

FEN VE MÜHENDİSLİK BİLİMLERİNDE GÜNCEL GELİŞMELER



EDİTÖRLER

Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN

Doç. Dr. Osman ÖRNEK



FEN VE MÜHENDİSLİK BİLİMLERİNDE GÜNCEL GELİŞMELER

EDİTÖRLER

Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN

Doç. Dr. Osman ÖRNEK

YAZARLAR

Prof. Dr. Hamza Yaşar OCAK

Prof. Dr. Levent URTEKİN

Prof. Dr. Nihat ARIKAN

Doç. Dr. Ahmet İYİGÖR

Doç. Dr. Abdullah CANDAN

Doç. Dr. Cihan KÜRKCÜ

Doç. Dr. Hakan SEPET

Doç. Dr. Oğuzhan ERBAŞ

Doç. Dr. Osman ÖRNEK

Doç. Dr. Murat ÇANLI

Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN

Dr. Öğr. Üyesi Erol ALBAYRAK

Dr. Öğr. Üyesi Fikri Erdem ŞEŞEN

Dr. Öğr. Üyesi Halit ARAT

Dr. Öğr. Üyesi Müjdat ÖZTÜRK

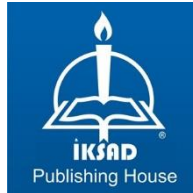
Dr. Öğr. Üyesi Salih ERMİŞ

Öğr. Gör. Dr. Ramazan KAYABAŞI

Dr. Büşra DURMAZ

Araş. Gör. Faik YILAN

Araş. Gör. İbrahim Baki ŞAHİN



Copyright © 2023 by iksad publishing house
All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, distributed or
transmitted in any form or by
any means, including photocopying, recording or other electronic or mechanical
methods, without the prior written permission of the publisher,
except in the case of
brief quotations embodied in critical reviews and certain other
noncommercial uses permitted by copyright law. Institution of Economic
Development and Social
Researches Publications®
(The Licence Number of Publicator: 2014/31220)
TÜRKİYE TR: +90 342 606 06 75
USA: +1 631 685 0 853
E mail: iksadyayinevi@gmail.com
www.iksadyayinevi.com

It is responsibility of the author to abide by the publishing ethics rules.

Iksad Publications – 2023©

ISBN: 978-625-367-485-4

Cover Design:

December / 2023

Ankara / Türkiye

Size = 16 x 24 cm

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....1

BÖLÜM 1

**GRİ KURT OPTİMİZASYON ALGORİTMASI KULLANARAK
FACT CİHAZLARI İLE OPTİMAL GÜÇ AKIŞI**

Dr. Öğr. Üyesi Salih ERMİŞ.....3

BÖLÜM 2

GÜÇ SİSTEMLERİNDE YÜK AKIŞ ANALİZ YÖNTEMLERİ

Dr. Öğr. Üyesi Salih ERMİŞ.....17

BÖLÜM 3

**BUHAR KAZANLARINDA ENERJİ DENGESİ İLE
PERFORMANS TEST YÖNTEMİ UYGULAMASI VE
PARAMETRELER**

Dr. Öğr. Üyesi Halit ARAT

Doç. Dr. Oğuzhan ERBAŞ.....29

BÖLÜM 4

**HİBRİT FOTOVOLTAİK SİSTEMLERİN ENERJİ
ÜRETİMİNE ETKİSİ**

Öğr. Gör. Dr. Ramazan KAYABAŞI

Dr. Öğr. Üyesi Müjdat ÖZTÜRK.....45

BÖLÜM 5

**NÜKLEER REAKTÖRLERDE ENERJİ ÜRETİMİ VE
TÜRKİYEDE'Kİ NÜKLEER GELİŞİM**

Dr. Büşra DURMAZ.....63

BÖLÜM 6

BİYEL KOLU TOPOLOJİ OPTİMİZASYONU

Araş. Gör. Faik YILAN

Araş. Gör. İbrahim Baki ŞAHİN

Prof. Dr. Levent URTEKİN.....79

BÖLÜM 7

MÜHENDİSLİKTE TEKNOLOJİ YÖNETİMİNDE CNC UYGULAMALARI

Araş. Gör. İbrahim Baki ŞAHİN

Araş. Gör. Faik YILAN

Prof. Dr. Levent URTEKİN.....91

BÖLÜM 8

ELEMENTEL BOR, BOR BİLEŞİKLERİ VE BOR İYONLARININ ALTLIK MALZEMEYE UYGULANMASI

Dr. Öğr. Üyesi Fikri Erdem ŞEŞEN

Dr. Öğr. Üyesi Erol ALBAYRAK.....103

BÖLÜM 9

Al₃Sc (Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc) ÇÖKELTİLERİNİN BAZI FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN DENEYSEL VE TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

Prof. Dr. Hamza Yaşar OCAK.....121

BÖLÜM 10

Os₂TiGa HEUSLER BİLEŞİĞİNİN ELEKTRONİK VE ELASTİK, TERMODİNAMİK ve FONON ÖZELLİKLERİ ÜZERİNE TEORİK BİR ÇALIŞMA

Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN

Doç. Dr. Osman ÖRNEK.....135

BÖLÜM 11

Fe₂BeGa FULL HEUSLER ALAŞIMININ TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

Dr. Öğr. Üyesi Erol ALBAYRAK

Dr. Öğr. Üyesi Fikri Erdem ŞEŞEN.....155

BÖLÜM 12

A-15 TİPİ Zr₃Hg BİLEŞİĞİNİN YAPISAL, ELASTİK, TERMODİNAMİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Doç. Dr. Cihan KÜRKÇÜ

Doç. Dr. Abdullah CANDAN.....173

BÖLÜM 13

TAM-HEUSLER CuAlAc_2 ALAŞIMI NİN YAPISAL, MEKANİK, ELEKTRONİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİNİN İNCELENMESİ

Prof. Dr. Nihat ARIKAN.....189

BÖLÜM 14

CaF_2 YAPISINDA RhSr_2 AŞIMINI YAPISAL, ELEKTRONİK, MEKANİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİ: İLK PRENSİP ÇALIŞMALARINDAN BİLGİLERİ

Prof. Dr. Nihat ARIKAN.....205

BÖLÜM 15

Na_3SbTe_4 MALZEMESİNİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN AB-İNİTİO İLE İNCELENMESİ

Doç. Dr. Ahmet İYİGÖR.....221

BÖLÜM 16

ScOs_2Ga HEUSLER ALAŞIMININ YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

Doç. Dr. Ahmet İYİGÖR.....237

BÖLÜM 17

LENS CULİNARİS'İN TOHUMLARI VE MERİSTEMATİK HÜCRELERİNDE MANGANIN ETKİSİNİN İNCELENMESİ

Doç. Dr. Murat ÇANLI

Doç. Dr. Hakan SEPET.....255

BÖLÜM 18

TRİTİCUM AESTIVUM'UN TOHUMLARI VE MERİSTEMATİK HÜCRELERİNDE MANGANIN BİYOLOJİK OLARAK DEĞERLENDİRİLMESİ

Doç. Dr. Hakan SEPET

Doç. Dr. Murat ÇANLI.....269

ÖNSÖZ

Fen ve mühendislik, insanlığın bilgi birikimini, teknolojik gelişimini ve çevresel etkilerini en derin şekilde etkileyen temel disiplinlerdir. Bu kitap, fen ve mühendislik alanlarındaki temel kavramları, ileri düzeydeki teknolojik gelişmeleri ve bu alanlardaki uygulamaları ele alarak, okuyuculara geniş bir bakış açısı sunmayı amaçlamaktadır. Fen ve mühendislik, doğanın yasalarını anlama, teknolojik yenilikler geliştirme ve toplumsal sorunlara çözüm bulma konularında insanlığa rehberlik etmiş, bilgi ve teknolojiyi en etkin şekilde kullanarak yaşam kalitesini artırmıştır. Bu temel disiplinlerin derinliklerine inmek isteyen tüm meslektaşlarımız ve öğrencilerimiz için rehberlik edeceğine inanıyorum.

Kitabın fen ve mühendislik disiplinleri ve bu disiplinlerin günlük hayattaki uygulamaları detaylı bir şekilde incelenmektedir. Bu bölümlerde, fizik, kimya, biyoloji, malzeme mühendisliği, makine mühendisliği, elektrik-elektronik mühendisliği, inşaat mühendisliği, bilgisayar mühendisliği ve çevre mühendisliği gibi farklı alanlara geniş bir bakış sunulmaktadır. Bununla birlikte, fen ve mühendislik alanlarındaki gelecek vaat eden teknolojik gelişmeler ve bu gelişmelerin topluma etkileri hakkında bilgi vermektedir. Fen ve mühendislik, dünyanın karşı karşıya olduğu çeşitli zorluklara çözüm bulma potansiyeline sahip disiplinlerdir. Bu zorluklar arasında iklim değişikliği, sürdürülebilir enerji, sağlık teknolojileri, su kaynakları yönetimi ve daha birçok konu bulunmaktadır. Fen ve mühendislik alanları, bu zorluklarla mücadele etmek ve insanlığın geleceğini daha sürdürülebilir kılmak için kritik bir rol oynamaktadır. Kitabımız esas olarak bu tür önemli konulara ışık tutmayı ve okuyucuların, fen ve mühendislik alanlarındaki potansiyellerinin gelişmesine yardımcı olmayı amaçlamaktadır.

Son olarak, bu kitabın, fen ve mühendislik alanlarına ilgi duyan gençler için de bir ilham kaynağı olmasını umuyoruz. Geleceğin bilim insanları, mühendisleri ve teknoloji uzmanları, bu disiplinlerin derinliklerine inerek, yaratıcı çözümler geliştirecek ve toplumun refahına katkıda bulunacaklardır.

Aralık, 2023

Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN
Doç. Dr. Osman ÖRNEK

BÖLÜM 1

GRİ KURT OPTİMİZASYON ALGORİTMASI KULLANARAK FACT CİHAZLARI İLE OPTİMAL GÜÇ AKIŞI

Dr. Öğr. Üyesi Salih ERMIŞ¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384570>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Elektrik Elektronik Mühendisliği Bölümü. sermis@ahievran.edu.tr ORCID No: 0000-0002-1053-9160

GİRİŞ

Bir güç sisteminin en temel özelliği, belirli kısıtlama ve sınırlamaları karşılayarak farklı ekonomik ve çevresel güç talebini minimum işletme maliyetiyle karşılayabilmektir. Bu bağlamda, minimum işletme maliyetlerinin yanında, enerji verimliliği, güç kalitesi, gerilim kararlılığı gibi problemleri ortadan kaldırmak için 1962 yılında Carpentier tarafından ortaya atılan optimal güç akışı (OGA) çalışmaları büyük önem kazanmıştır (Frank, Steponavice, & Rebennack, 2012; Pourakbari-Kasmaei, Rider, & Mantovani, 2014). OGA, minimum işletme maliyetini belirleyen ve kontrol değişkenlerini güvenli sınırlarında tutan belirli bir amaç fonksiyonunu optimize eden statik bir doğrusal olmayan programlama problem olarak tanımlanabilir. OPF çalışmalarında en temel amaç fonksiyonu üretim maliyetini en aza indiren problemdir.

OPF problemlerini çözmek için literatürde matematiksel ve meta sezgisel yöntemler kullanılmaktadır. Matematiksel yöntemler olarak, lineer programlama (LP), lineer olmayan programlama (NLP), quadratic programlama (QP), Newton rapshon gibi çözümler sunulmaktadır (Pourakbari-Kasmaei & Mantovani, 2018; Pourakbari-Kasmaei, Rider, & Mantovani, 2016). Matematiksel çözümler hızlı ve en doğru çözümleri elde edilememesinden dolayı OPF çözümleri için uygun çözümler değildir. Fakat uygulamada hızlı, doğru ve güvenilir sonuçlar sunan meta sezgisel yöntemler daha çok tercih edilmektedir. Örnek olarak parçacık sürü optimizasyonu (PSO) (Inkollu & Kota, 2016), genetik algoritma (GA) (Chung & Li, 2000), yerçekimi arama algoritması (YAA), öğretim öğrenme tabanlı optimizasyon algoritması (ÖÖTO) (Bouchevara, Abido, & Boucherma, 2014), karınca sürüsü algoritması (KSA) gibi meta sezgisel algoritmalar OPF çözümlerinde etkili bir şekilde kullanılmaktadır.

Güç sistemlerinde reaktif güç yetersizliği sonucunda, gerilim kararsızlığı, gerilim çökmesi gibi sorunlara neden olabilir. Bu reaktif güç desteğini arttırmak için esnek alternatif akım iletim sistemleri (FACTS) cihazları büyük önem kazanmaktadır (Inkollu & Kota, 2016). FACTS cihazları güç sistemlerinde, güç akış kontrolü, gerilim kararlılığı ve güç kayıplarının optimizasyonu, üretim maliyetinin en aza indirilmesi gibi amaçlar için OPF problemlerinde kullanılmaktadır (Hingorani & Gyugyi, 1999).

Bu çalışmada, OGA problemini FACT cihazları bağlı olmadan ve bağlı olduğunda tek amaçlı yakıt maliyeti optimizasyonunu gerçekleştirmek için meta sezgisel algoritmalarından gri kurt optimizasyon algoritması kullanılmıştır. Önerilen bu algoritma ile IEEE 30 baralı sistem üzerinde FACT cihazları bağlı iken ve bağlı olmadan tek amaçlı fonksiyona sahip OGA çözümü gerçekleştirilmiştir. Sonuçları değerlendirmek için hem incelenen algoritma hem de literatürde sunulan diğer algoritmalar karşılaştırılmıştır.

Çalışmanın diğer bölümleri şu şekilde hazırlanmıştır. Bölüm 2'de problemin formülasyonu ve OGA'nin amaç fonksiyonu anlatılmaktadır. Bölüm 3'te FACT cihazları, bölüm 4'te GKO algoritması tanıtılmaktadır. OGA simülasyonlarından elde edilen sonuçlar ve güç sistemlerindeki diğer algoritma karşılaştırmaları Bölüm 4'te sunulmaktadır. Son bölümde, çalışmanın sonucu ve önerileri sunulmaktadır.

1. PROBLEMİN FORMÜLASYONU

OGA problemi belirlenen bir amaç fonksiyonunu optimize etmektir. Güç sisteminde belirlenen amaç fonksiyonu, eşitsizlik ve eşitlik üzerindeki kısıtlamalarla, sistemin çalışma sınırlarını dikkate alarak aktif güç üretim maliyetini en aza indirmek olarak belirlenmiştir. OGA probleminin genel matematiksel modeli aşağıda sunulmuştur.

$$f(x, u) \quad (1)$$

$$g(x, u) \quad (2)$$

$$h(x, u) \leq 0 \quad (3)$$

Burada f , en aza edilmesi gereken amaç fonksiyonunu temsil eder. Durum değişken vektörü, x ve kontrol değişken vektörü, u 'dur. $g(x, u)$, eşitlik kısıtlaması ve $h(x, u)$, eşitsizlik kısıtlamalarıdır. Güç sistemlerinde, durum değişken vektörleri (x) Eş. 4 ile, kontrol değişkenleri (u) Eş. 5 ile ifade edilir.

$$x = [P_{G_1}, V_{L_1} \dots V_{L_{NL}}, Q_{G_1} \dots Q_{G_{NG}}, S_{l_1} \dots S_{l_{nl}}] \quad (4)$$

$$u^T = [P_{G_2} \dots P_{G_{NG}}, V_{G_1} \dots V_{G_{NG}}, Q_{C_1} \dots Q_{C_{NC}}, T_1 \dots T_{NT}] \quad (5)$$

Burada P_{G_1} salınım barası, Q_G generatörün reaktif gücü, V_L yük barası gerilimi ve S_L iletim hattı yükü, T , trafonun kademe ayarları ve Q_C , paralel reaktif güç kompansatör değerleridir.

Güç sisteminde üretim, tüketim ve kayıp güç değerlerinin toplamı 0 (sıfır) olmalıdır. Dengeli bir güç sistemi için eşitlik kısıtlamaları Eş. 6 ve Eş. 7 de verilmiştir.

$$P_{Gi} - P_{Di} - V_i \sum_{j=1}^{NB} V_j [G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) + B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j)] = 0 \quad (6)$$

$$Q_{Gi} - Q_{Di} - V_i \sum_{j=1}^{NB} V_j [G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) + B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j)] = 0 \quad (7)$$

Güç sistemlerinde eşitsizlik kısıtlamaları fiziksel ekipmanların sınırlarını temsil eder. Eşitsizlik kısıtlamaları aşağıda verilmiştir.

$$P_{Gi}^{min} \leq P_{Gi} \leq P_{Gi}^{max} , 1 \leq i \leq N_G \quad (8)$$

$$Q_{Gi}^{min} \leq Q_{Gi} \leq Q_{Gi}^{max} , 1 \leq i \leq N_G \quad (9)$$

$$V_{Gi}^{min} \leq V_{Gi} \leq V_{Gi}^{max} , 1 \leq i \leq N_G \quad (10)$$

$$Q_{Ci}^{min} \leq Q_{Ci} \leq Q_{Ci}^{max} , 1 \leq i \leq N_C \quad (11)$$

$$T_i^{min} \leq T_i \leq T_i^{max} , 1 \leq i \leq N_T \quad (12)$$

$$V_{Li}^{min} \leq V_{Li} \leq V_{Li}^{max} , 1 \leq i \leq N_L \quad (13)$$

$$S_{li} \leq S_{li}^{max} , 1 \leq i \leq N_l \quad (14)$$

1.1. Amaç Fonksiyonu

OGA problemlerinde en önemli ve en çok çalışılan amaç fonksiyonu toplam yakıt maliyetini en aza indirmektir. İkinci dereceden ve düzgün maliyet eğrisi genellikle tek yakıtla çalışan generatörlerin çıkış gücünü belirlemek için kullanılır. Söz konusu ikinci dereceden maliyet fonksiyonu matematiksel olarak aşağıdaki gibi ifade edilir. Eş. 15 de tek amaçlı yakıt maliyeti denklemi verilmiştir. Tablo 1 de IEEE 30 baralı güç sisteminde generatörlerin maliyet katsayı değerleri verilmiştir.

$$f_1 = F_{cost} = \sum_{i=1}^{N_G} a_i + b_i P_{Gi} + c_i P_{Gi}^2 , \quad (15)$$

Burada a_i , b_i ve c_i generatörlerin maliyet katsayılarıdır (Duman, Güvenç, Sönmez, & Yörükeren, 2012).

Tablo 1: Generatör maliyet katsayıları (IEEE 30 bara).

Bara No.	Maliyet Katsayıları		
	a	b	c
1	0	2	0.00375
2	0	1.75	0.0175
5	0	1	0.0625
8	0	3.25	0.00834
11	0	3	0.025
13	0	3	0.025

2. FACTS CİHAZLARI

2.1. TCSC'nin Modellenmesi

TCSC, güç sistemlerinin iletim hattına seri olarak yerleştirilen bir reaktans olarak ifade edilebilir. Reaktans değeri, dengeli bir iletim hattında aktif güç akışını geniş çalışma koşulları altında belirli bir seviyede tutulabilir (Hingorani, 1988; Zhang, Rehtanz, & Pal, 2012). OPF probleminde TCSC yerleştirilmesine ait hat verileri aşağıda verilmiştir. TCSC modeli Şekil 1'de gösterilmektedir.

TCSC bağlanan hattın yeni hat reaktans değeri (X_{Yeni});

$$X_{Yeni} = X_{ij} + X_S \quad (16)$$

TCSC'ye bağlı hattın (i . baradan j . baraya) güç akış denklemleri;

$$P_{ij} = V_i^2 G_{ij} - V_i V_j G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) - V_i V_j B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) \quad (17)$$

$$Q_{ij} = -V_i^2 B_{ij} - V_i V_j G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) + V_i V_j B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) \quad (18)$$

TCSC'ye bağlı hattın (j . baradan i . baraya) güç akış denklemleri;

$$P_{ji} = V_j^2 G_{ij} - V_i V_j G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) + V_i V_j B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) \quad (19)$$

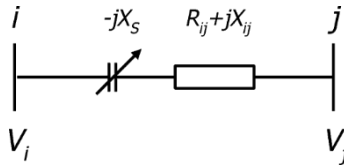
$$Q_{ji} = -V_j^2 B_{ij} + V_i V_j G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) + V_i V_j B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) \quad (20)$$

İletim Hattının iletkenliği;

$$G_{ij} = \frac{R_{ij}}{R_{ij}^2 + X_{Yeni}^2} \quad (21)$$

İletim hattının süseptansı;

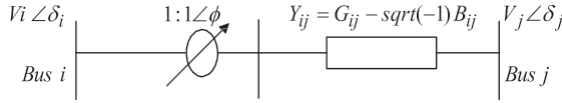
$$G_{ij} = \frac{R_{ij}}{R_{ij}^2 + X_{Yeni}^2} \quad (22)$$



Şekil 1: TCSC modeli.

2.2. TCPS'nin Modellenmesi

TCPS, kontrol parametresi φ olan bir faz kaydırma transformatörü (Ongsakul & Bhasaputra, 2002) ile modellenebilir. TCPS modeli Şekil 2'de gösterilmektedir.



Şekil 2: TCPS modeli

TCPS'ye bağlı hattın (i . baradan j . baraya) güç akış denklemleri;

$$P_{ij} = \frac{V_i^2 G_{ij}}{\cos^2} - \frac{V_i V_j}{\cos\phi} [G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j + \varphi) + B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j + \varphi)] \quad (23)$$

$$Q_{ij} = -\frac{V_i^2 B_{ij}}{\cos^2\phi} - \frac{V_i V_j}{\cos\phi} [G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j + \varphi) - B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j + \varphi)] \quad (24)$$

TCPS'ye bağlı hattın (j . baradan i . baraya) güç akış denklemleri;

$$P_{ji} = V_j^2 G_{ij} - \frac{V_i V_j}{\cos\phi} [G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j + \varphi) - B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j + \varphi)] \quad (25)$$

$$Q_{ij} = -V_j^2 B_{ij} + \frac{V_i V_j}{\cos\phi} [G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j + \varphi) + B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j + \varphi)] \quad (26)$$

TCPS'nin i . bara ve j . Baraya enjekte edilen aktif ve reaktif güç değerleri;

$$P_{ik} = -G_{ij} V_i^2 \tan^2 \varphi - V_i V_j \tan \varphi [G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) - B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j)] \quad (27)$$

$$Q_{ik} = B_{ij} V_i^2 \tan^2 \varphi + V_i V_j \tan \varphi [G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) + B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j)] \quad (28)$$

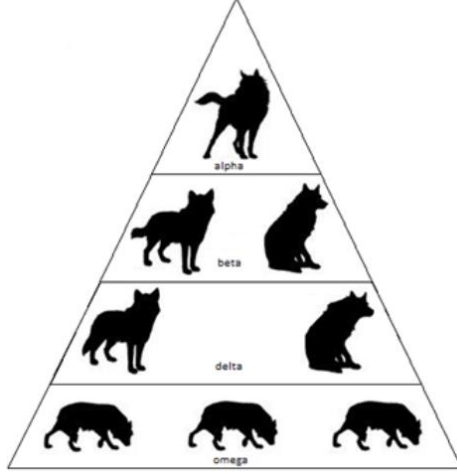
$$P_{jk} = -V_i V_j \tan \varphi [G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) + B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j)] \quad (29)$$

$$Q_{ik} = -V_i V_j \tan \varphi [G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) - B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j)] \quad (30)$$

3. GRI KURT OPTİMİZASYON ALGORİTMASI

Gri kurt optimizasyon (GKO) algoritması, kurtların doğadaki yaşam, avlanma ve liderlik davranışlarından ilham alan meta sezgisel bir algoritmadır. Gri kurtların sürüdeki hiyerarşisine göre sınıflandırma yapılmaktadır. Bu sınıflandırmada en üst seviyede alfa kurt, daha sonra

sırasıyla beta, delta, omega olmak üzere büyükten küçüğe doğru sıralama yapılmıştır. Şekil 3 de hiyerarşi şeması gösterilmektedir (Mirjalili, 2015; Mirjalili, Mirjalili, & Lewis, 2014; Song et al., 2015)



Şekil 3: GKO algoritması hiyerarşi şeması

Alfa kurtlar, sürüye yöneten, liderlik eden en baskın kurtlardır. Beta kurtlar, sürünün hiyerarşik sırasındaki ikinci kuttur. Lider alfa kurtların yardımcısı konumundadır. Delta kurtlar, alfa ve beta kurtlara uymakla zorynlu olan hiyerarşide üçüncü sıradaki kurtlardır. Omega kurtlar, alfa kurtlar tarafından seçilen ve en düşük rütbede bulunan kurtlardır. Avlanma esnasında en son beslenme sırası gelen kurtlardır.

GKO algoritması dört aşamadan oluşmaktadır.

- 1- Hiyerarşi
- 2- Avı kuşatmak
- 3- Avlanma
- 4- Ava saldırma

GKO algoritması çözümlerinde kurtların toplumsal hiyerarşisi göz önüne alınarak yapılandırılmıştır. En iyi uygunluk değerine sahip çözümler hiyerarşik sıraya göre alfa, beta, delta ve omega isimli kurtlar olarak kabul edilir.

GKO algoritmasında avı kuşatmak için Eş. 31 ve 32 ile ifade edilmektedir.

$$D = |C \cdot X_p(t) - X(t)| \quad (31)$$

$$X(t + 1) = |X_p(t) - A \cdot D| \quad (32)$$

$$A = |2a \cdot r_1 - a| \quad (33)$$

$$C = |2a \cdot r_2| \quad (34)$$

Burada, t anlık iterasyon sayısını, X_p avın konumunu, X konum vektörünü, A ve C katsayı vektörleridir. r_1 ve r_2 $[0,1]$ arasında rasgele sayıyı, a ise 2'den 0'a doğru iterasyon ilerledikçe doğrusal olarak azalan katsayıyı ifade etmektedir.

Algoritmada arama işlemi rastgele gerçekleşir. Amaç fonksiyonuna göre uygunluk değerleri hesaplanır. Bu durum algoritmanın avlanma aşamasıdır. Burada en iyi ilk üç çözüm tespit edilir ve kurtların bu konumlara göre pozisyonlarını belirlemesi sağlanır. Avlanma aşaması Eş. 35-41 de verilmiştir.

$$D_\alpha = |C_1 \cdot X_\alpha - X(t)| \quad (35)$$

$$D_\beta = |C_2 \cdot X_\beta - X(t)| \quad (36)$$

$$D_\delta = |C_3 \cdot X_\delta - X(t)| \quad (37)$$

Burada, X_α , X_β ve X_δ sırasıyla alfa, beta ve delta kurtların pozisyonlarını ifade etmektedir. Her yenilemede en iyi üç kurt sürekli güncellenmektedir.

$$X_1 = |X_\alpha - a_1 D_\alpha| \quad (38)$$

$$X_2 = |X_\beta - a_2 D_\beta| \quad (39)$$

$$X_3 = |X_\delta - a_3 D_\delta| \quad (40)$$

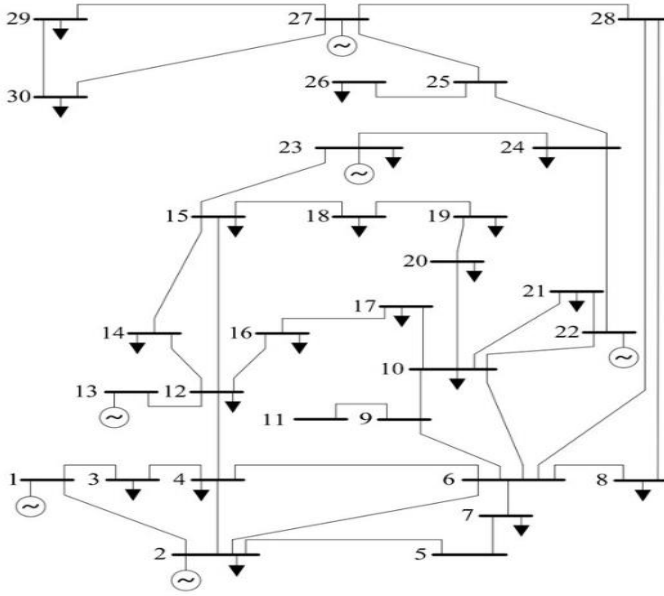
$$X(t + 1) = \frac{X_1 + X_2 + X_3}{3} \quad (41)$$

$X(t + 1)$ her yenilemeden sonra avın yeni konumunu ifade etmektedir.

Algoritmada avın konumu belirlendikten sonra ava saldırma işlemi gerçekleşir. Eş. 33 de belirtilen A değerine göre saldırı işlemi gerçekleşir. A değeri $[-1,1]$ aralığında rasgele değerlere sahip olduğunda, arama ajanının sonraki konumu, mevcut konumu ile avın konumu arasındaki herhangi bir yere konumlandırılır.

4. ANALİZ SONUÇLARI

Bu çalışmada, IEEE 30 baralı güç sisteminde FACT cihazları olmadan ve FACT cihazları bağlı iken optimal güç akışı gerçekleştirilmiştir. Güç sisteminin tek hat şeması şekil 4 de verilmiştir. FACT cihazı olarak TCSC ve TCPS kullanılmıştır. IEEE 30 baralı güç sisteminde TCSC, (3, 4) ve (19, 20) nolu iki hatta, TCPS, (5, 7) ve (10, 22) nolu iki hatta kurulumu yapılmıştır. OGA amaç fonksiyonu olarak yakıt maliyeti optimizasyonu gerçekleştirilmiştir. Optimizasyon algoritması olarak gri kurt optimizasyon (GKO) algoritması kullanılmıştır. GKO algoritması 100 iterasyon sayısı ve OGA için 30 kez çalıştırılmıştır. Tüm simülasyon sonuçları Intel Core(TM) i7-2620 2.7GHz ve 8.00 (64-bit) GB RAM PC kullanılarak Matlab R2017b programında analiz edilmiştir.



Şekil 4: IEEE 30 baralı güç sisteminin tek hat şeması

GKO algoritmasının ve literatürde çalışılmış bazı algoritmaların IEEE 30 baralı güç sisteminin FACT cihazları olmadan OGA sonuçları Tablo 2’de verilmiştir. Literatürde kullanılan diğer algoritmalarla, ACO (Slimani & Bouktir, 2007), GA (Ongsakul & Bhasaputra, 2002), SA (Niknam, Narimani, & Jabbari, 2013), IWO (Kaur & Narang, 2020) ve çalışılan GKO algoritması karşılaştırıldığında, hem maliyet açısından hem de aktif güç kayıpları açısından GKO algoritması daha iyi sonuçlar verdiği görülmüştür. FACT cihazları olmadan GKO algoritmasının yakıt maliyeti 802.479 \$/h, aktif güç kayıpları ise 9.7831 MW olarak hesaplanmıştır.

Tablo 2: IEEE 30 baralı güç sisteminde FACT cihazları olmadan OGA

	ACO	GA	SA	IWO	GKO
PG1 (MW)	181.945	192.6244	182.26	170.996	181.1441
PG2 (MW)	47.001	48.4195	38.3	50.822	48.593
PG5 (MW)	20.553	19.5575	19.31	23.707	21.9675
PG8 (MW)	21.146	11.6716	24.64	17.127	16.7293
PG11 (MW)	10.433	10	17.13	12.6	11.489
PG13 (MW)	12.173	12	12.35	18.226	13.2602
PGToplam (MW)	293.251	294.273	293.99	293.478	293.1831
FMaliyet (\$/h)	802.57	804.7837	803.24	807.474	802.479
PKayıp (MW)	9.851	10.873	10.59	10.078	9.7831

IEEE 30 baralı güç sisteminde, 3-4 ve 19-20 nolu hatlara TCSC, 5-7 ve 10-20 nolu hatlara TCPS FACT cihazları bağlandığında OGA sonuçları tablo 3 de verilmiştir. Literatürde kullanılan, GA, TS/SA (Ongsakul & Bhasaputra, 2002), ALC-PSO (Singh, Mukherjee, & Ghoshal, 2015) algoritmalarla karşılaştırıldığında kullanılan GKO algoritması FACT cihazları bağlı iken hem maliyet hem de aktif güç kayıpları açısından daha iyi sonuçlar verdiği görülmektedir. Hesaplama süresi açısından bakıldığında diğer algoritmalara göre ortalama bir değer hesaplanmıştır. GKO algoritmasının OGA sonuçlarına göre 796.81 \$/h yakıt maliyeti, 8.34 MW aktif güç kaybı hesaplanmıştır.

Tablo 3: IEEE 30 baralı güç sisteminde FACT cihazları bağlı iken OGA

	GA	TS/SA	DE	ALC-PSO	GKO
PG1 (MW)	192.5105	192.46	180.26	185.24	187.14
PG2 (MW)	48.3951	48.38	49.32	46.33	48.25
PG5 (MW)	19.5506	19.54	20.82	20.88	19.32
PG8 (MW)	11.6204	11.6	17.61	15.64	14.15
PG11 (MW)	10	10	11.05	11.12	10.88
PG13 (MW)	12	12	12.69	12.58	12
PGToplam (MW)	294.0766	294	291.75	291.79	291.74
Xc3-4 (p.u.)	0.02	0.02	0.019	0.0192	0.0198
Xc19-20 (p.u.)	0.02	0.02	0.0243	0.0241	0.022
ϕ_{5-7} (°)	0.0141	1.9137	-0.5558	-0.5556	-0.5546
ϕ_{10-22} (°)	0.0141	0.8251	-0.0286	-0.0287	-0.028
FMaliyet (\$/h)	804.1072	803.84	797.29	796.93	796.81
PKayıp (MW)	10.6766	10.6	8.35	8.39	8.34
CPU süresi (s)	624	265.8	487.3	479.2	422.3

Yapılan analizler sonucunda IEEE 30 baralı güç sisteminde FACT cihazları bağlı olmadan ve FACT cihazları bağlı iken karşılaştırıldığında hem maliyet hem de aktif güç kayıpları açısından FACT cihazları bağlı iken daha iyi sonuçlar verdiği görülmüştür. Genaratörlerin toplam üretim değerlerine bakıldığında FACT cihazları bağlı olmadığında 293.1831 \$/h, FACT cihazları bağlı iken 291.74 \$/h hesaplanmıştır. Bu sonuçlara göre generatörlerin toplam üretim değerleri FACT cihazları bağlı iken 1.4431 \$/h daha az üretim yaptığı görülmektedir.

5. SONUÇ

Bu çalışmada, güç sistemlerindeki FACT cihazları bağlı olmadan ve bağlı iken, tek amaçlı OGA problemi için gri kurt algoritması ile yeni bir optimizasyon yöntemi önerilmiştir. Burada amaç fonksiyonu, yakıt maliyetini en aza indirerek OGA çözümleri gerçekleştirilmektedir. Bu yöntem, IEEE 30 baralı güç sistemlerinde test edilmiştir. Sonuçlar, FACT cihazlarının bağlı ve bağlı olmadığı her iki durum içinde sunulan GKO algoritmasının literatürdeki diğer algoritmalara kıyasla OGA problemi için daha iyi bir çözüm sağladığını göstermektedir. FACT cihazlarının güç sistemlerine bağlı olup olmama durumlarına göre karşılaştırıldığında, FACT cihazları bağlı iken aynı yük talebine göre toplam generatör üretim değerlerini azaldığı ve buna bağlı olarak hem üretim maliyetleri hem de aktif güç kayıplarını daha da azalttığı görülmüştür.

KAYNAKÇA

- Boucekara, H., Abido, M., & Boucherma, M. (2014). Optimal power flow using teaching-learning-based optimization technique. *Electric Power Systems Research, 114*, 49-59.
- Chung, T., & Li, Y. (2000). A hybrid GA approach for OPF with consideration of FACTS devices. *IEEE Power Engineering Review, 20*(8), 54-57.
- Duman, S., Güvenç, U., Sönmez, Y., & Yörükeren, N. (2012). Optimal power flow using gravitational search algorithm. *Energy conversion and management, 59*, 86-95.
- Frank, S., Steponavice, I., & Rebennack, S. (2012). Optimal power flow: A bibliographic survey I: Formulations and deterministic methods. *Energy systems, 3*, 221-258.
- Hingorani, N. G. (1988). Power electronics in electric utilities: role of power electronics in future power systems. *Proceedings of the IEEE, 76*(4), 481-482.
- Hingorani, N. G., & Gyugyi, L. (1999). Understanding facts. (*No Title*).
- Inkollu, S. R., & Kota, V. R. (2016). Optimal setting of FACTS devices for voltage stability improvement using PSO adaptive GSA hybrid algorithm. *Engineering science and technology, an international journal, 19*(3), 1166-1176.
- Kaur, M., & Narang, N. (2020). An integrated optimization technique for optimal power flow solution. *Soft Computing, 24*, 10865-10882.
- Mirjalili, S. (2015). How effective is the Grey Wolf optimizer in training multi-layer perceptrons. *Applied Intelligence, 43*, 150-161.
- Mirjalili, S., Mirjalili, S. M., & Lewis, A. (2014). Grey wolf optimizer. *Advances in engineering software, 69*, 46-61.
- Niknam, T., Narimani, M. R., & Jabbari, M. (2013). Dynamic optimal power flow using hybrid particle swarm optimization and simulated annealing. *International Transactions on Electrical Energy Systems, 23*(7), 975-1001.
- Ongsakul, W., & Bhasaputra, P. (2002). Optimal power flow with FACTS devices by hybrid TS/SA approach. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems, 24*(10), 851-857.
- Pourakbari-Kasmaei, M., & Mantovani, J. R. S. (2018). Logically constrained optimal power flow: Solver-based mixed-integer nonlinear programming model. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems, 97*, 240-249.
- Pourakbari-Kasmaei, M., Rider, M. J., & Mantovani, J. R. (2014). An unequivocal normalization-based paradigm to solve dynamic economic and emission active-reactive OPF (optimal power flow). *Energy, 73*, 554-566.

- Pourakbari-Kasmaei, M., Rider, M. J., & Mantovani, J. R. S. (2016). Multi-area environmentally constrained active–reactive optimal power flow: a short-term tie line planning study. *IET Generation, Transmission & Distribution*, 10(2), 299-309.
- Singh, R. P., Mukherjee, V., & Ghoshal, S. (2015). Particle swarm optimization with an aging leader and challengers algorithm for optimal power flow problem with FACTS devices. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 64, 1185-1196.
- Slimani, L., & Bouktir, T. (2007). Economic power dispatch of power system with pollution control using multiobjective ant colony optimization. *International Journal of Computational Intelligence Research*, 3(2), 145-154.
- Song, X., Tang, L., Zhao, S., Zhang, X., Li, L., Huang, J., & Cai, W. (2015). Grey Wolf Optimizer for parameter estimation in surface waves. *Soil Dynamics and Earthquake Engineering*, 75, 147-157.
- Zhang, X.-P., Rehtanz, C., & Pal, B. (2012). *Flexible AC transmission systems: modelling and control*: Springer Science & Business Media.

BÖLÜM 2

GÜÇ SİSTEMLERİNDE YÜK AKIŞ ANALİZ YÖNTEMLERİ

Dr. Öğr. Üyesi Salih ERMIŞ¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384617>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Elektrik Elektronik Mühendisliği Bölümü. sermis@ahievran.edu.tr ORCID No: 0000-0002-1053-9160

GİRİŞ

Bir güç sisteminde güç, şebekedeki bara iletim hatları aracılığıyla üretim merkezinden son kullanıcıya kadar iletilir. Güç akışı veya yük akışı, aktif ve reaktif güç akışı olarak bilinir. Bir güç sisteminin kararlı bir durum çalışmasını planlamak, yönetmek ve belirlemek için yük akış analizi, mühendisler tarafından gerçekleştirilmesi gereken en önemli çalışma alanıdır (Wang et al., 2008). Yük akışı analizleri, bir güç sisteminin kararlı durum koşulları altında çalışması için sistemde ki, bara gerilimlerini, bara faz açılarını, generatörlerin üretim değerlerini, transformatör kademe ayarları ve hatlar üzerindeki aktif ve reaktif güç akışlarını belirlemek için matematiksel bir çözüm yöntemi sunar (Yeşilbudak et al., 2017). Güç sistemleri, elektrik enerjisinin üretim, iletim ve dağıtım şebekesinden oluşan bir sistemdir.

Yük akışı analizi ile bir güç sisteminin, anlık durum bilgisine, en iyi şekilde işletilmesine ve gelecekteki enerji talebine göre sistemin genişletilmesi çalışmalarında bilgi sahibi olunur. Yük akış analizi sonucunda güç sistemindeki tüm baraların gerilim genlik ve açı değerleri, iletim hatları üzerinden geçen aktif ve reaktif güçler, hat kayıplarını belirlemek mümkündür (Elgerd, 1982). Güç akışı denklemleri doğrusal olmayan denklemlerdir ve sayısal yöntemler kullanılarak iteratif tekniklerle çözümlenmelidir (Murthy, 2007). Sayısal yöntemler, matematiksel problemlerin aritmetik işlemlerle çözülebilecek şekilde formüle edildiği tekniklerdir ve genellikle sadece yaklaşık çözümler sunar.

Son yıllarda, yük akış analizi problemlerinin çözümünde çeşitli sayısal analiz yöntemleri uygulanmaktadır. En yaygın kullanılan yöntemler Gauss-Seidel, Newton Raphson ve Fast Decoupled yöntemleridir (Grigsby, 2007). Elektrik enerjisine olan talep karşısında güç sistemleri de büyümeye devam etmiş ve bu büyüme karşısında yük akış analizi denkleminin boyutu büyümüştür. Bu denklemlerdeki büyüme karşısında, herhangi bir sayısal matematiksel yöntem doğru bir çözüme yakınsayamaz. Bu nedenle enerji mühendisleri daha güvenilir yöntemler aramak zorundadır. Enerji endüstrisinin karşı karşıya olduğu sorun, bir güç sistemi analizi için hangi yöntemin en uygun olduğunun nasıl belirleneceğidir. Güç akışı analizinde, hangi yöntemin kullanılacağına en iyi şekilde belirlenmesi için yüksek derecede doğruluk ve daha hızlı bir çözüm süresi gereklidir.

Yük akışı çalışmalarında, generatörlerin talep edilen tüm yükleri ve hatlardaki kayıpları karşıladığı ve güç sistemi üç fazlı, dengeli yüklendiği ve sürekli hal koşulları altında çalıştığı kabul edilerek analizler gerçekleştirilir. Yük akış analizi en basit ifadeyle, güç sistemindeki gerilimleri ve güç değerlerini bulmak olarak ifade edilebilir. Bu değerlerin bulunabilmesi için bazı değerlerin ve tanımların bilmesi gerekir.

1. BARLARIN SINIFLANDIRILMASI

Güç sistemindeki baralar iki ana grupta tanımlanır. Bunlar, generatörlerin bağlı olduğu baralar üretim baraları, yüklerin bağlı olduğu baralar yük baraları olarak ifade edilir. Yük akış analizinde çözümleri gerçekleştirebilmek için üçüncü bir bara tanımı yapılmıştır. Bu baraya da, salınım (slack) bara ismi verilir (Glover et al., 2012; Kothari & Nagrath, 2003). Yük akışı analizi çalışmalarında her bir baranın aktif güç (P), reaktif güç (Q), gerilim genliği (V) ve faz açısı (δ) gibi parametrelerinin belirlenmesi gerekir. Bu parametrelerden herhangi ikisi biliniyorsa yük akışı analiz metotları ile diğer ikisi belirlenebilir (KRASNIQI, 2011; Nitve & Naik, 2014).

1.1. Salınım (slack) Bara

Bir güç sisteminde hat kayıpları yük akışı analizi sonucunda belirlenir. Güç sistemindeki güçler arasındaki dengeyi sağlayabilmek için bir referans barası belirlenir. Belirlenen bu baraya salınım (slack) barası ismi verilir. Sistemdeki güç dengesini sağlayabilmesi için salınım barası genellikle bir üretim barasından seçilir. Üretim barasından seçilmesinin nedeni yük akış analizi sonuna kadar sistemdeki güç kayıplarını sağlanması salınım barası üzerinden gerçekleşecektir. Salınım barasında, gerilim genliği (V) ve faz açısı (δ) bilinen değerler, aktif güç (P), reaktif güç (Q) değerleri bilinmeyen değerlerdir (Singhal, 2014).

1.2. Üretim Barası (PV)

Güç sistemlerinde gerilimi kontrol eden baralar üretim baralarıdır. Gerilim kontrolünü generatörlerin reaktif güç üretim değerlerini maksimum ve minimum değerlerini sınırlandırılarak sağlanır. Eğer reaktif güç üretim değerleri sınırlar dışına çıkarsa bara gerilim değerleri değişecek ve dolayısıyla

bu bara yük barasına dönüşecektir. Üretim baralarında, bara aktif güç (P) ve gerilim genliği (V) bilinen değer, bara faz açısı (δ) ve reaktif güç (Q) değerleri bilinmeyen değerlerdir (Singhal, 2014).

1.3. Yük barası (PQ)

Bu bara son kullanıcı ya da tüketim gücünün karşılandığı baradır. Yük baralarında, bara aktif güç (P) ve reaktif güç (Q) bilinen değer, bara gerilim genliği (V) ve faz açısı (δ) değerleri bilinmeyen değerlerdir (Singhal, 2014). Tablo 1 de bara tiplerine göre bilinen ve bilinmeyen bara parametreleri tablosu verilmiştir.

Tablo 1. Bara tiplerine göre bilinen ve bilinmeyen değerler

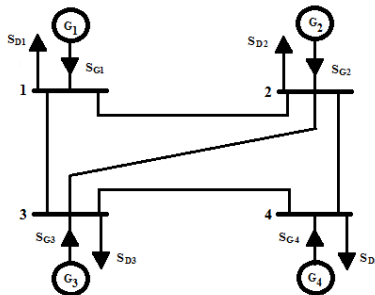
Bara Tipi	Bilinen Değerler	Bilinmeyen Değerler
<i>Salınım Barası</i>	V, δ	P, Q
<i>Üretim Barası (PV)</i>	P, V	Q, δ
<i>Yük Barası (PQ)</i>	P, Q	V, δ

2. YÜK AKIŞ ANALİZİ

Güç sistemlerinde yük akış analizlerinin gerçekleştirilmesi için ilk yapılması gereken bara admintans (Y_{BARA}) matrisinin oluşturulmasıdır. Güç sisteminde iletim hatlarının seri empedansları ve şönt admintans değerlerine göre Y_{BARA} matrisi elde edilebilir.

2.1. Bara Admintans Matrisi (Y_{BARA})

Bara admintans matrisinin oluşturulması şekil 1 de verilen basit bir dört baralı örnek güç sistemi üzerinde anlatılmaya çalışılırsa;



Şekil 1. Dört baralı örnek sistem tek hat şeması

Her baraya ait akım değerleri kirchhoff akımlar kanunu kullanılarak aşağıdaki Eş. 1-4 denklemleri elde edilir.

$$I_1 = V_1 y_{10} + (V_1 - V_2) y_{12} + (V_1 - V_3) y_{13}$$

$$I_2 = V_2 y_{20} + (V_2 - V_1) y_{12} + (V_2 - V_3) y_{23} + (V_2 - V_4) y_{24}$$

$$I_3 = V_3 y_{30} + (V_3 - V_1) y_{13} + (V_3 - V_2) y_{23} + (V_3 - V_4) y_{34}$$

$$I_4 = V_4 y_{40} + (V_4 - V_2) y_{24} + (V_4 - V_3) y_{34}$$

Bu akım değerlerini matris formuna dönüştürülürse Eş. 1 deki denklem elde edilir.

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{10} + y_{12} + y_{13} & -y_{12} & -y_{10} & 0 \\ -y_{12} & (y_{20} + y_{12} + y_{23} + y_{24}) & -y_{23} & -y_{24} \\ -y_{13} & -y_{23} & (y_{30} + y_{13} + y_{23} + y_{34}) & -y_{34} \\ 0 & -y_{24} & -y_{34} & (y_{40} + y_{24} + y_{34}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} \quad (1)$$

Eş. 1 denklemi aşağıdaki tanımlamalara göre yeniden düzenlenirse Eş. 2'deki gibi yazılabilir.

$$Y_{11} = y_{10} + y_{12} + y_{13}$$

$$Y_{22} = y_{20} + y_{12} + y_{23} + y_{24}$$

$$Y_{33} = y_{30} + y_{13} + y_{23} + y_{34}$$

$$Y_{44} = y_{40} + y_{24} + y_{34}$$

$$Y_{12} = Y_{21} = -y_{12}; Y_{23} = Y_{32} = -y_{23}$$

$$Y_{13} = Y_{31} = -y_{13}; Y_{14} = Y_{41} = -y_{14} = 0$$

$$Y_{24} = Y_{42} = -y_{24}; Y_{34} = Y_{43} = -y_{34}$$

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} & Y_{13} & Y_{14} \\ Y_{21} & Y_{22} & Y_{23} & Y_{24} \\ Y_{31} & Y_{32} & Y_{33} & Y_{34} \\ Y_{41} & Y_{42} & Y_{43} & Y_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Eş. 2 den;

$$I_i = \sum_{k=1}^n Y_{ik} V_k \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3)$$

Eş. 2 matris formda yazılırsa;

$$I_{BARA} = Y_{BARA} \cdot V_{BARA} \quad (4)$$

2.2. Yük Akış Problemi

i baralı bir güç sisteminde güç Eş. 5 deki gibi ifade edilebilir.

$$S_i = P_i + JQ_i = V_i I_i^* \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (5)$$

Burada, V_i , i . bara gerilimi, I_i ise i . baradan geçen kaynak akımıdır.

Veya,

$$S_i = P_i - JQ_i = V_i^* I_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (6)$$

$$I_i = \sum_{k=1}^n Y_{ik} V_k \quad (7)$$

Eş. 7 deki denklem Eş. 6 da yerine yazılırsa güç ifadesi Eş. 8 deki gibi yazılabilir.,

$$S_i = P_i - JQ_i = V_i^* \sum_{k=1}^n Y_{ik} V_k \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (8)$$

Eş. 8 göre gerçek ve imajiner kısımları yazılırsa Eş. 9 da bara aktif güç değeri, Eş. 10 da bara reaktif güç denklemleri oluşturulur.

$$P_i (\text{Aktif Güç}) = \text{Re} \{V_i^* \sum_{k=1}^n Y_{ik} V_k\} \quad (9)$$

$$Q_i (\text{Reaktif Güç}) = -\text{Im} \{V_i \sum_{k=1}^n Y_{ik} V_k\} \quad (10)$$

Aktif ve reaktif güçler tekrar düzenlenirse Eş. 11-12 gibi yazılabilir.

$$P_i (\text{Aktif Güç}) = |V_i| \sum_{k=1}^n |V_k| |Y_{ik}| \cos(\theta_{ik} + \delta_k - \delta_i) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (11)$$

$$Q_i (\text{Reaktif Güç}) = -|V_i| \sum_{k=1}^n |V_k| |Y_{ik}| \sin(\theta_{ik} + \delta_k - \delta_i) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (12)$$

Eş. 11-12 denklemleri sayesinde tüm baralardaki güçler elde edildiğinde, sistemdeki kayıplarda bulunmuş olur.

Güç sistemindeki aktif ve reaktif güç kayıpları Eş. 13-14 eşitlikte verilmiştir.

$$P_L = \sum_i P_{Gi} - \sum_i P_{Di} \quad (13)$$

$$Q_L = \sum_i Q_{Gi} - \sum_i Q_{Di} \quad (14)$$

Burada, P_{Gi} ve Q_{Gi} aktif ve reaktif generatör güçleri, P_{Di} ve Q_{Di} aktif ve reaktif yük güçleridir.

3. YÜK AKIŞ ANALİZ YÖNTEMLERİ

Yük akış analizlerini gerçekleştirmek için iteratif teknikler kullanılmaktadır. Bunlardan en yaygın olanları Gauss-Seidel, Newton-Raphson ve Fast Decoupled yöntemleridir.

3.1. Gauss-Seidel Yöntemi

Gauss-Seidel yöntemi, Gauss yöntemi olarak bilinen doğrusal olmayan matematiksel denklemleri çözmek için iteratif bir çözüm sunan yöntemdir (Moradi et al., 2017). Bu yöntemde kullanıcı tarafından belirlenen hata değerine göre çözüm gerçekleştirilir. Güç sisteminde hesaplanan bara gerilim

değeri bir önceki iterasyonla bulunan bara gerilimi karşılaştırılır, iki bara gerilimi arasındaki fark hata değerinden küçük ise iterasyon sonlanır, büyük ise iterasyona devam edilir (Glover et al., 2012). Eş. 15 ve 16 da sırasıyla bara akım ve gerilim değerleri verilmiştir (Bergen, 2009).

$$I_i = (P_i - JQ_i)/V_i^* \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (15)$$

$$V_i = \frac{1}{Y_{ii}} \left[I_i - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n Y_{ik} V_k \right] \quad (16)$$

Burada, V_i, I_i, P_i, Q_i sırasıyla bara gerilimi, bara akımını, bara aktif gücünü bara reaktif gücünü ve V_i^* , son hesaplanan i . bara gerilim değeri ifade eder. Y_{ii} , bara özadmittansı, Y_{ik} , i . ve k . baralar arası admittansı ve V_k , tahmini gerilim değerini ifade etmektedir (Alqadi & Khammash, 2007). Her iterasyondaki bara gerilim değeri, Eş. 15 ve 16'da yerine konulduğunda Eş. 17 deki gibi tanımlanır.

$$V_i = \frac{1}{Y_{ii}} \left[\frac{P_i - JQ_i}{V_i^*} - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n Y_{ik} V_k \right] \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (17)$$

Güç sisteminde, bara gerilim değeri her iterasyonunda Eş. 17 denklemi ile hesaplanır. Salınım barasının gerilim değeri sabit tutulur. Aktif ve reaktif güç değerlerini Eş. 11 ve 12 deki denklemden hesaplanır. İterasyon belirlenen hata değerinden küçük oluncaya kadar devam eder.

3.2. Newton-Raphson Yöntemi

Bu yöntem, 1960 yıllarda Isaac Newton ve Joseph Raphson tarafından geliştirilmiştir (Aroop et al., 2014). Newton-Raphson yöntemi, iki veya daha fazla doğrusal olmayan denklem fonksiyonların Taylor serisine açılımı metodu ile yük akışı problemi çözümünü gerçekleştirir. Eş. 11 ve 12 de yük baralarına ait aktif ve reaktif güç değerleri verilmiştir. Eş. 11 ve 12 Taylor serisine açılır ve yüksek mertebeden terimler ihmal edilirse aşağıdaki doğrusal denklem seti elde edilir (Mohammadi et al., 2013).

$$\begin{bmatrix} \Delta P_2^{(k)} \\ \vdots \\ \Delta P_n^{(k)} \\ \hline \Delta Q_2^{(k)} \\ \vdots \\ \Delta Q_n^{(k)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial P_2}{\partial \delta_2}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial P_2}{\partial \delta_n}\right)^{(k)} & \left(\frac{\partial P_2}{\partial |V_2|}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial P_2}{\partial |V_n|}\right)^{(k)} \\ \vdots & \vdots \\ \left(\frac{\partial P_n}{\partial \delta_2}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial P_n}{\partial \delta_n}\right)^{(k)} & \left(\frac{\partial P_n}{\partial |V_2|}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial P_n}{\partial |V_n|}\right)^{(k)} \\ \hline \left(\frac{\partial Q_2}{\partial \delta_2}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial Q_2}{\partial \delta_n}\right)^{(k)} & \left(\frac{\partial Q_2}{\partial |V_2|}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial Q_2}{\partial |V_n|}\right)^{(k)} \\ \vdots & \vdots \\ \left(\frac{\partial Q_n}{\partial \delta_2}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial Q_n}{\partial \delta_n}\right)^{(k)} & \left(\frac{\partial Q_n}{\partial |V_2|}\right)^{(k)} \dots \left(\frac{\partial Q_n}{\partial |V_n|}\right)^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \delta_2^{(k)} \\ \vdots \\ \Delta \delta_n^{(k)} \\ \hline \Delta |V_2|^{(k)} \\ \vdots \\ \Delta |V_n|^{(k)} \end{bmatrix}$$

Yukarıdaki denklemde referans barası olarak 1 numaralı bara salınım barası olarak kabul edilir ve gerilim açısı değeri bilindiğinden ihmal edilir. Jacobien matrisi aktif ve reaktif güçteki küçük değişimler ile gerilimin açısı ve büyüklüğü arasındaki değişimleri verir. Jacobien matrisi aktif ve reaktif güç bileşenlerindeki bara gerilim ve açı değişimlerinin kısmi türevleridir. Denklem matris formunda Eş. 18 deki gibi yazılabilir.

$$\begin{bmatrix} \Delta P \\ \Delta Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_1 & J_2 \\ J_3 & J_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \delta \\ \Delta |V| \end{bmatrix} \quad (18)$$

Burada J_1, J_2, J_3, J_4 Jacobien matrisinin bileşenleridir. Analiz sonucunda aktif ve reaktif hesaplanan güç değerler ile tahmin edilen değerler arasındaki fark $\Delta P_i^{(k)}$ ve $\Delta Q_i^{(k)}$ Eş. 19 ve 20 de verilmiştir.

$$\Delta P_i^{(k)} = P_i^{(tahmin)} - P_i^{(k)} \quad (19)$$

$$\Delta Q_i^{(k)} = Q_i^{(tahmin)} - Q_i^{(k)} \quad (20)$$

Analiz sonucunda baralardaki gerilim ve açı yeni değerleri Eş. 21 ve 22 de verilmiştir.

$$\delta_i^{(k+1)} = P_i^{(tahmin)} - P_i^{(k)} \quad (21)$$

$$|V_i^{(k+1)}| = |V_i^{(k)}| + \Delta |V_i^{(k)}| \quad (22)$$

3.3. Fast Decoupled Yöntemi

Fast-Decoupled güç akış yöntemi, 1974 yılında Stott ve Alsac tarafından geliştirilmiştir (Stott & Alsac, 1974). Newton-Raphson yönteminde oluşturulan Jacobian matrisi üzerinde bazı ihmallerin yapılarak işlemin hızlandırılması dayanan bir yöntemdir. Eş. 18 de verilen denklemde aktif gücün gerilime bağlı J_2 bileşeni ve reaktif gücün açığa bağlı J_3 bileşeni sıfır kabul edilerek güç akış analizi gerçekleştirilmektedir. Bu durum Eş. 23 de verilmiştir.

$$\begin{bmatrix} \Delta P \\ \Delta Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_1 & 0 \\ 0 & J_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \delta \\ \Delta |V| \end{bmatrix} \quad (23)$$

Buna göre aktif ve reaktif güç değerleri Eş. 24 ve 25 deki gibi yazılabilir.

$$J_1(i)\Delta\delta(i) = \Delta P(i) \quad (24)$$

$$J_4(i)\Delta V(i) = \Delta Q(i) \quad (25)$$

Başlangıç koşullarına göre hesaplama süresi sabit tutulan jacobien matrisine sabit Jacobian'lı Fast-Decoupled metodu adı verilir (Bergen, 2009)

KAYNAKÇA

- Alqadi, R., & Khammash, M. (2007). An Efficient Parallel Gauss-Seidel Algorithm for the Solution of Load Flow Problems. *Int. Arab J. Inf. Technol.*, 4(2), 148-152.
- Aroop, B., Satyajit, B., & Sanjib, H. (2014). Power flow analysis on IEEE 57 bus system using Matlab. *International Journal of Engineering Research & Technology (IJERT)*, 3.
- Bergen, A. R. (2009). *Power systems analysis*. Pearson Education India.
- Elgerd, O. I. (1982). *Electric energy systems theory: an introduction*.
- Glover, J. D., Sarma, M. S., & Overbye, T. (2012). *Power system analysis & design, SI version*. Cengage Learning.
- Grigsby, L. L. (2007). *Power system stability and control*. CRC press.
- Kothari, D. P., & Nagrath, I. (2003). *Modern power system analysis*. Tata McGraw-Hill Publishing Company.
- Krasniqi, I. (2011). Power flow analysis: Simulation for different buses of a system. *Journal of Institute Alb-Shkenca*, 4(2).
- Mohammadi, M., Shayegani, A., & Adaminejad, H. (2013). A new approach of point estimate method for probabilistic load flow. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 51, 54-60.
- Moradi, M. H., Foroutan, V. B., & Abedini, M. (2017). Power flow analysis in islanded Micro-Grids via modeling different operational modes of DGs: A review and a new approach. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 69, 248-262.
- Murthy, P. (2007). *Power system analysis*. BS Publications.
- Nitve, B., & Naik, R. (2014). Steady state analysis of IEEE-6 Bus System Using PSAT power toolbox. *International Journal of Engineering Science and Innovative Technology (IJESIT) Volume*, 3.
- Singhal, K. (2014). Comparison between load flow analysis methods in power system using Matlab. *International Journal of Scientific & Engineering Research*, 5(5), 1412-1419.
- Stott, B., & Alsac, O. (1974). Fast decoupled load flow. *IEEE transactions on power apparatus and systems*(3), 859-869.
- Wang, X.-F., Song, Y., & Irving, M. (2008). Load flow analysis. *Modern power systems analysis*, 71-128.
- Yeşilbudak, M., Ermiş, S., & Bayındır, R. (2017). Farklı Baralara Sahip Güç Sistemlerinde Yük Akışı Analiz Metotlarının Karşılaştırılması. *Gazi University Journal of Science Part C: Design and Technology*, 5(3), 237-246.

BÖLÜM 3

BUHAR KAZANLARINDA ENERJİ DENGESİ İLE PERFORMANS TEST YÖNTEMİ UYGULAMASI VE PARAMETRELER

Dr. Öğr. Üyesi Halit ARAT¹
Doç. Dr. Oğuzhan ERBAŞ²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384646>

¹ Kütahya Dumlupınar Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü, Kütahya, Türkiye, 0000-0002-6634-2535, halit.arat@dpu.edu.tr

² Kütahya Dumlupınar Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü, Kütahya, Türkiye, 0000-0001-9424-4273, oguzhan.eras@dpu.edu.tr

GİRİŞ

Uzun vadeli enerji planlaması, ulusal veya bölgesel hedeflerin, politikaların ve yatırım stratejilerinin, genellikle enerji sistemlerinin modellenmesiyle desteklenen, enerji sektörü senaryolarının niceliksel analizinden türetildiği süreçtir. Bu tür bir planlama, dünya çapında enerji politikası oluşturma süreçlerinin merkezi bir bileşenidir ve enerji sektörüne ne zaman, nerede ve nasıl yatırım yapılacağına ilişkin kararlara yol gösterir (IRENA, 2023). Dünyanın enerji ihtiyacı, elektrik üretimi için büyük ölçüde fosil yakıtlara dayanmaktadır. Dünyadaki elektrik üretiminin büyük bir kısmı kömür ve doğalgaz başta olmak üzere fosil yakıtlardan karşılanmaktadır. Rüzgar ve güneş enerjisi gibi yenilenebilir enerji tesislerinin büyümesine rağmen, fosil yakıtlara olan yoğun bağımlılığın onlarca yıl daha devam etmesi beklenmektedir (Regulagadda vd., 2010). Bölgesel olarak, ABD ve Avrupa Birliği'nin kömür talebinde sırasıyla %24 ve %16'lık düşüşlerle 2023'ün ilk yarısında beklenenden daha hızlı bir düşüş yaşanmıştır. Fakat buna karşılık, en büyük iki tüketici olan Çin ve Hindistan, aynı dönemde kömür talebinde %5'in üzerinde bir artışa tanık olmuş ve bu, dünyanın diğer bölgelerinde görülen düşüşleri etkili bir şekilde telafi etmiştir.

Kömür üzerindeki bu vazgeçilmez istek aynı zamanda temiz kömür teknolojilerinin ortaya çıkmasına sebep olmuştur. Temiz kömür teknolojileri, kömür çıkarma, hazırlama ve kullanmanın hem verimliliğini hem de çevresel kabul edilebilirliğini artırmak için tasarlanmış yeni nesil ileri kömür kullanım süreçleridir. Temiz kömür teknolojileri, gelecekteki enerji kaynakları, enerji fiyatlarındaki dalgalanmalar ve çevresel etkilerle ilgili endişeler nedeniyle dünyanın birçok ülkesi için giderek daha önemli hale gelmiştir. Birçok ülke enerji güvenliğini/istikrarını sağlamak için uzun vadeli bir çaba üzerinde çalışmaktadır. Bunu yapmak için fosil, nükleer ve yenilenebilir enerji kaynaklarını içeren dengeli ve çeşitlendirilmiş bir enerji kaynakları portföyü gereklidir. Temiz kömür, birçok ülke için genel enerji politikasının önemli bir unsuru olarak kabul edilmektedir. Kömür, dünya çapında iki ila üç yüzyıla yetecek kadar rezervlerin mevcut olması, dünya çapında yaygın olması ve en ekonomik enerji kaynakları arasında yer alması nedeniyle popüler bir yakıt seçeneğidir. Ancak kömür, tüm enerji kaynakları arasında çevresel açıdan en sorunlu olanlardan biridir ve bu sorunu çözmek için çok çaba harcanmaktadır

(Zhang vd., 2022). Bundan dolayı, yakıt türlerine ve özelliklerine göre uygun kazan tasarımı ve yanma sistemlerinin geliştirilmesi, enerji ekonomisi ve çevresel etki açısından büyük önem taşımaktadır. Bu durum günümüz enerji dönüşüm teknolojilerinin temel sorunlarını oluşturmaktadır. Kazan üreticisinin temel amacı, öngörülen kazan ısı performansını ve emisyon davranışını sağlamaktır. Bu amaçla kazan güvenliği, güvenilirliği, çalışabilirliği, verimliliği ve çevreye uygunluğu açısından en uygun şekilde oluşturulmuş bir kazan sistemi yapısını gerçekleştirmektir (Erbas, 2021). Özellikle endüstriyel boyutlu kazanlar, toz haline getirilmiş kömür için karmaşık bir yanma sürecini içermektedir; bu, kazanda kömürün yanmasını ve NOx oluşumunu tanımlamak için farklı modellerin kullanılmasını gerektirir. Ayrıca kazan yanmasını simüle etmek için kütle, momentum ve enerjinin korunumu denklemleri kullanılmalıdır (Lu vd., 2023).

BUHAR KAZANLARINDA ISI PROSES YAPISI

Kazanlar, endüstrilerde ısı enerjisi sağlamak amacıyla ısıtmak veya buhar üretmek ve buhar türbinlerini çalıştırarak elektrik üretmek amacıyla kullanılan basınçlı kaplardır. Kazanlar ayrıca binalarda mekân ısıtması sağlamanın yanı sıra çamaşırhane, mutfak gibi kullanıcıların ihtiyaç duyduğu sıcak su ve buharın üretilmesinde de kullanılmaktadır. Dünya elektriğinin büyük bir kısmını üretmek için kömür, gaz, petrol vb. fosil yakıtlar ve nükleer enerji kullanılmakta ve bu tür enerjilerin elektriğe dönüştürülmesi için genellikle kazanlar en çok tercih seçimidir. Dolayısıyla bir buhar kazanının veriminin çok küçük bir oranda artırılmasının, elektrik üretimindeki enerji tüketimini büyük oranda azaltacağı açıktır. Yine fosil yakıt rezervlerinin tükenmesi ve çevre koruma sorunlarına rağmen, petrol, doğal gaz ve kömür talebinin yükselmesi beklenmektedir. Ayrıca endüstriyel ısıtma sistemlerinin çoğunda sıcak su veya buhar üretmek için kazanlar kullanılmaktadır. Bu nedenle verimli bir kazanın ısıtma ile ilgili enerji tasarrufu üzerinde de önemli bir etkisi vardır. Şekil 1’de tipik bir dolaşımli akışkan yataklı buhar kazanı ile enerji eldesinin iş akış şeması gösterilmiştir (ASME, 2013). Enerji tasarrufu önlemleri alınarak ve genel kazan verimliliği artırılarak önemli miktarda enerji tasarrufu sağlanabilir (Topal vd., 2017).

nedenle kazan verimliliğini artırmak için, fazla hava, yakıt akış hızı, buhar talebi vb. gibi bazı parametrelerin optimize edilmesiyle kazandan boşa harcanan ısı miktarının en aza indirilmesi gerekir. Tam yanmayı sağlamak için, kazana teorik olarak önerilen yakma havası sağlanmalıdır. Aksi takdirde baca gazında hızlı bir şekilde karbon monoksit birikecek ve aşırı durumlarda duman oluşacaktır. Öte yandan, çok fazla hava fazlalığı baca sıcaklığında ısıtılan ve dışarı atılan gereksiz hava miktarını ve azot oksit emisyonlarını artırır (Barma vd., 2017).

Kazandaki ısı kayıpları ise öncelikle kazanın ısı performansını belirler. Kazanlarda ısı kayıplarının azaltılması sistem verimliliğinin artırılması açısından gereklidir. Bu nedenle kazanların ısı ve çevresel performans testlerinin yapılması büyük önem taşımaktadır. Daha sonra sonuçlar incelenmelidir. Gerekirse kazan sistemi yapısının optimizasyonu yapılmalıdır. Ayrıca yanma sistemlerinden çevreye yayılan hava kirletici emisyonların miktarı, yakıt özelliklerine ve miktarına, yanma sistemi özelliklerine ve sistemin çalışma tarzına bağlıdır (Arslan ve Erbas, 2021).

ENERJİ DENGESİ İLE PERFORMANS TEST YÖNTEMİ UYGULAMASI VE PARAMETRELER

Ekserji analizi genellikle bir enerji sisteminin termodinamik performansını ve sistem bileşenlerinin verimliliğini, bileşenlerin entropi üretimini doğru bir şekilde ölçerek tahmin eder. Ayrıca, eksergoekonomik analiz, elektrik ve buhar gibi ürünlerin birim maliyetini tahmin eder ve geri dönülemezlikten kaynaklanan parasal kaybı ölçer. Ayrıca bu analiz, karmaşık termal sistemlerin optimum tasarımı ve işletimi için de bir araç sağlar (Kwak vd., 2003). Kazandaki ısı kayıpları da analiz edilirken birçok faktörün dikkate alınması gerekir. Kazanın ana ısı kayıpları şu şekildedir: eksik yanma, fazla hava, baca gazı içerisindeki su buharından dolayı ısı kaybı, yakıt cinsi, kazan yükü, yüzey kirliliği, kazan ısıtma yüzeyinden kaynaklanan ısı kayıpları olarak yazılabilir. Baca gazlarının duyulur ısı kaybı, baca gazlarındaki su buharının ısısından kaynaklanmaktadır. Ayrıca termik santrallerde buhar üretimi için kazanın tasarım yapısı ve çalışma koşulları oldukça önemlidir. Çünkü güç, iş yapma oranı olarak

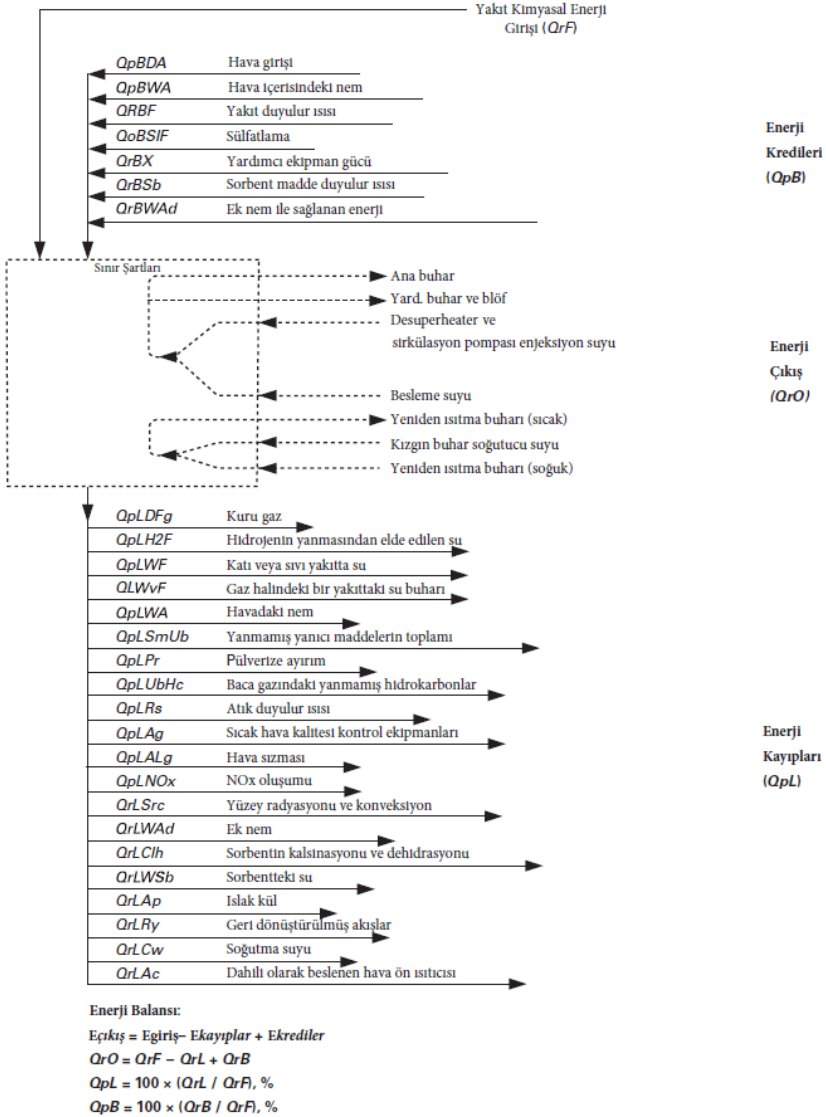
tanımlanabileceği gibi, ısı oranı da kazandaki toplam ısı ilavesinin santralden elde edilen net elektrik üretimine oranı olarak tanımlanabilir (Arslan vd., 2022).

Fosil yakıtların yakıldığı kazan ve türevlerinde enerji verimliliğinin sağlanması ve çevrenin korunması amaçlanmaktadır. Bu nedenle çeşitli uluslararası standartlar ve emisyon kontrol mevzuatı hazırlanmış ve uygulamaya konulmuştur (Behbahaninia vd., 2017). Bu standartlardan biri de yukarıda bahsedilen ve Amerikan Makine Mühendisleri Birliği tarafından oluşturulan, “enerji dengesi yöntemi”ni temel alan ASME PTC-4 test kodudur. ASME PTC-4 standardı, buhar kazanlarının performans testlerine ilişkin prosedür ve kuralları içerir. Bu standarda uygun olarak kömür, sıvı yakıt ve gaz yakıtlı kazanların performans ve emisyon testleri yapılabilmektedir. Ayrıca enerji dönüşüm sistemlerinin test özelliklerini ve koşullarını belirli çalışma koşullarına dönüştürmek için modeller sunmaktadır (ASME, 2013).

Buhar üretimindeki enerji analizi ile kazanın enerji verimliliğini değerlendirmek için ASME PTC-4 güç testi kodu buhar üreten ünitelere göre dolaylı yöntem kullanılarak hesaplanır. Isı kaybı yöntemiyle belirlenen kazan verimi, giriş-çıkış yöntemiyle elde edilen değerlere göre daha doğru değerler sunmaktadır. Ayrıca kazanda meydana gelen ısı kayıplarının tespit edilmesine olanak sağlar. Bu nedenle kazan verimliliğini ve performansını artırarak sorunları daha kalıcı çözmek mümkündür. Örneğin; “kömür-kül -silis kumu ve kireçtaşı” ile çalışan sirkülasyonlu akışkan yataklı kazanlarda yatak malzemesi ile kütle akışının ölçülmesi çok zordur. Bu nedenle kazan veriminin ısı kaybı yöntemiyle belirlenmesi doğru bir uygulamadır (Erbas, 2021).

Buhar kazanları için, belirli bir performans testinin doğruluğu, test sırasında kullanılan yakıttan veya operatörün (işletmen) takdirine bağlı olarak diğer faktörlerden etkilenebilir. Fosil yakıtla çalışan buhar üreteçleri, yanması beklenen yakıtların en ağır özelliklerine göre özel olarak tasarlanmıştır. Herhangi bir sistem için özel düzenleme, farklı

düşük seviyeli ısı geri kazanım sistemlerinin yanı sıra buhar üreteçleri sistemi içinde yer alan hava kalitesi ekipmanlarını da içerebilir. Emisyonların kontrolü için kimyasal katkı maddeleri de (sorbent) eklenebilir. Buhar kazanlarının tasarımındaki bu değişiklikler, enerji dengesi yöntemi için belirsizlik sonucunu etkiler. Kömür akışı için gravimetrik besleyiciler, testten önce ve sonra kömür ağırlığının doğrudan ölçülmesiyle kalibre edilmelidir. Yakıt verimliliği, çıkış olarak çalışma akışkanı tarafından emilen tüm enerjiyi içerir ancak yakıtın yalnızca kimyasal enerjisini girdi olarak sayar. Brüt verimlilik ise aynı zamanda çıkış olarak çalışma akışkanı tarafından emilen tüm enerjiyi içerir ve buhar jeneratörüne giren tüm enerji girişlerini girdi olarak sayar. Bu nedenle brüt verimlilik genellikle yakıt verimliliğinden daha az veya ona eşittir. Şekil 2’de bir buhar kazanı için tüm girdileri ve çıktıları gösteren enerji balansı detayları gösterilmiştir (ASME, 2013).



Şekil 2. ASME PTC-4 performans test kodu için enerji balans parametreleri (ASME, 2013).

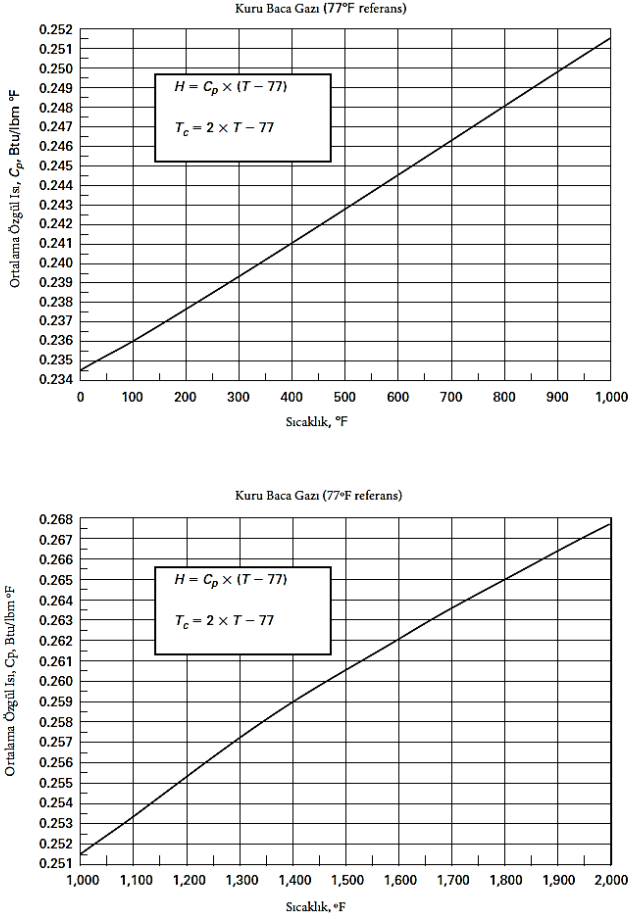
Bu test yöntemi, yakıt enerji girdisini belirlemek için yakıtın üst ısı değerini kullanır. Diğer bazı standartlar, kazan verimliliğini alt ısı değer esasına göre hesaplamak için yakıtın (LHV) veya net kalorifik değerini

kullanır. Bu durumda, yakıttaki nem de dahil olmak üzere yanma ürünlerinin gaz halinde kaldığı varsayılır ve suyun gizli buharlaşma ısısındaki enerji, yakıtta bulunan kimyasal enerjinin bir parçası olarak değerlendirilmez. Aynı yakıt kütle akış hızı (yakıt girişi) ve buhar jeneratörü çıkışı için, LHV'ye dayalı hesaplanan verimlilik her zaman HHV'ye dayalı hesaplanan verimlilikten daha yüksektir. Tersine, LHV esasına göre hesaplanan yakıt girdisi her zaman HHV esasına göre hesaplanan yakıt girdisinden daha düşüktür. Bu nedenle LHV'ye dayalı verimlilik yanıltıcı olabilir. Ekonomik ve çevresel etki değerlendirmesi ile buna göre buhar jeneratörünün ekonomik hale getirilmesi (yakıt girişi) ve çevresel değerlendirmelerde ısıl değer in esasının tutarlı olması gerekmektedir. Dolayısıyla LHV'nin belirsizliği HHV'nin belirsizliğinden daha büyüktür (Erbaş, 2021). Kömür özelliklerinin buhar kazanı tasarımı, termal performansı ve genel kazan çalışması üzerindeki etkileri Tablo 1'de listelenmiştir. Örneğin birbirine çok benzeyen kömürler arasında; devoltilizasyon yani gazlaşma oranları ve kömür reaktivitelerindeki farklılıklardan kaynaklanan yanma verimliliğinde önemli farklılıklar ortaya çıkabilmektedir. Yakma sistemlerinde ısı verim tanımı yapılırken; yanma verimliliği, buhar kazanı boyunca ısıtma yüzeylerinin ısı transfer performansı ve buhar üretim işlemini yürütmek için gereken yardımcı gücün birleşik etkisi olarak açıklanabilir. Ayrıca yanma mekanizmasına dahil edilen sorbent için de; termogravimetrik analiz (TGA), tane büyüklüğü, gözenek boyutu, yıpranma, yüzey alanı (ham ve kalsine edilmiş) ve gözenek hacmi (ham - kalsine edilmiş) gibi testlerin de yapılması tavsiye edilir.

Tablo 1. Kömür özelliklerinin buhar üretici tasarımı ve performansına etkileri

<i>Kömür Özelliği Değişkeni</i>	<i>Etkilenen Bileşen(ler)</i>	<i>Olası Etkisi</i>
Kömür ısı değeri	Silo depolama Besleyiciler Öğütücüler Brülörler Emisyon kontrol cihazları Kömür taşıma sistemi	Kömür akış hızı Ekipman kapasitesi Komponent bileşen sayısı Çalışma aralığı
Uçucu içerik	Brülörler Yanma odası Öğütücüler Ateşleyiciler	Gerekli incelik Brülör tasarımı Alev kararlılığı Yanmamış karbon kaybı Yanma odası geometrisi
Azot içeriği	Brülörler Yanma odası Hava dağılım ve besleme	Brülör tasarımı Yanma odası geometrisi Hava ve baca gazı sistemi NOx emisyonları Gerekli brülör zonu Stokiyometri
Kükürt içeriği	Yıkayıcı sistem Çökelticiler Hava ön ısıtıcıları Buhar boruları	Korozyon oranı Ekipman boyutlandırma Baca gazı sıcaklığı kontrolü Emisyon kontrol ekipmanları
Reaktivite indeksi	Brülörler Öğütücüler İnertleme sistemi Ateşleyiciler	Yanma Patlama potansiyeli Yanmamış karbon kaybı Çalışma aralığı
Kül ergimesi	Yanma odası Kurum üfleyici Su püskürtme	Cürufleme/FEGT/Buhar sıcaklığı Kirlenme/Buhar sıcaklığı NOx emisyonları Kurum üfleme ve su püskürtme işlemi

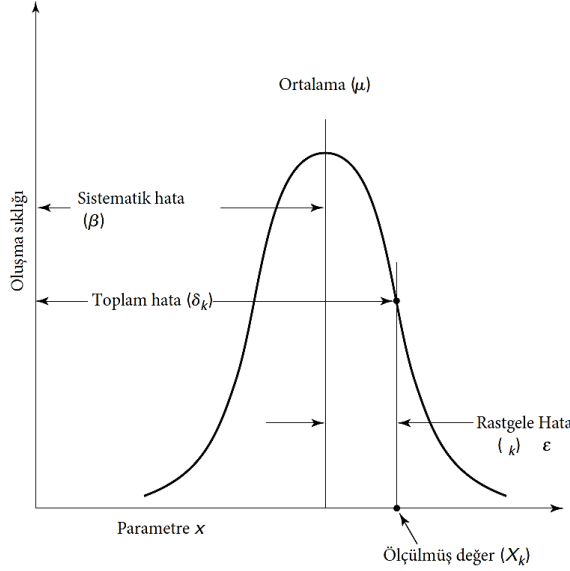
Kazanlardaki ısı kayıplarının toplamı, baca gazındaki duyulur ısı kaybıyla tutarlı bir değişim gösterir. Baca gazındaki duyulur ısı kaybının kazan verimini önemli ölçüde etkilediği anlaşılmaktadır. Baca gazı akış hızı ve sıcaklığı bu ısı kaybı belirler. Şekil 3'te kuru baca gazı ortalama özgül ısısı ile sıcaklığın karşılaştırılması gösterilmiştir.



Şekil 3. Kuru baca gazı ortalama özgül ısı ile sıcaklığın karşılaştırılması (ASME, 2013).

ASME PTC-4 test kodu ile performans testi sırasında kazan işletme değerlerinin ve ilgili ölçüm sensörlerinden alınan dataların belirsizlik analizi yöntemi ile analizi de gerekmektedir (Şekil 4.). Her ölçümdeki hata, sistematik hata ve rastgele hata olmak üzere iki bileşen içerir. Sistematik hata, tekrarlanan ölçümlerin ortalama sonucu ile gerçek değer arasındaki sapmayı ifade eder. Rastgele hata, tekrarlanan ölçümlerin ortalama sonucu ile her bir rastgele ölçüm arasındaki sapmayı ifade eder. Rastgele ve sistematik hatalar, ölçümlerdeki belirsizliğe katkıda bulunur ve bu da deneydeki kesin değere ilişkin bilgi eksikliğini yansıtır.

Uluslararası Standardizasyon Örgütü (ISO), ölçümlerdeki deneysel belirsizliklerin resmi bir analiz prosedürünü sağlayan “ölçüm belirsizliğinin ifadesine ilişkin bir kılavuz” (GUM) yayınlamıştır. GUM'a göre ölçümlerden kaynaklanan belirsizlikler standart belirsizlik, birleşik standart belirsizlik ve genişletilmiş belirsizlik olarak kategorize edilebilir.



Şekil 4. Performans test ölçümlerindeki olası hata türleri (ASME, 2013).

Standart belirsizlik, standart sapma olarak ifade edilen ölçüm belirsizliğini ifade eder. Bileşik standart belirsizlik ise sonucun bir dizi başka büyüklüğün değerlerinden elde edildiği durumu ifade eder; bu belirsizlik, her bir ağırlıklı varyansın toplamının kareköküdür. Aynı zamanda miktarlar arasındaki korelasyonları da hesaba katmaktadır. Genişletilmiş belirsizlik ise değer dağılımının büyük bir kısmını kapsaması beklenen bir ölçüm sonucunun aralığını ifade eder. Standart belirsizliği iki şekilde değerlendirilebilir; A Tipi değerlendirme ve B Tipi değerlendirme. A Tipi belirsizlik değerlendirmesi, tekrarlanan gözlem serilerinin istatistiksel analiziyle elde edilen belirsizlik sonucunu ifade eder. B Tipi belirsizlik değerlendirmesi ise, doğrudan istatistiksel analiz dışındaki yöntemlerle elde edilen belirsizlik sonucunu ifade eder (Wu vd., 2023).

SONUÇ

Kazanların enerji denetimi için iki yöntem karşımıza çıkmaktadır. Doğrudan yöntemde verimlilik sadece girdi ve çıktı koşullarının analiz edilmesiyle elde edilir. Dolaylı veya enerji kayıp yönteminde ise ısı kayıplarının her biri ayrı ayrı hesaplanır ve verimliliği saptamak için kullanılır. Bu yöntemin en bilinen versiyonlarından biri, buhar kazanlarının enerji denetimi için geliştirilen ASME PTC-4 standardıdır. Yöntemin temel noktalarından biri, bu yöntemin ölçülmesi kolay parametrelere dayalı olarak geliştirilmiş olmasıdır. Kazanların içindeki bazı parametreleri kullanan bir yöntem geliştirmek mümkündür ancak daha önce bu konuma bir sensör yerleştirilmemişse yöntem uygulanamaz. Yöntem, bileşenlerin farklı ısı kayıp koşullarını hesaplar ve verimliliği hesaplamak için tüm kayıp yüzdelerini 100'den çıkarır. Verimliliğin doğrudan hesaplandığı giriş ve çıkış yöntemine göre yöntemin temel avantajı, enerji kayıp kaynaklarının ayrı ayrı hesaplanmasının, sistemin verimliliğini artırmaya yönelik güçlü fikir vermesidir. Sonuç olarak; bu test kodu ile yapılan analiz değerlendirmeleri ile; gerçek performansın garanti edilen performansla karşılaştırılması, gerçek performans bir referansla karşılaştırmak, farklı koşulları veya çalışma yöntemlerini karşılaştırmak, ayrı ayrı parçaların veya bileşenlerin spesifik performansının belirlenmesi, alternatif bir yakıtı ateşlerken performansın karşılaştırılması ve ekipman değişikliklerinin etkilerinin belirlenmesi gibi başlıca önemli çıktılar elde edilebilmektedir.

KAYNAKÇA

- Arslan, O., Acikkalp, E., Genc, G. 2022. "A multi-generation system for hydrogen production through the high-temperature solid oxide electrolyzer integrated to 150 MW coal-fired steam boiler". *Fuel*, 315.
- Arslan, O., Erbas, O. 2021. "Investigation on the improvement of the combustion process through hybrid dewatering and air pre-heating process: A case study for a 150 MW coal-fired boiler". *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 121.
- ASME. 2013. "*Fired Steam Generators Performance Test Codes*". Tarihinde adresinden erişildi www.spic.ir
- Barma, M. C., Saidur, R., Rahman, S. M. A., Allouhi, A., Akash, B. A., Sait, S. M. 2017. "A review on boilers energy use, energy savings, and emissions reductions". *Renewable and Sustainable Energy Reviews*.
- Behbahaninia, A., Ramezani, S., Lotfi Hejrandoost, M. 2017. "A loss method for exergy auditing of steam boilers". *Energy*, 140.
- Erbaş, O. 2021. "Investigation of factors affecting thermal performance in a coal - Fired boiler and determination of thermal losses by energy balance method". *Case Studies in Thermal Engineering*, 26.
- IRENA. 2023. "Capacity building for energy planning and modelling". Tarihinde 12 Ekim 2023, adresinden erişildi <https://www.irena.org/Energy-Transition/Planning/Long-term-energy-planning-support/Capacity-building-for-energy-planning-and-modelling>
- Kwak, H. Y., Kim, D. J., Jeon, J. S. 2003. "Exergetic and thermoeconomic analyses of power plants". *Energy*, 28(4).
- Lu, H., Huang, S., Li, H., Cheng, Z., Chang, X., Dong, L., ... Jing, X. 2023. "Numerical simulation of combustion characteristics in a 660 MW tangentially fired pulverized coal boiler subjected to peak-load regulation". *Case Studies in Thermal Engineering*, 49.
- Regulagadda, P., Dincer, I., Naterer, G. F. 2010. "Exergy analysis of a thermal power plant with measured boiler and turbine losses". *Applied Thermal Engineering*, 30(8–9).
- Topal, H., Taner, T., Naqvi, S. A. H., Altınsoy, Y., Amirabedin, E.,

- Ozkaymak, M. 2017. "Exergy analysis of a circulating fluidized bed power plant co-firing with olive pits: A case study of power plant in Turkey". *Energy*, 140.
- Wu, M., Stratigaki, V., Fazeres-Ferradosa, T., Rosa-Santos, P., Taveira-Pinto, F., Troch, P. 2023. "Experimental uncertainty analysis of monopile scour protection stability tests". *Renewable Energy*, 210.
- Zhang, B., Wang, S., Wang, D., Wang, Q., Yang, X., Tong, R. 2022. "Air quality changes in China 2013–2020: Effectiveness of clean coal technology policies". *Journal of Cleaner Production*, 366.

BÖLÜM 4

HİBRİT FOTOVOLTAİK SİSTEMLERİN ENERJİ ÜRETİMİNE ETKİSİ

Öğr. Gör. Dr. Ramazan KAYABAŞI¹
Dr. Öğr. Üyesi Müjdat ÖZTÜRK²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384692>

¹ Kayseri Üniversitesi Tomarza Mustafa Akıncıoğlu MYO, Kayseri/Türkiye
rkayabasi@kayseri.edu.tr, ORCID ID: 0000-0001-6195-7445

² Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Kaman MYO, Kırşehir/Türkiye,
mujdat.ozturk@ahievran.edu.tr, ORCID ID: 0000-0003-1800-2234

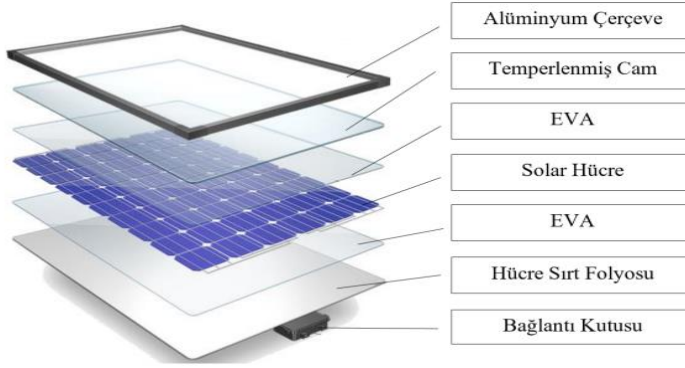
GİRİŞ

PV teknolojiler günümüz dünyasında enerji sektörünün ve çevresel sürdürülebilirliğin vazgeçilmez bir teknolojisi haline gelmiştir. Gelişen teknolojinin etkisi ile bu alanda yeni yatırımlar yapılmakta ve PV panellerin elektrik üretimindeki payı giderek artmaktadır. PV paneller farklı teknolojiler ile birlikte hibrit kullanılması hem PV panellerin verimini artırmakta hem de farklı enerji türlerinin üretilmesini sağlamaktadır. Bunlar; Termoelektrik Jeneratörler (TEG), rüzgar, jeotermal, biyogaz, hidrojen ve termal enerji sistemleridir.

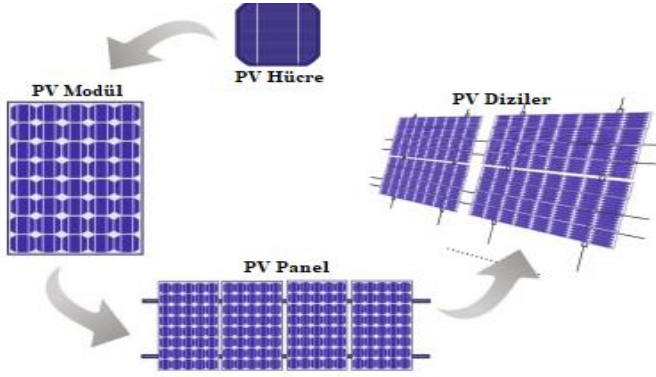
PV sistemler ile diğer yenilenebilir enerji kaynaklarını birlikte kullanan hibrit sistemler birçok akademik çalışmaya konu olmakta ve bu sistemlerde verim artışları görülmüştür. İklim, çevre ve hava koşullarının değişiminden dolayı bir yenilenebilir enerji türü ile sürekli ve kesintisiz enerji sağlamak zordur. Bu önemli sorun ile başa çıkmak için iki veya daha fazla yenilenebilir enerji sisteminin kullanılması hibrit sistemleri ortaya çıkarmıştır (Aydın vd. 2013). Güneş ve rüzgar enerjisi sistemlerinin hibrit kullanımı ile enerjinin ihtiyacının tamamını yenilenebilir enerji kaynaklarından sağlamak mümkündür. Ayrıca enerji üretiminin sürekliliğini sağlamak bu sistemlerin avantajlı yönüdür (Atik ve Sekin. 2022). PV-Hidrojen hibrit sistemi PEM tabanlı hidrojen teknolojilerinin gelişmesine bağlı olarak gelecekte daha avantajlı konuma gelecektir (Özden ve Tari. 2016). Hibrit PV-Biyogaz sistemi, kırsal alanlarda bağımsız enerji ihtiyacını karşılamak için önemli bir kaynaktır (Shahzad vd. 2017). PV-TEG sistemlerinin birlikte kullanımı ile hem PV panel verimi hem de sistemin genel verimi artmaktadır (Sark. 2011; Dallon vd. 2015).

1. FOTOVOLTAİK (PV) SİSTEM

PV hücreler güneş enerjisini kaynak olarak kullanarak güneşten gelen fotonları yarıiletken özelliği sayesinde elektrik enerjisine dönüştüren bir teknolojidir. Şekil 1'de bir PV panelin katmanları gösterilmektedir. PV hücreler birleştirilerek modülleri ve PV modüller birleştirilerek panelleri ve paneller birleştirilerek dizi sistemleri oluşturmaktadır (Şekil 2). Enerji ihtiyacına göre sistem ve bileşenleri eklenerek PV sistemler enerji taleplerinin karşılanmasında yaygın olarak kullanılmaktadır. Kurlumun yapılacağı bölgede yeterli ışınım şiddetinin olması ve enerji ihtiyacını karşılayacak yeterli alanın bulunması halinde PV sistemler ile enerji ihtiyacını karşılamak mümkündür.



Şekil 1: PV panelin katmanları (Selbaş ve Çetin. 2022)



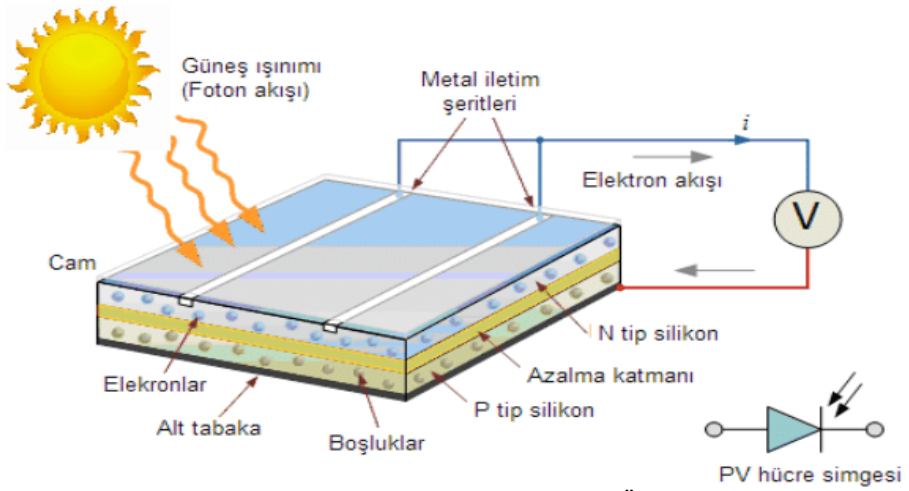
Şekil 2: PV hücre, PV modül, PV panel ve PV sistem (Yang vd. 2018)

1.1. PV Sistemin Çalışma Prensibi

Yarı iletken maddeler, N-tipi veya P-tipi yarıiletkenler olarak katlandırılarak güneş pilleri olarak kullanılabilir. Bu işlem, saf yarı iletken malzemeye kontrollü bir şekilde belirli katkı maddelerinin eklenmesi ile gerçekleştirilmektedir. Hangi tip yarı iletken elde edileceği, kullanılan katkı maddesine bağlıdır. Güneş panellerinde yaygın olarak çok kristalli silisyum kullanılır. İlk aşamada, P-tipi ve N-tipi yarı iletkenler elektriksel olarak nötrdür, yani elektrik akımı üretmezler. Ancak P-N birleşimi olduğunda, N-tipinde bulunan fazla elektronlar P-tipine doğru hareket eder ve yük dengesi oluşana kadar hareket devam eder ve bu şekilde elektrik akımı üretilmektedir (Kılıç. 2015).

Güneş panelleri içindeki PV hücreler, güneş ışığını absorbe edecek şekilde tasarlanmıştır. Fotonlar (ışık parçacıkları) bu hücrelere çarptığında, yarıiletken malzemedeki elektronları harekete geçirerek onların hareketli hale gelmesine neden olurlar. Elektronların bu hareketi hücreler içinde bir elektrik akımı oluşturarak DC elektrik üretir. Işınım şiddeti ve verime bağlı olarak

paneller yüzeyine düşen ışınımın bir kısmını elektrik enerjisine dönüştürmektedir. Şekil 3'te PV panelin elektrik üretim süreci verilmiştir. Panellerden gelen DC elektrik invertöre gönderilir. İnvörtör DC enerjiyi evlerde ve iş yerlerinde kullanılan standart şebeke elektriğine olan AC enerjiye dönüştürmektedir. İnvörtör tarafından üretilen AC elektriği, binadaki elektrikli cihazlara güç sağlamak için doğrudan kullanılabilir. Enerji fazlası şebekeye bağlı sistemler ile şebekeye verilebilmektedir. Bu durum yerel politika ve düzenlemelere bağlı olarak sistem sahibine potansiyel olarak kredi veya gelir kazandırılabilir. PV sistemler konut, ticari ve endüstriyel ortamlar dahil olmak üzere çeşitli uygulamalar için tasarlanabilir. Temiz ve yenilenebilir bir elektrik kaynağıdır ve sürdürülebilir enerji üretmek, elektrik faturalarını azaltmak ve sera gazı emisyonlarını azaltmak için giderek daha popüler hale gelmişlerdir.

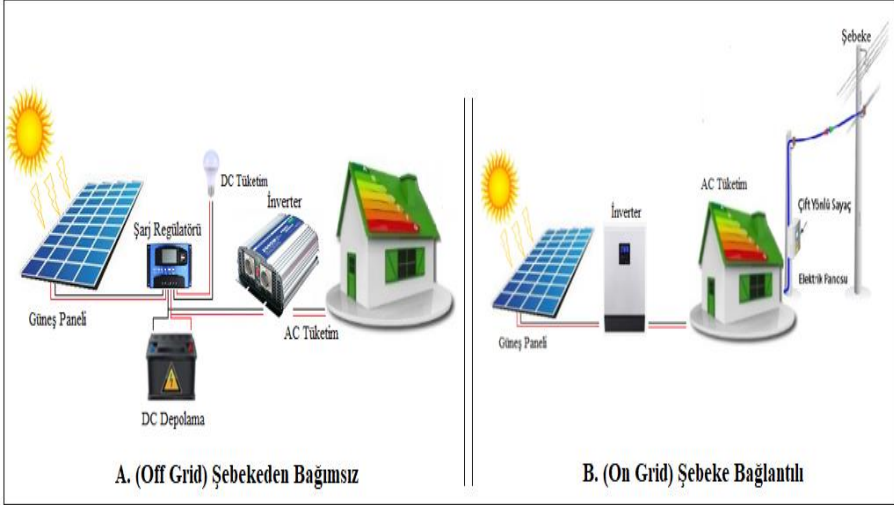


Şekil 3: PV hücrenin elektrik üretim ilkesi (Öztürk, 2019)

1.2. PV Sistemin Bileşenleri

PV modüller PV sisteminin sahada görünür kısmı ve enerji toplayıcıdır. Güneş panelleri silikon gibi yarı iletken malzemelerden yapılmış birçok PV hücresinden oluşur. Güneş ışığı bu hücelere çarptığında DC elektrik üretmektedir. Üretilen enerji sistem bileşeni olan çevresel şartlara dayanımı yüksek iletkenler aracılığıyla sistem içerisinde iletilmektedir. İnvörtörler ise PV tarafından üretilen elektriği şebekenin kullandığı AC elektriğe dönüştürmekte ve kullanıma hazırlamaktadır. Şebekeden bağımsız sistemlerde akü gurubu ile depolama ve şarj kontrol devresi ile şarj kontrolü ve DC kullanım için doğrudan kullanım yapılmaktadır (Şekil 4). Şebekeye bağlı sistemler için, genellikle ölçüm cihazları bulunmalıdır. Bu cihazlar, PV

sistemi tarafından üretilen elektriğin yanı sıra tüketilen elektrik enerjisini ölçmektedir.



Şekil 4: Şebeke bağlantılı (On grid) ve bağlantısız (Off grid) PV sistem bileşenleri (Kayabaşı. 2022)

2. PV SİSTEMİNİN HİBRİT KULLANIMI

Güneş panellerini diğer enerji kaynakları veya depolama çözümleri ile birleştiren hibrid PV sistemler, yenilenebilir enerji sistemlerinin genel verimliliği üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Verimlilik üzerindeki belirli etki hibrid sistemin tasarımına, bileşenlerine ve işleyişine bağlı olarak değişebilir. PV sistemlerin verimliliği etkileyecek çok sayıda hibrit sistem bulunmaktadır. Bu sistemlerin bir kısmı farklı bir kaynaktan enerji üretimi sağlayarak PV sistem ile hibrit çalışmaktadır. Bu sistemlerin diğer kısmı ise PV sistemin verimini artıracak hibrit PV sisteme ek olarak çalışan sistemlerdir. Her iki durumda kullanılan hibrit sistemler enerji arzının sürekliliğini sağlamak ve sistemleri verimli olarak kullanabilmek için çok sayıda yararı bulunmaktadır. Hibrit PV sistemlerin çok sayıda avantajı bulunmaktadır bunlardan bazıları;

- Güneş enerjisi sistemleri sürekli enerji üretimi sağlayamaması nedeniyle enerji üretiminin sürekliliğini sağlar.
- Hibrit sistemler yerel koşullardaki enerji kaynaklarının daha ekonomik kullanımına izin vermektedir.
- Hibrit sistemler iklim koşullarında ve çevre şartlarından daha az etkilenmektedir.
- Atık enerjinin elektrik enerjisine dönüşmesine fırsat vermektedir.

- Hibrit sistemler yenilenebilir enerji kaynaklarının birlikte kullanımı ile çevre dostu enerji üretimini sağlamaktadır.
- Artan enerji ihtiyacına yönelik çözümler sunmaktadır.
- Enerji kaynağından enerji hasadını artırmaktadır.
- Hibrit sistemlerin kullanımı toplam verimin artışına neden olmaktadır.
- Kaynak potansiyelinin düşük olduğu yerlerde hibrit sistemler ile enerji üretimi ekonomik hale gelebilmektedir.

2.1. PV-TEG (Termoelektrik Jeneratörler) Hibrit Sistem

PV panellerde güneş ışığı PV hücrelerine çarptığında DC üretilirken TEG'lerde ise iki yüzey arasındaki sıcaklık farkından yararlanarak benzer olarak DC çıkışı sağlanmaktadır. Sıcaklık gradyanının bir elektrik voltajı ürettiği Seebeck etkisine dayanmaktadır. TEG'ler çeşitli kaynaklardan gelen atık ısıyı elektrik enerjisine dönüştürmek için kullanmak enerji verimliliği açısından önemlidir. TEG'ler endüstriyel proseslerde ve sıcaklık farklılıklarının olduğu durumlarda; enerji geri kazanımı için araç egzozları, baca çıkışları ve motor blokları gibi yerlerde kullanılabilir. TEG'ler PV ile birleştirildiğinde fazla ısıyı elektrik enerjisine dönüştüren, iki yönde çalışabilmektedir. TEG'ler güneş hücrelerinin ürettiği fazla ısıyı elektrik enerjisine dönüştürerek cihazın verimliliğini artırırken, aynı zamanda güneş hücrelerinin atık ısı salınımını azaltmaktadır (Saleh. 2021). PV-TEG hibrit sisteminin özel tasarımı ve uygulaması, güneş ışığının mevcudiyeti, sıcaklık değişimleri ve kullanım amacı gibi faktörlere bağlıdır. Bu tür sistemler, enerji üretimini optimize edebildikleri ve atık ısıyı azaltabildikleri için, şebekeden bağımsız veya uzak konumlarda, endüstriyel ortamlarda veya enerji verimli bina tasarımlarının bir parçası olarak özellikle faydalıdır. Ancak hem PV hem de TEG bileşenlerinin birlikte uyumlu bir şekilde çalışmasını sağlamak için sistemi doğru şekilde tasarlamak ve yapılandırmak önemlidir. Şekil 5'te PV-TEG hibrit sisteminin katmanları verilmiştir.

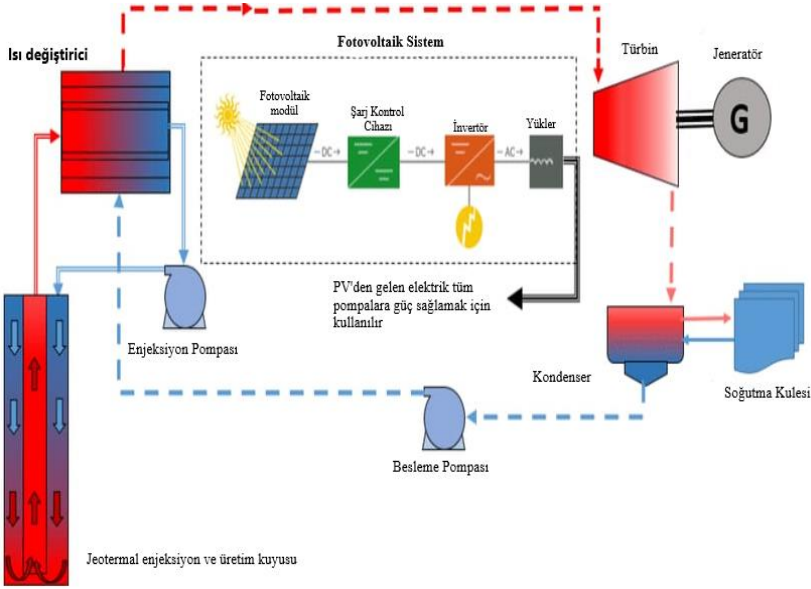


Şekil 6: PV-Rüzgar hibrit sisteminin diyagramı (Mahesh ve Sandhu.2015)

2.3. PV ve Jeotermal Hibrit Kullanımı

PV sistemler, gündüz saatlerinde ve yüksek ışınımın olduğu günlerde yüksek enerji üretimi sağlamaktadırlar. Ancak kış aylarında ve bulutlu günlerde enerji üretimi yetersiz kalabilmektedir. Bu nedenle PV veya PV/T sistemleri hava, toprak veya su kaynaklı ısı pompalarıyla veya jeotermal enerji ile entegre edilerek hibrit uygulamalarla enerji ihtiyacının karşılanması için kullanılabilirler. Jeotermal enerji üretimi hava koşullarına veya günün saatine bağlı olmadığı için tutarlıdır. Her iki sistemin birleştirilmesi, daha istikrarlı ve sürekli bir elektrik arzı sağlayabilmektedir. Güneş enerjisinin sürekliliğinin olmaması nedeniyle süreklilik sağlayan jeotermal enerji desteğiyle enerji ihtiyacı karşılanabilmektedir.

Bir PV-Jeotermal hibrit sistem tasarlarken, jeotermal kaynakların mevcudiyeti ve güneşe maruz kalma gibi sahaya özgü faktörlerin dikkate alınması gerekir. Optimum performans ve enerji verimliliğini sağlamak için uygun sistem boyutlandırması, entegrasyonu ve kontrol mekanizmaları çok önemlidir. Bu hibrit sistemler genellikle enerji güvenilirliğinin, sürdürülebilirliğinin ve maliyet etkinliğinin büyük önem taşıdığı konutlar, ticari binalar, endüstriyel tesisler ve şebeke dışı alanlar gibi çeşitli ortamlarda kullanılırlar. Şekil 7'de PV sistemin entegre edildiği jeotermal sistemin şeması görülmektedir. Bu hibrit sistemde PV panellerden elde edilen elektrik enerjisi pompalara güç sağlamak için kullanılmaktadır. Bu şekilde jeotermal sistemlerde yüksek enerji tüketen ekipmanların enerjisi yenilenebilir sistem olan PV panellerden karşılanmaktadır.



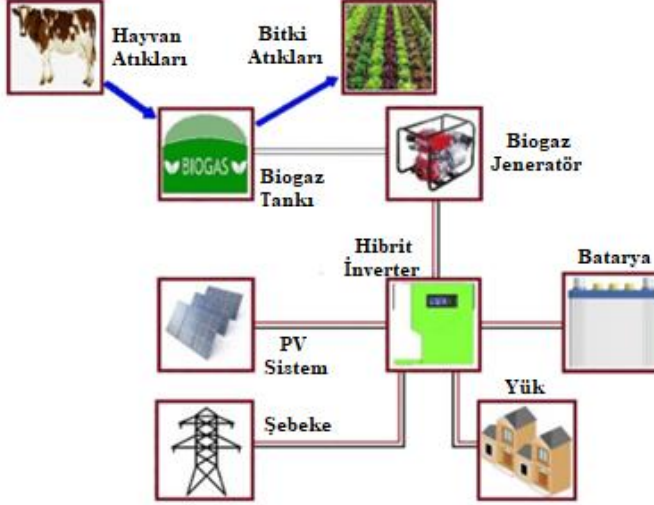
Şekil 7: PV-jeotermal hibrit sistemin şematik görünümü (Noorollahi vd. 2017)

2.4. PV ve Biyogaz Hibrit Kullanımı

Biyogaz, hayvan gübrelere ve bitki artıkları gibi organik maddelerin havasız fermantasyonu sonucu elde edilen bir gaz karışımıdır. İçeriğinde metan ve karbondioksit bulunur. Bu yüksek ısıl değere sahip enerji kaynağı, organik atıkların hem enerji üretimine hem de toprağa geri dönüştürülmesine imkan tanımaktadır. Aynı zamanda çevre dostu, ekonomik bir enerji ve gübre kaynağıdır. Biyogaz üretimi sırasında hayvan gübrelere içinde bulunan yabancı ot tohumlarının çimlenme yeteneği kaybolur. Biyogaz üretiminin ardından atıklar yok olmaz, aksine daha değerli bir organik gübreye dönüşmektedir (Gülen ve Çeşmeli. 2012).

PV güneş panellerini bir biyogaz jeneratörüyle birleştiren hibrit bir sistem, enerji üretimine sürdürülebilir ve çok yönlü bir yaklaşımdır. Bu kombinasyon, enerji üretimini en üst düzeye çıkarmak, sistem güvenilirliğini artırmak ve çevresel etkiyi azaltmak için her iki teknolojinin avantajlarından yararlanır. Bir PV-Biyogaz hibrit sistemi tasarlanırken, biyogaz üretimi için organik hammaddenin mevcudiyeti, güneş ışığına maruz kalma ve yerel enerji talebi gibi sahaya özgü faktörlerin dikkate alınması önemlidir. Optimum performansı ve enerji verimliliğini sağlamak için uygun sistem boyutlandırması, entegrasyonu ve kontrol mekanizmaları çok önemlidir. Bu hibrit sistemler genellikle atık malzemelerin biyogaz üretimi için kullanılabilmesi ve güneş enerjisinin elektrik ihtiyaçlarını karşılayabilmesi çiftlikler, kırsal topluluklar, endüstriyel tesisler ve atık su arıtma tesisleri gibi

ortamlarda kullanılır. Şekil 8’de PV-biogaz sisteminin birlikte kullanımının ilk üretiminden nihai kullanımına kadar olan süreç verilmiştir.



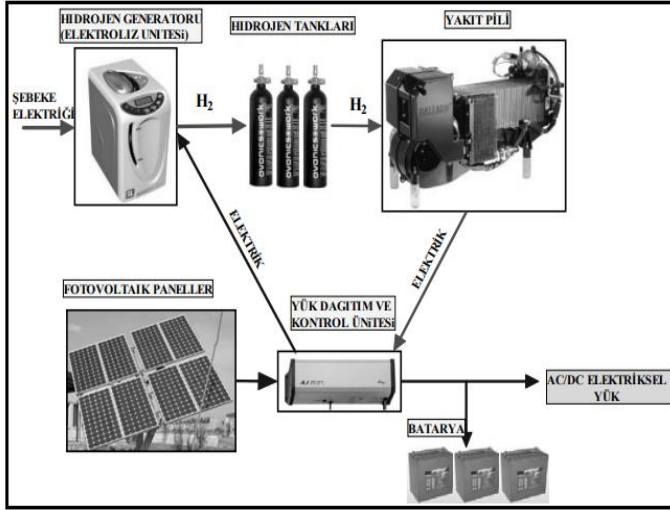
Şekil 8: PV-biyogaz sistemin diyagramı (Habib vd. 2023)

2.5. PV ve Hidrojen Hibrit Sistem

Güneş enerjisi PV paneller tarafından doğrudan elektrik enerjisine dönüştürülerek suyun elektroliz sürecinde hidrojen üretimi için kullanılabilir. Bu yöntem, PV panellerin ürettiği elektriğin su elektrolizi işleminde kullanılmasına olanak sağlamaktadır (Yılancı, 2008). PV ve hidrojen teknolojilerinin hibrit bir sistemde birleşimi, elektrik üretmek ve enerjiyi hidrojen formunda depolamak için sürdürülebilir bir yaklaşım sunmaktadır. Bir PV-Hidrojen hibrit sisteminde, PV paneller tarafından üretilen enerji, bir elektrolizöre güç sağlamak için kullanılmaktadır. PV sistem ile üretilen hidrojen gazı, tanklarda veya sıkıştırılmış gaz veya sıvı hidrojen gibi diğer depolama sistemlerinde depolanabilir. Elektriğe ihtiyaç duyulduğunda fakat güneş enerjisinden enerji ihtiyacı karşılanamadığında (gece ve kapalı günlerde) devreye girer. PV sistemi yeterli güç üretmediğinde, yakıt hücresi depolanan hidrojeni tekrar elektrik enerjisine dönüştürülebilmektedir. Bu süreç son derece verimlidir ve sıfır emisyon seviyesinde olması nedeniyle çevre dostudur.

Belirli enerji ihtiyaçlarını, depolama kapasitesini ve operasyonel gereksinimleri karşılayacak şekilde bir PV-hidrojen hibrit sisteminin tasarlanması ve boyutlandırılması çok önemlidir. Bu sistemler, uzak konumlar, yedek güç sistemleri veya şebeke elektriğinin bulunmadığı veya güvenilir olmadığı uygulamalar gibi sürekli ve güvenilir enerji tedarikinin

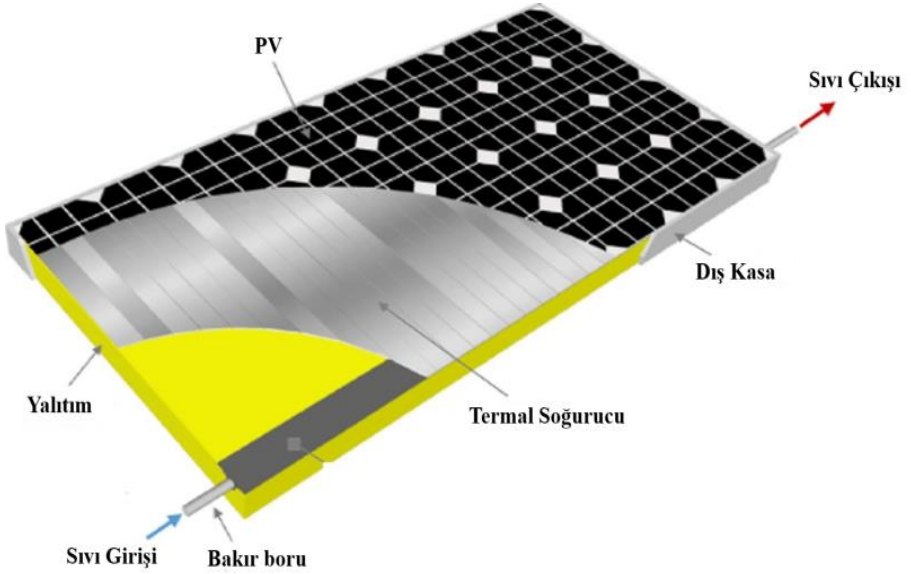
kritik olduğu ortamlarda özellikle değerlidir. Şekil 9’da PV panellerden elde edilen elektrik ile hidrojen üretimi ve elektrik ihtiyacının olduğu akşam ve kapalı havalarda enerjinin daha sonra elektriğe dönüştürmek için hidrojen olarak depolanması süreci gösterilmiştir.



Şekil 9: PV-hidrojen üretim sistemi (Hilali vd. 2009)

2.6. PV ve Termal Panellerin Hibrit Kullanımı

Farklı tasarım ve yapılarıyla PV/T hibrit sistemleri, güneş panellerindeki sıcaklık artışını kontrol etmek için kullanılır. Güneş enerjisi kullanılarak PV panellerden elektrik üretimi sırasında panel sıcaklığının artması verim kaybına neden olmaktadır. Verim kaybı panelin su veya hava ile soğutulması yoluyla giderilmektedir (Kabul ve Yaşar, 2017). PV ve termal panellerin hibrit kullanımı hem elektrik üretimi hem de ısı üretimi için güneş enerjisinin kullanımını en üst düzeye çıkarmak için iki farklı teknolojiyi birleştirir. PV/T sistemleri çok yönlüdür ve kombine elektrik ve sıcak su üretimi için konut ve ticari binalar hem elektrik hem de ısı gerektiren endüstriyel işlemler ve mahsul kurutma ve ısıtmaya yönelik tarımsal uygulamalar dahil olmak üzere çeşitli uygulamalara uyarlanabilir. Bir PV/T sisteminin tasarımı ve boyutlandırılması yerel güneş enerjisi koşullarına, enerji ihtiyaçlarına ve alan kullanılabilirliğine bağlıdır ve optimum performansı ve enerji verimliliğini sağlamak için uygun sistem entegrasyonu esastır. Şekil 10’da PV panelin arka kısmına eklenen bakır borular vasıtası ile ısınin emilip hem paneli soğutması hem de sıcak su üretmesini gösteren PV/T panelin katmanları verilmiştir.



Şekil 10: PV/T panelin şematik görünümü (Deng vd. 2015)

PV hibrit sistemlerde ısınmaya karşı çözüm aramak için çok sayıda çalışma yapılmıştır. Bu çalışmaların ortak özelliği PV modüllerin verimlerini artırmak ve verim azalmasına neden olan etkilerin bertaraf edilmesini sağlamaktır. PV modüllerin elektrik üretimi esnasında sıcaklığının artması kaynaklı verim düşüşünü engellemek için Faz değıştiren Madde (FDM) kullanımı (Yang vd. 2019) nanoakışkan kullanımı (Jasim vd. 2023; Babavali vd. 2023), pasif soğutma (Gao vd. 2023), kanatçık ve akışkan kullanımı (Khelifa vd. 2023) yöntemleri kullanılmaktadır.

2.7.Hibrit PV Sistemlerin Verimliliğe Etkisi

Hibrit sistemler genellikle düşük güneş ışığı dönemlerinde güneş enerjisini tamamlamak için rüzgâr türbinleri veya dizel jeneratörler gibi ek enerji kaynakları ile enerji sürekliliğini sağlamaktadır. Bu artan enerji ihtiyacını yakalama, sürekli bir enerji kaynağı sağlayarak genel sistem verimliliğini artırabilmektedir. Ayrıca PV sisteme bataryalar gibi enerji depolama eklemek, güneş ışığı olmadığında fazla enerjinin depolanmasına ve kullanılmasına olanak tanımaktadır. Bu, enerji israfını azaltmaya ve daha istikrarlı bir enerji kaynağı sağlamaktadır. Bazı hibrit sistemler elektrik şebekesi ile etkileşimde bulunmak üzere tasarlanmıştır. Üretim talebi aştığında fazla enerjiyi şebekeye satabilir ve güneş enerjisi yetersiz olduğunda şebekeden enerji alabilirler. Bu şebeke etkileşimi, kullanıcıların net ölçümleme veya diğer şebeke ile ilgili teşviklerden faydalanmasını sağlayarak

sistemin ekonomik verimliliğini artırabilmektedir. Hibrit bir sistemde birden fazla enerji kaynağını birleştirerek güvenilirliği artırmaktadır.

Hibrit sistemler, enerji üretiminin çevresel etkisini azaltmaktadır. Güneş panellerinin yanı sıra temiz enerji kaynaklarını entegre ederek sera gazı emisyonlarını ve çevresel ayak izi düşmektedir. Ayrıca hibrit sistemler, yenilenebilir enerji projelerinin ekonomik verimliliğini artırmaktadır. Birden çok enerji kaynağını birleştirerek ve kullanımlarını optimize ederek, bu sistemler enerji üretiminin genel maliyetini azaltmaya ve yatırım getirisini yükseltmektedir. Hibrit PV sistemin verimliliği üzerindeki etkinin, belirli tasarım ve uygulamaya bağlı olduğunu unutmamak önemlidir. Enerji kaynakları, enerji depolama kapasitesi, kontrol sistemleri ve kullanıcının enerji ihtiyaçları gibi faktörler, sistemin genel verimliliğini belirlemede rol oynar. Ayrıca, teknoloji ve sistem tasarımındaki ilerlemeler, hibrit PV sistemlerin verimliliğini ve geçerliliğini sürekli olarak artırmaktadır. Hibrit sistemler aşağıdaki uygulamalarda sıklıkla kullanılmaktadır;

- Tarımsal sulama tesisleri
- İçme suyu temini tesisleri
- Askeri tesisler
- Arıtma tesisleri
- Baz istasyonları
- Sahra hastaneleri
- Sondaj tesisleri
- Konut ve işyeri hibrit

3. SONUÇLAR

Hibrit PV sistemler, enerji sektörünün ve çevresel sürdürülebilirliğin geliştirilmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Bu sistemler, enerji üretiminin sürekliliği, enerji depolama, şebeke etkileşimi, talep yönetimi ve daha fazlası gibi bir dizi avantaj sunar. Ancak, bu hibrit sistemlerin tasarımı ve uygulanması, yerel koşullar, enerji gereksinimleri ve kaynakların mevcudiyeti gibi faktörlere bağlıdır.

Hibrit PV sistemlerin yaygınlaşması, temiz ve sürdürülebilir enerji üretiminin artırılmasına katkıda bulunmaktadır. Binalarda uygulanan hibrit sistemler elektrik faturalarının azaltılmasına, sera gazı emisyonlarının azaltılmasına, enerji iletim ve dağıtım yükünün azalmasına neden olmaktadır. Hibrit sistemlerin daha fazla keşfedilmesi ve uygulanması, gelecekte enerji sektöründe daha büyük bir rol oynayacaktır. Bu çalışmada PV-Hibrit sistemlerin kullanımı ile ilgili aşağıdaki sonuçlar çıkarılmıştır;

- PV-rüzgar hibrit kullanımı ile rüzgar enerjisinin istikrarsızlığı ve güneş enerjisinin gece kullanılamaması sorununa bir çözüm olarak düşünülmektedir.

- PV-TEG hibrit kullanımı, güneş hücrelerinin ürettiği fazla ısıyı elektrik enerjisine dönüştüren TEG, PV panelin verimliliğini artırırken, aynı zamanda güneş hücrelerinin çevreye atık ısı salınımını azaltmaktadır.
- PV-Jeotermal enerji hibrit kullanımı sürekli ve kararlı enerji üretimi sağlamaktadır.
- PV-Biyogaz hibrit sistemleri, özellikle şebeke olmayan kırsal bölgelerde kullanılmakta ve biyogaz kaynaklarının enerji üretiminde kullanılmasını sağlayarak yerel olarak ekonomik kazanım sağlamaktadır. Biyogaz sisteminin atık ürünlerini tarımsal faaliyetlerde kullanılması ile yerel hayvancılık ve tarım uygulamalarını desteklemektedir.
- PV-hidrojen hibrit sistemi, üretilen elektrik enerjisinin elektroliz ile hidrojen üretiminde kullanılmasını ve hidrojenin depolanmasını sağlayarak, elektrik ihtiyacı olduğu zamanlarda tekrar elektriğe dönüştürülmesini mümkün kılmaktadır. Bu sayede enerjinin uzun vadeli depolanması ve sürekli arzı sağlanmaktadır.
- PV-Termal paneller, PV panelde oluşan yüksek sıcaklığı arka tarafa entegre edilen termal kolektör vasıtası ile soğutulmakta ve elektrik üretimi artmaktadır. Bu şekilde PV panelin verimi artarak aynı zamanda sıcak akışkan (hava, su) üretimi ile atık kaynağın kullanımına olanak sunmaktadır

PV-Hibrit sistemlerin sahip olduğu avantajlar değerlendirildiğinde yerel olarak var olan kaynakların potansiyeline göre küçük çaplı uygulamalardan yüksek güç üreten hibrit santrallere kadar çeşitli büyüklükte enerji üretim uygulamaları yapmak mümkündür. Hibrit sistemlerin geliştirilmesi ve yaygınlaştırılması ile enerji talepleri fosil kaynakların değil yenilenebilir enerji kaynaklarından üretilerek CO₂ salınımı azalacak ve çevre kirliliği nedeniyle oluşan küresel ısınmaya karşı önemli bir adım atılmış olacaktır.

KAYNAKÇA

- 1- Atik, İ., & Sekin, A. (2022). Hibrit yenilenebilir enerji sistem tasarımı: Balıkesir örneği. *Dicle Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Mühendislik Dergisi*, 13(3), 517-529.
- 2- Aydın, N. Y., Kentel, E., & Duzgun, H. S. (2013). GIS-based site selection methodology for hybrid renewable energy systems: A case study from western Turkey. *Energy conversion and management*, 70, 90-106.
- 3- Babavali, S. F., Devi, N. L., Kaliappan, S., Garg, N., Nagalakshmi, V., & Rajagopalan, N. R. (2023). Thermal management of PV panel through the circulation of a nano-MgO/water-based nanofluid. *Materials Today: Proceedings*.
- 4- Dallan, B. S., Schumann, J., & Lesage, F. J. (2015). Performance evaluation of a photoelectric–thermoelectric cogeneration hybrid system. *Solar Energy*, 118, 276-285.
- 5- Deng, Y., Quan, Z., Zhao, Y., Wang, L., & Liu, Z. (2015). Experimental research on the performance of household-type photovoltaic–thermal system based on micro-heat-pipe array in Beijing. *Energy Conversion and Management*, 106, 1039-1047.
- 6- Engin, M., Özdamar, A., & Çolak, M. (2003). Güneş-rüzgar hibrit enerji sistemi: izmir örneği, II. *Yenilenebilir Enerji Kaynakları Sempozyumu Bildiriler Kitabı*, s.257-263, İzmir.
- 7- Gao, Y., Wu, D., Dai, Z., Wang, C., Zhu, L., Zhang, J., & Zhang, X. (2023). A passive evaporative cooling strategy to enhance the electricity production of hybrid PV-STEG system. *Applied Energy*, 349, 121689.
- 8- Gülen, J., & Çeşmeli, Ç. (2012). Biyogaz hakkında genel bilgi ve yan ürünlerinin kullanım alanları. *Erzincan University Journal of Science and Technology*, 5(1), 65-84.
- 9- Habib, S., Jia, Y., Tamoor, M., Zaka, M. A., Shi, M., & Dong, Q. (2023). Modeling, simulation, and experimental analysis of a photovoltaic and biogas hybrid renewable energy system for electrification of rural community. *Energy Technology*, 2300474.
- 10- Hilali, İ., Aktacir, M. A., Yeşilata, B. (2009). Fotovoltaik-yakıt pili bileşik sisteminin deneysel incelenmesi, V. *Yenilenebilir Enerji Kaynakları Sempozyumu*, 142-148.
- 11- Jasim, D. J., Al-Asadi, H. A., Alizadeh, A. A., Nabi, H., Albayati, T. M., Salih, I. K., & Ganji, D. D. (2023). Evaluation of different methods to ameliorate the performance of PV/T systems using hybrid nanofluids and PCM in a spiral tube with different cross sections. *Results in Engineering*, 20, 101514.

- 12- Kabul, A., & Yaşar, E. (2017). Fotovoltaik/termal (PV/T) hibrit sistemlerin soğutma tekniklerinin deneysel olarak incelenmesi. *Uluslararası Teknolojik Bilimler Dergisi*, 9(1), 17-32.
- 13- Kanagaraj, N., & Rezk, H. (2021). Dynamic voltage restorer integrated with photovoltaic-thermoelectric generator for voltage disturbances compensation and energy saving in three-phase system. *Sustainability*, 13(6), 3511.
- 14- Kayabaşı, R. (2022). PV modüllerde sıcaklık değişiminin performansları üzerine etkisinin deneysel incelenmesi, *Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Karabük Üniversitesi*.
- 15- Khelifa, A., Attia, M. E. H., Driss, Z., & Manokar, A. M. (2023). Performance enhancement of photovoltaic solar collector using fins and bi-fluid: Thermal efficiency study. *Solar Energy*, 263, 111987.
- 16- Kılıç, F. Ç. (2015). Güneş enerjisi, Türkiye'deki son durumu ve üretim teknolojileri. *Mühendis ve Makina*, 56(671), 28-40.
- 17- Mahesh, A., & Sandhu, K. S. (2015). Hybrid wind/photovoltaic energy system developments: Critical review and findings. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 52, 1135-1147.
- 18- Noorollahi, Y., Pourarshad, M., & Veisi, A. (2017). Solar-assisted geothermal power generation hybrid system from abandoned oil/gas wells. *IET Renewable Power Generation*, 11(6), 771-777.
- 19- Ozden, E., & Tari, I. (2016). Energy–exergy and economic analyses of a hybrid solar–hydrogen renewable energy system in Ankara, Turkey. *Applied Thermal Engineering*, 99, 169-178.
- 20- Öztürk, H. H. (2019). Güneş enerjisinden fotovoltaik yöntemle elektrik üretiminde güç dönüşüm verimi ve etkili etmenler [online]. www.emo.org.tr.
- 21- Saleh, U. A., Johar, M. A., Jumaat, S. A. B., Rejab, M. N., & Jamaludin, W. A. W. (2021). Evaluation of a PV-TEG hybrid system configuration for an improved energy output: a review. *International Journal of Renewable Energy Development*, 10(2), 385.
- 22- Selbaş, R., & Çetin, H. (2022). Fotovoltaik güneş sanrallerinin verimlerinin değişiminin incelenmesi. *Uluslararası Sürdürülebilir Mühendislik ve Teknoloji Dergisi*, 6(1), 10-17.
- 23- Shahzad, M. K., Zahid, A., ur Rashid, T., Rehan, M. A., Ali, M., & Ahmad, M. (2017). Techno-economic feasibility analysis of a solar-biomass off grid system for the electrification of remote rural areas in Pakistan using HOMER software. *Renewable energy*, 106, 264-273.
- 24- Van Sark, W. G. J. H. M. (2011). Feasibility of photovoltaic–thermoelectric hybrid modules. *Applied Energy*, 88(8), 2785-2790.

- 25- Yang, X., Guo, Z., Liu, Y., Jin, L., & He, Y. L. (2019). Effect of inclination on the thermal response of composite phase change materials for thermal energy storage. *Applied energy*, 238, 22-33.
- 26- Yang, Y., Kim, K. A., & Ding, T. (2018). Modeling and control of PV systems. In *Control of power electronic converters and systems* (pp. 243-268). Academic Press.
- 27- Yılcı, A. (2008). Güneş-hidrojenli bir sisteminin kurulması ve performansının analizi. *Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Pamukkale Üniversitesi.*

BÖLÜM 5

NÜKLEER REAKTÖRLERDE ENERJİ ÜRETİMİ VE TÜRKİYEDE'Kİ NÜKLEER GELİŞİM

Dr. Büşra DURMAZ¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384748>

¹ Erciyes Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Enerji Sistemleri Mühendisliği Bölümü, Kayseri, Türkiye, ORCID ID: 0000-0001-6659-1067, busradurmaz65@gmail.com

GİRİŞ

Günümüzde, sanayi ve teknoloji alanında meydana gelen gelişmeler dünya nüfusunun hızla artış göstermesi enerji kullanımının artmasına sebep olmuştur. Bu durum yenilenebilir enerji kaynaklarının kullanımını ön plana çıkarmıştır. Ancak yenilenebilir enerji kaynaklarının da bazı dezavantajları vardır. Örneğin, güneş enerjisi hava koşullarına bağlı olarak değişkenlik göstermektedir. Bu da sürekli olarak enerji üretimini zorlaştırmaktadır. Fosil yakıtlara bakıldığı zaman ise enerji üretiminde çok yaygın kullanıldığını görmek mümkündür. Ancak fosil yakıtlarında yakılması sera gazı emisyonuna ve bununla birlikte hava kirliliğine sebep olmaktadır. Bu durumda çevresel sorunları ön plana çıkarmıştır. Bu doğrultuda, nükleer enerji sürekli artış gösteren enerji talebini karşılamada önemli bir alternatif enerji olarak ön plana çıkmıştır (Durmaz, 2019).

NÜKLEER ENERJİ NEDİR?

Nükleer enerji, 1789 yılında Alman kimyager Martin Klaproth tarafından Uranyum yakıtının keşfi ile başlamıştır. 1932’de Chadwick nötronu keşfetmiş ve aynı yıl Cockroft ve Walton, hızlandırılmış protonlarla nötronları bombalayarak nükleer dönüşümleri üretmişlerdir. 1950-1960 yıllarına bakıldığı zaman ise ilk reaktör tasarımı yani 1.nesil reaktörleri görmek mümkündür. 1970 yılına geldiğimiz zaman ise mevcut kullanımda olan ticari reaktörleri yani 2.nesil reaktörler kullanılmaya başlamıştır (TAEK, 2011)

1970 yıllarında yaşanan petrol krizi, nükleer reaktörlerin tam anlamıyla gelişim göstermesine neden olmuştur. Çünkü petrol krizi, dünya çapında petrol fiyatlarının artmasına sebep olmuş ve petrol kaynaklarına sahip olmayan ülkeler bu krizden olumsuz etkilenmişlerdir. Bu ülkeler petrole bağımlılıklarını enaza indirmek, dışa bağımlılığı azaltmak ve kaynak çeşitliliğini artırmak için nükleer enerjiye yönelmişlerdir.

Nükleer reaktörlerin gelişmesinde petrol krizinin yanında birçok faktörde etkili olmuştur.

- Nükleer enerjide ki teknolojik gelişmeler
- Nükleer enerjinin çevresel etkilerinin azalması

gibi faktörler nükleer enerjiyi diğer enerji kaynakları arasında rekabetçi hale gelmesine sebep olmuş ve aslında çok daha fazla ülkenin dikkatini çekmiştir.

Günümüzde nükleer enerjinin en çok kullanım alanı ise elektrik üretimidir. Birçok ülke elektrik potansiyelinin büyük bir kısmını nükleer enerjiden karşılamaktadır. Nükleer enerjinin elektrik üretimi dışında birçok kullanım alanını görmek mümkündür.

Nükleer enerjinin kullanım alanları şu şekildedir:

- Sanayi alanında aktif olarak kullanımını görmek mümkündür. Genellikle nükleer enerji tarafından elde edilen ısı fırınları çalıştırmak için kullanılmaktadır. Ayrıca kimyasal ürünlerin üretiminde ve tedariginde nükleer enerjiden faydalandığını görmek mümkündür.
- Sağlık alanında tanı, tedavi ve tıbbi görüntüleme alanında kullanılmaktadır. MR görüntülerinde nükleer enerji tarafından elde edilen radyasyon kullanılmaktadır. Ayrıca kanser hastalarında radyoterapi olarak da görmek mümkündür. Sağlık alanında ise ilk kez 1951 yılında kanser tedavisinde kullanılan ilk cihazlar Kanada'da inşa edildi.
- Nükleer enerjinin bir diğer kullanım alanı ise hidrojen üretimidir. Örneğin nükleer ısı kullanılarak yüksek sıcaklıkta termokimyasal üretim elde etmek mümkündür.
- Nükleer enerjiyi kullanarak sebze, et ve baharat gibi gıda ürünlerinin raf ömrü uzatılabilmektedir. Bunun en aktif kullanımını Kanada'da kullanılan ışınlama teknolojisidir.
- Tarım da nükleer enerjiyi zararlı böceklerin ortadan kaldırılması ve tarımsal üretimi iyileştirmek için kullanılmaktadır.
- Nükleer enerji son olarak ise askeri, bilimsel araştırmalar dahi birçok alanda da aktif olarak kullanılmaktadır.

Nükleer enerjiye baktığımız zaman kendi ülkemiz daahil birçok ülkede yaygın şekilde kullanımını görmekteyiz. Aslında bu kadar aktif olarak kullanılmasının başlıca nedenleri ise:

- Çok yüksek miktarlar da elektrik üretmek mümkündür.
- Bir nükleer reaktör doğru yöneltildiği takdirde çevresinde en ufak bir kirliliğe neden olmamaktadır. Kısacası nükleer enerji kesintisiz, güvenilir bir enerji kaynağıdır.

- Yeni nesil nükleer reaktörler nükleer atıklar konusunda çok cimridir. Kullanılmış yakıtların tekrardan kullanılabilmesi açısından bu açıdan atık sorununa büyük bir çözüm kaynağıdır.
- Nükleer enerji temiz bir enerji kaynağıdır. İnsan ve çevreye zararı yok denecek kadar azdır. Tabiki gerekli güvenlik koşulları sağlandığı sürece.

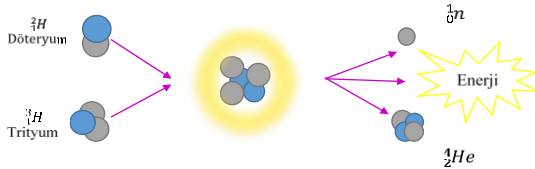
Son olarak ise nükleer enerjinin kullanımının bu kadar artmasının başlıca sebepleri ise:

- Gelişmekte olan ülkelerde sürekli olarak artan nüfus
- Ekonomik büyüme
- Teknolojide meydana gelen gelişmeler
- İklim değişikliği
- Enerji açığı
- Enerji güvenliği
- Temiz hava ve son olarak ise karbon sorunlarıdır.

NÜKLEER REAKSİYONLAR

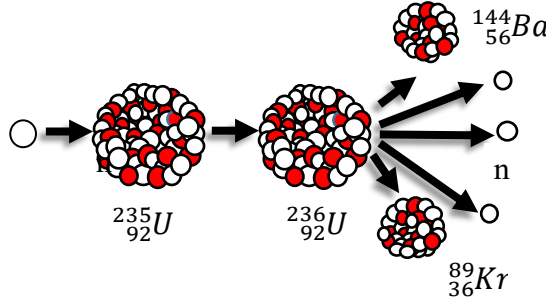
Nükleer enerji temel de üç ana reaksiyon sonucunda oluşmaktadır. Bu reaksiyonlara bakacak olursak;

Füzyon reaksiyonu: daha hafif iki atom çekirdeğinin birleşerek ağır bir atom oluşturduğu reaksiyon çeşididir. Füzyon tepkimesi sırasında ortama çok yüksek miktarda enerji salınımı oluşmaktadır (Muray vd., 2015). Bu oluşan yüksek enerji bilim insanlarının dikkatini çekmiş ve bu enerjiyi kullanmak istemişlerdir ancak bu enerjiyi birarada tutmak mümkündür değildir. Ancak füzyon enerjisi birçok avantajı beraberinde getirmektedir. Şöyle ki, füzyon reaksiyonu sonucunda rayoaktif atık üretimi gerçekleşmez ve çevre dostudur. Füzyon tepkimesine örnek vericek olursak:



Şekil 1. Füzyon Tepkimesi

Fisyon reaksiyonu: ağır atom çekirdeğinin fisyon ürünleri olarak ifade edilen iki veya daha fazla çekirdeğe bölünme reaksiyonu olarak tanımlanmaktadır. Fisyon reaksiyonu sonucunda iki hafif çekirdek, nötron ve 200 MeV gibi yüksek miktarda enerji açığa çıkmaktadır (Durmaz vd., 2021). Fisyon reaksiyonuna örnek verecek olursak;



Şekil 2. Fisyon Tepkimesi

Fisyon reaksiyonu sırasında ortaya çıkan hafif çekirdekler nükleer atıklar olarak adlandırılmaktadır ve bu nükleer atıklar radyoaktiftir. Fisyon reaksiyonu neticesinde ortama hafif çekirdekler salındığı gibi aynı zamanda da nötronlar da açığa çıkmaktadır ve bu oluşan nötronlar diğer çekirdekte ek bir fisyonu sebep olmakta ve bu sürekli olarak devam etmektedir. Bu olay zincirleme fisyon reaksiyonunu beraberinde getirmektedir. Zincirleme fisyon reaksiyonu kontrollü bir şekilde gerçekleşirse nükleer santrallerde kullanılabilir faydalı enerjiye dönüşmektedir ancak eğer kontrolsüz bir şekilde zincirleme fisyon reaksiyonu gerçekleşirse bu toplum için zararlı bir enerji haline dönüşebilir. Çünkü çok yüksek miktarda enerji açığa çıkmaktadır ve bu da atom bombası gibi bir gücün oluşmasına neden olabilir.

NÜKLEER YAKITLAR

Nükleer reaktörler de zincirleme fisyon reaksiyonunun sürdürülüp devam etmesi için gerekli olarak yakıtta nükleer yakıt adı verilmektedir. Nükleer reaktörlerin etkin, verimli ve güvenli çalışabilmesi için nükleer yakıtların performansı çok önemli bir yere sahiptir. Nükleer yakıtlara bakıldığında zaman zaman enerji yoğunlukları çok yüksektir. Bu da nükleer yakıtların önemli bir enerji

kaynağı halini almasına neden olmaktadır. Nükleer yakıtları temel de 2 şekilde incelemek mümkündür (Durmaz vd., 2021).

Fisil yakıtlar: ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu gibi yakıtlar fisil yakıtlar olarak adlandırılmaktadır. Fisil yakıtların termal nötronlarla fisyon yapabilme yetenekleri oldukça yüksektir.

Fertil yakıtlar: ^{232}Th , ^{238}U , ^{240}Pu gibi yakıtlar fertil yakıtlar olarak adlandırılmaktadır. Fertil yakıtlar termal nötronlarla fisyon yapabilme yeteneğine sahiptirler bunun yanında çok düşük bir ihtimalle de hızlı nötronlarla da reaksiyona girebilirler.

Genel olarak nükleer yakıtlara bakacak olursak en yaygın olarak kullanılan nükleer yakıt uranyum, plütonyum ve toryum yakıtıdır. Bu yakıtların nükleer reaksiyona girme ihtimalleri çok yüksektir. Çünkü atomları büyüktür ve atomlarının büyük olması onları kararsızlaştırır buda reaksiyona girme ihtimalini artırır. Nükleer yakıtlara bakıldığı zaman en çok kullanılan nükleer yakıt uranyum yakıtıdır.

Uranyumu direk yakıt olarak kullanmak mümkündür değildir çünkü uranyum diğer madenler gibi cevher olarak çıkarılmaktadır ve bu yüzden önce işlenmesi gerekir. Ve işlenen uranyum cevheri saf hale gelir ve diskler şeklinde ortaya çıkar daha sonrasında ise pelet adı verilen silindire dönüştürülür.



Şekil 3. Uranyum Peleti

Oluşan bu peletler daha sonrasında yakıt çubukları adı verilen tüpe konur ve nükleer reaktörlerde kullanılan yakıtı dönüşür.

Nükleer yakıtların avantajları ise şu şekildedir:

- Yüksek bir enerji yoğunluğuna sahiptirler.
- Nükleer yakıtlara baktığımız zaman fosil yakıtlara nazaran çevre duyarlı bir yakıt türüdür.

- Kısacası nükleer yakıtlar güvenli bir şekilde kullanıldığında herhangi bir güvenlik açığı oluşturmamaktadır.

Nükleer yakıtların dezavantajları ise şu şekildedir:

- Nükleer yakıtların maliyeti diğer yakıt türlerine göre biraz daha yüksektir.
- Nükleer yakıtların yanması sonucunda nükleer atıklar oluşmaktadır bu nükleer atıklarda çevreye zararlı ve radyoaktiftir. İnsan sağlığını ve çevreyi olumsuz etkileyeceğinden ötürü bu atıkların depolanması yada sistemden uzaklaştırılması gerekir.
- Nükleer yakıtlar gerekli güvenlik koşulları sağlanmaz ve kontrollü bir şekilde çalıştırılmaz ise nükleer kazalara yol açabilirler.

NÜKLEER ATIKLAR

Nükleer reaktörlerin çalışabilmesi için yakıtı ihtiyaç vardır ve yakıt çevrimi tamamlandıktan sonra enerji oluşmakta ve bu enerjinin yansırı ortama nükleer atıklarda salınmaktadır. Oluşan bu nükleer atıklar radyoaktif atık olarak adlandırıldığı için çevre ve insan sağlığını olumsuz yönde etkilemektedir. Bu yüzden bu nükleer atıkların depolanması ve sistemden uzaklaştırılması gerekmektedir. Nükleer atıklar genel olarak üç kategoriye de sınıflandırılır:

Düşük seviyeli atıklar: Radyoaktiflik değerleri en azdır. Nükleer reaktörlerin çalışması sırasında ortama salınmaktadır.

Orta seviyeli atıklar: Orta segment olarak ifade edilmektedirler. Genellikle nükleer reaktör kazaları ya da herhangi bir arıza durumunda onarım sırasında oluşan atıklardır.

Yüksek seviyeli atıklar: Radyoaktiflik derecesi en yüksek olan atıklardır. Bu atıklar yüksek oranda risk oluşturmaktadır.

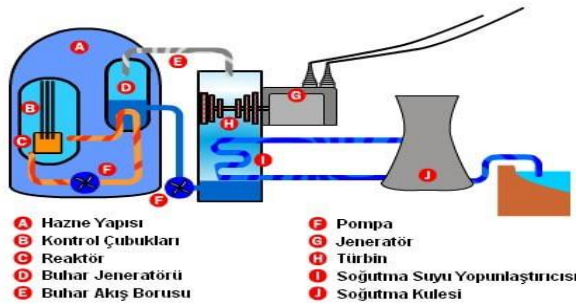
Nükleer atıklar gerek depolama havuzları kullanarak güvenli bir şekilde depolanabilir gerekse reaktör içerisinde yeniden işleyerek tekrardan yakıt olarak kullanılabilir hale getirilebilir. Bu açıdan yeni nesil nükleer reaktörler nükleer atık sorununa çok büyük bir katkı sağlamış ve nükleer atık sorununa çözüm getirmiştir diyebiliriz (Osmanlıoğlu, 2014).

NÜKLEER REAKTÖRLER

Nükleer reaktörler, zincirleme fisyon reaksiyonun başlatılıp devamlı ve kontrollü bir şekilde sürdürüldüğü sistemlerdir. Nükleer reaktörlere baktığımız zaman temel görevi nükleer enerjiyi elektrik enerjisine dönüştürmektir. Nükleer reaktörler temelde 4 ana kısımdan oluşmaktadır.

- Nükleer çekirdek
- Buhar odası
- Türbin odası
- Soğutma odası

Nükleer yakıt çubukları reaktör çekirdeğine boylamasına yerleştirilir. Genelde yakıt çubukları altıgen şeklindedir. Yakıt çubuklarının etrafında ağır su bulunmaktadır. Reaksiyonun başlatılması için genelde yakıt çubuklarına basınç uygulanır ve bu basınç ile ısı artar ve artık nükleer reaksiyon başlar. Ve bu nükleer reaksiyonun başlaması ile çok yüksek miktarda ısı enerjisi oluşmaya başlar. Oluşan bu ısı enerjisi çekirdek içerisinde bulunan sıvıyı ısıtır ve yüksek buharlara getirir. Oluşan buhar odasına gönderilir. Ancak gönderilen buhar kesinlikle buhar odasında bulunan sıvıyla temas halinde değildir ve buhar odasının içerisinde bulunan borular vasıtasıyla geçer ve buradaki sıvıyı yüksek sıcaklıklara getirir. Buhar odasında oluşan buhar türbin kanatlarına gönderilir. Ve Çoğu nükleer reaktörde elektrik enerjisini üretmek için türbinin döndürülmesi gerekmektedir. Türbinler jeneratöre bağlıdır ve jeneratörler de elektrik enerjisini oluşturur. Daha sonrasında burada oluşan yüksek sıcaklıktaki buhar soğutma odalarına burada soğuk su ile soğutma işlemi yapılır. Soğutma işlemi sırasında yoğun buhar salınır ve bu buhar bacalardan tahliye edilir.

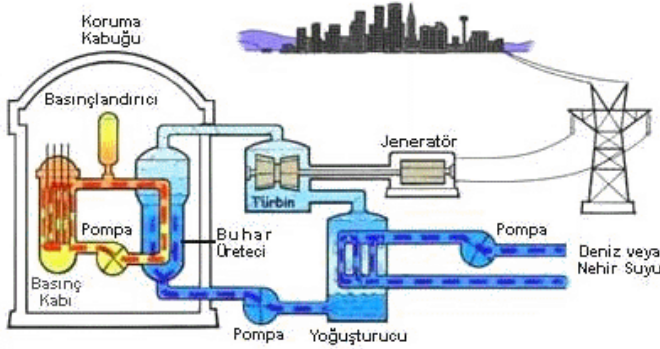


Şekil 4. Nükleer Reaktörlerin iç yapısı

Nükleer reaktör farklı şekillerde sınıflandırılmaktadır. En yaygın sınıflandırma çeşitlerine göre kullanım amacına, nötron enerjisine ve soğutucusuna göre sınıflandırılabilir. En yaygın kullanılan reaktör türleri ise:

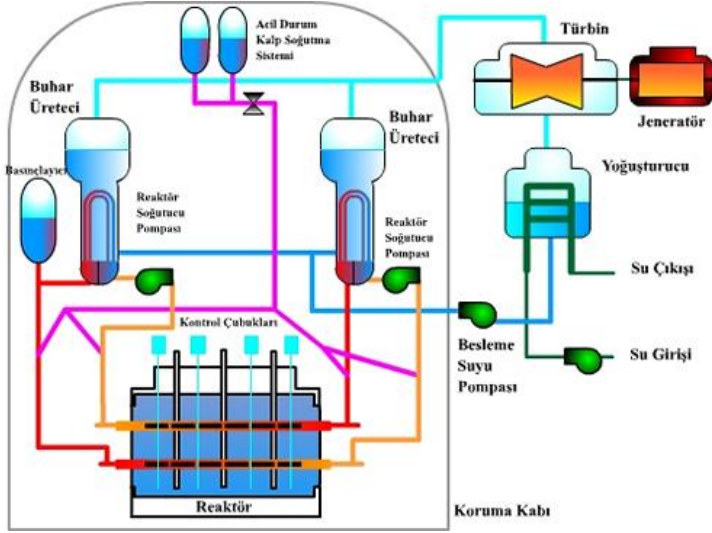
- Basınçlı su reaktörü (PWR)
- Basınçlı ağır su reaktörü (CANDU)
- Kaynar sulu reaktör (BWR)

Basınçlı Su Reaktörü: Dünyada en yaygın olarak kullanılan reaktör türüdür. %3,5 seviyesinde zenginleştirilmiş uranyum-235 yakıt olarak kullanır. Moderatör ve soğutucu olarak su kullanmaktadır. Bu onun en büyük avantajıdır çünkü su ucuz ve kolay bulunur. Diğer reaktör türlerinden farklı olarak iki aşamadan oluşan bir soğutma sistemine sahiptir. Basınçlı su reaktörünün en büyük dezavantajı ise zenginleştirilmiş yakıt kullanmasıdır. Ayrıca reaktöre yakıt yüklemesi yapılabilmesi için reaktör kapatılması gerekmektedir (Allen, 2003).



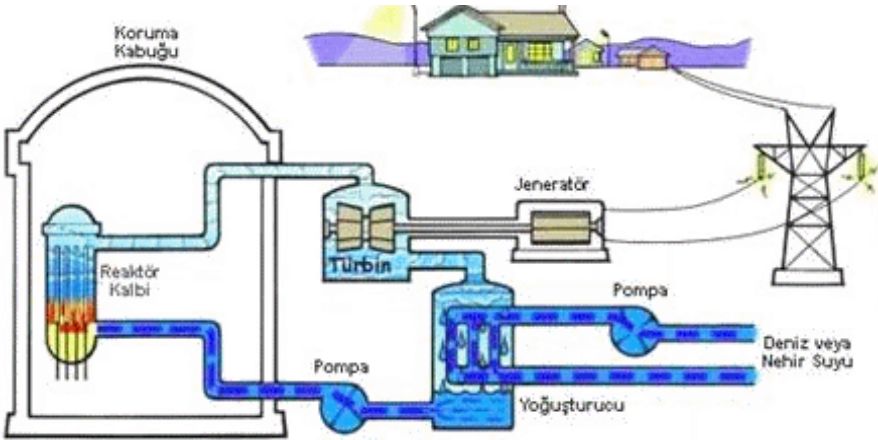
Şekil 5. Basınçlı su reaktörü (PWR)

Basınçlı Ağır Su Reaktörü (CANDU): Dünyada en yaygın olarak kullanılan reaktör türünden bir diğeridir. Moderatör ve soğutucu olarak ağır su kullanılmaktadır bu onun en büyük dezavantajıdır çünkü ağır suyu üretmek oldukça zordur. Yakıt olarak doğal uranyum kullanır bu onun en büyük avantajıdır çünkü doğal uranyumu zenginleştirme işlemi gerektirmez imalatı diğer yakıt türlerine göre çok daha kolaydır. CANDU reaktörünün bir diğer avantajı ise yakıt değiştirme işlemi sırasında reaktörün kapatılmasına ihtiyaç olmadan tam güçte dahi çalışırken yakıt değiştirme işleminin yapılabilmesidir (IAEA, 1979).



Şekil 6. Basınçlı ağır su reaktörü (CANDU)

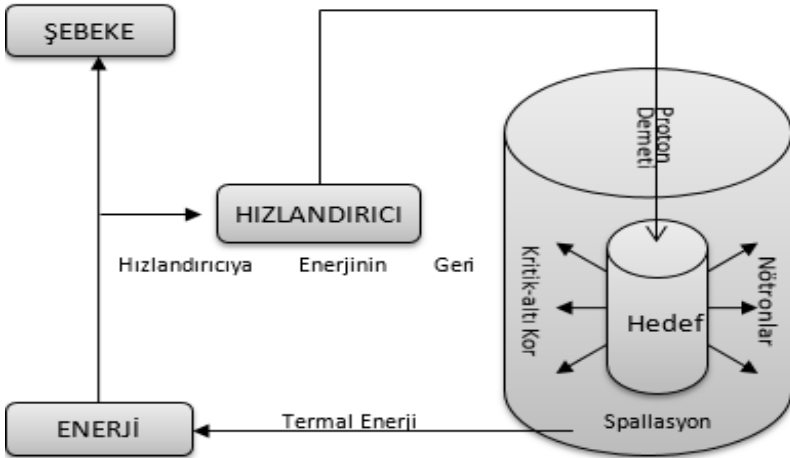
Kaynar Sulu Reaktör (BWR): Kaynar sulu reaktör basınçlı su reaktörüne benzer şekilde moderatör ve soğutucu olarak su kullanılmaktadır. Yakıt olarak %3,5 seviyesinde zenginleştirilmiş uranyum yakıtını kullanmaktadır. Zenginleştirilmiş yakıt kullanılması BWR en büyük dezavantajıdır. Ayrıca yakıt yüklemi işlemi sırasında reaktörün kapatılması gerekmektedir (Nükleer Enerji Dünyası).



Şekil 7. Kaynar su reaktörü (BWR)

NÜKLEER ATIKLARA YENİLİKÇİ BİR ÇÖZÜM

Hızlandırıcı Sürücülü Sistemler: Nükleer enerjinin temel görevi enerji üretmektir ancak üretilen enerjinin yansıra ortama yüksek miktarda radyoaktif madde yayılımının da gerçekleşmektedir. Nükleer atıklar radyoaktif atıklar olduğu için çevre ve insan sağlığını olumsuz etkilenmektedir bu yüzden bu atıkların sistemden uzaklaştırılması ya da uygun koşullar altında depolanması gerekmektedir. Uzun yıllardır yapılan araştırmalar ve çalışmalar neticesinde atık yönetimi konusunda birçok çalışma yapılmış ve bu çalışmalar neticesinde hibrit sistemler geliştirilmiştir. Bu hibrit sistemlere genel olarak hızlandırıcı sürücülü sistemler adı verilmektedir. Hızlandırıcı sürücülü sistemlere baktığımızda her geçen gün kullanımının arttığını görmek mümkündür (NEA,2000). Bunun başlıca sebebi ise, hızlandırıcı sürücülü sistemler nükleer atıkların dönüşümü konusunda çok büyük bir avantaj sağlamaktadır. Ayrıca hızlandırıcı sürücülü sistemlere bakıldığında diğer reaktör türlerinden farklı olarak uranyum yakıtının aksine yakıt olarak toryum yakıtını da kullanmaktadır. Toryum yakıtı uranyum yakıtının yaklaşık olarak 3,5 katı kadar fazla bulunmaktadır. Ayrıca toryum yakıtı uranyum yakıtının aksine zenginleştirme işlemi gerektirmez (Zhivkov 2018).



Şekil 8. Hızlandırıcı Sürücülü Sistemlerin Genel Şeması

Hızlandırıcı sürücülü sistemlere baktığımız zaman diğer reaktör türlerine göre birçok avantajı beraberinde getirmiştir. HSS'ler herhangi bir kaza anında reaktörün kendiliğinden açılıp kapanabilmesinden ötürü aktif olarak kullanılan reaktör türlerine göre büyük avantaj sağlamaktadır. Ayrıca HSS'ler diğer reaktör türlerinde kullanılan kontrol çubukları yerine nötron absorpsiyonunu proton demetleri ile sağlamaktadır. Bu da sistemin diğer reaktör türlerine bakıldığı zaman daha güvenli olmasını sağlamaktadır.

TÜRKİYE'DE NÜKLEER ENERJİ

Nükleer reaktörler birçok ülke tarafından tercih edilen bir enerji kaynağı halini almıştır. Bunun en büyük sebebi ise, nükleer reaktörlerin herhangi bir doğa koşulundan etkilenmeden sürekli olarak çalışabilmesidir yani iklim koşulundan çok fazla etkilenmemektedir. Ayrıca diğer enerji kaynaklarına göre çevreye daha duyarlıdır. Nükleer reaktörler yerleşim merkezinin etrafına da konumlandırılabilir bunun en iyi örneği Paris gibi dünyanın en önemli turizm merkezinde yerleşim biriminin yanı başında uzun zamandır aktif olarak çalışan bir reaktörün işletmede olmasıdır.

Türkiye'de 1961 yılında 1 MW gücünde deney reaktörü ile nükleer enerji kullanımını görmek mümkündür. 1968 yılında ise ilk kez fizibilite etütleri başlamış ve bu doğrultuda elektrik üretimi amacıyla nükleer reaktörler kurulmuştur. 1970 yılına geldiğimiz zaman ise artık bir nükleer reaktör kurulması için girişimler başlamış ancak başarılı olunmamıştır. 2004 yılında tekrar gündeme gelmiş ve bu doğrultu da üç santral için yapım aşamasına gelinmiştir.

Türkiye'deki nüfus artışına baktığımız zaman önümüzdeki zaman zaman dilimi içerisinde dahada artma eğiliminde olduğu ve bunun doğrultusunda da enerji talebinin de artması beklenmektedir. Ancak Türkiye'nin enerji kaynaklarına bakıldığı zaman artan enerji ihtiyacını karşılamada yetersiz kalacağı öngörülmektedir. Ve veriler dikkate alındığında elektrik üretiminin %55'in dışı kaynaklardan sağlandığı ve enerji açısından dışa bağımlı olduğumuzu göstermektedir. Bunun için kendi elektriğimizi üretmek ve bunun içinde yeni enerji kaynaklarının yatırım yapılması planlanmıştır. Bu doğrultuda nükleer reaktörlere yönelim artmıştır.

Nükleer reaktörlerin Türkiye'ye katkısı ise, Akkuyu nükleer reaktörler de çalıştırmak üzere bilim insanı yetiştirme ve aynı zamanda işletme çalıştırılmak üzere birçok kişi için iş imkânı sağlanacaktır bu da istihdamı sağlayacaktır. Ayrıca teknoloji bakımından nükleer reaktör projesi çok büyük bir gelişme olacaktır bunun yanında Türk sanayisinin gelişmesine katkı sağlayacaktır. Akkuyu nükleer reaktörü, 2010 yılı tarihin de Türkiye ve Rusya arasında anlaşma ile imzalanmış ve bu doğrultu da Mersin'de inşasına başlanmıştır. Türkiye'nin ilk nükleer reaktörüdür ve Rosatom tarafından inşa edilmektedir. Akkuyu Nükleer güç reaktörü 4 adet reaktör ünitesinden oluşmaktadır ve VVER-1200 olarak adlandırılmaktadır. Ve kurulacak olan reaktör türü basınçlı su reaktörü teknolojisi ile işletmeye alınacaktır. Bu reaktör ünitelerinin her biri 1200 M gücündedir. Akkuyu nükleer güç reaktörü tamamlandığında toplam 35-37 milyar Kw/saat elektrik üretilmesi planlanmaktadır. Ve reaktörün ilk ünitesi 2023 yılı içerisinde devreye girmiş ve 2024 yılında ilk elektrik üretiminin gerçekleşmesi planlanmaktadır. Akkuyu ile dışa olan enerji bağımlılığımız en aza inecektir. Bakıldığı zaman özellikle Akkuyu ile Rusya'ya olan doğalgaz bağımlılığımız da azalacaktır. Sadece bizi enerji alanında rahatlatmasını beklemek doğru olmaz aynı zaman Akkuyu nükleer santral istihdam, sanayi ve dinamizmle ülkemize çok büyük bir katma değer katacaktır.

Bir diğer reaktör projemizde Sinop nükleer güç reaktör projesidir. 2013 tarihinde Japonya ile imzalanmıştır ve Akkuyu nükleer güç reaktöründe olduğu gibi toplam da 4 adet üniteden oluşmaktadır. Her bir ünite ATMEA-1 tipi nükleer reaktör tasarımından oluşmaktadır. Sinop nükleer güç reaktörünün yeri ve sahası henüz netlik kazanmamıştır fizibilite çalışmasını ile ilerleyen zaman dilimi içerisinde belli olacaktır (Enerji ve Tabii Kaynaklar Bakanlığı, 2016).

KAYNAKÇA

- Durmaz, B., 2019. Yüksek Mertebeden 1. tip Chebyshev Polinomları Yaklaşımı ile Tek Hızlı Nötronlar İçin Dilim Geometride Difüzyon Mesafesi Hesaplanması, Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, Osmaniye 82.
- Durmaz, B., Bakir, G., Arslan A.B., Yapıcı, H., 2021. Neutronic Analysis of an ADS Fuelled with Minor Actinide and Designed for Spent Fuel Enrichment and Fissile Fuel Production. Nuclear Technology & Radiation Protection, 36(4): 299-314.
- NEA, 2000. Calculations of Different Transmutation Concepts an International Benchmark Exercise. Nuclear Science Committee.
- Zhivkov P., Stoyanov C, Furman W., 2018. Accelerator driven system for transmutation and energy production. EPJ Web of Conferences, 194(4): 1-4.
- Muray, L. R, Holbert, K. E., 2015. Nükleer Süreçlerin Kavramları, Sistemleri ve Uygulamalarına Giriş, Çeviri Editörleri: Yılmaz, A. H., Aydın, A., Bayram, T., Akkoyun, S., Billur, A. A., Nobel Yayıncılık, İstanbul, 548 s.
- Osmanlıoğlu, A. E., 2014. Radyoaktif Atık Yönetimi, Nobel Akademik Yayıncılık, Ankara, 218 s.
- Allen K.S, 2003. Advanced Polymeric Burnable Poison Rod Assemblies for Pressurized Water Reactors, A Thesis Presented to the Graduate School of the University of Florida, University of Florida, In Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science, 244 s.
- IAEA., Status and Prospects of Thermal Breeders and Their Effect on Fuel Utilization, Technical Report Series No. 195, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria (1979).
- Enerji ve Tabii Kaynaklar Bakanlığı., 2016. Türkiye'nin Nükleer Santral Projeleri, Nükleer Enerji Proje Uygulama Dairesi Yayın Serisi, 28 s.
- Nükleer Enerji Dünyası., 2017. <http://www.nukleer.web.tr/index.html>.

BÖLÜM 6

BİYEL KOLU TOPOLOJİ OPTİMİZASYONU

Araş. Gör. Faik YILAN¹

Araş. Gör. İbrahim Baki ŞAHİN²

Prof. Dr. Levent URTEKİN³

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384785>

¹ Kırşehir Ahi Evran University, Engineering-Architecture Faculty, Department of Mechanical Engineering, Orcid:0000-0001-7466-8604

² Kırşehir Ahi Evran University, Engineering-Architecture Faculty, Department of Mechanical Engineering, Orcid:0000-0001-8090-9748

³ Kırşehir Ahi Evran University, Engineering-Architecture Faculty, Department of Mechanical Engineering, Orcid:0000-0003-4348-4749

GİRİŞ

Motor biyel kolu, piston ile krank mili arasında bulunan motorun hayati bir bileşenidir ve aksel dönme kuvvetini aktarır. Biyel kolları V motorlar, düz motorlar, radyal motorlar ve diğerleri gibi çeşitli motor konfigürasyonlarında kullanılır. Bağlantı çubukları milyonlarca tekrarlanan yüke dayanır. Bu nedenle, piston ve krankın içine mükemmel uyum sağlamak için bunların hassas toleranslarla frezelenmesi zorunludur. Bağlantı çubukları motor içerisinde değişen yüklere maruz kalır. Biyel kolu maruz kaldığı çeşitli yüklerden dolayı piston kafasındaki gaz basıncının neden olduğu boylamasına sıkıştırmaya, piston hızındaki değişikliklerden kaynaklanan karşılıklı çekme ve sıkıştırma kuvvetlerine, salınım hareketi nedeniyle biyel gövdesinde bükülmeye ve burkulmaya maruz kalır. Yüksek sıkıştırma kuvvetlerinin neden olduğu. Teknolojinin giderek ilerlemesi, yüksek performanslı ve hafif ürünler için tasarım ve üretim sürecinin önemini önemli ölçüde artırdı. Bu amaca ulaşmak için tasarım süreçleri, ürünün en uygun yapıya ulaşmasını sağlayacak yapısal optimizasyon tekniklerini içerir. Yapısal optimizasyon yaklaşımları alanında üç farklı kategori vardır: boyut, form ve topoloji optimizasyonu. Bunlar arasında topoloji optimizasyonu en kapsamlı yaklaşım olarak öne çıkıyor. Bunun nedeni, önceden var olan bir tasarıma ihtiyaç duymadan mühendisler ve tasarımcılar için yeni tasarım konseptleri oluşturma yeteneğidir. Boyut optimizasyonu, yapıdaki her bir eleman için en uygun kesit alanının belirlenmesi ve istenilen formun elde edilmesi için boyutlarının buna göre ayarlanmasıdır. Şekil optimizasyonu, bir yapının dış formunu, bağlantılarını değiştirmeden optimize etme sürecini içerir. Topoloji optimizasyonu, bir yapıyı oluşturan elemanların birbirine bağlanabileceği en uygun yöntemi açıklar. Topoloji optimizasyonu, yapısal optimizasyonun en geniş şeklidir; burada amaç, istenen yapıyı üretmek için malzeme dağılımını optimize etmektir.

Bu çalışmada biyel kolu topoloji optimizasyonu kullanılarak beyaz dökme demir, yüksek krom dökme demir ve nodüler kır dökme demir malzemeleri ile analizler yapılmıştır. Biyel kolunun ağırlığı azaltılıp bu 3 malzeme için dayanım ve üretim maliyetleri açısından karşılaştırmalar yapılmış seçilen malzeme üzerinde topoloji optimizasyonu sonucunda çıkan

tasarım tekrar incelenerek üretim kolaylığı sağlanacak şekilde 2 farklı yapısal değişik gerçekleştirilmiş bunları neticesinde nihai tasarıma karar verilmiştir.

LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

(Kaya vd., 2010) yaptıkları çalışmada kavrama çatalı üzerinde topoloji ve şekil optimizasyonu neticesinde yeniden tasarlanmış olan kavrama çatalının ağırlığı %24 azaltmıştır.

Kong ve ark. (2016), helezon yaylı süspansiyon sisteminde kullanılan amortisör alt plakasının ağırlığını etkili bir şekilde %36,5 oranında azaltmak için hem topoloji hem de topografya optimizasyonlarından yararlanmıştır. Süspansiyon sisteminde kullanılan kumanda kolunun ağırlığını en aza indirmek için topoloji optimizasyon analizleri yapıldı.

Jagtap ve Dhoke (2017), üretim sınırlamalarını dikkate alarak topoloji optimizasyonu yoluyla egzoz montaj braketinin ağırlığında %50'lik bir azalma elde etti.

(Chumbre, 2018) çalışmalarında bir biyel kolu tasarlanmıştır ve tasarımı NX 6.0 ve ANSYS 14.5 programları kullanarak çeşitli malzemelerle analizler gerçekleştirilmiştir ve biyel kolu ana boyutlarını değiştirmeden optimize edilmiş tasarımın biyel kolu ağırlığında azalma olduğu sonuçlarını karşılaştırılmıştır. Bu araştırma çalışmasının amacı, biyel kolu tasarımının optimizasyonundan önce ve sonra topoloji optimizasyonu ve analiz sonuçlarının karşılaştırılmasıdır. Optimize edilmiş model, gerilmeler mevcut modelden daha az olacağından tasarımda verimli olacak ve optimize edilmiş tasarımda ağırlık azalması da sağlamaktır.

(Güleryüz ve Yılmaz 2019) çalışmalarında ağır hizmet taşıtlarında kullanılan kampanalı frenin parçası olan bir tork plakasına topoloji optimizasyonunu uygulamış döküm ve işlenmiş parça ağırlıkları sırasıyla %11.9 ve %12.2 azalmıştır.

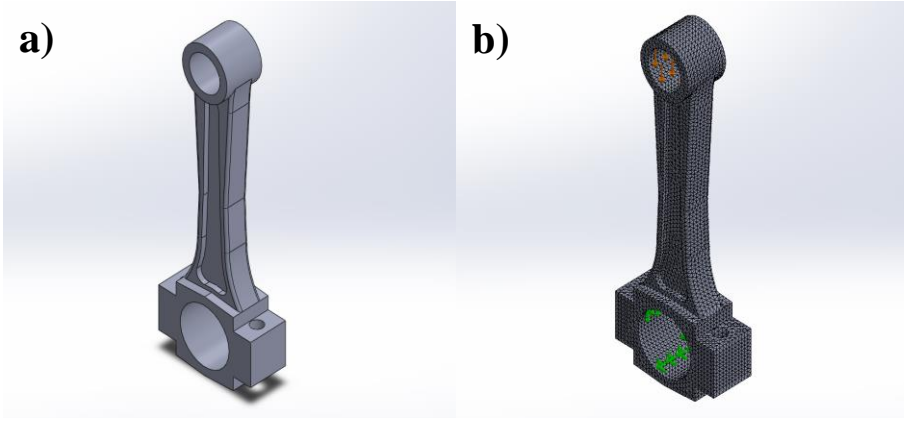
(Topaç vd., 2020) çalışmalarında, mafsallı bir kamyonun sağlam arka aksında kullanılan braket. Tasarım süreci, topoloji optimizasyonu, sonlu elemanlar analizi (SEA) ve yanıt yüzeyi metodolojisi tabanlı boyut optimizasyonu gibi farklı teknikleri içeren bileşik bir yöntemden oluşur. Topoloji optimizasyonunda, bağlantı braketini için en rijit tasarımı belirlenmiştir. Topoloji optimizasyonu neticesinde alınan sayısal sonuçlar,

temel tasarıma kıyasla braketin kütlesini yaklaşık %63 oranında azaltmanın mümkün olduğunu göstermiştir. SEA tabanlı yükleme simülasyonları, bileşenin en kritik bölgelerindeki eş değer gerilimin %62'ye kadar azaldığını da gösterdi. Bu sonuçlara göre nihai tasarım, kritik yük durumu için dayanım ve rijitlik koşullarını sağlar hale getirilmiştir.

(Chaudhari ve Khairnar 2020) yaptıkları çalışmada uzun ömürlü ve düşük maliyetli olması amacı ile tekerlek göbeği için Al-6061 T6 alaşımı ve mafsal için EN8 kullanılmıştır. Bu malzemelerin seçilmesindeki bir diğer sebep ise düşük yoğunluklu ve uyumlu akma dayanımına sahip olmalarıdır. Topoloji optimizasyonu çalışmasında tekerlek göbek bağlantısı için %24.09 ve mafsal için %16.30 ağırlık azalması sağlamıştır.

MATERYAL VE METOT

Çelik, dövme çelik, alüminyum biyel kolu için yaygın olarak kullanılan malzemelerdir. Biyel kolları kare, dikdörtgen, dairesel, I kesit, H kesit gibi çeşitli kesitlerde tasarlanmaktadır. Bunlar arasında I profiller ağırlık olarak hafif ve sağlam olduğu için daha çok tercih edilmektedir. Şekil 1'de SolidWorks 2020 programı ile biyel kolunun katı modellemesi gösterilmektedir. Biyel kolunun maruz kalacağı yükler hesaplamalar yapılarak bulunmuştur. Sonra SolidWorks programı ile ağ yapısı oluşturulmuş ve SEY (sonlu elemanlar yöntemi) kullanılarak statik analiz gerçekleştirilmiştir. Statik analiz neticesinde parçanın Von-Mises gerilmelerinin yüksek ve düşük bölgeleri tespit edilmiştir. Topoloji etüdü için modeller ve üç farklı malzeme üzerinde ağırlık azaltılmış malzemelerin modellerde malzemelerin dayanımları karşılaştırılmıştır. Son olarak 3 malzemedan seçilen malzeme üzerinde 2 farklı tasarım optimizasyonu arasından üretim kolaylığı, ağırlık gibi kriterleri karşılaştırılarak seçilen tasarım nihai tasarım olarak kabul edilmiştir. Bu bağlamda, analizlerde kullanılacak malzemelerin özellikleri Tablo 1'de ve bu malzemelerin analizde tanımlanmasıyla ağırlık/hacimleri Tablo 2'de sırasıyla verilmektedir.



Şekil 1. a) Tasarımın izometrik görünüşü b) Tasarımın mesh hali

Tablo 1. Analizde kullanılacak malzemelerin özellikleri

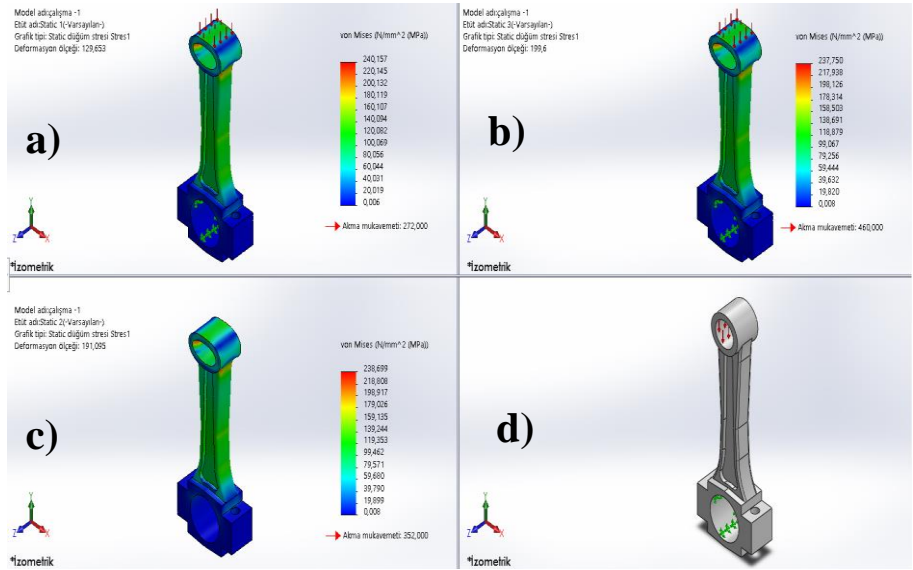
	Elastikiyet Modülü (GPa)	Poisson Oranı (ν)	Yoğunluğu (kg/m ³)	Akma Mukavemeti (MPa)
Beyaz Dökme Demir	125	0,23	7240	272
Yüksek Krom Dökme Demir	184	0,28	7520	352
Nodüler Kır Dökme Demir	192	0,31	7260	460

Tablo 2. Biyele malzemelerin tanımlanmasıyla ağırlıkları ve hacimleri

	Beyaz Dökme Demir	Yüksek Krom Dökme Demir	Nodüler Kır Dökme Demir
Ağırlığı (gr)	14965.69	15544.47	15007.03
Hacim (mm ³)	2067084.22	2067084.22	2067084.22

STATİK ANALİZ

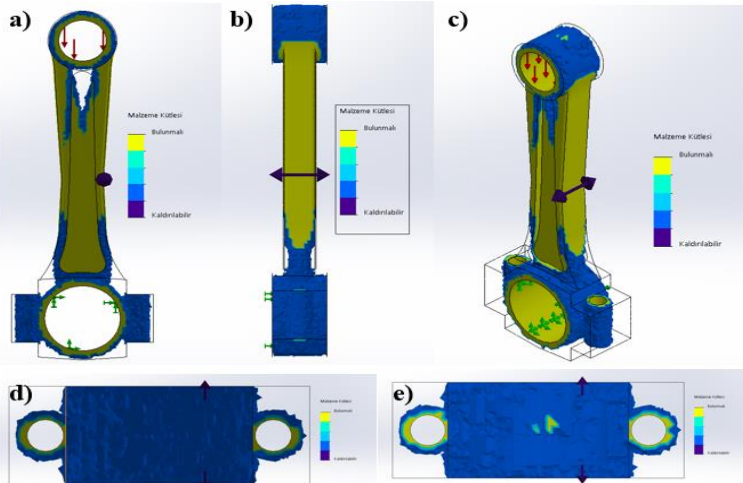
Şekil 2’de sunulan statik analiz sonuçlarına göre tüm malzemelerde akma mukavemetlerinin aşağısında değerlere ulaşılmıştır. Fakat yapılan analizinde ise en iyi sonucu nodüler kır dökme demir vermiştir. Daha sonra en yakın sonucu Yüksek kromlu dökme demir vermiştir. Son olarak ise Beyaz dökme demir malzemesinde elde edilmiştir.



Şekil 2. a) Beyaz dökme demir b) Nodüler kır dökme demir c) Yüksek krom dökme demir d) Ana tasarım sınır şartları

TOPOLOJİ OPTİMİZASYONU

Ana Tasarım sabit geometrisi seçilerek 15.46 N/mm^2 bir kuvvet altında ağırlığı %50 oranında azaltmak istediğimizi belirterek topoloji etüdü gerçekleştirilerek çıkan sonuç Şekil 3'te gösterilmektedir.



Şekil 3. Topoloji etüdü. a) önden görünüş b) yandan görünüş c) izometrik görünüşü. d) alttan görünüş e) üstten görünüş

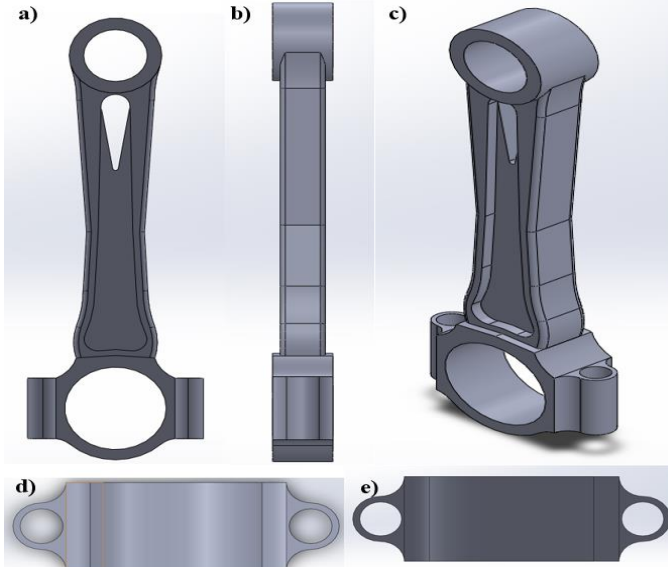
TASARIM ÖNERİLERİ

Birinci tasarım

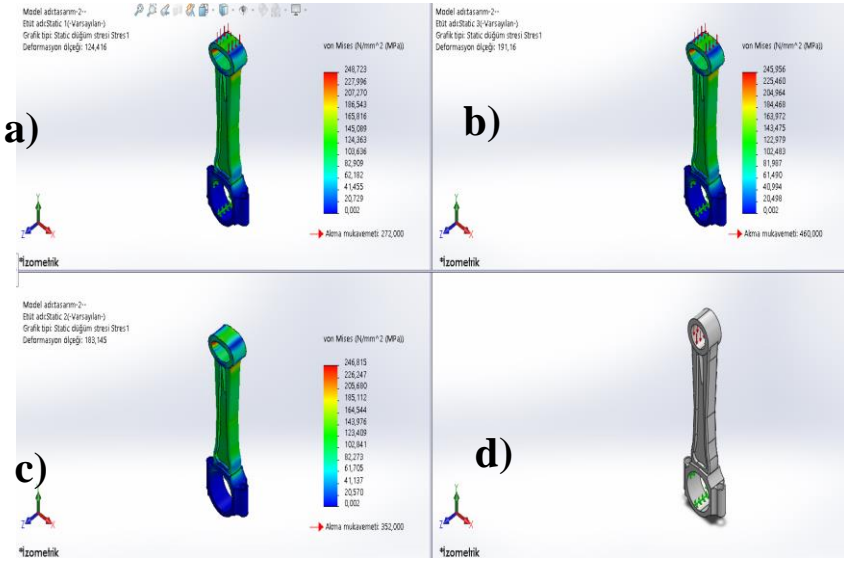
Tablo 3. Birinci tasarımda malzemelerin tanımlanmasıyla ağırlıkları ve hacimleri

	Beyaz Dökme Demir	Yüksek Krom Dökme Demir	Nodüler Kır Dökme Demir
Ağırlığı (gr)	10292.73	10690.8	10321.16
Hacim (mm ³)	1421647.8	1421647.8	1421647.8

Şekil 4'te gösterilen tasarımda ağırlığın %31.1 hacmin ise %32.2 azaldığı saptanmıştır. İlk tasarıma kıyasla bu tasarımda piston kısmına ve biyel koluna bağlanan kısımlar azaltılmıştır. Bu veriler Tablo 3'te gösterilmektedir. Biyele bağlanan kısmın ve pistonla bağlanan kısmının yüz ölçümlerinin azalması neticesinde birim başına düşen yük miktarının arttığını ve bu yük artışının neticesinde ilk tasarıma kıyasla malzemelerinin akma mukavemetlerinin arttığını görmekteyiz lakin ağırlığın %6.1 azaldığını öngörürsek malzemelerin ise Von-Mises değerleri akma mukavemetlerinin altında kaldığından fazla etkilemeyecektir (Şekil 5.).

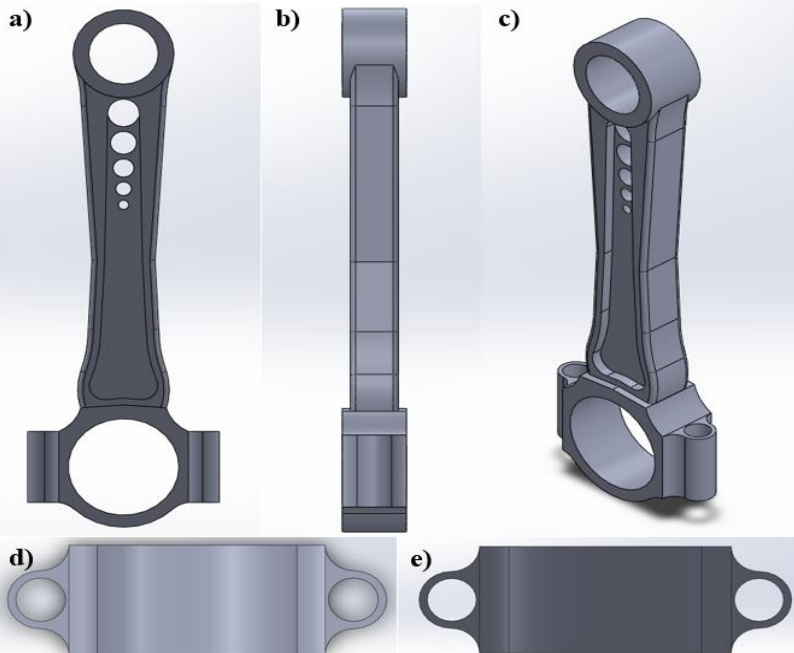


Şekil 4. Önerilen birinci tasarım a) önden görünüş b) yandan görünüş c) izometrik görünüşü d) alttan görünüş e) üstten görünüş



Şekil 5. a) Beyaz dökme demir b) Nodüler kır dökme demir c) Yüksek krom dökme demir d) Ana tasarım sınır şartları

İkinci tasarım

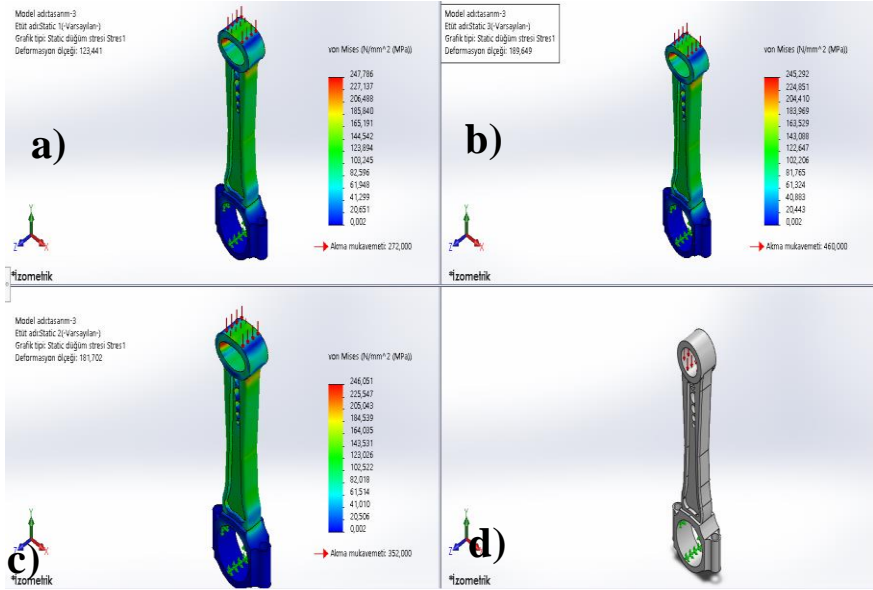


Şekil 6. Önerilen ikinci tasarım a) önden görünüş b) yandan görünüş c) izometrik görünüşü d) alttan görünüş e) üstten görünüş

Tablo 4. İkinci tasarımda malzemelerin tanımlanmasıyla ağırlıkları ve hacimleri

	Beyaz Dökme Demir	Yüksek Krom Dökme Demir	Nodüler Kır Dökme Demir
Ağırlığı (gr)	10297.15	10695.4	10325.6
Hacim (mm ³)	1422258.8	1422258.8	1422258.8

Şekil 4'te gösterilen ikinci tasarımda ağırlık olarak %31.2 hacim olarak ise %32.3 azaldığı görülmüştür. Birinci tasarıma çok benzeyen ikinci tasarımda orta kısmında azalan oranda ve mesafede delik tasarımı uygulanmıştır. Tasarlanan ikinci tasarımda statik analiz sonucu birinci tasarıma kıyasla çok çok az azaldığı görülmüştür. Tüm tasarımlarda olduğu gibi parçanın Von-Mises değerleri akma mukavemetinin aşağısında değer vermiştir (Şekil 7.).



SONUÇLAR

Ana tasarım üzerinde yapılacak statik analiz üzerine üç adet malzeme belirlendi. Statik yapısal analiz sonrası bu malzemelerin sonuçları

karşılaştırıldı. Karşılaştırma neticesi üç malzemenin de Von-Mises değerlerinin malzeme akma mukavemetinin aşağısında olduğu tespit edildi. Üç malzemede tasarım için uygun olduğu tespit edilmiştir.

Ana tasarım üzerine yapılan topoloji etüdü üzerine iki adet biyel tasarlandı. Bu tasarlanan biyeler seçilen üç adet malzeme ile statik yapısal analiz sonuçları karşılaştırıldı. Yapılan analizler sonucu altı adet sonuç çıktı. Elde edilen sonuçlara göre en uygun malzeme ve tasarımı seçmek için 3E kuralına başvuruldu.

1. Emniyet
2. Ekonomiklik
3. Estetik

Tüm malzemeler yapılan analiz sonucu dayanıklı çözümler dahi en ucuz imalatı olan beyaz dökme demir uzun vadeli işlemlerde dayanıksız olması onun yerine yüksek sıcaklıkta iyi performans göstermesi açısından ve maliyeti de orta seviye olan yüksek krom dökme demir seçilmiştir.

Tasarımları ekonomik olarak göz önüne aldığımızda ağırlık kayıplarından dolayı eşittirler. Bununla birlikte, 1. ve 2. Tasarım arasında bir kıyaslama yapıldığında 1. tasarımın 2. tasarıma göre daha kolay üretileceği ve 1. tasarımın daha estetik duruşundan 1. tasarım seçilmiştir.

Seçilen 1. tasarım göz önüne alındığında ana tasarıma oranla %31.1 ağırlığının az olması yaklaşık olarak maliyetinde %30 düştüğü farz ettiğimizde ve sadece performansından %1'lik bir kayıp olduğu saptanmıştır. Bu sebeple, en düşük bütçe ile en yüksek performans alındığı saptanmıştır.

KAYNAKÇA

- Chumbre, V., (2018). Design and Comparative Analysis of Connecting Rod using Finite Element Analysis. *Int. J. Res. Appl. Sci. Eng. Technol.* 6, 765–773. <https://doi.org/10.22214/ijraset.2018.4129>
- Chaudhari, P. ve Khairnar, R. (2020). Weight optimization of hub and knuckle using topology optimization. *International Journal of Mechanical Engineering*, 7(6), 20–23. doi:10.14445/23488360/ijme-v7i6p103
- Güleryüz, İ., & Yılmaz, B. (2019). Ağır hizmet araçlarında kullanılan Z-kam kampanalı fren tork plakası ağırlık optimizasyonu. *Academic Perspective Procedia*, 2(3), 466-475
- Jagtap, M., & Dhoke, A. (2017). Topology optimization of exhaust mounting bracket. In *Tech Mahindra, Altair Technology Conference*.
- Kaya, N., Karen, I., Öztürk, F., (2010). Re-design of a failed clutch fork using topology and shape optimisation by the response surface method. *Mater. Des.* 31, 3008–3014. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2010.01.002>
- Kong, Y.S., Abdullah, S., Omar, M.Z., Haris, S.M., (2016). Topological and topographical optimization of automotive spring lower seat. *Lat. Am. J. Solids Struct.* 13, 1388–1405. <https://doi.org/10.1590/1679-78252082>
- Topaç, M. M., Karaca, M., Aksoy, B., Deryal, U. ve Bilal, L. (2020). Lightweight design of a rear axle connection bracket for a heavy commercial vehicle by using topology optimisation: A case study. *Mechanics*, 26(1), 64-72.

BÖLÜM 7

MÜHENDİSLİKTE TEKNOLOJİ YÖNETİMİNDE CNC UYGULAMALARI

Araş. Gör. İbrahim Baki ŞAHİN¹
Araş. Gör. Faik YILAN²
Prof. Dr. Levent URTEKİN³

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384834>

¹ Kırşehir Ahi Evran University, Engineering-Architecture Faculty, Department of Mechanical Engineering, Orcid:0000-0001-8090-9748

² Kırşehir Ahi Evran University, Engineering-Architecture Faculty, Department of Mechanical Engineering, Orcid:0000-0001-7466-8604

³ Kırşehir Ahi Evran University, Engineering-Architecture Faculty, Department of Mechanical Engineering, Orcid:0000-0003-4348-4749

GİRİŞ

Günlük yaşamın önemli bir bileşeni haline gelen “teknoloji” kelimesinin kökenini, eski Yunanca sanat veya beceri anlamına gelen “techne” terimi oluşturmaktadır. Teknoloji, herhangi bir şeyi başarmak için yeni yöntemlerin icadı olarak görülebilir ve yeni teknolojinin, onu kullanacak kaynaklara sahip olanlara fayda sağladığı takdirde yayılacağı doğrudur. Aksi takdirde insanlar yeni teknolojiyi terk edeceklerdir (Akolaş, 2009).

Medeniyetin evrimi boyunca teknolojik gelişmeler, gelişmişlik düzeylerine bağlı olarak bireylerin yaşamlarını etkilemiştir. Taş Devri'nde av araçlarının icadı ve günümüzde nanoteknolojinin gelişimi, kendi dönemlerinde insanların hayatlarını etkileyen teknolojik gelişmelere örnek olarak gösterilebilir. Bilginin yalnızca aristokrasinin elinde olduğu eski uygarlıklarda teknoloji, işçilerin, zanaatkarların ve zanaatkarların alanı olarak görülüyordu. Ancak on dokuzuncu yüzyıldan başlayarak bu dönemde bilim ve teknolojinin giderek yakınlaşması ortaya çıktı ve tüm teknik uygulamalar tamamen bilimsel kavramlara dayalı hale geldi (Uluğ, 1999).

Özellikle artan küreselleşme göz önüne alındığında, dünyanın herhangi bir yerinde ortaya çıkan herhangi bir teknik buluşun dünyanın geri kalanını da etkilemesi artık kaçınılmazdır. Mal, hizmet ve bilgi üreten işletmelerin bu gelişmelere uyum sağlaması ve hayatta kalabilmek için değişiklikleri öngörmek ve bunlara uyum sağlamak da dahil olmak üzere zamanında kararlar alması gerekmektedir. Her geçen gün yeni üretim teknolojileri gelişerek kuruluşları rekabete karşı daha savunmasız hale getiriyor. Ancak hızla gelişen bir pazarda değişen pazar taleplerine etkili bir şekilde yanıt verebilmek için bu değişiklikleri öngörmek ve bunlara uyum sağlamak gerekir (Aydoğan & Semiz, 2004).

Satış ve tasarım döngüleri her geçen gün kısalıyor. Bu nedenle işletmelerin, rakipler onları taklit etmeden önce pazar fırsatlarını hızla yakalaması gerekir. 1940'ların sonlarında mahsul döngüsü 30 veya 40 yıl civarında iken, günümüzün döngüleri 30 veya 40 hafta civarında sürmektedir (Cetron & Davies, 2001).

Hızla değişen ve belirsizleşen dünyada işletmeler rekabet avantajı yaratabilmek ve başarılı olabilmek için teknolojik gelişmelere uyum sağlayabilmek için teknoloji yönetimine ihtiyaç duymaktadır. Bir kuruluş,

teknolojik gelişmelerin neler getireceğini öngörebilir ve doğru teknoloji yönetimi ile yatırımlarını ve üretimini buna göre planlayabilir. Aslında işletmenin kendisi de bu teknolojik gelişmelerin hem yaratıcısı hem de keşfedilmemiş coğrafyaların öncüsü olabilir.

Teknoloji Yönetimi Nedir

Teknoloji yönetimi, yönetim ve teknik uzmanlık arasındaki boşluğu doldurur. Kurumun büyümesi ve rekabet edebilmesi için hangi teknolojilere yatırım yapılması gerektiğini, teknolojinin nasıl üretilmesi, geliştirilmesi ve pazarlanması gerektiğini, kurum yapısının nasıl olması gerektiğini belirler. Yeni teknolojik gelişmelere yanıt vermek ve kullanılacak en iyi rekabet stratejilerinin belirlenmesi gibi konuları ele alır (Sarıhan, 1998).

Teknik yönetim, teknoloji yönetiminden çeşitli açılardan önemli ölçüde farklılık gösterir. Aşağıda özetlenen faydalar teknoloji yönetimindeki farklılıklardan kaynaklanmaktadır:

- Disiplinlerarası bilginin bir araya getirilmesi,
- Teknik kökenlerini aşan teknolojik bir bakış açısı yaratmak,
- Hem endüstriyel hem de endüstriyel olmayan alanlara uygulanabilecek teknoloji yönetimi yetkinliklerinin geliştirilmesi,
- Teknoloji, organizasyon ve yönetime makro bir bakış açısı geliştirmek.

Buna karşılık, teknik yönetim çok daha fazla odaklanmıştır ve mühendislik ve endüstriyel teknoloji gibi belirli teknik disiplinlerde farklı yönetim ilkeleri oluşturmayı amaçlamaktadır (Bellamy et al., 2003).

Teknolojik Yenilik ve Ar-Ge için İş Stratejileri

Teknoloji planlaması ürün kalitesini iyileştirmeye, maliyetleri düşürmeye ve verimliliği artırmaya odaklanırken, teknoloji stratejisi pazarları ve müşteri tabanlarını genişletecek yeni ürünler geliştirmeye odaklanmalıdır. Aşağıda teknolojik yenilik ve Ar-Ge'ye yönelik iş stratejilerinin bir listesi bulunmaktadır:

Agresif Strateji: Şirket bütçesinin önemli bir kısmı Ar-Ge harcamalarına ayrılmaktadır. Amaç, rakiplerin önünde yeni ürünler veya ürün pazarları yaratmak ve onlara hakim olmaktır. Teknolojik gelişmeleri yakından

takip etmeyi, iş dünyasında güçlü bir bilgi birikimine sahip olmayı, yeni fikirlere açık olmayı ve risk almayı gerektirir. Etkili pazarlama ve satış karşılaştırmalı olarak kullanılmalı, yeniliği teşvik eden seminer ve kurslar düzenlenmeli, yüksek vasıflı satış personeli işe alınmalı, reklam başta olmak üzere danışmanlık ve eğitim hizmetlerine ağırlık verilmelidir.

Fırsat İzleme Stratejisi: Rakiplerin kusurlarından yararlanır. Saldırı taktiğini uygulayanlardan farklı olarak liderlik etmezler, öncülerin kusurlarını taklit ederek fırsatları yakalarlar.

Savunma Planı: Fırsat yakalama stratejisiyle karşılaştırılabilir. Ancak bu alandaki işletmeler, orijinal firmaların ürünlerindeki kusurları inovasyon yoluyla gidererek veya yeni özellikler ekleyerek aynı pazardan yararlanmaya çalışmaktadır. Riskten kaçınırlar.

Taklit Stratejileri: Maliyetleri düşürerek yaratıcı firmaların kopyası olan ürünler geliştirin.

Bağumlu Stratejiler: Teknolojik yenilik perspektifinden bakıldığında güçlü bir donanım uydu ve yan kuruluşu olarak hizmet vermektedir. Müşteriler ürün ve hizmet parametrelerini istedikleri zaman değiştirebilirler.

Geleneksel Yaklaşımlar: Tipik olarak bu şirketler Ar-Ge yapmazlar; bunun yerine moda kullanım tasarımlarını değiştirirler. Yüksek teknoloji sektörlerinde yatırım potansiyeli yetersizdir.

Teknolojik Planlama

Bir şirketin kullandığı teknoloji ne olursa olsun, kısa ve uzun vadeli tüm planlama faaliyetleri teknolojik planlamaya entegre edilir. Teknoloji planları oluştururken çeşitli konuların ele alınması gerekir (Bellamy et al., 2003):

- Teknolojik girişimler iş stratejisinin neresine sığmalıdır?
- Temel teknolojik ürünün yaşam döngüsünün hangi aşamasındasınız?
- Teknolojinin tarihsel katkıları nelerdir?
- İş için ana planlar nelerdir? Bunlar yalnızca ilgisiz projelerin bir koleksiyonu mu?
- Teknolojik gücümüzü rakiplerimizinkiyle nasıl karşılaştırırız?

Üniversiteler, ortak araştırma merkezleri ve ticari laboratuvarlar gibi dış kaynaklar verimli bir şekilde kullanılıyor mu? Uygun teknolojik altyapıya sahip iyi yapılandırılmış bir altyapı, görevlerin daha sık tamamlanmasını

sağlar, zamandan tasarruf sağlar ve gereksiz mali harcamaların önlenmesini sağlar (Mestçi & Kul, 2005).

Mühendislik Teknolojileri

Bilgisayarlı Sayısal Kontrol Makineleri: Bir işlemin sayılar, harfler ve sembollerle kontrol edildiği programlanabilir otomasyona bilgisayar sayısal kontrolü (CNC) adı verilir. Bu durumda, belirli bir görevi veya işlevi gerçekleştirmek için sayıları, harfleri ve simgeleri kullanan belirli komutlardan oluşan programlar oluşturulur.

Robotlar: Cetron ve Davies'in 2001 tarihli "Trendler Dünyayı Değiştirir" başlıklı makalesine göre, "Sıradan servis işleri, tehlikeli çevre işleri, onarım işleri ve uzay istasyonu parçalarının montajı robotlar tarafından yapılacak. 2010 yılına gelindiğinde evler robotlar tarafından yapılmaya başlayacak" (Cetron & Davies, 2001).

Bilgisayar Destekli Üretim: AutoCAD programı bilgisayar destekli tasarımın en bilinen örneğidir. Bilgisayar destekli üretim, bir üretim sisteminin organizasyonunda, kontrolünde ve yönetiminde doğrudan veya dolaylı olarak bir bilgisayar sisteminin kullanılmasını içerir (TÜRK, 2008).

Bilgisayarla Bütünleşik İmalat: Bu imalat tüm sıralı, bireysel parçalardan oluşur. Organizasyon içindeki tasarım, proses kontrol, imalat, kalite kontrol, taşıma, depolama, makine ve mülkiyet kontrolünü içeren süreçlerin uygun teknolojik altyapı ile tasarlanmasıyla gerçekleştirilir. CI üretimi ayrıca siparişlerin ticari veriler kullanılarak alınmasını, malzemelerin buna göre hazırlanmasını ve üretimin buna göre düzenlenmesini önermektedir (Aydoğan & Semiz, 2004).

Otomatik Malzeme Taşıma: Genellikle otomatik malzeme taşıma olarak anılır ve bir üretim içindeki ürün hareketlerinin otomatik olarak kontrol edilmesini ve yönlendirilmesini içerir.

Grup Teknolojisi (Hücreyel Üretim): Belirli bir parça ailesinin aynı üretim özelliklerine sahip tam üretimi için insan, makine ve özellikle süreçlerin bir araya geldiği veya oluşturulduğu sistemdir (Gökşen & Erdem, 2016).

Esnek Üretim Sistemleri: Çeşitli parçaları sisteme girerken tanır ve gerekli işlemlerin yapılabilceği uygun makinelere yönlendirir.

Makine Yönetim Süreçleri

Adından da anlaşılacağı gibi üretimde kullanılan ekipman filosunun teknolojik durumu makine yönetimi işlemleri bölümünde incelenecektir. Örneğin, Makine ve Yönetim Süreçlerine yönelik üretim ekipmanları bir değerlendirme kriteri (EC) olarak değerlendirilecektir. Tablo 3'te kriter olarak değerlendirilebilecek makine ve ekipmanların listesi verilmektedir. Sonuç olarak, bir fabrikada üretim için kullanılan her makine ve özellikleri, Tablo 1'de örneklendiği gibi değerlendirme faktörü puanlama tablosunun uygun satırında listelenir. Her faktörün özellikleri, Tablo 2'deki seviye açıklamalarıyla karşılaştırılarak belirlenir, hangi seviyeye düştüklerini gösterir. Tablo 1, her seviyenin benzersiz bir puanı olduğunu göstermektedir. Seviyeler, Tablo 2'deki seviye açıklama tablosunda gösterildiği gibi, en zayıf senaryoyu temsil eden en düşük seviyeden başlayarak bir seviyeden (S) diğerine her adımı kapsayan altı adım olarak tanımlanır.

Tablo 1: Makine yönetimi süreçleri değerlendirme faktörü puanlama tablosu

	S1	S2	S3	S4	S5	S6
Level \rightarrow Değerlendirme faktörleri (DF)	Manuel sistemle r	Yarı Manuel sistemle r	Mekaniz e sistemler	Otomati k sistemle r	Otonom sistemle r	Akıllı insansız sistemle r
\downarrow						
DF ₁ drill press	Sahip olduğu seviye \checkmark					
DF ₂ CNC machine			Sahip olduğu seviye \checkmark			
DF ₃ mold bench		Sahip olduğu seviye \checkmark				
DF ₄			Sahip olduğu seviye \checkmark			
DF _n					Sahip olduğu seviye \checkmark	
Hesaplama yöntemi	$Toplam = \sum_{i=1}^n AF_i/n$					

Tablo 2: Örnek Üretim Yönetimi Süreçleri Seviye Tanım Tablosu.

Teknolojik Yeterlilik Düzeyleri	Seviye Kapsamı
Seviye 6: Akıllı İnsansız Sistemler	Bu seviyede insan faktörü çok zayıftır. Nanoteknolojileri, otonom ve akıllı robotları kullanan sistemler bu şekilde karakterize edilebilir. Şu anda bu kriteri karşılayan çok az işletme olmasına rağmen, teknoloji hem üretim hem de hizmet alanında kaçınılmaz olarak böyle bir organizasyon yapısına doğru ilerliyor. Özellikle nano-biyo sistemler ve ürün replikasyonu ile uğraşan fabrikaların yeni akıllı sistem veya ürünler üretecek şekilde kurulacağı öngörülmüyor. Günümüzde Endüstri 4.0 olarak bilinen başka boyutlar da var.
Seviye 5: Otonom Sistemler	Bu üretim aşamasında entegre akıllı sistemler tarafından yönlendirilen yüksek oranda bilgisayar yazılımları ve iş zekası ürünleri kullanılmaktadır. Bu düzeyde yalnızca insan unsuru dikkate alınarak üst düzey kararlar alınır. Sistemler seçilen görevleri üretmek için kendi makine zekasını kullanır.
Seviye 4: Otomatik Sistemler	Bu aşamada insandan çok az yardım alarak, son teknolojiye sahip makine ve sistemler kullanarak üretim yapılmaktadır. Otomasyon, belirli büyüklükteki makine ve sistemlerin entegre edilmesi, özel yazılım paketleri kullanılarak uygulanabilmekte ve artık işlerin önemli bir kısmı makineler tarafından tamamlanmaktadır. Otomasyon operasyonel emekte tipiktir. Araç üreten bir fabrika ya da seri üretim parçalar üreten bir atölye olabilir. Üretimde endüstriyel robot kollar ve otomasyon sistemleri kullanılmaktadır.
Seviye 3: Mekanize Sistemler	Bu seviyede çalışanlar, tüm görevleri tamamlamak için en son teknolojiye sahip ekipman ve araçları kullanır. CAD/CAM sistemleri endüstrilerde kullanılmaktadır ve bu tür mekanizasyon, özellikle atölye tarzı işlemlerde giderek daha yaygın hale gelmektedir. Bu aşamada sistem, özellikle ekipmanların kontrolü ve yönetimi için hala insan kaynağına ihtiyaç duymaktadır. Klasik torna tezgahları bu seviyedeki en yaygın ve ideal makine tipidir. Bu makinelerin atölyeden fabrika durumuna dönüştürülmesinde bilgisayarların rolü büyüktür.
Seviye 2: Yarı Manuel Sistemler	Bu seviyede ilkel makineler kullanılabilir de işin önemli bir kısmı işçilik yardımıyla elle tamamlanmaktadır. İnsan emeği hâlâ önemini koruyor. Taş öğütme değirmenleri bu seviyeye örnektir.
Seviye 1: Manuel Sistemler	Makine teknolojisi modern teknolojiye göre en düşük seviyededir. Kullanılan aletler çok basit el aletleri veya insan elidir. Önemli miktarda insan emeği kullanılıyor. Pulluklar veya eski dokuma tezgâhları bu tabakaya örnektir. Modern teknolojiye göre verimsiz ve emek yoğun üretim teknikleri ve teknolojileri kullanılmaktadır.

Yukarıdaki tablo genel terimler kullanılarak her seviye için teknolojik seviye kapsamlarını göstermektedir. Amaç, çeşitli endüstrileri ve işletme türlerini dikkate alan esnek ve uyarlanabilir bir değerlendirme modeli geliştirmektir. Seviye 1 veya 6'ya uyan işletmelerin bulunmaması modele engel teşkil ediyor gibi görünüyor. Ancak modelin uyarlanabilir yapısından dolayı bu durum, kullanışlılığını kaybetmekten ziyade, kullanıldığı zamana bağlı olarak güncelleme potansiyelini işaret etmektedir. Daha düşük seviyeler eninde sonunda güncelliğini yitirmiş gibi görünecek, ancak daha yüksek seviyeler büyüme fırsatlarına sahip olacak.

Teknolojik Tahmin Çeşitli teknoloji tahmin teknikleri şunları içermektedir (Mestçi & Kul, 2005). Aşağıda farklı teknoloji tahmin yöntemleri ele alınmıştır:

1. Delphi Tekniği: Teknolojiyle ilgili çeşitli konularda farklı lokasyonlardaki uzmanların sorgulanmasını, yanıtların değerlendirilmesini ve sonuçların uzmanlara geri gönderilmesini içerir. Bu süreç fikir birliğine varılıncaya kadar tekrarlanır.

2. SWOT ve STEEP Analizi: Teknolojinin geliştirilmesi için bilinen analizlerin kullanılması.

3. Beyin Fırtınası: Bu yöntem altı ila on iki kişilik gruplar halinde kullanılarak herkesin fikirlerini kesintisiz olarak dile getirmesine olanak sağlar. Daha sonra grup üyeleri fikirleri tartışacak ve değerlendirecektir.

Kritik/Anahtar Teknoloji Araştırması, yalnızca seçilmiş bir uzman grubunun katıldığı toplantılarda belirli kavramların tartışılmasını içerir.

- Ortaya çıkan teknik trendleri takip etmek,
- Hangi teknolojilere yatırım yapacağınızı belirleyin,
- Müşteri ihtiyaçlarına en uygun yeni ürün veya hizmet konseptini seçmek,
- İşletmeye rekabet avantajı sağlayacak yeni konseptler arayın.

Varyans Analizi Kullanılarak CNC Makine Bilgi Düzeyi Araştırması ile Teknoloji Yönetimi Tahmini

Bir teknolojik yenilik, bilimsel keşif veya buluşun, anlamlı faydalar üretip üretmeyeceği ve ne zaman üreteceğine ilişkin önemli göstergelere sahip olduğu tanımlanır veya tahmin edilir. Başka bir deyişle, bir şirket stratejik düşüncesini geliştirdikçe teknoloji de konuyla alakalı hale gelir ve

olasılıkların belirlenmesine yardımcı olur. Teknik tahminde en kritik stratejik seçimler aşağıdaki gibidir (Akın, 2005). Yapılacak değerlendirmede H1 ve H0 hipotezleri olmak üzere iki tür hipotez kurulacaktır. H0 hipotezinin $P < 0,005$ olması durumunda Yaş, Tecrübe ve Eğitim durumu ile elde edilen sınav sonuçları arasında anlamlı bir ilişki olduğu sonucuna varacağız. Yani sınav sonuçları yaş, mezuniyet ve tecrübeden etkilenmez. H1 hipotezi için $P > 0,05$ ise Yaş, Tecrübe ve Eğitim durumu ile elde edilen sınav sonuçları arasında herhangi bir ilişkinin olmadığı sonucuna varacağız. Eğer bu doğruysa Yaş, Deneyim ve Eğitim arasında bir ilişki vardır ve puanlar değiştikçe değişir. Araştırmaya toplam 130 fabrika işçisi katıldı. Katılımcılar 27 farklı yaş grubundandı. Katılımcıların 1 ila 16 yıl arasında değişen 24 farklı iş deneyimi vardı. Fabrika işçilerinin eğitim durumları ilkokul, lise, önlisans ve üniversite düzeylerine göre değişmektedir. Elde edilen analiz sonuçları Tablo 3, 4 ve 5'te sunulmaktadır.

Tablo 3: Katılımcıların yaş gruplarına göre varyans analizi

Kaynak	DF	Adj SS	Adj MS	F-Değeri	P- Değeri
Yaş	26	88,19	3,392	0,72	0,835
Hata	103	488,19	4,740	-	-
Toplam	129	576,38	-	-	-

Tablo 4: Katılımcıların deneyim düzeylerine göre varyans analizi

Kaynak	DF	Adj SS	Adj MS	F-Değeri	P- Değeri
Deneyim	23	128,3	5,577	1,32	0,173
Hata	106	448,1	4,227	-	-
Toplam	129	576,4	-	-	-

Tablo 5: Katılımcıların eğitim durumlarına göre varyans analizi

Kaynak	DF	Adj SS	Adj MS	F-Değeri	P- Değeri
Mezuniyet	4	20,23	5,059	1,14	0,342
Hata	125	556,14	4,449	-	-
Toplam	129	576,38	-	-	-

Yapılan çalışmada katılımcılara CNC ile ilgili çeşitli sorular sorulmuş ve bunların yaş, eğitim düzeyi ve deneyim düzeyleri ile ilişkileri incelenmiştir. Analizde $P < 0,05$ hipotezi desteklenmedi; bu durum, ne yaşı, ne deneyimin ne de mesleki deneyimin CNC ve teknik özellikleriyle herhangi bir ilgisi

olmadığını gösteriyor. Bu durum yaş, deneyim ve eğitim seviyesindeki değişikliklerin bu bilgiyi etkilemediği anlamına gelmektedir.

Bu bulgulara dayanarak teknoloji yönetiminin sadece üst yönetime değil, organizasyonun en alt kademesine de öğretilmesi gerekmektedir. Çünkü teknoloji yönetiminin uygulanabilirliği için bu yöntemi uygulayan ekibin başarılı olması verilerden de anlaşılmaktadır.

SONUÇ

Teknolojideki hızlı değişimler nedeniyle şirketler bazı iç yeterliliklerini dış kaynak kullanma becerisiyle birleştirmeye zorlanmaktadır. Günümüzün yoğun rekabet ortamında, daha iyi kararlar almak için gereken bilgiye duyulan ihtiyaç ve seçeneklerin çeşitliliği gibi yönetim operasyonlarının boyutları da büyümüştür. İlerleyen süreçte bu sayının daha da artması bekleniyor. Hızla tüketilen bir yapıya sahip olan ve artan rekabet koşulları karşısında kurum genelinde paylaşılması gereken bilginin, üretildiği andan itibaren paylaşılabilir hale getirilmesi gerekmektedir. Bu bakımdan gelecekte bilgi teknolojilerinin yönetsel amaçlarla kullanılması kaçınılmazdır. Ayrıca imalat ve hizmet sektörlerinin de bu alana odaklandığı göz önüne alındığında, teknolojide yeni ürün alanlarının ve inovasyon süreçlerinin yönetilebilirliği büyük önem taşıyor. Özellikle üretim girdisi olarak teknolojinin öneminin artmasıyla birlikte planlama daha da gerekli hale gelmiştir. Bu nedenle işletmeler tüm kaynaklarını maksimuma çıkararak teknik planlama sürecini hayata geçirmek için yoğun çaba göstermektedir. Dolayısıyla teknoloji yöneticilerinin yönetim kademelerinde görev alma ihtiyacı arttı ve artmaya da devam edecek. Bu yöneticiler işletmelerde güncel teknolojiden sorumlu, teknolojik gelişmeleri takip eden, gelecekteki iş stratejilerine karar veren ve bu konularda yönetimi bilgilendiren kişilerdir.

KAYNAKÇA

- Akın, H. B. (2005). *Yeni ekonomi: Strateji, rekabet, teknoloji yönetimi*. Çizgi Kitabevi.
- Akolaş, D. A. (2009). Teknoloji yönetimi ve teknoloji yönetim süreci. *Aksaray Üniversitesi İktisadi ve İdari Bilimler Fakültesi Dergisi*, 1(2), 203-218.
- Aydoğan, E., & Semiz, S. (2004). İşletmelerde Teknolojiyönetimibağlamında İleri Üretim Teknolojilerive Otomotiv Sektöründe Bir Uygulama. *Selçuk Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Dergisi*(11), 115-133.
- Bellamy, A., Becker, P., & Kuwik, P. (2003). Developing a technology management curriculum from the perspective of strategic intent. *Journal of Technology Studies*, 29(2), 103-109.
- Cetron, M. J., & Davies, O. (2001). Trends now changing the world: Technology, the workplace, management, and institutions. *The Futurist*, 35(2), 27.
- Gökşen, Y., & Erdem, S. (2016). Hücresel Üretim Sisteminde Makine-Parça Ailelerinin Oluşturulmasında Dengeli Talep-Kapasite ve Dengesiz Talep-Kapasite Durumunun Analizi. *Dokuz Eylül Üniversitesi İktisadi İdari Bilimler Fakültesi Dergisi*, 18(2), 99-111.
- Mestçi, A., & Kul, R. H. (2005). Teknoşirket'lerde Kriz Yönetim Sistemi. *Akademik Bilişim Konferansları*, 02-04.
- Sarıhan, H. İ. (1998). *Rekabette başarının yolu teknoloji yönetimi*. Desnet Yayınları.
- Türk, F. K. M. (2008). İşletmelerde Teknoloji Yönetiminin Geleceği. *Niğde Üniversitesi İktisadi ve İdari Bilimler Fakültesi Dergisi*, 1(1), 59-71.
- Uluğ, F. (1999). İlköğretimde teknoloji eğitimi. *Milli Eğitim Dergisi*.

BÖLÜM 8

ELEMENTEL BOR, BOR BİLEŞİKLERİ VE BOR İYONLARININ ALTLIK MALZEMEYE UYGULANMASI

Dr. Öğr. Üyesi Fikri Erdem ŞEŞEN¹
Dr. Öğr. Üyesi Erol ALBAYRAK²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10384902>

¹ Kırıkkale Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, 71450, Kırıkkale, ORCID: 0000-0003-0369-0038, fesesen@kku.edu.tr

² Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, ORCID: 0000-0001-9161-9068, erol.albayrak@ahievran.edu.tr

GİRİŞ

Bor, yüzey işlemleri, enerji uygulamaları, elektronik malzemelerin geliştirilmesi ve hatta biyoteknoloji konularını da içeren çok geniş bir alanda kullanılan eşsiz bir elementtir. Bu çalışmada elementel bor, bor bileşikleri ve bor iyonlarının metal ve yarı iletken altlıklara kaplama, difüzyon tabakası biriktirme ve iyon ekme şeklinde uygulanmasına ilişkin bir derleme sunulmaktadır. Burada ilgili süreçlerin fiziksel, kimyasal ve elektrokimyasal mekanizmalarına kimyasal ve/veya elektrokimyasal tepkimeler ve fizikokimyasal eşitliklere odaklanılmaktadır. Konu ile ilgili geleneksel yöntemleri aktarırken yakın zamanda ortaya çıkmış olan gelişmelerden de söz etmekte ve gelecekte yapılabilecek çalışmalar konusunda kısa önerilerde bulunmaktadır. Bor, gerek element şeklinde, gerek bileşik durumunda ve gerekse iyon durumunda pek çok kullanım alanı bulan, yarı-metal özelliğine sahip özel bir maddedir. Bor mineralleri açısından en zengin ülke olan Türkiye’de ve dünyanın diğer pek çok ülkesinde bora ilişkin pek çok çalışma yapılmıştır ve halen yapılmaktadır. Bor, element, bileşik ve iyon durumunda yüzey işlemi, alaşımlama, iyon ekme, karma malzeme oluşturma ve sert metal bileşiği üretimi gibi pek çok alanda kullanım alanı bulmakta ve borun bu amaçlarla kullanılmasına ilişkin her geçen gün yeni yöntemler, Covid-19 salgını sırasında gündeme gelen hijyen özelliği konusunda olduğu gibi, ortaya çıkarılmaktadır. Borun kullanımına ilişkin yukarıda sözü edilen pek çok yöntem arasında, element, bileşik ya da iyon durumundaki borun çeşitli özelliklerdeki altlık malzemeler üzerine çeşitli şekillerde uygulanması işlemleri giderek önem kazanmaktadır. Bu altlık, metal, yarı-metal, seramik, sert metal bileşiği, karma malzeme, elektronik malzeme ve hatta yine bor esaslı/bor içerikli bir malzeme olabilmektedir. Konuya ilişkin deneysel çalışmalardan da söz edilen bu derlemede, bor esaslı maddelerin bu tür altlık malzemelere çeşitli yol ve yöntemler izlenerek uygulanması anlatılmaktadır. Konu, bu uygulamalara ilişkin pratik bilgilerin ve kimyasal, elektrokimyasal, termodinamik tepkimeler ve fiziksel eşitlikler gibi- bilimsel mekanizmaların ışığında aktarılmıştır. Geleneksel yöntemlere ve yakın zamanda ortaya çıkmış olan gelişmelere bir arada yer verilmiştir.

BOR ELEMENTİ

Elementel borun atom numarası 5’tir. Periyodik çizelgede 3-A grubunda ve ikinci periyoddadır. Fizikokimyasal açıdan yarı-metal özelliğine sahip olan bir elementtir.

Teorik atom çapı 0.085 nm olup alaşım elementi olarak ara yer ya da yer alan konumunda bulunabilir. Kütleli mol başına 10.811 gramdır. Elektron dizilimi $1s^2 2s^2 2p^1$ şeklinde olup ortaklaşım (kovalent) bağlar oluşturan üç değerlik elektronuna sahiptir, dolayısıyla stokiometrik bileşik oluşturma durumunda pek çok değerlik alabilir. İyonik durumda ise bir elektron verebildiği gibi bir elektron alabilir. Fizikokimyasal açıdan kararlı bir duruma gelebilmesi

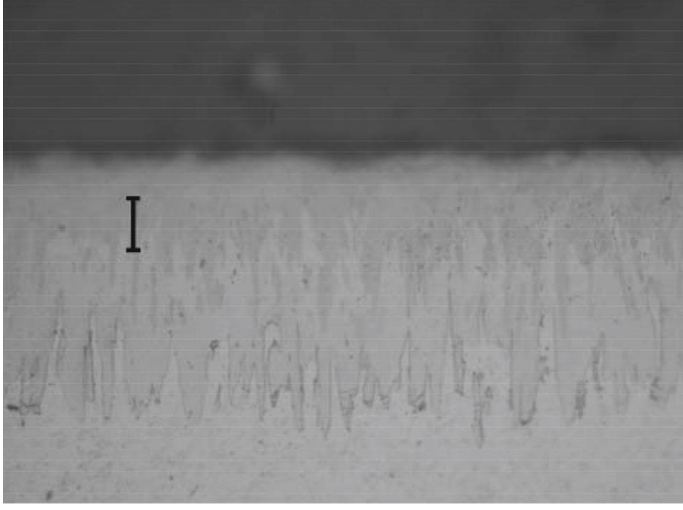
için bileşiklerinde son derece karmaşık yapılar oluşturmaktadır. Silisyum ve germanyum gibi yarı-iletken elementlere katkı atomu durumunda eklenerek artı tip katkı yarı-iletken malzeme oluşturur (Yünlü, 2019).

BOR ESASLI MALZEMELERİN DİFÜZYON TABAKASI BİRİKTİRME İŞLEMLERİNDE KULLANILMASI

Atom çapı küçük olan bor elementi, onlarca yıldır metallerin yüzeyine difüzyon tabakası biriktirme işlemlerinde kullanılmakta olup metal altlık yüzeyine bor yayımına kısaca “Borlama” adı verilir. Borlama işlemi, temel olarak, katı, sıvı, gaz ya da plazma durumundaki bir bor kaynağından elde edilmiş olan elementel borun metalin yüzeyine belirli bir derinliğe kadar nüfuz ettirilmesi olayıdır. Genellikle demir esaslı alaşımlara uygulanmakla birlikte son yıllarda titanyum alaşımlarına da uygulanmaktadır (Alaeddine & Khedidja, 2019). Borlama işleminin akışkan yatak veya lazer ışını kullanılarak da yapılabileceği rapor edilmiştir (Badini, Bianco, Talentino, Guo & Gianoglio, 1992; Anthymidis, Stergioudis & Tsipas, 2001; Anthymidis, Tsipas & Stergioudis, 2001). Altlık malzemenin yüzeyine yayılmış olan bor, bu malzemenin kimyasal bileşiminde bulunan elementlerle birleşerek bileşik oluşturur ve meydana gelmiş olan ve “Borür” adı verilen difüzyon tabakası bu bileşik ya da bileşiklerden oluşur.

Bor kaynağı olarak $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$, H_3BO_3 , B_4C kullanılabilir. Safsızlığı daha az yani saflığı yüksek metallere difüzyon tabakası biriktirme işlemlerine daha uygundur, çünkü nüfuz ettirilecek atomlar daha çok metal altlığın bünyesindeki boşluklardan yararlanarak içeriye doğru ilerler. Borun saflığı yüksek metallerin yüzeyinde oluşturduğu difüzyon tabakası, Şekil 1’de verilen mikro-yapı fotoğrafında görüldüğü gibi, parmaklı bir yapıdadır. Altlık metalin bünyesinde bulunan alaşım elementi içeriği arttıkça, bu borür tabakası düzleşme eğilimine girer yani yüzeye paralel bir durum alır.

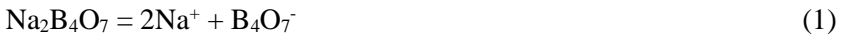
Elektronları etkileşmeyen moleküller için değiş - tokuş korelasyon potansiyelini belirlemek gereklidir (Gianozzi ve ark., 1991). Daha başarılı hesaplamalar yapabilmek için bazı bilim insanları LDA yaklaşımına eklemeler yapmış ve Perdew-Burke-Ernzehoﬀ, genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (PBE-GYY) ortaya çıkmıştır Bu çalışmada moleküller için hesaplamalarda daha iyi sonuç almak amaçlı olarak PBE-GYY yaklaşımı kullanılmıştır (Perdew ve ark., 1996). Malzemeye ait minimum enerjiyi hesaplayabilmek için denklem 2’de Schrödinger denklemini çözmek gerekir.



Şekil 1: Borun Armco demirinden sonra en az alaşımlı çelik olarak bilinen arayer atomuz çeliğin yüzeyinde oluşturduğu borür (difüzyon) tabakası (ölçek uzunluğu: 20 µm) (Şeşen, Özgen & Şeşen, 2017)

Bor kaynağı olarak sıvı durumdaki kalsine (susuz) sodyum boraksın ($\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$) kullanıldığı ve dışarıdan elektrik akımı verilerek elektrokimyasal bir pil düzeneğinin oluşturulduğu bir çok çalışma yapılmıştır (Yapar, 2003; Kartal, 2011; Şeşen, 2015). Borlanan çeliğin elektrokimyasal pilin katodu, nikel bir plakanın da pilin anodu olması durumunda aşağıda verilen kimyasal ve elektrokimyasal tepkimelerin meydana geldiği öne sürülmüştür (Sinha, 1995):

- 1- Öncelikle susuz boraks sodyum ve tetraborat iyonlarına parçalanır.



- 2- Sodyum iyonu katoda, tetraborat iyonu ise anoda doğru yönelir. Tetraborat iyonu anot bölgesinde bor oksit ve serbest oksijene parçalanır.



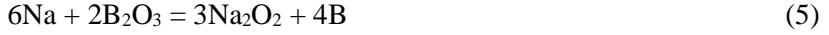
- 3- Serbest oksijen anot malzemesi olan nikel ile tepkimeye girerek nikel oksidi oluşturur.
- 4- Sodyum iyonları katot bölgesinde indirgenme yoluyla nötr duruma gelir.



- 5- Oluşmuş sodyum atomları, anot bölgesinde oluşmuş bor oksit ile tepkiye girerek bor atomlarını oluşturur.



ya da



Başka bir araştırma, elementel borun oluşumunun elektrokimyasal tepkimelerini biraz farklı bir şekilde ortaya koyar (Kartal, Eryılmaz, Krumdick & Erdemir, 2011):

- a- Susuz boraks iki farklı okside parçalanır.



- b- Sodyum bor oksit parçalanarak sodyum iyonunu oluşturur.



- c- B_2O_4^- anoda doğru, Na^+ ise katoda doğru hareket eder. Bor oksit anot bölgesinde nötr duruma gelirken sodyum iyonu da katot bölgesinde nötr duruma gelir.



- d- Sonunda, katodun yüzeyinde aşağıdaki tepkimenin gerçekleşmesiyle elementel bor oluşur.



Başka araştırmacılar da, elementel borun asıl oluşum tepkimesinin tümüyle elektrokimyasal bir özelliği olduğunu iddia eder (Çelikkın, Öztürk, Aydın & Aksu, 2007; Zhou & Bai, 2015):



ya da daha kısa bir şekilde



Oluşmuş bor atomları katot işlevini gören altlık malzemeye nüfuz eder. Elektrokimyasal borlama işleminde sisteme dışarıdan sağlanan elektrik akımı arttıkça daha çok sayıda bor atomu altlık malzemenin yüzeyine çarpar. Katı durumdaki bor kaynağı kullanılarak yapılan borlama sıvı borlama ile karşılaştırıldığında daha az donanım ve maliyet gerektirir, daha düşük sıcaklıklarda gerçekleştirilir, ancak daha uzun sürer. Altlık malzeme bor kaynağı, aktivatör ve dolgu maddesi ile doldurulmuş bir kapsül içerisine yerleştirilerek borlama sıcaklığına ısıtılacak olan bir fırına konur (Balusamy, Sankara Narayanan, Ravichandran, Park & Lee, 2013; Arslan & Akgün Kayral, 2021; Joshi & Osmani, 2014).

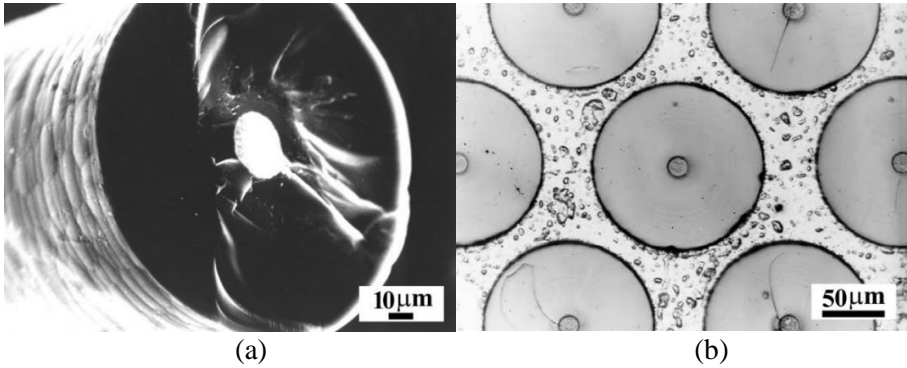
BOR ESASLI MALZEMELERİN KARMA MALZEME OLUŞTURMAK AMACIYLA ALTLIK MALZEME ÜZERİNE UYGULANMASI

Birbirinden biçimleri ve kimyasal bileşimleri ile ayrılmış ve esas olarak birbiri içerisinde çözünmeyen farklı türde en az iki malzemenin karıştırma ya da birleştirme yoluyla bir araya getirilmesiyle oluşturulan malzemeler “Karma (kompozit) malzeme” olarak adlandırılır. Bir karma malzeme, bir anafaz malzeme ile bu anafaz malzemeye yapılan takviye elemanından/elemanlarından oluşur (Kınıkoğlu, 2001).

Karma malzemeler birkaç açıdan sınıflandırılabilir: Anafaz malzemesinin türüne göre, Metal Anafazlı Karma Malzemeler, Polimer Anafazlı Karma Malzemeler ve Seramik-Karbon Anafazlı Karma Malzemeler olarak üçe ayrılır. Takviye malzemesinin fiziksel yapısına göre ise, Parçacık Takviyeli Karma Malzemeler, Lif Takviyeli Karma Malzemeler, Whisker Takviyeli Karma Malzemeler, Nanotüp Takviyeli Karma Malzemeler, Tabaka Takviyeli Karma Malzemeler, vb. türleri vardır (Avcioğlu, 2022; Avcioğlu, Buldu, Kaya & Kaya, 2021).

Bir karma malzemenin sonuç özellikleri, yalnızca anafaz malzemeye ve takviyeye bağlı değil, aynı zamanda doldurucunun dağılımına ve adhezyona yani anafaz malzeme ile takviye unsurlarının arayüzey bölgesinde birlikteliğine bağlıdır. Bundan dolayı, anafaz malzemenin kimyasal bileşimi ve ergime noktası, cam geçiş sıcaklığı, akıcılığı, özgül ağırlığı ve ıslatabilirliği gibi fizikokimyasal özellikleri ve takviye malzemelerinin boyut, şekil ve kimyasal özellikleri göz önünde bulundurulmalı ve üretim yöntemine buna göre karar verilmelidir. Bileşenler arasındaki adhezyonu arttırmak amacıyla bazı yüzey işlemlerinin yapılması gerekli olabilir. Bu konuda en çok yapılan uygulama bağlayıcı madde işlemi olup, en yaygın kullanılan bağlayıcı madde silan bileşikleridir (Avcioğlu, Buldu, Kaya & Kaya, 2021).

Elementel bor ve B_4C başta olmak üzere bor bileşiklerinden bazılarında yapılan lifler, havacılık endüstrisinde kullanılan polimer anafazlı karma malzemelerde takviye elemanı olarak 1960'lı yıllardan beri kullanılmaktadır (Bullock, 1974; Juneau, Shenker & Saffire, 1969). Karbon liflere bir alternatif olarak kullanım alanı bulmuş olan bor lifler, zamanla alüminyum başta olmak üzere metal anafazlı karma malzemelerde de kullanılmaya başlamıştır. Elementel bordan yapılmış bir lifin ve alüminyum anafazlı elementel bor takviyeli karma bir malzemenin yapısını gösteren Taramalı Elektron Mikroskobu fotoğrafları Şekil 2 (a) ve 2 (b)'de verilmiştir.



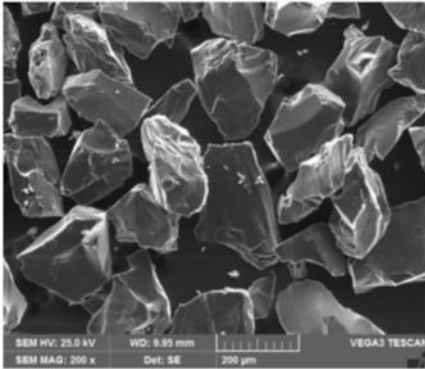
Şekil 2: Elementel bordan yapılmış bir lifin (a) ve alüminyum anafazlı elementel bor takviyeli karma bir malzemenin (b) yapısını gösteren Taramalı Elektron Mikroskobu fotoğrafları (Izdinsky, Minar & Ivan, 1995)

Metal anafazlı bor ya da B_4C veya BN takviyeli karma malzemeler, difüzyon yoluyla bağlama, toz metalurjisi (tozların karıştırılmasının ardından sıcak presleme uygulanması), sıvı metal infiltrasyonu, sıkıştırılmalı döküm, sprey kaplama, karma döküm ve katı-sıvı ikili faz teknikleriyle üretilebilir. Takviye malzemesi olarak kullanılan bu bor bileşikleri lif yapısında olabileceği gibi, parçacık, nano tabaka ya da nano tüp şeklinde de olabilir (Meydanoglu, 2006).

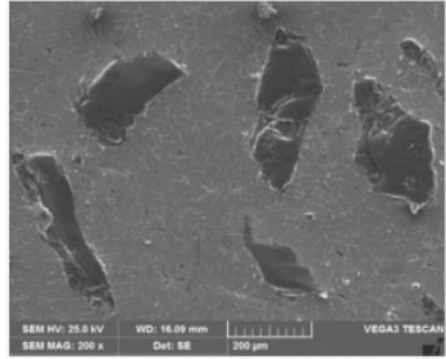
Cam takviyeli polyester anafazlı karma malzemeye ve karbon takviyeli polyester anafazlı karma malzemeye ek takviye olarak H_3BO_3 katıldığı ve bu yolla aşınma direncinin %50'ye kadar, çekme dayanımının da %32'ye kadar arttırıldığı açıklanmıştır (Aydın, Turan & Sarı, 2021).

Polietilen, poliamid, epoksi ve polistren gibi polimerlerin, molekül bünyesinde çok sayıda hidrojen atomu içerdiklerinden dolayı, nötron bombardı-

manına karşı savunmada kullanılabildiği bilinmektedir (Avcıoğlu, 2022; Sal-tan, Şirin, Aydın, Taşköprü & Yıldırım, 2024). B₄C takviyesi bu malzemelerin bu özelliğini arttırdığı gibi -özellikle mikron altı boyutta katılması duru-munda- mekanik özelliklerini de iyileştirmektedir. Alüminyum alaşımlarına yapılan B₄C takviyesinin aşınmaya ve korozyona karşı direnci de arttırdığı rapor edilmiştir (Kara, Özarpa, Esen, Ahlatçı & Turen, 2023). Elementel bor, B₄C ve BN takviyeli metal -özellikle alüminyum- anafazlı karma malzemele-rin üretimine ilişkin ve özelliklerinin iyileştirilmesine yönelik yeni yöntemler geliştirilmektedir (Mizuuchi et al., 2007; Kumaraswamy, Bharat & Rao, 2019). Karma malzeme üretimine uygun boyuttaki B₄C parçacıklarının ve 2011 alüminyum alaşımına ağırlıkça %6 oranında B₄C katılmasıyla ortaya çı-kan karma malzemenin Taramalı Elektron Mikroskobu kullanılarak elde edil-miş mikroyapı fotoğrafları sırasıyla Şekil 3 (a) ve 3 (b) de verilmiştir.



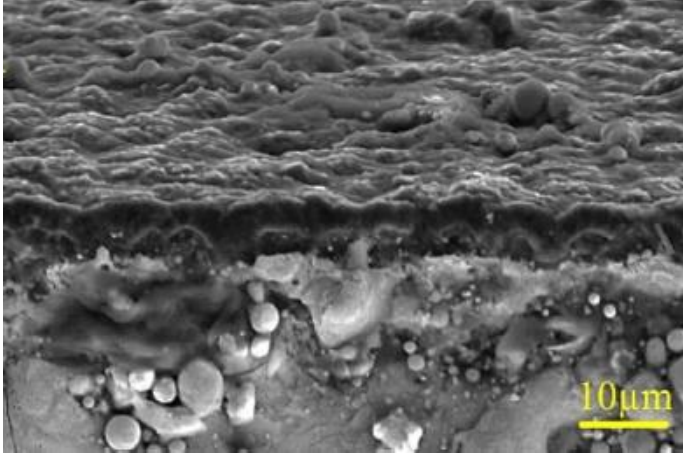
(a)



(b)

Şekil 3: 80-90 µm boyutunda B₄C parçacıklarının (a) ve 2011 alüminyum alaşımına ağırlıkça %4 oranında B₄C katılmasıyla ortaya çıkan karma malzemenin (b) Taramalı Elektron Mikroskobu kullanılarak elde edilmiş mikroyapı fotoğrafları (Raksha et al., 2023)

Mikron altı boyuta sahip elementel borun bilinen en sert malzeme olan elmasa takviye edilmesinin elmasın aşınmaya karşı direncini ve kesme performansını arttırdığı anlaşılmıştır. Söz konusu çalışmada üretilmiş olan elmas anafazlı elementel bor takviyeli karma malzemenin kesitinin Taramalı Elekt-ron Mikroskobu kullanılarak elde edilmiş mikroyapı fotoğrafı Şekil 4'te ve-rilmiştir.



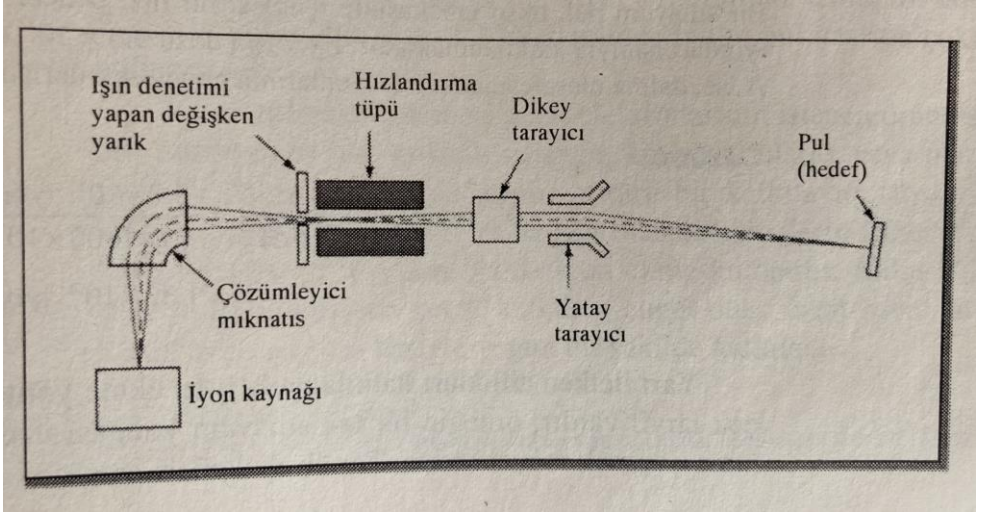
Şekil 4: Elmas anafazlı elementel bor takviyeli karma malzemenin kesitini gösteren mikroyapı fotoğrafı (Zhang, Xiang, Zhang, Zhang & Zhao, 2023)

BOR İYONU EKME

Yarı-iletken elektronik malzeme üretiminden biyoteknolojiye dek geniş bir yelpazede kullanım alanı bulan iyon ekme işlemi, aşılama atomlarının uçucu duruma geldiği, iyonlaştığı, ivmelendiği, kütle/yük oranına göre ayrıldığı ve genellikle yarı-iletken bir malzeme olan hedef altlığa doğru yönlendirildiği bir süreçtir. Aşılama atomları kristal kafesine girer, alıcı atomlarla bütünleşir, enerji kaybeder ve altlık malzemenin kesitinin sonuna dek ilerleyerek burada durur. Nüfuz etme derinliği aşılama malzemesine, altlık malzemeye ve ivmelenme potansiyeline bağlıdır (Rimini, 1986). Yarı-iletken bir hedefe uygulanan iyon ekme işleminin düzeneği Şekil 5'te temsili olarak verilen resimde gösterilmiştir.

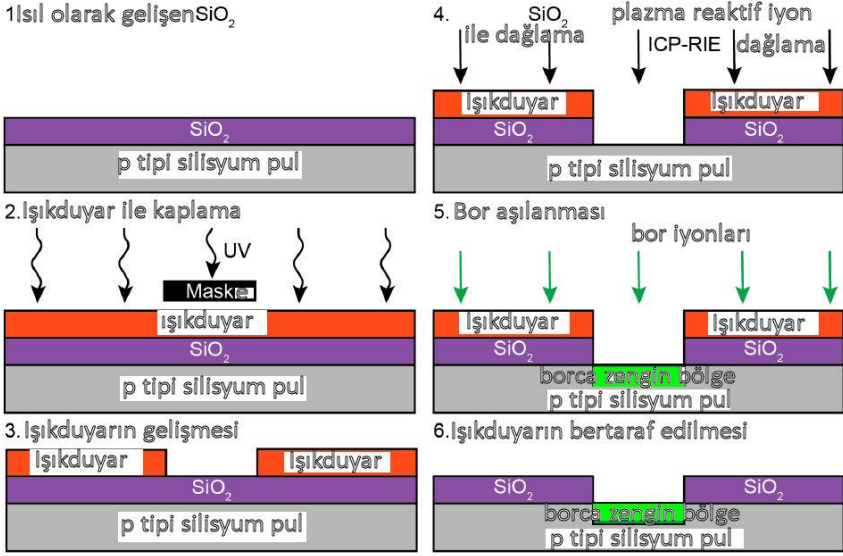
İyon ekme işlemi elektronik malzeme üretiminde yayınma işlemine göre bazı üstünlükler sergiler. Görece düşük sıcaklıklarda, hatta oda sıcaklığında uygulanabilmesi ve -örneğin metal oksit yarı-iletkenlerde- eşik potansiyelinin hassas derecede ayarlanabilmesine olanak sağlaması bu avantajlardan bazılarıdır. Kısa işlem süresi, geniş alanlar boyunca sağlanan mükemmel akış homojenliği, çok küçük aygıt yapılarının üretilmesine olanak sağlaması, aşılama iyonlarının toplam sayısının hassas şekilde kontrol edilebilmesi, nüfuz etme derinliğinin dozdan bağımsız olarak kontrol edilebilmesi, yayınmaya karşı maskelemede kullanılan oksit tabakalarının iyon ışınına karşı maskelemede de kullanılabilmesi, aşılama iyonlarının birbirinden ayrılması (uygulanması istenmeyen iyonların elenmesi) ve aşılama özelliklerinin çoklu iyon ekme yoluyla ayarlanabilmesi de mikroelektronik malzemelerin üretiminde atomsal yayınma tekniklerinden üstün olmasına sebep olan diğer özellikleridir. İyon ekme işlemi nanometre düzeyinde boyuta sahip mik-

roelektronik aygıt yapılarının üretiminde kullanılabilir tek aşılama yöntemi (El Kareh, 1995). Mikroelektronik aygıt üretiminin aşamalarından biri olan silisyum altlığın aşılama işleminin yöntemlerinden birinin akış şeması Şekil 6'da temsili olarak gösterilmiş, Şekil 7'de verilen temsili resimlerde ise atomal yayılım (a) ile iyon ekme (b) işlemleri altlık malzemeye nüfuz etme açısından karşılaştırılmıştır.

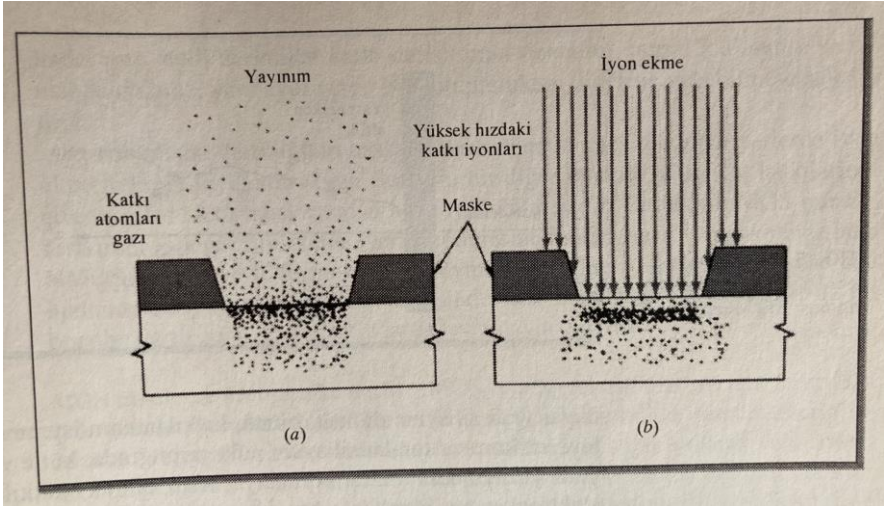


Şekil 5: Yarı-iletken pullara uygulanan iyon ekme işleminin düzeneğini gösteren basit bir şema (Kınıkoğlu, 2001)

Gerek atom durumunda, gerekse molekül durumundaki bor, temeli 1957 yılında alınmış olan bir patente dayanan iyon ekme işlemlerinde 1970'li yıllardan beri kullanılmaktadır. Katkısız (has) yarı-iletken malzemeler olan silisyum ve germanyum elementleri üzerinde ve bileşik yarı-iletkenlerden biri olan SiC üzerinde B⁺ iyonu şeklinde uygulanmaktadır (Anner, 1990). Ayrıca, Si₃N₄, metalik titanyum, metalik tungsten ve bunların silisyum ile oluşturdukları bileşiklerin üzerinde de uygulandığı rapor edilmiştir (Rimini, 1986; El Kareh, 1995).



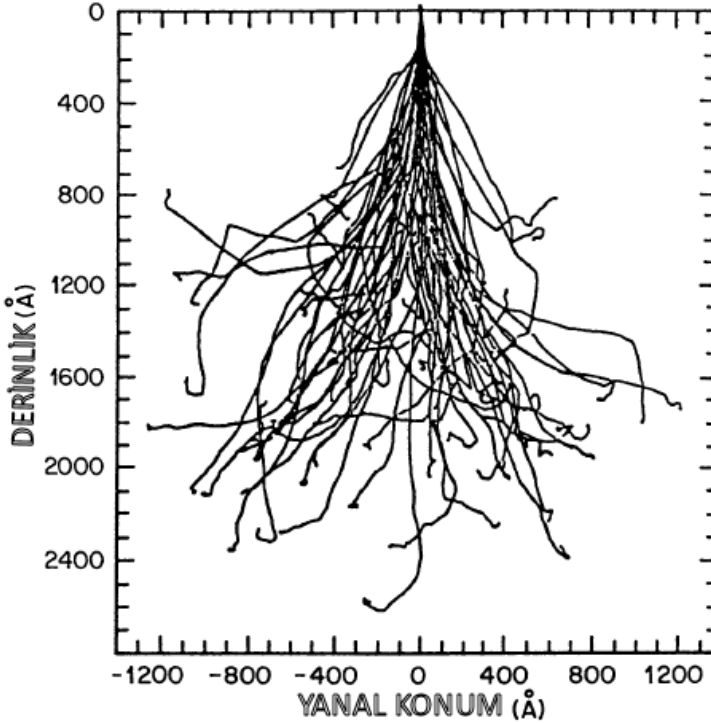
Şekil 6: Micron Technology firması tarafından kullanılan, silisyum altığa bir SiO₂ matrisi ile çevrelenmiş bor aşılı unsurların eklendiği imalatın akış şemasının özeti (Takabayashi et al., 2018)



Şekil 7: Açıkta kalan silisyum yüzeylerinin aşılmasını temsili olarak gösteren resimler: aşılama atomlarının yüksek sıcaklıkta yayılımı (a) iyon ekme (b) (Kınikoğlu, 2001)

Ekilmiş her iyon hedefe vurduktan sonra ev sahibi atomlarla birçok çarpışmaya girerek doğrultusunu değiştirir ve enerjisini azaltır. Sonunda, Şekil

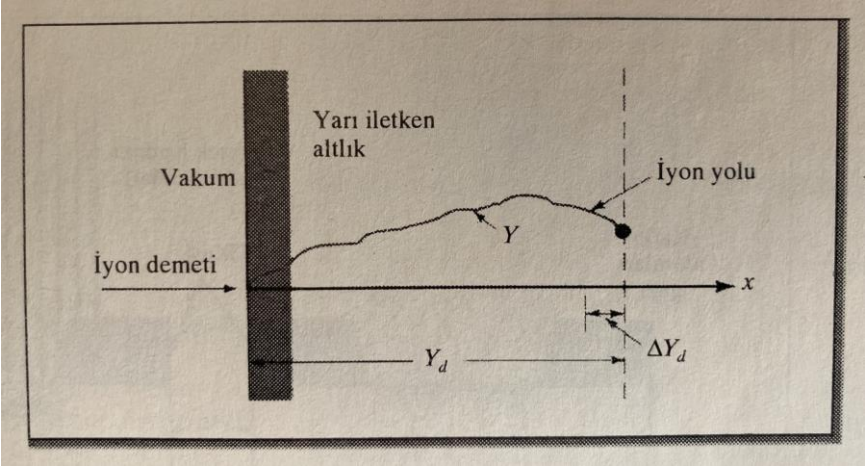
8’de verilen temsili resimde görüldüğü gibi, bir derinlikte durur. İyonun orijinal enerjisinin kafes bağlarının enerjisinden çok daha yüksek olmasından dolayı iyon saçılması işlemi, zayıf kafes kuvvetleri ihmal edilerek, çekirdek çiftleri arasındaki elastik çarpışmalarla tanımlanabilir. Saçılmanın ikinci bileşeni ise iyonun hedef altlıktaki elektronlarla yaptığı elastik olmayan çarpışmalardan kaynaklanmaktadır. S hedefin toplam durdurma gücü bu iki bileşenin toplamı olup, iyonun x yörünge uzunluğu başına düşen E enerji kaybı miktarıdır.



Şekil 8: Silisyum altlığa 50 keV’luk enerji uygulanarak ekilmiş bor iyonlarının 128 yörüngesinin hesaplanmasının sonucu (El Karez, 1995)

Ekilmiş her iyon hedef altlığa çarparken rastgele bir yol izler, bir yandan da yukarıda sözü edilmiş olan çekirdeksel ve elektronik duruşlar sebebiyle enerji kaybeder. İyon ekme dozlarının cm^2 başına genellikle 10^{12} ’den yüksek olmasından dolayı iyon güzergahı istatistiksel yöntemlerin uygulanmasıyla tahmin edilebilir. Yanal ve düşey hareketlerin bir bileşkesi olan ortalama top-

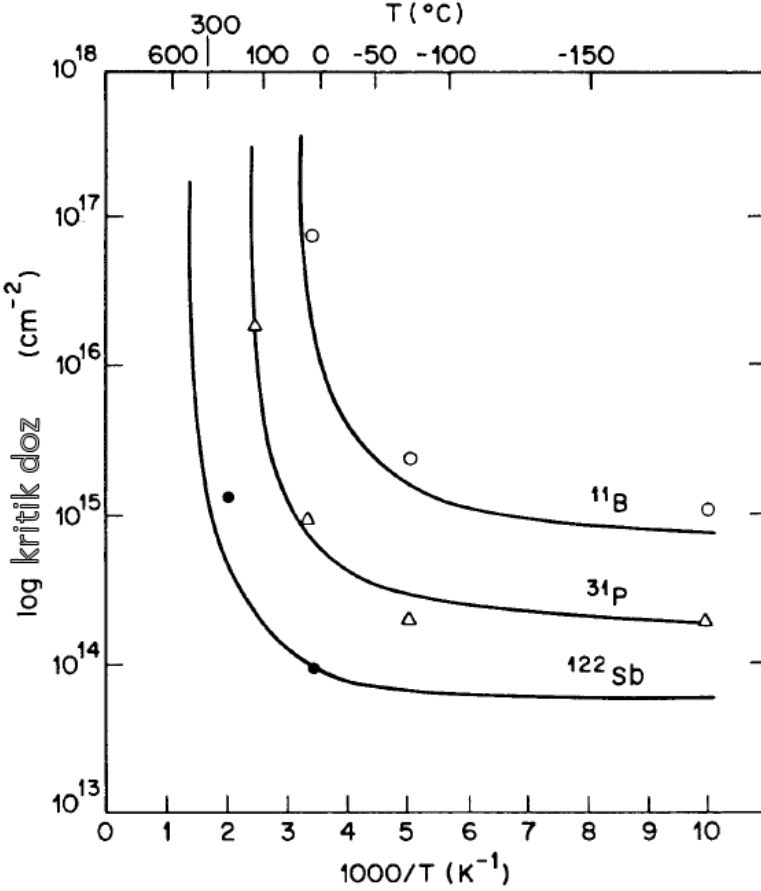
lam yolun uzunluğu Y yol şeklinde ifade edilir. Yolun gelen ışın demeti üzerindeki izdüşümü yani ekilmiş iyonların ortalama derinliği Y_d yol derinliği şeklinde ve ekilmiş iyonların bu yol derinliği boyunca dağılımının tahmin edilen standart sapma değeri ise ΔY_d yol derinliği sapması şeklinde ifade edilir. Bu üç kavram, Şekil 9’da verilen temsili bir resimde açıklanmaktadır. Yol derinliği sapması, hacimsel olarak her üç ekseninde de meydana gelir (Kınikoğlu, 2001; El Kareh, 1995).



Şekil 9: Y yol, Y_d yol derinliği ve ΔY_d yol derinliği sapmasını açıklayan temsili resim (Kınikoğlu, 2001)

Ekilmiş her iyon hedef altlığa ulaştığında, yukarıda anlatılmış olduğu gibi, kendisinin ve ev sahibi atomların yerinin değişmesine yol açan birçok çarpışmaya girer. Gerek iyon gerekse hedef atom hareket etmeyi sürdürür ve daha çok hasarın oluşmasına sebep olur, böylece enerji hareket eden pek çok parçacığa dağılır. Parçacık başına düşen enerji zamanla çok azalır ve sonunda akış durur. Bundan ötürü, çok sayıda iyonun ekilmesi durumunda, orijinal durumda kristal yapıda olan bir hedef altlığın kristal yapısı büyük ölçüde bozulur. Meydana gelmiş olan bu hasarın onarılması için iyon ekme işleminin ardından genellikle bir tür ısıtma işlemi yapılması gereklidir. Ne var ki, hedef altlığın sıcaklığının yeterince yüksek olması durumunda, hasarın bir kısmının, hatta bazı durumlarda tamamının onarılmasını sağlayacak bir “kendiliğinden tavlama” olayı gerçekleşir. Ağır elementlerin iyonları iyon başına daha çok sayıda hedef atomun yerini değiştirir, dolayısıyla altlığın tümüyle yeniden

kristalleşmesi için daha yüksek bir sıcaklığa gereksinim duyulur (Anner, 1990; El Kareh, 1995; Rimini, 1986).



Şekil 10: Bor, fosfor ve antimon iyonlarının sürekli bir amorf tabakanın oluşması için gerekli en düşük dozunun sıcaklıkla değişimini gösteren eğri (Anner, 1990)

Hedef altlığın amorf duruma gelmesi için gerekli olan en düşük doz sıcaklık arttıkça artmakta, ancak ekilen iyonların ağırlığı arttıkça azalmaktadır. Altlığın tümüyle amorf duruma gelmesi için gerekli olan en düşük iyon dozunun sıcaklıkla ve ekilen iyonun ağırlığıyla/büyüklüğüyle değişimi, bor, fosfor ve antimon iyonları özelinde, Şekil 10'da verilen grafikte gösterilmiştir.

KAYNAKÇA

- Alaeddine, K. & Khedidja, B. (2019). Electrochemical Boriding of Titanium Alloy, *Journal of Materials Research of Technology*, 8(6), 6407-6412.
- Anner, G. E. (1990). Planar Processing Primer, Van Nostrand Reinhold, New York.
- Anthymidis, K. G., Stergioudis, E. & Tsipas, D. N. (2001). Boriding in a Fluidized Bed Reactor, *Materials Letters*, 51(2), 156-160.
- Anthymidis, K. G., Tsipas, D. N. & Stergioudis, E. (2001). Boriding of Titanium Alloys in a Fluidized Bed Reactor, *Journal of Materials Science Letters*, 20, 2067-2069.
- Arslan, D. & Akgün Kayral, S. (2021). Mechanical Characterization of Pack-Boronized AISI 4140 and AISI H13 Steels, *International Advanced Researches and Engineering Journal*, 5(1), 061-071.
- Avcıoğlu, S. (2022). LDPE Matrix Composites Reinforced with Dysprosium-Boron Containing Compounds for Radiation Shielding Applications, *Journal of Alloys and Compounds*, 927, 166900.
- Avcıoğlu, S., Buldu, M., Kaya, F. & Kaya, C. (2021). Synthesis of Nuclear-Grade Nano-Sized Boron Carbide Powders and its Application in LDPE Matrix Composites in Neutron Shielding, “*Composite Materials: Manufacturing, Properties and Applications*” kitabından bölüm, 543-579, editörler: Low, I. M. & Dong, Yu., Elsevier.
- Aydın, T., Turan, K. & Sarı, N. Y. (2021). Investigation of Mechanical and Tribological Properties of Boric Acid Reinforced Composite Plates, *European Journal of Technique*, 11(2), 264-269.
- Badini, C., Bianco, M., Talentino, S., Guo, X. B. & Gianoglio, C. (1992). Laser Boronizing of Some Titanium Alloys, *Applied Surface Science*, 54, 374-380.
- Balusamy, T., Sankara Narayanan, T. S. N., Ravichandran, K., Song Park, I. & Ho Lee, M. (2013). Pack Boronizing of AISI H11 Tool Steel: Role of Surface Mechanical Attrition Treatment, *Vacuum*, 97, 36-43.
- Bullock, R. E. (1974). Mechanical of a Boron-Reinforced Composite Material Radiation-Induced of its Epoxy Matrix, *Journal of Composite Materials*, 8, 97.
- Çelikkan, H., Öztürk, M. K., Aydın, H. & Aksu, M. L. (2007). Boriding Titanium Alloys at Lower Temperatures using Electrochemical Methods, *Thin Solid Films*, 515(13), 5347-5352.
- El Kareh, B. (1995). Fundamentals of Semiconductor Processing Technology, Springer Science.

- Izdinsky, K., Minar, P. & Ivan, J. (1995). The Effect of Isothermal Exposure and Thermal Cycling on the Properties of Boron Fibre/Aluminium Alloy Composite Material, “*Metal Matrix Composites*” kitabından bölüm, *Key Engineering Materials*, 104-107, 845-853.
- Joshi, A. & Hosmani, S. S. (2014). Pack-Boronizing of AISI 4140 Steel: Boronizing Mechanism and the Role of Container Design, *Materials and Manufacturing Processes*, 29(9), 1062-1072.
- Juneau, P. W., Shenker, L. H. & Saffire, V. N. (1969). Optimization of a Boron Filament Reinforced Composite Matrix, “*Composite Materials: Testing and Design*” kitabından bölüm, 170-181, *American Society for Testing and Materials*.
- Kara, S. A., Özarpa, R., Esen, İ., Ahlatçı, H. & Turen, Y. (2023). Investigation of Corrosion Behavior of Boron Carbide Reinforced AA7075 Powder Composites, *Journal of Alloys and Compounds*, 968, 172168.
- Kartal, G. (2011). Katodik Redüksiyon-Termal Difüzyon Yöntemi ile Metallerin Borlanması (KRTD-bor) ve Süreçlerin Optimizasyonu, *Doktora tezi*, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Kartal, G., Eryılmaz, O. L., Krumdick, G., Erdemir, A. & Timur, S. (2011). Kinetics of Electrochemical Boriding of Low Carbon Steel, *Applied Surface Science*, 257(15), 6928-6934.
- Kınkoğlu, N. G. (2001). Malzeme Bilimi ve Mühendisliği, “*Smith, William F., Principles of Materials Science and Engineering*”den çev., Literatür Yayıncılık, İstanbul.
- Kumaraswami, H. S., Bharat, V. & Rao, T. K., (2019). Influence of Boron Fiber Powder and Graphite Reinforcements on Physical and Mechanical Properties of Aluminum 2024 Alloy Fabricated by Stir Casting, *Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering*, 7, 103-116.
- Meydanoglu, O. (2006). Wear and Corrosion Behaviors of Aluminum Matrix Boron Carbide Reinforced Composites, *Yüksek lisans tezi*, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Mizuuchi, K., Takeuchi, T., Inoue, K., Lee, J. H., Sugioka, M., Itami, M., Kawahara, M., Yamauchi, I. & Asanuma, H. (2007). Properties of Boron Fiber Reinforced Aluminum Matrix Composites Fabricated by Pulsed Current Hot Pressing (PCHP), *Materials Science Forum*, 539-543, 3139-3145.
- Raksha, M. S., Adaveesh, B., Nagaral, M., Boppana, S. M., Anjinappa, J., Khan, M. S., Wahab, M. O. A., Islam, S., Bhardwaj, V., Palavalasa, R. K., Khan, M. A. & Razak, A. (2023). Impact of Boron Carbide Particles and Weight Percentage on the Mechanical and Wear Characterization of Al2011 Alloy Metal Composites, *ACS Omega*, 8, 23763-23771.

- Rimini, E. (1986). Ion Implantation, "Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Microelectronic Materials and Processes" kitabından bölüm, editör: Levy, R. A., Kluwer Academic Publishing.
- Saltan, F., Şirin, K., Aydın, S., Taşköprü, C. & Yıldırım, Y. (2024). Boron Containing Polyvinyl Alcohol/Polyethylene Oxide/Polyvinyl Pyrrolidone Composites: Preparation, Characterization, Gamma Radiation Shielding and Gamma Radiation Effect on its Thermal Properties, *Radiation Physics and Chemistry*, 214, 111261.
- Şeşen, F. E. (2015). Çelik Yüzeylerinde Elektrotermokimyasal ve Termokimyasal Difüzyon Tabakası Oluşumuna ve Difüzyon Tabakalarının Özelliklerine İşlem Parametrelerinin Etkisi, *Doktora tezi*, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Şeşen, F. E., Özgen, Ö. S. & Şeşen, M. K. (2017). Effect of Process Parameters on the Formation of Boron-Titanium and Titanium-Boron Multilayered Diffusion Coatings on Interstitial-free Steel, *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*, 53(2), 167-178.
- Takabayashi, S., Kotani, S., Flores-Estrada, J., Spears, E., Padilla, J. E., Godwin, L. C., Graugnard, E., Kuang, W., Sills, S. & Hughes, W. L. (2018). Boron-Implanted Silicon Substrates for Physical Adsorption of DNA Origami – ek, *International Journal of Molecular Sciences*, 19, 2513.
- Yapar, U. (2003). Düşük Karbonlu Çeliklerin Termokimyasal Borlama ile Yüzey Özelliklerinin Geliştirilmesi, *Yüksek lisans tezi*, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Yünlü, K. (2019). Bor Bileşikleri, Sentez Yöntemleri, Özellikleri, Uygulamaları, Ulusal Bor Araştırma Enstitüsü, Ankara.
- Zhang, Z., Xiang, D., Zhang, Z., Zhang, Y & Zhao, B. (2023). Study on Tribology and Cutting Performance of Boron Doped Diamond Composite Coating Tool, *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 117, 106385.
- Zhou, J. & Bai, P. (2015). A Review on the Methods of Preparation of Elemental Boron, *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 10(3), 325-228.

BÖLÜM 9

Al₃Sc (Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc) ÇÖKELTİLERİNİN BAZI FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN DENEYSEL VE TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

Prof. Dr. Hamza Yaşar OCAK¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385024>

¹ Marmara Üniversitesi, Atatürk Eğitim Fakültesi, Fizik Anabilim Dalı, İstanbul, Türkiye, 0000-0003-3094-3459, hamza.ocak@marmara.edu.tr

GİRİŞ

Alüminyum, yer kabuğunda en bol bulunan üçüncü elementtir. Metalik özellik gösteren alüminyum “doğada en çok bulunan metal” unvanını taşımaktadır. Öte yandan, son 50 yıldır demir-çelikten sonra endüstriyel alanlarda en çok kullanılan metaldir. II. Dünya Savaşı ve Sanayi Devrimi sonrasında artan enerji, daha hafif ve yüksek dayanıma sahip komponentler, üretim kolaylığı ve geri dönüşüm ihtiyacı, alüminyumu endüstriyel kullanımda ön plana çıkarmıştır. (Eroğlu, 2018). Alüminyum alaşımları, sahip oldukları yüksek özgül mukavemet (mukavemet/yoğunluk), korozyon ve aşınma direnci, yüksek elektriksel ve ısıl iletkenlik, kolay işlenebilirlik, dökülebilirlik ve çevre dostu gibi özellikleri ile otomotiv ve havacılık endüstrisinde tercih edilmektedir. Üretilen parçaların ağırlıklarının azaltılması ve bunun doğal bir sonucu olarak ortaya çıkan enerji verimliliği, alüminyum alaşımlarını diğer rakiplerine göre üstün kılmaktadır.

1889 yılında mutfak araç gereçleri ile endüstri yolculuğuna başlayan alüminyum; deniz ve havacılık sektörü, konserve kutuları, büyük ölçekli borular, köprü inşaatlarında kendisine kullanım yeri bulmasının ardından, 2000 li yıllarda motor blokları, otomotiv jantları, doğalgaz sıvılaştırma üniteleri, zırh plakları üretiminde tercih edilmesi ile süreç güçlenerek devam etmektedir (Campbell, 2003; Zhao, 2010).

Diğer bir yandan, alüminyum alaşımlarının sahip olduğu fiziksel ve mekanik özellikler göz önüne alındığında gelecek yıllar içinde önemli bir malzeme grubu olacağı düşünülmektedir. Yurtiçi ve Yurtdışında ortaya konulan farklı araştırma çalışmalarında, artan dünya nüfusu, küresel ısınma ve şehirleşme artışı ile birçok bölge ve ülkede alüminyum alaşımlarına olan talebin artması beklenmektedir. (Demirci, 2011). Dünya üzerinde alüminyum talebinin 2020-2025 yılları arasında %24, 2025-2030 yılları arasında %26 ve 2030-2050 yılları arasında ise %136 oranında artış göstereceği öngörülmektedir. Bu kapsamda, alüminyumun ortaya koyduğu geri dönüşüm avantajı ve çevre dostu bir malzeme olması ve sahip olduğu diğer özellikler, onu geleceğin en parlak malzemesi konumuna getirmektedir.

Alüminyum skandiyum alaşımları, yumuşak görece hafif bir metal olup aynı zamanda mat gümüşümsü renktedir. Alaşımların bu rengi, havaya maruz kaldığında yüzeyinde teşekkül eden çok ince oksit tabakasından ileri gelmektedir. Bu alaşımlar, kıvılcım çıkarmaz ve zehirleyici değildir. Saf alüminyumun çekme gerilmesi yaklaşık 49 MPa iken, alaşım halinde bu değer 700 MPa'a kadar çıkar. Al-Sc yoğunluğu, diğer alaşımlar göre çok düşüktür. Alüminyum kolaylıkla dövülebilir olmasına rağmen Sc katkısıyla saha ser bir yapı kazanmaktadırlar. Çok üstün korozyon direncine sahip olmaları, yüzeyinde teşekkül eden oksit tabakasının kendisini koruyucu özellikte olmasındandır (Arslan, 2020).

Al-Sc alaşımları manyetik değildir ve normal şartlarda suda çözünmez. Alüminyum yer kabuğunda oksijen ve silisyumdan sonra en bol bulunan bir elementtir. Ama Sc için aynısını söyleyemeyiz. Dünyanın katı yüzeyinin ağırlığının yaklaşık %8'ini oluşturan alüminyum bolluk bakımından üçüncü metal olarak gelir. Alüminyum doğada genellikle serbest metal olarak bulunmamaktadır bunun yerine yüzlerce farklı mineral ve birleşiklerine rastlanmaktadır. Alüminyum metalinin mukavemet/ağırlık oranı çok yüksektir ve bu alüminyumun en önemli özelliğidir. Bu alaşımların en büyük avantajı hafif olmakla birlikte aşınmaya karşı dayanıklılığı olmasıdır. Aşınmaya karşı dayanıklı olması yüzeyinin hava ile temasında oluşan çok ince alüminyum oksit tabakasının daha fazla oksitlenmeye engel olmasındandır. Alüminyumun alaşımları içinde en mukavemetlilerinden biri Sc alaşımlı olanlarıdır (Ocak, 2013).

Al bazlı alaşımlar, maliyet ve enerji verimliliği bakımından da sanayinin önemli hammaddelerinden biri olup, bu alaşımlar üzerinde deneysel ve teorik çalışmalar yoğun olarak devam etmektedir (Nembach, 2000). Al-Sc alaşımları hafiflik ve esneklik özelliklerinden dolayı uzay ve otomobil endüstrisinde farklı sıcaklıklarda etkin olarak kullanılmaktadır (Willey, 1971). Kristal yapıların düzgünlüğü, tanecik boyutlarının küçüklüğü, süneklik, süper plastik özellik ve yorulma dirençlerinin düşük olması bu alaşımları daha özel kılmaktadır (Valiev,1997-Lee, 2002). Bunlara ilaveten, difüzyon, optik, manyetik ve korozyon özellikleri de araştırılan diğer bazı konulardandır (Morris, 1998-Valiev, 2000). Yapılan deneysel çalışmaların birçoğu x-ışınları analizlerini (XRD) içermekte ve bunlar teorik sonuçlarla da desteklenmektedir.

Bu alaşımlarında Sc elementi (hcp) Al (fcc) elementi içinde çok düşük oranda (%23) çözünmesine rağmen, mukavemeti oldukça artırmaktadır. Skandiyum, sadece mukavemet bakımından güçlendirici değil, aynı zamanda düşük oranlarda yeniden kristalleşmeyi artırarak, kristal boyutlarının da önemli ölçüde azalmasına neden olur (Murray,1998).

Malzemelerde gözlemlediğimiz mekanik özellikler malzemenin içyapısının değişmesi ile değişmektedir. Bahsi geçen malzeme içyapısı ise kimyasal bileşimin değiştirilmesi veya malzemeye uygulanan mekanik ve ısıl işlemler sayesinde değiştirilmektedir. Mukavemet, bir malzemenin en önemli mekanik özelliklerinden biri olup diğer birçok mekanik özellik de malzemenin mukavemetine bağlı olarak değişmektedir (Nembach,2000).

Malzemenin yapısını değiştirip mukavemet elde ettiğimiz yöntemlerden birisi de çökeltme sertleştirme işlemidir. Çökeltme sertleştirme tanımı olarak, malzeme içinde daha az miktarda bulunan ikinci fazın tanecikler halinde ana faz içerisinde çökeltilmesinin sağlanması ve bu sayede malzemede mukavemet artışının elde edilmesidir. Bu yöntem malzemelerin mukavemetlerini artırmada kullanılan en önemli yöntemlerden

biridir ve genellikle demir dışı metal alaşımlarında (Al, Ti, Mg) kullanım alanına sahiptir (Nembach,2000). Çökeltme sertleştirilmesi işleminde mukavemetin artmasının temel sebebi aşırı doymuş olan eriyiğin çökeltmesi sonucunda oluşan çökeltilerin diskolasyon hareketlerini sınırlaması ile açıklanmaktadır (Willey, 1971).

Teorik olarak, malzemelerin farklı fiziksel özelliklerini incelenmek için kuantum mekaniksel bir yöntem olan yoğunluk fonksiyonel teoremi (DFT) tercih edilmektedir. Bu fonksiyonun amacı, karmaşık çok yüzeyli elektronik dalga fonksiyonları yerine, elektron yoğunluğunu temel ölçüt olarak, elektronik yapı hesaplamalarını gerçekleştirmektir. DFT, birçok araştırmacı tarafından malzemelerin farklı fiziksel özelliklerini incelenmek için başarıyla uygulanmıştır (Jamal, 2014). Aynı şekilde Al-Sc alaşımlarının birçok özelliği de DFT yöntemleriyle incelenmiştir (Emmanuelle,2003). Daha önce bu teorik yöntemle Al-1.1Sc ve Al-1.9Sc alaşımlarının bazı elastik özellikleri hesaplanmıştı (Ocak,2013).

Al-Sc alaşımlarının mekanik özellikleri üzerine birçok çalışma olduğu, bu alaşımların mekanik özellikleri ayrıntılı olarak çalışıldığı bilinmektedir. Bu alaşımları daha özel kılan Al_3Sc fazlarıdır ve bu fazlar alaşımdaki Sc oranlarına göre farklı özellikler göstermektedir. Bu bağlamda Sc oranı yüksek olunca çökeltilerdeki mukavemetin büyüklüğü merak konusu olmuştur. (Royest, 2005).

ÇALIŞMA YÖNTEMİ

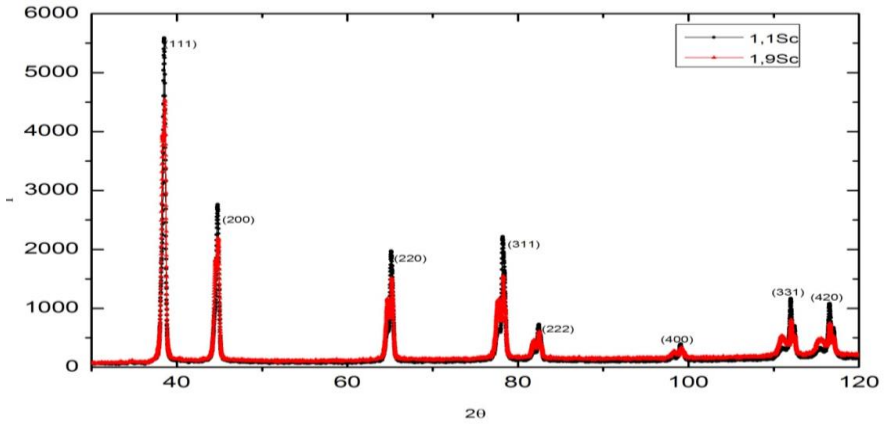
Bu çalışmada, Al-1.1Sc ve Al_3Sc alaşımlarının bazı mekanik ve termodinamik özelliklerinin incelenmesi amaçlandı. Bu maksatla, daha önce alaşımın XRD analizi yapılarak örgü parametreleri belirlendi. Bu analizin sonucunda alaşımların kübik fcc- $L1_2$ kristal yapıda ve Pm-3m (225) uzay gurubunda yer aldığı anlaşıldı. Bu alaşımların tanecik ve grain büyüklükleri, yeniden kristalleşme durumları, farklı kristal çökeltileri, zor ve zorlanma etkileri, sınır zorlamalarında kayma büyüklükleri, difüzyon özellikleri, makro ve mikro yapıları, kinetik özellikleri birçok araştırmacı tarafından farklı sıcaklıkta çalışılmıştır (Jones,2003- Roumina, 2002). Biz de bu alaşımlar için yaklaşık bir çalışma yöntemi uyguladık. Öncelikle her düzleme ait kırılma desenleri incelendi ve Al_3Sc fazının örgü parametreleri (a) hesaplandı. Yine bu fazlara ait, pik genişlikleri (β), XRD verilerinden, tanecik boyutları (D) da pik genişlikleri yardımıyla elde edildi ve son olarak da dislokasyon yoğunlukları hesaplandı.

Al_3Sc için yapılan teorik çalışmada Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin (DFT) CASTEP programında Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı (GGA) modülü kullanıldı. Dengedeki Al-Sc alaşımlarının örgü sabitini elde etmek için kayma enerjisi alınarak farklı örgü sabiti değerlerine karşılık gelen toplam enerjiler hesaplanmıştır. Bu hesaplamalarda deneysel değere en yakın

olan örgü parametresi dikkate alınmıştır. Hesaplalarda kesilim enerjisi olarak 50 Ryd ve smearing parametre değeri $\sigma=0.01$ Ry., 0,01GPa sabit basınç değerleri $4 \times 4 \times 4$ k point dağılımı kullanılarak, yapısal parametreler çerçevesinde Al-Sc alaşımlarının birim hacimleri ile elastik sabitleri ayrı ayrı hesaplandı. Bu değerler yardımıyla elastik sabitler ve bunlara bağlı olarak da bazı mekanik ve termodinamik özellikler elde edildi.

BULGULAR

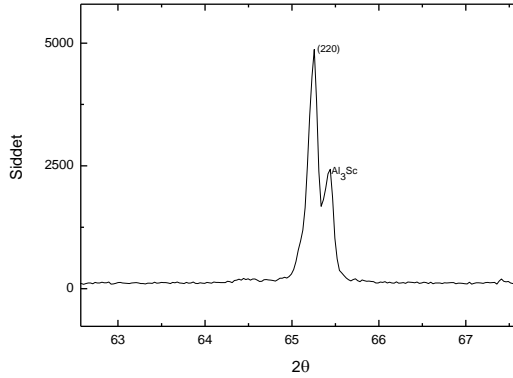
DeneySEL Bulgular



Şekil 1. Al-xSc (x=1,1-1,9) XRD sonuçları

Al-Sc alaışımının kristal yapı tayini şekil 1'den elde edildi. Bu kristal yapının $Pm\bar{3}m$ uzay boyutunda ve L12 fazında olduğu anlaşıldı. Bu bileşik Şekil 1'de görüldüğü üzere kübik yapıda kristalize olmuştur. Atomik pozisyonları: Al atomları köşelere yerleşirken Sc atomları Al atomlarının arasına yerleşmiştir. Şekil 1 deki pikler ayrı ayrı analiz edildiğinde her düzlem üzerinde kristalleşen Al_3Sc çökeltileri görülmüştür. Öncelikle her iki alaşıma ait Al_3Sc kristallerinin örgü parametreleri hesaplanarak ortalama büyüklüğü belirlendi.

İkinci aşamada Şekil 2'de görülen çökeltilere ait her bir pik genişliği $\beta = 0,5(2\theta_s - 2\theta_i)$ bağıntısından hesaplanarak radyan birimine dönüştürülerek ortalama büyüklük hesaplandı. Kristal boyutu ($D_{hkl} = \frac{0,9\lambda}{\beta_{hkl} \cos\theta_{hkl}}$) ise, kullanılan x ışınının dalga boyu, kırılma açısı ve pik genişliğine bağlı olarak, yine her bir pik için ayrı ayrı hesaplanıp ortalaması alınarak elde edildi.



Şekil 2: Örnek Al₃Sc piki

Dislokasyon veya diğer adıyla yapısal kusurlar; malzeme biliminde, kristal yapıların atomik dizilişlerinde bir doğru boyunca görülen atomik kaymalardır. Aslında mikro boyutta, malzemenin birim hacmindeki kusurların engellediği düzenli olarak dizilmiş atomlarda bulunan düzensizliklerdir. Dislokasyon hareketinin engellendiği bir yapıda mukavemet artar. Kristal oluşumunda meydana gelen her bir hata dislokasyonu daha da kuvvetli kılar. Kristal yapıdaki bütün metaller, ister tek taneli ya da çok taneli olsun, belli bir miktarda dislokasyon içerir. Çok taneli kristallerde görülen dislokasyonlar, tane ya da faz sınırları gibi, kristalin yöneliminde ya da yapısında değişimlerin olduğu sınırlarda çekirdeklenecek kristal içinde yayılır. Bu tür sınırların atom ölçeğinde pürüzsüz yapıya sahip olmaması ve ufak basamaklar, girintiler ya da çıkıntılar içermesi, dislokasyonların bu kusurlar üzerinde kolaylıkla çekirdeklenebilmesini sağlar.

Dislokasyonlar, sadece kristal yapı oluşurken ya da kristalin yüzeyindeki hatalar nedeniyle ortaya çıkmaz, dislokasyon oluşumundaki ara yüzey enerjileri de bu yayılmayı hızlandırır (Jamal, 2014). Malzemelerin gerek oluşumu gerekse homojenleştirme sürecinde kristal yapı içinde meydana gelen dislokasyon yoğunluğu, (hkl) düzlemlerinden gelen katkıların ortalaması olacağı için, bu yoğunluk ve sayısı tanecik boyutuna bağlı olarak $\delta_{hkl} = \frac{\tau}{D_{hkl}^2}$ bağıntısından hesaplandı (Gonzales-Ormeño, 2002).

Bu deneysel analizlerin sonucunda her iki alaşıma ait çökelti için elde edilen sonuçlar Tablo 1’ de verildi. Kristal boyutları malzemenin daha sertliği anlamında bir fikir verir. Bunun için bu alaşımlara ait DPÜ - İLTEM de ölçülen deneysel sertlik parametrelerinden 1,9 Sc oranlı çökeltilerin daha sert olduğu anlaşılmış olur. Tanecik boyutlarının çok küçük olması alzemede iyi kristalleşmenin bir ölçüsüdür (Lu, 2005).

Tablo 1: Al₃Sc fazına ait deneysel parametreler

Al ₃ Sc	a(Å)	β(rad)	D (nm)	ρ(1/nm ²)	H _v
Al-1,1Sc	4,0855	0,01535	13,6422	0,00615	104,53
Al-1,9Sc	4,1078	0,02208	10,1464	0,01231	114,44

Mekanik Özellikler

Bir malzemenin mekanik olarak kararlı veya kararsız olduğunun ve sertlik özellikleri hakkında detaylı bilgi ikinci dereceden bağımsız elastik katsayı özellikleri olan (C_{ij}) elastik parametreleriyle belirlenir. Bir malzemenin uygulanan basınca karşı tepkisi, o malzemenin yapısal kararlılığının ve elastik sabitleri hakkında bir ölçüdür. Bu durum, malzemenin her türlü özelliği hakkında bilgi edinmemizi kolaylaştırır. Bunlardan bazıları: Elastik sabitler, atomlar arası bağlanmalar, sertlik, süneklik, anizotropi, kırılma ve mekanik kararlılık hakkında bilgilerdir. Kübik yapılarda birbirinden farklı üç elastik sabiti (C_{11} , C_{12} ve C_{44}) değerleri vardır ve kübik yapılar için malzemenin mekanik kararlılığı da Born kararlılık kriterleri ile tanımlıdır (Born, 1954). Bu kriterler $C_{11} > 0$, $C_{44} > 0$, $C_{11} > |C_{12}|$, $(C_{11} + 2C_{12}) > 0$ şeklindedir.

Hesaplanan elastik sabiti değerleri Born kararlılık kriterlerinde yerine konulduğunda her iki alaşıma ait Al₃Sc fazlarının Born kararlılık kriterlerini sağladıkları ve dolayısıyla faz yapısının mekanik olarak kararlı olduğu sonucuna varılır. Cauchy basıncı olarak bilinen $C_{12} - C_{44}$ değerinin de pozitif olması atomik bağlanmaların önemli ölçüde iyonik karakterli olduğuna destek vermektedir. Hesaplama neticesinde ortaya çıkan Poisson oranı, atomlar arası bağlanmalar hakkında bilgi vermektedir. Ayrıca kovalent bağlanmanın bir ölçüsü gibi de değerlendirilir. Bu oran 0,1'e yakınsa malzeme kovalent, 0,25'e yakınsa iyonik bağlanmadan söz edilir. Buna göre, hesaplanan bazı parametreler Tablo 2' de verildi. Bu sonuçlar ELATE (Gaillac, 2016) programında kullanılarak diğer parametreler hesaplandı.

Tablo 2: Al₃Sc çökeltilerine ait bazı temel parametreler (GPa)

Al ₃ Sc	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	B	E	ν	G
Al-1,1Sc	181,72	38,95	71,77	88,88	167,92	0,1851	70,845
Al-1,9Sc	179,85	34,42	70,55	87,717	165,47	0,1856	69,783

Elastite teorisine göre doğrultu ve düzlemler üzerindeki sertlik özdeğerleri (λ) de yine ELATE programı yardımıyla hesaplandı. Sonuçlar Tablo 3' de verildi. Burada, 1.2.3 notasyonları eksen doğrultularını, 4,5,6 da sırayla düzlemleri tanımlamaktadır. Alaşımdaki çökeltilerin simetrik dağılımları incelendiğinde (E, B, G ve ν 'ya göre) $xy=xz \neq yz$ olduğu görüldü. Tablo 1 ve 2'den görüldüğü üzere Al-1,1Sc alaşımdaki Al₃Sc fazları daha kararlı ve daha mukavemetli olup, her iki durumda da atomik bağlar

iyonik olup kristal yapı isotropik değildir. B/G oranlarından her iki fazdaki çökeltilerin de kırılğan olduğu anlaşılmaktadır.

Malzemenin mekanik özellikleri de Tablo 1,2,3'te görülmektedir. Bu parametreler ikinci dereceden elastik sabit değerleri kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplama ilk önce Bulk Modülü (B) hesaplandı, sonra elastik sabit değerleri ve basınç kullanarak şekil değişikliği direncini ifade eden Shear Modülü (G) hesaplanır. G sertliği belirleyen parametrelerdendir. Malzemenin sertlik değeri, o malzemenin yüzeyindeki başka bir malzemenin basıncına karşı gösterdiği direnç değerinin ölçüsüdür. Tablolar incelendiğinde Bulk modülü beklendiği gibi $C_{12} < B < C_{11}$ aralığında hesaplandı. Bulk modülü 100 GPa dan küçüktür, buna göre bileşiminin sıkışabilirliği mümkün görülmemektedir. B/G oranı 1,75'ten büyükse malzemenin sünek, tersinde ise malzeme kırılğan karaktere sahip olduğu bilinmektedir. Bu değer Pugh kriteri olarak kabul edilir.

Tablo 3: Al₃Sc çökeltilerine ait sertlik özdeğerleri (GPa) ve anizotropi

Al ₃ Sc	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	A	B/G
Al-1,1Sc	71,77	71,77	71,77	131,41	146,74	267,01	1,056	1,2084
Al-1,9Sc	70,00	70,55	70,55	129,55	146,41	263,59	1,054	1,1988

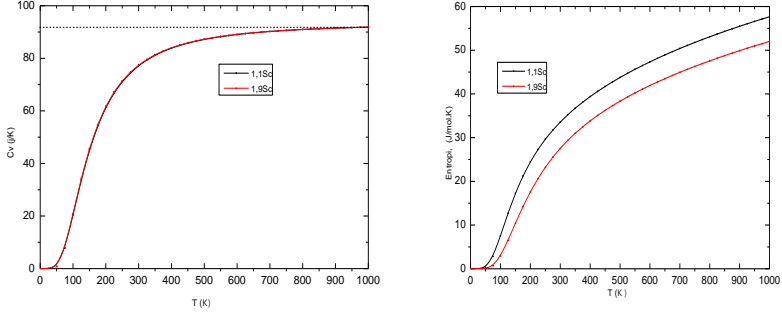
Al₃Sc çökeltilerinin termodinamik özellikleri 0-960 K aralığında incelenmiştir. Çökeltilere ait erime sıcaklığı (T_m), kaynama sıcaklığı (T_{KN}), ortalama ses hızı (V_{ort}), Debye sıcaklığı (θ_D), termal iletkenlik (k_m), denge noktası enerjisi (E) ve atomik yarıçapları hesaplanarak sonuçlar Tablo 4' de verildi.

Tablo 4: Al₃Sc çökeltilerine ait bazı termodinamik parametreler ve denge enerjisi

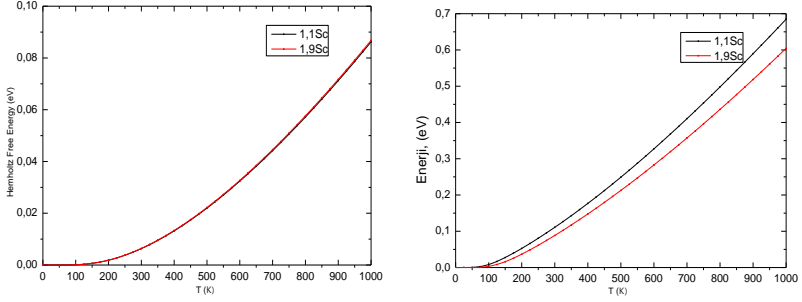
Al ₃ Sc	T_m (K)	$T_{K.N}$ (K)	k_m (E-19)	V_{ort} (m/s)	θ_D (K)	E (ev)
Al-1,1Sc	2554	1412	2,3917	5230	612,66	-4,0882
Al-1,9Sc	2335	1397	2,404	5260	604,76	-4,0524

Yapılan çalışmalarla kristallerin termodinamik enerji büyüklüklerinin sıcaklığa bağlı değişimleri ayrı ayrı incelendi ve sonuçlar aşağıdaki şekillerde verildi. Bu çalışmalardan sıcaklıkla titreşim enerjisinin arttığı ve serbest titreşim enerjisinin azaldığı anlaşılmıştır. Bu durum, alaşımı meydana getiren atomların arasındaki düzensizliğin sıcaklıkla beraber arttığını ifade etmektedir Entropi ise düzensizliğin bir göstergesidir. Isı sığası ise düşük sıcaklıklarda hızla artış göstererek T~400 K civarında bir maksimuma ulaşmakta ve daha sonra yavaşça artmaktadır. Debye sıcaklığından (800 K) sonra ise ısı sığası, Dulong-Petit limiti olarak bilinen

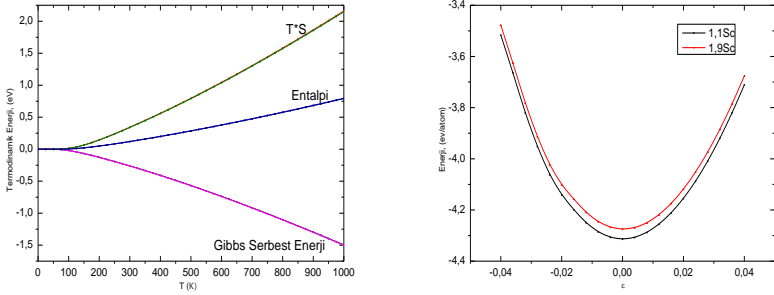
bir düzeye yaklaşarak düzleşmektedir. Entropi, entalpi, Gibbs serbest enerjisi ve titreşim enerjilerinin sıcaklıkla arttıkları görülmektedir.



Şekil 2: Al₃Sc Fazlarına ait, a) Isı akışı, b) Entropi



Şekil 3: Al₃Sc Fazlarına ait, a) Helmholtz Enerjisi, b) Enerji



Şekil 4: Al₃Sc Fazlarına ait, a) enerjiler, b) denge enerji

SONUÇ

Bu çalışmada, öncelikle deneysel parametreler olan örgü parametresi, pik genişliği, tanecik büyüklüğü ve dislokasyon yoğunluğu XRD analizlerine bağlı olarak elde edildi. Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımlarının ve onlara ait

çökelti fazlarının da kübik fcc yapısında olduğu anlaşıldı, Yüksek oran sayılabilecek Sc oranlarında da Al_3Sc fazlarının yapısal olarak farklı sonuçlar vermediği görüldü. Ancak, gerek tanecik boyutları, gerekse dislokasyon yoğunluğuna bakarak 1,1Sc oranlı alaşım içinde çökelen fazın 1,9Sc oranındaki çökeltilerden mekanik olarak daha iyi olduğu söylenebilir.

Teorik çalışma kısmında ise, deneysel örgü parametreleri kullanılarak denge noktası enerjileri hesaplandı ve bu sonuçlar Tablo 4'de verildi. Tablo 2'deki sonuçlardan Al-1,1Sc alaşımı içinde oluşan Al_3Sc fazının daha mukavemetli olduğu açıkça görülmektedir. Böylece deney ve teorik hesaplama sonuçlarının uyum içinde olduğu anlaşılmış olur. Bundan dolayı da diğer parametrelerin doğruluklarına güven artmış olur. Elastik parametrelere göre her iki alaşımdaki çökeltilerin Born karalılık kriterlerini sağladığı anlaşılmaktadır. Elastik sabiti değerlerinden Bulk, Young ve Shear modülü, Anizotropi ve Poisson oranı parametreleri hesaplanmıştır. Malzemenin sertliği hakkında bilgi veren Bulk ve Shear modülü değerleri incelendiğinde, malzemenin sünek ve sertliklerinin yüksek olduğu anlaşılır. Poisson oranına göre de her iki çökelti de metalik bağ yapısına sahiptir. Ayrıca izotropi değeri 1'den farklı olduğu görülmüş ve malzememizin anizotropik olduğu görülmüştür ve üç boyutlu dağılımları incelendiğinde xy, xz düzlemlerinde değişme yokken yz düzlemlerinin her dört dağılıma göre (E, B, G, ν) oldukça farklı olduğu görüldü. Şekiller hacim olarak çok yer kaplayacağı için bölüme konulmadı. Çökelti fazlarına ait sertlik özdeğerlerinin oldukça yüksek olduğu, eksenlerde aynı büyüklüklere sahipken düzlemlerde daha farklı olduğu ve özellikle yz (λ_6) düzleminde maksimum değere ulaştığı görülmektedir. bu sonuç anizotropi dağılımlarında gözlenen yz düzlemindeki değişimlerle ilgili olduğu düşünülmektedir.

Termodinamik özelliklerinde ise öncelikle Tablo 4' verileri parametreler hesaplandı. Yine bu sonuçlardan da Al-1,1Sc alaşımındaki çökelti fazlarının daha mukavemetli olduğu anlaşılmaktadır. Debye sıcaklığının artışı fononların hala uyarılmaya ihtiyaçları olduğu şeklinde anlaşılabilir. Son olarak sıcaklığa bağlı olarak bazı termodinamik parametrelerin değişimleri incelendi. Sıcaklık arttıkça ısı sığasının Dulong-Petit limitine doğru gittiği, sıcaklıkla birlikte alaşımdaki düzensizliğin arttığı anlaşılmaktadır. Ayrıca titreşim enerjisinin sıcaklık arttıkça arttığı, serbest titreşim enerjisinin ise azaldığı beklenen bir durumdur. Denge durumu enerjisinden de yine Al-1,1Sc alaşımında oluşan Al_3Sc fazının daha karalı olduğu anlaşılmaktadır.

Sonuç olarak bu çalışmada incelenen yüksek Sc oranlı alaşımlara bağlı olarak oluşan çökelti fazlarının düşük Sc oranlı Al-SC alaşımlarındaki çökeltilerle benzer özelliklere sahip oldukları anlaşıldı.

KAYNAKÇA

- Arslan, Y. B., (2020), Malzeme Bilimi, Teknik Kütüphane, <https://malzemebilimi.net/aluminyum-alasimlari.html>.
- Born, M. & Huang, K. (1954) *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Clarendon Press, Oxford.
- Campbell, J. (2003). *Castings: The New Metallurgy Of Cast Metals*, Butterworth Heinemann, United Kingdom.
- Demirci, M.K. (2011) Dünya Alüminyum Ticaretinde Türkiye'nin Yeri, 5. Alüminyum Sempozyumu, İstanbul.
- Eroğlu, G., ve Şahiner, M. (2018) Dünya ve Türkiye'de Alüminyum, Maden Tetkik Arama Genel Müdürlüğü, Fizibilite Etütleri D
- Emmanuelle A. Marquis, David N. Seidman, David C. Dunand., (2003) Effect of Mg addition on the creep and yield behavior of an Al–Sc alloy, *Acta Materialia* 51, 4751.
- Gonzales-Ormeño, G. P., and Petrilli, M. H., *Ab-initio Calculations of the Formation Energies of BCC-based Superlattices in the Fe-Al System*. *Calphad*, 26, 4.
- Gaillac, R., Pullumbi, P., Xavier, F.,(2016), An open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28,27.
- Jamal, M., Asadabadi, S. J., Ahmad, I. and Aliabad, H. A., (2014) *Elastic constants of cubic crystals*. *Computational Mater. Sci.*, 95.
- Lee, S., and others,(2002), Influence of scandium and zirconium on grain stability and superplastic ductilities in ultrafine-grained Al–Mg alloys, *Acta Materialia*, 50, 553.
- Lu, G., (2005), *The Peirles-Nabarro Model of Dislocations*, American Physical Society.
- Morris, D.G., (1998), *Trans Tech Publications*, Mechanical Behaviour of Nanostructured.
- Murray J.L., (1998), The Al-Sc (aluminum-scandium) system, *J. Phase Equilib.*, 19,4, 38.
- Nembach E., (2000), Order strengthening: recent developments, with special reference to aluminum-lithium alloys, *Prog. Mater. Sci.* 45, 275.
- Ocak H. Y., Uçgun E., and Ünal R., (2013), Experimental and first-principles investigation of the crystal structure of powder metallurgy Al-1.1Sc and Al-2Sc alloys, *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 23,10, 3020.
- Royest J., and Ruym N., (2005), Scandium in aluminium alloys, *Int.Mater. Rev.*, 50,1,19.
- Roumina R., (2002), *Mechanical properties of a recovered Al-Mg-Sc Alloys*, Doctor of philosophy, The University of British Columbia.

- Valiev, R.Z., and others, (1997), Observations of High Strain Rate Superplasticity in Commercial Aluminium Alloys With Ultrafine Grain Size, *Scripta Materialia*, 37, 194.
- Valiev, R.Z., and others,(2000), Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation, *Journal of Materials*, 52, 34.
- Zhao, J.W. ve Wu, S.S. (2010). Microstructure and Mechanical Properties of Rheodiecasted A390 Alloy, *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 3(0), 754-757
- Willey L.A., (1971), Aluminum Scandium Alloy, *Patent*, US.

BÖLÜM 10

Os₂TiGa HEUSLER BİLEŞİĞİNİN ELEKTRONİK VE ELASTİK, TERMODİNAMİK ve FONON ÖZELLİKLERİ ÜZERİNE TEORİK BİR ÇALIŞMA

Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN¹

Doç. Dr. Osman ÖRNEK²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385066>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü, 40100, Kırşehir, Türkiye, mozduran@ahievran.edu.tr; ORCID No: 0000-0003-4347-5906

² Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mühendislik-Mimarlık Fakültesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, Kırşehir, Türkiye, 0000-0001-6953-5001, osmanornek@ahievran.edu.tr

Giriş

Heusler alaşımları ilk olarak 1903 yılında keşfedilmiş ve manyetik elementlerin varlığı olmaksızın gözlemlenen ferromanyetizma nedeniyle ilgi çekmiştir (Felser, Wollmann et al. 2016). Kısa bir süre sonra, yarı metalik davranışın gözlemlenmesi, çok sayıda yeni Heusler alaşımına yol açan birleşik yarı iletken ve manyetik davranışın doğasını geliştirmek ve anlamak için önemli araştırmalara yol açmaya başladı. Çok çeşitli özellikler ve manyetik özellikleri istenen ihtiyaca göre uyarlama potansiyeli, 2015'ten bu yana Heusler alaşımları hakkında binlerce yayın yapılmasına yol açmıştır.

Manyetik şekil hafızası etkisi, manyetik alan kaynaklı süper esneklik ve mıknatıslanmada büyük gerinim kaynaklı değişiklikler sergileyen ferromanyetik Heusler alaşımları son zamanlarda güncel araştırmaların çok ilgi çekici konusudur (Webster and Ziebeck 1973, Dunlap, Stroink and Dini 1986, Worgull, Petti and Trivisonno 1996).

Ferromanyetik martensitler, Ni-Mn-Ga, Ni-Fe-Ga, Co-Ni-Ga ve diğer alaşımlar gibi farklı Heusler alaşımlarında deneysel olarak bulunmuştur. Manyetik şekil hafızası etkisi, belirgin manyetoelastik etkileşime duyarlı martensit dönüşümleri ile ilgilidir. Manyeto-mekanik özelliklerin yüksek verimliliği, bu malzemeleri farklı türde aktüatörler, sensörler, manyetik mikro-elektro-mekanik sistemler, bilginin kaydedilmesi ve depolanması vb. uygulamalar için çok cazip hale getirmektedir.

Heusler alaşımları dört grubda incelenebilir: (i) X_2YZ kimyasal formülüne sahip Tam Heusler alaşımları, Y'nin değerlik sayısı X'inkinden az olduğunda $AlCu_2Mn$ prototipi ile düzenli Heusler (L_{21})(225) kristal yapısında kristalleşir. (ii) Ters Heusler (X_a)(216), tam Heusler ile aynı kimyasal formüle sahiptir, ancak Y'nin değerlik sayısının X'inkinden büyük olduğu $CuHg_2Ti$ prototipi ile C_{1b} tipinde kristalleşir. (iii) Yarı Heusler alaşımları XYZ kimyasal formülüne sahiptir, bir X eksik olan ters Heusler olarak C_{1b} yapısında kristalleşir. (iv) Dörtlü Heusler alaşımları, $LiMgPdSn$ (Y-tipi) kristalinde $XX'YZ$ kimyasal formülüne sahiptir. Tüm kategorilerde X, X' ve Y geçiş metalleri iken Z ana grup elementidir.

Heusler alaşımları ve diğer yarı metalik bileşikler, çeşitli hesaplama

ve deneysel teknikler kullanılarak daha önce birçok çalışmaya konu olmuştur. 2019 yılında Han ve arkadaşları (Han, Chen et al. 2019) 171 skandiyum bazlı tam Heusler alaşımı üzerinde bir çalışma gerçekleştirmiştir. İki yapı arasındaki enerji farkı ($E = E_{XA} - E_{L_{21}}$) sıfırdan büyük olduğu için L_{21} tipi yapının (düzenli yapı) Xa yapısından (ters yapı) daha kararlı olduğunu bulmuşlardır. Bu da L_{21} tipi yapının sentezlenme olasılığının daha yüksek olduğu anlamına gelmektedir. Ayrıca ilk prensip hesaplamalarını kullanarak Sc_2TiAl ve Sc_2TiSi alaşımlarının bant yapısını hesapladılar. Sc_2TiAl ve Sc_2TiSi 'nin L_{21} tipi yapısının ve Xa yapısının hesaplanan elektronik yapıları ferromanyetiktir.

Graf ve diğerleri (Graf, Felser and Parkin 2011) Heusler bileşiklerinin kristal yapısını anlamak için basit kuralları tartışmıştır. Felser ve Hirohata (Felser and Hirohata 2015) Heusler bileşiklerinin spintronik ve ilgili uygulamalar için potansiyelini vurgulamıştır. Nayak ve diğerleri (Nayak, Nicklas et al. 2013), Mn_2PtGa da dahil olmak üzere yarı metalik Heusler bileşikleri üzerine hesaplamalı ve deneysel çalışmaların kapsamlı bir incelemesini sunmuştur. Bu çalışmalar, metalik tam Heusler bileşiklerine artan ilgiyi ve çeşitli uygulamalar için sahip oldukları potansiyeli göstermektedir (Nayak, Nicklas et al. 2013, Felser and Hirohata 2015, Han, Chen et al. 2019).

Yakın zamanda, Yahya ve arkadaşları Co_2CrAl ve Cr_2MnSb Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik ve elastik özelliklerini hesaplamalı olarak incelemişlerdir. Sonuçlar, her iki bileşiğin de yarı metalik karakterlere sahip olduğunu ortaya koydu (Yahya, Abu-Jafar et al. 2022). 2020 yılında Abu Baker ve arkadaşları (Baker, Abu-Jafar et al. 2020), düzenli Co_2TiSn ve ters Co_2TiSn tam Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik ve elastik özelliklerini araştırmak için FP-LAPW yaklaşımını kullandılar. Al ve ark. L_{21} fazındaki tam Heusler X_2TiAl ($X = Au, Ru$ ve Zr) alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik, termodinamik ve titreşimsel özelliklerini incelemiş ve temel fiziksel özellikler elde edilmişlerdir (Al, Arıkan and Iyigör 2018).

Ters Zr_2RhGa ve normal Co_2TiSn sırasıyla 6.619 Å ve 6.094 Å kafes parametrelerine sahiptir. Ayrıca, bu bileşiklerin sırasıyla 1.9786 μB ve 1.99 μB toplam manyetik momentlere sahip olduğu keşfedilmiştir. Ayrıca,

bu bileşikler için dolaylı enerji boşlukları sırasıyla 0,482 eV ve 0,573 eV'dir. Ayrıca mekanik olarak da kararlıdırlar. Öte yandan, Alrahamneh ve arkadaşları Zr_2RhGa ve Zr_2RhIn bileşikleri için termoelektrik özellikleri hesaplamış ve her iki bileşiğin de yarı metalik davranış sergilediğini ve termoelektrik uygulamalar için uygun olmadığını bulmuşlardır (Alrahamneh, Mousa and Khalifeh 2019).

2021 yılında Yotong Li ve arkadaşları (Li, Zhu et al. 2021) ilk prensip hesaplamalarına dayanarak yarı metalik X_2Y (Al/Si) tam Heusler alaşımlarını taramıştır. Bunlar 24'ü manyetik ve 10'u yarı metalik olmak üzere 26 kararlı alaşımdır. Manyetizmaya sahip alaşımlar için DOS, GGA uygulanarak hesaplanmıştır. (Ag/Cu/Mg) $2Y$ (Al/Si) alaşımlarının kararsız olduğu, (Mn/Co) $2Y$ (Al/Si) alaşımlarının ise her zaman kararlı olduğu bulunmuştur. X_2Cr (Al/Si) alaşımları kararlı iken, X_2Nb (Al/Si) alaşımları her zaman kararsızdır. (Co/Mn) $2YZ$ alaşımları her zaman manyetizma ve yarı metaliklik sergiler. Ayrıca, (Mn/Co) $2Y$ (Al/Si) alaşımlarının spintronik cihazlar için aday olarak düşünülebileceğini ve gelecekteki deneysel çalışmalar için değerli bir referans olarak hizmet edebileceğini öngörmüşlerdir.

2. METOT

Ab initio yoğunluk fonksiyonel teorisine (Hohenberg and Kohn 1964, Kohn 1965) dayanan tüm hesaplamalar Quantum-Espresso yazılım paketi (Giannozzi, Baroni et al. 2009) kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Değişim korelasyon potansiyeli için Perdew-Burke-Ernzerhof genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (PBE-GGA) kullanılmıştır (Perdew, Burke and Ernzerhof 1996). Elektronik dalga fonksiyonları, 40 Ry kinetik enerji kesme ayarlamak için düzlem dalga bazında genişletilirken, elektronik yük yoğunluğu için kesme enerjisi 400 Ry olarak ayarlandı. Brillouin bölgesini örneklemek için $10 \times 10 \times 10$ k-noktalı bir ağ kullanılmıştır. Fermi yüzeyine kadar entegrasyon için $\sigma = 0.03$ Ry genişliğinde bir Methfessel-Paxton (Methfessel and Paxton 1989) yayma parametresi uygulanmıştır. Örgü dinamiği hesaplamaları yoğunluk fonksiyonel pertürbasyon teorisi çerçevesinde yapılmıştır (Baroni and Quattropani 1987, Baroni, deGironcoli and Dal

Corso 2001). Fonon frekansları, sekiz dinamik matris elde etmek için $4 \times 4 \times 4$ k-noktalı bir ağ üzerinde hesaplanmıştır. Bu dinamik matrisleri keyfi dalga vektörlerinde değerlendirmek için bu ağa Fourier dekonvolüsyonu uygulanmıştır. Sıcaklığa karşı sabit hacimdeki özgül ısılar, quasi harmonik yaklaşım kullanılarak hesaplanmıştır (Baroni, Giannozzi and Isaev 2010).

Kübik bir kristal genellikle üç bağımsız elastik sabit (yani C_{11} , C_{12} ve C_{44}) ile temsil edilir. Bu sabitleri elde etmenin basit yolu, onları sabit bir hacimde gerilmemiş bir ortam ile çarpıtılmış bir ortam arasındaki enerji farkından hesaplamaktır. Bulk modülü B , C_{44} ve kayma modülü, $C' = (C_{11} - C_{12})/2$, hidrostatik basınç, $e = (\delta, \delta, \delta, 0, 0, 0)$, üç eksenli kayma gerinimi, $e = (0, 0, 0, \delta, \delta, \delta)$ ve hacim koruyan ortorombik gerinim, $e = (\delta, \delta, (1 + \delta)^{-2} - 1, 0, 0, 0)$ kullanılarak hesaplanmıştır. Gerinim (δ) 21 hesaplama seti için 0.02 olarak alınmıştır

Kübik bir kristal genellikle üç bağımsız elastik sabit (yani C_{11} , C_{12} ve C_{44}) ile temsil edilir. Bu sabitleri elde etmenin basit yolu, onları sabit bir hacimde gerilmemiş bir ortam ile çarpıtılmış bir ortam arasındaki enerji farkından hesaplamaktır. Elastik sabitler, bir malzemenin harici olarak uygulanan bir gerilmeye karşı sertliği, dolayısıyla mekanik kararlılığı hakkında bilgi sağlayabilir. Erime sıcaklığı ve mukavemet gibi çeşitli özellikler de elastik sabitlerden dolaylı tahmin edilebilir (Arıkan, Örnek et al. 2016). Elastik sabitleri, tam fonon spektrumundaki akustik modların eğimlerinden hesaplamak mümkündür (Shein, Shein and Ivanovskii 2007, İyigör, Özduran et al. 2017). Ses hızları, akustik fononların küçük dalga davranışına karşılık gelir. Bu hızlar, referanslarda (Mott and Jones 1936, Sharma, Dwivedi and Sharma 2015) açıklandığı gibi C_{11} , C_{12} ve C_{44} ile ilişkilidir. Bulk modülü (B), Shear modülü (G), Young modülü (E), anizotropi faktörü (A) ve Poisson oranı (σ) gibi ilgili kristalin özelliklerin elastik sabitlerinin hesaplanması aşağıdaki standart ilişkiler kullanılarak elde edilebilir:

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}$$

$$G = \frac{G_v + G_R}{2}, \quad G_v = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5}, \quad G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}}$$

Makine mühendisliği tasarımı için Young modülü (E) önemli bir parametredir ve aşağıda tanımlanmıştır:

$$E = \frac{9BG}{3B + G}$$

Poisson oranı da önemlidir ve aşağıdaki gibi yanal daralmanın uzama oranı olarak tanımlanır:

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})}$$

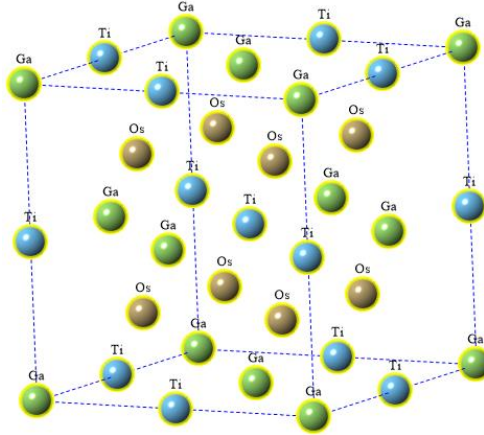
$$\sigma = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{3B} \right)$$

3. SONUÇ VE TARTIŞMA

3. 1. Yapısal ve Elastik Özellikler

Fm-3m uzay grubuna sahip (#No: 225) L_{21} tam heusler Cu_2MnAl fazında Os_2TiGa alaşımının kristal yapıları Şekil 1'de gösterilmiştir. Os_2TiGa 'nın kübik fazı, Os atomları (0.25, 0.25, 0.25), (-0.25, -0.25, -0.25), Ti atomları (-0.5, -0.5, -0.5), Ga atomları ise (0.0, 0.0, 0.0) konumlarında yer almaktadır. Denge hacmi etrafındaki farklı hacimler için toplam enerji L_{21} fazı için hesaplanmıştır. Sistemin dengede olduğu basıncın minimum olduğu nokta Os_2TiGa kübik bileşiğinin örgü sabiti olarak seçilmiştir. Minimum basınç noktası optimizasyon yapılarak belirlenmiştir. Hesaplanan toplam enerji daha sonra denge örgü sabitlerini, B kütle modülünü ve B' basınç türevi elde edildi.

Os_2TiGa alaşımı için optimize edilmiş örgü sabiti (a), bulk modülü (B), basınç türevi B' , elastik sabitler (C_{ij}) ve Cauchy basıncı ($C_{12}-C_{44}$) Tablo 1'de sunulmuştur.



Şekil 1. Kübik Os_2TiGa 'nın kristal yapısı.

Tablo 1: Os_2TiGa 'nın elde edilen denge örgü sabiti a (Å), bulk modülü B (GPa) ve elastik sabitleri.

Bileşik	a	B	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Os_2TiGa	6.143	245.9	336.7	200.5	142.9

Bir bileşiğin elastik özellikleri kristalin mekanik, yapısal özellikleri ve aralarındaki ilişki hakkında bilgi verir. Kübik yapıların üç farklı elastik sabiti vardır; C_{11} , C_{12} ve C_{44} . Elastik sabitler (C_{ij}), örgüye küçük gerilmelerin uygulanması yoluyla toplam enerji değişiminin elde edilmesiyle hesaplanır. Enerji farklarından elastik sabitler ve bulk modülü (B), shear (G) ve Young modülü (E) ve Poisson oranı (σ) hesaplanır. Kübik bir yapının mekanik kararlılığı için genel Born kriterleri (Born and Huang 1956) şu şekilde verilir;

$$(C_{11} + 2C_{12}) > 0, C_{44} > 0, C_{11} > 0 \text{ ve } C_{11} - C_{12} > 0 \quad (1)$$

Born kararlılık kriteri, bileşiğin yığın modülü için de bir

kısıtlama getirmektedir. Kübik bir yapının bulk modülü aşağıdaki gibi C_{11} ve C_{12} arasında bir değer almalıdır;

$$C_{11} > B > C_{12} \quad (2)$$

Tablo 1'den görülebileceği gibi, denklem 1 ve 2'de verilen her iki koşul da Os_2TiGa için yerine getirilmiştir. Tablo 1, Os_2TiGa 'nın mekanik kararlılık koşulunu yerine getirdiğini göstermektedir, bu da çalışılan Os_2TiGa 'nın mekanik olarak kararlı olduğunu göstermektedir.

Tablo 2: Os_2TiGa 'nın hesaplanan bulk modülü B (GPa), shear modülü G (GPa), B/G oranı, Young modülü E (GPa), Anizotropi faktörü A (GPa), Poisson oranı σ , Cauchy Basıncı ($C_{12} - C_{44}$).

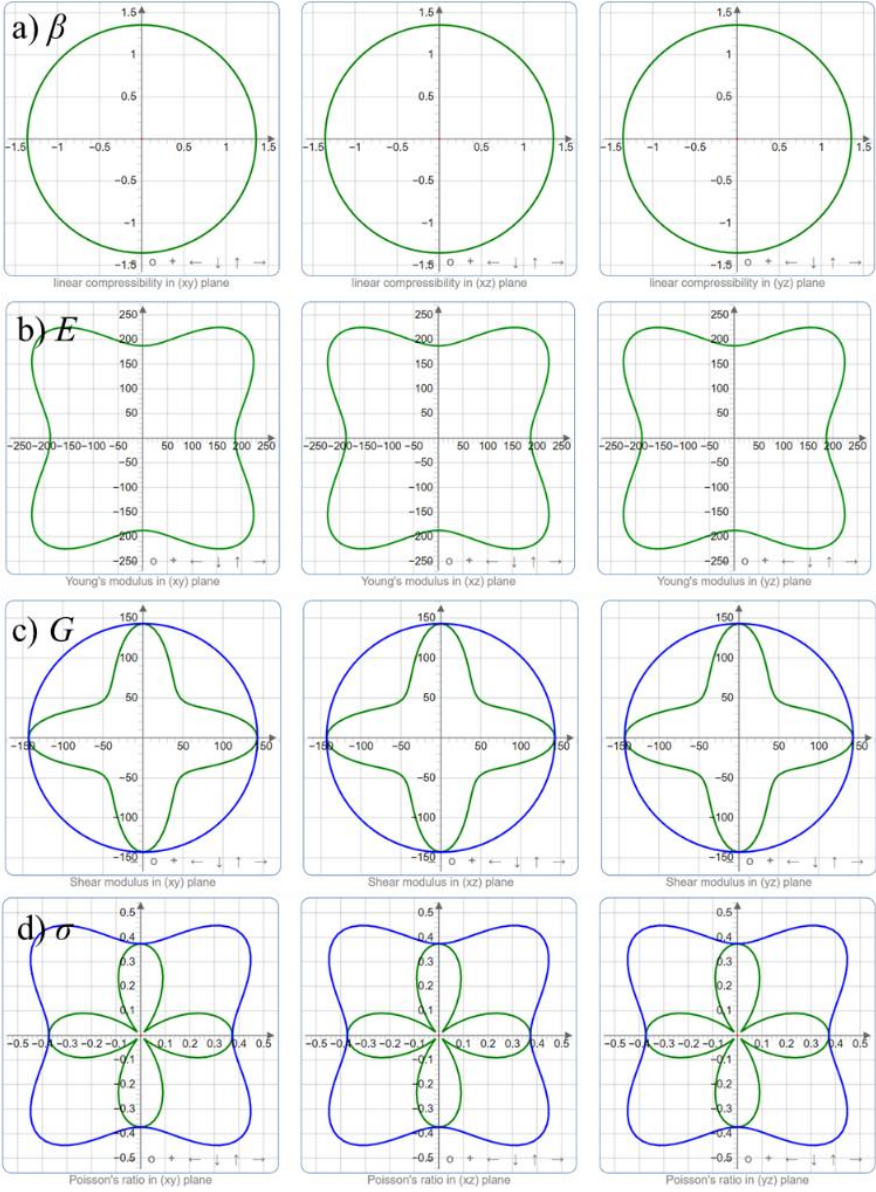
Bileşik	B	G	B/G	E	A	σ	C12 – C44
Os_2TiGa	245.9	106.1	1.32	278.3	2.09	0.31	57.6

Tablo 2'de verilen bu çalışmadaki hesaplama göre, Os_2TiGa 'nın basınç altında hacim değişimine karşı direnç göstermesinin nedeni bulk modülü (B) değerinin shear modülü (G) değeri verilmiştir. Ayrıca, Os_2TiGa 'nın kırılgenliğini ve sünekliğini değerlendirmek için B/G oranı hesaplanmıştır. Bu özellik yüksek sıcaklık dayanımı için son derece önemlidir. Pugh kriterlerine göre (Pugh 1954), bu oran 1.75'ten yüksekse katı sünek, değilse kırılgenlidir. Tablo 2'de verilen orana göre Os_2TiGa süneklerdir. Buna ek olarak, Os_2TiGa 'nin bağlanma özellikleri Poisson oranı ve Cauchy basıncı incelenmiştir. Poisson oranı yaklaşık 0.1 ise katının kovalent bağlanma özelliği gösterdiği, yaklaşık 0.25 ise iyonik bağlanma özelliği gösterdiği kabul edilmektedir (Pugh 1954, Haines, Leger and Bocquillon 2001). 0,25 ile 0,5 arasındaki değerler için merkezi kuvvetler baskındır (Haines, Leger and Bocquillon 2001). Tablo 2'de gösterildiği gibi Os_2TiGa 'nin atomlar arası kuvvetlerinin iyonik olduğu görülmektedir. Cauchy basıncı ($C_P=C_{12}-C_{44}$) metallerin ve bileşiklerin ağırsal atomik bağlanma özelliklerini tahmin etmek için kullanılabilir. Cauchy basıncının daha pozitif olduğu varsayımında, katı daha fazla metalik özellik gösterir, aksi takdirde katı bağlanmada

açısal karakter gösterir (Pugh 1954, Johnson 1988, Haines, Leger and Bocquillon 2001). Bu nedenle Os_2TiGa 'nin sıfır basınçta açısal bağlanma ile kırılğan olduğu söylenebilir.

Young modülü ve elastik anizotropi de önemli fiziksel parametrelerdir. Young modülü kuvvet uzunlamasına uygulandığında çekme veya sıkıştırma sertliğini ölçen katı malzemelerin mekanik bir özelliğidir. Gerilim veya aksenal sıkıştırma için elastikiyet modülüdür. Young modülü, nesneye uygulanan gerilimin (birim alan başına kuvvet) ve malzemenin doğrusal elastik bölgesinde ortaya çıkan aksenal gerinimin (yer değiştirme veya deformasyon) oranı olarak tanımlanır. Bir katının Young modülü arttıkça çok daha sert hale gelir. Eğer Anizotropi faktörü bir civarında ise ($A=1$), katı izotropiktir. Tablo 2, Os_2TiGa 'nın $A\sim 2$ nedeniyle neredeyse izotropik olduğunu göstermektedir.

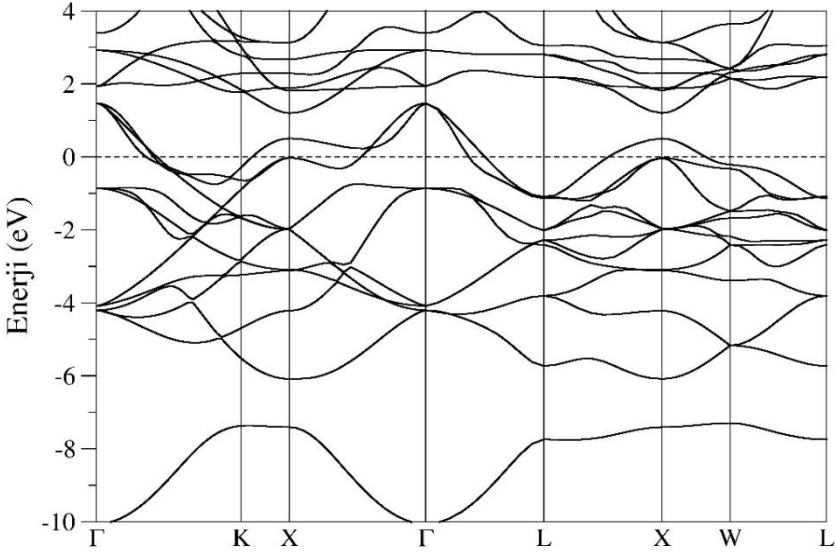
Os_2TiGa bileşiğinin Young ve kesme modülleri ile Poisson oranının anizotropisini daha rahat görmesi için ELATE (Gaillac, Pullumbi and Coudert 2016) yazılımı ile görselleştirilerek Şekil 2'de verilmiştir.



Şekil 2. Os_2TiGa bileşiğinin anizotropisinin 2D şekilleri. Şekilde minimum değerler yeşil, maksimum değerler mavi renk ile gösterilmiştir. Görsellerde izotropi, çember ya da küre ile temsil edilirken küreden/çemberden sapmalar anizotropikliğin göstergesidir. (a) Young modülü, (b) Kesme modülü, (c) Poisson'ın oranı.

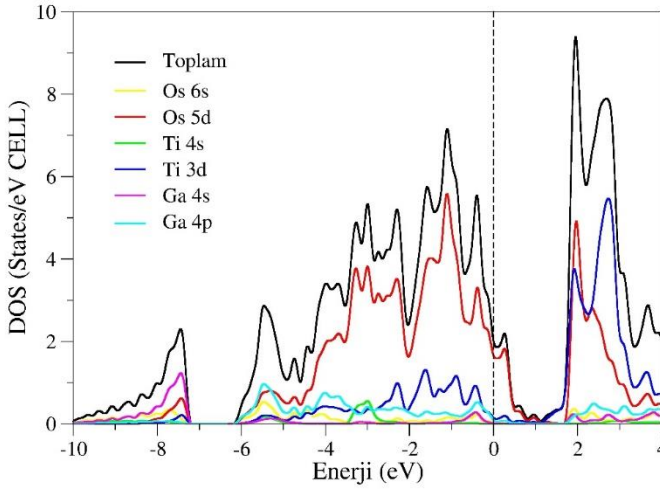
3. 2. Elektronik Özellikler

Os_2TiGa 'nin elektronik özelliklerini değerlendirmek için Brillouin bölgesindeki yüksek simetri yönleri boyunca elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu hesaplanmıştır. Şekil 3 ve 4, Os_2TiGa 'nin elektronik bant yapısını ve toplam ve kısmi durum yoğunluğunu göstermektedir.



Şekil 3. Os_2TiGa 'nin kübik fazda hesaplanan elektronik yapısı.

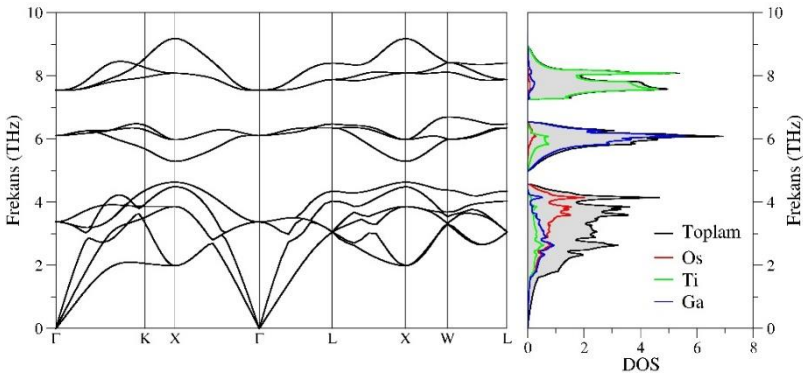
Fermi enerjisi tüm bant enerjilerinden çıkarılarak sıfır olarak alınır ve şekillerde kesikli çizgi ile gösterilir. Şekil 3'den de görülebileceği gibi Fermi enerji seviyesi iletim ve valans bandı tarafından kesilmektedir, çünkü Şekil 4'teki durum yoğunluğu Fermi seviyesinde boşluk olmadığını göstermektedir. Bu nedenle Os_2TiGa bileşiğinin metalik karaktere sahip olduğu söylenebilir. Orbitaler arasındaki etkileşimleri ortaya çıkarmak için Os_2TiGa 'nin toplam ve kısmi durum yoğunluğu Şekil 4'te gösterilmiştir. Şekil 4'teki kısmi durum yoğunluğundan görülebileceği gibi, Fermi seviyesinde banda katkı Os-5d, fermi seviyesi üstünde 2eV civarında Os-5d, Ti-3d, Ga-4p ve fermi seviyesi altında -1eV civarında Os-5d, Ti-3d ve Ga-4p durumlarından kaynaklanmaktadır.



Şekil 4. Kübik fazdaki Os_2TiGa 'nın hesaplanan toplam ve kısmi durum yoğunluğu.

3.3. Fonon Özellikleri

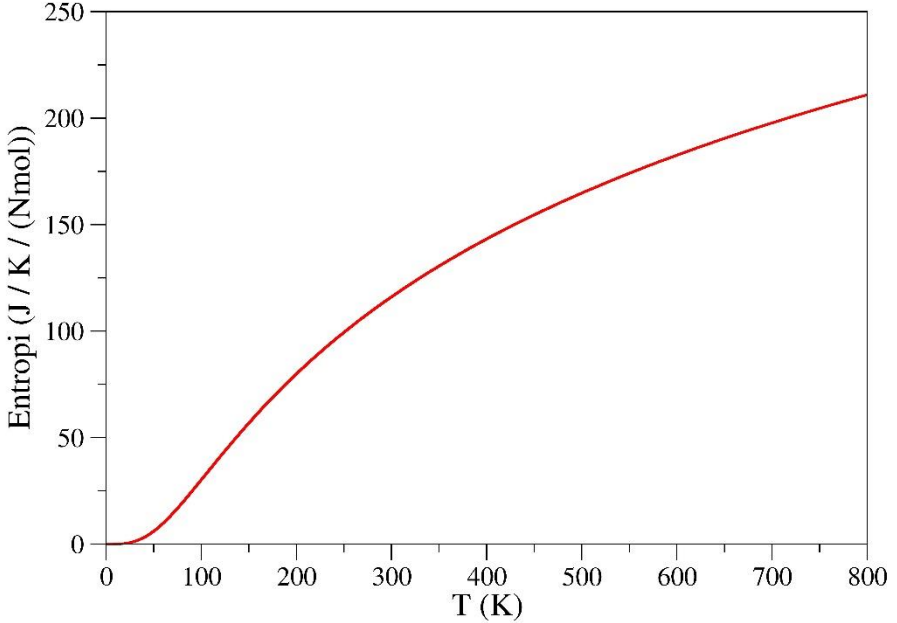
Birinci Brillouin bölgesindeki Γ -K-X- Γ -LX-W-L yönleri boyunca fonon dağılım eğrileri Os_2TiGa alaşımı için hesaplanmış ve Şekil 5'te gösterilmiştir. X2TiAl alaşımları için tüm Brillouin bölgesinde hayali fonon frekansları yoktur. Bu, üç alaşımın L21 fazında dinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. X2TiAl alaşımlarının birim hücresinde dört atom bulunduğu için, fonon spektrumunun 12 dalı olmalıdır; bunlardan üçü akustik (en düşük üç) ve dokuzu optiktir.



Şekil 5. Os_2TiGa alaşımının tam fonon dağılım spektrumları ve bunların toplam ve öngörülen durum yoğunlukları

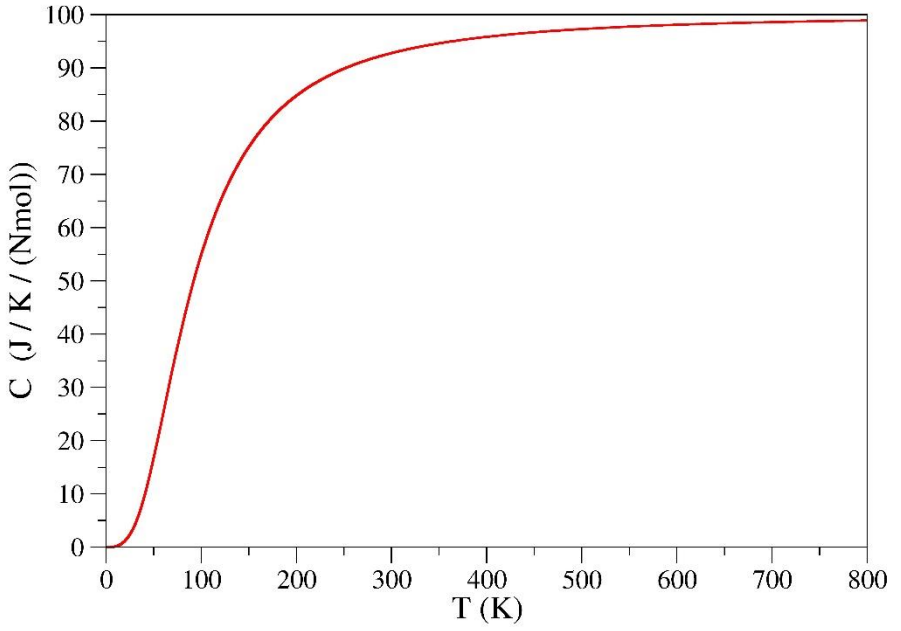
3.4. Termodinamik Özellikler

Termodinamik özellikler, enerji-hacim ilişkisinden farklı sıcaklıklar için yarı-harmonik yaklaşım içinde toplanmıştır. Os_2TiGa 'nın sıcaklıkla entropi değişimi hesaplanmış ve Şekil 6'te sunulmuştur. Şekil 6'te açıkça görüldüğü gibi, Os_2TiGa 'nın entropisi sıcaklıkla artmaktadır, bu da Os_2TiGa 'nın serbest enerjisinin azaldığı anlamına gelmektedir.

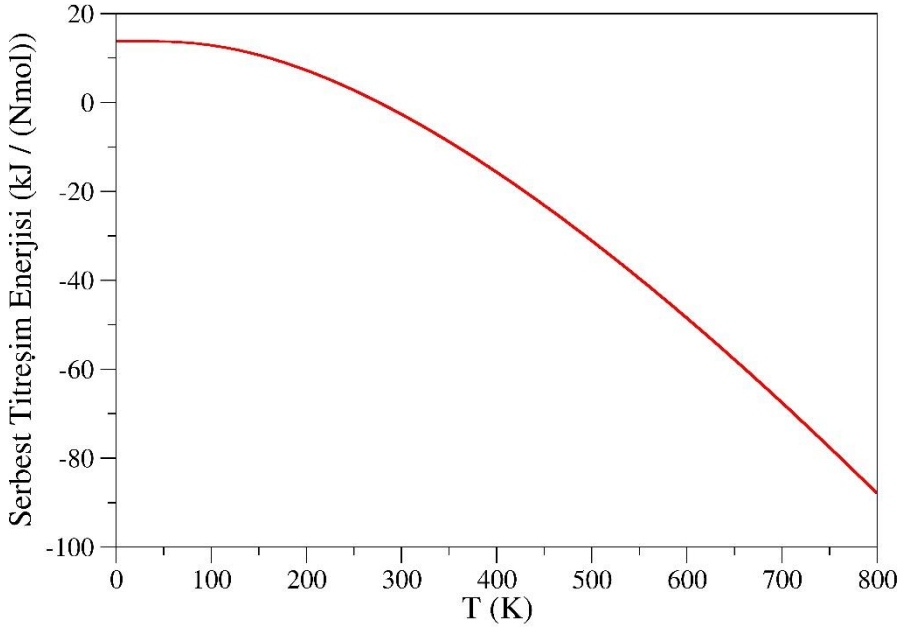


Şekil 6. Kübik yapıdaki Os_2TiGa 'nin sıcaklığa karşı entropi (S) değişimi

Sabit hacim ve basınçtaki ısı genleşme katsayılarının sıcaklığa karşı değişimleri sırasıyla Şekil 7 ve 8'de gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi Os_2TiGa 'nin ısı katsayıları 350 K'e kadar hızla artmaktadır. Bu noktadan sonra kademeli olarak artmakta ve düzleşmektedir. Daha yüksek sıcaklıklarda, her iki özgül ısı kapasitesi de Dulong-Petit (Dulong and Petit 1819) limitine ulaşmaktadır.



Şekil 7. Kübik yapıdaki Os_2TiGa 'nın sabit basınçtaki (C_v) özgül ısı kapasitelerinin sıcaklığa bağımlılığı.



Şekil 8. Kübik yapıdaki Os_2TiGa 'nın sabit hacimdeki titreşim enerjisi kapasitelerinin sıcaklığa bağımlılığı.

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Fm-3m (#225) uzay grubuna sahip Os₂TiGa bileşiğinin yapısal, elektronik ve elastik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kapsamında GGA-PBE yaklaşımı kullanılarak incelenmiştir. Os₂TiGa'nın fiziksel özellikleri ilk prensip hesaplamaları kullanılarak incelenmiştir. Örgü sabiti, bulk modülü, elastik sabitler ve shear modülü gibi çeşitli sabitler toplanmıştır. Elektronik bant yapıları ve durum yoğunluğu Os₂TiGa bileşiğinin metalik yapıda olduğunu göstermiştir. İletkenliğe en büyük katkı Fermi seviyesinde Os-5d, fermi seviyesi üstünde 2eV civarında Os-5d, Ti-3d, Ga-4p ve fermi seviyesi altında -1eV civarında Os-5d, Ti-3d ve Ga-4p durumlarından gelmektedir.

Elastik sabitlerinden Os₂TiGa bileşiğinin mekanik olarak kararlı olduğunu ortaya koymuştur. Bileşiğin bulk ve shear modülü, Os₂TiGa'nın basınç altında hacim değişimine direnebileceğini göstermektedir. Örgü sabitlerinin mekanik kararlılık açısından değerlendirilmesi, Os₂TiGa'nın iyi bilinen mekanik kararlılık kriterlerini karşıladığı için mekanik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Bağlanma özelliklerinin analizi, Os₂TiGa bileşiğinin baskın iyonik bağlanmaya sahip olduğunu göstermektedir. B/G oranı ve Pugh kriterlerine göre, Os₂TiGa sünek bir malzemedir. Os₂TiGa'nın elektronik bant yapısı, Os₂TiGa'nın doğası gereği metalik olduğunu göstermektedir. Isı kapasiteleri ve entropi gibi termodinamik özellikler de hesaplanmış ve değerlendirilmiştir. Os₂TiGa'nın sabit hacim ve basınçtaki ısı kapasiteleri 350 K civarında Dulong-Petit limitine ulaşmaktadır.

Bu çalışma, Os₂TiGa bileşiğinin tüm özelliklerini ortaya çıkarmak için sistematik bir araştırma yürütmekte ve gelecekteki araştırmalar ve uygulamalar için yeni veriler sunmaktadır.

KAYNAKÇA

- Al, S., et al. (2018). "Investigations of structural, elastic, electronic and thermodynamic properties of X2TiAl Alloys: a computational study." *Zeitschrift für Naturforschung A* **73**(9): 859-867.
- Alrahamneh, M. J., et al. (2019). "First principles study of the structural, electronic, magnetic and thermoelectric properties of Zr2RhAl." *Physica B: Condensed Matter* **552**: 227-235.
- Arıkan, N., et al. (2016). "A first-principle study of Os-based compounds: Electronic structure and vibrational properties." *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **96**: 121-127.
- Baker, D. N. A., et al. (2020). "Structural, magnetic, electronic and elastic properties of half-metallic ferromagnetism full-Heusler alloys: Normal-Co2TiSn and inverse-Zr2RhGa using FP-LAPW method." *Materials Chemistry and Physics* **240**: 122122.
- Baroni, S., et al. (2001). "Andrea aand Giannozzi. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory." *Rev. Mod. Phys* **73**: 515-562.
- Baroni, S., et al. (2010). "Density-functional perturbation theory for quasi-harmonic calculations." *Reviews in Mineralogy and Geochemistry* **71**(1): 39-57.
- Baroni, S. and A. Quattropani (1987). "Nuovo Cimento D 5, 89 (1985); S. Baroni, P. Giannozzi, and A. Testa." *Phys. Rev. Lett* **58**: 1861.
- Born, M. and K. Huang (1956). *Theory of Crystal Lattices*, Clarendon, Oxford.
- Dulong, P. L. and A.-T. Petit (1819). *Recherches sur quelques points importants de la theorie de la chaleur*.
- Dunlap, R., et al. (1986). "Permanent magnetic properties of Cu-Mn-Al alloys." *Journal of Physics F: Metal Physics* **16**(8): 1083.
- Felser, C. and A. Hirohata (2015). *Heusler alloys*, Springer.
- Felser, C., et al. (2016). "Basics and prospectives of magnetic Heusler compounds." *Heusler Alloys: Properties, Growth, Applications*: 37-48.
- Gaillac, R., et al. (2016). "ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors." *Journal of physics: Condensed matter* **28**(27): 275201.
- Giannozzi, P., et al. (2009). "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials." *Journal of physics: Condensed matter* **21**(39): 395502.
- Graf, T., et al. (2011). "Simple rules for the understanding of Heusler compounds." *Progress in solid state chemistry* **39**(1): 1-50.

- Haines, J., et al. (2001). "Synthesis and design of superhard materials." Annual Review of Materials Research **31**(1): 1-23.
- Han, Y., et al. (2019). "171 Scandium-based full Heusler compounds: A comprehensive study of competition between XA and L21 atomic ordering." Results in Physics **12**: 435-446.
- Hohenberg, P. and W. Kohn (1964). "Phys Rev 136: B864." Kohn W, Sham LJ (1965) Phys Rev **140**: A1133.
- İyigör, A., et al. (2017). "Ab-initio study of the structural, electronic, elastic and vibrational properties of HfX (X= Rh, Ru and Tc)." Philosophical Magazine Letters **97**(3): 110-117.
- Johnson, R. (1988). "Analytic nearest-neighbor model for fcc metals." physical review B **37**(8): 3924.
- Kohn, W. (1965). "W. kohn and lj sham, phys. rev. 140, a1133 (1965)." phys. Rev **140**: A1133.
- Li, Y., et al. (2021). "Screen the half-metallic X₂Y (Al/Si) full-Heusler alloys based on the first-principle calculations." Computational Materials Science **193**: 110391.
- Methfessel, M. and A. Paxton (1989). "High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals." physical review B **40**(6): 3616.
- Mott, N. F. and H. Jones (1936). "The theory of the properties of metals and alloys." (No Title).
- Nayak, A. K., et al. (2013). "Large zero-field cooled exchange-bias in bulk Mn₂ PtGa." Physical review letters **110**(12): 127204.
- Perdew, J. P., et al. (1996). "Generalized gradient approximation made simple." Physical review letters **77**(18): 3865.
- Pugh, S. (1954). "XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals." The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science **45**(367): 823-843.
- Sharma, R., et al. (2015). "Hydrides of YPd₃: Electronic structure and dynamic stability." International Journal of Hydrogen Energy **40**(2): 1071-1082.
- Shein, I., et al. (2007). "Elastic and electronic properties and stability of SrThO₃, SrZrO₃ and ThO₂ from first principles." Journal of nuclear materials **361**(1): 69-77.
- Webster, P. and K. Ziebeck (1973). "Magnetic and chemical order in Heusler alloys containing cobalt and titanium." Journal of Physics and Chemistry of Solids **34**(10): 1647-1654.
- Worgull, J., et al. (1996). "Behavior of the elastic properties near an intermediate phase transition in Ni₂ MnGa." Physical Review B **54**(22): 15695.

Yahya, S. J., et al. (2022). "The Structural, Electronic, Magnetic and Elastic Properties of Full-Heusler Co₂CrAl and Cr₂MnSb: An Ab Initio Study." *Crystals* **12**(11): 1580.

BÖLÜM 11

Fe₂BeGa FULL HEUSLER ALAŞIMININ TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

Dr. Öğr. Üyesi Erol ALBAYRAK¹

Dr. Öğr. Üyesi Fikri Erdem ŞEŞEN²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385109>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, ORCID: 0000-0001-9161-9068, erol.albayrak@ahievran.edu.tr

² Kırıkkale Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, 71450, Kırıkkale, ORCID: 0000-0003-0369-0038, fesesen@kku.edu.tr

GİRİŞ

Dünyada teknoloji ilerledikçe yeni gereksinimler ve bu gereksinimleri sağlamak için de yeni malzemeler üretmek gerekmektedir. Teknolojinin gelişmesi ile yeni nesil dayanıklı, sağlam ve uzun ömürlü malzemelerin keşfedilmesini sağlasa da bu gelişimden en büyük payı elektronik cihazlar ve dolayısıyla da bu cihazlarda kullanılan yeni nesil malzemeler almaktadır. Elektronik sektöründeki büyük gelişmelerin insanlığın 21. Yüzyılda internet tabanlı bir hayata eğilimli olmasına da bağlanabilir. Sebebi her ne olursa olsun bugün önümüzde duran olgu insanlığın teknolojik açıdan yeni bir çağa yelken açtığı ve bu çağda daha işlevsel malzemelere ihtiyaç duyduğu gerçeğidir. Bu bağlamda önümüzdeki yıllarda keşfedilmesi muhtemel yeni yarı iletken malzemeler, yarı metal malzemeler, manyetik ve non-manyetik malzemeler bilimin gelişerek insanlığın yeni gereksinimlerini karşılamak açısından öneme sahip olacaklardır.

1903 yılında Fredrich von Heusler tarafından yapılan bir çalışmada alaşımları oluşturan bileşenler manyetik olmamasına rağmen bu bileşenlerden elde edilen alaşımların manyetik özellikte olabileceği görüldü (Heusler ve ark., 1903). Bu durum, bazı özellikleri bilinen elementlerden elde edilen alaşımların farklı özellikler sergileyebileceğini göstermiş ve Heusler alaşımlara olan ilgiyi artırmıştır.

Berilyum (Be) oldukça kanserojen bir element olmakla birlikte son zamanlarda özellikle bakır gibi metallerle alaşımlandırılarak havacılık, elektronik ve nükleer silah üretim sanayilerinde kullanılan önemli bir elementtir. Alüminyumdan daha hafif ama çelikten yaklaşık 6 kat daha güçlü olan berilyum elementi olası endüstriyel uygulamalar açısından umut vaat eden bir malzemedir (Taylor ve ark., 2007). Demir (Fe), demirçelik sanayiinde, inşaat sektöründe, alet edevatlar da, doğada bulunan atık su kaynaklarının arındırılmasında vb. kullanılan ve bir çok alanda endüstriyel uygulamaları ile vazgeçilmesi neredeyse imkansız bir malzeme haline gelmiştir (Nichelson, 2023). Galyum (Ga), yarı iletkenlerin elde edilmesinde, entegre devre üretiminde, LED ve lazer diyotlarda, havacılık ve uzay sağlık ekipmanlarında kullanılır (Secrets, 2023). Literatür incelendiğinde Be, Fe ve Ga elementlerinden elde edilen full Heusler (FH) alaşımlara ait yapısal, elektronik ve elastik özellikler ile alakalı bir çalışma yapılmadığı görülür. Be, Fe ve Ga elementlerinin endüstrideki kullanım alanları göz önüne alınarak bu elementlerden elde edilen FH alaşımların incelemeye değer olduğu düşüncesini doğurdu. Deneysel olarak sentezlenmeleri zorlu süreçler gerektiren ve maliyetli olan Heusler alaşımlarının öncelikle teorik olarak incelenip bu incelemenin elde edilecek malzemenin bazı özelliklerine ışık tutması ve inceleme sonuçlarına göre tercih edilen malzemelerin hazırlanması makuldür. Bu bağlamda bu çalışmada iç içe geçmiş dört yüzey merkezli kübik (FCC) yapılı birim

hücreden oluşan Fe₂BeGa FH alaşımının bazı yapısal, elastik, termal ve elektronik özellikleri QuantumESPRESSO paket programı yardımı ile Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) yaklaşımı ile incelenmiştir (Gianozzi ve ark., 2009).

HESAPLAMA YÖNTEMİ

Bir malzemenin kararlı olduğu durumu ve örgü sabitini tespit etmek için o malzemeye ait minimum enerjisi değerini bulmak gerekir. Minimum enerji değerini ve moleküler yapıdaki malzemeye ait yapısal, elektronik, termal vb. özellikleri teorik olarak hesaplamak için başarılı sonuçlar veren DFT yaklaşımı kullanılır. DFT yaklaşımıyla malzemenin minimum enerji değerini hesaplamak için denklem 1' de ki ifade kullanılır (Kohn, Sahm,1965).

$$\rho(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (1)$$

Elektronları etkileşmeyen moleküller için değiş - tokuş korelasyon potansiyelini belirlemek gereklidir (Gianozzi ve ark., 1991). Daha başarılı hesaplamalar yapabilmek için bazı bilim insanları LDA yaklaşımına eklemeler yapmış ve Perdew-Burke-Ernzerhof, genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (PBE-GYY) ortaya çıkmıştır Bu çalışmada moleküller için hesaplamalarda daha iyi sonuç almak amaçlı olarak PBE-GYY yaklaşımı kullanılmıştır (Perdew ve ark., 1996). Malzemeye ait minimum enerjisi hesaplayabilmek için denklem 2'de Schrödinger denklemini çözmek gerekir.

$$H\phi = \epsilon\phi \quad (2)$$

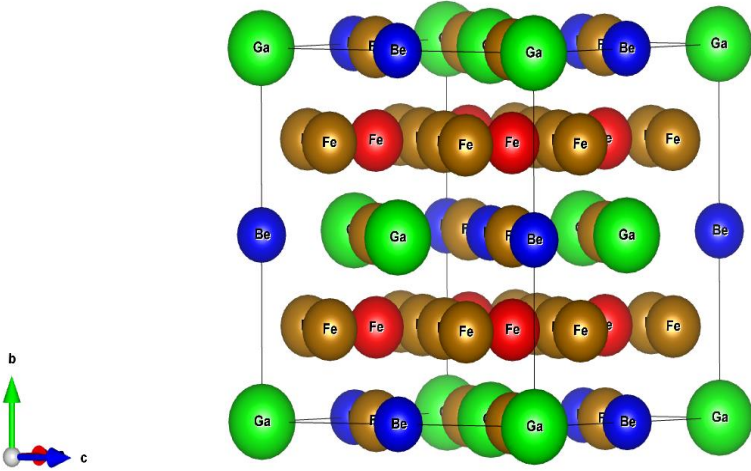
Schrödinger denklemini doğru bir şekilde çözebilmek için denkleme kor ve değerlik elektronlarından gelen katkıların potansiyel olarak eklenmesi gerekir. Yapılan hesaplamalarda denklemini çözebilmek için gerçek potansiyellere göre daha kullanışlı olan Pseudo potansiyeller kullanılır. Bu çalışmada da hesaplamalarda daha iyi sonuçlar almak maksadıyla Pseudo potansiyeller kullanıldı (Srivastava, 1990). Kullanılan Pseudo potansiyeller Rappe grubundan seçilerek hesaplamalar gerçekleştirildi. Hesaplamalarda düzlem dalga kesme enerjisi 40 Ry, elektronik yük yoğunluğu da 400 Ry alındı. Brillouin bölgesindeki entegrasyon için k-noktaları 8x8x8 olarak seçildi. Fermi yüzeyine kadar entegrasyon 0.02 Ry'lik bir Methfessel-Paxton yayma tekniği ile gerçekleştirildi (Methfessel, Paxton, 1989).

Alaşımın termodinamik özellikleri Debye modelini esas alan Termo_pw programı kullanılarak incelendi. Benzer şekilde alaşımların elastik özellikleri yine Termo_pw ile incelendi (Corso, 2016).

BULGULAR

Yapısal Özellikler

Fe_2BeGa alaşımlarının atomları Fm-3m uzay grubu olarak adlandırılan atomik dizilime sahiptirler. Alaşım sitekiyometrik olarak XYZ genel formülüne sahip olup bu tür alaşımlara full Heusler (FH) alaşımlar denir (Taylor ve ark.,2007). Full Heusler alaşımlar iç içe geçmiş dört FCC birim hücreden oluşur. Alaşımların atomik konfigürasyonu: (0, 0, 0) konumunda Fe atomu, (1/4, 1/4, 1/4) konumunda Be atomu, (1/2, 1/2, 1/2) konumunda ikinci Fe atomu ve (3/4, 3/4, 3/4) konumunda da Ga atomunu içerir. Şekil 1’de Fe_2BeGa FH alaşımların birim hücre yapısı gösterilmiştir.



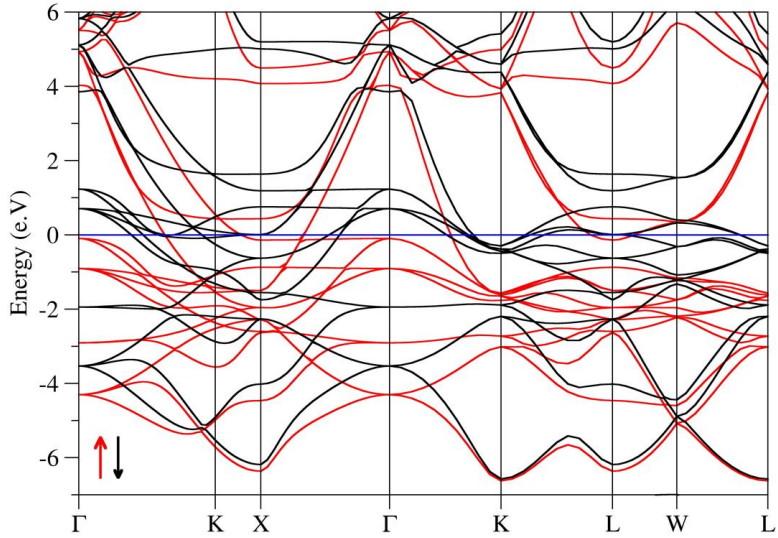
Şekil 1. Fe_2BeGa FH alaşımların birim hücre yapısı.

Fe_2BeGa FH alaşımları hakkında yapılan literatür araştırmasında alaşımlarla alakalı deneysel ya da teorik bir çalışma olmadığı görüldü. Fe_2BeGa FH alaşımları hakkında yapılan bu çalışmanın sonuçlarının güvenilirliğini test etmek amacıyla bir referans kütüphane olarak kabul gören The Open Quantum Materials Database (oqmd.org) adlı web sitesinde alaşımların olası kararlı durumları için modeller oluşturuldu. Oluşturulan modeller arasında en kararlı alaşımların Fm-3m uzay grubundaki alaşımlar olduğu yapılan hesaplamalardan anlaşıldı. Bu

hesaplamalar sonucunda en kararlı duruma karşılık gelen toplam enerjinin minimum olduğu denge durumu örgü sabiti $a_0 = 5,5796 \text{ \AA}$ olarak bulundu. Elde edilen bu değerin The Open Quantum Materials Database web sitesinde belirtilen denge durumu örgü sabiti ile yalnızca % 0.352 farklı olduğu görüldü.

Elektronik Özellikler

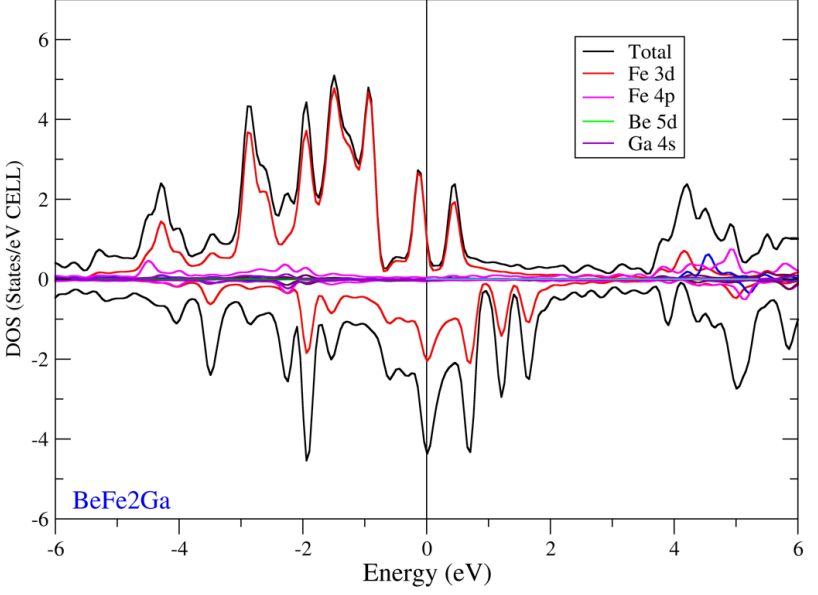
Alaşımın ait elektronik bant grafiği yüksek simetri spin polarizyonları dikkate alınarak çizdirildi. Bu grafikten alaşımın elektronik özelliklerinin anlaşılması amaçlandı. Şekil 2’de elde yüksek simetri yönlerine göre elde edilen elektronik bant grafiği görülmektedir.



Şekil 2. Fe₂BeGa FH alaşımının elektronik bant grafiği

Grafikteki elektronik bant eğrileri incelendiğinde, yüksek simetri eksenleri spin up (\uparrow) ve spin down (\downarrow) yönelimlerdeki valans ve değerlik bantlarının eğrilerinin iç içe geçerek birbirlerini ve Fermi enerji seviyesini kestikleri görülür. Bu bilgiye dayanarak Fermi enerji seviyesi yakınlarında herhangi bir yasak enerji aralığının olmadığı anlaşıldı. Valans ve iletkenlik bantlarının spin up ve spin down yönelimlerinde hem birbirlerini hem de Fermi enerji seviyesini kesmelerinden yola çıkarak alaşımın iletkenlik ve valans bantlarındaki elektronların bantlar arasında geçiş yapabilmek için herhangi bir engelin var olmadığı ve bu bağlamda da Fe₂BeGa FH alaşımın elektronik özellikleri açısından metalik bir davranışa sahip olduğu anlaşılır. Alaşımın başka elektronik özelliklerini anlamak için kısmi ve toplam durum

yoğunluğu (DOS) eğrileri çizdirildi. Şekil 3'te alaşıma ait durum yoğunluğu grafiği görülmektedir.



Şekil 3. Fe₂BeGa FH alaışımının durum yoğunluğu grafiği

Grafiğe göre spin up yöneliminde elektriksel iletkenliğe en baskın katkı sırasıyla, Fe elementinin 3d orbitalinden ve yine Fe elementinin 4p orbitalinden gelmektedir. Spin down yöneliminde ise elektronik iletkenliğe en baskın katkı Fe elementinin 3d orbitalinden gelir. Alaşımdaki diğer elementlerin elektronik iletkenliğe katkılarının oldukça sınırlı olduğu görüldü. Bu eğrilerin simetrik olmayışı alaışımın manyetik bir momente sahip olduğunu göstermektedir (Albayrak, 2022).

Elastik Özellikler

Şekil 2 ve 3'teki spin up ve spin down yönelimlerine ait eğriler incelendi ve bu eğrilerin simetrik olmadığı görüldü. Alaışımın elastik özelliklerini incelemek için alaşıma ait Bulk modülü (B), Young modülü (E), Shear modülü (G), B/G oranı gibi bazı niceliklerin hesaplanması gerekir. Bununla birlikte bu modüllerin ve oranların hesaplanabilmesi için öncelikle malzemeye ait elastik sabitleri olan C_{11} , C_{12} ve C_{44} değerlerinin hesaplanması gereklidir. Elastik sabitleri aynı zamanda malzemenin mekanik olarak kararlı olup olmadığını da anlamamızı sağlar. Malzemenin mekanik

kararlı olabilmesi için elastik sabitlerinin Born kararlılık kriterlerini sağlaması gerekir (Born, Huang, 1954). Born kararlılık kriterleri denklem 3'te görülmektedir.

$$C_{44} > 0; C_{11} - C_{12} > 0; C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (3)$$

Elastik sabitleri hesaplandıktan sonra hesaplamalarda bu elastik sabitleri kullanılarak malzemenin sertliği, sünekliliği vb. gibi elastik özellikleri veren modüller ve oranlar hesaplanarak malzeme hakkında bilgi sahibi olunur. Fe₂BeGa FH alaşımına ait hesaplanan elastik sabitleri Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1. Fe₂BeGa alaşımı için hesaplanan elastik sabitleri (C₁₁, C₁₂ ve C₄₄; GPa)

Malzeme	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄
Fe ₂ BeGa	184.001	182.12	96.17

Elastik sabitleri kullanılarak hesaplanan modüller ve oranları veren ifadeler Denklem (4), (5), (6), (7) ve (8)'de görülmektedir (Arikan ve ark., 2018).

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (4)$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{3B}\right) \quad (5)$$

$$B = \frac{2C_{12} + C_{11}}{3} \quad (6)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (7)$$

$$G = \frac{5(C_{11} - 2C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - 2C_{12}) + C_{44}} \quad (8)$$

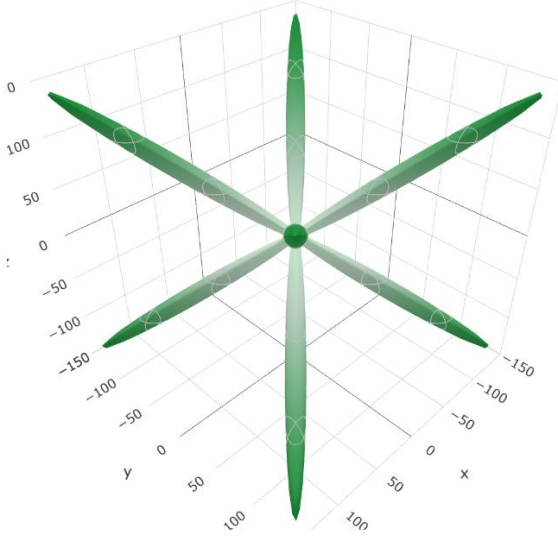
Tablo 2'de Fe₂BeGa FH alaşımı için hesaplanan değerler görülmektedir.

Tablo 2. Fe₂BeGa FH alaşımı için hesaplanan Bulk Modülü (*B*; GPa), Kayma/Shear modülü (*G*; GPa), Young modülü (*E*; GPa), *B/G* oranı, poisson oranı (σ), Anizotropi faktörü (*A*).

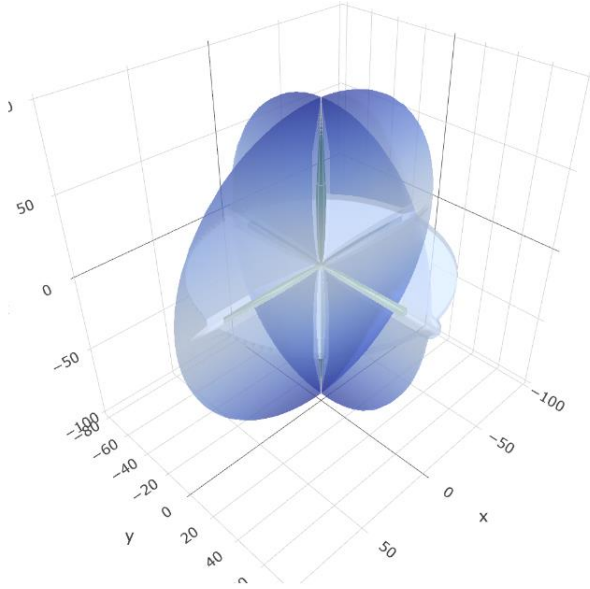
Malzeme	B	G	E	B	σ	A
				/G		
Fe₂	1	3	8	6	0.	1
BeGa	82.79	0.16	2.12	.061	3614	05.62

Tablo 2'deki hesaplanan değerler ele alındığında $C_{11} - C_{12}$ farkının pozitif olduğu görülür. $C_{11} - C_{12}$ değeri Cauchy basıncı olarak adlandırılır ve bu değer pozitif olması alaşımdaki bağların baskın olarak iyonik karakterde olduğunu gösterir. Cauchy basıncı değerini teyit etmek için Poisson oranına bakılır. Poisson oranının 0.1 civarında olması malzemede kovalent bağların baskın olduğunu, 0.25 civarında olması iyonik, 0.5 civarında olması da metalik bağlanmaların baskın olduğunu gösterir (Bannikow ve ark., 2007). Alaşım için Poisson oranı 0.3614 olarak hesaplanmış ve bu değere göre de alaşımda ki baskın bağlanmaların iyonik karakterde olduğu anlaşılır. Alaşım için hesaplanan Bulk modülü $C_{11} < B < C_{12}$ aralığında bulunmuştur. Bulk modülü 100 GPa değerinden büyük hesaplanmıştır. Bu değere göre alaşımın sıkışabilirliğinin az olduğunu anlaşılır. Bir malzeme için Young modülü değeri ne kadar büyükse malzemenin o kadar sert olduğu anlaşılır. Alaşım için Young modülü 100 GPa dan küçüktür ve buna göre alaşımın sertlikçe yumuşak bir karakterde olduğu düşünülmektedir. Pugh'un kriterine göre *B/G* oranı 1.75 değerinden büyükse malzemenin sünek, küçükse de kırılğan olduğu düşünülür.

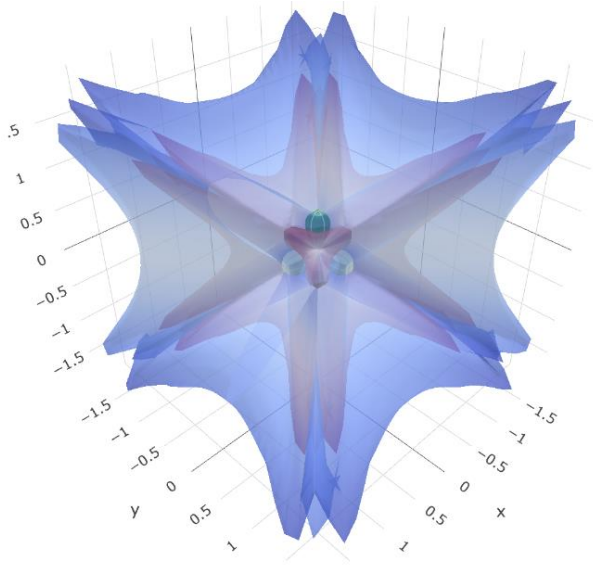
Buna göre malzemenin *B/G* oranının 6.061 olması alaşımın oldukça sünek bir doğaya sahip olduğunu gösterir (Pugh, 1954). Bir malzemenin anizotropik olması o malzemenin bazı özelliklerinin şekillenim sırasında yöne bağlı olması ile alakalıdır. Fe₂BeGa FH alaşımı için hesaplanan anizotropi değeri 1 den farklı olduğundan alaşımın anizotropik olduğu görülür. Alaşımın anizotropik olması nedeniyle ELATE kodları kullanılarak Young modülünün, kayma/Shear modülünün, Poisson oranının ve doğrusal sıkışa bilirliliğin yöne bağlılığı hesaplanarak üç boyutlu gösterimleri Şekil 4, 5 ve 6'da verilmiştir (Gaillac ve ark., 2016).



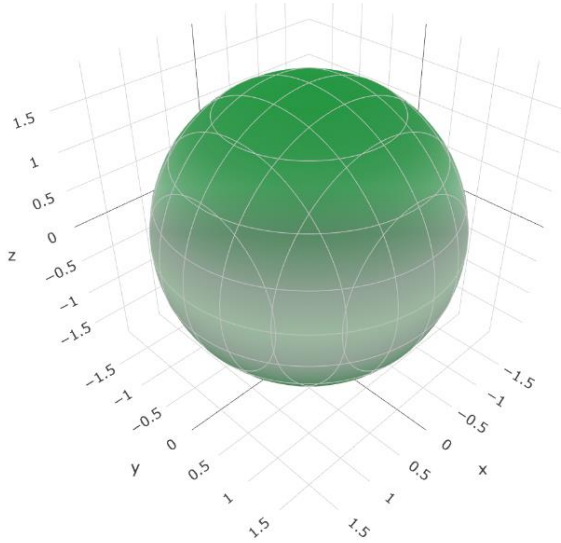
Şekil 4. Young modülünün yöne bağımlılığının üç boyutlu gösterimi.



Şekil 5. Kayma/Shear modülünün yöne bağımlılığının üç boyutlu gösterimi.



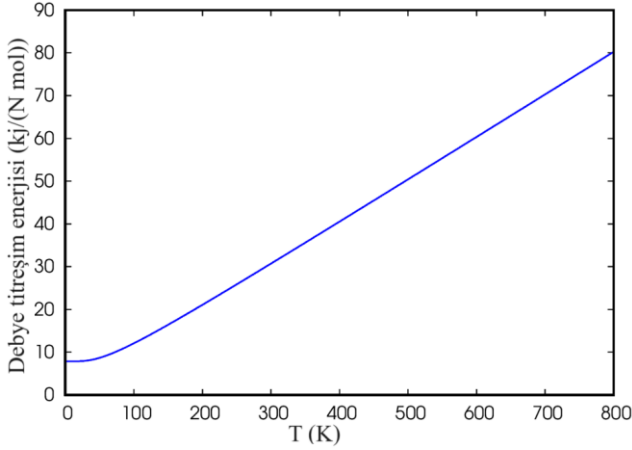
Şekil 6. Poisson oranının yöne bağımlılığının üç boyutlu gösterimi.



Şekil 7. Doğrusal sıkışabilirliğin yöne bağımlılığının üç boyutlu gösterimi.

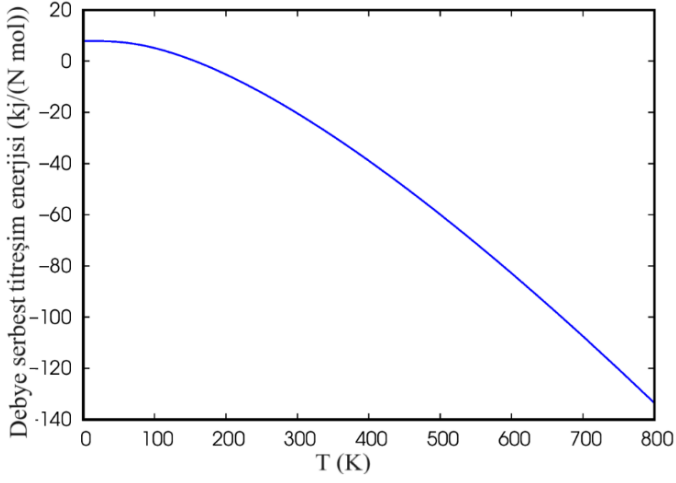
Termal Özellikler

Fe_2BeGa FH alaşımının termal özellikleri Debye modelini baz alan thermo_pw programı kullanılarak incelendi. Termal özellikleri anlayabilmek için alaşıma ait titreşim enerjisinin, serbest titreşim enerjisinin, ısı sığasının ve entropinin sıcaklığa bağlı grafikleri çizdirildi. Elde edilen grafikler Şekil 8, 9, 10 ve 11’de görülmektedir.



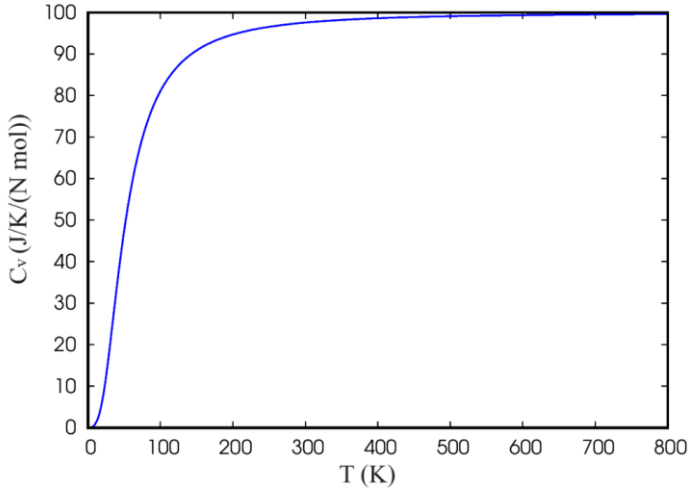
Şekil 8. Titreşim enerjisi- sıcaklık grafiği

Katı bir malzemenin ısı alması ile iç enerjisinin artması ve bu durumunda malzeme içerisindeki atomların titreşmesine sebep olması beklenir. Buna göre alaşımın sıcaklığının artması ile titreşim enerjilerinin artması olağandır. Şekil 8 de ki grafik incelendiğinde bu beklenen durumun Fe_2BeGa FH alaşımı için de geçerli olduğu görüldü.

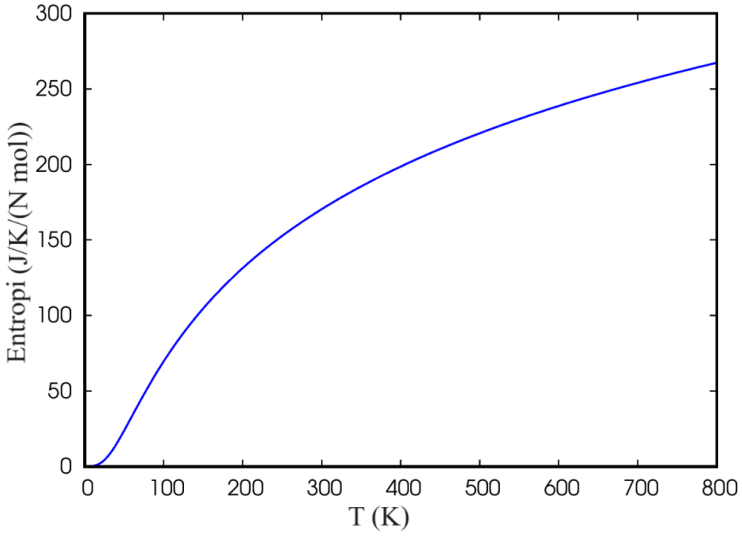


Şekil 9. Serbest titreşim enerjisi- sıcaklık grafiği

Katı malzemelerin sıcaklığının artması ile titreşim enerjisi de artar dolayısıyla serbest titreşim enerjisinin azalması beklenir. Yapılan hesaplamalarda alaşım için serbest titreşim enerjisinin sıcaklık arttıkça azaldığı tespit edildi. Alaşımın ısı sığasının sıcaklıkla ilişkisine bakıldığında, alaşımın ısı sığasının bir limit sıcaklık değerine kadar arttığı, bu limit değerden sonra da sabit bir değer aldığı görüldü. Alaşımın ısı sığasının ulaştığı bu limit Dulong-Petit limiti olarak bilinir (Petit, 1819). Alaşıma ait ısı sığası-sıcaklık grafiklerindeki ısı sığası değerleri 3NR limit değerlerine ulaşarak beklentiyi doğruladı. Düşük sıcaklıklarda ısı sıcaklığının hızlı bir şekilde arttığı yüksek sıcaklıklarda ise ısı sığasının artış hızının düşük sıcaklıklara göre daha az olduğu belirlendi.



Şekil 10. Isı sığasının- sıcaklık ile değişimi grafiği



Şekil 11. Entropi- sıcaklık grafiği

Sıcaklığın artması titreşimi artırmakla birlikte malzemenin düzensizliğini de artırır. Düzensizliğin ölçütü olan entropinin sıcaklıkla arttığı da beklendiği üzere Şekil 11 de görülmektedir. Ayrıca alaşıma ait Debye sıcaklığı 209.327 K olarak hesaplandı.

SONUÇ

Fm-3m uzay grubunda yer alan Fe₂BeGa FH alaşımının termodinamik, elastik, elektronik ve yapısal özellikleri DFT kullanılarak teorik açıdan incelenmiştir. Alaşımın alakalı yapılan literatür araştırmasında bu alaşımın alakalı teorik yada deneysel herhangi bir çalışma gözlemlenmemiştir. Alaşım hakkında termodinamik, elastik, elektronik ve yapısal özellikler ilk kez bu çalışmada rapor edildi. Alaşım için yapılan hesaplamalarda elde edilen kararlı durum örgü sabiti $a_0 = 5,5796 \text{ \AA}$ olarak bulundu. Bu değer, The Open Quantum Materials Database web sitesinde belirtilen örgü sabiti ile % 99.648 oranında uyumludur. Çizdirilen elektronik bant ve DOS grafiklerinden alaşımın metalik bir karakterde olduğu, iletkenliğe her iki yüksek simetri yöneliminde de en önemli katkının Fe atomunun 3d orbitalinden geldiği görüldü. Elektronik bant grafiği ve DOS grafiklerinde spin up ve spin down yüksek simetri yönelimlerine ait eğrilerin simetrik olmamaları bu malzemenin toplam net bir manyetik momente sahip olduğunu ve bu sayede malzemenin manyetik bir doğaya sahip olduğunu göstermektedir.

Elastik özelliklerin anlaşılması için elastik sabitleri hesaplanarak alaşımın Born kararlılık kriterlerini sağladığı ve bu yüzden de mekanik olarak kararlı olduğu görüldü. Elastik sabitler sayesinde alaşıma ait çeşitli bilgiler içeren Young modülü, Bulk modülü, Poisson oranı gibi modüller ve oranlar hesaplandı. Bu modüller ve oranlar ışığında malzemenin sünek, sıkışabilirliğinin az ve sertlikçe yumuşak olmamakla birlikte yumuşak denilebilecek eşşğin bir kademe üstünde denilebilecek kadar sert olduğu anlaşıldı. Alaşım içerisindeki bağlanmalar için Poisson oranı ve Cauchy basıncı değerlendirildi ve alaşım içerisinde iyonik bağların daha baskın olduğu sonucuna ulaşıldı. Ayrıca malzeme için anizotropi faktörü hesaplanarak malzemenin anizotropik bir doğaya da sahip olduğu anlaşıldı. Termodinamik hesaplamalar sonucunda Debye modeline göre malzemenin titreşim enerjisi, serbest titreşim enerjisi, ısı sığası ve entropi değerlerinin sıcaklıkla değişimi incelendi. Termodinamik açıdan incelenen tüm bu değerlerin beklendiği gibi sonuç verdikleri görüldü. Günlük hayatta önemli uygulamalara sahip Fe, Be ve Ga elementlerini içeren Fe₂BeGa FH alaşımının spin elektroniği uygulamaları açısından umut vaat eden veriler sağlayabileceği kanaatindeyim. Çalışmanın yapılma amacı spintronik uygulamalar açısından umut vaat edebilecek Fe₂BeGa FH alaşımı hakkında termodinamik, elastik, elektronik ve yapısal özellikler hakkında referans olabilecek ön bilgi sağlamaktır.

KAYNAKÇA

- Al S., Arikan N., Demir S. and İyigor A., (2018). LatticeDynamic Properties of Rh₂XAl (X= Fe and Y) Alloys, *Physica B: Condensed Matter*, 531, pp. 16-20,
- Albayrak E., (2022) XA yapıdaki Ti₂RuSn ters-Heusler alaşımının yapısal elektronik, elastic ve termodinamik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi, *Journal of the Institute of Science and Technology*, 12(3): 1496 - 1505
- Bannikov V.V, Shein I.R., Ivanovskii A.L., (2007). Electronic structure, chemical bonding and elastic properties of the first thorium-containing nitride perovskite TaThN₃. *Physica status solidi (RRL) – Rapid Res. Lett.*, 1 (3), pp. 89-91
- Alloys", *Physica B: Condensed Matter*, 531, pp.16-20
- Born M., Huang K., (1965). *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Clarendon Oxford
- Corso A.D., (2016). Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation, *J. Phys: Condens Matter* 28,075401
- Gaillac R., Pullumbi P., (2016). FX Coudert, ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *J. Phys.:Condens. Matter* 28, 275201
- Giannozzi P., De Gironcoli S., Pavone P., Baroni S., (1991). Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors. *Phys. Rev. B* 43 7231
- Gianozzi P. et al, (2009). Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials *J. Phy: Condens Matter*, 21 (39), p.395502
- Heusler F., Richarz F., (1903). Über Magnetische Manganlegierungen, *J. Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* 5, 219.
- Kohn W., Sham L.J., (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Phys.*,
- Methfessel M., Paxton A., (1989) High-precision sampling for Brillouin- zone integration in metals, *Phys. Rev. B*, 40 (6),p.3616
- Nichelson B., (2023). Iron (Fe), Salem Press Encyclopedia of Science, Research Starters,
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.*, 77 (18), pp. 3865-3868
- Petit P., (1819). Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur, *Annales de Chimie et de Physique* 10395–413
- Pugh S.F., (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45:367,823-843

- Secrets R., (2023). Gallium (Ga), Salem Press Encyclopedia of Science, Research Starters
- Srivastava G.P., (1990). The physics of phonons. Adam Hilger: Bristol
- Taylor T. P., Ding M., Ehler D. S., Foreman T. M., Kaszuba J. P. & Sauer N. N., (2007). 'Beryllium in the Environment: A Review', Journal of Environmental Science and Health, Part A, Pages 439-469,
- The Open Quantum Materials Database,
<https://oqmd.org/analysis/calculation/824849/>

BÖLÜM 12

A-15 TİPİ Zr_3Hg BİLEŞİĞİNİN YAPISAL, ELASTİK, TERMODİNAMİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Doç. Dr. Cihan KÜRKÇÜ¹
Doç. Dr. Abdullah CANDAN²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385147>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Teknik Bilimler Meslek Yüksekokulu Elektronik ve Otomasyon Bölümü, 0000-0003-3597-1950

² Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Teknik Bilimler Meslek Yüksekokulu Makine ve Metal Teknolojileri Bölümü, 0000-0003-4807-3017

GİRİŞ

1931'de Hartman ve ark. A-15 fazlı kübik kristal yapıyı ilk gözlemleyen (Hartman & Ebert, 1931) bilim insanlarıdır. A-15 fazları A_3B tipi bileşime sahiptir, burada A elementi herhangi bir geçiş metali iken B elementi periyodik tablonun sağ tarafındaki bir elementtir (Banus, Reed, Gatos, Lavine, & Kafalas, 1962; Killpatrick, 1964; Tarutani & Kawabe, 1978). A_3B tipi bileşikler arasında, süperiletkenlik gösteren intermetaliklere büyük ilgi gösterilmiştir.

Teknolojik açıdan önemli birçok bilim ve mühendislik dalının ilerlemesinde intermetalik bileşikler önemli bir rol oynamıştır. İntermetalik bileşikler, fizikçiler, kimyagerler ve malzeme bilimcileri için sürekli ilgi konusu olan en eski ve en önemli malzeme gruplarından birisidir (An & Qin, 2016; Liang, Fan, Jiang, Liu, & Zhao, 2017; Lu et al., 2017; Mohammedi, Daoudi, & Boukraa, 2014; Rajagopalan & Sundareswari, 2004; Terada, 2008; Terada, Ohkubo, Miura, Sanchez, & Mohri, 2003). Birçok intermetalik bileşik yüksek erime noktası, düşük yoğunluk ve iyi oksidasyon ve korozyon direnci dahil olmak üzere fiziksel ve mekanik özelliklerin çekici bir kombinasyonunu sergiler. Havacılık endüstrisi, uçak, otomotiv motoru, biyomedikal enstrümantasyonlar, piller, hidrojen depolama sistemleri ve kimya endüstrilerinde geniş uygulamaları vardır. Her lehim bağlantısında, lehim ile ilgilenilen sistem arasında, bir veya daha fazla intermetalik bileşik içeren bir katman mevcuttur (Kim, Huh, & Sugauma, 2003; Magnien, Khatibi, Lederer, & Ipsier, 2016; Zhong, Qin, An, & Wang, 2010). Süperiletken bileşiklerin kritik sıcaklığını (T_c) yükseltmek için büyük çaba sarf edilmiştir. A-15 tipi yapıya sahip bileşiklerin süperiletkenlik sergiledikleri bilinmekte ve bu bileşiklerin fiziksel özelliklerinin süperiletkenlik parametrelerini etkilediği bilinmektedir. Bu bağlamda, A_3B bileşiklerinin A-15 fazlı ailesi, teorik ve deneysel olarak kapsamlı birçok çalışmada incelenmiştir (Boscencu, Ilie, & Socoteanu, 2011; Godeke, ten Haken, ten Kate, & Larbalestier, 2006; Kumakura et al., 2004; Sluiter, 2006; Tachikawa, 2006). Bu sebeple Zr_3Hg bileşiğinin yapısal, elastik, termodinamik ve titreşim özellikleri ayrıntılı bir şekilde incelenerek bulgular kısmında sonuçları tartışılmıştır.

HESAPLAMA YÖNTEMİ

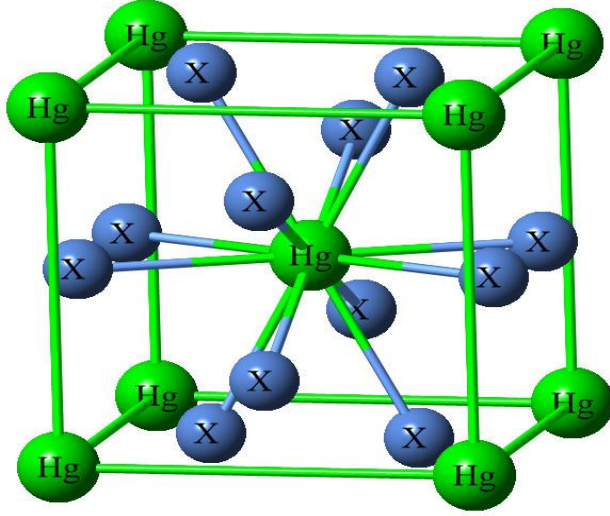
Bu çalışmada A-15 tipi yapıya ait uzay grubu Pm-3n olan kübik Zr₃Hg bileşiğinin yapısal, elastik, fonon ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi çerçevesinde Quantum-ESPRESSO paket programı kullanılarak incelendi (Giannozzi et al., 2009). Değiş tokuş-korelasyon enerjisi olarak Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) parametresi ile birlikte Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı (GGA) tercih edildi (Perdew, Burke, & Ernzerhof, 1996). Hesaplamalarda kinetik enerji kesme değeri 50 Ry ve Methfessel-Paxton'a göre smearing parametresi 0,01 Ry olarak yeterli görüldü. Yapılan geometri optimizasyonu sonucunda Zr₃Hg bileşiğinin kübik yapısı için Brillouin bölgesinin indirgenemez kısmında k-nokta değerleri $12 \times 12 \times 12$ olarak kullanıldı. Zr₃Hg bileşiğinin elastik sabitleri zor-zorlanma yöntemi kullanılarak hesaplandı. Isı kapasitesi, entropi ve titreşim enerjisi gibi değişkenleri belirlemek için Debye Modeli kullanılarak termodinamik hesaplamalar yapıldı.

BULGULAR

Yapısal Özellikler

A15 tipi Zr₃Hg bileşiği çevresel koşullarda Pm-3n (No. 223) uzay grubuna ait kübik yapıda kristalleşir. Bu yapının bir görüntüsü Şekil 1'de verilmiştir. Zr₃Hg bileşiğinin birim hücresinde altı Zr atomu ve iki Hg atomu bulunur. Zr atomları 2a (0.5, 0.5, 0.5) wyckoff konumuna yerleşirken Hg atomları 6c (0.5, 0.25, 0) wyckoff konumuna yerleşmiştir.

Hesaplamalara başlamadan önce ilk olarak geometrik optimizasyon yapıldı. Hesaplamalar sonucunda elde edilen yapısal parametreler ve mevcut deneysel parametreler Tablo 1'de karşılaştırılmalı olarak listelenmiştir. Tablo 1'den görülebileceği üzere hesaplanan örgü parametresi değeri (5.596 Å), % 0.60 ile 0.82 sınırlarında bir farkla mevcut deneysel verilerden daha büyük olarak bulunmuştur. Bunun nedeni, geometri optimizasyonunda kullanılan GGA yaklaşımının, örgü parametresi değerini biraz fazla tahmin etmesinden kaynaklanmaktadır. Bununla birlikte, optimize edilmiş örgü parametresi deneysel değerlerle iyi uyum göstermektedir. Bu uyum, çalışmada kullanılan hesaplama yönteminin uygulanabilir ve güvenilir olduğunu göstermektedir.



Şekil 1. A-15 tipi X_3Hg ($X = Zr$) bileşiğinin birim hücresinin görüntüsü.

Zr_3Hg bileşiğinin termodinamik olarak kararlılığını araştırmak için formasyon entalpisi (ΔH_f) hesaplandı. ΔH_f aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$\Delta H_f = (E_{tot} - 6E_{Zr}^{bulk} - 2E_{Hg}^{bulk})/8 \quad (1)$$

Burada ΔH_f ; formasyon entalpisi, E_{tot} ; Zr_3Hg 'nin formül başına toplam enerjisidir. E_{Zr}^{bulk} ve E_{Hg}^{bulk} , sırasıyla Zr ve Hg atomunun bulk haldeki enerjileridir. Katılar için yapısal kararlılığın termodinamik koşulları formasyon entalpisine bağlıdır (Jiaying Chen et al., 2020; Jing Chen et al., 2020; Xu, Wang, Yang, & Yan, 2011; Zhang et al., 2019; Zhang et al., 2020; Zhang, Huang, Ma, Yu, & Jiang, 2018). Daha düşük formasyon entalpisi termodinamik olarak daha kararlı malzemeye karşılık gelir (Jiaying Chen et al., 2020). Tablo 1'de Zr_3Hg 'nin hesaplanan formasyon entalpisi değeri verilmiştir. Hesaplanan formasyon entalpisi değerinin negatif olması bileşiğinin termodinamik olarak kararlı olduğu ve deneysel olarak sentezlenebileceği anlamlarına gelmektedir.

Tablo 1. Zr₃Hg bileşiğinin hesaplanan yapısal parametreleri.

Kaynaklar		a_0 (Å)	B (GPa)	B' (GPa)	ΔH_f (eV/f.u.)
Zr ₃ Hg	Bu çalışma	5.596	102.3	3.73	-0.726
	(Vielhaber & Luo, 1967)	5.560	-	-	-
	(Pietrokowsky, 1954)	5.558	-	-	-
	(Rong-Yao & Qi-Guang, 1986)	5.556	-	-	-
	(Paufler, 1977)	5.550	-	-	-
(Jain et al., 2010)	-	-	-	-	-0.792

Elastik Özellikler

Katıların elastik sabitleri, kristallerin mekanik ve dinamik davranışları arasında bir bağlantı sağlar ve bulk modülü (B), kayma modülü (G), Young modülü (E) ve Poisson oranı (ν) ile karakterize edilen dış gerilime tepkileri hakkında önemli bilgiler verir. Bu sabitler malzemenin mukavemetinin belirlenmesinde önemli bir rol oynar ve uygulamalar için önemli pratik göstergelerdir. Ayrıca sistemin mekanik kararlılığı hakkında da bilgi sağlarlar. Kübik simetriye sahip bir malzeme için yalnızca üç bağımsız elastik sabit değeri vardır: C_{11} , C_{12} ve C_{44} . Hesaplanan elastik sabitler Tablo 2'de literatürdeki diğer mevcut sonuçlar ile birlikte verilmiştir.

Tablo 2. Zr₃Hg bileşiğinin hesaplanan elastik sabitleri (GPa)

A-15	Kaynaklar	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	C_P (GPa)
Zr ₃ Hg	Bu çalışma	211.18	51.65	48.85	2.80
	(Kube, 2017)	210.35	51.14	46.41	-

Kübik bir yapıda mekanik kararlılık için aşağıdaki Born koşullarının sağlanması gerekmektedir (Mattesini, Ahuja, & Johansson, 2003).

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (2)$$

Hesaplanan elastik sabiti değerleri Eş. 2 ile verilen Born koşullarını sağladığından dolayı Zr₃Hg, Pm-3n fazında mekanik olarak kararlıdır.

Çok kristalli elastik modüller, tek kristalli elastik sabitlerden hesaplanabilir. Bulk modülü (B), kayma modülü (G), Young modülü (E) ve Poisson oranı (ν), B/G oranı ve kayma anizotropi faktörünün (A) hesaplanan değerleri Tablo 3'de verilmiştir.

Tablo 3. Zr₃Hg bileşiği için hesaplanmış elastik modüller

A-15	Kaynak	B (GPa)	G (GPa)	E (GPa)	ν	B/G	A
Zr ₃ Hg	Bu çalışma (Kube, 2017)	104.82 -	59.51 -	150.13 -	0.261 -	1.76 -	0.612 0.58

Ayrıca sıfır basınçta Young modülünü (E), Poisson oranını (ν) ve sıfır basınçta kayma anizotropi faktörünü (A) elde etmek için aşağıdaki iyi bilinen eşitlikler kullanılmıştır (Sari, Merad, & Abdelkader, 2015):

$$E = \frac{9BG}{(3B+G)} \quad (3)$$

$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (4)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11}-C_{12})} \quad (5)$$

Kayma deformasyonuna karşı direnci yansıtan C_{44} değerinin temel kristalografik yönler boyunca tek yönlü sıkıştırmayla ilişkili olan C_{11} 'den daha düşük olduğunu gözlemledik. Bu sonuç kübik hücrenin tek yönlü sıkıştırmayla karşılaştırıldığında kesme nedeniyle daha kolay deforme olduğu anlamına gelir. Katıların elastik modülleri ve erime sıcaklıklarının her ikisi de malzemenin bağlanma mukavemeti tarafından belirlendiğinden, bu parametrelerin birbirine bağlı olması şaşırtıcı değildir (Ali et al., 2018; Fine, Brown, & Marcus, 1984). Tablo 3'den görüldüğü gibi Zr₃Hg bileşiği için $B > G$ 'dir. Bu durum kayma modülünün mekanik kararlılığı sınırladığını gösterir. Poisson oranının değeri, malzemelerin bağlanma doğasını açıklar (Haines, Leger, & Bocquillon, 2001). Kovalent malzemeler için ν değeri küçüktür (tipik olarak ~ 0.10); iyonik malzemeler için ν 'un tipik değeri ~ 0.25 'tir; metalik malzemeler için tipik olarak ~ 0.33 'tür (Haines et al., 2001; Hu & Yang, 2006; Tang, Yu, Zeng, Ding, & Gray, 2008). Bu çalışmada Zr₃Hg bileşiği için Poisson oranı değeri 0.261 olarak elde edilmiştir. Bu sonuç Zr₃Hg bileşiğinde atomların birbiriyle iyonik bağ yaptığını gösterir. Belirli bir katının kırılma ve sünek yapısının bağlı olduğu faktörlerden bazıları şunlardır: Pugh indeksi (B/G) ve Cauchy basıncı (C_P). Pugh (Bannikov, Shein, & Ivanovskii,

2010; Pugh, 1954) malzemelerin mekanik özelliklerini (süneklik ve kırılgenlik) ayırt etmek için ampirik bir ilişki önerdi. B/G 1.75'ten büyükse malzeme sünek olmalıdır. Aksi halde kırılgenandır. Bu çalışmada Zr₃Hg bileşiđi için B/G oranı 1,76 olarak bulundu. Böylece Zr₃Hg bileşiđinin sünek bir davranış sergilediđi sonucu çıkarılabilir. Öte yandan, pozitif bir Cauchy basıncı malzeme için sünekliđi, negatif bir deđer ise kırılgenliđi gösterir (Feng & Cui, 2014). Zr₃Hg bileşiđi için hesaplanan Cauchy basıncı deđeri Tablo 2'de verilmiştir. Zr₃Hg için hesaplanan Cauchy basıncı deđeri pozitifdir, bu da söz konusu bileşiđin dođası geređi sünek olduđunu gösterir.

Termodinamik Özellikler

Debye sıcaklıđı katılar için önemli bir temel parametredir. Erime sıcaklıđı, özgül ısı, kafes titreşimi, termal iletkenlik ve termal genleşme katsayısı gibi birçok önemli fiziksel parametrenin tahmin edilmesine yol açar. debye sıcaklıđı metallerdeki boşluk formasyon enerjisiyle ilgilidir. Farklı malzeme türleri için güvenilir debye sıcaklıđı tahminleri elastik modüllerden elde edilebilir (Ali, Hadi, Hossain, Naqib, & Islam, 2017; Hadi, Ali, Naqib, & Islam, 2017; Hadi et al., 2016). Bir kristaldeki ortalama elastik dalga hızı v_a şu şekilde verilir:

$$v_a = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad (6)$$

Burada v_t ve v_l sırasıyla enine ve boyuna dalga hızlarıdır. Enine hız v_t şu şekilde ifade edilir:

$$v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (7)$$

burada ρ yoğunluktur. Boyuna dalga hızı v_l şu şekilde elde edilir:

$$v_l = \sqrt{\frac{B+4G/3}{\rho}} \quad (8)$$

Debye sıcaklıđı Θ_D şu şekilde ifade edilebilir (Hadi, Roknuzzaman, et al., 2017):

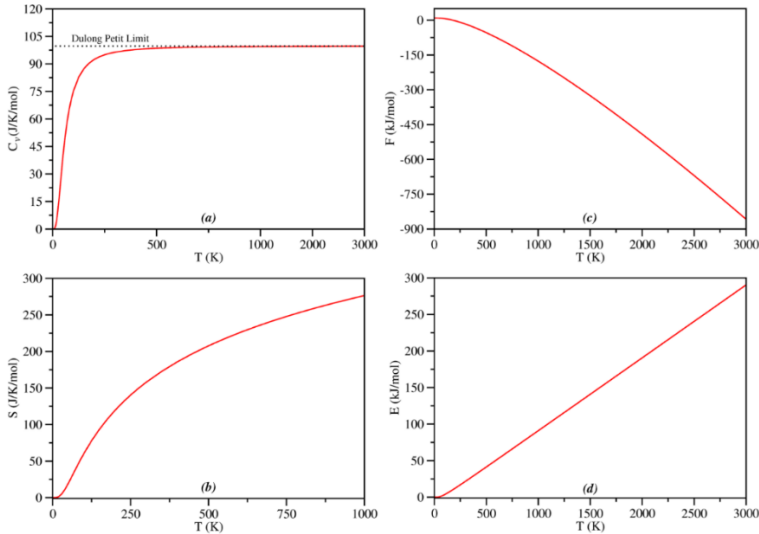
$$\Theta_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{3n}{4\pi V_0} \right)^{1/3} v_a \quad (9)$$

burada h ; Planck sabiti, k_B ; Boltzmann sabiti, V_0 ; birim hücrenin hacmi ve n birim hücre içindeki atom sayısıdır. Zr_3Hg bileşiği için hesaplanan yoğunluk, v_l , v_t ve v_a ses hızları ile Debye sıcaklığı Tablo 4'te sunulmuştur.

Tablo 4. Zr_3Hg bileşiği için hesaplanmış yoğunluk, v_l , v_t ve v_a ses hızları ile Debye sıcaklığı değerleri

A-15	Kaynaklar	ρ (g/cm ³)	v_l (m/s)	v_t (m/s)	v_a (m/s)	θ_D (K)
Zr₃Hg	Bu çalışma	8.969	4532	2576	2864	304.53

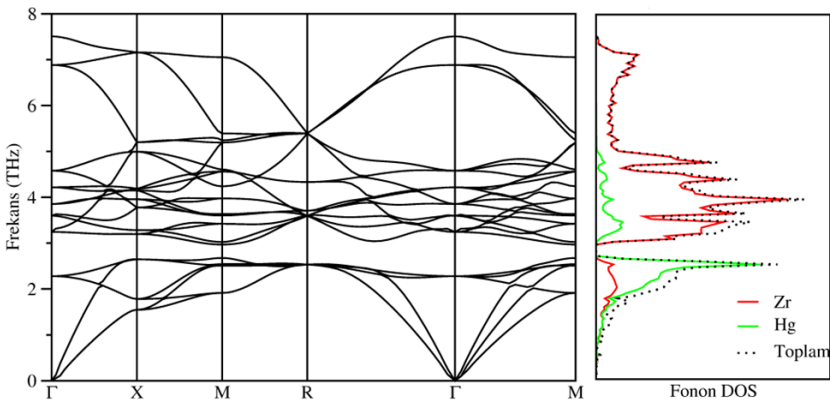
Zr_3Hg bileşiği için sıcaklığa karşılık öz ısı (C_v), entropi (S), serbest enerji (F) ve iç enerji (E) değişimleri Şekil 2'de verilmiştir. Şekil 2 (a)'da öz ısı $T \leq 200$ K için hızlı bir şekilde artmasına rağmen, $T > 200$ K için yavaş yavaş artar. Bu nedenle, yüksek sıcaklıklarda öz ısı Dulong-Petit limiti ($\sim 3NR$) olarak adlandırılan sabite yakınsar (Dulong & Petit, 1819). Burada N , birim hücredeki atom sayısı, R ise ideal gaz sabitidir. Şekil 2 (b), (c) ve (d) sırasıyla Zr_3Hg için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak entropi, serbest enerji ve iç enerjideki değişimi göstermektedir. Şekil 2 (b), (c) ve (d)'den, sıcaklıkla birlikte entropi ve iç enerji değeri artmasına rağmen serbest enerji değerinin azaldığı görülmektedir.



Şekil 2. Zr_3Hg bileşiği için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak öz ısı (a), entropi (b), serbest enerji (c) ve iç enerji (d) değişimi grafiği.

Titreşim Özellikleri

Zr_3Hg bileşiği için hesaplanan fonon-dağılım eğrisi Şekil 3 ile gösterilmektedir. Pm-3n fazının birim hücresi sekiz atom içerdiğinden, karşılık gelen titreşim modlarının sayısı yirmi dördür; bunların altısı akustik dallardır ve geri kalan onsekiz tanesi optik dallardır. Zr_3Hg 'nin Pm-3n fazı için Brillouin bölgesinin tamamında hayali bir fonon frekansı yoktur. Bu, Zr_3Hg 'nin Pm-3n fazının dinamik kararlılığını destekler. Bunun yanı sıra 0,36 THz'lik bir bant boşluğu olduğu da Şekil 3'den görülmektedir.



Şekil 3. Zr_3Hg bileşiğinin Pm-3n fazı için hesaplanan fonon dispersiyon eğrisi ile toplam ve parçalı durum yoğunluğu eğrisi.

Ayrıca Şekil 3'de verilen parçalı fonon dağılımı grafiğinden akustik dallarda Hg atomunun daha baskın olduğu optik dallarda ise Zr atomunun daha baskın olduğu görülmektedir. Akustik ve optik dallarda yer alan atomların baskınlığının farklı olmasının sebebi atomların kütlelerinin farklı olmasından kaynaklandığı düşünülmektedir.

SONUÇLAR

Zr_3Hg bileşiğinin Pm-3n fazı için yapısal, elastik, termodinamik ve fonon özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi çerçevesinde incelendi. Literatürde bulunan diğer çalışmalarla iyi uyum halinde olan örgü parametresi değeri $a_0 = 5.596 \text{ \AA}$ olarak elde edildi. Yapılan elastik sabiti hesaplamalarından Zr_3Hg bileşiğinin Pm-3n fazının mekanik olarak kararlı olduğu görüldü. Ayrıca elastik sabiti değerleri kullanılarak elde edilebilen B/G oranının 1,76 olarak ölçülmesi ve Cauchy basıncı değerinin pozitif çıkmasından dolayı Pm-3n fazında bileşiğinin sünek özelliğe sahiptir. Elastik sabitlerinden hesaplanan bir başka parametre olan Poisson oranı değerinin

0,261 olarak bulunmasından dolayı bileşiği oluşturan atomların birbirine iyonik bağ ile bağlandıkları görülmüştür. Ek olarak Zr_3Hg bileşiğinin yoğunluk, v_l , v_t ve v_a ses hızları ile Debye sıcaklığı değerleri de hesaplanmıştır. Zr_3Hg bileşiğinin Pm-3n fazının dinamik kararlılığı hakkında bilgi sahibi olabilmek için fonon hesabı yapıldı. Brillouin bölgesinin tamamında hayali bir fonon frekansı olmadığından dolayı bileşiğin hesaplanan fazının dinamik olarak kararlı olduğu görüldü.

KAYNAKÇA

- Ali, M., Hadi, M., Hossain, M., Naqib, S., & Islam, A. (2017). Theoretical investigation of structural, elastic, and electronic properties of ternary boride MoAlB. *Physica status solidi (b)*, 254(7), 1700010.
- Ali, M., Hossain, M., Hossain, M., Nasir, M., Uddin, M., Hasan, M., . . . Naqib, S. (2018). Recently synthesized $(Zr_{1-x}Ti_x)2AlC$ ($0 \leq x \leq 1$) solid solutions: Theoretical study of the effects of M mixing on physical properties. *Journal of alloys and compounds*, 743, 146-154.
- An, T., & Qin, F. (2016). Relationship between the intermetallic compounds growth and the microcracking behavior of lead-free solder joints. *Journal of Electronic Packaging*, 138(1), 011002.
- Bannikov, V., Shein, I., & Ivanovskii, A. (2010). Elastic properties of antiperovskite-type Ni-rich nitrides MNi_3 (M= Zn, Cd, Mg, Al, Ga, In, Sn, Sb, Pd, Cu, Ag and Pt) as predicted from first-principles calculations. *Physica B: Condensed Matter*, 405(22), 4615-4619.
- Banus, M., Reed, T., Gatos, H., Lavine, M., & Kafalas, J. (1962). Nb₃In: A β -tungsten structure superconducting compound. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 23(7), 971-973.
- Boscencu, R., Ilie, M., & Socoteanu, R. (2011). Spectroscopic behavior of some A₃B type tetrapyrrolic complexes in several organic solvents and micellar media. *International Journal of Molecular Sciences*, 12(9), 5552-5564.
- Chen, J., Zhang, X., Ying, C., Ma, H., Li, J., Wang, F., & Guo, H. (2020). The influence of vacancy defects on elastic and electronic properties of TaSi (5/3) desilicides from a first-principles calculations. *Ceramics International*, 46(8, Part A), 10992-10999.
- Chen, J., Zhang, X., Zhu, S., Ma, H., Li, X., Yu, H., & Wang, F. (2020). Elastic anisotropy and thermodynamics properties of BiCu₂PO₆, BiZn₂PO₆ and BiPb₂PO₆ ceramics materials from first-principles calculations. *Ceramics International*, 46(7), 8575-8581.
- Dew-Hughes, D. (1975). Superconducting A-15 compounds: A review. *Cryogenics*, 15(8), 435-454.
- Ding, Y., Deng, S., & Zhao, Y. (2014). The electronic structure of Nb₃Al/Nb₃Sn, a new test case for flat/steep band model of superconductivity. *Journal of Modern Transportation*, 22, 183-186.
- Dulong, P. L., & Petit, A.-T. (1819). *Recherches sur quelques points importants de la theorie de la chaleur*.
- Feng, W., & Cui, S. (2014). Mechanical and electronic properties of Ti₂AlN and Ti₄AlN₃: a first-principles study. *Canadian Journal of Physics*, 92(12), 1652-1657.

- Fine, M., Brown, L., & Marcus, H. (1984). Elastic constants versus melting temperature in metals. *Scripta metallurgica*, 18(9), 951-956.
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., . . . Dabo, I. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502.
- Godeke, A., ten Haken, B., ten Kate, H. H., & Larbalestier, D. (2006). A general scaling relation for the critical current density in Nb₃Sn. *Superconductor science and technology*, 19(10), R100.
- Hadi, M., Ali, M., Naqib, S., & Islam, A. (2017). New ternary superconducting compound LaRu₂As₂: Physical properties from density functional theory calculations. *Chinese Physics B*, 26(3), 037103.
- Hadi, M., Nasir, M., Roknuzzaman, M., Rayhan, M., Naqib, S., & Islam, A. (2016). First-principles prediction of mechanical and bonding characteristics of new T2 superconductor Ta₅GeB₂. *Physica status solidi (b)*, 253(10), 2020-2026.
- Hadi, M., Roknuzzaman, M., Chroneos, A., Naqib, S., Islam, A., Vovk, R., & Ostrikov, K. (2017). Elastic and thermodynamic properties of new (Zr_{3-x}Tix) AlC₂ MAX-phase solid solutions. *Computational Materials Science*, 137, 318-326.
- Haines, J., Leger, J., & Bocquillon, G. (2001). Synthesis and design of superhard materials. *Annual Review of Materials Research*, 31(1), 1-23.
- Hartman, H., & Ebert, F. (1931). Bretschneider, O. *Z. Anorg. Allg. Chem*, 198, 116.
- Hu, Q. M., & Yang, R. (2006). Mechanical properties of structural materials from first-principles. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 10(1), 19-25.
- Jain, A., Seyed-Reihani, S.-A., Fischer, C. C., Couling, D. J., Ceder, G., & Green, W. H. (2010). Ab initio screening of metal sorbents for elemental mercury capture in syngas streams. *Chemical Engineering Science*, 65(10), 3025-3033.
- Killpatrick, D. (1964). Pressure-temperature phase diagrams for Nb₃In and Nb₃Bi. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 25(11), 1213-1216.
- Kim, K., Huh, S., & Sukanuma, K. (2003). Effects of intermetallic compounds on properties of Sn–Ag–Cu lead-free soldered joints. *Journal of alloys and compounds*, 352(1-2), 226-236.
- Klein, B., Boyer, L., & Papaconstantopoulos, D. (1979). Superconducting properties of A 15 compounds derived from band-structure results. *Physical Review Letters*, 42(8), 530.
- Kube, C. M. (2017). Iterative solution to bulk wave propagation in polycrystalline materials. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 141(3), 1804-1811.

- Kumakura, H., Kitaguchi, H., Matsumoto, A., Yamada, H., Hirakawa, M., & Tachikawa, K. (2004). Fabrication of A15-type superconducting tape conductors by applying the ex situ powder-in-tube method. *Superconductor science and technology*, 18(1), 147.
- Liang, J., Fan, D., Jiang, P., Liu, H., & Zhao, W. (2017). First-principles study of the thermoelectric properties of intermetallic compound YbAl₃. *Intermetallics*, 87, 27-30.
- Lu, H.-J., Zou, N., Zhao, X.-S., Shen, J.-Y., Lu, X.-G., & He, Y.-L. (2017). Thermodynamic investigation of the Zr-Fe-Nb system and its applications. *Intermetallics*, 88, 91-100.
- Magnien, J., Khatibi, G., Lederer, M., & Ipsen, H. (2016). Investigation of interfacial behavior in miniaturized solder interconnects. *Materials Science and Engineering: A*, 673, 541-550.
- Mattesini, M., Ahuja, R., & Johansson, B. (2003). Cubic Hf₃N₄ and Zr₃N₄: A class of hard materials. *Physical Review B*, 68(18), 184108.
- Mohammedi, L., Daoudi, B., & Boukraa, A. (2014). Computational Condensed Matter.
- Paduani, C. (2007). Electronic structure of the A₃B compounds: A= Nb; B= Al, Ga, Ge, Sn and In. *Brazilian Journal of Physics*, 37, 1073-1076.
- Paufler, P. (1977). On the atomic size in Cr₃Si-type (A-15) phases. *Kristall und Technik*, 12(7), 667-672.
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
- Pietrokowsky, P. (1954). A cursory investigation of intermediate phases in the systems Ti-Zn, Ti-Hg, Zr-Zn, Zr-Cd, and Zr-Hg by X-ray powder diffraction methods. *JOM*, 6, 219-226.
- Pugh, S. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367), 823-843.
- Rajagopalan, M., & Sundareswari, M. (2004). Ab initio study of the electronic structure of rhodium based intermetallic compounds under pressure. *Journal of alloys and compounds*, 379(1-2), 8-15.
- Rong-Yao, W., & Qi-Guang, L. (1986). Structure of A15 compounds. *physica status solidi (a)*, 96(2), 397-406.
- Sari, A., Merad, G., & Abdelkader, H. S. (2015). Ab initio calculations of structural, elastic and thermal properties of TiCr₂ and (Ti, Mg)(Mg, Cr)₂ Laves phases. *Computational Materials Science*, 96, 348-353.
- Sluiter, M. (2006). Ab initio lattice stabilities of some elemental complex structures. *Calphad*, 30(4), 357-366.
- Stewart, G. R. (2015). Superconductivity in the A15 structure. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 514, 28-35.

- Tachikawa, K. (2006). Recent topics in high-field A15 superconductors in Japan. *Fusion engineering and design*, 81(20-22), 2401-2410.
- Tang, B.-Y., Yu, W.-Y., Zeng, X.-Q., Ding, W.-J., & Gray, M. (2008). First-principles study of the electronic structure and mechanical properties of CaMg₂ Laves phase. *Materials Science and Engineering: A*, 489(1-2), 444-450.
- Tarutani, Y., & Kawabe, U. (1978). Nb₃In and Mo₃Sn thin films with A-15 type structure. *Materials Research Bulletin*, 13(5), 469-472.
- Terada, Y. (2008). Thermophysical Properties of L1₂ Intermetallic Compounds of Iridium. *Platinum Metals Review*, 52(4), 208-214.
- Terada, Y., Ohkubo, K., Miura, S., Sanchez, J. M., & Mohri, T. (2003). Thermal conductivity and thermal expansion of L1₂ intermetallic compounds based on rhodium. *Journal of alloys and compounds*, 354(1-2), 202-207.
- Vielhaber, E., & Luo, H.-L. (1967). New A-15 phases. *Solid State Communications*, 5(4), 221-223.
- Xu, L.-C., Wang, R.-Z., Yang, X., & Yan, H. (2011). Thermal expansions in wurtzite AlN, GaN, and InN: First-principle phonon calculations. *Journal of Applied Physics*, 110(4).
- Zhang, X., Chen, J., Wang, F., Chen, X., Ma, H., Li, D., . . . Guo, H. (2019). Insight into the elastic and anisotropic properties of BiMg₂MO₆ (M= P, As and V) ceramics from the first-principles calculations. *Ceramics International*, 45(8), 11136-11140.
- Zhang, X., Dong, T., Ma, H., Li, D., Ying, C., Liu, C., & Wang, F. (2020). A first principles investigation on the influence of transition-metal elements on the structural, mechanical, and anisotropic properties of CaM₂Al₂₀ intermetallics. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 96, 107509.
- Zhang, X., Huang, W., Ma, H., Yu, H., & Jiang, W. (2018). First-principles prediction of the physical properties of ThM₂Al₂₀ (M= Ti, V, Cr) intermetallics. *Solid State Communications*, 284, 75-83.
- Zhong, W., Qin, F., An, T., & Wang, T. (2010). *Mechanical properties of intermetallic compounds in solder joints*. Paper presented at the 2010 11th International Conference on Electronic Packaging Technology & High Density Packaging.

BÖLÜM 13

TAM-HEUSLER CuAlAc_2 ALAŞIMI NİN YAPISAL, MEKANİK, ELEKTRONİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİNİN İNCELENMESİ

Prof. Dr. Nihat ARIKAN¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385190>

¹ Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, Osmaniye, Türkiye, 0000-0001-8028-3132, nihatarikan@osmaniye.edu.tr

GİRİŞ

Heusler bileşikleri, 1000'den fazla üyeye ve periyodik tablonun çoğunu kapsayan bileşimlere sahip üçlü intermetalik materyallerdir. Bu malzemeler, yüksek Curie sıcaklığı, yarı metalik karakter, yüksek manyetik moment, kararlı yapıya sahip olma, bir spin yönünde büyük bant aralığı, diğer spin yönünde ise metalik karakter sergilemesi ve şekil hafıza özellikleri gibi ilginç özelliklere sahiptir [1-11]. Yarı ve tam Heusler alaşımları sırasıyla $C1_b$ ve $L2_1$ fazlarında kristalleşir [12]. Yarı metal özelliği için bir spin kanalı metaliktir ve diğeri spin kanalı ise Fermi seviyesinde %100 spin polarizasyonu ile yalıtıcıdır [13,14]. Bu malzemelerde Fermi enerji seviyesine yakın bantların güçlü d karakterinin yanı sıra, yerel ve yüksek derecede ayarlanabilir manyetikliğe yol açan 4f-kabuğunda mevcut olan yerel ve hibrit momentlerin çeşitliliği, manyetoelastik, topolojik, süper iletken, ağır fermiyon ve termoelektrik özellikleri destekler [15-29]. Aslında bu özelliklerin birçoğu basit elektron konfigürasyonu yardımı ile anlaşılabilir olma durumundadır. Özellikler ve bileşimlerdeki yüksek derecede ayarlanabilirlik ve yapısal bozulmalara güçlü bağlanma, Heusler bileşiklerini hem toplu malzemelerde hem de epitaksiyle katmanlı hetero yapılarıdaki arayüzlerde malzeme tasarımı için heyecan verici bir platform haline getirir [30]. Heusler alaşımı, X_2YZ kimyasal formülüne (X ve Y: geçiş metali, Z: ana grup) ve çok çeşitli konfigürasyonlara sahip bir intermetalik alaşım sınıfıdır (Şekil 1). Heusler alaşımı, yüzyılı aşkın bir süredir üzerinde çalışılan eski bir malzeme olmasına rağmen, muazzam kombinasyonel olasılıkları nedeniyle çeşitli uygulamalarda ilgi çekmeye devam etmektedir. Heusler alaşımlarının örnek uygulamaları arasında ferromagnetizm [31] ve termoelektrik malzemeler [32] yer almaktadır ve son zamanlarda kataliz gibi kimya alanına da genişletilmişlerdir [33]. Fonksiyonel bir malzeme olarak Heusler alaşımı, özelliğinin, bir spin durumunda Fermi enerjisindeki (E_F) enerji boşluğunu kontrol etmek için elementel ikame ile ayarlanabilmesi gibi önemli bir avantaja sahiptir. Bu bant aralığı azınlık spin durumunda mevcut olduğunda, ilave elektronların azınlık spin durumunu işgal etmesini engeller. Böylece elektronlar çoğunluk spin durumunu tek başına işgal eder ve mıknatıslanma elektron sayısı ile doğrusal olarak artar. Böylece, bu davranış Slater-Pauling kuralı olarak bilinir [34, 35]. Örnek olarak Co_2CrAl alaşımının mıknatıslanmasının bakıldığında, Y ve Z

bölgelerindeki atomlardaki değerlik elektronlarının sayısı ile doğrusal olarak arttığı gözlenir [36]. Bu enerji aralığı aynı zamanda Heusler alaşımlarının katalitik aktivitesinin değerlik elektronlarına göre kontrol edilmesine de izin verir. Öte yandan, Heusler intermetalik alaşımları metallerin metalik parlaklığını ve yüksek iletkenliğini korurken bileşiklerin kimyasal düzen karakteristiğini de sergilerler [37]. Heusler bileşikleri dört ana grupta incelenmektedir. Bunlar sırasıyla, kübik tam, yarım, ters (inverse) ve dördümlü (quaternary) Heusler bileşikleridir. X_2YZ (ya da $XX'YZ$) bileşimine sahip tam Heusler bileşikleridir, sırasıyla X, X', Y ve Z elemanları için dört iç içe geçmiş yüz merkezli kübik (fcc) alt örgüden oluşan kübik $L2_1$ yapısında kristalleşir. Yarı-Heusler alaşımları XYZ bileşimine sahiptir ve X' alt yapısının çıkarılmasıyla ilişkilidir. Ters Heusler yapısını ise $(XY)XZ$ genel formülüyle göstereceğiz. Tam Heusler yapıdaki dört fcc alt örgüsünün her biri farklı atomlar ($XX'YZ$) tarafından işgal edildiğinde, farklı yapısal simetrilere sahip bir dördümlü Heusler yapısı (uzay grubu $F-43m$, #216) olan dördümlü yapı elde edilir. Heusler ve ilgili fazlar için, X ve Y'nin konumlarının değiştirilmesiyle ilişkilendirilen ortak adlandırma kuralının mevcut olduğuna dikkat edilmelidir. Şimdiye kadar yapılan çalışmaların çoğunluğunda, Fe bazlı Heusler alaşımlarına ve bunların yarı metalikten metalik karaktere kadar değişen elektronik özelliklerine odaklanmıştır [38, 39]. Örneğin, Fe_2TaAl ve Fe_2TaGa 'nın yapısal ve mekanik özellikleri incelenirken [40], Fe_2ZrSi 'nin basınca bağlı faz geçişleri ve termoelektrik özellikleri bakılmıştır [41]. Fe_2AlTi [42, 43] ve Fe_2CrSi [44] elektronik ve manyetik özellikleri açısından çalışılmıştır. Diğer taraftan farklı olarak, tam Heusler X_2TiAl ($X=Au, Ru$ ve Zr) alaşımlarının elastik, elektronik ve termodinamik özellikleri araştırılmıştır [45].

Bu çalışmanın amacı $CuAlAc_2$ Heusler alaşımının yapısal karakterizasyonu üzerine proses parametreleri, kristal yapısı, elektronik bant karakteri, elastik özellikleri ve ilgili parametreleri ve bazı termodinamik özellikleri açısından sistematik bir çalışmadır.

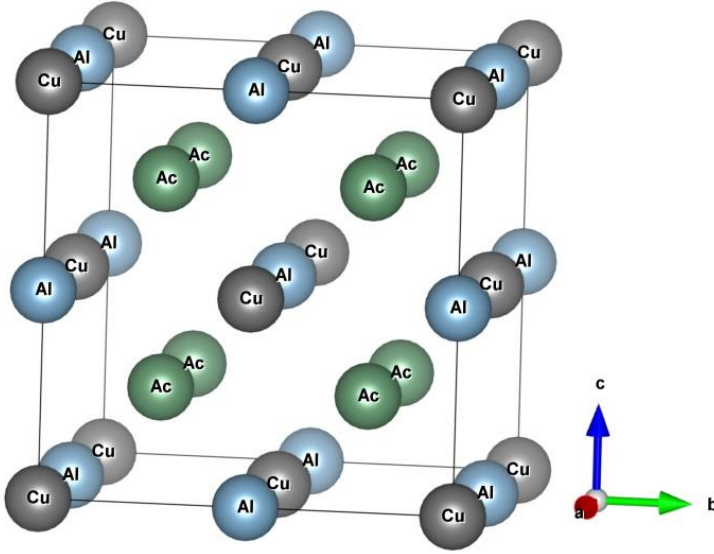
METOT

Bu çalışmada sunulan hesaplamalar DFT teorisi çerçevesinde Quantum-Espresso yazılım paket programı kullanılarak yapılmıştır [46]. DFT

teorisinde, yinelemeli bir süreç sırasında kendi kendine tutarlı bir çözüm yoluyla Cohen-Sham denklemleri kullanılarak [47], seçilen bileşiklerin çeşitli özellikleri hesaplanır. Burada, değişim-korelasyon potansiyeli için ultra yumuşak pseudopotansiyeli [48] ve Perdew-Burke-Ernzerhof genelleştirilmiş eğim yaklaşımı (GGA-PBE) [49] kullanılmıştır. Burada incelenen alaşım için için dalga fonksiyonlarının temel düzlem dalgalar cinsinden açılımında kinetik enerji kesme değeri 70 Ry ve elektronik yük yoğunluğu hesaplaması için enerji kesme değeri 700 Ry idi. Ayrıca bu hesaplamalarda atom başına enerji yakınsama eşiği 10^{-9} Ry ve mixing beta 0,7 olarak alındı. Brillouin bölgesinin örneklenmesi için atom başına 1 mRy'lik enerji yakınsaması sağlanmıştır. Ek olarak, ilk Brillouin bölgesinde örnekleme için $12 \times 12 \times 12$ Monkhorst-Pack k noktası ızgarası, her üç boyutta da optimum **k** noktaları kullanılarak yapıldı. Fermi yüzey integrasyonu, $\sigma=0.01$ Ry smearing parametresi ile Methfessel-Paxton smearing tekniği kullanılarak gerçekleştirildi [50]. Elastik özellikler (G ve E), termos-pw kodunda [51] uygulanan enerji-gerinim yöntemini kullanarak Voigt ve Reuss değerlerinin geometrik ortalaması olan Hill değerinden elde edildi. Kübik sistem için üç elastik sabit (C_{ij}) kullanılarak diğer ilgili elastik modüller de elde edilmektedir.

BULGULAR

Burada incelenecek olan CuAlAc_2 Heusler alaşımı kübik $L2_1$ kristal yapısında ($Fm\bar{3}m$, uzay grubu 225) kristalleşir ve Cu atomu 4a (0,0,0) bölgesini, Ac ise 8c (1/4, 1/4, 1/4) bölgesini işgal eder ve Al, 4b (1/2, 1/2, 1/2) bölgesini kaplar. $L2_1$ fazındaki CuAlAc_2 'in kristal yapısını temsil eden grafik çizilmiş ve Şekil 1 gösterilmiştir. Tahmin edilen örgü sabiti, bulk modülü ve elastik sabitler Tablo 1'de listelenmiştir. Bu materyal için tahmin edilen örgü sabiti literatürle iyi bir uyum içindedir [52].



Şekil 1. L₂₁ fazındaki CuAlAc₂ alaşımının kristal yapısı.

Tablo 1. L₂₁ yapıda CuAlAc₂ alaşımının örgü sabiti (Å), elastik sabitle C_{ij} (GPa), bulk modülü (GPa), Young modülü E (GPa), shear modülü G (GPa), Cauchy pressure C_P (GPa), Poisson's oranı σ ve Debye sıcaklığı θ_D

	<i>Referans</i>	a_0	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	B	E	G	C _P	σ	θ_D
CuAl	Bu	7.7	79.7	50.0	18.3	59.9	46.2	16.8	31.7	0.3	161.0
Ac₂	çalış. Teori [52]	7.7 78	86 32	32 88	69 69	69	40	57	19	7	49

Elastik sabitler fiziksel özellikler ve mekanik stabilite hakkında bilgi verebilir. Kübik bir yapı için simetri nedeniyle mevcut olan üç bağımsız elastik sabit vardır ve bunlar sırasıyla C₁₁, C₁₂, C₄₄ olarak bilinir. Stabil bir malzeme için bu elastik sabitler Born stabilite kriterlerini karşılamalıdır [53, 54].

$$(C_{11}-C_{12}) > 0, C_{11} > 0, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \text{ ve } C_{12} < B < C_{11} \quad (1)$$

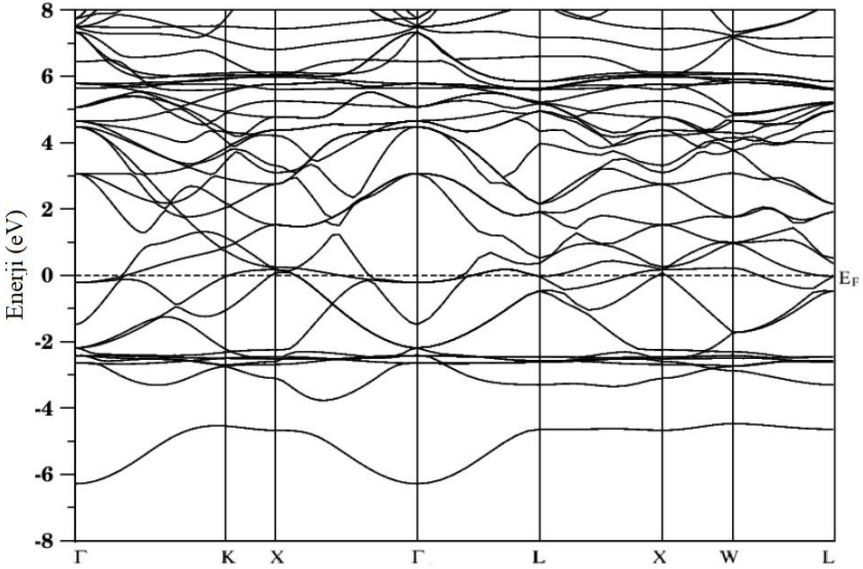
İncelenen materyalin tahmin edilen elastik sabitleri Born stabilite kriterlerini karşılar ve denklem 1'e göre alaşımın mekanik kararlılığını göstermektedir. CuAlAc₂ alaşımı için C₁₁ değeri C₄₄ değerinden daha yüksek

olma durumunda, tek yönlü sıkıştırmaya karşı direncin saf kayma deformasyonundan daha yüksek olduğunu anlatır. Ayrıca, kütle modülü B, dış basınç altında hacimdeki değişime karşı deformasyon direncini tanımlar. Buna göre 59.969 GPa değerindeki B değeri çok da yüksek değildir. CuAlAc_2 alaşımı için tahmin edilen elastik sabitleri kullanılarak, kayma modülü, Young modülü, Cauchy basınçları ve Poisson oranları hesaplanmış ve Tablo 1'de sunulmuştur. Malzemelerin kırılabilirliği ve sünekliğinin değerlendirilmesi B/G oranlarına göre yapılabilir. B/G oranının 1,75'ten yüksek olması alaşım sünek olarak sınıflandırılmasına ve B/G oranı 1,75'ten küçük olmasına göre ise alaşımın kırılabilir olarak sınıflandırılmasına izin verir [55]. Hesaplanan B/G oranı 3.557 olmasından dolayı burada incelenen malzemenin sünek bir doğaya sahip olduğunu söylenebilmektedir. Ancak bunları karşılaştırabileceğimiz herhangi bir önceki veri elimizde mevcut değildir. Malzemelerin sünek/kırılabilir özelliğinin belirlenmesi için bakılabilecek diğer bir kavram da Cauchy basıncıdır. Pozitif bir Cauchy basıncı sünek bir alaşım yapısı anlamına gelirken, negatif bir değer de kırılabilir özelliğinin ağı basması anlamına gelmektedir. İncelenen alaşım için Cauchy basıncı belirlendi. Tablo 1'den görülebileceği gibi, incelenen alaşım pozitif Cauchy basıncına sahiptir, bu da incelenen alaşımın sünek olduğunu göstermektedir. Bir malzemenin Poisson oranı, bağlanma özelliklerini ve kayma gerilimine karşı stabiliteyi tahmin etmek için kullanılır. Poisson oranının 0,25 civarında olması malzemenin kovalent davranış gösterdiği belirtirken, 0,33 civarında ise malzeme metalik davranış göstermektedir [56]. Böylece Tablo 1 de gösterilen Poisson oranına göre CuAlAc_2 alaşımı metalik davranış sergiler. Bir başka özellikte malzemenin sertliğidir. Bulk modülü ile malzemelerin sertliği arasındaki güçlü korelasyon çeşitli makalelerde doğrulanmıştır [57]. Malzemelerin sertliğiyle ilgili iyi bilinen bir parametrelerden bir Young modülüdür (E). Bir malzemenin E değerinin yüksek olması onun daha rijit olduğunu gösterir. Tablo 1'de verilen 46,240 GPa değerinde bir Young modülü değeri incelenen malzemenin çok da sert olmadığını bize göstermektedir. Yine elastik sabitlerin hesaplanmasına dayanan diğer bir parametre ise mikrosertlik (H_v). Mikrosertlik (H_v), bir malzemenin lokal deformasyona direnme yeteneğini tanımlayan önemli parametrelerden biridir [58]. Mikro sertlik aşağıdaki formül ile verilebilir:

$$H_v = \frac{(1-2\sigma)E}{6(1+\sigma)} \quad (2)$$

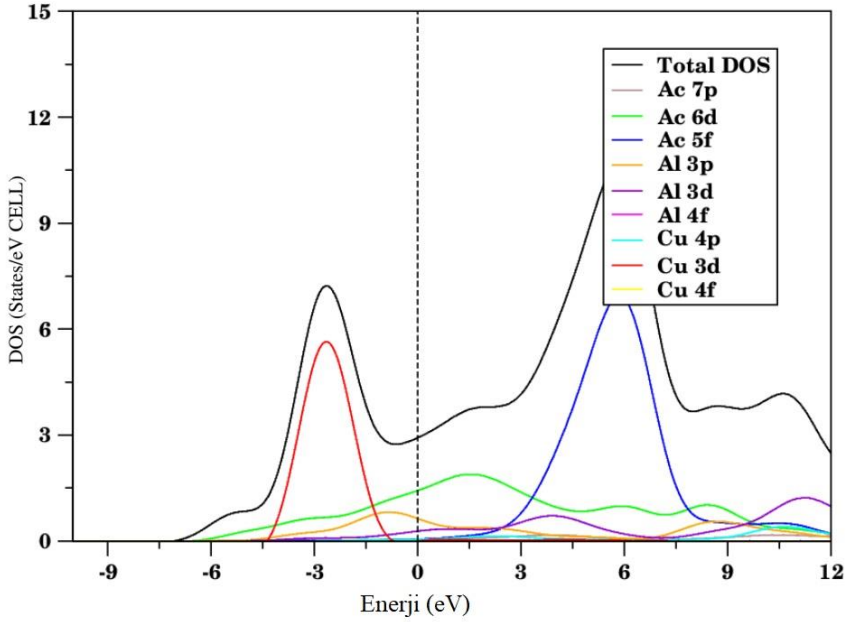
Böylece tahmin edilen mikrosertlik değeri 1,462 GPa olarak elde edilmiştir. Elde edilen bu değer incelenen materyal için oldukça küçük bir sertlik değeridir. Ayrıca, Debye sıcaklığı 161,049 K olarak hesaplanmıştır (Tablo 1); maalesef literatürde bildiğimiz kadarıyla karşılaştırma yapılabilecek bir veri mevcut değildir.

Tam Heusler yapıdaki CuAlAc_2 alaşımının elektronik bant profili, Brillouin bölgesindeki yüksek simetrik yönler boyunca, GGA yaklaşımı kullanılarak hesaplandı; sonuçlar Şekil 2'de sunulmaktadır.



Şekil 2. Tam Heusler yapıdaki CuAlAc_2 alaşımının elektronik bant profili.

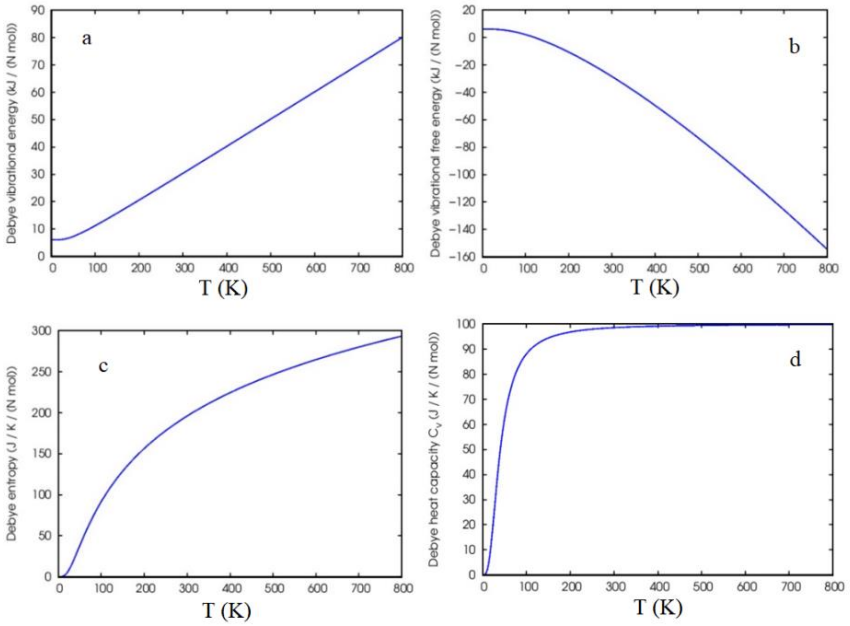
Şekil 2'den görülmekte olduğu gibi, CuAlAc_2 alaşımı için değerlik bandının maksimumu ve iletim bandının minimumu tüm simetri noktaları boyunca üst üste binmiş olduğundan, bu malzeme metalik özellik gösterir. Bu alaşımın elektronik bant profilini daha iyi anlamak için, durumların yoğunluğu grafiğinden Fermi düzeyine yakın atom durumlarının katkılarını görmek için hesaplandı ve Şekil 3'te sunuldu.



Şekil 3. Tam Heusler CuAlAc_2 alaşımının durum yoğunluk eğrisi.

İncelenen materyalin elektronik bant yapısında, Fermi seviyesine başlıca katkı Ac-d yörüngesinden ve Al-3p yörüngesi tarafından sağlanmaktadır ve diğer yörüngesel katkılar bunların yanında oldukça sınırlıdır. Şekil 3'te verilen CuAlAc_2 alaşımının toplam ve projektif durum yoğunluk eğrilerinden, Fermi seviyesinin üstünde ve altında birer pikin dağıldığı görülmektedir. Fermi seviyesinin üzerindeki pik Ac-4f durumundan kaynaklanırken, alttaki pik ise Cu-3d durumundan gelmektedir.

Yarı harmonik yaklaşım çerçevesinde (QHA), CuAlAc_2 alaşımının termodinamik özelliklerini 0 ila 800 K sıcaklık aralığında iç enerji, titreşim enerjisi, entropi ve özgül ısı kapasitesi hesaplanmış ve Şekil 4'te sunulmuştur.



Şekil 4. CuAlAc₂ alaşımının (a) titreşim enerji (b) serbest enerji (c) Entropi ve (d) Sabit hacim ısı kapasitelerinin sıcaklığa bağlılığı.

Titreşim ve titreşim serbest enerjisi, sistemdeki denge etrafındaki salınımlar hakkında bilgi sağlayan önemli özelliklerdir. CuAlAc₂ için Şekil 6 a, c ve d'de, bir sıcaklık fonksiyonu olarak artan sıcaklıkla birlikte titreşim enerji, entropi ve özgül ısı kapasitesi arttığı gözlenmektedir. Öte yandan, titreşim serbest enerjisi sıcaklığın ters fonksiyonu olarak, sıcaklıkla birlikte değişti Şekil 6. b'de verilmiştir. Özgül ısı ve sıcaklık arasındaki ilişki 100 K'e kadar hızlı bir şekilde doğrusal bir değişim sergilemekte ve sonra daha yüksek sıcaklıklarda Dulong-Petit limiti olarak bilinen bir sınır değerinde sabit kalmakta.

SONUÇLAR

Tam Heusler yapıda CuAlAc₂ alaşımının çeşitli özellikleri, elektronik, elastik ve termodinamik özelliklerine ilişkin sistematik teorik çalışmalar ilk kez bu çalışmada yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak araştırılmıştır. Mekanik stabilite değerlendirmesi elastik sabitler ve Born stabilite kriterleri kullanılarak, bu Heusler alaşımının mekanik olarak kararlı olduğunu

göstermiştir. Bu materyalin mekanik karalılığı, onu çeşitli uygulamalar için ilginç kılmaktadır. Hesaplanan B/G oranı ve Cauchy basıncına göre CuAlAc_2 sünek bir tabiata sahiptir. Young modülü ve mikrosertlik değerlerine göre ise incelenen materyal sert bir malzeme değildir. Poisson oranına göre ise incelenen materyal metalik bir yapıdadır ve bunu elektronik bant profili de desteklemektedir. Böylece, elektronik bant profilinden, değerlik ve iletkenlik bandı arasında bant aralığı olmadığından bu alaşımın metalik olduğunu göstermektedir. Ne yazık ki incelenen materyal için karşılaştırma açısından elde mevcut veri yoktur. Böylelikle bu çalışma sonra yapılacak çalışmalar için referans veri olarak değerlendirilebilecektir. Son olarak yarı harmonik yaklaşım çerçevesinde, CuAlAc_2 alaşımının iç enerji, titreşim enerjisi, entropi ve özgül ısı kapasitesi gibi bazı termodinamik özelliklerini 0 ile 800 K arasındaki sıcaklıklarda inceledik.

KAYNAKÇA

- [1] Elahmar, M. H., Rached, H., Rached, D., Khenata, R., Murtaza, G., Omran, S. B., & Ahmed, W. K. (2015). Structural, mechanical, electronic and magnetic properties of a new series of quaternary Heusler alloys CoFeMnZ ($Z = \text{Si, As, Sb}$): a first-principle study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 393, 165-174.
- [2] Wang, X. L., Dou, S. X., & Zhang, C. (2010). Zero-gap materials for future spintronics, electronics and optics. *NPG asia materials*, 2(1), 31-38.
- [3] Balke, B., Wurmehl, S., Fecher, G. H., Felser, C., & Kübler, J. (2008). Rational design of new materials for spintronics: Co_2FeZ ($Z = \text{Al, Ga, Si, Ge}$). *Science and Technology of advanced Materials*.
- [4] Amrich, O., Amine Monir, M. E., Baltach, H., Omran, S. B., Sun, X. W., Wang, X., ... & Khenata, R. (2018). Half-metallic ferrimagnetic characteristics of Co_2YZ ($Z = \text{P, As, Sb, and Bi}$) new full-Heusler alloys: a DFT study. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 31, 241-250.
- [5] Casper, F., Graf, T., Chadov, S., Balke, B., & Felser, C. (2012). Half-Heusler compounds: novel materials for energy and spintronic applications. *Semiconductor Science and Technology*, 27(6), 063001.
- [6] Ouardi, S. (2012). Electronic structure and Physical properties of Heusler compounds for Thermoelectric and Spintronic Applications.
- [7] Amudhavalli, A., Rajeswarapalanichamy, R., Iyakutti, K., & Kushwaha, A. K. (2018). First principles study of structural and optoelectronic properties of Li based half Heusler alloys. *Computational Condensed Matter*, 14, 55-66.
- [8] Kacimi, S., Mehnane, H., & Zaoui, A. (2014). I-II-V and I-III-IV half-Heusler compounds for optoelectronic applications: Comparative ab initio study. *Journal of Alloys and Compounds*, 587, 451-458.
- [9] Winterlik, J., Fecher, G. H., & Felser, C. (2008). Electronic and structural properties of palladium-based Heusler superconductors. *Solid state communications*, 145(9-10), 475-478.
- [10] Tritt, T. M., & Subramanian, M. A. (2006). Thermoelectric materials, phenomena, and applications: a bird's eye view. *MRS bulletin*, 31(3), 188-198.
- [11] Hao, L., Khenata, R., Wang, X., & Yang, T. (2019). Ab Initio study of the structural, electronic, magnetic, mechanical and thermodynamic properties of full-Heusler Mn_2CoGa . *Journal of Electronic Materials*, 48, 6222-6230.

- [12] Kandpal, H. C., Felser, C., & Seshadri, R. (2006). Covalent bonding and the nature of band gaps in some half-Heusler compounds. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39(5), 776.
- [13] Benkabou, M., Rached, H., Abdellaoui, A., Rached, D., Khenata, R., Elahmar, M. H., ... & Bin-Omran, S. (2015). Electronic structure and magnetic properties of quaternary Heusler alloys CoRhMnZ (Z= Al, Ga, Ge and Si) via first-principle calculations. *Journal of Alloys and Compounds*, 647, 276-286.
- [14] De Boeck, J., Van Roy, W., Das, J., Motsnyi, V., Liu, Z., Lagae, L., ... & Borghs, G. (2002). Technology and materials issues in semiconductor-based magnetoelectronics. *Semiconductor science and technology*, 17(4), 342.
- [15] Jourdan, M., Minár, J., Braun, J., Kronenberg, A., Chadov, S., Balke, B., ... & Kläui, M. (2014). Direct observation of half-metallicity in the Heusler compound Co₂MnSi. *Nature communications*, 5(1), 3974.
- [16] De Groot, R. A., & Mueller, F. M. (1983). PG v. Engen, and KHJ Buschow. *Phys. Rev. Lett*, 50(25), 2024-2027.
- [17] Du, D., Manzo, S., Zhang, C., Saraswat, V., Genser, K. T., Rabe, K. M., ... & Kawasaki, J. K. (2021). Epitaxy, exfoliation, and strain-induced magnetism in rippled Heusler membranes. *Nature communications*, 12(1), 2494.
- [18] Niemann, R., Rößler, U. K., Gruner, M. E., Heczko, O., Schultz, L., & Fähler, S. (2012). The role of adaptive martensite in magnetic shape memory alloys. *Advanced Engineering Materials*, 14(8), 562-581.
- [19] Zaslavskiy, I. K., Kokorin, V. V., Martynov, V. V., Tkachenko, A. V., & Chernenko, V. A. (1990). Crystal structure of martensite in Heusler alloy Ni₂MnGa. *Physics of metals and metallography*, 69(6), 104-108.
- [20] Kokorin, V. V., & Chernenko, V. A. (1989). Martensitic transformation in a ferromagnetic Heusler alloy. *The Physics of Metals and Metallography*, 68(6), 111-115.
- [21] Logan, J. A., Patel, S. J., Harrington, S. D., Polley, C. M., Schultz, B. D., Balasubramanian, T., ... & Palmstrøm, C. J. (2016). Observation of a topologically non-trivial surface state in half-Heusler PtLuSb (001) thin films. *Nature communications*, 7(1), 11993.
- [22] Chadov, S., Qi, X., Kübler, J., Fecher, G. H., Felser, C., & Zhang, S. C. (2010). Tunable multifunctional topological insulators in ternary Heusler compounds. *Nature materials*, 9(7), 541-545.
- [23] Nakajima, Y., Hu, R., Kirshenbaum, K., Hughes, A., Syers, P., Wang, X., ... & Paglione, J. (2015). Topological R PdBi half-Heusler semimetals: A new family of noncentrosymmetric magnetic superconductors. *Science advances*, 1(5), e1500242.

- [24] Liu, Z. K., Yang, L. X., Wu, S. C., Shekhar, C., Jiang, J., Yang, H. F., ... & Chen, Y. L. (2016). Observation of unusual topological surface states in half-Heusler compounds LnPtBi ($\text{Ln} = \text{Lu}, \text{Y}$). *Nature communications*, 7(1), 12924.
- [25] Lin, H., Wray, L. A., Xia, Y., Xu, S., Jia, S., Cava, R. J., ... & Hasan, M. Z. (2010). Half-Heusler ternary compounds as new multifunctional experimental platforms for topological quantum phenomena. *Nature materials*, 9(7), 546-549.
- [26] Winterlik, J., Fecher, G. H., Felser, C., Jourdan, M., Grube, K., Hardy, F., ... & Cava, R. J. (2008). Ni-based superconductor: Heusler compound ZrNi_2Ga . *Physical Review B*, 78(18), 184506.
- [27] Brydon, P. M. R., Wang, L., Weinert, M., & Agterberg, D. F. (2016). Pairing of $j = 3/2$ fermions in half-Heusler superconductors. *Physical review letters*, 116(17), 177001.
- [28] Canfield, P. C., Thompson, J. D., Beyermann, W. P., Lacerda, A., Hundley, M. F., Peterson, E., ... & Ott, H. R. (1991). Magnetism and heavy fermion-like behavior in the RBiPt series. *Journal of applied physics*, 70(10), 5800-5802.
- [29] Mastronardi, K., Young, D., Wang, C. C., Khalifah, P., Cava, R. J., & Ramirez, A. P. (1999). Antimonides with the half-Heusler structure: New thermoelectric materials. *Applied physics letters*, 74(10), 1415-1417.
- [30] J.K. Kawasaki, (2019) *APL Mater.* 7, 080907.
- [31] Singh, P., Jayaramaiah, R. H., Agawane, S. B., Vannuruswamy, G., Korwar, A. M., Anand, A., ... & Giri, A. P. (2016). Potential dual role of eugenol in inhibiting advanced glycation end products in diabetes: proteomic and mechanistic insights. *Scientific reports*, 6(1), 18798.
- [32] C. Fu, S. Bai, Y. Liu, Y. Tang, L. Chen, X. Zhao, T. Zhu, *Nat. Commun.* 2015, 6, 1.
- [33] Kojima, T., Kameoka, S., Fujii, S., Ueda, S., & Tsai, A. P. (2018). Catalysis-tunable Heusler alloys in selective hydrogenation of alkynes: A new potential for old materials. *Science advances*, 4(10), eaat6063.
- [34] Slater, J. C. (1936). The ferromagnetism of nickel. II. Temperature effects. *Physical Review*, 49(12), 931.
- [35] Pauling, L. (1938). The nature of the interatomic forces in metals. *Physical Review*, 54(11), 899.
- [36] Arıkan, N., İyigör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Charifi, Z., Baaziz, H., & Uğur, G. Ö. K. A. Y. (2014). Electronic and phonon properties of the full-Heusler alloys X_2YAl ($\text{X} = \text{Co}, \text{Fe}$ and $\text{Y} = \text{Cr}, \text{Sc}$): a density functional theory study. *Journal of Materials Science*, 49, 4180-4190.
- [37] Webster, P. J. (1969). Heusler alloys. *Contemporary Physics*, 10(6), 559-577.

- [38] Sof SA, Gupta DC (2020) Investigation of high pressure and temperature study of thermo-physical properties in semiconducting Fe₂ZrSi Heusler. *Physica B* 577:411792
- [39] Suzuki RO, Kyono T (2004) Thermoelectric properties of Fe₂TiAl Heusler alloys. *J Alloy Compd* 377(1):38–42.
- [40] Khandy SA et al (2019) Lattice dynamics, mechanical stability and electronic structure of Fe-based Heusler semiconductors. *J Scientific reports* 9(1):1–8
- [41] Sof SA et al (2020) Investigation of pressure induced phase transition and thermoelectrics of semiconducting Fe₂ZrSi. In *AIP Conference Proceedings*, AIP Publishing LLC 2265(1):030346
- [42] Friák M et al (2018) Origin of the low magnetic moment in Fe₂AlTi: An Ab initio study. *J Materials* 11(9):1732
- [43] Kurosaki Y et al (2020) Crystal growth and fat-band effects on thermoelectric properties of Fe₂TiAl-based full-Heusler thin flms. *J AIP Advances* 10(11):115313
- [44] Djaidi F, Mechri H, Azzaz M (2020) Crystal structure, microstructure, and magnetic properties of the Fe₂CrSi nanostructured Heusler alloy elaborated by the mechanical alloying method. *J International Journal of Materials Research* 111(8):681–687.
- [45] Al S, Arikan N, Iyigör A (2018) Investigations of structural, elastic, electronic and thermodynamic properties of X₂TiAl Alloys: a computational study. *Zeitschrift für Naturforschung A* 73(9):859–867.
- [46] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502.
- [47] Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133.
- [48] Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical review B*, 41(11), 7892.
- [49] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
- [50] Methfessel M, Paxton A (1989) High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. *J Physical Review B* 40(6):3616
- [51] R. Golezorkhtabar, P. Pavone, J. Spitaler, P. Puschnig, and C. Draxl (2013) “ElaStic: A tool for calculating second-order elastic constants from first principles,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 184, no. 8, pp. 1861–1873.
- [52] Saal, J. E., Kirklin, S., Aykol, M., Meredig, B., & Wolverton, C. (2013). Materials design and discovery with high-throughput density functional

- theory: the open quantum materials database (OQMD). *Jom*, 65, 1501-1509.
- [53] Reshak AH et al (2011) First-principles calculations of structural, elastic, electronic, and optical properties of perovskite-type KMgH_3 crystals: novel hydrogen storage material. *J Phys Chem B* 115(12):2836–2841
- [54] Arıkan, N., Al, S., & İyigör, A. (2022). Mechanical, electronic, thermodynamic and vibrational properties of X_2MgAl (X= Sc, Ti and Y) from first principles calculations. *Journal of Molecular Modeling*, 28(11), 366.
- [55] Yıldız, G. D., Yıldız, Y. G., Al, S., İyigör, A., & Arıkan, N. (2018). Computational investigations of mechanic, electronic and lattice dynamic properties of yttrium based compounds. *International Journal of Modern Physics B*, 32(20), 1850214.
- [56] Arıkan, N., Dikiçi Yıldız, G., Yıldız, Y. G., & İyigör, A. (2020). Electronic, elastic, vibrational and thermodynamic properties of HfIrX (X= as, Sb and Bi) compounds: insights from DFT-based computer simulation. *Journal of Electronic Materials*, 49, 3052-3062.
- [57] Arıkan, N., İyigör, A., Candan, A., Özduran, M., Karakoç, A., Uğur, Ş., ... & Guechi, N. (2014). Ab-initio study of the structural, electronic, elastic and vibrational properties of the intermetallic Pd 3 V and Pt 3 V alloys in the L1 2 phase. *Metals and Materials International*, 20, 765-773.
- [58] Tian, J., Zhao, Y., Hou, H., & Wang, B. (2018). The effect of alloying elements on the structural stability, mechanical properties, and debye temperature of Al_3Li : a first-principles study. *Materials*, 11(8), 1471.

BÖLÜM 14

CaF₂ YAPISINDA RhSr₂ AŞIMINI YAPISAL, ELEKTRONİK, MEKANİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİ: İLK PRENSİP ÇALIŞMALARINDAN BİLGİLERİ

Prof. Dr. Nihat ARIKAN¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385243>

¹ Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, Osmaniye, Türkiye, Türkiye, 0000-0001-8028-3132, nihatarikan@osmaniye.edu.tr

GİRİŞ

Laves fazlarını [1-4] oluşturan yaygın AB₂ bileşikleri ailesi, C15 tipi (kübik fcc MgCu₂ tipi) veya C14 tipi (hexagonal MgZn₂- veya MgNi₂- tipi) kristal yapılarıyla karakterize edilir. Yapılarındaki benzerliklere rağmen Laves fazları manyetoelastik faz geçişleri, düşük sıcaklıklarda süperiletkenlik, yüksek sertlik, korozyon direnci, hidrojen depolama yeteneği gibi çok fiziksel özelliğinden dolayı endüstride birçok potansiyel teknolojik ve bilimsel uygulamalarda önerilmiştir [5, 6]. Uzunca bir süreden buyana, kübik florit yapısında (CaF₂) kristalleşen ikili intermetalik bileşikler sınırlı da olsa, süperiletkenlik, elektronik bant spektrumu, örgü dinamik özellikleri, elektron-fonon etkileşimi, faz geçişi, faz karalılıkları ve elektrik özellikleri gibi bazı nicelikler çalışılmıştır [7-15]. Bildiğimiz kadarıyla, bazıları spesifik deneysel koşullar altında sentezlenebilir olan, Lava fazlarında (kübik C15-MgCu₂-type ve hekzagonal C14-MgZn₂-type) RhSr₂ alaşımını farklı içeriklerde oldukça sınırlı sayıda sistematik çalışmaları mevcuttur [16, 17]. Burada incelenen alaşım için çok az teorik çalışma yapılmış olmasına rağmen, teorik bu veriler hala alaşımın birçok fiziksel özelliklerini tam olarak belirleyememiştir. Bu noktada sadece iki çalışmada teorik hesaplamalar kullanılarak bu alaşım için yalnızca örgü sabiti hesaplanmıştır [16, 17]. Malzemelerin doğru başlangıç (*ab-initio*) yöntemlerine dayalı simülasyon modellemesi, malzemenin özelliklerinin tahmin edilmesinde önemli bir problem olmuştur ve henüz deneysel olarak araştırılmamış veya deneysel olarak ölçülmesi zor olan bazı özelliklerin keşfedilmesi için önemli bir araç sağlamaktadır. Malzemelerin fonon özellikleri, termal genleşme, özgül ısı, elektron-fonon etkileşimi, ısı iletimi ve faz geçişi gibi katıların pek çok fiziksel doğasını anlamak için önemli bir parametredir. Burada incelenen alaşımın tam fonon, mekanik, termodinamik özellikleri, mevcut verilere dayanan herhangi bir deneysel veya teorik yöntem kullanılarak incelenmemiştir. Bu çalışma, RhSr₂ alaşımının yapısal, elektronik, manyetik, termodinamik ve titreşim özelliklerini DFT ve Quantum-espresso kodunu kullanarak araştırmayı amaçlamaktadır. Ayrıca fonon spektrumlarını ve bunların toplam ve kısmi yoğunluğunu *ab-initio* lineer-tepki yaklaşımını kullanarak gerçekleştirildi.

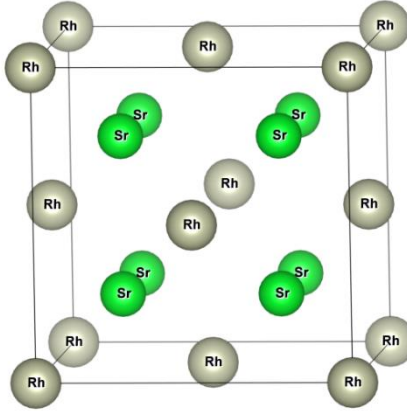
METOT

RhSr₂ alaşımının yapısal optimizasyonu ve özelliklerinin tahmini, Gainnoziet al. [18]'da benzer şekilde kullanılan Quantum-Espresso (QE) kodunun benimsenmesiyle gerçekleştirilir. Yoğunluk-fonksiyonel teori (DFT) ve değişim-korelasyon çerçevesinde ultra yumuşak psödopotansiyel (USPP) yöntemini temel alan bu hesaplama, Perdew-Burke-Ernzerhof [19] genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) formalisi kullanılarak hesaplanmıştır. Yakınsamayı sağlamak için, 40 Ry'lik bir kinetik enerji kesme (ecut), 400 Ry'lik bir yük yoğunluğu kesme ve 1,0 X 10⁻⁹lık bir yakınsama

eşiğine sahip bir düzlem-dalga temel seti uygulandı. Brillouin bölgesi entegrasyonları $10 \times 10 \times 10$ k-nokta kullanılarak uygulandı. Fermi yüzeyine kadar integrasyon için $\sigma = 0.02$ Ry smearing parametresi ile smearing tekniği [20] kullanıldı. Daha sonra Kohn-Sham denklemlerinin çözümleri hesaplanırken, RhSr_2 'nin örgü dinamik özellikleri, yoğunluk-fonksiyonel teorisine dayalı bir lineer-tepki (linear-response) tekniği [21,22] kullanılarak değerlendirildi. Rasgele dalga vektörlerindeki dinamik matrisler, $4 \times 4 \times 4$ q-noktalı bir ağ üzerinde gerçekleştirildi ve bu ağ üzerinde, tam fonon dağılımlarını ve fonon durum yoğunluğunu hesaplamak için bir Fourier ters dönüşümü uygulandı. Elastik sabitler (C_{ij}) ve diğer elastik özellikler (E ve G), Termo-pw kodunda [23, 24] uygulanan enerji-gerinim yöntemini kullanan Voigt ve Reuss değerlerinin geometrik ortalaması olan Hill değerinden denelde edildi.

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada incelenen RhSr_2 alaşımı, Şekil 1'de gösterildiği gibi $\text{Fm}\bar{3}m$ (no.225) uzay grubuyla C15 fazında iyi bilinen kalsiyum florit yapısıyla kristalleşir ve birim hücre başına üç atom içerir. Üç atomun koordinatları ise $\tau_{\text{Co}} = (0, 0, 0)$, $\tau_{\text{Si}} = (0,25, 0,25, 0,25)$ ve $\tau_{\text{Si}} = (-0,25, -0,25, -0,25)$.



Şekil 1. CaF_2 fazda RhSr_2 alaşımının kristal yapısı.

Tablo1. C15 yapıda RhSr_2 alaşımının denge örgü sabiti (Å), bulk modülü, shear modülü (GPa), B/G oranı ve elastik sabitleri (GPa)

	Ref.	a_0	B	G	B/G	C_{11}	C_{12}	C_{44}
RhSr₂	Bu çalış.	7.183	40.576	17.838	2.275	89.384	16.173	10.525
	[16]	7.300						
	[17]	7.307						

Fiziksel özellikler ve mekanik stabilite hakkında bilgi verebilme açısından elastik sabitler oldukça önemli bir niceliktir. Kübik bir yapı için simetri nedeniyle mevcut olan üç bağımsız elastik sabit vardır, bunlar sırasıyla, C_{11} , C_{12} , C_{44} olarak sembolize edilir. Kararlı bir malzeme için bu elastik sabitler Born stabilite kriterlerini [25] karşılamalıdır;

$$(C_{11} - C_{12}) > 0, C_{11} > 0, C_{44} > 0, (C_{11} + 2C_{12}) > 0$$

(1)

Denklem 1'den aşağıdaki şart da çıkarılabilir.

$$C_{12} < B < C_{11}$$

(2)

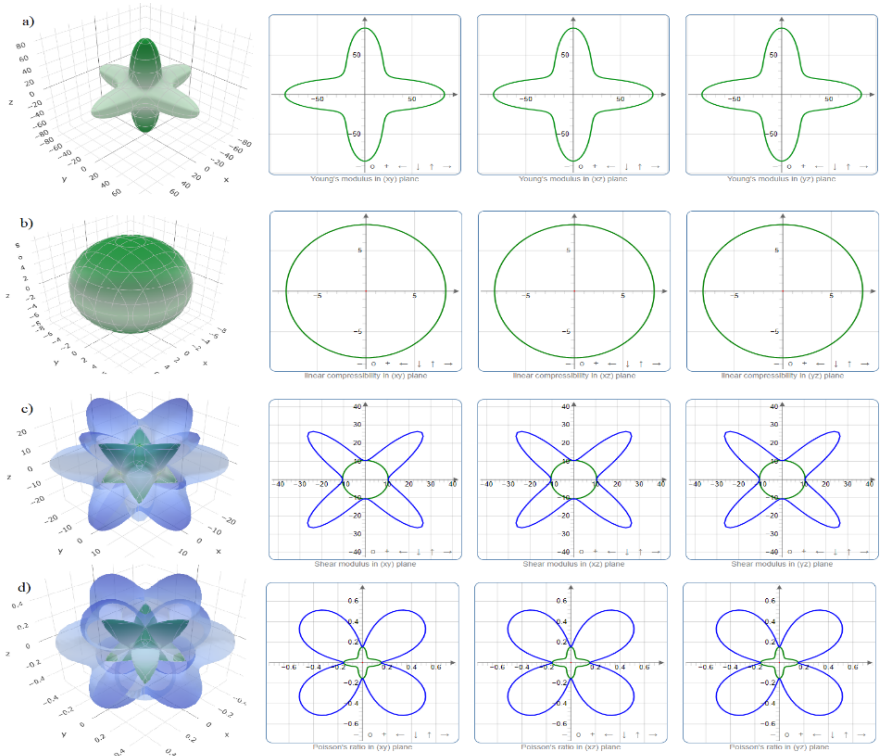
Böylece, incelenen alaşımın tahmin edilen elastik sabitleri Born kararlılık ilkelerini sağlamakta ve Denklem 1 ve 2'ye dayalı olarak incelenen alaşım için mekanik kararlılık gözlenmektedir. C_{11} değeri tüm alaşımlar için C_{44} değerinden daha yüksektir, bu da tek yönlü sıkıştırmaya karşı direncin saf kayma deformasyonundan daha yüksek olduğunu gösterir. Ek olarak, küçük bulk modülü değeri, dış basınç altında hacimdeki değişime karşı daha büyük deformasyon direncinin zayıf olabileceğini tanımlar. Elastik sabitler aracılığı ile alaşımın shear modülü, Young modülü, Cauchy basınçları ve Poisson oranları hesaplanmış ve Tablo 2'de sunulmuştur.

Tablo 2. RhSr₂ alaşımının shear modülü, Young modülü (GPa), Anizotropi faktörü, Poisson oranı, Debye sıcaklığı (K) ve Cauchy basınçları (GPa)

Material	References	E	A	σ	Θ_D	CP
RhSr ₂	Bu çalışma	46.517	0.143	0.30	192.85	5.648

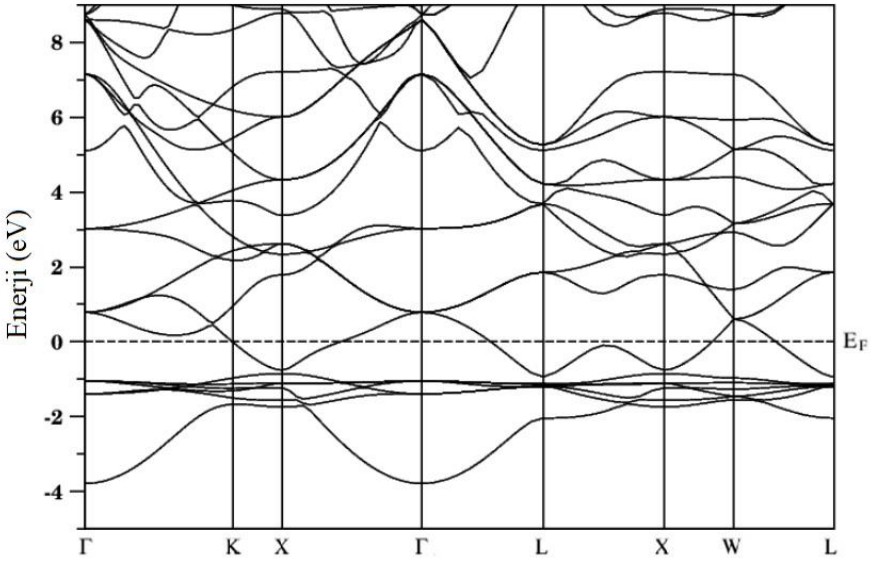
Malzemelerin kırılma eğilimi ve sünekliğinin değerlendirilmesi B/G oranlarına göre yapılabilir. B/G oranının 1,75'ten yüksek olması durumunda alaşım sünek olarak sınıflandırılır. B/G oranı 1,75'ten düşükse alaşımlar kırılma eğilimli olarak sınıflandırılır [26]. İncelenen RhSr₂ alaşımı C15 fazı için Tablo 3'te belirtildiği gibi 1,75'in üzerinde bir B/G oranına sahip olmasından dolayı süneklik gösterir. Buna ek olarak, bir malzemenin sünekliği veya kırılma eğilimi Poisson oranından (σ) da çıkarılabilir [27]. Eğer Poisson oranı 0,26'dan büyükse malzeme sünektir, aksi halde kırılma eğilimlidir. Tablo 2'de listelenen değere, incelenen alaşımın sünek davranış gösterdiğini bir kez daha doğrulamıştır. İncelenen alaşım için elastik anizotropi faktörü A, Tablo 2'de sunulmaktadır. İzotropik malzemeler için bu faktör 1'e eşittir ve değerlerin 1'den sapması, malzemenin sahip olduğu anizotropinin bir ölçüsünü temsil eder. Anizotropi faktörlerinin hesaplanan değerleri tablo 1'de listelenmiştir. RhSr₂ alaşımı için tahmin edilen değer 0.143 tür. Bu sonuç incelenen malzemenin anizotropik olduğunu açıkça ortaya koymaktadır. Pettifor [28], metaller ve bileşiklerdeki atomik bağlanmanın, malzemelerin kırılma eğilimli veya sünek özellikleriyle ilişkili

olabilecek açısal karakterinin, Cauchy basıncı ($C_{12}-C_{44}$) ile tanımlanabileceğini öne sürmüştür. Metalik bağlanma için Cauchy basıncı tipik olarak pozitifdir. Öte yandan, açısal karakterli yönlü bağlanma için Cauchy basıncı negatiftir ve daha büyük negatif basınç daha yönlü bir karakteristiği temsil etmektedir. Bu korelasyonlar, tipik metalik bağlanmaya sahip Ni ve Al gibi sünek malzemeler ve ayrıca yönlü bağlanmaya sahip Si gibi kırılğan yarı iletkenler için doğrulanmıştır. Tablo 2'de gösterilen $RhSr_2$ alaşımı için hesaplanan $C_{12}-C_{44}$ değerlerine dayanarak tüm Cauchy basınçlarının pozitif olduğu görülebilir. Bu sonuç yine $RhSr_2$ alaşımının doğası gereği sünek olduğunu göstermektedir. Yine bu malzemenin sünek davranışı, B/G oranı ve Poisson oranı ile elde edilen sonuçlarla paralellik sunar. Shear modülü G, malzemenin kayma gerilimi nedeniyle şekil değişikliğine karşı direncini tanımlar. Hesaplamalarımıza göre, 17.838 GPa değerindeki shear modülü incelenen materyalin sert bir yapıda olmadığını göstermektedir. Young modülü (E), gerilimin gerinime oranını tanımlar ve başka bir açıdan katıların sertliğinin bir ölçüsüdür. Young modülünün en yüksek değeri en yüksek sertliği tahmin eder. 46.517 GPa değerindeki bir Young modülü yine fazla sert olamayan bir yapıyı bize bildirir. Bu nedenle Young modülünün, Lineer sıkıştırılabilirlik, shear modülü ve Poisson oranı düzlemler boyunca 2 boyutlu ve 3 boyutlu değişimleri elde edilmiş ve Şekil 2'de sunulmuştur. Grafikler xy, yz ve xz düzlemleri boyunca oluşturulmuştur. Yönlerin projeksiyonları da sunulmaktadır.

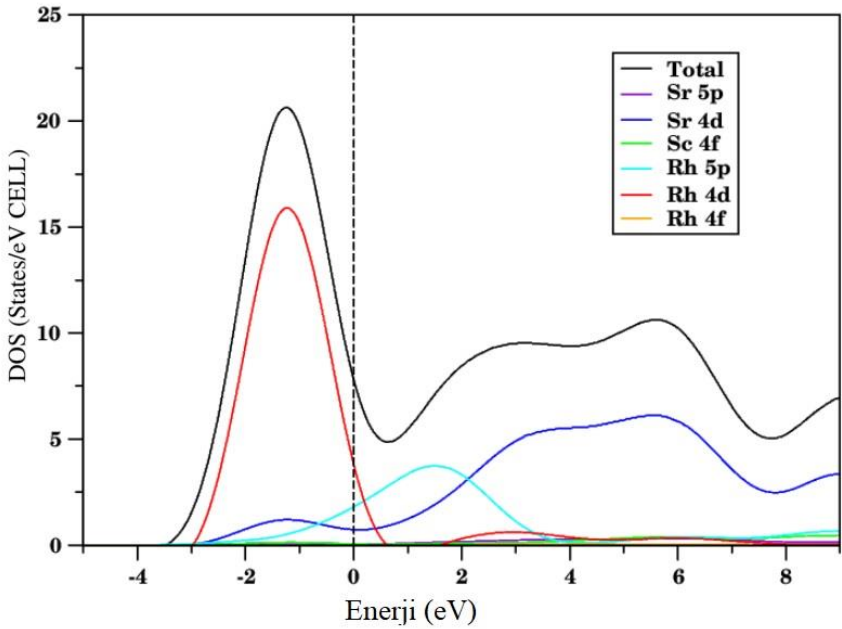


Şekil 2. RhSr₂ alaışımının sırasıyla 3 ve 2 boyutlu, a) Young modülü, b) Lineer sıkıştırılabilirlik, c) shear modülü ve d) Poisson oranı.

CaF₂ yapı alaışımalarında RhSr₂'nin elektronik özelliklerini tahmin etmek için elektronik bant yapıları ve toplam ve kısmi durum yoğunluğunu GGA yaklaşımı kullanılarak hesaplandı ve Şekil 3 ve 4'te sunulmuştur. Fermi enerji seviyesi 0 eV olarak ayarlanmıştır. Parçalı durum yoğunluğu, Fermi düzeyine yakın atom durumlarının katkılarını görmek için hesaplanmıştır.



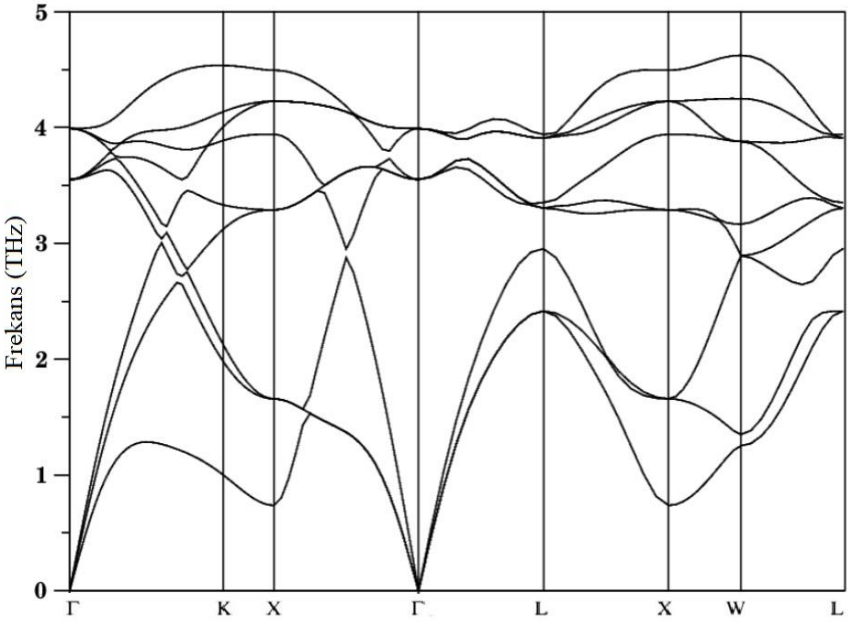
Şekil 3. CaF₂ fazındaki RhSr₂ alaşımının yüksek simetri yönleri boyunca elektronik bant yapısı.



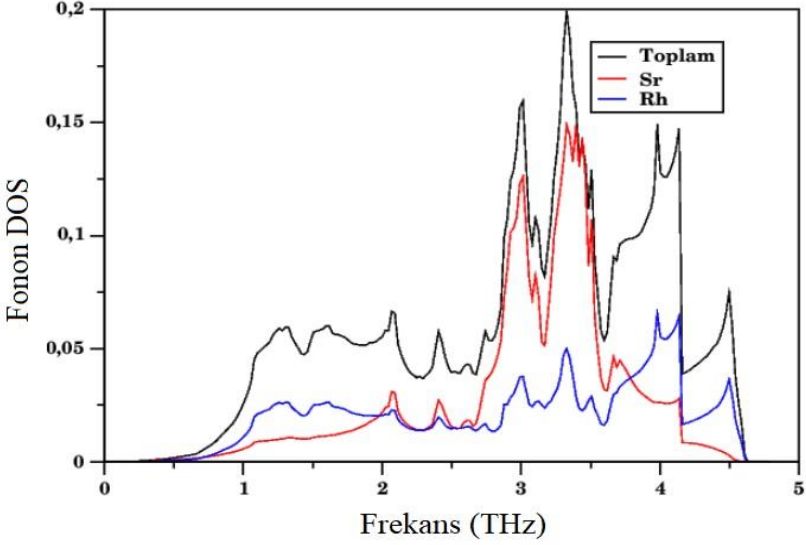
Şekil 4. CaF₂ fazındaki RhSr₂ alaşımının toplam ve parçalı durum yoğunluğu.

Şekil 3'te, RhSr_2 'nin iletim ve valans bandı arasında bir örtüşmenin mevcut olduğu görülmektedir; bu durum metalik bir yapıya işaret etmektedir. Ayrıca RhSr_2 'nin bant yapılarında Fermi enerjisi seviyesine yakın bant aralığı görülmemesi bu alaşımların metalik özelliklerini de doğrulamaktadır. Elektronik bant yapısının daha detaylı anlayabilmek adına, bir atomun her bir yörüngesinin katkısını belirlemek için parçalı durum yoğunluğu grafiğini çizdi ve Şekil 4'te sunulmuştur. Şekil 4'te incelenen materyal için Fermi seviyesine başlıca katkıların Rh 4d, Rh 5p ve Sr 4d orbitallerinden geldiği açıktır. Fermi seviyesinin altındaki keski pik Rh 4d durumundan kaynaklanırken, Fermi seviyesinin üzerindeki dağılım pikleri ise Sr 4d durumundan gelmektedir.

RhSr_2 alaşımının tam fonon, toplam ve parçalı fonon durum yoğunluğu eğrileri sırasıyla, Şekil 5 ve Şekil 6'da gösterilmektedir. Fonon özellikleri yapısal stabilite, titreşim ve termal özelliklerin belirlenmesi nedeniyle önemlidir. Bu çalışmadaki alaşımın birim hücrelerinde, 9 fonon moduna karşılık gelen, 3 atom bulunmaktadır.

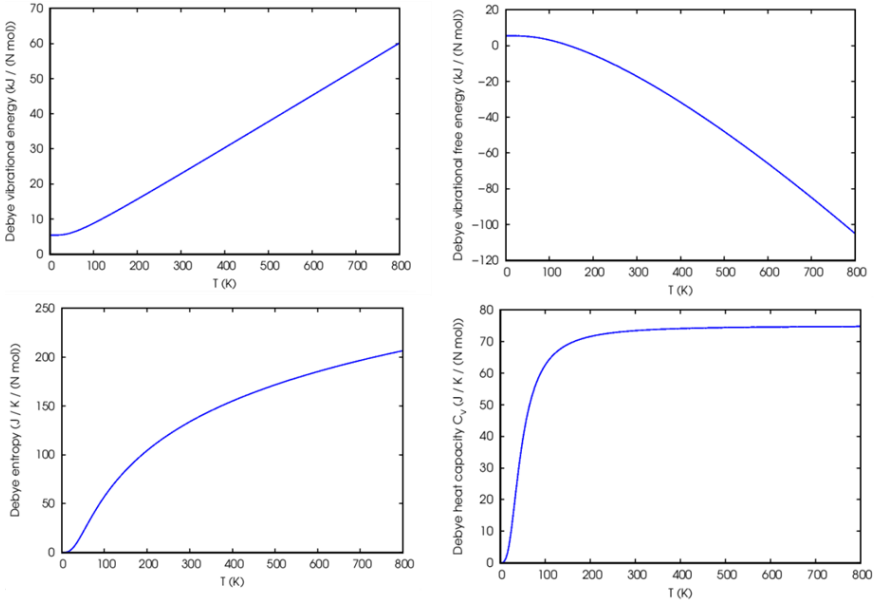


Şekil 5. CaF_2 fazındaki RhSr_2 alaşımının yüksek simetri noktaları boyunca tam fonon dağılımı eğrileri.



Şekil 6. CaF₂ fazındaki RhSr₂ alaşımının toplan ve parçalı durum yoğunluk eğrileri.

En düşük 3 fonon modu, tutarlı örgü atomlarının denge konumlarının dışındaki hareketlerinin sonucu olan akustik modlardır. Diğer 6 fonon modu optik fonon modlarıdır. Akustik modların frekansı dinamik kararlılık hakkında bilgi sağlar. Akustik fonon modları Γ noktasında sıfır frekansa sahip olduğundan incelenen alaşımın dinamik kararlılığa sahip olduğu söylenebilir. Ayrıca alaşımın fonon yoğunluklarında negatif fonon frekanslarının gözlenmemesi de dinamik kararlılık anlamına gelmektedir. Dinamik kararlılık, atomları etkileyen net bir kuvvet olmadığını gösterir; dolayısıyla atomlar belirleyicidir ve böylece incelenen materyal dinamik olarak kararlıdır. Şekil 7, 0 ila 800 K sıcaklık aralığında RhSr₂ alaşımının termodinamik özelliklerini göstermektedir. Titreşim ve titreşimsiz serbest enerji, sistemdeki denge etrafındaki salınımlar hakkında bilgi sağlayan önemli özelliklerdir.



Şekil 7. RhSr₂ alaşımının titreşim enerjisi, titreşim serbest enerjisi, entropisi ve ısı kapasitesi eğrileri.

Titreşim ve titreşim serbest enerjisi, sistemdeki denge etrafındaki salınımlar hakkında bilgi sağlayan önemli özelliklerdir. Titreşim enerjisi, dış etkileşimler için dahili olarak mevcut olan enerji miktarını tanımlar [29], serbest enerji ise bir dış kaynaktan emilebilen ısı enerjisini tanımlar. Şekil 7'den görülebileceği gibi alaşım için titreşim enerjisi sıcaklıkla artar ve titreşim serbest enerjisi 100 K'den sonra azalır. Düşük sıcaklıklarda atomların düşük termal enerjiden dolayı daha az titreşmesi nedeniyle titreşim enerjisi düşüktür. Sıcaklık arttıkça termal enerji ve dolayısıyla titreşim enerjisi artar. Sıfır sıcaklıkta, titreşim enerjisi ile titreşim serbest enerjisinin eşit olması beklenir, ancak sıfır noktası titreşimleri nedeniyle sıfır olmaz. Burada incelenen alaşım için sabit hacimde ısı kapasitesinin sıcaklığa bağlılığı da hesaplandı. Yüksek sıcaklıklarda ısı kapasitesinin Dulong-Petit sınırına [30] yaklaştığı açıktır. Alaşımın entropileri sıcaklık arttıkça artar. Bir malzemenin entropisi atomik seviyedeki düzensizliğin bir göstergesidir ve önemli bir termodinamik özelliktir.

SONUÇLAR

RhSr₂ alaşımının çeşitli özellikleri ilk kez bu çalışmada yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak araştırılmıştır. Mekanik stabilite değerlendirilmesi elastik sabitler ve Born stabilite kriterleri kullanılarak gerçekleştirildi. Bu alaşımın mekanik olarak kararlı olması onu çeşitli uygulamalar için ilginç kılmaktadır. Alaşımın B/G oranlarına ve Cauchy

basınçlarına göre incelenen materyal sünek bir yapıya sahiptir. Anizotropi analizi, Poisson oranı, shear modülü ve Young modülünün bu alaşım için tüm yönlerde anizotropik olduğunu göstermektedir. Elektronik bant yapısı, değerlik ve iletkenlik bandı arasında bant aralığı olmadığından bu alaşımın metalik olduğunu göstermektedir. Fonon ve termodinamik özellikler dinamik ve termodinamik kararlılığı gösterir. Alaşımların fonon modları pozitif bölgededir. Ne yazık ki alaşımların karşılaştırılması için mevcut veri yoktur. Dolayısıyla bu çalışma bundan sonra yapılacak çalışmalara referans veri olarak hizmet edecektir.

KAYNAKLAR

- [1] Schulze, G. E. (1939). Zur Kristallchemie der intermetallischen AB₂-Verbindungen (Laves-Phasen). *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie*, 45(12), 849-865.
- [2] Laves, F., & Witte, H. (1935). Die Kristallstruktur des MgNi₂ und seine Beziehungen zu den Typen MgCu₂ und MgZn₂. *Metallwirtsch*, 14(33), 645-649.
- [3] Gutowska, S., Górnicka, K., Wójcik, P., Klimczuk, T., & Wiendlocha, B. (2021). Strong-coupling superconductivity of SrIr₂ and SrRh₂: Phonon engineering of metallic Ir and Rh. *Physical Review B*, 104(5), 054505.
- [4] Laves, F., & Löhberg, K. (1934). *Die Kristallstruktur von intermetallischen Verbindungen der Formel AB₂*, von... F. Laves und... K. Löhberg. Weidmann.
- [5] Stein, F., & Leineweber, A. (2021). Laves phases: a review of their functional and structural applications and an improved fundamental understanding of stability and properties. *Journal of Materials Science*, 56(9), 5321-5427.
- [6] Brady, M. P., Zhu, J. H., Liu, C. T., Tortorelli, P. F., & Walker, L. R. (2000). Oxidation resistance and mechanical properties of Laves phase reinforced Cr in-situ composites. *Intermetallics*, 8(9-11), 1111-1118.
- [7] Maex, K. (1993). Silicides for integrated circuits: TiSi₂, CoSi₂. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 11(2-3), vii-153.
- [8] Zhang, S. L., & Smith, U. (2004). Self-aligned silicides for Ohmic contacts in complementary metal-oxide-semiconductor technology: TiSi₂, CoSi₂, and NiSi. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 22(4), 1361-1370.
- [9] Soyalp, F., & Ugur, G. (2011). Ground state and phonon spectrum of NiSi₂. *Philosophical Magazine*, 91(3), 468-476.
- [10] Tütüncü, H. M., Altuntaş, H., Srivastava, G. P., & Uğur, G. (2004). First-principles study of electronic and dynamical properties of AuAl₂. *physica status solidi (c)*, 1(11), 3027-3030.
- [11] Ugur, G., Soyalp, F., Tütüncü, H. M., Duman, S., & Srivastava, G. P. (2005). Ab initio calculation of the ground-state properties of CoSi₂. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 17(44), 7127.
- [12] Garg, A. B., & Vijayakumar, V. (2008). Pressure induced structural transitions in CoSi₂. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(39), 395210.
- [13] Cui, S., Feng, W., Feng, Z., Zhang, G., Guo, F., Zhang, G., ... & Liu, C. (2023). First-principles predictions of stable structure of AuAl₂ under high pressure. *Solid State Communications*, 359, 115009.

- [14] Lu, W., Zhai, H., Li, Q., & Chen, C. (2021). Pronounced enhancement of superconductivity in ZrN via strain engineering. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(7), 1985-1990.
- [15] Eglitis, R. I., Purans, J., Popov, A. I., & Jia, R. (2021). Tendencies in ABO₃ perovskite and SrF₂, BaF₂ and CaF₂ bulk and surface F-center ab initio computations at high symmetry cubic structure. *Symmetry*, 13(10), 1920.
- [16] Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., ... & Persson, K. A. (2013). Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL materials*, 1(1).
- [17] Saal, J. E., Kirklin, S., Aykol, M., Meredig, B., & Wolverton, C. (2013). Materials design and discovery with high-throughput density functional theory: the open quantum materials database (OQMD). *Jom*, 65, 1501-1509.
- [18] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502.
- [19] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1998). Perdew, burke, and ernzerhof reply. *Physical Review Letters*, 80(4), 891.
- [20] Methfessel, M. P. A. T., & Paxton, A. T. (1989). High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. *physical review B*, 40(6), 3616.
- [21] Baroni, S., De Gironcoli, S., Dal Corso, A., & Giannozzi, P. (2001). Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Reviews of modern Physics*, 73(2), 515.
- [22] Baroni, S., Giannozzi, P., & Testa, A. (1987). Green's-function approach to linear response in solids. *Physical review letters*, 58(18), 1861.
- [23] Cristiano M., Andrea D.C. (2021). Quasi-harmonic thermoelasticity of palladium, platinum, copper, and gold from first principles, *J. Phys. Condens. Matter* 33 (47) 475901(8pp).
- [24] Iyigör, A., Al, S., & Arikan, N. (2022). Density functional theory investigation on structural, mechanical, electronic and vibrational properties of Heusler alloys AlXIr₂ (X= Co, Cr, Cu, Fe and Zn). *Chemical Physics Letters*, 806, 140052.
- [25] Arikan, N., Al, S., & Iyigör, A. (2022). Mechanical, electronic, thermodynamic and vibrational properties of X₂MgAl (X= Sc, Ti and Y) from first principles calculations. *Journal of Molecular Modeling*, 28(11), 366.
- [26] Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London*,

Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 45(367), 823-843.

- [27] Frantsevich, I. N. (1982). Elastic constants and elastic moduli of metals and insulators. *Reference book*.
- [28] Pettifor, D. G. (1992). Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics. *Materials science and technology, 8(4), 345-349.*
- [29] Sunmonu, R. S., Akinlami, J. O., Dare, E. O., & Adebayo, G. A. (2019). Effects of Y atom substitution on the structural, magnetic, electronic, elastic, mechanical, thermodynamic and thermoelectric properties of Co₂YAl (Y= Cr, Mn) full Heusler alloys from first principles investigations. *Computational Condensed Matter, 21, e00412.*
- [30] Petit, A. T., & Dulong, P. L. (1981). Research on some important points of the theory of heat. *Ann. Chem. Phys., 10, 395.*

BÖLÜM 15

Na₃SbTe₄ MALZEMESİNİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN AB-İNİTİO İLE İNCELENMESİ

Doç. Dr. Ahmet İYİGÖR¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385284>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Makine ve Metal Teknolojileri Bölümü, Kırşehir, Türkiye.
ahmetiyigor@ahievran.edu.tr, ORCID No: 0000-0002-5996-6286

1. GİRİŞ

Yenilenebilir enerji kaynaklarından düzenli elektrik üretmek için büyük ölçekli enerji depolama sistemleri gereklidir (Goodenough ve Kim, 2010). Enerji depolama sistemlerinde kullanılmak için, sodyum-iyon piller daha ucuz ve daha fazla çevre dostudur (Banerjee ve ark., 2016). Ayrıca, bataryalardaki elektrolitlerin katılaştırılması, yangınlık ve sızıntı gibi ciddi güvenlik endişelerini ortadan kaldırarak enerji depolama sistemlerinin güvenilirliğini garanti eder (Kamaya ve ark., 2011). Bu bağlamda, tamamen katı hal sodyum-iyon pilleri enerji depolama sistemleri kullanımı için umut verici adaylardır.

Kükürtlü sodyum süper iyonik iletkenlerin araştırılması, tetragonal fazdan çok daha yüksek bir değer olan 0.46 mS cm^{-1} iletkenlik gösteren kübik Na_3PS_4 'ün geliştirilmesiyle başlatılmıştır (Hayashi ve ark., 2012). Na_3PS_4 'deki kükürtün selenyum (Na_3PSe_4) ile değiştirilmesiyle 1.16 mS cm^{-1} 'lik daha da yüksek bir iletkenlik elde edilmiştir (Zhang ve ark., 2015). Bu artış, aynı kübik yapıyı korurken örgü genişlemesi ve yüksek oranda polarize olabilen selenyumun varlığı ile açıklanmaktadır. Yakın zamanda, 0.4 mS cm^{-1} iletkenlik gösteren $\text{Na}_{10}\text{SnP}_2\text{S}_{12}$ adında başka bir sodyum-iyon iletkeni türü rapor edilmiştir (Richards ve ark., 2016). Genel olarak, yalnızca birkaç kükürt sodyum-iyon geliştirilmiştir. Bu nedenle, malzeme tasarımı yoluyla bileşim ve yapıda daha fazla iyileştirme için çok yer vardır. Dahası, iletkenlik dışındaki önemli hususlar henüz incelenmemiştir. Daha önce geliştirilen kükürt sodyum-iyon malzemeleri, oksijenle yüksek afinitesi olan fosfora dayanıyordu ve sonuç olarak havada stabil değillerdi (Park ve ark., 2016). Daha da önemlisi, çözelti ile işlenebilir kükürt sodyum-iyon malzemeleri bilinmemektedir, bu da kükürt sodyum-iyon malzemelerinin geri dönüşümsüz veya yan reaksiyonlar olmadan çözebilen çözücülerin bulunmamasıyla ilgilidir (Oh ve ark., 2015).

Bu çalışmada, alternatif oluşturabilecek bir malzeme olan kübik yapıdaki Na_3SbTe_4 malzemesi üzerine odaklanılacaktır. İletkenlik değerlerine bakılan sodyum-iyon pillerinin literatürden farklı olarak yapısal, elektronik, mekanik ve termodinamik özelliklerinin belirlenmesi bu çalışmanın amacını oluşturmaktadır. Bu malzemenin taban durum özelliklerinin belirlenmesinde ab-initio yöntem ile yapılması ve hesaplamalarda yoğunluk fonksiyonel

teorisi ile oluşturulmuş pseudopotansiyel yöntemin kullanılması hedeflenmektedir.

2. METOT

Bu çalışmada kullanılan tüm hesaplamalar, Quantum-Espresso kodunda bulunan düzlem dalga pseudopotansiyel yöntemiyle yapılmıştır (Giannozzi ve ark., 2009). Değişim korelasyonu (EC) etkilerini değerlendirmek için Perdew-Burke-Enzerhof (PBE) tarafından geliştirilen genelleştirilmiş eğim yöntemi (GGA-PBE) kullanıldı (Perdew ve ark., 1996). Tüm hesaplamalarda, düzlem dalga açılımını hesaplamak için kesme enerjisi değeri gerekli yakınsamalar yapılarak 40 Ryd olarak belirlendi. Yapılan yakınsamalar sonrasında, 8x8x8 k-noktalı Monkhorst-Pack şeması, Kohn-Sham denklemlerinin öz-tutarlı çözümleri için kullanıldı (Monkhorst ve Pack, 1976). Yarı harmonik Debye modeli, sabit hacimli termodinamik özellikleri elde etmek için tercih edildi (Giannozzi ve ark., 2017).

Ab-initio pseudopotansiyel hesaplamalar, rastgele kristal yapılar için toplam enerjiye ulaşabilir. Bu yöntemle, toplam enerjideki değişiklikleri bulmak için denge örgüsüne az miktarda gerilim uygulayarak elastik sabitleri elde edildi. Elastik sabitlerin bir fonksiyonu olan deformasyon parametresi (δ), toplam enerjinin bir polinom uyumundaki karesel katsayıyla orantılıdır.

Bu çerçevede elastik sabitler, stress-strain yöntemi kullanılarak bulunmuştur (Giannozzi ve ark., 2017). Voigt-Reuss-Hill ortalama şeması, Kayma modülü (G), Bulk modülü (B), Young modülü (E) ve Poisson oranı (σ) polikristal özellikleri belirleyen elastik modüller elastik sabitlerden türetilmiştir (Giannozzi ve ark., 2017). Kübik bir kristal C_{11} , C_{12} ve C_{44} gibi üç ayrı elastik sabiti ile tanımlar. Voigt, Reuss ve Hill ortalama şeması ile bir kübik kristalin Bulk modülü Eş. 1'deki gibidir.

$$B_v = B_R = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (1)$$

$$B = B_H = \frac{B_v + B_R}{2} \quad (2)$$

Kayma modülünün Voigt değeri Eşitlik 3'deki gibidir.

$$G_v = \frac{(C_{11}-C_{12}+3C_{44})}{5} \quad (3)$$

Reuss değeri ise Eşitlik 4'deki gibidir.

$$G_R = \frac{(5(C_{11}-C_{12})C_{44})}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})} \quad (4)$$

Hill değeri Voigt ve Reuss değerlerinin aritmetik ortalamasıdır ve $G = (G_v + G_R)/2$ şeklinde ifade edilir. Young modülü Eşitlik 5'de gösterildiği gibi elde edilir.

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (5)$$

Poisson oranı Eşitlik 6'daki gibi hesaplanarak elde edilir.

$$\sigma = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (6)$$

Anizotropi faktörü ise Eşitlik 7'den elde edilir.

$$A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) \quad (7)$$

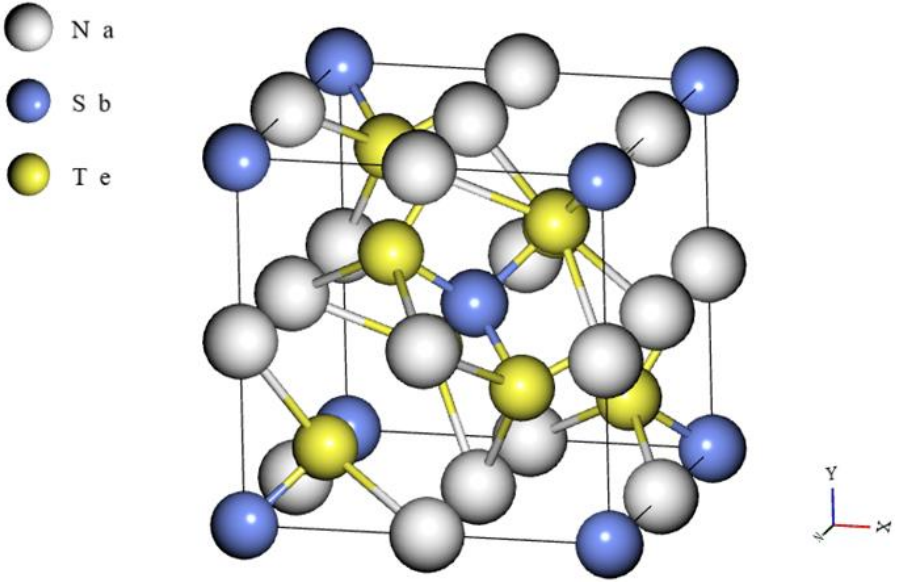
3. ARAŞTIRMA VE BULGULAR

3.1. Yapısal Özellikler

Tablo 1'de gösterildiği gibi, Na_3SbTe_4 malzemesini oluşturmak için elementler, I-43m uzay grubunun birer parçası olan atomik pozisyonlara göre yerleştirildi. Şekil 1'de gösterildiği gibi, Na_3SbTe_4 malzemesi I-43m uzay grubundaki kristal yapısını oluşturdu. Kristal yapısı oluşturulan Na_3SbTe_4 malzemesinin farklı örgü sabiti değerlerine göre toplam enerjileri hesaplandı. Tablo 1'de denge durumu örgü sabiti verildi. Buradaki örgü sabiti değeri toplam enerjinin minimum olduğu değere karşılık gelmektedir.

Tablo 1: Na_3SbTe_4 malzemesinin örgü sabiti (a_0 , Å) ve örgü parametreleri.

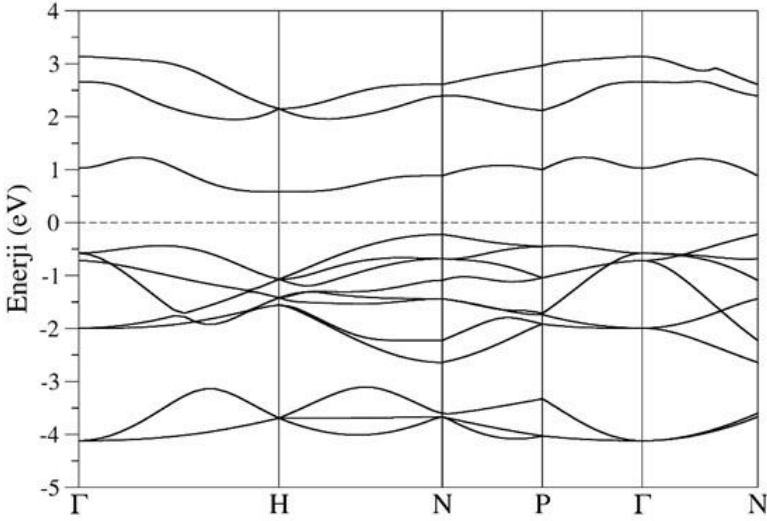
Malzeme	Uzay grubu	a_0	Atomik pozisyonlar				
			Atom	Wyckoff	x	y	z
Na_3SbTe_4	I-43m	8.127	Sb	2a	0	0	0
			Na	6b	0	1/2	1/2
			Te	8c	0.6953	0.6953	0.6953

**Şekil 1:** Na_3SbTe_4 malzemesinin I-43m uzay grubundaki temsili kristal yapısı

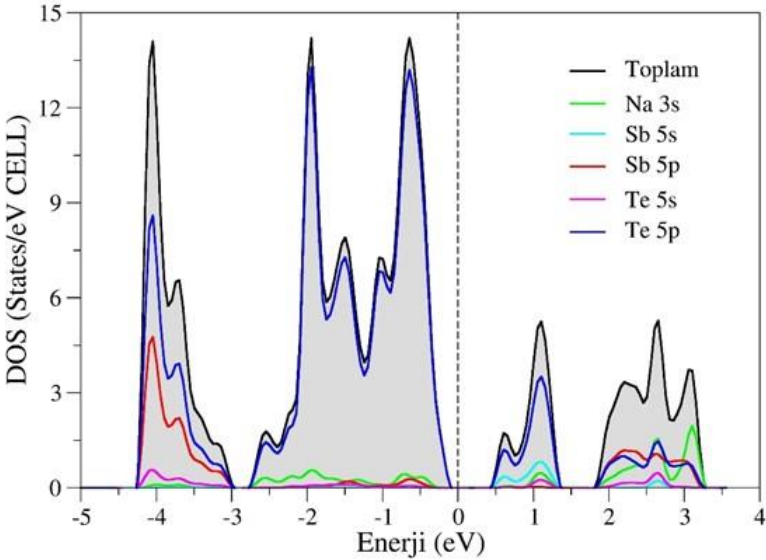
3.2. Elektronik Özellikler

Na_3SbTe_4 malzemesinin I-43m uzay grubundaki denge durumundaki örgüsü için elektronik özellikler elde edildi. Şekil 2, bu malzemenin tüm yüksek simetri yönelimlerine göre elektronik bant eğrilerini göstermektedir. Şekil 3'te gösterildiği gibi, elektronik katkının daha iyi analiz edilebilmesi için toplam ve kısmi durum yoğunluklarını gösteren spektrumlar çizildi. Şekil 2 ve Şekil 3'teki hesaplanan bant ve durum yoğunluklarındaki tüm enerji seviyelerinden Fermi enerjisi çıkartılarak Fermi enerji seviyesi 0 eV olarak ayarlandı ve kesikli çizgilerle gösterildi. Elektronik bant eğrileri incelendiğinde Fermi enerji seviyesinin altında kalan valans bantları ile Fermi enerji seviyesinin üstünde bulunda iletkenlik bantları arasında bir yasak enerji aralığı olduğu görülmektedir. Fermi civarındaki bu yasak enerji aralığının değeri 0.81 eV'tur. Bu malzeme sahip olduğu yasak enerji aralığı N yüksek

simetri eksenindeki valans bandının maksimumu ile H yüksek simetri eksenindeki iletkenlik bandının minimumu arasındadır. Bundan dolayı, Na_3SbTe_4 malzemesinin indirekt bant geçişine sahip bir yarıiletken özellik gösterdiği söylenebilir.



Şekil 2: Na_3SbTe_4 malzemesinin I-43m uzay grubundaki elektronik bant eğrileri



Şekil 3: Na_3SbTe_4 malzemesinin I-43m uzay grubundaki elektronik toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri

Elektronik katkının daha iyi analizi için elde edilerek çizilen toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerine bakıldığında toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerinde Fermi enerji seviyesi civarında yasak enerji aralığına sahip olduğu görülmektedir. Buda bu malzemenin yarıiletken bir malzeme olduğunu gösterir. Fermi enerji seviyesindeki altında kalan valans bantlarında -2.8 eV'ye kadar olan kısımda en baskın olan elektronlar Te-5p orbitaline ait elektronlardır. -2.8 eV'den -4.3 eV'ye kadar ki kısımda ise sırasıyla Te-5p, Sb-5p ve Te-5s orbitallerinin elektronları hakimdir. Fermi seviyesinin üstünde yer alan iletkenlik seviyesinde ise 1.4 eV'ye kadar oluşan tepelerde sırasıyla, Te-5p, Sb-5s ve Na-3s orbitallerinin elektronları hakim durumdadır. 1.8 eV'den 3.3 eV'ye kadar oluşan tepelerde ise Sb-5p, Te-5p ve Na-3s orbitallerinin elektronları baskın durumdadır.

3.3. Elastik Özellikler

Elastik sabitler, malzemelerin dış kuvvetlere karşı dayanıklılığını ölçmek için Bulk, Young ve Kayma modüllerini içerir. Atom bağları, mekanik kararlılık ve etkileşimler hakkında daha fazla bilgi edinmemize de yardımcı olabilir. Bir kristalin 36 tane elastik sabiti vardır. Kristalin simetrisi nedeniyle, elastik sabitlerin sayısı değişir. Kübik yapıda kristalleşen I-43m uzay grubundaki Na_3SbTe_4 malzemesinin simetri nedeniyle birbirinden bağımsız üç tane elastik sabiti bulunur: C_{11} , C_{12} ve C_{44} . Yapısal ve mekanik kararlılık gibi önemli bilgiler içeren bu elastik sabitleri hesaplamak için denge durumundaki kristal yapı için elde edilen değerler kullanıldı ve elde edilen elastik sabiti değerleri Tablo 2'de verildi. Tablo 2, verilen tüm elastik sabitlerinin pozitif değer aldığını göstermektedir.

Tablo 2: I-43m uzay grubundaki Na_3SbTe_4 malzemesinin elastik sabitleri (C_{ij} , GPa), ortalama ses hızı (v_m , m/s) ve Anizotropi Faktörü (A).

Malzeme	C_{11}	C_{12}	C_{44}	v_m	A
Na_3SbTe_4	20.27	6.37	7.90	1454.89	1.136

Kübik sistemler için Eş. 8'de gösterildiği gibi, Born kararlılık kriteri (Born ve ark., 1955), elastik sabitlerine bağlı olarak kristallerin mekanik kararlılıklarını değerlendirmek için kullanılır.

$$(C_{11} - C_{12}) > 0, \quad C_{11} > 0, \quad C_{44} > 0, \quad (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (8)$$

Tablo 2'deki elastik sabiti değerleri Eş. 8 ile uyumludur. Buna göre Na_3SbTe_4 malzemesi Born kararlılık kriterleri karşıladığından mekanik olarak kararlıdır. Malzeme mukavemeti, elastik sabitlerin değerleriyle ilişkilidir. Elastik sabitlerin değerleri, malzemenin mukavemeti ile bağlantılıdır. Malzemenin farklı yönlerdeki gerilme ve deformasyonunu tanımlamada önemli rol oynar. Malzemenin x eksenini boyunca tek yönlü sıkıştırmaya karşı gösterdiği direnç, C_{11} elastik sabiti tarafından gösterilir. Tablo 2'de gösterilen elastik sabit değerleri incelendiğinde, C_{11} değeri C_{44} değerinden daha yüksektir. Bu, Na_3SbTe_4 malzemesinin kayma deformasyonundan daha fazla tek yönlü basınca dayanıklı olduğunu göstermektedir.

Tablo 3: I-43m uzay grubundaki Na_3SbTe_4 malzemesinin Bulk modülü (B , GPa), Kayma modülü (G , GPa), Young modülü (E , GPa), B/G oranı Poisson oranı (σ) ve Debye Sıcaklığı (Θ_D , K).

Malzeme	B	G	E	B/G	σ	Θ_D
Na_3SbTe_4	11.01	7.50	18.34	1.47	0.22	134.31

Elastik sabitlerinden yararlanılarak hesaplanan elastik modülleri (B , G ve E), B/G oranı ve Poisson oranı Tablo 3'de sunuldu. Malzemelerin sünek veya kırılğan doğası hakkında bilgiler içeren Pugh kriteri (Pugh, 1954) göre B/G oranının 1.75 sınır değeri olarak kabul edilmektedir. B/G oranı 1.75 sınır değerinden yüksek olan malzemeler sünek düşük olan malzemeler ise kırılğan bir doğaya sahiptir. 1.47'lik B/G oranı değerine sahip olan Na_3SbTe_4 malzemesinin kırılğan bir doğaya sahip olduğu söylenebilir. Bulk modülü değeri bu malzeme için 50 GPa değerinden büyük olması uniform basınç altında sıkışabilirliğinin yüksek olduğu anlamına gelmektedir. Kayma modülünün 7.50 GPa olması makaslama kuvvetler arası sıkışabilirliğin biraz daha yüksek olduğunu göstermektedir. Young modülü sertliğin bir ölçüsü olarak kabul edilir. Bu malzeme için hesaplanan Young modülü değeri 18.34 GPa olarak elde edildi. Ek olarak, hesaplanan bu elastik modüllerden yola çıkarak atomik bağları daha iyi anlamak için Poisson oranı değerine bakılması gerekmektedir. Poisson oranı kovalentliğin bir ölçüsüdür. Buna göre kovalent

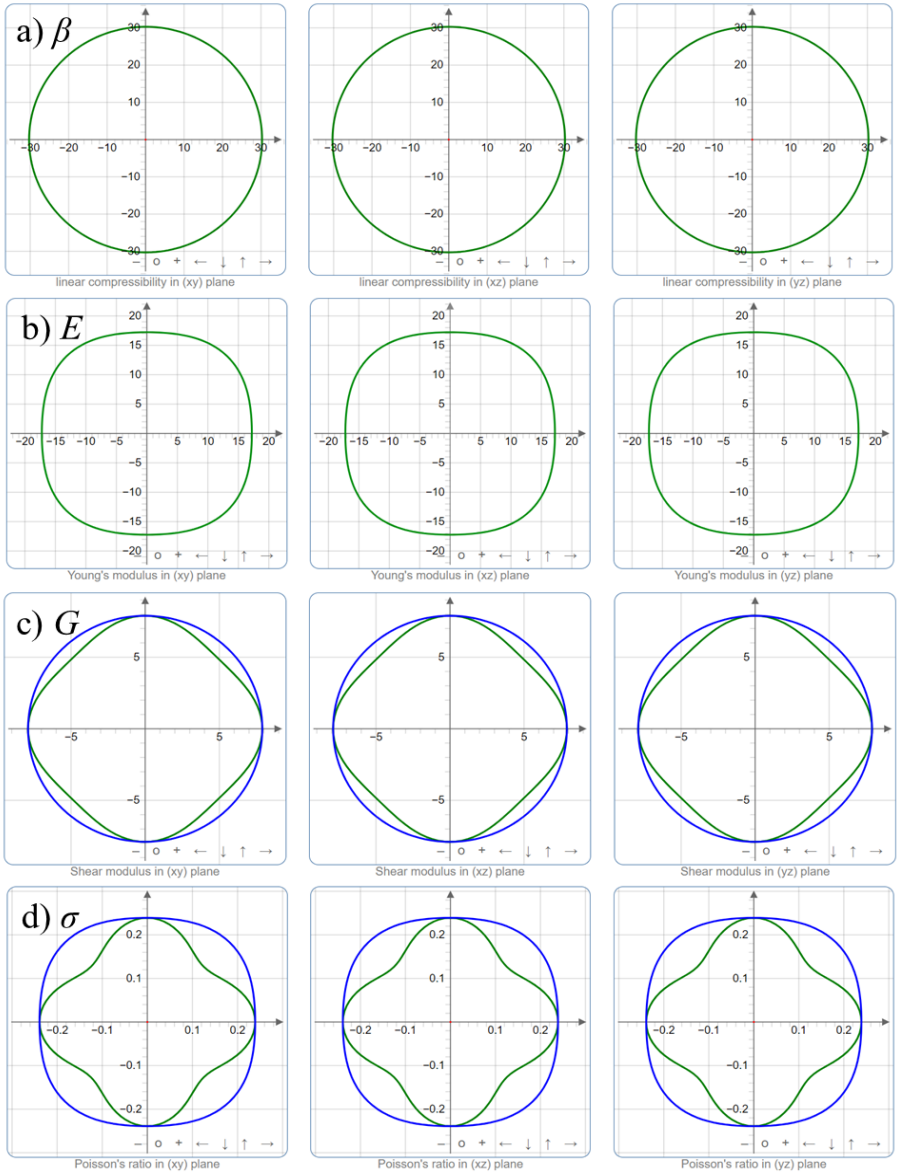
malzemeler için 0.1 yakınken iyonik malzemeler için ise 0.25 yakındır. Merkezi kuvvetler için ise alt ve üst limit değerleri 0.25 ile 0.50 arasındadır (Haines ve ark., 2001). Poisson oranı 0.22 olan bu malzeme için iyonik karakterinin baskındır.

Katıların ses hızları termodinamik, elastik ve dinamik özellikleri yakından ilgilidir. Katı malzemelerin ses hızları onları tanımlayan önemli bir özelliktir. Birim hücresinde 14 atom bulunan Na_3SbTe_4 malzemenin 3N serbestlik derecesi nedeniyle sadece 3'ü akustik 39'u optik olmak üzere 42 fonon dalı vardır. Kristal içinde yayılan ses dalgalarının frekansı, akustik modlar tarafından elde edilir. Bu çalışmada incelenen Na_3SbTe_4 malzemesinin, elastik sabitler kullanılarak elde edilen ortalama ses hızı Tablo 2'de verildi. Ses dalgaları mekanik dalgalar olduğundan yayılmak için bir ortama ihtiyaç duyarlar. Ortam ne kadar yoğun ve sertse ses dalgaları da o kadar hızlı yayılır. Bu malzemenin ortalama ses hızı 1454.89 m/s dir.

Na_3SbTe_4 malzemesinin elastik anizotropisi "A" elastik sabiti değerleri kullanılarak hesaplandı ve elde edildi (Gaillac ve ark., 2016). Elde edilen elastik anizotropi değeri yüksek teknoloji uygulamaları için oldukça önemlidir çünkü malzemenin dayanıklılığının tahmin edilmesine ve malzemenin farklı yönlerdeki yoğunluğunun ölçülmesinde önemli rol oynar. Elastik anizotropi değeri, izotropik bir malzeme için 1'iken ve anizotropik bir malzeme için 1'den farklıdır. Tablo 2'de görüldüğü gibi hesaplanan anizotropi faktörü bu malzeme için 1'den farklı bir değere sahiptir. Dolayısıyla, Na_3SbTe_4 malzemesi anizotropiktir. Ancak elastik anizotropi derecesi oldukça düşüktür. Bu malzemeye ait Young modülü, Kayma modülü ve Lineer sıkışabilirliğin yönlere göre değişiminin maksimum ve minimum değerleri Tablo 4'de verildi. Ayrıca, elastik modüllerin uzaysal bağımlılıkları Şekil 4'de gösterildi.

Tablo 4. Na_3SbTe_4 malzemesi için yönelimlere bağlı olarak elastik modüllerin (GPa) yönlere göre değişimleri.

Malzeme	E		β		G	
	E_{\min}	E_{\max}	β_{\min}	β_{\max}	G_{\min}	G_{\max}
Na_3SbTe_4	103.97	257.21	1.6995	1.6995	36.827	100.36
Anizotropi	1.11		1.00		1.136	

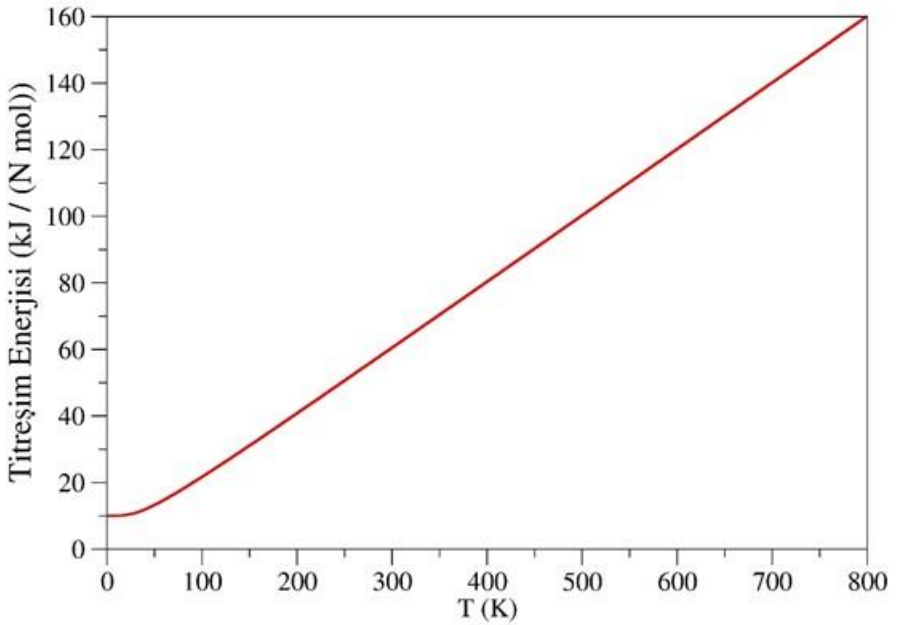


Şekil 4: Na_3SbTe_4 malzemesi için elastik modüllerin uzaysal bağımlılıkları

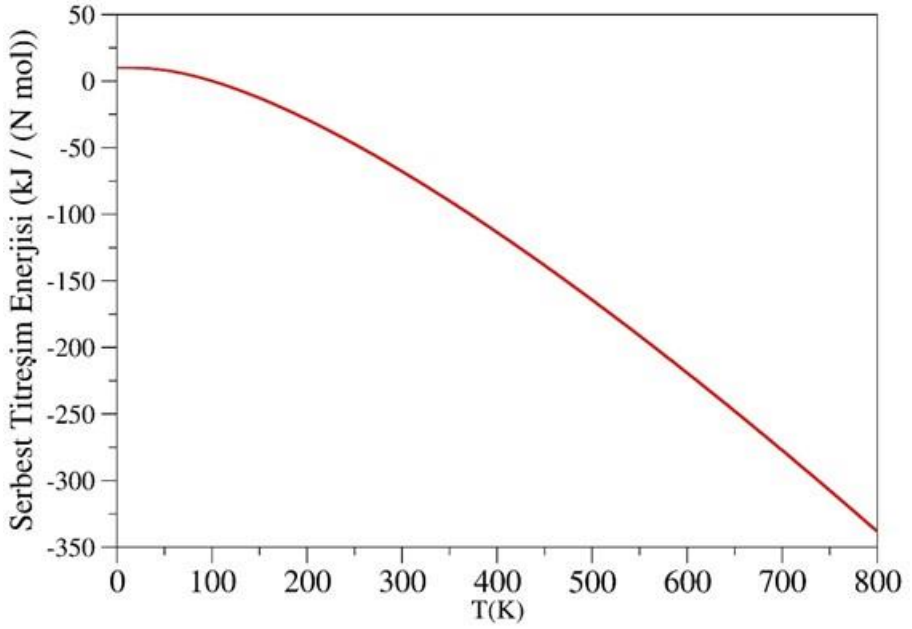
3.4. Termodinamik Özellikler

Termodinamik özellikler kapsamında Debye sıcaklığı (Θ_D) elde edildi ve Tablo 3'de verildi. Katı malzemelerin örgü titreşimlerinin belirlenmesinde önemli bir parametre olan Debye sıcaklığı, metalik malzemelerde elektriksel

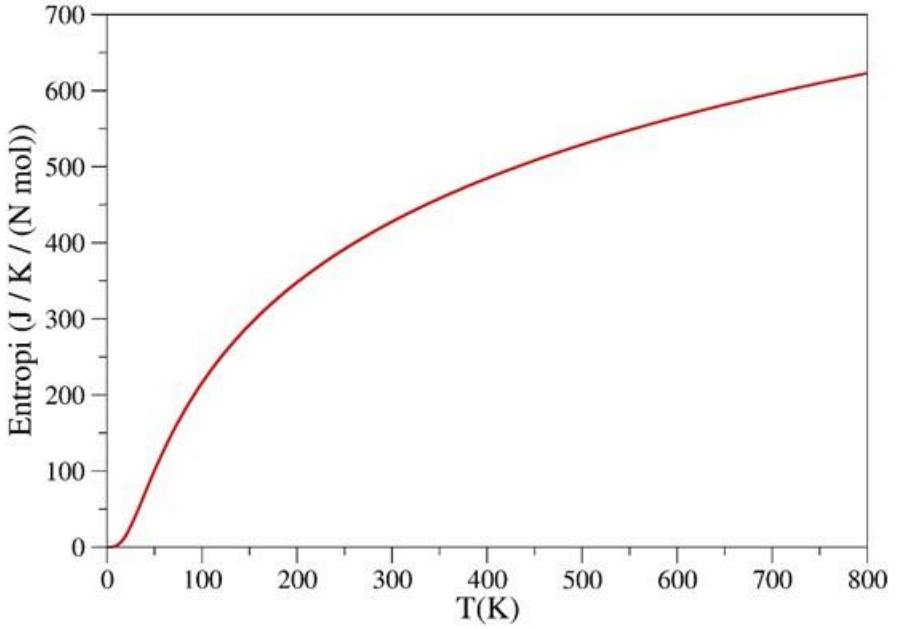
direncin sıcaklıkla olan ilişkisi ile bağlantılıdır. Bunun yanı sıra, termodinamik özellikler kapsamında 0K – 800K arasındaki titreşim enerjisi, serbest titreşim enerjisi, entropi ve ısı sığasının sıcaklıkla değişimleri elde edilerek sırasıyla; Şekil 5, Şekil 6, Şekil 7 ve Şekil 8’de verildi. Şekil 5 ve Şekil 6’dan anlaşılacağı üzere sıcaklık arttıkça titreşim enerjisi artarken beklenildiği gibi serbest titreşim enerjisi düşmektedir. Yine Şekil 7’den sıcaklıkla birlikte düzensizliğin bir ifadesi olan entropinin arttığı görülmektedir. Isı sığası ise 0K – 15K arası düşük sıcaklıklarda yavaşça artarken 15K – 75K arasındaki sıcaklıklarda ise T^3 yasasına uygun bir şekilde hızla artmaktadır. Debye sıcaklığından sonraki sıcaklık değerlerinde ise yüksek sıcaklıklara doğru Dulong-Petit limiti (Dulong ve Petit, 1819) olarak bilinen $3NR$ değerlerine yaklaşmakta olduğu Şekil 8’den anlaşılmaktadır.



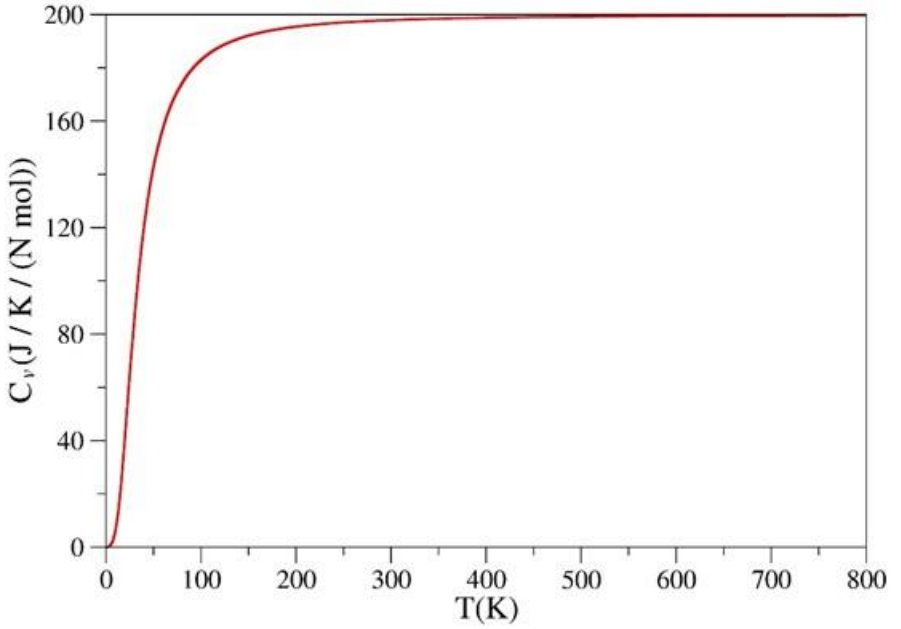
Şekil 5: Na_3SbTe_4 malzemesinin titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 6: Na_3SbTe_4 malzemesinin serbest titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 7: Na_3SbTe_4 malzemesinin entropisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 8: Na₃SbTe₄ malzemesinin ısı sığasının sıcaklıkla değişimi.

4. SONUÇLAR

Bu çalışmada, Na₃SbTe₄ malzemesinin yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı geliştirilmiş eğim yöntemi ile elde edildi. Yapısal özellikler kapsamında malzemenin örgü sabiti I-43m uzay grubunda 8.127 Å olarak rapor edildi. Elektronik özelliklerden dolayı bant aralığına sahip bir yarıiletken olduğu belirlendi. Elastik özelliklerden mekanik olarak kararlı olduğu ve kırılğan bir doğaya sahip olduğu saptandı. Termodinamik özellikler kapsamında ise 0K – 800K arasındaki sıcaklıkla değişimi incelendi. Ayrıca, bu çalışma ile I-43m uzay grubunda yer alan Na₃SbTe₄ malzemenin literatüre birçok fiziksel özelliği sunulmuş oldu.

KAYNAKÇA

- Born, M., Huang, K., & Lax, M. (1955). Dynamical theory of crystal lattices. *American Journal of Physics*, 23(7), 474-474.
- Banerjee, A., Park, K. H., Heo, J. W., Nam, Y. J., Moon, C. K., Oh, S. M., ... & Jung, Y. S. (2016). Na₃SbS₄: a solution processable sodium superionic conductor for all-solid-state sodium-ion batteries. *Angewandte Chemie*, 128(33), 9786-9790.
- Dulong, P. L., & Petit, A. T. (1819). *Recherches sur quelques points importants de la theorie de la chaleur*.
- Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M. B., Calandra, M., ... & Baroni, S. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of physics: Condensed matter*, 29(46), 465901.
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502.
- Gaillac, R., Pullumbi, P., & Coudert, F. X. (2016). ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28(27), 275201.
- Goodenough, J. B., & Kim, Y. (2010). Challenges for rechargeable Li batteries. *Chemistry of materials*, 22(3), 587-603.
- Haines, J., Leger, J. M., & Bocquillon, G. (2001). Synthesis and design of superhard materials. *Annual Review of Materials Research*, 31(1), 1-23.
- Hayashi, A., Noi, K., Sakuda, A., & Tatsumisago, M. (2012). Superionic glass-ceramic electrolytes for room-temperature rechargeable sodium batteries. *Nature communications*, 3(1), 856.
- Kamaya, N., Homma, K., Yamakawa, Y., Hirayama, M., Kanno, R., Yonemura, M., ... & Mitsui, A. (2011). A lithium superionic conductor. *Nature materials*, 10(9), 682-686.
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical review B*, 13(12), 5188.
- Oh, D. Y., Nam, Y. J., Park, K. H., Jung, S. H., Cho, S. J., Kim, Y. K., ... & Jung, Y. S. (2015). Excellent compatibility of solvate ionic liquids with sulfide solid electrolytes: toward favorable ionic contacts in bulk-type all-solid-state lithium-ion batteries. *Advanced Energy Materials*, 5(22), 1500865.
- Park, K. H., Oh, D. Y., Choi, Y. E., Nam, Y. J., Han, L., Kim, J. Y., ... & Jung, Y. S. (2016). Solution-processable glass LiI-Li₄SnS₄ superionic

- conductors for all-solid-state Li-ion batteries. *Advanced Materials*, 28(9), 1874-1883.
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
- Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367), 823-843.
- Reshak, A. H., Shalaginov, M. Y., Saeed, Y., Kityk, I. V., & Auluck, S. (2011). First-principles calculations of structural, elastic, electronic, and optical properties of perovskite-type KMgH₃ crystals: novel hydrogen storage material. *The Journal of Physical Chemistry B*, 115(12), 2836-2841.
- Richards, W. D., Tsujimura, T., Miara, L. J., Wang, Y., Kim, J. C., Ong, S. P., ... & Ceder, G. (2016). Design and synthesis of the superionic conductor Na₁₀SnP₂S₁₂. *Nature communications*, 7(1), 11009.
- Zhang, L., Yang, K., Mi, J., Lu, L., Zhao, L., Wang, L., ... & Zeng, H. (2015). Solid Electrolytes: Na₃PSe₄: A Novel Chalcogenide Solid Electrolyte with High Ionic Conductivity (Adv. Energy Mater. 24/2015). *Advanced Energy Materials*, 5(24).

BÖLÜM 16

ScOs₂Ga HEUSLER ALAŞIMININ YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

Doç. Dr. Ahmet İYİGÖR¹

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385322>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Makine ve Metal Teknolojileri Bölümü, Kırşehir, Türkiye.
ahmetiyigor@ahievran.edu.tr, ORCID No: 0000-0002-5996-6286

1. GİRİŞ

1900'lerin başlarında Alman bilim adamı Fritz Heusler, manyetik olmayan elementlerden ferromanyetik alaşımların nasıl oluşturulacağını keşfetti. Bu keşif o dönem için olağan üstü bir keşifti (Heusler, 1903). Heusler'in ilk fazı, Cu_2MnAl olarak bilinen arketip bir bileşiktir ve günümüze kadar çok detaylı bir şekilde incelenmiştir. Alman bilim adamının keşfi nedeniyle, X_2YZ kimyasal formülüne sahip tüm üçlü intermetalik elementler arası bileşikler veya alaşımlar "Heusler fazları" olarak isimlendirilirler. Burada, X ve Y tipik olarak geçiş metalleridir ve Z ise s, p değerlik elektronlarına sahip bir ana grup elementtir. Bu malzemelerin çoğu yüz merkezli kübik örgüsünde (fcc) L2_1 kristal yapılarıdır. Sentezlerinde basit ve bilinen metalürjik yollar kullanılır (Smart ve Moore, 2012). Bundan dolayı, yüzlerce farklı Heusler fazına sahip malzeme literatüründe incelenmiş ve incelenmeye devam etmektedir.

Heusler alaşımlarının Brillouin bölgesi dağılımlarındaki herhangi bir atomik düzensizlik, elektronik yapılarını, manyetik ve taşıma özelliklerini muazzam bir farkla güçlü bir şekilde etkileyebilir (Çanlı ve ark., 2021). Bazı tam Heusler alaşımlarının oluşum entalpileri, manyetik özellikleri ve yapısal kararlılıkları şimdiye kadar deneysel çalışmaların odağında yer almış olsa da hesaplama yöntemleri (kuantum mekaniği), gerçekte sentezlenmesi mümkün olmayan farklı konfigürasyonlara sahip birçok alaşımın en iyi bileşimlerini ve özelliklerini bulmak için daha uygundur.

Heusler ailesinin çeşitli özellikleri arasında optik (Engen ve ark., 1983), manyetokalorik (Krenke ve ark., 2005), yapısal (Kainuma ve ark., 2006) ve benzersiz Curie sıcaklıkları (Sabine, 2007) yer almaktadır. Bu nedenle, manyetik tünel bağlantıları, spintronik ve termoelektrik uygulamalar için uygundur (Wang ve ark., 2010).

Ta, W, Re, Os ve Ir gibi ağır geçiş metallerinin yüksek yoğunlukları ve son derece yüksek erime noktalarının yanı sıra olağanüstü mekanik, termal ve kimyasal kararlılıkları vardır. Çok düşük sıkıştırılabilirlikleri bu metalleri yüksek basınç çalışmaları için temel konular haline getirmektedir. Saf platin grubu metalleri Rh, Ru, Os ve Pd'nin faz kararlılıkları, sıkıştırılabilirlikleri ve hal denklemleri 75 GPa'ya kadar yüksek basınçlar altında incelenmişken, Pt ve Re'nin 304 ve 640 GPa arasındaki multi-megabar basıncılarda incelenmiştir

Pt ve Re sırasıyla 304 ve 640 GPa'ya kadar çok megabar basınçlarda incelenmiştir (McMahon ve Nemes, 2006; Dubrovinsky ve ark., 2012; Yusenkov ve ark., 2015; Tonkov ve Ponyatovsky, 2018). Bir seri Heusler alaşımının oluşum entalpisi ve örgü parametreleri de Gilleßen ve Dronskowski (2009) tarafından ilk prensip hesaplamaları kullanılarak belirlenmiştir. Elde ettikleri sonuçlar 810 Heusler alaşımının sadece %12'sinin deneysel olarak sentezlenebildiğini göstermiştir. Os bazlı ScOs_2Ga Heusler alaşımı ile ilgili literatürde kapsamlı bir çalışma bulunmamaktadır.

Bu çalışmada, ScOs_2Ga Heusler alaşımının yapısal, elektronik, mekanik ve termodinamik özelliklerinin belirlenmesi üzerine odaklanılmıştır. Bu alaşımın fiziksel özelliklerinin belirlenmesinde ab-initio hesaplama yöntemlerinden biri olan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin kullanılması amaçlanmaktadır.

2. METOT

Bu çalışmada kullanılan tüm hesaplamalar, Quantum-Espresso kodunda (Giannozzi ve ark., 2009) kullanılan düzlem dalga pseudopotansiyel yöntemiyle yapılmıştır. Perdew-Wang (PW91) tarafından geliştirilen genelleştirilmiş eğim yöntemi (GGA-PW91) (Perdew ve Wang, 1992), değişim korelasyonu (EC) etkilerini incelemek için kullanılmıştır. Tüm hesaplamalarda düzlem dalga açılımını belirlemek için kesme enerjisi değeri 40 Ryd olarak alınmıştır. Kohn-Sham denklemlerinin öz-tutarlı çözümleri, $12 \times 12 \times 12$ k-noktalı Monkhorst-Pack şeması (Monkhorst ve Pack, 1976) kullanılarak oluşturulmuştur. Yarı harmonik Debye modeli kullanılarak termodinamik özellikler sabit hacim altında elde edildi (Giannozzi ve ark., 2017).

Ab-initio pseudopotansiyel hesaplamaları, rastgele kristal yapılar için toplam enerji hesaplama yeteneğine sahiptir. Bu yöntem, toplam enerjideki değişiklikleri belirlemek için denge örgüsüne az miktarda gerilim uygularken elastik sabitleri üretmemize yardımcı oldu. Deformasyon parametresi (δ), elastik sabitlerin bir fonksiyonudur ve toplam enerjinin bir polinom uyumundaki karesel katsayı ile orantılıdır. Bu durumda, stress-strain yöntemi kullanılarak elastik sabitler hesaplanmıştır (Giannozzi ve ark., 2017). Voigt-Reuss-Hill ortalama şeması, kayma modülü (G), Bulk modülü (B), Young

modülü (E) ve Poisson oranı (σ) gibi elastik sabitlerden türetilmiştir (Giannozi ve ark., 2017). Kübik bir kristali tanımlamak için C_{11} , C_{12} ve C_{44} üç bağımsız elastik sabit vardır. Voigt, Reuss ve Hill ortalamaları, Eşitlik 1’de olduğu gibi bir kübik kristalin Bulk modülüne benzer:

$$B_v = B_R = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (1)$$

$$B = B_H = \frac{B_v + B_R}{2} \quad (2)$$

Kayma modülünün Voigt değeri Eşitlik 3’deki gibidir.

$$G_v = \frac{(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})}{5} \quad (3)$$

Reuss değeri ise Eşitlik 4’deki gibidir.

$$G_R = \frac{(5(C_{11} - C_{12})C_{44})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (4)$$

Hill değeri Voigt ve Reuss değerlerinin aritmetik ortalamasıdır ve $G = (G_v + G_R)/2$ şeklinde ifade edilir. Young modülü Eşitlik 5’de gösterildiği gibi elde edilir.

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (5)$$

Poisson oranı Eşitlik 6’daki gibi hesaplanarak elde edilir.

$$\sigma = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (6)$$

Anizotropi faktörü ise Eşitlik 7’den elde edilir.

$$A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) \quad (7)$$

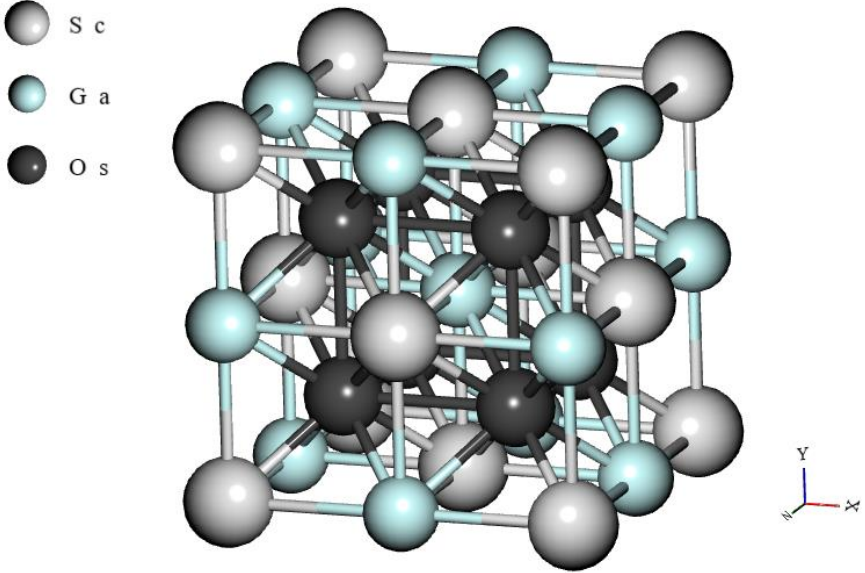
3. ARAŞTIRMA VE BULGULAR

3.1. Yapısal Özellikler

ScOs₂Ga Heusler alaşımının oluşturmak için Tablo 1'deki Fm-3m uzay grubunun birer bileşeni olan atomik pozisyonlara göre elementler yerleştirildi. Böylece Şekil 1'de gösterilen ScOs₂Ga Heusler alaşımının Fm-3m uzay grubundaki kristal yapısı oluşturuldu. Kristal yapısı Şekil 1'deki gibi oluşturulan ScOs₂Ga Heusler alaşımının farklı örgü sabiti değerlerine göre toplam enerjileri hesaplandı. Elde edilen toplam enerjilerden enerjinin minimum olduğu yer denge durumu örgü sabiti olarak belirlendi ve Tablo 1'de verildi.

Tablo 1: ScOs₂Ga Heusler alaşımının örgü sabiti (a_0 , Å) ve örgü parametreleri.

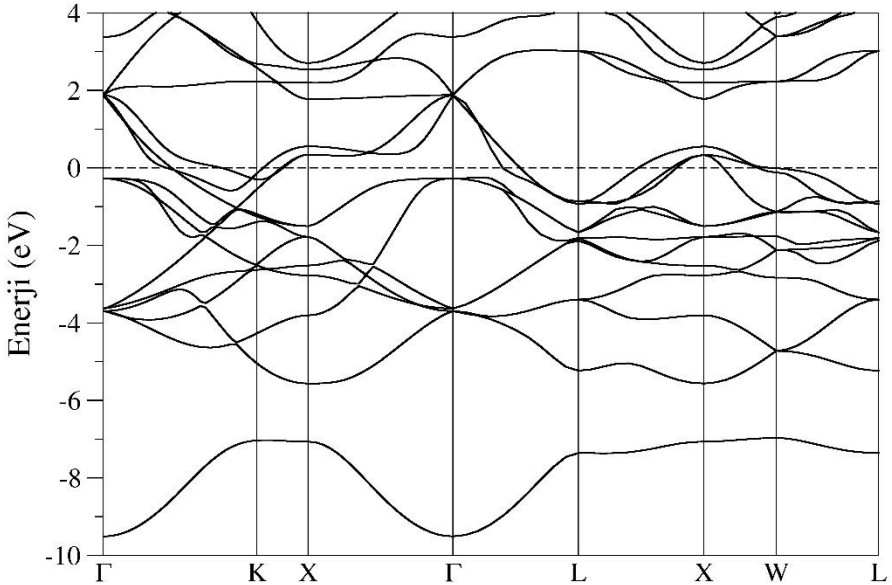
Malzeme	Uzay grubu	a_0	Atom	Wyckoff	x	y	z
ScOs ₂ Ga	Fm-3m	6.263	Sc	4a	0	0	0
			Ga	4b	1/2	1/2	1/2
			Os	8c	1/4	1/4	1/4



Şekil 1: ScOs₂Ga malzemesinin Fm-3m (#225) uzay grubundaki temsili kristal yapısı

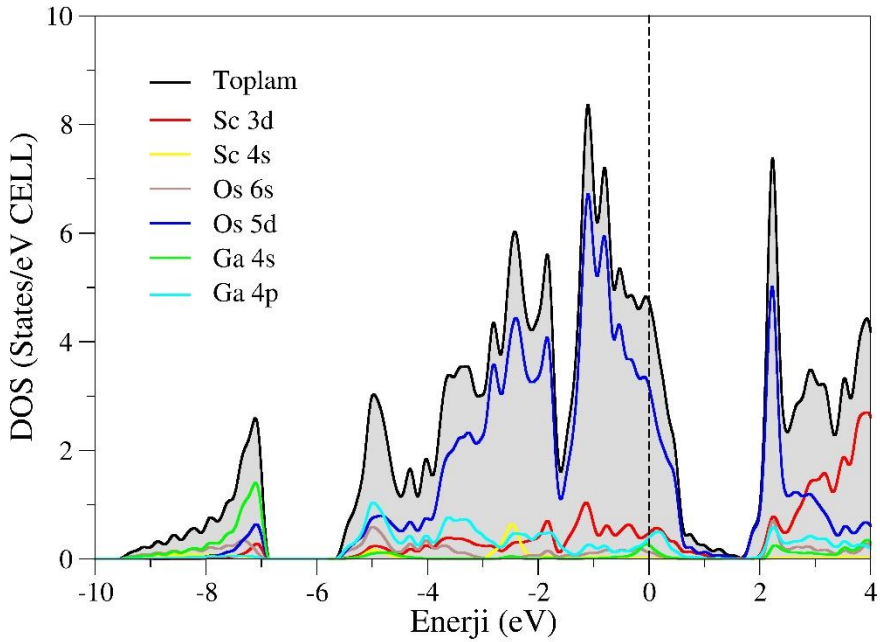
3.2. Elektronik Özellikler

Fm-3m uzay grubundaki ScOs_2Ga Heusler alaşımının optimizasyonu yapılan denge durumundaki örgüsü için elektronik özellikleri elde edildi. Elektronik özellikler kapsamında bu alaşımın tüm yüksek simetri yönelimlerine göre elektronik bant eğrileri çizilerek Şekil 2’de verildi. Ayrıca elektronik katkının daha iyi analiz edilebilmesi için toplam ve kısmi durum yoğunluklarını gösteren spektrumlar çizildi ve Şekil 3’te verildi. Şekil 2 ve Şekil 3’teki hesaplanan bant ve durum yoğunluklarındaki tüm enerji seviyelerinden Fermi enerjisi çıkartılarak Fermi enerji seviyesi 0 eV olarak ayarlandı ve kesikli çizgilerle gösterildi. Elektronik bant eğrileri incelendiğinde Fermi enerji seviyesinin altında kalan valans bantları ile Fermi enerji seviyesinin üstünde bulunda iletkenlik bantlarının iç içe geçtiği ve birbirlerini kestikleri açıkça görülmektedir. Bu alaşımın elektronik bantları arasında Fermi enerji seviyesi civarında herhangi bir yasak enerji aralığı bulunmamaktadır. Bundan dolayı, ScOs_2Ga Heusler alaşımının metalik karakterde olduğu söylenebilir.



Şekil 2: ScOs_2Ga Heusler alaşımının Fm-3m uzay grubundaki elektronik bant eğrileri

Elektronik katkının daha iyi analizi için elde edilerek çizilen toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri incelendiğinde toplam durum yoğunluğu eğrisinin Fermi enerji seviyesini kestiği ve yasak enerji aralığı bulunmadığı görülmektedir. İletkenliğe katkısı açısından Fermi enerji seviyesindeki en baskın elektronlar Os-5d orbitallerine ait elektronlardır. Daha sonrasında ise Sc-3d ve Ga-4p orbitallerine ait olan elektronlardır. Ayrıca -10 eV'den -6 eV'ye kadar sırasıyla Ga-4s, Os-5d, Os-6s ve Sc-3d elektronları hakimdir. -6 eV ve -4.5 eV arasında oluşan tepede en baskın durumdaki elektronlar Ga-4p elektronları iken -4.7 eV'dan sonraki enerji seviyeleri arttıkça Os-5d elektronları en baskın hale geçmiştir. Enerji seviyelerindeki artış iletkenlik seviyesine doğru devam ettikçe Sc-3d orbitaline ait elektronlar baskın hale geçtiği toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerinden görülmektedir.



Şekil 3: ScOs₂Ga Heusler alaşımının Fm-3m uzay grubundaki elektronik toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri

3.3. Elastik Özellikler

Elastik sabitler, malzemelerin dış kuvvetlere karşı dayanıklılığını ölçmek için Bulk, Kayma ve Young modüllerini içerir. Ayrıca, atom bağları,

mekanik kararlılık ve etkileşimler hakkında daha fazla bilgi edinmemize yardımcı olabilir. Bir kristal için 36 tane elastik sabiti (C_{ij}) vardır. Ancak kristalin sahip olduğu simetriden dolayı elastik sabitlerin sayısı düşer. Kübik yapıda kristalleşen Fm-3m uzay grubundaki ScOs₂Ga Heusler alaşımının simetriden dolayı birbirinden bağımsız C_{11} , C_{12} ve C_{44} olmak üzere ikinci mertebeden üç tane elastik sabiti bulunur. Yapısal ve mekanik kararlılık gibi önemli bilgiler içeren bu elastik sabitleri hesaplanarak elde edildi ve bu değerler Tablo 2’de verildi. Tablo 2’de verilen elastik sabitlerinin tümünün pozitif değer aldığı görülmektedir.

Tablo 2: Fm-3m uzay grubundaki ScOs₂Ga Heusler alaşımının elastik sabitleri (C_{ij} , GPa), ortalama ses hızı (v_m , m/s) ve Anizotropi Faktörü (A).

Malzeme	C_{11}	C_{12}	C_{44}	v_m	A
ScOs ₂ Ga	245.24	171.58	100.36	2479.895	2.725

Elastik sabitlerine bağlı olarak kristallerin mekanik kararlılıklarını değerlendirmek için kullanılan Born kararlılık kriteri (Born ve ark., 1955) kübik sistemler için Eş. 8’deki gibidir.

$$(C_{11} - C_{12}) > 0, \quad C_{11} > 0, \quad C_{44} > 0, \quad (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (8)$$

Tablo 2’deki elastik sabiti değerlerinin Eş. 8’e uyduğu görülmektedir. Buna dayanarak ScOs₂Ga Heusler alaşımının mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir. Malzeme mukavemeti, elastik sabitlerin değerleriyle ilişkilidir. Elastik sabitler, malzemenin farklı yönlerdeki gerilme ve deformasyonunu tanımlar. Örneğin, C_{11} elastik sabiti, malzemenin x eksenini boyunca tek yönlü sıkıştırmaya karşı gösterdiği direnci belirtir. Tablo 2’de verilen elastik sabit değerlerine bakıldığında, C_{11} değerinin C_{44} değerinden daha büyük olduğu görülür. Bu da ScOs₂Ga Heusler alaşımının kayma deformasyonundan daha fazla tek yönlü basınca dayanıklı olduğu anlamına gelir.

Tablo 3: Fm-3m uzay grubundaki ScOs₂Ga Heusler alaşımının Bulk modülü (B , GPa), Kayma modülü (G , GPa), Young modülü (E , GPa), B/G oranı Poisson oranı (σ) ve Debye Sıcaklığı (Θ_D , K).

Malzeme	B	G	E	B/G	σ	Θ_D
ScOs ₂ Ga	196.13	67.17	180.63	2.92	0.34	301.328

Elastik sabitlerinden hesaplanarak elde edilen Bulk modülü, Kayma modülü, Young modülü, B/G oranı ve Poisson oranı Tablo 3’de verildi. Pugh’un B/G oranı kriteri (Pugh, 1954) malzemelerin sünek veya kırılğan doğası hakkında bilgiler içerir. Pugh kriterine göre 1.75 sınır değeri olarak kabul edilir. Bu değerin üstündeki malzemeler sünek altındaki malzemeler ise kırılğan olarak kabul edilir. Buna göre B/G oranı 2.92 olan ScOs_2Ga Heusler alaşımı sünek bir doğaya sahiptir. Bulk modülü değerinin bu alaşım için 150 GPa değerinden büyük olması uniform basınç altında çok az sıkışabilir olduğu göstermektedir. Bununla birlikte Kayma modülünün 100 GPa altında olması makaslama kuvvetler arası sıkışabilirliğin daha yüksek olduğunu anlamına gelmektedir. Sertliğin bir ölçüsü olan Young modülü ise bu tür alaşımlar için beklenen değerlerdedir. Young modülü ne kadar büyükse malzeme o kadar serttir. Ayrıca hesaplanan bu polikristal özelliklerden yola çıkarak atomik bağlarla ilgili daha fazla bilgiye sahip olabilmek için Poisson oranı değerini incelemek gerekir. Poisson oranı kovalentliğin bir ölçüsü olarak da bilinir. Buna göre kovalent malzemeler için 0.1 civarında iyonik malzemeler için ise 0.25 civarındadır. Merkezi kuvvetler için ise alt ve üst limit değerleri 0.25 ile 0.50 arasındadır (Haines ve ark., 2001). Poisson oranı 0.34 olan bu malzemenin iyonik karakterinin baskın olduğu söylenebilir. Yine merkezi kuvvetler için olan sınır değerlerinin arasında olmasından ise bu alaşım için metalik bağlanma ise söz konusudur.

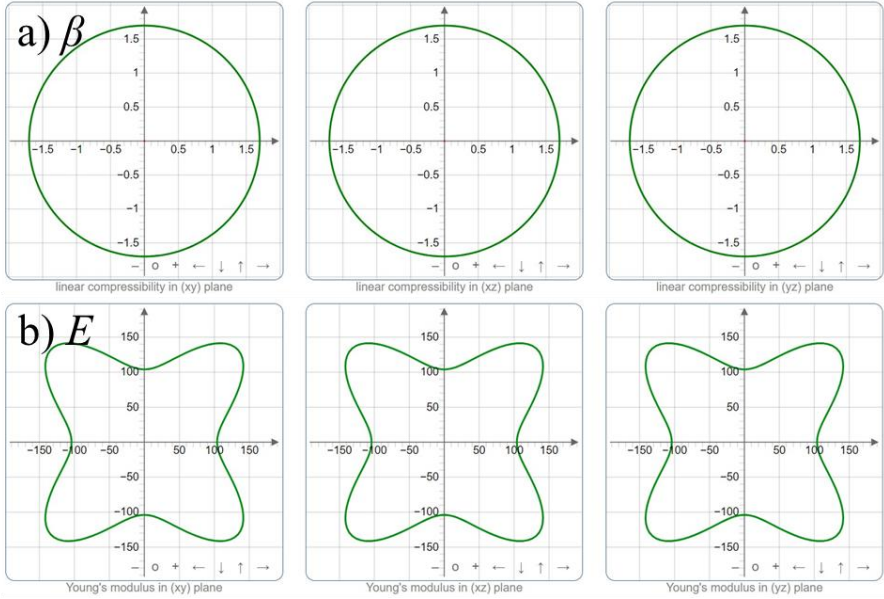
Malzemenin termodinamik, elastik ve dinamik özellikleri, ses hızlarını etkiler. Katı malzemeleri tanımlayan bir özellikte ses hızlarıdır. Örneğin, birim hücrede bir atom bulunan bir kristalin 3N serbestlik derecesi nedeniyle sadece üç akustik fonon modu vardır. Bununla birlikte, kristal içinde yayılan ses dalgalarının frekansı, akustik modlar tarafından üretilmektedir. Bu çalışmada, elastik sabitlerinden elde edilen ortalama ses hızı Tablo 2’de sunuldu. Ses dalgaları mekanik dalgalar olduğundan yayılmak için bir ortama ihtiyaç duyarlar. Ortam ne kadar yoğun ve sertse ses dalgaları da o kadar hızlı yayılır. Bu alaşım için elde edilen ortalama ses hızı 2479.895 m/s dir.

Elastik anizotropi ve çeşitli düzlemlerdeki anizotropik termal genleşme katsayıları, malzemelerin mikro çatlaklar gibi fiziksel özelliklerini etkiler. Özellikle yüksek teknoloji uygulamaları için çok önemlidir çünkü malzemenin dayanıklılığının tahmin edilmesine ve malzemenin farklı

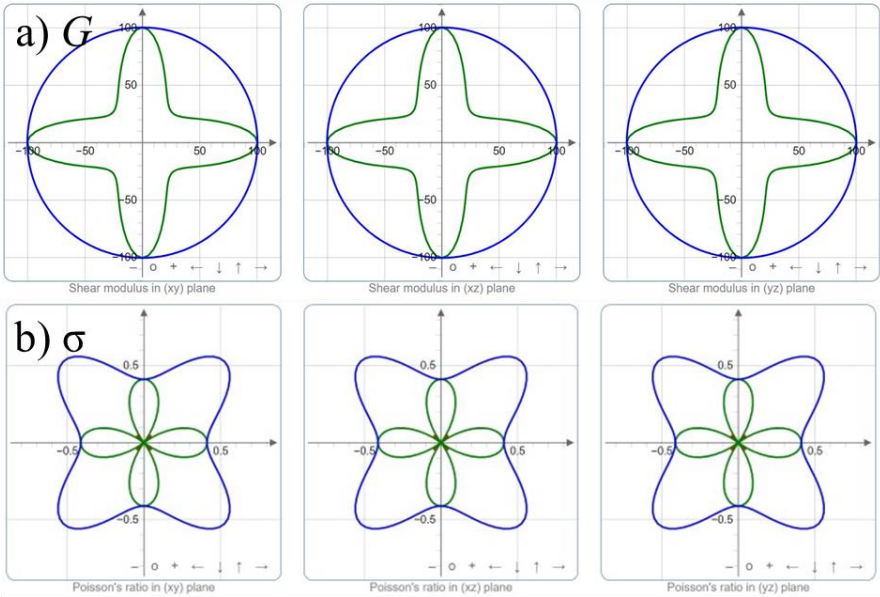
yönlerdeki yoğunluğunun ölçülmesine olanak tanır. Malzemenin anizotropi faktörü A' 'yı bulmak ve elastik anizotropiyi tahmin etmek için elastik sabiti değerleri kullanılır (Gaillac ve ark., 2016). Bu değer, tamamen izotropik bir malzeme için 1 dir ve 1'den farklı değerler için malzeme anizotropik olarak adlandırılır. Tablo 2'de görüldüğü gibi hesaplanan anizotropi faktörü 1'den farklıdır. Sonuç olarak, ScOs_2Ga Heusler alaşımı anizotropik bir davranış sergilemektedir. Bu alaşıma ait elastik modüllerinin yönlere göre değişiminin maksimum ve minimum değerleri Tablo 4'de verildi. Ayrıca, elastik modüllerin uzaysal bağımlılıkları Şekil 4 ve Şekil 5'de gösterildi.

Tablo 4. ScOs_2Ga Heusler alaşımı için yönelimlere bağlı olarak elastik modüllerin (GPa) değişimleri.

Malzeme	E		β		G	
	E_{\min}	E_{\max}	β_{\min}	β_{\max}	G_{\min}	G_{\max}
ScOs_2Ga	103.97	257.21	1.6995	1.6995	36.827	100.36



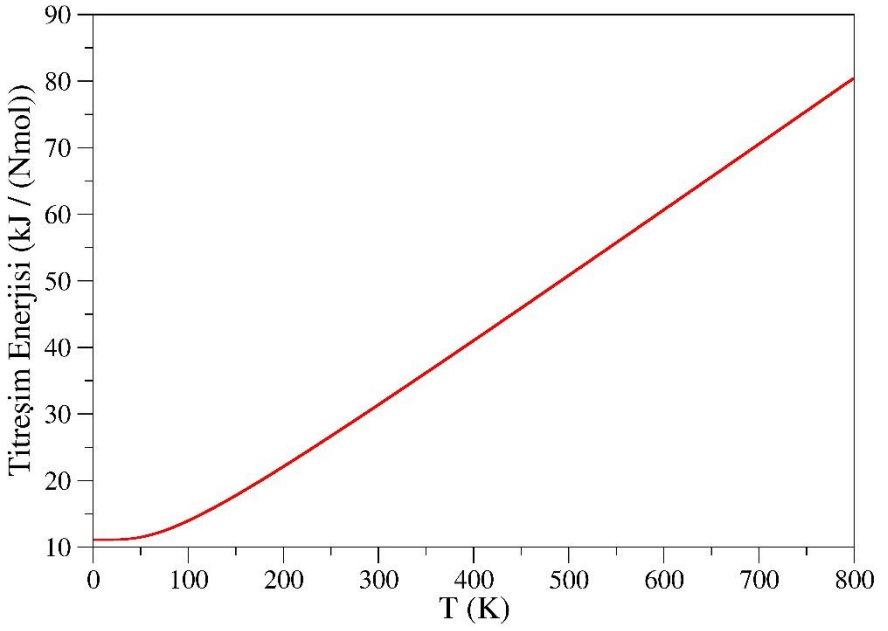
Şekil 4: ScOs_2Ga Heusler alaşımı için elastik modüllerin uzaysal bağımlılıkları. a) Lineer sıkışabilirlik, b) Young modülü.



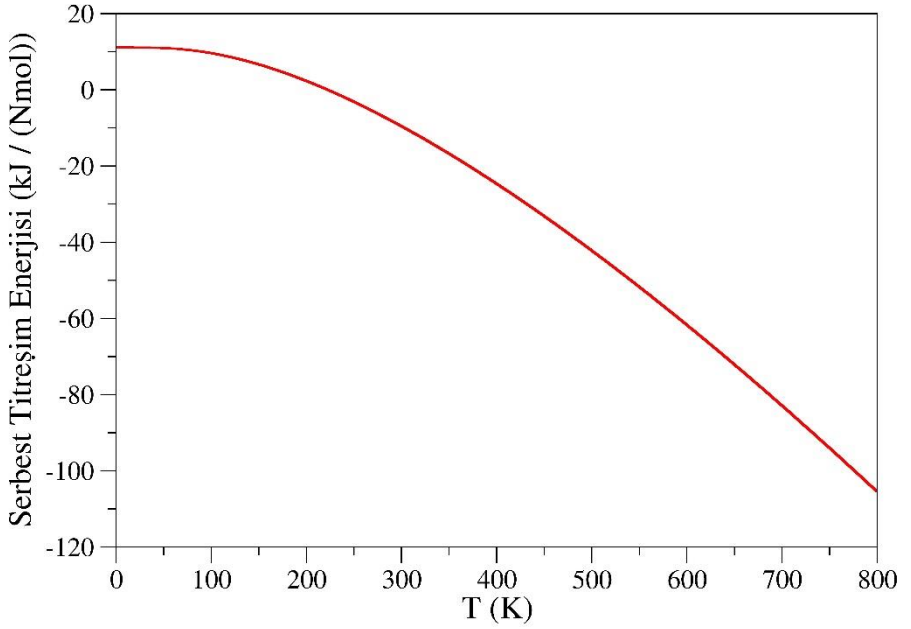
Şekil 5: ScOs₂Ga Heusler alaşımı için elastik modüllerin uzaysal bağımlılıkları. a) Kayma modülü, b) Poisson oranı.

3.4. Termodinamik Özellikler

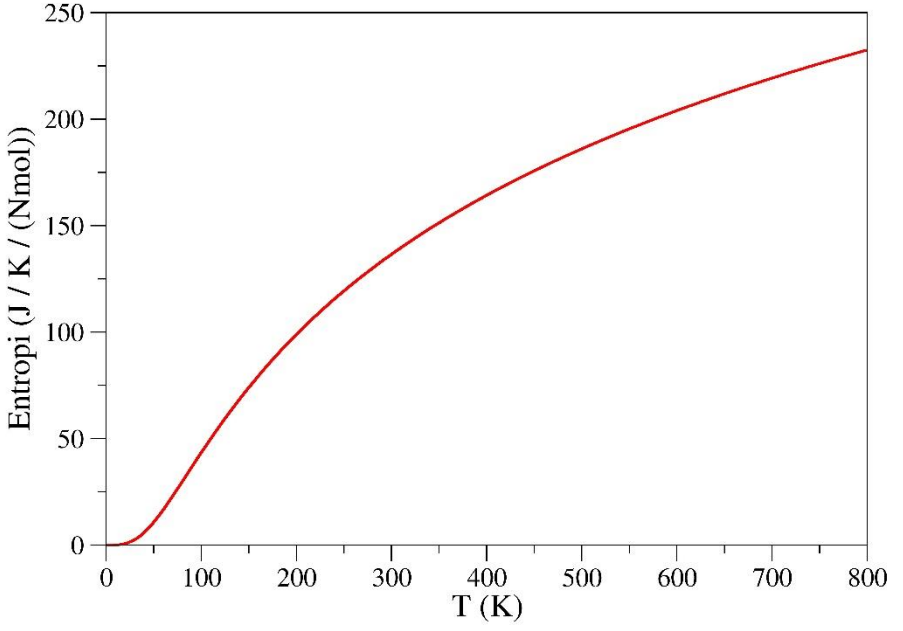
Debye sıcaklığı (Θ_D), katıların örgü titreşimlerinin belirlenmesindeki önemli bir parametredir. Ayrıca metallerde elektriksel direncin sıcaklığa bağımlılığıyla ilgili önemli rol oynamaktadır. ScOs₂Ga Heusler alaşımının termodinamik özellikleri kapsamında Debye sıcaklığı elde edildi. Elde edilen Debye sıcaklığı değeri Tablo 3'de verildi. Ayrıca, termodinamik özellikler kapsamında titreşim enerjisi, serbest titreşim enerjisi, entropi ve ısı sığasının sıcaklıkla 0K – 800K arasındaki değişimler elde edilerek sırasıyla; Şekil 6, Şekil 7, Şekil 8 ve Şekil 9'da verildi. Şekil 6 ve Şekil 7'den anlaşılacağı üzere sıcaklık arttıkça titreşim enerjisi artarken beklenildiği gibi serbest titreşim enerjisi düşmektedir. Yine Şekil 8'den sıcaklıkla birlikte düzensizliğin bir ifadesi olan entropinin arttığı görülmektedir. Isı sığası ise 0K – 30K arası düşük sıcaklıklarda yavaşça artarken 30K – 200K arasındaki sıcaklıklarda ise T^3 yasasına uygun bir şekilde hızla artmaktadır. Debye sıcaklığından sonra ki sıcaklık değerlerinde ise yüksek sıcaklıklara doğru Dulong-Petit limiti (Dulong ve Petit, 1819) olarak bilinen 3NR değerlerine yaklaşmakta olduğu Şekil 9'dan anlaşılmaktadır.



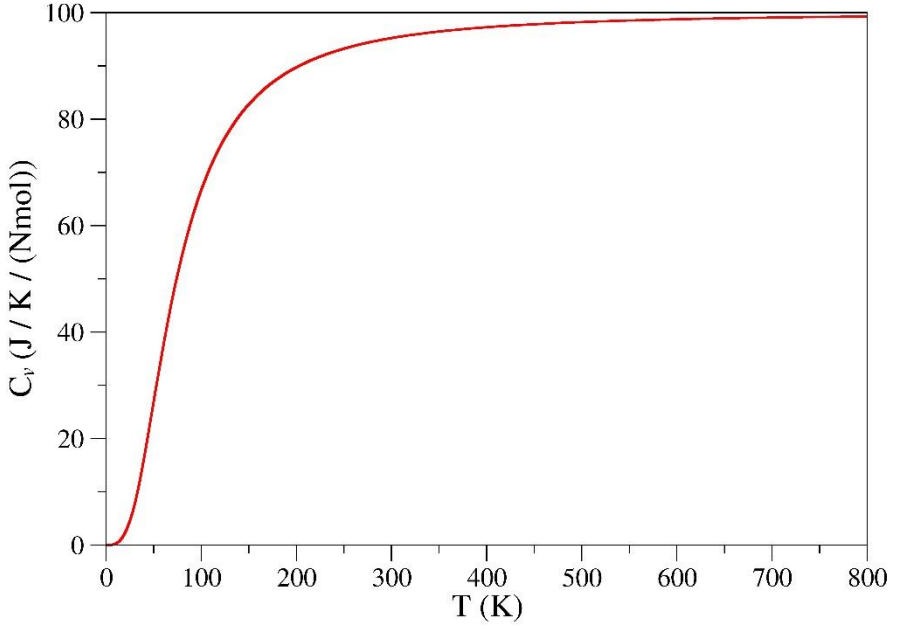
Şekil 6: ScOs₂Ga Heusler alaşımının titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 7: ScOs₂Ga Heusler alaşımının serbest titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 8: ScOs₂Ga Heusler alaşımının entropisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 9: ScOs₂Ga Heusler alaşımının ısı sığasının sıcaklıkla değişimi.

4. SONUÇLAR

ScOs₂Ga Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı genelleştirilmiş eğim yöntemi ile elde edildi ve bu çalışmada sunuldu. Yapısal özellikler kapsamında alaşımın örgü sabiti Fm-3m uzay grubunda 6.263 Å olarak bulundu. Elektronik özelliklerden metalik bir doğaya sahip olduğu raporlandı. Elastik özelliklerden mekanik olarak kararlı olduğu ve sünek bir doğaya sahip olduğu belirlendi. Termodinamik özellikler kapsamında ise 0K – 800K arasındaki sıcaklıkla değişimi incelendi. Ayrıca, bu çalışma ile ScOs₂Ga alaşımının Fm-3m uzay grubunda yer alan Heusler fazı ile literatüre birçok fiziksel özelliği sunulmuş oldu.

KAYNAKÇA

- Born, M., Huang, K., & Lax, M. (1955). Dynamical theory of crystal lattices. *American Journal of Physics*, 23(7), 474-474.
- Çanlı, M., İlhan, E., & Arıkan, N. (2021). First-principles calculations to investigate the structural, electronic, elastic, vibrational and thermodynamic properties of the full-Heusler alloys X₂ScGa (X= Ir and Rh). *Materials Today Communications*, 26, 101855.
- Dubrovinsky, L., Dubrovinskaia, N., Prakapenka, V. B., & Abakumov, A. M. (2012). Implementation of micro-ball nanodiamond anvils for high-pressure studies above 6 Mbar. *Nature communications*, 3(1), 1163.
- Dulong, P. L., & Petit, A. T. (1819). *Recherches sur quelques points importants de la theorie de la chaleur*.
- Engen, P.G.V., Buschow, K. H. J., Jongebreur, R., & Erman, M. (1983). PtMnSb, a material with very high magneto-optical Kerr effect. *Applied Physics Letters*, 42(2), 202-204.
- Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M. B., Calandra, M., ... & Baroni, S. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of physics: Condensed matter*, 29(46), 465901.
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502.
- Gaillac, R., Pullumbi, P., & Coudert, F. X. (2016). ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28(27), 275201.
- Gilleßen, M., & Dronskowski, R. (2009). A combinatorial study of full Heusler alloys by first-principles computational methods. *Journal of computational chemistry*, 30(8), 1290-1299.
- Haines, J., Leger, J. M., & Bocquillon, G. (2001). Synthesis and design of superhard materials. *Annual Review of Materials Research*, 31(1), 1-23.
- Heusler, F. (1903). Über magnetische manganlegierungen. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 5, 219.
- Kainuma, R., Imano, Y., Ito, W., Sutou, Y., Morito, H., Okamoto, S., ... & Ishida, K. (2006). Magnetic-field-induced shape recovery by reverse phase transformation. *Nature*, 439(7079), 957-960.
- Krenke, T., Duman, E., Acet, M., Wassermann, E. F., Moya, X., Mañosa, L., & Planes, A. (2005). Inverse magnetocaloric effect in ferromagnetic Ni-Mn-Sn alloys. *Nature materials*, 4(6), 450-454.

- McMahon, M. I., & Nelmes, R. J. (2006). High-pressure structures and phase transformations in elemental metals. *Chemical Society Reviews*, 35(10), 943-963.
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical review B*, 13(12), 5188.
- Perdew, J. P., & Wang, Y. (1992). Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical review B*, 45(23), 13244.
- Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367), 823-843.
- Reshak, A. H., Shalaginov, M. Y., Saeed, Y., Kityk, I. V., & Auluck, S. (2011). First-principles calculations of structural, elastic, electronic, and optical properties of perovskite-type KMgH₃ crystals: novel hydrogen storage material. *The Journal of Physical Chemistry B*, 115(12), 2836-2841.
- Sabine, W. (2007). Structural properties of the quaternary Heusler alloy Co₂Cr_{1-x}Fe_xAl. *J. Phys. D Appl. Phys*, 40(6).
- Smart, L. E., & Moore, E. A. (2012). *Solid state chemistry: an introduction*. CRC press.
- Tonkov, E. Y., & Ponyatovsky, E. G. (2018). *Phase transformations of elements under high pressure*. CRC press.
- Wang, W., Liu, E., Kodzuka, M., Sukegawa, H., Wojcik, M., Jedryka, E., ... & Hono, K. (2010). Coherent tunneling and giant tunneling magnetoresistance in Co₂FeAl/MgO/CoFe magnetic tunneling junctions. *Physical Review B*, 81(14), 140402.
- Yusenko, K. V., Bykova, E., Bykov, M., Gromilov, S. A., Kurnosov, A. V., Prescher, C., ... & Dubrovinsky, L. S. (2015). Compressibility of Ir–Os alloys under high pressure. *Journal of Alloys and Compounds*, 622, 155-161.

BÖLÜM 17

LENS CULİNARİS'İN TOHUMLARI VE MERİSTEMATİK HÜCRELERİNDE MANGANIN ETKİSİNİN İNCELENMESİ

Doç. Dr. Murat ÇANLI¹

Doç. Dr. Hakan SEPET²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385359>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mucur Meslek Yüksekokulu, Kimya ve Kimyasal İşleme Teknolojileri Bölümü, Kırşehir, Türkiye, 0000-0002-5275-861X, murat.canli@ahievran.edu.tr

² Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mühendislik-Mimarlık Fakültesi, Çevre Mühendisliği Bölümü, Kırşehir, Türkiye, 0000-0002-5841-9969, hakan.sepet@ahievran.edu.tr

GİRİŞ

Büyüyen insan nüfusu sonucu ortaya çıkan endüstriyel gelişmeler beraberinde metal kirliliğinin artan ölçülerden toprakta ve bitkilerde oluşmasına neden olmuştur (Yalçın ve Altay, 2023). Metal iyon-DNA etkileşimleri, bitkilerin dış etkilere karşı davranışları açısından sitogenetik çalışmalarının doğasını anlamak için hayati öneme sahiptir (Garlich ve ark., 2016; Oliveira ve ark., 2008; Özdemir ve ark., 2015; Saxena ve ark., 2009). Metallerle dayalı sanayilerin neden olduğu büyük miktardaki çevre kirliliği nedeniyle metallerin, özellikle de ağır metallerin sitogenetik etkileri halen araştırma çalışmalarının odağında yer almaktadır (Aksoy ve Deveci 2012; Özdemir ve ark., 2015; Pesnya, 2013; Sepet ve ark., 2014). Bitki sitogenetiği hala doğal ve insan faktörlerinin neden olduğu kromozomal değişiklikler yaşamaktaydı (Andronic, 2015; Gupta, 2006). Bitkiler metalleri topraktan alır ve yapraktan kök uçlarına kadar bitkinin her yerinde birikirler (Baranowska-Morek ve Wierzbicka, 2004; Maestri ve ark., 2010; Sepet ve ark., 2014).

DNA, metal iyonlarını bağlamak için fosfat oksijen atomları, riboz hidroksiller, baz halkası nitrojenleri ve siklik baz keto grupları gibi dört potansiyel bölgeye sahiptir (Oliveira ve ark., 2008). Bhardwaj ve ark. (2022), geçiş metalleri sıklıkla dolaylı olarak fosfat gruplarına ve doğrudan yukarıda bahsedilen DNA'daki bazlara olmak üzere ikiden fazla farklı bölgeyi kullanır. Metal iyonları ile DNA arasındaki bağlantı, metal iyonlarını çevreleyen koordine edici su moleküllerinin hidrojen bağlanması yoluyla kurulur. Bazlara metal bağlanması genellikle baz çiftindeki hidrojen bağının kopmasına neden olur ve DNA yapısının çift sarmalını zayıflatır ve şeker konformasyonunu dolaylı olarak etkiler (Bhardwaj ve ark., 2022).

Metaller, konsantrasyonları belirli bir noktaya ulaşana kadar büyüme üzerinde olumlu etkiye sahiptir (Bhat ve ark., 2012; Çanlı, 2018; Tangahu vd., 2011) ve ayrıca bitki içindeki kromozomların yapısını da değiştirmektedir (Çanlı, 2018; Liehr ve ark., 2009; Özdemir ve diğerleri, 2015). Çeşitli kaynaklarda kromozomlardaki altı tür değişiklik; köprüler, C-mitoz, fragmanlar, gecikmeler, çok kutupluluk ve yapışkanlık olarak adlandırılmıştır (Kuchy ve diğerleri, 2016; Özkul ve diğerleri, 2016). Ayrıca, Zahan ve Begum (2023) anormallikleri kromozom ayrımı, sitokinez yokluğu, sitomiksis, hücre füzyonu, düzensiz hücre şekli, kromozom köprüleri ve genomik ayrılma

olarak tanımladılar. Ayrıca kromozomlardaki değişikliklere ilişkin olarak köprü kromozomu, kromozomal yapışma, kromozom kırılması, kromozom dağılımları, kromozom küçülmesi, balık kılçığı, halka kromozomu gibi şekillerine göre yapılan bir sınıflandırma daha bulunmaktadır (Tablo 1, Şekil 1). Abdelsalam ve ark. (2018) bu anormallikleri metafazda yanlış yönelim, kromozomal kırılma, metafazik plaka distorsiyonu, iç disfonksiyonu, yapışkanlık, metafazda anormal hareket, parçalanma, saçılma, eşit olmayan ayrılma, saçılma, kromozomal boşluklar, çok kutuplu anafaz, erozyon ve dağıtılmış ve gecikmeli kromozomlar olarak sınıflandırmıştır.

Metallerin sitogenetik etkisi son araştırma çalışmalarının odağında kalmaya devam edecek gibi görünmektedir (Çanlı, 2018; Janas ve diğerleri, 2010; Kıran ve Şahin, 2005; Özdemir ve diğerleri, 2015; Sepet ve diğerleri, 2014).

Mangan (Mn) yeraltı ve yerüstü sularında bazı aylarda yüksek seviyelerde bulunması nedeniyle suyun kalitesini bozmaktadır (Tezcan ve Tezcan, 2007). Mn in sularında 0,05mg/L den yüksek olması istenmez. Mn hakkındaki bazı araştırmalarda tohum büyümesi gelişmesi ve çoğalması üzerine olumlu etkileri görülmüştür (Hajmoradi ve Taleb Beydokhti, 2019; Mittal ve ark., 2018). Bir diğer çalışmada buğday üzerinde Mn emiliminin büyümeye katkısına pozitif yönde katkı yaptığı görülmüştür (Abbas ve ark., 2011). Mn eksikliğinin eksiklik indeksine göre 0 ile 1 arası değerlendirmede 0,66 değerine kadar tolerans gösterdiği ortaya konmuştur (Barman ve ark., 2017). Bitkilerin hücre duvarında kalınlaştırma ve dayanıklılığı arttırmaya Mn kullanımının etkisi olduğunu Humpries ve ark. (2016) bulmuşlardır. Seregin ve Kozhevnikova (2005) ve Kudo ve ark. (2015) metallerin mısır tohumlarının çimlenmesini şu sırayla engellediğini bulmuşlardır: Mg > Cd > Ni ≈ Pb > Mn. Fernando ve Lynch (2015) fitotoksik etki açısından Mn'ı incelemişlerdir. Bitkilerde metal kirliliğinin mekanizması hakkında daha önce yapılan araştırmalar Mn'nin bitkilere kolayca geçebildiğini göstermiştir (Çelik ve ark., 2004; Lemtiri ve diğerleri, 2016; Manzatu ve diğerleri, 2015).

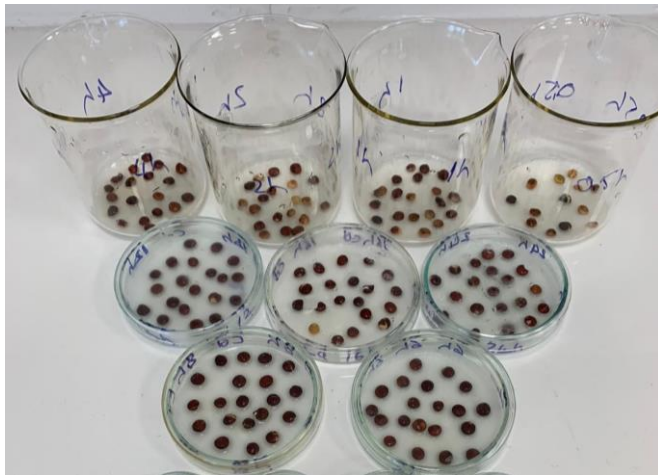
Mercimek, büyüme sürecinde ve vücudun her yerinde metal toksisitesi gösterebilmesi nedeniyle tercih edilmektedir (Talukdar, 2013). Talukdar (2013), bitkideki arsenik (As) birikimini anlamak için mercimeği kullanmıştır ancak çalışması yalnızca bitkinin katı sodyum arsenatla maruz bırakılmasına

odaklanmıştır. Sonunda, Mercimek'in sekiz genotipinde farklı porsiyonlarda birikmenin gerçekleştiğini buldu. Janas ve ark. (2010) mercimek vakuollerinde ve kök hücre duvarlarında bakır iyonlarının birikiminin meydana geldiğini belirtmişlerdir. Çanlı (2018), *Lens culinaris*'te baryum (Ba) ve vanadyum (V) iyonlarının neden olduğu sapmanın belirlenmesine odaklanmıştır. *Lens culinaris* ile ilgili çeşitli çalışmalar olmasına rağmen (Sepet ve ark, 2014; Talukdar, 2013), Mn'nin *Lens culinaris*'teki kromozomal değişim üzerindeki etkisini anlamaya yönelik herhangi bir çalışma bulunmamaktadır. Ayrıca hiçbir bitkinin tohumunda ppm'in üzerindeki metal konsantrasyonları da tespit edilmeye çalışılmamıştır.

Bu çalışmada, *Lens culinaris*'e farklı zaman dilimlerinde Mn maruziyeti sonucunda bitkinin kök ucu hücrelerini nasıl etkilediği araştırılmıştır. Mn'in hücre bölünmesi ve kromozomal anormallikler üzerindeki etkisini ve Mn'in DNA ile kimyasal olarak nasıl reaksiyona girdiğini anlamak bu çalışmanın ana hedefleriydi.

HESAPLAMA YÖNTEMİ

Araştırmada Mn'nin etkilerini görebilmek için 14 (2n) kromozomlu mercimek tohumları tercih edildi. Mercimek fidelerinin kök uçlarına yerleştirilen meristematik hücreler, bitki sitogenetiğinde (Singh, 2003) anlatıldığı gibi mikroskopik kromozom incelemesi için hazırlanır.



Şekil 1. LaZrO₃ bileşiğinin kristal yapısı

Tohumlar sağlam, dolgun ve eşit büyüklükte olmalarına göre seçilmiştir. Tohum kontaminasyonunu önlemek amacıyla %10'luk sodyum hipoklorit içerisinde 10 dakika bekletilmiştir (Sepet ve ark., 2014). Aşırı hipokloritin uzaklaştırılması için tohumlara birkaç kez (5 kez) distile su uygulanmış ve daha sonra tohumlar 25°C'de filtre kağıtları üzerinde kurutulmuştur. Zaman parametresi için 1.0 mol L⁻¹(M) Mn standart çözeltisi oda sıcaklığında bir beher içindeki tohumlara maruz bırakıldı. Tohumlar 1/2, 1, 2, 4, 6, 8, 12, 16, ve 24 saatlik süreyle kontrol amaçlı Mn standartlarında tutuldu. Daha sonra tohumların üzerinde kalan metal solüsyonu uzaklaştırmak için distile su kullanıldı ve 20–25 °C'de petri kaplarında çimlendirildi. Fiksasyon için kök uçları 1,5-2 cm ucundan kesilerek fiksatif etil alkol-glasiyel asetik asit solüsyonunda (3:1 oranında) bırakılır. Stok kök uçları Feulgen yöntemiyle (Bozdağ ve ark., 2023) boyanarak daha detaylı incelemeye hazır hale getirildi. Hücre anomalilerinin mikroskopik tespitinde homolog alanlar tercih edildi. Mitotik hücre sayısı belirlendi. Hücrelerde kromozomal anormalliklerin varlığı ve sıklığı tespit edildi. Preparatların fotoğraflanması için motorlu taramalı Leica DM 3000 mikroskop kullanıldı.

Her uygulama için toplam 400 hücre sayıldıktan sonra, aşağıdaki denklemle mitotik indeks (MI) elde edildi (Prates ve diğerleri, 2000):

$$MI = (m/T) \times 100$$

Burada: m = mitoz bölünen hücre sayısı; and T = toplam hücre sayısı.

BULGULAR

Bitkilerde hücresel anormallikler kendiliğinden veya bir metale fiziksel maruz kalmanın bir sonucu olarak ortaya çıkabilir (Hemachandra ve Pathiratne, 2015). DNA kırılmaları, DNA sentezinin inhibisyonu ve yapıdaki veya DNA kromozomlarının toplam sayısındaki değişen DNA replikasyonu gibi anormalliklerle karakterize edilirler (Morais-Leme ve Marin-Morales,2009; Restrepo ve ark., 2012; Russel, 2002).

Tablo 1. Lens culinaris'in Farklı Zaman Periyodundaki Kök Ucu Hücrelerinin Mitotik İndeksi ve Mn maruziyetinden sonra etkilenen ve etkilenmeyen hücrelerin yüzdeleri

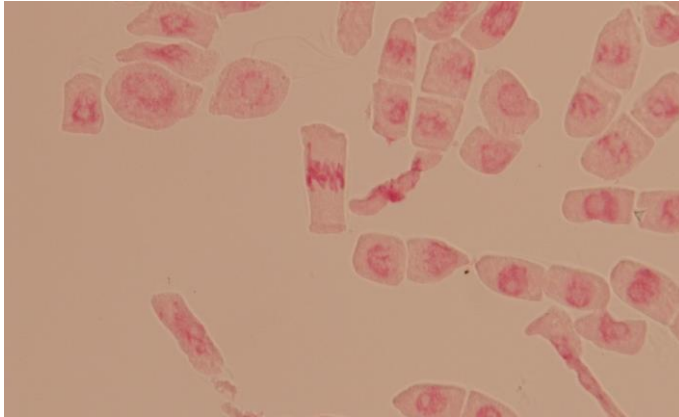
Süre (Saat)	Mitotik İndeks ± *S.D.	Çimlenmiş tohumlar (%)
1/2	16±4.75	80
1	12±5.10	60
2	11±3.82	55
4	11±4.14	55
6	10±3.43	50
8	10±1.94	50
12	Oluşmadı	
16	Oluşmadı	
24	Oluşmadı	
Kontrol	20±3.35	

Grup

*S.D. = Standart Sapma

Zaman değişkenine göre değerlendirme

Tablo 1, bitki hücrelerindeki mitoz derecesini gösteren mitotik indeksi (MI) temsil etmektedir. ½ ve 1 saatlik maruz kalma için MI bir düşüş gösterirken 2-8 saat arası uygulamalar benzer sonuçlar vermiştir (sırasıyla 11 ve 10). 12 saatten sonra herhangi bir çimlenme gözlenmemiştir. Fidelerde mitotik hücre bölünmesinin artmasında farklı zaman periyotlarında Mn standart solüsyon uygulaması ortaya çıkmıştır. ½-8 saat arasında mitotik hücre bölünmesinin derecesi azaldı. 8 saatlik maruz kalma sonrasında herhangi bir fide gözlenmedi. Kontrol grubu, her uygulama döneminde fidelerde daha fazla mitotik hücre bölünmesi gösterdi.

**Şekil 2.** Görülen bazı anomali şekilleri

Hücre bölünmesinin yanı sıra Mn uygulamasından sonra hücrelerde çeşitli anormallikler de tespit edildi (Şekil 2). 1/2 saatte kromozom dağılımı, köprü kromozomu ve balık kılıçığı gözlemlendi. 1 saatlik temas süresi boyunca balık kılıçığı, köprü kromozomu ve kromozom dispersiyonu kaydedilirken, 2 saatlik uygulamada at kromozom dispersiyonu ve at köprü kromozom anormalliği tespit edildi. 4 saatlik uygulama sonucunda balık kılıçığı ve halka kromozomunda anormallik ortaya çıktı. 8 saatlik uygulama sonunda balık kılıçığı, kromozom dağılımı, kromozom kırılması ve halka kromozomu oluştu. En sık görülen anormallik olarak kromozom dispersiyonu tespit edildi. Tüm uygulama süreleri boyunca kromozom yapışması, kromozom dağılımı ve köprü kromozomu gözlemlendi. Kromozom dağılımlarının sayısı 4 saatlik uygulamada en yüksekti. 2 saat hariç tüm uygulama periyotlarında kromozom kırılması tespit edildi. Balık kılıçığı ve kromozom yapışması 1 saatlik uygulamada en yüksek düzeyde belirlendi. 2. ve 4. saatlerde en yüksek sayıda kromozom yapışması gözlemlendi. Köprü kromozomu 1, 2 ve 4 saatlik uygulamada yüksek düzeyde belirlendi. Uygulamanın 4. saatinde kromozom kırılmasının yüksek düzeyde olduğu ve 4. saate kadar anormalliğin azaldığı görüldü. Halka kromozomu 2 ve 8 saatlik uygulamada gözlemlendi. Tüm uygulama sürelerinde kromozom küçülmesi görüldü. Maruz kalma süresinin arttırılmasıyla çimlenme oranı düştü (%80'den %50'ye).

DNA'daki baz ve şeker bağlanarak nükleozid molekülünü oluşturur. Baz ile şeker arasında glikozit bağı kurulur. Fosfodiester veya monosakkaritlerin arasındaki bağların kopmasıyla sakkaritler veya monofosfata bağlı esterler arasındaki bağların oluştuğu, DNA'da kromozomal değişiklikler ve anormalliklerin olduğu gözlenir. Bazlar arasındaki hidrojen bağları DNA yapısını bir arada tutar. O-bağlı monoglikozidlerin metal kompleksleri CAD üzerine neredeyse tamamen şeker kalıntılarını (glikoz veya ramnoz) kaybederken, C-bağlı monoglikozidlerin metal kompleksleri dehidrasyonla birlikte yoğun çapraz halka bölünmelerine maruz kalma eğilimindedir (Zhang ve ark., 2004).

SONUÇ

DNA'daki metal iyonları ile baz ve şeker arasındaki kimyasal bağlanma, yeni moleküllerin oluşmasına neden olmuş ve bu da bitkinin DNA

dizisinde çeşitli anormalliklerin ortaya çıkmasına neden olmuştur. Benzer bir çalışmada Oliveira ve ark. (2008), Pb iyonlarının özellikle DNA'nın adenin içeren bölümleriyle etkileşime girdiğini ve bunun oksidatif etkilerle sonuçlandığını bulmuşlardır. Şeker konformasyonunda önemli olan nükleik asitlerin konformasyonu, metal iyonunun DNA'da nasıl hareket ettiğine bağlıdır (Bhardwaj ve ark., 2022). Metal iyonları, metali bazlara bağlayarak baz çifti hidrojen bağıyı bozmanın ve çift sarmalı dengesizleştirmenin yanı sıra, aşırı negatif yüklü fosfat gruplarını da nötralize edebilir ve sarmalın stabilizasyonuna neden olabilir. Tüm bu değişiklikler bitkilerin DNA'sında farklı anormalliklerin oluşmasını etkiler.

KAYNAKÇA

- Abbas, G., Khan, M. Q., Khan, M. J., Tahir, M., Ishaque, M., & Hussain, F. (2011). Nutrient uptake, growth and yield of wheat (*Triticum aestivum* L.) as affected by manganese application. *Pakistan Journal of Botany*, 43(1), 607-616.
- Abdelsalam N. R., Abdel-Megeed A., Ali H.M., Salem M.Z.M., Al-Hayali M.F.A., Elshikh, M.S. (2018). Genotoxicity effects of silver nanoparticles on wheat (*Triticum aestivum* L.) root tip cells. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. **155**: 76-85.
- Aksoy Ö., Deveci A. (2012). The Investigation of the Cytotoxic Effects of Some Pesticides on Soybean (*Glycine max* L.) *Cytologia* **77**(4): 475–483
- Andronic, L. (2012). Viruses as triggers of DNA rearrangements in host plants. *Can. J. Plant Sci.* **92**: 1083-1091.
- Barman, A., Pandey, R. N., Singh, B., & Das, B. (2017). Manganese deficiency in wheat genotypes: Physiological responses and manganese deficiency tolerance index. *Journal of Plant Nutrition*, 40(19), 2691-2708.
- Bhardwaj, V., Salunke, P. S., Puranik, A. A., Kulkarni, N. D., & Ballabh, A. (2022). Design and synthesis of novel heterocyclic pivalamide ligands and their copper (II) complexes: Structure, BSA/DNA interactions and SOD synzyme activity. *Polyhedron*, 225, 116054.
- Bhat, S. A., Bashir, O., Haq, S. A. U., Amin, T., Rafiq, A., Ali, M., Americo-Pinheiro, J.H.P., & Sher, F. (2022). Phytoremediation of heavy metals in soil and water: An eco-friendly, sustainable and multidisciplinary approach. *Chemosphere*, 303, 134788.
- Bozdağ, B., Özdemir, C., Özdemir, A., Vural, Y., & Vural, S. (2023). Bakla (*Vicia faba* L.) Kök Ucu Hücrelerinde Nonilfenolün Sitogenetik Etkilerinin İncelenmesi. *Journal of New Results in Engineering and Natural Sciences*, 2023(18), 40-52.
- Çanlı M. (2018). A new perspective to aberrations caused by barium and vanadium ions on *Lens culinaris* Medik, *Ecotoxicology and Environmental Safety*. **160**: 19–23.
- Çelik, M., Aksoy, H., & Yılmaz, S. (2010). Evaluation of beauvericin genotoxicity with the chromosomal aberrations, sister-chromatid exchanges and micronucleus assays. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 73(7), 1553-1557.
- Çelik A., Kartal A., Akdoğan A., Kaska Y. (2005). Determining the heavy metal pollution in Denizli (Turkey) by using *Robinio pseudo-acacia* L., *Environmental International*. **31**(1): 105-112.

- Fernando, D.R., Lynch, J.P. (2015). Manganese phytotoxicity: new light on an old problem, *Annals of Botany*, 116(3), 313–319.
- Garlich N., Cruz C., Silva A.F., Malaspina I.C., Ferreira R.G., Tedesque M.G., Pitelli R.A., Bianco S. (2016). Effectiveness of Diquat, Copper Hydroxide, Copper Oxychloride and their Association in Control of Submerged Macrophytes *Ceratophyllum demersum*, *Planta Daninha*. 34(1): 117-123.
- Gupta P.K. (2006). Plant cytogenetics: A re-birth in twenty-first century. *Indian Journal of Crop Science*, 1(1-12): 1-7.
- Hajmoradi, F., & Taleb Beydokhti, A. (2019). Effect of heavy metals on meiosis cell division in *Stachys inflata* Benth. *Caspian Journal of Environmental Sciences*, 17(4), 363-373.
- Hemachandra C., Pathiratne A. (2015). Assessing toxicity of copper, cadmium and chromium levels relevant to discharge limits of industrial effluents into inland surface waters using common onion, *Allium cepa* bioassay *Contam. Toxicol.*, 94 (2): 199-203.
- Humphries, J. M., Stangoulis, J. C., & Graham, R. D. (2016). Manganese. In *Handbook of plant nutrition* (pp. 367-390). CRC Press.
- Janas K.M., Zielińska-Tomaszewska J., Rybaczek D., Maszewski J., Posmyk M.M., Amarowicz R., Kosińska A. (2010). The impact of copper ions on growth, lipid peroxidation, and phenolic compound accumulation and localization in lentil (*Lens culinaris* Medik.) seedlings. *J Plant Physiol*. 167(4): 270-276.
- Kıran Y., Şahin A. (2005). The effects of the lead on the seed germination, root growth and root tip cell mitotic divisions of *Lens culinaris* medik. *Gazi University Journal of Science*. 18 (1):17–25.
- Kozhevnikova A. D., Seregin I. V., Bystrova E. I., Belyaeva A. I., Kataeva M. N., Ivanov V. B. (2009). The Effects of Lead, Nickel, and Strontium Nitrates on Cell Division and Elongation in Maize Roots. *Russian Journal of Plant Physiology*. 56 (2): 242–250.
- Kudo, H., Kudo, K., Uemura, M., and Kawai, S. (2015). Magnesium inhibits cadmium translocation from roots to shoots, rather than the uptake from roots, in barley. *Botany*. 93: 345–351.
- Lemtiri, A., Lienard, A., Alabi, T., Brostaux, Y., Cluzeau, D., Francis, F., and Colinet, G. (2016). Earthworms *Eisenia fetida* affect the uptake of heavy metals by plants *Vicia faba* and *Zea mays* in metal-contaminated soils. *Applied Soil Ecology*. 104: 67–78.
- Liehr, T., Ewers, E., Kosyakova, N., Klaschka, V., Rietz, F., Wagner, R., & Weise, A. (2009). Handling small supernumerary marker chromosomes in prenatal diagnostics. *Expert review of molecular diagnostics*, 9(4), 317-324.

- MacMillan, J.P., Park, J.W., Gerstenberg, R., Wagner, H., Köhler K., and Wallbrecht P. (2005). Strontium and strontium compounds, in Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry (7th ed.): Weinheim, Germany, VCH Verlagsgesellschaft mbH, A25, p321–327.
- Manzatu C., Nagy B., Ceccarini A., Iannelli R., Giannarelli S., Majdik C. (2015). Laboratory tests for the phytoextraction of heavy metals from polluted harbor sediments using aquatic plants. *Marine Pollution Bulletin*. **101**: 605–611.
- Marin A.R., Masscheleyn P.H., Patrick W.H. Jr. (1992). The Influence of Chemical Form and Concentration of arsenic on rice growth and tissue arsenic concentration. *Plant and Soil*. **139**: 175-183
- Mittal, A., Chhibber, S., & Madan, Z. (2018). The effect of manganese on antioxidant enzymes activity on the wheat seedling. *Int J Pharm Biol Sci*, 8(1), 92-98.
- Movahhedy-Dehnavy, M., Modarres-Sanavy, S. A. M., & Mokhtassi-Bidgoli, A. (2009). Foliar application of zinc and manganese improves seed yield and quality of safflower (*Carthamus tinctorius* L.) grown under water deficit stress. *Industrial Crops and Products*, 30(1), 82-92.
- Morais-Leme D., Marin-Morales M. (2009). *Allium cepa* test in environmental monitoring: a review on its application *Mutat. Res.*, **682**: 71-81.
- Oliveira S.C.B., Corduneau O., Oliveira-Brett A.M. (2008). In situ evaluation of heavy metal-DNA interactions using an electrochemical DNA biosensor. *Bioelectrochemistry*. **72**: 53-58.
- Özdemir A., Bozdağ B., Sepet H., Parlak Y., Kocabaş O., Ereeş F.S., Özdemir C. (2015). Cytogenetic effects of ⁹⁹technetium on meristematic cells of root tips of *Vicia faba* L. and statistical comparison. *Caryologia*. **68** (3): 200–206.
- Pesnya D.S. (2013). Cytogenetic effects of chitosan-capped silver nanoparticles in the *Allium cepa* test, *Caryologia*. **66** (3): 275-281.
- Prates H.T., Paes J.M.V., Pires N.D.M., Filho I.A.P., Magalhaes P.C. (2000). Efeito do extrato aquoso de leucena na germinação e no desenvolvimento do milho. *Pesq Agropec Bras*. **35**(5): 909-914.
- Restrepo R., Reyes D., Ortiz M.C., Ruiz F.A.R., Kouznetsov V. (2012). Aberraciones cromosomales en bulbos de cebolla *Allium cepa* inducidas por moléculas híbridas 4-aminoquinólicas *Univ. Sci.*, **17**(3): 253-261.
- Russel P. (2002). Chromosomal mutation B. Cummings, Genetics, Pearson Education Inc, San Francisco.
- Salazar-Mercado, S. A., Torres-León, C. A., & Rojas-Suárez, J. P. (2019). Cytotoxic evaluation of sodium hypochlorite, using *Pisum sativum* L as

- effective bioindicator. *Ecotoxicology and environmental safety*, 173, 71-76.
- Saxena P.N., Murthy R.C., Gupta S.K. (2009). Evaluation of cytogenetic effects of deltamethrin in root meristem cells of *Allium sativum* and *Allium cepa*: A possible mechanism of chromosome damage, *Toxicological & Environmental Chemistry*. **91**(3): 577-594.
- Sepet H., Çanlı M., Özdemir A., Bozdağ B., Özdemir C. (2014). Cytogenetic effects of ⁴⁸Titanium (⁴⁸Ti) on meristematic cells of root tips of *Lens culinaris* Medik, *Pakistan Journal of Botany*. **46**(1): 101-110.
- Silva Jr. A.C., Gonçaves C.G., Scarano M.C., Pereira M.R.R., Martins D. (2018). Effect of Glyphosate on Guineagrass Submitted to Different Soil Water Potential *Planta Daninha*. **36**: 1-12.
- Singh R.J. (2003). *Plant Cytogenetics* (2nd Ed.). CRC Press: Boca Raton, FL, USA.
- Smical A.I., Hotea V., Oros V., Juhasz J., Pop E. (2008). Studies on Transfer And Bioaccumulation Of Heavy Metals From Soil Into Lettuce, *Environmental Engineering and Management Journal*. **7**(5): 609-615.
- Sözen, E., Yılmaz, M., Çolak, G., & Yücel, E. (2010). Alkali metal tuzları NaCl, KNO₃, kuvvetli asit H₂SO₄ ve bazı ağır metallerin CuCl₂, FeCl₃, MgCl₂ ve ZnCl₂ nohut Cicer arietinum tohumlarının çimlenmesi üzerine ekotoksikolojik etkileri. *Biyolojik Çeşitlilik ve Koruma*, 3(3), 64-71.
- Talukdar D. (2013). Bioaccumulation and transport of arsenic in different genotypes of lentil (*Lens culinaris* Medik.). *International Journal of Pharma and Bio Sciences*. **4**(1): 694–701.
- Tangahu, B. V., Sheikh Abdullah, S. R., BaMni, H., Idris, M., Anuar, N., & Mukhlisin, M. (2011). A review on heavy metals (As, Pb, and Hg) uptake by plants through phytoremediation. *International journal of chemical engineering*, 2011, 1-31.
- Yalcin, I. E., & Altay, V. (2023). Investigation of water-soil-plant relationships based on hazardous and macro-micro element concentrations on Orontes River, Türkiye. *International Journal of Phytoremediation*, 1-22.
- Zahan, N., & Begum, K. N. (2023). Meiotic behavior of B chromosome in two species of *Trigonella* L. from Bangladesh. *CYTOLOGIA*, 88(3), 217-223.
- Zhang J., Brodbelt J.S., Wand J. (2005). Threshold Dissociation and Molecular Modeling of Transition Metal Complexes of Flavonoids. *J Am Soc Mass Spectrom*. **16**: 139–151.

BÖLÜM 18

TRİTİCUM AESTIVUM'UN TOHUMLARI VE MERİSTEMATİK HÜCRELERİNDE MANGANIN BİYOLOJİK OLARAK DEĞERLENDİRİLMESİ

Doç. Dr. Hakan SEPET¹

Doç. Dr. Murat ÇANLI²

DOI: <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.10385404>

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mühendislik-Mimarlık Fakültesi, Çevre Mühendisliği Bölümü, Kırşehir, Türkiye, 0000-0002-5841-9969, hakan.sepet@ahievran.edu.tr

² Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mucur Meslek Yüksekokulu, Kimya ve Kimyasal İşleme Teknolojileri Bölümü, Kırşehir, Türkiye, 0000-0002-5275-861X, murat.canli@ahievran.edu.tr

GİRİŞ

Metal iyon-DNA etkileşimleri, bitkilerin dış etkilere karşı davranışları açısından sitogenetik çalışmalarının doğasını anlamak için hayati öneme sahiptir (Garlich ve ark., 2016; Oliveira ve ark., 2008; Özdemir ve ark., 2015; Saxena ve ark., 2009; Tangahu ve ark., 2011). Metallere dayalı sanayilerin neden olduğu büyük miktardaki çevre kirliliği nedeniyle metallerin, özellikle de ağır metallerin sitogenetik etkileri halen araştırma çalışmalarının odağında yer almaktadır (Aksoy ve Deveci 2012; Özdemir ve ark., 2015; Pesnya, 2013; Sepet ve ark., 2014). Bitki sitogenetiği hala doğal ve insan faktörlerinin neden olduğu kromozomal değişiklikler yaşamaktaydı (Andronic, 2015; Gupta, 2006). Bitkiler metalleri topraktan alır ve yapraktan kök uçlarına kadar bitkinin her yerinde birikirler (Baranowska-Morek ve Wierzbicka, 2004; Maestri ve ark., 2010; Sepet ve ark., 2014). Bazı kimyasallar bitki büyümesi ve tohum çimlenmesine olumlu etkide bulunurken bazıları ise olumsuz yönde ve çimlenmeyi engelleyici şekilde etkide bulunurlar (Salazar-Mercado ve ark., 2019).

DNA, metal iyonlarını bağlamak için fosfat oksijen atomları, riboz hidroksiller, baz halkası nitrojenleri ve siklik baz keto grupları gibi dört potansiyel bölgeye sahiptir (Oliveira ve ark., 2008). Anastassopoulou (2003), geçiş metalleri sıklıkla dolaylı olarak fosfat gruplarına ve doğrudan yukarıda bahsedilen DNA'daki bazlara olmak üzere ikiden fazla farklı bölgeyi kullanır. Metal iyonları ile DNA arasındaki bağlantı, metal iyonlarını çevreleyen koordine edici su moleküllerinin hidrojen bağlanması yoluyla kurulur. Bazlara metal bağlanması genellikle baz çiftindeki hidrojen bağının kopmasına neden olur ve DNA yapısının çift sarmalını zayıflatır ve şeker konformasyonunu dolaylı olarak etkiler (Anastassopoulou, 2003).

Metaller, konsantrasyonları belirli bir noktaya ulaşana kadar büyüme üzerinde olumlu etkiye sahiptir (Bhargava ve ark., 2012; Çanlı, 2018; Tangahu ve ark., 2011) ve ayrıca bitki içindeki kromozomların yapısını da değiştirmektedir (Çanlı, 2018); Özdemir ve ark., 2015). Çelik ve ark. (2010) çalışmalarında kromozom değişiklik türlerini belirlemişlerdir. Çeşitli kaynaklarda kromozomlardaki altı tür değişiklik; köprüler, C-mitoz, fragmanlar, gecikmeler, çok kutupluluk ve yapışkanlık olarak adlandırılmıştır (Kuchy ve ark., 2016; Özkul ve ark., 2016). Ayrıca, Utsunomiya ve ark. (2002) anormallikleri kromozom ayrımı, sitokinez yokluğu, sitomiksis, hücre füzyonu, düzensiz hücre şekli, kromozom köprüleri ve genomik ayrılma olarak tanımladılar. Ayrıca kromozomlardaki değişikliklere ilişkin olarak köprü kromozomu, kromozomal yapışma, kromozom kırılması, kromozom dağılımları, kromozom küçülmesi, balık kılıcı, halka kromozomu gibi şekillerine göre yapılan bir sınıflandırma daha bulunmaktadır. Abdelsalam ve ark. (2018) bu anormallikleri metafazda yanlış yönelim, kromozomal kırılma, metafazik plaka distorsiyonu, iğ disfonksiyonu, yapışkanlık, metafazda

anormal hareket, parçalanma, saçılma, eşit olmayan ayrılma, saçılma, kromozomal boşluklar, çok kutuplu anafaz, erozyon ve dağıtılmış ve gecikmeli kromozomlar.

Metallerin sitogenetik etkisi son araştırma çalışmalarının odağında kalmaya devam edecek gibi görünmektedir (Çanlı, 2018; Janas ve ark., 2010; Kıran ve Şahin, 2005; Özdemir ve ark., 2015; Sepet ve ark., 2014).

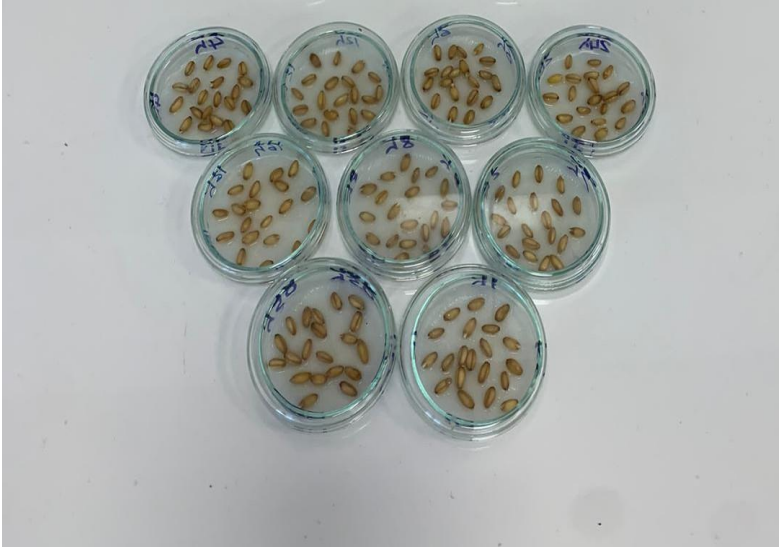
Sözen ve ark. (2010) bakır, demir, magnezyum ve çinko gibi metallerin çimlenme üzerine etkilerini incelemiştir. Değişik bitki tohumlarının metallere farklı tepkiler verdiğini göstermişlerdir. Magnezyum (Mg) asidik ortamlara karşı kaplama sağlayarak korozyona karşı sağlaması nedeniyle sanayide kullanılmaktadır (Tezcan ve Tezcan, 2007). Mn in sularında 0,05mg/L den yüksek olması istenmez. Mn hakkındaki bazı araştırmalarda tohum büyümesi gelişmesi ve çoğalması üzerine olumlu etkileri görülmüştür (Mittal ve ark., 2018; Movahhedy-Dehnavy ve ark., 2009). Bir diğer çalışmada buğday üzerinde Mn emiliminin büyümeye katkısına pozitif yönde katkı yaptığı görülmüştür (Abbas ve ark., 2011). Mn eksikliğinin eksiklik indeksine göre 0 ile 1 arası değerlendirmede 0,66 değerine kadar tolerans gösterdiği ortaya konmuştur (Barman ve ark., 2017). Bitkilerin hücre duvarında kalınlaştırma ve dayanıklılığı arttırmaya Mn kullanımının etkisi olduğunu Humpries ve ark. (2016) bulmuşlardır. Seregin ve Kozhevnikova (2005) ve Kudo ve ark. (2015) metallerin mısır tohumlarının çimlenmesini şu sırayla engellediğini bulmuşlardır: $Mg > Cd > Ni \approx Pb > Sr$. Fernando ve Lynch (2015) fitotoksik etki açısından Mn'ı incelemiştir. Bitkilerde metal kirliliğinin mekanizması hakkında daha önce yapılan araştırmalar Sr'nin bitkilere kolayca geçebildiğini göstermiştir (Çelik ve ark., 2004; Lemtiri ve ark., 2016; Manzatu ve ark., 2015).

Buğday, büyüme sürecinde ve vücudun her yerinde metal toksisitesi gösterebilmesi nedeniyle tercih edilmektedir (Abedi ve Majiri, 2020). Buğday tohumlarının katyon tutma kapasitelerinin geniş olması, katyonların köklerden itibaren kolaylıkla daha yüksek yerlere iletilmesi buğdayı cazip hale getirmiştir. Buğdaya uygulanan farklı metal iyonlarının seçicilikteki farklılığa bağlı olarak hücrelerde birikiminin değişiklik gösterdiği Abedi ve Majiri (2020) tarafından tespit edilmiştir. Janas ve ark. (2010) buğday vakuollerinde ve kök hücre duvarlarında bakır iyonlarının birikiminin meydana geldiğini belirtmişlerdir. Çanlı (2018), buğday yanında *Lens culinaris*'te baryum (Ba) ve vanadyum (V) iyonlarının neden olduğu sapmanın belirlenmesine odaklanmıştır. *Lens culinaris* ile ilgili çeşitli çalışmalar olmasına rağmen (Sepet ve ark., 2014; Talukdar, 2013), buğday üzerine yapılmış ve magnezyumun kromozomal değişim üzerindeki etkisini anlamaya yönelik herhangi bir çalışma bulunmamaktadır. Ayrıca hiçbir bitkinin tohumunda ppm'in üzerindeki metal konsantrasyonları da tespit edilmeye çalışılmamıştır.

Bu çalışmada, *Triticum aestivum*'un farklı zaman dilimlerinde Mn maruziyeti sonucunda bitkinin kök ucu hücrelerini nasıl etkilediği araştırılmıştır. Mn'nin hücre bölünmesi ve kromozomal anormallikler üzerindeki etkisini ve Mn'nin DNA ile kimyasal olarak nasıl reaksiyona girdiğini anlamak bu çalışmanın ana hedefleriydi.

HESAPLAMA YÖNTEMİ

Araştırmada Mn'nin etkilerini görebilmek için 14 (2n) kromozomlu buğday tohumları tercih edildi. Buğday fidelerinin kök uçlarına yerleştirilen meristematik hücreler, Bitki Sitogenetiğinde (Singh, 2003) anlatıldığı gibi mikroskopik kromozom incelemesi için hazırlanır (Şekil 1).



Şekil 1. Buğday örneklerine Mn uygulaması örnekleri

Tohumlar sağlam, dolgun ve eşit büyüklükte olmalarına göre seçilmiştir. Tohum kontaminasyonunu önlemek amacıyla %10'luk sodyum hipoklorit içerisinde 10 dakika bekletilmiştir (Sepet ve ark., 2014). Aşırı hipokloritin uzaklaştırılması için tohumlara birkaç kez (5 kez) distile su uygulanmış ve daha sonra tohumlar 25°C'de filtre kağıtları üzerinde kurutulmuştur. Zaman parametresi için 1.0 mol L⁻¹(M) Sr standart çözeltisi oda sıcaklığında bir beher içindeki tohumlara maruz bırakıldı. Tohumlar 1/2, 1, 2, 4, 6, 8, 12, 16, ve 24 saatlik süreyle kontrol amaçlı Sr standartlarında tutuldu. Daha sonra tohumların üzerinde kalan metal solüsyonu uzaklaştırmak için distile su kullanıldı ve 20–25 °C'de petri kaplarında çimlendirildi. Fiksasyon için kök uçları 1,5-2 cm ucundan kesilerek fiksatif etil alkol-

glasiyel asetik asit solüsyonunda (3:1 oranında) bırakılır. Stok kök uçları Feulgen yöntemiyle (Bozdağ ve ark., 2023) boyanarak daha detaylı incelemeye hazır hale getirildi. Hücre anomalilerinin mikroskobik tespitinde homolog alanlar tercih edildi. Mitotik hücre sayısı belirlendi. Hücrelerde kromozomal anormalliklerin varlığı ve sıklığı tespit edildi. Preparatların fotoğraflanması için motorlu taramalı Leica DM 3000 mikroskop kullanıldı.

Her uygulama için toplam 400 hücre sayıldıktan sonra, aşağıdaki denklemle mitotik indeks (MI) elde edildi (Prates ve ark., 2000):

$$MI = (m/T) \times 100$$

Burada: m = mitoz bölünen hücre sayısı; ve T = toplam hücre sayısı.

BULGULAR

Bitkilerde hücresel anormallikler kendiliğinden veya bir metale fiziksel maruz kalmanın bir sonucu olarak ortaya çıkabilir (Hemachandra ve Pathiratne, 2015). DNA kırılmaları, DNA sentezinin inhibisyonu ve yapıdaki veya DNA kromozomlarının toplam sayısındaki değişen DNA replikasyonu gibi anormalliklerle karakterize edilirler (Morais-Leme ve Marin-Morales, 2009; Restrepo ve ark., 2012; Russel, 2002).

Tablo 1. *Triticum aestivum*'un Farklı Zaman Periyodundaki Kök Ucu Hücrelerinin Mitotik İndeksi ve Mn maruziyetinden sonra etkilenen ve etkilenmeyen hücrelerin yüzdeleri

Süre (Saat)	Mitotik İndeks ± *S.D.	Çimlenmiş tohumlar (%)
1/2	13±4.75	65
1	10±5.10	50
2	12±3.82	60
4	14±4.14	70
6	9±3.43	45
8	12±1.94	60
12	15	75
24	8	40
Kontrol	20±3.35	
Grup		

*S.D. = Standart Sapma

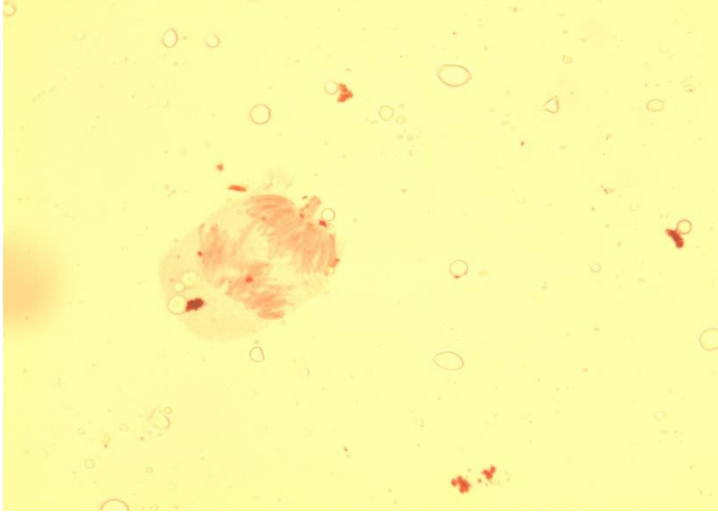
Tablo 1, bitki hücrelerindeki mitoz derecesini gösteren mitotik indeks (MI) temsil etmektedir. ½ saatlikten başlayıp 12 saate kadar maruz kalma için MI benzer sonuçlar verir (sırasıyla 13 ve 15), ancak özellikle 24 saatlik maruz kalma sonrasında mitozdaki hücrelerin yüzdesinde dramatik bir azalma meydana gelir (8). Fiderlerde mitotik hücre bölünmesinin artmasında farklı

zaman periyotlarında Mn standart solüsyon uygulaması ortaya çıkmıştır. Bu hücre bölünmesi 1/4 saatlik uygulamada en yüksek sayıya ulaştı. 1/2-4 saat arasında mitotik hücre bölünmesinin derecesi azaldı. 6 saatlik uygulamadan sonra tekrar yükselmeye başladı ve 8 saatlik maruz kalma sonrasında herhangi bir fide gözlenmedi. Kontrol grubu, her uygulama döneminde fidelerde daha fazla mitotik hücre bölünmesi gösterdi.



Şekil 2 Balık kılıçığı anomalisi

Hücre bölünmesinin yanı sıra Mn uygulamasından sonra hücrelerde çeşitli anormallikler de tespit edildi (Şekil 2-3). 1/4 saatte araştırılan kromozom anormallikleri balık kılıçığı ve köprü kromozomu içindi. 1/2 saatte kromozom dağılımı, köprü kromozomu ve balık kılıçığı gözlemlendi. 1 saatlik temas süresi boyunca balık kılıçığı, köprü kromozomu ve kromozom dispersiyonu kaydedilirken, 2 saatlik uygulamada at kromozom dispersiyonu ve at köprü kromozom anormalliği tespit edildi. 4 saatlik uygulama sonucunda balık kılıçığı ve halka kromozomunda anormallik ortaya çıktı. 8 saatlik uygulama sonunda balık kılıçığı, kromozom dağılımı, kromozom kırılması ve halka kromozomu oluştu. En sık görülen anormallik olarak kromozom dispersiyonu tespit edildi. Tüm uygulama saatleri boyunca kromozom yapışması, kromozom dağılımı ve köprü kromozomu gözlemlendi. Kromozom dağılımlarının sayısı 4 saatlik uygulamada en yüksekti. 2 saat hariç tüm uygulanma periyotlarında kromozom kırılması tespit edildi. Balık kılıçığı ve kromozom yapışması 1 saatlik uygulamada en yüksek düzeyde belirlendi. 2. ve 4. saatlerde en yüksek sayıda kromozom yapışması gözlemlendi. Köprü kromozomu 1, 2 ve 4 saatlik uygulamada yüksek düzeyde belirlendi. Uygulamanın 4. saatinde kromozom kırılmasının yüksek düzeyde olduğu ve 4. saate kadar anormalliğin azaldığı görüldü. Halka kromozomu 2 ve 8 saatlik uygulamada gözlemlendi. Tüm uygulama sürelerinde kromozom küçülmesi görüldü.



Şekil 3. Kromozom birleşmesi anomalisi

DNA'daki baz ve şeker bağlanarak nükleozid molekülünü oluşturur. Baz ile şeker arasında glikozit bağı kurulur. Fosfodiester veya monosakkaritlerin arasındaki bağların kopmasıyla sakkaritler veya monofosfata bağlı esterler arasındaki bağların oluştuğu, DNA'da kromozomal değişiklikler ve anormalliklerin olduğu gözlenir. Bazlar arasındaki hidrojen bağları DNA yapısını bir arada tutar. O-bağlı monoglikozidlerin metal kompleksleri CAD üzerine neredeyse tamamen şeker kalıntılarını (glikoz veya ramnoz) kaybederken, C-bağlı monoglikozidlerin metal kompleksleri dehidrasyonla birlikte yoğun çapraz halka bölünmelerine maruz kalma eğilimindedir. Zhang ve ark., 2004).

SONUÇ

DNA'daki metal iyonları ile baz ve şeker arasındaki kimyasal bağlanma, yeni moleküllerin oluşmasına neden olmuş ve bu da bitkinin DNA dizisinde çeşitli anormalliklerin ortaya çıkmasına neden olmuştur. Benzer bir çalışmada Oliveira ve ark. (2008), Pb iyonlarının özellikle DNA'nın adenin içeren bölümleriyle etkileşime girdiğini ve bunun oksidatif etkilerle sonuçlandığını bulmuşlardır. Şeker konformasyonunda önemli olan nükleik asitlerin konformasyonu, metal iyonunun DNA'da nasıl hareket ettiğine bağlıdır (Anastassopoulou, 2003). Metal iyonları, metali bazlara bağlayarak baz çifti hidrojen bağını bozmanın ve çift sarmalı dengesizleştirmenin yanı sıra, aşırı negatif yüklü fosfat gruplarını da nötralize edebilir ve sarmalın stabilizasyonuna neden olabilir. Tüm bu değişiklikler bitkilerin DNA'sında farklı anormalliklerin oluşmasını etkiler.

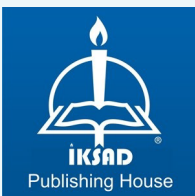
KAYNAKÇA

- Abbas, G., Khan, M. Q., Khan, M. J., Tahir, M., Ishaque, M., & Hussain, F. (2011). Nutrient uptake, growth and yield of wheat (*Triticum aestivum* L.) as affected by manganese application. *Pakistan Journal of Botany*, 43(1), 607-616.
- Abdelsalam N. R., Abdel-Megeed A., Ali H.M., Salem M.Z.M., Al-Hayali M.F.A., Elshikh, M.S. (2018). Genotoxicity effects of silver nanoparticles on wheat (*Triticum aestivum* L.) root tip cells. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. **155**: 76-85.
- Aksoy Ö., Deveci A. (2012). The Investigation of the Cytotoxic Effects of Some Pesticides on Soybean (*Glycine max* L.) *Cytologia* **77**(4): 475–483
- Alcaraz-Lopez C., Botia M., Alcaraz C.F., Riquelme F. (2003). Effects of foliar sprays containing calcium, magnesium and titanium on plum (*Prunus domestica* L.) fruit quality. *Journal of Plant Physiology*. **160**(12): 1441–1446.
- Anastassopoulou, J. (2003). Metal–DNA interactions. *Journal of Molecular Structure* **651–653**: 19–26.
- Andronic, L. (2012). Viruses as triggers of DNA rearrangements in host plants. *Can. J. Plant Sci.* **92**: 1083-1091.
- Barman, A., Pandey, R. N., Singh, B., & Das, B. (2017). Manganese deficiency in wheat genotypes: Physiological responses and manganese deficiency tolerance index. *Journal of Plant Nutrition*, 40(19), 2691-2708.
- Bozdağ, B., Özdemir, C., Özdemir, A., Vural, Y., & Vural, S. (2023). Bakla (*Vicia faba* L.) Kök Ucu Hücrelerinde Nonilfenolün Sitogenetik Etkilerinin İncelenmesi. *Journal of New Results in Engineering and Natural Sciences*, 2023(18), 40-52.
- Çanlı M. (2018). A new perspective to aberrations caused by barium and vanadium ions on *Lens culinaris* Medik, *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 160: 19–23.
- Çelik, M., Aksoy, H., & Yılmaz, S. (2010). Evaluation of beauvericin genotoxicity with the chromosomal aberrations, sister-chromatid exchanges and micronucleus assays. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 73(7), 1553-1557.
- Çelik A., Kartal A., Akdoğan A., Kaska Y. (2005). Determining the heavy metal pollution in Denizli (Turkey) by using *Robinio pseudo-acacia* L., *Environmental International*. **31**(1): 105-112.
- Darlington C. D., La Cour L. F. (1976). *The Handling of Chromosomes*. Allen and Unwin.

- Fernando, D.R., Lynch, J.P. (2015). Manganese phytotoxicity: new light on an old problem, *Annals of Botany*, 116(3), 313–319.
- Garlich N., Cruz C., Silva A.F., Malaspina I.C., Ferreira R.G., Tedesque M.G., Pitelli R.A., Bianco S. (2016). Effectiveness of Diquat, Copper Hydroxide, Copper Oxochloride and their Association in Control of Submerged Macrophytes *Ceratophyllum demersum*, *Planta Daninha*. 34(1): 117-123.
- Gupta P.K. (2006). Plant cytogenetics: A re-birth in twenty-first century. *Indian Journal of Crop Science*, 1(1-12): 1-7.
- Hemachandra C., Pathiratne A. (2015). Assessing toxicity of copper, cadmium and chromium levels relevant to discharge limits of industrial effluents into inland surface waters using common onion, *Allium cepa* bioassay *Contam. Toxicol.*, 94 (2): 199-203.
- Humphries, J. M., Stangoulis, J. C., & Graham, R. D. (2016). Manganese. In *Handbook of plant nutrition* (pp. 367-390). CRC Press.
- Janas K.M., Zielińska-Tomaszewska J., Rybaczek D., Maszewski J., Posmyk M.M., Amarowicz R., Kosińska A. (2010). The impact of copper ions on growth, lipid peroxidation, and phenolic compound accumulation and localization in lentil (*Lens culinaris* Medik.) seedlings. *J Plant Physiol*. 167(4): 270-276.
- Kıran Y., Şahin A. (2005). The effects of the lead on the seed germination, root growth and root tip cell mitotic divisions of *Lens culinaris* medik. *Gazi University Journal of Science*. 18 (1):17–25.
- Kozhevnikova A. D., Seregin I. V., Bystrova E. I., Belyaeva A. I., Kataeva M. N., Ivanov V. B. (2009). The Effects of Lead, Nickel, and Strontium Nitrates on Cell Division and Elongation in Maize Roots. *Russian Journal of Plant Physiology*. 56 (2): 242–250.
- Kudo, H., Kudo, K., Uemura, M., and Kawai, S. (2015). Magnesium inhibits cadmium translocation from roots to shoots, rather than the uptake from roots, in barley. *Botany*. 93: 345–351.
- Lemtiri, A., Lienard, A., Alabi, T., Brostaux, Y., Cluzeau, D., Francis, F., and Colinet, G. (2016). Earthworms *Eisenia fetida* affect the uptake of heavy metals by plants *Vicia faba* and *Zea mays* in metal-contaminated soils. *Applied Soil Ecology*. 104: 67–78.
- MacMillan, J.P., Park, J.W., Gerstenberg, R., Wagner, H., Köhler K., and Wallbrecht P. Strontium and strontium compounds, in *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry* (7th ed.): Weinheim, Germany, VCH Verlagsgesellschaft mbH, A25, 2005. p321–327.
- Manzatu C., Nagy B., Ceccarini A., Iannelli R., Giannarelli S., Majdik C. (2015). Laboratory tests for the phytoextraction of heavy metals from polluted harbor sediments using aquatic plants. *Marine Pollution Bulletin*. 101: 605–611.

- Marin A.R., Masscheleyn P.H., Patrick W.H. Jr. (1992). The Influence of Chemical Form and Concentration of arsenic on rice growth and tissue arsenic concentration. *Plant and Soil*. **139**: 175-183
- Mittal, A., Chhibber, S., & Madan, Z. (2018). The effect of manganese on antioxidant enzymes activity on the wheat seedling. *Int J Pharm Biol Sci*, 8(1), 92-98.
- Movahhedy-Dehnavy, M., Modarres-Sanavy, S. A. M., & Mokhtassi-Bidgoli, A. (2009). Foliar application of zinc and manganese improves seed yield and quality of safflower (*Carthamus tinctorius* L.) grown under water deficit stress. *Industrial Crops and Products*, 30(1), 82-92.
- Morais-Leme D., Marin-Morales M. (2009). *Allium cepa* test in environmental monitoring: a review on its application *Mutat. Res.*, **682**: 71-81.
- Oliveira S.C.B., Corduneau O., Oliveira-Brett A.M. (2008). In situ evaluation of heavy metal-DNA interactions using an electrochemical DNA biosensor. *Bioelectrochemistry*. **72**: 53-58.
- Özdemir A., Bozdağ B., Sepet H., Parlak Y., Kocabaş O., Ereeş F.S., Özdemir C. (2015). Cytogenetic effects of ⁹⁹technetium on meristematic cells of root tips of *Vicia faba* L. and statistical comparison. *Caryologia*. **68** (3): 200–206.
- Pesnya D.S. (2013). Cytogenetic effects of chitosan-capped silver nanoparticles in the *Allium cepa* test, *Caryologia*. **66** (3): 275-281.
- Prates H.T., Paes J.M.V., Pires N.D.M., Filho I.A.P., Magalhaes P.C. (2000). Efeito do extrato aquoso de leucena na germinação e no desenvolvimento do milho. *Pesq Agropec Bras*. **35**(5): 909-914.
- Restrepo R., Reyes D., Ortiz M.C., Ruiz F.A.R., Kouznetsov V. (2012). Aberraciones cromosomales en bulbos de cebolla *Allium cepa* inducidas por moléculas híbridas 4-aminoquinolínicas *Univ. Sci.*, **17**(3): 253-261.
- Russel P. (2002). *Chromosomal mutation*. B. Cummings, Genetics, Pearson Education Inc, San Francisco.
- Salazar-Mercado, S. A., Torres-León, C. A., & Rojas-Suárez, J. P. (2019). Cytotoxic evaluation of sodium hypochlorite, using *Pisum sativum* L as effective bioindicator. *Ecotoxicology and environmental safety*, 173, 71-76.
- Saxena P.N., Murthy R.C., Gupta S.K. (2009). Evaluation of cytogenetic effects of deltamethrin in root meristem cells of *Allium sativum* and *Allium cepa*: A possible mechanism of chromosome damage, *Toxicological & Environmental Chemistry*. **91**(3): 577-594.
- Sepet H., Çanlı M., Özdemir A., Bozdağ B., Özdemir C. (2014). Cytogenetic effects of ⁴⁸Titanium (⁴⁸Ti) on meristematic cells of root tips of *Lens culinaris* Medik, *Pakistan Journal of Botany*. **46**(1): 101-110.

- Silva Jr. A.C., Gonçalves C.G., Scarano M.C., Pereira M.R.R., Martins D. (2018). Effect of Glyphosate on Guineagrass Submitted to Different Soil Water Potential Planta Daninha. **36**: 1-12.
- Singh R.J. Plant Cytogenetics (2nd Ed.). CRC Press: Boca Raton, FL, USA. 2003.
- Smical A.I., Hotea V., Oros V., Juhasz J., Pop E. (2008). Studies on Transfer And Bioaccumulation Of Heavy Metals From Soil Into Lettuce, Environmental Engineering and Management Journal. **7**(5): 609-615.
- Sözen, E., Yılmaz, M., Çolak, G., & Yücel, E. (2010). Alkali metal tuzları NaCl, KNO₃, kuvvetli asit H₂SO₄ ve bazı ağır metallerin CuCl₂, FeCl₃, MgCl₂ ve ZnCl₂ nohut Cicer arietinum tohumlarının çimlenmesi üzerine ekotoksikolojik etkileri. Biyolojik Çeşitlilik ve Koruma, **3**(3), 64-71.
- Talukdar D. (2013). Bioaccumulation and transport of arsenic in different genotypes of lentil (*Lens culinaris* Medik.). International Journal of Pharma and Bio Sciences. **4**(1): 694–701.
- Tangahu, B. V., Sheikh Abdullah, S. R., Basri, H., Idris, M., Anuar, N., & Mukhlisin, M. (2011). A review on heavy metals (As, Pb, and Hg) uptake by plants through phytoremediation. International journal of chemical engineering, 2011, 1-31.
- Utsunomiya KS, Bione NCP, Pagliarini MS. (2002). How many different kinds of meiotic abnormalities could be found in a unique endogamous maize plant? Cytologia. **67**: 169-176.
- Zhang J., Brodbelt J.S., Wand J. (2005). Threshold Dissociation and Molecular Modeling of Transition Metal Complexes of Flavonoids. J Am Soc Mass Spectrom. **16**: 139–151.



ISBN: 978-625-367-485-4