



MUŞ ALPARSLAN ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ

DERGİSİ

2019
1 Haziran
Cilt/7

Muş Alparslan University Journal of Science * Published since 2013

- ❖ 2- (2-hidroksi-5-metoksi-3-nitrobenzilden)-N-metilhidrazin-1-karbotioamid Molekülünün Kuantum Kimyasal Metotlar ile Yapılan Teorik Hesaplamaları
Hacer GÖMÜŞ
- ❖ Kazıcı Yükleyici Makineler İçin Kazıcı Kepçe ile Çalışan Hidrolik Bir Çene Tasarımı ve Denenmesi
Yusuf Ziya DEMİR, Yusuf USTA
- ❖ On Stability of Fractional Differential Equations with Lyapunov Functions
Erdal KORKMAZ, Abdulhamit ÖZDEMİR
- ❖ Investigation of Corrosion Resistance of Cold Metal Transfer Welded AA7075 Aluminum Alloy-Galvanized Steel Couples
Hülya DURMUŞ, Nilay ÇÖMEZ

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi * 2013'ten beri yayında



<http://dergipark.gov.tr/maufbd>
e-ISSN:2149-6455



MSUFBD

**Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science**

YIL/YEAR: 2019 • CİLT/VOLUME: 7 • SAYI/NUMBER: 1

Yazılarda ifade edilen görüş ve düşünceler yazarlarının kişisel görüşleri olup derginin ve bağlı bulunduğu kurumun görüşlerini yansıtmaz.

The opinions and views expressed in papers published on the journal belong only to its author(s) and do not necessarily reflect the views of the journal and its publisher.



MSUFBD

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Dağıtım

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından yapılmaktadır.

ISSN	:	2147-7930
e-ISSN	:	2149-6455
Basım Tarihi	:	01/06/2019
Cilt	:	7
Sayı	:	1
İlk Yayın Tarihi	:	2013
Basım Yeri	:	Muş
Yayın Türü	:	Yılda iki defa olmak üzere altı ayda bir (Haziran ve Aralık) elektronik olarak yayımlanan uluslararası hakemli ve süreli yayındır.
Yayın Dili	:	Türkçe ve İngilizce'dir.
Adres	:	Muş Alparslan Üniversitesi Kampüsü, Fen Bilimler Enstitüsü, Diyarbakır Yolu 7. Km, 49250 – MUŞ / TÜRKİYE
e-posta	:	a.cetin@alparslan.edu.tr
URL	:	http://dergipark.gov.tr/msufbd

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Yıl/Year: 2019 • Cilt/Volume: 7 • Sayı/Number: 1

Yayın Kurulu • Editorial Board

Muş Alparslan Üniversitesi Adına Sahibi / Owner	Prof. Dr. Fethi Ahmet POLAT (Rektör) Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Baş Editör / Editor-in-Chief	Dr. Adnan ÇETİN Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Editörler / Editors	Doç. Dr. Sedat BOZARI Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Yayın Kurulu Üyeleri / Editorial Board Members	Prof. Dr. Murad Aydın ŞANDA Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
	Prof. Dr. Mahmoud ELAASSER Al-Azhar University / Egypt
	Prof. Dr. Sadulla JAFAROV Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
	Prof. Dr. Charis SEMİDALES University of Athena / Greek
	Prof. Dr. Nizameddin İSKENDEROV University of Baku State / Azerbaijan
	Prof .Dr. Vugar İSMAİLOV National Academy Of Sciences / Azerbaijan
	Doç. Dr. Wael Ibrahim Mostofa MORTADA Mansoura University / Egypt
	Prof. Dr. Esin KAYA Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
	Doç. Dr. Wasim Akhtar Jamia Hamdard University/ India
	Prof. Dr. Ercan BURSAL Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
	Dr. Derya YANMIŞ Giresun Üniversitesi/ Türkiye
	Dr. Furkan ORHAN Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi/ Türkiye
	Doç. Dr. Kenan YILDIRIM Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
	Dr. Ömer ARSLAN Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
	Dr. Garima Verma Jamia Hamdard University/ India
Sekreteryaya / Secretariat	Arş. Gör. Emine ŞAHİN
Teknik Redaksiyon / Redaction	Arş. Gör. Rukiye İŞİK
	Arş. Gör. Tayfun ABUT
Grafik Tasarım / Design	Okt. Seyhan SAYIM Levent Günaydın

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Yıl: 2019 • Cilt: 7 • Sayı: 1

Amaç ve Kapsam

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimler Dergisi, fen bilimler alanında özgün ve nitelikli çalışmaları bilimsel bir yaklaşımla ele almak amacıyla yayımlanan uluslararası hakemli bir dergidir. Haziran ve Aralık sayısı olmak üzere yılda iki defa düzenli olarak yayımlanmaktadır.

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimler Dergisinde yayımlanan yazıların bilimsel ve hukukî sorumluluğu, yazarlarına aittir. Yayımlanan yazıların bütün yayın hakları Muş Alparslan Üniversitesi'ne ait olup yayıncının izni olmadan kısmen veya tamamen elektronik ortama taşınmaz.

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimler Dergisi fen bilimleri, temel bilimler, doğa bilimleri ve mühendislik alanları ile alakalı konularda özgün ve nitelikli bilimsel çalışmalar yer almaktadır. Dergide yayımlanan tüm makalelere DOI numarası atanmakta ve yayımlanan makaleler için herhangi bir ücret talep edilmemektedir.

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimler Dergisi aşağıdaki indekslerce taranmaktadır:

- International Innovative Journal Impact Factor (IIJIF),
- Research Bible
- Scientific Indexing Service
- Infobase index
- DRJI (Directory of Research Journals Indexing)
- CrossRef DOI
- Academic keys
- COSMOS IF
- Eurasian Scientific Journal Index (ESJI)
- Index Copernicus
- National Science Digital Library
- CiteFactor

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Yıl/Year: 2019 • Cilt/Volume: 7 • Sayı/Number: 1

Aims and Scope

Mus Alparslan University Journal of Science is an international peer-reviewed journal that publishes original and qualified works with a scientific approach in the fields of sciences sciences. The Journal is published two times a year, in June and December by Mus Alparslan University.

Scientific and legal liabilities of the articles published in Mus Alparslan University Journal of Science belong to the authors. The copyrights of the works that are published in the journal are transferred to Mus Alparslan University. No part of this publication may be published elsewhere including electronically without permission of the Publisher.

Mus Alparslan University Journal of Science focuses on original and qualified scientific studies related to science, basic sciences, natural sciences and engineering fields. All articles published in our journals are open access and freely available online. DOI number is assigned to all the articles being published in the journal. The journal does not charge authors for any publication fee.

Mus Alparslan University Journal of Science is included in the following abstracting and indexing services:

- International Innovative Journal Impact Factor (IIJIF),
- Research Bible
- Scientific Indexing Service
- Infobase index
- DRJI (Directory of Research Journals Indexing)
- CrossRef DOI
- Academic keys
- COSMOS IF
- Eurasian Scientific Journal Index (ESJI)
- Index Copernicus
- National Science Digital Library
- CiteFactor

Danışma Kurulu

Prof. Dr. Erdal Necip YARDIM
Bitlis Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Mehmet Serdar GÜLTEKİN
Atatürk Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Cemil TUNÇ
Yüzüncü Yıl Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Mehmet Serdar GÜLTEKİN
Atatürk Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Ekrem ATALAN
İnönü Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Refik ABDULLA
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Güleray AĞAR
Atatürk Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Esvet AKBAŞ
Yüzüncü Yıl Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Cevat SELAM
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Giray TOPAL
Atatürk Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. İshak BİLDİRİCİ
Yüzüncü Yıl Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Arzu ALA GÖRMEZ
Atatürk Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Ersin KILINÇ
Mardin Artuklu Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Banu Bayram
Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Cezmi KAYAN
Dicle Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Tarık ARAL
Batman Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Refik SAMET
Ankara Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Ekrem YILMAZ
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Talat KÖRPİNAR
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Fırat KURT
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Murat DEMİR
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Selçuk SAĞIR
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Murat AYDEMİR
Dicle Üniversitesi / Türkiye
Dr. Erdal KORKMAZ
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Muhammed ÇINAR
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Adem KORKMAZ
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Ramazan ATICI
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye

Advisory Board

Prof. Dr. S. S. VOLOSIVETS
Saratov State University / Russia
Prof. Dr. Vladimir ANDRIEVSKI
Kent State University / USA
Prof. Dr. Ramazan MAMADOV
Pamukkale Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Daniyal ISRAFİLOV
Balıkesir Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Urfat NURİYEV
Ege Üniversitesi / Türkiye
Prof. Dr. Abdülvahabova SACİDE
University of Baku State / Azerbaijan
Prof. Dr. Goayev NİFTALİ
University of Baku State / Azerbaijan
Prof. Dr. Agamaliyev FARZALİ
University of Baku State / Azerbaijan
Prof. Dr. Harun POLAT
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Nevzat ESİM
Bingöl Üniversitesi / Türkiye
Dr. Tomasz JAROZS
Silesian University of Technology / Poland
Doç. Dr. Harun POLAT
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Santosh Kumar BHARDWAJ
Jiwaji University / India
Dr. Bamidele Joseph OKOLİ
Vaal University of Technology / South Africa
Dr. Marcelo MURGUİA
Universidad de Valencia/Spain
Dr. Muhsin İNCESU
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Murat SÜNKÜR
Batman Üniversitesi / Türkiye
Dr. Deniz Barış CEBE
Batman Üniversitesi / Türkiye
Doç. Dr. Nevin TURAN
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. İbrahim DOLAK
Dicle Üniversitesi / Türkiye
Mohammed Faraz KHAN
Jamia Hamdard University/ India
Dr. Salih ÖZER
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Hüseyin ALLAHVERDİ
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Fuat YETİŞSİN
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Yusuf ALAN
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Kenan BULDURUN
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye
Dr. Ahmet SAVCI
Muş Alparslan Üniversitesi / Türkiye

İÇİNDEKİLER • CONTENTS

ÖZGÜN ARAŞTIRMA / ORIGINAL ARTICLE

- Hacer GÜMÜŞ* 611-620
- 2-(2-hidroksi-5-metoksi-3-nitrobenziliden)-*N*-metilhidrazin-1-karbotioamid Molekülünün Kuantum Kimyasal Karakterizasyonu**
- Yusuf Ziya DEMİR, Yusuf USTA* 621-634
- Kazıcı Yükleyici Makineler için Kazıcı Kepçe ile Çalışan Hidrolik Bir Çene Tasarımı ve Denenmesi**
- Erdal KORKMAZ, Abdulhamit ÖZDEMİR* 635-638
- On Stability of Fractional Differential Equations with Lyapunov Functions**
- Hülya DURMUŞ, Nilay ÇÖMEZ* 639-644
- Investigation of Corrosion Resistance of Cold Metal Transfer Welded AA7075 Aluminum Alloy- Galvanized Steel Couples**

Okuyucu Mektupları / Letters

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimler Dergisi'nde yayımlanan çalışmalar hakkındaki değerli görüşlerinizi, yorumlarınızı ve önerilerinizi lütfen dergi editörüne iletiniz.
Dr. Adnan ÇETİN
a.cetin@alparslan.edu.tr

2- (2-hidroksi-5-metoksi-3-nitrobenziliden)-N-metilhidrazin-1-karbotioamid Molekülünün Kuantum Kimyasal Karakterizasyonu

Hacer GÜMÜŞ¹

¹Pazarlama ve Reklamcılık Bölümü, Gölcük MYO, Kocaeli Üniversitesi, Kocaeli, Türkiye
✉: hacer.gumus@kocaeli.edu.tr

Geliş (Received): 08/02/2019

Düzeltilme (Revision):07/04/2019

Kabul (Accepted): 06/06/2019

ÖZ

Bu çalışmada, 2-(2-hidroksi-5-metoksi-3-nitrobenziliden)-N-metilhidrazin-1-karbotioamid (SL) molekülünün geometrik yapısı taban durumunda Gaussian 09W programı kullanılarak optimize edilmiştir. Optimize edilen moleküler yapının sonuçları sunuldu. X-ışını kırınımı sonuçları ile mukayese edildi. SL molekülünün teorik harmonik titreşimsel dalga boyları hesaplandı ve deneysel değerlerle karşılaştırıldı. Deneysel değerler ve hesaplanan değerler birbiri ile uyum içerisinde bulunmuştur. SL molekülü, optiksel geçişler için UV-görünür spektral çalışmalar ile karakterize edilmiştir. Ayrıca, ¹H ve ¹³C NMR kimyasal kayma değerleri, doğrusal olmayan optik analizi, sınırlı moleküler yörünge enerjileri, moleküler yüzeyler, Mulliken yükü ve atomik polar tensör bazlı yükler incelenmiştir. Tüm teorik hesaplamalar LanL2DZ temel seti ile B3LYP ve HSEH1PBE yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır.

Anahtar Kelimeler: B3LYP, HSEH1PBE, NMR, UV

Quantum chemical characterization of 2-(2-hydroxy-5-methoxy-3-nitrobenzylidene)-N-methylhydrazine-1-carbothioamide molecule

ABSTRACT

In this study, the geometric structure of 2-(2-hydroxy-5-methoxy-3-nitrobenzylidene)-N-methylhydrazine-1-carbothioamide (SL) molecule was optimized using Gaussian 09W software in the ground state. The results of the optimized molecular structure were presented. It was compared to the X-ray diffraction data. The theoretical harmonic vibrational wavenumbers of SL molecule were calculated and its values were compared with experimental values. The experimentally and the calculated values were found to be in good agreement. SL molecule was characterized by UV-visible spectral studies for the optical transmission. Also, ¹H and ¹³C NMR chemical shifts values, nonlinear optical analysis, the frontier molecular orbital energies, molecular surfaces, Mulliken charges and atomic polar tensor based charges were investigated. All theoretical calculations were calculated by using LanL2DZ basis set B3LYP and HSEH1PBE density functional theory method.

Keywords: B3LYP, HSEH1PBE, NMR, UV

GİRİŞ

Kuantum mekanişel yöntemler, deneysel verileri desteklemek amacıyla bağ açısı ve bağ uzunluğu gibi yapısal özellikleri başta olmak üzere, moleküler sistemin elektronik, spektroskopik ve optik özellikleri hakkında faydalı bilgiler sağlamaktadır. Aynı zamanda deneysel olarak belirlenmesi oldukça zor, zaman alıcı ve/veya pahalı olan kimyasal süreçler teorik olarak yorumlanıp kolaylıkla açıklanabilmektedir. Hatta bazı çalışmalar teorik metotların deneysel metotlardan daha hassas veriler elde edildiğini göstermektedir. Teorik hesaplama verileri her zaman deneysel hesaplama verilerini yönlendirici, destekleyici ve aydınlatıcı olmaktadır. Bu sebeple, literatürde mevcut olan SL molekülünün deneysel verilerini destekleme amaçlı

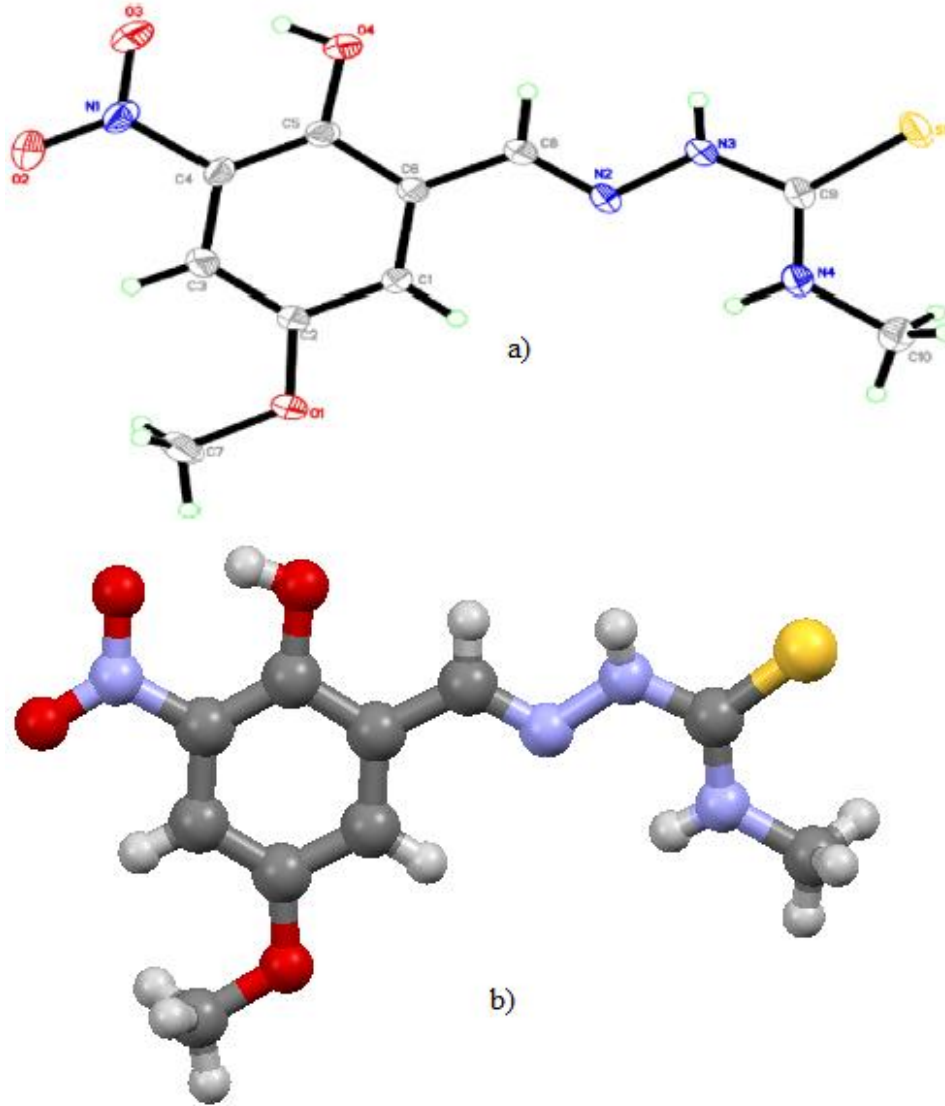
molekülün moleküler yapısı, spektroskopik, elektrik ve elektronik özellikleri teorik olarak incelenmiştir. Koordinasyon kimyasında ligand olarak kullanılan ve C=N grubu içeren bileşikler, ilk defa 1864 yılında Schiff tarafından sentezlendiği için "Schiff Bazları" olarak bilinmektedir. Geçiş metalleri ile onların koordinasyon kompleksleri polimer kimyası, malzeme bilimi, tıbbi ve endüstriyel kimyada oldukça önemlidir. Schiff bazı bileşikler ve geçiş metalleri ile komplekslerinin çoğu geniş biyolojik ve farmakolojik uygulamaları vardır. Schiff bazı bileşikleri ve metal komplekslerinin Tiyosemikarbazon türevleri çok yönlü bağlanma şemalarıyla antibakteriyel, antiviral, antifungal, antimalariyal ve antineoplastik aktiviteler göstermektedir. Bu kompleksler ayrıca antitümör ve antikanser aktiviteleri göstermişlerdir. Üç insan kanser

(kolon, meme ve servikal) hücre hattına ve bir normal hücre hattına karşı bölme sitotoksik potansiyelleri anti kanser ajanlar olarak test edilmiştir [1].

MATERYAL ve YÖNTEM

Kristal Yapısı

Schiff bazı bileşiklerden olan ve bu çalışmanın temelini oluşturan SL molekülünün sentezlenmesi A. Arafath ve diğerleri tarafından sentezi gerçekleştirildi. Sentezlenen SL molekülünün deneysel ve kristal yapısı Şekil 1’ de gösterilmiştir.



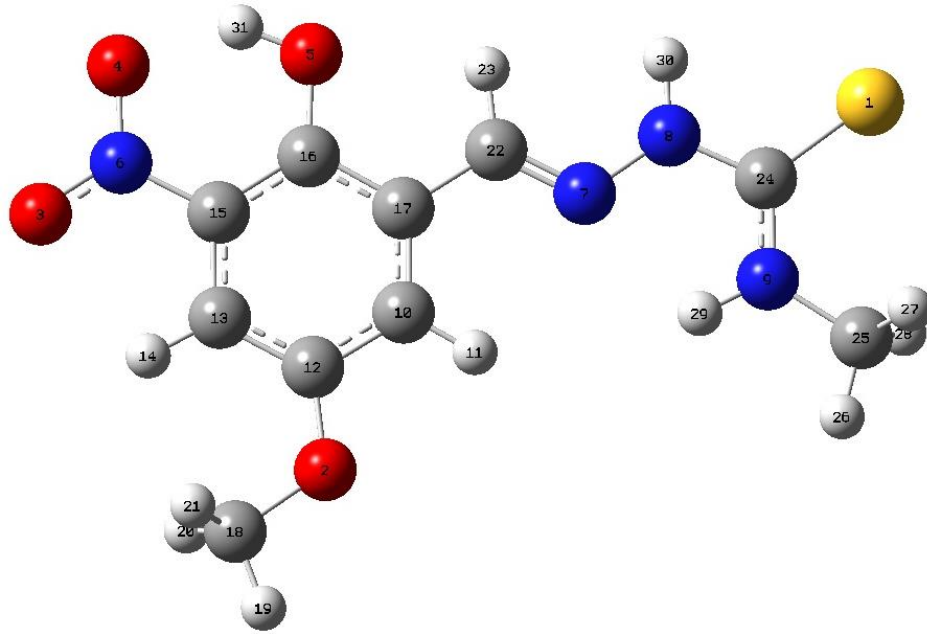
Şekil1. SL molekülünün a) deneysel b) kristal yapısı

SL molekülünün deneysel X-ışını tek kristal yapısı CCDC 1425804 kodu ile Cambridge kristalografik yapı veri tabanında (CSD) bulunmaktadır. SL molekülünün kapalı formülü $[C_{10}H_{12}N_4O_4S]$, moleküler formül ağırlığı $284.29 \text{ g mol}^{-1}$, birim hücresi ortorombik Pna21 kristal yapısında olduğu gözlenmiştir.

Geometrik Optimizasyonu

Teorik hesaplamalar için Cambridge kristalografik yapı veri den CCDC 1425804 kodu ile alınan SL molekülü

GaussView programında açılarak GAUSSIAN 09 paket programı kullanılarak optimize edildi [2]. Yoğunluk Fonksiyonu teorisinin (DFT), B3LYP [3,4] ve HSE1PBE[5-8] metodunun LanL2DZ (Hay ve Wadt ın etkili çekirdek potansiyeli) [9-11] seti ile gaz fazında ve taban durumunda hesaplatılmış ve molekülün optimize geometrisi Şekil 2’ de verilmiştir.



Şekil2. B3LYP/LanL2DZ metodu ile hesaplanan SL molekülünün optimize geometrisi

Yapılan geometrik optimizasyon ile moleküldeki atomların uzay yerleşimleri ve uzay yapısı belirlenerek bağ uzunlukları (Å) ve bağ açıları (°) teorik olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan bu parametreler deneysel değerler ile birlikte Tablo 1’ de listelenmiştir.

Tablo1. SL molekülünün bağ uzunluğu ve bağ açıları.

Bağ Uzunluğu(Å)	Teorik Hesaplamalar		
	Deneysel	B3LYP	HSEH1PBE
S1-C9	1.689(2)	1.72655	1.71859
O1-C2	1.364(3)	1.39018	1.38165
O1-C7	1.434(3)	1.45996	1.44905
O2-N1	1.216(3)	1.27379	1.26274
O3-N1	1.231(3)	1.30625	1.29387
O4-C5	1.346(3)	1.37150	1.36357
N1-C4	1.443(3)	1.45127	1.44333
N2-C8	1.272(3)	1.30651	1.30155
N2-N3	1.379(3)	1.37299	1.36122
N3-C9	1.351(4)	1.39706	1.38895
N4-C9	1.315(4)	1.35473	1.34776
N4-C10	1.459(4)	1.46463	1.45537
C1-C6	1.393(3)	1.40091	1.39558
C1-C2	1.398(3)	1.41452	1.40893
C3-C4	1.397(4)	1.41559	1.40960
C4-C5	1.397(3)	1.42071	1.41430
C5-C6	1.410(3)	1.42818	1.42218
C6-C8	1.457(3)	1.46702	1.45988
Bağ Açıları(°)			
C2-O1-C7	116.9(2)	118.51753	118.15419
O2-N1-O3	122.1(2)	121.82261	122.07825
O2-N1-C4	119.4(2)	119.75369	119.68152
O3-N1-C4	118.4(2)	118.42370	118.24023
C8-N2-N3	115.0(2)	118.62303	118.92103
C9-N3-N2	121.3(2)	120.98391	120.76873
C9-N4-C10	123.3(2)	123.27001	122.76350
C6-C1-C2	121.5(2)	121.69770	121.65626
O1-C2-C3	124.5(2)	124.71195	124.60809
O1-C2-C1	115.7(2)	115.17616	115.36164
C3-C2-C1	119.8(2)	120.11189	120.03027
C2-C3-C4	118.6(2)	118.61873	118.65309
C5-C4-C3	123.1(2)	122.12989	122.20926
C5-C4-N1	120.0(2)	120.30139	120.27661

C3-C4-N1	116.8(2)	117.56872	117.51413
O4-C5-C4	125.7(2)	124.11297	124.28694
O4-C5-C6	116.9(2)	117.59153	117.53778
C4-C5-C6	117.4(2)	118.29550	118.17528
C1-C6-C5	119.6(2)	119.14628	119.27584
C1-C6-C8	121.6(2)	122.66289	122.67010
C5-C6-C8	118.8(2)	118.19083	118.05406
N2-C8-C6	122.3(2)	120.91348	120.78063
N4-C9-N3	117.4(2)	114.93891	115.06500
N4-C9-S1	124.9(2)	125.91350	125.71168
N3-C9-S1	117.8(2)	119.14758	119.22331

SL molekülünün bağ uzunlukları (Å) ve bağ açıları (°) için lineer regresyon analizinden lineer korelasyon katsayıları (R^2) hesaplanmıştır. Bu korelasyon katsayılarından bağ uzunluğu için deneysel değerlerin B3LYP metodu ile 0,9658 uyumlu olduğu HSEH1PBE metodu ile 0,9679 uyumlu olduğu belirlenmiştir. Bağ açısı ise deneysel değerlerin B3LYP metodu ile 0,8397 uyumlu olduğu HSEH1PBE metodu ile 0,8384 uyumlu olduğunu yine belirlenmiştir. Bu sonuçlardan görüldüğü gibi Tablo 1’ deki moleküler geometrik parametrelerin deneysel ve teorik verileri birbirleriyle uyumludur.

Kızılötesi (IR) Spektrumu

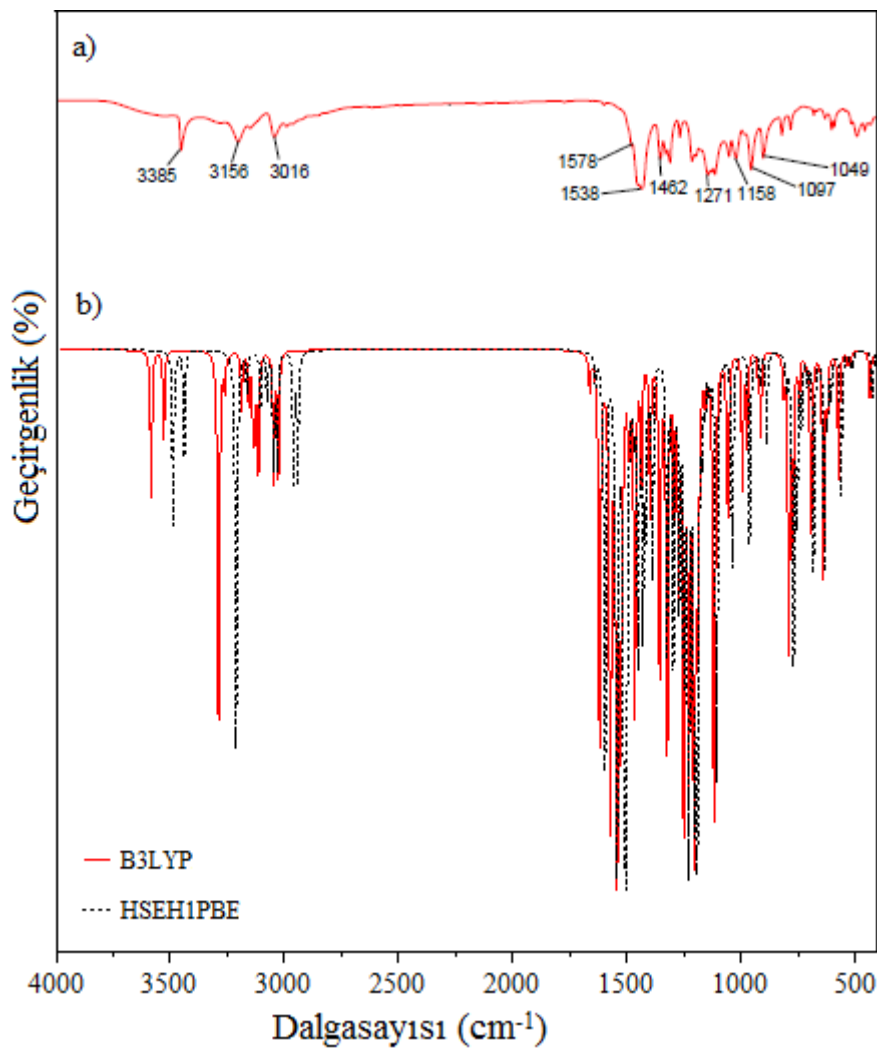
4000-400 cm^{-1} orta kızılötesi (IR) bölgesinde incelenen SL molekülünün harmonik titreşim frekansları gaz fazında B3LYP/LanL2DZ seviyesinde hesaplanan katı fazda olan deneysel değerleri ile uyumlu olabilmesi 0,9970 katsayısı ile çarpılmıştır. HSEH1PBE/LanL2DZ metodunda ise 0,9614 katsayısı ile çarpılmıştır. SL molekülünün harmonik titreşim frekansları ve işaretlemeleri Tablo 2’ de listelenmiştir. C-H₃ asimetrik gerilme titreşim bandlarının deneysel olarak 3016 cm^{-1} frekans aralığında gözlemlenirken teorik olarak B3LYP metodunda titreşim frekansları 3187 cm^{-1} ve HSEH1PB E metodunda 3104 cm^{-1} olarak hesaplandı.

Tablo2. SL molekülünün titreşim frekansları ve işaretlemeleri.

	Deneysel	Teorik	
	IR	B3LYP	HSEH1PBE
ν (N-H)	3385	3528	3438
ν (O-H)	3156	3288	3211
ν_a (CH ₃)	3016	3187	3104
ν (C=N)	1578	1618	1593
ν (C=N), ν_s (CH ₃)	1538	1572	1542
ν (O-N-O)	1462	1526	1502
δ (NC ₂)	1271	1250	1228
ρ (C-H)	1158	1153	1136
ν (N-N)	1097	1116	1106
ν (N-C-N)	1049	1054	1036

Kısaltmalar: ν , gerilme; a, simetrik olmayan; s, simetrik; δ , bükme; ρ , sallanma; γ , düzlem dışı bükme; τ , burulma.

N-H gerilme titreşim bandı deneysel olarak 3385 cm⁻¹ titreşim frekans aralığında gözlemlenirken teorik olarak B3LYP metodunda 3528 cm⁻¹ ve HSEH1PBE metodunda 3438 cm⁻¹ olarak hesaplandı. C=N gerilme titreşim bantları deneysel olarak 1578 cm⁻¹ aralığında gözlemlenirken B3LYP metodunda 1618 cm⁻¹, HSEH1PBE metodunda 1593 cm⁻¹ olarak hesaplandı. Sonuç olarak, Tablo 2 den kolayca görülebildiği gibi, HSEH1PBE metoduyla hesaplanan değerler B3LYP metoduna göre deneysel değerlere daha yakındır. SL molekülünün hesaplanan harmonik titreşim frekansları Şekil 3' de gösterilmiştir.



Şekil3. SL molekülünün a) deneysel ve b) teorik IR spektrumları

¹³C ve ¹H NMR Kimyasal Kaymaları

Bütün organik bileşiklerin analizinde NMR spektroskopileri yaygın olarak kullanılmaktadır. Moleküler yapı tayini için önemli rol oynayan NMR spektroskopileri ¹³C ve ¹H NMR kimyasal kayma hesaplamaları için SL molekülünün kararlı moleküler geometrik yapısı elde edilmiştir (TMS ye göre, tüm

değerler ppm olarak verilmiştir). Teorik hesaplamalar DFT/B3LYP/LanL2DZ seviyesinde hesaplanmıştır ve deneysel veriler ile birlikte Tablo 3' de listelenmiştir.

UV- görünür ışık spektrumu

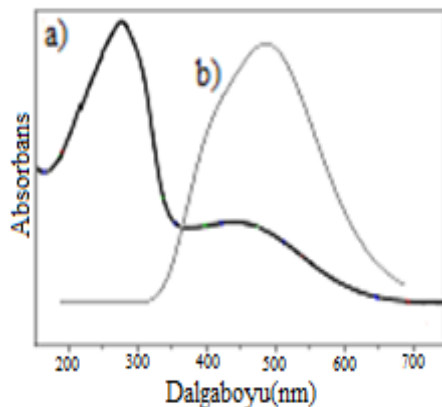
Atom veya molekülün dış kabuktaki elektronların geçişleri ile oluşan bir spektrum verir. Elektromagnetik

dalgaların en bilinenidir. İnsan gözünün görebildiği spektrum kısmı olarak tanımlanabilir.

Tablo3. SL molekülünün kimyasal kaymaları.

¹ H	Deneysel	B3LYP	HSEH1PBE
H _{N3}	11.648	11.016	11.117
H _{O4}	10.258	7.726	7.861
H _{N4}	8.653	7.480	7.623
H _{C8}	8.399	7.031	7.144
H _{C1}	8.051	6.714	6.820
H _{C3}	7.522	5.487	5.602
H _{C7}	3.828	3.228	3.373
H _{C7}	3.828	2.867	2.962
H _{C7}	3.828	2.867	2.962
H _{C10}	3.021	2.417	2.511
H _{C10}	3.021	2.416	2.510
H _{C10}	3.021	1.621	1.760
¹³ C			
C ₉	177.82	185.170	180.872
C ₈	151.63	147.396	144.001
C ₁	145.52	146.926	142.850
C ₂	109.14	136.086	132.439
C ₃	109.14	126.313	123.732
C ₄	109.14	121.009	118.011
C ₅	109.14	119.562	116.610
C ₆	109.14	97.861	94.806
C ₇	56.15	52.833	49.342
C ₁₀	30.89	25.564	21.808

Bu dalgalar, 1 µm den 10nm ye kadar olan dalgaboylarına ve 3.10¹⁴ Hz den 3.10¹⁶ Hz e kadar olan frekanslara sahiptirler. Görünür ışığın çeşitli dalga boyları, (λ≈400 nm) mordan kırmızıya kadar (λ≈700 nm) değişen renklerle sınıflandırılır. Gözün duyarlılığı, dalga boyunun bir fonksiyonudur. Duyarlılık, 560 nm (sarı-yeşil) civarındaki bir dalga boyunda maksimum olmaktadır. UV-Görünür ışık spektrumu zamana bağlı Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (TD-DFT) ile LanL2DZ temel seti ile hesaplanmıştır. SL molekülünün absorpsiyon piki deneysel olarak 330 nm de teorik olarak ise 500 nm de hesaplanmıştır. Deneysel ve teorik olarak elde edilen elektronik spektrum Şekil 4’ de gösterilmiştir.



Şekil4. SL molekülünün a) deneysel ve b) teorik elektronik spektrumları

Elektronik Özellikleri

Bir yapının elektron yoğunluğu dağılımına bakılarak, iyonizasyon potansiyeli, elektron ilgisi, kimyasal sertlik ve yumuşaklık parametreleri, elektrostatik potansiyel ve moleküler orbital şekilleri hakkında bilgi edinilebilir. Moleküler orbitaller HOMO-LUMO diye adlandırılır. Buradaki HOMO molekülün elektronu verme eğilimidir ve dolu olan en yüksek enerjili orbitaldir. LUMO ise molekülün elektron alma eğilimidir ve boş olan en düşük E_{HOMO} en yüksek dolu orbital, E_{LUMO} en düşük enerjili orbitaldir. boş molekül orbital olarak adlandırılır. en yüksek enerjili orbital ve molekülün elektronu verme eğilimidir.

SL molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/HSEH1PBE metodları ile LanL2DZ setinde Gaussian 09W programı kullanılarak E_{HOMO} ve E_{LUMO} enerji değerleri hesaplatılmıştır. Hesaplatılan E_{HOMO} ve E_{LUMO} enerjilerinin elektron yoğunluğu dağılımına bakılarak, enerji farkı (ΔE), iyonizasyon potansiyeli (I), elektron ilgisi (A), elektronegatiflik (χ), kimyasal sertlik (η) ve kimyasal yumuşaklık (S) parametreleri formüller yardımı ile hesaplanmıştır. Bu parametrelerin formülleri;

$$I = -E_{HOMO}, \quad A = -E_{LUMO},$$

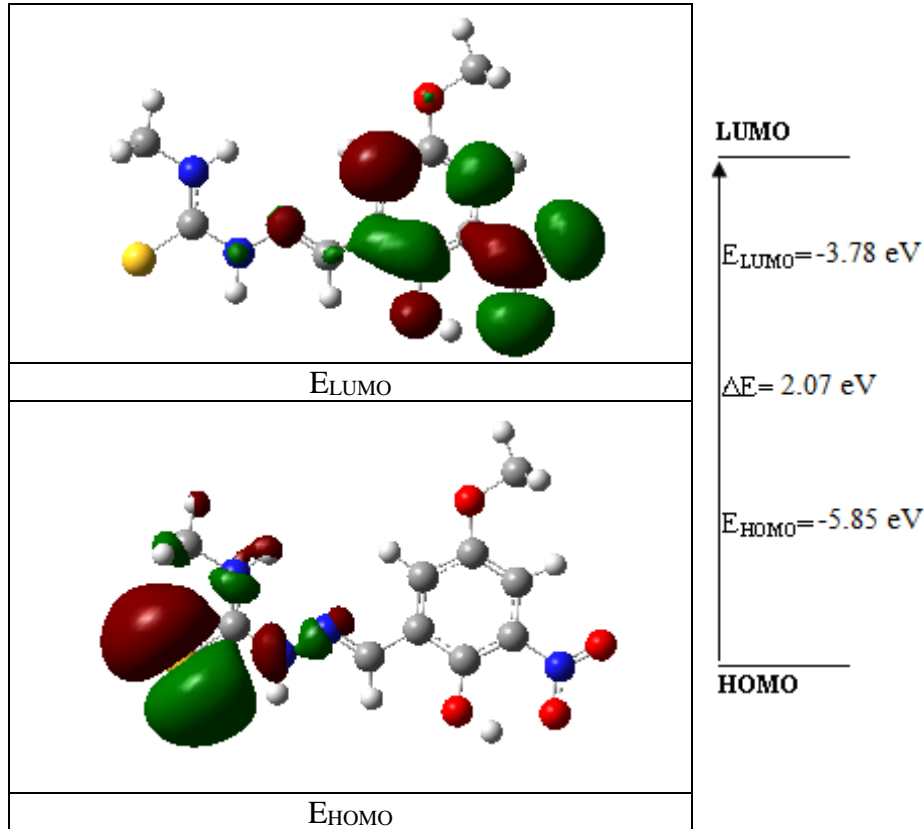
$$\chi = \frac{I + A}{2}, \quad \eta = \frac{I - A}{2} \quad \text{ve} \quad S = \frac{1}{2\eta} \quad [12] \text{ dir.}$$

Bu formülleri kullanarak DFT/B3LYP ve DFT/HSEH1PBE metodlarında hesaplatılan E_{HOMO} ve E_{LUMO} enerji değerlerinden Tablo 4’ deki parametreler bulunmuştur.

Tablo4. SL molekülünün teorik olarak hesaplanan elektronik yapı parametreleri.

	B3LYP	HSEH1PBE
E _{HOMO} (eV)	-5.850	-5.736
E _{LUMO} (eV)	-3.782	-3.964
ΔE=E _{LUMO} -E _{HOMO} (eV)	2.068	1.772
I (eV)	5.850	5.736
A (eV)	3.782	3.964
χ (eV)	4.816	4.850
η (eV)	1.034	0.886
S (eV ⁻¹)	0.085	0.087
E _{TOTAL} (a.u)	-918.039	-917.104

Molekülün enerji farkı (ΔE) büyük olduğunda elektron dağılımı daha az değişime uğrar ve kutuplanma düşük olur. ΔE enerji farkı küçük olduğunda ise; elektron dağılımı daha fazla değişime uğrar ve kutuplanma yüksek olur. Tablo 4’de verilen HOMO ile LUMO enerji farkının 1.5 eV dan büyük olması termodinamik açıdan molekülün kararlı ve dayanıklı olduğunu gösterir. Ayrıca molekül kendi kendileri ile reaksiyon vermez, dimerleşme, polimerleşme gerçekleştirmez. Teorik olarak B3LYP metoduyla elde edilen HOMO ve LUMO dağılımlarının gösterimi Şekil 5’ de gösterilmiştir.



Şekil5. SL molekülünün HOMO ve LUMO dağılımları

Lineer Olmayan Optik Özellikleri

Lineer olmayan optik (NLO) özellik gösteren moleküllerin tasarımı, modern iletişim teknolojisinde ve optik veri depolama alanlarında güncel bir araştırma konusudur. Alıcı-verici grup bağlı iki kutuplu moleküller en çok araştırılmış NLO malzemeleridir. NLO malzemeleri yarı iletken tabakalı yapılar olarak kategorize edilir. Bu nedenle, inorganik, organik ve organometalik moleküler sistemlerin birçok çeşidi NLO aktivitesi için incelenmektedir. Molekül üzerindeki π -elektron bulutunun delokalizasyonu artarsa, moleküllerin kutuplanabilirlik değeri artar [13]. Kutuplanabilirlik, uygulanan bir dış elektrik alana karşı molekülün statik dipol momentinin gösterdiği tepki olarak tanımlanır. Molekülün elektron dağılımı ve yük yoğunluğu gibi özelliklerinin bir ölçüsü olan kutuplanabilirlik moleküler spektroskopide kullanılan önemli bir niceliktir.

Toplam statik dipol moment;

$$\mu = (\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)^{1/2}$$

Uygulanan elektrik alanın yönünden bağımsız bir şekilde molekülün biçimsel bozulmasına neden oluyorsa izotropik kutuplanabilirlik olarak adlandırılır. Molekülün biçimsel bozulması uygulanan elektrik

alanın yönünden bağımsız değilse anizotropik kutuplanabilirlik olarak adlandırılır.

Kutuplanabilirlik ve yüksek mertebeli kutuplanabilirlik değerlerinin kartezyen bileşenleri (a.u.) biriminde hesaplanarak, bu kartezyen bileşen değerlerinden;

kutuplanabilirlik

$$\langle \alpha \rangle = \left(\frac{\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}}{3} \right)$$

yönelime bağlı kutuplanabilirlik

$$\Delta \alpha = \left(\frac{(\alpha_{xx} - \alpha_{yy})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{zz} - \alpha_{xx})^2}{2} \right)^{1/2}$$

ile ifade edilir [14]. Bir molekülün yüksek mertebeli kutuplanabilirliği, molekülün dipol momentinin uygulanan bir dış elektrik alana karşı gösterdiği doğrusal olmayan tepkinin bir ölçüsüdür.

Temel durumda yüksek mertebeli kutuplanabilirlik

$$\langle \beta \rangle = (\beta_x^2 + \beta_y^2 + \beta_z^2)^{1/2}$$

ile ifade edilir. Burada

$$\beta_x = \beta_{xxx} + \beta_{xyy} + \beta_{xzz}$$

$$\beta_y = \beta_{yyy} + \beta_{xxy} + \beta_{yzz}$$

$$\beta_z = \beta_{zzz} + \beta_{xxz} + \beta_{yyz}$$

olarak verilmektedir [14].

Tablo5. SL molekülünün teorik olarak hesaplanan elektriksel parametreleri.

	B3LYP	HSEH1PBE
μ_x	0.991 a.u.	1.061 a.u.
μ_y	2.162 a.u.	2.110 a.u.
μ_z	0.002 a.u.	0.002 a.u.
μ	6.047 Debye	6.003 Debye
α_{xx}	361.60 a.u.	354.06 a.u.
α_{yy}	200.40 a.u.	196.73 a.u.
α_{zz}	146.67 a.u.	71.64a.u.
$\langle\alpha\rangle$	31.28×10^{-24} esu.	30.74×10^{-24} esu.
$\Delta\alpha$	26.40×10^{-24} esu.	25.68×10^{-24} esu.
β_{xxx}	5862.49 a.u.	5752.37 a.u.
β_{yyy}	600.83 a.u.	574.57 a.u.
β_{zzz}	55.90 a.u.	57.06 a.u.
β_{yyy}	-212.62 a.u.	-190.19 a.u.
β_{xxy}	1111.48 a.u.	1107.91 a.u.
β_{yzz}	53.06 a.u.	52.36 a.u.
β_{zzz}	-0.05 a.u.	-0.05 a.u.
β_{xxx}	-9.01 a.u.	-8.57 a.u.
β_{yyz}	-1.83 a.u.	-1.70 a.u.
$\langle\beta\rangle$	569×10^{-35} esu.	558×10^{-35} esu.

SL molekülünün B3LYP ve HSEH1PBE metotları kullanarak dipol moment (μ), kutuplanabilirlik ($\langle\alpha\rangle$), yönelime bağlı kutuplanabilirlik ($\Delta\alpha$) ve temel durumda yüksek mertebeli kutuplanabilirlik ($\langle\beta\rangle$) değerleri hesaplanmıştır ve Tablo 5 de listelenmiştir. (1a.u.= $0,1482 \times 10^{-24}$ esu ve 1 a.u. = $8,6393 \times 10^{-33}$ esu).

Mulliken ve APT Yük Analizleri

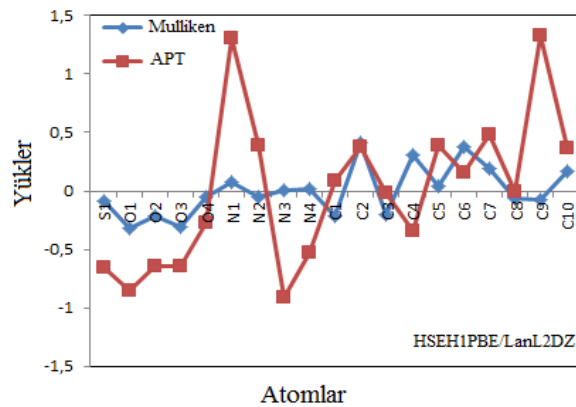
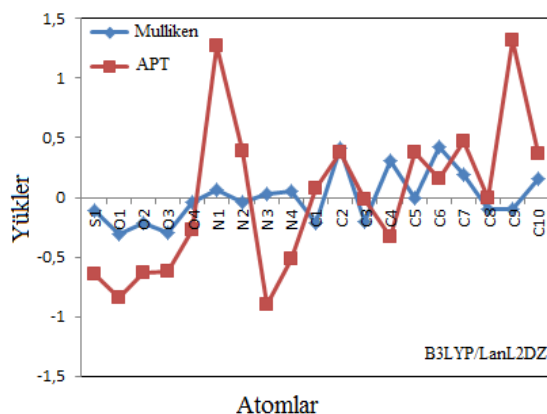
Mulliken popülasyon analizleri yapılarak elde edilen Mulliken yükleri birçok bilgisayar programında bulunması sebebi ile en eski ve yaygın olarak kullanılan analiz yöntemlerinden biridir. Mulliken yükleri, kısmi atom yüklerinin hesaplanmasıyla elde edilir. Bu metot atomik orbitallerin lineer kombinasyonu ile moleküler orbitallerin elde edilmesi yöntemine dayanmaktadır [15]. SL moleküller arası etkileşimlerini daha iyi

anlayabilmek için moleküllerin atomik yükleri hesaplanarak Tablo 6' da listelenmiştir.

Tablo 6. SL molekülünün Mulliken ve APT yük dağılımları.

	Mulliken		APT	
	B3LYP	HSEH1PBE	B3LYP	HSEH1PBE
S ₁	-0.10549	-0.08822	-0.64475	-0.65308
O ₁	-0.30535	-0.32217	-0.8424	-0.85059
O ₂	-0.21437	-0.21858	-0.63557	-0.6496
O ₃	-0.29796	-0.3095	-0.62518	-0.64451
O ₄	-0.04089	-0.04857	-0.26759	-0.27202
N ₁	0.06864	0.07076	1.26658	1.3058
N ₂	-0.0358	-0.0573	0.39023	0.39292
N ₃	0.02659	0.0048	-0.90421	-0.91036
N ₄	0.04865	0.02088	-0.51936	-0.52358
C ₁	-0.2142	-0.21155	0.07553	0.08171
C ₂	0.40672	0.414	0.37591	0.37319
C ₃	-0.19985	-0.1994	-0.01989	-0.01691
C ₄	0.30227	0.31334	-0.33436	-0.33885
C ₅	-0.01136	0.04047	0.37617	0.38385
C ₆	0.42174	0.38116	0.15839	0.15101
C ₇	0.19534	0.1952	0.47577	0.48000
C ₈	-0.09672	-0.06931	-0.01075	-0.00596
C ₉	-0.10201	-0.07983	1.32218	1.33321
C ₁₀	0.15407	0.16382	0.36329	0.36376

Mulliken ve APT yüklerine bakacak olursak negatif yükler elektronegativitesi en yüksek olan Oksijen (O) ve Karbon (C) atomları üzerinde toplanmıştır. Tablo 6' da Mulliken yük dağılımlarından görüldüğü gibi O₁ atomunun negatif yükü yaklaşık olarak B3LYP metodu için -0.30535 ve HSEH1PBE metodu için -0.32217 olarak hesaplanmıştır. Bu değer, diğer oksijen atomlarının negatif yüklerinden daha küçüktür ve molekül içi hidrojen bağında verici olarak bulunur. B3LYP ve HSEH1PBE metotları ile hesaplanan Mulliken ve atomik polar tensör (APT) yük analizleri daha iyi anlaşılabilmesi için yük dağılımları çizdirilip Şekil 6 da gösterilmiştir.

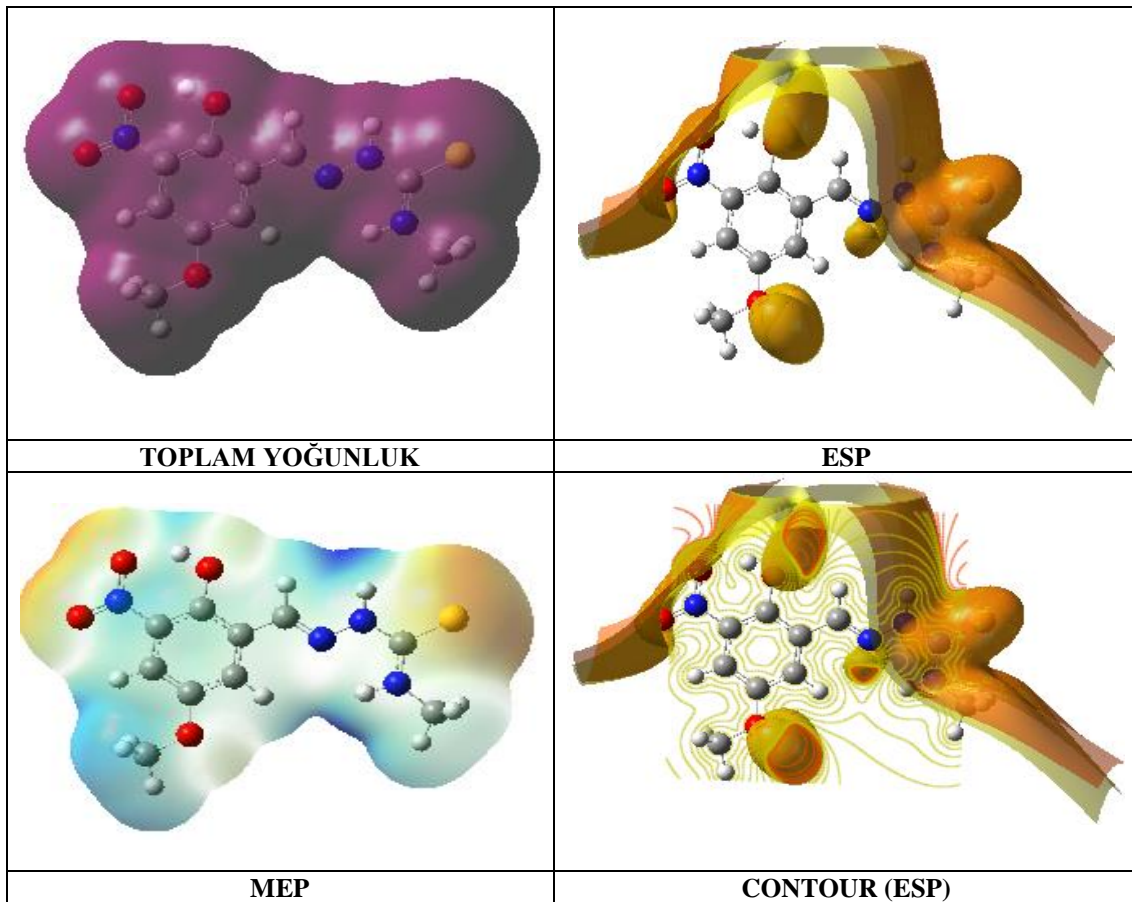


Şekil6. SL molekülünün Mulliken ve APT yük dağılımlarının gösterimi

Moleküler Elektrostatik Potansiyel Yüzey (MEPs) Analizleri

Moleküler elektrostatik potansiyel molekülün yerel kutupluluğu hakkında bilgi vermektedir [15]. Bir elektrostatik potansiyeli, moleküler etkileşimler ve kimyasal reaksiyonlarda güçlü bir etkiye sahiptir. MEPs özellikle büyük moleküller için hesaplanabilir; ayrıca moleküler şeklin ve yoğunlukla biyo moleküllerin kutuplanmış bölgeleri arasındaki sterik etkileşimleri ifade etmek için de kullanılır [16]. Moleküler elektrostatik potansiyel yüzeyler (MEPs), moleküler davranışların reaktifliği, yapı aktifliği ve hidrojen bağlarını açıklamakta kullanılan faydalı bir metoddur. Kırmızı bölgeler (-) yüklü elektrostatik potansiyel

bölgelerdir ve moleküllerin elektron yoğunluğu değişikliği tarafından protonun çekimini (tek çiftlenim, π bağları) temsil eder. Mavi bölgeler (+) yüklü elektrostatik potansiyel bölgelerdir ve düşük elektron yoğunluğunun ve nükleer yükün tam olarak korunmamış olduğu bölgelerde atom çekirdekleri tarafından protonun itmesine karşılık gelir. Hesaplanan kısmi yükler ise sarı alanlar (-), kırmızı alanlar ise (+) olmak üzere protonlar ve (+) yüklere yaklaşımla molekülün nasıl bir etkileşim içinde olabileceğini gösterir. SL molekülünün B3LYP/LanL2DZ metodu ile optimize olan yapılarının 3 boyutlu moleküler elektrostatik potansiyel yüzey haritaları Şekil 7' de gösterildi.



Şekil7. SL molekülünün moleküler yüzey haritaları

Termodinamik Özellikleri

Gaussian programında yapılan optimizasyon işleminde sistemlerin termokimyasal parametreleri de elde edilir. Toplam enerji, entalpi ve entropi gibi termodinamik parametreler kimyasal türlerin oluşabilirliğini ön görmede kullanılabilir. Termokimyasal özelliklerden ısı oluşumu en önemli parametrelerden biridir.

Termodinamik açıdan ısı etkilerinin incelenmesinin zor oluşu sebebi ile çoğu organik bileşiklerde ısı oluşumu değerleri bilinmemektedir. Bu durum teorik hesaplamalarda kuantum kimyasal metodların önemini artırmaktadır. Kuantum kimyasal sonuçlarının ısı etkilerine bakılarak, kimyasal reaksiyonun olup

olmayacağına karar verilebilir. Termodinamik kuantum kimyasal veriler organik bileşiklerin reaksiyon mekanizmalarının incelenmesinde yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. SL molekülünün termodinamik parametreleri B3LYP/LanL2DZ ve HSEH1PBE/LanL2DZ metodlarıyla Gaussian 09W programı kullanarak hesaplatılmıştır ve verileri Tablo 7' de listelenmiştir.

TARTIŞMA ve SONUÇ

Bu çalışmada, SL molekülünün yapısal, elektrik ve elektronik özelliklerini açıklamak için Gaussian programı yardımı ile kuantum kimyasal hesaplamalar

yapılmıştır. Molekülün geometrik yapısı HSEH1PBE ve B3LYP metotları ile belirlenmiştir.


Tablo7. SL molekülünün Termodinamik parametreleri.

Parametreler	B3LYP	HSEH1PBE
Termal enerji: E (Kcal/mol)		
Dönme	0.889	0.889
Ötelenme	0.889	0.889
Titreşim	155.011	156.80
Toplam	156.789	158.58
Isı sıgası: C _v (cal/molK)		
Dönme	2.981	2.981
Ötelenme	2.981	2.981
Titreşim	61.978	61.118
Toplam	67.939	67.080
Entropi: S (cal/molK)		
Dönme	42.830	42.830
Ötelenme	34.870	34.834
Titreşim	66.648	65.390
Toplam	144.349	143.06
Dönme sabitleri (GHz)		
A	0.58372	0.5914
B	0.13520	0.1368
C	0.10993	0.1112
Dönme sıcaklıkları (Kelvin)		
A	0.02801	0.0284
B	0.00649	0.0066
C	0.00528	0.0053
Termal özellikler (Hartree/parçacık)		
Sıfır nokta düzeltmesi	0.231209	0.2343
Enerji için termal düzeltme	0.249859	0.2527
Entalpi için termal düzeltme	0.250803	0.2536
Gibbs serbest enerjisi için termal düzeltme	0.182218	0.1856
Elektronik ve sıfır nokta enerjiler toplamı	-917.8073	-916.87
Elektronik ve termal enerjiler toplamı	-917.7886	-916.8
Elektronik ve termal entalpiler toplamı	-917.7877	-916.8
Elektronik ve termal serbest enerjiler toplamı	-917.8563	-916.9
Sıfır nokta titreşim enerjisi (kcal/mol)	145.08614	147.02

Hesaplanan bağ uzunlukları deneysel değerler ile yaklaşık 0.96, bağ açılarının ise yaklaşık 0.84 uyumlu olduğu gözlenmiştir. Titreşim spektrumu ve harmonik titreşim analizinin teorik hesaplamaları gerçekleştirilmiştir ve titreşim işaretlemeleri deneysel değerler ile karşılaştırılmıştır. Elektronik özelliğinden HOMO/LUMO enerji değerleri B3LYP metodunda -5.850/-3.782 ve HSEH1PBE metodunda ise -5.736/-3.964 dir. HOMO/LUMO enerji değerleri arasındaki fark B3LYP metodunda 2.0 HSEH1PBE metodunda 1.7 dir. Bu değerler SL molekülünün termodinamik açıdan kararlı ve dayanıklı olduğunu gösterir. SL molekülünün kutuplanabilirlik değeri B3LYP metodunda 31.28×10^{-24} esu., HSEH1PBE metodunda ise 30.74×10^{-24} esu. olarak hesaplandı. Bu değer bize SL molekülünün üzerindeki π -elektron bulutunun delokalizasyonu yüksek olduğunu gösterir. Mulliken atom yükleri popülasyon analizinden görüldüğü gibi O₁ atomunun negatif yükü yaklaşık olarak -0.3 dür. Oksijen atomlarının negatif yüklerinden küçük olan bu değer molekül içi hidrojen bağında verici olarak bulunduğunu gösterir. Ayrıca Entalpi, gibbs serbest enerjileri, entropi gibi termodinamik özellikleri

ve moleküler elektrostatik potansiyel enerji yüzey haritası (MEPS) hesaplatılmıştır. Tüm hesaplamalarımızda DFT/B3LYP ve DFT/HSEH1PBE metodunun LanL2DZ temel setini kullanılmıştır. Ağır atomlu çekirdeklerde, çekirdeğe yakın bölgelerdeki elektronlara, yaklaşık olarak etkili çekirdek potansiyeli (ECPs) gibi davranılır. Bu davranış, bu atomlar için önemli olan bazı görelî etkileri içerir. LanL2DZ temel seti bunların en iyi bilineni olduğu için hesaplamalarımızda bu set kullanılmıştır.

ORCID

Hacer GUMUS  <https://orcid.org/0000-0002-6486-0515>

KAYNAKÇA

- [1] Arafath Md. A., Adam F., Razali M. R., Hassan L. E. A., Ahamed M. B. K., Majid A. M. S. A. Synthesis, characterization and anticancer studies of Ni(II), Pd(II) and Pt(II) complexes with Schiff base derived from N-methylhydrazinecarbothioamide and 2-hydroxy-5-methoxy-3-nitrobenzaldehyde, Journal of Molecular Structure 1130, 791-798, 2017.
- [2] Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., Petersson, G.A., Nakatsuji, H., Caricato, M., Li, X., Hratchian, H.P., Izmaylov, A.F., Bloino, J., Zheng, G., Sonnenberg, J.L., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Vreven, T., Montgomery, J.A, Jr., Peralta, J.E., Ogliaro, F., Bearpark, M., Heyd, J.J., Brothers, E., Kudin, K.N., Staroverov, V.N., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A., Burant, J. C., Iyengar, S.S., Tomasi, J., Cossi, M., Rega, N., Millam, J. M., Klene, M., Knox, J.E., Cross, J. B., Bakken, V., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R.E., Yazyev, O., Austin, A. J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, J.W., Martin, R.L., Morokuma, K., Zakrzewski, V.G., Voth, G.A., Salvador, P., Dannenberg, J.J., Dapprich, S., Daniels, A.D., Farkas, O., Foresman, J. B., Ortiz, J.V., Cioslowski, J. Ve Fox D.J., Gaussian 09, Revision A.1, Gaussian, Inc., Wallingford Ct., 2009.
- [3] Lee, C., Yang, W. Parr R.G. Development Of The Colle-Salvetti Correlation-Energy Formula Into A Functional Of The Electron Density. Phys. Rev. B, 37, 785, 1988.
- [4] Becke, A. D. Density-Functional Thermochemistry. Iii. The Role Of Exact Exchange. J. Chem. Phys., 98, 5648, 1993.
- [5] Heyd, J. Scuseria G. Efficient Hybrid Density Functional Calculations In Solids: Assessment Of The Heyd-Scuseria-Ernzerhof Screened Coulomb Hybrid Functional. J. Chem. Phys., 121, 1187, 2004.
- [6] Heyd J. And Scuseria G.E. Assessment And Validation of A Screened Coulomb Hybrid Density Functional. J. Chem. Phys., 120, 7274, 2004.
- [7] Heyd J., Peralta J. E., Scuseria G. E., And Martin R. L. Energy Band Gaps And Lattice Parameters Evaluated With The Heyd-Scuseria-Ernzerhof Screened Hybrid Functional. J. Chem. Phys., 123, 174101, 2005.

- [8] Heyd J., Scuseria G. E., Ernzerhof M. Hybrid Functionals Based On A Screened Coulomb Potential. *J. Chem. Phys.*, 124, 219906, 2006.
- [9] P.J. Hay, W.R. Wadt. Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for the transition metal atoms Sc to Hg, *J. Chem. Phys.* 82, 270-283, 1985.
- [10] Wadt W.R., Hay P.J. Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for main group elements Na to Bi, *J. Chem. Phys.* 82, 284-298, 1985.
- [11] Hay P.J., Wadt W.R. Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for K to Au including the outermost core orbitals, *J. Chem. Phys.* 82 299-310, 1985.
- [12] Pir H., Günay N., Avcı D. Quantum chemical computational studies on bithiourea zinc chloride, *Indian J. Phys.*, 86, 1049, 2012.
- [13] Kariper S. E. Alkin Birimli Piridil Ligantları İçeren Bazı Dinükleer Metal Karbonillerin Kuantum Kimyasal Hesaplama Yöntemleriyle Yapısal, Spektroskopik Ve Optik Özelliklerinin İncelenmesi, Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, p. 103.
- [14] Maroulis, G. Static hyperpolarizability of the water dimer and the interaction hyperpolarizability of two water molecules, *J. Chem. Phys.*, 113, 5, 2000.
- [15] Pearson, R. Absolute electronegativity and hardness: applications to organic chemistry, *J. Org. Chem.*, 54, 1423-1430, 1989.
- [16] Cramer, J.C. *Essentials of Computational Chemistry, Theory And Models*, John Wiley And Sons, Usa, 596, 2002.

Kazıcı Yükleyici Makineler için Kazıcı Kepçe ile Çalışan Hidrolik Bir Çene Tasarımı ve Denenmesi

Yusuf Ziya DEMİR¹, Yusuf USTA²

¹Hidromek A.Ş., Araştırma Geliştirme ve Teknoloji Merkezi/, Ankara, Türkiye

²Makine Mühendisliği Bölümü, Mühendislik Fakültesi, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye

✉: yusuf.demir@hidromek.com.tr

Geliş (Received): 08/04/2019

Düzeltilme (Revision):25/04/2019

Kabul (Accepted): 13/06/2019

ÖZ

Günümüzde birçok farklı inşaat işlerinin tamamlanabilmesi için kazıcı yükleyici makinelere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu makineler önünde farklı yükleme işleri için yükleyici mekanizma grubu, arkasında ise farklı kazı işleri için kazıcı mekanizma grubu bulundurmaktadır. Yapılacak iş grubuna göre de farklı tip yükleyici ve kazıcı ataşmanları bulunmaktadır. Bu çalışmada kazıcı yükleyici makinelerin kazıcı tarafında kullanılan ve malzemelerin kavranarak yer değiştirilmesi ilkesine göre çalışan bir hidrolik çene mekanizması tasarlanmış ve prototip imalatı yapılmıştır. Bu tasarım ile makine üzerinde tahribata gerek olmayarak montaj edilebilen, amaca ve malzemeye göre ucu değiştirilebilen, ucun ters montajı yapılarak ripper ataşmanı olarak da kullanılabilen mekanizma geliştirilmiştir. Tasarımı tamamlanan ataşmanın analizleri gerçekleştirilmiş, yapılan prototip üzerinde testler uygulanmış, böylece tasarım doğrulaması yapılarak uyumu incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Çene tasarımı, hidrolik çene tasarımı, kazıcı kepçe, kazıcı yükleyici makineler

Design and Testing of a Hydraulic Thumb Design Working with Backhoe Bucket for Backhoe Loaders

ABSTRACT

Nowadays, backhoe loaders are needed to complete many different construction works. These machines have loader mechanism on the front side for different loading works beside; they have backhoe mechanism for different excavation works on the backside. According to the working group, there are different types of loader and backhoe attachments. In this study, a hydraulic backhoe thumb mechanism is designed and produced a prototype, which is used for backhoe side of the backhoe loaders and works by gripping the materials which is subjected to move. With the design, the thumb can be assembled on the machine without any destruction on the machine body, its toe can be replaced to the intended use and the material to be moved and can also be used as a ripper attachment by reverse assembly of the toe. The analysis, production and testing of the attachment is carried out and the compatibility of the design with the analysis as well as the tests is examined.

Keywords: Backhoe buckets, backhoe loaders, hydraulic backhoe thumb design, jaw design

GİRİŞ

Kazıcı yükleyici iş makineleri günümüzde inşaat işlerinin birçoğunu yapma kabiliyetini bünyesinde bulunduran ve sektörde en yaygın kullanılan iş makinelerinden biridir. Bu makineler genel olarak kabin, şasi, güç aktarma elemanları, soğutma grubu elemanları ve hidrolik sistemler ile beraber ön tarafta yükleyici mekanizma grubu ve arka tarafta kazıcı mekanizma grubunun yer aldığı kazma ve yükleme işlerinde kullanılan iş makineleridir [1]. Mekanizma gruplarının hareketi hidrolik sistem vasıtasıyla gerçekleşir. Yükleyici mekanizma grubu ile farklı ataşmanlar kullanılarak yığılı olan ya da kazı sonucunda ortaya çıkan malzemelerin araca yüklenmesinde veya kısa mesafede başka bir yere taşınmasında, yüzey tesviye işlemlerinde, malzeme küreme gibi birçok işlemlerde kullanılabilir. Kazıcı mekanizma grubuna

uygun ataşmanlar kullanılarak da kanal ve diğer kazma işlemleri, sert zeminlerin kırılma ve yumuşatılmasında, araç yer değiştirmeden malzemelerin tutulup yer değiştirilmesi ya da malzemelerin yerleştirilmesi gibi farklı birçok iş gerçekleştirilebilir [2]. Bu işleri gerçekleştirmek amacıyla yükleyici kepçeler, forklift çatalları, tomruk yükleyici vs. gibi ataşmanlar yükleyici mekanizma grubu ile çalışırken, kazıcı kepçeler, polip, burgu, kırıcı vs. ataşmanlar ise kazıcı mekanizma grubu ile çalışır. Bu ataşmanlar genel kullanım amaçlı olup diğer ataşmanlara oranla daha sık tercih edilirler [3]. Ataşmanların kazıcı yükleyici makinelerde kullanımı Şekil 1’de gösterilmiştir.

Şekil 1’de gösterilen ataşmanlar kazıcı ve yükleyici mekanizma gruplarında çok sık kullanım alanı olan ataşmanlardır [4]. Fakat bu tip ataşmanların yanı sıra bir de işe özel ataşmanlar bulunmaktadır. Özel ataşmanlar genel kullanım amaçlı değil de belirli bir işin daha kolay

ve kısa sürede yapılabilmesi için tasarlanan ataşmanlardır. Bu tip ataşmanlardan biri de kazıcı kepçe ile çalışan çene ataşmanlarıdır.



Şekil 1. Ataşmanların kazıcı yükleyici makinelerde kullanımı

Günümüzde rekabetin arttığı, zaman ile yarışıldığı, iş bitirme sürelerinin yakıt tüketimi, işletim giderleri, makine bakım giderleri ile doğru orantılı olduğu iş makineleri sektöründe özel ataşman kullanımının gelişmesi, geniş kullanım alanı olan kazıcı kepçe ile kullanılan çene ataşmanlarının da gelişmesinde büyük rol oynamıştır. Bu ataşmanlar, malzemelerin tutulup yer değiştirilmesi, malzemelerin kavranması gereken iş tanımları için özel olarak tasarlanmış ataşmanlardır.

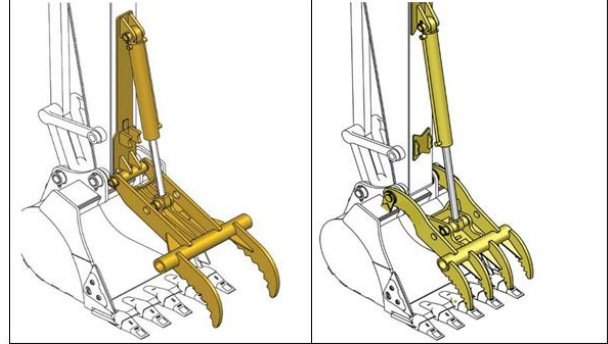
Mekanik ve hidrolik olmak üzere genel olarak iki tip kazıcı kepçe ile çalışan çene ataşmanı bulunmaktadır. Mekanik çeneler (Şekil 2) herhangi bir hidrolik tertibat olmaksızın kazıcı kepçeler ile çalışabilen ataşmanlardır. Genelde ilgili komponente kaynatılarak ya da montajlanarak iş makinelerine malzemeleri tutabilme özelliği kazandırılır [5]. Maliyeti düşük olmasına karşın malzemelerin kavranması sadece kazıcı kepçenin hareketi ile gerçekleştirildiği için hidrolik tip çeneler kadar verimli değildir [6].



Şekil 2. Mekanik tip çeneler

Hidrolik çeneler makine üzerine kurulan hidrolik sistemden tahrik olarak bünyesinde bulundurduğu silindire hareket verir ve çenenin açılıp kapanması sağlanır (Şekil 3). Böylece operatör, kabininden çıkmaksızın kapasitesinin mümkün olduğu farklı boyutlardaki her türlü malzemeyi rahatça kavrayabilmektedir. Hem kazıcı kepçenin hem de hidrolik çenenin ayrı ve birbirinden bağımsız iki farklı silindir ile çalışmaları malzemelerin kavranabilmesinde operatöre büyük bir kolaylık sağlamaktadır [7]. Operatör kazıcı kepçeyi sabit pozisyonda tutarak sadece hidrolik çenenin hareketi ile çalışabilir ya da hem kazıcı kepçe hem de hidrolik çenenin ikisini birden hareket ettirerek çalışabilir. Bu tip çenenin de hareket edebildiği

çalışma tarzı diğer çene tiplerine kıyasla işi daha kısa sürede bitirmeye olanak sağlar.



Şekil 3. Hidrolik tip çeneler

Hidrolik çenelerin kullanılabilmesi için makine üzerinde buna uygun bir hidrolik tesisatın bulunması ya da çene ile birlikte gerekli olan bu hidrolik tesisatın makine üzerine kurulması gerekmektedir. Genel olarak makinedeki uygun bir noktadan basınç ve diğer bir noktadan da tank hattı olmak üzere iki hat makineye takılan hidrolik çenedeki silindire beslenir. Böylece hidrolik çene silindirine hareket verilmiş olur [8]. Hidrolik tip çenelerin en büyük dezavantajı tüm bu hidrolik tesisat ve hidrolik silindirin sisteme getirdiği maliyettir. Ayrıca bakım gerektirmeyen, sadece yağlama periyotlarında silindirin her iki uç yataklarının yağlanması yeterli olacaktır. Böylece ilk yatırım maliyeti dışında makineye ek bir maliyet getirmemiş olacaktır. Mekanik tip çeneler ile bu yönden kıyaslandığında hidrolik tip çeneler dezavantajlıdır. Bu noktada, her iş makinesinde olmamak ile beraber makine üzerinde kazıcı mekanizma grubu üzerinde burgu, makas vs. gibi ataşmanların çalışmasını sağlayacak hidrolik tesisat bulunuyorsa hidrolik çene ataşmanını da çalıştırabilmek için bu hat kullanılabilir. Dolayısıyla eğer makine üzerinde böyle bir hidrolik tesisat varsa mekanik tip çeneler ile hidrolik tip çeneler arasındaki maliyet farkı ciddi miktarda azalacaktır. Hidrolik tip çenelerin en büyük avantajı ise verimliliğidir. Operatör hidrolik çeneye de verdiği hareket ile malzemeleri kolayca kavrayabilecek ve çok daha kısa bir süre içerisinde mevcut işini bitirebilecektir. Bu tip çenelerin, malzemelerin kavranması esnasında manevra kabiliyeti çok yüksektir. Böylece kaya yerleşimi, yıkım, arazi temizleme, orman çalışmaları, tomruk yüklemeleri, hurdacılık vs. gibi geniş kullanım alanlarında daha kısa sürede iş tamamlama ve buna bağlı olarak düşük makine yakıt tüketimi, düşük işçilik ücretleri ve işletim giderleri, uzun vadede daha seyrek makine bakım giderleri gibi ciddi avantajlar sağlayacaktır [9]. Şekil 4'te ataşmanın kullanıldığı çalışma alanlarından örnekler görülmektedir.

Özellikle kazıcı kepçe ile çalışan hidrolik çenelerin tasarım kriterleri ile ilgili standart bulunmamaktadır. Fakat bu çalışmada tasarımı yapılacak olan hidrolik çene, kullanım şekli ve amacı itibarı ile nesne taşıma uygulamalarında kullanılmaktadır.



Şekil 4. Kazıcı kepçe ile çalışan çenelerin kullanım alanları

İş makinelerinde çene, polip, kanca vs. gibi ataşmanlar malzemelerin kavranıp yer değiştirme ilkesine göre çalıştığı için DIN EN 474-4 standardı 5.5.3.3. kazıcı tarafı nesne taşıma uygulamalarına (Object Handling Application) uymak zorundadır [10]. Bu standart genel olarak makine kaldırma ağırlığı, makine hidroliği kaldırma kapasitesi ve ilgili ataşmanla birlikte nesne taşıma uygulamalarında gereken güvenlik gereksinimlerini kapsamaktadır. Hidrolik çene ataşmanı ile nesne taşıma uygulamaları yapıldığı için makine üzerinde istenen güvenlik gereksinimleri bulunmalıdır. Bu zorunlu güvenlik gereksinimleri ise, makine maksimum kaldırma kapasitesi 1000 kg veya daha fazla; veya devrilme momenti 40000 Nm' ye eşit veya daha fazla olan makinelerde:

1- Deklare edilen kaldırma ağırlığı veya devrilme yükünün aşıldığı durumlarda sesli ya da görsel bir ikaz cihazının operatörü uyarması gerekmektedir. Bu uyarı cihazı nesne taşıma uygulamaları dışındaki kullanımlarda devre dışı bırakılabilir olmalıdır. Bu cihazın aktive edildiği de operatöre açık bir şekilde belirtilmelidir. Aktif/deaktif işlemlerini sağlayan tuşun konumu ise operatörün konfor bölgesi içerisinde olmalıdır. Nesne taşıma işlemi esnasında kontrol cihazının(tuşun) yanında ikaz cihazının aktive olduğunu belirten bir uyarıcı işaret olmalıdır [10].

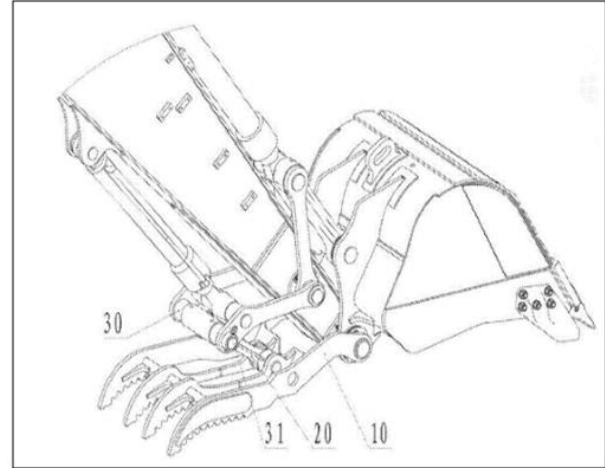
2- Ayrıca kazıcı mekanizma grubunda bulunan kaldırıcı (bom) ve devirici (arm) silindir üzerlerinde hortum patlama valfleri olmalıdır. Devirici silindir üzerindeki kontrol cihazı kolun makineden uzaklaşıp yükselmesini sağlayan basınç tarafına konumlandırılmalıdır [10].

Tüm bu güvenlik gereksinimleri ataşmanın çalıştırılması için seçilen Hidromek marka kazıcı yükleyici makinelerinde farklı ataşmanlar ile yapılan nesne taşıma uygulamaları olduğu için makine üzerinde ilgili ataşmanla birlikte verilebilmektedir. Tasarımı yapılacak olan hidrolik çene ataşmanı kaldırma kapasitesi makinenin kaldırma kapasitesi ve devrilme yükü hesaplarının üstünde yapılmayacağı için makine bu ataşman ile birlikte kullanıldığında DIN EN 474-4 standardına uygun bir şekilde çalışacaktır.

Literatür çalışmalarında ayrıca ilgili patentler incelenmiştir. Böylece bu alan ile ilgili yenilikler, ataşman ile ilgili sorunlar ve dezavantajlara farklı

yaklaşım ve çözüm önerileri ortaya koyulmuştur. Ayrıca bu çalışmada tasarımı yapılacak olan hidrolik tip çenenin tasarım kriterlerini oluşturmasına katkı sağlamıştır.

CN105256851A numaralı patent incelemesi (Şekil 5) [11].



Şekil 5. CN105256851A numaralı patent

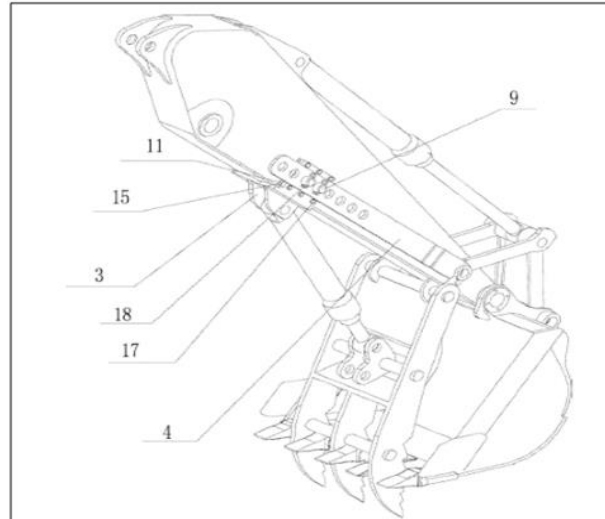
Avantajlar:

Farklı bağlantı yapısı ve silindir ile itici bağlantının farklı noktalarda çalışması ile çenenin daha fazla açma kapama açısına sahip olması,

Dezavantajlar:

- Hidrolik silindirin makine komponentine kaynaklı montajlanması,
- Bağlantı noktalarının nispeten fazla olması ile ayrıyeten maliyet yükü,
- Çenenin tek parça olması, ileride yaşanabilecek çene uçlarının kırılması ya da hasar görmesi durumunda gövdenin tamamen değişmesi gereken ve farklı malzemeler için farklı tip uç kullanımına uygun olmaması.

CN203383252U numaralı patent incelemesi (Şekil 6) [12].



Şekil 6. CN105256851A numaralı patent

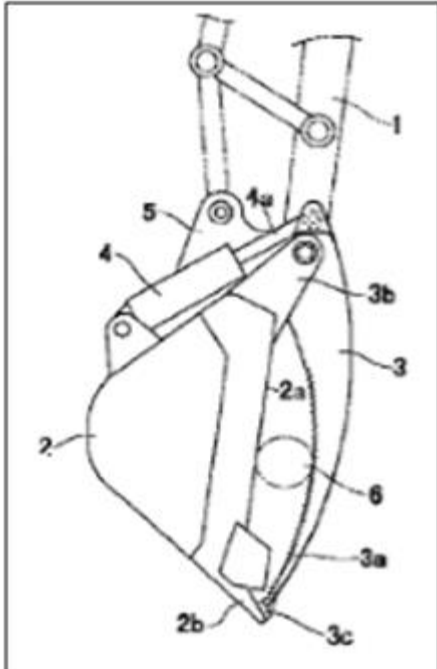
Avantajlar:

- Silindirin montajı için makine üzerinde kaynaklı ya da farklı tip tahribata ihtiyaç duyulmaması,
- Silindirin makine üzerindeki piston tarafı bağlantı noktasının değiştirilebiliyor olması,
- Farklı bağlantı noktaları kullanılarak çenenin toplam açma kapama açısının değiştirilebiliyor olması,
- Silindirin çene üzerindeki mil tarafı bağlantı noktasının da iki farklı alternatifinin olması. Böylece silindirin piston tarafı bağlantı noktası değişiyorken mil tarafında da ayrıca farklı bağlantı noktası kullanılarak mevcut arkalık bağlantı noktasında dahi çene açma kapama açısının değiştirilebiliyor olması.

Dezavantajlar:

- Silindir montajının makine üzerinde kaynaktan bağımsız bir şekilde montajlanabilmesi başarılı olmuşken, çenenin bağlantı noktası için makine üzerine kaynaklı bağlantı noktalarının eklenmesi. Böylece makine, çenenin montajı için kaynak gerekliliğinden kurtarılamamıştır.
- Çenenin tek parça olması, ileride yaşanabilecek çene uçlarının kırılması ya da hasar görmesi durumunda gövdenin tamamen değişmesi gerekecek ve farklı malzemeler için farklı tip uç kullanımına uygun olmaması.

JP2003213718A numaralı patent incelemesi (Şekil 7) [13].



Şekil 7. CN105256851A numaralı patent

Avantajlar:

- Hidrolik çene atışmanını tamamen makineden bağımsız kılarak kazıcı kepçe üzerinde konumlandırılmıştır. Böylece makine üzerinde yapılması gereken işlemler ortadan kalkmıştır.

Dezavantajlar:

- Hidrolik çene atışmanı tamamen kazıcı kepçeye bağımlı hale getirilerek, müşterinin sonradan böyle bir atışmanı istemesi durumunda kazıcı kepçe ile birlikte tedarik etmek zorunda kalması.
- Operatörün hidrolik çene atışmanı ile işi bittikten sonra üzerindeki kepçe ile kazı vs. gibi işlemleri uygun bir şekilde yapabilmesi için silindir, çene vs. tüm bağlantıları ayrı ayrı sökmeye gerekecek.
- Çene tipi tek tip malzeme kavranabilmesi için tasarlanmıştır. Bu tip çene ile genelde yuvarlak kesitli, tomruk vs. gibi malzemelerin kavranması uygundur.
- Silindir kazıcı kepçe üzerinde konumlandırıldığı için buraya kadar kurulması gereken hidrolik tesisatlar malzeme ile çalışma alanına çok yakın kalacaktır. Bu da çalışma esnasında hidrolik hortumların malzeme ya da bir cisme teması ile zarar görmesine yol açabilir.

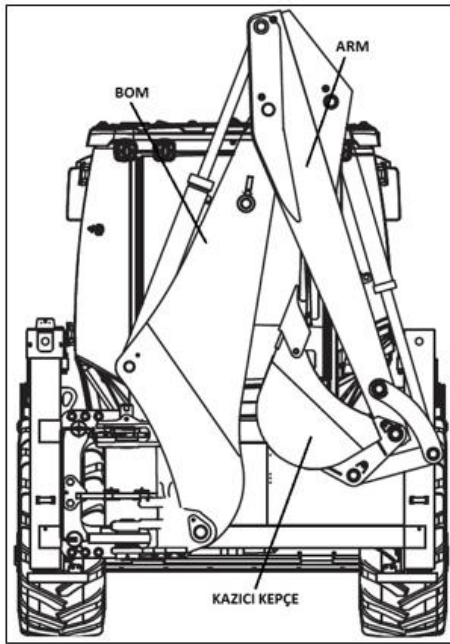
MATERYAL ve YÖNTEM

Bu çalışmada kaya yerleşimi, yıkım, arazi temizleme, orman çalışmaları, tomruk yüklemeleri, hurdacılık vs. gibi çalışma alanı oldukça geniş olan bir hidrolik çene atışmanının tasarımı yapılmış, tasarım hesapları, analizleri ile üretimi ve testleri gerçekleştirilmiştir. Bu başlıklar altında rakip firmalar, ilgili patentler ve farklı atışman üreticileri incelenerek piyasadaki bu tip atışmanların avantaj ve dezavantajları araştırılmıştır. Buna göre farklı ve birçok avantajı bünyesinde bulunduran tasarım kriterleri belirlenmiş, bağlantı noktaları belirlenerek çenenin hareket yolu, açılma ve kapanma açıları vs. gibi bilgilerini içeren kinematik iskeleti oluşturulmuştur. Makinenin kaldırma kapasitesinden yola çıkarak atışmanın kapasitesi belirlenmiştir. Daha sonra, belirlenen bu kinematığı ve kapasiteyi sağlayacak olan silindir hesapları ve tasarımı yapılmıştır. Kuvvet hesapları yapılarak piyasada oldukça geniş kullanım alanı bulunan SAE S355J2C+N ve aşınmaya dayanıklı saclar gibi atışmana ait komponentlerin malzeme seçimi yapılarak ana gövde oluşturulmuştur. Creo 4.0 yazılımı ile tasarım tamamlanmıştır. Tasarımın tamamlanması ile birlikte hedeflenen sonuçlara ulaşan atışmanın MSC Marc&Mentat yazılımı ile sonlu elemanlar yöntemi analizi yapılmış ve yapılan tasarım doğrulamasının ardından prototip üretimi gerçekleştirilmiştir. Atışman üzerinde belirlenmiş bölgelere gerinim-ölçerler montaj edilerek belirlenmiş yükler altında davranışı incelenmiş ve ticari olarak kullanılacak bir ürünün ortaya çıkması sağlanmıştır.

Tasarım

Literatür araştırmasının tamamlanması ile birlikte atışmanın teknik özelliklerine karar verilmiştir ve öncelikle kinematik analizinin gerçekleştirilebilmesi için belirlenen teknik özellikleri sağlayan mekanizma noktaları ve mekanizmayı oluşturan uzuvların uzunlukları belirlenmiştir.

Mekanizma noktaları belirlenirken çenenin hareketini kısıtlayacak olan ve makinenin kazıcı mekanizma grubu ile maksimum yükü kaldırabileceği pozisyon dikkate alınmıştır. Bu pozisyon, hacim kısıtı olarak makineye ait kaldırıcı kol (bom) ve devirici kol (arm) uzuvlarının birbirine doğru kapalı olduğu pozisyon iken, kaldırma ağırlığı kısıtı olarak da bom ve kolun makineye en yakın olduğu yürüyüş pozisyonudur. Makinenin bu pozisyonu Şekil 8’de gösterilmiştir. Bu pozisyonda dahi hidrolik çene sorunsuz bir şekilde açılıp kapanabilmeli, malzemeyi kavrayabilmelidir [14].

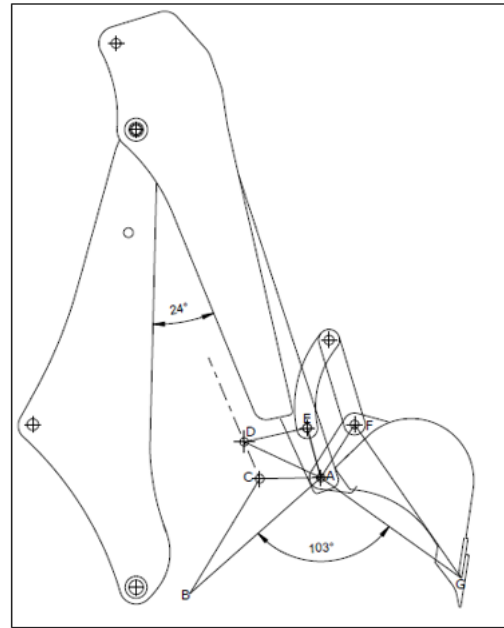


Şekil 8. Makine bom ve kolun kapalı olduğu pozisyon (yürüyüş pozisyonu)

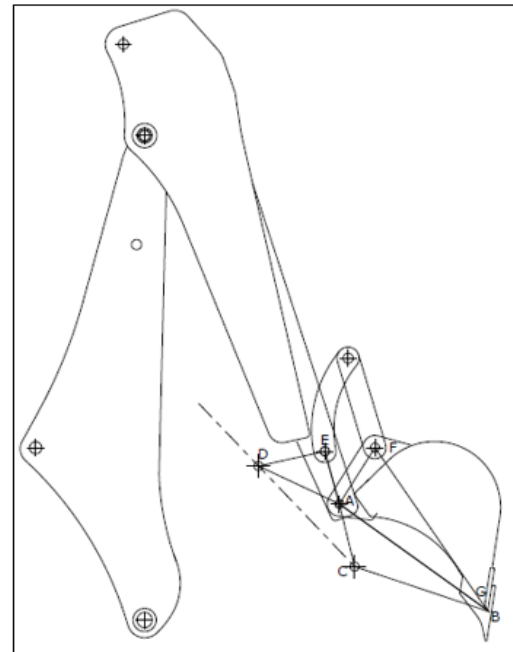
Çenenin açılma açısının yanı sıra makineden bağımsız olarak çalışabilmesi için seçilen silindir bağlantı şeklinin dezavantajı olarak, silindir de çenenin hareketine bağımlı olarak makine üzerinde bir yay boyunca hareket edecektir. Silindirin hareketi için de kısıtlayıcı pozisyon kolun tam kapalı olduğu pozisyonudur. Tüm bu kısıtlara göre ataşmanın ilk mekanizma noktaları ortaya çıkarılmıştır. Buna göre iki boyutlu yapılan çalışmalarda çenenin açık ve kapalı pozisyonları Şekil 9 ve Şekil 10’da gösterilmiştir.

Mekanizma noktaları belirlendikten sonra hidrolik çenenin kaldırma kapasitesi ve kuvvet hesapları yapılmıştır. Bunun için tasarımı yapılacak olan hidrolik çenenin uygulanacağı kazıcı yükleyici makinenin maksimum yükü kaldırabildiği pozisyonda, çenenin de bu yükü taşıyabilmesi hedeflenmiştir. Makinenin maksimum ağırlığı kaldırabildiği pozisyonda çenenin de bu ağırlığı kaldırabilmesi, diğer bütün pozisyonlarda ağırlık maksimum değerinin üstüne çıkamayacağı için çene rahat bir şekilde çalışacaktır. Böylece makine daha yüksek bir ağırlığı kaldırabiliyorken çenenin kaldırma kapasitesinin daha az olmasından dolayı düşük ağırlıklarda çalışması gerekmeyecek, makinenin

kaldırma kapasitesinden taviz verilmeyecek ve verimlilik artacaktır.



Şekil 9. Çenenin açık pozisyonu

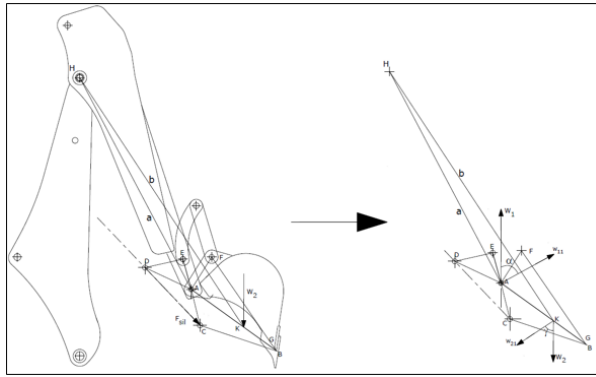


Şekil 10. Çenenin kapalı pozisyonu

Kazıcı yükleyici makinelerde kazıcı mekanizma grubunda ağırlık kaldırma işlemi sadece kolun hareketi ile kaldırma, sadece bomun hareketi ile kaldırma ve son olarak her iki uzvun da hareketi ile kaldırma olmak üzere üç farklı şekilde yapılabilir. Kaldırma kapasitesi hesaplarında sadece kol ya da sadece bom ile yapılan kaldırma hareketi kullanılır. Hidromek marka kazıcı yükleyici makinelerde kazıcı mekanizma grubunda bu her iki kaldırma tipi için de maksimum kaldırma kapasiteleri incelenmiştir. Sadece kolun hareketi ile

kaldırma tipinde, kol ve bom tamamen kapalı pozisyonda moment kolu en düşük uzunlukta olduğu için makine en yüksek ağırlığı bu pozisyonda kaldırabilmektedir [15].

Yükün maksimum geleceği pozisyonun seçiminden sonra, bu pozisyonda Hidromek marka kazıcı yükleyici makinelerin kazıcı mekanizma grubu maksimum kol kaldırma kapasitesinden yola çıkılarak, makine bu maksimum ağırlığı hidrolik çene ile birlikte taşıdığına hidrolik çeneye gelen ağırlık hesaplanmıştır. Maksimum kuvveti kol kaldırma pozisyonunda kaldırabildiği için sadece kol dönü noktası (H noktası) hareket ederek kaldırma sağlanacaktır. A noktasında kaldırma kapasitesi makine katalog değerinde 2800 kg olarak verilmektedir. Buna göre kazıcı kepçe içerisindeki malzeme hidrolik çene ile kavrandığında K noktasından çene üzerine kuvvet uygulanmaktadır. Bu pozisyon Şekil 11'de gösterilmiştir. K noktasına uygulanan kuvvet hesaplanmıştır.



Şekil 11. Makine kaldırma kapasitesine göre çene kapasitesinin belirlenmesi

Burada:

$$HA \text{ uzunluğu; } a = 2062 \text{ mm}$$

$$HK \text{ uzunluğu; } b = 2574 \text{ mm}$$

$$\alpha = 62^\circ$$

$$\gamma = 56^\circ$$

$$W_1 = 2800 \text{ Kg} = 27468 \text{ N}$$

$$W_{11} = W_1 \cos \alpha = 1314,52 \text{ Kg} = 12895,44 \text{ N}$$

$$W_{21} = W_2 \cos \gamma$$

Dönme noktası olan H noktasına göre moment alınırsa:

$$\sum M_H = 0$$

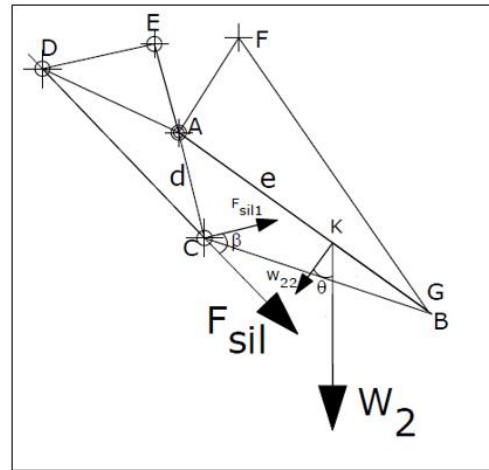
$$W_{11}a = W_{21}b$$

$$W_{21} = 1053 \text{ Kg} = 10330,38 \text{ N}$$

$$W_2 = 1883 \text{ Kg} = 18472,23 \text{ N}$$

Hidrolik çene üzerine 18472,23 N kuvvet geleceği görülmüştür.

Hidrolik çene kapalı iken kazıcı kepçe içerisinde kepçenin malzeme alabilen alanın ortasından (K noktası) çeneye uygulanan kuvvet en kötü şartlar temel alındığında 18472,23 N olarak hesaplanmıştır. Buradan yola çıkarak bu kuvvete karşı hidrolik çeneye hareket veren silindirin üretmesi gereken kuvvet hesaplanacaktır (Şekil 12) [16].



Şekil 12. Silindir kuvvetinin belirlenmesi

Burada:

$$AC \text{ uzunluğu; } d = 319 \text{ mm}$$

$$AK \text{ uzunluğu; } e = 556 \text{ mm}$$

$$\beta = 51,3^\circ$$

$$\theta = 35,8^\circ$$

$$W_2 = 1883 \text{ Kg} = 18472,23 \text{ N}$$

Dönme noktası olan A noktasına göre moment alınırsa:

$$\sum M_A = 0$$

$$W_{22}e = F_{sil1}d$$

$$W_2 = 1883 \text{ Kg} = 18472,23 \text{ N}$$

$$W_{22} = W_2 \cos \theta = 1527,23 \text{ Kg} = 14982,15 \text{ N}$$

$$F_{sil1} = 26113,04 \text{ N}$$

$$F_{sil} = F_{sil1} / \cos \beta$$

$$F_{sil} = 41764,64 \text{ N}$$

Hidrolik çene için gerekli olan silindir kuvveti 41764,64 N olarak hesaplanmıştır. Hidromek marka kazıcı yükleyici makinelerin hidrolik çalışma basıncı 230 bar'dır. Buradan yola çıkarak gerekli olan silindir piston çapı hesabı için [16]:

$$P = 230 \text{ bar} = 23 \text{ MPa}$$

$$F = 41764,64 \text{ N}$$

$$F = PA_{piston}$$

$$A_{piston} = 1815,85 \text{ mm}^2$$

$$A_{piston} = \pi r_{piston}^2$$

$$r_{piston} = 24,04 \text{ mm}$$

$$D_{piston} = 48,08 \text{ mm}$$

Gerekli kuvveti oluşturması için piston çapı 48,08 mm olarak hesaplanmıştır. İmalat kolaylığı ve emniyetli bölgede kalınması açısından piston çapı 50 mm tasarlanacaktır.

Silindirin itme kuvvetini oluşturacak olan piston alanının tayininden sonra çekme kuvvetini belirleyen mil çapı flambaj hesapları yapılarak 30 mm olarak hesaplanmıştır. Mil çapları ayrıca 20 ve 25 için hesaplanmış fakat flambaj için uygun olmadığı için, emniyetli olan 30 mm mil çapı tasarımı yapılmıştır.

Flambaj hesabı için şuana kadar belirlenen silindir boyutları [17]:

$$\text{Silindirin açık boyu: } s_1 = 1190 \text{ mm}$$

$$\text{Silindirin kapalı boyu: } s_2 = 708 \text{ mm}$$

$$L_{ef} = 646 \text{ mm}$$

$$D_{piston} = \varnothing 50 \text{ mm}$$

$$D_{mil} = \varnothing 30 \text{ mm}$$

$$A_{piston} = \pi r_{piston}^2 = 1963,49 \text{ mm}^2$$

$$A_{mil} = \pi r_{mil}^2 = 706,85 \text{ mm}^2$$

Mil malzemesi olarak 20MnV6, C1050 ve Ck45 olmak üzere üç alternatif belirlenmiş olup bu üç malzemenin akma mukavemetleri sırasıyla:

$$\sigma_{20MnV6} = 450 \text{ MPa}$$

$$\sigma_{C1050} = 340 \text{ MPa}$$

$$\sigma_{Ck45} = 310 \text{ MPa}$$

Tüm bu alternatif malzemeler arasında akma mukavemeti en düşük Ck45 malzeme seçilerek hesap yapılmıştır. Ayrıca elastisite modülü $E = 210000 \text{ MPa}$ alınmıştır. Ayrıca c sabiti 1 alınmıştır.

Atalet yarıçapının hesabı için:

$$\text{Atalet yarıçapı} = K = \sqrt{(r_{mil}^2/2) + (L_{ef}^2/2)}$$

$$K = 186,78 \text{ mm}$$

$$L_{ef}/K (\text{Gerçek}) = 3,45$$

$$L_{ef}/K (\text{Kritik}) = \sqrt{(2\pi^2 CE)/\sigma_{Ck45}}$$

$$L_{ef}/K (\text{Kritik}) = 115,63$$

$L_{ef}/K (\text{Kritik}) > L_{ef}/K (\text{Gerçek})$ olduğu için F_{kritik} hesabında Johnson formülü kullanılacaktır.

$$F_{kritik, johnson} = [\sigma_{Ck45} - \frac{[\sigma_{Ck45} L_{ef}]^2}{2\pi K CE}] A_{mil}$$

$$F_{kritik, johnson} = 219025,48 \text{ N}$$

$$\text{Emniyet katsayısı} = s = 3$$

$$F_{uygun} = \frac{F_{kritik}}{s}$$

$$F_{uygun} = 73008,49 \text{ N}$$

$$\text{Makine çalışma basıncı} = 23 \text{ MPa}$$

$$F = PA_{piston}$$

$$F = 45160,27 \text{ N}$$

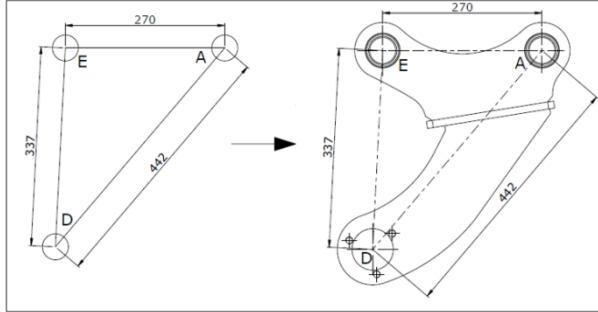
$$\frac{F_{uygun}}{F} > 1 \text{ olması gerekmektedir.}$$

$$\frac{F_{uygun}}{F} = 1,6 > 1 \text{ olduğu için } \varnothing 50 \text{ mm piston çapı için } \varnothing 30 \text{ mm mil çapı uygundur.}$$

Silindir boyutları hesaplandıktan sonra sızdırmazlık elemanları seçilerek silindir kompleksi oluşturulmuştur. Daha sonra ayrı ayrı bağlantı elemanı, ana gövde ve uç tasarımı yapılmıştır.

Bağlantı elemanı tasarımı için:

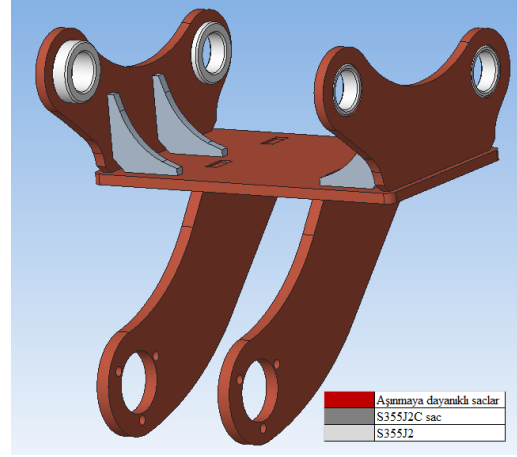
Bağlantı elemanı, hidrolik çene ataşmanın uygulanacağı makine üzerinde herhangi bir tahribat oluşturmamak için çene ile makine arasında bağlantı görevi yapacak olan elemandır. A ve E noktaları makine üzerine bağlanırken, D noktası hidrolik silindir bağlantı noktasıdır (Şekil 13).



Şekil 13. Bağlantı elemanının hesaplanan sınırlar ile mukayesesi

Bağlantı elemanı, SAE S355J2C+N saclar, aşınmaya dayanıklı saclar ve S355J2 dolu malzemeler kullanılarak tasarlanmıştır (Şekil 14). Burada E ve A noktasını bünyesinde taşıyan sacın yekpare “U” bükümü şeklinde tasarlanması düşünülmüştür. Fakat bu bölgede analizlerden okunan yüksek gerilme değerleri sonucu mekanik özellikleri daha yüksek olan aşınmaya dayanıklı saclar ile tasarlanmıştır. Aşınmaya dayanıklı saclar daha sert oldukları için “U” büküme elverişli değildir. Dolayısıyla burada toplam üç sacın birbirine kaynatılması ile “U” kesit oluşturulmuştur. Aşınma kaygısı değil de mekanik özelliklerin daha üstün olmasından dolayı aşınmaya dayanıklı saclar bu bölgede tercih sebebidir. Tablo 1’de görüldüğü üzere, aşınmaya dayanıklı sacların sahip olduğu sertlik değeri bu sacları büküme elverişsiz kılar (özellikle 90° ve daha dar bükümlerde), S355J2C+N sacların büküme elverişli

olduğu görülmektedir. Kaynaklanabilirlik özellikleri yaklaşık olarak aynıdır.

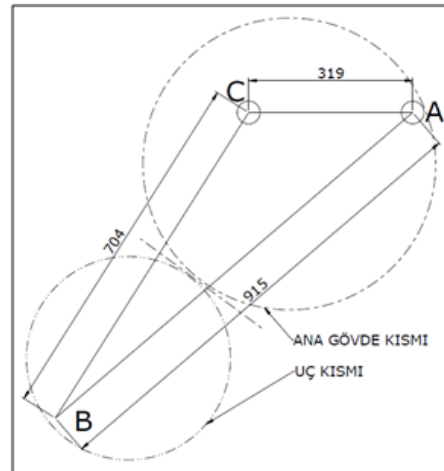


Şekil 14. Bağlantı elemanı tasarımı

Tablo 1. Malzeme Özellikleri

Malzeme/ Özellikler	Sertlik (HBW)	Akma Mukavemeti (MPa)	Kalınlık (mm)
S355J2C+N Saclar	146-187	355	<16
Aşınmaya Dayanıklı Saclar	425-475	1250	2,3-80

Bağlantı elemanı tasarımından sonra çene tasarlanmıştır. Burada piyasadaki genel kullanımın aksine değiştirilebilir ve 180° döndürülerek malzeme sökme işlemleri için ripper ataşmanı olarak da kullanımı amaçlanarak bu konuda 2019/02575 numaralı patent başvurusu yapılmıştır. Böylece çene, ana gövde ve uç olarak iki parça halinde tasarlanmıştır (Şekil 15).

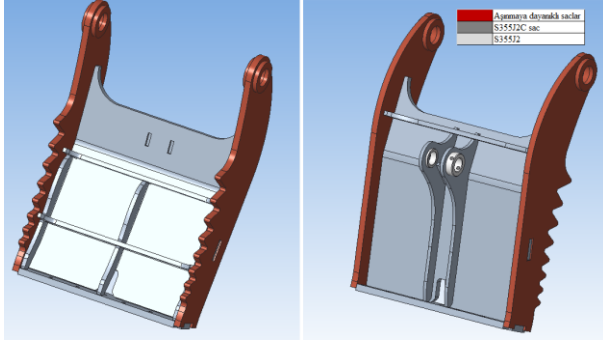


Şekil 15. Çene tasarımının iki parça olarak yapılması

Ana gövde tasarımı için:

Ana gövde, en başta belirlenen mekanizma noktalarına uyacak şekilde boyutlandırılarak üç boyutlu olarak tasarlanmıştır. Tasarım Şekil 16’da görülmektedir. Malzeme seçimi; gövdenin ana yapısı S355J2C+N sac,

aşınmaya müsait bölgeler aşınmaya dirençli sac ve dönme noktası S355J2 dolu malzeme olarak üretimi planlanmıştır.

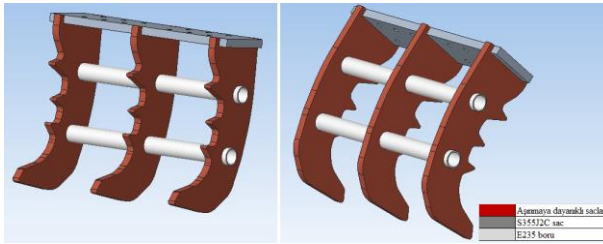


Şekil 16. Ana gövde tasarımı

Ana gövde üzerinde malzemenin kavranması esnasında malzeme ile sürekli temas halinde çalışacak olan parçalar aşınmaya dayanıklı sac ve malzemelerin kolay kavranması amacıyla kesim formunun dişli formda üretilmesi öngörülmüştür.

Uç tasarımı için:

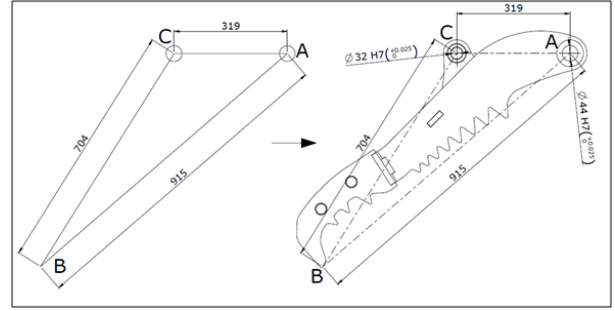
Ana gövdeye cıvatalı bağlantılar ile montajlanarak ana gövde ile birlikte çeneyi oluşturmaktadırlar (Şekil 17). Uzun montajlı tasarlanması ile birlikte tek tip malzemelerin taşınmasında değil de malzemeye göre uç değiştirilerek tüm malzemelerin taşınabilmesinde kullanılabilir. Çalışma şartlarında uç sürekli malzemeler ile temas halinde olacağından ve özellikle ripper atışmanı olarak kullanımda malzemenin yerinden sökülmesinde kullanılacağından ucun genel yapısı aşınmaya dayanıklı sac ile tasarlanmış ve bu saclar birbirleri ile EN 10305-3-E235 boru ile birbirleri arasında bağlanmıştır [18].



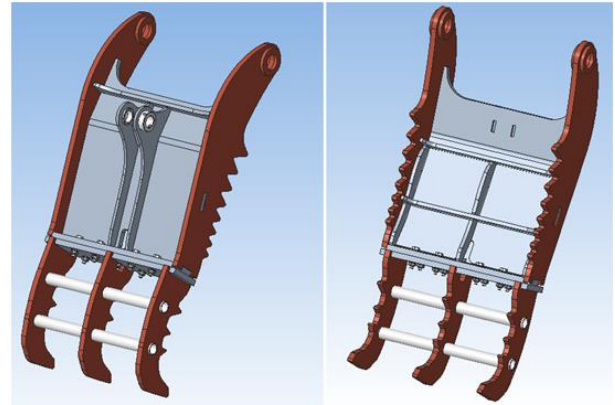
Şekil 17. Uç tasarımı

Uç tasarımında, ana gövde ile montajlandığında düzgün bir form izleyerek çeneyi oluşturması, yine sac kesim formuna verilen diş yapısı ile malzemenin kavranabilmesi ve uç kısmının hem malzemeyi kavrayabilmesi hem de çeneye ters montajlandığında ripper atışmanı olarak da çalışabilmesi için farklı bir kesim formuna sahip olması göz önünde bulundurulmuştur.

Ana gövde ve uç tasarımı ile birlikte çene yapısı ortaya çıkmıştır. Burada bağlantı noktalarının ve sınır noktalarının belirlenen mekanizma noktalarının ve sınırlarının içerisinde kalmasına dikkat edilmiştir (Şekil 18, 19).



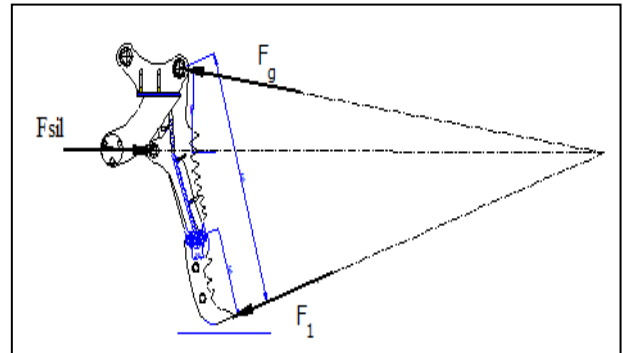
Şekil 18. Çene tasarımının hesaplanan sınırlar ile mukayesesi



Şekil 19. Çene tasarımı

Çene kompleksi için cıvata hesabı:

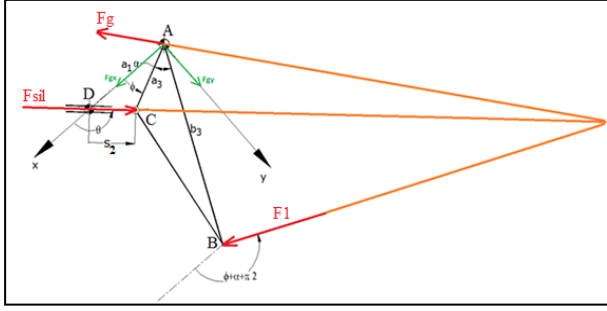
İlk olarak çene ile ucu birleştiren cıvata hesabı için bu bölgede serbest cisim diyagramı Şekil 20'deki gibi çizilmiştir. Çeneye etki eden 3 kuvvet vardır (ağırlık ihmal edilebilir). F_s silindir kuvveti $F_s=PA$ olarak daha önce hesaplanmıştı. Cisim kola bağlı olduğundan F_g etki-tepki kuvveti ve F_1 , çenenin uygulayabileceği maksimum kuvvet altında statik dengede olacaktır. F_1 çeneye dik olacak şekilde alınmıştır. Bu üç kuvvet altında dengede olduğunda cisme etki eden kuvvetler toplamı sıfır olmalı ve kuvvetler bir noktada kesişmelidir.



Şekil 20. Cıvata hesabı için serbest cisim diyagramı

$$F_{sil} + F_g + F_1 = 0$$

Ayrıca Şekil 21'deki gibi konum analizi yapılarak gerekli açılar ve boyutlar bulunmuştur.



Şekil 21. Kuvvetlerin ve harekete göre birbirine bağımlı açıların tayini

a_1 , a_3 , b_3 bilinen boyutlar, s ise pistonun konumudur. θ ve ϕ açıları cosinus teoremi kullanılarak bulunmuştur:

$$\phi = \cos^{-1} \left[\frac{a_1^2 + a_3^2 - s_2^2}{2a_1 a_3} \right]$$

$$\theta = \pi - \cos^{-1} \left[\frac{a_1^2 - a_3^2 + s_2^2}{2a_1 s_2} \right]$$

ϕ ve θ açıları bulunduktan sonra statik denge durumuna göre:

$$\sum F_x = 0 \quad \sum F_y = 0 \quad \sum M = 0$$

Denklemleri yazılırsa:

$$F_{sil} \cos \theta - F_1 \cos \left(\alpha + \phi + \frac{\pi}{2} \right) + F_{gx} = 0$$

$$F_{sil} \sin \theta - F_1 \sin \left(\alpha + \phi + \frac{\pi}{2} \right) + F_{gy} = 0$$

Sadeleştirilirse:

$$F_{sil} \cos \theta + F_1 \sin(\alpha + \phi) + F_{gx} = 0 \quad (1)$$

$$F_{sil} \sin \theta - F_1 \cos(\alpha + \phi) + F_{gy} = 0 \quad (2)$$

Ve moment denklemi yazılırsa:

$$F_{sil} a_3 \sin(\theta - \phi) - F_1 b_3 = 0 \quad (3)$$

3 numaralı denklem F_1 için çözülürse:

$$F_1 = F_{sil} \frac{a_3}{b_3} \sin(\theta - \phi)$$

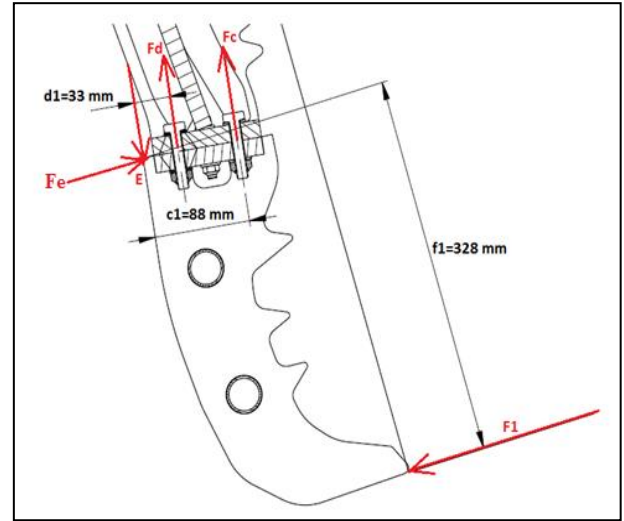
1 ve 2 numaralı denklemlerden:

$$F_{gx} = -F_{sil} \cos \theta - F_1 \cos \left(\alpha + \phi + \frac{\pi}{2} \right)$$

$$F_{gy} = -F_{sil} \sin \theta - F_1 \sin \left(\alpha + \phi + \frac{\pi}{2} \right)$$

$$F_g = \sqrt{F_{gx}^2 + F_{gy}^2}$$

Cıvatalara etki eden kuvvetleri bulmak için uç parçanın serbest cisim diyagramı Şekil 22'deki gibi çizilmiştir.



Şekil 22. Cıvatalara etki eden kuvvetleri bulmak için uç parçanın serbest cisim diyagramı

Etki eden F_1 kuvvetini dengede tutma sırasında bu uç parça saat yelkovanı yönünde E noktası etrafında dönmeye ve temas yüzeyinden sağdan sola doğru kaymaya çalışacaktır. Dönme sırasında cismin dengede durması için:

$$F_c c_1 + F_d d_1 = F_1 f_1$$

C ve D cıvata kuvvetleri birbirlerine tam eşit değildir. Aynı malzemeden yapıldıkları düşünülür ve parça yüzeyinin düz kalacağı varsayılarak her iki cıvata sırasında sehim:

$$\frac{\delta_D}{d_1} = \frac{\delta_C}{c_1} \quad (3.3)$$

Bu iki sırada cıvatalar aynı boyutta ve özellikte ise (Elastisite modülü, E, alan A ve uzunluk L aynı)

$$\frac{F_D}{d_1} = \frac{F_C}{c_1} \quad (3.4)$$

Moment denge denklemi ve bu denklem kullanılarak cıvata sıralarına gelen toplam F_C ve F_D çekme kuvvetleri hesaplanmıştır. (Her bir cıvataya gelen kuvvet bu sayının cıvata sayısına bölünmesi ile elde edilmiştir.)

Cıvataların kesmeye çalışması istenmez. Bu durumda cıvatalara ön gerilim verilmeli ve kesme yerine sürtünme kuvveti ile bu kuvvet taşınmalıdır. Bu durumda her bir cıvataya N kadar bir ön gerilim kuvveti verilir ise oluşacak olan sürtünme kuvveti: (cıvata sayısı n kabul edilmiştir.)

$$\mu_s n N = F_1$$

μ_s sürtünme katsayısı iki çelik yüzey arasındaki statik sürtünme katsayısı olan 0,6 alınmıştır. Buradan N ön gerilme kuvveti de bulunduktan sonra C ve D sıralarına dizilmiş dörder adet cıvata, bir cıvataya gelen maksimum kuvvet (F_{C1} veya F_{D1}) ile ön gerilme kuvvetinin toplamı, kullanılacak olan cıvatanın kesit alanına bölünerek gerilme bulunmuştur. Bu gerilme emniyet katsayısı 3 alınarak cıvatanın akma mukavemetinden daha düşük olması beklenmiştir.

$$\sigma = \frac{F_{C1} + N}{A}$$

Cıvata kesit alanı belirlenirken cıvata diş dibi çapı esas alınmıştır. Burada cıvata için yapılan hesaplara uyduğu için altı köşe başlı DIN 933 M12x50-10.9 cıvata kullanılmıştır. Bu cıvata için:

$$\sigma_{akma} = 900 \text{ MPa}, \sigma_{çekme} = 1000 \text{ MPa}$$

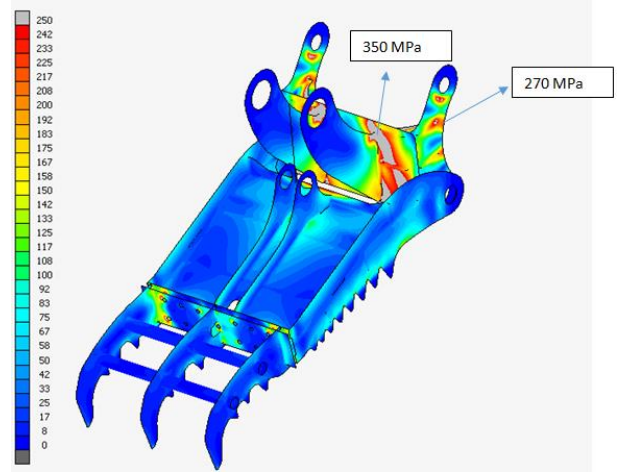
Analiz

Hidrolik çeneye ait tüm parçaların mukavemet hesaplamaları sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak MSC Marc&Mentat yazılımı vasıtası ile gerçekleştirilmiştir. Hidrolik çenenin yükleme şartı belirlenerek çene üzerine gelen yükler tespit edilmiştir. Çene makine üzerinde iken en açık, orta ve en kapalı konumlar dikkate alınmak üzere analizler gerçekleştirilmiştir. Analiz bilgileri ise aşağıdaki gibidir:

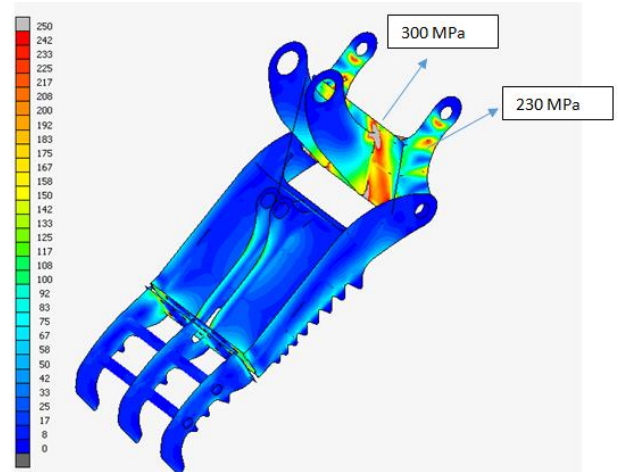
- Elastisite Modülü: 210000 MPa
- Poisson Oranı: 0,3
- Yoğunluk: 7,85 gr/cm³
- Çalışma basıncı: 230 bar
- Sınır Şartları: Ataşmanın makine kolu ile bağlantı noktasında tüm noktalardan sabitlenmiş, sadece rotasyon açık bırakılmıştır.
- Geometrik özellikler: Kabuk elemanlarla modellenmiştir.
- Eleman Tipi: quad4
- Eleman Sayısı: 20160
- Eleman Büyüklüğü: 9-10 mm

Analiz sonucunda hesaplanan gerilme değerleri kullanılan malzemelerin akma gerilmesinden küçük

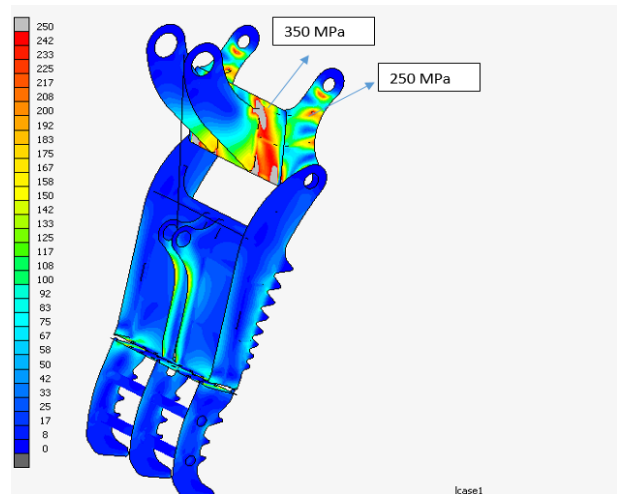
olduğu için yapılan tasarımın emniyetli olduğu belirlenmiştir. Elde edilen gerilme haritaları Şekil 23-25'te verilmiştir.



Şekil 23. Hidrolik çene silindiri en kapalı pozisyondayken çene üzerindeki gerilme haritası (Kapalı konum) (Von Mises)



Şekil 24. Hidrolik çene silindiri 241 mm açık pozisyondayken çene üzerindeki gerilme haritası (Orta konum) (Von Mises)



Şekil 25. Hidrolik çene silindiri en açık pozisyondayken çene üzerindeki gerilme haritası (Açık konum) (Von Mises)

Böylece 230 bar çalışma basıncında uç ile dönme eksenindeki doğrultuya sürekli dik olacak şekilde koparma kuvveti uygulanmıştır. Hidrolik çene silindirin en kapalı konumdan en açık konuma gelene kadar gerilmeler incelenmiştir. Özellikle hidrolik çene silindiri en kapalı pozisyonda iken gerilmelerin en yüksek olduğu görülmüştür.

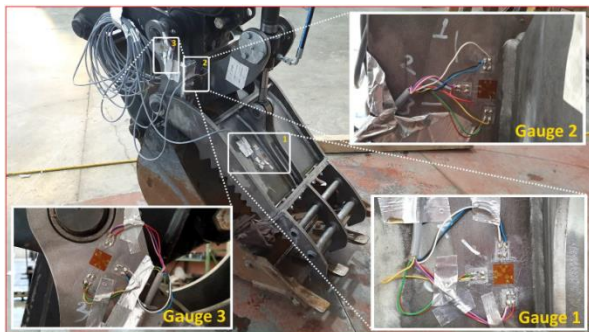
Test

Hidrolik çene ataşman elemanları üretildikten sonra testi yapılmak üzere seçilen Hidromek marka kazıcı yükleyici makineye montajı yapılmıştır (Şekil 26). Analiz koşullarına en yakın şekilde test düzeneği hazırlanmıştır. Burada analizde görülen iki adet en yüksek gerilme bölgesi ile bir adet de normal gerilme bölgesi olmak üzere ataşmana toplam 3 adet gerilmeölçer yapıştırılmıştır. LMS Scadas cihazı vasıtasıyla ilgili bölgelerde gerilmeler ölçülmüştür [19].



Şekil 26. Hidrolik çene ataşmanının makineye montajı

Hidrolik çene ataşmanı üzerinde üç doğrultuda ölçüm yapan birim uzama elemanlarının olduğu rozet olarak tanımlanan elemanların ataşman üzerinde ilgili bölgelere yapıştırılarak testi yapılmıştır. Çok eksenli gerilme durumu olduğundan klasik tip basit birim uzama bantları yerine rozet tipi gerilme ölçerler kullanılmıştır Gerilim ölçerlerin yerleri Şekil 27'de görülmektedir [20].



Şekil 27. Gerilim-ölçerlerin hidrolik çene ataşmanı üzerindeki yerleri

Gerilme bantları yapıştırılan ataşman sonlu elemanlar yöntemi ile analiz koşullarındaki gibi çenenin en açık (silindir tam kapalı strokta), orta (silindir orta strokta) ve en kapalı (silindir tam açık strokta) konumda olduğu durumda uç kısmından çeneye yaklaşık 90° olacak şekilde araya cisim yerleştirilerek kazıcı kepçe sabit

olacak şekilde çene hidrolik silindirin açma kuvveti ile zorlanmıştır.

Bu işlemler yapılırken silindirde oluşan basıncın kontrolü üzerine montajlanan basınç portları sayesinde takip edilmiştir. Silindir çalışma basıncı 220-230 bar arasında ölçülmüştür.

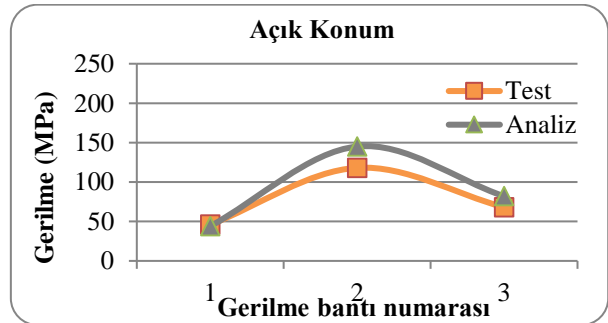
TARTIŞMA

Literatür çalışması yapılarak tasarım kriterleri belirlenen ve ardından tasarım hesaplarının sonlu elemanlar yöntemi ile analiz edilerek doğrulandığı hidrolik çene ataşmanı, son olarak da analiz koşullarına en yakın olacak şekilde gerilim-ölçerler ile teste tabi tutularak analiz doğrulaması yapılmıştır. Test sırasında analizde olduğu gibi çenenin açık, orta ve kapalı konumlarında çene ucuna dik etki edecek şekilde kuvvet uygulanmıştır (Şekil 28).

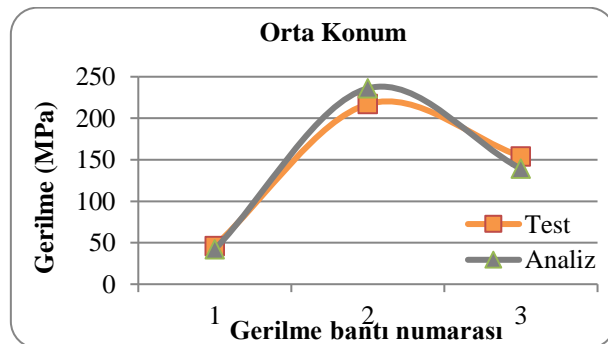


Şekil 28. Hidrolik çenenin açık, orta ve kapalı konumu

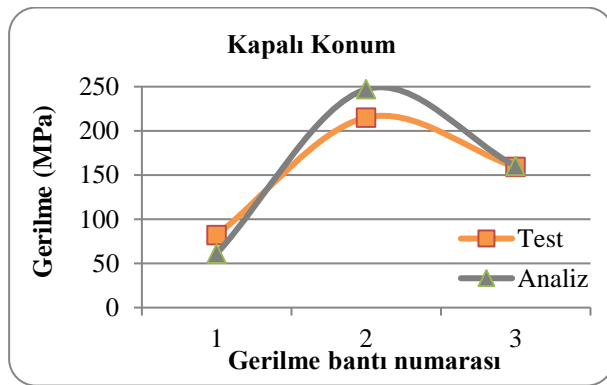
Buna göre belirlenen üç bölgede oluşan gerilmelerin analiz ve test kıyaslamaları Şekil 29, 30 ve 31'de gösterilmiştir.



Şekil 29. Hidrolik çenenin açık konumda analiz ve test değerlerinin kıyaslanması



Şekil 30. Hidrolik çenenin orta konumda analiz ve test değerlerinin kıyaslanması



Şekil 31. Hidrolik çenenin kapalı konumda analiz ve test değerlerinin kıyaslanması

Tüm test gerilme ölçüm değerleri ile sonlu elemanlar analiz değerleri arasında ortalama %11,74 hata oranı olmuştur. Bu hatanın olası nedenlerinden bazıları:

- Hidrolik çene üretim toleransları
 - Rozet imalindeki ufak hatalar
 - Testte analiz koşullarının birbir gerçekleştirilememiş olması
 - Test sırasında silindir çalışma basıncının sabit 230 barda olmaması
 - Özellikle kapalı konum olmak üzere test sırasında analizdeki gibi kuvvet tam olarak çene ucundan çeneye dik olacak şekilde verilememesi
 - Parçalara rozet yapıştırılmasında oluşabilecek hatalar
 - Sonlu elemanlar analizinde küçük modelleme hataları
- şeklinde ifade edilebilir.

Ayrıca genel olarak analiz değerlerinin test değerlerinden yüksek hesaplanması bu ataşmanın tasarım sürecinde güvenli bölgede kalınmış olması olarak da yorumlanabilir.

SONUÇ

Bu çalışmada kazıcı yükleyici iş makineleri için hidrolik tahrikli çene ataşman tasarımı, sonlu elemanlar analizi ve gerilim ölçüm testi gerçekleştirilmiştir. Önce makine üzerinde hidrolik çene ataşmanı yokken makinenin kazıcı kaldırma kapasitesinin maksimum olduğu noktadaki kaldırma ağırlığı hidrolik çene makineye montajlandıktan sonra da çene ile bu ağırlığı kaldırabilecek şekilde tasarım hesapları yapılmıştır. Hidrolik çenenin makine ana komponentlerinde herhangi bir deformasyon gerçekleştirilmeksizin, direk montajlanabilir olması ve çene ucunun tamamen gövdeden ayrılmaksızın 180° döndürülerek malzeme tutma işlevinin dışında malzeme sökme işlevi de kazanması ile farklılık yaratılmıştır.

Ataşmanın gerçek çalışma koşullarında çok nadir karşılaşılabilecek çenenin en uç noktasından gövdeye dik doğrultuda kuvvetin uygulanması ile tasarım hesapları

ve sonlu elemanlar yöntemi ile analiz yapılmıştır. Bu yükleme şartı çene üzerine gelebilecek maksimum kuvvetleri oluşturduğu için seçilmiştir. Hidrolik çene silindirinin tüm strok değerlerinde bu yükleme şartı korunmuştur. Genel olarak da hidrolik çenenin tam kapalı, orta ve tam açık pozisyonlarında üzerindeki gerilmeler incelenmiştir.

Test sırasında en yüksek gerilim değeri 217 MPa ile çene orta konumda iken bağlantı braketini üzerindeki silindir bağlantı uzuvlarının kaynak bölgesine yakın olan bölgede okunmuştur. Bu durum analizlerde görüldüğü için aşınma bölgesi olmamasına rağmen bağlantı braketini akma mukavemeti yaklaşık 1000 MPa olan aşınmaya dayanıklı saclardan üretilmesi kararı isabetli olmuştur. Böylece analizden önce SAE S355J2C+N malzemedan tasarlanan bağlantı braketini analizden sonra malzemesi değiştirilerek okunan gerilme değerlerine dayanımı sağlanmıştır.


Analizlerde bu üç pozisyonda görülen maksimum gerilme değerlerine göre iki nokta ve bir de çenede farklı bölgede bir nokta alınacak şekilde üretilen çene üzerine gerilim-ölçerler yapıştırılmıştır. Hidrolik silindirin çalışma basınç değeri de kontrol altına alınarak bu üç bölgede oluşan gerilme değerleri kaydedilmiştir. Analiz ve test değerleri karşılaştırılmıştır. Test şartlarının tam olarak analiz şartlarını oluşturamaması göz önüne alındığında genel olarak ilgili bölgelerde analiz ve test değerleri uyum sağladı. Genele bakıldığında da analiz değerlerinin test değerleri üzerinde çıkması ile güvenli bölgede kalınmış oldu. Sonuç olarak üretilen çenenin malzeme akma mukavemetinin altında değerler ölçüldüğü ve tasarım ile analizlerde öngörülen değerlerin üstünde bir sonuçla karşılaşılmadığı için tasarım testi başarı ile tamamlanmıştır.


Bu tasarımdan farklı olarak operatörlerin de üzerinde ortak görüş bildirdiği hidrolik çene makine üzerine montajlı iken de kazıcı kepçeyi tam anlamı ile kazı işlerinde kullanılabilir bir tasarım üzerinde çalışma yapılabilir.

TEŞEKKÜR

Çalışmada cihaz, malzeme, teknik destek gibi birçok imkân HİDROMEK A.Ş. tarafından sağlanmıştır, teşekkürü bir borç bilirim.

ORCID

Yusuf Ziya DEMİR  <https://orcid.org/0000-0003-2625-4589>

Yusuf USTA  <https://orcid.org/0000-0003-2403-155X>

KAYNAKÇA

- [1] Kılıç, B., Balkan, T., Söylemez, E. Kazıcı-yükleyici iş makinasının hidrolik ve mekanik sistemlerinin dinamik analizi, V. Ulusal Hidrolik Pnömatik Kongresi, Sayfa 1-3, İzmir, 2008.
- [2] Akpınar, M.V. İş makineleri ders notları, Karadeniz Teknik Üniversitesi, Sayfa 1-2, Trabzon, 2010.
- [3] Söylemez, E. Mekanizma Tekniği Makine Teorisi-1, Birsen Yayınevi, Bölüm 1, 2010.
- [4] JCB Kazıcı yükleyici makineler, www.sif-jcb.com.tr/urunler/makina-gruplari/kazici-yukleyiciler.
- [5] Broken tractor machinery parts, <https://www.brokentractor.com/>
- [6] Extreme metal products, <https://extrememetalproducts.com/>
- [7] Alibaba global trade, https://turkish.alibaba.com/trade/search?fsb=y&IndexArea=product_en&CatId=&SearchText=backhoe+thumb
- [8] Everything attachments, <https://www.everythingattachments.com/>
- [9] Draco equipment, <http://www.dracoequipment.com/index.htm>
- [10] Earth moving machinery, Safety, Requirements for backhoe loaders, DIN EN 474-4, 2006.
- [11] Excavator hydraulic type thumb clamp mechanism and excavator work device, CN105256851A numaralı patent, 2016.
- [12] Kepeçeye bağlantılı çene tasarımı, JP2003213718A numaralı patent, 2003Söylemez E. Mekanizma tekniği makine teorisi-1, Birsen Yayınevi, Sayfa 57-77, İstanbul, 2010.
- [13] Yener M. Design of a computer interface for automatic finite element analysis of an excavator boom. Yüksek Lisans Tezi, Sayfa 11-18. Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Ankara, 2005.
- [14] Arslan M., Serer M. Hidrolik silindir tasarım ve imalatında kullanılan toleranslar ve formüller. 3. Ulusal Hidrolik Pnömatik Kongresi, İzmir, 2003.
- [15] Valansi A. Hidrolik kreyn tasarımı. Yüksek Lisans Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi, Sayfa 18-87, İstanbul, 2008.
- [16] Çelik borular, Hassas uygulamalar için, Teknik teslim şartları, Bölüm 3, Kaynaklı soğuk çekilmiş borular, TS EN 10305-3, 2012.
- [17] Yener M., Fıçıcı F., Söylemez E, Arıkoğlu T. İş makineleri konstrüksiyonlarının tasarımında bilgisayar ortamında sonlu eleman analizi metoduyla mukavemet analizlerinin yapılması ve önemi, İş makineleri sempozyumu bildiri kitapçığı, 2003.
- [18] Köse H.T. Kazıcı Yükleyici İş Makinesi Ön Aks Tasarımı ve Tasarımın Deneysel Doğrulanması, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi, Ankara, 2014 .

On Stability of Fractional Differential Equations with Lyapunov Functions

Erdal KORKMAZ¹, Abdulhamit ÖZDEMİR¹✉

¹Department of Mathematics, Faculty of Science and Literature, Muş, Turkey

✉: ayna_hamit@hotmail.com

Received (Geliş): 30/04/2019

Revision (Düzeltilme): 27/05/2019

Accepted (Kabul): 14/06/2019

ABSTRACT

We discuss the asymptotic stability of autonomous nonlinear fractional order systems, in which the state equations contain integer derivative and fractional order. We use the Lyapunov's second method to derive some sufficient conditions to ensure asymptotic stability of nonlinear fractional order differential equations. We also give two examples in order to consolidate the obtained results.

Keywords: Asymptotic Stability, Fractional Differential Equations, Lyapunov Functional

Lyapunov Fonksiyonları ile Fraksiyonel Diferansiyel Denklemlerin Kararlılığı

ÖZ

Bu çalışmada, fraksiyonel ve tamsayı merteye içeren lineer olmayan otonom diferansiyel denklem sistemlerinin asimptotik kararlılığı araştırıldı. Lineer olmayan otonom fraksiyonel sistemlerin asimptotik kararlılığını göstermek için bazı yeterli şartlar elde edilerek Lyapunov'un ikinci metodu kullanıldı. Ayrıca elde edilen sonuçları pekiştirmek için iki örnek verildi.

Anahtar Kelimeler: Asimptotik Kararlılık, Fraksiyonel Diferansiyel Denklemler, Lyapunov Fonksiyonları,

INTRODUCTION

Fractional calculus is known as the generalization of the traditional integer-order calculus. It has attracted the attention of many authors due to its increasing application fields in recent years in many areas of science and engineering [1-5]. Studies on fractional derivatives and fractional integrals have been particularly conducted via fractional calculus. Thus, widely accepted calculations and interesting results have been obtained [6-20]. We studied the stability of the solutions of these equations by establishing differential equation models from a new fractional-order motivated by these studies considering the Lyapunov's Second Method, to determine the stability behavior of solutions of certain nonlinear fractional differential equations. The major advantage of this method is that stability can be obtained without any prior knowledge of solutions. Although A. M. Lyapunov, who introduced this method in 1892, used it only to establish simple stability theorems, his basic ideas have been extensively exploited and effectively applied to entirely new problems in physics and engineering for 40 years [8]. In this paper, we consider the nonlinear fractional differential equations

$$x' + {}_0D_t^\alpha x(t) = f(x(t)), \quad t \geq 0 \quad (1)$$

$$x''(t) + g(x'(t)) + {}_0D_t^\alpha x'(t) = f(x(t)), \quad t \geq 0 \quad (2)$$

where $0 < \alpha < 1$, ${}_0D_t^\alpha x(t)$ denotes Caputo's fractional derivative with the lower limit 0 for the function $x(t)$, $f, g \in C^1(\Omega)$, with $f(0) = g(0) = 0$, $\Omega \subset R$ is a domain that contains the origin $x = 0$.

Definition 1.1. ([2]). Given an interval $[a, b]$ of R , the fractional order integral of a function $f \in L^1([a, b], R)$ of order $\alpha \in R^+$ is defined by

$${}_aI_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-s)^{\alpha-1} f(s) ds, \quad t \in [a, b], \quad \alpha > 0 \quad (3)$$

where Γ is the Gamma function.

Definition 1.2. ([2]). Suppose that a function f is defined on the interval $[a, b]$. Caputo's fractional derivative of order α with lower limit a for f is defined as

$${}_aD_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-s)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(s) ds = I_t^{n-\alpha} f^{(n)}(t), \quad t \in [a, b] \quad (4)$$

where $0 < n - 1 < \alpha \leq n$.

Particularly, when $0 < \alpha \leq 1$, it holds

$${}_aD_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^t (t-s)^{-\alpha} \dot{f}(s) ds = {}_aI_t^{1-\alpha} \dot{f}(t), \quad t \in [a, b] \quad (5)$$

Lemma 1.1. ([2]). Let $0 < \alpha < 1$, $p \geq \alpha$ and $f(t)$ be continuous on $[a, +\infty)$. Then it holds

$${}_aD_t^p ({}_aI_t^\alpha f(t)) = {}_aD_t^{p-\alpha} f(t). \quad (6)$$

Lemma 1.2. ([19]). Let $0 < \alpha < 1$ and $f(t) \geq 0$ on $[a, b]$. Then it holds

$${}_a I_t^\alpha f(t) \geq 0, \quad t \in [a, b]. \quad (7)$$

We quote a result of existence and uniqueness of the global solution for the nonlinear fractional dynamical system

$$\begin{cases} {}_a D_t^\alpha x(t) = f(t, x(t)) \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (8)$$

which is a precondition in the development of this paper.

Lemma 1.3. ([19]). Consider the system (8). Suppose $0 < \alpha < 1$, $\Omega \subset R$ is a domain that contains the origin $x = 0$, $x_0 \in \Omega$. Suppose further $f(t, x): [0, +\infty) \times \Omega \rightarrow R$ is continuous and satisfies a Lipschitz condition in x with a Lipschitz constant $L > 0$. Then there exists a unique function $x(t) \in C[0, +\infty)$ satisfying the system (8).

Lemma 1.4. ([18]). Let $x(t) \in R$ be a continuous and derivable function. Then, for any time instant $t \geq t_0$

$$\frac{1}{2} {}_{t_0} D_t^\alpha x^2(t) \leq x(t) {}_{t_0} D_t^\alpha x(t), \quad \forall \alpha \in (0, 1). \quad (9)$$

Proof. Proving that expression (9) is true, is equivalent to prove that

$$x(t) {}_{t_0} D_t^\alpha x(t) - \frac{1}{2} {}_{t_0} D_t^\alpha x^2(t) \geq 0, \quad \forall \alpha \in (0, 1) \quad (10)$$

Using Definition 1.2. it can be written that

$${}_t D_t^\alpha x(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_{t_0}^t \frac{x'(\tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau. \quad (11)$$

And in the same way

$$\frac{1}{2} {}_t D_t^\alpha x^2(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_{t_0}^t \frac{x(\tau)x'(\tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau. \quad (12)$$

So, expression (10) can be written as

$$\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_{t_0}^t \frac{|x(t)-x(\tau)|x'(\tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau \geq 0. \quad (13)$$

Let us define the auxiliar variable $y(\tau) = x(t) - x(\tau)$, which implies that $y'(\tau) = \frac{dy(\tau)}{d\tau} = -\frac{dx(\tau)}{d\tau}$. In this way, expression (13) can be written as

$$\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_{t_0}^t \frac{y(\tau)y'(\tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau \leq 0. \quad (14)$$

Let us integrate by parts expression (14), defining

$$\begin{aligned} du &= y(\tau)y'(\tau)d\tau & u &= \frac{1}{2}y^2 \\ v &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}(t-\tau)^{-\alpha} & dv &= \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)}(t-\tau)^{-\alpha-1} \end{aligned}$$

In that way, expression (14) can be written as

$$-\left[\frac{y^2(\tau)}{2\Gamma(1-\alpha)(t-\tau)^\alpha} \right]_{\tau=t} + \left[\frac{y_0^2}{2\Gamma(1-\alpha)(t-t_0)^\alpha} \right] + \frac{\alpha}{2\Gamma(1-\alpha)} \int_{t_0}^t \frac{y^2(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1}} d\tau \geq 0 \quad (15)$$

Let us check the first term of expression (15), which has an indetermination at $\tau = t$ so let us analyze the corresponding limit

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow t} \frac{y^2(\tau)}{2\Gamma(1-\alpha)(t-\tau)^\alpha} &= \frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} \lim_{\tau \rightarrow t} \frac{[x(t)-x(\tau)]^2}{(t-\tau)^\alpha} \\ &= \frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} \lim_{\tau \rightarrow t} \frac{x^2(t)-2x(t)x(\tau)+x^2(\tau)}{(t-\tau)^\alpha} \end{aligned} \quad (16)$$

Given that the function is derivable, L'Hospital rule can be applied

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} \lim_{\tau \rightarrow t} \frac{x^2(t)-2x(t)x(\tau)+x^2(\tau)}{(t-\tau)^\alpha} \\ &= \frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} \lim_{\tau \rightarrow t} \frac{-2x(t)x'(\tau)+2x(\tau)x'(\tau)}{-\alpha(t-\tau)^{\alpha-1}} \\ &= \frac{1}{2\Gamma(1-\alpha)} \lim_{\tau \rightarrow t} \frac{[-2x(t)x'(\tau)+2x(\tau)x'(\tau)](t-\tau)^{1-\alpha}}{-\alpha} = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

So, expression (15) is reduced to

$$\frac{y_0^2}{2\Gamma(1-\alpha)(t-t_0)^\alpha} + \frac{\alpha}{2\Gamma(1-\alpha)} \int_{t_0}^t \frac{y^2(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1}} d\tau \geq 0 \quad (18)$$

Expression (18) is clearly true, and this concludes the proof. ■

RESULTS and DISCUSSION

Theorem 2.1. Consider the system (1). $\Omega \subset R$ is a domain that contains the origin $x = 0$. Suppose further that $f(x) \in C^1(\Omega)$ with $f(0) = 0$. If $x \cdot f(x) \leq 0$, then the equilibrium point $x = 0$ is stable. Further, if $x \neq 0$ implies $x \cdot f(x) < 0$, then the equilibrium point $x = 0$ is asymptotically stable.

Proof. As the basic tool for proof, we choose Lyapunov function

$$V(x(t)) = \frac{1}{2}[x^2(t) + {}_0 I_t^{1-\alpha} x^2(t)] \quad (19)$$

where $0 < \alpha < 1$. It is clear that $V(0) = 0$ and $V(x(t)) \geq 0$ from Lemma 1.2. Therefore $V(x(t))$ positive definite. By derivating along trajectory (1) expression (19), we get

$$\begin{aligned} \dot{V}(x(t))|_{(1)} &= x'(t)x(t) + \frac{1}{2} {}_0 D_t^1 ({}_0 I_t^{1-\alpha} x^2(t)) \\ &= x(t)[f(x) - {}_{t_0} D_t^\alpha x(t)] + \frac{1}{2} {}_{t_0} D_t^\alpha x^2(t) \\ &= x(t)f(x) - x(t) {}_{t_0} D_t^\alpha x(t) \\ &\quad + \frac{1}{2} {}_{t_0} D_t^\alpha x^2(t). \end{aligned} \quad (20)$$

where $x(t)$ satisfies the system (1). By Lemma 1.4 the equality (20), can be written as

$$\begin{aligned} \dot{V}(x(t))|_{(1)} &\leq x(t)f(x) - x(t) {}_0D_t^\alpha x(t) \\ &\quad + x(t) {}_0D_t^\alpha x(t) = x(t)f(x) \leq 0. \end{aligned} \tag{21}$$

Thus the equilibrium point $x(t) = 0$ of the system (1) is stable. Obviously, if $x(t) \neq 0$ implies $x(t) \cdot f(x(t)) < 0$ then $f(x(t)) \neq 0$. It follows that the state $x(t)$ of the system (1) satisfies $x(t) \neq constant$. Therefore $x'(t) \neq 0$. Thus, $x(t)f(x) < 0$. So the system (1) is asymptotically stable. This completes the proof. ■

Theorem 2.2. Consider the fractional differential equation (2). $\Omega \subset R$ is a domain that contains the origin $x = 0$. Suppose further that $f, g \in C^1(\Omega)$ with $f(0) = 0, g(0) = 0$. If $x \cdot f(x) \leq 0$ and $y \cdot g(y) \geq 0$, then the equilibrium point $x = 0$ is stable. Further, if $x \neq 0$ and $y \neq 0$ implies $x \cdot f(x) < 0$ and $y \cdot g(y) > 0$, then the equilibrium point $x = 0$ is asymptotically stable.

Proof. Fractional differential equation (2), we write as differential equation system

$$\begin{aligned} x'(t) &= y(t), \\ y'(t) &= -g(y(t)) - {}_0D_t^\alpha y(t) + f(x(t)). \end{aligned} \tag{22}$$

For proof, we choose Lyapunov function as

$$\begin{aligned} V(x(t), y(t)) &= \frac{1}{2}[y(t)]^2 + \frac{1}{2} {}_0I_t^{1-\alpha} y^2(t) \\ &\quad - \int_0^{x(t)} f(s) ds \end{aligned} \tag{23}$$

Obviously, $V(0,0) = 0$ and $V(x(t), y(t)) \geq 0$ from Lemma 1.2. So $V(x(t), y(t))$ positive definite. By derivating along trajectory (22) expression (23), we get

$$\begin{aligned} \dot{V}(x(t), y(t))|_{(22)} &= -x'(t)f(x) + y'(t)y(t) \\ &\quad + \frac{1}{2} {}_0D_t^\alpha ({}_0I_t^{1-\alpha} y^2(t)) \\ &= -y(t)f(x) + y(t)[-g(y(t)) \\ &\quad - {}_0D_t^\alpha y(t) + f(x)] + \frac{1}{2} {}_0D_t^\alpha y^2(t) \\ &= -y(t)f(x) - y(t)g(y(t)) \\ &\quad - y(t) {}_0D_t^\alpha y(t) + y(t)f(x) \\ &\quad + \frac{1}{2} {}_0D_t^\alpha y^2(t) \end{aligned} \tag{24}$$

By Lemma 1.4 the equality (24), can be written as

$$\begin{aligned} \dot{V}(x(t), y(t))|_{(22)} &\leq -y(t)g(y(t)) - y(t) {}_0D_t^\alpha y(t) \\ &\quad + y(t) {}_0D_t^\alpha y(t) \\ &= -y(t)g(y(t)) \end{aligned} \tag{25}$$

So $\dot{V}(x(t), y(t))|_{(22)} \leq 0$. Therefore the equilibrium point $x(t) = 0$ of the system (22) is stable. Obviously, if $x(t) \neq 0$ and $y(t) \neq 0$ implies $x(t) \cdot f(x(t)) < 0$ and $y(t) \cdot g(y(t)) > 0$ then $f(x(t)) \neq 0$ and $g(y(t)) \neq 0$. It follows that the state $(x(t), y(t))$ of the system (22) satisfies $y(t) \neq constant$. So solution of the system (22) is asymptotically stable. This completes the proof. ■

Example 2.1. We consider fractional differential equation

$$x'(t) + {}_0D_t^\alpha x(t) = -x^5(t) \tag{26}$$

where $0 < \alpha < 1$ and $\Omega = R$. Denote $f(x) = -x^5(t)$. Because of $xf(x) = -x^6(t) \leq 0$, by Theorem 2.1 the equilibrium point $x = 0$ of (26) is stable. Obviously, $x \neq 0$ implies $xf(x) < 0$. By Theorem 2.1 the equilibrium point $x = 0$ of (26) is asymptotically stable.

Example 2.2. We consider fractional differential equation

$$\begin{aligned} x''(t) + [x'(t)]^3(2 + \sin(x'(t))) + {}_0D_t^\alpha x(t) \\ = -x(t)e^{x(t)} \end{aligned} \tag{27}$$

where $0 < \alpha < 1$ and $\Omega = R$. Denote $f(x) = -x(t)e^{x(t)}$ and $g(y(t)) = y^3(t)(2 + \sin(y(t)))$. Because of $xf(x) = -x^2(t)e^{x(t)} \leq 0$ and $y(t)g(y(t)) = y^4(t)(2 + \sin(y(t))) \geq 0$, by Theorem 2.2 the equilibrium point $x = 0$ of (27) is stable. Obviously, $x \neq 0$ and $y \neq 0$ implies $xf(x) < 0$ and $yg(y) > 0$. By Theorem 2.2 the equilibrium point $x = 0$ of (27) is asymptotically stable.

ORCID

Erdal KORKMAZ  <https://orcid.org/0000-0002-6647-9312>
 Abdulhamit ÖZDEMİR  <https://orcid.org/0000-0002-5310-6285>

REFERENCES

- [1] Kilbas A. A., Srivastava H. M., Trujillo J. J. Theory and Applications of Fractional Differential Equations, Elsevier Science B. V., Amsterdam, 2006.
- [2] Podlubny I. Fractional Differential Equations, Academic Press, SanDiego, 1999.
- [3] Miller K.S., Ross B. An Introduction to the Fractional Calculus and Differential Equations, John Wiley, New York, 1993.
- [4] Lakshmikantham V., Vatsala A.S. Theory of fractional differential inequalities and applications. Commun. Appl. Anal., 11, 395-402, 2007.
- [5] Lakshmikantham V., Vatsala A.S. Basic theory of fractional differential equations. Nonlinear Anal., 69, 2677-2682, 2008.
- [6] Lakshmikantham V. Theorem of fractional functional differential equations. Nonlinear Anal., 69, 3337-3343, 2008.

- [7] Lakshmikantham V., Vatsala A. S. Basic theory of fractional differential equations, *Nonlinear Anal.*, 69, 2677-2682, 2008.
- [8] Lyapunov A.M. The general problem of the stability of motion. Translated from Edouard Davaux's French translation (1907) of the 1892 Russian original and edited by A. T. Fuller. Taylor Francis, Ltd., London, 1992.
- [9] Diethelm K. *The Analysis of Fractional Differential Equations*. Springer, Heidelberg, Dordrecht, London, New York, 2010.
- [10] Trigeassou J.C., Maamri N., Sabatier J., Oustaloup A. A Lyapunov approach to the stability of fractional differential equations. *Signal Process*, 91(3), 437-445, 2011.
- [11] Matignon D. Stability results for fractional differential equations with applications to control processing. *Comput. Eng. Syst. Appl.*, 2, 963-968, 1996.
- [12] Deng W., Li C., Lu J. Stability analysis of linear fractional differential system with multiple time delays. *Nonlinear Dynam.*, 48, 409-416, 2007.
- [13] Liao Z., Peng C., Li W., Wang Y. Robust stability analysis for a class of fractional order systems with uncertain parameters. *J. Franklin Inst.*, 348, 1101-1113, 2011.
- [14] Wang J., Lv L., Zhou Y. New concepts and results in stability of fractional differential equations. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 17, 2530-2538, 2012.
- [15] Choi S.K., Koo N. The monotonic property and stability of solution of fractional differential equations. *Nonlinear Anal.*, 74, 6530-6536, 2011.
- [16] Li Y., Chen Y., Podlubny I. Stability of fractional-order nonlinear dynamic systems: Lyapunov direct method and generalized Mittag-Leffler stability. *Comput. Math. Appl.*, 59, 1810-1821, 2010.
- [17] Matignon D. Stability results for fractional differential equations with applications to control processing. in: *IMACS-SMCP Proceedings*, Lille, p. 963-968, France, 1996.
- [18] Aguila-Camacho N., Duarte-Mermoud M. A., Gallegos J. A. Lyapunov functions for fractional order systems. *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat*, 19, 2951-2957, 2014.
- [19] Zhou X.F., Hu L.G., Liu S., Jiang W. Stability criterion for a class of nonlinear fractional differential systems. *Appl. Math. Lett.*, 28, 25-29, 2014.
- [20] Li Y., Chen Y.Q., Podlubny I. Mittag-Leffler stability of fractional order nonlinear dynamic systems. *Automatica*, 45(8), 1965-1969, 2009.
- [21] Li C.P., Zhang F.R. A survey on the stability of fractional differential equations. *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, 193, 27-47, 2011.

Investigation of Corrosion Resistance of Cold Metal Transfer Welded AA7075 Aluminum Alloy Galvanized Steel Couples

Hülya DURMUŞ¹, Nilay ÇÖMEZ¹

¹Metallurgical and Materials Engineering Department, Manisa Celal Bayar University, Manisa, Turkey
✉: hulya.durmus@cbu.edu.tr

Received (Geliş): 15.03.2019

Revision (Düzeltilme):05/04/2019

Accepted (Kabul): 20.06.2019

ABSTRACT

Corrosion is the degradation of the metal as a result of chemical reactions with its surroundings. However, corrosion can be predicted, in some cases significantly slowed down or prevented. In this study, the effect of galvanic corrosion formation on the tensile strength of AA7075-galvanized steel joints produced by cold metal transfer welding, which is one of the manufacturing methods used in forming many constructions, was investigated. The aluminum and steel pair are difficult to combine with other welding methods. Joining is provided by this method. Corrosion in this joining was investigated in this article. As a result, increased heat input during welding adversely affected galvanic corrosion and increased material dissolution.

Keywords: AA7075, cold metal transfer, corrosion, welding, steel

Soğuk Metal Transfer Kaynağı ile Birleştirilmiş AA7075-Galvanizli Çelik Çiftinin Korozyon Direncinin İncelenmesi

ÖZ

Korozyon, metalin çevresi ile arasındaki kimyasal reaksiyonların bir sonucu olarak bozulmasıdır. Fakat korozyon, önceden tahmin edilebilir, bazı durumlarda önemli ölçüde yavaşlatılabilir veya önenebilir. Bu çalışmada, pek çok konstrüksiyonun oluşturulmasında kullanılan imalat yöntemlerinden biri olan kaynak çeşitlerinden soğuk metal transfer kaynağı ile üretilen AA7075-galvanizli çelik bağlantılarda galvanik korozyon oluşumunun ve farklı bağlantıların gerilme dayanımına etkisi incelenmiştir. Alüminyum ve çelik çifti diğer kaynak yöntemleriyle birleştirilmesinin zor olduğu bir çifttir. Bu yöntem ile birleştirilme sağlanmıştır. Bu çalışmada, bağlantıda oluşacak korozyon incelenmiştir. Sonuç olarak, kaynak sırasında artan ısı girişi galvanik korozyonu olumsuz yönde etkiledi ve malzeme çözünmelerini arttırdığı tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: AA7075, Çelik, Kaynak, Korozyon, Soğuk Metal Transfer

INTRODUCTION

Aluminum alloys are attractive materials for automotive and aerospace industries owing to their lightness, high strength, good fracture strain and corrosion endurance [1-3]. Although aluminum alloys are found suitable in particular for automobiles, it would be very expensive to produce whole body structure only with aluminum. Thus, replacing some of the steel parts of a car with aluminum alloys sounds a workable solution that demands riveting or welding these dissimilar materials [3, 4]. The problems during the welding of aluminum and steel arise from their different chemical, physical properties and formation of brittle intermetallic compounds [2, 3]. Cold metal transfer (CMT) welding is an economic method with low initial investment cost and is well known with its low heat input characteristic [5] that enables a significant control on growth of intermetallic compounds. AA7075 alloy is preferred in particular in aircraft applications [4]. The use of welding methods instead of mechanical connections is a more weight-reducing solution. But there has not been much work on this issue. However the developing techniques make possible the welding of dissimilar materials and give the idea of using high strength

AA7075 alloy with steel in automobile bodies. In addition to CMT welding, several welding techniques can be also applied to join aluminum to steel such as friction stir and laser welding techniques [6]. These techniques eliminate or minimize the problems in welding dissimilar metals. However, another issue shows up after the welding: the galvanic corrosion that occurs between these different materials in contact [7]. Borrisutthekul and et al.(2018), investigated effect of zinc-coated layer on steel sheet of dissimilar metals welding between SCGA270C steel and A5052 aluminum alloy by GTAW [8]. In this study, AA7075 aluminum alloy and galvanized steel are welded by cold metal transfer method. It is aimed to reveal the changes in macro scale such as material loss and the reduction in tensile strength due to the galvanic corrosion between AA7075 and steel.

MATERIAL and METHOD

AA7075 (Table 1) and galvanized steel (Table 2) sheets with dimensions of 500mmx200mmx2mm were welded by cold metal transfer (CMT) welding (Table 3) using ER4043 (AlSi5) filler wire. Argon gas was used as protect of weld metal.

Table1. Chemical compositions of AA7075 aluminum alloy and ER4043 filler wire

Element	Mg	Si	Cr	Cu	Fe	Zn	Mn	Al
AA7075 (T6)	2.43	0.071	0.187	1.675	0.17	6.36	0.03	
ER4043	-	5	-	<0.01	<0.3	<0.01	<0.01	Rest

Table2. Chemical composition of galvanized steel

C	Mn	P	S	Si	Ti	Fe
0.051	0.216	0.018	0.013	0.014	0.001	Balance

Table3. CMT welding parameters

Sample	Current (A)	Voltage (V)	Welding speed (m/min)	Wire feed rate (m/min)	Heat Input (J/mm)
A	81	11	1	4.8	48.11
B	86	12.3	0.5	4.6	114.24

AA7075 aluminum alloy and Nital for galvanized steel solutions were used. In addition to the microstructure samples, the tensile test specimens were held in a 3.5 wt. % NaCl aqueous solution for five months in order to investigate the effect of corrosion on the tensile strength of AA7075-steel. The tensile test of the welded samples was carried out at a speed of 1 mm/min at room temperature at SHIMADZU (250 kN) in MCBÜ DEFAM. SEM-EDX analyzes performed in İYTE MAM SEM-EDX device.

RESULTS AND DISCUSSION

Microstructure

Figure 1 shows the grain coarsening caused by the increased heat input in the weld metal and in HAZ of AA7075 base metal was investigated by microstructural studies. A thin, dark layer between the aluminum based weld metal and steel can be seen in Figure 1a and 1b. SEM-EDX analysis was taken along a line from sample B. As it is seen in Figure 1, the percentage of iron and aluminum through the line changed gradually that indicates the formation of Al-Fe intermetallic compounds in the thin, dark layer.

Before the microstructural examinations, the samples were cut (20mmx30mmx2mm) and polished. Keller for

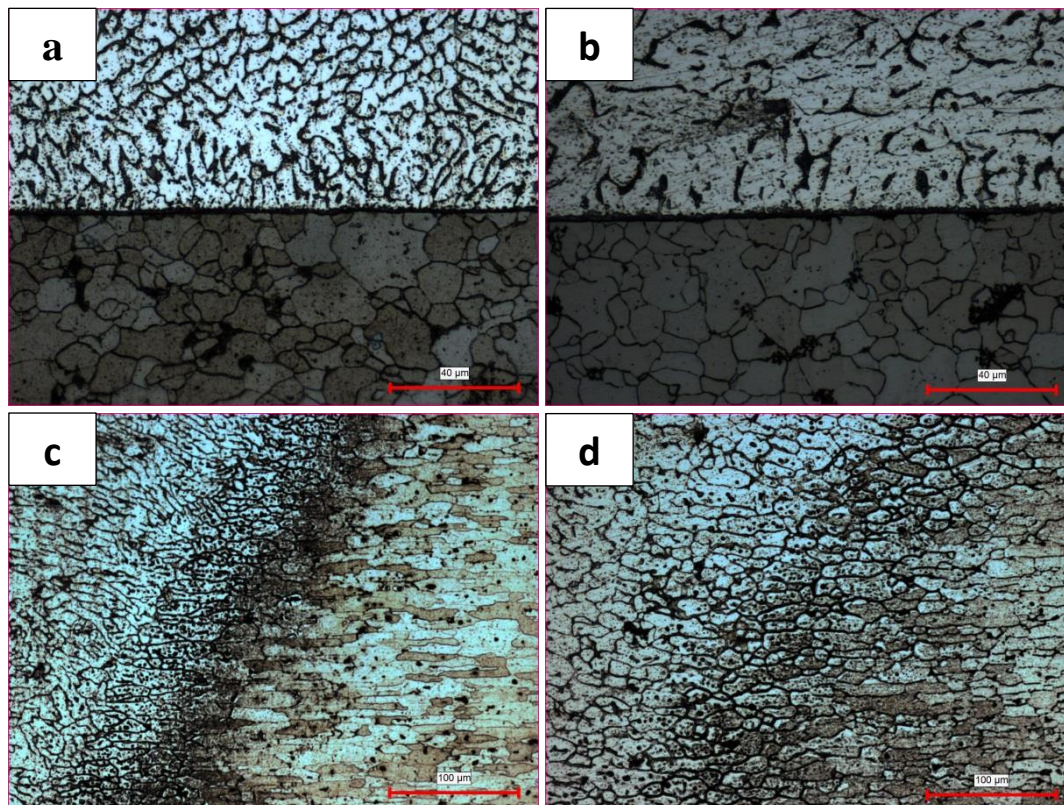


Figure1. Microstructure of weld metal/steel interface of: a) Sample A, b) Sample B and AA7075/weld metal interface of: c) Sample A, d) Sample B

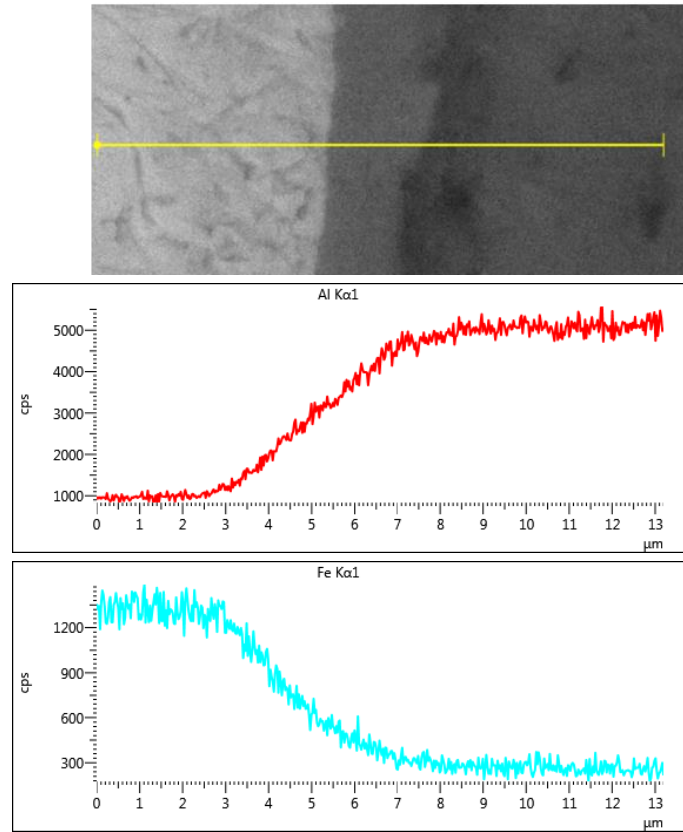


Figure2. SEM-EDX line analysis of Sample B

In Figure 2, Selected area is scanned to better detect element transitions in İYTE SEM-EDX device. The presence of elements (Al and Fe) in the intermediate weld metal can be seen.

Corrosion

Numerous parameters such as pores, cracks, residual stresses, wrong fill material selection affect the corrosion resistance of welded parts [9]. Besides, the potential occurrence of the galvanic corrosion increases in hybrid structures of steel and aluminum due to the different electrochemical behavior of these two materials. Moreover, the sheet metal which was used in the welding process is produced by plastic deformation

processes that induce the residual stresses. After the welding process, residual stresses promote the activation of regional stress corrosion cracking and may reduce the strength of the connection [10]. According to galvanic series of various or several metals in sea water (Table 4), aluminum is more anodic than steel. Just say as expected, material loss occurred in the AA7075 base material (Figure 3). Besides, Figure 4 revealed that weld tip also suffered from corrosion. Several works exposed that the zinc layer on galvanized steel was dragged towards the weld tip and forms a zinc-rich zone [11, 12, 13]. Consequently, zinc as an active metal (Table 4) caused the dissolution of weld tip (Figure 4).

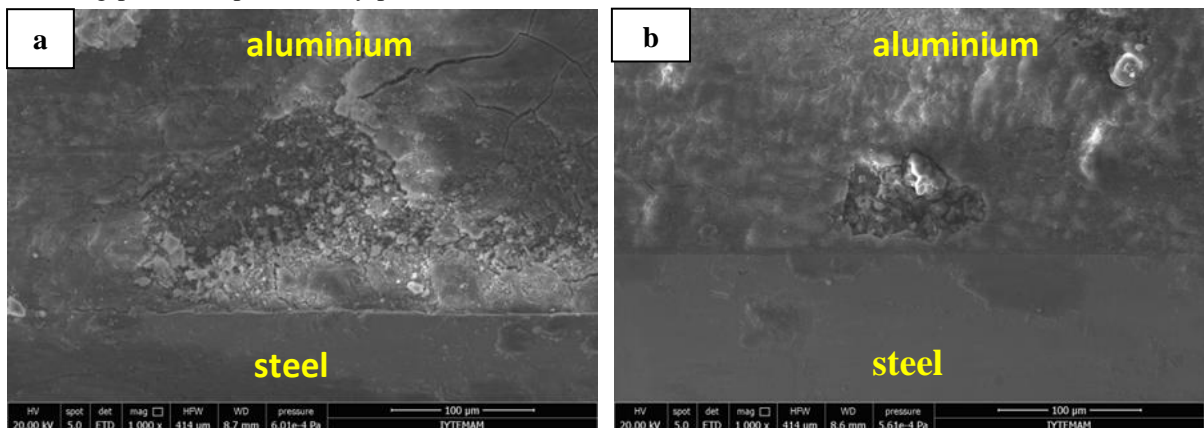


Figure3. SEM images of the surfaces of the corrosion in Sample a and Sample b

Table4. Galvanic series of some metals in sea water [14-15]

Active, Corroded ↑	Magnesium	Copper	Noble, Protected ↓
	Zinc	Nickel	
	Beryllium	Silver	
	Aluminium	Titanium	
	Low carbon steel	Zirconium	
	Alloyed steel	Gold	
	Cast iron	Platinum	

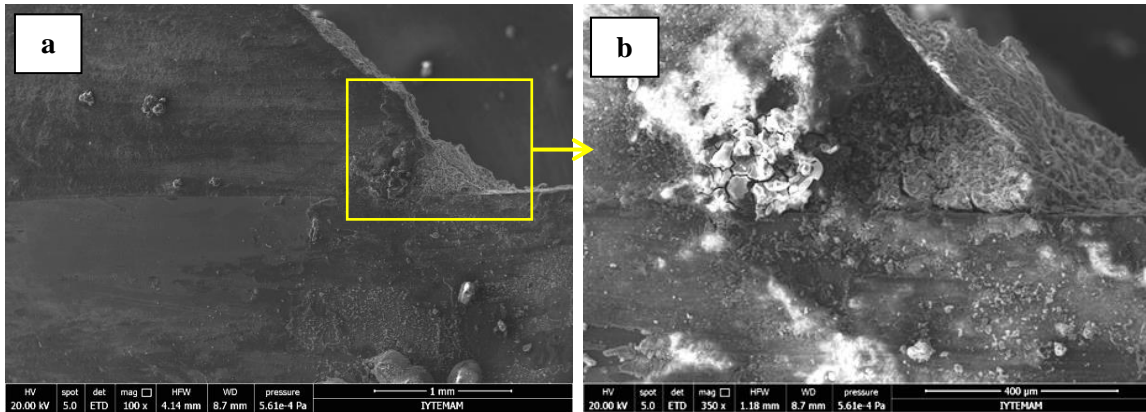


Figure4. Corrosion in zinc-rich zone of sample B

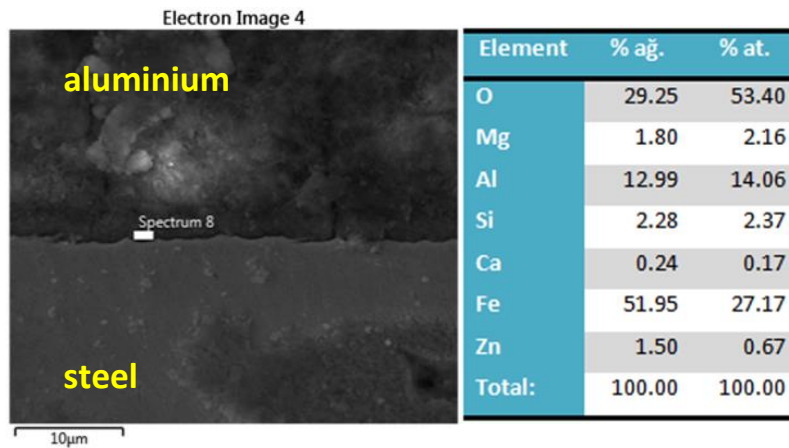


Figure5. SEM-EDX analysis of Sample B after corrosion

Tensile testing

Material loss was observed in AA7075 base metal of tensile specimens that were held in 3.5 wt. % NaCl solution (Figure 6). More material loss occurred in sample B than sample A because of heat input. Although increased weld heat input enhanced the tensile strength of AA7075-steel joint, it caused a change in microstructure of AA7075. It is known that MgZn₂ precipitates have a great influence on corrosion [16]. A change in size and distribution of these precipitates may worsen the corrosion resistance and increase the material loss (Figure 7). In general, increased heat input deteriorates the mechanical properties of welded parts. However, thickness and mechanical properties of intermetallic compound layers might affect the overall strength of AA7075-steel joints. The galvanic corrosion between aluminum and steel caused material loss in the

aluminum base material that decreased the joint strength approximately 40% (Figure 7).

CONCLUSIONS

AA7075 and galvanized steel sheets were welded by cold metal transfer welding successfully. The effect of galvanic corrosion on AA7075-steel joints can be summarized as follows:

1. An intermetallic layer of Al-Fe formed between the galvanized steel and weld metal.
2. Material loss was observed only in aluminium alloy due to its anodic characteristic.
3. With increasing heat input, material dissolution increased and galvanic corrosion was adversely affected.

4. As a result of the dissolution of AA7075 base metal and galvanic corrosion, the tensile strength of AA7075-steel joints was reduced.

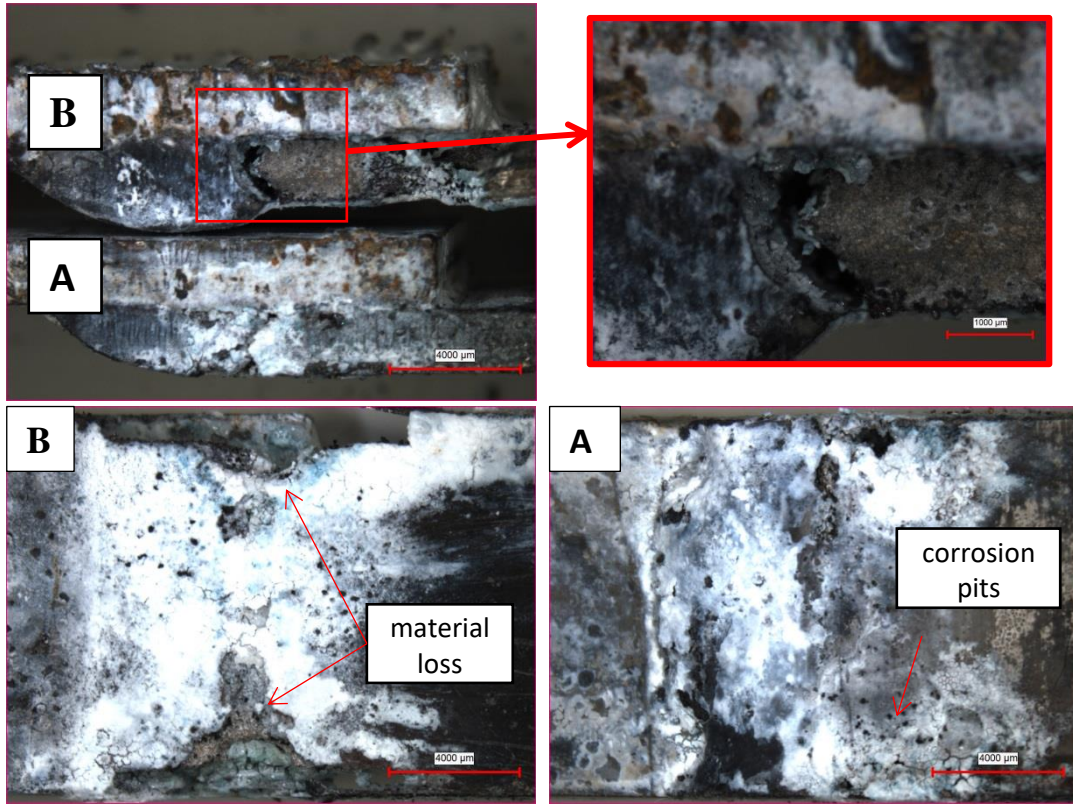


Figure6. Tensile test specimens after corrosion test on Sample A and Sample B

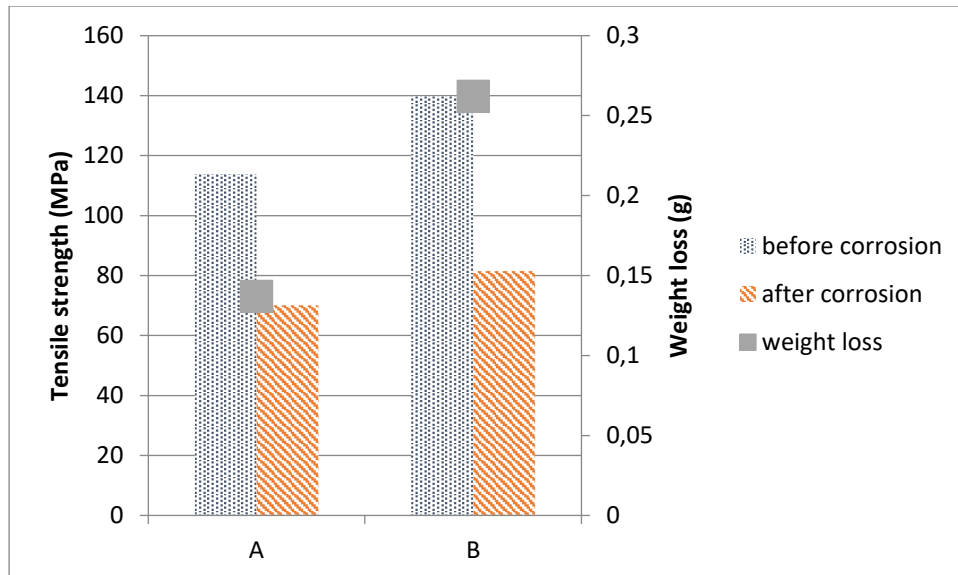


Figure7. Tensile strength before and after corrosion

ACKNOWLEDGEMENT

The authors are to thank for the financial support to the Scientific and Technological Research Council of Turkey (Project Number: TUBITAK 215M623).

ORCID

Hülya DURMUŞ  <https://orcid.org/0000-0002-7270-562X>
Nilay ÇÖMEZ  <https://orcid.org/0000-0002-6432-6582>

REFERENCES

1. Sun, Q.J., Li, J.Z., Liu, Y.B., Li, B.P., Xu, P.W., Feng, J.C. Microstructural characterization and mechanical properties of Al/Ti joint welded by CMT method-Assisted hybrid magnetic field, *Materials Design*, 116, 316-324, 2017.
2. Wang, T., Zhang, Y., Li, X., Zhang, B., Feng, J. Influence of beam current on microstructures and mechanical properties of electron beam welding-brazed aluminum-steel joints with an Al5Si filler wire. *Vacuum*, 141, 281-287, 2017.
3. Huang, J., He, J., Yu, X., Li, C., Fan, D. The study of mechanical strength for fusion-brazed butt joint between aluminum alloy and galvanized steel by arc-assisted laser welding. *Journal of Manufacturing Processes*, 25, 126-133, 2017.
4. Lim, Y. C., Squires, L., Pan, T. Y., Miles, M., Song, G. L., Wang, Y., Feng, Z. Study of mechanical joint strength of aluminum alloy 7075-T6 and dual phase steel 980 welded by friction bit joining and weld-bonding under corrosion medium. *Materials Design*, 69, 37-43, 2015.
5. Zhang, H. T., Feng, J. C., He, P., Zhang, B. B., Chen, J. M., Wang, L. The arc characteristics and metal transfer behavior of cold metal transfer and its use in joining aluminum to zinc-coated steel. *Materials Science and Engineering: A*, 499(1-2), 111-113, 2009.
6. Shi, Y., Li, J., Zhang, G., Huang, J., Gu, Y. Corrosion behavior of aluminum-steel weld-brazing joint. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 25(5), 1916-1923, 2016.
7. Hasan, B.O. Galvanic corrosion of aluminum-steel under two-phase flow dispersion conditions of CO₂ gas in CaCO₃ solution. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 133, 76-84, 2015.
8. Borrisutthekul R., Seangsai A., Paonil W. GTAW of Zinc-Coated Steel and Aluminum Alloy, *Eng. J.* 22, 3, 39-49, 2018.
9. Fahimpour, V., Sadrnezhad, S.K., Karimzadeh, F. Corrosion behavior of aluminum 6061 alloy joined by friction stir welding and gas tungsten arc welding methods, *Materials Design*, 39, 329-333, 2012.
10. Calabrese, L., Proverbio, E., Galtieri, G., Borsellino, C. Effect of corrosion degradation on failure mechanisms of aluminum/steel clinched joints, *Materials Design*, 87, 473-481, 2015.
11. Zhou, Y., Lin, Q. Wetting of galvanized steel by Al 4043 alloys in the first cycle of CMT process. *Journal of Alloys and Compounds*, 589, 307-313, 2014.
12. Yang, S., Zhang, J., Lian, J., Lei, Y. Welding of aluminum alloy to zinc coated steel by cold metal transfer. *Materials Design*, 49, 602-612, 2013.
13. Agudo, L., Eyidi, D., Schmaranzer, C. H., Arenholz, E., Jank, N., Bruckner, J., Pyzalla, A. R. Intermetallic FeAl₃-phases in a steel/Al-alloy fusion weld. *Journal of Materials Science*, 42(12), 4205-4214, 2007.
14. Schweitzer, P. A. 2009. *Fundamentals of Corrosion: Mechanisms, Causes, and Preventative Methods*. USA: CRC Press, Taylor Francis Group, p. 189-193, 2009.
15. Vargel, C. *Corrosion of Aluminum*, Elsevier, Oxford, England, p. 700, 2004.
16. Na, K.-H., Pyun, S.-I. Comparison of susceptibility to pitting corrosion of AA2024-T4, AA7075-T651 and AA7475-T761 aluminum alloys in neutral chloride solutions using electrochemical noise analysis, *Corrosion Science*, 50(1), 248-258, 2008.

Yazım Kuralları

Haziran ve Aralık sayısı olmak üzere yılda iki defa yayımlanan uluslararası hakemli bir dergidir. Derginin asıl amacı fen bilimleri, temel alanlar ve mühendislik alanlarında nitelikli akademik çalışmaların yayımlanmasına katkı yapmaktır.

Dergide yayımlanan makaleler yazı işlerinin izni olmaksızın başka hiç bir yerde yayımlanamaz veya bildiri olarak sunulamaz. Kısmen veya tamamen yayımlanan makaleler kaynak gösterilmeden hiçbir yerde kullanılamaz. Dergiye gönderilen makalelerin içerikleri özgün, daha önce herhangi bir yerde yayımlanmamış veya yayımlanmak üzere gönderilmemiş olmalıdır. Makaledeki yazarlar isim sırası konusunda fikir birliğine sahip olmalıdır.

*Makalenin hazırlanması sırasında yardımcı olması amacıyla, internet sitemizde yazarlar için linkinin altında yer alan **MSUFBD** Dergisi yazım kurallarına göre hazırlanmış "örnek_makale" dosyasını bilgisayarınıza indirmeniz ve makalenizi bu makaleyi örnek alarak hazırlamanız, düzenlemelerde kolaylık ve zaman tasarrufu sağlayacaktır. Bu makaleyi bilgisayarınıza Word programında şablon (template) olarak kaydederek de makalenizi hazırlayabilirsiniz.*

- Makaleler MS Word 2007 veya üstü bir sürümde hazırlanarak gönderilmelidir.
- Sayfa yapısı özel boyutta (15.5x23 cm), MS Word programında, Times New Roman veya benzeri bir yazı karakteri ile 10 punto, tek satır aralığıyla yazılmalıdır. Sayfa kenarlarında üst 2.5 cm olmak üzere diğer kenarlar için 2.5 cm boşluk bırakılmalı ve sayfalar numaralandırılmalıdır.
- Yazar(lar)ın ad(lar) ve soyad(lar), kurumsal unvanları; yazar(lar)ın görev yaptığı kurum(lar) ve e-posta adres(ler) bilgileri verilmelidir. Ayrıca makalelerde sorumlu yazar belirtilmelidir. Times New Roman 10 punto, tek satır aralığıyla yazılmalıdır.
- Makale başlığı, içerikle uyumlu, içeriği en iyi ifade eden bir başlık olmalıdır. Başlık, kalın ve 12 punto büyüklüğünde olmalı ve ilk harfler büyük olacak şekilde sayfa ortalanarak yazılmalıdır. Makaleler aynı özellikte İngilizce bir başlık/title içermelidir.
- Makalenin başında, konuyu kısa ve öz biçimde ifade eden ve en az 75, en fazla 150 kelimedenden oluşan Türkçe "Öz" bulunmalıdır. Öz içinde, yararlanılan kaynaklara, şekil ve çizelge numaralarına değinilmemelidir. Adres/ler den 2 satır boşluk bırakıldıktan sonra, Times New Roman 10 punto, tek satır aralığıyla yazılmalıdır. Özün altında bir satır boşluk bırakılarak, en az 3, en çok 6 sözcükten oluşan anahtar kelimeler verilmelidir. Anahtar kelimeler makale içeriği ile uyumlu ve kapsayıcı olmalıdır. Aynı şekilde makaleler İngilizce bir başlık/title, anahtar sözcükler/keywords ve öz/abstract içermelidir.
- **MSUFBD**'in yayın dili Türkçe ve İngilizcedir.
- Herhangi bir sempozyum veya kongrede sunulmuş olan çalışmalar kongrenin adı, yeri ve tarihi belirtilerek yayımlanabilir. Bir araştırma kurumu veya fonu tarafından desteklenen çalışmalarda desteği sağlayan kuruluşun adı ve proje numarası verilmelidir.
- Makaleler Giriş, Materyal ve Metod, Deneysel Kısım, Gereç ve Yöntem, Tartışma, Sonuç vb. yer alacak şekilde hazırlanmalı ve alt başlıklar ikinci derece başlıklar Times New Roman 10 punto ile sağa hizalı olarak düzenlenmelidir.
- Formüller ve denklemler Math Type ya da Word Denklem Düzenleyici kullanılarak yazılmalıdır.
- Çalışma, dil bilgisi kurallarına uygun olmalıdır. Makalede noktalama işaretlerinin kullanımında, kelime ve kısaltmaların yazımında en son çıkan TDK Yazım Kılavuzu esas alınmalı, açık ve yalın bir anlatım yolu izlenmeli, amaç ve kapsam dışına taşan gereksiz bilgilere yer verilmemelidir. Makalenin hazırlanmasında geçerli bilimsel yöntemlere uyulmalı, çalışmanın konusu, amacı, kapsamı, hazırlanma gerekçesi vb. bilgiler yeterli ölçüde ve belirli bir düzen içinde verilmelidir.
- Bir makalede sırasıyla özet, ana metnin bölümleri, kaynakça ve (varsa) ekler bulunmalıdır. Makalenin bir "Giriş" ve bir "Sonuç" bölümü bulunmalıdır. "Giriş" çalışmanın amacı, önemi, dönemi, kapsamı, veri metodolojisi ve planını mutlaka kapsamalıdır. Konu gerektiriyorsa literatür tartışması da bu kısımda verilebilir. "Sonuç" araştırmanın amaç ve kapsamına uygun olmalı, ana çizgileriyle ve öz olarak verilmelidir. Metinde sözü edilmeyen hususlara "Sonuç"ta yer verilmemelidir. Belli bir düzen sağlamak amacıyla ana, ara ve alt başlıklar kullanılabilir.
- Tablo/Şekillerin numarası ve başlığı bulunmalıdır. Tablo çiziminde dikey çizgiler kullanılmamalıdır. Yatay çizgiler ise sadece tablo içindeki alt başlıkları birbirinden ayırmak için kullanılmalıdır. Tablo/Şekil numarası üste, tam sola dayalı olarak Times New Roman 10 punto yazılmalı; tablo/şekil adı ise, her sözcüğün ilk harfi büyük olacak şekilde yazılmalıdır. Ayrıca tablo/şekiller siyah beyaz baskıya uygun hazırlanmalıdır.
- Makalede, düzenli bir bilgi aktarımı sağlamak üzere ana, ara ve alt başlıklar kullanılabilir. Makale başlığı dışındaki diğer tüm başlıklar 10 punto yazılmalıdır. Birinci derece başlıklar büyük ve koyu karakterde; ikinci derece başlıklar, yalnız ilk harfleri büyük ve koyu olmayan; üçüncü derece başlıklar ise yalnız ilk harfleri büyük, koyu olmayan ve italik harflerle yazılmalıdır. Ayrıca başlıklar, öncesi ve sonrası 6 nk olacak şekilde ayarlanmalıdır.

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

1. BİRİNCİ DERECE BAŞLIK

1.1. İkinci Derece Başlık

1.1.1. Üçüncü Derece Başlık

- Kaynak göstermede makale içerisinde “köşeli parantez içerisinde numara” ile yazılmalıdır. Her kaynak kendi orijinal dilinde verilmelidir. Kaynaklar Times New Roman 9 punto ile yazılmalıdır. Kaynaklar yazılırken sıralama aşağıdaki şekilde olmalıdır:
- Chen Y. R., Chao K., Kim M. S. Machine vision technology for agricultural applications, Computers and Electronics in Agriculture, 36, 173-191, 2002.
- Kumar A. Computer vision based fabric defect detection: a survey, IEEE Transactions on Industrial Electronics, 55, 348-363, 2008.
- Yetis H., Baygin M., Karaköse M. A New Micro Genetic Algorithm Based Image Stitching Approach for Camera Arrays at Production Lines, The 5th International Conference on Manufacturing Engineering and Process (ICMEP 2016), 25-27 May, 2016.
- Aydın I., Karaköse E., Karaköse M., Gençoğlu M.T., Akın E., A New Computer Vision Approach for Active Pantograph Control, IEEE International Symposium on Innovations in Intelligent Systems and Applications (IEEE INISTA 2013), Albena, Bulgaria, 2013.
- Lim S. H. Video-processing applications of high speed cmos image sensors, The Degree of Doctor of Philosophy, Stanford University, 2003.
- **MSUFBD'e** yazım kurallarına uygun olarak gönderilen makaleler, daha sonraki aşamada intihal denetiminden geçirilir. Dergide intihal denetimi iThenticate programı ile yapılmaktadır ve intihal denetiminde kabul edilebilir benzerlik oranı en fazla %20 olmalıdır.
- Yayım aşamasının ilk adımı için makaleler Online Başvuru Sistemi aracılığıyla yollanmalıdır. Başvurunun hemen ardından elektronik posta adresinize otomatik olarak bir onay mesajı gönderilecektir. Daha fazla bilgi için <http://dergipark.gov.tr/msufbd> elektronik adresi aracılığıyla editörümüzle bağlantıya geçilebilir.

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Instructions for Authors

MSUFBD is an international peer-reviewed journal that is published two times a year. The purpose of the journal is to make contributions to publishing qualified academic studies in sciences, basic and engineering areas.

The articles that are published in the journal cannot be published or presented anywhere else unless permission is granted from the editorial board. The articles that are published either partially or completely cannot be used anywhere else unless reference is given. The content of the articles that are sent to the journal has to be authentic, not previously published or sent to be published. The authors of the articles have to have a consensus regarding the list of the names in the article.

If you download the "sample article" that was prepared according to spelling rules and format of the **MSUFBD** Journal from our website through the link for authors to help you prepare the article, this will save your time and facilitate the preparation process. You can also prepare your article by saving this sample as a template on the Microsoft Word program.

- The articles should be in MS Word 2007 or higher version.
- The layout has to be custom-designed (15.5x23 cm). The file format has to be MS Word. The font has to be Times New Roman or a similar one with a size of 10. The file has to have single-line spacing. Page margins have to be 2.5 cm on the top and 2.5 cm for all the other sides. The pages have to be numbered.
- The articles need to include the name(s), surname(s), institutional title(s), institution name(s), and e-mail address(es) of the author(s). In addition, the corresponding author has to be indicated in the articles. The font has to be Times New Roman with a size of 10 and single line spacing.
- The title of the article has to be consistent with the content and must reflect the content in the best way possible. The title has to be boldface with a font size of 12. The first letter of all the words has to be uppercase. The title has to be centered. The articles need to have an English title with the same properties.
- The article needs to include an "Abstract" at the beginning not less than 75 words nor longer than 150 words summarizing the content in the most precise and concise way. The abstract must not include references, figures, and table numbers. Leaving a space under the abstract, the author has to add keywords including at least 3 and utmost 6 words. The keywords have to be consistent with the content and need to be comprehensive. Similarly, the articles have to include an English title, keywords, and abstract.
- **MSUFBD** is published in Turkish and English.
- The works that are presented in any symposium or congress can be published after specifying the name, place and the date of the congress. The works that are supported by a research organization or fund have to indicate the name of the supportive organization and the number of project.
- The articles have to be organized as introduction, body, experimental, result and discussion and conclusion. Sub-titles and lower-level titles have to have a font size of 10 and be right-aligned.
- Formulas and equations need to be written via Math Type or Word Equation Editor.
- The study has to comply with grammatical rules. The latest Turkish Language Association Spell Check has to be employed regarding the use of punctuation, spelling of the words, and abbreviations. The text is expected to be clear and simple. No expressions out of purpose and scope must be included in the work. The valid scientific methods have to be employed to prepare the article. The content, purpose, scope, justification, etc. of the study have to be provided as much as needed in a certain order.
- An article is expected to include abstract, sections of the main text, references, and appendices (if there is any) respectively. An article has to have an "Introduction" and "Conclusion" sections. The "Introduction" is definitely expected to include the purpose, importance, period, scope, data methodology, and outline of the study. If it is necessary for the subject to be dealt with, literature review can be given in this section as well. The "conclusion" needs to be in compliance with the study's purpose and scope. It needs to be given generally and concisely. The points that are not mentioned within the text must not be included in "conclusion". Headings, titles, and sub-titles can be used to organize the text.
- Tables/Figures need to be numbered and given with their titles. No vertical lines must be used to draw the tables. Horizontal lines can only be used to separate the sub-titles within the table from each other. Table/Figure number has to be at the top left-aligned and non-Italic with Times New Romans 10 font. The name of tables/figures has to be written with each word having its first letter uppercase. In addition, tables/figures have to comply with black and white print. If there is anything in the table that requires reference, the references must be given at the bottom of the table with in-text reference format.
- Headings, titles, and sub-titles can be used to ensure an ordered information transfer. All the other titles except for the title of the article have to have a font size of 10. First-level titles need to be uppercase and boldface; the first letters of

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

all the words in the second-level titles need to be uppercase and not boldface; and only the first letters of the words in the third-level titles need to be uppercase, and these titles have to be italic. In addition, the titles have to be organized with 6 nk before and after the title.

1. FIRST-LEVEL TITLE

1.1. Second-Level Title

1.1.1. Third-level Title

(i) The reference should be marked with "number in square brackets" in the article. Each reference must be given in its original language. The references should be written in Times New Roman 9 point. When writing the references, the sequence should be as follows:

- Chen Y. R., Chao K., Kim M. S. Machine vision technology for agricultural applications, Computers and Electronics in Agriculture, 36, 173-191, 2002.
 - Kumar A. Computer vision based fabric defect detection: a survey, IEEE Transactions on Industrial Electronics, 55, 348-363, 2008.
 - Yetis H., Baygin M., Karaköse M. A New Micro Genetic Algorithm Based Image Stitching Approach for Camera Arrays at Production Lines, The 5th International Conference on Manufacturing Engineering and Process (ICMEP 2016), 25-27 May, 2016.
 - Aydın I., Karaköse E., Karaköse M., Gençoğlu M.T., Akın E., A New Computer Vision Approach for Active Pantograph Control, IEEE International Symposium on Innovations in Intelligent Systems and Applications (IEEE INISTA 2013), Albena, Bulgaria, 2013.
 - Lim S. H. Video-processing applications of high speed cmos image sensors, The Degree of Doctor of Philosophy, Stanford University, 2003.
- The manuscripts that comply with the publication principles of anemon are passed through plagiarism checking. The journal uses the Ithenticate software to detect instances of overlapping and similar text in submitted manuscripts. If the similarity level is above %20, the manuscript is not accepted for publication.
 - The articles are sent through Online Application System for the first step of the publication. An automatically-sent confirmation message is sent to your e-mail address upon the completion of the application. For further information, please contact the editor via <http://dergipark.gov.tr/msufbd>.

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Değerlendirme Süreci

- **MSUFBD'e** gönderilen yazılar, önce Yayın Kurulunca dergi ilkelerine uygunluk açısından bir ön değerlendirmeye tabi tutulur. Dergi kapsamına girmeyen veya bilimsel bir yazı formatına içerik ve şekil şartları açısından uymayan yazılar, hakemlik süreci başlatılmadan geri çevrilir ya da bazı değişiklikler istenebilir. Yayın için teslim edilen makalelerin değerlendirilmesinde akademik tarafsızlık ve bilimsel kalite en önemli ölçütlerdir.
- **MSUFBD'e** yayın kurallarına uygun olarak gönderilen makaleler, daha sonraki aşamada intihal denetiminden geçirilir. Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi'nde intihal denetimi, Ithenticate paket programı aracılığıyla gerçekleştirilmekte ve intihal denetiminde, benzerlik oranının %20'nin üstüne çıkmaması gerekmektedir. İlgili çalışmada herhangi bir intihale rastlanmadığı takdirde değerlendirilmek üzere o alandaki çalışmalarıyla tanınmış iki hakeme gönderilir. **MSUFBD** Dergisi, sürecin her aşamasında, hakem ve yazarların isimlerinin saklı tutulduğu çift-kör hakemlik sistemini kullanmaktadır. Hakem raporlar beş yıl süreyle saklanır. Makaleyi değerlendiren iki hakemden birisinin olumlu diğerinin olumsuz rapor vermesi durumunda makale üçüncü hakeme gönderilmekte veya Yayın Kurulu, hakem raporlarını inceleyerek nihai kararı vermektedir.
- **MSUFBD'e** gönderilen çalışmalarda yazarlar, hakem ve Yayın Kurulunun eleştiri ve önerilerini dikkate alırlar. Katılmadıkları hususlar varsa gerekçeleriyle birlikte itiraz etme hakkına sahiptirler. Dergideki hakemlik sürecinde, akademik unvana sahip kişilerin yayınları için ancak eşit ya da üst derecede akademik unvana sahip kişiler hakem olabilir.
- **MSUFBD'e** hakem değerlendirme süreci, istenilmeyen nedenlerden dolayı bazen uzun sürebilmektedir. Normal koşullarda editör tarafından ön değerlendirme aşaması bir hafta; hakem değerlendirme süreci de 8 hafta olarak planlanmaktadır. Ancak hakemlerden zamanında dönüş olmaması nedeniyle yeniden hakem atama vb. nedenlerden dolayı hakem değerlendirme süreci uzayabilmektedir.
- **MSUFBD'e** makale gönderen yazar/yazarlar, Derginin söz konusu hakem değerlendirme koşullarını ve sürecini kabul etmiş sayılırlar.
- **MSUFBD'de** yayımlanmasına karar verilen (kabul edilen) çalışmaların telif hakkı, Muş Alparslan Üniversitesi'ne devredilmiş sayılır.

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Peer Review Process

- The papers that are sent to **MSUFBD** are subjected to preliminary assessment by the Editorial Board to see whether the work complies with the principles of the journal. The papers that are out of the scope of the journal or do not comply with the format of a scientific text either in terms of content or style are either rejected or demanded to be corrected prior to peer-review process. Academic objectivity and scientific quality are the most important criteria for the assessment of the articles that are submitted to be published.
- The articles that comply with the publication principles of **MSUFBD** are passed through plagiarism checking. Journal of Social Sciences of Muş Alparslan University uses the iThenticate software to detect instances of overlapping and similar text in submitted manuscripts. The journal allows an overall similarity of 20% for a manuscript to be considered for publication. After determining an acceptable similarity rate, the article is sent to two reviewers who are known for their studies in the relevant field. **MSUFBD** employs double-blind review system in which the names of neither the reviewers nor the authors are disclosed in any of the phases of the process. Reviewer reports are saved for five years. If one of the reviewers gives positive feedback while the other gives negative feedback, the article is either sent to a third reviewer or Editorial Board examines the reviewer reports to make the final decision.
- The authors submitting papers to **MSUFBD** take into account the criticisms and suggestions of the reviewers and the Editorial Board. The authors also have the right to object to the points with which they disagree. In the reviewing process, the publications of people with academic titles are only reviewed by academics of either an equal or a higher degree.
- Assessment process of **MSUFBD** may sometimes take long periods of time due to undesired reasons. Normally, preliminary assessment by the editor takes a week while reviewer's assessment period takes 8 weeks. However, reviewer assessment process may get longer when reviewers do not respond on time or in cases of appointing a new reviewer and so on.
- The author/authors submitting papers to **MSUFBD** is/are considered to have accepted the aforementioned reviewing conditions and process of the journal.
- The copyrights of the works that are decided to be published (accepted) in **MSUFBD** is transferred to Muş Alparslan University.

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Yayın İlkeleri

- **MSUFBD**, ulusal ve uluslararası düzeyde yapılan, fen, temel alanlar ve mühendislik bilimleri alanında özgün ve nitelikli çalışmaları, bilimsel bir yaklaşımla ele alarak fen bilimler alanlarındaki çalışmaların niteliğinin yükselmesine, yöntem ve uygulamaların gelişmesine, kuram ve uygulama alanlarındaki çalışmalar arasında iletişimin güçlenmesine ve fen bilimleri alanındaki literatürün zenginleşmesine katkı sağlamak amacıyla yayımlanmaktadır.
- **MSUFBD**'e, matematik, fizik, kimya, biyoloji, çevre bilimi, sağlık, eczacılık, mühendislik bilimleri vb. tüm fen bilimlerine ait özgün ve nitelikli bilimsel çalışmaları destekleyerek bilim camiasında üretilen bilgileri akademisyenlerin ve kamuoyunun istifadesine sunmak amacıyla yeni ve özgün çalışmalara yer verilmektedir.
- **MSUFBD**'e gönderilecek çalışma, alanında bir boşluğu dolduracak özgün bir yazı olmalı ya da daha önce yayımlanmış çalışmaları değerlendiren, konuya dair yeni ve dikkate değer görüşler ortaya koyan inceleme olmalıdır.
- **MSUFBD**'e gönderilecek yazılar makale, çeviri ve kitap tanıtımı türünde olmalıdır. Dergimize gönderilen çeviri yazılar için, makale sahibinin yayın izni ve orijinal metin gereklidir.
- **MSUFBD**'e yayın dili Türkçe ve İngilizce'dir.
- **MSUFBD**'e gönderilen çalışmalar daha önce hiçbir yerde yayımlanmamış ve halihazırda yayımlanmak üzere sunulmamış olmalıdır. Bilimsel bir toplantıda sunulmuş bildiriler, durum açıkça belirtilmek şartıyla dergiye gönderilebilir.
- **MSUFBD**'e Kış/Aralık ve Yaz/Haziran sayısı olmak üzere yılda iki defa düzenli olarak yayımlanmaktadır.
- **MSUFBD**'e gönderilen yazılara telif hakkı ödenmez. Yayımlanan makalelerin telif hakkı Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimler Dergisi'ne aittir.
- **MSUFBD**'de yayımlanan yazıların bilimsel ve hukuki sorumluluğu yazarlarına aittir.
- **MSUFBD**'de yer alan yazılardaki görüş ve düşünceler yazarlarının kişisel görüşleri olup derginin ve bağlı olduğu kurumların görüşlerini yansıtmaz.
- **MSUFBD**'e gönderilen çalışmalar, TÜBİTAK ULAKBİM'in DergiPark Sistemi (UDS) üzerinden elektronik ortamda gönderilmektedir. Bu sisteme <http://dergipark.gov.tr/msufbd> da yer alan "Kullanıcı Sayfası/Yeni Gönderi" linkinden ulaşılabilir. Söz konusu sisteme kayıt yapıp makale gönderildikten sonra hakem süreciyle ilgili gelişmeler ve hakem değerlendirme raporları yazarlar tarafından kolaylıkla takip edilebilir.

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Editorial Principles

- **MSUFBD** is a national and international peer-reviewed journal that publishes authentic and qualified works with a scientific approach in the fields of science, basic and engineering sciences. It is published to contribute to raising the quality of the social sciences studies, development of methods and practices, to strengthen the communication between theoretical and practical studies, and to enrich the science literature.
- **MSUFBD** supports all the authentic and qualified scientific studies in the science fields including maths, physic, chemistry, biology, health, pharmacy, engineering sciences *etc.* It publishes new and authentic works to offer the knowledge produced by scientific circles for the benefit of academics and public.
- The works that are sent to **MSUFBD** must be both an authentic work to eliminate a lack in the literature or a review assessing the previously-published works and suggesting relevant, new, and noteworthy opinions.
- The texts that are sent to **MSUFBD** include articles, translations, and book promotions. For the translated texts, publication permission of the owner of the article and the source text are required.
- Publication languages of **MSUFBD** are Turkish and English.
- The works that are sent to **MSUFBD** must not be published previously anywhere. They have to be ready for publication. The papers that have previously been presented in a scientific meeting can be sent to the journal if it is clearly indicated.
- **MSUFBD** is regularly published in Winter/December and Summer/June per year.
- No copyright payment is made for the papers that are sent to **MSUFBD**. The copyrights of the works that are published in **MSUFBD** are transferred to Mus Alparslan University Journal of Science.
- Scientific and legal liabilities of the articles published in **MSUFBD** belong to the authors.
- All the opinions and ideas indicated in the articles that are published in **MSUFBD** are authors' personal opinions and do not reflect the opinions of the Journal or the affiliated institutions by any means.
- The works that are sent to **MSUFBD** are sent to TUBITAK ULAKBIM's DergiPark System (UDS) in electronical environment. This system can be accessed via <http://dergipark.gov.tr/msufbd> under the link "User Page/New Submission". After registering in the system and submitting the paper, the developments regarding the reviewing process and reviewer reports can be followed by the authors.

MSUFBD
Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi
Mus Alparslan University Journal of Science

Yazışma Adresi / Address

Muş Alparslan Üniversitesi
MSUFBD Dergi Editörlüğü

Muş Alparslan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
49250 – MUŞ/TÜRKİYE

Tel: 0 436 249 49 49 / 3671 - Fax: 0 436 213 00 28

Web: <http://dergipark.gov.tr/msufbd>

e-mail: msufbd@alparslan.edu.tr