/adma.200800533.
- Hsiao, Sheng-huei, and Shu-wei Lin. 2016. “Polymer Chemistry Electrochemical Synthesis of Electrochromic

- Polycarbazole Fi Lms from N -Phenyl-.” *Polym. Chem.* 7:198–211. doi: 10.1039/c5py01407g.
- Hu, Bin, Wen Luo, Lin Jin, Zengchen Liu, Mengnan Wang, Liuyang Zhou, and Chunyang Li. 2016. “Electrochemical and Spectroelectrochemical Properties of Poly (Carbazole-EDOT) s Derivatives Functionalized with Benzonitrile and Phthalonitrile Units.” *ECS Journal of Solid State Science and Technology* 5(2):21–26. doi: 10.1149/2.0091602jss.
- Iram, Noor e, Mohd Shoeb Khan, Reshma Jolly, Mohammad Arshad, Mahboob Alam, Parvez Alam, Rizwn Hasan Khan, and Farya Firdauz. 2015. “Journal of Photochemistry & Photobiology , B : Biology Interaction Mode of Polycarbazole – Titanium Dioxide Nanocomposite with DNA : Molecular Docking Simulation and in-Vitro Antimicrobial Study.” *Journal of Photochemistry & Photobiology, B: Biology* 153:20–32. doi: 10.1016/j.jphotobiol.2015.09.001.
- Ji Ram, Vishnu, Arun Sethi, Mahendra Nath, and Ramendra Pratap. 2019. *Five-Membered Heterocycles*.
- Kausar, Huma, Mohd Shoeb, Aminul Islam, Anees Ahmad, Ravi Kant, and Shahab A. A. Nami. 2021. “Polycarbazole-Multiwalled Carbon Nanotubes Based Nanocomposite : Synthesis , Spectral , Biocidal and Acetaldehyde Sensing Studies.” *Journal of Molecular Structure* 1229:12974. doi: 10.1016/j.molstruc.2020.129704.
- Kuo, Chung-wen, Jui-cheng Chang, Jeng-kuei Chang, Sheng-wei Huang, Pei-ying Lee, and Tzi-yi Wu. 2021. “Electrosynthesis of Electrochromic Polymer Membranes Based on 3 , 6-Di (2-Thienyl) Carbazole and Thiophene Derivatives.” *Membranes* 11(125):1–19. doi: <https://doi.org/10.3390/membranes11020125>.

- Li, Xiaoning, Sandra M. Robinson, Akash Gupta, Krishnendu Saha, Ziwen Jiang, Daniel F. Moyano, Ali Sahar, Margaret A. Riley, and Vincent M. Rotello. 2014. "Functional Gold Nanoparticles as Potent Antimicrobial Agents against Multi-Drug-Resistant Bacteria." *ACS Nano* 8(10):10682–86.
- Lichter, Jenny A., Krystyn J. Van Vliet, and Michael F. Rubner. 2009. "Design of Antibacterial Surfaces and Interfaces : Polyelectrolyte Multilayers as a Multifunctional Platform." *Macromolecules* 42(12):8573–86. doi: <https://doi.org/10.1021/ma901356s>.
- Malik, Akhtar Hussain, Faiza Habib, Mohsin Jahan Qazi, Mohd Azhardin Ganayee, Zubair Ahmad, and Mudasir A. Yattoo. 2023. "A Short Review Article on Conjugated Polymers." *Journal of Polymer Research* 30(3):1–15. doi: 10.1007/s10965-023-03451-w.
- Mallick, Sudesh, Sudhakar Maddala, Kalidass Kollimalayan, and Parthasarathy Venkatakrishnan. 2019. "Oxidative Coupling of Carbazoles: A Substituent-Governed Regioselectivity Profile." *Journal of Organic Chemistry* 84(1):73–93. doi: 10.1021/acs.joc.8b02322.
- Meragelman, Karina M., Tawnya C. Mckee, and Michael R. Boyd. 2000. "Siamenol , a New Carbazole Alkaloid from *Murraya Siamensis*." *J Nat Prod* 63:427–28.
- Pachori, Preeti, Ragini Gothalwal, and Puneet Gandhi. 2019. "Emergence of Antibiotic Resistance *Pseudomonas Aeruginosa* in Intensive Care Unit ; a Critical Review." *Genes & Diseases* 6(2):109–19. doi: <https://doi.org/10.1016/j.gendis.2019.04.001>.
- Pan, Youheng, Jing Zhang, Xin Guo, Yarou Li, Lanlan Li, and Lijia Pan. 2024. "Recent Advances in Conductive

- Polymers-Based Electrochemical Sensors for Biomedical and Environmental Applications.” *Polymers* 16(11):1597. doi: <https://doi.org/10.3390/polym16111597>.
- Pelgrift, Robert Y., and Adam J. Friedman. 2013. “Nanotechnology as a Therapeutic Tool to Combat Microbial Resistance ☆.” *Advanced Drug Delivery Reviews* 65(13–14):1803–15. doi: 10.1016/j.addr.2013.07.011.
- Rai, M. K., S. D. Deshmukh, A. P. Ingle, and A. K. Gade. 2012. “Silver Nanoparticles: The Powerful Nanoweapon against Multidrug-Resistant Bacteria.” *Journal of Applied Microbiology* 112:841–52. doi: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2672.2012.05253.x>.
- Rai, Mahendra, Alka Yadav, and Aniket Gade. 2009. “Silver Nanoparticles as a New Generation of Antimicrobials.” *Biotechnology Advances* 27(1):76–83. doi: 10.1016/j.biotechadv.2008.09.002.
- Roncali, Jean. 1997. “Synthetic Principles for Bandgap Control in Linear π -Conjugated Systems.” *Chemical Reviews* 97(1):173–206. doi: 10.1111/j.1754-4505.2009.00107.x.
- Schmidt, Arndt W., Kethiri R. Reddy, and Hans Joachim Knölker. 2012. “Occurrence, Biogenesis, and Synthesis of Biologically Active Carbazole Alkaloids.” *Chemical Reviews* 112(6):3193–3328. doi: 10.1021/cr200447s.
- Shakir, Mohammad, Mohd Shoeb Khan, Saud Ibrahim Al-resayes, Asif Ali Khan, and Umair Baig. 2014. “Electrical Conductivity , Isothermal Stability , and Ammonia-Sensing Performance of Newly Synthesized and Characterized Organic – Inorganic Polycarbazole – Titanium Dioxide Nanocomposite.” *Industrial &*

- Engineering Chemistry Research* 53(19):8035–44. doi: 8035–8044 <https://doi.org/10.1021/ie404314q>.
- Slavin, Yael N., Jason Asnis, Urs O. Häfeli, and Horacio Bach. 2017. “Metal Nanoparticles : Understanding the Mechanisms behind Antibacterial Activity.” *Journal of Nanobiotechnology* 15(65):1–20. doi: 10.1186/s12951-017-0308-z.
- Wang, Junsong, Yongtang Zheng, Thomas Efferth, Ruirui Wang, Yuemao Shen, and Xiaojiang Hao. 2005. “Indole and Carbazole Alkaloids from *Glycosmis Montana* with Weak Anti-HIV and Cytotoxic Activities.” *Photochemistry* 66:697–701. doi: 10.1016/j.phytochem.2005.02.003.
- Wang, Linlin, Chen Hu, and Longquan Shao. 2017. “The Antimicrobial Activity of Nanoparticles : Present Situation and Prospects for the Future.” *International Journal of Nanomedicine* 14(12):1227–49. doi: <https://doi.org/10.2147/IJN.S121956>.
- War, Jahangir Ahmad, and Hamida-tun-nisa Chisti. 2022. “In-Situ Polymerization of Polycarbazole-Zinc Oxide Nanocomposite : An in Silico Docking Model and in Vitro Antibacterial Biomaterial.” *European Polymer Journal* 181:111701. doi: <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2022.111701>.
- Zhang, Xiaofeng, Lingwei Feng, Kai Zhang, and Shi Yong Liu. 2022. “Carbazole and Diketopyrrolopyrrole-Based D-A π -Conjugated Oligomers Accessed via Direct C–H Arylation for Opto-Electronic Property and Performance Study.” *Molecules* 27(24):9031. doi: 10.3390/molecules27249031.
- Zhou, Huaxing, Liqiang Yang, and Wei You. 2012. “Rational Design of High Performance Conjugated Polymers for

Organic Solar Cells.” *Macromolecules* 45(2):607–32. doi: 10.1021/ma201648t.

Zhou, Zihong, Yaqi Zhang, Wang Xia, Huixuan Chen, Hao Liang, Xuefeng He, Sifan Yu, Rihui Cao, and Liqin Qiu. 2016. “Palladium-Catalyzed Suzuki–Miyaura Coupling Reactions of Boronic Acid Derivatives with Aryl Chlorides.” *Asian Journal of Organic Chemistry* 5(10):1260–68. doi: 10.1002/ajoc.201600319.

Zhuo, Yujiang, Cuiling Du, Xingqi Li, Wendong Sun, and Ying Chu. 2013. “One-Step Synthesis and Photoluminescence Properties of Polycarbazole Spheres and Ag / Polycarbazole Core / Shell Composites.” *European Polymer Journal* 49(6):1365–72. doi: 10.1016/j.eurpolymj.2013.02.022.

Zia, Jannatun, Elham S. Aazam, and Ufana Riaz. 2020. “Synthesis of Nanohybrids of Polycarbazole with α -MnO₂ Derived from Brassica Oleracea : A Comparison of Photocatalytic Degradation of an Antibiotic Drug under Microwave and UV Irradiation.” *Environmental Science and Pollution Research* 27:24173–89. doi: <https://doi.org/10.1007/s11356-020-08149-w>.

AKADEMİK PERSPEKTİFTEN KİMYA

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