
AKADEMİK PERSPEKTİFTEN FİZİK

Editör: Prof.Dr. Cem Cüneyt ERSANLI



yaz
yayınları

Akademik Perspektiften Fizik

Editör

Prof.Dr. Cem Cüneyt ERSANLI

yaz
yayınları

2025

Akademik Perspektiften Fizik

Editör: Prof.Dr. Cem Cüneyt ERSANLI

© 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 978-625-5596-51-2

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

Supporting Nuclear Shell Model Calculations by Machine Learning	1
<i>Serkan AKKOYUN</i>	
Bazı Glutamik Asit Türevlerinin Manyetik Değerlerinin Karşılaştırılması.....	20
<i>Mehmet Halim BAŞKAN</i>	
Malzeme Fizikinden Ürüne: Şekil Hafızalı Alaşımların Endüstriyel Dönüşümü	53
<i>Osman ARMAĞAN, Esra ARMAĞAN</i>	
Gas Sensors	72
<i>Handan AYDIN, Cihat AYDIN</i>	
Organobromine Compound from Algae: A Theoretical Study on the Basis of Thermodynamics	90
<i>Cem Cüneyt ERSANLI</i>	
Karbonlu Meteoritler.....	111
<i>Ceren KAMİL, Çisem ALTUNAYAR ÜNSALAN, Ozan ÜNSALAN</i>	
Optisyenlik İşletmelerinin Doğru Lokasyon Seçiminde Karar Faktörleri: Rize Kent Merkezi Örneği	152
<i>Mutlu GÜNEY, Özge ERDEM</i>	
Lösemi Hastalığının Tanı ve İzleminde Kan Örneklerinin FTIR Spektroskopisi ile Değerlendirilmesi.....	167
<i>Çisem ALTUNAYAR ÜNSALAN</i>	

Metal-Organik Kafes (MOF) Yapıların Optik Özelliklerinin İncelenmesi	188
<i>Ali UĞUR, Arife GENCER İMER</i>	
Application Areas of MgB2 in Terms of Energy Efficiency.....	210
<i>Özge ERDEM</i>	
Photocurrent Generation and Mechanisms in Two-Dimensional Materials	230
<i>Selim ÜNAL</i>	
Exploring Nuclear Reactors: History, Types, and Educational Simulations for Public Awareness.....	245
<i>Ali Özhan AKYÜZ, Elif P. TUNCER, Yeşim ÖKTEM</i>	
Nuclear Energy: Risks, Society and Türkiye's Experience.....	272
<i>Ali Özhan AKYÜZ, Elif P. TUNCER, Yeşim ÖKTEM</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."

SUPPORTING NUCLEAR SHELL MODEL CALCULATIONS BY MACHINE LEARNING¹

Serkan AKKOYUN²

1. INTRODUCTION

Many phenomena such as ground and excited state spin and parity of atomic nuclei, existence of nuclear magic numbers, magnetic moments, Nuclear density can be successfully explained with the scope of nuclear shell model (Krane, 2001). According to this model, the motion of each nucleon (proton or neutron in the nucleus) is governed by an average field created by all other nucleons. Similar to the atomic shell model that describes the location of electrons in the atom, a similar model has been developed for nucleons in the nucleus (Mayer, 1948; Mayer, 1949; Mayer, 1959; Talmi, 2005, Jensen, 1949). However, in the atomic nucleus, there is no external potential source created by the Coulomb field as in the atom. On the other hand, the nucleons in the nucleus move in an average potential they create and under the influence of this potential. In the case where all protons or neutrons in the nucleus fill the shells, nuclear magic numbers are obtained. The atomic nucleus in which only protons or neutrons form a filled shell is called a single magic nucleus. The nuclei in which both protons and neutrons fill the shells are called double magic nuclei. These nuclei are considered as core nuclei in shell model calculations. The magic numbers are 2, 8, 20, 28, 50, 82 and 126 (Haxel, 1949). For example, ^4He , ^{16}O ,

¹ This work is supported by the Scientific Research Project Fund of Sivas Cumhuriyet University under the project number

² Prof. Dr., Sivas Cumhuriyet University, Faculty of Sciences, Department of Physics, sakkoyun@cumhuriyet.edu.tr, ORCID: 0000-0002-8996-3385.

^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{56}Ni , ^{78}Ni , ^{100}Sn , ^{132}Sn and ^{208}Pb have magic numbers for both protons and neutrons. These nuclei have extraordinary stability. In the nuclear shell model, when the nuclei have filled shells, the ground state has zero total angular momentum. The addition of a valence nucleon determines the spin and parity of the ground state. When nucleons are removed from the ground state, they change the angular momentum of the nucleus, as well as the parity and isospin projection quantum numbers.

The nuclear shell model describes how much energy is required to move nucleons from one orbit to another and how quantum numbers change. Thereby, excited nuclear states can decay to more stable states. Measuring the transition probabilities between nuclear energy levels requires special alpha, beta, and gamma detectors and associated electronic circuits to precisely determine the energy and half-life of the decay. Quantum mechanics and the nuclear shell model allow calculations of the transition probability, energy, spin, and parity values between nuclear levels. For nuclei whose structures can be described by valence nucleons outside of filled shells, the results obtained from shell model calculations agree very well with experimental values (Huth, 2018).

As in atomic physics, the degeneracy of each energy level is the number of nucleons that that level can accommodate and is calculated by $(2j+1)$. In the use of these potentials, it is possible to see the magic numbers 2, 8 and 20, but higher magic numbers cannot be observed. In order to obtain the higher magic numbers, the spin-orbit interaction term for the centrally symmetric potential is added to the potential expression. In 1949, Mayer and his colleagues showed that adding a spin-orbit potential to the potential would give the exact separation of the subshells. Fukui et al. investigated the shell model effective Hamiltonian, including three-body contributions for the p shell nucleus, and showed how the inclusion of three-body correlations between

valence nucleons improved the fit of the calculated binding energies (Fukui, 2018). Navratil and Barrett made calculations for p shell nuclei with $A = 7-11$ without considering any core nuclei (Navratil and Barrett, 1993). Liebig et al. presented an algorithm for light p-shell nuclei (Liebig, 2015). Yuan et al. studied boron, carbon, nitrogen and oxygen isotopes with a newly constructed shell model Hamiltonian developed from the monopole-based universal interaction (Yuan, 2012). In all these studies, some isotopes of some elements in the p shell were studied. In the studies, the three-body interaction contribution was investigated and different interaction Hamiltonians were produced and used.

In this study, the determination of the single particle term of the nuclear shell model Hamiltonian, which is considered in the nuclear shell model calculations, has been modified by machine learning methods. Thus, it is aimed to make the nuclear properties such as energy states obtained from the shell model calculations more compatible with the experimental data. In the study, the nuclear shell model, which is a powerful tool in the investigation of the nuclear structures of atomic nuclei, has been applied on the atomic nuclei located in the p shell. As can be seen from Figure 1, the p shell is the shell located between the magic numbers 2 and 8, containing the $p_{3/2}$ and $p_{1/2}$ orbitals.

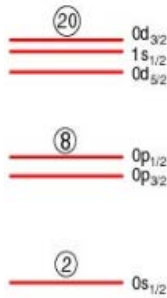


Figure 1 The p-shell orbitals between the first two magic numbers 2 and 8.

In order to perform shell model calculations in this shell, the first term in the Hamiltonian given below in Eq.1, the single particle term (ϵ), must be known with high accuracy. This term can be obtained for the p shell from ^5He , which has 1 valence neutron, and from ^5Li , which has 1 valence proton.

$$H = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l \quad \text{Eq.1}$$

Various methods and calculation techniques are used to obtain neutron single particle energy as summarized following.

(d, p) Reactions: In such experiments, a nucleus is bombarded by deuterium and occupies a neutron level by emitting a proton. These reactions are used to examine single particle energy levels.

(p, d) Reactions: A nucleus is bombarded by protons and a deuterium is emitted. This allows the removal of a neutron from the target nucleus and provides information about the neutron levels.

Gamma Rays: By measuring the energies of gamma rays emitted from excited nucleus levels, information about the energies of the levels within the nucleus can be obtained. Direct information about the energy levels of the nucleus can be obtained by gamma spectroscopy.

Shell Model: The nuclear shell model is based on the assumption that neutrons and protons are arranged in certain energy levels. Single particle energies are calculated from the energy differences between these levels. In particular, shells with magic numbers are important in determining the stability of the nucleus and energy levels.

Mean Field Approximation: The interactions of each neutron in the nucleus with other nucleons create an average potential. The

energy levels of the neutrons are calculated within this average potential.

Hartree-Fock Method: This is a method used to calculate the energies of many-particle quantum systems. The interactions of neutrons and protons with each other and the energy levels are calculated using mean field approximations.

Density Functional Theory: The energy levels of nuclear systems can be calculated using the density functional theory of quantum mechanics. This method is used to model the distribution of particles in the nucleus and their energy levels.

2. MATERIALS AND METHODS

2.1. Obtaining Single Particle Energies

Neutron single particle energy is a critical parameter for understanding nuclear structure and nuclear reactions. Both experimental methods and theoretical models are used to obtain this energy. Experiments provide direct information about the energy levels of neutrons, while theoretical calculations and models are used to understand and estimate these levels. The combination of these methods allows important discoveries to be made in nuclear physics. In the literature, in order to obtain neutron and proton single particle energies for the p shell experimentally, the $1/2$ spin energy level value is not available in the energy spectrum of ^5He and ^5Li nuclei. Therefore, in the current shell model calculations, these single particle energies are obtained by fitting the existing experimental data in the literature. Within the scope of the study, instead of fitting, different machine learning approaches were used to obtain the first term of the Hamiltonian through machine learning models. Machine learning models are performed with these energy values of the nuclei in the p shell that have an experimental $1/2$ spin energy level value.

75% of the entire data set was used in the training of machine learning, and the remaining 25% was used in the test. The used machine learning models are Random Forest (RF), AdaBoost (ADA) and Ensemble model (ENS) which give the better results than the other models. The statistical performance indicators of these models (root mean square error (RMSE), mean absolute error (MAE) and correlation coefficient (R^2)) are given in Table 1 for the training and test data sets. As can be seen, the lowest RMSE and MAE values were obtained in the RF model for the training data set and in the ADA and ENS models for the test data set. The highest correlation coefficient was obtained with RF in the training data set and with ADA and ENS in the test data set. When evaluated in general, it was seen that the ENS model was slightly more successful compared to the other models.

Table 1. Machine learning model performances

MODEL	RMSE		MAE		R^2	
	Train	Test	Train	Test	Train	Test
RF	487	1409	383	1019	0,94	0,53
ADA	940	1345	872	1105	0,75	0,57
ENS	718	1358	639	1073	0,85	0,57

In Figure 2, the graphs of the predicted values of the 1/2 energy level in the ENS model compared to the experimental data are given separately for the training and test data sets. When the distribution in the training data set is examined, the agreement of the predicted values with the experimental data is clearly seen. In the test data set, although there is not such a high agreement, it is seen that the ENS model results are consistent with the general trend.

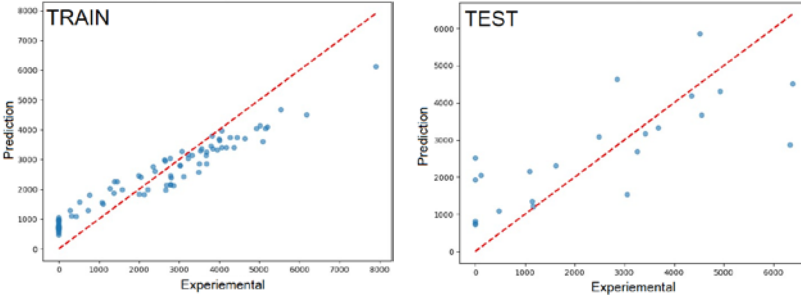


Figure 2 Predictions of the ensemble machine learning model (ENS) on training (left) and test (right) datasets.

2.2. Calculation of Neutron Single Particle Energy

The following steps are applied in the calculation of neutron single particle energy for the p shell. First of all, the difference between the ${}^5\text{He}$ binding energy and the ${}^4\text{He}$ binding energy gives the energy of the 3/2 level. From here, $[-(5 \times 5512 \text{ keV} - 4 \times 7074 \text{ keV}) = 736 \text{ keV}]$, the energy of the 3/2 level was obtained as 736 keV. Therefore, the neutron single particle energy of the p3/2 orbital is 736 keV. Since the energy of the 1/2 spin level of ${}^5\text{He}$ was estimated as 534 keV, 1285 keV and 1029 keV by RF, ADA and ENS machine learning models, respectively, the p1/2 orbital energies are calculated as 1270 keV, 2021 keV and 1765 keV.

2.3. Calculation of Proton Single Particle Energy

The following steps are applied in the calculation of the proton single particle energy for the p shell. First of all, the difference between the ${}^5\text{Li}$ binding energy and the ${}^4\text{He}$ binding energy gives the energy of the 3/2 level. From here, the energy of the 3/2 level is obtained as 1966 keV $[-(5 \times 5266 \text{ keV} - 4 \times 7074 \text{ keV}) = 1966 \text{ keV}]$. Therefore, the proton single particle energy of the p3/2 orbital is 1966 keV. Since the energy of the 1/2 spin level of ${}^5\text{Li}$ is estimated as 543 keV, 1285 keV and 1026 keV by RF,

ADA and ENS, respectively, the $p_{1/2}$ orbital energies are calculated as 2509 keV, 3251 keV and 2992 keV.

3. RESULTS AND DISCUSSION

These single particle energies obtained are considered as the single particle energy term of the Hamiltonian in the shell model calculations. These different single particle energies are used separately in the shell model calculations and the results are compared to each other. The production of the ground and excited level energies of the isotopes are done by different methods and the following results are obtained.

Table 2 lists the experimental and calculated energy levels of Li isotopes (EXP: experimental, CKPOT: shell model calculations, ENS, AB, RF: modified CKPOT with single particle energies obtained by ensemble, adaboost and random forest machine learning approaches). For the ${}^5\text{Li}$ nucleus, the ground state spin and parity were calculated correctly in all models. A similar situation was obtained for ${}^6\text{Li}$, while it was observed that the excited state energies were obtained more accurately for the 3^+ and 0^+ levels with the RF model. For excited energy levels above 4000 keV, it was observed that RF and ENS gave results closer to the experimental values. For ${}^7\text{Li}$, the ground states were obtained correctly with all models. Excited state energies were obtained more or less close to each other in all models and were generally found to be consistent with the experimental data. Among the models, ENS and RF were observed to be slightly closer to the experimental values than the others. For ${}^8\text{Li}$, the ground state spin and parity were obtained correctly with all models, however, the results obtained from CKPOT were closer to the experimental data. The ground state spin and parity of the ${}^9\text{Li}$ nucleus were calculated correctly in all models. For this isotope, where experimental data are scarce, ENS and RF were

found to be superior to the others. While the ground state was obtained correctly for the ^{10}Li isotope, it was observed that ENS and RF were prominent. For ^{11}Li , only the ground state spin and parity were available in the literature experimentally and were obtained correctly with all models.

Table 3 lists the results for Be isotopes. While the ground state spin and parity for ^6Be were obtained correctly with all models, the first excited 2^+ state energy was calculated with a value considerably higher than the experimental data with all models. The ground state of the ^7Be nucleus was calculated as $3/2^-$ in agreement with the experiments. It was observed that ENS and CKPOT were more successful than the others in obtaining low-level excited states. For ^8Be , the ground states were obtained correctly, while it was seen that first CKPOT, then ENS and ADA were more successful in low-level excited states. The same situation was observed for the ^9Be nucleus. For ^{10}Be , ENS was superior to the others. While it was observed that ENS and then CKPOT gave values closer to the experimental data for the ^{11}Be nucleus, a similar situation was observed for ^{12}Be .

Table 4 presents the experimental and theoretical results for B isotopes. For all B isotopes, the ground state spin and parity values were calculated correctly with each model. For ^8B , the first excited state energy was calculated more accurately with ENS. For the second excited state, it was observed that ADA and CKPOT gave results closer to the experimental data. While ENS gave more accurate results for the first excited $5/2^-$ level in the ^9B nucleus, it was observed that ADA and CKPOT were more successful in higher-level states. For ^{10}B , CKPOT gave more accurate results for some levels and ENS for others. A similar situation is observed for ^{11}B . However, for ^{12}B and ^{13}B , it was observed that ENS was more prominent.

Table 2. Values of the ground and low excited energy levels of Li nuclei

ISOTOP	EXP	CKPOT	ENS	AB	RF
5Li	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
5Li		1/2- 1290	1/2- 1027	1/2- 1285	1/2- 543
6Li	1+ 0	1+ 0	1+ 0	1+ 0	1+ 0
6Li	3+ 2186	3+ 424	3+ 592	3+ 427	3+ 920
6Li	0+ 3563	0+ 1523	0+ 1561	0+ 1524	0+ 1621
6Li	2+ 4312	1+ 4160	1+ 3973	1+ 4157	1+ 3592
6Li	2+ 5366	2+ 4923	2+ 4829	2+ 4921	2+ 4668
6Li	1+ 5650	2+ 6065	2+ 6100	2+ 6066	2+ 6152
6Li	3+ 15600	1+ 8492	1+ 8398	1+ 8490	1+ 8294
6Li		2+ 9550	2+ 9590	2+ 9551	1+ 9460
6Li		1+ 9715	1+ 9622	1+ 9714	2+ 9705
7Li	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
7Li	1/2- 478	1/2- 1979	1/2- 1825	1/2- 1976	1/2- 1535
7Li	7/2- 4630	7/2- 5080	7/2- 5123	7/2- 5081	7/2- 5202
7Li	5/2- 6680	5/2- 8207	5/2- 8034	5/2- 8204	5/2- 7712
7Li	5/2- 7460	5/2- 8863	5/2- 8899	5/2- 8864	5/2- 8941
7Li	7/2- 9670	7/2- 10411	7/2- 10408	7/2- 10411	7/2- 10437
7Li	3/2- 9850	3/2- 11046	3/2- 10956	3/2- 11044	1/2- 10560
7Li	3/2- 11240	1/2- 11300	1/2- 11046	1/2- 11295	3/2- 10785
7Li		3/2- 11908	3/2- 11719	3/2- 11905	3/2- 11388
8Li	2+ 0	2+ 0	2+ 0	2+ 0	2+ 0
8Li	1+ 981	1+ 908	1+ 750	1+ 905	1+ 449
8Li	3+ 2255	3+ 1630	3+ 1613	3+ 1630	3+ 1568
8Li	1+ 3210	1+ 2730	1+ 2671	1+ 2778	1+ 2484
8Li	1+ 5400	2+ 2946	2+ 2839	2+ 2944	2+ 2670
8Li	3+ 6100	0+ 5319	0+ 5013	0+ 5313	0+ 4460
8Li	4+ 6530	1+ 5337	1+ 5035	1+ 5331	1+ 4498
8Li	1+ 9670	4+ 5543	2+ 5345	4+ 5541	2+ 4928
8Li	0+ 10822	2+ 5573	4+ 5435	2+ 5568	4+ 5258
8Li		3+ 5585	3+ 5474	3+ 5583	3+ 5304
9Li	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
9Li	1/2- 2691	5/2- 3787	1/2- 3640	5/2- 3785	1/2- 3197
9Li	- 4301	1/2- 3878	5/2- 3692	1/2- 3874	5/2- 3531
9Li	- 5380	3/2- 4880	3/2- 4738	3/2- 4878	3/2- 4483
9Li	9/2- 6430	7/2- 6177	7/2- 6121	7/2- 6176	7/2- 6035
9Li		3/2- 7565	3/2- 7404	3/2- 7562	3/2- 7125
9Li		5/2- 7820	5/2- 7770	5/2- 7819	5/2- 7695
9Li		1/2- 9106	1/2- 8922	1/2- 9103	1/2- 8600
9Li		7/2- 9849	7/2- 9588	7/2- 9844	7/2- 9135
10Li	1,2- 0	1+ 0	1+ 0	1+ 0	1+ 0
10Li	1+ 210	2+ 1186	2+ 1166	2+ 1186	2+ 1103
10Li	- 470	2+ 3653	2+ 3504	2+ 3650	3+ 3199
10Li	1,3+ 2330	3+ 3798	3+ 3588	3+ 3794	2+ 3263
10Li	2+ 2820	1+ 5032	1+ 4791	1+ 5027	1+ 4339
10Li	- 4160	0+ 6535	0+ 6323	0+ 6531	1+ 5894
10Li	2+ 4600	1+ 6730	1+ 6431	1+ 6724	0+ 5942
10Li		2+ 9681	2+ 9218	2+ 9672	2+ 8368
10Li		1+ 13078	1+ 12773	1+ 13072	1+ 12231
11Li	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
11Li	- 1266	1/2- 5553	1/2- 5290	1/2- 5548	1/2- 4806
11Li	- 2474				
11Li	- 3700				
11Li	- 4860				
11Li	- 6230				

Table 3. Ground and low excited energy levels of Be nuclei

İSOTOP	EXP		CKPOT		ENS		AB		RF	
6Be	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
6Be	2+	1670	2+	4542	2+	4538	2+	4542	2+	4530
6Be			2+	8027	2+	8029	2+	8027	1+	7840
6Be			1+	8192	1+	8060	1+	8190	2+	8082
6Be			0+	11831	0+	11566	0+	11826	0+	11127
7Be	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0
7Be	1/2-	429	1/2-	1979	1/2-	1826	1/2-	1976	1/2-	1533
7Be	7/2-	4570	7/2-	5080	7/2-	5122	7/2-	5081	7/2-	5204
7Be	5/2-	6730	5/2-	8207	5/2-	8034	5/2-	8204	5/2-	7712
7Be	5/2-	7210	5/2-	8863	5/2-	8899	5/2-	8864	5/2-	8942
7Be	7/2-	9270	7/2-	10411	7/2-	10408	7/2-	10411	7/2-	10439
7Be	3/2-	9900	3/2-	11046	3/2-	10957	3/2-	11044	1/2-	10561
7Be	3/2-	11010	1/2-	11300	1/2-	11045	1/2-	11295	3/2-	10780
7Be	1/2-	17000	3/2-	11908	3/2-	11719	3/2-	11905	3/2-	11389
8Be	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
8Be	2+	3030	2+	3820	2+	3803	2+	3819	2+	3774
8Be	4+	11350	4+	11958	4+	11967	4+	11958	4+	11974
8Be	2+	16626	2+	12871	2+	12913	2+	12871	2+	13005
8Be	2+	16922	1+	14397	1+	14276	1+	14395	1+	14058
8Be	1+	17640	2+	16194	2+	16280	2+	16196	2+	16436
8Be	1+	18150	3+	16602	3+	16558	3+	16602	3+	16493
8Be	3+	19069	1+	17102	0+	17009	1+	17101	0+	16708
8Be	3+	19235	0+	17168	1+	17029	0+	17165	1+	16887
8Be			4+	17641	4+	17718	4+	17643	4+	17900
9Be	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0
9Be	5/2-	2429	1/2-	1791	1/2-	1623	1/2-	1787	1/2-	1322
9Be	1/2-	2876	5/2-	2942	5/2-	2857	5/2-	2940	5/2-	2706
9Be	3/2-	5590	3/2-	4665	3/2-	4451	3/2-	4661	3/2-	4064
9Be	7/2-	6380	7/2-	6201	7/2-	6183	7/2-	6201	7/2-	6120
9Be	5/2-	7940	5/2-	7381	5/2-	7269	5/2-	7379	5/2-	7078
9Be	7/2-	11282	7/2-	9855	7/2-	9798	7/2-	9853	3/2-	9689
9Be			3/2-	10039	3/2-	9906	3/2-	10036	7/2-	9835
9Be			5/2-	10874	5/2-	10685	5/2-	10870	5/2-	10332
10Be	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
10Be	2+	3368	2+	4160	2+	4144	2+	4160	2+	4119
10Be	2+	5958	2+	5811	2+	5693	2+	5809	2+	5487
10Be	0+	6179	1+	8134	1+	8049	1+	8132	1+	7911
10Be	2+	7542	2+	9157	2+	9030	2+	9155	2+	8811
10Be	2+	9560	3+	9758	3+	9616	3+	9755	3+	9370
10Be			1+	10223	2+	10014	1+	10220	2+	9582
10Be			2+	10258	1+	10040	2+	10253	1+	9718
10Be			0+	11054	0+	10884	0+	11051	0+	10607
10Be			4+	11633	4+	11619	4+	11632	4+	11624
11Be	1/2+	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0
11Be	1/2-	320	3/2-	2279	3/2-	2147	3/2-	2276	3/2-	1872
11Be	3/2-	2654	5/2-	4660	5/2-	4602	5/2-	4659	5/2-	4463
11Be	3/2-	3400	3/2-	4925	3/2-	4763	3/2-	4922	3/2-	4470
11Be	5/2-	3889	7/2-	7988	7/2-	7791	7/2-	7985	7/2-	7420
11Be	3/2-	3955	5/2-	8387	5/2-	8209	5/2-	8383	5/2-	7897
11Be	5/2-	5255	3/2-	8518	3/2-	8312	3/2-	8514	3/2-	7933
11Be	7/2-	6705	1/2-	9730	1/2-	9519	1/2-	9726	1/2-	9132
11Be			5/2-	10755	5/2-	10554	5/2-	10751	5/2-	10201
11Be			3/2-	11200	3/2-	10979	3/2-	11196	3/2-	10585
12Be	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
12Be	2+	2109	2+	4373	2+	4390	2+	4373	2+	4421
12Be	0+	2251	2+	9924	2+	9739	2+	9920	2+	9413
12Be	2+	4580	1+	11187	1+	10972	1+	11183	1+	10583
12Be	4,2+	5724	0+	17821	0+	17390	0+	17813	0+	16612

Table 4. Ground and low excited energy levels of B nuclei

ISOTOP	EXP	CKPOT	ENS	AB	RF
7B	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
7B		1/2- 863	1/2- 740	1/2- 860	1/2- 557
7B		5/2- 3340	5/2- 3217	5/2- 3337	5/2- 3034
7B		3/2- 3979	3/2- 3792	3/2- 3975	3/2- 3511
7B		3/2- 9771	3/2- 9588	3/2- 9767	3/2- 9322
8B	2+ 0	2+ 0	2+ 0	2+ 0	2+ 0
8B	1+ 770	1+ 908	1+ 749	1+ 905	1+ 454
8B	3+ 2320	3+ 1630	3+ 1613	3+ 1630	3+ 1572
8B	0+ 3500	1+ 2780	1+ 2671	1+ 2778	1+ 2485
8B	2+ 10619	2+ 2946	2+ 2838	2+ 2944	2+ 2674
8B		0+ 5319	0+ 5012	0+ 5313	0+ 4466
8B		1+ 5337	1+ 5035	1+ 5331	1+ 4497
8B		4+ 5543	2+ 5345	4+ 5541	2+ 4927
8B		2+ 5573	4+ 5434	2+ 5568	4+ 5264
8B		3+ 5585	3+ 5473	3+ 5583	3+ 5309
9B	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
9B	5/2- 2345	1/2- 1791	1/2- 1622	1/2- 1787	1/2- 1327
9B	5/2- 2751	5/2- 2942	5/2- 2857	5/2- 2940	5/2- 2708
9B	1/2- 2780	3/2- 4665	3/2- 4449	3/2- 4661	3/2- 4070
9B	7/2- 6985	7/2- 6201	7/2- 6183	7/2- 6201	7/2- 6122
9B	7/2- 11640	5/2- 7381	5/2- 7268	5/2- 7379	5/2- 7079
9B	3/2- 14655	7/2- 9855	7/2- 9797	7/2- 9853	3/2- 9689
9B	5/2- 14700	3/2- 10039	3/2- 9906	3/2- 10036	7/2- 9737
9B		5/2- 10874	5/2- 10684	5/2- 10870	5/2- 10334
10B	3+ 0	3+ 0	3+ 0	3+ 0	3+ 0
10B	1+ 718	1+ 903	1+ 683	1+ 898	1+ 280
10B	0+ 1740	0+ 1419	0+ 1327	0+ 1417	0+ 1144
10B	1+ 2154	1+ 2384	1+ 2343	1+ 2383	1+ 2258
10B	2+ 3587	2+ 3339	2+ 3152	2+ 3336	2+ 2811
10B	3+ 4774	3+ 4718	3+ 4434	3+ 4712	3+ 3898
10B	2+ 5164	2+ 5531	2+ 5227	2+ 5525	2+ 4672
10B	1+ 5182	2+ 5578	2+ 5471	2+ 5576	4+ 5230
10B	2+ 5920	4+ 5719	4+ 5546	4+ 5715	2+ 5263
10B	4+ 6025	1+ 6188	1+ 5876	1+ 6182	1+ 5315
11B	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
11B	1/2- 2125	1/2- 1708	1/2- 1548	1/2- 1705	1/2- 1268
11B	5/2- 4445	5/2- 4348	5/2- 4164	5/2- 4344	5/2- 3836
11B	3/2- 5020	3/2- 5390	3/2- 5154	3/2- 5385	3/2- 4730
11B	7/2- 6742	7/2- 5845	7/2- 5760	7/2- 5843	7/2- 5618
11B	3/2- 8560	5/2- 8105	5/2- 7997	5/2- 8103	5/2- 7808
11B	5/2- 8920	5/2- 10692	5/2- 10424	5/2- 10687	5/2- 9961
11B	3/2- 10262	3/2- 11437	3/2- 11279	3/2- 11434	3/2- 11017
11B	5/2- 10330	1/2- 11617	1/2- 11480	1/2- 11614	1/2- 11123
11B		1/2- 12017	1/2- 11832	1/2- 12013	1/2- 11646
12B	1+ 0	1+ 0	1+ 0	1+ 0	1+ 0
12B	2+ 953	2+ 1606	2+ 1649	2+ 1607	2+ 1724
12B	0+ 2723	1+ 4421	1+ 4261	1+ 4418	1+ 3983
12B	2+ 3760	0+ 4513	0+ 4362	0+ 4510	3+ 4029
12B	1+ 4990	3+ 4546	3+ 4363	3+ 4542	0+ 4101
12B	3+ 5610	2+ 4955	2+ 4743	2+ 4951	2+ 4368
12B	1+ 6600	1+ 6471	1+ 6245	1+ 6467	1+ 5835
12B		3+ 8486	3+ 8333	3+ 8483	3+ 8069
12B		2+ 8893	2+ 8620	2+ 8888	2+ 8098
12B		2+ 10401	2+ 10062	2+ 10395	2+ 9483
13B	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0	3/2- 0
13B	3/2- 3536	1/2- 3998	1/2- 3772	1/2- 3994	1/2- 3363
13B	1/2- 3713	5/2- 6475	5/2- 6249	5/2- 6471	5/2- 5841
13B	1/2,3/2- 5388	3/2- 8101	3/2- 7834	3/2- 8096	3/2- 7342
13B		3/2- 15054	3/2- 14644	3/2- 15046	3/2- 13910

Table 5 presents the experimental and theoretical results for C isotopes. For all C isotopes, the ground state spin and parity values were calculated correctly with each model. For ^{9}C , the first excited state energy was calculated more accurately with RF.

While RF gave more accurate results for the first excited 2^+ level in the ^{10}C nucleus, ADA and CKPOT were more successful in higher-level states. For ^{11}C , CKPOT gave more accurate results for some levels and ADA for others. For ^{12}C , all model results were close to each other. In the calculations for the ^{13}C isotope, CKPOT and ADA were seen to be prominent. For ^{14}C , ENS was more successful in predicting the first excited 0^+ level.

The results for N isotopes are listed in Table 6. While the ground state spin and parity for ^{10}N are experimentally 1^- , they are calculated as 1^+ by theoretical models. A similar situation is observed for ^{11}N , and the $1/2^+$ ground state is calculated as $1/2^-$. It is observed that CKPOT and ADA are a little more prominent in the calculation of low excited levels. The ground state spin and parity for ^{12}N are calculated correctly by all models. Again, it is observed that CKPOT and ADA are prominent compared to the others. For ^{13}N , it is seen that the predictions of each model are superior to the others for different excited levels. While CKPOT and ADA are more successful below 10000 keV, ENS and RF are more successful above 10000 keV. A similar situation is observed for ^{14}N . Finally, the energy of the first excited $3/2^-$ level for ^{15}N was calculated more accurately with CKPOT and ADA.

Table 5. Ground and low excited energy levels of C nuclei

ISOTOP	EXP		CKPOT		ENS		AB		RF	
8C	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
8C			2+	4716	2+	4664	2+	4715	2+	4592
8C			1+	7339	1+	7330	1+	7339	1+	7348
9C	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0
9C	1/2-	2218	5/2-	3787	1/2-	3641	5/2-	3785	1/2-	3192
9C	5/2-	3542	1/2-	3878	5/2-	3691	1/2-	3874	5/2-	3533
9C	-	5750	3/2-	4880	3/2-	4738	3/2-	4878	3/2-	4483
9C	-	9000	7/2-	6177	7/2-	6121	7/2-	6176	7/2-	6037
9C	-	15000	3/2-	7565	3/2-	7404	3/2-	7561	3/2-	7125
9C			5/2-	7820	5/2-	7770	5/2-	7819	5/2-	7695
9C			1/2-	9106	1/2-	8921	1/2-	9103	1/2-	8600
9C			7/2-	9849	7/2-	9586	7/2-	9844	7/2-	9144
9C			5/2-	10709	5/2-	10437	5/2-	10704	5/2-	9964
10C	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
10C	2+	3354	2+	4160	2+	4144	2+	4160	2+	4119
10C	-	5220	2+	5811	2+	5692	2+	5809	2+	5488
10C	-	5380	1+	8134	1+	8049	1+	8132	1+	7912
10C	2+	6580	2+	9157	2+	9031	2+	9155	2+	8809
10C	-	9000	3+	9458	3+	9615	3+	9755	3+	9371
10C	-	1000	1+	10223	2+	10013	1+	10220	2+	9586
10C	-	16500	2+	10258	1+	10041	2+	10253	1+	9716
10C			0+	11054	0+	10883	0+	11051	0+	10610
10C			4+	11633	4+	11618	4+	11632	4+	11628
11C	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0	3/2-	0
11C	1/2-	2000	1/2-	1708	1/2-	1548	1/2-	1705	1/2-	1267
11C	5/2-	4319	5/2-	4348	5/2-	4165	5/2-	4344	5/2-	3834
11C	3/2-	4804	3/2-	5390	3/2-	5155	3/2-	5385	3/2-	4727
11C	7/2-	6478	7/2-	5845	7/2-	5759	7/2-	5843	7/2-	5622
11C	3/2-	8105	5/2-	8105	5/2-	7997	5/2-	8103	5/2-	7809
11C	5/2-	8654	5/2-	10692	5/2-	10425	5/2-	10687	5/2-	9959
11C			3/2-	11437	3/2-	11279	3/2-	11434	3/2-	11016
11C			1/2-	11617	1/2-	11480	1/2-	11614	1/2-	11122
11C			1/2-	12017	1/2-	11832	1/2-	12013	1/2-	11647
12C	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
12C	2+	4440	2+	4648	2+	4534	2+	4645	2+	4344
12C	0+	7654	1+	12449	1+	12430	1+	12449	1+	12419
12C	2+	9870	0+	13467	4+	13434	0+	13466	4+	12995
12C	0+	9930	4+	13503	0+	13434	4+	13499	0+	13430
12C	0+	10300	1+	15084	1+	15092	1+	15084	1+	15133
12C	5,7+	12400	2+	15730	2+	15548	2+	15726	2+	15236
12C	1+	12710	2+	16691	2+	16741	2+	16692	2+	16857
12C	4+	13300	3+	17261	3+	17123	3+	17258	3+	16906
12C	4+	14079	2+	18129	2+	17961	2+	18126	2+	17684
12C	1+	15110								
13C	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0
13C	3/2-	3685	3/2-	3587	3/2-	3350	3/2-	3583	3/2-	2913
13C	5/2-	7547	5/2-	7404	5/2-	7267	5/2-	7401	5/2-	7035
13C	1/2-	8866	1/2-	8782	1/2-	8656	1/2-	8779	1/2-	8450
13C	3/2-	9895	3/2-	10433	3/2-	10305	3/2-	10431	3/2-	9986
13C	7/2-	10754	7/2-	11079	7/2-	10691	7/2-	11071	3/2-	10089
13C	5/2-	10813	5/2-	13180	5/2-	12830	5/2-	13173	5/2-	12203
13C	1/2-	11076	1/2-	13812	1/2-	13568	1/2-	13807	1/2-	13153
13C	3/2-	11727	3/2-	14005	3/2-	13697	3/2-	13999	3/2-	13161
13C	1/2-	12055	3/2-	14794	3/2-	14659	3/2-	14791	3/2-	14428
14C	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0	0+	0
14C	0+	6589	2+	6834	2+	6648	2+	6831	2+	6320
14C	2+	7012	1+	9094	1+	8920	1+	9090	1+	8616
14C	2+	8317	0+	13634	0+	13286	0+	13627	0+	12679
14C	0+	9746	2+	15190	2+	14766	2+	15182	2+	14003

Table 6. Values of ground and low excited energy levels of N nuclei

İSOTOP	EXP		CKPOT		ENS		AB		RF	
10N	1-	0	1+	0	1+	0	1+	0	1+	0
10N	2-	900	2+	1186	2+	1166	2+	1186	2+	1105
10N			2+	3653	2+	3502	2+	3650	3+	3208
10N			3+	3798	3+	3586	3+	3794	2+	3269
10N			1+	5032	1+	4791	1+	5027	1+	4340
10N			0+	6535	0+	6324	0+	6531	1+	5890
10N			1+	6730	1+	6432	1+	6724	0+	5939
10N			2+	9681	2+	9218	2+	9672	2+	8368
10N			1+	13078	1+	12772	1+	13072	1+	12233
10N			0+	20207	0+	19996	0+	20203	0+	19614
11N	1/2+	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0
11N	1/2-	730	3/2-	2279	3/2-	2146	3/2-	2276	3/2-	1877
11N	-	1570	5/2-	4660	5/2-	4602	5/2-	4659	5/2-	4464
11N	3/2-	2860	3/2-	4925	3/2-	4762	3/2-	4922	3/2-	4473
11N	5/2-	3630	7/2-	7988	7/2-	7789	7/2-	7985	7/2-	7430
11N	5/2-	4420	5/2-	8387	5/2-	8208	5/2-	8383	5/2-	7902
11N	3/2-	5080	3/2-	8513	3/2-	8312	3/2-	8514	3/2-	7931
11N			1/2-	9730	1/2-	9520	1/2-	9726	1/2-	9130
11N			5/2-	10755	5/2-	10555	5/2-	10751	5/2-	10196
11N			3/2-	11200	3/2-	10980	3/2-	11196	3/2-	10582
12N	1+	0	1+	0	1+	0	1+	0	1+	0
12N	2+	961	2+	1606	2+	1649	2+	1607	2+	1723
12N	0+	2439	1+	4421	1+	4262	1+	4418	1+	3978
12N	2+	3558	0+	4513	3+	4362	0+	4510	0+	4036
12N	1,2+	4561	3+	4546	0+	4362	3+	4542	3+	4101
12N	3+	6275	2+	4955	2+	4743	2+	4951	2+	4365
12N	0+	12196	1+	6471	1+	6246	1+	6467	1+	5832
12N			3+	8486	3+	8335	3+	8483	3+	8062
12N			2+	8893	2+	8621	2+	8888	2+	8091
12N			2+	10401	2+	10062	2+	10395	2+	9481
13N	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0
13N	3/2-	3500	3/2-	3587	3/2-	3350	3/2-	3583	3/2-	2914
13N	5/2-	7377	5/2-	7404	5/2-	7268	5/2-	7401	5/2-	7029
13N	1/2-	8918	1/2-	8782	1/2-	8657	1/2-	8779	1/2-	8449
13N	3/2-	9476	3/2-	10433	3/2-	10306	3/2-	10431	7/2-	9988
13N	5/2-	10360	7/2-	11079	7/2-	10690	7/2-	11071	3/2-	10084
13N	7/2-	10360	5/2-	13180	5/2-	12830	5/2-	13173	5/2-	12205
13N	1/2-	10383	1/2-	13812	1/2-	13568	1/2-	13807	1/2-	13149
13N	5/2-	11700	3/2-	14005	3/2-	13698	3/2-	13999	3/2-	13157
13N	3/2-	11740	3/2-	14794	3/2-	14659	3/2-	14791	3/2-	14428
14N	1+	0	1+	0	1+	0	1+	0	1+	0
14N	0+	2313	0+	2690	0+	2616	0+	2688	0+	2465
14N	1+	3948	1+	3617	1+	3351	1+	3612	1+	2857
14N	1+	6204	2+	6991	2+	6744	2+	6986	2+	6286
14N	3+	6446	2+	9524	2+	9265	2+	9519	3+	8688
14N	2+	7029	3+	10145	3+	9636	3+	10135	2+	8782
14N	0+	8618	1+	11783	1+	11536	1+	11729	1+	11079
14N	5+	8964	1+	15239	1+	14764	1+	15230	1+	13884
14N	2+	8980	0+	16323	0+	15903	0+	16315	0+	15139
14N	3+	9129	2+	17880	2+	17383	2+	17870	2+	16461
15C	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0	1/2-	0
15C	3/2-	6324	3/2-	6363	3/2-	6100	3/2-	6358	3/2-	5616

4. CONCLUSIONS

In this study, it is aimed to support nuclear shell model calculations by machine learning models. The results of the used methods clearly show the applicability of machine learning in the

field of nuclear physics. Single particle energy estimations made using Random Forest (RF), AdaBoost (ADA) and Ensemble (ENS) models revealed that the ENS model is particularly superior when compared to experimental data. RF and ADA models also give successful results in certain cases, but in general, ENS provided the most consistent estimates. Calculations performed on p shell nuclei show that the energy levels of this shell can be estimated quite accurately with machine learning. However, the accuracy of the estimates depends on the scope of the data set used and the quality of training the models. Especially in cases where experimental data is missing, machine learning estimates play a complementary role rather than replacing experimental studies.

The results of this study show that machine learning approaches can be used effectively in nuclear shell model calculations. The obtained results can be summarized as follows:

1. Machine learning models have been successfully applied to nuclear physics calculations. The ENS model has shown better performance compared to other models for the generations of single particle energi values.
2. The agreement with experimental data has been achieved at a high level, especially in calculations performed on p-shell nuclei.
3. The machine learning approach can be used as a powerful tool to support nuclear shell model calculations in cases where experimental data are missing or limited.
4. Future studies can increase the general validity of the method by investigating the applicability of this approach with larger data sets and in different nuclear regions.

In conclusion, machine learning offers an innovative solution in the field of nuclear physics, and such approaches are considered as a promising method to support theoretical modeling and complement experimental data.

REFERENCES

- Akkoyun, S., et al. (2021). Improvement studies of an effective interaction for $N = Z$ sd-shell nuclei by neural networks. *Bulgarian Journal of Physics*, 48, 245–256.
- Fukui, T., et al. (2018). Realistic shell-model calculations for p-shell nuclei including contributions of a chiral three-body force. *Physical Review C*, 98, 044305.
- Haxel, O., Jensen, J. H. D., & Suess, H. E. (1949). On the "magic numbers" in nuclear structure. *Physical Review*, 75, 1766.
- Haykin, S. S. (1999). *Neural networks: A comprehensive foundation*. Prentice Hall.
- Krane, K. S. (2001). *Nükleer fizik*. Palme Yayıncılık.
- Kuhn, M., & Johnson, K. (2013). *Applied predictive modeling*. Springer New York.
- Liebig, S., et al. (2016). Jacobi no-core shell model for p-shell nuclei. *The European Physical Journal A*, 52, 103.
- Huth, L., Durant, V., Simonis, J., & Schwenk, A. (2018). Shell-model interactions from chiral effective field theory. *Physical Review C*, 98, 044301.
- Mayer, M. G. (1948). On closed shells in nuclei. *Physical Review*, 74, 235.
- Mayer, M. G. (1949). On closed shells in nuclei. II. *Physical Review*, 75, 1969.
- Mayer, M. G. (1950). Nuclear configurations in the spin-orbit coupling model. I. Empirical evidence. *Physical Review*, 78, 16.
- Navratil, P., & Barrett, B. R. (1998). Large-basis shell-model calculations for p-shell nuclei. *Physical Review C*, 57, 3119.

- Talmi, I. (2005). 55 years of the shell model: A challenge to nuclear many-body theory. *International Journal of Modern Physics E*, 14, 821.
- Yuan, C., et al. (2012). Shell-model study of boron, carbon, nitrogen, and oxygen isotopes with a monopole-based universal interaction. *Physical Review C*, 85, 064324.

BAZI GLUTAMİK ASİT TÜREVLERİNİN MANYETİK DEĞERLERİNİN KARŞILAŞTIRILMASI

Mehmet Halim BAŞKAN¹

1. GİRİŞ

Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisi, serbest radikallerin yapısını incelemek ve kimliğini belirlemek için kullanılan yöntemlerdendir [1-5].

Bu çalışmada daha önce çalışılmış ve gama ile ışınlanmış L-Glutamik asit dimetil ester hidroklorür, L-Glutamik asit hidroklorür, DL-Glutamik asit Monohidrat, L-Glutamik asit γ -etil ester, DL-2-Metil glutamik asit hemihidrat, N-Asetil-L-Glutamik asit, N-Metil-L-Glutamik asit, L-Glutamin hidroklorür, Glisil-L-Glutamin, L-Glutamin, Alanil-L-Glutamin, Glisil-L-Glutamin monohidrat toz örneklerinin manyetik değerleri (a ve g değerleri gibi), örneklerde oluşan radikaller ve çizgi şiddetleri karşılaştırılarak, benzer ve farklılıklarla ilgili yorumlar yapılmıştır. Ayrıca örneklerin biyolojik özellikleri incelenmiştir.

Glutamik asit (Glu, E), proteinleri oluşturan 20 aminoasitten biridir. Glutamat olarak da bilinir. 1 amino ve 2 karboksil içerir. Polar, asidik aminoasittir. Fizyolojik pH'da iyonize olup negatif yüklüdür. Non esansiyel ve glukojeniktir. Glutaminin anyonik formudur. Karaciğerde sentezlenen pıhtılaşma faktörlerinin yapısında, protein S ve C'nin yapısında ve kemiklerde osteokalsinin yapısındaki aminoasit olup K

¹ Prof. Dr., Dicle Üniversitesi, Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Fizik Eğitimi Anabilim Dalı, hbaskan@dicle.edu.tr, ORCID: 0000-0001-9288-4947

vitaminine bağılı olarak gama karboksile olur. Folik asitin yapısında bulunur. Eksitör etkili nörotransmitter (siniriletici)dir. Oksidatif deaminasyona giren tek aminoasittir.

Glutamik asidin biyolojik özellikleri, vücutta önemli işlevler görmesinden kaynaklanır. İşte bazı temel biyolojik özellikleri:

1. **Protein Sentezi:** Glutamik asit, vücutta proteinlerin yapı taşı olarak kullanılan bir amino asittir. Bu, hücrelerin ve dokuların yapılarını oluşturmaları ve onarılması için gereklidir.
2. **Nörotransmitter Olarak Rolü:** Glutamik asit, merkezi sinir sistemi üzerinde önemli bir etkiye sahip olan glutamatın öncüsüdür. Glutamat, sinir hücreleri arasında iletişimi sağlayan bir nörotransmitterdir ve öğrenme, hafıza, dikkat gibi bilişsel fonksiyonlar için çok önemlidir.
3. **Enerji Metabolizması:** Glutamik asit, vücutta enerji üretimi için de rol oynar. Glutamat, hücreler içinde enerji üretimiyle ilgili olan çeşitli metabolik yollarla ilişkilidir, örneğin, trikarboksilik asit (TCA) döngüsüne katılabilir.
4. **Asidik Özellik:** Glutamik asit, yan zincirinde iki karboksil grubu içerdiği için asidik bir amino asittir. Bu özellik, vücutta asidik veya bazik dengeyi düzenlemeye yardımcı olabilir.
5. **Detoksifikasyon:** Glutamat, amonyak gibi toksik maddelerin vücuttan atılmasında da rol oynar. Özellikle beyin hücrelerinde, glutamatın amonyağı bağlayarak detoksifikasyon sağlaması, nörolojik sağlığı koruma açısından önemlidir.
6. **Bağıışıklık Sistemi ve Hücre İletişimi:** Glutamik asit, bağışıklık sistemi hücrelerinin işlevlerinde de rol oynar.

Ayrıca, hücreler arası iletişimi etkileyebilir ve hücre büyümesini teşvik edebilir.

Bu biyolojik özellikleri nedeniyle glutamik asit, vücuttaki birçok önemli süreçte kritik bir bileşen olarak görev alır.

Glutamin, vücutta bulunan önemli amino asittir ve glutamik asidin amide dönüşmüş halidir. Kimyasal olarak, glutaminin yapısında bir amino grubu ($-NH_2$) ile bir karboksil grubu ($-COOH$) bulunur. Ancak, glutaminin yapısındaki karboksil grubunun bir azot atomu tarafından amide dönüşmesiyle glutamik asitten farklılaşır. Glutamin, vücudun çoğu hücresinde bulunan, en bol amino asitlerden biridir ve birçok biyolojik süreçte önemli roller üstlenir.

Glutaminin biyolojik özellikleri, onu vücutta birçok hayati süreçte kritik bir bileşik haline getirir. Bağışıklık sistemi, sindirim sistemi, kas sağlığı ve sinir sistemi gibi pek çok alanda önemli işlevlere sahiptir. Bu nedenle, glutaminin sağlıklı bir metabolizma ve genel vücut fonksiyonları için vazgeçilmez bir amino asit olduğunu söyleyebiliriz.

2. MATERYAL VE METOT

Toz örnekler ^{60}Co γ (gama)-ışını kaynağı ile oda sıcaklığında çeşitli doz oranlarında ışınlanmışlardır. g faktörü (spektroskopik yarıma faktörü) dipenhylicrylhydrazyl (DPPH) örneği ($g = 2.0036$) ile karşılaştırılarak hesaplanmıştır. Spektrumlar simülasyon programı kullanılarak simüle edilmişlerdir[6]. Spektrumlar çeşitli aralıklarla ölçülerek, toz örneklerde oluşan radikallerin kararlılığı tespit edilmiştir.

3. SONUÇ VE TARTIŞMA

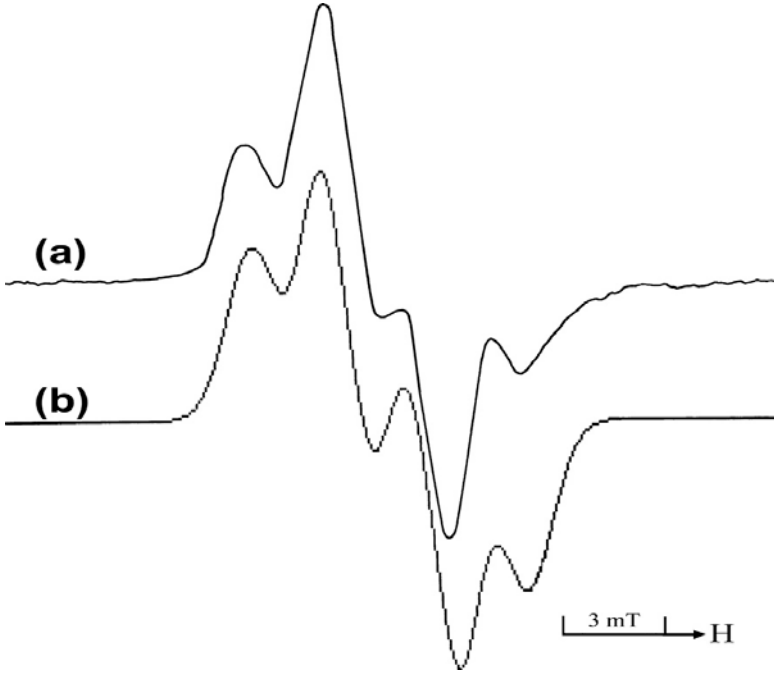
3.1. L-Glutamik asit dimetil ester hidroklorür(LGA)

L-glutamik asit dimetil ester hidroklorür, yapısal olarak glutamatın bir türevidir ve çeşitli biyolojik etkiler yaratabilir. Beyin ve merkezi sinir sistemi üzerinde önemli etkiler yaratabilmesi, özellikle nörolojik bozuklukların tedavisinde potansiyel bir uygulama alanı sunabilir. Ancak, bu bileşiğin klinik kullanımı ve uzun dönem etkileri hakkında daha fazla araştırmaya ihtiyaç vardır.

Kimyasal formülü $C_7H_{13}ClN_2O_4$ dir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 30 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı. Spektrumların oda sıcaklığında 2 aydan daha fazla kararlı (sönmediği) kaldığı görülmüştür.

LGA'nın oda sıcaklığındaki gama ışını ile ışınlanmış tozu, Şekil 1a'da gösterilen spektrumu verir[7]. Bu spektrum yaklaşık olarak 1:3:3:1 yoğunluk dağılımına sahiptir. Bu spektrum $-CH_2\dot{C}HCOOCH_3$ radikaline atfedilebilir. Bu sonuçlar eşlenmemiş elektronun α -protonu ve iki β -protonu ile etkileşime girdiğini göstermektedir. Protonlarla olan aşırı ince yapı etkileşimleri şu şekilde verilmiştir: $\alpha^{(1)}_{\beta} = 2.50$ mT, $\alpha^{(2)}_{\beta} = 1.94$ mT ve $\alpha_{\alpha} = 1.94$ mT. α -protonu ve iki β -protonu yaklaşık manyetik olarak eşdeğerdir. Bu radikalın g-değeri $g = 2.0041 \pm 0.0005$ olarak ölçülmüştür. Bu aşırı ince yapı parametreleriyle simüle edilmiş spektrum, Şekil 1b'de gösterilmiştir. DeneySEL ve simüle edilmiş EPR spektrumlarının birbirleriyle iyi bir uyum gösterdiği bulunmuştur. Bu sonuçlara göre, $-CH_2\dot{C}HCOOCH_3$ radikalının, $COOCH_3$ grubuna bağlı karbon atomundan NH_2 grubunun uzaklaştırılmasıyla elde edildiği söylenebilir.



Şekil.1 a) LGA toz örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.2. L-Glutamik asit hidroklorür(LGAHCl)

L-glutamik asit hidroklorürün biyolojik özellikleri, genellikle L-glutamik asidin biyolojik aktiviteleriyle yakından ilişkilidir. L-glutamik asit hidroklorür, nörolojik ve metabolik fonksiyonlarda kritik rol oynayan bir bileşiktir. Ancak, dengeli ve kontrollü kullanımı önemlidir çünkü aşırı glutamat salınımı, nörotoksisiteye ve nörolojik hastalıklara yol açabilir.

Kimyasal Formül: $C_5H_9NO_4 \cdot HCl$ dir.

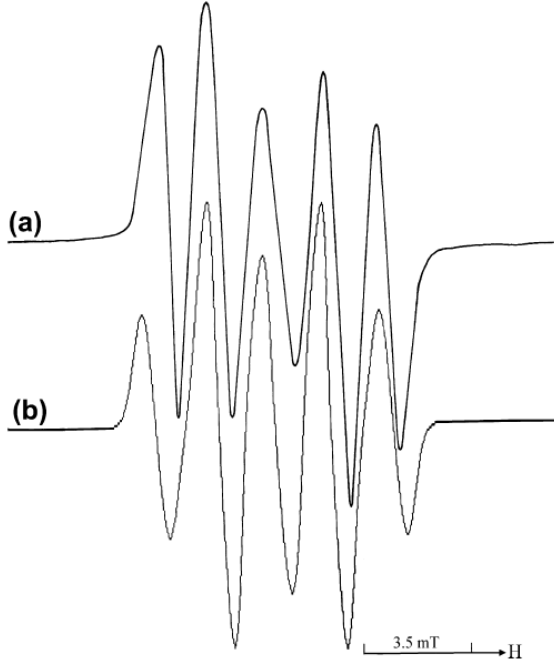
Toz örnek, oda sıcaklığında 30 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı. Spektrumların oda sıcaklığında 2 aydan daha fazla kararlı (sönmediği) kaldığı görülmüştür.

Gama ışını ile ışınlanmış LGAHCl tozlarının EPR spektrumu, Şekil 2a'da gösterilmiştir [8]. 1:2:2:2:1 yoğunluk dağılımına sahip spektrum detaylı incelendiğinde, 3.87 mT'lik bir

çift çizgi içerdiği görülür. Ardından, çift çizginin her biri, 2.14 mT'lik üç çizgiye daha bölünmüştür ve bu çizgilerin yoğunluk dağılımı 1:2:1'dir. Bu spektrum için binom açılımı şu şekilde verilir:

$$1 : 2 : 1 + 1 : 2 : 1 = 1 : 2 : 2 : 2 : 1$$

Sonuç olarak, eşlenmemiş elektronun α -proton ve manyetik olarak eşdeğer olmayan iki β -protonu ile etkileşimde olduğunu gösterir. Protonlarla olan aşırı ince yapı etkileşimleri şunlardır: $a_\alpha = 2.14$ mT, $a^{(1)}_\beta = 3.87$ mT, $a^{(2)}_\beta = 2.14$ mT ve $\Delta H = 0.48$ mT. α -proton ve $\beta^{(2)}$ -proton manyetik olarak eşdeğerdir. Bu EPR spektrumunun HOOCCH2CH2C(H)COOH'ye ait olduğunu varsayabiliriz. Bu serbest radikalın g değeri $g = 2.0035 \pm 0.0005$ olarak ölçülmüştür. Yukarıda verilen değerlerle yapılan spektrum simülasyonu Şekil 2b'de gösterilmiştir.



Şekil.2 a) LGAHCl örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

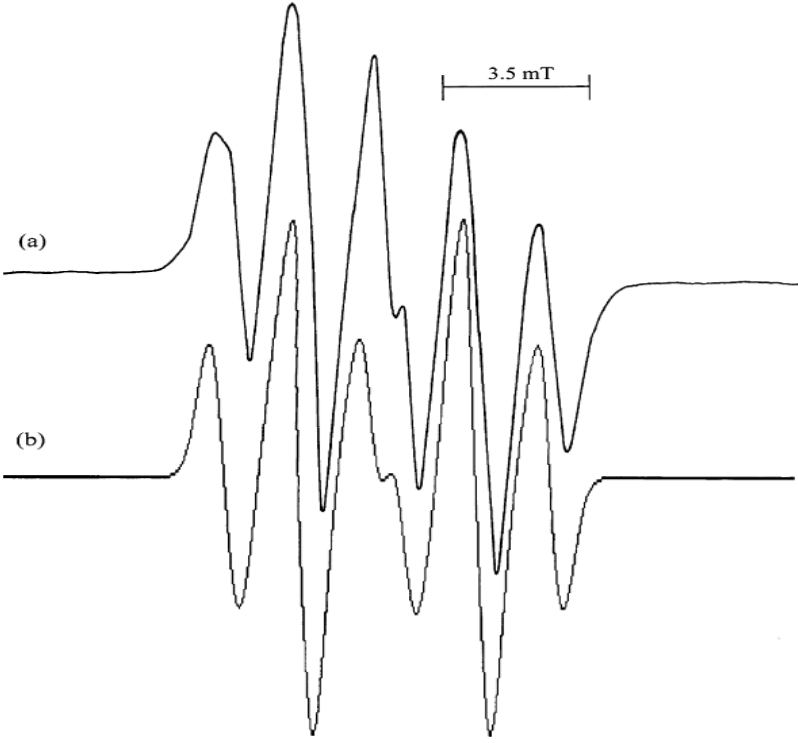
3.3. DL-Glutamik asit Monohidrat(DLGAM)

DL-glutamik asit monohidrat bir amino asit olarak, merkezi sinir sistemi fonksiyonlarını destekler, bağışıklık ve sindirim sistemlerinde önemli bir rol oynar ve vücuttaki asidik-bazik dengeyi korur. Aynı zamanda enerji üretimi ve metabolizma için kritik bir bileşiktir. Bu biyolojik özellikleri, DL-glutamik asit monohidratı birçok tıbbi ve biyolojik araştırmada önemli bir bileşik haline getirir.

Kimyasal formülü $C_5H_9NO_4 \cdot H_2O$ dur.

Toz örnek, oda sıcaklığında 20 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı. Spektrumların oda sıcaklığında 3 aydan daha fazla kararlı (sönmediği) kaldığı görülmüştür.

Şekil 3a, DLGAM tozunun gama ışını ile ışınlanmış oda sıcaklığında kaydedilen EPR spektrumunu göstermektedir[9]. Spektrum, yoğunluk dağılımı 1:2:1:1:2:1 olan altı çizgiden oluşmuştur. spektrum, 4.20 mT'lik bir çift çizgi(dublet) içerdiği görülmektedir. Ardından, çift çizginin her biri, yoğunluk dağılımı 1:2:1 olan 1.74 mT'lik üç çizgiye daha bölünmüştür. Eşlenmemiş elektron, α -protonu ve manyetik olarak eşdeğer olmayan iki β -protonu ile bir etkileşimde olduğunu göstermektedir. Protonlarla olan aşırı ince yapı etkileşimleri şunlardır: $a_\alpha = 1.74$ mT, $a^{(1)}_\beta = 4.20$ mT, $a^{(2)}_\beta = 1.74$ mT ve $\Delta H=0.40$ mT. α -proton ve $a^{(2)}_\beta$ -proton manyetik olarak eşdeğerdir. Elde edilen sonuçlar, bu EPR spektrumunun $HOOCCH_2CH_2\dot{C}HCOOH$ radikaline ait olduğunu açıkça göstermektedir. Bu radikalın g değeri $g = 2.0038 \pm 0.0005$ olarak ölçülmüştür. Yukarıda verilen aşırı ince yapı parametreleri ile yapılan spektrum simülasyonu Şekil 3b'de gösterilmiştir. DeneySEL ve simüle edilen EPR spektrumları birbirleriyle iyi bir uyum göstermektedir. Bu toz örnekte oluşan radikal, COOH grubuna bağlı karbon atomundan NH_2 grubunun kopmasıyla elde edilmiştir.



Şekil.3 a) DLGAM toz örneğinin oda sıcaklığındaki EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.4. L-Glutamik asit γ -etil ester(LGE)

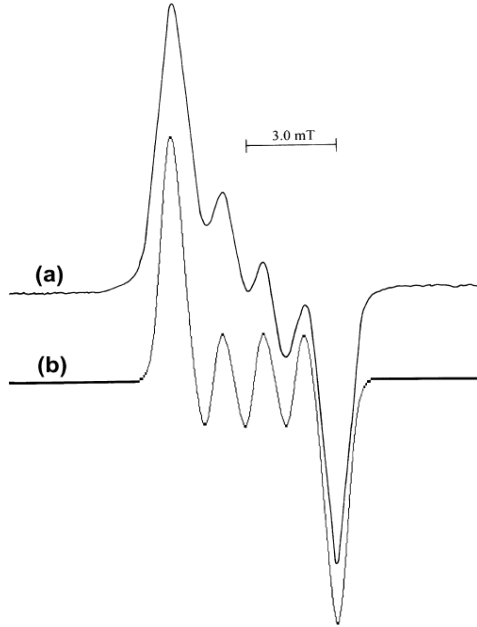
L-Glutamik asit γ -etil ester, glutamik asit (bir amino asit) türevlerinden biridir ve kimyasal olarak, glutamik asidin γ -pozisyonunda etil grubu eklenmiş bir ester formudur.

L-Glutamik asit γ -etil ester, glutamat ile ilgili biyolojik etkilerin modülasyonunda ve nörolojik hastalıkların tedavisinde potansiyel bir bileşik olarak öne çıkabilir. Ancak, biyolojik etkilerini tam olarak anlamak için daha fazla araştırma yapılması gereklidir.

Kimyasal formülü: $C_7H_{13}NO_4$ dir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 24 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı. Spektrumların oda sıcaklığında 6 aydan daha fazla kararlı (sönmediği) kaldığı görülmüştür.

LGE (L-Glutamik asit γ -etil ester) tozu, oda sıcaklığında ^{60}Co gama-ışını kaynağı ile ışınlандığında, EPR spektrumu Şekil 4a'da gösterilmektedir[10]. Bu spektrum, $\text{C}_2\text{H}_5\text{OCOCH}_2\text{CH}_2\dot{\text{C}}(\text{NH}_2)\text{COOH}$ radikale atfedilebilir. Eşlenmemiş elektron, iki β -protonu ve azot çekirdeği ile etkileşime girmiştir. Spektrumun EPR simülasyonu, Şekil 4b'de gösterilmiştir. Örneğin aşırı ince yapı sabiti değerleri, $a^{(1)}_{\beta} = 3.60$ mT, $a^{(2)}_{\beta} = 1.80$ mT, $a_N = 0.53$ mT ve $\Delta H = 0.58$ mT. Azot çekirdeğinin aşırı ince yapı sabiti, spektrumun çizgi genişliğinden daha küçük olduğundan dolayı spektrumda gözlemlenmemektedir. Radikalin g değeri ise $g = 2.0032 \pm 0.0005$ olarak bulunmuştur.



Şekil.4 a) LGE toz örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.5. DL-2-Metil glutamik asit hemihidrat (DL2MGAH)

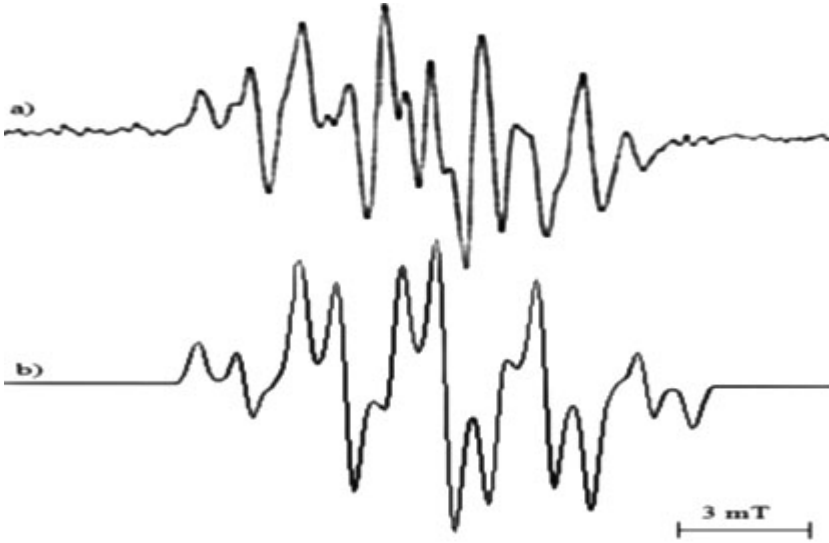
DL-2-Metil Glutamik Asit Hemihidrat (DL-2-Methylglutamic acid hemihydrate), bir amino asit türevidir ve genellikle kimyasal ve biyolojik araştırmalarda kullanılır. Hemihidrat formu, bir molekül suyu bağlayan kristal yapısını ifade eder.

DL-2-Metil Glutamik Asit Hemihidrat, glutamatın biyolojik özelliklerini ve nörolojik etkilerini taşıyan bir bileşiktir. Bu özellikler, onu özellikle nörolojik hastalıkların tedavisinde, amino asit metabolizmasında ve farmasötik araştırmalarda potansiyel bir bileşik yapmaktadır. Bununla birlikte, bu türevin tam biyolojik etkilerinin daha iyi anlaşılabilmesi için daha fazla araştırma yapılması gerekebilir.

Kimyasal formülü $C_6H_{11}NO_4 \cdot 1/2H_2O$ dir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 12 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı. Spektrumların oda sıcaklığında 3 aydan daha fazla kararlı (sönmediği) kaldığı görülmüştür.

DL-2-MGAH'nin gama-ışını ile ışılandıktan sonra kaydedilen EPR spektrumu Şekil 5a'da verilmiştir [11]. Metilen grubundan bir hidrojenin kopmasıyla oluşan paramanyetik merkez $HOOCCH_3NH_2\dot{C}CH_2COOH \cdot 1/2H_2O$ radikaline atfedilmiştir. Spektrum, 1:1:4:4:6:6:4:4:1:1 yoğunluk dağılımına sahip on çizgiden oluşmuştur. Spektrumun g-değeri $g = 2.0031 \pm 0.0005$ 'tir. Eşlenmemiş elektron, bir α -protonu, metilen grubunun iki eşdeğer protonu, NH_2 grubunun bir protonu, metil grubunun bir protonu ve azot çekirdeği ile etkileşime girer. Aşırı ince yapı etkileşimler şu şekilde belirlenmiştir: $a_\alpha = 2.1$ mT, $a^{(1)}_\beta = a^{(2)}_\beta = 2.2$ mT, $a^3_\gamma = 2.0$ mT, $a^4_\gamma = 0.87$ mT, $a_N = 0.36$ mT ve $\Delta H = 0.30$ mT. Bu parametrelerle elde edilen simüle edilmiş spektrum Şekil 5b'de verilmiştir. Deneysel ve simüle edilmiş spektrumlar oldukça uyumludur.



Şekil.5 a) DL2MGAAH örneğinin oda sıcaklığındaki EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.6. N-Asetil-L-Glutamik asit(NALGA)

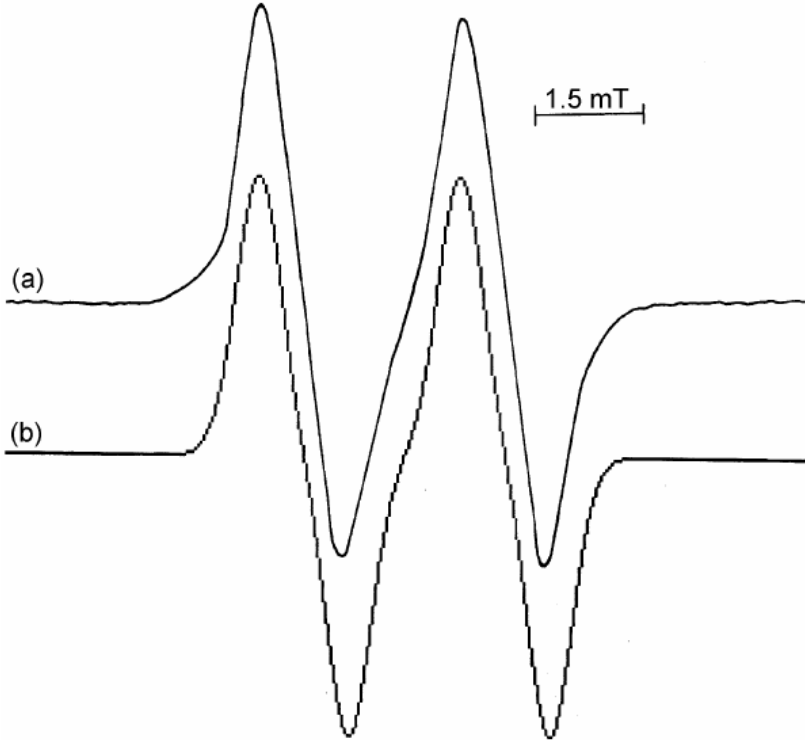
N-Asetil-L-Glutamik Asit, glutamik asidin bir türevi olup, genellikle biyokimyasal ve farmasötik araştırmalarda kullanılır. Bu bileşik, glutamik asit molekülüne asetik asit (CH_3COOH) grubu eklenerek sentezlenir.

N-Asetil-L-Glutamik Asit, glutamatın biyolojik etkilerini modüle eden bir bileşiktir. Glutamatın nörolojik etkilerini düzenleyerek, nöroprotektif, anti-inflamatuar ve metabolik süreçlerde etkili olabilir. Potansiyel olarak nörolojik hastalıkların tedavisinde kullanılabilir ve farmasötik araştırmalarda önemli bir bileşik olabilir.

Kimyasal formülü $\text{C}_7\text{H}_{11}\text{NO}_5$ dir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 24 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı. Spektrumların oda sıcaklığında 3 aydan daha fazla kararlı (sönmediği) kaldığı görülmüştür.

NALGA'nın gama ışını ile ışılandıktan sonra karakteristik EPR spektrumu Şekil 6(a)'da gösterilmiştir[12]. Spektrum incelendiğinde, 2.83 mT' lik, bir çift çizgiden oluştuğu görülmektedir. Eşlenmemiş elektron metilenin bir protonu ve ^{14}N çekirdeğiyle etkileşmektedir. Spektrumun çizgi genişliği büyük olduğundan, azot çekirdeğinin etkisi spektrumda gözlemlenmemektedir. Simülasyon programı kullanılarak, $a^{(1)}_{\beta} = 2.83 \text{ mT}$, $a_{\text{N}} = 0.43 \text{ mT}$ ve $\Delta H = 0.40 \text{ mT}$ olarak elde edilmiştir. Spektrumun g değeri $g = 2.0030 \pm 0.0005$ tir. Paramanyetik merkez HOOCCH2CH2C(NHCOCH3)COOH radikale atfedilmiştir.



Şekil.6 a) NALGA örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.7. N-Metil-L-Glutamik asit (NMGA)

N-Metil-L-glutamik asit(metilglutamat), amino grubuna bir metil grubunun eklendiği glutamik asidin kimyasal bir türevidir. Metan metabolizmasında bir ara maddedir. Biyosentetik olarak, metilamin ve glutamik asitten metilamin-glutamat N -metiltransferaz enzimi tarafından üretilir.

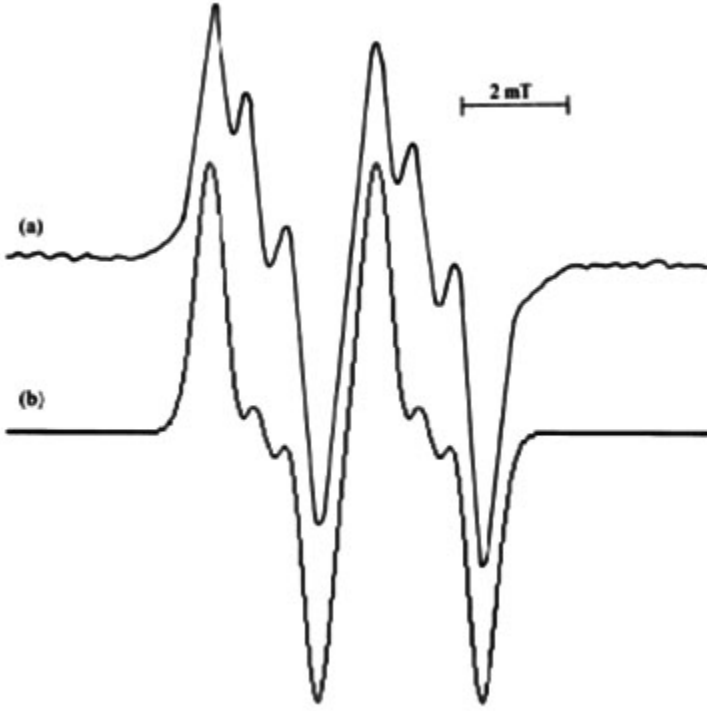
N-Metil-L-Glutamik Asit (NMGA), biyolojik olarak önemli bir moleküldür ve genellikle nörolojik araştırmalarla ilişkilendirilir. Bu bileşik, glutamik asit (bir nörotransmitter) türevidir ve bir metil grubu (-CH₃) içerir.

N-Metil-L-Glutamik Asit'in nörolojik ve farmasötik araştırmalarda çok yönlü bir bileşik olarak yerini aldığını söyleyebiliriz. Henüz tüm biyolojik etkileri net olarak anlaşılamamış olsa da, gelecekteki çalışmalarda bu molekülün potansiyeli daha da açığa çıkabilir.

Kimyasal formülü C₆H₁₁NO₄ tir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 20 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

NMGA tozunun oda sıcaklığındaki karakteristik kararlı EPR spektrumu Şekil 7a'da gösterilmiştir [13]. Spektrum dikkatlice incelendiğinde, 3,00 mT'lik bir ikili(dublet) çizgiden oluştuğu, daha sonra her bir çiftin 0,65 mT'lik bir mesafe ile üçe bölündüğü görülmektedir. Bu, eşleşmemiş elektronu bir metilen protonu ve bir azot çekirdeği (I=1) ile olan etkileşimini göstermektedir. Bu nedenle, paramanyetik merkez HOOCCH₂CH₂Ċ(NHCH₃)COOH radikaline ait olduğunu düşünülmektedir. Bu radikalın g değeri $g = 2.0027 \pm 0.0005$ olarak ölçülmüştür. Şekil 7b'de, etkileşim sabitleri $a^{(1)}_{\beta} = 3.00$ mT, $a_N = 0.65$ mT kullanılarak yapılan spektrum simülasyonu gösterilmektedir. DeneySEL ve simüle edilen EPR spektrumu birbirleriyle oldukça uyumlu bulunmuştur.



Şekil.7 a) Oda sıcaklığındaki NMGA toz örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.8. L-Glutamin hidroklorür(LGHCl)

L-Glutamin hidroklorür, L-glutaminin bir tuzu olup, genellikle vücutta önemli bir amino asit olan glutaminin biyolojik özelliklerini taşır. Glutamin, vücutta birçok temel işlevi yerine getiren, protein sentezi ve enerji üretiminde rol oynayan bir amino asittir.

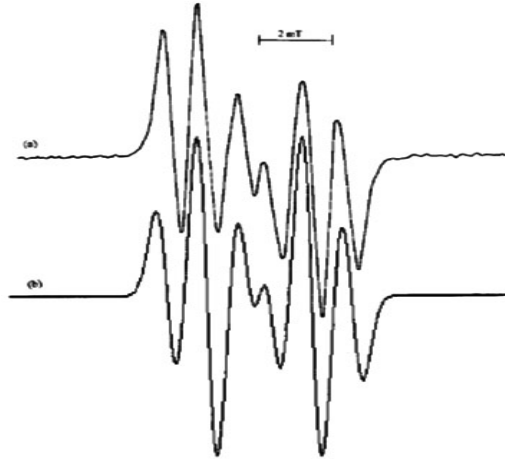
L-Glutamin hidroklorürün genellikle sporcular, bağışıklık sistemi sorunları olan bireyler ve sindirim problemleri yaşayan kişiler tarafından takviye olarak kullanılmaktadır.

Kimyasal formülü $C_5H_{10}N_2O_3 \cdot HCl$ dir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 20 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

LGHCl örneğinin EPR spektrumu şekil.8 a da gösterilmiştir[14]. Oluşan radikalin karbon merkezli radikal olduğunu gösteriyor. Bu spektrum, 1:2:1:1:2:1 oranında bir yoğunluk dağılımı sergiler ve $\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ radikaline atfedilebilir. Spektrum, 2.87 mT'lik iki çizgi (doublet) oluştuğunu gösterir. Ardından, ikili çizginin her biri, 1.08 mT'lik bir aralıkla ve 1:2:1 yoğunluk dağılımına sahip üç çizgiye(triplet) ayrılmıştır. Bu sonuçlar, serbest elektronun α -proton ve iki metilen protonu ile olan etkileşmesini işaret eder. Ölçülen g değeri $g = 2.0035 \pm 0.0005$ 'dir. Bu spektrum, $a_{\text{CH}} = 2.87 \text{ mT}$ ve $a_{\text{CH}_2} = 1.08 \text{ mT}$ ve $\Delta H = 0.35 \text{ mT}$ değerlerle simüle edilmiştir.

Simüle spektrum Şekil 8b'nde gösterilmiştir. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumlarının birbirleriyle iyi bir uyum içinde olduğu bulunmuştur. Sonuç olarak, toz örnekte gama ışınlamasının, $-\text{COOH}$ grubuna bağlı karbon atomundan bir NH_2 grubunun kopmasıyla LGHCl'de serbest radikal oluştuğu söylenebilir.



Şekil.8 a) LGHCl örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.9. Glisil-L-Glutamin(GLG)

Glisil-L-Glutamin (Gly-L-Glu), glisin ve L-glutamin amino asitlerinin dipeptididir. Bu bileşik, biyolojik sistemlerde çeşitli önemli işlevlere sahiptir.

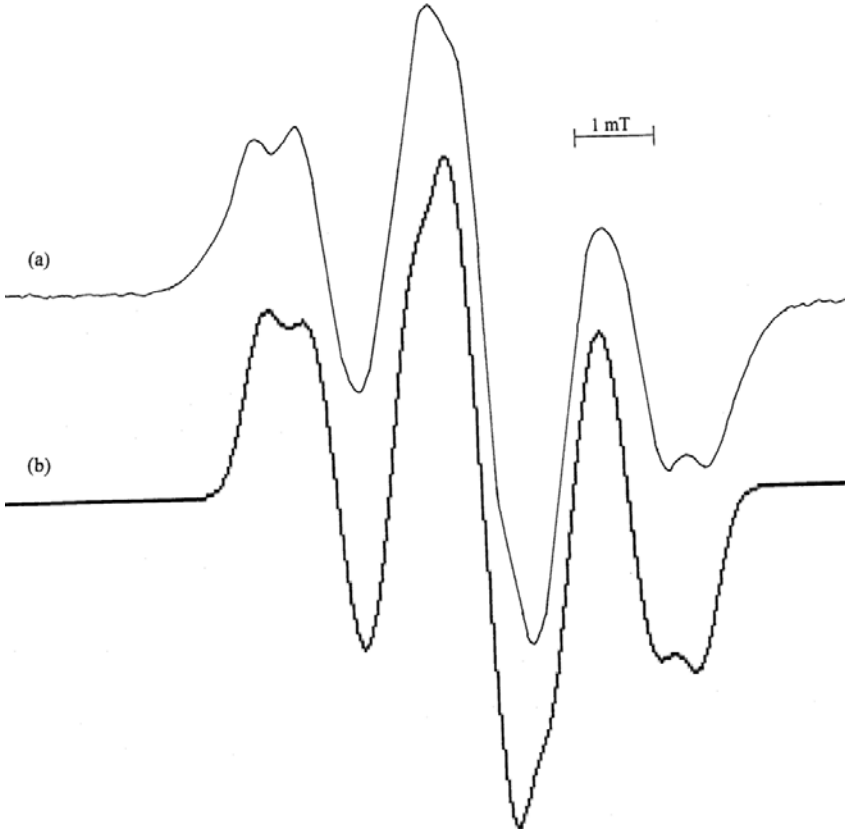
Glisil-L-Glutamin, hem glisin hem de L-glutaminin biyolojik özelliklerini taşıyan önemli bir bileşiktir ve birçok biyolojik işlevde rol oynayabilir. Bağışıklık, sinir sistemi, sindirim sistemi, kas sağlığı ve antioksidan savunma gibi alanlarda potansiyel faydalar sağlayabilir.

Kimyasal formülü $C_7H_{13}N_3O_4$ dir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 36 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

GLG'nin gama radyasyonuna uğratılmış tozu oda sıcaklığında Şekil 9a'da gösterilen spektrumu verir[15]. Bu spektrum, $CH_2\dot{C}NHCOOH$ radikaline atfedilebilir. Spektrum, 1:1 çift çizginin(dublet) her biri 1:2:1 üç çizgiye ayrılmıştır. Aşırı ince yapı sabitleri, $a_{CH_2} = 2.17$ mT, $a_{NH} = 0.72$ mT, $a_N = 0.48$ mT, $\Delta H = 0.40$ mT ve g-faktörü $g = 2.0028 \pm 0.0005$ olarak ölçülmüştür.

Spektrum ayrıntılı olarak incelendiğinde, 2.17 mT'lik bir aralıkla bir üçlü çizginin oluştuğu görülmektedir. Ardından, her bir üçlü çizgi, 0.72 mT'lik bir aralıkla iki çizgiye daha bölündüğü görülmektedir, bu Şekil 9a'da gösterilmektedir. Bu sonuçlar, eşlenmemiş elektronun, iki metilen protonu ve bir NH protonu ile olan etkileşmesini göstermektedir. Azot çekirdeği ile olan etkileşme, azotun a sabitinin küçük olmasından dolayı çözünür değildir. Bu değerlerle simüle edilen bir spektrum, deneyle iyi bir uyum içindedir (Şekil 9b). Sonuç olarak, gama radyasyonunun, GLG'de bir hidrojen atomunun CH grubundan kaybı ile serbest radikal oluştuğu söylenebilir.



Şekil.9 a) GLG toz örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.10. L-Glutamin(LG)

L-glutaminin biyolojik özellikleri çok çeşitlidir ve vücudun enerji üretimi, bağışıklık sistemi, sindirim sağlığı, kas onarımı ve sinir sistemi gibi bir dizi kritik fonksiyonunda önemli bir rol oynar. Bu özellikleri nedeniyle L-glutamin, sporcular, bağışıklık sistemi zayıf olan bireyler ve sindirim sistemi problemleri yaşayan kişiler için faydalı bir takviye olabilir.

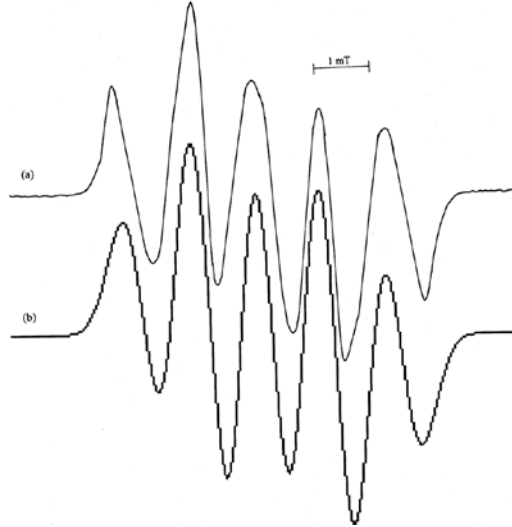
Kimyasal formülü $C_5H_{10}N_2O_3$ tür.

Toz örnek, oda sıcaklığında 36 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

Şekil 10 a, oda sıcaklığında gama radyasyonuna uğratılmış LG tozunun EPR spektrumunu göstermektedir[15]. Bu spektrum, $\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ radikaline atfedilebilir. Bu radikalın, $-\text{COOH}$ grubuna bağlı karbon atomundan bir NH_2 grubunun kopması sonucu oluştuğu düşünülmektedir. Bu örneğin spektrumu, yaklaşık 1:2:2:2:1 yoğunluk dağılımına sahiptir; bu spektrumda, 2.30 mT'lik bir aralıkla bir çift çizginin (dublet) bulunduğu görülmektedir. Ardından, her bir çizgi, 1.23 mT'lik bir aralıkla ve 1:2:1 yoğunluk dağılımına sahip üç çizgiye bölünmüştür. Bu spektrumun binom açılımı şu şekilde verilmiştir:

$$1:2:1 + 1:2:1 = 1:2:2:2:1$$

Eşdeğer olmayan protonların daha büyük bir sayısı için spektrum, binom açılımı ile bulunabilir; Bu spektrum için, ölçülen değerler şunlardır: $a_{\text{CH}} = 2.30 \text{ mT}$, $a_{\text{CH}_2} = 1.23 \text{ mT}$, $\Delta H = 0.45 \text{ mT}$ ve $g = 2.0027 \pm 0.0005$. Bu parametrelerle simüle edilen bir spektrum, Şekil 10b'de gösterilmiştir. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumları arasındaki uyum oldukça iyidir.



**Şekil.10 a) LG toz örneğinin Oda sıcaklığındaki EPR spektrumu
b) Simüle edilmiş spektrum.**

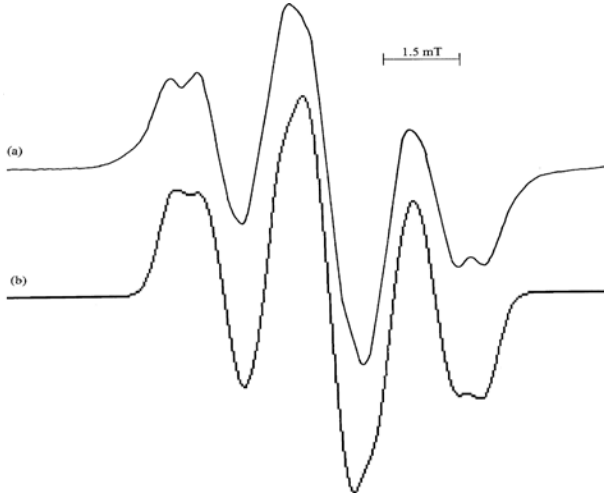
3.11. Alanil-L-Glutamin(ALG)

Alanil-L-Glutamin (Ala-L-Glu), alanin ve L-glutamin amino asitlerinin dipeptididir ve biyolojik sistemlerde çeşitli işlevleri vardır. Alanil-L-Glutamin, hem alanin hem de L-glutaminin biyolojik özelliklerini taşıyan bir bileşiktir. Bağışıklık sistemi, sindirim sağlığı, kas büyümesi, enerji üretimi ve nörolojik fonksiyonlar gibi birçok alanda önemli biyolojik etkiler gösterir.

Kimyasal formülü $C_8H_{15}N_3O_4$ tür.

Toz örnek, oda sıcaklığında 18 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı. Spektrumların oda sıcaklığında 3 aydan daha fazla kararlı (sönmediği) kaldığı görülmüştür.

Şekil 11a'da, oda sıcaklığında gama radyasyonuna uğratılmış ALG tozunun EPR spektrumu gösterilmektedir[16]. Bu spektrumun hasar merkezi, $CH_2\dot{C}NHCOOH$ ile ilişkilendirilebilir. Eşlenmemiş elektron, iki metilen protonu, bir NH protonu ve ^{14}N çekirdeği ile etkileşir. ALG spektrumunun bir simülasyonu, aşırı ince yapı bağlanma sabitleri olan $a_{CH_2} = 2.10$ mT, $a_{NH} = 0.68$ mT, $a_N = 0.43$ mT ve $\Delta H = 0.38$ mT kullanılarak Şekil 11b'de gösterilmiştir. ALG'nin g-değeri $g = 2.0028 \pm 0.0005$ olarak ölçülmüştür. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumları arasındaki uyum oldukça iyidir. Sonuç olarak, gama radyasyonunun ALG'de bir CH grubundan bir hidrojen atomunun kaybı ile serbest radikal oluşturduğu söylenebilir.



Şekil.11 a) ALG toz örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

3.12. Glisil-L-Glutamin monohidrat(GLGM)

Toz örnek, oda sıcaklığında 18 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

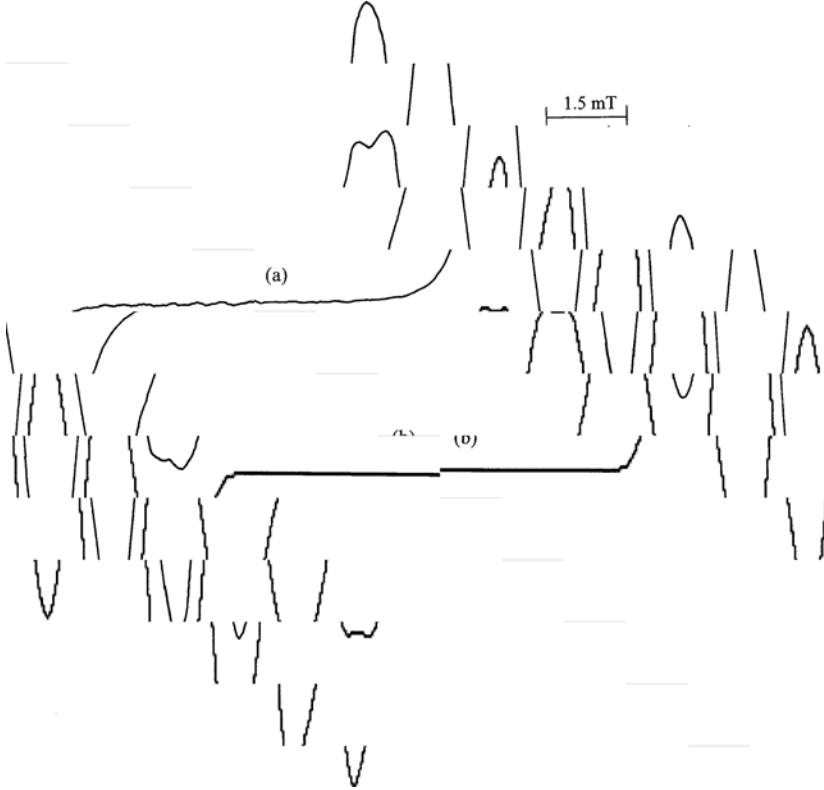
Glisil-L-Glutamin Monohidrat (Gly-L-Glu·H₂O), glisin ve L-glutamin amino asitlerinin birleşiminden oluşan bir dipeptid olup, biyolojik sistemlerde önemli işlevlere sahiptir. Hem glisin hem de L-glutaminin biyolojik özelliklerine sahip olan bu bileşik, çeşitli fizyolojik süreçlerde rol oynar.

Glisil-L-Glutamin Monohidrat, bağışıklık sistemini desteklemekten nörolojik işlevleri iyileştirmeye kadar geniş bir biyolojik etki yelpazesinde rol oynar. Bu özellikleri, onun vücut tarafından biyolojik olarak aktif bir bileşik olarak kullanılmasını ve çeşitli sağlık faydaları sağlamasını mümkün kılar.

Kimyasal formülü C₇H₁₃N₃O₄ · H₂O dur.

Şekil 12a, oda sıcaklığında gama ile ışınlanmış GLGM tozlarının EPR spektrumunu göstermektedir[17]. Bu spektrum için radikal, CH₂ĊNHCOOH ile ilişkilendirilebilir. Eşlenmemiş

elektron, iki metilen protonu, bir NH protonu ve ^{14}N çekirdeği ile etkileşir. GLGM spektrumunun bir simülasyonu, aşırı ince yapı bağlanma sabitleri $a_{\text{CH}_2} = 2.40 \text{ mT}$, $a_{\text{NH}} = 0.63 \text{ mT}$, $a_{\text{N}} = 0.53 \text{ mT}$ ve $\Delta H = 0.40 \text{ mT}$ kullanılarak Şekil 12b'de gösterilmiştir. Bu radikaldeki metilen protonlarının bağlanması, öncelikle hiperkonjugasyon yoluyla olmuştur. Sonuç olarak, gama radyasyonunun, GLGM'de bir CH grubundan bir hidrojen atomunun kaybı yoluyla serbest radikal oluşturduğu söylenebilir.



Şekil.12 a) GLGM örneğinin EPR spektrumu b) Simüle edilmiş spektrum.

4. SONUÇLAR

Tablo 1. Gama Işınlaması Sonucu Glutamik Asit Türevlerinde Oluşan Radikaller, g Değerleri ve a Değerleri

Madde Adı	Oluşan Radikal	g Değeri (± 0.0005)	a Değerleri (mT)
L-Glutamik asit dimetil ester hidroklorür	$-\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HCOOCH}_3$	2.0041	$a_\alpha = 1.94$, $a^{(1)}_\beta = 2.50$, $a^{(2)}_\beta = 1.94$
L-Glutamik asit hidroklorür	$\text{HOOCCH}_2\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$	2.0035	$a_\alpha = 2.14$, $a^{(1)}_\beta = 3.87$, $a^{(2)}_\beta = 2.14$
DL-Glutamik asit Monohidrat	$\text{HOOCCH}_2\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$	2.0038	$a_\alpha = 1.74$, $a^{(1)}_\beta = 4.20$, $a^{(2)}_\beta = 1.74$
L-Glutamik asit γ -etil ester	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OCOCH}_2\text{CH}_2\dot{\text{C}}(\text{NH}_2)\text{COOH}$	2.0032	$a^{(1)}_\beta = 3.60$, $a^{(2)}_\beta = 1.80$, $a_N = 0.53$
DL-2-Metil glutamik asit hemihidrat	$\text{HOOCCH}_3\text{NH}_2\dot{\text{C}}\text{HCH}_2\text{COOH} \cdot 1/2\text{H}_2\text{O}$	2.0031	$a_\alpha = 2.1$, $a^{(1)}_\beta = a^{(2)}_\beta = 2.2$, $a^{(3)}_\gamma = 2.0$, $a^{(4)}_\gamma = 0.87$, $a_N = 0.36$
N-Asetil-L-Glutamik asit	$\text{HOOCCH}_2\text{CH}_2\dot{\text{C}}(\text{NHCOCH}_3)\text{COOH}$	2.0030	$a^{(1)}_\beta = 2.83$, $a_N = 0.43$
N-Metil-L-Glutamik asit	$\text{HOOCCH}_2\text{CH}_2\dot{\text{C}}(\text{NHCH}_3)\text{COOH}$	2.0027	$a^{(1)}_\beta = 3.00$, $a_N = 0.65$
L-Glutamin hidroklorür	$\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$	2.0035	$a_{\text{CH}} = 2.87$, $a_{\text{CH}_2} = 1.08$
Glisil-L-Glutamin	$\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{NHCOOH}$	2.0028	$a_{\text{CH}_2} = 2.17$, $a_{\text{NH}} = 0.72$, $a_N = 0.48$
L-Glutamin	$\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$	2.0027	$a_{\text{CH}} = 2.30$, $a_{\text{CH}_2} = 1.23$
Alanil-L-Glutamin	$\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{NHCOOH}$	2.0028	$a_{\text{CH}_2} = 2.10$, $a_{\text{NH}} = 0.68$, $a_N = 0.43$
Glisil-L-Glutamin monohidrat	$\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{NHCOOH}$	2.0026	$a_{\text{CH}_2} = 2.40$, $a_{\text{NH}} = 0.63$, $a_N = 0.53$

g değeri (spektroskopik yarıлма faktörü), bir radikalın manyetik alandaki enerji seviyelerinin nasıl yarıldığını (split) gösteren boyutsuz bir parametredir. Serbest elektronun manyetik momentinin manyetik alanla etkileşimini ifade eder. Radikalın kimyasal çevresini ve elektron dağılımını anlamak için kullanılır. Radikalın türünü ve yapısını belirlemeye yardımcı olur. g değeri, EPR spektroskopisinde radikalleri tanımlamak ve karakterize etmek için kullanılan önemli bir parametredir.

Tablo 1. de görüldüğü gibi glutamik asit türevlerinin g değerleri birbirine oldukça yakın, genellikle 2.0026 ile 2.0041 arasında değişiyor. Bu durum, bu moleküllerdeki radikallerin elektronik yapısının genel olarak benzer olduğunu gösterir.

Radikal pozisyonu da bu benzerliği destekler niteliktedir. Ayrıca glutamik asit ve glutamin türevlerinin temel yapısı birbirine benzediği için, g değerleri arasındaki farklar oldukça küçüktür.

g değerlerindeki küçük sapmalar, moleküldeki farklı grupların (metil, etil, amino, karboksil, peptit bağları) radikalin manyetik çevresi üzerindeki etkilerinden kaynaklanır. Bu küçük sapmalar, radikallerin lokal yapısındaki küçük farklılıkların bir yansımasıdır. Örneğin; glisin bağının varlığı, g değerini biraz düşürürken, ester grupları g değerini daha fazla yükseltmektedir.

g değerleri, incelenen radikallerin genel elektronik yapısını ve manyetik ortamını anlamak için önemli bir referans noktasıdır. Küçük farklılıklar, radikallerin moleküler yapılarındaki spesifik detayları ve çevresel etkileşimleri hakkında bilgiler sunar. Bu çalışma kapsamındaki moleküllerde, g değerlerindeki varyasyonlar, radikallerin bağlı olduğu grupların ve moleküler ortamın etkileşimlerinin bir sonucudur.

Glutamik asit ve türevlerinde gözlemlenen radikallerin g değerlerinin birbirine yakın olması, bu radikallerin çoğunlukla aynı türden (karbon merkezli) radikaller olmasından kaynaklanır.

a değeri (Aşırı İnce Yapı Sabiti), eşleşmemiş elektronun, komşu atom çekirdeklerinin manyetik momentleri ile etkileşiminin gücünü gösterir. Bu değer, genellikle mili Tesla (mT) biriminde ölçülür.

Aşırı ince yapı (hiperfin) etkileşimleri, spektrumdaki çizgi sayısını ve aralıklarını belirler. Bu etkileşimler, radikaldeki eşleşmemiş elektronun çevresindeki manyetik çekirdeklerle (protonlar, azot çekirdekleri vb.) etkileşiminden kaynaklanır.

a değeri, radikaldeki eşleşmemiş elektronun, etkileştiği çekirdek ile olan mesafesi, spin yoğunluğu ve bağ yapısı gibi faktörlerden etkilenir.

α -Proton Etkileşimi: Genellikle α -karbon atomlarına bağlı protonlar, daha büyük a değerleri gösterir (1.5-2.5 mT).

Metilen ve Metil Protonları: Metilen ve metil gruplarındaki protonlar daha düşük a değerleri gösterir (0.5-1.5 mT).

Bu çalışmada, glutamik asit türevlerinin a değerleri, radikallerin kimyasal yapısı ve çevresel etkileşimleri hakkında kritik bilgiler sunmuştur. Yüksek a değerleri, protonların radikal merkeziyle güçlü etkileşimlerini yansıtırken, düşük değerler zayıf etkileşimleri veya uzak konumlanmayı gösterir. Bu bulgular, bileşiklerin biyolojik aktiviteleri ve kararlılıklarıyla ilişkilendirilebilir. Özellikle, ester ve metil gruplarının hiperfine etkileşimleri şekillendirmedeki rolü, bu türevlerin farmasötik ve nörolojik uygulamalarda potansiyelini anlamak için önemlidir.

a değerlerindeki benzerlikler, aynı temel radikal yapısının varlığından kaynaklanırken, farklılıklar molekül yapısındaki fonksiyonel gruplar, sterik engeller, hiperkonjugasyon etkileri, çekirdek türleri ve çevresel faktörlerden kaynaklanır.

g değeri ve a değeri (aşırı ince yapı etkileşim sabiti), Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisinde radikallerin manyetik özelliklerini ve çevresel etkileşimlerini anlamak için kullanılan temel parametrelerdir. Bu değerler, radikallerin yapısı, elektron dağılımı ve çevresindeki atomlarla olan etkileşimleri hakkında bilgi verir. g değeri radikalin genel elektronik yapısını ortaya koyarken, a değerleri eşleşmemiş elektronun çevresindeki atomlarla etkileşimini detaylandırır.

Örnekler için beta protonlarının manyetik eşdeğerliği veya eşdeğer olmaması durumunu değerlendirmesi, her bir molekülün yapısı ve gama ışınlaması sonrası oluşan radikallerin özellikleri dikkate alınmalıdır. Bu değerlendirme, EPR spektrumlarının karmaşıklığını,

yorumlanmasını ve elde edilen aşırı ince yapı sabitlerinin anlamını doğrudan etkiler.

Manyetik Eşdeğerlik: Beta protonlarının manyetik olarak eşdeğer olması, bu protonların manyetik alan altında aynı rezonans frekansında tepki vermesi anlamına gelir. Bu, kimyasal çevrelerinin benzer olmasından kaynaklanır ve EPR spektrumlarında daha az çizgi ve daha basit desenlere yol açar.

Manyetik Eşdeğer Olmama: Beta protonlarının manyetik olarak eşdeğer olmaması, bu protonların farklı rezonans frekanslarında tepki vermesi demektir. Bu durum, farklı kimyasal çevrelerden kaynaklanır ve EPR spektrumlarında daha fazla çizgi, karmaşık desenler ve farklı hiperfin kuplaj sabitlerine yol açar.

Hiperkonjugasyon: Beta protonları, radikaldeki alfa karbon atomuna doğrudan bağlı olmasa da, hiperkonjugasyon yoluyla eşleşmemiş elektronla etkileşime girer. Bu etkileşimin şiddeti, protonların manyetik eşdeğer olup olmamasına göre değişir.

Hiperkonjugasyon, serbest bir radikalın etrafındaki bağlarla etkileşimi sayesinde, elektronların daha geniş bir alanda dağılmasına yol açarak, genellikle bu radikalın daha stabil hale gelmesini sağlar.

Dönme ve Konformasyon: Beta protonlarının eşdeğerliği, genellikle C_{α} - C_{β} bağı etrafında hızlı dönmeye ilişkilidir. Bu dönme, protonların farklı konformasyonları arasında ortalama bir etkileşim oluşmasına ve dolayısıyla eşdeğer bir manyetik çevreye sahip olmasına yol açar. Eşdeğer olmama durumunda ise bu dönme kısıtlı olabilir veya farklı konformasyonlar tercih edilebilir.

EPR (Elektron Paramanyetik Rezonans) spektroskopisinde konformasyon, bir molekülün üç boyutlu

yapısındaki özgül düzeni ya da şeklini ifade eder. Yani, bir molekülün atomlarının uzaydaki yerleşimi ve bağ yapısı, özellikle serbest radikaller ya da paramanyetik merkezlerin bulunduğu moleküller söz konusu olduğunda konformasyon, bu yapının nasıl olduğunu anlatır.

Serbest radikaller gibi paramanyetik türlerde, bu tür bir yapısal düzen değişikliği, elektron yoğunluğunun etkileşime girebileceği alanı ve dolayısıyla ölçülen EPR spektrumunun özelliklerini etkiler. Örneğin, bir molekülün konformasyonel değişimi, serbest radikalın çevresindeki çevreyi değiştirerek EPR sinyalinin şiddetini, genişliğini veya şekil özelliklerini etkileyebilir. EPR spektroskopisinde konformasyon, paramanyetik merkezlerin etrafındaki yapısal düzenin, özellikle moleküller arası etkileşimlerin, bu sistemin EPR özelliklerini nasıl etkilediğini anlamada önemli bir kavramdır. Bu tür konformasyonel değişiklikler, özellikle kimyasal reaksiyonlar ve moleküler düzeydeki etkileşimlerin anlaşılmasında kritik rol oynar.

Tablo 2. Örneklerdeki Çizgi Şiddet Oranları

Madde Adı	Çizgi Şiddet Oranı
L-Glutamik asit dimetil ester hidroklorür	1:3:3:1
L-Glutamik asit hidroklorür	1:2:2:2:1
DL-Glutamik asit Monohidrat	1:2:1:1:2:1
L-Glutamik asit γ -etil ester	Simülasyonla uyumlu
DL-2-Metil glutamik asit hemihidrat	1:1:4:4:6:6:4:4:1:1
N-Asetil-L-Glutamik asit	1:1 (Çift çizgi)
N-Metil-L-Glutamik asit	1:1 (çift) $\rightarrow$ 1:1:1 (üçlü)
L-Glutamin hidroklorür	1:2:1:1:2:1
Glisil-L-Glutamin	1:1 (çift) $\rightarrow$ 1:2:1 (üçlü)
L-Glutamin	1:2:2:2:1
Alanil-L-Glutamin	Simülasyonla uyumlu
Glisil-L-Glutamin monohidrat	Simülasyonla uyumlu

Çizgi Şiddet Oranlarının Anlamı

1:3:3:1 Oranı: L-Glutamik asit dimetil ester hidroklorür (LGA) örneğinde görülen bu oran, eşlenmemiş elektronun bir α -protonu ve iki β -protonu ile etkileşime girdiğini gösterir (Tablo.2).

1:2:2:2:1 Oranı: L-Glutamik asit hidroklorür (LGAHCl) ve L-Glutamin (LG) örneklerinde görülen bu oran, eşlenmemiş elektronun bir α -protonu ve manyetik olarak eşdeğer olmayan iki β -protonu ile etkileşimini yansıtır.

1:2:1:1:2:1 Oranı: DL-Glutamik asit monohidrat (DLGAM) ve L-Glutamin hidroklorür (LGHCl) örneklerinde görülen bu oran, eşlenmemiş elektronun bir α -protonu ve manyetik olarak eşdeğer olmayan iki β -protonu ile etkileşimini gösterir.

1:1:4:4:6:6:4:4:1:1 Oranı: DL-2-Metil glutamik asit hemihidrat (DL2MGAM) örneğinde görülen bu oran, eşlenmemiş elektronun bir α -protonu, metilen grubunun iki eşdeğer protonu, NH_2 grubunun bir protonu, metil grubunun bir protonu ve azot çekirdeği ile etkileşime girdiğini gösterir.

1:1 (Çift Çizgi): N-Asetil-L-Glutamik asit (NALGA) örneğinde görülen bu oran, eşlenmemiş elektronun metilenin bir protonu ve ^{14}N çekirdeğiyle etkileşmektedir. Azot çekirdeğinin etkisi spektrumda belirgin değildir.

1:2:1 (Dublet ve Triplet): N-Metil-L-Glutamik asit (NMGA) ve Glisil-L-Glutamin (GLG) örneklerinde görülen bu oranlar, eşleşmemiş elektronun bir metilen protonu ve bir azot çekirdeği ($I=1$) ile olan etkileşimini gösterir.

L-Glutamik asit γ -etil ester (LGE), Alanil-L-Glutamin (ALG) ve Glisil-L-Glutamin monohidrat (GLGM) örnekleri için çizgi şiddet oranları simülasyonla uyumlu bulunmuştur.

Çizgi şiddet oranları, radikallerin aşırı ince yapı etkileşimlerini ve yapısal karmaşıklığını yansıtan kritik

parametrelerdir. Basit oranlar (1:2:1), tek veya eşdeğer proton gruplarını gösterirken, karmaşık oranlar (1:1:4:4:6:6:4:4:1:1), çoklu proton/azot etkileşimlerini ifade eder. Bu bulgular, bileşiklerin radikal stabilitesi, elektronik ortamı ve biyolojik etkileşim potansiyeli hakkında değerli bilgiler sağlar.

Tablo 2 deki açıklamalar, incelenen örneklerdeki radikallerin yapısını ve manyetik özelliklerini anlamak için önemli bir referans sunar. Çizgi şiddet oranları, her bir radikal için özgündür ve o radikalin yapısı hakkında detaylı bilgiler verir.

Bu çalışmada incelenen tüm glutamik asit türevlerinde, radikallerin karbon atomu merkezli olduğu hem yapısal formüller hem de EPR spektrumlarıyla kanıtlanmıştır. Bu bulgular, serbest radikallerin kimyasal ve biyolojik davranışlarını anlamak için temel oluşturur.

EPR spektrumlarındaki hiperfine bölünme desenleri ve yapısal analizler, tüm bileşiklerde radikal merkezinin karbon atomunda lokalize olduğunu açıkça göstermektedir. Karbon merkezli radikal, merkezinde bir karbon atomu bulunan ve bu karbon atomunun eşleşmemiş bir elektrona sahip olduğu bir kimyasal türdür.

Glutamik asit ve türevleri, vücutta çok çeşitli ve önemli biyolojik fonksiyonlara sahip bileşiklerdir. Temel amino asit fonksiyonlarının yanı sıra, nörolojik etkileri, bağışıklık sistemi ve enerji metabolizmasındaki rolleri nedeniyle, hem temel bilim araştırmalarında hem de tıbbi uygulamalarda büyük önem taşırlar. Bu bileşiklerin her birinin özgün moleküler yapısı, onları çeşitli biyolojik süreçlerde farklı şekillerde etkili kılar.

Örneklerin spektrumlarının simüle edilmiş spektrumlarla uyumlu olması, birkaç önemli anlama gelmektedir:

- **Deneysel Verilerin Doğrulanması:** Simüle edilmiş spektrumlar, deneysel olarak elde edilen EPR (Elektron Paramanyetik Rezonans) spektrumlarını teorik olarak modelleyerek oluşturulur. Deneysel spektrumların simüle edilmiş spektrumlarla iyi bir uyum göstermesi, deneysel verilerin doğruluğunu ve güvenilirliğini destekler. Başka bir deyişle, ölçülen spektrumların, gerçekten o maddeye ait olduğu ve doğru bir şekilde elde edildiği anlamına gelir.
- **Radikal Yapısının Doğrulanması:** Simülasyonlar, oluşan radikal yapısı hakkında varsayımlar kullanılarak yapılır. Örneğin, spektrumdaki çizgi yoğunlukları, g değerleri ve aşırı ince yapı sabitleri (a değerleri) gibi parametreler, belirli bir radikal yapısına göre hesaplanır. Deneysel ve simüle edilmiş spektrumların örtüşmesi, varsayılan radikal yapısının doğru olduğunu gösterir. Bu, hangi atomların ve grupların radikal merkezini oluşturduğunu ve eşlenmemiş elektronun hangi çekirdeklerle etkileşim içinde olduğunu anlamamızı sağlar.
- **Aşırı İnce Yapı Etkileşimlerinin Doğrulanması:** EPR spektrumlarında görülen çizgi yarımaları (hiperfin yapı), eşlenmemiş elektronun manyetik çekirdeklerle (örneğin, protonlar veya azot çekirdekleri) etkileşiminden kaynaklanır. Simülasyonlar, bu etkileşimlerin şiddetini (a değerleri) ve manyetik eşdeğerliklerini doğru bir şekilde modelleyebilmelidir. Deneysel ve simüle edilmiş spektrumlar uyumluysa, bu, eşlenmemiş elektronun çevresindeki atomlarla olan etkileşimlerinin doğru bir şekilde anlaşıldığı anlamına gelir.
- **Spektrum Parametrelerinin Tutarlılığı:** Simülasyonlar sırasında kullanılan g değerleri ve a değerleri gibi

parametreler, deneysel verilerle tutarlı olmalıdır. Deneysel ve simüle edilmiş spektrumlar arasındaki uyum, bu parametrelerin doğru bir şekilde belirlendiğini ve kullanıldığını gösterir. Bu parametreler, radikallerin manyetik özelliklerini ve kimyasal çevresini anlamak için önemlidir.

- Modelin Geçerliliği: Simülasyonlar, radikal oluşumu ve manyetik etkileşimler hakkında belirli bir model varsayar. Deneysel spektrumların simüle edilmiş spektrumlarla iyi bir uyum göstermesi, bu modelin geçerliliğini ve doğruluğunu destekler. Bu, radikallerin oluşum mekanizması ve davranışları hakkında güvenilir sonuçlar çıkarılmasına olanak tanır.

Özetle, örneklerin spektrumlarının simüle edilmiş spektrumlarla uyumlu olması, deneysel verilerin güvenilirliğini, radikal yapılarının doğru bir şekilde belirlendiğini ve manyetik etkileşimlerin doğru bir şekilde modellendiğini gösterir. Bu uyum, EPR spektroskopisinin gücünü ve analiz sonuçlarının doğruluğunu vurgular.

KAYNAKÇA

1. Osmanoğlu, Y. E., & Sütçü, K. (2023). Electron Spin Resonance Study of Free Radicals Induced in Single Crystal of Oxcarbazepine. *Applied Magnetic Resonance*, 54(8), 751-759.
2. Sütçü, K., & Aydın, M. (2024). Gamma irradiation effects on diphenhydramine hydrochloride: an EPR study. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 1-10.
3. Osmanoğlu, Y. E., Sütçü, K., & Osmanoğlu, Ş. (2017). Radiation effect studies on some glycine derivatives in solid state. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 172(7-8), 621-628.
4. Sütçü, K., & Osmanoğlu, Y. E. (2024). EPR Investigation of Gamma-Irradiated Tiopronin. *Applied Magnetic Resonance*, 55(6), 585-597.
5. Sütçü, K. (2024). A study to identify and analyze the radiosensitivity of 4-piperidinecarboxylic acid using electron paramagnetic resonance spectroscopy. *Applied Magnetic Resonance*, 55(5), 537-549.
6. McKelvey, R. D. (1987). Huckel MO theory and electron spin resonance in the spectroscopy course. *Journal of Chemical Education*, 64(6), 497.
7. Başkan, M. H., & Aydın, M. (2013). Electron paramagnetic resonance studies of gamma-irradiated DL-alanine ethyl ester hydrochloride, L-theanine and L-glutamic acid dimethyl ester hydrochloride. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 112, 280-282.
8. Aydın, M., Kartal, Z., Osmanoğlu, Ş., Başkan, M. H., & Topkaya, R. (2011). EPR and FT-IR spectroscopic studies of l-lysine monohydrochloride and l-glutamic acid

hydrochloride powders. *Journal of Molecular Structure*, 994(1-3), 150-154.

9. Osmanoğlu, Ş., Aydın, M., Osmanoğlu, Y. E., Dicle, I. Y., & Başkan, M. H. (2011). Structure and behaviour of the free radicals generated in gamma irradiated amino acid and iminodiacetic acid derivatives. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 78(5), 1611-1614.
10. Başkan, M. H., Aydın, M., & Osmanoğlu, Ş. (2010). Investigation of ^{60}Co γ -irradiated l-(-) malic acid, N-methyl-dl-valine and l-glutamic acid γ -ethyl ester by electron paramagnetic resonance technique. *Journal of Molecular Structure*, 983(1-3), 200-202.
11. Sütçü, K., & Osmanoğlu, Y. E. (2017). EPR study of gamma-irradiated N-methyl-L-alanine, DL-2-methyl glutamic acid hemihydrate and Di-leucine hydrochloride in solid state. *Journal of Molecular Structure*, 1149, 593-595.
12. Aydın, M. (2010). EPR study of free radicals in amino acid derivatives gamma-irradiated at 300 K. *Indian J Pure & Appl Phys*, 48, 611-614.
13. Aydın, M. (2010). Identification of free radicals induced by gamma irradiation in amino acid derivatives. *Brazilian Journal of Physics*, 40, 306-308.
14. Aydın, M., Başkan, M. H., & Emre Osmanoglu, M. Y. (2009). EPR study of gamma induced radicals in amino and iminodiacetic acid derivatives. *Brazilian Journal of Physics*, 39, 583-586.
15. Başkan, M. H., Osmanoğlu, Ş., & Dicle, I. Y. (2009). Radiation damage produced in powder of α -(methylamino) isobutyric acid, α -aminoisobutyric acid

- methyl ester hydrochloride and diethylmalonic acid. Radiation Effects & Defects in Solids, 164(11), 673-678.
16. Aydin, M., Halim Başkan, M., Yakar, S., Ulak, F. Ş., Aydinol, M., Aydinol, B., & Büyüm, M. (2008). EPR studies of gamma-irradiated L-alanine ethyl ester hydrochloride, L-arginine and alanyl-L-glutamine. Radiation Effects & Defects in Solids, 163(1), 41-46.
17. Aydin, M., Osmanoglu, Y. E., & Başkan, M. H. (2008). Electron paramagnetic resonance of γ -irradiated glycyl-L-glutamine monohydrate, iminodiacetic acid and methyliminodiacetic acid. Radiation Effects & Defects in Solids, 163(1), 47-53.

MALZEME FİZİĞİNDEN ÜRÜNE: ŞEKİL HAFIZALI ALAŞIMLARIN ENDÜSTRİYEL DÖNÜŞÜMÜ

Osman ARMAĞAN¹

Esra ARMAĞAN²

1. GİRİŞ

Şekil hafızalı alaşımlar (ŞHA), özel termomekanik davranışları sayesinde deformasyon sonrasında orijinal şekillerine geri dönebilen akıllı malzeme sınıfıdır. Bu özellik, malzemenin kristal yapısında meydana gelen faz dönüşümleri ile ilişkilidir (Jani vd., 2014). ŞHA'lar, hafıza etkisi, termo-mekanik ve süper elastikiyet gibi benzersiz özelliklere sahiptir. Bu alaşımlar, sıcaklık ya da manyetik alana bağlı olarak iki faz dönüşümü arasında gerçekleşen süreci hatırlayabilen (Şekil Hafızalı Etki - ŞHE) özellikleriyle bilinir (Shabalovskaya vd., 2008). Termomekanik özellik, akıllı malzeme büyük plastik şekil değişimine (gerinim) maruz kaldığında, ısı uygulanarak malzemenin eski şekline veya boyutuna geri dönebilmesini ifade eder. Süperelastik özellik ise, malzemenin doğrusal olmayan (elastik sınırın ötesinde) bir şekil değişimine uğradıktan sonra, uygulanan gerilimin veya yükün kaldırılmasıyla anında eski formuna dönebilme yeteneğidir (Balasubramanian vd., 2021).

¹ Dr. Öğr. Üyesi, Karamanoğlu Mehmetbey Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, oarmagan@kmu.edu.tr, ORCID: 0000-0002-7860-0909.

² Öğr. Gör., Karamanoğlu Mehmetbey Üniversitesi, Ermenek Uysal ve Hasan Kalan Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Eczane Hizmetleri Bölümü, earmagan@kmu.edu.tr, ORCID: 0000-0002-5414-2392.

Şekil hafızalı etki (ŞHE) ilk olarak 1930 yılında keşfedilmiştir. İsveçli fizikçi Arne Olander, altın-kadmiyum (Au-Cd) alaşımlarının bu etkiyi gösterebildiğini fark etmiştir. Daha sonra Otsuka ve Wayman, bu alaşımın yalancı elastik (pseudoeLASTİK) davranışını tanımlamıştır. Benzer şekilde, 1950’li yıllarda bakır-alüminyum-nikel (Cu-Al-Ni) alaşımlarında da ŞHE gözlemlenmiştir. W. Buehler ve Wang, bu etkiyi nikel-titanyum (Ni-Ti) alaşımında incelemiş ve bu alaşıma “Nitinol” adı verilmiştir. 1980’lerden itibaren, Ni-Ti alaşımı hafifliği ve kompakt yapısı sayesinde birçok alanda kullanılmaya başlanmıştır. 1990’lı yıllarda ise bu teknoloji, şekil hafızalı malzemeler topluluğu içinde daha geniş bir şekilde tanıtılmıştır (Yüce, 2017).

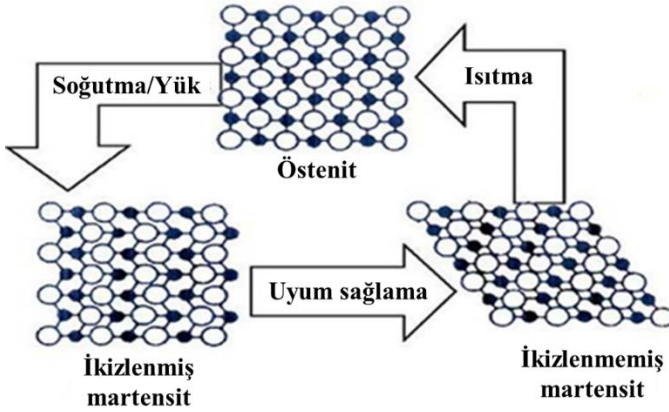
2. ŞEKİL HAFIZALI ALAŞIMLARIN MEKANİZMASI

Şekil hafızalı alaşımlar, dış bir etkiye maruz kaldıklarında iki farklı fazda ve çeşitli kristal yapılarla bulunabilirler. ŞHA’lar, kuvvet uygulanarak şekil değiştirme ve ardından belirli bir sıcaklığa ısıtılarak veya manyetik alan uygulanarak orijinal şekillerine geri dönme gibi basit bir çalışma prensibine sahiptir. Bu alaşımlar, yüksek sıcaklık fazı olan **östenit** ve düşük sıcaklık fazı olan **martensit** arasında altı farklı faz dönüşümü gösterebilir. Bu dönüşüm, kafes yapısının kayarak bozulması ile gerçekleşir. ŞHA ısıtıldığında, sıcaklık belli bir eşiğe ulaştıktan sonra martensit yapısı östenit yapısına dönüşmeye başlar. Soğuma sırasında ise, herhangi bir dış etki olmadan, yapı tekrar östenitten martensite dönüşür. Martensit → Östenit dönüşümüne ileri dönüşüm, östenit → martensit dönüşümüne ise ters dönüşüm denir.

Pratikte bu alaşımlar; elektron ışını, vakum ya da plazma ergitme yöntemleriyle üretilebilir. Ancak en iyi yöntem olarak

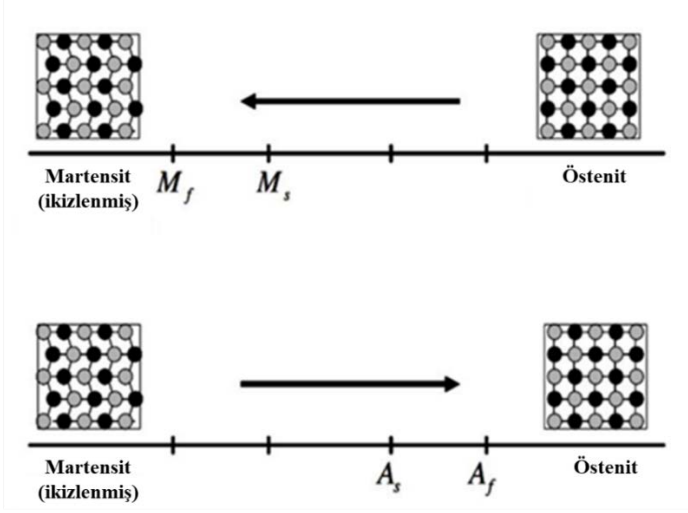
vakumla ergitme kabul edilmektedir. Dönüşümün başladığı sıcaklık A_s (Austenite start) ve tamamlandığı sıcaklık A_f (Austenite finish) ile ifade edilir. Ters dönüşüm sırasında martensit fazına geçiş ise M_s (Martensite start) sıcaklığında başlar ve M_f (Martensite finish) sıcaklığında tamamlanır (Balasubramanian vd., 2021).

Başlangıçta, östenit fazı şekil değiştirmeye başlar ve ikizlenmiş martensit yapısına dönüşür. Bu ikizlenmiş martensit fazındaki malzemeye yük uygulandığında, martensit yapısı detwin (ikiz yapının bozulması) olur ve bu da malzemenin şeklinin değişmesine neden olur. Uygulanan yük kaldırıldığında ise, malzeme şekil değiştirmiş halde kalır (Şekil 1).



Şekil 1. Şekil hafızalı alaşımlarda faz dönüşümü (Balasubramanian vd., 2021).

Eğer bu şekil değiştirmiş ŞHA, A_f sıcaklığının üzerine kadar ısıtılırsa, ters faz dönüşümü gerçekleşir ve malzeme orijinal şekline geri döner. Ardından sıcaklık tekrar M_f sıcaklığının altına düşürüldüğünde, yapı tekrar ikizlenmiş martensit fazına döner. Bu şekilde bir fazdan diğerine dönüşüm süreci, ŞHE olarak adlandırılır (Şekil 2) (Machado vd., 2008).



Şekil 2. Şekil hafızalı alaşımların yapısal değişimi (Machado vd., 2008).

Bu etkiye göre, şekil hafızalı alaşımlar üç temel özelliğe göre sınıflandırılır:

1. **Tek yönlü şekil hafızalı etki:** Malzeme soğuk haldeyken şekil değişikliğine uğratıldığında bu deforme olmuş şeklini korur ve ısıtıldığında tekrar orijinal şekline geri döner.
2. **Çift yönlü şekil hafızalı etki:** Malzemenin hem yüksek sıcaklıkta hem de düşük sıcaklıkta belirli şekilleri “hatırlayabilmesi” çift yönlü etki olarak adlandırılır. Bu etki, tek yönlü ŞHA’ların oluşturduğu şekil değişiminden kısmi geri kazanım sağlar.
3. **Yalancı elastikiyet (pseudoelastik özellik):** Mekanik bir yükleme uygulandıktan sonra, herhangi bir ısı etki olmaksızın, ŞHA farklı sıcaklıklarda (östenit ve martensit fazlarında) orijinal şekline geri dönebilir (Balasubramanian vd., 2021).

3. YAYGIN ŞEKİL HAFIZALI ALAŞIMLAR

Ni-Ti (Nitinol): En yaygın kullanılan ŞHA'dır. Mevcut birçok ŞHA arasında, Ni-Ti süper elastikiyet ve şekil hafızalı etki gibi umut vadeden fonksiyonel özellikleriyle özellikle biyomedikal uygulamalar için ideal bir malzeme olarak öne çıkmaktadır (Maurya vd., 2022; Jani vd., 2014). Yüksek sıcaklık fazı olan östenit ile düşük sıcaklık fazı olan martensit arasında gerçekleşen geri dönüşümlü faz dönüşümü sayesinde, Ni-Ti alaşımı deformasyona uğradıktan sonra, yük kaldırıldığında (süperelastikiyet) veya ısıtıldığında (ŞHE) (özellikle A_f üzerindeki sıcaklıklarda) orijinal şeklini geri kazanabilir (Sevcikova & Goldbergova, 2017; Gallardo Fuentes vd., 2002). Nitinol, bu üstün fonksiyonel özelliklerinin yanı sıra, mükemmel biyouyumluluk ve vücut içinde korozyon direnci gibi avantajlar da sunmaktadır (Patel vd., 2020; Es-Souni vd., 2002). Diğer metal alaşımlarından farklı olarak, Ni-Ti; yük-gerinim histerezisi, yüksek şekil geri kazanım kapasitesi ve gerilme platosu gibi, vücudumuzdaki malzemelere (örneğin tendon, saç, kemik vb.) benzer mekanik davranışlar sergiler. Bu özel özellikler, Ni-Ti alaşımını birçok biyomedikal uygulama için son derece cazip hale getirmektedir (Tareq vd., 2024).

Bakır (Cu) Bazlı Alaşımlar (Cu-Al-Ni, Cu-Zn-Al): Cu bazlı ŞHA'lar, mükemmel şekil hafızalı etkileri ve yüksek elektrik iletkenlikleri sayesinde geniş bir uygulama potansiyeline sahiptir (Yamauchi vd., 2011). Ayrıca, bu alaşımlar uygulanan gerilme veya şekil değiştirme sırasında martensit sınırlarının hareketi sayesinde sönümleyici (damping) alaşımlar olarak da kullanılabilir (Cai vd., 2023). Örneğin, reaktörlerdeki boru destekleri gibi titreşim ve gürültü azaltma sistemlerindeki alaşımların yüksek çalışma sıcaklıklarına dayanıklı olması gereklidir (Wang, vd., 2024). Bu nedenle, yüksek martensitik dönüşüm sıcaklıklarına ve mükemmel dönüşebilirliğe sahip Cu bazlı ŞHA'ların geliştirilmesi, bu alaşımların uygulama alanlarını

artırmak açısından hâlâ önemli bir konudur. Cu-Zn-Al alaşımlarına kıyasla, Cu-Al-Ni alaşımları martensitik stabilizasyona karşı çok daha yüksek direnç gösterir. Bu dayanıklılığın nedeni, Ni ve Al atomları arasındaki güçlü atomik bağlardır, bu bağlar sayesinde boşluk hareketleri doğrudan su verilmiş (soğutma yöntemi) Cu-Al-Ni alaşımlarında önemli ölçüde kısıtlanır (Nakata vd., 2016). Bu nedenle, Cu-Al-Ni alaşımları 473 °K sıcaklığa kadar martensitik stabilizasyonun oluşmasına karşı dirençlerini koruyabilmekte ve bu da onları yüksek sıcaklık uygulamaları için ideal adaylar haline getirmektedir (Zhang vd., 2021).

Demir (Fe) Bazlı Alaşımlar: Fe-Mn-Si esaslı ŞHA'lar, Fe bazlı ŞHA'lar arasında en pratik gruplardan biri olarak kabul edilmektedir ve bu nedenle çok sayıda araştırmancının odağı haline gelmiştir (Zhang vd., 2022). Fe-Mn-Si esaslı ŞHA'lar titreşim azaltma, enerji sönmüleme ve yeniden merkezleme gibi uygulama potansiyelleri nedeniyle inşaat sektöründe yoğun araştırma ilgisi görmektedir (Khodaverdi vd., 2023). Bu alaşımlar; düşük malzeme maliyeti, yüksek Young modülü ve mukavemet, olağanüstü işlenebilirlik, ve yüksek gerilme-gerinim geri kazanımı gibi avantajları sayesinde (Gu vd., 2021); bağlantı elemanları, mekanik sıkıştırma, yapısal elemanlar, aktif kontrol sistemleri, ön-gerilim (pre-stressing) ve son-gerilim (post-tensioning) uygulamaları ve sönmüleme cihazları gibi çok çeşitli alanlarda kullanılmaktadır (Khodaverdi vd., 2023).

4. ŞEKİL HAFIZALI ALAŞIMLARIN UYGULAMA ALANLARI

Dünya genelinde yürütülen araştırmalar, ŞHA'ların kullanım alanlarını ve özelliklerini geliştirmeyi amaçlamaktadır. Bu hedef doğrultusunda, yeni bileşimlerin keşfedilmesi ve çalışma sıcaklık aralıklarının iyileştirilmesi üzerine yoğun

alışmalar gerekleřtirilmektedir. **řHA'ların yorulma mrnn ve yapısal kararlılıđının artırılması**, bu alandaki arařtırmaların devam etmesini zorunlu kılmaktadır.

Mhendislik alanlarında en yaygın kullanılan řHA'lar bařlıca  temel uygulama grubunda sınıflandırılabilir:

1. Havacılık ve uzay sanayi
2. Otomotiv sektr
3. Biyomedikal uygulamalar

Bu uygulama alanları, řHA'ların yksek esneklik, řekil hafızası etkisi ve sperelastik zelliklerinden yararlanılarak kritik teknolojilerde kullanılmasını mmkn kılmaktadır (Balasubramanian vd., 2021).

Havacılık ve Uzay Sanayi: Havacılık endstrisi uygulamalarında kullanılmak zere daha geliřmiř malzemelere ve zmlere olan ihtiyalar hala srmektedir. Bu bađlamda, kanat morfolojisinin (wing morphing) deđiřtirilmesi, eřitli kořullara uyum sađlayabilen pratik bir zm olarak ne ıkmaktadır (Hartl & Lagoudas, 2007). Arařtırmacılar, havacılık endstrisindeki birok mhendislik problemini zmek amacıyla řekil hafızası ve yalancı elastik (pseudoelastic) etkilerden yararlanılabileceđini ortaya koymuřtur. Bu teknoloji, sabit kanatlı uaklar, dner kanatlı hava araları ve uzay aralarında uygulanabilirliđiyle nem kazanmıřtır. Bu alışmalar, řHA'ların havacılık uygulamalarındaki yerini ve bu tr sistemlerin tasarımında karřılařılan zorlukları aıklamaktadır (Quan & Hai, 2015).

zellikle hidrolik hatların řHA bađlantı elemanlarıyla birleřtirilmesi, savař uaklarında dikkat ekici uygulamalar arasında yer almakta; bu durum arařtırmacıların havacılık alanına olan ilgisini artırmaktadır. řHA'lar; sızdırmazlık elemanları (sealers), aktatrler (actuators) ve titreřim snmleyiciler

(vibration dampers) gibi pek çok bileşende kullanılmaktadır. ŞHA'lar kullanılarak kaldırma yüzeylerinin performansını optimize etmeyi amaçlayan çalışmalar gerçekleştirilmiştir. Bu kapsamda, kanat genişlemesini bükülme yoluyla başlatmak için bir ŞHA tüpü kullanılmıştır. Alaşım, gerekli hareketi sağlayabilmiş olsa da, tüp belirli bir kuvvet aralığında kanat açılımını tam kapasiteyle gerçekleştirememiştir. Uçak motorlarının hava girişi geometrisinin değiştirilmesinde bu alaşımların kullanım potansiyeli incelenmiştir. Bu teknoloji, F-15 savaş uçağının hava girişi üzerinde tam ölçekli doğrulama testleriyle değerlendirilmiştir. NASA tarafından geliştirilen bir rüzgar tüneline, birbirine zıt yönde yerleştirilmiş iki farklı ŞHA plaka kullanılarak ilk uygulama gerçekleştirilmiştir (Ikeda, 2011). Bu sistemde, bir plakanın ısıtılması sonucunda deformasyon sağlanmakta ve plaka ilk formuna geri dönmektedir. Isıtılan plaka soğutulduğunda, daha önce detwin (ikiz yapısı giderilmiş) edilen diğer plaka ısıtılarak ters yönde hareket sağlanmıştır (Gangil vd., 2020).

ŞHA ile üretilmiş uyarlanabilir nozzle (Adaptive Nozzle), gaz türbini motorlarında gürültü azaltımına yönelik geliştirilmiş ileri düzey bir uygulamadır. Uçaklarda, ince ŞHA plakalar, Ti-6Al-4V alaşımı ile birleştirilerek kullanılır. Yüksek güç seviyelerinde, ŞHA aktüasyon sağlayarak motordaki hava akımı üzerinde tırtıklı yapıları (serrations) devreye sokar. Düşük güçte ise, pasif elastik özellikteki titanyum bileşenler, ŞHA'nın tırtıklı yapısını orijinal konfigürasyona döndürmek için görev yapar (Balasubramanian vd., 2021).

Otomotiv Sektörü: Otomotiv sektöründe ŞHA'ların aktüatör olarak kullanımı üç ana başlık altında sınıflandırılmaktadır:

1. Konfor odaklı düşük güçlü sistemler
2. Yüksek güçlü araç kontrol sistemleri
3. Yüksek frekanslı kontrol sistemleri

Literatürde genel olarak düşük güçlü konfor sistemleri, diğer iki kategoriye kıyasla daha uygun ve uygulanabilir olarak değerlendirilmektedir.

Günümüzde birçok otomotiv üreticisi, ŞHA teknolojisini araçlarında aktif olarak kullanmakta ve bu alandaki uygulamaları genişletmektedir. Örneğin, ısıya bağlı genleşme prensibiyle çalışan basınç kontrol vanası, bir otomotiv firmasının otomatik şanzıman sistemlerine entegre edilmiştir. Bazı firmalar, araç koltuklarında kullanılmak üzere ŞHA içeren pnömatik vanalar geliştirmiştir. ŞHA'lar, aynı zamanda **akıllı kompozitler** (smart composites) olarak da adlandırılmakta ve çok işlevli operasyonlarda kullanılmaktadır. Bu teknolojinin **otomotiv bataryalarına** entegre edilmesi zor olarak görülse de, uygulamaların çoğu Ni-Ti alaşımı ile başarıyla gerçekleştirilebilmektedir. ŞHA tabanlı aktüatörler, otomotiv sektöründe elektromanyetik aktüatörlerin yerine alternatif olarak önerilmektedir ve birçok elektronik bileşenin yerini alabilecek potansiyele sahiptir. Uyarlanabilirlik özellikleri sayesinde, ŞHA'lar otomobillerin aerodinamik sistemlerinde de kullanılmaya başlanmıştır (Balasubramanian vd., 2021).

Son dönemde, bazı otomobil üretici firmalar, bagaj kapağını kapatmak amacıyla ŞHA aktüatörlerini entegre etmişlerdir. Ayrıca, ŞHA aktüatörlerin pantograf sistemleri ve eagle tipi aynaların tasarımında da kullanıldığı bildirilmektedir. Bu gelişmeler, ŞHA'ların büyük potansiyelini ortaya koymakta ve ileri teknoloji tasarım süreçlerinde tasarımcılar tarafından daha fazla tercih edilmelerini sağlamaktadır (Jani vd., 2014).

Biyomedikal uygulamalar: ŞHA'lar, biyomedikal alanda geniş bir uygulama yelpazesine sahiptir ve bu uygulamalar dört ana kategoride sınıflandırılabilir:

1. Ortodonti
2. Ortopedi

3. Vasküler cerrahi

4. Nöroşirurji

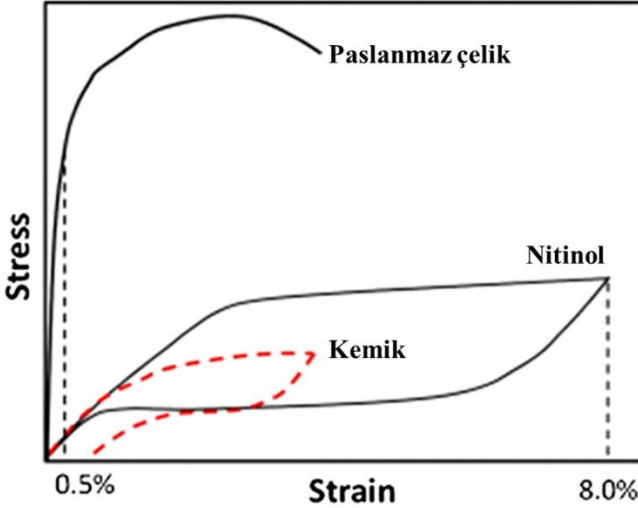
Ni-Ti esaslı ŞHA'lar, sahip oldukları üstün işlevsel özellikler nedeniyle biyomedikal alanda en yaygın kullanılan ŞHA'lar arasında yer almaktadır. Bu alaşımlar, ŞHE ve yalancı elastik davranış gibi işlevsel özelliklerinin yanı sıra, %8'e kadar geri kazanılabilir şekil değişimi göstermeleri ile dikkat çekmektedir (Elahinia vd., 2016).

Ni-Ti alaşımının biyomedikal uygulamalarda tercih edilmesinin başlıca nedenleri şunlardır:

- Yüksek biyouyumluluk
- Üstün korozyon direnci
- Düşük elastikiyet modülü
- Manyetik rezonans görüntüleme (MRG) ve bilgisayarlı tomografi (BT) ile uyumlu görüntülenebilirlik (Sabahi vd., 2020).

Günümüzde, Ni-Ti telleri, östenit fazında ağız boşluğunda (bukkal kavite) çoklu braketli ortodontik tedavilerde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu teller, diş hareketini optimize etmek amacıyla braketlere çok yönlü kuvvet uygulayarak etkili bir düzeltme sağlar. Aynı zamanda bu teller, palatal ark sistemlerinde de kullanım alanı bulmuştur. ŞHA'ların yalancı elastik (pseudoelastik) davranışı, özellikle ortodontik genişletici (distraktör) sistemlerde avantaj sağlamaktadır (Balasubramanian vd., 2021). Ayrıca, Ni-Ti alaşımının yalancı elastik etkisi, kırık kemiklerde intramedüller çivi (nail) olarak da kullanılmaktadır. Ortodontik ve ortopedik tedavilerin her ikisinde de, kısmen atrofik kasların fizyoterapisi, ŞHA'ların şekil geri kazanım özelliklerinden faydalanılarak yapılmaktadır (Morgan, 2004). Ni-Ti alaşımları, geleneksel metalik biyomalzemelere kıyasla daha

düşük elastik modüle sahiptir. Bu özellik, insan kemiği ile daha benzer mekanik özellikler göstermesini sağlar. Bu benzerlik, kemik stres korumasını (stress shielding) azaltarak kemik iyileşmesini desteklemek açısından kritik öneme sahiptir. Şekil 3; Ni-Ti alaşımı, diğer iki yaygın metalik biyomalzeme ve insan kemiği arasında gerilme-şekil değiştirme eğrilerinin karşılaştırmasını göstermektedir (Sabahi vd., 2020). Görüldüğü üzere, Ni-Ti hem kemiğe benzer deformasyon davranışı sergilemekte hem de %8'e kadar yüksek geri kazanılabilir şekil değişimine olanak sağlamaktadır. Bu da Ni-Ti implantlarının, vücut içerisinde yüklenme-boşalma döngülerinde biyomimetik davranış gösterebildiğini ortaya koymaktadır.



Şekil 3. Paslanmaz çelik, Nitinol ve kemiğin şematik stress (gerilim)-strain (gerinim) eğrileri (Sabahi vd., 2020).

Ayrıca, Ni-Ti alaşımı yalancı elastik ve plastik deformasyon rejimlerinde dahi etkilenmeyen, kendini onaran pasif bir oksit filmi sayesinde mükemmel korozyon direnci sergiler. İnsan vücudu ise, ŞHA'ların şekil hafıza etkisi ve yalancı elastik davranışı göstermesi için ideal bir izotermal ortam sunmaktadır (Lecce, 2014). Tüm bu avantajlar sayesinde, Ni-Ti

alaşımları günümüzde ortopedi, endodonti, ortodonti, nöroloji, vasküler cerrahi ve tıbbi cihazlar dahil olmak üzere birçok biyomedikal alanda yaygın biçimde kullanılmaktadır (Song, 2010).

Günümüzde Ni-Ti'nin ortodontideki başlıca uygulamaları:

1. Ark telleri
2. Damak genişleticiler (palatal expanders)
3. Diş frezleri ve fiksatörleri

Bu uygulamalardan elde edilen sonuçlar, Ni-Ti'nin klinik performansı artırdığını göstermektedir. Yüksek büyüklükte ve kesintili kuvvetlerin, doku yıkımına yol açan hiyalinizasyon sürecini tetikleyebileceği bilinmektedir (Lecce, 2014). Ni-Ti'nin ortodontideki başarısı ise takma ve konumlandırma sırasında sabit ve daha düşük kuvvetler üretebilmesine dayanmaktadır. Bunun temel nedeni, Ni-Ti'nin yalancı plastisite (pseudoplastic) rejiminde çalıştırılabilmesi; bu rejimde gerilme, şekil değiştirme artışına rağmen önemli ölçüde yükselmez. Böylece:

- Altyapı ekipmanları korunur
- Hastanın konforu artar
- Tedavi sürecinde istenmeyen doku hasarları en aza iner.

Bu benzersiz mekanik davranış, Ni-Ti alaşımlarını ortodontik tedavilerde vazgeçilmez kılmıştır.

Ortopedik alanda, iki ayrılmış kemik segmenti arasında etkili bir bağlantının sağlanabilmesi için temel gereklilikler; stabil bir fiksasyon ve kemikler arasında uygun bir sıkıştırmanın sağlanmasıdır. Bu amaçla geliştirilen fiksasyon cihazları, kırık kemiklerin doğru ve sabit hizalanmasını destekleyerek iyileşme sürecine katkı sağlar (Fazel-Rezai, 2011). Bu cihazların aynı zamanda minimal invaziv, biyouyumlu ve mekanik olarak kararlı

olması beklenir. Ni-Ti alaşımları, bu gereksinimlerin tamamını karşılayabilecek özelliklere sahiptir. SHE, özellikle zımba (staple) ve plak gibi uygulamalarda yaygın biçimde kullanılmaktadır. Ortam sıcaklığında martensit fazında bulunan Ni-Ti plaklar, kolayca şekil verilebilir ve vücuda yerleştirilebilir. Vücut sıcaklığında ise östenit fazına dönüşerek sabit bir gerilme oluşturur, bu da kırık kemiklerin sıkıştırılmasını ve birbirine yaklaşmasını sağlar.

Ni-Ti şekil hafızalı alaşımlarının kullanımı, vasküler cerrahi alanına önemli katkılar sağlamış ve invaziv olmayan cerrahi yöntemlerin gelişimini hızlandırmıştır. Bu alandaki başlıca uygulamalar arasında:

- Kateterler
- Kılavuz teller (guidewires)
- Emboli filtreleri
- Stentler yer almaktadır (Sabahi vd., 2020).

Özellikle Ni-Ti alaşımlarının şekil hafıza etkisi, kendi kendine genişleyebilen vasküler stentler gibi birçok uygulamada başarıyla kullanılmaktadır. Bu stentler, geleneksel paslanmaz çelik ya da kobalt-krom (Cr-Co) esaslı stentlere kıyasla daha kolay uygulanabilir olmaları ve damar dokusuna zarar verme riskinin daha düşük olması nedeniyle önemli avantajlar sunmaktadır. Bu alandaki temel zorluklardan biri, sistolik basınç döngüleri ve bacak hareketleri gibi dinamik biyomekanik yüklemeler sonucunda ortaya çıkan yorulma kaynaklı kırıklardır. Ancak, pseudoelastik etkiye bağlı doğrusal olmayan davranış ve üretim yöntemlerine bağlı olarak oluşan yüzey özellikleri ve malzeme yapısının özgünlüğü, bu cihazların in vivo ortamda yorulma davranışlarının araştırılmasını zorlaştırmaktadır (Morgan, 2004). Bu nedenle, Ni-Ti esaslı vasküler implantların

yorulma direncini daha iyi anlayabilmek ve bu direnci artırabilmek için ileri düzey araştırmalara ihtiyaç vardır.

Son olarak, beyin cerrahisi alanında da Ni-Ti alaşımları, bobinler, stentler ve mikro rehber tellerde kullanılmaktadır. Klinik beyin cerrahisi, küçük boyutlu çalışma ortamına uyum sağlamak için yeni malzemelerin ve yenilikçi yapılarının kullanımını gerektirmektedir. Başka bir deyişle, cerrahi aletlerin mümkün olduğunca küçük olması ve basit tasarımlar sayesinde gereksiz bileşenlerin ortadan kaldırılması önemlidir. Ni-Ti alaşımının yüksek şekil geri kazanım kabiliyeti ve burulma direnci nedeniyle, Ni-Ti mikro rehber teller, şiddetli bükülme sorunları yaşayan diğer rehber tellere kıyasla önemli bir avantaja sahiptir (Lecce, 2014).

4. SONUÇ

Şekil hafızalı alaşımlar, sahip oldukları benzersiz ŞHE ve pseudoelastik davranışları sayesinde, son yıllarda çok sayıda mühendislik ve tıbbi uygulamada önemli bir yer edinmiştir. Özellikle Ni-Ti alaşımı, bu özelliklerin yanı sıra yüksek korozyon direnci, biyouyumluluk, düşük elastik modül ve gelişmiş yorulma ömrü gibi avantajlarıyla dikkat çekmektedir. Yapılan araştırmalar, ŞHA'ların havacılık, otomotiv ve biyomedikal gibi yüksek hassasiyet gerektiren alanlarda konvansiyonel malzemelere göre çok daha işlevsel ve esnek çözümler sunduğunu ortaya koymuştur. Havacılık sektöründe aerodinamik yüzeylerin aktif kontrolü, otomotivde elektromekanik aktüatörlerin yerine geçen düşük enerjili sistemler ve biyomedikal alanda stent, ortopedik implant ve ortodontik teller gibi ürünler, ŞHA'ların yaygınlaştığı başlıca uygulamalardır. Bununla birlikte, ŞHA'ların işlenebilirliğine dair bazı sınırlamalar, özellikle geleneksel imalat yöntemleri açısından hâlâ önemli bir zorluk oluşturmaktadır. Bu sebeple, geleneksel ve

geleneksel olmayan işleme tekniklerinin optimizasyonu, ŞHA'ların daha verimli kullanılmasını sağlamak adına gelecekteki çalışmalarda odaklanması gereken bir alandır. Ayrıca, yorulma dayanımı, uzun ömürlü kullanım ve malzeme-mekanik uyumluluğu konularında daha kapsamlı in vivo ve simülasyon tabanlı araştırmalara ihtiyaç duyulmaktadır. Sonuç olarak, ŞHA'lar; malzeme bilimi, biyomühendislik ve mekatronik gibi disiplinlerin kesişiminde yer alarak akıllı malzeme teknolojileri içerisinde öncü bir konuma gelmiştir. Geliştirilecek yeni kompozisyonlar, üretim teknikleri ve uygulama stratejileri ile birlikte ŞHA'ların gelecekte çok daha geniş bir kullanım alanı bulacağı öngörülmektedir.

KAYNAKÇA

- Balasubramanian, M., Srimath, R., Vignesh, L., & Rajesh, S. (2021, October). Application of shape memory alloys in engineering—A review. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 2054, No. 1, p. 012078). IOP Publishing.
- Cai, L., Wang, Y., Huang, W., He, W., Peng, H., & Wen, Y. (2023). Effect of Ni alloying on vacancy behavior and damping capacity in martensitic ductile Cu–Al–Mn alloys. *Journal of Materials Research and Technology*, 25, 7109-7118.
- Elahinia, M., Moghaddam, N. S., Andani, M. T., Amerinatanzi, A., Bimber, B. A., & Hamilton, R. F. (2016). Fabrication of NiTi through additive manufacturing: A review. *Progress in Materials Science*, 83, 630-663.
- Es-Souni, M., Es-Souni, M., & Fischer-Brandies, H. (2002). On the properties of two binary NiTi shape memory alloys. Effects of surface finish on the corrosion behaviour and in vitro biocompatibility. *Biomaterials*, 23(14), 2887-2894.
- Fazel-Rezai, R. (Ed.). (2011). *Biomedical engineering: from theory to applications*. BoD—Books on Demand.
- Gallardo Fuentes, J. M., Gümpel, P., & Strittmatter, J. (2002). Phase change behavior of nitinol shape memory alloys. *Advanced engineering materials*, 4(7), 437-452.
- Gangil, N., Siddiquee, A. N., & Maheshwari, S. (2020). Towards applications, processing and advancements in shape memory alloy and its composites. *Journal of Manufacturing Processes*, 59, 205-222.
- Gu, X. L., Chen, Z. Y., Yu, Q. Q., & Ghafoori, E. (2021). Stress recovery behavior of an Fe-Mn-Si shape memory alloy. *Engineering Structures*, 243, 112710.

- Hartl, D. J., & Lagoudas, D. C. (2007). Aerospace applications of shape memory alloys. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, 221(4), 535-552.
- Ikeda, T. (2011). The use of shape memory alloys (SMAs) in aerospace engineering. In *Shape Memory and Superelastic Alloys* (pp. 125-140). Woodhead Publishing.
- Jani, J. M., Leary, M., Subic, A., & Gibson, M. A. (2014). A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. *Materials & Design (1980-2015)*, 56, 1078-1113.
- Khodaverdi, H., Mohri, M., Ghorabaei, A. S., Ghafoori, E., & Nili-Ahmadabadi, M. (2023). Effect of low-temperature precipitates on microstructure and pseudoelasticity of an Fe–Mn–Si-based shape memory alloy. *Materials Characterization*, 195, 112486.
- Lecce, L. (Ed.). (2014). *Shape memory alloy engineering: for aerospace, structural and biomedical applications*. Elsevier.
- Machado, L. G., & Lagoudas, D. C. (2008). Thermomechanical constitutive modeling of SMAs. In *Shape Memory Alloys: Modeling and Engineering Applications* (pp. 121-187). Boston, MA: Springer US.
- Maurya, M. R., Sadasivuni, K. K., Cabibihan, J., Ahmad, S., & Kazim, S. (2022). *Shape memory composites based on polymers and metals for 4D printing* (pp. 361-388). Springer International Publishing AG, Switzerland.
- Morgan, N. B. (2004). Medical shape memory alloy applications—the market and its products. *Materials Science and Engineering: A*, 378(1-2), 16-23.

- Nakata, Y., Iizuka, Y., & Ono, T. (2016). The effects of aging on the degree of order in Cu-Al-Ni shape memory alloys. *MATERIALS TRANSACTIONS*, 57(3), 257-262.
- Patel, S. K., Behera, B., Swain, B., Roshan, R., Sahoo, D., & Behera, A. (2020). A review on NiTi alloys for biomedical applications and their biocompatibility. *Materials today: proceedings*, 33, 5548-5551.
- Quan, D., & Hai, X. (2015). Shape memory alloy in various aviation field. *Procedia Engineering*, 99, 1241-1246.
- Sabahi, N., Chen, W., Wang, C. H., Kruzic, J. J., & Li, X. (2020). A review on additive manufacturing of shape-memory materials for biomedical applications. *Jom*, 72, 1229-1253.
- Sevcikova, J., & Pavkova Goldbergova, M. (2017). Biocompatibility of NiTi alloys in the cell behaviour. *Biomaterials*, 30(2), 163-169.
- Shabalovskaya, S., Anderegg, J., & Van Humbeeck, J. (2008). Critical overview of Nitinol surfaces and their modifications for medical applications. *Acta biomaterialia*, 4(3), 447-467.
- Song, C. (2010). History and current situation of shape memory alloys devices for minimally invasive surgery. *Open Medical Devices Journal*, 2(1), 24-31.
- Tareq, S., Rahman, T., Poudel, B., Chung, H., & Kwon, P. (2024). Heat treatment protocol for additively manufactured nitinol shape memory alloys in biomedical applications. *Materials Science and Engineering: A*, 897, 146274.
- Wang, Y., Huang, Y., Cai, L., He, W., Peng, H., Luo, Q., ... & Wen, Y. (2024). Dependence of martensitic stabilization

- on Ms temperature in Cu-Al-Ni shape memory alloys. *Materials Today Communications*, 41, 110603.
- Yamauchi, K., Ohkata, I., Tsuchiya, K., & Miyazaki, S. (2011). Shape memory and superelastic alloys: technologies and applications. Woodhead Pub. LTD, Cambridge, UK.
- Yüce, I. (2017). Shape memory polymers and shape memory alloys: use in smart textiles. *International Journal of Development Research*, 7(11), 16730.
- Zhang, X., Cui, T., Liu, Q., Dong, Z., & Man, C. (2021). Effect of Nd addition on the microstructure, mechanical properties, shape memory effect and corrosion behaviour of Cu–Al–Ni high-temperature shape memory alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 858, 157685.
- Zhang, Z. X., Zhang, J., Wu, H., Ji, Y., & Kumar, D. D. (2022). Iron-based shape memory alloys in construction: research, applications and opportunities. *Materials*, 15(5), 1723.

GAS SENSORS

Handan AYDIN¹

Cihat AYDIN²

1. INTRODUCTION

The detection of gases in industry and households has gained great importance in recent years. Especially harmful gases need to be detected as early as possible to protect the environment and human health. Gas sensors are generally developed for two basic needs. One of them is to protect against safety and health hazards caused by harmful gases, and the other is to control the gases produced or consumed as a result of some processes. For these reasons, studies on gas sensors have increased. While some of the gas sensor research is focused on improving existing systems, much of it is focused on developing new systems that are more efficient and sensitive.

Gas sensors can be defined as gas measurement devices that enable gas monitoring in any environment. Gas sensors consist of three main parts:

1. Gas sensing part
2. Electronic evaluation unit (display and control unit)
3. Audible light warning system

Gas sensors are divided into two types according to their usage areas: industrial and handheld. Handheld gas sensors are

¹ Assoc. Prof. Dr. Munzur University, Department of Medical Services and Techniques Optician Program. haydin@munzur.edu.tr ORCID: 0000-0002-0141-9773.

² Prof.Dr. Firat University, Department of Airframe and Powerplant Maintenance, School of Civil Aviation. caydin@firat.edu.tr ORCID:0000-0001-9997-6326.

portable and can be easily transported. Industrial type sensors are designed to be mounted and fixed in one place. At the same time, industrial type sensors can automatically shut off the gas after detecting a gas leak. The most important part of gas measurement devices is the sensor part. Because this part interacts with the gases in the environment. When the gas to be detected enters the environment, the sensor material interacts with gas molecules depending on its electrical, optical or chemical properties and transfers this to the electronic evaluation unit (Evyapan, 2005).

2. SEMICONDUCTOR POLYMER THIN FILMS

Polymers, in the simplest definition, are long-chain, in other words high molecular weight compounds formed by a large number of the same or different groups linked by chemical bonds in a more or less regular manner. The small molecules that are chemically bonded with each other to form polymer molecules are called “monomers”. In a polymer molecule called a macromolecule, hundreds, thousands and sometimes more of these building units are linked together. But most polymers are usually in the 5,000 - 250,000 molecular weight region.

At low temperatures, the energy levels of valence electrons in semiconductors are full. Therefore, there are no free electrons to conduct electricity. However, when the temperature rises sufficiently, some electrons gain enough energy to jump from their current levels to the conduction band and leave a charged electron gap, called a hole, in their former places in the valence levels. Thus, an equal number of mobile electrons and vacancies can conduct electric current.

Polyacetylene, polypyrrole and polythiophene are almost impossible to process, but new techniques have made it possible to turn these materials into semiconductors (Stallinga, Gomes, Murgia, & Müllen, 2002).

Other conducting polymers such as polyphenyl vinylin have also been developed with the same technique. Other processable conducting polymers have been made by loading covalently bonded siloxane phthalocyanine (PC) complexes $[\text{Si}(\text{PC})\text{O}]_n$.

Despite the wide variety of polymeric materials available, the vast majority of capsules are based on epoxide and silicone compounds, with the exception of one or two other compound-based ones for specialized applications. The use of epoxide resin as a semiconductor capsule has a 30-year history. The most commonly used epoxide resin is obtained by reacting epichloridine with bisphenol A in the presence of an alkali to give bisphenol A diglycidyl ether.

Another important type of capsule used in the encapsulation of electronics is silicones. These are synthetic polymers based on an alternative silicon-oxygen structure with additional organic groups attached to the silicon atoms.

Polyphenylene sulfide, another semiconductor polymer, maintains its mechanical properties at high temperatures. Below 200 °C it is resistant to all solvents, above this temperature it is soluble in some aromatic and heterocyclic solvents. Polyphenylene sulfides have been mainly used for encapsulating elements such as ceramic capacitors.

Polyurethanes, which are used as semiconductor polymers, are not directly used as capsules but have found widespread use as protective layers. They have excellent electrical insulation properties, physical durability, resistance to abrasion, moisture and chemical attack.

Semiconductor polymers are extensively used as chemical sensors. In the automotive industry, chemical sensors are used to determine the oxidation and reduction characteristics of the air-fuel mixture and to adapt the air-fuel mixture to the engine requirements for maximum efficiency and minimum pollution. In

the medical sector, chemical sensors are used to monitor blood pH and blood concentrations of K, Ca, and glucose. One of the most promising near-future applications of conducting polymers is in rechargeable batteries (batteries, accumulators, etc.). These will use polymers as active electrodes because polymers are lightweight, flexible, reversible at high capacity and electrically charged.

In the latest advanced technologies, semiconductor polymers are being used in computer technology to make self-regenerating chips, computer memory and processors that can improve memory. For example, IBM, a computer company, is using semiconductor polymer technology to make Central Process Units (CPUs) that can reach speeds of 10 ghz (Smith & Semiconductors, 1978).

3. GAS SENSORS

3.1. Sensors

Sensors act as a bridge connecting the physical environment and industrial electrical/electronic devices. These devices have a wide range of applications such as protection and monitoring in the industrial production process. There are hundreds of types of sensors manufactured today. The incredibly rapid advances in microelectronics technology enable new inventions or new application types to be developed every day. In general, the working mechanism of a sensor is as follows (Varan, 2005).

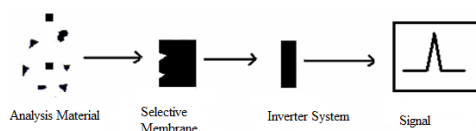


Figure 3.1. Operating Mechanism of a Sensor (Varan, 2005).

3.2. Types of Gas Sensors

- CO_2 , SO_2 , NH_3 glass membrane detects pH change
- Detects HCN , H_2S Ag_2S membrane, pCN and pS exchange
- HF LaF_3 membrane detects pF change

Gas sensors can also be classified as follows;

1. Solid state gas sensors
2. conductive polymer gas sensors
3. Metal oxide gas sensors
4. Amperometric gas sensors (Snow & Barger, 1989; Temurtaş, 2000)

The development of semiconductor technology and the use of microprocessors in sensor applications have been the main sources of the development of gas measurement systems. However, new searches are still ongoing, especially in the production of sensor materials. Because what is important in gas measurement systems is precision, longevity and easy applicability to practice. For this reason, different types of sensors with different working principles have been developed and some of them are given in Figure 3.2. (Evyapan, 2005).

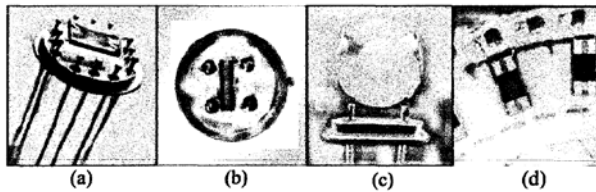


Figure 3.2: Various Sensors : (A) Metal Acoustic Sensor, (B) Surface Acoustic Wave Sensor, (C) QCM Sensor, (D) Conductive Polymer Sensor Array (Karlık, 2004).

3.3. Sensing Material-Gas Interactions

Regardless of the sensing mechanism, the response characteristics of an acoustic wave sensor depend on the nature of the interaction between analyte molecules and the sensing material used as an interface. Knowing the type of these interactions is important for interfacial design. The interactions between the sensing material and analyte molecules can be categorized into two groups: physical and chemical interactions.

In the case of adsorption, these interactions are called physical adsorption and chemical adsorption respectively.

Physical adsorption has very small activation energy and involves relatively weak van der Waals interactions. It is therefore a small energy production (5-12 kCal/mol, 0.217-0.521 eV). Physical adsorption is generally reversible at room temperature but is not selective.

Chemical adsorption can be characterized by the redistribution of electron density and the formation of chemical bonds with energies of 25-100 kCal/mol (1.086-4.346 eV) and higher. In the case of chemical adsorption, the chemical bonds between analyte molecules can be broken and react with the interfacial sensing agent and new bonds can be formed. Thus, the interfacial sensing agent loses its original properties. Physical and chemical adsorption can be distinguished from each other by the following features (Rajagopalan & Petit, 2021).

1. The heat of adsorption is small in the case of physical adsorption and large in the case of chemical adsorption.
2. In the case of physical adsorption the adsorbed molecules can be easily removed from the surface, in the case of chemical adsorption this is very difficult.
3. In the case of physical adsorption, under favorable conditions of temperature and pressure, an adsorbed

layer is formed, the thickness of which is several times the diameter of the adsorbed molecules. In the case of chemical adsorption a layer of monomolecules is formed.

In the case of adsorption, there is mixing at the molecular level of the adsorbed substance and the sensing substance used as an interface. In the case of absorption, the absorbed molecules are soluble in the interfacial substance. In other words, absorption interactions are not limited to active adsorption centers on the surface as in adsorption.

The amount of substance absorbed at equilibrium is called the solubility of that substance. If the interfacial material is a polymer, the solubility of the diffusing substance is determined by the interactions between the chains in the polymer and between the chain and the diffusing substance (Nikolic, Milovanovic, Vasiljevic, & Stamenkovic, 2020).

4. CONSTRUCTION OF GAS SENSORS

Over the past 30 years many gas-sensitive electrochemical assemblies have appeared on the market. In the manufacturers' literature, these assemblies are usually not gas-sensitive electrodes, but electrochemical cells consisting of a reference electrode and a specific ion immersed in an internal solution retained by a thin gas-permeable membrane. Therefore, gas sensors are a more appropriate name than gas-sensitive electrodes.

Gas sensors are highly selective and sensitive systems for the determination of soluble gases or ions that can be converted into soluble gases by pH adjustment. The gas sensor consists of a tube containing a reference electrode, a specific ion electrode and an electrolyte solution. Attached to one end of the tube is a thin

replaceable gas-permeable membrane, a complete electrochemical cell that acts as a barrier between the inner solution and the analyte solution. Gas sensors are widely used in the determination of gases dissolved in water and other solvents. A gas sensor is a galvanic cell whose potential is related to the concentration of the gas in solution. The selectivity of gas sensors depends only on the permeability of the gas membrane.

Gas sensors are useful for the determination of soluble gases such as NH_3 , CO_2 , H_2S , SO_2 , NO_2 . The gas molecules react with the buffer solution by diffusing across the membrane and the pH of the buffer solution changes. This change is determined by the gas sensor combination (Güre, 2005).

4.1. Components of a Gas Sensor

A gas sensor consists of four components. These are

- A. Gas Permeable Membrane
- B. Electrode
- C. Electrolyte
- D. Filter

4.2. Potentiometric Gas Sensor

In potentiometric gas sensors, the potential change is obtained by the electrical interaction of neutral gas molecules with the sensor. The sample can be gas or liquid phase. The potential difference indicates charge separation. There must be a mechanism at an interface within the sensor where electrons or ions interact electrically with neutral gas molecules.

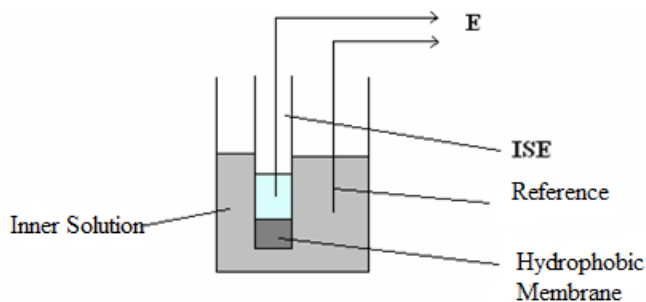


Figure 4.3. A Potentiometric Sensor (Varan, 2005).

Although different specialized designs have been developed for the detection of carbon dioxide, the general principle by which this instrument works is similar to that of other gases. It is based on the measurement of the limited ion-activity change caused by the diffusion of gas molecules across the inner electrode and their subsequent hydrolysis. The mechanism can be described by the generation of a series of equilibria between the electrode and the sample in which the gas diffuses. For the carbon dioxide sensor, this step is given by the following dissolution equilibrium (Varan, 2005).

$$(a_{CO_2})_W = \alpha P_{CO_2} \quad (5.1)$$

$$(a_{CO_2})_W = \text{Activity of } CO_2 \text{ dissolved in water}$$

α = Dissolution coefficient

P_{CO_2} = Partial pressure of carbon dioxide

Gas sensors are widely used for the determination of gases dissolved in water and other solvents. The selectivity of the gas sensor depends only on the permeability of the gas membrane. The gas permeable membrane is thin and replaceable. It acts as a barrier between the inner solution and the analyte solution.

Gas sensors respond to the concentrations of gases dissolved in aqueous solution. These sensors consist of an ion-selective electrode connected to a thin layer of the solution held in place by a membrane that passes the desired gas such as NH_3 , CO_2 . When the gas passes through the membrane, the change in the thin layer of solution is sensed by the electrode.

In short, gas sensors are useful for the measurement of dissolved gases. Among its advantages;

- Fast response time
- Less sample preparation
- Ease of design development .

Gas sensors are also highly selective and sensitive devices for the determination of ions that can be converted into soluble gases by pH adjustment (Varan, 2005).

4.3. Features Required in a Gas Sensor

4.3.1. Selectivity

It is one of the most important features to have. Selectivity is more important in sensors because if the selectivity of the sensor is not very good, additional processing will be required. The selectivity of a sensor is measured by its sensitivity to a specific component.

4.3.2. Repeatability

An ideal gas sensor should show more or less the same results in successive measurements under the same conditions. When a gas sensor is being studied, its repeatability must be measured. The higher the repeatability, the better the sensor can be said to be.

4.3.3. Stability

Stability depends on the physical durability of the material used. In addition, factors such as pH, humidity, environment, temperature, O₂ concentration affect the stability. High stability is necessary for the sensor to be an ideal gas sensor.

4.3.4. Calibration Requirement

Normally, for a sensor to be ideal, it would need to be calibrated either never or at most once. However, this theoretical situation has not been possible in practice. Gas sensors are frequently calibrated throughout their use.

4.3.5. Wide Measurement Range

The so-called measurement range is the concentration range where the current concentration curves from the gas sensor are linear.

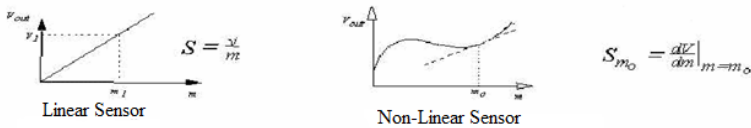


Figure 4.4. Measurement Range of Sensors (Varan, 2005).

4.3.6. Fast Response Time

The response time of the sensor can be understood from the curves obtained. For example, if the shape of the steps in the resulting curve is flat and wide, the response time is long (slow), and vice versa, the response time is short (fast).

4.3.7. Fast Reversal Time

It indicates how long after the first sample the second sample should be measured. In other words, after a constant value is observed after the first sample, the second sample should be added after the same period.

4.3.8. Lifetime

The life of a gas sensor is affected by factors such as temperature, humidity, dust and high gas concentration. Under normal operating conditions, sensors will last at least one year and in most cases two years. If exposed to high gas concentration, the performance of the sensor is shortened. In addition, the lifetime of the sensor affects other parameters of the gas sensor such as calibration frequency, stability, repeatability.

4.3.9. Simple and Cheap

Gas sensors that are simple and inexpensive to design and easy to use are ideal gas sensors. With the studies carried out in recent years, the gas sensor has achieved this suitability.

4.3.10. Miniaturization and Sterilizability

Sterilization and size reduction of sensors are important in sensor design. However, the physical strength of the material that goes into the sensor structure is the most important parameter limiting sterilization.

4.3.11. High Sensitivity

An ideal sensor is one in which the material attached to the sensor is only sensitive to certain substances. It is very difficult to make a sensor that provides all these properties and is free of interference. However, sensors that provide some of these properties can be obtained.

4.3.12. Limit of Determination

The detection limit of a designed sensor should be below a certain concentration value. This limit is influenced by factors such as the size of the sensor surface, the affinity of the material to the substance to be determined, and the amount of substance retained (Varan, 2005).

4.4. Toxic Gas Sensors

The following reactions take place on the electrode surface of the CO gas sensor;

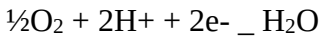


Figure 4.5. Shape of the CO Gas Sensor (Varan, 2005).

Similar reactions occur for all other toxic gases with electrochemical oxidation and reduction tendencies (H_2S , Cl_2).

Typical CO gas sensors are difficult to measure when hydrogen is present in the environment and show significant responses to hydrogen. However, when all CO electrodes and some hydrogen-responsive electrodes are used together, they are separated from electrodes that are only sensitive to hydrogen.

5. APPLICATIONS OF GAS SENSORS

- Combustion control systems (automobile, industrial furnaces)
- Toxic and flammable gas detectors (for leaks)
- In medical diagnostics, in electronic noses in the manufacture of quality food.

5.1. What is an Electronic Nose?

E-noses are systems that mimic the human odor detection mechanism by using fewer sensors and with the support of an artificial intelligence network, and basically consist of four parts. These four parts (Bartlett, Elliott, & Gardner, 1997);

- Sensor array
- Microprocessor
- Signal regulator
- Power supply

Unlike simple gas analysis sensors, e-noses can be used not only to detect an odor but also to classify odors and assess their quality. The sensor array is the most important part of the system. Because the performance of an e-nose depends primarily on the sensitivity, repeatability, selectivity, stability, response time, size and cost of the sensors used in the array. We can analyze the sensors used in e-noses in two groups according to their operating temperatures. Hot sensors and cold sensors.

Hot sensors are the most widely used sensors as they have a longer lifespan (5 years) than cold sensors. Another advantage of hot sensors is that they are easily available as they are commercially produced, have high sensitivity and short response times. The disadvantage is the high cost due to their high temperature (400-600 °C) operation. Cold sensors, on the other hand, operate at room temperature, so their response time (20-40 s) is quite long. Since they are laboratory-made, they are very difficult and expensive to obtain. Their lifetime is at most 18 months and it is difficult to make measurements because they are poor conductors (Ampuero & Bosset, 2003).

5.2. Application Areas of Gas Sensors [36-37]

- Identification of Chemicals
- Water Analysis

- Food and beverage industry
- Finding and Treating Diseases
- In chemical plants
- In ventilation installations of houses, workplaces, automobiles, etc.
- pharmaceutical industry
- Space Industry
- Automatic cooking controls in microwave ovens
- Ventilation control systems
- In electrical processes
- Alcohol controls
- Waste water treatment
- In the automotive industry (Ampuero & Bosset, 2003; Liu, Parisi, Sun, & Lei, 2014)

5.3. Use of Thin Films in Gas Sensor Applications

Recent research in gas sensors has been directed towards more sensitive, long-lasting, nano-sized and cost-effective sensors. Technological developments are now moving from micron to nano dimensions and studies in gas sensors are accelerating in this direction. Thin films produced using Langmuir- Blodgett (LB) thin film technique can be used as sensitive thin layers in gas sensor studies (Shin, Choi, Lee, & Kwon, 1997; Zhang, Chen, Bao, & Li, 1998). Due to the easy synthesis of organic materials, attachment or removal of desired groups on the molecular structure, easy processing and low cost, both organic materials and thin films produced with these materials are used in many studies. For these reasons, films made of organic materials are used as gas-sensitive materials in gas measurement devices and in most of the studies using organic materials, the interaction between the organic material and gas molecules is studied. As a result of these interactions, changes in electrical properties (conductivity, resistivity, etc.), optical properties or mass are measured. Techniques such as Quartz

Crystal Microresonator (QCM), UV-Visible spectroscopy and Atomic Force Microscopy (AFM) are used to measure these properties (Evyapan, 2005; Shiratori, Kohno, & Yamada, 2000).

6. CONCLUSION

As events such as burning, explosion, being affected by toxic gases increase day by day, the interest and demand for sensors is increasing. Thus, the importance of sensors in our daily lives has gained importance and studies related to this subject have been focused on. Sensors are devices that can detect chemical and physics differences in the external environment and convert these changes into electrical signals. Sensors that control these changes in the gas environment are gas sensors. In order for a material to be used as a good sensor, it must have a short response time, a stable structure, good sensitivity, be cheap and easy to design, and have good recycling.

REFERENCES

- Ampuero, S., & Bosset, J. (2003). The electronic nose applied to dairy products: a review. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 94(1), 1-12.
- Bartlett, P. N., Elliott, J. M., & Gardner, J. W. (1997). Electronic noses and their application in the food industry. *Food Technology (Chicago)*, 51(12), 44-48.
- Evyapan, M. (2005). *Organik gaz sensör maddelerinin Langmuir-Blodgett ince film tekniği ile incelenmesi*. Balıkesir University (Turkey).
- Güre, R. (2005). *Düşük sıcaklık amonyak gaz sensörlerinin geliştirilmesi ve uygulamaları*. Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Karlık, B. (2004). Tehlikeli ve Zararlı Kokuları Gerçek-Zamanlı Tanıma ve Koku Bilgisinin İletimi. *Havacılık İleri Teknolojiler ve Uygulamaları Sempozyumu, Hava Harp Okulu, İstanbul*.
- Liu, Y., Parisi, J., Sun, X., & Lei, Y. (2014). Solid-state gas sensors for high temperature applications—a review. *Journal of Materials Chemistry A*, 2(26), 9919-9943.
- Nikolic, M. V., Milovanovic, V., Vasiljevic, Z. Z., & Stamenkovic, Z. (2020). Semiconductor gas sensors: Materials, technology, design, and application. *Sensors*, 20(22), 6694.
- Rajagopalan, A. K., & Petit, C. (2021). Material screening for gas sensing using an electronic nose: Gas sorption thermodynamic and kinetic considerations. *ACS sensors*, 6(10), 3808-3821.
- Shin, H.-K., Choi, Y.-S., Lee, B.-J., & Kwon, Y.-S. (1997). Characteristics of organic gas sensitivity in copolymer LB films. *Synthetic metals*, 86(1-3), 2253-2254.

- Shiratori, S. S., Kohno, K., & Yamada, M. (2000). High performance smell sensor using spatially controlled LB films with polymer backbone. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 64(1-3), 70-75.
- Smith, R., & Semiconductors, I. (1978). Edition: Cambridge University Press.
- Snow, A. W., & Barger, W. (1989). *Phthalocyanine films in chemical sensors* (Vol. 1): John Wiley and Sons: New York.
- Stallinga, P., Gomes, H. L., Murgia, M., & Müllen, K. (2002). Interface state mapping in a Schottky barrier of the organic semiconductor terrylene. *organic Electronics*, 3(1), 43-51.
- Temurtaş, F. (2000). *Kimyasal Sensör Dzilerinde Yapay Sinir Ağları ve Bulanık Mantık Uygulamaları: Gazların Sınıflandırılması ve Gaz Konsantrasyonlarının Belirlenmesi*. Sakarya Üniversitesi (Turkey).
- Varan, S. (2005). *Düşük sıcaklık kompozit amonyak gaz sensörler*. Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Zhang, S., Chen, Z., Bao, G., & Li, S. F. (1998). Organic vapor detection by quartz crystal microbalance modified with mixed multilayer Langmuir–Blodgett films. *Talanta*, 45(4), 727-733.

ORGANOBROMINE COMPOUND FROM ALGAE: A THEORETICAL STUDY ON THE BASIS OF THERMODYNAMICS

Cem Cüneyt ERSANLI¹

1. INTRODUCTION

The name algae is from Latin, where it originally referred to sea grasses. Today it means a broad group of photoautotrophic organisms that thrive in an astounding diversity of habitats: aquatic and marine and brackish environments; wetted surfaces of terrestrial plants and animals; lighted caves; even snowfields. Algae can be unicellular or multicellular and are classified in the Thallophyta, a group distinguished by the presence of chlorophyll.

Depending on their pigment content, algae are traditionally grouped into five large lineages. The Cyanophyta, or blue-green algae, are prokaryotic cells that contain blue (and sometimes red) pigments in addition to chlorophyll and are found in freshwater and oceanic habitats. Chlorophyta, the green algae, are the most universal lineage; they are eukaryotic, possess well-formed chloroplasts and nuclei, and are found in freshwater and also wet tree trunks and rocks, varying from bright to yellow-green in color. Diatoms, members of Bacillariophyta, are golden-yellow to brown and exhibit an extraordinary range of shape-rectangular, triangular, round or oval-and are found in fresh and marine water. Red

¹ Prof. Dr., Sinop University, Faculty of Arts and Science, Department of Physics, Sinop, Turkey, ccersanli@sinop.edu.tr, ccersanli@gmail.com, ORCID: 0000-0002-8113-5091.

algae or Rhodophyta are found in predominance of salt-water habitats and usually occupy lower strata than the bulk of other algal groups; they are quickly recognizable by their red color and often branched thalli. Finally, the brown Ochrophyta are common in cold shallow marine habitats where they fix themselves to substrata in intertidal zones with an enormous variety of species (Akkayan, 1987). Being primary producers, algae form the base of aquatic food webs (Cirik & Cirik, 2011). Algae are broadly classified into two groups: prokaryotic algae, represented only by the Cyanophyta, and eukaryotic algae, a heterogeneous group represented by a plethora of taxa including Chlorophyta, Charophyta, Euglenozoa, Bacillariophyta, Cryptophyta, Haptophyta, Miozoa, Ochrophyta, and Rhodophyta (Guiry & Guiry, 2015). Aside from their ecological role, algae also have an invaluable contribution to make toward a vast range of biotechnological applications. They are utilized in the generation of bioenergy - biodiesel, biogas, and bioethanol- and as sources of nutrients, nutritional supplements, pharmaceuticals, animal feeds, cosmetics, and fertilizers. Additionally, bioactive secondary metabolites produced by algae make them promising candidates in drug discovery (Gümüş, 2006; Cirik & Cirik, 2011). During photosynthesis, algae fix CO₂ and evolve O₂ and therefore contribute significantly to oxygen production and carbon cycling in aquatic habitats (Zeybek et al., 2003). Because of their impact on the environment, the development of blue-green algae in drinking and farming water supplies, reservoirs, rivers, and recreational waterbodies must be closely monitored. A number of scientific investigations have analyzed the taxonomic composition, distribution characteristics, and ecological relations of algal communities in freshwater environments (*e.g.*, Çelik & Ongun, 2007; Tezel Ersanlı & Hasırcı, 2013; Tezel Ersanlı & Gönülol, 2014; Hasırcı Mustak & Tezel Ersanlı, 2015; Deniz & Tezel Ersanlı, 2016a; Tezel

Ersanlı & Hasırcı Mustak, 2017; Tezel Ersanlı & Öztürk, 2017; Yılmaz et al., 2018; Deniz & Tezel Ersanlı, 2020a; 2020b; Solak et al., 2020; Aswathy et al., 2021; Deniz & Tezel Ersanlı, 2021a; 2021b; 2022). Nutritionally, algae are valued as high in protein, minerals, and fiber content, low in fat, and composed of easily digestible carbohydrates. Some *Ulva* species, for example, are consumed as dietary supplements since they are low in calories. They are traditionally used in some regions to treat conditions such as goiter and kidney issues due to their anthelmintic property. *Ulva lactuca*, highly utilized in South America, contains goiter-preventive qualities due to its vitamin A content (Serrano et al., 1998). In recent years, algae have gained significant attention in the field of bioremediation. Algae such as *Spirogyra* sp. and *Rhizoclonium* sp. were investigated for the adsorption of synthetic dyes from contaminated water (Deniz & Tezel Ersanlı, 2016b). Likewise, macroalgae such as *Chaetomorpha* sp., *Polysiphonia* sp., *Ulva* sp., and *Cystoseira* sp. were reported to possess high biosorption capacity (Sari & Tuzen, 2008; Li et al., 2015; Deniz & Tezel Ersanlı, 2018a; 2018b). In red algae (Rhodophyta), the genus *Laurencia* is among the most biochemically and ecologically diverse. Typically found on rocky substrates in intertidal warm waters (Masuda et al., 1996), *Laurencia* consists of 421 described species, with only 146 being taxonomically confirmed (Guiry & Guiry, 2015). The genus is well known for producing a wide range of secondary metabolites with remarkable molecular structures (Suzuki et al., 2009). These compounds -particularly polyhalogenated terpenoids- are defensive in nature and have varied biological activities such as antifeedant, anthelmintic, antimalarial, antifouling, antimicrobial, and cytotoxic activities (Kurata et al., 1998; Davyt et al., 2001; Paul et al., 2011). A compound, 8-bromo-3,7,7-trimethyl-11-methylene-spiro[5.5]

undec-1-en-3,9-diol (**I**), a new rigidol isomer, was first isolated from *Laurencia rigida* (Suescun et al., 2001).

Thermodynamic parameters such as standard molar heat capacity ($C_{p,m}^0$), entropy (S_m^0), and enthalpy change (H_m^0) are crucial to understand the energetic and dynamic profile of molecules at varying temperatures. In this study, these parameters were estimated for the (**I**) via Density Functional Theory (DFT) at the B3LYP/6-311G(d,p) level of theory in the gas-phase. The obtained thermodynamic values were fitted to second-order polynomial equations of the form:

$$y = a + b T + c T^2 \quad (1)$$

(where T is the temperature in Kelvin.) to facilitate continuous interpolation of these properties over a wide range of temperatures. These equations are very crucial to explain reaction thermodynamics, phase behavior, and process simulations with this molecule.

In this study, molecular structure of compound with molecular formula $C_{15}H_{23}BrO_2$ (**I**) (Suescun et al., 2001) was investigated by DFT. All quantum chemical computation was carried out at the gas-phase ($\epsilon = 1$) level of B3LYP/6-311G(d,p) by using the Gaussian 03 computer package (Frisch et al., 2004; Dennington et al., 2007). Apart from the thermodynamic behavior of (**I**), its room temperature and a wide range of temperatures (100-1000 K) were also studied.

2. MATERIAL AND METHOD

2.1. Computational Details

In order to determine the quantum chemical characteristics of the compound $C_{15}H_{23}BrO_2$ (Suescun et al., 2001) (Figure 1), all the thermodynamic calculations and

geometry optimizations were carried out under the Gaussian 03 computational package (Frisch et al., 2004). The B3LYP hybrid functional and the 6-311G(d,p) basis set was utilized, a common protocol for good thermochemical predictions in organic systems (Becke, 1993; Lee et al., 1988). Frequency analysis confirmed that the optimized structure is actually a genuine minimum on the potential energy surface (*i.e.*, no imaginary frequencies were observed).

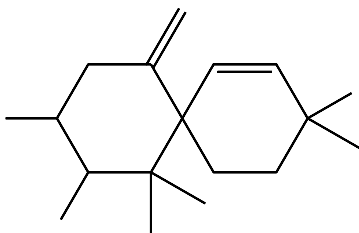
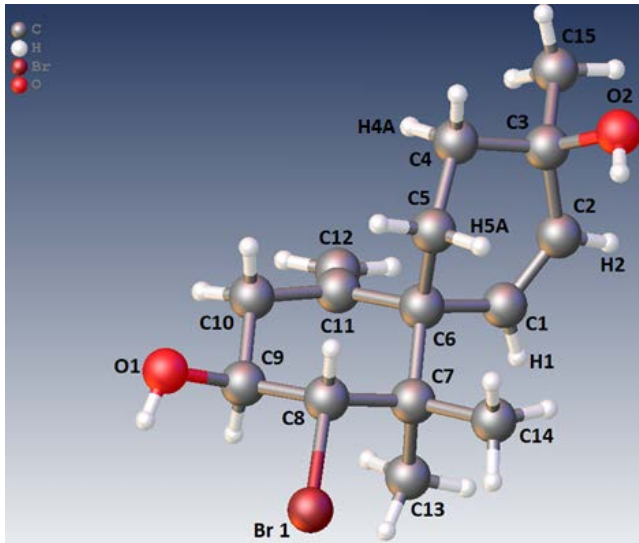


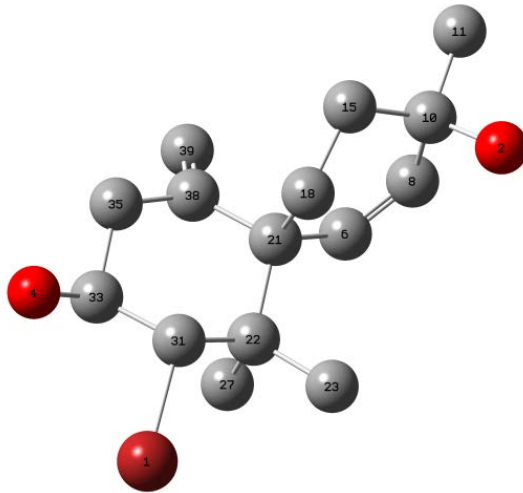
Figure 1. Chemical diagram of (I) molecule (Suescun et al., 2001).

3. RESULT AND DISCUSSION

Suescun et al. 2001 performed crystallographic research of the molecule of the alga. Figure 2 is Olex2-1.5 (Dolomanov et al., 2009) projection of (I) (Suescun et al., 2001).



(a)



(b)

Figure 2. (a) The Olex (Dolomanov et al., 2009) diagram of (I) molecule (Suescun et al., 2001), (b) Optimised structure view (Hydrogen atoms are omitted for clarity).

3.1. Temperature Dependence of Thermodynamic Properties

3.1.1. In the Range of 100-1000K

Table 1 depicts the thermodynamic values calculated for (I) within the range of 100-1000 K, obtained through DFT calculations at B3LYP/6-311G(d,p) level in gas-phase. The values reflect total thermal energy (EEE), constant pressure heat capacity ($C_{p,m}^0$), entropy (S_m^0), and enthalpy change (H_m^0).

The EEE increases progressively with temperature, from 223.877 kcalmol⁻¹ at 100 K to 329.450 kcalmol⁻¹ at 1000 K. The increase is from the contribution of vibrational, rotational, and translational modes in storing thermal energy input. The greatest increases are at high temperatures, as predicted for activation of higher-frequency vibrational modes out of reach thermally at low temperatures (Table 1).

Table 1. Temperature dependence of EEE, $C_{p,m}^0$, S_m^0 , and H_m^0 for (I) calculated at the B3LYP/6-311G(d,p) level in gas-phase.

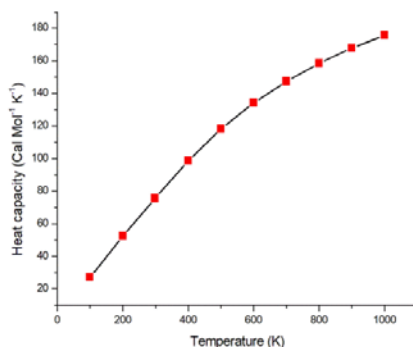
Temperature (K)	EEE (kcalmol ⁻¹)	$C_{p,m}^0$ (calmol ⁻¹ K ⁻¹)	S_m^0 (calmol ⁻¹ K ⁻¹)	H_m^0 (kcalmol ⁻¹)
100	223.877	27.181	82.430	1.667
200	227.895	52.465	110.654	5.884
298.15	234.182	75.643	136.718	12.366
400	243.076	98.608	162.798	21.463
500	253.939	118.069	187.401	32.524
600	266.575	134.112	210.756	45.359
700	280.667	147.314	232.760	59.650
800	295.965	158.330	253.436	75.147
900	312.277	167.652	272.872	91.657
1000	329.450	175.618	291.168	109.029

The heat capacity is significantly boosted from 27.18 calmol⁻¹K⁻¹ at 100 K to 175.62 calmol⁻¹K⁻¹ at 1000 K. This is an indication of the enhanced ability of the molecule to absorb the heat energy as more and more degrees of freedom (in this case, vibrational) become populated. The smooth rise is in

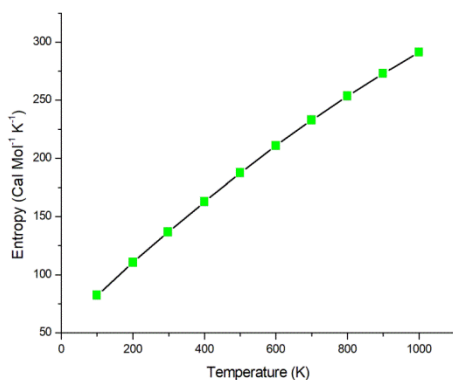
accordance with expectations for flexible, polyatomic organic molecules, in which variety and number of vibrational modes favor enhanced thermal energy accommodation at increased temperatures (Figure 3a).

Calculated entropy increases from $82.43 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ at 100 K to $291.17 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ at 1000 K. Smooth and nearly linear rise indicates an increasing number of accessible microstates with rising temperature. With a decrease in temperature, the system's configurational space is reduced, but with more thermal energy, more rotational and vibrational freedom is employed, and the disorder among the molecules rises. This follows the general thermodynamic definition of entropy as molecular dispersal and randomness of energy (Atkins & de Paula, 2014) (Figure 3b).

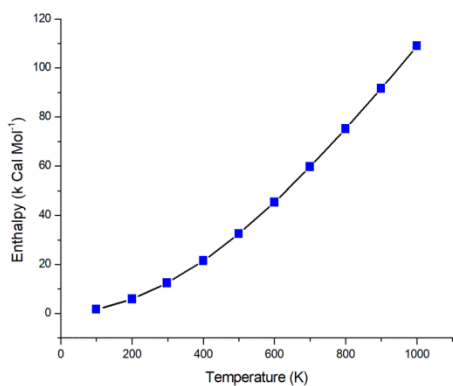
The enthalpy of standard also increases smoothly with temperature, from $1.67 \text{ kcal mol}^{-1}$ at 100 K to $109.03 \text{ kcal mol}^{-1}$ at 1000 K. The smooth increase is a sign of the accretion of thermal terms to internal energy, an item of direct relevance in the assessment of thermal stability and reactivity of the molecule in different regimes of temperature. This data can also assist in the modeling of enthalpic change in chemical processes involving (I) (Figure 3c).



(a)



(b)



(c)

Figure 3. Plot of calculated thermodynamic parameters vs. temperature of (I) in gas-phase.

The computed thermodynamic values for (I) were fitted to second-order polynomial functions of temperature T in Kelvin units. The results of the fit are provided below:

Heat Capacity ($C_{p,m}^0$):

$$C_{p,m}^0 = -1.97562 + 0.29955T - 1.22686 \times 10^{-4}T^2 \quad (R^2 = 0.99982) \quad (2)$$

Entropy (S_m^0):

$$S^0_m = 53.0863 + 0.29925T - 6.1102 \times 10^{-5}T^2 \quad (R^2=1) \quad (3)$$

Enthalpy (H^0_m):

$$H^0_m = -3.3623 + 0.03137T + 8.20767 \times 10^{-5}T^2 \quad (R^2=0.99954) \quad (4)$$

These high correlation coefficients indicate the excellent goodness of the polynomial fitting and verify the accuracy of the computational results.

The positive linear term in the heat capacity equation reflects a steady increase in the capacity for thermal energy storage with temperature. However, the extremely small negative quadratic term reflects a slowing of the increase at high temperatures, in agreement with most polyatomic molecules' behavior as their vibrational states come to full excitation (Moran & Shapiro, 2010). Entropy equation shows an essentially linear increase with temperature, evidenced by the dominance of the linear coefficient and the very small negative quadratic coefficient. This is as expected with an increase in molecular disorder with higher thermal energy (Atkins & de Paula, 2014). The enthalpies rise steadily with temperature, dominated by linear and quadratic positive terms. This is consistent with molecular systems gaining vibrational and rotational energy as they are heated.

3.1.2. Electronic and Thermodynamic Parameters at Standard Temperature (298.15 K)

The electronic and thermodynamic values of (**I**) at 298.15 K in the gaseous phase were computed with DFT methods at the level of B3LYP/6-311G(d,p). The presented values in Table 2 clearly reflect the energy distribution and molecular motion at standard temperature.

Table 2. Electronic and thermodynamic values computed by DFT with the basis set B3LYP/6-311G(d,p) for (I) in the gas-phase at 298.15 K.

Parameters	Gas-phase ($\epsilon=1$)
<i>Energy (kcalmol⁻¹)</i>	
Electronic	0.000
Translational	0.889
Rotational	0.889
Vibrational	232.405
Total	234.182
Zero-point vibrational energy	222.40843
Nuclear repulsion energy (<i>Hartree's</i>)	1888.8702094894
<i>Heat capacity [C_{p,m}⁰ (calmol⁻¹K⁻¹)]</i>	
Electronic	0.000
Translational	2.981
Rotational	2.981
Vibrational	69.681
Total	75.643
<i>Entropy [S_m⁰ (calmol⁻¹K⁻¹)]</i>	
Electronic	0.000
Translational	43.130
Rotational	33.923
Vibrational	59.665
Total	136.718
<i>Rotational constants (GHz)</i>	
A	0.65381
B	0.19496
C	0.17664
<i>Thermal correction to Gibbs free energy (Hartree/Particle)</i>	0.309178
<i>Dipole moment (D)</i>	1.6110420

At 298.15 K, the total thermal energies of the molecule are 234.182 kcalmol⁻¹, with the component from vibrational energy contributing significantly (232.405 kcalmol⁻¹) and translational and rotational components contributing negligibly (0.889 kcalmol⁻¹ each). This is as expected for polyatomic molecules at room temperature, when vibrational modes are fully activated. The electronic energy contribution at this level of theory is 0.000 kcalmol⁻¹, since the molecule remains in its ground electronic state under conditions of thermal excitation.

The zero-point vibrational energy is calculated as 222.41 kcalmol⁻¹, *i.e.*, the intrinsic vibrational energy of the molecule at 0 K. This is crucial in determining reaction energetics, particularly for estimating total reactant and product energies. The nuclear repulsion energy is 1888.8702 Hartree, *i.e.*, the electrostatic attraction of atomic nuclei and one component of the total molecular electronic structure.

The total molar heat capacity at constant pressure is calculated as 75.643 calmol⁻¹K⁻¹, overwhelmingly accounted for by the vibrational contribution (69.681 calmol⁻¹K⁻¹). The translational and the rotational contributions are equal (2.981 calmol⁻¹K⁻¹) because in a nonlinear polyatomic gas-phase molecule they have to be, and electronic contribution is again 0.000, as it should be because the molecule is in its electronic ground state. The overall entropy of the system is 136.718 calmol⁻¹K⁻¹, a sum of contributions from translational (43.130 calmol⁻¹K⁻¹), rotational (33.923 calmol⁻¹K⁻¹), and vibrational (59.665 calmol⁻¹K⁻¹) degrees of freedom. The illustration shows how molecular entropy is mass, geometry, and vibrational complexity-dependent at room temperature. The A, B, and C rotational constants are 0.65381, 0.19496, and 0.17664 GHz, respectively. They are consistent with the asymmetric top nature of the molecule, as the spirocyclic non-planar structure would be anticipated to lead to. These values are valuable in the simulation of microwave or rotational spectra and for information on the dynamic molecular behavior in the gas-phase. The thermal correction to Gibbs free energy is determined as 0.309178 Hartree, and it is a measure of thermal effects at 298.15 K which can be used in estimating relative stabilities or reaction equilibrium constants in thermodynamics. The molecule has a dipole moment of 1.611 Debye, indicating moderate polarity. This value is a good indicator for intermolecular dipole-dipole interactions and

indicates something about the compound's capability to act in polar solvents or when performing molecular docking against polar targets.

4. CONCLUSIONS

In this study, the organobromine compound (**I**), isolated from the marine algae *Laurencia rigida*, was theoretically investigated using the density functional theory (DFT) at the B3LYP/6-311G(d,p) level of theory in the gas phase. The thermodynamic properties of the compound were systematically investigated in a broad range of temperatures (100-1000 K), and standard thermodynamic functions like total thermal energy (EEE), heat capacity ($C_{p,m}^0$), entropy (S_m^0), and enthalpy change (H_m^0) were thoroughly investigated. Results showed uniform and replicable improvement in all the thermodynamic properties with rising temperature as observed for polyatomic organic molecules. Vibrational motion's significant contribution to thermal energy and heat capacity, especially at room temperature, reflects the molecule's complexity in internal structure and flexibility. Entropy and enthalpy values also increased smoothly, reflecting increasing molecular disorder and capacity for energy storage within the molecule as the temperature increased. All the computed parameters were well-represented by second-order polynomial equations with excellent correlation coefficients, making them dependable for future theoretical and practical modeling. At 298.15 K (room temperature), the compound exhibited a reasonable dipole moment (1.611 D), significant zero-point vibrational energy, and a thermodynamically reasonable profile. The findings reveal that compound (**I**) has the potential to exhibit good thermal stability and could be a good contender to pursue for further investigations in bioactivity, bearing in

mind its derivation from a genus with known diverse and strong secondary metabolites.

In total, the theoretical thermodynamic analysis created here provides useful insight into the energy characteristics of this sea-derived organobromine compound and is part of the underlying knowledge needed for its potential application in pharmaceutical or materials science research.

REFERENCES

- Akkayan, C. (1987). Microbiological problems in cellulose production. *Journal of Istanbul University Faculty of Forestry*, 37(1), 141-159.
<https://doi.org/10.17099/jffiu.50471>
- Aswathy Udayan, Pandey, A. K., Sharma, P., Sreekumar, N., & Kumar, S. (2021). Emerging industrial applications of microalgae: Challenges and future perspectives. *Systems Microbiology and Biomanufacturing*, 1(4), 411-431.
<https://doi.org/10.1007/s43393-021-00038-8>
- Atkins, P., & de Paula, J. (2014). *Atkins' Physical Chemistry* (10th ed.). Oxford University Press.
<https://doi.org/10.1063/1.464913>
- Becke, A. D. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 98(7), 5648-5652.
<https://doi.org/10.1063/1.464913>
- Cirik, Ş., & Cirik, S. (2011). Aquatic plants I: Biology, ecology, and cultivation techniques of marine plants, 58,. Ege University Faculty of Fisheries Publications
- Çelik, K., & Ongun, T. (2007). The influence of certain physical and chemical variables on the seasonal dynamics of phytoplankton assemblages of a source inlet and the outlet of the shallow hypertrophic Lake Manyas, Turkey. *Turkish Journal of Botany*, 31(6), 485-493
- Davyt, D., Fernandez, R., Suescun, L., Mombru, A. W., Saldana, J., Dominguez, L., Coll, J., Fujii, M. T., & Manta, E. (2001). New sesquiterpene derivatives from the red alga *Laurencia scoparia*: Isolation, structure determination, and anthelmintic activity. *Journal of*

- Natural Products*, 64(12), 1552-1555.
<https://doi:10.1021/np01023071>
- Deniz, F., & Tezel Ersanlı, E. (2016a). Simultaneous bioremoval of two unsafe dyes from aqueous solution using a novel green composite biosorbent. *Microchemical Journal*, 128, 312-319.
<https://doi:10.1016/j.microc.2016.05.012>
- Deniz, F., & Tezel Ersanlı, E. (2016b). Removal of colorant from simulated wastewater by phyco-composite material: Equilibrium, kinetic and mechanism studies in a lab-scale application. *Journal of Molecular Liquids*, 220, 120-128. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2016.04.081>
- Deniz, F., & Tezel Ersanlı, E. (2018a). An ecofriendly approach for bioremediation of contaminated water environment: Potential contribution of a coastal seaweed community to environmental improvement. *International Journal of Phytoremediation*, 20(3), 256-263.
<https://doi.org/10.1080/15226514.2017.1374335>
- Deniz, F., & Tezel Ersanlı, E. (2018b). A natural macroalgae consortium for biosorption of copper from aqueous solution: Optimization, modeling and design studies. *International Journal of Phytoremediation*, 20(4), 362-368. <https://doi.org/10.1080/15226514.2017.1393387>
- Deniz, F., & Tezel Ersanlı, E. (2020a). An effectual biosorbent substance for removal of manganese ions from aquatic environment: A promising environmental remediation study with activated coastal waste of *Zostera marina* plant. *BioMed Research International*, 2020(1), 7806154, 1-8. <https://doi.org/10.1155/2020/7806154>
- Deniz, F., & Tezel Ersanlı, E. (2020b). A low-cost and eco-friendly biosorbent material for effective synthetic dye

- removal from aquatic environment: Characterization, optimization, kinetic, isotherm and thermodynamic studies. *International Journal of Phytoremediation*, 22(4), 353-362.
<https://doi.org/10.1080/15226514.2019.1663485>
- Deniz, F., & Tezel Ersanli, E. (2021a). A renewable biosorbent material for green decontamination of heavy metal pollution from aquatic medium: A case study on manganese removal. *International Journal of Phytoremediation*, 23(3), 231-237.
<https://doi.org/10.1080/15226514.2020.1807905>
- Deniz, F., & Tezel Ersanli, E. (2021b). Purification of malachite green as a model biocidal agent from aqueous system by using a natural widespread coastal biowaste (*Zostera marina*). *International Journal of Phytoremediation*, 23(7), 772-779.
<https://doi.org/10.1080/15226514.2020.1857684>
- Deniz, F., & Tezel Ersanlı, E. (2022). A novel biowaste-based biosorbent material for effective purification of methylene blue from water environment. *International Journal of Phytoremediation*, 24(12), 1243-1250.
<https://doi.org/10.1080/15226514.2021.2025039>
- Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2007). GaussView (Version 4.1.2). Semichem Inc.
- Dolomanov, O.V., Bourhis, L.J., Gildea, R.J., Howard, J.A.K. and Puschmann, H. (2009) OLEX2: A Complete Structure Solution, Refinement and Analysis Program. *Journal of Applied Crystallography*, 42, 339-341.
<http://dx.doi.org/10.1107/S0021889808042726>
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Montgomery, J. A., Jr.,

- Vreven, T., Kudin, K. N., Burant, J. C., Millam, J. M., Iyengar, S. S., Tomasi, J., Barone, V., Mennucci, B., Cossi, M., Scalmani, G., Rega, N., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Klene, M., Li, X., Knox, J. E., Hratchian, H. P., Cross, J. B., Bakken, V., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R. E., Yazyev, O., Austin, A. J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, J. W., Ayala, P. Y., Morokuma, K., Voth, G. A., Salvador, P., Dannenberg, J. J., Zakrzewski, V. G., Dapprich, S., Daniels, A. D., Strain, M. C., Farkas, O., Malick, D. K., Rabuck, A. D., Raghavachari, K., Foresman, J. B., Ortiz, J. V., Cui, Q., Baboul, A. G., Clifford, S., Cioslowski, J., Stefanov, B. B., Liu, G., Liashenko, A., Piskorz, P., Komaromi, I., Martin, R. L., Fox, D. J., Keith, T., Al-Laham, M. A., Peng, C. Y., Nanayakkara, A., Challacombe, M., Gill, P. M. W., Johnson, B., Chen, W., Wong, M. W., Gonzalez, C., & Pople, J. A. (2004). Gaussian 03, Revision C.02. Gaussian, Inc.
- Guiry, M. D., & Guiry, G. M. (2015). *AlgaeBase: World-wide electronic publication*. National University of Ireland, Galway. <http://www.algaebase.org>
- Gümüş, G. (2006). *Investigation of the chemical composition of sea lettuce* (Master's thesis). Ege University Institute of Science.
- Hasırcı Mustak, S., & Tezel Ersanlı, E. (2015). Spatial and temporal characterization of the physicochemical parameters and phytoplankton assemblages in Dodurga Reservoir (Sinop, Turkey). *Turkish Journal of Botany*, 39(3), 547-554. <https://doi.org/10.3906/bot-1407-32>

- Kurata, K., Taniguchi, K., Agatsuma, Y., & Suzuki, M. (1998). Diterpenoid feeding-deterrents from *Laurencia saitoi*. *Phytochemistry*, 47, 363-369. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(97\)00461-5](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(97)00461-5)
- Lee, C. T., Yang, W. T., & Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37, 785-789. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>
- Masuda, M., Abe, T., Suzuki, T., & Suzuki, M. (1996). Morphological and chemotaxonomic studies on *Laurencia composita* and *L. okamurae* (Ceramiales, Rhodophyta). *Phycologia*, 35(6), 550-562. <https://doi.org/10.2216/i0031-8884-35-6-550.1>
- Moran, M. J., & Shapiro, H. N. (2010). *Fundamentals of Engineering Thermodynamics* (7th ed.), John Wiley & Sons, Hoboken
- Paul, V. J., Ritson-Williams, R., & Sharp, K. (2011). Marine chemical ecology in benthic environments. *Natural Product Reports*, 28(2), 345-387. <https://doi.org/10.1039/C0NP00040J>
- Sari, A., & Tuzen, M. (2008). Biosorption of Pb(II) and Cd(II) from aqueous solution using green alga (*Ulva lactuca*) biomass. *Journal of Hazardous Materials*, 152(1), 302-308. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2007.06.097>
- Serrano, A., Palacios, C., Roy, G., Cespón, C., Villar, M. L., Nocito, M., & González-Porqué, P. (1998). Derivatives of gallic acid induce apoptosis in tumoral cell lines and inhibit lymphocyte proliferation. *Archives of biochemistry and biophysics*, 350(1), 49-54. <https://doi.org/10.1006/abbi.1997.0474>

- Solak, C. N., Peszek, Ł., Yilmaz, E., Ergül, H. A., Kayal, M., Ekmekçi, F., Várбірó, G., Yüce, A. M., Canli, O., Binici, M. S., & Ács, É. (2020). Use of diatoms in monitoring the Sakarya River Basin, Turkey. *Water*, 12(3), 703. <https://doi.org/10.3390/w12030703>
- Suescun, L., Mombru, A. W., Mariezcurrena, R. Â., Davyt, D., Fernandez, R., & Manta, E. (2001). Two natural products from the algae *Laurencia scoparia*. *Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry*, 57(3), 286-288. <https://doi.org/10.1107/s0108270100017935>
- Suzuki, M., Takahashi, Y., Nakano, S., Abe, T., Masuda, M., Ohnishi, T., Noya, Y., & Seki, K.-I. (2009). An experimental approach to study the biosynthesis of brominated metabolites by the red algal genus *Laurencia*. *Phytochemistry*, 70(11-12), 1410-1415. <https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2009.07.038>
- Tezel Ersanlı, E., & Gönülol, A. (2014). Phytoplankton dynamics and some physicochemical variables in Cakmak Reservoir, Samsun, Turkey. *MANAS Journal of Agriculture and Life Sciences*, 4(1), 17-25
- Tezel Ersanlı, E., & Hasırcı, S. (2013). The relationship between environmental variables and the vertical and horizontal assemblages of phytoplankton in Erfelek Reservoir in Sinop, Turkey. *Turkish Journal of Botany*, 37(4), 715-726. <https://doi.org/10.3906/bot-1207-21>
- Tezel Ersanlı, E., & Hasırcı Mustak, S. (2017). Distribution dynamics of vegetative cells and cyst of *Ceratium hirundinella* in two reservoirs, Turkey. *Süleyman Demirel University Journal of Natural and Applied Sciences*, 21(1), 247-253. <https://doi.org/10.19113/sdufbed.99878>

- Tezel Ersanlı, E., & Öztürk, R. (2017). Ecological and statistical evaluation of algal flora and water quality of Karasu Stream. *KSU Journal of Natural Sciences*, 20(3), 193-200. <https://doi.org/10.18016/ksudobil.264177>
- Yılmaz, N., Yardımcı, C. H., Elhag, M., & Dumitrache, C. A. (2018). Phytoplankton composition and water quality of Kamil Abduş Lagoon (Tuzla Lake), Istanbul-Turkey. *Water*, 10(5), 603. <https://doi.org/10.3390/w10050603>
- Zeybek, N., Zeybek, U., & Saygıner, B. (2003). *Pharmaceutical botany*. Meta Publishing House, p. 102-103, İzmir, Turkey

KARBONLU METEORİTLER¹

Ceren KAMİL²

Çisem ALTUNAYAR ÜNSALAN³

Ozan ÜNSALAN⁴

1. GİRİŞ

Asteroit, meteoroit, meteor ve meteorit terimleri, sıkça karıştırılsa da aslında birbirinden tamamen farklı kavramlardır. Asteroitler, bilindiği kadarıyla Mars ile Jüpiter arasında bulunan ve “Asteroit Kuşağı” olarak bilinen bölgede yer alırlar. Mevcut bilgilere göre, asteroitlerin atmosferlerinin olmadığı düşünülmektedir. Bu gökcisimlerinden, çarpışmalar gibi çeşitli nedenlerle kopan küçük parçalar “meteoroit” olarak adlandırılır. Bu meteoroitler, uzun zaman içinde Dünya’nın yerçekimi etkisiyle atmosferine girdiğinde “meteor” ismini alırlar. Atmosfere 11 ile 75 km/s hızla giren meteorların kütlelerinin ~ %90’dan fazlası yüksek sıcaklık ve sürtünme nedeniyle yok olur. Ancak bu zorlu koşullara dayanıp yeryüzüne ulaşabilen parçalar, artık “meteorit” olarak adlandırılır. Asteroitlerin, meteoritlerin kaynak (ana) gövdeleri oldukları düşünülmektedir. Dünya atmosferine girişte, artan sıcaklık ve sürtünmenin de etkisiyle birlikte ortaya çıkan meteorların

¹ Bu kitap bölümü “Vigarano Türü Karbonlu Göktaşı NWA 5508 Üzerine Petrografik, Titreşimsel Spektroskopik ve Mikroskopik Analizler” başlıklı doktora tez çalışmasından üretilmiştir.

² Dr., Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Malzeme Bilimi ve Mühendisliği ABD, cerenkamil697@gmail.com, ORCID: 0000-0002-7311-9550.

³ Dr., Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, cisemaltunayar@gmail.com, ORCID: 0000-0001-6479-4223.

⁴ Prof. Dr., Ege Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, physicistozan@gmail.com, ORCID: 0000-0001-5736-7530.

renkleri çıplak gözle gözlemlenebilir (Şekil 1.1’de görüldüğü gibi) ve bu renkler meteorun sahip olduğu kimyasal bileşim hakkında ipuçları verebilir (Lada, 2016).



Şekil 1.1. Kimyasal bileşimlerine bağlı olarak meteorların renkleri (Lada, 2016).

Bir numunenin meteorit olabilmesi için, 1 mm’den daha ince yanık dış kabuğa sahip olması, dış yüzeyinde kabarcıklar, tabakalar, damarlı yapı, delikli yapı, çok köşeli, şekilli ve tıraşlanmış görünüm olmamalıdır. Dış yüzeyi ise “regmaglipt” olarak adlandırılan ve parmak izini andıran girintili ve çıkıntılı bir yapıya sahip olmalıdır. Demirli, taşsı ve taşsı-demirli olmak üzere başlıca üç tür meteorit vardır. Ay ve Mars kökenli meteoritler ile karbonlu meteoritler de bu üç gruba ek olarak verilebilir. Taşsı-demirli meteoritler, yaklaşık olarak eşit miktarda Si (Silikat) ve Fe-Ni (Demir-Nikel) alaşımı içerir. Taşsı meteoritler, gözlenen meteorit düşmelerinin yaklaşık %94’ünü oluşturur ve bu nedenle en yaygın meteorit türüdür. Bu meteoritler, “kondritler” ve “akondritler” olmak üzere iki farklı kategoriye ayrılmaktadır. Kondritler, Si açısından zengin, neredeyse küresel yapılar olan kondrüllerden oluşur ve en bol bulunan taşsı meteorit türüdür. Ayrıca Arizona State University’nin Buseck Center for Meteorite Studies ekibi (2025), kondritlerin erime geçirmeden oluştuğunu ve oluşumlarından bu yana diğer nesneler ile çok az kimyasal etkileşime girdikleri için kimyalarının son derece ilkel olduğunu

belirtmiştir. Dünya’da bulunan tüm meteoritlerin yaklaşık %86’sını taşı meteoritler oluşturur. Bu nedenle, özellikle karbonlu kondritler, Güneş Sistemi’nin erken dönemleri hakkında bilgi edinmek amacıyla bilim insanları tarafından detaylı şekilde incelenmektedir.

Kondritlerdeki kondrüller yapılarına göre sekiz farklı sınıfa ayrılmaktadır (Şekil 1.2).



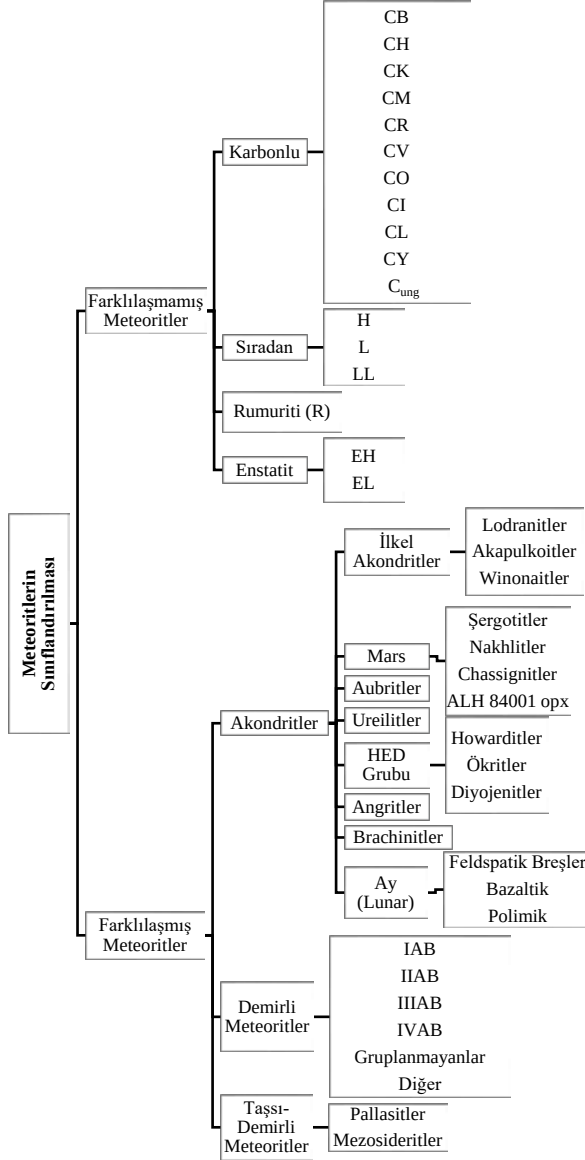
Şekil 1.2. Kondritlerdeki kondrül yapıları (Norton & Chitwood, 2008).

Meteoritlerin sınıflandırılmasında petrografik kriterler ayırt edici özellikler olarak kullanılır ve kondritlerin sınıflandırılabilmesi için öncelikli olarak o kondritin ait olduğu kimyasal grup bilinmelidir. Petrografik sınıfın belirlenmesinde, meteorit içeriğindeki mineraller ve bu minerallerin bolluğu, kondrüllerin varlığı, bolluğu ve boyutları ile refrakter kapanım özellikleri önemlidir. Kondritlerin petrografik tipleri Tablo 1.1’de özetlenmiştir (Norton & Chitwood, 2008). Meteoritlerin genel sınıflandırılması ise Tablo 1.2’de verilmiştir.

Tablo 1.1. Petrografik tipler (Norton & Chitwood, 2008).

Kriterler						
	1	2	3	4	5	6
1.Olivin ve piroksen bileşimlerinin homojenliği	—	Piroksenin ortalama sapması $\geq\%5$		Tekdüzede ortalama sapma $\leq\%5$	Tek tip ferromagnezyen mineraller	
2.Düşük-Ca pirokseninin yapısal durumu	—	Ağırlıklı olarak monoklinik kristaller		Monoklinik kristaller		Ortorombik kristaller
				$>\%20$	$<\%20$	
3.İkincil feldispatın büyüme derecesi	—	Yok		$<2\text{ }\mu\text{m}$ taneler	$<50\text{ }\mu\text{m}$ taneler	$>50\text{ }\mu\text{m}$
4.Kondrüllerde volkanik cam	—	Şeffaf ve izotropik cam; değişken bolluk		Var ise bulanık/opak	Gözlenmez	
5.Metalik mineraller (maksimum wt% Ni)	—	taenit yok veya çok az (Ni $<200\text{ mg/gr}$)	kamasit ve taenit var ise ($>\%20$)			
6.Sülfür mineralleri (ortalama Ni içeriği)	—	$>5\text{ mg/gr}$	$<\%0,5$			
7.Kondrül yapısı	Kondrül mevcut değil	Keskin olarak tanımlanan kondrüller		İyi tanımlanmış kondrüller	Kolayca tanımlanabilen kondrüller	Ayırt edilmesi güç kondrüller
8.Matris yapısı	Tümü opak ve ince taneli	Matris daha çok opak	Opak matris	Saydam mikrokristalin matris	Yeniden kristallenmiş matris	
9.Yığın karbon (wt%)	$\%3\text{-}5$	$\%1,5\text{-}2$	$\%0,1\text{-}1$	$<\%0,2$		
10.Yığın su içeriği (wt%)	$\%18\text{-}22$	$\%3\text{-}11$	$<\%2$			

Tablo 1.2. Meteoritlerin sınıflandırılması (NASA Johnson Space Center, 2022).



CB (Bencubbin-benzeri), CH (ALH 85085-benzeri), CK (Karoonda), CM (Mighei), CR (Renazzo), CV (Vigarano), ve CO (Ornans), CI (Ivuna), CL (Loongana), CY (Yamato), C_{ung} (gruplandırılmamış) H (yüksek Fe), L (düşük Fe), LL (düşük Fe ve düşük metal), EH (enstatit kondritlerin yüksek Fe), EL (enstatit kondritlerin düşük Fe), opx (ortopiroksen) Tablo 1.2’de kullanılan kısaltmalardır. Kondritler, karbonlu (CB, CH, CK, CM, CR, CV, CO CI, CL, CY ve C_{ung}), sıradan (H, L ve LL), Rumuruti (R) ve enstatit (EH, EL) olmak üzere, genel olarak dört gruba ayrılmaktadır ve petrografik özelliklere göre sınıflandırma Tablo 1.3’te özetlenmiştir (Norton & Chitwood, 2008).

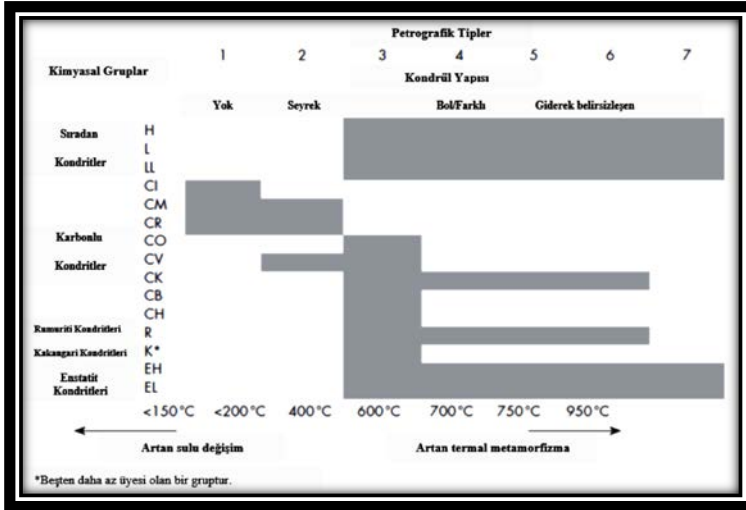
Tablo 1.3. Petrografik özelliklerine göre kondritlerin sınıflandırılması.

	Karbonlu								Sıradan			R	Enstatit	
Kriter	CI	CM	CO	CV	CK	CR	CH	CB	H	L	LL	R	EL	EH
Kondrül Boyutu (mm)	—	0,3	0,1 5	1,0	1,0	0,7	0,0 2	2- 10	0,3	0,7	0,9	0,4	0,6	0,2
Matris (%)	>9 9	70	34	40	40	30- 50	5	<1	10- 15	10- 15	10- 15	36	2-15	2- 15
Kondrül (%)	<1	20	48	45	45	50- 60	70	20- 40	60- 80	60- 80	60- 80	>4 0	60- 80	60- 80
CAI (%)	<1	5	13	10	10	0,5	0,1	<1	<1	<1	<1	0	<1	<1
Metal (%)	0	0,1	1-5	0-5	0-5	5-8	20	60- 80	8	4	2	0,1	10	10
Olivin (%)	<1	30	>50	>50	>50	40	6	?	39	48	58	50 - 75	<1	<1
Piroksen (%)	<1	az	az	az	az	10	60	?	28	24	16	0- 13	70	65

Not: Bu tablo Norton & Chitwood (2008)’den uyarlanmıştır. CL, CY ve C_{ung} (sınıflandırılmamış) grupları için veriler literatürde tam anlamıyla derlenmediği için burada yer verilmemiştir.

Şekil 1.3., meteoritlerdeki yedi farklı petrografik tipi göstermektedir. Bu tipler, tip 3’ten tip 7’ye doğru sıralanır ve sıcaklık arttıkça ısıya bağlı değişimlerde (termal metamorfizma) artar. Bu değişimlerin sıcaklığı 950°C’ye kadar çıkabilir. Tip 3 kondritler, içerdikleri minerallerin kimyasal olarak tam dengede olmaması nedeniyle dengesiz kabul edilir. Buna karşılık, tip 4 ile tip 7 arasındaki kondritler dengeli ve daha homojen yapılara sahiptir. Sıcaklığın daha düşük olduğu (yaklaşık 400°C’den

-20°C'ye kadar) bir aralıkta ise, su etkisiyle oluşan değişiklikler görülür. Bu değişim özellikle tip 1 ve tip 2 kondritlerde daha belirgindir. Su, kayalardaki çatlaklardan girerek orijinal minerallerle tepkimeye girer ve kil ve manyetit gibi su içeren yeni mineraller oluşturur. Tip 3, hem suyla olan bu değişimlerden hem de yüksek sıcaklık etkisinden en az etkilenen türdür; bu yüzden geçiş tipi olarak kabul edilir. Bazı karbonlu kondrit türleri (örneğin CI1, CM2 ve CR2) çok düşük sıcaklıklarda suyla yoğun şekilde tepkimeye girmiştir. Bu tepkimeler büyük olasılıkla meteoritlerin bağlı olduğu asteroidlerde gerçekleşmiştir (Norton & Chitwood, 2008).



Şekil 1.3. Kondritlerin sınıflandırılması (Norton & Chitwood, 2008).

Kondritlerin değerlendirilmesinde şok derecesi (S) ve hava maruziyeti (W) önemlidir. Hava maruziyeti derecesi meteoritin yeryüzünde geçirdiği zaman ile doğru orantılıdır (W0: hiç oksidasyon, W6: ileri düzeyde değişim) (Wlotzka, 1993). Şok derecesi ise düşme koşullarına bağlı olarak S1'den S6'ya kadar değişir; S6'da yüksek basınç ve erime görülür (Jinping, 2016). Kondritlerin birçoğu, yere çarpma anında

ve/veya atmosferik girişte yüksek basınç ve sıcaklık dalgalarına maruz kalır. Bu etkiler, meteoritin yapısında bozulma, çatlak ve eriyik damarlar oluşturur. Bunlar, Tablo 1.4'te detaylı olarak açıklanmış olup şok derecesi belirlenmesinde kullanılır (Norton & Chitwood, 2008).

Tablo 1.4. Petrografik tipleri tanımlama özellikleri (Norton & Chitwood, 2008).

Kriterler	Su Değişimi		Çok az değişim / Değişim yok		Termal Metamorfizma	
	Tip 1	Tip 2	Tip 3	Tip 4	Tip 5	Tip 6
Kondrüllerin Durumu	Kondrül yok	Keskin olarak tanımlanmış	—	İyi tanımlanmış	Kolayca tanımlanmış	Zayıfça tanımlanmış
Plajiyoklaz	Yok	—	—	Taneler 2 µm	Taneler 2-50 µm	Taneler >50 µm
Kondrüllerde cam	Yok	Çoğunlukla değiştirilmiş	Temiz cam	Bulanık	Kristal	—
Matris	Opak	—	—	Yarı saydamdan (tip 4) saydamlığa (tip 6) kadar sınıflar; tane büyüklüğü tip 4'ten tip 6'ya kadar iridir.		
Piroksen	Yok	Ağırlıklı olarak iğiz	—	Bir miktar klinopiroksen	—	Ortopiroksen

Meteoritler üzerine yapılan araştırmalar, yıldızların ve Güneş Sistemi'nin oluşumu, Dünya ve Ay'ın jeolojik tarihi ile yaşamın gelişimi hakkında önemli bilgiler sağlar. Özellikle karbonlu kondritler, Güneş Sistemi'nin en eski ve ilkel malzemeleri olarak büyük önem taşır. Bu meteoritler nadir bulunur (%0,04 oranında) ve karbon açısından zengin, kil mineralleri, oksitler ve organik maddeler içerir. Örneğin, Murchison meteoritinde günümüze kadar 96 çeşit aminoasit tespit edilmiştir (Koga & Naraoka, 2017). Karbonlu kondritlerde bulunan organik maddeler, hem çözünebilir (aminoasitler, karboksilik asitler gibi) hem de çözünmeyen (polisiklik aromatik hidrokarbonlar gibi) türlerde olabilmektedir. Bu organik maddelerin oluşumuyla ilgili iki temel teori vardır: biri organik maddenin Güneş bulutsusundan geldiğini ve meteorit içindeki değişikliklerin asteroitlerdeki işlemlerle oluştuğunu, diğeri ise organik maddenin Güneş bulutsusundaki heterojen yapıyı yansıttığını savunur (Starkey, Franchi, & Alexander, 2013). Karbonlu kondritlerin incelenmesi, erken gezegensel diskteki

süreçler ve Dünya'daki yaşamın kimyasal kökeni hakkında bilgi verir. Bu meteoritler ayrıca, termal ve metamorfik geçmişi anlamada yardımcı olan grafitik organik malzemeler içerir (Gasda, 2014). 1960'lerden beri yapılan çalışmalar, karbonlu kondritlerin astrobiyolojik açıdan çok değerli örnekler olduğunu göstermiştir. Örneğin, bazı araştırmalarda karbonlu kondritlerdeki organik bileşiklerin Dünya'daki deniz çökeltileri ile benzerlik taşıdığı, bazı minerallerin uzayda tarım için gerekli fosfat sağladığı ve belirli minerallerin yüksek sıcaklık ve basınçta oluşabildiği bulunmuştur (Meinschein, Nagy, & Hennessy, 1963; Mautner & Sinaj, 2002). Bazı karbonlu kondritlerde belirli sıcaklıklarda ve belli basınç koşullarında var olabilecek minerallerle karşılaşılması da mümkündür. Bunlardan bazıları, "kirschsteinite" ve "hedenbergit" mineralleridir (Ganino & Libourel, 2017).

2. KARBONLU METEORİTLERİN TÜRLERİ, ÖZELLİKLERİ VE ÖNEMİ

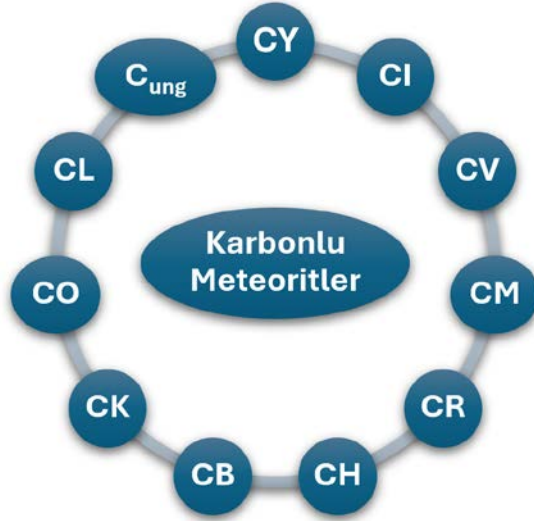
Taşsı meteorit olan karbonlu kondritler, kondrül içermekte olup, "karbonlu kondritler" olarak adlandırılırlar. Karbonlu kondritler, Güneş Sistemi'nin kökenini ve evrimini anlamak için önemli meteoritlerdir. Bu, Güneş Sistemi'ndeki en eski ve en ilkel kayaçlar arasında olmalarından kaynaklanır. Çeşitli mineralojileri, bulutsu tarihin farklı yönlerini kaydeden parçacıkları içerir. Ayrıca, Güneş Sistemi oluşumundan önceki yıldızlararası taneciklerin ev sahibidirler ve sonraki işlemlerden sağ çıkmış olabildikleri düşünülmektedir. Ayrıca, erken Güneş Sistemi'nde kısa ömürlü radyonüklitlerin varlığına dair kanıtlar da dahil olmak üzere geniş bir izotopik bileşim çeşitliliği gösterirler. Karbonlu kondritler, çeşitli ve belirgin mineralojilere sahip bir dizi alt grup içerir ve genellikle koyu bir görünüm veren ince dağılmış karbonlu malzemelerin varlığıyla

karakterize edilirler. Ancak bu kriter, element bolluğu ve oranları gibi diğer özelliklere dayanan sınıflandırma şemalarıyla yer değiştirmiştir. Kompozisyonlara bağlı bu kriterler, oksijen izotopik varyasyonları, mineralojik ve petrografik farklılıklar ve oksidasyon durumu gibi diğerleriyle tamamlanmaktadır (Cloutis, Hudon, Hiroi, Gaffey, & Mann, 2011).

Karbonlu kondritler, Güneş sisteminin oluşumundan bu yana nispeten değişmemiş asteroit parçalarıdır. Bu nedenle, bu ilkel nesneler erken Güneş sistemi ortamının ve Güneş sisteminin inşa edildiği malzemelere dair bir kayıt niteliği taşırlar. Bu kaydın önemli bir kısmı, yapı ve köken bakımından büyük ölçüde değişen karbon ve nitrojen taşıyan bileşenlerde korunmuştur. Bu bileşenler arasında organik madde, karbonat, elmas, silisyum karbür ve grafit bulunur. Nispeten bol miktarda bulunan organik maddenin yıldızlararası öncüllerden bir araya getirildiği ve daha sonra ana gövdenin sulu ve termal işlenmesi sırasında değiştirildiği düşünülmektedir. Karbonatın, meteorit ana gövdelerindeki sulu değişim sırasında çökelediği görülmektedir, ancak yıldız çevresindeki kabuklarda sulu olmayan reaksiyonlarla bir köken de olasıdır. Elmasların karbon yıldızlarından gelen yıldız çevresi yoğunlaşmaları olduğu düşünülürken, silisyum karbürün (SiC) çoğunlukla kırmızı dev yıldızlardan kaynaklandığı düşünülmektedir. Geniş grafit tabakaları, meteorit ana gövdelerindeki organik maddenin termal metamorfizmasından kaynaklanabilirken, grafit taneciklerinin novalar, kırmızı devler ve Wolf-Rayet yıldızları gibi birkaç yıldız kaynağı olabilir (Sephton, Verchovsky, Bland, Gilmour, Grady, & Wright, 2002).

Karbon, Güneş Sistemi'nde en temel ve bol miktarda bulunan elementlerden biridir. Bununla birlikte, karbonlu kondritlerin de temel bileşenlerindendir (Varela & Métrich, 2000). Örneğin, Antarktika'da bulunan ve buz üzerinden toplanan taşsı meteorit örnekleri, radyoaktif yaş tayini amacıyla

kullanılmıştır. Analiz sonucunda, 0,1 milyar yıldan daha az bir belirsizlik ile 4,54 milyar yıllık bir geçmişleri oldukları belirlenmiştir. Bulunan bu değer, Güneş Sistemimizin yaşına dair kuvvetli ipuçları vermektedir (Fraknoi, Morrison, & Wolff, 2000). Karbonlu meteoritler (Tablo 1.2.) on bir kimyasal gruba ayrılır (Şekil 2.1). Bununla birlikte, petrografik sınıflama olarak tip 1 ve tip 7 arasında değişen alt gruplara sahiptirler. Burada C karbonlu sınıfı ifade ederken, diğer harflerin her biri ise benzer özelliğe sahip olduğu meteoritlerin baş harflerini göstermektedir.



Şekil 2.1. Karbonlu meteorit türleri.

Karbonlu kondritlerin çeşitli sınıfları, uçucu elementlerin (örneğin karbon, nitrojen ve soy gazlar) bolluğu bakımından sistematik olarak birbirlerinden farklıdır. Bu farklılıklar en çok sayıda ve en iyi çalışılmış olan CV, CO, CM ve CI tipleri için en iyi şekilde tanımlanır. Bunlardan CV ve CO tipleri uçucu maddeler bakımından fakirdir, CI tipi uçucu maddeler bakımından zengindir. CM tipi ise bir dizi ara uçucu bolluğu kapsar. Benzer şekilde, bu gruplar arasında sistematik dokusal farklılıklar vardır: CO ve CV kondritleri, kondrüller, CAI

(Kalsiyum-Alüminyum kapanımı) yapıları ve ince taneli matris Si'leri dahil olmak üzere susuz Si'ler bakımından zengindir. CM kondritleri de bu bileşenleri içerir ancak sulu sıvı ile önceden var olan susuz mineraller arasındaki reaksiyonla üretilen sulu Si'ler (çoğunlukla serpantinler) bakımından zengindir. CI kondritleri sulu mineraller tarafından domine edilir ve CAI yapılarının ve kondrüllerin belirgin kalıntılarından yoksundur. Bu gözlemlerin makul bir açıklaması tüm karbonlu kondrit tiplerinin CO ve CV kondritleri gibi nispeten uçucu-zayıf susuz Si koleksiyonları olarak birikmiş olması ve bu susuz bileşenlerin sulu değişimle susuz Si'lere ve kısmen CM kondritleri durumunda ve tamamen CI kondritleri durumunda diğer fazlara dönüştürülmüş olmasıdır (Eiler & Kitchen, 2002).

Karbonlu kondritlerin CI, CM, CO, CV, CR, CH ve CK olarak alt bölümlere ayrılması esas olarak refrakter ve uçucu element konsantrasyonlarına dayanır. Refrakter litofil elementler için CV/CI 1,33'tür, oysa CO/CI ve CM/CI için bu oran 1,11'dir. CM, Zn/Mn oranları gibi uçucu element fraksiyonlarına göre CO'dan ayırt edilebilir. CK kondritleri, CV ve CO arasında refrakter element bolluğuna ve CV'ye benzer uçucu element bolluğuna sahip metamorfozlu kayalardır. CR kondritleri, CI seviyelerinde refrakter litofil elementlere sahiptir ve büyük kenarlı kondrülleri ve bol miktarda Fe-Ni metali barındırması ile dikkat çekicidirler. CH kondritleri, bol miktarda metal ve uçucu element içermeleri bakımından CR kondritlerine kimyasal olarak benzerler, ancak çok daha küçük kondrüllere sahip olmaları bakımından farklılık gösterirler (Clayton & Mayeda, 1998).

CI kondritleri, Güneş Sistemi'nin kimyasal olarak en az değişime uğramış örnekleridir ve elementlerin kozmik bolluklarının temelini oluşturur. CI ve CM kondritleri, zengin organik molekül içeriğiyle abiyotik sentez için önemli ipuçları sunar; izotop bolluğu değişimleri ise güneş bulutsusunda düşük

sıcaklıkta gerçekleşen iyon-molekül tepkimelerini yansıtır. CM karbonlu kondritleri, esas olarak kil, oksit ve sülfürlerden oluşan C açısından zengin bir matristen oluşan eski meteoritlerdir. Güneş sisteminin ve belki de güneş öncesi moleküler bulutun erken evrelerini kaydederler (Garvie & Buseck, 2004).

Ek olarak, Acfer 094, Lewis Cliff (LEW) 85332 vb. gibi önemli ve dikkat çekici meteorit örneklerinin kategorize edilmesi daha zor olduğundan “gruplandırılmamış” (Cung) olarak adlandırılırlar. Bu gruplandırılmamış kondritler, asteroit kuşağında bulunan malzeme çeşitliliğine ilişkin anlayışımızı genişletmeleri ve erken Güneş Sistemi’nde hüküm süren koşullara ilişkin ek bilgiler sağlamaları açısından oldukça önemlidirler. Örneğin Yamato (Y)-82094 kondriti, diğer potansiyel olarak ilişkili kondritlerden ayıran birçok özelliğe sahip olan benzer bir karbonlu kondrit örneğidir. Bu benzerlikler arasında (1) kondrüllerin oldukça bol miktarda olması (hacimce %78), (2) kondrül boyut dağılımının CV ve CO arasında olması ve (3) matris bolluğunun düşük olması (hacimce %14) ve sıradan (O) kondritlere benzemesi yer alır. Ancak, refrakter kapanımların bolluğu ile toplu oksijen izotopik ve kimyasal bileşimi C kondritlerinin tipik özellikleridir. Kondrüllerin oksijen izotopik bileşimi, diğer C kondritlerinin içerdiği kondrüllere benzer bir dağılım eğilimi göstermektedir. Bu nedenle, Y-82094 kondriti gruplandırılmamış bir C kondrit örneği olarak sınıflandırılmıştır (Garenne et al., 2019).

Son zamanlarda, King ve ark. (2019) henüz tam olarak gruplandırılmamış olan Yamato (CY) karbonlu kondrit grubunu tanımlamışlardır. CI grubu CY grubundan özellikle farklıdır çünkü bu grubun üyeleri tanımlanabilir kondrül içermez ve hacim kimyaları Güneş fotosferinin ağır element bileşeniyle yakından uyuşur. Her kondrit grubunun tek bir ana gövdeyi (veya birkaç ilişkili ana gövdeyi) temsil ettiği düşünülmektedir. Bu nedenle, yeni kondrit gruplarının tanımlanması, erken Güneş Sisteminde

oluşan gezegenciklerin çeşitliliğini ve bu çeşitliliğe yol açan süreçleri anlamak için önemlidir (Metzler et al., 2021).

Gruplandırılmış karbonlu kondrit gruplarına ek olarak, bu gruplardan birine atanamayan gruplandırılmamış karbonlu kondritler de vardır. Bunlara örnek olarak Tagish Lake, Tarda, Essebi ve Bells (C2-gruplanmamış) ve Ningqiang (C3-gruplanmamış) meteoritleri verilebilir. Benzer özelliklere dayanarak, bazı gruplandırılmamış kondritler, Coolidge ve Loongana 001 durumunda olduğu gibi, 5'ten az bireysel üyeden oluşan gruplarla birleştirilebilir. Coolidge, başlangıçta CV4 kondrit olarak sınıflandırılan bir meteorittir. Ancak, McSween (1977) bunun indirgenmiş bir CV kondritinin basitçe metamorfoza uğramış bir örneği olamayacağı sonucuna varmıştır. Buna karşılık, Coolidge'in bir CV kondritini temsil ettiğini, “muhtemelen açık sistem metamorfik yeniden ısıtmaya maruz kaldığını” ifade etmişlerdir. Ancak, Kallemeyn ve Wasson (1981) daha sonra, uçucu elementlerin hızlıca tükenmesinin daha çok bulutsu süreçlerini yansıttığını ve bu nedenle bu meteoritin bir CV kondrit olmayabileceğini ileri sürmüştür. Dahası, Noguchi (1994), indirgenmiş Efremovka CV kondriti ile karşılaştırıldığında, Coolidge'deki kondrüllerin ve matrisin sistematik olarak Na'da tükendiğini, bunun da bir metamorfik süreçten ziyade bulutsu bir sürece işaret ettiğini bulmuştur. Son olarak, petrografik gözlemlere ve uçucu elementlerin envanterlerindeki karakteristik farklılıklara dayanarak, Kallemeyn ve Rubin (1995), Coolidge'in açıkça CV grubu, yeni keşfedilen Loongana 001 meteoriti ile yeni bir karbonlu kondrit grubunu tanımlamaktadır (Metzler et al., 2021).

Karbonlu kondritler, Güneş Sisteminin oluşumundan kalan en ilkel malzemeler olarak kabul edildiğinden, diğer meteorit türlerine göre karbonlu meteoritlerin araştırılması, Dünya ve erken Güneş Sisteminin anlaşılması açısından daha

fazla öneme sahiptir (Stokke, 2018). Özellikle CAI yapıları açısından zengin olan Vigarano meteoriti, 22 Ocak 1910 tarihinde İtalya, Ferrara yakınlarında düşen (CV3) karbonlu bir kondrittir. Burada C karbonlu sınıfı, V Vigarano grubunu ve 3 petrografik tipi ifade etmektedir. Vigarano, The Meteoritical Society'ye göre, çoğu magmatik rimler, büyük refrakter (sıcaklığa dayanıklı) kapanımlar ve bol miktarda matris (hacimce %40) ile çevrili büyük (mm boyutlu) kondrüller ile ayırt edilen CV grubu meteoritleri için tipik bir örnektir. Bu gruba örnek olarak, NWA 5508 meteoriti verilebilir. NWA 5508 meteoriti, bir CV3 kondritidir ve bol miktarda CAI yapıları içerdiği için önemli, spesifik ve ilgi çekici bir örnektir. CV3 kondritik meteoritleri, refrakter kapanımların varlığı nedeniyle oldukça önemlidirler. Metamorfik derecenin doğru bir şekilde değerlendirilmesi, bu cisimlerin ilkeliği ve CAI yapılarının sahip olduğu özellikler hakkında bilgiler sağlar (Bonal, Quirico, & Bourot-Denise, 2004).

CAI yapıları, erken Güneş Sistemi'nde gerçekleşen olaylara ışık tutmakta olup bu olayların meydana geldiği zaman ve çevresel koşullar hakkında bilgi sağlar. Çoğu CAI yapısının boyutu 1 mm'den daha küçüktür. En büyük CAI yapıların boyutu ise 2-3 cm'ye kadar varabilir ve bunlar yalnızca bir karbonlu kondrit tipinde (CV3) meydana gelir. Bu yapılar ilk olarak 1968 yılında Vigarano meteoritinde tanımlanmıştır (Christophe Michel-Lévy, 1968) ancak ilk kez 1969 yılında düşen Allende meteoritinden elde edilmiştir (MacPherson, Simon, Davis, Grossman, & Krot, 2005). CAI yapıları, melilit ($\text{Ca}_2(\text{Al,Mg,Fe})((\text{Al,Si,B})\text{SiO}_7)$), spinel (MgAl_2O_4) ve anortit ($\text{Ca}(\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8)$) gibi yüksek sıcaklığa dayanıklı oksitlerden ve Si'lerden oluşan karmaşık bir mineralojiye sahiptir (Norton & Chitwood, 2008).

CV3 kondritlerinde, kondrüllerde, CAI yapılarında ve matris yapısında geniş yelpazede mineralojik ve kimyasal

özellikler göze çarpmaktadır. Birçok CV3 kondriti, yoğun sulu değişime uğramıştır (Krot, Scott, & Zolensky, 1995). CV3 kondritleri, çeşitli derecelerde sulu değişiklik ve/veya termal metamorfizma gösterir ve bu durum CV3 kondritlerinin mineralojik ve petrografik olarak karmaşık yapıya sahip olduklarına işarettir. Allende (CV3) meteoriti 1969 yılında Meksika'ya düştüğünden beri kondritler, meteorit çalışmalarında önemli bir rol oynamıştır. CV3 grubu meteoritler literatürde ilk kez 1969 yılında Van Schmus tarafından tanımlanmıştır (Van Schmus, 1969; Krot et al., 1995). CV3 kondritleri, mineralojik ve kimyasal açıdan karmaşık bir yapıya sahiptir ve farklı derecelerde sulu değişim ile termal metamorfizmaya uğramışlardır. Bu gruptaki meteoritler, indirgenmiş (reduced-red) ve oksitlenmiş (oxidized-ox) alt gruplara ayrılır. Vigarano alt grubu da petrografik olarak karmaşıktır ve metal, manyetit ve sülfür minerallerindeki farklılıklarla tanımlanır (McSween, 1977; Krot et al., 1995; Bonal, Quirico, Bourot-Denise, & Montagnac, 2006).

Termal metamorfizma, kondritlerde farklı düzeylerde değişimlere neden olur ve CV3 kondritleri bu açıdan iyi incelenmiştir. Allende meteoritinin analizleri, en düşük 325°C olmak üzere 600°C'ye kadar uzanan bir sıcaklık aralığı sağlamıştır. Ayrıca Raman spektroskopisi ile karbonlu kondritlerde, organik maddenin yapısal düzeni (karbon bantlarının şiddeti, genişliği ve yoğunluğu) ve metamorfizma derecesi gibi özellikler incelenerek termal geçmiş hakkında bilgiler elde edilmektedir. Yapılan mikro-Raman çalışmaları çözünmeyen organik maddenin moleküler yapısının petrografik tip ile bir korelasyon içinde olduğunu göstermiştir (Cody et al., 2008).

CV kondritlerinin alt gruplarının kondrül boyut dağılımı, matris bollukları ve metamorfik geçmiş karşılaştırmaları, indirgenmiş (CVred) ve oksitlenmiş (CVox) bu alt grupların

farklı kaynak gövdelerden kaynaklandığını göstermektedir. Öte yandan, oksitlenmiş alt gruba ait olan Allende-benzeri (CVoxA) ve Bali-benzeri (CVoxB) CV kondritlerinin kaynağının muhtemelen aynı kaynak gövde olduğu iddia edilmektedir (Bonal, Gattacceca, Garenne, Eschrig, & Rochette, 2020). Termal metamorfizma çoğu kondritik meteoritleri bir dereceye kadar etkilemiştir. Sıradan kondritlerin birçoğunda, bazı karbonlu kondritlerde ve birçok enstatit kondritinde meteoritlerin birincil özelliklerini önemli ölçüde değiştirmiştir. Termal metamorfizma esnasında, kondritlerin dokularında birçok değişiklikler oluşur ve CV3 kondritlerin alt grupları, bu değişikliklerden farklı düzeylerde etkilenir. Buna karşın, diğer karbonlu kondritlerin ne tür bir termal metamorfizma süreci yaşadığına dair çok az kanıt vardır ve bu nedenle, karbonlu kondritlerin termal geçmişleri hakkında daha fazla bilgiye sahip olabilmek için karbonlu meteoritler üzerine çalışmalar yapılması önem arz eder (Huss, Rubin, & Grossman, 2006).

Termal değişim esnasında, birincil (kondritik bileşenlerin oluştuğu ilk dönem) ve ikincil (sulu alterasyon, termal ve şok metamorfizması gibi) süreçler söz konusu olup, bu süreçlerde farklı minerallerin oluşumları da mümkündür. Bu süreçlerde oluşan farklı mineraller Raman spektroskopi tekniği ile ortaya çıkarılabilir. Poliaromatik karbon yapısı içeren bir meteoritin yapısı Raman spektroskopi yöntemiyle birçok karbonlu meteorit için incelenmiş ve özellikle spektrumda gözlenen karbon sinyallerinden yararlanılarak incelenen meteoritlerin termal geçmişleri hakkında bulgulara ulaşılabilmektedir (Bonal, Quirico, Flandinet, & Montagnac, 2016).

3. KARBONLU METEORİTLERİN İNCELENMESİNDE KULLANILAN ANALİTİK TEKNİKLER

Meteoritlerin sınıflandırılması için öncelikle petrografik özellikleri (doku, minerallerin türü, miktarı ve kondrüllerin yapısı) ile kimyasal bileşimlerinin analiz edilmesi gerekir. Demirli ve taşsı-demirli meteoritler genellikle fiziksel incelemeyle tanımlanabilirken, karbonlu meteoritlerin detaylı sınıflandırılması için spektroskopik, mikroskopik ve kimyasal analizler katkı sağlamaktadır. Bu analizler arasında başlıca (Taramalı elektron mikroskopi (SEM) - Enerji dispersif X-ışını spektroskopisi (EDS), optik mikroskopi, Raman ve Kırmızı-altı (IR) spektroskopisi) teknikler yer almaktadır. Ayrıca, kondritlerin sınıflandırılması için ait oldukları kimyasal grubun belirlenmesi de gereklidir (Kim & Yang, 1998; Paul, 2018; Stokke, 2018; Dall'Asén et al., 2019; LeBleu-DeBartola, 2019; Skulteti & Kereszturi, 2019). Özellikle optik mikroskopiyle yapılan petrografik incelemeler ise karbonlu meteoritlerin kimyasal gruplarını ve alt sınıflarını belirlemeye yardımcı olur (Stokke, 2018).

3.1. Taramalı Elektron Mikroskopi (SEM) – Enerji Dispersif X-ışını Spektroskopisi (EDS)

Karbonlu meteoritlerin yüzey yapıları ve element analizlerinde sıkça kullanılan taramalı elektron mikroskobu (SEM), alan emisyonlu elektron tabancasından çıkan elektronların örnek yüzeyine gönderilmesiyle oluşan etkileşimleri inceleyen bir yöntemdir. SEM’de, elektron demeti örnek yüzeyi ile etkileşime girerek sinyaller üretir; bu sinyaller toplanıp analiz edilerek yüzeyin görüntüsü oluşturulur. SEM cihazına entegre edilen enerji dispersif X-ışını spektroskopisi (EDS) tekniği sayesinde, incelenen bölgede bulunan elementlerin haritası çıkarılır ve bu elementlerin varlığına göre

mineraller tespit edilebilir. EDS, elektron bombardımanı sonucunda yayılan X-ışınlarını kullanarak, yaklaşık 1 mikrometre büyüklüğündeki yüzey bölgelerinin yarı kantitatif element analizini sağlar. SEM, malzemenin yüzey yapısını ve mikro ile nano ölçekli detaylarını görüntülemek için kullanılır. Ancak SEM analizi için numunenin elektrik iletken olması gerekir; iletken olmayan örnekler, altın, platinyum, karbon veya paladyum gibi iletken kaplamalarla hazırlanır. SEM-EDS ile hem nokta ve çizgi analizleri hem de element haritalaması yapılabilir ve elementlerin oranları yüzde olarak belirlenebilir. SEM’de farklı dedektörler farklı yapıların görüntülenmesini sağlar. Örneğin, ikincil elektronlar (SE) numune yüzeyinden yansıyan veya kopan elektronlardır ve yüzeyin morfolojik özellikleri hakkında bilgi verir. Bu elektronlar, yüzeyden yaklaşık 10 nanometre derinliğe kadar olan bölgeyi analiz eder. (Ul-Hamid, 2018).

Geri saçılan elektronlar Backscattered Electron (BSE), olarak adlandırılır. BSE dedektörü ile farklı atom numarasına sahip olan elementlerin farklı enerji ile saçtığı elektronların yoğunluğu ölçülmektedir. Böylece, elde edilen görüntüde bir kontrast farkı oluşur. Örneğin, atom numarası yüksek olan bir element daha parlak (beyaz) görünürken, atom numarası düşük olan element daha koyu (gri ve/veya siyah) renkte görünmektedir. BSE dedektörü ile numune yüzeyinden 450 nm’ye kadar olan derinliğe inilebilmektedir.

SEM-EDS tekniği ile meteoritlerin hem kimyasal hem de fiziksel olarak özellikleri belirlenebilir. Meteoritlerin içeriğindeki mineraller tanımlanabilir. Meteoritlerin kaynak gövdelerine ilişkin termal metamorfizma geçmişleri ve değişimleri hakkında bilgi sahibi olunabilir. Bu özelliklerin belirlenmesiyle ortaya çıkan yapılar ve sonuçlar incelenerek meteoritler sınıflandırılabilir (Morlok, Köhler, & Grady, 2008;

Dirri et al., 2018; Dall'Asén et al., 2019; Kayastha, Paul, & Stokke, 2019).

3.2. Optik Mikroskop

Optik mikroskopi ya da ışık mikroskopisi olarak adlandırılan analiz tekniği, küçük nesneleri büyötmek için merceklerden oluşan bir sistem ile görünür ışığı kullanan bir mikroskop türüdür. Optik mikroskop ile malzemelerin mikro yapısı incelenmektedir. En yaygın kullanılan ve en basit yapıya sahip olan mikroskop çeşididir. Meteoritlerin incelenmesinde de sıklıkla kullanılmaktadır. Optik mikroskopta kullanılan polarize ışık, ışığı oluşturan dalgaların tümünün aynı yönde düzenlendiği ışık akışı türüdür. Petrografik inceleme sırasında polarize ışık kullanılmaktadır. Petrografik çalışma, ince kesit olarak hazırlanan numuneye alttan ışık verilerek, numunedeki mineralin türü, yapısı, dokusu, sınırları, boyutu yani numunenin mineralojisi hakkında birçok bilgi veren analiz tekniğidir (Tosi et al., 2021).

3.3. Raman Spektroskopisi

Karbonlu meteoritlerin mineralojik analizinde sıkça kullanılan yöntemlerden biri de Raman spektroskopisidir. 1928 yılında Sir Chandrasekhara Venkata Raman, ışığın bir molekülle etkileşime girdiğinde gönderilen dalgaboyuna göre, saçılan dalga boylarında değişiklikler olduğunu keşfetmiştir; bu olaya “Raman saçılması” denir. Raman spektroskopisi, ışığın saçılma prensibine dayanır ve infrared spektroskopisinde görölmeyen bazı titreşim modlarını tespit edebilir. Bu açıdan Raman ve infrared teknikleri birbirini tamamlayıcı niteliktedir. Raman spektroskopisinde, numuneye gönderilen ışığın dalga boyundaki değişim, yani “Raman kayması” ölçölerek numunedeki mineraller belirlenir.

Raman spektrometreleri üç ana parçadan oluşur: lazer kaynağı, numune aydınlatma sistemi ve spektrometre. Konfokal

Raman spektrometresi, konfokal mikroskop ile hassas Raman spektrometrenin birleşimidir. Konfokal mikro-Raman spektroskopisi (KRS), mineralojik ve petrografik çalışmalarda optik mikroskop, kimyasal analiz ve diğer spektroskopik yöntemleri destekler ve tamamlar. KRS sayesinde minerallerin Raman spektrumları ve hızlı Raman görüntüleri elde edilebilir, ayrıca spektrum haritaları oluşturulabilir. KRS uygulamaları nokta analizi, çizgi boyu analizi, haritalama ve şiddet analizi olarak sıralanabilir. Nokta analizinde numunenin tek bir noktasından Raman spektrumu alınır ve genellikle mineral tanımlamada kullanılır. Çizgi boyu analizinde ise numune üzerinde bir çizgi boyunca belirli aralıklarla spektrumlar alınarak zonlanma ve bileşimsel farklılıklar incelenir. Haritalama ve şiddet analizinde ise numunenin bileşimsel değişimleri ve geçiş bölgeleri detaylı şekilde ortaya konur. Raman spektroskopisi, meteoritler ve asteroitler gibi dünya dışı malzemelerin karakterizasyonu ve bu malzemelerin içeriğinde var olan minerallerin tanımlanmasında sıklıkla kullanılan bir analiz tekniğidir (Dall'Asén et al., 2019; Kayastha et al., 2019). Ek olarak, meteoritlerin geldiği düşünülen kaynak gövdeleri ve bu gövdelerin geçirdiği termal süreçler ile değişimleri anlamak için Raman spektroskopi tekniği yine önemli bir rol oynamaktadır (Wang, Jollif, Haskin, Kuebler, & Viskupic, 2001; Dirri et al., 2018).

3.4. Kırmızı-altı (IR) Spektroskopisi

Karbonlu meteoritlerin mineralojik ve moleküler analizinde kırmızı-altı (IR) spektroskopisi yaygın olarak kullanılır. IR spektroskopisi, moleküllerin IR ışıınımını soğurması sonucu ortaya çıkan titreşimsel modları inceler. Moleküle özgü titreşimlerin gözlemlenebilmesi için bir molekülün en yüksek katlı simetri eksenı boyunca değişen bir dipol momenti olması gereklidir. Fourier Dönüşüm Kırmızı-altı Spektroskopisi (FTIR), katı, sıvı ve toz haldeki malzemelerin

kimyasal yapısını belirlemede kullanılan etkili bir yöntemdir. FTIR spektrumlarında 4000-1550 cm^{-1} arası grup frekansları, fonksiyonel grupların tanınmasını sağlar; 1550-650 cm^{-1} arası ise parmak izi bölgesi olup, molekül yapısındaki küçük farklılıklar burada belirginleşir. Bu bölge sayesinde bilinmeyen maddeler standart spektrumlarla karşılaştırılarak tanımlanabilir.

FTIR cihazı, IR ışınımını interferometre aracılığıyla ayırarak interferogram üretir ve bu sinyal bilgisayar destekli Fourier dönüşümü ile frekans spektrumuna dönüştürülür. IR bölgesi, uzak, orta ve yakın IR olmak üzere üç alt bölgeye ayrılır. IR ışınımı, moleküllerdeki kimyasal bağların titreşimlerini uyarır ve bu bağların karakteristik frekanslarda ışınımı soğurması temel alınarak bileşikler tanımlanır. Ayrıca, IR spektroskopisinde yansıma teknikleri de kullanılır; bunlar içten ve dıştan yansıma olarak ikiye ayrılır. İçten yansıma, numune ile daha yüksek kırılma indeksli ortam arasındaki etkileşimi, dıştan yansıma ise numune yüzeyinden yansıyan ışınımı inceler. Dıştan yansımada düzenli (ayna benzeri) ve dağınık (pürüzlü yüzey) yansımalar söz konusudur. Yansıma spektrumları, Kramers-Kronig dönüşümüyle soğurma spektrumuna dönüştürülerek daha ayrıntılı analiz yapılabilir. Böylece, meteoritlerin olası kaynak gövdeleri ile ilişkileri kurulabilir ve bu gövdelerin termal geçmişleri ve değişimleri hakkında önemli veriler elde edilebilir (Perkins, 1986; Smith, 2011; Khoshhesab, 2012; Kereszturi, Gyollai, & Szabó, 2015; Thomas, Thomas, Zachariah, & Mishra, 2017; Jaggi & Vij, 2021).

4. UZAY GÖREVLERİ AÇISINDAN KARBONLU METEORİTLER VE ÖNEMİ

Karbonlu meteoritlerin ana gövdeleri olduğu düşünülen karbonlu asteroitler, Güneş Sistemi'nin en ilkel ve en az

değişime uğramış cisimleri arasında yer alır. Bu cisimler, 4,6 milyar yıl öncesinin koşullarını dolaylı olarak inceleme fırsatı sunarlar ve Dünya'nın erken dönem tarihine ışık tutmaları ve yaşamın olası yapı taşlarını içermeleri nedeniyle bilim insanları için büyük önem taşır. Bu asteroitler, amino asitler gibi yaşamın yapı taşlarını oluşturan organik moleküller ile su içerebilir. Dünya'daki suyun ve organik bileşiklerin bir kısmının bu tür gök cisimlerinden geldiği düşünülmektedir. Ayrıca gezegen oluşumlarını ve kimyasal çeşitliliği anlamamıza yardımcı olurlar (Cronin & Pizzarello, 1997; Morbidelli et al., 2000; Alexander et al., 2012; Pizzarello & Shock, 2017).

2016 yılında fırlatılan OSIRIS-REx uzay aracı, Aralık 2018'de Dünya'ya yakın asteroit olan 101955 Bennu'ya ulaşmıştır. Görevin amacı, Bennu'dan örnek alıp Dünya'ya getirerek asteroitin bileşimini incelemek olup, 2020 yılında alınan örneklerin 2023 yılında Dünya'ya ulaşmasıyla, asteroitten getirilen örneklerde bol miktarda karbon içeren maddeler ve suya işaret eden bileşenler tespit edilmiştir. Bennu, yaklaşık maksimum 500 m çapında bir asteroittir ve şimdiye kadar bir uzay aracının yörüngesine girdiği en küçük gök cismi olma özelliğini taşımaktadır. Düşük bir kütle yoğunluğu olan 1,19 g/cm³ ve yüzeyinde belirgin eğim ya da büyük topoğrafik yapılar bulunmaması, Bennu'nun moloz yığını (rubble-pile) yapısında bir asteroit olduğunu göstermektedir. Bennu'nun karmaşık ve heterojen yüzeyinde, yüksek çözünürlüklü görüntüler koyu, düşük albedolu ve muhtemelen daha zayıf litolojili bölgeler ile, nispeten daha parlak, yüksek albedolu ve daha sağlam litolojili alanların varlığını ortaya koymuştur (Ciceri, 2023). Yüzeydeki bu koyu ve parlak kayaların kırılmasına termal gerilmeler, büyük çaplı çarpma olayları, mikrometeorit etkileri ve güneş rüzgarı iyonlarının implantasyonu gibi çeşitli süreçlerin neden olduğu düşünülmektedir. OSIRIS-REx üzerindeki OVIRS cihazı,

hidratlı mineraller için tipik olan 2,7 μm 'ye yakın kırmızı-altı soğurma özelliği ve hidratlı CM kondritlerinki ile eşleşen termal kırmızı-altı spektral özellikler tespit etmiştir. OSIRIS-REx görevi sırasında, Bennu'dan 0,05 ile 3 m/s arasında hızlarla fırlatılan, çapları 1 cm'den 10 cm'ye kadar değişen parçacıklar da tespit edilmiştir. Bu parçacıkların fırlatılma nedenleri arasında termal kırılma, fillosilikat minerallerinin su kaybı sonucu uçucu madde salınımı ve meteor çarpmaları gibi mekanizmalar gösterilmiştir. Bennu'dan toplanan örnekleri içeren dönüş kapsülü ise 24 Eylül 2023 tarihinde Utah Çölü'ne inmiş ve yetkililerce alınmıştır (Ciceri, 2023).

2014 yılında fırlatılan Hayabusa2 görevi, Haziran 2018'de asteroit Ryugu'ya ulaşmıştır. Görevin amacı, asteroitten yüzey ve yer altı örnekleri toplayarak Dünya'ya getirmek olup Ryugu'dan getirilen örneklerde su içeren mineraller ve organik bileşikler tespit edilmiştir. Bu da yaşamın yapı taşlarının uzaydan Dünya'ya taşınabileceği hipotezini destekler niteliktedir. Ryugu asteroidi, Bennu ile aynı olan yaklaşık 1,19 g/cm³'lük oldukça düşük bir kütle yoğunluğuna sahiptir (Van den Neucker et al., 2023). Yaklaşık 1 km çapında olan Ryugu, moloz yığınının oluştuğu bir yapıya sahiptir. Bennu'da tespit edilen OH içeren mineraller, ilkel CI ve CM kondritlerinde bulunan Mg açısından zengin fillosilikatlar olan serpantin ve saponit gibi minerallerin Mg-OH özelliklerine benzemektedir. Geri getirilen örneklerin incelenmesiyle, Ryugu'nun bileşiminin karbonlu kondrit meteoritlere, özellikle CI tipi gruba oldukça benzediği, ancak daha ilkel ve Güneş'in fotosferine çok yakın bir bileşim sergilediği doğrulanmıştır. Numunelerin çoğunlukla, kaynak gezegenlerde sulu ortamlarda oluşan minerallerden oluştuğu da belirtilmiştir. Ayrıca, numunelerin çoğunda düzensiz şekilli iç çatlaklar gözlemlenmiştir. Numunelerin kütle yoğunluğunun ise 1,7 ile 1,9 g/cm³ arasında değiştiği bildirilmiştir. Bu değerler, Ryugu'nun genel kütle

yoğunluğundan daha yüksek olup, asteroitte önemli oranda klastlar arası gözenekliliğin varlığına işaret etmektedir (Ciceri, 2023). Asteroit üzerinde yapılan mikro-kırmızıaltı ve mikro-Raman spektroskopi ölçümleri, mineralojik ve kimyasal bileşim belirlemeye olanak sağlamaktadır. Bu analizlerde, numunelerde fillosilikatlar gibi ikincil minerallerin bolca bulunduğu, Raman spektroskopisi ile dolomit varlığının da tespit edildiği görülmüştür. Karbonat minerallerin varlığı, Ryugu'nun kaynak gövdesinde gerçekleşen sulu değişim süreçlerini anlamak için önemlidir; çünkü karbonatlar, asteroit içinde sıvı suyun varlığının kanıtıdır. Bu sıvı suyun, Dünya ve diğer gezegenlere su dağıtımında potansiyel bir rol oynayabileceği de vurgulanmaktadır. Sulu değişim yoluyla oluşan hidratlı minerallerin incelenmesi, Ryugu'nun ve erken gezegenimsi diskin evriminin daha iyi anlaşılmasına katkı sağlamaktadır (Van den Neucker et al., 2023).

Ryugu ve Bennu asteroitlerinin özelliklerini karşılaştırmalı olarak özetleyen bir tablo, Tablo 4.1'de verilmiştir.

Tablo 4.1. Ryugu ve Bennu asteroitlerinin özellikleri (Ciceri, 2023; Van den Neucker et al., 2023).

Özellik	Ryugu	Bennu
Görev	Hayabusa2 (JAXA)	OSIRIS-REx (NASA)
Göreve Başlama	2014 (fırlatma) / 2018 (ulaşma)	2016 (fırlatma) / 2018 (ulaşma)
Numune Dönüş Tarihi	2020 sonu	24 Eylül 2023
Çap	Yaklaşık 1000 m	Yaklaşık 500 m
Yoğunluk	~1,19 g/cm ³	~1,19 g/cm ³
Yapı	Moloz yığını asteroit	Moloz yığını asteroit
Yüzey Özellikleri	Heterojen, çatlaklı, iç gözeneklilik yüksek	Heterojen, koyu ve açık litolojiler, yüzeyde farklı parlaklık
Litoloji ve Renk	OH içeren mineraller (serpantin, saponit), karbonat mineralleri	Koyu ve açık renkli litolojiler, termal kırılma etkileri
Örneklerde Tespit Edilenler	Serpantin, saponit, pentlandit, manyetit, dolomit, karbonatlar	OH içeren mineraller, hidratlı CM kondritlerine benzer bileşikler
Kütle Yoğunluğu (örnek)	1,7 - 1,9 g/cm ³ (örneklerde)	—
Spektral Özellik	CI tipi kondritlerle benzer, Güneş'in fotosferine yakın bileşim	CM tipi kondritlerle benzer, hidratlı mineraller (2,7 µm IR soğurma)
Organik İçerik	Organik bileşikler, karbonatlar	Karbon içeren maddeler, suya işaret eden bileşikler
Mineraller	Olivin, piroksen, karbonatlar, CAI (nadir)	Serpantin, saponit gibi OH mineralleri
Bilimsel Önemi	CI tipi kondritlerle benzer, çok ilkel yapı, Güneş Sistemi'nin izleri	CM tipi kondritlerle benzer, Dünya'ya su ve organik madde taşıma potansiyeli

Ryugu asteroidi üzerinde yapılan arařtırmalar, bu asteroidin CI tipi kondritlerle iliřkili olabileceđini g stermektedir (Van den Neucker et al., 2023; Zolensky, 2023).  te yandan, Bennu asteroidinin CM tipi kondritlerle bađlantılı olduđu belirtilmiřtir (Ciceri, 2023). Spesifik bir CV3 kondrit  rneđi olan NWA 5508 meteoriti, organik maddeler ve CAI yapıları a ısından zengin bir karbonlu meteorit olarak  ne  ıkar. Ryugu  rneklerinde nadiren bulunan olivin, d ř k kalsiyum i eren piroksen ve CAI yapıları NWA 5508 meteoritte yaygın řekilde bulunmaktadır. Meteoritte en bol mineraller olivin ve piroksendir. Olivin ve piroksenlerin varlıđı, meteorit i erisindeki fillosilikatlardan daha baskındır. Ryugu  rneklerinde sık a rastlanan serpantin, saponit, pentlandit ve manyetit mineralleri NWA 5508 meteoritinde de mevcuttur. Ayrıca, sıvı suyun varlıđını g steren karbonatlar, NWA 5508 karbonlu meteoritinde de tespit edilmiřtir. Bennu'da bulunan OH i eren mineraller ( rneđin serpantin ve saponit) de NWA 5508'de g zlemlenmiřtir. B ylece, Ryugu ve Bennu asteroidleri CI ve CM kondritlerine ek olarak, CV kondritleri i in de potansiyel kaynak g vde adayları olarak deđerlendirilebilir (Kamil, 2023).

Asteroitlere g nderilen g revler  nemlidir ve bu g revlerden elde edinilen bilgiler ile meteoritlerin ayrıntılı olarak arařtırılması, oluřum ve evrim kavramlarının anlařılabilmesi a ısından birbirini tamamlayan niteliklere sahiptir.  rneđin, organik molek llerin uzaydaki yaygınlıđını ve evrimini anlamamıza yardım eder. Su ve yařam i in gerekli bileřiklerin D nya'ya nasıl ulařmıř olabileceđine dair ipu ları sađlar. Ek olarak, asteroidlerin yapısı hakkında bilgi sahibi olunarak, ileride uzay madenciliđinin daha da geliřmesi ya da potansiyel  arpma tehditlerini  nlemek i in kritik  neme sahiptir.

 zetle, karbonlu asteroidler, hem G neř Sistemi'nin ge miřine dair bilgi sađlar hem de yařamın evrimi hakkında

önemli ipuçları taşır. Hayabusa2 ve OSIRIS-REx gibi görevler, bu asteroitlerden Dünya'ya örnekler getirerek bilimde çığır açan veriler sağlamıştır. Bu görevler, yalnızca bilimsel değil, aynı zamanda insanlığın uzun vadeli uzay stratejileri açısından da hayati öneme sahiptir.

5. GELECEĞE YÖNELİK PERSPEKTİFLER

Karbonlu meteoritler ve bu meteoritlerin ana gövdeleri olduğu düşünülen karbonlu asteroitlere gönderilen görevler, hem temel bilim açısından hem de potansiyel teknolojik uygulamalar açısından gelecekte oldukça önemli araştırma konuları olmaya devam edecektir. Gelecekte Ay, Mars ve diğer gök cisimlerinin yanı sıra karbonlu asteroitlerden daha fazla ve çeşitli örnekler getirmek hedeflenmektedir. Örneğin, Ulusal Havacılık ve Uzay İdaresi (NASA)'nın Lucy görevinin ana hedefi Jüpiter'in Trojan asteroitleri olsa da ilk olarak karbonlu asteroit (152830) Dinkesh'ten geçtiği için karbon içeriği olan cisimleri de kapsamaktadır (NASA, 2025). Avrupa Uzay Ajansı (ESA) ve Japon Uzay Araştırma ve Geliştirme Ajansı (JAXA)'nın iş birliği kapsamında ESA, Japonya'nın MMX (Martian Moons eXploration) görevine yönelik Marsa ait Phobos (olası karbonlu kaynak) ve Deimos'un yüzeylerinden örnek getirme çalışmalarına destek vermektedir. Bu uyduların karbonlu asteroit kökenli olabileceği hipotezi bulunduğundan, karbonlu malzemeye dolaylı erişim olasılığı bulunmaktadır (ESA, 2025). Özellikle asteroitlerden alınan yer altı örneklerinin getirilmesiyle organik bileşiklerin uzay ortamında nasıl evrimleştiği daha iyi anlaşılacaktır.

NASA, ESA, JAXA gibi ajanslar ortak görevlerle karbonlu cisimlere yönelik daha büyük ölçekli projeler yürütmeyi planlamaktadır. Örneğin, ESA'nın Hera görevi, Didymos ikili asteroit sistemini inceleyerek asteroit savunma

stratejileri geliřtirmeyi ve karbon ierięi arařtırmalarını hedeflemektedir (ESA, 2024). Karbonlu asteroitlerde su, metal ve organik bileřikler bulunması; bu asteroitleri gelecekte uzay madencilięi aısından cazip hale getirmektedir. zellikle su, uzay grevleri iin yakıt ($H+O$) ve yařam desteęi aısından olduka nemlidir. Ayrıca karbonlu asteroitlerin yapısal ve kimyasal eřitlilięi, Gneř Sistemi'nin erken dnemindeki maddesel daęılımı ve dinamiklerini anlamada daha da nemli olacaktır. Yařam iin gerekli olan amino asitlerin ve nkleotit ncllerinin nasıl olduęu, bu gkcisimlerindeki analizlerle anlařılabilir. Uzayda prebiyotik kimyanın iřleyiři zlebilir. O, C ve H izotopları zerinden erken Gneř Sistemi'ndeki suyun ve karbonun izleri de srlebilir. Dnya'nın erken dneminde atmosfer ve okyanusların oluřumuna karbonlu meteoritlerin katkısı daha net ortaya konabilir (Pizzarello & Shock, 2010; Callahan et al., 2011).

Su ve karbon ieren asteroitlerde yerinde kaynak kullanımı (ISRU - In-Situ Resource Utilization) mmkn olabilir. Bu da Mars ve tesine yapılacak grevlerde yakıt ve yařam destek sistemleri iin lojistik avantaj saęlayacaktır (NASA, 2024). Yapısal farklılıklar, arpıřma nleme tekniklerini doęrudan etkiler. Karbonlu asteroitlerin yapısı anlařıldıka, Dnya'ya arpma riski olan cisimlere karřı daha etkili savunma sistemleri geliřtirilebilir.

Spektroskopi, mikroskopi ve izotop analizlerinde yeni teknikler geliřtirilerek, laboratuvarlarda daha kk miktarlarla daha kesin analizler yapılabilir. Karbon ieren doęal nano yapılar, rneęin karbon bazlı speriletkenler veya uzay radyasyonu koruması gibi yeni malzeme tasarımlarında rnek teřkil edebilir. Meteoritler, zellikle de karbonlu kondritler, Gneř Sisteminin oluřumu ve evrimi, ilkel gezegen diskleri, gezegenlerin oluřumu ve evrimi gibi birok konu hakkında nemli bilgiler saęlar. Bugn asteroitlere gnderilen ve yakın

gelecekte gönderilecek olan görevler sayesinde, teknolojinin gelişmesiyle birlikte önemli bir uzay malzemesi olan nadir karbonlu kondrit örneklerinin sayısının artması da muhtemeldir. Bu nedenle, karbonlu kondritler ve asteroitler, genel olarak uzay ve malzeme bilimi açısından ilkel ve nadir örnekler oldukları için önemli dünya dışı malzemeler olacaktır.

6. SONUÇ

Karbonlu meteoritler, Güneş Sistemi'nin oluşumundan bu yana kimyasal ve yapısal olarak büyük ölçüde korunmuş ilkel malzemelerden oluşmaktadır. Kondrit yapıları, içeriklerindeki organik moleküller, hidratlı mineraller ve izotopik özellikleriyle bu meteoritler hem Dünya'daki yaşamın kökeni hem de erken gezegenimsi disklerin evrimi hakkında benzersiz bilgiler sunar. Özellikle CI, CM ve CV gibi alt gruplara ayrılan karbonlu kondritler, kondrül boyutu, matris oranı, mineral içeriği ve uçucu element bileşenlerine göre detaylı olarak sınıflandırılmaktadır (Clayton & Mayeda, 1998; Eiler & Kitchen, 2002; Garvie & Buseck, 2004).

Karbonlu asteroitler Bennu ve Ryugu'ya yönelik gerçekleştirilen OSIRIS-REx ve Hayabusa2 görevleri, bu tür asteroitlerin karbonlu kondritlerle olan benzerliğini doğrudan gözlemleyebilme fırsatı sunmuştur. Ryugu'nun CI tipi, Bennu'nun ise CM tipi kondritlerle kimyasal ve mineralojik benzerlik taşıdığı belirlenmiştir (Ciceri, 2023; Van den Neucker et al., 2023; Zolensky, 2023). Ancak bu asteroitlerdeki bazı mineral ve yapısal özellikler, CV3 tipi kondritlerle olan potansiyel benzerlikleri de gündeme getirmiştir. Özellikle NWA 5508 gibi CV3 kondrit örnekleri, içerdiği CAI yapıları, olivin ve piroksen zenginliği gibi özellikleriyle karşılaştırmalarda önemli bir referans noktası oluşturmaktadır (Kamil, 2023).

Spektroskopik (Raman, FTIR), mikroskopik (SEM-EDS, optik) ve kimyasal analiz teknikleri, meteoritlerin sınıflandırılması ve kökenlerinin belirlenmesinde önemli araçlardır. Özellikle SEM-EDS ile yüzey ve elementel bileşimler incelenmekte, Raman ve IR spektroskopisi ile mineral türleri ve organik yapılar detaylıca tespit edilmektedir. Bu analizlerle elde edilen veriler, meteoritin geçirdiği termal ve sulu değişim süreçlerinin anlaşılmasına olanak sağlar (Perkins, 1986; Smith, 2011; Khoshhesab, 2012; Wang, Jollif, Haskin, Kuebler, & Viskupic, 2001; Morlok, Köhler, & Grady, 2008; Kereszturi, Gyollai, & Szabó, 2015; Thomas, Thomas, Zachariah, & Mishra, 2017; Dirri et al., 2018; Dall'Asén et al., 2019; Kayastha et al., 2019; Kayastha, Paul, & Stokke, 2019; Tosi et al., 2021; Jaggi & Vij, 2021).

Karbonlu meteoritlerin bilimsel önemi yalnızca gezegen oluşumu ile sınırlı kalmayıp, yaşamın yapı taşları olan amino asitler, karbonatlar ve kompleks organik moleküller gibi bileşiklerin Güneş Sistemi'nde nasıl oluştuğu ve Dünya'ya nasıl ulaştırıldığı sorularına da ışık tutmaktadır. Ryugu ve Bennu gibi asteroidlerin taşıdığı organik bileşikler ve su içeren mineraller, bu gökcisimlerinin prebiyotik kimya süreçlerinde rol oynayabileceklerini göstermektedir (Pizzarello & Shock, 2010; Callahan et al., 2011; Ciceri, 2023; Van den Neucker et al., 2023).

Sonuç olarak, karbonlu kondritler ve bu meteoritlerin ana gövdeleri olduğu düşünülen karbonlu asteroidler; Güneş Sistemi'nin kimyasal evrimini, yaşamın kökenini ve gezegen oluşum süreçlerini anlamada vazgeçilmez doğal arşivler olarak nitelenebilir. Mevcut örneklerin detaylı laboratuvar analizlerinin yanı sıra gelecekte gerçekleştirilecek uzay görevleriyle elde edilecek yeni örneklerin, bu alandaki bilgi birikimini daha da derinleştireceği oldukça aşıkardır. Karbonlu meteoritlerin çok

disiplinli yaklaşımlarla incelenmesi hem bilimsel hem de teknolojik açıdan büyük fırsatlar sunmaya devam edecektir.

KAYNAKÇA

- Alexander, C. M. O'D., Bowden, R., Fogel, M. L., Howard, K. T., Herd, C. D. K., & Nittler, L. R. (2012). The provenances of asteroids, and their contributions to the volatile inventories of the terrestrial planets. *Science*, 337(6095), 721–723. <https://doi.org/10.1126/science.1223474>
- Arizona State University, Buseck Center for Meteorite Studies. (n.d.). *Chondrites – Buseck Center for Meteorite Studies*. Retrieved June 8, 2025, from <https://meteorites.asu.edu/chondrites>
- Bonal, L., Quirico, E., & Bourot-Denise, M. (2004). Petrologic type of CV3 chondrites as revealed by Raman spectroscopy of organic matter. *35th Lunar and Planetary Science Conference*, League City, Texas, Abstract No. 1562.
- Bonal, L., Quirico, E., Bourot-Denise, M., & Montagnac, G. (2006). Determination of the petrologic type of CV3 chondrites by Raman spectroscopy of included organic matter. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 70(7), 1849–1863. <https://doi.org/10.1016/j.gca.2005.12.004>
- Bonal, L., Quirico, E., Flandinet, L., & Montagnac, G. (2016). Thermal history of type 3 chondrites from the Antarctic meteorite collection determined by Raman spectroscopy of their polyaromatic carbonaceous matter. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 189, 312–337. <https://doi.org/10.1016/j.gca.2016.06.017>
- Bonal, L., Gattacceca, J., Garenne, A., Eschrig, J., Rochette, P., & Krämer Ruggiu, L. (2020). Water and heat: New constraints on the evolution of the CV chondrite parent

- body. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 276, 363–383.
<https://doi.org/10.1016/j.gca.2020.03.009>
- Callahan, M. P., Smith, K. E., Cleaves, H. J., II, Ruzicka, J., Stern, J. C., Glavin, D. P., House, C. H., & Dworkin, J. P. (2011). Carbonaceous meteorites contain a wide range of extraterrestrial nucleobases. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 108(34), 13995–13998.
<https://doi.org/10.1073/pnas.1106493108>
- Ciceri, F. (2023). *Physical, mechanical, and elastic properties of chondrite lithologies* (Doctoral dissertation, University of Calgary). 182 pages.
- Clayton, R. N., & Mayeda, T. K. (1999). Oxygen isotope studies of carbonaceous chondrites. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 63(13/14), 2089–2104.
[https://doi.org/10.1016/S0016-7037\(99\)00090-3](https://doi.org/10.1016/S0016-7037(99)00090-3)
- Cloutis, E. A., Hudon, P., Hiroi, T., Gaffey, M. J., & Mann, P. (2011). Spectral reflectance properties of carbonaceous chondrites: 2. CM chondrites. *Icarus*, 216, 309–346.
<https://doi.org/10.1016/j.icarus.2011.09.009>
- Cody, G. D., Alexander, C. M. O.'D., Yabuta, H., Kilcoyne, A. L. D., Araki, T., Ade, H., Dera, P., Fogel, M., Militzer, B., & Mysen, B. O. (2008). Organic thermometry for chondritic parent bodies. *Earth and Planetary Science Letters*, 272(1–2), 446–455.
<https://doi.org/10.1016/j.epsl.2008.05.008>
- Cronin, J. R., & Pizzarello, S. (1997). Enantiomeric excesses in meteoritic amino acids. *Science*, 275(5302), 951–955.
<https://doi.org/10.1126/science.275.5302.951>
- Dall'Asén, A. G., Paul, R., Stokke, A. R., Kayastha, R., Bromley, B. C., & Kenyon, S. J. (2019). Comparing

carbonaceous chondritic meteorites using micro-Raman spectroscopy and SEM/EDS. *50th Lunar and Planetary Science Conference*, Woodlands, Texas, LPI Contribution No. 2132, Abstract #2897.

Dirri, F., Ferrari, M., Palomba, E., Stefani, S., Longobardo, A., & Rotundi, A. (2018). Chondrules alteration study of NWA 2086 CV3 meteorite by using μ -IR and SEM/EDS combined analysis and implications for asteroid parent body. *European Planetary Science Congress, EPSC Abstracts*, 12, EPSC2018-481. Retrieved from <https://meetingorganizer.copernicus.org/EPSC2018/EPSC2018-481.pdf>

Eiler, J. M., & Kitchen, N. (2004). Hydrogen isotope evidence for the origin and evolution of the carbonaceous chondrites. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 68(6), 1395–1411. <https://doi.org/10.1016/j.gca.2003.09.014>

European Space Agency. (2024). *Hera*. Retrieved June 12, 2025, from https://www.esa.int/Space_Safety/Hera

European Space Agency. (2025). *MMX factsheet*. ESA Science & Exploration. Retrieved June 12, 2025, from https://www.esa.int/Science_Exploration/Space_Science/MMX_factsheet

Fraknoi, A., Morrison, D., & Wolff, S. (2000). *Voyages through the universe* (2nd ed.). Harcourt College Publishers.

Ganino, C., & Libourel, G. (2017). Reduced and unstratified crust in CV chondrite parent body. *Nature Communications*, 8, 261. <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-017-00293-1>

Garenne, A., Beck, P., Montes-Hernandez, G., Bonal, L., Quirico, E., Proux, O., & Hazemann, J. L. (2019). The iron record of asteroidal processes in carbonaceous

- chondrites. *Meteoritics & Planetary Science*, 54(11), 2652–2665. <https://doi.org/10.1111/maps.13377>
- Garvie, L. A. J., & Buseck, P. R. (2004). Nanosized carbon-rich grains in carbonaceous chondrite meteorites. *Earth and Planetary Science Letters*, 224, 431–439. <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2004.05.024>
- Gasda, P. J. (2014). *The aqueous alteration of carbon-bearing phases in CR carbonaceous chondrites* (Doctoral dissertation, University of Hawaii). 164 pages.
- Huss, G. R., Rubin, A. E., & Grossman, J. N. (2006). Thermal metamorphism in chondrites. In D. S. Lauretta & H. Y. McSween Jr. (Eds.), *Meteorites and the Early Solar System II* (pp. 567–586). University of Arizona Press.
- Jinping, H. (2016). *Shock metamorphism in ordinary chondrites: Constraining pressure and temperature history* (Doctoral dissertation). Arizona State University.
- Kallemeyn, G. W., & Wasson, J. T. (1981). The compositional classification of chondrites: I. The carbonaceous chondrite groups. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 45, 1217–1230. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(81\)90145-9](https://doi.org/10.1016/0016-7037(81)90145-9)
- Kallemeyn, G. W., & Rubin, A. E. (1995). Coolidge and Loongana 001: A new carbonaceous chondrite grouplet. *Meteoritics*, 30(1), 20–27. <https://doi.org/10.1111/j.1945-5100.1995.tb01207.x>
- Kamil, C. (2023). *Vigarano türü karbonlu göktaşı NWA 5508 üzerine petrografik, titreşimsel spektroskopik ve mikroskobik analizler* (Doktora tezi). İzmir, Türkiye.
- Kayastha, R., Paul, R., & Stokke, A. (2019). Comparative study of carbonaceous meteorites using micro-Raman spectroscopy and SEM/EDS. In *Proceedings of The*

National Conference On Undergraduate Research (NCUR), April 11-13, 2019, Kennesaw State University, Kennesaw, Georgia (pp. 350–358).

- Kereszturi, A., Gyollai, I., & Szabó, M. (2015). Case study of chondrule alteration with IR spectroscopy in NWA 2086 CV3 meteorite. *Planetary and Space Science*, 106, 122–131. <https://doi.org/10.1016/j.pss.2014.12.015>
- Khoshhesab, Z. M. (2012). Reflectance IR spectroscopy. In T. Theophile (Ed.), *Infrared spectroscopy - Materials science, engineering and technology* (pp. 233–244). InTech. <http://dx.doi.org/10.5772/37180>
- Kim, C., & Yang, J. (1998). Quantitative FT-IR analysis for chondritic meteorites: Search for C₆₀ in meteorites. *Journal of Astronomy and Space Sciences*, 15(1), 151–162.
- King, A. J., Bates, H. C., Krietsch, D., Busemann, H., Clay, P. I., Schofield, P. F., & Russell, S. S. (2019). The Yamato-type (CY) carbonaceous chondrite group: Analogues for the surface of asteroid Ryugu? *Geochemistry*, 79, 125531. <https://doi.org/10.1016/j.chemer.2019.08.003>
- Koga, T., & Naraoka, H. A. (2017). A new family of extraterrestrial amino acids in the Murchison meteorite. *Scientific Reports*, 7, 636. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-00693-9>
- Krot, A. N., Scott, E. R. D., & Zolensky, M. E. (1995). Mineralogical and chemical modification of components in CV3 chondrites: Nebular or asteroidal processing? *Meteoritics*, 30(6), 748–775. <https://doi.org/10.1111/j.1945-5100.1995.tb01173.x>
- Lada, B. (2016, December 5). Why do meteors glow in vibrant colors? AccuWeather.

<https://www.accuweather.com/en/space-news/why-do-meteors-glow-in-vibrant-colors/433610>

- LeBleu-DeBartola, A. (2019). *Insights into the formation and evolution of organics within carbonaceous chondrite meteorites from hyperspectral Raman and infrared mapping*. Paper presented at the EPSC-DPS Joint Meeting, Geneva, Switzerland. Retrieved from <https://meetingorganizer.copernicus.org/EPSC-DPS2019/EPSC-DPS2019-2073.pdf>
- MacPherson, G. J., Simon, S. B., Davis, A. M., Grossman, L., & Krot, A. N. (2005). Calcium-aluminum-rich inclusions: Major unanswered questions. In *ASP Conference Series* (Vol. 341, pp. 225–250).
- Mautner, M. N., & Sinaj, S. (2002). Water-extractable and exchangeable phosphate in Martian and carbonaceous chondrite meteorites and in planetary soil analogs. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 66(17), 3161–3174. [https://doi.org/10.1016/S0016-7037\(02\)00910-9](https://doi.org/10.1016/S0016-7037(02)00910-9)
- McSween, H. Y., Jr. (1977). Petrographic variations among carbonaceous chondrites of the Vigarano type. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 41(12), 1777–1790. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(77\)90210-1](https://doi.org/10.1016/0016-7037(77)90210-1)
- Meinschein, W. G., Nagy, B., & Hennessy, D. J. (1963). Evidence in meteorites of former life: The organic compounds in carbonaceous chondrites are similar to those found in marine sediments. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 108(2), 553–579. <https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.1963.tb13408.x>
- Metzler, K., Hezel, D. C., Barosch, J., Wölfer, E., Schneider, J. M., Hellmann, J. L., Berndt, J., Stracke, A., Gattacceca, J., Greenwood, R. C., Franchi, I. A., Burkhardt, C., &

- Kleine, T. (2021). The Loongana (CL) group of carbonaceous chondrites. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 304, 1–31. <https://doi.org/10.1016/j.gca.2021.04.007>
- Michel-Lévy, M. C. (1968). Un chondre exceptionnel dans la météorite de Vigarano. *Bulletin de Minéralogie*, 91(2), 212–214.
- Morbidelli, A., Chambers, J., Lunine, J. I., Petit, J. M., Robert, F., Valsecchi, G. B., & Cyr, K. E. (2000). Source regions and timescales for the delivery of water to Earth. *Meteoritics & Planetary Science*, 35(6), 1309–1320. <https://doi.org/10.1111/j.1945-5100.2000.tb01518.x>
- Morlok, A., Köhler, M., & Grady, M. M. (2008). Mid-infrared spectroscopy of refractory inclusions (CAIs) in CV and CO chondrites. *Meteoritics & Planetary Science*, 43(7), 1147–1160. <https://doi.org/10.1111/j.1945-5100.2008.tb01119.x>
- NASA, Johnson Space Center, Curatorial Facility. (August 10, 2022). *Meteorite Classification Database*. Retrieved June 12, 2025, from <https://curator.jsc.nasa.gov/education/classification.cfm>
- NASA. (August 5, 2024). *In-Situ Resource Utilization (ISRU)*. Retrieved June 12, 2025, from <https://www.nasa.gov/mission/in-situ-resource-utilization-isru/>
- NASA. (2025). *Dinkinesh*. NASA Science. Retrieved June 12, 2025, from <https://science.nasa.gov/solar-system/asteroids/dinkinesh/>
- Noguchi, T. (1994). Petrology and mineralogy of the Coolidge meteorite (CV4). *Proceedings of the NIPR Symposium on Antarctic Meteorites*, 7, 42–72

- Norton, O. R., & Chitwood, L. A. (2008). *Field guide to meteors and meteorites*. Springer.
- Paul, R. (2018). *Comparative study of CV3 carbonaceous chondrites Allende and Bali using micro-Raman spectroscopy and SEM/EDS* (Master's thesis, Minnesota State University, Mankato). Retrieved from <https://cornerstone.lib.mnsu.edu/etds/837/>
- Perkins, W. D. (1986). Fourier transform-infrared spectroscopy. In F. A. Settle, Jr. (Ed.), *Journal of Chemical Education*, 63(1), 5–10.
- Pizzarello, S., & Shock, E. (2010). The organic composition of carbonaceous meteorites: The evolutionary story ahead of biochemistry. *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology*, 2(3), a002105. <https://doi.org/10.1101/cshperspect.a002105>
- Pizzarello, S., & Shock, E. (2017). The organic inventory of carbonaceous meteorites: Evidence for the origin of life. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 375(2094), 20160369. <https://doi.org/10.1098/rsta.2016.0369>
- Sephton, M. A., Verchovsky, A. B., Bland, P. A., Gilmour, I., Grady, M. M., & Wright, I. P. (2003). Investigating the variations in carbon and nitrogen isotopes in carbonaceous chondrites. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 67(11), 2093–2108. [https://doi.org/10.1016/S0016-7037\(02\)01320-0](https://doi.org/10.1016/S0016-7037(02)01320-0)
- Skulteti, A., Kereszturi, A., Kereszty, Zs., Pal, B., Szabo, M., & Cipriani, F. (2020). Role of spectral resolution for infrared asteroid compositional analysis using meteorite spectra. *Monthly Notices of the Royal Astronomical*

- Society*, 496(1), 689–694.
<https://doi.org/10.1093/mnras/staa1475>
- Smith, B. C. (2011). *Fundamentals of Fourier transform infrared spectroscopy* (2nd ed.). CRC Press.
<https://doi.org/10.1201/b10777>
- Starkey, N. A., Franchi, I. A., & Alexander, C. M. O.'d. (2013). A Raman spectroscopic study of organic matter in interplanetary dust particles and meteorites using multiple wavelength laser excitation. *Meteoritics & Planetary Science*, 48(10), 1800–1822.
<https://doi.org/10.1111/maps.12196>
- Stokke, A. R. (2018). *Compositional and topographical characterization of carbonaceous chondritic meteorites Moss and Murray using micro-raman spectroscopy and SEM/EDS* (Master's thesis, Minnesota State University). *Masters Abstracts International*, 58(1), 74 pages.
- Thomas, S., Thomas, R., Zachariah, A. K., & Mishra, R. K. (2017). *Spectroscopic methods for nanomaterials characterization*. In *Micro and Nano Technologies* (Vol. 2, p. 444). Elsevier. <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-323-46140-5.01001-3>
- Tosi, A. A., Zucolotto, M. E., Wolff, W., Mendes, J. C., Suárez, S., Pérez, P. D., & Andrade, D. P. P. (2021). The classification of Parauapebas meteorite: Petrological, mineralogical and elemental compositions and physical properties. *Planetary and Space Science*, 203, 105250.
<https://doi.org/10.1016/j.pss.2021.105250>
- Ul-Hamid, A. (2018). *A beginners' guide to scanning electron microscopy* (1st ed.). Springer.
- Van den Neucker, A., Bonato, E., Maturilli, A., Schwinger, S., Helbert, J., Baqué, M., Hamm, M., Alemanno, G., &

- D'Amore, M. (2023). Carbonates from Ryugu: Evidence of parent body aqueous alteration in sample A0112. *86th Annual Meeting of the Meteoritical Society*, #6223.
- Van Schmus, W. R. (1969). The mineralogy and petrology of chondritic meteorites. *Earth-Science Reviews*, 5(3), 145–184. [https://doi.org/10.1016/0012-8252\(69\)90076-2](https://doi.org/10.1016/0012-8252(69)90076-2)
- Varela, M. E., & Métrich, N. (2000). Carbon in olivines of chondritic meteorites. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 64(19), 3433–3438. [https://doi.org/10.1016/S0016-7037\(00\)00432-4](https://doi.org/10.1016/S0016-7037(00)00432-4)
- Wang, A., Jolliff, L. B., Haskin, L. A., Kuebler, K. E., & Viskupic, K. M. (2001). Characterization and comparison of structural and compositional features of planetary quadrilateral pyroxenes by Raman spectroscopy. *American Mineralogist*, 86, 790–806. <https://doi.org/10.2138/am-2001-0703>
- Wlotzka, F. (1993). A weathering scale for the ordinary chondrites. *Meteoritics*, 28(3), 460.
- Zolensky, M. (2023). Results of the preliminary analyses of asteroid Ryugu regolith samples returned by the Hayabusa2 mission. *Microscopy and Microanalysis*, 29(1), 832–833.

OPTİSYENLİK İŞLETMELERİNİN DOĞRU LOKASYON SEÇİMİNDE KARAR FAKTÖRLERİ: RİZE KENT MERKEZİ ÖRNEĞİ¹

Mutlu GÜNEY²

Özge ERDEM³

1. GİRİŞ

Son yıllarda ülkemizde dijital araçların kullanım süresi giderek artmakta ve nüfus hızlı bir şekilde yaşanmaktadır. Bu durum optik ürünlerin tüketimini her geçen yıl arttırmaktadır. Bu kapsamda ülkemizde birçok üniversitede optisyenlik programları açılmıştır ve her yıl yaklaşık 5 bin öğrenci “Optisyen” olarak mezun olmaktadır. Mezun öğrenciler iş hayatına yatırımcı veya çalışan olarak katılmaktadır. Yatırım kararı alan mezunların bir kısmı başarılı olurken, bir kısmı ise yatırımlarıyla ilgili yanlış kararlar alarak başarısız olmaktadır. Bu durumu etkileyen en önemli faktörlerden biri, optisyenlik işletmelerinin hastaneye yakınlık ve kent merkezine yakınlık gibi lokasyonun sunduğu avantajlardan doğrudan etkilenmesidir.

Çeşitli sektörler için lokasyon seçimi sorunu, son dönemde akademik çevrede ilgiyle takip edilmektedir (Dördüncü

¹ Bu çalışma, TÜBİTAK 2209-A Üniversite Öğrencileri Araştırma Projeleri Destek Programı tarafından 2023 yılı/1.dönem 1919B012304231 proje numarası ile desteklenen “Optisyenlik İşletmelerinin Doğru Lokasyon Seçiminde Karar Faktörleri: Rize Kent Merkezi Örneği” isimli projeden üretilmiştir.

² Optisyen, Bayburt Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri MYO, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, mutlu_ozyildiz@hotmail.com

³ Doç. Dr., Bayburt Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri MYO, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, ozgeerdem@bayburt.edu.tr, ORCID: 0000-0003-4542-941X.

& Karaköprü, 2021). Örneğin; sağlık hizmetleri sektöründe faaliyet gösteren hastaneler (Akyüz & Kılınç, 2016; Hoşgör, 2021; Rahmi, 2021; Sütçü, 2022), diş sağlığı merkezleri (Yücenur & Yazıcı, 2023) ve eczaneler (Yıldız, Kara, & Özkan, 2021) için doğru lokasyon tercihi kapsamında birçok çalışma yapılmıştır. Akpınar & Koçak (2021), 2021 yılında yaptıkları çalışmada sağlık merkezleri için uygun ve alternatif alanların tespiti amacıyla çeşitli kriterler belirlemiştir. Belirlenen kriterler ile sağlık hizmetinden yararlanacak bireylerin bu hizmete erişiminde en uygun lokasyonlar tespit edilmiştir. Buna karşılık sağlık hizmetleri sektöründe hem talep hem de arz yönünde büyüme gösteren optisyenlik için bu yönde bir çalışmaya rastlanmamıştır. Optisyenlik meslek grubunda genellikle mikro ölçek olarak ifade edebileceğimiz işletme içerisinde mekânsal organizasyon dikkate alınırken, makro ölçekte işletmenin kentin hangi lokasyonunda yer alması gerektiği göz ardı edilmektedir.

Sunulan bu çalışmada, optisyenlik işletmeleri için daha önce literatürde yanıtlanmayan şu soruya cevap aranmaktadır: “Optisyenlik işletmeleri için en uygun lokasyon neresidir?”. Çalışma sahası olarak hâlihazırda pek çok hastanesi olan ve Rize Şehir Hastanesi’nin inşasının sürdüğü Rize kenti ele alınmıştır. Çalışmadan elde edilen bulgular, hem sınırlı yatırımların doğru yönlendirilmesi hem de toplumsal hizmet bakımından önemli sonuçlar içermektedir.

2. ÇALIŞMA İÇERİĞİ

2.1. Materyal/Metot

Bu çalışmanın amacı hem optisyenlik yatırımcıları hem de tüketiciler için optisyenlik işletmelerine en uygun lokasyon tercihini belirlemektir. Bu kapsamda çalışmada Rize Merkez ilçesindeki optisyenlik işletmelerinin dağılımı ArcGIS 10.6.1 yazılımı ile haritalandırılmıştır. İşletmelerin kümelenme

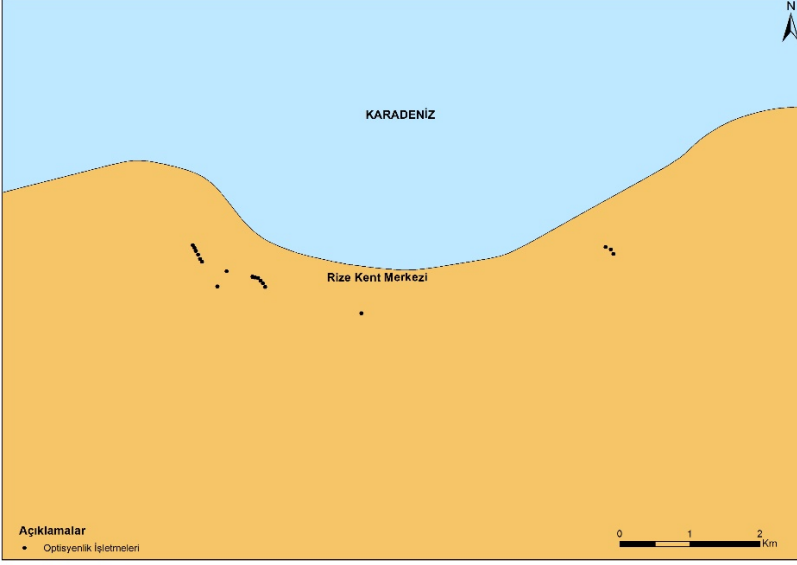
lokasyonları (yoğun bölgeler) Kernel yoğunluk analizi ile belirlenmiştir (Güney & Somuncu, 2024). Yoğunluğun olduğu bölgelerde bulunan işletmelerle anket çalışması yapılmıştır. Anket çalışması “pazara yakınlık, maliyet ve kent merkezine yakınlık” faktörlerinin optisyenlik işletmelerinin lokasyon seçimindeki etkisini ölçmek amacıyla yapılmıştır. Bu saha çalışmasından elde edilen verilere SPSS 22.0 yazılımı ile ANOVA ve Post Hoc testi uygulanıp yoğunluğun olduğu bölgelerde hangi lokasyon tercihinin neden yapıldığı tespit edilmeye çalışılmıştır.

2.2. Bulgular

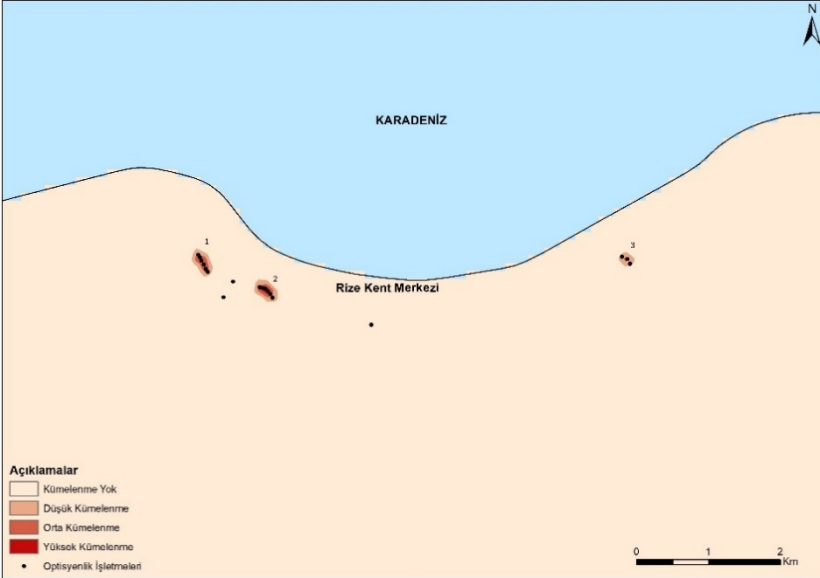
2.2.1. Rize Merkez İlçesinde Optisyenlik İşletmelerinin Dağılımı ve Kernel Yoğunluk Analizi

Çalışma kapsamında, Rize Merkez ilçesindeki optisyenlik işletmelerine ilişkin konum bilgileri Rize İl Sağlık Müdürlüğü’nden alınmış ve ArcGIS 10.6.1 yazılımı ile haritalandırılmıştır. Böylece konuma ilişkin temel veriler Şekil 1’den görüldüğü üzere mekânsal veriye dönüştürülmüştür. Bu haritadan yararlanılarak yapılan Kernel yoğunluk analizi sonucu, optisyenlik işletmeleri arasında hipotetik olarak kümelenme oluşturanlar tespit edilmiş ve Şekil 2’de gösterilmiştir. Şekil 2’den görüleceği üzere Rize Merkez ilçesinde lokasyon olarak yüksek kümelenme eğilimi gösteren ve 1, 2, 3 ile belirtilen üç adet yoğun bölge bulunmuştur. Bu bölgelerin yanı sıra, Şekil 2’den kümelenme göstermeyen yani bireysel işletmelerin olduğu da görülmektedir.

Şekil 1. Araştırma Alanındaki Optisyenlik İşletmelerinin Dağılımı



Şekil 2. İşletmelerin Yoğun Olduğu Bölgeleri Gösteren Kernel Yoğunluk Haritası



2.2.2. ANOVA ve Post Hoc Testleri

Bu çalışmada, optisyenlik işletmelerinin lokasyon seçiminde “pazara yakınlık, maliyet ve kent merkezine yakınlık” faktörlerinin etkisini ölçmek için anket çalışması yapılmıştır. Anket çalışması, dört farklı grup ile yürütülmüştür. Bunlar, Şekil 2’de optisyenlik işletmelerinin kümелendiği üç bölgede yer alan işletmeler ve dördüncü olarak kümelenme göstermeyen bireysel işletmelerdir. Bu dört grup; “Meydan, Devlet ve özel hastane, Üniversite, Bireysel” diye isimlendirilmiştir. Bu gruplardan “Meydan”, Rize kent meydanına yakın konumlanan işletmeleri temsil etmektedir. Şekil 2’de 2 numara ile gösterilen yoğun bölgedir. “Devlet ve özel hastane” grubu, kentin batı kısmında bulunan devlet hastanesi ve iki özel hastanenin etrafında kümelenen işletmeleri temsil etmektedir. Şekil 2’de 1 numara ile gösterilen yoğun bölgedir. “Üniversite” grubu, Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Eğitim ve Araştırma Hastanesi yakınında bulunan işletmelerdir. Şekil 2’de 3 numara ile gösterilen yoğun bölgedir. “Bireysel” grup ise, Şekil 2’de bu üç grubun dışında kalan işletmeleri temsil etmektedir.

Yukarıda belirtilen dört grup ile gerçekleştirilen anket çalışmasından elde edilen verilere, SPSS 22.0 yazılımı ile ANOVA ve Post Hoc testi uygulanıp kümelenme gösteren bölgelerde hangi lokasyon tercihinin neden yapıldığı analiz edilmiştir.

Tablo 1, araştırmaya ilişkin “Ortalama (Mean), Standart Sapma (Std. Deviation) ve Güven Aralıkları (Confidence Interval for Mean)” gibi tanımlayıcı istatistiksel verileri göstermektedir. Tablo 1’den görüleceği üzere lokasyon tercihinde, pazara yakınlık “Meydan” grubundaki işletmeler için, maliyet ve kent merkezine yakınlık ise “Bireysel” grubundaki işletmeler için ağırlıklı olarak lokasyon tercih nedeni olarak öne çıkmıştır.

Tablo 1. Araştırmaya İlişkin Tanımlayıcı İstatistikler

Descriptives						
		N	Mean	Std. Deviation	Std. Error	95% Confidence Interval for Mean
						Lower Bound
Pazara yakınlık	Meydan	6	3,4167	,22973	,09379	3,1756
	Devlet ve özel hastane	6	3,3333	,18257	,07454	3,1417
	Üniversite hastanesi	3	2,7778	,34694	,20031	1,9159
	Bireysel	3	2,7778	,25459	,14699	2,1453
	Total	18	3,1759	,36368	,08572	2,9951
Maliyet	Meydan	6	3,5667	,29439	,12019	3,2577
	Devlet ve özel hastane	6	3,1000	,20976	,08563	2,8799
	Üniversite hastanesi	3	2,8667	,30551	,17638	2,1078
	Bireysel	3	4,0000	,20000	,11547	3,5032
	Total	18	3,3667	,45633	,10756	3,1397
Kent merkezine yakınlık	Meydan	6	3,4667	,30111	,12293	3,1507
	Devlet ve özel hastane	6	4,0333	,29439	,12019	3,7244
	Üniversite hastanesi	3	3,0000	,20000	,11547	2,5032
	Bireysel	3	4,0667	,30551	,17638	3,3078
	Total	18	3,6778	,48574	,11449	3,4362

Araştırmadaki gruplar için varyansların homojenliği varsayımını kontrol etmek amacıyla Levene Varyansların Homojenliği Testi yapılmış ve sonuçlar Tablo 2’de verilmiştir. Tablo 2’de p-değerleri (Sig.) 0,05’ten büyük olduğundan çalışmadaki gruplar için varyanslar homojen kabul edilmiştir. Bu sonuç, ANOVA’nın homojenlik varsayımının karşılandığını gösterir.

Tablo 2. Levene Varyansların Homojenliği Testi Sonuçları

	Levene Statistic	df1	df2	Sig.
Pazara yakınlık	,826	3	14	,501
Maliyet	,563	3	14	,648
Kent merkezine yakınlık	,403	3	14	,753

ANOVA, gruplar arasındaki ortalama farkların istatistiksel olarak anlamlı olup olmadığını test etmek için kullanılır. Tablo 3’de verilen ANOVA testi sonuçlarına göre; p-değerleri (Sig.) 0,05’ten küçük olduğundan, ortalama farkların rastlantısal olmadığı kabul edilir. Sonuç olarak, çalışmadaki gruplar (Meydan, Devlet ve özel hastaneler, Üniversite hastanesi, Bireysel) arasında lokasyon tercihinde pazara yakınlık, maliyet ve kent merkezine yakınlık değişkenlerinin tercih edilme durumunun anlamlı farklar gösterdiği tespit edilmiştir.

Tablo 3. ANOVA Testi Sonuçları

ANOVA						
		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
Pazara yakınlık	Between Groups	1,448	3	,483	8,434	,002
	Within Groups	,801	14	,057		
	Total	2,248	17			
Maliyet	Between Groups	2,620	3	,873	13,290	,000
	Within Groups	,920	14	,066		
	Total	3,540	17			
Kent merkezine yakınlık	Between Groups	2,858	3	,953	11,563	,000
	Within Groups	1,153	14	,082		
	Total	4,011	17			

ANOVA testinde anlamlı farklar bulunduğu için Post Hoc testler kullanılmış ve gruplar arası farkların hangi gruplar arasında olduğu incelenmiştir. Tablo 4’de verilen Tukey HSD sonuçlarına göre elde edilen bulgular aşağıda listelenmiştir:

1. Pazara yakınlık deęiřkeni bakımından:

a) “Meydan” ile “Üniversite Hastanesi” ve “Meydan” ile “Bireysel” grupları arasındaki ikili karşılařtırmalarda anlamlı farklar vardır. Her iki grup karşılařtırmaları için $p = 0,010$ bulunmuřtur.

b) “Devlet ve özel hastaneler” ile “Üniversite Hastanesi” ve “Devlet ve özel hastaneler” ile “Bireysel” grupları arasındaki ikili karşılařtırmalarda anlamlı farklar vardır. Her iki grup karşılařtırmaları için $p = 0,025$ bulunmuřtur.

2. Maliyet deęiřkeni bakımından:

a) “Meydan” ile “Devlet ve özel hastaneler” ve “Meydan” ile “Üniversite Hastanesi” grupları arasındaki ikili karşılařtırmalarda anlamlı farklar vardır. Her iki grup karşılařtırmaları için p deęerleri sırasıyla 0,032 ve 0,008 olarak bulunmuřtur.

b) “Bireysel” ile “Devlet ve özel hastaneler” ve “Bireysel” ile “Üniversite Hastanesi” grupları arasındaki ikili karşılařtırmalarda anlamlı fark vardır. p deęerleri sırasıyla 0,001 ve 0,000 olarak bulunmuřtur.

3. Kent meydanına yakınlık deęiřkeni bakımından:

a) “Meydan” ile “Devlet ve özel hastaneler” ve “Meydan” ile “Bireysel” grupları arasındaki ikili karşılařtırmalarda anlamlı farklar vardır. p deęerleri sırasıyla 0,019 ve 0,046 olarak bulunmuřtur.

b) “Üniversite Hastanesi” ile “Devlet ve özel hastaneler” ve “Üniversite Hastanesi” ile “Bireysel” grupları arasındaki ikili karşılařtırmalarda anlamlı farklar vardır. p deęerleri sırasıyla 0,001 ve 0,002 olarak bulunmuřtur.

Yukarıdaki analizde $p < 0,05$ olma durumu göz önüne alınmıřtır. Burada Bonferroni düzeltmesi yapılırsa; çalışmadaki

dört grubun ikili kombinasyonları alınmıştır ki bu da altı adet eder. $0.05/6=0,0083$ eder ki bu durum Tukey HSD testinde $p<0,008$ olan ikili gruplar arasında anlamlı fark olduğunu gösterir. Buna göre Tukey HSD testini yeniden yorumlarsak;

1) Pazara yakınlık değişkeni bakımından, gruplar arasında anlamlı fark yoktur.

2) Maliyet değişkeni bakımından, “Bireysel” ile “Devlet ve özel hastaneler” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,001$) ve “Bireysel” ile “Üniversite Hastanesi” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,000$).

3) Kent meydanına yakınlık değişkeni bakımından, “Üniversite Hastanesi” ile “Devlet ve özel hastaneler” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,001$) ve “Üniversite Hastanesi” ile “Bireysel” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,002$).

Tablo 4’de Scheffé Testi sonuçlarına göre elde edilen bulgular, Bonferroni düzeltmesine göre değerlendirildiğinde aşağıda listelenen sonuçlar, Tukey HSD testini doğrulamaktadır:

1) Pazara yakınlık değişkeni bakımından, gruplar arasında anlamlı fark yoktur.

2) Maliyet değişkeni bakımından, “Bireysel” ile “Devlet ve özel hastaneler” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,002$). “Bireysel” ile “Üniversite Hastanesi” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,001$).

3) Kent meydanına yakınlık değişkeni bakımından, “Üniversite Hastanesi” ile “Devlet ve özel hastaneler” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,002$). “Üniversite Hastanesi” ile “Bireysel” grupları arasında anlamlı fark vardır ($p = 0,004$).

Tablo 3. Post Hoc Testi Sonuçları

Multiple Comparisons								
Dependent Variable		(I) İşletmenin bulunduğu konum	(J) İşletmenin bulunduğu konum	Mean Difference (I-J)	Std. Error	Sig.	95% Confidence Interval	
							Lower Bound	Upper Bound
Pazara yakınlık	Tukey HSD	Meydan	Devlet ve özel hastaneler	,08333	,13809	,929	-,3180	,4847
			Üniversite hastanesi	,63889*	,16913	,010	,1473	1,1305
			Bireysel	,63889*	,16913	,010	,1473	1,1305
		Devlet ve özel hastaneler	Meydan	-,08333	,13809	,929	-,4847	,3180
			Üniversite hastanesi	,55556*	,16913	,025	,0640	1,0471
			Bireysel	,55556*	,16913	,025	,0640	1,0471
		Üniversite hastanesi	Meydan	-,63889*	,16913	,010	- 1,1305	-,1473
			Devlet ve özel hastaneler	-,55556*	,16913	,025	- 1,0471	-,0640
			Bireysel	,00000	,19529	1,000	-,5676	,5676
		Bireysel	Meydan	-,63889*	,16913	,010	- 1,1305	-,1473
			Devlet ve özel hastaneler	-,55556*	,16913	,025	- 1,0471	-,0640
			Üniversite hastanesi	,00000	,19529	1,000	-,5676	,5676
	Scheffe	Meydan	Devlet ve özel hastaneler	,08333	,13809	,946	-,3540	,5207
			Üniversite hastanesi	,63889*	,16913	,017	,1032	1,1746
			Bireysel	,63889*	,16913	,017	,1032	1,1746
		Devlet ve özel hastaneler	Meydan	-,08333	,13809	,946	-,5207	,3540
			Üniversite hastanesi	,55556*	,16913	,041	,0199	1,0912
			Bireysel	,55556*	,16913	,041	,0199	1,0912
		Üniversite hastanesi	Meydan	-,63889*	,16913	,017	- 1,1746	-,1032
			Devlet ve özel hastaneler	-,55556*	,16913	,041	- 1,0912	-,0199
			Bireysel	,00000	,19529	1,000	-,6185	,6185
		Bireysel	Meydan	-,63889*	,16913	,017	- 1,1746	-,1032
			Devlet ve özel hastaneler	-,55556*	,16913	,041	- 1,0912	-,0199
			Üniversite hastanesi	,00000	,19529	1,000	-,6185	,6185

Maliyet	Tukey HSD	Meydan	Devlet ve özel hastaneler	,46667*	,14800	,032	,0365	,8968
			Üniversite hastanesi	,70000*	,18127	,008	,1731	1,2269
			Bireysel	-,43333	,18127	,125	-,9602	,0935
		Devlet ve özel hastaneler	Meydan	-,46667*	,14800	,032	-,8968	-,0365
			Üniversite hastanesi	,23333	,18127	,585	-,2935	,7602
			Bireysel	-,90000*	,18127	,001	- 1,4269	-,3731
		Üniversite hastanesi	Meydan	-,70000*	,18127	,008	- 1,2269	-,1731
			Devlet ve özel hastaneler	-,23333	,18127	,585	-,7602	,2935
			Bireysel	-1,13333*	,20931	,000	- 1,7417	-,5250
		Bireysel	Meydan	,43333	,18127	,125	-,0935	,9602
			Devlet ve özel hastaneler	,90000*	,18127	,001	,3731	1,4269
			Üniversite hastanesi	1,13333*	,20931	,000	,5250	1,7417
	Scheffe	Meydan	Devlet ve özel hastaneler	,46667	,14800	,051	-,0021	,9354
			Üniversite hastanesi	,70000*	,18127	,015	,1259	1,2741
			Bireysel	-,43333	,18127	,175	- 1,0075	,1408
		Devlet ve özel hastaneler	Meydan	-,46667	,14800	,051	-,9354	,0021
			Üniversite hastanesi	,23333	,18127	,655	-,3408	,8075
			Bireysel	-,90000*	,18127	,002	- 1,4741	-,3259
		Üniversite hastanesi	Meydan	-,70000*	,18127	,015	- 1,2741	-,1259
			Devlet ve özel hastaneler	-,23333	,18127	,655	-,8075	,3408
			Bireysel	-1,13333*	,20931	,001	- 1,7963	-,4704
		Bireysel	Meydan	,43333	,18127	,175	-,1408	1,0075
			Devlet ve özel hastaneler	,90000*	,18127	,002	,3259	1,4741
			Üniversite hastanesi	1,13333*	,20931	,001	,4704	1,7963
Kent	Tukey HSD	Meydan	Devlet ve özel hastaneler	-,56667*	,16571	,019	- 1,0483	-,0850
			Üniversite hastanesi	,46667	,20295	,145	-,1232	1,0566

			Bireysel	-,60000*	,20295	,046	- 1,1899	-,0101
		Devlet ve özel hastaneler	Meydan	,56667*	,16571	,019	,0850	1,0483
			Üniversite hastanesi	1,03333*	,20295	,001	,4434	1,6232
			Bireysel	-,03333	,20295	,998	-,6232	,5566
		Üniversite hastanesi	Meydan	-,46667	,20295	,145	- 1,0566	,1232
			Devlet ve özel hastaneler	-1,03333*	,20295	,001	- 1,6232	-,4434
			Bireysel	-1,06667*	,23435	,002	- 1,7478	-,3855
		Bireysel	Meydan	,60000*	,20295	,046	,0101	1,1899
			Devlet ve özel hastaneler	,03333	,20295	,998	-,5566	,6232
			Üniversite hastanesi	1,06667*	,23435	,002	,3855	1,7478
	Scheffe	Meydan	Devlet ve özel hastaneler	-,56667*	,16571	,032	- 1,0915	-,0418
			Üniversite hastanesi	,46667	,20295	,200	-,1761	1,1095
			Bireysel	-,60000	,20295	,071	- 1,2428	,0428
		Devlet ve özel hastaneler	Meydan	,56667*	,16571	,032	,0418	1,0915
			Üniversite hastanesi	1,03333*	,20295	,002	,3905	1,6761
			Bireysel	-,03333	,20295	,999	-,6761	,6095
		Üniversite hastanesi	Meydan	-,46667	,20295	,200	- 1,1095	,1761
			Devlet ve özel hastaneler	-1,03333*	,20295	,002	- 1,6761	-,3905
			Bireysel	-1,06667*	,23435	,004	- 1,8089	-,3244
		Bireysel	Meydan	,60000	,20295	,071	-,0428	1,2428
			Devlet ve özel hastaneler	,03333	,20295	,999	-,6095	,6761
			Üniversite hastanesi	1,06667*	,23435	,004	,3244	1,8089

3. SONUÇ

Yapılan çalışmadan elde edilen sonuçlara göre, çalışmada yer alan dört grup arasında bulunan anlamlı farklılıklar optisyenlik işletmelerinin lokasyon tercihlerini mekânda bulunan

belirli faktörlere (pazara yakınlık, maliyet, kent merkezine yakınlık) göre yaptığını göstermiştir. Buna göre, gruplar arasında lokasyon seçiminde pazara yakınlık kriteri bakımından anlamlı bir fark olmadığı saptanmıştır. Bu durumun, tüm gruplar için pazara yakınlığın (hastanelere ve hastaların yoğun olduğu bölgelere yakınlık) en önemli kriter olmasından kaynaklandığı düşünülmektedir. Maliyet kriteri (çalışan maliyetinin az olması, rekabetin düşük olması gibi) bakımından “Bireysel” grup ile “Devlet ve özel hastaneler” ve “Üniversite Hastanesi” grupları arasında anlamlı farklılıklar bulunmuştur. Kent merkezine yakınlık (toplu taşımanın yoğun olması, park yerlerinin olması, ticaretin canlı olması gibi) kriteri bakımından ise, “Üniversite Hastanesi” grubu ile “Devlet ve özel hastaneler” ve “Bireysel” grupları arasında anlamlı farklılıklar tespit edilmiştir.

Sonuç olarak, bu çalışmada pazara yakınlık optisyonluk işletmelerinin lokasyon seçiminde en önemli kriter olarak bulunurken, maliyet ve kent merkezine yakınlık ise işletmeler tarafından tercih edilen ikincil kriterler olmuştur.

KAYNAKÇA

- Akpınar, M. E., & Koçak, K. (2021). TOPSIS yöntemine dayalı öğrenci sağlık merkezi yeri seçimi: bir üniversite uygulaması. Dokuz Eylül Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fen ve Mühendislik Dergisi, 23(69), 823-833.
- Akyüz, G., & Kılınç, E. (2016) Kuruluş Yeri Seçiminde Bulanık Topsıs Yönteminin Kullanımı: Sağlık Sektöründe Bir Uygulama. Akademik Sosyal Araştırmalar Dergisi, 4, 33, 590-608.
- Dördüncü, H., & Karaköprü, U. O. (2021). Çok Kriterli Karar Verme Yöntemleriyle Otogar Lokasyon Seçimi: İstanbul İli Örneği. İşletme Araştırmaları Dergisi, 13(4), 3741-3754.
- Güney, İ., & Somuncu, M. (2024). Evrimsel Ekonomik Coğrafya Perspektifinden Turizm Destinasyonlarının Evrimi, Krizler ve Dirençlilik Bağlamında Antalya Örneği. İktisadi İdari ve Siyasal Araştırmalar Dergisi, 9(23), 154-181.
- Hoşgör, H. (2021). Hastane Kuruluş Yeri Seçimi Konusunda Çok Kriterli Karar Verme Teknikleri Kullanılarak Yapılan Ulusal Çalışmaların İçerik Analizi ile İncelenmesi. Uluslararası Sağlık Yönetimi ve Stratejileri Araştırma Dergisi, 7(1), 167-180.
- Baki, R. (2021). Özel bir hastanenin yer seçimi için bulanık COPRAS tekniğinin uygulanması. Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 10(4), 1506-1514.
- Sütçü, M. (2022). Analitik Hiyerarşi Karar Verme Süreci ile Hastane Yeri Seçimi Problemi: Türkiye'de Bir Uygulama. Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi, (45), 144-150.
- Yıldız, A., Kara, S. S., & Özkan, C. (2021). Sağlık kurumlarının ve eczanelerin taleplerine yönelik ecza deposu yer seçimi

problemi. Gümüşhane Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 11(2), 452-465.

Yücenur, G., & Yazıcı, M. (2023). Global Location Selection for an Oral Health Center with a Sequential Method by SWARA&TODIM. Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 6 (1) , 476-492.

LÖSEMİ HASTALIĞININ TANI VE İZLEMİNDE KAN ÖRNEKLERİNİN FTIR SPEKTROSKOPİSİ İLE DEĞERLENDİRİLMESİ

Çisem ALTUNAYAR ÜNSALAN¹

1. GİRİŞ

Lösemi, nispeten yüksek görülme sıklığı ve genellikle düşük sağ kalım oranı nedeniyle toplumda önemli bir yer tutmaktadır. Çocuklarda lösemi en yaygın kanser türü olmakla birlikte yetişkinlerde, Dünya Sağlık Örgütü'ne göre en yaygın 15 kanser türü arasında yer almaktadır (Kampen, 2012). Lösemi, dünya nüfusunu önemli ölçüde etkileyen en yaygın kötü huylu hastalıklardan biridir. Löseminin coğrafi dağılımı daha gelişmiş ülkelerde daha yüksek yaygınlık ve genel ölüm oranı ile kendini göstermektedir. Ancak, ölüm oranı gelişmekte olan ülkelerde daha yüksektir. Her iki cinsiyet de etkilense de lösemiye erkeklerde daha çok rastlanmaktadır. Akut lösemiler, hematopoietik sistemdeki bir veya daha fazla hücre hattını içeren kan oluşturan organların kötü huylu klonal bozukluklarıdır. Bu bozukluklar, kemik iliğinin anormal olgunlaşmamış ve farklılaşmamış hematopoietik hücrelerle yaygın şekilde yer değiştirmesiyle belirlenir ve bunun sonucunda periferik kanda eritrosit ve trombosit sayısı azalır. Lenfoid, miyeloid, karışık veya farklılaşmamış gibi ilgili anormal hematopoietik hücrelerin kökenine göre bu bozukluklar sınıflandırılır. Buna karşın, kronik lösemiler, hematopoietik sistemin olgun, farklılaşmış hücrelerinin kontrolsüz çoğalması

¹ Arş. Gör. Dr., Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, cisemaltunayar@gmail.com, ORCID: 0000-0001-6479-4223.

ve genişlemesiyle karakterize edilen geniş bir hastalık yelpazesini kapsar. Bu nedenle, kronik lösemiler, ilgili hematopoietik hücre türüne bağlı olarak sınıflandırılır (Tebbi, 2021). Batı ülkelerinde löseminin en sık görülen formu olan kronik lenfositik lösemi (KLL), kanda, kemik iliğinde, lenf düğümlerinde ve dalakta neoplastik B lenfositlerin klonal çoğalması ve birikmesiyle karakterizedir. Tanı sırasında hastaların ortalama yaşı 65'tir ve sadece %10 ile %15'i 50 yaşın altındadır. Hastalığın seyri değişkenlik göstermekle birlikte kronik lenfositik lösemili bazı hastaların normal bir yaşam süresi varken, diğerleri tanıdan sonraki beş yıl içinde ölebilmektedir (Rozman ve Montserrat, 1995).

Lösemi hastalarının sağkalım oranını arttırmak için erken tanı ve tedavi büyük önem taşır. Lösemi tanısı için yaygın olarak kullanılan birkaç yöntem vardır: (1) Periferik kan muayenesi; (2) Kemik iliği aspirasyonu; (3) Fransız-Amerikan-İngiliz sınıflandırması; (4) Rutin sitokimyasal değerlendirme. Ancak bu yöntemlerin büyük ölçüde patoloğların yargılarına, karmaşık prosedürlere ve pahalı araçlara bağlı olması gibi birkaç dezavantajı vardır. Bu nedenle lösemiye erken evrede teşhis etmek için basit ve hızlı bir yöntem geliştirmek çok acildir (Sheng vd., 2013).

Fourier dönüşüm infrared (FTIR) spektroskopisi, plazma, serum (Kendall vd., 2009; Finlayson vd., 2019; Huber vd., 2021) ve hücre (Maziak vd., 2007; Babrah vd., 2009; Bellisola vd., 2013; Wald vd., 2016; Altharawi vd., 2019;) yapılar ve kanserli karakter dahil olmak üzere hızlı, etiketsiz, tahribatsız, düşük maliyetli bir araç olarak biyolojik örneklerin analizi için yaygın olarak kullanılmaktadır. Farklı moleküler sınıfları araştırmak ve hastalıkla ilişkili farklılıklara sahip proteinlerin, lipidlerin ve nükleik asitlerin içerikleri için karakteristik moleküler değişiklikleri ortaya çıkarmak için çoklu bir yoldur ve bunlar spektral değişiklikler olarak ele alınır.

Dahası, farklı örnekler arasındaki bant şiddeti ve konumlarındaki farklılıklar, makromoleküllerin kompozisyonunda, konformasyonunda ve/veya konsantrasyonunda farklılıkları gösterir ve bu durum infared spektrumun en büyük avantajlarından biridir (Xie vd., 2023).

Bu çalışmanın amacı, lösemi hastalığının tanı ve izlenmesinde, non-invaziv ve hızlı bir analiz yöntemi olarak Fourier dönüşüm infrared (FTIR) spektroskopisinin potansiyelini ortaya koymaktır. Bu doğrultuda, lösemi hastalarından ve sağlıklı bireylerden alınan kan örnekleri üzerinde FTIR spektroskopisi uygulanarak, hastalığa özgü biyokimyasal değişimlerin spektral düzeyde belirlenmesi hedeflenmiştir. Veriler doğrultusunda, FTIR spektroskopisinin lösemiye özgü biyobelirteçlerin tespitinde ve hastalığın moleküler düzeyde karakterizasyonunda kullanılabilirliği değerlendirilecektir. Bu yaklaşımın, mevcut tanısal yöntemlere tamamlayıcı bir katkı sağlayarak, klinik uygulamalarda kullanım potansiyelini arttırması beklenmektedir.

2. GENEL BİLGİLER

2.1. Lösemi Hastalığı

Lösemi, çocuklarda ve yetişkinlerde yaygın görülen bir malignitedir ve normal hücre düzenleyici süreçlerdeki değişiklikler kemik iliğindeki hematopoietik kök hücrelerin kontrolsüz çoğalmasına neden olduğunda ortaya çıkar. Amerika Birleşik Devletleri'nde löseminin yaşa göre ayarlanmış insidans oranı her yıl 100.000 kişide 12,8'dir. Lösemi prevalansı genellikle beyazlarda ve erkeklerde daha yüksektir ve yaşla birlikte artar. Yaklaşık 70 kişiden biri yaşamı boyunca lösemi geliştirir. Birincil bakım hekimlerinin en sık karşılaştığı dört lösemi alt tipi akut lenfoblastik, akut miyeloid, kronik lenfositik ve kronik miyeloiddir (Davis vd., 2014).

Löseminin erken anlaşılmasıyla ilgili güncel literatür genellikle tanınmada önemli rol oynayan bir veya iki hekime odaklanmıştır. Alfred Velpeau, Alfred Donné, John Bennett ve Rudolf Virchow, lösemi keşfeden “kişi” olarak sıklıkla anılan dört kişidir. Bu, güncel literatürde löseminin keşfi ve erken tarihi hakkında bir fikir birliği olmadığını açıkça göstermektedir (Kampen, 2012).

Küresel olarak, 2018’de lösemi, 437.033 vaka ve 309.006 ölümle en sık teşhis edilen kanserler arasında on beşinci sırada yer almış ve kötü huylu hastalıklar nedeniyle on birinci ölüm nedeni olmuştur. Belirli genetik bozuklukları olan bireylerin lösemi geliştirme oranının daha yüksek olduğu bilinmektedir. Li Fraumeni sendromu, Down sendromu, Shwachman sendromu, nörofibromatozis tip 1, Fanconi anemisi, ataksi-telenjiektazi, Bloom sendromu, Klinefelter sendromu ve Diamond Blackfan anemisi gibi bozuklukları olan kişiler lösemi geliştirme açısından daha yüksek risk altındadır (Tebbi, 2021).

Genetik, löseminin etiyolojisinde önemli bir rol oynar. Akut lösemilerin patogenezinde genetiğin etkileri en çok özdeş ikizlerde belirgindir. Özdeş ikizlerden biri 7 yaşından önce hastalığa yakalanırsa, diğerinin bu hastalığa yakalanma olasılığı genel popülasyondan iki kat daha fazladır. Lösemi geliştirme olasılığı daha sonra zamanla azalır. 15 yaşına kadar lösemi geliştirmeden ulaşan ikizin bu hastalığa yakalanma riski ortalama popülasyondan daha yüksek görünmemektedir. Lösemi vakalarının çoğunda bilinen belirgin bir yatkınlık faktörü bulunmamakla birlikte, bazı genetik ve edinilmiş germ hattı mutasyonları ve klonal kromozomal anormallikler lösemi insidansının artmasıyla ilişkilidir. Otozomal dominant şekilde kalıtılabilen ve potansiyel olarak löseminin gelişimine neden olabilen tanımlanmış genler arasında CEPBA, RUNX1 ve GATA2 bulunur (Tebbi, 2021).

2.1.1. Akut Lösemi

Akut lenfoblastik lösemi (ALL) her yıl Amerika Birleşik Devletleri'nde 3000 ile 4000 kişiye teşhis edilir; bunların üçte ikisi çocuktur. Çocuklarda yaklaşık %80'lik mevcut iyileşme oranı, hastalığın dirençli alt tipleri için etkili tedavilerin geliştirilmesinde kayda değer ilerleme olduğunu göstermektedir. İlerleme, presemptomatik lösemi için kombinasyon kemoterapisinin ve merkezi sinir sistemi tedavisinin başlatılmasından, yüksek nüks riski olan hastalar için daha yeni, yoğun tedavi rejimlerine kadar kademeli olmuştur. Buna karşılık, ALL'li yetişkinlerin yalnızca %30 ile %40'ı iyileşmektedir. Bu tutarsızlık, kısmen yetişkinlerin lösemik lenfoblastlarındaki olumsuz genetik anormalliklerin daha yüksek sıklığına bağlanabilir (Pui ve Evans, 1998).

ALL, çok soylu potansiyele sahip ilkel hücreler de dahil olmak üzere, gelişimin belirli bir aşamasında bloke edilen herhangi bir lenfoid hücreden gelişebilir. Çoğu durumda Auer çubukları, miyeloperoksidaz veya monosit ilişkili esterazların varlığıyla kolayca tanımlanabilen akut miyeloid lösemik hücrelerin aksine, lösemik lenfoblastlar spesifik morfolojik veya sitokimyasal özelliklerden yoksundur, bu nedenle ALL tanısı immünofenotiplemeye bağlıdır (Pui ve Evans, 1998).

ALL, farklı ülkelerde 100.000 çocukta 0,9 ile 4,7 arasında değişen sıklıkta görülen baskın bir çocukluk çağı lösemi türüdür. Radyasyon, çevresel etkenler, annede alkol tüketimi ve babada sigara kullanımı çocuklarda ALL riskinin artmasıyla ilişkilidir. ALL, hematopoietik hücrelerdeki genetik değişikliklerden kaynaklanan klonal bir hematolojik hastalıktır. Transkripsiyon faktörü onkogenlerindeki genetik değişiklikler esas olarak lökomogenez sürecinde rol oynar. ALL'nin kombinasyon tedavisi kullanılarak tedavisi, çocuklarda sağkalım oranını önemli ölçüde iyileştirmiştir. Kliniklerde, minimal

rezidüel hastalığı tespit etmek için oldukça hassas PCR teknikleri uygulanmaktadır (Ramesh vd., 2002).

Akut miyeloid lösemi (AML), hematopoietik sistemin proliferatif, klonal, anormal şekilde farklılaşmış ve bazen de zayıf şekilde farklılaşmış hücrelerinin kemik iliği, kan ve diğer dokulara sızmasıyla karakterize bir kanser türüdür. 50 yıl önce tedavi edilemez olmasına rağmen, AML artık 60 yaş ve üzeri yetişkin hastaların %35 ile %40'ında ve 60 yaş üzeri hastaların %5 ile %15'inde tedavi edilmektedir. Kabul edilemez yan etkiler olmadan yoğun kemoterapi alamayan yaşlı hastalardaki sonuç, yalnızca 5 ile 10 aylık ortalama sağ kalımla iç karartıcı olmaya devam etmektedir. AML'nin sitogenetik heterojenliği 30 yıldan uzun süredir bilinmesine rağmen, hastalığın moleküler heterojenliği daha belirgin hale gelmiştir (Döhner vd., 2015).

AML, normal iliğin kötü huylu hücrelerle değiştirildiği miyeloid öncül hücrelerin kontrolsüz proliferasyonu ile karakterize bir hematolojik malignitedir. Biyokimya değişiklikleriyle birlikte bozulmuş hematopoezise yol açar. Yoğun kemoterapi tedavisine rağmen ve sıklıkla otolog veya allojenik kök hücre nakliyle takip edilmesine rağmen, yine de hastaların yaklaşık %40'ı nüks yaşar. AML tanısı, immünolojik, sitopatolojik ve moleküler prosedürler yoluyla miyeloblastları gösteren periferik kan (PB) yayması ve kemik iliği (BM) biyopsi incelemesine dayanır. Ancak, BM aspirasyonu hastalar için ağır bir yüküdür ve özellikle erken teşhis veya sonraki ziyarette oldukça travmatik olabilir. Burada, lösemi özelliğini değerlendirmek için PB kullanımı erken teşhis veya sonraki ziyaret için çekici bir alternatif kaynak olmaktadır (Xie vd., 2023).

Çocukluk lösemisine ilişkin üç retrospektif vaka incelemesine göre (vakaların %75 ile %100'ü akut lenfoblastik lösemi), yaygın görülen belirti ve semptomlar arasında ateş

(%17 ile %77), uyuşukluk (%12 ile %39) ve kanama (%10 ile %45) yer alır (Rogalsky vd., 1986; Ma vd., 1997; Sinigaglia vd., 2008). Çocukların yaklaşık üçte birinde, özellikle omurga ve uzun kemiklerde olmak üzere kas-iskelet sistemi semptomları ortaya çıkar, %75'inde karaciğer veya dalakta büyüme gözlenir ve yaklaşık %60'ında lenfadenopati vardır. Merkezi sinir sistemi tutulumu, tanı sırasında çocukların yaklaşık %7'sinde mevcuttur. Akut miyeloid lösemi yetişkinlerde akut lösemisinin %80'ini oluşturur. Yetişkinler ayrıca ateş, yorgunluk ve kilo kaybı gibi semptomlar gösterir. Nefes darlığı veya göğüs ağrısı gibi anemiyle ilişkili semptomlar veya kadınlarda aşırı morarma, burun kanaması veya ağır adet dönemleri gibi trombositopeniyle ilişkili semptomlar gösterebilirler. Yetişkinlerin kemik ağrısıyla gelişme olasılığı daha düşüktür. Hepatosplenomegali ve lenfadenopati akut miyeloid lösemili yetişkinlerde nadirdir, ancak akut lenfoblastik lösemili yetişkinlerin yaklaşık %50'sinde bulunur. Merkezi sinir sistemi tutulumu akut lenfoblastik lösemili yetişkinlerin yaklaşık %5 ile %8'inde görülür (Davis vd., 2014).

2.1.2. Kronik Lösemi

Kronik miyeloid lösemi (KML), dönüştürülmüş, ilkel hematopoietik progenitör hücrelerin klonal miyeloproliferatif genişlemesidir. Miyeloid, monositik, eritroid, megakaryositik, B-lenfoid ve ara sıra T-lenfoid soyları içerir. KML, karyotipin - Philadelphia (Ph) kromozomunun - belirli bir anormalliğinin lökomogenezin patogenetik olaylarıyla ilişkilendirilebildiği ilk insan hastalığıdır. Biyolojik bir ajanla (interferon) tedavinin lösemik klonu baskıladığı ve sağkalımı uzattığı bulunan ilk neoplastik hastalıklardan biriydi. Heterojen olmasına rağmen, KML moleküler düzeyde en iyi karakterize edilmiş lösemi olup, başlamasında ve ilerlemesinde yer alan moleküler olayları daha fazla tanımlamaya ve bu olayları klinik belirtilerle, hastalığın

seyriyle ve terapötik müdahalelerle ilişkilendirmeye yardımcı olmuştur (Faderl vd., 1999).

Kronik lösemi alt tipleri neredeyse yalnızca yetişkinlerde görülür. Kronik lösemi hastaları tanı anında asemptomatik olabilir. Kronik lenfositik lösemi hastalarının yaklaşık %50'si ve kronik miyeloid lösemi hastalarının %20'si, ilgisiz bir nedenle alınan tam kan sayımında belirgin lökositoz bulunduğunda, tesadüfen tanı alır. Semptomlar daha az yaygındır ve kronik lenfositik lösemi hastalarının %15'inde ve kronik miyeloid lösemi hastalarının yaklaşık üçte birinde görülür. Hepatosplenomegali ve lenfadenopati, kronik lenfositik lösemili kişilerde yaygın fiziksel muayene bulgularıdır. Splenomegali, kronik miyeloid lösemi hastalarında yaygındır; büyük, retrospektif bir incelemede, hastaların %75'inin elle muayene edilebilen bir dalağı vardı. Kanama ve morarma kronik lösemi alt tiplerinde daha az görülen özelliklerdir (Davis vd., 2014).

2.2. Fourier Dönüşüm Infrared (FTIR) Spektroskopisi

Infrared (kızılötesi) (IR) spektroskopisi, son on yılda hematoloji alanına önemli katkılarda bulunmuştur. Kandaki üç hücresel elementin, yani lökositlerin, eritrositlerin ve trombositlerin normal fizyolojisi ve patolojik değişiklikleri, bu yöntemle kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. Bu yöntem kan hücrelerindeki makromoleküllerin yapılarındaki ince değişiklikleri ortaya çıkararak, çeşitli yaygın hematolojik bozuklukları teşhis etmek için kullanılan geleneksel biyokimyasal analizlere ideal bir tamamlayıcı analitik araç haline gelmiştir. Bu tür geleneksel analizler, eritrosit membran akışkanlığını ve konformasyonel değişiklikleri belirleyen moleküler yapı ölçümlerini, trombosit membranlarının lipid profilini ve lökosit proliferasyonu ve farklılaşma analizlerini içerir. IR spektroskopik tabanlı teknikler, DNA değişikliklerini,

proteinlerdeki ikincil yapısal değişiklikleri analiz etmek ve hücrel lipitlerin durumlarını belirlemek için kullanılabilir. Moleküler ve biyomedikal açıdan, IR spektroskopisi lösemi ve talaseminin tanısı ve prognozu, kemoterapi hastalarında ilaç duyarlılığını ve direncini tahmin etmek ve daha yakın zamanda kan hücrelerindeki apoptotik süreçleri incelemek için araştırılmıştır. Bu çalışmalar ilaca dirençli hastaların erken teşhisi ve hematolojik bozuklukların, özellikle malignitelerin erken teşhisi konusunda büyük umut vadetmektedir. Dahası, IR spektroskopik tabanlı araştırmalar, kan hücrelerindeki moleküler değişiklikleri çok erken bir patogeneze aşamasında ortaya çıkararak hematolojik bozuklukların altında yatan spesifik mekanizmaların açıklığa kavuşturulmasını sağlayacaktır (Liu vd., 2005).

Fourier dönüşüm infrared (FTIR) spektroskopisi, son zamanlarda yılda önemli gelişmeler kaydeden, daha kolay, daha hızlı ve daha nesnel tanımlar vaat eden bir alandır. FTIR spektroskopisi, bir spektrum biçiminde görünen madde ve elektromanyetik radyasyon arasındaki etkileşimleri inceler. Her molekülün, kendisini benzersiz kılan ve diğer moleküllerden ayırt edilmesini sağlayan bir spektrum izi vardır. FTIR spektroskopisi ayrıca hücrel değişiklikleri izlemek için etkili ve tahribatsız bir yöntemdir. FTIR spektral analizi, çeşitli organ hastalıklarının karakterizasyonunun yanı sıra proteinler (Cooper ve Knutson, 1995), nükleik asitler (Liquier ve Taillandier, 1996; Banyay vd., 2003) ve lipitler (Brandenburg ve Seydel, 1998) gibi farklı biyomoleküllerin belirlenmesine olanak sağlamaktadır. Spektroskopik tekniklerin kanser tespitindeki önemini vurgulayan çeşitli araştırma belgeleri literatürde yayınlanmıştır (Mantsch ve Chapman, 1996; Mostaço-Guidolin vd., 2009; Gremlich, 2001). FTIR, numuneyi oluşturan moleküler konformasyonları, bağlanma tiplerini, fonksiyonel grupları ve moleküller arası etkileşimleri kesin olarak belirlemek

için bireysel bantlara veya fonksiyonel gruplara bakarak hücrelerin ve dokuların farklılaşmasına ve karakterizasyonuna odaklanır (Fadlelmoula vd., 2022).

FTIR tekniği, numunelerin moleküler bileşimine ışık tutabilen tahribatsız bir spektroskopik araçtır. Genellikle orta infrared (MIR) bölgesinde ($400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$) spektral parmak izi sağlar ve nükleik asitlere, proteinlere, karbohidratlara ve lipitlere karşılık gelen karakteristik absorpsiyon piklerine sahiptir. Standart tanı araçlarının aksine FTIR, hızlı, uygun maliyetli ve tekrarlanabilir bir araçtır. Bir avantaj olarak, bu teknikte numune hazırlama aşamasında hemen hemen hiç zorluk çekilmemektedir. Son yıllarda, birçok çalışma FTIR spektroskopisinin dokularda, hücrelerde ve biyosıvılarda kansere özgü kimyasal değişikliklerin erken tespitine uygulanmasını göstermiştir, böylece neoplazmların taranması ve erken teşhisi için kullanılabileceği potansiyelini arttırmıştır (Su ve Lee, 2020; Chaber vd., 2021).

Orta infrared bölgesinin (MIR), insan serumlarının FTIR spektrumunu kullanarak hastalık modellerinin tanımlanmasında yararlı olduğu gösterilmiştir (Staib vd., 2001). Glikoz, toplam protein, kolesterol ve üre gibi serum bileşenlerinin hassas bir şekilde belirlenmesi bu bölgede FTIR tekniği kullanılarak gerçekleştirilmiştir (Erukhimovitch vd., 2006). MIR bölgesinde, infrared radyasyonu tanımlamak için dalga boyu yerine dalga sayısı (cm^{-1}) kullanılır. Dalga sayısı ($\bar{\nu}$), dalga boyu (λ) ve frekans (ν) ile ilişkilidir:

$$\bar{\nu} = \nu/(c/n) = 1/\lambda$$

burada c , ışığın vakumdaki hızıdır ($3 \times 10^{10}\text{ cm/s}$) ve (c/n) ışığın kırılma indisi n olan bir ortamdaki hızıdır ($n_{\text{hava}} = 1.00$). Bu nedenle, dalga sayılarında MIR spektral bölgesi 4000 ile 400 cm^{-1} arasında uzanır (Gaffney vd., 2012). Uluslararası Birimler Sistemi (SI) tarafından infrared spektral bölgede önerilen dalga

boyu birimi mikrometredir (μm), ancak mikron (μ) özellikle eski literatürde sıklıkla birbirinin yerine kullanılır. Dalga sayıları ve dalga boyları aşağıdaki denklem kullanılarak birbirine dönüştürülebilir:

$$\bar{\nu} \text{ (cm}^{-1}\text{)} = \mu\text{m} \times 10^4$$

3. SONUÇ

Ramesh ve ark. (2002), B ve T hücreli çocukluk çağı lösemi hastalarından kemoterapiden önce ve sonra alınan kandan periferik lenfositleri izole etmiş ve izole edilen lenfositlerin FTIR spektrumlarını kaydetmiştir. Kontrol grubu ile tedavinin başlamasından önceki hastalardan alınan örneklerle ait spektrumlar arasında önemli bir spektral değişiklik gözlenmemiştir. Fosfat grubunun simetrik ($1000\text{--}1100 \text{ cm}^{-1}$) ve asimetrik ($1200\text{--}1245 \text{ cm}^{-1}$) titreşim bölgelerinin ve ayrıca proteinlerden kaynaklanan amid II bölgesinin absorbandsında küçük değişiklikler meydana gelmiştir. 15 ve 30 günlük tedaviden sonra elde edilen spektrumlar incelenmiş ve nükleik asitlere karşılık gelen fosfat bantlarının absorbandsında açıkça azalma görülmüştür. Ayrıca nükleik asitlerdeki fosfodiester bağlarının simetrik gerilme titreşimini belirten 965 cm^{-1} bandı, işlemden önce ve sonra şiddetçe azalma göstermiştir. Kemoterapi işleminden önceki örnek ile işlemin son (22/30) günü arasındaki farkın büyük olduğu ve fosfat içeren metabolitlerin simetrik ve asimetrik gerilme titreşiminde meydana geldiği saptanmıştır. Öte yandan, kemoterapi tedavisi, B hücreli ALL hastasının spektrumlarında gözlemlenebilen hücrelerde köklü moleküler değişikliklere neden olmuştur. Aynı çalışmada, tedaviden önce T hücreli ALL hastasından izole edilen lenfositlerin spektrumları kontrollerle karşılaştırıldığında fosfat bölgesinde absorbanda değişiklikleri göstermemiştir. $1400\text{--}1600 \text{ cm}^{-1}$ arasındaki bölgede, kontroller ile tedaviden önceki örnek

arasındaki şiddette belirgin değişiklikler bulunmuştur. Protein konsantrasyonunda azalma, amid II bandı için daha düşük şiddetle belirginleşmiştir. Kemoterapi tedavisi sırasında, spektrumlarda önemli değişiklikler meydana gelmiştir. Tedavinin 11. gününde ölçülen spektrumlar, $900\text{--}1800\text{ cm}^{-1}$ spektral bölgesindeki absorbansın ani bir şekilde azaldığını ve fosfat bölgesindeki piklerin genişlediğini göstermektedir. Tedavinin 22. gününde toplanan spektrumlar, tedaviden önceki (0. gün) spektruma kıyasla $1000\text{ ile }1200\text{ cm}^{-1}$ arasındaki bölgede çok daha düşük absorbans ile önemli ölçüde daha düşük fosfat içeriği göstermiştir. Bu durum, kemoterapi tedavisi nedeniyle hem B hem de T hücreli hastalarda blast (kanseri B veya T hücreleri) yüzdesindeki belirgin azalma ile uyumludur. Bir haftalık kemoterapi tedavisinden sonraki spektrumların, blast yüzdesinde ciddi bir azalma ile lenfositlerin normal popülasyonuna karşılık geldiği belirtilmiştir (Ramesh vd., 2002).

Erukhimovitch ve ark. (2006), lösemi hastalarının izlenmesi ve tanımlanması için biyobelirteç görevi görebilecek spektral parametreleri saptamak amacıyla insan plazma örneklerinin analizi için Fourier dönüşüm infrared mikrospektroskopisi (mikro-FTIR) kullanmıştır. Plazma örnekleri, kronik lenfositik lösemi hastası sağlıklı ve hasta kişilerden elde edilmiş ve mikro-FTIR ile analiz edilmiştir. Sağlıklı ve lösemi hastalarının FTIR spektrumlarının benzer olduğunu, ancak hasta örneklerinin bazı bölgelerde sağlıklı kişilerden farklı olduğunu göstermektedir. Spektrumlardaki $1643\text{ ve }1544\text{ cm}^{-1}$ absorbans bantları, sırasıyla amid I ve II bantlarına karşılık gelmektedir. Amid I bandı, C=O hidrojen bağlı gerilme titreşimlerinden, amid II ise C–N gerilme ve CNH bükülme titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. 1270 cm^{-1} 'deki amid III bandı, C–N gerilmesi ve N–H bükülmesinin birleşmesinden kaynaklanan proteinler tarafından sağlanmaktadır. $900\text{--}1300\text{ cm}^{-1}$ 'deki bantlar sakkaritlerin

(glukoz, laktoz ve gliserol) C–O bükölme modlarına, 1360–1430 cm^{-1} 'deki pikler amino asitlerin COO^- 'suna ve 1430–1480 cm^{-1} ise yağ asitlerine, fosfolipitlere ve trigliseritlere karşılık gelmektedir. Elde edilen tüm spektrumlar dikkatli bir şekilde incelenmiş ve birkaç spektral parametre lösemi hastalarının tespiti için olası gelecekteki biyobelirteçler olarak tanımlanabilmiştir. Bunlardan ilki, kontrol örnekleriyle karşılaştırıldığında, lösemi hastalarının serumlarında 1056 cm^{-1} 'deki pikte önemli ve tespit edilebilir bir azalma olduğunu göstermiştir. Bu spektral pik karbohidratlara karşılık gelmektedir. İkincisi, 1270 cm^{-1} 'deki pik şiddeti lösemi örneklerinde normal örneklerle karşılaştırıldığında önemli ölçüde daha düşük olduğu ve bu spektral pikin amid III bandına karşılık geldiği saptanmıştır. Üçüncüsü, amid I ve II pikleri arasındaki 1592 cm^{-1} 'deki pikin tüm hasta örneklerinde önemli ölçüde azaldığı görülmüş ve bu spektral pikin amino asitlerin $\delta(\text{NH}_2)$ açısı bükölmesi durumuna karşılık geldiği ortaya konulmuştur (Erukhimovitch vd., 2006).

Sahu ve ark. (2006), FTIR spektroskopisini lösemi hastalarında kemoterapi sırasında ilaçların etkinliğini izlemek için ve yetişkin AML hastasının beyaz kan hücrelerinde (WBC) meydana gelen spektral değişiklikler saptamak için kullanmıştır. Kemoterapi sırasında normalize edilen spektrumların şiddetlerinde, karbohidratlar, nükleik asitler, lipitler ve diğer hücresel bileşenler gibi biyokimyasallara karşılık gelen çeşitli dalga sayılarında dinamik değişiklikler olduğu görülmektedir. Şiddet değişikliklerinin belirgin olduğu dalga sayılarından biri, nükleik asitler ve lipitlerden kaynaklanan absorbandsa karşılık gelen 966 cm^{-1} civarındaki bant olduğu saptanmıştır. Ayrıca spektrumların ikinci türevleri de alınarak dalga sayılarında bir kayma olup olmadığı incelenmiştir. Spektrumlarda 0. ve 4. günde normal yetişkine kıyasla birkaç bantta şiddet azalması saptanmıştır ve bu durumun lösemi nedeniyle ilgili

biyokimyasalların miktarının azaldığı yönünde yorumlanmıştır. Glikojen (karbohidratlar) ve fosfatlar, $900\text{--}1185\text{ cm}^{-1}$ bölgesindeki absorbansa çoğunlukla katkıda bulunan moleküller olmuştur. Absorbansın lipitlerden ve proteinlerden gelen CH_2 ve CH_3 gerilme titreşimlerinden kaynaklandığı $2800\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$ bölgesinde büyük farklılıklar olduğu belirlenmiştir. 27. günde hastanın normal şekilde taburcu edilmesiyle birlikte, hastanın WBC spektrumunun her iki bölgede de sağlıklı gönüllülerin WBC spektrumlarına çok benzediği ortaya konulmuştur. Amid II/Amid I absorbans oranının değişimi, nükleik asitlerdeki değişimi temsil etmektedir ve bu oranda önemli dalgalanmalar olduğu gözlemlenmiştir. Kemoterapinin sonunda ise amid II/amid I oranı kontrol grubuna benzer şekilde normal bir seviyeye ulaşmıştır. Amid II/Amid I oranı, örneklerdeki su miktarı, protein konformasyonu ve bileşimi, nükleik asitlerin varlığı/konformasyonu (amid I şiddetini etkileyen faktörler) gibi çeşitli diğer parametrelerden etkilenebilmektedir ve bu nedenle günden güne büyük değişkenlik beklenebilmektedir. Plazma membranındaki lipitler, esas olarak membran stabilitesini, akışkanlığını ve membran enzimatik aktivitesini belirleyen fosfolipitlerden oluşmaktadır. Bu nedenle, WBC’lerde lipit absorbansının izlenmesi önemli bir tanı parametresidir. Lipit/protein oranları, 2852 , 1740 ve 1400 cm^{-1} ’deki şiddetler kullanılarak hesaplanmaktadır. Yetişkin için lipit/protein oranı kemoterapi sonlandırıldığında 7. güne kadar azalır ve daha sonra oran artar. Tedavinin sonundaki son değerler normal bir seviyeye ulaşır ve böylece FTIR spektroskopisine dayalı tanı için çıkarımlar yapabilmektedir. Ayrıca, sıfırıncı gündeki başlangıç değerinin, sağlıklı grupla benzer olan son değerden biraz daha düşük olduğu da belirtilmektedir. Bu nedenle, bu oran kemoterapi sırasında WBC popülasyonunda normalliği izlemek için önemli bir parametre olabilmektedir (Sahu vd., 2006).

Sheng ve ark. (2013), lösemi hastalarının serum örneklerini sağlıklı kişilerin serum örnekleri ile karşılaştırmak için FTIR spektroskopisi kullanmıştır. Lösemi hastalarının serum örneklerinin infrared spektrumlarının sağlıklı kişilerin serum örneklerinin infrared spektrumlarına benzer olduğu, spektrumlar arasında belirgin bir pik kayması olmadığı ve tüm örneklerin proteinlerden, lipitlerden ve nükleik asitlerden oluştuğu belirtilmiştir. Lösemi hastalarının serum örneklerini sağlıklı kişilerin serum örneklerinden ayırt etmek için: 1079, 1542, 1045, 1467, 2959, 2931 cm^{-1} pikleri seçilmiş ve pik yüksekliği (H1045, H1079, H1467, H1542, H2959, H2931) ölçülmüştür. Daha sonra, H1079/H1542, H1045/H1467 ve H2959/H2931 oranları hesaplanmış ve lösemi hastalarının serum örnekleri ile sağlıklı kişilerin serum örnekleri arasındaki farklılıkları karşılaştırmak için bağımsız t-testi kullanılmıştır. 1079 cm^{-1} civarındaki band PO_2^- 'nin simetrik titreşiminden kaynaklanırken, 1542 cm^{-1} civarındaki bant C–N gerilmesinden ve N–H bükülmesinden kaynaklanmaktadır. H1079/H1542 (DNA/proteinler) oranı sağlıklı kişileri kanser hastalarından ayırt etmek için yaygın olarak kullanılan bir faktördür. H1079/H1542'nin ortalama değeri lösemi hastaları için 0,247 iken sağlıklı kişiler için 0,284 olarak bulunmuştur. Bağımsız t-testi H1079/H1542'nin P değerinin 0,2099 olduğunu göstermiş ($P > 0,05$) ve bu durumun lösemi hastaları ile sağlıklı kişilerin H1079/H1542 oranlarının önemli ölçüde farklı olmadığını ortaya koymuş olup H1079/H1542 oranı lösemi hastalarını sağlıklı kişilerden ayırt edememiştir. 1045 cm^{-1} bandı karbohidratlardaki C–O gerilmesine bağlıdır ve glikojeni temsil ederken, 1467 cm^{-1} bandı kolesterolü temsil etmektedir. H1045/H1467'nin ortalama değeri lösemi hastaları için 2,85 iken sağlıklı kişiler için 3,53'tür. Bağımsız t-testi, H1045/H1467'nin P değerinin 0,0514 ($P > 0,05$) olduğunu göstermiş ve lösemi hastaları ve sağlıklı kişiler arasındaki oranların önemli ölçüde farklı olmadığını ortaya koymuştur.

2959 cm^{-1} bandı metil gruplarındaki asimetric C–H gerilmesinden ve 2931 cm^{-1} bandı metilen gruplarındaki asimetric C–H gerilmesinden kaynaklanmaktadır. H2959/H2931 oranı CH_3/CH_2 'yi temsil etmektedir. H2959/H2931'in ortalama değeri lösemi hastaları için 0,988 iken sağlıklı kişiler için 1,18 olarak bulunmuştur ve bu durum lösemi hastalarının serumundaki lipidlerin sağlıklı kişilerin serumundakilerden daha uzun zincirlere ve/veya daha az dallı zincire sahip olduğunu ortaya koymaktadır (Sheng vd., 2013).

Chaber ve ark. (2021), en yaygın pediatrik neoplazm olan B hücreli öncül lenfoblastik lösemiye (BCP-ALL) tespit etmek ve erken tarama için yeni biyobelirteçler belirlemek amacıyla BCP-ALL'li 10 hastanın kan serumlarını ve neoplazm dışındaki bazı rahatsızlıkları olan 10 çocuğun kontrol örneklerini FTIR spektroskopisi ile incelemiştir. Lösemi hastalarına ve sağlıklı bireylere ait örneklerin ortalama spektrumları arasında belirgin bir pik kayması gözlemlenmemiş iken bazı piklerin şiddetleri arasında birkaç farklılık bulunmuştur. En önemli kaymanın, amid I bandına (1700–1600 cm^{-1}) karşılık gelen pik için gözlemlendiği ve bunun peptit bağlarının C=O gerilme titreşimlerinden kaynaklandığı ortaya konulmuştur. Kontrol grubunun ortalama FTIR spektrumunda amid I bandının maksimumunun pozisyonu 1645 cm^{-1} 'de iken BCP-ALL hastalarının ortalama spektrumunda aynı pik maksimumu 1641 cm^{-1} 'e kaymıştır. BCP-ALL grubu için 1641/1537, 2926/1641, 2926/1537, 1070/1239, 3277/1537, 3277/1641 ve 1641/1239 ve kontrol grubu için 1645/1538, 2924/1645, 2924/1538, 1071/1241, 3278/1538, 3278/1645 ve 1645/1241 pik alanı oranları hesaplanmıştır. Pik alanı oranlarının çoğunluğu her iki grup arasında anlamlı olarak farklı değil iken 2965/1645 pik alanı oranı anlamlı olarak farklı bulunmuştur (Chaber vd., 2021).

KAYNAKÇA

- Altharawi, A., Rahman, K.M., Chan, K.L.A. (2019) Towards identifying the mode of action of drugs using live-cell FTIR spectroscopy, *Analyst*, 144(8), 2725–2735.
- Babrah, J., McCarthy, K., Lush, R.J., Rye, A.D., Bessant, C., Stone, N. (2009), Fourier transform infrared spectroscopic studies of T-cell lymphoma, B-cell lymphoid and myeloid leukaemia cell lines, *Analyst*, 134(4), 763–768.
- Banyay, M., Sarkar, M., Graslund, A. (2003), A library of IR bands of nucleic acids in solution, *Biophys. Chem.*, 104, 477–488.
- Bellisola, G., Cinque, G., Vezzalini, M., Moratti, E., Silvestri, G., Redaelli, S., Gambacorti Passerini, C., Wehbe, K., Sorio, C. (2013) Rapid recognition of drug-resistance/sensitivity in leukemic cells by Fourier transform infrared microspectroscopy and unsupervised hierarchical cluster analysis, *Analyst*, 138(14), 3934–3945.
- Brandenburg, K., Seydel, U. (1998), Infrared spectroscopy of glycolipids, *Chem. Phys. Lipids*, 96, 23–40.
- Chaber, R., Kowal, A., Jakubczyk, P., Arthur, C., Łach, C., Wojnarowska-Nowak, R., Kusz, K., Zawlik, I., Paszek, S., Cebulski, J. (2021), A preliminary study of FTIR spectroscopy as a potential non-invasive screening tool for pediatric precursor B lymphoblastic leukemia, *Molecules*, 26, 1174.
- Cooper, E.A., Knutson, K. (1995), Fourier transform infrared spectroscopy investigations of protein structure, *Vaccine Des.*, 7, 101–143.

- Davis, A.S., Viera, A.J., Mead, M.D. (2014), Leukemia: an overview for primary care, *American Family Physician*, 89(9), 731–738.
- Döhner, H., Weisdorf, D.J., Bloomfield, C.D. (2015), Acute myeloid leukemia, *The New England Journal of Medicine*, 373(12), 1136–1152.
- Erukhimovitch, V., Talyshinsky, M., Souprun, Y., Huleihel, M. (2006), FTIR spectroscopy examination of leukemia patients plasma, *Vibrational Spectroscopy*, 40, 40–46
- Faderl, S., Talpaz, M., Estrov, Z., O'Brien, S., Kurzrock, R., Kantarjian, H.M. (1999), The biology of chronic myeloid leukemia, *The New England Journal of Medicine*, 341(3), 164–172.
- Fadlelmoula, A., Pinho, D., Carvalho, V.H., Catarino, S.O., Minas, G. (2022), Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy to analyse human blood over the last 20 years: a review towards lab-on-a-chip devices, *Micromachines*, 13, 187, 1–20.
- Finlayson, D., Rinaldi, C., Baker, M.J. (2019), Is infrared spectroscopy ready for the clinic?, *Anal. Chem.*, 91(19), 12117–12128.
- Gaffney, J.S., Marley, N.A., Jones, D.E. (2012), Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy, *Optical Imaging and Spectroscopy, Characterization of Materials*, Kaufmann, E.N., Eds.; John Wiley & Sons Inc.: New York, NY, USA, pp. 1104–1135.
- Gremlich, H.U. (2001), *Infrared and Raman Spectroscopy of Biological Materials*; Marcel Dekker: New York, NY, USA.
- Huber, M., Kepesidis, K.V., Voronina, L., Bozic, M., Trubetskov, M., Harbeck, N., Krausz, F., Zigman, M.

- (2021), Stability of person-specific blood-based infrared molecular fingerprints opens up prospects for health monitoring, *Nat. Commun.*, 12(1), 1511.
- Kampen, K.R. (2012), The discovery and early understanding of leukemia, *Leukemia Research*, 36, 6–13.
- Kendall, C., Isabelle, M., Bazant-Hegemark, F., Hutchings, J., Orr, L., Babrah, J., Baker, R., Stone N. (2009), Vibrational spectroscopy: a clinical tool for cancer diagnostics, *Analyst*, 134(6), 1029–1045.
- Liquier, J., Taillandier, E. (1996), Infrared spectroscopy of nucleic acids. In *Infrared Spectroscopy of Biomolecules*; Mantsch, H.H., Chapman, D., Eds.; Wiley-Liss: New York, NY, USA, pp. 131–158.
- Liu, K.-Z., Shi, M.-H., Mantsch, H.H. (2005), Molecular and chemical characterization of blood cells by infrared spectroscopy: A new optical tool in hematology, *Blood Cells, Molecules, and Diseases*, 35, 404–412.
- Ma, S.K., Chan, G.C., Ha, S.Y., Chiu, D.C., Lau, Y.L., Chan, L.C. (1997), Clinical presentation, hematologic features and treatment outcome of childhood acute lymphoblastic leukemia: a review of 73 cases in Hong Kong, *Hematol Oncol.*, 15(3), 141–149.
- Mantsch, H.H., Chapman, D. (1996), *Infrared Spectroscopy of Biomolecules*; John Wiley & Sons Inc.: New York, NY, USA.
- Maziak, D.E., Do, M.T., Shamji, F.M., Sundaresan, S.R., Perkins, D.G., Wong, P.T. (2007), Fourier-transform infrared spectroscopic study of characteristic molecular structure in cancer cells of esophagus: an exploratory study, *Cancer Detect Prev.*, 31(3), 244–253.

- Mostaço-Guidolin, L.B., Murakami, L.S., Nomizo, A., Bachmann, L. (2009), Fourier transform infrared spectroscopy of skin cancer cells and tissues, *Appl. Spectros. Rev.*, 44, 438–455.
- Pui, C.-H., Evans, W.E. (1998), Acute lymphoblastic leukemia, *The New England Journal of Medicine*, 339(9), 605–615.
- Ramesh, J., Kapelushnik, J., Mordehai, J., Moser, A., Huleihel, M., Erukhimovitch, V., Levi, C., Mordechai, S. (2002), Novel methodology for the follow-up of acute lymphoblastic leukemia using FTIR microspectroscopy, *J. Biochem. Biophys. Methods*, 51, 251–261.
- Rogalsky, R.J., Black, G.B., Reed, M.H. (1986), Orthopaedic manifestations of leukemia in children, *J Bone Joint Surg Am*, 68(4), 494–501.
- Rozman, C., Montserrat, E. (1995), Chronic lymphocytic leukemia, *The New England Journal of Medicine*, 333(16), 1052–1057.
- Sahu, R.K., Zelig, U., Huleihel, M., Brosh, N., Talyshinsky, M., Ben-Harosh, M., Mordechai, S., Kapelushnik, J. (2006), Continuous monitoring of WBC (biochemistry) in an adult leukemia patient using advanced FTIR-spectroscopy, *Leukemia Research*, 30, 687–693.
- Sheng, D., Liu, X., Li, W., Wang, Y., Chen, X., Wang, X. (2013), Distinction of leukemia patients' and healthy persons' serum using FTIR spectroscopy, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 101, 228–232.
- Sinigaglia, R., Gigante, C., Bisinella, G., Varotto, S., Zanesco, L., Turra, S. (2008) Musculoskeletal manifestations in pediatric acute leukemia, *J Pediatr Orthop.*, 28(1), 20–28.

- Su, K.Y., Lee, W.L. (2020), Fourier Transform Infrared Spectroscopy as a Cancer Screening and Diagnostic Tool: A Review and Prospects, *Cancers*, 12, 115.
- Staib, A., Dolenko, B., Fink, D.J., Fruh, J., Nikulin, A.E., Otto, M., Pessin-Minsley, M.S., Quarder, O., Somorjai, R., Thienel, U., Werner, G. (2001), Disease pattern recognition testing for rheumatoid arthritis using infrared spectra of human serum, *Clin. Chim. Acta*, 308, 79.
- Tebbi, C.K. (2021), Etiology of acute leukemia: a review, *Cancers*, 13, 2256.
- Wald, N., Bordry, N., Foukas, P.G., Speiser, D.E., Goormaghtigh, E. (2016), Identification of melanoma cells and lymphocyte subpopulations in lymph node metastases by FTIR imaging histopathology, *Biochim Biophys. Acta*, 1862(2), 202–212.
- Xie, L., Wang, J., Wang, N., Zhu, J., Yin, Q., Guo, R., Duan, J., Wang, S., Hao, C., Shen, X. (2023), Identification of acute myeloid leukemia by infrared difference spectrum of peripheral blood, *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 233, 115454.

METAL-ORGANİK KAFES (MOF) YAPILARIN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Ali UĞUR¹

Arife GENCER İMER²

1. GİRİŞ

Metal-organik kafes (MOF) yapılar, metal iyonlarının poli-fonksiyonel organik bağlayıcıların üç boyuta kadar ağ oluşturabilen, kristal yapıda, gözenekli son derece düzenli polimerleridir (Lee et al. 2009). Başta gaz depolama, ayırma ve kataliz gibi alanlarda kullanılsa da günümüzde fotonik ve optoelektronik alanlarda da ön plana çıkmaktadırlar (Rosi et al. 2003). MOF'ların optik özellikleri ayrıntılı olarak anlaşılabilmekte ve fonksiyonel malzemelerin tasarımı mümkün hale gelmektedir. Tasarlanmış bir ince filmin optik ve elektriksel yapısını anlamak ve bunlardan tam olarak yararlanmak için optoelektronik cihazların performansını artırmaya yönelik şemalar geliştirmek çok önemlidir. Birçok malzeme arasında, MOF'lar benzersiz yapısal özellikleri (Metal iyonları ve organik ligandlardaki değişim), ayarlanabilir optik özellikleri nedeniyle son zamanlarda optik ince filmlerin üretimi için pratik bir seçim olarak ortaya çıkmıştır (Zhai et al. 2022).

Optik malzemelerin temel özelliklerinden ve parametrelerinden biri kırılma indisidir. MOF'un optik sabitini

¹ Dr., Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik, ugurali1976@gmail.com, ORCID: 0009-0007-6241-0303.

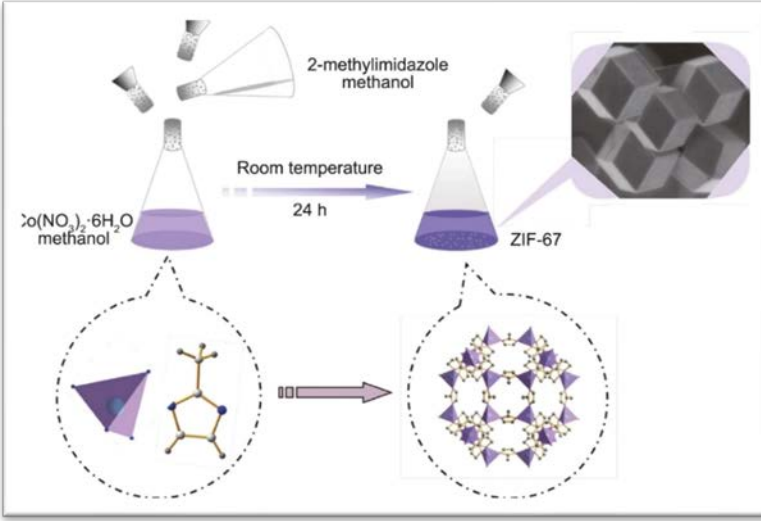
² Prof., Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik, gencerimerarife@gmail.com, ORCID: 0000-0002-8147-9169.

belirlemek için elipsometrik yöntem ve girişim saçakları yöntemi gibi çeşitli yöntemler vardır. Dikkat edilmesi gereken önemli nokta, MOF ince filmlerinin etkin kırılma indislerinin MOF toz malzemelerinin içsel kırılma indislerinden farklı olmasıdır (Sabzehmeidani et al. 2024).İnce film üretimi sırasında oluşan parçacıklar arası gözenekler bu tutarsızlığın nedenidir. Sentezlenen ince filmin kırılma indisi, film yoğunluğu arttıkça MOF toplu kırılma indisine yaklaşır (Multilayer Thin Films Versatile Applications for Materials Engineering n.d.).

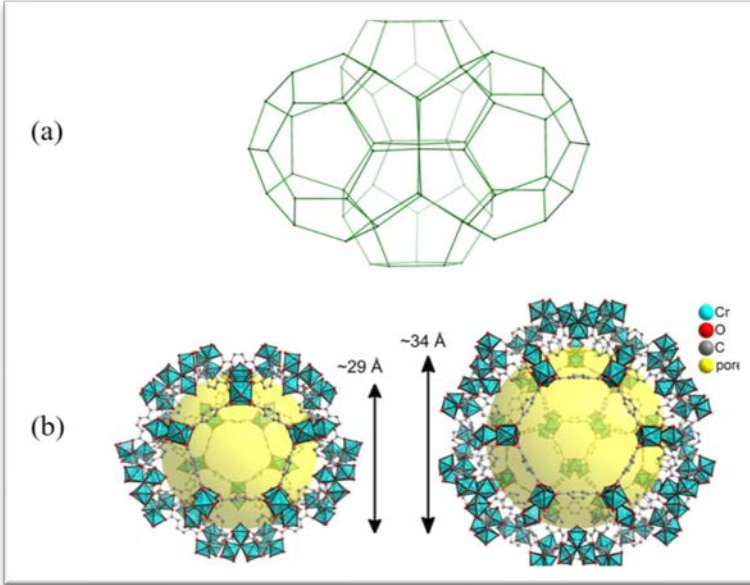
MOF yapıların kullanılmasıındaki temel amaçlardan biri, emisyon merkezlerinin, inorganik ve organik kimyayı birleştirerek yapısal çeşitliliğin özelliklerini örneklendirmek için "çoklu fotonik birimler" tarafından oluşturulabilmesi nedeniyle umut verici optik algılama malzemeler olmalarıdır (Jiang et al. 2018). Bu yapıların metal iyon ve organik ligandların birleşiminden oluşması, yakın kızılötesi, UV, görünür bölge gibi farklı dalga boylarında ışık yayma özelliği göstermektedir. Ayrıca, MOF yapılar organik ve inorganik gözenekli malzemelerin birçok özelliğini barındıran geniş yüzey alanına sahip, ayarlanabilir gözenek boyutu sayesinde farklı kullanım alanlarında da ön plana çıkmaktadırlar (Yi et al. 2015).

Ligantların metal atomlarına bağlanma uzunluğu, bağlanma açısı ve sıklığı MOF yapı geometrisinde değişkenlik gösterir. Böylece MOF yapının yüzey alanı, hacmi ve gözenek boyutu bu parametrelere bağlı olarak değişir ve ayarlanabilir (Li et al. 2020; Schneemann et al. 2014).

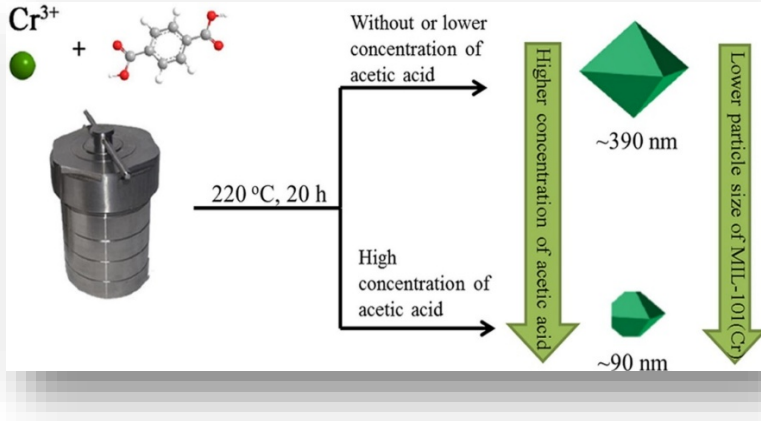
Yaygın olarak kullanılan ve optik alanda pek çok uygulaması olan MIL-101, *nano*-MIL-101, ZIF-67 gibi bazı MOF yapıların yüzey alanları ve elde edilişi Şekil 1,2 ve 3'te gösterilmiştir



Şekil 1. ZIF-67 şematik gösterimi (Duan, Yu, and Hu 2022).



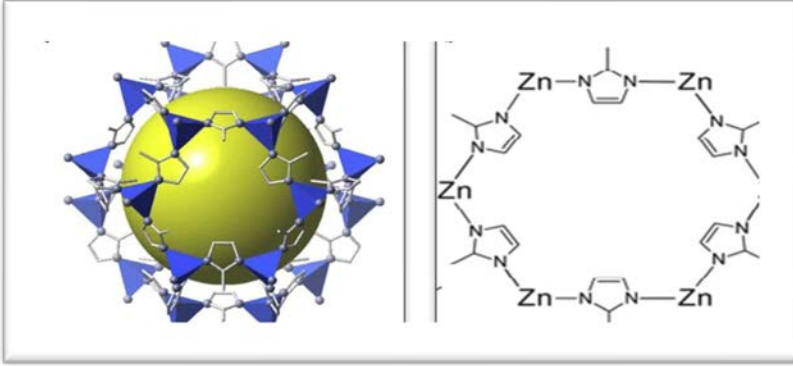
Şekil 2. a) MIL-101 yapısı b) beşgen pencereli sırasıyla 29 veya 34 Å çapındaki mezogözenekli kafeslerin şematik gösterimi (Zou, Dong, and Zhao 2022).



Şekil 3. nano-MIL-101 elde edilişi ve şematik gösterimi (Zou et al. 2022).

Yan Wang ve arkadaşlarının 2017’de yaptığı mikrodalga emici özelliklerin araştırmaları, çekirdek-kabuk kompozitinin maksimum emilim yoğunluğu ve emilim bant genişliği açısından önemli ölçüde iyileştirilmiş EM dalga emilim özellikleri sergilediğini göstermiştir (Wang et al. 2017).

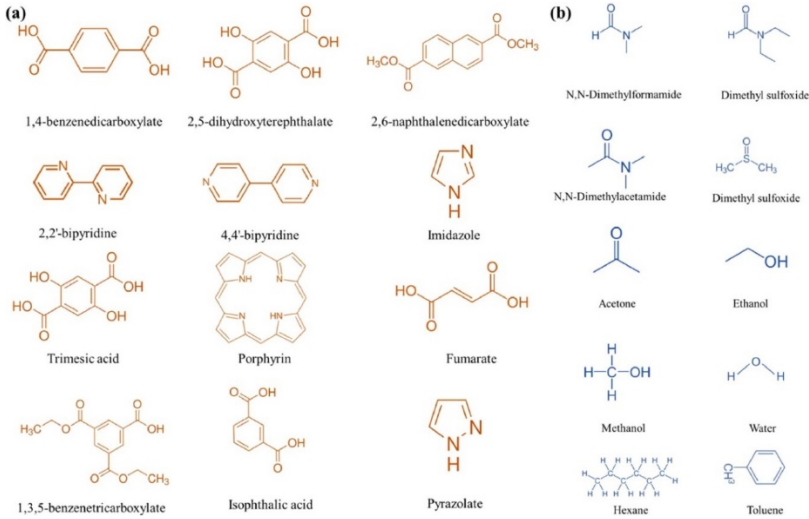
Dong, M ve arkadaşları, gözenekli yapıda lüminesans katkı molekülleri kapsülleme için ultra yüksek gözeneklilik ve değiştirilebilir iç yüzey özelliğinin avantajından yararlanılarak, MOF yapılara çok modlu ölçüm yeteneği kazandırmak için bir lüminesans boyutu daha eklenebileceğini göstermiştir (Dong et al. 2014).



Şekil 4. ZIF-8 şematik gösterimi (Xiao et al. 2022).

Bilindiği üzere UV maruziyeti birçok sağlık sorununa yol açmaya devam etmektedir. Yüksek güvenlik ve etkinliğe sahip yeni UV filtrelerine ihtiyaç duyulmaktadır. Metal-organik çerçeveler, hassas kontrollü sentezle ayarlanabilir optik, elektriksel ve fotoelektrik özellikleri nedeniyle UV filtresi geliştirme için uygun birer adaydır. Bu bilgilerden yola çıkılarak Jisheng Xiao ve arkadaşları çeşitli bant aralığı enerjilerine sahip dört çinko bazlı MOF, optik davranışlarını araştırmak ve güneş kremi olarak olasılıklarını değerlendirmek için seçmiştir. Zeolitik imidazolat çerçeve-8 (ZIF-8) yapı en yüksek ve en geniş UV yansımaya sahip olduğu, böylece fare derisinde güneş yanığına ve DNA hasarına karşı koruma sağladığı ve hatta domuz derisinde ticari olarak mevcut UV filtreleri TiO_2 veya ZnO ile karşılaştırılabilir veya daha yüksek bir anti-UV etkinliğine ulaştığı, insan derisiyle iyi korelasyon gösteren bir model olduğunu göstermişlerdir. Ayrıca, ZIF-8 düşük radikal üretimi, düşük cilt penetrasyonu, düşük toksisite, yüksek şeffaflık ve yüksek stabilite ile topikal cilt kullanımı için cazip özellikler sergilemiştir. MOF yapıların daha etkili ve güvenli UV filtreleri geliştirmek için yeni bir kaynak olabileceğini göstermişlerdir (Xiao et al. 2022).

MOF yapılar fiziksel özelliklerini tanımlama hakkında yapılan çalışmalar MOF film yapısının belirlenmesinde en önemli etkenlerden birinin çözücü türü olduğunu göstermiştir. MOF sentezi sırasında kullanılan çözücü veya çözücü karışımının seçimi, film oluşumunu, kristal boyutunu ve film morfolojisini etkileyebilir. Yüzey modifikasyonu için, MOF'un yüzey özelliklerinde istenen değişiklikleri kolaylaştıran çözücülerin seçilmesi önemlidir. Toksik olmayan veya geri dönüştürülebilir çözücüler, MOF sentezi için diğer önemli unsurlardır. Bu nedenle, gözenekli MOF sentezinde çözücüsüz yöntem düşüncesi iyi bir yaklaşım olarak bilinmektedir (Stassin et al. 2020). Şekil 5'te MOF sentezinde kullanılan organik ligandların (a) ve çözücünün (b) temsili örnekleri verilmiştir.



Şekil 5. MOF sentezinde kullanılan organik ligandların (a) ve çözücünün (b) temsili örnekleri (Sabzehmeidani et al. 2024).

Günümüzde elektromanyetik kirlilik kaynakları hızla ilerleyen teknolojik gelişmelerin kaçınılmaz sonucu ve çözüm bekleyen önemli problemlerden biridir. Yüksek frekanslarda

alışan iletiřim cihazlarının yaygın kullanımı nedeniyle, elektromanyetik ortamı bozmaları muhtemeldir. Elektronik tesislerden yayılan yedekli elektromanyetik dalgalar, saėlıėımızı ciddi řekilde tehdit etmekte ve normal ekipman alışmasını bozmaktadır (Li et al. 2018). Aėırlařtırıcı elektromanyetik dalga (EMW) kirliliėi sorunlarıyla bařa ıkmak iin, yksek verimli EMW emilim malzemelerinin arařtırılması kaınılmaz bir ihtiya haline gelmiřtir (Wu et al. 2025). Bu bilimsel veriler ıřıėında Xue Zhang ve arkadařları 2021 yılında yaptıėı alışma ile MOF trevleri, eřitli uygulama gereksinimlerini karřılaması beklenen ayırt edici bileřenler ve yapılar nedeniyle MOF yapıların yksek gzenek boyutu yapıların, yksek daėılım, gl iřlerliėi ve kolayca ayarlanabilir kompozisyonlar gibi temel zelliklerinin EMW absorpsiyon performansının geliřtirilmesi iin kullanılabileceėini doėrulamıřtır (Zhang et al. 2021).

Huijie Wei ve arkadařları 2021'de mikrodalga solvotermal yntemindeki hızlı ısıtılma sonucu, MOF yapılarda bazı kusurların olduėunu, bu nedenle reaksiyon sıcaklıėını ayarlayarak, termodinamik durumundan etkilenen kusurları etkili bir biimde dzenlediklerini bylelikle elektriksel ve manyetik zellikleri, optimum empedans uyumu iin modlasyonunu rapor etmiřlerdir. Tek bir demir-kinoid MOF'ta manyetizma ve elektriksel iletkenliėin eř zamanlı uygulanması, etkili manyetizasyon ve dřk diren deėerine katkıda bulunurken stn bir elektromanyetik empedans uyumu saėladıėını gsterdiler. Reaksiyon sıcaklıėı 160 C'ye ulařtıėında, optimum mikrodalga emici performansı, 13,8 GHz'de -73,5 dB'lik maksimum yansıma kaybı RL ile elde edildi. alışmalarını kolay bir mikrodalga solvotermal yntemle yksek performanslı mikrodalga emici demir-kinoid MOF'ların sentezi iin mit verici bir durum olduėunu ortaya koydular. Sonular, MOF'un isel niteliklerinden yararlanılarak, malzeme-yapı birleřtirme stratejisi, yksek verimli, hafif ve ayarlanabilir mikrodalga

emicilerin tasarım sürecini basitleştirecek ve yeni nesil yüksek performanslı mikrodalga emici malzemelerin geliştirilmesinde etkili olduğunu göstermiştir (Wei et al. 2021).

Xiuyun Ren ve arkadaşları 2022 de ayarlanabilir kristal yapıya sahip bir dizi MOF-üzerine MOF hibrit türevli Cu nano kümeleri, EMW emilimi üzerindeki nano etkiyi incelemek için öz-birleştirme yöntemi ile üretmiştir. Cu nano kümelerinin polarizasyon merkezleri oluşturduğunu ve dipol polarizasyonunu önemli ölçüde artıran yerel yük birikimini indüklediğini göstermiştir. Ayrıca, nano kümelerin ve karbon ağlarının sinerjik etkisi yalnızca arayüz polarizasyonunu indüklemekle kalmadığı, aynı zamanda karbon ağlarının iletken kaybını da desteklediğini göstermiştir (Ren, Gao, and Wu 2022).

2. MATERYAL VE METOD

Yapılan bu çalışmada detaylı olarak optik özellikleri incelemek için, öncelikle *nano-MIL-101* literatürde verilen adımlar izlenerek hidrotermal yöntemiyle sentezlenmiştir (Uğur et al. 2022). İlk önce 10 cm³ suya 550 mmol tereftalik asit (0.33 mmol) ve Cr (NO₃)₃.9H₂O (0.33 mmol) katılarak hazırlanmaya başlandı. Elde edilen süspansiyon 1 saat boyunca 20 °C sıcaklıkta karıştırıldı. Bu işlemin ardından otojen basınç altında 180 °C'de 4,5 saat boyunca teflon haneli otoklavda ısıtıldı. Ardından soğumaya bırakılarak bir süre beklendi. Oda sıcaklığına geldikten sonra elde edilen karışım, yeniden kristalleşen tereftalik asidi uzaklaştırmak için Whatman filtre kâğıdı ile süzdürüldü. Numune santrifüje bırakılarak 12 saat boyunca 12000 rpm'de bekletildi. Bu işlemin ardından yeşilimsi bir toz elde edildi. Son olarak numune etanol ile birkaç kez yıkanarak kurutulmaya bırakıldı (Jiang et al. 2018).

Sentezlenen *nano-MIL-101* solüsyonu spin kaplama yöntemiyle temizlenmiş cam üzerine kaplanarak, ince film

oluřturuldu. Bu filmin optik geirgenlięini ve optik bant aralıęının deęerini belirlemek iin UV-Vis lümü 300-900 nm aralıęında olan ve 2 nm artıřlarla Shimadzu UV-2450 spektrometre ile alındı. Bu lüm MOF filmlerin emilim spektrumlarını belirler. Bant aralıęı tayini ve optik filtre zelliklerinin deęerlendirilmesinde kullanılır.

3. BULGULAR VE TARTIřMA

3.1. MOF Optik zelliklerin İncelenmesi

Metal iyonlar ile organik ligandlardaki deęiřiklikler nedeniyle MOF yapıların benzersiz yapısal farklılıęı, zel optik zelliklere neden olmuř ve onları optik uygulamalarda ince filmlerin retimi iin pratik bir seenek haline getirmiřtir. Genel olarak, MOF yapıların ince tabakasında ligandlar ve metal iyonları mhendislięi yapılarak, optoelektronik cihazlar iin doęrusal ve doęrusal olmayan optik zellikler elde etmek mmkn hale gelmiřtir (Gupta et al. 2021).

3.1.1. MOF Yapıların Optik Filtreleme zellikleri

MOF ince filmleri, yksek yzey alanı, ayarlana bilirlik ve gzeneklilik gibi zellikleri nedeniyle optik filtrelerde potansiyel kullanımlarından dolayı da dikkat ekmiřtir. MOF ince filmleri, dalga boyu seici filtreler, dar bant filtreler, ayarlanabilir filtreler , polarizasyon filtreleri ve bant aralıklı fotonik filtreler gibi birok optik filtrede kullanılmaktadır. Son zamanlarda, ayarlanabilir bant geniřlięine sahip MOF ince film tabanlı MIM (metal-yalıtkan-metal) rezonatrler ile ilgili Zhihuan Li ve arkadaşlarının 2024 te yayımladıęı bir alıřmasında MOF ince filmlerin, belirli ıřık dalga boylarını seici olarak iletme veya yansıtmak zere tasarlamıřtır. MOF tabanlı MIM rezonatrnn yansıma rengi, MOF filmlerinin kalınlıklarını kontrol ederek dzenlenmiřtir. Bu

nedenle, LBL yöntemi ile alt tabaka üzerine biriktirilen MOF tabakası ve MIM rezonatörü, Au tabakaları arasına ince MOF filmleri sıkıştırılarak oluşturulmuştur; bu, daha büyük yüzeylerde daha yüksek aydınlatmaya yol açmıştır. MOF tabanlı MIM rezonatörünün $\lambda = 520$ nm'deki yansıması, ksilen gazına maruz kaldıktan sonra 5 saniye içinde 568 nm'ye kırmızıya kayma yaşadı. Bu kayma (48 nm), rezonatörlerin yüksek hassasiyetini gösterdi (Liu et al. 2024) .

Sonuç olarak, MOF tabanlı MIM rezonatörleri, yüksek çözünürlük için ultra ince optik filtreler değil, aynı zamanda kimyasal algılamayı ilerletmek için genel bir strateji de göstermektedir.

3.1.2. MOF yapı *nano-MIL-101* Optik Özellikleri

Metal-organik kafes yapı *nano-MIL-101* için soğurma ölçümleri UV-Vis spektrometre cihazıyla yapıldı ve bu ölçümler sonucunda elde edilen optik bant aralığı grafikleri elde edildi. Burada numunenin optik soğurma katsayısı α , optik geçirgenliği T ve kalınlık ise d ile Eş.1 gösterilmektedir (Yakuphanoglu et al. 2009).

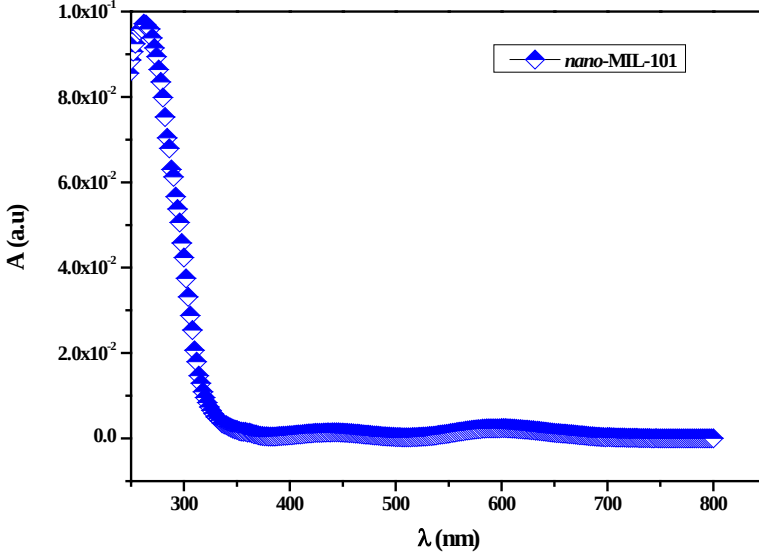
$$\alpha = -\ln(T)/d \quad (1)$$

Eş.1 ile yapılan hesaplamalarla optik soğurma katsayısı hesaplanır. Yarıiletkenlerde optik soğurma katsayısı ile optik bant aralığı enerjisi E_g arasında bağıntı ise Eş.2 ile verilmektedir (El-Hagary et al. 2012).

$$\alpha h\nu = B(h\nu - E_g)^{1/2} \quad (2)$$

Eş.2 de yer alan B enerjiden bağımsız sabit bir sayıyı göstermektedir. Gelen fotonun enerjisini $h\nu$ temsil etmektedir. Filmlerin optik bant aralığı enerjisi $(\alpha h\nu)^{1/2}$ - $h\nu$ grafiğinde doğrusal bölgenin eğimi ile ya da doğrusal kısma yapılan fitin yatay eksenini kestiği nokta ile belirlenir. Böylelikle, $(\alpha h\nu)^2 = 0$

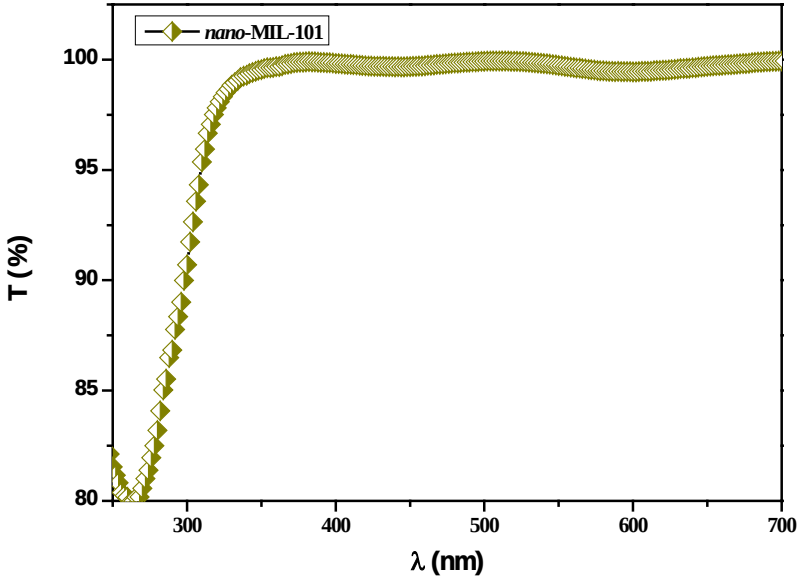
alındığında enerji eksenini kesen nokta ise optik bant aralığına karşılık gelir (Antoniadou and Lianos 2009; Johannes, Pingak, and Bukit 2020).



Şekil 6. MOF-yapı nano-MIL-101 soğurma-dalga boyu

Şekil 6 nano-MIL-101 soğurma grafiğini göstermektedir. Soğurma sınırı 335 nm dalga boyu değerinde başlayıp ve maksimum emilim 265 nm'de tespit edilmiştir ve literatür ile uyum göstermektedir. Xiaojing Liu ve arkadaşlarının porfirin bağlayıcılar ve gözeneklere gömülü C₆₀ içeren kristalin, yönlendirilmiş MOF ince filmleri ile yaptığı çalışmada 436 nm, 561 nm ve 600 nm'deki emilim bantları porfirin kromoforuna, 330 nm'deki bant ise C₆₀'a ait olduğu rapor edilmiştir.(Liu et al. 2019).

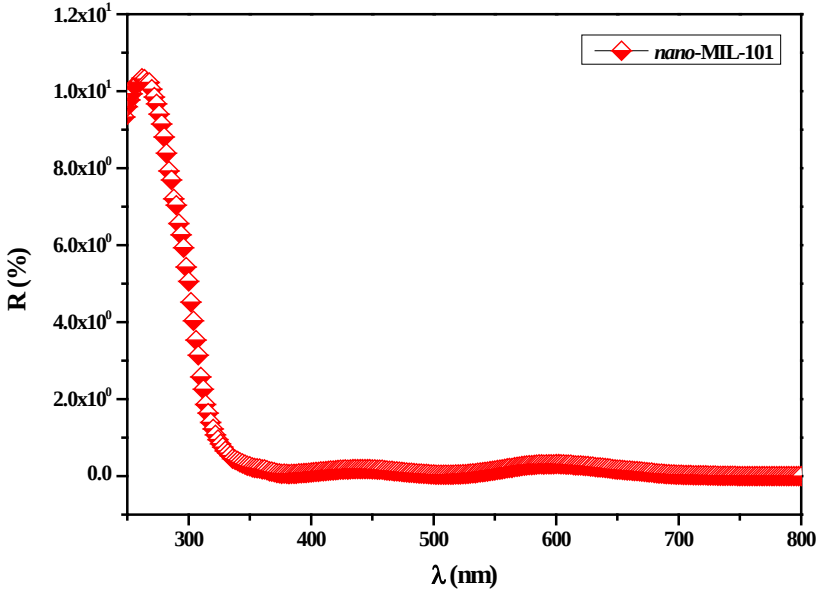
Have Wang ve arkadaşlarının TiO₂ filme katkı malzemesi olarak eklenen ZIF-67 mezogözenekli molekül yapısı sayesinde, boya moleküllerinin daha fazla bağlanmış olmasından daha yüksek soğurmanın gerçekleştiğini göstermiştir (Wang et al. 2021). (Wang et al. 2021).



Şekil 7. MOF yapı nano-MIL-101geçirgenlik-dalga boyu

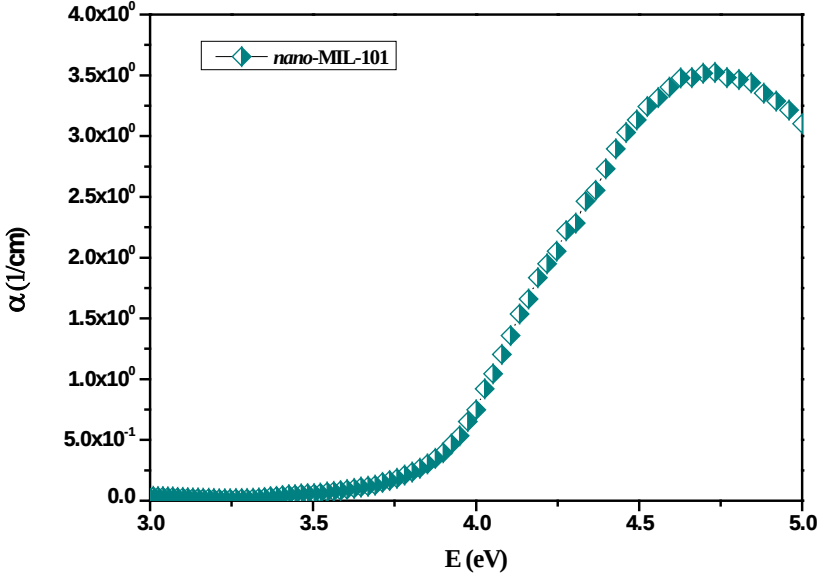
Yapılan çalışmada 320 nm dalga boyundan büyük dalga boyu değerlerinde geçirgenlik yüksek, daha küçük dalga boylarında ise düşük olduğu görülmektedir. Şekil 7'de, düşük geçirgenlik gösterilen diğer alt grupları reddederken, optik spektrumun bir alt kümesini seçici olarak iletir. Optik gözlemler arasındaki girişimi önlemek için, geleneksel spektroskopide ince bir spektral tepe ve yüksek bir spektral derinliğe sahip ince filmler tercih edilir. İnce film filtre birkaç spektral tepe ve foton dalga boyuna göre geçirgenlik değerinde hızlı değişimler gösterir. Bu nedenle, her filtre yüksek bir optik verime sahiptir, yani geleneksel bant geçiş filtresi yöntemine göre içinden daha fazla enerji akar. Bir altlık üzerine kaplanan ince filmler genellikle bu şekilde davranır. Kaplanan filmin üst ve alt sınırlarından yansıyan dalgaların girişimi, maksimum ve minimumların kaynağıdır. Tüm dalgalar aynı fazdadır ve belirli bir dalga boyunda yapıcı etkileşime girerler. Bu, geçirgenlikte bir minimum ve yansımada bir maksimuma yol açar. Tüm dalgalar faz dışı olduğunda,

yansıma grafiğinde bir minimum ve geçirgenlik grafiğinde bir maksimum oluşur. Ki-Joong Kim ve arkadaşlarının ZIF-8 MOF kaplamalı optik fiber sensör ile ilgili yapmış oldukları çalışmada ZIF-8 MOF'un özgül adsorpsiyon kabiliyetinden kaynaklanan diğer küçük gazlara (H_2 , N_2 , O_2 ve CO) kıyasla CO_2 gazına karşı yüksek bir seçicilik gösterdiğini rapor etmiştir (Kim et al. 2018).



Şekil 8. MOF yapı nano-MIL-101 yansıma-dalga boyu grafiği

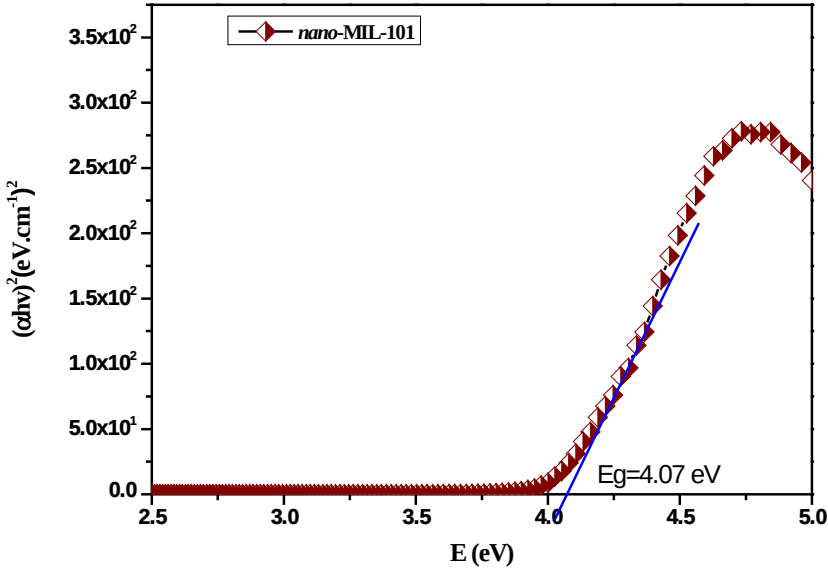
Şekil 8’de nano-MIL-101 MOF yapının yansıma-dalga boyu grafiği verilmiştir. Beklendiği üzere geçirgenliğin maksimum olduğu noktada yansıma minimum iken, geçirgenliğin minimum olduğu dalga boyunda da maximum yansıma elde edilmiştir. İmran Kanmaz ve arkadaşlarının CeO_2 / MOF ile yapmış oldukları farklı konsantrasyondaki MOF ince filmlerin sonuçları, DL ince filmde optik olarak etkili olduğu ve hem yansımayı hem de geçirgenliği iyileştirdiğini göstermiştir. Bu gözenekli yapısı ve pürüzlü yüzeyi nedeniyle gelen ışığın yansımasını engelleyen MOF yapıların emilim kapasitesine atfedilir (Kanzmaz et al. 2024).



Şekil 9. MOF yapısı nano-MIL-101 α -E grafiği

Bilindiği gibi, optik soğurma katsayısı α ile enerji arasındaki ilişki Beer Lambert yasası ile incelenmektedir. Bu yasa ışık ve madde arasındaki etkileşimden kaynaklanan etkilerin doğru bir tanımını sağlamaktadır (Dissanayake et al. 2024). Şekil 9’da MOF yapının soğurma katsayısı ve gelen ışığın enerjisi arası ilişkisinin grafiği gösterilmiştir. Maximum soğurma katsayısı 4,71 eV enerji değerinde elde edilmiştir.

Yakuphanoglu ve arkadaşlarının yaptığı bir çalışmaya göre soğurma katsayısı değerleri artan film kalınlığıyla birlikte arttığı rapor edilmiştir (Yakuphanoglu et al. 2009).



Şekil 10. MOF yapı nano-MIL-101($\alpha h\nu$)²-E grafiği

Filmlerin optik bant aralığı (E_g) değeri Tauc denklemini yardımıyla belirlendi ve $(\alpha h\nu)^2$ ile $(h\nu)$ değerleri kullanılarak doğrusal bölgenin eğimi ile ya da doğrusal kısma yapılan fitin yatay eksenini kestiği nokta ile belirlenerek Şekil 10 da verilen grafik çizildi. MOF nano-MIL-101 E_g değeri 4,07 eV olarak hesaplandı. Elde edilen bu sonuçla da geniş bant aralığı sayesinde UV ışınlarını etkili şekilde yansıttığını ve UV koruyucu malzemelerde kullanılabileceği fikrini desteklemektedir. Yapısal olarak ligand ve metal kombinasyonlarıyla optik özellikler hassas şekilde ayarlanabilir.

4. SONUÇLAR

Bu çalışmada, farklı MOF yapıların uygulamalarına ilişkin yapılan çalışmalardan örnekler ve nano-MIL-101 özelinde soğurma, geçirgenlik ve yansıma gibi optik özelliklerin yanı sıra optik bant aralığı incelenmiştir. MOF ince film çeşitlerinin farklı doğası, gelecekteki teknolojik uygulamalar için farklı

kolaylıklara ve zorluklara yol açabilmektedir. MOF yapıların en önde gelen güçlü yönlerinden biri, moleküler yapısının katı bir malzemenin özellikleriyle koordine edilebilmesidir. Bazı MOF film çeşitleri içsel elektriksel özellik gösterebilmektedir. Bu özellik sayesinde MOF yapılar elektronik aygıt içerisinde yük transferini ve enjeksiyonu daha kolay gerçekleştirebilir. MOF ince filmlerdeki organik ligandlar ve metal düğümler, malzemelerin bağlanma mesafesinin ayarlanmasına olanak sağlarlar. Ancak, pek çok MOF görünür ışık bölgesinde zayıf soğurma özelliğine sahiptir. Bu durum, özellikle fotovoltaik uygulamalar için ciddi bir dezavantaj olarak görülmektedir. Bu modifiye edilebilen özellik, optoelektronik cihazlarda MOF ince filmlerin emisyonu ve adsorpsiyonu için çok önemlidir. MOF yapılar, esneklik ve işlevsellikleri hem lineer hem nonlineer optik özellikleri sayesinde fotonik, optoelektronik ve sensör teknolojilerinde geleceğin önemli malzemeleri olarak görülmektedir. Geniş bant aralığı hassas kontrollü sentezle ayarlanabilir optik, elektriksel ve fotoelektrik özellikleri nedeniyle UV ışınlarını etkili şekilde yansıttıkları, UV-A ve UV-B ışınlarını engelleyebilecekleri, bu sayede optik filtreleme için de uygun bir aday olduğu söylenebilir. MOF yapıların ince filmlerinin kırılma indisi düşük olmasından kaynaklı optik kaplama ve lazer rezonatörlerinde kullanılabilirler. Yüksek gözeneklilik ve düşük yoğunluk, optik yansıma ve geçirgenlik özelliklerini etkilemektedir. MOF yapıların yüksek yüzey alanı ve yapısal çeşitliliği sayesinde, çevresel değişikliklere (örneğin gaz varlığı, nem, pH değişimi) karşı optik sinyal değişikliği gösterebilirler. Bu da MOF yapıları kimyasal ve biyosensörlerde ideal materyaller olarak öne çıkarmaktadır.

Teşekkür: MOF yapı desteği ve değerli katkılarından dolayı Prof. Dr. Mehmet GÜLCAN’a teşekkür ederim.

KAYNAKÇA

- Antoniadou, Maria, and Panagiotis Lianos. 2009. "Near Ultraviolet and Visible Light Photoelectrochemical Degradation of Organic Substances Producing Electricity and Hydrogen." *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 204(1):69–74. doi:10.1016/J.JPHOTOCHEM.2009.02.001.
- Dissanayake, M. A. K. L., K. Paramanathan, G. K. R. Senadeera, C. A. Thotawattage, K. Balashangar, P. Ravirajan, and B. S. Dissanayake. 2024. "Optical Transmission and Photoconductivity of Chemical Bath-Deposited CdS Thin Films for Optoelectronic Applications." *Thin Solid Films* 791:140225. doi:10.1016/J.TSF.2024.140225.
- Dong, Ming-Jie, Min Zhao, Sha Ou, Chao Zou, and Chuan-De Wu. 2014. "A Luminescent Dye@MOF Platform: Emission Fingerprint Relationships of Volatile Organic Molecules." *Angewandte Chemie* 126(6):1601–5. doi:10.1002/ange.201307331.
- Duan, Chongxiong, Yi Yu, and Han Hu. 2022. "Recent Progress on Synthesis of ZIF-67-Based Materials and Their Application to Heterogeneous Catalysis." *Green Energy & Environment* 7(1):3–15. doi:10.1016/J.GEE.2020.12.023.
- El-Hagary, M., M. Emam-Ismail, E. R. Shaaban, and A. El-Taher. 2012. "Effect of γ -Irradiation Exposure on Optical Properties of Chalcogenide Glasses Se₇₀S₃₀-xSbx Thin Films." *Radiation Physics and Chemistry* 81(10):1572–77. doi:10.1016/J.RADPHYSICHEM.2012.05.012.
- Gupta, Mayank, Ziyu Zhu, Dileep Kottilil, Bibhuti Bhusan Rath, Wang Tian, Zhi Kuang Tan, Xiaogang Liu, Qing Hua Xu, Wei Ji, and Jagadese J. Vittal. 2021. "Impact of the Structural Modification of Diamondoid Cd(II) MOFs on

- the Nonlinear Optical Properties.” *ACS Applied Materials and Interfaces* 13(50):60163–72. doi:10.1021/acsami.1c17327.
- Jiang, Xiantao, Liangjing Zhang, Shunxiang Liu, Yiyue Zhang, Zhiliang He, Wenjia Li, Feng Zhang, Yihuang Shi, L. Wei, Yu Li, Qiao Wen, Jiagen Li, Jun Feng, Shuangchen Ruan, Yu Jia Zeng, Xi Zhu, Yuerui Lu, and Han Zhang. 2018. “Ultrathin Metal–Organic Framework: An Emerging Broadband Nonlinear Optical Material for Ultrafast Photonics.” *Advanced Optical Materials* 6(16). doi:10.1002/adom.201800561.
- Johannes, Albert Zicko, Redi Kristian Pingak, and Minsyahril Bukit. 2020. “Tauc Plot Software: Calculating Energy Gap Values of Organic Materials Based on Ultraviolet-Visible Absorbance Spectrum.” in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. Vol. 823. Institute of Physics Publishing.
- Kanmaz, İmran, Selçuk Demir, Gamze Kiztanir, Murat Tomakin, and Vagif Nevruzoglu. 2024. “Metal-Organic Frameworks (MOFs) as an Anti-Reflective Coating for Crystalline Silicon Solar Cells.” *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*. doi:10.1007/s10904-024-03462-0.
- Kim, Ki Joong, Ping Lu, Jeffrey T. Culp, and Paul R. Ohodnicki. 2018. “Metal-Organic Framework Thin Film Coated Optical Fiber Sensors: A Novel Waveguide-Based Chemical Sensing Platform.” *ACS Sensors* 3(2):386–94. doi:10.1021/acssensors.7b00808.
- Lee, Sangwook, Jun Hong Noh, Hyun Soo Han, Dong Kyun Yim, Dong Hoe Kim, Jung Kun Lee, Jin Young Kim, Hyun Suk Jung, and Kug Sun Hong. 2009. “Nb-Doped TiO₂: A New Compact Layer Material for TiO₂ Dye-Sensitized Solar

Cells.” *Journal of Physical Chemistry C* 113(16):6878–82.
doi:10.1021/jp9002017.

Li, Dien, Natalia B. Shustova, Corey R. Martin, Kathryn Taylor-Pashow, John C. Seaman, Daniel I. Kaplan, Jake W. Amoroso, and Roman Chernikov. 2020. “Anion-Exchanged and Quaternary Ammonium Functionalized MIL-101-Cr Metal-Organic Framework (MOF) for $\text{ReO}_4^-/\text{TcO}_4^-$ Sequestration from Groundwater.” *Journal of Environmental Radioactivity* 222:106372.
doi:10.1016/J.JENVRAD.2020.106372.

Li, Xinliang, Xiaowei Yin, Changqing Song, Meikang Han, Hailong Xu, Wenyan Duan, Laifei Cheng, and Litong Zhang. 2018. “Self-Assembly Core-Shell Graphene-Bridged Hollow MXenes Spheres 3D Foam with Ultrahigh Specific EM Absorption Performance.” *Advanced Functional Materials* 28(41).
doi:10.1002/adfm.201803938.

Liu, Jianxi, Li Feng, Zhihuan Li, Yang Wu, Feng Zhou, and Yadong Xu. 2024. “Plasma-Etching on Monolithic MOFs-Based MIM Filter Boosted Chemical Sensing.” *Nano Research* 17(4):2800–2807. doi:10.1007/s12274-023-6098-8.

Liu, Xiaojing, Mariana Kozłowska, Timur Okkali, Danny Wagner, Tomohiro Higashino, Gerald Brenner-Weiß, Stefan M. Marschner, Zhihua Fu, Qiang Zhang, Hiroshi Imahori, Stefan Bräse, Wolfgang Wenzel, Christof Wöll, and Lars Heinke. 2019. “Photoleitfähigkeit in Dünnschichten Metall-organischer Gerüste.” *Angewandte Chemie* 131(28):9691–96. doi:10.1002/ange.201904475.

Multilayer Thin Films Versatile Applications for Materials Engineering. n.d.

- Ren, Xiuyun, Zhenguo Gao, and Guanglei Wu. 2022. "Tunable Nano-Effect of Cu Clusters Derived from MOF-on-MOF Hybrids for Electromagnetic Wave Absorption." *Composites Communications* 35:101292. doi:10.1016/J.COCO.2022.101292.
- Rosi, Nathaniel L., Juergen Eckert, Mohamed Eddaoudi, David T. Vodak, Jaheon Kim, Omar M. Yaghi, and Los Alamos. 2003. *Supporting Online Material for MS#1083440 Hydrogen Storage in Microporous Metal-Organic Frameworks*.
- Sabzehmeidani, Mohammad Mehdi, Shadi Gafari, Sara jamali, and Mahmood Kazemzad. 2024. "Concepts, Fabrication and Applications of MOF Thin Films in Optoelectronics: A Review." *Applied Materials Today* 38:102153. doi:10.1016/J.APMT.2024.102153.
- Schneemann, A., V. Bon, I. Schwedler, I. Senkovska, S. Kaskel, and R. A. Fischer. 2014. "Flexible Metal-Organic Frameworks." *Chemical Society Reviews* 43(16):6062–96.
- Stassin, Timothée, Ivo Stassen, João Marreiros, Alexander John Cruz, Rhea Verbeke, Min Tu, Helge Reinsch, Marcel Dickmann, Werner Egger, Ivo F. J. Vankelecom, Dirk E. De Vos, and Rob Ameloot. 2020. "Solvent-Free Powder Synthesis and MOF-CVD Thin Films of the Large-Pore Metal-Organic Framework MAF-6." *Chemistry of Materials* 32(5):1784–93. doi:10.1021/acs.chemmater.9b03807.
- Uğur, Ali, Arife Gencer Imer, Esra Kaya, Yaşar Karataş, and Mehmet Gülcan. 2022. "Improved Efficiency in Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) by Nano-MIL-101(Cr) Impregnated Photoanode." *Zeitschrift Fur Naturforschung - Section A Journal of Physical Sciences* 77(1):93–104. doi:10.1515/zna-2021-0175.

- Wang, Su Juan, Mohammad Amin Alavi, Farnoosh Zare Karizi, Alireza Azhdari Tehrani, X. W. Yan, Ali Morsali, and M. L. Hu. 2021. "A Pillar-Layered Metal-Organic Framework Based on Pinwheel Trinuclear Zinc-Carboxylate Clusters; Synthesis and Characterization." *Materials Letters* 287:129261. doi:10.1016/J.MATLET.2020.129261.
- Wang, Yan, Wenzhi Zhang, Xinming Wu, Chunyan Luo, Qiguan Wang, Jinhua Li, and Lin Hu. 2017. "Conducting Polymer Coated Metal-Organic Framework Nanoparticles: Facile Synthesis and Enhanced Electromagnetic Absorption Properties." *Synthetic Metals* 228:18–24. doi:10.1016/j.synthmet.2017.04.009.
- Wei, Huijie, Yu Tian, Qian Chen, Diana Estevez, Peng Xu, Hua Xin Peng, and Faxiang Qin. 2021. "Microwave Absorption Performance of 2D Iron-Quinoid MOF." *Chemical Engineering Journal* 405:126637. doi:10.1016/J.CEJ.2020.126637.
- Wu, Xin, Peiyuan Kang, Yinghan Zhang, Haocheng Guo, Shuoying Yang, Qi Zheng, Lianjun Wang, and Wan Jiang. 2025. "Highly Electrically Conductive MOF/Conducting Polymer Nanocomposites toward Tunable Electromagnetic Wave Absorption." *Journal of Materials Science & Technology* 205:258–69. doi:10.1016/J.JMST.2024.03.066.
- Xiao, Jisheng, Haishan Li, Wanling Zhao, Chengyuan Cai, Tingting You, Zhenyu Wang, Mengling Wang, Feng Zeng, Jinmei Cheng, Jiaxin Li, and Xiaopin Duan. 2022. "Zinc-Metal–Organic Frameworks with Tunable UV Diffuse-Reflectance as Sunscreens." *Journal of Nanobiotechnology* 20(1). doi:10.1186/s12951-022-01292-1.

- Yakuphanoglu, F., C. Viswanathan, P. Peranantham, and D. Soundarrajan. 2009. "Effects of the Film Thickness on Optical Constants of Transparent CdS Thin Films Deposited by Chemical Bath Deposition." doi:10.81043/APERTA.37937.
- Yi, Huan, Huanwen Wang, Yuting Jing, Tianquan Peng, and Xuefeng Wang. 2015. "Asymmetric Supercapacitors Based on Carbon Nanotubes@NiO Ultrathin Nanosheets Core-Shell Composites and MOF-Derived Porous Carbon Polyhedrons with Super-Long Cycle Life." *Journal of Power Sources* 285:281–90. doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2015.03.106.
- Zhai, Rui, Yihong Xiao, Zhigang Gu, and Jian Zhang. 2022. "Tunable Chiroptical Application by Encapsulating Achiral Lanthanide Complexes into Chiral MOF Thin Films." *Nano Research* 15(2):1102–8. doi:10.1007/s12274-021-3610-x.
- Zhang, Xue, Jing Qiao, Yanyan Jiang, Fenglong Wang, Xuele Tian, Zhou Wang, Lili Wu, Wei Liu, and Jiurong Liu. 2021. "Carbon-Based MOF Derivatives: Emerging Efficient Electromagnetic Wave Absorption Agents." *Nano-Micro Letters* 13(1).
- Zou, Minmin, Ming Dong, and Tian Zhao. 2022. "Advances in Metal-Organic Frameworks MIL-101(Cr)." *International Journal of Molecular Sciences* 23(16).

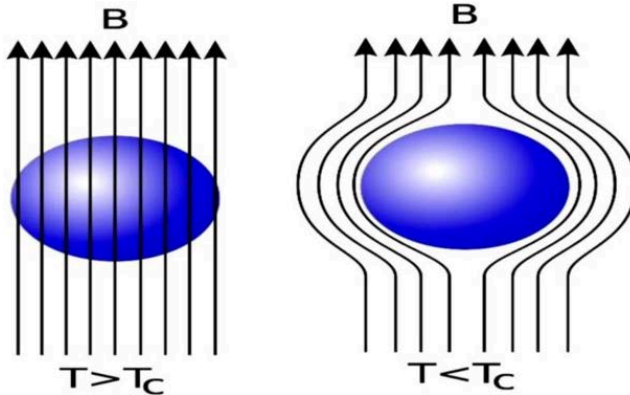
APPLICATION AREAS OF MgB_2 IN TERMS OF ENERGY EFFICIENCY

Özge ERDEM¹

1. INTRODUCTION

Superconductors, which have many applications around the world, not only contribute to clean energy production, but also help minimize energy losses in power systems due to their near-zero electrical resistance. Superconductors have the ability to exclude the applied magnetic field (Meissner effect) in the superconducting phase at temperatures lower than critical transition temperature (T_c), as seen in Figure 1. This property helps reduce magnetic losses in energy systems. Superconductors increase energy efficiency when used in generators, transformers and power transmission lines.

Figure 1. Expulsion of a weak external magnetic field from the interior of the superconducting material [1]



¹ Assoc. Prof., Bayburt University, Vocational High School of Health Services, Department of Medical Services and Techniques, ozgeerdem@bayburt.edu.tr, ORCID: 0000-0003-4542-941X.

Thermal, electrical and magnetic properties of a superconductor, such as transition temperature to normal conducting phase, resistance property and current carrying capacity under applied magnetic field, are the most important factors affecting energy efficiency. In addition, production method and fabrication cost of a superconductor, its ability to be produced in different forms (bulk, wire, tape, thin film etc.) and sizes, mechanical strength and service life also affect energy efficiency.

MgB₂, one of the low temperature superconductors and showing Type II superconductivity, has the potential to be used in engineering and electronic applications aiming to increase energy efficiency. The basic properties of MgB₂ superconductor, such as being easy to produce and low cost, being lightweight, having a simple binary composition, being mechanically more durable than high-temperature superconductors and having the highest T_c among low-temperature superconductors increase the interest in the application areas of MgB₂ day by day. In this section, the use of MgB₂ superconductors in fault current limiters (FCLs) is investigated in terms of energy efficiency and the advantages and challenges of this event are discussed.

2. APPLICATION OF MgB₂ AS FAULT CURRENT LIMITER

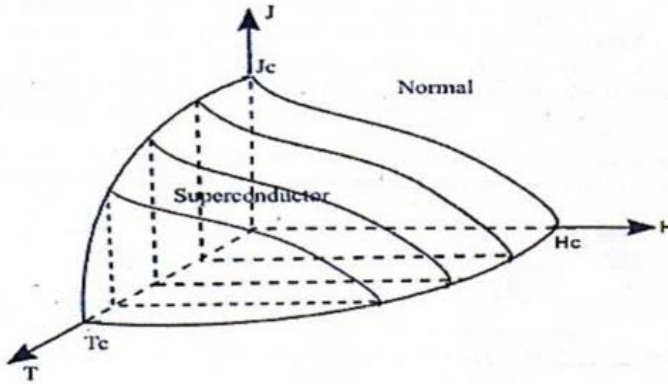
Due to the zero resistance and perfect diamagnetism properties of superconductors, one of the important application areas of them is power systems consisting of generation, transmission and distribution. By utilizing the normal-superconducting phase transition characteristics of superconductors, electromagnetic and thermal problems such as voltage collapse, fault current, short circuit, overloading, current

surge and high energy losses encountered from time to time in power systems can be minimized in just milliseconds.

The use of superconductors as FCLs in power systems has been investigated for approximately 30 years, and many projects are being carried out on this subject today. In general, superconducting FCLs (SFCLs) are the passive devices exhibiting virtually zero resistance and zero impedance to the flow of current on a power system when operating under nominal conditions and using the highly non-linear resistance characteristic of superconductors to limit the fault currents during a fault event. As coated conductors approach the desired cost and performance level, SFCLs have begun to be considered as an alternative by electric distribution companies. SFCLs operate within a fixed current window of operation that is determined by the critical transition temperature (T_c), critical magnetic field intensity (H_c) and critical current density (J_c) of a superconductor. The superconducting material is in the superconducting phase below these three critical values shown in Figure 2 and shows zero resistance to the current flow. When one of these critical values is reached a maximum threshold, superconductor loses its superconducting property and transports the normal conducting phase and shows resistance to the current flow. SFCLs limit the fault current encountered in power systems using the non-linear resistance characteristic of a superconductor.

The location where SFCLs are placed in the system is important to effectively limit the fault current and maintain the system stability. SFCLs are also used in transmission lines, distribution networks, renewable energy and HVDC systems to secure the interconnection to the grid, reduce voltage fluctuations in distribution, and increase the transient stability and reliability of the power systems [2].

Figure 2. The ability of a material to superconductor depends on three factors: the temperature (T), the magnetic field intensity (H) and the current density (J) [3]



Superconducting material used in electrical utilities and industrial facilities requiring high power operates in the superconducting phase during the nominal grid operating conditions. When the power circuit becomes short-circuited and malfunctions, the superconducting material becomes resistant to limit the fault current in the circuit. In fault events occurring in power systems, the fault current can be 5 to 20 times the nominal current [4]. Currently, for high-temperature superconducting materials, the current that causes a voltage drop of $1.0 \mu\text{V}/\text{cm}$ across the conductor is called the critical current [4]. The superconducting material, which becomes resistant, effectively limits the fault current with a fast response time, ensuring system security and protecting the network infrastructure. When the fault in the system is eliminated and normal conditions are restored, the superconducting material shows a reversible transition and operates as a superconductor again. SFCLs have the ability to limit the fault current within the first cycle and thus maintain the stability of the power system. SFCLs are available in resistive and inductive types.

FCLs operate in AC mode when in normal conditions. Therefore, AC losses are of central importance for many SFCL applications. For AC losses, the loss/volume ratio is proportional to the J_c value of a superconductor. However, since the volume of material required for a given magnet is inversely proportional to J_c , the AC loss is independent of the material used and depends only on the width of the conductor [5].

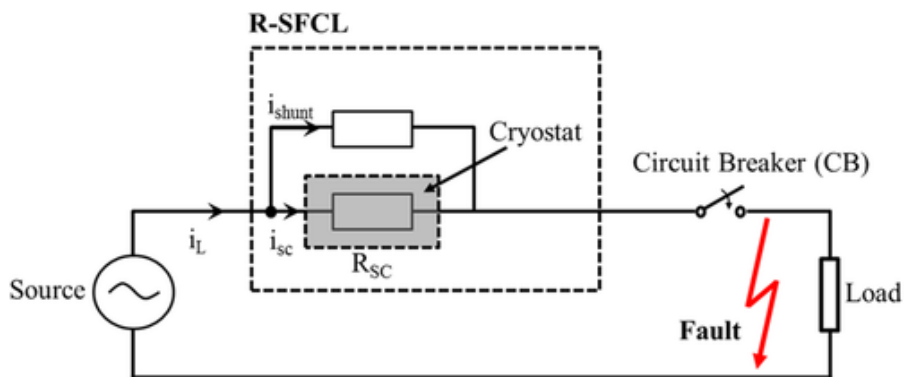
Since its discovery in 2001 [6], the MgB_2 superconductor has rapidly been shown as a candidate for BSCO-based and low-temperature superconductor (LTS)-based wire applications. One of the early applications of MgB_2 wires was for low thermal conductivity current leads on the ASTRA-2 satellite [7]. Nowadays, MgB_2 superconductor is used as SFCL in power distribution systems [8].

Advantages of MgB_2 , such as easy production, low cost, better thermal stability, and cooling with cryocoolers or liquid hydrogen, which are more practical than liquid helium in large-scale applications, make MgB_2 more advantageous when compared to high-temperature superconductors such as YBCO and BSCO. The MgB_2 superconductor conducts electricity with zero resistance at temperatures below its T_c value, making it highly efficient during normal grid operation. Additionally, ongoing advances in wire and tape processing technologies are improving the critical current density, thermal conductivity, and mechanical properties of MgB_2 . All these features increase the potential of MgB_2 as a reliable and efficient current limiter in medium and high voltage electrical networks.

Figure 3 shows a resistive SFCL (R-SFCL) circuit. When the R-SFCL circuit is operating in the nominal condition, the superconductor with low inductance, is in the superconducting phase and conducts the load current in the system without loss. During a fault event, the current rises rapidly and when the device

current exceeds the critical current (I_c) value that the superconductor can withstand, the superconductor transforms to normal conducting phase and shows a highly resistive state referred to as a quench. The critical current threshold is directly proportional to the temperature. So, an alternative current path is needed to protect the superconductor. The increase in resistance creates a voltage on the superconductor, which causes the fault current to transfer to the shunt in parallel with the superconductor. It means that the high resistance path of the quenched superconductor causes the fault current to take an alternate flow path through a shunt [9]. In this state, the superconductor acts like a switch that gives millisecond responses that allow the load current in the system to be transmitted to the shunt [4, 9]. The shunt in a power system can be an inductive or resistive path that exhibits a relatively large impedance under nominal conditions, but is relatively low compared to the quenched superconductor [4]. The shunt resistor suppresses hot spots and overvoltage on the superconductor during quenching transients [10]. The sharp transition of MgB_2 from the superconducting phase to the normal state, its ease of production in different sizes and forms, and its being a lightweight material make MgB_2 ideal for use as R-SFCL.

Figure 3. Resistive superconducting fault current limiter (R-SFCL) [11]



MgB₂ has faster normal zone heat propagation compared to ceramic superconductors. This feature minimizes hot spots and the superconductor can be designed with a variety of high-resistance sheath materials [12]. Using Nb-barrier monofilamentary and multi-filamentary MgB₂ wires with CuNi and Cu/CuNi sheaths supplied by Hyper Tech Research Inc., Lin et al. [13] aimed to compare the quench behaviour at 24–26 K in an AC environment in a self-field at 50 Hz. According to the 1 $\mu\text{V cm}^{-1}$ criterion, the average engineering critical current density (J_e) for the samples with varying sheaths was around $4.8 \times 10^4 \text{ A cm}^{-2}$ at 25 K in a self-field, with the quench currents recovered from the pulse measurements falling between 200 and 328 A [13]. The findings obtained from this study showed that sheathed MgB₂ is suitable for SFCL applications.

In 2007, many studies were conducted on the current limiting properties of different types of MgB₂ wires at 50 Hz in the temperature range of 20–30 K [14–16]. In these studies, MgB₂ wires showed good current limiting properties by rapidly transitioning to the normal state in the first half of the first cycle. They maintained their limiting properties without damaging the wire samples in the next six cycles.

In 2012, a prototype R-SFCL was developed. The 1.28 mm diameter MgB₂ monofilament round wire was provided by Hyper Tech Research Inc. and wound staggered to minimize coil inductance [17]. The SFCL coil, shown in Figure 4, demonstrated reliable and repeatable current-limiting properties. It effectively limited the fault current in the first quarter of a cycle and withstood a potential peak current of 372 A for one second without performance degradation [17].

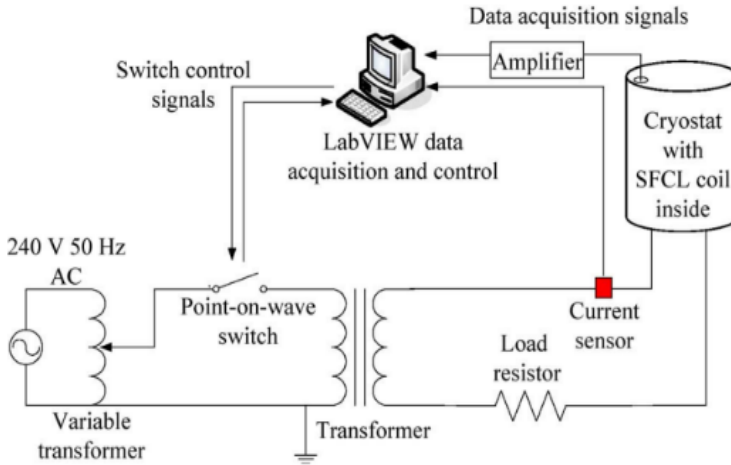
Figure 4. Prototype SFCL coil prior to installation in cryostat [17]



Yao et al. [18] tested the performance of a MgB_2 based R-SFCL prototype cooled with liquid helium and helium gas at different supply voltages in a study conducted in 2013. This prototype showed superior limiting performance with a short-circuit current suppression ratio exceeding 45 %. As the voltage level increased, the current limiting capability also improved, reaching up to 56 %.

Pei et al. [19] developed an R-SFCL for an 11 kV substation with multiple MgB_2 wire strands and analysed the different coil designs. Two types of low-inductance solenoidal coils were investigated and compared: the series-connected coil and the parallel-connected coil. The function of these two SFCL coils was tested using a controllable high-current supply (see Figure 5). In this study, it was reported that both coils demonstrated repeatable and reliable operation as R-SFCLs. The quenching mechanism of the parallel coil ensured rapid quenching, triggered by current transfer once quenching begins [19].

Figure 5. High-current test circuit schematic [19]



Some R-SFCL projects are carried out by the prime contractor such as SuperPower and Siemens/American Superconductor using YBCO high temperature superconductors in the United States.

In recent years, several studies have advanced the application of MgB_2 in R-SFCL, focusing on their design, performance enhancement, testing, and performance under various conditions, integration with other technologies, and practical deployment in power systems. These studies underscore the ongoing advancements in MgB_2 based R-SFCLs, highlighting their potential to enhance the protection and stability of modern power grids.

A study published in March 2020 [20] investigated the current density distribution in R-SFCLs and its impact on device stability. The research showed that non-uniform current distribution can lead to local overheating and potential device failure. By simulating various construction patterns, design modifications were proposed to achieve a more uniform current distribution and thus improve the reliability and longevity of the R-SFCL [20].

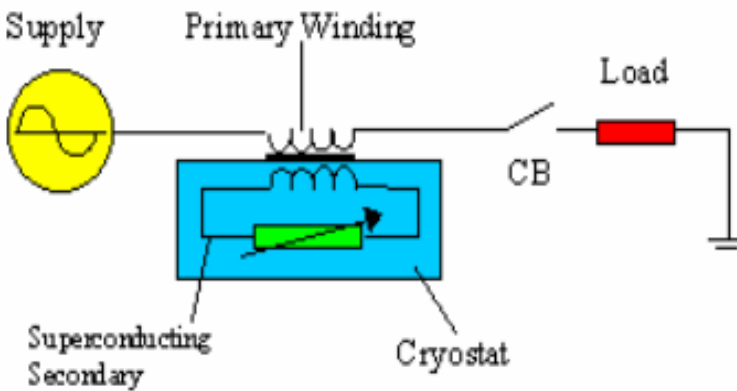
In January 2025, SuperGrid Institute in France achieved a significant milestone by combining an R-SFCL with a mechanical circuit breaker for high-voltage direct current (HVDC) networks [21, 22]. This integration resulted in an 87% reduction in fault current, demonstrating the R-SFCL's capability to effectively protect HVDC systems. The technology's compactness and rapid response make it particularly suitable for offshore energy applications, where space and reliability are critical [21, 22].

Some of the superconducting fault current limiters are inductive. Inductive fault current limiters used in power systems should show zero impedance and inductance under normal conditions. In a fault event, the use of nonlinear SFCLs that rapidly increase their impedance is required. Inductive SFCL (I-SFCL) is designed like a transformer connected in series with the network to be protected and its secondary windings are short-circuited. In I-SFCL, the primary coil is traditionally made of copper winding and is directly connected to the electrical circuit. The secondary winding consists of a superconducting ring and its function is to protect the iron core from the magnetic flux produced by the primary winding under normal operating conditions, thus showing low impedance [23].

I-SFCLs come in shielded core (open or closed core) and saturable core varieties [9]. Figure 6 shows the I-SFCL circuit with shielded core. When the power system is operating in nominal condition, fault current limiters exhibit very small inductance, negligible impedance and voltage drop in the system. Thanks to this feature, no significant power loss and voltage drop occur in the system in nominal operating conditions. The secondary winding, which contains the coil made of superconductor, becomes resistive when it encounters a magnetic flux greater than the critical current value. Thus, the flux from the primary winding enters the iron core. The effect of the magnetic

field on the iron core causes the limiting impedance to increase. In this case, the inductance of the device increases and the SFCL shows high impedance [24]. Thus, the fault current in the system is limited. SFCLs have the advantage of limiting the fault current without adding impedance to the circuit during normal operation, as compared to reactors or high impedance transformers [9]. The advantage of I-SFCL over R-SFCL is that the cryogenic power load is less as there is no superconducting heat input through the current cables [25]. But even so, R-SFCL has a simpler design than I-SFCL, is smaller in size, lighter in weight and has less losses.

Figure 6. Typical circuit diagram of the magnetic-shielded inductive SFCL [26]



A study published in 2017 [27] investigated the application of MgB_2 based superconductors in FCLs. The study focused on I-SFCL (transformer-type) utilizing ring-shaped bulk MgB_2 prepared under high quasi-hydrostatic pressure and hot pressing techniques, showed in Figure 7. The results indicated that the SFCLs used in this study possess low impedance under normal operating conditions and can rapidly increase their impedance to limit both transient and steady-state fault currents. The study also examined the quenching currents and AC losses in the MgB_2 rings, demonstrating their potential for effective fault

current limitation. It was observed that the quenching current and critical current densities determined from AC losses could be 10-20 times less than those determined from magnetization experiments. This study showed that AC losses play an important role in the quenching behaviour of MgB_2 based SFCLs [27].

Figure 7. Some tested MgB_2 rings of various sizes [27]



ASG Superconductors has developed an innovative inductive SFCL system employing MgB_2 wire designed to protect electrical networks from fault currents [28]. This 36 kV system has undergone type testing in independent laboratories in Berlin under short-circuit conditions more severe than those typical in real power grid. The device operates without cryogenic fluids, reducing maintenance needs and enhancing efficiency compared to traditional solutions. It can rapidly transition to a high-impedance state during faults, limiting fault currents and ensuring quick recovery times, often within milliseconds. The system's inductive technology allows for scalability to higher voltage levels, with designs up to 123 kV suitable for transmission networks [28].

The total loss in an FCL should be in the range of 0.01% to 0.1% of the nominal power of the protected circuit and the voltage drop should be less than 5% of the nominal circuit voltage. In SFCL, the total loss is due to AC losses in the superconducting elements, energy consumption required for cooling and losses in the normal conducting elements of the system [29-32]. MgB_2 is suitable for low-cost coil production in

I-SFCL systems. It is also competitive with I-SFCL coils using YBCO coated conductors. MgB_2 can operate efficiently at moderate cryogenic temperatures (15–25 K) achievable with compact cryocoolers, eliminating the need for expensive liquid helium cooling.

3. ADVANTAGES AND CHALLENGES OF USING MgB_2 IN ENERGY APPLICATIONS

The Kyoto Protocol, an international agreement on global warming and climate change adopted in 1997 and entered into force in 2005 to ensure that greenhouse gas concentrations in the atmosphere remain balanced at levels that will not adversely affect the climate, envisages a series of binding targets for industrialized countries. It is possible to reach the clean energy field by complying with the Kyoto Protocol by using superconductors in the energy sector. All high voltage FCL systems will generally require a fluid dielectric such as oil or synthetic. In systems using superconductors, energy losses converted into heat are at a minimum level and since cooling processes are carried out using liquid nitrogen instead of oil, greenhouse gas emissions are prevented.

MgB_2 is a superconductor with low production cost and easy fabrication method compared to high temperature superconductors such as YBCO and BSCO, and is mechanically more durable. It minimizes energy losses in power systems thanks to its low electrical resistance and sharp transition from the superconducting state to the normal conducting phase. It provides system safety with its fast response time in case of failure and extends equipment life. It reduces magnetic losses by excluding the magnetic field (Meissner effect) and ensures more efficient operation of the system [33].

Since superconductors can change from a normal state to a superconducting state below a certain critical temperature, expensive cooling systems (such as liquid helium and liquid nitrogen) are needed in power systems using superconducting materials. This is one of the most important factors that increase the cost in systems using superconductors. Integration of superconducting cooling systems into power systems may also create a separate disadvantage. MgB_2 can be cooled with cryocoolers or liquid hydrogen, which are more practical than liquid helium, especially in large-scale applications, and can operate efficiently at moderate cryogenic temperatures (15–25 K).

The usability of MgB_2 in power plants, magnetic energy storage and magnetic levitation systems and its ability to reject the applied external magnetic field depend on the superconductivity parameters such as the critical magnetic field value (H_{c2}), critical transition temperature (T_c) and critical current density (J_c). Therefore, further research is needed to increase these three superconductivity parameters to increase the application potential of MgB_2 in these areas.

The use of superconductors in FCL systems is preferred because of the superconductor's very fast current limiting feature (less than 1 ms), minimum impedance under normal operating conditions, and being a proven technology in projects involving high voltage applications. In addition, SFCLs generally do not operate on the basis of switching algorithms or sophisticated control electronics.

4. CONCLUSIONS

MgB_2 has the potential to increase energy efficiency, but some factors such as production cost, fabrication method, and

cooling conditions play an important role in realizing this potential.

As research and production techniques improve and the market develops, it is expected that MgB_2 based applications will increase and MgB_2 will be included in projects worldwide where it will play an important role in increasing system reliability and energy efficiency.

REFERENCES

- [1] Omar, M. A. (1975). Elementary solid state physics principles and applications. Ch 10, Addison-Wesley.
- [2] Okakwu, I. K., Orukpe, P. E., & Ogujor, E. A. (2018). Application of superconducting fault current limiter (SFCL) in power systems: A review. *European Journal of Engineering and Technology Research*, 3(7), 28-32.
- [3] Meissner, W., & Ochsenfeld, R. (1933). Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, 21(44), 787-788.
- [4] Eckroad, S. (2009). Superconducting Fault Current Limiters: Technology Watch 2009. Electric power research institut, 1017793.
- [5] Campbell, A. M. (2006, March). Superconducting Materials for Practical Applications. In *AIP Conference Proceedings* (Vol. 824, No. 1, pp. 395-415). American Institute of Physics.
- [6] Nagamatsu, J., Nakagawa, N., Muranaka, T., Zenitani, Y., & Akimitsu, J. (2001). Superconductivity at 39 K in magnesium diboride. *Nature*, 410(6824), 63-64.
- [7] Goldacker, W., Schlachter, S. I., Liu, B., Obst, B., & Klimenko, E. (2004). Considerations on critical currents and stability of MgB₂ wires made by different preparation routes. *Physica C: Superconductivity*, 401(1-4), 80-86.
- [8] Yılmaz, B., & Gençoğlu, M. (2022). Rezistif Süperiletken Arıza Akımı Sınırlayıcı MATLAB-Simulink Modeli ve Uygulaması. *Fırat Üniversitesi Mühendislik Bilimleri Dergisi*, 34(2), 803-815.
- [9] <https://gsk.cigreturkiye.org.tr/bildiriler2016/8.2.pdf> Access date: May 23, 2025.

- [10] Rama, P. V., & Swathi, M. (2015). Superconducting Fault Current Limiter in DC Systems with MLI Fed to IM. ITSI Transactions on Electrical and Electronics Engineering, 3, 25-28.
- [11] Lee, H. Y., Asif, M., Park, K. H., & Lee, B. W. (2019). Feasible protection strategy for HVDC system by means of SFCL and passive resonance DC breaker. The Journal of Engineering, 2019(16), 767-770.
- [12] Tomsic, M., Rindfleisch, M., Yue, J., McFadden, K., Phillips, J., Sumption, M. D., ... & Collings, E. W. (2007). Overview of MgB₂ superconductor applications. International journal of applied ceramic technology, 4(3), 250-259.
- [13] Ye, L., Majoros, M., Campbell, A. M., Coombs, T., Astill, D., Harrison, S., ... & Tomsic, M. (2007). Experimental studies of the quench behaviour of MgB₂ superconducting wires for fault current limiter applications. Superconductor Science and Technology, 20(7), 621.
- [14] Majoros, M., Ye, L., Campbell, A. M., Coombs, T. A., Velichko, A. V., Astill, D. M., ... & Husband, M. (2007). Fault Current Limiting Properties of MgB_2 Superconducting Wires. IEEE transactions on applied superconductivity, 17(2), 1764-1767.
- [15] Ye, L., Majoros, M., Campbell, A. M., Coombs, T., Harrison, S., Sargent, P., ... & Husband, M. (2007). MgB_2 Sample Tests for Possible Applications of Superconducting Fault Current Limiters. IEEE transactions on applied superconductivity, 17(2), 2826-2829.
- [16] Majoros, M., Ye, L., Campbell, A. M., Coombs, T. A., Sumption, M. D., & Collings, E. W. (2007). Modeling of

transport ac losses in superconducting arrays carrying anti-parallel currents. IEEE transactions on applied superconductivity, 17(2), 1803-1806.

- [17] Smith, A. C., Oliver, A., Pei, X., Husband, M., & Rindfleisch, M. (2012). Experimental testing and modelling of a resistive type superconducting fault current limiter using MgB₂ wire. Superconductor Science and Technology, 25(12), 125018.
- [18] Yao, L., Mei, J., Zheng, J. Y., Liu, B., & Xu, Y. (2013). Experiment of a Resistive Superconducting Fault Current Limiter Based on MgB₂ under Different Supply Voltages. Advanced Materials Research, 721, 527-530.
- [19] Pei, X., Zeng, X., Smith, A. C., & Malkin, D. (2015). Resistive superconducting fault current limiter coil design using multistrand MgB₂ wire. IEEE Transactions on applied superconductivity, 25(3), 1-5.
- [20] Farokhiyan, M., Hosseini, M., & Kavousi-Fard, A. (2021). Current density distribution in resistive fault current limiters and its effect on device stability. Physica C: Superconductivity and its Applications, 580, 1353786.
- [21] <https://www.supergrid-institute.com/wp-content/uploads/2025/01/Press-Kit-first-DC-current-limiting-breaking-tests.pdf> Access date: May 29, 2025.
- [22] <https://www.supergrid-institute.com/2024/07/19/superconducting-fault-current-limiters-future-grid-protection> Access date: May 29, 2025.
- [23] Chaudhary, C. V., Mahajan, G. K., & Chaudhari, A. P. (2015). A Comprehensive review on Superconducting fault current limiters in Electrical Utility Network.

International Journal of Emerging Trends in Science and Technology, 2(05).

- [24] Janowski, T., Stryczewska, H. D., Kozak, S., Kondratowicz-Kucewicz, B., Wojttasiewicz, G., Kozak, J., ... & Malinowski, H. (2004). Bi-2223 and Bi-2212 tubes for small fault current limiters. IEEE transactions on applied superconductivity, 14(2), 851-854.
- [25] Yang, Q., Le Blond, S., Liang, F., Yuan, W., Zhang, M., & Li, J. (2017). Design and application of superconducting fault current limiter in a multiterminal HVDC system. IEEE Transactions on applied Superconductivity, 27(4), 1-5.
- [26] Wu, X., Mutale, J., Jenkins, N., & Strbac, G. (2003). An investigation of network splitting for fault level reduction. The Manchester Centre for Electrical Energy (MCEE), UMIST, UK.
- [27] Sokolovsky, V., Prikhna, T., Meerovich, V., Eisterer, M., Goldacker, W., Kozyrev, A., ... & Moshchil, V. (2017, February). MgB₂-based superconductors for fault current limiters. In IOP Conference Series: Materials Science and Engineering (Vol. 171, No. 1, p. 012144). IOP Publishing.
- [28] <https://www.newswire.ca/news-releases/asgs-novel-superconductive-system-for-electricity-networks-protection-673350563.html?utm> Access date: May 30, 2025.
- [29] Zhang, Y., & Dougal, R. A. (2012). IEEE power and energy society general meeting. New Energy Horizons- Opportunities and Challenges.
- [30] Meerovich, V., & Sokolovsky, V. (2015). High-temperature superconducting fault current limiters (FCLs) for power

grid applications. In Superconductors in the power grid (pp. 283-324). Woodhead Publishing.

- [31] Sokolovsky, V., Meerovich, V., Vajda, I., & Beilin, V. (2004). Superconducting FCL: design and application. IEEE Transactions on Applied Superconductivity, 14(3), 1990-2000.
- [32] Tixador, P. (2010). Development of superconducting power devices in Europe. Physica C: Superconductivity and its applications, 470(20), 971-979.
- [33] https://www.emo.org.tr/ekler/ca89f0f987ae652_ek.pdf?utm
Access date: May 30, 2025.

PHOTOCURRENT GENERATION AND MECHANISMS IN TWO-DIMENSIONAL MATERIALS¹

Selim ÜNAL²

1. INTRODUCTION

The isolation of graphene in 2004 (GEIM and NOVOSELOV 2009) opened a new era for materials science, attracting enormous interest from a wide scientific community due to an unprecedented combination of properties, including record-high room temperature charge carrier mobility (Banszerus et al., 2015; Bolotin et al., 2008), extreme mechanical flexibility (Shekhawat & Ritchie, 2016) and optical transparency (Nair et al., 2008). Since then, a diverse range of two-dimensional (2D) materials have been explored, including transition metal dichalcogenides (TMDCs), black phosphorous (BP), and hexagonal boron nitride (h-BN), exhibiting extraordinary properties with distinct electronic band structures ranging from gapless (graphene) to large-bandgap (h-BN) (Elias et al., 2019; Román et al., 2021) and semiconducting (TMDCs). Strong excitation binding energies, quantum confinement effects, and enhanced surface-to-volume ratios would make them a strong candidate material for optical and electrical applications.

¹ This chapter is derived in part from the author's doctoral thesis entitled 'Field Effect Transistors and Optoelectronic Devices based on Emerging Atomically Thin Materials', submitted to the University of Exeter in partial fulfillment of the requirements for the Ph.D. degree (Unal 2017).

² Dr. Öğr. Üyesi, Kastamonu Üniversitesi, Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, sunal@kastamonu.edu.tr, ORCID: 0000-0003-1521-3327.

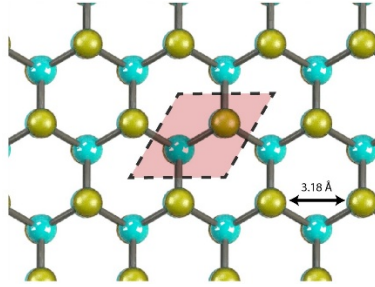


Figure 1. Top view of atomic structure of a 2D material, the shaded area with dashed line represents the primitive unit cell, adapted by (Unal 2017).

Photocurrent generation mechanisms are vital understanding the optical behavior and properties of 2D materials. Due to the unique properties of 2D materials, as they present a single atomic layer material, photocurrent is generated with distinct mechanisms.

2. FUNDAMENTAL MECHANISMS OF PHOTOCURRENT GENERATION

The photocurrent is generated by absorbed photons, which are converted into an electrical current. In general, forming an electron-hole (e-h) pair upon absorption of a photon results in a free-carrier separation and transport of these carriers to electrodes, providing an electrical current.

Several mechanisms contribute to photocurrent generation in 2D materials depending on the material, device design, and operating conditions. The dominant mechanisms discussed in this chapter are the photoconductive, photovoltaic, photo-thermoelectric, and bolometric effects.

2.1. Photovoltaic Effect

The photovoltaic effect is the primary mechanism for photocurrent generation in 2D materials and semiconductor

devices, relying on a built-in electric field that sets apart the electron-hole pairs in opposite directions. The electrons are driven to the n-type region, while holes are driven to the p-type region. This might occur in a Schottky junction, p-n or heterostructure interface. The separation generates a voltage and photocurrent when the circuit is closed.

In 2D materials, the photovoltaic effect is more pronounced in van der Waals (vdW) heterostructures. Researchers can engineer strong built-in electric fields at the interfaces by stacking different 2D materials with different work functions and band alignments. For example, a graphene/MoS₂ heterojunction forms a direct bandgap semiconductor and can separate charge efficiently under illumination (Li et al., 2023; Roy et al., 2013). The atomically sharp interfaces and clean vdW bonding minimize interface defects, often recombination centers in conventional heterojunctions, enhancing charge separation efficiency. In the case of stacked n and p-type graphene, a built-in electric field separates the hole and electron (Koppens et al., 2014).

Gr Graphene has unique photocurrent behavior due to hot carriers, which produce high-energy electrons through light absorption. A single photon absorbed in graphene can generate multiple electron-hole pairs due to the strong electron-electron interactions. Hot carriers yield tremendous quantum efficiencies exceeding one electron per photon (Konstantatos et al., 2012). A single high-energy electron can multiply its energy with others, multiplying electron-hole pairs from a single photon. In graphene, excited electrons lose their energy slowly with vibrations in the lattice, dominating the transport properties, which can lead to enhanced photocurrents.

The photocurrent changes sign where chemical potentials are equal, $\mu_1 = \mu_2$, demonstrated in Figure 2 (Song et al., 2011).

Two adjacent sections of a graphene device are independently gated to control its gate voltage and tune its carrier type and density. A laser is positioned at the interface, providing adjustable electronic environments. The photovoltaic current depends on the electric field gradient at the interface. When the direction of the built-in field reverses as the two gate voltages switch relative polarity, the sign of the current flips. The current is maximized when the chemical potentials have opposite signs; one is p-type, and the other one is n-type.

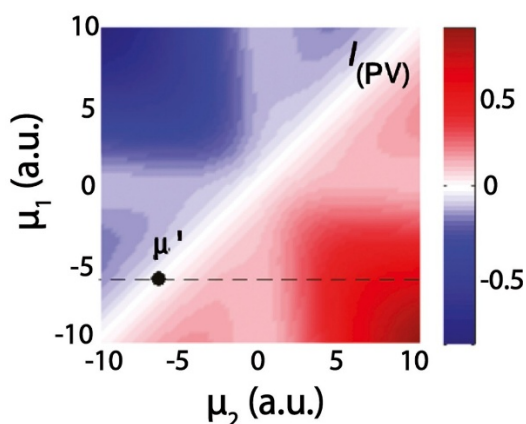


Figure 2. Photovoltaic effect as a function of the chemical potentials μ_1 and μ_2 in the regions 1 and 2 of a dual-gated graphene device, reprinted with permission from Song, J. C. W.; Rudner, M. S.; Marcus, C. M.; et al. “Hot Carrier Transport and Photocurrent Response in Graphene,” *Nano Lett.*, 2011, 11 (11), 4688–4692. Copyright © 2011 American Chemical Society (Song et al., 2011).

2.2. Photoconductive Effect

The photoconductive effect occurs when the material’s electrical conductivity increases when illuminated. Photons with energy above the band gap of a semiconductor can be absorbed by the material and generate free charge carriers – electrons in the conduction band and/or holes in the valence band. In systems with

trap states, one of the photoexcited charge carriers can be localized while the other remains mobile in the energy band. When an external bias is applied between the source and drain, the mobile carrier contributes to the overall conductivity of the material.

In the photogating mechanism, illumination changes the carrier density, especially in graphene, which modulates the photogeneration process (Koppens et al., 2014). Photoexcitation in graphene or a nearby semiconductor region creates electron-hole pairs. One of these carriers can be trapped by trap sites, including defect states, molecular adsorbates, or states in the conduction or valence band of the surrounding semiconductor material (Konstantatos et al., 2012). The free carrier traverses the channel between the source and drain electrodes under the gate voltage (Konstantatos et al., 2012; Xie et al., 2017).

Both photoconductive and photogating effects show increased conductivity in the material when exposed to light. If the trapped carrier relaxation time is much larger than the free carrier transit time, the free carrier can circulate through the channel multiple times before recombination occurs. This allows internal photoconductive gain, leading to external quantum efficiency (EQE) greater than 100%.

In the case of graphene-WS₂ heterostructure, the primary photocurrent generation mechanism is the photogating effect. Figure 3a shows a change in the drain current with gate voltage under illumination and in a dark environment. When the light collides with the WS₂ layer, it absorbs photons and generates excitons. Due to the work function between WS₂ and graphene, a built-in electric field at the junction drives the electrons toward the graphene, leaving the holes trapped in the WS₂ (Mehew et al., 2017). The holes act like a persistent positive gate voltage on the graphene channel, which is measured as a photocurrent, as shown

in Figure 3. The longer the holes stay trapped, the more electrons circulate through the graphene, leading to high internal gain. The mobile ions in the LiClO₄/PEO ionic polymer gate enhance this effect by screening charge traps and improving charge transfer efficiency. This mechanism enables high responsivity and fast response times, overcoming typical speed limitations caused by long-lived trap states in similar devices (Mehew et al., 2017).

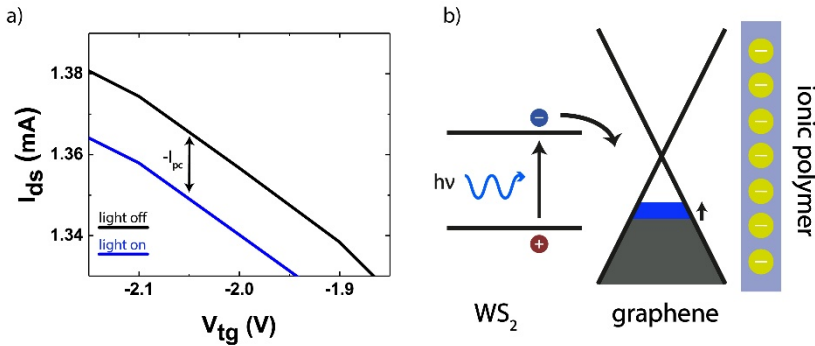


Figure 3. a) Photogating effect on a 2D material showing the change in the gate voltage (V_{tg}) versus drain current (I_{ds}), adapted from (Mehew et al. 2017; Unal 2017) licensed under CC BY. I_{pc} is the photocurrent. b) Schematic of charge transfer at graphene/WS₂ interface, adapted from (Mehew et al., 2017; Unal, 2017) licensed under CC BY. Ionic polymer is used as a transparent top gate.

2.3.Photo-thermoelectric Effect (PTE)

The photo-thermoelectric effect is related to heating due to the illumination. When light hits a material, such as graphene, the area the light shines becomes hotter than the surrounding parts. The temperature difference causes electrons to move from the hot to cooler regions, generating small electric currents (Xu et al., 2010). The light turns to heat rather than the excited electron-hole pairs. The different parts of the material have different Seebeck coefficients where electrons move, triggering the Seebeck effect.

When graphene absorbs light, it does not just excite electrons; it heats them very quickly, within about 10 to 50 femtoseconds (Tielrooij et al., 2015). These hot electrons do not immediately transfer their energy to the graphene lattice because the lattice cools down slowly thanks to its high-energy optical phonons. Instead, there is a temporary temperature difference between two parts of the material, especially if those regions are differently doped, such as one being p-type and the other n-type (Koppens et al., 2014).

The temperature difference, combined with different Seebeck coefficients (which describe how voltage is generated from a temperature gradient), creates a voltage. The PTE converts the heat of photoexcited electrons directly into an electric signal without needing a junction or bias (Koppens et al., 2014). In a graphene-bilayer graphene heterostructure, the difference in thermoelectric response between two regions leads to strong photocurrent generation under illumination. The effect can increase 10 times at cryogenic temperatures compared to room temperature (Xu et al., 2010).

The PTE-based detectors can be ultrafast because the heating occurs in 10 to 50 femtoseconds driven by hot electrons rather than electric fields. This phenomenon paws the way for building extremely responsive and energy-efficient photodetectors in 2D materials.

Figure 4 demonstrates the image maps of the photocurrent generated as a laser-focused on a spot scanned across the surface of the graphene device. Red and green regions indicate the direction and magnitude of the photocurrent measured at the drain contact. The central horizontal feature corresponds to the top-gate electrode, while outer red/green patches align with the metal source and drain contacts. No source-drain and top-gate voltage were applied. Strong photocurrent appears near the edges of the

top gate and at the metal contacts, even though no bias is applied, suggesting local potential gradients and junctions within the graphene are sufficient to separate photogenerated carriers and produce a measurable current (Lemme et al., 2011). The symmetry and spatial localization of the photocurrent signals imply enhanced carrier dynamics at the p-n junctions performed naturally by differing doping levels, which is controllable by a gating bias (Lemme et al., 2011).

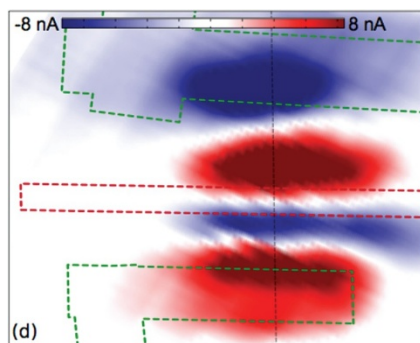


Figure 4. Scanning photocurrent image of the graphene photodetector device when no gate bias or voltages are applied, $V_d=V_t=0$, reprinted with permission from Lemme, M. C.; Koppens, F. H. L.; Falk, A. L.; et al. “Gate-Activated Photoresponse in a Graphene p–n Junction,” *Nano Lett.*, 2011, 11 (10), 4134–4137. Copyright © 2011 American Chemical Society (Lemme et al., 2011). The middle red dashed line represents the top gate electrode, and the green dashed lines are the source and drain electrodes deposited on top of the graphene.

2.4.Bolometric Effect

The light-induced heating changes the conductance of a material such as graphene. Instead of directly generating a photocurrent similar to photovoltaic detectors, bolometers measure incoming electromagnetic radiating by detecting the temperature rise it causes (Buscema et al., 2015; Koppens et al., 2014; Xie et al., 2017). The temperature changes alter the material's electrical resistance, which can be measured under an

externally applied bias. Graphene's tiny heat capacity and considerable thermal resistance make it ultra-sensitive to small temperature changes. An external bias is required in this effect, and the bolometric effect changes the material's resistance.

3. EXCITON DISSOCIATION IN TWO-DIMENSIONAL SEMICONDUCTORS

Monolayer TMDCs, with their large exciton binding energies on the order of hundreds of meV, exhibit photoexcited electron-hole pairs from tightly bound excitons rather than free carriers at room temperature (Itzhak et al., 2025; Malic et al., 2023). For efficient photocurrent generation, these excitons dissociate into free electrons and holes, which can be collected by the electrodes (Perea-Causín, Brem, and Malic 2021). To solve this problem, several strategies can be applied to 2D materials.

3.1. External Electric Fields

Applying an external in-plane electric field to 2D TMDCs reduces exciton binding energies and facilitates dissociation. The field distorts the Coulomb potential between the electron and hole in an exciton, reducing the energy, keeping them together, and making them easier to separate (Zhu et al., 2024). As the field increases, a strong potential gradient is introduced, enough to overcome exciton binding.

3.2. Heterojunction Formation

Built-in electric fields form heterojunctions with different 2D materials, assisting exciton dissociation (Frisenda et al., 2018). A potential well is produced due to the band alignment at the interface for one carrier type, and a barrier is introduced for the other, promoting charge separation. Interlayer excitons across the interface in vdW heterostructure can exhibit longer lifetimes,

leading to more time for dissociation (Narciso Pedrosa et al., 2025).

3.3. Defects and Strain Engineering

Introducing defects such as dopants or grain boundaries generates localized energy states within the bandgap of 2D semiconductors, which can trap an exciton, assisting exciton dissociation and contributing to the photogating effect (Malik et al., 2022). Furthermore, applying tensile or compressive strain to a 2D material modifies its band structure, resulting in changes in exciton binding energy. A strain can produce spatial bandgap gradients, forming built-in electric fields that drive electron-hole separation (Malik et al., 2022).

4. CONCLUSION

2D material photocurrent generation is a popular research area with massive potential for next-generation optoelectronics. The unique properties of 2D materials enable various photocurrent mechanisms, photovoltaic, photoconductive, photo-thermoelectric, photogating, and bolometric effects. Efficient exciton dissociation, especially in semiconducting 2D materials, is a big challenge and an active area of research. Progress in understanding and controlling charge separation and transport mechanisms and advances in material synthesis and device fabrication will drive the development of high-performance 2D material-based photodetectors, solar cells, and other optoelectronic devices. Future research will focus on integrating different 2D materials into complex heterostructures to leverage their synergistic properties, optimizing device architecture for specific applications, and developing scalable fabrication methods for industrial relevance. This will enable 2D materials to go mainstream in optoelectronics.

REFERENCES

- Banszerus, Luca, Michael Schmitz, Stephan Engels, Jan Dauber, Martin Oellers, Federica Haupt, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Bernd Beschoten, and Christoph Stampfer. 2015. "Ultrahigh-Mobility Graphene Devices from Chemical Vapor Deposition on Reusable Copper." *Science Advances* 1(6):1–7. doi: 10.1126/sciadv.1500222.
- Bolotin, K. I., K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. L. Stormer. 2008. "Ultrahigh Electron Mobility in Suspended Graphene." *Solid State Communications* 146(9–10):351–55. doi: 10.1016/j.ssc.2008.02.024.
- Buscema, Michele, Joshua O. Island, Dirk J. Groenendijk, Sofya I. Blanter, Gary A. Steele, Herre S. J. van der Zant, and Andres Castellanos-Gomez. 2015. "Photocurrent Generation with Two-Dimensional van Der Waals Semiconductors." *Chemical Society Reviews* 44(11):3691–3718. doi: 10.1039/C5CS00106D.
- Elias, C., P. Valvin, T. Pelini, A. Summerfield, C. J. Mellor, T. S. Cheng, L. Eaves, C. T. Foxon, P. H. Beton, S. V. Novikov, B. Gil, and G. Cassabois. 2019. "Direct Band-Gap Crossover in Epitaxial Monolayer Boron Nitride." *Nature Communications* 10(1):1–7. doi: 10.1038/s41467-019-10610-5.
- Frisenda, Riccardo, Aday J. Molina-Mendoza, Thomas Mueller, Andres Castellanos-Gomez, and Herre S. J. Van Der Zant. 2018. "Atomically Thin P-n Junctions Based on Two-Dimensional Materials." *Chemical Society Reviews* 47(9):3339–58. doi: 10.1039/c7cs00880e.
- GEIM, A. K., and K. S. NOVOSELOV. 2009. "The Rise of Graphene." Pp. 11–19 in *Nanoscience and Technology*.

Co-Published with Macmillan Publishers Ltd, UK.

- Itzhak, Raziell, Nathan Suleymanov, Boris Minkovich, Liana Kartvelishvili, Vladislav Kostianovski, Roman Korobko, Alex Hayat, and Ilya Goykhman. 2025. "Exciton Manipulation via Dielectric Environment Engineering in 2D Semiconductors." *ACS Applied Optical Materials* 1–9. doi: 10.1021/acsaom.5c00105.
- Konstantatos, Gerasimos, Michela Badioli, Louis Gaudreau, Johann Osmond, Maria Bernechea, F. Pelayo Garcia de Arquer, Fabio Gatti, and Frank H. L. Koppens. 2012. "Hybrid Graphene–Quantum Dot Phototransistors with Ultrahigh Gain." *Nature Nanotechnology* 7(6):363–68. doi: 10.1038/nnano.2012.60.
- Koppens, F. H. L., T. Mueller, Ph Avouris, A. C. Ferrari, M. S. Vitiello, and M. Polini. 2014. "Photodetectors Based on Graphene, Other Two-Dimensional Materials and Hybrid Systems." *Nature Nanotechnology* 9(10):780–93. doi: 10.1038/nnano.2014.215.
- Lemme, Max C., Frank H. L. Koppens, Abram L. Falk, Mark S. Rudner, Hongkun Park, Leonid S. Levitov, and Charles M. Marcus. 2011. "Gate-Activated Photoresponse in a Graphene p-n Junction." *Nano Letters* 11(10):4134–37. doi: 10.1021/nl2019068.
- Li, Panke, Huitian Guo, Ran Duan, Guoliang Ru, and Weihong Qi. 2023. "Excellent Optoelectronic Properties and Low Contact Resistance of Graphene/MoS₂ Heterostructure Optoelectronic Devices: First-Principles Calculation and Experimental Verification." *ACS Applied Electronic Materials* 5(3):1676–87. doi: 10.1021/acsaelm.2c01726.
- Malic, Ermin, Raúl Perea-Causin, Roberto Rosati, Daniel Erkensten, and Samuel Brem. 2023. "Exciton Transport in

- Atomically Thin Semiconductors.” *Nature Communications* 14(1):10–13. doi: 10.1038/s41467-023-38556-9.
- Malik, Maria, Muhammad Aamir Iqbal, Jeong Ryeol Choi, and Phuong V Pham. 2022. “2D Materials for Efficient Photodetection: Overview, Mechanisms, Performance and UV-IR Range Applications.” *Frontiers in Chemistry* 10(May):1–28.
- Mehew, Jake D., Selim Unal, Elias Torres Alonso, Gareth F. Jones, Saad Fadhil Ramadhan, Monica F. Craciun, and Saverio Russo. 2017. “Fast and Highly Sensitive Ionic-Polymer-Gated WS₂–Graphene Photodetectors.” *Advanced Materials* 29(23):1–10. doi: 10.1002/adma.201700222.
- Nair, R. R., P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim. 2008. “Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene.” *Science* 320(5881):1308. doi: 10.1126/science.1156965.
- Narciso Pedrosa, Renan, Cesar E. P. Villegas, Alexandre Reily Rocha, Rodrigo G. Amorim, and Wanderlã Scopel. 2025. “Interlayer Excitons and Radiative Lifetimes in MoSe₂/SeWS Bilayers: Implications for Light-Emitting Diodes.” *ACS Applied Nano Materials*. doi: 10.1021/acsanm.4c06994.
- Perea-Causín, Raúl, Samuel Brem, and Ermin Malic. 2021. “Phonon-Assisted Exciton Dissociation in Transition Metal Dichalcogenides.” *Nanoscale* 13(3):1884–92. doi: 10.1039/d0nr07131e.
- Román, Ricardo Javier Peña, Fábio J. R. Cost. Costa, Alberto Zobelli, Christine Elias, Pierre Valvin, Guillaume

- Cassabois, Bernard Gil, Alex Summerfield, Tin S. Cheng, Christopher J. Mellor, Peter H. Beton, Sergei V. Novikov, and Luiz F. Zagonel. 2021. "Band Gap Measurements of Monolayer H-BN and Insights into Carbon-Related Point Defects." *2D Materials* 8(4):1–38. doi: 10.1088/2053-1583/ac0d9c.
- Roy, Kallol, Medini Padmanabhan, Srijit Goswami, T. Phanindra Sai, Gopalakrishnan Ramalingam, Srinivasan Raghavan, and Arindam Ghosh. 2013. "Graphene-MoS₂ Hybrid Structures for Multifunctional Photoresponsive Memory Devices." *Nature Nanotechnology* 8(11):826–30. doi: 10.1038/nnano.2013.206.
- Shekhawat, Ashivni, and Robert O. Ritchie. 2016. "Toughness and Strength of Nanocrystalline Graphene." *Nature Communications* 7:1–8. doi: 10.1038/ncomms10546.
- Song, Justin C. W., Mark S. Rudner, Charles M. Marcus, and Leonid S. Levitov. 2011. "Hot Carrier Transport and Photocurrent Response in Graphene." *Nano Letters* 11(11):4688–92. doi: 10.1021/nl202318u.
- Tielrooij, K. J., L. Piatkowski, M. Massicotte, A. Woessner, Q. Ma, Y. Lee, K. S. Myhro, C. N. Lau, P. Jarillo-Herrero, N. F. Van Hulst, and F. H. L. Koppens. 2015. "Generation of Photovoltage in Graphene on a Femtosecond Timescale through Efficient Carrier Heating." *Nature Nanotechnology* 10(5):437–43. doi: 10.1038/nnano.2015.54.
- Unal, Selim. 2017. "Field-Effect Transistors and Optoelectronic Devices Based on Emerging Atomically Thin Materials." University of Exeter.
- Xie, Chao, Chunhin Mak, Xiaoming Tao, and Feng Yan. 2017. "Photodetectors Based on Two-Dimensional Layered

Materials Beyond Graphene.” *Advanced Functional Materials* 27(19).

Xu, Xiaodong, Nathaniel M. Gabor, Jonathan S. Alden, Arend M. Van Der Zande, and Paul L. McEuen. 2010. “Photo-Thermoelectric Effect at a Graphene Interface Junction.” *Nano Letters* 10(2):562–66. doi: 10.1021/nl903451y.

Zhu, Tao, Chenhang Zheng, Lei Xu, and Ming Yang. 2024. “Exciton Dissociation in Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides: Excited States and Substrate Effects.” *Physical Review B* 110(15):155416. doi: 10.1103/PhysRevB.110.155416.

EXPLORING NUCLEAR REACTORS: HISTORY, TYPES, AND EDUCATIONAL SIMULATIONS FOR PUBLIC AWARENESS

Ali AKYÜZ¹

Elif P. TUNCER²

Yeşim ÖKTEM³

1. INTRODUCTION

The historical development of nuclear reactors represents one of the most complex and multi-layered success stories of modern science and engineering. It began with the understanding of the structure of the atomic nucleus and accelerated with fundamental experimental and theoretical work in the early 20th century. Ernest Rutherford's discovery of the atomic nucleus in 1911 provided the first concrete clues to the internal structure of the atom, while James Chadwick's discovery of the neutron in 1932 was a critical turning point in understanding the mechanism of nuclear reactions. In 1938, Otto Hahn and Fritz Strassmann's observation that bombarding a uranium atom with neutrons split it in two led to the experimental confirmation of nuclear fission. Lise Meitner and Otto Frisch theoretically explained this phenomenon and predicted that the energy released during fission could be sustained through a chain reaction (Fernandez and

¹ Prof. Dr., Burdur Mehmet Akif Ersoy University, Bucak Emin Gülmez TBMYO, Bucak Bilgisayar ve Bilişim F., aakyuz@mehmetakif.edu.tr, ORCID: 0000-0001-9265-7293.

² Istanbul University, Department of Sociology, eptuncer@gmail.com, ORCID: 0009-0008-3801-7453.

³ Istanbul University, Department of Physics, yesim.oktem@istanbul.edu.tr, ORCID: 0000-0002-1638-4331.

Ripka, 2012; Compton, 2019). These developments led to the idea that nuclear energy could be released in a controlled manner. With the outbreak of World War II, the military and strategic importance of nuclear energy rapidly increased and scientific research was largely transferred to practice. As part of the Manhattan Project initiated in the United States, the Chicago Pile-1 (CP-1), built at the University of Chicago on December 2, 1942 under the leadership of Enrico Fermi, became the first reactor in human history to successfully carry out a controlled and self-sustaining nuclear chain reaction. Using a graphite moderator and natural uranium fuel, CP-1 proved the practical feasibility of nuclear fission. This success paved the way for the use of nuclear energy for both military and civilian purposes. During the war years, reactors were primarily used for plutonium production and atomic bomb development, with large-scale reactors being built at facilities such as Hanford and Oak Ridge (Angelo, 2004; Johnston, 2012; Shirk, 2018). In the post-war period, the use of nuclear energy for peaceful purposes came to the agenda and electricity was generated from nuclear energy for the first time with the EBR-I reactor in Idaho in 1951. This reactor demonstrated that nuclear energy could be used to generate electricity by lighting four light bulbs. The Obninsk Nuclear Power Plant, built in the Soviet Union in 1954, made history as the first nuclear power plant to energize the electricity grid. The 1950s and 1960s were a period of rapid diversification and commercialization of nuclear reactor technology. Different designs such as the Pressurized Water Reactor (PWR) and Boiling Water Reactor (BWR) in the USA, Magnox and Advanced Gas-cooled Reactor (AGR) in the UK, Pressurized Heavy Water Reactor (CANDU) in Canada, and RBMK and VVER in the Soviet Union were developed and widely used. In 1956, Calder Hall in the UK became the first nuclear power plant to generate electricity for commercial purposes, while the Shippingport plant in the US, which came online in 1957, was the

first full-scale PWR reactor for civilian purposes (Michal, 2001; Rachkov et al., 2014). In the 1970s and 1980s, interest and investments in nuclear energy increased rapidly worldwide, and dozens of reactors were built in many countries, particularly in the USA, France, the Soviet Union and Japan. During this period, standardization in reactor designs, fuel cycle optimization and increased safety measures came to the fore. However, the Three Mile Island (USA) and Chernobyl (USSR) accidents in 1979 and 1986, respectively, raised serious concerns about nuclear safety on a global scale and led to significant regulations in the sector. These accidents necessitated the development of passive and active safety systems in reactor designs and the revision of emergency management and radiation protection standards. Moreover, the public's loss of confidence in nuclear energy has also affected the public acceptance of new reactor projects (Mamun, 2013; Filburn et al., 2016). In addition, intensive research is being conducted on small modular reactors (SMR) and IVth generation reactor concepts (such as fast reactors, molten salt reactors, high temperature gas reactors). In 2011, the Fukushima Daiichi nuclear accident in Japan once again raised the importance of reactor safety, especially against natural disasters, and led to a reassessment of international safety standards. Figure 1 summarizes the history of nuclear energy (Adamantiades and Kessides, 2009; Marques, 2014).

2. NUCLEAR REACTOR DISTRIBUTION BY COUNTRY: TECHNOLOGY PREFERENCES AND ENERGY POLICIES

Today, nuclear energy plays an important role in the energy policies of many countries. In particular, the increasing demand for energy, the fight against climate change and carbon emission reduction targets have brought nuclear energy back to

the forefront. By 2024, more than thirty countries around the world will have hundreds of nuclear reactors in operation, with many new reactors under construction. Each country's energy strategy, technological developments and preferred reactor types directly affect the share of nuclear power in total electricity generation and its installed capacity. In Figure 2, the number of active and under-construction nuclear reactors, reactor types, total power, their share in electricity generation, and the major cities where the reactors are located are presented together as of 2024. This information helps us better understand the current global spread of nuclear energy and its role in energy production (world-nuclear, 2024; statista.com, 2025). In general, the share of nuclear energy in electricity generation varies greatly from country to country. For example, in France, around 70-72% of electricity generation is provided by nuclear power plants, whereas in the US this ratio is around 18-20%. However, the US is the world leader in terms of the number of reactors and total capacity. China is rising rapidly in terms of the number of reactors and capacity, but its share in electricity generation is still low (5%). This shows that nuclear is not yet dominant in China's energy portfolio, but its growth potential is high. In countries such as Russia and South Korea, the share of nuclear energy hovers around 20-30%. Apart from France, the share of nuclear energy in electricity generation is quite high in countries such as Sweden, Slovakia, Hungary, Belgium. Especially in Slovakia, Hungary and Belgium, this ratio approaches or exceeds 50%. For these countries, nuclear energy plays a critical role in terms of energy supply security and reducing carbon emissions. In Japan, most of the reactors were shut down after the Fukushima disaster in 2011; currently, the share of operating reactors in electricity generation is around 7%. However, Japan is signaling a return to nuclear power. Germany is a striking example of nuclear power. A major nuclear power producer for many years, Germany accelerated its nuclear phase-out (Energiewende) policy after the Fukushima disaster in 2011

and shut down all its nuclear power plants by 2023. This decision led to a greater emphasis on coal and renewables in Germany's energy portfolio. However, Japan is signaling a return to nuclear power. Germany is a striking example of nuclear power. A major nuclear power producer for many years, Germany accelerated its nuclear phase-out (Energiewende) policy after the Fukushima disaster in 2011 and shut down all its nuclear power plants by 2023. This decision led to a greater emphasis on coal and renewables in Germany's energy portfolio. However, the impact of the nuclear phase-out on security of energy supply and carbon emissions remains a matter of debate.

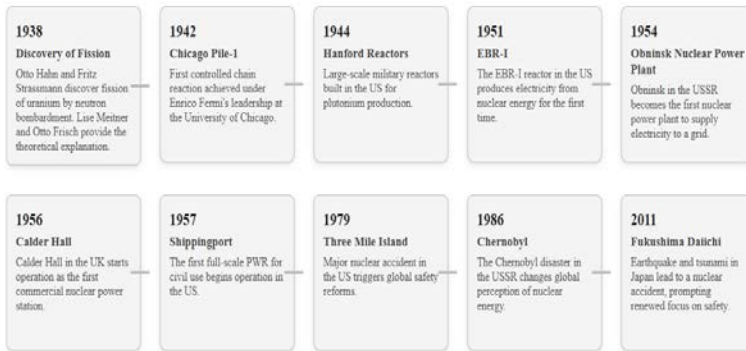


Figure 1. History of nuclear energy: key events and milestones

In addition, some countries with already operating nuclear power plants are building new reactors in addition to their existing plants. Countries such as China and Russia, for example, are both increasing the number of existing reactors and investing in next-generation reactor technologies. South Korea, India and the United Arab Emirates are also aiming to increase their nuclear capacity through new reactor construction. These countries see nuclear power as a strategic option in response to rising energy demand and the fight against climate change. Countries such as Türkiye, Bangladesh and Egypt do not yet have operational nuclear power plants, but they are taking important steps to transition to nuclear energy. With the commissioning of the

Akkuyu Nuclear Power Plant under construction in Türkiye, the share of nuclear in energy production will increase. This development is of great importance in terms of energy supply security, reducing foreign dependency and reducing carbon emissions. Countries with nuclear energy in the world generally continue to keep nuclear in their portfolios in line with energy supply security, low carbon emissions and sustainability goals. However, there is also a tendency in some countries to exit or slow down nuclear power due to public pressure, security concerns and economic reasons. For example, Germany has decided to completely phase out nuclear energy, while some countries in Asia and the Middle East are making new nuclear investments. Although each country's approach to nuclear energy varies, nuclear energy plays an important role in the strategies of many countries in line with the goals of energy supply security, combating climate change and economic development. In particular, new reactor constructions indicate that the role of nuclear energy on a global scale may increase even further in the coming years. The paths that countries follow to meet their energy needs and achieve their sustainability goals bring different approaches to the use of nuclear energy. In this context, the reactor types preferred by countries also influence their energy policies (Khaleel et al., 2025; Toklu et al., 2025). Apart from Russia, VVER reactors are also widespread in former Soviet countries and in countries to which Russia exports nuclear technology.

3. NUCLEAR REACTOR TYPES: DIFFERENT APPROACHES TO ENERGY PRODUCTION

Different reactor types used in nuclear power generation offer various solutions to the energy sector, each with its own unique design, operating principle and advantages.

3.1. Pressurized Water Reactor (PWR) and Simulation

Pressurized Water Reactors (PWR), by far the most widely used nuclear reactor type worldwide, have an important place in the nuclear energy sector thanks to their reliability, mature technology and economic advantages (Sikorska et al., 2024). In PWRs, heat from the reactor heart is transferred to water kept under high pressure. This hot water is sent to the steam generator, where it vaporizes water in a second water circuit, turning turbines. It is a reliable and mature technology. It offers high thermal efficiency. Low risk of radioactive contamination in the turbine circuit, as the reactor heart and turbine circuit are separate. Requires a thicker and more costly reactor pressure vessel because it operates under high pressure. Uranium-235 enriched fuel must be used. It is used in the USA, France, China, China, Japan, South Korea, the United Kingdom, Brazil, Pakistan, Iran, Argentina and many other countries (Aksan, 2019; Zhang et al., 2025; world-nuclear, 2024). The operating principle of a PWR is basically based on the conversion of heat generated by the nuclear fission reaction into electrical energy. The large amount of heat released as a result of nuclear fission in the uranium fuel rods at the heart of the reactor is transferred to water in the primary circuit. Since this water is kept under a very high pressure of about 150-160 bar, it cannot boil and remains liquid despite reaching temperatures above 300°C. This hot water in the primary circuit leaves the reactor core and goes to the steam generator, where it transfers heat to the water in the secondary circuit. At this stage, where the two waters do not mix, the water in the secondary circuit evaporates and high-pressure steam is produced. The steam produced is sent to the turbine, allowing the turbine to rotate and thus generating electricity by running the generator. The steam from the turbine is converted back to liquid in the condenser with the help of cooling water, which is pumped

back to the steam generator to complete the cycle. Finally, the heat from the condenser is discharged to the environment, usually via a cooling tower or sea/lake water (Durmayaz and Yavuz, 2001; Yu, 2024). In this study, an interactive web simulation was developed for educational purposes to demonstrate the working principle of a pressurized water reactor (PWR). The simulation shows the main components of the reactor, flow paths and typical pressure, temperature, flow rate, and yield values at each stage. The source code of the simulation is available on GitHub (<https://github.com/AliAkyuz12/pwr-simulation>) and can be viewed online. In a pressurized water reactor (PWR) system, 3000 MW of thermal power is generated inside the reactor at a pressure of 155 bar and an outlet temperature of 325°C. The system's pressure regulator operates at 155 bar pressure and 345°C temperature, while water circulates in the primary circuit at a rate of 15,000 kg/s. In the steam generator, water at a pressure of 155 bar and a temperature of 325°C on the primary side produces steam at a pressure of 70 bar and a temperature of 280°C on the secondary side. The produced steam enters the turbine with an inlet pressure of 70 bar and operates the turbine with an outlet pressure of 0.05 bar with 90% efficiency. The generator provides 1000 MW electricity output and operates with 98% efficiency. In the condenser, steam condenses at a pressure of 0.05 bar and a temperature of 33°C, while water circulates in the cooling system at a flow rate of 45,000 kg/s, with an inlet temperature of 20°C and an outlet temperature of 30°C. As a result of all these processes, the PWR system operates with a total efficiency between 33-36%. A screenshot of the output of the code is given in Figure 2. The simulation code was developed using a combination of modern web technologies. HTML5 was used for basic structure and content organization, CSS3 for visual styling and layout, JavaScript for interactivity and dynamic content creation. SVG (Scalable Vector Graphics) technology was used for drawing reactor components, pipelines and particle

animations. Since the code is written in pure web technologies without any additional libraries or frameworks, it can run smoothly in all modern web browsers without external dependencies. By dynamically manipulating SVG elements with JavaScript, the movement of fluid particles and interactive highlighting of system components are allowed. PWR are a core subject in nuclear power engineering education and understanding PWR technology provides students with in-depth knowledge of energy production, thermodynamic principles and nuclear safety. As these reactors are the most widely used type of nuclear power plant worldwide, understanding the operating principles and components of PWRs is critical for students seeking knowledge in the nuclear power industry. The interactive web simulation we have developed can be an important tool in the education of PWRs; it makes the complex structure and operating principles of the reactor visually understandable, allows students to observe the effects on the system by changing different parameters, can be accessed and used from anywhere thanks to its web-based nature, and provides practical applications of theoretical knowledge. Simulation can be integrated into the curriculum to support the theoretical knowledge taught in the courses, to be used as an alternative or complement to traditional laboratory experiments, and to give students the project of modeling or optimizing a specific PWR system. The technical details of the simulation (HTML5, CSS3, JavaScript, SVG) are also important to demonstrate the use of modern web technologies, and its open-source nature (GitHub) can encourage students to learn more deeply by reviewing and modifying the code. To further improve the simulation, more detailed models of the different components of the reactor can be added, more realistic animations can be used to show the movement of fluids and heat transfer, the user interface can be made more user-friendly, and different scenarios (e.g. emergency

scenarios) can be created to help students understand the behavior of the reactor under different conditions.

3.2. Boiling Water Reactors (BWR): Key Features and Operating Principle

The Boiling Water Reactor (BWR) is the second most common type of reactor for the use of nuclear energy in electricity generation. BWRs use light water (normal water) for heat transfer and neutron moderation. The principle of operation is to boil water directly in the reactor pressure vessel and send the resulting steam to a turbine to generate electricity. In these reactors, light water (H_2O) is used as coolant and moderator, while low enriched uranium dioxide (UO_2) is preferred as fuel. BWRs operate at lower pressure (about 7 MPa) than PWR and steam is produced directly inside the reactor vessel, without a separate steam generator. For safety reasons, they are equipped with multiple emergency cooling and control rods (Ortiz-Villafuerte et al., 2007; Mehtap, 2021; Siorska et al., 2024).

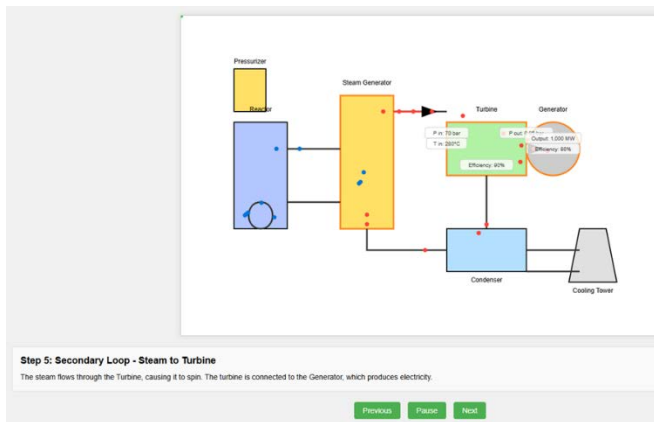


Figure 2. Screenshot of one of the steps of the PWR operating principle simulation

BWRs have the advantages of being relatively simple in design, producing steam directly in the reactor vessel and requiring less equipment and piping. They can also operate at

high efficiency. However, the fact that the steam going to the turbine carries radioactivity due to direct contact with the reactor requires more stringent maintenance and safety measures.

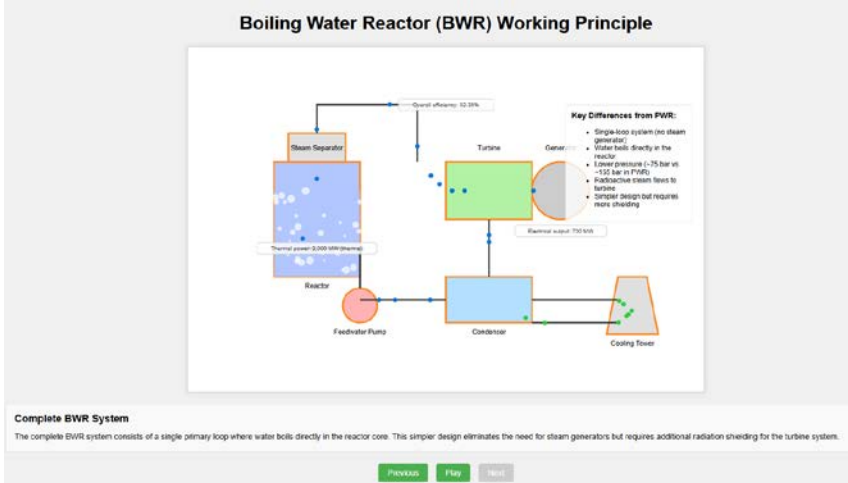


Figure 3. BWR working principle and screenshot from simulation

Therefore, they are less common than PWRs. Countries where BWRs are in use include the USA (about 30 operating reactors), Japan, Sweden, Germany, Spain, Mexico and Finland. Typical power ranges from 600 MW to 1400 MW (electrical) and examples include Fukushima Daiichi (Japan), Oskarshamn (Sweden) and Nine Mile Point (USA) (Umasankari and Mohanakrishan, 2021; world-nuclear, 2024). BWRs differ from PWRs mainly in that they use a single circuit (the primary circuit is directly connected to the turbine), water boils and steam forms in the reactor, there is no steam generator, the pressure is lower (~75 bar), and the steam to the turbine is radioactive. BWRs are characterized by a single circuit system (water boils directly in the reactor, steam separators are used, no steam generator), lower pressure and temperature (~75 bar, ~285°C), and radioactive steam to the turbine. These features allow BWRs to have a simpler design (Singh, 2021; Umasankari and Mohanakrishan, 2021). The BWR simulation (screen excerpts are given in Figure

3) is built on the basic structure of the PWR simulation, but is developed taking into account the unique features of the BWR. In the BWR system, unlike the PWR, water is boiled directly in the reactor and the resulting steam is sent directly to the turbine without a separate steam generator. This fundamental difference is shown in the simulation as a single circuit system. In the BWR simulation, 2000 MW thermal power is generated in the reactor at a pressure of 75 bar and a temperature of 285°C. The steam generated in the reactor passes through steam separators and is sent to the turbine at 70 bar pressure and 285°C temperature. The turbine operates at 85% efficiency with an inlet pressure of 70 bar and an outlet pressure of 0.05 bar, rotating the generator and generating 700 MW of electricity. Steam condenses in the condenser at a pressure of 0.05 bar and a temperature of 33°C, while water circulates in the cooling system at a flow rate of 30,000 kg/s. The BWR system operates with an overall efficiency between 32-35%. As with the PWR simulation, the simulation code was developed using HTML5, CSS3, JavaScript and SVG technologies. Since both simulations are written with pure web technologies without using external libraries or frameworks, they can run smoothly in all modern web browsers. The source code of the simulations is available on GitHub (<https://aliakyuz12.github.io/brw-working-principle/>) and can be used for educational purposes.

3.3. CANDU (PHWR) Reactor Main Features, Operating Principle and Simulation

A Heavy Water Reactor (PHWR) is a type of nuclear reactor that uses heavy water (D_2O , deuterium oxide) as coolant and neutron moderator. The best known PHWR design is the CANDU (CANada Deuterium Uranium) reactor developed in Canada. PHWRs use natural uranium fuel in the reactor core and are cooled by heavy water, with heavy water also used as a moderator. Operating under high pressure, these reactors have the

ability to change fuel without going offline. They are equipped with multiple safety systems and passive safety features (Strachan and Brown, 1984; Han and Zhon, 2024). One of the major advantages of PHWRs is that they do not require fuel enrichment as they can use natural uranium. In addition, the ability to change fuel during operation ensures a high-capacity factor. Since heavy water absorbs neutrons less, fuel utilization efficiency is also high. However, the production and supply of heavy water is costly, and reactor design and operation are more complex. It requires careful control in terms of plutonium production and proliferation risk. Countries where PHWRs are in use include Canada, India, China, South Korea, Romania, Argentina and Pakistan. Typical power ranges from 600 MW to 900 MW (electrical) and examples include Bruce, Darlington, Pickering (Canada), Kakrapar, Rajasthan (India) and Cernavodă (Romania) (Nayak and Banaerjee, 2017; Vitorino and De Stefani, 2021; world-nuclear, 2024). CANDU reactors are nuclear reactors that can operate on natural uranium thanks to the use of heavy water, have a high-capacity factor and are particularly common in Canada and India. They are characterized by the advantages of flexible fuel utilization and hot fuel switching. PHWR/CANDU reactors use heavy water (D_2O) in the primary circuit (both coolant and moderator). Pressurized heavy water heats up as it passes through the reactor tubes and goes to the steam generator. The secondary circuit works similarly to the PWR: Steam generator, turbine, generator, condenser and cooling circuit. The efficiency of these reactors is about 30-33% (Suk et al., 1995; Abbasi and Wallam, 2014). The CANDU reactor simulation is built on the basic structure of the PWR simulation, but has been developed by taking into account the unique features of CANDU. In the CANDU system, unlike the PWR, natural uranium fuel is used and heavy water (D_2O) is preferred as the neutron moderator. In addition, there are fuel elements in horizontally positioned pressure tubes and fuel can be changed while the reactor is

operating. These basic differences are shown in the simulation as two separate heavy water circuits (moderator and coolant). In the CANDU simulation (screenshot is provided in Figure 4), thermal power is generated in the reactor at 10 MPa pressure and 310°C temperature. The heavy water circulating in the primary circuit transfers heat to the steam generators, creating steam at 4.7 Mpa pressure and 260°C temperature in the secondary circuit. The turbine rotates the generator with the steam passing through the high-pressure and low-pressure stages, and electricity is generated. While the steam condenses in the condenser, heavy water circulates in the cooling system at a flow rate of approximately 7500 kg/s. The CANDU system operates with a total efficiency of 32-33%. The simulation codes, as in the PWR simulation, were developed using HTML5, CSS3, JavaScript and SVG technologies. Since both simulations are written with pure web technologies without using external libraries or frameworks, they can run smoothly in all modern web browsers. The source codes of the simulations are available on GitHub (<https://aliakyuz12.github.io/CANDU-phwr/>) and can be used for educational purposes.

3.4. VVER Reactor Main Features, Operating Principle and Simulation

VVER (Водо-водяной энергетический реактор), or Water-Water Power Reactor, belongs to the Pressurized Water PWR family and uses ordinary (light) water as both coolant and neutron moderator. In the reactor core, low-enriched uranium dioxide (UO₂) fuel rods are usually used. These fuel rods generate heat by initiating a controlled chain reaction in the heart of the reactor. They operate under high pressure (about 15-16 Mpa), preventing the water from boiling and allowing more efficient heat transfer. This high pressure allows the water to reach higher temperatures, increasing thermodynamic efficiency

and allowing more electricity to be generated (Poullikkas, 2013; Bojinoy et al., 2024).

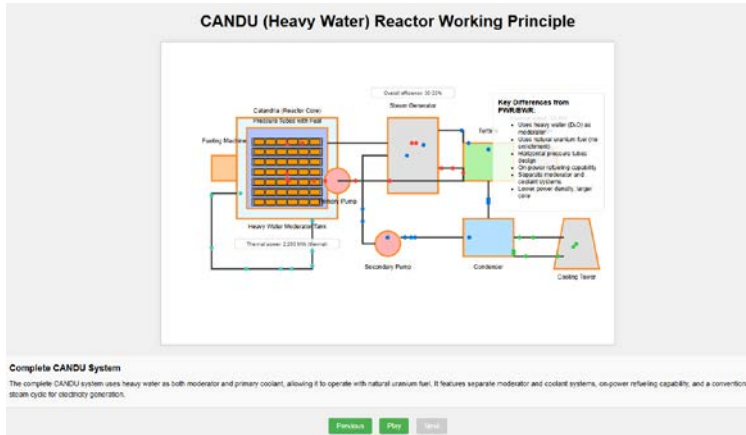


Figure 4. CANDU (PHWR) Reactor and screenshot from simulation

Modern VVER designs have been developed in accordance with international safety standards and feature multiple active and passive safety systems. While active safety systems rely on external power sources, passive safety systems rely on natural forces such as gravity and natural circulation to safely shut down the reactor in the event of an accident. For example, core catchers in VVER-1200 reactors minimize the environmental impact in the event of a meltdown by preventing molten fuel from spreading outside the reactor vessel. In addition, emergency cooling systems are designed to prevent the reactor from overheating and melting. VVER-440s have a 6-loop cooling system, while VVER-1000 and VVER-1200 have a 4-loop cooling system. VVER reactors, whose main purpose is electricity generation, can in some cases also provide heat for district heating systems, which increases energy efficiency and reduces dependence on fossil fuels (Brutschin, 2023; Sabotinov et al., 2014). Modern VVER designs have been developed in accordance with international safety standards and feature

multiple active and passive safety systems. While active safety systems rely on external power sources, passive safety systems rely on natural forces such as gravity and natural circulation to safely shut down the reactor in the event of an accident.

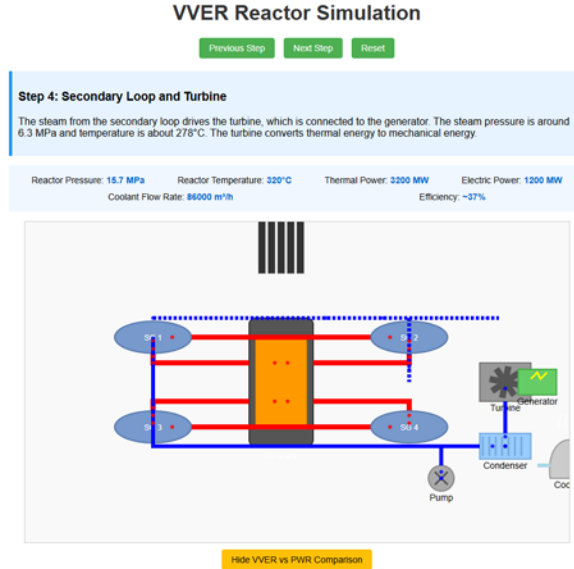


Figure 5. VVER Reactor and screenshot from simulation

For example, core catchers in VVER-1200 reactors minimize the environmental impact in the event of a meltdown by preventing molten fuel from spreading outside the reactor vessel. In addition, emergency cooling systems are designed to prevent the reactor from overheating and melting. VVER-440s have a 6-loop cooling system, while VVER-1000 and VVER-1200 have a 4-loop cooling system. VVER reactors, whose main purpose is electricity generation, can in some cases also provide heat for district heating systems, which increases energy efficiency and reduces dependence on fossil fuels (Brutschin, 2023; Sabotinov et al., 2014). VVER reactors are widely used in Russia and former Soviet countries. In addition, VVER reactors have been or are being built in countries such as China, India, Iran and Türkiye. The widespread use of these reactors can be

explained by their reliability, efficiency and the accumulated experience gained due to the fact that it is a technology that has been in operation for many years. VVER-440s have been widely used in Eastern Europe since the 1970s, while VVER-1000s have included higher power and improved safety systems since the 1980s. VVER-1200s, first commissioned at Novovoronezh II in 2016, are characterized by advanced passive and active safety systems, digital automation and control systems, a 60-year design life (extendable), and early warning and emergency cooling system (Asmolov et al., 2017; Fernandez-Arias et al., 2020). VVER-TOI (VVER-1300) is the newest and most advanced VVER design, with higher power and more advanced safety features than VVER-1200 and a more compact and modular design. However, it also has disadvantages such as high initial investment cost and management of nuclear waste (Gagarinskiy et al., 2022). Safe storage and disposal of nuclear waste is crucial to minimize environmental impacts and new technologies are constantly being developed. Türkiye's first nuclear power plant, Akkuyu NPP, uses VVER-1200 type reactors, designed in accordance with modern safety standards (Saylan and Aygün, 2024; Toklu et al., 2025). The VVER reactor simulation was built on the basic structure of the PWR simulation, but was developed taking into account the unique features of VVER. Similar to the PWR, the VVER system uses normal (light) water as both coolant and neutron moderator. However, VVER is distinguished by its unique design features such as horizontal steam generators, hexagonal fuel arrangement, and typically a 4- or 6-cycle cooling system. These key differences are shown in the simulation as a 4-cycle primary circuit and horizontal steam generators. In the VVER simulation, 3200 MW of thermal power is generated inside the reactor at a pressure of 15.7 Mpa and a temperature of 320°C. Water circulating in the primary circuit transfers heat to the steam generators and generates steam in the secondary circuit. The turbine turns the generator with this steam and 1200 MW of

electricity is generated. While steam condenses in the condenser, water circulates in the cooling system at a flow rate of about 86000 m³/h. The VVER system operates with a total efficiency of about 37%. As in previous simulations, the simulation code was developed using HTML5, CSS3, JavaScript and SVG technologies. Since all three simulations are written with pure web technologies, without using external libraries or frameworks, they can run smoothly in all modern web browsers. The source code of the simulations is available on GitHub (<https://aliakyuz12.github.io/VVER/>) and can be used for educational purposes. Unlike the PWR simulation, the VVER simulation (screen excerpts in Figure 5) emphasizes the 4-cycle primary circuit system and horizontal steam generators. Also included is a comparative information box showing how the VVER differs from the Western PWR. This comparison highlights the distinctive features of the VVER, such as its Russian design, hexagonal fuel arrangement, horizontal steam generators, 4- or 6-loop design, and passive safety systems such as the core arrestor found in modern VVER-1200 models.

3.5. Advanced Gas Cooled Reactor (AGR) Key Features, Operating Principle and Simulation

The Advanced Gas Cooled Reactor (AGR) is a type of nuclear reactor developed in the United Kingdom and widely used only in that country. An improved version of Magnox reactors, AGRs cool the reactor core with carbon dioxide (CO₂) gas and use graphite as a neutron moderator. Lightly enriched uranium dioxide (UO₂) is preferred as fuel. The fuel is contained in casings made of stainless steel, which allow the fuel to withstand high temperatures. The reactor operates under high pressure (about 4 Mpa), which allows the coolant gas to transport heat more efficiently. One of the most important technical advantages of AGRs is that they can produce steam at temperatures as high as about 650°C and thus achieve a high

thermal efficiency of about 41% (Goodjohn, 1991; Zohuri, 2020). This means higher efficiency, less fuel consumption and lower operating costs. Equipped with a thick steel pressure vessel and multiple safety systems, AGRs have good neutron economy thanks to the graphite moderator. Control rods are inserted into the core from the top of the reactor and are used to control the nuclear reaction. Emergency shutdown systems are designed to shut down the reactor quickly in the event of a malfunction. However, these reactors are only used in the UK and have not become widespread in other countries due to their complex design and maintenance requirements. The complex structure of AGRs requires regular and meticulous maintenance, which increases operating costs. In addition, no new AGR reactors are being built and existing reactors are being decommissioned as they reach the end of their life. The UK government plans to build new nuclear power plants to replace these reactors. Power plants such as Heysham, Hartlepool, Hinkley Point B, Hunterston B, Dungeness B and Torness generate between 600-660 MW of electricity. These plants meet a significant portion of the UK's energy needs (Abraham and Ion, 2008; Taylor, 2016; Wealer et al., 2018). The AGR reactor simulation (screenshots are shown in Figure 6) builds on the basic structure of previous simulations, but is enhanced by taking into account the unique features of the AGR. Unlike other reactors, the AGR system uses carbon dioxide (CO_2) gas as coolant and graphite as neutron moderator. In addition, the reactor core is located in a pre-stressed concrete pressure vessel and the fuel is contained in stainless steel casings. These main differences are shown in the simulation as CO_2 gas flow and graphite moderator structure. In the AGR simulation, 1500 MW of thermal power is generated inside the reactor at a pressure of 4 Mpa and a temperature as high as 650°C. The CO_2 gas circulating in the primary circuit transfers heat to the boilers (steam generators) to form high pressure steam at 565°C in the secondary circuit. The turbine turns the generator with this steam and 625

MW of electricity is generated. While steam condenses in the condenser, water circulates in the cooling system. The AGR system operates with a high overall efficiency of about 41%, which is higher than other reactor types. As in previous simulations, the simulation code was developed using HTML5, CSS3, JavaScript and SVG technologies. Since all simulations are written with pure web technologies without using external libraries or frameworks, they can run smoothly in all modern web browsers. The source code of the simulations is available on GitHub (<https://aliakyuz12.github.io/AGR-Reactor/>) and can be used for educational purposes. The AGR simulation, unlike other simulations, includes different color coding to show the CO₂ gas flow and highlights the graphite moderator structure. Also included is a comparative information box showing how AGR differs from PWR. This comparison highlights the distinctive features of the AGR such as the CO₂ gas cooler, graphite moderator, higher operating temperature (650°C), higher thermal efficiency (41%), concrete pressure vessel and stainless-steel fuel casings.

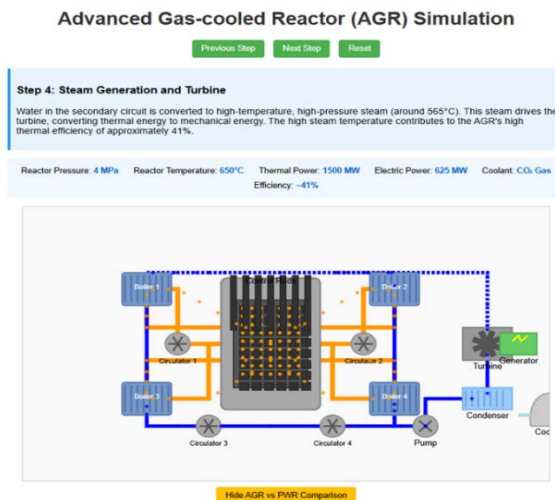


Figure 6. AGR Reactor screenshot from simulation

4. CONCLUSION

The historical development of nuclear reactors is a complex and constantly evolving process extending from scientific discoveries to technological innovations. While different reactor types offer various advantages in energy production, they require different approaches and solutions in terms of safety, efficiency and sustainability. Simulations used to increase the general level of knowledge about nuclear energy and to facilitate the understanding of this technology make significant contributions, especially to raising public awareness and eliminating misperceptions about nuclear energy. These simulations provide interactive learning environments, conveying the working principles of nuclear reactors, safety precautions and potential risks in a more understandable way. In order for nuclear energy policies to be successfully implemented, decisions based on scientific data must be made, technological developments must be closely followed, transparent communication strategies must be developed and training programs must be constantly updated. In addition, international cooperation and compliance with safety standards are of great importance.

REFERENCES

- Abbasi, A. R., & Wallam, F. (2014). Evaluating transient handling capability of fuzzy logic controller for a pressurized heavy water reactor (PHWR). *Journal of Control Engineering and Applied Informatics*, 16(2), 40–48.
- Abram, T., & Ion, S. (2008). Generation-IV nuclear power: A review of the state of the science. *Energy Policy*, 36(12), 4323–4330.
- Adamantiades, A., & Kessides, I. (2009). Nuclear power for sustainable development: Current status and future prospects. *Energy Policy*, 37(12), 5149–5166. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2009.07.052>
- Aksan, N. (2019). An overview on thermal-hydraulic phenomena for water cooled nuclear reactors; part I: SETs, and ITFs of PWRs, BWRs, VVERs. *Nuclear Engineering and Design*, 354, 110212. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2019.110212>
- Angelo, J. A., Jr. (2004). *Nuclear technology*. Bloomsbury Publishing USA.
- Asmolov, V. G., Gusev, I. N., Kazanskiy, V. R., Povarov, V. P., & Statsura, D. B. (2017). New generation first-of-the kind unit–VVER-1200 design features. *Nuclear Energy and Technology*, 3(4), 260–269.
- Bojinov, M., Betova, I., & Karastoyanov, V. (2024). Corrosion mechanism and electrochemical reactions on Alloy 690 in simulated primary coolant of water–water energy reactors. *Materials*, 17(8), 1846. <https://doi.org/10.3390/ma17081846>

- Brutschin, E. (2023). A new hope for nuclear? In *Handbook on the geopolitics of the energy transition* (pp. 372–386). Edward Elgar Publishing.
- Compton, A. H. (2019). *Atomic quest: A personal narrative*. Plunkett Lake Press.
- Durmayaz, A., & Yavuz, H. (2001). Exergy analysis of a pressurized-water reactor nuclear-power plant. *Applied Energy*, 69(1), 39–57. [https://doi.org/10.1016/S0306-2619\(00\)00062-2](https://doi.org/10.1016/S0306-2619(00)00062-2)
- Fernandez, B., & Ripka, G. (2012). *Unravelling the mystery of the atomic nucleus: A sixty year journey 1896–1956*. Springer Science & Business Media.
- Fernández-Arias, P., Vergara, D., & Orosa, J. A. (2020). A global review of PWR nuclear power plants. *Applied Sciences*, 10(13), 4434. <https://doi.org/10.3390/app10134434>
- Filburn, T., Bullard, S., & Bullard, S. G. (2016). Three Mile Island, Chernobyl and Fukushima (pp. 105–114). New York: Springer.
- Gagarinskiy, A. Y., Semchenkov, Y. M., Sidorenko, V. A., & Fomichenko, P. A. (2022). New stage in Russia's nuclear energy strategy. *Atomic Energy*, 131(6), 307–311.
- Goodjohn, A. J. (1991). Summary of gas-cooled reactor programs. *Energy*, 16(1–2), 79–106.
- Han, Y., & Zhong, X. (2024). An overview of heavy water reactors. In *Nuclear power reactor designs* (pp. 351–363).
- Ho, M., Obbard, E., Burr, P. A., & Yeoh, G. (2019). A review on the development of nuclear power reactors. *Energy Procedia*, 160, 459–466. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2019.02.186>

- International Atomic Energy Agency. (2024). Nuclear power reactors in the world (IAEA-RDS-2/44). <https://www.iaea.org/publications/14713/nuclear-power-reactors-in-the-world>
- Johnston, S. (2012). *The neutron's children: Nuclear engineers and the shaping of identity*. Oxford University Press.
- Khaleel, M., Yusupov, Z., Rekik, S., Kılıç, H., Nassar, Y. F., El-Khozondar, H. J., & Ahmed, A. A. (2025). Harnessing nuclear power for sustainable electricity generation and achieving zero emissions. *Energy Exploration & Exploitation*. <https://doi.org/10.1177/01445987251314504>
- Mamun, M. M. A. (2013). Recent Fukushima nuclear detonation, Chernobyl nuclear fallout, three mile island nuclear accident and atomic bomb explosion—rethinking the effects of nuclear radiations over human health. *International Journal of Radiation Research*, 11(2), 63.
- Marques, J. G. (2014). Environmental characteristics of the current Generation III nuclear power plants. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Energy and Environment*, 3(2), 195–212. <https://doi.org/10.1002/wene.97>
- Mehtap, D. Ü. Z. (2021). Boiling water reactors. *Natural Sciences*, 65.
- Miang Jiazhen, H. (2024). Safety analysis of pressurized water reactor (PWR) type nuclear reactor against cooling system failure. *Idea: Future Research*, 2(1), 28–36.
- Michal, R. (2001). Fifty years ago in December: Atomic reactor EBR-I produced first electricity. *Nuclear News*, 44(12), 28–29.
- Nayak, A. K., & Banerjee, S. (2017). Pressurized heavy water reactor technology: Its relevance today. *Journal of*

Nuclear Engineering and Radiation Science, 3(2), 020901.

- Ortiz-Villafuerte, J., Castillo-Durán, R., Hernández-López, H., & Araiza-Martínez, E. (2007). Fundamentals of boiling water reactor safety design and operation. In *Towards a cleaner planet: Energy for the future* (pp. 123–146).
- Poullikkas, A. (2013). An overview of future sustainable nuclear power reactors. *International Journal of Energy & Environment*, 4(5).
- Rachkov, V. I., Kalyakin, S. G., Kukharchuk, O. F., Orlov, Y. I., & Sorokin, A. P. (2014). From the first nuclear power plant to fourth-generation nuclear power installations [on the 60th anniversary of the world's first nuclear power plant]. *Thermal Engineering*, 61, 327–336. <https://doi.org/10.1134/S0040601514040092>
- Sabotinov, L., Dimitrov, B., & Bruna, G. B. (2014, July). Safety assessment and accident analysis of VVER-1000/466B with active and passive safety systems for Belene NPP. In *International Conference on Nuclear Engineering* (Vol. 45936, p. V003T06A044). American Society of Mechanical Engineers.
- Saylan, E., & Aygün, C. (2024). Thermoeconomic analysis and environmental impact assessment of the Akkuyu nuclear power plant. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 149(12), 6531–6550.
- Shirk, W. L. (2018). *A history of the atomic space age and its implications for the future*. Dog Ear Publishing.
- Sikorska, D., Brzozowska, J., Pawełkiewicz, A., Psykała, M., Błasiak, P., & Kolasiński, P. (2024). Convective heat transfer in PWR, BWR, CANDU, SMR, and MSR nuclear

- reactors—A review. *Energies*, 17(15), 3652.
<https://doi.org/10.3390/en17153652>
- Singh, O. P. (2021). Nuclear reactors of the future. In *Physics of nuclear reactors* (pp. 695–746). Academic Press.
- Statista. (2024). Number of under construction nuclear reactors worldwide.
<https://www.statista.com/statistics/513671/number-of-under-construction-nuclear-reactors-worldwide/>
- Strachan, B., & Brown, D. R. (1984). Operating performance and reliability of CANDU PHWR fuel channels in Canada. *Nuclear Engineering and Design*, 81(1), 3–16.
[https://doi.org/10.1016/0029-5493\(84\)90113-2](https://doi.org/10.1016/0029-5493(84)90113-2)
- Suk, H. C., Shim, K. S., Byun, T. S., Park, K. S., Kang, H. Y., Kim, B. K., ... & Lee, E. J. (1995). Development of the advanced PHWR technology—Design and analysis of CANDU advanced fuel.
- Taylor, S. (2016). *The fall and rise of nuclear power in Britain: A history*. Bloomsbury Publishing.
- Toklu, O. D., Tunçez, F. D., & Vardar, N. (2025). Environmental impact assessment of nuclear power plants. *International Journal of New Findings in Engineering, Science and Technology*, 3(1), 68–82.
- Umasankari, K., & Mohanakrishnan, P. (2021). Types of nuclear reactors. In *Physics of nuclear reactors* (pp. 155–191). Academic Press.
- Vitorino, I. M., & De Stefani, G. L. (2021). On CANDU reactors: History, features and its use around the world. In *Proceedings of the INAC 2021: International nuclear atlantic conference. Nuclear technology: Reducing our carbon footprint and increasing quality of life*.

- Wealer, B., Bauer, S., Landry, N., Seiß, H., & von Hirschhausen, C. R. (2018). Nuclear power reactors worldwide: Technology developments, diffusion patterns, and country-by-country analysis of implementation (1951–2017) (No. 93). DIW Data Documentation.
- World Nuclear Association. (2024). Nuclear reactor database: Summary. <https://world-nuclear.org/nuclear-reactor-database/summary>
- Yu, J. (2024). Advanced pressurized water reactors (Gen III). In *Nuclear power reactor designs* (pp. 105–110). Academic Press.
- Zhang, Q., Sun, A., Xiao, L., Wei, X., & Sun, P. (2025). Active disturbance rejection control of pressurizer pressure during startup process in a pressurized water reactor nuclear power plant. *Nuclear Engineering and Technology*, 57(4), 103325. <https://doi.org/10.1016/j.net.2024.103325>
- Zohuri, B. (2020). Generation IV nuclear reactors. In *Nuclear reactor technology development and utilization* (pp. 213–246). Woodhead Publishing.

NUCLEAR ENERGY: RISKS, SOCIETY AND TÜRKİYE'S EXPERIENCE

Ali AKYÜZ¹

Elif P. TUNCER²

Yeşim ÖKTEM³

1. NUCLEAR ACCIDENTS: THE FRAGILE BALANCE BETWEEN HUMANITY AND TECHNOLOGY

The Chernobyl nuclear accident occurred on April 26, 1986 at reactor No. 4 of the Chernobyl Nuclear Power Plant, and is recorded as one of the worst nuclear disasters in history, with a nuclear reaction that went out of control as a result of a series of errors and violations during a safety test. Deficiencies in the design of the RBMK-type reactor, especially the inability to control reactivity at low power levels and the positive void coefficient, were one of the main causes of the accident.

Human error also played an important role, as the operators performing the safety test violated safety procedures and put the reactor in an unsafe condition. In addition, the lack of safety awareness in the nuclear industry in the Soviet Union and non-compliance with safety procedures made it difficult to prevent the accident. Explosions and fires in the reactor caused

¹ Prof. Dr., Burdur Mehmet Akif Ersoy University, Bucak Emin Gülmez TBMYO, Bucak Bilgisayar ve Bilişim F., aakyuz@mehmetakif.edu.tr, ORCID: 0000-0001-9265-7293.

² Istanbul University, Department of Sociology, eptuncer@gmail.com, ORCID: 0009-0008-3801-7453.

³ Istanbul University, Department of Physics, yesim.oktem@istanbul.edu.tr, ORCID: 0000-0002-1638-4331.

large amounts of radioactive material to be released into the atmosphere, and radioactive clouds affected a large part of Europe. The accident directly killed 31 people, but the long-term health effects were much more serious, with radiation exposure causing cancer, thyroid disease and other health problems in thousands of people. The World Health Organization (WHO) estimates that around 4,000 people could lose their lives due to the long-term health effects of the accident. Following the accident, a 30-kilometer area around Chernobyl (the Exclusion Zone) was evacuated, forcing around 115,000 people to leave their homes. Radioactive contamination adversely affected soil, water, vegetation and animals, and agriculture and forestry activities were halted for long periods. The cost of the accident amounted to billions of dollars, and the cleanup of the plant, environmental remediation, compensation for evacuees and health care have imposed a huge economic burden. The accident caused psychological problems such as stress, anxiety, depression and post-traumatic stress disorder (PTSD) in the community, and the fear of radiation changed people's lifestyles and behaviors.

The lessons learned from the Chernobyl accident include important principles such as prioritizing safety in the design of nuclear power plants, training operators and ensuring compliance with safety procedures, developing a safety culture in the nuclear industry, preparing emergency plans and conducting regular drills, strengthening international cooperation and ensuring transparency and public information (Anspaugh et al., 1989; Tuttle and Becker, 2000; Saenko et al., 2011; Friedman, 2011). The Fukushima Daiichi nuclear accident, triggered by a 9.0 magnitude earthquake off the east coast of Japan on March 11, 2011, and the subsequent tsunami that hit the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant, painfully illustrated the potentially devastating effects of natural disasters on nuclear facilities. The tsunami knocked out the plant's cooling systems, causing a

meltdown of the reactor cores and releasing significant amounts of radioactive material into the atmosphere and ocean. The main causes of the accident include the severe damage caused by the earthquake and tsunami to the plant's infrastructure, the plant's inadequate protection against the tsunami (emergency generators were not located in a watertight area), and the failure of Japan's nuclear regulators to adequately oversee the safety of the plant and ignore the tsunami risk. The meltdown of the reactors resulted in radioactive materials spreading over a wide area, 20 kilometers around the plant were evacuated and around 160,000 people were forced to leave their homes. The radioactive contamination adversely affected soil, water, vegetation and animals, and radioactive material in the ocean threatened marine life. The cost of the accident amounted to hundreds of billions of dollars, and the cleanup of the plant, environmental remediation, compensation for evacuees, and losses in energy production imposed a huge economic burden. The accident caused psychological problems such as stress, anxiety, depression and post-traumatic stress disorder (PTSD) in the community, and the fear of radiation changed people's lifestyles and behavior.

The lessons learned from the Fukushima Daiichi accident include critical measures such as ensuring that nuclear power plants are resilient to natural disasters, emergency generators and other essential equipment are located in a watertight area, nuclear regulators rigorously oversee the safety of the plants, emergency plans are prepared and drills are regularly conducted, international cooperation is strengthened, and transparency and public information are ensured (Friedman, 2011; Blandford and Ahn, 2012; Thielen, 2012; Rhodes, 2014). The Three Mile Island nuclear accident occurred on March 28, 1979 at reactor No. 2 of the Three Mile Island Nuclear Power Plant in Pennsylvania, USA, causing a partial meltdown of the reactor core as a result of a combination of a failure in the cooling system and operator errors.

The main causes of the accident included overheating of the reactor due to a valve in the cooling system not closing, operators misjudging the situation and not taking correct interventions (inadequate training and failure to follow procedures), and inadequate indicators in the control room (making it difficult for operators to correctly understand the situation). The reactor meltdown resulted in the release of radioactive gases into the atmosphere, but there was no large-scale environmental disaster. Radiation exposure did not cause short-term health problems, but concerns about long-term health effects remained. Evacuations were ordered in some areas around the plant and around 140,000 people had to leave their homes. The cleanup and repair of the plant caused huge economic losses. The accident caused stress, anxiety and feelings of insecurity in the community (Corey, 1979; Bowen et al., 1983; Friedman, 2011).

The Windscale (UK, 1957), Kyshtym (Russia, 1957) and Tokaimura (Japan, 1999) accidents are important events that show how critical safety measures and the human factor are in the nuclear industry.

The fire at Windscale exposed the Wigner energy problem in graphite moderated reactors and the dangers of improper annealing procedures, causing the release of substances such as radioactive iodine-131 into the atmosphere, with environmental and health impacts.

The Kyshtym accident showed what cooling system failures and inadequate safety precautions at nuclear waste storage facilities could lead to, affecting a large area with a massive radiation leak and causing the evacuation of thousands of people.

The Tokaimura accident, on the other hand, emphasized the importance of training and compliance with procedures by workers at nuclear fuel fabrication facilities, and led to a

criticality accident caused by human error, resulting in radiation leakage and loss of workers' lives. These accidents emphasize the importance of safety standards and procedures that must be strictly adhered to during the operation and management of nuclear facilities, and remind us of the need for constant vigilance and care in the use of nuclear technology (Kumagai, 1999; Penny et al., 2017; Wakeford, 2017).

2. SOCIETAL IMPLICATIONS OF NUCLEAR REACTORS

The sociological impacts of nuclear reactors have a profound and multi-layered impact on energy production, economic structures, environmental sensitivities, security perceptions, political decision-making mechanisms and cultural values of modern societies. These impacts are not limited to technical and economic aspects, but can also profoundly affect social relations, psychological states and cultural identities (Kosai and Unesaki, 2024).

In terms of energy production, nuclear power plants offer the potential to increase energy independence and reduce dependence on fossil fuels, especially for developed and industrialized countries. This reduces the risks arising from the geopolitical distribution of energy resources and provides a significant advantage for national security strategies. The construction and operation of nuclear power plants increases the demand for highly skilled labor in various sectors such as engineering, construction, technology, management and security. This stimulates local economies, raises the level of education and encourages technological innovation.

Moreover, nuclear power plant projects contribute to the overall development of the region by requiring the development of infrastructure systems such as transportation, communication,

energy distribution and water management. However, public perception of nuclear energy is shaped by various factors such as environmental risks, safety concerns and ethical values. The long-term storage and disposal of nuclear waste raises serious concerns about environmental pollution, potential risks to human health and the rights of future generations (He et al., 2019).

Major nuclear accidents such as Chernobyl and Fukushima have deeply shaken confidence in nuclear energy and created widespread public skepticism about the safety of such facilities. These accidents have resulted not only in environmental and economic costs, but also in the displacement of thousands of people, health problems, psychological trauma and social disintegration. Therefore, the security of nuclear power plants and their protection against various threats such as terrorism, sabotage, cyber-attacks and natural disasters is vital to ensure the safety of society.

Nuclear energy policies require governments to strike a complex balance between energy needs, economic development, environmental sustainability, security, international relations and societal values. These policies are often based on various sources of information, such as scientific data, economic analyses, risk assessments, social surveys and political negotiations.

Nuclear energy projects often give rise to divergent views in society, which can increase political polarization. Social movements that oppose nuclear energy use a variety of arguments, such as environmental risks, lack of democratic participation, the potential of alternative energy sources, the risk of nuclear proliferation, and ethical values. By protesting the construction and operation of nuclear power plants, these movements draw public attention and seek to influence political decision-making (Kessides, 2012; Belyakov, 2015).

Ensuring public participation makes nuclear energy projects more transparent, democratic, accountable and acceptable. Taking community views into account helps to tailor projects to local needs, values and cultural characteristics, and reduces social tensions. Community participation should not only be limited to decision-making processes, but should also cover all phases of the project: planning, implementation, monitoring and evaluation. The construction and operation of nuclear power plants have significant socioeconomic, cultural, demographic and psychological impacts on local communities. While new jobs, educational opportunities, infrastructure improvements, increased tax revenues and technological transfers can improve local quality of life, negative impacts such as environmental changes, disruption in social relations, loss of cultural identity, demographic shifts, stress, anxiety and insecurity can also occur. Therefore, it is critical for the sustainability, social acceptance and long-term success of nuclear energy projects that they take into account the needs, expectations, values and cultural characteristics of local communities (Anderson et al., 2003; Huang and Chen, 2021).

Consequently, the sociological impacts of nuclear reactors create a complex and dynamic interaction between the energy future, economic development, environmental sustainability, security, political decision-making processes and cultural values of modern societies. Successful implementation of nuclear energy policies requires consideration of society's needs and expectations, transparent communication, high safety standards, democratic participation, principles of long-term sustainability, respect for ethical values and international cooperation.

3. TÜRKİYE'S NUCLEAR ENERGY JOURNEY

Türkiye's nuclear energy adventure started in 1955 with the vision of "using atomic energy for peaceful purposes", and the first step taken in this direction was the 1 MW experimental reactor established at Çekmece Nuclear Research and Training Center in 1961. This reactor provided an important basis for basic research and training activities.

The idea of establishing a nuclear power plant for electricity generation began to materialize in 1968 with feasibility studies, and in 1976, the Akkuyu site west of Silifke was identified as the location for the first nuclear power plant and the necessary site license was obtained (Authority, 2018; Karahan, 2018). However, tender attempts with various international firms throughout the 1970s and 1980s were inconclusive due to financing problems, technological preferences and management model disagreements.

The Chernobyl disaster in 1986 had a negative impact on the view of nuclear energy in Türkiye and projects were temporarily suspended. Although nuclear energy was back on the agenda in the 1990s, concrete steps could not be taken due to economic uncertainties, technological developments and public concerns (Mesut et al., 2025).

In the early 2000s, nuclear energy became a priority issue again in line with the goals of energy supply security and reducing foreign dependency, and the Akkuyu Nuclear Power Plant project was realized with the intergovernmental agreement signed with Russia in 2010. The Akkuyu NPP is planned to consist of four VVER-1200 type reactors and will have a total installed capacity of 4800 MW. The project is being financed by Russia and constructed by Rosatom. As of 2023, the goal is to bring the first reactor into operation, and significant steps have been taken in this direction, with the first nuclear fuel being delivered to the

site. With the completion of the Akkuyu NPP, it is aimed to meet approximately 10% of Türkiye's electricity needs and to enhance energy supply security (Tagotra, 2025; Hijriyanti, and Rodrigues, 2025). Besides Akkuyu, a nuclear power plant project has also been planned in Sinop, and international agreements have been signed with Japan and France for this project. However, due to increasing costs and technological preferences, the project was stopped in 2019. As of 2023, the "Founder" status of EÜAŞ was transferred to the Turkish Nuclear Energy Corporation (TÜNAŞ) and site approval was obtained for the Sinop site. In addition, studies are being carried out to establish a nuclear power plant with a fourth reactor in the Thrace region (İğneada), negotiations are being held with China and site determination studies are ongoing. Although Türkiye's transition to nuclear energy has followed an up-and-down course due to technical, economic, social and environmental factors, with the construction of the Akkuyu NPP, the country has taken an important step in the field of nuclear energy and is progressing towards diversifying its energy portfolio, reducing external dependency and achieving low carbon emission targets. However, issues such as social acceptance of nuclear energy, environmental impacts, waste management, earthquake risk and security continue to be discussed in the public (Duru, 2025; Balcı ve Erbay, 2025).

4. TÜRKİYE'S NUCLEAR ENERGY JOURNEY

While nuclear energy stands out with its high potential and low carbon emission advantages in meeting humanity's energy needs, it is also at the center of debates due to the risks and social impacts it brings with it. Major nuclear accidents such as Chernobyl, Fukushima and Three Mile Island have painfully demonstrated the delicate balance between technological sophistication and the human factor. These accidents have

demonstrated how vital a nuclear safety culture, transparency, international cooperation and continuous training are.

The societal impacts of nuclear energy are not limited to technical and economic aspects, but are manifested in multi-layered areas such as public trust, social acceptance, psychological effects and cultural values. Public concerns, participation and information are critical to the success and sustainability of nuclear projects. Türkiye's nuclear energy journey is shaped by the lessons learned from global experiences in line with the goals of energy supply security, reducing external dependence and sustainable development. With the construction of the Akkuyu Nuclear Power Plant, Türkiye has taken an important step towards diversifying its energy portfolio. However, issues such as social acceptance, environmental impacts, waste management, earthquake risk and safety continue to be debated in terms of the future of nuclear energy.

In conclusion, balanced management of the opportunities and risks of nuclear energy, ensuring high safety standards, increasing public participation and maintaining transparent communication are indispensable for nuclear energy to be a sustainable and acceptable option both in Türkiye and globally.

REFERENCES

- Andersson, K., Westerling, M., & Atherton, E. (2003). Transparency and public participation in radioactive waste management. *RISCOM II final report*.
- Anspaugh, L. R., Catlin, R. J., & Goldman, M. (1988). The global impact of the Chernobyl reactor accident. *Science*, 242(4885), 1513–1519.
- Balcı, Y., & Erbay, C. (2025). Green hydrogen production from offshore wind: A techno-economic analysis for Türkiye. *International Journal of Hydrogen Energy*, 97, 377–390.
- Belyakov, A. (2015). From Chernobyl to Fukushima: An interdisciplinary framework for managing and communicating food security risks after nuclear plant accidents. *Journal of Environmental Studies and Sciences*, 5(3), 404–417.
- Blandford, E. D., & Ahn, J. (2012). Examining the nuclear accident at Fukushima Daiichi. *Elements*, 8(3), 189–194.
- Bowen, R. M., Castanias, R. P., & Daley, L. A. (1983). Intra-industry effects of the accident at Three Mile Island. *Journal of Financial and Quantitative Analysis*, 18(1), 87–111.
- Corey, G. R. (1979). A brief review of the accident at Three Mile Island. *IAEA Bulletin*, 21(5), 54–59.
- Duru, A. A. (2025). The implementation of Türkiye's nuclear energy policy. *Energy Strategy Reviews*, 59, 101737.
- Friedman, S. M. (2011). Three Mile Island, Chernobyl, and Fukushima: An analysis of traditional and new media coverage of nuclear accidents and radiation. *Bulletin of the Atomic Scientists*, 67(5), 55–65.

- He, Y., Li, Y., Xia, D., Zhang, T., Wang, Y., Hu, L., ... & Wu, Y. (2019). Moderating effect of regulatory focus on public acceptance of nuclear energy. *Nuclear Engineering and Technology*, 51(8), 2034–2041.
- Hijriyanti, A., & Rodrigues, S. M. (2025, March). Türkiye's nuclear energy ambition: Its foreign policy and the dynamics of collaboration with Russia. In *Proceedings of The International Conference on Politics, Social Sciences, and Humanities* (Vol. 1, pp. 288–301).
- Huang, G. C. L., & Chen, R. Y. (2021). Injustices in phasing out nuclear power?: Exploring limited public participation and transparency in Taiwan's transition away from nuclear energy. *Energy Research & Social Science*, 71, 101808.
- Karahan, H. (2018). Developing national competence in nuclear energy: The case of Turkey. In *Turkish economy: Between middle income trap and high income status* (pp. 337–354).
- Kessides, I. N. (2012). The future of the nuclear industry reconsidered: Risks, uncertainties, and continued promise. *Energy Policy*, 48, 185–208.
- Kosai, S., & Unesaki, H. (2024). Nuclear power, resilience, and energy security under a vulnerability-based approach. *Cleaner Energy Systems*, 7, 100107.
- Kumagai, J. (1999). In the wake of Tokaimura, Japan rethinks its nuclear future. *Physics Today*, 52(12), 51–52.
- Mesut, T., Nguyen, D. D., Nguyen, D. L., & Thai, D. K. (2025). Seismic performance of AP1000 nuclear power plants in earthquake-prone regions: A case study of the 2023 Türkiye earthquakes. *Progress in Nuclear Energy*, 180, 105636.

- Penney, W., Schonland, B. F., Kay, J. M., Diamond, J., & Peirson, D. E. (2017). Report on the accident at Windscale No. 1 Pile on 10 October 1957. *Journal of Radiological Protection*, 37(3), 780.
- Rhodes, C. J. (2014). The Fukushima Daiichi nuclear accident. *Science Progress*, 97(1), 72–86.
- Saenko, V., Ivanov, V., Tsyb, A., Bogdanova, T., Tronko, M., Demidchik, Y., & Yamashita, S. (2011). The Chernobyl accident and its consequences. *Clinical Oncology*, 23(4), 234–243.
- Tagotra, N. (2025). The evolution of the nuclear energy market and its impact on non-proliferation and disarmament. In *Emerging from the shadows* (pp. 109–125). Routledge India.
- Thielen, H. (2012). The Fukushima Daiichi nuclear accident—An overview. *Health Physics*, 103(2), 169–174.
- Turkish Atomic Energy Authority. (2018). Developing national competence in nuclear energy: The case of Turkey. In *Turkish economy: Between middle income trap and high income status* (pp. 337–354).
- Tuttle, R. M., & Becker, D. V. (2000, April). The Chernobyl accident and its consequences: Update at the millennium. In *Seminars in Nuclear Medicine* (Vol. 30, No. 2, pp. 133–140). WB Saunders.
- Wakeford, R. (2017). A double diamond anniversary—Kyshtym and Windscale: The nuclear accidents of 1957. *Journal of Radiological Protection*, 37(3), E7.

AKADEMİK PERSPEKTİFTEN FİZİK

yaz
yayınları

YAZ Yayınları
M.İhtisas OSB Mah. 4A Cad. No:3/3
İscehisar / AFYONKARAHİSAR
Tel : (0 531) 880 92 99
yazyayinlari@gmail.com • www.yazyayinlari.com