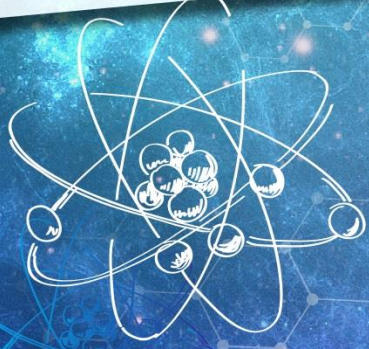




BİLECİK ŞEYH EDEBALI
UNIVERSITY

ADIM Physics Days VIII

Abstract and Proceeding Book



Editor
Arslan ÜNAL

12-15 SEPTEMBER 2019

Bilecik Şeyh Edebali University

<http://w3.bilecik.edu.tr/adimfizikviii/>

ISBN 978-605-65470-9-6

Editor: ARSLAN ÜNAL

Assistant Editor: Ali İhsan GÖKER

Assistant Editor: Aşlı Ayten KAYA

Prepared by Muhammet OKUR

Prepared by Nazmiye ALBAYRAK



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
TAM METİNLER	79

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 bildiri 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 katılımıyla 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

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
Muzaffer 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 UCHİYAMA	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 KONUŞMALARI
12.00-13:30	Öğle Yemeği
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
Oturum Başkanı	Prof. Dr. Yusuf ATALAY
15:10-15:30	Burcu AKÇA BAZI POTASYUM BİLEŞİKLERİ İÇİN KÜTLE SOĞURMA KATSAYILARININ ÖLÇÜLMESİ
	M. Fatih GÖZÜKIZIL YENİ BİR İNCE FİLM ÜRETİM TEKNİĞİ OLAN MANYETİK DÖNDÜREREK KAPLAMA TEKNİĞİ KULLANARAK ZnO İNCE FİMLERİN ÜRETİLMESİ
15:30-15:50	Murat KOÇAK İKİ GRUPLU DİFÜZYON TEORİSİ YARDIMIYLA KRİTİK NÜKLEER REAKTÖR EBATININ TESPİTİ
	Hüseyin AKSU 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 GAUZYAN KABUK ORBİTALLERİ İÇİN ATOM İNTEGRALLERİNİN HESAPLANMASI
	Aylin YALÇIN SARIBEY FİZİĞİN ADLİ BİLİMLERDEKİ UYGULAMALARI
16:10-16:30	Mustafa KURBAN INVESTIGATION OF ELECTRONIC STRUCTURE AND THERMAL PROPERTIES OF NANO-SATURN FOR FUNCTIONAL MATERIALS
	Handan ENGİN KIRIMLI 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
Oturum Başkanı	Doç. Dr. Sinan TEMEL
17:30-17:50	Arif Kösemen INVESTIGATION OF COMPOSITE GEL DIELECTRIC MATERIALS FOR OFET APPLICATIONS
	Dr. Öğr. Üyesi Yalçın KALKAN Zekayi ANDIÇ YARDIMCI FONKSİYONLARI KULLANARAK SLATER TİPLİ 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 TIPLI 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 SINIR YARALANMASI SONRASI ÜÇ BOYUTLU BİYOYAZICIDA ÜRETİLEN BİYOYUMLU SINIR TÜPLERİNİN ETKİLERİNİN ARAŞTIRILMASI	Gülşen KARAKOYUN GENELLEŞTİRİLMİŞ SPİN-S MANYETİK İKİLİ ALAŞIMLARIN HİSTEREZİS KARAKTERİSTİKLERİ
10:50-11:10	Çay-Kahve Arası	
11:10-11:30	Gürkan DEMİRDAK ATOMİK HARTREE-FOCK-ROOTHAAN HESAPLAMALARINDA GENELLEŞTİRİLMİŞ ÖZ-SÜRTÜNME ÜSTEL TIPLI 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 ₃ 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 Schwingschlögl OBSTACLES AND POSSIBLE SOLUTIONS ON THE WAY TO VALLEY-POLARIZED 2D MATERIALS	
Yer	Salon 1	Salon 2
Oturum Başkanı	Dr. Öğretim Üyesi Adil MERAKİ	Dr. Öğretim Üyesi Yalçın KALKAN
14:10-14:30	Manolya CİN ZrRuP MALZEMESİNİN YAPISAL ve ELESTATİK ÖZELLİKLERİ: Ab-İNİTİO HESAPLAMALARI	Volkan ÇETİNKAYA HZZ VE HyZ 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		
Yer	Salon 1	Salon 2
Oturum Başkanı	Dr. Öğretim Üyesi Adil MERAĞI	Dr. Öğretim Üyesi Yalçın KALKAN
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 BİYOYAZICI TASARIMI VE ÜRETİMİ	Yunus KAYA BAZI OKSİM MOLEKÜLLERİNİN MOLEKÜLER DOCKİNG ÇALIŞMALARI: SUBSTITUENT ETKİSİNİN İNCELENMESİ
15:50-16:10	Durgun DURAN JAYNES-CUMMINGS MODELİ İÇİN KUANTUM PARAMETRE TAHMİNİ	Nazmiye ALBAYRAK L-PROLİNİUM PİCRATE 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 PİCRATE 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 Nanoclusters 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

Bazı Potasyum Bileşikleri için Kütle Soğurma Katsayılarının Ölçülmesi

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 $\text{Si}(\text{Li})$ 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 $\text{Si}(\text{Li})$ detector. Obtained experimental mass attenuation coefficients have been compared with WinXCom and FFAST theoretical values.

Keywords: Potassium, EDXRFS, WinXCom, FFAST.

S-02

Yeni Bir İnce Film Üretim Tekniği Olan Manyetik Döndürerek Kaplama Tekniği Kullanarak ZnO İnce Filmlerin Üretilmesi

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

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

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

³Bilecik 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 yüzeysel özellikleri X-Işını Kırınımı (XRD), yüzeysel 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 hekzagonal 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 içerisinde. 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

İki Gruplu Difüzyon Teorisi Yardımıyla Kritik Nükleer Reaktör Ebatının Tespiti

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 kullanılabilen 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 denkleminin 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 Dunitz¹

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

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

³University 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 Orbitalleri için Atom İntegrallerinin Hesaplanması *

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: Gausyan 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, Gausyan kabuk orbitalleri kullanılarak bazı atomlar için Hartree-Fock-Roothaan hesaplamaları da yapılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Gausyan 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

Fiziğin Adli Bilimlerdeki Uygulamaları

Aylin YALÇIN SARIBEY^{1,2}

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

²Üsküdar Üniversitesi, Bağlılık 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 Radikal İçeren Çözeltilerde Overhauser Dinamik Nükleer Polarizasyon Büyümelerinin İncelenmesi

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 çözündeki 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

Yardımcı Fonksiyonları Kullanarak Slater Tipli Orbitallerine Örtme İntegrallerinin Genelleştirilmesi

*Zekayi ANDIÇ, zekayiaandic@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 katkılı 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 katkılı olduğunda band boşluğunda değişimler meydana gelmektedir. Bu değişimler malzemenin uygulama alanına göre kullanım alanlarını genişletmektedir. Bu nedenle, özellikle geçiş metallerinin katkılı olduğu 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 katkılı 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

Kemik Defektlerin Onarımında 3d ve Biyomalzemeler; Bor Pla Üretimi

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 soğutularak 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 İncelenmesi

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

Genelleştirilmiş Spin-S Manyetik İkili Alaşımların Histerezis Karakteristikleri

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 yarım 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. Akıncı, G. Karakoyun, Physica B, 521, 365 (2017).
- [10] G. Karakoyun, Ü. Akıncı, 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^u 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-Zamanında Tachyon Scalar Alan Çözümleri

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 Alaşımlarının Bazı Termal Özelliklerinin Deneysel Yöntemle İncelenmesi ve Sc Etkisinin Karşılaştırılması

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.sarioglu@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 genişleme 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

Sıçanlarda Siyatik Sinir Yaralanması Sonrası Üç Boyutlu Biyoyazıcıda Üretilen Biyoyumlu Sinir Tüplerinin Etkilerinin Araştırılması

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 Biopatician After Sciatic 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 İncelenmesi

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 Bazlı γE Çarpıştırıcısında Uyarılmış Spin-3/2 Nötrinolar için Araştırma

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 Elestatik 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 HyZ Anormal Bağlaşımlarının Gelecek Nesil Doğrusal Çarpıştırıcılarda İncelenmesi

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 HyZ anormal bağlaşımları model bağımsız efektif teori kullanılarak araştırılmıştır. $\gamma e^- \rightarrow HZe^-$ sürecinde tesir kesiti değerleri hem yeni fizik etkileri hem de Standart Model ardaalan 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 $H\gamma Z$ Anomalous Couplings at the Future Linear Colliders

Abstract: In this study, we investigate HZZ ve $H\gamma Z$ 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 $\gamma e^- \rightarrow HZe^-$. 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. Akıncı, 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-Dimetilsoxazol-5-YL)-4-(2-Hidroksi-5-Metilbenzylidene)Amino)Benzensülfonamit Molekülünün Yapısının Spektroskopik (X-RD, FT-IR, NMR) Yöntemlerle Aydınlatılması

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: Sülfonamitler insanlarda bakteri enfeksiyonlarının tedavisinde sistematik olarak kullanılan ilk ilaç grubudur. Ticari olarak da üretilen sülfonamit 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 sülfonamit türevi olan (Z)-N-(3,4-dimetilsoxazol-5-yl)-4-(2-hidroksi-5-metilbenzylidene)amino)benzensülfonamit 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: Sülfonamitler, 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

Biyoyazıcı Tasarımı ve Üretimi

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 stereolithograpydan (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: Biopinter, 3D Modeling, Tissue Engineering, Biomaterials.

S-30

Jaynes-Cummings Modeli için Kuantum Parametre Tahmini

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 inceleneceğiz. 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-Dimetilisoxazol-5-Yl)-4-(2-Hidroksi-5-Metilbenzylidene)Amino)Benzensülfonamit Molekülünün Homo-Lumo, Nlo ve Mep Analizleri

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

Bu çalışmada yeni sentezlenen ve bir sülfonamit türevi olan (Z)-N-(3,4-dimetilisoxazol-5-yl)-4-(2-hidroksi-5-metilbenzylidene)amino)benzensülfonamit molekülünün yapısı DFT/B3LYP metodu ve 6-311++G(d,p) temel seti ile optimize edildi. Sentezlenen molekülün kararlı yapısı bulunduktan 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: Sülfonamitler, 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 İnfrared 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-Methyl-Pyridinium Picrate Bileşiğinin Yapısal ve Spektroskopik İncelemesi

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 taban durumda, yoğunluk fonksiyoneli teorisi B3LYP ve PBE1PBE yöntemleri 6-311++G(d,p) temel seti ile 2-methyl-pyridinium picrate bileşiğinin yapısal ve spektroskopik incelemesi sunulmaktadır. Bileşiğe 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, pyridinium picrate

Structural and Spectroscopic Investigations of 2-Methyl-Pyridinium Picrate

Abstract: This paper presents the structural and spectroscopic investigations on 2-methyl-pyridinium picrate using the Density Functional Theory B3LYP and PBE1PBE levels with the 6-31++G (d,p) basis set on the ground state. The optimized structure of the 2-methyl-pyridinium picrate 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, pyridinium 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

Gıdalarda Karbondioksit Tayini

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. Erdiç, Yeni Başlayanlar İçin ARDUINO, Pusula Yayıncılık, 2016.
- [3] S.Ö. Doğu, 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

Rölativistik ÖUA Yaklaşımında Ortaya Çıkan Matematiksel Zorluklar Üzerine 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 nin Yapısal ve Spektroskopik Özelliklerinin DFT Hesaplamaları

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 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 ayı 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, HOMO, LUMO, MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂

DFT Calculations On Spectroscopic And Structural Properties Of MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂

Abstract: In this study, structural and vibration frequency values of MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂ 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, HOMO, LUMO, MgCl₂.6H₂O.C₂H₄(OH)₂

S-38

L-Pronilium Picrate Molekülünün Spektroskopik ve Doğrusal Olmayan Optik Özellikleri Üzerine Bir Çalışma

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 L-pronilium picrate 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 PBE1PBE/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 L-pronilium picrate 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, NMR, NLO özellikler, picrate

A Study on Nonlinear Optical Properties and Spectroscopic of L-Pronilium Picrate

Abstract: In this paper, presents nonlinear optical and vibrational properties on L-pronilium picrate. Geometric parameters such as bond lengths and bond angles were calculated B3LYP/6-311++G(d,p) and PBE1PBE/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, NMR, NLO properties, picrate

S-39

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, T₂. [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 N₂ buffered and pure Cs vapor cells, respectively. The calculated sensitivities for these lineshapes are 22.4 pT/√Hz and 76 pT/√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)] Molekülünün Spektroskopik ve Doğrusal Olmayan Optik Özellikleri Üzerine Bir Çalışma

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, [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)] 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, FMOs, NLO özellikler, [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)]

A Study On Spectroscopic and Nonlinear Optical Properties of [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)]

Abstract: In this study, spectroscopic and nonlinear optical properties of [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)] were performed by using Gaussian 09 package program in theoretically. The optimized structure of the L-pronilium picrate 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, FMOs, NLO properties, [Li(C₈H₅Cl₂O₂)(C₁₂H₈N₂)(H₂O)]



POSTER SUNUM ÖZETLERİ

P-01

Yüzeyde Güçlendirilmiş Raman Saçılmasıyla Fe@Au/Hidrojel Nanoplatform Üzerinde Glikoz Tayini

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

Bir İyot Atomu Katkılanan Lityum Topaklarının Bağlı Kararlılıkları

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 (YFT) kullanılarak incelenmiştir. Li_nI ($n = 1-8$) topaklarının bağlı kararlılıkları YFT-B3LYP teori seviyesinde relativistik efektif çekirdek potansiyelini içeren Lanl2dz baz seti yardımıyla araştırılmıştır. Elde edilen herbir 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. Bağlı 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, YFT, 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, a 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

Lityum-Florür Topaklarının DFT Optiksel Aktivite Çalışması

Arslan Ünal¹, Selçuk Güvenir^{2,*}

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

²Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilimdalı, Bilecik

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

Özet: Li_nX ($n \geq 2$ ve $X = Cl, Br, F$ 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 (YFT) 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 (gapHL), elektron ilgi (A), iyonlaşma potansiyeli (I), elektronegatiflik (η), kimyasal sertlik (η), kimyasal yumuşaklık (σ), kimyasal potansiyel (Pi) ve elektrofillik indeksi (ω) de araştırılmıştır. YFT-B3LYP fonksiyoneli ile birlikte Lanl2dz baz seti yukarıda bahsedilen tüm hesaplamaları yapmak için kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler: YFT, 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 $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{F}$ 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 (Pi) 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.



TAM METİNLER

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

Bilal Cangül¹, Arslan Ünal², Saliha Alyar³, Hamit Alyar^{4*}

¹Çankırı Karatekin University, Faculty of Science, Department of Physics, Çankırı, Turkey.

²Bilecik Şeyh Edebali University, Faculty of Art and Science, Department of Physics, Bilecik, Turkey.

³Çankırı Karatekin University, Faculty of Science, Department of Chemistry, Çankırı, Turkey.

^{4*}Çankırı Karatekin University, Faculty of Science, Department of Physics, Çankırı, Turkey.

*Corresponding author e-mail: halyar@karatekin.edu.tr

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).

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

INTRODUCTION

Sulfonamides together with various pharmacological agents with antibacterial [1,2], insulin-releasing [3,4], carbonic anhydrase inhibitory [5], anti-inflammatory [6], antidiabetic [7] and antitumor [8] activities are an important class of drugs. With advancing technology and work, many important effects of sulfonamides in metabolism have been explained. Considering the multifunctional chemistry of the sulfonamide derivatives, it appears that continuous efforts have been made to synthesize the Schiff base ligands of the substituted sulfonamides. Due to the great biological importance of sulfonyl derivatives, we planned the evaluation of the hybrid derivatives of this group and the various enzyme inhibition potentials. In our previous studies, we synthesized different sulfonamides and tested their antimicrobial activity [9,10,11]. Spectroscopic properties and carbonyl complexes of methanesulfonic acid hydrazide [12], methanesulfonic acid 1-methylhydrazide [13] and some ethanesulfonylhydrazone derivatives were also studied [14]. In addition, different aromatic/heteroaromatic sulfonylhydrazone derivatives and their transition metal complexes have been investigated for their inhibitory effects on carbonic anhydrase II (hCA II) isoenzyme [15].

. 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.

MATERIALS AND METHODS

The entire calculations of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide were performed with Gaussian 09(Linux) [16] and Gauss View 05 program packages using density functional theory (DFT). The geometries of the compounds were fully optimized without any constraint with the help of an analytical gradient procedure implemented with the B3LYP functional and 6-311++G(d,p) basis set. Optimized geometry of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide presented at Fig. 1. The optimized structural parameters have been evaluated for the calculation of vibrational frequencies at functional (B3LYP) method.

RESULTS AND DISCUSSION

Molecular Geometry

The geometrical parameters of title compound calculated at B3LYP/6-311++ G (d, p) level of theory are presented in Table 1 and Fig. 1 depicts the optimized structure of the host molecule along with atom numbering. The calculated energies and dipole moments for the molecule are -1599.0399 a.u. and 8.4129 D respectively. A superposition of the molecular structure of the compound evaluated by quantum mechanical calculations and X-ray study show almost perfect matching comparing the theoretical data with the experimental results indicate that optimized bond length and bond angle values are slightly different from these experimental ones.

Table 1. The experimental and theoretical bond lengths (Å), bond angles (°) of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide

	Exp	DFT/B3LYP		Exp	DFT/B3LYP
S-O2	1.423(2)	1.456	C19-H13C	0.96	1.084
S-N2	1.654(3)	1.747	C19-H13A	0.96	1.085
O1-C5	1.352(3)	1.352	C1-H1A	0.96	1.093
O4-C14	1.313(4)	1.366	S-O3	1.428(3)	1.460
N3-C12	1.298(4)	1.280	S-C6	1.756(3)	1.788
N2-C5	1.401(4)	1.393	O1-N1	1.417(3)	1.398
C11-C10	1.378(4)	1.405	O4-H9	0.82	0.96
C5-C3	1.329(4)	1.361	N3-C11	1.413(4)	1.398
C10-H7	0.93	1.083	N2-H3	0.85(3)	1.017
C14-C13	1.409(4)	1.408	C11-C9	1.390(4)	1.405
C13-C12	1.416(4)	1.463	C10-C7	1.378(4)	1.389
C6-C7	1.373(4)	1.393	C14-C16	1.388(4)	1.396
C3-C2	1.404(4)	1.432	C13-C15	1.400(4)	1.404
C12-H8	0.93	1.093	N1-C2	1.300(4)	1.312
C9-C8	1.377(4)	1.386	C6-C8	1.385(4)	1.395
C8-H4	0.93	1.082	C3-C4	1.484(4)	1.493
C18-C17	1.401(5)	1.397	C7-H5	0.93	1.082
C15-H10	0.93	1.083	C9-H6	0.93	1.083
C17-C16	1.361(5)	1.390	C18-C15	1.360(5)	1.386
C16-H11	0.93	1.085	C18-C19	1.510(5)	1.474
C4-H2B	0.96	1.094	C2-C1	1.507(5)	1.494

Table 1. (continued)

	Exp	DFT/B3LYP		Exp	DFT/B3LYP
O2-S-O3	121.42(17)	122.0	O2-S-N2	107.44(17)	106.2
O3-S-N2	104.66(17)	107.0	O2-S-C6	108.55(17)	109.0
O3-S-C6	108.47(16)	108.0	N2-S-C6	105.13(15)	102.4
C5-O1-N1	106.7(3)	108.1	C14-O4-H9	109.5	110.0
C12-N3-C11	124.9(3)	120.0	C5-N2-S	119.2(2)	119.0
C5-N2-H3	112.(3)	112.3	S-N2-H3	109.(3)	108.0
C10-C11-C9	119.6(3)	119.0	C10-C11-N3	116.5(3)	123.0
C9-C11-N3	124.0(3)	118.0	C3-C5-O1	111.7(3)	111.0
C3-C5-N2	132.7(3)	132.2	O1-C5-N2	115.5(3)	117.0
C11-C10-C7	120.8(3)	120.5	C11-C10-H7	119.6	120.0
C7-C10-H7	119.6	120.0	O4-C14-C16	121.0(3)	122.0
O4-C14-C13	121.2(3)	118.0	C16-C14-C13	117.8(3)	120.4
C15-C13-C14	119.0(3)	118.3	C15-C13-C12	120.1(3)	118.3
C14-C13-C12	120.9(3)	120.2	C2-N1-O1	105.2(3)	106.0
C7-C6-C8	120.4(3)	121.2	C7-C6-S	119.5(3)	119.3
C8-C6-S	119.9(2)	119.4	C5-C3-C2	103.5(3)	103.0
C5-C3-C4	129.2(3)	129.0	C2-C3-C4	127.3(3)	128.4
			N3-C12-H8	118.6	121.5

This small difference originate from that the theoretical calculations are performed for isolated molecule in gas-phase. It should be noted that the geometry of solid state structure is subject to intra and inter molecular hydrogen bonding.

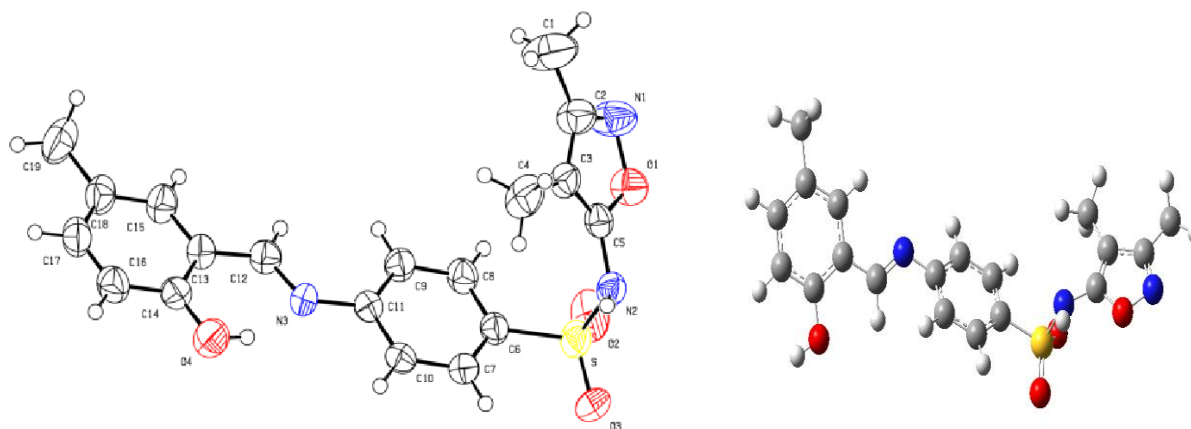


Figure 1. Ortep diagram and optimized structure of (Z)-N-(3,4-dimethylisoxazol-5-yl)-4-(2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide

Vibrational Assignments

The title molecule consists of 45 atoms and they have 132 normal modes of vibrations. The detailed vibrational assignment for some important peaks of title molecule presented in Table 2.

The IR spectrum of the prepared compounds exhibits the characteristic bands of the expected functional groups. The IR spectrum of free Schiff base ligand shows a strong bond at 1625 cm^{-1} (Fig. 2), which refers to the the stretching vibration of azomethine as the main characteristic band and obviously confirms the formation of the Schiff base. In the IR spectra of ligands vibrational band observed at 1374 cm^{-1} and 1165 cm^{-1} are assigned to asymmetric and symmetric SO_2 stretching modes, respectively. The presence of single and strong NH band at $\sim 3192\text{ cm}^{-1}$ confirms the presence of secondary amine group in compounds.

Table 2. Vibrational assignment of studied compound

Mod	Experimental	B3LYP/6-311++G(d,p)	Vib. Assign.
132		3836	$\nu_s(\text{OH})$
131	3192	3520	$\nu_{as}(\text{NH})$
130	2925	3206	$\nu_s(\text{CH})_{r2}$
129		3202	$\nu_s(\text{CH})_{r2}$
128		3190	$\nu_{as}(\text{CH})_{r2}$
127		3187	$\nu_s(\text{CH})_{r1}$
126		3185	$\nu_{as}(\text{CH})_{r2}$
125		3169	$\nu_s(\text{CH})_{r1}$
124		3149	$\nu_{as}(\text{CH})_{r1}$
123		3126	$\nu_s(\text{C39-H}_3)$
122		3106	$\nu_{as}(\text{C43-H}_3)$
121		3103	$\nu_{as}(\text{C35-H}_3)$
120		3084	$\nu_{as}(\text{C39-H}_3)$
119		3082	$\nu_{as}(\text{C35-H}_3)$
118		3072	$\nu_{as}(\text{C43-H}_3)$
117		3068	$\nu(\text{C2-H})$
116		3033	$\nu_s(\text{C39-H}_3)$
115		3029	$\nu_s(\text{C35-H}_3)$
114		3024	$\nu_s(\text{C43-H}_3)$
113		1690	$\nu(\text{C30-C31})$
112		1680	$\nu(\text{C2-N}) + \nu(\text{CC})_{r1,2}$
111		1650	$\nu(\text{CC})_{r1} + \nu(\text{C2-C3}) + \delta(\text{CH})_{r1}$
110		1630	$\nu(\text{CC})_1 + \delta(\text{C4-O12-H}) + \delta(\text{CH})_{r1}$
109	1625	1618	$\nu(\text{CC})_{r2} + \nu(\text{C2-CN}) + \delta(\text{CH})_{r2}$
108		1598	$\nu(\text{CC})_{r2} + \delta(\text{CH})_{r2}$
107		1532	$\nu(\text{C34-N}) + \nu(\text{C30-C31})$
106		1530	$\nu(\text{CC})_{r1} + \delta(\text{CH})_{r1}$
105		1514	$\nu(\text{CC})_{r2} + \delta(\text{CH})_{r2}$
104		1504	$\delta(\text{C35-H}_3)$
103		1502	$\delta(\text{C43-H}_3)$
102		1488	$\delta(\text{C43-H}_3)$
101		1487	$\delta(\text{C35-H}_3)$
100		1481	$\delta(\text{C39-H}_3)$
99		1473	$\delta(\text{C39-H}_3) + \delta(\text{C35-H}_3)$
98		1454	$\delta(\text{SNH})$
97		1450	$\nu(\text{CC})_{r1}$
96		1434	$\nu(\text{CC})_{r2} + \delta(\text{N1-C-H})$
95		1425	$\delta(\text{SNH}) + \delta(\text{C31-NH})$
94		1420	$\gamma(\text{C35-H}_3) + \gamma(\text{C39-H}_3)$
93		1418	$\gamma(\text{C43-H}_3)$
92		1412	$\delta(\text{N1-C-H})$
91		1404	$\gamma(\text{C39-H}_3)$
90	1374	1300	$\nu_{as}(\text{SO}_2)$
89	1165	1125	$\nu_s(\text{SO}_2)$

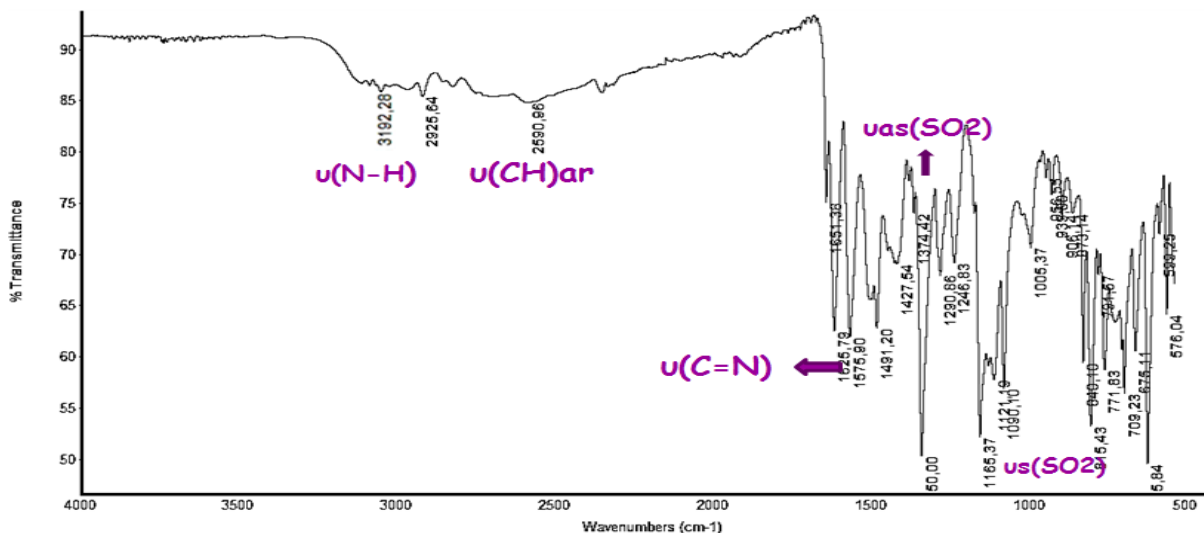


Figure 2. Experimental FT-IR spectra of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide

NMR

Theoretical NMR calculations were performed with B3LYP/6-311G++(d, p) level of theory in DMSO phase. Isotropic shielding tensors of ^{13}C were changed into chemical shifts by using a linear relationship suggested by Blanco et al. [17]. A similar relationship proposed by Silva et al. [18] was used to obtain chemical shifts for ^1H . The computed chemical shift values fit well with experimental values. The experimental and calculated chemical shift values are shown in Table 3.

Table 3. The experimental and theoretical ^1H and ^{13}C NMR chemical shifts δ (ppm) for (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide

Assignment	δ (exp.)	δ (calc.)
C1	6.27	6.08
C4	12.51	12.48
C12	191.75	192.00
Ar-CH ₃	20.36	21.45
Ar-C	95.88-170.86	95.00-172.75
H1	1.69	1.70
H4	2.10	2.07
Ar-CH ₃	2.31	2.87
CH=N	8.91	8.95
Ar-H	6.60-7.80	6.62-7.92
NH	11.10	11.28
OH	12.20	12.80

CONCLUSION

In these study, structure of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide were investigated with experimental and theoretical spectroscopic (X-RD, FT-IR, NMR) methods. The all calculated parameters were compared with the experimental ones. The calculated theoretical values were found to be consistent with the experimental data.

REFERENCES

- [1] Bilge E, Arslan Ü, Fadime ÖK, 2019. Combined experimental and theoretical studies on the chemical and spectroscopic properties of an antimicrobial N-(Phenyl)dimethyldisulfonimide, *J. Mol. Struct.* 1175:542-550.
- [2] Muhammad D, Ayesha B, Khola G, Muhammad AR, Muhammad A, Muhammad NA, Abdullah MA, Khurshid A, 2019. Antiradical, antimicrobial and enzyme inhibition evaluation of sulfonamide derived esters; synthesis, X-Ray analysis and DFT studies, *J.Mol. Struct.* 1175: 379-388.
- [3] Nafila B, Wassim F, Zeinab G, Marjorie B, Kamel H, Xavier F, Bernard P, Philippe L, Gilles F, Smail K, 2015. Design and synthesis of new potassium channel activators derived from the ring opening of diazoxide: Study of their vasodilatory effect, stimulation of elastin synthesis and inhibitory effect on insulin release, *Bioorgan. Med. Chem.* 23: 1735-1746.
- [4] Maren TH, 1976. Relations Between Structure and Biological Activity of Sulfonamides, *Ann. Rev. Pharmacol. Toxicol.* 16: 309-327.
- [5] Supuran CT, Scozzafava A, Jurca BC, Iies MA, 1998. Carbonic anhydrase inhibitors-part 49: Synthesis of substituted ureido and thioureido derivatives of aromatic heterocyclic sulfonamides with increased affinities of isozyme, *I. Eur. J. Med. Chem.* 33: 83-93.
- [6] Govindharasu B, Rajendran S, Vediappen P, 2018. Synthesis and characterization of curcumin-sulfonamide hybrids: Biological evaluation and molecular docking studies, *J. Mol. Struct.* 1155: 90-100.
- [7] Paul SH, Ross B, John K, Eric M, Kerry M, Timothy P, Travis RER, Tod S, Eric DT, Zhi-Liang W, Erik W, 2016. Carbazole-containing sulfonamides and sulfamides: Discovery of cryptochrome modulators as antidiabetic agents, *Bioorgan. Med. Chem.Lett.* 26: 757-760.
- [8] Lianqi S, Yanbin W, Yonghua L, Xiaofang C, Laixing H, 2017. Novel carbazole sulfonamide derivatives of antitumor agent: Synthesis, antiproliferative activity and aqueous solubility, *Bioorgan. Med. Chem.Lett.* 27: 261-265.
- [9] Ozbek N, Katircioglu H, Karacan N, Baykal T, 2007. Synthesis, characterization and antimicrobial activity of new aliphatic sulfonamide, *Bioorg Med Chem* 15: 5105–5109.
- [10] Özdemir ÜÖ, Akkaya N, Özbek N, 2013. New Ni (II), Pd (II), Pt (II) complexes with aromatic methanesulfonylhydrazone based ligands. Synthesis, spectroscopic characterization and in vitro antibacterial evaluation, *Inorganica Chim. Acta* 400: 13–19.
- [11] Alyar S, Özbek N, Ocak İskeleli N, Karacan N, 2013. Synthesis, characterization, and antimicrobial activity of copper(II) complexes with N,N'-propanediyl-bisbenzenesulfonamide and N,N'-ethanediyl-bis-2-methylbenzenesulfonamide, *Med. Chem. Research* 22: 2051-2060.
- [12] Ozdemir U, Karacan N, Senturk OS, S, Sert, 2004. Synthesis and Characterization of Metal Carbonyl Complexes of $M(CO)_6$ ($M = Cr, Mo, \text{ and } W$), $Re(CO)_5Br$, and $Mn(CO)_3Cp$ with Acetonemethanesulfonylhydrazone (amsh) and Methanesulfonylhydrazone (msh), *Synth. React. Inorgan. Metal-Org. Chem.* 34: 1057-1067.

- [13] Ozbek N, Alyar S, Karacan N, 2009. Experimental and theoretical studies on methanesulfonic acid 1-methylhydrazide: Antimicrobial activities of its sulfonyl hydrazone derivatives, *J. Mol. Struct.* 938: 48–53
- [14] Gündüzalp AB, Özmen ÜÖ, Çevrimli BS, Mamaş S, Çete S, 2014. Synthesis, characterization, electrochemical behavior, and antimicrobial activities of aromatic/heteroaromatic sulfonylhydrazone derivatives, *Med. Chem. Research* 23: 3255-3268.
- [15] Alyar S, Adem S, 2014. Synthesis, characterization, antimicrobial activity and carbonic anhydrase enzyme inhibitor effects of salicylaldehyde-N-methyl p-toluenesulfonylhydrazone and its Palladium(II), Cobalt(II) complexes, *Spectrochim. Acta Part A*: 131: 294-302.
- [16] Frisch MJ, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, J.A. Montgomery Jr., T. Vreven, K.N. Kudin, J.C. Burant, J.M. Millam, S.S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishi7V87621da, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J.E. Knox, H.P. Hratchian, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, P.Y. Ayala, K. Morokuma, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, V.G. Zakrzewski, S. Dapprich, A.D. Daniels, M.C. Strain, O. Farkas, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, Q. Cui, A.G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, C. Gonzalez, J.A. Pople, Gaussian 09, Revision C.01, Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009.
- [17] Blanco F, Alkorta I, Elguero J, 2007. Statistical analysis of ¹³C and ¹⁵N NMR chemical shifts from GIAO/B3LYP/6-311++G**calculated absolute shieldings, *Magn. Reson. Chem.* 45: 797-800.
- [18] Silva AMS, Sousa RMS, Jimeno ML, Blanco F, Alkorta I, Elguero J, 2008. Experimental measurements and theoretical calculations of the chemical shifts and coupling constants of three azines (benzalazine, acetophenoneazine and cinnamaldazine), *Magn. Reson. Chem.* 46:859-864.

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

Bilal Cangül¹, Arslan Ünal², Saliha Alyar³, Hamit Alyar^{4*}

¹Çankırı Karatekin University, Faculty of Science, Department of Physics, Çankırı, Turkey.

²Bilecik Şeyh Edebali University, Faculty of Art and Science, Department of Physics, Bilecik, Turkey.

³Çankırı Karatekin University, Faculty of Science, Department of Chemistry, Çankırı, Turkey.

⁴Çankırı Karatekin University, Faculty of Science, Department of Physics, Çankırı, Turkey.

*Corresponding author e-mail: halyar@karatekin.edu.tr

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. 6-31++ G (d, p) and 6-311 ++ G (d, p) basis sets were chosen for calculations. After determining the stable structure of the synthesized molecule, nonlinear optical properties (NLO), HOMO-LUMO molecular orbital energies, chemical reactivity descriptors, and molecular electrostatic potential (MEP) and Mulliken atomic charges were examined. All calculations were performed with Gaussian 09 (Linux) and Gauss View 5 package programs.

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

INTRODUCTION

Sulfonamides, its derivatives, and complexes are important pharmacological molecules. They are ones of the oldest synthetic antimicrobial agents and are used in the treatment of many bacterial, protozoal and fungal infections [1, 2]. Although the use of penicillin and other antibiotics is increased compared to sulfonamides, they are still used actively in ophthalmic infections and for urinary and gastrointestinal infections [3, 4]. In particular, situations such as multidrug resistance (MDR), bioterrorism and biological assault increase the need for the search for new and more effective antibiotics [5-9]. It is very important to examine the physical, chemical and antibacterial effects of molecules with important biological effects such as sulfonamides. In our previous studies, we have reported conformational analysis and vibrational spectroscopic investigation of the methanesulfonic acid hydrazide [10] methanesulfonic acid 1-methylhydrazide [11] sulfonamide, p-toluensulfonamide [12] and some methanesulfonyl hydrazone derivatives [13-15].

In this study, nonlinear optical properties (NLO), HOMO-LUMO molecular orbital energies, chemical reactivity descriptors, molecular electrostatic potential (MEP) and Mulliken atomic charges were examined. DFT / B3LYP method 6-31 ++ G (d, p) and 6-311 ++ G (d, p) basis sets were used in theoretical calculations.

MATERIALS AND METHODS

The entire calculations of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide were performed with Gaussian 09(Linux) [16] and Gauss View 05 program packages using density functional theory (DFT). The geometries of the compounds were fully optimized without any constraint with the help of an analytical gradient procedure implemented with the B3LYP functional and 6-31++G(d,p) basis set. Optimized geometry of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide presented at Fig. 1. The HOMO-LUMO molecular orbital energies and nonlinear optical properties (NLO) calculated with B3LYP/6-31++G(d,p) level of theory. Molecular electrostatic potential (MEP) and Mulliken atomic charges were examined with B3LYP/6-31++G(d, p) level of theory.

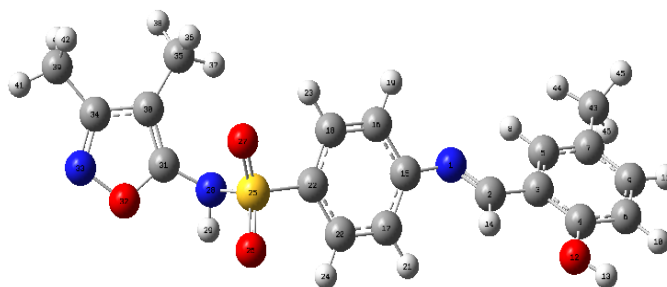


Figure 1. Optimized molecular structure with atomic numbering of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide.

RESULTS AND DISCUSSION

HOMO and LUMO Molecular Orbital Energies

The frontier molecular orbitals (FMOs) help for physicists and chemists for the main orbital taking part in chemical reaction. While the HOMO is directly related to the ionization potential, the LUMO is directly related to the electron affinity. The molecules with a larger $\Delta E_{HOMO-LUMO}$ band gap should be less reactive than one having a smaller gap [16].

The calculated values of HOMO and LUMO energies and $\Delta E_{HOMO-LUMO}$ band gaps of studied molecules were listed in Table 1. As shown in Fig. 2 and Table 1, the difference between HOMO and LUMO energy levels ($\Delta E_{HOMO-LUMO}$) were found to be 4.03 eV. The ionization energy and electron affinity can be expressed through HOMO and LUMO orbital energies according to the Koopman's theorem [17];

$$I = -E_{HOMO} \quad (1)$$

$$A = -E_{LUMO} \quad (2)$$

In the past, the hardness has been associated with the stability of chemical system [18]. The chemical hardness corresponds to the gap between the HOMO and LUMO orbitals. The larger the HOMO-LUMO energy gap the harder molecule.

$$\eta = \frac{1}{2} (E_{LUMO} - E_{HOMO}) \quad (3)$$

The chemical softness is as follows,

$$S = \frac{1}{2\eta} \quad (4)$$

Electro negativity is a measure of the tendency of an atom to attract a bonding pair of electrons.

$$\chi = \frac{1}{2} (I + A) \quad (5)$$

Electronic chemical potential μ defined by Parr and Pearson [19] as follow;

$$\mu = -\frac{1}{2}(I+A) = \frac{1}{2}(E_{HOMO} + E_{LUMO}) \quad (6)$$

The global electrophilicity index ω was introduced by Parr [20] and calculated as follow equation;

$$\omega = \mu^2 / 2\eta \quad (7)$$

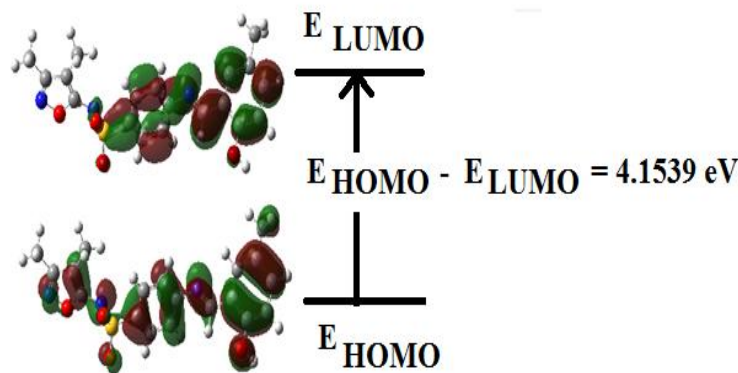


Figure 2. Molecular orbital surfaces and energy levels for the HOMO and LUMO of (Z)-N-(3,4-dimethylisoxazol-5-yl)-4-(2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino benzenesulfonamide.

All the calculated parameters were given in Table 1.

Table 1. Calculated values for frontier orbital energies, energy band gap (ΔE), ionization energy (I), electron affinity(A), electronegativity(χ), chemical hardnesses (η) and chemical softness (S), chemical potential(μ) and electrophilicity index (ω) of (Z)-N-(3,4-dimethylisoxazol-5-yl)-4-(2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino benzenesulfonamide.

Physical properties	B3LYP/6-311++G(d,p)
E_{HOMO} (eV)	-6.49829
E_{LUMO} (eV)	-2.34441
$\Delta E = E_{HOMO-LUMO}$ (eV)	4.15390
I (eV)	6.49829
A (eV)	2.34441
χ (eV)	4.42135
η (eV)	2.07695
S (eV^{-1})	0.24074
μ (eV)	-4.42135
ω (eV)	4.70602

Nonlinear optical properties (NLO)

The dipole moment (μ), the static polarizability (α_0) and first static hyperpolarizability (β_{tot}) are related directly to the nonlinear optical (NLO) activity of structures. The calculated values of the polarizabilities and the hyperpolarizabilities from Gaussian 09 output were converted from atomic units into electrostatic units (α : 1 a.u = $0.1482 \cdot 10^{-24}$ esu; β : 1 a.u = $8.6393 \cdot 10^{-33}$ esu) [21].

The total static dipole moment, μ is defined as; $\mu = (\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)^{1/2}$. The calculations of static polarizability (α_{ave}) and first static hyperpolarizability (β_{tot}) from the Gaussian output have been stated in detail previously [22] as follows:

$$\langle \alpha \rangle = 1/3 (\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) \quad (8)$$

$$\beta_{tot} = [(\beta_{xxx} + \beta_{xyy} + \beta_{zzz})^2 + (\beta_{yyy} + \beta_{yzz} + \beta_{yxx})^2 + (\beta_{zzz} + \beta_{zxx} + \beta_{zyy})^2]^{1/2} \quad (9)$$

The first static hyperpolarizability (β_{tot}), mean polarizability ($\langle \alpha \rangle$) and the ground state dipole moment (μ) of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide were calculated and results presented at Table 2. First static hyperpolarizability of studied compound was computed to be 12740.4×10^{-33} esu. It found that, the first static hyperpolarizability of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide is 342.65 times larger than that of urea (0.3728×10^{-30} esu). According to this result, (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide present large nonlinear optical activity and this compound is candidate system for nonlinear optical applications.

Table 2. The electric dipole moment μ (D), the mean polarizability $\langle \alpha \rangle$ ($\times 10^{-24}$ esu) and the first hyperpolarizability β_{tot} ($\times 10^{-33}$ esu) of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide by DFT B3LYP/6-31++G(d,p) method.

Parameter	Parameter	Sulfisoxazole	
μ_x	0.7256	β_{xxx}	-1658.9
μ_y	8.3772	β_{xyy}	-348.3
μ_z	0.2713	β_{yyy}	93.7
M	8.4129	β_{yzz}	190.3
α_{xx}	499.14	β_{xxz}	120.6
α_{xy}	0.31	β_{xvz}	47.1
α_{yy}	265.19	β_{yyz}	-8.56
α_{xz}	-9.77	β_{zzz}	100.7
α_{yz}	15.37	β_{yzz}	30.7
α_{zz}	182.49	β_{zzz}	4.8
$\langle \alpha \rangle$ (a.u.)	315.6	β_{tot} (a.u.)	1474.7
$\langle \alpha \rangle$ (esu)	46.77	β_{tot} (esu)	12740.4

α : 1 a.u = $0.1482 \cdot 10^{-24}$ esu

β : 1 a.u = $8.6393 \cdot 10^{-33}$ esu

Molecular Electrostatic Potential Surface

The MEP for the title compound was composed by DFT calculation using the optimized geometry at the B3LYP/6-311++G(d, p). Our aim is to investigate reactive sites for electrophilic and nucleophilic attack, the regions of the MEP. The MEP of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide by DFT B3LYP/6-31++G(d,p) method molecule in 3D is presented in Fig. 3.

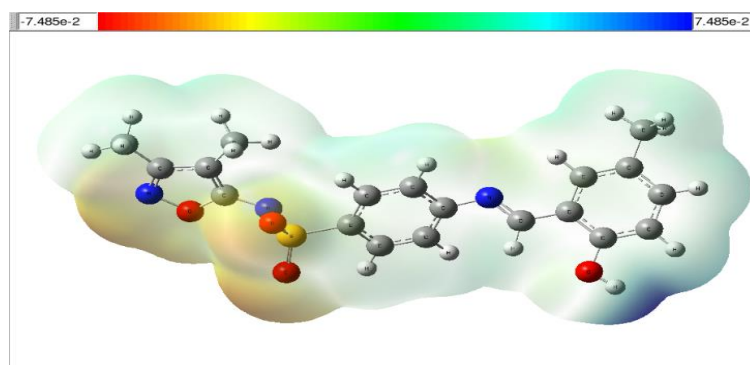


Figure 3. Molecular electrostatic potential of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide.

As shown in Fig. 3, while the blue colors indicate for partial positive regions to nucleophilic reactivity (where is the electron-poor region), red and yellow colors indicated for the negative regions of the MEP (where is the electron-rich region) are related to electrophilic reactivity. While the blue colors represent strongest attraction, the red colors represent repulsion.

Mulliken Atomic Charges

The calculation of atomic charges very important in the application of quantum mechanical calculations the molecular systems due to atomic charges affect some molecular properties including dipole moment and molecular polarizability. Also, the atomic charges have been used to describe the MEP surfaces. We calculated the Mulliken atomic charges of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide) by using DFT/B3LYP methods and 6-311++G(d,p) basis set. The total Mulliken atomic charges were listed in the Table 3.

Table 3. Mulliken atomic charges of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino) benzenesulfonamide molecule by using B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory.

Atoms	B3LYP/6-311++G(d,p)	Atoms	B3LYP/6-311++G(d,p)
C2	-0,154	H8	0,171
C3	0,700	H10	0,184
C4	-0,660	H11	0,205
C5	-0,564	H13	0,302
C6	-0,248	H14	0,208
C7	0,267	H44	0,162
C9	-0,384	H45	0,160
C43	-0,505	H46	0,167
C15	-0,088	H19	0,211

Table 3. (continued)

Atoms	B3LYP/6-311++G(d,p)	Atoms	B3LYP/6-311++G(d,p)
C16	-0,304	H21	0,219
C17	-0,154	H23	0,242
C18	-0,169	H24	0,219
C20	-0,068	H29	0,355
C22	0,063	H36	0,196
C30	0,550	H37	0,191
C31	-0,526	H38	0,157
C34	0,381	H40	0,181
N1	0,179	H41	0,172
N28	-0,104	H42	0,182
N33	-0,471		
O12	-0,255		
O26	-0,082		
O27	-0,193		
O32	0,173		
S25	-0,012		

According to the calculated Mulliken atomic charges, the C3 atom has a largest positive atomic charge and C4 atom has a largest negative atomic charge. As can be seen the Table 3, all of the hydrogen atoms have positive charge. The obtained atomic charge was showed that the H29 atom has bigger positive atomic charge than the other hydrogen atoms. The N28, N33 and O26, O27 atoms have negative atomic charges. This behavior may be result of the intermolecular hydrogen bond.

CONCLUSION

In the present study, we investigated the HOMO and LUMO molecular orbital energies, global reactivity descriptors nonlinear optical properties (NLO), molecular electrostatic potential (MEP) and Mulliken atomic charges of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino benzenesulfonamide compound. All calculations performed by using quantum chemical density function theory (DFT) B3LYP functional 6-31 ++ G (d, p) and 6-311 ++ G (d, p) basis sets. The HOMO–LUMO energy gap value of (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino benzenesulfonamide was found to be 4.1539 eV. According to the energy band gap between the HOMO and LUMO, the value of chemical hardness and chemical softness is 2.07695 eV and 0.24074 eV for the title molecule. The computational results show that β_{tot} for the title compound is greater than those of urea. So (Z) -N- (3,4-dimethylisoxazol-5-yl) -4- (2-hydroxy-5-methylbenzylidene) amino benzenesulfonamide molecule is a good candidate system as a nonlinear optical material.

REFERENCES

- [1] Anand N., in: Wolff M.E. (Ed.).1996. Burger's Medicinal Chemistry and Drug Discovery, fifth ed., Therapeutic Agents; New York: J. Wiley & Sons.
- [2] Mastrolorenzo A., Scozzafava A., Supuran C.T.,2000. Antifungal activity of silver and zinc complexes of sulfadrag derivatives incorporating arylsulfonylureidomoieties, Eur. J. Pharm. Sci. 11 (2) :99-107.
- [3] Barnhart E.R. (Ed.), 1989. Physicians Desk Reference, PDR, 43rd ed, Medical Economics, New York.
- [4] Singh H., Srivastava V.K., Shukla S.N., Srivastava M.K., Upadhyay M.K.,1994. Synthesis, characterization and fungitoxicity of manganese(II), iron(II), cobalt(II), nickel(II), copper(II) and zinc(II) complexes of N-phenyl-S-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-sulphonamide and S-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-imino sulphonamide, Indian J. Chem. 33A : 350-353.
- [5] Metwally K.A., Abdel-Aziz L.M., Lashine E.M., Hussein M.I., Badawy R.H.,2006. Hydrazones of 2-aryl-quinoline-4-carboxylic acid hydrazides: synthesis and preliminary evaluation as antimicrobial agents, Bioorg. Med. Chem. 14 :8675-8682.
- [6] Hadj-esfandiari N., Navidpour L., Shadnia H., Amini M., Samadi N., Faramarzi M.A., 2007. A. Shafiee, Synthesis, antibacterial activity, and quantitative structure-activity relationships of new (Z)-2-(nitroimidazolylmethylene)-3(2H2H)-benzofuranone derivatives, Bioorg. Med. Chem. Lett. 17 : 6354-6363.
- [7] Khan M.W., Alam M.J., Rashid M.A., Chowdhury R.,2005. A new structural alternative in benzo [b] furans for antimicrobial activity, Bioorg. Med. Chem. 13: 4796-4805.
- [8] Nilo Z., Alves S.H., Coelho H.S., Borchhardt D.M., Machado P., Flores J., da Silva F.M., Spader T.B., Santurio J.M., Bonacorso H.G., Martins M.A.,2007. Synthesis, antimicrobial activity, and QSAR studies of furan-3-carboxamides, Bioorg. Med. Chem. 15 :1947-1958.
- [9] Greenfield R.A., Bronze M.S., 2003. Prevention and treatment of bacterial diseases caused by bacterial bioterrorism threat agents, Drug Discov. 8:881-888.
- [10] Ienco A., Mealli C., Paoli P., Dodoff N., Kantarci Z., Karacan N., 1999. Structure and vibrational spectroscopy of methanesulfonic acid hydrazide: an experimental and theoretical study, New J. Chem. 23: 1253-1260.
- [11] Ozbek N., Alyar S., Karacan N.,2009. Experimental and theoretical studies on methanesulfonic acid 1-methylhydrazide: antimicrobial activities of its sulfonylhydrazone derivatives, J. Mol. Struct. 1-3:48-53.
- [12] Alyar S., Zengin H., Ozbek N., Karacan N.,2011. Synthesis, characterization, spectroscopic properties, theoretical calculation, and antimicrobial activity of new aryl disulfonamides, J. Mol. Struct. 992:27-32.

- [13] Dodoff N.I., Ozdemir U., Karacan N., Georgieva M.Ch., Konstantinov S.M., Stefanova M.E.,1999. Schiff bases of methanesulfonylhydrazine. Synthesis, spectroscopic characterization, conformational analysis and biological activity, *Z. Naturforsch* 54b :1553-1562.
- [14]Ozbek] N., Kavak G., Ozcan Y., Ide S., Karacan N.,2009. Structure, antibacterial activity and theoretical study of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde-N-methylethanesulfonylhydrazone, *J. Mol. Struct.* 919:154-159.
- [15] Alyar S., Ozmen U.O., Karacan N., Senturk O.S., Udachin K.A., 2008. Tautomeric properties, conformations and structure of 2-hydroxyacetophenone methanesulfonylhydrazone, *J. Mol. Struct.* 889: 144-149.
- [16] Kurtaran R., Odabasoğlu S., Azizoğlu A., Kara H., Atakol O. 2007. Experimental and computational study on [2,6-bis(3,5-dimethyl-N-pyrazolyl) pyridine]-(dithiocyanato)mercury(II)", *Polyhedron*, 26:5069-5074.
- [17] Koopmans T., 1933. Über die Zuordnung von Wellenfunktionen und Eigenwerten zu den einzelnen Elektronen eines Atoms, *Physica* 1: 104-113.
- [18] Pearson R. G., 2005. Chemical hardness and density functional theory , *J. Chem.Sci.* 117:369-377.
- [19] Parr R. G., Pearson R. G., 1983. Absolute hardness: companion parameter to absolute electronegativity" *J. Am. Chem. Soc.* 105:7512-7516.
- [20] Roy R. K., Choho K., De Proft F., Geerlings P., 1999. Reactivity and stability of aromatic carbonyl compounds using density functional theory-based local and global reactivity descriptors", *J. Phys. Org. Chem.* 12: 503-509.
- [21] Sundaraganesan N., Kavitha E., Sebastian S., Cornard J. P., Martel M.,2009. Experimental FTIR, FT-IR (gas phase), FT-Raman and NMR spectra, hyperpolarizability studies and DFT calculations of 3, 5-dimethylpyrazole, *Spectrochimica Acta Part A* 74: 788–797.
- [22] Alyar H., Kantarci Z., Bahat M., Kasap E.,2007. "Investigation of torsional barriers and nonlinear optical (NLO) properties of phenyltriazines", *J. Mol. Struct.* 834-836: 516-520.

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

Aslı A. KAYA^{1*}

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

*Sorumlu yazar e-mail: asli.kaya@bilecik.edu.tr

Özet

II-IV. grup yarı iletken sınıfında yer alan çinko oksit (ZnO) nanopartiküllerine farklı geçiş metalleri katkılıandığında band boşluğunda değişimler meydana gelmektedir. Bu değişimler malzemenin uygulama alanına göre kullanım alanlarını genişletmektedir. Bu nedenle, özellikle geçiş metallerinin katkılıandığı 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 katkılı 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.

GİRİŞ

II-IV. grup yarı iletken sınıfında yer alan çinko oksit (ZnO) geniş bir band boşluğuna (3,27 eV) sahip ve genel olarak hegzagonal yapıya sahiptir [1]. Çinko oksitler, optik, optoelektronik, manyeto-elektronik, mikrodalga cihazları gibi birçok alanda kullanılmaktadır [2]. Bu tür malzemelerin optik band boşluğu, kristal yapıları gibi özellikleri geçiş metallerinin katkılanmasıyla değişiklik göstermektedir. Bu değişiklikler, malzemelerin kullanım alanlarını da değiştirebilmektedir. Bu nedenle, farklı geçiş metalleri katkılanarak oluşturulan çinko oksitlerin elde edilmesi ve yapılarının aydınlatılması önemlidir.

Bu çalışmada, farklı konsantrasyonlarda Mn ve Sn katkılı çinko oksit nanopartiküllerinin sol-gel metodu ile elde edilmiştir. Elde edilen nanopartiküllerin yapıları X-ışını toz difraksiyon yöntemi ile aydınlatılmıştır. Kristal analizi sonucunda kristal yapısındaki değişiklikler tartışılmıştır.

MATERYAL VE METOT

Zn(Ac)₂·2H₂O, MnCl₂·4H₂O ve SnCl₂·2H₂O tuzları satın alınarak saflaştırmaksızın eşit derişimlerde çözeltileri hazırlanmıştır. Katkısız ve katkılı ZnO nanopartikülleri, Zn_{1-x}Mn_xSn_xO, x = 0; 0,005; 0,015; 0,025 içerecek şekilde uygun hacimlerde alınarak sulu çözeltileri hazırlanmıştır. Çözeltinin pH sı 7 olacak şekilde ayarlanarak kontrol altında tutulmuştur. Sulu çözelti öncelikle 70 °C sıcaklıkta bir saat karıştırılarak homojen hale getirilmiştir. Sonrasında sıcaklık 150 °C'ye çıkarılarak çözücünün tamamen uçması sağlanmıştır. Elde edilen toz numunelerin kararlı kristal yapıları elde edilmek için 500 °C'de 4 saat tutulmuştur.

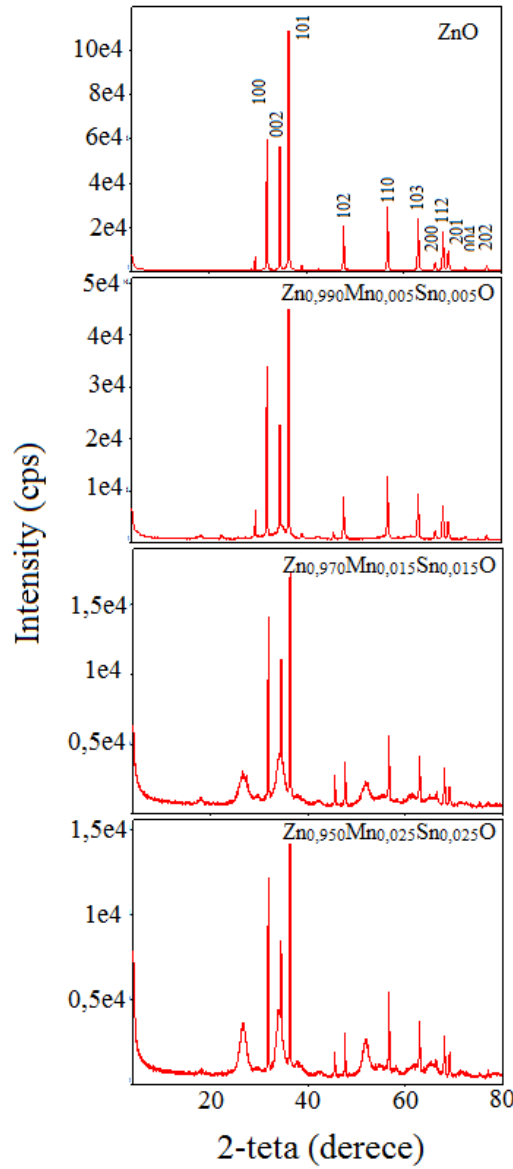
BULGULAR ve TARTIŞMA

Bu çalışmada katkısız çinko oksit (ZnO) ve farklı konsantrasyonlarda Mn ve Sn katkılı ZnO nanopartiküllerinin sol gel metodu kullanılarak elde edilmesi ve yapılarının aydınlatılması hedeflenmiştir. Çok geniş bir uygulama alanına sahip olan ZnO nanopartiküllerinin katkılanarak özellikle band boşluğu değiştirilebilir. Böylelikle uygulama alanları da daha genişletilebilir. Bu malzemelerin uygulama alanlarının önemini yanında kristal olarak elde edilmeleri de bir o kadar önem taşımaktadır. Ayrıca sol gel yöntemi, kimyasal bir yöntem olmakla birlikte ucuz ve uygulama kolaylığı gibi avantajları da vardır. Bu yöntemde sistem sıvı fazdan (sol) katı faza (jel) geçiş yapar. Zn(Ac)₂·2H₂O, MnCl₂·4H₂O ve SnCl₂·2H₂O tuzları aynı derişimlerde çözeltileri hazırlanıp, Tablo 1' de listendiği hacimlerde karıştırılarak sıvı çözeltiler (sol) hazırlanmıştır. Öncelikle maddelerin homojen karışımı sağlanarak suyun uzaklaştırılması ile katı malzemeler elde edilmiştir. Son olarak ta kararlı kristaller elde edilmek için 500 °C'de malzemeler tavlanarak nanopartiküller elde edilmiştir.

Tablo 1. Sıvı çözeltilerin karışım oranları

Nanopartiküller	Çözeltiler (mL)		
	Zn(Ac) ₂ ·2H ₂ O	MnCl ₂ ·4H ₂ O	SnCl ₂ ·2H ₂ O
ZnO	100		
Zn _{0,990} Mn _{0,005} Sn _{0,005} O	99	0,5	0,5
Zn _{0,970} Mn _{0,015} Sn _{0,015} O	97	1,5	1,5
Zn _{0,950} Mn _{0,025} Sn _{0,025} O	95	2,5	2,5

Katkısız ve katkılı ZnO nanopartiküllerin XRD toz difraksiyon analiz sonuçları Şekil 1' de resmedilmiştir. Katkısız ZnO nanopartikülün elde edilen pikleri incelendiğinde, piklere ait miller indisleri literatürden elde edilenler ile uyum içerisinde olup, nanopartiküllerin wurtzite-hekzagonal yapı fazında kristallendiğini göstermektedir. Mn ve Sn katkılı ZnO nanopartiküllerinde aynı yapı fazında kristallendiği gözlenmiştir. Numuneye yapılan Mn ve Sn katkılarıyla, katkı miktarının artışıyla piklerin şiddetinde artan azalmalar tespit edilmiştir. %1,5 ve %2,5 oranında Mn ve Sn katkılanan XRD deseni incelendiğinde ZnO nanopartiküllerine ait piklerin dışında yeni pikler oluştuğu gözlenmiştir. Bu oluşumlar, %1,5 ve %2,5 oranında Mn ve Sn katkılarının ZnO dışına yeni bir faz oluştuğunu göstermektedir. Bu durum, ilave edilen katkıların ZnO yapısına katılmak yerine dışında bir yapı oluşturduğunu göstermektedir. Oluşan bu yeni fazın kalay oksitten kaynaklandığı düşünülmektedir.



Şekil 1. Katkısız ve katkılı ZnO nanopartiküllerin X_Rd difraksiyon analiz sonuçları

SONUÇ

Katkısız, Mn ve Sn katkılı ZnO nanopartikülleri sol-gel metodu ile elde edilmiştir. Elde edilen nanopartiküllerin wurtzite-hekzagonal yapı fazında kristallendiğini XRD sonuçlarından elde edilmiştir. Katkı yapılması ile XRD desenlerinin şiddetinde azalma gözlenmiştir. %1,5 ve %2,5 oranında Mn ve Sn katkılanan nanopartiküllerde yeni bir fazın oluştuğu belirlenmiştir.

KAYNAKLAR

- [1] Ozgur U, Alivov YL, Liu C, Teke A, Reshchikov MA, Dogan S, Avrutin V, Cho SJ, Morkoc H. 2005. J. Appl. Phys. 98, 041301.
- [2] Ohno H, Matsukura F, Ohno Y. 2002. JSAP Int. 5, 4.

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

Aslı A. KAYA^{1*}

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

*Sorumlu yazar 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 metallere 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 is optimized by drawing. 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

GİRİŞ

Çinko oksit (ZnO) nanopartikülleri, 3.27 eV gibi bir band boşluğuna sahip yarı iletken malzemelerdir. yarı iletken sınıfında yer alan metal oksitlerdir [1]. Genel olarak optik, optoelektronik, manyeto-elektronik gibi yüksek verimli mavi LED'ler, mikrodalga cihazları gibi birçok alanda kullanılmaktadır [2]. Bu kadar geniş bir uygulama alanına sahip bu malzemelerin farklı geçiş metalleri ile katılanması ile optik özellikleri değiştirilebilir. Ayrıca, son yıllarda bilgisayar biliminin ve uygun metotlarında ilerlemesi ile birlikte, bu tür malzemelerin modellenerek kuramsal olarak özelliklerinin incelenmesine ilgi artmıştır.

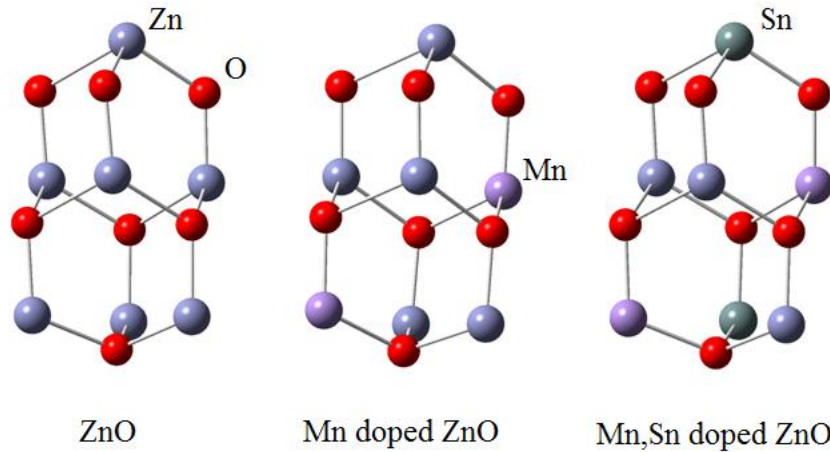
Bu çalışmada, ZnO moleküllerinin hegzagonal yapıda şekli çizilerek optimize edilecektir. Optimize molekül üzerinden Zn atomları yerine Mn ve Sn atomları yer değiştirilerek her bir molekül için elektronik enerjileri hesaplanacak ve optik yoğunluk analizi yapılacaktır. Her bir molekülün band boşluğu (E_g) hesaplanarak geçiş metallere ilavesi ile değişimler tartışılacaktır.

MATERYAL VE METOT

Hegzagonal yapı Zn_7O_7 moleküllerinin yapısı çizilerek yarı deneysel yöntem ve pm6 taban küme kullanılarak optimize edilmiştir. Optimize yapı üzerinden katkısız, Mn ve Sn katkılı ZnO moleküllerinin enerji hesaplamaları aynı yöntem ve taban kümede yapılmıştır. Yapılan tüm kuramsal çalışmalar Gaussian 09 paket programı [3] kullanılarak yapılmıştır.

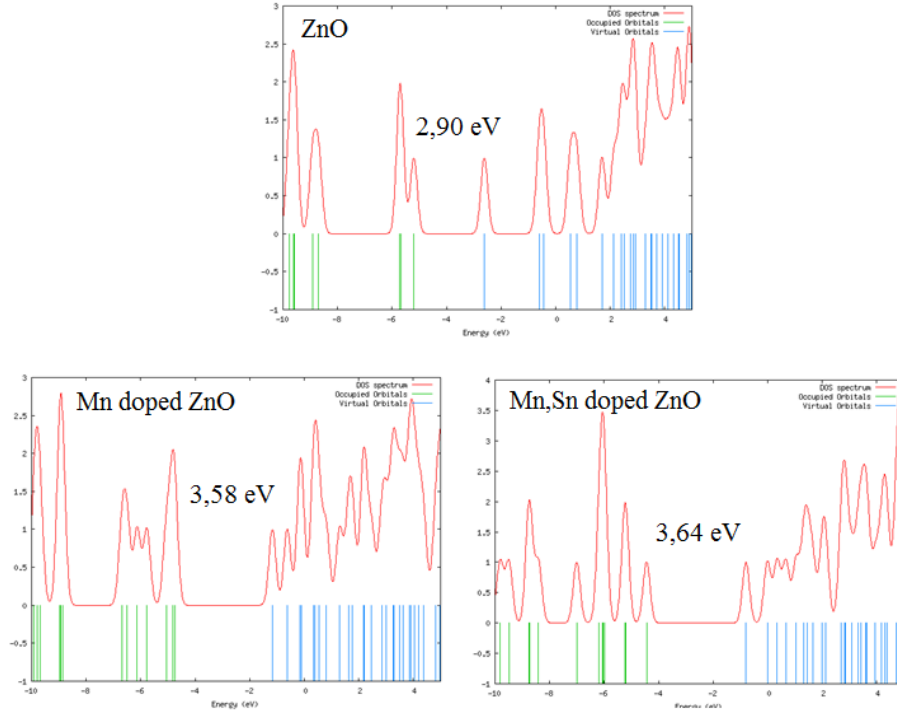
BULGULAR ve TARTIŞMA

Zn_7O_7 , $Zn_5Mn_2O_7$ ve $Zn_3Mn_2Sn_2O_7$ molekülleri yarı deneysel yöntem ve pm6 taban kümesinde modellenerek optimize edilmiştir. Katkısız ve katkılı ZnO molekül kümelerinin optimize molekül yapıları Şekil 1’ de resmedilmiştir.



Şekil 1. Katkısız ve Mn, Mn,Sn katkılı ZnO moleküllerinin optimize yapısı

Optimize edilen molekül kümelerinin elektronik enerjileri ve optik yoğunlukları aynı yöntem ve taban kümede hesaplanmıştır. Yapılan hesaplamalarda katkısız ZnO için band boşluğu, E_g 2.90 eV olarak hesaplanmıştır. Bu değer literatürde deneysel olarak 3.27 eV olarak ölçülmüştür [1]. Bu sonuç yapılan hesaplamaların doğruluğunu desteklemektedir. Daha sonra çinko oksit molekülündeki iki Zn^{+2} iyonu yerine Mn^{+2} iyonları yer değiştirerek, en son olarakta iki Zn^{+2} iyonu yerine daha Sn^{+2} iyonları geçerek hesaplamalar tekrarlanmıştır. Her üç molekül kümesi için hesaplanan band boşluğu ve optik yoğunluk değerleri Şekil 2 ‘de resmedilmiştir. ZnO molekül kümesinin sırasıyla Mn ve Mn,Sn katkılanması sonucunda band boşlukları 3.58 ve 3.64 eV olarak hesaplanmıştır. Bu sonuç Mn ve Mn,Sn katkılanmasıyla band boşluğunun arttığını göstermektedir.



Şekil 2. Katkısız ve Mn, Mn,Sn katkılı ZnO moleküllerinin optik yoğunluk grafikleri

SONUÇ

Yapılan bu çalışmada, hegzagonal yapılı Zn_7O_7 , $Zn_5Mn_2O_7$ ve $Zn_3Mn_2Sn_2O_7$ molekülleri optimize edilmiştir. Çıkış dosyalarından her bir molekül için orbital yoğunluk diyagramları çizildi. Moleküllerin sırasıyla 2.90, 3.58 ve 3.64 eV band boşluğu değerleri hesaplanmıştır. Bu sonuç, ZnO moleküllerinin band boşluğunun, E_g , Mn ve Mn,Sn katkılanmasıyla arttığını göstermektedir.

KAYNAKLAR

- [1] Ozgur U, Alivov YL, Liu C, Teke A, Reshchikov MA, Dogan S, Avrutin V, Cho SJ, Morkoc H. 2005. J. Appl. Phys. 98, 041301.
- [2] Ohno H, Matsukura F, Ohno Y. 2002. JSAP Int. 5, 4.
- [3] Frisch, M.F., et al. 2009. Gaussian 09. Gaussian Inc.: Wallingford, CT.

Bazı oksim moleküllerinin moleküler docking çalışmaları: Substituent etkisinin incelenmesi

Yunus KAYA^{1*}

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

*Sorumlu yazar 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 22 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 yapıların 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. 22 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

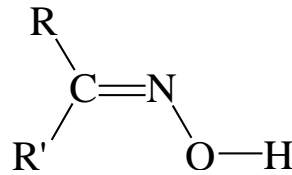
GİRİŞ

İlk kez 1882 yılında Meyer ve arkadaşları tarafından sentezlenen oksim molekülleri, araştırmacılar tarafından yüz yılı aşkın süredir yoğun bir şekilde çalışılmaktadır [1]. Oksim molekülleri yapısında azot ve oksijen gibi heteroatomları bulunduran biyolojik olarak aktif bir moleküldür. Bu nedenle bir çok uygulama alanına sahiptir [2-4]. Bu tür moleküller ayrıca ilaç etken madde olarak ta kullanılabilirler. Bu nedenle farklı fonksiyonel gruplara sahip oksim moleküllerinin DNA ile etkileşimlerinin incelenmesi önemlidir [5]. Diğer taraftan, özellikle ilaç denemelerinin maliyeti oldukça yüksektir ve sentez aşamaları oldukça zaman almaktadır. Bu nedenle moleküllerin öncesinde modellenerek, özelliklerinin incelenmesi ve özellikleri beklenen değer üzerinde olan sentezlerin üzerine yoğunlaşılması önemlidir.

Bu çalışmada, bazı fonksiyonel gruplara sahip oksim molekülleri modellenerek, autodock vina programı ile DNA (PDB no = 1BNA) ile etkileşimleri kuramsal olarak incelenmiştir. Etkileşimlerde eklenen grupların etkileri tartışılmıştır.

MATERYAL VE METOT

Bu çalışmada, genel yapısı Şekil 1’de gösterilen oksim moleküllerinin R ve R’ gruplarının farklılaşmasına göre Tablo 1’de listelenen 22 oksim molekülü kullanılmıştır. Moleküllerin optimizasyonunda yoğunluk fonksiyon kuramı (YFK/B3LYP) metodu [6] ve 6-311++G(d,p) taban kümesi kullanılmıştır. Optimize molekül yapıların frekans hesaplamaları da yapılarak moleküllerin en uygun geometride optimize oldukları doğrulanmıştır (negatif frekans değerinde titreşim kipi gözlenmemiştir). Moleküler docking çalışmalarında optimize molekül parametreleri kullanılmıştır. YFK hesaplamalarında Gaussian 09 paket programı [7] ve HP Z240 model iş istasyonu kullanılmıştır. Optimize molekül yapılarından .pdbqt dosyaları elde edilmiş ve kenetleme hesaplamaları autodock vina programı ile yapılmıştır. Kullanılan DNA molekülünün kristal yapısı protein data bank (PDB)’ tan indirilmiştir (PDB no: 1BNA). Her bir molekül için 9 farklı konformerdeki bağlanma türleri incelenmiş, en uygun bağlanma türü belirlenmiştir (RMSD < 2 Å).



Şekil 1. Oksim molekülünün genel gösterimi

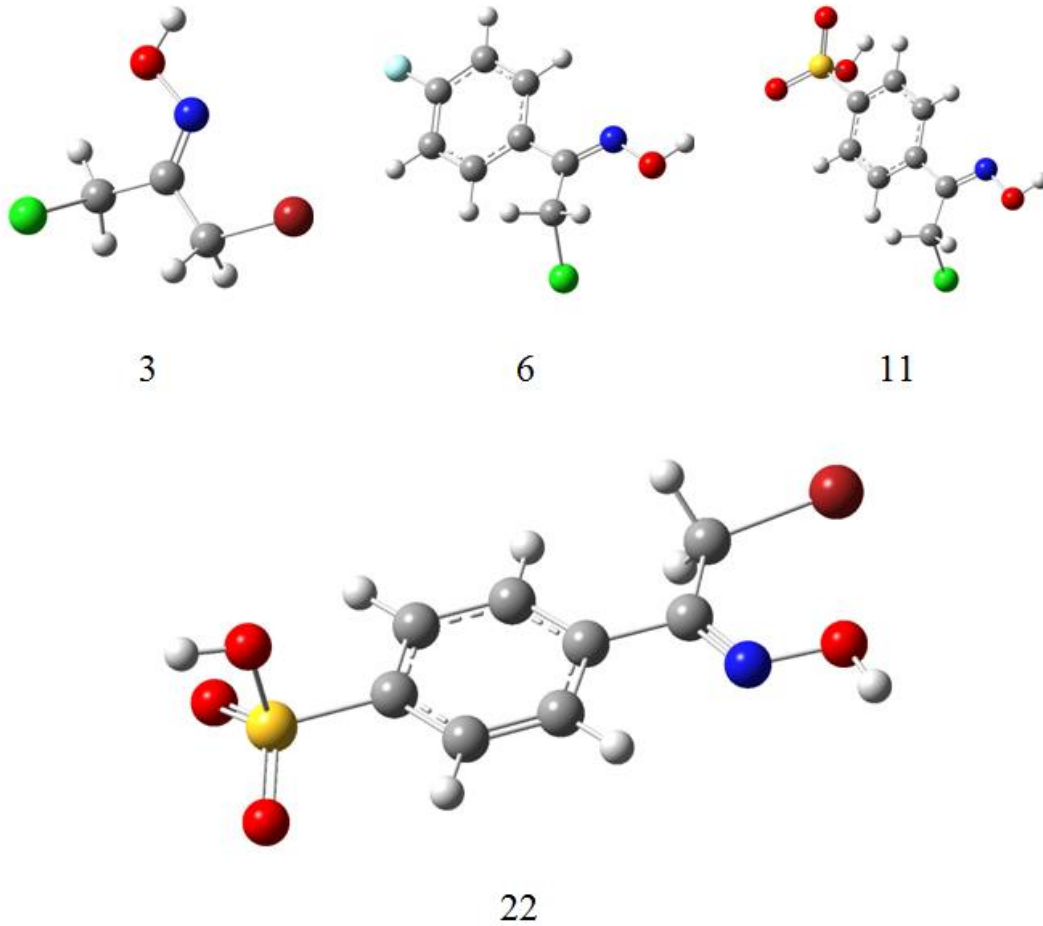
Tablo 1. Çalışmada kullanılan oksim moleküllerinin listesi

Molekül	R	R'
1	-CH ₂ F	-CH ₂ Cl
2	-CH ₂ Cl	-CH ₂ Cl
3	-CH ₂ Br	-CH ₂ Cl
4	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ Cl
5	-C ₆ H ₅	-CH ₂ Cl
6	-C ₆ H ₄ F	-CH ₂ Cl
7	-C ₆ H ₄ Cl	-CH ₂ Cl
8	-C ₆ H ₄ Br	-CH ₂ Cl
9	-C ₆ H ₄ NO ₂	-CH ₂ Cl
10	-C ₆ H ₄ NH ₂	-CH ₂ Cl
11	-C ₆ H ₄ SO ₃ H	-CH ₂ Cl
12	-CH ₂ F	-CH ₂ Br
13	-CH ₂ Cl	-CH ₂ Br
14	-CH ₂ Br	-CH ₂ Br
15	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ Br
16	-C ₆ H ₅	-CH ₂ Br
17	-C ₆ H ₄ F	-CH ₂ Br
18	-C ₆ H ₄ Cl	-CH ₂ Br
19	-C ₆ H ₄ Br	-CH ₂ Br
20	-C ₆ H ₄ NO ₂	-CH ₂ Br
21	-C ₆ H ₄ NH ₂	-CH ₂ Br
22	-C ₆ H ₄ SO ₃ H	-CH ₂ Br

BULGULAR ve TARTIŞMA

Bu çalışmada, genel yapısı Şekil 1’ de verilmiş olan oksim moleküllerine farklı elektronegatiflikte grupların katılması ile elde edilen 22 molekül incelenmiştir. Oksim moleküllerinin biyolojik aktif özellikleri bilinen bir özellik olmasından yola çıkılarak farklı gruplar bağlanmış olan oksim moleküllerinin DNA ile etkileşimleri incelenmiştir. Moleküllerin her biri Tablo 1’ de verilmiş olan numaralar ile tanımlanmıştır ve tartışmalar boyunca bu numaralar kullanılmıştır.

Hesaplamalarda moleküllerin en olası geometrilerinin bulunması için Gaussian 09 paket programı kullanılmıştır. Moleküller docking çalışmalarında ise DNA için PDB no=1BNA ve Autodock/vina programı kullanılmıştır. Moleküllerin optimizasyonu B3LYP/6-311++G(d,p) yöntem ve taban kümesinde yapılarak, seçilen bazı moleküllerin optimize yapıları Şekil 2’ de verilmiştir. Optimize molekül yapılarında moleküllerin daha çok düzlemsel yapıyı benimsediği belirlenmiştir.



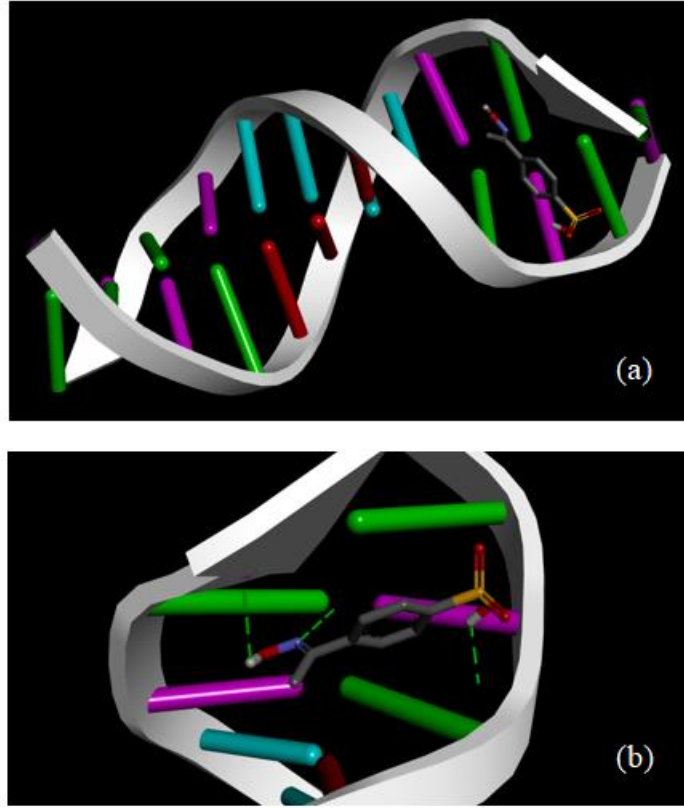
Şekil 2. Seçilmiş bazı oksim moleküllerinin optimize yapısı

Optimize edilen moleküllerin her biri ayrı ayrı 1BNA molekülü ile etkileşimleri Autodock/vina programı ile hesaplanmıştır. Moleküllerin .pdbqt dosyaları autodock programı ile oluşturulmuştur. Moleküllerin DNA ile en olası etkileşimleri belirlenerek kenetlenme enerjileri hesaplanmıştır. Her bir molekül için etkileşim enerjileri Tablo 2’ de listelenmiştir.

Tablo 2. Oksim moleküllerin DNA ile bağlanma enerjileri

Molekül	Kenetlenme enerjileri (kJ/mol)
1	-18.83
2	-18.83
3	-18.41
4	-19.25
5	-23.43
6	-25.52
7	-24.69
8	-24.69
9	-25.10
10	-23.85
11	-26.36
12	-18.41
13	-18.41
14	-18.83
15	-18.41
16	-23.43
17	-24.69
18	-24.69
19	-24.27
20	-25.10
21	-23.85
22	-26.78

Tablo 2’ deki değerleri incelendiğinde en yüksek kenetlenme enerjisinin görüldüğü molekül sülfonil grubu içeren oksim molekülü (22) olduğu ve kenetlenme enerjisinin -26,78 kJ/mol olarak hesaplandığı görülmektedir. Bu molekülü yine sülfonil grubu içeren ve R2 grubunda klor atomunu bulunduran 11 nolu molekül izlemektedir. Bu sonuç elektronegatif gruba sahip moleküllerin kenetlenmeye etkisinin yüksek olduğunu desteklemektedir. Ancak 22 nolu molekülün bağlanma enerjisi çok azda olsa 11 nolu molekülden daha yüksek hesaplanmıştır. Bu durum polarizlenme gücünden kaynaklandığı düşünülebilir. Sülfonil grubunu içeren 22 nolu bileşiğin DNA molekülü ile etkileşimini Şekil 3’ te görselleştirilmiştir.



Şekil 3. 22 nolu oksim molekülünün a) DNA'nın küçük oluklarına kenetlenmesi, b) DNA ile oluşturduğu hidrojen bağları

22 nolu molekülün DNA'nın küçük oluklarına ve guanin-sitozin baz çiftlerinin olduğu bölge ile etkileştiği görülmektedir. Bu molekülün DNA ile etkileşiminde en yüksek bağlanma enerjisine sahip olmasında hidrojen bağları etkin rol oynamıştır.

SONUÇ

Farklı sübstitüe gruplara sahip 22 farklı molekül YFK/6-311++G(d,p) yöntem ve taban kümesi kullanılarak optimize edildi. Optimize edilen her bir molekül Autodock vina programı kullanılarak, 1BNA DNA molekülü ile docking hesaplamaları yapıldı. Hesaplama sonuçlarına göre sülfonil grubu içeren 22 nolu DNA'ya en yüksek kararlılık ile bağlandığı belirlenmiştir.

KAYNAKLAR

- [1] Meyer V, Janny A. 1882. Ueber stickstoffhaltige Acetonderivate. Ber Dtsch Chem Ges. 15:1164.
- [2] Nakamura H, Iitaka Y, Sakakibara H, Umezawa H. 1974. J. Antibiot. 27: 894.
- [3] Kirst HA, Szymanski EF, Doman DE, Occolowitz JL, Jones ND, Chaney MO, Hamill RL, Hoehn MM. 975. J. Antibiot. 28: 286.
- [4] Ponomareva VV, Halley NK, Kou X, Gerasimchuk NN, Domasevich KV. 1996. J. Chem. Soc. Dalton Trans. 2351.
- [5] Scaffidi-Domianello YYu, Meelich K, Jakupec MA, Arion VB, Kukushkin VYu, Galanski M, Kepler BK. 2010. Inorg. Chem. 49: 5669.
- [6] Becke AD 1993. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. J Chem. Phys. 98: 5648.
- [7] Frisch, MF, et al. Gaussian 09. 2009. Gaussian Inc.: Wallingford, CT.

Brom-asetofenon oksim molekülünün konformer ve infrared spektroskopi çalışması

Yunus KAYA^{1*}, Aslı A. KAYA²

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

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

*Sorumlu yazar 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.

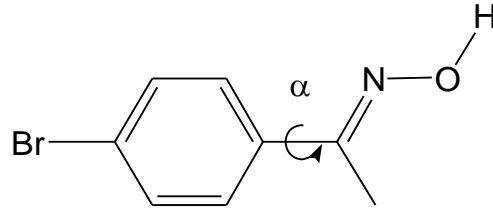
Keywords: Oxime, DFT, Conformer, Spectroscopy

GİRİŞ

Oksim molekülleri, yapısında azot ve oksijen heteroatomlarına sahip olmasından dolayı, kuramsal kimya alanında önemli bir rol oynamaktadır [1]. Bu moleküllerin sahip olduğu bu heteroatomlar, konformer yapısının incelenmesini de önemli hale getirmektedir. Ayrıca, bu tür moleküllerin elektronik ve spektroskopik özelliklerinin deneysel ve kuramsal incelenmesi önemlidir [2,3].

Bu çalışmada, yapısı Şekil 1’de gösterilen bromoasetofenon oksim molekülünün α bağı etrafında dönmesine bağlı olarak enerji taraması yapılmıştır, en kararlı konformer yapısı belirlenerek yeniden optimize edilmiştir. Optimize edilen molekülün frekans hesaplaması yapılarak deneysel IR spektrum sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

Hesaplamaların hepsinde Yoğunluk Fonksiyon Kuramı (YFK), B3LYP metodu ve 6-311++G(d,p) taban kümesi kullanılmıştır.



Şekil 1. Brom-asetofenon oksim molekülünün yapısı

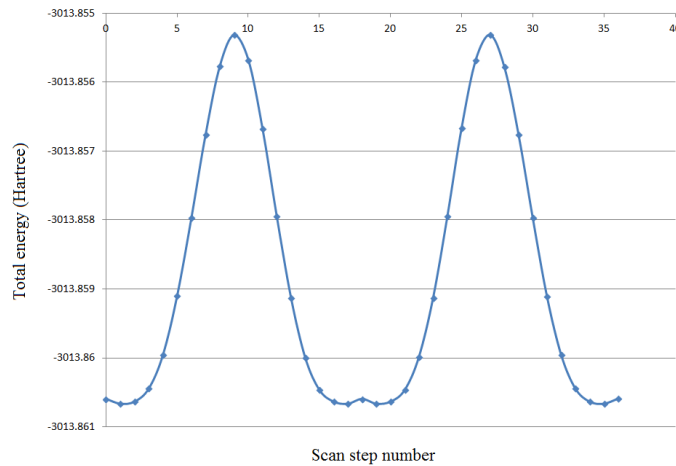
MATERYAL VE METOT

Bütün kimyasallar ticari olarak satın alınmış ve saflaştırma yapılmadan kullanılmıştır. Bromoasetofenon oksim literatürde verilen yol ile sentezlenmiştir [4]. Sentezlenen molekülün FT-IR spektrumu Perkin Elmer Spektrum II spektrofotometre ile ölçülmüştür.

Bütün hesaplamalarda Gaussian 09 [5] paket programı kullanılmıştır. Konformer çalışmaları optimizasyon ve titreşim frekanslarının hesaplanmasında DFT/B3LYP metod [6] ve 6-311++G(d,p) taban kümesi kullanılmıştır. Frekans hesaplamalarının harmonik osilatöre göre yapılması ve bazı sistematik hatalardan dolayı hesaplanan frekans değerleri deneysel değerlerden daha yüksek çıkmaktadır [7]. Bu nedenle, frekans hesapları 4000-1700 cm^{-1} aralığı için 0,958 [8], 1700-400 cm^{-1} aralığı için 0,978 [9] skala faktörü ile çarpılmıştır.

BULGULAR ve TARTIŞMA

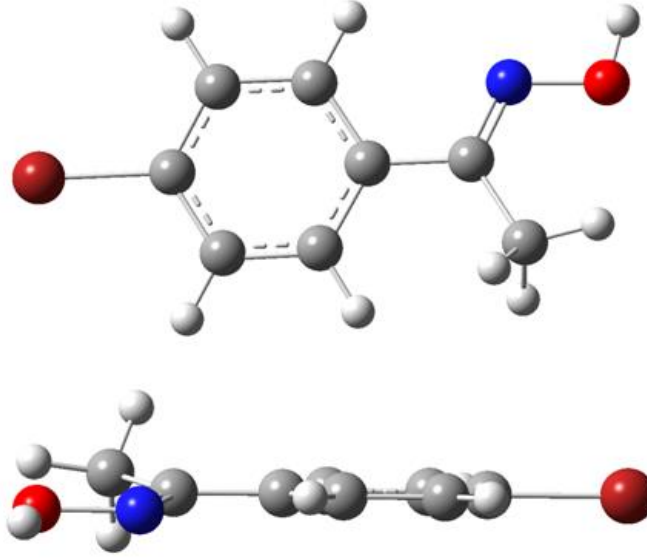
Bu çalışmada ilk olarak, yapısı Şekil 1’ de verilmiş olan brom-asetofenon molekülünde fenol ve oksim karbonu arasındaki bağ, α onar derece artırılması ile toplam 36 molekülün single point (SP) enerjisi hesaplanmıştır. Hesaplamalar sonucunda potansiyel enerji grafiği (PES) oluşturularak en kararlı molekül yapısı belirlenmiştir. Moleküle ait PES grafiği Şekil 2’ de verilmiş olup, $\alpha = 11,9^\circ$ hesaplanmıştır. Optimizasyon ve frekans hesaplamaları bu molekül üzerinden yapılmıştır.



Şekil 2. Brom-asetofenon oksim molekülünün PES grafiği

Brom-asetofenon molekülünün en kararlı geometrisi B3LYP/6-311++G(d,p) metod ve taban kümesinde yeniden optimize edilip, frekans hesaplamaları yapılmıştır. Negatif frekansın gözlenmemesi molekülün en kararlı

geometride optimize olduğunu göstermektedir. Molekülde en karakteristik bandlar olan oksim CN ve NO bağları, sırasıyla 1,286 ve 1,398 Å olarak hesaplanmıştır. Fenil grubundaki CC çift bağları ortalama olarak 1,401 Å hesaplanmıştır. Molekülün optimize yapısı Şekil 3’ te resmedilmiştir.



Şekil 2. Brom-asetofenon oksim molekülünün optimize molekül yapısı

Molekülün harmonik osilatöre göre frekans hesaplamaları B3LYP/6-311++G(d,p) seviyesine göre hesaplanmıştır. Deneysel olarak gözlenen ve kuramsal olarak şiddeti onun üzerinde hesaplanan kiplerin listesi Tablo 1’ de verilmiştir. Aromatik ve alifatik CH bandları genel olarak 3100-2800 cm^{-1} aralığında gözlenmektedir [10]. Aromatik CH gerilme titreşimleri 3058 cm^{-1} ’de gözlenirken 3069 ve 3055 cm^{-1} değerlerinde hesaplanmıştır. Metil grubundan kaynaklanan alifatik CH gerilme titreşimleri ise 2943-2896 cm^{-1} değerinde gözlenirken 2962-2909 cm^{-1} aralığında hesaplanmıştır. Oksim molekülünde en önemi gerilme bandları CN ve NO gerilme titreşimleridir. Bu titreşim frekansları sırasıyla 1633 ve 958 cm^{-1} değerlerinde gözlenmiştir. Bu gerilme titreşimleri ise programdan 1652 ve 997 cm^{-1} değerlerinde elde edilmiştir. Hesaplanan değerlerin gözlenen değerlerden daha yüksek çıkması molekülün kuramsal hesaplarında izole ortam kullanılması ve tek molekülün hesaplamaya katılması gösterilebilir. Deneysel sistemde ise moleküller arası hidrojen bağları bu titreşim frekanslarının daha düşük değerlerde gözlenmesine neden olmaktadır. Diğer titreşim frekansları ve işaretlemeleri Tablo 1’ de listelenmiştir.

Tablo 1. Brom-asetofenon oksim molekülünün deneysel ve kuramsal frekans değerleri

Mod	Titreşim atamaları	Deneysel	Skalasız	Skalanmış	Şiddet
8	$\gamma\text{NOH} + \gamma\text{CC}_{\text{fen}}$		329	322	7
10	γOH		406	397	105
13	$\nu\text{CBr} + \delta\text{NO}$		462	452	25
15	$\gamma\text{CH}_{\text{fen}}$	541oş	569	556	25
19	$\delta\text{CC}_{\text{fen}} + \delta\text{CN}$	754ş	781	764	21
20	$\gamma\text{CH}_{\text{fen}}$	833ş	833	815	13
21	$\gamma\text{CH}_{\text{fen}}$		846	827	35
22	$\nu\text{NO} + \delta\text{CC}_{\text{fen}}$	926oş	941	920	119
25	$\nu\text{NO} + \delta\text{CC}_{\text{fen}}$	958oş	1019	997	191
26	$\delta\text{CC}_{\text{fen}} + \delta\text{C-C}$		1024	1001	12
28	$\delta\text{CC}_{\text{fen}} + \delta\text{C-C}$	1038oş	1083	1059	31
29	$\delta\text{CC}_{\text{fen}} + \delta\text{C-C}$		1105	1081	8
32	$\delta\text{OH} + \nu\text{C-C}$	1242oş	1296	1267	99
35	$\delta\text{OH} + \nu\text{C-C}$	1368oş	1390	1359	22
36	γCH		1402	1371	9
37	$\delta\text{CH}_{\text{fen}} + \nu\text{CC}_{\text{fen}}$		1424	1393	22
38	γCH		1486	1453	12
39	γCH		1496	1463	12
40	$\delta\text{CH}_{\text{fen}} + \nu\text{CC}_{\text{fen}}$	1464ş	1518	1485	53
42	$\nu\text{CC}_{\text{fen}}$		1625	1589	17
43	$\nu\text{CN} + \delta\text{OH}$	1633oş	1689	1652	10
44	νCH	2896z	3037	2909	9
45	νCH	2943z	3092	2962	10
47	$\nu\text{CH}_{\text{fen}}$		3189	3055	5
49	$\nu\text{CH}_{\text{fen}}$	3058çz	3204	3069	5
51	νOH	3242y	3844	3683	149

y: yayvan, ş: güçlü, oş: orta, z: zayıf, çz: çok zayıf;

Skala faktörü: 0,958 for 4000-1700 cm^{-1} ; 0,978 for 1700-400 cm^{-1} .

SONUÇ

Bu çalışmada, brom-asetofenon oksim molekülünün konformer ve frekans hesaplamaları yapılmıştır. Molekülün en kararlı yapısında α dihedral açısının $11,9^\circ$ olduğu belirlenmişti. Hesaplanan frekans değerleri deneysel değerler ile karşılaştırılmıştır. Deneysel sonuçların hesaplanan değerler ile uyum içerisinde olduğu gözlenmiştir. Gözlenen ve hesaplanan frekans değerleri için korelasyon sabiti 0,990 olarak hesaplanmıştır.

KAYNAKLAR

- [1] Kaya Y, Yilmaz VT, Arslan T, Buyukgungor O. 2012. J. Mol. Struc. 1024: 65.
- [2] Ponomareva VV, Halley NK, Kou X, Gerasimchuk NN, Domasevich KV. 1996. J. Chem. Soc. Dalton Trans. 2351.
- [3] Scaffidi-Domianello Y Yu, Meelich K, Jakupec MA, Arion VB, Yu V. Kukushkin, Galanski M, Kepler BK. 2010. Inorg. Chem. 5669:49.
- [4] Li C, Zhang H, Cui Y, Zhang S, Zhao Z, Choi MCK, Chan ASC. 2010. Synthetic Communication. 543: 33.
- [5] Frisch MJ, et al. 2010. Gaussian 09, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT.
- [6] Becke AD. 1993. J Chem. Phys. 5648: 98.
- [7] Foresman JB, Frisch E.1993. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, USA.
- [8] Sundaraganesan N, Ilakiamani S, Saleem H, Wojciechowski PM, Michalska D.2005. Spectrochim. Acta. A 61, 2995.
- [9] Jesus AJL, Rosado MTS, Reva I, Fausto R, Eusebio ME, Redinha JS. 2006. J. Phys. Chem. A. 4169: 110.
- [10] Colthup NB, L. Daly H, Wiberley SE. 1964. Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy, Academic Press Inc., London.

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.sarioglu@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 bir 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, 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, the thermal properties of Al-1,1Sc and Al-1,9Sc alloys obtained by a special technique were investigated using experimental techniques. This study was carried out in Kütahya Dumlupınar University Advanced Technology Center laboratory from room temperature to 600 °C. As a result of the analysis, thermal expansion constant, Young's 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.

I. GİRİŞ

Al-Sc alaşımları hafif ve yüksek mukavemete sahip olmaları nedeni ile havacılık ve ulaştırma endüstrilerinde büyük ilgi görmektedir. Yeni alaşım elementleri bularak alüminyumun mekanik özelliklerini geliştirmek günümüzde de araştırmacıların ilgisini çekmektedir [1,2]. İlk Al-Sc alaşımları Willey (1971) tarafından patentlenmiştir [3]. Çeşitli alüminyum alaşımlarına % 0.1-1 Sc eklendiğinde mekanik özelliklerde önemli bir iyileşmenin olduğu belirtilmiştir. Bu buluş, skandiyum içeren alüminyum alaşımlarının sertleşme mekanizmaları, faz geçişleri, elektronik yapılar ve mekanik özelliklerinin detaylı araştırılmasını sağlamıştır [4]. Alüminyumdaki çözünürlüğünün çok düşük olmasına rağmen, Skandiyum Alüminyum içinde belli oranda çözünerek, alaşımlarının mekanik özelliklerinin iyileştirilmesinde önemli katkıda bulunur. Ayrıca, Skandiyum elementi alaşımın mukavemetinde artış, tanecik boyutunun azalması, yeniden kristalleşme sıcaklığının artması ve sıcak çatlamaya karşı büyük oranda dirençli olması bakımından oldukça ilave faydalar sağlamaktadır. Bu iki elementin dört intermetalik faz oluşturduğu bilinmektedir: Al_3Sc , Al_2Sc , $AlSc$ ve $AlSc_2$. Düşük Skandiyum oranlarında malzemenin yüksek mukavemet ve yüksek sıcaklıkta yeniden kristalleşmesini sağlayan etki malzeme içerisindeki Al_3Sc çökeltilerinden kaynaklanmaktadır [5,6]. Bu çalışmada Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımının termal ölçümleri yapılarak sıcaklık değişimi ile fiziksel parametrelerinin nasıl etkilendiği incelenmiştir. Ayrıca bu 1,1Sc ve 1,9Sc orandaki ilk çalışma olması bakımından da önemlidir.

II. YÖNTEM VE METODLAR

Termal analiz deneylerinde Al-1,1Sc alaşımına ait numunelerin Diferansiyel taramalı kalorimetre (TG/DSC) ve Termomekanik analiz (TMA) ölçümleri yapılmıştır.

TG/DSC için 30 – 1600 °C arasındaki sıcaklıklarda çalışabilen SETARAM marka Labsys Evo modeli Simultane Termal Analiz cihazı kullanılmıştır. TMA deneyleri için 30-1750 °C arasındaki sıcaklıklarda çalışabilen SETARAM marka Setsys Evo modeli Termo-Mekanik Analiz cihazı kullanılmıştır.



Şekil 1. SENSYS EVO TG-DSC



Şekil 2. SETSYS EVOLUTION TMA

TG/DSC analizleri için 55 mg ağırlığında numuneler platin krozelere konulmuştur. Cihaza bağlı bilgisayar yardımıyla argon atmosferinde 10°C/dk ısıtma hızı kullanılarak numunelere 30 - 600 °C sıcaklıkları arasında ısıl işlem uygulanmıştır. Isıl işlem süresince eş zamanlı olarak malzeme üzerinde gerçekleşen ağırlık ve enerji değişimi ölçülmüştür. Ölçülen değerlerden Entalpi, Gibbs serbest enerjisi ve Entropi değerleri türetilmiştir.

TMA analizleri için 2,36 mm yüksekliğinde numuneler alumina holder üstüne yerleştirilmiş ve 5 g yük uygulanmıştır. Cihaza bağlı bilgisayar yardımıyla argon atmosferinde 10°C/dk ısıtma hızı kullanılarak numunelere 30 - 600 °C sıcaklıkları arasında ısıl işlem uygulanmıştır. Isıl işlem süresince malzeme üzerinde gerçekleşen boyut değişimi ve termal genleşme ve Young modülü katsayısı elde edilmiştir.

Diferansiyel taramalı kalorimetre (TG/DSC) analizleri için kullanılan LABSYS EVO TG-DSC cihazı ve Termomekanik analiz (TMA) için kullanılan SETSYS EVOLUTION TMA cihazı sırası ile Şekil 1 ve Şekil 2’de görülmektedir. Ölçüm cihazları Kütahya Dumlupınar Üniversitesi İLTEM araştırma merkezinde bulunmaktadır.

Elde edilen TG/DSC eğrisinde oluşan piklerden yeniden kristalleşme sıcaklıkları, pik alanlarından entalpi - sıcaklık aralıkları ve ısı verileri de kullanılarak entropi hesaplanmıştır. Denklem 1 kullanılarak yeniden kristalleşme pikine ait Gibbs enerjisi hesaplanmıştır. Burada ΔG ; Gibbs enerjisi, ΔH ; Entalpi, T; yeniden kristallenme sıcaklığı ve ΔS ; Entropi değerlerini göstermektedir.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (1)$$

TMA ölçümleri ile elde edilen grafiklerden faydalanarak boyut değişimi (ϵ), termal genleşme katsayısı (α) ve Young Sabiti (E) sırasıyla denklem 2, 3 ve 4 kullanılarak hesaplanmıştır. Burada Δl ; genleşme miktarı, l_0 ; malzemenin ilk uzunluğu ve ΔT ; sıcaklık değişimini göstermektedir [8].

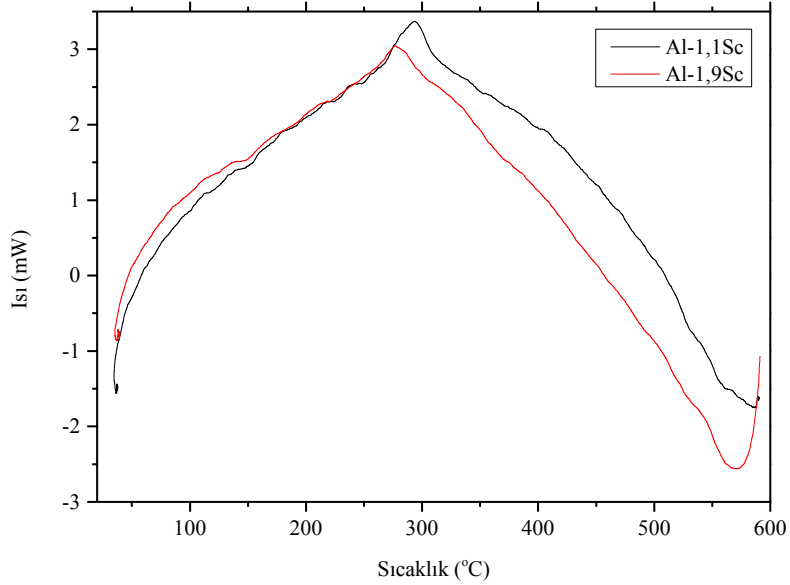
$$\epsilon = \frac{\Delta l}{l_0} \quad (2)$$

$$\alpha = \frac{\Delta l}{l_0 \Delta T} (\text{°C})^{-1} \quad (3)$$

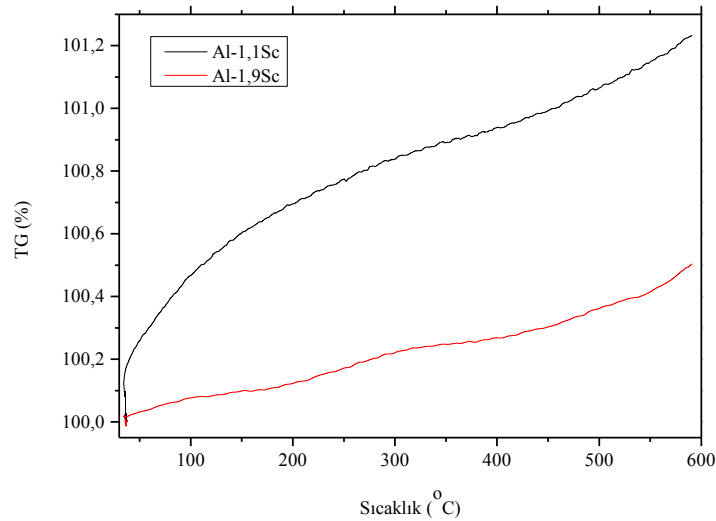
$$E = \frac{G}{\epsilon} (N/m^2) \quad (4)$$

III. TARTIŞMA ve SONUÇ

Alaşımın DSC grafikleri Şekil 3’de görülmektedir. Grafik incelendiğinde artan Sc oranının yeniden kristalleşme sıcaklığını azalttığı görülmüştür. Al-1,1Sc alaşımının yeniden kristalleşme sıcaklığı 293,71°C iken Al-1,9Sc alaşımının yeniden kristalleşme sıcaklığı 276,55°C olarak deneysel veriler ile elde edilmiştir.



Şekil 3. Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc Alaşımının DSC grafiği



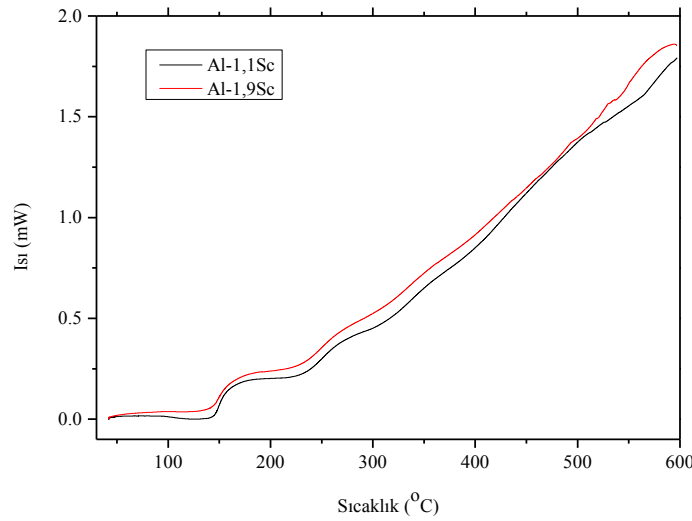
Şekil 4. Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımının sıcaklık ile TG(%) değişimi

Alaşımın sıcaklık artışı ile kütlesi ölçülmüş ve sıcaklık değişkenli kütle yüzdesindeki değişim Şekil 4’de verilmiştir. Buna göre alaşımların kütlelerinde azalma olmamıştır. Oluşan çok küçük artış ortam basıncından kaynaklanmaktadır.

Alaşımın DSC grafiklerinden yeniden kristalleşme sırasında oluşan entalpi, entropi ve Gibbs enerjisi değişimleri hesaplanmıştır. Bu değerler her iki alaşım için Tablo 1’de gösterilmektedir. Buna göre Al-1,9Sc alaşımının entalpi değişimi değeri daha küçük bulunmuştur. Entropi değişimi değeri ise her iki alaşımda birbirine çok yakın çıkmıştır. Al-1,9Sc alaşımının entropi değerinin kısmen daha küçük olması bu alaşımın kristal yapısının biraz daha düzenli olduğu şeklinde yorumlanır.

	Yeniden Kristalleşme Sıcaklığı (°C)	ΔH (J/g)	ΔS (J/g°C)	ΔG (J/g)
Al -1,1Sc	293,71	-14,61	0,0095	-17,41
Al-1,9Sc	276,55	-5,116	0,0092	-7,664

Tablo 1. Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımlarının bazı termal parametreleri.



Şekil 5. Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımlarının sıcaklık ile genişleme değişimi

Termomekanik analiz (TMA) ölçümlerinde alaşımların sıcaklık ile genişleme oranları belirlenmiştir. Şekil 5’de alaşımların TMA grafikleri görülmektedir. Buradan alaşımların termal genişleme katsayıları ve Young sabiti hesaplanmıştır. Tablo 2’de her iki alaşımın farklı sıcaklık değerleri için termal genişleme katsayısı ve Young sabiti değerleri gösterilmektedir. Al-1,1Sc alaşımının ortalama termal genişleme katsayısı $30,33 \cdot 10^{-6} (\text{°C})^{-1}$, Al-1,9Sc alaşımının ortalama termal genişleme katsayısı $27,84 \cdot 10^{-6} (\text{°C})^{-1}$ olarak bulunmuştur. Bu değer saf alüminyumun termal genişleme katsayısı olan $24 \cdot 10^{-6} (\text{°C})^{-1}$ değeri ile birbirine yakın bir değerdir. Al-1,1Sc alaşımının Young sabiti ortalama değeri 25,57 GPa ve Al-1,9Sc alaşımının Young modülü ortalama değeri 61,71 GPa iken saf alüminyumun Young sabiti değeri 69 GPa değerindedir.

Al-1,1Sc			Al-1,9Sc		
Sıcaklık Aralığı (°C)	α (*10-6) (°C) ⁻¹	E (GPa)	Sıcaklık Aralığı (°C)	α (*10-6) (°C) ⁻¹	E (GPa)
45,822 – 126,13	1,077	72,19	42,86 – 122,89	3,34	64,78
126,13 – 143,34	6,97	52,04	122,89– 141,77	10,74	85,54
143,34 – 165,13	71,16	4,02	141,77 – 171,06	51,39	11,52
165,13 – 223,53	7,705	13,87	171,06 – 229,23	11,03	27,03
223,53 – 266,55	37,42	3,87	229,23 – 277,54	39,44	9,10
266,55 – 308,71	24,19	6,12	277,54 – 532,55	43,44	1,56
308,71 – 594,71	45,59	0,47	532,55 – 593,37	47,47	6,00
594,71 – 597,18	48,58	52,04	593,37 – 597,15	15,92	288,17
Aritmetik Ortalama	30,33	25,57	Aritmetik Ortalama	27,84	61,71
45,82- 597,18	32,32	0,34	42,58 – 597,15	33,23	0,33

Tablo 2. Al-1,1Sc ve Al-1,9Sc alaşımlarının termal genleşme ve Young modülü değerleri

Sonuç olarak, DSC verilerinden yeniden kristalleşme sıcaklığı, entalpi, entropi ve Gibbs enerji değişimleri elde edilmiştir. Sc eklenmesi Al-1,9Sc alaşımı için yeniden kristalleşme sıcaklığını azaltmıştır. Termal grafiklerden ve sonuçlarından malzemede ekzotermik reaksiyona sahip olduğu ve buna bağlı olarak çok küçük oranda madde miktarında artış olduğu görüldü. Gibbs enerji değişiminin negatif olması reaksiyonun istemli, yani kendiliğinden olma eyleminde olduğunu, entropi değişiminin çok küçük olması ise malzemedeki kristal düzenliliğinin iyi olduğunu anlamına gelir. Al-1,9Sc alaşımının entropi değişiminin küçük olması, kristalleşmenin daha düzgün olduğu, bunun da mukavemette etken olduğunu ifade edilebiliriz.

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı destekleyen Kütahya Dumlupınar Üniversitesi BAP programına teşekkürlerimizi sunarız.

REFERANSLAR

1. Costa S., Puga H., Barbosa J., Pinto A. M. P. (2012). The effect of Sc additions on the microstructure and age hardening behaviour of as cast Al–Sc alloys, *Materials and Design*, 42, 347–352.
2. Hamza Yaşar O., Ercan U., Rahmi Ü. (2013) Experimental and first-principles investigation of crystal structure of powder metallurgy Al–1.1Sc and Al–2Sc alloys, *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, 23, 3020–3026
3. Willey L. A. (1971) *United States Patent*, United States Patent, 8.
4. Toropova L. S., Eskin D. G., Kharakterova M. L., Dobatkina T. V. (1998) *Advanced Aluminum Alloys Containing Scandium Structure and Properties*, Taylor and Francis, 173.
5. Cacciamani G., Riani P., Borzone G., Parodi N., Saccone A., Ferro R., Pisch A., Schmid-Fetzer R. (1999) *Intermetallics* 7, 101-108.
6. Xuan L., Jilai X., Zhichao G., Cheng Z. (2019) Thermodynamic measurements and assessment of the Al-Sc system, *Journal of Materials Science & Technology*, 35, 1422–1431.

Deposition of ZnO Thin Films by Using a Novel Technique: Magnetic Spin Coating

M. Fatih GÖZÜKIZIL^{*1}, Sinan TEMEL², Nurgül ÖZBAY³

^{*1} *Bilecik Seyh Edebali University, Sogut Vocational School, 11230, Bilecik, Turkey*

² *Bilecik Seyh Edebali University, Central Research Laboratory, 11230, Bilecik, Turkey*

³ *Bilecik Seyh Edebali University, Chemical Engineering Department, 11230, Bilecik, Turkey*

*Corresponding author e-mail: fatih.gozukizil@bilecik.edu.tr

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.

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 yüzeysel özellikleri X-Işını Kırınımı (XRD), yüzeysel 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 hekzagonal 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.

GİRİŞ

Fotoelektrik[1], piezoelektrik[2] ve termoelektrik[3] özelliklerinin yüksek olmasından dolayı ZnO yarıiletkenler; gaz sensörleri [4], ince film transistörler[5], optoelektronik cihazlar[6], güneş hücreleri[7], UV dedektörler[8], piezoelektrik güç çeviriciler, yüzey akustik devreleri[9], biosensörler[10] gibi uygulamada kullanılmaktadır. Ayrıca ZnO ince filmler; Magnetron Saçtırma[11], lazer aşındırma[12], ultrasonik sprey[13], elektrokimyasal depolama[14] ve sol-gel [15] gibi birçok teknikle üretilebilmektedir.

ZnO ince film üretiminde kullanılan kısmen maliyetli, karmaşık ve yurt dışından ithal edilen sistemlere alternatif olarak, Sol-gel döndürerek kaplama metodu geliştirilerek daha ekonomik, basit ve kullanışlı Sol-gel manyetik döndürerek kaplama metodu kullanılmıştır. Bu çalışma kapsamında literatürde ilk defa kullanılan Sol-gel manyetik döndürerek kaplama metodu ile üretilen ZnO ince filmlerin, yapısal ve yüzeysel karakterizasyonları incelenmiştir.

MATERYAL VE YÖNTEM

Tekniğin kurulumu için IKA marka, Big Squid White model, ısıtmasız, yüksek hızda dönebilen (0-3000 rpm) manyetik karıştırıcı, özel yapışkanlı PTFE yuvarlak teflon manyetik döndürücü ve ince film oluşumu sırasında altlık döndürülürken üzerine damlatılan sol-gel çözeltisinin etrafa sıçramasını önleyen bir kapak kullanılmıştır. Kapağın üzerinde uygulama sırasında çözeltiyi mikropipetle altlığın üzerine damlatabilmek için küçük bir delik vardır.

Manyetik döndürerek kaplama yöntemi, elde edilecek filmler için hazırlanan çözeltilerin bir taban üzerine aktarıldıktan sonra bu tabanı çeşitli hızlarda ve sürelerde manyetik olarak döndürerek çözeltinin bu taban üzerine yayılması ile film oluşturmasıdır. Manyetik döndürerek kaplama olayı temelde beş aşamadan meydana gelmektedir. Bu aşamalar;

- 1- Hazırlanan çözeltinin altlık üzerine damlatılması,
- 2- Altlığın farklı hızlarda ve sürelerde manyetik olarak döndürülmesi,
- 3- Döndürülerek elde edilen ince filmin kurutulması,
- 4- Çok katlı yapı hazırlamak için sürecin tekrarlanması,
- 5- Elde edilen çok katlı filmde yapının kristalleşmesi için farklı sıcaklıklarda tavlama işleminin gerçekleştirilmesi.

Döndürerek kaplama yönteminde; film kalınlığı, dönüş hızı, dönüş zamanı, kaplama katman sayısı, çözelti hacmi ve tavlama sıcaklığı gibi parametreler değiştirilerek üretilmek istenen filmler kolayca çeşitlendirilebilir.

Bu çalışmada üretilen ince filmler için altlık malzeme olarak ISOLAB marka mikroskop lamı kullanılmıştır. ZnO ince filmleri üretmek için kullanılacak sol-gel çözeltisi 0,5 M olarak hazırlanmıştır. Bu sol-gel çözeltisi için $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$ (çinko asetat dihidrat), çözücü olarak 2-metoksietanol ve stabilizör olarak monoetanolamin (MEA) kullanılmıştır. Çözelti hazırlanırken önce çözeltinin hazırlanacağı kaba 30 ml 2-metoksietanol konulmuştur. İçerisine 3,3005 gr çinko asetat dihidrat ilave edilmiştir. 10 dk. 70°C’de karıştırılmıştır. Daha sonra çözeltiye 0,3 ml monoetanolamin (MEA) damla damla eklenmiştir. 150 dk. 70°C’de karıştırılmış ve son olarak hazırlanan çözelti iki gün bekletilmiştir.

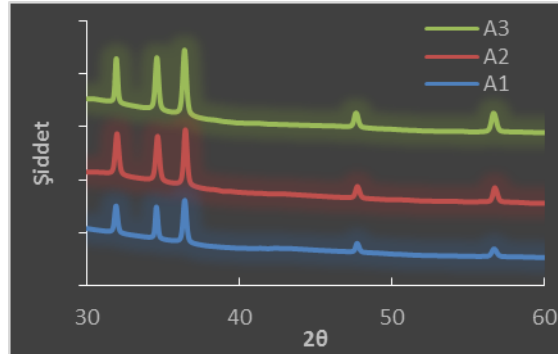
Üretilen filmlerden en iyi sonucu elde edebilmek için damlatma çözeltisi, döndürme süresi, döndürme hızı, kaplama katman sayısı ve tavlama sıcaklıkları parametreleri değiştirilerek sonuçlar incelenmiştir. ZnO serisi için yapılan denemeler sonucunda; damlatma çözeltisi miktarının 15 µl, döndürme süresinin de 30 s olması kararlaştırılmıştır. Döndürme hızları 1000, 2000 ve 3000 rpm olarak belirlenen filmlerin 9 katman olarak kaplanması ve hava ortamında 300, 400 ve 500°C’de tavlama karar verilmiştir. ZnO serisi için seçilen bu parametreler Çizelge 1’de verilmiştir.

Çizelge 1. ZnO serisi için filmlerin kaplama parametreleri.

Döndürme Hızı (rpm)	Katman Sayısı	Tavlama Sıcaklığı (°C)	Seri Adı	
1000	9	300	A1	A
		400	A2	
		500	A3	
2000	9	300	B1	B
		400	B2	
		500	B3	
3000	9	300	C1	C
		400	C2	
		500	C3	

DENEYSEL SONUÇLAR

Elde edilen filmlerin yapısal özelliklerinin incelenmesi için PANALYTICAL Emprayan X-Işını Kırınımı (XRD) cihazı kullanılmıştır.



Şekil 1. A serisi ince filmlerin karşılaştırmalı XRD analiz spektrumu.

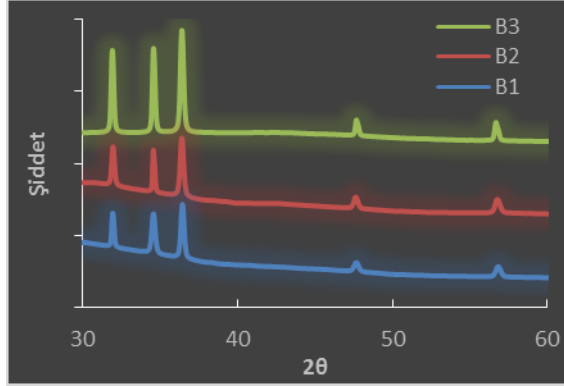
XRD spektrumlarından da görüldüğü gibi, tüm seriler polikristal yapıdadır. Ayrıca A3 serisi ZnO ince filmlerin pik şiddetleri A1 ve A2 serisi ince filmlerin pik şiddetlerinden daha büyüktür. Tüm serilerde en şiddetli pik hekzagonal ZnO yapısına ait (011) pikidir. Ayrıca bu filmlerde sırasıyla (010), (002), (011), (012) ve (110) olmak üzere 5 adet pik gözlenmektedir.

Çizelge 2’de de A serisi ZnO ince filmlerin XRD spektrumundan elde edilen yarı pik genişlikleri (FWHM) ve Scherrer Formülü ile hesaplanan tane boyutu değerleri verilmiştir.

Çizelge 2. A serisi piklerine ait bilgiler.

Seri	FWHM	D (nm)
A1	0,29	68
A2	0,28	70
A3	0,23	88

Bu veriler ve XRD spektrumları göz önüne alındığında, A serisi için en iyi kristalleşmeyi A3 serisi ince filmler göstermiştir.



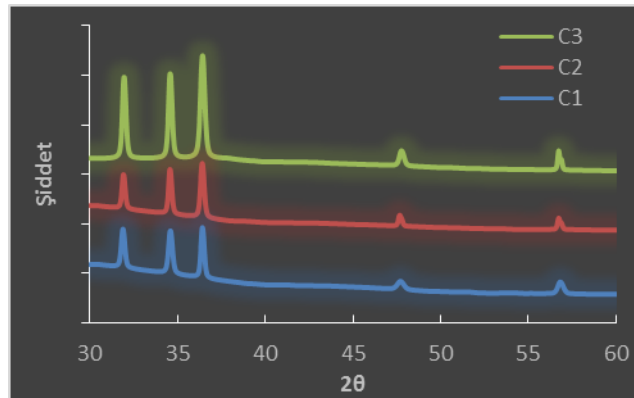
Şekil 2. B serisi ince filmlerin karşılaştırmalı XRD analiz spektrumu.

XRD spektrumlarından da görüldüğü gibi, tüm seriler polikristal yapıdadır. Ayrıca B3 serisi ZnO ince filmlerin pik şiddetleri, B1 ve B2 serisi ince filmlerin pik şiddetlerinden daha büyüktür. Tüm serilerde en şiddetli pik hekzagonal ZnO yapısına ait (011) pikidir. Ayrıca bu filmlerde sırasıyla (010), (002), (011), (012) ve (110) olmak üzere 5 adet pik gözlenmektedir. Çizelge 3’de de B serisi ZnO ince filmlerin XRD spektrumundan elde edilen yarı pik genişlikleri (FWHM) ve Scherrer Formülü ile hesaplanan tane boyutu değerleri verilmiştir.

Çizelge 3. B serisi piklerine ait bilgiler.

Seri	FWHM	D (nm)
B1	0,25	84
B2	0,23	86
B3	0,18	108

Yarı pik genişliği ve ortalama tane boyutu değerleri incelendiğinde ve XRD spektrumları göz önüne alındığında, B serisi için en iyi kristalleşmeyi B3 serisi ince filmler göstermiştir.



Şekil 3. C serisi ince filmlerin karşılaştırmalı XRD analiz spektrumu.

XRD spektrumlarından da görüldüğü gibi, tüm seriler polikristal yapıdadır. Ayrıca C3 serisi ZnO ince filmlerin pik şiddetleri, C1 ve C2 serisi ince filmlerin pik şiddetlerinden daha büyüktür. Tüm serilerde en şiddetli pik hekzagonal ZnO yapısına ait (011) pikidir. Ayrıca bu filmlerde sırasıyla (010), (002), (011), (012) ve (110)

olmak üzere 5 adet pik gözlenmektedir. Çizelge 4’de de C serisi ZnO ince filmlerin XRD spektrumundan elde edilen yarı pik genişlikleri (FWHM) ve Scherrer Formülü ile hesaplanan tane boyutu değerleri verilmiştir.

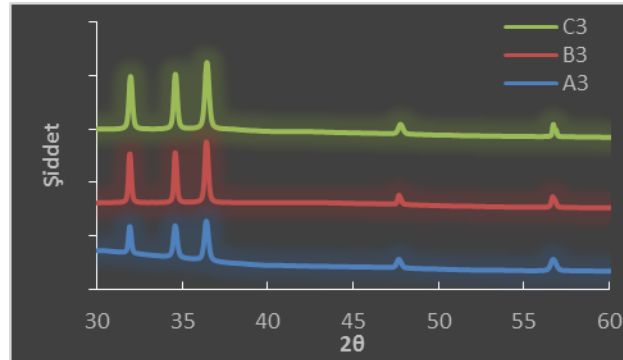
Çizelge 4. C serisi piklerine ait bilgiler.

Seri	FWHM	D (nm)
C1	0,25	82
C2	0,20	90
C3	0,17	112

Yarı pik genişliği ve ortalama tane boyutu değerleri incelendiğinde ve XRD spektrumları göz önüne alındığında, C serisi için en iyi kristalleşmeyi C3 serisi ince filmler göstermiştir.

A, B ve C serileri XRD spektrumları incelendiğinde her seride en iyi kristalleşmeyi gösteren filmlerin 500°C’de tavlanan A3, B3 ve C3 serileri olduğu görülmüştür. Tavlama sıcaklığı arttıkça kristalleşme iyileşmektedir.

Şekil 4’de tüm seriler içinde en iyi kristalleşmeyi gösteren A3, B3 ve C3 ince filmlerin XRD analiz spektrumları karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Çizelge 5’te A3, B3 ve C3 serisi ZnO ince filmlerin XRD spektrumundan elde edilen yarı pik genişlikleri (FWHM) ve Scherrer Formülü ile hesaplanan tane boyutu değerleri verilmiştir.



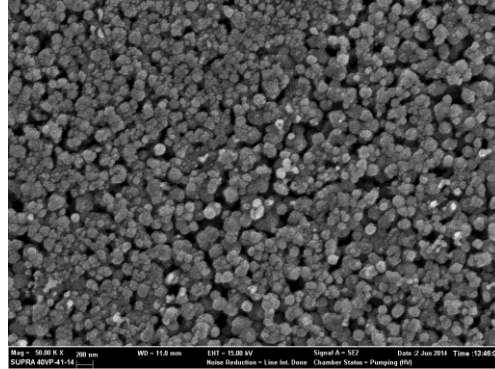
Şekil 4. ZnO ince filmlerin karşılaştırmalı XRD analiz spektrumu.

Çizelge 5. A3, B3 ve C3 serilerinin piklerine ait bilgiler.

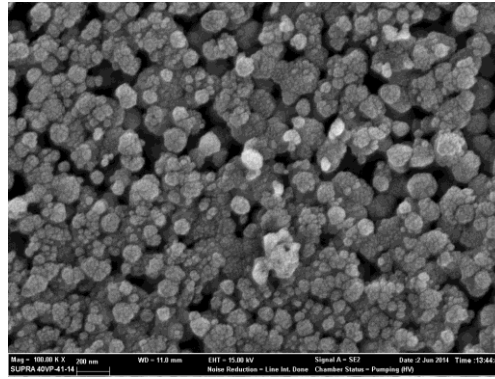
Seri	FWHM	D (nm)
A3	0,23	88
B3	0,18	108
C3	0,17	112

XRD spektrumları ve çizelge incelendiğinde döndürme hızı arttıkça kristalleşmenin iyileştiği görülmektedir. Bu sonuçlara göre, 3000 rpm döndürme hızında 9 katman olarak üretilen ve 500°C’de tavlanan C3 serisi tüm seriler içinde en iyi kristalleşmeyi gösteren ince film olarak öne çıkmıştır.

Elde edilen filmlerin yüzey özelliklerinin incelenmesi için ZEISS Supra 40VP Alan Emisyonu Taramalı Elektron Mikroskobu (FESEM) kullanılmıştır. XRD sonuçlarına göre en iyi kristalleşmeyi gösteren C3 serisi ZnO ince filmlere ait 50kx ve 100kx büyütme FESEM görüntüleri verilmektedir.



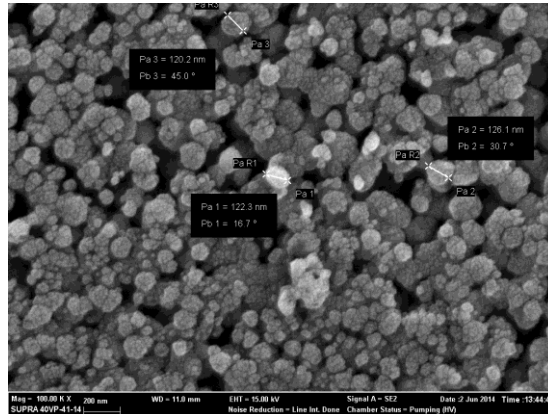
Şekil 5. C3 serisi ZnO ince filmlerin 50kx büyütme FESEM görüntüleri.



Şekil 6. C3 serisi ZnO ince filmlerin 100kx büyütme FESEM görüntüleri.

FESEM görüntüleri incelendiğinde, filmin tüm yüzeyine hemen hemen homojen dağılmış nanoboyutta taneciklerden meydana geldiği görülmektedir. Ayrıca yığılma şeklinde oluşumların bulunmadığı ve yüzeyde boşluklar olmadığı, böylece tanelerin birbirine daha iyi tutunduğu görülmektedir.

Şekil 8’de ise 100kx büyütülmüş FESEM görüntüsü üzerinde belirlenen tane boyutu değerleri verilmektedir. Görüntülerden belirlenen tane boyutu değerleri yaklaşık 120 nm’dir. Bu tane FESEM görüntülerinden belirlenen tane boyutu değerleri XRD spektrumundan hesaplanan tane boyutu değerleri ile çok yakındır ve birbirini destekler niteliktedir.



Şekil 7. C3 serisi ZnO ince filmlerin tane boyutu değerleri.

Yüzey özellikleri incelenen ince filmlerin aynı zamanda taramalı elektron mikroskopuna bağlı BRUKER marka Enerji Dağılımlı X-Işını Spektrometresi (EDX) dedektörü kullanılarak kimyasal bileşimleri de elde edilmiştir. Çizelge 6'da C3 serisi ZnO ince filmlere ait EDX sonuçları verilmiştir. Altaş üzerinde ZnO yapısı olduğu EDX sonuçlarında da belirlenmiştir.

Çizelge 6. C3 serisi ZnO ince filmlere ait EDX sonuçları.

Element	Atomik Yüzde (%)
Çinko (Zn)	62
Oksijen (O)	38

Elde edilen filmlerin optik özelliklerinin incelenmesi için UV-Vis Spektroskopisi ölçümleri, Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Merkezi Araştırma Laboratuvarı'nda bulunan PERKIN ELMER LAMBDA 25 cihazında 300 - 1100 nm dalgaboyu aralığında alınmıştır. UV-Vis Spektroskopisi ölçümlerinden elde edilen temel absorpsiyon spektrumu verilerinden yararlanarak filmlerin yasak enerji aralıklarının belirlenebilmesi Tauc Metodu kullanılmıştır. C3 serisi ince filmlerin yasak enerji aralığı değeri 3.31 eV olarak hesaplanmıştır.

SONUÇ

Öncelikli hedef olan yeni bir ince film üretim tekniği olarak "Sol-Gel Manyetik Döndürerek Kaplama Tekniğini" oluşturma işi başarıyla gerçekleştirilmiştir. Hazırlanan çözeltiler ile döndürme hızı, kaplama katman sayısı, tavlama sıcaklığı gibi birçok deney parametresi denenmiştir. Elde edilen ince filmlerin XRD analiz sonuçları incelenerek en iyi kristalleşmeyi gösteren seriye karar verilmiş ve bu sonuçlara göre optimum ince film oluşum şartları belirlenmiştir. ZnO ince filmlerin üretimi sırasında, burada elde edilen sonuçlar doğrultusunda ince film üretim şartları olarak 3000 rpm döndürme hızı ve 500°C tavlama sıcaklığı optimum parametre değerleri olarak bulunmuştur. Belirlenen seriye ait ince filmlerin FESEM görüntüleri de incelenmiş ve sonuçların XRD spektrumlarından elde edilen sonuçlar ile uyum içerisinde olduğu görülmüştür. Ayrıca UV-Visible ölçümlerinden yasak enerji aralığı değeri 3.31 eV olarak belirlenmiştir. Bu sonuçlar literatürde daha önce ZnO ince filmler için bulunan değerler ile uyum içerisindedir. Bu incelemelerden de anlaşılacağı gibi literatürde ilk defa kullanılan, "Sol-Gel Manyetik Döndürerek Kaplama Tekniği" ile ZnO ince filmler daha basit ve ekonomik bir şekilde rahatlıkla üretilebilmiştir.

REFERENCES

- [1] B. A. H. Ameen, A. Yildiz, W. A. Farooq, and F. Yakuphanoglu, “Solar Light Photodetectors Based on Nanocrystalline Zinc Oxide Cadmium Doped/p-Si Heterojunctions,” *Silicon*, 2019.
- [2] S. A. Hasan, H. Torun, D. Gibson, Q. Wu, M. D. Cooke, and Y. Fu, “Flexible UV sensor based on nanostructured ZnO thin film SAW device,” in 2019 IEEE Jordan International Joint Conference on Electrical Engineering and Information Technology (JEEIT), 2019, pp. 85–90.
- [3] S. Temel, M. Nebi, and D. Peker, “Sol-Gel Döndürerek Kaplama Tekniği ile Saydam İletken ZnO İnce Filmlerin Üretilmesi ve Karakterizasyonu.”
- [4] T. Bhowmick, A. Banerjee, S. Nag, and S. B. Majumder, “Gas Sensing Characteristics in ZnO Thin Film Explicated Through the Analysis of Conductance Transients and the Concept of Activation Energy,” in 2018 IEEE SENSORS, 2018, pp. 1–4.
- [5] H. Li et al., “High-Performance ZnO Thin-Film Transistors Prepared by Atomic Layer Deposition,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 66, no. 7, pp. 2965–2970, Jul. 2019.
- [6] C. Ling et al., “Oxygen vacancies enhanced photoresponsive performance of ZnO nanoparticles thin film/Si heterojunctions for ultraviolet/infrared photodetector,” *J. Alloys Compd.*, vol. 797, pp. 1224–1231, Aug. 2019.
- [7] S. K. Kokate et al., “CdS sensitized pristine and Cd doped ZnO solar cells: Effect of SILAR cycles on optical properties and efficiency,” *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 80, pp. 179–183, Jun. 2018.
- [8] T. Varma, C. Periasamy, and D. Boolchandani, “Electrical and UV detection properties of ZnO thin film based schottky contacts deposited by RF magnetron sputtering,” in 2017 Conference on Emerging Devices and Smart Systems (ICEDSS), 2017, pp. 37–40.
- [9] S. M. N, M. V N Prasad, V. Gaddam, K. Rajanna, and M. Nayak, “Development of a Novel Acoustic Sensor using Sputtered ZnO Thin Film,” 2019.
- [10] B. Chakraborty, S. Chakrabarty, S. Ghosh, and C. R. Chaudhuri, “High Performance Biosensor Based on RGO/ZnO Thin Film Transistor,” in 2018 IEEE SENSORS, 2018, pp. 1–4.
- [11] H. Zhu, X. Niu, M. Wan, and Y. Mai, “A study of ZnO:Al thin films reactively sputtered under the control of target voltage for application in Cu(In,Ga)Se₂ thin film solar cells,” *Vacuum*, vol. 161, pp. 297–305, Mar. 2019.
- [12] J. A. Guerrero de León et al., “Influence of the Zn plasma kinetics on the structural and optical properties of ZnO thin films grown by PLD,” *SN Appl. Sci.*, vol. 1, no. 5, p. 475, May 2019.
- [13] T. Güngör and E. Güngör, “ZnO ince filmlerin sıcaklığa bağlı elektriksel davranışında co etkisinin incelenmesi,” *Deu Muhendis. Fak. Fen ve Muhendis.*, vol. 19, no. 56, pp. 421–431, Jan. 2017.
- [14] L. Guo, “Characterization of Mg_xZn_{1-x}O films grown by electrochemical deposition,” in *Advanced Materials Research*, 2014, vol. 926–930, pp. 22–25.
- [15] B. Rahal et al., “Sol-gel synthesis and nanostructured semiconductor analysis of undoped and Cd-doped ZnO thin films,” *Optik (Stuttg.)*, 2018.

Hysteresis Characteristics of Generalized Spin-S Magnetic Binary Alloys

Gülşen Karakoyun¹, Ümit Akıncı^{2*}

¹*Dokuz Eylül University, The Graduate School of Natural and Applied Sciences, Nanoscience and Nanoengineering Department, İzmir, Turkey*

²*Dokuz Eylül University, Faculty of Science, Physics Department, Buca, 35390 İzmir, Turkey*

*Corresponding author e-mail: umit.akinci@deu.edu.tr

Abstract

In this study, hysteresis characteristics of the generalized spin-S binary alloy represented by the formula have been investigated within the framework of effective field approximation. The binary system 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. By detailed investigation on hysteresis loops, double and multi 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 with concentration.

Keywords: Binary Alloy, Effective Field Theory, Hysteresis

INTRODUCTION

The disordered magnetic alloys represented by constitute a wide range of theoretical and experimental field of study due to their modifiable composition properties. More information on the magnetism of alloys can be found in the reference [1].

Although the spin-1/2 [2] and spin-1 [3,4] models are very basic models of magnetism, demand with high-order spin systems has increased for many systems day by day. Generalized spin-S models have been investigated by means of several methods such as mean field theory (MFT) [5], effective field theory (EFT) [6,7], Monte Carlo (MC) method [8], series expansion method [9,10]. Besides, a lot of mixed spin system systems are modeled where at least one of the components is generalized spin-S. For instance, mixed spin-1/2-spin-S system has examined with EFT [11,12], series expansion [13], exact recursion relations on the Bethe lattice [14] and exact results [15].

There are also many studies in literature for certain spin values of binary alloys. Binary alloy systems consisting of different spin values such as spin-1/2-spin-1 are investigated by the use of EFT [16,17,18,19,20], MFT [21], MC method [22]. Spin-1/2-spin-3/2 are also inspect by means of EFT [23,24] and MFT [25]. Besides, experimental implementation of magnetic alloy systems supported by experimental studies such as $FeAl_{1-x}Mn_x$ [26], $Gd_{1-x}C_x$ [27], $Mn_xSc_{1-x}N$ [28], $Mn_xZn_{1-x}F_2$ [29], Ag_cAu_{1-c} and Ag_cPd_{1-c} [30].

The main of this work to determine hysteresis characteristics of the binary alloys by taking both generalized spin-S of type A and type B atoms consisting of different spin values. The outline of this paper as follow: the formulation of the generalized spin-S binary alloy has been constructed by effective field theory. In the following section, evolution of hysteresis loops is presented with selected parameters. Then, quantities of hysteresis characteristics have been investigated. The last section contains our conclusions.

MODEL AND FORMULATION

Binary alloy system consists of type A atoms with concentration c and type B atoms with concentration $1-c$ which are represented by $A_c B_{1-c}$. The Hamiltonian of the generalized spin-S binary ferromagnetic alloy model can be given by

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\xi_i \xi_j \sigma_i \sigma_j + \xi_i \xi_j \sigma_i S_j + \delta_i \xi_j S_i \sigma_j + \delta_i \delta_j S_i S_j) - D \sum_i \delta_i (S_i)^2 \quad (1)$$

where J is the ferromagnetic exchange interaction between nearest neighbor spins and D is the crystal field (single ion anisotropy) parameter. σ_i and S_i represents spin operator of type A atoms and type B atoms respectively. In our model both of A and B type atoms have spin-S values. They have $2\sigma+1$ and $2S+1$ different spin values such as $\sigma_i = -\sigma, -\sigma+1, \dots, \sigma-1, \sigma$ and $S_i = -S, -S+1, \dots, S-1, S$. ξ_i and δ_i are the site occupation numbers and $\xi_i + \delta_i = 1$. While $\xi_i = 1$ means that the site i has type A atom, $\xi_i = 0$ means that the site i has type B atom.

The magnetizations and quadrupole moments of the system is obtained via exact identities which are given by [31]

$$m_A = \frac{\langle\langle \xi_0 \sigma_0 \rangle\rangle}{\langle \xi_0 \rangle} = \langle\langle \exp(E_0^A \nabla) \rangle\rangle F_A(x) \Big|_{x=0} \quad (2)$$

$$m_B = \frac{\langle\langle \delta_0 S_0 \rangle\rangle}{\langle \delta_0 \rangle} = \langle\langle \exp(E_0^B \nabla) \rangle\rangle F_B(x) \Big|_{x=0} \quad (3)$$

where m_A is the magnetization of A atom and m_B is the magnetization of the B atom.

$$q_A = \frac{\langle\langle \xi_0 \sigma_0^2 \rangle\rangle}{\langle \xi_0 \rangle} = \langle\langle \exp(E_0^A \nabla) \rangle\rangle G_A(x) \Big|_{x=0} \quad (4)$$

$$q_B = \frac{\langle\langle \delta_0 S_0^2 \rangle\rangle}{\langle \delta_0 \rangle} = \langle\langle \exp(E_0^B \nabla) \rangle\rangle G_B(x) \Big|_{x=0} \quad (5)$$

where q_A is the quadrupole moment of A atom and q_B is the quadrupole moment of the B atom. E_0^A and E_0^B represent local fields. The explicit form of the functions,

$$F(x, D) = \frac{\sum_{k=-S}^S k \exp(\beta D k^2) \sinh[\beta k(x)]}{\sum_{k=-S}^S \exp(\beta D k^2) \cosh[\beta k(x)]} \quad (6)$$

$$G(x, D) = \frac{\sum_{k=-S}^S k^2 \exp(\beta D k^2) \cosh[\beta k(x)]}{\sum_{k=-S}^S \exp(\beta D k^2) \cosh[\beta k(x)]} \quad (7)$$

Differential operator technique on functions can be given as,

$$\exp(\alpha \nabla) F(x) = F(x + \alpha) \quad (8)$$

This expression can be used as approximated van der Waerden identities [32] for high order spins which is given by the formula;

$$\exp(\alpha S_k) = \cosh(\alpha \eta) + \frac{S_k}{\eta} \sinh(\alpha \eta) \quad (9)$$

where η is the square root of the quadrupole moments.

Total magnetization of magnetic binary alloy system is calculated by

$$m = c m_A + (1 - c) m_B \quad (10)$$

Linearization of this formula gives us second order critical temperatures of the binary alloy system.

RESULTS and DISCUSSION

Results have been obtained for honeycomb lattice throughout this work. We will utilize scaled (dimensionless) quantities with the following

$$t = \frac{k_B T}{J}, d = \frac{D}{J} \quad (11)$$

The hysteresis loops which is the response to the magnetization by sweeping the magnetic field from $-h_o$ to h_o and reverse direction. It has been shown that different hysteresis characteristics are obtained for integer-integer model in Fig.1 with selected values of the Hamiltonian parameters. First we choose both of spin-A and spin-B atoms as integer-integer model. The concentration $c = 1$ and $c = 0$ means that full of lattice consists of type-A

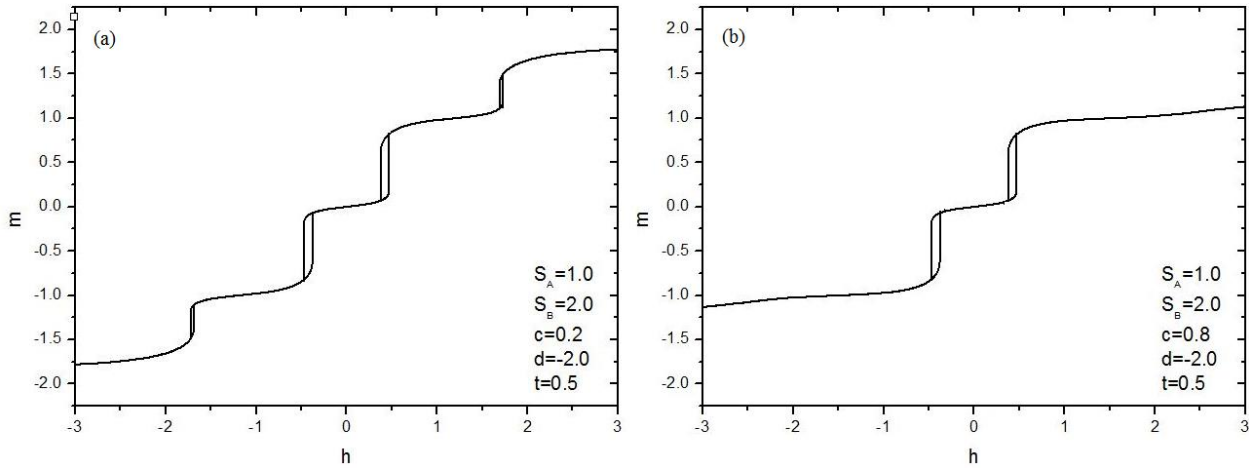


Figure 1. Selected hysteresis loops for $S_A = 1.0$ and $S_B = 2.0$ binary Ising model on honeycomb lattice for the concentration values (a) $c = 0.2$ and (b) $c = 0.8$ with the crystal field parameter $d = -2$ and the temperature $t = 0.5$.

atoms and type-B atoms respectively. Spin values of type A and type B atoms chosen as $S_A = 1.0$ and $S_B = 2.0$ values. We emphasize that $S_A < S_B$ within this work. Hysteresis loop of the binary alloy system evolve from four hysteresis loops to double hysteresis loops with rising concentration for fixed temperature and crystal field parameter. The system is in paramagnetic phase for both hysteresis characters.

The second case of hysteresis loops consists of spin-A and spin-B atoms as half integer- half integer model as seen in Fig. 2. Spin values of type A and type B atoms chosen as $S_A = 0.5$ and $S_B = 1.5$ values. The system exhibits single hysteresis loop for the parameter values of the concentration $c = 0.5$, the crystal field $d = -1$ and the temperature $t = 0.7$ (can be seen in Fig 2a). This loop represents the ferromagnetic phase. If the value of the crystal field parameter takes negative large values as $d = -2$, then the system exhibits paramagnetic hysteresis. The system evolves from the single hysteresis loop to paramagnetic loop, when crystal field takes negative large values for half integer-half integer model.

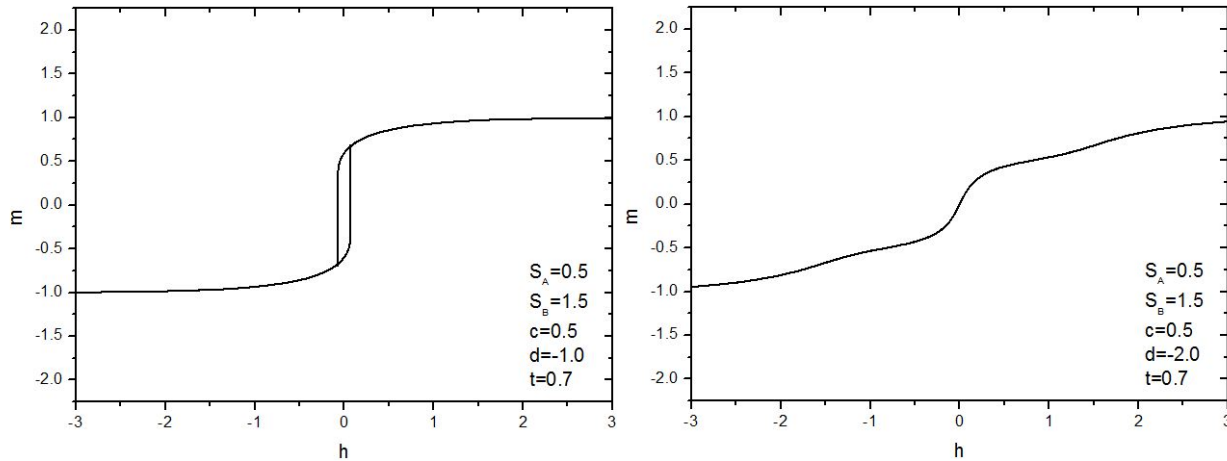


Figure 2. Selected hysteresis loops for $S_A = 0.5$ and $S_B = 1.5$ binary Ising model on honeycomb lattice for the crystal field values (a) $d = -1$ and (b) $d = -2$ with the concentration parameter $c = 0.5$ and the temperature $t = 0.7$.

The quantities of hysteresis characteristics are constructed such as hysteresis loop area (HLA), remanent magnetization (RM) and coercive field (CF). HLA which is the area covered by hysteresis loop in (m,h) plane. The RM is residual magnetization in the system after the magnetic field is removed. The CF is the intensity of the magnetic field which is needed to change the sign of the magnetization. The variation of this quantities with temperature are obtained for selected values of concentration values $c = 0.0$, $c = 0.5$ and $c = 1.0$ can be seen in Fig.3. Spin values of type A and type B atoms chosen as $S_A = 1.0$ and $S_B = 2.0$ values. HLA decreases with rising temperature and then disappears for $d = 0$ (can be seen in Fig. 3a). When the concentration value increases from 0 to 1, HLA decreases. This behavior holds for RM and CF (can be seen in Fig. 3b and 3c). When HLA, RM and CF are non-zero, we can say that the system exhibits single hysteresis character and the system is in ferromagnetic phase. As temperature rises, transition occurs from the single hysteresis to the paramagnetic hysteresis.

The effect of the crystal field parameter is obtained for the quantities of hysteresis characteristics HLA, RM and CF can seen in Fig. 4. Spin values of type A and type B atoms chosen as $S_A = 1.0$ and $S_B = 2.0$ values. When the crystal field parameter takes negative values, the system exhibits double or multiple hysteresis characteristics at low temperatures. The relations between HLA, RM and CF explain type of the hysteresis. When HLA is non-zero, RM and CF is zero, the system exhibits double hysteresis or hysteresis which has the number of even loops.

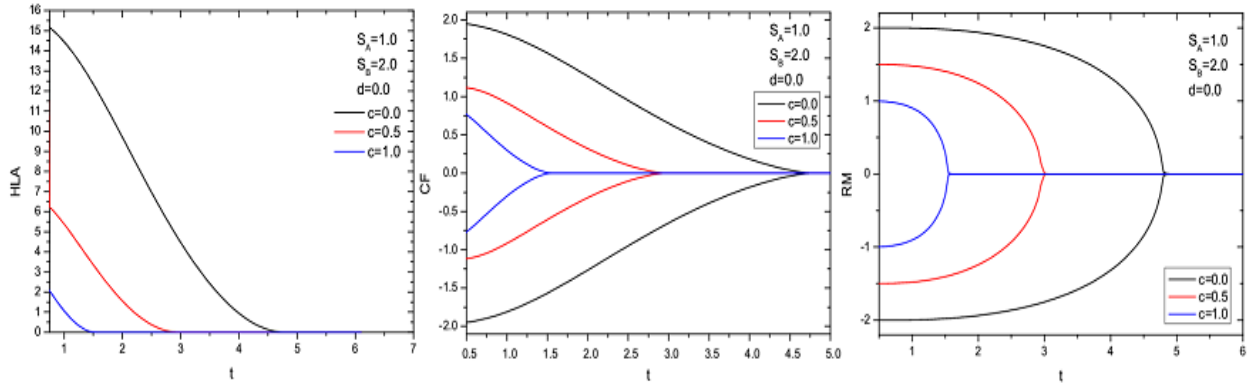


Figure 3. Variation of (a) hysteresis loop area (HLA), (b) coercive field (CF) and (c) remanent magnetization (RM) with the temperature for the crystal field parameter $d = 0$ and the selected values of the concentration $c = 0.0$, $c = 0.5$ and $c = 1.0$. The values of the spin models chosen as $S_A = 1.0$ and $S_B = 2.0$.

For the crystal field parameter $d = -2$, the system has double or multiple hysteresis which consists of even loops at low temperatures for the concentration value $c = 0.0$. The transition occurs from double or multiple hysteresis to paramagnetic hysteresis, as the temperature rises. Because of all of these quantities are zero, the system exhibits paramagnetic hysteresis for $c = 0.5$ and $c = 1.0$ for all temperatures (can be seen in Fig 4). So the system is in a disordered state for the integer-integer model at the negative $d = -2$ value of the crystal field for all concentrations.

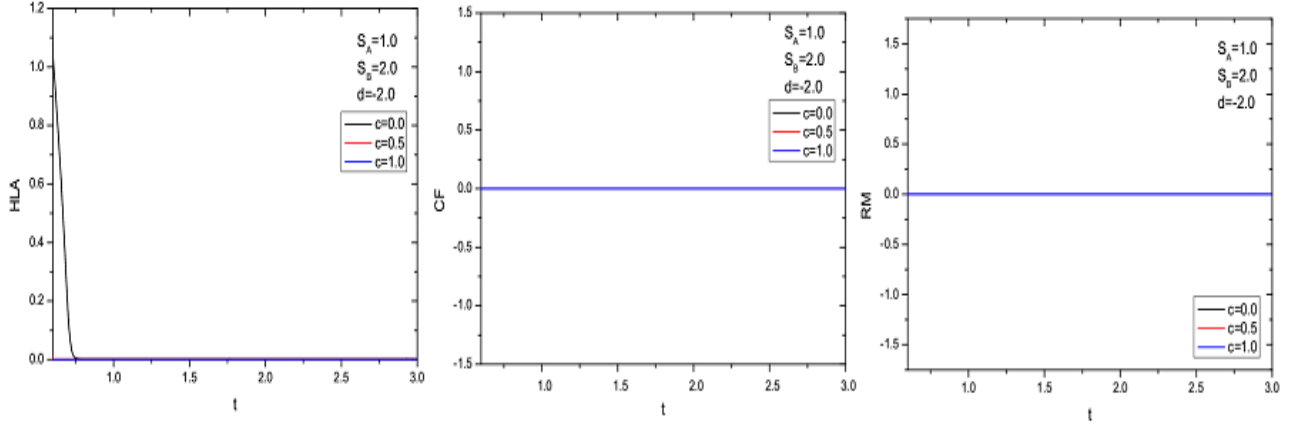


Figure 4. Variation of (a) hysteresis loop area (HLA), (b) coercive field (CF) and (c) remanent magnetization (RM) with the temperature for the crystal field parameter $d = -2$ and the selected values of the concentration $c = 0.0$, $c = 0.5$ and $c = 1.0$. The values of the spin models chosen as $S_A = 1.0$ and $S_B = 2.0$.

CONCLUSION

In conclusion, hysteresis characteristics of the generalized spin-S magnetic binary alloy system represented by $A_c B_{1-c}$ have been investigated within the framework of effective field theory. The system consists of type A atom and type B atom with the concentration c and $1 - c$ respectively. Both of the spin values of the system are chosen as generalized spin-S model. Results of the generalized spin-S binary alloy model are discussed as integer-integer and half-integer-half-integer models.

The effects of the concentration of the magnetic binary alloy model strongly depend on whether the spins of atoms are integer or half-integer. As consistently in literature, the system exhibits double hysteresis or multiple hysteresis which consists of even loops for the integer-integer spin model. Besides, the transition occurs between these hysteresis characters with the variation of concentration and the crystal field parameter. The system exhibits single hysteresis character with small half-integer spin values. The relation between HLA, RM, CF supports the type of the hysteresis characters.

REFERENCES

- [1] Wohlfarth EP. (Ed.) 1980. Handbook of Magnetic Materials, vol.1, North-Holland Publishing Company.
- [2] Ising E. 1925. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei 31(1): 253-258.
- [3] Blume M. 1966. Theory of the First Order Magnetic Phase Change in UO₂. Phys. Rev. 141: 517.
- [4] Capel, HW. 1966. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. Physica 32(5): 966-988.
- [5] Ghatak, SK. and D. Sherrington. 1977. Crystal field effects in a general S Ising spin glass. Journal of Physics C: Solid State Physics 10(16): 3149.
- [6] Tucker, JW., M. Saber, and L. Peliti. 1994. A new technique in the effective field theory of general spin S dilute Ising models Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 206(3-4): 497-507.
- [7] Costabile E. et al. 2014. The general-spin Blume–Capel model: A study of the multicritical behavior using effective-field theory. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 393:297-303.
- [8] Nagai, O., Miyashita, S., Horiguchi, T. 1993. Ground state of the antiferromagnetic Ising model of general spin S on a triangular lattice. Physical Review B 47(1): 202.
- [9] Fox, PF., and Guttman AJ. 1973. Low temperature critical behavior of the Ising model with spin $S > 1/2$. Journal of Physics C: Solid State Physics 6(5): 913.
- [10] Camp WJ. and Van Dyke JP. 1975. High-temperature series for the susceptibility of the spin-s Ising model: Analysis of confluent singularities. Physical Review B 11(7): 2579.
- [11] Boughrara, M., Kerouad M, and Saber M. 2007. Effect of a random longitudinal field and crystal field on a decorated ferrimagnetic Ising model. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 316(2): e287-e290.
- [12] Kaneyoshi T. 1995. Phase diagrams and tricritical behavior of a diluted mixed spin Ising model in a random field. Journal of Magnetism and Materials 151: 45-53.
- [13] Yousif, BY., and Bowers. RG. 1984. High-temperature series expansion studies of mixed spin-1/2-spin-S Ising models. Journal of Physics A: Mathematical and General 17(17): 3389.
- [14] Ekiz C. 2005. Mixed spin-1/2 and spin-S Ising ferrimagnets with a crystal field. Physica A. 353: 286-296.
- [15] Strečka, J. 2006. Exact results of a mixed spin-1/2 and spin-S Ising model on a bathroom tile (4–8) lattice: Effect of uniaxial single-ion anisotropy. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 360(2): 379-390.
- [16] Kaneyoshi, T. 1986. Critical temperatures and the compensation temperatures of disordered and amorphous ferrimagnetic Ising systems. Physical Review B 33(11): 7688.
- [17] Kaneyoshi, T. 1986. On the role of the fluctuation of exchange bonds in amorphous ferrimagnetic alloys. Journal of the Physical Society of Japan 55(5): 1430-1433.
- [18] Kaneyoshi, T. 1986. Role of single-ion anisotropy in amorphous ferrimagnetic alloys. Physical Review B 34(11): 7866.
- [19] Akıncı Ü., and Karakoyun G. 2017. Hysteresis behavior of the binary Ising model. Physica B: Condensed Matter 521:365-370.
- [20] Karakoyun. G. and Akıncı Ü. 2018. Binary alloy in random field: Phase diagrams. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 510: 407-414.
- [21] Plascak J.A. 1993. Multicritical points in the ferromagnetic binary Ising model. Physica A 198: 655-665.
- [22] Cambui DS., De Arruda AS. and Godoy M. 2012. Monte Carlo simulations of a disordered binary Ising model. International Journal of Modern Physics C 23(8): 1240015.
- [23] Kaneyoshi T. and Beyer H. 1980. Amorphization of Layered Ferro- and Antiferromagnetic Systems. Journal of Physical Society of Japan 49(4): 1306.
- [24] Kaneyoshi T. 1994. Paramagnetic susceptibility in a disordered binary alloy. Physica B 193: 255-264.

- [25] Rancourt DG., Dube M. and Heron P.R.L. 1993. General method for applying mean field theory to disordered magnetic alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 125: 39-48.
- [26] Kobeissi M.A. 1991. Mossbauer and AC-susceptibility investigations of the alloy series FeAl_{1-x}Mn_x. *J. Phys. Condens. Matter* 3: 4983-4998.
- [27] Ma Y., Du A. 2009. Monte Carlo simulation of magnetic and magnetocaloric properties of binary alloy Gd_{1-x}Cx. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 321: L65-L68.
- [28] Alsaad A., Bani-Yassein M., Qattan IA., Ahmad A., Malkawi S.R. 2010. Structural and magnetic properties of MnN and ScN binaries and their ScN:Mn diluted magnetic semiconductors and Mn_xSc_{1-x}N alloys. *Physica B* 405: 1408-1414.
- [29] Cowley R. A., Birgeneau R. J. and Shirane G. 1986. Phase Transition and metastable states in the presence of random fields. *Physica* 140A: 285-290.
- [30] Vilja I., Kokko K. 2014. Short-range correlations in binary alloys: Spin model approach to Ag_cAu_{1-c} and Ag_cPd_{1-c}. *Journal of Alloys and Compounds* 614: 408-414.
- [31] Sabarreto F.C., Fittipaldi IP, Zeks B. 1981. New effective field theory for the transverse Ising model. *Ferroelectrics* 39: 1103.
- [32] Kaneyoshi T., Tucker J., Jascur M. 2013. The general-spin Blume-Capel model: A study of the multicritical behavior using effective-field theory *Phys. A* 393: 297.

Tachyon Scalar Field Solutions in FRW Space-time

Elif Ece Demir^{1*}, Can Aktaş²

^{*1} *Graduate School of Natural and Applied Sciences
Çanakkale Onsekiz Mart University, Terzioğlu Campus
17020, Çanakkale, Turkey.*

*Department of Mathematics, Gazi University, Faculty of Science, Teknikokullar, 06500 Ankara,
Turkey*

² *Department of Mathematics, Çanakkale Onsekiz Mart University
Arts and Sciences Faculty, Terzioğlu Campus
17020, Çanakkale, Turkey.*

*Corresponding author e-mail:elifecedemir@gazi.edu.tr

Abstract

In this research, we have 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

INTRODUCTION

The idea that the universe was static disappeared by proving its expansion [1]-[2]. Then, it was suggested that the universe was expand by accelerated. However, Einstein thought that the universe was static. His calculations gave him the opposite of his opinion. For this reason, he added the cosmological term, he thought would constitute a driving power to his equation, in 1916. However, he removed this term from his equation. It was seen that this term, which Einstein added, should not be removed from the equation as a result of proving that the universe is expanding by accelerated. Since this term has problems such as cosmic coincidence and fine-tuning, another solution has been searched for as an alternative to this term. As a consequence of, scientists have suggested dark energy which existence is still unproven but there are traces of its existence through astrophysical observations [3]. Models such as k-essence, quintessence, tachyon are some of the models nominated for dark energy. Setare, Felegary and Darabi have studied tachyon field and they showed that the formation of the structure may be earlier in tachyon compared to other matter [4]. Salako and Jawad have obtained solutions for tachyon scalar field in $f(R, T)$ gravity [5]. Aygün and Aktaş have obtain exact solutions in Lyra theory for various spaces and matters [6]-[7].

Einstein field equations based on Lyra geometry which can be written as[8],

$$R_{ik} - \frac{1}{2}g_{ik}R + \frac{3}{2}(\Phi_i\Phi_k - \frac{1}{2}g_{ik}\Phi_j\Phi^j) = -\chi T_{ik} \quad (1)$$

here $\Phi_i = (0,0,0,\beta)$ is the displacement vector and gauge function β is gauge function. Also, β is a function of time.

MODIFIED FIELD EQUATIONS IN LYRA GEOMETRY

Friedman-Robertson- Walker (FRW) metric doesn't give the full distribution of matter in the early universe. But it is also the observed universe is homogeneous and isotropic, thus spacetime is usually defined by FRW cosmology.

$$ds^2 = A^2 dr^2 + A^2 r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\Phi^2) - dt^2 \quad (2)$$

here A is the function of t. The energy momentum-tensor for perfect fluid is given by

$$T_{ik} = (\rho + p)u_i u_k \pm p g_{ik} \quad (3)$$

where $u_i = (0,0,0,1)$ is 4-velocity of the co-moving observer, ρ is the energy density and p denote the cosmic pressure. From equations (1)- (3) modified field equations in Lyra geometry as follows

$$3H^2 + 2\dot{H} + \frac{3}{4}\beta^2 = -p \quad (4)$$

$$3H^2 - \frac{3}{4}\beta^2 = \rho \quad (6)$$

When we look at the field equations, we see that there are two equations with four unknowns. From this reason, we need additional equations. Therefore, we used the deceleration parameter and conservation equation to solve the equations. The deceleration parameter is defined by

$$q = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{H} \right) - 1$$

The sign of deceleration parameter q represents the cosmological model inflation. The positive sign corresponds to standard decelerating models whereas the negative sign indicates inflation and when $q = 0$ is expansion with a constant velocity. We can take the deceleration parameter as follows,

$$q = \alpha H - 1 \quad (7)$$

here α is a constant. If we solve eq. (7), we get Hubble parameter as follows,

$$H = \frac{1}{\sqrt{2\alpha t + c_1}} \quad (8)$$

here c_1 is an integral constant.

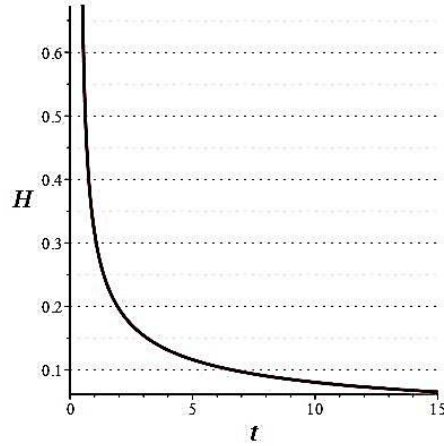


Figure 1 Variation of Hubble parameter against with time.

The conservation of the left side of equation (1) leads to the following equation.

$$\left(R_i^j - \frac{1}{2}Rg_i^j\right)_{;j} + \left(\frac{3}{2}\Phi_i\Phi^j\right)_{;j} - \frac{3}{4}\left(\Phi_k\Phi^k g_i^j\right)_{;j} = 0 \quad (9)$$

from equation (9), we obtain,

$$3H + \frac{\dot{\beta}}{\beta} = 0 \quad (10)$$

If we use equations (9) and (10), we obtain β^2

$$\beta^2 = \frac{c_2^2}{e^{\frac{6\sqrt{2}at+c_1}{\alpha}}} \quad (11)$$

here c_2 is an arbitrary constant.

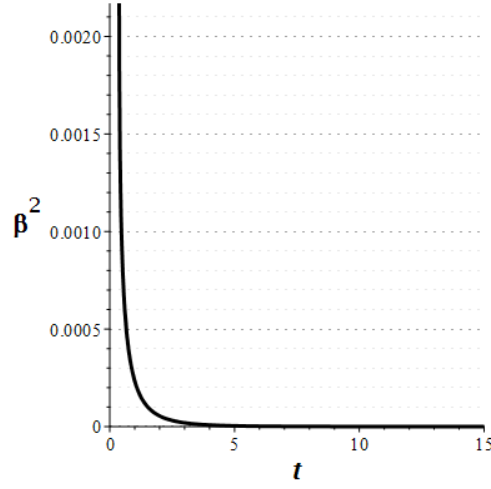


Figure 2 Variation of gauge function against time

If we use equations (4), (5), (8) and (11), we find pressure and energy density as follows,

$$p = -\frac{3T^3 c_2^2 e^{-\frac{6T}{\alpha}} + 8\alpha - 6T}{4T^3} \quad (12)$$

$$\rho = \frac{-12 - 3T c_2^2 e^{-\frac{6T}{\alpha}}}{4T} \quad (13)$$

where T is equal to $(\sqrt{2\alpha t + c_1})$. If we rate equation (12) to equation (13), we obtain equation state parameter as follows,

$$w = \frac{p}{\rho} = \frac{3T^3 c_2^2 e^{-\frac{6T}{\alpha}} - 12T + 8\alpha}{3T^3 c_2^2 e^{-\frac{6T}{\alpha}} + 12T} \quad (14)$$

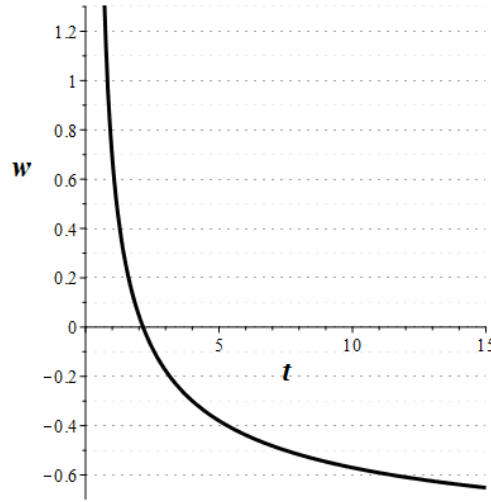


Figure 3 Variation of equation of state parameter against with time

RESULTS OF TACHYON SCALAR FIELD

In this study, one of the dark matter candidates tachyon matter which is thought to cause the expansion of the universe and constitutes approximately 73% of the universe is examined within the framework of Lyra theory. Because this matter is one of the dark energy candidates like that k-essence [9], quintessence [9] etc. The emergence of the tachyon [10] scalar field model from string theory is a reason for being a dark energy candidate [11]. For tachyon, pressure and energy density are as follows;

$$p = -V(\phi)\sqrt{1 - \dot{\phi}^2} \quad (15)$$

$$\rho = \frac{V(\phi)}{\sqrt{1 - \dot{\phi}^2}} \quad (16)$$

From equations (12), (13), (15) and (16), we obtain kinetic energy and scalar potential of tachyon field,

$$\dot{\phi}^2 = \frac{8\alpha + 6c_2^2 T^3 e^{-\frac{6T}{\alpha}}}{12T + 3c_2^2 T^3 e^{-\frac{6T}{\alpha}}} \quad (17)$$

$$V(t) = \frac{\sqrt{\left(24T + 16\alpha - 6c_2^2 T^3 e^{-\frac{6T}{\alpha}}\right) \left(6 + 3c_2^2 T^2 e^{-\frac{6T}{\alpha}}\right)}}{4T^5} \quad (18)$$

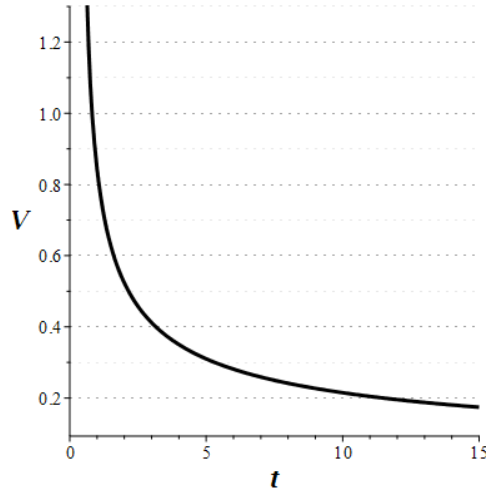


Figure 4 Variation of scalar potential against with time

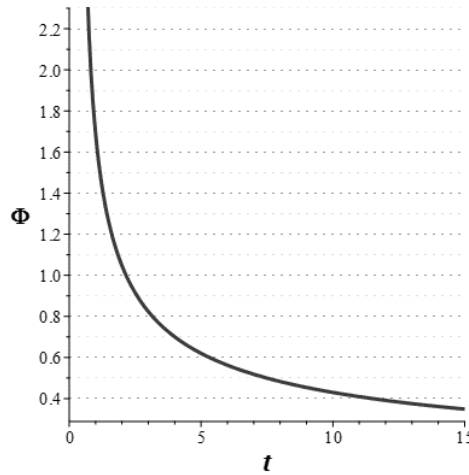


Figure 5 Variation of scalar field against with time

CONCLUSION

It is known that FRW metric which best describes the observed universe today. One of the reasons for the acceleration and expansion of the universe, although its existence is still unproven, is dark energy. In this study, we have obtained solutions for the tachyon scalar field in the Lyra geometry in FRW space-time. To obtain exact solution of the filed equations, we have used the deceleration parameter and conservation equations.

In our results, the point $t = -\frac{c_1}{2\alpha}$ is the singular point. As known, singular points are gravitation theories do not apply. From this reason, it must be $t \neq -\frac{c_1}{2\alpha}$ for our results to be continuous. When $t \rightarrow \infty$, Hubble parameter, pressure and energy density approaches zero. We also know that, when β equals 0, Lyra's theory converts to General Relativity theory. Therefore, if we take c_2 equal to 0, our theory will be reduced into General Relativity theory because the displacement vector $\beta = 0$. For the tachyon scalar field, both the scalar field and the scalar potential decrease over time.

The equation of state parameter for tachyon is known to be in the range of -1 to 0. In our model, this situation is provided for a particular range. In this case, our solutions are consistent with observations.

REFERENCES

- [1] S. Perlmutter, G. Aldering, B. J. Boyle, P. G. Castro, W. J. Couch, S. Deustua, S. Fabbro, R. S. Ellis, A. V. Filippenko, A. Fruchter, G. Goldhaber, A. Goobar, D. E. Groom, I. M. Hook, M. Irwin, A. G. Kim, M. Y. Kim, R. A. Knop, J. C. Lee, T. Matheson, R. G. McMahon, H. J. M. Newberg, C. Lidman, P. Nugent, N. J. Nunes, R. Pain, N. Panagia, C. R. Pennypacker, R. Quimby, P. Ruiz-Lapuente, B. Schaefer, N. Walton and Supernova Cosmology Project, 1988, Measurements of Omega and Lambda from 42 High-Redshift Supernovae, in 19th Texas Symposium on Relativistic Astrophysics and Cosmology,
- [2] P. M. Garnavich, R. P. Kirshner, P. Challis, J. Tonry, R. L. Gilliland, R. C. Smith, A. Clocchiatti, A. Diercks, A. V. Filippenko, M. Hamuy, C. J. Hogan, B. Leibundgut, M. M. Phillips, D. Reiss, A. G. Riess, B. P. Schmidt, R. A. Schommer, J. Spyromilio, C. Stubbs, N. B. Suntze_ and L. Wells, 1998, Observational Evidence from Supernovae for an Accelerating Universe and a Cosmological Constant, *The Astronomical Journal*, 116: 1009-1038.
- [3] A. G. Riess, A. V. Filippenko, P. Challis, A. Clocchiatti, A. Diercks, P. M. Garnavich, R. L. Gilliland, C. J. Hogan, S. Jha, R. P. Kirshner, B. Leibundgut, M. M. Phillips, D. Reiss, B. P. Schmidt, R. A. Schommer, R. C. Smith, J. Spyromilio, C. Stubbs, N. B. Suntze_ and J. Tonry, 1998, Observational Evidence from Supernovae for an Accelerating Universe and a Cosmological Constant, *The Astronomical Journal*, 116: 1009-1038
- [4] M. R. Setare, F. Felegary and F. Darabi, 2017, Evolution of spherical over-densities in tachyon scalar field model, *Physics Letters B*, 772: 70-77.
- [5] Salako Ines G., Jawad Abdul and Moradpour Hooman, 2018, Cosmological implications of scalar field dark energy models in $f(T, \mathcal{T})$ gravity, *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, 15: 1850063-7516
- [6] Aygün Sezgin, Caglar Halife, Taşer Dogukan and Aktas Can, 2015, Quark and strange quark matter solutions for higher dimensional FRW universe in Lyra geometry, *European Physical Journal Plus*, 130:12- 7.
- [7] Aygün Sezgin, Aktas Can and Yılmaz İhsan, 2012, Non-existence of a massive scalar field for the Marder universe in Lyra and Riemannian geometries, *Journal of Geometry and Physics*, 62: 100-106.
- [8] G. Lyra, 1951, *Mathematische Zeitschrift* 54-52.
- [9] E. J. Copeland, M. Sami and S. Tsujikawa, 2006, Dynamics of Dark Energy, *International Journal of Modern Physics D*, 15:1753-1935
- [10] Copeland Edmund J, 2007, Dynamics of Dark Energy, *PARTICLES, STRINGS, AND COSMOLOGY: 13th International Symposium on Particles, Strings, and Cosmology-PASCOS 2007*. AIP Conference Proceedings, 957: 21-29
- [11] G. W. Gibbons, 2002, Cosmological Evolution of the Rolling Tachyon, *Physics Letter B*, 537:1-4.

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 of 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, bandgap energies, Fermi levels, dipole moments and absorption spectra were investigated for these structures. The obtained results show that the nano-Saturn structure has more desirable properties than anthracene, anthracene ring structure and C_{60} . For instance, the bandgap 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. Besides, the results are compared with experimental data in the literature.

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

1. INTRODUCTION

Recently, organic semiconductors (OSs) are finding use in many applications, especially, electronic and photonic applications due to their fascinating photophysical properties [1, 2]. Among them, the chemistry and biology of organic molecules have attracted increasing interest over the last 50 years because it possesses desirable electronic and charge transport properties, as well as a large π -conjugated system. This enables various functional groups to be easily introduced into the structurally rigid carbazolyl ring. For example, nano-Saturns with a rigid circular shape exhibit properties useful for the design of supramolecular assemblies [3–5] because a ring moiety gives rise to an attractive interaction in its cavity where there is a spherical molecule like fullerene (C_{60}) owing to their spherical shape and the presence of π -electrons enhancing molecular association. As a ring moiety for a C_{60} planet, π -conjugated macrocycles have been occasionally utilized because of the large attractive interactions between systems [6–8].

The electronic structure of materials is significantly tunable as a function of temperature and an atom substitution [9, 11]. In these regards, in this study, the changes in the bandgap and photophysical properties of C_{60} , anthracene, disk-type anthracene ring and nano-Saturn have been investigated using the self-consistent charge density-functional based tight-binding (SCC-DFTB) which is based on the density functional theory (DFT). Firstly, some benchmarks were carried out on the structure mentioned above using Slater-Koster parameters including DFTB3 and long-range corrected (LC) parameters. HOMO, LUMO and bandgap energies, dipole moments, and Fermi levels were investigated. Absorption spectral analysis has also been obtained by time-dependent (TD)-DFTB calculations.

2. MATERIAL AND METHODS

The electronic structure and optical properties of C_{60} , anthracene, disk-type anthracene ring and nano-Saturn have been examined using DFTB implemented in DFTB+ code [12] with the 3ob/3ob-3-1 [13, 14] and ob2-1-1/base sets [15] of Slater Koster parameters. Firstly, some benchmarks were carried out using Slater-Koster parameters including DFTB3 and long-range corrected (LC) parameters. HOMO, LUMO and bandgap energies, dipole moments, and Fermi levels were investigated. Absorption spectra have also been obtained by TD-DFTB calculations-based on Casida's approach [16]. The detailed descriptions of theoretical aspects and performance of the DFTB approach, as well as advances in theoretical development and application, have been studied in Refs [17-20].

3. RESULTS AND DISCUSSION

The picture of the optimized geometry of the nano-Saturn is indicated in Fig. 1.

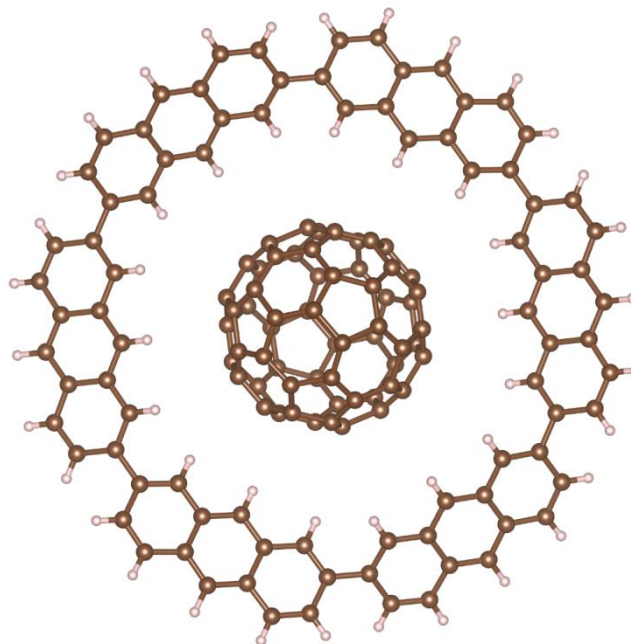


Figure 1. The optimized geometry of nano-Saturn organic molecule. (Blue is Nitrogen, purple is Hydrogen and brown is Carbon).

To get detailed information on electronic states in C_{60} , anthracene, disk-type anthracene ring and nano-Saturn, firstly, the results of the electronic total DOS of C_{60} , ring and nano-Saturn (in gas phase and solvent) based on the DFTB method as seen in Fig. 2. These fluctuations progressively increase from gas phase to solvent environment also there is a shift in energy values. The density of localized states has a sharply increasing tendency to occur in the region of between -10 and -8 eV in gas phase, but it is between -4 to 0 for solvent environment. The DOS analysis also indicates that C_{60} , ring and nano-Saturn have the energy gap, so, all the structures show semiconductor character. There is an increase in HOMO and LUMO energy levels form DFTB to LC-DFTB method. We also compared the DOS between anthracene and its ring (see Fig. 3). From Fig. 3, the ring structure has the HOMO and LUMO energy values of -5.25 eV and -3.03 eV, respectively. The HOMO of anthracene decreases, while there is an increase in the LUMO energy level. Herein, the ring structure has more desirable electronic properties than anthracene.

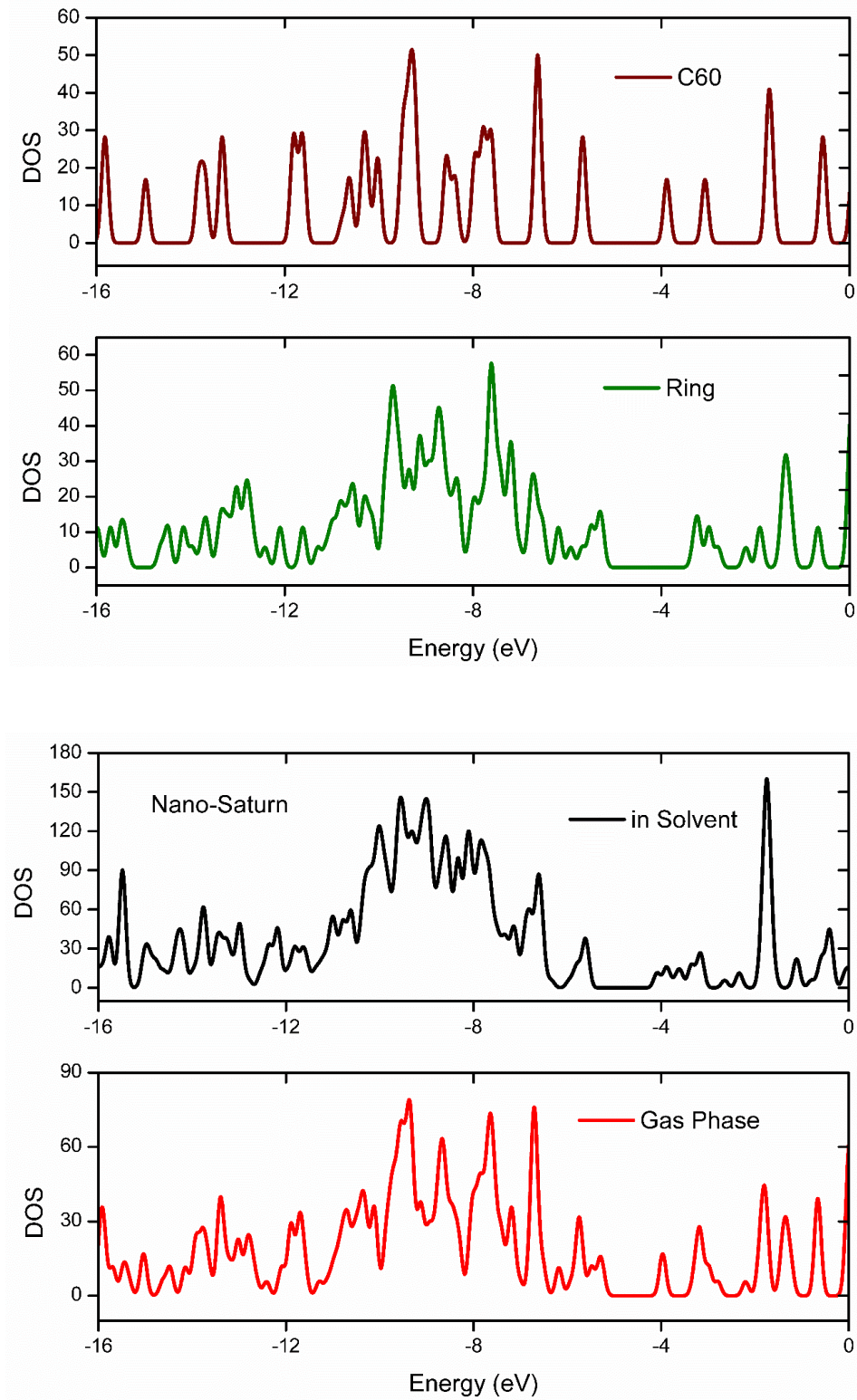


Figure 2. The total and partial density of states (DOS) of C₆₀, ring and nano-Saturn based on (a) LC-DFTB and (b) DFTB methods.

The obtained results were also compared to experimental and DFT data. The HOMO energy level of nano-Saturn from SCC-DFTB and SCC-LC-DFTB calculations was found -5.24 and -4.77 eV (see Fig. 4) respectively. The band energy is 1.28 eV wide i.e. smaller 0.46 eV from the LC-DFTB (1.73 eV). The HOMO-LUMO energy gap of C₆₀ from SCC-DFTB and SCC-LC-DFTB calculations was found 1.79 and 2.22 eV (see Fig. 5) respectively, which are compatible with experimental energy gap (1.86 eV) [21]. The band energy of anthracene from the DFTB is 2.46 wide i.e. smaller 0.11 eV from DFT result (2.55 eV) and smaller 0.49 eV from the LC-DFTB. The obtained results were also tabulated in Table 1.

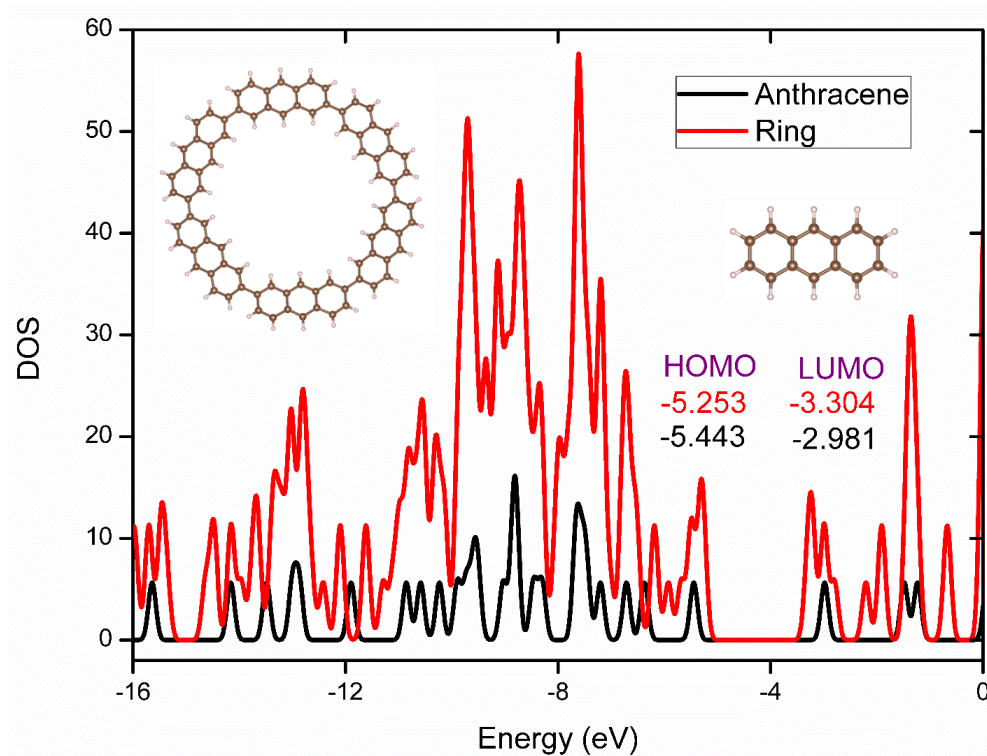
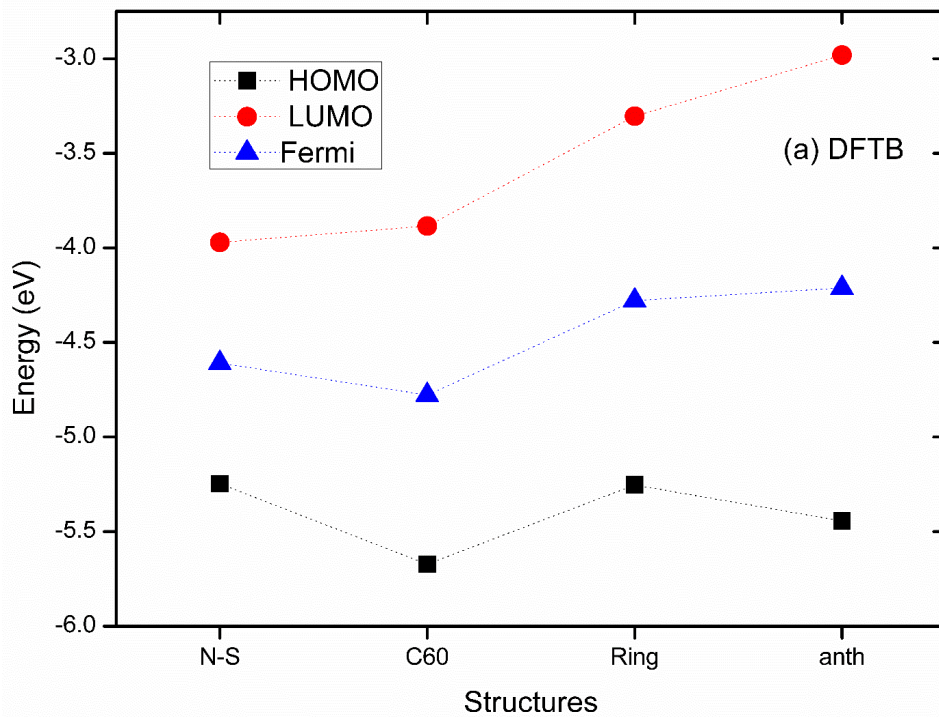


Figure 3. The comparison of total density of states (DOS) of anthracene and its ring.

Table 1. The electronic structure of C_{60} , anthracene, ring and nano-Saturn based on the DFTB.

	Nano- Saturn	C_{60}	Ring	Anthra- cene
HOMO	-5.247	-5.672	-5.253	-5.443
LUMO	-3.971	-3.884	-3.304	-2.981
Fermi	-4.609	-4.777	-4.278	-4.212
E_g	1.276	1.788	1.949	2.462



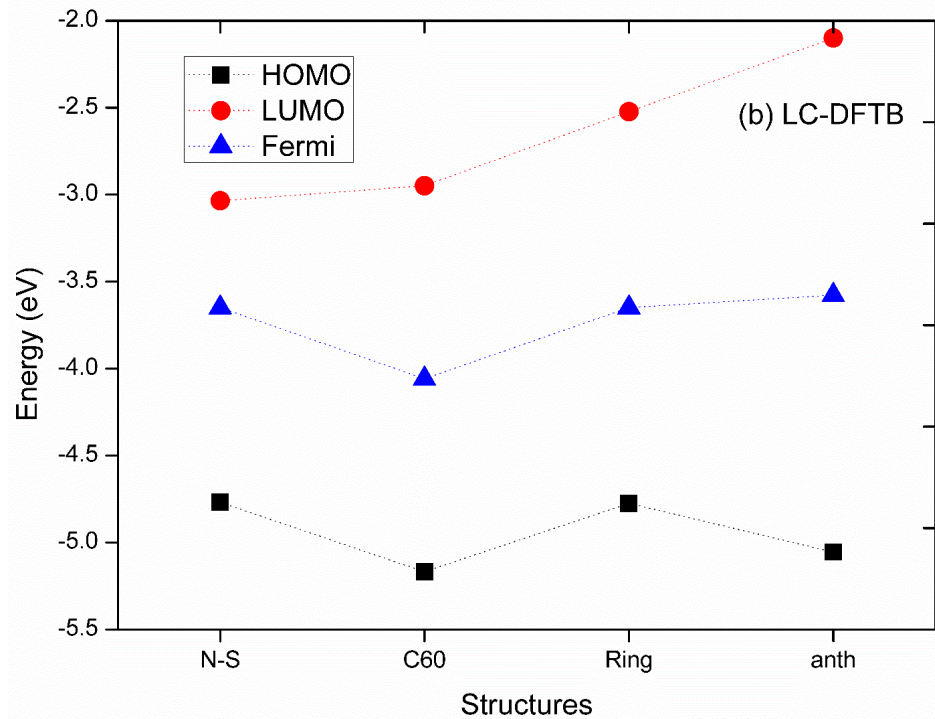


Figure 4. The HOMO, LUMO and Fermi energies of nano-Saturn, C60, ring and anthracene from (a) SCC-DFTB and (b) SCC-LC-DFTB.

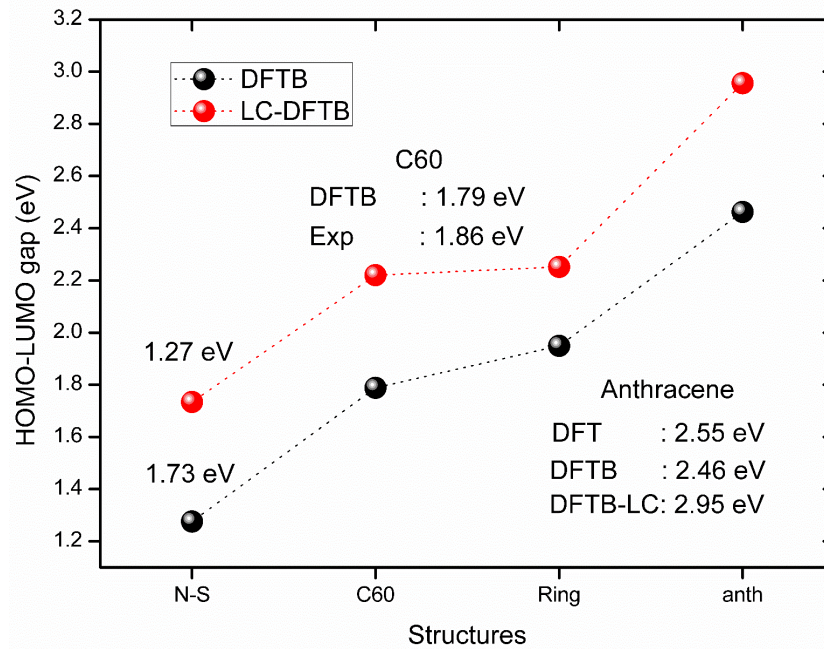


Figure 5. The HOMO-LUMO energy gap nano-Saturn, C60, ring and anthracene from (a) SCC-DFTB and (b) SCC-LC-DFTB methods.

The dipole moment (D_M) results from differences in electronegativity. The bigger D_M means stronger intermolecular interaction. The component of D_M along the y -axis (0.00002500 Debye) gives rise to the largest positive charge separation in the y -direction. D_M decreases along x -, y - and z -directions when it comes to the ring structure. These values are comparable with the bandgap because the lowest gap energy of the structures obtained from SCC-DFTB means that electrons easily transfer from HOMO to LUMO. In this regard, there is a highly relevant correlation between D_M and the energy gaps of nano-Saturn, C₆₀, ring and anthracene. Thus, it can be concluded that the large D_M has a small energy gap.

Absorbance spectra of nano-Saturn, C₆₀, ring and anthracene were depicted in Fig. 6. The nano-Saturn exhibits the maximum peaks 2.13 eV (582 nm), which is the lowest absorbance value in the visible region. The absorbance spectra of C₆₀, ring and anthracene are 2.66 eV (465 nm) which is well-matched with experimental data 2.78 eV (445 nm) [22], 2.86 eV (433 nm) and 4.97 eV (249 nm) which is the near ultraviolet region, respectively. When nano-Saturn is compared with the other structures, it has more desirable absorbance properties than that of the others.

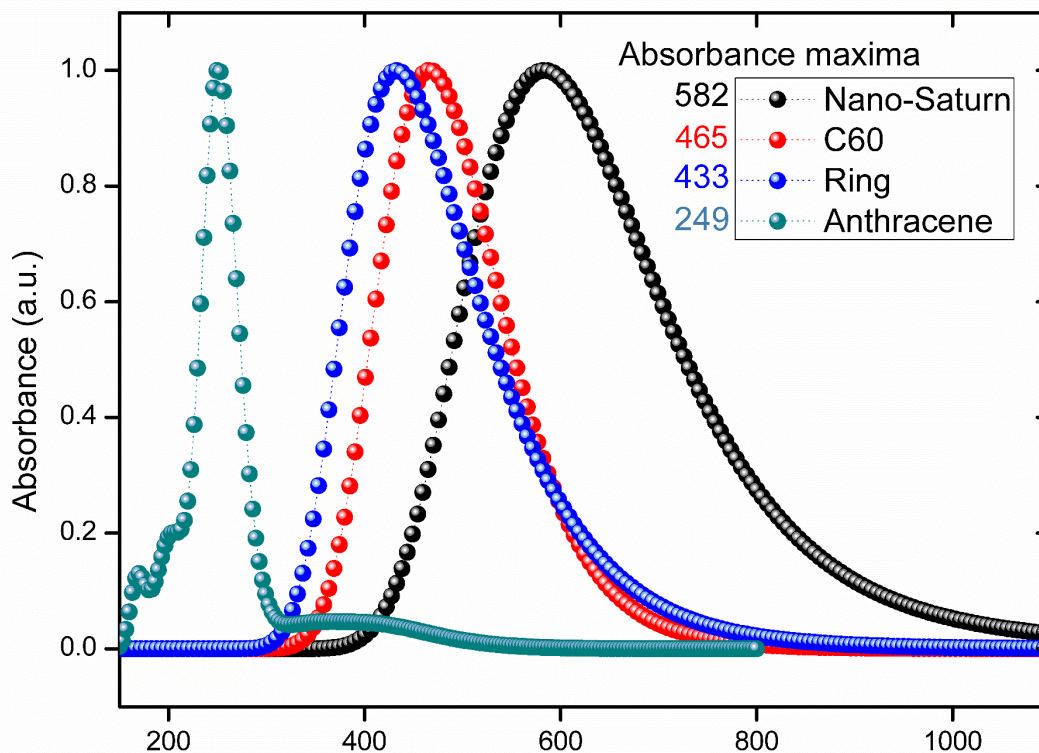


Figure 6. Absorbance spectra of nano-Saturn, C₆₀, ring and anthracene from (a) SCC-DFTB and (b) SCC-LC-DFTB methods.

4. CONCLUSION

The electronic and photophysical properties of nano-Saturn, C₆₀, ring and anthracene have been investigated by DFT, SCC-DFTB, and SCC-LC-DFTB methods. The HOMO energy level of nano-Saturn was found -5.24 and -4.77 eV, from SCC-DFTB and SCC-LC-DFTB calculations respectively. The band energy is 1.28 eV wide i.e. smaller 0.46 eV from the LC-DFTB (1.73 eV). The band energy is 1.28 eV wide i.e. smaller 0.46 eV from the LC-DFTB (1.73 eV). The HOMO-LUMO energy gap of C₆₀ from SCC-DFTB and SCC-LC-DFTB calculations was found 1.79 and 2.22 eV, respectively, which are compatible with experimental energy gap (1.86 eV). The component of D_M along the y-axis (0.00002500 Debye) for nano-Saturn gives rise to the largest positive charge separation in the y-direction. The nano-Saturn exhibits the maximum peaks 2.13 eV (582 nm), which is the lowest absorbance value in the visible region.

ACKNOWLEDGMENTS

The numerical calculations were also partially performed at TUBITAK ULAKBIM, High Performance and Grid Computing Centre (TRUBA resources), Turkey.

REFERENCES

- [1] Kurban M., & Gündüz, B. (2018). Study of structural, optical properties and electronic structure of PTCDI-C5 organic nanostructure. *Chem. Phys. Lett.* 691, 14-21.
- [2] Kurban M., & Gündüz, B. (2018). Electronic structure, optical and structural properties of organic 5,5'-Dibromo-2,2'-bithiophene. *Optik* 165, 370-379.
- [3] Rehman, H. U., McKee, N. A., McKee, & M. L. (2016). Saturn systems. *J. Comput. Chem.* 37, 194-209.
- [4] Kigure, S., Omachi, H., Shinohara, H., & Okada, S. (2015). Nano-Saturn: Energetics of the Inclusion Process of C₆₀ into Cyclohexabiphenylene. *J. Phys. Chem. C* 119(116), 8931-8936.
- [5] Zhao, Y., & Truhlar, D. G. (2007). Size-Selective Supramolecular Chemistry in a Hydrocarbon Nanoring. *J. Am. Chem. Soc.* 129(127), 8440-8442.
- [6] Kawase, T., Tanaka, K., Seirai, Y., Shiono, N., & Oda, M. (2003). Complexation of carbon nanorings with fullerenes: supramolecular dynamics and structural tuning for a fullerene sensor. *Angew. Chem. Int. Ed.* 42(45), 5597-5600.
- [7] Iwamoto, T., Watanabe, Y., Sadahiro, T., Haino, T., & Yamago, S. (2011). Size-selective encapsulation of C₆₀ by [10]cycloparaphenylene: formation of the shortest fullerene-peapod. *Angew. Chem. Int. Ed.* 50(36), 8342-8344.
- [8] Segawa, Y., Yagi, A., Matsui, K., & Itami, K. (2016). Design and Synthesis of Carbon Nanotube Segments. *Angew. Chem. Int. Ed.* 55(17), 5136-5158.

- [9] Kurban, M. (2018). Electronic structure, optical and structural properties of Si, Ni, B and N-doped a carbon nanotube: DFT study. *Optik* 172, 295-301.
- [10] Kurban, M., Malcıoğlu, O. B., & Erkoç, Ş. (2016). Structural and thermal properties of Cd-Zn-Te ternary NPs: Molecular-dynamics simulations. *Chem. Phys.* 464, 40-45.
- [11] Kurban, M. (2018). Size and composition dependent structure of ternary Cd-Te-Se nanoparticles , *Turk. J. Phys.* 42, 443-454.
- [12] Aradi, B., Hourahine, B., & Frauenheim, T. (2007). DFTB+, a Sparse Matrix-Based Implementation of the DFTB Method. *J. Phys. Chem. A* 111, 5678-5684.
- [13] Gaus, M., Goez, A., & Elstner, M., (2013). Parametrization and Benchmark of DFTB3 for Organic Molecules. *J. Chem. Theory Comput.* 9, 338-354.
- [14] Kubillus, M., Kubař, T., Gaus, M., Řezáč, J., & Elstner, M. (2015). Parameterization of the DFTB3 Method for Br, Ca, Cl, F, I, K, and Na in Organic and Biological Systems. *J. Chem. Theory Comput.* 11, 332-342.
- [15] Vuong, V. Q., Akkarapattikal, K. J., Kubillus, M., Kranz, J. J., Mast, T., Niehaus, T. A., Irle S., & Elstner, M. (2018). Parametrization and Benchmark of Long-Range Corrected DFTB2 for Organic Molecules. *J. Chem. Theory Comput.* 14(1), 115-125.
- [16] Andersen, H. C. (1980). Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *J. Chem. Phys.* 72(4), 2384-2393.
- [17] Islam S. M., & Roy, P-N. (2012). Performance of the SCC-DFTB Model for Description of Five-Membered Ring Carbohydrate Conformations: Comparison to Force Fields, High-Level Electronic Structure Methods, and Experiment. *J. Chem. Theory Comput.* 8(7), 2412-2423.
- [18] Addicoat, M. A., Stefanovic, R., Webber, G. B., Atkin, R., & Page A. J. (2014). Assessment of the Density Functional Tight Binding Method for Protic Ionic Liquids. *J. Chem. Theory Comput.* 10(10), 4633-4643.
- [19] Frauenheim, Th., Seifert, G., Elstner, M., Hajnal, Z., Jungnickel, G., Porezag, D., Suhai, S., & Scholz, R. (2000). A Self-Consistent Charge Density-Functional Based Tight-Binding Method for Predictive Materials Simulations in Physics, Chemistry and Biology. *Phys. Status Solidi B* 217, 41-62.
- [20] Kurban, M. (2019). Tunable electronic structure and structural transitions of GaAs clusters at high pressure and temperature. *J. Alloys Compd.* 791, 1159-1166.
- [21] Rabenau, T., Simon, A., Kremer, R. K., & Sohmen, E. (1993). The energy gaps of fullerene C₆₀ and C₇₀ determined from the temperature dependent microwave conductivity. *Z. Phys. B* 90, 69-72.
- [22] Inani, H., Singhal, R., Sharma, P., Vishnoi, R, Aggarwal, S., & Sharma, G. D. (2017). Effect of low fluence radiation on nanocomposite thin films of Cu nanoparticles embedded in fullerene C₆₀. *Vacuum* 142, 5-12.