

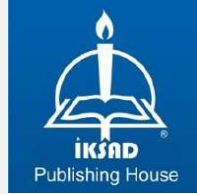
MAS
INTERNATIONAL EUROPEAN CONGRESS
ON MATHEMATICS, ENGINEERING, NATURAL AND
MEDICAL SCIENCES-IV
March 21-23, 2019
ANTALYA, TURKEY

PROCEEDINGS
BOOK

Editors
Dr. YILDIRIM TOSUN
Tolga ÖZBİLEN

2019
ISBN 978-605-7875-33-4

PROCEEDINGS BOOK



MAS EUROPEAN INTERNATIONAL CONGRESS ON MATHEMATICS-ENGINEERING- NATURAL & MEDICAL SCIENCES-IV

March 21-23, 2019

Antalya-Turkey

Edited by
Dr. Yıldırım İ. TOSUN
Tolga ÖZBİLEN

Institute Of Economic Development And Social Researches Publications®

(The Licence Number of Publicator: 2014/31220)

TURKEY

TR: +90 342 606 06 75 USA: +1 631 685 0 853

E mail: info@iksad.com

www.iksad.org.tr

All rights of this book belong to IKSAD Publishing House
Authors are responsible both ethically and juridically

Iksad Publications - 2019©

Issued: 28.03.2019

ISBN -978-605-7875-33-4



CONGRESS ID

CONGRESS TITLE

MAS EUROPEAN INTERNATIONAL CONGRESS
ON MATHEMATICS-ENGINEERING-NATURAL&MEDICAL SCIENCES-IV

DATE AND PLACE

March 21-23, 2019 – Antalya

ORGANIZATION

İKSAD- Institute of Economic Development and Social Researches

HEAD OF CONGRESS

Prof. Dr. Osman ERKMEN

ORGANIZING COMMITTEE

Dr. Osman ERKMEN - Gaziantep University
Dr. Kenes JUSIPOV - Kazak Vehicle Academy
Dr. Elvira NURLANOVA - Tver Medical Academy

GENERAL COORDINATOR

Tolga ÖZBİLEN

INTERNATIONAL SPEAKERS/PARTICIPANTS

Terane HESHIMOVA - Azerbaijan
Tursunjan KERIMOVA- *Tajikistan*
Omurbek NAZARAKUNOV - *Kyrgyzistan*
Nurida NASIYBULLINA – *Russia*
M.E. SUMAGULOV- *Kazakistan*

LANGUAGES

Turkish, English, Russian

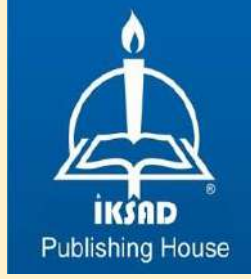
SCIENTIFIC ADVISORY COMMITTEE

- Dr. Abdikalık KUNIMJAN - Kazakh State Women's Pedagogy University**
Dr. Almaz AHMEDOV - Bakü Satate University
Dr. Akmaral S. SYRGAKBAYEVA - Al – Farabi Kazakh National University
Dr. Anatoliy LOGINOV - Ukraine Shevchenko Lugan National University
Dr. A.S. KIDIRSAEV Makhambet U. - West Kazakhstan State University
Dr. Ayslu B. SARSEKENOVA - Orleu National Development Institute
Dr. Bahit KULBAEVA - S.Baybeshev Aktobe University
Dr. Bakit OSPANOVA - H.Ahmet Yasawi Kazakh Turk University
Dr. Bazarhan IMANGALIEVA - K.Zhubanov Aktobe State University
Dr. Bekzhan B. MEYRBAEV - Al – Farabi Kazakh National University
Dr. Bigamila TORSIKBAEVA - Astana Medical University
Dr. B.K.ZAYADAN - Al – Farabi Kazakh National University
Dr. Botagul TURGUNBAEVA - Kazakh State Women's Pedagogy University
Dr. Cholpon TOKTOSUNOVA - Rasulbekov Kyrgyz Economy University
Dr. Deniz ATALAYER - Sabancı University
Dr. D.K.TÖLEGENOVA - Makhambet U. West Kazakhstan University
Dr. Dinarakhan TURSUNALIVA - Rasulbekov Kyrgyz Economy University
Dr. Feda REHIMOV - Bakü State University
Dr. George RUDIC - Montreal Pedagogy Institute
Dr. Gulmira ABDIRASULOVA - Kazakh State Women's Pedagogy University
Dr. Gulsat SUGAYEVA - Dosmukhamedov Atyrau Devlet Üniversitesi
Dr. G.I. ERNAZAROVA - Al – Farabi Kazak National University
Dr. Hilale CAFEROVA - AMEA Institute of Management Systems
Dr. MEIXIA Huou - Capital Normal University
Dr. Kalemkas KALIBAEVA - Kazakh State Women's Pedagogy University
Dr. Karligash BAYTANASOVA - Al – Farabi Kazakh National University
Dr. K.A.TLEUBERGENOVA - Kazakh State Women's Pedagogy University
Dr. Kenjehan MEDEUBAEVA - Kazakh State Women's Pedagogy University
Dr. Kenes JUSUPOV - M. Tinisbaev Kazakh Communication Academy Dr. Keles Nurmasuli JAYLIBAY - Kazakh State Women's Pedagogy University
Dr. Kulas MAMIROVA - Kazakh State Women's Pedagogy University

Dr. Machabbat OSPANBAEVA - Taraz State Pedagogy University
Dr. Maha Hamdan ALANAZI - Riyad King Abdulaziz Technology University
Dr. Maria LEONTIK - Macedonia Ishtib Gotse Delchev University
Dr. Mavlyanov ABDIGAPPAR - Kyrgyz Elaralık University
DR. MELAHAT GOKTAŞ - VAN YUZUNCU YIL UNIVERSITY
Dr. Maira ESIMBOLOVA - Kazakhstan Narkhoz University
Dr. Maira MURZAHMEDOVA - Al – Farabi Kazakh National University
Dr. Khan Nadezhda - E.A. Buketov Karaganda State University
Dr. Nazim IBRAHIM - Skopje Cyril and Methodius University
Dr. N.N. KERMANOVA - Al – Farabi Kazakh National University
Dr. Sudabe SALIIHOVA - Azerbaijanan State University
Dr. Rovshan ALIYEV - Bakü State University
DR. OSMAN ERKMEN - GAZIANTEP UNIVERSITY

ANTALYA
MAS 4. ULUSLARARASI MATEMATİK-MÜHENDİSLİK-FEN VE SAĞLIK
BİLİMLERİ KONGRESİ
21-23 Mart 2019

ANTALYA
KONGRE YERİ:



- Kayıt masası kongre süresince 08:30 – 17:00 saatleri arasında hizmet verecektir.
- Kaydınızı oturum saatinizden en geç yarım saat öncesine kadar yaptırabilirsiniz
- Sunum sıralaması, ara verilmesi ve oturuma ilişkin tüm hususlarda oturum başkanları tam yetkilidir.
- Katılım belgeleri oturum sonunda oturum başkanı tarafından verilecektir
- Kongre programında yer ve saat değişikliği **gibi talepler dikkate alınmayacaktır**
- Katılım belgelerindeki yazar isimleri ve bildiri isimleri programdaki gibi basılacaktır

21 MART- 13:00-15:30

AÇILIŞ VE TÜRK DÜNYASI NEVRUZ KUTLAMASI



21.03.2019- - PERŞEMBE**SAAT 10:00 - 12:00**

Salon A, OTURUM -1	Oturum başkanı: Dr. Lect. Yıldırım İsmail TOSUN
Dr. Yıldırım İsmail TOSUN	IMAGE ANALYSIS OF CRACKS ON MARBLE FACE - REGRESSED MODEL
Dr. Yıldırım İsmail TOSUN	IMAGE ANALYSIS OF SIZE DISTRIBUTION ON COMPRESSED AGGREGATE FACE - REGRESSED MODEL
Serkan AKKOYUN Tuncay BAYRAM	THEORETICAL CALCULATIONS FOR ENERGY LEVELS IN NE ISOTOPES
Prof. Dr. Oğuz ARSLAN Dr. Öğrenci Onur KAYAPINAR	ISITMA SİSTEMLERİNDE İŞIMA KALKANI KULLANIMININ ISI TRANSFERİNE ETKİSİ
Serkan AKKOYUN Tuncay BAYRAM	REDUCED QUADRUPOLE TRANSITION PROBABILITIES OF MG ISOTOPES
Süleyman ÖZÇELİK Yusuf Mert GÜMÜŞAY	OPTO-MEKANİK İŞIK MODÜLATÖRÜ GELİŞTİRİLMESİ
Dr. Mine Nazan Kerimak ÖNER	EVSEL GIDA ATIKLARI: SÜRDÜRÜLEBİLİR BİR GELECEK İÇİN BİYOEKONOMİK SÜREÇTE UMUT VEREN YENİLENEBİLİR HAMMADDE
Dr. Mine Nazan Kerimak ÖNER	BELEDİYE KATI ATIKLARININ ORGANİK FRAKSİYONUNUN BİYOLOJİK YÖNTEMLER VASITASIYLA DEĞERLENDİRİLMESİ
Ali YAZGAN Yusuf GÜNER Özkan ENGİN Ali Erkin KUTLU Abdulkadir ALLI	BİTKİSEL YAĞLARIN EPDM KAUÇUK FORMÜLASYONUNDA PETROL BAZLI YAĞLARIN YERİNE KULLANILMASI
Merve ŞENTÜRK ACAR	THERMODYNAMICAL ANALYSIS OF GEOTHERMAL POWERED ORGANIC RANKINE CYCLE FOR R-1233ZD, R-600, R-245FA AND R-236FA

21.03.2019- - PERŞEMBE**SAAT 15:30 - 17:30**

Salon A, OTURUM-2	OTURUM BAŞKANI: Dr. Öğr. Üyesi Fatma OĞUZ ERDOĞAN
Nihan Akın SÖNMEZ	FİLM KALINLIĞININ ESNEK ITO/PET ALTTAŞLAR ÜZERİNE BÜYÜTÜLEN Nb ₂ O ₅ İNCE FİMLERİN ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ
Yusuf Emre ÇABUKOĞLU Abdulkadir ALLI	HİDROFİLİK SİLİKON TEKSTİL YUMUŞATICI ELDESİ
Sennur DENİZ Selin ARICAN Ceren Alpaslan GÜLER	METAL ORGANİK KAFES İÇEREN BİYOBOZUNUR POLİMER NANOKOMPOZİT FİMLERİN HAZIRLANMASI VE KARAKTERİZASYONU
Seda TURPÇU Sennur DENİZ Sevilay NIGAR Fırat YILMAZ Tuğba İNCIRKUŞ	BIYO BAZLI VE PETROKİMYASAL POLIOL KARIŞIMLARINDAN POLIÜRETAN FİMLERİN SENTEZİ VE ÖZELLİKLERİ

22.03.2019- CUMA

SAAT 15:30 - 17:30

Salon A , OTURUM-1	OTURUM BAŞKANI: Prof.Dr.Oğuz ARSLAN
Dr. Öğr. Üyesi Can Bülent FİDAN	EMG SİNYALLERİNİN ELDE EDİLMESİ VE SINIFLANDIRILMASI İÇİN FPGA KARTI İLE DEVRE TASARIMI
Taner Erdogan	A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY ON 3-(BENZYLOXY)PENTA-1,4-DIENE-1,5-DIYL)DIBENZENE DERIVATIVES
Prof. Dr. Oğuz ARSLAN Onur KAYAPINAR	ISITMA SİSTEMLERİNDE İŞİMA KALKANI KULLANIMININ ISI TRANSFERİNE ETKİSİ
Taner Erdogan	A DFT STUDY ON THE REACTIONS OF 5-PHENYL-1,3,4-OXADIAZOLE-2-THIOL WITH VARIOUS 2-BROMO-1-ARYLETHAN-1-ONE DERIVATIVES
Doç. Dr. İsmail KIRBAŞ	BROWN NOISE ZAMAN SERİLERİNDE ARIMA TAHMİN MODELLERİNİN PERFORMANSLARININ İNCELENMESİ
Çiğdem Müge HAYLI	ÇOCUK HOSPİSLERİ ve TÜRKİYE' DE KURULMASININ ÖNEMİ
Çiğdem Müge HAYLI Aylin AKÇA SÜMENGİN Prof. Dr. Ayşe Ferda OCAKÇI	SOKAKTA ÇALIŞAN ÇOCUKLARA YÖNELİK KORUYUCU VE ÖNLEYİCİ SAĞLIK HİZMETLERİNDE HEMŞİRENİN ROLÜ
Şükriye ULUBAY KARABİBEROĞLU	ASCORBIC ACID DETERMINATION IN SOME FRUIT VIA CONDUCTING POLYMER-SUPPORTED METAL OXIDES ELECTRODES
Çağrı Ceylan KOÇAK	FOLIC ACID DETERMINATION AT METAL NANOPARTICLES MODIFIED CARBON BASED ELECTRODES
Doç. Dr. İsmail KIRBAŞ	INVESTIGATION OF THE MULTI-STEP PERFORMANCE OF TIME DELAY AND NARX NETWORK MODELS OVER TIME SERIES
Taner ERDOĞAN Serpil Ozkurt SIVRIKAYA	COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF BENZYL ETHERS DERIVED FROM CHALCONES: A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY
Taner ERDOĞAN Serpil Ozkurt SIVRIKAYA	DFT AND MOLECULAR DOCKING CALCULATIONS ON THE 1,3,4-THIADIAZOLETHIOL SUBSTITUTED BENZYL ETHERS
Dr. Öğr. Üyesi Fatma OĞUZ ERDOĞAN	ADSORPTION OF CO ₂ AND CH ₄ GASES ONTO FE/MCM-41, FE/MWCNT AND FE/ZEOLITE COMPOSITES
Dr. Öğr. Üyesi Fatma OĞUZ ERDOĞAN	EFFECT OF TEMPERATURE ON THE ADSORPTION OF ALLURA RED DYE ONTO MULTIWALLED CARBON NANOTUBES

22.03.2019- CUMA

SAAT 17:30 - 19:00

**THE CHARACTERISTIC FEATURES OF NATIONAL IDENTITY IN
THE BAKHTIYAR VAKHABZADE'S WORKS: THEMATIC AND
IDEOLOGICAL PARALLELS IN MODERN UZBEK POETRY**

Terane HESHIMOVA

**АЛИШЕР НАВОИЙ ИЖОДИДАГИ УЛУ ВОР Д СТЛИКНИНГ
Я ИН ШНИ ДАВЛАТЛАР МАТБУОТИДА ИНЪИКОС ЭТИШИ**

Турсунжон Каримова, Равшан Усанов

**ЧЫНГЫЗ АЙТМАТОВДУН ЧЫГАРМАЛАРЫНДАГЫ КЭЭ БИР
ФРАЗЕОЛОГИЯЛЫК БИРДИКТЕРДИН КЫРГЫЗ, ОРУС ЖАНА
АНГЛИС ТИЛИНДЕГИ АНАЛИЗИ**

Назаракунов Омурбек

ТУКАЕВЛАРНЫ ДИНИ ҺЕМ МЕГЪРИФ ТЧЕЛЕК ЭШЧ НЛЕГЕ

Нурид Насыйбуллина

**БОЛАША МУЗЫКА М АЛИМИНИ ЭСТРАДАЛЫ
Н АЙТУ ДА ДЫЛАРЫН АЛЫПТАСТЫРУ ЖОЛДАРЫ**

М. . Смагулов

GALLERY





To get all pictures of congress subscribe to our facebook page entitled "İKSAD KONGRE TOPLULUĞU"

CONTENTS

*EMG SİNYALLERİNİN ELDE EDİLMESİ VE SINIFLANDIRILMASI İÇİN FPGA KARTI
İLE DEVRE TASARIMI*

Can Bülent FİDAN

Page 1-12

ISITMA SİSTEMLERİNDE IŞIMA KALKANI KULLANIMIN ISI TRANSFERİNE ETKİSİ

Onur KAYAPINAR, Oğuz ARSLAN

Page 13-19

THEORETICAL CALCULATIONS FOR ENERGY LEVELS IN Ne ISOTOPES

Serkan AKKOYUN, Tuncay BAYRAM

Page 20-24

*REDUCED ELECTRIC QUADRUPOLE TRANSITION
PROBABILITIES OF Mg ISOTOPES*

Serkan AKKOYUN, Tuncay BAYRAM

Page 25-31

*BROWNIAN GÜRÜLTÜLÜ ZAMAN SERİLERİNDE ARIMA TAHMİN MODELLERİNİN
PERFORMANSLARININ İNCELENMESİ*

İsmail KIRBAŞ

Page 32-41

*IMAGE ANALYSIS OF SIZE DISTRIBUTION ON COMPRESSED AGGREGATE FACE -
REGRESSED MODEL*

Yıldırım İsmail Tosun

Page 42

*IMAGE ANALYSIS OF CRACKS ON MARBLE FACE -
REGRESSED MODEL*

Yıldırım İsmail Tosun

Page 43

*MİDYAT KALKER TAŞININ GEOTEKNİK ÖZELLİKLERİ - HAFİF AGREGALI ASFALT
ÜRETİMİ*

Yıldırım İsmail Tosun

Page 44

OPTO-MEKANİK IŞIK MODÜLATÖRÜ GELİŞTİRİLMESİ

Süleyman Özçelik, Yusuf Mert Gümüşay

Page 45-46

*BELEDİYE KATI ATIKLARININ ORGANİK FRAKSİYONUNUN BİYOLOJİK
YÖNTEMLER VASITASIYLA DEĞERLENDİRİLMESİ*

Mine Nazan Kerimak Öner

Page 47

*VALORIZATION of ORGANIC FRACTION of MUNICIPAL SOLID WASTE By
BIOLOGICAL APPLICATIONS*

Mine Nazan Kerimak Öner

Page 48

*EVSEL GIDA ATIKLARI: SÜRDÜRÜLEBİLİR BİR GELECEK İÇİN BİYOEKONOMİK
SÜREÇTE UMUT VEREN YENİLENEBİLİR HAMMADDE*

Mine Nazan Kerimak Öner

Page 49

*HOUSEHOLD FOOD WASTE: A PROMISING RENEWABLE RAW MATERIAL IN
BIOECONOMIC PROCESSES FOR SUSTAINABLE FUTURE*

Mine Nazan Kerimak Öner

Page 50

*BİTKİSEL YAĞLARIN EPDM KAUÇUK FORMÜLASYONUNDA PETROL BAZLI
YAĞLARIN YERİNE KULLANILMASI*

Ali YAZGAN, Yusuf GÜNER, Özkan ENGİN, Ali Erkin KUTLU, Abdulkadir ALLI

Page 51

*THE USE OF VEGETABLE OILS INSTEAD OF CONVENTIONAL PETROLEUM BASED
OILS IN EPDM RUBBER COMPOUND*

Ali YAZGAN, Yusuf GÜNER, Özkan ENGİN, Ali Erkin KUTLU, Abdulkadir ALLI

Page 52

*THE EFFECT OF FILM THICKNESS ON THE PROPERTIES OF Nb₂O₅ THIN FILMS
DEPOSITED ON FLEXIBLE ITO/PET SUBSTRATES*

Nihan Akın Sönmez

Page 55

HİDROFİLİK SİLİKON TEKSTİL YUMUŞATICI ELDESİ
Yusuf Emre ÇABUKOĞLU, Abdulkadir ALLI
Page 56-57

METAL ORGANİK KAFES İÇEREN BİYOBOZUNUR POLİMER NANOKOMPOZİT
FİLMLEİN HAZIRLANMASI VE KARAKTERİZASYONU
S. ARICAN a, S. DENİZ a, C. ALPASLAN GÜLERa*
Page 58

BIYO BAZLI VE PETROKİMYASAL POLIOL KARIŞIMLARINDAN POLİÜRETAN
FİMLERİN SENTEZİ VE ÖZELLİKLERİ
Seda TURPÇU, Sennur DENİZ , Sevilay NİGAR , Fırat YILMAZ, Tuğba İNCİRKUŞ
Page 59

A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY ON
3-(BENZYLOXY)PENTA-1,4-DIENE-1,5-DIYL)DIBENZENE DERIVATIVES
Taner ERDOĞAN
Page 60

A DFT STUDY ON THE REACTIONS OF 5-PHENYL-1,3,4-OXADIAZOLE-2-THIOL
WITH VARIOUS 2-BROMO-1-ARYLETHAN-1-ONE DERIVATIVES
Taner ERDOĞAN
Page 61

COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF BENZYL ETHERS DERIVED FROM
CHALCONES: A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY
Taner ERDOĞAN, Serpil OZKURT SIVRIKAYA
Page 62

DFT AND MOLECULAR DOCKING CALCULATIONS ON THE 1,3,4-
THIADIAZOLETHIOL SUBSTITUTED BENZYL ETHERS
Taner ERDOĞAN, Serpil OZKURT SIVRIKAYA
Page 63

EFFECT OF TEMPERATURE ON THE ADSORPTION OF ALLURA RED DYE ONTO
MULTIWALLED CARBON NANOTUBES
Fatma OĞUZ ERDOĞAN
Page 64

ADSORPTION OF CO₂ AND CH₄ GASES ONTO FE/MCM-
41, FE/MWCNT AND FE/ZEOLITE COMPOSITES
Fatma OĞUZ ERDOĞAN
Page 64

ÇOCUK HOSPİSLERİ ve TÜRKİYE' DE KURULMASININ ÖNEMİ

Çiğdem Müge HAYLI

Page 65-66

SOKAKTA ÇALIŞAN ÇOCUKLARA YÖNELİK KORUYUCU VE
ÖNLEYİCİ SAĞLIK HİZMETLERİNDE HEMŞİRENİN ROLÜ

Çiğdem Müge HAYLI , Aylin AKÇA SÜMENGEN,

Ayşe Ferda OCAKÇI

Page 67-68

ASCORBIC ACID DETERMINATION IN SOME FRUIT VIA
CONDUCTING POLYMER-SUPPORTED METAL OXIDES
ELECTRODES

Şükriye ULUBAY KARABİBEROĞLU

Page 69

FOLIC ACID DETERMINATION AT METAL NANOPARTICLES
MODIFIED CARBON BASED ELECTRODES

Çağrı Ceylan Koçak

Page 70

THE CHARACTERISTIC FEATURES OF NATIONAL IDENTITY IN
THE BAKHTIYAR VAKHABZADE'S WORKS: THEMATIC AND
IDEOLOGICAL PARALLELS IN MODERN UZBEK POETRY

Terane HESHIMOVA

Page 71

АЛИШЕР НАВОИЙ ИЖОДИДАГИ УЛУ ВОР Д СТЛИКНИНГ
Я ИН ШНИ ДАВЛАТЛАР МАТБУОТИДА ИНЪИКΟΣ
ЭТИШИ

Турсунжон Каримова, Равшан Усанов

Page 72

ЧЫНГЫЗ АЙТМАТОВДУН ЧЫГАРМАЛАРЫНДАГЫ КЭЭ БИР
ФРАЗЕОЛОГИЯЛЫК БИРДИКТЕРДИН КЫРГЫЗ, ОРУС ЖАНА
АНГЛИС ТИЛИНДЕГИ АНАЛИЗИ

Назаракунов Омурбек

Page 79

ТУКАЕВЛАРНЫ ДИНИ ИЕМ МЕГЪРИФ ТЧЕЛЕК ЭШЧ НЛЕГЕ

Нурид Насыйбуллина

Page 80

БОЛАША МУЗЫКА М АЛІМІНІ ЭСТРАДАЛЫ
Н АЙТУ ДА ДЫЛАРЫН АЛЫПТАСТЫРУ ЖОЛДАРЫ

М. . Смагулов

Page 81

INVESTIGATION OF THE MULTI-STEP PERFORMANCE OF
NONLINEAR AUTOREGRESSIVE NETWORK MODELS OVER
TIME SERIES SAMPLES

İsmail KIRBAŞ

Page 82

FİLM KALINLIĞININ ESNEK ITO/PET ALTTAŞLAR ÜZERİNE BÜYÜTÜLEN
Nb2O5 İNCE FİMLERİN ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ
Nihan Akın Sönmez
Page 90

THERMODYNAMICAL ANALYSIS OF GEOTHERMAL POWERED
ORGANIC RANKINE CYCLE FOR R-1233ZD, R-600, R-245FA AND R-236FA
Merve ŞENTÜRK ACAR
Page 96

OPTO-MEKANİK IŞIK MODÜLATÖRÜ GELİŞTİRİLMESİ
Süleyman ÖZÇELİK & Yusuf Mert GÜMÜŞAY
Page 107

A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY ON
3-(BENZYLOXY)PENTA-1,4-DIENE-1,5-DIYL)DIBENZENE DERIVATIVES
Taner ERDOGAN
Page 114

A DFT STUDY ON THE REACTIONS OF 5-PHENYL-1,3,4-OXADIAZOLE-2-
THIOL WITH VARIOUS 2-BROMO-1-ARYLETHAN-1-ONE DERIVATIVES
Taner ERDOGAN
Page 124

BELEDİYE KATI ATIKLARININ ORGANİK FRAKSİYONUNUN BİYOLOJİK
YÖNTEMLER VASITASIYLA DEĞERLENDİRİLMESİ
Mine Nazan KERİMAK ÖNER
Page 136

IMAGE ANALYSIS OF CRACKS ON MARBLE FACE -
REGRESSED MODEL
Yıldırım İsmail Tosun
Page 146

IMAGE ANALYSIS OF SIZE DISTRIBUTION ON COMPRESSED
AGGREGATE FACE - REGRESSED MODEL
Yıldırım İsmail Tosun
Page 156

EVSEL GIDA ATIKLARI: SÜRDÜRÜLEBİLİR BİR GELECEK İÇİN
BİYOEKONOMİK SÜREÇTE UMUT VEREN YENİLENEBİLİR HAMMADDE
Mine Nazan KERİMAK ÖNER
Page 165

COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF BENZYL ETHERS DERIVED
FROM CHALCONES: A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING
STUDY

Taner Erdogan & Serpil Ozkurt Sivrikaya

Page 173

DFT AND MOLECULAR DOCKING CALCULATIONS ON THE 1,3,4-
THIADIAZOLETHIOL SUBSTITUTED BENZYL ETHERS

Taner Erdogan & Serpil Ozkurt Sivrikaya

Page 181

EFFECT OF TEMPERATURE ON THE ADSORPTION OF ALLURA RED DYE
ONTO MULTIWALLED CARBON NANOTUBES

Fatma OĞUZ ERDOĞAN

Page 190

ADSORPTION OF CO₂ AND CH₄ GASES ONTO FE/MCM-41, FE/MWCNT
AND FE/ZEOLITE COMPOSITES

Fatma OĞUZ ERDOĞAN

Page 200

EMG SİNYALLERİNİN ELDE EDİLMESİ VE SINIFLANDIRILMASI İÇİN FPGA KARTI İLE DEVRE TASARIMI

Dr.Öğr.Üyesi Can Bülent FİDAN

Karabük Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Mekatronik Mühendisliği Bölümü
cbfidan@karabuk.edu.tr

ÖZET

Protez çalışmalarında nihai amaç; gerçek anlamda aynı görevi üstlenebilecek bir cihaz ortaya koyabilmektir. Protez kontrolü üzerine bugüne kadar oldukça değişik çalışmalar yapılmış olmasına karşın myoelektrik işaretler üzerinde yapılan çalışmalar ve günümüzde gelişme gösteren yüksek hızlı ve paralel işlem yapabilme özelliği olan CPU' lar sayesinde gerçek zaman uyumlu ürünler ortaya konabilmektedir. Özellikle DSP ve FPGA' ların gelişmesiyle bu türden çalışmalar artık daha rahat yapılabilmektedir. Bilindiği gibi kas yorgunluğu arttıkça EMG işaretinin frekans spektrumu düşük frekanslara doğru bir yığılma göstermektedir. Bu nedenle çalışmamız küçük bir zaman dilimindeki analizleri içermektedir. Deri yüzeyinden algılanan elektromiyografik (EMG) işaretler, kas liflerinin kasılması sonucu oluşan çok sayıda aksiyon potansiyellerin birleşimidir. Kaslardan üretilen her bir EMG işaretinin örüntüsü hareketin yönü ve eylemin hızı hakkında bilgi içerir. Bu örüntülerin sınıflandırılmasında kullanılan öznitelik vektörlerini bulmak için değişik işaret işleme teknikleri mevcuttur.

Bu çalışmada ön kol yana kaldırma, ön kol yandan indirme, dirsek açma ve dirsek kapama hareketlerini tanımlayabilmek için ön kol yüzeyinden algılanan EMG işaretleri kullanılmıştır. Bu hareketleri sağlayan üç farklı kas grubuna elektrotlar bağlanmıştır. Hareketlere ait EMG sinyalleri deneğin sol kolunda bulunan üç farklı kas topluluğundan eş zamanlı olarak alınmıştır. Her bir hareketten 125 olmak üzere, toplamda 500 kayıt alınmıştır. Yüzey kaslardan algılanan bu EMG işaretlerine ait özellikler çıkarılmadan önce elde edilen EMG sinyalleri dijital filtrelerden geçirilerek hem işareti bozan etkilerden arındırılmış hem de işarete ait olmayan diğer bileşenlerin çoğu filtrelenmiştir. Daha sonra filtrelenen işaretin zaman dönemine ait farklı özellikleri tespit edilmiştir. Sınıflandırma aşamasında Yapay Sinir Ağları (YSA) kullanılmıştır. Yapay sinir ağı, Hatanın Geriye Yayılması (Back- Propagation) algoritmasına sahiptir.

Anahtar Kelimeler: Miyoelektrik İşaretler, EMG, Yapay Sinir Ağları (YSA), Dijital Filtre, Özellik Çıkarma

CIRCUIT DESIGN WITH FPGA CARD FOR ACQUISITION AND CLASSIFICATION OF EMG SIGNALS

ABSTRACT

The ultimate goal in prosthetic studies; To be able to produce a device that can actually take on the same task. Although many studies have been carried out on prosthetic control so far, real time compatible products can be produced thanks to the studies done on myoelectric signals and the CPUs which have high speed and parallel processing capability which are developing today. Especially with the development of DSP and FPGAs, such studies can be made more comfortable. As is known, as the muscle fatigue increases, the frequency spectrum of the EMG signal shows an accumulation towards low frequencies. For this reason, our study includes analyzes in a small-time segment. Electromyographic (EMG) signals markings from the skin surface are a combination of multiple action potentials resulting from the contraction of muscle fibers. The pattern of each EMG signal produced from the muscles contains information about the direction of movement and the speed of action. Different signal processing techniques are available to find the feature vectors used to classify these patterns.

In this study, EMG signs detected from the forearm surface were used to define forearm abduction, forearm adduction, elbow extension, elbow flexion movements. The electrodes are connected to three different muscle groups that provide these movements. The EMG signals of the movements were taken simultaneously from three different muscle populations of the left arm of subject. A total of 500 records have been received, 125 from each movement. Before extracting features of signals the characteristics of the EMG signals detected from the surface muscles, the resulting EMG signals were passed through the digital filters and both the signal-disrupting effects were cleared and most of the other non-marking components were filtered. Then, different characteristics of the filtered sign were determined. Artificial Neural Networks (ANN) were used in the classification stage. Artificial neural network has the error back propagation algorithm.

Keywords: Myoelectric Signals, EMG, Artificial Neural Network (ANN), Digital Filter, Feature Extraction

1.GİRİŞ

II. Dünya savaşından beri vücudun dış güçleri olan uzuvların (kol ve bacak gibi) hasara uğradığında tekrar kullanmaya yönelik yapay protez cihazları imal etmek için birtakım çalışmalar yapıldı. Bu konudaki ilk sayılabilecek çalışmalarda, vücudun zedelenmiş kaslarından gelen elektromiyografik (EMG) işaretlerinden yararlanıldı. [1, 2, 3, 4]. Yapılan araştırmaların çoğu ana parçanın üzerinde özel çalışma veya efor gerektiren ya hep ya hiç biçimi tek hareket kontrolleri şeklinde olmuştur. İlk myoelektrik kontrollü protez; kavrama/bırakma gibi tek bir fonksiyonu gerçekleştirmeyi amaçlamıştır. Gelişen bilgisayar teknolojisinin, EMG işaretleri

üzerinde daha detaylı işaret işleme ve analiz imkanlarını sağlamasıyla protezler üzerinde hareket kontrollerini daha mümkün hale getirdi. Parmak kapama (flexor) ve açma (extensor) kas gruplarından elde edilen EMG işaretlerini kullanan araştırmacılar işaretleri doğrultuktan sonra genliklerini karşılaştırmış, hangisi daha büyükse onun temsil ettiği hareketin istendiğine karar vermiştir. [5,6]. Buna göre parmak sıkıcı veya açıcı röleler çalıştırılarak elin kavrama ya da bırakma hareketini yapması sağlanmıştır. Aynı çalışma ilkesi günümüzde de tek fonksiyonlu yapay ellerde kullanılmaktadır. Ancak daha gelişmiş işaret işleme yöntemleriyle kavrama hız ve gücünü kapsayan oransal kontroller artık mümkün olmaktadır.

Dorcas ve Scott, birden fazla serbestlik derecesini kontrol edebilmek için bir noktadan ölçülen EMG işaretinin etkin değerini ayrı bölgelere bölme yöntemini geliştirmiştir.[7]. Daha sonraları aynı kasın değişik düzeylerdeki kasılmaları farklı hareketlere karşı düşürülmüş EMG işareti hangi aralığa giriyorsa o aralığın belirttiği hareket protezde gerçekleştirilmiştir. Zamanla birçok noktadan ölçülen EMG işaretlerinden faydalanılması düşünülmüş ve 10 tane elektrot, belli hareketlerin gerçekleştirilmesinde etkin olan kasların üzerine yerleştirilmiştir. Elektrotlarla edinilen EMG ölçümleri matris halinde dizilmiş ve bilgisayarda incelenmiştir. İnceleme sonucunda elde edilen sınıflama işlemleri daha sonra EMG ölçümlerinin sınırlanarak değişik hareket sınıflarına ayrılmasında kullanılmıştır. Çok elektrotlu myoelektrik kontrolün farklı bireylere uygulanması üzerinde çalışan Lyman, 'öğrenme' ve 'çalışma' olarak iki ayrı aşama tanımlamıştır.[8]. Öğrenme sırasında özürü kişi, sağlıklı koluyla hayali kolunu paralel olarak hareket ettirirken bilgi-işlemci EMG örüntüleri ile kol hareketleri arasındaki bağıntıyı saptar ve böylece normal çalışma sırasında, özürünün ürettiği EMG eğitim süresinde elde edilenlerle kıyaslanıp en fazla benzeyen örüntü saptanır. Sonra o örüntüye ait hareketi amaçladığına karar verilir. (en yakın komşu algoritması) Yöntemin, (pazu kemiği) döndürme, dirseği açma/kapama ve önkolu döndürme fonksiyonlarının kontrolünde başarılı olduğu bildirilmiştir. Aynı tekniği uyarlayan İsveçli araştırmacılar, "İsveç Eli" olarak bilinen çalışmalarında, kavrama/bırakma, önkolu döndürme ve bileği aşağı/yukarı bükme hareketlerini denetlemişlerdir.[9]. Ayrıca sistemde mikroişlemci kullanılarak protezin oransal kontrolü sağlanmıştır. Başka bir çalışmada ise dirsekten omuza kadar olan kemiği (pazu kemiği) kesilen veya felç olan şahsın biceps (kolun üst kısmındaki kaslar-iki başlı kas) ve triceps (üç başlı kas)' kaslarından alınan EMG işaretlerinin istatistiksel analizini yaptı. İstatistiksel işaret tanıma algoritmaları, kolun birleşik ilk hareketleri ve muhtemel işaretlerinin her birine cevap veren işaretleri sınıflandırmak için kullanıldı. Bu çalışmada; kol kemiğine veya omuza ait iç/dış dönme, dirsek açma/kapama ve bileği aşağı/yukarı bükme hareketleri denetlenmiştir. El kavraması hareketi sınıflandırmaya katılmamıştır.[10].

Özellikle Graupe'nin çalışmasından faydalanarak, Kelly, Parker ve Scott ilk olarak YSA (Hopfield algoritması) kullanarak myoelektrik işareti sınıflamaya dayalı çok fonksiyonlu kontrol tasarımını gerçekleştirdiler. [5,6]. Daha sonra bu ilk çalışmadan yararlanarak Hudgins, Parker ve Scott tarafından yine YSA kullanılarak çok fonksiyonlu bir myoelektrik kontrol çalışması geliştirildi.[11]. Söz konusu çalışmalar, biceps ve triceps kaslardaki elektrotlardan

alınan işaretlerin zaman serisi parametreleri çıkartılarak dört hareketin sınıflandırılması gerçekleşmiştir. Bu öncü çalışmaların verdiği umut, bu işle uğraşmak isteyen bilim adamı ve mühendisleri öyle etkilemiştir ki, bugün artık yüzlerce araştırmacı çok daha ileri tekniklerle EMG işaretlerini elde edebilmekte ve istatistik, işaret işleme, yapay zekâ gibi pek çok bilim dalını birlikte kullanarak yeni analiz yöntemleri geliştirebilmektedirler. (Bulanık Mantık, Genetik Algoritmalar, Yapay Sinir Ağları, Dalgacık Dönüşüm Algoritmaları, Temel Bileşen Analizi... gibi onlarca değişik yöntem)

Bu çalışmamızda esas olarak; EMG işaretlerinin elde edilmesine yönelik bir elektronik devreden bahsedeceğiz. Bu devre pek çok alt devreden ve parçadan oluşmakta. Bu devreyi oluştururken biyolojik bir işaret olan emg işaretinin özelliklerini (genlik, frekans bandı... gibi) göz ardı edemeyiz. Tıbbi amaçlı uygulamalar için bugün artık oldukça profesyonel cihazlar mevcut. Fakat araştırmacı mühendisler için hiçbir zaman hiçbir olay tamamen bitmiş sayılmaz. Bu yüzden gelişim sürekli devam edecektir. Bu amaçla; kullandığımız ve temiz veri elde edebildiğimiz bir devrenin parçalarını ve tasarımını bu çalışmada anlatmayı uygun buldum.

2. MATERYAL VE YÖNTEM

Genel olarak baktığımızda biyolojik ölçmeleri; Klinik ve Araştırma Ölçmeleri diye iki ana kategoriye ayırabiliriz. Bu ana yaklaşım altında oluşturulan bir ölçüm düzeni; ölçü cihazı ve üzerinde ölçüm yapılacak obje, diye iki temel birimden oluşmaktadır diyebiliriz. Biyolojik ölçme düzenlerinde obje tamamen insan veya insandan alınan bir doku örneği olabilir. Objenin ölçümü için dinamik ve statik örnekleme yöntemleri kullanılır.

- a) Dinamik Örnekleme: Fizyolojik parametreler vücuttan bir dönüştürücü yardımıyla algılanır. Dinamik örnekleme de ölçü sistemi; ölçüm parametrelerindeki ani değişimlere cevap verebilecek niteliklere haiz olmalıdır. Dinamik Örnekleme, direkt ve dolaylı olmak üzere iki şekilde yapılır. Direkt Örnekleme de elektrot ve çeviriciler deri yüzeyine veya vücut içine yerleştirilmiştir. Hasta için tehlike içermesine karşın tasarımı ve kullanımı kolaydır. Dolaylı Örnekleme de dönüştürücüler objeyle temas etmez. Güvenli olmalarına karşın kullanım açısından karmaşıktır.
- b) Statik Örnekleme: Ölçüm yapılacak obje canlı sistemden alınmıştır. Laboratuvar ortamında gerekli analizler yapılabilir. Örneğin, parmaktan alınan kan vs...

2.1. EMG İşaretinin oluşumu

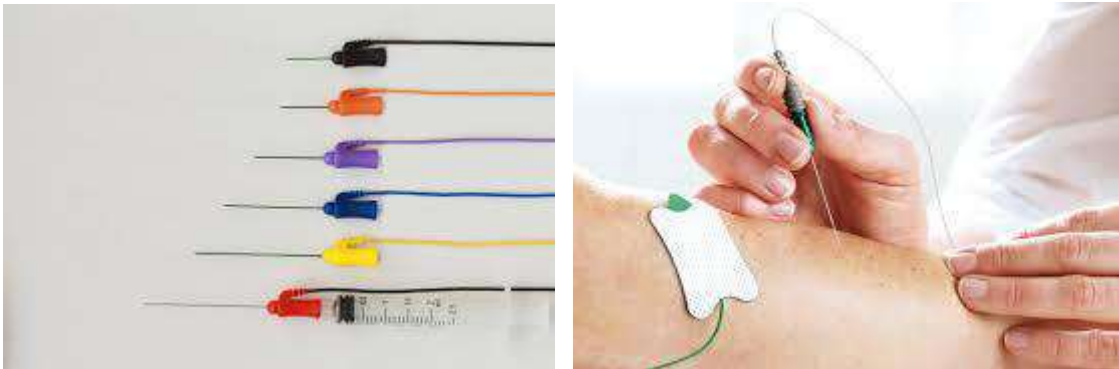
Biyolojik işaretlerin oluşumunda hücre içinde ve hücreler arasındaki biyokimyasal ilişkilerin bilinmesi önemlidir. İnsan bir hareket yapmak istediğinde beynimizden sinir hücrelerine aksiyon potansiyeliyle emir gönderilir ve sinirlerden de kasa iletilen bir aksiyon potansiyeli sayesinde yapmak istediğimiz hareketi gerçekleştirmiş oluruz. Canlı hücrelerin membranlarının iki yanından yapılan ölçümlerde elektriksel potansiyel farkı saptanabilir. Hücre tipine göre değişen ve *dinlenme potansiyeli* adını alan bu fark kas ve sinir hücrelerinde

hücre içi negatif olmak üzere 50-100 mV kadardır. Dinlenme potansiyeli iyonların hücre membranının iç ve dış yüzeyleri arasında eşit olmayan dağılımından kaynaklanır. Aktif transport yoluyla sodyumun sürekli hücre dışına ve potasyumun hücre içine pompalanması sonucu sodyumun hücre dışındaki konsantrasyonu içeriye göre 20 kat fazlalaşır. Hücre içinde ise potasyum konsantrasyonu hücre dışına oranla 35 kat fazladır. Bu kimyasal transport sırasında bir biyopotansiyel ortaya çıkar.[12]. Ortaya çıkan bu biyopotansiyel uygun sensörler vasıtasıyla elektriksel akıma dönüştürülebilir.

2.2. EMG İşaretinin elde edilmesi

Biyoelektrik potansiyelleri ölçmek için iyonik potansiyel ve akımı, elektrik potansiyel ve akıma çeviren transdüserlere (çeviriciler) ihtiyaç vardır. Böyle bir çevirici 2 tane elektrot ihtiva eder. Bu elektrotlar ölçülecek iyonik potansiyel noktalarına yerleştirilir. Hareket potansiyeli birden çok hücreden gelen toplam sinyal olacağından herhangi bir hücrenin hareket potansiyelini ölçmek oldukça zordur. Bunun için hücreye çok hassas bir şekilde elektrotların yerleştirilmesi gerekir. Bundan dolayı çok sayıdaki hareket potansiyelinin derideki birleşik etkisi ölçülür veya birden fazla elektrotu adalenin çeşitli yerlerine yerleştirilerek ölçme yapılır. Bu potansiyellerin deri yüzeyine ulaşma metodu kesin olarak henüz bilinmiyor. Bazı olayları açıklayan birçok teori olmasına rağmen olaylara tam uyum sağlayan herhangi bir teori oluşturulamamıştır. Bilhassa iyonik akım ile deri yüzeyinde oluşan elektrik alan örnekleri arasındaki bağıntı hususunda çok değişik kabuller vardır. Bu değişik görüşleri bir yana atarak, deri yüzeyine yerleştirilen elektrotlarla yapılan ölçmeler bize biyoelektrik sinyaller hakkında geniş bilgiler vermektedir.

Özellikle tıbbi incelemelerde, bir takım kas hastalıkları ve hareket bozukluklarını tespit için veya bir hareket mekanizmasının temel yapısını anlamak adına hastane ortamında iğne elektrotlar kullanılabilir. İnce telli elektrotlar, Basmajian ve De'Luca 'nın kas davranışlarını incelemek üzere geliştirdikleri ve şimdi de onların bu tanımlamalarına sadık kalınarak üretilen bir elektrot çeşididir. Tel elektrotları yapmakta ki genel prosedür, iki uzun telin birer uçlarını ısıtarak birleştirilip güzelce kaplanıp minelenir. Boşta kalan diğer uçları 2 – 3 mm kalacak kadar kesilir. Böylece lif halindeki iki uç, kas içine uygulanabilecek iğne elektrot olarak kullanıma hazır hale gelir.



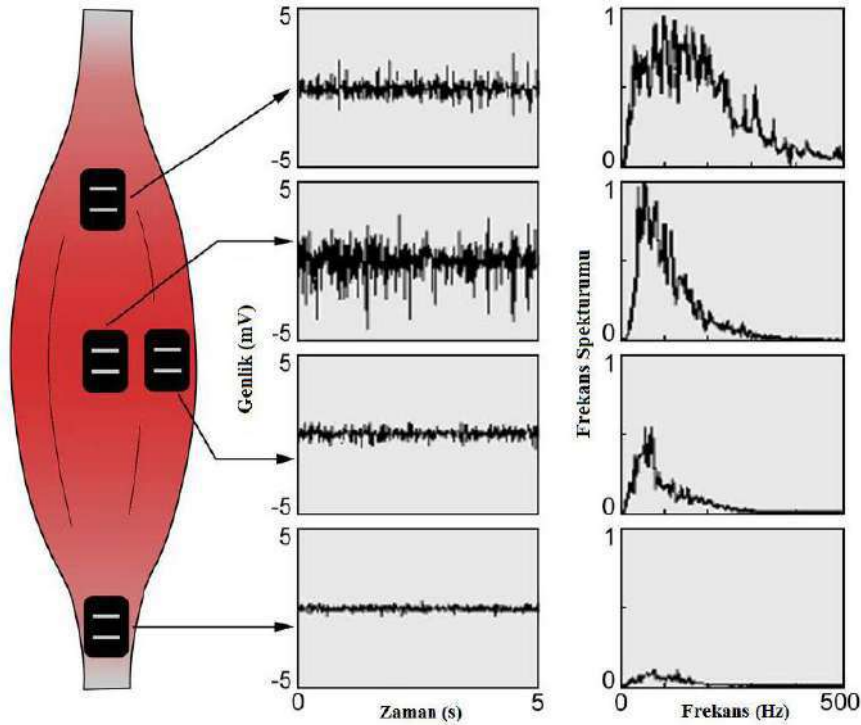
Şekil 1. İğne elektrotlar ve uygulaması

Yüzeydeki kasların faaliyeti altta kalan bilgileri örteceği için daha derinlerdeki özel bir kas lifinin faaliyetlerini incelemek adına tek kutuplu, çift kutuplu veya çok kutuplu iğne elektrotlar kullanılmaktadır. Protez kontrolü ve robotik uygulamalar gibi mühendislik uygulamalarında ise yüzey elektrotlarının seçimi daha pratik olacaktır. Zira hiç kimse koluna batırılmış bir iğne ile rahat hareket imkânı bulamayacaktır. Yüzey elektrotları da pasif ve aktif elektrot olmak üzere temelde ikiye ayrılmaktadır.



Şekil 2. Pasif Yüzey Elektrot ve Aktif Yüzey Elektrot

Yüzey elektrotu ile yapılan ölçümlerde geniş bir alandan elde edilmiş bir elektrik potansiyeline sahip olduğu unutulmamalıdır. Yüzeyden ölçülen bu toplam potansiyel yüzey altındaki bireysel aksiyon potansiyellerinin aslında 1. Türevlerinin toplamıdır. Yüzey elektrotlarının kas demeti üzerine nereye konulması gerektiği de ölçülecek EMG işareti için önem arz etmektedir. Şekil 3’ te görüleceği üzere bir kas demetinin üzerine yerleştirilmiş elektrot çiftinin konumu algılanan sinyalin zaman ve frekans ekseninde değişmesine sebep olmaktadır.

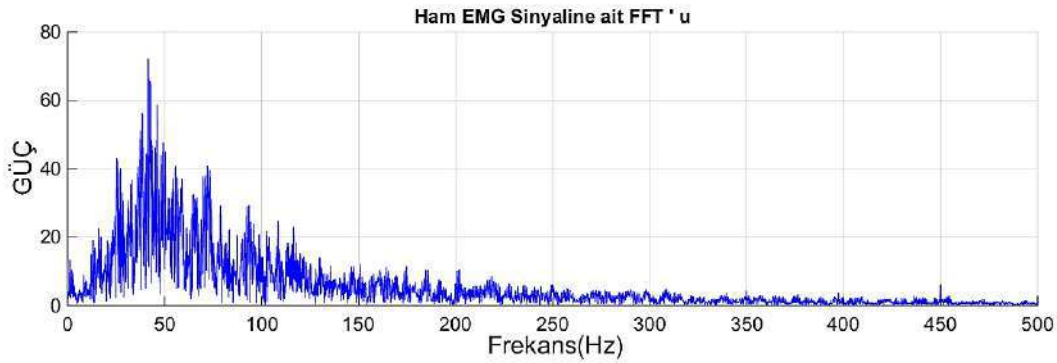


Şekil 3. Kas demetinin farklı noktalarından EMG etkisi.[14].

Algılama yüzeyleri arasındaki mesafe de EMG işaretinin band genişliğine ve genlik değerine etki etmektedir. Eğer çok küçük bir mesafe seçilirse; EMG sinyalinin band genişliği yüksek frekanslara kaymakta genliği ise azalmaktadır. Bu yüzden optimum bir mesafenin bulunup uygulanması gerekmektedir.

3. BULGULAR

EMG sinyalinin alınması sırasında, sinyalinin yapısını etkileyen iki durum vardır. Birincisi sinyal enerjisinin gürültü enerjisine oranıdır (SNR). Genel olarak gürültü, EMG sinyalinde istenmeyen elektriksel sinyallerdir. Diğer bir durum ise EMG sinyaline, sinyalin karakteristiğini değiştiren farklı frekans bileşenlerinin katılmasıdır. EMG sinyali stokastik (rastlantısal) bir yapı gösterir ve Gaussian dağılım fonksiyonuyla tanımlanır. EMG sinyalinin genliği 0 ile 10mV (tepe noktaları arası) ya da 0 ile 1,5mV (RMS) arasında değişir.[15]. Kullanılabilen sinyal enerjisi 0 ile 500Hz frekans aralığında olup baskın enerji 0 ile 200Hz arasında değişir. Kullanılabilen sinyaller, elektriksel gürültü seviyesinin üzerinde bir enerji taşırlar. Şekil 4'te ham EMG sinyaline ait frekans spektrumundan işaretin baskın olduğu frekanslar görülebilmektedir.

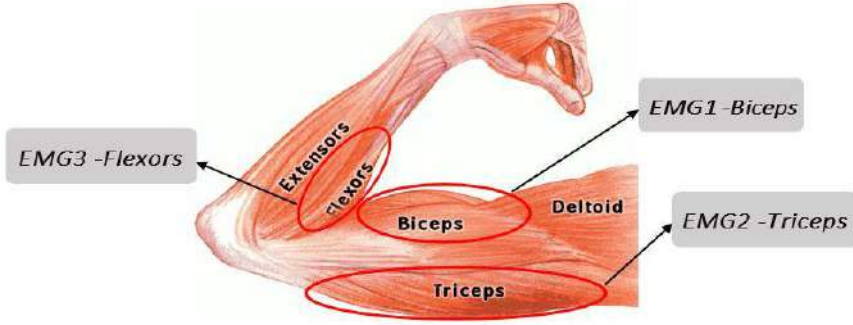


Şekil 4. Ham EMG sinyaline ait frekans spektrumu.

Yaptığım çalışmada, önceden belirlenen hareketlere ait EMG sinyalleri gönüllü deneklerin sol kolunda bulunan üç farklı kas topluluğundan eş zamanlı olarak alınmıştır. Bunun için her bir kas topluluğuna bir aktif elektrot olmak üzere, toplamda üç elektrot bağlanmıştır. Sinyallerin alındığı kaslar ve bağlanan elektrotların isimleri ile ilgili bilgi Çizelge 3.1' de belirtilmiştir. Ayrıca Şekil 5'te elektrotların bağlı olduğu kaslar gösterilmiştir. Referans noktası olarak çene altında, boyun ile göğüs kafesinin birleştiği noktada kas bulunmayan bölge seçilmiştir. Her bir hareketten 125 olmak üzere, toplamda 500 kayıt alınmıştır. Her bir harekete ait EMG sinyali kas topluluklarına bağlı olan üç aktif yüzey elektrottan eş zamanlı olarak bilgisayar ortamına kaydedilmiştir.[16].

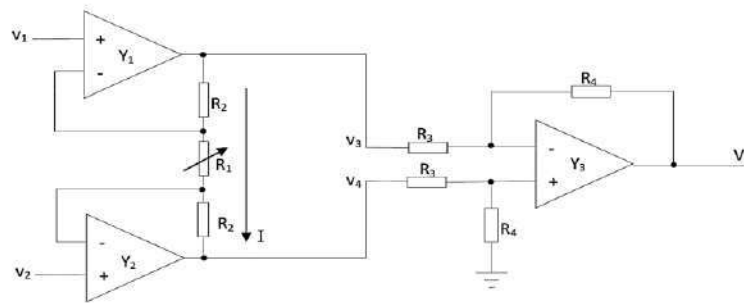
Çizelge 3.1. EMG sinyalinin alındığı kaslar ve kaslara bağlanan elektrotlar.

Sinyalin Alındığı Kas Grubu	Kas Grubuna Bağlanan EMG Elektrotu
Biceps	EMG1
Triceps	EMG2
Flexors	EMG3



Şekil 5. EMG sinyalinin alındığı kas grupları.

EMG işaretini alabilmek için kas yüzeyinde referans noktaya göre oluşmuş potansiyel gerilim farkı sezilen bir fark kuvvetlendiricisine giriş yapılır. Fark kuvvetlendiricisinin girişlerine EMG işaretiyle birlikte gelen elektriksel gürültüler elimine edilerek çıkışa sadece EMG işareti ulaştırılmış olur. EMG gibi karmaşık bir analog sinyal kaydedilirken bazı temel faktörler hesaba katılmalıdır. EMG sinyali algılanırken ve kaydedilirken sinyalin orijinalliğine etki edecek iki ana konu vardır. İlki işaret-gürültü oranıdır. Genellikle gürültü olarak EMG sinyalinin bir parçası olmayan elektriksel gürültüler kastedilir ve EMG işareti bulaşmaları istenmez. Diğer bir önemli nokta işarettaki bozulmalardır (distortion). Bu bozulmalar, gerçek işaretin bazı frekans bileşenlerinin bozulması veya yok olması anlamına gelmektedir. EMG sinyali genelde rastlantısal (stokastik) bir işaret olmakla birlikte makul bir yaklaşıklıkla Gauss Dağılım Fonksiyonu gibi görülebilir.[15]. Aşağıda Şekil 6'da fark kuvvetlendirici devresi olarak ta çalışan bir enstrümantasyon yükseltici devresi görülmektedir.



Şekil 6. Enstrümantasyon yükseltici devresi

Enstrumantasyon yükselticinin çıkışı şu şekilde formüle edilebilir.

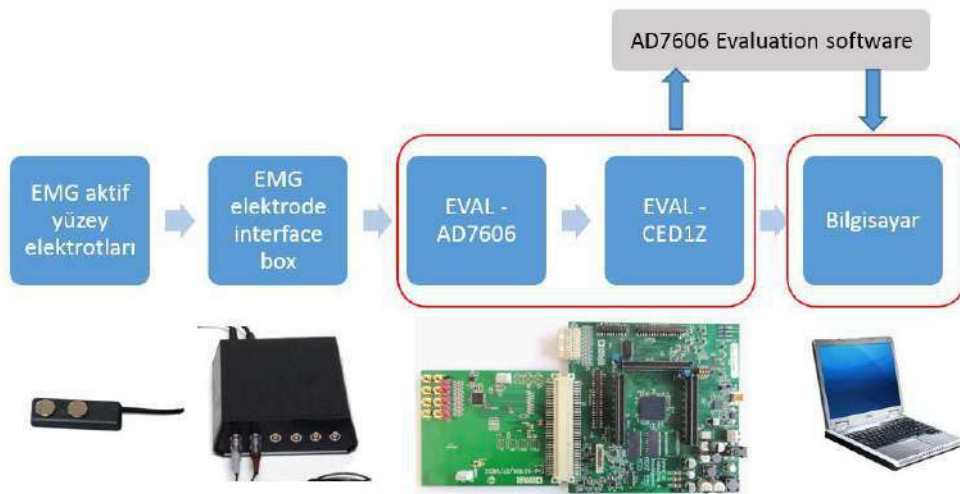
$$V_c = \frac{2xR_2+R_1}{R_1} x \frac{R_4}{R_3} x (v_2 - v_1) \quad (3.1)$$

Bu devre ile işaretleme hem bir kuvvetlendirme (kazanç) elde edilebilir hem de işaret-gürültü oranı gibi belli gürültüler fark kuvvetlendiriciler sayesinde elimine edilmiş olur. Devrede kullandığım aktif yüzey elektrotlar da ayrıca 10-3000 Hz band geçiren analog bir filtreye sahiptir. Tüm bu yükseltme, filtreleme işlemleri için çalışmada seçilen yüzey EMG elektrotları için tasarlanan B&L Engineering firmasına ait 6 kanallı EMG Electrode Interface Box kullanılmıştır. EMG Electrode Interface Box girişine gelen düşük genlikli EMG sinyallerini içerdiği Enstrumantasyon devreleri sayesinde hem belli oranda gürültüye karşı filtreleme işlemini hem de 900 mV'a kadar kuvvetlendirme işlemini gerçekleştirmektedir.



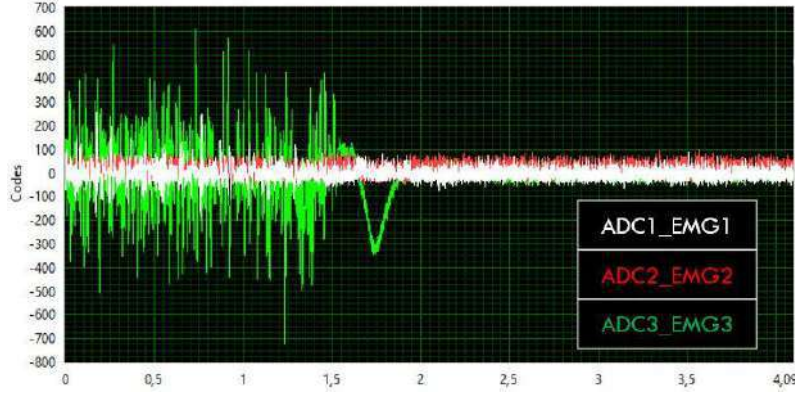
Şekil 7. EMG Electrode Interface Box.

EMG Electrode Interface Box çıkışını bir ADC devresine uyguluyoruz. Bu ADC devresi Analog Device firmasının AD7606 ADC si için üretilmiş 8 kanallı bir ADC geliştirme kartıdır. Bu kartı seçmemin amacı eş zamanlı olarak 8 kanal birden örnekleme yapabilmesidir (Simultaneous Sampling). Bu sayede 8 adede kadar EMG analog işaretini eş zamanlı olarak sayısal değere çevirebiliriz. ADC kartının sayısal çıkışları da yine Analog Device firması tarafından üretilmiş EVAL CED1Z FPGA geliştirme kartına aktarılmıştır. Elde edilen sistemin tamamı Şekil 8'de toplu halde gösterilmektedir.

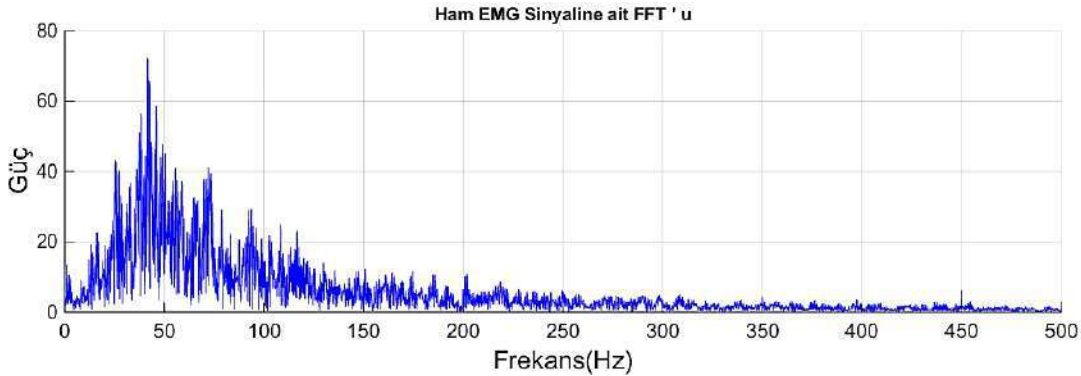


Şekil 8. Ham EMG sinyallerinin bilgisayar ortamına kaydedilmesi için oluşturulan sistem.

Aşağıda dirsek açma hareketine ait üç kasta eş zamanlı olarak alınan EMG sinyalinin genlik (ADC Kodu)-zaman grafiğini gösterilmektedir. Şekil 9’da bulunan ham EMG sinyalinin FFT’si alındığında, sinyalin frekans-güç grafiği Şekil 10’daki gibi olur. Grafik incelendiğinde ham EMG sinyalinin baskın genliğinin 0-200 Hz arasında olduğu rahatlıkla görülebilmektedir.



Şekil 9. Üç kas topluluğundan alınan dirsek açma hareketi için ham EMG sinyalleri.



Şekil 10. Şekil 9’da gösterilen ADC3_EMG3 ham EMG sinyalinin FFT grafiği.

4.TARTIŞMA, SONUÇ ve ÖNERİLER

Eş zamanlı örnekleme yapan ADC kullanarak tam ölçüm anında ilgilendiğimiz tüm noktalarda neler olduğu bilgisini eş zamanlı olarak öğrenmiş oluyoruz. Eş zamanlı örnekleme yapılmayan bir devre ile çoklu elektrotlu bir örnekleme yaptığımızda ise aslında birbirinden biraz sonraki anların potansiyel değerleriyle analiz yapıyoruz demektir. Bu da kritik anlardaki bazı bilgileri kaçıracağız anlamına gelecektir. Kas demetlerinin sinirlerden gelen uyarıyla kasıldığı an ki değerleri değil de her bir kasılan kas demetinin birbirlerini etkiledikleri sonraki anların değerleriyle ilgileniyor olacağız.

Sistemde FPGA kartı kullanmam yüksek hızda analiz yapabilmek ve böylece elde edilen EMG işareti için öz nitelikler çıkarabilmek ve değişik sınıflama algoritmalarıyla bu işaretleri sınıflayabilmektir. Tüm bu işlemler yazılım olarak FPGA yapısının içerisine

gömülebilmektedir. Yukarda anlattığım devre ile 3 farklı kas demeti üzerinden eş zamanlı örnekler alıp, bu işaretlerin uygun şekilde filtrelenmesi, kuvvetlendirilmesi, sayısal işarete çevrilerek bu bilginin bilgisayarda saklanması veya FPGA kart yazılımlarıyla analizlerinin yapılması ve sınıflandırılması işlemleri gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada bu analizlerden ve yapay sinir ağlarıyla oluşturulan sınıflama sonuçlarından bahsetmeyeceğim. Esas amacım; EMG çalışmaları hakkında bugüne kadar yapılmış belli çalışmalara işaret etmek, rahat ve güvenilir işaret alabileceğimiz bir devre tasarımı ortaya koymaktır. EMG çalışmalarına yeni başlayacak olan veya halen bununla meşgul olan meslektaşlarıma bir yaklaşım sunabilmektir. İşaret elde etme ve analiziyle uğraşan tüm mühendisler için en önemli husus güvenilir ve kolay veri elde edebilmektir. Bu uğurda yapılan tüm tasarımlar ve analizler bir araştırmacı için işin olmazsa olmazıdır. Elimizde güvenilir veri elde etme sistemleri varsa bugüne kadar geliştirilmiş pek çok analiz yöntemi denenebilir ve yenileri geliştirilebilir.

KAYNAKLAR

- [1] Alderson, S., (1954), The Electric Arm, Mc Graw-Hill, New York.
- [2] Graupe, D., Magnuses, J. ve Beex, A.(1978), “ Microprocessor system for multifunctional control of upperlimbs prostheses,” IEEE Trans. Automat. Control., 23:538-544.
- [3] Lyman, A. Freedy ve H. Zadaca. (1974), “Studies and development of heuristic end-point control for artificial upper limbs,” UCLA Biotechnol. Lab.,Tech. Rep. 54.
- [4] Saridis ve Stephanou, H.E., (1977) “A hierarchical approach to the control of a prosthetic arm,” IEEE Transactions on Systems Man and Cybernetics 7(6):407 - 420
- [5] Kelly,M. Parker, P. ve Scott, Robert.N. (1990), “The application of neural networks to myoelectric,signal analysis:A Preliminary study,” IEEE Trans. Biomed. Eng., vol. BME-37:221-227.
- [6] Kelly,M. Parker, P. ve Scott, Robert.N. (1990), “Myoelectric Signal Analysis Using Neural Networks.” ,IEEE Eng. In Medicine and Biyology Magazine vol. Mart:61-64.
- [7] Dorcas ve Scott, R.N,(1966),“A Three State Myoelectric Control,” Medical Biyol.Eng.,4:367-372.
- [8] Lyman, ve Freedy. A.(1976), “A pattern analysis and sequential decision methods for sensory feed back and control of upper limb prostheses,” Res. Prop. To the Nat. Sci. Found.
- [9] Almstrom, Herberts, P. ve Korner, L.,(1981) “ Experiences with swedish multifunction prosthetic hands controlled by pattern recognition of multiple myoelectric signals”, Int. Orthopased., 5:15-21.
- [10] Saridis, G.N. ve Gotee, T., (1982) “EMG Pattern Analysis ve Classification for a Prosthetic Arm.” IEEE Trans. Biyomed. ENG. Vol. BME-29 no:6 pp. 403-412

- [11] Hudgins, Parker, P.ve Scott, R.N.(1993), "A New Strategy for Multifonction Myoelectric Control," IEEE Trans. Biomed. Eng. Vol. 40, no:1.
- [12] Despopoulos,A.ve Silbernang, S.(1991) Color Atlas of Physiology., GTV, Stuttgart.
- [13] S. A. Dalley, H. A. Varol, and M. Goldfarb, "A Method for the Control of Multigrasp Myoelectric Prosthetic Hands," IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering, vol. 20, pp. 58-67, 2012.
- [14] De Luca, C.J., The use of surface EMG in biomechanics. Journal of Applied Biomechanics, volume 13, number 2, May 1997
- [15] Fidan C.B., "Dirsek Üstü Kol Protezinin YSA Kullanılarak DSP Tabanlı Bir Devre ile Gerçek Zamanda Kontrolü", Doktora Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bil. Enstitüsü, İstanbul, Türkiye, 2001.
- [16] Akay,A., "EMG Sinyalleri Kullanarak model Bir Araba Kontrolü", Yüksek Lisans Tezi, Karabük Üniversitesi Fen B. Enst., Karabük, Türkiye, 2015.

ISITMA SİSTEMLERİNDE IŞIMA KALKANI KULLANIMIN ISI TRANSFERİNE ETKİSİ

Onur KAYAPINAR, Prof.Dr.Oğuz ARSLAN

Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü
okayapinarsamsung@gmail.com, oguz.arslan@bilecik.edu.tr

ÖZET

Bu çalışmada ışımın ile ısı transferinin ısıtma sistemlerinde etkileri araştırılmış, literatürdeki deneysel çalışmalar göz önünde bulundurularak ışıma kalkanın ısıtma sistemlerindeki ışımın ile ısı transferine etkisi incelenmiştir. Fiziksel model olarak 60/50 °C ısıtma devresine ait panel radyatör dikkate alınmıştır. Çalışmada, kalkansız ve kalkanlı olmak üzere iki durum ele alınarak ısı transfer hesapları yapılmıştır. Sonuç olarak, ışıma kalkanı kullanımının ısı kayıplarını % 3 civarında azalttığı tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Işıma kalkanı, Isı kaybı, Isıtma sistemi.

ABSTRACT

In this study, the effects radiative heat transfer on the heating systems are investigated on the basis the experimental data conducted in the literature. In this aim, the effect of the radiation shield on the radiative heat transfer in the heating systems was investigated. As a physical model, a radiator used in the heating circuit with 60/50 °C was taken into account. In the study, two cases such as with radiative shielded and non-shielded were handles and heat transfer calculatios were performed for this aim. As conclusion, it was conducted that, using the radiatvie shield decreases the heat losses in a rate of 3%.

Keywords: Heat losses, Heating system, Radiation shield.

1. GİRİŞ

Elektromanyetik dalgalar şeklinde veya fotonlar vasıtasıyla gerçekleşen ısı transferi şekline ışınım (radyasyonla) ısı transferi denir. Elektromanyetik dalgaların veya fotonların ilerlemesi için maddesel bir ortama ihtiyaç yoktur. Bazı ısı transferi problemlerinde ışınım ile ısı transferi ihmal edilebilmektedir. Fakat sıcak bir borudan çevreye olan ısı transferinde ışınım ile olan ısı transferi taşınım yoluyla olan ısı transferine eşit olabilmektedir. Bunun gibi durumlarda ışınımı ihmal etmek büyük hatalara neden olmaktadır. Bu nedenle, mühendislik hesaplarında, duruma göre ışınım ile olan ısı transferini de hesaba katmak, ihmal etmemek dikkate alınması gereken bir konudur.

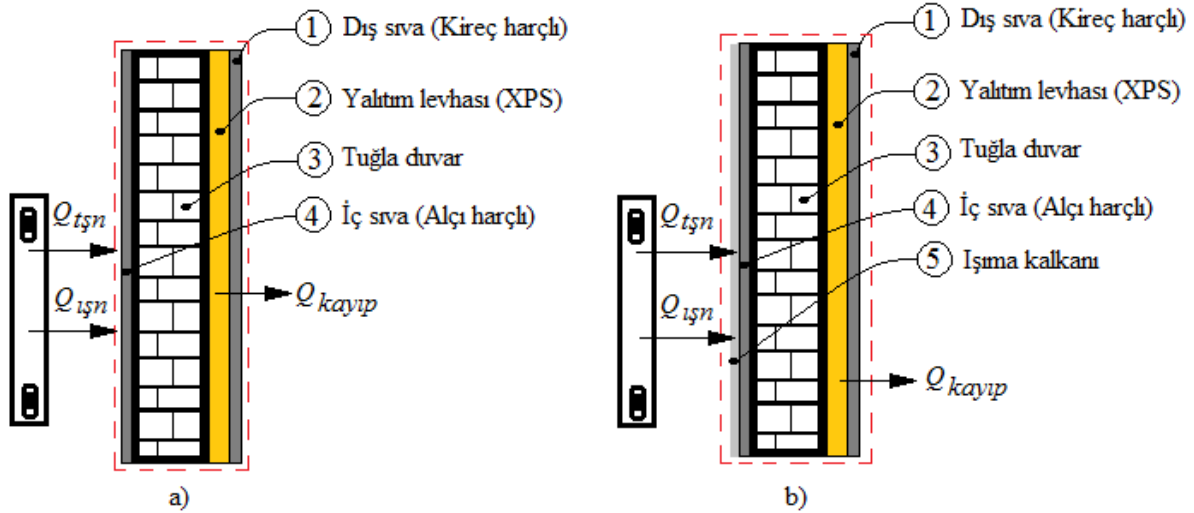
Saedodin vd. (2010), iç içe geçirilmiş iki silindir arasındaki ısı transferine ışıma kalkanının etkilerini inceleyen deneysel bir çalışma yapmıştır. Deney için kurulmuş fiziksel modelde dış silindir soğuk, iç silindir sıcaktır. Deney süresince ışıma kalkanı olarak bakır,alüminyum ve çelik materyal kullanılmıştır. Çevre basıncının 1 atm ve 0.2 atm olduğu iki farklı koşul için ışıma kalkanlarının performansı ölçülmüştür. Yapılan bu çalışmaya göre radyasyonla ışıma kaybı , yayılım katsayısı (ϵ) değerinin artması ile birlikte artmakta, çevre basıncındaki her hangi bir değişimde ihmal edilebilecek seviyede ışıma kaybı oluşmaktadır.Basıncın azaltılması taşınım ile ısı transferine etki ettiğinden, yapılan çalışmada düşük basınç

altında, toplam ısı kaybı azalmıştır. Deney sonucunda bakırın düşük ε değerinden dolayı alüminyum ve çelik ışıma kalkanına göre daha verimli olduğu, düşük ε değerinin ışıma kalkanı için belirleyici bir özellik olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Sadegh vd. (2015) yaptıkları çalışmada, bakır, alüminyum v çelik olmak üç farklı materyalden yapılmış ışıma kalkanı için ısı kayıplarını gözlemlemişler ve bakır kalkanın diğerlerine göre daha olumlu sonuçlar verdiğini tespit etmişlerdir. Guenther ve Jurandir (2012) yılında yaptıkları çalışma ile su içerisinde kısmen yüzen bağlantı kablolarındaki ısı dağılımını modellemişlerdir. Isı transferini modellemek amacıyla Fluent yazılımı kullanılmıştır. Rüzgar hızı, hava sıcaklığı, güneş ışınımı ve kablunun ısı yayma oranı bu çalışma için belirleyici kısımlar olarak belirlenmiştir. Yapılan çalışmaya göre su üzerinde kalan kablo kısmı sıcak çevre şartlarından ve güneş ışınımından etkilenmektedir. Çevresel koşullardaki minimal değişimlerin, kablo içerisindeki ışıma kalkanının dış yüzeyinde büyük sıcaklık düşümüne neden olduğu belirlenmiştir. Ibrahim vd. (2012), yaptıkları deneysel çalışma ile bir pişirme fırını için ağ sunum yöntemini kullanarak ışınım ile ısı transferini modellemişlerdir. Deneysel çalışmada ele alınan fırın $\varepsilon=0.5$ değerine sahip olup, fırın modelinde aynı zamanda sıcaklık ölçümleri yapılmıştır. Çalışma sonucunda, bir pişirme fırını için ışıma ile ısı transferinin ağ sunum modeli oluşturulmuştur.

Bu çalışmada, konutlarda ısıtma amaçlı olarak kullanılan radyatörlerden ısıl ışıma bağlı olarak gerçekleşen ısı kayıpları hesaplanmış, radyatör arkası ışınım kalkanı kullanılması durumunda gerçekleşecek ısı kayıplarındaki değişim araştırılmıştır.

2. MATERYAL ve METOT

Çalışmada, 60/50 ısıtma devresi için ortalama yüzey sıcaklığı $T_{rad} = 55^\circ\text{C}$ olan ev tipi bir radyatör ele alınmış ve çalışmanın fiziksel modeli (kontrol hacmi) oluşturulmuştur. Çalışmada, ele alınan kontrol hacmi sadece radyatör alanı kadar ışınımın etkili olduğu bölge olarak belirlenmiş olup, fiziksel model kalkanlı ve kalkansız olmak üzere Şekil 1’de verildiği gibidir.



Şekil 1. Fiziksel model; a) Kalkansız ve b) Kalkanlı.

Ele alınan fiziksel model için oda sıcaklığının 22°C olduğu kabul edilmiş ve radyatörden gerçekleşen ısı transferinin ışınım ve taşınım olmak üzere iki temel mekanizmadan gerçekleştirdiği dikkate alınmıştır. Fiziksel modelde kullanılan yapı bileşenlerine ait termodinamik özellikler Tablo 1’de verildiği gibidir.

Tablo 1. Yapı bileşenlerine ait fiziksel özellikler (TSE, 1998; Yüncü ve Kakaç, 1999).

Bileşen No	Özellik	Birim	Değer					
1	k	W/mK	0,87					
	l	m	0,03					
2	k	W/mK	0,03					
	l	m	0,05					
3	k	W/mK	0,45					
	l	m	0,19					
4	k	W/mK	0,87					
	l	m	0,02					
			Kalkansız	Alüminyum	Kalay	Bakır	Paslanmaz Çelik	Dökme Demir
5	$l_{kaplama}$	m	-	$0,01 \times 10^{-3}$	$0,01 \times 10^{-3}$	$0,01 \times 10^{-3}$	$0,01 \times 10^{-3}$	$0,01 \times 10^{-3}$
	$k_{kaplama}$	W/mK	-	164	64	386	16,3	51,9
	l_{levha}	m	-	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002
	k_{levha}	W/mK	-	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04

Sürekli rejim kabulüyle, ele alınan fiziksel modele ait enerji dengesi en genel haliyle Eşitlik (1)'de verildiği gibidir;

$$Q_{tşn} + Q_{ışn} = Q_{kayıp} \quad 1$$

Burada, $Q_{tşn}$; radyatör arkasında doğal taşınım ile radyatörden gerçekleşen ısı transferini, $Q_{ışn}$; radyatör arkasındaki ışınım ile ısı transferini, $Q_{kayıp}$; toplam ısı kazancını tanıduvardan gerçekleşen ısı kaybını tanımlamaktadır. Isı taşınım ifadesi en genel haliyle;

$$Q_{taşınım} = h \cdot A \cdot \Delta T \quad 2$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada; A ve ΔT terimleri sırasıyla ısı transfer alanı ve sıcaklık farkını tanımlamakta olup, h ise ısı taşınım katsayısıdır ve aşağıdaki gibi verilir;

$$h = \frac{k}{L} \cdot Nu \quad 3$$

Nu (Nusselt) sayısı boyutsuz ısı transfer katsayısı olup, ele alınan problem için aşağıda verilen bağıntı ile hesap edilmiştir (Yüncü ve Kakan, 1999).

$$Nu = (C \cdot Ra_L)^m \quad 4$$

Burada, Ra ; Rayleigh sayısı olup aşağıdaki olup;

$$Ra_L = \frac{g \cdot \beta \cdot (T_{rad} - T_{oda}) \cdot L^3}{\nu^2} \cdot Pr \quad 5$$

eşitliği ile verilmektedir. Türbülanslı akış durumu için C ve m değerleri sırasıyla 0,1 ve 1/3 olarak hesaplamalara dahil edilmiştir. Pr ; Prandtl sayısını, ν ; kinematik viskoziteyi ve termal genişleme katsayısını tanımlamakta olup ideal gaz kabulüyle hava için literatürdeki değerler dikkate alınmıştır. Işınım ile gerçekleşen genel ısı transfer bağıntısı ise;

$$Q_{ışın} = \frac{\sigma \cdot A \cdot (T_{rad}^4 - T_{yüzey,duvar}^4)}{\frac{1}{\epsilon_{rad}} + \frac{1}{\epsilon_{yüzey,duvar}} - 1} \quad 6$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada, ϵ ; yayılım katsayısını, σ ; Stefan-Boltzman sabitini tanımlamaktadır. Matematiksel model’de kullanılan ve hesap edilen değerler Tablo 2’de verildiği gibidir. Duvar yüzeyin kaybolan ısı ise Eşitlik 7 ile verilen ifade kullanılarak hesaplanmış olup, duvar yüzey sıcaklıkları, matematiksel model sonucu elde edilen açık ifadenin deneme yanılma yoluyla çözümüyle elde edilmiştir.

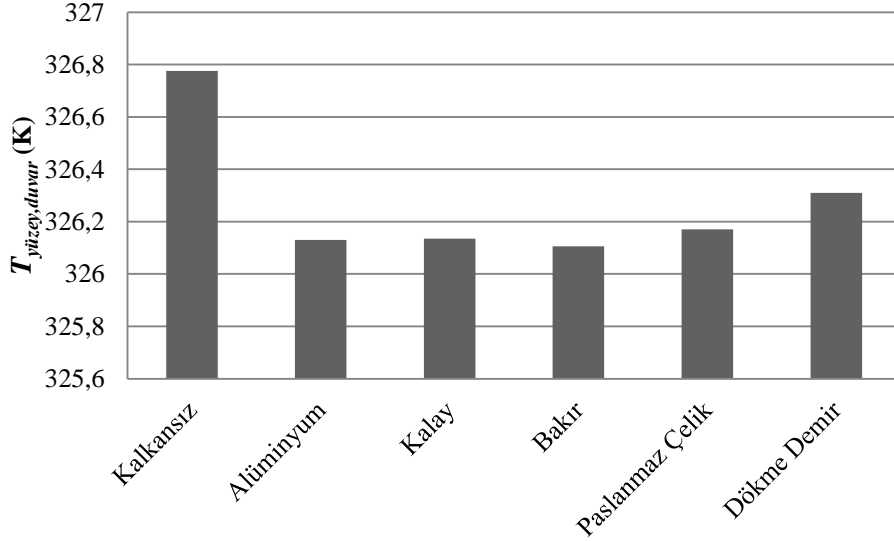
$$Q_{kayıp} = \frac{A \cdot (T_{yüzey,duvar} - T_{dış})}{\frac{l_1}{k_1} + \frac{l_2}{k_2} + \frac{l_3}{k_3} + \frac{l_4}{k_4} + \frac{l_5}{k_5} + \frac{1}{h_{dış}}} \quad 7$$

Tablo 2. Matematiksel modele ait hesap değerleri (Yılmaz ve Bulut, 2001; Yüncü ve Kakaç, 1999).

Parametre	Birim	Değer					
T_{oda}	K	295,15					
T_{rad}	K	328,15					
$T_{dış}$	K	267,75					
Isı transfer alanı	m ²	4,5					
k_{hava}	W/m ² K	2,57 x10 ⁻²					
ν	m ² /s	15,11x10 ⁻⁶					
Pr	-	0,713					
B	1/K	3,39x10 ⁻⁶					
Nu	-	301,96					
Ra_L	-	2,75x10 ⁹					
h_{ic}	W/m ² K	12,93					
$h_{dış}$	W/m ² K	25,00					
		Kalkansız	Alüminyum	Kalay	Bakır	Paslanmaz Çelik	Dökme Demir
$\epsilon_{yüzey,duvar}$	-	0,95	0,039	0,043	0,018	0,074	0,21
ϵ_{rad}	-	0,95					

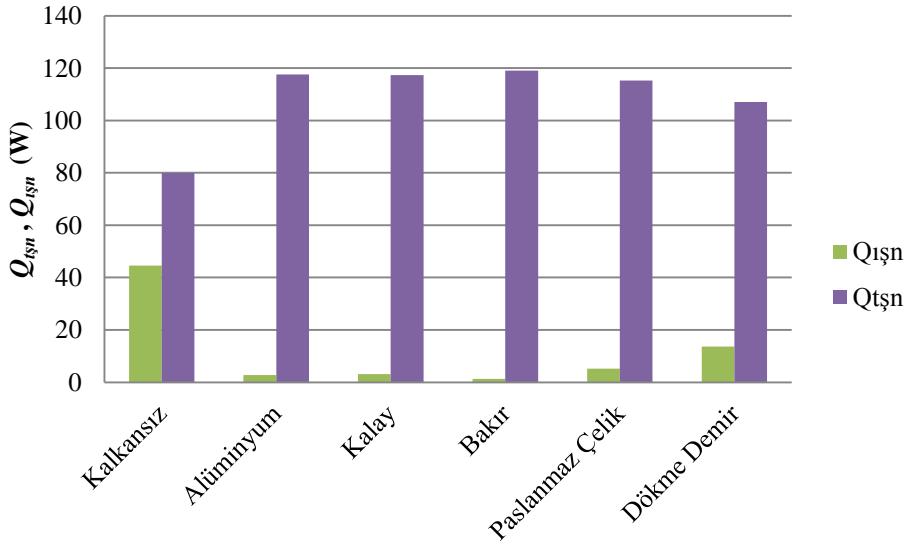
3.BULGULAR ve TARTIŞMA

Işıma kalkanı kullanımı ile Şekil 1’de gösterilen fiziksel model için 4 farklı kaplama malzemesinin ele alındığı kalkan kullanımı dikkate alınmış, ve kalkansız duruma göre ısı kayıplarındaki değişim incelenmiştir. Kalkan malzemesi, 0.002 m kalınlığında poliüretan köpük üzerine 0,01 x10⁻³ m kalınlığında alüminyum, paslanmaz çelik, kalay, dökme demir ve bakır kaplamadan oluşturulmuştur. Şekil 2’de kalkanlı ve kalkansız durumlar için oluşturulan altı farklı modele ait yüzey sıcaklıklarının değişimi verilmektedir.



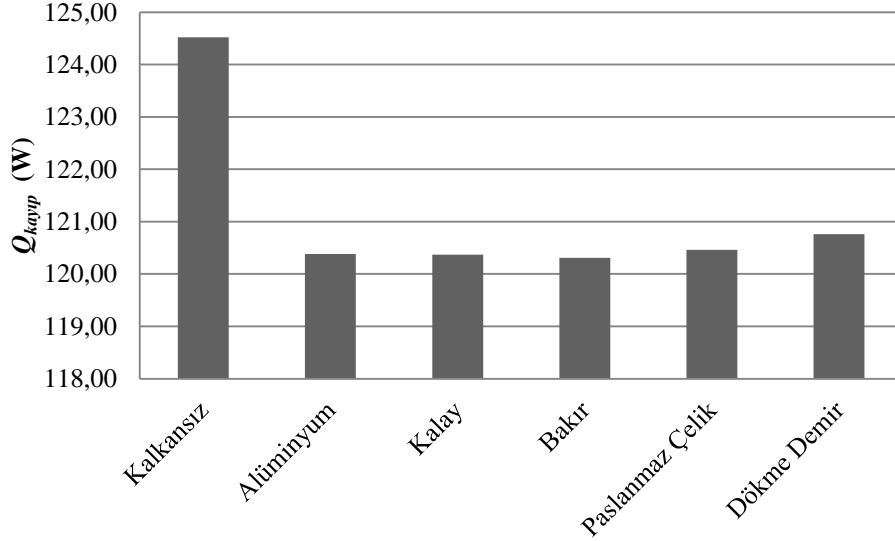
Şekil 2. İç duvar yüzey sıcaklık değerleri.

Şekil 2 incelendiğinde, duvar yüzey sıcaklıklarının 326,1 K ile 326,8 K arasında değiştiği görülmektedir. Maksimum sıcaklık değişimi 0,7 K olarak hesap edilmiş olup ihmal edilebilecek düzeydedir. Ancak, ısı kaybı hesaplarında bu durumun dikkate alınması gerekmekte ve ihmal edilip edilemeyeceği kararı bu doğrultuda verilmelidir. Buna göre, ele alınan model için ışınlım ve taşınımaya bağlı olarak gerçekleşen ısı transferleri Şekil’de verilmektedir.



Şekil 3. Işınlım ve taşınım ile gerçekleşen ısı transferleri.

Şekil 3’e göre, kalkansız durum için gerçekleşen taşınım ile ısı transferi 79,97 W olarak hesap edilmiş, bu değer ışınlım ile ısı transferi için 44,45 W olarak hesaplanmıştır. Bu değerler, alüminyum, kalay, bakır, paslanmaz çelik ve dökme demir kaplama durumları için sırasıyla 117,6-2,8 W, 117,3-3,1 W, 119,0-1,3 W, 115,2-5,2 W ve 107,1-13,7 W olarak hesap edilmiştir. Buna göre, ele alınan model için duvardan gerçekleşen ısı kayıpları hesaplanmış ve sonuçları Şekil 4’de verilmektedir.



Şekil 4. Duvardan gerçekleşen kayıp ısı miktarları.

Şekil 4'e göre, kalkan kullanılması durumunun kalkansız duruma göre kayıpları azalttığı görülmektedir. Kalkansız durum için gerçekleşen ısı kaybı 124,52 W olarak hesap edilmiştir. Bu değerler, alüminyum, kalay, bakır, paslanmaz çelik ve dökme demir kaplama durumları için sırasıyla 120,38 W, 120,37 W, 120,31 W, 120,46 W ve 120,76 W olarak hesaplanmıştır. Kalkansız duruma göre ısı kayıplarındaki değişim % 3,02 ile % 3,38 arasında gerçekleşmiştir.

4. SONUÇ

Yapılan bu çalışma ile ele alınan fiziksel model için ışıma kalkanı kullanımının ısı kayıplarına etkisi belirlenmiştir. Kalkan kullanılması durumunun taşınım ile gerçekleşen ısı transferini artırmasına rağmen, ışıma ile gerçekleşen ısı transferini önemli ölçüde düşürdüğü görülmektedir. Gerçekleşen ısı kayıplarında ise % 3 civarında bir azalmanın gerçekleştiği tespit edilmiş olup, bu değer aynı oranda kazanç anlamı taşımaktadır.

Kalkanlı durumlar ele alındığında, ışıma bağlı ısı transferinde ve ısı kayıplarındaki değişimin çok küçük miktarlarda gerçekleştiği ve ihmal edilebilir olduğu anlaşılmaktadır. En uygun durumun belirlenmesi açısından durumun maliyet analiziyle birlikte değerlendirilmesi gerekmektedir.

KAYNAKLAR

- Guenther., K., Jurandir, Y., 2012. Prediction of the temperature distribution of partially submersed umbilical cables. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences., 34: no.2 Rio de Janeiro Apr./June 2012.
- Ibrahim, U., Mohd, R., Zhou W., 2012. Radiation Heat Transfer Analysis in High Emissivity Baking Oven Using Network Representation Metot. ICCCP 2012: 5-6 May 2012, Kuala Lumpur, Malaysia.

Saedodin, S., Sadegh, M., Barforoush, M. 2010. Experimental and numerical investigations on enclosure pressure effects on radiation and convection heat losses from two finite concentric cylinders using two radiation shields, *Energy*, 90:652-662.

Sadegh, M., Barforoush, M., Saedodin, S., 2015. Heat transfer reduction between two finite concentric cylinders using radiation shields; Experimental and numerical studies, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 65: 94–102.

TSE (Türk Standartları Enstitüsü), TS 825: Binalarda Isı Yalıtımı, 1998.

Yılmaz, T., Bulut H., Türkiye İçin Yeni Dış Ortam Sıcaklık Tasarım Değerleri, V. Ulusal Tesisat Mühendisliği Kongresi ve Sergisi, Bildiriler Kitabı, sf: 93-311, 3-6 Ekim 2001, İzmir, Türkiye.

Yüncü H., Kakaç., S., 2009. Temel Isı Transferi, Bilim Yayıncılık, Ankara.

THEORETICAL CALCULATIONS FOR ENERGY LEVELS IN Ne ISOTOPES

Dr. Serkan AKKOYUN

^aDepartment of Physics, Faculty of Science, Sivas Cumhuriyet University, Sivas, Turkey
sakkoyun@cumhuriyet.edu.tr

Dr. Tuncay BAYRAM

^bDepartment of Physics, Faculty of Science, Karadeniz Technical University, Trabzon,
Turkey

^cIstituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro, I-35020 Legnaro
(PD), Italy
t.bayram@ktu.edu.tr

ABSTRACT

One of the best model is nuclear shell model for investigation of nuclear structure. In order to describe the low-lying spectra of nuclei, the model has been used successfully. In this study, the energy levels of Ne isotopes have been calculated in the scope of the nuclear shell model by using KShell computer code. In the calculations, ^{16}O inert core were considered and $d_{5/2}$, $s_{1/2}$ and $d_{3/2}$ single particle orbitals have been used as model space in which all of the sd nucleons are active. Different interactions existing in the literature which is used for the sd model space have been taken for two-body interactions. Excited state spin, parity and energy values have been obtained for Ne isotopes. Also, reduced electric transition probabilities (B(E2)) have been calculated. The results have been compared each other and the experimental values in the literature. The closest result to the experimental values was determined.

Keywords: Shell Model, energy levels, sd shell, Ne, KShell code

1.INTRODUCTION

As in the case of electron shell model of atom, atomic nucleus is also assumed to be composed of shells. Nucleons, protons and neutrons, fill the shells from lowest energy level by increasing energy values with obeying quantum mechanical restrictions. The shells for protons and neutrons are independent of each other. The nuclear shell model is a quite successful model for understanding of atomic nucleus [1-7]. In the model, a core nucleus is considered as inert. Only valence nucleons outside the inert core are active in considered model space. According to the large shell gaps which corresponds to nuclear magic numbers (2, 8, 20, 28, 82 and 126), there are several core nuclei such as ^4He , ^{16}O , ^{40}Ca , ^{56}Ni , etc.

Identification of the spin, parity and energies of nuclear levels are important way in order to investigation of the nuclear structure properties. By this purpose, usage of nuclear shell model is one of the most featured and successful nuclear models. In this paper, the excited level energies, spins and parities of even-even Ne isotopes and reduced quadrupole transition

probabilities from 0^+ to 2^+ have been calculated. Doubly magic ^{16}O has been considered as inert core. The nucleons in the core with $J=0$ do not move from the core. Additional two protons and zero to ten neutrons which correspond to ^{18}Ne to ^{28}Ne isotopes have been separately treated as valance nucleons. The model space contains $d_{5/2}$, $s_{1/2}$ and $d_{3/2}$ single particle orbits whose short name is sd-shell model space. USDB [8] effective interaction has been handled for the two-body interaction between nucleons. In the calculations, Kshell shell-model computer code has been operated [9]. The Kshell code enables us to perform nuclear shell-model calculations with M-scheme representation with the thick-restart Lanczos method. The code is used on a Linux operating system with a many-core CPU and OpenMP library. It is also used on a state-of-the-art massive parallel computer with hybrid MPI+OpenMP parallel programming. It can compute energy levels, spin, isospin, magnetic and quadrupole moments, E2/M1 transition probabilities and one-particle spectroscopic factors. If enough memory is available on the computers, up to tens of billions M-scheme dimension is capable.

2. THEORETICAL FRAMEWORK

Valance nucleons move in a finite number of j-orbits. The Hamiltonian of the valance nucleons is given by

$$H = E_0 + \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + 1/2 \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

where E_0 is the energy of the inert core, ϵ_i is the single particle energies of the valance orbits and $\langle ij|V|kl \rangle$ term is two-body interaction matrix elements of residual interaction amongst the valance particles. The last terms (a^\dagger and a) are particle creation and annihilation operators. In the calculations, single particle energies for $d_{3/2}$, $d_{5/2}$ and $s_{1/2}$ orbitals are +1.647, -3.948 and -3.164, respectively. The USDB interaction is a standard interaction for sd model space covering nuclei from mass number $A=18$ to $A=38$. The interaction Hamiltonian is defined by 63 two-body matrix elements.

Reduced quadrupole transition probability ($B(E2)$) values are in particular importance in nuclear structure studies. The values are a key measure of collectivity in nuclei. $B(E2)$ includes nuclear information about energy of low-lying levels of nuclei. The first excited states of the even-even nuclei are 2^+ . The transition from this state to the 0^+ ground state is highly related to nuclear quadrupole deformation parameter (β), mean lifetime (τ) and electric quadrupole moment (Q_0). The $B(E2)$ values of the nuclei have been compiled by Raman et al. [10].

3. RESULTS and DISCUSSION

Nuclear energy levels, nuclear spins (J), nuclear parities (π) and reduced quadrupole transition probabilities ($B(E2)$) of even-even neon isotopes have been calculated by Kshell computer code with USDB interaction. First then positive parity states have been obtained in the

calculations but only values whose exist in the literature have been given. As can be seen in the Table 1 that the calculated results are close to the available experimental values.

In case of stable ^{18}Ne isotope, only for levels have been compared. The maximum and minimum difference between calculated and experimental energy values are 151 keV for 4^+ state and 3 keV for 0_2^+ state. For the next stable isotope ^{20}Ne , these maximum and minimum are 231 keV for $6+$ and 27 keV for 0_2^+ states. In the last stable isotope of neon, ^{22}Ne , ten states have been compared and maximum deviation from experimental values is 238 keV. For this isotope, 4^+ state energy has been calculated exactly as 3357 keV. The next even-even isotope is ^{24}Ne which is an unstable isotope of neon with 3.38 min half-life. The excited energy states have been obtained with 195 and 13 keV maximum and minimum deviations. ^{26}Ne isotope is radioactive, too, with 197 ms. Their maximum and minimum deviations of calculated values from experiment are 77 and 7 keV, respectively. Spin and parities of only 0^+ and 2^+ states are exact in the literature. The next states are unambiguously determined as $(3^+,4^+)$, (2^+) , (0^+) and $(3^+,4^+)$, respectively. In our calculations, we have theoretically estimated them as 4^+ , 2^+ , - and 3^+ . For the last isotope which we have investigate, again, only first two states spins and parities assigned ambiguously. The next two states have been given as (4^+) and (4^+) . In our calculation we have calculated them as 4^+ and 2^+ . The maximum and minimum deviations in energies are 319 and 20 keV.

We have also calculated $B(E2)$ values from ground state to first $2+$ excited state for the neon isotopes (Figure 1). As is seen in the figure, the calculated values are not so close to the adopted data. Only for $^{20,26}\text{Ne}$, the data are close with each with the calculated and experimental values of 0.034 and 0.030 for ^{20}Ne and 0.0228 and 0.0249 for ^{26}Ne .

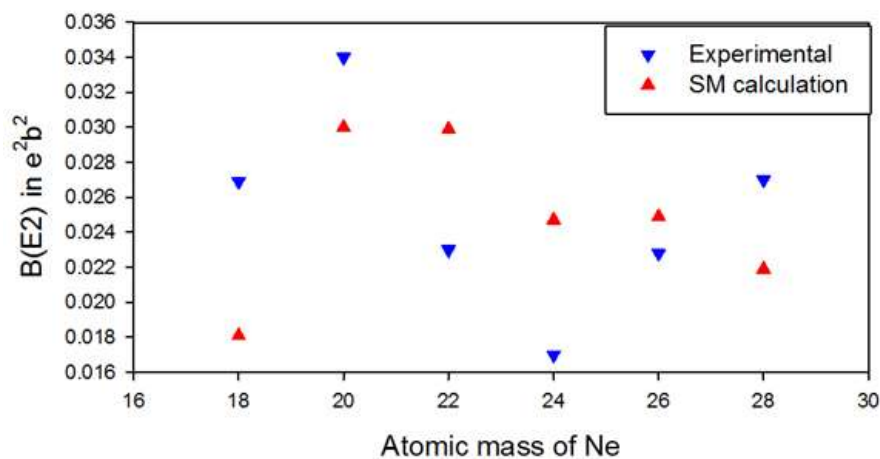


Figure 1: The calculated reduced electric quadrupole transition probabilities $B(E2)$ of Ne isotopes in comparison with literature adopted values.

$B(E2)$ value reach the maximum for ^{20}Ne isotope in both calculation and adopted data. After this isotope, it starts to decrease according to the our calculations and takes its minimum is for ^{18}Ne . In adopted data, after maximum value it decreases and takes the minimum for ^{24}Ne and then start again to increase.

Table 1. Experimental and calculated energy levels of even-even Ne isotopes

	Nuclear Energy Level (keV)

J, π	Experimental	SM calculation	Difference
^{18}Ne			
0, +	0	0	0
2, +	1887	1998	-111
4, +	3376	3527	-151
0, +	4590	4593	-3
^{20}Ne			
0, +	0	0	0
2, +	1634	1747	-113
4, +	4248	4175	73
0, +	6725	6698	27
2, +	7421	7543	-122
6, +	8778	8547	231
4, +	9990	9945	45
4, +	10553	10493	60
^{22}Ne			
0, +	0	0	0
2, +	1275	1363	-88
4, +	3357	3357	0
2, +	4456	4284	172
2, +	5363	5125	238
4, +	5523	5367	156
1, +	5329	5404	-75
3, +	5641	5461	180
2, +	6119	6175	-56
6, +	6311	6244	67
^{24}Ne			
0, +	0	0	0
2, +	1982	2111	-129
2, +	3868	3748	120
4, +	3972	3985	-13
0, +	4767	4962	-195
2, +	5575	5547	28
^{26}Ne			
0, +	0	0	0
2, +	2018	2063	-45
(3,4), 4, +	3517	3510	7
(2), 2, +	3690	3767	-77
(3,4), 3, +	5360	5367	-7
^{28}Ne			
0, +	0	0	0
2, +	1304	1623	-319
(4), 4, +	3010	2990	20
(4), 2, +	3904	3988	-84

4. SUMMARY

In the scope of nuclear shell-model calculations, the nuclear structure properties of even-even Ne isotopes have been studied. The nuclear excited energy levels, nuclear spins and parities and reduced quadrupole transition probabilities of these isotopes have been obtained and compared with available experimental data. It should be noted that the calculated results of

B(E2) have not been as to be close to the literature data except several isotopes. However, for the energies, spins and parities, the calculated results are found to be in agreement with available experimental data.

ACKNOWLEDGMENT

This work is supported by the scientific research project fund of Sivas Cumhuriyet University under the project number SHMYO-015.

REFERENCES

- [1] Mayer, M.G. Phys.Rev. 75, 1969, 1949.
- [2] Jensen, J.H.D., etal. Phys.Rev. 75, 1766, 1949.
- [3] Mayer, M.G. Phys.Rev. 74, 235, 1948.
- [4] Mayer, M.G. Phys.Rev. 78, 16, 1950.
- [5] Talmi, I. Int.J.Mod.Phys.E 14, 821,2005.
- [6] Caurier, E., etal. Rev.Mod.Phy. 77, 427, 2005.
- [7] Brown, B.A. Prog.Part.Nucl.Phys. 47, 517, 2001.
- [8] Brown, B.A. and Richter, W.A. Phys.Rev.C 74, 034315, 2006.
- [9] Shimizu, N. Nuclear shell-model code for massive paralel computation, KSHELL, arXiv:1310.5431 [nucl-th], 2013.
- [10] Raman, S., Nestor, C. W. and Tikkanen, P. (Atom.Data.Nucl.Data, 78, 1, 2001.

**REDUCED ELECTRIC QUADRUPOLE TRANSITION
PROBABILITIES OF Mg ISOTOPES**

Dr. Tuncay BAYRAM

Department of Physics, Faculty of Sciences, Karadeniz Technical University, Trabzon, Turkey
INFN, Laboratori Nazionali di Legnaro, Legnaro (PD), Italy
t.bayram@ktu.edu.tr

Dr. Serkan AKKOYUN

Department of Physics, Faculty of Sciences, Cumhuriyet University, Sivas, Turkey
serkan.akkoyun@gmail.com

ABSTRACT

Reduced quadrupole transition probability of nuclei $B(E2)$ is an important phenomenon for determination of deformation for nuclei in its ground state. There can be found many experimental efforts to determination of $B(E2)$ values through wide region of nuclidic chart. However, experimental determination $B(E2)$ values of nuclei close to neutron rich and proton rich side of Segre chart is not easy task because production rate of this nuclei may not provide statistically enough data. Therefore theoretical predictions of $B(E2)$ values for nuclei close to proton and neutron drip-lines are welcome. In this study, we have carried out theoretical predictions of even-even magnesium isotopes starting from mass number $A=20$ to $A=40$ by means of covariant density functional theory with density dependent PC1 interaction. Magnesium (Mg) isotopes have been considered as axially symmetric and both prolate and oblate shape configuration of magnesium nuclei have been taking into account. By using obtained electric quadrupole deformation parameters of Mg nuclei, $B(E2)$ values for Mg nuclei have been calculated. Furthermore ground-state binding energies, nucleon separation energies and rms charge radii of even-even Mg nuclei have been calculated and discussed in detail by using available experimental data and other nuclear model results.

Keywords: Deformation, ground state, $B(E2)$, covariant density functional theory, Mg

1. INTRODUCTION

Investigation of deformation and shape of nuclei is a hot topic in nuclear physics research. There can be found many excellent works on deformations and shape of nuclei theoretically and experimentally. Also, recent introducing of new symmetries related with shape phase transition of nuclei triggered studies on this topic (Casten and McCutchan, 2007). Studies on deformation of nuclei are required spectroscopic knowledge of nuclei interested. Transition energies and reduced transition probabilities $B(E2)$ are important tools for determination of deformation of nuclei. By means of $B(E2)$ there can be found limited number of available data (Raman et al. 2001) and any theoretical works can insight into more knowledge about deformation of Mg isotopes. From theoretical side, there are many compatible nuclear models for describing nuclear properties of nuclei such as macroscopic, microscopic and algebraic (Greiner and Maruhn, 1996). One of the successful nuclear models for predictions of nuclear

properties of finite nuclei is relativistic mean field (RMF) model (Bayram ve Yilmaz, 2013 and references therein).

In the present study, RMF model with density-dependence has been employed to study on deformation and B(E2) values of even-even Mg isotopes between mass number A=20 and A=40. Nuclear ground-state properties of considered Mg isotopes such as binding energies, root mean square (rms) charge radii and quadrupole deformation parameter have been calculated and compared with available experimental data together with other nuclear model results. By using calculated deformation parameter in a semi empirical formula, B(E2) values of Mg isotopes have been carried out.

2. THEORETICAL FRAMEWORK

There can be found many nuclear model for calculating ground state properties of nuclei (Greiner W. and Maruhn J. A, 1996). One of the most successful nuclear models is relativistic mean field (RMF) model and it has been used for studying of nuclear structure of nuclei during last forty years (Bayram, T. and Yilmaz A. H., 2013). An excellent review on RMF model can be found in the book (Meng, J., 2016) and reference therein. On the other hand the RMF model has different type of versions by means of handling interaction i.e. non-linear, density-dependent and point coupling methods. In the present study we have considered density dependent point coupling version of RMF model and therefore we restrict ourselves to giving details about only density dependent point coupling version of RMF model.

The RMF mean field model is a microscopic phenomenological nuclear model because it starts with nucleon-nucleon interaction by using various mesons exchanges between nucleons as well as it covers free nucleon and mesons. The starting point of RMF model is a Lagrangian density given by

$$L = \bar{\psi}(i\gamma \cdot \partial)\psi - \frac{1}{2}\alpha_S(\rho)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V(\rho)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TV}(\rho)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) - \frac{1}{2}\delta_S(\delta_\nu\bar{\psi}\psi)(\delta^\nu\bar{\psi}\psi) - e\bar{\psi}\gamma \cdot A \frac{(1-\tau_3)}{2}\psi. \quad (1)$$

This equation covers the isoscalar-scalar, isoscalar-vector and isovector-vector four-fermion interactions (Niksic, T. et al., 2008). The Lagrangian density given by Eq. (1) can be transformed two coupled set of equations after application of variation principle. Therefore, Dirac like equation for fermions and Klein-Gordon like equations for mesons called RMF equations can be obtained and they can be solved iteratively for obtaining ground state nuclear properties of nuclei in mean field formalism. Details of solution of RMF model and numerical prescription which is followed in the present study can found in the study of Niksic et al. (Niksic, T. et al. 2014). It should be noted that DD-PC1 density-dependent interaction (Niksic, T. et al., 2008) for our RMF calculations have been considered in the present study.

3. RESULTS AND DISCUSSION

In the present study we have employed RMF model calculation by using DD-PC1 interaction for carrying out ground-state properties of Mg isotopic chain. First we have obtained binding energies of Mg isotopes. In Figure 1, the calculated binding energies per nucleon (BE/A) for Mg isotopes are shown. Also the results of RMF+NL3* (Bayram, T. and Yilmaz A. H., 2013), non-relativistic Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) with Sly4 parameter set (Dobaczewski, J., 2004), Finite Range Droplet Model (FRDM) taken from the study of Möller et al. (Möller, P., 1997) and experimental data (Wang, M. et al., 2011) are shown for comparison. As can be seen in the Figure 1, general tendency of all theoretical predictions for BE/A of Mg isotopes are found as in agreement with experimental data. It should be noted that RMF+DD-PC1 calculation results are closer to experimental data more than those of RMF+NL3* calculations. The best agreement with experimental data is coming from FRDM results but this model is fitted with many parameters for perfect match of binding energies for experimental data.

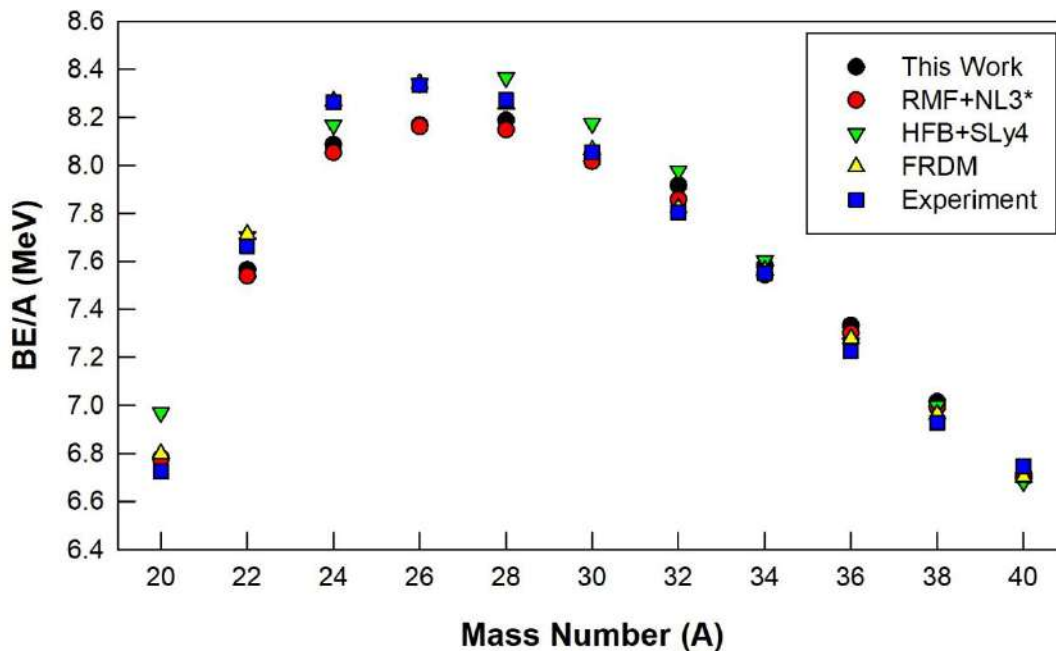


Figure 1: The calculated binding energies per nucleon (BE/A) with RMF+DD-PC1 model for Mg isotopes as in comparison with other model predictions and available experimental data.

As it is well known nuclei can have different shape in its ground state such as spherical, prolate and oblate shape. Prolate and oblate shapes are deformed shapes for nuclei. Electric quadrupole deformation parameter (β_2) is related with deformation of nuclei. In the case of spherical nuclei β_2 value is close to zero. If nuclei have magic neutron or proton number, we called this type of nuclei as stable nuclei in its isotopic chain because it has lowest energy when it is compared with other nuclei in its isotopic chain. It has spherical shape. Magicity of nuclei is related with its having closed shell for neutrons or protons. In the case of Mg isotopes, it has 12 protons. One can expect that ^{20}Mg and ^{32}Mg nuclei have spherical shape because it has 8 and 20 magic neutron numbers, respectively. its β_2 value should be close to

zero in these neutron numbers. These discussions are clearly visible in the Figure 2 for ^{20}Mg and ^{32}Mg nuclei. All model predictions for β_2 value has general tendency for going to zero starting from mass number $A=24$ to $A=32$ and starting to have bigger value from $A=32$ to $A=40$. Except ^{20}Mg and ^{32}Mg nuclei, the calculated and observed data shows that Mg isotopes have higher deformation parameters values and they are highly deformed in their f-ground states.

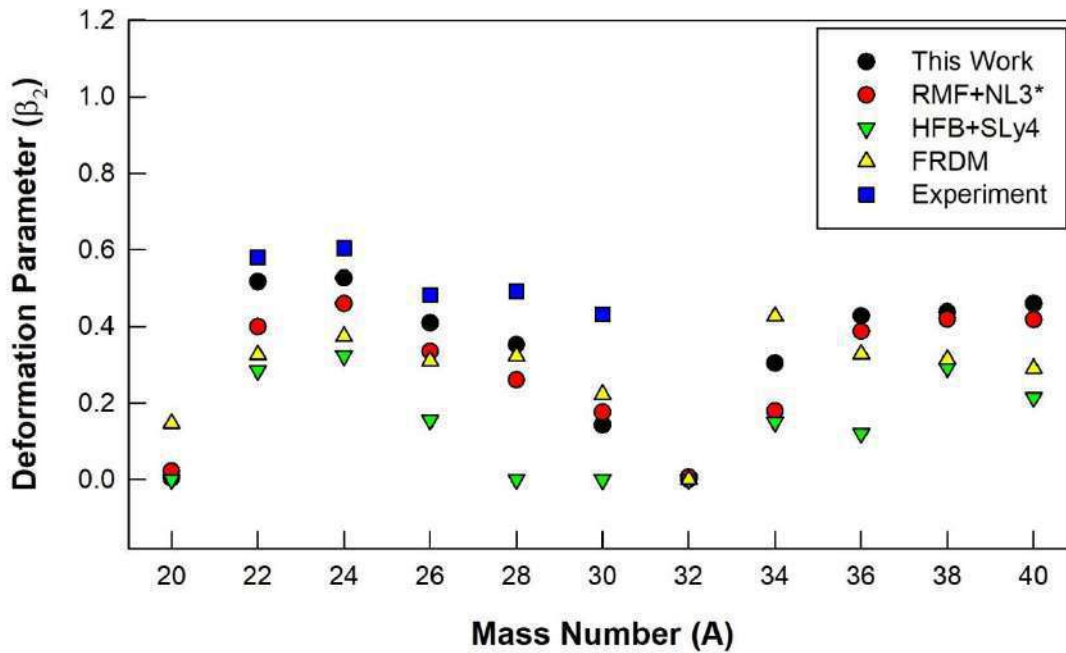


Figure 2: The calculated electric quadrupole deformation parameters (β_2) with RMF+DD-PC1 model for Mg isotopes as in comparison with other model predictions and available experimental data.

Furthermore, mean field formalism has capability to correct prediction for size of nuclei. Because there is no possibility to direct measuring the size of nuclei, one of the observable for size of nuclei root mean square (rms) charge radii. In Figure 3, the calculated rms charge radii of Mg isotopes are shown in comparison with the results of RMF+NL3* (Bayram, T. and Yilmaz A. H., 2013), HFB+SLy4 (Dobaczewski, J., 2004) and small numbers of available experimental data (Angeli, I. and Marinova, K. P., 2015). As one can expect that adding of neutrons increases the rms charge radii of Mg isotopes starting from ^{32}Mg .

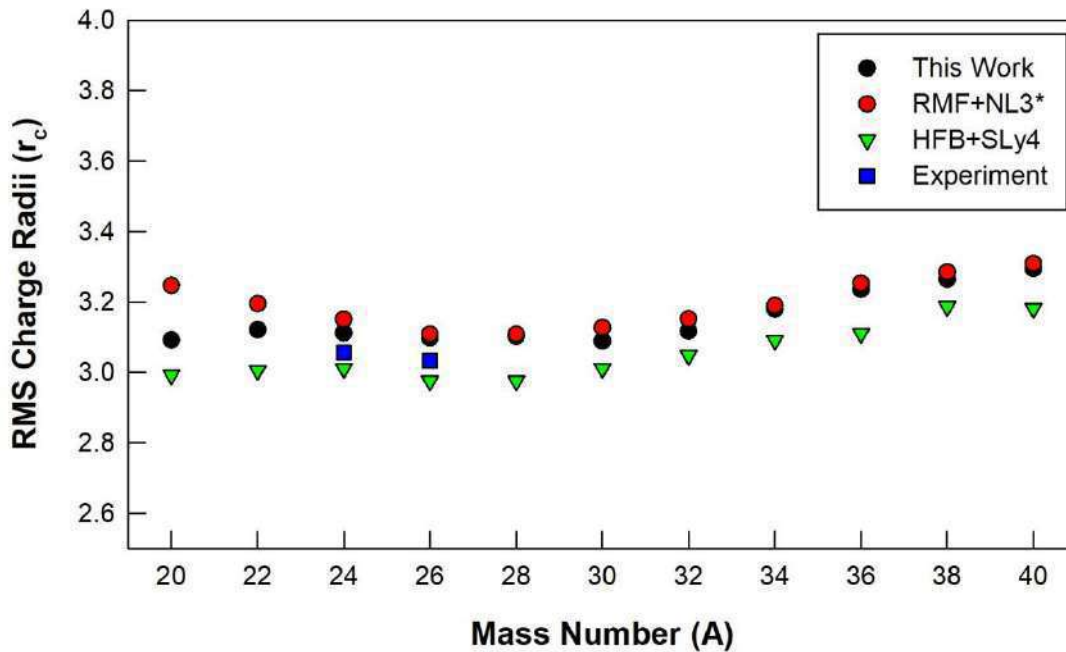


Figure 3: The calculated root mean square charge radii with RMF+DD-PC1 model for Mg isotopes as in comparison with other model predictions and available experimental data.

Nuclei can exhibit different type of shapes in their ground state such as spherical, deformed (prolate and oblate) and gamma-soft shape. These geometrical shapes can be interpreted by means of symmetries having nuclei. An excellent review can be found in the study of Casten and McCutchan. Experimental nuclear spectroscopic knowledge for nuclei such as transition energies for different levels of nuclei and reduced electric quadrupole transition rates are useful for der-termination of deformation of nuclei. Reduced quadrupole transitions can be determined from life-time measurement by using Doppler Shift Method (Dewald, A. et al., 2012). On the other hand there is a small number of available experimental data on reduced electric quadrupole transitions B(E2) on Mg isotopes. In mean field formalism direct calculating of B(E2) cannot be possible but predictions of B(E2) values by using calculated β_2 values can be used in a semi empirical module which was introduced by Raman et al. (Raman, S. et al., 2001). In the present study, for calculating of transition probability from ground-state to firs-excited 2^+ state of Mg isotopes we have used the semi empirical formula given by

$$\beta = \left(\frac{4\pi}{3ZR_0^2} \right) [B(E2) \uparrow / e^2]^{1/2} \quad (2)$$

where B(E2) is in units of e^2b^2 and $R_0=1.2A^{1/3}$. The calculated B(E2) values in the present study together with experimental data are listed in the Table 1. Even if there is some close results to available experimental data for A=26 and A=28, mean field formalism produced small value of deformation parameter in the region of closed shell nuclei. Therefore the

agreement with experiment at A=30 and A=32 cannot be seen in Table 1 for both RMF and HFB approaches. On the other hand, it should be noted that higher B(E2) values are predicted when adding neutrons starting from A=32.

Table 1: The calculated reduced electric quadrupole transition B(E2) of Mg isotopes obtained from RMF+DD-PC1 model calculations as in comparison with other model predictions and available experimental data.

Mass Number	This Work (e²b²)	RMF+NL3* (e²b²)	HFB+SLy4 (e²b²)	FRDM (e²b²)	Experiment (e²b²)
20	0.00	0.00	0.00	0.00	-
22	0.09	0.04	0.02	0.02	-
24	0.10	0.06	0.00	0.03	-
26	0.04	0.02	0.00	0.02	0.03
28	0.02	0.01	0.00	0.02	0.04
30	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03
32	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04
34	0.02	0.00	0.00	0.05	-
36	0.05	0.03	0.00	0.02	-
38	0.05	0.04	0.01	0.02	-
40	0.06	0.04	0.00	0.01	-

4. SUMMARY

The nuclear structure properties of Mg isotopes starting from mass number A=20 to A=40 have been studied by using covariant density functional theory (RMF+DD-PC1). The nuclear binding energy per nucleon, charge radii and quadrupole deformation parameters of considered nuclei have been carried out and compared with other model predictions. The results are found as to be in agreement with available experimental data. From calculated deformation parameter of Mg isotopes, the ground state shape evolution of these isotopes has been carried out and high deformations in their ground states for these isotopes have been predicted. By using the calculated deformation parameter in a semi empirical formula the reduced electric transition probabilities of even-even ²⁰⁻⁴⁰Mg nuclei have been calculated and tabulated in the present paper.

REFERENCES

- Angeli, I. and Marinova, K. P. (2015). Correlations of Nuclear Charge Radii with Other Nuclear Observables, 42, 055108.
- Bayram, T. and Yilmaz, A. H. (2013). Table of Ground State Properties of Nuclei in RMF Model, Modern Physics Letters A, 28, 1350068.
- Casten R. F. and McCutchan E. A. (2007). Quantum Phase Transitions and Structural Evolution in Nuclei. Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 34, R285-R320.

- Dewald, A., Möller, O. and Petkov, P. (2012). Developing the Recoil Distance Doppler-Shift technique towards a versatile tool for lifetime measurements of excited nuclear states. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 67, 786-839.
- Dobaczewski, J., (2004). <http://www.fuw.edu.pl/~dobaczew/stu26w/stu26w.html>
- Greiner, W. and Maruhn, J. A. (1996). *Nuclear Models*, Springer Berlin Heidelberg.
- Meng, J., (2016). *Relativistic Density Functional for Nuclear Structure*. World Scientific Publishing Company.
- Möller, P., Nix, J. R. and Kratz, K.-L., 1997. Nuclear Properties for Astrophysical and Radioactive-ion-beam Applications. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 66, 131-343.
- Raman, S., Nestor, C. W. and Tikkanen, P. (2001). Transition Probability from the Ground to the First-excited 2^+ State of Even-even Nuclides. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 78, 1-128.
- Nikšić, T., Vretenar, D. and Ring, P. (2008). Relativistic Nuclear Energy Density Functionals: Adjusting Parameters to Binding Energies. *Physical Review C*, 78, 034318.
- Nikšić, T., Paar, N., Vretenar, D. and Ring, P. (2014). DIRHB-A Relativistic Self-consistent Mean-field Framework for Atomic Nuclei. *Computer Physics Communications*, 185, 1808-1821.
- Wang, M., Audi, G., Kondev, F. G., Huang, W. J., Naimi, S. and Xu, X., (2017). The AME2016 Atomic Mass Evaluation, 41, 030003.

BROWNIAN GÜRÜLTÜLÜ ZAMAN SERİLERİNDE ARIMA TAHMİN MODELLERİNİN PERFORMANSLARININ İNCELENMESİ

Doç. Dr. İsmail KIRBAŞ

Burdur Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü
ismailkirbas@mehmetakif.edu.tr

ÖZET

Eldeki veriler doğrultusunda ileride oluşması muhtemel değerlerin tahminlerini yapmak insanoğlu için yüzyıllardır süregelen bir araştırma konusudur. Zamana bağlı veri tahmini finanstan meteorolojiye kadar pek çok bilim dalında yaygın olarak kullanılmaktadır. Nehir debisinin hesaplanmasından turistik yolcu sayılarının öngörülmesine kadar farklı konularda çözüm üretilmesinde faydalanılmaktadır. Tahminlerin doğruluğunun artırılması pek çok uygulama için hayati öneme sahiptir.

Finans sektörü için ele alındığında döviz paritesi ve hisse senedi fiyatlarının veya emtianın gelecek dönemlerde alacağı değerleri doğru öngörebilmek bu alanla uğraşan herkes için vazgeçilmez bir ihtiyaçtır.

Literatürde zamana bağlı olarak değişen verilerden tahmin yapmak üzere geliştirilmiş pek çok yöntem bulunmaktadır. Çalışmamızın konusu sonraki değeri önceki değerlerinden etkilenen ve rastlantısallık içeren brownian noise sinyallerinin zaman serisi şeklinde ele alınması ve bu zaman serilerinin gelecek değerlerini tahmin eden yaklaşımların performanslarının karşılaştırılmasıdır.

Bu amaçla MATLAB yazılımı ve python kütüphanelerinden faydalanılmış ve 2000 elemanlı 3 farklı zaman serisi üretilmiştir. Bu zaman serilerinin ilk 1900 değeri üzerinden katsayılar belirlenmiş ve buna göre geriye kalan 100 değer tahmin edilmiştir.

Gelecek değerlerin tahmin edilmesinde ağırlıklı olarak Autoregressive integrated moving average (ARIMA) tekniği kullanılmış ve bu teknik için birbirinden farklı 6 model oluşturulmuştur. ARIMA yaklaşımında belli bir t anındaki değerin kendisinden önce gelen değerlerin belli bir katsayı ile çarpılmış hallerinin toplamı olduğu varsayılmaktadır. Bunun için t anındaki değer ile önceki değerler arasındaki ilişki incelenir ve bağlantı katsayıları hesaplanır. Çalışma kapasamında belirlenmiş olan 6 tahmin modelinden elde edilen sonuçlar R değeri, Mean Square Error, Root Mean Square Error, Peak signal-to-noise ratio ve Mean Absolute Percentage Error performans kriterlerine göre tablo ve grafiklerle karşılaştırılmış ve yorumlanmıştır.

Anahtar Kelimeler: ARIMA tahmin modeli, zaman serisi analizi, çok adımlı tahmin, kestirim.

ABSTRACT

Estimating the possible future values in line with the available data is a research subject for humanity for centuries. Time-dependent data estimation is widely used in many disciplines, from finance to meteorology. From the calculation of the river flow to the forecasting of the number of tourist passengers, it is utilized in the production of solutions in different subjects. Increasing the accuracy of forecasts is vital for many applications.

When considered for the financial sector, it is an indispensable need for anyone who is engaged in this field to be able to foresee the values that will be taken in the future periods.

There are many methods developed in the literature to estimate the time-dependent data. The subject of our study is the time series of brownian noise signals which are affected by their previous values and randomness, and we compared the performance of approaches that predict future values of these time series.

For this purpose, MATLAB software and python libraries were used and 3 different time series with 2000 values were produced. The coefficients were determined over the initial 1900 value of these time series and the remaining 100 values were estimated.

Autoregressive integrated moving average (ARIMA) technique was used to estimate future values and 6 different models were created for this technique. In ARIMA approach, it is assumed that the values before a certain time value are the sum of the previous values multiplied by certain coefficients. For this purpose, the relationship between the value at the time and the previous values is examined and the connection coefficients are calculated. The results obtained from the 6 prediction models determined in the working capacity are compared and interpreted with the tables and graphs according to the performance criteria of the R value, Mean Square Error, Root Mean Square Error, Peak Signal-to-noise ratio and Mean Absolute Percentage Error.

Keywords: *ARIMA forecasting model, time series analysis, multi-step prediction, forecasting.*

1. GİRİŞ

Zaman serileri zamana bağılı olarak deęişen tüm ölçümler ve veriler için kullanılabilen, tıptan, finansa, meteorolojiden robotik bilimlerine kadar pek çok sahada uygulama alanı bulan geniş bir çalışma konusudur. Günümüzde geliştirilen yöntemler sayesinde, zamana bağılı olmamasına rağmen bir seri şeklinde ifade edilebilen tüm veriler için zaman serisi analiz metotları uygulanabilmektedir (İslamoęlu, 2015; Kaynar & Taştan, 2009; Khandelwal, Adhikari, & Verma, 2015; Vergil & Özkan, 1997; Yunus, Thiringer, & Chen, 2016).

Zaman serilerinin analizi sonucunda ulaşılmak istenen hedef, bilinmeyen gelecek deęerlerin en düşük hata ile tahmin edilebilmesidir. Bu amaçla serinin geçmiş deęerlerine bakılır ve bunlar arasında bir ilinti olup olmadığı tespit edilmeye çalışılır. Bu amaçla, öncelikle varsa veri içerisindeki eğilim (trend) ve mevsimsellik (seasonality) bileşenleri bulunur. Bu parametreler gelecek deęerlere ait en genel yönelimi gösterirler.

Bütün tahmin metotları kendi içlerinde hata parametresi barındırırlar. Hata parametresinin sınırlarının tespit edilebilmesi ve hata dağılımının normal dağılıma uyması son derece önemlidir. Aksi takdirde yapılan tahminde hataya karşı bir eğilim gözükcektir.

İstatistiksel tahmin metotları içerisinde yaygın olarak kullanılan metotların başında ARIMA yaklaşımı gelmektedir. Çalışmanın ikinci bölümünde çalışmanın konusu olan brownian gürültü kavramı açıklanmış ve bu tür zaman serilerinde kullanılacak ARIMA parametreleri gösterilmiştir. Çalışmanın üçüncü ve son bölümünde ise elde edilen model başarımları ölçütleri bir tablo halinde detaylı olarak verilmiş ve farklı zaman serileri için model başarımları kıyaslanmıştır.

2. MATERYAL VE YÖNTEM

İlişkisiz tektip gürültü sinyallerinde (uncorrelated uniform noise) seri içerisinde yer alan değerler önceki ve sonraki değerlerden tamamen bağımsızdır. Ancak Brownian gürültü çeşidinde her bir değer önceki değer ile rastlantısal bir değer toplamı şeklindedir. Brownian ifadesi Brownian hareketinden (Brownian motion) gelen bir analogidir ve genellikle rastgele yürüyüş (random walk) ile açıklanır.

Brownian hareketi sıklıkla, adımlar arasındaki mesafenin rastgele bir dağılım ile karakterize edildiği bir yolun matematiksel bir modeli olan rastgele bir yürüyüş kullanılarak tanımlanır. Tek boyutlu rastgele yürüyüşte, parçacık her adımında rastgele bir miktarda yukarı veya aşağı hareket eder. Zaman içinde herhangi bir noktadaki parçacık konumu önceki adımların toplamıdır (Downey, 2014).

Brownian gürültüsü bazı metinlerde brown noise olarak geçmekle birlikte litretürde kırmızı gürültü (red noise) olarak da adlandırılır. Bu gürültü, beyaz gürültünün geçici entegrasyonu ile üretilebilir ("Brownian noise," 2019). $dW(\tau)$ beyaz gürültüyü temsil ettiğinde, beyaz gürültünün integrali Brownian hareketini verir. İlgili denklik denklem 1 de verilmiştir.

$$W(t) = \int_0^t \frac{dW(\tau)}{d\tau} dt \quad (1)$$

Bu gürültünün güç spektrum yoğunluğu sabittir ve Fourier dönüşümü \mathcal{F} ile gösterildiğinde denklem 2 eşitliğini verir.

$$S_0 = \left| \mathcal{F} \left[\frac{dW(t)}{dt} \right] (w) \right|^2 = \text{sabit} \quad (2)$$

Brownian gürültünün güç spektrum denklemi ise denklem 3'te verilmiştir.

$$S(w) = |\mathcal{F}[W(t)](w)|^2 = \frac{S_0}{w^2} \quad (3)$$

Çalışma kapsamında 3 adet 2000 örnekten oluşan brownian gürültülü zaman serisi üretilmiştir. Üretilen zaman serilerine ilişkin temel istatistik verileri tablo 1'de verilmiştir. Seriler arasında benzerlik olmamasına dikkat edilmiştir. Böylece daha adil bir kıyaslanmanın yapılması amaçlanmıştır.

Tablo 1. Çalışmada kullanılan zaman serilerine ilişkin açıklayıcı istatistik verileri.

	Seri 1	Seri 2	Seri 3
Ortalama	-2.87	5.51	25.39
Standart sapma	8.38	6.37	18.49
En yüksek	20.15	20.44	66.69
En düşük	-26.74	-9.29	-12.98
Medyan	-2.04	5.58	25.60
Mod	-26.74	-9.29	-12.98
Varyans	70.20	40.60	341.91

ARIMA modeli, Box-Jenkins yaklaşımı olarak da bilinen karma otoregresif bütünleşik hareketli ortalama hesaplama işlemini ifade eder ve temel olarak 4 temel bileşenden oluşmaktadır. Bu bileşenlerden ilki otoregresif süreci ifade eden AR filtresidir. Bu filtre uzun vade hareketi temsil etmektedir. İkinci bileşen, hareketli ortalama filtresidir ve MA ile ifade edilir. Tahmindeki rolü kısa vade hareketleri kestirmektir. Üçüncü filtre stokastik eğilimi temsil eden tümleştirme filtresidir ve I harfi ile gösterilir. Son bileşen hata terimlerini ifade eder ve beyaz gürültü şeklinde olmalıdır (Kırbaş, 2016; Kırbaş & Kerem, 2016).

Otoregresif süreç, AR(p) şeklinde ifade edilirken hesaplamak için denklem 4 kullanılır. Burada p ifadesi otoregresif sürecin derecesini gösterir. Burada y_{t-i} , gözlem değerlerini α_i , gözlem değerleri için katsayıları ve ε_t ifadesi de hata terimini temsil etmektedir (Kırbaş, 2018).

$$AR(p) = \sum_{i=1}^p \alpha_i y_{t-i} + \varepsilon_t \quad (4)$$

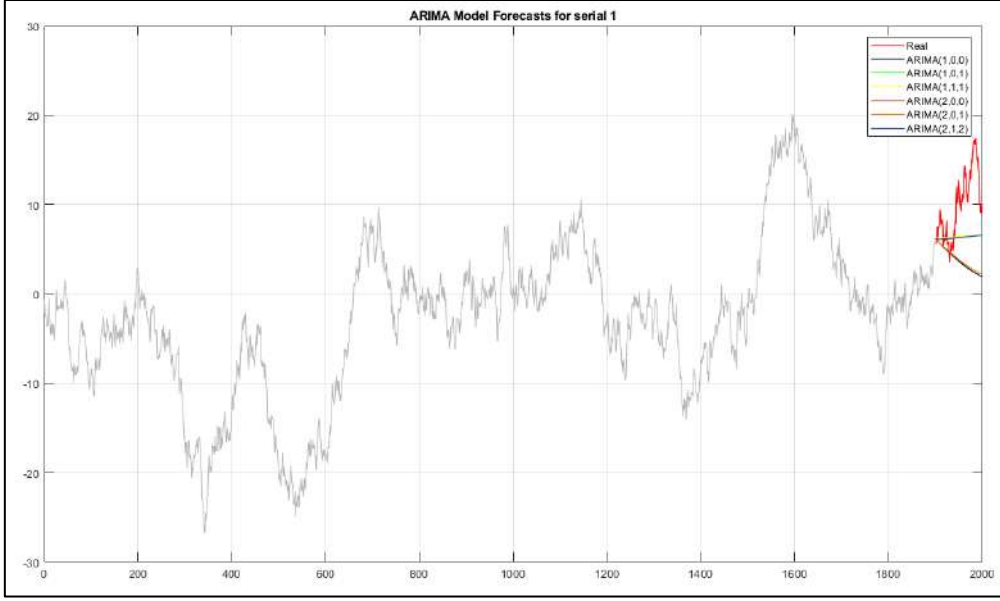
Hareketli ortalama süreci sapma değeri hesaplamasında mevcut sapma değeri daha önceki sapma değerlerine bağlıdır. q değeri hareketli ortalama işleminin derecesini belirtmektedir.

$$MA(q) = \varepsilon_t = \sum_{i=1}^q \beta_i \varepsilon_{t-i} \quad (5)$$

Modelin genel gösterimi ARIMA(p,d,q) şeklindedir. Burada q ifadesi otoregresif modelinin derecesini, d ifadesi fark alma derecesini, q ifadesi ise hareketli ortalama modelinin derecesini ifade etmektedir. Genel ARIMA(p,q,d) modeli denklem 6'da verilmiştir.

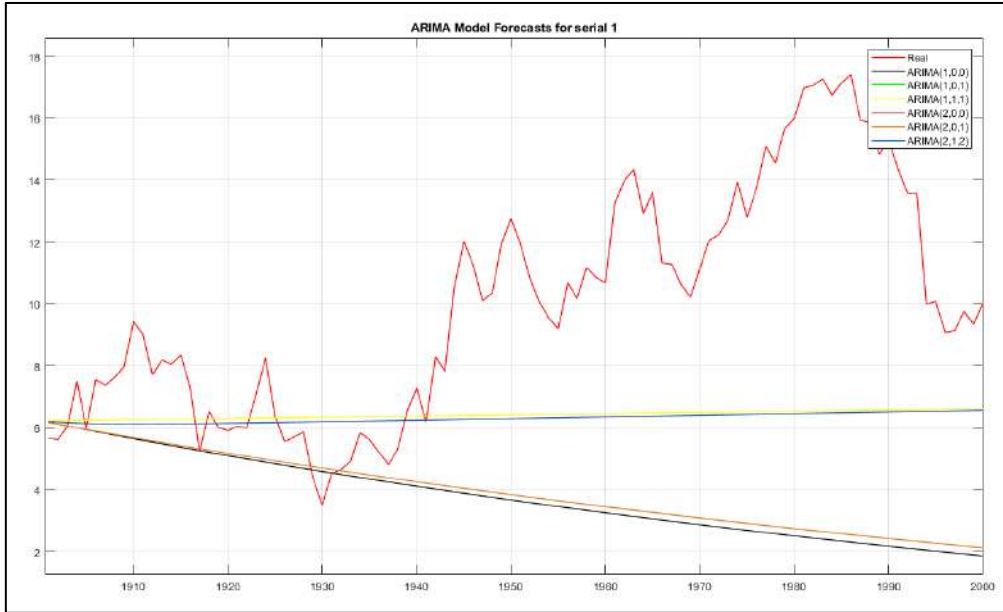
$$y_t = \varphi_1 y_{t-1} + \varphi_2 y_{t-2} + \dots + \varphi_p y_{t-p} + \delta + \varepsilon_t - \theta_1 \varepsilon_{t-1} - \theta_2 \varepsilon_{t-2} - \dots - \theta_q \varepsilon_{t-q} \quad (6)$$

Şekil 1'de zaman serisi 1' in tüm elemanları çizilmiştir. Son 100 eleman kırmızı ile gösterilmiştir. Geliştirilen 6 farklı ARIMA modeli son 100 elemanı tahmin etmiş ve aynı grafikte sonuçlar üst üste çizilerek görüntülenmiştir.



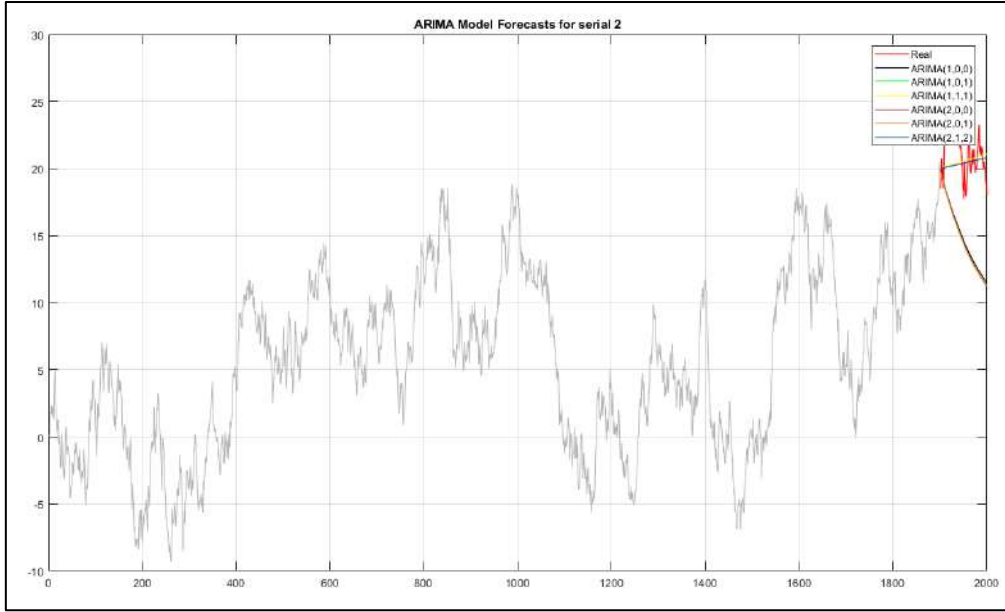
Şekil 1. Zaman serisi 1'in tüm verileri ve ARIMA model tahminleri.

Şekil 2'de ise tahmin edilen son 100 eleman ve gerçek değerler gösterilmiştir. Kırmızı ile verilen grafik gerçek değerleri temsil ederken, diğer renkler karşılık gelen ARIMA modelinin ürettiği tahmin verilerini göstermektedir.

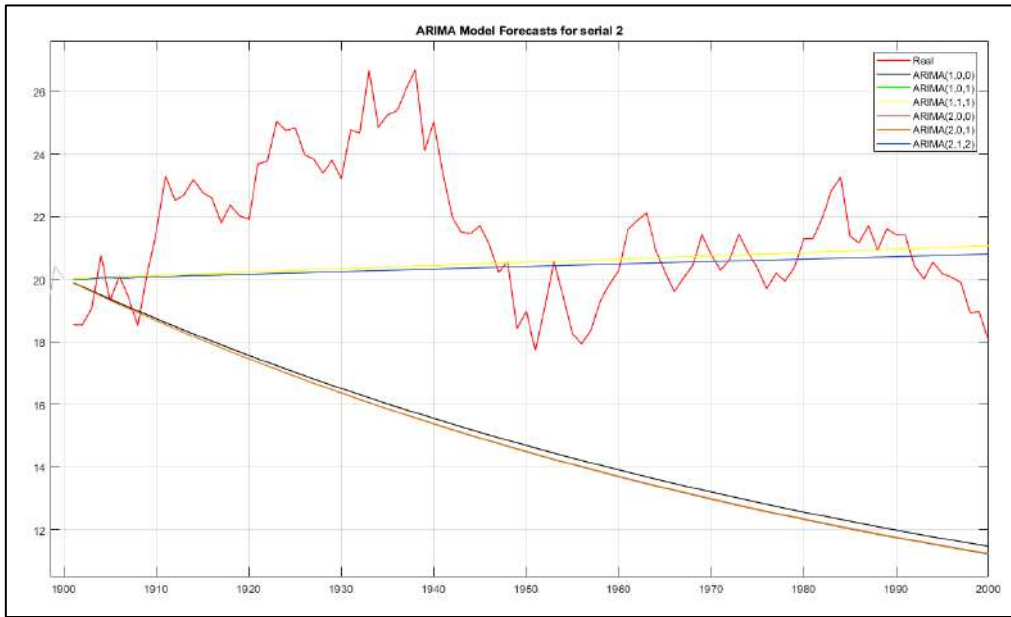


Şekil 2. Zaman serisi 1 için gerçek değer ve ARIMA model tahminleri.

Şekil 3 ve Şekil 4'de zaman serisi 2'ye ait gerçek veriler ve model tahminleri görülmektedir.

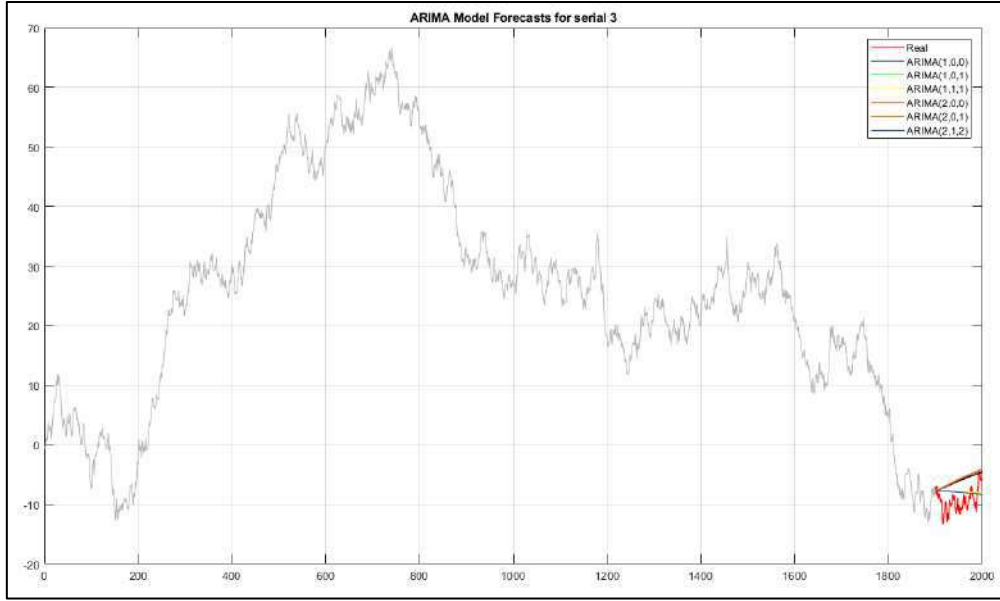


Şekil 3. Zaman serisi 2'in tüm verileri ve ARIMA model tahminleri.

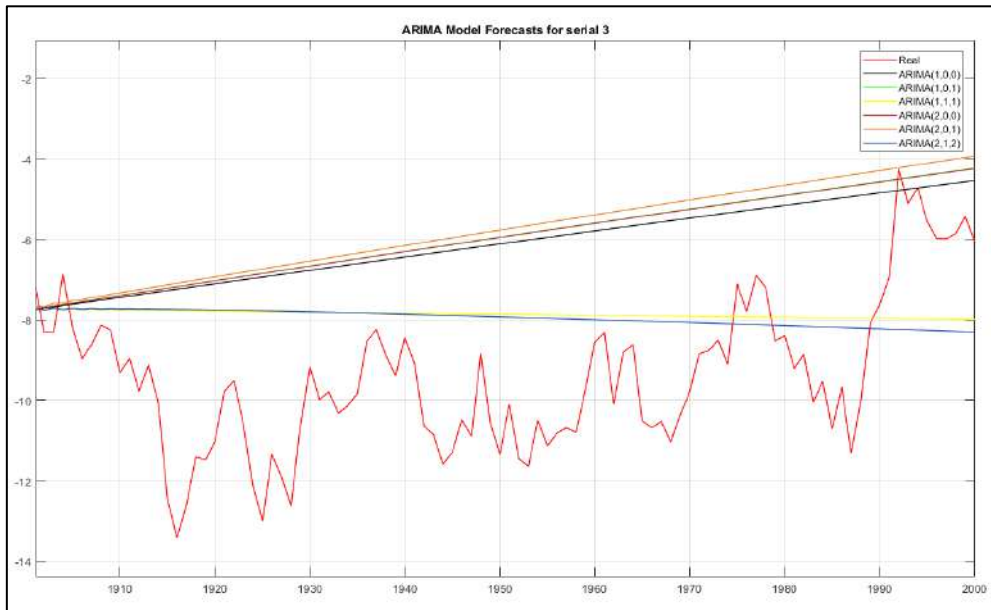


Şekil 4. Zaman serisi 2 için gerçek değer ve ARIMA model tahminleri.

Şekil 5 ve Şekil 6'da zaman serisi 3 için gerçek veriler ve model tahminleri çizilmiştir.



Şekil 5. Zaman serisi 3'in tüm verileri ve ARIMA model tahminleri.



Şekil 6. Zaman serisi 3 için gerçek değer ve ARIMA model tahminleri

Çalışma kapsamında geliştirilen tahmin modellerinin başarımlarının daha net ve adil olarak kıyaslanması için yedi farklı performans ölçütünden yararlanılmıştır (Kerem, Kırbaş, & Saygın, 2016). Söz konusu performans kriterlerine ait denklemler Tablo 2'de listelenmiştir.

Tablo 2. Model performans kriterleri

Model Performans Kriteri	Denklem
MSE	$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2$
PSNR	$PSNR = 20 \log_{10} \left(\frac{MAX_f}{\sqrt{MSE}} \right)$
RMSE	$RMSE = \sqrt{\frac{SSE}{n}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n}}$
NRMSE	$NRMSE = \frac{RMSE}{Y_{max} - Y_{min}}$
MAPE	$MAPE = \frac{100}{n} \times \sum_{i=1}^n \left \frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i} \right $
SMAPE	$SMAPE = \frac{200}{n} \times \sum_{i=1}^n \left \frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i + \hat{Y}_i} \right $

3. TARTIŞMA VE SONUÇLAR

İstatistik verileri birbirinden farklı üç zaman serisi üzerinde yapılan tahmin çalışmasında altı farklı ARIMA modeli geliştirilmiştir. Modellerin başarımlarını ölçmek amacıyla yedi farklı performans ölçütünün ölçümü yapılmış bütün modeller bu ölçütlere göre kıyaslanmıştır. Tablo 3’de zaman serileri ve ARIMA modelleri başarımlarına göre detaylı olarak listelenmektedir.

Tablo 3. Çalışmada kullanılan zaman serilerine ilişkin ARIMA modelleri ve tahmin performansları.

	MSE	PSNR	R	RMSE	NRMSE	MAPE	SMAPE	ARIMA
Zaman Serisi 1	60.466	30.316	0.465	7.776	0.559	53.229	82.576	(1,0,0)
	57.902	30.504	0.488	7.609	0.547	51.819	79.374	(1,0,1)
	<u>25.531</u>	<u>34.060</u>	<u>0.774</u>	<u>5.053</u>	<u>0.363</u>	<u>34.384</u>	<u>42.868</u>	(1,1,1)
	57.914	30.503	0.487	7.610	0.547	51.824	79.387	(2,0,0)
	57.946	30.501	0.487	7.612	0.548	51.840	79.425	(2,0,1)
	26.172	33.952	0.768	5.116	0.368	34.599	43.547	(2,1,2)
Zaman Serisi 2	49.200	31.211	0.894	7.014	0.782	30.110	36.413	(1,0,0)
	51.800	30.988	0.888	7.197	0.802	30.936	37.629	(1,0,1)
	<u>5.642</u>	<u>40.617</u>	<u>0.988</u>	<u>2.375</u>	<u>0.265</u>	<u>8.053</u>	<u>8.393</u>	(1,1,1)
	51.758	30.991	0.889	7.194	0.802	30.923	37.610	(2,0,0)
	51.578	31.006	0.889	7.182	0.801	30.867	37.526	(2,0,1)
	5.784	40.508	0.988	2.405	0.268	8.074	8.460	(2,1,2)
Zaman Serisi 3	13.598	-11.335	0.852	3.688	0.403	33.397	41.415	(1,0,0)
	14.741	-11.685	0.839	3.839	0.419	35.212	44.153	(1,0,1)
	<u>5.968</u>	<u>-7.758</u>	<u>0.935</u>	<u>2.443</u>	<u>0.267</u>	<u>22.158</u>	<u>23.700</u>	(1,1,1)
	14.704	-11.674	0.840	3.835	0.419	35.156	44.067	(2,0,0)
	16.015	-12.045	0.825	4.002	0.437	37.128	47.121	(2,0,1)
	5.950	-7.745	0.935	2.439	0.266	22.294	23.528	(2,1,2)

Veriler incelendiğinde her üç zaman serisi için de en başarılı modelin ARIMA(1,1,1) olduğu görülmektedir. Ondan sonra gelen en başarılı model ise ARIMA(2,1,2) olmuştur. Bu iki modelin başarımlarının diğer modellere göre daha üstün olmasının en önemli sebebinin ARIMA modelinin d parametresi olduğu görülmektedir.

TEŞEKKÜR

Bu çalışma, KOSGEB AR-GE ve İnovasyon Destek Programı kapsamında gerçekleştirilen 2018/620-5/01 numaralı proje ile desteklenmiştir.

KAYNAKLAR

- Brownian noise. (2019, March 18). [Wikipedia]. Retrieved March 21, 2019, from https://en.wikipedia.org/wiki/Brownian_noise
- Downey, A. (2014). *Think DSP Digital Signal Processing in Python* (Vol. 1). Needham, Massachusetts: Green Tea Press.
- İslamoğlu, E. (2015). Aralık Değerli Zaman Serilerinde Kullanılan Modelleme Teknikleri. *EÜFBED Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 8(2), 178–193. <http://dx.doi.org/10.18185/eufbed.04685>

- Kaynar, O., & Taştan, S. (2009). Zaman serisi analizinde MLP yapay sinir ağları ve ARIMA modelinin karşılaştırılması. *Erciyes Üniversitesi İktisadi ve İdari Bilimler Fakültesi Dergisi*, (33), 161–172.
- Kerem, A., Kırbaş, İ., & Saygın, A. (2016). Performance Analysis of Time Series Forecasting Models for Short Term Wind Speed Prediction (pp. 2733–2739). Presented at the International Conference on Engineering and Natural Sciences (ICENS).
- Khandelwal, I., Adhikari, R., & Verma, G. (2015). Time Series Forecasting Using Hybrid ARIMA and ANN Models Based on DWT Decomposition. *Procedia Computer Science*, 48, 173–179. <http://dx.doi.org/10.1016/j.procs.2015.04.167>
- Kırbaş, İ. (2016). Short- Term Multi- Step Wind Speed Prediction Using Statistical Methods And Artificial Neural Networks (Vol. 1, p. 1064). Presented at the International Science and Technology Conference.
- Kırbaş, İ. (2018). İstatistiksel metotlar ve yapay sinir ağları kullanarak kısa dönem çok adımlı rüzgâr hızı tahmini. *Sakarya University Journal of Science*, 22(1), 24–38. <https://doi.org/10.16984/aufenbilder.305224>
- Kırbaş, İ., & Kerem, A. (2016). Short-Term Wind Speed Prediction Based on Artificial Neural Network Models. *Measurement and Control*, 49(6).
- Vergil, H., & Özkan, F. (1997). Döviz kurları öngörüsünde satınalma gücü paritesi ve ARIMA modelleri: Trkiye Örneği. *İMKB Dergisi*, 9(35), 41–55.
- Yunus, K., Thiringer, T., & Chen, P. (2016). ARIMA-Based Frequency-Decomposed Modeling of Wind Speed Time Series. *IEEE Transactions on Power Systems*, 31(4), 2546–2556. <https://doi.org/10.1109/TPWRS.2015.2468586>

IMAGE ANALYSIS OF SIZE DISTRIBUTION ON COMPRESSED AGGREGATE
FACE - REGRESSED MODEL

Yıldırım İsmail Tosun ¹

¹ Department of Engineering, Şırnak University, Şırnak
yildirimtosun@sirnak.edu.tr

Abstract

Image analysis of concrete mixture aggregates produced in two different forms in regular size and sieved form. One type of highly uniform distribution crushed in roll was in granular size and easily be evaluated in industry for concrete grading and scavenge ring.

The non uniform distribution and other irregular form type may be evaluated as less filling materials in finer size and so soft as which collected following solid-fine separation sieving. That waste in finer size may deteriorate picture near cognition blurred form as discharge of photos and control of form contrast in picture streams was compulsory and calibration patterns were used. Beneficiate from that finer marble aggregate in picture coloring controlled the analysis during analysis can efficiently be made. However, to avoid this disturbing contrast rake up manner of that fine material, dark color were used in picture. But post two stage processing capturing for image were widely used. 40%, 60% and 80% tine material and mid size content containing gray color was activated round third stage processing forms were used in our test experiments at 1-2 mm sized distributions and finer materials.

in this article, we obtain some new complex analytical solutions to the nonlinear Gaussian equation which seems in the field theory, weakly nonlinear dispersive water waves and nonlinear functions by using improved exponential sub-equation function method.

Keywords: Gaussian equation, improved Bernoulli function method; nonlinear dispersive waves; Complex exponential distribution.

REFERENCES

1. Pan Wang, Bo Tian, Kun Sun, Feng-Hua Qi, The title of Paper, Applied Mathematics and Computation, Vol:2, No:1, 233- 242, 2015.

**IMAGE ANALYSIS OF CRACKS ON MARBLE FACE -
REGRESSED MODEL**

Yıldırım İsmail Tosun¹

¹ Department of Engineering, Şırnak University, Şırnak
yildirimtosun@sirnak.edu.tr,

Abstract

Image analysis of concrete mixture aggregates produced in two different forms in regular size and sieved form. One type of highly uniform distribution crushed in roll was in granular size and easily be evaluated in industry for concrete grading and scavenge ring.

The non uniform distribution and other irregular form type may be evaluated as less filling materials in finer size and so soft as which collected following solid-fine separation sieving. That waste in finer size may deteriorate picture near cognition blurred form as discharge of photos and control of form contrast in picture streams was compulsory and calibration patterns were used. Beneficiate from that finer marble aggregate in picture coloring controlled the analysis during analysis can efficiently be made. However, to avoid this disturbing contrast make up manner of that tine material, dark color were used in picture. But post two stage processing capturing for image were widely used. 40%, 60% and 80% fi.ne material and mid size content containing gray color was activated mid third stage processing forms were used in our test experiments at 1-2mm sized distributions and finer materials.

in this article, we obtain some new complex analytical solutions to the nonlinear Gaussian equation which seems in the field theory, weakly nonlinear dispersive water waves and irregular distribution by using improved exponential sub-equation function method.

Keywords: Gaussian equation, Improved Gaussian function , exponential regression method; nonlinear dispersive waves; Complex exponential distribution.

REFERENCES

1. Pan Wang, Bo Tian, Kun Sun, Feng-Hua Qi, The title of Paper, Applied Mathematics and Computation, Vol:2, No:1, 233- 242, 2015.

**MİDYAT KALKER TAŞININ GEOTEKNİK ÖZELLİKLERİ -
HAFİF AGREGALI ASFALT ÜRETİMİ**

Yıldırım İsmail Tosun ¹

¹Department of Engineering, Şırnak University, Şırnak

yildirimtosun@sirnak.edu.tr

Abstract

Significant quantities of Midyat limestone are produced as building out-cover stone pile/ inner wall pile as decorative purpose in Southeastern Anatolian Region. Although it can be used as an lightweight blocks or aggregates, it is sent to mortar fill for sound and heat isolation. The porous structure of Midyat limestone occupies a significant portion of isolation and protects against many serious environmental problems. This study aims to investigate the feasibility of utilizing lightweight aggregates in Stone Matrix and Stone Matrix Asphalt mixtures for road pavement. The results show that the use of Midyat limestone as the coarse portion of aggregates can enhance Marshall Stability, bending and shear strength, resistance to freeze-thaw and compressibility of SMA mixtures.

Keywords: Limestone, Stone-asphalt, bending, shear deformation, compressibility

Poster olarak sunulmuştur.

OPTO-MEKANİK IŞIK MODÜLATÖRÜ GELİŞTİRİLMESİ

Süleyman Özçelik¹, Yusuf Mert Gümüşay²

Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Gazi Üniversitesi 06500 Ankara, Türkiye
ASENTEK Savunma ve Enerji Teknolojileri Ltd. Şti, OSTİM Teknokent OSTİM, Ankara,
Türkiye

ÖZET

Pyroelektrik materyal dizinlerinden oluşan soğutmasız termal veya KÖ görüntüleme sistemleri bir ortamdaki çeşitli nesnelere termal ışınlımadaki farklılıkları algılar. 8-12 um spektral aralığında çalışan termal dedektörler, ışınlımadaki bu farklılıkları elektriksel sinyale dönüştürerek ortamın görsel bir görüntüsüne dönüştürür. Dedektör dizinlerinin sürekli KÖ ışınlıma maruz kalması sonucu oluşan termal etki nedeniyle gürültü oranı artar ve dedektörün görüntü kalitesi azalır. Harici soğutma tankının olmadığı, soğutmasız dedektörlerde bu istenmeyen ısıl etki ışığın modülasyonu ile önlenmektedir. Çeşitli tiplerde üretilebilen ve ışık kıyıcı (chopper) da olarak adlandırılan ışık modülatörlerinden biri, ilgili spektral bölgede ışınlıma geçiren malzemeden üretilen ve ışınlıma azaltan bölgelere sahip opto-mekanik modülatörlerdir. Modülatör belirli bir frekansta döndürülerek, görüntü kalitesini bozmayacak şekilde ışığın dedektör dizinleri üzerine sinüzoidal olarak düşmesini sağlamalıdır. Bu çalışmada, aktif malzeme olarak Ge ve Si ince dilimlerin kullanıldığı ışık kıyıcı diskler geliştirildi. Disklerin yüzeylerinde KÖ ışınlıma modüle etmek amacıyla, eş odaklı iki Archimedean spiral eğrinin sınırladığı yüzey tasarımı geliştirildi. Modülatör diskleri, bu spiral yüzey bölgesinin altı köşeli geometride, ısıl yayıcılığı yüksek metal reflektör malzemesinin kaplanması ile oluşturuldu. Reflektör dizinlerinin açık ve kapalı alanlarının oranı ve dizinlerin kalınlıkları 10 um ışınlıma dalgaboyu dikkate alınarak belirlendi. Geliştirilen disklerin yüzeyi, yansıma önleyici metal-oksit ince film ile kaplanarak, 8-12 um'de dedektör dizini üzerine düşen ışınlıma şiddeti uygun aralığa yükseltildi. Özgün tasarımla prototip olarak geliştirilen opto-mekanik ışık modülatörünün Ge ve Si modülatör disklerinin optik ve termal verimlilikleri belirlendi. Yapılan testler sonucunda, ucuz üretim tekniği ile geliştirilen opto-mekanik KÖ ışık modülatörlerin soğutmasız termal kameralar için uygun olduğu değerlendirildi.

ABSTRACT

Non-cooled thermal detectors or IR imaging systems consisting of pyroelectric material arrays detect the differences in the thermal radiation of various objects in an environment. Thermal detectors operating in the 8-12 μm spectral range convert these differences in radiation into electrical signals and transform them into a visual image of the environment. The image quality of the detector is reduced due to the thermal effect caused by the IR light dropping over the detector arrays. In uncooled detectors without external cooling tank, this unwanted thermal effect can be prevented by modulation of light with a light modulator. A kind of the light modulators, called chopper, which can be produced in various types, is opto-mechanical modulators which are produced from the radiation-permeable materials in the respective spectral region and have radiation-reducing zones. The modulator should be rotated at a specific frequency to ensure that the light drops sinusoidally onto the detector arrays so as not distorting the image quality. In this study, light chopper discs were developed as active material using Ge and Si thin slices. In order to modulate the IR radiation, a region on the surface was designed by two Archimedean spiral curves. The modulator discs were fabricated by coating of the metal reflector material having high emissivity onto this region with a hexagonal geometry. The ratio of the open-closed areas of the reflector arrays and the thickness of the arrays were determined by considering the 10 μm radiation wavelength. The optical and thermal efficiencies of the Ge and Si modulator discs of the opto-mechanical light modulator developed as prototype. As a result of the tests, it was evaluated that opto-mechanical IR light modulators developed with cheap production technique were suitable for uncooled thermal imaging applications.

BELEDİYE KATI ATIKLARININ ORGANİK FRAKSİYONUNUN BİYOLOJİK YÖNTEMLER VASITASIYLA DEĞERLENDİRİLMESİ

Dr, Mine Nazan Kerimak Öner

Köseköy Meslek Yüksekokulu, Gıda İşleme Teknolojileri Bölümü,
41135, Kartepe-Kocaeli/TÜRKİYE

mine@kocaeli.edu.tr

Özet

Organik atıklarla ilgili olarak daha sıkı düzenlemeler ve yenilenebilir kimyasallara ve yakıtlara olan talep, maliyet etkinliğini artırmak ve müşterilerin talebini karşılamak için imalat endüstrisini daha yüksek sürdürülebilirliğe doğru itmektedir. Atık değerlendirme; atık materyalleri kimyasallar, malzemeler ve yakıtlar dâhil olmak üzere daha kullanışlı son ürünlere dönüştürme işlemidir. Hızla artan dünya nüfusu ile birlikte artan gıda talebi, takibinde de ülkelerin gelişmişlik seviyesine bağlı olarak ortaya çıkacak olan gıda atık ve kayıp miktarında da artma gerçekleşecektir. Gıda kaybı ve gıda atığı üretimi çevresel, sosyal ve ekonomik düzeyde farklı etkiler yaratmaktadır. Çevresel açıdan değerlendirildiğinde, gıda kayıp ve atıkları, atık depolama alanlarında bertaraf sırasında atık metan gazı oluşturarak sera gazı emisyonlarına katkıda bulunmaktadır. Ayrıca, gıda üretimi, işlenmesi, nakliyesi, depolanması ve dağıtımı ile ilgili faaliyetlerde de aynı sonuçlar gözlenmektedir. Gıda kaybı ve atığı ile ilişkili diğer çevresel etkiler, doğal kaynakların tükenmesi ve toprağın, besin maddelerinin, suyun ve de biyojenik döngülerin bozulması olarak da sıralanabilirler. Gıda kayıp ve atıklarının sosyal etkileri ise küresel gıda güvenliği kuralları içerisinde etik ve ahlaki boyutlara bağlanabilir. Ekonomik etkileri ise gıda israfına ilişkin maliyetlerden ve bunların çiftçilere ve tüketicilere olan etkileri olarak sınıflandırılmaktadır.

Son yıllarda, gıda atıklarının çöp alanlarına biriktirilmesi sonucu ortaya çıkan problemlerin artması ile birlikte bilim insanları organik madde oranı çok yüksek olan bu değerli atıkların değerlendirilmesi amacıyla yenilikçi arayışlar içerisine girmişlerdir. Birinci nesil gıda atık işleme teknolojileri olarak isimlendirilen bu yenilikçi teknolojiler, atık-enerji dönüşümü, katma değerli ürün üretimi, kompostlama ve hayvan yemi üretimini içermektedir. Evsel gıda atıklarının organik fraksiyonu ön muamele işlemlerini takiben biyomolekül, biyoplastik, biyoyakıt v.b. katma değerli son ürünlerin üretimi için hammadde olarak kullanılabilir. Bu nedenle sunulan bu çalışmada; bu değerli hammaddeyi son ürün üretiminde kullanılan biyolojik değerlendirme yöntemleri ve bu yöntemler vasıtasıyla elde edilen son ürünlerin biyoekonomik değerleri tartışılmaya çalışılmıştır.

Keywords: Biyoatık, Gıda Atığı, Sürdürülebilirlik, Atık Değerlendirme, Enerji, Katma Değerli Ürün

**VALORIZATION of ORGANIC FRACTION of MUNICIPAL SOLID WASTE By
BIOLOGICAL APPLICATIONS**

Mine Nazan Kerimak Öner, Ph.D.

Köseköy Vocational School, Food Processing Department,

41135, Kartepe-Kocaeli/TURKEY

mine@kocaeli.edu.tr

Abstract

Increasingly tighter regulations regarding organic waste, and the demand for renewable chemicals and fuels, are pushing the manufacturing industry toward higher sustainability to improve cost-effectiveness and meet customers' demand. Waste valorization is the process of converting waste materials into more useful end-products including chemicals, materials, and fuels. Rapidly increasing world population and increasing food consumption with a same level will mean that the demand for food will increase for at near future all over world. According to this, meeting of the increasing food demand according to the level of development of countries will lead to increase in the amount of food waste (FW) and loss (FL). FL and FW generation produces an impact at environmental, social and economic level. From an environmental point of view, FL and FW contribute to Green House Gas emissions during final disposal in landfills. Additionally; same results are observed during activities associated with food production, processing, manufacturing, transportation, storage and distribution. Other environmental impacts associated with FL and FW can listed as natural resource depletion and disruption of soil, nutrients, water and biogenic cycles. Social impacts of FL and FW may be ascribed to ethical and moral dimension within the general concept of global food security. Economic impacts are due to the costs related to food wastage and their effects on farmers/consumer incomes. In recent years, problems associated with the disposal of food waste to landfills lead to increased interest in searching for innovative alternatives due to high proportion of organic matter in food waste. First generation food waste processing technologies include waste to energy, value-added product, composting, and animal feed.

Therefore, in this study; the biological evaluation methods used in the production of the final product from this valuable raw material and bioeconomic values of the end products obtained by these methods has discussed.

Keywords: Biowaste, Food Waste, Sustainability, Waste Valorization, Energy, Value-added Product

**EVSEL GIDA ATIKLARI: SÜRDÜRÜLEBİLİR BİR GELECEK İÇİN
BİYOEKONOMİK SÜREÇTE UMUT VEREN YENİLENEBİLİR HAMMADDE**

Dr. Mine Nazan Kerimak Öner

Köseköy Meslek Yüksekokulu, Gıda İşleme Bölümü,
41135, Kartepe-Kocaeli/TÜRKİYE
mine@kocaeli.edu.tr

Özet

Yaşadığımız çağda gezegenimizde var olan en önemli temel sorunlardan bir tanesi de tüm dünyada hızla ortaya çıkan katı atık problemidir. Katı atıkların bertaraf edilmeleri sırasında yaşanan beşeri ve çevresel problemler sebebi ile bu atıkların ya kaynakta azaltılması ya da değerli bileşenlerinin sürdürülebilirlik kapsamında atılmadan katma değerli son ürünlere dönüştürülmesi son yıllarda biyoekonomik süreçte benimsenen uygulamalardan bir tanesi olmuştur. Belediye katı atıkları sınıfında yer alan ve belediye katı atıklarının organik fraksiyonu (OFMSW) olarak isimlendirilen gıda atıkları (FW), şehir katı atıklarının en önemli bileşenlerinden bir tanesidir. Gıda ve Tarım Örgütü'ne (FAO) göre, taze sebze, meyve, et, unlu mamuller ve süt ürünleri de dâhil olmak üzere yaklaşık 1.3-1.6 milyar ton gıda, gıda tedarik zinciri boyunca kaybolmaktadır. Günümüzde Hindistan, Çin, Tayland, Sri Lanka, Türkiye, vb. gibi gelişmekte olan ülkelerde, gıda atıklarının atık bertarafı amacıyla gömme, yakma ve kompostlama gibi geleneksel yöntemler ile zararsızlaştırılması çok yaygın olarak kullanılan yöntemlerdir. Bununla birlikte, anılan uygulamalar, organik besin maddesi içeriği yönünden zengin bileşimi nedeniyle gıda atıklarının bertarafı için uygun değerlendirme yöntemleri değildir. Teorik olarak, gıda atıkları biyoekonomik süreçte katma değerli materyallerin üretiminde yararlı bir kaynak olarak kullanılabilirler. Sürdürülebilir ekonomi çerçevesinde gelecek yıllar içerisinde gerek enerji gerekse diğer değerli ürünlerin yenilenebilir kaynaklardan elde edilmesi insan ve çevre sağlığına kattığı kazanç açısından düşünüldüğünde oldukça büyük önem taşımaktadır.

Bu nedenle sunulan bu çalışmada; belediye katı atıklarının organik fraksiyonundan kimyasal ve/ya termokimyasal yöntemler vasıtasıyla elde edilebilecek katma değerli ürünlerin yarar ve değerlerinin irdelenmesi yapılmaya çalışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Biyoekonomi, Belediye Katı Atıkları, Mutfak Atıkları, Biyoenerji, Biyoürün,

HOUSEHOLD FOOD WASTE: A PROMISING RENEWABLE RAW MATERIAL IN BIOECONOMIC PROCESSES FOR SUSTAINABLE FUTURE

Mine Nazan Kerimak Öner, Ph.D.

Köseköy Vocational School, Food Processing Department,
41135, Kartepe-Kocaeli/TURKEY
mine@kocaeli.edu.tr

Abstract

One of the most important fundamental problems that existed in our planet in our age is the solid waste problem that is rapidly emerging all over the world. Human and environmental problems during the disposal of solid wastes are experienced. Therefore, the reduction of these wastes at the source or the conversion of the valuable components into value-added end products without being sustained in the scope of sustainability has been one of the applications adopted in the bioeconomic process in recent years. Food waste (FW), which is named as municipal solid waste and organic fraction of municipal solid waste (OFMSW), is one of the most important components of city solid waste. According to Food and Agricultural Organization (FAO), about 1.3 and 1.6 billion tons of food, including fresh vegetables, fruits, meat, bakery and dairy products, are lost along the food supply chain. FWs are currently landfilled, incineration and composting are very common and mature technologies for waste disposal in developing countries e.g., India, China, Thailand, Sri Lanka, Turkey. However, the aforementioned applications are not suitable for the disposal of food wastes due to their organic nutrient-rich composition. Theoretically, food waste can be used as a useful source of value-added products in the bioeconomic process. Within the framework of sustainable economy, obtained both energy and other valuable products from renewable sources like food waste in the years to come are important in terms of gain to both human and environmental health.

Therefore, presented in this study; it is to evaluate the the benefits and values of value-added products that can be obtained by using chemical and/or thermochemical methods from the organic fraction of municipal solid wastes.

Keywords: Bioeconomy, Municipal Solid Wastes, Kitchen Waste, Bioenergy, Bioproduct

Bitkisel Yağların EPDM Kauçuk Formülasyonunda Petrol Bazlı Yağların Yerine Kullanılması

Ali YAZGAN^a, Yusuf GÜNER^a, Özkan ENGİN^a, Ali Erkin KUTLU^a, Abdulkadir ALLI^b

^a Standard Profil, Hamamalti Mevkii Konuralp, Düzce, Türkiye,

^b Düzce Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, Düzce, Türkiye

ayazgan@standardprofil.com

Özet

EPDM (Etilen Propilen Dien Monomer) kauçuğunun sentetik kauçuklar içinde kullanımı hızlı bir şekilde büyümeye devam etmektedir. EPDM kauçuğunun kullanımı oldukça geniş alanlara sahiptir. Kullanım alanları içinde en önemli yeri araç sızdırmazlık profilleridir. Bunun sebebi, EPDM kauçukların dış hava koşullarına ve ozona karşı mükemmel dayanımıdır. Ayrıca, EPDM kauçuğunun sertlik aralığı 40 ile 95 ShA arasında değişebilmektedir. EPDM kauçuğunun üretiminde hamur karışımında petrol kökenli parafinik ve naftanik yağlar yumuşatıcı (plastifiyan) olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada, sızdırmazlık profili üretiminde kullanılan kauçuk hamuru formülasyonunda petrol kökenli parafinik yağ yerine bitkisel kökenli ve yenilenebilir Ayçiçek, Mısır ve Ketan Tohumu yağlarının formülasyonda kullanılabilirliği araştırılmıştır. Elde edilen kauçuk hamurunun Reolojik özellikleri; MDR (Moving Die Rheometre), Mooney Viskosite, Mooney Scorch ve RPA (Rubber Proses Analizör) ile belirlenmiştir. Elde edilen kauçuk örneklerinin yaşlanma öncesi ve sonrası (4 gün 90 °C) mekanik özellikleri (sertlik, kopma mukavemeti, kopma uzamaları, yırtılma), yoğunluk ve kalıcı deformasyonları incelenmiştir. Ayrıca, numunelerin termal özellikleri TGA (Termo Gravimetrik Analiz) analizleri ile karakterize edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: EPDM, Bitkisel Yağ, Kauçuk

Kaynaklar

- [1] Vasseur Didier; Labauze Gerard, 2008 Rubber composition for tire tread United Kingdom Patent, No: US7335692 (B2) — 2008-02-26.
- [2] Sandstrom Paul Harry, Method of processing rubber compositions containing soya fatty acids, sunflower fatty acids and mixtures thereof United Kingdom Patent, No: US6448318 (B1) — 2002-09-10.
- [3] Zoran S. Petrović, Mihail Ionescu, Jelena Milić, James R. Halladay, Soybean Oil Plasticizers As Replacement Of Petroleum Oil In Rubber Chemistry And Technology, Vol. 86, No. 2, pp. 233–249 (2013).
- [4] A.A. Gujel, M. Bandeira, V.D. Veiga, M. Giovanela, L.N. Carli, R.S. Mauler, R.N. Brandalise, J.S. Crespo, Development of bus body rubber profiles with additives from renewable sources: Part I – Additives characterization and processing and cure properties of elastomeric compositions Materials and Design 53 (2014) 1112–1118.
- [5] Wonsuk Kim, Alan Argento, Cynthia Flanigan, Deborah F. Mielewski, Effects of soy-based oils on the tensile behavior of EPDM rubber Polymer Testing 46 (2015) 33-40.

The Use Of Vegetable Oils Instead Of Conventional Petroleum Based Oils In EPDM Rubber Compound

Ali YAZGAN^{a,b*}, Yusuf GÜNER^a, Özkan ENGİN^a, Ali Erkin KUTLU^a, Abdulkadir ALLI^b

^a Standard Profil, Hamamalti Mevkii Konuralp, Duzce, Turkey

^bDuzce University, Faculty Of Sciences And Letters, Chemistry Department, Duzce, Turkey

ayazgan@standardprofil.com

Abstract

EPDM (Ethylene Propylene Diene Monomer) usage synthetic rubbers has been continuously increasing. EPDM is being used in different sectors and it is widely used in automotive weatherstrip production due to its resistance to weather conditions and ozone. In addition, EPDM compounds hardness range can be vary between 40 to 95 ShA. Petroleum based paraffinic and naphtanic oils are used as plastifiers in rubber compounds. In this study, the possibility of using vegetable based renewable oils (sunflower, corn and flax seed) instead of petroleum based paraffinic oil in the weatherstrip rubber compounds were investigated. The rheological properties of compounds were analysed with Mooney Viscosity, Mooney Scorch, MDR (Moving Die Rheometer) and RPA (Rubber Process Analyzer). The mechanical properties of compounds such as hardness, elongation at break, tensile strength before and after aging (4 days at 90 °C) were analysed. Compression set and density were also measured. Besides, the thermal properties of compounds were characterized with TGA (Thermogravimetric Analysis).

Keywords: EPDM, Vegetable Oil, Rubber

References

- [1] Vasseur Didier; Labauze Gerard, 2008 Rubber composition for tire tread United Kingdom Patent, No: US7335692 (B2) — 2008-02-26.
- [2] Sandstrom Paul Harry, Method of processing rubber compositions containing soya fatty acids, sunflower fatty acids and mixtures thereof United Kingdom Patent, No: US6448318 (B1) — 2002-09-10.
- [3] Zoran S. Petrović, Mihail Ionescu, Jelena Milić, James R. Halladay, Soybean Oil Plasticizers As Replacement Of Petroleum Oil In Rubber Rubber Chemistry And Technology, Vol. 86, No. 2, pp. 233–249 (2013).
- [4] A.A. Gujel, M. Bandeira, V.D. Veiga, M. Giovanela, L.N. Carli, R.S. Mauler, R.N. Brandalise, J.S. Crespo, Development of bus body rubber profiles with additives from renewable sources: Part I – Additives characterization and processing and cure properties of elastomeric compositions Materials and Design 53 (2014) 1112–1118.
- [5] Wonsuk Kim, Alan Argento, Cynthia Flanigan, Deborah F. Mielewski, Effects of soy-based oils on the tensile behavior of EPDM rubber Polymer Testing 46 (2015) 33-40.

THE EFFECT OF FILM THICKNESS ON THE PROPERTIES OF Nb₂O₅ THIN FILMS DEPOSITED ON FLEXIBLE ITO/PET SUBSTRATES

Nihan Akın Sönmez

*Gazi University, Technical Sci. VS, Department of Electrics and Energy, Ostim, Ankara
Gazi University, Photonics Application and Research Center, Teknikokullar, Ankara*

nihanakin@gazi.edu.tr

Abstract

In this work, Nb₂O₅ thin films with attractive transparent and wide band gap for electro-optical device applications were deposited on flexible ITO/PET substrate at 25, 50, 75 and 100 nm thickness at room temperature with reactive DC magnetron sputtering method. Coatings were carried out using a metallic Nb target of 99.9% purity of 2 inches in diameter, with a processing gas of 10 mTorr and a power of 100 W. Oxygen (O₂/(O₂+Ar)) gas was used for the reactive sputtering. Structural, optical and morphological properties of the films were evaluated by SIMS, UV-Vis spectrometer and AFM analysis. It was determined by SIMS analysis that the atomic species O and Nb distributed homogeneously throughout the film depth. The band gaps of the films were 3.5 eV and the optical transmittance at the visible region was around 70%. In addition, the optical reflectance in the range of 400-1000 nm decreased by about 5% on average with increasing the thickness of Nb₂O₅ thin film. It was seen from the surface images scanned in the 3x3 μm² area that the films had smooth surface morphology and the calculated RMS roughness values increased with the film thickness. This can be associated with coarse grain on the surface. The obtained results show that Nb₂O₅ film of all thicknesses has been successfully deposited on flexible substrate by reactive magnetron sputtering technique.

Key Words: Magnetron Sputtering, Thin Film, Nb₂O₅, Flexible ITO/PET Substrate

HİDROFİLİK SİLİKON TEKSTİL YUMUŞATICI ELDESİ

Yusuf Emre ÇABUKOĞLU, Abdulkadir ALLI

Düzce Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, Düzce, Türkiye

yusufemre81@hotmail.com

Özet

Bu çalışmada farklı emülgatörler kullanılarak emülsifikasyon yöntemi ile organo silikon destekli hidrofilik silikon tekstil yumuşatıcı elde edilmesi amaçlanmıştır. Polieter fonksiyonel grupları ve diğer geleneksel kimyasal maddeler içeren doğrusal bir blok silikon kopolimerinin farklı emülgatörler, kıvamlaştırıcı ve ph dengeleyici kullanılarak su ile emülsifikasyonu sonucu hidrofilik silikon tekstil yumuşatıcı eldesi amaçlanmıştır. İlk olarak hidrofilik silikon tekstil yumuşatıcısı , kopolimerin tridecyl alcohol 6EO etoxylated emülgatörü varlığında su ile emülsifikasyonu sonucu elde edilmiştir. Burada tridecyl alcohol 12 EO etoxylated yardımcı emülgatör , butil karbitol kıvam arttırıcı ve asetik asit ph düzenleyici olarak kullanılmıştır. Çalışmanın ikinci kısmında farklı emülgatörler ile hidrofilik silikon tekstil yumuşatıcı elde edilmiştir ve sonuçların kıyaslaması yapılmıştır. Emülgatör olarak **C12-C14 Alcohol polyethylene glycol ether** , **C12-13 Pareth-9** , **C12-C14 Alcohol polyethylene glycol ether** ve **C12-13 Pareth-9 karışımı** , **Laureth-7** , tridecyl alcohol 12 EO etoxylate kullanılmıştır. Bu çalışmalar sonucunda FTIR, görünüş, vizkozite, ph test sonuçları doğrultusunda kullanılan emülgatörler ile uygun sonuçlar elde edilmiştir.

Çalışmalar sonucunda tridecyl alcohol 6EO etoxylated emülgatörü ve yardımcı olarak tridecyl alcohol 12 EO etoxylate ile yapılan çalışmanın FTIR , görünüş, vizkozite, ph test sonuçları doğrultusunda diğer emülgatörlere kıyasla daha iyi sonuçlar verdiği gözlemlenmiştir.

Burada emülsifikasyon çalışmaları oda sıcaklığında ve 30 rpm karışım ortamında gerçekleştirilerek berrak görünümlü ve FTIR test sonuçları doğrultusunda referans ürün ile % 98 oranında uyumlu bir hidrofilik silikon tekstil yumuşatıcı elde edilmiştir. Emülsiyon, geniş bir PH aralığında, yüksek sıcaklıkta veya yüksek tuz konsantrasyonlarında aşırı kararludur. Bu işlemin sonunda mikro emülsiyon elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Emülsifikasyon, Emülgatör, Hidrofilik, Konsantrasyon, Mikro emülsiyon

Abstract

In this study, it is aimed to obtain hydrophilic silicone textile softener with SUPPORT OF organo silicone by emulsification method using different emulsifiers. Hydrophilic silicone textile softener is intended as a result of emulsification of a linear block silicone copolymer containing polyether functional groups and other conventional chemicals with water using different emulsifiers, thickeners and pH stabilizers. First, the hydrophilic silicone textile softener was obtained by water emulsification of the copolymer in the presence of tridecyl alcohol 6EO etoxylated emulsifier. In this section, tridecyl alcohol 12 EO etoxylated auxiliary emulsifier, butyl carbitol thickener and acetic acid were used as pH regulator. In the second part of the study, hydrophilic silicone textile softener was obtained with different emulsifiers and the results were compared. C12-C14 Alcohol polyethylene glycol ether, C12-13 Pareth-9, C12-C14 Alcohol polyethylene glycol ether and C12-13 Pareth-9 mixture, Laureth-7, tridecyl alcohol 12 EO etoxylate were used as the emulsifier. FTIR, appearance, viscosity, pH test results were showed that studied emulgators have similar results with market products.

As a result of the studies, it was observed that the study with tridecyl alcohol 6EO etoxylated emulsifier and tridecyl alcohol 12 EO etoxylate was found to be better than other emulsifiers according to FTIR, appearance, viscosity, pH test results.

Emulsification studies were carried out at room temperature and 30 rpm in a mixed medium. A hydrophilic silicone textile softener was obtained in accordance with the 98% of the reference product according to FTIR test results. The emulsion is extremely stable at a high pH range, high temperature, or high salt concentrations. Micro emulsion was obtained at the end of this process.

Keywords : Emulsification, Emulsifier, Hydrophilic, Concentration, Micro emulsion

Kaynaklar

[1] Periyasamy, S., Khanna, A., 2007. Silicone finishing: softer than a soft touch. Colourage LIV (16), 91–99.

[2] Saraf, N.M., Alat, D.V., 2007. Evaluation of softeners for cotton knits. Colourage LIV (6), 70–71.

[3] Chattopadhyay, D.P., Vyas, D.D., 2010. Effect of silicon nano-emulsion softener on physical properties of cotton fabric. Indian J. Fibre Text. Res. 35, 68–71

Poster olarak sunulmuştur.

**METAL ORGANİK KAFES İÇEREN BİYOBOZUNUR POLİMER
NANOKOMPOZİT FİLMLEİN HAZIRLANMASI VE KARAKTERİZASYONU**

S. ARICAN^a, S. DENİZ*^a, C. ALPASLAN GÜLER^{a,b}

^a Yıldız Teknik Üniversitesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, Davutpaşa Cad. No:127, 34220
Esenler, İstanbul-TÜRKİYE

^b Elif Ambalaj San. ve Tic. AŞ, İkitelli OSB, Hürriyet Bulvarı, No:1/28, Başakşehir, İstanbul-
TURKEY
e-mail: deniz@yildiz.edu.tr

ÖZET

Biyobozunur ve yenilenebilir kaynaklardan üretilmiş polimerler, çevresel kaygılar ve sürdürülebilirlik sorunları nedeniyle büyük ilgi görmektedir. Poli (laktik asit) (PLA), laktik asitten oluşan tekrarlayan birimlere sahip alifatik polyesterler grubuna ait bir polimerdir. Mısır ve buğday gibi nişasta yönünden zengin bitkisel kaynaklardan üretilen biyobozunur ve kompostlanabilir bir termoplastik polimer olması en önemli özelliklerinden biridir. Poli (kaprolakton) (PCL), yüksek kristalleşme ve hidrofobik karaktere sahip sentetik bir alifatik polyesterdir ve halka açma polimerizasyonu ile üretilir. Metal organik çerçeveleri (MOF'ler), genellikle çok yüksek gözeneklilik ve yüzey alanı olan metal iyonlarından veya iyon kümelerinden oluşan karbon bazlı organik bağlayıcı malzemelerdir. Gözenekli yapısı sayesinde CH₄, CO₂, H₂ gibi gazların depolanmasını sağlar. Bu çalışmanın amacı, metal organik çerçeveli PLA ve PCL bazlı biyonano-kompozit filmlerin çözelti döküm yöntemi ile hazırlanması ve bu filmlerin karakterizasyon çalışmalarının yapılmasıdır. Solvo-termal yöntemle sentezlenen Cu ve Zn bazlı MOF nanokristalleri, polimer çözeltilerinde dağıtılmıştır. Karışımlar, ince bir film elde etmek için bir döküm bıçağı kullanılarak dökülmüştür. Biyo-kompozit filmlerin mekanik, optik, kimyasal, fiziksel, termal ve morfolojik yapı analizlerini Gloss-Haze, berraklık, FTIR, XRD, SEM mikroskobu yapılmıştır. MOF'larla hazırlanan PLA ve PCL biyanokompozit filmlerin mekanik özellikleri çekme uzama testleri ile değerlendirildi. MOF içeriğinin, PLA harman filmlerinin termal stabilite, mekanik ve antibakteriyel özellikleri üzerindeki etkileri araştırılmış ve saf filmler ile karşılaştırılmıştır. Ek olarak, elde edilecek filmlerin gıda ambalajı olarak uygun olup olmadığını incelemek için antibakteriyel testler yapılmıştır. Bu projede üretilen biyobozunur filmler, ambalaj endüstrisindeki gelişmiş mekanik özellikler ve düşük maliyetler açısından beklentilerin gerçekleştirilmesinde yararlı olacaktır.

Anahtar Kelimeler— Biyobozunur filmler, nanokompozitler, MOF, Polilaktik asit, Polikaprolakton

BIYO BAZLI VE PETROKIMYASAL POLIOL KARIŞIMLARINDAN POLIÜRETAN FILMLERİN SENTEZİ VE ÖZELLİKLERİ

¹Seda Turpçu, ¹Sennur Deniz¹, ¹Sevilay Nigar¹, ¹Fırat Yılmaz¹, ¹Tuğba İncirkuş¹

¹Yıldız Teknik Üniversitesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, Davutpaşa cd, 34210,
Esenler-İstanbul, Türkiye,
sedaturpcu@hotmail.com , deniz@yildiz.edu.tr

ÖZET

Ham petrol fiyatlarının artması ve çevre dostu yaklaşım nedeniyle, alternatif yenilenebilir kaynaklardan polimerler geliştirilmektedir. Selüloz, protein, doğal yağ, lignin, nişasta ve şeker benzeri bazı yenilenebilir malzemeler alternatif yenilenebilir kaynaklar olarak düşünülmektedir. Bunların arasında bitkisel yağlar en avantajlı olanıdır, çünkü ekonomik, sürdürülebilir, çevre dostu ve kolay temin edilebilir özelliktedirler.

Poliüretanlar, iyi mekanik ve yüzey özellikleri, bakteriyal enzimlere karşı hidrolitik direnç, düşük sitotoksitite ve iyi hemouyumluluk nedeniyle, geleneksel olarak köpük, elastomer, film, kaplama, yapıştırıcı, vernik ve biyomalzeme olarak kullanılırlar.

Farklı zincir uzunluklarındaki trigliseritlerden oluşan bitkisel yağlar bazı polimerizasyon prosesleri için uygundur. Bunlardan bir tanesi de soya yağlarıdır.

Bitkisel yağların reaktif grupları, bitkisel yağlardan yüksek molekül ağırlıklı polimerler üretmek için daha reaktif hidroksil, epoksi veya karboksil işlevlerine dönüştürülürler.

Bu yaklaşım, bitkisel yağların polimer sentezinde ana malzeme olarak kullanılmasına yenilenebilir bir yaklaşım getirmiştir. Bu özellikler bitkisel yağ bazlı poliüretanları sentez kolaylığı ve çeşitli alanlarda potansiyel uygulamalarından dolayı önemli hale getirmiştir. Bu uygulamalara; medical, ayakkabı, ambalajlama, otomobil, boyama ve kaplama uygulamaları örnek olarak verilebilir.

Poliüretan sentezinde hammadde olarak kullanılan izosiyanat hammaddesi türü doku biyouyumluluğu için önemlidir. Çünkü izosiyanatların kendiliğinden hidrolizi sırasında eser miktarda da olsa zehirli etki meydana gelmektedir.

HDI, H12MDI veya TMDI gibi alifatik diizosiyanatlardan elde edilen poliüretanların mekanik özellikleri, MDI ve TDI olarak en popüler aromatik diizosiyanatlardan sentezlenen poliüretanlardan daha zayıftır. Yine de alifatik diizosiyanatlardan elde edilen poliüretanlar diğerlerinden daha uygundur.

Bu çalışmada; bitkisel bazlı poliollerin özellikleri ve sentezini, esnekpoliüretan filmler üretmek için bitkisel bazlı poliollerin ve bu poliollerle petrokimyasal bazlı poliollerden oluşan karışımların, esnek poliüretanların elde edilmesinde kullanılması açıklanmaktadır. Bu çalışmanın başlangıcında, halka açma reaksiyonları ile biyo bazlı poliol sentezi için epokside soya fasulyesi yağı (ESO) ve farklı substituentler reaksiyona sokulmuştur. Biyo bazlı poliol sentezi sırasında optimum reaksiyon koşulları belirlenmiştir.

Biyo bazlı poliüretan filmlerin sentezi için poliol olarak, polipropilen glikol (PPG425), polikarbonat polioli (PC), politetrametilen glikol (PTMG1000) ve bu petrokimyasal bazlı poliollerin epokside soya fasulyesi yağı bazlı poliollerle karışımları kullanılmıştır. Heksametilen diizosiyanat (H12MDI) ve izoforon diizosiyanat (IPDI) izosiyanat kaynakları olarak kullanılmıştır. Sentezin etkinliğinin değerlendirmesinde poliüretan filmlerin mekanik özellikleri önemli rol oynamaktadır.

Sentezlenmiş ESO bazlı polioller ve PU filmler Fourier dönüşümü kızılötesi spektroskopisi (FTIR), spektroskopi ve mekanik özellikleri ile karakterize edilmiştir.

Anahtar Kelimeler- Bitkisel yağ bazlı polioli, Politetrametilen glikol, Epokside soya yağı, Biyo-bazlı poliüretan film

A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY ON 3-(BENZYLOXY)PENTA-1,4-DIENE-1,5-DIYL)DIBENZENE DERIVATIVES

Taner ERDOGAN^A

^a Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School, Kocaeli University, e-mail: taner.erdogan@kocaeli.edu.tr

Abstract

Chalcones and their derivatives are important compounds in organic and pharmaceutical chemistry. They can act as anticancer, antitubercular, antiviral, antifungal, antibacterial agents etc. In the present study, some novel 3-(benzyloxy)penta-1,4-diene-1,5-diyl)dibenzene derivatives have been investigated computationally via DFT calculations. Geometry optimizations, frequency analyses, frontier molecular orbitals, molecular electrostatic potential maps and NMR calculations have been performed at DFT/B3LYP level of theory with the use various basis sets, including 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311+G(d,p) and 6-311+G(2d,p) basis sets. The general structure of the title compounds is given in Figure 1.

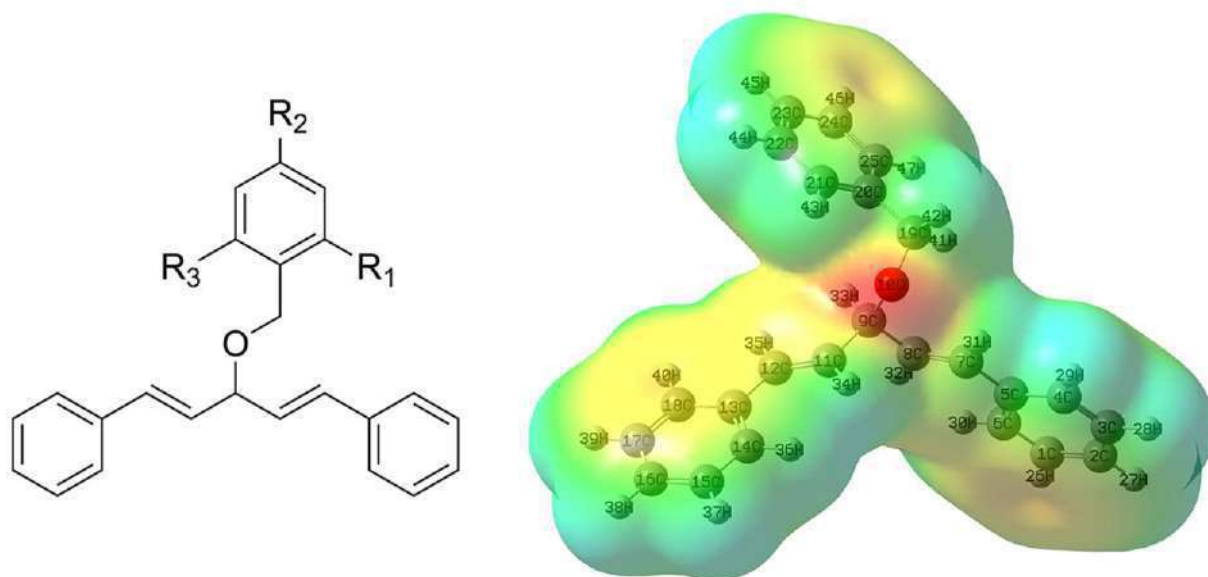


Figure 1: General structure of the title compounds and MEP map of compound 5a.

In the second part of the study, molecular docking calculations have been performed on the title compounds. Binding affinities of the investigated compounds have been determined for several enzymes, including cholinesterase enzymes, ACHE and BCHE, and heat-shock protein *N*-terminal domain, HSP90A. All calculations have been performed using Gaussian 09 Rev.D01 and Avogadro 1.1.1 program packages. GaussView 5 was used for the visualization of the computational results. AutoDock Vina, UCSF Chimera and Discovery Studio Visualizer program packages have been used in the molecular docking calculations.

Keywords: computational chemistry, DFT, molecular docking, chalcone, benzyl ether

A DFT STUDY ON THE REACTIONS OF 5-PHENYL-1,3,4-OXADIAZOLE-2-THIOL WITH VARIOUS 2-BROMO-1-ARYLETHAN-1-ONE DERIVATIVES

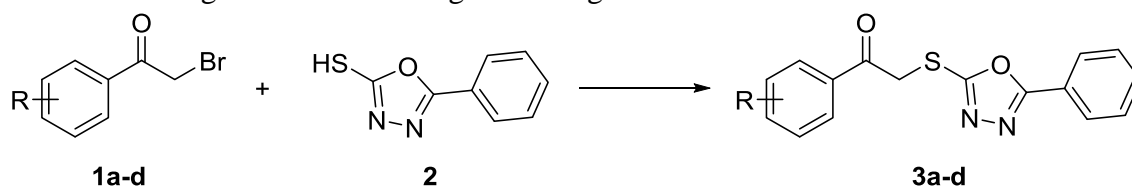
Taner ERDOGAN^A

^a Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School, Kocaeli University, e-mail: taner.erdogan@kocaeli.edu.tr

Abstract

Nitrogen containing heterocyclic compounds, including 1,3,4-oxadiazole compounds, are important organic compounds and have various applications in the field of pharmaceutical and agriculture industries. 2-Mercapto-1,3,4-oxadiazoles and their derivatives also possess a wide range of biological activities such as antimicrobial, anti-inflammatory, anti-HIV, antiparasitic, fungicidal, anticonvulsant etc.

In this study, it was aimed to investigate the reactions between 5-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-thiol and various 2-bromo-1-arylethan-1-one derivatives, computationally. For this purpose, detailed density functional theory (DFT) calculations have been performed on the chemical species which take place in the investigated reactions and the results have been compared with the experimental data obtained from the literature. All calculations have been performed at DFT B3LYP level of theory with the use of various basis sets. Calculations have been performed both at gas phase and solution phase, and various solvents have been examined. In the solution phase calculations IEFPCM solvation model was used. In the computational studies, Gaussian 09 Rev. D01, Avogadro 1.1.1 and GaussView 5.09 program packages have been used. Investigated reactions are given in Figure 1.



Comp.	R
1a, 3a	H
1b, 3b	4-Cl
1c, 3c	4-Br
1d, 3d	4-OCH ₃

Figure 1: Investigated reactions

Keywords: Computational chemistry, DFT, phenacyl bromide, 1,3,4-oxadiazole-2-thiol

COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF BENZYL ETHERS DERIVED FROM CHALCONES: A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY

Taner ERDOGAN^A, Serpil OZKURT SIVRIKAYA^a

^a Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School, Kocaeli University

Abstract

Chalcones and their derivatives are important compounds in organic and pharmaceutical chemistry. They can act as anticancer, antitubercular, antiviral, antifungal, antibacterial agents etc. The main objectives of this study are: (1) to investigate chalcone derived benzyl ethers computationally via DFT calculations and (2) to perform molecular docking calculations on the investigated molecules. For these purposes, in the first part of the study some DFT calculations have been performed on the title compounds. The general molecular structure of the investigated molecules and a sample molecular docking representation are given in Figure 1.

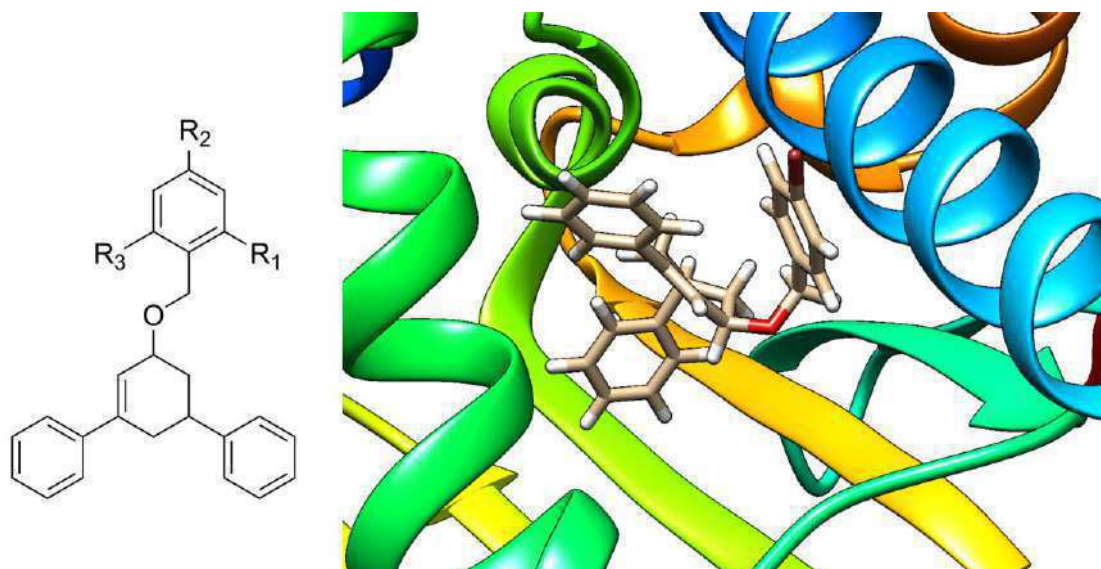


Figure 1: General molecular structure of the chalcone-based benzyl ethers and sample docking results.

In the second part of the study, binding affinities of the title compounds for cholinesterase enzymes and heat-shock protein have been determined via molecular docking calculations. In DFT calculations Gaussian 09 Rev.D01, GaussView 5 and Avogadro 1.1.1 program packages have been used. Molecular docking calculations have been performed with the use of AutoDock Vina, UCSF Chimera and Discovery Studio Visualizer program packages.

Keywords: computational chemistry, DFT, chalcone, benzyl ether, molecular docking

DFT AND MOLECULAR DOCKING CALCULATIONS ON THE 1,3,4-THIADIAZOLETHIOL SUBSTITUTED BENZYL ETHERS

Taner ERDOGAN^a, Serpil OZKURT SIVRIKAYA^A

^a Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School, Kocaeli University

Abstract

Thiadiazole heterocycle bearing compounds are important molecules in organic and pharmaceutical chemistry. Thiadiazole derivatives display a broad spectrum of biological activities comprising antimicrobial, antituberculosis, anti-inflammatory and anticancer. The study consists of two parts: In the first part of the study some 1,3,4-thiadiazolethiol substituted benzyl ethers have been investigated computationally via DFT calculations. Geometry optimizations, frequency analyses, molecular electrostatic potential map calculations, frontier molecular orbital calculations and NMR spectral analyses have been performed on the investigated compounds. Calculations have been performed at DFT B3LYP level of theory with the use of various basis sets. In the second part of the study, molecular docking calculations have been performed on the investigated compounds for several enzymes and proteins. The general molecular structure of the investigated molecules and sample molecular electrostatic potential map are given in Figure 1.

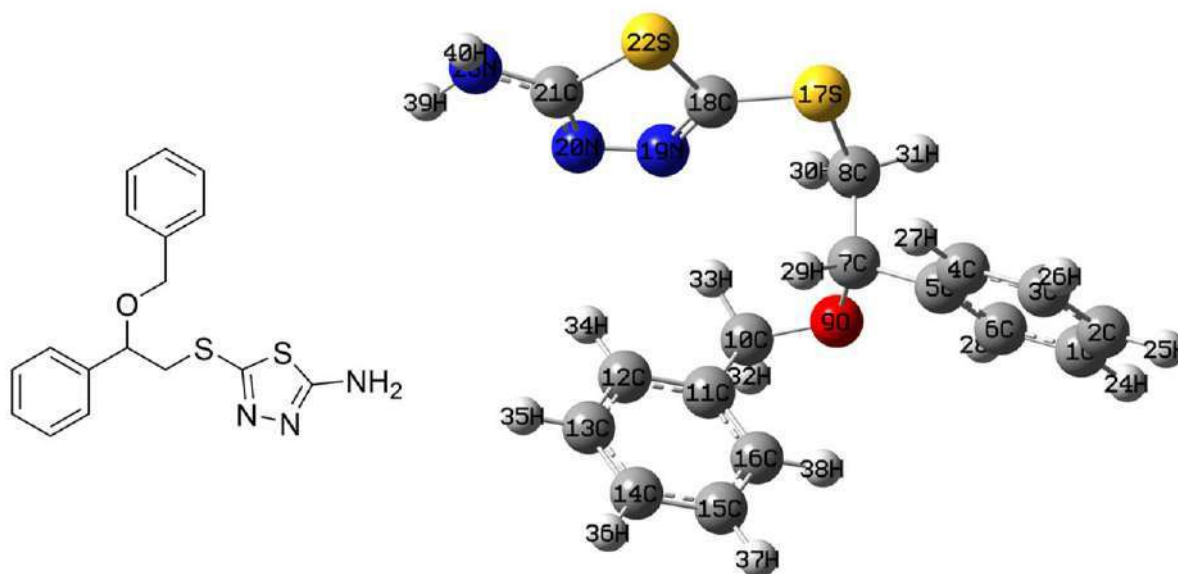


Figure 1: General molecular structure of the thiadiazolethiol substituted benzyl ethers and sample calculated molecular structure.

In DFT calculations Gaussian 09 Rev.D01, GaussView 5 and Avogadro 1.1.1 program packages have been used. Molecular docking calculations have been performed with the use of AutoDock Vina, UCSF Chimera and Discovery Studio Visualizer program packages.

Keywords: computational chemistry, DFT, 1,3,4-thiadiazole thiol, benzyl ether, molecular docking

EFFECT OF TEMPERATURE ON THE ADSORPTION OF ALLURA RED DYE ONTO MULTIWALLED CARBON NANOTUBES

Fatma OĞUZ ERDOĞAN

Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School,
Kocaeli University, Kocaeli, Turkey.
foerdogan@gmail.com

Allura red (FD&C Red 40) is a popular food dye used worldwide. Annual production in 1980 was greater than 2.3 million kilograms. Adsorption is one of the several techniques that has been successfully used for food dyes removal. Adsorption of allura red food dye onto multiwalled carbon nanotubes in aqueous phase at various temperatures and adsorbent dosage were studied. The adsorption studies include both equilibrium adsorption isotherms and kinetics. The experimental adsorption equilibrium data were compared to the Langmuir, Freundlich, Temkin and Dubinin-Radushkevich (DR) isotherm models and the isotherm model parameters were determined. Langmuir adsorption isotherm constant corresponding to adsorption capacity, Q_0 , was found to be 151.3 mg/g at 30 °C. The kinetic of adsorption was investigated using pseudo first order and pseudo second order kinetic models. The mechanism of the adsorption process was also described from the intraparticle diffusion model. The results indicate that multiwalled carbon nanotubes could be employed as a effective adsorbent for the removal of the allura red dye from effluents.

Keywords: Multiwalled carbon nanotubes, dye adsorption, allura red, food dye, adsorption isotherms, adsorption kinetic.

ADSORPTION OF CO₂ AND CH₄ GASES ONTO FE/MCM-41, FE/MWCNT AND FE/ZEOLITE COMPOSITES

Fatma OĞUZ ERDOĞAN

Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School,
Kocaeli University, Kocaeli, Turkey.
foerdogan@gmail.com

Climate change refers to the rise in average surface temperature on Earth. Climate change is a global problem, the result of increasing the greenhouse gases (CO₂, CH₄, N₂O, HFCs and F₆) emissions. In the response to this status, the capture and storage of carbon dioxide and methane gases will be necessary. Adsorption is the most commonly used method for the capture of CO₂ and CH₄ because of the low cost and the high adsorption capacity. Zeolites are microporous and crystalline aluminium silicates that are used extensively as adsorbents in many chemical reactions. After the discovery of carbon nanotubes and MCM-41, much attention has been devoted to their potential applications, such as the possible storage of CH₄ and capture of CO₂. Composite materials have found widespread application in various fields. In this study, composites were prepared from iron and multiwalled carbon nanotubes, MCM-41 or zeolite. BET, BJH and t-plot methods were used for the characterization of the composite samples based on N₂ adsorption-desorption data obtained at 77.4 K. CO₂ and CH₄ adsorption-desorption isotherms of the composite samples were measured by using a static volumetric apparatus. The equilibrium experiments were conducted at 25 °C and at pressure values up to 900 mmHg. The adsorption data were evaluated by several isotherm models such as Freundlich, Langmuir, Temkin, Dubinin-Radushkevich (DR) and Harkins-Jura (HJ) isotherm models.

Keywords: CH₄ and CO₂ adsorption, composite, iron, multiwalled carbon nanotubes, MCM-41, zeolite.

ÇOCUK HOSPİSLERİ ve TÜRKİYE’ DE KURULMASININ ÖNEMİ

Uzman Çocuk Hemşiresi Çiğdem Müge HAYLI

Koç Üniversitesi, Sağlık Bilimleri Enstitüsü, Çocuk Sağlığı ve Hastalıkları Hemşireliği (PhD Öğrencisi)

chayli@17@ku.edu.tr

ÖZET

Yaşadığımız çağda, değişik türde hastalıklar, kanserler görülmekte olup bunun sonucunda ölüm oranlarının giderek arttığı gözlemlenmiştir. Kanser ve diğer ölümcül hastalıkların yetişkinlerde görülmekle beraber, çocuklarda da sık görülmeye başlaması sonucunda Palyatif bakıma/Hospise olan ihtiyaç artmıştır. Palyatif bakım, hayatı tehdit eden, hastalıklardan/fizyolojik etkilerden kaynaklanan sorunlar ile hastaların ve hastanın yakınlarının yaşamlarını, genel olarak tehdit eden sorunların tespit edilmesinde ve etkili değerlendirmeler yapılarak, yaşam kalitesini en iyi aşamaya getirmeyi amaçlar. Palyatif bakımın yapıldığı kurumlar ‘Hospis’ lerdir. Hospislerde, yaşamın son evrelerinde destekleyici bakımın verildiği kurumlardır. Türkiye’ de yeni yeni gelişmekte olan palyatif bakım ve hospise uzun dönem gereken önem gösterilmemiştir. Terminal dönemde olan çocuklara kaliteli bakım ve yaşam kalitesini arttırmaya yönelik eylemler yapılmamaktadır. Çocuklarda yetişkinlere oranla daha hassas davranılması ve multidisipliner bir anlayışla adım atılması gerekmektedir. Araştırmanın örneklemini 365 pediatri alanında çalışan hemşire oluşturmuştur. Verilerin toplanmasında “Yaşam Sonu Dönemde Çocuk Hospisin/ Palyatif Bakımın Önemi Tanımlayıcı Soru Formu” ve “Pediatri Alanında Çalışan Hemşirelerin Çocuk Hospislerine İlişkin Görüşlerinin Belirlenmesine Yönelik Ölçeği” kullanılmıştır. Türkiye’de Çocuk Hospisi üzerine henüz bir çalışma ve gelişme mevcut olmayıp, Çocuk Hospis tanımlanmasını, düzeyini, bakımını, hemşireleri çocuk Hospisi konusunda bilgilendirmek ve yapılacak çalışmalar hakkında tanımlayıcı olarak yapılmıştır. %82.19’ u hospisin ne anlama geldiğini, ayrıca hemşirelerin %95.62’ si Türkiye’ de Hospis kurumlarının kurulması yönünde olumlu oldukları görülmüştür. Türkiye’de sağlık hizmetlerinin iyileşmesi, kamu hastanelerindeki yoğunluk, çocuk ölüm oranlarının azalması, ölümcül hastalıkların etkilerinin kontrol altına alınması gibi konularda büyük ilerlemeler kat edilecek ve sağlık hizmetleri konusunda gelişmiş ülkeler arasında yerini alacaktır.

Anahtar kelimeler: *Palyatif bakım, Hospis, Çocuk hospis, Terminal dönem, Türkiye*

ABSTRACT

In our age, different types of diseases and cancers have been observed and as a result, it has been observed that death rates are increasing gradually. Although cancer and other fatal diseases are seen in adults, the need for palliative care / hospice has increased. Palliative care aims to improve the quality of life by making life-threatening, life-threatening, health-related / physiological-related problems, and the lives of patients and their relatives, and by making effective evaluations. The institutions where palliative care is performed are 'Hospices yapı. Hospices, in the last stages of life are given supportive care institutions. Turkey was also shown the importance of palliative care and hospice newly emerging long-term needs. Children who are in terminal period are not undergoing quality care and quality of life. Children should be treated more sensitive than adults and steps should be taken with a multidisciplinary approach. The sample of the study consisted of 365 pediatric nurses. In Descriptive Questionnaire for the Importance of Child Hospice / Palliative Care in the End of Life Period "and" The Scale for Determining the Opinions of Pediatric Nurses About Child Hospices elik were used. Children's Hospice in Turkey is not yet available on a work and development, Children's Hospice identification, level, care, nurses are conducted as a descriptive study to inform children about the Hospice and to do. 82.19% 'u get hospice what it means, as well as 95.62% of the nurses' Turkey have been seen to be positive towards the establishment of the Hospice organization. improvement of health services in Turkey, the intensity of public hospitals, reduction of child mortality, on issues such as controlling the impact of deadly diseases to be covered great progress and take its place among the developed countries in health care.

Keywords: *Palliative care, Hospice, Child hospice, Terminal period, Turkey*

SOKAKTA ÇALIŞAN ÇOCUKLARA YÖNELİK KORUYUCU VE ÖNLEYİCİ SAĞLIK HİZMETLERİNDE HEMŞİRENİN ROLÜ

Uzman Çocuk Hemşiresi Çiğdem Müge HAYLI* , Uzman Öğretim Görevlisi Aylin
AKÇA SÜMENGEN**, Prof. Dr. Ayşe Ferda OCAKÇI**

Koç Üniversitesi, Sağlık Bilimleri Enstitüsü, Çocuk Sağlığı ve Hastalıkları Hemşireliği PhD
Bölümü

chayli@17@ku.edu.tr, ayakca@ku.edu.tr, aocakci@ku.edu.tr

ÖZET

Çocuk işçiliği, sokakta çalışan ve yaşayan çocuk dünyadaki en önemli sosyal problemlerin başında gelmektedir. Ülkemizde yoksulluk, muhtaçlık, işsizlik, sığınmacı göçü, bölgeler arası iç göç, kentleşme süreci doğrudan veya dolaylı olarak toplumun tüm nüfus gruplarını etkilemektedir. Özellikle çocuklar toplumsal, ekonomik ve kültürel alanda meydana gelen hızlı değişimler sonucu çeşitli risk ve tehlikelerle karşı karşıya kalmaktadır. Koruyucu ve önleyici sağlık hizmetleri çerçevesinde sokakta çalışan çocuklarda karşılaşılan sağlık sorunları, hemşirelerin bu çocuklara yönelik tutumları ve sağlık hizmetleri sunumunda üstlendikleri rollerin belirlenmesidir. Araştırma için sokakta çalışan 22 çocuk ile genel görüşme yapılmış ve ikamet ettikleri mahalleler belirlenmiştir. Sokakta çalışan çocukların ikamet ettikleri mahallelerdeki aile sağlığı merkezlerinde çalışan 20 hemşire ile anket yöntemi kullanılarak veriler toplanmıştır. Veriler frekans, ortalama, standart sapma değeri analizleri ile değerlendirilmiştir. Sokakta çalışan çocukların birçok bulaşıcı hastalık riski ile karşı karşıya oldukları, düzenli sağlık kontrollerinin, aşılarının yapılamadığı bundan dolayı hastalıkların ilerleyen safhalarında tedavi için başvurdukları bulgusu edinilmiştir. Sokakta çalışan çocuklar ile ilgili yoksul ve muhtaç ailelere mensup oldukları, gecekondu ve kenar mahallelerde yaşadıkları eğitim, sağlık gibi hizmetlere erişim zorluklarının olduğu bulgusu edinilmiştir. Araştırmada hemşirelerin sokakta çalışan çocuklar ile ilgili birçok bilgiye sahip oldukları bulgusu edinilmiştir. Sokakta çalışan çocuklar ile ilgili diğer kurum ve kuruluşlar arasında koordinasyon sorunlarının olduğu belirlenmiştir. Sokakta çalışan çocukların sağlık sorunları ile ilgili hastalıklar ilerledikten sonra sağlık kuruluşlarına başvurduğu, bu durumun ise önleyici ve koruyucu sağlık hizmetlerinin işlemlerini engellediği, ikinci basamak sağlık hizmetlerinde bir yığılmaya neden olabileceği sonucuna ulaşılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Sokakta Çalışan Çocuk, Hastalık, Hemşirelik.

ABSTRACT

Child labor, working in the street and living children are the most important social problems in the world. In our country, poverty, neediness, unemployment, refugee migration, inter-regional migration, urbanization process directly or indirectly affect all population groups of the society. Especially children are exposed to various risks and dangers due to rapid changes in social, economic and cultural areas. In the framework of preventive and preventive health services, health problems encountered in children working on the streets, attitudes of nurses towards these children and determining the roles they play in the provision of health services. 22 children working on the street were interviewed for the study and their neighborhoods were identified. Data were collected using 20 nurses working in family health centers in the neighborhoods where children were working in the streets. Data were evaluated by frequency, mean and standard deviation. It has been found that children working in the street face many infectious diseases risks, regular health checks and vaccinations cannot be done and therefore they apply for treatment in the later stages of diseases. It was found that there were difficulties in accessing services such as education and health in the slums and suburbs where they belong to poor and needy families about the children working in the streets. In the study, it was found that nurses had a lot of information about children working on the street. It has been determined that there are coordination problems between the children working in the streets and other institutions and organizations. It has been concluded that children working on the street apply to health institutions after advancing diseases related to health problems;

Keywords: *Children Working in The Streets, Disease, Nursing.*

**ASCORBIC ACID DETERMINATION IN SOME FRUIT VIA CONDUCTING
POLYMER-SUPPORTED METAL OXIDES ELECTRODES**

Şükriye Ulubay Karabiberöglü

Ege University, Faculty of Science, Chemistry Department, İzmir, Turkey
e-mail: sukriye.karabiberoglu@ege.edu.tr

ABSTRACT

Ascorbic acid is consumed on a large scale as an antioxidant agent in food, drinks and medicines, due to its importance in several enzymatic reactions and in the defense against oxidative stress. In addition, ascorbic acid has been used for the prevention and treatment of common cold, mental illness, infertility, cancer and AIDS. The increased knowledge of the role of vitamin C has necessitated the development of accurate and specific methods for its determination [1-2].

The aim of this study was investigation of ascorbic acid redox behavior and determination on metal oxide-conducting polymer modified glassy carbon electrode by cyclic and differential pulse voltammetry. The formation of metal oxide- conducting polymer films (poly-eriochrome black-T) on a glassy carbon electrode surface was characterized by scanning electron microscopy, and X-ray photoelectron spectroscopy. The parameters such as solution pH, polymerization scan rate, monomer concentration and polymerization cycle number were optimized for poly(EBT) modified glassy carbon electrode. Under optimized conditions, the linear determination range is 1.00–200.00 $\mu\text{mol L}^{-1}$ with a detection limit of 0.81 $\mu\text{mol L}^{-1}$. The selectivity of the modified electrode was examined in the presence of metals, inorganic ions, and organic substances. Moreover, the proposed method was successfully used for the assessment of ascorbic acid contents in commercial food products with satisfactory results. The developed method was applied to ascorbic acid content assessment in strawberry, orange, lemon and apple.

Keywords: Ascorbic acid, conducting polymer, metal oxide, modified surface.

References

- [1] Ruiz, C. C., Bayona, A. H., Shnchez, F. G., J. Agric. Food Chem.,38 (1990) 178-181.
- [2] Ates, M., Sarac, A. S., Prog. Org. Coat.,66 (2009), pp. 337–358.

FOLIC ACID DETERMINATION AT METAL NANOPARTICLES MODIFIED CARBON BASED ELECTRODES

Çağrı Ceylan Koçak*

*Bergama Vocational School, Dokuz Eylül University, İzmir, Turkey

E-mail: ceylan.kocak@deu.edu.tr

Folic acid (N-[p-{{(2-amino-4-hydroxy-6-pteridinyl) methyl} amino}benzoyl]-L-glutamic acid), commonly known as vitamin B₉, is a water soluble component. Its deficiency cause c neural tube defects in newborns, anemia, mental and cardiovascular disorders (Xiao et al., 2008). Therefore, it's important to find suitable electrode material for folic acid determination.

Carbon based materials have attracted tremendous interest due to their special physical and chemical properties. They have wide application field such as sensing, pharmaceutical industry and fuel cells (Salmanipour et al., 2013). Also, metal nanoparticles are one of the most studied electrode materials because of their high electron transfer ability, large surface area and catalytic capability (Kenarkob, 2019). Fabrication of the composite electrode surface with carbon based material and metal nanoparticles provide enhanced peak currents, good stability and selectivity with high sensitivity (Shahrokhian 2018).

In this study, composite electrode was fabricated by two step preparation technique. Firstly, treated carbon nanotubes (tCNT) modified on glassy carbon electrode (GCE) surface by drop-dry technique. Secondly, modified electrode (tCNT/GCE) was immersed in palladium containing acidic solution and nanoparticles were formed electrochemically by cyclic voltammetry technique. Resulting electrode was characterized with electrochemical impedance spectroscopy and scanning electron microscopy. Pd/tCNT/GCE was used for folic acid determination in pH 7 phosphate buffer solution. pH, cycle number and concentration of metal nanoparticles and effect of treatment on CNT on folic acid behavior was investigated. Differential pulse voltammetry was studied under optimized conditions and folic acid peak was found in linear relationship with its increasing concentrations between 0.4 μ M and 40 μ M. Limit of detection was calculated as 0.26 μ M (S/N=3). Interferants were also studied and selectivity of the electrode was confirmed. In conclusion, Pd/tCNT/GCE is a selective, sensitive and stable sensing platform for folic acid determination.

Key words: Folic acid, Metal nanoparticles, Carbon based materials, Voltammetry

References

- Xiao, F., Ruan, C., Liu, L., Yan, R., Zhao, F., Zeng, B. 2008. Single-walled carbon nanotube-ionic liquid paste electrode for the sensitive voltammetric determination of folic acid. *Sensors and Actuators B*, 134, 895–901.
- Salmanipour, A., Taher, M.A., Beitollahi, H., Hosseinzadeh, R. 2013. New voltammetric strategy for simultaneous determination of N-acetylcysteine and folic acid using a carbon nanotube modified glassy carbon electrode. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 102, 385–390.
- Shahrokhian, S., Hafezi-Kahnamouei M. 2018. Glassy carbon electrode modified with a nanocomposite of multi-walled carbon nanotube decorated with Ag nanoparticles for electrochemical investigation of Isoxsuprine. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 825, 30-39.
- Kenarkob, M. Pourghobadi Z. 2019. Electrochemical sensor for acetaminophen based on a glassy carbon electrode modified with ZnO/Au nanoparticles on functionalized multi-walled carbon nanotubes. *Microchemical Journal*, 146, 1019-1025.

**THE CHARACTERISTIC FEATURES OF NATIONAL IDENTITY IN THE
BAKHTIYAR VAKHABZADE'S WORKS: THEMATIC AND IDEOLOGICAL
PARALLELS IN MODERN UZBEK POETRY**

Prof. Dr. Terane HESHIMOVA
Azerbaijan National Academy of Sciences

ABSTRACT

The paper is about the effect of the great Azerbaijanian Bakhtiyar Vahabzadeh's (1925-2009) creation, works and literary translation activity to the Uzbek literary environment, and his role in the public opinion of the Uzbek people during the Soviet period. Bakhtiyar Vahabzadeh's poetry has great importance both in translation and in idea-theme parallels from the point of view of harmony, in Uzbek literature. Bakhtiyar Vahabzadeh, Rauf Parfi, Jamal Kamal, Abdulla Aripov, Khalil Rza Uluturk, Erkin Vahidov are poets who play important role in awakening of national spirit, in protection of the homeland from the effects of the known system, and in strengthening of national identity by the poems. B. Vahabzadeh and the well-known representatives of the 1960's Azerbaijan and Uzbekistan, in the 80s poets' works with the same theme, content, idea works, parallels and soundings in national themes reveal the artistic effect of Bakhtiyar Vahabzadeh creation. These parallels have combined the evolution of the poetry of the Azerbaijani and Uzbek peoples, and have led to the awakening, liberation of literature in general literature. These parallels by the combining the common developmental features of the poetry of the Azerbaijani and Uzbek peoples, led to the awakening, and the liberation stage of the common turkish literature.

Keywords: Azerbaijan, Uzbek, literary links, national, Bakhtiyar Vahabzadeh

**АЛИШЕР НАВОИЙ ИЖОДИДАГИ УЛУҒВОР ДЎСТЛИКНИНГ ЯҚИН ҚЎШНИ
ДАВЛАТЛАР МАТБУОТИДА ИНЪИКОС ЭТИШИ**

Турсунжон Каримова, Равшан Усанов,
академик Бобожон Ғафуров номидаги
Хужанд давлат университети доцентлари (Тожикистон),
фалсафа фанлари номзодлари,
Саиджон Қорихонов,
академик Бобожон Ғафуров
номидаги Хужанд давлат университети ўқитувчиси (Тожикистон)
ravshan-usanov@mail.ru

Тоҷик ва ўзбек халқларининг кўп қиррали алоқалари бой таҷриба ва тарихий жараёнда шаклланган азалий ўзаро муносабатларга таянади.

Эмомалӣ Раҳмон

Тожикистон ва Ўзбекистон республикалари ўртасидаги дўстлик муносабатлари ҳақида гап кетганда, икки биродар - тоҷик ва ўзбек халқлари алоқаларининг асрлар қаърига бориб туташувчи тарихи кўз ўнгимизда гавдаланади. Агар ушбу тарихга ибрат кўзи билан қарайдиган бўлсак, ўртадаги муносабатларнинг энг яхши ва бахтли дамлари бу - халқлар ўзаро тинчлигу дўстлик ҳамда меҳрибонлигу хайрхоҳликда яшаган онлари бўлганлигини кўришимиз мумкин.

Нафақат, халқлар тарихи, балки илм, маданият, икки халқнинг буюк аждодлари ўртасидаги дўстона муносабатлар тарихи ҳам бугунги авлод учун ибрат намунасидир. Математика, астрономиядан тортиб фалсафа-ю руҳшуносликкача бўлган кўпгина аниқ фанлар соҳасида минтақа олимлари ўз замонаси илми учун хизмат қилиб, унинг мустаҳкам пойдеворини яратиб беришган. Мавлоно Абдурахмон Жомий ва Мир Алишер Навоий ўртасидаги биродарлик, устоз-шогирдлик, ўзаро юксак эҳтиром икки қўшни халқ дўстлигининг олий намунасидир. Шунингдек, ушбу дўстлик икки томон учун ҳам манфаат келтириб, миллатлараро илм, адабиёт ва маданият, сиёсат ривожига салмоқли ҳисса қўшди.

Йиллар ўтиши билан буюклар томонидан қўйилган мустаҳкам пойдевор дўстликнинг муҳташам қасрини янгидан бунёд этиш лозимлигига ундади.

2018 йилнинг март ойида Ўзбекистон Республикаси Президенти Шавкат Мирзиёевнинг Тожикистонга давлат ташрифи ва Тожикистон Республикаси Президенти муҳтарам Эмомали Раҳмоннинг август ойида Тошкентга расмий ташрифи чоғидаги мулоқоту музокаралари икки мамлакат дўстлигу биродарлигининг янги тарихида қувончли ва унутилмас воқеаларга айланди. Миллат пешвоси муҳтарам Эмомали Раҳмоннинг нутқида икки мамлакат муносабатларидаги умидли уфқлар очилаётгани таъкидлаб ўтилди: «Халқларимизни кўп асрлик дўстлик, яхши қўшничилик ва ўзаро эҳтиром анъаналари боғлаб туради. Ўзбекистон Республикаси билан ҳамкорлик Тожикистон Республикаси ташқи сиёсатининг устувор йўналишларидан бири саналади. Бўлиб ўтган музокаралар жараёнида эришилган келишувларимиз эса, кўп жиҳатдан тарихий хусусиятга эгадир. Улар Тожикистон-Ўзбекистон муносабатларини босқичма-босқич янги даражага кўтариш учун асос ва ишончли пойдевор яратади».

Икки биродар мамлакат президентларининг ҳар бир сўзида эҳтиром, ишонч ва самимийлик зоҳир эди: «Биз Сизнинг муштаракликдаги дўстлик ва самарали муҳитни яратиш борасидаги ташаббусингизни самимий қабул қилдик. Зеро, улар бизнинг мақсадларимизга тўлиқ мувофиқдир», - деди Тожикистон Республикаси Президенти муҳтарам Эмомали Раҳмон.

Тожику ўзбек халқлари дўстлик алоқаларининг янги йўналишда давом этиши ва унинг матбуотда ёритилишининг катта сиёсий, маданий ва ижтимоий аҳамияти бордир. Ҳақиқатдан ҳам бу икки халқ ўртасидаги муносабатларнинг жонланиши ушбу давлатларда яшаётган одамларни хурсанд қилиб юборди. Уларнинг шодлиги телевидение ва матбуот орқали кенг ёритилди. Таниқли олимлар, ёзувчилар ва санъаткорлар томонидан берилган интервью, суҳбат ва ёзилган мақолаларда бу икки халқ дўстлиги тараннум этилди.

Тожиқлар ва ўзбеклар адабий алоқалари, халқларимизнинг муносабати, муомала ва яқин дўстлиги илдизлари чуқурдир. Мавлоно Абдурахмон Жомий ва Мавлоно Алишер Навоий ўртасида қарор топган дўстлик, яқинлик, устозу шогирдлик тожик ва ўзбек халқларининг дўстлиги рамзига айланиб кетгани ҳақиқат ва юқорида таъкидлаганимиздай ҳар вақт дўстлик ҳақида сўз кетганда, беихтиёр ана шу дўстликнинг икки шохсутуни ёдга олинади. Бу икки улғвор шахс - устозу шогирд дўстлиги шу қадар зич ва мустаҳкам бўлганки, мана орадан беш асрдан кўпроқ вақт ўтган бўлса ҳам самимият, инсоний муҳаббат, адиблик тимсоли бўлиб келмоқда. Бу борада ўзбек тилларида нашр этилаётган Тожикистон Ҳукумати нашрияси «Халқ овози» ва Суғд вилояти давлат ҳокимияти ижроия органи нашрияси «Суғд ҳақиқати» газеталари энг фаол газеталардан ҳисобланиб, икки дўст халқлар ғоясини катта миқёсда ёритмоқда.

«Халқ овози» газетасида чоп этилган «Қардошлик ва дўстликнинг кўнгилочар саҳифалари» (2018 йилнинг 11 октябри сони) номли мақолада 2018 йилнинг 7-8 август кунлари Тошкентда «Ўзбек мумтоз ва замонавий адабиётини ўрганиш ва тарғиб қилиш

масалалари» бўйича Ўзбекистон ёзувчилар иттифокининг биринчи конференциясида қатнашган Тожикистон ёзувчилар иттифоқи раиси Низом Қосим чиқиш қилгани борасида шундай дейилади: «Тожиқлар ва ўзбекларнинг дўстлик анъаналари ва адабий алоқалари тўғрисида сўз кетар экан, даставвал Мавлоно Абдурахмон Жомий ва Мавлоно Алишер Навоий номини тилга олишади ва бу чиндан ҳам ўринлидир. Ҳақиқатан ҳам шундай. Бу икки буюк сиймо ёрқин ва ўчмас йўлчи юлдузлар каби олис замонлардан халқларимиз ва ўлкаларимизни мангу ҳамдиллик ва ҳамбасталикка ҳидоят этиб туради. Лекин шуни айтиш керакки, бу икки улуғ сиймо муомала ва муносабати фақатгина тожиқларнинг ўзбеклар билан яқинлигини эмас, балки минтақадаги бошқа туркзабон халқлар билан ҳам қадимдан яқин эканлигини ифодалайди. Агар шундай бўлмаганда, бу қадар улуғлик кашф этмаган бўлур эди. Навоий улуғ устозини содиқ фарзандидай эъзозлар, ҳурмат қилар ва кўплаб самимий сатрларни унга бағишлаган эди. Икки тил-тожик ва ўзбек тилида ижод қилиш ҳам Навоийдан бошланган. Чунончи, ушбу масаланинг мумтоз танқидчиси Абдулғани Мирзоевнинг таъкидлашича, Хожа Ҳофизнинг Мавлоно Навоийга таъсири шу даражада кучли бўлганки, ғазал жанрини ўзбек адабиётида устувор жанр сифатида шаклланиши учун замин яратган ва Навоий тожик-форс девони орқали ғазалсари шоирлар қаторидан ўрин олган. Таниқли академикнинг фикрича, Алишер Навоий буюк адабиёт вакили сифатидагина эмас, балки адабиёт ва санъат аҳлининг ҳимоячиси ва 15 асрнинг иккинчи ярмида Мовароуннаҳр, Хуросон ва Эрон халқлари фани, адабиёти ва санъатининг ривожланишига муносиб замин тайёрлашга катта ҳисса қўшган, Абдурахмон Жомийдан кейин, форс-тожик ғазалнавислари орасида энг пешқадамлардан бири сифатида адабиётимиз тарихига кирган шахслардан биридир».

Газетада чоп этилган «Ул гавҳари яктодур...» (2018 йилнинг 31 августи) номли мақолада (муаллиф, Тожикистон маориф аълочиси, олий тоифали адабиёт ўқитувчиси Маъруфжон Жўраев) шундай фикрлар бор: «Мирзо Турсунзоданинг кадрдон дўсти академик шоир Ғафур Ғулом бу икки ажойиб халқни «Икки тилда сўзлашувчи бир халқ», деганда тўла ҳақли эди. Албатта, бу ҳақда кўплаб ёзиш мумкин. Қўлга қалам олишдан асосий мақсад бу мўъжазгина мақолада ана шу икки буюк халқнинг дўстлик тамал тошини қўйган улуғ фарзандлари Абдурахмон Жомий ва Алишер Навоийнинг ўзаро дўстона муносабатлари, ижодий ҳамкорлиги ҳақида фикр юритишдир. Абдурахмон Жомий улуғ тожик шоири ва мутафаккиридир. У тожик адабиёти юксалишига улкан ҳисса қўшган алломадир. Тожик шоирларидан Ҳилолий, Биноий, Ҳотифий, Осафий, ўзбек шоирларидан Лутфий, Алишер Навоий, Ҳусайнийларнинг энг яқин маслаҳатчиси ва устози эди. Айниқса, Жомийнинг Мир Алишер Навоий билан муносабати диққатга сазовордир.

Жомий ўзининг аксар асарларини Навоийнинг маслаҳати ва илтимоси билан ёзган. Ёшлари ўртасида фарқ кўп бўлишига қарамай, улар маънавий жиҳатдан жуда яқин дўст эдилар. Жомий Навоийнинг ота даражасидаги устози, Навоий эса, севакли шогирди эди. Уларнинг бу даражада яқинлиги ҳақида Жомийнинг ўзи бир шеърида қуйидагича изоҳлаган эди.

Дедилар: бу йигит фарзандми сизга?

Ё шоғирд, қариндош, дилбандми сизга?

Дедим: йўк, у туркдир, мен эса тожик,

Аммо қариндошмиз кўп яқин-наздик.

Жомий ўзининг «Хирадномаи Искандарий» ва «Юсуф ва Зулайҳо» дostonларида Навоийни ҳурмат билан тилга олади. Навоий ҳам «Хамса»даги дostonларида Жомийга махсус боблар бағишлади. Жомий вафотидан кейин эса, устозига бағишлаб, «Хамсат ул-мутаҳаййирин» («Беш хайрат») номли махсус асар яратди».

Тожикистон Халқ шоири, Рўдакий номидаги Давлат мукофоти лауреати, Камол Насруллонинг «Дўстликдан кишилар топгай саодат...» (2018 йилнинг 30 июли) мақоласи айниқса диққатга сазовордир. Унда келтирилишича, «Икки халқ дўстлигининг ёрқин мисоли буюк аждодларимиз - мавлоно Абдурахмон Жомий ва Мир Алишер Навоий тимсолида намоён бўлади. Улуғ аждодларимиз асос солган дўстлик боғида XX асрда икки халқнинг оқил фарзандлари, замонанинг таниқли сиёсий шахслари Бобожон Ғафуров ва Шароф Рашидовлар ҳам ўз дарахтларини ўтқазиб, парвариш қилдилар ва улар ўз самарасини берди.

Тожикистон Республикаси Президенти Душанбе шаҳрининг Беҳзод кўчасида жойлашган "Ёшликнинг 50 йиллиги" боғига Низомиддин Алишер Навоий номини бериши ҳамда ушбу боғда Нуриддин Абдурахмон Жомий ва Низомиддин Алишер Навоий ҳайкалини ўрнатилиши икки халқ хурсандчилиги билан қабул қилди».

Тожикистон Миллий университети ректори, академик, Муҳаммадюсуф Имомзода, филология фанлари номзоди, доцент. Муртазо Зайниддиновларнинг «Фикрдошлик тарихининг жонланиши» (2018 йилнинг 5 июни) мақоласида тожик ва ўзбек адабий алоқалари кенг ёритилган. Фикрларимизни мақолада келтирилган қуйидаги мулоҳазалар ифодалади: «Тожик ва ўзбек халқлари адабиётидаги бундай яқинлик икки буюк сиймо - Мавлоно Абдурахмон Жомий ва Мир Алишер Навоий ўртасидаги дўстлик, биродарлик, пиру муршидлик ва устоз-шоғирдлик муносабатларида яққол кўзга ташланади.

Устоз Садриддин Айний "Тожик адабиёти намуналари" асарида форс шоирлари қаторида Алишер Навоийни ҳам ёдга олиб, форс тилида шеър ёзишда унинг "кўплаб форс шоирлари билан тенглаша олиши, қолаверса, устунлиги"ни ҳам алоҳида таъкидлаб, форсча ашъоридан намуналар келтирган.

Кейинчалик Садриддин Айний шоирнинг тожик тилида ёзган шеърлари, таржимаи ҳоли, унинг асарлари ва шеърларидаги луғатлар шарҳини чопга тайёрлашда катта заҳмат чекиб, "Алишер Навоий ва тожик адабиёти" мақоласи ва "Алишер Навоий" монографиясини ёзади. Бу билан тожик ва ўзбек халқлари адабий алоқаларининг тарихий илдизларини исботлаб, навоийшунослик илмининг амалий ривожига муносиб ҳисса қўшди».

Тожикистон ёзувчилар иттифоқи аъзоси, Сулаймон Эрматовнинг «Чегаралар очиқ... чехралар очиқ...» (2018 йилнинг 31 майи) номли мақоласи таниқли ёзувчининг Ўзбекистонга сафари ёритилади ва унда шундай сатрлар бор: «Ўша куни Ўзбекистон Халқ шоири Азим Суённинг 70 йиллигига бағишланган тадбир ўтказилаётган экан. Тантанали йиғилишдан аввал Самарқанднинг қоқ марказида тожик ва ўзбек халқлари дўстлигининг рамзи сифатида ўрнатилган Абдурахмон Жомий ва Алишер Навоий ҳайкали пойига гул қўйиш маросими бўлиб ўтди. Ўзбекистон Республикаси санъат арбоби, атоқли таржимон, таниқли адиб ва зукко мунаққид Иброҳим Ғафуров тожик ва ўзбек халқлари дўстлигига тамал тошини қўйган икки буюк зот - Абдурахмон Жомий ва Алишер Навоийнинг буюк хизматларини эсга олиб, бу дўстлик дарахти ҳозир ҳам гуркираб ўсаётганлигини ўзгача бир ҳаяжон билан сўзлаб берди».

«Дўстлар дийдорида шодлик мужассам» (2018 йилнинг 19 майи) номли мақолада журналистлар Ёқубжон Абдуманонзода ва Зухриддин Умаровлар муштарак мақсадларни кўзлаган делегация ҳайъати Заҳириддин Муҳаммад Бобур номидаги Андижон Давлат университетининг профессор-ўқитувчилари: илмий ишлар бўйича проректор, тарих фанлари доктори, профессор Бахтиёр Расулов, филология факултети ўзбек тилшунослиги кафедраси мудир, филология фанлари доктори, профессор Дилоро Набиева, психология кафедраси мудир, психология фанлари номзоди, доцент Машрабой Ҳалимова, халқаро алоқалар бўлими бошлиғи Фарҳод Алимовлардан иборат гуруҳ билан мулоқот баён этилган мақолада Жомий ва Навоий адабий алоқалари кенг ёритилади.

Филология фанлари номзоди, доцент Бахтиёр Файзуллоев, «Туркигўй шоирлар устоз Айний нигоҳида» (2018 йилнинг 10 майи) мақоласида устоз Садриддин Айний ўзбек ва тожик адабиётининг XX асрдаги такрорланмас истеъдодли вакили дейилади ва унда шундай фикрлар бор: “Тожик адабиёти намуналари”да туркигўй шоирлар – Султонхалил ибни Мироншоҳ ибни Амир Темур, Абулқосим Бобурмирзо ибни Бойсанқур, Низомиддин Алишери Навоий, Абдуллохон-волии Бухоро, Имомқулихон-волии Бухоро, Қосимхон ибни Хусравхон, Абдулазизхон-волии Бухоро, Субҳонқулихон-волии Бухоро, Бобораҳим Машраби Намангоний, Сўфи Аллоҳёри Каттакўрғоний, Нодираи Андижоний, Амир Умархон-волии Фарғона, Мирзоостонақул Дабири Каттакўрғоний, Муҳаммадияқуб ибни Амир Дониёл ибни Манғит кабилар ҳаёти ва ижоди ҳақида қимматли маълумотлар берилган.

Тазкирадаги муҳим маълумотлардан яна бири Алишер Навоий ижоди билан боғлиқдир. Унда А.Навоий туғилган ва вафот этган саналари (1441-1501) йил кўрсатилиб, сўнг шоирнинг форсийдаги машҳур қасидаларидан бири “Тухфат ул афкор” (“Фикрлар туҳфаси”)дан 13 байт келтирилган. Уни Давлатшоҳ асаридан олинганлиги ҳам кўрсатиб ўтилган.

Устоз Айний Навоийнинг форсий тилда ёзилган “Тўхфат ул афкор” (“Фикрлар туҳфаси”) қасидасига эътибор берганлиги бежиз эмас эди. Мазкур қасида Навоий ижодида муҳим адабий-эстетик қимматга эга бўлиб, у устози Абдурахмон Жомийга бағишланган етук ижод намуналаридан бири ҳисобланади. Шу билан бирга, Жомийнинг “Лужжат ул асрор” (“Сирлар денгизининг туби”) қасидасига татаббуъ

сифатида ёзилган эди. Янада аниқроқ айтганда, ушбу қасида Амир Хусрав (1253-1325)нинг “Дарёи аброр” (“Яхши кишилар дарёси”) ва Жомийнинг юқорида тилга олинган қасидасига татаббуъ эканлиги навоийшуносликда қайд этилган».

Суғд вилояти давлат ҳокимияти ижроия органи нашрияси «Суғд ҳақиқати» газетаси ҳам икки халқ дўстлигини тараннум этувчи мақолалар чоп этишда энг фаол нашрлардан ҳисобланиб, дўстлик мавзусидаги ҳар бир мақола Абдурахмон Жомий ва Алишер Навоий дўстлиги ҳақидаги фикрлар билан бошланади. Масалан, «Иккиси бир куй-ғазалдан» (таникли журналист Д.Қўчқоров муаллифлик қилган), атокли журналист Бобожон Икромовнинг «Дўстлик чаманининг булбуллари», таникли журналист ва хажвнигор Эгамназар Соҳибназаровнинг «Дўстлик алоқалари мустаҳкам бўлаверсин» номли мақолаларда шу дўстлик тарихи бугунги кун нуқтаи назаридан ёритилади.

2018 йил апрел ойида Ўзбекистон Республикаси маънавият-маърифат маркази, Навоий вилояти ҳокимлиги, Олий ва ўрта махсус таълим вазирлиги, Навоий давлат педагогика институти, Тошкент давлат ўзбек тили ва адабиёти университети, Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси Ўзбек тили, адабиёти ва фолклори институти ҳамкорлигида “Алишер Навоий ижодий меросининг умумбашарият маънавий-маърифий тараққиётидаги ўрни” мавзусида 2-анъанавий халқаро илмий конференцияда қатнашган Тожикистонлик олимлар академик Бобожон Ғафуров номидаги Хужанд давлат университети ўзбек филологияси факултети профессори, филология фанлари доктори Абдусалом Абдуқодиров ва шу факултет доценти Бахтиёр Файзуллоевлар билан суҳбатлашган «Суғд ҳақиқати» газетаси бош муҳаррири Фарҳод Жўраев «Навоийни англаш саодати» мақоласида инсоният маънавиятида дўстлик тушунчаси муҳим ўрин тутуши, дўстлик кишилар ўртасидаги аҳиллик ва яқинликни билдириши, у манфаатларнинг умумийлиги ва ўзаро ишончга асосланиб, кишиларнинг бир-бирларига бўлган муносабатида намоён бўлишини айтиб ўтиб, тожик ва ўзбек халқлари қадимдан бир-бирларига яқин ҳудудда ва ҳатто аралаш ҳолда яшаганликлари, манфаатларининг бир хиллиги, урф-одатларининг ўхшашлиги, меҳнат ҳамда яшаш тарзларининг муштараклиги тўғрисида фикр юритиб, бу икки қардош халқ ўрта-сидаги дўстлик ҳар жиҳатдан мустаҳкам бўлиши лозимлигини таъкидлаб, тожик ва ўзбек халқлари адабиётидаги бундай яқинлик икки буюк сиймо - Мавлоно Абдурахмон Жомий ва Мир Алишер Навоий ўртасидаги дўстлик, биродарлик, пиру муршидлик ва устоз-шогирдлик муносабатларида яққол кўзга ташланади, дея хулоса чиқаради.

Миллий бирлик ва тинчлик асосчиси, Миллат Пешвоси. Тожикистон Республикаси Президенти Эмомали Раҳмон фикрича, Жомий ва Навоий дўстлиги, уларнинг устоз ва шогирд сифатида ҳамкорликлари шу қадар самимий ва мустаҳкам эдики, Жомий ўз асарларидан бирида Навоийни вафо ва садоқат намунаси, дея атайди. Дарҳақиқат Алишер Навоий ижодий мероси умумбашарият маънавий-маърифий тараққиётида катта ўринга эга. Икки халқ дўстлиги ҳақида сўз юритар эканмиз, беихтиёр Тинчлик ва миллий бирлик асосчиси - Миллат пешвоси, Тожикистон Республикаси Президенти муҳтарам Эмомали Раҳмоннинг: "Тожик ва ўзбек дўстлиги Худованд амри биландир. Икки халқ дўстлигининг зилол булоғи бошида икки буюк сиймо - Абдурахмон Жомий ва Алишер Навоий турганлиги икки халқ дўстлиги рамзидир. Биз бу дўстлик

булоғининг мусаффо сувларига асло гард юқтирмаймиз, уни кўз қорачиғидек авайлаб-асраймиз. Бу сувнинг мусаффо юзаларида хазон барглари эмас, нилуфар гуллари қийғос очилиб, сузиб юришини истаймиз...",- деган образли сўзлари ёдга тушди. Зотан, Эмомали Раҳмон давлатимиз сарвари бўлган кундан бошлаб, шу катта оиланинг меҳрибон падари сифатида икки халқ - тожик ва ўзбекларнинг дўстлигини тез-тез эслатиб келмоқда. Шу боис, икки халқ дўстлиги кундан-кунга ошиб бораптики, ҳеч қанча камайгани йўқ. Бу дўстликнинг сиёсатда, маданиятда, ижтимоий ҳаётнинг муҳтим қисми бўлган матбуотда инъикос этилиши эса кенг имкониятларни келтириб чиқаради.

Албатта, бу дўстликнинг асосида Абдураҳмон Жомий ва Алишер Навоий Ҳазратларининг туриши дилларга ҳузур бағишлайди.

ФЙДАЛАНИЛГАН АДАБИЁТЛАР РЎЙХАТИ:

1. «Халқ овози» газетаси. – Душанбе: 2018.
2. «Суғд ҳақиқати» газетаси. – Хужанд: 2018.

**ЧЫНГЫЗ АЙТМАТОВДУН ЧЫГАРМАЛАРЫНДАГЫ КЭЭ БИР
ФРАЗЕОЛОГИЯЛЫК БИРДИКТЕРДИН КЫРГЫЗ, ОРУС ЖАНА АНГЛИС
ТИЛИНДЕГИ АНАЛИЗИ**

Назаракунов Өмүрбек Үсөнович, окутуучу
Ош гуманитардык-педагогикалык институту

Аннотация

В данной статье анализируются переводы фразеологических единиц с кыргызского языка на английский, отобранных из повести Ч.Айтматова «Гулсарат». При этом русские переводы фразеологических единиц выполняют роль корреляции.

Ключевые слова: Фразеологические сращение, фразеологические единства, фразеологические сочетания, фразеологические выражения.

Аннотация

Бул макалада Чынгыз Айтматовдун «Гулсарат» чыгармасынан алынган фразеологиялык бирдиктердин кыргыз тилинен англис тилине орус тили аркылуу которулуусу каралган.

Ачкыч сөздөр: фразеологиялык ширешме, фразеологиялык бирдик, фразеологиялык айкаш, фразеологиялык сөздөр (терминдер).

ТУКАЕВЛАРНЫҢ ДИНИ ҺӘМ МӘГЪРИФӘТЧЕЛЕК ЭШЧӘНЛЕГЕ
(БАШКОРТСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ СТӘРЛЕБАШ РАЙОНЫНЫҢ
СТӘРЛЕБАШ АВЫЛЫ МӘДРЭСӘСЕ ТАРИХЫННАН)

Нуридә Насыйбуллина

филология фәннәре кандидаты

Татарстан Фәннәр академиясенен

Г. Ибраһимов ис. Тел, әдәбият һәм сәнгать институты

nasibullina.nur@yandex.ru

Аннотация: Целью данной работы является анализ культурно-просветительской, образовательной деятельности медресе и трудов преподавателей профессионального учебного заведения села Стерлибашево. Особое внимание уделяется анализу благотворительного, педагогического наследия династии Тукаевых (Нигматуллиных) и осознанию исторической роли медресе в общественно-духовном развитии татарского, башкирского, киргизского и казахского общества. Эстәрлебаш төбәге борынгыдан мәгърифәтле як булганы тарихыбызга яхшы мәгълүм. Эстәрлебаш мәдрәсәсе үз вакытында дөнъякүләм мөселман халыкларын агартуда мөһим урын тотта, иң данлыклы, иң мәшһүр уку йортларының берсе булып таныла.

Ключевые слова: образование, медресе, религия, ислам, методическая деятельность, выдающиеся личности.

**БОЛАШАҚ МУЗЫКА МҰҒАЛІМІНІҢ ЭСТРАДАЛЫҚ ӘН АЙТУ ДАҒДЫЛАРЫН
ҚАЛЫПТАСТЫРУ ЖОЛДАРЫ М.Ә. Смағулов**

I. Жансүгіров атындағы Жетісу мемлекеттік университеті Талдықорған қаласы
(Қазақстан)

miras.net@mail.ru

АНДАТПА

Жоғары білім беру жүйесін жаңғырту қажеттілігі қазіргі заманғы, түбегейлі өзгермелі қоғамның жалпы және кәсіби мәдениеттің жоғары деңгейіне ие мамандарды даярлаудағы қажеттігіне негізделген. Осыған байланысты болашақ музыка мұғалімінің кәсіби дайындығына, оның музыкалық-педагогикалық даярлығына қойылатын талаптар артып келеді. Музыка мұғалімінің вокалдық-педагогикалық мәдениетін біз, жеке тұлғаның интегративті сапасы ретінде түсінеміз, оның құрамына әр түрлі әншілік қызмет, құндылық қарым-қатынас, вокалдық педагогика саласындағы құзыреттілік, жеке вокалдық-орындаушылық шеберлік, сондай-ақ вокалдық-педагогикалық қызметтегі шығармашылық белсенділіктер де кіреді. Заманауи педагогиканың маңызды міндеттерінің бірі музыкалық білім беру үдерісін мақсатты және дәйекті етуге мүмкіндік беретін жаңа үйлесімді жүйені құру болып табылады. Мақалада болашақ музыка пәні мұғалімдерінің вокалдық-эстрадалық ән айту қабілеттерін дамыту үшін атқарылатын жұмыс пен жаттығулардың негізгі кезеңдері айқын сипатталады. Қазіргі заманғы эстрадалық вокалдық өнері өзінің әдістері мен формаларының әр түрлілігі санаға, сезімге, талғамға, болмысқа эстетикалық көзқарасты қалыптастыруға, тұлғаның шығармашылық қасиеттерін дамытуға үлкен әсер ететіні анықталады. Сондықтан да болашақ музыка мұғалімінің вокалдық қабілетін дамытуда эстрадалық ән айту дағдыларын қалыптастыру, руханилыққа тәрбиелеу, өзін-өзі дамыту және өзін-өзі дамыту мәселесі өзекті және маңызды көкейкесті сауалдардың бірі болып табылады.

Түйін сөздер: музыка мұғалімі, ән айту, эстрадалық вокал өнері, вокалдық қабілет

INVESTIGATION OF THE MULTI-STEP PERFORMANCE OF NONLINEAR AUTOREGRESSIVE NETWORK MODELS OVER TIME SERIES SAMPLES

Assoc. Prof. Dr. İsmail KIRBAŞ

Burdur Mehmet Akif Ersoy University, Department of Computer Engineering
ismailkirbas@mehmetakif.edu.tr

ABSTRACT

In this study we developed three different nonlinear autoregressive network models to investigate their multi-step prediction performance over certain time series. Within the scope of the study, we selected three unlike time series with different numbers of sampling and shapes then future values were estimated by looking at the past values. The results obtained from the different prediction models determined are compared and interpreted with the tables and graphs according to the performance criteria of the R value, Mean Square Error, Root Mean Square Error, Peak Signal-to-noise ratio and Mean Absolute Percentage Error. Thus, the reader can compare the evaluation results and evaluate the advantages and disadvantages of the prediction models clearly.

Keywords: *Nonlinear autoregressive artificial neural networks, time series analysis, multi-step forecasting, prediction.*

1. INTRODUCTION

Neural networks can be classified into two parts static and dynamic networks. Static networks have no feedback elements and contain no delay element; the output is calculated directly from the input through feedforward connections. Dynamic networks work differently, and the output of the neuron depends not only on the current input to the network, but also on the current or previous inputs, outputs, or states of the network. Thus, dynamic networks have memory; they can learn sequential or time-varying patterns (Kırbaş & Kerem, 2016).

This type of dynamic networks can be used to prediction in financial markets, channel equalization in communication systems, phase detection in power systems, fault detection in control systems and speech recognition (Khandelwal, Adhikari, & Verma, 2015; Kırbaş, 2017). Time delay neural networks (TDNN) only have feed-forward connections. In each layer of the network, time is encoded by buffering the input in tap-delay lines. They can be trained by standard backpropagation method (Kırbaş, 2018a).

NAR (Nonlinear autoregressive) networks also can learn to predict one time series given past values of the same time series, the feedback input, and another time series, called the external or exogenous time series (Al-Sbou & Alawasa, 2017; Kerem, Kırbaş, & Saygın, 2016; Kırbaş, 2016, 2018b).

In this study we developed three different nonlinear autoregressive network models to investigate their multi-step prediction performance over certain time series. The results obtained from the different prediction models determined are compared and interpreted with the tables and graphs according to the performance criteria of the R value, Mean Square Error, Root Mean Square Error, Peak Signal-to-noise ratio and Mean Absolute Percentage Error.

Thus, the reader can compare the evaluation results and evaluate the advantages and disadvantages of the prediction models clearly.

2. METHOD

Within the scope of the study, we selected three unlike time series with different numbers of sampling and shapes then future values were estimated by looking at the past values.

There are many statistical methods developed for time series estimation and the ARIMA approach is the leading one. Correlation coefficients are determined by determining the correlation between the values in ARIMA approach. In our study, a special kind of time delayed neural networks (Nonlinear autoregressive networks) were used for multi-step prediction (Buitrago, 2017; Caswell, 2014; Dietz, 2010; Pucheta et al., 2011; Shen & Chang, 2013).

Time-delayed neural networks evaluate d -past values to estimate the future value and estimate according to the relationship determined (Thielbar & Dickey, 2011). To predict series y_t given d past values of y_t , equation 1 can be used.

$$y_t = f(y_{t-1}, y_{t-2}, \dots, y_{t-d}) \quad (\text{Equation 1})$$

The network with 40 lags (delay) has been created and trained in open loop form as shown in Figure 1.

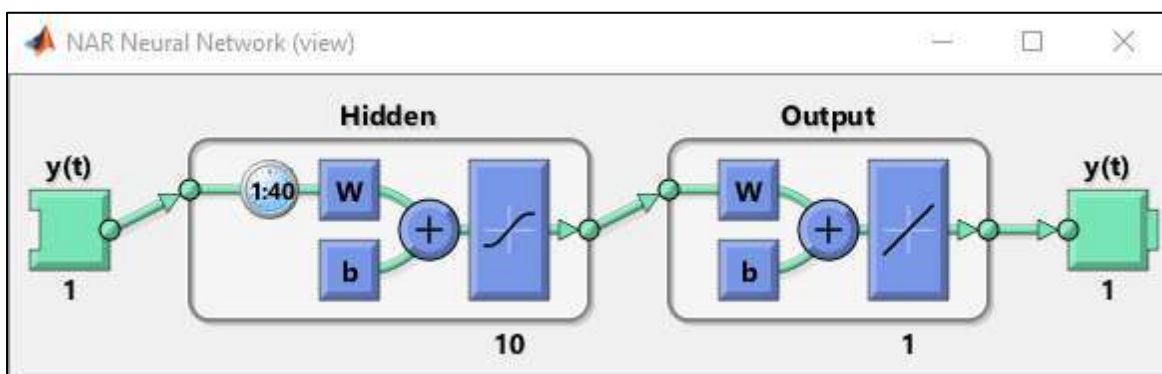


Figure 1. Open loop architecture of the artificial neural network.

Training with open loop (single-step) prediction is more efficient than with closed loop (multi-step) prediction because it allows us to supply the network with correct feedback inputs even as we train it to produce the correct feedback outputs.

After training, the network may be converted to closed loop form that the application requires. Closed loop architecture of the nonlinear autoregressive network is shown in Figure 2.

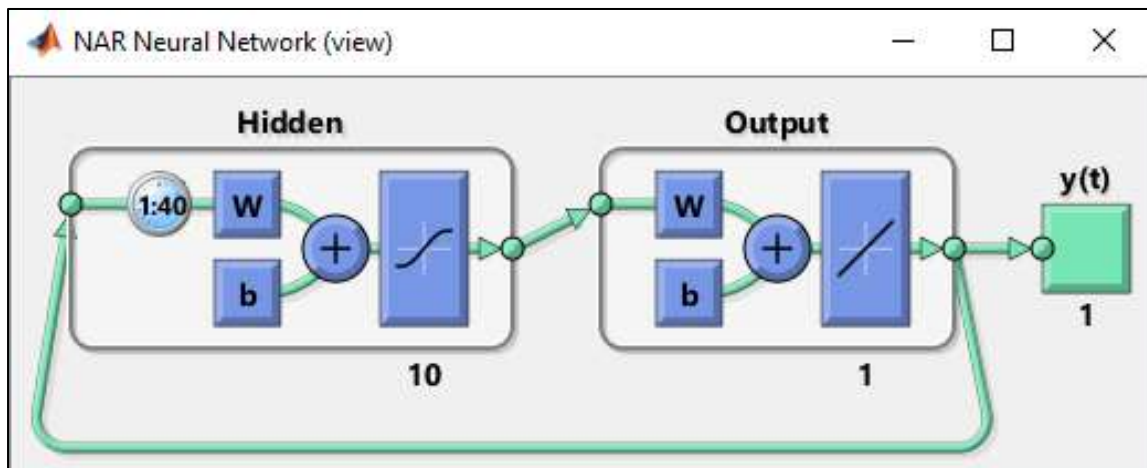


Figure 2. Closed loop architecture of the artificial neural network.

Ten neurons were used in the artificial neural network. The Levenberg-Marquardt method was selected as a training function. 70% of the time series data were used for time-delay network training, 15% for validation and the remaining 15% for testing.

The descriptive statistical data of the chosen time series are given in Table 1.

Table 1. Descriptive statistical data for 3 different serials.

	Time Series 1	Time Series 2	Time Series 3
Sample Size	72	422	500
Max	11317	14338	6047
Min	6892	1254	2524.31
Standart deviation	958.34	3487.08	1144.16
Variance	918411.75	12159753.80	1309095.73
Mean	8787.74	6068.67	4062.22
Median	8728.50	5629	3707.11

In the upper left corner of Figure 3, all of the time series 1 is drawn with a solid blue line. Dashed lines belong to the last 12 data to be estimated. The 12-step estimation of the delayed artificial neural network in the lower right corner is delayed with 40 delayed at the top right corner of the figure and delayed 20 at the lower left corner. The blue line shows the real value and the dashed red line shows the estimated artificial neural network model.

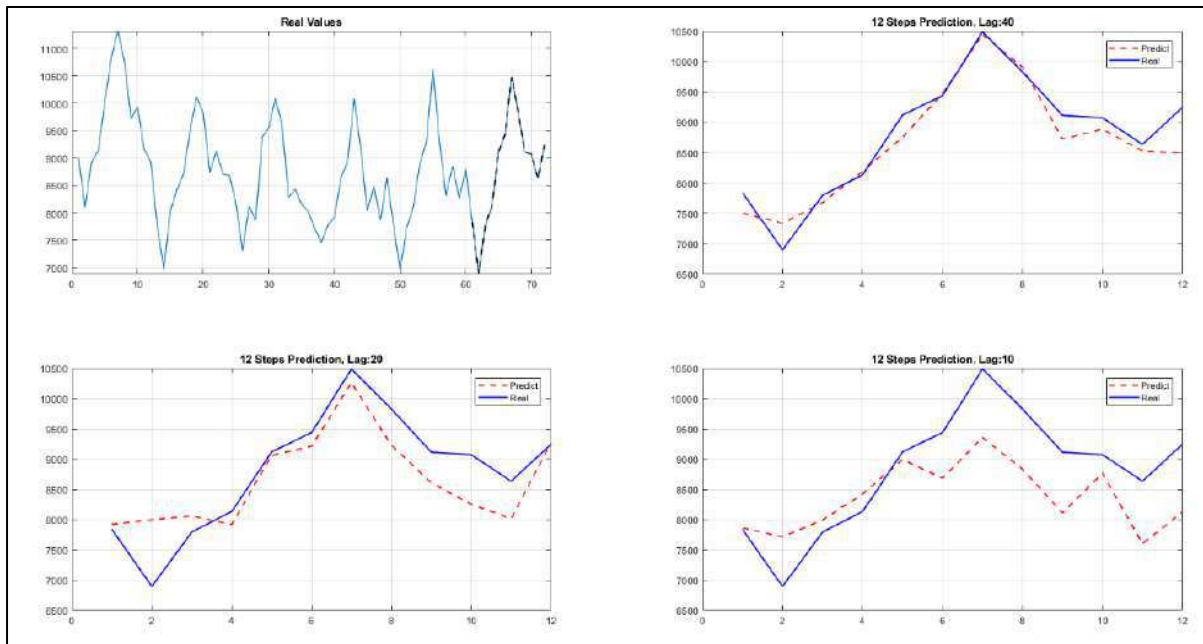


Figure 3. Time series 1 and multi-step predictions for different lag values.

Similarly, figure 4 shows the actual and model prediction values for time series 2 and figure 5 also depicts for time series 3.

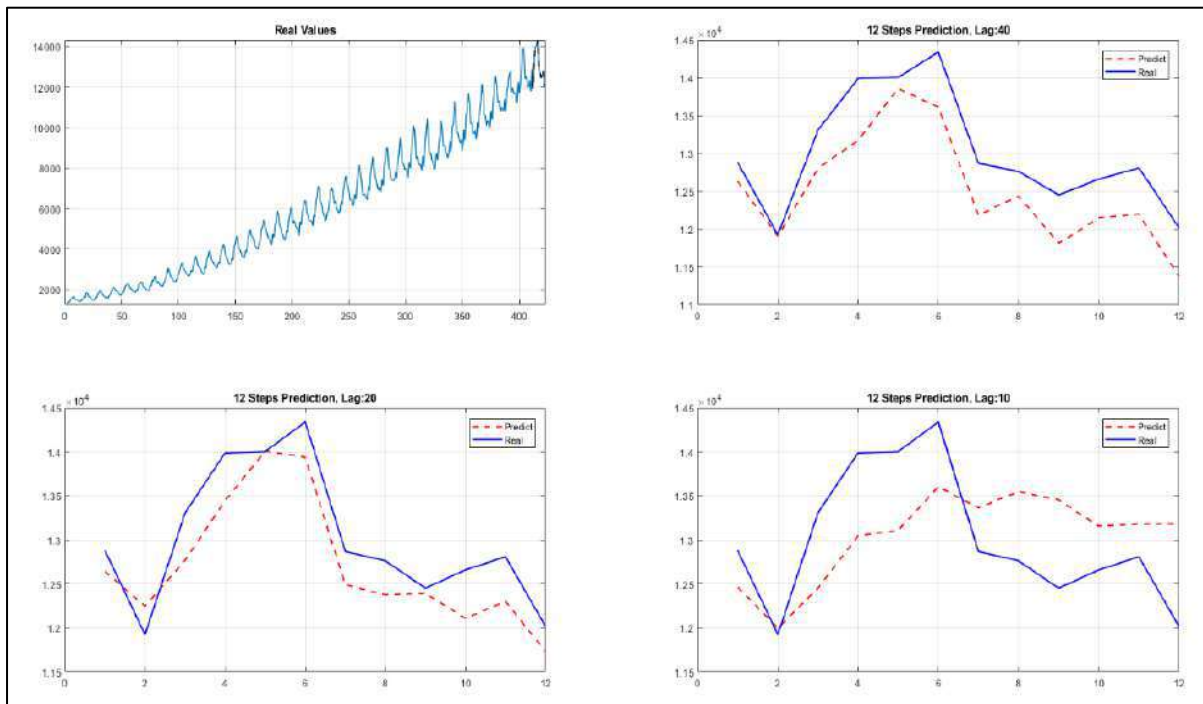


Figure 4. Time series 2 and multi-step predictions for different lag values.

Time series 1 is a periodic signal and has a strong seasonality while time series 2 has an obvious trend component and represents the rising trend line.

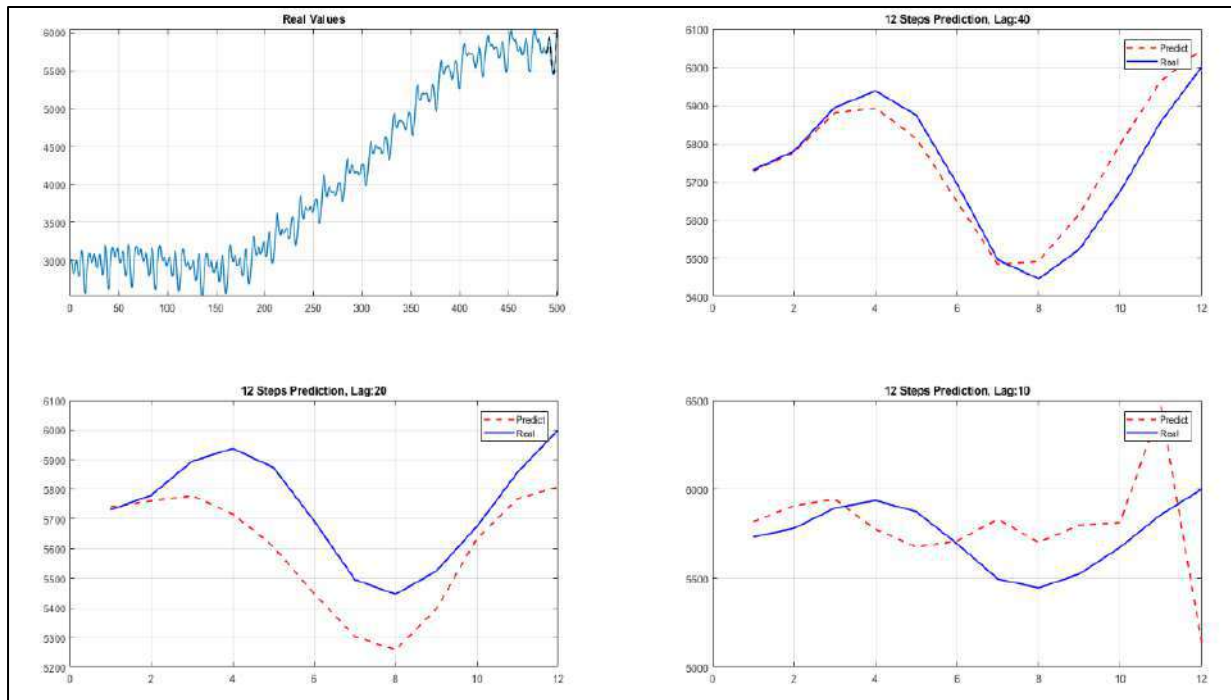


Figure 5. Time series 3 and multi-step predictions for different lag values.

Time series 3 has a rising trend between the 200th and the 400th sample when the raising trend line it is not shown in the first 200 samples. Afterwards, the trend line is horizontal again.

MSE performance criterion is often considered to compare the performance of models with different delay values. Accordingly, the model with lower MSE value has lower error rate and higher success rate than the others. We have chosen 7 different performance criteria for our study. The equations that is used for model performance criteria are given in Table 2.

Table 2. Model performance criteria

Model Performance Criteria	Equation
Mean Squared Error	$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2$
Peak signal-to-noise ratio	$PSNR = 20 \log_{10} \left(\frac{MAX_f}{\sqrt{MSE}} \right)$
Root-mean-square error	$RMSE = \sqrt{\frac{SSE}{n}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n}}$
Normalized Root-mean-square error	$NRMSE = \frac{RMSD}{Y_{max} - Y_{min}}$

Mean Absolute Percentage Error

$$MAPE = \frac{100}{n} \times \sum_{i=1}^n \left| \frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i} \right|$$

Symmetric Mean Absolute Percentage Error

$$SMAPE = \frac{200}{n} \times \sum_{i=1}^n \left| \frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i + \hat{Y}_i} \right|$$

3. RESULTS AND DISCUSSION

The comparisons of time series according to seven different performance criteria are given in table 3. The best values are written underlined.

Table 3. Comparison of the performance metric values for different lags.

	Perf. Metric	Lag 40	Lag 20	Lag 10
Time Series 1	MSE	<u>102042.804</u>	259520.967	588865.309
	PSNR	<u>-1.957</u>	-6.011	-9.569
	R	<u>0.999</u>	0.997	0.992
	RMSE	<u>319.441</u>	509.432	767.376
	NRMSE	<u>0.089</u>	0.142	0.214
	MAPE	<u>2.843</u>	4.701	7.252
	SMAPE	<u>2.880</u>	4.692	7.500
Time Series 2	MSE	297533.716	<u>153175.839</u>	563465.843
	PSNR	-6.605	<u>-3.721</u>	-9.378
	R	0.998	<u>0.999</u>	0.997
	RMSE	545.467	<u>391.377</u>	750.644
	NRMSE	0.226	<u>0.162</u>	0.311
	MAPE	3.753	<u>2.698</u>	5.264
	SMAPE	3.842	<u>2.738</u>	5.239
Time Series 3	MSE	<u>3958.029</u>	27458.264	122755.592
	PSNR	<u>12.156</u>	3.744	-2.760
	R	<u>1.000</u>	0.999	0.996
	RMSE	<u>62.913</u>	165.705	350.365
	NRMSE	<u>0.113</u>	0.299	0.632
	MAPE	<u>0.869</u>	2.480	4.491
	SMAPE	<u>0.865</u>	2.523	4.509

According to the calculations and comparisons, it is obviously seen that the models developed are very successful in predicting the future value. For the 3 different time series where the future value estimation is difficult to perform, the forecasting can be made with low error rates.

However, there are many parameters that affect the result when predicting multi-step future value estimation. The number of delays is at the beginning of these. The high number of lags doesn't always guarantee the best solution, but because of more information about the sequence, it gives good results. In all three-time series, the lowest performance was shown with the lowest latency model (lag 10). The number of neurons used in the artificial neural network, the training function of the network and the training parameters also affect the result.

For future studies, the network training method, the number of neurons and prediction steps can be changed and their effects on different time series can be investigated.

ACKNOWLEDGE

This research is supported by KOSGEB Research & Development Innovation and Industrial Application Support Program, grant no 2018/620-5/01.

REFERENCES

- Al-Sbou, Y. A., & Alawasa, K. M. (2017). Nonlinear Autoregressive Recurrent Neural Network Model For Solar Radiation Prediction. *International Journal of Applied Engineering Research*, 12(14), 4518–4527.
- Buitrago, J. H. (2017). *Short-Term Forecasting of Electric Loads Using Nonlinear Autoregressive Artificial Neural Networks with Exogenous Multivariable Inputs* (PhD Thesis). University of Miami, Open Access Dissertations. Retrieved from http://scholarlyrepository.miami.edu/oa_dissertations/1908
- Caswell, J. M. (2014). A Nonlinear Autoregressive Approach to Statistical Prediction of Disturbance Storm Time Geomagnetic Fluctuations Using Solar Data. *Journal of Signal and Information Processing*, 05(02), 42–53.
<https://doi.org/10.4236/jsip.2014.52007>
- Dietz, D.-K. S. (2010). Autoregressive Neural Network Processes.
- Kerem, A., Kırbaş, İ., & Saygın, A. (2016). Performance Analysis of Time Series Forecasting Models for Short Term Wind Speed Prediction (pp. 2733–2739). Presented at the International Conference on Engineering and Natural Sciences (ICENS).
- Khandelwal, I., Adhikari, R., & Verma, G. (2015). Time Series Forecasting Using Hybrid ARIMA and ANN Models Based on DWT Decomposition. *Procedia Computer Science*, 48, 173–179. <http://dx.doi.org/10.1016/j.procs.2015.04.167>
- Kırbaş, İ. (2016). Short-Term Multi-Step Wind Speed Prediction Using Statistical Methods And Artificial Neural Networks (Vol. 1, p. 1064). Presented at the International Science and Technology Conference.

- Kırbaş, İ. (2017). Determination of Appropriate Distribution Functions for the Wind Speed Data Using the R Language (Vol. 1, pp. 142–149). Presented at the III ICENS International Conference on Engineering and Natural Science, Budapest.
- Kırbaş, İ. (2018a). İstatistiksel metotlar ve yapay sinir ağları kullanarak kısa dönem çok adımlı rüzgâr hızı tahmini. *Sakarya University Journal of Science*, 22(1), 24–38. <https://doi.org/10.16984/saufenbilder.305224>
- Kırbaş, İ. (2018b). NAR based forecasting interface for time series analysis: T-seer (Vol. 1, pp. 144–149). Presented at the IV ICENS International Conference on Engineering and Natural Science, At Kiev.
- Kırbaş, İ., & Kerem, A. (2016). Short-Term Wind Speed Prediction Based on Artificial Neural Network Models. *Measurement and Control*, 49(6).
- Pucheta, J. A., Rodríguez Rivero, C. M., Herrera, M. R., Salas, C. A., Patiño, H. D., & Kuchen, B. R. (2011). A feed-forward neural networks-based nonlinear autoregressive model for forecasting time series. *Computación y Sistemas*, 14(4).
- Shen, H.-Y., & Chang, L.-C. (2013). Online multistep-ahead inundation depth forecasts by recurrent NARX networks. *Hydrology and Earth System Sciences*, 17(3), 935–945. <https://doi.org/10.5194/hess-17-935-2013>
- Thielbar, M., & Dickey, D. A. (2011). *Neural Networks for Time Series Forecasting: Practical Implications of Theoretical Results*.

FİLM KALINLIĞININ ESNEK ITO/PET ALTTAŞLAR ÜZERİNE BÜYÜTÜLEN Nb₂O₅ İNCE FİMLERİN ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ

Nihan Akın Sönmez

Gazi Üniversitesi, Teknik Bilimler MYO, Elektrik ve Enerji Bölümü, Ostim, Ankara
Gazi Üniversitesi, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Teknikokullar, Ankara

nihanakin@gazi.edu.tr

ÖZET

Bu çalışmada, elektro-optik aygıt uygulamaları için ilgi çekici transparant geniş bant aralıklı Nb₂O₅ ince filmleri esnek ITO/PET alttaş üzerine reaktif DC magnetron püskürtme yöntemi ile oda sıcaklığında 25, 50, 75 ve 100 nm kalınlıklarda kaplandı. Kaplamalar 2 inç çapında %99.9 saflıkta metalik Nb hedef kullanılarak Ar işlem gazı ile 10 mTorr basınçta ve 100 W güçte gerçekleştirildi. Reaktif kaplama için %20 oranında Oksijen (O₂/(O₂+Ar)) gazı kullanıldı. Filmlerin yapısal, optik ve morfolojik özellikleri SIMS, UV-Vis spektrometre ve AFM analizleri ile değerlendirildi. O ve Nb atomik türlerin film derinliği boyunca homojen olarak dağılım gösterdiği SIMS analizleri ile belirlendi. Filmlerin yasak enerji aralıkları 3.5 eV ve görünür bölge optik geçirgenlikleri %70 civarında bulundu. Bununla birlikte, 75 nm kalınlıklı Nb₂O₅ ince filmin optik yansıtıcılık değerinin 400-1000 nm aralığında ortalama %10 civarına düştüğü belirlendi. Ayrıca, 3x3 µm²'lik alanda taranan yüzey görüntülerinden bu filmin düzgün yüzey morfolojisine ve 1.2 nm RMS pürüzlülük değerine sahip olduğu görüldü. Elde edilen sonuçlar, özellikle 75 nm kalınlıklı Nb₂O₅ filminin esnek alttaş üzerine reaktif magnetron püskürtme tekniği ile başarılı olarak büyütüldüğünü göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: *Magnetron Püskürtme, İnce Film, Nb₂O₅, Esnek ITO/PET Alttaş*

ABSTRACT

In this work, Nb₂O₅ thin films with attractive transparant and wide band gap for electro-optical device applications were deposited on flexible ITO/PET substrate at 25, 50, 75 and 100 nm thickness at room temperature with reactive DC magnetron sputtering method. Coatings were carried out using a metallic Nb target of 99.9% purity of 2 inches in diameter, with a processing gas of 10 mTorr and a power of 100 W. Oxygen (O₂/(O₂+Ar)) gas was used for the reactive sputtering. Structural, optical and morphological properties of the films were evaluated by SIMS, UV-Vis spectrometer and AFM analysis. It was determined by SIMS

analysis that the atomic species O and Nb distributed homogeneously throughout the film depth. The band gaps of the films were 3.5 eV and the optical transmittance at the visible region was around 70%. In addition, 75 nm thick Nb₂O₅ thin film's optical reflectance in the range of 400-1000 nm decreased by about 10%. It was seen from the surface images scanned in the 3x3 µm² area that the film had smooth surface morphology and the RMS roughness value calculated as 1.2 nm. The obtain results show that especially 75 nm thick Nb₂O₅ film has been successfully deposited on flexible substrate by reactive magnetron sputtering technique.

Key Words: *Magnetron Sputtering, Thin Film, Nb₂O₅, Flexible ITO/PET Substrate*

1. GİRİŞ

Esnek ince filmler cam, silisyum, safir, kuvars gibi alttaşlar üzerine geliştirilen filmlere göre daha hafif, daha küçük hacimli, kolay taşınabilir ve katlanabilir olma özelliklerine sahiptirler. Günümüzde sıvı kristal ekranlar, plazma ekran panelleri, elektronik kağıt ekranlar, ışık dedektörleri, gaz sensörleri, dokunmatik paneller, düz panel ekranlar, fotovoltaikler, organik ışık yayan ledler gibi bir çok opto-elektronik cihaz uygulamalarında metal oksit malzemeye dayalı esnek filmlerin kullanım yaygınlığı artmıştır (Fortunato vd. 2008).

PES, PEN, PI, PET ve ITO/PET gibi esnek alttaşlar üzerinde metal oksit film elde etmek için sol-gel, PVD, MOCVD, DC ve RF magnetron püskürtme gibi çeşitli yöntemler kullanılmaktadır (Kao vd. 2008, Wang vd. 2012). Bu yöntemler içerisinde püskürtme (sputtering) tekniği en çok tercih edilen yöntemlerden birisidir. Püskürtme tekniğinde ince film kaplanırken püskürtme basıncı, ortamdaki gaz dağılımı, kaplama gücü, alttaş sıcaklığı ve ince film kalınlığı gibi önemli kaplama parametrelerinin kontrolü kolay bir şekilde yapılabilmekte ve bu sayede metal oksit ince filmler yüksek kalitede üretilebilmektedir (Lin vd. 2004). Ayrıca, püskürtme tekniği üretim hızı ve üretim maliyeti açısından öne çıkan teknikler arasında yer almaktadır.

Son zamanlarda, geniş yasak enerji aralıklı (>3.2 eV) görünür bölgede yüksek geçirgen metal oksitler arasında TiO₂ ve ZnO gibi en bilinenlere kıyasla Ta₂O₅ ve Nb₂O₅ gibi metal oksitlerin araştırılması yaygınlaşmıştır. Bu metal oksitlerin elektrokromik, fotoelektrik ve fotokatalitik aktivite gibi özellikleri nedeniyle özellikle esnek alttaş üzerine geliştirilerek esnek elektro-optik cihaz geliştirilmesi oldukça popülerdir (Feng vd. 2017).

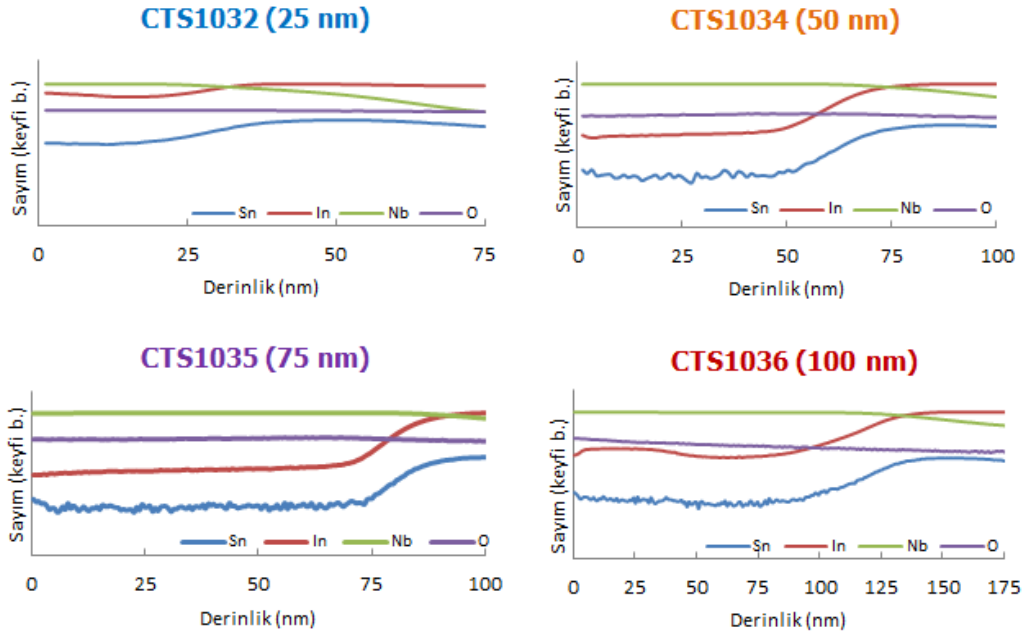
Niyobyum oksidin yapısı farklı formlarda olabilir. En az üç kararlı niyobyum oksit vardır: NbO, NbO₂ ve Nb₂O₅. Bu formlar içerisinde Nb₂O₅, termodinamik olarak diğerlerinden daha stabildir. Sunulan bu çalışmada reaktif DC magnetron püskürtme yöntemi ile esnek ITO/PET alttaşlar üzerine farklı kalınlıklarda (25, 50, 75 ve 100 nm) kaplanan Nb₂O₅ ince filmlerin yapısal, morfolojik ve optik özellikleri sırasıyla SIMS, AFM ve UV-Vis spektrometre ölçümleri ile incelendi.

2. YÖNTEM

Nb₂O₅ ince filmler esnek ITO/PET alttaşlar üzerine reaktif DC magnetron püskürtme yöntemi (Nanovak, NVTS-500) ile kaplandı. Kaplamalarda 2 inç. çapında %99.9 saflıkta metalik Nb hedef kullanıldı. Tüm kaplamalar oda sıcaklığında, 10 mTorr Ar gaz basıncında 5 rpm döndürme hızı ile yapıldı. Reaktif kaplama için %20 oranında Oksijen (O₂/(O₂+Ar)) gazı kullanıldı. İnce film kalınlığı değişiminin kaplamaya olan etkisini anlayabilmek amacıyla, 25, 50, 75 ve 100 nm kalınlıklarda sırasıyla CTS-1032, CTS-1034, CTS-1035 ve CTS-1036 olarak isimlendirilen numuneler elde edildi. Filmlerin kalınlıkları büyütme süresince içeride bulunan kalınlık sensörü ile takip edildi ve numuneler dışarı çıkartıldığında kalınlıkları Dektak 150 profilometre cihazı kullanılarak teyit edildi. Elde edilen Nb₂O₅ ince filmlerin yapısal, optik ve morfolojik analizleri sırasıyla SIMS, UV-Vis Spektrometre ve AFM ölçümleri ile araştırıldı. SIMS ölçümlerinde Nb kütesinin takibi için O₂ (oksijen) ve O kütesinin takibi için ise Cs (Sezyum) iyon tabancaları kullanıldı. O₂ tabancası için, 4000 V iyon enerjisi ve 350 nA ışın akımı; Cs tabancası için 5 keV iyon enerjisi ve 30 nA ışın akımı ayarlandı. İkincil iyonlar ise kütle spektrometresi yardımı ile 100-1000 µm² merkezi krater alanından toplandı. AFM ölçümleri 3×3 µm² tarama alanından alındı. Geçirgenlik ve yansıma ölçümleri 200-1100 nm dalgaboyu aralığında alındı. Ek olarak, elde edilen soğurma spektrumundan filmlerin yasak enerji aralıkları da belirlendi.

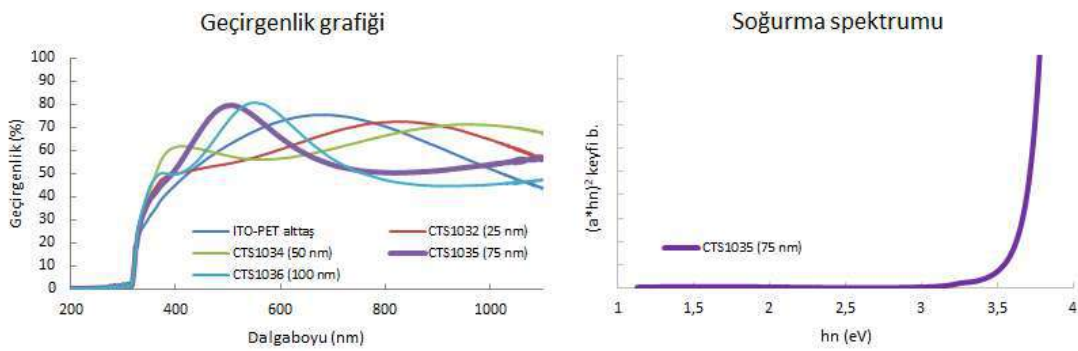
3. BULGULAR

Şekil 1'de esnek ITO/PET alttaşlar üzerine 25, 50, 75 ve 100 nm kalınlıklarda kaplanan Nb₂O₅ ince filmlerin SIMS derinlik profilleri görülmektedir. Nb₂O₅ ince filmlerin hedeflenen film kalınlıklarında başarıldığı ve film kalınlığı boyunca düzgün Nb ve O atomik dağılımına sahip olduğu görüldü. En düzgün dağılıma sahip numune CTS1035 (75 nm) kodlu numunedir.



Şekil 1. Esnek Nb₂O₅ filmlerin SIMS derinlik profilleri

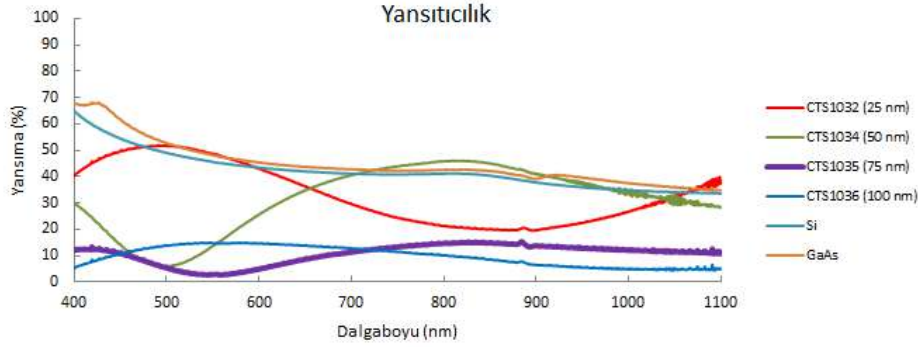
Şekil 2’de UV-Vis geçirgenlik ölçüm verileri kullanılarak çizilen Geçirgenlik-Dalgaboyu ve $(\alpha \cdot hv)^2$ -Foton Enerjisi grafikleri görülmektedir. Numunelere ait geçirgenlik grafiği incelendiğinde, 75 nm kalınlıkta olan esnek Nb₂O₅ ince filminin 400-700 nm dalgaboyu aralığında %70 optik geçirgenliğe sahip olduğu görülmektedir. Filmin soğurma spektrumundan yasak enerji aralığı (E_{gap}) yaklaşık 3.5 eV olarak belirlendi. Belirlenen yasak enerji aralığının literatürle uyumlu olduğu görüldü (Shimizu vd. 2005).



Şekil 2. Esnek Nb₂O₅ filmlerin UV-Vis geçirgenlik spektrumu ve soğurma eğrisi

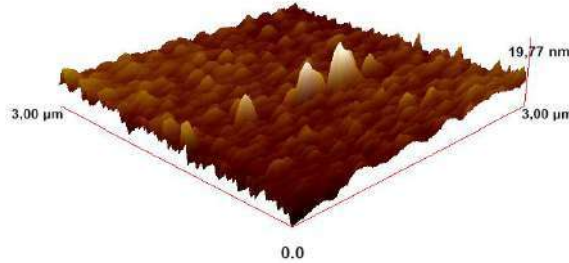
Şekil 3’de UV-Vis yansıtma ölçüm verileri kullanılarak çizilen Yansıtma-Dalgaboyu grafiği görülmektedir. SIMS analizlerinden bilindiği gibi en düzgün atomik dağılıma sahip olan CTS1035 (75 nm) kodlu numunenin optik yansıtıcılık değerinin 400-1000 nm aralığında ortalama %10 civarına düştüğü görülmektedir. Yüzeyi kaplanmamış Si ve GaAs alüminlerin

400-1000 nm aralığında ortalama optik yansıtıcılık değerinin %46 olduğu bilindiğine göre, bu çalışmada geliştirilen ince filmin yansıma önleyici olarak kullanılabilir olduğu anlaşılmaktadır.



Şekil 3. Esnek Nb₂O₅ filmlerin UV-Vis yansıma spektrumu

Şekil 4’de en kaliteli olduğu belirlenen CTS1035 (75 nm) kodlu numunenin 3x3 µm² lik alanda alınan 3D AFM görüntüsü sunuldu. Görüntüdeki yükselti yüzeyin yapısından değil, yüzey üzerindeki toz partiküllerinden kaynaklıdır. Nb₂O₅ ince filminin yüzeyinin homojen olduğu ve yüzeyde herhangi bir derinlik defekti görülmemektedir. Ayrıca, bu film 1.2 nm gibi oldukça düşük bir RMS değerine sahiptir.



Şekil 4. CTS1035 (75 nm) kodlu esnek Nb₂O₅ filmin 3D AFM görüntüsü

4. SONUÇ

Püskürtme Tekniği ile esnek ITO/PET alttaşlar üzerine 25, 50, 75 ve 100 nm kalınlıklarda kaplanan Nb₂O₅ ince filmlerden 75 nm kalınlıkta büyütülen numunenin en iyi yapısal ve optik özelliklere sahip olduğu görüldü. 75 nm kalınlıklı Nb₂O₅ ince filmi 400-700 nm’de %70 geçirgenliğe, 400-1000 nm’de %9 dolayında yansıtıcılığa, 3.5 eV yasak enerji aralığına ve 1.2 nm RMS’e sahiptir. Esnek alttaş üzerinde kalınlık optimizasyonu yapılan Nb₂O₅ filminin opto-elektronik uygulamalar için kullanılabilir bir malzeme olduğu görüldü.

KAYNAKLAR

Feng, J., Yang, Z., Yang, D., Ren, X., Zhu, X., Jin, Z., Liu, S. F. 2017. E-beam evaporated Nb₂O₅ as an effective electron transport layer for large flexible perovskite solar cells. *Nano Energy*, 36, 1-8.

Fortunato, E., Raniero, L., Silva, L., Goncalves, A., Pimentel, A., Barquinha, P., Aguas, H., Pereira, L., Goncalves, G., Ferreira, I., Elangovan, E., Martins, R. 2008. Highly stable transparent and conducting gallium-doped zinc oxide thin films for photovoltaic applications. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 92, 1605-1610.

Kao, J.Y., Hsu, C.Y., Chen, G.C., Wen, D.C. 2012. The characteristics of transparent conducting Al-doped zinc oxide thin films deposited on polymer substrates. *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 23, 1352-1360.

Lin, S.S., Huang, J.L., Lii, D.F. 2004. The effects of r.f. power and substrate temperature on the properties of ZnO films. *Surface and Coatings Technology* 176, 173-181.

Shimizu, H., Sato, H., Nishimura, S., Honda, M. 2005. Electrical properties of anodically oxidized Nb₂O₅ and Si-doped Nb₂O₅ films. *Japanese journal of applied physics*, 44(9R), 6664.

Wang, X., Zeng, X., Huang, D., Zhang, X., Li, Q. 2012. The properties of Al doped ZnO thin films deposited on various substrate materials by RF magnetron sputtering. *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 23, 1580-1586.

THERMODYNAMICAL ANALYSIS OF GEOTHERMAL POWERED ORGANIC RANKINE CYCLE FOR R-1233ZD, R-600, R-245FA AND R-236FA

Merve ŞENTÜRK ACAR

Mechanical Engineering Dept., Engineering Faculty, Bilecik Seyh Edebali University, Bilecik, Turkey

merve.senturkacar@bilecik.edu.tr

Abstract

In this study, the net power outputs, energy and exergy efficiencies of the Organic Rankine cycle was investigated for different operating parameters and working fluids. The geothermal resource temperature and mass flow were accepted as 406.15 K and 462 kg/s, respectively. The geothermal re-injection temperature was changed between 335.15 K and 353.15 K. The R 1233zd, R 600, R 245 fa and R 236 fa were used as a working fluid for the different operating parameters of geothermal powered ORC. As a result of this study, the exergy efficiency of the system was increased with the decrease of the heat exchanger outlet flow temperature and the inlet pressure of turbine and increase of the outlet pressure of the turbine. The energy efficiency and the net power output of the system were increased with the increase of the heat exchanger outlet flow temperature and the inlet pressure of turbine and decrease of the outlet pressure of the turbine. The R 600 was identified as the most effective working fluid in terms of exergy efficiency. In terms of energy efficiency, the most effective working fluids were determined as R 600 for turbine inlet pressure higher than 1500 kPa and R 1233zd for low pressures. The maximum net power output of the system was determined as 33329.61 kW.

Keywords: Organic Rankine Cycle, Energy, Exergy, Geothermal.

1. Introduction

Low-temperature geothermal heat resources are used with binary cycles because of the electricity conversion efficiency of the steam power plant is low at low well enthalpies (Valdimarsson, 2011). The ORC is the one type of the binary cycle which is used an organic working fluid (Walraven et. al., 2013). In literature, the ORCs are investigated according to the energy, exergy and economic analysis for different design parameters working fluids.

Fiaschi et. al. (2017) investigated the performance of Kalina Cycles and ORC according to the energy and exergo-economic analysis for low and medium temperature geothermal heat resources. Also, they compared the ORC for different working fluids and working parameters. It is mentioned that the highest exergy efficiency obtained for the ORC with n-octane/n-pentane mixture for high temperature resources. In the other hand, they determined the Kalina cycle more effective than ORC for low temperature heat resources (Fiaschi; 2017). Radulovic (2014) evaluated the thermal efficiency, exergy efficiency and net power output of super critical ORC with different working fluids. The R-134a was determined the most effective working fluid for supercritical ORC according to the exergy efficiency (Radulovic; 2014). Sadaghiani et. al. (2018) investigated the performance of combined ORC and Kalina cycle which was powered with geothermal resource and LNG. Some modifications were done as a result of the energy and exergy analysis of the combine system. After the modifications, the exergy efficiency of each power unit increased from 13,25% to 26,13%

(Sadaghiani et. al.; 2018). Han et. al. (2017) investigated the effect of superheating, working fluids and the design parameters on the thermodynamic and economic performance of regenerative ORC which was powered with waste flue gas at 160°C. According to the thermodynamic and economic analysis, the most effective working fluid was determined as butane at the optimal evaporation temperature of 100°C (Han et. al.; 2017).

In this study, the net power outputs, energy and exergy efficiencies of the geothermal powered Organic Rankine cycle is investigated for different operating parameters and working fluids according to the thermodynamic analysis. Determination of working fluid is important for the design of the optimum cycle parameters because of critical temperature and pressure of the working fluids. The R 1233zd, R 600, R 245 fa and R 236 fa are used as a working fluid for the different operating parameters of geothermal powered ORC.

2. Materials and methods

2.1. System description

Flow diagram of geothermal powered ORC system was given in Fig. 1. As seen in Fig. 1, the working fluid enters the heat exchanger (H.E.) and takes the heat of geothermal fluid. Then, the working fluid enters to the turbine where power is produced. It enters the air-cooled condenser and leaves as saturated liquid. The R 1233zd, R 600, R 245 fa and R 236 fa are used as a working fluid in ORC. The ORC parameters are designed parametrically according to the geothermal energy heat source temperature. The geothermal resource temperature and mass flow were accepted as 406.15 K and 462 kg/s, respectively. The geothermal re-injection temperature was changed between 335.15 K and 353.15 K. The properties of the system units are given in Table 1. The thermodynamic properties of R 1233zd, R 600, R 245 fa and R 236 fa are determined by Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties Database (REFPROP).

Figure 1. Flow diagram of geothermal powered ORC.

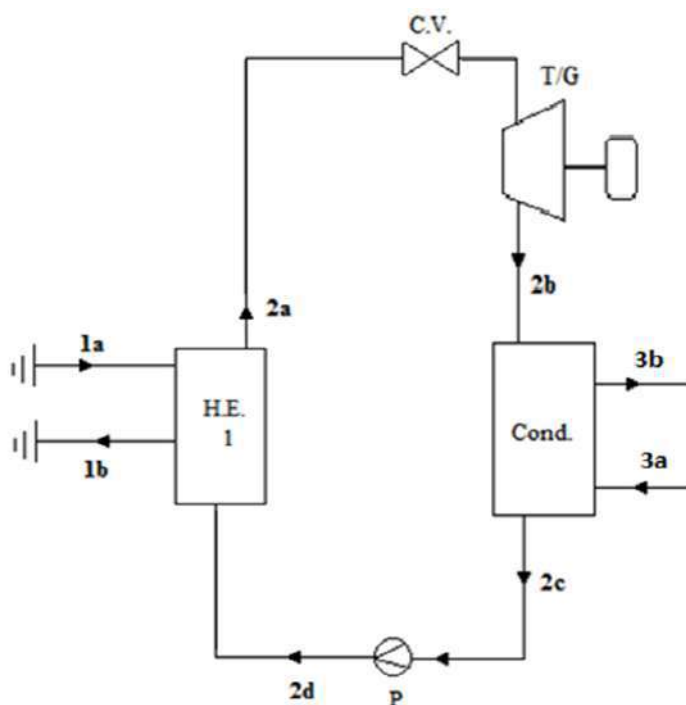


Table 1. Properties of system units (Arslan; 2008).

η_T	Isantropic efficiency of turbine	0.85
η_G	Efficiency of generator	0.99
η_P	Isantropic efficiency of pump	0.90
η_{HE}	Efficiency of heat exchanger	0.98
wf	Working fluid	R-1233zd, R-600, R-245fa, R-236fa

2.2. Thermodynamic modeling

Several assumptions are used to simplify the thermodynamic analysis of the geothermal energy powered ORC;

- The geothermal energy powered ORC is under steady-state conditions
- Pressure drops in components and pipes are neglected.
- Kinetic and potential energy effects are negligible
- The reference state is 298 K and 101.325 kPa.

The governing energy equations of the geothermal powered ORCs are obtained as follows.

The power output of the turbine;

$$\dot{W}_T = \dot{m}_{wf} \cdot (h_{2b} - h_{2a}) \quad (1)$$

The electric power of the generator;

$$\dot{W}_G = \eta_G \cdot \dot{W}_T \quad (2)$$

The power consumption occurring in the pump;

$$\dot{W}_P = \dot{m}_{wf} \cdot (h_{2d} - h_{2c}) \quad (3)$$

The energy of the geothermal heat exchanger;

$$\dot{Q}_{gf} = \dot{m}_{gf} \cdot (h_{1b} - h_{1a}) \cdot \eta_{HE} = \dot{m}_{wf} \cdot (h_{2a} - h_{2d}) \quad (4)$$

The net power output of the system is given as;

$$\dot{W}_{net} = \dot{W}_G - \dot{W}_P \quad (5)$$

The energy efficiency of the system calculated as;

$$\eta = \frac{W_{net}}{Q_{gf}} \quad (6)$$

The exergy balance equation for steady systems is given by the following equation:

$$\dot{E}_{X_{heat}} - \dot{E}_{X_{work}} + \dot{E}_{X_{m,i}} - \dot{E}_{X_{m,o}} = \dot{E}_{X_{dest}} \quad (7)$$

where the exergy terms occurred by heat, work, solar radiation exergy and mass flow are given as following:

$$\dot{E}_{X_{heat}} = \sum \left(1 - \frac{T_0}{T_k}\right) \cdot \dot{Q}_k \quad (8)$$

$$\dot{E}_{X_{work}} = \dot{W} \quad (9)$$

$$\dot{E}_{X_{m,i}} = \sum \dot{m}_i \cdot \psi_i \quad (10)$$

$$\dot{E}_{X_{m,o}} = \sum \dot{m}_o \cdot \psi_o \quad (11)$$

here ψ indicates the physical exergy term and given as:

$$\psi = (h - h_0) - T_0 \cdot (s - s_0) \quad (12)$$

where h is enthalpy, s is entropy, and the subscript zero indicates properties of fluids at the dead state.

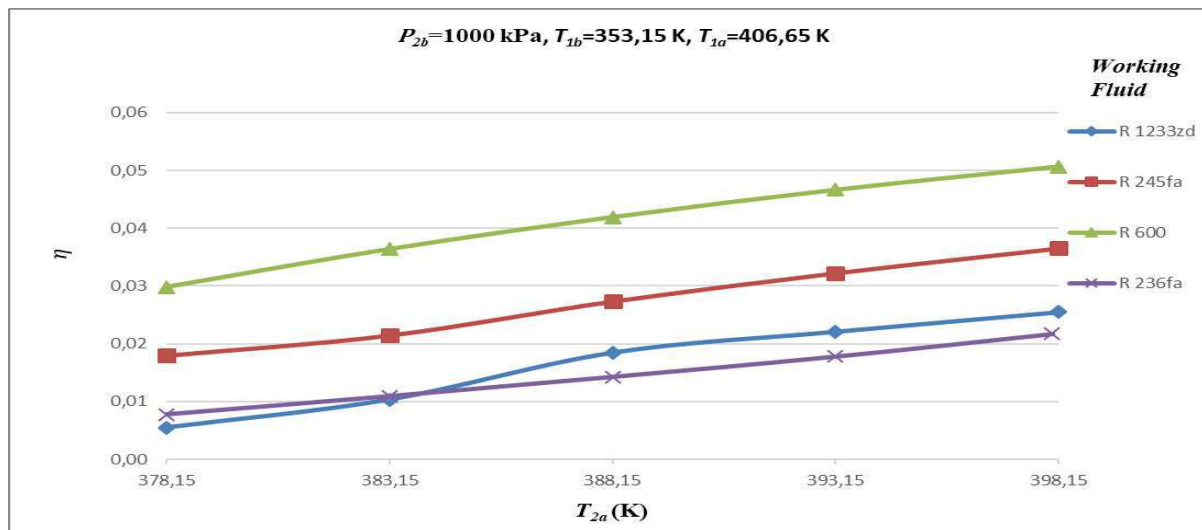
The exergetic efficiency of system is then calculated by the following equation;

$$\varepsilon = \frac{W_{net}}{(\dot{m}_{gf} \cdot (\psi_{1a} - \psi_{1b}))} \quad (13)$$

3. Results and Discussion

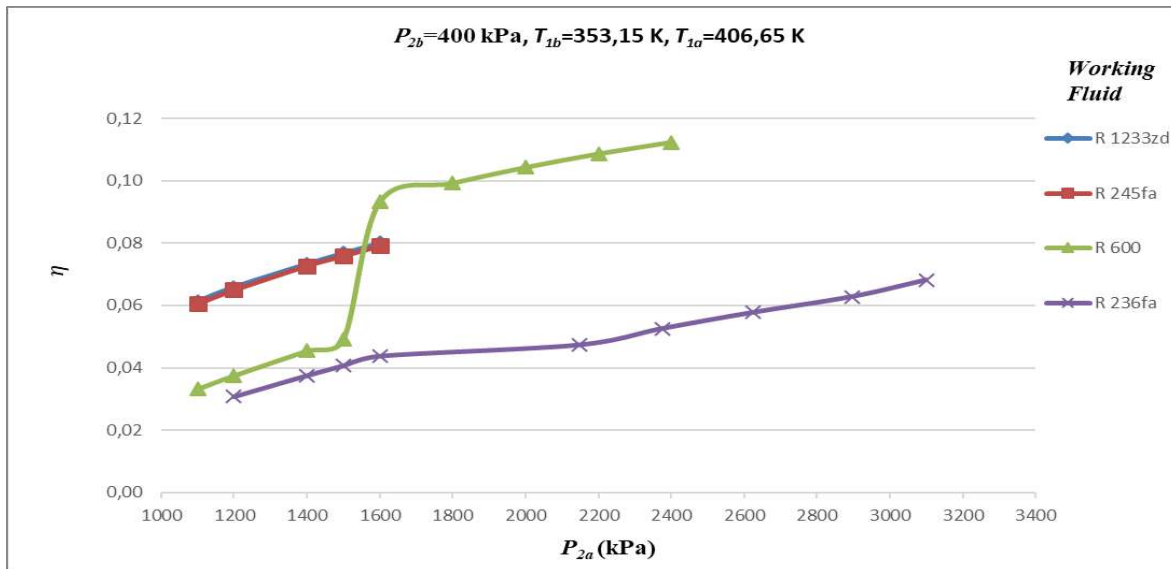
According to the energy analysis of the geothermal powered ORC, energy efficiencies of the system for different working fluids were determined. Handling the operating parameters as $P_{2b}=1000$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the energy efficiency with different working fluids temperatures at heat exchanger outlet was obtained as seen in Fig. 1.

Figure 1. The variation of η versus T_{2a} .



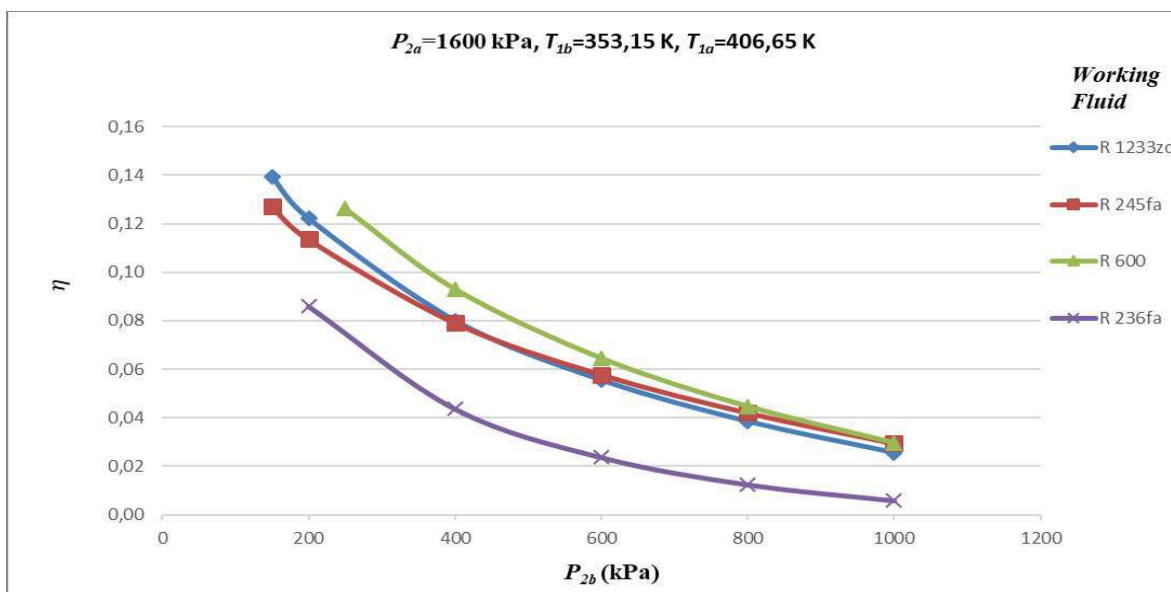
As seen in Fig. 1, the energy efficiency values of the geothermal powered ORC increase by the increase of the working fluids temperatures at heat exchanger outlet. The energy efficiency of the purposed system ranges between 0,01 and 0,05. The highest energy efficiency was calculated for the working fluid R-600. Handling the operating parameters as $P_{2b}=400$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the energy efficiency with different working fluids pressures at turbine inlet was obtained as seen in Fig. 2.

Figure 2. The variation of η versus P_{2a} .



As seen in Fig. 2, the energy efficiency values of the geothermal powered ORC increase by the increase of the working fluids inlet pressures of turbine. The energy efficiency of the purposed system ranges between 0,03 and 0,11. The highest energy efficiency was calculated for the working fluid R-600 for turbine inlet pressure higher than 1500 kPa and R 1233zd was the highest energy efficiency for low pressures than 1500 kPa. Handling the operating parameters as $P_{2a}=1600$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the energy efficiency with different working fluids pressures at turbine outlet was obtained as seen in Fig. 3.

Figure 3. The variation of η versus P_{2b} .



As seen in Fig. 3, the energy efficiency values of the geothermal powered ORC increase by the decrease of the working fluids pressures at turbine outlet. The energy efficiency of the purposed system ranges between 0,01 and 0,14. The highest energy efficiency was calculated for the working

fluid R-1233zd for turbine outlet pressure of 150 kPa. Handling the operating parameters as $T_{2a}=398,15$ K, $P_{2b}=1000$ kPa, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the energy efficiency with geothermal fluid temperature at heat exchanger outlet was obtained as seen in Fig. 4.

Figure 4. The variation of η versus T_{1b} .

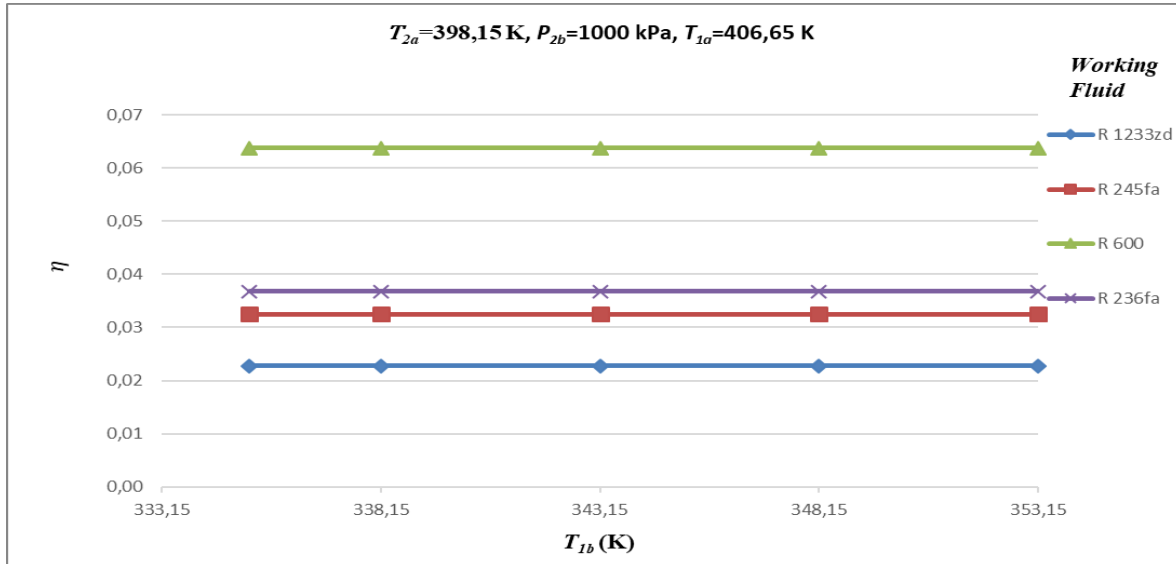
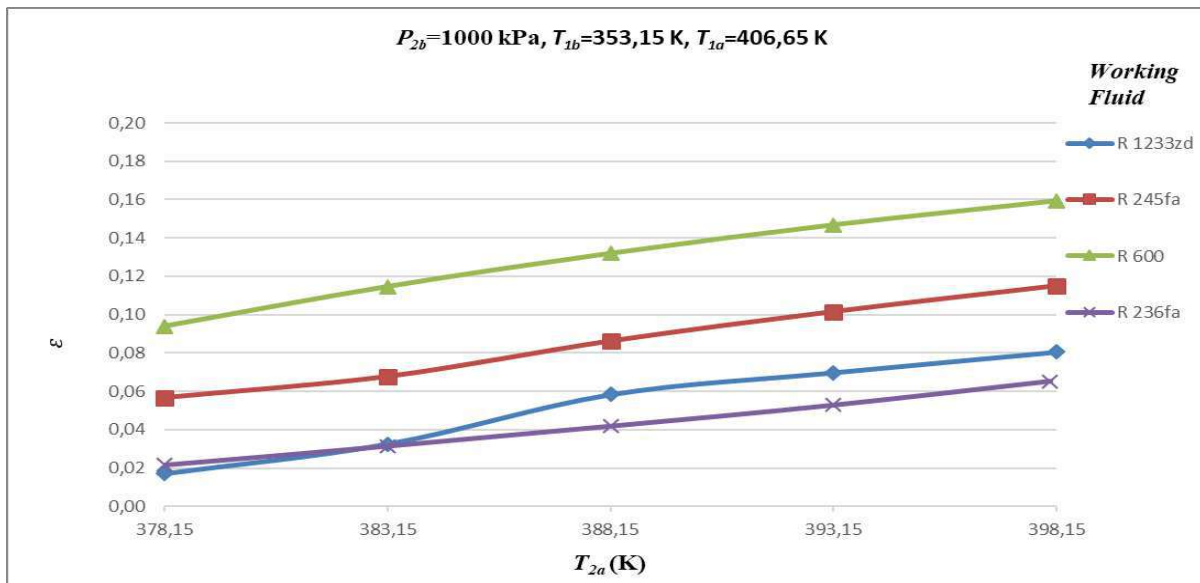


Fig. 4 shows that the energy efficiencies of the geothermal powered ORC constant with the change of the geothermal fluid temperature at heat exchanger outlet for same working fluid. The energy efficiency of the purposed system ranges between 0,02 and 0,06. The highest energy efficiency was calculated for the working fluid R-600. Taking the $P_{2b}=400$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K constant, the change of exergy efficiency with temperature of working fluids at turbine outlet was obtained as seen in Fig. 5.

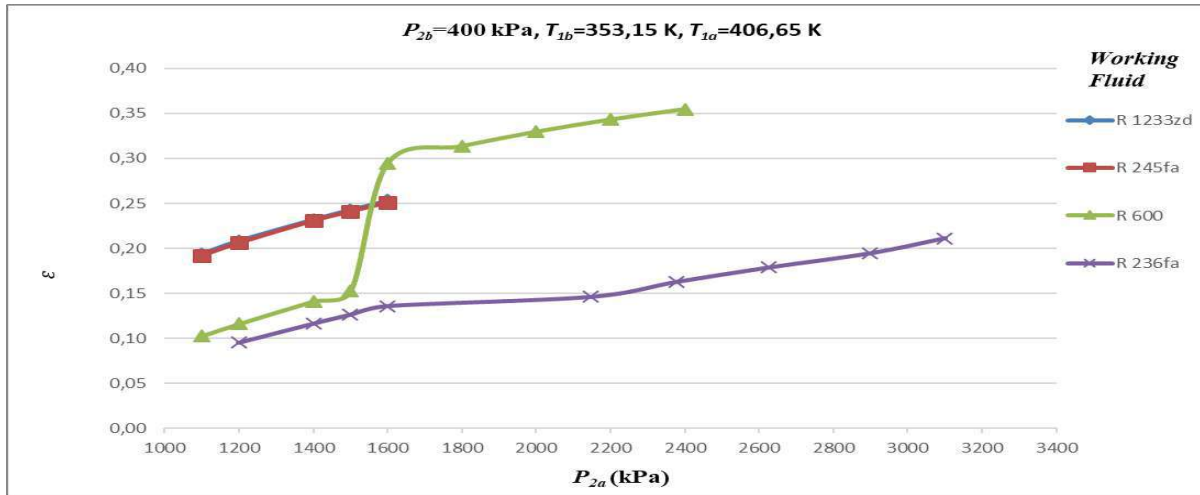
Figure 5. The variation of ϵ versus T_{2a} .



As seen in Fig. 5, the exergy efficiency values of the geothermal powered ORC increase by the increase of the working fluids temperatures at heat exchanger outlet. The exergy efficiency of the

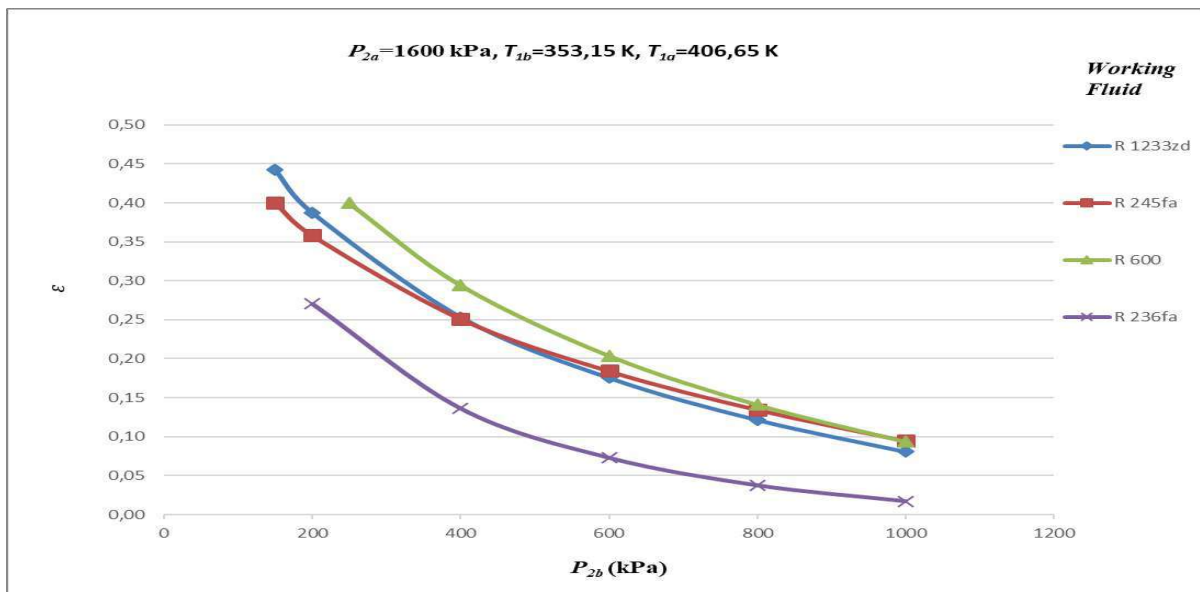
purposed system ranges between 0,02 and 0,16. The highest energy efficiency was calculated for the working fluid R-600. Handling the operating parameters as $P_{2b}=400$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the exergy efficiency with different working fluids pressures at turbine inlet was obtained as seen in Fig. 6.

Figure 6. The variation of ϵ versus P_{2a} .



As seen in Fig. 6, the exergy efficiency values of the geothermal powered ORC increase by the increase of the working fluids pressures at turbine inlet. The exergy efficiency of the purposed system ranges between 0,10 and 0,35. The highest exergy efficiency was calculated for the working fluid R-600 for turbine inlet pressure higher than 1500 kPa and R 1233zd was the highest exergy efficiency for low pressures than 1500 kPa. Handling the operating parameters as $P_{2a}=1600$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the exergy efficiency with different working fluids pressures at turbine outlet was obtained as seen in Fig. 7.

Figure 7. The variation of ϵ versus P_{2b} .



As seen in Fig. 7, the exergy efficiency values of the geothermal powered ORC increase by the decrease of the working fluids pressures at turbine outlet. The exergy efficiency of the purposed

system ranges between 0,02 and 0,44. The highest exergy efficiency was calculated for the working fluid R-1233zd for turbine outlet pressure of 150 kPa. Handling the operating parameters as $T_{2a}=398,15$ K, $P_{2b}=1000$ kPa, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the exergy efficiency with geothermal fluid temperature at heat exchanger outlet was obtained as seen in Fig. 8.

Figure 8. The variation of ϵ versus T_{1b} .

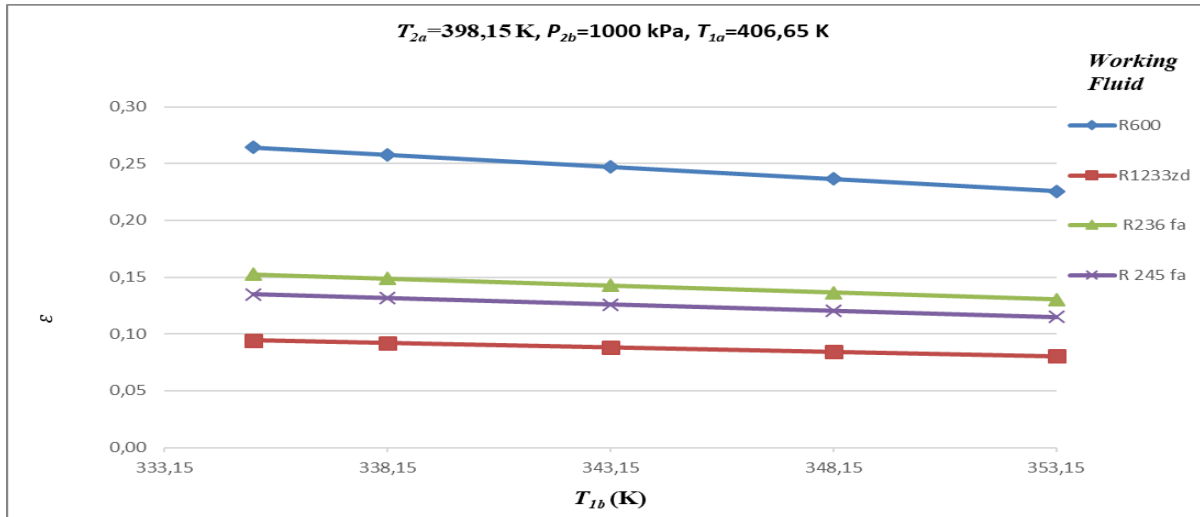
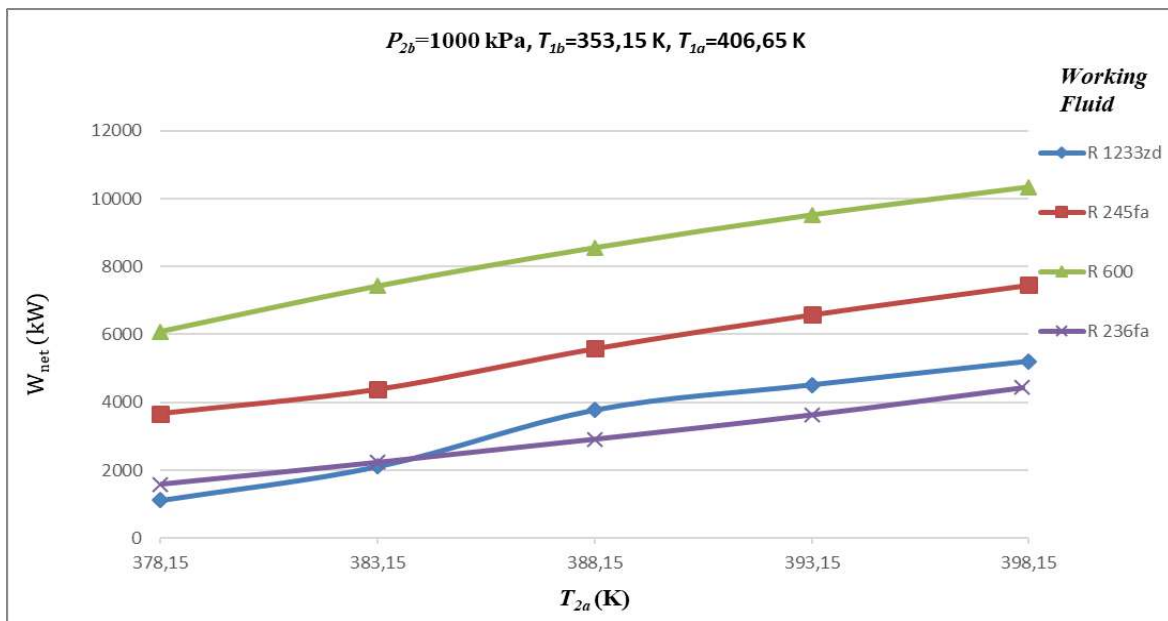


Fig. 8 shows that the exergy efficiencies of the geothermal powered ORC increase by the decrease of the geothermal fluid temperature at heat exchanger outlet. The exergy efficiency of the purposed system ranges between 0,08 and 0,26. The highest exergy efficiency was calculated for the working fluid R-600. Taking the $P_{2b}=400$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K constant, the change of net power output of the system with working fluids temperature at turbine outlet was obtained as seen in Fig. 9.

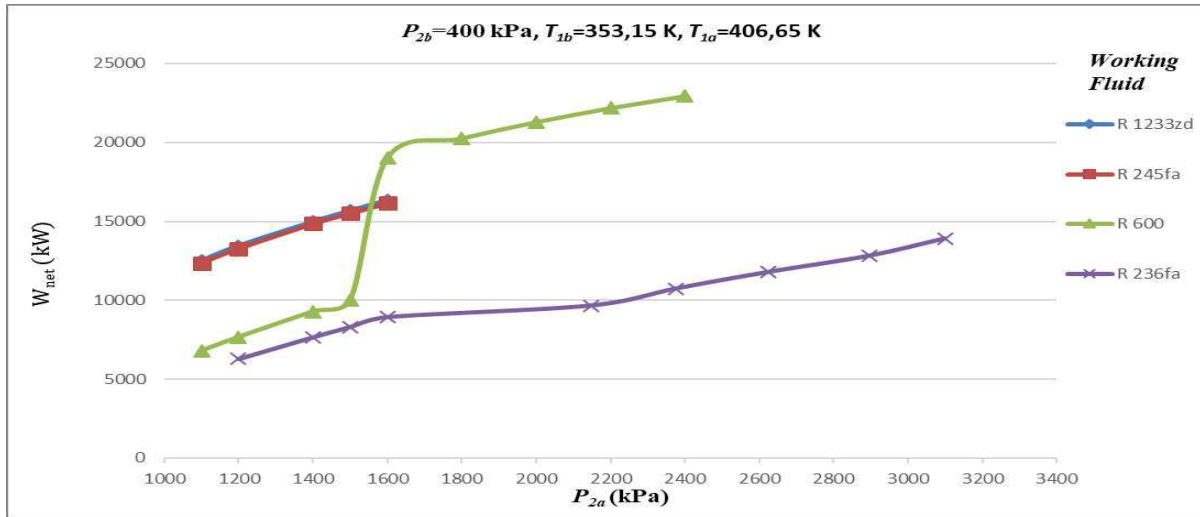
Figure 9. The variation of W_{net} versus T_{2a} .



As seen in Fig. 9, the net power output values of the geothermal powered ORC increase by the increase of the working fluids temperatures at heat exchanger outlet. The net power output of the

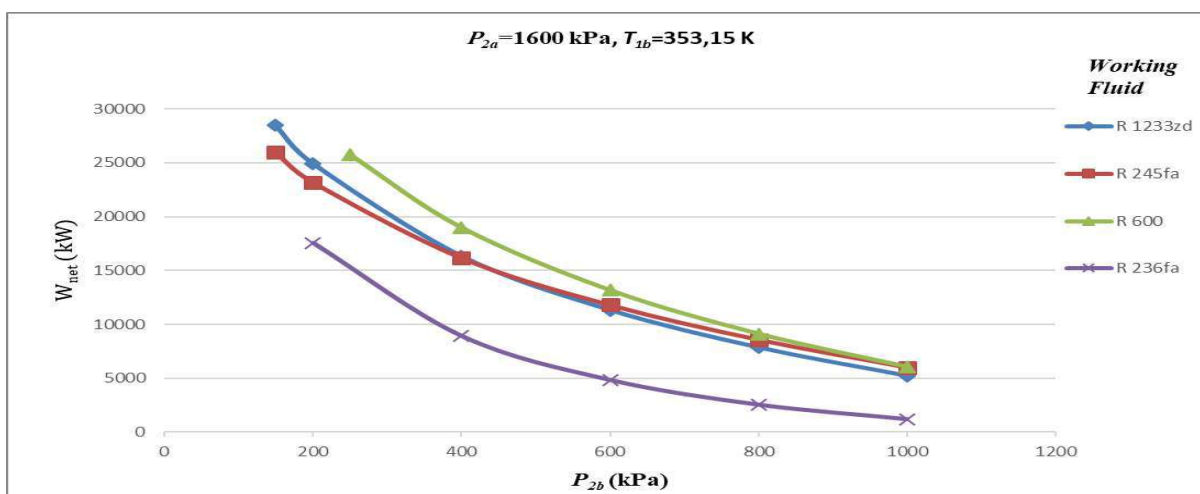
purposed system ranges between 1114,38 kW and 1338,38 kW. The highest net power output was calculated for the working fluid R-600. Handling the operating parameters as $P_{2b}=400$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K, the change of net power output with different working fluids pressures at turbine inlet was obtained as seen in Fig. 10.

Figure 10. The variation of W_{net} versus P_{2a} .



As seen in Fig. 10, the net power output values of the geothermal powered ORC increase by the increase of the working fluids inlet pressures of turbine. The net power output of the purposed system ranges between 6278,43 kW and 22924,03 kW. The highest net power output was calculated for the working fluid R-600 for turbine inlet pressure higher than 1500 kPa and R 1233zd was the highest net power output for low pressures than 1500 kPa. Handling the operating parameters as $P_{2a}=1600$ kPa, $T_{1b}=353,15$ K, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the net power output with different working fluids pressures at turbine outlet was obtained as seen in Fig. 3.

Figure 11. The variation of W_{net} versus P_{2b} .



As seen in Fig. 11, the net power output values of the geothermal powered ORC increase by the decrease of the working fluids pressures at turbine outlet. The net power output of the purposed system ranges between 1198,85 kW and 28470,68 kW. The highest net power output was calculated for the working fluid R-1233zd for turbine outlet pressure of 150 kPa. Handling the operating

parameters as $T_{2a}=398,15$ K, $P_{2b}=1000$ kPa, $T_{1a}=406,65$ K, the change of the net power output with geothermal fluid temperature at heat exchanger outlet was obtained as seen in Fig. 12.

Figure 12. The variation of W_{net} versus T_{1b} .

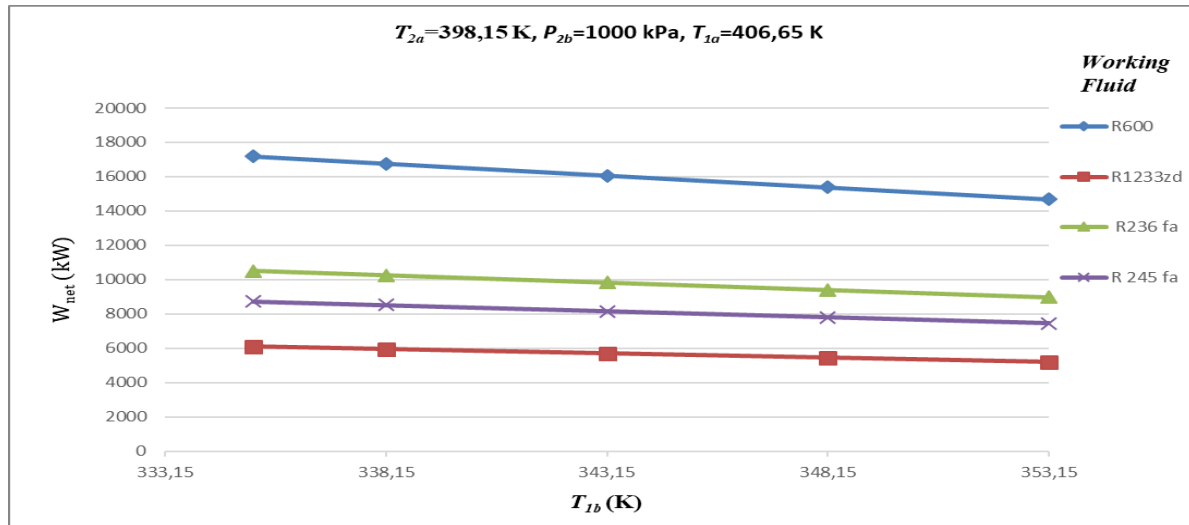


Fig. 12 shows that the net power output of the geothermal powered ORC increase by the decrease of the geothermal fluid temperature at heat exchanger outlet. The net power output of the purposed system ranges between 5211,67 kW and 17183,09 kW. The highest net power output was calculated for the working fluid R-600.

4. Conclusion

The most effective system parameters were determined as $T_{1b}=353,15$ K, $T_{2a}=398,15$ K, $P_{2b}=150$ kPa and R 1233zd as a working fluid. The energy and exergy efficiencies of the geothermal powered Organic Rankine Cycle was calculated as 0,14 and 0,44, respectively. The net electrical energy production of the geothermal powered Organic Rankine Cycle was calculated as 28470,68 kW.

The highest net power output, energy and exergy efficiencies were calculated for the working fluid R-600 for turbine inlet pressure higher than 1500 kPa and R 1233zd for low pressures than 1500 kPa.

Nomenclature

$\dot{E}x$	Exergy (kW)
h	Specific enthalpy (kJkg^{-1})
\dot{m}	Mass flow (kgs^{-1})
\dot{Q}	Heat energy (kJ s^{-1})
T	Temperature (K)
\dot{W}	Power (kJ s^{-1})
ε	Exergy efficiency
ψ	Specific exergy (kJ kg^{-1})

η Energy efficiency

Subscripts

G Generator

gf Geothermal fluid

m,i Inlet mass flow

m,o Outlet mass flow

P Pump

wf Working fluid

T Turbine

References

Arslan, O. Ultimate evaluation of Simav-Eynal geothermal resources: design of integrated system and its energy-exergy analysis. Ph.D. thesis, Eskisehir Osmangazi University. Institute of Applied Sciences. Eskisehir 2008 (in Turkish).

Fiaschi, D., Manfrida, G., Rogai, E., Talluri, L., (2017), Exergoeconomic analysis and comparison between ORC and Kalina cycles to exploit low and medium-high temperature heat from two different geothermal sites, Energy Conversion and Management 154, 503-516.

Han, Z., Li, P., Han, X., Mei, Z., Wang, Z., (2017), Thermo-Economic Performance Analysis of a Regenerative Superheating Organic Rankine Cycle for Waste Heat Recovery, Energies 10, 1593, <https://doi.org/10.3390/en10101593>.

Radulovic, J., (2015), Utilisation of fluids with low global warming potential in supercritical Organic Rankine Cycle, Journal of Thermal Engineering 1, No:1, 24-30.

Sadaghiana, M.S., Ahmadi, M.H., Mehrpooya, M., Pourfayaz, F., Feidt, M., (2018), Process development and thermodynamic analysis of a novel power generation plant driven by geothermal energy with liquefied natural gas as its heat sink, Applied Thermal Engineering 133, 645-658.

Valdimarsson, P., (2011), Geothermal Power Plant Cycles and Main Components, Short Course on Geothermal Drilling, Resource Development and Power Plants, 16-22.

Walraven, D., Laenen, B., D'haeseleer, W., (2013), Comparison of Thermodynamic Cycles for Power Production from Low-Temperature Geothermal Heat Resources, Energy Conversion and Management 66, 220-233.

OPTO-MEKANİK IŞIK MODÜLATÖRÜ GELİŞTİRİLMESİ

Süleyman ÖZÇELİK¹ ve Yusuf Mert GÜMÜŞAY²

¹Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Gazi Üniversitesi 06500 Ankara, Türkiye

²ASENTEK Savunma ve Enerji Teknolojileri Ltd. Şti, OSTİM Teknokent, Ankara, Türkiye

¹sozcelik@gazi.edu.tr; ²iletisim@asentek.net

ÖZET

Pyroelektrik materyal dizinlerinden oluşan soğutmasız termal kameralar veya KÖ görüntüleme sistemleri bir ortamdaki çeşitli nesnelerin termal ışınlamadaki farklılıkları algılar. 8-12 um spektral aralığında çalışan bu dedektörler, ışınlamadaki bu farklılıkları elektriksel sinyale dönüştürerek ortamdaki nesneleri görsel bir görüntüye dönüştürür. Dedektör aktif alanı üzerindeki sıcaklık değişimi, pyroelektrik etki olarak bilinen, elektriksel kutuplanmaya neden olur; bu sinyal dedektörün çalışma prensibini oluşturur. Dedektör çipi üzerinde KÖ ısı değişim, ışığın modülasyonu ile sağlanabilir. Pyroelektrik etki için ışığın modülasyonu, opto-mekanik ışık modülatörleri (OMIM) veya ışık kıyıcı ile sağlanabilmektedir. Çeşitli tiplerde üretilebilen ve ışık kıyıcı (chopper) da olarak adlandırılan ışık modülatörlerinden biri, ilgili spektral bölgede ışınlamayı geçiren malzemeden üretilen ve ışınlamayı azaltan bölgelere sahip opto-mekanik modülatörlerdir. Modülatör belirli bir frekansta döndürülerek, görüntü kalitesini bozmayacak şekilde ışığın dedektör dizinleri üzerini sinüzoidal olarak düşmesini sağlamalıdır. Bu çalışmada, aktif malzeme olarak Ge ve Si ince dilimlerin kullanıldığı ışık kıyıcı diskler geliştirildi. Disklerin yüzeylerinde KÖ ışınlamayı modüle etmek amacıyla, eş odaklı iki Archimedean spiral eğrinin sınırladığı yüzey tasarımı geliştirildi. Modülatör diskleri, bu spiral yüzey bölgesinin altı köşeli geometride, ısı yayıcılığı yüksek metal reflektör malzemesinin kaplanması ile oluşturuldu. Reflektör dizinlerinin açık ve kapalı alanlarının oranı ve dizinlerin kalınlıkları 10 um ışınlam dalgaboyu dikkate alınarak belirlendi. Geliştirilen disklerin yüzeyi, yansıma önleyici metal-oksit ince film ile kaplanarak, 8-12 um'de dedektör dizini üzerine düşen ışınlam şiddeti uygun aralığa yükseltildi. Özgün tasarımla geliştirilen opto-mekanik ışık modülatörü için Ge ve Si modülatör disklerinin optik verimlilikleri belirlendi. Yapılan testler sonucunda, ucuz üretim tekniği ile geliştirilen opto-mekanik KÖ ışık modülatörlerin soğutmasız termal kameralar için uygun olduğu değerlendirildi.

Anahtar Kelimeler: *Pyroelektrik, Soğutmasız termal kamera, Işık modülatörü, KÖ, İnce Film*

ABSTRACT

Un-cooled thermal detectors or IR imaging systems consisting of pyroelectric material arrays detect the differences in the thermal radiation of various objects in an environment. Thermal detectors operating in the 8-12 μm spectral range convert these differences in radiation into electrical signals and transform them into a visual image of the environment. The temperature changes on the detector active area causes electrical polarization, which is known as the pyroelectric effect, and this generated signal constitutes the working principle of the detector. The IR thermal change on the detector chip can be achieved by modulating the light. Modulation of light to generate the pyroelectric effect can be achieved by opto-mechanical light modulators (OMLM) or light chopper. A kind of the light modulators, called chopper, which can be produced in various types, is opto-mechanical modulators which are produced from the radiation-permeable materials in the respective spectral region and have radiation-reducing zones. The modulator should be rotated at a specific frequency to ensure that the light drops sinusoidally onto the detector arrays so as not distorting the image quality. In this study, light chopper discs were developed as active material using Ge and Si thin slices. In order to modulate the IR radiation, a region on the surface was designed by two Archimedean spiral curves. The modulator discs were fabricated by coating of the metal reflector material having high emissivity onto this region with a hexagonal geometry. The ratio of the optically open-closed areas of the reflector arrays and the thickness of the arrays were determined by considering the 10 μm wavelength. The optical efficiencies of the developed Ge and Si modulator discs of the opto-mechanical light modulator were determined. As a result of the tests, it was evaluated that opto-mechanical IR light modulators developed with cheap production technique were suitable for uncooled thermal imaging applications.

Key Words: *Pyroelectric, Uncooled termal detector, Light modulator, IR, Thin films*

1. GİRİŞ

Optik kısıcılar veya modülatörler, ışık ışınlarını düzenli-sabit zaman aralıklı veya düzensiz olarak değiştirmek ve kesmek için kullanılan cihazlardır. Optik modülatörlerin tasarımı, kullanılan teknolojilere bağlı olarak sıvı kristal optik kesici, döner diskler, hareketli paletler

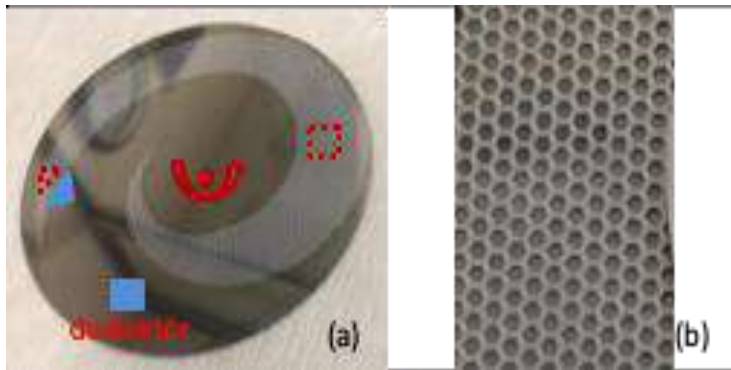
şeklinde olabilmektedir. Optik modülatörün frekansındaki değişimlere bağlı olarak modüle edilen ışının frekansı değişebilmektedir [Giraldo vd. 2017; Duma vd. 2017). Ayrıca, dedektörde gürültü oranı da modülasyon frekansına bağlı olarak optimize edilmelidir (Pintilie vd. 2017). Optik modülatörler birçok elektro-optik uygulamada sistemlerin temel bileşenleri arasında yer almakta ve güncel olarak gelişimi de devam etmektedir. Işık modülatörlerinin kritik teknolojiler arasında yer alan soğutmasız pyroelektrik termal kameralarda kullanımı ayrı bir öneme sahiptir (Hu vd. 2010). Ayrıca KÖ ışık modülatörleri, otomotiv endüstrisi, medikal ölçüm sistemleri, yüksek sıcaklık endüstriyel prosesler, uzay ve savunma sistemlerinde uygulama alanı olan mikro-bolometre KÖ dedektörlerde de kullanılmaktadır [Sumesh vd, 2013]. Üzerine düşen KÖ ışınının şiddetinin değişmesi diğer ifade ile ısıl etkinin değişimi pyroelektrik malzemenin dielektrik sabitini ve elektriksel polarizasyon durumunu değiştirir (Jayalakshmy vd. 2014). Bu sıcaklık değişimi belirli bir frekansta gerçekleştiğinde, malzeme üzerinde bir DC sinyal meydana gelir. Bu sayede oluşan elektriksel kutuplanma ve polarite değişimi oda sıcaklığında çalışan soğutmasız pyroelektrik dedektörlerin temel çalışma prensibini oluşturmaktadır. Nesneden yayılan KÖ ışınının termal kamera çiplerinin üzerine modüle edilerek düşürülmesi, dedektör yüzeyine ışınının farklı şiddetlerde ulaşması ışık kısıyıcı bir optik diskin dönmesi şeklinde oluşturulan opto-mekanik ışık modülatörü (OMIM) ile sağlanmaktadır (Pintilie vd. 2017). Yüzeyi KÖ ışınım için şeffaf (açık) ve yarı-şeffaf (yarı-açık) nitelikte olan optik disk bir hassas motor ile döndürülerek, dedektör üzerinde periyodik ısı (ya da KÖ ışınım) farklılığı oluşturması gerçekleşmektedir. Disk altına yerleştirilen dedektör çipi, diskin belirli frekansta dönmesi ile optik açık/kapalı (veya yarı açık) bölgeler sayesinde farklı KÖ ışınımına maruz kalacak ve bu farklılık cip üzerinde termal değişim oluşturacaktır. Bu değişim dedektörün, pyroelektrik özellik göstererek elektriksel kutuplanmasına ve görüntüye dönüşebilecek sinyal üretmesine imkan verecektir. Işık modülatörü üzerindeki kapalı diğer ifade ile optik geçirgenliği düşük bölge, dedektör çipinin disk altında olabileceği pozisyon dikkate alınarak optik ve geometrik tasarımı gerçekleştirilmelidir. Literatürde bu bölge için çeşitli geometriler ve bölge yüzeyinde farklı tasarımlarla oluşturulmuş ışık yolu yapıları bulunmaktadır. Geometrik tasarımlardan en yaygın Archimedian spiral eğrilerin sınırladığı alan şeklindedir. Üretilen diskleri farklılaştıran, bu bölgenin farklı geometrik şekli, yüzeyde oluşturulan desen, desenin geometrisi ve desenleme için kullanılan malzeme farklılıklarıdır.

Bu çalışmada, KÖ bölgede çalışan soğutmasız termal kameralar için ışık modülatörü geliştirme çalışmalarına başlangıç teşkil eden özgün bulgular sunuldu. Si ve Ge dilimleri

üzerinde ışığı modüle etmek amacıyla iki Archimedian eğriyle sınırlandırılmış spiral alan tasarlandı. Diskin her iki yüzeyi 8-12 μm spektral bölge için yansıma önleyici malzeme olarak TiO_2 ince filmi ile kaplandı. Optik olarak kısmi kapalı bölge şeklinde tasarlanan yüzeyi KÖ ışınımı kısmen yansıtacak/geçirecek şekilde altıgen geometride metalik maske üretildi. Optik olarak yaklaşık yarı açık olan bu alan KÖ yansıtıcılığı yüksek Ag filmi ile kaplandı. Geliştirilen optik modülatör diskinin 2-15 μm aralığında optik geçirgenliği FTIR spektrometresi ile belirlendi.

2. YÖNTEM

KÖ ışınım modülatörü diski, optik açık bölge fiziksel olarak açık ya da fiziksel kapalı ancak ilgili spektral ışınımı geçiren bir bölge; kapalı (ya da yarı kapalı) bölge ise fiziksel olarak kapalı ancak yüzeyinde oluşturulan kaplama nedeniyle KÖ ışınımın bir kısmını geçiren bölge olacak şekilde tasarlandı: 8-12 μm bölgesinde çalışan KÖ dedektörler için ışık kısıyıcı disk malzemesinin, bu bölgede %45'den büyük optik geçirgenliklerinden dolayı, 70 mm çaplı Sb katkılı Germanyum ve katkısız Silisyum kristallerinden seçildi. Kristallerin yüzeyinde Şekil.1a'da gösterilen spiral eğrilerle sınırlandırılmış bölgenin tasarımı, diskin belirli bir frekansta döndürülmesi sayesinde diskin altına yerleştirilecek dedektör çipinin spiral alan (yarı şeffaf) altından şeffaf alandan gelen ışınımın etkilenmesi dikkate alınarak yapıldı. Bu bölgenin, KÖ ışığın %40-50 oranında geçirmesine imkan verecek şekilde altıgen geometriye sahip Şekil 1b'de görülen desenler tasarlandı. Bu desenler, lazerle işlenerek 1 mm kalınlıklı paslanmaz çelik üzerine aktarılarak metal maske üretildi.



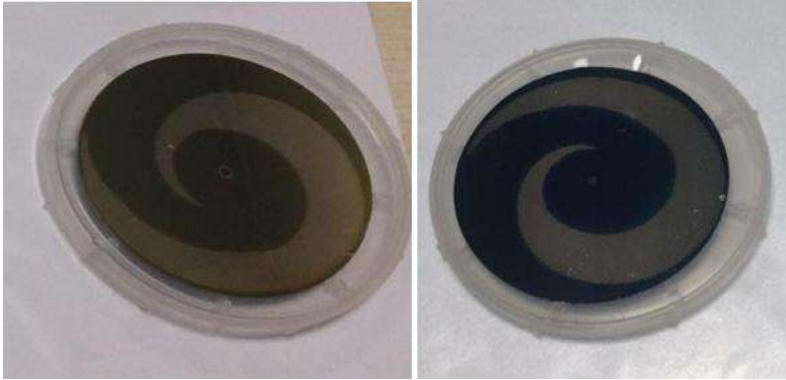
Şekil1. (a) Spiral eğrilerle sınırlandırılmış metalik maske (b) altıgen geometride tasarlanmış yarı-geçirgen desen.

Si ve Ge dilimler üzerindeki Archimedian spiral alan üzerine, geliştirilen metakik maske konarak, termela buharlaştırma sistemşinde 8 μm kalınlığında Ag filmi kaplandı. Dilimlerin

her iki yüzeyine, yansıma önleyici olarak 300 nm kalınlıklı TiO₂ ince filmleri RF magnetron püskürtme yöntemi (Nanovak, NVTS-500) ile kaplandı. Kaplamalarda 2 inç. çapında %99.99 saflıkta TiO₂ hedef kullanıldı. Tüm kaplamalar oda sıcaklığında, 30 mTorr Ar işlem gazı basıncında ve 5 rpm alttaş döndürme hızı ile gerçekleştirildi. Hedef alttaş arası mesafe 11 cm olarak sabitlendi. TiO₂ filminin kalınlığı büyütme süresince içeride bulunan kalınlık sensörü ile belirlendi. Geliştirilen modülatör disklerinin KÖ bölgede optik geçirgenlikleri FTIR (Vertex-80, Bruker) ile ölçüldü.

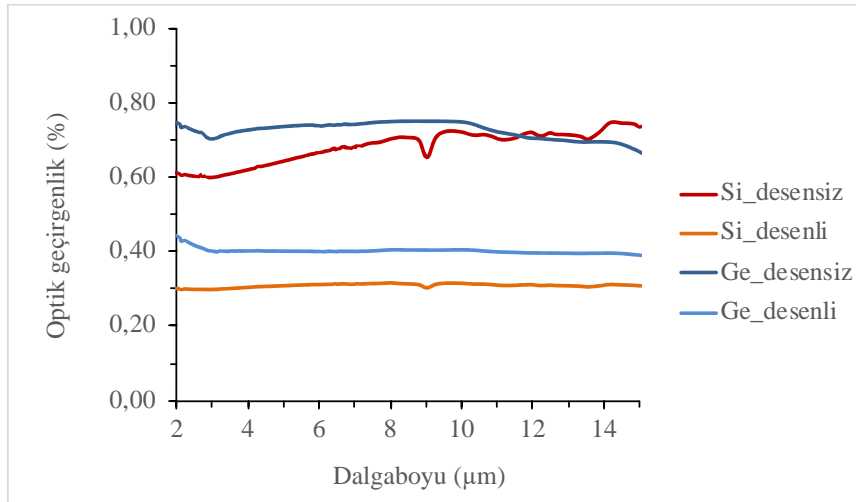
3. BULGULAR

Şekil 1’de gösterilen altıgen desenlerden oluşturulan Archimedean spiral geometrideki maske kullanılarak yöntem kısmında tarif edilen süreçlerle yüzey kaplamaları yapılan Ge ve Si kristal dilimler kullanılarak, KÖ modülatör diskleri Şekil 2’de gösterildi.



Şekil 2. Geliştirilen Ge ve Si KÖ ışık modülatör diskleri

Ge ve Si dilimler kullanılarak geliştirilen KÖ modülatör disklerinin optik geçirgenlikleri Şekil 3’de gösterildi. Disklerin desensiz (optik olarak açık) ve desenli (Archimedean spiral) bölgelerinin ortalama optik geçirgenlik değerleri 8-12 μ m aralığında Ge için, sırasıyla, %72 ve %40 olarak elde edildi. Si modülatör diski için bu değerler, sırasıyla %70 ve %30 dolayında olduğu görüldü.



Şekil 2. Geliştirilen modülatör diskinin KÖ optik geçirgenlik spektrumu

Geliştirilen Ge modülatörünün optik geçirgenlik değerinin 10-12μm aralığında bir miktar azalması, kaplanan TiO₂ filminin kalınlığı ile ilişkilidir. Film kalınlığı artırılarak KÖ termal kameraların çalışma bölgesi olan 8-12 μm’de optik geçirgenlik değeri homojen olarak elde edilebilir. Oda sıcaklığında kaplanan TiO₂ filminin anataz fazda olduğu bilinmektedir. TiO₂’nin kırılma indisi 10 μm’de 1.4 dolayındadır. Si tek-kristalinin bu dalgaboyundaki kırılma indisinin 3.42 olduğu dikkate alındığında, TiO₂ filminin Si için yansıma önleyici olarak kullanımı, kırılma indisi 4.0 civarında olan Ge’a göre daha uygundur. Ge diskin yüzeyinin kırılma indisi 10 μm’de 2.20 olan ZnS filmi ile kaplanması halinde 8-12 μm aralığında %90’ın üzerine çıkarılması mümkündür. Işık modülatörü açısından değerlendirildiğinde hem Ge hem de Si disklerin spiral bölgesinde KÖ ışınımı 8-12μm aralığında %45 civarında azalttığı görülmektedir. Bu değişim, pyroelektrik dedektör üzerinde AC sinyal oluşturabilecek yeterli elektriksel kutuplanmayı sağlayabileceği değerlendirilmektedir.

4. SONUÇ

Bu çalışmada, soğutmasız pyroelektrik termal kameralar için KÖ ışık modülatörlerinin geliştirilmesi kapsamında yapılan ön çalışmalar sunuldu. Bu doğrultuda, soğutmasız pyroelektrik termal kameralarda, pyroelektrik etkiyi oluşturmak amacı ile KÖ ışığı modüle edebilecek modülatör diskleri özgün tasarım ve kaplamalar ile geliştirildi. Bir başlangıç çalışması olarak üretilen modülatör disklerinin 8-12μm aralığında KÖ optik geçirgenliklerinin desensiz ve desenli bölgedeki %45 dolayındaki farklılıkları, geliştirilen Ge ve Si

modülâtörlerin soğutmasız pyroelektrik dedektörler için uygun olabileceği önerilmektedir. Çalışmalarımız, modülâtör diskleri üzerindeki KÖ ışınım için yarı-açık bölgenin litografik süreçlerle geliştirilerek soğutmasız dedektör ile doğrulama testlerinin yapılması hedefli olarak devam etmektedir.

Teşekkür:

Bu çalışma Alkan Teknoloji Elektronik San.Tic.Ltd.Şti. tarafından desteklenmiştir.

KAYNAKLAR

Duma, O., Cira, V.F., Demian, D., 2017. Optical choppers with rotational elements: modeling, design and prototypes. Proc. of SPIE 10231, doi: 10.1117/12.2265155

Giraldo, D., Correa, H. and D., Pena Lara, 2017. Implementation of a programmable electromechanical chopper with adjustable frequency and duty cycle for specific heat measurements. Measurement 110 (2017) 60–64.

Hu, X., Yuan, J. and Long, L. 2010. Binary optics pyroelectric chopper technology. Proc. SPIE 7544,75443H; doi:10.1117/12.885670

Jayalakshmy, M.S. and Philip, J. 2014. Pyroelectric figures of merit and associated properties of LiTaO₃/poly vinylidene difluoride nanocomposites for thermal/infrared sensing. Sensors and Actuators A 206, 121–126

Pintilie, I., Trinca, L., Trupina, L., Pasuk, I. and Pintilie, L. 2017. Relation between domain structure and pyroelectric response in as-grown epitaxial Pb(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O₃ thin films on substrates with different resistivity. Materials Research Bulletin 93, 201–207

Sumesh, M.A., Karanth, S., Prakash, S., Laxmiprasad, A.S., Nagendra, C.L. 2013. Ion beam sputtered Ge–Si–O amorphous thin films for microbolometer infrared detectors and their application in earth sensors. Sensors and Actuators A: Physical 193, 81-93.

**A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY ON
3-(BENZYLOXY)PENTA-1,4-DIENE-1,5-DIYL)DIBENZENE DERIVATIVES**

Taner Erdogan^a

^a *Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School, Kocaeli University, e-mail: taner.erdogan@kocaeli.edu.tr*

ABSTRACT

In the present study, some novel 3-(benzyloxy)penta-1,4-diene-1,5-diyl)dibenzene derivatives have been investigated computationally. The study consist of two parts. In the first part of the study, some Density Functional Theory (DFT) calculations have been performed on the investigated compounds. Geometry optimizations, frequency analyses, frontier molecular orbitals and molecular electrostatic potential map calculations have been performed at DFT/B3LYP level of theory with the use various basis sets, including 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311+G(d,p) and 6-311+G(2d,p) basis sets. In the second part of the study, molecular docking calculations have been performed on the title compounds and various proteins including AChE, BChE and HSP90A *N*-Terminal domain. Binding affinities have been determined and results showed that title compounds exhibit good binding affinity especially for HSP90A *N*-terminal domain.

Keywords: computational chemistry, DFT, molecular docking, chalcone, benzyl ether, AChE, BChE, HSP90A

INTRODUCTION

Chalcones and their derivatives are important compounds in organic and pharmaceutical chemistry. They can act as anticancer, antitubercular, antiviral, antifungal, antibacterial agents etc. [1-13] Chalcones can be synthesized via the Claisen-Schmidt condensation between a ketone and an aldehyde. A typical chalcone structure is given in Fig.1.

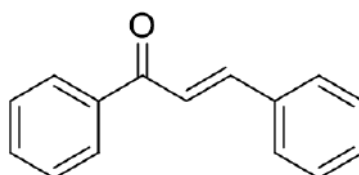


Fig. 1. A typical chalcone structure.

In this study, 3-(benzyloxy)penta-1,4-diene-1,5-diyl)dibenzene derivatives, which are the benzyl ether forms of 1,5-diphenylpenta-1,4-dien-3-one have been investigated computationally. General structure of the investigated chalcone and its benzyl ether derivatives are given in Fig. 2.

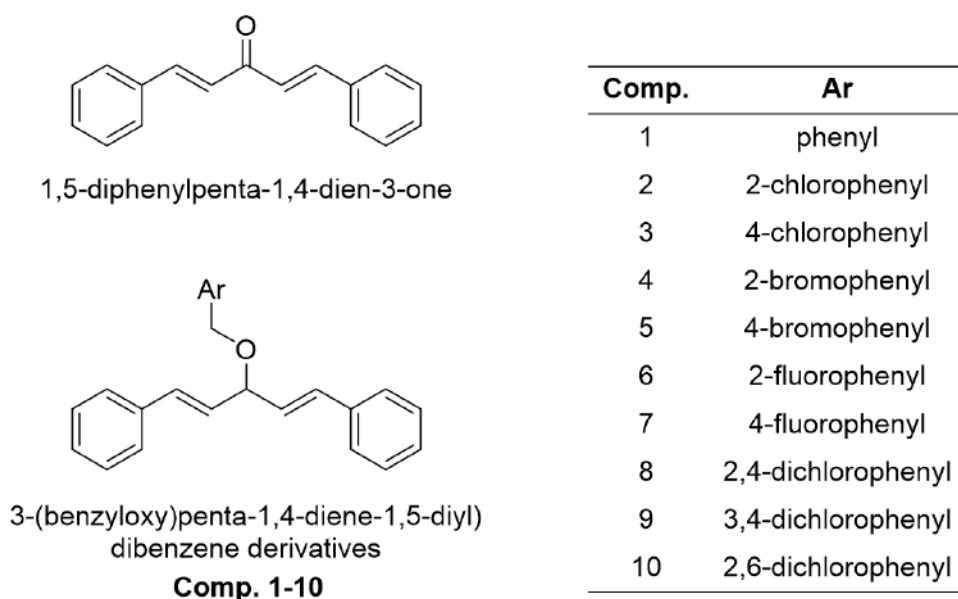


Fig.2. General structure of the investigated chalcone and its benzyl ether derivatives.

THEORETICAL CALCULATIONS

DFT calculations have been performed on the title compounds at DFT/B3LYP level of theory with the use of 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311+G(d,p) and 6-311+G(2d,p) basis sets. In this part, geometry optimizations, single point energy calculations, frequency analyses, frontier molecular orbital calculations and molecular electrostatic potential map calculations have been performed. Before performing geometry optimizations, conformer search calculations have been performed and the obtained structures have been used as initial geometries. All calculations have been performed using Gaussian 09 Rev. D01. [14] Avogadro 1.1.1 [15] software was used for the conformational searches and GaussView 5.09 [16] was used for the visualization of the computational results. Optimized geometries of the compounds 1-10 are given in Fig.3. Single point energies of the title compounds have been calculated and are given in Table 1.

Table 1. Single point energies of the investigated compounds.

Comp.	SPE (hartree)	Comp.	SPE (hartree)
1	-1003.2722	6	-1102.5433
2	-1462.8985	7	-1102.5435
3	-1462.8974	8	-1922.5225
4	-3576.8121	9	-1922.5176
5	-3576.8113	10	-1922.5186

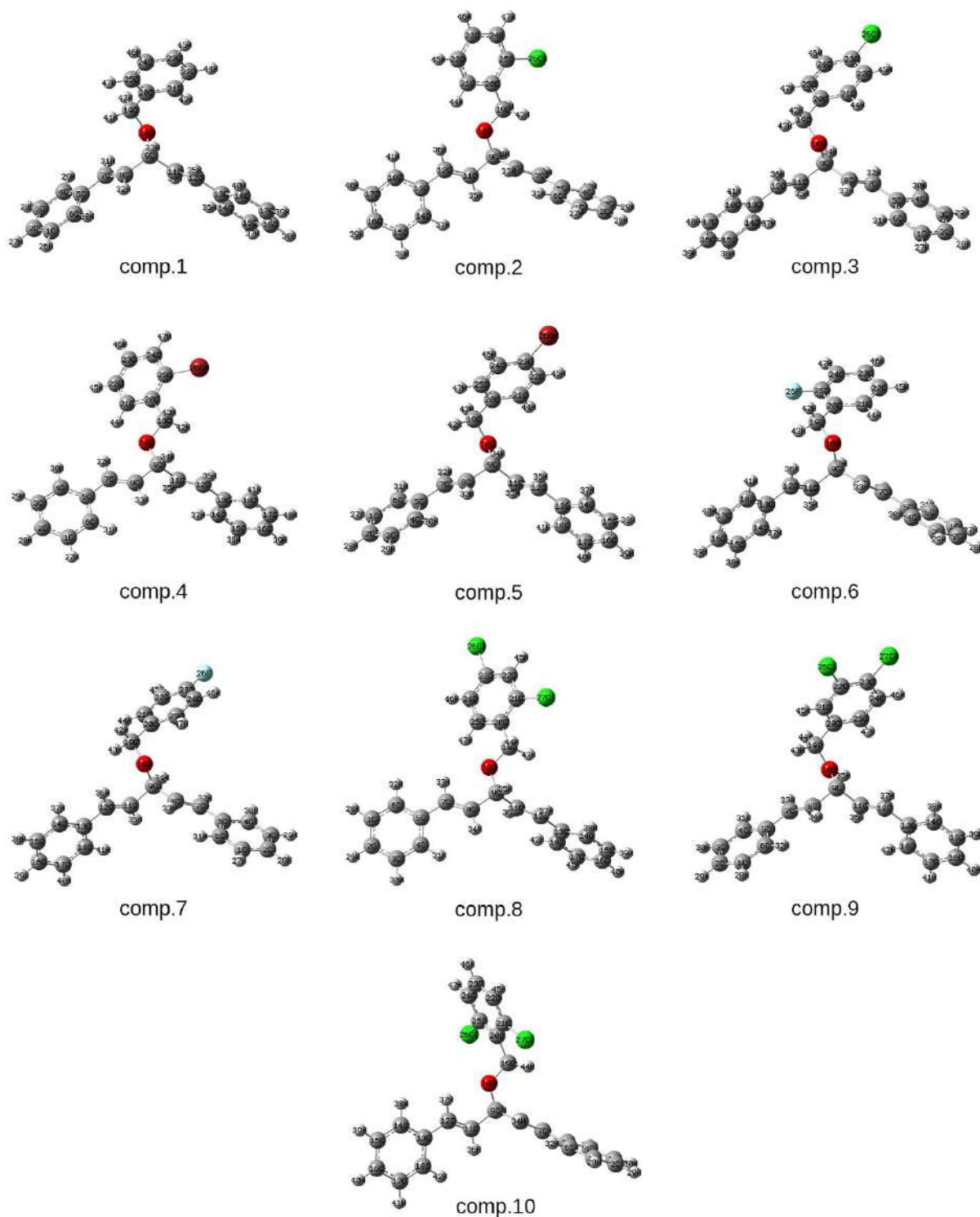


Fig. 3. Optimized geometries of the investigated compounds at DFT/B3LYP 6-311+G(2d,p) level of theory.

Frequency analysis were also carried out at DFT B3LYP level of theory using 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p) and 6-311+G(2d,p) basis sets and calculated IR spectra of compound 1 at DFT/B3LYP 6-311+G(2d,p) level of theory is given in Fig. 4.

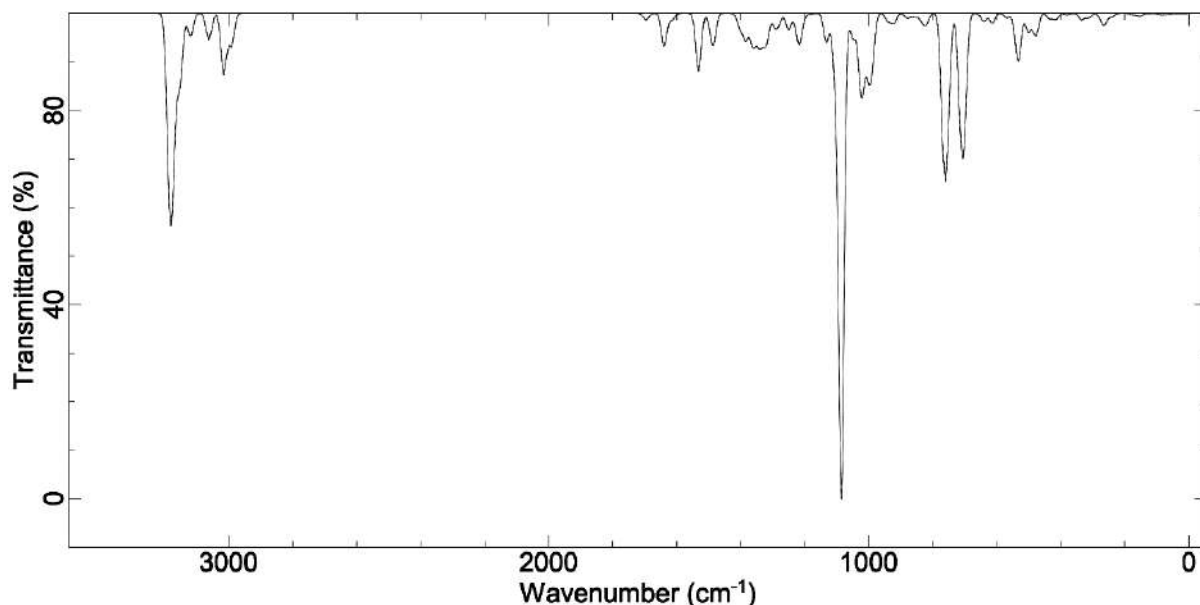


Fig. 4. Calculated IR Spectra of Comp.1

Molecular electrostatic potential (MEP) maps give information about the electron rich and electron deficient parts of the investigated molecules. MEP maps were calculated at DFT B3LYP/6-31G(d), B3LYP/6-311G(d,p) and B3LYP/6-311+G(2d,p) levels of theory. Calculated MEP diagram of Comp. 1 is given in Fig. 5. It can be seen from Fig. 5 negative charge was dominantly located on the oxygen atom.

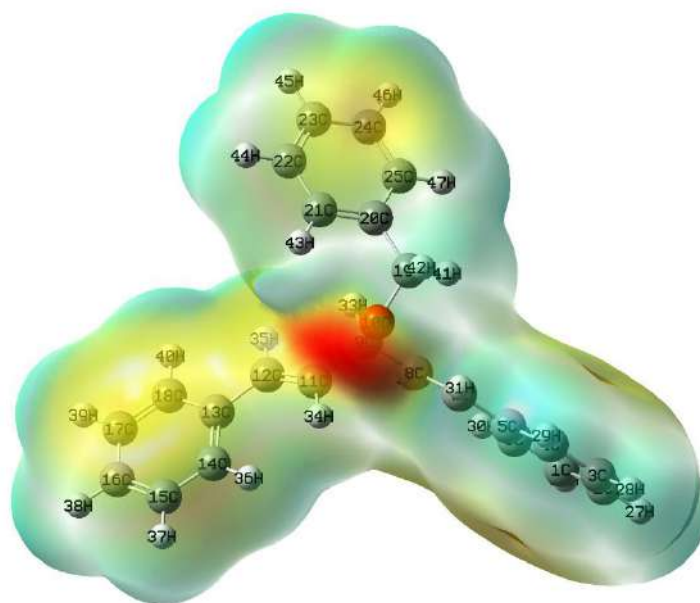


Fig. 5. MEP map for Comp.1

Lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) and the highest occupied molecular orbital (HOMO) energy calculations were carried out at DFT B3LYP level of theory using 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p) and 6-311+G(2d,p) basis sets. HOMO and LUMOs of Comp.1-10 calculated at the B3LYP/6-311+G(2d,p) level of theory are given in Figs. 6 and 7.

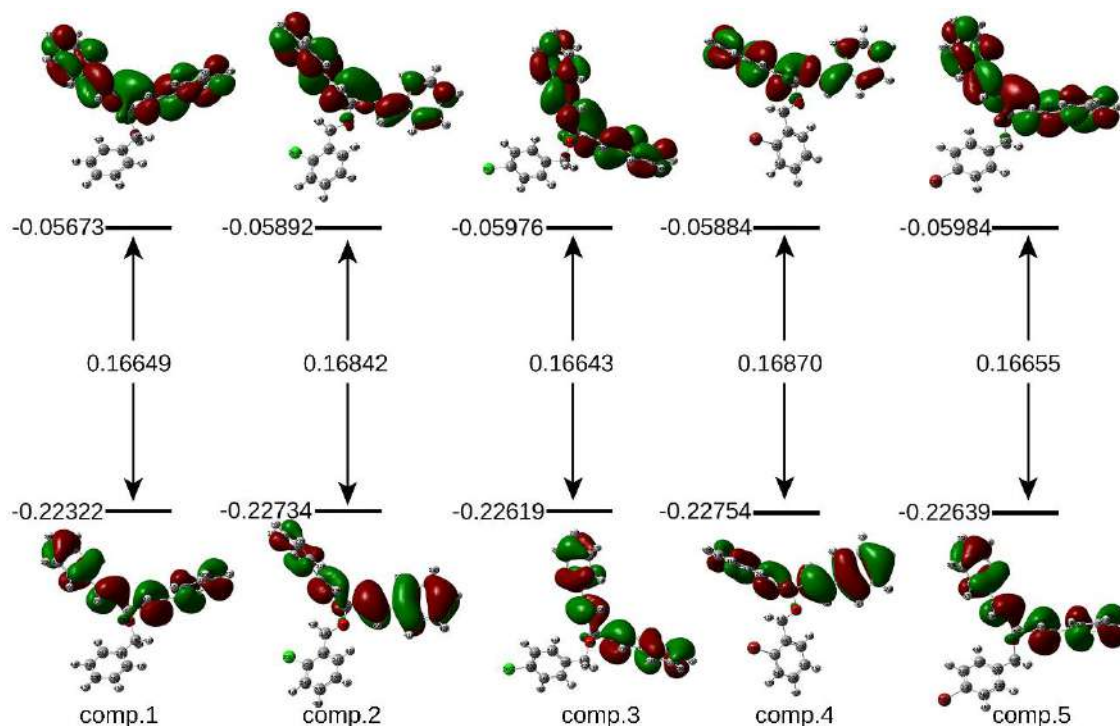


Fig. 6. HOMO and LUMOs of compounds 1-5.

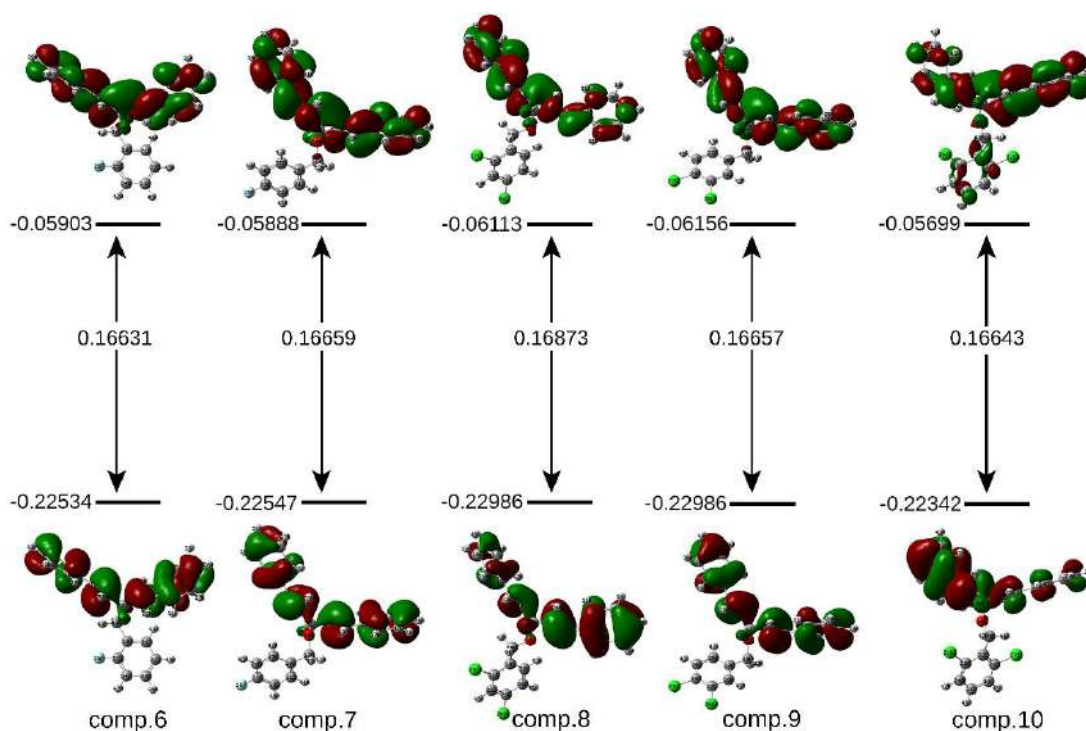


Fig. 7. HOMO and LUMOs of compounds 6-10.

Molecular Docking Calculations

Molecular docking calculations have been performed for three different receptors, acetylcholinesterase (AChE), butyrylcholinesterase (BChE) and heat shock protein (HSP90A). The structures of the proteins have been obtained from RSCB Protein Data Bank.

[17] PDB codes are 3QDD for HSP90A, 5EI5 for AChE and 4BDS for BChE. In molecular docking calculations, AutoDock Vina [18], UCSF Chimera [19] and AutoDock Tools [20-21] program packages were used. Discovery Studio Visualizer [22] was used for the representation of the results. Binding affinities of the investigated compounds are given in Table 2 and Fig. 8, and receptor – ligand interactions have been represented in Figs.9, 10 and 11.

Table 2. Binding affinities of compounds 1-10.

Binding Affinities (kcal/mol)			
Comp.	AChE	BChE	HSP90A
1	-11.1	-9.8	-12.3
2	-11.4	-9.8	-12.2
3	-11.0	-9.9	-12.4
4	-11.2	-9.8	-11.9
5	-11.0	-9.9	-11.8
6	-11.3	-9.9	-12.6
7	-11.6	-10.0	-12.4
8	-11.2	-9.8	-13.3
9	-11.7	-9.9	-12.2
10	-11.4	-10.0	-12.0

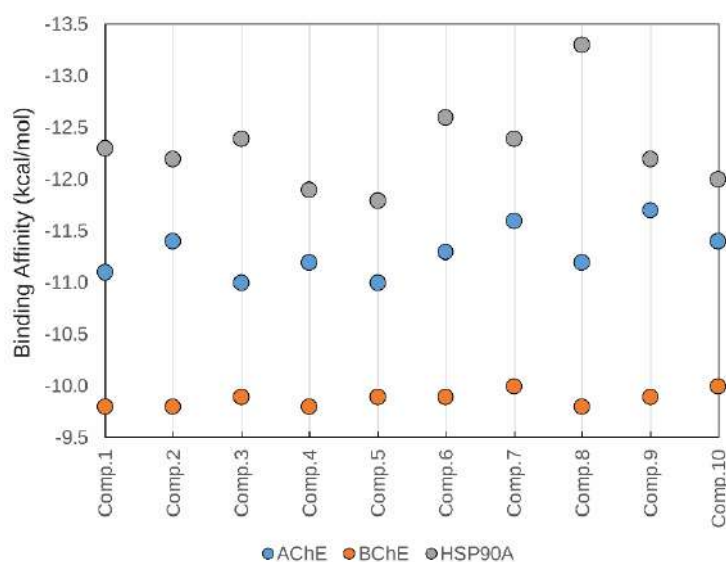


Fig. 8. Binding affinities of the investigated compounds 1-10.

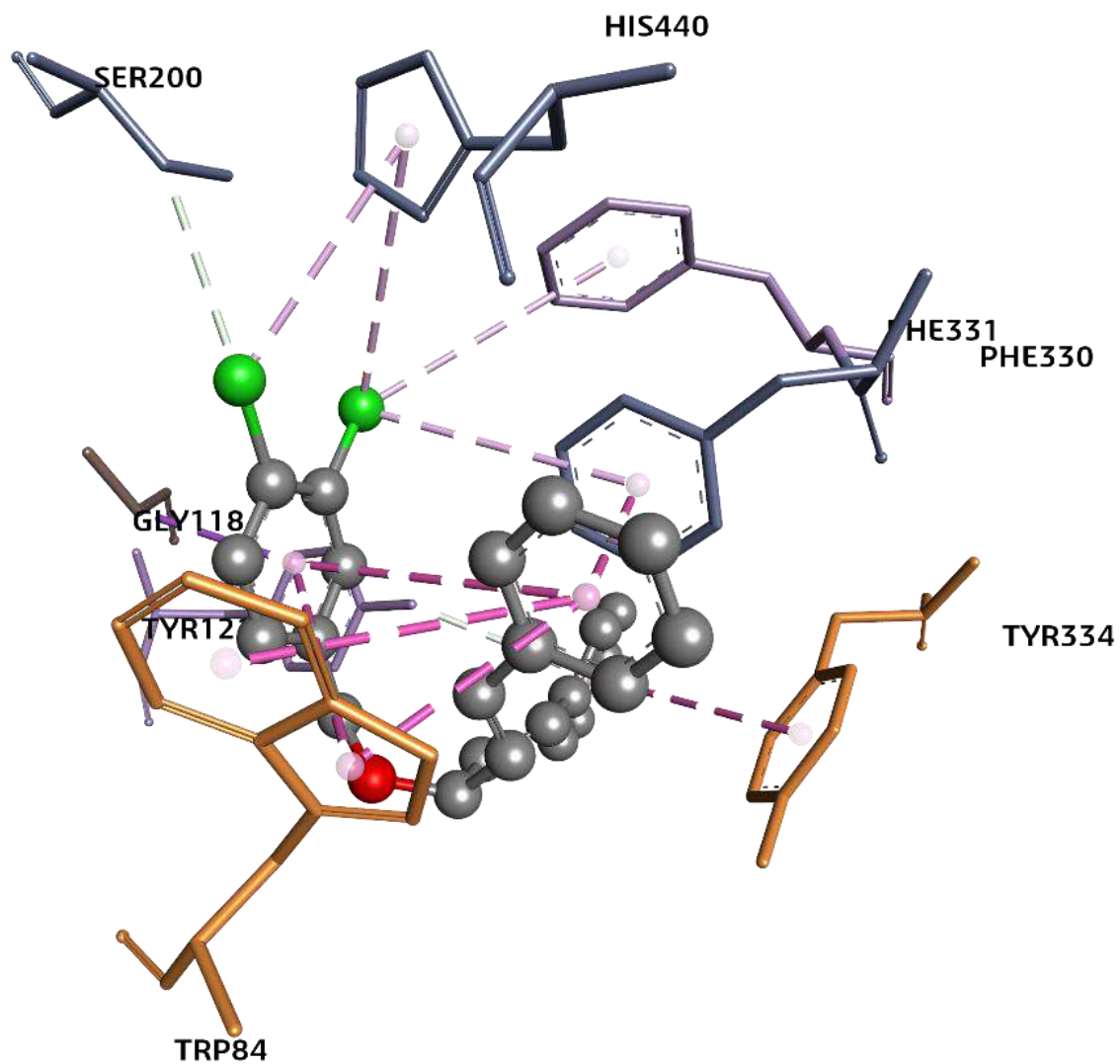


Fig. 9. Receptor – ligand interactions between compound 9 and AChE.

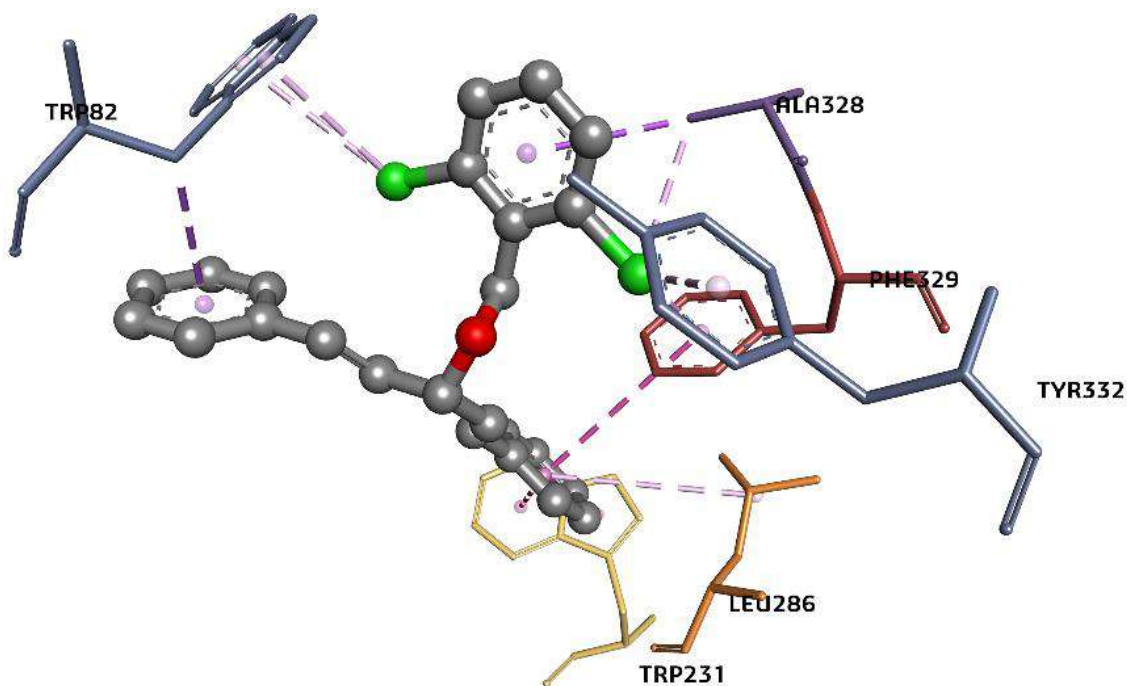


Fig. 10. Receptor – ligand interactions between compound 10 and BChE.

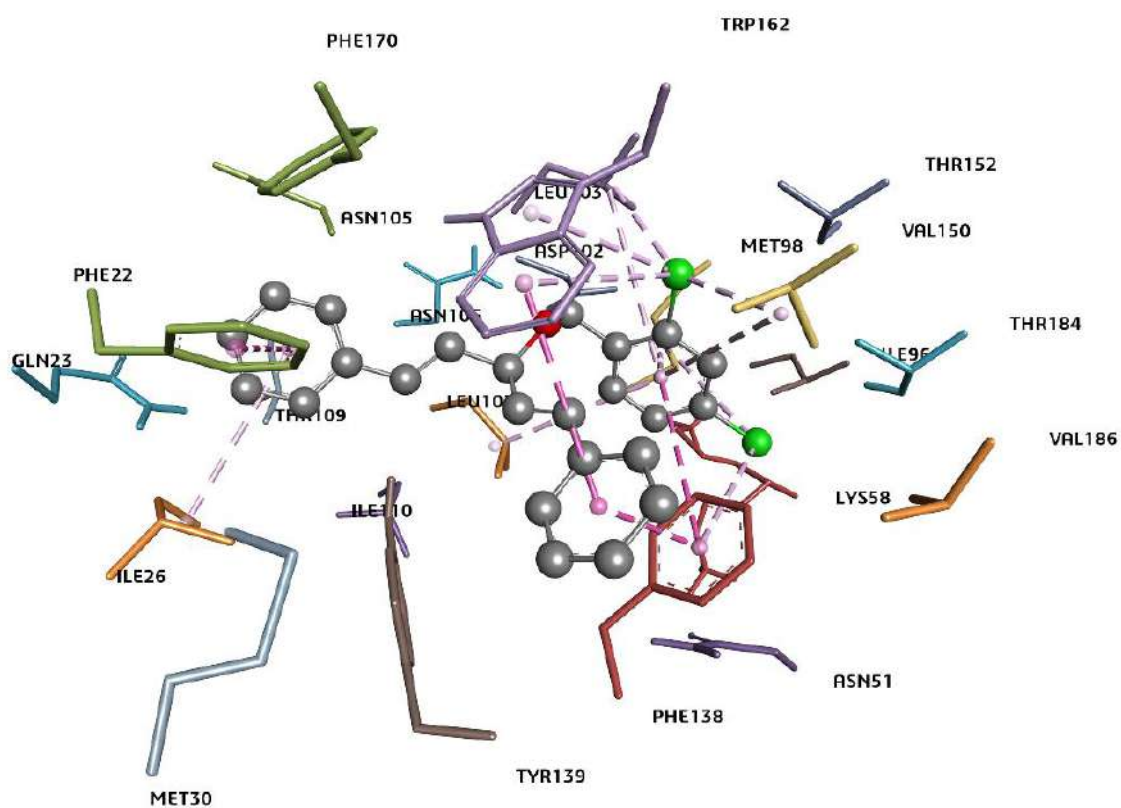


Fig. 11. Receptor – ligand interactions between compound 8 and HSP90A.

RESULTS AND DISCUSSION

In this work, DFT and molecular docking calculations have been performed on the title compounds. Results showed that investigated compounds exhibit good binding affinity

especially for HSP90A N-terminal domain. The binding affinities for HSP90A were found to be in the range of 11.8-13.3 kcal/mol. On the other hand, substitutions on the phenyl ring affect the binding affinity considerably. For HSP90A, the highest and the lowest binding affinities were obtained for 2,4-dichlorosubstituted derivative and 4-bromosubstituted derivative, respectively. For cholinesterase enzymes, binding affinities were found to be quite close to each other. The values obtained for AChE and BChE were found to be in the range of 11.0-11.7 kcal/mol and 9.8-10.0 kcal/mol, respectively.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by Kocaeli University Scientific Research Projects Unit. Project Number: 2011/062. The author acknowledge Kocaeli University for the financial support.

REFERENCES

1. D.N. Dhar, *The chemistry of chalcones and related compounds*. 1st ed. 1981, New York: Wiley & Sons.
2. X. Dong, T. Liu, J. Yan, P. Wu, J. Chen, Y. Hu, *Bioorg Med Chem* (2009) <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2008.11.052>
3. H.-K. Hsieh, L.-T. Tsao, J.-P. Wang, C.-N. Lin, *Journal of Pharmacy and Pharmacology* (2000) <https://doi.org/10.1211/0022357001773814>
4. S. Katade, U. Phalgune, S. Biswas, R. Wakharkar, N. Deshpande, *Indian Journal of Chemistry Section B-Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry* (2008)
5. S. Khatib, O. Nerya, R. Musa, M. Shmuel, S. Tamir, J. Vaya, *Bioorganic & medicinal chemistry* (2005) <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2004.10.010>
6. I.G. Mamedov, M.R. Bayramov, Y.V. Mamedova, A.M. Maharramov, *Magnetic Resonance in Chemistry* (2013) <https://doi.org/10.1002/mrc.3982>
7. N. Mishra, P. Arora, B. Kumar, L.C. Mishra, A. Bhattacharya, S.K. Awasthi, V.K. Bhasin, *European journal of medicinal chemistry* (2008) <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2007.09.014>
8. Z. Nowakowska, B. Kedzia, G. Schroeder, *European journal of medicinal chemistry* (2008) <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2007.05.006>
9. S.G. Patil, P.S. Utale, S.B. Gholve, S.D. Thakur, S.V. Pande, *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research* (2012)
10. V.J. Ram, A.S. Saxena, S. Srivastava, S. Chandra, *Bioorganic & medicinal chemistry letters* (2000) [https://doi.org/10.1016/s0960-894x\(00\)00409-1](https://doi.org/10.1016/s0960-894x(00)00409-1)
11. V. Sharma, K.V. Sharma, *E-Journal of Chemistry* (2010) <https://doi.org/10.1155/2010/426383>
12. M.S. Yar, A.A. Siddiqui, A.M. Ali, *Journal of the Serbian Chemical Society* (2007)
13. L. Zhai, M. Chen, J. Blom, T.G. Theander, S.B. Christensen, A. Kharazmi, *Journal of Antimicrobial Chemotherapy* (1999) <https://doi.org/10.1093/jac/43.6.793>

14. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. Montgomery, J. A. , J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, 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, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, Gaussian 09. 2013, Gaussian Inc.: Wallingford CT.
15. M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison, *Journal of Cheminformatics* (2012) <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>.
16. R. Dennington, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 5. 2009, Semichem Inc.: Shawnee Mission, KS.
17. <https://www.rcsb.org/>
18. O. Trott, A.J. Olson, *Journal of Computational Chemistry* (2010) <https://doi.org/doi:10.1002/jcc.21334>
19. E.F. Pettersen, T.D. Goddard, C.C. Huang, G.S. Couch, D.M. Greenblatt, E.C. Meng, T.E. Ferrin, *J Comput Chem* (2004) <https://doi.org/10.1002/jcc.20084>
20. Michel F. Sanner. Python: A Programming Language for Software Integration and Development. *J. Mol. Graphics Mod.*, 1999, Vol 17, February. pp57-61.
21. Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S. and Olson, A. J. (2009) Autodock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. *J. Computational Chemistry* 2009, 16: 2785-91.
22. D.S. BIOVIA, Discovery Studio Visualizer, v17.2.0.16349. 2016, San Diego: Dassault Systèmes.

A DFT STUDY ON THE REACTIONS OF 5-PHENYL-1,3,4-OXADIAZOLE-2-THIOL WITH VARIOUS 2-BROMO-1-ARYLETHAN-1-ONE DERIVATIVES

Taner Erdogan^{1*}

*Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School,
Kocaeli University e-mail:taner.erdogan@kocaeli.edu.tr*

ABSTRACT

In this study, it was aimed to investigate the reactions between 5-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-thiol and various 2-bromo-1-arylethan-1-one derivatives, computationally. For this purpose, detailed density functional theory (DFT) calculations have been performed on the chemical species which take place in the investigated reactions and results have been compared with the experimental data which was obtained from the literature. All calculations have been performed at DFT B3LYP level of theory with the use of various basis sets, including 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p) and 6-311+G(d,p) basis sets. Calculations have been performed at both gas and solution phase, and various solvents, including toluene, tetrahydrofuran, ethanol and acetonitrile, have been examined. In NMR calculations both CSGT and GIAO methods have been used. In the second part of the study, molecular docking calculations have been performed on the 1-phenyl-2-((5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)thio)ethan-1-one derivatives and three different proteins (AChE, BChE and HSP90A).

Keywords: Computational chemistry, DFT, molecular docking, 2-bromo-1-arylethan-1-one, 5-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-thiol, AChE, BChE, HSP90A.

INTRODUCTION

Nitrogen containing heterocyclic compounds, including 1,3,4-oxadiazole compounds, are important organic structures and have applications in various fields, including pharmaceutical and agriculture industries. [1-6] 2-Mercapto-1,3,4-oxadiazole and its analogues also possess a wide range of biological activities such as antimicrobial, anti-inflammatory, anti-HIV, antiparasitic, fungicidal, anticonvulsant etc. [6-16]

In this study, the reactions of 5-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-thiol with various 2-bromo-1-arylethan-1-one derivatives for the synthesis of some known 1-aryl-2-((5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)thio)ethanone derivatives have been investigated computationally. The investigated reactions are given in Fig. 1.

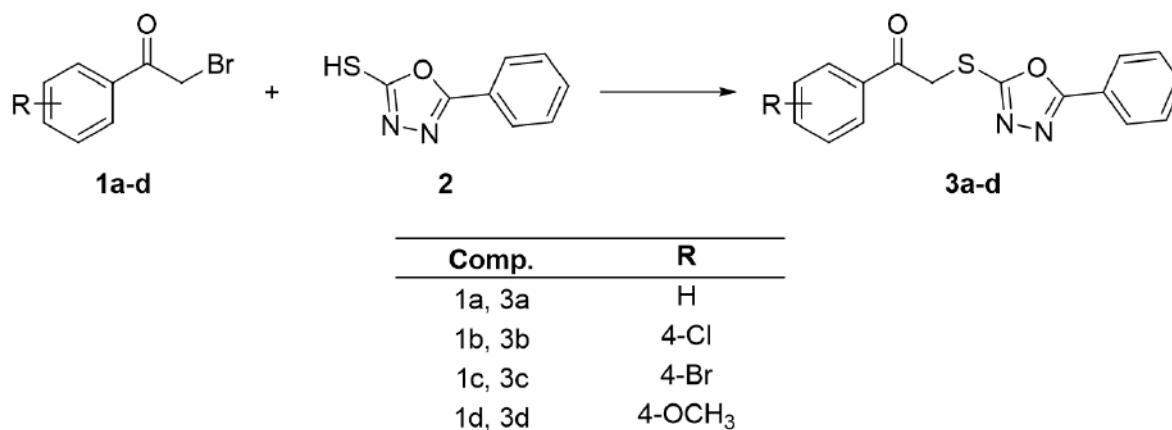


Fig. 1: Computationally investigated reactions.

THEORETICAL CALCULATIONS

All calculations have been performed using Gaussian 09 Rev. D01. [17] Avogadro 1.1.1 [18] software was used for the conformational searches and GaussView 5.09 [19] was used for the visualization of the computational results. Calculations have been performed at DFT B3LYP level of theory with the use of various basis sets, including 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p) and 6-311+G(d,p). The calculations have been performed at both gas and solution phase. In the solution phase calculations IEFPCM solvation model was used and four different solvents, toluene, dimethylformamide, tetrahydrofuran and ethanol have been selected. In the second part of the study, molecular docking calculations have been performed on the 1-phenyl-2-((5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)thio)ethan-1-one derivatives and three different proteins, AChE, BChE and HSP90A. Protein structures have been obtained from RCSB Protein Data Bank [20]. Pdb codes are 5ei5, 4bds and 3qdd, respectively. In the molecular docking calculations, AutoDock Vina [21] UCSF Chimera [22] and Autodock Tools [23-24] software packages have been used. Discovery Studio Visualizer [25] was used for the representation of the molecular docking results.

Prior to geometry optimizations, a conformer search has been performed and obtained geometry was used as an initial geometry for each optimization. Optimized geometries for the chemical species which take place in the investigated reactions are given in Fig. 2. Single point energies of the compounds 1a-d, 2 and 3a-d are given in Table 1.

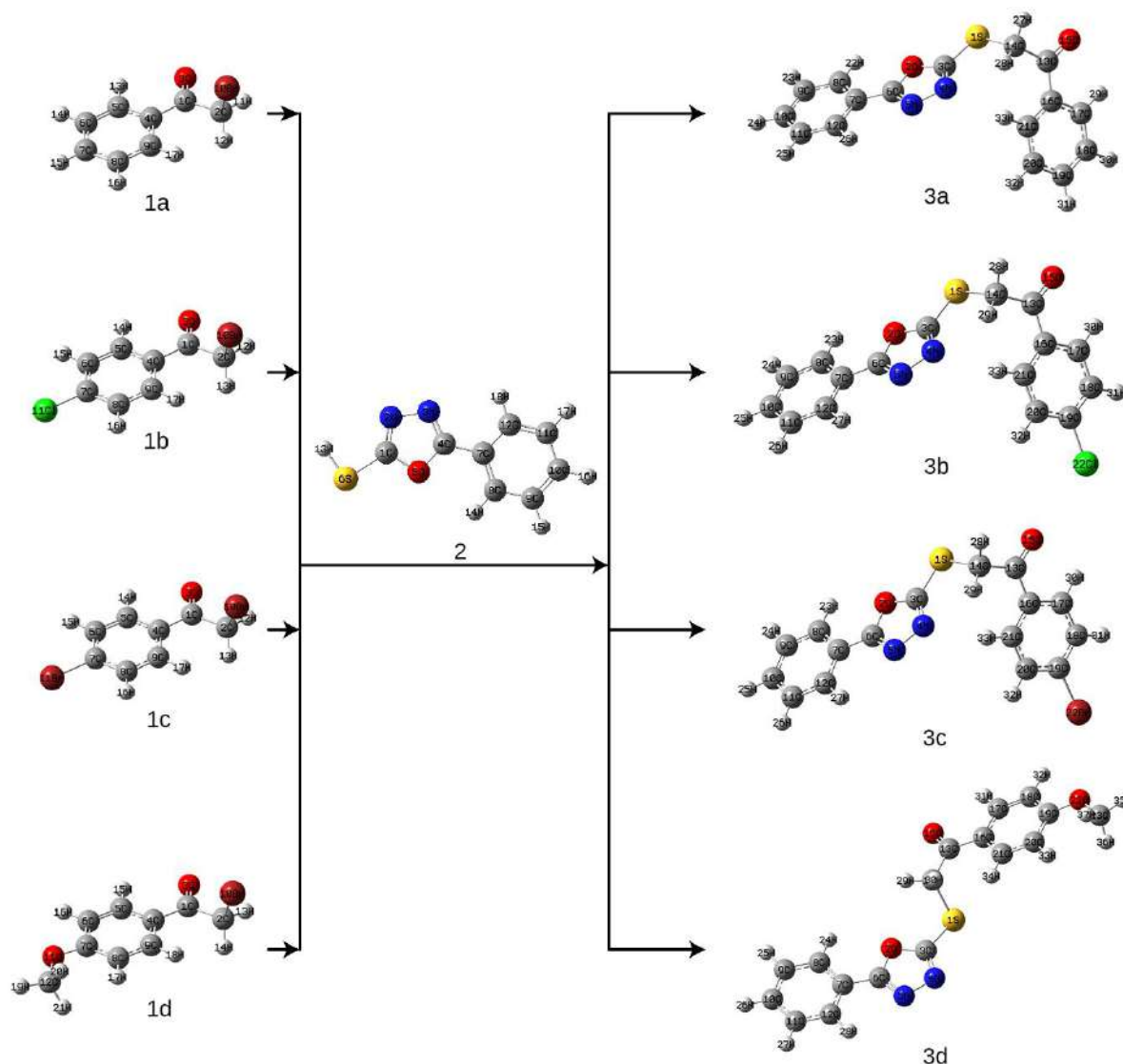


Fig. 2: Optimized geometries of the compounds 1a-d, 2 and 3a-d

Table 1. Single point energies of the compounds 1a-d, 2 and 3a-d

Comp.	SPE (hartree)	Comp.	SPE (hartree)
1a	-2958.54883409	3a	-1275.29657808
1b	-3418.17354775	3b	-1734.91937116
1c	-5532.08718639	3c	-3848.83891999
1d	-3073.11247852	3d	-1389.85027129
2	-891.50882899		

To confirm that the geometry optimized structures are true minima, a frequency analysis was performed for each structure and vibrational spectra were obtained for all compounds. For instance, infrared spectra of compound 3b is given in Fig. 3.

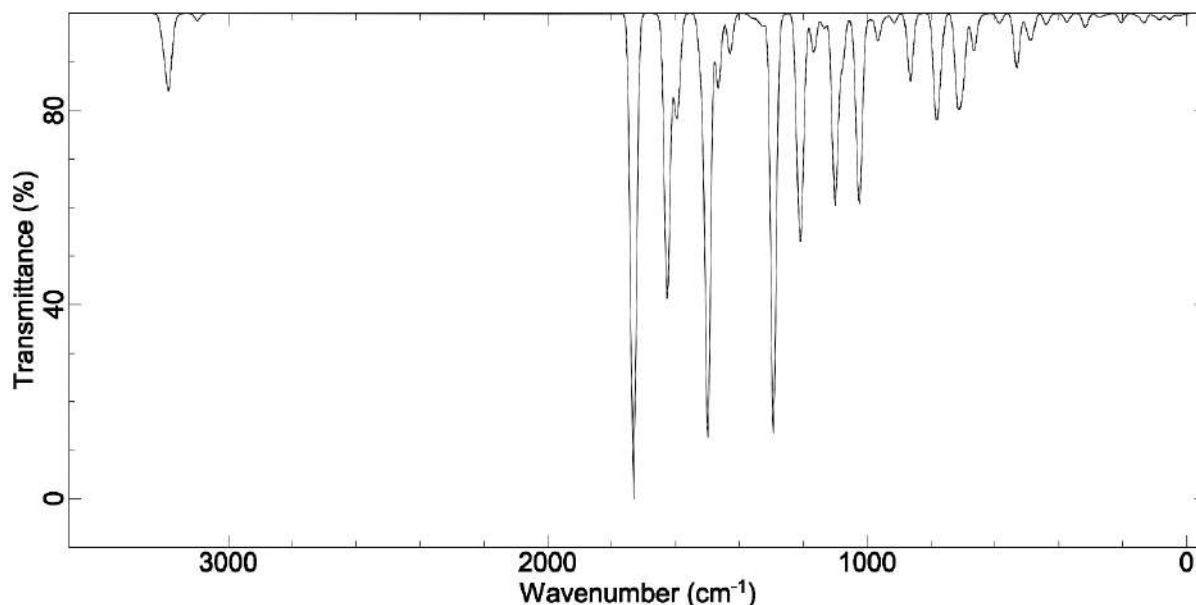


Fig. 3. IR spectra of the compounds 3b calculated with 6-311+G(2d,p) basis set at gas phase.

Nuclear magnetic shield tensors have also been computationally determined at B3LYP level of theory with the same basis sets. In NMR calculations both CSGT and GIAO methods have been used. The calculated values have been compared with the experimental data. Experimental data have been obtained from the literature. [15] For compound 3b, calculated and experimental data are given in Table 2 and absolute errors are given in Fig. 4.

Table 2. NMR data for compound 3b

Protons	Exp.[15]	CSGT1 a	CSGT2 b	CSGT3 c	CSGT4 d	GIAO1 a	GIAO2 b	GIAO3 c	GIAO4 d
30-H	8.08	4.96	5.70	6.82	7.32	8.35	8.67	8.73	8.82
33-H	8.08	4.96	5.70	6.82	7.32	8.35	8.67	8.73	8.82
23-H	7.92	5.04	5.66	6.81	7.13	7.99	8.22	8.33	8.41
27-H	7.92	5.04	5.66	6.81	7.13	7.99	8.22	8.33	8.41
24-H	7.66	4.74	5.32	6.40	6.57	7.34	7.53	7.64	7.65
26-H	7.66	4.74	5.32	6.40	6.57	7.34	7.53	7.64	7.65
25-H	7.59	4.75	5.31	6.40	6.58	7.33	7.52	7.63	7.69
31-H	7.59	3.87	4.53	5.73	6.20	7.13	7.34	7.47	7.57
32-H	7.59	3.87	4.53	5.73	6.20	7.13	7.34	7.47	7.57
28-H	5.17	1.80	2.44	2.78	3.42	4.30	4.46	4.46	4.53
29-H	5.17	1.80	2.44	2.78	3.42	4.30	4.46	4.46	4.53

^a 6-31G(d); ^b 6-31G(d,p); ^c 6-311G(d,p); ^d 6-311+G(d,p)

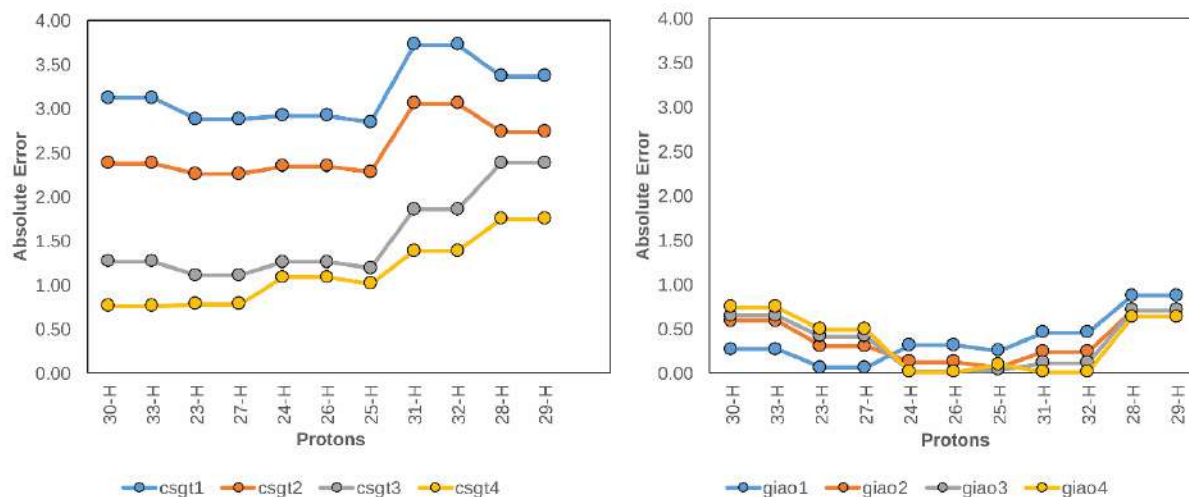


Fig. 4. Absolute errors for calculated calculated 1H NMR spectrum of compound 3c.

Molecular electrostatic potential (MEP) map calculations have also been performed on the investigated structures and are given in Fig. 5.

Frontier molecular orbital (FMO) calculations have been performed at the same level of theory. FMOs for compounds 1a-d are given in Fig. 6.

Condensed Fukui functions provide information about which atoms have larger tendency to accept or lose electron. Condensed Fukui function for compounds 1a-d have been determined and are given in Tables 2 and 3.

Molecular docking calculations have been performed for compounds 3a-d. Binding affinities for acetylcholinesterase (AChE), butyrylcholinesterase (BChE) and heat shock protein (HSP90A) are given in Table 5 and Fig. 7. Receptor – ligand interactions are given in Figs. 8, 9 and 10.

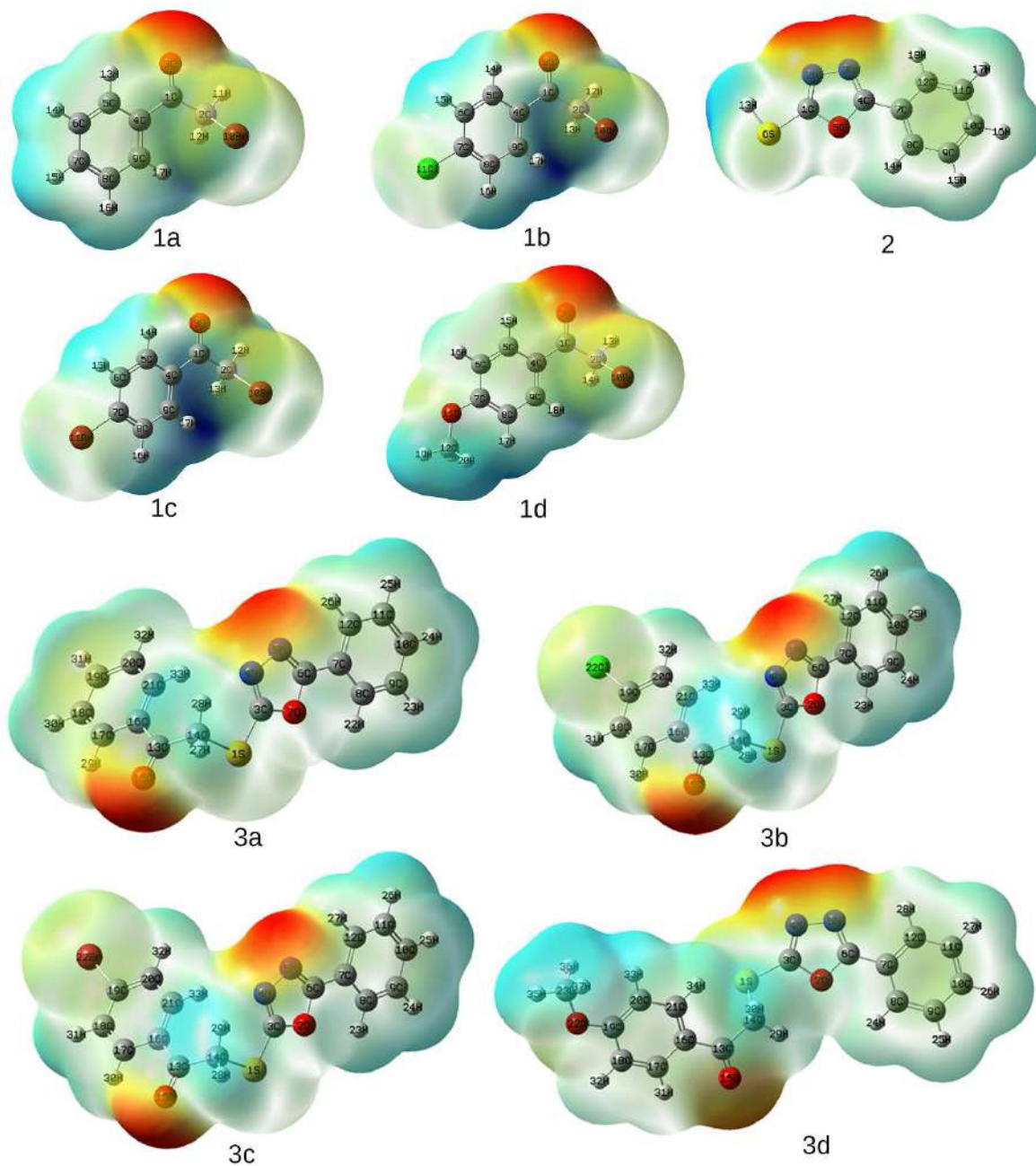


Fig. 5. MEP maps for compounds 1a-d, 2 and 3a-d (B3LYP/6-311+G(2d,p)).

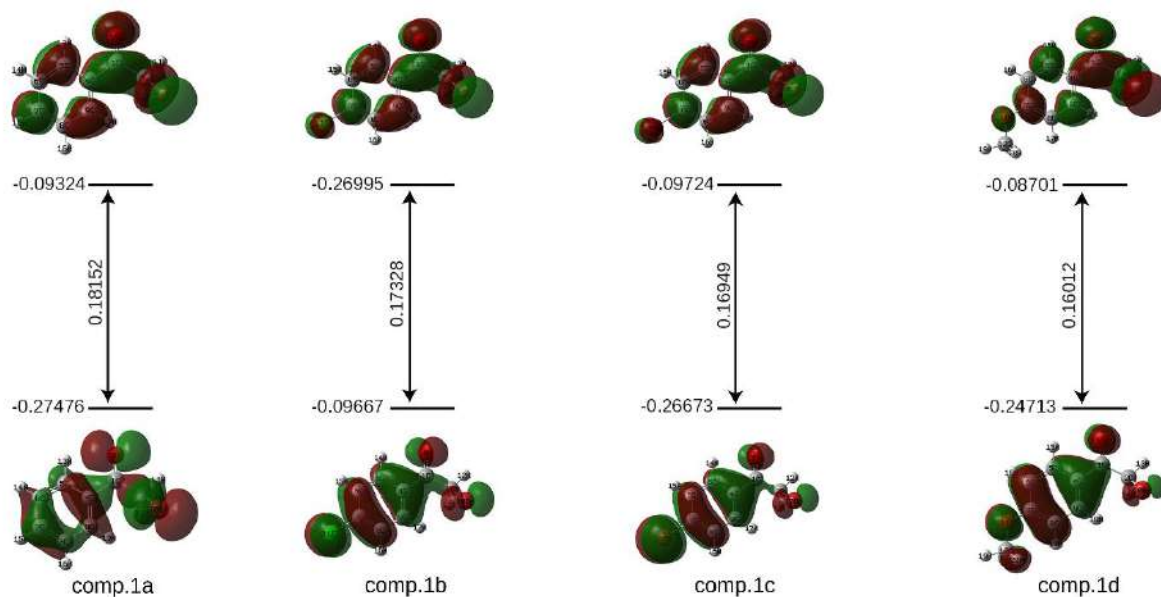


Fig. 6. HOMO, LUMO and HOMO-LUMO gaps of compound 1a-d.

Table 3. Condensed Fukui functions for compounds 1a-d

	Toluene				Tetrahydrofuran			
	1a	1b	1c	1d	1a	1b	1c	1d
1C	-0.351	-0.352	-0.349	-0.350	-0.362	-0.358	-0.356	-0.363
2C	0.628	0.632	0.616	0.676	0.698	0.673	0.663	0.769
4C	0.106	0.107	0.107	0.120	0.103	0.103	0.103	0.120
5C	0.061	0.053	0.054	0.055	0.064	0.056	0.056	0.057
6C	0.095	0.105	0.106	0.115	0.099	0.109	0.110	0.126
7C	0.069	0.001	0.035	-0.194	0.073	0.003	0.035	-0.184
8C	0.099	0.111	0.111	0.146	0.102	0.111	0.112	0.144
9C	0.075	0.065	0.066	0.060	0.074	0.066	0.065	0.063

Table 4. Condensed Fukui functions for compounds 1a-d

	Acetonitrile				Ethanol			
	1a	1b	1c	1d	1a	1b	1c	1d
1C	-0.367	-0.362	-0.362	-0.211	-0.366	-0.362	-0.361	-0.211
2C	0.728	0.703	0.699	0.241	0.719	0.699	0.696	0.241
4C	0.103	0.102	0.101	0.116	0.103	0.102	0.101	0.116
5C	0.066	0.057	0.057	0.084	0.065	0.057	0.057	0.083
6C	0.102	0.111	0.112	0.096	0.101	0.111	0.112	0.096
7C	0.077	0.004	0.036	-0.181	0.076	0.004	0.036	-0.181
8C	0.102	0.111	0.113	0.134	0.102	0.111	0.112	0.134
9C	0.076	0.066	0.066	0.065	0.074	0.066	0.066	0.065

Table 5. Binding affinities for AChE, BChE and HSP90A

	AChE	BChE	HSP90A
Comp.3a	-10.2	-9.3	-9.5
Comp.3b	-10.3	-9.5	-9.5
Comp.3c	-10.2	-9.6	-9.4
Comp.3d	-10	-9.3	-9.1

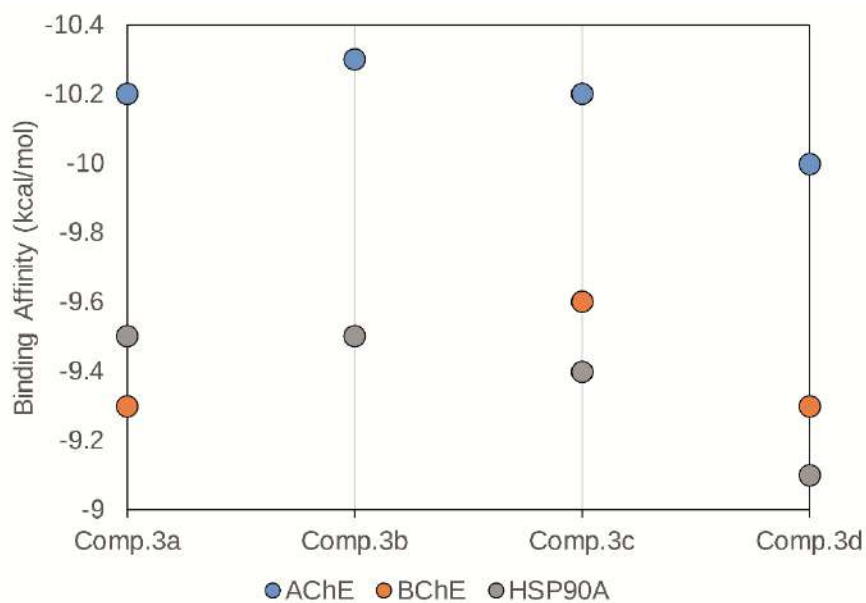


Fig. 7: Binding Affinities for compounds 3a-d.

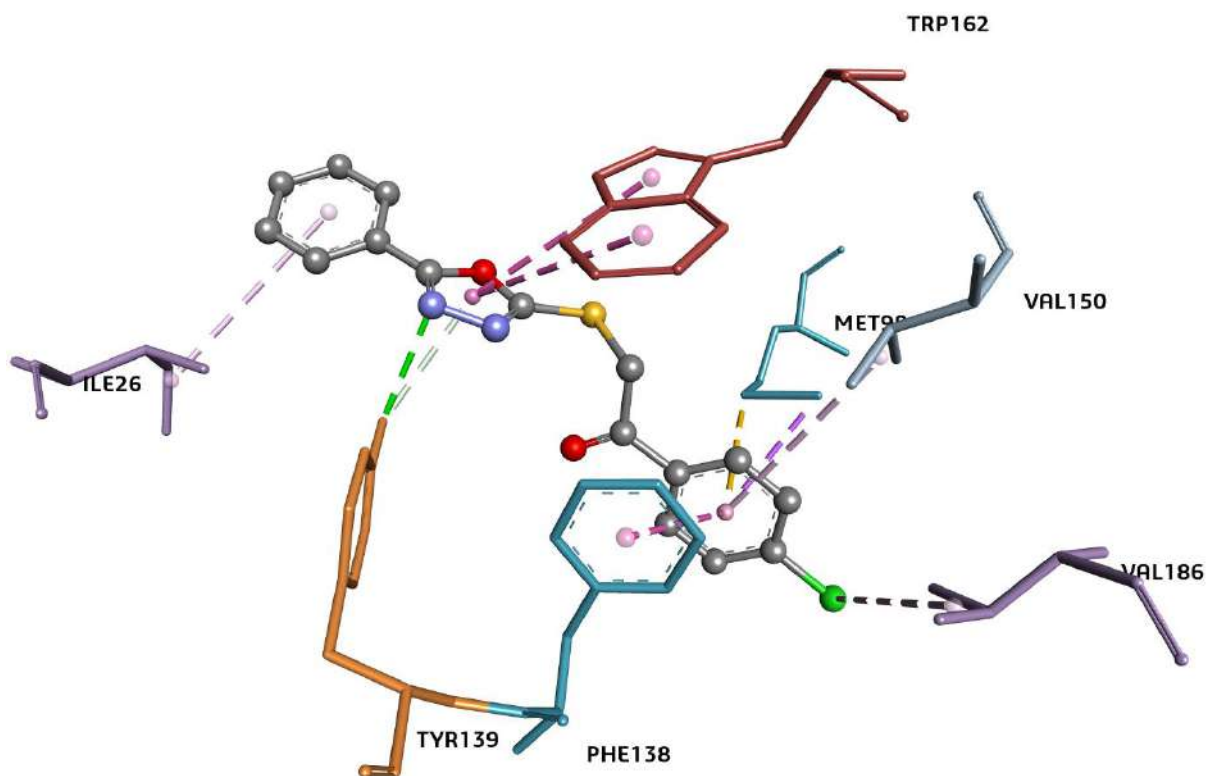


Fig. 8. Receptor – ligand interactions between comp. 3b and AChE.

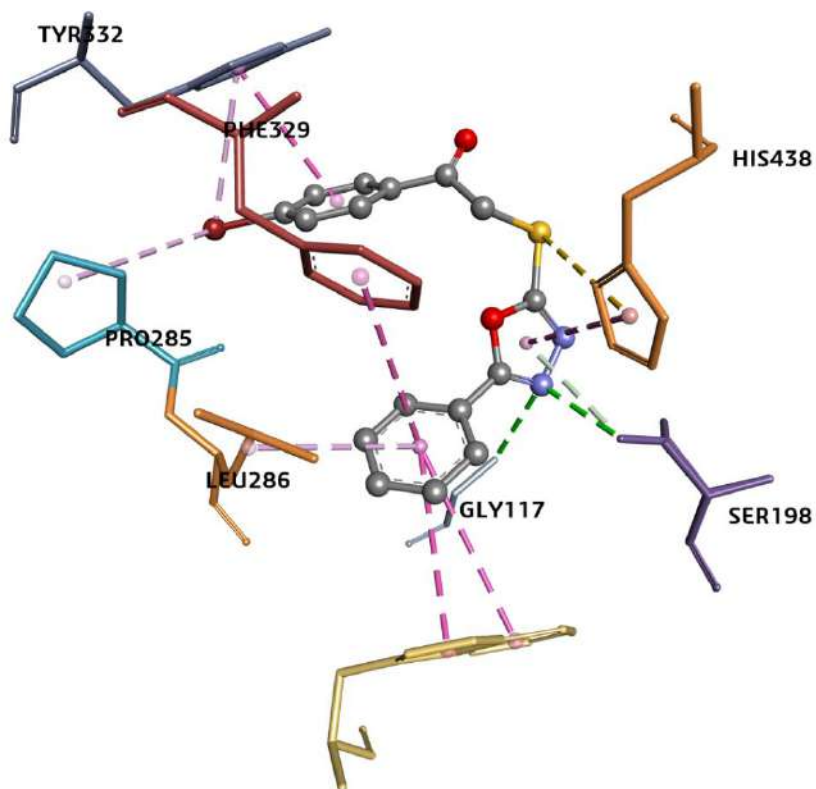


Fig. 9. Receptor – ligand interactions between comp. 3c and BChE.

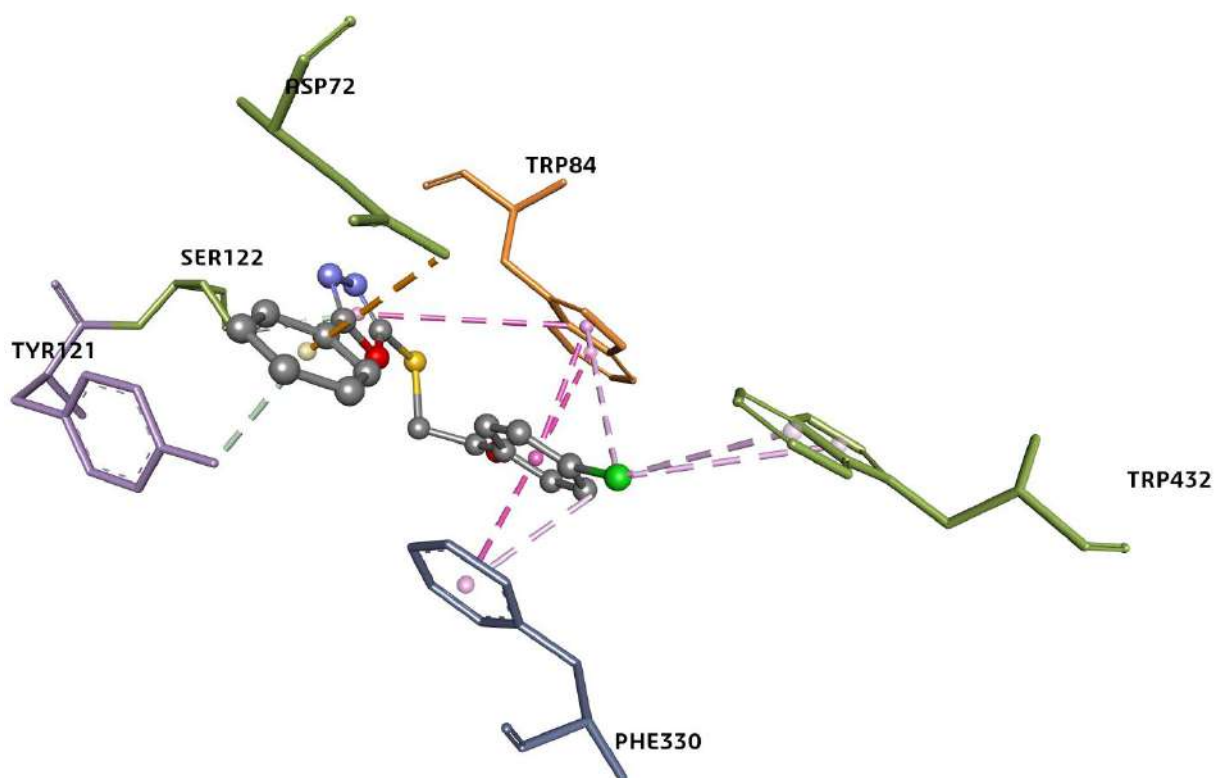


Fig. 10. Receptor – ligand interactions between comp. 3b and HSP90A.

RESULTS AND DISCUSSION

In this study, the reactions between 5-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-thiol and 2-bromo-1-arylethanone derivatives have been investigated. As can be seen from Tables 3 and 4, the highest values have been obtained for 2C atom of the 2-bromoethanone derivatives and it means that the 2C atom is the reactive site for a nucleophilic attack. On the other hand, considering solvent alternatives, except compound 1d, the highest values obtained for acetonitrile.

In NMR calculations, it can be seen from Table 2 and Fig. 4, GIAO method is more successful than CSGT method. In Table 2, green color corresponds to more successful results while the red color corresponds to the worst. In Fig. 4, it can be seen that, absolute errors obtained with GIAO method are smaller than the errors obtained with GIAO method.

In molecular docking calculations, the binding affinities were found to be in the range of 10.0-10.3 kcal/mol for AChE, 9.3-9.6 kcal/mol for BChE and 9.1-9.5 kcal/mol for HSP90A. It can be said that the investigated compounds exhibit good to moderate binding affinity for AChE, BChE and HSP90A.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by Kocaeli University Scientific Research Projects Unit. Project Number: 2011/062. The author acknowledge Kocaeli University for the financial support.

REFERENCES

1. Kumar, H, Javed, SA, Khan, SA, Amir, M, 1,3,4-Oxadiazole/thiadiazole and 1,2,4-triazole derivatives of biphenyl-4-yloxy acetic acid: Synthesis and preliminary evaluation of biological properties, *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2008, 43, 2688-2698.
2. Chohan, ZH, Pervez, H, Rauf, A, Khan, KM, Supuran, CT, Antibacterial cobalt (II), copper (II), nickel (II) and zinc (II) complexes of mercaptothiadiazole—derived furanyl, thienyl, pyrrolyl, salicylyl and pyridinyl Schiff bases, *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 2006, 21, 193-201.
3. Khan, KM, Rahim, F, Halim, SA, Taha, M, Khan, M, Perveen, S, Zaheer ul, H, Mesaik, MA, Iqbal Choudhary, M, Synthesis of novel inhibitors of β -glucuronidase based on benzothiazole skeleton and study of their binding affinity by molecular docking, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2011, 19, 4286-4294.
4. Khan, MTH, Choudhary, MI, Khan, KM, Rani, M, Atta ur, R, Structure–activity relationships of tyrosinase inhibitory combinatorial library of 2,5-disubstituted-1,3,4-oxadiazole analogues, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2005, 13, 3385-3395.
5. Dua, R, Shrivastava, S, Sonwane, SK, Srivastava, SK, Pharmacological significance of synthetic heterocycles scaffold: A review, *Adv. Biol. Res.*, 2011, 5, 120-144.

6. Kashtoh, H, Hussain, S, Khan, A, Saad, SM, Khan, JAJ, Khan, KM, Perveen, S, Choudhary, MI, Oxadiazoles and thiadiazoles: Novel alpha-glucosidase inhibitors, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2014, 22, 5454-5465.
7. Almasirad, A, Vousooghi, N, Tabatabai, SA, Kebriaeezadeh, A, Shafiee, A, Synthesis, anticonvulsant and muscle relaxant activities of substituted 1,3,4-oxadiazole, 1,3,4-thiadiazole and 1,2,4-triazole, *Acta Chimica Slovenica*, 2007, 54, 317-324.
8. Abu-Elteen, KH, Abdel-Jalil, RJ, Hamad, MA, Ghaleb, M, Khen, KM, Voelter, W, Fungicidal effects of some derivatives of 2-ferrocenyl-benzimidazoles: A possible template for antifungal drug design, *Journal of Medical Sciences*, 2008, 8, 673-681.
9. Chen, C-J, Song, B-A, Yang, S, Xu, G-F, Bhadury, PS, Jin, L-H, Hu, D-Y, Li, Q-Z, Liu, F, Xue, W, Lu, P, Chen, Z, Synthesis and antifungal activities of 5-(3,4,5-trimethoxyphenyl)-2-sulfonyl-1,3,4-thiadiazole and 5-(3,4,5-trimethoxyphenyl)-2-sulfonyl-1,3,4-oxadiazole derivatives, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2007, 15, 3981-3989.
10. Omar, MT, Synthesis of new xanthenone derivatives of expected antibilharzial activity, *Archives of Pharmacal Research*, 1997, 20, 602-609.
11. Akhtar, T, Hameed, S, Al-Masoudi, NA, Khan, KM, Synthesis and anti-HIV activity of new chiral 1,2,4-triazoles and 1,3,4-thiadiazoles, *Heteroatom Chemistry*, 2007, 18, 316-322.
12. El-Sayed, WA, El-Essawy, FA, Ali, OM, Nasr, BS, Abdalla, MM, Abdel-Rahman, AA, Anti-HIV activity of new substituted 1,3,4-oxadiazole derivatives and their acyclic nucleoside analogues, *Z. Naturforsch*, 2009, 64, 773-778.
13. Kadi, AA, El-Brollosy, NR, Al-Deeb, OA, Habib, EE, Ibrahim, TM, El-Emam, AA, Synthesis, antimicrobial, and anti-inflammatory activities of novel 2-(1-adamantyl)-5-substituted-1,3,4-oxadiazoles and 2-(1-adamantylamino)-5-substituted-1,3,4-thiadiazoles, *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2007, 42, 235-242.
14. Padmavathi, V, Sudhakar Reddy, G, Padmaja, A, Kondaiyah, P, Ali, S, Synthesis, antimicrobial and cytotoxic activities of 1,3,4-oxadiazoles, 1,3,4-thiadiazoles and 1,2,4-triazoles, *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2009, 44, 2106-2112.
15. Abd-Ellah, HS, Abdel-Aziz, M, Shoman, ME, Beshr, EAM, Kaoud, T, Ahmed, A, New 1,3,4-oxadiazole/oxime hybrids: Design, synthesis, anti-inflammatory, COX inhibitory activities and ulcerogenic liability, *Bioorganic Chemistry*, 2017, 74, 15-29.
16. Macaev, F, Rusu, G, Pogrebnoi, S, Gudima, A, Stingaci, E, Vlad, L, Shvets, N, Kandemirli, F, Dimoglo, A, Reynolds, R, Synthesis of novel 5-aryl-2-thio-1,3,4-oxadiazoles and the study of their structure-anti-mycobacterial activities, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2005, 13, 4842-4850.
17. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. Montgomery, J. A. , J.E. Peralta, F. Ogliaro, M.

- Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, 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, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, Gaussian 09. 2013, Gaussian Inc.: Wallingford CT.
18. M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison, *Journal of Cheminformatics* (2012) <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>.
 19. R. Dennington, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 5. 2009, Semichem Inc.: Shawnee Mission, KS.
 20. <https://www.rcsb.org/>
 21. O. Trott, A.J. Olson, *Journal of Computational Chemistry* (2010) <https://doi.org/doi:10.1002/jcc.21334>
 22. E.F. Pettersen, T.D. Goddard, C.C. Huang, G.S. Couch, D.M. Greenblatt, E.C. Meng, T.E. Ferrin, *J Comput Chem* (2004) <https://doi.org/10.1002/jcc.20084>
 23. Michel F. Sanner. Python: A Programming Language for Software Integration and Development. *J. Mol. Graphics Mod.*, 1999, Vol 17, February. pp57-61.
 24. Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S. and Olson, A. J. (2009) Autodock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. *J. Computational Chemistry* 2009, 16: 2785-91.
 25. D.S. BIOVIA, Discovery Studio Visualizer, v17.2.0.16349. 2016, San Diego: Dassault Systèmes.

BELEDİYE KATI ATIKLARININ ORGANİK FRAKSİYONUNUN BİYOLOJİK YÖNTEMLER VASITASIYLA DEĞERLENDİRİLMESİ

Dr. Mine Nazan KERİMAK ÖNER

Kocaeli Üniversitesi, Köseköy Meslek Yüksekokulu,
Gıda İşleme Teknolojileri Bölümü,
41135, Kartepe-Kocaeli/TÜRKİYE
mine@kocaeli.edu.tr

ÖZET

Organik atıklarla ilgili olarak daha sıkı düzenlemeler ve yenilenebilir kimyasallara ve yakıtlara olan talep, maliyet etkinliğini artırmak ve müşterilerin talebini karşılamak için imalat endüstrisini daha yüksek sürdürülebilirliğe doğru itmektedir. Atık değerlendirme; atık materyalleri, kimyasallar, malzemeler ve yakıtlar dâhil olmak üzere daha kullanışlı son ürünlere dönüştürme işlemidir. Hızla artan dünya nüfusu ile birlikte artan gıda talebi, takibinde de ülkelerin gelişmişlik seviyesine bağlı olarak ortaya çıkacak olan gıda atık ve kayıp miktarında da artma gerçekleşecektir. Gıda kaybı ve gıda atığı üretimi çevresel, sosyal ve ekonomik düzeyde farklı etkiler yaratmaktadır. Çevresel açıdan değerlendirildiğinde, gıda kayıp ve atıkları, atık depolama alanlarında bertaraf sırasında atık metan gazı oluşturarak sera gazı emisyonlarına katkıda bulunmaktadır. Ayrıca, gıda üretimi, işlenmesi, nakliyesi, depolanması ve dağıtımı ile ilgili faaliyetlerde de aynı sonuçlar gözlenmektedir. Gıda kaybı ve atığı ile ilişkili diğer çevresel etkiler, doğal kaynakların tükenmesi ve toprağın, besin maddelerinin, suyun ve de biyojenik döngülerin bozulması olarak da sıralanabilirler. Gıda kayıp ve atıklarının sosyal etkileri ise küresel gıda güvenliği kuralları içerisinde etik ve ahlaki boyutlara bağlanabilir. Ekonomik etkileri ise gıda israfına ilişkin maliyetlerden ve bunların çiftçilere ve tüketicilere olan etkileri olarak sınıflandırılmaktadır.

Son yıllarda, gıda atıklarının çöp alanlarına biriktirilmesi sonucu ortaya çıkan problemlerin artması ile birlikte bilim insanları organik madde oranı çok yüksek olan bu değerli atıkların değerlendirilmesi amacıyla yenilikçi arayışlar içerisine girmişlerdir. Birinci nesil gıda atık işleme teknolojileri olarak isimlendirilen bu yenilikçi teknolojiler, atık-enerji dönüşümü, katma değerli ürün üretimi, kompostlama ve hayvan yemi üretimini içermektedir. Evsel gıda atıklarının organik fraksiyonu ön muamele işlemlerini takiben biyomolekül, biyoplastik, biyoyakıt vb. katma değerli son ürünlerin üretimi için hammadde olarak kullanılabilir. Bu nedenle sunulan bu çalışmada; bu değerli hammaddeden son ürün üretiminde kullanılan biyolojik değerlendirme yöntemleri ve bu yöntemler vasıtasıyla elde edilen son ürünlerin biyoekonomik değerleri tartışılmaya çalışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Biyoatık, Gıda Atığı, Sürdürülebilirlik, Atık Değerlendirme, Enerji, Katma Değerli Ürün

ABSTRACT

Increasingly tighter regulations regarding organic waste, and the demand for renewable chemicals and fuels, are pushing the manufacturing industry toward higher sustainability to improve cost-effectiveness and meet customers' demand. Waste valorization is the process of converting waste materials into more useful end-products including chemicals, materials, and fuels. Rapidly increasing world population and increasing food consumption with a same level will mean that the demand for food will increase for at near future all over world. According to this, meeting of the increasing food demand according to the level of development of countries will lead to increase in the amount of food waste (FW) and food loss (FL). FL and FW generation produces an impact at environmental, social and economic level. From an environmental point of view, FL and FW contribute to Green House Gas emissions during final disposal in landfills. Additionally; same results are observed during activities associated with food production, processing, manufacturing, transportation, storage and distribution. Other environmental impacts associated with FL and FW can listed as natural resource depletion and disruption of soil, nutrients, water and biogenic cycles. Social impacts of FL and FW may be ascribed to ethical and moral dimension within the general concept of global food security. Economic impacts are due to the costs related to food wastage and their effects on farmers/consumer incomes. In recent years, problems associated with the disposal of food waste to landfills lead to increased interest in searching for innovative alternatives due to high proportion of organic matter in food waste. First generation food waste processing technologies include waste to energy, value-added product, composting, and animal feed.

Therefore, in this study; the biological evaluation methods used in the production of the final product from this valuable raw material and bioeconomic values of the end products obtained by these methods has discussed.

Keywords: Biowaste, Food Waste, Sustainability, Waste Valorization, Energy, Value-added Product

1. GİRİŞ

Katı atık bertaraf ve yönetimi, artan nüfus ve hızla gelişen şehirleşme dolayısıyla tüm Dünya'nın karşı karşıya kaldığı en önemli çevresel problemlerden bir tanesidir. Bu problem ile baş edebilmenin en etkin yolu ise sürdürülebilir çözümler üreterek atığı yerinde azaltmak ve ortaya çıkan atığı kullanışlı son ürünlere çevirerek biyoekonomik döngüye sokmaktan geçmektedir (Nair vd., 2006). Katı atık, insan veya hayvan kullanımı sonrası ortaya çıkan istenmeyen katı/yarı-katı materyal olarak isimlendirilmektedir. Kullanıcı tarafından tüketilmiş ve değerini kaybetmiş forma dönüşmüş katı atık olarak isimlendirilen şehir atıkları ise toplumların tüketim alışkanlıklarına göre organik ve inorganik formda olan ticari değerini kaybetmiş materyallerdir. Bu atıkların uygun olmayan depolama alanlarında ve şartlarında bekletilmesi ve depolanması, hava, toprak ve su gibi yaşayan çevre üzerinde önemli problemlere sebep olurken bu çevrede yaşayan insan sağlığı üzerinde de hayati riskler

oluşturmaktadırlar. Atıklar ile yaşanan bu depolama ve bertaraf problemleri gelişmekte olan ülkelerde gelişmiş ülkelere göre daha ciddi tehditler yaratmaktadır. Katı atıklar, ticari, evsel, endüstriyel ya da tarımsal aktivitelerden kaynaklanan orijinine bağlı olarak ortaya çıkan atık formları şekliindedirler (Mukherje vd., 2016).

Günümüzde atıkların değerlendirilmesi üç zorlu sürdürülebilir süreç üzerinden gerçekleştirilmektedir; birincisi atıklardan yakıt ve enerji üretmek ki bu takdirde atıklar şu anda yaygın olarak kullanılan fosil yakıt kaynakları ile yer değiştirebilecek sürdürülebilir bir kaynak olarak kullanılabilir, ikincisi yüksek kullanım değerine sahip kimyasallar ve bu kimyasallardan kullanışlı ürünler elde etmek, üçüncüsü ise yine atıklardan içerisinde süksinik asit (SA), furfural ve furanlar, fenolik bileşikler ve bioplastiklerin de yer aldığı katma değeri yüksek ürünlerin üretilmesidir (Arancon vd., 2013).

Atık bertaraf etme yöntemleri incelendiğinde gelişmekte olan ülkeler tarafından daha çok gömme, yakma ve kompostlama gibi geleneksel teknolojiler tercih edilirken, gelişmiş ülkeler çoğunlukla teknolojik yöntemleri kullanarak atıkların faydalı son ürünlere dönüştürüldüğü modern prosesleri kullanmaktadırlar. Geleneksel teknolojiler, metan gazı ve kötü koku oluşumu, yüksek enerji tüketimi ve yavaş reaksiyon kinetiği ve en önemlisi bozunma süreci sonunda katma değere sahip bir ürün oluşmaması gibi sebepler ile organik atıkların bertaraf edilmesi için uygun teknolojiler değildir. Günümüzde yapılan çalışmalar, gıda atıkları gibi değerli bileşenler içeren atıkların terk edilmesi veya bozunması yöntemlerinin yerine biyoetanol veya biyodizel gibi kullanışlı ve katma değerli ürünlerin üretilmesi amacıyla enerji kaynağı olarak kullanılmasının üzerine odaklanmıştır (Arancon vd., 2013). Gıda atıkları içerdikleri yüksek organik madde ve nem içeriği dolayısıyla hem toplanması, taşınması ve saklanması zor hem de gerekli tedbirler alınmaksızın bertaraf edilmeleri durumunda ciddi çevresel kirliliğe neden olan atıklardır (Nair vd., 2006).

Küresel olarak yıllık 1.3×10^9 ton gıda atığı atık sahalarına terk edilmekte bu suretle de 3.3×10^9 ton CO₂-eş/yıl sera gazı emisyonu gerçekleşmektedir. Yapılan tahminler 2025 yılına kadar sürdürülebilir karbon (çevrimsel) ekonomisinin gerçekleştirilebilmesi için, oluşması durdurulacak, azaltılacak, geri kazanılacak ve işlenecek $\sim 2.5 \times 10^9$ ton gıda atığının küresel olarak ortaya çıkacağını göstermektedir. Gıda atıklarının geri dönüştürülmesinin ekonomik faydaları kısaca aşağıdaki şekilde sıralanabilir;

- Gıda atıklarının biyoenerji ve biyoyakıtlara dönüştürülmesi fosil yakıt ihtiyacını azaltacak ve yakıt/enerji üretim maliyetini indirgeyecektir
- Gıda atıklarının biyogübre olarak değerlendirilmesi toprak kalite ve stabilitesini arttıracak ve fosil yakıt bazlı ticari gübre üretim/ihtiyaç oranını azaltacaktır
- Gıda atıklarının yeni biyomalzemeler ve endüstriyel biyokimyasallar (pigmentler, biyoplastikler vd.) üretimi için kullanılması fosil yakıt ihtiyacını ve temel kimyasal kullanımını azaltacaktır.
- Gıda atıklarının hayvan yemi olarak değerlendirilmesi hayvan ve balık beslenmesi için kullanılan ekilebilir tarım arazisi ve su kullanımını azaltacaktır.

Sonuç olarak; gıda atıklarının geri dönüştürülmesi yeni iş imkânları sunmasının yanında sera gazı emisyonunu indirgeyerek, atıkların bertaraf maliyetini azaltmakta, olumsuz çevre etkilerini azaltarak sürdürülebilir atık yönetimini biyodönüşüm uygulamaları çerçevesinde desteklemektedir.

2. GIDA ATIKLARININ GENEL ÖZELLİKLERİ

Belediye atıklarının organik fraksiyonu olan mutfak atıkları heterojen bileşime sahiptirler. İçerdiği ana elementler ve kimyasal bileşimi; C, H, N, O, S ve Cl, sırasıyla % olarak, 46.11, 6.89, 3.19, 37.80, 0.29 ve 0.21 şeklindedir (Li vd., 2016). Bu bileşim ülkeden ülkeye değişmekle birlikte aynı ülkede farklı şehirlere ve/veya aynı şehirde farklı yerleşim bölgelerine göre de farklılık gösterebilmektedir. Mutfak atıkları, karakteristik olarak pirinç, tahıl, sebze ve meyve artıklarından oluşmakta ve yüksek miktarda organik ve biyolojik olarak parçalanabilen bileşenler barındırmaktadırlar. İçerdiği organik bileşenlerinin yaklaşık % 60'ı çözünür ya da polimerik formdaki karbohidrat polimerleri (nişasta, selüloz ve hemiselüloz), % 20'si protein, % 10'u yağ ve diğer organik maddeler (asitler vb.) ve daha küçük inorganik karakterli kalıntılardan oluşmaktadır (Gwak vd., 2018, Hafid vd., 2017, Vavouraki vd., 2014).

Mutfak atıkları sahip oldukları bu kullanışlı bileşim sebebiyle, içerisinde metan, hidrojen, etanol, enzimler, organik asitler, biyopolimerler ve biyoplastiklerin de bulunduğu katma değerli son ürünler olarak isimlendirilen çeşitli biyoürünlerin üretilmesi amacıyla mikrobiyal besiyeri olarak kullanılabilirler. Biyoteknoloji mühendisliği ve uygulamalarının da süreç içerisinde gelişmesi, mutfak atıklarının endüstriyel uygulamalarda ham madde olarak kullanılmasının yollarını geliştirerek yeni katma değerli ürünlerin üretilmesini mümkün kılacaktır (Uçkun Kıran vd., 2014).

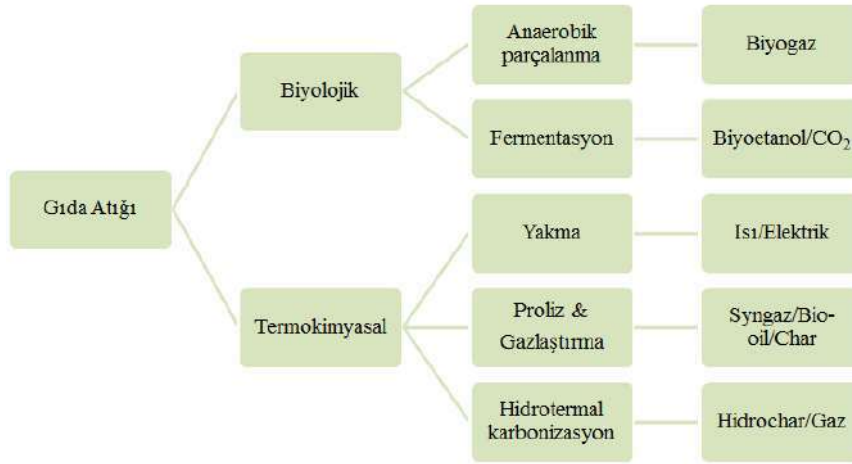
3. GIDA ATIKLARINDAN ENERJİYE

Biyokütle, farklı prosesler kullanılarak enerjinin kullanışlı formlarına dönüştürülebilir. Dönüşüm prosesi seçiminde etkili olan faktörler ise; biyokütle miktarı ve tipi, istenen enerji formu, son kullanım gereksinimleri, çevresel standartlar, ekonomik koşullar ve projeye ait spesifik faktörler şeklinde sıralanabilirler. Bazı durumlarda ise gerekli olan enerji türü prosesi ve gidişini belirleyerek mümkün olan biyokütle miktarı ve seçimini yaptırır.

Biyokütle, iki tanesi enerji ile ilgili olmak üzere üç ana ürüne dönüştürülebilir; i) güç/enerji üretimi, ii) ulaşım yakıtları, iii) kimyasal hammadde. Biyokütlenin enerjiye dönüşümünde ise; biyokimyasal/biyolojik ve termokimyasal yöntemlerin kullanıldığı süreçler olmak üzere iki ana teknoloji kullanılır. Mekanik ayrıştırma ise kolza tohumundan kolzatohumu metil ester biyodizeli (esterifikasyon ile) gibi yakıtların üretildiği ve biyokütleden enerji üretiminin mümkün olduğu bir üçüncü teknolojik yöntemdir. Günümüzde maliyeti sebebi ile biyodizel üretimi, fosil yakıtlardan dizel üretimi ile rekabet edemese bile şehirlerdeki hava kalitesinin iyileştirilmesi gibi artan çevresel baskılar nedeniyle gelecekte bu durumun değişeceği aşıkardır.

Termokimyasal dönüşüm; yakma, piroliz, gazlaştırma ve sıvılaştırma olmak üzere dört ana proses üzerinden gerçekleştirilirken, biyokimyasal/biyolojik dönüşümde digeston (biyogaz üretimi, karışım ana miktar olarak metan içerirken karbondioksiti de barındırır) ve fermentasyon (etanol üretimi) olmak üzere iki ana teknoloji kullanılır (Peter McKendry, 2002). Gıda atıklarından enerjiye dönüşüm teknolojileri ve ürünlerinin özetlendiği şekil 1 aşağıda verilmiştir (Pham vd., 2015).

Şekil 1. Gıda Atıklarından Enerjiye Dönüşüm Teknolojileri



3.1. BİYOLOJİK DÖNÜŞÜM TEKNOLOJİLERİ

3.1.1. Anaerobik Parçalanma (AD)

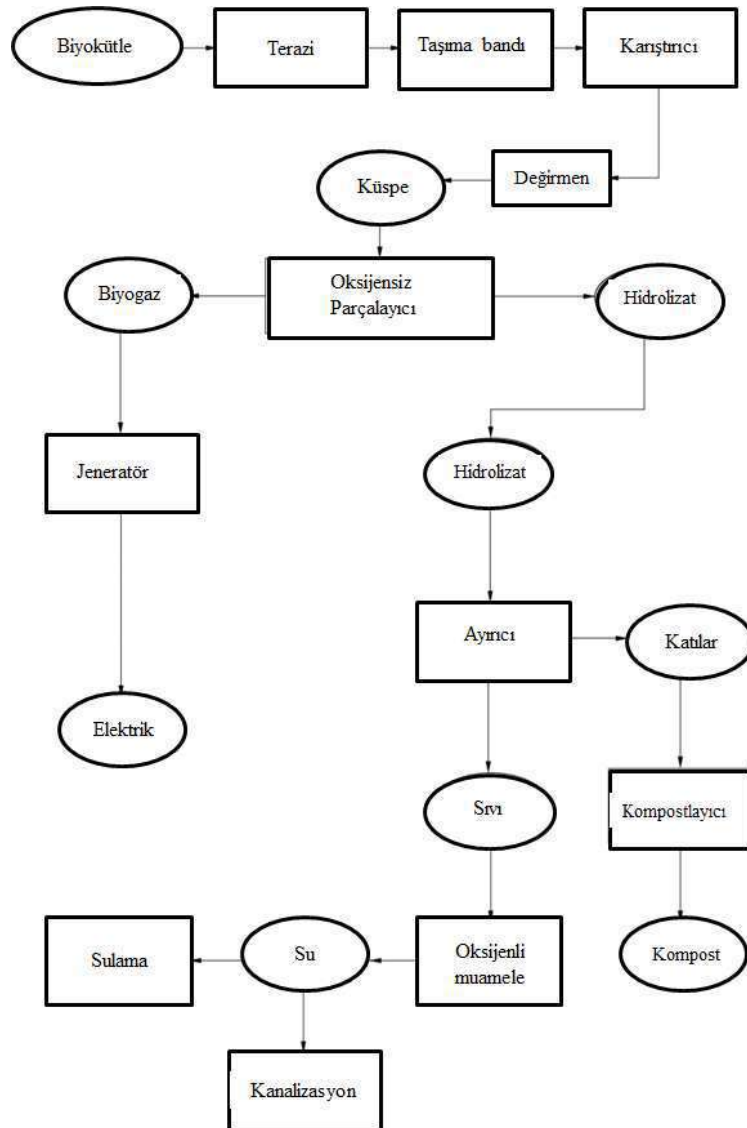
Depolama alanlarında kontrolsüz şartlarda bekletilen organik atıklar, biyogaz olarak isimlendirilen ve ana miktarda metan (CH_4) ve yanında karbondioksit (CO_2) içeren eser miktarlarda da azot (N_2), oksijen (O_2) ve hidrojen sülfid (H_2S) bulunduran atık gazları atmosfere çevre kirleticisi olarak serbest bırakırlar. Aynı süreç, kontrollü koşullar altında ve oksijensiz ortamda, organik atıkları biyoyakıt (biyogaz) ve toprak iyileştirici ve gübre gibi besin maddesi açısından zengin içeriğe sahip kullanışlı son ürünlere dönüştürme potansiyeline sahiptir. Pilot ve ticari AD reaktörlerinin tasarımı 1950'lerin başlarında başlamış ve organik atıkların oksijensiz ortamda parçalanarak yararlı ürünlere dönüştürülmesi dünya çapında dikkat toplamıştır. AD'nin yenilenebilir enerji üretimi, besin döngüsünü mümkün kılması ve atık hacmini indirilmesi gibi bazı avantajları da vardır (Pham vd., 2015, Peter McKendry, 2002).

AD proses süreci sonunda üretilen $1m^3$ biyogazın 21MJ enerjiye eşit olduğu ve 2.04 kWh'e karşılık gelen elektrik üretilmediği rapor edilmiştir (Pham vd., 2015). Ad sürecinin problem olan kısmı mikrobiyal reaksiyonun genellikle 20-40 gün aralığında gerçekleşmesidir. Bu sebeple, azot içeriği yüksek protein bileşiklerinin parçalanması sonucu ortaya çıkan yüksek konsantrasyondaki serbest amonyak (NH_3) metajonik bakterilerin spesifik aktivitesini etkileyerek AD süreci üzerinde ciddi problemler yaratmaktadır. Gıda atıkları yüksek miktarda organik bileşikler içerdikleri için AD prosesinde alternatif enerji üretimi için oldukça uygundur. Ancak, gıda atıklarının içerdiği yüksek tuz konsantrasyonu, sodyum, potasyum,

kalsiyum ve magnezyum gibi katyonların varlığı AD sürecini inhibe etmektedir. Sayılan bu problemlerin çözümü düşük azot ve lipid içeriğine sahip gıda atıklarının da sürece dahil edilmesinden geçmektedir. Böylelikle yüksek amonyak konsantrasyonlarının oluşumu ve uçucu bileşiklerin ara ürün olarak birikmesinin önüne geçilmiş olmaktadır. Yapılan bir çok çalışma gıda atıklarının şehir atıkları ile birlikte AD sürecinde yer almasının biogaz oluşumunu yalnız gıda atıklarının AD sürecine alınmasına göre %40-50 oranında arttırdığını göstermiştir (Pham vd., 2015).

AD prosesinde birçok reaktör tasarımının kullanılmasına rağmen üç temel sistem; kesikli, sürekli tek-basamaklı ve sürekli iki-basamaklı reaktörler en çok tercih edilenlerdir. Bu reaktörlere sürekli karıştırılmalı tank reaktör (continuously stirred tank reactor, CSTR), tübüler reaktör (tubular reactor), oksijensiz sıralama kesikli reaktör (anaerobic sequencing batch reactor, ABSR), yukarı akışlı oksijensiz çamur battaniyesi (upflow anaerobic sludge blanket, UASB) ve sabit film reaktörü (fixed film reactor) (Pham vd., 2015). AD prosesi kullanılarak biyokütlenin dönüştürüldüğü tipik bir AD akış şeması şekil 2’de verilmiştir (Peter McKendry, 2002).

Şekil 2. Biyokütlenin dönüştürüldüğü AD akış şeması

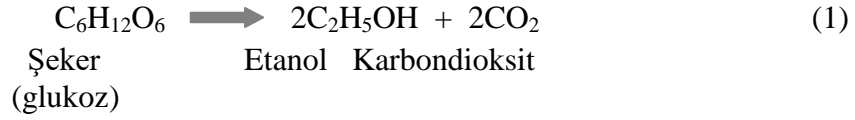


3.1.2. Etanol Fermentasyonu

Biyogaz üretimi ile karşılaştırıldığında, gıda atıklarından etanol üretimi atıktan enerjiye dönüşüm sürecinde farklı bir yaklaşım gerektirir. Biyoetanol olarak da bilinen yakıt etanolün fermentasyon vasıtasıyla üretimi Dünya toplam etanol üretiminin %60'ını oluşturur. Etanol, sera gazı ve karbondioksitin çevreye zararlı etkilerini indirger ve taşıma yakıtlarına alternatif temiz bir çevre dostu yakıttır. Etanolün yanmasından elde edilen enerji petrol yakıtların yanmasından elde edilen enerjiden kayda değer bir şekilde düşük (~%68) olmasına rağmen etanol yanarken sülfür dioksitin de içinde bulunduğu toksik maddelerin %80 daha az yayınımına neden olmak vasıtasıyla karbon emisyonunu indirger. Biyoetanolün yakıt olarak kullanılmasının yanında etilen esaslı polietilen plastiklerin üretiminde, içecek endüstrisinde, ilaç ve kozmetik endüstrisinde kimyasal hammadde olarak ve asetaldehit, bütadien, etil asetat ve asetik asit üretiminde de hammadde olarak kullanılmaktadır (Hafid vd., 2017).

Biyoetanol üretiminde kullanılan hammaddeler üç kategori altında toplanabilirler. Birinci sınıfta herhangi bir ön muamele işlemi gerektirmeden mikroorganizmalar tarafından direkt olarak biyoetanolle dönüştürülebilen melas ve şeker gibi şekerli hammaddeler. İkinci sınıf substratlar kategorisinde yer alan ve hammaddenin fermente edilebilen şekerlere dönüştürülebilmesi için bir enzimatik hidroliz aşamasına ihtiyaç duyulan mısır, buğday ve aralarında diğer tahılların da yer aldığı şekerli hammaddeler. Üçüncü sınıf ise fermentasyon sürecinde biyoetanol üretimi için hammadde olarak kullanılacak maddenin fermentasyonda kullanılabilmesi için asit ve/veya enzimatik hidroliz muamelelerine ihtiyacın duyulduğu lignosellülozik hammaddelerin yer aldığı hammadde grubudur. Anılan bu hammaddelere alternatif ve biyoetanol üretiminde kullanılacak potansiyele sahip bir başka hammadde grubu da evsel atıklar ya da mutfak atıkları olarak da isimlendirilebilen gıda atıklarıdır (Hafid vd., 2017). Muz kabukları, şeker pancarı küspesi, ananas atıkları, narenciye atıkları, patates kabuğu atıklarının yanında kantin-kafeterya atıkları, evsel mutfak atıkları gibi atıklar da biyoetanol üretimi için değerlendirilebilen gıda atıkları arasındadır. Gıda atıklarının lignosellülozik bileşenlerinin kompleks yapıları nedeniyle bu atıkları etanol üretim prosesinde kullanılabilir hale getirmek amacıyla; asidik, alkali, termal ve enzimatik ön muamele işlemleri kullanılarak atıkların doğal yapısında bulunan selülozik yapının mikroorganizmalar tarafından kullanılabilirliğinin artırılması amaçlanır. Gıda atıklarından etanol üretiminde en yaygın olarak kullanılan ön muamele işlemi enzimatik hidrolizdir. Asidik veya alkali koşullarda gerçekleştirilen ön muamele işlemi ki özellikle bu işlem alkali varlığında ve ağır koşullarda yapılmış ise çözünür şekerler parçalanarak furfural gibi çeşitli inhibitörlerin oluşumuna neden olurlar (Pham vd., 2015).

Biyokütlenin kaynağına bağlı olarak, mutfak atıkları hidrolizatı tipik olarak glukoz, fruktoz, sukroz ve maltoz şekerlerini bulundururken diğer kaynaklardan elde edilen lignosellülozik hidrolizatlar glukoz, ksiloz, arabinoz, galaktoz, mannoz, fruktoz ve ramnoz şekerleri ile karakterize edilirler. Bu şekerler, maya ve bakteriler tarafından biyoetanol fermentasyonunda substrat olarak kullanılırlar (Denklem 1).



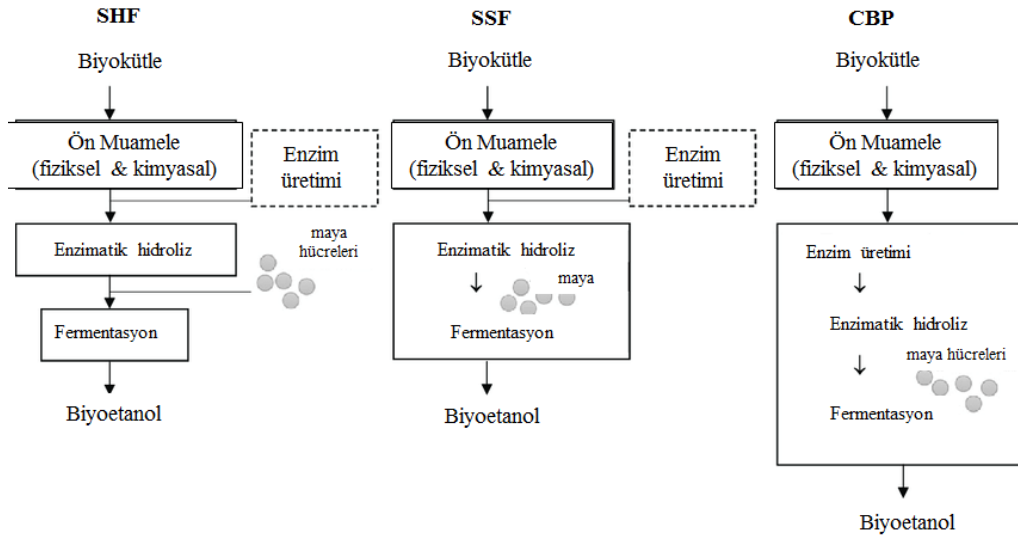
Teorik olarak fermentatif mikroorganizmalar 1 kg şekerden, özellikle de glukoz, 0.51 kg etanol ve 0.49 kg karbondioksit üretirler (Hafid vd., 2017). 26.9 MJ/kg enerji içeriği etanol esas alınarak gıda atıklarından üretilen etanol için ortalama 8.3-11.6 kJ/g TS değerinde bir enerji içeriği tahmin edilebilir (Pham vd., 2015).

Biyokütleden biyoetanol üretiminde kullanılacak ideal bir mikroorganizma; yüksek miktarda etanol üretebilme yeteneğine ve geniş bir substrat kullanım yelpazesine sahipken, hidroliz basamaklarında oluşan inhibitörlere karşı dirençli, yüksek şeker ve etanol konsantrasyonlarını tolere edebilen ve yüksek sıcaklıklarda kararlı, aynı zamanda da düşük pH'da büyüeyebilen, minimum miktarda yan-ürün oluşturan ve ortam gereksinimleri de en az da olan bir mikroorganizma türü olmalıdır. Endüstriyel biyoetanol üretimi için uygun mikroorganizmalar, teorik olarak %90'dan fazla ürün üretebilmeli, biyoetanol toleransı 40g/L'den, biyoetanol üretkenliği ise 1g/L.h'den yüksek olmalıdır. *Saccharomyces cerevisiae*, *Escherichia coli*, *Zymomonas mobilis*, *Candida shehatae*, *Kluyveromyces marxianus* gibi bazı native/vahşi tip mikroorganizmalar biyoetanol fermentasyonunda kullanılırlar. Geleneksel olarak endüstriyel biyoetanol üretimi fermentasyon sürecinde tercih edilen mikroorganizma türü *S.cerevisiae*'dir. Bu mikroorganizma heksoz şekerleri bulunduran farklı tipte biyokütle hidrolizatlarında güçlü büyüme yeteneği ile karakterize edilmiş bir türdür.

Mutfak atıklarından biyoetanol üretiminde ön muamele yöntemleri (fiziko-kimyasal ve enzimatik hidroliz) ve fermentasyon süreci mutfak atıklarında sürdürülebilir biyoetanol üretim sürecinin anahtar belirleyicisidir. Biyokütleden etkin bir biyoetanol üretimi için üç tip proses tanımlanmıştır: i) Ayrı hidroliz ve fermentasyon, (SHF: separate hydrolysis and fermentation), ii) eş zamanlı şekerlendirme ve fermentasyon, (SSF: simultaneous saccharification and fermentation), iii) birleştirilmiş biyo-dönüşüm, (CBP: consolidated bioprocessing). Geleneksel olarak SHF prosesi biyoetanol üretiminde kullanılan biyo-dönüşüm sürecidir. Hidroliz reaktöründen alınan biyokütle hidrolizatı şeker fermentasyonu reaktörüne alınarak etanol üreten fermentasyon bakterileri tarafından biyoetanole dönüştürülür. Fermentasyon sonunda karışım distillenerek üretilen biyoetanol fermentasyon ortamından ayrılır. Ancak bu uygulama, bir reaktör içerisinde SSF ve CBP gibi farklı tekniklerin fermentasyon ve enzimatik hidroliz ile kombinasyonunu içerir. Bağlantılı dönüşüm teknolojisi, SSF ve CBP, hidroliz ve fermentasyon basamaklarını tek bir reaktör içerisinde gerçekleştirmeyi hedefler. SSF'in anahtarı, fermentasyon ortamındaki şekerleri hızlı bir şekilde biyoetanole dönüştürülerek ortamda birikmesini önlemektir. Bu da enzimatik hidroliz ve fermentasyonun tek basamakta ve aynı reaktörde gerçekleştirilmesi yoluyla başarılmaktadır. Adı geçen bu üç biyodönüşüm teknolojisi arasında CBP halen kuruluş aşamasında olan bit stratejidir. Yapılan çalışmalar CBP teknolojisinin gelecekte uygulanabilir bir yöntem olacağını göstermektedir. CBP yapılanmasında, hidrolitik enzim üretimi, enzimatik hidroliz ve biyoetanol fermentasyonu tek bir reaktör içerisinde ve mikrobiyal toplulukla birlikte gerçekleştirilmektedir. Her aşamanın tek bir reaktör içerisinde

gerçekleştirilmesi bu teknolojiyi diğerlerinden ayıran özelliğdir. Bu farklılık ise bu yöntemde diğer yöntemlere göre enzim üretiminin de biyoetanol üretimi ile aynı reaktör içerisinde gerçekleşmesi nedeni ile yöntemin maliyetini düşürmesi açısından farklılık kazandırmaktadır. Biyokütleden biyoetanol üretimi için kullanılan biyolojik dönüşüm süreçleri şekil 3'de verilmiştir.

Şekil 3. Biyokütleden biyoetanol fermentasyonu (SHF: ayrı hidroliz ve fermentasyon, SSF: eş zamanlı şekerlendirme ve fermentasyon, CBP: birleştirilmiş biyo-dönüşüm)



Biyoetanol fermentasyonunun tamamlanmasının ardından biyoetanolün distillenerek geri kazanılması takip eden aşamadır. Biyoetanolün fermentasyon ortamından alınması katı-sıvı ekstraksiyonunu gerektiren bir işlemdir. Katı-sıvı ekstraksiyonu için en iyi seçim santrifüj ve filtrasyon işlemleridir. Süpernatant döner buharlaştırıcıya gönderilerek hidrolizattaki su miktarının azaltılması yoluna gidilir. Bu ilk basamağın ardından, biyoetanol içeren konsantrasyon şurup destilasyon ünitesine gönderilerek biyoetanol ($\sim 78^{\circ}\text{C}$) ve su (100°C) içeriğinin kaynama noktası farklılıklarına göre ayrılması sağlanır. Su ile karışık olan seyreltik biyoetanol karışımı $>95\%$ biyoetanol içerecek şekilde konsantrasyon edilir.

4. SONUÇ

Gıda atıklarından enerji elde edilmesinde anaerobik parçalanma ve fermentasyon literatürde etkili biyolojik prosesler olarak tanımlanırlar. Anaerobik parçalanmanın birincil avantajı i) gıda atıklarının farklı substratlar ile birlikte oksijensiz parçalanmaya tabii tutularak hem hedeflenen ürünlerin üretimi yapılırken hem de atık yönetiminin gerçekleştirilmesidir, ii) bu yöntem ile gerçekleştirilen düşük maliyetli biyogaz üretimi gelecekteki enerji ihtiyacını karşılamak için hayati önem taşımaktadır. Ancak; reaktör tipleri, yardımcı substratların bileşimi ve kalitesi, pH ve sıcaklık gibi proses kontrol faktörleri ve mikrobiyal dinamikler anaerobik parçalanmanın etkinliğine katkıda bulunurlar ve bu teknolojiye maksimum fayda sağlanmasından optimize edilmeleri gerekmektedir. Gıda atıklarından biyoetanol üretiminde kullanılan fermentasyon süreci ile enerji eldesi ise karbon ayak izini düşürmesi, gıda atık miktarını indirilmesi ve gıda bitkilerinin kullanımını azaltması ile kullanılabilen

faydalı bir başka teknolojidir. Ancak prosesin toplam faydası değerlendirildiğinde, gıda atıklarından biyoetanol üretim maliyetini indirgeyecek çalışmaların gerçekleştirilmesinin gerekliliği görülebilmektedir.

KAYNAKLAR

- Arancon, R.A.D., Lin, C.S.K., Chan, K. M., Kwan, T.H., Lague, R. 2013. Advances on waste valorization: new horizons for a more sustainable society. *Energy Science & Engineering*, 1(2), 53-71. <https://doi.org/10.1002/ese3.9>
- Gwak, Y.R., Kim, Y.B., Gwak, I.S., Lee, S.H. 2018. Economic evaluation of synthetic ethanol production by using domestic biowastes and coal mixture. *Fuel*, 213, 115-129. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.10.101>
- Hafid, H.S., Rahman, N.A.A., Md Shah, U.K., Baharuddin, A.S., Ariff, A.B. 2017. Feasibility of using kitchen waste as future substrate for bioethanol production: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 74, 671-686. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.02.071>
- Karthikeyan, O.P., Trably, E., Mehariya, S., Bernet, N, Wong, J.W.C., Carrere, H. 2018. Pretreatment of food waste for methane and hydrogen recovery: A review. *Bioresource Technology*, 249, 1025-1039. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2017.09.105>
- Li, Y., Jin, Y., Li, J., Chen, Y., Gong, Y., Li, Y., Zhang, J. 2016. Current situation and development of kitchen waste treatment in China. *Procedia Environmental Sciences*, 31, 40-49. <https://doi.org/10.1016/j.proenv.2016.02.006>
- McKendry, P. 2002. Energy production from biomass (part 2): conversion technologies. *Bioresource Technology*, 83, 47-54. PII: S0960-8524 (01)00119-5
- Mukherje, A., Bose, G.K., Mandal, B., Ghosh, A. 2016. Review on biodegradable kitchen waste management. *International Journal of Research in Engineering and Technology*, 5(1), 88-93. eISSN: 2319-1163 | pISSN: 2321-7308
- Nair, J., Sekiozoic, V., Anda, M. 2006. Effect of pre-composting on vermicomposting of kitchen waste. *Bioresource Technology*, 97, 2091-2095. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2005.09.02>
- Pham, T.P.T., Kaushik, R., Parshetti, G.K., Mahmood, R., Balasubramanian, R. 2015. Food waste-to-energy conversion technologies: Current status and future directions. *Waste management*, 38, 399-408. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2014.12.004>
- Uçkun Kıran, E., Trzcinski, A.P., Ng, W.J., Liu, Y. 2014. Bioconversion of food waste to energy: A review. *Fuel*, 134, 389-399. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.05.074>
- Vavouraki, A.I., Volioti, V., Kornaros, M.E. 2014. Optimization of thermo-chemical pretreatment and enzymatic hydrolysis of kitchen wastes. *Waste Management*, 34, 167-173. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2013.09.027>

**IMAGE ANALYSIS OF CRACKS ON MARBLE FACE -
REGRESSED MODEL**

Dr. Öğr. Üyesi Yıldırım İsmail Tosun

*Şırnak University, Department of Mining Engineering, Şırnak, Turkey
yildirimismailtosun@gmail.com*

Abstract

Image analysis of concrete mixture aggregates produced in two different forms in regular size and sieved form. One type of highly uniform distribution crushed in roll was in granular size and easily be evaluated in industry for concrete grading and scavenge ring.

The non uniform distribution and other irregular form type may be evaluated as less filling materials in finer size and so soft as which collected following solid-fine separation sieving. That waste in finer size may deteriorate picture near cognition blurred form as discharge of photos and control of form contrast in picture streams was compulsory and calibration patterns were used. Beneficiate from that finer marble aggregate in picture coloring controlled the analysis during analysis can efficiently be made. However, to avoid this disturbing contrast make up manner of that tine material, dark color were used in picture. But post two stage processing capturing for image were widely used. 40%, 60% and 80% fi.ne material and mid size content containing gray color was activated mid third stage processing forms were used in our test experiments at 1-2mm sized distributions and finer materials.

in this article, we obtain some new complex analytical solutions to the nonlinear Gaussian equation which seems in the field theory, weakly nonlinear dispersive water waves and irregular distribution by using improved exponential sub-equation function method.

Keywords: Gaussian equation, Improved Gaussian function , exponential regression method; nonlinear dispersive waves; Complex exponential distribution

1. INTRODUCTION

An image of a fern which exhibits affine self-similarity In geometry, an affine transformation or affine map or an affinity (from the Latin, *affinis*, "connected with") between two vector spaces (strictly speaking, two affine spaces) consists of a linear transformation followed by a translation Affine transformation In the finite-dimensional case each affine transformation is given by a matrix A and a vector b , satisfying certain properties described below. Geometrically, an affine transformation in Euclidean space is one that preserves 1. The collinearity relation between points; i.e., three points which lie on a line continue to be collinear after the transformation 2. Ratios of distances along a line; i.e., for distinct collinear points P, Q, R , the ratio is preserved In general, an affine transformation is composed of linear transformations (rotation, scaling or shear) and a translation (or "shift"). Several linear transformations can be combined into a single one, so that the general formula given above is still applicable. In the one-dimensional case, A and b are called, respectively, slope and intercept.

Ordinary vector algebra uses matrix multiplication to represent linear transformations, and vector addition to represent translations. Using an augmented matrix, it is possible to represent both using matrix multiplication. The technique requires that all vectors are augmented with a "1" at the end, and all matrices are augmented with an extra row of zeros at the bottom, an extra column—the translation vector—to the right, and a "1" in the lower right corner. If A is a matrix, is equivalent to the following This representation exhibits the set of all invertible affine transformations as the semidirect product of K^n and $GL(n, k)$. This is a group under the operation of composition of functions, called the affine group. Ordinary matrix-vector multiplication always maps the origin to the origin, and could therefore never represent a translation, in which the origin must necessarily be mapped to some other point. By appending a "1" to every vector, one essentially considers the space to be mapped as a subset of a space with an additional dimension. In that space, the original space occupies the subset in which the final index is 1. Thus the origin of the original space can be found at $(0, 0, \dots, 0, 1)$. A translation within the original space by means of a linear transformation of the higher-dimensional space is then possible (specifically, a shear transformation). This is an example of homogeneous coordinates. The advantage of using homogeneous coordinates is that one can combine any number of affine transformations into one by multiplying the matrices. This device is used extensively by graphics software.

An affine transformation is invertible if and only if A is invertible. In the matrix representation, the inverse is: The invertible affine transformations form the affine group, which has the general linear group of degree n as subgroup and is itself a subgroup of the general linear group of degree $n + 1$. The similarity transformations form the subgroup where A is a scalar times an orthogonal matrix. If and only if the determinant of A is 1 or -1 then the transformation preserves area; these also form a subgroup. Combining both conditions we have the isometries, the subgroup of both where A is an orthogonal matrix. Affine transformation Each of these groups has a subgroup of transformations which preserve orientation: those where the determinant of A is positive. In the last case this is in 3D the group of rigid body motions (proper rotations and pure translations). For any matrix A the following propositions are equivalent:

- $A - I$ is invertible
 - A does *not* have an eigenvalue equal to 1
 - for all b the transformation has exactly one fixed point
 - there is a b for which the transformation has exactly one fixed point
 - affine transformations with matrix A can be written as a linear transformation with some point as origin
- If there is a fixed point, we can take that as the origin, and the affine transformation reduces to a linear transformation. This may make it easier to classify and understand the transformation. For example, describing a transformation as a rotation by a certain angle with respect to a certain axis is easier to get an idea of the overall behavior of the transformation than describing it as a combination of a translation and a rotation. However, this depends on application and context. Describing such a transformation for an *object* tends to make more sense in terms of rotation about an axis through the center of that object,

combined with a translation, rather than by just a rotation with respect to some distant point. As an example: "move 200 m north and rotate 90° anti-clockwise", rather than the equivalent "with respect to the point 141 m to the northwest, rotate 90° anti-clockwise". Affine transformations in 2D without fixed point (so where A has eigenvalue 1) are:

- pure translations
- scaling in a given direction, with respect to a line in another direction (not necessarily perpendicular), combined with translation that is not purely in the direction of scaling; the scale factor is the other eigenvalue; taking "scaling" in a generalized sense it includes the cases that the scale factor is zero (projection) and negative; the latter includes reflection, and combined with translation it includes glide reflection.
- shear combined with translation that is not purely in the direction of the shear (there is no other eigenvalue than 1;

it has algebraic multiplicity 2, but geometric multiplicity 1

Affine transformation of the plane

To visualise the general affine transformation of the Euclidean plane, take labelled parallelograms $ABCD$ and $A' B' C' D'$. Whatever the choices of points, there is an affine transformation T of the plane taking A to A' , and each vertex similarly. Supposing we exclude the degenerate case where $ABCD$ has zero area, there is a unique such affine transformation T . Drawing out a whole grid of parallelograms based on $ABCD$, the image $T(P)$ of any point P is determined by noting that $T(A) = A'$, T applied to the line segment AB is $A' B'$, T applied to the line segment AC is $A' C'$, and T respects scalar multiples of vectors based at A . [If A, E, F are collinear then the ratio $\text{length}(AF)/\text{length}(AE)$ is equal to $\text{length}(A' F')/\text{length}(A' E')$.] Geometrically T transforms the grid based on $ABCD$ to that based in $A' B' C' D'$.

Affine transformations don't respect lengths or angles; they multiply area by a constant factor $\text{area of } A' B' C' D' / \text{area of } ABCD$.

A given T may either be *direct* (respect orientation), or *indirect* (reverse orientation), and this may be determined by its effect on *signed* areas (as defined, for example, by the cross product of vectors).

The following equation expresses an affine transformation in $\text{GF}(2)$ (with "+" representing XOR): where $[M]$ is the matrix and $\{v\}$ is the vector

For instance, the affine transformation of the element $\{a\} = x^7 + x^6 + x^3 + x = \{11001010\}$ in big-endian binary notation = $\{CA\}$ in big-endian hexadecimal notation, is calculated as

$$\{a'\} = M\{a\} + \{v\},$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot$$

follows:

Thus, $\{a'\} = x^7 + x^6 + x^5 + x^3 + x^2 + 1 = \{11101101\} = \{ED\}$.

- The transformation matrix for an affine transformation
- Affine geometry
- Homothetic transformation
- Similarity transformation
- Linear transformation (the second meaning is affine transformation in 1D)
- 3D projection
- Flat (geometry)

Affine transformation 70

A geological map of the provinces of Sirnak and the surrounding area has been identified geotechnical engineering unit of surface features (Anonymous, 2012). The slope, was one of the first large-scale topographic maps of the bottom preparation work in the region on the geological map processing. The determination of the engineering properties of slope, is intended to draw attention to the critical importance of geotechnical and municipal development plans in the future in the construction field.

Often, it is more useful to use homogeneous coordinates, since translation cannot be accomplished with a 3-by-3

matrix. To scale an object by a vector $v = (v_x, v_y, v_z)$, each homogeneous vector $p = (p_x, p_y, p_z, 1)$ would need to be multiplied with this scaling matrix:

As shown below, the multiplication will give the expected result:

The scaling is uniform if and only if the scaling factors are equal. If all scale factors except one are 1 we have directional scaling.

$$S_v = \begin{bmatrix} v_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$S_v p = \begin{bmatrix} v_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_x p_x \\ v_y p_y \\ v_z p_z \\ 1 \end{bmatrix}$$

Since the last component of a homogeneous coordinate can be viewed as the denominator of the other three

components, a scaling by a common factor s can be accomplished by using this scaling matrix:

$$S_v = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{s} \end{bmatrix}.$$

$$S_v p = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ \frac{1}{s} \end{bmatrix}$$

For each homogeneous vector $p = (p_x, p_y, p_z, 1)$ we would have which would be homogenized

$$\begin{bmatrix} sp_x \\ sp_y \\ sp_z \\ 1 \end{bmatrix}$$

2. METHOD

Image conversion and analysis for size distribution were made by pixel counting as shown in Figure 1.2 and 3.



Figure 1. Crack Size Analysis of Rock Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of Size test on site



Figure 2. Crack Size Analysis of PALE Rock Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of Size test on site

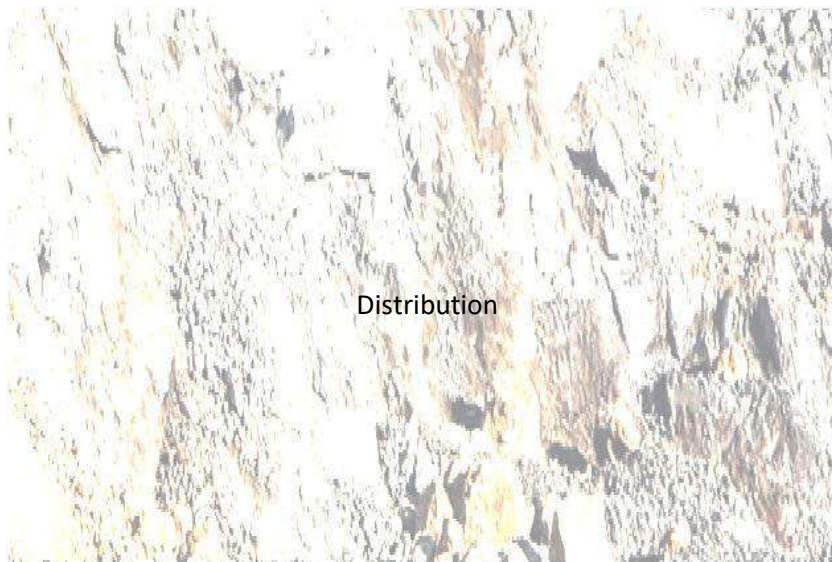


Figure 3. Crack Size Analysis of WHITE/BLACK Rock Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of Size test on site

Image conversion and analysis for marble face crack size distribution were made by pixel counting as shown in Figure 4.5 and 6.



Figure 4. Marble Crack Size Analysis of Rock Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of Size test on site

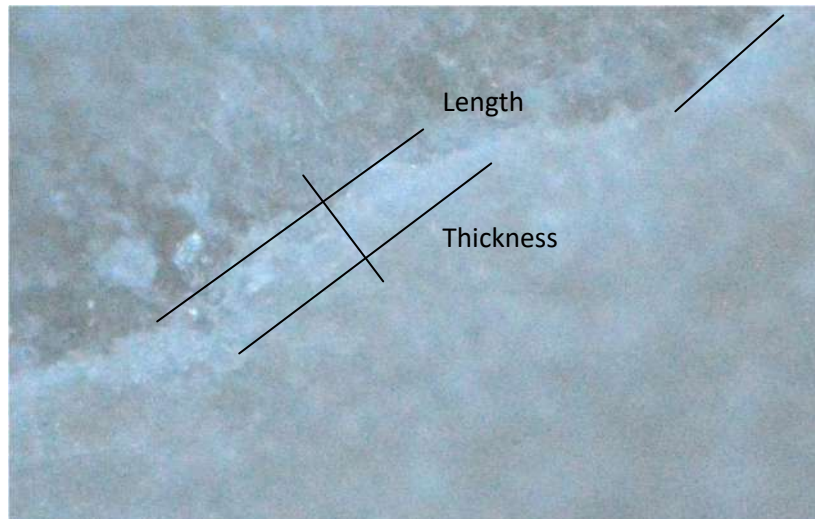


Figure 5. Marble Crack Size Analysis of Methyl Blue Colored Rock Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of Size test on site

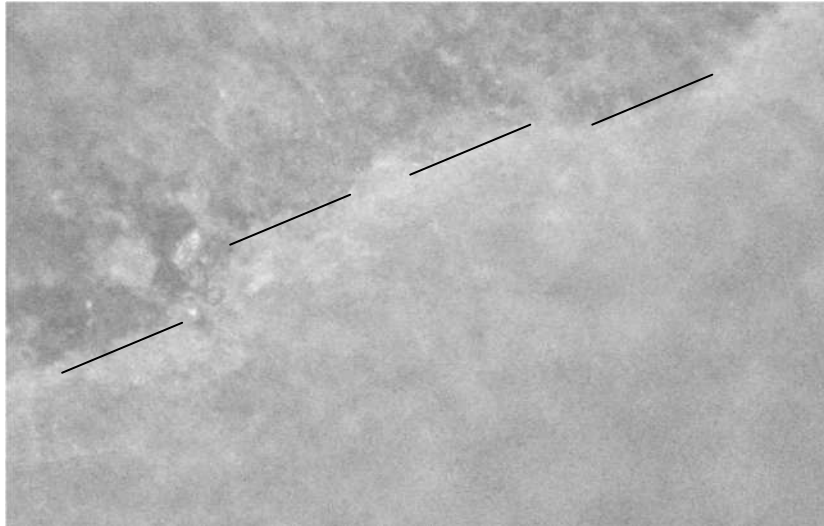


Figure 6. Marble Crack Size Analysis of Black/WHITE Colored Rock Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of Size test on site

2.1. Newton Regression model

Pixel solute diffuses from the internal matrix and gets from three dimension to two dimensional pixel picture on the surface, which further travels to the crack regression. The Newton model is presented in the following form,(1-3)

$$Y=Y_f.t(K_L+t) \quad (1)$$

where Y is % extraction yield (w/w), Y_f and K_L are constants (Y_f is the yield at infinite time). The size dependence of the error coefficient is governed by an Gaussian equation as follows (3),

$$K_L=K_0 \exp(-\text{Error}(y)) \quad (5)$$

where E is the error function, K_{0L} is the pre-exponential coefficient constant.

Principle of selective Crack Analysis

The mining operation may be evaluated over the images created and processed by operators and specialist by binary correlation during the production. As seen in Figure 1, coal mining made over the cracked rock formations which may be deteriorated by human made or naturally. The principle of selective analysis through the investigation surface was managed. The two dimensional stereonet material and on the rose rate of the cracks are shown in Figure 7.

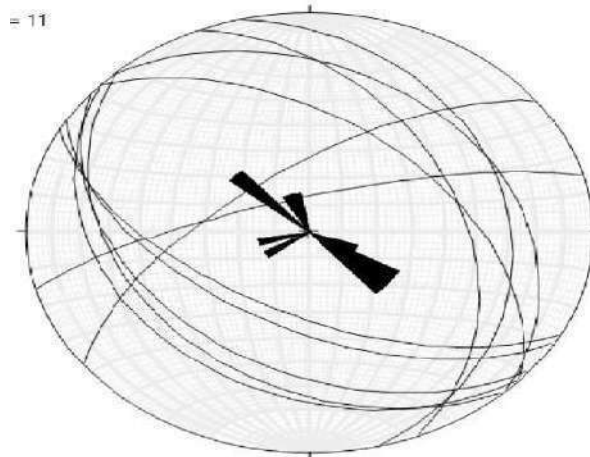


Figure 7. Stereonet example: at different crack pattern in regional locations.

The driving force needed to separate cracks is achieved by means of a partial density gradient. as seen in Figure 5

4 CONCLUSIONS

Şırnak was investigated by urban areas close to border regions participating in the colliery images of rock samples taken from four different slopes of slope stability and geotechnical properties of the unit field studies and laboratory experiments. the results of the slope stability calculations were discussed with risk maps and risk section of program GEO5 and Matlab regression analysis programs are succesfully used.

References

- [1]. Geometric Operations: Affine Transform [1], R. Fisher, S. Perkins, A. Walker and E. Wolfart. <http://homepages.inf.ed.ac.uk/rbf/HIPR2/affine.htm>
- [2]. Weisstein, Eric W., "Affine Transformation [2]" from MathWorld. <http://mathworld.wolfram.com/AffineTransformation.html>
- [3]. *Affine Transform* [3] by Bernard Vuilleumier, Wolfram Demonstrations Project. <http://demonstrations.wolfram.com/AffineTransform>
- [4]. Affine Transformation on PlanetMath <http://planetmath.org/encyclopedia/AffineTransformation.html>
- [5]. Anonymous, Demonstration of basic *image processing*, https://eweweb.poly.edu/~yao/EL5123/lecture1_intro.pdf
- [6]. Anonymous, the fundamental *image processing*, <https://www.visiononline.org/./T11-%20Image-Processing->

IMAGE ANALYSIS OF SIZE DISTRIBUTION ON COMPRESSED AGGREGATE
FACE - REGRESSED MODEL

Dr. Yıldıırım İsmail Tosun

*Şırnak University, Department of Mining Engineering, Şırnak, Turkey
yildirimismailtosun@gmail.com*

ABSTRACT

Image analysis of concrete mixture aggregates produced in two different forms in regular size and sieved form. One type of highly uniform distribution crushed in roll was in granular size and easily be evaluated in industry for concrete grading and scavenge ring.

The non uniform distribution and other irregular form type may be evaluated as less filling materials in finer size and so soft as which collected following solid-fine separation sieving. That waste in finer size may deteriorate picture near cognition blurred form as discharge of photos and control of form contrast in picture streams was compulsory and calibration patterns were used. Beneficiate from that finer marble aggregate in picture coloring controlled the analysis during analysis can efficiently be made. However, to avoid this disturbing contrast rake up manner of that fine material, dark color were used in picture. But post two stage processing capturing for image were widely used. 40%, 60% and 80% tine material and mid size content containing gray color was activated round third stage processing forms were used in our test experiments at 1-2 mm sized distributions and finer materials.

in this article, we obtain some new complex analytical solutions to the nonlinear Gaussian equation which seems in the field theory, weakly nonlinear dispersive water waves and nonlinear functions by using improved exponential sub-equation function method.

Keywords: Gaussian equation, Improved Gaussian function , exponential regression method; nonlinear dispersive waves; Complex exponential distribution

1. INTRODUCTION

An affine transformation is invertible if and only if A is invertible. In the matrix representation, the inverse is: The invertible affine transformations form the affine group, which has the general linear group of degree n as subgroup and is itself a subgroup of the general linear group of degree $n + 1$. The similarity transformations form the subgroup where A is a scalar times an orthogonal matrix. If and only if the determinant of A is 1 or -1 then the transformation preserves area; these also form a subgroup. Combining both conditions we have the isometries, the subgroup of both where A is an orthogonal matrix. Affine transformation Each of these groups has a subgroup of transformations which preserve orientation: those where the determinant of A is positive. In the last case this is in 3D the group of rigid body motions (proper rotations and pure translations). For any matrix A the following propositions are equivalent: • $A - I$ is invertible • A does *not* have an eigenvalue equal to 1

• for all b the transformation has exactly one fixed point

- there is a b for which the transformation has exactly one fixed point
- affine transformations with matrix A can be written as a linear transformation with some point as origin. If there is a fixed point, we can take that as the origin, and the affine transformation reduces to a linear transformation. This may make it easier to classify and understand the transformation. For example, describing a transformation as a rotation by a certain angle with respect to a certain axis is easier to get an idea of the overall behavior of the transformation than describing it as a combination of a translation and a rotation. However, this depends on application and context. Describing such a transformation for an *object* tends to make more sense in terms of rotation about an axis through the center of that object, combined with a translation, rather than by just a rotation with respect to some distant point. As an example: "move 200 m north and rotate 90° anti-clockwise", rather than the equivalent "with respect to the point 141 m to the northwest, rotate 90° anti-clockwise". Affine transformations in 2D without fixed point (so where A has eigenvalue 1) are:

- pure translations
- scaling in a given direction, with respect to a line in another direction (not necessarily perpendicular), combined with translation that is not purely in the direction of scaling; the scale factor is the other eigenvalue; taking "scaling" in a generalized sense it includes the cases that the scale factor is zero (projection) and negative; the latter includes reflection, and combined with translation it includes glide reflection.
- shear combined with translation that is not purely in the direction of the shear (there is no other eigenvalue than 1; it has algebraic multiplicity 2, but geometric multiplicity 1)

Affine transformation of the plane

To visualise the general affine transformation of the Euclidean plane, take labelled parallelograms $ABCD$ and $A'B'C'D'$. Whatever the choices of points, there is an affine transformation T of the plane taking A to A' , and each vertex similarly. Supposing we exclude the degenerate case where $ABCD$ has zero area, there is a unique such affine transformation T . Drawing out a whole grid of parallelograms based on $ABCD$, the image $T(P)$ of any point P is determined by noting that $T(A) = A'$, T applied to the line segment AB is $A'B'$, T applied to the line segment AC is $A'C'$, and T respects scalar multiples of vectors based at A . [If A, E, F are collinear then the ratio $\text{length}(AF)/\text{length}(AE)$ is equal to $\text{length}(A'F')/\text{length}(A'E')$.] Geometrically T transforms the grid based on $ABCD$ to that based in $A'B'C'D'$.

Affine transformations don't respect lengths or angles; they multiply area by a constant factor $\text{area of } A'B'C'D' / \text{area of } ABCD$.

A given T may either be *direct* (respect orientation), or *indirect* (reverse orientation), and this may be determined by its effect on *signed* areas (as defined, for example, by the cross product of vectors).

The following equation expresses an affine transformation in GF(2) (with "+" representing XOR): where [M] is the matrix and {v} is the vector

For instance, the affine transformation of the element {a} = $x^7 + x^6 + x^3 + x = \{11001010\}$ in big-endian binary notation = {CA} in big-endian hexadecimal notation, is calculated as

$$\{a'\} = M\{a\} + \{v\},$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot$$

follows:

Thus, $\{a'\} = x^7 + x^6 + x^5 + x^3 + x^2 + 1 = \{11101101\} = \{ED\}$.

- The transformation matrix for an affine transformation
- Affine geometry
- Homothetic transformation
- Similarity transformation
- Linear transformation (the second meaning is affine transformation in 1D)
- 3D projection
- Flat (geometry)

Affine transformation 70

A geological map of the provinces of Sirnak and the surrounding area has been identified geotechnical engineering unit of surface features (Anonymous, 2012). The slope, was one of the first large-scale topographic maps of the bottom preparation work in the region on the geological map processing. The determination of the engineering properties of slope, is intended to draw attention to the critical importance of geotechnical and municipal development plans in the future in the construction field.

Often, it is more useful to use homogeneous coordinates, since translation cannot be accomplished with a 3-by-3

matrix. To scale an object by a vector $v = (v_x, v_y, v_z)$, each homogeneous vector $p = (p_x, p_y, p_z, 1)$ would need to be multiplied with this scaling matrix:

As shown below, the multiplication will give the expected result:

The scaling is uniform if and only if the scaling factors are equal. If all scale factors except one are 1 we have directional scaling.

$$S_v = \begin{bmatrix} v_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$S_v p = \begin{bmatrix} v_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_x p_x \\ v_y p_y \\ v_z p_z \\ 1 \end{bmatrix}$$

Since the last component of a homogeneous coordinate can be viewed as the denominator of the other three

components, a scaling by a common factor s can be accomplished by using this scaling matrix:

$$S_s = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{s} \end{bmatrix}.$$

$$S_s p = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ \frac{1}{s} \end{bmatrix}$$

For each homogeneous vector $p = (p_x, p_y, p_z, 1)$ we would have

which would be homogenized

$$\begin{bmatrix} sp_x \\ sp_y \\ sp_z \\ 1 \end{bmatrix}$$

2. METHOD

Image conversion and analysis for size distribution were made by pixel counting as shown in Figure 1.2 and 3.



Figure 1. Particle Size Distribution Analysis of Sand Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of laboratory screen test



Figure 2. Line Size Distribution Analysis of Sand Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of laboratory screen test



Figure 3. Particle Size Distribution Analysis of Sand Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of laboratory screen test

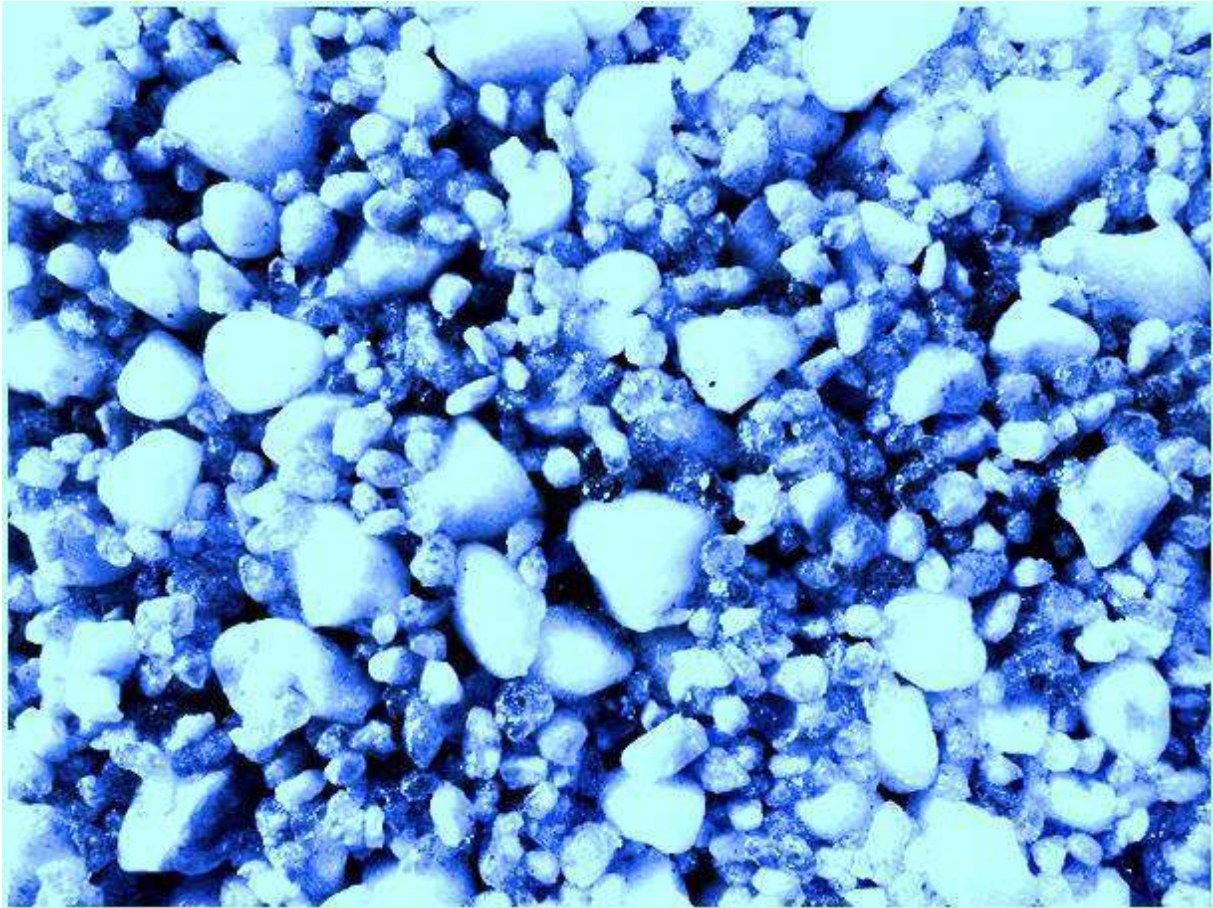


Figure 4. Particle (Methyl Blue Indicator Sorbed Color) Distribution Analysis of Sand Specimen for Precision of Image Analysis with comparison of laboratory screen test

2.1. Size Distribution Model: Gaudin Model

From the observation of the two figures and the corresponding linear correlation coefficient, one deduces that the RR model provides a better fit to the experimental PSD curve than GGS does. The resulting distribution and density functions obtained by application of RR model are given by the following expressions:

$$y = 100 \cdot (x/k)^a$$

where y = cumulative % passing,
 x = particle size,
 k = size modulus, and
 a = distribution modulus.

$$\log(y) = a \cdot \log(x) + (2 - a \cdot \log(k))$$

The application of these expressions to the PSD curve allows one to extrapolate (for estimation purpose only) the percentage of material smaller than a certain particle diameter (ϕ) at points that do not correspond to the sieving classification system used, thus obtaining information at the extremes of the particle size diagrams.

The size dependence of the error coefficient is governed by an Gaussian equation as follows (3),

$$K_L = K_0 \exp(-\text{Error}(y)) \quad (5)$$

where E is the error function, K_{0L} is the pre-exponential coefficient constant.

4 CONCLUSIONS

Şırnak was investigated by urban areas close to border regions participating in the colliery images of rock samples taken from four different slopes of slope stability and geotechnical properties of the unit field studies and laboratory experiments. the results of the slope stability calculations were discussed with risk maps and risk section of program GEO5 and Matlab regression analysis programs are succesfully used.

References

- [1]. Geometric Operations: Affine Transform [1], R. Fisher, S. Perkins, A. Walker and E. Wolfart. <http://homepages.inf.ed.ac.uk/rbf/HIPR2/affine.htm>
- [2]. Weisstein, Eric W., "Affine Transformation [2]" from MathWorld. <http://mathworld.wolfram.com/AffineTransformation.html>
- [3]. *Affine Transform* [3] by Bernard Vuilleumier, Wolfram Demonstrations Project. <http://demonstrations.wolfram.com/AffineTransform>
- [4]. Affine Transformation on PlanetMath <http://planetmath.org/encyclopedia/AffineTransformation.html>
- [5]. Anonymous, Demonstration of basic *image processing*, https://eeweb.poly.edu/~yao/EL5123/lecture1_intro.pdf
- [6]. Anonymous, the fundamental *image processing*, <https://www.visiononline.org/./T11-%20Image-Processing->

EVSEL GIDA ATIKLARI: SÜRDÜRÜLEBİLİR BİR GELECEK İÇİN BİYOEKONOMİK SÜREÇTE UMUT VEREN YENİLENEBİLİR HAMMADDE

Dr. Mine Nazan KERİMAK ÖNER

Kocaeli Üniversitesi, Köseköy Meslek Yüksekokulu,
Gıda İşleme Teknolojileri Bölümü,
41135, Kartepe-Kocaeli/TÜRKİYE
mine@kocaeli.edu.tr

ÖZET

Yaşadığımız çağda gezegenimizde var olan en önemli temel sorunlardan bir tanesi de tüm dünyada hızla ortaya çıkan katı atık problemidir. Katı atıkların bertaraf edilmeleri sırasında yaşanan beşeri ve çevresel problemler sebebi ile bu atıkların ya kaynakta azaltılması ya da değerli bileşenlerinin sürdürülebilirlik kapsamında atılmadan katma değerli son ürünlere dönüştürülmesi son yıllarda biyoekonomik süreçte benimsenen uygulamalardan bir tanesi olmuştur. Belediye katı atıkları sınıfında yer alan ve belediye katı atıklarının organik fraksiyonu (OFMSW) olarak isimlendirilen gıda atıkları (FW), şehir katı atıklarının en önemli bileşenlerinden bir tanesidir. Gıda ve Tarım Örgütü'ne (FAO) göre, taze sebze, meyve, et, unlu mamuller ve süt ürünleri de dâhil olmak üzere yaklaşık 1.3-1.6 milyar ton gıda, gıda tedarik zinciri boyunca kaybolmaktadır. Günümüzde Hindistan, Çin, Tayland, Sri Lanka, Türkiye, vb. gibi gelişmekte olan ülkelerde, gıda atıklarının atık bertaraf edilmesi amacıyla gömme, yakma ve kompostlama gibi geleneksel yöntemler ile zararsızlaştırılması çok yaygın olarak kullanılan yöntemlerdir. Bununla birlikte, anılan uygulamalar, biyoekonomik perspektiften bakıldığında organik besin maddesi içeriği yönünden zengin bileşimi nedeniyle gıda atıklarının bertaraf için uygun değerlendirilme yöntemleri değildir. Teorik olarak, gıda atıkları biyoekonomik süreçte katma değerli materyallerin üretiminde yararlı bir kaynak olarak kullanılabilirler. Sürdürülebilir ekonomi çerçevesinde gelecek yıllar içerisinde gerek enerji gerekse diğer değerli ürünlerin yenilenebilir kaynaklardan elde edilmesi insan ve çevre sağlığına kattığı kazanç açısından düşünüldüğünde oldukça büyük önem taşımaktadır.

Bu nedenle sunulan bu çalışmada; belediye katı atıklarının organik fraksiyonundan kimyasal ve/ya termokimyasal yöntemler vasıtasıyla elde edilebilecek katma değerli ürünlerin yarar ve değerlerinin irdelenmesi yapılmaya çalışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Biyoekonomi, Belediye Katı Atıkları, Mutfak Atıkları, Biyoenerji, Biyoürün,

HOUSEHOLD FOOD WASTE: PROMISING RENEWABLE RAW MATERIAL in BIOECONOMIC PROCESSES for SUSTAINABLE FUTURE

ABSTRACT

One of the most important fundamental problems that existed in our planet in our age is the solid waste problem that is rapidly emerging all over the world. Human and environmental problems during the disposal of solid wastes are experienced. Therefore, the reduction of these wastes at the source or the conversion of the valuable components into value-added end products without being sustained in the scope of sustainability has been one of the applications adopted in the bioeconomic process in recent years. Food waste (FW), which is named as municipal solid waste and organic fraction of municipal solid waste (OFMSW), is one of the most important components of city solid waste. According to Food and Agricultural Organization (FAO), about 1.3 and 1.6 billion tons of food, including fresh vegetables, fruits, meat, bakery and dairy products, are lost along the food supply chain. FWs are currently landfilled, incineration and composting are very common and mature technologies for waste disposal in developing countries e.g., India, China, Thailand, Sri Lanka, Turkey. However, the aforementioned applications are not suitable for the disposal of food wastes due to their organic nutrient-rich composition. Theoretically, food waste can be used as a useful source of value-added products in the bioeconomic process. Within the framework of sustainable economy, obtained both energy and other valuable products from renewable sources like food waste in the years to come are important in terms of gain to both human and environmental health.

Therefore, presented in this study; it is to evaluate the benefits and values of value-added products that can be obtained by using chemical and/or thermochemical methods from the organic fraction of municipal solid wastes.

Keywords: Bioeconomy, Municipal Solid Wastes, Kitchen Waste, Bioenergy, Bioproduct

1. GİRİŞ

Gelişen Dünya ile birlikte ortaya çıkan hızlı şehirleşme, hızla artan nüfus ve artan nüfusa paralel olarak da artan bilinçsiz gıda tüketimi mutfak atıklarının üretim hızını gün geçtikçe arttırmaktadır. Organik içeriği bakımında oldukça zengin ve kıymetli olan ve pirinç, et, sebze, meyve, fırıncılık ve günlük süt ürünlerini içeren bu atıklar ev, restaurant, kafeterya, gıda endüstrisi ve hazır öğünlerden kalan tüketilmemiş gıda atıklarını içermektedir. Ekonomik gücün artması da mutfak atıklarının miktarındaki artışın sebeplerinden bir tanesidir. Mutfak atıklarındaki bu artış hem gelişmiş hem de gelişmekte olan ülkeler için göz önüne alınması gereken problemlerden bir tanesi haline gelmiştir. İçerdiği yüksek miktardaki biyolojik olarak parçalanabilen organik bileşikler nedeni ile kötü koku oluşumu, haşere çekmesi ve toksik gaz salınımı nedeniyle rahatsız edici sorunlar yaratmaktadır (Hafid vd., 2017, Mohan vd., 2016).

Küresel olarak yıllık 1.3×10^9 ton gıda atığı bertaraf sahalarına terk edilmekte bu suretle de 3.3×10^9 ton CO₂-eş/yıl sera gazı emisyonu gerçekleşmektedir. Yapılan tahminler 2025 yılına kadar sürdürülebilir karbon (çevrimsel) ekonomisinin gerçekleştirilebilmesi için , oluşması durdurulacak, azaltılacak, geri kazanılacak ve işlenecek $\sim 2.5 \times 10^9$ ton gıda atığının küresel olarak ortaya çıkacağını göstermektedir.

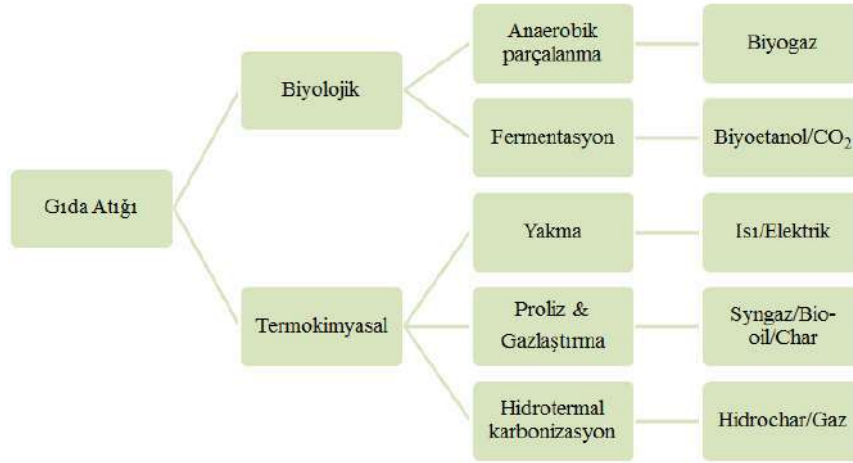
Belediye atıklarının organik fraksiyonu olan mutfak atıkları heterojen bileşime sahiptirler. İçerdiği ana elementler ve kimyasal bileşimi; C, H, N, O, S ve Cl, sırasıyla % olarak, 46.11, 6.89, 3.19, 37.80, 0.29 ve 0.21 şeklindedir (Li vd., 2016). Bu bileşim ülkeden ülkeye değişmekle birlikte aynı ülkede farklı şehirlere ve/veya aynı şehirde farklı yerleşim bölgelerine göre de farklılık gösterebilmektedir. Mutfak atıkları, karakteristik olarak pirinç, tahıl, sebze ve meyve artıklarından oluşmakta ve yüksek miktarda organik ve biyolojik olarak parçalanabilen bileşenler barındırmaktadırlar. İçerdiği organik bileşenlerinin yaklaşık % 60'ı çözünür ya da polimerik formdaki karbohidrat polimerleri (nişasta, selüloz ve hemiselüloz), % 20'si protein, % 10'u yağ ve diğer organik maddeler (asitler vb.) ve daha küçük inorganik karakterli kalıntılardan oluşmaktadır (Gwak vd., 2018, Hafid vd., 2017, Vavouraki vd., 2014).

Mutfak atıkları sahip oldukları bu kullanışlı bileşim sebebiyle, içerisinde metan, hidrojen, etanol, enzimler, organik asitler, biyopolimerler ve biyoplastiklerin de bulunduğu katma değerli son ürünler olarak isimlendirilen çeşitli biyoürünlerin üretilmesi amacıyla mikrobiyal besiyeri olarak kullanılabilirler. Biyoteknoloji mühendisliği ve uygulamalarının da süreç içerisinde gelişmesi, mutfak atıklarının endüstriyel uygulamalarda ham madde olarak kullanılmasının yollarını geliştirerek yeni katma değerli ürünlerin üretilmesini mümkün kılacaktır (Uçkun Kıran vd., 2014).

2. MUTFAK ATIKLARINDAN ENERJİYE

Biyokütle, farklı prosesler kullanılarak enerjinin kullanışlı formlarına dönüştürülebilir. Dönüşüm prosesi seçiminde etkili olan faktörler ise; biyokütle miktarı ve tipi, istenen enerji formu, son kullanım gereksinimleri, çevresel standartlar, ekonomik koşullar ve projeye ait spesifik faktörler şeklinde sıralanabilirler. Bazı durumlarda ise gerekli olan enerji türü prosesi ve gidisini belirleyerek mümkün olan biyokütle miktarı ve seçimini yaptırır.

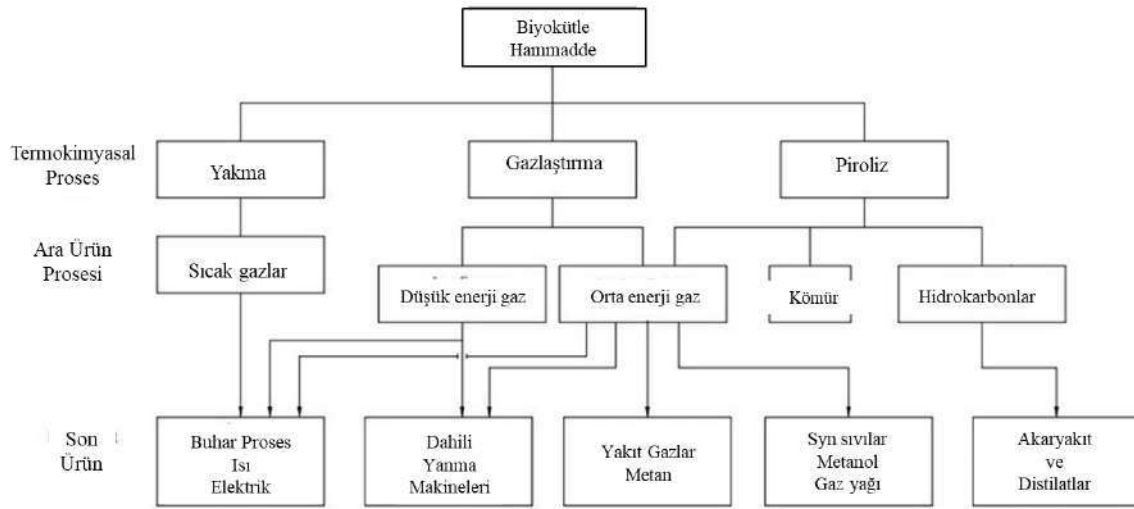
Biyokütle, iki tanesi enerji ile ilgili olmak üzere üç ana ürüne dönüştürülebilir; i) güç/enerji üretimi, ii) ulaşım yakıtları, iii) kimyasal hammadde. Biyokütlenin enerjiye dönüşümünde ise; biyokimyasal/biyolojik ve termokimyasal yöntemlerin kullanıldığı süreçler olmak üzere iki ana teknoloji kullanılır. Mekanik ayrıştırma ise kolza tohumundan kolzatohumu metil ester biyodizeli (esterifikasyon ile) gibi yakıtların üretildiği ve biyokütleden enerji üretiminin mümkün olduğu bir üçüncü teknolojik yöntemdir. Termokimyasal dönüşüm; yakma, piroliz, gazlaştırma ve sıvılaştırma olmak üzere dört ana proses üzerinden gerçekleştirilirken, biyokimyasal/biyolojik dönüşümde digeston (biyogaz üretimi, karışım ana miktar olarak metan içerirken karbondioksiti de barındırır) ve fermentasyon (etanol üretimi) olmak üzere iki ana teknoloji kullanılır (Peter McKendry, 2002). Gıda artıklarından enerjiye dönüşüm teknolojileri ve ürünlerinin özetlendiği şekil 1 aşağıda verilmiştir (Pham vd., 2015).



Şekil 1. Gıda Atıklarından Enerjiye Dönüşüm Teknolojileri

2.1. TERMAL/TERMOKİMYASAL DÖNÜŞÜM TEKNOLOJİLERİ

Biyokütlenin termokimyasal dönüşümü işleminde, iki daha az tercih edilen seçenek ile birlikte üç ana proses kullanılır. Termokimyasal dönüşüm sonucu oluşan ara enerji taşıyıcıları ve son enerji ürünlerinin de gösterildiği ana üretim prosesleri şekil 2’de gösterilmiştir.



Şekil 2. Biyokütlenin termokimyasal dönüşümündeki ana süreçler, ara enerji taşıyıcıları ve son enerji ürünleri

2.1.1. Yakma

Depolama alanlarında kontrolsüz şartlarda bekletilen organik atıklar, biogaz olarak isimlendirilen ve ana miktarda metan (CH_4) ve yanında karbondioksit (CO_2) içeren eser miktarlarda da azot (N_2), oksijen (O_2) ve hidrojen sülfid (H_2S) bulunduran atık gazları atmosfere çevre kirlenici olarak serbest bırakılır (Pham vd., 2015, Peter McKendry, 2002).

Yakma, atık materyallerin yanma suretiyle ısı ve enerjiye dönüştürüldüğü eski ve geleneksel bir yöntemdir. Yanma prosesinden elde edilen ısı, enerji üretimi için buhar tribünlerini çalıştırmak ya da endüstride proses akışlarını arttırmak için kullanılan ısı eşanjörleri için kullanılır. Yakma fırınları katı atık hacmini % 80-85 oranında indirgeyebilir böylelikle de bertaraf edilecek atık miktarı da dikkate değer bir şekilde azaltılabilir. Katı atıkların yakılarak azaltılması eski bir teknoloji olması sebebiyle bazı Avrupa Birliği Ülkeleri tarafından atık yönetimi amacıyla tamamıyla onaylanmamaktadır. Bazı ülkelerin atıkların yakılmasına karşı duydukları güvensizlik yakma sırasında kullanılan alet ve teknolojinin eski olması nedeniyle dioksinleri ve ağır metalleri içeren gazların havaya bırakılmasından kaynaklanmaktadır. Ayrıca, yakma sonrasında geriye kalan yakılmayan kül genellikle konsantre inorganik atıkları içerdiğinden bu atıkların da uygun bir şekilde bertaraf edilmesi zorunludur.

Literatür çalışmaları incelendiğinde, gıda atıklarından yakma yöntemi ile enerji geri kazanımında gıda atıklarının yüksek miktarda nem ve yakılmayan bileşenler içermesi sebebiyle tek başlarına yakıldıklarında bertaraf yöntemi açısından kötünün iyisi olarak değerlendirilmektedirler. Tipik olarak, mutfak atıkları şehir çöpleri ile birlikte aynı süreçten geçirilerek yakma yöntemi ile ısı ve enerjiye çevrilirler. Gıda atıkları kurutulmalarının ardından şehir çöpleri ile birlikte 850°C ile yaklaşık olarak 1100°C'a kadar yakılırlar. Kurutma için ortalama elektrik tüketimi 649 kWh'tir ki bu miktar bir ton gıda atığından elde edilecek 27920 MJ enerjiye eşdeğerdir. Yakma ile yapılan deneylerden elde edilen sonuçlar 1 g TS'in kurutulmuş yakılmasından 37.7 kJ ısı elde edildiğini göstermektedir (Pham vd., 2015). Biyokütle olarak kullanılan mutfak atıklarının içerdiği nem oranının <%50 olması durumunda atıkların kurutulmadan yakılması uygulanabilir karlı bir yöntem olarak değerlendirilebilir (Peter McKendry, 2002).

2.1.2. Piroliz ve Gaz Haline Getirme (Gazlaştırma)

Piroliz ve gazlaştırma her ikisi de termal proseslerdir. Piroliz, gıda atıklarını oksijensiz ortamda syngas ($CO+H_2$) ve katı biyo-kömür ile birlikte ana ürün olarak biyo-yakıt haline dönüştürür. Pirolizden elde edilen enerji ürünleri şekil 3'de gösterilmiştir.



Şekil 3. Pirolizin enerji ürünleri

Dönüşüm prosesi ile ilgili problemler ve üretilen yakıtın sahip olduğu zayıf termal stabilite ve aşındırıcılık gibi özellikleri halen üstesinden gelinmesi gereken proses sorunlarından.

Hidrojenasyon yoluyla alkalilerin giderilmesi ve oksijen içeriğinin düşürülerek biyo-yakıtın geliştirilmesi bazı uygulamalar için gerekli olabilmektedir (Peter McKendry, 2002).

Gaz haline getirme, biyokütlenin yüksek sıcaklıklarda, tipik olarak 800-900°C arasında, kısmi oksidasyonu vasıtasıyla yakılabilir gaz karışımı haline dönüştürülmesidir. Üretilen düşük kalori değerine sahip gaz (4-6 MJ/Nm³) direkt olarak yakılabilir ya da gaz motorları ve gaz tribünleri için yakıt olarak kullanılabilir. Ürün gazı, metanol gibi kimyasalların üretiminde de hammadde (syngas) olarak kullanılabilir (Pham vd., 2015, Peter McKendry, 2002).

Gazlaştırma ve piroliz proseslerinin her ikisi de gıda atıkları için uygun atık değerlendirme yöntemleri olarak değerlendirilebilirler. Her iki proses de ana bileşeni CO ve H₂ (%85) olan ve küçük bir miktarda da CO₂ ve CH₄ bulunduran syngazı üretirler. Piroliz prosesinde ısıtma değeri 17MJ/kg civarında olan biyo-yakıt %80'e varan verim ile üretilebilir. Ancak gazlaştırma prosesinin performansını etkileyen birçok faktör vardır. Gazlaştırma prosesinde atık-enerji dönüşümünde kullanılacak olan atıkların elementel bileşimi, düşük ısıtma değeri, kül içeriği ve bileşimi, nem içeriği, uçucu madde içeriği, diğer kirleticiler (N, S, Cl, alkaliler, ağır metaller vb.), yoğunluk ve boyut çok önemli karakteristik özelliklerdir. Yapılan araştırmalar gıda atıklarının her iki termal proses için de uygun bir biyokütle-enerji dönüşüm hammaddesi olduğunu göstermiştir (Pham vd., 2015, Peter McKendry, 2002).

2.1.3. Hidrotermal Karbonizasyon (HTC)

Hidrotermal karbonizasyon özellikle yüksek nem içeriğine (%80-90) sahip atıkların dönüştürülmesi amacıyla kullanılmaya başlanmış ve araştırmacıların dikkatini çekmiş bir termal dönüşüm teknolojisidir. HTC, 1913 yılında ilk kez selülozdan kömür eldesi amacıyla denenmiştir.

HTC, otojen basınç altında ve nispeten düşük sıcaklıklarda (180-350°C) yemek atıklarını değerli enerji kaynaklarına dönüştüren ıslak prosestir. Biyolojik proseslerde kullanılan diğer atıktan enerjiye dönüşüm prosesleri ile karşılaştırıldığında, HTC daha az işlem atığı, daha büyük atık hacmini indirgemesi ve proses ile ilgili kötü kokulara sebep olmaması gibi avantajlara sahiptir. Ayrıca günlerden aylara kadar uzayabilen biyolojik proseslere göre sadece birkaç saatte tamamlanması diğer tekniklere karşı sahip olduğu bir başka avantajdır. HTC'nin yüksek sıcaklıklarda gerçekleştirilmesi patojenleri elimine ederken diğer potansiyel organik kirleticilerinde inaktivasyonuna neden olur. HTC prosesi sonlandığında steril, hijyenik, kolayca depolanıp taşınabilen enerjice zengin bir kaynak elde edilmiş olur. Benzer şekilde HTC proses sıvısından da enerjinin geri kazanılması da olasıdır. Kullanım/yeniden kullanım için bazı kimyasalların HTC işlem suyundan geri kazanılması olasılığı vardır. HTC prosesi ile ilişkili diğer bir avantaj ise azot türlerini içeren besinlerin sıvılardan geri kazanılması yoluyla gübre olarak kullanma potansiyeli ile ilgilidir. HTC prosesi sırasında ıslak hammadde içerisinde dekarboksilasyon, dehidrasyon, kondenzasyon ve hidroliz reaksiyonlarının da bulunduğu bir seri kendiliğinden gerçekleşen reaksiyona maruz kalır. Tüm bu reaksiyonlar sonucunda enerji içeriği linyit kömürüne eşdeğer ve yüksek miktarda karbonize olmuş enerjice yoğun materyal oluşur. Üretilen kömür, yüzey işlevselleştirilmesinin

ardından, zararlı kirleticiler için bir adsorban olarak faydalı son ürün kullanım uygulamasına tabii tutulabilir. Ayrıca, son ürün olarak üretilen kömürün karbon yakıt hücreleri için hammadde ve toprak iyileştirme (piroliz / gazlaştırma işleminden elde edilen kömüre benzer) gibi faydalı son kullanım uygulamalarında kullanılması da mümkündür (Pham vd., 2015, Peter McKendry, 2002).

3. SONUÇ

Sürdürülebilir bir toplum ve paralelinde sağlıklı bir çevre ve gelecek için yapılması gereken en önemli ataklardan bir tanesi de yenilenebilir ve sürdürülebilir enerji kaynaklarını mümkün olduğunca hızlı bir şekilde kullanıma geçirmektir. Hızla artan nüfus ile birlikte hızla artan enerji ihtiyacının yanında tüketim ile birlikte gelen atık birikiminin de tehditkâr boyutlara ulaşması günümüz toplumlarının en önemli problemlerinden biri olmaya devam etmektedir.

Enerji ihtiyacının karşılanması amacıyla fosil yakıtlarının kullanımda olduğu günümüzde bu yakıtlarında yakın gelecek de tükenecek olması tükenmeyen ve yenilenebilir enerji kaynaklarını daha da kıymetli hale getirmiştir. Son zamanlarda atıklar ile yapılan çalışmalarda gıda atıkları gibi zengin içeriğe sahip şehir atıklarının yenilenebilir kaynaklar arasına girmesi bu alanda yapılan çalışmaları daha da hızlandırmıştır.

Büyük metropoller ve şehirler için depolanması ve bertaraf edilmesi problem haline gelmeye başlayan şehir atıkları ve bu atıkların organik fraksiyonu olarak tanımlanan mutfak atıkları da son zamanlarda atıktan enerjiye dönüşüm teknolojilerinin kullanılabilirliğinin mümkün olduğu ortaya çıkan organik atık materyaller arasında değerlendirilmektedirler. Bu sebeple bu atıkların yenilenebilir kaynak olarak değerlendirilmesi hem var olan atık yönetimi mücadelesinde başarılı olmamızı sağlamasının yanında hem de atık materyallerden enerji elde edilmesi dolayısıyla şehirlerin yenilenebilir kaynaklardan kendi enerji santrallerini oluşturmalarını sağlayarak akıllı şehirler kurma yolunda ilerleyen Dünya ülkelerine entegre olmamızı da sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

- Gwak, Y.R., Kim, Y.B., Gwak, I.S., Lee, S.H. 2018. Economic evaluation of synthetic ethanol production by using domestic biowastes and coal mixture. *Fuel*, 213, 115-129. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.10.101>
- Hafid, H.S., Rahman, N.A.A., Md Shah, U.K., Baharuddin, A.S., Ariff, A.B. 2017. Feasibility of using kitchen waste as future substrate for bioethanol production: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 74, 671-686. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.02.071>
- McKendry, P. 2002. Energy production from biomass (part 2): conversion technologies. *Bioresource Technology*, 83, 47-54. PII: S0960-8524 (01)00119-5
- Mohan, S.V., Nikhil, G.N., Chiranjeevi, P., Reddy, C.N., Rohit, M.V., Kumar, A.N., Sarkar, O. 2016. Waste biorefinery models towards sustainable circular bioeconomy: Critical

review and future perspectives. *Bioresource Technology*, 215, 2-12.
<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.03.130>

Pham, T.P.T., Kaushik, R., Parshetti, G.K., Mahmood, R., Balasubramanian, R. 2015. Food waste-to-energy conversion technologies: Current status and future directions. *Waste management*, 38, 399-408. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2014.12.004>

Uçkun Kıran, E., Trzcinski, A.P., Ng, W.J., Liu, Y. 2014. Bioconversion of food waste to energy: A review. *Fuel*, 134, 389-399. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.05.074>

Vavouraki, A.I., Volioti, V., Kornaros, M.E. 2014. Optimization of thermo-chemical pretreatment and enzymatic hydrolysis of kitchen wastes. *Waste Management*, 34, 167-173. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2013.09.027>

COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF BENZYL ETHERS DERIVED FROM CHALCONES: A COMPUTATIONAL AND MOLECULAR DOCKING STUDY

Taner Erdogan^a, Serpil Ozkurt Sivrikaya^a

^a *Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School, Kocaeli University*

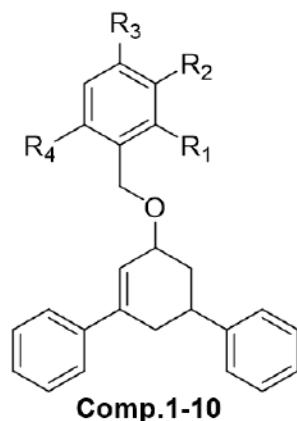
ABSTRACT

In this study, DFT and molecular docking calculations have been performed on some novel chalcone based benzyl ether derivatives. In the first part, density functional theory (DFT) calculations have been performed on the investigated molecules. Geometry optimizations, frequency analyses, frontier molecular orbital calculations and molecular electrostatic potential map calculations have been performed at DFT/B3LYP level of theory with the use of 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p) and 6-311+G(d,p) basis sets. In the second part, molecular docking calculations have been performed for acetylcholinesterase, butyrylcholinesterase and heat shock protein. Results show that investigated compounds show good binding affinity especially for cholinesterase enzyme.

Keywords: DFT, computational chemistry, molecular docking, AChE, BChE, HSP90A, chalcone, benzyl ether

INTRODUCTION

1,3-diphenyl-2-propenones (chalcones) and their derivatives are important structures in organic and pharmaceutical chemistry. They have anticancer, antitubercular, antiviral, antifungal, antibacterial activity etc. [1-13] Fig. 1 represents the structure of investigated compounds.



Comp.	Ar	Comp.	Ar
1	phenyl	6	2-fluorophenyl
2	2-chlorophenyl	7	4-fluorophenyl
3	4-chlorophenyl	8	2,4-dichlorophenyl
4	2-bromophenyl	9	3,4-dichlorophenyl
5	4-bromophenyl	10	2,6-dichlorophenyl

Fig. 1. Structures of the investigated compounds 1-10.

THEORETICAL CALCULATIONS

All calculations have been performed using Gaussian 09 Rev. D01. [14] Avogadro 1.1.1 [15] software was used for the conformational searches and GaussView 5.09 [16] was used for the visualization of the computational results. Optimized geometries of the compounds 1-10 are given in Fig. 2. Single point energies of the title compounds have been calculated and are given in Table 2. In the first part of the study, some DFT calculations have been performed on the title compounds. DFT calculations performed at B3LYP level of theory with the use of various basis sets including 6-31G(d), 6-31G(d,p) and 6-311+G(d,p) basis sets.

Conformer search calculations have been performed on the title compounds prior to geometry optimizations. After geometry optimizations, frequency calculations have been performed on the title compounds to verify the obtained structures are global minima. Optimized geometries obtained with 6-311+G(d,p) basis set are given in Fig. 2.

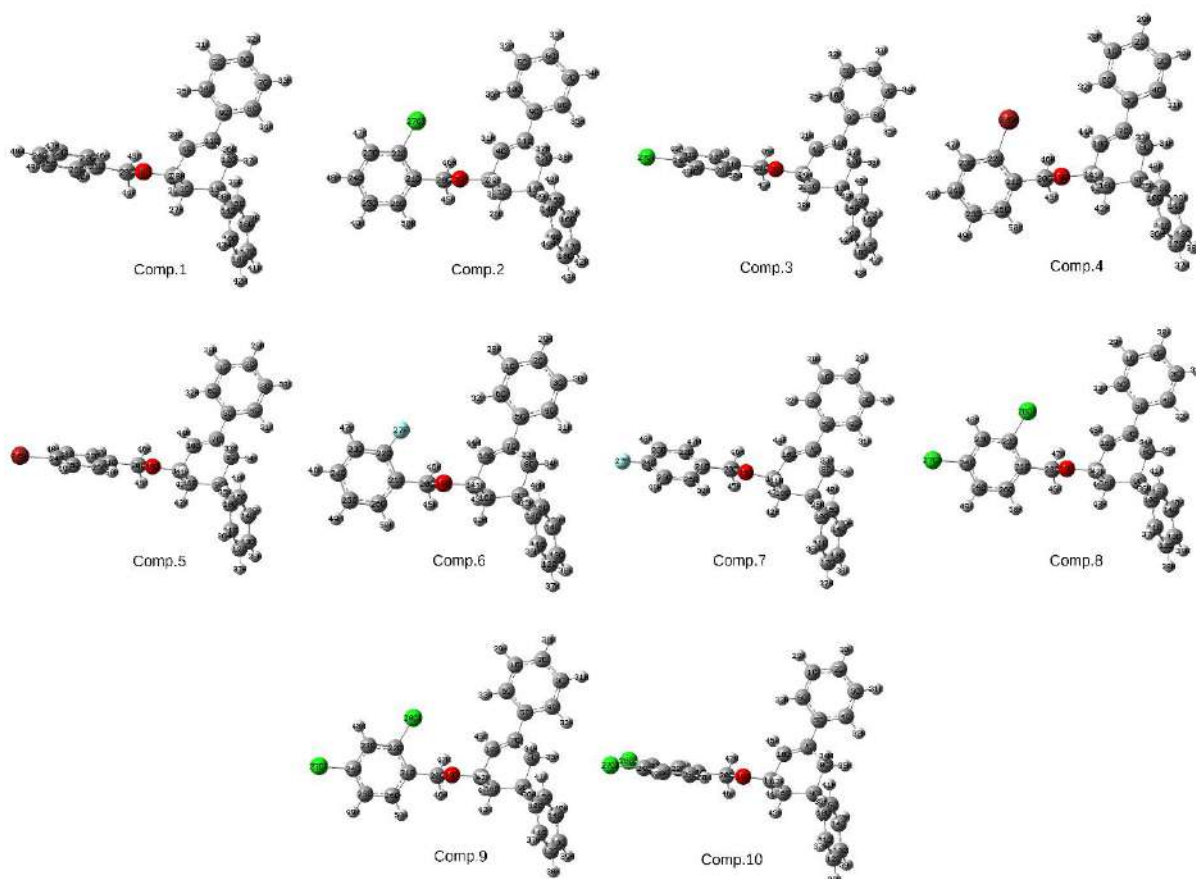


Fig. 2. Optimized structures of the investigated compounds 1-10.

Single point energies (SPEs) of the investigated compounds calculated at DFT/B3LYP 6-311+G(d,p) level of theory are given in Table 1.

Table 1. Single point energy calculations of compounds 1-10.

Comp.	SPE (hartree)
1	-1042.6135297
2	-1502.2372564
3	-1502.2390061
4	-3616.1505177
5	-3616.1528946
6	-1141.8847986
7	-1141.8849814
8	-1961.8296918
9	-1961.8278433
10	-1961.8586843

Table 2. HOMO and LUMO energies and HOMO-LUMO gaps of compounds 1-10.

Comp.	HOMO (hartree)	LUMO (hartree)	HOMO-LUMO Gap (hartree)
1	-0.03771	-0.23374	0.19603
2	-0.03722	-0.23111	0.19389
3	-0.04031	-0.23660	0.19629
4	-0.03796	-0.23159	0.19363
5	-0.04046	-0.23666	0.19620
6	-0.03625	-0.23088	0.19463
7	-0.03978	-0.23597	0.19619
8	-0.04382	-0.23373	0.18991
9	-0.04225	-0.23882	0.19657
10	-0.04463	-0.23236	0.18773

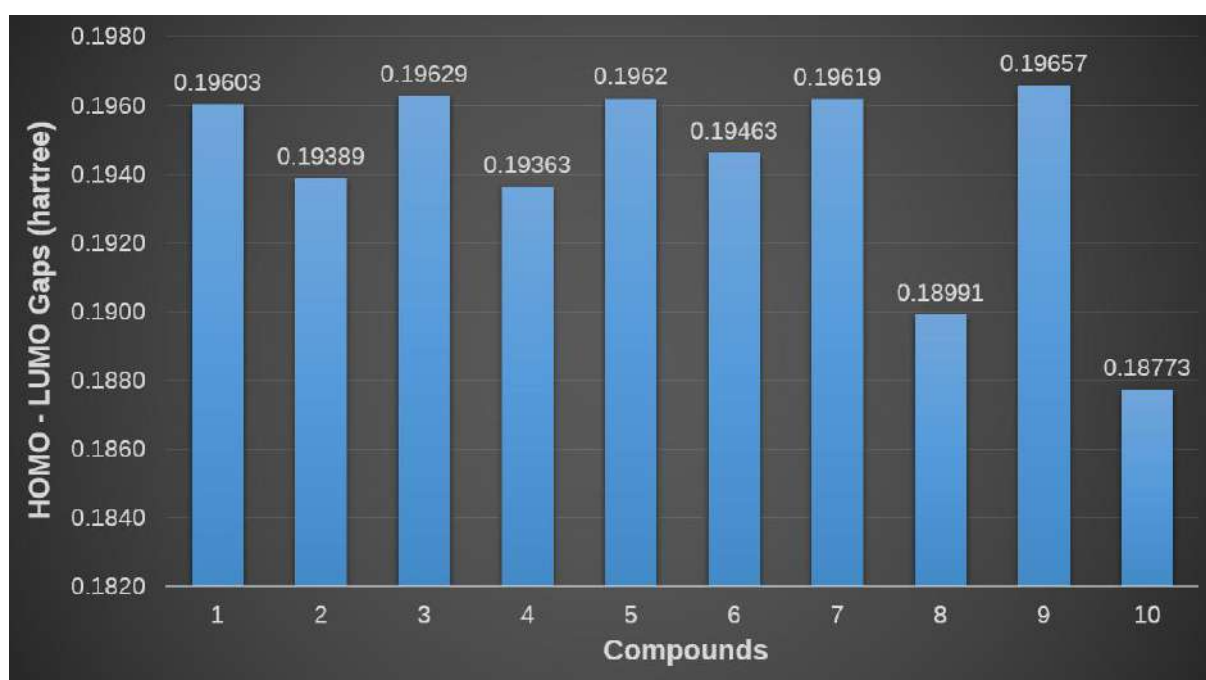


Fig. 3. HOMO – LUMO Gaps of compounds 1-10.

Higher HOMO – LUMO gaps correspond to more stable molecular structure, so it can be said that compound 9 is the most stable compound among compounds 1-10.

A frequency analysis after geometry optimization have been performed to verify that the optimized geometry correspond to a real minimum. Calculated IR spectra of compound 1 at DFT/B3LYP 6-311+G(d,p) level of theory is given in Fig. 4

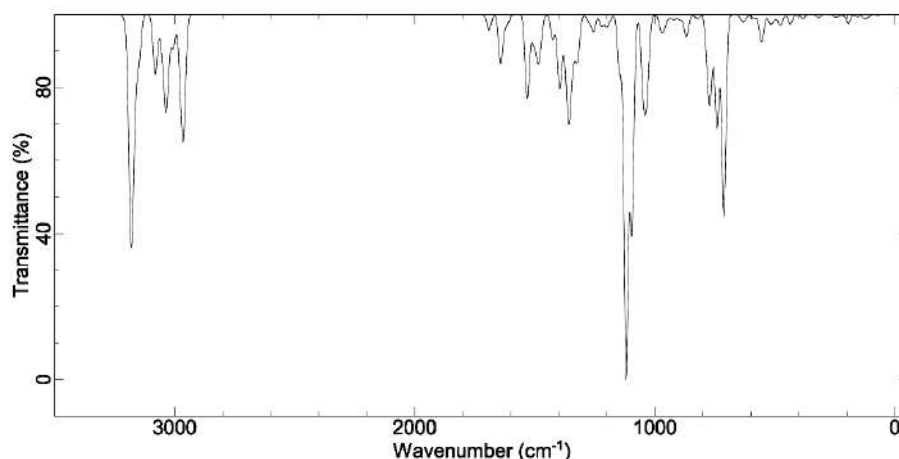


Fig. 4. Calculated IR spectra of compound 1.

In molecular docking calculations, optimized structures of the compounds have been used to calculate binding affinities and to determine possible receptor – ligand interactions between investigated compounds and the selected receptors, AChE, BChE and HSP90A. The structures of the proteins have been obtained from RCSB Protein Data Bank [17]. PDB codes of AChE, BChE and HSP90A are 5ei5, 4bds and 3qdd, respectively. Molecular docking calculations have been performed with the use of AutoDock Vina [18], UCSF Chimera [19], AutoDockTools [20-21] and Discovery Studio Visualizer [22] program packages. Binding affinities of the investigated compounds 1-10 are given in Table 3 and Fig. 5. Results show that investigated molecules exhibit good binding affinity for BChE and especially for AChE. Additionally it can be said that the binding affinities for HSP90A are slightly lower than those of the BChE.

Table 3. Binding affinities

Compounds	AChE	BChE	HSP90A
1	-12.1	-11.6	-9.6
2	-11.4	-11.8	-10
3	-12	-10.7	-9.7
4	-11.4	-11.8	-9.8
5	-11.9	-10.7	-9.7
6	-12	-11.7	-10
7	-11.7	-11.3	-9.9
8	-11.8	-10.6	-9.8
9	-12.1	-10.8	-9.9
10	-11.4	-11.5	-10.2

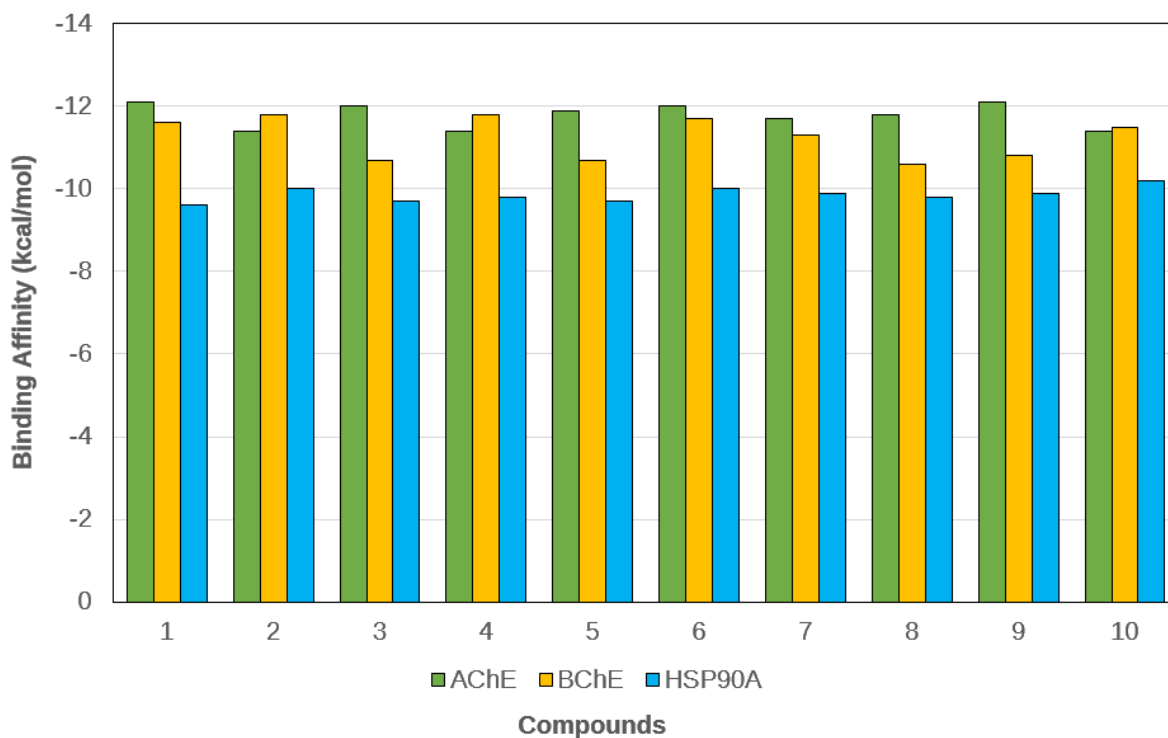


Fig. 5. Binding affinities.

Receptor – ligand interactions are represented in Figs. 6, 7 and 8.

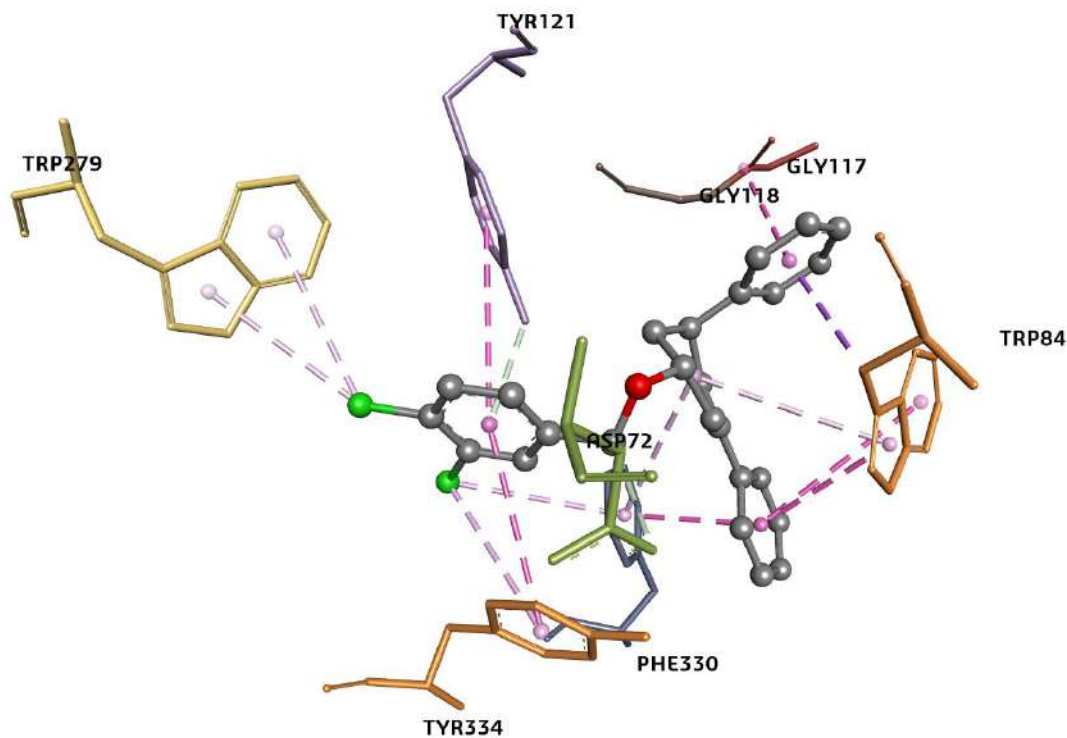


Fig. 6. Receptor – ligand interactions for comp. 9 and AChE.

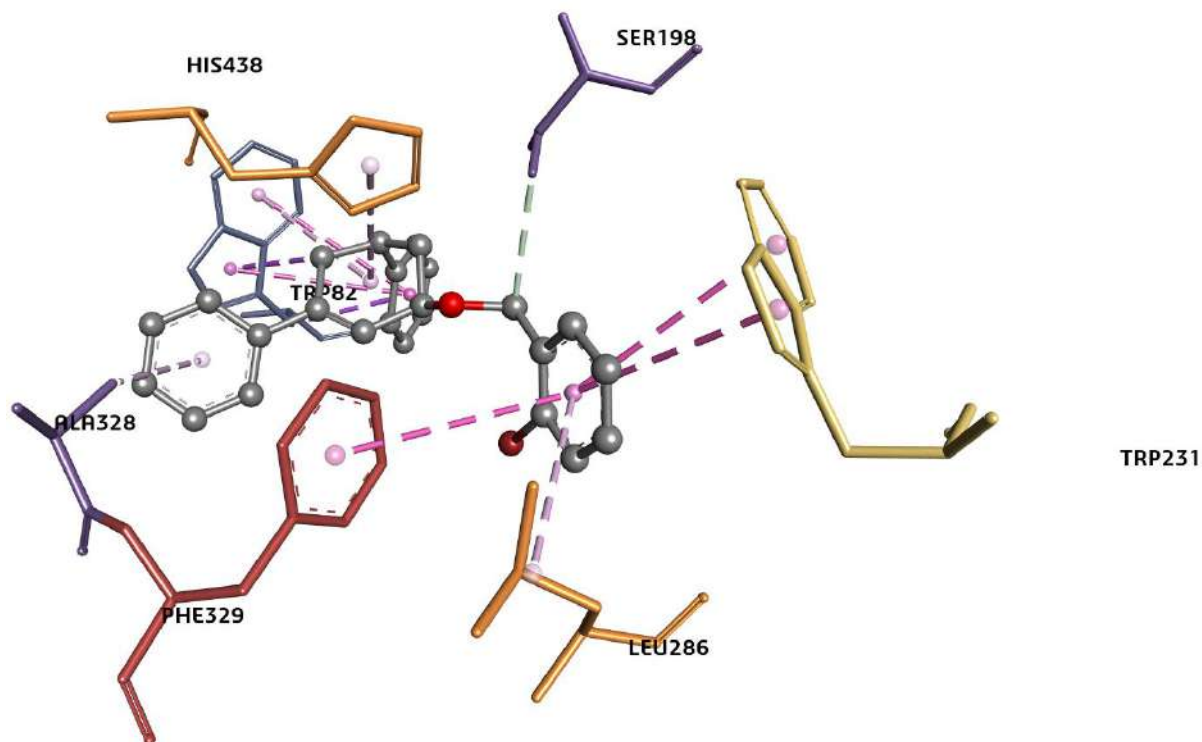


Fig. 7. Receptor – ligand interactions for comp. 4 and BChE.

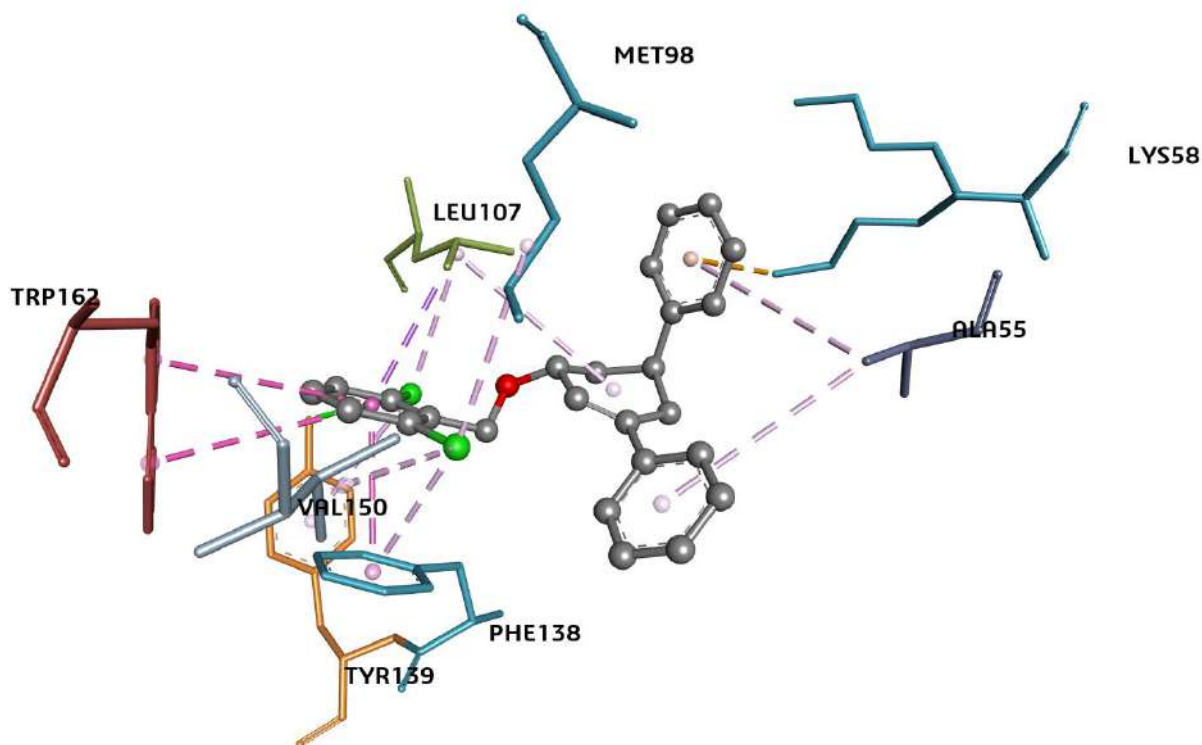


Fig. 8. Receptor – ligand interactions for comp. 10 and HSP90A.

RESULTS AND DISCUSSION

In this study, DFT and molecular docking calculations have been performed on the benzyl ethers derived from chalcones. Results showed that investigated compounds exhibit good binding affinity especially for AChE. The binding affinities of compounds were found to be in

the range of -11.4 – 12.1 kcal/mol. The highest binding affinities for BChE and HSP90A were found to be -11.8 kcal/mol and -10.2 kcal/mol, respectively.

In FMO calculations, since the higher HOMO-LUMO gap correspond to more stable structure, it can be said that compound 9 is the most stable compound among compounds 1-10.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by Kocaeli University Scientific Research Projects Unit. Project Number: 2011/062. The author acknowledge Kocaeli University for the financial support.

REFERENCES

1. D.N. Dhar, *The chemistry of chalcones and related compounds*. 1st ed. 1981, New York: Wiley & Sons.
2. X. Dong, T. Liu, J. Yan, P. Wu, J. Chen, Y. Hu, *Bioorg Med Chem* (2009) <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2008.11.052>
3. H.-K. Hsieh, L.-T. Tsao, J.-P. Wang, C.-N. Lin, *Journal of Pharmacy and Pharmacology* (2000) <https://doi.org/10.1211/0022357001773814>
4. S. Katade, U. Phalgune, S. Biswas, R. Wakharkar, N. Deshpande, *Indian Journal of Chemistry Section B-Organic Chemistry Including Medicinal Chemistry* (2008)
5. S. Khatib, O. Nerya, R. Musa, M. Shmuel, S. Tamir, J. Vaya, *Bioorganic & medicinal chemistry* (2005) <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2004.10.010>
6. I.G. Mamedov, M.R. Bayramov, Y.V. Mamedova, A.M. Maharramov, *Magnetic Resonance in Chemistry* (2013) <https://doi.org/10.1002/mrc.3982>
7. N. Mishra, P. Arora, B. Kumar, L.C. Mishra, A. Bhattacharya, S.K. Awasthi, V.K. Bhasin, *European journal of medicinal chemistry* (2008) <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2007.09.014>
8. Z. Nowakowska, B. Kedzia, G. Schroeder, *European journal of medicinal chemistry* (2008) <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2007.05.006>
9. S.G. Patil, P.S. Utale, S.B. Gholve, S.D. Thakur, S.V. Pande, *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research* (2012)
10. V.J. Ram, A.S. Saxena, S. Srivastava, S. Chandra, *Bioorganic & medicinal chemistry letters* (2000) [https://doi.org/10.1016/s0960-894x\(00\)00409-1](https://doi.org/10.1016/s0960-894x(00)00409-1)
11. V. Sharma, K.V. Sharma, *E-Journal of Chemistry* (2010) <https://doi.org/10.1155/2010/426383>
12. M.S. Yar, A.A. Siddiqui, A.M. Ali, *Journal of the Serbian Chemical Society* (2007)
13. L. Zhai, M. Chen, J. Blom, T.G. Theander, S.B. Christensen, A. Kharazmi, *Journal of Antimicrobial Chemotherapy* (1999) <https://doi.org/10.1093/jac/43.6.793>
14. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. Montgomery, J. A. , J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, 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, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, *Gaussian 09*. 2013, Gaussian Inc.: Wallingford CT.

15. M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison, *Journal of Cheminformatics* (2012) <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>.
16. R. Dennington, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 5. 2009, Semichem Inc.: Shawnee Mission, KS.
17. <https://www.rcsb.org/>
18. O. Trott, A.J. Olson, *Journal of Computational Chemistry* (2010) <https://doi.org/doi:10.1002/jcc.21334>
19. E.F. Pettersen, T.D. Goddard, C.C. Huang, G.S. Couch, D.M. Greenblatt, E.C. Meng, T.E. Ferrin, *J Comput Chem* (2004) <https://doi.org/10.1002/jcc.20084>
20. Michel F. Sanner. Python: A Programming Language for Software Integration and Development. *J. Mol. Graphics Mod.*, 1999, Vol 17, February. pp57-61.
21. Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S. and Olson, A. J. (2009) Autodock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. *J. Computational Chemistry* 2009, 16: 2785-91.
22. D.S. BIOVIA, Discovery Studio Visualizer, v17.2.0.16349. 2016, San Diego: Dassault Systèmes.

**DFT AND MOLECULAR DOCKING CALCULATIONS ON THE 1,3,4-
THIADIAZOLETHIOL SUBSTITUTED BENZYL ETHERS**

Taner Erdogan^a, Serpil Ozkurt Sivrikaya^a

^a Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School, Kocaeli University

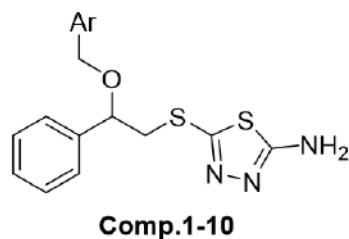
ABSTRACT

In the present study, some novel 1,3,4-thiadiazolethiol substituted benzyl ethers have been investigated computationally via density functional theory (DFT) and molecular docking calculations. In the first part of the study, geometry optimizations, frequency analyses, molecular electrostatic potential (MEP) map calculations, frontier molecular orbital (FMO) calculations have been performed on the title compounds at DFT B3LYP level of theory with the use of various basis sets. In the second part of the study, AChE, BChE and HSP90A were selected as receptors and the binding affinities of the investigated molecules against these proteins have been determined. Results show that the compounds exhibit good to moderate binding affinity for investigated proteins.

Keywords: thiadiazole, computational chemistry, DFT, molecular docking, AChE, BChE, HSP90A

INTRODUCTION

Thiadiazole compounds are important structures in organic chemistry. These heterocycles and their derivatives can act as antimicrobial, antituberculosis, anti-inflammatory, anticancer, antihypertensive and anticonvulsant agents and α -glucosidase and cyclooxygenase-2 inhibitors. In recent years, there has been intense investigation of different classes of thiadiazole compounds. [1-6] In this study some DFT and molecular docking calculations have been performed on 1,3,4-thiadiazolethiol substituted benzyl ethers. The structures of the investigated molecules are given in Fig.1.



Comp.	Ar	Comp.	Ar
1	phenyl	6	2-fluorophenyl
2	2-chlorophenyl	7	4-fluorophenyl
3	4-chlorophenyl	8	2,4-dichlorophenyl
4	2-bromophenyl	9	3,4-dichlorophenyl
5	4-bromophenyl	10	2,6-dichlorophenyl

Fig.1. Investigated molecules

THEORETICAL CALCULATIONS

In the first part of the study, some DFT calculations have been performed on the title compounds. DFT calculations performed at B3LYP level of theory with the use of various basis sets including 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311+G(d,p) and 6-311+G(2d,p) basis sets.

All calculations have been performed using Gaussian 09 Rev. D01. [7] Avogadro 1.1.1 [8] software was used for the conformational searches and GaussView 5.09 [9] was used for the visualization of the computational results.

Prior to geometry optimizations, conformer search calculations have been performed on the title compounds. Then, geometry calculations, frequency analyses, frontier molecular orbital calculations and molecular electrostatic potential map calculations have been performed on the investigated compounds. Optimized geometries obtained with 6-311+G(d,p) basis set are given in Fig.2

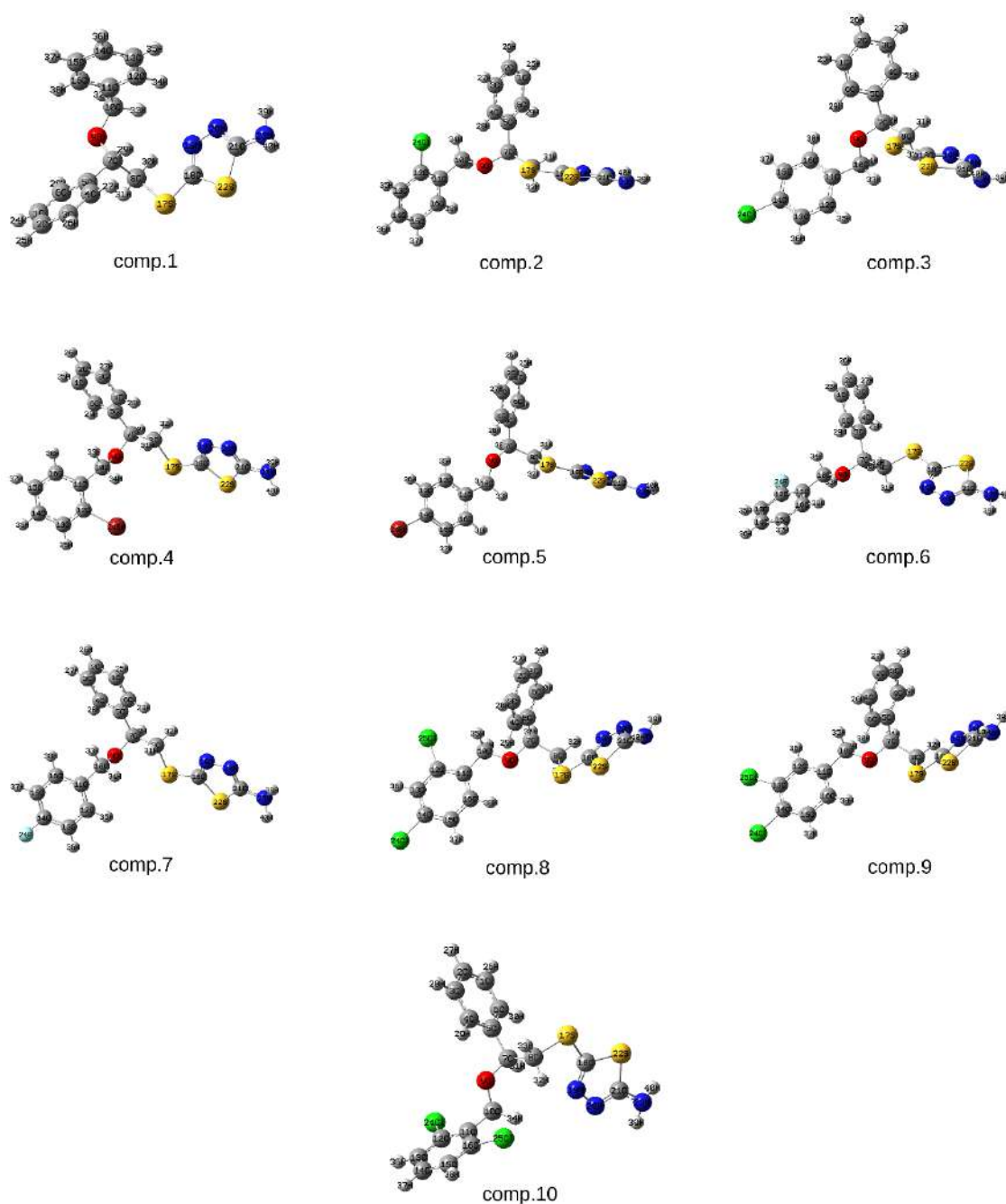


Fig.2. Optimized geometries of the investigated compounds.

Molecular electrostatic potential (MEP) map calculations have been performed at DFT B3LYP level of theory with the use of 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311+G(d,p) and 6-311+G(2d,p) basis sets. For instance MEP map of compound 1 is given in Fig.3.

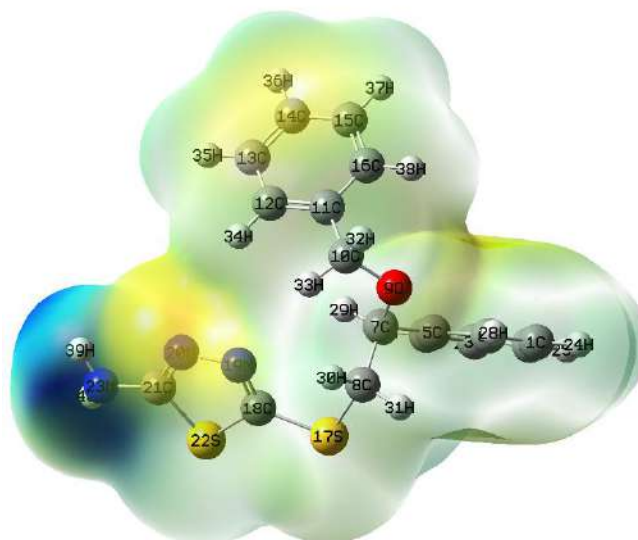


Fig.3. MEP map of compound 1 calculated with 6-311+G(2d,p) basis set.

In Fig.4., vibrational spectrum of compound 1 is given. The spectrum has been obtained at DFT/ B3LYP 6-311+G(2d,p) level of theory.

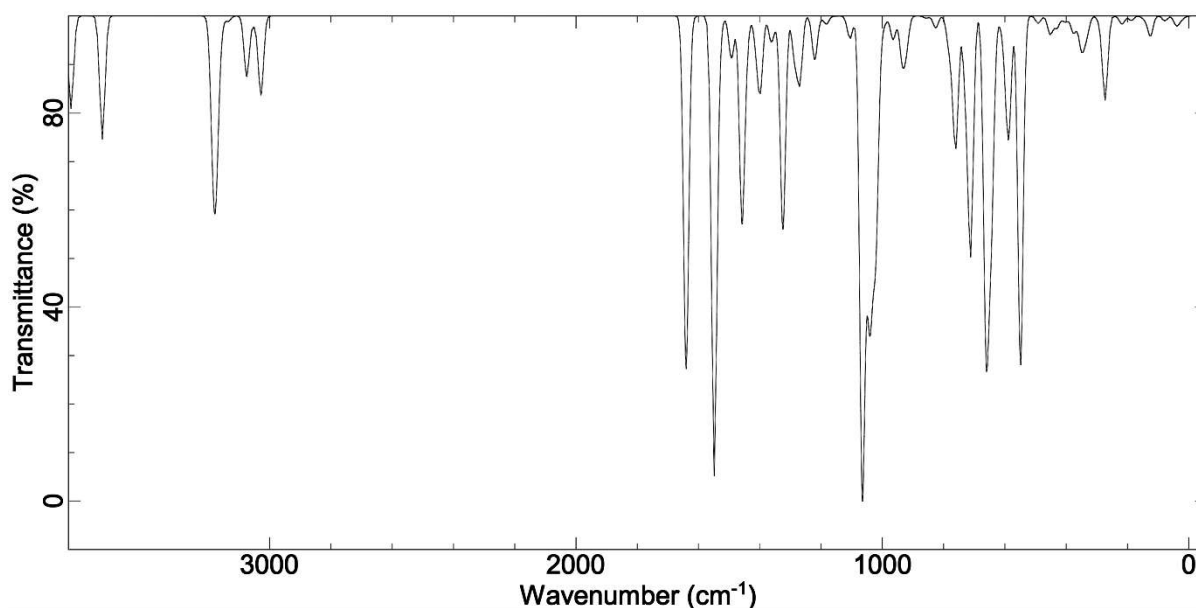


Fig.4. IR spectra of compound 1 calculated with 6-311+G(2d,p) basis set.

HOMO and LUMOs of the investigated molecules are calculated at DFT B3LYP level of theory with the use of same basis sets. Calculated HOMO and LUMO energies and the HOMO-LUMO gap values, calculated with 6-311+G(2d,p) basis set are given in Table 1. Since higher HOMO-LUMO gap correspond to most stable compound, it can be seen that compound 6 is the most stable compound.

Table 1. HOMO and LUMO energies of the investigated molecules.

	LUMO (hartree)	HOMO (hartree)	HOMO-LUMO Gap (hartree)
Comp.1	-0.03837	-0.22737	0.18900
Comp.2	-0.03724	-0.21809	0.18085
Comp.3	-0.03478	-0.22441	0.18963
Comp.4	-0.03810	-0.22258	0.18448
Comp.5	-0.03539	-0.22466	0.18927
Comp.6	-0.03378	-0.22462	0.19084
Comp.7	-0.03588	-0.22667	0.19079
Comp.8	-0.03833	-0.22486	0.18653
Comp.9	-0.03990	-0.22549	0.18559
Comp.10	-0.04228	-0.22599	0.18371

Molecular docking calculations have been performed for cholinesterase enzymes and heat shock protein. The structures of the proteins have been obtained from RCSB Protein Data Bank [10]. PDB codes of AChE, BChE and HSP90A are 5ei5, 4bds and 3qdd, respectively. Molecular docking calculations have been performed with the use of AutoDock Vina [11], UCSF Chimera [12], AutoDockTools [13-14] and Discovery Studio Visualizer [15] program packages. Binding affinities are given in Table 2 and Fig.5.

Table 2. Binding affinities of the investigated compounds.

	Binding Affinities (kcal/mol)		
	AChE	BChE	HSP90A
Comp.1	-9.8	-8.9	-8.9
Comp.2	-10.2	-9.2	-9.0
Comp.3	-10.3	-8.8	-9.1
Comp.4	-10.2	-9.4	-9.0
Comp.5	-10.2	-8.7	-9.0
Comp.6	-10.1	-9.2	-9.0
Comp.7	-10.3	-9.2	-9.1
Comp.8	-10.6	-9.1	-9.0
Comp.9	-10.5	-9.1	-9.2
Comp.10	-9.8	-9.3	-9.1

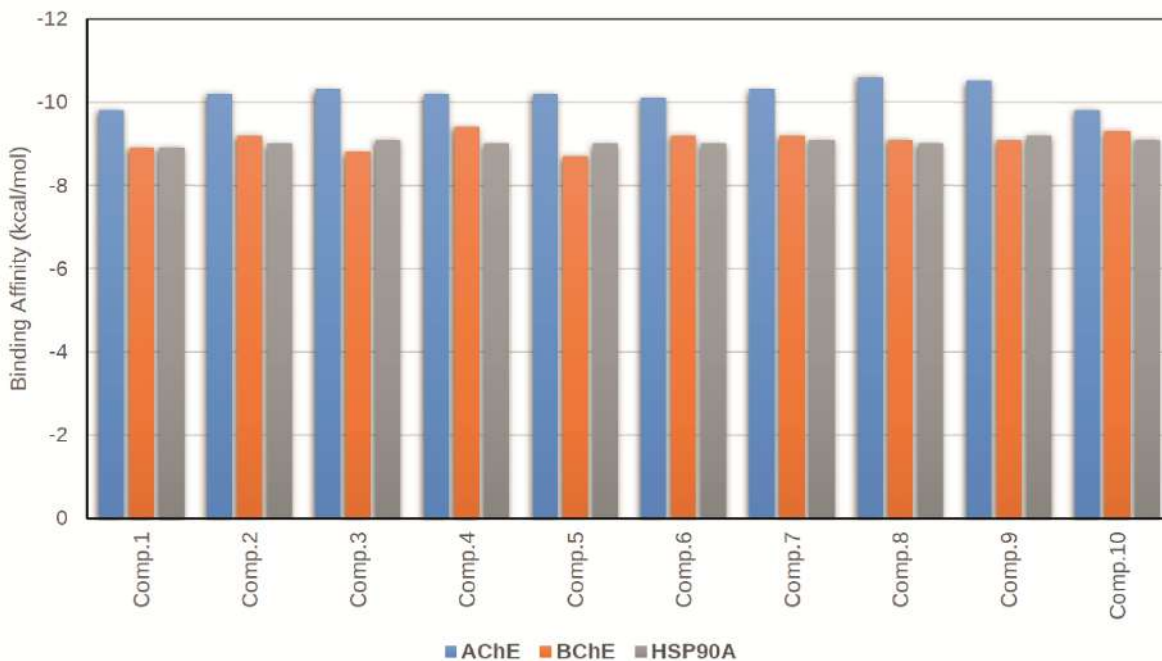


Fig.5. Binding affinities of the investigated compounds.

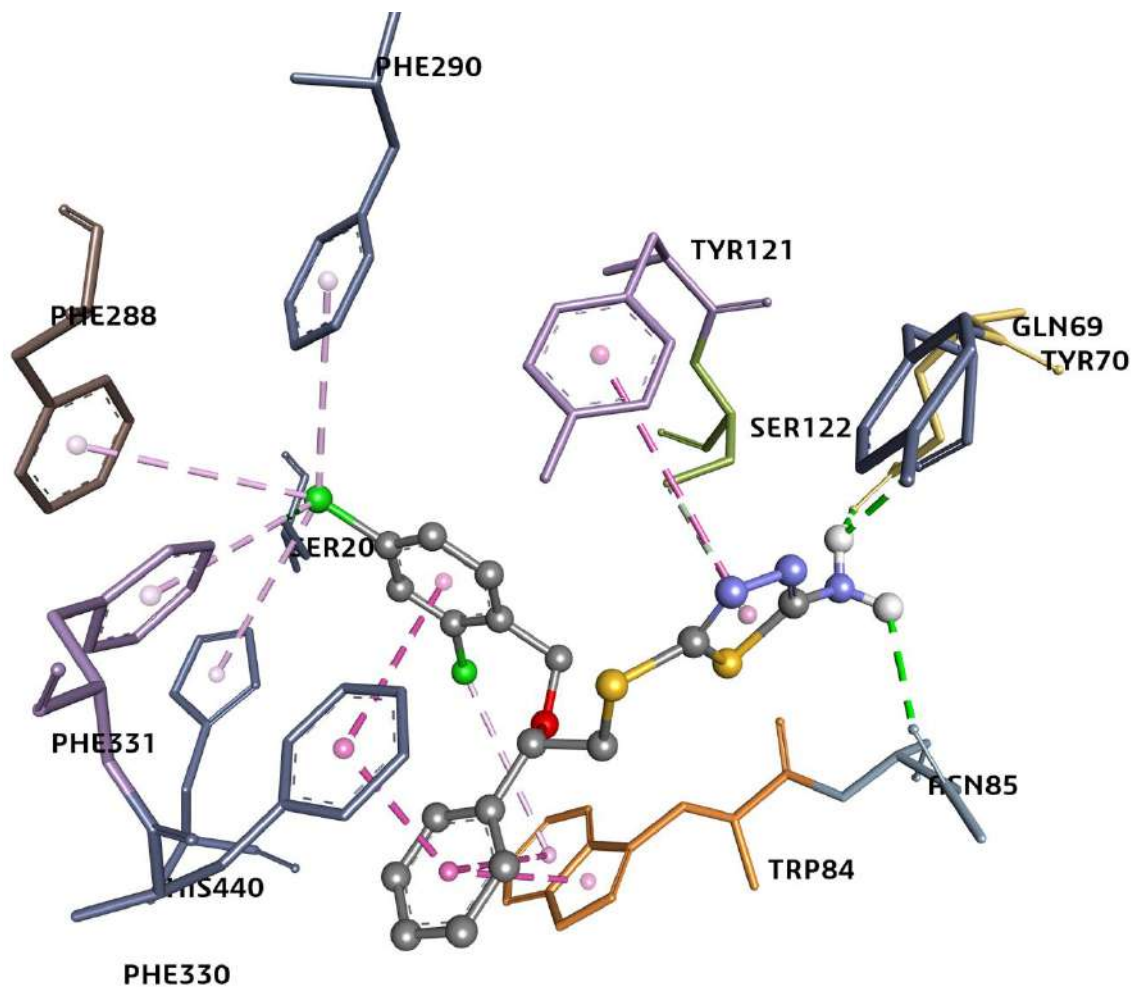


Fig.6. Receptor – ligand interactions between compound 6 and AChE.

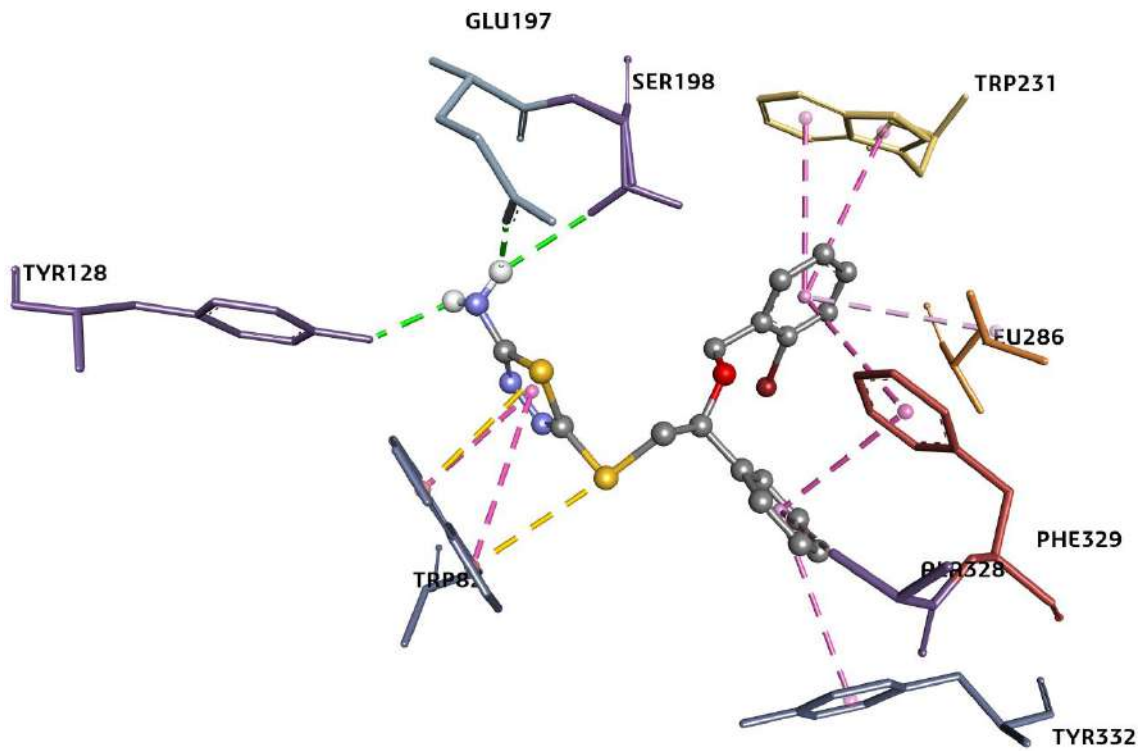


Fig.7. Receptor – ligand interactions between compound 4 and BChE.

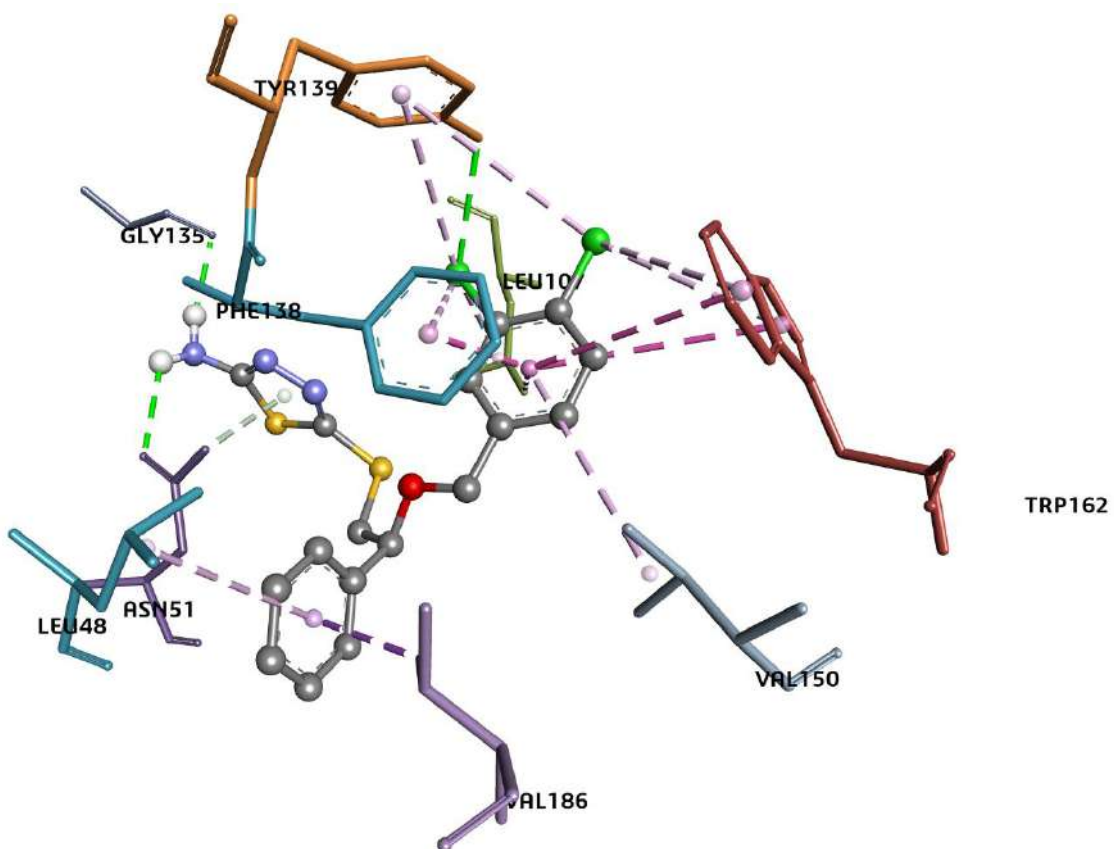


Fig.8. Receptor – ligand interactions between compound 9 and HSP90A.

RESULTS AND DISCUSSION

Results show that investigated compounds exhibit good binding affinity for AChE. Compound 8 which is the 2,4-dichloro substituted benzyl ether derivative, exhibit the highest binding affinity for AChE. On the other hand investigated compounds exhibit average binding affinity for BChE and HSP90A.

According to frontier molecular orbital calculations, the highest HOMO-LUMO gap was obtained for compound 6 and so it can be said that compound 6 is the most stable compound among compounds 1-10.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by Kocaeli University Scientific Research Projects Unit. Project Number: 2011/062. The author acknowledge Kocaeli University for the financial support.

REFERENCES

1. C.B. Chapleo, M. Myers, P.L. Myers, J.F. Saville, A.C.B. Smith, M.R. Stillings, I.F. Tulloch, D.S. Walter, A.P. Welbourn, *Journal of Medicinal Chemistry* (1986) <https://doi.org/10.1021/jm00161a024>
2. C.B. Chapleo, P.L. Myers, A.C.B. Smith, I.F. Tulloch, D.S. Walter, *Journal of Medicinal Chemistry* (1987) <https://doi.org/10.1021/jm00388a038>
3. M.R. Stillings, A.P. Welbourn, D.S. Walter, *Journal of Medicinal Chemistry* (1986) <https://doi.org/10.1021/jm00161a025>
4. M.T. Javid, F. Rahim, M. Taha, H.U. Rehman, M. Nawaz, A. wadood, S. Imran, I. Uddin, A. Mosaddik, K.M. Khan, *Bioorganic Chemistry* (2018) <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2018.03.022>
5. Y. Song, D.T. Connor, A.D. Sercel, R.J. Sorenson, R. Doubleday, P.C. Unangst, B.D. Roth, V.G. Beylin, R.B. Gilbertsen, K. Chan, D.J. Schrier, A. Guglietta, D.A. Bornemeier, R.D. Dyer, *Journal of Medicinal Chemistry* (1999) <https://doi.org/10.1021/jm980570y>
6. F. Clerici, D. Pocar, M. Guido, A. Loche, V. Perlini, M. Brufani, *Journal of Medicinal Chemistry* (2001) <https://doi.org/10.1021/jm001027w>
7. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. Montgomery, J. A. , J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, 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, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, Gaussian 09. 2013, Gaussian Inc.: Wallingford CT.
8. M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison, *Journal of Cheminformatics* (2012) <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>.
 9. R. Dennington, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 5. 2009, Semichem Inc.: Shawnee Mission, KS.
 10. <https://www.rcsb.org/>
 11. O. Trott, A.J. Olson, *Journal of Computational Chemistry* (2010) <https://doi.org/doi:10.1002/jcc.21334>
 12. E.F. Pettersen, T.D. Goddard, C.C. Huang, G.S. Couch, D.M. Greenblatt, E.C. Meng, T.E. Ferrin, *J Comput Chem* (2004) <https://doi.org/10.1002/jcc.20084>
 13. Michel F. Sanner. Python: A Programming Language for Software Integration and Development. *J. Mol. Graphics Mod.*, 1999, Vol 17, February. pp57-61.
 14. Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S. and Olson, A. J. (2009) Autodock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. *J. Computational Chemistry* 2009, 16: 2785-91.
 15. D.S. BIOVIA, Discovery Studio Visualizer, v17.2.0.16349. 2016, San Diego: Dassault Systèmes.

EFFECT OF TEMPERATURE ON THE ADSORPTION OF ALLURA RED DYE ONTO MULTIWALLED CARBON NANOTUBES

Fatma OĞUZ ERDOĞAN

Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School,
Kocaeli University, Kocaeli, Turkey.

foerdogan@gmail.com

ABSTRACT

Allura red (FD&C Red 40) is a popular food dye used worldwide. Annual production in 1980 was greater than 2.3 million kilograms. Adsorption is one of the several techniques that has been successfully used for food dyes removal. Adsorption of allura red food dye onto multiwalled carbon nanotubes in aqueous phase at various temperatures and adsorbent dosage were studied. The adsorption studies include both equilibrium adsorption isotherms and kinetics. The experimental adsorption equilibrium data were compared to the Langmuir, Freundlich, Temkin and Dubinin-Radushkevich (DR) isotherm models and the isotherm model parameters were determined. Langmuir adsorption isotherm constant corresponding to adsorption capacity, Q_0 , was found to be 151.3 mg/g at 30 °C. The kinetic of adsorption was investigated using pseudo first order and pseudo second order kinetic models. The mechanism of the adsorption process was also described from the intraparticle diffusion model. The results indicate that multiwalled carbon nanotubes could be employed as a effective adsorbent for the removal of the allura red dye from effluents.

Keywords: Multiwalled carbon nanotubes, dye adsorption, allura red, food dye, adsorption isotherms, adsorption kinetic.

1. INTRODUCTION

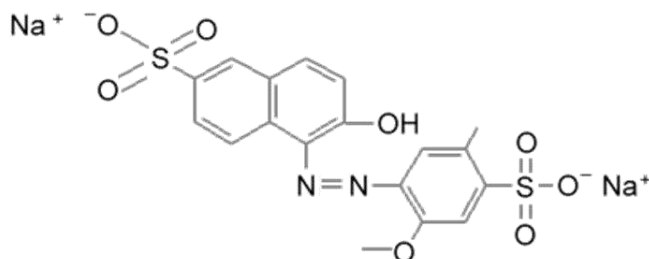
Carbon nanotubes can be classified into two broad categories: single walled carbon nanotubes and multiwalled carbon nanotubes. Multiwalled carbon nanotubes are widely used carbonaceous nanomaterials. They are pure carbon molecules consisting of sheets of carbon atoms in hexagonal arrays. Multiwalled carbon nanotubes with different diameters would have different BET surface area, which would affect their adsorptive properties [1-4]. Multiwalled carbon nanotubes showed high affinity for dyes, heavy metals and phenolic pollutants. Most of the dyes used to give color to several products in food, textile, plastic and automotive industries, can accumulate in the environment and have high toxicity to human health. The discharge of colored wastewater from these industries causes many environmental problems. For the removal of dyes from wastewater, adsorption methods are economical, efficient and successful [5, 6].

This work conducted a study of allura red dye removal from aqueous solutions using multiwalled carbon nanotubes. The equilibrium data and kinetic data were analyzed so that we can understand the adsorption mechanism and different models were applied to fit the experimental data.

2. MATERIALS and METHODS

Adsorbate

Allura red dye (AR) purchased from Sigma-Aldrich, was used without any further purification. The chemical structure of AR ($C_{18}H_{14}N_2O_8S_2Na_2$, molecular weight 496.4 g/mol, C.I. 16045, $\lambda_{max}=500$ nm, $pK_a=11$) is shown in Scheme 1[7,8]. Distilled water was used to prepare all solutions. A stock standard solution of 1000 mg/L was prepared by dissolving an appropriate quantity of the solid in distilled water and diluted to the desired initial concentration.



Scheme 1. Chemical structure of allura red dye.

Batch equilibrium studies

To study the effect of parameters such as contact time, solution temperature and adsorbent dose for the removal of AR on multiwalled carbon nanotubes, batch experiments were performed in a set of 60 mL volumetric flasks that contain a definite volume (30 mL in each flask) of fixed initial concentrations of AR dyes solution. The flasks were kept in a thermostated water bath shaker (GFL 1086) at a constant speed of 100 rpm and different temperatures (30, 35 and 40 °C). After adsorption, the sample solutions were filtered and the concentrations of AR in the supernatant were determined by spectrophotometry (LaboMed) at 500 nm. The amount of adsorbate adsorbed at equilibrium condition, q_e (mg/g), was calculated by the following equations:

$$q_e = \frac{(C_0 - C_e)V}{W}$$

where C_0 and C_e are the initial and equilibrium dye concentrations (mg/L), respectively. V is the volume of solution (L) and W is the mass of adsorbent used (g) [6].

Adsorption isotherms

Adsorption isotherms describe how the adsorbate interacts with adsorbents, and give a comprehensive understanding of the nature of interaction. The parameters obtained from the different isotherm models provide important information on the surface properties of the adsorbent and its affinity to the adsorbate. The equilibria were simulated using the Langmuir, Freundlich, DR and Temkin isotherm models in this study.

The Langmuir isotherm assumes monolayer adsorption may only occur at a finite number of localized sites that are identical and equivalent. A well-known linear expression for the Langmuir isotherm is represented as:

$$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{Q_0} + \frac{1}{K_L Q_0 C_e}$$

where Q_0 (mg/g) and K_L (L/mg) are Langmuir constants related to adsorption capacity and adsorption energy, respectively. The values of K_L and Q_0 can be determined from the slope and intercept of the linear plot of $1/q_e$ versus $1/C_e$. The results of essential characteristics of Langmuir isotherm expressed in dimensionless separation factor R_L , calculated for all adsorbent dosage at various temperatures investigated revealed that the entire adsorption processes were favourable since their values were in the range of $0 < R_L < 1$. The R_L equation is given by:

$$R_L = \frac{1}{(1 + K_L C_0)}$$

where K_L is the Langmuir constant, and C_0 the initial dye concentration mg/L [6].

The Freundlich isotherm is an equation assuming that the adsorption process takes place on a heterogeneous surface through a multilayer adsorption mechanism and adsorption capacity is related to the concentration of dye at equilibrium. The well-known linear form of Freundlich is given by

$$\ln q_e = \ln K_F + \frac{1}{n} \ln C_e$$

where K_F and $1/n$ are the Freundlich adsorption and a measure of adsorption intensity, respectively. The values of K_F and $1/n$ were calculated from the intercept and slope of the plot of $\ln q_e$ versus $\ln C_e$ [9].

The Temkin isotherm assumes the heat of adsorption of all molecules in the layer decreases linearly with surface coverage rather than logarithmically due to adsorbent-adsorbate interactions. The linear form of Temkin isotherm is expressed as:

$$q_e = B_1 \ln A + B_1 \ln C_e$$

where $B_1 = RT/b$, b (J/mol) is the Temkin constant related to heat of adsorption, A (L/g) is the equilibrium binding constant, R (8.314 J/mol K) is the gas constant, and T (K) is the temperature. The corresponding parameters were calculated from the slope and intercept of a linear plot of q_e versus $\ln C_e$ [4, 10].

The Dubinin-Radushkevich (DR) model is a more general model in which assumption is not based on homogeneous surface or constant adsorption potential, it gives insight into the porosity as well as the adsorption energy. The linear presentation of the DR isotherm equation is as follows:

$$\ln q_e = q_0 - \beta \varepsilon^2$$

where q_e is the amount of AR dye molecules adsorbed on per unit weight of adsorbent (mol/L), q_0 is the maximum adsorption capacity mol/g; β is the activity coefficient related to adsorption mean free energy mol²/J²; and ε is the Polanyi potential given by

$$\varepsilon = RT \ln \left(1 + \frac{1}{C_e} \right)$$

The adsorption mean free energy, E (kJ/mol) is given as:

$$E = \frac{1}{\sqrt{2\beta}}$$

The mean free energy (E) of adsorption specifies the adsorption mechanism whether its physical or chemical. Physical adsorption process occurs if the value of $E < 8$ kJ/mol while $8 < E < 16$ kJ/mol describes chemical adsorption mechanism [10].

Adsorption kinetics

The kinetics of adsorption is important because this is what controls the efficiency of the process and the equilibrium time. It also describes the rate of AR dye uptake on multiwalled carbon nanotubes. The uptake of AR dye at time t , q_t (mg/g) was calculated by:

$$q_t = \frac{(C_0 - C_t)V}{W}$$

where C_t (mg/L) is the liquid-phase concentration of dye at time t (min). The pseudo-first-order kinetic model can be presented by the following Lagergren rate equation:

$$\log(q_e - q_t) = \log q_e - \frac{k_1}{2.303} t$$

where q_e and q_t are the amounts of adsorbate adsorbed (mg/g) at equilibrium and at contact time t (min), respectively and k_1 is the pseudo-first-order rate constant (min^{-1}). The values of q_e and k_1 for the pseudo-first-order kinetic model were determined from the intercepts and the slopes of the plots of $\log(q_e - q_t)$ versus t , respectively [6].

The pseudo-second-order kinetic model can be represented in the following form:

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{1}{q_e} t$$

where k_2 is the rate constant of pseudo-second-order adsorption ($\text{g}/(\text{mg min})$). The values of k_2 and q_e for the pseudo-second-order kinetic model were determined from the intercepts and the slopes of the plots of t/q_t versus t , respectively [6].

As the above kinetic models (pseudo-first-order and pseudo-second-order models) were not able to identify the diffusion mechanism, thus intraparticle diffusion model based on the theory proposed by Weber and Morris was tested. According to this theory:

$$q_t = k_{pi} t^{1/2} + C_i$$

where k_{pi} ($\text{mg/g min}^{1/2}$), the rate parameter of stage i , is obtained from the slope of the straight line of q_t versus $t^{1/2}$ [9].

3. RESULTS AND DISCUSSION

Effects of adsorbent dosage and contact time

The adsorptive properties of the multiwalled carbon nanotubes to the AR food dye were examined. Figure 1 presents the adsorption isotherms of the AR dye as the relationship

between the amount of dye adsorbed per unit mass of a given MWCNT and time. These experiments reveal that an increase in the mass of MWCNT from 0.005 to 0.02 g leads to an increase of AR dye removal from 66.2% to 97.26%. Conversely, adsorbed AR dye (mg/g) decreased from 71.342 to 26.208 mg/g when the mass of MWCNT increased from 0.005 to 0.02 g, at 30 °C. When the mass of the MWCNT increases, the amount of AR dye molecule is reduced per unit of the adsorbent dosage, due to the unsaturation of active adsorbent sites. A similar observation was previously reported for removal of sunset yellow dye from aqueous solution by MWCNT and MCM-41 [4, 11]. Figure 3 also shows rapid adsorption of AR dye in the first 30 min for all adsorbent dosage, and thereafter, the adsorption rate decreases gradually till it reaches equilibrium. The higher adsorption rate observed before 100 min of process for adsorbent dosage of 0.005 and 0.01 g at 30 °C can be explained by the greater number of active sites available on the surface of the adsorbents for the adsorption of AR dye molecules and then it is reduced after the adsorption process. Hameed [12] reported that equilibrium time of 120 min was enough for the adsorption of methylene blue dye by spent tea leaves at 30 °C.

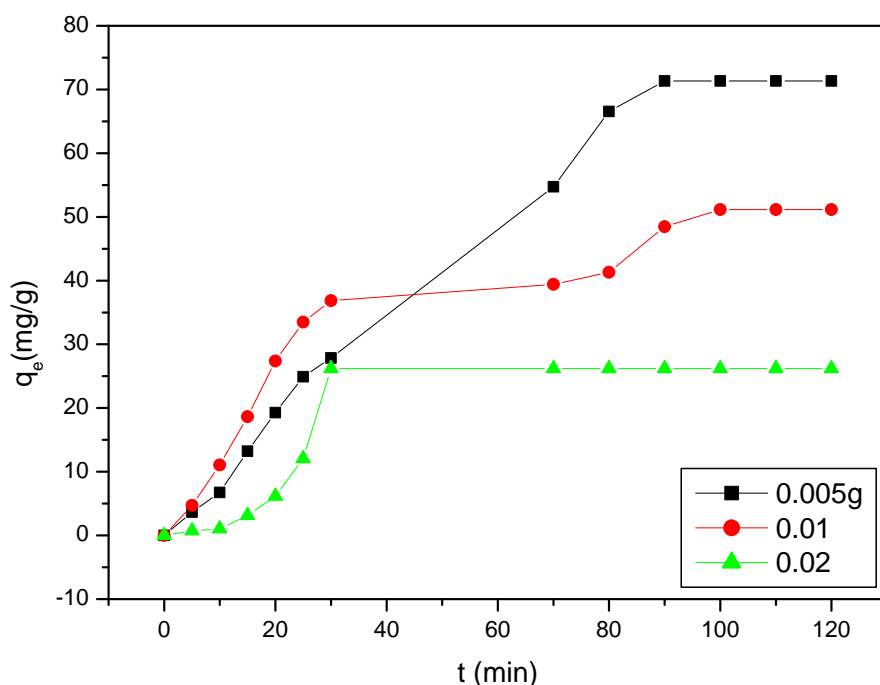


Figure 1. Effect of adsorbent dosage and contact time on the adsorptive uptake of allura red dye onto MWCNT.

Effects of the solution temperature on dye adsorption

The influence of the temperature on the adsorption of AR dye using MWCNT was determined in three different temperatures (30, 35 and 40 °C) at the optimal values of the adsorbent dosage and reaction time. Figure 2 presents the adsorption capacity of AR dye onto MWCNT at temperatures from 30 to 40 °C. The result shows that the equilibrium adsorption capacity of AR dye decreased while increasing the solution temperature from 30 to 40 °C. This decrease may be due to weakening of the bonds between the dye molecules and the active sites of

MWCNT. Similar phenomena have been observed in the adsorption of sunset yellow [4] and methylene blue [13] dyes onto MWCNT and orange peel adsorbent.

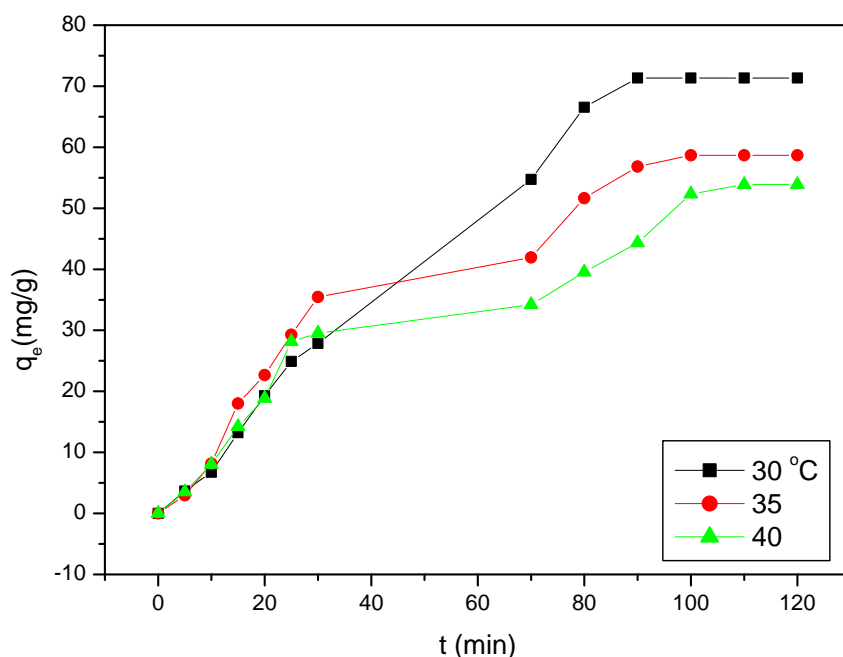


Figure 2. Effect of solution temperature on the adsorption of the allura red dye onto MWCNT.

Adsorption isotherms

The equilibrium data are essential to the practical design and optimization of the adsorption process. The equilibrium isotherms in this study were analyzed using the Langmuir, Freundlich, Temkin and DR isotherms. All the correlation coefficients, R^2 values and the four isotherm models are summarized in Table 1. The DR isotherm model gave the highest R^2 values, showing that the adsorption of AR dye onto MWCNT was best described by this model. Langmuir adsorption isotherm constant related to adsorption capacity, Q_0 , was found as 151.3 mg/g. The result revealed that the adsorption of AR dye on MWCNT was described by the Langmuir isotherm, indicating homogeneous and a monolayer was present. The R_L values between 0 and 1 indicate favorable adsorption. The value of R_L was found to be 0.062, which further confirmed that the Langmuir isotherm was favorable for the adsorption of the AR dye on the MWCNT. The values of the Freundlich equilibrium coefficients K_F and $1/n$ were generated from the plot of adsorption data. The parameter $1/n$ (0.346, in this study) is a measure of adsorption intensity or surface heterogeneity with values between 0 and 1 becoming more heterogeneous as the value gets closer to zero. The DR isotherm model, further supported the monolayer mechanism which was physical in nature as the values of mean free energy E , were less than 8 kJ/mol. In Temkin isotherm, R^2 value was found as 0.885, which is lower than two other isotherms (Langmuir and DR isotherms). The adsorption energy, b , is positive and was obtained as 155.01 J/mol.

Table 1. Adsorption Isotherm Constants for Adsorption of Allura Red onto MWCNT at 30 °C.

Isotherms	Constants		
Freundlich	K_F (mg/g)(L/mg) ^{1/n}	1/n	R ²
	40.714	0.346	0.790
Langmuir	Q ₀ (mg/g)	K _L (L/mg)	R ²
	151.3	0.751	0.912
Temkin	A (L/g)	b (J/mol)	R ²
	15.095	155.01	0.885
DR	q _s (mg/g)	E (kJ/mol)	R ²
	75.560	1.946	0.987

Adsorption kinetics

The results of the equilibrium time experiments were used to calculate pseudo-first order and pseudo-second order models, as the widely used kinetic models. The k₁ values, correlation coefficient values (R²) and q_e values (experimental and calculated) are summarized in Table 2. The correlation coefficients for the pseudo-first order model changed in the range of 0.782-0.999. The linear plot shows a good agreement between the experimental and the calculated q_e values. It suggests that the kinetic of AR dye adsorption onto MWCNT follow the pseudo-first order kinetic model and hence a diffusion-controlled phenomena. The higher regression coefficients indicated that the pseudo-first order model was a better fit than the pseudo-second order model.

Table 2. Kinetic model parameters for the adsorption of allura red dye onto MWCNT at different adsorbent dosage and temperatures.

Adsorption Conditions			Pseudo first order			Pseudo second order		
T(°C)	m _{ads} (g)	q _{e,exp} (mg/g)	k ₁ (min) ⁻¹	q _{e,cal} (mg/g)	R ²	k ₂ (g/mgmin)	q _{e,cal} (mg/g)	R ²
30	0.005	71.342	0.0302	88.373	0.911	7.74E-7	1045.7	0.046
	0.01	51.149	0.0871	71.531	0.865	3.07E-4	151.332	0.440
	0.02	26.208	0.0223	28.915	0.782	4.85E-4	18.622	0.268
35	0.005	58.677	0.0104	52.751	0.980	1.57E-4	72.674	0.988
	0.01	48.476	0.0122	48.467	0.999	1.21E-4	66.313	0.904
	0.02	26.876	0.0183	30.122	0.994	2.85E-4	35.311	0.914
40	0.005	63.462	0.0242	66.836	0.987	0.0830	10.666	0.811
	0.01	49.179	0.0201	49.187	0.989	0.0111	10.310	0.660
	0.02	25.680	0.0307	32.545	0.973	0.0378	5.490	0.668

It is known that the mechanism of adsorption process is usually demonstrated by two rate controlling steps: transport of adsorbate ions from the boundary film to the external surface of the adsorbent, and transfer of ions from the surface to the intra-particle active sites [9]. In this study, intraparticle diffusion model was used to analyze the adsorption mechanism of AR dye. The intraparticle diffusion kinetic parameters of the adsorption of AR dye are shown in Table 3. It was found that all the plots exhibited multi-linearity, and could be divided into two separate straight line regions, indicating that more than one diffusion steps took place during the adsorption of AR dye. The slope of the linear portion represented the rate of the adsorption process. The initially steeper linear portion could be attributed to the external resistance to AR dye mass transfer surrounding the particles, while the second linear portion was the gradual sorption stage in which intraparticle diffusion dominated.

Table 3. Intraparticle diffusion kinetic parameters for the adsorption of allura red dye onto MWCNT at different adsorbent dosage and temperatures.

T(°C)	m _{ads} (g)	C _i (mg/g)		K _{di} (mg/g min ^{1/2})			
		C ₁	C ₂	K _{di1}	R ₁ ²	K _{di2}	R ₂ ²
30	0.005	-16.371	-38.390	8.006	0.973	10.728	0.827
	0.01	-20.476	-35.018	10.527	0.986	8.232	0.945
	0.02	-12.429	-	4.986	0.768	-	-
35	0.005	-9.970	7.597	5.304	0.996	2.408	0.932
	0.01	-9.614	1.234	4.479	0.994	2.241	0.842
	0.02	-6.117	12.547	2.825	0.994	0.692	0.975
40	0.005	-18.588	44.353	8.888	0.989	1.191	0.928
	0.01	-12.512	29.012	6.322	0.992	1.254	0.946
	0.02	-9.332	17.569	3.782	0.976	0.506	0.911

4. CONCLUSION

The results obtained show that the multiwalled carbon nanotubes can be used for the removal of allura red food dye from aqueous solution. The equilibrium data were fitted to Langmuir, Freundlich, Temkin and Dubinin- Radushkevich isotherm models and the equilibrium data were best described by the DR and Langmuir isotherm models. The maximum monolayer adsorption capacity of AR onto MWCNT was 151.3 mg/g at 30 °C. Kinetic data were tested using the pseudo-first order and pseudo-second order kinetic models. The kinetics of the adsorption process was found to follow the pseudo-first order kinetic model with a multi-step diffusion process.

ACKNOWLEDGEMENTS

The author acknowledges the financial support provided by Kocaeli University Scientific Research Projects Unit. (Project No: 2017/57 HD and 2019/011 HD).

REFERENCES

- [1] Boukhalfa, N., Boutahala, M., Djebri, N., Idris A., 2019. Kinetics, thermodynamics, equilibrium isotherms, and reusability studies of cationic dye adsorption by magnetic alginate/oxidized multiwalled carbon nanotubes composite. *International Journal of Biological Macromolecules* 123, 539-548.
- [2] DENGHANI, M. H., Kamalian, S., Shayeghi, M., Yousefi, M., Heidarinejad, Z., Agarwal, S., Gupta, V. K., High-performance removal of diazinon pesticide from water using multiwalled carbon nanotubes. *Microchemical Journal* 145, 486-491.
- [3] Wang, J., Wang, F., Yao, J., Guo, H., Blake, R.E., Choi, M.M.F., Song, C., 2013. Effect of pH and temperature on adsorption of dimethyl phthalate on carbon nanotubes in aqueous phase. *Analytical Letters* 46, 379-393.
- [4] Erdogan, F.O., 2018. Comparative study of sunset yellow dye adsorption onto cornelian cherry stones-based activated carbon and carbon nanotubes. *Bulgarian Chemical Communications* 50, 4, 592-601.
- [5] Ferreira, G.M.D., Ferreira, G.M.D., Hespanhol, M.C., Rezende, J.P., Pires, A.C.S., Gurgel, L.V.A., Silva, L.H.M., 2017. Adsorption of red azo dyes on multi-walled carbon nanotubes and activated carbon: A thermodynamic study. *Colloids and Surfaces A* 529, 531-540.
- [6] Erdogan, T., Erdogan, F.O., 2016. Characterization of the adsorption of disperse yellow 211 on activated carbon from cherry stones following microwave-assisted phosphoric acid treatment. *Analytical Letters* 49, 7, 917-928.
- [7] Erdogan, F.O., 2018. Preparation and characterization of activated carbon from Turkish green plum stones by chemical activation with LiOH for allura red dye adsorption. *Uluslararası Hakemli Mühendislik ve Fen Bilimleri Dergisi* 13, 60-72
- [8] Erdogan, F.O., 2019. Comparison of activated carbon produced from carob stones with 4A zeolite for allura red AC dye adsorption. *The Online Journal of Science and Technology* 9 (1), 75-79.
- [9] Li, Y., Du, Q., Liu, T., Qi, Y., Zhang, P., Wang, Z., Xia, Y., 2011. Preparation of activated carbon from *Enteromorpha prolifera* and its use on cationic red X-GRL removal. *Applied Surface Science* 257, 10621-10627.

[10] Boukhalifa, N., Boutahala, M., Djebri, N., Idris, A., 2019. Kinetics, thermodynamics, equilibrium isotherms, and reusability studies of cationic dye adsorption by magnetic alginate/oxidized multiwalled carbon nanotubes composites. *International Journal of Biological Macromolecules* 123, 539-548.

[11] Erdogan, F. O., Erdogan, T., 2018. Adsorption of sunset yellow FCF onto MCM-41. *The Online Journal of Science and Technology* 8 (1), 16-20.

[12] Krishni, R. R., Foo, K.Y., Hameed, B. H., 2014. Adsorption of methylene blue onto papaya leaves: comparison of linear and nonlinear isotherm analysis. *Desalination and Water Treatment* 52, 6712-6719.

[13] Kumar, P.S., Fernando, P. S. A., Ahmed, R. T., Srinath, R., Priyadharshini, M., Vignesh, A. M., thanjiappan, A., 2014. *Chemical Engineering Communications* 201, 1526-1536.

ADSORPTION OF CO₂ AND CH₄ GASES ONTO FE/MCM-41, FE/MWCNT AND FE/ZEOLITE COMPOSITES

Fatma OĞUZ ERDOĞAN

Department of Chemistry and Chemical Processing Technologies, Kocaeli Vocational School,
Kocaeli University, Kocaeli, Turkey, foerdogan@gmail.com

ABSTRACT

Climate change refers to the rise in average surface temperature on Earth. Climate change is a global problem, the result of increasing the greenhouse gases (CO₂, CH₄, N₂O, HFCs and F₆) emissions. In the response to this status, the capture and storage of carbon dioxide and methane gases will be necessary. Adsorption is the most commonly used method for the capture of CO₂ and CH₄ because of the low cost and the high adsorption capacity. Zeolites are microporous and crystalline aluminium silicates that are used extensively as adsorbents in many chemical reactions. After the discovery of carbon nanotubes and MCM-41, much attention has been devoted to their potential applications, such as the possible storage of CH₄ and capture of CO₂. Composite materials have found widespread application in various fields. In this study, composites were prepared from iron and multiwalled carbon nanotubes, MCM-41 or zeolite. BET, BJH and t-plot methods were used for the characterization of the composite samples based on N₂ adsorption-desorption data obtained at 77.4 K. CO₂ and CH₄ adsorption-desorption isotherms of the composite samples were measured by using a static volumetric apparatus. The equilibrium experiments were conducted at 25 °C and at pressure values up to 900 mmHg. The adsorption data were evaluated by several isotherm models such as Freundlich, Langmuir, Temkin, Dubinin-Radushkevich (DR) and Harkins-Jura (HJ) isotherm models.

Keywords: CH₄ and CO₂ adsorption, composite, iron, multiwalled carbon nanotubes, MCM-41, zeolite.

1. INTRODUCTION

In the last years the high atmospheric concentration of greenhouse gases, particularly carbon dioxide (CO₂) and methane (CH₄), and their implications in climate change became a matter of concern for scientist, policy makers and general public. Some of the current ways to reduce carbon dioxide emissions are the efficient conversion of fossil fuels, the use of low carbon fossil fuels, the use of renewable energy and carbon capture and storage [1-4]. One of the major priorities for carbon capture and storage is to develop the efficient and cost effective CO₂ capture techniques such as absorption, adsorption and membrane separation. Activated carbon, carbon nanotubes, zeolites and MCM-41 have emerged as promising adsorbents due to their good affinity towards CO₂ and CH₄ gases [5-8]. Recently, in order to improve the adsorption capacity of the adsorbents and their interactions with the CO₂ and CH₄ gases, the adsorbents are chemically modified by using different reagents. The surface modification of adsorbents has been mainly conducted via two ways: metal impregnation/doping or group functionalization [9]. In this connection, this paper presents the results from experimental studies on the adsorption of CO₂ and CH₄ on zeolite, multiwalled carbon nanotubes and MCM-41 modified with transition metal Fe.

2. MATERIALS AND METHODS

Multiwalled carbon nanotubes were provided by CNT CO., LTD (Korea). Zeolite and MCM-41 were purchased from Sigma-Aldrich (St. Louis, MO, USA).

CO₂ and CH₄ adsorption measurement

CO₂ and CH₄ adsorption-desorption isotherms of the composite samples were measured using a Micromeritics TriStar II 3020 instrument, which is a static volumetric apparatus. The equilibrium experiments were conducted at 25 °C and at pressures up to 900 mmHg. The CO₂ and CH₄ adsorption capacities were determined using the values of the quantity adsorbed at 900 mmHg. The adsorption data were fitted into Langmuir, Freundlich, Temkin, Harkins-Jura and DR isotherms. Adsorption isotherms describe the interaction between gases (CO₂ and CH₄) and the porous adsorbents.

3. RESULTS AND DISCUSSIONS

Textural characterization

The surface textural properties of the composite adsorbents were characterized with an automated gas sorption apparatus using nitrogen as adsorbate at 77 K. Figure 1 shows the isotherms of the Fe/MCM-41. It can be seen that, the Fe/MCM-41 composite possessed a combination of type I and type IV isotherms according to IUPAC classification [10-12]. Appearance of hysteresis loop indicates the presence of mesopores (2-50 nm). The pore structure of the composite samples were calculated by using the t-method analysis from the N₂ adsorption isotherm.

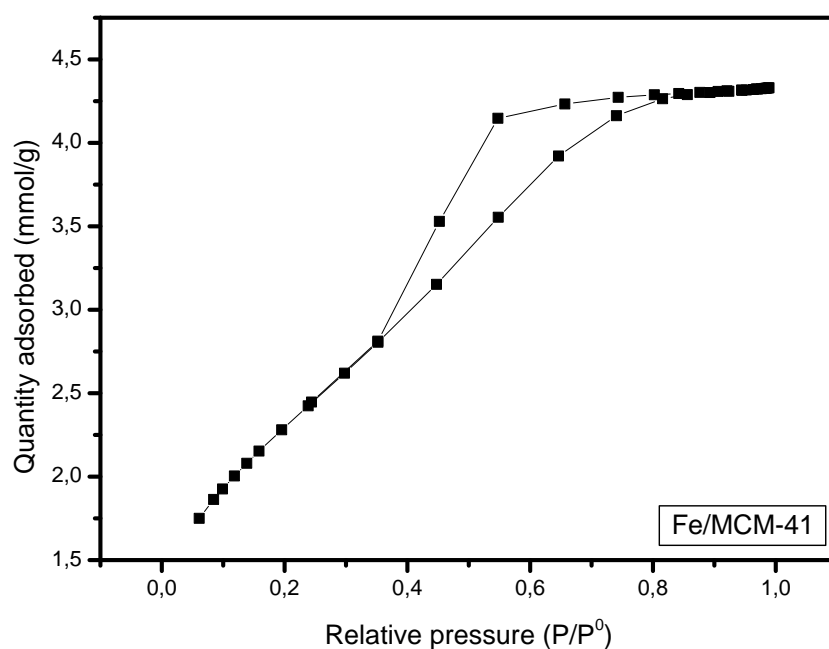


Figure 1. The nitrogen adsorption-desorption isotherms of Fe/MCM-41 composite at 77 K.

The nitrogen adsorption-desorption isotherms of the Fe/Zeolite composite is shown in Figure 2. Appearance of hysteresis loop indicates the presence of mesopores.

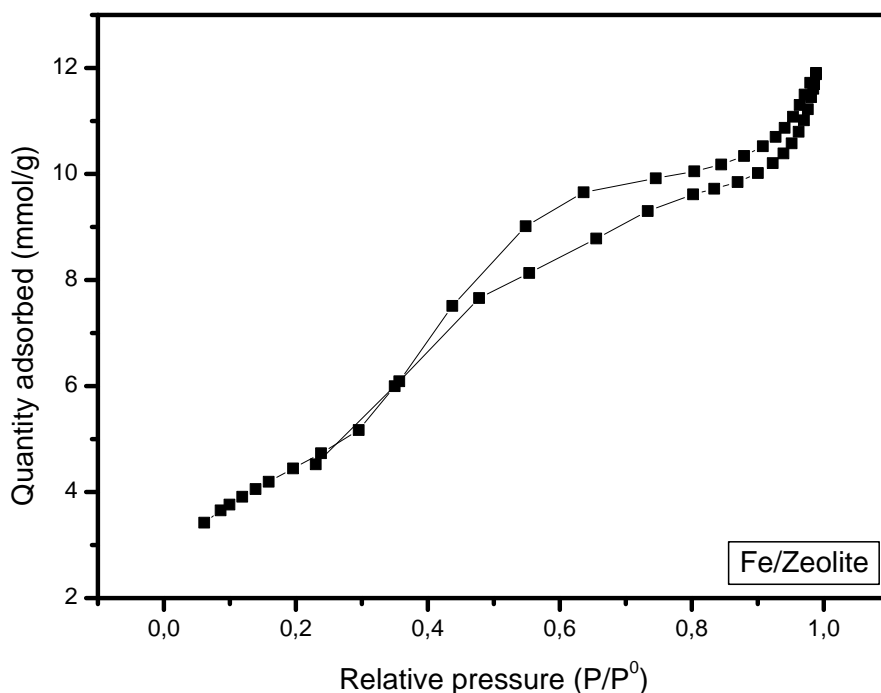


Figure 2. The nitrogen adsorption-desorption isotherms of Fe/Zeolite composite at 77 K.

Figure 3 shows the isotherm of the Fe/MWCNT at 77 K. It can be found that this composite possessed type V isotherm according to the IUPAC. The desorption isotherm of Fe/MWCNT exhibited H3 type hysteresis loop [13, 14].

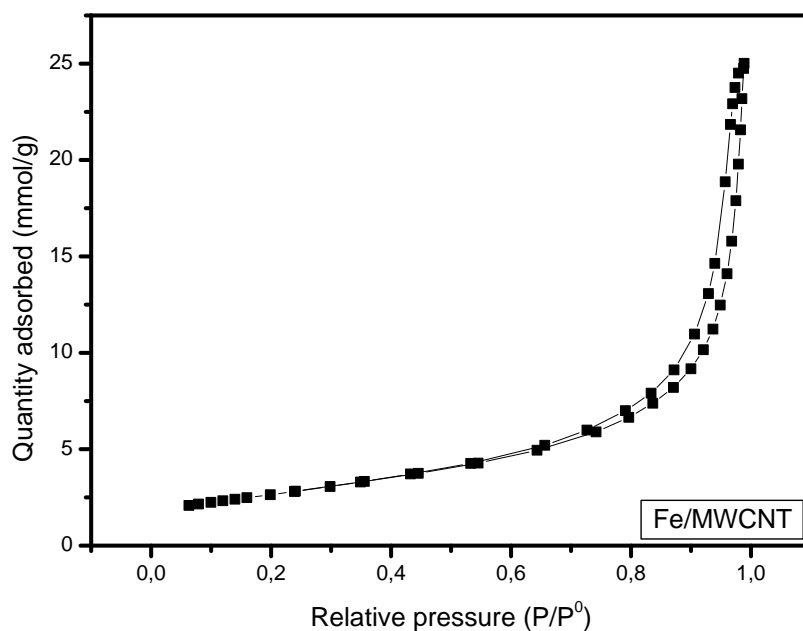


Figure 3. The nitrogen adsorption-desorption isotherms of Fe/MWCNT composite at 77 K.

Table 1 gives the values of the BET surface areas, Langmuir surface areas, total pore volumes, t-Plot micropore volumes and average pore widths which were calculated by using the nitrogen adsorption-desorption data obtained at 77 K.

Table 1. Textural Parameters of Activated Carbon Samples.

Properties	Fe/MCM-41	Fe/Zeolite	Fe/MWCNT
BET surface area (m ² /g)	187.29	363.94	213.26
Langmuir surface area (m ² /g)	258.60	502.70	290.88
Total pore volume (cm ³ /g)	0.150	0.448	0.861
t-Plot micropore volume (cm ³ /g)	0.00007	0.006	0.0259
Average pore width (nm)	3.204	4.422	14.022

CO₂ and CH₄ Adsorptions

CO₂ and CH₄ adsorption-desorption isotherms were obtained on composite samples at 25 °C. Figure 4 represents the CO₂ adsorption-desorption isotherms of the Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT samples at 25 °C. The CO₂ and CH₄ adsorption capacities of these composite adsorbents are shown in Table 2. As shown in Table 2, the CO₂ adsorption capacities of the Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT were 0.676, 0.523 and 0.436 mmol/g, respectively.

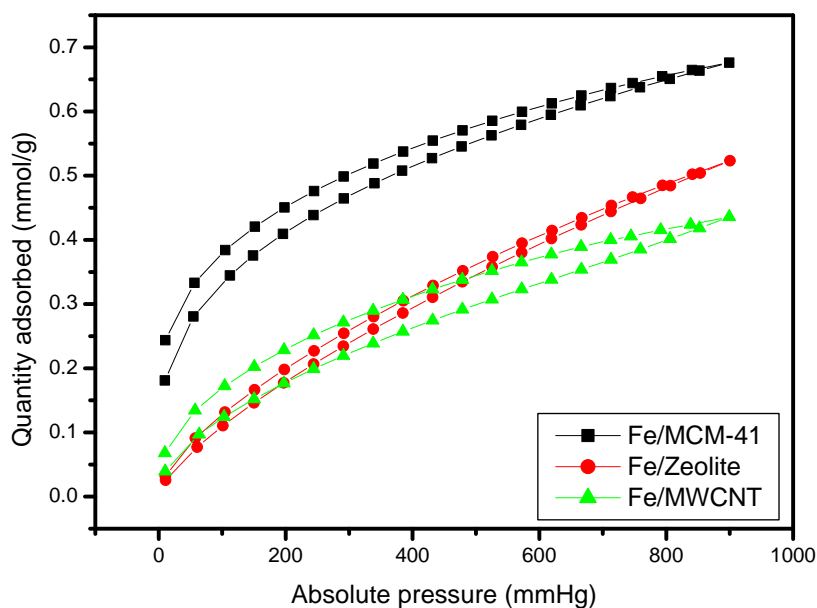


Figure 4. The Carbon Dioxide Adsorption-Desorption Isotherms at 298 K for the Composite Samples.

Figure 5 represents the CH₄ adsorption-desorption isotherms of the composite samples at 25 °C. All of them are also Type II isotherms according to IUPAC classification. As shown in Table 2, the CH₄ adsorption capacities of the Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT were 0.0363, 0.0623 and 0.0594 mmol/g, respectively.

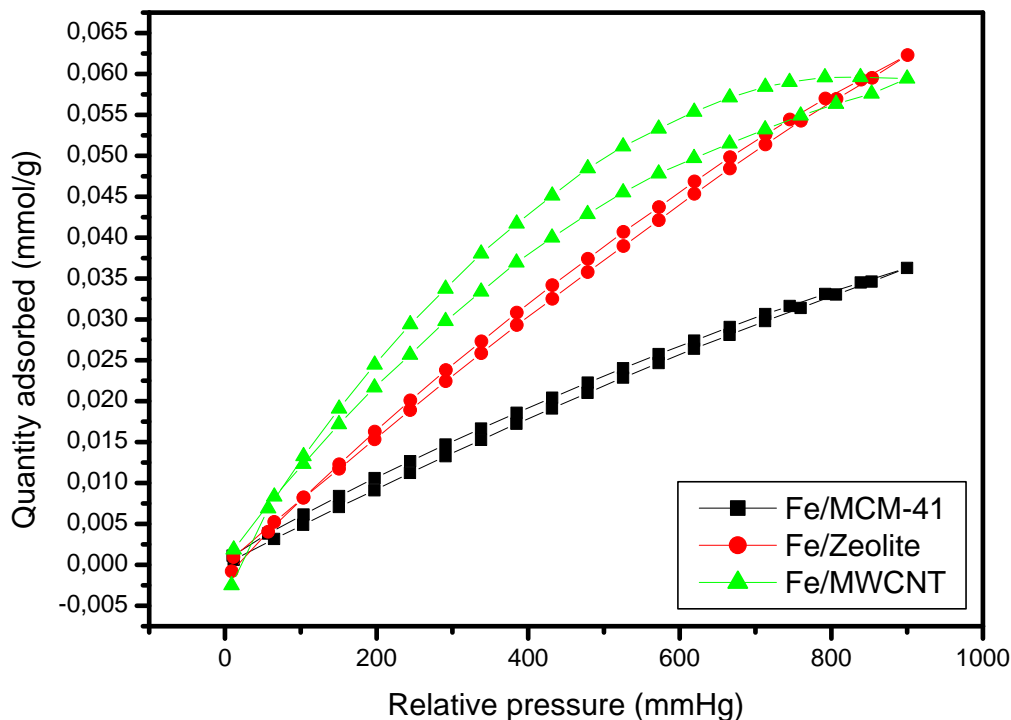


Figure 5. The Methane Adsorption-Desorption Isotherms at 298 K for the Composite Samples.

The highest CH₄ adsorption capacity at 25 °C was found with the Fe/Zeolite sample. The composite samples can be ranked according to their CH₄ adsorption capacities as follows: Fe/Zeolite > Fe/MWCNT > Fe/MCM-41. The relationship between the CH₄ adsorption capacities and the BET surface area in these activated carbon samples show a proportional relation.

Table 2. CO₂ and CH₄ adsorption capacities of porous adsorbents.

Samples	CO ₂ adsorption capacities (mmol/g)	CH ₄ adsorption capacities (mmol/g)
Fe/MCM-41	0.676	0.0363
Fe/Zeolite	0.523	0.0623
Fe/MWCNT	0.436	0.0594

Carbon dioxide and methane adsorption isotherms were obtained on these three composite porous adsorbents at 25 °C. The adsorption data were fitted into Freundlich, Langmuir, Temkin, DR and Harkins-Jura isotherms. The parameters obtained from the five isotherm models were represented in Table 3 for CO₂ adsorption. As shown in Table 3, the values of linear regression coefficient (R²) are situated within the range of 0.996-0.999, demonstrating that the experimental data fitted well with the Freundlich isotherm equation. Freundlich isotherm constant 1/n can be used to calculate the adsorption capacity and to explore the favourability of the adsorption process. The 1/n value indicates the type of sorption process to be irreversible (1/n=0), favorable (0<1/n<1), unfavorable (1/n>1) [8]. For the adsorption of CO₂ on these composite adsorbents, it can be seen from Table 3 that the values of 1/n are situated in the range of 0-1, demonstrating that it is favorable for the carbon dioxide adsorption process. These results prove that the CO₂ adsorption on the composite adsorbents follows the Freundlich model and adsorption process mainly occurred on the heterogeneous surface of the porous adsorbents.

Table 3. The Freundlich, Langmuir, Temkin, DR and Harkins-Jura isotherm parameters for CO₂ adsorption.

Parameters	Adsorbents		
	Fe/MCM-41	Fe/Zeolite	Fe/MWCNT
Freundlich isotherm model			
K_F (mmol/g)(1/mmHg) ^{1/n}	0.087	4.6E-3	0.0105
1/n	0.298	0.694	0.540
R ²	0.996	0.999	0.997
Langmuir isotherm model			
W _m (mmol/g)	0.742	0.871	0.570
K _L (1/mmHg)	7.19E-3	1.43E-3	2.55E-3
R ²	0.981	0.882	0.914
Temkin isotherm model			
A (1/mmHg)	0.231	0.036	0.053
b (kJ/mol)	21.0	19.73	26.0
R ²	0.933	0.838	0.858
DR isotherm model			
Q _{DR} (mmol/g)	0.589	0.383	0.329
K _{DR} (mol ² /J ²)	0.0014	0.0026	0.0022
E (J/mol)	18.83	13.79	15.22

R^2	0.736	0.712	0.695
Harkins-Jura isotherm model			
A	6.698	6.365	6.563
B	0.164	0.017	0.027
R^2	0.888	0.759	0.858

As shown in Table 3, it can be seen that the values of R^2 are in the range of 0.882-0.981, suggesting that these experimental data fitted well with the Langmuir isotherm model. Langmuir model adsorption capacities, W_m , were found as 0.742, 0.871 and 0.570 mmol/g for Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT adsorbents, respectively. The highest value of W_m was found as 0.871 mmol/g for the Fe/Zeolite sample. These results indicate that carbon dioxide adsorption on the three composite adsorbents follow the Langmuir monolayer adsorption. As summarized in Table 3, it can be seen that the values of R^2 are in the range of 0.838-0.933, revealing that the experimental data fitted well with the Temkin isotherm model for composite adsorbents. The adsorption energies, b , are positive for all composite adsorbents and were obtained 21.0, 19.73 and 26.0 kJ/mol for Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT, respectively.

In DR isotherms, R^2 values were found in the range of 0.695-0.736, which are lower than all other isotherms. Moreover, it is reported that when the value of E is below 8000 J/mol, the adsorption process can be considered as the physical adsorption. As it can be seen from Table 3 that the obtained values of E are limited within the range of 13.79-18.83 J/mol. These results indicate that the adsorption of carbon dioxide on the composite adsorbent samples follow physisorption process. In Table 3, the values of R^2 are in the range of 0.759-0.888 for Harkins-Jura isotherm model. The R^2 values calculated for the Langmuir isotherm model are higher than those calculated for the Harkins-Jura isotherm model. These results reveal that carbon dioxide adsorption on samples Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT are against the rule of multilayer adsorption.

Adsorption isotherms describe the interaction between CH_4 and these three composite adsorbents. The parameters obtained from the five isotherm models were represented in Table 4 for composite adsorbents. Table 4 shows that three isotherms described the adsorption mechanism very well with $0.993 \leq R^2 \leq 0.999$, $0.921 \leq R^2 \leq 0.987$, $0.788 \leq R^2 \leq 0.879$ for Freundlich, Langmuir and Temkin isotherms, respectively. For the adsorption of CH_4 on these composite adsorbents, it can be seen from Table 4 that the values of $1/n$ are situated in the range of 0.792-0.959, demonstrating that it is favorable for the methane adsorption process. The K_F is found to be primarily related to the capacity of the adsorbent for the methane. The K_F followed an order of Fe/MWCNT > Fe/Zeolite > Fe/MCM-41. These results prove that the CH_4 adsorption on the composite adsorbents follows the Freundlich model and adsorption process mainly occurred on the heterogeneous surface of the porous adsorbents.

The correlation coefficient of Fe/MCM-41 for Langmuir isotherm model was found to be lower than the other composite adsorbents. Langmuir model adsorption capacities, W_m , were found as 0.112, 0.184 and 0.432 mmol/g for Fe/MWCNT, Fe/MCM-41 and Fe/Zeolite,

respectively. These results indicate that methane adsorption on the composite adsorbents follow the Langmuir monolayer adsorption. The R^2 of the Fe/Zeolite adsorbents for Temkin isotherm model was found to be lower than the other two composite adsorbents. The adsorption energies, b , are positive for all composite adsorbents and were obtained as 269.6, 156.4 and 159.7 kJ/mol for Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT adsorbents, respectively.

In DR isotherms, R^2 values were found in the range of 0.736-0.797, which are lower than three other isotherms. From Table 3, it can be seen that the obtained values of E are limited within the range of 11.69-13.11 J/mol. These results indicate that the adsorption of methane on the carbonaceous porous adsorbent samples follow physisorption process. It can be noted in Table 3 that the values of R^2 are in the range of 0.662-0.696 for Harkins-Jura isotherm model. The R^2 values calculated for the Langmuir isotherm model are higher than those calculated for the Harkins-Jura isotherm model. These results reveal that methane adsorption on composite samples are against the rule of multilayer adsorption. Notice that, by comparing the values of R^2 of the examined five isotherm models, it can be concluded that the Freundlich, Langmuir and Temkin isotherm models gave much better fitting than the DR and Harkins-Jura isotherm models.

Table 4. The Freundlich, Langmuir, Temkin, DR and Harkins-Jura isotherm parameters for CH_4 adsorption.

Parameters	Adsorbents		
	Fe/MCM-41	Fe/Zeolite	Fe/MWCNT
Freundlich isotherm model			
K_F (mmol/g)(1/mmHg) ^{1/n}	6.45E-5	9.53E-5	3.08E-4
1/n	0.935	0.959	0.792
R^2	0.999	0.999	0.993
Langmuir isotherm model			
W_m (mmol/g)	0.184	0.432	0.112
K_L (1/mmHg)	2.70E-4	1.88E-4	1.26E-3
R^2	0.921	0.979	0.987
Temkin isotherm model			
A (1/mmHg)	0.0254	0.0250	0.034
b (kJ/mol)	269.6	156.4	159.7
R^2	0.793	0.788	0.879
DR isotherm model			

Q_{DR} (mmol/g)	0.025	0.043	0.048
K_{DR} (mol ² /J ²)	0.0036	0.0037	0.0029
E (J/mol)	11.82	11.69	13.11
R^2	0.738	0.736	0.797
Harkins-Jura isotherm model			
A	6.249	6.245	6.304
B	2.58E-5	7.10E-5	1.84E-4
R^2	0.665	0.662	0.696

CONCLUSION

We have investigated the adsorption process for CO₂ and CH₄ on three composite adsorbent materials with different texture, surface area and porosity. The CO₂ and CH₄ adsorption isotherms are modeled using five isotherm models. The adsorption of CO₂ and CH₄ on composite samples followed the Freundlich, Langmuir and Temkin isotherm models. Langmuir adsorption isotherm constants related to adsorption capacity, W_m were found as 0.742, 0.871 and 0.570 mmol/g for Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT adsorbents, respectively for CO₂ adsorption. The correlation coefficients descended in the order of Freundlich > Langmuir > Temkin > Harkins-Jura > DR for CO₂ adsorption. The adsorption heat calculated from Temkin isotherm model was restricted within 19.73-26.0 kJ/mol for CO₂ adsorption. The CO₂ adsorption capacities of the Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT were 0.676, 0.523 and 0.436 mmol/g, respectively.

Langmuir adsorption isotherm constants related to adsorption capacity, W_m were found as 0.184, 0.432 and 0.112 mmol/g for Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT adsorbents, respectively for CH₄ adsorption. The correlation coefficients descended in the order of Freundlich > Langmuir > Temkin > DR > Harkins-Jura for CH₄ adsorption. The adsorption heat calculated from Temkin isotherm model were obtained as 269.6, 156.4 and 159.7 kJ/mol for Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT adsorbents, respectively for CO₂ adsorption. The CH₄ adsorption capacities of the Fe/MCM-41, Fe/Zeolite and Fe/MWCNT were 0.0363, 0.0623 and 0.0594 mmol/g, respectively.

ACKNOWLEDGEMENTS

The author acknowledges the financial support provided by Kocaeli University Scientific Research Projects Unit. (Project No: 2017/57 HD and 2019/11 HD).

REFERENCES

[1] Gui, M. M., Yap, Y. X., Chai, S. P., Mohamed, A. R., (2013). Multi-walled carbon nanotubes modified with (3-aminopropyl) triethoxysilane for effective carbon dioxide adsorption. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 14:65-73.

- [2] Zhang, J., Singh, R., Webley, P. A., (2008). Alkali and alkaline-earth cation exchanged chabazite zeolites for adsorption based CO₂ capture. *Microporous and Mesoporous Materials*, 111:478-487.
- [3] Andrés, J.M., Orjales, L., Narros, A., Fuente, M. M., Rodríguez, M. E., (2013). Carbon dioxide adsorption in chemically activated carbon from sewage sludge. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 63(5):557-564.
- [4] Ribeiro, R. P. P. L., Grande, C. A., Rodrigues, A. E., (2013). Activated carbon/honeycomb monolith-Zeolite 13X hybrid system to capture CO₂ from flue gases employing Electric Swing Adsorption. *Chemical Engineering Science*, 104:304-318.
- [5] Boyjoo, Y., Cheng, Y., Zhong, H., Tian, H., Pan, J., Pareek, V. K., Jiang, S. P., Lamonier, J. F., Jaroniec, M., Liu, J., (2017). From waste Coca Cola[®] to activated carbons with impressive capabilities for CO₂ adsorption and supercapacitors. *Carbon*, 116: 490-499.
- [6] Cazetta, A. L., Vargas, A. M. M., Nogami, E. M., Kunita, M. H., Guilherme, M. R., Martins, A. C., Silva, T. L., Moraes, J. C. G., Almeida, V. C., (2011). NaOH-activated carbon of high surface area produced from coconut shell: Kinetics and equilibrium studies from the methylene blue adsorption. *Chemical Engineering Journal*, 174 (1): 117-125.
- [7] Djeridi, W., Ouederni, A., Wiersum, A. D., Llewellyn, P. L., El Mir, L., (2013). High pressure methane adsorption on microporous carbon monoliths prepared by olive stones. *Materials Letters*, 99: 184-187.
- [8] Erdogan, F. O., (2019). Freundlich, Langmuir, Temkin, DR and Harkins-Jura isotherm studies on the adsorption of CO₂ on various porous adsorbents. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 20180134, in press.
- [9] Nguyen, T. T. H., Le, V. K., Minh, C. L., Nguyen, N. H., (2017). A theoretical study of carbon dioxide adsorption and activation on metal-doped (Fe, Co, Ni) carbon nanotube. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1100:46-51.
- [10] Erdogan, F. O., (2016). Characterization of the activated carbon surface of cherry stones prepared by sodium and potassium hydroxide. *Analytical Letters*, 49 (7): 1079-1090.
- [11] Erdogan, F. O., (2017a). Comparison of textile dye adsorption properties of low-cost biowaste adsorbents. *Tekstil ve Mühendis*, 24 (107): 181-187.
- [12] Erdogan, T., Erdogan, F. O., (2016). Characterization of the adsorption of disperse yellow 211 on activated carbon from cherry stones following microwave-assisted phosphoric acid treatment. *Analytical Letters*, 49 (7): 917-928.
- [13] Erdogan, F. O., (2018). Comparative study of sunset yellow dye adsorption onto cornelian cherry stones-based activated carbon and carbon nanotubes. *Bulgarian Chemical Communications*, 50 (4): 592-601.
- [14] Erdogan, F. O., (2019). A comparative study of various porous adsorbents for CO₂ adsorption. *The Online Journal of Science and Technology*, 8(1):12-16.
- [15] Erdogan, F. O., (2018). Adsorption Studies of N₂, CO₂ and CH₄ on Activated Carbons Produced from Damson Plum Stones by Chemical Activation with ZnCl₂. *Uluslararası Hakemli Mühendislik ve Fen Bilimleri Dergisi*, 14:1-10