

EDİTÖR

Prof. Dr. Nihal ERCAN

FİZİK

Alanında Araştırmalar ve Değerlendirmeler

ARALIK
2024

İmtiyaz Sahibi / Yaşar Hız
Yayına Hazırlayan / Gece Kitaplığı
Birinci Basım / Aralık 2024 - Ankara
ISBN / 978-625-388-128-3

© copyright

2024, Bu kitabın tüm yayın hakları Gece Kitaplığı'na aittir.
Kaynak gösterilmeden alıntı yapılamaz, izin almadan hiçbir
yolla çoğaltılamaz.

Gece Kitaplığı

Kızılay Mah. Fevzi Çakmak 1. Sokak
Ümit Apt No: 22/A Çankaya/ANKARA
0312 384 80 40
www.gecekitapligi.com / gecekitapligi@gmail.com

Baskı & Cilt

Bizim Büro
Sertifika No: 42488

FİZİK
ALANINDA ARAŞTIRMALAR VE
DEĞERLENDİRMELER

EDİTÖR
Prof. Dr. Nihal ERCAN

gece
kitaplığı

İÇİNDEKİLER

BÖLÜM 1

BOYA DUYARLI GÜNEŞ PİLLERİ İÇİN YENİ BOYA OLUŞTURULMASI VE ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN HESAPLANMASI

Mutlu GÜNGÖR, Murat YILDIZ 7

BÖLÜM 2

MGB2 KÜLÇE SÜPERİLETKENİNDE MANYETİK KALDIRMA KUVVETİ

Burcu SAVAŞKAN, Sait Barış GÜNER 21

BÖLÜM 3

GAZ SENSÖRLERİNİN TEORİK MODELLENMESİ

Ali ÇIBIK, Murat YILDIZ 37

CHAPTER 4

DEVELOPMENT AND ANALYSIS OF MAXIMUM POWER POINT TRACKING (MPPT) ALGORITHMS USING MATLAB

Tuba ÖZDEMİR ÖGE, Mecit ÖGE, Firdevs Banu ÖZDEMİR 55



BÖLÜM 1

BOYA DUYARLI GÜNEŞ PİLLERİ İÇİN YENİ BOYA OLUŞTURULMASI VE ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN HESAPLANMASI¹

Mutlu GÜNGÖR², Murat YILDIZ³

1 “Boya Duyarlı Güneş Pilleri İçin Yeni Boya Oluşturulması Ve Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması” adlı Yüksek Lisans Tezi, Öğrenci Mutlu GÜNGÖR, Danışman:Prof. Dr. Murat Yıldız yayın Yılı:2021

2 Konya Milli Eğitim Müdürlüğü

3 Prof. Dr., Karamanoğlu Mehmetbey Ü. Fizik Böl., ORCID ID: 0000-0003-2746-4190

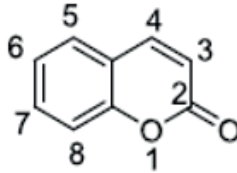
GİRİŞ

Dünya nüfusunun artmasıyla birlikte küresel enerji talebi de artmakta ayrıca gelişmekte olan ülkelerin ekonomik büyümesi sonucu bugünkü seviyesinin en az iki katı olması beklenmektedir ((Feldt, 2013). Bu nedenle, üretim maliyetini düşürmek ve fotovoltaiik dönüşüm için yeni malzemeler ve çeşitlerin araştırılması gereklidir. Boyaya duyarlılaştırılmış güneş pilleri(BDGP'ler), düşük maliyeti ve düşük ışıktaki verimleri nedeniyle yenilenebilir enerji kaynağı olarak yoğun bir şekilde araştırılmaktadır. BDGP'leri diğer güneş pillerine göre daha üstün özelliklere sahiptir. İmalat maliyetinin düşük olması, esnek yapıları, renk çeşitliliği, yarı saydam hale getirilmiş ve dağınık ışık koşullarında bile performans gösterme kabiliyetine sahiptir(Gong, J., & Sumathy, 2012) (Calogero, 2010).

BDGP'lerinde kullanılacak olan bir boyanın etkili bir boya olabilmesi için bazı temel özellikleri taşıması gerekir vardır(Hagfeldt, Boschloo, & Sun et. al., 2010) (Mikroyannidis, 2011).

Bu çalışmada floresan kemosensör özelliğine sahip ana iskeleti 7-konumunda elektron verici NET₂ substitüentlerini içeren kumarin ve 3-konumunda tiyofenden oluşan bileşikler tasarlanmış ve bu bileşiklerin DFT yöntemiyle fotofiziksel özelliklerindeki değişimler incelenmiştir.

Kumarin bileşiği, elektron sağlayıcı benzen halkası ile elektron çeken pironhalkasının birleşmesi ile meydana gelmiştir (Şekil 1.1). Kumarin bileşiğindeki dipol-dipol ve rezonans etkileşimi sayesinde floresans emisyon güçlendiği görülmüştür(Christie & Lui, 2000)



Şekil 1.1:Kumarin yapısı

Kumarinin 3 veya 4 konumuna elektron çekici grupların (heterohalkalı aromatik veya CN, CF₃ vb.) bağlanmasıyla elde edilen türevlerinde, molekül içi yük transferi (MYT)arttığından, floresans davranış eğiliminin arttığı görülmüştür.

Yine kumarin bileşiğinin 7- konumuna sırasıyla elektron verici (-OH, -OCH₃, -NH₂, -NET₂ vb.) gruplar bağlandığında, elektron verme kapasitelerine bağlı olarak batokromik bölgeye kaymaktadır(Sun, 2010) .

Tiyofen, kükürt içeren 5 üyeli heteroaromatik bileşiklerin önemli bir sınıfını oluşturur. Victor Meyer tarafından 1882 yılında keşfedilmesinden bu yana, farmakoloji, elektronik cihazlarda ve iletken polimerlerde kullanımı yaygınlaşmıştır (Roux, 2007).

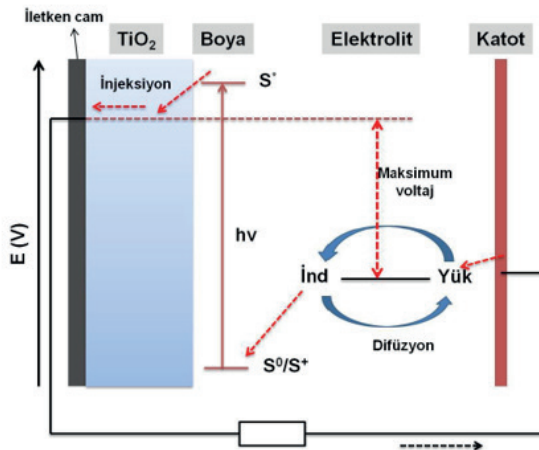
Tiyofende kükürt atomu sp^2 hibritleşmiştir ve sahip olduğu ortaklanmamış birelektron çiftini π sistemine vererek aromatik altı elektronlu yapıya ulaşılır (Solomons, 2002).

Son yıllarda birçok tiyofen türevi, kemoteropik ajan, iltihap giderici ilaç, Alzheimer hastalığının tedavisinde, damar sertliğini önleyici ilaç, anti-bakteriyel ilaç, dişanestezisi gibi alanlarda çoğunlukla kullanılmaktadır (Shi, 2015).

Tiyofen halkası aynı zamanda, DSSC sistemlerindeki termal kararlılığı ve yüksek fotofiziksel özelliğinden dolayı π köprüsü (donör – π köprüsü – akseptör: donörden akseptöre yük aktarımının sağlayan grup) olarak kullanımı artmıştır (Amine, 2013).

Diğertarıftan, tiyofen halkası, kumarin bileşięi ile reseptör bölgeyi bağlayacak π köprüsü olarak tasarlanmıştır. Tez kapsamında floresans ke-mosensör bileşiklerinin yapısında, üstün fotofiziksel özelliklerinden dolayı kumarin türevleri tasarlanmıştır.

Boya temelli güneş pilleri, iletken bir cam üzerine tutturulmuş bir yarı iletkenin (genellikle TiO_2) boya ile emdirilmesiyle elde edilen ve çalışma elektrodu olarak da adlandırılan film ile karşıt elektrot olarak kullanılan platin kaplı iletken camdan oluşmaktadır (Şekil 1.2).



Şekil 1.2: Boya duyarlı güneş pilinin yapısı.

Boya esaslı güneş pili ilk olarak **O'Regan ve Grätzel** tarafından yapılmıştır (O'Regan & Grätzel, 1991). Nano gözenekli TiO_2 'in kullanıldığı bir çalışmayla, boya esaslı güneş pilleri % 7-11 verimle pratikte uygulanabilir hale getirilmiştir. Organik boyalar son yıllarda sentezlenmelerinin kolay olması, düşük maliyet ve yapısal modifikasyonlara olanak vermeleri gibi özelliklerinden dolayı çok ilgi görmektedirler. Boya esaslı güneş pillerinde başta rutenyum polipridil kompleksleri olmak üzere, metalo-ftalosiyaninler, metalo-porfirinler, kumarin (Kandavelu, 2009), (Wang, 2007) ve hemisiyanin türevi boyalar (Chen, 2005), indolin boyaları (Kuang, 2008), (Li, 2009), karbazol boyaları (Yang, 2010), triarilamin boyaları (Unger, 2010), skuarin boyaları (Yum, 2007), perilen mono, di-imidler ve polimerik boyalar kullanılmakta ve makul verimler elde edilmektedir. Uygun yapısal ve fotofiziksel özelliklerinden dolayı rutenyum (II) bipiridil kompleksleri bu pillerde kullanılabilen en verimli malzemelerdir. Ancak rutenyumun az bulunması ve dolayısıyla pahalı olması yeni tür boyalara olan ihtiyacı arttırmaktadır (Cu, Zn gibi pahalı olmayan metaller içeren).

MATERYAL ve METOT

Bu tez de B1-B2-B3 olarak adlandırdığımız kumarin ve tiyofen sınıfından türetilmiş, BDGP'lerinde boyar madde olarak kullanılabilecek moleküllerin Gaussian 09 ve Gaussview 5,0 görüntüleme programları ile Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) metodu 6-31 G(d) temel seti kullanılarak yapıldı (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016). Geometrik optimizasyon enerjinin atomik koordinatlara göre birinci türevinin alınması işleminin sonucunda ortaya çıkmaktadır. Molekülün görünür bölge spektrumu (UV-Visible) elektronik geçişler (time-dependent) TD-DFT B3LYP metodu ve 6-31 G(d) temel setinde gaz fazında hesaplama yapıldı. Bu hesaplamalar yardımıyla molekülün en yüksek dolu moleküler orbital (highest occupied molecular orbital, HOMO) enerjisi, en düşük boş moleküler orbital (lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) enerjisi, elektronik geçiş enerjileri hesaplandı. hazırlanabilir. Moleküller görsel hale getirdikten sonra bağ mesafelerini, bağ açılarını, etkileşim uzaklıklarını belirleyip giriş parametreleri üzerinde değişiklikler yapılabilir. GaussView, Gaussian'ın hesaplama modülü ile entegre değildir, daha ziyade Gaussian'ın kullanımına yardımcı, sonuçların yorumlanması ve görüntülenmesi için tasarlanmış bir grafik ara yüzü işlemcisidir. Teorik verilerin hesaplama yöntemlerini ayarlamayı kolaylaştırır ve hesaplamalarının sonuçlarını incelemenizi sağlar.

Geometrik Optimizasyon

Boya molekülü optimizasyonu ve yüzeylerin oluşturulmasından sonra yüzeye tutunma geometrisini inceledik. Öncelikle boya molekülü değişik pozisyonlarda yüzeylere yaklaştırılmıştır.

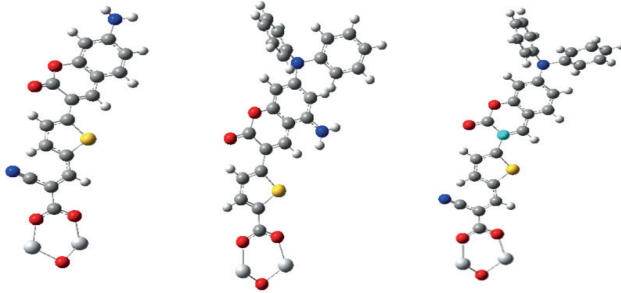
Bu amala boya molekln yzeyeye bir ok deęiřik geometride yerleřtirdik Molekln yzeyeye baęlanabilmesi iin her iki yzeyde de dřk koordinasyonlu atomların bulunduęu noktalar olası baęlanma noktaları olarak seildi.

Molekln yzeyeye tutunmasını saęlamak amacıyla COOH grubundaki (zellikle H atomunun) atomlarının pozisyonları deęiřtirilerek hesaplar bařlatılmıřtır. Ayrıca literatrde H atomunun ayrıldıęı modlar belirtildięinden molekul H^+ ve boya COO^- řekilde ayrılarak yzeyde uygun yerlere yerleřtirilmiřtir. Molekllere ait farklı konfigrasyonlardaki enerji deęerleri kontrol edilerek en kararlı yapı elde edildi. Geometrik parametreler baę uzunlukları (Å) ve baę aıları ($^\circ$) teorik olarak elde edildi. Optimizasyon iřlemi yapılan her molekl iin DFT yoęunluk fonksiyon teorisi ve B3LYP (Becke-Lee-Yang-Parr) metodu ve 6-31 G(d) temel seti kullanılarak elde edildi.eřitli bařlangı geometrilerinde hazırlanan TiO_2 -boya sistemi řekil 4-1 ile gsterilen geometride baęlandıęı grlmřtr. Bu baęlanma literatrdeki baęlanma biimlerine benzer řekilde gerekleřmiřtir (Gomez ve dięerleri, 2014; Ojamae ve dięerleri, 2005).



řekil 4.1:ift-diřli H-ayrık mod.

B1-B2-B3 boyaalarının TiO_2 ile baęlanma geometrileri řekil 4.2 de ki gibidir,



řekil 4.2: B1-B2-B3 boyaalarının TiO_2 ile baęlanma geometrileri.

Tutunma enerjileri, bağ uzunlukları ve açıları çizelge 4.1, 4.2 ve 4.3'teki gibidir.

Çizelge 4.1:Boya molekülleri ve tutunma enerjileri.

Molekül	Enerji (a.u)	Molekül	Enerji (a.u)	Molekül	Enerji (a.u)
B1-TiO ₂	-3235,50	B2-TiO ₂	-3585,35	B3-TiO ₂	-3699,64
B1	-1461,92	B2	-1809,80	B3	-1923,84
TiO ₂	-1000,90	TiO ₂	-1000,90	TiO ₂	-1000,90
E _{TF}	-772,68	E _{TF}	-774,65	E _{TF}	-774,90

Çizelge 4.2:Boya molekülleri ve TiO₂ bağ uzunlukları (Å).

B1-TiO ₂		B2-TiO ₂		B3-TiO ₂	
O1-Ti1	1,983	O1-Ti1	1,984	O1-Ti1	1,991
O2-Ti2	1,984	O2-Ti2	1,985	O2-Ti2	1,994

Çizelge 4.3:Boya molekülleri ve TiO₂ arasındaki karboksil grubunun açısı. (°)

B1-TiO ₂	B2-TiO ₂	B3-TiO ₂
124,38	124,40	124,68

Tutunma enerjilerine baktığımız zaman üç molekül için bulunan sonuçların birbirine çok yakın olduğu görülmüştür. Bağ uzunlukları incelendiğinde B3 boyası için sonuçların beklendiğinden fazla olduğu görülmüş bunun hesaplama hatası olduğu kanaati oluşmuştur. Bağ açılarında da sonuçlar birbirine çok yakın değer hesaplanmıştır.

4.2 UV-Vis Spektrum Analizleri ve Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması

Moleküllerin teorik olarak UV-Vis spektrumları analizi ve diğer elektronik özelliklerin hesaplanması zamana bağlı yoğunluk fonksiyonel teori (Time-Dependent Density Functional Theory, TD-DFT) (**Petersilka ve diğerleri, 1996**) metodu B3LYP/6-31G(d) temel seti kullanılarak gerçekleştirildi.

Çalışmalarını yaptığımız moleküllerin teorik hesaplaması boyutlarının orta büyüklükte olması sebebiyle TD-DFT metodu kullanılarak gaz fazında yapılmıştır. Elektronik absorpsiyon spekturum analizinde absorpsiyon dalga boyları λ (nm), uyarılma enerjileri E (eV) ve uyarılma orbitaleri (MOs) hesaplandı.

UV-Vis spektrum deęeri uyarılmıř elektronun yuıksek enerji seviyesine ıkarken absorbladıęı enerjiyle ıktıęı bir uřt enerji seviyesinden tekrar eski haline donerken yaymıř olduęu ıřımanın verdięi deęerdir. Kısaca elektronların en yuıksek enerji seviyesinden en duřuk enerji seviyesine geiřteki eksitasyon deęerini vermektedir. izelge 4.4’de boya molekulleri ile TiO_2 iin uyarılma enerjileri ve dalgaboyu deęerleri verilmiřtir.

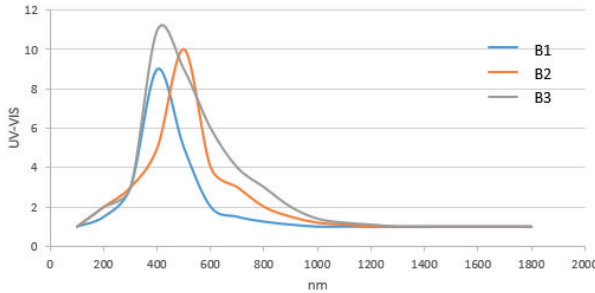
izelge 4.4:Boya molekulleri ile TiO_2 iin uyarılma enerjileri ve dalgaboyu.

Species	Energy	Wavelength(nm)	MOs
B1	2,95 ev	444	87-88
B1- TiO_2	1,43 ev	3465	113-114
B2	2,88 ev	508	118-119
B2- TiO_2	1,43 ev	1972	146-147
B3	2,82 ev	477	127-128
B3- TiO_2	1,08 ev	2535	155-156

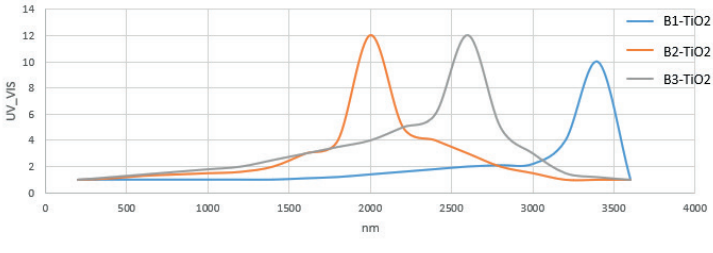
Yalın haldeki B1 molekulunde 444 nm dalga boyunda 1 pik gozlenmiřtir. B1- TiO_2 molekulunde 3465 nm bir pik elde edilmiřtir. Yalın haldeki B2 molekulunde 472 nm ve 508 nm dalga boyunda 2 pik gozlenmiřtir. B2- TiO_2 molekulunde 1250 nm ve 1372 nm iki pik elde edilmiřtir. Yalın haldeki B3 molekulunde 405 nm ve 477 nm dalga boyunda iki pik gozlenmiřtir. B3- TiO_2 molekulunde 2532 nm bir pik elde edilmiřtir.

Bu dalga boylarındaki artıř deęerleri tasarladıęımız boya molekullerinin BDGP olarak alıřabileceęi sonucunu ıkarmaktadır

řekil 4.3 ve 4.4’te boya molekulleri ile boya- TiO_2 iin UV-VIS deęerleri verilmiřtir.



řekil 4.3: B1-B2-B3 molekullerinin Uv-Vis Deęerleri.



Şekil 4.4: B1- TiO_2 , B2- TiO_2 , B3- TiO_2 moleküllerinin Uv-Vıs değerleri.

4.3 Moleküler Orbital Analizi

Sınır molekül orbitalleri ve uyarma enerjisi sırasıyla B3LYP / 6-31G (d) ve TD-B3LYP/ 6-31G(d) düzeyinde hesaplanmaktadır. Çalışmamızda TD-B3LYP'nin ilk uyarma enerjileri kullanıldı. Komplekslerin uyarma enerjileri, bant aralıklarından (HOMO ve LUMO enerjilerinin farkı) elde edilmiştir. Moleküler orbital enerjisi boya molekülü ile TiO_2 'nin etkileşiminden dolayı değişmiştir. HOMO-LUMO enerjisindeki bu değişim tıpkı yük analizindeki değişim gibi boya molekülünün iletkenliği hakkında bilgiler verir. HOMO-LUMO arasındaki band boşluğu (Eg) azaldıkça iletkenlik artmaktadır. Band boşluğunun düşürülmesi elektronun boya molekülü üzerindeki delokalizasyonunun artmasına bağlıdır, bu da iletkenlikte artışa neden olur. Kuantum kimyasal hesaplaması yapılan boya- TiO_2 arasındaki etkileşim moleküler orbital etkileşimlerinin değişmesi nedeniyle gerçekleşir.

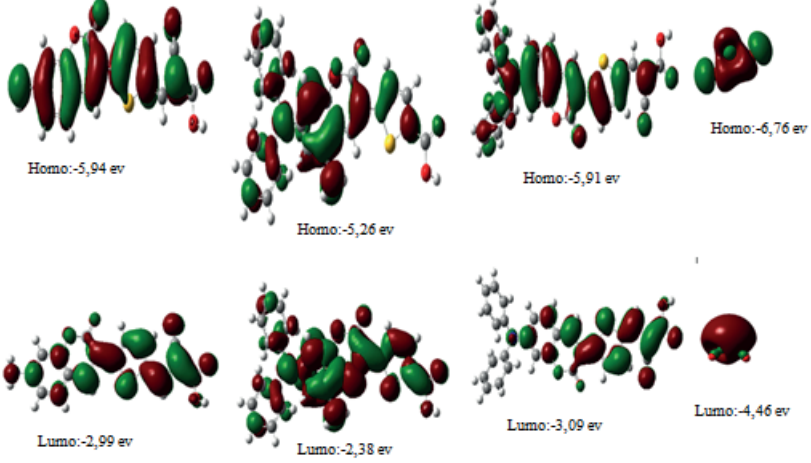
Boya molekülü ile boya- TiO_2 'nin HOMO-LUMO görüntüleri çizelge 4.5'te verilmiştir.

Çizelge 4.5: Boya molekülü ile boya- TiO_2 'nin HOMO-LUMO band aralıkları.

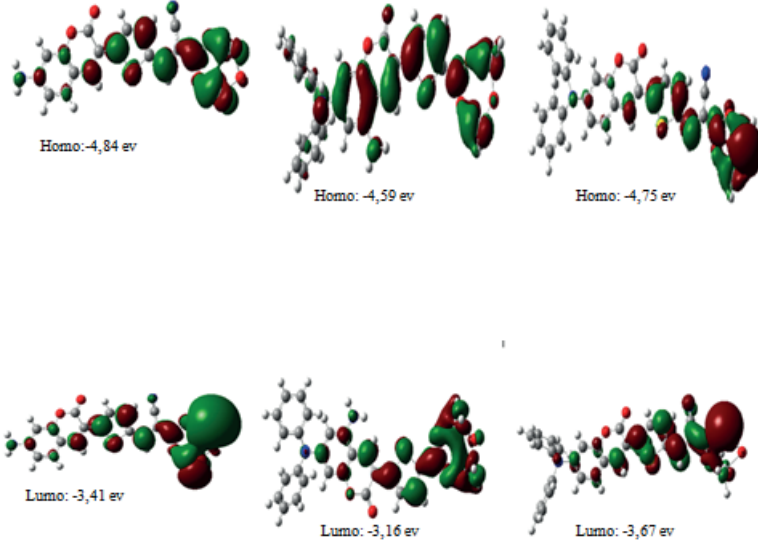
Molekül	HOMO (eV)	LUMO (eV)	BAND GAP (eV)
B1	-5,94	-2,99	2,95
B1- TiO_2	-4,84	-3,41	1,43
B2	-5,26	-2,38	2,88
B2- TiO_2	-4,59	-3,16	1,43
B3	-5,91	-3,09	2,82
B3- TiO_2	-4,75	-3,67	1,08
TiO_2	-6,76	-4,46	2,30

Yalın haldeki boya moleküllerin band boşlukları TiO_2 ile bağlandıkları zaman düşmüşlerdir. Bu da iletkenliklerin artması anlamını çıkarmaktadır. Aynı zamanda boya moleküllerinin LUMO değerleri TiO_2 'nin LUMO se-

viyesinden yüksek olması elektron transferini kolay hale getirecektir. Őekil 4.4 ve 4.5'te , B1,B2 ve B3 boya molekülleri ile B1- TiO_2 , B2- TiO_2 , B3- TiO_2 moleküllerinin HOMO-LUMO görüntüleri gösterilmiştir.



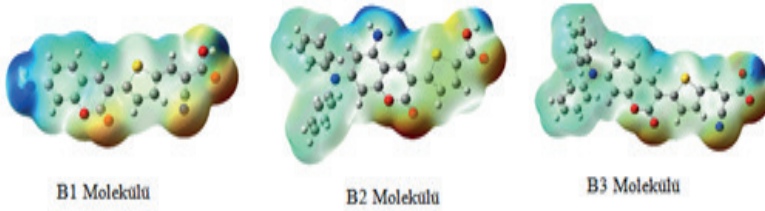
Őekil 4.5:B1-B2-B3-TiO2 moleküllerinin HOMO-LUMO görüntüleri.



Őekil 4.6:B1-TiO₂, B2-TiO₂, B3-TiO₂ moleküllerinin HOMO-LUMO görüntüsü.

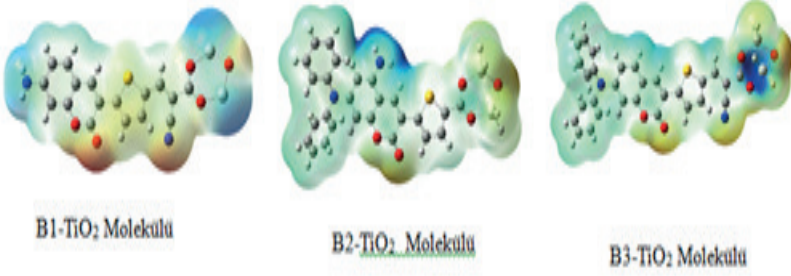
Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) Analizi

Moleküler elektrostatik potansiyel (MEP), bir molekülün belirli noktalarındaki toplam yük dağılımı, elektrostatik etki, elektrofilik ve nükleofilik yerlerin belirlenmesi, elektron yoğunluğu, moleküllerin boyutu, şekli, molekül içi iletkenlik ve kimyasal reaktivite bölgelerini MEP haritasında belirlenebilir (Murray ve Sen, 1996). Şekil 4.7 ve 4.8 de gösterilen ESP ile eşlenen toplam SCF yoğunluğundan elektron yoğunluğu, molekülün yük dağılımlarını göstermektedir. Burada, yüzeydeki farklı elektrostatik potansiyellerin değerleri farklı renklerle temsil edilir. Kırmızı en elektronegatif bölgeleri, mavi en pozitif bölgeleri, yeşil ise sıfır potansiyelin bölgelerini temsil eder. (Kırmızı < turuncu < sarı < yeşil < mavi)



Şekil 4.7: B1, B2, B3 moleküllerinin MEP haritası.

Boya molekülleri ile TiO_2 ile bağ yapan boya molekülleri üzerindeki elektron yoğunluklarını tahmin etmek üzere MEP, B3LYP / 6-31 G (d) optimize edilmiş geometride hesaplandı. MEP görüntüleme sonuçları analiz edildi ve moleküllerdeki negatif bölgeler ve pozitif bölgeler belirlendi. TiO_2 ile bağlanan boya moleküllerinin negatif ve pozitif bölgelerindeki değişimler incelendi. Bu değişimlere göre B3 molekülünün TiO_2 ile bağlandığı zaman ki MEP değişiminin iletkenliğe daha uygun olduğu anlaşılmıştır. Bunun nedeni ise BDGP çalışma prensibine göre elektron aktarımı boya molekülünden TiO_2 'ye göre olması gerekmektedir. Bağlanma bölgesi incelendiğinde o bölgedeki mavi renk oranı en iyi B3- TiO_2 ile ortaya çıkmıştır.



řekil 4.8: $B1-TiO_2$, $B2-TiO_2$, $B3-TiO_2$ moleküllerinin MEP haritası.

SONUÇ

Bu alıřmada, B1-B2-B3 olarak adlandırdığımız boya moleküllerinin TiO_2 'ye tutunma enerjileri ve UV-VIS deęerlerinin teorik olarak elde edilen sonuçlarının gelecekteki alıřmalara ışık tutması adına yapıldı. "Yoęunluk Fonksiyonel Teori" DFT yöntemi B3LYP/6-31G(d) ve TD-B3LYP/6-31G(d) düzeyinde geometrik optimizasyonları ve elektronik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi için hesaplamalar yapıldı. Tutunma enerjileri karşılaştırıldığında sonuçların birbirine ok yakın ıkmasıyla beraber B3 molekülünün dięerlerine göre daha sıkı tutunduęu anlaşıldı. En dengeli ve kararlı konfigürasyonların tam yapısal optimizasyonundan sonra, geometrik özelliklerindeki deęişimler incelendi. Ü molekülünde Lumo deęerlerinin TiO_2 'nin LUMO deęerinden yüksek ıktığı görüldü (B1: -2,99 ev, B2: -2,38 ev, B3: -3,09 ev, TiO_2 : -4,46 ev). Bunun iletkenlik adına olumlu olduęu anlaşıldı. B2 molekülünde enerji farkının daha fazla olması iletkenlięin daha fazla olduęunu ifade etmektedir. Ayrıca TiO_2 'ye boya moleküllerinin tutunması sonucu Fermi seviyesinin (Band Aralığı) düşmesi iletkenlięi artıracakını ifade etmesi bakımından olumlu sonuçlanmıştır. Burada da B3 molekülündeki düşme daha fazla olarak gözlemlenmiştir. UV-vis deęerleri incelendięi zaman boya moleküllerinin TiO_2 'ye tutunduęu zaman daha büyük dalga boyunda pik gözlenmesi moleküllerin daha geniř bölgede soęurma yapabileceęinin bir kabiliyetini ifade etmektedir. Özellikle B2 ve B3 boya moleküllerinin yakın IR aralığında soęurma yapması boyaların verimle alıřabileceęini ifade etmektedir. MEP analizi sonucu özellikle B3 molekülünün elektron aktarımında daha verimli bir şekilde kullanılabileceęi anlaşılmaktadır.

Elde edilen deęerler neticesinde boya moleküllerinin BDGP'lerinde kullanılabileceęi, daha kesin sonuçlar için deneysel alıřmaların yapılabileceęi öngülmektedir.

Kaynaklar

- Amine, M. (2013). Investigation of New Low Gap Conjugated Compounds Based on Thiophene-Phenylene as Solar Cells Materials. *Journal of Applied Chemical Research* , 7, 33-44.
- Calogero, G. (2010). Efficient Dye-Sensitized Solar Cells Using Red Turnip and Purple Wild Sicilian Prickly Pear Fruits. *International Journal of Molecular Sciences* , 11(1), 254–267.
- Chen, Y. e. (2005). Efficient Electron Injection Due to A Special Adsorbing Group's Combination of Carboxyl and Hydroxyl: Dye-Sensitized Solar Cells Based on New Hemicyanine Dyes. *Journals of Materials Chemistry* , 15, 1654- 1661.
- Christie, R., & Lui, C. (2000). Studies of Fluorescent dyes: part 2. An investigation of the synthesis and electronic spectral properties of substituted 3-(20-benzimidazolyl)coumarins. *Dyes and Pigments* , 47, 79-89.
- Feldt, S. .. (2013). *Alternative Redox Couples For Dye-Sensitized Solar Cells*. Uppsala: Acta Universitatis Upsaliensis.
- Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016. (tarih yok).
- Gong, J. L., J., L., & Sumathy, K. (2012). . Review on Dye-Sensitized Solar Cells (DSSCs): Fundamental Concepts And Novel Materials ., *Renewable and Sustainable Energy Reviews* , 16(8) 5848–5860.
- Hagfeldt, A., Boschloo, G., & Sun et. al., L. (2010). Dye-Sensitized Solar Cells. *Chemical Reviews* , 110(11), 6595–6663.
- Kandavelu, V. (2009). Novel iminocoumarin dyes as photosensitizers for dye-sensitized solar cells. *Solar Energy* , 83, 574-581.
- Kuang, D. (2008). Organic Dye-Sensitized Ionic Liquid Based Solar Cells: Remarkable Enhancement in Performance Through Design of Indoline Sensitizers. *Angewandte Chemie International Edition* , 47, 1923-1927.
- Li, Q. (2009). New Indole-Based Metal-Free Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry B* , 113, 14588-14595.
- Mikroyannidis, J. A. (2011). Low Band Gap Dyes Based On 2-Styryl-5-Phenylazo-Pyrrole: Synthesis And Application For Efficient Dye-Sensitized Solar Cells. *Journal of Power Sources* , 196(8), 4152–4161.
- Oregan, B., & Gratzel, M. (1991). A Low-Cost, High-Efficiency Solar-Cell Based on Dye-Sensitized Colloidal TiO₂ Films. *Nature* , 353(6346):737-740.
- Roux, M. V. (2007). Experimental and Computational Thermochemical Study of 2- and 3-thiopheneacetic Acid Methyl Esters. *Journal of Physical Chemistry* , 111, 5280-5286.
- Shi, W. (2015). Facile one-pot synthesis of 2,3-thienoimides via formal [3+2] annulation reaction of 1,4-dithiane-2,5-diol and N-substituted imides. *Tetrahedron*

ron Letters , 56, 3861- 3863.

Solomons, T. (2002). *Organik Kimya*. İstanbul: Literatür Yayıncılık.

Sun, Y. (2010). The synthesis, structure and photoluminescence of coumarin-based chromophores. *Dyes and Pigments* , 87, 109-118.

Unger, E. (2010). Bilayer Hybrid Solar Cells Based on Triphenylamine-Thienylenevinylene Dye and TiO₂. (114, 11659-11664).

Wang, Z. (2007). A High-Light-harvesting-Efficiency Coumarin Dye for Stable Dye-Sensitized Solar Cells. *Advanced Materials* , 19, 1138-1141.

Yang, C.-H. (2010). Optimization of Multiple Electron Donor and Acceptor in Carbazole-Triphenylamine-Based Molecules for Application of Dye-Sensitized Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry C* , 114, 21786-21794.

Yum, F. (2007). Efficient Far Red Sensitization of Nanocrystalline TiO₂ Films by an Unsymmetrical Squaraine Dye. (129, 10320-10321).



BÖLÜM 2

MGB2 KÜLÇE SÜPERİLETKENİNDE MANYETİK KALDIRMA KUVVETİ

Burcu SAVAŞKAN¹, Sait Barış GÜNER²

1 Enerji Sistemleri Mühendisliği, Enerji Fakültesi, Karadeniz Technical Üniversitesi, 61830 Of, Trabzon, Turkey. bsavaskan@ktu.edu.tr

2 Fizik Bölümü, Fen Edebiyat Fakültesi, Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi, 53100 Rize, Turkey.

Giriş

Magnezyum diborür (MgB_2) 1954'te, Morton E. Jones ve Richard E. Marsh tarafından keşfedilen intermetalik bir bileşiktir [1]. 2001'de Japonya'da Okayama Üniversitesi'ndeki bir araştırma grubu MgB_2 bileşiğinin 40 K' ne yakın kritik sıcaklığa sahip tip II. tip süperiletken olduğunu duyurdu [2]. BCS teorisiyle tanımlanabilen bir süperiletkendir, aynı zamanda yüksek kritik sıcaklık süperiletken (HTS) ailesinin bir üyesidir.

MgB_2 süperiletkeninin üstün yönlerini şu şekilde sıralayabiliriz:

(i) Basit bir stokiometri ve oksit olmayan bir süperiletkenler içinde en yüksek kritik sıcaklığa sahiptir. MgB_2 nin çalışma sıcaklığı 20-27 K civarındadır. Bu sıcaklık geleneksel metalik süperiletkenlerinkinden daha yüksektir.

(ii) Süperiletken malzemeler arasında en düşük teorik yoğunluğa sahiptir.

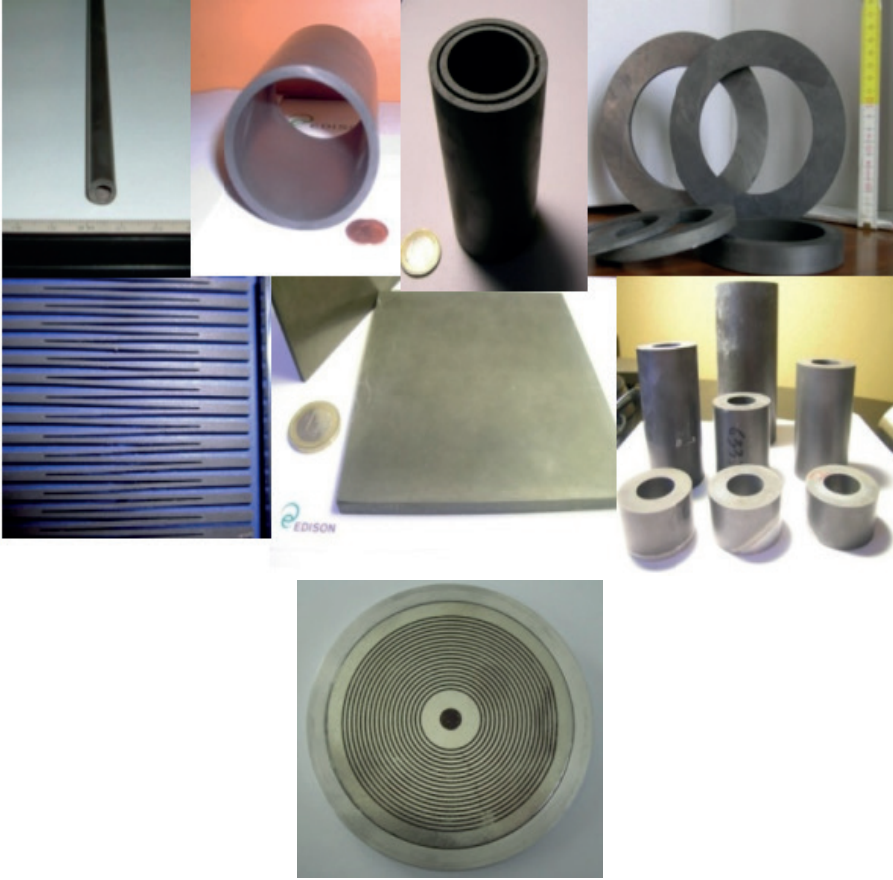
(iii) Nispeten yüksek bir üst kritik alan H_{c2} [3,4] değerine sahiptir.

(iv) Büyük bir akım taşıma kapasitesi [5,6] vardır.

(v) Yüksek manyetik alan tuzaklama [7–10] kabiliyeti vardır.

(vi) Külçe MgB_2 örnekleri yüksek kaldırma kuvveti özelliğine sahiptir [11,12].

(vii) MgB_2 süperiletkeni külçe, ince film [13,14], tel [15,16] ve şerit [17,18] vb. şekillerde üretilebilir.



Őekil 1. Edison SpA řirketi (İtalya) tarafından üretilen farklı geometri ve boyutlarda MgB_2 süperiletkenleri.

(viii) Bakır tabanlı yüksek sıcaklık süperiletkenleri ile karşılaştırıldığında, geçiş sıcaklığı birçok uygulama için nispeten düşük olmasına rağmen, MgB_2 bakırlara kıyasla tane sınırlarında daha az anizotropi gösterir.

(ix) MgB_2 , HTS malzemelerine göre kıyasla daha basit kimyasal yapıya sahiptir ve oldukça ucuzdur. Ayrıca uygulamalarda soğutma sıvısı olarak sıvı hidrojen kullanılan teknolojiler geliştirilerek maliyetlerde tasarruf edilebilir.

MgB_2 Süperiletkeninin Uygulamaları

Günümüzde, süperiletkenliğin uygulama alanları enerji, ulaşım, endüstri, tıp, iletişim, çevre koruma ve diğer birçok alanı kapsamaktadır. Bunlar temel olarak süperiletkenin geometrisine göre üç kategoriye ayrılabilir:

1. Josephson bağlantısına dayalı elektronikte (süperiletken bilgisayarlar ve SQUID dedektörleri) ağırlıklı olarak kullanılan ince filmler.

2. Süperiletken motor ve jeneratörlerde akım iletimi, arıza akımı sınırlayıcıları, senkrotronlar, parçacık çarpıştırıcıları ve füzyon reaktörleri gibi bilimsel cihazlar için gerekli olan yüksek manyetik alanların oluşturulması, manyetik rezonans görüntüleme (MRI) ve nükleer manyetik rezonans (NMR) gibi amaçlarla kullanılabilen şeritler veya kablolar.

3. Süperiletken külçeler manyetik tarama, enerji depolama ve manyetik kaldırma uygulamalarında kullanılabilir.

Uygulamalar için yalnızca birkaç yüksek performanslı süperiletken geliştirilmiştir ve bunların çoğu NbTi, Nb₃Sn gibi geleneksel düşük sıcaklık süperiletkenleri (LTS) veya YBaCuO gibi bakır tabanlı oksit yüksek sıcaklık süperiletkenleridir (HTS). MgB₂'de süperiletkenliğin keşfiyle, bu malzemenin benzersiz performansları, özellikle hafifliği, güçlü sertliği, basit ve düşük maliyetli üretimi nedeniyle endüstrinin dikkatini çekmiştir.

Sıvı hidrojen ve süperiletken kabloların birlikte kullanımı, hem hidrojeni hem de elektriği aynı altyapıda dağıtmak için eşsiz bir fırsat sunmaktadır. 20 K civarındaki sıvı hidrojen, MgB₂ süperiletkenini soğutmak için idealdir ve bu da hidrojen akışı için yeterli alan bırakan kompakt bir güç kablosuyla sonuçlanır.

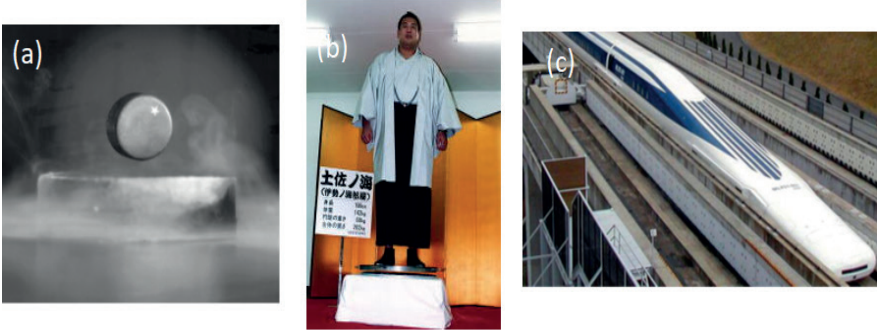
Düşük sıcaklık süperiletkenlerinin ($T_c < 25$ K) soğutma maliyetleri ve bakır tabanlı oksit süperiletkenleri'nin (üretim maliyetleri göz önüne alındığında MgB₂, 0 - 7 T alan altında yüksek J_c gerektiren elektrik iletim kablosu [19, 20], MRI sistemleri [21] ve süperiletken motorlar ve jeneratörler [22] gibi uygulamalar için iyi bir alternatiftir.

Ayrıca, 2021 yılında Çin, trenin içinde bulunan bakır tabanlı oksit süperiletken külçeler ile manyetik bir kılavuz yolunun etkileşiminden kaynaklanan manyetik kaldırma prensibi ile çalışan bir Maglev tren prototipi piyasaya sürdü. Bu tren 620 km/s maksimum hıza ulaştı [23, 24]. Ancak, gerekli süperiletken malzemenin maliyeti oldukça yüksektir. Bakır tabanlı oksit süperiletkenler ile benzer bir kaldırma kuvvetine sahip büyük boyutlu MgB₂ külçelerinin nispeten basit üretim süreci [25] ve bu malzemenin manyetik kaldırma uygulamaları için muazzam potansiyelini göstermektedir.

Manyetik Kaldırma Kuvveti

Süperiletkenler külçelerin teknolojik uygulamalar için önemli özelliği de; kritik sıcaklığın altında, uygulanan manyetik alanı dışarılamalarının (Meissner Olayı) sonucu olarak manyetik cisimleri havada tutmasıdır (Şekil 2 a, b, c). Bu eşsiz özelliğin günümüzde en çarpıcı örnekleri “Maglev”

olarak bilinen “Manyetik olarak havalanmıř uulařım araları” ve “Süperiletken manyetik yataklar” dır.



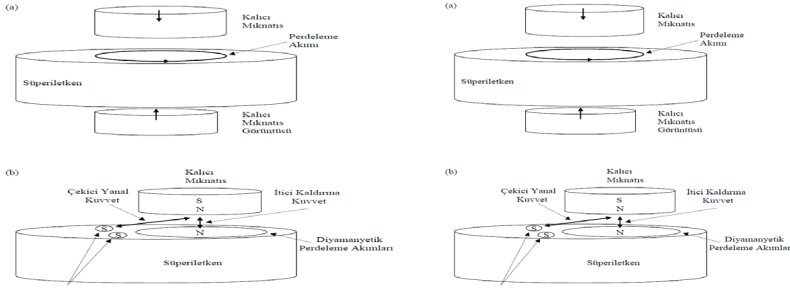
řekil 2. (a) Bir küle süperiletken üzerinde dengeli bir řekilde havada duran kalı mıknatıs (b) Küle süperiletkenlerin en etkileyici gösteri deneylerinden biri, yaklaşık 200 kg'lık bir Sumo güreřçisinin küle bir süperiletken üzerinde havada askıda kalması; (c) Japonya'da bir Maglev treni.

Maglev sisteminde görölen sürtünme yalnızca, ray ile ara arasındaki fiziksel temasın olmaması nedeniyle hava sürtünmesidir. Bu nedenle manyetik trenler, sınırlı enerji tüketimi ve düşük gürültü seviyeleri ile çok yüksek hızlarda (yaklaşık 650 km/sa) seyahat amacıyla kullanılabilirler (řekil 2 c). Manyetik kaldırma kuvveti süperiletkenin manyetik momenti ve manyetik alan gradyanı ile orantılıdır.

$$F_z = m (dH/dz), \quad m = MV, \quad M = AJ_c r \quad (1)$$

Burada m , süperiletkenin manyetik momenti; dH/dz , manyetik kaynak tarafından oluşturulan alanın düşey z eksenini boyunca deęişim oranı; M , birim hacimdeki mıknatıslanma; V , numune hacmi; A numune geometrisine baęlı bir sabit; J_c , süperiletkenin kritik akım yoğunluęu ve r , uygulanan dıř manyetik alanı dıřarlamak için süperiletkende oluşun perdeleme akım halkasının yarıapıdır.

Maglev sistemlerinde daha fazla yük taşıma kapasitesi için kaldırma kuvvetinin büyük olması istenir. Eřitlik 1'den anlaşılacağı gibi, büyük kaldırma kuvveti için malzemenin kritik akım yoğunluęu (J_c) ve malzemede indüklenen perdelemem akım yarıapının (r) büyük olması gerekir.



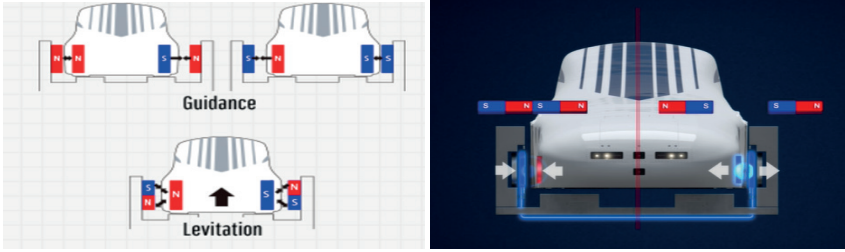
Şekil 3. Kaldırma kuvvetinin temel şematik diyagramları: (a) diyamanyetik tepki (b) akı tuzaklama.

Şekil 3'te manyetik kaldırma kuvvetinin temel diyagramları gösterilmiştir. Mıknatıs süperiletken örneğe yaklaşırken, belli bir mesafeden sonra süperiletken örnek manyetik alanı dışlamaya başlar ve örnekte perdeleme akımı ortaya çıkar. Bunun sonucunda, süperiletken örnek mıknatısa itici bir kuvvet uygular ve mıknatıs süperiletken örneğin hemen üzerinde boşlukta dengede kalır (itici kuvvet). Bu olayın tersi olarak, eğer süperiletken örnek yeteri kadar manyetik alan tuzaklarsa, mıknatıs süperiletken örneğin hemen altında da dengede kalabilir (çekici kuvvet). Ayrıca, süperiletken örneğin mıknatısa karşı direnç göstermesi olayı, mıknatısın ayna görüntüsü olarak da yorumlanabilir. Çünkü iki mıknatısın aynı kutupları birbirlerine doğru yaklaştırılırsa, birbirlerini iterler. Şekil 3 (b) mıknatıs süperiletken örneğe en yakın olacak şekilde yaklaştırıldıktan sonra uzaklaştırılırsa, çivileme merkezlerinde manyetik alanın tuzaklanmasından dolayı, süperiletken örnek mıknatısa çekici bir kuvvet uygular. Bu olay, iki zıt kutuplu mıknatısın birbirlerine doğru yaklaştırılmaları halinde birbirlerini çekmelerine benzetilir. Günümüzde yapılan araştırmalar sonucunda, manyetik kaldırma kuvveti özelliklerindeki iyileşmeler, araçların elektromanyetik parametrelerinin saptanmasında kullanılan ölçüm sistemlerindeki gelişmeler, Maglevlerin teknolojik uygulanabilirliğini arttırmış olsa da, teknolojik anlamda henüz istenilen düzeye gelinebilmiştir.

MAGLEV Nasıl Çalışır?

Trendeki süperiletken mıknatıslar yüksek hızda Levitation (kaldırma) ve Guidance (kılavuzlama) bobinlerinden geçerken, kaldırma ve kılavuzlama bobinlerinden elektrik akımı geçer ve bu sayede treni 10 cm kadar yukarı kaldıracak ve bu yükseklikte kalmasını sağlayacak bir manyetik kuvvet oluşturur (Şekil 4). Bu bobinlerin her ikisi de kılavuz yolunun her iki tarafındaki yan duvarlara monte edilmiştir, ancak farklı işlevleri vardır. Tahrik Bobinleri trene itme kuvveti verirken, Kaldırma ve Kılavuzlama bobinleri treni havaya kaldırmaya ve onu merkeze yönlendirmeye hizmet eder.

Süperiletken mıknatıslar Maglev aracına takıldığında araç kaldırma ve kılavuzlama bobinlerinden yüksek hızda geçerken, elektrik akımı bunların içinden akar ve onları elektromıknatıslara dönüřtürür. Bu elektromıknatıslar treni yukarı doğru itmek ve kaldırmak için manyetik kuvvet üretirler. Tren, kılavuz hattında merkezin dışına çıktığında, trenden daha uzak olan kılavuz yolu tarafı çekici bir kuvvet özellięi gösterirken, trene daha yakın olan dięer taraf itici kuvvet özellięi gösterir. Bu mekanizma, Maglev araçlarını her zaman kılavuzlama yolunun merkezine geri getirir. Maglev treni, kılavuz yolunun merkezinde hareket eder. Eęer tren bir tarafa yaklařırsa, süperiletken mıknatıslar ile Levitasyon ve Yönlendirme Bobinleri arasında etkili olan manyetik kuvvet, treni her zaman kılavuz hattında ortalanmış halde tutar. Manyetik kuvvet, Süperiletken Maglev' in kılavuz yolu duvarlarına çarpmasını önler ve kararlı çalıřmaya katkıda bulunur.

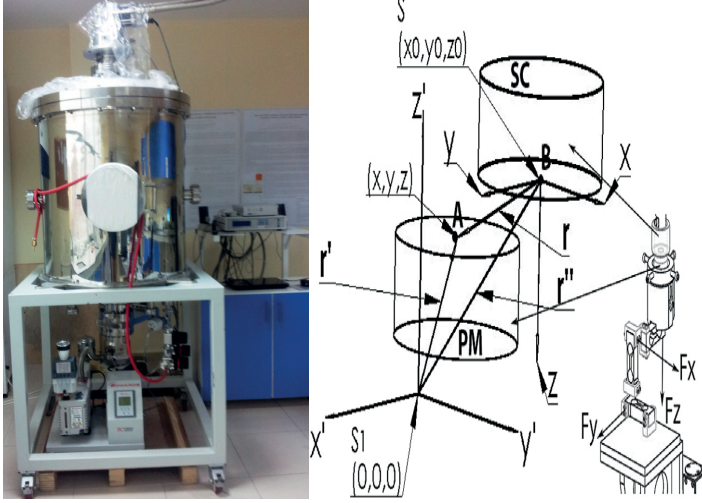


Şekil 4. Trendeki süperiletken mıknatıslar dönüşümlü olarak N ve S kutuplarına ayarlanır. Elektrik akımı, kılavuzlama yolu üzerindeki "tahrik bobinlerini" besler ve bu bobinlerin N ve S kutupları, treni ileri doğru itmek için elektrikselsel olarak deęiřtirilir. Elektrik akımının frekansı, N ve S kutupları arasında geçiř hızını kontrol etmek için ayarlanır ve böylece trenin hızı ayarlanabilir.

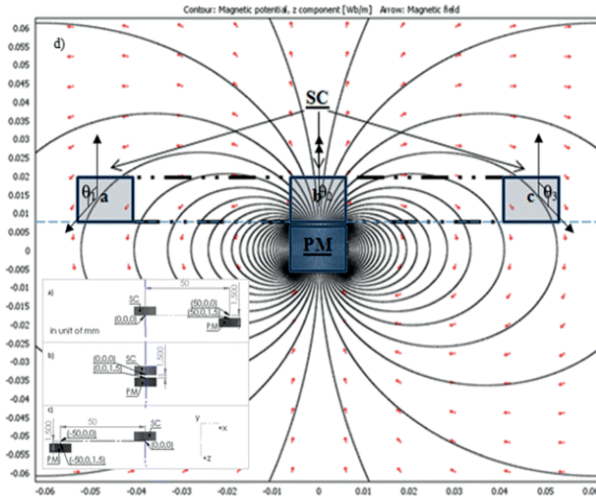
Manyetik Kaldırma Kuvveti Ölçümleri

Düşük sıcaklıklardaki manyetik kuvvet ölçümleri, TÜBİTAK tarafından desteklenen 110T622 nolu proje ile tasarlanan, 2013/13638 patent numaralı "Düşük Sıcaklık Cryostat Sistemi" kullanılarak Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Katıhal Arařtırma Laboratuvarı'nda gerçekleştirildi. Manyetik Kaldırma Kuvvet ölçümü için, içten dişli örnek tutucuya yerleřtirilen örnek özel yapıştırıcıyla yapıştırılıp, sonrasında Cryostat içinde bulunan yuvasına takılmıştır (Şekil 5a). Alan sağlayıcı olarak kullanılan mıknatıs ve süperiletken örnek arasındaki mesafe "Alansız soęutma" ZFC ve "Alanlı Soęutma" FC rejimine göre belli mesafe sisteme baęlı PC kontrolünde hassas olarak ayarlanmıştır. Cryostat kapatılarak, önce bu sisteme baęlı Rotary pompa ile ön vakum saęlandıktan sonra (10^{-2} torr), turbo moleküler pompayla kaba vakum saęlanmıştır (10^{-5} - 10^{-6} torr). Yine ZFC veya FC durumuna göre mesafe ayarı yapılmışken, kapalı devre su soęutma sis-

temi açılarak kompresör devreye sokulmuştur. Soğuma işlemi sırasında soğutma durumuna göre veriler sisteme bağlı ekipmanlar ve PC aracılığıyla ayarlanmış ve buna göre ölçümler alınmıştır (Şekil 5b).

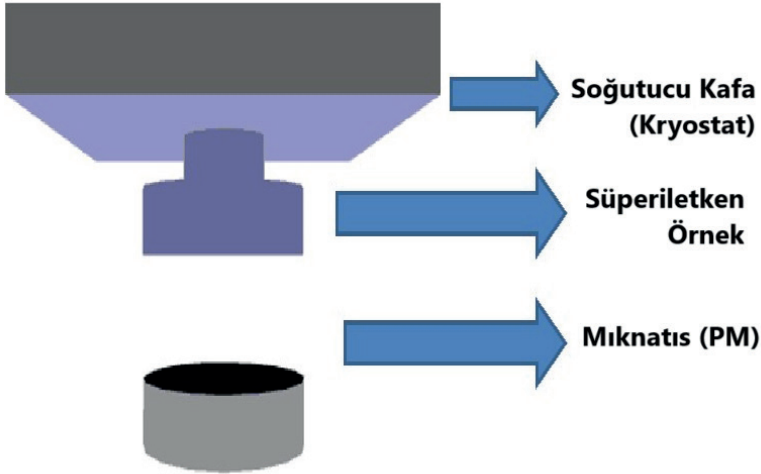


Şekil 5. (a) Manyetik Kaldırma Kuvveti Ölçüm Sistemi fotoğrafı, (b) Manyetik kaldırma kuvveti deney geometrisi ve süperiletken ile sürekli mıknatısın (permanent magnet, PM) birbirine göre konumları.



Şekil 6. Uygulanan bir manyetik alanın etkisi altındaki bir süper iletkenin şematik gösterimi.

MgB₂ süperiletkeninin hemen altında, hem eksensel hem de radyal yönde hareket edebilen NdFeB silindirik mıknatıs (19 mm apında ve 10 mm yüksekliğinde) manyetik alan üretme kaynağı olarak kullanıldı (Şekil 6). Düşey kuvvet (F_z), mıknatısın üst yüzey merkezi ve örneğin alt yüzey merkezi arasındaki düşey mesafeye baęlı olarak bilgisayar kontrolünde kesintisiz ölçüldü. MgB₂ örnekleri, mıknatısın 50 mm üstündeyken (manyetik alanının ihmal edilebildiğı mesafe) düşey ZFC ölçümleri için oda sıcaklığından ařağı soęutuldu. Sonra mıknatıs ile örnek arasındaki minimum uzaklık 1,5 mm olana kadar yükseltildi ve ilk pozisyonuna indirildi. İlk ölçüm 35 K' de alınarak süperiletkenin kaldırma gücü test edildi. Bunun nedeni, Cryostat sisteminin zorlanacağı ve bozulabileceğı kuvvetlerin önceden fark edilmesidir. FC ölçümleri ise, örnekler ve mıknatıs arasındaki mesafe 1,5 mm iken soęutma yapılarak, aradaki mesafenin 50 mm artışı ve tekrar 1,5 mm' ye düşüşü sırasında alınmıştır (Şekil 7).

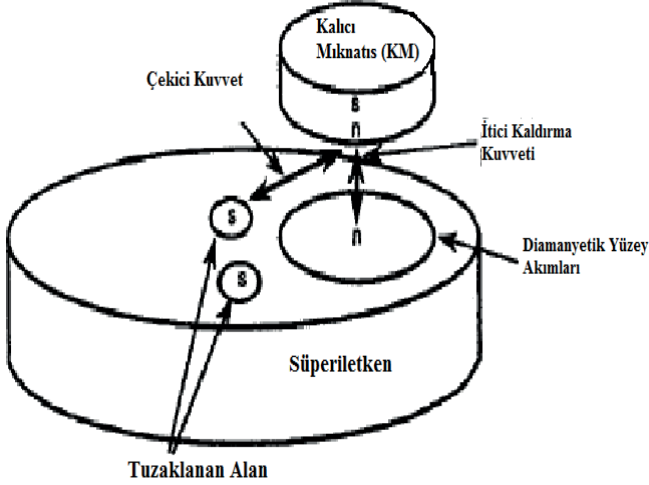


Şekil 7. Yukarıdaki şematik gösterim, ZFC ve FC koşulları için manyetik kaldırma ölçümü sırasında numune-PM hareketini ve sabit mıknatıs ile süper iletken numune arasındaki mesafe ilişkisini göstermektedir.

II. Süperiletkenlerde Alansız Soęutma (Zero-Field-Cooling)

II. tip süperiletkenlerde karışık halde alan geçişi olmaktadır. Eđer süperiletken alan olmadan soęutulursa, karışık halde alan geçişi baskılanmış olacaktır. Çünkü ivileme merkezleri görevi yapan kesimler donmuş olacak ve akı kısmi olarak süperiletkene işleyecektir. Bu durumda I. tip süperiletkene benzer şekilde, baskın bir itme gözlemlenirken, kısmi olarak

çekme gözükecektir. Şekil 8’de görüldüğü gibi karışık halde hem çekici kuvveti oluşturan aynı yönlü alan olacak hem de zıt yönlü itici kuvveti oluşturan diamanyetik yüzey akımları olacaktır.



Şekil 8. II. Tip süperiletken külçe ile kalıcı mıknatıs arasında oluşan itici ve çekici manyetik kuvvetler.

II. Tip Süperiletkenlerde Alanlı Soğutma (Field-Cooling)

Alan geçişi sırasında, süperiletken soğutulduğunda çekici kuvvetin baskın olduğu aynı yönlü akım tuzaklanmış olacaktır. Süperiletken perdeleyici akımlar, daha az baskın şekilde oluşacaktır. Manyetik akıların çivilenmesi de kuvvet için önemli olacaktır. Mıknatıs süperiletkene yaklaştırıldığında çivileme alanın bu bölgede tuzaklanmasını sağlamış olacaktır (Şekil 6).

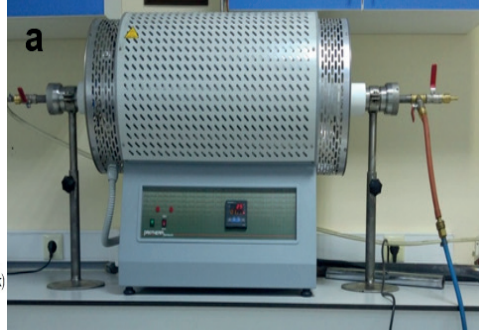
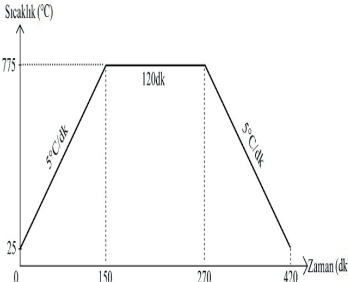
Geleneksel Katı-hal Sinterleme Yöntemiyle Üretilen Külçe MgB_2 örneklerinde Kaldırma Kuvveti

1.5 g lık silindirik ($R = 18$ mm) külçe MgB_2 örnekleri geleneksel katı-hal tepkime (*in-situ*) yöntemiyle üretildi. Bu yöntemde elemental Mg tozu (Alfa Aesar, -325 mesh) ve amorf nano-B (Pavezyum, %99.8 saflıkta) tozu uygun stokiyometrik oranlarda ($Mg:B = 1:2$) birbirine eklenip agat havanda, hava ortamında bir saat boyunca homojen karışım elde etmek için karıştırıldı. Magnezyumun yüksek buharlaşma özelliği de dikkate alınarak toplam miktar üzerinden %10 daha fazla magnezyum eklendi ve toplam toz kütlesi 1,65 gr'a yükseldi. Toz karışım 18 mm çapında silindirik kalıpta 10 ton basınç altında preslendi.

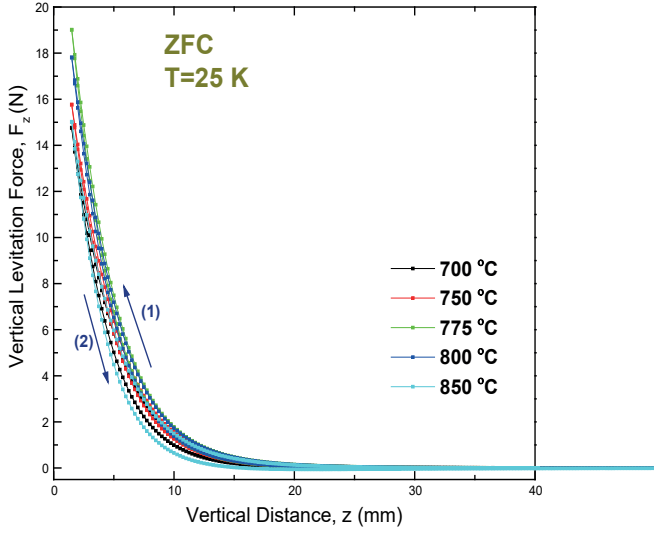
Tablo 2. Bařlangıç kompozisyonu hazırlamasında kullanılan tozlar

Tozun Adı	Sembolü	Saflık Derecesi (%)	Molekül Aęırlığı (a.u.)
Magnezyum	Mg	% 99.8	24,305
Bor	B	% 99.8	10,811

Preslenerek pellet haline getirilen örnekler tantalyum (Ta) folyoya sarıldı ve ısıl iřlem için paslanmaz krom (Cr) tüp ierisine yerleřtirildi. Yirmi dakika boyunca tüpün ve baęlantı borularının vakumu (10^{-2} bar) alındı. Isıl iřlemede kullanılan tüp fırın (řekil 9) iine yerleřtirildi ve argon (Ar) atmosferinde farklı sinterleme sıcaklıklarında 3 saat süresince ısıl iřleme tabii tutuldu.

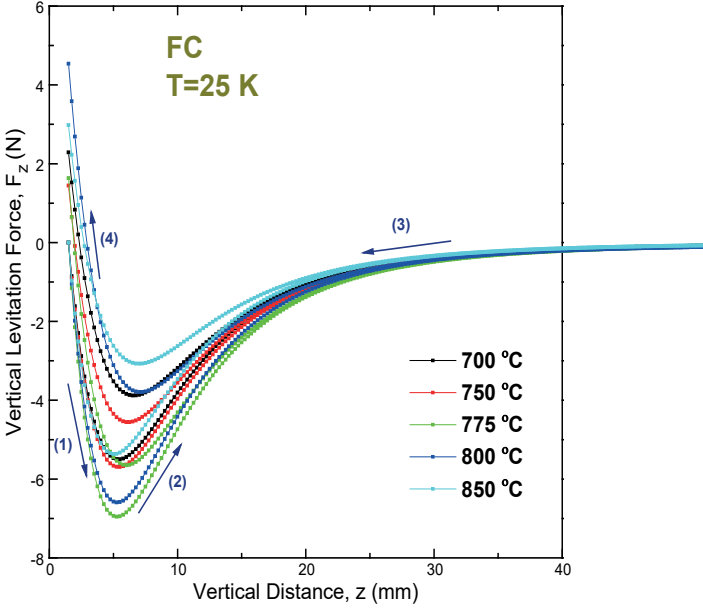
**řekil 9.** (a) Sinterleme iřleminde kullanılan silindirik fırın, (b) Isıl iřlem grafięi.

Farklı sıcaklıklarda sinterlenen küle MgB_2 örneklerinin $T=25$ K sıcaklığında, sıfır alan altında soęutma (ZFC) rejiminde, manyetik kaldırma kuvvetinin dikey harekete göre deęiřim grafięi řekil 10'da görölmektedir. řekilde ki (1) ve (2) iřaretleri sırasıyla, örneęe ve örnekten uzaęa doęru mıknatısın hareketini gösterir. Mıknatıs süperiletkene doęru hareket ettięinde, süperiletkenin hissettięi manyetik alan artar ve dolayısıyla manyetik kaldırma kuvvetini de arttıracaktır. Maksimum kaldırma kuvvetleri (mıknatıs ve örnek arasındaki mesafe 1,5 mm olduęunda alındı) grafięin ierisinde büyütölerek tekrar çizildi. řekil 10'da, 25 K sıcaklığında tüm örneklerde önemli dikey kaldırma kuvveti deęeri gözlemlendi ve en yüksek kaldırma kuvveti 775 °C'de sinterlenen MgB_2 örneęinde elde edildi.



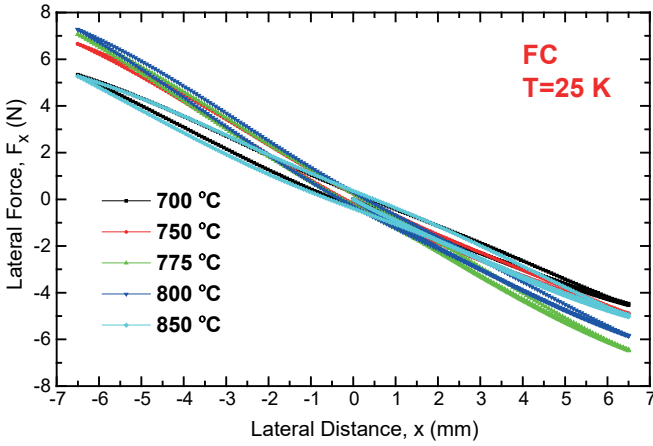
Şekil 10. 700, 750, 775, 800 ve 850 °C sıcaklıklarda sinterlenen MgB_2 örneklerinin ZFC rejiminde 25 K sıcaklıkta ölçülmüş kalıcı mıknatıs ve örnekler arasında dikey mesafeye karşı dikey kaldırma kuvveti grafiği.

Şekil 11’ de, farklı sıcaklıklarda sinterlenen MgB_2 örneklerinin alanlı soğutma (FC) rejiminde mıknatıs ve örnekler arasında dikey mesafeye karşı dikey kaldırma kuvveti grafiği görülmektedir. 25 K sıcaklıkta en yüksek çekici kuvvet (negatif değer) ZFC ölçümünde olduğu gibi, 775 °C de sinterlenen MgB_2 örneğinde elde edildi. 775 °C sinterlenen örnekte elde edilen yüksek çekici ve itici manyetik kuvvet değerleri, bu sıcaklıkta sinterlenen örnekte süperiletken taneler arasındaki teması arttırdığını göstermiştir.



Şekil 11. 700, 750, 775, 800 ve 850 °C sıcaklıklarda sinterlenen MgB_2 örneklerinin FC rejiminde 25 K sıcaklıkta ölçülmüş kalıcı mıknatıs ve örnekler arasında dikey mesafeye karşı dikey kaldırma kuvveti grafięi.

Yatay manyetik kuvvet, Maglev araçlarında kılavuzlayıcı kuvvettir ve kaldırma araçlarında yatay dengelemeyi etkiler. Maglev sistemlerinin teknolojik uygulamaları için manyetik kaldırma kuvvetinin yanında, kılavuzlama kuvvetinde artırılması gerekmektedir. Şekil 12, FC rejimi altında farklı sıcaklıklarda sinterlenen külçe MgB_2 örneklerinin yatay mesafeye (x) karşı kılavuzlayıcı kuvvet (F_x) değerlerini göstermektedir. 25 K ölçüm sıcaklığında, en büyük kılavuzlama kuvveti 775 ve 800 °C de sinterlenen MgB_2 külçe örneklerinde elde edildi.



Şekil 12. 700, 750, 775, 800 ve 850 °C sıcaklıklarda sinterlenen MgB_2 örneklerinin 25 K sıcaklıkta ölçülmüş kalıcı mıknatis ve örnekler arasında yanıl mesafeye (x) karşı kılıvzlayıcı kuvvet (F_x) grafikleri.

SONUÇ

Günümüzde süperiletken malzemeler enerji, ulaşım, endüstri, tıp, iletişim ve çevre koruma gibi pekçok farklı alanda kullanılmaktadır. Düşük sıcaklık süperiletkenlerinin (Nb- tabanlı) soğutma maliyeti, yüksek sıcaklık (Cu-tabanlı) süperiletkenlerinin üretim maliyeti gözönüne alındığında, MgB_2 süperiletkeni, 0-7 T manyetik alan altında yüksek J_c gerektiren elektrik iletim kabloları, MRI sistemleri, süperiletken motorlar, jeneratörler ve manyetik taşıyıcı sistemler gibi birçok uygulama için iyi bir alternatiftir. Çin’de 2021 yılında, 620 km/saat maksimum hıza ulaşabilen Cu-tabanlı yüksek sıcaklık süperiletken malzemenin kullanıldığı süperiletken Maglev tren prototipi piyasaya sürüldü. Ancak Cu-tabanlı süperiletken malzemenin maliyeti oldukça yüksektir. Bu nedenle en iyi Cu-tabanlı süperiletken malzemeler ile benzer manyetik kaldırma kuvveti performansına sahip, büyük boyutlu ve farklı geometrilere üretime uygun MgB_2 ’nin basit ve hızlı üretim süreci bu malzemenin manyetik taşıyıcı sistemlerde mükemmel potansiyelini göstermektedir.

Referanslar

- [1] Jones M E and Marsh R E 1954 The Preparation and Structure of Magnesium Boride, MgB_2 *J. Am. Chem. Soc.* **76** 1434–6.
- [2] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu 2001 Superconductivity at 39 K in magnesium diboride *Nature* **410** 63–4.
- [3] Huang X, Mickelson W, Regan B C and Zettl A 2005 Enhancement of the upper critical field of MgB_2 by carbon-doping *Solid State Communications* **136** 278–82
- [4] Prikhna T, Eisterer M, Gawalek W, Kozyrev A, Weber H W, Sokolovsky V, Chaud X, Noudem J, Habisreuther T, Moshchil V, Karpets M, Basyuk T, Kovylaev V, Dellith J, Sverdun V, Kuznetsov R, Shmidt C, Vitovetskaya T and Polikarpova L 2013 Synthesis Pressure–Temperature Effect on Pinning in MgB_2 -Based Superconductors *J Supercond Nov Magn* **26** 1569–76
- [5] Muralidhar M, Inoue K, Koblischka M R, Murakami A and Murakami M 2015 Effects of Silver Addition on Critical Current Densities and Mechanical Properties in Bulk MgB_2 *Advanced Engineering Materials* **17** 831–8
- [6] Muralidhar M, Kenta N, Koblischka M R and Murakami M 2015 High critical current densities in bulk MgB_2 fabricated using amorphous boron: High critical current densities in bulk MgB_2 *Phys. Status Solidi A* **212** 2141–5
- [7] Yamamoto A, Ishihara A, Tomita M and Kishio K 2014 Permanent magnet with MgB_2 bulk superconductor *Appl. Phys. Lett.* **105** 032601
- [8] Durrell J H, Dancer C E J, Dennis A, Shi Y, Xu Z, Campbell A M, Babu N H, Todd R I, Grovenor C R M and Cardwell D A 2012 A trapped field of >3 T in bulk MgB_2 fabricated by uniaxial hot pressing *Supercond. Sci. Technol.* **25** 112002
- [9] Fuchs G, Häßler W, Nenkov K, Scheiter J, Perner O, Handstein A, Kanai T, Schultz L and Holzapfel B 2013 High trapped fields in bulk MgB_2 prepared by hot-pressing of ball-milled precursor powder *Supercond. Sci. Technol.* **26** 122002
- [10] Noudem J G, Aburras M, Bernstein P, Chaud X, Muralidhar M and Murakami M 2014 Development in processing of MgB_2 cryo-magnet superconductors *Journal of Applied Physics* **116** 163916
- [11] Noudem J G, Bernstein P, Dupont L, Martin F G R, Sotelo G G, Dias D H N, de Andrade R, Muralidhar M and Murakami M 2020 Spark plasma sintering of bulk MgB_2 and levitation force measurements *Supercond. Sci. Technol.* **33** 024001
- [12] Bernstein P, Colson L, Dupont L and Noudem J 2017 Investigation of the levitation force of field-cooled YBCO and MgB_2 disks as functions of temperature *Superconductor Science and Technology* **30** 065007
- [13] Kang W N, Kim H-J, Choi E-M, Jung C U and Lee S-I 2001 MgB_2 Superconducting Thin Films with a Transition Temperature of 39 Kelvin *Science*

292 1521–3

- [14] Shi Z X, Zhang Y X, Lv H, Xu M, Choi E-M and Lee S-I 2007 Flux pinning in c-axis-oriented MgB_2 thin film *Physica C: Superconductivity and its Applications* **467** 101–5
- [15] Canfield P C, Finnemore D K, Bud'ko S L, Ostenson J E, Lapertot G, Cunningham C E and Petrovic C 2001 Superconductivity in Dense MgB_2 Wires *Phys. Rev. Lett.* **86** 2423–6
- [16] Liu Y, Cheng F, Qiu W, Ma Z, Al Hossain M S and Dou S X 2016 High performance MgB_2 superconducting wires fabricated by improved internal Mg diffusion process at a low temperature *J. Mater. Chem. C* **4** 9469–75
- [17] Grasso G, Malagoli A, Ferdeghini C, Roncallo S, Braccini V, Siri A S and Cimberle M R 2001 Large transport critical currents in unsintered MgB_2 superconducting tapes *Appl. Phys. Lett.* **79** 230–2
- [18] Fang H, Padmanabhan S, Zhou Y X and Salama K 2003 High critical current density in iron-clad MgB_2 tapes *Appl. Phys. Lett.* **82** 4113–5
- [19] Tixador P 2006 Concepts for HTS and MgB_2 in transformers vol 47 (Trans Tech Publ) pp 195–203
- [20] Ballarino A, Bordini B and Giannelli S 2016 MgB_2 Transmission Lines for the Large Hadron Collider *MgB₂ Superconducting Wires: Basics and Applications* (World Scientific) pp 581–91
- [21] Razeti M, Angius S, Bertora L, Damiani D, Marabotto R, Modica M, Nardelli D, Perrella M and Tassisto M 2008 Construction and Operation of Cryogen Free MgB_2 Magnets for Open MRI Systems *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **18** 882–6
- [22] Nakamura T, Yamada Y, Nishio H, Kajikawa K, Sugano M, Amemiya N, Wakuda T, Takahashi M and Okada M 2012 Development and fundamental study on a superconducting induction/synchronous motor incorporated with MgB_2 cage windings *Supercond. Sci. Technol.* **25** 014004
- [23] Deng Z, Zhang W, Zheng J, Ren Y, Jiang D, Zheng X, Zhang J, Gao P, Lin Q, Song B and Deng C 2016 A High-Temperature Superconducting Maglev Ring Test Line Developed in Chengdu, China *IEEE Transactions on Applied Superconductivity* **26** 1–8
- [24] Lilit M 2021 China debuts train prototype that can hit speeds of 620 kilometers per hour
- [25] Bernstein P and Noudem J 2020 Superconducting magnetic levitation: principle, materials, physics and models *Supercond. Sci. Technol.* **33** 033001

”

BÖLÜM 3

GAZ SENSÖRLERİNİN TEORİK MODELLENMESİ¹

Ali ÇIBIK², Murat YILDIZ³

1 “ Gaz sensörlerinin teorik modellenmesi” adlı tez Yüksek Lisans Tezi olarak sunulacak, Öğrenci Ali ÇIBIK,

2 İstanbul Milli Eğitim Müdürlüğü

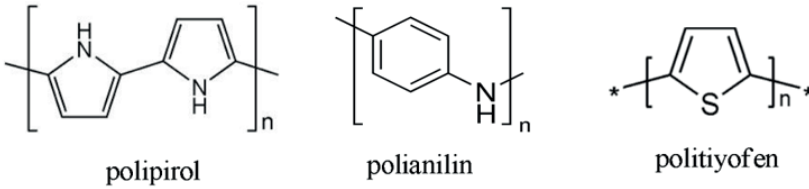
3 Prof. Dr., Karamanoğlu Mehmetbey Ü. Fizik Böl., ORCID ID: 0000-0003-2746-4190

GİRİŞ

Yalıtkan materyal olarak bilinen polimerler, 1977 yılında Shirakawa, MacDiarmid ve Heeger'in Ziegler Natta katalizörü kullanarak, metal görünümü ve tam anlamıyla iletken olmayan gümüşümsüpoliasetilen (PA) filmlerinin, klor, brom, iyot buharıyla tepkimesiyle mekanik özelliklerinde olumlu değişim gözlemlendiği ve ilk durumdan 109 kat daha fazla iletken hal aldıkları anlaşılmıştır.(Ito, Shirakawa ve ark. 1996). Bu gelişmelerle iletken polimer terimi ortaya çıkmış ve sensörler gibi yeni kullanım alanları oluşmuştur.

Küçük molekül yapıları olan monomerlerin, birbirlerine eklenmesiyle oluşan uzun zincirli yapılar, polimer olarak adlandırılır. Polimerlerin metallere nazaran avantajlı ve dezavantajlı olduğu durumlar bulunmaktadır. Polimerler, metallere nazaran hafif, ucuz ve kolay şekil alabilmektedirler. Ancak iletken olmamaları dezavantaj olarak görülmektedir. Bu nedenle iletken madde üretmek için iki materyalin bir araya getirilmesiyle çalışma başlatılmıştır. Shirakawa, Macdiarmid ve Heeger çalışmalarında, iletken polimer kavramını keşfetmişlerdir.

1979'da Diaz'ın pirolü elektrokimyasal yöntemle yükseltgeyerek polipirolü üretmesi, iletken polimer üretilmesinde önemli bir adım olarak görülmektedir. Polipirol anot üzerinde üretilebilmiş ve güçlü bir film olarak yüzeyden çıkarıldığında iletkenliği 100 S/cm'ye ulaşabilmiştir. (Diaz 1979).



Şekil 1 - Bazı iletken polimerler

İletken polimerler tekrar üretilmeleri, hazırlık sürecinin kolay olması ve sahip oldukları elektrokimyasal özellikleri sebebiyle sensörlerde tercih edilmektedirler. Bilim demeydana gelen yeniliklerde de teorik anlamda veri eldesi için tercih sebebi olmaktadır. Sensörler, tarımdan gıdaya, çevreden askeri alan gibi birçok yerde kullanılabilir. Dithieno(3,2-b:2'',3''-d)pyrrole (DTP), p-konjuge organik materyallerin sentezi ve uygulamalarında, üretim ve maliyet açısından daha ekonomik ve seri olması, uygun ağırlıkta olması, esnek malzeme üretiminde kullanışlı ol-

ması gibi avantajları, yapılan bilimsel arařtırmalarda kullanılabiliyor olması, akademik arařtırmalarda ilgi odaęı olmuřtur. DTP bazlı p-konjuge organik materyaller, organik ışık yayan diyotlarda (Evenson, Mumm ve ark. 2011), organik ince film transistörlerde (Balaji, Phua ve ark. 2010), alan etki transistörlerde (Liu, Wang ve ark. 2012), (Tiwari, Kim ve ark. 2012) ve fotovoltaiik hücreler ve (Kim, Lim ve ark. 2011), (Lu, Chen ve ark. 2010) fotolüminesans, elektrolüminesans ince filmlerde (Mo, Radke ve ark. 2010) kullanılmıřlardır.

Atmosferde solunan hava içerisinde , mevcut durumda varlıklarının milyonda bir seviyesindeki (ppm) oranı bile saęlık açısından olumsuz sonuçlar doğuracak, toksik etkiye sahip gaz molekülleri var. Sıvılařtırılmıř petrol gazı (LPG), sıvılařtırılmıř doęal gaz (LNG), karbon monoksit (CO), sülfür dioksit (SO₂), azot dioksit (NO₂), sülfür trioksit (SO₃), metan (CH₄), etan, propan ve sigara dumanı vb. uçucu toksik bileřiklerin varlıęı, üretilecek gaz sensörlerinin, erken uyarı ve algılaması gereken zehirli bileřiklerdir. (Persaud ve Pelosi, 1992; Hatfield ve ark., 1994; De Souza ve ark., 1999; Adhikari ve Majumdar, 2004). Gaz detektörü olarak da bilinen gaz sensörü, farklı gaz türlerini tespit eden bir elektronik cihazdır. Genellikle zehirli ve patlayıcı gazların tespit edilmesi ve ölçülmesi süreçlerinde kullanılır. Aynı zamanda gaz sızıntısının ve sızıntı miktarının önemli olduęu alanlarda da yaygın olarak kullanılır. Budedektörler hassas oldukları gazı algıladıklarında alarm verirler. Gaz kaçaıklarının tespit edilmesi için kullanılan dedektörler kaçaık tehlikeli olmadan tespit edilmesini saęlar.

Atmosferde bulunan ve oranı deęiřmeyenler; %78 ile azot ilk sırada, %21 ile oksijen ikinci sırada bulunmaktadır. Geriye kalan %1'lik kısımda ise asal yani serbest halde dolařan gazlar (helyum, hidrojen, kripton, argon, neon, ksenon) dır. Yanıcı gazlara, metan(CH₄), karbonmonoksit (CO) ve hidrojen örnek verilebilirken, boęucu gazlara karbondioksit , nitrojen ve metan(CH₄) örnek verilebilir. Zehirli gazlar ise karbonmonoksit (CO), azotun(N) tüm oksitleri, hidrojen sülfür , kükürtdioksit vb. gazlardan oluşmaktadır.

Temiz hava olarak tanımlanan havanın insan faaliyetleri ve bazı doęal süreçlerle nitelięinin deęiřmesi olayına hava kirlilięi denmektedir. Kirletici maddeler belli bir sınır deęerin üzerinde bulunuyorlarsa kirlilięi hava söz konusudur. Pek çok bilim adamı temiz havayı bileřimi ařaęıda verilmiř gazların bir karıřımı olarak tanımlamaktadır: Dinitrojen (% 78.09), dioksijen(% 20.94), argon (% 0.93), karbondioksit (% 0.031), neon, helyum, metan, kripton, dihidrojen, nitrozoksit, karbonmonoksit, ozon, amonyak, azot dioksit ve kükürt dioksit. řayet temiz hava bu ise buna karıřan her hangi birleřen “ kirletici / pollutant” olarak tanımlanabilir. Yakın zamanda, polianilin (PANI), politiyofen (PT), polipirol (PPy) ve bunların türevleri gibi cazip elektriksel, kimyasal ve fiziksel özelliklerinden dolayı polimerlerin

iletimi üzerinde yoğunlaşmıştır. İletken polimerler basitçe sentezlenebilirler ve pratik uygulamalar için ucuz mikro elektronik sensörler olarak bilinir. Polimer, küçük moleküllerin birbirine kovalent bağ ile bağlanarak oluşturdukları zincir halkalarına benzetebileceğimiz büyük moleküllerdir. Polimerler ilk kullanım alanlarına bakıldığında elektriksel yalıtkanlığı iyi olan maddeler olarak bilinirler. Esnekliği, kolay işlenebilir olması, estetik görüntüsü, hafif olması diğer üstün özelliklerindedir. Teorik modelleme ile bilgisayar üzerinde moleküllerin özelliklerinin ve davranışlarının hesaplanması ve simüle edilebilmesi temeline dayanan bilgisayar hesaplamalı teorik modelleme sayesinde moleküllerin geometrik yapıları, geçiş halleri ve enerjileri, kimyasal reaktiviteler, UV, IR, NMR spektrumları, fizikokimyasal özellikleri tespit edilebilir. Gaz dedektörü olarak da bilinen gaz sensörü, farklı gaz türlerini tespit eden bir elektronik cihazdır. Genellikle zehirli ve patlayıcı gazların tespit edilmesi ve ölçülmesi süreçlerinde kullanılır. Aynı zamanda gaz sızıntısının ve sızıntı miktarının önemli olduğu alanlarda da yaygın olarak kullanılır. Genel bir açıklama yapmak gerekirse; gaz dedektörü, gaz kaçaqlarını hemen algılayan ve tehlikelere karşı güvenlik oluşturan cihazdır. Herhangi bir şekilde yanıcı gazlarda meydana gelen kaçağı algılayarak patlamalara ve yangınlara engel olmak için yardımcı olur. Benzen, toluen ve diğer bazı uçucu organik bileşikler (VOC'ler) gibi birçok önemli organik analitler, oda sıcaklığında ve ılımlı koşullar altında reaktif değildir. Bu nedenle onları iletken polimerlerle kimyasal reaksiyona girerek tespit etmek zordur. Bununla birlikte, polimer matrislerinin emilmesi veya şişmesi vb. dahil olmak üzere algılayıcı polimerlerle zayıf fiziksel etkileşimlere sahip olabilirler. Bu etkileşimler, iletken polimerlerin oksidasyon seviyelerini değiştirmez, ancak aynı zamanda algılama malzemelerinin özelliklerini de etkileyebilir ve bu gazları tespit edilebilir hale getirebilir (Hua&Gaoquan, 2007).

Metan, kimyasal formülü CH_4 (Karbon ve 4 Hidrojen atomu) olan bileşiktir. Normal sıcaklık ve basınçlarda gaz halinde bulunan metan, kokusuzdur. Isınma durumunda yangın, yaralanma riskini artırır. Metan zehirli değildir, fakat yüksek konsantrasyonda basit bir boğucu gaz olarak davranır. Aksi belirtilmediği sürece madde verileri, Standart sıcaklık ve basınç koşullarında belirtilir ($25\text{ }^{\circ}C$ [$77\text{ }^{\circ}F$], 100 kPa). Doğal metan hem zemin altında hem de deniz tabanı altında bulunabilir. İçten yanmalı motorlar ve gaz türbinleri, elektrik ve termal enerji üretmek için kömür kökenli metanı kullanabilmektedir. Bunun yanı sıra havalandırma havasında bulunan metan, yanma havası olarak kullanılabilir. Doğalgaz yer kabuğunun içindeki fosil kaynaklı bir çeşit yanıcı gaz karışımıdır. Bir petrol türevidir. Yakıt olarak önem sıralamasında ham petrolden sonra ikinci sırayı alır. Doğalgazın büyük bölümü (%70-90'ı), Metan gazı (CH_4) adı verilen hidrokarbon bileşiğinden oluşur. Eğer hoş olmayan, çürük yumurtaya benzer

bir kokuyu alabiliyorsanız metan seviyesi patlamaya sebep olacak kadar yüksek olabilir. Normal sıcaklık ve basınçlarda gaz halinde bulunan metan, kokusuzdur. Doğal gazın bir bileşenidir ve önemli bir yakıttır. Oksijenin varlığında bir mol metanın yanmasıyla bir mol karbondioksit ve iki mol su ve 55.5 MJ/kg ısı açığa çıkar: Doğal metan hem zemin altında hem de deniz tabanı altında bulunabilir. Havadan daha hafif bir gaz olan (özgül ağırlığı 0,554) ve suda oldukça az miktarda çözünen metan havada kolaylıkla yanarak karbon dioksit ve su buharı verir. Sıvılaştırılmış doğal gaz veya uluslar arası kabul edilmiş adı ile kısaca LNG esas bileşeni Metan olan doğal gazın aşırı soğutulmuş -162 C’de sıvı haline geçirilmiş şeklidir. -162 C’de doğal gaz yoğunlaşarak sıvı haline geçtiğinde (LNG) gaz halindeki hacimden yaklaşık 600 defa daha az hacim kaplar.

Grizu kaynaklı patlama riskinin önlenmesi için madenin havalandırılması ve gaz yoğunluğu seviyesinin kontrolü büyük önem taşıyor. Bartın’da (Amasra) maden ocağında grizu patlaması: 41 can kaybı Bartın’ın Amasra ilçesinde Türkiye Taşkömürü Kurumu’nda meydana gelen patlamanın ilk belirlemelere göre grizu nedeniyle yaşandığı açıklandı. Grizu patlaması, madenlerde kaza sonucu en fazla ölümün sebebi. Risk, özellikle yaşlı kömür damarlarında çok yüksek. Özellikle CH₄’ün etkisi ömrünün artmasıyla artırılır, ve ozon, stratosferik su buharı ve CO₂’nin atmosferik bolluğu atmosferik kimyasal süreçlerin sonucudur. Emisyon senaryolarındaki belirsizliklere rağmen, Sonuçlarımız atmosferik kimyadaki geri bildirimlerin daha iyi anlaşılmasını sağlıyor bu iklim ısınmasını artıracaktır. (Isaksen ve ark, 2011) Metan emisyonlarının tahmini Depolama sahaları genellikle atık üretimi ve metan yakalama yöntemlerinin verimliliği gibi girdi parametrelerini kullanan model tahminlerine dayanır ve bu nedenle yüksek belirsizlikle ilişkilendirilir. Büyüklüğü ve dinamikleri hakkında daha iyi bir anlayış elde etmek Depolama alanlarındaki metan emisyonlarının ölçümü için uygun ölçüm yöntemleri Emisyonları tanımlamak ve ölçmek için gereklidir. (Mønster ve ark, 2014) Metanın okyanusa salınması da önemlidir, çünkü metanın su kolonunda oksidasyonu okyanus asitliliğini artırır ve çözünmüş oksijen seviyelerini düşürür, bunun sonucunda deniz biyoçeşitliliğini etkiler. (Westbrook ve ark, 2009)

Metan içeren çöp gazı, organik atıkların anaerobik olarak parçalanmasıyla üretilir. Metan güçlü bir sera gazıdır ve çöplükler, atmosferik metanın başlıca antropojenik kaynaklarından biridir. Depolama alanındaki metan, topraktaki metanotrofik mikroorganizmalar veya atmosferden örtü tabakasına yayılan oksijeni kullanan atık malzemeler tarafından oksitlenebilir. Çeşitli çevresel faktörler tarafından yönetilen metan oksidasyon sürecinden mühendislik sistemlerinde yararlanılabilir. Metan emisyonunun azaltılması için geliştirildi. Metan oksidasyonunu açıklayan matematiksel modeller tahmin etmek için kullanılabilir çöplüklerden metan emisyonları.

Mikrobiyal metan oksidasyon süreçlerini kullanan metan azaltma teknolojilerinin ticari olarak uygulanabilir hale gelmesi ve yaygın olarak uygulanması için ek araştırma ve teknoloji geliştirmeye ihtiyaç vardır. Özellikle çöp depolama alanlarının birincil öneme sahip olduğu tespit edildi. CH₄ üretiminin kaynağı. Dünya çapında CH₄ emisyonu Atık sektöründen kaynaklanan küresel antropojenik CH₄ emisyonunun yaklaşık %18'i dir. (Scheutz ve ark, 2009)

Birçok gelişmiş ülke sera gazını azaltma stratejileri arasında çöp alanlarındaki metan geri kazanımını hedeflemiştir, çünkü metan en önemli gazdır.karbondioksitten sonra ikinci en önemli sera gazıdır. Gerçek metan üretim oranlarına ilişkin önemli sorular halen devam etmektedir.Saha ayarları ve geri kazanılan, yayılan, metanotrofik bakteriler tarafından oksitlenen, yanal olarak taşınan metan kütlesi veyadepolama sahası hacminde geçici olarak depolanır. (Spokas ve ark, 2005)

KURAMSAL TEMELLER

Moleküler Modelleme

Moleküler modelleme, moleküllerin davranışını modellemek veya taklit etmek için kullanılan teorik ve bilgisayarlı tüm yöntemleri kapsar. Bu yöntemler, küçük kimya sistemlerinden büyük biyolojik moleküllere ve malzeme gruplarına kadar değişen moleküler sistemleri incelemek için bilgisayarlı kimya, ilaç tasarımı, bilgisayarlı biyoloji ve malzeme bilimi alanlarında kullanılmaktadır. En basit hesaplamalar elle yapılabilir, ancak kaçınılmaz olarak makul büyüklükteki herhangi bir sistemin moleküler modellemesini bilgisayarların yapması gerekir. Moleküler modelleme yöntemlerinin ortak özelliği, moleküler sistemlerin atom düzeyinde tanımlanmasıdır. Bu, atomları en küçük bireysel birim olarak muamele edilmesini (moleküler mekanik yaklaşımı) içerebilir veya protonları ve nötronları kuarkları, gluonlarıyla beraber ve elektronları da fotonlarıyla beraber (kuantum kimyası yaklaşımı) açıkça modellemeyi içerebilir.

Moleküler modelleme yöntemleri artık inorganik, biyolojik ve polimerik sistemlerin yapısını, dinamiklerini, yüzey özelliklerini ve termodinamiğini araştırmak için rutin olarak kullanılmaktadır. Moleküler modelleme kullanılarak araştırılan biyolojik aktivite türleri arasında protein katlanması, enzim katalizi, protein stabilitesi, biyomoleküler fonksiyonla ilişkili konformasyonel değişiklikler ve protein, DNA ve membrankomplekslerinin moleküler tanınması yer alır.Madde içerisindeki elektron sistemi artık bir kuantum sistemi olarak çözümlenmelidir. Hohenberg ve Kohn (1964) tarafından ilk adımı atılan yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) de temel durumdaki herhangi bir elektronik sistem için çok-elektron dalga fonksiyonunu kullanmak yerine başlangıç noktası olarak elektron yoğunluğunu kullanır.

Moleküler Mekanik Yöntemler

Bu yöntemde klasik fizik yasaları (newton kanunları) kullanılarak, çekirdeklerin klasik parçacıklar gibi hareket ettięi varsayılır ve moleküllerin yapısal özellikleri hakkında bilgi edinebilir. Çekirdeğin hareketi için;

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{m}_n \cdot \mathbf{a}_n = -\nabla_{\mathbf{x}_n} V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$$

\mathbf{F}_n ; n çekirdeğine uygulanan kuvveti, \mathbf{m}_n ; çekirdeğin kütlesi ve \mathbf{a}_n ; ivmeyi göstermektedir. Mevcut çekirdeklerin koordinatlarının bir fonksiyonu olan V toplam potansiyel enerjidir. Bu enerjinin gradientinin bulunmasıyla, çekirdek üzerindeki kuvvetler hesaplanmış olur. Yapılan hesaplamalarda bu enerjinin bütün atomlar için hesaplanması zordur. Daha gelişmiş sistemlerde atom sayılarının da artmasıyla, enerji hesabı oldukça zorlaşır. Bundan dolayı, bu yöntemde hesap yapılırken elektronlar doğrudan göz önüne alınmaz dolayısıyla, elektronik yapı hakkında detaylı bilgi edinemeyiz.

Moleküler Mekanik Uygulama Alanları

Moleküler mekaniğin ana kullanımı moleküler dinamik alanındadır. Moleküler dinamik, her bir parçacıęa etkiyen kuvvetleri hesaplamak için kuvvet alanını ve parçacıkların dinamiklerini modellemek ve yörüngeleri tahmin etmek için uygun bir entegratörü kullanır. Yeterli örnekleme göz önüne alındığında ve ergodik hipoteze tabi olarak moleküler dinamik yörüngeler, bir sistemin termodinamik parametreleri veya reaksiyon hızları ve mekanizmaları gibi kinetik özelliklerini tahmin etmek için kullanılabilir.

Kuantum Mekanik Hesaplama Yöntemleri

Kuantum Mekanięi: Bir molekülün Schrödinger denkleminin çözümünü gerektiren elektronik yapısının bir kuantum mekaniksel modelidir. Kuantum mekanięi, moleküllerin dipol momentleri ve spektroskopi gibi elektronik özelliklerini tahmin etmede kullanılabilir. Bir molekülün elektronik yapısının kuantum mekaniksel bir modelini yapmak için Schrödinger denklemi çözümlenmelidir. Schrödinger denklemi, küçük sistemlerde tam çözüme ulaşırken, büyük ve karmaşık sistemlerde, tam anlamıyla bir çözüm henüz mümkün deęil. Çok elektronlu yapılarda çözüme ulaşılabilmek için, uygun matematiksel yöntemlerle çözüm aranır. Elektronik yapı yöntemleri dediğimiz, Yarı deneysel ve ab-initio yöntemleri yanısıra, yoğunluk fonksiyonel teorisi yöntemleri (Density functional theory-DFT) de ilave edilmektedir. Karmaşık sistemler için elde edilen hibrit yöntemler (ab-initio ve DFT yöntemlerinin birleřtirilmesiyle oluşan) dikkat çekmektedir. (Frisch, 2009; Hratchian ve ark., 2009).

MATERYAL VE METOT

Moleküler Mekanik

Moleküler Mekanik: Bir molekülü elastik bağlarla birbirine tutulmuş bir atomlar grubu şeklinde temsil eden bir klasik mekaniksel modeldir. Moleküler mekanik yöntemleri, moleküler geometriler ile oluşum ısılarını verirler.

Moleküler mekanik moleküler sistemleri modellemek için klasik mekaniği kullanır. Born-Oppenheimer yaklaşımının geçerli olduğu varsayılır ve tüm sistemlerin potansiyel enerjisi, kuvvet alanları kullanılarak nükleer koordinatların bir fonksiyonu olarak hesaplanır. Moleküler mekanik, boyutu birkaç atom büyüklüğünde olan sistemlerden tutun da milyonlarca atomdan oluşan büyük sistemlere kadar uygulanabilir.

Birçok durumda, büyük moleküler sistemler, kuantum mekanik hesaplamalardan tamamen arındıktan sonra başarıyla modellenilebilir. Örneğin, molekül mekaniği simülasyonları, bir bileşiğin enerjisi için klasik bir ifade kullanır. Örnek olarak harmonikosilatör verilebilir. Denklemlerde görünen tüm sabitler önceden deneysel verilerden veya ab initio hesaplamalardan alınmalıdır.

Parametre belirlemek için kullanılan bileşiklerin veritabanı, yani elde edilen parametreler ve fonksiyonların setine kuvvet alanı denir. Bu alan moleküler mekanik hesaplamaların başarısı için çok önemlidir. Belirli bir molekül sınıfına karşı parametre tanımlanan bir kuvvet alanının, aynı sınıfın diğer moleküllerini tanımlarken yalnızca herhangi bir ilişkiselliği olması beklenir.

Kuantum Mekanik Hesaplamalar

Bu çalışmada, iletken polimer sınıfından dithieno(3,2-b:2',3'-d)pyrrole (DTP) molekülünün Gaussian 09W ve GaussView5.0 görüntüleme paket programları ile Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) metodu 6-31 G(d) temel seti kullanılarak yapıldı. Atomik koordinatlara göre, geometrik optimizasyon enerji, birinci türevinin alınması sonucunda edilir. Molekülün görünür bölge spektrumu (UV-Visible) elektronik geçişler (time-dependent) TD-DFT B3LYP metodu ve 6-31 G(d) temel setinde gaz fazında hesaplama yapıldı. Yapılan bu hesaplamalar neticesinde, molekülün en yüksek dolu moleküler orbital (highest occupied molecular orbital, HOMO) enerjisi, en düşük boş moleküler orbital (lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) enerjisi, elektronik geçiş enerjileri değerleri hesaplanmış oldu.

Hesaplamalarda Kullanılan Bilgisayar Programlar

Gaussian 09 Programı:

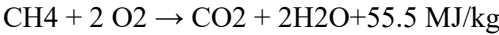
Gaussian09, Gaussian elektronik yapı programlarının en sonuncusudur. Çok çeřitli řartlar altında bulunan ve geniş bir yelpaze oluřturan moleküler sistemleri modellemek için tasarlanmış olan Gaussian, kuantum mekanięinin temel yasalarını kullanarak hesaplamalar yapar. Gaussian kimyacılar, fizikçiler ve mühendisler tarafından, kimya ile ilgili yerleşmiş ve yeni gelişmekte olan ilgi alanlarında araştırma yapmak, moleküller üzerinde ve deneysel olarak incelenmesi imkansız veya çok zor olan duraęan türleri ve bileşikleri de içeren (mesela kısa ömürlü ara birimler, geçiş yapıları ve benzerleri gibi) kesin veya potansiyel reaksiyonlar üzerinde çalışmak için kullanılmaktadır. ab-initio ve yarı-deneysel yöntemlerini de kapsayan detaylı bir programdır. Bu program sayesinde çeřitli atom ve moleküllerin enerji, enerjiye baęlı titreşim frekansı, geometrik optimizasyonlar vb. hesaplanabilir.

. GaussianView 5.0 Programı

Kuantum mekaniksel hesaplamalar sonrasında elde edilen, Gaussian 09 programı için girdi ve elde edilen sonuç dosyaları için görüntüleme yapan yardımcı programdır. Karmaşık ve büyük moleküller, bu program yardımıyla görsel hale getirilip, atomlar arası baę mesafeleri, baę açıları, etkileşim uzaklıkları belirlenip, giriş parametreleri üzerinde güncelleme yapılabilir. GaussView gelişmiş görselleştirme olanaęı sayesinde, girdi dosyalarının oluřturulması, yorumlanması ve görüntülenmesi için tasarlanmış bir grafik ara yüzü işlemcisidir.

TEORİK HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

Metan, kimyasal formülü CH₄ (Karbon ve 4 Hidrojen atomu) olan bileşiktir. Normal sıcaklık ve basınçlarda gaz halinde bulunan metan, kokusuzdur. Doğalgazın bir bileşenidir ve önemli bir yakıttır. Oksijenin varlığında bir mol metanın yanmasıyla bir mol karbondioksit ve iki mol su ve 55.5 MJ/kg ısı açığa çıkar.



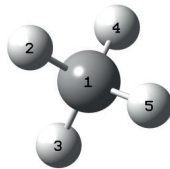
Doęal metan hem zemin altında hem de deniz tabanı altında bulunabilir. Yüze ve atmosfere ulařtıęında atmosferik metan olarak bilinir. Normal sıcaklık ve basınçlarda gaz halinde bulunan metan, kokusuzdur. Doęal gazın bir bileşenidir ve önemli bir yakıttır.

Kömür içinde bulunan metan gazları da bizim evlerde kullandığımız doęal gazın en önemli bileşenidir. Enerjiyi güvenli üretip, güvenli kullanmazsanız hem kirlilik, hem de tehlikeli sonuçlar oluřturabilirsiniz. Isı üretildięi zaman basınç ve parlama, ani yanma gibi riskleri beraberinde taşır.

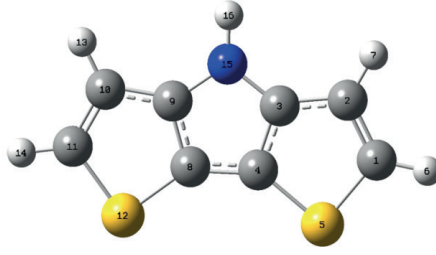
Metan gazı kömür oluşumu sırasında açığa çıkmadan önce kömür yapısındaki çatlak ve mikro gözenekler içerisinde belirli bir basınç altında bulunmaktadır. Bu basınç, üretim çalışmaları sırasında değişebilir ve bunun sonucu olarak yeraltında metan salınımı gerçekleşebilir.

Toprağın altından gelen doğal metan madenlerdetrajik patlamalara sebep olmuştur. Zehirli olmamasına rağmen metan basit asfiksantlardan-
dır(boğucu madde). Çünkü nefes almak için gerekli olan oksijenin yerini alır. %16'dandüşük oranlarda oksijen tehlikeli, %10'dan düşük oranlarda oksijen ölümcüloolabilir.Grizu patlaması, belli oranlardaki metan gazıyla havanın karışarak oluşturduğu patlamadır. Patlamanın gerçekleşebilmesi için asgari %12 oranında oksijen gerekmektedir. Havada %5-6 oranında bulunan metan gazı ancak bir sıcaklık etkisiyle yanarken, metan oranının %5-16 olması durumunda patlayıcı özellik kazanır.Dolayısıyla ortamda bulunan metanın önceden tespiti hayati öneme sahiptir.

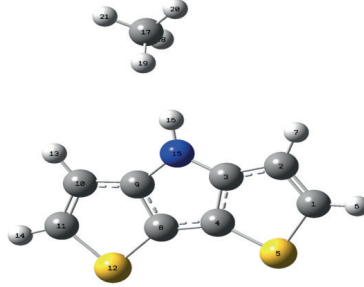
DFT metodu B3LYP 6-31 G(d) setinde teorik hesaplamalar yapılmıştır.Algılayıcı ve analit moleküller arasındaki bağ mesafeleri, burulma ve dihedral açılarıGeometrik optimizasyonlar için önemli veri oluşturmaktadır.Optimazasyonlar sonucu elde edilen geometrik özellikler, sensör mekanizmasının analiti algılamasında önemli veri oluşturur.Sensör mekanizması ile analit arasındaki uyumu tespit edebilmemiz için, CH₄ molekülünün sensör mekanizmasıyla farklı pozisyonlardaki yaklaşımları teorik olarak incelenmiştir.Öncelikli olarak CH₄ molekülü yalın olarak optimize edilmiştir. Ardından DTP molekülü optimize edilmiştir. Ardından DTP-CH₄-P1 (DTP molekülü ile CH₄analitinin 1.Konfigürasyonundaki etkileşimi); DTP-CH₄-P2 (DTP molekülü ile CH₄analitinin 2. Konfigürasyonundaki etkileşimi); DTP-CH₄-P3(DTP molekülü ile CH₄analitinin 3. Konfigürasyonundaki etkileşimi), teorik anlamda hesaplanmıştır.



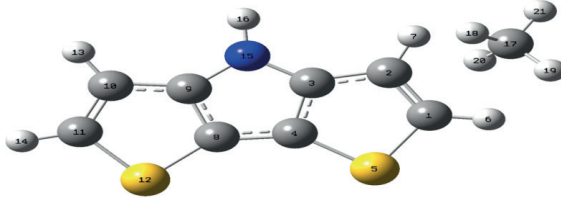
Şekil 4 - 1CH₄ molekülünün teorik optimize geometrik yapısı



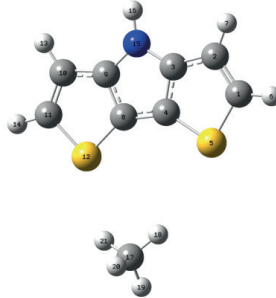
Şekil 4 – 2DTP molekülünün teorik optimize geometrik yapısı



Şekil 4 - 3DTP- CH4-P1, DTP ile CH4 analitinin 1. Konfigürasyon etkileşimi



Şekil 4 - 4DTP- CH4-P2, DTP ile CH4 analitinin 2. Konfigürasyon etkileşimi



Şekil 4 - 5DTP- CH4-P3, DTP ile CH4 analitinin 3. Konfigürasyon etkileşimi

Geometrik Optimizasyon

Yapılan çalışmada her bir molekül ve konfigürasyon için DFT yoğunluk fonksiyon teorisi ve B3LYP (Becke-Lee-Yang-Parr) metodu ve 6-31G(d) temel seti kullanılarak teorik hesaplama yapıldı. Farklı konfigürasyonlardaki enerji değerleri kontrol edilerek en kararlı yapılar elde edildi. Geometrik parametreler bağ uzunlukları (Å) ve bağ açıları (°) teorik olarak elde edildi. Optimize DTP molekülü için $N_{15}-H_{16}$ intermoleküler bağ uzunluğu 1.007 Å olarak ölçüldü, DTP_CH4_P3 de yapılan ölçümlerde bağ uzunluğu değerinde çok az azalma (1.006 Å), DTP_CH4_P2 de yapılan ölçümlerde herhangi bir değişiklik gözlenmezken (1.007 Å), DTP_CH4_P1 de yapılan ölçümlerde bağ uzunluğunun arttığı gözlemlendi (1.008)Å, bağ uzunluğunda bu artış hidrojen bağının ortaya çıkmasıyla artmıştır. Bağ uzunluğundaki bu artış, sensör mekanizmasının analite karşı gösterdiği tepkiyi göstermiştir. Ayrıca DTP molekülünün optimize edilmiş yalın haldeki ve DTP_CH4_P1 in, seçilen atomlar arasındaki, bağ açıları da meydana gelen değişimlere bakacak olursak, yalın halde DTP molekülünde, $\langle C_3N_{15}C_9 \rangle$ atomları arasındaki bağ açısı 107.94 iken, DTP_CH4_P1 in, $\langle C_3N_{15}C_9 \rangle$ atomları arasındaki bağ açısı 107.88 olmuştur. Bu durumda, sensör mekanizmasının analite karşı gösterdiği tepkide, olumlu olarak yorumlayabiliriz. Her bir sistem için teorik olarak hesaplanan geometrik parametreler bağ uzunlukları, bağ açıları ve bazı düzlemsel açılar ile etkileşim enerjileri **çizelge 4-1** de verildi.

Çizelge 4-1 DTP Molekülü ile CH4 Analiti İçin Geometrik Özellikleri ve Etkileşim Enerjileri

	$d_{N_{15}-H_{16}}$	$\langle C_3N_{15}C_9 \rangle$	$\langle C_2C_3N_{15} \rangle$	$\Delta E_{INT.(eV)}$	$\Delta E_{INT.CP.(eV)}$
DTP	1.007	107.94	136.77		
DTP_CH4_P1	1.008	107.88	136.74	-0.013	-0.029
DTP_CH4_P2	1.007	107.94	136.77	-0.003	-0.019
DTP_CH4_P3	1.006	107.94	136.75	0.007	-0.008

4.2. UV-Vis Spektrum Analizleri ve Elektronik Özelliklerinin Teorik Hesaplaması

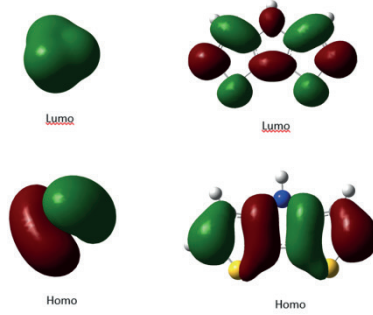
Moleküllerin teorik olarak UV-Vis spektrumları analizi ve diğer elektronik özelliklerin hesaplanması zamana bağlı yoğunluk fonksiyonel teori (Time-Dependent Density Functional Theory, TD-DFT) (Petersilka ve ark., 1996) metodu B3LYP/6-31G(d) temel seti kullanılarak gerçekleştirildi. TD-DFT metodu kullanılarak yapılan bu çalışmada, moleküllerin teorik olarak yapılan hesaplamalarında, boyutların küçük olması nedeniyle, gaz fazında hesaplamalar yapılarak yorumlanmıştır. Elektronik absorpsiyon spektrom analizinde absorpsiyon dalga boyları λ (nm), uyarılma enerjileri

E (eV) ve uyarılma orbitalleri (MOs) hesaplandı. Hesaplanan bu deęerler, **Çizelge 4- 2**de verilmiştir.

Çizelge 4- 2DTP Molekölü ile CH₄ Analitleri İçin Uyarılma Enerjileri ve Dalgaboyu

4.3. Moleküler Orbital Analizi

Molekül sınır orbitalleri ve uyarma enerjisi sırasıyla B3LYP / 6-31G (d) ve TD-B3LYP/ 6-31G(d) düzeyinde hesaplanmıştır. Teorik anlamda üretilen sensör mekanizması için DTP molekülünün algılama yeteneğini olumlu anlamda destekleyen ilk uyarma enerjisi verileri kullanıldı. Kullanılan bu enerji, bant aralıklarından elde edilen enerjidir. HOMO ve LUMO enerjilerinin farkından elde edilen enerji de diyebiliriz. DTP molekülünün analit CH₄ gazıyla, farklı konfigürasyonlarıyla neticesinde, moleküler orbital enerjisinde farklılıklar gözlenmiştir. HOMO-LUMO enerjisindeki bu farklı durumlar, DTP molekülünün analitleri algılama mekanizması hakkında bilgiler verir. HOMO-LUMO arasındaki band boşluğu(E_g), elektronun polimer zincir üzerindeki delokalizasyonunun artışına baęlı olarak azalmıştır, bu durum iletkenlik anlamında artışa neden olmaktadır.



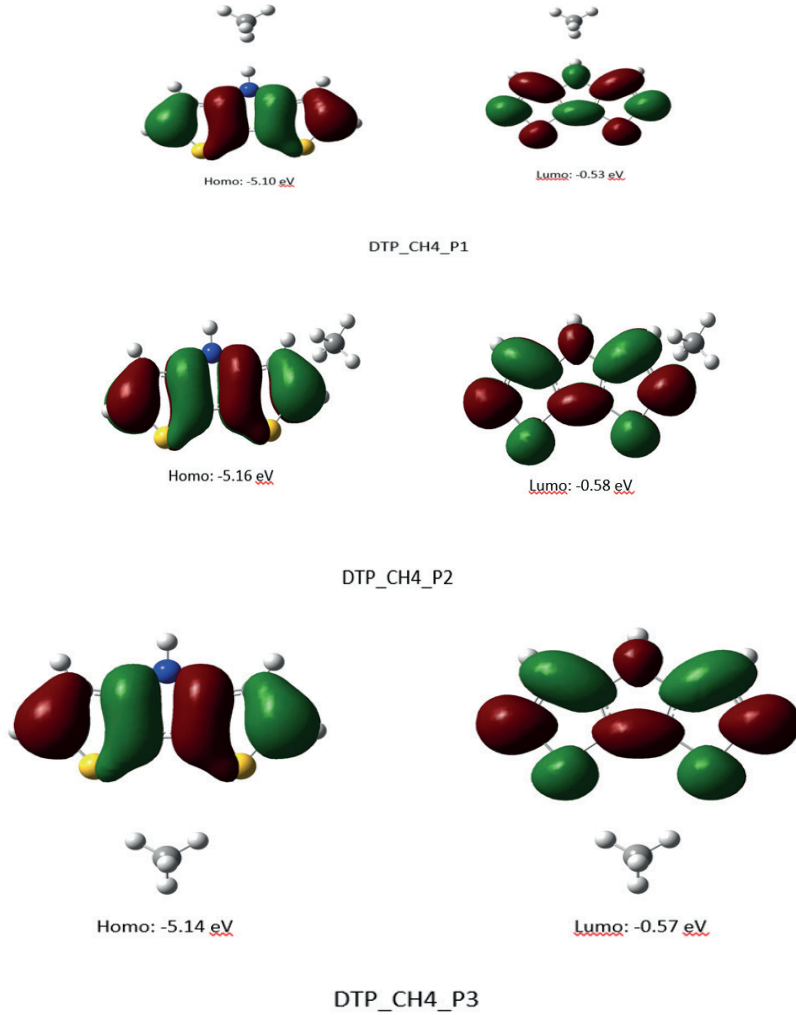
Şekil 4 - 6CH₄ ve DTP Moleküllerinin Homo-Lumo Görüntüleri

Çizelge 4- 3DTP Molekülü ile CH₄Analitleri İçin Homo-Lumo, Bant Aralıkları

	HOMO (eV)	LUMO (eV)	BAND GAP (eV)
CH ₄	-10.69	-3.35	7.34
DTP	-5.13	-0.55	4.58
DTP_CH ₄ - P1	-5.10	-0.53	4.57
DTP_CH ₄ -P2	-5.16	-0.58	4.58
DTP_CH ₄ – P3	-5.14	-0.57	4.57

Yalın halde optimize edilmiş DTP molekülü için elde edilen bant boşluğu: 4.58 eV iken

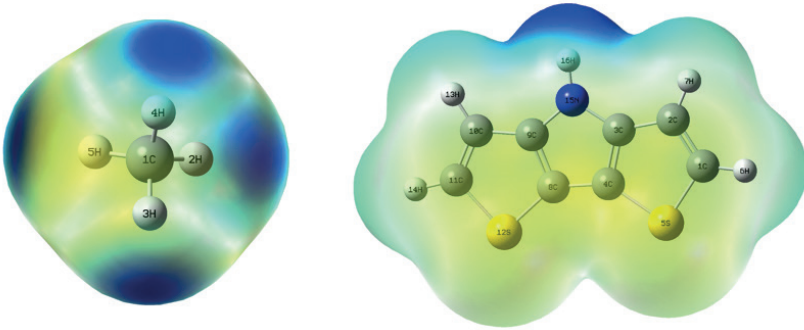
DTP_CH4 - P1 için yapılan hesaplamalarda, elde edilen bant boşluğu: 4.57 Ev gerilemiştir. Bu gerilemeyi, DTP üzerinde CH4 tespiti için elektrik sinyali alınmasını ve iletkenliğin artması olarak yorumlayabiliriz.



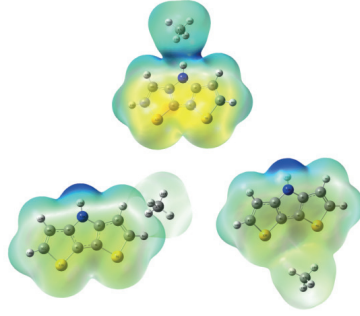
Şekil 4 – 7DTP_CH4_P1,P2,P3 Homo-Lumo Görüntüleri

Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) Analizi

Moleküler elektrostatik potansiyel (MEP), molekülün etrafındaki bir noktada, moleküle ait toplam yük dağılımı (elektron + proton) ile üretilen net elektrostatik etki hakkında bilgi sahibi olmamızı sağlar. MEP görüntüleme, elektrofilik ve nükleofilik yerlerin belirlenmesinde bize yardımcı olur. Bir elektron yoğunluğunun, elektrostatik potansiyel yüzey ile eşleşmesinden elde edilen görüntü, moleküllerin kimyasal reaktivite bölgeleri, yük yoğunluğu, molekülün şekli ve boyutu hakkında bilgi verir. Aşağıda belirtilen üç boyutlu görsellerde, yüzeydeki elektrostatik potansiyelin farklı değerleri farklı renklerle ifade edilir. Mavi en pozitif elektrostatik potansiyelin bölgelerini (pozitif yüklerin olduğu bölgeleri), kırmızı ve sarı bölgeler, en elektronegatif elektrostatik potansiyelin bölgelerini (negatif yüklü ve elektron yoğunluğunun fazla olduğu bölgeleri), Yeşil ile belirtilen bölgeler ise potansiyelin olmadığı nötr olduğu bölgeleri temsil eder. DTP ve CH₄ molekülleri üzerinde, nükleofilik (eksi yüklü parçacık) ve elektrofilik (artı yüklü parçacık) için reaktif bölgeleri belirlemek üzere, MEP, B3LYP / 6-31 G (d) optimize geometri hesaplandı. MEP görüntüleme sonuçlarını analiz ettiğimizde, pozitif yüklerin olduğu bölgeleri, negatif yüklü ve elektron yoğunluğunun fazla olduğu bölgeleri ve potansiyelin olmadığı nötr olduğu bölgeleri görebilmekteyiz.



Şekil 4 - 8CH₄ ve DTP Moleküllerinin MEP Görüntüleri



Şekil 4 - 9DTP_CH4_P1,P2,P3 MEP Görüntüleri

5.SONUÇ

Yapılan bu çalışmada, bir iletken polimer dithieno(3,2-b:2',3'-d)pyrrole (DTP) molekülünün, CH₄ molekülü ile uyumu teorik anlamda incelenmiş ve iki molekülün etkileşiminden, metan gaz kaçaklarını önlemek amacıyla teorik anlamda DTP tabanlı bir metan gaz dedektörü oluşturulmuştur. DFT (Yoğunluk Fonksiyonel Teori)yöntemi, B3LYP/6-31G(d) ve TD-B3LYP/6-31G(d) setleri ile geometrik optimizasyonları ve elektronik özellikleri, teorik olarak hesaplandı. DTP molekülü ile CH₄ ün farklı açılardaki konfigürasyonları ve geometrik özellikleri incelenerek, sensör oluşturma durumu analiz edildi. DTP molekülü ile CH₄ analiti için geometrik özellikleri ve etkileşim enerjileri, uyarılma enerjileri ve dalga boyları, Homo-Lumo enerjileri ve bant aralık enerjileri, CH₄ ve DTP moleküllerinin ve birbiriyle olan konfigürasyonlarının, moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) analizi yorumları ve görüntüleri hesaplandı. DTP molekülünün, CH₄ molekülünü algılama kabiliyeti teorik anlamda test edilmiş oldu. Yapılan bu çalışmanın bilimsel çalışmalara yol göstermesi dileğiyle.

KAYNAKLAR

- Bai, H., & Shi, G. (2007). Gas Sensors Based on Conducting Polymers. *Sensors*, 7(3), 267–307.
- Balaji, G., D. I. Phua, W. L. Shim and S. Valiyaveetil, 2010, Synthesis and Characterization of Unsymmetric Indolodithienopyrrole Diindolodithienopyrrole, *Organic Letters* 12(2): 232-235. And Extended
- Born, M. Ve Oppenheimer J.R., 1927. On the Quantum Theory of Molecules. *Annalen der Physik*, 84, 457.
- Chambers, P., Austin, E. A. D., & Dakin, J. P. (2004). Theoretical analysis of a methane gas detection system, using the complementary source modulation method of correlation spectroscopy. *Measurement Science and Technology*, 15(8), 1629–1636.
- Diaz, A. F., Kanazawa, K.K., Gardini, G.P., 1979), Electrochemical polymerization of pyrrole, *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*(14): 635-636.
- Dirc, P.A.M., 1929. The Basis of Statistical Quantum Mechanics. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 25, 62–66.
- Dirac, P.A.M., 1930. Note on Exchange Phenomena in the Thomas Atom. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 26, 376–385.
- Fermi, E., 1927. Un Metodo Statistico per la Determinazione di Alcune Priorietà dell' Atome, *Rend. Accad. Naz. Lincei*, 6, 602–607.
- Foresman, J.B. ve Frisch, E., 1996. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. 2nd edition Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 253p., USA.
- Foresman, J.B. ve Frisch, E., 1996. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. 2nd edition Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 253p., USA.
- Frisch, M.J. vd., 2009. *Gaussian 09, Revision A.02*. Gaussian, Inc., Wallingford CT.
- Hinchliffe, V.A., 1988. *Computational Quantum Chemistry*. John Wiley & Sons, Chichester, 276-277, New York.
- Hohenberg, P. Ve Kohn, W., 1964. Inhomogeneous Elektron Gas. *Physical. Review*. 136, S. B864–B871.
- Isaksen, I. S. A., Gauss, M., Myhre, G., Walter Anthony, K. M., & Ruppel, C. (2011). Strong atmospheric chemistry feedback to climate warming from Arctic methane emissions. *Global Biogeochemical Cycles*, 25(2), n/a–n/a.
- Ito, T., H. Shirakawa and S. Ikeda, 1996, Simultaneous polymerization and formation of polyacetylene film on the surface of concentrated soluble Ziegler-type catalyst solution (Reprinted from *Journal Polymer Science, Polymer Chemistry edition*, vol 12, pg 11-20, 1974), *Journal of Polymer Science Part a-Polymer Chemistry* 34(13): 2533 2542.

- Kim, J., B. Lim, K. J. Baeg, Y. Y. Noh, D. Khim, H. G. Jeong, J. M. Yun and D. Y. Kim, 2011, Highly Soluble Poly(thienylenevinylene) Derivatives with Charge-Carrier Mobility Exceeding $1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, *Chemistry of Materials* 23(21): 4663-4665.
- Kohn, W. ve Sham, L.J., 1965. Self-consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140, A1133.
- Levine, I.N., 1991. *Quantum Chemistry*. Prentice-Hall, 486p., USA.
- Liu, Y., H. F. Wang, H. L. Dong, J. H. Tan, W. P. Hu and X. W. Zhan, 2012, Synthesis of a Conjugated Polymer with Broad Absorption and Its Application in High Performance Phototransistors, *Macromolecules* 45(3): 1296-1302.
- Lu, Y., H. Chen, X. Y. Hou, X. A. Hu and S. C. Ng, 2010, A novel low band gap conjugated polymer based on N-substituted dithieno[3,2-b:2',3'-d]pyrrole, *Synthetic Metals* 160(13-14): 1438-1441.
- Miehlich, B., Savin, A., Stoll, H. vePreuss, H., 1989. *Chemical. Physics. Letters.*, 157, 200.
- Mo, H., K. R. Radke, K. Ogawa, C. L. Heth, B. T. Erpelding and S. C. Rasmussen, 2010, Solution and solid-state properties of highly fluorescent dithieno[3,2-b:2',3'-d]pyrrole-based oligothiophenes, *Physical Chemistry Chemical Physics* 12(43): 14585-14595.
- Mønster, J. G., Samuelsson, J., Kjeldsen, P., Rella, C. W., & Scheutz, C. (2014). Quantifying methane emission from fugitive sources by combining tracer release and downwind measurements – A sensitivity analysis based on multiple field surveys. *Waste Management*, 34(8), 1416–1428.
- Norman, F., Van den Schoor, F., & Verplaetsen, F. (2006). Auto-ignition and upper explosion limit of rich propane–air mixtures at elevated pressures. *Journal of Hazardous Materials*, 137(2), 666–671.
- Parr, R.G. ve Yang, W., 1988. Development of the Colle-Salvetti Correlation-Energy Formula into a Functional of the Electron Density. *Physical Review B*, 37, 785.
- Parr, R.G. ve Yang, W., 1989. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, USA.
- Pekalski, A. A., & Pasma, H. J. (2009). Distinction between the upper explosion limit and the lower cool flame limit in determination of flammability limit at elevated conditions. *Process Safety and Environmental Protection*, 87(1), 47–52.
- Perdew, J.P. ve Wang, Y., 1992. Accurate and Simple Analytic Representation of the Electron-gas Correlation Energy. *Physical Review B*, 45, 13244–13249.



CHAPTER 4

DEVELOPMENT AND ANALYSIS OF MAXIMUM POWER POINT TRACKING (MPPT) ALGORITHMS USING MATLAB

*Tuba ÖZDEMİR ÖGE¹, Mecit ÖGE²,
Firdevs Banu ÖZDEMİR³*

1 Assoc. Prof. Dr., Bartın University, Bartın University, Faculty of Forestry, Department of Forestry Industry Engineering, Bartın, Turkey. E-mail: tozdemir@bartin.edu.tr, ORCID ID, 0000-0001-6690-7199.

2 Asst. Prof. Dr., Bartın University, Faculty of Engineering, Architecture and Design, Department of Mechanical Engineering, Bartın, Turkey; E-mail: mecitoge@bartin.edu.tr, ORCID ID, 0000-0001-5243-0828.

3 Inst. Dr., Kütahya Health Sciences University, Simav Vocational School of Health Sciences, Department of Medical Services and Techniques, Kütahya, Turkey; E-mail: firdevsbanu.ozdemir@ksbu.edu.tr, ORCID ID, 0000-0002-7935-2062.

1. Introduction

Maximum Power Point Tracking (MPPT) is an essential algorithm integrated into charge controllers, ensuring the maximization of energy extraction from photovoltaic (PV) modules under diverse environmental conditions. The electrical energy generated by solar panels varies depending on the irradiation intensity, environmental temperature, and panel characteristics. MPPT algorithms aim to enhance energy generation capacity by continuously tracking the maximum power point of the solar panel under these variable conditions. Traditional methods offer simplicity and cost-effectiveness but face challenges such as instability and energy losses under variable environmental conditions. In recent years, artificial intelligence-based methods (e.g., Artificial Neural Networks, Support Vector Machines, Deep Learning) and hybrid approaches (e.g., Fuzzy Logic + Artificial Neural Networks, Genetic Algorithms + Particle Swarm Optimization) have been developed to achieve higher efficiency and adaptability, enabling significant advancements in the field of MPPT. In this context, the development of MPPT algorithms is crucial for enabling PV systems to provide more efficient and sustainable energy solutions.

The study published by Islam et al. (2018) provides an in-depth analysis of MPPT algorithms employed in solar energy systems. Various MPPT methods are evaluated based on their performance under diverse environmental conditions, including shading scenarios and system dynamics. The paper explores not only traditional algorithms like Incremental Conductance (INC) and Perturbation and Observation (P&O) but also modern and hybrid approaches, including Artificial Neural Networks (ANN) and Fuzzy Logic Controllers (FLC). Performance evaluation is conducted using criteria such as speed, accuracy, cost, and implementation simplicity. The study aims to guide researchers and engineers in selecting the most suitable MPPT algorithm to meet their specific requirements. MPPT methods, developed to enhance energy efficiency in photovoltaic (PV) systems, have been extensively examined in the literature. Among traditional methods, the most widely used algorithms are Perturb and Observe (P&O) and Incremental Conductance (INC). These approaches aim to identify the maximum power point by continuously monitoring the system's operating conditions. However, it is well-documented that these algorithms suffer from performance degradation and oscillation issues under variable weather conditions. To overcome these limitations, artificial intelligence-based MPPT methods have been introduced in recent years. For instance, Lü et al. (2021) designed a Particle Swarm Optimization (PSO)-based MPPT algorithm and compared its performance with the P&O and INC algorithms. The results demonstrated that the PSO-based algorithm achieves the maximum power point more rapidly and with fewer oscillations un-

der variable irradiance conditions. Bülbül (2011) addressed the design and implementation of a setup to test various MPPT algorithms for optimizing energy extraction from solar panels. The designed system employed a boost DC-DC converter to charge the battery of an electric vehicle using 130W solar panels. Three different algorithms—Perturb and Observe (P&O), Three-Point Weight Comparison, and Hill Climbing—were compared in a microcontroller-based setup, with their performances evaluated through simulations and experiments. The results indicated that while the “P&O” and “Hill Climbing” algorithms provided fast responses, they exhibited continuous oscillations. In contrast, the “Three-Point Weight Comparison” algorithm demonstrated more stable operation. Ardiç (2015) explored the use of an Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System (ANFIS) method for MPPT in solar panels. The study analyzed the performance of mathematically modeled photovoltaic panels under varying irradiance and temperature conditions. By combining the learning capability of artificial neural networks with the decision-making efficiency of fuzzy logic, the ANFIS structure effectively identified the maximum power point using a boost DC-DC converter. Simulation results demonstrated that the ANFIS method outperformed other MPPT algorithms, delivering more accurate and stable outcomes. Koç (2012) examined the performance of a DC-DC boost converter designed, simulated, developed, and tested for tracking the MPPT of a PV panel. The study utilized the Perturb and Observe method to evaluate the performance of a 5W PV panel under varying irradiance levels, ensuring a constant output voltage of 27V on the load side. During simulations and experiments, factors influencing the efficiency of the designed converter were analyzed, and results were obtained using digital methodologies. Akdemir (2023) aimed to enhance energy efficiency in solar panels by comparing different MPPT methods. The study utilized PVSOL software to analyze methods such as Perturb and Observe (P&O), Fuzzy Logic (FL), and Artificial Neural Networks (ANN). Almohana (2024) aimed to develop a Hybrid Kalman Filter (KF) and Grey Wolf Optimization (GWO)-based Maximum Power Point Tracking (MPPT) method for optimizing energy harvesting in photovoltaic (PV) systems. The study emphasized the proposed hybrid method’s ability to provide rapid and accurate MPPT under partial shading conditions (PSC) and its capacity to adapt effectively to rapid changes in irradiance and temperature. Tülüçü (2024) aimed to design and evaluate a genetic algorithm-based control system for MPPT in PV systems using boost converters. The study compared traditional methods (e.g., Perturb and Observe, Incremental Conductance) with genetic algorithm-based MPPT approaches under varying irradiance and temperature conditions. Simulation results demonstrated that the genetic algorithm exhibited superior efficiency and stability. This method is proposed as an effective solution to enhance the energy generation capacity

of PV systems and minimize power losses.

Harrison et al. (2024) proposed a new framework to enhance MPPT algorithms by narrowing the search space, enabling faster and more accurate determination of the MPP voltage. By use of an artificial neural network (ANN) combined with an empirical equation, the introduced method enables an accurate voltage estimation by eliminating the need for irradiance sensors, thus achieving 96.64% efficiency under dynamic environmental conditions (Harrison et al., 2024). Tao et al. (2024) applied Harris Hawk Optimization (HHO) algorithm for maximum power point tracking (MPPT) for use in grid-connected PV power generation systems. Owing to its high adaptability and global optimization capability, the HHO algorithm exhibits superior efficiency and stability compared to traditional methods (Tao et al., 2024). Astaomar and Erkal (2024) investigated the improvement of the conventional Perturb and Observe (P&O) algorithm by integration with the Harris Hawks Optimization (HHO) technique. The introduced hybrid P&O-HHO algorithm exhibits significant performance enhancements, offering faster convergence time and higher tracking efficiency compared to traditional methods (Astaomar and Erkal, 2024).

Recent progress in MPPT algorithms includes notable advancements in methodologies designed to optimize the efficiency of photovoltaic systems under varying environmental conditions. The literature reveals a variety of approaches, ranging from conventional algorithms such as P&O and INC to advanced artificial intelligence-driven and hybrid models. The emphasis has increasingly shifted toward achieving greater precision, adaptability, and resilience.

This research builds upon existing studies to investigate, compare, and evaluate these techniques, offering valuable insights to foster the development of more efficient and dependable energy harvesting solutions for PV systems. The primary purpose of this study is to examine and compare a range of MPPT algorithms to improve the energy harvesting efficiency of PV systems. By utilizing simulation platforms such as MATLAB, the research aims to evaluate the performance of both conventional and advanced methodologies across diverse environmental conditions. By systematically identifying the strengths and limitations of these approaches, this study seeks to establish a comprehensive framework for selecting optimal MPPT strategies, thereby contributing to the advancement of more efficient and sustainable energy systems.

The goal of this study is to improve the energy efficiency in photovoltaic systems by incorporating Incremental Conductance, Fuzzy Logic, Artificial Neural Networks and Harris Hawks Optimization algorithms to enhance the MPPT performance under varying environmental conditions.

In the study, it is aimed to compare the traditional and modern approaches, and to underline the advantages of hybrid algorithms.

2. MPPT Algorithms

The Incremental Conductance algorithm determines the maximum power point by comparing the instantaneous conductance (I/V) of the panel with the Incremental Conductance ($\Delta I/\Delta V$).

Fuzzy Logic has the capability to make quick and intuitive decisions under complex and uncertain conditions. It can readily adapt to variations in solar irradiance, temperature, and other environmental conditions. It can be implemented as a preliminary decision-making mechanism in the MPPT process to enable rapid adjustments.

Artificial Neural Networks: ANNs are equipped with learning capabilities and can determine optimal points using more complex relationships. They can further improve the preliminary predictions found by Fuzzy Logic with greater precision. By using historical data, ANNs improve the system performance in response to changing environmental conditions.

2.1. IC+ HHO

Power-Voltage curves are utilized in MPPT systems to illustrate the power output of a solar panel at various voltage levels. Figure 1 is utilized to comprehend how much power the panel can generate under different temperature and irradiance conditions and how the generated power varies with voltage.

In general, the P-V curve starts with low power near zero voltage, increases with increasing voltage and then drops as a certain point known as the MPP is exceeded. On the curve, the MPP indicates the point where the panel reaches a maximum power output level, thus indicating a balance with optimum output between voltage and current under the panel's corresponding condition.

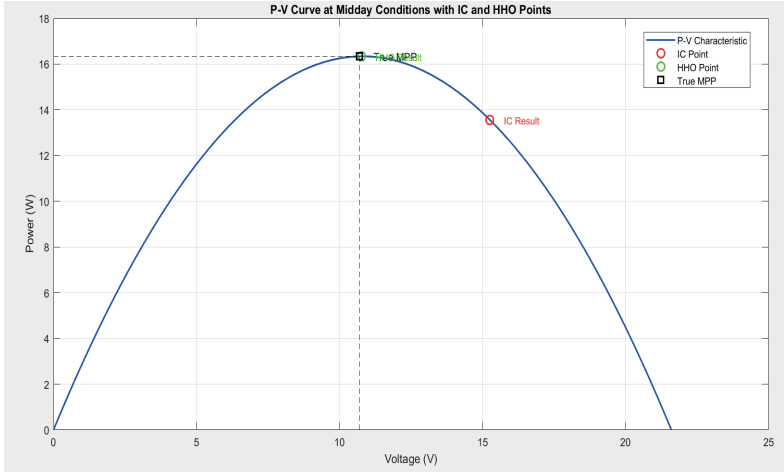


Figure 1. *P–V curve of the solar panel under midday conditions*

Figure 1 shows the peak point of the panel’s P-V curve, representing the (True MPP). While the HHO point is located very close to the True MPP, the IC point deviates towards a higher voltage, resulting in a lower power level.

The performance of P&O and Incremental Conductance MPPT algorithms was compared by Umashankar et al. (2011) under varying atmospheric conditions and to evaluate the efficiency of different DC-DC converters in maximizing the power output of photovoltaic systems. Their results showed that the IC method outperforms P&O, especially under rapidly changing atmospheric conditions, while the Cuk converter achieves the highest efficiency due to its reduced switching losses (Umashankar et al. 2011).

Harris Hawks Optimization: HHO is a metaheuristic optimization algorithm with the capability to quickly identify global optimum points. HHO swiftly explains the Maximum Power Point (MPP) due to its rapid search capability. It accurately determines the global maximum among local maxima in scenarios such as partial shading. Additionally, HHO quickly adapts to varying temperature and irradiance conditions. The HHO algorithm provides a superior solution in MPPT systems compared to traditional methods (e.g., P&O, INC) due to its high efficiency, fast tracking performance, and ability to avoid local optima. Consequently, it ensures maximum energy extraction from photovoltaic systems.

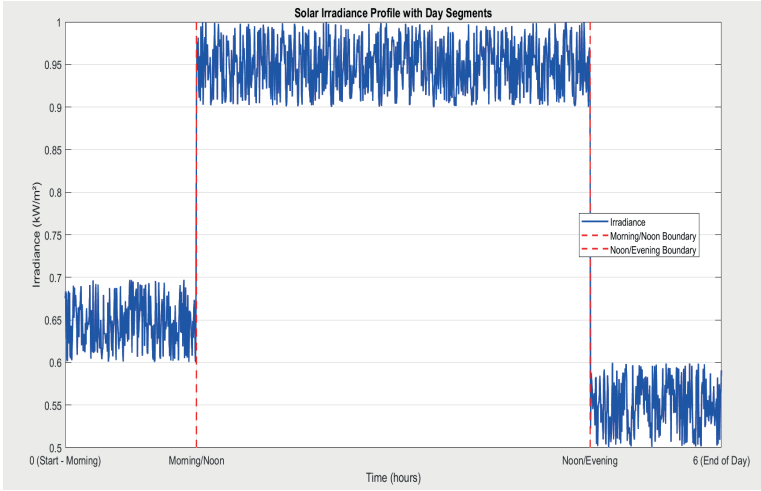


Figure 2. *Solar irradiance profile over a six-hour period, divided into three distinct day segments (morning, noon, and evening).*

Figure 2 illustrates the variation of solar irradiance throughout the day, by dividing the day into three daily time periods as morning, noon, and evening. The red dashed lines signify the transitions between these segments of the day. This illustration thus shows the irradiance profile, characterized by lower irradiance levels in the morning, a peak of irradiance at noon, and a drop back to moderate levels in the evening.

2.2. Fuzzy Logic + ANN+ HHO

Integrating Fuzzy Logic and Artificial Neural Networks (ANN) for the MPPT process combines Fuzzy Logic's ability to handle uncertainty with ANN's learning capabilities to enhance decision-making. Fuzzy Logic evaluates changes in power (ΔP) and voltage (ΔV), while ANN refines these inputs to predict and adjust the optimal voltage (V_{pred}) for maximum power output.

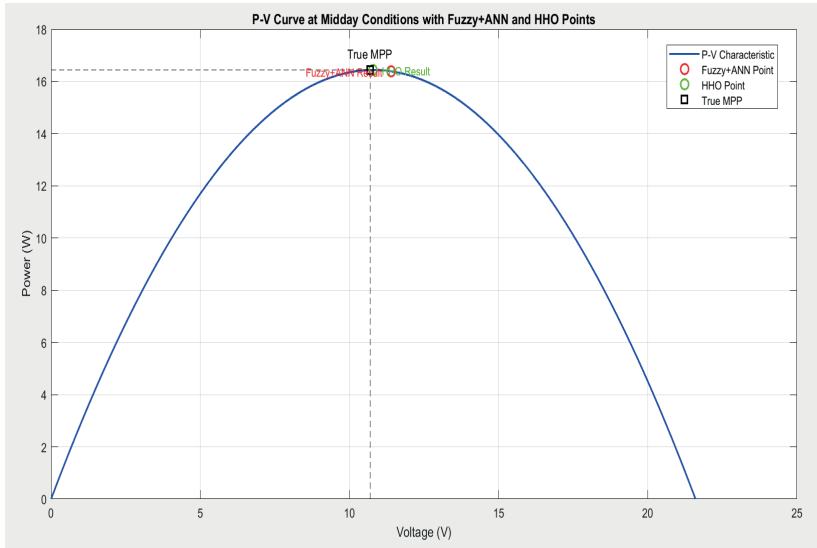


Figure 3. *P–V curve of the solar panel under midday conditions, showing the true MPP, Fuzzy+ANN point and HHO point.*

Figure 3 examines the panel’s P-V curve under midday conditions and the operating points selected by two different MPPT methods: Fuzzy+ANN and HHO. While the HHO point is positioned closer to the peak (True MPP), the Fuzzy+ANN point is located around the MPP with only a slight deviation.

The P-V curve of solar panels demonstrates the Maximum Power Point (MPP), particularly for midday conditions when the panels are exposed to maximum solar irradiance. At this point, the power output of the panel reaches its peak, determined as the product of voltage and current values. Briefly, midday conditions can be deemed ideal for observing and analyzing the highest point on the P-V curve.

(Ort, 2016) aimed to develop a solar tracking system for PV systems and improve energy efficiency using MPPT control methods. A PID controller was employed in the solar tracking system, and its energy efficiency was compared with that of the fixed-angle panels. Additionally, four different MPPT methods were modeled, simulated in MATLAB/Simulink, and their performances were evaluated (Ort, 2016).

Nezam (2024) aimed to combine the Hybrid Modified Grey Wolf Optimization and Modified Incremental Conductance methods to enhance energy efficiency and track the MPP accurately under partial shading conditions and different climate conditions. The hybrid algorithm proposed in the study has been compared with other algorithms under Partial Shading

Conditions and Standard Test Conditions, achieving high efficiency and low oscillation. Simulations have demonstrated the superior performance of the proposed algorithm by analyzing system efficiency, settling time, and steady-state oscillation rates (Nezam, 2024).

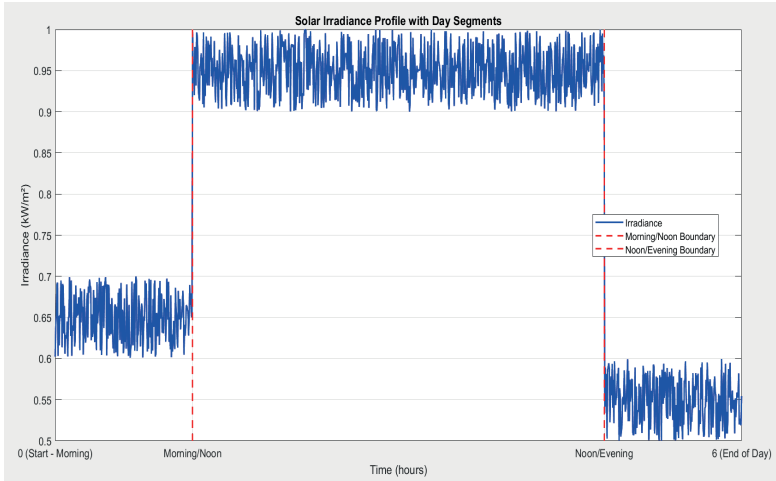


Figure 4. *The solar irradiance profile over a six-hour period is divided into three distinct time segments—morning, noon, and evening—highlighted by red dashed lines.*

The solar irradiance levels throughout the day are sectioned into three segments as morning, noon, and evening—which are indicated red dashed lines. Such segmentation of the day enables a more precise observation of how irradiance levels change across each time (Figure 4).

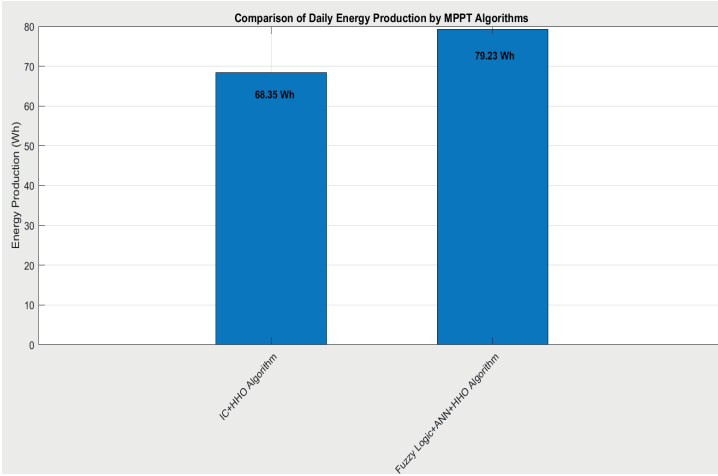


Figure 5. Energy production comparison of MPPT algorithms

Figure 5 illustrates the energy generation capability of two different MPPT algorithms. The algorithms are represented by distinct colors on the bar, and the energy generation values are labelled on the bars. Figure 5 compares the daily energy outputs of the MPPT algorithms. The IC+HHO combination achieves an energy output of approximately 68.35 Wh, whereas the Fuzzy Logic+ANN+HHO method significantly outperforms it with a generation of 79.23 Wh, highlighting its superior efficiency in tracking the maximum power point.

These results signify the superior performance of the Fuzzy Logic+ANN+HHO method for enhancing daily energy generation. This indicates that the operating points for the advanced algorithm combination are closer to the MPP, thus achieving a more efficient energy output.

In Figure 1, the operating point for the IC algorithm is located farther from the true Maximum Power Point (True MPP), whereas the HHO point is significantly closer to the MPP. Similarly, in Figure 3, the Fuzzy+ANN algorithm is located closer to the MPP compared to the IC algorithm, while the HHO point is located very close to the MPP. This shows that the Fuzzy+ANN approach captures the MPP more effectively than the IC method. It can be thus stated that the combination of Fuzzy+ANN and HHO provides more enhanced panel efficiency and power output. In Figures 2 and 4, the morning, noon, and evening sections of the day are pointed out by red dashed lines, providing a clear understanding of variations in irradiance throughout the day in three primary time sections.

3. Conclusion

This study evaluates the MPPT algorithms developed to enhance energy efficiency in photovoltaic systems. The limitations of conventional methods, particularly under variable environmental conditions, have been tackled by developing enhanced artificial intelligence-based and hybrid approaches. In this regard, combinations such as IC+HHO and Fuzzy Logic+ANN+HHO proved to have superior performance for improving system efficiency and stability. The simulation results demonstrate that these algorithms achieve the maximum power point with greater speed and precision compared to conventional methods. The outcomes of this study provide a foundation for enhancing the efficiency and sustainability of photovoltaic systems. Through a systematic evaluation of conventional and hybrid MPPT techniques, this research aims to provide comprehensive guidance to support future innovations in optimization of solar energy systems.

4. References

- Ardıç, O. (2015). *Güneş panellerinde adaptif ağ tabanlı bulanık mantık çıkarım yöntemi ile maksimum güç noktası takibi* (Yüksek Lisans Tezi). Afyon Kocatepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Elektrik-Elektronik Mühendisliği Anabilim Dalı, Afyonkarahisar.
- Akdemir, A. (2023). *Güneş panellerinde kullanılan maksimum güç takip yöntemlerinin karşılaştırılarak analiz edilmesi* (Yüksek Lisans Tezi). Kocaeli Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Enerji Sistemleri Mühendisliği Anabilim Dalı, Kocaeli.
- Almohana, W. R. M. (2024). *Hybrid Kalman Filter Based MPPT Design for Photovoltaic System in Energy Harvesting Optimization* (Master's thesis). Yıldız Technical University, Graduate School of Science and Engineering, Control and Automation Engineering Department, Istanbul.
- Astaomar, S., & Erkal, B. (2024). Performance of the rapid convergence time for the perturb and observe MPPT algorithm by using Harris Hawks optimization in photovoltaic systems. *Politeknik Dergisi*, 27(6), 2377-2387. <https://doi.org/10.2339/politeknik.1488197>.
- Bülbül, A. B. (2011). *Güneş panelleri için bir maksimum güç noktası izleme algoritmaları sinama düzeneğinin tasarımı ve gerçekleştirilmesi* (Yüksek Lisans Tezi). Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- Harrison, A., Feudjio, C., Mbobda, C. R. F., & Alombah, N. H. (2024). A new framework for improving MPPT algorithms through search space reduction. *Results in Engineering*, 22, 101998. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2024.101998>.
- Islam, H., Mekhilef, S., Mohamed Shah, N. B., Soon, T. K., Seyedmahmousian, M., Horan, B., & Stojcevski, A. (2018). Performance evaluation of maximum power point tracking approaches and photovoltaic systems. *Energies*, 11(2), 365.
- Koc, M. (2012). *Design, simulation, build and test of a DC-DC boost converter and control for maximum power point tracking of a photovoltaic panel* (Master's thesis). The University of Nottingham, Department of Electrical and Electronic Engineering, Nottingham.

- Lüy, M., Türk, F., & Metin, N. A. (2021). *Fotovoltaik sistemlerde maksimum güç noktası takibi için Deęiřtir ve Gözle, Artan İletkenlik ve Parçacık Sürü Optimizasyon algoritmalarının karşılaştırılması*. Uluslararası Mühendislik Arařtırma ve Geliřtirme Dergisi (UMAGD), 13(3), 202-214.
- Nezam, A. M. (2024). *Hybrid modified grey wolf optimization-based modified incremental conductance MPPT for photovoltaic systems* [Master's thesis, Ankara Yıldırım Beyazıt University].
- Ort, M. I. (2016). *FV sistemlerde güneři takip eden sistem tasarımı ve MPPT kontrolü ile enerjinin yüke maksimum olarak aktarılması* [Yüksek lisans tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi].
- Tao, X., Xin, J., Zhang, S., Xu, Z., Ye, Z., Wang, K., Chen, B., & Zhou, N. (2024). A novel Harris-Hawk-Optimization-based maximum-power-point-tracking control strategy for a grid-connected PV power-generation system. *Energies*, 17(1), 76. <https://doi.org/10.3390/en17010076>.
- Tülücü, M. E. (2024). *Fotovoltaik sistemlerde yükseltici türü dönüřtürücü tabanlı MPPT sisteminin evrimsel algoritma kontrolü* (Yüksek Lisans Tezi). Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Elektrik Mühendislięi Anabilim Dalı, Elektrik Makinaları ve Güç Elektronięi Programı, İstanbul.
- Umashankar, S., Srikanth, P., Vijay Kumar, D., & Kothari, D. P. (2011). *Comparative study of maximum power point tracking algorithms with DC-DC converters for solar PV system*. International Journal of Electrical and Computer Engineering, 3(1), 11–20.