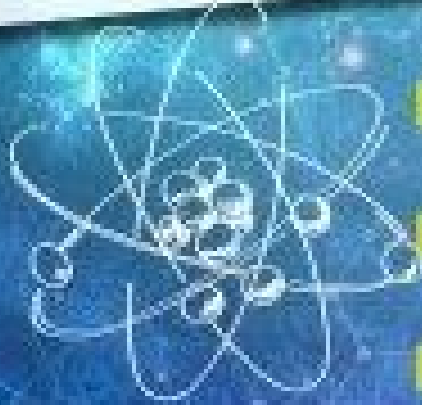




BİLECİK ŞEYH EDEBALI
ÜNİVERSİTESİ

ADIM FİZİK GÜNLERİ VIII



Ignasi Ferrando Castella Ferrer

Andri Filipe Barbara Cortez

Ef'a Schlegeloch'igi

Mikhail Bogdanov

Masum Baccanabadi

Barry Dunlop

12-15 EYLÜL 2019

Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi

ÖZET KİTAPÇIĞI



BİLECİK

TÜRKİYE

12-15 EYLÜL 2019

ORGANİZASYON KOMİTESİ	4
BİLİMSEL KOMİTE	4
BİLİMSEL PROGRAM	7
ÇAĞRILI KONUŞMACI ÖZETLERİ	11
SÖZLÜ SUNUM ÖZETLERİ	18
POSTER SUNUM ÖZETLERİ	74



ADIM Fizik Günleri VIII

ADIM Üniversiteleri Konsorsiyumu 30/03/2001 yılında Adnan Menderes Üniversitesi, Pamukkale Üniversitesi, Süleyman Demirel Üniversitesi ve Muğla Üniversitesi işbirliği ile kurulmuştur. Bu üniversiteler Pamukkale Üniversitesi Rektörlüğünde bir araya gelerek eğitim-öğretim, bilimsel-teknik ve sosyal-kültürel alanlarda işbirliği konularında birlikte hareket etmek üzere ADIM adı altında bir ortaklık protokolü imzalamışlardır.

Bu dört üniversiteye, 2003 yılında Afyon Kocatepe Üniversitesi, 2005 yılında Dumlupınar Üniversitesi ve 25 Aralık 2008 tarihinde Pamukkale Üniversitesi'nde gerçekleştirilen “Bölge Üniversite Rektörleri Toplantısı” neticesinde; Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi ve Uşak Üniversitesi katılmış olup, bu işbirliğinin adının ADIM olarak devam etmesine karar verilmiştir. Konsorsiyuma 2011 yılında Celal Bayar Üniversitesi, 2012 yılında Balıkesir Üniversitesi ve Uluslararası Antalya Üniversitesi, 02 Nisan 2013 tarihinde Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi'nde gerçekleşen Rektörler Toplantısı neticesinde Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi ve Eskişehir Osmangazi Üniversitesi, 06 Aralık 2013 tarihinde Pamukkale Üniversitesi'nde düzenlenen Rektörler Toplantısı ile de Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi Konsorsiyuma katılmıştır.

İmzalanan ADIM Protokolü; birbirine coğrafi ve kuruluş tarihi olarak yakınlığı olan, ortak sorunlara ortak çözüm arayan üniversiteler tarafından yürütülen İşbirliği Programı çerçevesinde, lisans ve lisansüstü eğitim-öğretim, bilimsel ve teknolojik araştırma-geliştirme projeleri, sosyal ve kültürel alanlarda yapılacak ortak çalışmalarla ilgili esasları belirlemeyi amaçlar. ADIM Üniversiteleri, eğitim-öğretim, araştırma-geliştirme, bilimsel-teknik, sosyal ve kültürel üniversitelerarası etkinliklerde işbirliği ve ortak girişimlerde bulunmak üzere bir araya gelmiştir.

ADIM Üniversiteleri Birliği Genel Koordinatörlüğü, Pamukkale Üniversitesi tarafından yürütülmektedir. Koordinatörlük tarafından; Konsorsiyuma üye Üniversitelerde gerçekleştirilecek olan toplantı bilgileri ile toplantıda alınan kararların ADIM Üniversitelerine bildirim yapılarak, konsorsiyumun faaliyetlerinin duyurulduğu ve arşivlendiği bir merkez olarak işlevini sürdürmektedir. Ayrıca konsorsiyuma üye Üniversitelerde ADIM Birim Sorumluları belirlenerek, koordinasyonun daha hızlı ve etkin olması sağlanmıştır. ADIM Üniversiteleri web sayfası hazırlanarak yayınlanmıştır. Web sayfasında, gerçekleştirilen toplantılara ait kararlar yayınlanmakta, ayrıca geçmiş yıllara ait toplantı kararlarıyla toplantı arşivi oluşturulmaktadır. Bugüne kadar ADIM Üniversiteleri arasında birçok toplantı gerçekleşmiştir. Bu toplantılarda Üniversitelerin karşılaştığı ortak sorunlar ve çözüm yolları belirlenmiş, ortak hareket etme yönünde kararlar alınmıştır. Bölümlerin kendi aralarında ortak doktora programları açılmıştır.

ADIM Üniversitelerinin Fizik bölümlerinin bir araya gelmesiyle ilki 2010 yılında Afyon Kocatepe Üniversitesi'nde ADIM Fizik Günleri I, ikincisi 2012 yılında Pamukkale Üniversitesi'nde ADIM Fizik Günleri II, üçüncüsü 2014 yılında Süleyman Demirel Üniversitesi'nde ADIM Fizik Günleri III, dördüncüsü 2015 yılında Dumlupınar Üniversitesi'nde ADIM Fizik Günleri IV , beşincisi 2016 yılında Eskişehir Osmangazi Üniversitesi'nde ADIM Fizik Günleri V, altıncısı 2017 yılında Balıkesir Üniversitesi'nde ADIM Fizik Günleri VI ve yedincisi 2018 yılında Adnan Menderes Üniversitesi'nde ADIM Fizik Günleri VII adı altında düzenlenmeye devam etmiştir.

ADIM Fizik Günlerinin sekizincisi 12 – 15 Eylül 2019 tarihlerinde, Bilecik Üniversitesi Fizik Bölümü bünyesinde gerçekleştirilecektir. Kongre, fizik alanındaki gelişmelere paralel olarak bilimsel paylaşımlara ve ortak çalışmalar için iş birliği ortamı oluşturmayı hedeflemektedir. Kongremizin Onursal Başkanları Bilecik Üniversitesi Rektörü Sayın Prof. Dr. İbrahim TAŞ, Bilecik Belediye Başkanı , katılımlarıyla beraber Bilecik'de güzel bir kongre olması dileğiyle, sevgi ve saygılar sunarız..

Doç. Dr. Arslan ÜNAL

ADIM Fizik Günleri VIII Kongre Başkanı

KONGRE DÜZENLEME KURULU

Prof. Dr. Ali İhsan Göker

Doç. Dr. Arslan ÜNAL

Doç. Dr. Aslı Ayten KAYA

Doç. Dr. Yunus KAYA

Dr.Öğr. Üyesi Sinan TEMEL

Dr.Öğr. Üyesi Adil Meraki

Öğr. Gör. Muhammet OKUR

Öğr.Gör. Nazmiye ALBAYRAK

Dr.Öğr. Üyesi Yalçın KALKAN

Ayşenur MUTLU

KONGRE BİLİM KURULU

A. Sertap KAVASOĞLU	Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi
Adil BAŞOĞLU	Sakarya Üniversitesi
Ali İhsan GÖKER	Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi
Arslan ÜNAL	Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi
Aslı Ayten KAYA	Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi
Asma AMJAD	University of Florence and INSTM
Antonio BARONE	Napoli University
Atalay KÜÇÜKBURSA	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Ayberk Bostan SARIOĞLAN	Balıkesir Üniversitesi
Aytaç Gürhan GÖKÇE	Adnan Menderes Üniversitesi
Bayram TEKİN	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Beyhan TATAR	Namık Kemal Üniversitesi
Canan KAZAK	Ondokuz Mayıs Üniversitesi
Cem GÜÇLÜ	İstanbul Teknik Üniversitesi
Cem Salih ÜN	Uludağ Üniversitesi
Cem SEVİK	Eskişehir Teknik Üniversitesi
Cesur EKİZ	Adnan Menderes Üniversitesi
Chee-Hun KWAK	Sunchon National University
Davut AVCI	Sakarya Üniversitesi
Dilek KAZICI	Namık Kemal Üniversitesi
Erdoğan TARCAN	Kocaeli Üniversitesi
Ersen METE	Balıkesir Üniversitesi
Ethem AKTÜRK	Adnan Menderes Üniversitesi
Evangalis HRISTOFOROU	National Technical University of Athens
Fatih YAŞAR	Hacettepe Üniversitesi



ADIM FİZİK GÜNLERİ VIII
Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü
12 – 15 EYLÜL 2019, BİLECİK / TÜRKİYE



Fatma GÖDE	Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi
Ferhunde ATAY	Osmangazi Üniversitesi
Gareth OWEN	The University of South Wales
Haldun SEVİNÇLİ	İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü
Hamit ALYAR	Çankırı Karaketen Üniversitesi
Handan OLGAR	Ankara Üniversitesi
Hasan BİRCAN	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Hasan KARABIYIK	Dokuz Eylül Üniversitesi
Hasan TÜNER	Balıkesir Üniversitesi
Hülya KARA SUBAŞAT	Balıkesir Üniversitesi
Hüseyin Ali YALIM	Afyon Kocatepe Üniversitesi
Hüseyin KÜÇÜKÖZER	Balıkesir Üniversitesi
Hüseyin SARI	Ankara Üniversitesi
Ivan BOBRIKOV	Joint Institute for Nuclear Research
İdris AKYÜZ	Osmangazi Üniversitesi
İlknur ÜSTÜNDAĞ	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
İsmail MARAŞ	Celal Bayar Üniversitesi
İsmail TARHAN	Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi
Kaan MANİSA	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Kadir ERTÜRK	Namık Kemal Üniversitesi
Levent SELBUZ	Ankara Üniversitesi
Levent SOLMAZ	Balıkesir Üniversitesi
Mehmet ŞAHİN	Uşak Üniversitesi
Metin BİLGE	Ege Üniversitesi
Muhammet OKUR	Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi
Murat BAYHAN	Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi
Murat TANIŞLI	Eskişehir Teknik Üniversitesi
Mustafa EROL	Dokuz Eylül Üniversitesi
Mustafa Emre KANSU	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Mustafa Kemal ÖZTÜRK	Gazi Üniversitesi
Mustafa ŞENYEL	Eskişehir Teknik Üniversitesi
Muzaffar ADAK	Pamukkale Üniversitesi
Nalan ÇİÇEK BEZİR	Süleyman Demirel Üniversitesi
Nikolai PEROV	Moscow State University
Nuri KOLSUZ	Pamukkale Üniversitesi
Oğuz GÜLSEREN	Bilkent Üniversitesi
Ömer TAMER	Sakarya Üniversitesi
Özlem KOCAHAN YILMAZ	Namık Kemal Üniversitesi
Özgür ALVER	Eskişehir Teknik Üniversitesi
Özgür OKTEL	Bilkent Üniversitesi
Özgür ÖZCAN	Hacettepe Üniversitesi
Paul Ian WILLIAMS	Cardiff Üniversitesi
Rasim DERMEZ	Afyon Kocatepe Üniversitesi
Santiago Garcia GRANDA	University of Oviedo
Saowanit SAITHONG	Prince of Songkla University

Sedat ZEYREK	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Sefer Bora LİŞESİVDİN	Gazi Üniversitesi
Selçuk AKTÜRK	Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi
Senem AYDOĞDU	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Serbülent YILDIRIM	Namık Kemal Üniversitesi
Serdar ÜNLÜ	Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi
Sevgi ÖZDEMİR KART	Pamukkale Üniversitesi
Seyfettin ÇAKMAK	Süleyman Demirel Üniversitesi
Shuhrat KALANDAROV	Joint Institute for Nuclear Research
Siti Nadiyah Abdul HALİM	University of Malaya
Suat PAT	Osmangazi Üniversitesi
Şinasi Barış EMRE	Ankara Üniversitesi
Şükrü Hanif TANYILDIZI	Balıkesir Üniversitesi
Şükrü ŞENTÜRK	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Tahsin BABACAN	Celal Bayar Üniversitesi
Tanju GÜREL	Namık Kemal Üniversitesi
Tekin İZGİ	İnönü Üniversitesi
Tsuyoshi UCHIYAMA	Nagoya University
Tuğrul SENER	İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü
Uğur TIRNAKLI	Ege Üniversitesi
V. Serkan KOLAT	İnönü Üniversitesi
Vildan BİLGİN	Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi
Volkan ÇETİNKAYA	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Yunus KAYA	Bursa Teknik Üniversitesi
Yusuf ATALAY	Sakarya Üniversitesi
Zafer NERGİZ	Ömer Halisdemir Üniversitesi
Zeki KARTAL	Kütahya Dumlupınar Üniversitesi
Ziya MERDAN	Gazi Üniversitesi

KONGRE BAŞKANI

Doç. Dr. Arslan ÜNAL

KONGRE ONUR KURULU

Prof. Dr. İbrahim TAŞ Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi Rektörü



BİLİMSEL PROGRAM

12 EYLÜL 2019 PERŞEMBE		
09:30-10:30	KAYIT	
10:30-12:00	AÇILIŞ KONUŞMALARİ	
12.00-13:30	Öğle Yemeđi	
13:30-14:50	I. OTURUM	
Yer	Salon 1	
Oturum Başkanı	Doç. Dr. Arslan ÜNAL	
13:30-14:10	Barry Dunietz	
	MODELING PHOTO AND BIAS INDUCED ELECTRON TRANSFER AND TRANSPORT. AN AB-INITIO PERSPECTIVE ON KINETICS	
14:10-14:50	Hassan Hassanabadi	
	Q-DEFORMED CLASSICAL AND QUANTUM MECHANICS BASED ON THE Q ADDITION	
14:50-15:10	Çay-Kahve Arası	
16:30-16:50	II. OTURUM	
Yer	Salon 1	Salon 2
Oturum Başkanı	Prof. Dr. Yusuf ATALAY	Prof. Dr. Erdoğan TARCAN
15:10-15:30	Burcu AKÇA	M. Fatih GÖZÜKIZIL
	BAZI POTASYUM BİLEŞİKLERİ İÇİN KÜTLE SOĞURMA KATSAYILARININ ÖLÇÜLMESİ	YENİ BİR İNCE FİLM ÜRETİM TEKNİĐİ OLAN MANYETİK DÖNDÜREREK KAPLAMA TEKNİĐİ KULLANARAK ZnO İNCE FİMLERİN ÜRETİLMESİ
15:30-15:50	Murat KOÇAK	Hüseyin AKSU
	İKİ GRUPLU DİFÜZYON TEORİSİ YARDIMIYLA KRİTİK NÜKLEER REAKTÖR EBATININ TESPİTİ	UNDERSTANDING OF THE QUANTUM NATURE OF ELECTRON TRANSFER AND EXPLAINING THE SPECTRAL ASYMMETRIES IN PHOTOSYNTHETIC BACTERIO REACTION CENTER: RHODOBACTER SPHAEROIDES
15:50-16:10	Ercan ŞAHİN	Aylin YALÇIN SARİBEY
	GAUSYAN KABUK ORBİTALLERİ İÇİN ATOM İNTEGRALLERİNİN HESAPLANMASI	FİZİĞİN ADLİ BİLİMLERDEKİ UYGULAMALARI
16:10-16:30	Mustafa KURBAN	Handan ENGİN KIRIMLI
	INVESTIGATION OF ELECTRONIC STRUCTURE AND THERMAL PROPERTIES OF NANO-SATURN FOR FUNCTIONAL MATERIALS	SERBEST RADİKAL İÇEREN ÇÖZELTİLERDE OVERHAUSER DİNAMİK NÜKLEER POLARİZASYON BÜYÜMELERİNİN İNCELENMESİ
16:30-16:50	Çay-Kahve Arası	
16:50-18:30	III. OTURUM	
Yer	Salon 1	
Oturum Başkanı	Doç. Dr. Arslan ÜNAL	
16:50-17:30	Dimitar Pushkarov	
	VACANCY-IMPURITY NANOCCLUSERS IN QUANTUM CRYSTALS	
Yer	Salon 1	Salon 2
Oturum Başkanı	Doç. Dr. Sinan TEMEL	Dr. Öğr. Üyesi Yalçın KALKAN
17:30-17:50	Arif Kösemen	Zekayi ANDIÇ
	INVESTIGATION OF COMPOSITE GEL DIELECTRIC MATERIALS FOR OFET APPLICATIONS	YARDIMCI FONKSİYONLARI KULLANARAK SLATER TIPLİ ORBİTALLERİNE ÖRTME İNTEGRALLERİNİN GENELLEŞTİRİLMESİ

17:50-18:10	Ayşe Nur MUTLU A NEW WAY TO DEFINE CLUSTER IONS IN MPGds	Mustafa KURBAN STUDY OF STRUCTURAL AND OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF HEXAGONAL ZnO NANOPARTICLES
18:10-18:30	Aslı Ayten KAYA Mn ve Sn KATKILI ZnO NANOPARTİKÜLLERİNİN SOL_GEL METODU İLE ELDE EDİLMESİ X-IŞINI İLE YAPISININ AYDINLATILMASI	Murat ERTÜRK ATOMLARIN ELEKTRONİK YAPI HESAPLAMALRI İÇİN BAZ KÜMESİ OLARAK KISITLANMAMIŞ ÜSTEL TIPLİ FONKSİYONLARIN HASSASİYETİ

13 EYLÜL 2019 CUMA		
09:30-12:00	I. OTURUM	
Yer	Salon 1	
Oturum Başkanı	Doç. Dr. Arslan ÜNAL	
09:30-09:50	Andre Filipe Cortez GAS RADIATION DETECTORS-CONTRIBUTIONS FROM COIMBRA	
09:50-10:30	Yalçın KALKAN HISTORICAL DEVELOPMENT OF GAS DETECTORS AND NEW GENERATIONS	
Yer	Salon 1	Salon 2
Oturum Başkanı	Doç. Dr. Aslı Ayten KAYA	Doç. Dr. Yunus KAYA
10:30-10:50	Meryem Cansu ŞAHİN SİÇANLARDA SİYATİK SİNİR YARALANMASI SONRASI ÜÇ BOYUTLU BİYUYUZICIDA ÜRETİLEN BİYUYUMLU SİNİR TÜPLERİNİN ETKİLERİNİN ARAŞTIRILMASI	Gülşen KARAKOYUN GENELLEŞTİRİLMİŞ SPİN-S MANYETİK İKİLİ ALAŞIMLARIN HISTEREZİS KARAKTERİSTİKLERİ
10:50-11:10	Çay-Kahve Arası	
11:10-11:30	Gürkan DEMİRDAK ATOMİK HARTREE-FOCK-ROOTHAAN HESAPLAMALARINDA GENELLEŞTİRİLMİŞ ÖZ-SÜRTÜNME ÜSTEL TIPLİ BAZ TAKIMLARI	Elif Ece DEMİR FRW UZAY-ZAMANINDA TACHYON SCALAR ALAN ÇÖZÜMLERİ
11:30-11:50	Gencer SARIOĞLU Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc ALAŞIMLARININ BAZI TERMAL ÖZELLİKLERİNİN DENEYSEL YÖNTEMLE İNCELENMESİ VE Sc ETKİSİNİN KARŞILAŞTIRILMASI	Meryem Cansu ŞAHİN KEMİK DEFEKTLERİN ONARIMINDA 3D VE BİYOMALZEMELER; BOR PLA ÜRETİMİ
11:50-12:10	Volkan ÇETİNKAYA CLIC BAZLI γ e ÇARPIŞTIRICISINDA UYARILMIŞ SPİN-3/2 NÖTRİNOLAR İÇİN ARAŞTIRMA	Ertuğrul KARACA KUBİK YAPIDA KRİSTALLEŞEN Ta ₂ Sb BİLEŞİĞİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK VE ELASTİK ÖZELLİKLERİ
12.10-13.30	Öğle Yemeği	
13:30-15:00	II. OTURUM	
Yer	Salon1	
Oturum Başkanı	Doç. Dr. Arslan Ünal	
13:30-14:10	Udo Schwingenschlögl OBSTACLES AND POSSIBLE SOLUTIONS ON THE WAY TO VALLEY-POLARIZED 2D MATERIALS	
Yer	Salon 1	Salon 2
Oturum Başkanı	Dr. Öğretim Üyesi Adil MERAĞI	Dr. Öğretim Üyesi Yalçın KALKAN
14:10-14:30	Manolya CİN ZrRuP MALZEMESİNİN YAPISAL ve ELESATİK ÖZELLİKLERİ: Ab-İNİTİO HESAPLAMALARI	Volkan ÇETİNKAYA HZZ VE H ₂ Z ANORMAL BAĞLAŞIMLARININ GELECEK NESİL DOĞRUSAL ÇARPIŞTIRICILARDA İNCELENMESİ

14:30-14:50	Ümit AKINCI MALZEMELERİN MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİNDE ETKİN ALAN YAKLAŞIMLARI	Bilal CANGÜL (Z)-N-(3,4-DİMETİLİSOXAZOL-5-YL)-4-(2-HİDROKSİ-5-METİLBENZYLİDENE)AMİNO)BENZENSÜLFONAMİT MOLEKÜLÜNÜN YAPISININ SPEKTROSKOPİK(X-RD, FT-IR, NMR) YÖNTEMLERLE AYDINLATILMASI
Çay-Kahve Arası		
III. OTURUM		
15:10-17:30	Salon 1	Salon 2
Yer	Dr. Öğretim Üyesi Adil MERAKİ	Dr. Öğretim Üyesi Yalçın KALKAN
Oturum Başkanı		
15:10-15:30	Bilal CANGÜL (Z)-N-(3,4-DİMETİLİSOXAZOL-5-YL)-4-(2-HİDROKSİ-5-METİLBENZYLİDENE)AMİNO)BENZENSÜLFONAMİT MOLEKÜLÜNÜN HOMO-LUMO, NLO VE MEP ANALİZLERİ	Muhammet OKUR DFT CALCULATIONS ON SPECTROSCOPIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF MgCl ₂ ·6H ₂ O·C ₂ H ₄ (OH) ₂
15:30-15:50	Emirhan BOZOĞLAN BİYÖYAZICI TASARIMI VE ÜRETİMİ	Yunus KAYA BAZI OKSİM MOLEKÜLLERİNİN MOLEKÜLER DOCKING ÇALIŞMALARI: SUBSTİTUENT ETKİSİNİN İNCELENMESİ
15:50-16:10	Durgun DURAN JAYNES-CUMMINGS MODELİ İÇİN KUANTUM PARAMETRE TAHMİNİ	Nazmiye ALBAYRAK L-PROLİNİUM PICRATE MOLEKÜLÜNÜN SPEKTROSKOPİK VE DOĞRUSAL OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİ ÜZERİNE BİR ÇALIŞMA
16:10-16:30	Gökhan DİKMEN DETERMINATION OF TEMPERATURE-DEPENDENT CONFORMATION STATES OF CINNAMIC ACID BY SPECTROSCOPIC METHODS	Aslı Ayten KAYA HEGZAGONAL YAPILI ZnO MOLEKÜLLERİNİN MODELLENMESİ, Mn ve Sn KATKISI İLE OPTİK BAND BOŞLUĞUNUN DEĞİŞİMİNİN KURAMSAL İNCELENMESİ
16:30-16:50	Keziban AY GIDALARDA KARBONDİOKSİT TAYİNİ	Yunus KAYA BROM-ASETOFENON OKSİM MOLEKÜLÜNÜN KONFORMER VE INFRARED SPEKTROSKOPİ ÇALIŞMASI
16:50-17:10	Ali BAĞCI RÖLATİVİSTİK ÖUA YAKLAŞIMINDA ORTAYA ÇIKAN MATEMATİKSEL ZORLUKLAR ÜZERİNE NOTLAR	Nazmiye ALBAYRAK 2-METHYL-PYRIDİNİUM PICRATE BİLEŞİĞİNİN YAPISAL VE SPEKTROSKOPİK İNCELEMESİ
17:10-17:30	İsmail YORULMAZ GLASS-BLOWN SPHERICAL MINIATURE CESIUM VAPOR CELSS FOR ATOMIC MAGNETOMETER APPLICATIONS	Muhammet OKUR [Li(C ₈ H ₅ Cl ₂ O ₂)(C ₁₂ H ₈ N ₂)(H ₂ O)] MOLEKÜLÜNÜN SPEKTROSKOPİK VE DOĞRUSAL OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİ ÜZERİNE BİR ÇALIŞMA
17:30-18:30	POSTER SUNUMLARI	
19:00	Kongre Yemeği	



ÇAĞRILI KONUŞMACI ÖZETLERİ

ÇK-1

q-deformed classical and quantum mechanics based on the q-addition

Hassan Hassanabadi

Faculty of physics, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

We find the q-analogue of the Newton mechanics based on the q-addition. We prove the energy conservation and formulate the Lagrangian-Hamiltonian formalism for the q-deformed mechanics. We extend one dimensional q-deformed mechanics into two dimension and discuss the effect of q in Kepler problem. Then, we consider the q-derivative appearing in the non-extensive thermodynamics to formulate the q-deformed quantum mechanics. From the q-addition we discuss the q-deformed calculus and q-deformed elementary functions. We use these to construct the q-deformed quantum mechanics. As examples we discuss momentum eigenfunction, one dimensional box problem and quantum harmonic potential problem.

ÇK-2

VACANCY-IMPURITY NANOCCLUSERS IN QUANTUM CRYSTALS

D. I. Pushkarov

Bulgarian Academy of Sciences, Independent Scholar

A new kind of nanoclusters in the solid solutions of ^3He and ^4He are presented. They exist only due to the quantum nature of defects – vacancies and impurities which are delocalized and behave as quasiparticles – defectons (vacancions and impuritons). They are described in an ideal crystal lattice not by their positions and velocities, but by the dispersion law $\varepsilon(\mathbf{p})$ with \mathbf{p} for quasimomentum. The situation is similar to that of electrons in metals, but with the essential difference that the creation energy of vacancies and impurities is of the order of several degrees, and the energy bands are extremely narrow (several degrees for vacancions and about 10^{-4}K for impuritons. Delocalization lowers the activation energy compared with the localized defect. However, this needs a good periodicity. Impurities brake the periodicity and prevent delocalization of the vacancies. So, around the vacancy a region rid of impurities appears. But there is also another way for a vacancy to create a periodic structure around itself. It can attract impurities and build a cluster around itself. The vacancy-impurity nanocluster may have different structure compared to that of the main lattice and stimulate phase transitions. This effect is important as well when considering the phase separation in helium solid solutions.

References

- [1] D. I. Pushkarov, JETP Lett. 27 (6) 337-339 (1978); Phys.Rev. B 70 172506 (2004)
- [2] Ganshin A.N., Grigor'ev V.N. et al. - JETP Letters 73 (6) 289-293 (2001); Physica B: Condensed Matter 329-333 (1) 390-391 (2003)

ÇK-3

Obstacles and possible solutions on the way to valley-polarized 2D materials

U. Schwingenschlögl

King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), Physical Science and Engineering Division (PSE), Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia

The presentation addresses possible realizations of valley-polarized 2D materials. The electronic properties of 2D MoTe₂ on EuO(111) substrate are discussed [1]. Strong spin polarization is induced in 2D MoTe₂ by proximity to the substrate. Due to spin-valley coupling, this spin polarization results in large valley polarization. Besides transition metal dichalcogenides, silicene and germanene are key materials for the field of valleytronics. However, interaction with the substrate, which is necessary to support the electronically active medium, becomes a major obstacle. We show that magnetically doped WS₂ can be used as substrate that avoids detrimental effects and at the same time induces valley polarization [2]. Broken inversion symmetry due to the presence of WS₂ opens a substantial band gap in silicene and germanene, and the induced spin polarization in conjunction with proximity-enhanced spin-orbit coupling creates sizable valley polarization. We also discuss the possibility to generate valley polarization in 2D MoS₂ by substitutional magnetic doping [3]. An unprecedented physical-chemical mechanism, based on delicate interplay between defect state and extended moment formation, is identified as source of the valley polarization.

References

- [1] Q. Zhang, S. A. Yang, W. Mi, Y. Cheng, and U. Schwingenschlögl. *Advanced Materials*, 2016, 28: 959.
- [2] S. Sattar, N. Singh, and U. Schwingenschlögl. *Physical Review B*, 2016, 94: 205415.
- [3] N. Singh and U. Schwingenschlögl. *Advanced Materials*, 2017, 29: 1600970.



ÇK-4

Gas Radiation Detectors – Contributions from Coimbra

André F.V. Cortez

Laboratory of Instrumentation, Biomedical Eng. and Radiation Physics (LIBPhys-UC)
Department of Physics, University of Coimbra, Rua Larga, Coimbra, Portugal

The use of electroluminescence as the amplification mechanism in gas detectors has the advantage of introducing much smaller fluctuations than the charge amplification mechanisms, allowing to obtain very competitive solutions. Some of the most relevant contributions of Coimbra in the development of gas radiation detectors based on electroluminescence and possible applications are reviewed.

Keyword: Electroluminescence, Gas radiation detectors, Large Volume Detectors, High Pressure, Secondary Scintillation

ÇK-5

Modeling Photo and Bias Induced Electron transfer and transport. An ab-initio perspective on kinetics

Barry Dunietz

Charge transfer and transport processes through molecular interfaces are ubiquitous as they play a crucial role in determining functionality of biological systems and in enabling energy conversion applications. We study computationally such processes to understand structure-function relationships at the molecular level.

I will describe our modeling of (1) Photovoltaic and charge transfer properties of organic semiconductors materials. (2) Charge transport through voltage-biased molecular scale bridges. Importantly we establish predictive computational scheme that addresses key challenges. Our studies are employed in conjunction with experimental efforts to design materials and applications that control and tune relevant physical properties.



ÇK-6

Historical Developments of Gas Detectors and New Generations

Yalçın Kalkan
Muş Alparslan University

Gas detectors; has been used for many years to detect radiation because of their detection rates, high resolution and cheap costs. After the invention of the Geiger Müller meter, these detectors have undergone a long-term research and development process and can now be used in many areas such as industry, fire security, biology, health etc. After the invention of the Geiger Müller counter, these detectors have undergone a long-term research and development process and can now be used in many areas such as industry, fire security, biology, health etc. In spite of the negative effects of ionic clusters, gas detectors are being used in experiments carried out in CERN with micro-structured models such as GEM and Micromegas. Muş Alparslan University team conducts theoretical and experimental research on determination of ionic cluster sizes, development of gaseous flame detectors, development of gaseous neutron detectors and their use in security sector, theoretical approaches of signal generation mechanisms in detectors within the framework of this CERN RD51 collaboration.



SÖZLÜ SUNUMLAR

S-01

BAZI POTASYUM BİLEŞİKLERİ İÇİN KÜTLE SOĞURMA KATSAYILARININ ÖLÇÜLMESİ

Burcu AKÇA^{1,*}

¹Ardahan Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, Ardahan

*Yazışılan yazar e-posta: burcuakca@ardahan.edu.tr

Özet: Bu çalışmada, bazı potasyum bileşiklerinin (KH_2PO_4 , KNO_3 , $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$, KOH , K_2HPO_4 , K_2SO_4 , KCl , KIO_3 , ve KI) kütle soğurma katsayıları Enerji Ayrımlı X-ışını Floresans Spektrometresi (EDXRFS) ve yüksek çözünürlüklü bir Si(Li) detektör kullanılarak ölçülmüştür. Elde edilen deneysel kütle soğurma katsayıları, WinXCom ve FFAST teorik değerleriyle karşılaştırılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Potasyum, EDXRFS, WinXCom, FFAST.

MEASUREMENT OF MASS ATTENUATION COEFFICIENTS FOR SOME POTASSIUM COMPOUNDS

Abstract: In this study, the mass attenuation coefficients of some potassium compounds (KH_2PO_4 , KNO_3 , $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$, KOH , K_2HPO_4 , K_2SO_4 , KCl , KIO_3 , and KI) have been measured by using Energy Dispersive X-ray Fluorescence Spectrometer (EDXRFS) and a high-resolution Si(Li) detector. Obtained experimental mass attenuation coefficients have been compared with WinXCom and FFAST theoretical values.

Keywords: Potassium, EDXRFS, WinXCom, FFAST.

S-02

YENİ BİR İNCE FİLM ÜRETİM TEKNİĞİ OLAN MANYETİK DÖNDÜREREK KAPLAMA TEKNİĞİ KULLANARAK ZnO İNCE FİMLERİN ÜRETİLMESİ

M. Fatih Gözükızıl^{1,*}, Sinan Temel², Nurgül Özbay³

¹ Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Enerji Sistemleri Mühendisliği ABD, Bilecik

² Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Merkezi Araştırma Laboratuvarı Uygulama ve Araştırma Merkezi, Bilecik

³ Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, Bilecik

*Yazışılan yazar e-posta: fatih.gozukizil@bilecik.edu.tr

Özet: ZnO ince filmler, literatürde ilk defa kullanılan “Sol-Gel Manyetik Döndürerek Kaplama Tekniği” ile elde edilmiştir. Geliştirilen bu teknikte döndürme işlemi, diğer pahalı tekniklerden farklı şekilde manyetik olarak gerçekleştirilmektedir. Elde edilen ZnO ince filmlerin yüzeyel özellikleri X-Işını Kırınımı (XRD), yüzeyel özellikleri ve kimyasal bileşimi Alan Emisyonu Taramalı Elektron Mikroskopisi-Enerji Dağılımlı X-Işını Spektroskopisi (FESEM-EDX) ve optik özellikleri UV-Vis. Spektroskopisi kullanılarak incelenmiştir. Bu sayede yeni geliştirilen ince film kaplama tekniğimizin ince film üretiminde kullanılabileceğini göstermek amaçlanmaktadır. Yapılan XRD analizlerinde elde edilen tüm ince filmlerin polikristal yapıda olduğu ve hegzagonal ZnO yapısı ile birebir örtüştüğü görülmüştür. FESEM görüntüleri incelendiğinde ise, filmin tüm yüzeyine hemen hemen homojen dağılmış nanoboyutta taneciklerden meydana geldiği görülmüştür. Ayrıca yüzeyde boşluklar olmadığı ve yığın şeklinde oluşumların bulunmadığı anlaşılmıştır. EDX analizi ile de ince filmlerin kimyasal bileşimleri elde edilmiş ve yapının ZnO olduğu ispatlanmıştır. UV-Vis Spektroskopisi ölçümleri ile elde edilen yasak enerji aralığı değerleri yaklaşık 3,3 eV olarak hesaplanmıştır ve bu değer literatürde daha önce ZnO ince filmler için bulunan değer ile uyum içerisindedir. Bu sonuçlara göre literatürde ilk defa kullanılan, “Manyetik Döndürerek Kaplama Tekniği” ile ZnO ince filmler daha basit ve ekonomik bir şekilde rahatlıkla üretilebilmiştir.

Anahtar Kelimeler: İnce film, ZnO, sol-gel, manyetik döndürerek kaplama.

DEPOSITION OF ZnO THIN FILMS BY USING A NOVEL TECHNIQUE: MAGNETIC SPIN COATING

Abstract: ZnO thin films were deposited by using Sol-Gel Magnetic Spin Coating Technique which is used for the first time in the literature. In this technique, spin process is performed magnetically. Structural, morphological and optical properties of obtained ZnO thin films were investigated by X-Ray Diffraction (XRD), Field Emission Scanning Electron Microscopy- Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy (FESEM-EDX) and UV-Vis. spectroscopy respectively. Thus, it is aimed to show that our newly developed thin film deposition technique can be used in thin film production. XRD analysis showed that all thin films were polycrystalline nature and matched with hexagonal ZnO structure. When FESEM images were examined, it was seen that the film consisted of nano particles which were almost homogeneously distributed over the whole surface. It was also found that there were no gaps on the surface and there were no stack formations. The chemical composition of the thin films was obtained by EDX analysis and the structure was proved to be ZnO. The band gap values obtained by UV-Vis Spectroscopy measurements, were calculated to be approximately 3.3 eV and this value is consistent with the value found in the literature for ZnO thin films previously. According to these results, ZnO thin films could be produced more easily and economically with Magnetic Spin Coating Technique which is used for the first time in the literature.

Keywords: Thin film, ZnO, sol-gel, magnetic spin coating.

S-03

İKİ GRUPLU DİFÜZYON TEORİSİ YARDIMIYLA KRİTİK NÜKLEER REAKTÖR EBATININ TESPİTİ

Murat Koçak^{1,*}, Ali İhsan Göker²

¹Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Enerji Sistemleri Mühendisliği ABD, Bilecik

²Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü, Bilecik

*Yazışılan yazar e-posta: muratkocak06@outlook.com

Özet: Fosil yakıtların haricinde kesintisiz güç kaynağı olarak kullanılacak bilinen tek enerji kaynağı nükleer enerjidir. Nükleer enerjinin açığa çıkarılması ise nükleer reaktörlerde gerçekleşen fisyon reaksiyonuyla meydana gelmektedir. Fisyon reaksiyonunun kontrol altında tutulabilmesi ise kritiklik şartının sağlanmasına bağlıdır. Bu çalışmada, fisyon reaksiyonunu tetikleyen nötronlar düşük enerjili termal nötronlar ve yüksek enerjili hızlı nötronlar olmak üzere iki ayrı grup halinde değerlendirilmiştir. Bunun sonucunda ortaya çıkan iki gruplu nötron difüzyon teorisi iki gruplu kritiklik denklemine yol açar. Verilen bir reaktör kompozisyonu için kritikliği sağlayan reaktör ebatı iki gruplu kritiklik denklemini numerik olarak çözerek tespit edilmiştir. Bu yolla, küresel geometride çekirdek yarıçapı, yansıtıcı kalınlığı ve ekstrapolasyon uzunluğundaki değişimlerin kritik reaktör ebatı üzerindeki etkileri detaylı bir şekilde araştırılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Nükleer enerji, Fisyon, Kritiklik, Nötron difüzyon

DETERMINATION OF THE CRITICAL NUCLEAR REACTOR SIZE VIA THE TWO GROUP DIFFUSION THEORY

Abstract: The only known energy source that can be used as a continuous power source except fossil fuels is the nuclear energy. Exploitation of the nuclear energy takes place via the fission reaction that takes place inside the nuclear reactors. Being able to keep the fission reaction under control depends on satisfying the criticality condition. In this work, the neutrons that trigger the fission reaction have been regarded as two different groups that are low energy thermal neutrons and high energy fast neutrons. Two group neutron diffusion theory that arises as a result of this yields two group criticality equation. The reactor size that satisfies the criticality condition for a given reactor composition has been determined by solving the two group criticality equation numerically. In this way, the effects of the changes in the core radius, the reflector thickness and the extrapolation length on the critical reactor size in spherical geometry have been investigated in detail.

Keywords: Nuclear energy, Fission, Criticality, Neutron diffusion

S-04

**UNDERSTANDING OF THE QUANTUM NATURE OF ELECTRON
TRANSFER AND EXPLAINING THE SPECTRAL ASYMMETRIES IN
PHOTOSYNTHETIC BACTERIO REACTION CENTER: *RHODOBACTER
SPHAEROIDES***

Huseyin Aksu^{1,*}, Alexander Schubert², Eitan Geva³, Barry Dunietz¹

¹*Kent State University, Department of Chemistry and Biochemistry, Kent, Ohio / USA*

²*Friedrich-Schiller University, Institute of Physical Chemistry, Jena / Germany*

³*University of Michigan, Department of Chemistry, Ann Arbor, Michigan / USA*

*Yazışılan yazar e-posta: haksu@kent.edu

Abstract: Spectral peaks of the special pair (P) and adjacent pigments in the bacterial reaction center (BRC) are investigated computationally. We employ a novel computational framework based on a polarization-consistent treatment of the dielectric environment, combining the polarizable continuum model (PCM) with time-dependent screened range-separated hybrid density functional theory (TD-SRSH-DFT). Our calculations quantitatively reproduce the recently measured spectral peak splits between P states, and spectral asymmetries within pairs of the adjacent bacteriochlorophyll a (BChl) and bacteriopheophytin a (BPhe) pigments. Measured spectral trends are correctly reproduced based on X-Ray resolved structures (1PCR and 2J8C), and where the effect of neighboring pigments on the electronic structure is addressed through an effective dielectric environment. We also reproduce the spectral shifts due to the BChl and BPhe pigment pairs, where the pigment of branch A is affected by a larger polarization dielectric environment. We find in the BChl case a positive shift and in the case of the BPhe a negative shift in agreement with the experimental measurements only with SRSH energies. The special pair found at the core of bacterial reaction centers (BRCs) a dimer of bacteriochlorophyll a (BChl), is known to play a key role in the functionality of the photosystem, serving as a precursor to the photosynthesis process. We have calculated the charge transfer rates within the pair and investigate the rectification ratio. We identify the roles of stereo structural asymmetry between the two BChl units and of the dielectric environment in stabilizing and discriminating between the CT processes.

Keywords: Charge transfer, Fermi golden rate, polarizable continuum model, screened range separated DFT functional

S-05

GAUSYAN KABUK ORBITALLERİ İÇİN ATOM İNTEGRALLERİNİN HESAPLANMASI *

Ercan ŞAHİN^{1,**}, Telhat ÖZDOĞAN²

¹Amasya Üniversitesi, Taşova Yüksel Akın Meslek Yüksekokulu, Taşova, Amasya

²Amasya Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, BÖTE Bölümü, Amasya

**Yazışılan yazar e-posta: ercan.sahin@amasya.edu.tr

Özet: Gaussian kabuk orbitalleri için, bir ve iki elektronlu atom integralleri yardımcı fonksiyonlar ve sayısal integrasyon yöntemleri kullanılarak incelenmiştir. Elde edilen ifadelerin keyfi kuantum sayıları ve diğer orbital parametreleri için geçerli olduğu gösterilmiştir. Ayrıca, Gaussian kabuk orbitalleri kullanılarak bazı atomlar için Hartree-Fock-Roothaan hesaplamaları da yapılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Gaussian kabuk orbitali, Hartree-Fock-Roothaan metodu, atom integralleri

**Bu çalışma Amasya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinasyon Birimi tarafından desteklenmiştir. Proje numarası: FMB-BAP 18-0362.*

EVALUATION OF ATOMIC INTEGRALS OVER GAUSSIAN SHELL ORBITALS *

Abstract: One- and two-electron atomic integrals over Gaussian shell orbitals were examined by the use of auxiliary functions and numerical integration methods. It is shown that the relationships obtained are valid for the arbitrary quantum numbers and other orbital parameters. Also, the Hartree-Fock-Roothaan calculations were performed for some atoms by using Gaussian shell orbitals.

Keywords: Gaussian shell orbital, Hartree-Fock-Roothaan method, atomic integrals

**This study was supported by The Scientific Research Projects Coordination Unit of Amasya University. Project number: FMB-BAP 18-0362.*

S-06

FİZİĞİN ADLİ BİLİMLERDEKİ UYGULAMALARI

Aylin YALÇIN SARİBEY^{1,2}

¹Üsküdar Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Adli Bilimler Bölümü, İstanbul

²Üsküdar Üniversitesi, Bağımlılık ve Adli Bilimler Enstitüsü, Adli Bilimler Anabilim Dalı, İstanbul
aylin.yalcinsaribey@uskudar.edu.tr

Özet: Adli Bilimler, olay yerinden elde edilen delillerin bilimsel yöntemler kullanılarak incelenmesi ile suçun aydınlatılması için yapılan teknik değerlendirmelerdir. Delillerin incelenmesi sırasında kimya, biyoloji, fizik ve daha pek çok uzmanlık alanından faydalanılmaktadır. Adli amaçlı incelemelerde fizik kilit öneme sahiptir. Araç kazaları, patlama sonrası olay yeri inceleme, kan sıçraması model analizi gibi pek çok alan, incelemelerin karmaşıklığından dolayı özel bilgi, birikim, eğitim ve beceri gerektirmektedir. Bu alanların yanında balistik incelemelerde de fizik bilgisi gerekmektedir. Ateşli silahların kullanıldığı olaylar sonrasında mermi çekirdeğinin hareketi, menzili, hedef yüzeyde yaptığı tahribat olayda kullanılan silahın tespiti açısından büyük önem taşımaktadır. Olay yeri incelemecileri ve soruşturma ekipleri, bir suçun tam olarak nasıl gerçekleştiğini anlamak için olayın yeniden canlandırmasını yaparlar ki bu da büyük ölçüde fizik bilgisi gerektirmektedir. Ayrıca kan lekesi model analizi ile olay yerindeki kan lekeleri değerlendirilerek şekil, büyüklük, çarpma açısı, dağılımlarına göre olayın nasıl, nerede, ne tür alet kullanılarak meydana geldiği anlaşılmasına çalışılmaktadır. Tüm bu alanlarda fizik bilgisine ve eğitimine ihtiyaç duyulmaktadır. Bu çalışmada fiziğin adli bilimler alanında kullanımını ele alınmıştır.

Anahtar Kelimeler: Adli Bilimler, adli fizik, olay yeri, balistik

S-07

INVESTIGATION OF ELECTRONIC STRUCTURE AND THERMAL PROPERTIES OF NANO-SATURN FOR FUNCTIONAL MATERIALS

Mustafa Kurban *

Kırşehir Ahi Evran University, Department of Electronics and Automation, Kırşehir

**Yazışılan yazar e-posta: mkurbanphys@gmail.com*

Abstract: In recent years, nano-Saturn systems have attracted a lot of attention because a ring moiety gives rise to an attractive interaction in its cavity where there is a spherical molecule like fullerene (C_{60}). In this regard, nano-Saturn including of disk-type hydrocarbon rings has been studied in this study in detail. Density functionals based tight binding (DFTB) method has been performed in the calculations. The nano-Saturn structure is composed of a C_{60} in the cavity, anthracene as a ring. Firstly, the electronic and structural properties anthracene molecule have been investigated using self-consistent redistribution of Mulliken charges (SCC) long-range corrected (LC)-DFTB and SCC-DFTB methods to get reasonable results with experimental data. Later, the electronic structure of anthracene ring structure, C_{60} , and nano-Saturn structures have been researched. HOMO, LUMO, band gap energies, Fermi levels, dipole moments and absorption spectra were investigated for these structures. Moreover, the electronic structure of nano-Saturn was researched under heat treatment (up to 600 K). The obtained results show that nano-Saturn structure has more desirable properties than anthracene, anthracene ring structure and C_{60} . For instance, the band gap of nano-Saturn (1.73 eV) is smaller than anthracene (2.95 eV) anthracene ring (2.25 eV) and C_{60} (2.22 eV). The reduction in the bandgap means that less energy is needed for photogenerated charge carriers. In addition, the results are compared with experimental data in the literature.

Keywords: NanoSaturn; Hydrocarbon rings; Band gap; Electronic structure; DFTB

S-08

SERBEST RADİKAL İÇEREN ÇÖZELTİLERDE OVERHAUSER DİNAMİK NÜKLEER POLARİZASYON BÜYÜMELERİNİN İNCELENMESİ

Handan Engin Kırımlı^{1,*}

¹Bursa Uludağ Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Bursa

*Yazışılan yazar e-posta: hengin@uludag.edu.tr

Özet: Polarizasyon tekniklerinden biri olan Overhauser dinamik nükleer polarizasyon (DNP) tekniği, nükleer manyetik rezonans deneylerinden elde edilen sinyallerde belirgin bir artış sağlayabilir. Bu teknikle, Tempo serbest radikale sahip üç farklı çözücü için ¹H Overhauser dinamik nükleer polarizasyon büyümeleri 1.5 mT'lık manyetik alanda incelendi. Overhauser büyümeleri ölçüldü. Bu sinyal büyümeleri, serbest radikalın çiftlenmemiş elektronu ile çözgündeki hidrojen çekirdeği arasındaki etkileşmelerin skaler olduğunu göstermektedir. Gözlenen büyümeler -0.005 ile -0.139 aralığında değişmektedir. Ek olarak, ESR frekansına bağlı sinyal büyüme faktörleri ölçülerek tüm örneklerin EPR spektrumları elde edildi. Çözgen içindeki serbest radikal Tempo'dan elde edilen EPR spektrumlarının Gauss eğrilerinden oluştuğu gözlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Dinamik nükleer polarizasyon, Overhauser etkisi, Nükleer manyetik rezonans, Serbest radikal.

A STUDY ON OVERHAUSER DYNAMIC NUCLEAR POLARIZATION ENHANCEMENTS IN SOLUTIONS INCLUDING FREE RADICAL

Abstract: Polarization techniques, such as Overhauser dynamic nuclear polarization (DNP), can provide a significant increase in the signal obtained from nuclear magnetic resonance experiments. By this technique, studies of the ¹H Overhauser dynamic nuclear polarization enhancements at 1.5 mT were investigated for three different solvents with the Tempo free radical. Overhauser enhancements were measured. This is indicating that there are scalar interactions between the unpaired electron of the free radical and the hydrogen nuclei of solvents. The observed enhancements vary from -0.005 and -0.139. Additionally, By measuring signal enhancement factors which depend on ESR frequency, EPR spectra of all the samples were obtained. It was seen that EPR spectra obtained from Tempo free radical in solvents consist of Gaussian curves.

Keywords: Dynamic nuclear polarization, Overhauser effect, Nuclear magnetic resonance, Free radical.

S-09

Investigation of Composite Gel Dielectric Materials for OFET Applications

Arif Kösemen

MuşAlparslan University, Department of Physics, 49250Muş, Turkey

Abstract: In today's scientific world, Organic field effect transistors (OFETs) are being researched intensively and take their place in technological applications. However, due to the low mobility values of organic materials, they have problems such as not having a low operating voltage, high mobility and not stable structure for commercial applications [1-3]. To overcome such problems several fabrication methods and material combinations have been investigated such as self-assembled monolayer dielectrics (SAM), Organic-Inorganic structures, high-k inorganic thin film dielectrics, organic-inorganic composite dielectrics [4,5]. Solid state composite dielectric materials frequently are used as a dielectric material for OFET application [6,]. However, the use of these structures poses important problems such as the increase in leakage currents due to the deterioration of surface morphology and the decrease in on / off ratio. Because of that, using of gel form composite dielectric materials in the OFET structure suggested and investigated in this study. This proposed structure both solves the problems caused by surface roughness and reduces the operation voltages of the OFETs.

References

- 1) Orgiu, E.; Samori, P. 25th Anniversary Article: Organic Electronics Marries Photochromism: Generation of Multifunctional Interfaces, Materials, and Devices. *Advanced Materials*. 2014, pp 1827–1844.
- 2) Veres, J.; Ogier, S.; Lloyd, G.; De Leeuw, D. Gate Insulators in Organic Field-Effect Transistors. *Chemistry of Materials*. 2004, pp 4543–4555.
- 3) Wang, Q.; Juarez-Perez, E. J.; Jiang, S.; Qiu, L.; Ono, L. K.; Sasaki, T.; Wang, X.; Shi, Y.; Zheng, Y.; Qi, Y.; et al. Spin-Coated Crystalline Molecular Monolayers for Performance Enhancement in Organic Field-Effect Transistors. *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, 9 (6), 1318–1323.
- 4) Hu, B. L.; Zhang, K.; An, C.; Pisula, W.; Baumgarten, M., Thiadiazoloquinoxaline-Fused Naphthalenediimides for n-Type Organic Field-Effect Transistors (OFETs). *Org. Lett.* 2017, 19 (23), 6300–6303.
- 5) M. E. Harb, S. Ebrahim, M. Soliman, M. Shabana, Fabrication of Organic Transistors Using Nanomaterials for Sensing Applications, *Journal of Electronic Materials*, 2018, 47, 1, 353.
- 6) Ha, Y.-g.; Jeong, S.; Wu, J.; Kim, M.-G.; Dravid, V. P.; Facchetti, A.; Marks, T. J. Flexible Low-Voltage Organic Thin-Film Transistors Enabled by Low-Temperature, Ambient Solution-Processable Inorganic/Organic Hybrid Gate Dielectrics. *J. Am. Chem. Soc.* 2010, 132, 17426–17434.

S-10

YARDIMCI FONKSİYONLARI KULLANARAK SLATER TIPLİ ORBİTALLERİNE ÖRTME İNTEGRALLERİNİN GENELLEŞTİRİLMESİ

**Zekayi ANDIÇ, zekayiandic@hotmail.com*

¹Çanakkale Onsekiz Mart üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Çanakkale

Özet: Bu çalışmada, yardımcı fonksiyonlar kullanılarak, tamsayı ve tamsayı olmayan n χ -Slater tipli yörüngelerin (χ -ISTO ve χ -NISTO) örtme integralleri incelenmiştir. Örtme integrallerinin kuantum sayıları ve yörünge konumlarının keyfi değerleri için hesaplamalar yapılmıştır. Hesaplamaların sonuçları literatürle karşılaştırıldı ve tutarlı olduğu gösterildi.

Anahtar Kelimeler: Slater Tip Orbitaller, Örtme integralleri, Yardımcı fonksiyonlar

GENERALIZATION OF OVERLAP INTEGRALS USING AUXILIARY FUNCTIONS FOR SLATER TYPE ORBITALS

Abstract In this study, by using auxiliary functions, the overlap integrals of n S-Slater type orbit (χ -ISTO and χ -NISTO) are investigated. Calculations were made for the arbitrary values of the quantum numbers and orbit positions of the overlap integrals. The results of the calculations were compared with the literature and shown to be consistent.

Keywords: Slater type orbitals, Overlap integrals, Auxiliary functions

S-11

Mn ve Sn katkı ZnO nanopartiküllerinin Sol-gel metodu ile elde edilmesi ve X-ışını ile yapısının aydınlatılması

Asli A. Kaya

Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Bilecik, Türkiye

e-mail: asli.kaya@bilecik.edu.tr

Özet: II-IV. grup yarı iletken sınıfında yer alan çinko oksit (ZnO) nanopartiküllerine farklı geçiş metalleri katkılандığında band boşluğunda değişimler meydana gelmektedir. Bu değişimler malzemenin uygulama alanına göre kullanım alanlarını genişletmektedir. Bu nedenle, özellikle geçiş metallerinin katkılандığı ZnO nanopartiküllerinin sentezi ve yapılarının aydınlatılması yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. Bu çalışmada, saf ZnO, %0,5, 1,5 ve 2,5 oranlarında Mn ve Sn katkı çinko oksit nanopartiküllerinin sol-gel metodu ile elde edilmiştir. Elde edilen nanopartiküllerin yapıları X-ışını toz difraksiyon yöntemi ile aydınlatılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Çinko oksit, X-ışını analizi, Sol-gel metodu

Synthesis of Mn and Sn doped ZnO nanoparticles by Sol-gel method and characterization of their structures by X-ray

Abstract

When different transition metals are added to the zinc oxide (ZnO) nanoparticles in the class of II-IV group semiconductor, changes occur in the band gap. These changes extend the usage areas of the material according to the application area. For this reason, the synthesis of ZnO nanoparticles to which transition metals are doped and the elucidation of their structures are extensively studied. In this study, pure ZnO, Mn and Sn doping at 0.5, 1.5 and 2.5% of zinc oxide nanoparticles were obtained by sol-gel method. The structures of nanoparticles were illuminated by X-ray powder diffraction method.

Keywords: Zinc oxide, X-ray analysis, Sol-gel method.

S-12

A New Way to Define Cluster Ions in MPGDs

Ayşe Nur Mutlu

Muş Alparslan University

Email: aysemutlu4906@gmail.com

Abstract:

Gas detectors such as Micromegas, TPC's and Drift Tubes are suffering about ions because of their effect on signal. The idea is that ions disrupting electric field in the detector volume so scientists are trying different ways to overcome this problem. In fact, our work in recent years showed that initial ions react carrier gas so cluster ions are forming at the last (not ions). By placing a detector in the detector, we can accurately measure the dimensions of the ionic clusters with a new experimental system we have recently developed. Measured values show that ionic clusters are heavier and slower than we know, so they affect the signal than we expect. Solutions and simulation programs produced for the ion problem should be reviewed in the light of these data.

KEYWORDS: Gas radiation detectors, Definition of cluster ions.

S-13

STUDY OF STRUCTURAL AND OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF HEXAGONAL ZnO NANOPARTICLES

Hasan Kurban^{1,2}, Mustafa Kurban^{3*}

¹ *Computer Science Department, Indiana University, Bloomington, 47405 Indiana, USA.*

² *Computer Engineering Department, Siirt University, 56100 Siirt, Turkey.*

³ *Kırşehir Ahi Evran University, Department of Electronics and Automation, Kırşehir*

**Yazışılan yazar e-posta: mkurbanphys@gmail.com*

Abstract:

In this work, we study the structural and electronic properties of ZnO nanoparticle (NP) using the density-functional tight-binding (DFTB) method. First, a ZnO NP with ~0.9 nm including 258 atoms was characterized from 30×30×30 supercell based on the hexagonal crystal structure of ZnO. Second, some electronic properties, such as HOMO, LUMO, bandgap energies, Fermi levels and density of states (DOS), of undoped ZnO NP were calculated. These properties were also analyzed in terms of temperature (up to 1000 K). The structural analysis, such as the number of bonds, segregation phenomena and radial distribution function (RDF) of two-body interactions such as Zn-Zn, O-O, Zn-O were investigated using novel algorithms. The results reveal that the number of Zn-Zn bonds is greater than that of O-O, and Zn-O bonds; thus, it appears that Zn atoms have a greater preference for O atoms. From the density of state (DOS) analysis, our experiments show that ZnO NPs demonstrate a semiconductor-like character. The HOMO-LUMO energy gap increases while the temperature goes up. The results are found to be compatible with experimental data.

Keywords: ZnO; Nanoparticles; Band gap; Electronic structure

S-14

Atomların Elektronik Yapı Hesaplamaları için Baz Kümesi Olarak Kısıtlanmamış Üstel Tipli Fonksiyonların Hassasiyeti

Murat Ertürk^{1,*}, Gürkan Demirdak¹, Meral Coşkun¹

¹Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Çanakkale
*Yazışılan yazar e-posta: merturk@comu.edu.tr

Özet: Atom orbitalleri merkezi atom çekirdeğinde olan üstel tipli baz fonksiyonlarının üst üste binmesi ile ifade edilebilmektedir. Literatürden bilindiği gibi Hartree-Fock-Roothaan (HFR) hesaplamalarında üstel tipli baz fonksiyonları birçok dezavantaja sahip olan Gausyan tipli baz fonksiyonlarından daha kesin ve hassas sonuçlar elde edilmesini sağlayabilir. Bu yüzden, üstel tipli baz fonksiyonlarının parametrelerinin kısıtlanmadan kullanımı atomik özelliklerin hesaplanmasında önemli bir role sahip olacaktır.

Bu çalışmada, HFR yaklaşımında hesaplama büyüklüğünü etkilemeden kosinüs hiperbolik ve genelleştirilmiş radyal fonksiyonları kullanılarak bazı tam üstel tipli fonksiyonlar geliştirilmiştir. Atomların enerjisinin ve özelliklerinin hesaplanmasında kullanılan bu değiştirilmiş baz kümelerinin performansları literatürde kullanılan diğer üstel tipli baz fonksiyonları ile karşılaştırılmıştır. Özet olarak sonuçlar tablolarda verilecektir.

Bu çalışma Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi Rektörlüğü Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi (BAP) FBA-2019-2888 Nolu BAP Projesi Kapsamında desteklenmektedir.

Anahtar Kelimeler: Üstel tipli orbital, Hartree-Fock-Roothaan yöntemi, Genelleştirilmiş üstel fonksiyon

Accuracy of Unrestricted Exponential Type Functions as a basis set for Electronic Structure Calculations of Atoms

Abstract: Atomic orbitals may be represented as superpositions of exponential type basis functions centered on the atomic nuclei. As is well known that Hartree-Fock-Roothaan (HFR) calculations can potentially be much more precise with exponential type basis functions than mostly used Gaussian basis functions which have many disadvantages. Therefore, use of exponential type basis functions without any restriction will play an important role in the calculations of atomic properties.

In this work, some complete sets of exponential type functions in HFR approximation are improved with the generalized radial functions and hyperbolic cosine functions as possible as without sacrifice the efficiency of computational cost. The performance of these modified atomic basis sets in the calculations of atomic energy and their properties is also compared to those obtained by using other exponential type functions used in the literature. A summary of results are given in tables.

This work is financially supported by the Research fund of the Canakkale Onsekiz Mart University, Project ID: FBA-2019-2888.

Keywords: Exponential type orbital, Hartree-Fock-Roothaan method, Generalized exponential function.

S-15

KEMİK DEFEKTLERİN ONARIMINDA 3D VE BİYOMALZEMELER; BOR PLA ÜRETİMİ

Meryem Cansu Şahin^{1,*}, İsmail Kaya², Hasan Emre Aydın³

¹Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya

²Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Beyin ve Sinir Cerrahisi ABD, Kütahya

³Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Beyin ve Sinir Cerrahisi ABD, Kütahya

*Yazışılan yazar e-posta: meryemcansu.sahin@ksbu.edu.tr

Özet: Kemik hücresi iyileşmesi ve antibakteriyel özelliği nedeniyle bor, doğru oranlarda kullanıldığında medikal ürünü üretiminde bir çok avantajı bir arada bulunduran bir elementtir. PLA gibi biyoyumluluk, biyobozunurluk ve termal plastisite nedeniyle kemik doku mühendisliğinde tercih edilen bir polimer ile borun birleşimi cerrahi branşlarda kullanılan bir çok ekipmanın üretiminde avantaj sağlayacaktır.

Çalışmamızın amacı kemik defektlerin onarımında polilaktik asidin kullanım amacı doğrultusunda bu ürünün antimikrobiyal özelliğini sağlamak için bor katkılanarak medikal alanda uygulama alanlarını arttırarak yeni kullanım sahaları oluşturabilmektir.

Üretimde kullanılan malzeme ve yöntem, “PLA’nın Toz Hale Getirilmesi”, “PLA tozunun eritilmesi”, “Eriyik haldeki PLA’ya bor katkılanması” “Bor-PLA karışımının soğutulmuş pellet haline getirilmesi” ve “Mekanik testler” alt başlıkları altında detaylı olarak bahsedilmiştir.

Elementel bor ve PLA karışımından elde edilen filament ile üretilen numunenin sertlik değeri yaklaşık 17.5 Hv olarak ölçülmüştür. Tüm numuneler için sertlik değerinin 3 mm ile 5 mm arasında arttığı gözlenmiştir.

Bor kombinasyonu ile başladığımız ve başarılı sonuçlar elde ettiğimiz bilimsel çalışmalarımızı farklı biyomalzemeler ile birlikte daha geniş bir kullanım alanına taşımayı ve kullanabileceğimiz yeni faydalı modeller bulmayı planlıyoruz.

Anahtar Kelimeler: Elementel Bor, Polilaktik Asit, Doku Mühendisliği, Biyomalzeme.

3D AND BIOMATERIALS IN BONE DEFECT REPAIR; BORON PLA PRODUCTION

Abstract: Due to its bone cell healing and antibacterial properties, boron is an element which has many advantages in the production of medical product when used in the correct proportions. Combination of a preferred polymer in bone tissue engineering with boron, such as PLA due to

biocompatibility, biodegradability and thermal plasticity, will provide advantages in the production of many equipments used in surgical branches.

The aim of our study is to add boron in order to provide antimicrobial properties of polylactic acid in the repair of bone defects.

Materials and methods used in production, detaylı PLA Powdering ”,“ PLA powder melting ”, bor Boron doped to molten PLA” soğutul Pelletizing boron-PLA mixture ”and“ Mechanical tests olarak It has been mentioned.

Hardness value of the sample produced with filament acquired from elemental boron and PLA mixture was measured nearly 17.5 Hv. For all samples, hardness value was observed to increase between 3 mm and 5 mm.

We plan to carry out our scientific studies, which we started with the combination of boron and achieved successful results, with different biomaterials to a wider area of use and to find new useful models that we can use.

Keywords: Elemental Boron, Polylactic Acid, Tissue Engineering, Biomaterials.

S-16

Bazı oksim moleküllerinin moleküler docking çalışmaları: Substituent etkisinin incelenmesi

Yunus Kaya

Bursa Teknik Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Kimya Bölümü, Bursa, Türkiye

e-mail:yunus.kaya@btu.edu.tr

Özet

Bu çalışmada, bazı fonksiyonel gruplara sahip oksim molekülleri modellenerek, autodock vina programı yardımıyla DNA ile etkileşimleri kuramsal olarak incelenmiştir. Etkileşimlerde eklenen grupların etkileri tartışılmıştır. Farklı gruplara sahip 57 oksim molekülü B3LYP/6-311++G(d,p) yöntem ve taban kümesinde optimize edilerek .pdbqt dosyaları hazırlanmıştır. Elde edilen moleküllerin DNA ile etkileşim çalışmaları sonucunda sülfonil grubu içeren yapının en iyi kenetlenmeyi gerçekleştirdiği belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Oksim, DNA, Moleküler docking, Autodoc vina

Molecular docking studies of some oxime molecules: Investigation of substituent effect

Abstract

In this study, oxime molecules with some functional groups were modeled and their interactions with DNA were examined theoretically with the help of autodock vina program. The effects of the added groups in the interactions were discussed. 57 oxime molecules with different groups were optimized in B3LYP / 6-311 ++ G (d, p) method and base set .pdbqt files were prepared. As a result of the interaction studies of the obtained molecules with DNA, it was determined that the structure containing the sulfonyl group had the best coupling

Keywords: Oxime, DNA, Molecular docking, Autodock vina

S-17

GENELLEŞTİRİLMİŞ SPİN-S MANYETİK İKİLİ ALAŞIMLARIN HİSTEREZİS KARAKTERİSTİKLERİ

Gülşen KARAKOYUN¹, Ümit AKINCI^{2,*}

¹Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Nanobilim ve Nanomühendislik Anabilim Dalı, İzmir

²Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, İzmir

*Yazışılan yazar e-posta: umit.akinci@deu.edu.tr

Özet: İkili alaşımların kritik ve termodinamik özellikleri Bethe-Peierls yaklaşımı [1], ortalama alan yaklaşımı [2,3], etkin alan yaklaşımı [4,5,6] ve Monte Carlo simülasyonu [7,8] gibi çeşitli yaklaşımlarla incelenmiştir. Son araştırmalarda, manyetik ikili alaşım sistemlerinin belirli konsantrasyon değerlerinde ikili histerezis davranışı sergilediği sonucuna varılmıştır [9]. Ayrıca, manyetik ikili alaşımın rasgele alan dağılımının etkisi de incelenmiştir [10].

Bu çalışmada, $A_c B_{1-c}$ ile temsil edilen genelleştirilmiş spin-S ikili alaşımının histerezis özellikleri, etkili alan yaklaşımı çerçevesinde incelenmiştir. A tipi (spin-S) ve B tipi (spin-S) atomlardan oluşan ikili alaşım sisteminin atomları bir örgü üzerinde rastgele dağıtılmıştır. İki atom tipinin hem tamsayı hem de yarı tamsayı spin modelleri incelenmiştir. İkili alaşım sisteminin taban durum manyetizasyonları ve histerezis döngü alanları karşılaştırılarak verilen Hamiltoniyen parametre setleri için ikili histerezis davranışları elde edilmiştir. Ayrıca, histerezis döngü alanı, kalıcı mıknatıslanma ve koersif alan gibi histerezis karakteristiklerinin nicelikleri incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: İkili Alaşım, Etkin Alan Yaklaşımı, Histerezis Karakteristikleri.

Referanslar

- [1] T. Ishikawa, T. Oguchi, J. Phys. Soc. Jpn. 44 (1978) 1097
- [2] J.A. Plascak, Physica A 198 (1993) 655.
- [3] T. Kaneyoshi, J. Magn. Mater. 140 (1995) 261.
- [4] R. Honmura, A.F. Khater, I.P. Fittipaldi, T. Kaneyoshi, Solid State Commun. 41 (1982) 385.
- [5] T.Kaneyoshi, Z.Y. Li, Phys. Rev. B 35 (1987) 1869.
- [6] Augusto S. Freitas, Douglas F. de Albuquerque, Solid State Commun. 225 (2016) 44.
- [7] P.D. Scholten, Phys. Rev. B 32 (1985) 345.
- [8] Tanmoy Ghosh, Ambika Prasad Jena, Abhijit Mookerjee, J. Alloy. Compd. 639 (2015) 583.
- [9] Ü. Akinci, G. Karakoyun, Physica B, 521, 365 (2017).
- [10] G. Karakoyun, Ü. Akinci, Physica A, 510, 407-414 (2018).

HYSTERESIS CHARACTERISTICS OF GENERALIZED SPIN-S MAGNETIC BINARY ALLOYS

Abstract: Critical and thermodynamical properties of the binary alloys have been investigated by various methods such as Bethe-Peierls Approximation [1], mean-field approximation (MFA) [2,3], effective field theory (EFT) [4,5,6] and Monte Carlo (MC) simulation [7,8]. In recent studies, it has been concluded that magnetic binary alloy systems exhibit double hysteresis behavior at certain concentration values [9]. Besides, the effect of random field distribution of the magnetic binary alloy has also been studied [10].

In this study, hysteresis characteristics of the generalized spin-S binary alloy represented by the formula A_cB_{1-c} have been investigated within the framework of effective field approximation. The binary system A_cB_{1-c} consists of type A (spin-S) and type B (spin-S) atoms which are randomly distributed on a regular lattice. Both integer and half-integer spin models of two atomic types are examined. Ground state magnetizations and hysteresis loop areas of binary alloy systems are compared with each other and double hysteresis behaviors are obtained for a given set of Hamiltonian parameters. Besides, the quantities of hysteresis characteristics as the hysteresis loop area, remanent magnetization, and coercive field have been investigated.

Keywords: Binary Alloy, Effective Field Theory, Hysteresis Characteristics.

References

- [1] T. Ishikawa, T. Oguchi, J. Phys. Soc. Jpn. 44 (1978) 1097
- [2] J.A. Plascak, Physica A 198 (1993) 655.
- [3] T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater. 140 (1995) 261.
- [4] R. Honmura, A.F. Khater, I.P. Fittipaldi, T. Kaneyoshi, Solid State Commun. 41 (1982) 385.
- [5] T.Kaneyoshi, Z.Y. Li, Phys. Rev. B 35 (1987) 1869.
- [6] Augusto S. Freitas, Douglas F. de Albuquerque, Solid State Commun. 225 (2016) 44.
- [7] P.D. Scholten, Phys. Rev. B 32 (1985) 345.
- [8] Tanmoy Ghosh, Ambika Prasad Jena, Abhijit Mookerjee, J. Alloy. Compd. 639 (2015) 583.
- [9] Ü. Akıncı, G. Karakoyun, Physica B, 521, 365 (2017).
- [10] G. Karakoyun, Ü. Akıncı, Physica A, 510, 407-414 (2018).

S-18

Atomik Hartree-Fock-Roothaan Hesaplamalarında Genelleştirilmiş Öz-sürtünme Üstel Tipli Baz Takımları

Gürkan Demirdak^{1*}, Murat Ertürk¹.

¹Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Çanakkale

*Yazışılan yazar e-posta: gurkan_demirdak@yahoo.com.tr

Özet: Bu çalışmada, Hartree-Fock Roothaan (HFR) yöntemi ile atomik elektronik yapı hesaplamalarında baz fonksiyonu olarak genelleştirilmiş öz-sürtünme üstel tipli fonksiyonlar (ÖSÜTF) kullanılmıştır. ÖSÜTF'lerin radyal kısmında r yerine r^u kullanılması ile fonksiyonlar dalga fonksiyonu parametrelerinin optimizasyonu işlemlerinde daha fazla esnekliğe sahip olmaktadır. Yeni baz fonksiyonu için optimize edilmiş parametreler, atom numarası $Z < 21$ olan bazı atomların temel durum ve ± 1 yüklü iyonların en düşük enerjili terim için minimal baz yaklaşımı ile HFR hesaplamalarında toplam enerjilerinin minimumluğuna dayalı olarak yapılan optimizasyon ile elde edilmiştir. Ayrıca her biri için kinetik enerji, potansiyel enerji virial oranları ve orbital enerjileri hesaplanmıştır. Ar atomu, Cl anyonu ve K^+ katyonu için her orbitale ait orbital momentlerinin beklenen değerleri $\langle r^n \rangle$ $n = -3$ 'ten 2 'ye kadar hesaplanmıştır. Böylece yeni baz fonksiyonları ile oluşturulan atom orbitallerinin kalitesi değerlendirilmiştir. Bu çalışmada toplam enerji ve orbital momentleri literatürdeki sonuçlar ile mükemmel uyumlu şekilde elde edilmiştir.

Bu çalışma, Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi Rektörlüğü Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi (BAP) tarafından, FBA-2019-2888 Nolu proje kapsamında desteklenmektedir.

Anahtar Kelimeler: Üstel Tipli Fonksiyonlar, Hartree-Fock-Roothaan Yöntemi, Orbital Momentleri



Validity of Generalized Self-frictional Exponential Type Basis Sets for Atomic Hartree-Fock-Roothaan Calculations

Abstract: In this work, within Hartree-Fock-Roothaan (HFR) method the generalized complete orthonormal sets of Self-frictional exponential type functions (SFETF) have been used as basis functions in atomic electronic structure calculations. Using r^μ instead of r in the radial part of SFETF has given more flexibility to them in the optimization process of wavefunctions parameters. Optimal variation parameters of the new basis functions have been obtained by minimizing the total energies for the ground states of some neutral atoms and the low lying states of singly charged ions with $Z < 21$ using minimal basis approximation in HFR calculations. Kinetic energy, potential energy, orbital energies and virial ratios have been also calculated for each of them. Expectation values of the orbital moments $\langle r^n \rangle$ with n from -3 to 2 for each orbital of Ar atom, Cl^- anion and K^+ cation have been calculated. Thus, the quality of atomic orbitals constructed by new basis functions has been evaluated. Total energies and orbital moments obtained in this work are in excellent agreement with the results in literature.

This work is financially supported by the Research fund of the Canakkale Onsekiz Mart University, Project ID: FBA-2019-2888.

Keywords: Exponential Type Functions, Self-frictional Polynomials, Orbital Moments

S-19

FRW UZAY-ZAMANINDA TACHYON SCALAR ALAN ÇÖZÜMLERİ

Elif Ece Demir^{1*}, Can Aktaş²

¹Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Matematik Bölümü, Ankara

²Çanakkale OnsekizMart Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü, Çanakkale

*Yazışılan yazar e-posta: elifecedemir@gazi.edu.tr

Özet: Bu çalışmada, düz FRW uzay-zamanı için skaler alan formundaki karanlık enerji adaylarından biri olan tachyon üzerinde çalıştık. Frenleme parametresini kullanarak Lyra geometrisindeki alan denklemlerinin tam çözümünü elde ettik. Ayrıca, karanlık enerji modellerinden biri olan takyonun fiziksel ve geometrik özelliklerini tartıştık.

Anahtar Kelimeler: FRW uzay-zamanı, tachyon, Lyra geometri

Tachyon Scalar Field Solutions in FRW Space-time

Abstract: In this research, we studied tachyon one of the dark energy candidates in scalar field form for the flat FRW space-time. We have obtained the exact solution of the field equations in Lyra geometry by using the deceleration parameter. Also, we have discussed the physical and geometrical quantities of tachyon one of the dark energy models.

Keywords: FRW space-time, tachyon, Lyra geometry

S-20

Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc ALAŞIMLARININ BAZI TERMAL ÖZELLİKLERİNİN DENEYSEL YÖNTEMLE İNCELENMESİ VE Sc ETKİSİNİN KARŞILAŞTIRILMASI

Gencer Sarioğlu^{1,*}, Hamza Yaşar Ocak²

¹Kütahya Dumlupınar Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya

²Kütahya Dumlupınar Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya
Yazışılan yazar e-posta: gencer.sarioğlu@dpu.edu.tr

Özet: Al-Sc alaşımları mekanik özellikleri bakımından endüstri sektöründe önemli bir yere sahiptir. Bu bakımdan Al-Sc alaşımlarının termal özellikleri de oldukça ilgi çekmektedir. Bu maksatla özel teknikle elde edilen Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımlarının termal özellikleri deneysel teknikler kullanılarak incelendi. Bu çalışma Kütahya Dumlupınar Üniversitesi İleri Teknoloji Merkezi laboratuvarında oda sıcaklığından 600°C sıcaklığa kadar yapıldı. Analizin sonucunda Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımlarının sıcaklığa bağlı olarak termal genleşme sabiti, Young sabiti, makaslama sabiti, entalpi değişimi, Gibbs enerji değişimi ve entropi değişimi elde edildi. Analizin sonucunda Sc elementinin malzemeye mukavemet kattığı belirlendi. Ayrıca elde edilen sonuçların yakın orantılı Al-Sc alaşım sonuçlarıyla uyumlu olduğu görüldü.

Anahtar Kelimeler: Al-Sc, Diferansiyel Termal analiz, Termomekanik Analiz.

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF SOME THERMAL PROPERTIES OF Al-1,1Sc and Al-1,9Sc ALLOYS AND COMPARISON OF Sc EFFECT

Abstract: Al-Sc alloys have an important place in the industrial sector in terms of their mechanical properties. In this respect, the thermal properties of Al-Sc alloys are of great interest. For this purpose, thermal properties of Al-1,1Sc and Al-1,9Sc alloys obtained by special technique were investigated using experimental techniques. This study was conducted in Kütahya Dumlupınar University Advanced Technology Center laboratory from room temperature to 600°C temperature. As a result of the analysis, thermal expansion constant, Young constant, shear constant, enthalpy change, Gibbs energy change and entropy change of Al-1,1Sc and Al-1,9Sc alloys were obtained. As a result of the analysis, it was determined that the element Sc added strength to the material. In addition, it was found that the results obtained were consistent with the results of Al-Sc alloy.

Keywords: Al-Sc, Differential Thermal Analysis, Thermomechanical Analysis.

S-21

SIÇANLARDA SİYATİK SİNİR YARALANMASI SONRASI ÜÇ BOYUTLU BİYOYAZICIDA ÜRETİLEN BİYOYUMLU SİNİR TÜPLERİNİN ETKİLERİNİN ARAŞTIRILMASI

Meryem Cansu Şahin^{1,*}, İlker Deniz Cingöz², Salih Kavuncu³

¹Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya

²Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Beyin ve Sinir Cerrahisi ABD, Kütahya

³Afyon Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Plastik Rekonstrüktif ve Estetik Cerrahi ABD, Kütahya

*Yazışılan yazar e-posta: meryemcansu.sahin@ksbu.edu.tr

Özet: Periferik sinir yaralanmaları ile klinik pratikte sıklıkla karşılaşmaktadır. Dünyada yıllık görülme insidansının 1/1000 olduğu gösterilmiştir. Gerilme, ezilme, kesilme nedeniyle meydana gelen hasar sonrası önemli histopatolojik değişiklikler ortaya çıkmaktadır. Bu histopatolojik değişikliklerle birlikte aksonal yapı tamamen hasarlanır ve sinir hasarından sonraki ilk 48-96 saat içinde impuls iletimi bozulur. Hasarlanan sinir hücresi tarafından uyarılan kas veya duyu organlarına impuls iletilemez ve etkilenen bölgeye göre nörolojik disfonksiyon gelişir.

Periferik sinir yaralanmalarının tedavisi için tüp benzeri materyaller ile sinir arasındaki boşluk doldurulabilmektedir. Fakat üretilen sentetik sinir tüpleri biyoyumlu olmamakla birlikte enfeksiyon riski taşımaktadır.

Günümüzde bir çok alanda hızla gelişen üç boyutlu bio yazıcı teknolojisi tamamen biyolojik, dayanıklı ve enfeksiyon riskini belirgin oranda azaltan, ihtiyaca uygun olarak bilgisayar ortamında modellenebilen yapılar üretmemize imkan sunmaktadır. Farklı kimyasal materyal (fibrin, collagen, polycaprolactone, alginate, laminin, gelatin vb.) ve yöntemlerle hazırlanan jel fazındaki bio filamentlerin sinir rejenerasyonu, kemik onarımı gibi farklı alanlardaki in vivo ve in vitro çalışmaları hızla devam etmektedir.

Çalışmamız, siyatik sinir hasarı bulunan sıçanlara uygulanacak iki farklı bio filament (PLA ve Ekstraselüler Matriks) ile hazırlanan Bio 3D tüplerinin, standart tedavi materyali olan silikon tüplere üstünlüğünün araştırılmasını amaçlamaktadır.

Cerrahiden 8 hafta sonra genel anestezi altında sıçanlar üzerinde elektrofizyolojik çalışma yapılarak her bir deney grubunun motor sinir iletim hızı hesaplanmıştır. Elektrofizyolojik çalışmadan sonra CO₂ ile sakrifiye edilen sıçanlardan sinir rejenerasyonunu tamamlamış tibialis anterior kası diseke edilerek ıslak kas kütleleri karşılaştırılmıştır. Periferik sinir hasarı sonrası, iskemi reperfüzyona bağlı olarak ortamda gelişen inflamatuvar yanıtı değerlendirmek amacıyla ELISA yöntemiyle TNF α ve S100 düzeyleri ölçülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Ekstraselüler Matriks, Polilaktik Asit, Periferik Sinir Hasarı, Biyomalzeme.

PRODUCED IN THREE DIMENSIONAL BIOPATRICIAN AFTER SCIATRIC NERVE INJURY IN RATS INVESTIGATION OF THE EFFECTS OF BIO-COMPATIBLE NERVE TUBES

Abstract: Peripheral nerve injuries are frequently encountered in clinical practice. The annual incidence in the world has been shown to be 1/1000. Significant histopathological changes occur after damage caused by stress, crush and shear. With these histopathological changes, the axonal structure is completely damaged and impulse conduction is impaired within the first 48-96 hours after nerve damage. Impulse cannot be transmitted to the muscle or sensory organs stimulated by the damaged nerve cell and neurological dysfunction develops depending on the affected area.

For the treatment of peripheral nerve injuries, the space between the tube and the nerve can be filled. However, the synthetic nerve tubes produced are not biocompatible but carry a risk of infection.

Nowadays, rapidly developing three dimensional bio printer technology in many fields is completely biological,

It allows us to produce structures that are durable and can be modeled in computer environment according to the need, significantly reducing the risk of infection. In vivo and in vitro studies of different chemical materials (fibrin, collagen, polycaprolactone, alginate, laminin, gelatin, etc.) and gel phase bio filaments prepared in different methods such as nerve regeneration and bone repair are continuing rapidly.

The aim of this study was to investigate the superiority of Bio 3D tubes prepared with two different bio filaments (PLA and Extracellular Matrix) to silicone tubes which are the standard treatment material for rats with sciatic nerve damage.

Electrophysiological study was performed on rats under general anesthesia 8 weeks after surgery and motor nerve conduction velocity of each experimental group was calculated. After electrophysiological study, the anterior muscle of the tibialis, which had completed nerve regeneration, was dissected from the rats sacrificed with CO₂ and wet muscle masses were compared. TNF α and S100 levels were measured by ELISA in order to evaluate the inflammatory response caused by ischemia reperfusion after peripheral nerve injury.

Keywords: Extracellular Matrix, Polylactic Acid, Peripheral Nerve Injury, Biomaterials.

S-22

Hegzagonal yapılı ZnO moleküllerinin modellenmesi, Mn ve Sn katkısı ile optik band boşluğunun değişiminin kuramsal incelenmesi

Asli A. Kaya

Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Bilecik, Türkiye

e-mail: asli.kaya@bilecik.edu.tr

Özet

Bu çalışmada, ZnO moleküllerinin hegzagonal yapıda şekli çizilerek optimize edilmiştir. Optimize molekül üzerinden Zn atomları yerine Mn ve Sn atomları yer değiştirilerek her bir molekül için elektronik enerjileri hesaplanmış ve optik yoğunluk analizleri yapılmıştır. Her bir molekülün band boşluğu (E_g) hesaplanarak geçiş metallerinin ilavesi ile değişimler tartışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: ZnO, Band boşluğu, Optik yoğunluk analizi, pm6

Modeling of hexagonal ZnO molecules, theoretical examination of the change of optical band gap with doping Mn and Sn

Abstract

In this study, hexagonal structure of ZnO molecules by drawing has been optimized. Instead of Zn atoms over the optimized molecule, Mn and Sn atoms were replaced and electronic energies were calculated for each molecule and optical density analyzes were performed. The band gap (E_g) of each molecule is calculated and the changes are discussed with the addition of transition metals.

Keywords: ZnO, Band gap, Optical density analysis, Density functional theory

S-23

CLIC BAZLI γe ÇARPIŞTIRICISINDA UYARILMIŞ SPİN-3/2 NÖTRİNOLAR İÇİN ARAŞTIRMA

Volkan Çetinkaya^{1,*}

¹*Kütahya Dumlupınar Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya*

* e-posta: volkan.cetinkaya@dpu.edu.tr

Özet: Bu çalışmada, foton indüklü reaksiyonlarda uyarılmış spin-3/2 nötrinoların (ν^*) t-kanalı yoluyla doğrudan olmayan üretimi incelenmiştir. Bunun için gelecek nesil elektron-pozitron çarpıştırıcısı olan CLIC'in (Kompakt Lineer Çarpıştırıcı) γe modu düşünülmüştür. $e^- e^+$ sisteminin kütle merkezi enerjisi 1500 GeV alınmıştır. Alt süreç için Compton geri saçılan foton dağılımı kullanılmıştır. Dolayısıyla γe çarpışması için kütle merkezi enerjisi yaklaşık 1367 GeV olmuştur. Uyarılmış leptonlar, Standart Model (SM) leptonları ve ayar bozonları arasındaki etkileşmeler için efektif Lagranjiyen yöntemi kullanılmıştır. Böylece, $\gamma e^- \rightarrow \nu_e W^-$ sürecinde tesir kesiti değerleri, sinyal ve karşılık gelen SM ardalan değerleri için hesaplanmıştır. Bu çalışmada istatistik analiz yöntemi olarak SS (İstatistik Önem) kullanılmıştır. $SS > 3$ kriteri için spin-3/2 uyarılmış nötrinolar, son durumdaki W bozonunun leptonik ve hadronik bozonumları dikkate alındığında, sırasıyla 2300 GeV ve 2500 GeV kütle değerine kadar dolaylı olarak gözlemlenebilir. Sonuçlarımız, CLIC'in, uyarılmış nötrinoların araştırılması için dikkate değer bir potansiyele sahip olduğunu göstermiştir.

Anahtar Kelimeler: CLIC, γe Çarpıştırıcısı, Efektif Lagranjiyen Metodu, Uyarılmış Spin-3/2 Nötrino.

SEARCH FOR EXCITED SPIN-3/2 NEUTRINOS AT CLIC BASED γe COLLIDER

Abstract: In this study, we investigate the indirect production of excited spin-3/2 neutrinos (ν^*) via t-channel in the photon induced reactions. For this purpose, the γe mode of CLIC (Compact Linear Collider), an electron-positron collider in future, is considered. The center of mass energy of the e^-e^+ system is taken as 1500 GeV. Compton backscattering photon distribution was used for the subprocess. Thus, the center of mass energy for the γe collision was about 1367 GeV. For the interactions among excited leptons, Standard Model (SM) leptons and gauge bosons, the effective Lagrangian method was used. Thus, we calculate the cross sections for the signal through the process $\gamma e^- \rightarrow \nu_e W^-$ and the corresponding SM background. In this study, we used SS (Statistical Significance) as a statistical analysis method. For the criteria $SS > 3$ spin-3/2 excited neutrinos can be indirectly observed up to a mass value of 2300 GeV and 2500 GeV, respectively, given the leptonic and hadronic decays of W boson in the final state. Our results have showed that CLIC has a remarkable potential for the study of excited neutrinos.

Keywords: CLIC, γe Collider, Excited Spin-3/2 Neutrino, Effective Lagrangian Method.

S-24

Kubik Yapıda Kristalleşen Ta₃Sb Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Elastik Özellikleri

Karaca E.^{1,*}

¹Sakarya Üniversitesi, BIMAYAM Biyomedikal, Manyetik ve Yarıiletken Malzemeler Araştırma Merkezi,
54187 Adapazarı, Turkey
*ertugrulkaraca@sakarya.edu.tr

Özet: Kübik yapıda kristalleşen Ta₃Sb bileşiğinin yapısal, elektronik ve elastik özellikleri *Ab initio* pseudopotansiyel hesaplamalarıyla çalışıldı. Kübik yapıda kristalleşen Ta₃Sb bileşiği Pm $\bar{3}$ n uzay grubundadır. Bu kristal yapıdaki atomların Wyckoff pozisyonları: 6 Ta atomu 6c (1/4, 0, 1/2) ve 2 Sn atomu (2a) (0, 0, 0) olarak verilir. Sonuç olarak Ta₃Sb bileşiğinin kübik yapısı sadece bir kristal parametresi *a* ile belirlenir. Ta₃Sb bileşiğinin elektronik yapısından metalik özellik gösterdiği anlaşılabilir, çünkü bazı bantlar Fermi seviyesini kesmektedir. Bu bileşiğin elektronik yapısının en ilginç özelliği Γ -X, R- Γ ve Γ -M yüksek simetri noktalarında düz bant bulunmaktadır. Bu durum elektronik durum yoğunluğu (DOS) grafiğinde Fermi seviyesi civarında güçlü pik oluşturmaktadır. Hesaplanan elastik sabitler, Ta₃Sb bileşiğini mekanik olarak kararlı ve işlenebilir olduğunu göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk fonksiyonel teorisi, elektronik yapı, mekanik özellikler.

Structural, Electronic and Elastic Properties of cubic phase Ta₃Sb

Ab initio pseudopotential calculations have been performed to study for the structural, electronic and elastic properties of cubic phase of Ta₃Sb. The cubic phase of Ta₃Sb belongs to the space group Pm $\bar{3}$ n. The Wyckoff positions of the atoms are: (1/4, 0, 1/2) for 6 Ta atoms and (2a) (0, 0, 0) for 2 Sn atoms. As a consequence, the cubic phase of Ta₃Sb is defined by only its lattice parameter *a*. The electronic structure signals the metallic nature of Ta₃Sb because the metallic d-like bands cut the Fermi level. The most striking feature in the electronic structure of this material is the presence of an almost flat band coinciding with the Fermi level along the Γ -X, R- Γ and Γ -M symmetry lines, constituting a strong peak in the electronic density of states (DOS). The calculated second-order elastic constants indicate that Ta₃Sb is mechanically stable and behaves in a ductile manner.

Keywords: Density-functional theory; electronic structure; mechanical properties

S-25

ZrRuP Malzemesinin Yapısal ve Elesatik Özellikleri: Ab-initio Hesaplamaları

Bağcı S.^{1,2}, Cin M.^{1,*}, Uzunok H. Y.^{1,2}, Karaca E.², Tütüncü H.M.^{1,2}, Srivastava G. P.³

¹Sakarya Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 54187 Adapazarı, Turkey

²Sakarya Üniversitesi, BIMAYAM Biyomedikal, Manyetik ve Yarıiletken Malzemeler Araştırma Merkezi,
54187 Adapazarı, Turkey

³School of Physics, University of Exeter, Stocker Road, Exeter EX4 4QL, United Kingdom

*manolya.cin1@ogr.sakarya.edu.tr

Özet:

Hegzagonal ve ortorombik yapıda kristalleşen ZrRuP malzemesinin yapısal, elastik ve mekanik özellikleri *Ab initio* pseudopotansiyel hesaplamalarıyla çalışıldı. Hegzagonal fazda her tabaka Zr ve P atomları ya da Ru ve P atomlarını içermektedir. Ortorombik fazda ise her tabaka Zr, Ru ve P atomlarını birlikte içermektedir. Sonuç olarak ortorombik fazın tabakaları eşdeğerdir ve hegzagonal fazdan farklıdır. Her iki fazında yapısal optimizasyonu minimum enerji ve sıfır basınç şartlarında elde edilmiştir. ZrRuP kristalinin ortorombik fazı için a, b ve c değerleri sırasıyla 6.4786, 3.907 ve 4.441 Å olarak bulundu. ZrRuP kristalinin hegzagonal fazı için ise a ve c değerleri sırasıyla 6.4630 and 3.8584 Å olarak hesaplandı. ZrRuP kristalinin her iki fazı için hesaplanan kristal yapı değerleri genel olarak önceden ölçülen veya hesaplanan değerler ile uyumludur. Hesaplanan elastik sabitler, her iki fazında mekanik olarak kararlı ve işlenebilir olduğunu göstermektedir. Bulk modülü, shear modülü, Young modülü, Poisson oranı, universal anisotropik indeks ve anisotropi yüzdeleri gibi mekanik özellikler her iki yapı için de hesaplanmıştır. Elastik ve mekanik özelliklerden faydalanılarak h-ZrRuP fazının o-ZrRuP fazından daha işlenebilir olduğu belirlendi.

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk fonksiyonel teorisi; elektronik yapı, elastik sabitler.

Structural and Elastic Properties of ZrRuP: An Ab-initio Study

Ab initio pseudopotential calculations have been performed to study the structural, elastic and mechanical properties of orthorhombic and hexagonal ZrRuP. Each layer contains either Zr and P atoms or Ru and P atoms in the hexagonal phase, while orthorhombic phase is formed by layers which are filled with Zr, Ru and P atoms. As a result, all layers are equivalent in the orthorhombic phase different from the hexagonal phase. Full structural optimization for both phases of ZrRuP has been achieved by making use of total energy minimization and zero force criteria. The calculated a, b and c parameters are found to be as 6.4786, 3.907 and 4.441 Å for orthorhombic phase of ZrRuP. On the other hand, the a and c parameters for hexagonal phase of ZrRuP have been calculated as 6.4630 and 3.8584 Å, respectively. In general, the calculated values of lattice parameters and internal parameters for both phases of ZrRuP harmonize with the measured and previously calculated results. The calculated second-order elastic constants indicate that both phases is mechanically stable and behaves in a ductile manner. The mechanical properties like the bulk modulus, shear modulus, Young's modulus, Poisson's ratio, the universal anisotropic index and percent anisotropy for orthorhombic and hexagonal phases of ZrRuP have been calculated for the two phases of ZrRuP. An assessment of their elastic and mechanical properties reveals that h-ZrRuP is more ductile than o-ZrRuP.

Keywords: Density-functional theory; electronic structure; elastic constant

S-26

HZZ VE $H\gamma Z$ ANORMAL BAĞLAŞIMLARININ GELECEK NESİL DOĞRUSAL ÇARPIŞTIRICILARDA İNCELENMESİ

Volkan Çetinkaya^{1,*}, Volkan Arı², Ahmet Alper Billur³

¹Kütahya Dumlupınar Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya

²Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara

³Sivas Cumhuriyet Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Sivas

*e-posta: volkan.cetinkaya@dpu.edu.tr

Özet: Bu çalışmada, HZZ ve $H\gamma Z$ anormal bağlaşımları model bağımsız efektif teori kullanılarak araştırılmıştır. $\gamma e^- \rightarrow HZe^-$ sürecinde tesir kesiti değerleri hem yeni fizik etkileri hem de Standart Model ardalan için hesaplanmıştır. Burada Z bozonu yüklü lepton (e, μ) çiftine bozunurken higgs bozonu (H) $b\bar{b}$ çiftine bozunur. Bu süreçteki γe^- çarpıştırıcısı gelecek nesil doğrusal çarpıştırıcıların bir modu olarak ele alınmıştır. Tesir kesiti değerleri ve fit fonksiyonları hesaba katılarak Wilson katsayıları üzerine %68 güvenirlilik seviyesinde sınırlamalar getirilmiştir. γe^- çarpışmasında Weizsacker-Williams Yaklaşımı (WWA) ve Lazer foton (Compton geri saçılan foton) dağılım fonksiyonları kullanılarak hesaplama yapılmıştır. Lazer fotonları ile elde edilen sonuçların WWA'ya göre daha duyarlı olduğu ortaya konulmuştur. Ayrıca, katsayılar üzerine getirilen sınırlamaların güncel deneysel limitleri iyileştirebildiği gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Anormal Bağlaşımlar, Ayar Bozonları, Efektif Lagranjiyen, Higgs Bozonu, Wilson katsayıları.



INVESTIGATION OF HZZ AND H γ Z ANOMALOUS COUPLINGS AT THE FUTURE LINEAR COLLIDERS

Abstract: In this study, we investigate HZZ ve H γ Z anomalous couplings using model independent effective theory. The cross-section values have been calculated for both new physics effects and the Standard Model background through the process $\gamma e^- \rightarrow H Z e^-$. Here, while Z boson decays into a pair of charged leptons (e, μ), Higgs boson (H) decays into the $b\bar{b}$ pair. The γe^- collider in this process is considered as a mode of the future linear colliders. By taking effect cross-section values and fit functions into account, bounds on the Wilson coefficients have been obtained at 68% Confidence Level (CL). In the γe^- collision, calculations were made using Weizsacker-Williams Approach (WWA) and Laser photon (Compton back scattering photons) distribution functions. The obtained results with laser photons have been found to be more sensitive than WWA. In addition, we have shown that limits on coefficients can improve the current experimental limits.

Keywords: Anomalous Couplings, Effective Lagrangian, Gauge Bosons, Higgs Boson, Wilson coefficients.

S-27

Malzemelerin manyetik özelliklerinin belirlenmesinde etkin alan yaklaşımları

Ümit AKINCI

Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, İzmir
**Yazışılan yazar e-posta: umit.akinci@deu.edu.tr*

Özet:

Manyetik malzemelerin, istatistik fizik dahilinde faz geçiş ve manyetik özelliklerinin belirlenmesinde kullanılan araçlar genellikle uzun zaman alan Monte Carlo simülasyonları gibi simülasyon yöntemleridir [1]. Seri açılımları, ortalama alan ya da etkin alan yaklaşımı gibi yöntemlerin, manyetik model çözümlerinde Monte Carlo simülasyonu gibi yöntemlerle kıyaslandığında gerçekten uzak sonuç verdiği görülmektedir [2]. Bu nedenle bu tip yöntemler gerçek malzeme hesaplarında tercih edilmemektedir. Öte yandan, gelişen nümerik çözüm yöntemleri daha karmaşık formülasyonların sonuç üretmesine olanak tanımaktadır. Bu nedenle, simülasyon yöntemleri dışındaki yöntemlerin geliştirilmesi, bunların gerçek malzeme hesaplarında kullanılabilmesine olanak tanıyabilir.

Bu noktadan hareketle, son zamanlarda etkin alan yaklaşımı dahilindeki formülasyonlarda bazı geliştirmeler gerçekleştirilmiştir [3]. Bu geliştirmeler ile manyetik modellerin çözümlerinde daha iyi sonuçlar elde edilebilmiştir. Bu sunumda söz konusu gelişmeler gözden geçirilerek, Heisenberg model için elde edilen sonuçlar Monte Carlo simülasyon sonuçları ile kıyaslamalı bir şekilde verilecektir.

Anahtar Kelimeler: Etkin Alan Yaklaşımı, Manyetik Malzemeler.

Referanslar

- [1] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Clarendon Press (1999).
- [2] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions, Oxford Science Publications (1992).
- [3] Ü. Akinci, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 386 (2015) 60.

Effective field approximations in determination of the magnetic properties of real materials

Abstract:

The tools used for determination of phase transition and magnetic properties of the magnetic materials in statistical physics are mostly time-consuming simulation methods such as Monte Carlo simulations [1]. The methods such as series expansions, mean-field or effective field approximations give poor results, in comparison to the results of Monte Carlo simulations [2]. Therefore, these methods not preferred for real material calculations. On the other hand, developed numerical solution methods allow producing results with more complex formulations. Therefore, by an improvement of methods other than the computer simulations, they can be used in real material calculations.

From this point of view, some improvements have been made recently in formulations within the effective field approximations [3]. With these improvements, better results have been obtained in the solutions of magnetic models. In this presentation, these developments will be reviewed and the results obtained for the Heisenberg model will be given in a comparative manner with Monte Carlo simulation results.

Keywords: Effective Field Approximation, Magnetic Materials

References

- [1] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Clarendon Press (1999).
- [2] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions, Oxford Science Publications (1992).
- [3] Ü. Akıncı, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 386 (2015) 60.

S-28

(Z)-N-(3,4-DİMETİLİSOXAZOL-5-YL)-4-(2-HİDROKSİ-5-METİLBENZYLİDENE)AMİNO)BENZENSÜLFONAMİT MOLEKÜLÜNÜN YAPISININ SPEKTROSKOPİK(X-RD, FT-IR, NMR) YÖNTEMLERLE AYDINLATILMASI

Bilal Cangül^{1,*}, Arslan Ünal², Saliha Alyar³, Hamit Alyar⁴

^{1,4}Çankırı Karatekin Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Çankırı

²Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Bilecik

³Çankırı Karatekin Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Çankırı

*Yazışılan yazar e-posta: bilalcangul@gmail.com

Özet: Sülfonamidler insanlarda bakteri enfeksiyonlarının tedavisinde sistematik olarak kullanılan ilk ilaç grubudur. Ticari olarak da üretilen sülfonamid türü ilaçlar geniş bir spektrumda hem Gram (+) hem de Gram (-) bakterilere karşı yüksek etkinlik göstermektedir. Bu özelliklerinden dolayı, antimikrobiyal, antiviral, hipoglisemik, diüretik ve antitümör olarak yaygın bir şekilde kullanılmaktadır.

Bu çalışmada yeni sentezlenen ve bir sülfonamid türevi olan (Z)-N-(3,4-dimetilisoxazol-5-yl)-4-(2-hidroksi-5-metilbenzilidene)amino)benzensülfonamid molekülünün yapısı spektroskopik (X-RD, FT-IR, NMR) yöntemleriyle aydınlatıldı. Teorik hesaplamalarda DFT/B3LYP metodu ve 6-311++G(d,p) temel seti kullanıldı. Hesaplamaların tamamı Gaussian 09 (Linux) ve Gauss View 5 paket programlarıyla gerçekleştirildi.

Anahtar Kelimeler: Sülfonamidler, X-RD, FT-IR, NMR, DFT



DETERMINATION OF THE STRUCTURE OF (Z) -N- (3,4-DIMETHYLISOXAZOL-5-YL) -4- (2-HYDROXY-5-METHYLBENZYLIDENE) AMINO) BENZENESULFONAMIDE MOLECULE BY SPECTROSCOPIC (X-RD, FT-IR, NMR) METHODS

Abstract: Sulfonamides are the first group of drugs systematically used in the treatment of bacterial infections in humans. Commercially produced sulfonamide-type drugs have a high spectrum of activity against both Gram (+) and Gram (-) bacteria. Because of these properties, it is widely used as antimicrobial, antiviral, hypoglycemic, diuretic and antitumor.

In this study, the structure of the newly synthesized (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide molecule was clarified by spectroscopic (X-RD, FT-IR, NMR) methods. DFT / B3LYP method and 6-311 ++ G (d, p) basic set were used in theoretical calculations. All calculations were performed with Gaussian 09 (Linux) and Gauss View 5 package programs.

Keywords: Sulfonamides, X-RD, FT-IR, NMR, DFT

S-29

BİYOYAZICI TASARIMI VE ÜRETİMİ

Emirhan Bozoğlan^{1,*}, Meryem Cansu Şahin², İsmail Kaya³, İlker Deniz Cingöz³, Hasan Emre Aydın³

¹Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Uygulama ve Araştırma Merkezi, Kütahya

²Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya

³Kütahya Sağlık Bilimleri Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Beyin ve Sinir Cerrahisi ABD, Kütahya

*Yazışılan yazar e-posta: meryemcansu.sahin@ksbu.edu.tr

Özet: Üç boyutlu (3B) yazdırma, dijital bir modelin 3B yapısının kat tabaka şeklinde katkılı üretimi olarak ifade edilebilir. İlk olarak stereolithographydan (SLA) tekniği ile ortaya çıkmıştır. İsimlendirme işlemi çok geniş bir çerçevede ele alınabilir: katı, sıvı vb. malzeme çeşidi, 3B nesnenin oluşturulma biçimine ve ya malzeme ekleme ya da çıkarma işlemine göre işlem temelde 5 aşama ile gerçekleşmektedir; 1) 3B görüntünün üretilmesi, 2) 3B görüntünün kullanıcı tarafından belirli sayıda 2B katman yığını haline getirilmesi, 3) bu verilerin cihazın anlayacağı bir dile çevrilmesi, 4) belli sayıda oluşturulan 2B katmanların yapıyı oluşturana kadar birer birer basılması ve 5) malzemenin özelliğine göre ihtiyaç duyulan son işlemin yapılması.

Üç boyutlu yazıcılar ile temelde benzer mekanik sistemlere ve yazılıma sahip olduğu için açık kaynaklardan faydalanılarak üretimi gerçekleştirilecektir. Kendi tasarımı olan biyoyazıcı, şase, elektronik modüller ve mekanik parçalar dahil olmak üzere 10.000 TL'ye üretilebilecektir. Günümüzde piyasada satılan fabrikasyon üretim 3B biyoyazıcıların fiyatı ise 7.000-25.000 \$ arasında değişmektedir. Ürettiğimiz biyoyazıcı isteğe bağlı olarak değiştirilebilen ve sayısı artırılabilen ekstruder tasarımı ile farklı biyomateryallerin basımında kolaylık sağlayacaktır.

KSBÜ olarak multidisipliner bir çalışma gerçekleştirerek mevcut kadromuz ve bilgi birikimleri ile piyasaya nazaran daha düşük bütçeler kullanarak bünyemizde yapılacak olan çalışmalarda kullanılacak bir 3B biyoyazıcı tasarlanmıştır. Standart 3B biyoyazıcılara göre daha geniş basım alanına sahip, ekstruder çeşitliliği ile farklı biyomateryaller basabilen ve ihtiyaç dahilinde ekstruder sayısı artırılabilen bir tasarım ortaya konmuştur. Bu çalışma ile ortaya çıkan tasarım hem günümüz ihtiyaçlarına cevap verirken hem de gelecekte doğacak ihtiyaçlar için minimum masraf ile tekrar revize edilebilecektir.

Anahtar Kelimeler: Biyoyazıcı, 3 Boyutlu Modelleme, Doku Mühendisliği, Biyomalzeme.

BIOPINTER DESIGN AND PRODUCTION

Abstract: Three-dimensional (3D) printing can be expressed as the doped production of the 3D structure of a digital model. It was first introduced by stereolithography (SLA) technique. The nomenclature process can be handled in a wide range: solid, liquid, etc. depending on the type of material, the manner in which the 3D object is formed and either the material addition or subtraction, the process takes place in essentially 5 steps; 1) generation of the 3D image, 2) rendering the 3D image into a certain number of 2D layer stack by the user, 3) translating this data into a language the device understands; the last operation heard.

Since it has basically similar mechanical systems and software with three dimensional printers, production will be realized by using open sources. Our own design, including biomass, chassis, electronic modules and mechanical parts will be produced for 10,000 TL. Today, the price of fabricated 3D biodivers sold in the market varies between \$ 7,000-25,000. The biofuel we produce will provide ease of printing of different biomaterials with its extruder design which can be changed and increased optionally.

As KSBU, a multidisciplinary study has been designed and a 3D bio-printer is designed to be used in our studies using lower budgets compared to the market with our current staff and knowledge. A design which has a wider printing area compared to standard 3D biodiesel, which can print different biomaterials with a variety of extruders and which can increase the number of extruders when needed, has been proposed. The design that is created with this study will be able to be revised with minimum cost for both the needs of today and the future needs. As Kütahya University of Health Sciences, a multidisciplinary study was carried out and a 3D biodeveloper was designed to be used in our studies by using lower budgets compared to the market with our current staff and knowledge. A design which has a wider printing area compared to standard 3D biodiesel, which can print different biomaterials with a variety of extruders and which can increase the number of extruders when needed, has been proposed. The highest efficiency levels that can be obtained mechanically have been tested with the preferred frame type and the quality of the movement elements (chrome plated sled, trolley and ball screw etc.). In accordance with the modification, the design presented with open source codes and design details is suitable for add-ons according to the needs arising from future projects. The design that is created with this study will be able to be revised with minimum cost for both the needs of today and the future needs.

Keywords: Bioprinter, 3D Modeling, Tissue Engineering, Biomaterials.

S-30

JAYNES-CUMMINGS MODELİ İÇİN KUANTUM PARAMETRE TAHMİNİ

Durgun DURAN^{1,*}

¹Yozgat Bozok Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Yozgat

*Yazışılan yazar e-posta: durgun.duran@bozok.edu.tr

Özet: Kuantum Fisher bilişimi (KFB), verilen bir gözlenebilir cinsinden bir kuantum sistemin bilişim içeriğini niteler ve kuantum metrolojide önemli bir rol oynar. Çevreyle etkileşmelerden dolayı tüm kuantum sistemler, çeşitli eşfazlılığın kaybolması etkilerine maruz kalırlar. Bundan dolayı bu etkiler altındaki KFB araştırmaları son zamanlarda daha fazla dikkat çekmektedir. Bu çalışmada, Jaynes-Cummings ve Tavis-Cummings modellerinin etkisi altında bazı düşük boyutlu sistemler (iki-kübit saf olmayan durumlar) kullanarak optimal parametre tahmini için KFB'nin davranışını inceleneyeceğiz. KFB'nin bağlaşım sabitine göre ilgi çekici davranışına işaret eden sonuçları sunacağız.

Anahtar Kelimeler: Kuantum Fisher bilişimi, parametre tahmini, Jaynes-Cummings modeli.

QUANTUM PARAMETER ESTIMATION FOR JAYNES-CUMMINGS MODEL

Abstract: Quantum Fisher information (QFI) quantifies the information content of a quantum state with respect to a given observable and is playing a paramount role in quantum metrology. Due to the interactions with the environment, all quantum systems are subject to various decoherence effects. Therefore the researches on QFI under this effects have been recently attracting more attention. In this work, we investigate the behavior of QFI for the optimal estimation of parameter using some low dimensional systems, say two-qubit mixed states, under action of Jaynes-Cummings and Tavis-Cummings model. We present our results which point the interesting behavior of QFI with respect to the coupling constant.

Keywords: Quantum Fisher information, parameter estimation, Jaynes-Cummings model.

S-31

(Z)-N-(3,4-DİMETİLİSOXAZOL-5-YL)-4-(2-HİDROKSİ-5-METİLBENZYLİDENE)AMİNO)BENZENSÜLFONAMİT MOLEKÜLÜNÜN HOMO-LUMO, NLO VE MEP ANALİZLERİ

Bilal Cangul^{1,*}, Arslan Ünal², Saliha Alyar³, Hamit Alyar⁴

^{1,4}Çankırı Karatekin Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Çankırı

²Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Bilecik

³Çankırı Karatekin Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Çankırı

*Yazışılan yazar e-posta: bilalcangul@gmail.com

Özet: Sülfonamidler bakteri enfeksiyonlarının tedavi önlenmesinde sistematik olarak kullanılan ilk ilaç grubudur. Sülfonamidlerin antibakteriyel olarak kullanılması 1933 yılında Domagk tarafından farelerdeki bakteri enfeksiyonlarının tedavi etkinliğinin bulunmasıyla başlar.

Bu çalışmada yeni sentezlenen ve bir sülfonamid türevi olan (Z)-N-(3,4-dimetilisoxazol-5-yl)-4-(2-hidroksi-5-metilbenzilidene)amino)benzensülfonamid molekülünün yapısı DFT/B3LYP metodu ve 6-311++G(d,p) temel seti ile optimize edildi. Sentezlenen molekülün kararlı yapısı bulunduğundan sonra çizgisel olmayan optik özellikleri(NLO), HOMO-LUMO moleküler orbital enerjileri, kimyasal reaktivite tanımlayıcıları, moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) ve Mulliken atomik yükleri yine aynı metot ve temel set ile incelendi. Hesaplamaların tamamı Gaussian 09 (Linux) ve Gauss View 5 paket programlarıyla gerçekleştirildi.

Anahtar Kelimeler: Sülfonamidler, NLO, HOMO-LUMO, MEP, DFT

HOMO-LUMO, NLO AND MEP ANALYSIS OF (Z) -N- (3,4-DIMETHYLISOXAZOL-5-YL) -4- (2-HYDROXY-5-METHYLBENZYLIDENE) AMINO) BENZENESULFONAMIDE MOLECULE BY DFT METHOD

Abstract: Sulfonamides are the first group of drugs used systematically to prevent the treatment of bacterial infections. Antibacterial use of sulfonamides began in 1933 when Domagk discovered the efficacy of bacterial infections in mice.

In this study, the structure of the newly synthesized (Z)-N-(3,4-dimethylisoxazol-5-yl)-4-(2-hydroxy-5-methylbenzylidene)amino)benzenesulfonamide molecule, which is a sulfonamide derivative, was optimized with DFT / B3LYP method and 6-311 ++ G (d, p) basis set. After determining the stable structure of the synthesized molecule, nonlinear optical properties (NLO), HOMO-LUMO molecular orbital energies, chemical reactivity descriptors, molecular electrostatic potential (MEP) and Mulliken atomic charges were examined with the same method and basis set. All calculations were performed with Gaussian 09 (Linux) and Gauss View 5 package programs.

Keywords: Sulfonamides, NLO, HOMO-LUMO, MEP, DFT

S-32

Brom-asetofenon oksim molekülünün konformer ve infrared spektroskopi çalışması

Yunus Kaya^{1,*}, Aslı Kaya²

¹Bursa Teknik Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Kimya Bölümü, Bursa, Türkiye

²Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Bilecik, Türkiye

e-mail:yunus.kaya@btu.edu.tr

Özet

Bromoasetofenon molekülü yapısında para konumunda brom bağlı bir fenol ve oksim grubunu bulunduran organik bir moleküldür. Oksim molekülleri biyolojik aktivite özelliklerinden dolayı yoğun ilgi gören moleküllerdir. Bu tür moleküllerin ilginç elektronik özellikleri bu moleküllerin teorik hesaplamalarına olan ilgiyi artırmaktadır. Bu çalışmada, bromoasetofenon oksim molekülünün fenil ve oksim karbonu arasındaki bağın dönmesine bağlı olarak konformer çalışması ve en olası geometrinin frekans hesaplamaları ile infrared spektroskopisinin incelenmesini içermektedir. Hesaplamaların tümünde Yoğunluk Fonksiyon Kuramı (YFK), B3LYP metodu ve 6-311++G(d,p) taban kümesi kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Oksim, YFK, Konformer, Spektroskopi

Conformer and infrared spectroscopic studies of bromine-acetophenone oxime

Abstract

Bromoacetophenone molecule is an organic molecule containing a bromine-bound phenol and oxime group in its para position. Oxime molecules are of great interest due to their biological activity. The interesting electronic properties of such molecules increase the interest in the theoretical calculations of these molecules. In this study, the conformer study of the bonding between phenyl and oxime carbon of bromoacetophenone oxime molecule and the frequency calculations of the most possible geometry and infrared spectroscopy are examined. Density Function Theory (DFT), B3LYP method and 6-311 ++ G (d, p) base set were used in all calculations.

Keywords: Oxime, DFT, Conformer, Spectroscopy

S-33

2-METİLPRİDİNYUM PİKRAF'TIN YAPISI VE TİTREŞİM FREKANSLARI ÜZERİNE TEORİK ÇALIŞMA

Nazmiye Albayrak^{1*}, Muhammet Okur¹, Arslan Ünal¹, Adil Başoğlu², Yusuf Atalay²

¹Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Optisyenlik, Bilecik

²Sakarya Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Sakarya

*Yazışılan yazar e-posta: nazmiye.albayrak@bilecik.edu.tr

Özet: Bu çalışmada 2-metilpridinyum pikrat molekülünün yapısal ve titreşim frekansı değerleri üzerine çalışma sunulmaktadır. İlk olarak, taban durumundaki kararlı moleküle ait bağ açısı ve bağ uzunluğu gibi geometrik parametreler Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi B3LYP ve PBE1PBE metotlarıyla 6-311++G(d,p) temel seti kullanılarak elde edilmiştir. Kararlı yapıdan hareketle moleküle ait titreşim frekansları, ¹H ve ¹³C kimyasal kaymaları, HOMO ve LUMO enerji değerleri de aynı metotlar ile hesaplanmıştır. Ayrıca, moleküle ait kimyasal sertlik ve elektronegatiflik değerleri HOMO ve LUMO enerji değerleri kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar deneysel verilerle karşılaştırıldığında uyumlu olduğu gözlenmektedir.

Anahtar Kelimeler: DFT, IR, NMR, FMOs, metilpridinyum, pikrat

THEORETICAL INVESTIGATION ON STRUCTURAL AND VIBRATIONAL FREQUENCIES OF 2-METHYLPYRIDINIUM PICRATE

Abstract: In this study, structural and vibration frequency values of 2-methylpyridinium picrate molecule are presented. Initially, geometric parameters such as bond angle and bond length of the optimized molecule in the ground state were obtained by using the Density Functional Theory (DFT) B3LYP and PBE1PBE methods by using the 6-311 ++ G (d, p) basis set. The vibration frequencies of the title molecule, ¹H and ¹³C chemical shifts, HOMO and LUMO energy values were also calculated by using same levels. In addition, chemical hardness and electronegativity values of the molecule were calculated using HOMO and LUMO energy values. The results are consistent with the experimental data.

Keywords: DFT, IR, NMR, FMOs, methylpyridinium, picrate

S-34

DETERMINATION OF TEMPERATURE-DEPENDENT CONFORMATION STATES OF CINNAMIC ACID BY SPECTROSCOPIC METHODS

Gökhan Dikmen^{1*}

¹*Eskisehir Osmangazi University, Central Research Laboratory Research and Application Center (ARUM),
Eskisehir*

**gdikmen@ogu.edu.tr*

Abstract: Cinnamic acid has anti-inflammatory, anti-oxidative, anti-tumor and anti-microbial effects. However, these effects vary depending on cinnamic acid conformation states. Because, cinnamic acid has two conformational states such as trans and cis. In this study, Nuclear Magnetic Resonance (NMR), Infrared (IR) and Raman spectroscopic methods were used to determined conformational states of cinnamic acid molecule. In these methods, the temperature was adjusted between -10 and + 100 °C and change in chemical structure of cinnamic acid were observed. As a result, cinnamic acid was observed in trans conformational state up to 50 °C and the chemical structure change to cis conformational state at temperatures after 50 °C using all spectroscopic methods.

Keywords: Cinnamic Acid, NMR, IR, Raman.

S-35

GIDALARDA KARBONDİOKSİT TAYİNİ

Keziban Ay^{1,*}, Hamit Onur Işık¹, Ertuğrul Özkan¹, Metin Bilge¹, Cemal Parlak¹

¹Ege Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, İzmir

*Yazışılan yazar e-posta: kezibanay92@gmail.com

Özet: Günlük yaşantımızda insan sağlığını tehlikeye atacak olaylara karşı alınan tedbirlerin temelinde sensör ve mikrodenetleyiciler bulunmaktadır. Fizik bilimi sayesinde gelişen, yaşadığımız dünyanın fiziksel büyüklüklerini elektrik sinyallerine çeviren aktif ya da pasif cihazlar olan sensörler ile günlük yaşantımız daha kolay ve verimli hale gelmiştir. Bu sensörlerin çeşitlerinden biri olan NDIR (Non dispersive infrared) sensörler ise, genelde gaz ve ilgili büyüklüklerinin ölçüm işlemlerinde kullanılan spektroskopik sensörlerdir. Enfraruj enerjisinin, deforme olmadan atmosferik örnekleme odasından geçmesine izin verildiğinden optik dağılım bakımından dağılmazlar [1,2]. Çalışmada processing dili ile programlanmış Arduino Uno mikrodenetleyici kartı ve NDIR karbondioksit sensörü kullanılarak günlük yaşantımızda sıkça tükettiğimiz gıdaların bozulmaları ile karbondioksit salgılamaları arasındaki ilişki anlaşılmasına ve ortaya konulmaya çalışılmıştır [3-4]. Ürün olarak yumurta kullanılmış ve yumurtanın oluşturduğu karbondioksit ölçümü sayesinde ürünün yaşı belirlenmiştir. Bu tür bir çalışma ile tükettiğimiz gıdaların tedarik ve depolama davranışlarının geliştirilmesine olanak sağlanabilecektir.

Kaynakça:

- [1] G. Korotcenkov, Handbook of Gas Sensor Materials, Springer Science & Business, 2013.
- [2] F. Erdiñç, Yeni Başlayanlar İçin ARDUINO, Pusula Yayıncılık, 2016.
- [3] S.Ö. Dođu, U.T. Şireli, Gıdalarda izlenebilirlik, The Journal of Food, 40/5, 295-302, 2015.
- [4] D. Folinas, I. Manikas, B. Manos, Traceability data management for food chains, British Food Journal, 108/8, 622-633, 2006.

Anahtar Kelimeler: Arduino, CO₂ Sensörü, Gıdalarda İzlenebilirlik.



DETERMINATION OF CARBON DIOXIDE IN FOODS

Abstract: Sensors and microcontrollers are the basis of the measures taken in our daily lives against events that may endanger human health. Thanks to the science of physics, our daily life has become easier and more efficient with sensors, which are active or passive devices that transform the physical quantities of the world we live into electrical signals. One of these sensors, NDIR (Non-dispersive infrared) are spectroscopic sensors which are generally used for measuring gas and related sizes. It is nondispersive in the sense of optical dispersion since the infrared energy is allowed to pass through the atmospheric sampling chamber without deformation [1,2]. In this study, using Arduino Uno microcontroller card (programmed with processing language) and NDIR carbon dioxide sensor, it is tried to understand and reveal the relationship between the foods spoilage we consume frequently in our daily lives and the secretions of carbon dioxide [3,4]. Eggs were used as the product and the age of the product was determined by the measurement of carbon dioxide produced by the egg. With this kind of study, it will be possible to improve the supply and storage behavior of the foods we consume.

Keywords: Arduino, Sensor of CO₂, Traceability in Food

S-36

RÖLATİVİSTİK ÖUA YAKLAŞAMINDA ORTAYA ÇIKAN MATEMATİKSEL ZORLUKLAR ÜZERİNE NOTLAR

Ali Bağcı

*Pamukkale Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 20017 Denizli, Türkiye
abagci@pau.edu.tr*

Özet: Rölativistik moleküler ÖUA denklemleri, dört-bileşenli Dirac spinörleri için Slater-tipli spinör orbitaller kullanılarak elde edilir. Rölativistik olmayan limit durumunda bu spinör orbitalleri kesirli baş-kuantum sayılı Slater-tipli orbitallere indirgenir. Slater-tipli orbitaller, kompleks analize göre $r=0$ 'da analitik değildir. Bu, ÖUA yönteminde ortaya çıkan moleküler integrallerin analitik yöntemle dayalı hesaplamalarında zorlukların ortaya çıkmasına neden olur. Yazarın daha önceki çalışmalarında, tekrarlama bağıntıları, yakınsak seri formülleri bu zorlukların aşılması adına Coulomb etkileşiminin Laplace açılımı ve “prolate” küresel koordinatları kullanılarak üretilmiştir. Daha önceki çalışmalara dayalı olarak burada genel bir formalizm sunulur.

Anahtar Kelimeler: Dirac denklemleri, Slater-tipli spinör orbitalleri, öz-uyumlu alan, moleküler integraller, analitik hesaplama

NOTES ON MATHEMATICAL DIFFICULTIES ARISING IN RELATIVISTIC SCF APPROXIMATION

This work presents the formalism for evaluating molecular SCF equations, as adapted to four component Dirac spinors, which in turn reduce to Slater-type orbitals with non-integer principal quantum numbers in the non-relativistic limit. The difficulty associated with finding relations for molecular integrals over these type of orbitals which are not analytic in the sense of complex analysis at $r=0$, is eliminated. Unique numerical accuracy is provided by solving the molecular integrals through Laplace expansion of Coulomb interaction and prolate spheroidal coordinates. Recurrence relations and new convergent series representation formulae are derived. The technique draws on previous work by the author and the general formalism is presented in this paper.

Keywords: Dirac equations, Slater-type spinor orbitals, self-consistent field, molecular integrals, analytical evaluation.

S-37

MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂ MOLEKÜLÜNÜN SPEKTROSKOPİK VE DOĞRUSAL OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİ ÜZERİNE BİR ÇALIŞMA

Muhammet Okur^{1*}, Nazmiye Albayrak¹, Arslan Ünal¹, Yusuf Atalay²

¹Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Optisyenlik, Bilecik

²Sakarya Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Sakarya

*Yazışılan yazar e-posta: muhammet.okur@bilecik.edu.tr

Özet: Bu çalışmada, MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂ molekülünün spektroskopik ve doğrusal olmayan optik özellikleri Gaussian 09 paket programı kullanılarak teorik olarak incelenmiştir. Molekülün taban durum enerjisindeki kararlı yapısı Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinin B3LYP ve PBE1PBE yöntemleriyle 6-311++G(d,p) temel seti kullanılarak elde edilmiştir. Taban durum enerjisine ait bu yapıdan hareketle molekülün doğrusal olmayan optik özelliklerinin yanında titreşim frekansları ve kimyasal kayma değerleri de aynı metotlarla hesaplanmıştır. IR ve NMR spektroskopisi yardımıyla molekülün kararlı yapısı aydınlatılmıştır. Yapılan hesaplamalar molekülün deneysel verileriyle karşılaştırıldığında uyum olduğu gözlenmektedir.

Anahtar Kelimeler: DFT, NMR, NLO özellikler, MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂

A STUDY ON NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES AND SPECTROSCOPIC OF MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂

Abstract: In this study, spectroscopic and nonlinear optical properties of MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂ were performed by using Gaussian 09 package program in theoretically. The optimized structure of the MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂ on the ground state was obtained by using B3LYP and PBE1PBE methods of Density Functional Theory with 6-311 ++ G (d, p) basis set. In addition, the nonlinear optical properties, vibration frequencies and chemical shift values of the title molecule were calculated by using the same methods. The optimized structure of the title molecule was established by IR and NMR spectroscopy. When the calculated data of the molecule are compared with the experimental ones, it is observed that there is agreement.

Keywords: DFT, NMR, NLO özellikler, MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂

S-38

YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ HESAPLAMALARI İLE 4-HİDROKSİ-BENZALDEHİT-N-METİL-4-STİLBZOLYUM TOSİLAT MOLEKÜLÜNÜN DOĞRUSAL OLMAYAN OPTİK VE TİTREŞİMSSEL ÖZELLİKLERİ

Nazmiye Albayrak^{1*}, Muhammet Okur¹, Arslan Ünal¹, Adil Başoğlu², Yusuf Atalay²

¹Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Optisyenlik, Bilecik

²Sakarya Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Sakarya

*Yazışılan yazar e-posta: nazmiye.albayrak@bilecik.edu.tr

Özet: Bu çalışmada 4-Hidroksi-Benzaldehit-N-Metil-4-Stilbazolyum Tosilat (HBST) molekülünün doğrusal olmayan optik ve titreşimsel özellikleri sunulmaktadır. Kararlı durumdaki yapıya ait bağ uzunluğu ve bağ açısı gibi geometrik parametreler B3LYP/6-311++G(d,p) ve HSEH1PBE/6-311++G(d,p) yöntemleriyle hesaplanmıştır. Moleküle ait titreşim frekansları, ¹H ve ¹³C kimyasal kayma değerleri, HOMO-LUMO enerjileri de aynı yöntemler ile elde edilmiştir. Moleküler orbital enerji (FMOs) değerleri kullanılarak HBST molekülünün kimyasal sertlik ve elektronegatiflik parametreleri elde edildi. Molekülün doğrusal olmayan optik özellikleri tipik bir NLO materyal olan para-Nitroanilin(pNA) ile karşılaştırıldı. Elde edilen verilerin deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görüldü. Tüm hesaplamalar Gaussian 09 paket programı ile gerçekleştirildi.

Anahtar Kelimeler: DFT, FMOs, NLO, HBST

NONLINEAR OPTICAL AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF 4-HYDROXY-BENZALDEHYDE-N-METHYL-4-STILBAZOLIUM TOSYLATE BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY CALCULATIONS

Abstract: In this paper, presents nonlinear optical and vibrational properties on 4-hydroxy-benzaldehyde-N-methyl-4-stilbazolium tosylate (HBST). Geometric parameters such as bond lengths and bond angles were calculated B3LYP/6-311++G(d,p) and HSEH1PBE/6-311++G(d,p) levels on the ground state. Vibrational frequencies, ¹H and ¹³C chemical shifts, HOMO-LUMO energies of the title compound were performed on same levels. The chemical hardness (η) and electronegativity (χ) parameters were also obtained by using frontier molecular orbital (FMOs) energies. The NLO parameters of the title compound were compared with those of para- Nitroaniline (pNA) and urea which are typical NLO materials. Obtained data showed that there is an agreement between the calculated data and experimental ones. All calculations were carried out with the GAUSSIAN 09 package program.

Keywords: DFT, FMOs, NLO, HBST

Glass-blown Spherical Miniature Cesium Vapor Cells For Atomic Magnetometer Applications

İ. Yorulmaz¹, A. Meraki^{1,2}, B. Kaçar¹, B. Kubanaliev¹, İ. Araz^{1,*},

¹ Atomic Sensors Laboratory, TUBITAK National Metrology Institute, Kocaeli, Turkey

² Department of Physics, Bilecik Şeyh Edebali University, Bilecik, Turkey

*email to: isa.araz@tubitak.gov.tr

In recent years, there is considerable interest in the development of atomic magnetometer technology for the measurement of weak magnetic fields. Atomic vapor cells play crucial roles for precise measurement devices such as atomic clocks [1], atomic magnetometers [2] and, atomic spin gyroscopes [3], all of which consist of alkali metal atoms with long-lasting polarization [4]. The magnetic field sensitivity of an optically pumped magnetometer is mainly related to the cell volume, the gyromagnetic ratio of alkali metal and the alkali metal density and the relaxation time, T_2 . [5]

We report on the fabrication of millimeter-sized vapor cells and their performance in cardiomagnetometric measurements. The process of manufacturing an atomic vapor cell is important to ensure uniformity in the magnetic field sensitivity of optically pumped atomic magnetometer. It is well known that alkali metals are very volatile and easily react with oxygen. Therefore, alkali metals must be processed under high vacuum conditions. In this study, manual glass-working technique was used to fill the alkali metal into empty cells. The fabrication and the characterization of nitrogen buffered and pure cesium vapor cells were reported. The natural linewidth of $F=4$ to $F=5$ ' transition was measured as 5.36 MHz by using Doppler-free saturated absorption spectroscopy. In addition, an Mx type atomic magnetometer setup was used to measure and compare the magnetic resonance lineshapes of the pure and buffered Cs vapor cells for cardiomagnetometer applications. The halfwidths at half maxima of the phase signals were measured as 1039 Hz and 4450 Hz for 10 torr N_2 buffered and pure Cs vapor cells, respectively. The calculated sensitivities for these lineshapes are 22.4 pT/ $\sqrt{\text{Hz}}$ and 76 pT/ $\sqrt{\text{Hz}}$, respectively. The sensitivities of both cells are optimized for cardiomagnetometric measurements.

Keywords: atomic vapor cells, high precision magnetometry, optically detected magnetic resonance.

References:

- [1] C. J. Bordé, "Atomic clocks and inertial sensors," *Metrologia*, vol. 39, no. 5, p. 435, 2002.
- [2] I. Kominis, T. Kornack, J. Allred, and M. Romalis, "A subfemtotesla multichannel atomic magnetometer," (in English), *Nature*, Article vol. 422, no. 6932, pp. 596-599, APR 10 2003 2003, doi: 10.1038/nature01484.
- [3] E. A. Donley, "Nuclear magnetic resonance gyroscopes," in *SENSORS, 2010 IEEE*, 2010: IEEE, pp. 17-22.
- [4] J. Kitching, S. Knappe, and E. A. Donley, "Atomic Sensors - A Review," *Ieee Sensors Journal*, vol. 11, no. 9, pp. 1749-1758, Sep 2011, doi: 10.1109/jsen.2011.2157679.
- [5] D. Budker, W. Gawlik, D. F. Kimball, S. M. Rochester, V. V. Yashchuk, and A. Weis, *Rev. Mod. Phys.* 74, 1153 (2002).

S-40

[Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)] nin YAPISAL VE SPEKTROSKOPİK İNCELEMESİ

Muhammet Okur^{1*}, Nazmiye Albayrak¹, Arslan Ünal¹, Yusuf Atalay²

¹Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Optisyenlik, Bilecik

²Sakarya Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Sakarya

*Yazışılan yazar e-posta: muhammet.okur@bilecik.edu.tr

Özet: Bu çalışmada taban durumda, yoğunluk fonksiyoneli teorisi B3LYP ve PBE1PBE yöntemleri 6-311++G(d,p) temel seti ile hbst molekülünün yapısal ve spektroskopik incelemesi sunulmaktadır. Moleküle ait taban durumdaki kararlı yapı aynı yöntemlerle hesaplandı. Yapıyı karakterize etmek için kararlı yapıdan hareketle IR, NMR ve Moleküler orbital enerji değerleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçların deneysel verilerle uyumlu olduğu gözlenmiştir. Ayrıca, moleküle ait kimyasal sertlik ve elektronegatiflik değerleri HOMO ve LUMO enerji değerleri kullanılarak hesaplanmıştır. Son olarak 3D moleküler yüzey simüle edildi.

Anahtar Kelimeler: DFT, IR, NMR, FMOs, [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)]

STRUCTURAL AND SPECTROSCOPIC INVESTIGATIONS OF [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)]

Abstract: This paper presents the structural and spectroscopic investigations on [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)] using the Density Functional Theory B3LYP and PBE1PBE levels with the 6-311++G (d,p) basis set on the ground state. The optimized structure of the [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)] on the ground state was obtained by using same methods. In order to characterize the title compound, IR, NMR and Frontier molecular orbital(FMOs) energies computation are performed based on the optimized structure. Obtained results showed that there is an agreement between the calculated data and experimental ones. In addition, chemical hardness and electronegativity values of the molecule were calculated using HOMO and LUMO energy values. Finally, 3D molecular surfaces were simulated.

Keywords: DFT, IR, NMR, FMOs, [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)]



POSTER SUNUM ÖZETLERİ

P-01

YÜZEYDE GÜÇLENDİRİLMİŞ RAMAN SAÇILMASIYLA Fe@Au/HİDROJEL NANOPLATFORM ÜZERİNDE GLİKOZ TAYİNİ

Erkan Altun*, İlknur Üstündağ

Dumlupınar Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kütahya

**e-posta: erkanaltuncagman@gmail.com*

Soljel yöntemiyle aljinat çözeltisi içinde demir nanoparçacıklar sentezlendikten sonra demir nanoparçacıkların çevresi altın nanoparçacıklarla kaplanmıştır. Kolloidal çözelti kalsiyum çözeltisi ile hidrojel haline dönüştürülmüştür. Hazırlanan kompozit malzemenin ismi Fe@Au/Hidrojel olarak kısaltılmıştır.

Hazırlanan hidrojeller vizkozitesi yüksek jel haline getirildikten sonra alüminyum levha üzerine döner kaplama sistemi ile film halinde kaplanmıştır. Altın nanoparçacıklar üzerine 4-merkaptofenilboronik asit kendiliğinden düzenlenen tektabakalar (SAMs) yöntemi ile bağlandıktan sonra 1-10 mM glikoz standart çözeltisi damlatılan filmler iyice saf su ile yıkandıktan sonra SERS ölçümleri alınarak kalibrasyon çalışması yapılmıştır. Geliştirilen yöntemin alt tayin sınırı 0,011 mM olarak hesaplanmıştır (S/N=3). Ticari insan serum numunesiyle gerçek numune uygulaması yapılarak başarılı geri kazanım değerleri (% 98 ile %103 aralığında) elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: SERS, Glikoz Sensör, Fe@Au/hidrojel

P-02

BİR İYOT ATOMU KATKILANAN LİTYUM TOPAKLARININ BAĞIL KARARLILIKLARI

Arslan Ünal¹, Ömer Ayın^{2,*}

¹Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Bilecik

²Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Bilecik

*Yazışılan yazar e-posta: omr.ayin@gmail.com

Özet: Bir iyot atom katkılı lityum topaklarının yerel minimum yapıları [Li_nI ($n = 1-8$)] yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) kullanılarak incelenmiştir. Li_nI ($n = 1-8$) topaklarının bağıl kararlılıkları DFT-B3LYP teori seviyesinde relativistik efektif çekirdek potansiyelini içeren Lanl2dz baz seti yardımıyla araştırılmıştır. Elde edilen her bir topağın lokal minimum yapısının atom başına bağlanma enerjisi (E_b), ayrışma enerjisi (ΔE), ikinci dereceden enerji farkı ($\Delta_2 E$) ve HOMO-LUMO aralığı (gapHL) belirlenmiştir. Bağıl enerji hesaplamaları sonucunda, Li_nI ($n = 3, 5, 7$) topaklarının komşu Li_nI ($n = 2, 4, 6, 8$) topaklarına göre daha kararlı olduğunu gösteren bir tek-çift osilasyon gözlemlenmiştir. LiI araştırılan lityum-iyodür topakları içinde en kararlı olanıdır.

Anahtar Kelimeler: Topak, DFT, Kararlılık, Lityum, İyot.

THE RELATIVE STABILITY OF ONE IODINE-DOPED LITHIUM CLUSTERS

Abstract: The local minima structures of an iodine atom doped lithium clusters [Li_nI ($n = 1-8$)] have been examined by using the density functional theory (DFT). The relative stabilities of Li_nI ($n = 1-8$) clusters have been investigated at the DFT-B3LYP theory level within the help of Lanl2dz basis set containing relativistic effective core potential. The binding energy per atom (E_b), dissociation energy (ΔE), second-order energy difference ($\Delta_2 E$) and HOMO-LUMO gap (gapHL) of the obtained local minimum structure of each cluster have been determined. As a result of the relative energy computations, an odd-even oscillation has been observed showing that Li_nI ($n = 3, 5, 7$) clusters are more stable than adjacent Li_nI ($n = 2, 4, 6, 8$) clusters. LiI is the most stable one in the studied range of lithium-iodide clusters.

Keywords: Cluster, DFT, Stability, Lithium, Iodine.

P-03

A DFT OPTICAL ACTIVITY STUDY OF LITHIUM-FLUORIDE CLUSTERS

Arslan Ünal¹, Selçuk Güvenir^{2,*}

¹Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Bilecik

²Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Bilecik

*Yazışılan yazar e-posta: selcuk.guvenir@bilecik.edu.tr

Özet: Li_nX ($n \geq 2$ ve $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{F}$ ve I) kimyasal formüllü halojen atom katkılanmış küçük lityum topakları kuramsal ve deneysel bilim insanları tarafından yoğun olarak çalışılmıştır. Son on yılda, nanomalzemeler, şarj edilebilir lityum bazlı bataryalar, süpertuzlar, soğutma sistemleri, optik sensörler ve elektridler gibi çeşitli araştırma alanlarındaki uygulamalardan dolayı Li_nX (özellikle Li_nF) topaklarına özel bir ilgi gösterilmiştir. Bu çalışmada, Li_nF ($n = 2-8$) topaklarının taban durum yapıları yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) çerçevesinde optimizasyon ve kızılötesi frekans hesaplamaları kullanılarak elde edilmiştir. Taban durum yapılarının doğrusal olmayan optik (NLO) aktiviteleri örneğin dipol momenti (μ), ortalama kutuplanabilirlik ($\langle \alpha \rangle$) ve birinci dereceden toplam statik kutuplanabilirlikleri (β_0) hesaplanmıştır. Global reaktivite tanımlayıcı parametreleri örneğin elektronlarla işgal edilmiş en yüksek moleküler yörünge enerji (E_{HOMO}), elektronlarla işgal edilmemiş en düşük moleküler yörünge enerji (E_{LUMO}), HOMO-LUMO gap (gap_{HL}), elektron ilgi (A), iyonlaşma potansiyeli (I), elektronegatiflik (η), kimyasal sertlik (η), kimyasal yumuşaklık (σ), kimyasal potansiyel (P_i) ve elektrofillik indeksi (ω) de araştırılmıştır. DFT-B3LYP fonksiyoneli ile birlikte Lanl2dz baz seti yukarıda bahsedilen tüm hesaplamaları yapmak için kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler: DFT, Lityum, Flor, NLO, Kutuplanabilirlik.

A DFT OPTICAL ACTIVITY STUDY OF LITHIUM-FLUORIDE CLUSTERS

Abstract: Halogen atom doped small lithium clusters with chemical formula Li_nX ($n \geq 2$ and $X = Cl, Br, F$ and I) have extensively studied by theoretical and experimental scientists. In the last decade, a special interest has been focused on the Li_nX (particularly Li_nF) clusters due to the applications in various research areas as in the nanomaterials, rechargeable lithium-based batteries, supersalts, cooling systems, optical sensors and electrides. In this study, the ground state structures of Li_nF ($n = 2-8$) clusters were obtained by using optimization and infrared frequency calculations within the framework of density functional theory (DFT). The nonlinear optical (NLO) activities for the ground state structures such as dipole moment (μ), average polarizability ($\langle\alpha\rangle$) and first order total static hyperpolarizability (β_0) were computed. Global reactivity descriptor parameters for instance highest occupied molecular orbital energy (E_{HOMO}), lowest unoccupied molecular orbital energy (E_{LUMO}), HOMO-LUMO gap (gapHL), electron affinity (A), ionization potential (I), electronegativity (χ), chemical hardness (η), chemical softness (σ), chemical potential (P_i) and electrophilicity index (ω) were also analyzed. The DFT-B3LYP functional within Lanl2dz basis set were used to perform all the above mentioned calculations.

Keywords: DFT, Lithium, Fluorine, NLO, Polarizability.