



Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

ISSN:2148-6840

December-2021

Volume:8 Issue:2

www.cjoscience.com



ISSN
2148-6840

www.cjscience.com

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

December 2021 Volume: 8 Issue: 2

AMAÇ VE KAPSAM

Caucasian Journal of Science Dergisi 2014 yılından bu yana aralıksız olarak yayınlanan uluslararası hakemli bir dergidir. Dergi, haziran ve aralık aylarında olmak üzere yılda iki kez yayınlanmaktadır. Caucasian Journal of Science dergisinin amacı; fen bilimleri, fen eğitimi, mühendislik ve sağlık alanlarında, araştırma makaleleri, kısa bildirimler, olgu sunumları, derleme yazıları ve editöre mektuplar yayınlanmak ve bu sayede akademik çalışmalara destek sağlamaktır. Fen bilimleri, fen eğitimi, mühendislik ve sağlık alanlarında, araştırma makaleleri, kısa bildirimler, olgu sunumları, derleme yazıları ve editöre mektuplar gibi akademik çalışmaların bağımsız ve ön yargısız olarak değerlendirilmesi en önemli ilkemizdir. Bu sebeple, çift kör hakemlik sistemi uygulanmakta ve gerekli durumlarda üçüncü hakeme müracaat edilmektedir. Yazıların değerlendirilmesinde ICMJE standartları gözetilir. Yayınlanan yazıların tam metinlerine erişim ücretsizdir. Dergimizin etik politikası gereği, intihal tolere edilemez. Dergimize yayımlanmak üzere gönderilen tüm makalelerin içeriği, intihal denetimi yazılımı ile kontrol edilmektedir.

TARANDIĞIMIZ İNDEKSLER





ISSN
2148-6840


www.cjscience.com

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

December 2021 Volume: 8 Issue: 2

EDİTÖR KURULU

| | | | | | |
|---|---|--|---|---|--|
|  Prof. Dr. Muzaffer Alkan Editör |  Doç. Dr. Murat Beytur Editör Yardımcısı |  Doç. Dr. Öğretim Üyesi Tufan İnaltekin Editör Yardımcısı |  Prof. Dr. Yaşar Nuhoglu Mühendislik Alan Editörü |  Dr. Öğretim Üyesi Zeynep Şilan Turhan Uygulamalı Kimya Alan Editörü |  Prof. Dr. Özlem Gürsoy Kol Kimya Alan Editörü |
|  Doç. Dr. Nigar Yıldırım Aksoy Matematik Alan Editörü |  Doç. Dr. Özlem Karabulutlu Sağlık Bilimleri Alan Editörü |  Doç. Dr. Volkan Göksu Fen Eğitimi Alan Editörü |  Doç. Dr. Faik Özgür Karataş Kimya Eğitimi Alan Editörü |  Dr. Öğretim Üyesi Güventürk Uğurlu Fizik Alan Editörü |  Dr. Öğretim Üyesi Perihan Akbaş Biyoloji Alan Editörü |
| |  Öğretim Görevlisi Catherine Akça Dil Editörü |  Arş. Gör. Mükremin Durmuş İletişim ve Yayın Editörü | | | |



ISSN
2148-6840

www.cjoscience.com

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

December 2021 Volume: 8 Issue: 2

HAKEM KURULU

| | |
|-------------------------------------|---|
| Prof. Dr. Ahmet ÇOLAK | Karadeniz Technical University Faculty of Science |
| Prof. Dr. Ahmet Zeki SAKA | Trabzon University Fatih Education Faculty |
| Prof. Dr. Anahit COŞKUN | Haliç University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Ayda ÇELEBİOĞLU | Mersin University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Ayfer TEZEL | Ankara University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Ayşe OKANLI | İstanbul Medeniyet University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Behice ERÇİ | İnönü University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Bülent ŞAHİN | Trabzon University Fatih Education Faculty |
| Prof. Dr. Duygu ARIKAN | Atatürk University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Elanur YILMAZ KARABULUTLU | Atatürk University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Emel EGE | Necmettin Erbakan University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Emine KIYAK | Atatürk University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Ergül ASLAN | İstanbul Univ. Florence Nightingale Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Evşen NAZİK | Çukurova University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Evşen NAZİK | Çukurova University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. F. Deniz SAYINER | Eskişehir Osmangazi University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Fatma ŞAHİN | Marmara University Atatürk Education Faculty |
| Prof. Dr. Gabil YAGUB | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Prof. Dr. Gökhan DEMİRCİOĞLU | Trabzon University Fatih Education Faculty |
| Prof. Dr. Haluk ÖZMEN | Trabzon University Fatih Education Faculty |
| Prof. Dr. Haydar YÜKSEK | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Prof. Dr. Hümeysra BATI | Ondokuz Mayıs University Science and Literature Faculty |
| Prof. Dr. Lale CERRAH ÖZSEVGEÇ | Trabzon University Fatih Education Faculty |
| Prof. Dr. Mağfiret KAŞIKÇI | Atatürk University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Mehmet KÜÇÜK | Recep Tayyip Erdoğan University Education Faculty |
| Prof. Dr. Melek Nihal ESİN | İstanbul University Florence Nightingale Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Mevlüt KARABULUT | Gebze Technical University Faculty of Basic Sciences |
| Prof. Dr. Miraç OCAK | KTU Science and Literature Faculty |
| Prof. Dr. Miraç OCAK | Karadeniz Technical University Science Faculty |
| Prof. Dr. Muhittin YILMAZ | Sinop University Health Services Vocational School |
| Prof. Dr. Mustafa EROL | Dokuz Eylül University Buca Education Faculty |
| Prof. Dr. Mustafa KANDEMİR | Amasya University Education Faculty |
| Prof. Dr. Nadiye ÖZER | Atatürk University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Nejlâ YÜRÜK | Gazi University Gazi Education Faculty |
| Prof. Dr. Nevin ŞAHİN | İstanbul University Florence Nightingale Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Neziha KARABULUT | Atatürk University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Onur ATAKIŞI | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Prof. Dr. Orhan KARAMUSTAFAOĞLU | Amasya University Education Faculty |
| Prof. Dr. Öznur ERGEN AKÇİN | Ordu University Science and Literature Faculty |
| Prof. Dr. Öznur ERGEN AKÇİN | Ordu University Science and Literature Faculty |
| Prof. Dr. Papatya KARAKURT | Erzincan Binali Yıldırım University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Reva BALCI AKPINAR | Atatürk University Nursing Faculty |
| Prof. Dr. Selçuk GÜMÜŞ | Yüzüncü Yıl University Faculty of Science |
| Prof. Dr. Serap ALTUNTAŞ | Bandırma Onyeddi Eylül University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Sevban ARSLAN | Çukurova University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Sevilay KARAMUSTAFAOĞLU | Amasya University Education Faculty |
| Prof. Dr. Tülay YAVAN | İzmir University of Economics Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Türkan PASİNLİOĞLU | Sanko University Health Sciences Faculty |
| Prof. Dr. Yaşar AKKAN | Trabzon University Fatih Education Faculty |
| Assoc. Prof. Arzu ÖNEL | Kafkas University Education Faculty |
| Assoc. Prof. Aslı SİS ÇELİK | Ataturk University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Dilek GÜRÇAYIR | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Elif KARAHAN | Bartın University Health Sciences Faculty |



ISSN
2148-6840

www.cjoscience.com

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

December 2021 Volume: 8 Issue: 2

| | |
|---------------------------------------|--|
| Assoc. Prof. Emine HATUN DİKEN | Kafkas University Education Faculty |
| Assoc. Prof. Funda ÇETİNKAYA | Aksaray University Health Sciences Faculty |
| Assoc. Prof. Funda ÖZDEMİR | Ankara University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Gökhan BİLİR | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Assoc. Prof. Gülay İPEK ÇOBAN | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Gülçin AVŞAR | Atatürk University Health Sciences Faculty |
| Assoc. Prof. Gülçin BİLGİCİ | Kafkas University Science and Literature |
| Assoc. Prof. Hacı Ahmet DEVECİ | Gaziantep University Health Sciences Faculty |
| Assoc. Prof. Hava ÖZKAN | Atatürk University Health Sciences Faculty |
| Assoc. Prof. Hüseyin ERTAP | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Assoc. Prof. Kerime Derya BEYDAĞ | İstanbul Okan University Faculty of Health Sciences |
| Assoc. Prof. Mehtap KAVURMACI | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Metin ÖĞÜN | Kafkas University Medicine Faculty |
| Assoc. Prof. Murat KURT | Amasya University Education Faculty |
| Assoc. Prof. Nazlı HACIALIOĞLU | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Nur AKCANCA | Çanakkale Onsekiz Mart University Education Faculty |
| Assoc. Prof. Nuray DAYAPOĞLU | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Serdar SARITAŞ | İnönü University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Seyhan ÇITLIK SARITAŞ | İnönü University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Sibel AŞI KARAKAŞ | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assoc. Prof. Şeyda GÜL | Atatürk University Kazım Karabekir Education Faculty |
| Assoc. Prof. Taha Yasin ÖZTÜRK | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Assoc. Prof. Uğur AKBABA | Kafkas University Education Faculty |
| Assoc. Prof. Yeşim YAMAN AKTAŞ | Giresun University Health Sciences Faculty |
| Assoc. Prof. Zeynep YÜCE | Kafkas University Dede Korkut Education Faculty |
| Assist. Prof. Ahmet HARMANKAYA | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Assist. Prof. Ayşe AYDIN | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assist. Prof. Ayşegül YAYLA | Atatürk University Nursing Faculty |
| Assist. Prof. Betül AKTAŞ | İzmir Katip Çelebi University Health Sciences Faculty |
| Assist. Prof. Eray ATALAY | Kafkas University Medicine Faculty |
| Assist. Prof. Fatma GENÇ | Giresun University Health Sciences Faculty |
| Assist. Prof. Fatma TOYOĞLU | Erzincan Binali Yıldırım Unv. Science and Literature Faculty |
| Assist. Prof. Gülname GÜVENDİ | Recep Tayyip Erdoğan University Medicine Faculty |
| Assist. Prof. Güventürk UĞURLU | Kafkas University Science and Literature Faculty |
| Assist. Prof. Hatice DURMAZ | Atatürk University Health Sciences Faculty |
| Assist. Prof. Hilal MEDETALİBEYOĞLU | Kafkas University Science and Literature |
| Assist. Prof. Julianne A. WENNER | Boise State University Faculty of Staff |
| Assist. Prof. Kıymet YEŞİLÇİÇEK ÇALIK | Karadeniz Technical University Health Sciences Faculty |
| Assist. Prof. Mine EKİNCİ | Ataturk University Nursing Faculty |
| Assist. Prof. Özlem DEMİREL BOZKURT | Ege University Nursing Faculty |
| Assist. Prof. Ryan NIXON | Brigham Young University Department of Teacher Education |
| Assist. Prof. Sara P. RAVEN | Texas A&M Unv. Department Teaching Learning and Culture |
| Assist. Prof. Serap SÖKMEN | Erzincan Binali Yıldırım University Health Sciences Faculty |
| Assist. Prof. Shannon SUNG | Spelman College Institute for Future Intelligence |
| Assist. Prof. Sibel ÖZTÜRK | Ataturk University Health Sciences Faculty |
| Assist. Prof. Sonay BİLGİN | Ataturk University Nursing Faculty |
| Assist. Prof. Vanessa KLEİN | Montclair State University Science Education |
| Assist. Prof. Vembu ANANTHASWAMY | Madura College Department of Mathematics |
| Assist. Prof. Zafer OCAK | Kafkas University Dede Korkut Education Faculty |
| Assist. Prof. Zehra DEMET ÜS | Atatürk University Health Sciences Faculty |
| Assist. Prof. Zeynep TURHAN IRAK | İğdir University Engineering Faculty |



ISSN
2148-6840

www.cjoscience.com

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

December 2021 Volume: 8 Issue: 2

BU SAYININ HAKEMLERİ

| | |
|-----------------------------------|---------------------------------------|
| Prof. Dr. SİMGE ZEYNELOĞLU | Gaziantep Üniversitesi |
| Prof. Dr. Selçuk GÜMÜŞ | Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi |
| Prof. Dr. Fatih İSLAMOĞLU | Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi |
| Doç. Dr. MUSTAFA ÜREY | Trabzon Üniversitesi |
| Doç. Dr. Tufan İNALTEKİN | Kafkas Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi Fatma USLU ŞAHAN | Hacettepe Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi Zeliha DOĞAN | Altınbaş Üniversitesi |
| Öğr. Gör. Dr. Serkan SUGEÇTİ | Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi |
| Öğr. Gör. Dr. Utku DURAN | Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi RECEP ÖZ | Erzincan Binali Yıldırım Üniversitesi |
| Doç. Dr. Solmaz AYDIN BEYTUR | Kafkas Üniversitesi |
| Öğr. Gör. Dr. Hakan TÜFEK | Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi Fatih ŞEN | Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi İpek ADA ALVER | Altınbaş Üniversitesi |
| Doç. Dr. Arzu ÖNEL | Kafkas Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi Meva BAYRAK KARSLI | Atatürk Üniversitesi |
| Doç. Dr. Rövsen GULİYEV | Ardahan Üniversitesi |
| Doç. Dr. Ceyran AHMEDOVA | Adıyaman Üniversitesi |
| Prof. Dr. Şükrü KARATAŞ | Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi |
| Doç. Dr. Hacı ÖZİŞİK | Aksaray Üniversitesi |
| Arş. Gör. Ebru YÜKSEL | Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi |
| Doç. Dr. Murat ÇAĞLAR | Atatürk Üniversitesi |
| Doç. Dr. Ahmet KUNDURACIOĞLU | Uludağ Üniversitesi |
| Doç. Dr. Onur AKYILDIRIM | Kafkas Üniversitesi |
| Doç. Dr. Abdullah ÖZKAN | İskenderun Teknik Üniversitesi |
| Doç. Dr. Pınar AKSU KILIÇLE | Kafkas Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi Safiye KAFADAR | Adıyaman Üniversitesi |
| Arş. Gör. Dr. Pınar GÜLLER | Atatürk Üniversitesi |
| Dr. Öğr. Üyesi ŞENGÜL | Bayburt Üniversitesi |

İLETİŞİM

| | |
|--|---|
| Yazışma Adresi/Adress Kafkas Üniversitesi Dede Korkut Eğitim Fakültesi 36040-KARS | Tel/Phone 0 474 225 12 59/1350 web: www.cjoscience.com |
| EDİTÖR / EDITOR Prof. Dr. Muzaffer ALKAN E-mail: muzafferalkan61@gmail.com Telefon/Phone: 05053454561 | Teknik İletişim / Technical Contact Assoc. Prof. Dr. Murat BEYTUR E-mail: muratbeytur83@gmail.com Telefon/Phone: 05062790686 |



ISSN
2148-6840

www.cjoscience.com

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

December 2021 Volume: 8 Issue: 2

İÇERİK

| No | Makale | Makale Türü | Alanı | Sayfa |
|----|---|--------------------|--|---------|
| 1 | Male Attitudes in Kars, Turkey Toward Violence Against Women Mehmet UTKAN, Rukiye TÜRK DELİBALTA | Araştırma Makalesi | Sağlık | 108-122 |
| 2 | Fen Bilimleri Eğitiminde Artırılmış Gerçekliğe İlişkin Çalışmaların Analizi Murat Tolga KAYALAR, Gizem BARAN | Araştırma makalesi | Bilgisayar Teknolojileri | 123-138 |
| 3 | Influence of <i>Citrobacter freundii</i> Infection on Ion Levels of Model Organism <i>Galleria mellonella</i> Larvae Serkan SUGEÇTİ | Araştırma Makalesi | Biyoloji | 139-147 |
| 4 | Conformational and Vibrational Analysis of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one by Density Functional Theory and <i>ab initio</i> Hartree-Fock Güventürk UĞURLU | Araştırma Makalesi | Fizik | 148-164 |
| 5 | Neighborhoods of Certain Classes of Analytic Functions Defined By Miller-Ross Function Sercan KAZIMOĞLU | Araştırma Makalesi | Matematik | 165-172 |
| 6 | Naphthoquinones from <i>Onosma</i>: Molecular Mechanisms of Action in the Treatment and Prevention of COVID-19 Namık KILINÇ | Araştırma Makalesi | Sağlık | 173-184 |
| 7 | Bazı Organik Elektrolüminesans 2-[3-(Metil/Etil/p-Metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-yl]-izoindolin-1,3-dionlar'ın Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile Elektronik Özelliklerinin Belirlenmesi Murat BEYTUR, Zeynep TURHAN, Haydar YÜKSEK | Araştırma makalesi | Kimya | 185-197 |
| 8 | Thermal Camera Use for Evaluation of Patients and Injured in Chemical, Biological, Radiological, Nuclear Events Çağatay KADIRSOY, Gökhan NUR, Hüseyin KAFADAR | Derleme | Sağlık Bilimleri, Mühendislik | 198-208 |
| 9 | (4-Carbamoylphenyl)Boronic Acid: A DFT Study On The Structural And Spectral Properties Ahmet KUNDURACIOĞLU | Araştırma Makalesi | Kimya | 209-223 |
| 10 | Fen Bilimleri Dersi 5. Sınıf "Işığın Yayılması" Ünitesine Yönelik Başarı Testi Geliştirme Çalışması Serkan SEVİM, İsmail UYSAL, Emin DEMİRCİ | Araştırma Makalesi | Fen Bilgisi Eğitimi | 224-246 |
| 11 | Öğretmenlerin Uzaktan Eğitime Yönelik Algı ve Tutumları Cengiz GÜNDÜZALP | Araştırma Makalesi | Uzaktan Eğitim | 247-271 |
| 12 | Kobalt(II) 4-Floro- ve 4-Bromobenzoat Nikotinamid Komplekslerinin Hirshfeld Yüzey Analizi, Etkileşim Enerjisi Hesaplamaları ve Koronavirüs Spike Proteini ile Etkileşimlerinin Moleküler Docking Çalışmaları ile İncelenmesi Füreyâ Elif ÖZTÜRKKAN, Giray Buğra AKBABA, Mustafa SERTÇELİK | Araştırma Makalesi | İnorganik Kimya, Teorik Kimya, Biyoloji, Farmakoloji | 272-291 |



ISSN
2148-6840

www.cjoscience.com

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

December 2021 Volume: 8 Issue: 2

| | | | | |
|----|---|-----------------------|----------|---------|
| 13 | Investigation of The Activity of Lipase Variants on Different 4-Nitrophenyl Esters by Spectrophotometric Assay | Araştırma Makalesi | Biyoloji | 292-303 |
| | Nurcan VARDAR YEL | | | |



Male Attitudes in Kars, Turkey Toward Violence Against Women

Mehmet UTKAN¹, Rukiye TÜRK DELİBALTA²

Makalenin Alanı: Sağlık

| Makale Bilgileri | Öz |
|---|---|
| Geliş Tarihi 21.01.2021 | Bu araştırma, Türkiye'nin Kars ilinde yaşayan erkeklerin kadına yönelik şiddete yönelik tutumlarını belirlemek amacıyla yapılmıştır. Tanımlayıcı ve kesitsel tipteki bu araştırma Ocak-Mart 2019 tarihleri arasında yapılmıştır. Araştırmanın örneklemini 380 erkek birey oluşturmuştur. Araştırmanın verilerinin toplanmasında "Sosyodemografik Özellikler" formu ve "İSKEBE Kadına Yönelik Şiddete Yönelik Tutum Ölçeği" kullanılmıştır. Araştırmamızda erkeklerin kadına yönelik şiddete karşı olduğu belirlendi. Bulgulara göre araştırmaya katılanların %43,9'u çocukluk döneminde şiddete tanık olmuştur. Ayrıca evlilerde, 46 yaş ve üzeri, ilkokul mezunu erkeklerde ve çocukluk döneminde şiddete tanık olmuş erkeklerde kadına yönelik şiddete yönelik tutumların yüksek olduğunu bulduk. Kadına yönelik şiddetle mücadele için ailelere ve bireylere sağlık personeli ve bu alanda uzman kişiler, sivil toplum kuruluşları ve toplumda tanınmış dini liderler tarafından düzenli eğitim ve öğretim sağlanmalıdır. Halkın aile içi şiddet konusunda düzenli eğitim ve öğretiminin amacı, kadın ve çocukların ve toplumun tüm üyelerinin sağlığını geliştirmek ve korumaktır. Ayrıca şiddet uygulayan erkeklere yönelik psikososyal ve hukuki yaklaşımları destekleyecek programlar geliştirilmelidir. |
| Kabul Tarihi 23.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Erkek tutumları Şiddete maruz kalma Kadın Hemşirelik | |

| Article Info | Abstract |
|--|---|
| Received 21.01.2021 | This research was conducted to determine the attitudes of men living in Kars, Turkey, towards violence against women. This descriptive and cross sectional study was conducted between January and March 2019. The study sample consisted of 380 male individuals. In data collection for the study, the "Sociodemographic Characteristics" form and "İSKEBE Scale of Attitudes Toward Violence Against Women" were used. Our study determined that men are against violence toward women. According to the findings, 43,9% of study participants had witnessed violence during childhood. We also found that attitudes toward violence against women were high in married, individuals aged 46 and above, men with primary school education and men who had witnessed violence during childhood. To combat violence against women, regular training and education should be provided to families and individuals by health personnel and experts in this field, non-governmental organizations and recognized religious leaders in the community. The goal of regular training and education of the public concerning the topic of domestic violence is to promote and protect the health of women and children and all members of society. In addition, programs should be developed which would support psychosocial and legal approaches for men who commit violence. |
| Accepted 23.12.2021 | |
| Keywords Male attitudes Violence exposure Women Nursing | |

¹ Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü-Kars; e-mail: mehmetutkan-36@hotmail.com; ORCID: 0000-0003-4362-6903

² Kafkas Üniversitesi Sağlık Bilimleri Fakültesi Doğum ve Kadın Sağlığı Hemşireliği Bölümü-Kars; e-mail: rahsantur@gmail.com; ORCID: 0000-0002-1424-1564 (Sorumlu yazar)

1. INTRODUCTION

Violence is an ever-increasing public health problem throughout the world and can be seen in all aspects of human life. The World Health Organization (WHO) defines violence as “the intentional use of physical force or power, threatened or actual, against oneself, another person, or against a group or community, that either results in or has a high likelihood of resulting in injury, death, psychological harm, maldevelopment or deprivation” (WHO, 1996). Violence against women is defined as “any act of gender-based violence that results in, or is likely to result in, physical, sexual or psychological harm or suffering to women, including threats of such acts, coercion or arbitrary deprivation of liberty, whether occurring in public or in private life” (United Nations (UN) General Assembly, 1993). Violence against women is common in every society, regardless of geographical boundaries, economic development and level of education, due to women's powerlessness in the social sense (Directorate General on the Status of Women, 2012-2015;).

According to a study by the World Health Organization in 10 countries, women are exposed to various types of violence. These include physical (13-61%), sexual (6-59%), physical/sexual (15-71%), and emotional (20-75%) abuses against women (Garcia-Moreno et al, 2005). The rates of women who are exposed to physical and/or sexual violence by their spouses were 15% in Japan (Garcia-Moreno et al, 2005), and 68% in Kiribati (Asian Development Bank, 2016). A study in eastern India found that 16% of women experienced physical violence, and 25% experienced sexual violence by their spouses (Babu and Kar, 2010). In other research, one-third of women in China and Vietnam, and more than half of women in Papua New Guinea and Vanuatu have been reported to experience physical violence by a spouse (Parish et al, 2004; General Statistics Office (GSO) of Viet Nam, 2010; Lewis et al, 2008). One Turkish study found that 45.8% of women had experienced verbal violence, and 20.8% stated that they had been exposed to verbal and physical violence. Furthermore, 16.7% of these women reported verbal, physical, and sexual violence (Turk et al, 2017). Another study found that 38% of married women had been subjected to physical violence, 12% to sexual and 44% to emotional violence by their spouse or partner (Research of Domestic Violence Against Women in Turkey, 2014). The different types of violence that women experience throughout their lives negatively affects their physical health (Research of Domestic Violence Against Women in Turkey, 2014). It also affects their mental health (Research of Domestic Violence Against Women in Turkey, 2014; Devries et al, 2013). Studies

show that women's personal negative health perception, difficulties in carrying out their usual daily activities, drug use, mental problems, gynecological complaints, injuries, physical complaints, and substance abuse are significantly higher in women who are victims of violence compared to women who haven't experienced violence (Ellsberg et al, 2008; Cengiz-Özyurt and Deveci, 2010; Noroien and Schei, 2008).

Women are most often subjected to sexual, emotional or physical violence by their partners or men. In this context, 4 out of 10 women are exposed to emotional violence and abuse. In addition, approximately 4 out of 10 women are victims of physical violence. (Research on Domestic Violence Against Women in Turkey, 2014). Therefore, in order to help prevent violence towards women and to provide training and consultancy services by health care professionals to men, it is imperative to understand the attitudes of men regarding violence against women. When these attitudes and behaviors are defined and understood, it is believed that health care professionals, especially nurses, can help reduce the health problems caused by violence against women.

2. MATERIALS AND METHODS

2.1. Study Design and Sample

We conducted this study as a descriptive and cross sectional to determine the attitudes of men living in Kars towards violence against women.

The sample of the study comprised 380 men aged between 18-65 who knew how to read and write. The minimum number of samples to be taken from the population was evaluated as 5% acceptable error and 95% confidence rate.

2.2. Instruments

The questionnaire form was developed by the researchers after a survey of the available literature to determine the socio-demographic characteristics of male individuals (Bilican-Gökkaya, 2011; Heise, 2011; Kanbay et al, 2012; Jewkes et al, 2015). In order to determine the attitudes of men concerning violence against women, the ISKEBE Attitude Scale (The Violence Against Women Scale) was used (Kanbay et al, 2012).

2.2.1 Questionnaire form

The questionnaire was comprised of two parts. The first part contained 8 questions age, education, job status, monthly income, income level perception, women's gender preference of children they wished to have, violence witnessed in childhood, and what kind of violence they had witnessed. The second part asked six questions about study participants' personal information: family type, average monthly income of the family, mother's education level, father's education status, mother's profession and father's profession.

2.2.2 ISKEBE Attitude Scale

The ISKEBE Attitude Scale is a scale which measures violence attitudes toward women. For the purposes of our study, we found the ISKEBE scale to be appropriate in terms of scope, content and structure. The scale consists of two parts with a total of 30 items which can be named and collected. Part 1 concerns attitudes toward the body (Sexual and physical violence) and has 16 items (3,4, 8, 9,10, 12, 14, 15, 16, 17, 20, 22, 25, 26, 28 and 30). Part 2 concerns attitudes toward identity (psychological and economic violence), and it has 14 items (1, 2, 5, 6, 7, 11, 13, 18, 19, 21, 23, 24, 27 and 29). We scored the 5th and 24th in reverse. The total score of the scale was obtained by adding the scores obtained from the mentioned items.

The first part can be scored with a minimum of 16 points and a maximum of 80 points. The second part can be scored with a minimum of 14 points and a maximum of 70 points. The minimum score that can be obtained from the overall scale is 30 and the maximum score is 150. The Cronbach α value of the scale was .86. In our study the score for the scale was .80 for the first part, and .83 for the second part. The Cronbach's Alpha reliability coefficient of the ISKEBE Attitude Scale was $\alpha=0.92$ for all 30 items, Cronbach's Alpha coefficient for the scale's "attitude towards the body" subscale was $\alpha=0.89$ for 16 items, and it was $\alpha=0.88$ for 14 items the scale's "attitude towards the identity" subscale.

The high scores over 90 points indicate a negative view towards violence against women (the person is against the violence against women) and scores below 90 points indicate a positive view towards violence against women (the person is not against the violence against women).

In order to apply the ISKEBE attitude scale, individuals had to be at least primary school graduates, aged 15-65, male or female, married or single (Kanbay et al, 2012).

2.3. Data collection procedure

This study was carried out in the Family Medicine Department of the Central Community Health Center of Kars Provincial Health Directorate Public Health Services Presidency. We explained the aim of the study to male individuals between 18-65 years old who had applied to Family Medicine Units. Those who agreed to take part in the study were provided with a data collection form which they filled out in approximately 15 minutes. The number of questionnaires administered in one day ranged from 10 to 15. The data of the study was completed between January and March 2019

2.4. Data analysis

We analyzed the study data using the Statistical Package for Social Sciences (SPSS) 23.0. In analysis of the data, percentage, numbers, mean, standard deviation, the Kolmogorov Smirnov normality test, One-Way Analysis of Variance (ANOVA), independent samples 't' test and Tukey Test were used. The reliability of the scale was tested with Cronbach α coefficient, and the “ $p < .05$ ” was considered significant.

2.5. Permission and ethics

Before beginning the research, ethical approval to conduct the study was obtained from the Ethics Committee of Kafkas University Faculty of Health Sciences dated 30.11.2018, number 81829502.903 / 14 and numbered 02. Written permission was obtained from the institutions where the study was to be conducted. After receiving information about the study, those who wished to participate gave their consent.

3. RESULTS

In this study, the ISKEBE attitude scale score average of married men ($\bar{X}=93.01$) was lower than the score average of single men ($\bar{X}=103.19$), with a statistically significant difference between them ($t:-4.607$, $p<0.001$). The average score of men in the 18-25 age group ($\bar{X}=102,35$) was higher than that of men aged 26-35 years ($\bar{X}=101.15$), 36-45 years ($\bar{X}=96.33$) and 46 and older ($\bar{X}=87.04$), with a significant difference between them ($t:8.467$, $p<0.001$). In addition, the average score of men aged 46 and over was different from the average scores of men aged 18-25, 26-35 and 36-45 years. The average score of primary school graduate men ($\bar{X}=78.79$) was lower than that of men with secondary education ($\bar{X}=93,72$), bachelor's degree

(\bar{X} =106.17) and master's degree (\bar{X} =96,16), with a significant difference (F :21,210, p <0,001). The difference between the average scores of men with low income (\bar{X} =95,00), moderate income (\bar{X} =99,86) and a high level of income (\bar{X} =94,10) was insignificant (F :2,216, p >0,05).

Study results revealed that the average score of men aged 46 and over in the attitude towards the body subscale of the ISKEBE attitudes scale (\bar{X} =57.81) was lower than that of men in the 18-25 (\bar{X} =65.20), 26-35 (\bar{X} =65.41), and 36-45 (\bar{X} =62.28) age groups, with a significant difference between them (t :6,242, p <0.001). The average score of men aged 46 and older in the attitude towards the identity subscale of the ISKEBE attitude scale (\bar{X} =29.24) was lower than that of men in the 18-25 (\bar{X} =37.15), 26-35 (\bar{X} =35.74), 36-45 (\bar{X} =34.05) age groups, and the difference was significant (t :6.458, p <0.001). Our study found that the average score of married men in the attitude towards the body subscale in the ISKEBE attitude scale (\bar{X} =60.73) was lower than the average score of single men (\bar{X} =66.00), with a statistically significant difference (t :-4.091, p <0.001).

In the attitude towards the identity subscale of the ISKEBE attitude scale, the average score of married men (\bar{X} =32.28) was lower than the average score of single men (\bar{X} =37.19), with a statistically significant difference (t :-3.898, p <0.001). According to the educational status of the men, the average score of primary school graduate men in the attitude towards the body subscale of the ISKEBE attitude scale (\bar{X} =53.24) was lower than that of men with secondary education (\bar{X} =61.22), bachelor's degree (\bar{X} =67.54) and master's degree (\bar{X} =61.68), with a significant difference between them (F :16.413, p <0.001). In the attitude towards the identity subscale of the ISKEBE attitude scale, however, the average score of primary school graduate men (\bar{X} =25.56) was lower than that of men with secondary education (\bar{X} =32.50), bachelor's degree (\bar{X} =38.63) and master's degree (\bar{X} =34.47), with a significant difference between them (F :14.699, p <0.001). In our study, the difference between the ISKEBE attitude towards the body subscale averages of men with low levels of income (\bar{X} =62.92), moderate income (\bar{X} =63.66) and high levels of income (\bar{X} =61.10) was insignificant (F :0.294, p >0.05). In the attitude towards identity subscale of the ISKEBE attitude scale, a significant difference was found between the average score of the men with a low level of income (\bar{X} =32.08) and the men with moderate (\bar{X} =36.20) and high (\bar{X} =33.00) level of income (F :4.772, p <0.01).

Table 1. Distribution of Mean Scores of ISKEBE Attitude Scale Sub-dimensions According to Some Socio-Demographic Characteristics of Men

| Characteristics | Statistical analysis | | | | | Statistical Analysis | | | | | |
|--------------------------------------|----------------------|------|---------------------------|-----------|-------|--------------------------|-----------|-------|---------------------------|-----------|-------|
| | | | | | | Attitude towards body | | | Attitude towards identity | | |
| Age | n | % | X± SS | t | Diff. | X± SS | t | Diff. | X± SS | t | Diff. |
| 18-25 | 126 | 33,2 | ^b 102,35±21,27 | 8,467*** | a<b | ^b 65,20±11,99 | 6,242*** | a<b | ^b 37,15±12,59 | 6,458*** | a<b |
| 26-35 | 107 | 28,2 | ^b 101,15±20,51 | | | ^b 65,41±11,90 | | | ^b 35,74±12,18 | | |
| 36-45 | 80 | 21,1 | ^b 96,33±23,14 | | | ^b 62,28±13,59 | | | ^b 35,05±12,51 | | |
| 46 ve üzeri | 67 | 17,5 | ^a 87,04±21,28 | | | ^a 57,81±13,31 | | | ^a 29,24±11,34 | | |
| Marital status | n | | X± SS | t | | Ort. ± S.S. | t | | Ort. ± S.S. | t | |
| Married | 192 | 50,5 | 93,01±22,00 | -4,607*** | | 60,73±13,40 | -4,091*** | | 32,28±11,83 | -3,898*** | |
| Un married | 188 | 49,5 | 103,19±21,04 | | | 66,00±11,64 | | | 37,19±12,72 | | |
| Education | n | | X± SS | F | | X± SS | F | | X± SS | F | |
| Primary education | 34 | 8,9 | ^a 78,79±18,41 | 21,210*** | a<b<c | ^a 53,24±14,07 | 16,413*** | | ^a 25,56±9,17 | 14,699*** | a<b<c |
| Secondary | 158 | 41,6 | ^b 93,72±20,73 | | | ^b 61,22±12,31 | | | ^b 32,50±11,45 | | |
| License | 169 | 44,5 | ^c 106,17±20,26 | | | ^c 67,54±11,08 | | | ^c 38,63±12,56 | | |
| Graduate | 19 | 5,0 | ^b 96,16±24,38 | | | ^b 61,68±15,17 | | | ^b 34,47±13,38 | | |
| Income level detection status | | | | F | | | F | | | F | |
| Low income | 130 | 34,2 | 95,00±22,42 | 2,216 | | 62,92±13,02 | 0,294 | | ^a 32,08±12,94 | 4,772*** | a<b |
| Middle income | 240 | 63,2 | 99,86±21,52 | | | 63,66±12,63 | | | ^b 36,20±11,98 | | |
| High income | 10 | 2,6 | 94,10±28,52 | | | 61,10±15,60 | | | ^a 33,00±14,60 | | |

***:p<0,001, **:p<0,01, *:p<0,05

This study determined that the score average of men who had witnessed violence in their childhood ($X=94.47$) was lower than the score average of those who had not witnessed violence in their childhood ($X=100.85$), with a significant difference ($t:-2.815$, $p<0.05$). The average score of men who had witnessed physical/psychological violence in childhood ($X=92.37$) was lower than the average of those who had witnessed multiple types of violence ($X=106.40$), with a significant difference ($t:-2.789$, $p<0.01$). In the attitude towards body subscale of the ISKEBE attitude scale in this study, an average score of men who had witnessed violence in childhood ($X=61.55$) was lower than the average score of those who had not witnessed violence in childhood ($X=64.74$), with a significant difference between them ($t:-2.424$, $p<0.05$). In the attitude towards the identity subscale of the ISKEBE attitude scale, an average score of men who had witnessed violence in childhood ($X=32.92$) was lower than the average score of those who had not witnessed violence in childhood ($X=36.10$), with a significant difference between them ($t:-2.478$, $p<0.05$). In the attitude towards body subscale of the ISKEBE attitude scale, the average score of men who had witnessed physical/psychological violence in childhood ($X=60.49$) was lower than the average score of those who had witnessed multiple types of violence ($X=67.56$), with a significant difference between them ($t:-2.477$, $p<0.05$). In the attitude towards the identity subscale of the ISKEBE attitude scale, the average score of men who had witnessed physical/psychological violence in childhood ($X=31.88$) was lower than the average score of those who had witnessed multiple types of violence ($X=38.84$), with a significant difference between them ($t:-2.535$, $p<0.05$).

Table 2. Distribution of average scores of ISKEBE attitude scale and sub-dimensions according to men's witnessing violence in childhood

| Characteristics | Statistical analysis | | | | statistical analysis | | | |
|-----------------------------------|----------------------|------|--------------|--------------|-----------------------|-------------|-------------|---------------------------|
| | | | | | Attitude towards body | | | Attitude towards identity |
| Witnessing violence in childhood | n | % | X± SS | t | X± SS | t | X± SS | t |
| Yes | 167 | 43,9 | 94,47±23,58 | - 2,815** | 61,55±13,36 | - 2,424* | 32,92±1286 | -2,478* |
| No | 213 | 56,1 | 100,85±20,48 | | 64,74±12,23 | | 36,10±12,06 | |
| Type of violence witnessed | | | | | | | | |
| Physical / Psychological | 142 | 85,0 | 92,37±23,08 | - 2,798** | 60,49±13,25 | - 2,477* | 31,88±12,44 | -2,535* |
| More than one | 25 | 15,0 | 106,40±23,32 | | 67,56±12,54 | | 38,84±13,88 | |

**: $p < 0,01$, *: $p < 0,05$

4. DISCUSSION

The World Health Organization defines violence against women as a violation of women's human rights and a major public health issue. It also states that violence negatively affects women's physical, mental, sexual and reproductive health and can increase the risk of becoming infected with HIV (WHO, 2017). Thirty-five percent of women have been subjected to physical or sexual violence during their lifetime, either by their partners or by others (WHO, 2013). It has been determined that more than 30% of women in the world have been subjected to physical and sexual violence. (WHO,2017, WHO ,2020). In a study conducted across Turkey, women were found to have been exposed to physical (36%), sexual (12%) and emotional (34%) violence at some time in their lives (Research on Domestic Violence Against Women in Turkey, 2014).

Since most of those who commit violence against women are male, this study aimed to determine the attitudes of men regarding violence against women. Our study results determined that the total and subscale score averages of the men aged 46 and older were

lower than that of men in the other age groups, with a statistically significant difference between them. This shows that the male participants in this study were more prone to violence against women, violence towards the body (sexual and physical violence), and violence towards identity (psychological/economic). In contrast to our study, another study found that men aged 35-44 years committed the most physical violence against women. Furthermore, while the rates of physical violence against women show an increase up to men's age of 44 years, the rates decrease after they become 45 years of age (Akkuş and Yıldırım, 2018). The Fernandez et al. study (2017) reported that the peak age range of men who committed violence against women was in the 31-40 age range (Fernandez et al, 2017). The reason for this difference in our study may be related to the fact that older generations of men living in Kars province in eastern Turkey are more prone to violence.

Marital status is a fundamental feature that has the greatest impact on the level of violence committed against women. A study conducted across Turkey in 2014 reported that 36% of married women had been exposed to physical violence by their spouses or partners at some time during their lives (Research of Domestic Violence Against Women in Turkey, 2014).

In this study, the ISKEBE attitude scale total and subscale score averages of married men were lower than the scores of single men, with a statistically significant difference between them. These results show that single men opposed violence against women more than married men. One study determined that married women suffered more violence than singles (Yanık et al, 2014). In another study, a significant relationship has been found between the length of the marriage and women's exposure to physical violence (Altınay and Arat, 2008). The results of their research support our study.

The increased educational level of women in Turkey has helped to reduce the percentage of physical violence experienced by them. However, the rate of physical violence experienced by illiterate women or by the women married before finishing primary school has been found to be two times higher than the violence experienced by women who have a bachelor's degree or higher (Domestic Violence Against Women in Turkey Survey, 2015). Another study determined that the educational levels of women exposed to violence and the educational level of their spouses was lower than that of women who had not experienced violence (Şahin et al, 2012). Our study results showed that the average scores in the ISKEBE attitude scale and its subscales of men with primary education were lower than the average scores of men who have secondary education, undergraduate degrees and graduate degrees.

It was determined that men with primary education were more prone to violence against women than men with higher education. In their study, Boz et al. (2008) found that most victims and perpetrators of violence had a primary education or lower (Boz et al, 2008). Similarly, Güler's (2010) study found a statistically significant difference between the physical violence experienced by pregnant women and the lower level of education of both the women and their spouses (Güler, 2010). Another study found that women's exposure to domestic violence decreases as their educational level increases (Bedir et al, 2017). The study conducted by Ediz and Altan (2017) found that the women with only a primary education (36%) had been exposed to violence (Ediz and Altan, 2017). These results show that in order to reduce and prevent domestic violence, increasing the level of education for all citizens is very important. Children who have witnessed or who have been the direct victims of domestic violence are at risk for repeating similar behaviors (Holden, 2003). This study found that the average ISKEBE attitude scale score and its subscale scores of men who had witnessed violence in their childhood were lower than the average scores of those who had not witnessed any violence in their childhood, with a significant difference between them . Men who had witnessed violence in their childhood were found to be more prone to violence against women than men who had not witnessed it. Kitzmann et al. (2003) observed that children who had witnessed domestic violence exhibited more negative behaviors than those who had not witnessed it (Kitzmann et al, 2003). A study by Ayan, which was conducted with secondary school students, reported that students who experienced violence had a greater tendency to aggression (Ayan, 2007). Similarly, the study by Vahip and Doğanavşargil (2006) determined a significant relationship between the history of physical violence in childhood and the violence against one's own child ($p < 0.01$) (Vahip and Doğanavşargil, 2006). This current study is in line with the literature.

Hattery reported that children raised in families with violence-related behaviors provide an important clue to their violent behaviors in later years (Hattery, 2009). Children who witness domestic violence learn that men are aggressive and dominant, while women are powerless and deserve mistreatment (McCue, 2008). In our study, it was determined that the average ISKEBE attitude scale score and its subscale scores in men who had witnessed physical/psychological violence in childhood were lower than the score averages of the men who had witnessed multiple types of violence, with a significant difference between them . These results show that individuals who had witnessed physical and psychological violence

during childhood were more prone to violence. A study found that 71% of men had witnessed domestic violence, 4% were victims of violence, and 25% were perpetrators of violence (Rahmatian, 2009). Another study found that men who had been exposed to physical domestic violence as children or who had witnessed their fathers commit physical violence against their mothers were more likely to abuse their own wives (McCue, 2008).

The ISKEBE attitude scale score average of men in this study was $X=98.04$, whereas average scores in the violence against the body and identity were $X=63.34$, and $X=34.71$, respectively. Furthermore, the violence against women attitude scale scores of the study participants were close to the positive end (Kanbay et al, 2017). These results show that the men who took part in the study oppose violence against women.

Although the men in our study were shown to oppose violence against women, we found that those who were married, primary school graduates, and who had witnessed violence in childhood were more prone to violence against women than those who were single, had higher education levels, and had not witnessed violence in childhood, respectively. These results indicate that in order to combat violence against women, the education of all society's members must become a high priority. Education and training should be given to families at regular intervals by health personnel, especially nurses and experts working in this field, and NGOs and recognized religious leaders within their communities. It is believed that these measures will be very important in focusing society's attention on the detrimental effects of domestic violence on its members.

In conclusion, the goal of education and training regarding domestic violence issues is to help improve and protect the health of women, children and society in general. Included in this would be the development of psychosocial and legal approaches for men who engage in violence.

Conflict of Interest: The authors declare that they have no conflict of interest.

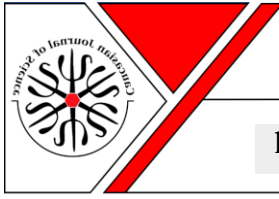
REFERENCES

- Akkuş, S., and Yıldırım, Ş. (2018). Investigating the factors affecting man's physical violence to women. *Gaziantep University Journal of Social Sciences*, 17(4): 1368-1388. <https://doi.org/10.21547/jss.408090>
- Altınay, A. G., and Arat, Y. (2008). *Violence against women in Turkey*, Metis Yayınları. (2nd Ed.). Istanbul.

- Asian Development Bank. (2016). Gender statistics, the pacific and timor leste. Retrieved from <https://www.adb.org/sites/default/files/publication/181270/gender-statistics-pacific-tim.pdf>
- Ayan, S. (2007). Aggressiveness tendencies of the children exposed to domestic violence. *Anadolu Psikiyatri Dergisi*, 8(3): 206-214.
- Babu, B. V., and Kar, S. K. (2010). Domestic violence in Eastern India: Factors associated with victimization and perpetration. *Public Health*, 124: 136-148. <https://doi.org/10.1016/j.puhe.2010.01.014>
- Bedir, N., Ekerbiçer, H. Ç., İnci, M. B., Köse, E., Karatepe, T. U., Demirbaş, M., ... Kılıç, Z. (2017). Violence perceptions of a group of women living in Sakarya and influential factors. *Sakarya Tıp Dergisi*, 7(4): 188-196. <https://doi.org/10.31832/smj.363175>
- Bilican-Gökkaya, V. (2011). Economic violence towards women: Sample of Sivas (Cumhuriyet University). *Journal of World of Turks*, 3(3): 129-145.
- Boz, B., Acar, K., and Kurtuluş, A. (2008). Intra familiar violence cases of Pamukkale University School of Medicine Department of Legal Medicine between May 2003-July 2004. *Pamukkale Üniversitesi, Tıp Fakültesi Adli Tıp Anabilim Dalı Anabilim Dalı, Pamukkale Tıp Dergisi, Denizli*, 1: 13-16.
- Cengiz-Özyurt, B., and Deveci, A. (2010). The relationship between domestic violence and the prevalence of depressive symptoms in married women between 15 and 49 years of age in a rural area of Manisa, Turkey. *Türk Psikiyatri Dergisi*, 22(1): 10-6. doi: 10.5080/u6350
- Devries, K. M., Mak, J. Y., Bacchus, L. J., Child, J. C., Falder, G., Petzold, M., ... Watts, C. H. (2013). Intimate partner violence and incident depressive symptoms and suicide attempts: A systematic review of longitudinal studies. *PLOS Medicine* 10(5):e1001439. doi: 10.1371/journal.pmed.1001439. Epub 2013 May 7
- Directorate General on The Status of Women. (2012-2015). National action plan for combating violence against women. T. C. Ministry Of Family And Social Policies. Retrieved from http://bianet.org/files/doc_files/000/000/643/original/kadina_yonelik_siddet_uep12-15.pdf
- Domestic Violence Against Women in Turkey. (2009). Hacettepe University Institute of Population Studies, Ankara. Retrieved from <http://www.hips.hacettepe.edu.tr/TKAA2008-AnaRapor.pdf>
- Domestic Violence Against Women in Turkey Survey. (2015). Hacettepe University Institute of Population Studies, Ankara. Available from URL:<http://www.hips.hacettepe.edu.tr/KKSA-TRAnaRaporKitap26Mart.pdf>
- Ediz, A., and Altan, Ş. (2017). A field study on violence against women in Turkey. *TBB Dergisi (Özel Sayı)*. Retrieved from <http://tbbdergisi.barobirlik.org.tr/m2017-2017-1729>
- Ellsberg, M., Jansen, H. A., Heise, L., Watts, C. H., and Garcia-Moreno, C. (2008). Intimate partner violence and women's physical and mental health in the WHO multi-country study on women's health and domestic violence: An observational study. *Lancet*, 371(9619): 1165-72. doi: [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(08\)60499-7](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(08)60499-7)
- Fernandez, M. D., Silva, I. M. M., Vazquez-Portomene, F., and Calvo, M. S. R. (2017). Features and consequences of gender violence: Study of cases confirmed by a conviction. *Spanish Journal of Legal Medicine*, 43(3): 115-122. <https://doi.org/10.1016/j.reml.2017.07.003>

- Garcia-Moreno, C., Jansen, H. A., Ellsberg, M., Heise, L., and Watts, C. (2005). WHO multi-country study on women's health and domestic violence against women: Initial results on prevalence, health outcomes and women's responses. World Health Organization, Geneva.
- General Statistics Office. (GSO). of Viet Nam (2010) Keeping silent is dying: Results from the national study on domestic violence against women in Viet Nam. Summary Report.
- Güler, N. (2010). Physical, emotional, sexual, and economic violence by spouse during pregnancy and associated factors background. *Dokuz Eylül Üniversitesi Hemşirelik Yüksekokulu Elektronik Dergisi*, 3(2): 72-77.
- Hattery, A. J. (2009). *Intimate partner violence*. Rowman and Littlefield Publishers, 222.
- Heise, L. (2011). What works to prevent partner violence? An evidence overview. STRIVE, London School of hygiene and tropical medicine, London.
- Holden, G. W. (2003). Children exposed to domestic violence and child abuse: terminology and taxonomy. *Clin Child Fam Psychol Rev*, 6(3): 151-160. <https://doi.org/10.1023/A:1024906315255>
- Jewkes, R. K., Flood, M. G., and Lang, J. (2015). From work with men and boys to changes of social norms and reduction of inequities in gender relations: A conceptual shift in prevention of violence against women and girls. *The Lancet*, 385(9977): 1580-1589.
- Kanbay, Y., Aslan, O., Işık, E., and Tektaş, P. (2017). "Development study on ISKEBE violence against women attitude scale (ISKEBE Attitude Scale)", 18(5): 453-459. doi: 10.5455/apd.256374
- Kanbay, Y., Işık, E., Yavuzaslan, M., and Keleş, S. (2012). Determination of the opinions and attitudes of nursing students about domestic violence against women. *Gümüşhane Üniversitesi Sağlık Bilimleri Dergisi*, 1(2): 107-119.
- Kitzmann, K. M., Gaylord, N. K., Holt, A. R., and Kenny, E. D. (2003). Child witnesses to domestic violence: A meta-analytic review. *Journal of Consulting and Clinical Psychology*, 71(2): 339-52.
- Lewis, I., Maruia, B., and Walker, S. (2008). Violence against women in Papua New Guinea. *Journal of Family Studies*, 14: 183-197. <https://doi.org/10.5172/jfs.327.14.2-3.183>.
- McCue, M. L. (2008). *Domestic violence*. Contemporary world issues, ABC-CLIO, California, 328.
- Noroien, A. I., and Schei, B. (2008). Partner violence and health: Result from the first national study on violence against women in Norway. *Scandinavian Journal of Public Health*, 36(2): 161-8. <https://doi.org/10.1177/1403494807085188>
- Parish, W. L., Wang, T., Laumann, E. O., Pan, S., and Luo, Y. (2004). Intimate partner violence in China: National prevalence, risk factors and associated health problems. *International Family Planning Perspectives*, 30(4): 174-81. doi: 10.1363/ifpp.30.174.04
- Rahmatian, A. A. (2009). Breaking down the social learning of domestic violence. *Iranian Journal of Psychiatry and Behavioral Sciences*, 3(1): 62-66.
- Research of Domestic Violence against Women in Turkey. (2014). Hacettepe University Institute of Population Studies, Summary Report, Ankara. Retrieved from http://www.hips.hacettepe.edu.tr/TKAA2014_Ozet_Rapor.pdf

- Şahin, E. M., Yetim, D., and Öyekçin, D. G. (2012). Rate of intimate partner violence against women and attitudes of women towards violence in Edirne Turkey. *Cumhuriyet Tıp Dergisi*, 34(1): 23-32. <http://dx.doi.org/10.7197/1305-0028.940>
- Türk, R., Senol-Celik, S., Çetin, M., and Soydan, G. (2017). Experiences and views of married women about domestic violence. *International Journal of Nursing Practice*. <https://doi.org/10.1111/ijn.12543>
- United Nations General Assembly. (1993). Declaration on the elimination of violence against women. Sexual and gender-based violence, UN General Assembly. A/RES/48/104. Retrieved from <https://www.refworld.org/docid/3b00f25d2c.html>
- Vahip, I., and Doğanavşargil, Ö. (2006). Domestic physical violence and female patients. *Türk Psikiyatri Dergisi*, 17(2): 107-114.
- World Health Organization. Global and regional forecasts The prevalence of violence against women and its effects on health intimate partner violence and non-partner sexual violence. Executive Summary. Retrieved 27 October 2017 from http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/85241/1/WHO_RHR_HRP_13.06_eng.pdf.
- World Health Organization. Global and regional forecasts The prevalence of violence against women and its effects on health intimate partner violence and non-partner sexual violence. Retrieved July 07, 2020 from https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/85239/9789241564625_eng.pdf;jsessionid=1A6C2F3A503E596CAB7AD022945898B8?array=1
- World Health Organization. (1996). Global Consultation on Violence and Health. Violence: a public health priority. Geneva, Switzerland.
- World Health Organization. (2013). Global and regional estimates of violence against women. Prevalence and health effects of intimate partner violence and non-partner sexual violence, Department of reproductive health and research, WHO, Geneva, Switzerland.
- World Health Organization. (2017). Violence against Women. Retrieved from <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/violence-against-women>
- Yanık, A., Hanbaba, Z., Soygür, S., Ayaltı, B., and Doğan, M. (2014). Evaluation of violent behavior against women: Evidence from Turkey. *Electronic Journal of Vocational Colleges*, 4(4): 104-111. <https://doi.org/10.17339/ejovoc.49520>.



Fen Bilimleri Eğitiminde Artırılmış Gerçekliğe İlişkin Çalışmaların Analizi

Murat Tolga KAYALAR¹, Gizem BARAN²

Makalenin Alanı: Bilgisayar Teknolojileri

| Makale Bilgileri | Öz |
|---|--|
| Geliş Tarihi 30.09.2021 | Eğitim ömür boyu devam eden bir süreçtir. Bu süreç, teknolojinin de gelişmesi ile devamlı ilerleme göstermektedir. Sürekli gelişen teknoloji ile birlikte, eğitimde kullanılan öğretim teknikleri, materyaller ve uygulamaların da teknoloji ile eş zamanlı gelişim gösterdiği görülmektedir. Bu gelişmelerden biri de Artırılmış Gerçeklik Teknolojisidir. Artırılmış Gerçeklik, gerçek dünya nesnelere yerine dijital ortam ürünlerinin kullanıldığı gerçeklik ortamıdır. Eğitimde artırılmış gerçeklik ile ilgili çalışmalarda ağırlığın daha çok fen bilimleri alanında yoğunlaştığı anlaşılmaktadır. |
| Kabul Tarihi 24.12.2021 | Bu çalışmada alan yazındaki Fen Bilimleri eğitiminde artırılmış gerçekliğe yönelik araştırmaların incelenmesi ve bu araştırmalardaki potansiyel boşlukların ve eksikliklerin tespit edilmesi amaçlanmıştır. Çalışmanın yöntemi doküman incelemesidir. Bu amaçla bir değerlendirme rubriğine yer verilmiştir. Bu rubriğe göre 30 farklı artırılmış gerçeklik içerikli akademik çalışma incelenmiştir. Daha sonra bu rubrikten elde edilen veriler, betimsel analize tabi tutulmuştur. |
| Anahtar Kelimeler Teknoloji Artırılmış gerçeklik çalışmaları Fen eğitimi Değerlendirme rubriği | Çalışma sonucunda, artırılmış gerçeklikle ilgili çalışmalarda, değerlendirme aşamalarında önemli eksiklikler tespit edilmiştir. Ayrıca içeriğin oluşturulması ve çalışmanın uyumluluğu açısından da bazı temel problemler belirlenmiştir. |
| Article Info | Abstract |
| Received 30.09.2021 | Education is a lifelong process. This process is constantly progressing with the development of technology. Along with the constantly developing technology, it is seen that the teaching techniques, materials and applications used in education develop simultaneously with technology. One of these developments is Augmented Reality Technology. Augmented Reality is a reality environment where digital media products are used instead of real world objects. It is understood that studies on augmented reality in education are mostly concentrated in the field of science. In this study, it is aimed to examine the researches on augmented reality in science education in the field and to determine the potential problems and deficiencies in these researches. The method of the study is document review. For this purpose, an evaluation rubric is included. According to this rubric, 30 different augmented reality academic studies were examined. Then, the data obtained from this rubric were subjected to descriptive analysis. As a result of the study, important deficiencies were identified in the evaluation stages of the studies on augmented reality. In addition, some basic problems were determined in terms of the creation of the content and the compatibility of the study. |
| Accepted 24.12.2021 | |
| Keywords Technology Augmented reality studies Science education Evaluation rubric | |

¹ Erzincan Binali Yıldırım Üniversitesi Eğitim Fakültesi Bilgisayar ve Öğretim Teknolojileri Eğitimi Bölümü-Erzincan; e-mail: mtkayalar@gmail.com; ORCID: 0000-0003-2442-9330 (Sorumlu yazar)

² Erzincan Binali Yıldırım Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü-Erzincan; e-mail: barangizem.0@gmail.com; ORCID: 0000-0003-1746-9887

1. Giriş

Tarihsel süreç incelendiğinde, eğitim teknolojilerinin kara tahta ve tebeşirden başlayıp yapay zekâ ve sanal ortamların kullanıldığı bir değişime uğradığı görülmektedir. Her yeni teknolojik gelişmenin eğitime entegre edilmesi ciddi ve etkili bir dönüşümü hazırlamaktadır. Özellikle bilgisayar ve internetin yaygınlaşması ile gelişmeler baş döndürücü hızla çeşitlilik kazanmaya başlamıştır (Erbaş ve Demirer, 2014). Bu teknolojileri kullanma becerisi ise öğretmenlerde aranan önemli bir nitelik olmaktadır. Bu teknolojileri kullanabilen öğretmenler yeni öğrenme ortamları dizayn ederek avantajlı konuma gelmektedir. Diğer yandan bu teknolojik yeniliklerin temini aşamasında sağlanacak kolaylıklar, ihtiyaca çözüm bulmak için doğru bir yaklaşım olacaktır (Akkoyunlu,1995; Topraklıkoğlu, 2018; Kırıkkaya ve Şentürk, 2018). Yaygınlık gösteren bu uygulamalardan biri olan artırılmış gerçeklik teknolojisi, yeni bir farkındalık yaratmak ve görselleştirme aşamasında pozitif katkı sağlamak bakımından ilk sıralarda yer almaktadır (Kırıkkaya ve Şentürk, 2018).

Artırılmış gerçeklik farklı şekillerde öğrenme ortamlarına sunulabilmektedir. Gerçek ile sanal olanın entegrasyonu, gerçek zamanlı etkileşim ve 3 boyutlu kayıt olmak üzere üç önemli özelliği barındırmaktadır (Azuma,1997). Özarslan (2011) artırılmış gerçekliği görüntü kayıt cihazı ile sanal ve gerçeğin birleştirilmesi olarak tanımlar. Kağan ve Şahin (2017) ise artırılmış gerçekliği soyut verilerin insan zihninde gerçeklik olgusunu oluşturma olarak ifade etmektedir. Diğer bazı tanımlamalara bakıldığında da içeriğin benzer olduğu ve gerçek dünya üzerine sanal materyallerin entegrasyonun ana ekseninde yer aldığı görülmektedir (İbili ve Şahin, 2013; Alınlı ve Yazıcı, 2020; Bal ve İçten, 2017; Topraklıkoğlu, 2018; Durak ve Yılmaz, 2019; Onbaşılı, 2018). Farklı teknikler kullanılarak sunulan artırılmış gerçeklik çalışmalarının somutlaştırma, görsel algılama ve gerçeklik hissi oluşturma şeklindeki katkıları ile öğrenmeye pozitif destek vereceği belirtilmektedir (Timur ve Özdemir, 2018; Gül ve Şahin, 2017).

Eğitimde teknoloji kullanımının bilgiye erişim, bilgi transferi, başkalarının kullanımına bilginin sunulması, analiz ve sentez basamaklarını daha hızlı gerçekleştirme ve etkin kullanma görevlerini üstlendiği düşünüldüğünde (Sarıtaş ve Üner, 2013), artırılmış gerçeklik çalışmalarının bu işlevlere en yüksek düzeyde katkı sağlayacak yenilikçi bir uygulama olacağı ifade edilmektedir (Önder, 2007). Bu alandaki önemli çalışmalardan birinde Sarıkara ve arkadaşları (2018) 26 artırılmış gerçeklik içerikli çalışmayı incelemiş ve fen alanındaki bu çalışmalara artırılmış gerçekliğin anlaşılma, bilişsel yükü azaltma, motivasyon artırma, kavramsal öğrenme, olumlu tutum geliştirme, eğlenceli olma, laboratuvar yeterliliklerini

geliştirme, kavram yanlışlarını giderme, sorgulama becerilerini artırma ve performanslarını geliştirme açısından önemli bir katkı sağladığını tespit etmişlerdir.

Fen konularının ve özelde ise fen laboratuvarı uygulamalarının artırılmış gerçeklik ile gerçekleştirildiği, buna bağlı olarak her türlü öğrenme ortamının sınıfa taşıdığı çalışmalar da bulunmaktadır (Elmas, Kahrıman Pamuk ve Pamuk, 2020; Timur ve Özdemir, 2018).

2. Materyal ve Metot

2.1. Araştırmanın Tasarımı

Bu araştırma kapsamında doküman analizi yöntemi kullanılmıştır. Doküman analizi, yazılı çalışmaların içeriğini sistematik olarak analiz etmek için kullanılan nitel bir araştırma yöntemi olarak tanımlanmaktadır (Wach, 2013). Bu araştırma 2010-2020 yılları arasında Türkiye’de Fen Bilimleri Eğitimi alanında artırılmış gerçeklik konusunda yapılan çalışmalarını inceleyen bir doküman analizidir.

2.2. Örneklem

Bu çalışmanın örneğine, Ocak 2010- Ocak 2020 tarihleri arasında Fen Bilimleri, Fen Bilimleri Eğitimi ve Teknoloji alanlarında artırılmış gerçeklik ile ilgili yapılmış çalışmaların literatürün taraması yoluyla ulaşılmıştır. Teknolojinin son yirmi yılda büyük ivme kazanmış ve eğitimde gün geçtikçe kullanımı artmıştır (Ayas, 1995; Erdoğan, 2004; Fyle, 2013).

Bu nedenden dolayı son yirmi yıldaki çalışmalar incelenmiştir. İncelenen akademik çalışmaların tablosu, yazarlar, çalışmanın alanı ve çalışmanın sonuç etkisi olarak Tablo 1’de verilmiştir.

Tablo 1. Araştırmada incelenen artırılmış gerçeklik çalışmaları

| Makale | Konusu | Etkisi |
|----------------------------------|-----------------------|---|
| Altınpulluk ve Kesim, (2015) | Teknoloji | Somutlaştırma desteği |
| Avcı ve Taşdemir, (2019) | Fen Bilimleri | Dikkat çekme etkisi ile eğitimi destekleme |
| Çankaya ve Girgin, (2018) | Fen Bilimleri | Akademik performans artırma |
| Çelik, (2019) | Materyal Tasarımı | Dersi zevkli hale getirme |
| Çilek ve Çınar, (2019) | Fen Bilimleri | Görsellik ve akademik başarı desteği |
| Dağdalan, (2019) | Fen Bilimleri | Bilişsel süreçlere destek sağlama |
| Demirel, (2019) | Fen Bilimleri | Akademik başarıya katkı |
| Demirer ve Erbaş, (2014) | Teknoloji | Teknolojide yeni ufuk açma |
| Demirer ve Erbaş, (2015) | Teknoloji | Soyut kavramları içselleştirebilme |
| Elmas, Pamuk ve Pamuk, (2020) | Fen Eğitimi | Öğrenme hevesi artışı |
| Goto, Levec ve Smith, (1942) | Fizik | Görselleştirme |
| Gül ve Şahin, (2017) | Bilişim Teknolojileri | Akademik başarıya katkı |
| İbili ve Şahin, (2013) | Geometri | İlgi ve dikkat çekme |
| İçten ve Bal, (2017a) | Teknoloji | İş dünyasında destek sağlama |
| İçten ve Bal, (2017b) | Teknoloji | Gelecekte daha fazla kullanım gerekliliği |
| Karakaş ve Özerbaş, (2020) | Fizik | Analiz yeteneklerinin geliştirilmesi |
| Karaoğlan ve Durak, (2019) | Eğitsel Oyun | Eğlenceli, dikkat çekici ve etkili öğrenme |
| Kırıkkaya ve Şentürk, (2015) | Fen Bilimleri | Doğa bilimleri, matematik ve istatistiğe destek |
| Onbaşılı, (2018) | Fen Eğitimi | Öğrenci tutum ve performans artışı |
| Önal, (2017) | Matematik Eğitimi | Motivasyon artışı |
| Önder, (2007) | Fen Bilgisi | Akademik başarı artışı |
| Özdemir, (2017) | Teknoloji | Fen ve matematikte performans değişimi |
| Shaljami, (2018) | Medya ve İletişim | Tüketici ilgisi sağlama |
| Sırakaya ve Alsancak, (2018) | Fen Eğitimi | Öğrenme tutumlarının gelişimi |
| Timur ve Özdemir, (2018) | Fen Eğitimi | Öğrenme süreçlerine katkı sağlama |
| Topraklıkoğlu, (2018) | Geometri | Motivasyon ve zevkli hale getirme |
| Tuncel ve Fidan, (2018) | Fen Eğitimi | Görsel katkı sağlama |
| Tülü ve Yılmaz, (2012) | Teknoloji | Öğrenme ve hayal etme becerilerinin gelişimi |
| Usta, Korucu, Yavuzaslan, (2016) | Teknoloji | Soyut kavramları içselleştirebilme |
| Yalçın Çelik, (2019) | Öğretmen Eğitimi | Dikkat ve ilgi özelliklerinin artışı |

2.3. Veri Toplama Süreci

Araştırma veri toplama sürecinde ilk olarak, ilgili veritabanı seçimi yapılmış, anahtar kelimelere göre ilgili çalışmalar seçilmiş, sonrasında belirlenen kriterlere göre çalışmaların analizi yapılmıştır. Son olarak; sonuçların raporlanması, bulguların tartışılması ve araştırma sonucu süreçleri işe koşulmuştur.

2.4. Veri Toplama Aracı

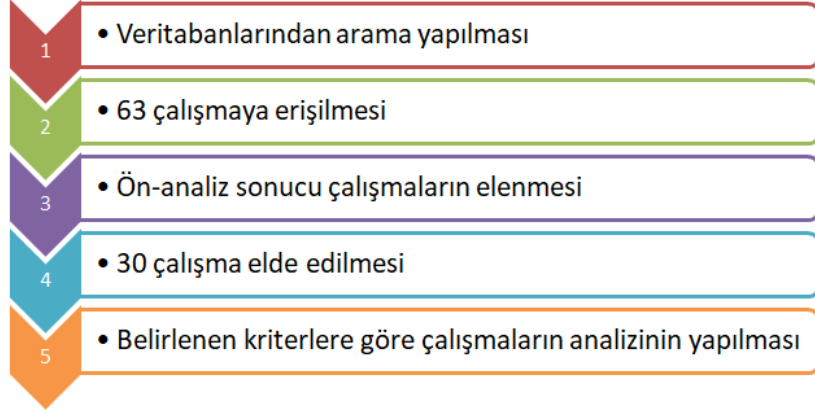
Çalışmada "Google Scholar" ve "Yök tez" veri tabanlarında "artırılmış gerçeklik", "fen eğitiminde artırılmış gerçeklik" ve "eğitimde artırılmış gerçeklik" anahtar kelimeleri ile tarama yapılmıştır.

Tarama kapsamında elde edilen araştırmalardan bazıları çalışmanın kapsamı dışında bırakılmıştır. Çalışmaya dahil edilen ve edilmeyen çalışmalara ilişkin kriterler aşağıdaki tabloda sunulmuştur (Tablo 2).

Tablo 2. Çalışmaya dahil edilen ve edilmeyen çalışmalara ilişkin kriterler

| Çalışmaya dahil edilme kriterleri | Çalışmaya dahil edilmeme kriterleri |
|---|---|
| -Çalışmalar Yök Tez veya Google Scholar veri tabanında yer almalı | -Kitap bölümleri. |
| -Çalışmalar alan uzmanları tarafından değerlendirilmiş olmalı. | -Artırılmış gerçeklik içermeyen çalışmalar. |
| -Tam metin erişim imkânı vermeli. | -İngilizce olan çalışmalar. |
| -1 Ocak 2010- 01 Ocak 2020 tarihleri arasında yayınlanmış olmalı. | -Tam metnine ulaşılamayan çalışmalar |
| Orijinal olmalı. | |
| -Eğitimde artırılmış gerçeklik kullanımı ile ilgili olmalı. | |

Yukarıda bahsedilen anahtar kelimeler kullanılarak araştırmacı tarafından ulaşılan çalışmalar, 3 alan uzmanı tarafından taranıp, tekrar eden çalışmalar çıkarılmış ve eleme kriterlerine göre filtreleme yapılmıştır. Sonuç olarak toplam 63 çalışmaya ulaşılmıştır. Çalışmaların özet bölümlerinin incelenerek ön-analize tabi tutulmuştur. Ön-analiz sürecinde çalışmaların konuyla ilgi olup olmadığı kontrol edilmiştir. Sonuçta, Fen Bilimleri Eğitiminde artırılmış gerçeklik ile ilgili toplamda 30 çalışma değerlendirmeye alınmıştır. Bu çalışmaların seçim süreci Şekil 1’de özetlenmiştir.



Şekil 1. Çalışmaların seçim süreci

2.5. Verilerin Analizi

2.5.1. Verilerin Analiz Güvenirliği

Araştırmadan toplanan veriler için alan yazın taranmıştır. Kullanılan rubrik için 3 alan uzmanından görüş alınmış ve üç uzman tarafından 19 maddelik rubrik oluşturulmuştur. Oluşturulan değerlendirme rubriği ile araştırmadan elde edilen veriler betimsel olarak analiz edilmiştir. Değerlendirme rubriğindeki maddeler m1, m2 vb. ve incelenen makale isimleri ise AG1, AG2 vb. şeklinde ifade edilmiştir. Tutarlılık katsayısı yüzde 75'in üzerinde bulunmuştur ve bu tutarlılık yüzdesi Miles ve Huberman (1994)'e göre uygundur.

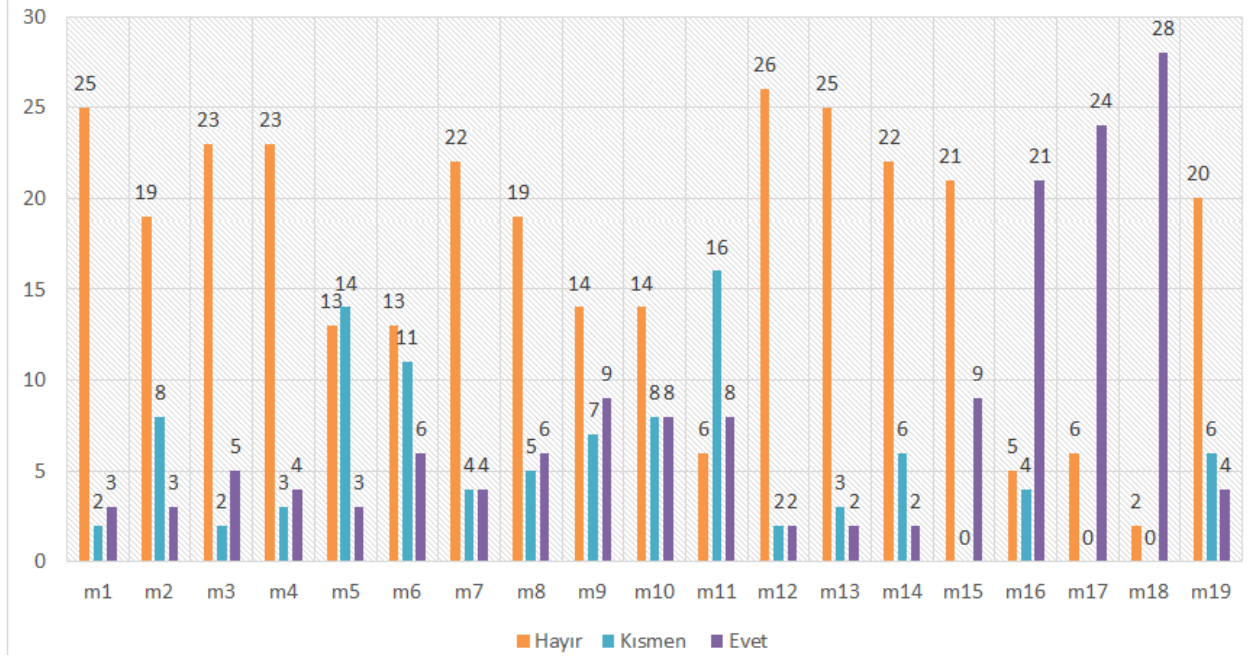
3. Bulgular

Bu çalışmada alan yazındaki Fen Bilimleri eğitiminde artırılmış gerçekliğe yönelik araştırmaların incelenmesi ve bu araştırmalardaki potansiyel boşlukların ve eksikliklerin tespit edilmesi amaçlanmıştır. Bu kapsamda değerlendirme rubriğine göre incelenmiş çalışmaların betimsel analizi yapılmış ve aşağıdaki bulgular elde edilmiştir.

3.1. Artırılmış Gerçeklik Çalışmalarının Betimsel Analizi

Artırılmış gerçeklik çalışmalarının değerlendirme rubriğine göre betimsel analizi Grafik 1'de verilmiştir. Grafik incelendiğinde m16, m17 ve m18'in frekans olarak en çok evet olan maddeler olduğu görülmektedir. Bunun yanı sıra m5 ve m11'in frekans olarak en fazla kısmen olduğu ve diğer maddelerin ise değerlendirme rubriğine göre hayır olduğu görülmektedir. Ayrıca m15, m17 ve m18'in hiç kısmen çıkmadığı tespit edilmiştir. Genel olarak artırılmış gerçeklik çalışmalarının değerlendirme ölçeğinden hayır aldığı görülmektedir. Yani

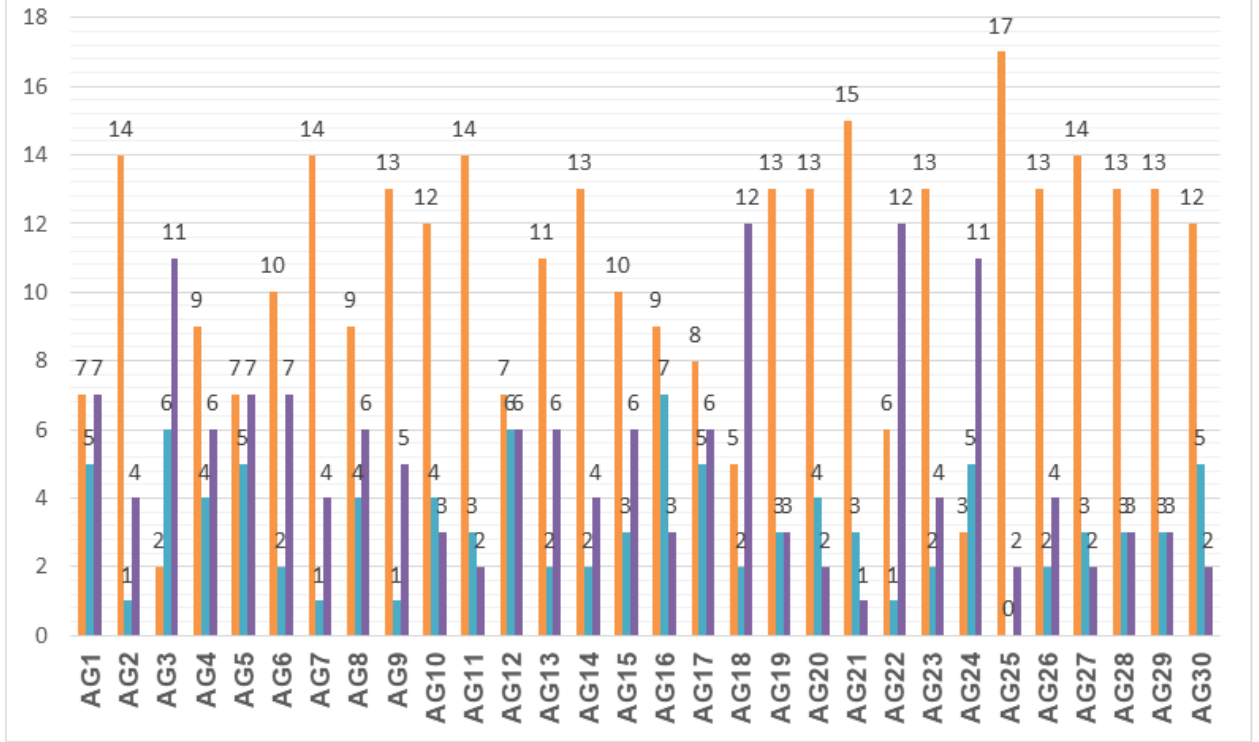
değerlendirme rubriğine göre ele alınan maddeler açısından incelenen çalışmalarda eksikliklerin olduğu tespit edilmiştir.



Grafik 1. Artırılmış gerçeklik çalışmalarının betimsel analiz grafiği

3.2. Artırılmış Gerçeklik Çalışmalarının Her Birinin Betimsel Analizi

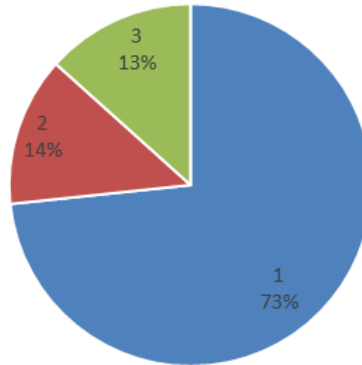
Artırılmış gerçeklik çalışmalarının her birinin değerlendirme rubriğine göre betimsel analiz sonuçları Grafik 2’de verilmiştir. Bu grafik incelendiğinde ise AG3, AG18, AG22 VE AG24 kodlu çalışmaların değerlendirme rubriğine göre daha fazla sayıda evet çıktığı, AG1 VE AG5 kodlu çalışmalarda ise evet ve hayırların eşit olduğu görülmektedir. Ancak diğer çalışmalar incelendiğinde ise çok büyük oranda değerlendirme rubriğine göre hayır çıktığı görülmektedir.



Grafik 2. Artırılmış gerçeklik çalışmalarının her birinin betimsel analiz sonuçları grafiği

3.3. Artırılmış Gerçeklik Çalışmaların Giriş Bölümlerinin Aldıkları Puanların Ortalaması

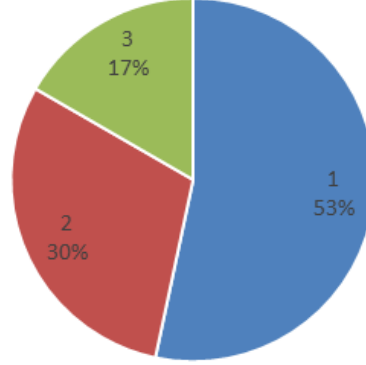
Değerlendirme rubriğinin giriş bölümü ile ilgili maddesine (m7) göre makalelerin aldıkları puanların ortalaması incelenmiş ve aşağıdaki grafik oluşturulmuştur (Grafik 3). Grafik incelendiğinde çalışmaların araştırmada farklı düşüncelere ya da alternatif açıklamalara değinilmiş midir sorusuna yapılan puanlamaya göre %73'ünün 1 (hayır), %14'ünün 2 (kısmen) ve %13'ünün 3 (evet) puan aldığı görülmüştür.



Grafik 3. Giriş bölümü ile ilgili verilen puanların ortalamaları

3.4. Artırılmış Gerçeklik Çalışmaların Yöntem Bölümlerinin Aldıkları Puanların Ortalaması

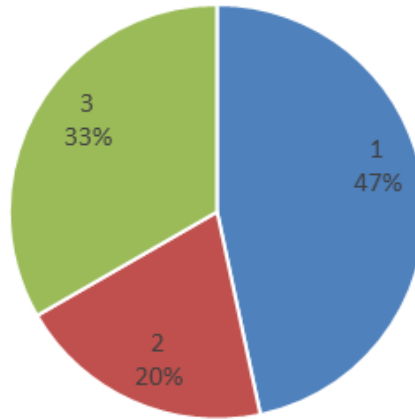
Değerlendirme rubriğinin yöntem bölümüne ilişkin maddelerine göre (m1, m2, m4, m5, m6, m11, m13, m14, m15) makalelerin aldıkları puanların ortalaması incelenmiş ve aşağıdaki grafik oluşturulmuştur (Grafik 4). Grafik incelendiğinde çalışmaların yöntem (araştırma deseni, veri toplama aracı, örneklem, araştırmacının rolü) ile ilgili yapılan puanlamaya göre %53'ünün 1 (hayır), %30'unun 2 (kısmen) ve %17'sinin 3 (evet) puan aldığı görülmüştür.



Grafik 4. Yöntem bölümü ile ilgili verilen puanların ortalamaları

3.5. Artırılmış Gerçeklik Çalışmaların Araştırma Soruları Bölümlerinin Aldıkları Puanların Ortalaması

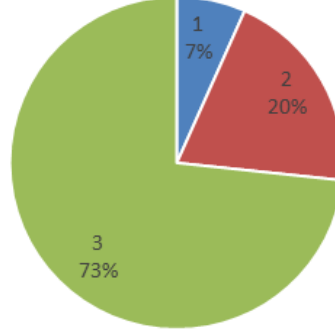
Değerlendirme rubriğinin araştırma soruları bölümü ile ilgili maddelerine (m9, m10) göre makalelerin aldıkları puanların ortalaması incelenmiş ve aşağıdaki grafik oluşturulmuştur (Grafik 5). Grafik incelendiğinde çalışmaların araştırma soruları ile ilgili yapılan puanlamaya göre %47'sinin 1 (hayır), %20'sinin 2 (kısmen) ve %33'ünün 3 (evet) puan aldığı görülmüştür.



Grafik 5. Araştırma soruları bölümü ile ilgili verilen puanların ortalamaları

3.6. Çalışmaların Verilerin Analizi Bölümlerinin Aldıkları Puanların Ortalaması

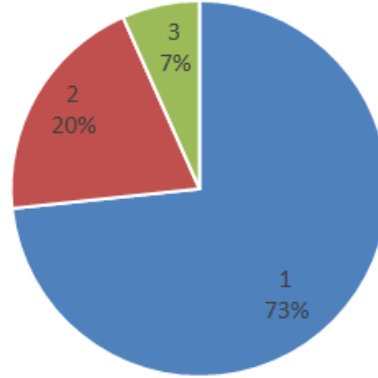
Değerlendirme rubriğinin verilerin analizi bölümü ile ilgili maddelerine (m16, m17, m18) göre makalelerin aldıkları puanların ortalaması incelenmiş ve aşağıdaki grafik oluşturulmuştur (Grafik 6). Grafik incelendiğinde çalışmaların verilerin analizi ile ilgili yapılan puanlamaya göre %7'sinin 1 (hayır), %20'sinin 2 (kısmen) ve %73'ünün 3 (evet) puan aldığı görülmüştür.



Grafik 6. Verilerin analizi bölümü ile ilgili verilen puanların ortalamaları

3.7. Artırılmış Gerçeklik Çalışmaların Bulgular Bölümlerinin Aldıkları Puanların Ortalaması

Değerlendirme rubriğinin bulgular bölümü ile ilgili maddelerine (m3, m12, m19) göre makalelerin aldıkları puanların ortalaması incelenmiş ve aşağıdaki grafik oluşturulmuştur (Grafik 7). Grafik incelendiğinde çalışmaların bulgular ile ilgili yapılan puanlamaya göre %73'ünün 1 (hayır), %20'sinin 2 (kısmen) ve %7'sinin 3 (evet) puan aldığı görülmüştür.



Grafik 7. Bulgular bölümü ile ilgili verilen puanların ortalamaları

4. Sonular ve Tartışma

alıřma iin hazırlanmıř deęerlendirme rubrięine gre hazırlanan grafikler ve bu grafiklerden elde edilen verilere gre;

- Genel olarak artırılmıř gereklik alıřmalarının deęerlendirme leęinden hayır aldıęı grlmektedir. Yani deęerlendirme rubrięine gre ele alınan maddeler aısından incelenen alıřmalarda eksikliklerin olduęu tespit edilmiřtir. Bu durum Cuendet ve ark. (2013) yapmıř oldukları alıřma ile paralellik gstermektedir.

- Artırılmıř gereklik alıřmalarının her birinin deęerlendirme rubrięine gre betimsel analiz sonuları incelendięinde daha fazla sayıda hayır ıkmıřtır. Bu durum bize incelenen alıřmaların byk bir blmnn deęerlendirme rubrięine gre eksikleri olduęunu ortaya koymaktadır. Billingham, Kato ve Poupyrev (2001) yapmıř oldukları alıřmalarında Artırılmıř gereklik uygulamalarının eęitimde kullanılmakta olan dięer bilgi iřlem tabanlı teknolojilere gre eksikleri olduęunu vurgulamıřtır.

- Arařtırmada farklı dřncelere ya da alternatif aıklamalara deęinilmıř midir sorusuna yapılan puanlamaya gre alıřmaların farklı dřnce ve aıklamalara yer verme konusunda yeterince iyi puan alamadıkları ortaya ıkmıřtır. Alan yazın incelendięinde yapılan alıřmalarda bir okul ortamında uygulanabilirlięinin zor olduęunu belirtmiřlerdir(Billinghurst, 2002).

- Yntem (arařtırma deseni, veri toplama aracı, rneklem, arařtırmacının rol) ile ilgili yapılan puanlamaya gre alıřmaların yntemsel aıdan yeterince iyi yapılandırılmadıęı dřnlebilir. Yntem blmnde giriř blmne nazaran daha ok makaleye verilen puanlarının ortalamasının 2 olmasına raęmen, alıřma hakkında yeterince bilgi verilmedięine inanılmaktadır. Yapılan alıřmalarda genelde nitel arařtırmalar tespit edilmiřtir. Nitel arařtırmaları nicel arařtırmalar izlemiřtir. Bununla birlikte karma yntemleri kullanan arařtırmalara da rastlanmıřtır. Alan yazın incelendięinde artırılmıř gereklikle ilgili makalelerde karma yntem daha yaygın bir şekilde kullanıldıęı grlmřtr (Altınpulluk, 2018; Chen vd., 2017). Bununla birlikte Altınpulluk (2018) tarafından yapılan alıřmada nitel arařtırmaların tezlerde kullanılmamasının arařtırılması gerektięi belirtilmiřtir. Nitel arařtırmalarda oęunlukla literatr inceleme alıřmalarına yer verilmiřtir. Korucu vd. (2016) tarafından yapılan alıřmada incelenen arařtırmaların oęunluęunun literatr taraması ve uygulama inceleme amacı ile yapılmıř olduęu bulgusuna ulařılmıřtır. Bu bulgu arařtırmanın bulgusunu destekler niteliktedir.

- Araştırma soruları ile ilgili yapılan puanlamaya göre çalışmaların araştırma sorularının açık bir şekilde ifade edilmediği veya araştırmacının aşamalarının araştırma soruları ile tutarlı olmadığı düşünülebilir. Yapılan çalışmalarda sonuçların genellikle betimsel sonuçlar içerdiği bulgusuna rastlanmıştır. Korucu vd. (2016) yapmış oldukları çalışmada literatürde en çok doküman incelemeye rastlamışlardır. Bu durum fen bilimleri eğitiminde artırılmış gerçeklik çalışmalarının ülkemizde henüz yeni çalışılıyor olmasından dolayı ortaya çıkıyor olabilir.

- Verilerin analizi ile ilgili yapılan puanlamaya göre çalışmaların çoğunluğunda verilerin kodlanmasında; birden fazla araştırmacının yer aldığı, kodlama karşılaştırılması yapıldığı, tutarlılık katsayılarının hesaplandığı ve geçerli olmayan verilerin ayıklandığı düşünülebilir. Baltacı(2017), bir araştırmada oldukça çok veriye sahip olmaktan ziyade o verilerin analizinin de önem arz ettiği belirtmiştir.

- Bulgular ile ilgili yapılan puanlamaya göre çalışmaların ortaya konulan veriler ile açık bir şekilde ilişkilendirilmediği, çalışmaların sonuçların veriler ile uyumunun düşük olduğu ve çalışmaların gözlem ve görüşme dokümanlarının bulgularda birbirleri ile mantıklı ve ilişkili olarak uyumunun düşük olduğu düşünülebilir. Fen eğitimi alanında ülkemizde yapılan pek çok araştırmacının tekrarlana bilirlik özelliğinin bulunmayışından dolayı tekil bulguların ötesinde bir nitelik taşımadığı söylenebilir(Erdem, 2011).

Araştırmanın genel sonuçlarına bakıldığında ise;

Artırılmış gerçeklik alanında yapılan çalışmalar bir bütün olarak ele alındığında, farklı çalışmalarda hazırlanan rubriklerin araştırmacılar tarafından incelenmesi ve bu rubriklerde yer alan maddelerin iyi analiz edilerek çalışmaların olgunlaştırılması gerektiği ortaya çıkmıştır.

Artırılmış gerçeklikle ilgili çalışmalar tek tek ele alındığında da “hayır” cevabının hâkim olduğu görülmektedir. Bu durum sadece bütün halinde değil, bireysel olarak da makalelerin rubriğe göre önemli eksiklikleri içerdiğinin tespiti olarak değerlendirilmektedir.

İncelenen çalışmalarda araştırmacıların dikkat etmesi gerek diğer bir özellik ise çalışmalarını tek boyuttan çıkararak farklılıklara yer verecek düzeyde geliştirmeleri ve daha geniş perspektiften olaylara bakmaları gerektiği sonucudur. Grafik 3’te yer alan %73’lük “hayır” cevabı tek boyutlu düşüncenin çalışmaya yansıyan oranıdır. Bu bakış açısı çalışmaları monoton hale getiren ve sadece bir parametrenin incelendiği sade çalışmalar olarak yansıtmaktadır.

Bu tür çalışmaların yapılandırılmasında katılımcılara ayrıntılı bilgi verilmesi gerektiği belirlenmiştir. Grafik 4’ün ortaya koyduğu değerler bu tezi doğrulayan verilerdir. Bu nedenle

benzer arařtırmaları yaparken hazırlık ařaması daha aıklayıcı bilgileri iermeli ve alıřma daha titiz Őekilde yapılandırılmalıdır.

Arařtırmada incelenen alıřmalarına veri toplama aralarında sorulan arařtırma sorularının daha aık olarak ifade edilmesi gerektiđi de elde edilen genel sonulardandır. Bu durum arařtırmanın ařamalarında ortaya ıkan tutarsızlıđın sebebi olarak tahlil edilmiřtir. Arařtırmada incelenen makale ve alıřmalarda verilerin yapılandırılması ve kodlanmasında beklenen dađılım elde edilmiřtir. Elde edilen verilere gre tutarlılıđı olmayan verilerin alıřmadan ıkarıldıđı ve alıřmanın bu boyutu hatalardan ayıklandıđı grlmektedir.

Nihai olarak; incelenen alıřmaların veriler ile uyumunun dřk seyrettiđi ve iliřkilendirme yapıldıđında kopukluđun olduđu genel bir kanaat olarak tespit edilmiřtir(Dnser ve ark., 2008). Bu alanda yapılacak olan ileri tarihli alıřmalarda bu eksiklikler dikkate alınarak alıřmaların tesis edilmesi literatre daha olumlu katkı sađlayacaktır.

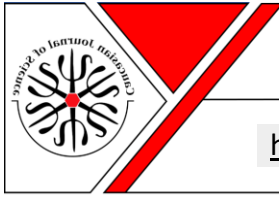
KAYNAKLAR

- Akkoyunlu, B. (1995). Bilgi teknolojilerinin okullarda kullanımı ve rretmenlerin rol. *Hacettepe niversitesi Eđitim Fakltesi Dergisi*, 11(11).
- Alınlı, C. & Yazıcı, F. (2020). 8. Sınıf TC İnkılap Tarihi ve Atatrklk Dersinde artırılmıř gereklik uygulamalarının đrencilerin akademik bařarılarına etkisi ve đrencilerin artırılmıř gereklik uygulamasına karřı tutumları. *Uluslararası Trk Eđitim Bilimleri Dergisi*, 15, 99-113.
- Altınpulluk, H. & Kesim, M. (2015, Őubat). *Gemiřten gnmze artırılmıř gereklik uygulamalarında gerekleřen paradigma deđiřimleri*. Akademik Biliřim Kongresi, 4-6.
- Altınpulluk, H. (2018). Trkiye’de artırılmıř gereklikle ilgili hazırlanan tezlerin bibliyometrik analiz yntemiyle incelenmesi. *Eđitim Teknolojisi Kuram ve Uygulama*, 8(1), 248–272.
- Avcı, A. F. & Tařdemir, Ő. (2019). Artırılmıř ve sanal gereklik ile periyodik cetvel đretimi. *Selcuk University Journal of Engineering Sciences*, 18(2), 68-83.
- Ayas, A. (1995) Fen Bilimlerinde Program Geliřtirme ve Uygulama Teknikleri zerine Bir alıřma: İki ađdař Yaklařımın Deđerlendirilmesi, *Hacettepe niversitesi Eđitim Fakltesi Dergisi*, 11, 149-155.
- Azuma, R. T. (1997). A survey of augmented reality. *Teleoperators and Virtual Environments*, 6(4), 355-385.
- Bal, G. & İten, T. (2017). Artırılmıř gereklik teknolojisi zerine yapılan akademik alıřmaların ierik analizi. *Biliřim Teknolojileri Dergisi*, 10(4), 401-415.
- Baltacı, A. (2017). Nitel veri analizinde Miles-Huberman modeli. *Ahi Evran niversitesi Sosyal Bilimler Enstits Dergisi*, 3(1), 1-14.
- Billinghurst, M. (2002). Augmented reality in education. *New horizons for learning*, 12(5), 1-5.
- Billinghurst, M., Kato, H., & Poupyrev, I. (2001, August). Collaboration with tangible augmented reality interfaces. *HCI international*, 1, 5-10.

- Chen, P., Liu, X., Cheng W., & Huang R. (2017). A review of using augmented reality in education from 2011 to 2016. In Popescu E. et al. (Eds.), *Innovations in smart learning. Lecture notes in educational technology* (pp. 13–18). Singapore: Springer.
- Cuendet, S., Bonnard, Q., Do-Lenh, S., & Dillenbourg, P. (2013). Designing augmented reality for the classroom. *Computers & Education*, 68, 557-569.
- Çankaya, B. & Girgin, S. (2018). Artırılmış gerçeklik teknolojisinin fen bilimleri dersi akademik başarısına etkisi the effect of augmented reality technology on the academic success of science course. *Journal of Social And Humanities Sciences Research (JSHSR)*, 5(30), 4283-4290.
- Çelik, İ. (2019). *Öğretim elemanlarının artırılmış gerçeklik teknolojisini ders materyali olarak kabullerinin incelenmesi*. Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Eğitim Bilimleri Enstitüsü: Van.
- Çilek, E. & Çınar, İ. H. (2019). *Fen eğitiminde artırılmış gerçeklik uygulamaları*. Eğitimin Yeni Dinamikleri X. Ulusal Öğretmenim Sempozyumu Bildirileri Uluslararası Öncü Eğitimciler Derneği Yayınları – 4. ISBN: 978-605-82831-5-2.
- Dağdalan, G. (2019). *Sanal gerçeklik ve animasyon destekli fen bilimleri öğretiminin öğrencilerin bazı öğrenme ürünlerine etkisi*. (Yüksek Lisans Tezi). Ordu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Demirel, G. (2019). *Artırılmış gerçeklik uygulamaları ile işlenen fen bilimleri dersinin 7. Sınıf öğrencilerimin akademik başarılarına ve artırılmış gerçeklik uygulamalarına karşı tutumlarına etkisi*. (Yayınlanmamış Yüksek Lisans Tezi). Gazi University, Institute of Educational Sciences, Ankara.
- Demirer, V. & Erbaş, Ç. (2015). Mobil artırılmış gerçeklik uygulamalarının incelenmesi ve eğitimsel açıdan değerlendirilmesi. *Mersin Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 11(3).
- Durak, A. & Yılmaz, F. G. K. (2019). Artırılmış gerçekliğin eğitsel uygulamaları üzerine ortaokul öğrencilerinin görüşleri. *Abant İzzet Baysal Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 19(2), 468-481.
- Dünser, A., Grasset, R., & Billinghamurst, M. (2008). *A survey of evaluation techniques used in augmented reality studies* (pp. 5-1). Human Interface Technology Laboratory New Zealand.
- Elmas, R., Kahriman-Pamuk, D. & Pamuk, S. (2020). Artırılmış gerçeklik ve fen etkinlikleri: okul öncesi öğretmen ve öğretmen adaylarının görüşleri. *Yüzüncü Yıl Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 17(1), 671-699.
- Erbaş, Ç. & Demirer, V. (2014). Eğitimde artırılmış gerçeklik uygulamaları: Google Glass örneği. *Journal of Instructional Technologies and Teacher Education*, 3(2), 8-16.
- Erdem, D. (2011). Türkiye’de 2005–2006 yılları arasında yayımlanan eğitim bilimleri dergilerindeki makalelerin bazı özellikler açısından incelenmesi: Betimsel bir analiz. *Journal of Measurement and Evaluation in Education and Psychology*, 2(1), 140-147.
- Erdoğan, İ. (2004). *Eğitimde değişim yönetimi*. Pegem A Yayıncılık.
- Fyle, C.O. (2013). *Teacher Education MOOCs for Developing World Contexts: Issues and Design Considerations*, Sixth International Conference of MIT’s Learning International Networks Consortium (LINC), June 16 – 19, 2013 Cambridge, Massachusetts.
- Goto, S., Levec, J. & Smith, J. M. (1942). Mass transfer in packed ebds with two-phase flow. *Heat Transmission* 2nd ed., McGraw Hill, New York, 278-292.

- Gül, K. & Şahin, S. (2017). Bilgisayar donanım öğretimi için artırılmış gerçeklik materyalinin geliştirilmesi ve etkililiğinin incelenmesi. *Bilişim Teknolojileri Dergisi*, 10(4), 353-362.
- İbili, E. & Şahin, S. (2013). Artırılmış gerçeklik ile interaktif 3d geometri kitabı yazılımın tasarımı ve geliştirilmesi: ARGE3D. *Afyon Kocatepe Üniversitesi Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi*, 13(1), 1-8.
- İçten, T. & Bal, G. (2017a). Artırılmış Gerçeklik Teknolojisi Üzerine Yapılan Akademik Çalışmaların İçerik Analizi. *Bilişim Teknolojileri Dergisi*, Cilt: 10, Sayı: 4, Ekim.
- İçten, T. ,Bal, G. (2017b). Artırılmış Gerçeklik Üzerine Son Gelişmelerin ve Uygulamaların İncelenmesi. *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi*, GU J Sci, Part C, 5(2): 111-136.
- Karakaş, M. & Özerbaş, M. (2020). Fizik dersinde artırılmış gerçeklik uygulamalarının öğrencilerin akademik başarılarına etkisi. *Eğitim Teknolojisi Kuram ve Uygulama*, 10(2), 452-468.
- Karaoğlan Yılmaz, F. G. & Durak, A. (2017, Ekim). *Artırılmış gerçekliğin eğitsel uygulamaları üzerine ortaokul öğrencilerinin görüşlerinin incelenmesi*. 5th International Instructional Technologies & Teacher Education Symposium.
- Kırıkkaya, E. B. & Şentürk, M. (2018). Güneş sistemi ve ötesi ünitesinde artırılmış gerçeklik teknolojisi kullanılmasının öğrenci akademik başarısına etkisi. *Kastamonu Eğitim Dergisi*, 26(1), 181-189.
- Korucu, A. T., Usta, E. ve Yavuzaslan, İ. F. (2016). Eğitimde artırılmış gerçeklik teknolojilerinin kullanımı: 2007-2016 döneminde Türkiye’de yapılan araştırmaların içerik analizi. *Alan Eğitimi Araştırmaları Dergisi*, 2(2), 84-95.
- Miles, M. B. & Huberman, A. M. (1994). *Qualitative data analysis: An expanded sourcebook*. sage.
- Onbaşılı, Ü. İ. (2018). Artırılmış gerçeklik uygulamalarının ilkökul öğrencilerinin artırılmış gerçeklik uygulamalarına yönelik tutumlarına ve fen motivasyonlarına etkisi. *Ege Eğitim Dergisi*, 19(1), 320-337.
- Önal, N. (2017). Artırılmış Gerçeklik Eğitim Uygulamaları İlköğretim Matematik Öğretmen Adaylarının Akademik Motivasyonlarını Etkiler mi? *İnsan ve Toplum Bilimleri Araştırmaları Dergisi*, 6(5), 2847-2857.
- Önder, K. (2007). *İlköğretim 6. sınıf fen ve teknoloji dersi “canlılarda üreme, büyüme ve gelişme” ünitesinin öğretiminde laboratuvar yönteminin öğrenci başarısına etkisi*. (Yüksek Lisans Tezi). Fen Bilimleri Enstitüsü, İlköğretim Anabilim Dalı, Konya.
- Özarslan, Y. (2011, Eylül). *Öğrenen içerik etkileşiminin genişletilmiş gerçeklik ile zenginleştirilmesi*, 5th International Computer & Instructional Technologies Symposium, 22-24 September.
- Özdemir, M. (2017). Artırılmış gerçeklik teknolojisi ile öğrenmeye yönelik deneysel çalışmalar: sistematik bir inceleme. *Mersin Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 13(2), 609-632.
- Sarıtaş, T. & Üner, N. (2013). Eğitimdeki yenilikçi teknolojiler: *Bulut teknolojisi*. *Eğitim ve Öğretim Araştırmaları Dergisi*, 2(3), 192-201.
- Shaljami, B. (2018). *Reklamlarda arttırılmış gerçeklik uygulamalarının tüketici davranışlarında oynadığı rol*. (Yayımlanmamış Yüksek Lisans Tezi). İstanbul Ticaret Üniversitesi, Sosyal Bilimler Enstitüsü, Medya ve İletişim Sistemleri, İstanbul
- Sırakaya, M. & Sırakaya, D. A. (2018). Artırılmış gerçekliğin fen eğitiminde kullanımının tutum ve motivasyona etkisi. *Kastamonu Eğitim Dergisi*, 26(3), 887-905.

- Timur, B. & Özdemir, M. (2018). Fen eğitiminde artırılmış gerçeklik ortamlarının kullanımına ilişkin öğretmen görüşleri. *Uluslararası Türk Eğitim Bilimleri Dergisi*, 10, 62-75.
- Topraklıkoğlu, K. (2018). *Üç boyutlu modellemenin kullanıldığı artırılmış gerçeklik etkinlikleri ile geometri öğretimi*, (Yüksek Lisans Tezi), Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Tuncel, M. & Fidan, M. (2018, Ekim). *Ortaokul fen bilimleri dersinde öğrenmede zorlanılan konular ve çözüm önerileri*. 6. Uluslararası Eğitim Programları ve Öğretim Kongresi Tam Metin. Ankara Pegem Akademi.
- Tülü, M. & Yılmaz, M.(2012, Şubat). *iPhone ile arttırılmış gerçeklik uygulamalarının eğitim alanında kullanılması*. Akademik Bilişim'12 - XIV. Akademik Bilişim Konferansı Bildirileri. 1-3 Şubat, Uşak Üniversitesi.
- Wach, E. (2013). Learning about qualitative document analysis. <https://opendocs.ids.ac.uk/opendocs/bitstream/handle/20.500.12413/2989/PP%20InBrief%2013%20QDA%20FINAL2.pdf?sequence=4>. 04.08.2021 tarihinde indirilmiştir.
- Yalçın Çelik, A. (2019). Biyoloji ve kimya öğretmen adaylarının artırılmış gerçeklik materyalleri deneyimi. *Karaelmas Journal of Educational Sciences*, 7(7), 123-132.



Influence of *Citrobacter freundii* Infection on Ion Levels of Model Organism

Galleria mellonella Larvae

Serkan SUGEÇTİ¹

Makalenin Alanı: Biyoloji

| Makale Bilgileri | Öz |
|--|--|
| Geliş Tarihi 07.10.2021 | Son yıllarda <i>Galleria mellonella</i> larvaları enfeksiyon modeli olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada memelilerde üriner sistem, solunum sistemi, bakteriyemi, kateter enfeksiyonları ve menenjit gibi birçok patofizyolojik etkiye sahip olan <i>Citrobacter freundii</i> enfeksiyonunun <i>G. mellonella</i> larvalarının hemolenf dokusundaki iyon seviyeleri üzerindeki etkileri araştırıldı. <i>G. mellonella</i> larvalarının hemolenf dokusunda kalsiyum seviyeleri uygulamadan 8 saat sonra kontrol grubuna göre önemli ölçüde azaldı. Demir seviyeleri, bakteriyel enfeksiyondan 2 ve 4 saat sonra önemli ölçüde arttı. Ancak <i>C. freundii</i> enfeksiyonundan 8 saat sonra kontrol grubuna göre istatistiksel olarak azaldı. Ayrıca tüm <i>C. freundii</i> uygulamalarına bağlı olarak <i>G. mellonella</i> larvalarının hemolenf dokusunda potasyum ve magnezyum seviyeleri önemli ölçüde azaldı. <i>C. freundii</i> enfeksiyonundan 8 saat sonra <i>G. mellonella</i> larvalarının hemolenf dokusunda fosfor seviyeleri arttı, ancak istatistiksel olarak bir fark oluşmadı. Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar <i>C. freundii</i> enfeksiyonunun <i>G. mellonella</i> larvalarının iyon dengesini bozduğu göstermiştir. |
| Kabul Tarihi 17.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Enfeksiyon modeli İyon dengesi <i>Citrobacter freundii</i> <i>Galleria mellonella</i> | |

| Article Info | Abstract |
|--|--|
| Received 07.10.2021 | In recent years, <i>Galleria mellonella</i> larvae have been used as a model of infection. In this study, the effects of <i>Citrobacter freundii</i> infection, which has many pathophysiological effects such as urinary system, respiratory system, bacteremia, catheter infections and meningitis in mammals, on ion balance in hemolymph of <i>G. mellonella</i> larvae were investigated. Calcium levels in hemolymph of <i>G. mellonella</i> larvae significantly decreased 8 hours after the infection when compared to the control group. Iron levels significantly increased 2 and 4 hours after bacterial infection. However, it was statistically reduced 8 hours after the <i>C. freundii</i> infection compared to the control group. In addition, potassium and magnesium levels were significantly decreased in hemolymph of <i>G. mellonella</i> larvae due to all <i>C. freundii</i> infection. Phosphorus levels increased in hemolymph of <i>G. mellonella</i> larvae 8 hours after <i>C. freundii</i> infection, but there was no statistical difference. In the present study demonstrated that <i>C. freundii</i> infection disrupts the ion balance of <i>G. mellonella</i> larvae. |
| Accepted 17.12.2021 | |
| Keywords Infection model Ion balance <i>Citrobacter freundii</i> <i>Galleria mellonella</i> | |

¹ Zonguldak Bülent Ecevit University Çaycuma Food and Agriculture Vocational School Department of Veterinary Medicine-Zonguldak; e-mail: serkan.sugecti@hotmail.com ; ORCID: 0000-0003-3412-2367

1. Introduction

Citrobacter spp. belong to a group of gram-negative bacteria, facultative and anaerobic, within family Enterobacteriaceae. These bacteria are frequently found in soil, food, sewage water, and the intestines of animals and humans. *Citrobacter* spp. are opportunistic pathogens and the most frequently isolated strain is *Citrobacter freundii*. *C. freundii* can cause various infections such as urinary system, respiratory system, bacteremia, catheter infections and meningitis (Khorasani et al., 2008; Anderson et al., 2018; Liu et al., 2018).

The great wax moth (*Galleria mellonella*) is an important pest insect that causes economic losses in beekeeping belonging to the Lepidopteran order. *G. mellonella* completes its life cycle in four stages as egg, larva, pupa and adult (Kwadha et al., 2017). *G. mellonella* is used as a model organism in the development of alternative new strategies against pesticides with high toxic effects for the environment and non-target organisms used in agricultural areas (Büyükgüzel et al. 2010; Sugeçti et al., 2016; Kastamonuluoğlu et al., 2020; Tunçsoy et al., 2021; Büyükgüzel & Büyükgüzel, 2021). In recent years, invertebrate infection models have been used to determine the effects of pathogenic bacteria on animals. Especially, *G. mellonella* larvae are the most preferred invertebrate infection models (Asai et al., 2020; Moore & Gitai, 2020; Ochoa et al., 2021). *G. mellonella* larvae are an important infection model that is suitable for injection, can be quickly mass production and can survive at 30-37 °C after injection. In addition, the absence of ethical concerns in the use of this model organism is an important factor (Harding et al., 2012; Ames et al., 2017; Sugeçti & Büyükgüzel, 2018; Sugeçti, 2021).

Ions have important roles in the regulation of homeostasis in insects. In addition, this ion supports the functioning of the nervous and muscular system (Southall et al. 2006). In this study, changes in ion amounts such as calcium (Ca), iron (Fe), potassium (K), magnesium (Mg) and phosphorus (PHOS) of model organism *G. mellonella* larvae due to pathogenic bacteria *C. freundii* infection were investigated.

2. Materials And Methods

2.1. Model insect

The *G. mellonella* larvae used in the experiments were mass-produced under laboratory conditions. Larva, pupa and adult stages of *G. mellonella* were collected from apicultural areas in Zonguldak, Turkey and transferred to glass jars (1000 ml). Newly emerged adults of *G.*

mellonella were used for mass-production under laboratory conditions. Adults of *G. mellonella* were transferred to a glass-jar (1000 ml) containing artificial diet. Then, newly hatched larvae were reared artificial diet in incubator (FN 500, Nüve, Ankara, Turkey) set at 28 ± 2 °C and 65 ± 5 % relative humidity, with a photoperiod of 12:12 h (L:D) (Büyükgüzel et al., 2010; Sugeçti et al., 2016). Artificial diet content; 420 g wheat bran, 150 ml filtered honey, 150 ml glycerol (Merck, Darmstadt, Germany), 20 g ground dark old honeycomb and 30 ml pure water (Bronskill, 1961).

2.2. *C. freundii* Injection and Collection of Hemolymph

C. freundii (ATCC-8090) was obtained from a local company. *C. freundii* dose was prepared in 0.5 McFarland units (approximately 1×10^7 (CFU/ml) per ml of 0.9% physiological saline. Seventh instar larvae of *G. mellonella* were anesthetized by cooling on ice for approximately 5 minutes. The surface of the larvae was then sterilized with 95% ethanol. Prepared *C. freundii* strains (10 µl) were injected from the *G. mellonella* abdomen of the insect. Hamilton syringe was used for bacteria injection. In the control group, *G. mellonella* larvae were injected with only 10 µl of 0.9% physiological saline.

In the present study, hemolymph from the abdomen of the *G. mellonella* (seventh instar larvae) was obtained by amputating the second pair of prolegs. Samples were collected in Microcentrifuge tubes (1.5 ml) kept in ice. A few phenylthiourea crystals (Sigma Aldrich, Missouri, USA) were placed to prevent melanization. Samples were stored at -80 °C until analysis.

2.3. Experimental Design

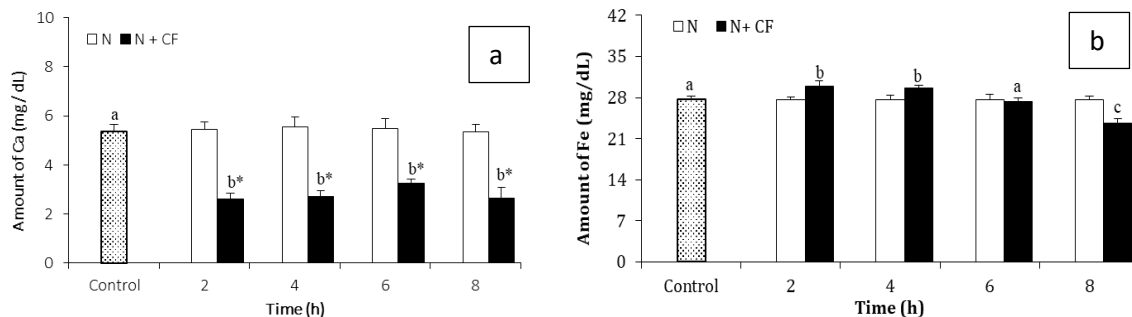
In this study, ion levels were performed with the Roche Hitachi Cobas c501 instrument (Roche, Germany) using appropriate kits. Hemolymph extracts were prepared according to the method of Hyršl et al. (2007). Samples were centrifuged at 10.000 g for 10 min at 4 °C (Nüve FN 800R, Turkey). Calcium (Ca) (Kit no: 45055201), iron (Fe) (Kit no: 44323201), potassium (K) (Kit no: 48497701), magnesium (Mg) (Kit no: 42773901) and phosphorus (P) (Kit no: 44961201). Ion levels assays were performed according to manufacturer's instructions. All experiments used 20 larvae per treatment. The experiments were repeated four times.

2.4. Statical Analyses

In the current study, one-way analysis of variance (ANOVA) test was used to evaluate data on ion levels. Tukey's HSD test was used to determine the importance of the difference between the averages. T-test was used compare to *C. freundii* infection effects at each timepoint to physiological saline treatment at the same timepoint. All analyses were performed in SPSS v.15.0 (SPSS, Chicago, IL, USA). A probability level of 0.05 was used to check the significance of the difference between the averages.

3. Results

In this study, Ca levels significantly decreased in hemolymph of *G. mellonella* larvae 8 hours after the *C. freundii* inoculation when compared to the control group. In addition, Ca levels statistically increased 2, 4, 6 and 8 hours after *C. freundii* inoculation when compared to physiological saline treatment for same timepoint (F: 50.547, df: 4, $p < 0.001$) (Fig 1A). Fe levels significantly increased 2 and 4 hours after bacterial infection. However, it was statistically reduced 8 hours after the *C. freundii* infection when compared to the control group (F: 71.193, df: 4, $p < 0.001$) (Fig 1B). Levels of K (F: 246.977, df: 4, $p < 0.001$) and Mg (F: 68.354, df: 4, $p < 0.001$) significantly increased 2, 4, 6 and 8 hours after *C. freundii* infection when compared to the control group and physiological saline treatment for the same timepoint (Fig 1C and Fig 1D). PHOS levels increased in hemolymph of *G. mellonella* larvae 8 hours after *C. freundii* infection, but there was no statistical difference ($p > 0.05$). In addition, 6 hours after *C. freundii* infection, it significantly decreased when compared to the control group (F: 25.295, df: 4, $p < 0.001$) (Fig 1E).



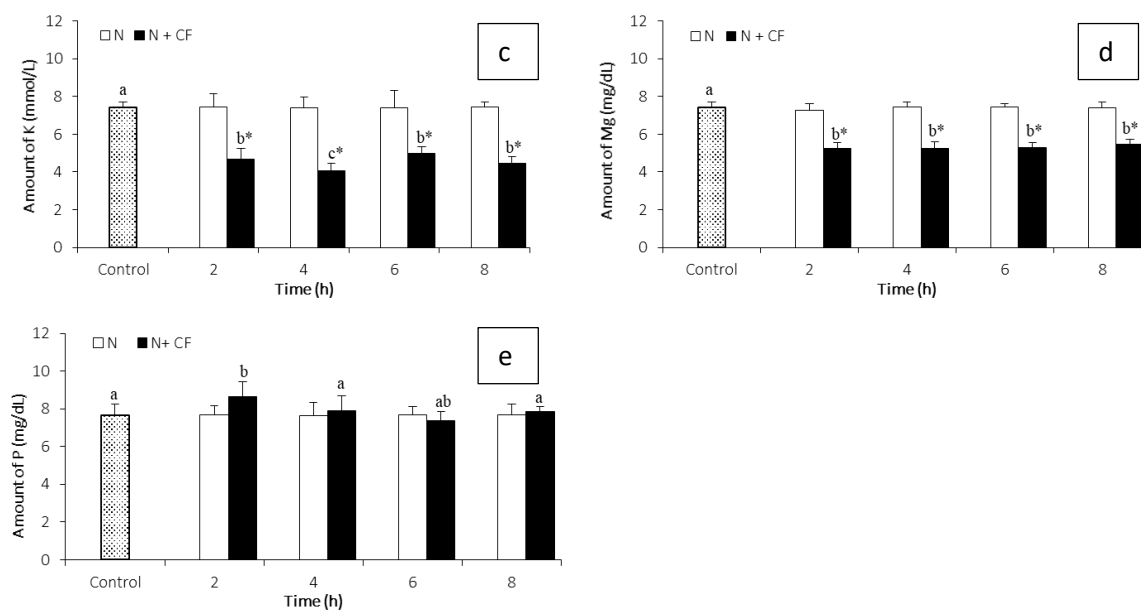


Fig 1. Effects of *C. freundii* infection on ion levels of *G. mellonella* (Bars represent the means (\pm S.D.) of four replicates. Means followed by the same letter are not significantly different ($p > 0.05$; * $p < 0.05$: compared with NaCl 0.9% (N) injected for same timepoint of *C. freundii* (CF) infection) (Control: 8 hours after N injection)

4. Discussion

The cytotoxic effects of chemical and biological agents on organisms can cause oxidative damage and disruption of ion balance (Sugeçti 2021; Sertçelik et al., 2021; Akbaba et al., 2021). In recent years, model insect *G. mellonella* has been used to investigate the deterioration of ion balance, homeostasis and oxidative stress due to infections (Asai et al., 2020; Sugeçti, 2021). In the current study, it was provided information about the effects of *C. freundii* infection on ion levels in *G. mellonella* larvae. The results of this study showed that ion levels were altered in the hemolymph of *G. mellonella* larvae due to *C. freundii* infection.

Ions have important physiological roles in living organisms, including insects (Aci et al., 2020; Sugeçti, 2021). Ions have physiological effects such as osmoregulation, homeostasis, and contribution to oxidative stress in insects. Calcium acts as a second messenger in all cells. In addition, this ion supports the functioning of the nervous system and muscular system (Southall et al., 2006). In this study, the amount of calcium significantly decreased 8 hours after *C. freundii* infection. The reason for the decrease in the amount of calcium may be as a result of cell damage due to infection. In another study, it was reported that there were changes in free calcium and hydrogen ions in the hemocytes of *Bombyx mori*, *Exolontha*

serrulata and *Spodoptera litura* SL-1 cell line due to the toxic effects of destruxins. This study reported that hemocytes to destruxins tend to rapidly increase and then decrease calcium levels (Chen et al., 2014). Fe, which is an important transition metal, causes an increase in reactive oxygen derivatives and oxidative stress in organisms (Gaete et al., 2017). Hydrogen peroxide (H₂O₂), which causes oxidative stress, is the result of Fenton reactions and the interaction of Cu (II) and Fe (II) ions with hydrogen. In this study, although the amount of Fe increased 2 and 4 hours after *C. freundii* infection, it decreased 8 hours after infection. When Cu and Fe bind to proteins in organism, these ions become less susceptible to participating in Fenton reactions. Therefore, non-enzymatic antioxidants such as albumin can bind metals and protect the organism from oxidative stress (Roche et al., 2008). The decrease in the amount of Fe ion in the hemolymph of *G. mellonella* larvae 8 hours after infection may be a result of antioxidant defense. Additional experiments are needed to support this hypothesis. In the present study, K and Mg ions were significantly decreased in the hemolymph of *G. mellonella* larvae due to *C. freundii* infection. Magnesium plays important role in the physiological function and intermediary metabolism of insects (Clark et al., 1958). K plays a key role in important physiological functions, including maintenance of membrane potentials and cell volume, acid/base balance, and nerve impulse transmission [Dunham, 2004; Marshall & Grosell, 2006] In another study, Sowers et al. (2006) reported that K, Ca and Na levels in the *Litopenaeus vannamei* exposed to artificial sea salt or mixed ion solution were adversely affected by salt stress. Another study was reported that Na and K levels significantly increased in *G. mellonella* larvae exposed to dichlorvos (8 µg/100 g diet). In the study was reported that there were significant changes in ion levels and impaired homeostasis in *G. mellonella* larvae due to dichlorvos (Kayış et al., 2015). In this study, the amount of P ion increased significantly 2 hours after infection. In addition, although the amount of P ion increased 8 hours after infection, there was no statistical difference. Sugeçti (2021) reported that 8 hours after *Klebsiella pneumoniae* infection, the amount of P ion increased, while the amount of Mg, K and Ca ions significantly decreased. These results show that pathogenic bacteria disrupt the ion balance in insects.

In conclusion, this study showed that *C. freundii* infection disrupts the ion balance and homeostasis of *G. mellonella* larvae. In addition, *G. mellonella* can be used as a model organism in determining the effects of infections on the ion balance.

Conflict of interest: The authors declare no conflict of interest.

Author Contributions: SS analyzed the ion levels. SS was a major contributor in writing the manuscript. All authors read and approved the final manuscript.

5. REFERENCES

- Aci, R., Muderrisoğlu, S., Duran, U., Shakouri, N., Çiftci, G. (2020). Content of minerals in muscle tissue of diploid rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*) in freshwater (Derbent Dam) and seawater (The Black Sea). *Journal of Elementology*, 25(4), 1375-1384. <https://doi.org/10.5601/jelem.2020.25.2.2017>
- Akbaba, G.B., Akbaba, U., Öztürkkan, F.E. (2021). Evaluation of interactions of multi-walled carbon nanotubes with benzoic acid and its 2-halogeno derivatives and their cytotoxicity. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 937-943. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2021.1918676>.
- Ames, L., Duxbury, S., Pawlowska, B., Ho, H.L., Haynes, K., Bates, S. (2017). *Galleria mellonella* as a host model to study *Candida glabrata* virulence and antifungal efficacy. *Virulence*, 8 (8), 1909-1917. <https://doi.org/10.1080/21505594.2017.1347744>
- Anderson, M.T., Mitchell, L.A., Zhao, L., Mobley, H.L. (2018). *Citrobacter freundii* fitness during bloodstream infection. *Scientific Reports*, 8 (1), 1-14. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-30196-0>
- Asai, M., Li, Y., Spiropoulos, J., Cooley, W., Everest, D., Robertson, B.D., Langford, P.R., Newton, S.M. (2020). A novel biosafety level 2 compliant tuberculosis infection model using a Δ leuD Δ panCD double auxotroph of *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv and *Galleria mellonella*. *Virulence*, 11 (1), 811-824. <https://doi.org/10.1080/21505594.2020.1781486>.
- Bronskill, J. (1961). A cage to simplify the rearing of the greater wax moth, *Galleria mellonella* (Pralidae). *Journal of the Lepidopterists' Society*, 15 (2), 102-104
- Büyükgüzel, E., Büyükgüzel, K. (2021). Oxidative Impact of Dietary Triclabendazole in *Galleria mellonella*. *Kafkas Universitesi Veteriner Fakültesi Dergisi*, 27 (3), 301-306, 2021. <https://doi.org/10.9775/kvfd.2020.25170>
- Büyükgüzel, E., Hyršl, P., Büyükgüzel, K. (2010). Eicosanoids mediate hemolymph oxidative and antioxidative response in larvae of *Galleria mellonella* L. *Comparative Biochemistry and Physiology Part A*, 156 (2), 176-183. <https://doi.org/10.1016/j.cbpa.2010.01.020>
- Chen, X.R., Hu, Q.B., Yu, X.Q., Ren, S.X. (2014). Effects of destruxins on free calcium and hydrogen ions in insect hemocytes. *Insect Science*, 21 (1), 31-38. <https://doi.org/10.1111/1744-7917.12028>
- Clark, E.W. (1958). A review of literature on calcium and magnesium in insects. *Annals of the Entomological Society of America*, 51(2), 142-154. <https://doi.org/10.1111/1744-7917.12028>.
- Dunham, R.A. (2004). *Aqua culture and fisheries biotechnology: Genetic approaches*. Book review, p. 145.
- Gaete, H., Álvarez, M., Lobos, G., Soto, E., Jara-Gutiérrez, C. (2017). Assessment of oxidative stress and bioaccumulation of the metals Cu, Fe, Zn, Pb, Cd in the polychaete *Perinereis gualpensis* from estuaries of

- central Chile. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 145, 653-658. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2017.07.073>
- Harding, C.R., Schroeder, G.N., Reynolds, S., Kosta, A., Collins, J.W., Mousnier, A., Frankel, G. (2012). *Legionella pneumophila* pathogenesis in the *Galleria mellonella* infection model. *Infection and Immunity*, 80 (8), 2780-2790. <https://doi.org/10.1128/IAI.00510-12>
- Hyršl, P., Büyükgüzel, E., Büyükgüzel, K. (2007). The effects of boric acid-induced oxidative stress on antioxidant enzymes and survivorship in *Galleria mellonella*. *Archives of Insect Biochemistry and Physiology*, 66 (1), 23–31. <https://doi.org/10.1002/arch.20194>
- Kastamonuluoğlu, S., Büyükgüzel, K., Büyükgüzel, E. (2020). The use of dietary antifungal agent terbinafine in artificial diet and its effects on some biological and biochemical parameters of the model organism *Galleria mellonella* (Lepidoptera: Pyralidae). *Journal of Economic Entomology*, 113(3),1110–1117. <https://doi.org/10.1093/jee/toaa039>
- Kayış, T., Coşkun, M., Dursun, O., Emre, I. (2015). Alterations in antioxidant enzyme activity, lipid peroxidation, and ion balance induced by dichlorvos in *Galleria mellonella* (Lepidoptera: Pyralidae). *Annals of the Entomological Society of America*, 108(4),570–574. <https://doi.org/10.1093/aesa/sav038>
- Khorasani, G., Salehifar, E., Eslami, G. (2008). Profile of microorganisms and antimicrobial resistance at a tertiary care referral burn centre in Iran: emergence of *Citrobacter freundii* as a common microorganism. *Burns*, 34 (7), 947-952. <https://doi.org/10.1016/j.burns.2007.12.008>
- Kwadha, C.A., Ongamo, G.O., Ndegwa, P.N., Raina, S.K., Fombong, A.T. (2017). The biology and control of the greater wax moth, *Galleria mellonella*. *Insects* 8(2),61. <https://doi.org/10.3390/insects8020061>
- Liu, L.H., Wang, N.Y., Wu, A.Y.J., Lin, C.C., Lee, C.M., Liu, C.P. (2018). *Citrobacter freundii* bacteremia: Risk factors of mortality and prevalence of resistance genes. *Journal of Microbiology, Immunology and Infection*, 51(4), 565-572. <https://doi.org/10.1016/j.jmii.2016.08.016>
- Marshall, W.S., Grosell, M. (2006). *Ion transport, osmoregulation, and acid-base balance*. In: *The Physiology of Fishes*. Evans D.H., Claiborne J.B., eds. CRC Press, Boca Raton, 177- 230.
- Moore, G.M., Gitai, Z. (2020). Both clinical and environmental *Caulobacter* species are virulent in the *Galleria mellonella* infection model. *PLoS one*, 15 (3), e0230006. <https://doi.org/10.1371/JOURNAL.PONE.0230006>
- Ochoa, S., Fernández, F., Devotto, L., France Iglesias, A., Collado, L. (2021). Virulence assessment of enterohepatic *Helicobacter* species carried by dogs using the wax moth larvae *Galleria mellonella* as infection model. *Helicobacter*, e12808. <https://doi.org/10.1111/hel.12808>.
- Roche, M., Rondeau, P., Singh, N.R., Tarnus, E., Bourdon, E. (2008). The antioxidant properties of serum albumin. *FEBS Letters*, 582(13), 1783-1787. <https://doi.org/10.1016/j.febslet.2008.04.057>
- Sertçelik, M., Akbaba, G.B., Öztürkkan, F.E. (2021). Kobalt (II) ve Çinko (II) 4-Florobenzoatın 3-Hidroksipiridin Komplekslerinin Sentezi, Spektroskopik ve Sitotoksik Özellikleri. *Caucasian Journal of Science*, 8(1): 14-26.
- Southall, T.D., Terhzaz, S., Cabrero, P., Chintapalli, V.R., Evans, J.M., Dow J.A.T., Davies, S.A. (2006). Novel subcellular locations and functions for secretory pathway Ca²⁺/Mn²⁺-ATPases. *Physiological Genomics*, 26 (1), 35-45. <https://doi.org/10.1152/physiolgenomics.00038.2006>.

- Sowers, A.D., Young, S.P., Grosell, M., Browdy, C.L., Tomasso, J.R. (2006). Hemolymph osmolality and cation concentrations in *Litopenaeus vannamei* during exposure to artificial sea salt or a mixed-ion solution: relationship to potassium flux. *Comparative Biochemistry and Physiology Part A*, 145(2), 176-180. <https://doi.org/10.1016/j.cbpa.2006.06.008>
- Sugeçti, S. (2021). Pathophysiological effects of *Klebsiella pneumoniae* infection on *Galleria mellonella* as an invertebrate model organism. *Archives of Microbiology*, 203, 3509–3517 <https://doi.org/10.1007/s00203-021-02346-y>
- Sugeçti, S., Büyükgüzel, K. (2018). Effects of oxfendazole on metabolic enzymes in hemolymph of *Galleria mellonella* L. (Lepidoptera: Pyralidae) larvae reared on artificial diet. *Karaelmas Fen ve Mühendislik Dergisi*, 8(2),590–594. <https://doi.org/10.7212/Fzkufbd.v8i2.1380>
- Sugeçti, S., Büyükgüzel, K., Büyükgüzel, E. (2016). Laboratory assays of the effects of oxfendazole on biological parameters of *Galleria mellonella* (Lepidoptera: Pyralidae). *Journal of Entomological Science*, 51(2),129–137. <https://doi.org/10.18474/JES15-36.1>
- Tunçsoy, B., Sugeçti, S., Büyükgüzel, E., Özalp, P., Büyükgüzel, K. (2021). Effects of Copper Oxide Nanoparticles on Immune and Metabolic Parameters of *Galleria mellonella* L. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 107: 412–420. <https://doi.org/10.1007/s00128-021-03261-0>



Conformational and Vibrational Analysis of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one by Density Functional Theory and *ab initio* Hartree-Fock

Güventürk UĞURLU¹

Makalenin Alanı: Fizik

| Article Info | ÖZ |
|---|---|
| Geliş Tarihi 17.11.2021 | <p>Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one (1)'in potansiyel enerji eğrileri (PEC), bir fonksiyon dihedral açı ϕ(C8-C9-) olarak hesaplandı. C10-O1), 6-311++G (d,p) temel seti ve düşük karşılık gelen syn- ve anti-uyumlular ile birlikte B3LYP fonksiyoneli kullanan hem başlangıçta Hartree-Fock (HF) hem de Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinde (DFT) enerji konformerleri belirlendi. Başlık molekülünün syn- ve anti-conformer'lerinin optimize edilmiş moleküler yapıları, titreşim dalga sayıları yukarıda bahsedilen iki yöntemle elde edilmiştir. ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kimyasal kayma değerleri ve sınır moleküler orbitaller (FMO'lar), her iki konformerin optimize edilmiş yapısından 6-311++G(d,p) temel seti ile DFT/B3LYP ve HF yöntemleri ile hesaplandı. Ayrıca TD-DFT/B3LYP/6-311++G (d,p) hesaplaması ile gaz fazında her iki konformer malın UV-Vis spektrumu hesaplanmıştır. Anti ve syn konformerin denge durumu (temel durum) dipol moment değerleri B3LYP/6-311++ G(d,p) ile 3.33 ve 3.01 Debye ve <i>ab initio</i> HF/6-311 ile 4.05 ve 3.88 Debye olarak hesaplanmıştır. ++ G(d,p) yöntemi. Molekülün hesaplanan geometrik parametreleri (bağ uzunlukları ve bağ-dihedral açıları) literatürdeki deneysel değerlerle karşılaştırılmış ve iyi bir uyum içinde oldukları görülmüştür. Hesaplama dosyasından üretilen çıktı chk.file, elektrostatik potansiyel haritasını ve HOMO-LUMO orbitallerini GaussView5.0.9 programı kullanılarak görselleştirmek için kullanıldı.</p> |
| Kabul Tarihi 28.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Titreşim spektrumu DFT Öncü moleküler orbital Potansiyel enerji eğrisi C ₁₃ H ₁₀ O ₂ | |

| Article Info | Abstract |
|--|--|
| Received 17.11.2021 | <p>The potential energy curves (PEC) of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one (1) were calculated as a function dihedral angle ϕ(C8-C9-C10-O1) at both <i>ab initio</i> Hartree-Fock (HF) and Density Functional Theory (DFT) using the B3LYP functional together with 6-311++G (d,p) basis set and the syn- and anti-conformers corresponding low energy conformers were determined. The optimized molecular structures, vibrational wavenumbers of the syn- and anti-conformers of title molecule were obtained with the two methods mentioned above. The ¹H- NMR and ¹³C-NMR chemical shift values and frontier molecular orbitals (FMOs) were computed from the optimized structure of both conformers by DFT/B3LYP and HF methods with 6-311++G(d,p) basis set. Also, UV-Vis spectrum of both conformers were calculated in gas phase via TD-DFT/B3LYP/6-311++G (d,p) calculation. The equilibrium state (ground state) dipole moment values of the anti and syn conformer were calculated as 3.33 and 3.01 Debye by B3LYP/6-311++ G(d,p) and 4.05 and 3.88 Debye by <i>ab initio</i> HF/6-311++ G(d,p) method. The calculated geometric parameters (bond lengths and bond-dihedral angles) of the molecule were compared with the experimental values in the literature and they were found to be in good agreement. The output chk.file generated from calculation file was</p> |
| Accepted 28.12.2021 | |
| Keywords Vibrational spectra DFT frontier molecular orbitals Potential energy curve C ₁₃ H ₁₀ O ₂ | |

¹ Kafkas University Faculty of Sciences and Letter Department of Physics-Kars; e-mail: gugurlu@kafkas.edu.tr; ORCID: 0000-0003-4171-7879 (Sorumlu yazar)

used to visualize the electrostatic potential map, and HOMO-LUMO orbitals using GaussView5.0.9 program.

Introduction

Chalcones are one of the important compounds with an enormous number of diverse biological activities. They are natural products exist in diverse plant kind such as in vegetables, fruits, tea and soy (Middleton, et al. 2000; Nowakowska, et al. 2007). Synthesis and characterization of new compounds containing chalcone and its derivatives continues increasingly owing to their influence as a drug for variety of promising biological activities such as different anti-diabetic (Hsieh, et al. 2012), anti-cancerous (Saxena, et al. 2007), anti-malarial (Domínguez, et al. 2005), anti-inflammatory (Herencia, et al. 1998), anti-tumour (Kumar, et al. 2003), and tyrosinase inhibitor (Akhtar, et al. 2015), anti-oxidant (Jayasinghe, et al. 2006), analgesic (Tanaka, et al. 2009), antiulcer (Batovska, et al. 2009), antimalarial (Ravichandran, et al. 2015) and antihelmintic(Liu, et al. 2001). Also, they are great intermediates for the synthesis of diverse heterocyclic compounds like isoxazole (Kaur, et al. 2013), pyrazoline (Reddy, et al. 2016), epoxide (Farooq, et al. 2020), thiazine (Badshah, et al.2016), indazole (Shakil, et al. 2013) and pyrimidine valuable in pharmaceutical industries (Bhat, et al. 2017). Crystal structure of molecule (1) were determined experimentally using X-ray structure analysis and spectroscopic methods (Vazquez-Vuelvas et al., 2015) but molecular properties such as electronic energy, conformation and vibration analysis of title molecule have not been determined. In this work, molecular structure, dipole moment, vibrational frequency, the electronic structure and HOMO-LUMO energies of above-mentioned molecule have been studied. The calculated geometric parameters (bond lengths and bond-dihedral angles) of the molecule were compared with the experimental values in the literature and they were found to be in good agreement. ^1H NMR and ^{13}C NMR chemical shifts calculations have been performed. Also, the energy band gap of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one molecule is calculated by using the highest occupied molecular orbital (HOMO) energy and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energy. The molecular structure using numbering scheme of the compound (1) is given in Figure 1

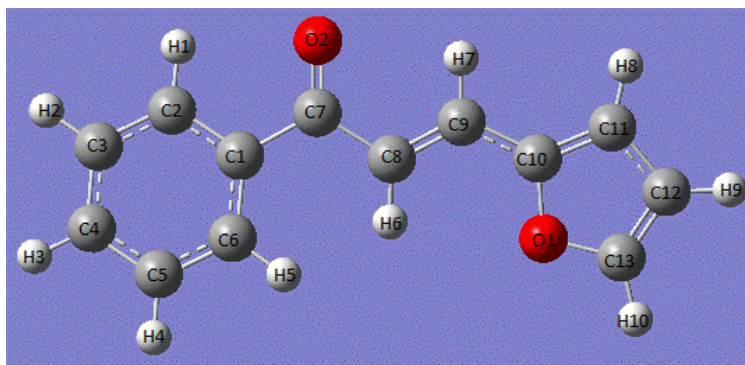


Figure 1. Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one molecule numbering scheme

Computational detail

First, the initial geometry of the molecule was modeled in the GaussView 5.0.9 program (Dennington, et al., 2009) and used as input data to determine conformational analysis. The conformational analysis were carried out by calculating the PECs as a function of the torsion angles $\phi(\text{C8-C9-C10-O1})$ at both ab initio HF and DFT (Kohn et al., 1965) method with standard 6-311++G(d,p) basis set. In the result of conformational analysis, the anti and syn conformers corresponding with low energy on potential energy curves obtained both methods were determined. The molecular geometry of the determined conformers are optimized without any symmetry constraint (preference) at both ab initio HF and DFT method with a hybrid functional B3LYP (Becke's three parameter hybrid functional using the LYP correlation functional) (Becke et al., 1988; Lee et al., 1988; Becke, 1993) in combination with 6-311++G(d,p) basis set. The optimized molecular structures, vibrational wavenumbers of the syn- and anti-conformers of title molecule were obtained with the two methods mentioned above. Also, $^1\text{H-NMR}$ and $^{13}\text{C-NMR}$ chemical shift values and frontier molecular orbitals (FMOs) were computed from the optimized structure of both conformers by DFT/B3LYP and HF methods with 6-311++G(d, p) basis set. Also, UV-Vis spectrum of both conformers were calculated in gas phase via TD-DFT/ B3LYP / 6-311++G (d,p) calculation. The output chk.file generated from calculation file was used to visualize the electrostatic potential map, and HOMO-LUMO orbitals using GaussView5.0.9 program. The quantum mechanics calculations were performed by the aid of Gaussian 09W program package (Frisch et al., 2010) in the gas phase.

RESULTS AND DISCUSSION

Conformational analysis

The conformational analysis were carried out by calculating the PECs as a function of the torsion angles ϕ (C8-C9-C10-O1) at both ab initio HF and DFT method with standard 6-311++G(d,p) basis set. The PECs were calculated by varying dihedral angle ϕ (C9-C10 single bond) from 0° to 180° in 10° increments. In the result of conformational analysis, the anti and syn conformers corresponding with low energy on potential energy curves obtained both methods were determined. The PECs obtained both methods are given Figure 2. As seen from figure 2., the calculated PECs exist two minima, one of these is corresponded syn conformer with ϕ (C8-C9-C10-O1) of 180°. The other conformer, syn conformer with dihedral angle of 180°, exist local minimum, this is 1.27 kcal/mol and 2.35 kcal/mol higher in energy than anti conformer at the DFT/B3LYP and HF methods, respectively. Also, the energy obtained by at the DFT/B3LYP of orthogonal conformation is higher than that of HF method. The difference energy of syn conformer relate to methods, the energy calculated HF method is 1.08 kcal/mol than that of DFT/B3LYP method. In our previous studies (Uğurlu, et al. 2007; 2020), we have not encountered a situation with such a large energy difference.

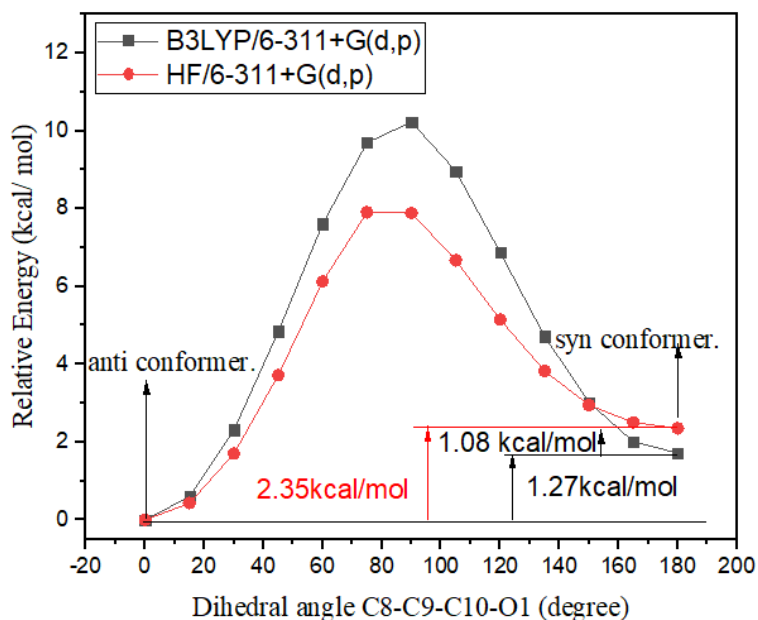


Figure 2. The potential energy curves of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one molecule

Molecular structure

The equilibrium state structures of (1) compound obtained by the HF/6-311++ G (d,p) and DFT/6-311++G (d,p) methods are compiled. The X-ray crystal structures for studied molecule is available in the literature (Vazquez-Vuelvas et al., 2015) and the calculated parameter of studied molecule of both at the B3LYP/6-311++G (d, p) and the HF/6-311++ G (d,p) methods in the ground state are tabulated in the Table 1. As seen from Table 1. in the anti-conformer, the center C9-C10 single bond length of dihedral angle $\phi(\text{C8-C9-C10-O1})$ is 1.4305Å at the B3LYP/6-311++G (d, p) and 1.4480 Å at HF/6-311++ G (d,p), In the syn-conformer, 1.3643Å at the B3LYP/6-311++G (d, p) and 1.3443Å at HF/6-311++ G (d,p), respectively. This observed value is 1.4236 Å. For C9-C10 single bond, the calculated bond lengths in the anti-conformer both methods are larger than the bond lengths in the syn conformer and are closer to the experimental value. Also, regression analyses of the bond length values in the Table 1 were carried out and in the results of regression analyses, it has been shown that there is a linear correlation between experimental and theoretical bond lengths. It was observed that the calculated optimal R^2 value was 0.9811 at anti-conformer with B3LYP/6-311++G (d,p). In the anti-conformer, dihedral angle $\phi(\text{C8-C9-C10-O1})$ is 0.02° at the B3LYP/6-311++G (d, p) and 0.05° at HF/6-311++ G (d,p), in the syn-conformer, -179.18° at the B3LYP/6-311++G (d, p) and -178.90° at HF/6-311++ G (d,p), respectively. The experimental value of this dihedral angle was observed as -3.20° (Vazquez-Vuelvas et al., 2015). In the both methods and both conformer, dihedral angle $\phi(\text{C8-C9-C10-O1})$ is planer almost.

Table 1. Selected structural parameters of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one molecule

| Bond length (Å) | anti-conformer | | | syn-conformer | |
|-----------------------|----------------|--------|--------------------|---------------|--------|
| | DFT | HF | Exp ^a . | DFT | HF |
| Atoms | | | | | |
| O1—C13 | 1.3568 | 1.3389 | 1.3627 (17) | 1.3525 | 1.3352 |
| O1—C10 | 1.3739 | 1.3470 | 1.3628(15) | 1.3765 | 1.3847 |
| C1—C7 | 1.5032 | 1.5019 | 1.4882 (17) | 1.5030 | 1.5802 |
| O2—C7 | 1.2256 | 1.1952 | 1.2218 (15) | 1.2248 | 1.1944 |
| C7—C8 | 1.4801 | 1.4896 | 1.4664 (18) | 1.4803 | 1.4897 |
| C9—C8 | 1.3485 | 1.3278 | 1.3308 (17) | 1.3484 | 1.3276 |
| C9—C10 | 1.4305 | 1.4480 | 1.4236 (18) | 1.4335 | 1.4534 |
| C12—C13 | 1.3625 | 1.3410 | 1.327 (2) | 1.3643 | 1.3423 |
| R^2 | 0.9811 | 0.9794 | | 0.9767 | 0.9594 |
| Bond angle (°) | | | | | |
| C2-C1-C7 | 118.77 | 117.86 | 118.43 (11) | 117.78 | 117.90 |
| C6-C1-C7 | 123.55 | 123.05 | 122.76 (12) | 123.40 | 122.98 |
| O2-C7-C8 | 121.14 | 121.07 | 120.74 (12) | 121.31 | 121.18 |

| | | | | | |
|---------------------------|---------|---------|--------------|---------|---------|
| O2-C7-C1 | 119.87 | 120.07 | 119.78 (12) | 119.92 | 120.10 |
| C8-C7-C1 | 118.98 | 118.86 | 119.44 (11) | 118.76 | 118.70 |
| C8-C9-C10 | 126.31 | 125.33 | 127.34(12) | 126.21 | 125.64 |
| C9-C8-C7 | 120.16 | 119.96 | 121.16 (12) | 120.34 | 120.10 |
| O1-C10-C9 | 119.35 | 119.22 | 118.76 (11) | 115.97 | 115.76 |
| Dihedral angle (°) | | | | | |
| C2-C1-C7-O2 | 10.01 | 15.93 | 19.4 (2) | 14.32 | 18.38 |
| C6-C1-C7-O2 | -169.05 | -162.72 | -159.66 (14) | -164.25 | -160.14 |
| C2-C1-C7-C8 | -169.00 | -163.40 | -158.15 (13) | -164.90 | -160.81 |
| C6-C1-C7-C8 | 11.00 | 17.95 | 22.74 (19) | 16.53 | 20.67 |
| C10-C9-C8-C7 | -179.21 | -179.30 | -176.31 (13) | -178.98 | -178.90 |
| O2-C7-C8-C9 | 2.77 | 8.09 | -5.4 (2) | 4.63 | 9.12 |
| C1-C7-C8-C9 | -177.84 | -172.59 | 172.14 (12) | -176.18 | -171.70 |
| C8-C9-C10-O1 | 0.02 | 0.05 | -3.2 (2) | -179.08 | -177.21 |
| C7-C1-C2-C3 | -179.59 | -179.39 | -179.11 (14) | -179.29 | -179.35 |
| C2-C1-C6-C5 | 0.03 | 0.00 | -0.7 (2) | 0.00 | 0.00 |
| C7-C1-C6-C5 | 179.07 | 178.63 | 178.37 (13) | 178.55 | 178.51 |
| C1-C6-C5-C4 | 0.43 | 0.06 | 0.80 (2) | 0.60 | 0.69 |
| C8-C9-C10-C11 | 179.96 | 179.95 | 173.72 (14) | 0.99 | 3.09 |

((^a) ref Vazquez-Vuelvas et al., 2015)

The surface of the highest occupied molecular orbital (HOMO) energy, the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energy and the electrostatic potential map are given Figure 3 and 4., respectively.

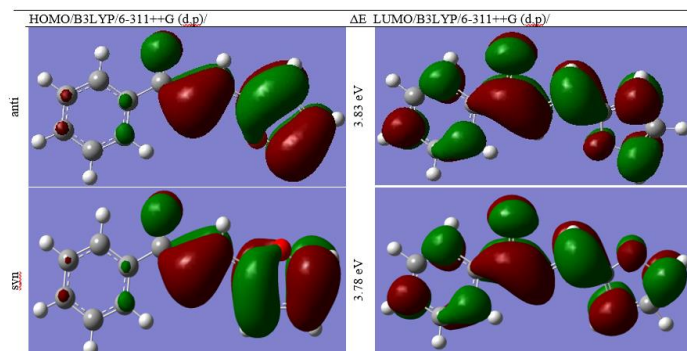


Figure 3. The surface of HOMO-LUMO orbitals of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one

The anti-conformer of (1) molecule the transitions are calculated at wavelengths 384.65, 339.28 and 299.83 nm and for syn conformer at 385.80, 344.94 and 299.44 nm in the gas phase at the B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory.

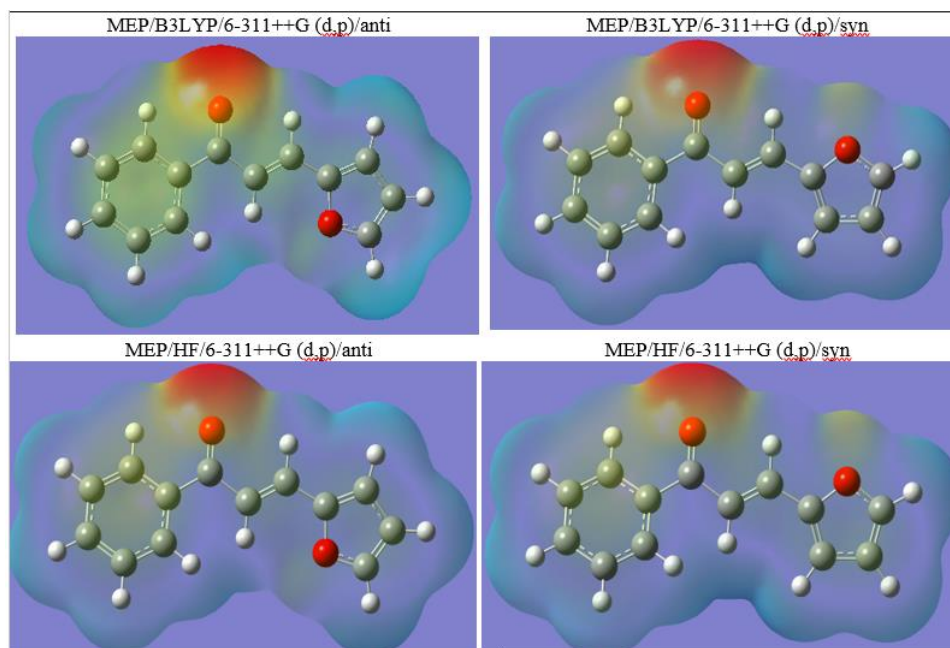


Figure 4. the electrostatic potential map of Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one

Vibrational Frequencies

Chalcone (E)-3-(Furan-2-yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one molecule consist of 25 atoms having 69 normal modes of vibrations. The vibrational frequency values calculated B3LYP/6-311++G(d,p) level were scaled with 0.958 for ($\nu > 1700 \text{ cm}^{-1}$), 0.983 for ($\nu < 1700 \text{ cm}^{-1}$) (Çelik, et al., 2021) and HF/6-311++G(d,p) level were scaled with 0.9607 (Govindarajan, et al., 2018; Uğurlu, et al. 2018; 2020). Also, the calculated vibrational assignments of the normal modes were performed on the basis of the Potential Energy Distribution (PED) and it has been calculated using the Vibrational Energy Distribution Analysis VEDA 4 program (Jomroz, 2004). The calculated IR and Raman spectrum of (1) molecule are given Figure 5 and 6., respectively.

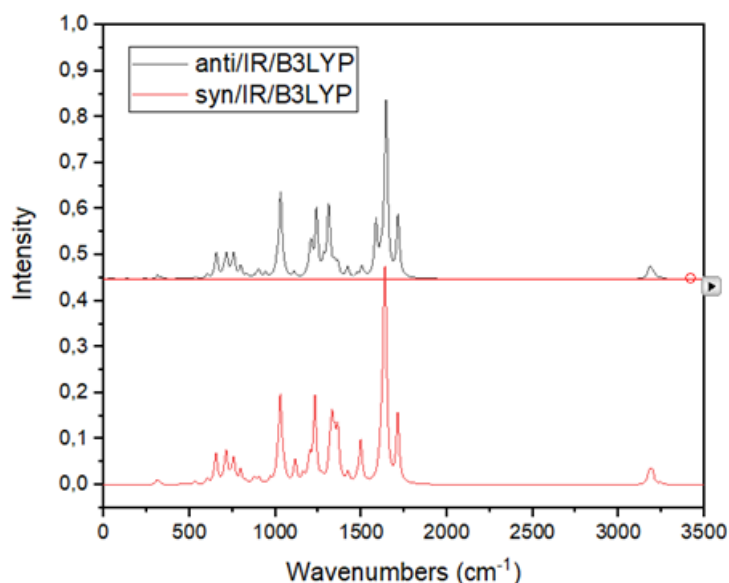


Figure 5. calculated IR spectrum of (1) molecule with 6-311++ G (d,p).

In the both methods and both conformer, the calculated vibrational frequencies of (1) molecule are given Table 2 and 3., respectively.

Table 2. the vibrational frequencies of of (1) molecule with 6-311++ G (d,p)

| anti | | Theoretical wavenumbers (cm ⁻¹) (<i>Unscaled abbreviated as Unsc</i>) | | | | Assignments with PED (≥10 %) |
|------|-------|---|-------|------|--|--|
| Exp. | Unsc. | DFT | | HF | | |
| | | Sc. | Unsc. | Sc | | |
| 3123 | 3277 | 3140 | 3436 | 3116 | | vC11H(11) vC13H(81) |
| 3123 | 3255 | 3118 | 3408 | 3090 | | vC11H(85) vC13H(13) |
| | 3244 | 3108 | 3396 | 3080 | | vC12H(91) |
| | 3215 | 3080 | 3384 | 3068 | | vC6H(39) vC8H(12) vC9H(46) |
| | 3201 | 3067 | 3371 | 3057 | | vC2H(27) vC4H(11) vC5H(53) |
| | 3195 | 3061 | 3359 | 3046 | | vC2H(13) vC8H(62) |
| 3035 | 3185 | 3051 | 3350 | 3038 | | vC2H(15) vC3H(29) vC5H(35) vC8H(13) |
| | 3174 | 3041 | 3346 | 3034 | | v C2H(36) vC3H(53) |
| | 3168 | 3035 | 3335 | 3023 | | v C6H(47) vC9H(47) |
| | 3164 | 3031 | 3321 | 3011 | | v C4H(81) |
| 1658 | 1714 | 1685 | 1923 | 1743 | | v O2C7(54) vC11C10(11) |
| | 1646 | 1618 | 1832 | 1661 | | vO2C7(17) vC9C8(10) vC12C13(16) vC10C9(10) |
| 1594 | 1635 | 1607 | 1786 | 1620 | | vC11C10(21) vC4C3(14) |
| | 1614 | 1586 | 1760 | 1596 | | vC4C3(40) |
| 1545 | 1586 | 1559 | 1745 | 1582 | | v C2C3(51) βHC11C12(11) |
| | 1521 | 1495 | 1655 | 1501 | | vC1C6(13) βHC2C3(38) |
| 1474 | 1504 | 1479 | 1647 | 1493 | | vC9C8(33) vC12C13(20) βHC13O1(17) |
| | 1475 | 1450 | 1592 | 1443 | | vC1C6(16) βHC3C4(10) βHC6C5(33) |
| | 1420 | 1396 | 1545 | 1401 | | βHC11C12(20) βHC13O1(12) βC12C13O1(35) |
| | 1364 | 1340 | 1471 | 1334 | | βHC6C5(29) βHC6C5(24) βHC9C10(14) |
| | 1345 | 1322 | 1438 | 1304 | | vC5C4(48) βHC8C9(12) |
| | 1322 | 1300 | 1416 | 1284 | | vC5C4(11) βHC6C5(17) βHC8C9(27) |

| | | | | |
|------|------|------|------|--|
| 1310 | 1288 | 1386 | 1256 | vC8C7(10)HC6C5(17) |
| 1281 | 1260 | 1339 | 1214 | vO1C13 (14) βHC9C10(24) |
| 1239 | 1218 | 1329 | 1205 | C7C1(20) βHC11C12(20) βHC13O1(10) |
| 1210 | 1189 | 1311 | 1189 | v C7C1(10) βHC9C10(35) |
| 1201 | 1181 | 1288 | 1168 | βHC3C4(42) βHC8C9(12) |
| 1183 | 1163 | 1274 | 1155 | vC5C4(11) βHC4C5(71) |
| 1176 | 1156 | 1215 | 1101 | vO1C10 (40) βHC11C12(10) βHC13O1(29) |
| 1109 | 1091 | 1195 | 1084 | vO1C13 (10) |
| 1105 | 1086 | 1172 | 1063 | O1C13 (14) βHC11C12(12) |
| 1053 | 1035 | 1125 | 1020 | vC1C6(10) vC6C5(11) βHC2C3(11) βC9C8C7(19) |
| 1040 | 1023 | 1120 | 1015 | γHC11C12(52) βC12C13O1(13) βO1C10C9(11) |
| 1030 | 1012 | 1113 | 1009 | vC6C5(10) vC8C7(14) vC10C9(16) βC10C9C8(15) |
| 1016 | 999 | 1108 | 1004 | vC6C5(28) βC6C5C4(32) βC9C8C7(16) |
| 1011 | 994 | 1100 | 997 | γHC4C5C6(39) γHC6C5C4(13) γHC8C9C10(16) |
| 1008 | 991 | 1092 | 990 | γHC4C5C6(28) γHC6C5C4(20) γHC8C9C10(20) |
| 990 | 974 | 1081 | 980 | γHC3C4C5(56) |
| 947 | 931 | 1058 | 959 | γHC2C3C4(40) γHC6C5C4(20) |
| 942 | 926 | 1031 | 935 | vO1C10 (23) v O1C13 (20) βC12C13O1(10) |
| 902 | 887 | 1010 | 916 | vO1C10 (13) βC11C10O1(57) βC12C13O1(10) |
| 895 | 880 | 995 | 902 | γHC9C10C11(25) γHC12C13O1(40) |
| 888 | 873 | 971 | 881 | γHC8C9C10(13) γHC9C10C11(26) γHC12C13O1(34) |
| 877 | 862 | 950 | 862 | βO2C7C8(15) βC5C4C3(14) βC9C8C7(10) |
| 857 | 843 | 945 | 857 | γHC2C3C4(45) γHC3C4C5(10) γHC5C6C1(12) |
| 831 | 817 | 944 | 856 | γHC11C12C13(69) |
| 798 | 784 | 875 | 793 | γHC5C6C1(23) γHC9C10C11(14) γHC11C12C13(10) |
| 757 | 744 | 856 | 776 | γHC13O1C10(87) |
| 740 | 727 | 791 | 717 | vC8C7(19) vC7C1(12) βC11C10O1(11) βO1C10C9(10) |
| 714 | 702 | 783 | 710 | γHC5C6C1(34) γO2C1C8C7(24) γC11C9O1C10(12) |
| 699 | 687 | 756 | 685 | γHC4C5C6(11) γHC5C6C1(15) γC1C6C5C4(26) |
| 658 | 646 | 714 | 648 | βO2C7C8(12) γO2C1C8C7(10) γC11C9O1C10(24) |
| 654 | 642 | 697 | 632 | βO2C7C8(20) γC11C9O1C10(16) |
| 632 | 621 | 673 | 610 | βC2C3C4(33) γC5C4C3(32) |
| 603 | 593 | 650 | 590 | γHC12C13O1(16) γC2C3C4C5(12) γC6C5C4C3(15) |
| 532 | 523 | 568 | 515 | βC1C6C5(12) γC13O1C10(16) γC7C1C6(36) |
| 454 | 447 | 495 | 448 | γC6C5C4C3(18) γC9C8C7C1(14) γC7C2C6C1(19) |
| 428 | 420 | 451 | 409 | vC7C1(15) βO2C7C8(10) βC7C1C6(15) |
| 410 | 403 | 450 | 408 | γHC3C4C5(15) γC2C3C4C5(31) γC12C12O1C10(24) |
| 338 | 332 | 359 | 326 | γC10C9C8C7(10) γO1C10C9C8(50) γC11C9O1C10(13) |
| 312 | 307 | 329 | 298 | βO2C7C8(18) βC6C5C4(12) βC13O1C10(10) |
| 237 | 233 | 252 | 229 | v C10C9(24) v C7C1(12) βC2C3C4(10) βC8C7C1(15) |
| 207 | 204 | 229 | 207 | βC8C7C1(12) γC2C3C4C5(12) γC9C8C7C1(15) |
| 173 | 170 | 173 | 157 | βC8C7C1(24) γC9C8C7C1(11) |
| 133 | 131 | 140 | 127 | γC2C3C4C5(11) γC6C5C4C3(11) γC13O1C10C9(21) |
| 98 | 97 | 108 | 98 | γC1C6C5C4(23) γC10C9C8C7(20) γO1C10C9C8(14) |
| 60 | 59 | 63 | 57 | βC1C6C5(21) βC13O1C10(10) βC8C7C1(27) |
| 36 | 36 | 34 | 31 | γC6C5C4C3(22) γC12C12O1C10(28) γC13O1C10C9(13) |
| 19 | 19 | 32 | 29 | γC8C7C1C2(82) |

(v: stretching, β: in- plane bending, γ: out-of-plane bending)

Table 3. the vibrational frequencies of (1) molecule with 6-311++ G (d,p)

| syn | Theoretical wavenumbers (cm ⁻¹) (<i>Unscaled abbreviated as Unsc</i>) | | | | |
|-------------|---|------------|--------------|-------------------------------------|---|
| | DFT | HF | | (<i>Scaled abbreviated as Sc</i>) | |
| <i>Exp.</i> | <i>Unsc.</i> | <i>Sc.</i> | <i>Unsc.</i> | <i>Sc.</i> | Assignments with PED (≥10 %) |
| 3123 | 3277 | 3140 | 3437 | 3116 | vC11H(11) vC13H(81) |
| 3123 | 3255 | 3119 | 3409 | 3091 | vC11H(85) vC13H(13) |
| | 3244 | 3108 | 3397 | 3080 | vC12H(91) |
| | 3201 | 3067 | 3370 | 3056 | vC6H(39) vC8H(12) vC9H(46) |
| | 3200 | 3065 | 3368 | 3054 | vC2H(27) vC4H(11) vC5H(53) |
| | 3188 | 3055 | 3353 | 3040 | vC2H(13) vC8H(62) |
| 3035 | 3183 | 3049 | 3350 | 3037 | vC2H(15) vC3H(29) vC5H(35) vC8H(13) |
| | 3174 | 3040 | 3345 | 3033 | vC2H(36) vC3H(53) |
| | 3166 | 3033 | 3334 | 3023 | vC6H(47) vC9H(47) |
| | 3164 | 3031 | 3321 | 3011 | vC4H(81) |
| 1658 | 1713 | 1641 | 1925 | 1746 | vO2C7(54) vC11C10(11) |
| | 1641 | 1573 | 1821 | 1651 | vO2C7(17) vC9C8(10) vC12C13(16) vC10C9(10) |
| 1594 | 1632 | 1564 | 1786 | 1620 | vC11C10(21) vC4C3(14) |
| | 1614 | 1546 | 1763 | 1598 | vC4C3(40) |
| 1545 | 1599 | 1532 | 1760 | 1596 | vC2C3(51) βHC11C12(11) |
| | 1521 | 1457 | 1649 | 1495 | vC1C6(13) βHC2C3(38) |
| 1474 | 1497 | 1434 | 1647 | 1493 | vC9C8(33) vC12C13(20) βHC13O1(17) |
| | 1476 | 1414 | 1592 | 1443 | vC1C6(16) βHC3C4(10) βHC6C5(33) |
| | 1423 | 1363 | 1542 | 1398 | βHC11C12(20) βHC13O1(12) βC12C13O1(35) |
| | 1364 | 1307 | 1471 | 1334 | βHC6C5(29) βHC6C5(24) βHC9C10(14) |
| | 1346 | 1290 | 1442 | 1307 | vC5C4(48) βHC8C9(12) |
| | 1330 | 1274 | 1429 | 1296 | vC5C4(11) βHC6C5(17) βHC8C9(27) |
| | 1317 | 1261 | 1366 | 1238 | vC8C7(10)HC6C5(17) |
| | 1271 | 1217 | 1338 | 1213 | vO1C13 (14) βHC9C10(24) |
| | 1230 | 1178 | 1325 | 1201 | vC7C1(20) βHC11C12(20) βHC13O1(10) |
| | 1202 | 1151 | 1307 | 1185 | vC7C1(10) βHC9C10(35) |
| | 1192 | 1142 | 1288 | 1168 | βHC3C4(42) βHC8C9(12) |
| | 1183 | 1133 | 1252 | 1135 | βC5C4(11) βHC4C5(71) |
| | 1161 | 1112 | 1214 | 1101 | vO1C10 (40) βHC11C12(10) βHC13O1(29) |
| | 1116 | 1069 | 1200 | 1088 | vO1C13 (10) |
| | 1107 | 1060 | 1172 | 1062 | vO1C13 (14) βHC11C12(12) |
| | 1053 | 1009 | 1125 | 1020 | vC1C6(10) vC6C5(11) βHC2C3(11) βC9C8C7(19) |
| | 1042 | 999 | 1121 | 1016 | βHC11C12(52) βC12C13O1(13) βO1C10C9(11) |
| | 1028 | 985 | 1117 | 1013 | vC6C5(10) vC8C7(14) vC10C9(16) βC10C9C8(15) |
| | 1017 | 974 | 1108 | 1004 | vC6C5(28) βC6C5C4(32) βC9C8C7(16) |
| | 1012 | 969 | 1100 | 997 | γHC4C5C6(39) γHC6C5C4(13) γHC8C9C10(16) |
| | 1008 | 966 | 1095 | 993 | γHC4C5C6(28) γHC6C5C4(20) γHC8C9C10(20) |
| | 990 | 948 | 1081 | 980 | γHC3C4C5(56) |
| | 969 | 929 | 1058 | 959 | γHC2C3C4(40) γHC6C5C4(20) |
| | 946 | 907 | 1054 | 956 | vO1C10 (23) vO1C13 (20) βC12C13O1(10) |
| | 904 | 866 | 1009 | 915 | vO1C10 (13) βC11C10O1(57) βC12C13O1(10) |
| | 889 | 852 | 986 | 894 | γHC9C10C11(25) γHC12C13O1(40) |
| | 881 | 844 | 973 | 882 | βHC8C9C10(13) βHC9C10C11(26) βHC12C13O1(34) |
| | 871 | 835 | 951 | 862 | βO2C7C8(15) βC5C4C3(14) βC9C8C7(10) |

| | | | | |
|-----|-----|-----|-----|---|
| 857 | 821 | 942 | 854 | γ HC2C3C4(45) γ β HC3C4C5(10) γ HC5C6C1(12) γ HC6C5C4(14) |
| 826 | 792 | 940 | 852 | γ HC11C12C13(69) |
| 796 | 763 | 874 | 792 | γ HC5C6C1(23) γ HC9C10C11(14) γ HC11C12C13(10) |
| 756 | 724 | 856 | 776 | γ HC13O1C10(87) |
| 739 | 708 | 791 | 717 | C8C7(19)C7C1(12)C11C10O1(11)O1C10C9(10) |
| 712 | 682 | 781 | 708 | γ HC5C6C1(34) γ O2C1C8C7(24) γ C11C9O1C10(12) |
| 699 | 669 | 756 | 686 | γ HC4C5C6(11) γ HC5C6C1(15) γ C1C6C5C4(26) γ C10C9C8C7(15) |
| 654 | 626 | 706 | 641 | β O2C7C8(12) γ O2C1C8C7(10) γ C11C9O1C10(24) |
| 645 | 618 | 693 | 629 | β O2C7C8(20) γ C11C9O1C10(16) |
| 632 | 605 | 673 | 610 | β C2C3C4(33) β C5C4C3(32) |
| 602 | 576 | 649 | 589 | γ HC12C13O1(16) γ β C2C3C4C5(12) γ C6C5C4C3(15) |
| 530 | 508 | 565 | 513 | β C1C6C5(12) β C13O1C10(16) β C7C1C6(36) |
| 455 | 436 | 493 | 447 | γ C6C5C4C3(18) γ C9C8C7C1(14) γ C7C2C6C1(19) |
| 421 | 403 | 451 | 409 | ν C7C1(15) β O2C7C8(10) β C7C1C6(15) |
| 411 | 394 | 446 | 404 | γ HC3C4C5(15) γ C2C3C4C5(31) γ C12C12O1C10(24) |
| 321 | 307 | 345 | 313 | γ C10C9C8C7(10) γ O1C10C9C8(50) γ C11C9O1C10(13) |
| 309 | 296 | 327 | 296 | β O2C7C8(18) β C6C5C4(12) β C13O1C10(10) β C7C1C6(17) |
| 231 | 221 | 244 | 221 | β C10C9(24) β C7C1(12) β C2C3C4(10) β C8C7C1(15) |
| 211 | 202 | 227 | 206 | β C8C7C1(12) γ C2C3C4C5(12) γ C9C8C7C1(15) |
| 163 | 156 | 170 | 154 | β C8C7C1(24) γ C9C8C7C1(11) |
| 122 | 117 | 115 | 104 | γ C2C3C4C5(11) γ C6C5C4C3(11) γ C13O1C10C9(21) |
| 97 | 93 | 101 | 91 | γ C1C6C5C4(23) γ C10C9C8C7(20) γ O1C10C9C8(14) |
| 62 | 59 | 63 | 57 | β C1C6C5(21) β C13O1C10(10) β C8C7C1(27) |
| 33 | 31 | 35 | 32 | γ C6C5C4C3(22) γ C12C12O1C10(41) |
| 28 | 27 | 23 | 21 | γ C8C7C1C2(82) |

((^a) ref Vazquez-Vuelvas et al., 2015)

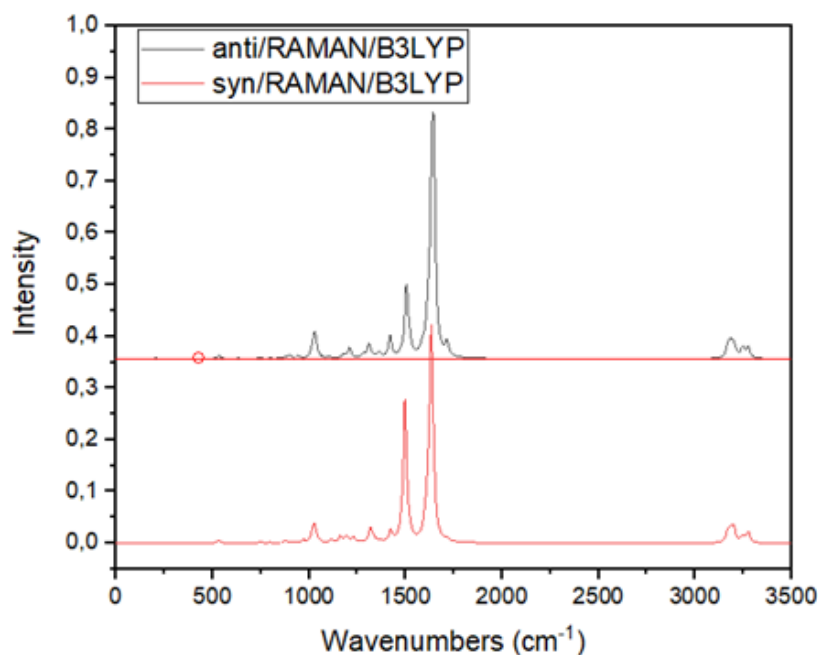


Figure 6. The calculated Raman spectrum of (1) molecule with 6-311++ G (d,p)

The geometry of the studied molecule belongs to C_1 point group symmetry and as seen figure 3 and 4, all vibrations are active in both IR and Raman.

^1H and ^{13}C NMR Chemical Shift

Table 4. The calculated chemical shifts (ppm) of (1) molecule with B3LYP

| anti- | | 6-31G | | 6-31G+(d) | | 6-31G+(d,p) | | 6-31G++(d) | | 6-31G++(d,p) | |
|----------------|--------------------|--------|--------|-----------|--------|-------------|--------|------------|--------|--------------|--------|
| No | Exp ^a . | GAS | DMSO | GAS | DMSO | GAS | DMSO | GAS | DMSO | GAS | DMSO |
| C7 | 189.95 | 181.48 | 183.24 | 178.64 | 181.17 | 180.34 | 182.71 | 189.47 | 201.18 | 171.43 | 182.92 |
| C10 | 151.69 | 150.29 | 149.37 | 149.66 | 148.94 | 151.63 | 150.48 | 160.27 | 168.19 | 142.49 | 150.67 |
| C13 | 144.98 | 140.91 | 143.81 | 139.50 | 143.16 | 140.52 | 144.70 | 149.99 | 162.54 | 131.28 | 143.94 |
| C1 | 138.16 | 135.05 | 135.03 | 134.50 | 134.65 | 136.47 | 136.19 | 145.24 | 152.39 | 127.43 | 136.53 |
| C4 | 132.82 | 127.43 | 129.44 | 126.74 | 129.32 | 127.79 | 130.86 | 137.26 | 147.84 | 118.58 | 130.14 |
| C9 | 130.72 | 125.79 | 127.58 | 126.00 | 127.97 | 127.32 | 129.51 | 136.64 | 145.56 | 118.13 | 129.06 |
| C2 | 128.47 | 125.67 | 125.19 | 125.92 | 125.26 | 126.97 | 126.79 | 136.53 | 143.00 | 117.93 | 126.17 |
| C6 | 128.47 | 124.42 | 125.18 | 123.71 | 125.23 | 124.80 | 126.77 | 134.40 | 142.59 | 115.77 | 126.03 |
| C3 | 128.47 | 123.55 | 124.91 | 123.21 | 124.90 | 124.14 | 126.44 | 133.76 | 142.54 | 115.01 | 125.93 |
| C5 | 128.47 | 123.27 | 124.80 | 122.57 | 124.70 | 123.66 | 126.24 | 133.00 | 142.27 | 114.40 | 125.51 |
| C8 | 119.30 | 115.41 | 118.99 | 113.78 | 118.01 | 114.64 | 119.55 | 124.35 | 135.84 | 105.76 | 118.87 |
| C11 | 116.33 | 115.34 | 115.02 | 113.27 | 113.09 | 114.46 | 114.63 | 124.30 | 127.83 | 105.60 | 114.51 |
| C12 | 112.74 | 111.08 | 112.67 | 108.01 | 109.91 | 109.09 | 111.45 | 118.54 | 127.57 | 99.95 | 110.86 |
| R ² | | 0.9915 | 0.9958 | 0.9906 | 0.9962 | 0.9886 | 0.9962 | 0.9903 | 0.9919 | 0.9886 | 0.9962 |
| H1 | 8.04 | 8.51 | 8.36 | 8.45 | 8.33 | 8.70 | 7.87 | 9.12 | 8.39 | 8.96 | 8.61 |
| H7 | 8.04 | 7.89 | 7.92 | 7.69 | 7.75 | 7.99 | 7.30 | 8.36 | 7.83 | 8.25 | 8.08 |
| H6 | 7.61 | 7.85 | 7.91 | 7.37 | 7.48 | 7.76 | 7.02 | 8.02 | 7.57 | 8.01 | 7.88 |
| H10 | 7.58 | 7.82 | 8.06 | 7.96 | 8.22 | 8.19 | 7.76 | 8.65 | 8.27 | 8.48 | 8.49 |
| H5 | 7.52 | 7.57 | 7.84 | 7.46 | 7.75 | 7.73 | 7.29 | 8.14 | 7.79 | 8.01 | 8.05 |
| H2 | 7.52 | 7.51 | 7.69 | 7.45 | 7.62 | 7.62 | 7.17 | 8.12 | 7.70 | 7.90 | 7.84 |
| H3 | 7.49 | 7.45 | 7.72 | 7.51 | 7.78 | 7.65 | 7.32 | 8.18 | 7.81 | 7.92 | 7.95 |
| H4 | 7.47 | 7.44 | 7.69 | 7.43 | 7.68 | 7.60 | 7.23 | 8.12 | 7.72 | 7.90 | 7.91 |
| H8 | 6.72 | 6.65 | 7.00 | 6.56 | 6.92 | 6.83 | 6.46 | 7.23 | 6.97 | 7.13 | 7.25 |
| H9 | 6.51 | 6.51 | 6.79 | 6.41 | 6.66 | 6.70 | 6.21 | 7.07 | 6.61 | 6.99 | 7.01 |

((^a) ref Vazquez-Vuelvas et al., 2015)

The ^1H NMR and ^{13}C NMR chemical shifts of Chalcone (E)-3-(Furan-2-Yl)-1-Phenylprop-2-en-1-one molecule are calculated using the gauge-independent atomic orbital method (GIAO method) and the hybrid three-parameter B3LYP density functional in combination and Hartree-fock methods with different basis sets such as 6-31G, 6-31+G(d), 6-31+G(d,p), 6-31++G(d), and 6-31++G(d,p) basis sets in gas phase and in solvents (DMSO).

The calculated ^1H and ^{13}C chemical shielding values calculated B3LYP/6-31G, B3LYP/6-31+G(d), B3LYP/6-31+G(d,p), B3LYP/6-31++G(d), and B3LYP/6-31++G(d,p) are given in the Table 4. The calculated ^1H and ^{13}C chemical shielding values calculated HF/6-31G, HF/6-

31+G(d), HF/6-31+G(d.p), HF/6-31++G(d), and HF/6-31++G(d.p) are given in the Table 5. Also, the value ^{13}C NMR chemical shifts are carried regression analyses and the results were indicated linear correlation.

Table 5. The calculated chemical shifts (ppm) of (1) molecule with HF

| anti- | | 6-31G | | 6-31G+(d)(3) | | 6-31G+(d,p)(4) | | 6-31G++(d) | | 6-31G++(d,p) | |
|----------------|------------------|--------|--------|--------------|--------|----------------|--------|------------|--------|--------------|--------|
| No | Exp ^a | GAS | DMSO | GAS | DMSO | GAS | DMSO | GAS | DMSO | GAS | DMSO |
| C7 | 189.95 | 200,29 | 202,85 | 187,68 | 190,71 | 189,05 | 192,45 | 187,96 | 191,29 | 189,40 | 192,72 |
| C10 | 151.69 | 158,95 | 156,86 | 151,60 | 149,42 | 153,30 | 151,47 | 151,81 | 149,92 | 153,59 | 151,89 |
| C13 | 144.98 | 154,56 | 157,47 | 147,29 | 150,43 | 148,06 | 151,55 | 147,61 | 151,08 | 148,45 | 151,66 |
| C1 | 138.16 | 142,40 | 141,92 | 137,55 | 135,99 | 138,62 | 138,04 | 137,82 | 136,54 | 138,96 | 141,74 |
| C4 | 132.82 | 141,10 | 142,37 | 136,78 | 137,22 | 138,47 | 138,53 | 137,01 | 137,80 | 138,75 | 138,78 |
| C9 | 130.72 | 140,00 | 144,14 | 134,82 | 140,06 | 135,78 | 141,49 | 135,07 | 140,62 | 136,10 | 138,26 |
| C2 | 128.47 | 138,62 | 137,93 | 134,73 | 133,72 | 135,58 | 134,93 | 135,03 | 134,33 | 135,91 | 135,20 |
| C6 | 128.47 | 135,17 | 137,17 | 130,96 | 132,92 | 131,79 | 134,11 | 131,27 | 133,53 | 132,19 | 134,42 |
| C3 | 128.47 | 132,89 | 133,41 | 127,25 | 127,69 | 128,25 | 129,05 | 127,54 | 128,30 | 128,62 | 129,35 |
| C5 | 128.47 | 131,60 | 133,14 | 125,82 | 127,37 | 126,81 | 128,70 | 126,11 | 127,98 | 127,18 | 129,02 |
| C8 | 119.30 | 124,61 | 121,30 | 118,64 | 112,77 | 119,27 | 114,09 | 118,92 | 123,82 | 119,67 | 124,56 |
| C11 | 116.33 | 122,96 | 129,46 | 114,53 | 123,23 | 115,50 | 124,23 | 114,70 | 113,23 | 115,71 | 114,23 |
| C12 | 112.74 | 118,10 | 119,18 | 109,72 | 110,36 | 110,70 | 111,69 | 110,02 | 111,00 | 111,09 | 112,03 |
| R ² | | 0.9902 | 0.9686 | 0.9774 | 0.9478 | 0.9776 | 0.9517 | 0.9774 | 0.9600 | 0.9777 | 0.9747 |
| H1 | 8.04 | 9,70 | 9,55 | 9,39 | 9,34 | 9,47 | 9,36 | 9,40 | 9,29 | 9,49 | 9,38 |
| H7 | 8.04 | 9,18 | 9,27 | 8,78 | 8,97 | 8,86 | 8,97 | 8,79 | 8,90 | 8,87 | 8,98 |
| H6 | 7.61 | 8,54 | 8,57 | 7,81 | 7,98 | 8,00 | 8,10 | 7,80 | 7,90 | 7,99 | 8,09 |
| H5 | 7.58 | 8,72 | 9,04 | 8,61 | 9,00 | 8,70 | 9,01 | 8,63 | 8,95 | 8,71 | 9,03 |
| H10 | 7.52 | 8,55 | 8,86 | 8,12 | 8,50 | 8,19 | 8,49 | 8,11 | 8,43 | 8,20 | 8,50 |
| H2 | 7.52 | 8,25 | 8,47 | 7,99 | 8,26 | 8,04 | 8,25 | 8,01 | 8,22 | 8,07 | 8,28 |
| H3 | 7.49 | 8,38 | 8,73 | 8,18 | 8,58 | 8,21 | 8,54 | 8,19 | 8,53 | 8,23 | 8,56 |
| H4 | 7.47 | 8,17 | 8,48 | 7,93 | 8,30 | 7,98 | 8,28 | 7,94 | 8,25 | 8,00 | 8,30 |
| H8 | 6.72 | 7,49 | 7,96 | 7,11 | 7,63 | 7,27 | 7,71 | 7,12 | 7,57 | 7,29 | 7,73 |
| H9 | 6.51 | 7,22 | 7,54 | 6,76 | 7,10 | 6,96 | 7,23 | 6,78 | 7,05 | 6,98 | 7,25 |

((^a) ref Vazquez-Vuevas et al., 2015)

The ^{13}C NMR chemical shifts calculated B3LYP, R² 6-31G, 6-31+G(d), 6-31+G(d.p), 6-31++G(d), and 6-31++G(d.p), 6-31+G(d) have been 0.9915 ppm, 0.9906 ppm, 0.9886 ppm, 0.9903 ppm, 0.9886 ppm (gas phase) and 0.9958 ppm, 0.9962 ppm, 0.9962 ppm, 0.9919 ppm, 0.9962 ppm DMSO) for ^{13}C -NMR chemical shifts values. The ^{13}C NMR chemical shifts calculated HF, R² 6-31G, 6-31+G(d), 6-31+G(d.p), 6-31++G(d), and 6-31++G(d.p), 6-31+G(d), have been 0.9902ppm, 0.9774 ppm, 0.9776 ppm, 0.9774 ppm, 0.9777 ppm (gas phase) and 0.9686 ppm, 0.9478 ppm, 0.9517 ppm, 0.9600 ppm, 0.9747 ppm DMSO) for ^{13}C -NMR chemical shifts values. In the ^{13}C NMR chemical shifts calculated B3LYP, R² vales in the DMSO

are larger than that of in the gas phase and in the ^{13}C NMR chemical shifts calculated B3LYP, R2 vales in gas phase are larger than that of in the DMSO. These results show that there is a good agreement between the experimental values and the theoretical values.

Conclusion

The potential energy curves of (1) molecule were calculated as a function dihedral angle $\phi(\text{C8-C9-C10-O1})$ at both ab initio HF) and DFT/ B3LYP with 6-311++G (d,p) basis set and the syn- and anti-conformers corresponding low energy conformers were determined. The optimized molecular structures, vibrational wavenumbers of the syn- and anti-conformers of title molecule were obtained with the two methods mentioned above. The ^1H - NMR and ^{13}C -NMR chemical shift values and frontier molecular orbitals (FMOs) were computed from the optimized structure of both conformers by DFT/B3LYP and HF methods with 6-311++G(d,p) basis set. The anti-conformer of (1) molecule the transitions are calculated at wavelengths 384.65, 339.28 and 299.83 nm and for syn conformer at 385.80, 344.94 and 299.44 nm in the gas phase atB3LYP/6-311++G(d,p) level of theory. The equilibrium state (ground state) dipole moment values of the anti and syn conformer were calculated as 3.33 and 3.01 Debye by B3LYP/6-311++ G(d,p) and 4.05 and 3.88 Debye by ab initio HF/6-311++ G(d,p) method. In the the both methods and both conformer, dihedral angle $\phi(\text{C8-C9-C10-O1})$ is planer almost.

REFERENCES

- Akhtar, M.N., Sakeh, N.M., Zareen, S., Gul, S., Lo, K.M., Ul-Haq, Z., Shah, S.A.A., Ahmad, S. (2015). Design and synthesis of chalcone derivatives as potent tyrosinase inhibitors and their structural activity relationship, *J. Mol. Struct.* 1085 97–103.
- Badshah, S., Naeem, A. (2016) Bioactive Thiazine and Benzothiazine Derivatives: Green Synthesis Methods and Their Medicinal Importance. *Molecules.* 21, 1054.
- Batovska, D., Parushev, S., Stamboliyska, B., Tsvetkova, I., Ninova, M., Najdenski, H. (2009). Examination of growth inhibitory properties of synthetic chalcones for which antibacterial activity was predicted. *Eur J Med Chem.* 44: 2211-2218, 2009.
- Becke, A. D. (1988) Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical Review A*, 38(6), 3098–3100.
- Becke, A. D., 1993. Density-Functional Thermochemistry .3. The Role of Exact Exchange. *J. Chem. Phys.*, 98 (7): 5648-5652.
- Bhat, M. A., Khan, A. A., Al-Omar, M. A., Khan, A. A. (2017), "Synthesis and anti-candidal activity of some new pyrazoline derivatives," *Biomedical Research*, vol. 28, pp. 3082–3087.
- Çelik, F., Ustabas, R., Süleymanoglu, N., Direkel, S., Güler, H. I., Ünver, Y. (2021). 2,3-triazole derivative: Synthesis, characterization, DFT, molecular docking study and antibacterial-antileishmanial activities *Journal of the Indian Chemical Society.* 98.
- Dennington, R., Keith T., Millam, J. (2009). *Semichem Inc., GaussView, Version 5*, Shawnee Mission KS,
- Domínguez, J.N., León, C., Rodrigues, J., Domínguez, N.G.D., Gut, J., Rosenthal, P.J. (2005). Synthesis and antimalarial activity of sulfonamide chalcone derivatives, *Il Farmaco.* 60 (4), 307–311.
- Farooq, S., Ngaini, Z., Mortadza N. A. (2020) Microwave-assisted Synthesis and Molecular Docking Study of Heteroaromatic Chalcone Derivatives as Potential Antibacterial Agents. *Bull. Korean Chem. Soc.* Vol. 41, 918–924.
- 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, Vreven T J, Peralta J E, Ogliaro F, Bearpark M, Heyd J. J, Brothers E, Kudin 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 J, Ochterski W, Martin L R, 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, Fox D J, 2009. *Gaussian Inc.*, (Wallingford, CT).
- Govindarajan, M., Salgado-Morán, G., Montes Romero, P., Gerli Candi, L. 2018). A theoretical quantum study of the electronic properties of mentoxy dichloro phosphorous. *J. Chil. Chem. Soc.* Vol.63, 3887-3897.
- Herencia, F., Ferrandiz, M.L., Ubeda, A., Domínguez, J.N., Charris, J.E., Lobo, G.M., Alcaraz, M.J. (1998). Synthesis and anti-inflammatory activity of chalcone derivatives, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 8 (10), 1169–1174.

- Hsieh, C.T., Hsieh, T. J., El-Shazly, M., Chuang, D.W., Tsai, Y. H., Yen, C.T., Wu, S. F., Wu, Y. C., Chang, F. R. (2012). Synthesis of chalcone derivatives as potential anti-diabetic agents, *Bioorg. Med. chem. Lett.* 22 (12), 3912–3915.
- Jamroz, M. H. (2004). *Vibrational Energy Distribution Analysis VEDA Computer program*. Poland
- Jayasinghe, L., Rupasinghe, G.K., Hara, N., Fujimoto, Y. (2006) Geranylated phenolic constituents from the fruits of *Artocarpus nobilis*. *Phytochemistry*. 67: 1353-1358.
- Kaur, N., Kishore, D. (2013). Application of chalcones in heterocycles synthesis: Synthesis of 2-(isoxazolo, pyrazolo and pyrimido) substituted analogues of 1,4-benzodiazepin-5-carboxamides linked through an oxyphenyl bridge. *J. Chem. Sci.* 125, 555.
- Kohn, W., Sham, L.J. (1965) Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Phys. Rev.* 140 A1133–A1138.
- Kumar, S.K., Hager, E., Pettit, C., Gurulingappa, H., Davidson, N.E., Khan, S.R., (2003). Design, synthesis, and evaluation of novel boronic-chalcone derivatives as anti-tumor agents, *J. med. Chem.* 46 (14) 2813–2815.
- Lee, C. T., Yang, W. T., Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37, 785-789
- Liu, M., Wilairat, P., Go, M.L. (2001). Antimalarial alkoxyated and hydroxylated chalcones: Structure-activity relationship analysis. *J Med Chem.* 44 (25): 4443-4452.
- Middleton, E.; Kandaswami, C.; Theoharides, T. C. (2000) The effects of plant flavonoids on mammalian cells: Implications for inflammation, heart disease, and cancer. *Pharmacol. Rev.*, 52, 673-751.
- Nowakowska, Z., A review of anti-infective and anti-inflammatory chalcones. *Eur. J. Med. Chem.* 2007, 42, 125-137.
- Ravichandran, R., Rajendran, M., Devapiriam, D. (2013). Studies on chalcone derivatives antioxidant and stability constant. *J Chem Bio Phy Sci Sec A.* 3 (4): 2446-2458.
- Reddy, L.S.S., Raju, M.B. and Sridhar, C. (2016). Novel Pyrazolines: Synthesis and Evaluation of Their Derivatives with Anticancer and Anti-Inflammatory Activities. *Int J Pharm Pharm Sci.* 8, 247.
- Saxena, H.O., Faridi, U., Kumar, J.K., Luqman, S., Darokar, M.P., Shanker, K., Chanotiya, C.S., Gupta, M.M., Negi, A.S. (2007) Synthesis of chalcone derivatives on steroidal framework and their anticancer activities, *Steroids*. 72 (13) 892–900.
- Shakil, N.A., Singh, M.K., Sathiyendiran, M., Kumar, J., Padaria, J.C. (2013) Microwave synthesis, characterization and bio-efficacy evaluation of novel chalcone based 6-carbomethoxy-2-cyclohexen-1-one and 2H-indazol-3-ol derivatives. *Eur. J. Med. Chem.* 120–31.
- Tanaka, H., Nakamura, S., Onda, K., Tazaki, T., Hirano, T. (2009). Sofalcone, an anti-ulcer chalcone derivative, suppresses inflammatory crosstalk between macrophages and adipocytes and adipocyte differentiation: implication of heme-oxygenase-1 induction. *Biochem Biophys Res Commun* 381: 566-571.
- Uğurlu, G., Kasap, E., Kantarci, Z., Bahat, M. (2007), A theoretical study of the linear, nonlinear optical properties and conformational analysis of 3-phenylthiophene and its fluoro derivatives with torsional dependence. *Journal of Molecular Structure.* 834–836, 508–515.

- Uğurlu, G., Beytur, M. (2020) Theoretical studies on the structural, vibrational, conformational analysis and nonlinear optic property of 4-(methoxycarbonyl)-phenylboronic acid. *Indian Journal of Chemistry*. Vol. 59A, pp. 1504-1512.
- Uğurlu, G., NECEFOĞLU, H. (2018) Theoretical investigation on the structural and electronic properties of (1-naphthylmethylidene)isonicotinohydrazide molecule. *Iğdır Univ. J. Inst. Sci. & Tech.* 8(2): pp.167-177.
- Uğurlu, G. (2020) Theoretical examination of the conformational effect on the molecular structure and electronic properties of the orthorhombic metaboric acid molecule. *BORON 5* (2), pp. 91 – 99.
- Vazquez-Vuelvas, O.F., Enriquez-Figueroa, R.´ A., Garcia-Ortega, H., Flores-Alamo, M., Pineda-Contreras, A. (2015). Crystal structure of the chalcone (E)-3-(furan-2-yl)- 1-phenylprop-2-en-1-one. *Acta Cryst.* E71, 161–164.



Neighborhoods of Certain Classes of Analytic Functions Defined By Miller-Ross Function

Sercan KAZIMOĞLU¹

Makalenin Alanı: Matematik

| Makale Bilgileri | Özet |
|---|---|
| Geliş Tarihi 26.11.2021 | Bu makalede, normalize edilmiş Miller-Ross yardımıyla tanımlanan negatif katsayılı açık U birim diskinde analitik fonksiyonların yeni bir alt sınıfını tanıtaçacağız. Bu makalenin amacı, tanımlanan bu alt sınıfa ait Miller-Ross fonksiyonu için katsayı eşitsizliklerini, indirgeme bağıntılarını ve komşuluk özelliklerini belirlemektir. |
| Kabul Tarihi 28.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Analitik Fonksiyon Yıldızlı ve Konveks Fonksiyonlar Miller-Ross Fonksiyonu Komşuluklar | |

| Article Info | Abstract |
|--|--|
| Received 26.11.2021 | In this paper, we introduce a new subclass of analytic functions in the open unit disk U with negative coefficients defined by normalized of the Miller-Ross function. The object of the present paper is to determine coefficient inequalities, inclusion relations and neighborhoods properties for Miller-Ross function belonging to this subclass. |
| Accepted 28.12.2021 | |
| Keywords Analytic Function Starlike and Convex Functions Miller-Ross Function Neighborhoods | |

1. Introduction

Let A be a class of functions f of the form

$$f(z) = z + \sum_{n=2}^{\infty} a_n z^n \quad (1.1)$$

that are analytic in the open disk $U = \{z: |z| < 1\}$. Denote by $A(n)$ the class of functions consisting of functions f of the form

$$f(z) = z - \sum_{n=2}^{\infty} a_n z^n, \quad (a_n \geq 0) \quad (1.2)$$

which are analytic in U .

¹ Kafkas University Faculty of Science and Letters Department of Mathematics-Kars; e-mail: srcnkzmglu@gmail.com; ORCID: 0000-0002-1023-4500

We recall that the convolution (or Hadamard product) of two functions

$$f(z) = z + \sum_{n=2}^{\infty} a_n z^n \quad \text{and} \quad g(z) = z + \sum_{n=2}^{\infty} b_n z^n$$

is given by

$$(f * g)(z) := z + \sum_{n=2}^{\infty} a_n b_n z^n =: (g * f)(z), \quad (z \in U).$$

Note that $f * g \in A$.

Next, following the earlier investigations by (Goodman, 1957), (Ruscheweyh, 1981), (Silverman, 1995), (Altıntaş & Owa, 1996; Altıntaş et al., 2000) and (Srivastava & Bulut, 2012) (see also Aktaş & Orhan, 2015; Çağlar & Orhan, 2017; Çağlar & Orhan, 2019; Çağlar et al., 2020; Darwish et al., 2015; Deniz & Orhan, 2010; Keerthi et al., 2008; Murugusundaramoorthy & Srivastava, 2004; Orhan, 2007), we define the (n, δ) -neighborhood of a function $f \in A(n)$ by

$$N_{n,\delta}(f) = \left\{ g \in A(n) : g(z) = z - \sum_{n=2}^{\infty} b_n z^n \text{ and } \sum_{n=2}^{\infty} n |a_n - b_n| \leq \delta \right\}. \quad (1.3)$$

For $e(z) = z$, we have

$$N_{n,\delta}(e) = \left\{ g \in A(n) : g(z) = z - \sum_{n=2}^{\infty} b_n z^n \text{ and } \sum_{n=2}^{\infty} n |b_n| \leq \delta \right\}. \quad (1.4)$$

A function $f \in A(n)$ is α -starlike of complex order γ , denoted by $f \in S_n^*(\alpha, \gamma)$ if it satisfies the following condition

$$\Re \left\{ 1 + \frac{1}{\gamma} \left(\frac{zf'(z)}{f(z)} - 1 \right) \right\} > \alpha, \quad (\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}, 0 \leq \alpha < 1, z \in U)$$

and a function $f \in A(n)$ is α -convex of complex order γ , denoted by $f \in C_n^*(\alpha, \gamma)$ if it satisfies the following condition

$$\Re \left\{ 1 + \frac{1}{\gamma} \frac{zf''(z)}{f'(z)} \right\} > \alpha, \quad (\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}, 0 \leq \alpha < 1, z \in U).$$

The Miller-Ross (Miller & Ross, 1993) function $E_{\nu,c}(z)$, defined by

$$E_{\nu,c}(z) = z^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n}{\Gamma(\nu+n+1)} z^{n(1+\alpha)}, \quad (\nu > -1, c \geq 0, z \in U). \quad (1.5)$$

The Miller-Ross function $E_{\nu,c}(z)$ does not belong to the class A . Therefore, we consider the following normalization for the function $E_{\nu,c}(z)$:

$$E_{\nu,c}(z) = \Gamma(1+\nu) z^{1-\nu} E_{\nu,c}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n \Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n+1)} z^{n+1}, \quad (z \in U). \quad (1.6)$$

In terms of Hadamard product and $E_{\nu,c}(z)$ given by (1.6), a new operator $\varepsilon_{\nu,c} : A \rightarrow A$ can be defined as follows:

$$\varepsilon_{\nu,c}f(z) = (\varepsilon_{\nu,c} * f)(z) = z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c^n \Gamma(1+\nu) a_{n+1}}{\Gamma(\nu+n+1)} z^{n+1}, \quad (z \in U). \tag{1.7}$$

If $f \in A(n)$ is given by (1.2), then we have

$$\varepsilon_{\nu,c}f(z) = z - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c^n \Gamma(1+\nu) a_{n+1}}{\Gamma(\nu+n+1)} z^{n+1}, \quad (z \in U). \tag{1.8}$$

Finally, by using the differential operator defined by (1.8), we investigate the subclasses $M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$ and $R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \vartheta)$ of $A(n)$ consisting of functions f as the followings:

However, throughout this paper, we restrict our attention to the case real-valued ν, c with $\nu > -1$ and $c \geq 0$.

Definition 1.1: The subclass $M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$ of $A(n)$ is defined as the class of functions f such that

$$\left| \frac{1}{\gamma} \left(\frac{z [\varepsilon_{\nu,c}f(z)]'}{\varepsilon_{\nu,c}f(z)} - 1 \right) \right| < \alpha, \quad (z \in U), \tag{1.9}$$

where $\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ and $0 \leq \alpha < 1$.

Definition 1.2: Let $R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \vartheta)$ denote the subclass of $A(n)$ consisting of f which satisfy the inequality

$$\left| \frac{1}{\gamma} \left[(1-\vartheta) \frac{\varepsilon_{\nu,c}f(z)}{z} + \vartheta (\varepsilon_{\nu,c}f(z))' - 1 \right] \right| < \alpha, \tag{1.10}$$

where $\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $0 \leq \alpha < 1$ and $0 \leq \vartheta \leq 1$.

In this paper, we obtain the coefficient inequalities, inclusion relations and neighborhood properties of the subclasses $M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$ and $R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \vartheta)$.

2. Coefficient Inequalities For $M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$ and $R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \vartheta)$.

Theorem 2.1: Let $f \in A(n)$. Then $f \in M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$ if and only if

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1} \Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} [n-1+\alpha|\gamma|] a_n \leq \alpha|\gamma| \quad (z \in U) \tag{2.1}$$

for $\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ and $0 \leq \alpha < 1$.

Proof. Let $f \in A(n)$. Then, by (1.9) we can write

$$\Re \left\{ \frac{z [\varepsilon_{\nu,c}f(z)]'}{\varepsilon_{\nu,c}f(z)} - 1 \right\} > -\alpha|\gamma|, \quad (z \in U). \tag{2.2}$$

Using (1.2) and (1.8), we have,

$$\Re \left\{ \frac{-\sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} [n-1] a_n z^n}{z - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} a_n z^n} \right\} > -\alpha|\gamma|, \quad (z \in U). \tag{2.3}$$

Since (2.3) is true for all $z \in U$, choose values of z on the real axis. Letting $z \rightarrow 1$, through the real values, the inequality (2.3) yields the desired inequality

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} [n-1+\alpha|\gamma|] a_n \leq \alpha|\gamma|.$$

Conversely, supposed that the inequality (2.1) holds true and $|z|=1$, then we obtain

$$\begin{aligned} \left| \frac{z [\varepsilon_{\nu,c} f(z)]' - 1}{\varepsilon_{\nu,c} f(z)} \right| &\leq \left| \frac{\sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} [n-1] a_n z^n}{z - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} a_n z^n} \right| \\ &\leq \frac{\sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} [n-1] a_n}{1 - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} a_n} \\ &\leq \alpha|\gamma|. \end{aligned}$$

Hence, by the maximum modulus theorem, we have $f(z) \in M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$, which establishes the required result.

Theorem 2.2: Let $f \in A(n)$. Then $f \in R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \mathcal{G})$ if and only if

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{c^{n-1}\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\nu+n)} [1+\mathcal{G}(n-1)] a_n \leq \alpha|\gamma| \tag{2.4}$$

for $\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $0 \leq \alpha < 1$ and $0 \leq \mathcal{G} \leq 1$.

Proof. We omit the proofs since it is similar to Theorem 2.1.

3. Inclusion Relations Involving $N_{n,\delta}(e)$ of $M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$ and $R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \mathcal{G})$

Theorem 3.1: If

$$\delta = \frac{2\alpha|\gamma|(1+\nu)}{c(1+\alpha|\gamma|)}, \quad (|\gamma| < 1), \tag{3.1}$$

then $M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma) \subset N_{n,\delta}(e)$.

Proof. Let $f(z) \in M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma)$. By Theorem 2.1, we have

$$\frac{c}{(1+\nu)}(1+\alpha|\gamma|)\sum_{n=2}^{\infty}a_n \leq \alpha|\gamma|,$$

which implies

$$\sum_{n=2}^{\infty}a_n \leq \frac{\alpha|\gamma|}{\frac{c}{(1+\nu)}(1+\alpha|\gamma|)}. \tag{3.2}$$

Using (2.1) and (3.2), we get

$$\begin{aligned} \frac{c}{(1+\nu)}\sum_{n=2}^{\infty}na_n &\leq \alpha|\gamma| + \frac{c}{(1+\nu)}(1-\alpha|\gamma|)\sum_{n=2}^{\infty}a_n \\ &\leq \frac{2\alpha|\gamma|}{(1+\alpha|\gamma|)} = \delta. \end{aligned}$$

That is,

$$\sum_{n=2}^{\infty}na_n \leq \frac{2\alpha|\gamma|}{\frac{c}{(1+\nu)}(1+\alpha|\gamma|)} = \delta.$$

Thus, by the definition given by (1.4), $f(z) \in N_{n,\delta}(e)$, which completes the proof.

Theorem 3.2: If

$$\delta = \frac{2\alpha|\gamma|(1+\nu)}{c(1+\vartheta)}, \quad (|\gamma| < 1), \tag{3.3}$$

then $R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \vartheta) \subset N_{n,\delta}(e)$.

Proof. For $f(z) \in R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \vartheta)$ and making use of the condition (2.4), we obtain

$$\frac{c}{(1+\nu)}(1+\vartheta)\sum_{n=2}^{\infty}a_n \leq \alpha|\gamma|$$

so that

$$\sum_{n=2}^{\infty}a_n \leq \frac{\alpha|\gamma|}{\frac{c}{(1+\nu)}(1+\vartheta)}. \tag{3.4}$$

Thus, using (2.4) along with (3.4), we also get

$$\begin{aligned} \vartheta \frac{c}{(1+\nu)}\sum_{n=2}^{\infty}na_n &\leq \alpha|\gamma| + (\vartheta-1)\frac{c}{(1+\nu)}\sum_{n=2}^{\infty}a_n \\ &\leq \alpha|\gamma| + \frac{c(\vartheta-1)}{(1+\nu)}\frac{\alpha|\gamma|(1+\nu)}{c(1+\vartheta)} \\ &\leq \frac{2\vartheta\alpha|\gamma|}{(1+\vartheta)} = \delta. \end{aligned}$$

Hence,

$$\sum_{n=2}^{\infty} na_n \leq \frac{2\alpha|\gamma|}{\frac{c}{(1+\nu)}(1+\vartheta)} = \delta$$

which in view of (1.4), completes the proof of theorem.

4. Neighborhood Properties For The Classes $M_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma,\eta)$ and $R_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma,\eta;\vartheta)$

Definition 4.1: For $0 \leq \eta < 1$ and $z \in U$, A function $f(z) \in A(n)$ is said to be in the class $M_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma,\eta)$ if there exists a function $g(z) \in M_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma)$ such that

$$\left| \frac{f(z)}{g(z)} - 1 \right| < 1 - \eta. \tag{4.1}$$

Analogously, for $0 \leq \eta < 1$ and $z \in U$, A function $f(z) \in A(n)$ is said to be in the class $R_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma,\eta;\vartheta)$ if there exists a function $g(z) \in R_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma;\vartheta)$ such that the inequality (4.1) holds true.

Theorem 4.1: If $g(z) \in M_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma)$ and

$$\eta = 1 - \frac{\delta c(1 + \alpha|\gamma|)}{2[c(1 + \alpha|\gamma|) - \alpha|\gamma|(1 + \nu)]} \tag{4.2}$$

then $N_{n,\delta}(g) \subset M_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma,\eta)$.

Proof. Let $f(z) \in N_{n,\delta}(g)$. Then,

$$\sum_{n=2}^{\infty} n|a_n - b_n| \leq \delta, \tag{4.3}$$

which yields the coefficient inequality,

$$\sum_{n=2}^{\infty} |a_n - b_n| \leq \frac{\delta}{2}, \quad (n \in \mathbb{N}).$$

Since $g(z) \in M_{\nu,c}^n(\alpha,\gamma)$ by (3.2), we have

$$\sum_{n=2}^{\infty} b_n \leq \frac{\alpha|\gamma|}{\frac{c}{(1+\nu)}(1+\alpha|\gamma|)}, \tag{4.4}$$

and so

$$\begin{aligned} \left| \frac{f(z)}{g(z)} - 1 \right| &< \frac{\sum_{n=2}^{\infty} |a_n - b_n|}{1 - \sum_{n=2}^{\infty} b_n} \\ &\leq \frac{\delta \frac{c}{(1+\nu)} (1 + \alpha |\gamma|)}{2 \frac{c}{(1+\nu)} (1 + \alpha |\gamma|) - \alpha |\gamma|} \\ &= 1 - \eta. \end{aligned}$$

Thus, by the definition, $f(z) \in M_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma, \eta)$ for η given by (4.2), which establishes the desired result.

Theorem 4.2: If $g(z) \in R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma; \vartheta)$ and

$$\eta = 1 - \frac{\delta c(1 + \vartheta)}{2[c(1 + \vartheta) - \kappa|\gamma|(1 + \nu)]}, \quad (4.5)$$

then $N_{n,\delta}(g) \subset R_{\nu,c}^n(\alpha, \gamma, \eta; \vartheta)$.

Proof. We omit the proofs since it is similar to Theorem 4.1.

REFERENCES

- Aktaş, İ., & Orhan, H. (2015). Distortion bounds for a new subclass of analytic functions and their partial sums. *Bulletin of the Transilvania University of Brasov. Mathematics, Informatics, Physics, Series III*, 8(2), 1-12.
- Altıntaş, O., & Owa, S. (1996). Neighborhoods of certain analytic functions with negative coefficients. *Int. J. Math. and Math. Sci.*, 19, 797-800.
- Altıntaş, O., Özkan, E., & Srivastava, H. M. (2000). Neighborhoods of a class of analytic functions with negative coefficients. *Appl. Math. Let.*, 13, 63-67.
- Çağlar, M., Deniz, E., & Kazımoğlu, S. (2020). Neighborhoods of certain classes of analytic functions defined by normalized function $az^2J_{\vartheta}''(z) + bzJ_{\vartheta}'(z) + cJ_{\vartheta}(z)$. *Turkish Journal of Science*, 5 (3), 226-232.
- Çağlar, M., Orhan, M. (2017). On neighborhood and partial sums problem for generalized Sakaguchi type function. *Al. I. Cuza Din Iasi (S.N) Matematica*, LXIII, f.1, 17–28.
- Çağlar, M., Orhan, M. (2019). (θ, μ, τ) –Neighborhood for analytic functions involving modified sigmoid function. *Commun. Fac. Sci. Univ. Ank. Ser. A1 Math. Stat.*, 68(2), 2161-2169.
- Darwish, H. E., Lashin, A. Y., & Hassan, B. F. (2015). Neighborhood properties of generalized Bessel function. *Global Journal of Science Frontier Research (F)*, 15(9), 21-26.
- Deniz, E., & Orhan, H. (2010). Some properties of certain subclasses of analytic functions with negative coefficients by using generalized Ruscheweyh derivative operator. *Czechoslovak Math. J.*, 60(135), 699-713.
- Goodman, A. W. (1957). Univalent functions and nonanalytic curves. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 8, 598-601.
- Keerthi, B. S., Gangadharan, A., & Srivastava, H. M. (2008). Neighborhoods of certain subclasses of analytic functions of complex order with negative coefficients. *Math. Comput. Model.*, 47, 271-277.
- Miller, K. S., & Ross, B. (1993). *An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations*. Wiley.
- Murugusundaramoorthy, G., & Srivastava, H. M. (2004). Neighborhoods of certain classes of analytic functions of complex order. *J. Inequal. Pure Appl. Math.*, 5(2), Art. 24. 8 pp.

- Orhan, H. (2007). On neighborhoods of analytic functions de_fined by using hadamard product. *Novi Sad J. Math.*, 37(1), 17-25.
- Ruscheweyh, S. (1981). Neighborhoods of univalent functions. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 81(4), 521-527.
- Silverman, H. (1995). Neighborhoods of a classes of analytic function. *Far East J. Math. Sci.*, 3(2), 175-183.
- Srivastava, H. M., & Bulut, S. (2012). Neighborhood properties of certain classes of multivalently analytic functions associated with the convolution structure. *Appl. Math. Comput.*, 218, 6511-6518.



Naphthoquinones from *Onosma*: Molecular Mechanisms of Action in the Treatment and Prevention of COVID-19

Namık KILINÇ¹

Makalenin alanı: Sağlık

| Makale Bilgileri | Öz |
|---|---|
| Geliş Tarihi 17.12.2021 | <p>Şiddetli akut solunum sendromu koronavirüs 2'nin (SARS-CoV-2) neden olduğu COVID-19, ilk olarak Aralık 2019'da Çin'in Wuhan kentinde tespit edildi. Şu anda virüs için etkili bir tedavi veya bağışıklama yok ve yüksek ölüm oranıyla hızla yayılıyor. Hem viral replikasyonun hem de transkripsiyonun başlatılmasında rol oynayan çok önemli bir CoV enzimi olan COVID-19 ana proteazı (Mpro), araştırmacılar için çekici bir hedeftir. SARS-CoV-2'nin neden olduğu COVID-19'un erken aşamalarını tedavi etmek için acilen yeni terapötiklere ihtiyaç vardır. Bu nedenle, potansiyel COVID-19 Mpro inhibitörlerini bulmak için <i>Onosma</i> cinsinden naftokinonlar, Mpro enzimi üzerindeki olası etkilerini bulmak için tarandı. Bu çalışmada, mevcut doğal ürün veritabanlarından SARS-CoV-2 Mpro'nun potansiyel inhibitörlerini ortaya çıkarmak için moleküler yerleştirme ve MM-GBSA dahil olmak üzere bir dizi hesaplama yaklaşımı kullandık. Bulgularımıza göre deoksishikonin, 3-hidroksi-izovaleryl shikonin, propionil shikonin ve asetil shikonin moleküllerinin Mpro enzimine yüksek bağlanma afiniteleri vardır. Ayrıca diğer shikonin bileşiklerinin anti-Mpro enzim aktivitesine sahip olduğu gözlemlendi. Yerleştirme simülasyonları ve moleküler mekanik, shikonin türevlerinin etkili anti-SARS-CoV-2 bileşikleri olabileceğini düşündürmektedir.</p> |
| Kabul Tarihi 29.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler COVID-19 Moleküler doking Naftokinon <i>Onosma</i> Shikonin | |

| Article Info | Abstract |
|--|---|
| Received 17.12.2021 | <p>COVID-19, which is caused by the severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2), was first detected in December 2019 in Wuhan, China. There is currently no effective treatment or immunization for the virus, and it is spreading rapidly with a high mortality rate. As a crucial CoV enzyme involved in initiating both viral replication and transcription, the COVID-19 main protease (Mpro) is an appealing target for researchers. Novel therapeutics are urgently required to treat the early stages of COVID-19 caused by SARS-CoV-2. Therefore, to find potential COVID-19 Mpro inhibitors, naphthoquinones from the <i>Onosma</i> genus were screened to find out their possible effects on the Mpro enzyme. In this study, we employed a range of computational approaches, including molecular docking and MM-GBSA, to uncover potential inhibitors of SARS-CoV-2 Mpro from existing natural product databases. According to our findings, the molecules deoxyshikonin, 3-hydroxy-isovaleryl shikonin, propionyl shikonin, and acetyl shikonin have high binding affinities for the Mpro enzyme. In addition, it was observed that the other shikonin compounds have anti-Mpro enzyme activity. Docking simulations and molecular mechanics suggest that shikonin derivatives might be effective anti-SARS-CoV-2 compounds.</p> |
| Accepted 29.12.2021 | |
| Keywords COVID-19 Molecular docking Naphthoquinones <i>Onosma</i> Shikonin | |

¹ Iğdır University Vocational School of Health Service Department of Medical Services and Techniques-Iğdır; e-mail: namikkilinc@igdir.edu.tr; ORCID: 0000-0002-9102-1370

1. Introduction

The coronavirus disease, which was officially designated as Covid-19 by the World Health Organization on February 11, 2020, originated in Wuhan, China, in December 2019 and has rapidly spread around the world in an epidemic manner (Lillie et al., 2020). The new coronavirus was called SARS-CoV-2, according to the International Virus Classification Commission. COVID-19 is not the first virus to be linked to a coronavirus-related severe respiratory disease (Lai et al., 2020). Coronaviruses, on the other hand, have produced three pandemic infections in the last 20 years: SARS-CoV-2, MERS-CoV, and SARS CoV (De Wit et al., 2016). COVID-19 cases have been recorded in many countries throughout the globe (Wu et al., 2020).

Coronavirus is a member of the Coronaviridae family, which is part of the Nidovirales order. Coronaviruses are a wide family of positive-sense, single-stranded RNA viruses (Yan et al., 2020). Coronaviruses have been detected in mice, poultry, swine, cattle, rats, turkeys, dogs, rabbits, horses, cats, and humans, with genomic RNA measuring 26–32 kb and being capped and polyadenylated. Coronaviruses may cause a variety of severe ailments, including gastroenteritis and respiratory tract infections (Van Der Hoek et al., 2004). Pneumonia is the most common indication and symptom of SARS-CoV-2 infection. Other symptoms include headache, shortness of breath (dyspnea), cough, chest discomfort, tiredness, diarrhea, muscular soreness, fever, anorexia, sore throat, vomiting, disorientation, and nausea. At least four comprehensive investigations on clinical and epidemiological aspects of SARS-CoV-2 infected individuals have been conducted. Fatigue, cough, and fever were reported by 96 percent, 68 percent, and 90 percent of patients, respectively, in this study (Zheng, 2020).

There is currently no treatment available for COVID-19. As a result, medicines that may suppress SARS-CoV-2 are required. The Main Protease (Mpro) is one of the main therapeutic targets for combating coronaviruses (Figure 1). Polyproteins produced by viral RNA transcription are processed by the Mpro, which is responsible for this processing in the cell (Hilgenfeld, 2014). From humans to other animals, the amino acid sequences of the Mpro of all SARS-like CoVs are substantially conserved (Ortega et al., 2020). The Mpro has a proclivity towards forming dimers (protomer A and B). Three domains can be found in protomers. An antiparallel β -barrel structure is formed by domain I (residues 8–101) and domain II (residues 102–184). A cleft between these two domains contains the substrate-binding pocket. Domain III (residues 201–303) forms an antiparallel globular cluster with five α -helices (Jin et al., 2020).

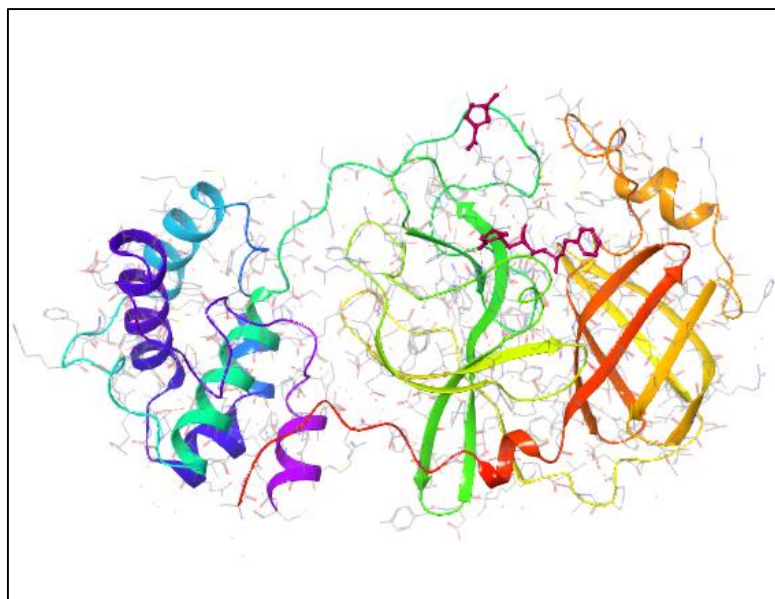


Figure 1. Crystal structure of COVID-19 Main Protease in complex with the inhibitor N3 (PDB ID: 7BQY)

More than 150 species are known to exist in the genus *Onosma* (Boraginaceae) (El - Shazly et al. 2003). In the flora of Turkey, the genus *Onosma* is represented by 97 species, 4 variations, and 1 hybrid species (102 taxa), 50 species and 1 variety of which are endemic, with a 50% incidence of endemism (Binzet and Orcan, 2009). Naphthoquinones (alkannin, shikonin, and alkannin/shikonin derivatives) are found in the roots of several *Onosma* species (Ozgen et al., 2011; Kagramanyan and Mnatsakanyan, 1985; Sut et al., 2017; Ozgen et al., 2006). In this study, the possible inhibitory effects of naphthoquinones in the *Onosma* genus on the Main Protease (Mpro) enzyme, which is responsible for the replication of the coronavirus in the cell, were investigated.

2. MATERIALS AND METHOD

Online bibliographic sources such as Science Direct, PubMed, Web of Science, and Google Scholar were used to acquire data on *Onosma* naphthoquinones.

Protein Preparation

The RCSB Protein Data Bank (PDB) was used to get the X-ray crystal structure of COVID-19 Main Protease (PDB code: 7BQY). The Protein Preparation Wizard of Schrödinger Molecular Modelling Suite was used to pre-process and prepare the X-ray crystal structure. Converting

selenomethionines to methionines, assigning bond orders, filling in missing side chains and loops (if any) (using Prime), adding hydrogens to protein structures, generating het states at pH 7.0 ± 2.0 (using Epik), creating zero-order bonds to metals and disulfide bonds, and deleting water molecules beyond 5 from het groups are all processes performed by Protein Preparation Wizard. PROPKA was used to improve H-bond assignment at pH 7.0 with several water sample orientations. The OPLS3e force field was used to minimize the energy of protein structures under physiological parameters.

Ligand Preparation

A ligand library including 13 shikonin derivatives from *Onosma* species was generated as a starting point using PubChem's 2D structures. The 2D structures of the medications favipiravir, remdesivir, and hydroxychloroquine used in covid therapy were retrieved from PubChem for comparison. Maestro's LigPrep module was used to create 2D structure drawings of all ligands to be docked into the Mpro protein, as well as 3D transformations of these structures. With the OPLS3e force field, the LigPrep module was also utilized to create potential ionization and optical isomers of ligands at physiological pH.

Possible Binding Site Identification And Grid Generation

The main protease protein's ligand-binding sites were predicted using the Schrödinger suite's SiteMap tool. SiteMap looks for all probable binding sites on the protein surface and ranks them using the Dscore scoring function. Five potential binding sites for the main protease protein were discovered as a consequence of SiteMap. Using Maestro's Receptor Grid Generation module, a grid box of $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$ was formed on the best-scored binding site predicted by SiteMap.

Extra Precision (XP) Docking

Schrödinger Maestro software was used to conduct all docking simulations and visualizations of shikonin derivatives against the Mpro receptor (Schrödinger, 2020). The Glide Extra Precision (XP) docking approach was used to the top-scoring binding site previously discovered by SiteMap for a total of 13 compounds collected from *Onosma* species. The receptor sites are maintained rigid throughout the XP docking technique, but the ligands are permitted to move freely (Kılınc, 2021).

Binding Free Energy Calculation Using Molecular Mechanics/Generalized Born Surface Area (MM/GBSA)

The free binding energies of the protein and ligand complexes were investigated using the MM-GBSA (Molecular Mechanics, the Generalized Born model, and Solvent Accessibility) approach. The optimum binding energy of the chosen complexes with the lowest docking score was calculated using the Prime module of Schrödinger program. The VSGB 2.0 model was used for the investigation, using an OPLS3e force field that included an implicit solvent model as well as physics-based modifications for hydrophobic interactions, π - π interactions, and hydrogen bonding self-contact interactions (Genheden and Ryde, 2015).

3. RESULTS

Molecular docking studies using two distinct approaches were used to investigate the possible effects of 13 shikonin derivatives in *Onosma* species on the Mpro enzyme. To begin, the SiteMap module of Maestro was used to find the probable ligand binding sites for the Mpro enzyme (Table 1).

Table 1. Five top-scored ligand binding sites of main protease enzyme

| Name | Dscore | volume | phobic | philic | residues |
|--------|--------|--------|--------|--------|---|
| Site 1 | 1,04 | 264,8 | 0,93 | 0,89 | Chain A: 25,26,27,41,44,49,52,54,140, 141,142, 143, 144,145, 163,164,165,166,167,168, 172, 187,188,189, 190,191,192 |
| Site 2 | 0,81 | 249,4 | 0,40 | 1,01 | Chain A:8,107,108,109,110,111,127,151,153, 200,201,202,203,240,242,246,249,292,293, 294, 295,298 |
| Site 4 | 0,49 | 73,40 | 0,44 | 1,14 | Chain A: 218,219,220,221,267,270, 271,274, 275,279 |
| Site 3 | 0,53 | 107,7 | 0,16 | 1,04 | Chain A: 15,17,18,19,31,69,70,71,97,119,120 |
| Site 5 | 0,34 | 53,20 | 0,25 | 1,47 | Chain A: 3,4,5,207,282,284,288,291 |

Using the extra precision (XP) docking methodology, thirteen naphtoquinones identified in *onosma* and three positive control compounds were docked to the ligand binding site defined for the target protein. All naphtoquinones were docked flexibly to the Mpro enzyme binding site. Additionally, we used the Prime MM/GBSA module to calculate the free binding energies of naphtoquinones and positive control medicines to the Mpro receptor,

allowing us to get a better understanding of the thermodynamic factors governing their binding activities. Table 2 shows the XP docking findings and Prime MM/GBSA free binding energy results of naphthoquinones against the Mpro receptor.

Table 2. XP docking and MM-GBSA results of naphthoquinones and reference compounds against Mpro receptor

| Name | Docking score | XP GScore | Glide emodel | MM-GBSA |
|---|---------------|-----------|--------------|---------|
| Deoxyshikonin | -7,49 | -7,50 | -38,98 | -44.37 |
| 3-hydroxy-isovaleryl shikonin | -6,51 | -6,53 | -55,59 | -59.02 |
| Propionyl shikonin | -5,95 | -5,96 | -48,05 | -48.19 |
| Acetyl shikonin | -5,85 | -5,87 | -46,91 | -45.98 |
| Shikonin | -5,65 | -5,66 | -37,94 | -34.85 |
| 1-(5,8-dimethoxy-1,4-dioxo-1,4-dihydronaphthalen-2-yl)-4-methylpent-3-en-1-yl 2-methylbutanoate | -5,62 | -5,62 | -43,80 | -39.53 |
| β,β -Dimethylacryl shikonin | -5,58 | -5,59 | -49,36 | -46.93 |
| Isobutyryl shikonin | -5,51 | -5,52 | -47,83 | -45.92 |
| Isovaleryl shikonin | -5,38 | -5,39 | -58,85 | -44.52 |
| (E)-2-(4-hydroxy-4-methylpent-2-en-1-yl)-5,8-dimethoxynaphthalene-1,4-dione | -5,07 | -5,07 | -43,03 | -38.00 |
| 5,8-O-dimethyl deoxyshikonin | -4,85 | -4,85 | -46,31 | -44.95 |
| 5,8-O-dimethylacetyl shikonin | -4,59 | -4,60 | -50,34 | -46.21 |
| 5,8-dimethoxyisobutyryl shikonin | -4,31 | -4,31 | -45,94 | -41.34 |
| Remdesivir | -8,48 | -8,48 | -75,77 | -68.45 |
| Hydroxychloroquine | -5,19 | -5,19 | -36,23 | -24.86 |
| Favipiravir | -3,77 | -3,77 | -24,11 | -18.31 |

DISCUSSION AND CONCLUSION

The use of plants to cure diseases is a widely used practice across the globe. Ethnobotanical research forms a large part of the practice of scientists. Health care for 80 percent of the world's population still heavily depends on herbal treatments (Oladele *et al.*, 2020). Numerous studies are showing that herbs have antibacterial, antifungal, and antiviral

effects. Plants show these effects through phenolic compounds, secondary metabolites, and other chemicals in their content (Tada *et al.*, 1994; Koch *et al.*, 2008; Mukhtar *et al.*, 2008; Tan *et al.*, 2013; Mikaili *et al.*, 2013). SARS, MERS, dengue, and influenza virus symptoms have been treated using plant-derived antiviral medications (Theisen and Muller, 2012; Yu *et al.*, 2012; Zandi *et al.*, 2012). Natural compounds originated from plants, such as flavonoids and xanthenes, as well as other chemical components with antibacterial, antiviral, and anti-inflammatory properties, might interact well with SARS-CoV-2 targets. As a consequence, herbal drugs containing these compounds as key ingredients might be beneficial in the treatment of SARS-CoV-2 infections.

Shikonin is a key naphthoquinone natural substance obtained from *Onosma* species' roots (Ozgen *et al.*, 2011; Sut *et al.*, 2017). Shikonin has a diverse set of pharmacological properties, including anti-cancer, anti-oxidant, antibacterial, and anti-inflammatory properties. Shikonin has been reported to have antiviral effect against the adenovirus and human immunodeficiency virus-1 (HIV-1) (Andújar *et al.*, 2013; Chen *et al.*, 2003). These properties of the shikonin compound have increased the interest in this compound and its derivatives. Therefore, our current study was designed considering that shikonin and its derivatives may have a potential effect on SARS-CoV-2 virus. For this purpose, the potential effects of shikonin and its derivatives on the SARS-CoV-2 Main Protease enzyme were investigated using molecular docking and molecular mechanics techniques.

Molecular docking simulations showed that the best scoring compound was Deoxyshikonin. Although deoxyshikonin scored lower than Remdesivir, it scored better than the other positive control compounds hydroxychloroquine and favipiravir. Deoxyshikonin made hydrogen bonding with amino acid residues LEU141, GLY143, GLU166, and GLN189 at the active site of the Mpro enzyme (Figure 2 and 3). In the molecular mechanical calculations for the Deoxyshikonin compound, it was determined that the free binding energy for the Mpro enzyme was -44.37 kcal/mol (Table 2). 3-hydroxy-isovaleryl shikonin compound, another high-scoring compound against SARS-CoV-2 Mpro enzyme, was found in hydrogen bond interaction with ASN142, GLU166, GLN189, and GLN19 residues in the active site of the enzyme, similar to the deoxyshikonin compound (Figure 2). The 3-hydroxy-isovaleryl shikonin compound was determined as the compound with the highest free binding energy value (59.02 kcal/mol) among the shikonin derivatives, whose possible inhibition effects against the Mpro enzyme were investigated. The free binding energies of Propionyl shikonin and Acetyl shikonin

compounds, whose docking scores against the SARS-CoV-2 Mpro enzyme were very close to each other, were similarly close. While the propionyl shikonin compound hydrogen bonded with the amino acid residues LEU141 and GLN189, Acetyl shikonin hydrogen bonded with the residues of GLU166 and THR190 in the catalytic active site of the Mpro enzyme (Figure 2). Propionyl shikonin and Acetyl shikonin both outperformed the positive control compounds hydroxychloroquine and favipiravir. Considering the free binding energies and docking scores of these two compounds, it can be said that they have a potent affinity for the SARS-CoV-2 Mpro enzyme. Other shikonin derivatives other than the best-scoring deoxyshikonin, 3-hydroxy-isovaleryl shikonin, propionyl shikonin, and acetyl shikonin compounds against Mpro enzyme also showed very high affinity for Mpro enzyme regarding their docking scores and binding free energies.

Novel therapies for treating the early stages of COVID-19 induced by SARS-CoV-2 are urgently needed. Mpro is one of the antiviral targets that might be used to treat SARS-CoV-2. Natural resources abound, which may be used to find pharmacologically important natural compounds. In this study, to find possible inhibitors of SARS-CoV-2 Mpro from existing natural product databases, we used a variety of computational techniques, including molecular docking and MM-GBSA. The molecules deoxyshikonin, 3-hydroxy-isovaleryl shikonin, propionyl shikonin, and acetyl shikonin exhibit great binding affinities for the Mpro enzyme, according to our findings. Furthermore, it was discovered that the other shikonin compounds displayed potential anti-Mpro enzyme activity. Shikonin derivatives may be strong anti-SARS-CoV-2 drugs, according to docking simulations and molecular mechanics.

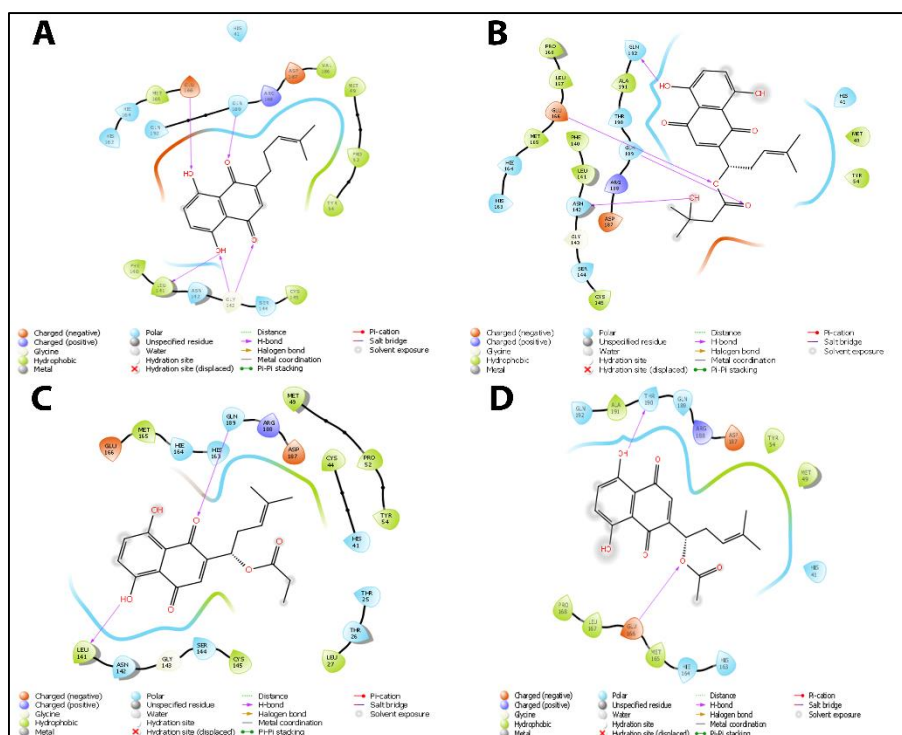


Figure 2. 2D ligand interaction diagrams of deoxyshikonin (A), 3-hydroxy-isovaleryl shikonin (B), propionyl shikonin (C), and acetyl shikonin (D).

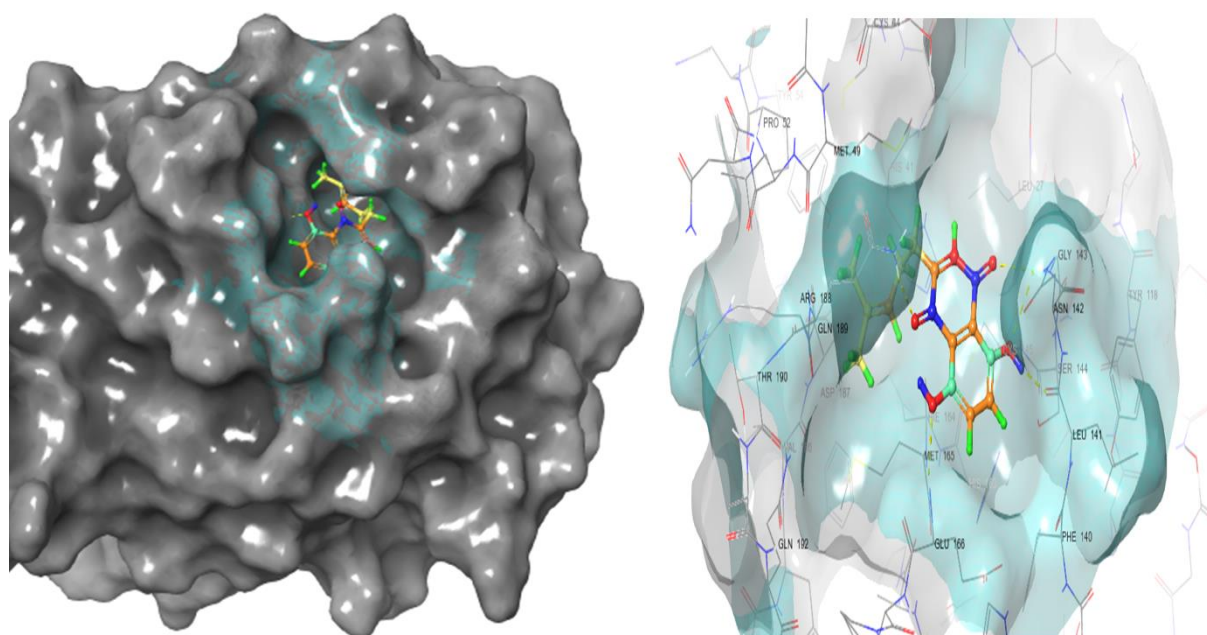


Figure 3. 3D surfaced and 3D detailed binding mode of deoxyshikonin compound. Ligand binding sites of the Mpro enzyme are represented as solid surfaces.

REFERENCES

- Lillie, P. J., Samson, A., Li, A., Adams, K., Capstick, R., Barlow, G. D., Easom, N., Hamilton, E., Moss, P. J., Evans, A., Ivan, M., Taha, Y., Duncan, C. J. A., & Schmid, M. L., & The Airborne HCID Network, PHE Incident Team. (2020). Novel coronavirus disease (Covid-19): The first two patients in the UK with person to person transmission. *Journal of Infection*, 80, 578–606. <https://doi.org/10.1016/j.jinf.2020.02.020>
- Lai, C. C., Liu, Y. H., Wang, C. Y., Wang, Y. H., Hsueh, S. C., Yen, M. Y., Chien Ko, W., & Hsueh, P. R. (2020). Asymptomatic carrier state, acute respiratory disease, and pneumonia due to severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2): Facts and myths. *Journal of Microbiology, Immunology and Infection*, 53(3), 404-412. <https://doi.org/10.1016/j.jmii.2020.02.012>
- De Wit, E., Van Doremalen, N., Falzarano, D., & Munster, V. J. (2016). SARS and MERS: recent insights into emerging coronaviruses. *Nature Reviews Microbiology*, 14(8), 523-534. <https://doi.org/10.1038/nrmicro.2016.81>
- Wu, J. T., Leung, K., & Leung, G. M. (2020). Nowcasting and forecasting the potential domestic and international spread of the 2019-nCoV outbreak originating in Wuhan, China: a modelling study. *The Lancet*, 395(10225), 689-697. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(20\)30260-9](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(20)30260-9)
- Yan, S., Sun, H., Bu, X., & Wan, G. (2020). New strategy for COVID-19: an evolutionary role for RGD motif in SARS-CoV-2 and potential inhibitors for virus infection. *Frontiers in Pharmacology*, 11, 912. <https://doi.org/10.3389/fphar.2020.00912>
- Van Der Hoek, L., Pyrc, K., Jebbink, M. F., Vermeulen-Oost, W., Berkhout, R. J., Wolthers, K. C., & Berkhout, B. (2004). Identification of a new human coronavirus. *Nature medicine*, 10(4), 368-373. <https://doi.org/10.1038/nm1024>
- Zheng, J. (2020). SARS-CoV-2: an emerging coronavirus that causes a global threat. *International Journal Of Biological Sciences*, 16(10), 1678. [10.7150/ijbs.45053](https://doi.org/10.7150/ijbs.45053)
- Hilgenfeld, R. (2014). From SARS to MERS: crystallographic studies on coronaviral proteases enable antiviral drug design. *The FEBS Journal*, 281(18), 4085-4096. <https://doi.org/10.1111/febs.12936>
- Ortega, J. T., Serrano, M. L., Pujol, F. H., & Rangel, H. R. (2020). Unrevealing sequence and structural features of novel coronavirus using in silico approaches: The main protease as molecular target. *EXCLI Journal*, 19, 400. <http://dx.doi.org/10.17179/excli2020-1189>
- Jin, Z., Du, X., Xu, Y., Deng, Y., Liu, M., Zhao, Y., & Yang, H. (2020). Structure of M pro from SARS-CoV-2 and discovery of its inhibitors. *Nature*, 582(7811), 289-293. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2223-y>
- El-Shazly, A., Abdel-Ghani, A., & Wink, M. (2003). Pyrrolizidine alkaloids from *Onosma arenaria* (Boraginaceae). *Biochemical Systematics and Ecology*, 31(5), 477-485. [https://doi.org/10.1016/S0305-1978\(02\)00177-1](https://doi.org/10.1016/S0305-1978(02)00177-1)
- Binzet, R. (2009). Anatomical and palynological investigations on endemic *Onosma mersinana* Riedl, Binzet & Orcan. *Pakistan Journal of Botany*, 41, 503-510.
- Ozgen, U., Miloglu, F. D., & Bulut, G. (2011). Quantitative determination of shikonin derivatives with UV-Vis spectrophotometric methods in the roots of *Onosma nigricaula*. *Reviews in Analytical Chemistry*, 30(2), 59-63. <https://doi.org/10.1515/revac.2011.014>

- Kagramanyan, N. S., & Mnatsakanyan, V. A. (1985). Shikonin and its derivatives from *Onosma setosum* roots. *Armyanskii Khimicheskii Zhurnal*, 38(8), 527-8.
- Sut, S., Pavela, R., Kolarčik, V., Cappellacci, L., Petrelli, R., Maggi, F., & Benelli, G. (2017). Identification of *Onosma visianii* roots extract and purified shikonin derivatives as potential acaricidal agents against *Tetranychus urticae*. *Molecules*, 22(6), 1002. <https://doi.org/10.3390/molecules22061002>
- Ozgen, U., Ikbali, M., Hacimuftuoglu, A., Houghton, P. J., Gocer, F., Dogan, H., & Coskun, M. (2006). Fibroblast growth stimulation by extracts and compounds of *Onosma argentatum* roots. *Journal of Ethnopharmacology*, 104(1-2), 100-103. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2005.08.052>
- Schrödinger Release 2020-3: *Maestro*, Schrödinger, LLC, New York, NY, 2020
- Kılınc, N. Inhibition profiles and molecular docking studies of antiproliferative agents against aldose reductase enzyme. *International Journal of Chemistry and Technology*, 5(1), 77-82. <https://doi.org/10.32571/ijct.944049>
- Genheden, S.; Ryde, U. (2015) The MM/PBSA and MM/GBSA methods to estimate ligand-binding affinities. *Expert Opinion on Drug Discovery*, 10(5), 449-461. <https://doi.org/10.1517/17460441.2015.1032936>
- Oladele, J. O., Ajayi, E. I., Oyeleke, O. M., Oladele, O. T., Olowookere, B. D., Adeniyi, B. M., & Oladiji, A. T. (2020). A systematic review on COVID-19 pandemic with special emphasis on curative potentials of Nigeria based medicinal plants. *Heliyon*, e04897. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04897>
- Tada, M., Okuno, K., Chiba, K., Ohnishi, E., & Yoshii, T. (1994). Antiviral diterpenes from *Salvia officinalis*. *Phytochemistry*, 35(2), 539-541. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)94798-8](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)94798-8)
- Koch, C., Reichling, J., Kehm, R., Sharaf, M. M., Zentgraf, H., Schneelee, J., & Schnitzler, P. (2008). Efficacy of anise oil, dwarf-pine oil and chamomile oil against thymidine-kinase-positive and thymidine-kinase-negative herpesviruses. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, 60(11), 1545-1550. <https://doi.org/10.1211/jpp.60.11.0017>
- Mukhtar, M., Arshad, M., Ahmad, M., Pomerantz, R. J., Wigdahl, B., & Parveen, Z. (2008). Antiviral potentials of medicinal plants. *Virus Research*, 131(2), 111-120. <https://doi.org/10.1016/j.virusres.2007.09.008>
- Tan, W. C., Jaganath, I. B., Manikam, R., & Sekaran, S. D. (2013). Evaluation of antiviral activities of four local Malaysian *Phyllanthus* species against herpes simplex viruses and possible antiviral target. *International Journal of Medical Sciences*, 10(13), 1817. [10.7150/ijms.6902](https://doi.org/10.7150/ijms.6902)
- Mikaili, P., Maadirad, S., Moloudizargari, M., Aghajanshakeri, S., & Sarahroodi, S. (2013). Therapeutic uses and pharmacological properties of garlic, shallot, and their biologically active compounds. *Iranian Journal of Basic Medical Sciences*, 16(10), 1031.
- Theisen, L. L., & Muller, C. P. (2012). EPs® 7630 (Umckaloabo®), an extract from *Pelargonium sidoides* roots, exerts anti-influenza virus activity in vitro and in vivo. *Antiviral research*, 94(2), 147-156. <https://doi.org/10.1016/j.antiviral.2012.03.006>
- Yu, M. S., Lee, J., Lee, J. M., Kim, Y., Chin, Y. W., Jee, J. G., & Jeong, Y. J. (2012). Identification of myricetin and scutellarein as novel chemical inhibitors of the SARS coronavirus helicase, nsP13. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 22(12), 4049-4054. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2012.04.081>

- Zandi, K., Teoh, B. T., Sam, S. S., Wong, P. F., Mustafa, M. R., & AbuBakar, S. (2012). Novel antiviral activity of baicalein against dengue virus. *BMC Complementary And Alternative Medicine*, 12(1), 1-9. <https://doi.org/10.1186/1472-6882-12-214>
- Andújar, I., Ríos, J. L., Giner, R. M., & Recio, M. C. (2013). Pharmacological properties of shikonin—a review of literature since 2002. *Planta Medica*, 79(18), 1685-1697. [10.1055/s-0033-1350934](https://doi.org/10.1055/s-0033-1350934)
- Chen, X., Yang, L., Zhang, N., Turpin, J. A., Buckheit, R. W., Osterling, C., & Howard, O. Z. (2003). Shikonin, a component of Chinese herbal medicine, inhibits chemokine receptor function and suppresses human immunodeficiency virus type 1. *Antimicrobial Agents And Chemotherapy*, 47(9), 2810-2816. <https://doi.org/10.1128/AAC.47.9.2810-2816.2003>



Bazı Organik Elektrolüminesans 2-[3-(Metil/Etil/p-Metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-yl]-izoindolin-1,3-dionlar'ın Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile Elektronik Özelliklerinin Belirlenmesi

Murat BEYTUR¹, Zeynep TURHAN², Haydar YÜKSEK³

Makalenin alanı: Kimya

| Makale Bilgileri | Özet |
|--|---|
| Geliş Tarihi 05.12.2021 | <p>Son zamanlarda bilim adamlarının ilgisini çeken 4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin potansiyel organik elektrolüminesans özellikleri tartışılmaktadır. Bu heterosiklik organik bileşiklerin elektronik özellikleri hesaplama yöntemleriyle incelenmiştir. Hesaplama işlemleri Windows işletim sistemlerinde çalışan yüksek performanslı sunucu sistemleri ile yapılmıştır. 2-[3-(metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-il]-izoindolin-1,3-dionların geometrileri GaussView 5.0 bilgisayar programı kullanılarak çizilmiştir. Teorik hesaplamalar Gaussian09W programı kullanılarak yapılmıştır. Daha sonra teorik hesaplamalarla optimize edilen moleküllerin HOMO-LUMO şekilleri elde edilmiştir. Her molekülün HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE) eV cinsinden hesaplanmıştır. Sonuçlar ilgili literatürden elde edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Bu çalışmada kullanılan DFT (Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi) yönteminin B3LYP 6-311G++(d,p) ve CAMB3LYP 6-311G++(d,p) temel set hesaplamalarından elde edilen teorik ve simülasyon sonuçlarına göre; HOMO-LUMO enerji farklılıkları incelendiğinde, çalışılan ilgili moleküller arasında optoelektronik özelliklere sahip olabilecek potansiyel moleküller olduğu belirlenmiştir. Bu yüzden, çalışmanın optoelektronik malzemelerin elde edilmesi açısından sentetik organik kimya prosedürlerine ışık tutması beklenmektedir. Organik elektronik cihazlar, optoelektronik özellikleri nedeniyle oldukça dikkat çekicidir. Bu cihazlar üç ana başlık altında incelenebilir. Bunlar organik ışık yayan diyot (OLED), organik ince film transistörler (OTFT) ve organik güneş pilleridir. Bu cihazlar genellikle birbiri üzerine yerleştirilmiş anot-organik malzeme-katot tabakaları şeklinde yapılandırılmıştır.</p> |
| Kabul Tarihi 29.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler 1.2.4-Triazol-5-on Organik ışık yayan diyot Elektrolüminesans, Moleküller yoğunluk fonksiyonel teorisi. | |

| Article Info | Abstract |
|--|---|
| Received 05.12.2021 | <p>The potential organic electroluminescent properties of 4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one derivatives that have recently attracted much of the scientists' interest is discussed. The electronic features of these heterocyclic organic compounds are examined with computational methods. The calculation operations were conducted with the high-performance server systems running on Windows operating systems. The geometries of the studied molecules were plotted using the GaussView 5.0 computer program. Theoretical calculations were conducted using the Gaussian09W program. Then, the HOMO-LUMO shapes of the molecules that were optimized with theoretical calculations were obtained. The HOMO-LUMO energy difference (ΔE) of each molecule was calculated in terms of eV. The results were compared with the values obtained from</p> |
| Accepted 29.12.2021 | |
| Keywords 1,2,4-Triazol-5-one Organic light emitting diode | |

¹ Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi- Kars; e-mail: muratbeytur83@gmail.com; ORCID: 0000-0002-7098-5592 (Sorumlu Yazar)

² Iğdır Üniversitesi Mühendislik Fakültesi- Iğdır; e-mail: zeynepilanturhan@hotmail.com; ORCID: 0000-0002-3587-2576

³ Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi- Kars; e-mail: hhigh61@gmail.com; ORCID: 0000-0003-1289-1800

| | |
|---|--|
| Electroluminescent molecules Density functional theory | relevant literature. According to the theoretical and simulation results obtained from the B3LYP 6-311G++(d,p) and CAMB3LYP 6-311G++(d,p) basic set calculations of the DFT (Density Functional Theory) method used in this study; when the HOMO-LUMO energy differences were examined, it was determined that from among the studied candidate molecules, there were potential molecules that have/could have optoelectronic features. Therefore, it is expected that the study will shed light on synthetic organic chemistry procedures in terms obtaining optoelectronic materials. Organic electronic devices are quite remarkable due to their optoelectronic features. These devices can be examined under three main headings. These are organic light emitting diode (OLED), organic thin-film transistors (OTFT) and organic solar cells. These devices are usually structured in the form of anode-organic material-cathode layers placed on top of each other. |
|---|--|

Giriş

Elektronik endüstrisi, dizüstü bilgisayarlar, akıllı telefonlar, kameralar ve televizyonlar gibi ürünlerle dünya çapında her yıl trilyonlarca doları hareket ettirmekten sorumlu olan küresel ticaretin en önemli yapıtaşdır. Tüm bu cihazlar, çipler veya mikroçipler olarak bilinen entegre devrelere dayanmaktadır. Bu bileşenler öncelikle inorganik yarı iletken malzemelerden üretildiği ve en önemli kimyasal elementin silikon olduğu bilinir. Ancak, son yıllarda Organik Elektronik olarak bilinen yeni bir araştırma bölümü ortaya çıkmaktadır. Bu teknolojiler arasındaki fark, organik diyotlar, transistörler ve sensörler gibi bazı bileşenlerin üretiminde inorganik malzemelerin yerini organik bileşiklerin almasıdır. Bu bileşiklerin ana avantajı mikroçipler ve hatta büyük esnekliğe sahip mikroişlemciler oluşturma olasılığıdır. Bir diğer önemli avantajı da, günümüzde Organik Işık Yayan Diyotlar (OLED) ekranların imalatı için kullanılan ışık yayan cihazlar yaratma yeteneğidir. Ancak, bu elektro-ışıldayan organik bileşiklerin birçoğu, ekranların imalatında uygulanmasını engelleyen geniş emisyon bantlarına sahiptir. Bu sorun, üç değerlikli nadir toprak iyonları içeren bileşiklerin kullanılmasıyla aşılabilir (Gallardo ve ark., 2011; Sabbatini ve ark., 1993). Organik ışık yayan cihazların (OLED'ler) ilk gösteriminden bu yana, OLED'leri düz panel ekranlarda ve katı hal aydınlatmalarında ticari uygulamalara getirmek için kapsamlı araştırmalar yapılmıştır (Wu ve ark., 2009).

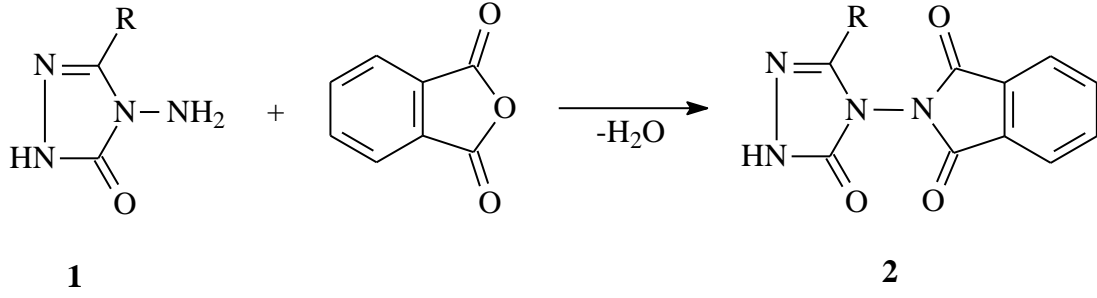
Organik elektronik cihazlar, optoelektronik özellikleri nedeniyle oldukça dikkat çekicidir. Bu cihazlar üç ana başlık altında incelenebilir. Bunlar; organik ışık yayan diyot (OLED), organik ince film transistörler (OTFT) ve organik güneş pilleri olarak sınıflandırılır. Bu cihazlar genellikle birbiri üzerine yerleştirilmiş anot-organik malzeme-katot tabakaları şeklinde yapılandırılmıştır. OLED'ler, bir elektrik akımı uygulandığında ince bir zar tabakasındaki organik moleküller aracılığıyla ışık üretebilen cihazlardır. İki metal arasına bir veya daha fazla organik yarı iletken tabaka yerleştirilerek hazırlanırlar. Hem anot hem de katot yarı geçirgen olabilir.

Elektrolüminesans sırasında ışık yayan cihaza OLED denir (Forrest, 2004; Malenfant ve ark., 2002).

Son zamanlarda heterosiklik bileşiklerle ilgili birçok literatür ortaya çıkmıştır (Bahçeci ve ark., 2016; Koç ve ark., 2020; Özbek ve ark., 2019; Öztürkkan ve ark., 2021; Öztürkkan Özbek ve ark., 2020; Sertçelik, Akbaba, ve ark., 2021; Sertçelik, Öztürkkan Özbek, ve ark., 2021; Turhan Irak & Beytur, 2019; Uğurlu & Beytur, 2020; Ulaş, 2021, 2020). Yeni heterosiklik organik bileşiklerin geliştirilmesi, chemical (Beytur & Avinca, 2021; Boy ve ark., 2021; Çiftçi ve ark., 2018; Kardas ve ark., 2016; Kotan ve ark., 2020; Turhan Irak & Beytur, 2019), iyonik veya biyolojik problemler (Beytur, 2020), kemosensörler (Wang ve ark., 2015), doğrusal olmayan optik malzemeler (Beytur ve ark., 2019; Guezguez ve ark., 2014), güneş pilleri için verimli yük taşıma ve/veya floresan malzemeler (Shirota & Kageyama, 2007), organik ışık yayan diyotlar (OLED) (Danel ve ark., 2015; Ulla ve ark., 2014; Zhang ve ark., 2015), düz panel ekranlar (Wang ve ark., 2004) ve aydınlatma teknolojileri (Sun ve ark., 2006; Zhao ve ark., 2017) gibi potansiyel floresan uygulamaları nedeniyle büyük ilgi görmüştür.

Günümüzde, Schiff bazları çok önemli organik bileşikler sınıfıdır çünkü sentezlenmeleri ve katalizörler (Gupta & Sutar, 2008), görsel pigment (Arun ve ark., 2010), kemosensör (Zhou ve ark., 2012) ve geniş bir biyolojik faaliyetler (Murthy ve ark., 2011) gibi sayısız uygulamalarla tasarlanmaları kolaydır.

Bu çalışmada kullanılan DFT (Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi) yönteminin B3LYP 6-31++G(d,p) temel seti hesaplamalarından elde edilen teorik ve simülasyon sonuçlarına göre; HOMO-LUMO enerji farklılıkları incelendiğinde, 2-[3-(metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H) arasından -il]-izoindolin-1,3-dion (Ikizler & Yüksek, 1996) moleküllerinin, optoelektronik özelliklere sahip olabilecek potansiyeli olduğu belirlendi. Bu nedenle çalışmanın optoelektronik malzemelerin elde edilmesi açısından sentetik organik kimya prosedürlerine ışık tutması beklenmektedir.



Şema 1: 2 Tipi bileşiğin sentez yöntemi; a) R= CH₃, b) R= CH₂CH₃, c) R= CH₂C₆H₄CH₃(p-)

Materyal ve Yöntem

Hesaplama Yöntemleri

Korozyon inhibitörlerinin belirlenmesinde deneysel yöntemler kadar hesaplamalı kimya yöntemleri de önemlidir. Deney yapılmadan bir inhibitörün aktivitesi bazı kuantum kimyasal verileri kullanılarak yorumlanabilir (Li ve ark., 2011). Kuantum kimyasal hesaplamaları ile organik bileşikler arasında korozyon önleyici gibi davranabilen bileşikler tasarlanabilmektedir. Korozyonla ilgili teorik çalışmalarda sıklıkla kullanılan kuantum kimyasal parametreleri atomik yükler, moleküler yörünge enerjileri ve enerji başlıkları altında toplanabilir (Karelson ve ark., 1996). Yani korozyon inhibitörlerinde moleküler aktivite, yapı ve yük gibi parametrelerin hesaplanması gerekmektedir. Molekülün olası yapısı, sterik engele veya inhibitörün metal solüsyon arayüzüne nasıl yaklaştığına biraz ışık tutabilir. Başka bir yaklaşımda, yörünge enerjilerinde ve yörünge enerjilerindeki farklılıklar, inhibitörün çevrede elektrokimyasal olarak nasıl davrandığını da gösterebilir.

Hesaplamalı kimyada ise moleküller, ab initio, yarı deneysel ve moleküler mekanik olmak üzere üç temel yöneme göre hesaplanır. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) (Kohn & Sham, 1965), Hohenberg ve Kohn tarafından teorize edilen, son 20 yılda araştırmacılar tarafından en yaygın olarak kullanılan yöntemdir. DFT, bir molekülün toplam elektron enerjisinin, o molekülün elektron yoğunluğuna bağlı olarak bulunması ilkesine dayanır.

Gaz fazındaki ve temel durumdaki moleküllerin yaklaşık geometrisi GaussView5.0 (Dennington ve ark., 2009) moleküler görüntüleme yazılımında çizildi ve Gaussian09W software (Foresman & Frisch, 1996; Frisch ve ark., 2009) yazılımında hesaplandı. Yapıların elektronik özelliklerinin daha iyi belirlenebilmesi için elektron yoğunluğunu dikkate alan ve bu elektron yoğunluğu üzerinden istenilen verileri üreten DFT yöntemi kullanıldı. Ayrıca Gaussian09W yazılımında uygun hibrit fonksiyon B3LYP 6-311G++(d,p) ve CAMB3LYP 6-

311G++(d,p) (Becke, 1996) temel setleri kullanıldı. 2-[3-(Metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-il]-izoindolin-1,3-dion (Ikizler & Yüksek, 1996) bileşikleri optimize edildi ve yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) hesabı kullanılarak ve zamana bağlı DFT (TD-DFT) yöntemi kullanılarak enerji seviyelerinin (singlet ve triplet) yerleri hesaplandı. Teorik hesaplamalarla optimize edilen moleküllerin HOMO-LUMO şekilleri elde edildi. Her molekülün HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE) ve S1 ve T1 durumları arasındaki enerji boşluğu (ΔE_{ST}) eV cinsinden hesaplandı. Sonuçlar ilgili literatürden elde edilen değerlerle karşılaştırıldı. DFT ve TD-DFT yönteminin B3LYP/6-311G++(d,p) ve camB3LYP/6-311G++(d,p) temel set hesaplamalarından teorik ve simülasyon sonuçları elde edildi.

En Yüksek Dolu Moleküler Yörünge Enerjisi (E_{HOMO}) ve En Düşük Boş Moleküler Yörünge Enerjisinden (E_{LUMO}), tüm geometri için optimize edilmiş yapılardan elektronik yapı tanımlayıcıları olan LUMO-HOMO enerji boşluğu (ΔE_{gap}), mutlak sertlik (η), mutlak yumuşaklık (σ), elektronegatiflik (χ), kimyasal potansiyel (μ), elektrofiliklik indeksi (ω), nükleofilik indeksi (ϵ) ve dipol momentini (μ) ve korozyon önleme aktivitesi ile ilişkili transfer edilen elektron fraksiyonu (ΔN) hesaplanmıştır.

Bulgular ve Tartışma

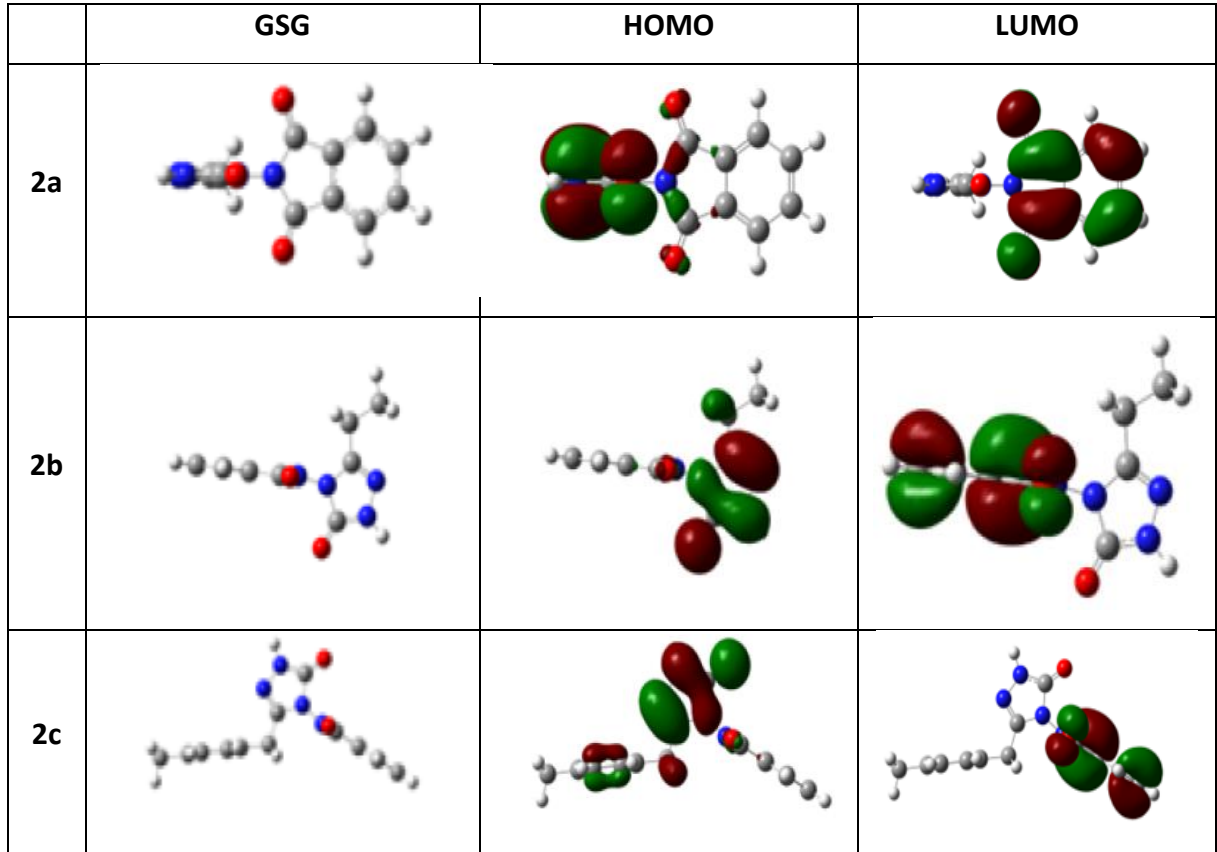
Geometrik Optimizasyon

Çalışılan tüm yapıların gaz fazı geometrisi optimizasyonları öncelikle MM2 yöntemi ve ardından yarı deneysel PM3 tutarlı moleküler orbital (SCFMO) yöntemi kullanılarak belirlendi. B3LYP/6-311G++(d,p) taban seti kullanılarak gelişmiş geometri optimizasyonları sağlandı. Her yapı için normal mod analizi, her üç hesaplama yönteminde de herhangi bir negatif frekansla sonuçlanmadı (Turhan Irak & Gumus, 2017).

Organik Elektrolüminesan Özellikleri

2-[3-(Metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-il]-izoindolin-1,3-dionların (Ikizler & Yüksek, 1996) HOMO ve LUMO dağılımları, B3LYP 6-311++G(d,p) ve CAMB3LYP 6-311++G(d,p) temel setleri (Becke, 1996) kullanılarak yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) hesaplamaları ile belirlendi. Şekil 1'de gösterildiği gibi, Tüm bileşikler için, DFT/ B3LYP 6-311G++(d,p) 'ye göre, 2a, 2b ve 2c'nin hesaplanan HOMO/LUMO enerji seviyeleri sırasıyla $-6.62/-2.96$, $-7.46/-2.94$ ve $-6.56/-2.94$ eV olarak hesaplandı. Ayrıca, TD-DFT/6-311 G++(d,p)'ye göre 2a, 2b ve 2c'nin hesaplanan B3LYP / CAM-B3LYP enerji seviyeleri sırasıyla

0.033/0.112, 0.032/0.106 ve 0.029/0.099 eV olarak belirlendi. Moleküller hesaplanan ΔE ve ΔE_{ST} değerlerine göre değerlendirildi. Bir molekülün OLED olarak kullanılabilmesi için yarı iletken özellikler sergilemesi gerekir. Yarı iletken malzemelerin ΔE değeri 0,5 ila 4,0 eV arasındadır. 2a-c bileşiklerinin hesaplanan ΔE değerleri 4 eV'nin altındadır. İkinci olarak HOMO-LUMO yörünge bölgeleri incelenmiştir. HOMO-LUMO bölgeleri birbirinden ayrılmalıdır. Değeri 0,5 eV'den küçük olan moleküller aday moleküller olarak kabul edilir.



Şekil 1. Bileşiklerin (2a-c) temel durum geometrisi (GSG), HOMO ve LUMO görünüşleri.

Tablo 1. Hesaplanan organik elektrominesans özelliklerinin sonuçları (Tüm veriler eV cinsindedir)

| | R | DFT | | | TD-DFT (ΔE_{ST}) | |
|----|--|---------------------|-------|------------|----------------------------|---------------|
| | | B3LYP/6-311G++(d,p) | | | B3LYP | CAM-B3LYP |
| | | HOMO | LUMO | ΔE | 6-311G++(d,p) | 6-311G++(d,p) |
| 2a | -CH ₃ | -6,62 | -2,96 | 3,66 | 0,033 | 0,112 |
| 2b | -CH ₂ CH ₃ | -7,46 | -2,94 | 4,52 | 0,032 | 0,106 |
| 2c | -CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃ | -6,56 | -2,94 | 3,62 | 0,029 | 0,099 |

Elektronik Parametreler

İncelenen moleküllerin Gauss çıktı dosyasından elde edilen elektronik yapıya bağlı 1H-1,2,4-triazol-4(5H)-yl]-izoindolin-1,3-dion türevlerinin elektronik yapılarından türetilen parametreler En Yüksek Dolu Moleküler Yörünge Enerjisi (E_{HOMO}), En Düşük Boş Moleküler Yörünge Enerjisinden (E_{LUMO}) elde edilmiştir [43]. LUMO-HOMO enerji aralığı (ΔE_{gap}), mutlak sertlik (η), mutlak yumuşaklık (σ), elektronegatiflik (χ), kimyasal potansiyel (Π), elektrofiliklik indeksi (ω), nükleofilik indeksi (ϵ) ve dipol momentin (μ) gibi elektronik özellikler incelenmiştir.

Koopman teoremine göre, herhangi bir kimyasal türün E_{HOMO} ve E_{LUMO} değerleri, iyonlaşma enerjisi ve elektron afinite (Koopmans, 1934; Sastri & Perumareddi, 1997), Enerji boşluğu (ΔE_{gap}) (Jesudason ve ark., 2009), mutlak sertlik (η) (Gökce & Bahçeli, 2011), mutlak yumuşaklık (σ) (Arivazhagan & Subhasini, 2012) elektronegatiflik (χ) ve kimyasal potansiyel (Π) (Masoud ve ark., 2012) değerleri ile ilişkilidir ve aşağıdaki şekilde hesaplanabilir. Elektrofiliklik indeksi (ω), verici ve alıcı arasındaki maksimum elektron akışından kaynaklanan enerji tükenmesinin bir ölçüsüdür (Kiyooka ve ark., 2013). Denklem 8'deki gibi verilmiştir. Yeni bir moleküler yapı tanımlayıcısı olan nükleofilik indeksi (ϵ) (Pearson, 1988) denklemdeki gibi hesaplanır.

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

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

$$\Delta E = (E_{LUMO} - E_{HOMO}) \quad (3)$$

$$\eta = (I - A) / 2 \quad (4)$$

$$\sigma = 1/\eta \quad (5)$$

$$\chi = (I + A) / 2 \quad (6)$$

$$P_i = -\chi \quad (7)$$

$$\omega = P_i^2 / 2\eta \quad (8)$$

$$\varepsilon = P_i \times \eta \quad (9)$$

Tablo 2. 1H-1,2,4-triazol-4(5H)-yl]-izoindolin-1,3-dion türevlerinin elektronik özellikleri (Tüm veriler eV cinsindedir).

| Comp. | 2a | 2b | 2c |
|---------------|------------------|----------------------------------|--|
| Subst. | -CH ₃ | -CH ₂ CH ₃ | -CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃ |
| I | 6.620 | 7.461 | 6.560 |
| A | 2.961 | 2.939 | 3.619 |
| ΔE | 3.660 | 4.422 | 2.941 |
| σ | 0.0025 | 0.0031 | 0.0020 |
| χ | 4.790 | 5.200 | 5.900 |
| ε | 4.0462 | 3.2744 | 5.0344 |
| ω | 0.0283 | 0.0413 | 0.0257 |
| P_i | -4.790 | -5.200 | -5.900 |
| η | 1.830 | 2.261 | 1.471 |

Sonuç

Bu çalışmada, moleküller, hesaplanan ΔE ve ΔE_{ST} değerlerine göre değerlendirilmiştir. Bir molekülün OLED olarak kullanılabilmesi için yarı iletken özellikler sergilemesi gerekir. Yarı iletken malzemelerin ΔE değeri 0,5 ila 4,0 eV arasındadır. 2a ve 2c'nin hesaplanan ΔE değerleri 4 eV'nin altındadır. İkinci olarak HOMO-LUMO yörünge bölgeleri incelenmiştir. Moleküllerin HOMO-LUMO bölgeleri birbirinden belirlenmiştir. Son olarak, EST değeri 0,5 eV'den düşük olan moleküller, aday moleküller olarak kabul edilir. İncelenen bileşikler arasında, 2b bileşiği HOMO-LUMO enerjileri, ΔE ve ΔE_{ST} verileri olarak yarı iletkenlik özelliği açısından 2a ve 2c bileşiğinden daha iyi olduğu belirlenmiştir.

Kaynaklar

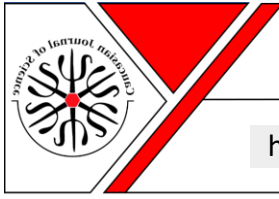
- Arivazhagan, M., & Subhasini, V. P. (2012). Quantum chemical studies on structure of 2-amino-5-nitropyrimidine. *Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 91, 402–410. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2012.02.018>
- Arun, V., Mathew, S., Robinson, P. P., Jose, M., Nampoory, V. P. N., & Yusuff, K. K. M. (2010). The tautomerism, solvatochromism and non-linear optical properties of fluorescent 3-hydroxyquinoxaline-2-carboxalidine-4-aminoantipyrine. *Dyes and Pigments*, 87(2), 149–157. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2010.03.012>
- Bahçeci, Yıldırım, N., Gürsoy-Kol, Manap, S., Beytur, M., & Yüksek, H. (2016). Synthesis, characterization and antioxidant properties of new 3-alkyl (Aryl)-4-(3-hydroxy-4-methoxy-benzylidenamino)-4,5-dihydro-1h-1,2,4-triazol-5-ones. *Rasayan Journal of Chemistry*, 9(3), 494–501.
- Becke, A. D. (1996). Density-functional thermochemistry. IV. A new dynamical correlation functional and implications for exact-exchange mixing. *Journal of Chemical Physics*, 104(3), 1040–1046. <https://doi.org/10.1063/1.470829>
- Beytur, M. (2020). Fabrication of Platinum Nanoparticle/Boron Nitride Quantum Dots/6-Methyl-2-(3-hydroxy-4-methoxybenzylidenamino)-benzothiazole (ILS) Nanocomposite For Electrocatalytic Oxidation of Methanol. *Journal of the Chilean Chemical Society*, 65(3), 4929–4933. <https://doi.org/10.4067/s0717-97072020000204929>
- Beytur, M., & Avinca, I. (2021). Molecular, Electronic, Nonlinear Optical and Spectroscopic Analysis of Heterocyclic 3-Substituted-4-(3-methyl-2-thienylmethyleneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones: Experiment and DFT Calculations. *Heterocyclic Communications*, 27(1), 1–16. <https://doi.org/doi:10.1515/hc-2020-0118>
- Beytur, M., Turhan Irak, Z., Manap, S., & Yüksek, H. (2019). Synthesis, characterization and theoretical determination of corrosion inhibitor activities of some new 4,5-dihydro-1H-1,2,4-Triazol-5-one derivatives. *Heliyon*, 5(6). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e01809>
- Boy, S., Türkan, F., Beytur, M., Aras, A., Akyıldırım, O., Karaman, H. S., & Yüksek, H. (2021). Synthesis, design, and assessment of novel morpholine-derived Mannich bases as multifunctional agents for the potential enzyme inhibitory properties including docking study. *Bioorganic Chemistry*, 107, 104524. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2020.104524>
- Çiftçi, E., Beytur, M., Calapoğlu, M., Gürsoy-Kol, Ö., Alkan, M., Toğay, A., Manap, S., & Yüksek, H. (2018). Synthesis, Characterization, Antioxidant and Antimicrobial Activities and DNA Damage of Some Novel 2-[3-alkyl (aryl)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one-4-yl]-phenoxyacetic acids in Human Lymphocytes. *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*, 9, 1760–1771.
- Danel, A., Chacaga, Ł., Uchacz, T., Pokladko-Kowar, M., Gondek, E., Karasiński, P., & Sahraoui, B. (2015). Solution processable double layer organic light emitting diodes (OLEDs) based on 6- N , N -arylsubstituted-1 H -pyrazolo[3,4- b]quinolines . *Advanced Device Materials*, 1(1), 17–22. <https://doi.org/10.1179/2055031614y.0000000004>
- Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). *GaussView, Version 5*, (Version 5).

- Foresman, J. B., & Frisch, A. (1996). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods Gaussian* (2nd editio).
- Forrest, S. R. (2004). The path to ubiquitous and low-cost organic electronic appliances on plastic. *Nature*, 428(6986), 911–918. <https://doi.org/10.1038/nature02498>
- 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., & Sonnenbe, D. J. (2009). *Gaussian 09* (Revision E).
- Gallardo, H., Conte, G., Bortoluzzi, A. J., Bechtold, I. H., Pereira, A., Quirino, W. G., Legnani, C., & Cremona, M. (2011). Synthesis, structural characterization, and photo and electroluminescence of a novel terbium(III) complex: {Tris(acetylacetonate) [1,2,5]thiadiazolo[3,4-f][1,10]phenanthroline}terbium(III). *Inorganica Chimica Acta*, 365(1), 152–158. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ica.2010.09.003>
- Gökce, H., & Bahçeli, S. (2011). A study on quantum chemical calculations of 3-, 4-nitrobenzaldehyde oximes. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 79(5), 1783–1793. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.saa.2011.05.057>
- Guezguez, I., Ayadi, A., Ordon, K., Iliopoulos, K., Branzea, D. G., Migalska-Zalas, A., Makowska-Janusik, M., El-Ghayoury, A., & Sahraoui, B. (2014). Zinc Induced a Dramatic Enhancement of the Nonlinear Optical Properties of an Azo-Based Iminopyridine Ligand. *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(14), 7545–7553. <https://doi.org/10.1021/jp412204f>
- Gupta, K. C., & Sutar, A. (2008). Catalytic Activities of Schiff Base Transition Metal Complexes. *Coordination Chemistry Reviews*, 252, 1420–1450. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2007.09.005>
- Ikizler, A.A., & Yüksek, R. (1996). Reactions of ester ethoxycarbonylhydrazones with some amine type compounds. *Revue Roumaine de Chimie*, 41(7), 585–590.
- Jesudason, E. P., Sridhar, S. K., Malar, E. J. P., Shanmugapandiyam, P., Inayathullah, M., Arul, V., Selvaraj, D., & Jayakumar, R. (2009). Synthesis, pharmacological screening, quantum chemical and in vitro permeability studies of N-Mannich bases of benzimidazoles through bovine cornea. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 44(5), 2307–2312. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2008.03.043>
- Kardas, F., Manap, S., Gürsoy-Kol, Ö., Beytur, M., & Yüksek, H. (2016). Synthesis and antioxidant properties of some 3-Alkyl(Aryl)-4-[3-ethoxy-2-(4- toluenesulfonyloxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones. *Der Pharma Chemica*, 8(18), 274–281.
- Karelson, M., Lobanov, V. S., & Katritzky, A. R. (1996). Quantum-Chemical Descriptors in QSAR/QSPR Studies. *Chemical Reviews*, 96(3), 1027–1044. <https://doi.org/10.1021/cr950202r>
- Kiyooka, S., Kaneno, D., & Fujiyama, R. (2013). Parr's index to describe both electrophilicity and nucleophilicity. *Tetrahedron Letters*, 54, 339–342. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2012.11.039>
- Koç, E., Yüksek, H., Beytur, M., Akyildirim, O., Akçay, M., Beytur, C., Üniversitesi, K., Fakültesi, M. M., & Bölümü, B. (2020). *Araştırma Makalesi / Research Article Heterosiklik 4, 5-dihidro-1 H -1, 2, 4-triazol-5- on Türevinin Antioksidan Özelliğinin Erkek Ratlarda (Wistar albino) İn vivo Olarak Belirlenmesi In vivo Determination of Antioxidant Properties of Heterocyclic 4 . 9(2)*, 542–548.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.*, 140(4A), A1133--A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

- Koopmans, T. (1934). Über die Zuordnung von Wellenfunktionen und Eigenwerten zu den Einzelnen Elektronen Eines Atoms. *Physica*, 1(1), 104–113. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(34\)90011-2](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0031-8914(34)90011-2)
- Kotan, G., Gökçe, H., Akyıldırım, O., Yüksek, H., Beytur, M., Manap, S., & Medetalibeyoğlu, H. (2020). Synthesis, Spectroscopic and Computational Analysis of 2-[(2-Sulfanyl-1H-benzo[d]imidazol-5-yl)iminomethyl]phenyl Naphthalene-2-sulfonate. *Russian Journal of Organic Chemistry*, 56(11), 1982–1994. <https://doi.org/10.1134/S1070428020110135>
- Li, X., Deng, S., & Fu, H. (2011). Three pyrazine derivatives as corrosion inhibitors for steel in 1.0M H₂SO₄ solution. *Corrosion Science*, 53, 3241–3247. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2011.05.068>
- Malenfant, P. R. L., Dimitrakopoulos, C. D., Gelorme, J. D., Kosbar, L. L., Graham, T. O., Curioni, A., & Andreoni, W. (2002). N-type organic thin-film transistor with high field-effect mobility based on a N,N'-dialkyl-3,4,9,10-perylene tetracarboxylic diimide derivative. *Applied Physics Letters*, 80(14), 2517–2519. <https://doi.org/10.1063/1.1467706>
- Masoud, M. S., Ali, A. E., Shaker, M. A., & Elsalala, G. S. (2012). Synthesis, computational, spectroscopic, thermal and antimicrobial activity studies on some metal-urate complexes. *Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 90, 93–108. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2012.01.028>
- Murthy, Y. L. N., Karthikeyan, N., Boddeti, G., Diwakar, B. S., & Singh, E. R. (2011). Design, synthesis and in vitro antibacterial activities of methyl-4-((substituted phenyl) [6H-indolo (2,3-b)quinoxalin-6-yl]methyl-amino) benzoate derivatives. *Chinese Chemical Letters*, 22(5), 567–570. <https://doi.org/10.1016/j.ccllet.2010.10.055>
- Özbek, F. E., Sertçelik, M., Yüksek, M., Uğurlu, G., Tonbul, A. M., Necefoğlu, H., & Hökelek, T. (2019). Synthesis and Crystallographic, Absorption and Emission Studies of 4-Pyridine Carboxamide of Zn(II) 4-Chlorophenylacetate. *Journal of Fluorescence*, 29(5), 1265–1275. <https://doi.org/10.1007/s10895-019-02440-x>
- Öztürkkan, F. E., Sertçelik, M., Yüksek, M., Necefoğlu, H., & Hökelek, T. (2021). Hirshfeld surface analysis, interaction energy calculations of metal (II)4-cyanobenzoate with nicotinamide/N,N'-diethylnicotinamide complexes. *Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry*, 8(1), 125–136. <https://doi.org/10.18596/jotcsa.824551>
- Öztürkkan Özbek, F. E., Sertçelik, M., Yüksek, M., Elmalı, A., & Şahin, E. (2020). The superiority of the classical synthesis compared to the hydrothermal synthesis upon the structural, optical absorption and fluorescent properties of new Cd(II) 3-fluorobenzoate complexes with Pyridine-3-carboxamide/Pyridine-3-carboxylate. *Inorganica Chimica Acta*, 509, 119694. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.119694>
- Pearson, R. G. (1988). Absolute electronegativity and hardness: application to inorganic chemistry. *Inorganic Chemistry*, 27(4), 734–740. <https://doi.org/10.1021/ic00277a030>
- Sabbatini, N., Guardigli, M., & Lehn, J.-M. (1993). Luminescent lanthanide complexes as photochemical supramolecular devices. *Coordination Chemistry Reviews*, 123(1), 201–228. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0010-8545\(93\)85056-A](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0010-8545(93)85056-A)
- Sastri, V. S., & Perumareddi, J. R. (1997). Molecular Orbital Theoretical Studies of Some Organic Corrosion Inhibitors. *Corrosion (Houston)*, 53(8), 617–622. <https://doi.org/10.5006/1.3290294>

- Sertçelik, M., Akbaba, G. B., & Öztürkkan, F. E. (2021). *Kobalt (II) ve Çinko (II) 4-Florobenzoatın 3-Hidroksipiridin Komplekslerinin Sentezi, Spektroskopik ve Sitotoksik Özellikleri. Ii*, 0–2.
- Sertçelik, M., Öztürkkan Özbek, F. E., Taslimi, P., Necefoglu, H., & Hökelek, T. (2021). Supramolecular complexes of Ni (II) and Co (II) 4-aminobenzoate with 3-cyanopyridine: Synthesis, spectroscopic characterization, crystal structure, and enzyme inhibitory properties. *Applied Organometallic Chemistry*, 35(5), 1–10. <https://doi.org/10.1002/aoc.6182>
- Shirota, Y., & Kageyama, H. (2007). Charge Carrier Transporting Molecular Materials and Their Applications in Devices. *Chemical Reviews*, 107(4), 953–1010. <https://doi.org/10.1021/cr050143+>
- Sun, Y., Giebink, N. C., Kanno, H., Ma, B., Thompson, M. E., & Forrest, S. R. (2006). Management of singlet and triplet excitons for efficient white organic light-emitting devices. *Nature*, 440(7086), 908–912. <https://doi.org/10.1038/nature04645>
- Turhan Irak, Z., & Beytur, M. (2019). Theoretical Study on The Investigation of Antioxidant Properties of Some 4-Benzylidenamino-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Derivatives. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 9(1), 512–521. <https://doi.org/10.21597/jist.481990>
- Turhan Irak, Z., & Gumus, S. (2017). *Heterotricyclic Compounds Computational Study Click Reaction : 01(07)*, 80–89.
- Uğurlu, G., & Beytur, M. (2020). Theoretical studies on the structural, vibrational, conformational analysis and nonlinear optic property of 4-(methoxycarbonyl)-phenylboronic acid. *Indian Journal of Chemistry -Section A (IJC-A)*, 59(10), 1504–1512.
- Ulaş, Y. (2020). *Experimental and Theoretical Studies of 2- (naphthalen-1-yl (piperidin-1-yl) methyl) phenol Compound. Journal of the Chemical Society of Pakistan*, 42(06), 818–826.
- Ulaş, Y. (2021). Investigation of the relationship between the substituent and nonlinear optical properties in 2-(Phenyl ((4-Vinylphenyl)Amino) Methyl)phenol derivative compounds by DFT method. *Journal of the Chemical Society of Pakistan*, 43(3), 271–277.
- Ulla, H., Raveendra Kiran, M., Garudachari, B., Satyanarayan, M. N., Umesh, G., & Isloor, A. M. (2014). Blue emitting halogen–phenoxy substituted 1,8-naphthalimides for potential organic light emitting diode applications. *Optical Materials*, 37, 311–321. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.optmat.2014.06.016>
- Wang, G., Qin, J., Li, C.-R., & Yang, Z. (2015). A highly selective fluorescent probe for Al³⁺ based on quinoline derivative. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 150, 21–25. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.saa.2015.05.041>
- Wang, Y., Teng, F., Ma, C., Xu, Z., Hou, Y., Yang, S., Wang, Y., & Xu, X. (2004). Green to white to blue OLEDs by using PBD as a chromaticity-tuning layer. *Displays*, 25(5), 237–239. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.displa.2004.09.016>
- Wu, C., Djurovich, P., & Thompson, M. (2009). Study of Energy Transfer and Triplet Exciton Diffusion in Hole-Transporting Host Materials. *Advanced Functional Materials*, 19, 3157–3164. <https://doi.org/10.1002/adfm.200900357>
- Zhang, X., Guo, X., Chen, Y., Wang, J., Lei, Z., Lai, W., Fan, Q., & Huang, W. (2015). Highly efficient red

- phosphorescent organic light-emitting devices based on solution-processed small molecular mixed-host. *Journal of Luminescence*, 161, 300–305. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2015.01.035>
- Zhao, J., Wang, Z., Wang, R., Chi, Z., & Yu, J. (2017). Hybrid white organic light-emitting devices consisting of a non-doped thermally activated delayed fluorescent emitter and an ultrathin phosphorescent emitter. *Journal of Luminescence*, 184, 287–292. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2016.11.067>
- Zhou, Y., Li, Z.-X., Zang, S.-Q., Zhu, Y.-Y., Zhang, H.-Y., Hou, H.-W., & Mak, T. C. W. (2012). A novel sensitive turn-on fluorescent Zn²⁺ chemosensor based on an easy to prepare C₃-symmetric Schiff-base derivative in 100% aqueous solution. *Organic Letters*, 14(5), 1214–1217. <https://doi.org/10.1021/ol2034417>



Thermal Camera Use for Evaluation of Patients and Injured in Chemical, Biological, Radiological, Nuclear Events

Çağatay KADIRSOY¹, Gökhan NUR², Hüseyin KAFADAR³

Makalenin Alanı: Sağlık Bilimleri, Mühendislik

| Makale Bilgileri | Öz |
|--|---|
| Geliş Tarihi 08.12.2021 | <p>Kimyasal, Biyolojik, Radyolojik ve Nükleer (KBRN) sahaları, niteliği bakımından oldukça çeşitli riskler barındırmaktadır. Kimyasal, biyolojik, radyolojik ve nükleer tehditler ayrı ayrı riskler oluşturabildiği gibi komplike riskler de oluşturabilmektedir. Bu sebeple olası bir KBRN kazası veya afeti durumunda olay yerinde oluşabilecek riskler tespit edilmeden olay yerine girilmesi mümkün olamamaktadır. Bu durumda olay yerindeki risklerin tespiti için geçen süre uzun olmakta ve süre boyunca hiçbir ekip olay yerine girerek bilgi ve müdahale şansı bulamamaktadır. Bu çalışmada özellikle KBRN sahaları gibi girilmesi güvenli olmayan sahalarda olabilecek olgularda, olay yerindeki vakaların genel sağlık durumunun tespiti için termal kamera ile durum tespiti yapılabilmesi üzerine çalışılmaktadır. Ulaşılması güç veya yüksek tehlikeli alanlardaki (KBRN sahaları) olgularda, olay yeri hakkında yaşayan birey ve yaralanan durumu gibi bilgilerin alınması ihtiyacının olduğu ve olmaya devam edeceği açıktır. Bu çalışmada yaşamsal bulgulardan, birden çok kişiye aynı anda uygulanabilirliği ve temassız tespit edilebilirliği gibi avantajlarıyla beraber termal kameraların insansız hava araçlarına entegre bir biçimde kullanılabilmesi sebebiyle vücut ısısı yani ateş ölçümü üzerine odaklanılmıştır. Bununla birlikte elde edilen görüntüler üzerinde otonom analiz teknikleri üzerine çalışılmıştır. Çalışmamız kapsamında KBRN olgularında vücut ısısı üzerinden yaşam bulgusu ve etkilenme seviyesi değerlendirmesi amacıyla termal kameraların nasıl kullanılabileceği üzerine bir ön çalışma yapılmıştır.</p> |
| Kabul Tarihi 29.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Derin öğrenme Kızılötesi Termografi Termogram Ateş | |

| Article Info | Abstract |
|---|---|
| Received 08.12.2021 | <p>Chemical, Biological, Radiological, Nuclear (CBRN) areas contain various risks due to their structure. Chemical, biological, radiological, and nuclear threats can create separate or combined risks. For this reason, it is not possible to enter the scene safely without detecting the risks that may occur in a possible CBRN accident or disaster. Since the risk assessment in the incident area takes a long time, no team can enter the scene and find information and intervention until the risk assessment is done.</p> <p>In this article, it is studied the determination of the general health status of people in hazardous CBRN zones via a thermal camera. It is obvious that there is a continuous need to obtain information about the scene of the incident such as the alive, sick, and injured people in the situation of hard-to-reach and highly hazardous CBRN areas. In addition, autonomous analysis techniques were studied on the obtained images.</p> <p>In this study, it is focused on the determination of health status according to body temperature measurement, which is one of the vital signs, by the advantages of applying to more than one person without contact provided by thermal cameras integrated into a UAV. In addition, autonomous analysis techniques were studied on the</p> |
| Accepted 29.12.2021 | |
| Keywords Deep Learning Infrared Thermography Thermogram Feverly | |

¹ İskenderun Teknik Üniversitesi KBRN Tehditleri Yönetimi- Hatay; e-mail: cagataykadirsoy@gmail.com; ORCID: 0000-0002-8587-7826

² İskenderun Teknik Üniversitesi Biyomedikal Mühendisliği- Hatay; e-mail: gokhan.nur@iste.edu.tr; ORCID: 0000-0002-5861-8538

³ Adıyaman Üniversitesi Tıp Fakültesi Dahili Tıp Bil.- Adıyaman; e-mail: hkafadar@adiyaman.edu.tr; ORCID: 0000-0002-6844-7517

obtained images. Within the scope of the study, a preliminary study was implemented on how thermal cameras can be used to evaluate vital signs in CBRN cases and to evaluate exposure levels according to body temperature.

Introduction

Today, vital signs can be easily observed with current technologies in disasters and emergencies where many people are affected. As it is known, the first step in all disaster and emergency cases, scene safety comes first in the response process. Also, considering the chemical, biological, radiological, and nuclear threats, it is extremely important how to treat people exposed to the incident. In this case, it is extremely important to get information about the general health condition of the people exposed to the incident and determine how many people were affected as sick or injured by the CBRN incident and calculate the probability of survival (Richard et al., 2013).

In this study, the approach of collecting the local or general body temperature data of affected people is proposed to understand the damage caused by CBRN threats. According to this approach, the possibility of determining the health condition of the affected people is studied by analyzing the data obtained from the thermal camera images.

The main purpose of the study is to put a preliminary study on the effect of thermal cameras for obtaining vital signs in various CBRN incidents. Crime scene safety is achieved quickly in many cases but in CBRN situations it is difficult to ensure (AFAD, 2021). The main reason is CBRN incidents are complex cases. Many CBRN research and application studies in the fields of industry, energy, and health have indirectly increased the probability of accidents. The accidents that occurred during these studies have taken a place in memory as they have caused many fatal disasters in the history of the world (Ekşi, 2016). It must keep in mind that CBRN agents can be used as weapons of war or for terrorist purposes. Expanding impact areas and successional CBRN reactions may occur in CBRN attacks or CBRN disasters (Sarı and Seyhan, 2012; Marsella and Sciarretta, 2018).

For this reason, a contactless, non-invasive, and remotely controllable analysis technique compared to existing measurement technologies was deemed necessary to evaluate the conditions of people in CBRN events. In this manner, the usability of the thermography method relating to body temperature data for vital sign detection has been investigated.

Body Temperature (Fever)

Since the earliest times, body temperature has been seen as one of the most basic vital signs. The main reason is body temperature has a quite wide etiology. It appears as the main variable in many cases such as inflammatory (infectious) diseases, various enzyme and hormonal changes in endocrinology, chemical agent or drug use, radiation absorption, and death. Body temperature changes observe most effectively on the skin. Body temperature change has been observed most effectively on the skin. The body temperature causes radiation emitted from the skin and the radiation level can be measured by infrared spectroscopy. (Ring et al., 2010).

Body temperature variability in CBRN circumstances

According to analysis, it is observed that CBRN agents caused direct or indirect variability in body temperature. It is known that most biological infectious agents increase body temperature (Erkekoğlu and Koçer, 2018). In addition, the direct effects of radiation in radiological incidents on body temperature are known. In nuclear incidents, a specific increase occurs in body temperatures according to the ambient temperature rise due to radiation (Ayan and Dönmez, 2018). Chemical agents cause various reactions on the body and indirectly cause changes in body temperature (Ganesan et al., 2010).

Mass deaths are one of the most negative situations that may happen in CBRN incidents. It is especially important to get information about the number of dead and alive in the CBRN area. In a death situation, the metabolic activities gradually decrease and stop. Thermal cameras provide highly specific life-saving information in this field.

Due to the wide etiology of body temperature, it is difficult to determine what kind of CBRN agent caused the body temperature change. For this reason, it is hard to make a definite diagnosis based on body temperature. However, detecting the common body temperature variability will strengthen the assumption of influence and simplify the elimination of misdiagnoses. For this reason, observation with a thermal camera in CBRN incidents is promising as it saves time by performing collective analysis.

Infrared radiation and human infrared

Electromagnetic radiation waves cover a very wide range of wavelengths and frequencies between gamma rays and radio waves. The infrared spectrum represents the part

after visible light in the region of non-ionizing radiation. The wavelength of infrared radiation is 0.75-1000 μm (micrometers) (Gade and Moeslund, 2014; Balcı and Sensoy, 2004).

Every object above zero temperature emits a specific infrared wave. The wavelength, and frequency of the emitted infrared radiation change in direct proportion with object temperature. Although this wide range of radiation, the infrared waves emitted by a normal person are in a very narrow range of 8 -12 μm . So, thermal images can provide distinctive data (Psokoski, 2000; Usamentiaga et al., 2014).

Thermal infrared cameras and their usage areas

Thermal imaging studies were first started on night vision in the USA in the 1940s. Studies have progressed day by day and had been used in many fields, up to today's modern thermography technique (Gade and Moeslund, 2014). A thermal infrared camera detects infrared waves emitted by an object and converts them into electronic signals and creates thermal images. While the thermal images are defined as thermograms, the name of this technique is defined as infrared thermography (IRT) (Usamentiaga et al., 2014).

Infrared thermography has many advantages:

1. IRTs are non-contact thermometers: there is no need to contact the heat source for measurement. In this way, extremely hot objects, or dangerous products such as acids can be safely measured and keep the user out of danger.
2. IRT provides two-dimensional thermal images that users can make comparisons between target areas.
3. IRT quickly scans stationary targets, fast-moving targets and compares rapidly changing thermal patterns.
4. IRT has no harmful radiation effects like X-ray imaging technology has. It is suitable for long-term and repeated use.
5. IRT is a non-invasive and painless technique. There is no interventional interference with the target in any way (Speakman and Ward, 1998).

One of the most critical areas of use of thermal cameras is human thermal imaging. The infrared thermal imaging studies were first found for night vision purposes in the 1940-1950s, human use studies started in 1963. The first infrared thermograms appeared in the black and white format (Barnes, 1963).

Infrared thermography (IRT) is a fast, passive, and non-invasive technique compared to other techniques. The biggest advantage of body temperature analysis with a thermal camera is thermal cameras do not need to focus on a single point. Thus, body temperature obtained according to thermal image can give an idea about a large part or all the body. Body temperature distribution can be seen as an inhomogeneous color map in thermal camera measurements. The main reason is the various parts of the body are at different temperatures and their surface areas are variable. For this reason, when there is a local temperature increase, a color change is also observed in the thermal camera. Other advantages are, thermal cameras are not affected by the skin color of humans, produce thermal images independently of daylight, and capture images on a large group of people at the same time (Ivanescu and Ciupitu, 2010; Tkáčová et al., 2011).

Considering the latest technologies, the use of special thermal infrared imagers in the medical field is increasing day by day. It is used successfully in the field, especially in the detection of cancer types, diabetes, neuropathy, peripheral vascular disorders, and many similar diseases, and it can also be used in research such as the variables of activity result and the investigation of body comfort (Ivanescu and Ciupitu, 2010; Jackers, 2014).

Today, advanced thermal imaging devices with high sensitivity are being developed and used, especially in the medical field. The human body is variable in terms of vascular structure, muscle distribution, distribution of joints, skin thickness, regions of organs, and endocrinological factors that cause temperature differences in terms of body regions apart from various illnesses. Due to this variability, body temperature is not distributed homogeneously. For this reason, very distinctive features are observed in terms of color distribution in human thermography (Lahiri et al., 2012).

Use of thermal camera in disaster or accident situations

Firefighters, search and rescue personnel, emergency medical personnel, and security units can benefit from the use of thermal cameras in case of an accident or disaster (Doherty and Rudol 2008). The main reason is thermal cameras can be used in many areas such as scene security, number, and location of the sick and injured people, emergency classification of the sick and injured people (Amon et al., 2005). Many field examples can be given such as remotely detecting casualties in a large area, detecting overheated areas, making risk analysis in the crisis area, using night vision feature for search and rescue in a dark area, detecting

general information of health condition of people, disease diagnosis, and eliminating misdiagnoses. (Amon et al., 2005; Doherty and Rudol 2008).

Although thermal cameras are a very efficient technology on their own, they can be used in combination with various robotic systems according to the characteristics of the research field today (Lock and Amon, 2008). Images taken from the thermal camera can be instantly transferred to long distances via mobile network systems. The location tracking can be made via GPS systems. In the search and rescue field, thermal cameras integrated onto UAVs and combined with a mobile network system and GPS system are used. (Amon and Lock, 2008; Rodin et al., 2018). Unmanned aerial vehicles (UAVs) are defined as reusable motorized aircraft that can be remotely controlled autonomously or semi-autonomously without a manned pilot, depending on the task to be performed, and that perform special tasks in the atmosphere or outside for a certain period, with different loads depending on their characteristics (Blyenburgh Van, 1999). It offers very economical and practical solutions to affordable prices, especially due to its remote-control capability.

Another technology is the smartphones with thermal camera features, as well as thermal cameras with the ability to connect to phones with simple interfaces (Rodin at al., 2018). In this way, the use of thermal cameras in the relevant field has become extremely easy and accessible. In addition, today's technology works on the processing and classification of images. Through the help of software, people detection, counting, and situation analysis can make simultaneously (Lee et al., 2015). In this way, automatic thermal image analysis becomes possible with remotely controlled UAVs in case of disasters and CBRN incidents. Its usability is promising especially in dangerous situations where incident scene safety cannot be provided. The research has been done on the use of thermal cameras in the CBRN field, and it is concluded that deep learning studies with thermographic data in CBRN fields will yield successful results (Nguyen et al., 2017; Arora and Singh, 2020).

Global difficulties for thermal camera use in CBRN field

Infrared Thermography is a sensitive measurement technique due to its structure. Working with Infrared Thermography, it is necessary to consider many factors that affect the interpretation of thermographic data, so the results are consistent and meet validation parameters. These factors are divided into three main groups as environmental factors, individual factors, and technical factors (Quintana and Sillero, 2015).

Environmental factors are related to the environment in which the measurement is made. These are ambient size, ambient temperature, relative humidity, atmospheric pressure, and ambient radiation level. The ambient size should be wide enough to meet the factors such as the distance and angle required to take the image. Ambient temperature, atmospheric pressure, and relative humidity level affect the body temperature of living objects in the environment. The ambient radiation intensity also should not be ignored, as the radiation level can both increase the temperature of the living thing and degrade the infrared wavelength (Shterenshis, 2017).

Individual factors are gender, age, anatomical features (height, weight), physiological characteristics (metabolism rate, hormonal status, skin blood supply level), circadian rhythm (the amount of heat exchange between various times of the day), hair density, skin emission, medical condition (genetic factors, food intake status, drug intake, use of various chemicals). It should be considered that most of these factors can influence body temperature, as well as the clarity of the thermal image. Technical factors are accuracy, reliability, technical protocols, distance vision capability, camera position and angle, camera features (temperature range, resolution, margin of error) (Shterenshis, 2017).

To standardize these factors, the University of Glamorgan has prepared the Glamorgan protocol as a standardization that will form the basis for medical thermography. Although it may seem complex to have so many variables for thermal imaging, it should be considered during studies (Ammer, 2008).

Conclusion

In this study, new techniques were discussed to obtain information on the overall level of exposure, number of dead and alive, or to make a preliminary assessment in terms of exposure in a CBRN event. The focus of the study is the Infrared Thermal Imaging (IRT) technique via body temperature for non-contact, non-invasive, simultaneous measurement, and simultaneous scanning of a group of people.

Body temperature is one of the basic vital signs with a wide etiology. It is obvious that many diseases, physiological variables, and death status influence body temperature. In this study, a detailed literature review has been made over body temperature changes that occurred in CBRN instances (Uzun, 2007; Ring et al., 2010). The technical study could not be performed due to the difficulty of finding samples affected by CBRN agents. When previous

studies were investigated, it is observed that chemical agents, especially nerve agents and some capacity-disrupting agents, directly affect body temperature. And caustic, turmoil control, and suffocating agents indirectly affect body temperature in both the short and long term (Ganesan et al., 2010; Clark, 1979). In biological agent exposure, despite the effects has not seen quickly, it is observed that all infectious microorganisms can cause changes in body temperature (Erkekoğlu and Koçer, 2018; Kılıç, 2006). It has been observed that the body temperature rises in direct proportion with the absorption of radiation in radioactive events or in acute radiation syndrome. In nuclear incidents, it is found that body temperature changes are observed in proportion to the radiation emission to the environment (Ayan and Dönmez, 2018; Özcan and Topçuoğlu, 2008). More increase has been observed in body temperature in the CBRN area that is exposure to chemical agents, biological agents, or radiation. As an example, in choking agents, an increase in temperature in the chest due to lung infection is expected, while in caustic agents, the temperature increase is expected more in the face area where the mucosa density is more. Biological agents also cause a predominant increase in temperature in the infected tissues. It is observed that this situation caused a change in the non-homogeneous distribution of normal body temperature.

In the rest of the study, body temperature measurement technologies were investigated, and research was made on the usability of the Infrared Thermal Imaging (IRT) technique in CBRN events. The advantages of infrared thermal cameras indicate the various level of body temperature in assorted colors, the simultaneous analysis of a whole part of the body or a large group of people, and the applicability of autonomous image processing and classification techniques with deep learning, which is an area of artificial intelligence, were considered and the infrared thermography technique was recommended. By the infrared thermography method, the body temperature change and the body temperature distribution can be analyzed. The thermogram image of the body under normal conditions and under the presence of the CBRN agents can be compared for differences (Ivanescu and Ciupitu, 2010; Tkáčová et al., 2011). For example, the temperature level close to the radioactive material is higher than in other regions, and the color of the region in the thermogram image is expected to turn towards red tones. In addition, the usability of infrared thermal cameras with different technologies has been investigated. It is seen that the usability of thermal cameras and the obtained images can be transferred simultaneously with mobile networks via long distances, without entering the CBRN zone (Amon and Lock, 2008; Rodin et al., 2018).

In this study, it is seen that body temperature analysis can be performed by using Infrared Thermal Cameras in CBRN events, disasters, and emergency zones, and preliminary information can be given on the presence of CBRN exposure. From this point, this study showed that infrared thermography (IRT) is a highly promising method for CBRN exposure level measurement.

Conflict of Interest Statement

There is no conflict of interest between the authors.

REFERENCES

- Ammer, K.(2008). The Glamorgan Protocol for recording and evaluation of thermal images of the human body. *Thermol Int*, 18 (4), 125-44.
- Amon, F. K., Bryner, N. P., and Hamins, A. (2005). Thermal imaging research needs for first responders: workshop proceedings. *US Department of Commerce, Technology Administration, National Institute of Standards and Technology*.
- Ayan, A., and Dönmez, S. (2018). Radyolojik Nükleer Kaza ve Terör Olaylarında Tıbbi Yönetim. *Ankara Eğt. Arş. Hast. Dergisi*, 51(2), 154-162.
- Barnes, R.B. (1963). Thermography of the Human Body: Infrared-radiant energy provides new concepts and instrumentation for medical diagnosis. *Science*, 140(3569), 870-877.
- Clark, W. G. (1979). Changes in body temperature after administration of amino acids, peptides, dopamine, neuroleptics and related agents, *Neuroscience & Biobehavioral Reviews*, 3(4), 179-231.
- Ekşi, A. (2016). Kbrn Terörizminde Risk Değerlendirmesi Ve Yönetimi, *Journal of International Social Research*, 9(42).
- Erkekoğlu, P., and Koçer-Gümüşel, B. (2018). Biyolojik Savaş Ajanları: Tarihçeleri, Patofizyolojileri, Tanıları, Tedavileri ve Önlemler. *FABAD Journal of Pharmaceutical Sciences*, 43(2), 81-111.
- Gade, R., and Moeslund, T.B. (2014). Thermal cameras and applications: a survey. *Machine vision and applications*, 25(1), 245-262.
- Ganesan, K., Raza, S.K., and Vijayaraghavan, R. (2010). Kimyasal savaş ajanları. *Eczacılık ve Biyoallied Bilimler Dergisi*, 2(3), 166.
- Ivanescu, N.A., and Ciupitu, L. (2010). Vision system for human body infrared thermography. In 19th International Workshop on Robotics in Alpe-Adria-Danube Region (RAAD 2010) (pp. 353-356). *IEEE*.
- Jockers. D. (2014). Thermography: Is This The Best Breast Screening Device, <https://drjockers.com/thermography-breast-screening/>.
- Uzun, N.K. (2007). Fever and feverly ill management. *The Medical Bulletin of Sisli Etfal Hospital*, 41(4), 7-13.
- Kılıç, S. (2006). Biyolojik silahlar ve biyoterörizm. *Türk Hijyen ve Deneysel Biyoloji Dergisi*, 63(1), 2.

- Lahiri, B.B., Bagavathiappan, S., Jayakumar, T., and Philip, J. (2012). Medical applications of infrared thermography: a review. *Infrared Physics & Technology*, 55(4), 221-235.
- Lee, F.F., Chen, F., and Liu, J. (2015). Infrared thermal imaging system on a mobile phone. *Sensors*, 15(5), 10166-10179.
- Lock, A., and Amon, F. (2008). Measurement of the nonuniformity of first responder thermal imaging cameras. In *Infrared Imaging Systems: Design, Analysis, Modeling, and Testing XIX (Vol. 6941, p. 694114)*. International Society for Optics and Photonics.
- Marsella, S., and Sciarretta, N. (2018). CBRN Events and Mass Evacuation Planning, *In Enhancing CBRNE Safety & Security: Proceedings of the SICCC 2017 Conference* (pp. 353-363). Springer, Cham.
- Nguyen, D.T., Kim, K.W., Hong, H.G., Koo, J.H., Kim, M. C., and Park, K.R. (2017). Gender recognition from human-body images using visible-light and thermal camera videos based on a convolutional neural network for image feature extraction. *Sensors*, 17(3), 637.
- Özcan, M., and Topçuoğlu, P. (2008). Akut Radyasyon Sendromu. Nükleer Kaza veya Terörist Atakta Hematopoietik Kök Hücre Transplantasyon Stratejisi. Ed. Fikret Arpacı, Mutlu Arat. Bilimsel Tıp Yayınevi. Sayfa 33-41.
- Prokoski, F. (2000). History, current status, and future of infrared identification. *In Proceedings IEEE Workshop on Computer Vision Beyond the Visible Spectrum: Methods and Applications (Cat. No. PR00640)* (pp. 5-14). IEEE.
- Richardt, A., Hülseweh, B., Niemeyer, B., and Sabath, F. (Eds.). (2013). CBRN protection: Managing the threat of chemical, biological, radioactive and nuclear weapons, *Part 1. History and Treaties in CBRN- Warfare and Terrorism* (pp.2-8).
- Ring, E.F.J., McEvoy, H., Jung, A., Zuber, J., and Machin, G. (2010). New standards for devices used for the measurement of human body temperature. *Journal of medical engineering & technology*, 34(4), 249-253.
- Rodin, C. D., de Lima, L. N., de Alcantara Andrade, F. A., Haddad, D. B., Johansen, T. A., and Storvold, R. (2018). Object classification in thermal images using convolutional neural networks for search and rescue missions with unmanned aerial systems. In *2018 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)* (pp. 1-8). IEEE.
- Rudol, P., and Doherty, P. (2008). Human body detection and geolocalization for UAV search and rescue missions using color and thermal imagery. *In 2008 IEEE aerospace conference* (pp. 1-8).
- Sensoy, B., and Balci, H. (2004). Thermal imaging technology and applications in Turkey. *In Proceedings of the IEEE 12th Signal Processing and Communications Applications Conference, 2004.* (pp. 661-664). IEEE.
- Seyhan, E., and Sarı, G. (2012). Terör Maksatlı Biyolojik-Kimyasal Saldırlara Ait Tehdit Değerlendirmesinde Risk Analizi ve Yönetimi, *Güvenlik Bilimleri Dergisi*, 1(1), 79-94.
- Sillero-Quintana, M. (2015). Classification of factors influencing the use of infrared thermography in humans: A review. *Infrared Physics & Technology*, 71, 28-55.
- Singh, J., and Arora, A.S. (2020). Automated approaches for ROIs extraction in medical thermography: a review and future directions. *Multimedia Tools and Applications*, 79(21), 15273-15296.

- Speakman, J.R., and Ward, S. (1998). Infrared thermography: principles and applications. *Zoology-Jena-*, 101, 224-232.
- Shterenshis, M. (2017). Challenges to global implementation of infrared thermography technology: current perspective. *Central Asian journal of global health*, 6(1).
- T.C. İçişleri Bakanlığı Afet ve Acil Durum Yönetimi Başkanlığı (AFAD), (Ocak, 2021). *KBRN Terimler Sözlüğü*.
- Tkáčová, M., Hudák, R., Živčák, J., and Sidun, J. (2011, June). Thermographic atlas of the human body. *In 2011 15th IEEE International Conference on Intelligent Engineering Systems (pp. 427-429). IEEE.*
- Usamentiaga, R., Venegas, P., Guerediaga, J., Vega, L., Molleda, J., and Bulnes, F.G. (2014). Infrared thermography for temperature measurement and non-destructive testing. *Sensors*, 14(7), 12305-12348.
- Van Blyenburgh, P. (1999). UAVs: an overview. 1(5-6), 43-47.



(4-Carbamoylphenyl)Boronic Acid: A DFT Study On The Structural And Spectral Properties

Ahmet KUNDURACIOĞLU¹

Makalenin Alanı: Kimya

| Makale Bilgileri | Öz |
|---|---|
| Geliş Tarihi 16.07.2021 | Başlangıç bileşiği; CAPBA, B3LYP düzeyinde ve 6.31G* temel setinde DFT yöntemi kullanılarak hesaplama yöntemleriyle analiz edilmiştir. Hesaplamalı analiz için SPARTAN-14 yazılımı kullanıldı. Hesaplanan sonuçlar literatürdeki deneysel değerlerle karşılaştırıldı. Bağ uzunlukları, bağ açıları, dihedral açılar ve elektronik özellikler spektroskopik bilgilere göre araştırılmış ve açıklanmıştır. Hesaplanan değerler ve deneysel sonuçların %0,1 ile %3 arasında bir hata payı ile mükemmel bir uyum içinde olduğu gözlemlenmiştir. |
| Kabul Tarihi 28.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler DFT Boronic asit türevleri Moleküler yapı Tautomerik formlar | |

| Article Info | Abstract |
|---|--|
| Received 16.07.2021 | Title compound; CAPBA was analyzed via computational methods using the DFT method in the B3LYP level and 6.31G* basis set. The SPARTAN-14 software was used for computational analysis. The calculated results were compared to experimental values from the literature. Bond lengths, bond angles, dihedral angles and electronic properties were investigated and explicated according to spectroscopic knowledge. The calculated values and experimental results were observed to be in perfect agreement in an error margin between 0,1% and 3%. |
| Accepted 28.12.2021 | |
| Keywords DFT Boronic acid derivatives, Molecular structure, Tautomeric forms | |

INTRODUCTION

Boronic acid and its derivatives (BAs) are well known for their wide use in, especially medicinal chemistry. Their chemical and biological activities depend upon their additional substituents (Hall, 2006, pp. 1-99). BAs exhibit Lewis acid properties due to the lack of e^- in

¹ Bursa Uludağ Üniversitesi Mustafa Kemal Paşa MYO-Bursa; e-mail: akunduracioglu@uludag.edu.tr; ORCID: 0000-0002-4421-9912 (Sorumlu yazar)

the valence shell of the Boron atom. Boron atom attracts a OH^- anion from water in aqueous solutions to fill its valence shell (Zepeda-Valesquez, 2015, pp.6-7)

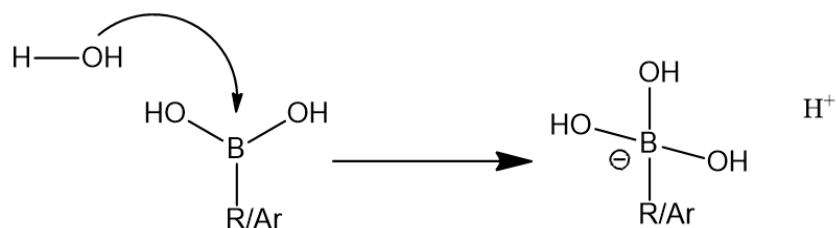


Figure 1. Acidic behavior of boronic acid in aqueous solution.

Previously, all boron-containing compounds were assumed to be poisonous, and their use was limited except for some ant poisoning chemicals. But recently, this prejudice has been broken and boron compounds have been acquitted in this regard, so their use in pharmaceutical chemistry has been paved (Baker et al., 2009). Because of their importance in chemical and medicinal studies such as Boron Neutron Capture Therapy (BNCT) (Tjarks et al., 1992) preparing medicines (Kar, 2003, pp.143-146), etc. a huge number of studies has been undergone about spectroscopic and structural properties of the organoboron compounds particularly on boronic acids and their esters. These studies generally survey the molecular structures as a dimer or monomer-dimer equilibrium Lu et al., Zheng et al., Rani et al., Karabacak et al., 2012, Zheng et al., 2011, Sachan et al., 2014, Erdoğdu et al., 2009).

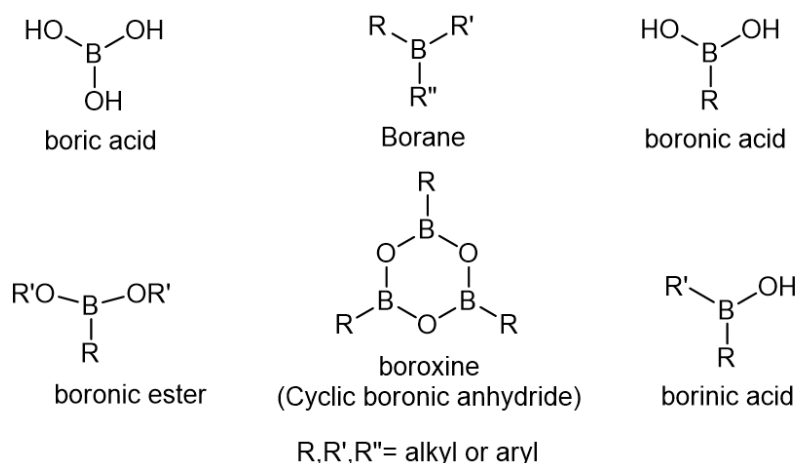


Figure 2. Oxygen-containing organoboron compounds (Hall 2006)

In some recent studies, researchers have handled their effect on the formation of biofilm, production of virulence factors (elastase and pyocyanin) and swarming motility in *Pseudomonas aeruginosa* (Akalin&Ulusoy, 2018).

CAPBA is a white to Brown solid with a melting point of 229-234°C (URL1). Apostolova et al. experimentally found the molecular properties of the title compound 4-Carbamoylphenylboronic acid (AKA 4-Aminocarbonylphenylboronic acid / CAPBA) in a crystallographic study (Apostolova et al., 2010). But unfortunately, there is no other experimental spectral data for this compound so far.

EXPERIMENTAL

Computational Details

In all calculations, the SPARTAN 14 computational chemistry suite (Hehre, 2014) was used. Calculations were undergone according to the DFT method in the B3LYP level and 6.31G* basis set (Becke, 1993, Hehre, 2014, Jensen, 2017, Onishi, 2018, Peter et al., 2011, Silverstein et al., 2005). The calculated and experimental results were tabulated in relational tables for comparisons. Recently, DFT method has gained a rising popularity among the researchers. Most researchers especially the ones investigating d-block metal complexes prefer to use this method with or instead of HF. (Beytur&Yüksek, 2018). Some small molecules such as boronic acid derivatives or benzoic acid derivatives are investigated using both DFT and HF and mostly In many studies, it was seen that the results of the DFT method were more compatible with the experimental results than the HF method (Kotan&Yüksek, 2019).

The DFT method has also been successfully used in the study of other small groups of molecules such as pyrazoles and their derivatives (Turhan İrak&Beytur 2019).

Molecular Structure CAPBA has a dimeric structure like other boronic acid derivatives which has been investigated in depth so far. But in these studies, CAPBA never was handled for its tautomeric forms. Due to the lack of a survey on its tautomers, in the following study, it has been handled considering its tautomeric forms and conformational isomers on the same hand. The dimeric structure was omitted for clarity (Figure 3 a and b). The group of $-B(OH)_2$ has four conformers which will be abbreviated as "CC", "CT", "TC" and "TT" in the following pages (C= Cis, T=Trans).

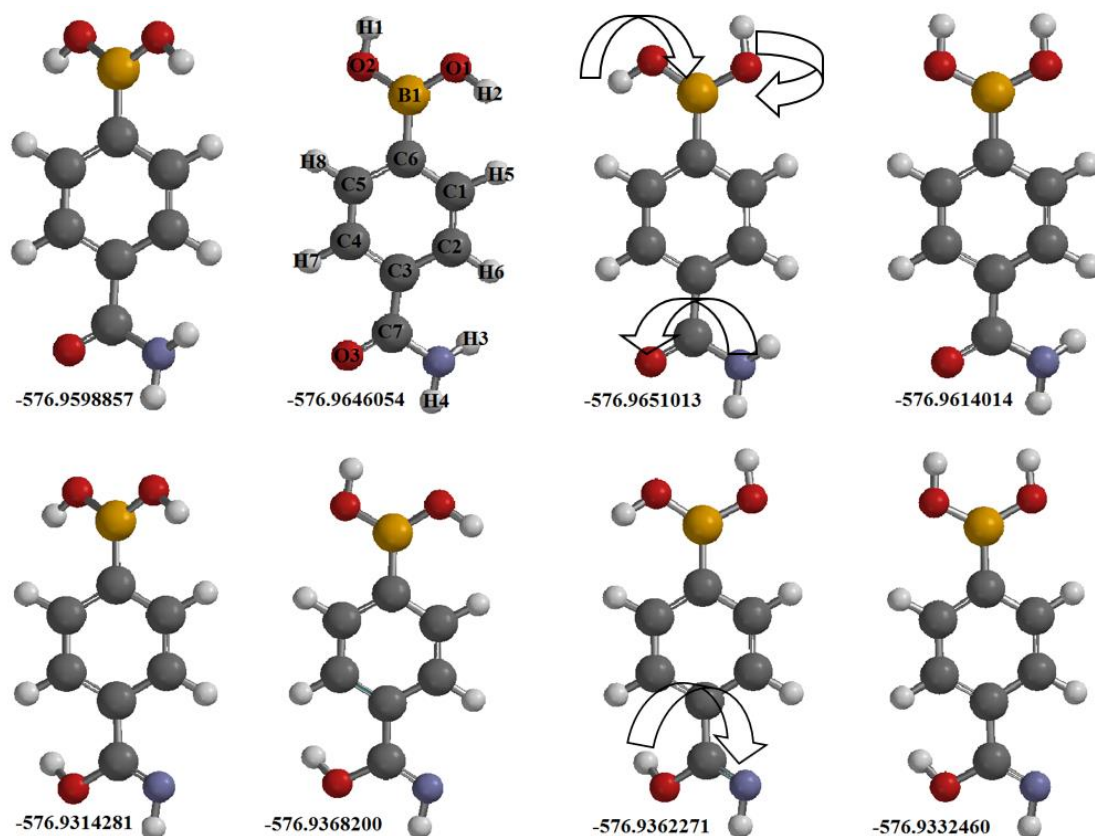


Figure 3. The isomeric forms and tautomeric transformation of the compound CAPBA (energies in Hartree)

Molecular Structure

As mentioned before, CAPBA had been investigated for its crystallographical structure via single-crystal X-ray spectroscopy (Apostolova et al., 2010). Both the experimental and the calculated bond lengths and bond angles have been tabulated in Table 1 and Table 2 respectively. Besides calculated dihedral angles have been given in Table 3 for gaining an idea about the torsion of some parts in the molecule. Unfortunately, experimental dihedral angles are not available in the literature.

As seen in Table 1, the calculated bond lengths are very close to the experimentally measured ones. Since the least energetic form of the compound is TC the error% values were calculated between the experimental values and the ones that belong to TC.

Table 1. Bond distances (Å) for the compound CAPBA

| Distance (Å) | CC1 | CC2 | CT1 | CT2 | TC1 | TC2 | TT1 | TT2 | EXP* | Error% |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|
| H3,O3 | 3.149 | 0.971 | 3.145 | 0.971 | 3.149 | 0.971 | 3.145 | 0.971 | xx | X |
| H4,O3 | 2.460 | 2.354 | 2.457 | 2.351 | 2.459 | 2.353 | 2.456 | 2.349 | xx | X |
| O1,H2 | 0.966 | 0.966 | 0.966 | 0.966 | 0.970 | 0.970 | 0.967 | 0.967 | 0.820 | 18.29 |
| O2,H1 | 0.966 | 0.966 | 0.970 | 0.970 | 0.967 | 0.966 | 0.967 | 0.967 | 0.820 | 17.93 |
| H4,N1 | 1.012 | 1.024 | 1.012 | 1.024 | 1.012 | 1.024 | 1.012 | 1.024 | 0.860 | 17.67 |
| H3,N1 | 1.010 | 3.084 | 1.010 | 3.085 | 1.010 | 3.083 | 1.010 | 3.084 | 0.860 | 17.44 |
| N1,C7 | 1.376 | 1.271 | 1.378 | 1.272 | 1.376 | 1.271 | 1.378 | 1.272 | 1.298 | 6.01 |
| O3,C7 | 1.224 | 1.371 | 1.224 | 1.371 | 1.225 | 1.372 | 1.225 | 1.372 | 1.246 | -1.69 |
| C7,C3 | 1.504 | 1.490 | 1.503 | 1.489 | 1.503 | 1.489 | 1.503 | 1.489 | 1.505 | -0.13 |
| C2,C1 | 1.394 | 1.390 | 1.393 | 1.390 | 1.393 | 1.390 | 1.393 | 1.390 | 1.384 | 0.65 |
| C3,C2 | 1.401 | 1.403 | 1.402 | 1.402 | 1.402 | 1.403 | 1.402 | 1.403 | 1.397 | 0.36 |
| C4,C3 | 1.401 | 1.402 | 1.401 | 1.403 | 1.400 | 1.402 | 1.401 | 1.403 | 1.388 | 0.86 |
| C5,C4 | 1.391 | 1.394 | 1.391 | 1.393 | 1.391 | 1.394 | 1.391 | 1.394 | 1.384 | 0.51 |
| C6,C5 | 1.407 | 1.404 | 1.407 | 1.405 | 1.406 | 1.404 | 1.407 | 1.404 | 1.391 | 1.08 |
| C1,C6 | 1.406 | 1.408 | 1.405 | 1.407 | 1.406 | 1.409 | 1.406 | 1.408 | 1.391 | 1.08 |
| B1,O1 | 1.368 | 1.367 | 1.374 | 1.374 | 1.367 | 1.366 | 1.375 | 1.374 | 1.351 | 1.18 |
| B1,O2 | 1.367 | 1.368 | 1.366 | 1.367 | 1.374 | 1.374 | 1.374 | 1.374 | 1.393 | -1.36 |
| C6,B1 | 1.580 | 1.580 | 1.571 | 1.571 | 1.571 | 1.571 | 1.564 | 1.564 | 1.546 | 1.62 |
| H6,C2 | 1.087 | 1.085 | 1.087 | 1.085 | 1.087 | 1.085 | 1.087 | 1.085 | 0.930 | 16.88 |
| H5,C1 | 1.089 | 1.089 | 1.090 | 1.089 | 1.086 | 1.086 | 1.086 | 1.086 | 0.930 | 16.77 |
| H7,C4 | 1.085 | 1.088 | 1.085 | 1.088 | 1.085 | 1.088 | 1.085 | 1.088 | 0.930 | 16.67 |
| H8,C5 | 1.089 | 1.089 | 1.086 | 1.086 | 1.090 | 1.089 | 1.086 | 1.086 | 0.930 | 17.20 |

*Received from Ref. (Erdogdu et al., 2009) xx=no data for this value in lit. X= not calculated.

As seen in the table, the bonds between C and C or C and Heteroatom were calculated with small deviations which are between 0.36% and 6%, from the experimental values. But the bonds between H and C or H and heteroatoms were calculated with deviations between 16% to 18%. Also, another point to notice, most values are very close to each other despite the tautomeric activity except for the H3-O3 bond which changes dramatically from one form to another due to H3 immigration between N1 to O3. As the last word for bond distances, between two tautomers for every isomer, the bond distances change slightly between 0 to 2 Å on the phenyl and $-B(OH)_2$ parts. But the differences increase to 100 Å's when the turn comes to bonds between N1, C7 and O3.

The bond angles for the compound have been tabulated in table 2. According to these values, the most mobile parts of the molecule are again the group of $-B(OH)_2$ and carbamoyl part.

Table 2. Some bond angles ($^{\circ}$) for the compound CAPBA

| Angle ($^{\circ}$) | CC1 | CC2 | CT1 | CT2 | TC1 | TC2 | TT1 | TT2 | EXP* | err% |
|----------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|------|
| H3,O3,C7 | 22.92 | 109.71 | 23.06 | 109.65 | 22.94 | 109.55 | 23.08 | 109.45 | xx | x |
| O3,C7,N1 | 121.86 | 121.85 | 121.78 | 121.75 | 121.77 | 121.80 | 121.61 | 121.67 | 120.80 | 0.80 |
| C7,N1,H4 | 115.13 | 110.00 | 114.90 | 109.92 | 115.12 | 109.94 | 114.94 | 109.84 | 120.00 | 4.07 |
| H3,N1,C7 | 120.23 | 19.13 | 119.88 | 19.06 | 120.23 | 19.15 | 119.93 | 19.03 | 120.00 | 0.19 |
| H4,N1,H3 | 116.32 | 91.25 | 116.11 | 91.20 | 116.36 | 91.18 | 116.23 | 91.14 | 120.00 | 3.03 |
| N1,C7,C3 | 116.24 | 121.26 | 116.16 | 121.34 | 116.26 | 121.40 | 116.19 | 121.56 | 118.80 | 2.14 |
| O3,C7,C3 | 121.88 | 116.89 | 122.05 | 116.90 | 121.96 | 116.79 | 122.18 | 116.76 | 120.40 | 1.30 |
| C7,C3,C2 | 123.52 | 119.29 | 123.28 | 119.21 | 123.58 | 119.40 | 123.33 | 119.37 | 122.20 | 1.13 |
| C3,C2,C1 | 120.17 | 120.17 | 120.03 | 120.03 | 120.30 | 120.29 | 120.19 | 120.21 | 121.10 | 0.66 |
| C4,C3,C2 | 119.06 | 118.91 | 119.11 | 118.91 | 119.08 | 118.93 | 119.15 | 118.96 | 117.80 | 1.09 |
| C5,C4,C3 | 120.25 | 120.34 | 120.36 | 120.49 | 120.12 | 120.22 | 120.30 | 120.41 | 121.20 | 0.89 |
| C6,C5,C4 | 121.59 | 121.54 | 121.36 | 121.30 | 121.68 | 121.60 | 121.24 | 121.20 | 120.80 | 0.73 |
| C1,C6,C5 | 117.35 | 117.25 | 117.49 | 117.37 | 117.46 | 117.37 | 117.85 | 117.74 | 118.20 | 0.63 |
| C2,C1,C6 | 121.57 | 121.78 | 121.63 | 121.88 | 121.35 | 121.58 | 121.26 | 121.47 | 120.80 | 0.46 |
| B1,O1,H2 | 111.96 | 112.14 | 113.16 | 113.29 | 110.65 | 110.76 | 114.84 | 114.96 | xx | x |
| B1,O2,H1 | 112.05 | 112.04 | 110.73 | 110.69 | 113.22 | 113.27 | 114.92 | 114.87 | xx | x |
| C6,B1,O2 | 122.22 | 122.17 | 118.41 | 118.38 | 123.83 | 123.92 | 118.01 | 117.94 | 121.60 | 1.83 |
| C6,B1,O1 | 122.15 | 122.21 | 123.87 | 123.85 | 118.43 | 118.34 | 117.98 | 117.97 | 119.40 | 0.81 |
| C1,C6,B1 | 121.25 | 121.44 | 122.20 | 122.40 | 120.21 | 120.32 | 120.98 | 121.23 | 119.50 | 0.59 |
| C5,C6,B1 | 121.40 | 121.30 | 120.31 | 120.23 | 122.32 | 122.31 | 121.16 | 121.03 | 122.20 | 0.10 |
| H6,C2,C1 | 119.39 | 121.38 | 119.55 | 121.44 | 119.32 | 121.27 | 119.43 | 121.32 | 119.50 | 0.15 |
| H5,C1,C6 | 119.67 | 119.57 | 120.21 | 120.08 | 119.00 | 118.91 | 119.22 | 119.11 | 119.60 | 0.50 |
| C2,C1,H5 | 118.74 | 118.63 | 118.15 | 118.02 | 119.64 | 119.51 | 119.52 | 119.42 | 119.60 | 0.03 |
| H7,C4,C5 | 121.45 | 119.15 | 121.32 | 119.02 | 121.52 | 119.20 | 121.39 | 119.09 | 119.40 | 1.78 |
| C3,C2,H6 | 120.39 | 118.45 | 120.39 | 118.53 | 120.34 | 118.44 | 120.33 | 118.46 | 119.50 | 0.70 |
| H8,C5,C4 | 118.79 | 118.69 | 119.66 | 119.60 | 118.16 | 118.07 | 119.57 | 119.48 | xx | x |
| O1,B1,O2 | 115.63 | 115.62 | 117.73 | 117.77 | 117.73 | 117.74 | 124.02 | 124.09 | 118.90 | 0.98 |
| C2,C3,C7 | 123.52 | 119.29 | 123.28 | 119.21 | 123.58 | 119.40 | 123.33 | 119.37 | xx | x |
| C7,C3,C4 | 117.41 | 121.80 | 117.60 | 121.88 | 117.34 | 121.67 | 117.52 | 121.67 | 120.00 | 2.22 |
| H7,C4,C3 | 118.30 | 120.46 | 118.32 | 120.44 | 118.37 | 120.53 | 118.31 | 120.45 | 119.40 | 0.86 |
| C6,C5,H8 | 119.62 | 119.75 | 118.97 | 119.09 | 120.15 | 120.32 | 119.18 | 119.31 | 119.60 | 0.46 |

As seen from Table 2 the error margin is between 0.03% and 4%. An important point to be noticed from the table, there is a 5-6° difference between the tautomeric forms when it comes to carbamoyl groups such as N1, C7, C3 and O3, C7, C3 angles. But in the phenyl part and $-B(OH)_2$ group, the values only change slightly. For example for C6, B1, O2 the values are 123.83° and 123.92°, for O1, B1, O2 angle 117.73° and 117.74° between two tautomers for TC isomer.

In the literature, there is no data for the torsional properties of CAPBA, for this reason, Table 3 has no experimental values column. Since the values in Table1 and Table 2 are close to the experimental results enough, it can be considered that Table 3 is also reliable.

As seen in Table 3 torsion angles in the CAPBA molecule differs according to the sections. In the phenyl part, as expected, for example, dihedral angles are about 1-2 degrees. For instant H6, C2, C1, H5 $-1.93 / 0.64^\circ$ for TC isomer and C1, C2, C3, C4 has $0.78 / -0.93^\circ$. But O3, C7, C3, C2 and N1, C7, C3, C4 has $160.83^\circ / 157.24^\circ$ and $-162.87^\circ / -155.72^\circ$ respectively.

Table 3. Dihedral angles for CAPBA and conformers.

| Dihedral | CC1 | CC2 | CT1 | CT2 | TC1 | TC2 | TT1 | TT2 |
|-------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| H3,O3,N1,H4 | 135.70 | -155.87 | -134.05 | -157.00 | 135.86 | -155.61 | -134.62 | -157.49 |
| H3,O3,C7,C3 | -165.14 | 16.94 | 164.54 | 16.02 | -165.26 | 17.05 | 164.79 | 15.61 |
| H4,N1,C7,O3 | -9.66 | 2.41 | 10.09 | 2.33 | -9.83 | 2.47 | 10.23 | 2.30 |
| H3,N1,C7,O3 | -156.81 | 14.32 | 155.79 | 13.65 | -157.05 | 14.49 | 156.36 | 13.42 |
| H4,N1,C7,C3 | 171.67 | -178.70 | -171.31 | -178.65 | 171.45 | -178.57 | -171.02 | -178.58 |
| H3,N1,C7,C3 | 24.53 | -166.79 | -25.61 | -167.33 | 24.22 | -166.55 | -24.89 | -167.46 |
| H3,O3,C7,N1 | 16.27 | -164.12 | -16.95 | -164.92 | 16.09 | -163.94 | -16.53 | -165.23 |
| H1,O2,O1,H2 | -20.84 | -21.27 | 170.00 | 171.95 | 172.16 | -170.16 | -0.08 | 0.12 |
| H1,O2,B1,O1 | 173.43 | 173.23 | -1.88 | -1.49 | 175.90 | -174.84 | -0.24 | -0.13 |
| H2,O1,B1,O2 | 173.36 | 173.30 | 174.76 | 175.78 | -1.46 | 1.82 | 0.15 | 0.26 |
| C5,C6,B1,O1 | 147.07 | 146.74 | 163.07 | 164.96 | 166.06 | -164.50 | 179.26 | -179.71 |
| C5,C6,B1,O2 | -32.94 | -33.22 | -16.70 | -14.68 | -14.26 | 15.73 | -0.82 | 0.24 |
| C1,C6,B1,O1 | -33.42 | -32.85 | -16.47 | -14.50 | -14.55 | 15.82 | -0.36 | 0.61 |
| C3,C2,C1,C6 | -0.39 | -0.06 | -0.45 | 0.18 | -0.26 | 0.85 | -0.17 | 0.42 |
| C3,C4,C5,C6 | 0.23 | -0.43 | -1.21 | -0.38 | 0.48 | 0.32 | -0.73 | 0.04 |
| H7,C4,C5,H8 | 1.25 | -1.37 | -0.90 | -2.30 | 1.33 | -2.79 | -0.57 | -2.11 |
| B1,C6,C1,C2 | -179.91 | -179.85 | -179.96 | 179.62 | -179.56 | 179.51 | -179.68 | -179.92 |
| B1,C6,C1,H5 | -1.62 | -1.11 | -0.64 | -1.58 | -0.05 | -0.55 | 0.75 | -0.07 |
| B1,C6,C5,H8 | -1.02 | -1.67 | 0.57 | -0.09 | -1.51 | 0.49 | 0.03 | -0.82 |
| B1,C6,C5,C4 | 179.99 | -179.91 | -179.22 | -179.53 | 179.44 | 179.91 | -179.86 | 179.69 |
| H6,C2,C1,H5 | -1.08 | 1.04 | 2.33 | 1.11 | -1.93 | 0.64 | 1.66 | 0.34 |
| C1,C6,B1,O2 | 146.56 | 147.19 | 163.75 | 165.86 | 165.12 | -163.96 | 179.56 | -179.44 |
| N1,C7,C3,C4 | -162.43 | -156.40 | 161.28 | -157.32 | -162.87 | -155.72 | 162.34 | -156.67 |
| N1,C7,C3,C2 | 18.66 | 22.73 | -19.56 | 22.10 | 17.90 | 23.75 | -18.43 | 22.76 |
| C1,C2,C3,C4 | 1.08 | -0.68 | -0.42 | -0.61 | 0.78 | -0.93 | -0.80 | -1.00 |
| H1,O2,B1,C6 | -6.56 | -6.80 | 177.91 | 178.18 | -3.78 | 4.94 | 179.85 | 179.92 |
| H2,O1,B1,C6 | -6.65 | -6.67 | -5.02 | -3.86 | 178.23 | -177.97 | -179.94 | -179.80 |
| O3,C7,C3,C2 | -160.00 | -158.33 | 159.03 | -158.84 | -160.83 | -157.24 | 160.31 | -158.08 |
| O3,C7,C3,C4 | 18.90 | 22.54 | -20.13 | 21.74 | 18.41 | 23.29 | -18.92 | 22.49 |

Briefly, it can be said, the molecule is almost planar in the phenyl section and twisted about 15° and 35° in the substituted parts (Figure 4).

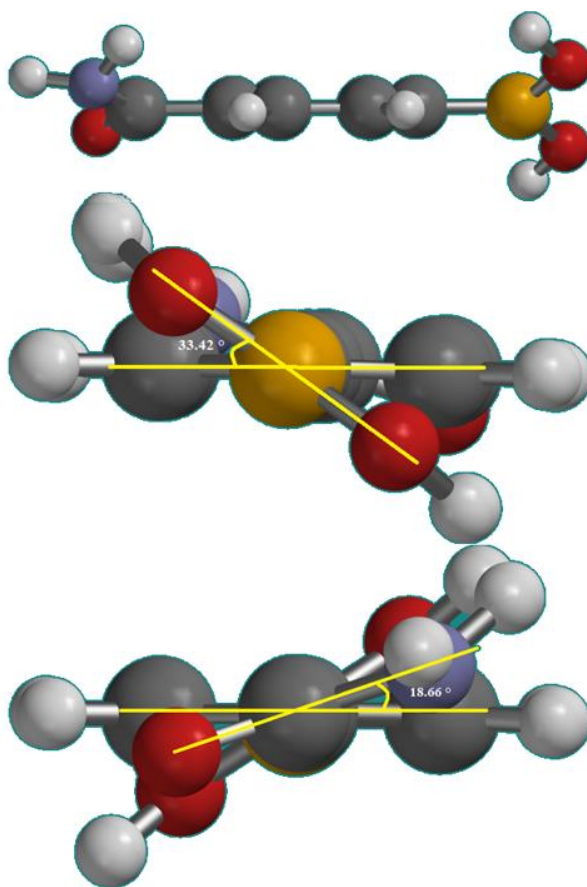


Figure 4. Deviation from planarity in parts of CAPBA

Mulliken Charges Analysis

Like every molecule, CAPBA's atoms have different electronegativities. For this reason, the electronic distribution on the molecule is not homogenous. The more an atom is electronegative, the more electrons it gathers up. This heterogeneity causes different partial charges on atoms of the same molecule. If a certain section of a molecule is electronically rich, it is a partially negative site and so on. Electron-rich parts of the molecules are more suitable for electrophilic attacks and electron-poor sites are open for nucleophilic attacks. Mulliken charge distribution is important for predicting the potential reaction mechanisms that the molecule is involved (Jensen, 2016). ESPMap surface determines the distance that a certain positive charge can interact with the molecule enough to form an attraction or repulsion so

that they can have a bonding possibility for complexation reaction. Molecular ESP (V_r) is calculated via Eq. 2 (Peter et al., 2011).

$$V_r = \sum_A \frac{Z_A}{R_A - r} - \int \frac{\rho(r')}{(r' - r)} dr' \quad \text{Eq.2}$$

Figure 5 and Table 4 exhibit the Mulliken charges of CAPBA which are also depicted in figure 2 as colors. At a glance the most remarkable points are briefly:

- 1- C atoms of the molecule are divided into two parts; C1,2,4 and 5 are negatively charged and C3, 6 and 7 are charged positively. C7 has the highest positive charge and its charge dramatically changes between tautomeric forms.
- 2- All H atoms have positive charges and the most striking differences are seen on H4 and H8 according to tautomeric changes.
- 3- All O atoms have negative charges and according to tautomeric activity only the charge of O3 changes.
- 4- N atom has a considerable negative charge and as expected it changes between tautomeric forms.
- 5- B1, O1, O2, H1, H2 and H3 are not affected by tautomeric transformations.

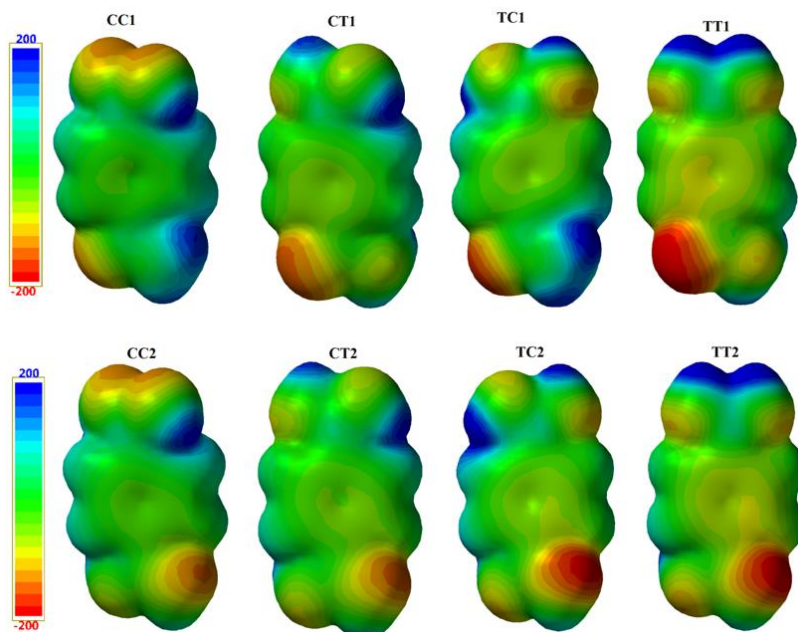


Figure 5. Mulliken Charge distribution of CAPBA according to isomeric and tautomeric forms

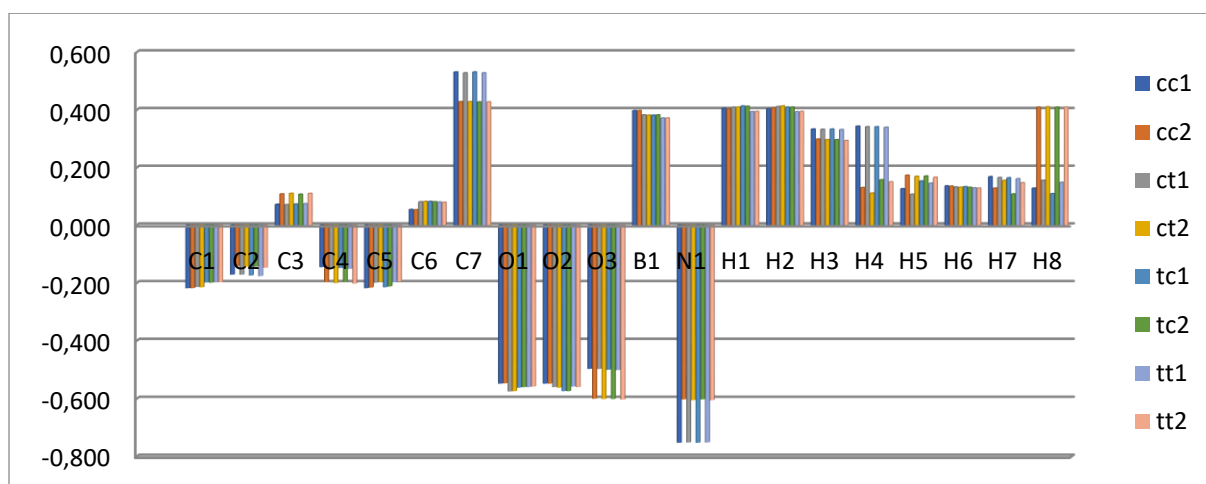


Figure 6. Mulliken Charge distribution of CAPBA

Table 4. Mulliken Charge distribution of CAPBA

| Charges | CC1 | CC2 | CT1 | CT2 | TC1 | TC2 | TT1 | TT2 |
|-----------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| C1 | -0.218 | -0.218 | -0.214 | -0.215 | -0.198 | -0.199 | -0.196 | -0.197 |
| C2 | -0.171 | -0.141 | -0.171 | -0.143 | -0.174 | -0.143 | -0.176 | -0.147 |
| C3 | 0.072 | 0.108 | 0.071 | 0.110 | 0.073 | 0.107 | 0.074 | 0.110 |
| C4 | -0.145 | -0.196 | -0.148 | -0.200 | -0.148 | -0.196 | -0.151 | -0.202 |
| C5 | -0.218 | -0.216 | -0.199 | -0.196 | -0.215 | -0.212 | -0.197 | -0.194 |
| C6 | 0.054 | 0.053 | 0.081 | 0.082 | 0.082 | 0.081 | 0.080 | 0.079 |
| C7 | 0.531 | 0.428 | 0.528 | 0.428 | 0.531 | 0.427 | 0.528 | 0.427 |
| O1 | -0.548 | -0.547 | -0.575 | -0.574 | -0.562 | -0.560 | -0.560 | -0.558 |
| O2 | -0.548 | -0.548 | -0.560 | -0.562 | -0.574 | -0.574 | -0.558 | -0.560 |
| O3 | -0.497 | -0.600 | -0.497 | -0.601 | -0.500 | -0.601 | -0.501 | -0.603 |
| B1 | 0.397 | 0.397 | 0.382 | 0.381 | 0.381 | 0.382 | 0.371 | 0.371 |
| N1 | -0.752 | -0.602 | -0.751 | -0.605 | -0.752 | -0.602 | -0.751 | -0.605 |
| H1 | 0.405 | 0.403 | 0.409 | 0.409 | 0.413 | 0.412 | 0.393 | 0.394 |
| H2 | 0.403 | 0.406 | 0.411 | 0.413 | 0.409 | 0.409 | 0.393 | 0.394 |
| H3 | 0.333 | 0.298 | 0.332 | 0.296 | 0.333 | 0.296 | 0.331 | 0.293 |
| H4 | 0.343 | 0.130 | 0.341 | 0.111 | 0.341 | 0.157 | 0.339 | 0.150 |
| H5 | 0.126 | 0.173 | 0.107 | 0.169 | 0.153 | 0.170 | 0.145 | 0.166 |
| H6 | 0.136 | 0.135 | 0.132 | 0.131 | 0.133 | 0.131 | 0.129 | 0.128 |
| H7 | 0.168 | 0.128 | 0.165 | 0.155 | 0.164 | 0.108 | 0.161 | 0.147 |
| H8 | 0.128 | 0.409 | 0.155 | 0.410 | 0.109 | 0.409 | 0.148 | 0.409 |

Molecular Orbitals analysis (HOMO-LUMO) and UV-Vis spectra

HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) represents the highest energy level that at least one electron exists around the molecule. As just opposite LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) represents the lowest energy level around the molecule in which there is no electron. The HOMO-LUMO gap is very important for charge transfers which affect the biological and chemical reactivities of the molecules. The molecules with small energy gaps

are expected to be chemically reactive and called soft molecules. HOMO LUMO levels also determine the acidity or basicity of the molecules.

In the molecule, CAPBA HOMO-LUMO gap is 5.4 eV which means this molecule can be supposed to be a “soft” molecule and of course the opposite is also true (figure 6.). The larger HOMO–LUMO gap always refers to higher kinetic stability and lower chemical reactivity. Molecule's hardness can be calculated via Eq. 3a and softness (S) can be calculated via Eq 3b.

$$\eta = (\epsilon_{\text{LUMO}} - \epsilon_{\text{HOMO}}) \quad \text{Eq. 3a}$$

$$S = 1/\eta \quad \text{Eq. 3b}$$

While hard molecules which have a large gap between HOMO&LUMO do not change their electron density easily, the soft molecules with a small gap of HOMO&LUMO change their electron density relatively easily (Sahin et al., 2015, Pearson, 2005).

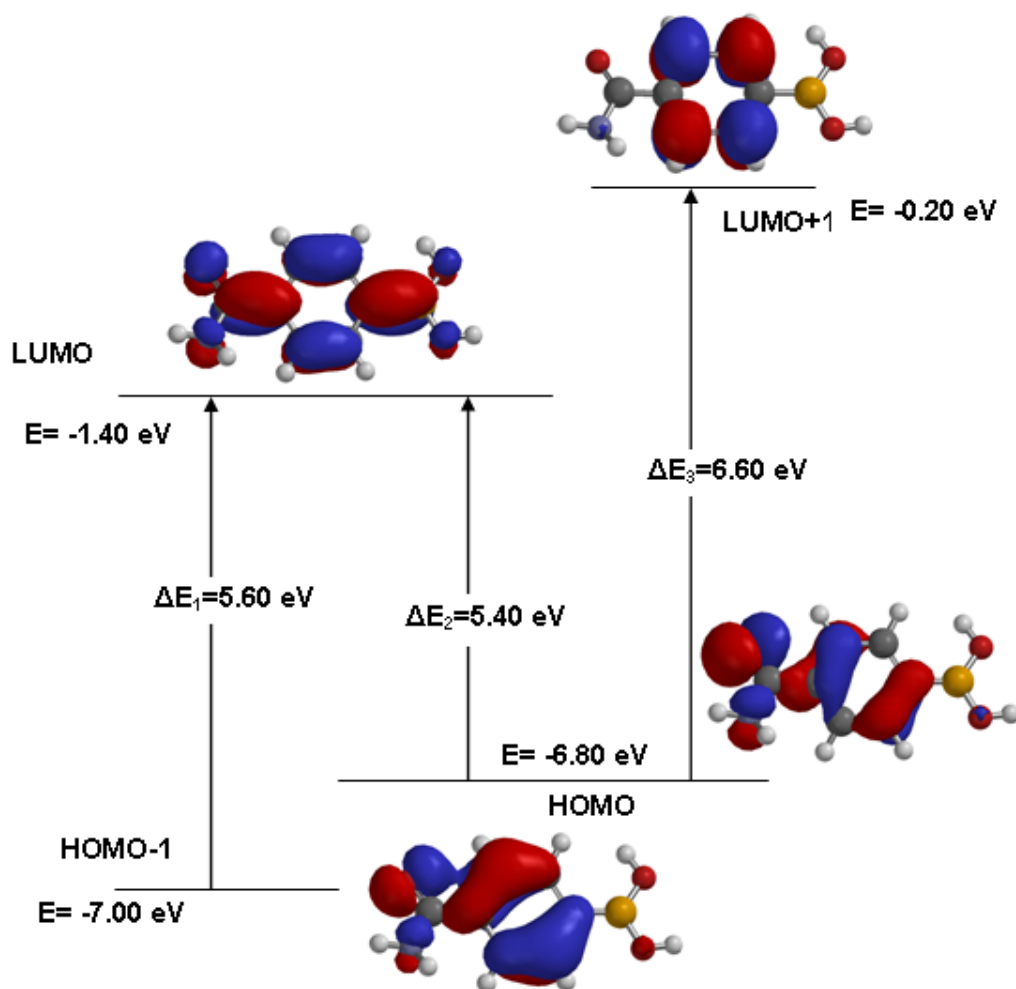


Figure 7. Electron transfers and corresponding E values and HOMO-LUMO gap (ΔE_2) for TC form of CAPBA

Table 5. The energy equivalencies for the transitions between conformers for the compound CAPBA

| Conformers | Energy (Hartree) | Energy Diff. | | | Eq. Freq. (cm ⁻¹) | Dip. Moment (Debye) |
|------------|---------------------|--------------|--------------------------|----------|----------------------------------|---------------------------|
| | | (Hartree) | (kcalmol ⁻¹) | (eV) | | |
| CC | - | 0.0052150 | 3.272463 | 0.141907 | 1144.56 | 3.57 |
| CT | - | 0.0004960 | 0.311245 | 0.013497 | 108.86 | 4.09 |
| TC | - | 0.0000000 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 2.29 |
| TT | - | 0.0037000 | 2.321786 | 0.100682 | 812.06 | 5.24 |

Table 6. MO energies and differences with λ_{\max} values (simplified) for conformers of the compound CAPBA

| Conf. | HOMO-1 | HOMO | LUMO | LUMO+1 | ΔE (eV) | | | λ_{\max} | | |
|-------|--------|------|------|--------|-----------------|--------------|--------------|------------------|--------|--------|
| | | | | | ΔE_1 | ΔE_2 | ΔE_3 | Calc. (Vac) | | |
| CC | -7.3 | -6.9 | -1.5 | -0.6 | 5.8 | 5.4 | 6.3 | 213.77 | 229.60 | 196.80 |
| CT | -7 | -6.8 | -1.4 | -0.3 | 5.6 | 5.4 | 6.5 | 221.40 | 229.60 | 190.74 |
| TC | -7 | -6.8 | -1.4 | -0.2 | 5.6 | 5.4 | 6.6 | 221.40 | 229.60 | 187.85 |
| TT | -6.8 | -6.6 | -1.2 | 0 | 5.6 | 5.4 | 6.6 | 221.40 | 229.60 | 187.85 |

Table 7 Calculated Allowed electron transitions and corresponding λ_{\max} values for CAPBA

| nm | Strength | MO | | nm | Strength | MO | | | | |
|----------------|--------------|----------------|------------------|--------|--------------|------------------|------------------|--------|----------------|------------------|
| | | | Comp.% | | | | Comp.% | | | |
| CC | 203.46 | 0.0046 | HOMO-4 -> LUMO | 66 | 193.13 | 0.0039 | HOMO-5 -> LUMO | 7 | | |
| | | | HOMO-5 -> LUMO | 23 | | | HOMO-3 -> LUMO+1 | 16 | | |
| | 203.92 | 0.0794 | HOMO -> LUMO+1 | 34 | 214.71 | 0.0616 | HOMO -> LUMO+1 | 58 | | |
| | | | HOMO-3 -> LUMO+1 | 22 | | | HOMO-1 -> LUMO+1 | 28 | | |
| | | | HOMO-2 -> LUMO+1 | 20 | | | 220.24 | 0.1069 | HOMO-3 -> LUMO | 55 |
| | | | HOMO-1 -> LUMO | 14 | | | HOMO -> LUMO+1 | | 13 | |
| | 206.77 | 0.037 | HOMO-3 -> LUMO | 76 | 222.74 | 0.2627 | HOMO -> LUMO | 12 | | |
| | | | HOMO -> LUMO | 66 | | | HOMO-2 -> LUMO | 41 | | |
| | 228.57 | 0.2988 | HOMO-2 -> LUMO | 16 | 250.42 | 0.0175 | HOMO-3 -> LUMO | 32 | | |
| | | | HOMO-2 -> LUMO | 79 | | | HOMO-1 -> LUMO | 12 | | |
| 239.69 | 0.0361 | HOMO-2 -> LUMO | 79 | 284.98 | 0.0035 | HOMO-1 -> LUMO | 45 | | | |
| | | HOMO-1 -> LUMO | 55 | | | HOMO-2 -> LUMO | 22 | | | |
| | | HOMO -> LUMO+1 | 33 | | | HOMO-2 -> LUMO+1 | 15 | | | |
| | | HOMO -> LUMO+1 | 33 | | | HOMO -> LUMO | 70 | | | |
| CT | 192.87 | 0.0024 | HOMO-5 -> LUMO | 88 | 211.18 | 0.0292 | HOMO -> LUMO+1 | 61 | | |
| | | | HOMO -> LUMO+1 | 42 | | | HOMO-2 -> LUMO+1 | 26 | | |
| | 200.45 | 0.081 | HOMO-3 -> LUMO+1 | 24 | 219.6 | 0.0438 | HOMO-3 -> LUMO | 80 | | |
| | | | HOMO-2 -> LUMO+1 | 15 | | | 223.93 | 0.4045 | HOMO-2 -> LUMO | 61 |
| | | | HOMO-1 -> LUMO | 13 | | | 252.89 | | 0.019 | HOMO-1 -> LUMO |
| | | | HOMO-3 -> LUMO | 82 | | | 284.51 | 0.0036 | | HOMO-2 -> LUMO+1 |
| | HOMO -> LUMO | 62 | HOMO -> LUMO | 64 | | | | | | |
| | 240.37 | 0.0442 | HOMO-2 -> LUMO | 17 | 251.23 | 0.0214 | HOMO-2 -> LUMO | 23 | | |
| | | | HOMO-2 -> LUMO | 78 | | | HOMO -> LUMO+1 | 26 | | |
| | 251.23 | 0.0214 | HOMO-1 -> LUMO | 55 | HOMO -> LUMO | 13 | | | | |
| HOMO -> LUMO+1 | | | 26 | | | | | | | |

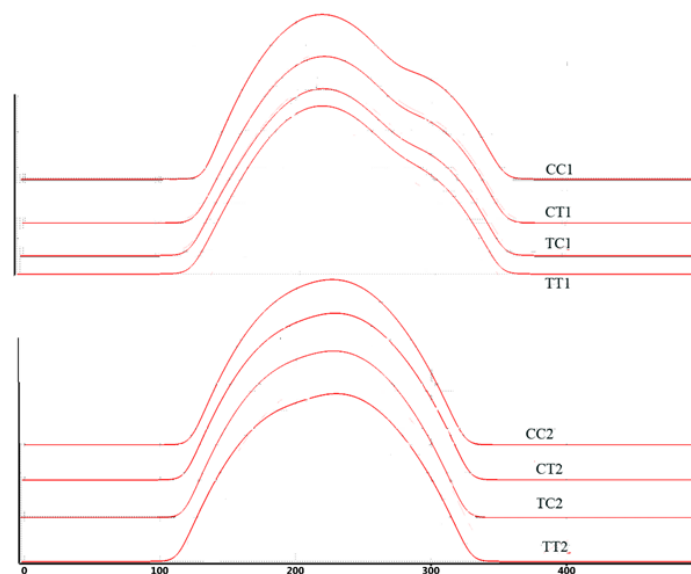


Figure 8. Calculated UV-Vis spectra for the compound CAPBA

CONCLUSIONS

In this study, the compound CAPBA was investigated for mainly its molecular structure using computational methods. Imported experimental values such as bond lengths and bond angles were compared to corresponding calculated ones (and were found to agree). Also, the molecule was surveyed for its UV-Vis spectra and HOMO&LUMO analysis beside Mulliken charge distribution. The HOMO&LUMO energy gap and UV-Vis spectra and also the hardness of the molecule were discussed. The obtained results were tabulated in corresponding sections and some results were depicted in graphs and figures. In calculations, the 6.31G* basis set was used under DFT's B3LYP level. The SPARTAN 14 quantum chemical calculation software was used in this study. The experimental and calculated results were compared in tables and verified each other.

The author declares that there is no Conflict of Interest with any person and/or institution.

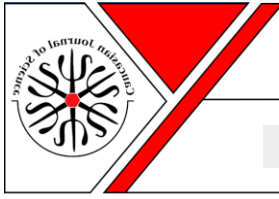
Supplementary material

All requests from the readers who would like to obtain extra information such as pictures, tables, etc. will be responded with pleasure by the corresponding author.

REFERENCES

- Akalın R.,B., Ulusoy S., (2018), Boronik asit moleküllerinin *Pseudomonas aeruginosa*'da virülens faktörlerinin üretimine etkisi, *Journal of Boron*, 3 (3), 166 - 173
- Apostolova M. D., Nikolova R. P., Shivachev B. L., (2010), (4-Carbamoylphenyl)boronic acid, *Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications* 66, 1273-1279.
- Baker S.,J., Ding C.,Z., Akama T., Zhang Y.,K., Hernandez V., Xia Y., (2009) Therapeutic potential of boron-containing compounds, *Future Med Chem.* 1(7), 1275-88.
- Becke A.D., (1993), Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange, *Journal of Chemical Physics* 98, 5648-5652.
- Beytur M., Yüksek H., (2018) 3-Fenil-4-(3-Sinamoiloksibenzilidenamino)-4,5-Dihidro-1h-1,2,4-Triazol-5-On Molekülünün Spektroskopik Özellikleri, *Caucasian Journal of Science*, 5 (2), 65-80
- Erdogdu Y., Güllüoğlu M., Kurt M., (2009), DFT, FT-Raman, FT-IR and NMR studies of 2-fluorophenylboronic acid, *Journal of Raman Spectroscopy*, 40(11), 1615-1623,
- Hall D.G., (2006), Structure, properties, and preparation of boronic acid derivatives. Overview of their reactions and applications. Boronic acids: preparation and applications in organic synthesis and medicine, Wiley Online library.
- Hehre, W., J., SPARTAN'14, (2014), Wavefunction Inc. Irvine CA, USA
- Hehre W. J., (2014), "SPARTAN'14 Tutorial and User's Guide", Wavefunction, Inc.
- Jensen F., (2017), Introduction to Computational Chemistry, Wiley
- Kar A., (2003), Pharmacognosy and Pharmacobiotechnology, New Age International (P) Ltd., Publishers New Delhi
- Karabacak M, Kose E, Atac A, Cipiloglu Ma, Kurt M., (2012), Molecular structure investigation and spectroscopic studies on 2,3-difluorophenylboronic acid: A combined experimental and theoretical analysis. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 97, 892-908,
- Kotan G., K., Yüksek H., (2019), Experimental (FT-IR, NMR) and Theoretical (B3PW91, B3LYP, HF) Analyses of 2-(3-Ethyl-4,5-Dihidro-1H-1,2,4-Triazol-5-on-4-yl)-azomethine)-Benzoic Acide, *Caucasian Journal of Science*, 6 (1), 64-75
- Lee C., Yang W., Parr R.G., (1998), Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 37 785-799
- Lu, G.-P.; Voigtritter, K. R.; Cai, C.; Lipshutz, B. H., (2012), Ligand Effects on the Stereochemical Outcome of Suzuki–Miyaura Couplings. *Journal Organic Chemistry*, 77(8), 3700-3703,
- Onishi T., (2018), "Quantum Computational Chemistry: Modelling and Calculation for Functional Materials", Springer-Singapore, pp. 49–53
- Pearson R.G., (2005), Chemical hardness and density functional theory, *Chemical Science Journal*, 117(5), 369-377,
- Peter K., Vollhardt C., Schore N. E., (2011), Organic chemistry: structure and function, 6th ed. Freeman&Comp. NY-US.

- Rani U, Karabacak M, Tanriverdi O, Kurt M, Sundaraganesan N., (2012), The spectroscopic (FTIR, FT-Raman, NMR and UV), first-order hyperpolarizability and HOMO-LUMO analysis of methyl boronic acid. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 92(15), 67-77
- Sachan Ak, Pathak Sk, Sinha L, Prasad O, Karabacak M, Asiri A.M., A, (2014), combined experimental and theoretical investigation of 2-Thienylboronic acid: Conformational search, molecular structure, NBO, NLO and FT-IR, FT-Raman, NMR and UV spectral analysis. *Journal of Molecular Structure*, 1076, 639-650,
- Şahin Z. S., Kaya Kantar G., Şaşmaz S., Büyükgüngör O., (2015), Synthesis, molecular structure, spectroscopic analysis, thermodynamic parameters and molecular modeling studies of (2-methoxyphenyl)oxalate, *Journal of Molecular Structure*, 1087, 104-112.
- Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., (2005), Spectrometric Identification of Organic Compounds 7th Ed. John Wiley Sons INC.
- Tjarks W., Anisuzzaman A.K., Liu L., Soloway S.H., Barth R.F., Perkins D.J., Adams D.M., (1992), Synthesis and in vitro evaluation of boronated uridine and glucose derivatives for boron neutron capture therapy. *Journal Medicinal Chemistry*, 35, 1628-1633
- Turhan İrak Z., Beytur M., (2019), 4-Benzilidenamino-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Antioksidan Aktivitelerinin Teorik Olarak İncelenmesi, *İğdir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 9(1): 512-521
- URL1.<https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/683876?lang=en®ion=TR> (03.26.2020)
- Zepeda-Velazquez L. C., (2015), Synthesis and characterization of novel stimuli-responsive silicone-boronic acid materials, (Unpublished doctoral dissertation), McMaster University Hamilton, Ontario.
- Zheng H., Ghanbari S., Nakamura S., Hall D.G., (2012), Boronic Acid Catalysis as a Mild and Versatile Strategy for Direct Carbo- And Heterocyclizations of Free Allylic Alcohols, *Angewandte Chemie Int. Ed.*, 51(25), 6187-6190,
- Zheng H., Lejkowski M., Hall D.G., (2011), Mild and selective boronic acid-catalyzed 1,3-transposition of allylic alcohols and Meyer-Schuster rearrangement of propargylic alcohols, *Chemical Science Journal*, 2(7), 1305-1310.



Fen Bilimleri Dersi 5. Sınıf “Işığın Yayılması” Ünitesine Yönelik Başarı Testi Geliştirme Çalışması

Serkan SEVİM¹, İsmail UYSAL², Emin DEMİRCİ³

Makalenin Alanı: Fen Eğitimi

| Makale Bilgileri | Öz |
|---|--|
| Geliş Tarihi 08.11.2019 | <p>Türkiye’de 2017 yılında program geliştirme çalışması gerçekleştirilmiştir. Bu program geliştirme çalışması mevcut programın yeniden güncellenmesini içermektedir. Bu değişiklik 2017-2018 eğitim-öğretim yılından itibaren 5. sınıflarda uygulanmaya başlamıştır. Bu yüzden mevcut literatür incelendiğinde yenilenen programı tam olarak içeren bir başarı testi bulunmamaktadır. Mevcut programda değişiklikler olmuştur. Önceki programda ışık konusu ‘Işığın ve Sesin Yayılması’ ünitesi altında yer almaktadır. Son değişikliklerden sonra ışık konusu ses konusundan ayrılarak ‘Işığın Yayılması’ adıyla yeni bir ünite olarak düzenlenmiştir. Ayrıca önceki programda 6. Sınıfta yer alan ‘Düzgün yansıma, dağınık yansıma ve yansıma kanunları’ konuları 5. Sınıf ‘Işığın Yayılması’ ünitesi kapsamına alınmıştır. Buna ek olarak tam gölgenin büyüklüğünü etkileyen değişkenler; ‘Tam gölgenin oluşumunda sadece cismin ve ışık kaynağının konumları ile gölgenin büyüklüğü arasındaki ilişki üzerinde durulur.’ şeklinde sınırlandırılmıştır. Önceki programın kazanımlarında güneş ve ay tutulmasının da birer gölge olayı olduğunun belirtilmesi şeklinde bir açıklama yer alırken son düzenlemelerden sonra bu açıklama kaldırılarak geleneksel gölge oyunlarının tam gölge olayı ile ilişkilendirilmesi şeklinde bir açıklama gelmiştir. Tüm bu değişiklikler 5. Sınıf ‘Işığın Yayılması’ ünitesi ile ilgili yeni bir başarı testi geliştirilmesi ihtiyacını doğurmuştur. Bu araştırmanın amacı, ortaokul 5. Sınıf öğrencilerine yönelik ‘Işığın Yayılması Ünitesi Başarı Testi’ geliştirmektir. Bu çalışmada tarama modeli kullanılmıştır. Test ve ölçeklerin geçerliliğini belirlemek amacıyla 258 ortaokul öğrencisi ile pilot uygulama yapılmıştır. Pilot uygulama neticesinde; 30 sorudan oluşan çoktan seçmeli ‘Işığın Yayılması Ünitesi Başarı Testi (İYÜBT)’ hazırlanmıştır. Başarı testinin maddelerinin yapısal geçerliliği için madde güçlük ve madde ayırt edicilik indeksleri hesaplanmıştır. Güvenirlik analizi için ise Kuder Richardson-20 tekniği kullanılmıştır. Test geçerliliği için kapsam geçerliliği, görünüş geçerliliği ve yapı geçerliliğine bakılmıştır. Yapılan geçerlilik ve güvenirlilik çalışmaları neticesinde, ‘Işığın Yayılması Ünitesi Başarı Testi’ nin geçerli ve güvenilir nitelikte olduğu belirlenmiştir.</p> |
| Kabul Tarihi 30.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Başarı Testi Işık Fen Eğitimi Ölçek Geliştirme | |

| Article Info | Abstract |
|-------------------------------|---|
| Received 08.11.2019 | <p>Program development study was carried out in Turkey in 2017. This program development study includes re-updating the existing program. This change has been implemented in the 5th grades since the 2017-2018 academic year. Therefore, when the current literature is examined, there is no success test that fully includes the renewed program. There have been changes in the current program. In the previous program, the subject of light was located under the unit of 'The Propagation of Light</p> |
| Accepted 30.12.2021 | |
| Keywords | |

¹ Pamukkale Üniversitesi Eğitim Fakültesi Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü-Denizli; e-mail: serkansvm@yahoo.com ; ORCID: 0000-0002-8849-3959 (Sorumlu yazar)

² Pamukkale Üniversitesi Eğitim Fakültesi Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü-Denizli; e-mail: iuyosal@pau.edu.tr ; ORCID: 0000-0002-0936-4850

³ MEB-Denizli; e-mail: e_demirci20@hotmail.com ; ORCID: 0000-0001-8259-8947

Achievement Test
Light
Science Education
Scale Development

and Sound'. After the last changes, the subject of light was separated from the subject of sound and organized as a new unit with the name of 'The Propagation of Light'. In addition, the topics of 'Smooth reflection, diffuse reflection and reflection laws', which were in the 6th grade in the previous program, were included in the 5th Grade 'Scattering of Light' unit. In addition, the variables that affect the size of the full shadow; It is limited as "Only the relationship between the positions of the object and the light source and the size of the shadow is emphasized in the formation of the full shadow." While there was a statement stating that solar and lunar eclipses are also shadow events in the achievements of the previous program, this explanation was removed after the last regulations and an explanation was made that traditional shadow plays were associated with full shadow events. All of these changes have led to the need to develop a new achievement test for the Grade 5 'Diffusion of Light' unit. The purpose of this research is to develop the 'Light Propagation Unit Achievement Test' for middle school 5th grade students. Scanning model was used in this study. A pilot study was conducted with 258 secondary school students to determine the validity of the tests and scales. As a result of the pilot application; Multiple choice 'Light Propagation Unit Achievement Test (IYÜBT)' consisting of 30 questions has been prepared. Item difficulty and item discrimination indices were calculated for the structural validity of the items of the achievement test. Kuder Richardson-20 technique was used for reliability analysis. For test validity, content validity, face validity and construct validity were examined. As a result of the validity and reliability studies, it has been determined that the 'Light Propagation Unit Achievement Test' is valid and reliable.

1. GİRİŞ

Fen bilimleri birçok soyut kavram içeren bir derstir. Bu durum öğrencilerin birçoğunun fen konularını anlamakta sıkıntı çekmesine ve bu konularla ilgili kavram yanlışlarına sahip olmasına neden olmaktadır (Sevim, 2013). Bunun yanında öğrenciler öğrendikleri bilgileri günlük yaşamlarıyla ilişkilendirmekte zorluk yaşamaktadırlar. Bu yüzden öğrencilerin derslerde öğrendikleri bilgileri ne kadar kazandıklarının belirlenmesi ve bilgilerini günlük yaşamda kullanabilme yeterliliğinin de belirlenmesi gerekmektedir (Ayas, Karamustafaoğlu, Sevim ve Karamustafaoğlu, 2001; Sevim, 2013; Sevim ve Tarım, 2017)

Öğrencilerin günlük yaşamdan edindikleri kavramlar bazen alternatif kavramlar geliştirmelerine sebep olmaktadır. Örneğin, Galili ve Hazan (2000), öğrencilerin optik derslerindeki alternatif kavramlarının kaynağını, ışık ile ilgili, örneğin ışık hızı, dalga boyu gibi fiziksel parametrelerin insanın algısından uzak olmasına ve günlük hayatta çoğu kez tecrübe edilememesine, günlük hayatta kullanılan, "gözün parlaması", "odayı ışığın doldurması" gibi fiziksel yanlış deyim veya ifade şekillerine bağlamaktadırlar.

Birçok farklı ülkedeki araştırmacılar optik derslerinde karşılaşılan öğrencilerin alternatif kavramları üzerinde çalışmalar yapmaktadırlar (Stead ve Osborne 1980, Andersson ve Kärrqvist 1983, Guesne 1984, Jung 1986, Ramadas ve Driver 1989, Saxena 1991, Selley 1996, Galili ve Hazan 2000, Sevim, 2013). Türkiye'de ise, bu alanda yapılan araştırmalara ancak son

yıllarda rastlamaktayız. Aynı zamanda Türkiye’de de 2017 yılında program geliştirme çalışması gerçekleştirilmiştir. Bu program geliştirme çalışması mevcut programın yeniden güncellenmesini içermektedir. Bu değişiklik 2017-2018 eğitim-öğretim yılından itibaren 5. sınıflarda uygulanmaya başlamıştır. Bu yüzden mevcut literatür incelendiğinde yenilenen programı tam olarak içeren bir başarı testi bulunmamaktadır. Mevcut programda değişiklikler olmuştur. Önceki programda ışık konusu ‘Işığın ve Sesin Yayılması’ ünitesi altında yer almaktadır. Son değişikliklerden sonra ışık konusu ses konusundan ayrılarak ‘Işığın Yayılması’ adı altında bir ünite olarak düzenlenmiştir. Ayrıca önceki programda 6. sınıfta yer alan ‘Düzgün yansıma, dağınık yansıma ve yansıma kanunları’ konuları 5. sınıf ‘Işığın Yayılması’ ünitesi kapsamına alınmıştır. Buna ek olarak tam gölgenin büyüklüğünü etkileyen değişkenler; ‘Tam gölgenin oluşumunda sadece cismin ve ışık kaynağının konumları ile gölgenin büyüklüğü arasındaki ilişki üzerinde durulur.’ şeklinde sınırlandırılmıştır. Önceki programın kazanımlarında güneş ve ay tutulmasının da birer gölge olayı olduğunun belirtilmesi şeklinde bir açıklama yer alırken son düzenlemelerden sonra bu açıklama kaldırılarak geleneksel gölge oyunlarının tam gölge olayı ile ilişkilendirilmesi şeklinde bir açıklama gelmiştir. Bu yüzden mevcut literatür incelendiğinde yenilenen programı tam olarak içeren bir başarı testi bulunmamaktadır. Tüm bu değişiklikler 5. Sınıf ‘Işığın Yayılması’ ünitesi ile ilgili yeni bir başarı testi geliştirilmesi ihtiyacını doğurmuştur.

“Ölçek kavramı” özünde ölçme sonuçlarının matematiksel niteliklerini göstermekle birlikte (Turgut ve Baykul, 1992) eğitim ve psikoloji gibi davranış bilimlerinin birçok alanında, hedeflenen kişi(ler), sistem, konu ya da içerik açısından veri/bilgi toplamak amacıyla kullanılır. Torgerson (1958), ölçekleri uygulanış biçimine göre iki grupta toplamaktadır; (a) yanıtlayıcı merkezli ve (b) gözlemleyici merkezli ölçekler. Çoktan seçmeli testler, tutum ölçekleri, anketler gibi ölçme araçları yanıtlayıcı merkezli ölçekler kapsamındadır. Diğer taraftan gözlemleyici merkezli ölçekler için gözlem formları, rubrikler vb. örnek olarak verilebilir

Ölçek geliştirme çalışmaları, genellikle deneysel süreç ya da kuramsal süreçler ile gerçekleştirilir. Deneysel süreçte literatür ya da uzman yaklaşımları sayesinde aday ölçek formu elde edilir ve hedef kitle ile benzer özellikler taşıyan bir örneklem grubuna deneme uygulaması yapılarak ölçek maddelerine ilişkin psikometrik özellikler belirlenerek ideal maddelerden nihai form elde edilir. Bu sürecin karakteristik özellikleri ise; nicel bir çalışma özelliği taşıması, genellikle faktör analizlerinin kullanılması ve büyük örneklem gerektirmesidir.

Bu sürece ilişkin genel yaklaşım ve bilgiler Tezbaşaran (1989) ve Torgerson (1958) tarafından ayrıntılı bir şekilde açıklanmıştır.

Bu araştırmanın temel amacı; ortaokul 5. sınıf öğrencilerine yönelik, Fen Bilimleri dersindeki «Işığın Yayılması» Ünitesi ile ilgili kazanımlarla ilişkili fen okuryazarlığının bileşenlerini içeren “Başarı Testi” geliştirmektir.

2. MATERYAL VE METOT

2.1. Araştırma Modeli

Bu araştırma bir ölçek geliştirme çalışmasıdır. Bu bölümde, çalışma grubu, Işığın Yayılması Ünitesi ile ilgili araştırmacılar tarafından geliştirilen testin geliştirilme aşaması ve pilot uygulama ile ilgili bilgiler yer almaktadır.

2.2. Çalışma Grubu

Araştırma kapsamında verilerin toplanabilmesi için araştırmacılar tarafından hazırlanan ölçme araçları, 2017-2018 eğitim öğretim yılında Denizli ilinden rastgele seçilen 4 okulda öğrenim gören 258 tane 5. sınıf öğrencisine uygulanmıştır.

2.3. Veri Toplama Araçlarının Geliştirilmesi

Veri toplama aracının geliştirilmesinden önce, 5. sınıf Fen bilimleri dersi öğretim programında yer alan Işık konusu ile ilgili kazanımlar tek tek incelenmiş ve bir kazanım havuzu oluşturulmuştur. Daha sonra bu kazanımlar incelenerek, Başarı Testi’ndeki her bir madde, ilgili kazanımla uyumlu olacak şekilde hazırlanmıştır. Bu kazanımların neler olduğu ve kazanımların ilgili olduğu testteki soru numaraları Tablo 1’de verilmiştir. Test maddeleri hazırlama aşamasında bu alanla ilgili literatür taranmış ve Işığın Yayılması ile ilgili hazırlanmış ölçme araçları incelenmiştir. İncelenen bu ölçme araçlarındaki maddeler dil uzmanlarınca incelenmiş olup hiçbir madde aynen alınmamış, belirlenen ilgili kazanımlar ile uyumlu olanlar, araştırmacılar tarafından kazanıma uygun hale getirilmiştir. Kazanımdaki maddeler ile ölçme aracındaki maddelerin birbiri ile uyumlu olup olmadığı, maddelerin ilgili kazanımı içerip içermediğini sorgulamak için alanında uzman 3 öğretim üyesi ve derslerini bu kazanıma göre işleyen 2 fen bilimleri öğretmenin görüşlerine başvurulmuştur. Öğretmenlerin görüşleri neticesinde gerekli düzenlemeler yapılarak geliştirilen ölçme aracı pilot uygulama için hazır hale getirilmiştir.

Tablo 1. 5. Sınıf ‘Işığın Yayılması’ ünitesi belirtke tablosu

| KAZANIMLAR | SORULAR |
|--|--------------------|
| F.5.5.1.1. Bir kaynaktan çıkan ışığın her yönde ve doğrusal bir yol izlediğini gözlemleyerek çizimle gösterir. | 1, 2, 3, 4, 5 |
| F.5.5.2.1. Işığın düzgün ve pürüzlü yüzeylerdeki yansımalarını gözlemleyerek çizimle gösterir. | 6, 7, 8, 9, 10 |
| F.5.5.2.2. Işığın yansımada gelen ışın, yansıyan ışın ve yüzeyin normali arasındaki ilişkiyi açıklar. | 11, 12, 13, 14, 15 |
| F.5.5.3.1. Maddeleri, ışığı geçirme durumlarına göre sınıflandırır. | 16, 17, 18, 19, 20 |
| F.5.5.4.1. Tam gölgenin nasıl oluştuğunu gözlemleyerek basit ışın çizimleri ile gösterir. | 21, 22, 23, 24, 25 |
| Tam gölgeyi etkileyen değişkenlerin neler olduğunu deneyerek keşfeder. | 26, 27, 28, 29, 30 |

2.4. Pilot Uygulama

Araştırmacılar tarafından hazırlanan testin pilot uygulaması için, Denizli ili merkezinde öğrenim gören 300 6. sınıf öğrencisine, Denizli İl Milli Eğitim Müdürlüğü’den gerekli izin alınarak veri toplama aracı uygulanmıştır. Pilot uygulama esnasında öğrencilerin testteki soruları anlamakta zorluk çektikleri, takıldıkları yerler not alınmış, daha sonra gerekli düzenlemeler yapılmıştır. Pilot uygulama öncesinde ve sonrasında alanında uzman 3 öğretim üyesinin (fen eğitimi, ölçme değerlendirme uzmanı, istatistik uzmanı olmak üzere) ve 2 fen bilimleri öğretmenin görüşlerine başvurularak veri toplama aracındaki maddeler ile ilgili gerekli düzeltmeler yapılmıştır.

Ayrıca hazırlanan bu veri toplama aracında yer alan ölçekler yazım ve imla kuralları, alanında uzman bir Türkçe eğitimi öğretim üyesi tarafından kontrol edilmesi sağlanarak teste son hali verilmiştir. Son hali verilen test 2017-2018 eğitim öğretim yılında Denizli ilinden rastgele seçilen dört okulda öğrenim gören 258, 5. sınıf öğrencisine uygulanmıştır.

3. BULGULAR

Bu bölümde “Işığın Yayılması” Ünitesine yönelik geliştirilen başarı testinin geçerlik ve güvenilirlik çalışmalarına yönelik veriler sunulmuştur. Öncelikle geliştirilen ölçeğe yönelik geçerlik çalışmasının verilerine yer verilmiştir. İkinci bölümde ise testin güvenilirliğine yönelik

elde edilen veriler sunulmuştur. Başarı testinde kullanılan her bir sorunun ölçülmek istenen özelliğe sahip olanlar ile olmayanları ayırıp ayırmadığını öğrenmek için, “madde ayırt edicilik indeksi” hesaplanmış, her bir maddenin doğru cevaplanma oranını bulmak için de, “madde güçlük indeksi”ne bakılmıştır.

3.1. Ölçme Aracının Geçerlilik ve Güvenirlik Çalışması

Araştırmada kullanılan ölçme aracı için güvenilirlik ve geçerlilik çalışmaları yapılmıştır. Pilot uygulama yapılan kişi sayısı madde sayısının yaklaşık 10 katı olduğu için ölçme aracının deneme uygulaması için örneklem sayısı yeterli olarak değerlendirilmiştir (Akgül & Çevik, 2005; Tavşancıl, 2010).

3.2. Başarı Testi Geçerlilik Çalışması

Testin kapsam ve görünüş geçerliliği için alanında uzman (fen eğitimi, ölçme değerlendirme uzmanı, istatistik uzmanı olmak üzere) 3 öğretim üyesi ve 2 fen bilimleri öğretmenin görüşüne başvurulmuştur.

Görünüş geçerliliği için başvuru uzmanlara göre; pilot uygulamadaki 19. ve 4. soruların soru kökünün tekrar düzenlenmesi gerektiği belirtilmiş, bu sorular tekrar düzenlenip incelendiğinde, ölçme aracının kullanıldığı amaç için uygun olduğu, gerekli verileri toplayacak durumda olduğu ve ölçme aracının gerçekten istenen özelliği ölçebilecek görüldüğü için görünüş geçerliliğinin var olduğu uzmanlarca tespit edilmiştir.

Testin kapsam geçerliliği için yine aynı uzmanlar tarafından ölçme araçlarının maddeleri incelenmiştir. Testteki soruların, ölçme aracının ölçmeyi amaçladığı konuları dengeli bir şekilde temsil ettiği tüm uzmanlar tarafından belirtilmiştir.

3.3. Başarı Testi Güvenirlik Çalışması

Pilot uygulama neticesinde 300 öğrenciye uygulanan çoktan seçmeli “Işık Konusu” Başarı Testi’nden elde edilen veriler incelenmiş ve buna göre düzenlenmiştir. Son şekli verilen 30 sorudan oluşan çoktan seçmeli başarı testi 258 5. Sınıf öğrencisine uygulanmış ve öğrencilerden elde edilen veriler kullanılarak Testin güvenirliliğine bakılmıştır. Testin iç tutarlık katsayısı KR-20 formülü uygulanarak hesaplanmış ve .80 olarak bulunmuştur. Bir test için hazırlanan güvenirlilik katsayısının .70 ve daha yüksek olması test puanlarının güvenirliliği için genel olarak yeterli görülmektedir (Büyüköztürk, 2011).

Buna göre araştırmacı tarafından hazırlanan 30 soruluk Testin güvenilir bir ölçme aracı olduğu söylenebilir.

Test, çoktan seçmeli 4 seçenekli sorulardan oluşup, doğru yanıtlara 1 puan, yanlış ya da boş yanıtlara 0 puan verilerek değerlendirilmeye alınmıştır. Bir test maddesinin, o madde ile ölçülmek istenen özelliğe sahip olanlar ile olmayanları ayırıp ayırmadığını öğrenmek için, “madde ayırt edicilik indeksi” hesaplanmış, her bir maddenin doğru cevaplanma oranını bulmak için de, “madde güçlük indeksi”ne bakılmıştır.

Madde ayırt edicilik ve madde güçlük indeksi aşağıdaki formül ile hesaplanmıştır (Gönen, Kocakaya ve Kocakaya, 2011).

$$P = \frac{n(dü) + n(da)}{Nü + Na} \quad D = \frac{n(dü) - n(da)}{Nü \text{ veya } Na}$$

- P = Madde güçlük indeksi
D = Madde ayırt edicilik indeksi
n(dü) = Maddeyi üst grupta doğru cevaplayanlar
n(da) = Maddeyi alt grupta doğru cevaplayanlar
Nü = Üst gruptaki öğrenci sayısı
Na = Alt gruptaki öğrenci sayısı

Windows
Windows'u e

Tablo 2. Testte yer alan maddelerin ayırt edicilik indeksleri (D) ve güçlük dereceleri (P)

| Soru | Gruplar | P Değeri (Madde Güçlük İndeksi) | D Değeri (Madde Ayırtedicilik İndeksi) |
|------|------------------------------------|------------------------------------|---|
| 1 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,642 | 0,485 |
| 2 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,450 | 0,442 |
| 3 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,657 | 0,571 |
| 4 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,364 | 0,471 |
| 5 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,578 | 0,642 |

| | | | | |
|----|---------------------------------------|----------|-------|-------|
| 6 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,650 | 0,642 |
| 7 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,442 | 0,714 |
| 8 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,271 | 0,457 |
| 9 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,329 | 0,457 |
| 10 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,607 | 0,671 |
| 11 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,671 | 0,485 |
| 12 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,507 | 0,671 |
| 13 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,550 | 0,514 |
| 14 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,471 | 0,571 |
| 15 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | | 0,550 | 0,585 |
| 16 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,414 | 0,428 |
| 17 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,464 | 0,471 |
| 18 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,642 | 0,542 |
| 19 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,650 | 0,642 |
| 20 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,514 | 0,600 |
| 21 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,442 | 0,457 |
| 22 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,450 | 0,442 |
| 23 | Üstgrup (%27=70) (%27=70) | Alt grup | 0,607 | 0,671 |

| | | | |
|----|------------------------------------|-------|-------|
| 24 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,550 | 0,514 |
| 25 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,550 | 0,514 |
| 26 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,592 | 0,671 |
| 27 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,578 | 0,642 |
| 28 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,450 | 0,442 |
| 29 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,442 | 0,714 |
| 30 | Üstgrup (%27=70) Alt grup (%27=70) | 0,657 | 0,571 |

Tablo incelendiğinde Testin maddelerinin ayırt edici ve güvenilir olduğu görülmektedir. Testin ortalama güçlüğü; $(\text{Puanların aritmetik ortalaması} = 16,37) / (\text{Testten alınabilecek en yüksek puan} = 30)$ olarak hesaplanmış olan bu değer 0,546 olarak tespit edilmiştir. Bir testteki maddelerin her birinin güçlük düzeyi farklı olsa da bunların ortalaması alınarak bulunacak olan testin ortalama güçlülüğünün 0,50 civarında olması arzu edilen bir durumdur (Çepni vd., 2008). Ayrıca testin madde ayırt edicilik indeks değeri 0.40 ve üzerinde ise maddenin ayırt etme gücünün yüksek olduğu sonucuna ulaşılır (Tekin, 2010). Bu araştırma için elde edilen ortalama madde ayırt edicilik indeksinin 0.50 olduğu görülmektedir

Buna göre Testin madde ayırt edicilik ve madde güçlük indeksleri bir ölçme aracı için beklenen seviyededir.

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu araştırmanın amacı, ortaokul 5. Sınıf öğrencilerine yönelik 'Işığın Yayılması Ünitesi Başarı Testi' geliştirmektir. Bu amaçla geliştirilen test oluşturulurken bazı basamaklar izlenmiştir. Bu basamaklar; testin amacı ve kapsamının belirlenmesi, maddelerin yazılması ve düzenlenmesi, ön uygulamanın yapılarak maddelerin analiz edilmesi ve son olarak testin oluşturulması, uygulanması ve puanlanmasıdır. Eğitim alanında alan yazın incelendiğinde yukarıda bahsedilen test geliştirme basamaklarının kullanıldığı görülmüştür (Akbulut ve Çepni,

2013; Fidan, 2013; Çakır ve Aldemir, 2011; Gönen ve diğer., 2011; Kingır, 2011; Kızılcık ve Tan, 2011; Şen ve Eryılmaz, 2011; Tekbıyık ve Akdeniz, 2010; Kılıç ve Sağlam, 2009).

Bu araştırmada, yukarıda bahsedilen test geliştirme basamakları uygulanırken geçerlik ve güvenirlik çalışmaları ayrıntılı bir şekilde yürütülmüştür. Bu araştırmada da öncelikli olarak başarı testinin amacı belirlenmiş, Işığın Yayılması ünitesine ait kazanımlar incelenerek bu kazanımlara uygun sorular hazırlanmıştır. Kazanımlar ve bu kazanımlara karşılık gelen sorulara yönelik belirtke tablosu oluşturulmuştur. Oluşturulan bu niteliklerin uygun olup olmadığını anlamak amacıyla uzman görüşüne sunulmuştur. Böylece testin kapsam geçerliliği sağlanmıştır. Uzman görüşleri alınarak son hali verilen 30 soruluk başarı testi, 258 kişiden oluşan 5. sınıf öğrencilerine uygulanmıştır. Öncelikle uygulanan başarı testi için her bir maddenin ayrı ayrı madde ayırt edicilik ve güçlük indeksleri, ayrıca ortalama madde güçlük indeksleri ve madde ayırt edicilik indeksleri hesaplanmıştır. Testin ortalama güçlüğü; $(\text{Puanların aritmetik ortalaması} = 16,37) / (\text{Testten alınabilecek en yüksek puan} = 30)$ olarak hesaplanmış olan bu değer 0,546 ve ortalama ayırt edicilik indeksi 0.50 olarak tespit edilmiştir. Bir testteki maddelerin ortalama güçlülüğünün 0,50 civarında olması arzu edilen bir durumdur (Çepni ve diğer., 2008). Bu durumda bu araştırmada öğrencilere uygulanan başarı testinin ortalama madde güçlük indeksinin 0.50'ye yakın olması, testin öğrencilerin düzeyine uygun olduğunu göstermektedir. Ayrıca testin madde ayırt edicilik indeks değeri 0.40 ve üzerinde ise maddenin ayırt etme gücünün yüksek olduğu sonucuna ulaşılır (Tekin, 2010). Bu araştırma için elde edilen ortalama madde ayırt edicilik indeksinin 0.50 olduğu görülmektedir. Bu değer, hazırlanan başarı testinin ayırt edicilik düzeyinin yüksek olduğunu göstermektedir.

Bir ölçme aracı geliştirilirken yukarıda bahsedilen özellikler dışında dikkate alınması gereken bir diğer nokta testten elde edilen puanların güvenirliğidir. Bu amaçla testten elde edilen puanların güvenirliğini tespit etmeye yönelik bazı analizler vardır. Bunlardan en çok tercih edilen yöntemler KR-20, KR-21 ve Cronbach Alpha güvenirlik katsayılarının hesaplanmasıdır. Alan yazında başarı testi çalışmaları incelendiğinde güvenirliğin sağlanması için bu yöntemlerin kullanıldığı gözlemlenmiştir (Şimşek, 2007; Taşdemir, 2004; Yalçın, 2012). KR-20 bir testin tekrarı, paraleli ya da iki yarısı yerine, testteki tüm maddeler arasındaki tutarlığın bir ölçüsünü verir. Bir kez uygulanmış olan bir ölçme aracının, güvenirliği hakkında bilgi verir ve "iç tutarlılık katsayısı" olarak adlandırılır. Bir testin KR 20 güvenirlik katsayısı yüksek bulunmuş ise, bu testteki maddelerin aynı yeterliği ölçtüğü (testin tek boyutlu olduğu)

anlamına gelir. Yapılan bu çalışmada da 5.sınıf öğrencilerine uygulanan EK-1’de verilen “Işığın Yayılması” Ünitesi başarı testi sonuçları için güvenilirlik analizleri yapılmış olup, KR-20 katsayısı hesaplanmıştır. Testin KR-20 güvenilirliği 0,807 olarak tespit edilmiştir. Sonuç olarak 5.sınıf düzeyinde “Işığın Yayılması” Ünitesine yönelik olarak alan yazına katkı sağlayabilecek geçerli ve güvenilir bir başarı testi geliştirildiği söylenebilir.

KAYNAKLAR

- Akbulut, H. İ. ve Çepni, S. (2013). Bir üniteye yönelik başarı testi nasıl geliştirilir?: ilköğretim 7. sınıf kuvvet ve hareket ünitesi. *Amasya Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 2(1), 18-44.
- Akgül, A. ve Çevik, O. (2005). *İstatistiksel analiz teknikleri, SPSS’te işletme yönetimi uygulamaları* (2. Baskı). Ankara: Emek Ofset.
- Andersson, B. & Kärrqvist, C. (1983). How Swedish pupils understand light and it’s properties, *European Journal of Science Education*, 5, 387-402.
- Ayas, A., Karamustafaoğlu, O., Sevim, S., & Karamustafaoğlu, S. (2001). Fen bilgisi öğrencilerinin bilgilerini günlük yaşamla ilişkilendirebilme seviyeleri. *Yeni Bin Yılın Başında Fen Bilimleri Eğitimi Sempozyumu*, Maltepe Üniversitesi Eğitim Fak, 7-8.
- Büyüköztürk, Ş. (2011). *Sosyal Bilimler için veri analizi el kitabı* (14.baskı) Ankara: PegemAkademi.
- Çakır, M. ve Aldemir B. (2011). İki aşamalı genetik kavramlar tanı testi geliştirme ve geçerlik çalışması. *Mustafa Kemal Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Dergisi*, 8(16), 335-353.
- Çepni, S., Bayrakçeken, S., Yılmaz, A., Yücel, C., Semerci, Ç., Köse, E., Sezgin, F., Demircioğlu, G. ve Gündoğdu, K. (2008). *Ölçme ve Değerlendirme*. Ankara: Pagem Akademi.
- Fidan, E. (2013). *İlkokul öğrencileri için matematik dersi sayılar öğrenme alanında başarı testi geliştirilmesi*. Yüksek lisans tezi, Ankara Üniversitesi.
- Galili, I. & Hazan A. (2000). Learners’ knowledge in optics: interpretation, structure and analysis, *International Journal of Science Education*, 22, 57-88.
- Gönen, S., Kocakaya, S. ve Kocakaya, F. (2011). Dinamik konusunda geçerliliği ve güvenilirliği sağlanmış bir başarı testi geliştirme çalışması. *Yüzüncü Yıl Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 8(1), 40-57.
- Guesne, E. (1984). Die Vorstellung von Kindern über Licht, *Physica didactica*, 11, 79-98.
- Gündoğdu, K. (2008). *Ölçme ve Değerlendirme*. Ankara: Pagem Akademi.
- Kılıç, D. ve Sağlam N. (2009). Öğrencilerin mantıksal düşünme yeteneklerinin bazı değişkenler açısından incelenmesi. *Ege Eğitim Dergisi*, 10(2), 23-38
- Kingir, S. (2011). *Using the science writing heuristic approach to promote student understanding in chemical changes and mixtures*. Doktora tezi, ODTÜ, Ankara.
- Kızılıçık, H. Ş. ve Tan, M. (2011). İtme ve momentum konusunda çoktan seçmeli bir test geliştirilmesi. *Kastamonu Eğitim Dergisi*, 19(1), 185-198.
- Ramadas, J. & Driver, R. (1989). *Aspects of secondary students’ ideas about light*, Leeds, UK: University of Leeds, Center for Studies in Science and Mathematics Education

- Saxena, A.B. (1991). The understanding of the properties of light by students in India, *International Journal of Science Education*, 13, 283-289.
- Selley, N.J. (1996). Children's ideas on light and vision, *International Journal of Science Education*, 18, 713-723.
- Sevim, S. (2013). Promoting Conceptual Change in Science Which is More Effective: Conceptual Change Text or Analogy? *Journal Of Turkish Science Education*. Volume 10, Issue 3.
- Sevim, S. ve Tarım, S.S. (2017). Comparison of the Conceptual Change of Analogies and Conceptual Change Texts in Eliminating Students' Alternative Conceptions for Acids and Bases. *Turkish Journal of Teacher Education* Vol. 6(1) 47-60.
- Stead, B.F. & Osborne, R.J. (1980). Exploring science students' conceptions of light, *Australian Science Teaching Journal*, 26, 84-90.
- Şen, H. C. ve Eryılmaz, A. (2011). Bir başarı testi geliştirme çalışması: Basit elektrik devreleri başarı testi geçerlik ve güvenilirlik araştırması. *Yüzüncü Yıl Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, VIII (1), 1-39.
- Tavşancıl, E. (2010). *Tutumların ölçülmesi ve SPSS ile veri analizi*. Ankara: Nobel Yayın Dağıtım.
- Tekbıyık, A. ve Akdeniz, A.R. (2010). Ortaöğretim öğrencilerine yönelik güncel fizik tutum ölçeği: Geliştirilmesi, geçerlik ve güvenilirliği. *Türk Fen Eğitimi Dergisi*, 7(4), 134-144.
- Tekin, H. (2010). *Eğitimde ölçme ve değerlendirme* (20. Baskı). Ankara: Yargı Yayınevi.
- Tezbaşaran, A. (1997). *Likert tipi ölçek geliştirme kılavuzu*. Ankara: Türk Psikologlar Derneği Yayınları.
- Togerson, W.S. (1958). *Theory and Methods of Scaling*, New York: Wiley.
- Turgut, M. F. ve Baykul, Y. (1992). *Ölçme Teknikleri*, ÖSYM Yayınları, Ankara.

EK IŞIĞIN YAYILMASI' ÜNİTESİ BAŞARI TESTİ'

SORU 1. F.5.5.1.1.

5-Z sınıfı öğrencisi Erkin, Fen Bilimleri dersinde yaptığı bir deneyde öncelikle 1 m uzunluğundaki hortumu düz tutarak mum alevine bakmış ve mum alevini görebilmiştir. Daha sonraki aşamada ise hortumu bükerek mum alevine bakmış, fakat mum alevini görememiştir. Erkin, yaptığı bu deney sonucunda aşağıdaki sonuçlardan hangisine ulaşmıştır?

- A) Işık, doğrusal bir yol izler.
- B) Işık, boşlukta da yayılabilir.
- C) Işık, dalgalar halinde yayılır.
- D) Işık, madde ile karşılaştığında yansiyabilir.

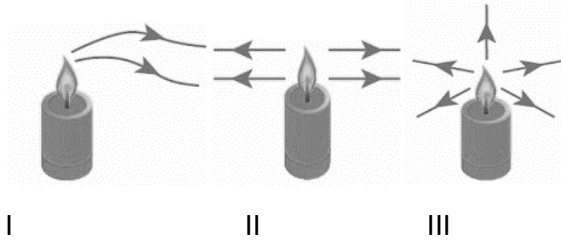
SORU 2. F.5.5.1.1.

Can, Mert ve Ece öncelikle boş bir ayakkabı kutusunun her tarafına delikler açarlar. Daha sonra ayakkabı kutusunun içine bir ışık kaynağı yerleştirirler. Sınıflarının perdelerini kapatarak sınıfın içini karanlık hale getirirler. Kutunun içindeki ışık kaynağını açtıklarında ayakkabı kutusunda açtıkları deliklerden ışık yayıldığını gözlemlerler.

Can, Mert ve Ece'nin yaptığı deneyin amacı aşağıdakilerden hangisidir?

- A) Işık, dalgalar halinde her yöne yayılır.
- B) Yansıma açısı ile kırılma açısı birbirine eşittir.
- C) Bir kaynaktan çıkan ışık doğrusal bir yol izleyerek her yönde yayılır.
- D) Işık kaynağından çıkan ışık, tek bir yönde yayılır.

SORU 3. F.5.5.1.1.



Bir ışık kaynağından çıkan ışığın izlediği yol yukarıdaki resimlerin hangisindeki gibi **olamaz**?

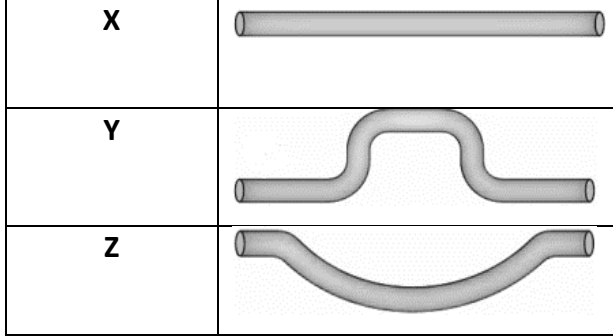
- A) Yalnız I
- B) II ve III
- C) I ve III
- D) I ve II

SORU 4. F.5.5.1.1.

'Bir kaynaktan çıkan ışık ışınlarıbir yol izler.'

Yukarıdaki ifadede gösterilen boşluğa hangisi yazılabilir?

- A) Dairesel B) Doğrusal
C) Eliptik D) Noktasal

SORU 5. F.5.5.1.1.

Yukarıdaki görselde şekilleri farklı bahçe hortumları verilmiştir. Hangisi ya da hangileri ile bakıldığında mum alevi görülebilir?

- A) Yalnız X B) X ve Z C) Yalnız Z D) X, Y ve Z

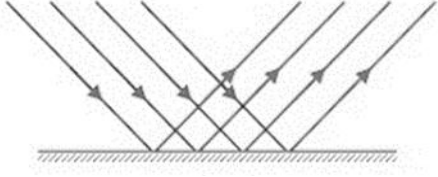
SORU 6. F.5.5.2.1.

| DÜZGÜN YANSIMA | DAĞINIK YANSIMA |
|----------------------------------|------------------------------------|
| 1- Düz Ayna | 4- Halı |
| 2- Buruşturulmuş alüminyum folyo | 5- Buruşturulmamış alüminyum folyo |
| 3- Durgun su yüzeyi | 6- Asfalt |

Ulaş, sınıfta yaptığı bir etkinlikte düzgün yansımaya ve dağınık yansımaya yapan yüzeyleri tabloya yerleştirmiştir. Ancak tabloda bir hata yapmıştır. Ulaş'ın yaptığı tablonun hatasız olabilmesi için hangi iki yüzey yer değiştirmelidir?

- A) 1 ve 4 B) 2 ve 5 C) 3 ve 6 D) 1 ve 5

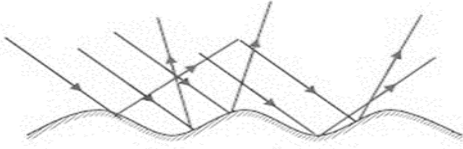
SORU 7. F.5.5.2.1.



Yukarıdaki görselde verilen yansıma çeşidi ile ilgili olarak aşağıdaki ifadelerden hangisi **yanlıştır**?

- A) Düzgün ve pürüzsüz yüzeylerde gerçekleşir.
- B) Net bir görüntü oluşmasını sağlar.
- C) Yüzeğe paralel olarak gelen ışık ışınları yine paralel olarak yansır.
- D) Dalgalı su yüzeyinde gerçekleşen yansıma, buna örnek olarak verilebilir.

SORU 8. F.5.5.2.1.



Aşağıdaki yüzeylerin hangisinde yukarıdaki görselde gösterilen yansıma çeşidi **gözlenmez**?

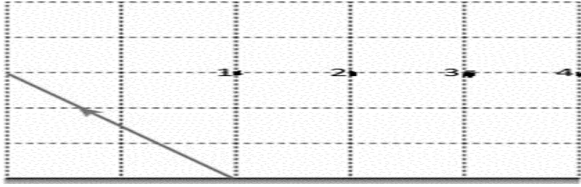
- A) Halı
- B) Asfalt
- C) Toprak
- D) Düz ayna

SORU 9. F.5.5.2.1.

- Düz ve parlak bir yüzeye birbirine paralel olarak gelen ışınlar paralel olarak yansır. Buna**X**..... denir.
- Pürüzlü bir yüzeye birbirine paralel olarak gelen ışınlar farklı yönlere yansır. Buna**Y**..... denir.

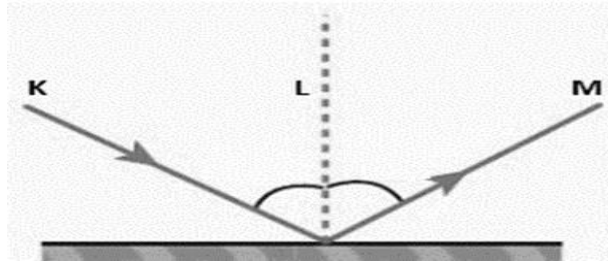
Yukarıdaki ifadelerde X ve Y ile gösterilen boşluklara ne gelmelidir?

| | X | Y |
|----|----------------|----------------|
| A) | Tam gölge | Yarı gölge |
| B) | Düzgün Yansım | Dağınık Yansım |
| C) | Işıma | Soğurulma |
| D) | Paralel Yansım | Kırılma |

SORU 10. F.5.5.2.1.

Yukarıdaki görselde yüzeyden yansıyan ışın gösterilmiştir. Buna göre yüzeye gelen ışın hangi noktadan geçerek yüzeye ulaşır?

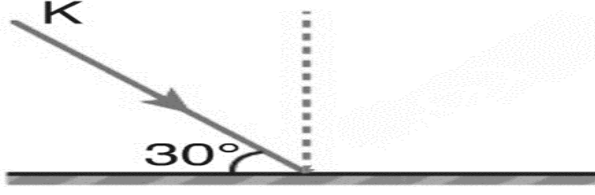
- A) 1 B) 2 C) 3 D) 4

SORU 11. F.5.5.2.2

Yukarıdaki görselde K, L ve M şeklinde gösterilen kısımlar hangi seçenekte doğru verilmiştir?

| | K | L | M |
|----|---------------|---------------|---------------|
| A) | Gelen Işın | Normal | Yansıyan Işın |
| B) | Normal | Gelen Işın | Yansıyan Işın |
| C) | Yansıyan Işın | Normal | Gelen Işın |
| D) | Normal | Yansıyan Işın | Gelen Işın |

SORU 12. F.5.5.2.2



Yukarıdaki görselde K ışınının yüzey ile yaptığı açı 30° 'dir. Buna göre yansıma açısı kaç derecedir?

- A) 30 B) 90 C) 180 D) 60

SORU 13. F.5.5.2.2

Yansıma Kanunları ile ilgili olarak;

I- Gelen ışın, normal ve yansıyan ışın aynı düzlem içindedir.

II- Gelme açısı ile yansıma açısı birbirine eşittir.

III- Yüzeye dik olarak gelen ışın zıt yönde geri döner.

İfadelerinden hangisi ya da hangileri doğrudur?

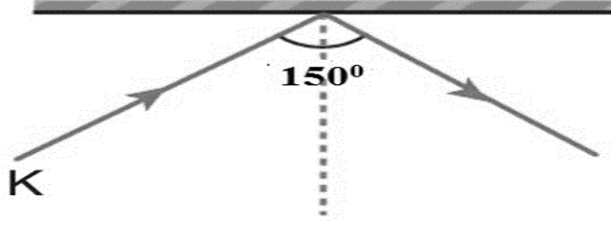
- A) Yalnız I B) I ve II
C) II ve III D) I, II ve III

SORU 14. F.5.5.2.2

Yapısında farklı açılarla yerleştirilmiş düz aynalar bulunan ve özellikle deniz altılarda suyun yüzeyinin gözetlenmesini sağlayan araca ne ad verilir?

- A) Periskop B) Mikroskop
C) Teleskop D) Stetoskop

SORU 15. F.5.5.2.2



Yukarıdaki ki görselde gelen ışın ile yansıyan ışın arasındaki açı 150° dir. Buna göre yansıma açısı kaç derecedir?

- A) 30 B) 75 C) 90 D) 60

SORU 16. F.5.5.3.1.

Işığı geçiren maddelere saydam madde denir. Buna göre aşağıdakilerden hangisi saydam madde **değildir**?

- A) Pencere camı B) Şeffaf naylon
C) Dikiz Aynası D) Hava

SORU 17. F.5.5.3.1.

Öğretmen: Işığı kısmen geçiren maddelere yarı saydam maddeler denir. Böyle maddelerin arkasındaki cisimleri net olarak göremeyiz. Bana yarı saydam maddelere örnek verebilir misiniz?

Eda: Tül Perde Seda: Yağlı kağıt Ayla: Fon kartonu Fulya: Buzlu cam

Hangi öğrencinin verdiği örnek **yanlıştır**?

- A) Eda B) Fulya C) Ayla D) Seda

SORU 18. F.5.5.3.1.

Bazı maddelerin kalınlıkları arttırılarak saydamlık durumları deęiřtirilebilir. Ařaęıdaki ifadelerden hangisi bu durumla iliřkilendirilebilir?

- A) Düz aynalarda cismin net görüntüsünün oluşması
- B) Derin bir havuzun dibinin net görülememesi
- C) Yüzeğe dik olarak gelen ışınlar zıt yönde geri dönmesi
- D) Bir kaynaktan çıkan ışık ışını doğrusal yolla yayılması

SORU 19. F.5.5.3.1.

- Üzerine gelen ışık ışınlarını dięer tarafa geçirmez.
- Bir tarafından bakıldığında arkasındaki cisimler görülmez.

Yukarıda bir maddeye ait özellikler sıralanmıştır. Ařaęıdakilerden hangisi bu maddeye örnek olarak **verilemez**?

- A) Tahta B) Ayna C) Cam D) Duvar

SORU 20. F.5.5.3.1.

I- Opak maddeler ışığı geçirir mi?

II- Yarı saydam maddelerin arkasında yer alan cisimler net olarak görülebilir mi?

III- Hava, saydam maddelere örnek olarak verilebilir mi?

Yukarıdaki soruları 'Evet', 'Hayır' şeklinde yanıtladığımızda ařaęıdaki hangi seçenekteki sıra oluşur?

| | I | II | III |
|----|-------|-------|------|
| A) | Evet | Evet | Evet |
| B) | Hayır | Hayır | Evet |
| C) | Evet | Hayır | Evet |
| D) | Hayır | Evet | Evet |

SORU 21. F.5.5.4.1

Bir ışık kaynağından yararlanarak bir cismin gölgesinin herhangi bir yere düşürülmesi ile yapılan sanat çeşidine gölge oyunları denir. Aşağıdakilerden hangisi geleneksel bir gölge oyunumuzdur?

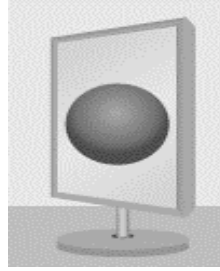
- A) Keloğlan B) Nasreddin Hoca
C) Karagöz-Hacivat D) Kırmızı Başlıklı Kız

SORU 22. F.5.5.4.1

Tam gölge olayı ile ilgili aşağıdaki ifadelerden hangisi **yanlıştır**?

- A) Işığın doğrusal yolla yayılması, tam gölge olayına sebep olur.
B) Saydam cisimlerin gölgesi en net gölgedir.
C) Bir cismin perde üzerindeki gölgesini basit çizimler yaparak tespit edebiliriz.
D) Tam gölgenin oluşabilmesi için bir ışık kaynağından çıkan ışınların opak cisme ulaşması gerekir.

SORU 23. F.5.5.4.1



Karanlık bir ortamda bir ışık kaynağı ile opak cisim perdenin önüne yerleştirildiğinde, cismin perdede oluşan gölgesi yukarıdaki gibi oluyor. Buna göre opak cisim aşağıdakilerden hangisi olabilir?

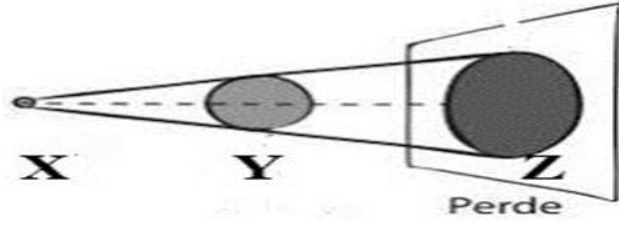
| A) | B) | C) | D) |
|----|----|----|----|
| | | | |

SORU 24. F.5.5.4.1

I-Kalem II-Cam III-Silgi

Fatma, sınıfta yaptığı bir etkinlikte el fenerinin önüne farklı cisimler koyarak tam gölge oluşturmak istemektedir. Fatma, yukarıdaki cisimlerden hangisini ya da hangilerini el fenerinin önüne yerleştirirse tam gölge elde edebilir?

A) Yalnız I B) I ve II C) I ve III D) I, II ve III

SORU 25. F.5.5.4.1

Yukarıdaki şekilde X, Y ve Z ile gösterilen kavramlar hangi seçenekte doğru verilmiştir?

| | X | Y | Z |
|----|--------------|--------------|--------------|
| A) | Işık kaynağı | Tam gölge | Opak cisim |
| B) | Işık kaynağı | Opak cisim | Tam gölge |
| C) | Opak cisim | Işık kaynağı | Tam gölge |
| D) | Opak cisim | Tam gölge | Işık kaynağı |

SORU 26. F.5.5.4.2.

Berke Can, elindeki feneri vazoya tutarak vazonun duvardaki gölgesini gözlemlemektedir.

Berke Can vazonun daha büyük bir gölgesini oluşturmak için;

I – El fenerini vazodan uzaklaştırmak

II – El fenerini vazoya yaklaştırmak

III – Vazoyu duvara yaklaştırmak

İşlemlerinden hangisini ya da hangilerini tek başına yapmalıdır?

A) Yalnız II B) I ve II C) II ve III D) I, II ve III

SORU 27. F.5.5.4.2.

5-C sınıfı öğrencisi Ceren bir el feneri ve tenis topunu kullanarak duvarda tenis topunun gölgesini oluşturmak istemektedir. Ceren tenis topunun **en küçük** gölgesini elde etmek için nasıl bir düzenek kurmalıdır?

| | Işık kaynağının cisme uzaklığı | Cismin perdeye uzaklığı |
|----|--------------------------------|-------------------------|
| A) | 5 cm | 5 cm |
| B) | 4 cm | 6 cm |
| C) | 7 cm | 3 cm |
| D) | 2 cm | 8 cm |

SORU 28. F.5.5.4.2.

- Cisim, ışık kaynağından uzaklaştırılırsa tam gölgesinin büyüklüğü artar mı?
- Cisim, perdeye yaklaştırılırsa tam gölgesinin büyüklüğü azalır mı?

Yukarıdaki soruların yanıtları sırasıyla hangi seçenekte doğru verilmiştir?

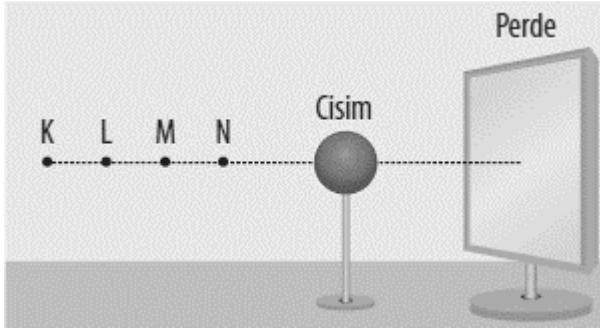
- A) Evet-Evet B) Hayır-Hayır
C) Evet-Hayır D) Hayır-Evet

SORU 29.F.5.5.4.2.

Sokak lambasının yanında oyun oynayan iki arkadaşın Enis, sokak lambasına yaklaşmakta; Meriç ise sokak lambasından uzaklaşmaktadır. Bu süreçte Enis ve Meriç'in gölge büyüklüklerinin değişimi nasıl olur?

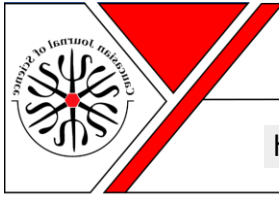
| | Enis'in gölgesinin büyüklüğü | Meriç'in gölgesinin büyüklüğü |
|----|------------------------------|-------------------------------|
| A) | Küçülür. | Büyür. |
| B) | Büyür. | Küçülür. |
| C) | Büyür. | Değişmez. |
| D) | Değişmez. | Küçülür. |

SORU 30. F.5.5.4.2.



Bir arařtırmacı yandaki dzenekte bir ışık kaynağını sırasıyla K, L, M ve N noktalarına koyarak perdede oluşan gölge boyunu gözlemlemiştir. Arařtırmacının bu deneydeki amacı aşağıdakilerden hangisidir?

- A) Cisim ile perde arasındaki uzaklığın gölge boyuna etkisini gözlemlemek
- B) Pürüzlü yüzeylerde dağınık yansımayı gözlemlemek
- C) Cismin büyüklüğü ile gölge boyu arasındaki ilişkiyi gözlemlemek
- D) Işık kaynağı ile cisim arasındaki uzaklığın gölge boyuna etkisini gözlemlemek



Öğretmenlerin Uzaktan Eğitime Yönelik Algı ve Tutumları

Cengiz GÜNDÜZALP¹

Makalenin Alanı: Uzaktan Eğitim

| Makale Bilgileri | Öz |
|--|---|
| Geliş Tarihi 31.10.2021 | Bu çalışma öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarını farklı değişkenler açısından incelemek amacıyla gerçekleştirilmiştir. Çalışma tarama modeli ile yürütülmüştür. Çalışmaya basit tesadüfi örnekleme yöntemi ile seçilen toplam 263 öğretmen katılmıştır. Çalışmaya ilişkin veriler “Uzaktan Eğitim Algı Ölçeği”, “Uzaktan Eğitim Tutum Ölçeği” ve “Kişisel Bilgi Formu” ile toplanmıştır. Çalışmanın veri analiz işlemleri için betimsel istatistikler ve bağımsız gruplar t-testi, tek yönlü varyans analizi (ANOVA), post-hoc testlerinden Games-Howell ve Gabriel testleri kullanılmıştır. Çalışmadan elde edilen bulgular öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin puan ortalamalarının birbirine oldukça yakın değerlerde ve orta düzeyde olduğunu göstermiştir. Ayrıca öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algılarında yaş ve mesleki deneyim açısından anlamlı farklar olduğu, cinsiyet, öğrenim durumu, branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ile bilgi ve iletişim teknolojileri (BİT) kullanma yeterlilikleri bakımından ise anlamlı farklar olmadığı anlaşılmıştır. Buna ek olarak öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumlarında mesleki deneyim, branş ve uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma bakımından anlamlı farklar olduğu, cinsiyet, yaş, öğrenim durumu ve BİT kullanma yeterlilikleri bakımından ise anlamlı farklar olmadığı belirlenmiştir. Sonuç olarak öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumları farklı değişkenler bakımından anlamlı değişimler göstermiştir. Bu durumun, öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumları üzerinde yaş, mesleki deneyim, branş ve uzaktan eğitim ile ilgili bilgi sahibi olmanın etkili olmasından, kaynaklandığı söylenebilir. |
| Kabul Tarihi 30.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Uzaktan Eğitim, Öğretmen Algı Tutum | |

| Article Info | Abstract |
|--|--|
| Received 31.10.2021 | This study was carried out to examine teachers' perceptions and attitudes towards distance education in terms of different variables. The study was carried out with the survey model. A total of 263 teachers, selected by simple random sampling method, participated in the study. The data of the study were collected by Scale of Distance Education Perception, Scale of Distance Education Attitude and Personal Information Form. For data analysis processes of the study, descriptive statistics and independent samples t-test, one-way analysis of variance (ANOVA), Games-Howell and Gabriel tests from among post-hoc tests were used. The findings obtained from the study showed that the average scores of teachers' perceptions and attitudes towards distance education were very close to each other and at a moderate level. In addition, it was understood that there were significant differences in teachers' perceptions towards distance education in terms of age and professional experience, and there were no significant differences in terms of gender, educational status, branch, sufficiencies of having knowledge about distance education and using information and communication technologies (ICT). In addition, it has been determined that there are significant differences in teachers' attitudes towards distance education in terms of professional experience, branch and knowledge about distance education, but there are no |
| Accepted 30.12.2021 | |
| Keywords Distance Education Teacher Perception Attitude | |

¹ Kafkas Üniversitesi, Kazım Karabekir Teknik Bilimler M.Y.O., Bilgisayar Teknolojileri Bölümü, Kars; e-mail: cengizgunduzalp@kafkas.edu.tr; ORCID: 0000-0001-5108-437X

significant differences in terms of gender, age, educational status and sufficiencies of ICT usage. As a result, teachers' perceptions and attitudes towards distance education showed significant changes in terms of different variables. It can be said that this situation is due to the fact that age, professional experience, branch and knowledge about distance education are effective on teachers' perceptions and attitudes towards distance education.

1. GİRİŞ

Bilgi ve iletişim teknolojilerinin, eğitim amaçlı bilgi edinme ve bu bilgiyi paylaşma adına zaman ve mekân kavramlarına bağlı kalmaması bu araçlar ile farklı bir eğitimin yapılmasına ön ayak olmuştur. Bu uzaktan eğitimi işaret eden bir durumdur. Uzaktan eğitim farklı teknolojilerin işe koşulmasını ve zaman ve mekân kavramlarından bağımsızlığı benimseyen bir eğitim şeklidir ve Moore ve Kearsley'in (2011) uzaktan eğitimi, geleneksel yapıya ek olarak çeşitli teknolojiler kullanılarak iletişimin sağlandığı, genel olarak öğretimin değişik mekanlarda gerçekleştirilebildiği öğretim ve bir plana uygun olarak yürütülen öğrenme faaliyeti olarak ifade etmesi de bu yöndedir.

Uzaktan eğitim geleneksel eğitim kurumlarının bir uygulaması olarak düşünülmüş ve uygulanmış bir eğitim şekli olsa bile alan seçimi, eğitim sürecinin zaman ve mekândan bağımsızlığı gibi farklı esnekliklerinden (Özkul & Aydın, 2016) dolayı günümüzde bağımsız bir eğitim modeli olarak anılmaktadır. Özarslan, Kubat ve Bay'ın (2007) uzaktan eğitimi, öğrenen ve öğretmenlerin mekan ve zaman şartına bağlı kalmadan birbirlerine bağlandığı ve farklı teknolojiler ile iletişim kurulan eğitim ortamları olduğunu ifade etmesi ve İşman'ın (2011) uzaktan eğitimin bireyin yaşam şartlarına uygun eğitim imkanları sağlayan, geleneksel eğitime göre daha esnek özellikleri olan ve bireyin yaşam şartlarına göre farklı şekillerde düzenlenebilen bir eğitim modeli olduğunu ifade etmeleri de bu yönde görüşlerdir. Uzaktan eğitimin sahip olduğu bu esnek yapı eğitimin farklı alanlarda yaygın bir şekilde kullanılabilirliğini artırmaktadır. Özellikle örgün eğitimin mümkün olmadığı durumlarda uzaktan eğitim bireylerin eğitim ihtiyaçlarını karşılamak adına işe koşulabilmektedir. Bu anlamda uzaktan eğitim özellikle bireyler arası fırsat eşitliğini sağlamak adına da oldukça güçlü bir model olarak görülmektedir. Uzaktan eğitimde farklı teknolojiler kullanılarak mesafeler ortadan kaldırılmış ve örgün eğitime alternatif olmaktan ziyade eğitimde fırsat eşitliğini sağlayarak örgün eğitimi destekleyen bir kimlik kazanılmıştır (Saiegh-Haddad, 2011). Boz (2019) bunu "uzaktan eğitim bireyin bilgiye ulaşmak adına zaman ve mekân sınırlamasına olmadan ulaşmasını sağlamanın yanında sosyal, ekonomik, coğrafi ve özel nedenlerden

dolayı geleneksel eğitimden faydalanamayan bireylerin dezavantajlarını asgari düzeye indirerek fırsat eşitliğine imkân sunabilmektedir” (s. 8) şeklinde ifade etmiştir. Aynı zamanda uzaktan eğitim, sınırlı koşullar çerçevesinde eğitimde bireylere fırsat eşitliği sağlayıp, bireylerin eğitim öğretim gereksinimlerini belirli ölçülerde karşılayıp, yenilikçi öğretim yaklaşımları sunarak ve öğrenci sayısında hızlı bir artış sağlayarak disiplinler arası bir bilim alanına dönüşüp (Fırat, 2016) bu amaca önemli bir katkı sunmuştur. Bu durum özellikle öğrenciler açısından uzaktan eğitimin fırsat eşitliğini sağlamada etkili ve kullanışlı bir eğitim modeli olduğunun işareti olarak görülebilir.

Uzaktan eğitimin sunduğu fırsat eşitliğini etkili ve amacına uygun olarak sağlayabilmesi için öğretmen rollerini gözden kaçırmamak gerekir. Nitekim uzaktan eğitimde öğretmenin, örgün eğitimdekinden daha kapsamlı rollere sahip olduğu ifade edilebilir (Kocaoğlu & Altuntaş, 2011). Eğitim öğretim faaliyetlerinde uzaktan eğitimin ve buna bağlı olarak çevrimiçi öğrenmenin öneminin giderek artması uzaktan eğitimde görev alan öğretmenlere yeni roller vermiştir (Kocaoğlu ve Altuntaş, 2011). Uzaktan eğitim sürecinde öğretmen, öğrenci kadar önemli bir pozisyonadadır, çeşitli roller üstlenir ve sürecin farklı aşamalarında yer alır. Öğretmenlerin uzaktan eğitim sürecinde özellikle öğrenci merkezli anlayışı ön plana çıkarma, farklı strateji, yöntem ve teknikleri işe koşma, çeşitli teknolojileri derslerinde etkin ve etkili bir şekilde kullanabilme ve ölçme ve değerlendirme süreçlerini yönetebilme rolleri dikkate değerdir ve bu roller öğretmenler tarafından iyi benimsenmelidir. Buna ek olarak öğretmenler uzaktan eğitim sürecinde öğrenme hedef ve amaçlarını açık bir şekilde sunma, amaçlara ulaşmak için gerekli kaynak ve stratejilere açık bir şekilde vurgu yapan etkinlikleri tasarlama, başarıya ulaşıp ulaşılmadığını göstermek adına bir plan geliştirme (Özkul & Aydın, 2016) konularında da çeşitli roller üstlenerek bu sürece oldukça önemli katkılar sunabilmektedir. Öyle ki uzaktan eğitimde öğretmenler sadece belli bir zaman diliminde değil, öğretim sürecinin her aşamasında geleneksel eğitimdeki görev, sorumluluk ve rollerini uzaktan eğitimde aynen devam ettirmektedir (Ülkü, 2018). Bu anlamda öğretmenlerin uzaktan eğitimdeki görev, sorumluluk ve rollerinin önemi, özellikle pandemi süreci ile birlikte uzaktan eğitime olan ilginin artmasıyla, daha da artmış ve dikkate değer görülmüştür.

Öğretmenlerin uzaktan eğitimde üstlendikleri görev, sorumluluk ve rolleri amacına uygun olarak benimsenmesi ve yerine getirmesi adına uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının olumlu yönde olması gerekmektedir. Öyle ki öğrencilerin uzaktan eğitim sistemlerini kullanma düzeylerini ortaya koymak adına dikkat edilecek değişkenler arasında

uzaktan eğitime yönelik algı ve beklentilerde vardır (Can, 2020). Ayrıca uzaktan eğitim sistemlerine yönelik teknoloji kullanımındaki en güçlü engellerden birinin tutum olması bu anlamda dikkate değerdir (Ertmer, Ottenbreit-Leftwich, Sadik, Sendurur & Sendurur, 2012). Algı, gerçek dünyanın kişisel olarak yorumlanmasını ifade eder ve algılar orijinal uyarıcıların birebir aynısı iken genel anlamda bireysel deneyimlerimiz tarafından değiştirilir, manipüle edilir veya bozular. (Plotnik, 2009). Tutum, ise “yaşantı ve deneyimler sonucu oluşan, ilgili olduğu bütün obje ve durumlara karşı bireyin davranışları üzerinde yönlendirici ya da dinamik bir etkileme gücüne sahip duygusal ve zihinsel hazırlık durumu” (Allport, 1935) olarak ifade edilebilir. Bu anlamda uzaktan eğitime yönelik algı ve tutum, öğretmenlerin bu alandaki duygu durumlarının yanında, süreçteki davranışları üzerinde de etkileyici ve yönlendirici bir etkiye sahip olacaktır. Uzaktan eğitim faaliyetlerinin beklentileri karşılması adına, uzaktan eğitime yönelik algı önemli bir faktör olarak görülmektedir (Başar, Arslan, Günsel & Akpınar, 2019). Buna ek olarak bireylerin öğrenmelerini oldukça önemli ölçüde etkileyen duyuşsal özelliklerden biri olan tutumda (Erden, 1995; Gardner, 1985; Tavşancıl, 2010) uzaktan eğitim sürecinde göz ardı edilemeyecek bir kavram olarak görülmektedir. Nitekim Okçu ve Ağır'ın (2006), Moçoşoğlu ve Kaya'nın (2020), Kocayigit ve Uşun'un (2020), Gök ve Çakmak'ın (2020) ve benzeri birçok çalışmanın bu yönde yapılması da buna işarettir. Bu anlamda uzaktan eğitim süreçlerinde öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumları dikkate değer kavramlardır. Sonuç olarak bu çalışma, yukarıda belirtilen durumlar göz önünde bulundurularak uzaktan eğitim sürecinde yer alan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının incelenmesi gerekliliğinden hareketle gerçekleştirilmiştir.

1.1. Amaç

Bu çalışmanın amacı, Milli Eğitim Bakanlığı'nda (MEB) görev yapan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarını cinsiyet, yaş, mesleki deneyim, öğrenim durumu, branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve bilgi ve iletişim teknolojilerini (BİT) kullanma yeterliliği açısından incelemektir.

1.2. Araştırma Soruları

1. Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumları hangi düzeydedir?
2. Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumları;

2.1. Cinsiyet,

- 2.2. Yaş,
- 2.3. Mesleki deneyim,
- 2.4. Öğrenim durumu,
- 2.5. Branş,
- 2.6. Uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma,
- 2.7. BİT kullanma yeterliliklerine göre anlamlı farklılık göstermekte midir?

2. Yöntem

2.1. Araştırma Modeli

Araştırma tarama modeli ile yürütülmüştür. Bu model var olan bir durumu olduğu haliyle betimlemeyi ve araştırma kapsamındaki kişi, olay veya nesneyi mevcut şartlar dahilinde tanımlamayı amaç edinmektedir (Karasar, 2008). Bu çalışmada da öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının cinsiyet, yaş, mesleki deneyim, öğrenim durumu, branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve BİT yeterliliğine göre farklılaşıp farklılaşmadığı incelenmiştir.

2.2. Evren ve Örneklem

Araştırmanın evrenini 2020-2021 eğitim öğretim yılı, bahar yarısında, Kars ili merkez ilçesindeki devlet ve özel okullarında farklı branşlarda görev yapan öğretmenler oluşturmaktadır. Araştırma örneklemini ise evren içerisinde basit seçkisiz örnekleme yöntemiyle belirlenmiş 263 öğretmen oluşturmuştur. Çalışmaya katılan öğretmenlere ilişkin demografik bilgiler Tablo 1’de yer almaktadır.

Tablo 1. Öğretmenlere ilişkin demografik bilgiler

| | N | % |
|------------------------|-----|------|
| Cinsiyet | | |
| Erkek | 116 | 44.1 |
| Kadın | 147 | 55.9 |
| Toplam | 263 | |
| Yaş | | |
| 21-30 | 73 | 27.8 |
| 31-40 | 111 | 42.3 |
| 41-50 | 63 | 23.9 |
| 51-60 | 16 | 6 |
| Toplam | 263 | |
| Mesleki Deneyim | | |
| 1-5 | 82 | 31.1 |
| 6-10 | 59 | 22.5 |

| | | |
|---|------------|------|
| 11-15 | 54 | 20.5 |
| 16-20 | 28 | 10.6 |
| 20 yıl üstü | 40 | 15.3 |
| Toplam | 263 | |
| Öğrenim Durumu | | |
| Ön lisans (iki yıllık eğitim enstitüsü veya eğitim yüksek okulu) | 5 | 1.9 |
| Lisans (dört yıllık eğitim fakültesi ve dört yıllık yüksekokulu) | 216 | 82.2 |
| Lisans üstü (Yüksek Lisans, Doktora) | 42 | 15.9 |
| Toplam | 263 | |
| Branş | | |
| Matematik | 22 | 8.3 |
| Sınıf | 65 | 24.8 |
| İngilizce\Almanca | 21 | 7.9 |
| Türkçe\Türk Dili ve Edebiyatı | 23 | 8.8 |
| Beden Eğitimi | 8 | 3 |
| Fen ve Teknoloji\Biyoloji\Kimya\Fizik | 23 | 8.8 |
| Din Kültürü\Meslek Dersleri | 14 | 5.3 |
| Rehberlik\Psikolojik Danış. | 11 | 4.1 |
| Bilgisayar | 6 | 2.2 |
| Özel Eğitim | 11 | 4.1 |
| Okul Öncesi\Çocuk Gelişimi | 15 | 5.7 |
| Sosyal Bilgiler\Tarih\Coğrafya | 20 | 7.7 |
| Felsefe | 5 | 1.9 |
| Görsel Sanatlar | 5 | 1.9 |
| Teknoloji Tasarım | 6 | 2.2 |
| Diğer (Elektrik, El San., Adalet, Büro Yön., Pazarlama, Ulaştırma Hiz.) | 9 | 3.4 |
| Toplam | 263 | |
| Uzaktan Eğitimle İlgili Bilgi Sahibi Olma | | |
| Çok az bilgiye sahibim | 7 | 2.6 |
| Yeterince bilgiye sahibim | 232 | 88.2 |
| Yeterince bilgiye sahip değilim | 24 | 9.2 |
| Toplam | 263 | |
| Bilgi ve İletişim Teknolojileri Yeterliliğiniz | | |
| Çok İyi | 53 | 20.3 |
| İyi | 139 | 52.8 |
| Orta Düzey | 71 | 26.9 |
| Toplam | 263 | |

Tablo 1’de çalışmaya katılan öğretmenlerin cinsiyet, yaş, mesleki deneyim, öğrenim durumu, branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve bilgi ve iletişim teknoloji yeterliliklerine ilişkin bilgiler yer almaktadır.

2.3. Veri Toplama Araçları

Uzaktan Eğitim Algı Ölçeği (UEAÖ)

Uzaktan Eğitim Algı Ölçeği Gök (2011) tarafından geliştirilmiştir. Ölçek “temel bakışa ilişkin algı”, “kaynaklara erişim” ve “eğitim öğretimi planlama” olarak üç faktörden oluşmaktadır. Ölçek temel bakışa ilişkin algı faktörde 10 madde, kaynaklara erişim faktöründe 6 madde ve eğitim öğretimi planlama faktöründe 5 madde olmak üzere toplam 21 maddeden

oluşmaktadır. Ölçeğin genelinden alınabilecek en düşük puan 21, en yüksek 105 puandır. Ölçekten alınan puanlar 21-49 puan arası ise algı düzeyi düşük, 49.01-77 arası orta, 77.01-105 arası ise yüksek olarak nitelendirilir. Ölçeğin Cronbach's Alpha iç güvenilirlik katsayısı .91'dir ve ölçek toplam varyansın % 56,88'i açıklayabilmektedir (Gök, 2011). Ölçeğin bu çalışmadaki Cronbach's Alpha iç güvenilirlik katsayısı ise .89'dur.

Uzaktan Eğitim Tutum Ölçeği (UETÖ)

Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumlarını belirlemek adına kullanılan Uzaktan Eğitim Tutum Ölçeği Ağır (2007) tarafından geliştirilmiştir. Ölçek toplam 21 maddeden oluşmaktadır. Ölçeğin 14 maddesi olumlu, 7 maddesi ise olumsuz özelliklerden oluşmaktadır. Ölçeğe ilişkin bu maddeler uzaktan eğitimin avantajları ve sınırlılıkları faktörleri altında sıralanmıştır. Ölçeğe ilişkin faktörler toplam varyansın %60.1'ini açıklamaktadır. Ölçeğin Cronbach's Alpha iç tutarlılık katsayısı 0.88'dir. Ölçeğin bu çalışmadaki Cronbach's Alpha iç güvenilirlik katsayısı ise .90 olarak belirlenmiştir.

Kişisel Bilgi Formu

Kişisel bilgi formu araştırmacı tarafından oluşturulmuştur. Katılımcıların demografik bilgilerini belirlemek için hazırlanan formda cinsiyet, yaş, mesleki deneyim, öğrenim durumu, branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve bilgi ve iletişim teknolojilerini kullanma yeterliliği başlıkları bulunmaktadır. Formda cinsiyet için "kadın-erkek", yaş için "21-30, 31-40, 41-50 ve 51-60" yaş aralıkları, mesleki deneyim için "1-5, 6-10, 11-15, 16-20 ve 20 yıl üstü" seçenekleri, öğrenim durumu için ise "ön lisans (iki yıllık eğitim enstitüsü veya eğitim yüksek okulu), lisans (dört yıllık eğitim fakültesi ve dört yıllık yüksekokulu) ve lisans üstü (Yüksek Lisans, Doktora)" seçenekleri yer almaktadır. Ayrıca formda branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve bilgi ve iletişim teknolojileri yeterliliklerini belirlemeye yönelik seçenekler bulunmaktadır.

2.4. Veri Toplama Süreci

Çalışma için ilk olarak gerekli izinler alınmıştır. Gerekli izinler alındıktan sonra Kars Milli Eğitim Müdürlüğü web sitesinden merkez ilçede bulunan okullara ilişkin güncel bilgiler incelenmiş ve veri toplanacak okullar belirlenmiştir. Okullara ilişkin bu bilgiler göz önünde bulundurularak Kars Milli Eğitim Müdürlüğü'nden alınan izin belgesi ile birlikte belirlenen

okullara ziyaretler gerçekleştirilmiştir. Ziyaret edilen okullarda çalışmanın veri toplama araçları olan kişisel bilgi formu, uzaktan eğitim algı ölçeği ve uzaktan eğitim tutum ölçeği ile öğretmenlerden gönüllülük esasına uygun olarak veriler toplanmıştır.

2.5. Verilerin Analizi

Çalışmada öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının belirlemek için betimsel istatistikler kullanılmıştır. Çalışmanın veri analiz işlemleri için kullanılacak testlerin belirlenmesi için verilerin normal dağılım gösterip göstermediği kontrol edilmiştir. Bu işlem için verilerin çarpıklık (skewness) ve basıklık (kurtosis) değerleri dikkate alınmıştır. Çarpıklık ve basıklığa ilişkin değerlerin -1.5 / +1.5 aralığında olması verilerin normal dağıldığını ifade edebilmektedir (Tabachnick, Fidell & Ullman 2007). Çalışmadan elde edilen verilere ilişkin çarpıklık ve basıklık değerleri belirtilen aralıklar arasında yer almıştır.

Çalışmada betimsel istatistiklerden yararlanılmıştır. Çalışmadan elde edilen verilerin normal dağıldığı ve genel varsayımların (ölçüm düzeyi, gözlemlerin bağımsızlığı, seçkisiz örneklem ve varyansların homojenliği) sağlandığı (Pallant, 2016) göz önünde bulundurularak istatistiksel analiz işlemleri için parametrik testlerden yararlanılmıştır. Değişkenler arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olup olmadığını belirlemek için bağımsız gruplar t-testi ve tek yönlü varyans analizi (ANOVA) testi kullanılmıştır. Öte yandan farkın hangi grup veya gruplardan kaynaklandığını ortaya koymak adına Post-Hoc testleri kullanılmıştır. Bu anlamda varyansların eşit olduğu durumlarda Gabriel testinden yararlanılmıştır. Gabriel testi varyanslar eşit ve örneklem büyüklüklerinin farklı olduğu durumlarda kullanılır (Gabriel, 1978). Diğer taraftan varyansların eşit olmadığı durumlarda ise Games-Howell testi kullanılmıştır. Games-Howell testi varyansların ve örneklem boyutlarının eşit olmadığı durumlarda kullanılır (Games, 1971).

2.6. Araştırma Etiği

Çalışma için Kars Valiliği İl Milli Eğitim Müdürlüğü 06/11/2020 tarih ve 16303785 sayılı Valilik Makam Onayı ve Kafkas Üniversitesi Sosyal ve Beşeri Bilimler Etik Kurulu 07/10/2020 tarihli 14 sayılı oturumda 4 nolu kararı ile izin alınmıştır. Çalışmada veri toplama aracı olarak kullanılan ölçekler için ilgili araştırmacılardan gerekli izinler alınmıştır. Çalışmada yapılan alıntılar bilimsel kurallara uygun bir şekilde gerçekleştirilmiş olup, bütün alıntılar kaynakça bölümünde belirtilmiştir.

3. BULGULAR

Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının hangi düzeyde olduğunu ortaya koymak adına yararlanılan betimsel istatistikler Tablo 3’de sunulmuştur.

Tablo 2. Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin betimleyici istatistikler

| | N | Min. | Mak. | \bar{X} | Sd |
|-------|-----|-------|-------|-----------|-------|
| Algı | 263 | 32.00 | 83.00 | 59.42 | 11.04 |
| Tutum | 263 | 36.00 | 86.00 | 61.52 | 10.02 |

Tablo 2 incelendiğinde öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı puan ortalamalarının ($\bar{X} = 59.42$) ve tutum puan ortalamalarının ($\bar{X} = 61.52$) birbirine oldukça yakın değerlerde ve öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının orta düzeyde olduğu görülmüştür. Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının cinsiyetlerine göre anlamlı bir farklılık gösterip göstermediğini belirlemek için yapılan bağımsız gruplar t-testi sonuçları Tablo 3’te yer almaktadır.

Tablo 3. Öğretmenlerin cinsiyetlerine göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin bağımsız gruplar t-testi sonuçları

| | | N | \bar{X} | Sd | t | df | p |
|-------|-------|-----|-----------|-------|-------|--------|------|
| Algı | Erkek | 116 | 58.38 | 11.40 | -1.35 | 261 | .178 |
| | Kadın | 147 | 60.23 | 10.72 | | | |
| Tutum | Erkek | 116 | 60.36 | 11.56 | -1.61 | 205.64 | .108 |
| | Kadın | 147 | 62.43 | 8.55 | | | |

Tablo 3’e göre erkek öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ($\bar{X} = 58.38$) ve tutum ($\bar{X} = 60.36$) puan ortalamalarının kadın öğretmenlerin algı ($\bar{X} = 60.23$) ve tutum ($\bar{X} = 62.43$) puan ortalamalarından daha düşük olduğu görülmüştür. Öğretmenlerin cinsiyetlerine göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutum puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olmadığı belirlenmiştir ($p > .05$).

Çalışmaya katılan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının yaşlarına göre istatistiksel olarak anlamlı bir farklılık gösterip göstermediğini tespit adına yapılan ANOVA testi sonuçları Tablo 4’te verilmiştir.

Tablo 4. Öğretmenlerin yaşlarına göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin ANOVA testi sonuçları

| | Yaş | N | \bar{X} | sd | F | p | Games-Howell |
|-------|-------|-----|-----------|-------|------|------|----------------------------|
| Algı | 21-30 | 73 | 64.26 | 7.02 | 5.22 | .002 | 21-30,31-40 21-30,41-50 |
| | 31-40 | 111 | 58.30 | 14.12 | | | |
| | 41-50 | 63 | 58.46 | 11.61 | | | |
| | 51-60 | 16 | 54.87 | 12.94 | | | |
| | Yaş | N | \bar{X} | sd | F | p | |
| Tutum | 21-30 | 73 | 63.41 | 10.15 | 1.65 | .178 | - |
| | 31-40 | 111 | 59.99 | 11.04 | | | |
| | 41-50 | 63 | 60.74 | 9.80 | | | |
| | 51-60 | 16 | 60.93 | 8.40 | | | |

Tablo 4 incelendiğinde 21-30 yaş arasındaki öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ($\bar{X}= 64.26$) ve tutum ($\bar{X}= 63.41$) puan ortalamalarının diğer yaş gruplarındaki öğretmenlerin algı ve tutum puan ortalamalarından daha yüksek olduğu belirlenmiştir. Öğretmenlerin yaşlarına göre uzaktan eğitime yönelik algı puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğu ($p<.05$), tutum puanları arasında ise istatistiksel olarak anlamlı bir farkın olmadığı tespit edilmiştir ($p>.05$). Games-Howell testi sonuçları da uzaktan eğitime yönelik algı puanları bakımından 21-30 yaş grubu ile 31-40 ve 41-50 yaş grupları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğunu göstermiştir ($p<.05$).

Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının mesleki deneyimlerine göre anlamlı bir farklılık gösterip göstermediğini ortaya koymak için yapılan ANOVA testi sonuçları Tablo 5’de yer almaktadır.

Tablo 5. Öğretmenlerin mesleki deneyimlerine göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin ANOVA testi sonuçları

| | Mesleki Deneyim | N | \bar{X} | sd | F | p | Games-Howell |
|-------|-----------------|----|-----------|-------|-------|------|---------------------------------------|
| Algı | 1-5 | 82 | 62.56 | 9.48 | 5.745 | .000 | 1-5, 20 yıl üstü 6-10, 20 yıl üstü |
| | 6-10 | 59 | 62.59 | 11.59 | | | |
| | 11-15 | 54 | 58.83 | 8.59 | | | |
| | 16-20 | 28 | 58.39 | 12.93 | | | |
| | 20 yıl üstü | 40 | 53.92 | 11.52 | | | |
| | Mesleki Deneyim | N | \bar{X} | sd | F | p | Gabriel |
| Tutum | 1-5 | 82 | 64.31 | 10.73 | 3.161 | .015 | 1-5, 20 yıl üstü |
| | 6-10 | 59 | 62.03 | 9.04 | | | |
| | 11-15 | 54 | 60.88 | 7.63 | | | |
| | 16-20 | 28 | 58.89 | 10.59 | | | |
| | 20 yıl üstü | 40 | 58.57 | 10.84 | | | |

Tablo 5’den 1-5 ve 6-10 yıllık mesleki deneyime sahip öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı puan ortalamalarının diğer grupların algı puan ortalamalarından daha yüksek olduğu anlaşılmıştır. Öğretmenlerin mesleki deneyimleri açısından uzaktan eğitime yönelik algı puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğu belirlenmiştir ($p < .05$). Games-Howell testi sonuçlarına göre 1-5 ve 6-10 yıllık mesleki deneyimi olan öğretmenlerin algı puan ortalamaları ile 20 yıl üstü mesleki deneyimi olan öğretmenlerin algı puan ortalamaları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğu tespit edilmiştir ($p < .05$). Öte yandan 1-5 yıllık mesleki deneyime sahip öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutum puan ortalamalarının ($\bar{X} = 64.31$) diğer grupların tutum puan ortalamalarından daha yüksek olduğu ve öğretmenlerin mesleki deneyimleri bakımından uzaktan eğitime yönelik tutum puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğu görülmüştür ($p < .05$). Gabriel testi sonuçları ise 1-5 yıllık mesleki deneyimi olan öğretmenlerin tutum puan ortalamaları ile 20 yıl üstü mesleki deneyimi olan öğretmenlerin tutum puan ortalamaları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğunu göstermiştir ($p < .05$).

Çalışmaya katılım gösteren öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının öğrenim durumlarına göre istatistiksel olarak anlamlı bir farklılık gösterip göstermediğini belirlemeye yönelik olarak yapılan ANOVA testi sonuçları Tablo 6 ile verilmiştir.

Tablo 6. Öğretmenlerin öğrenim durumlarına göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin ANOVA testi sonuçları

| | Öğrenim Durum | N | \bar{X} | sd | F | p |
|-------|---------------|-----|-----------|-------|-------|------|
| Algı | Ön Lisans | 5 | 63.60 | 1.67 | 2.112 | .123 |
| | Lisans | 216 | 59.18 | 11.88 | | |
| | Lisans üstü | 42 | 62.92 | 10.37 | | |
| | Öğrenim Durum | N | \bar{X} | sd | F | p |
| Tutum | Ön Lisans | 5 | 64.80 | .83 | 1.619 | .200 |
| | Lisans | 216 | 61.54 | 9.79 | | |
| | Lisans üstü | 42 | 58.66 | 14.13 | | |

Tablo 6’ya göre ön lisans mezunu öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ($\bar{X} = 63.60$) ve tutum ($\bar{X} = 64.80$) puan ortalamalarının diğer grupların algı ve tutum puan ortalamalarından daha yüksek olduğu görülmüştür. Öğretmenlerin öğrenim durumları bakımından uzaktan eğitime yönelik algı ve tutum puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olmadığı belirlenmiştir ($p > .05$).

Öğretmenlerin uzaktan eğitime ilişkin algı ve tutumlarında branşlarına göre istatistiksel olarak anlamlı bir farklılık olup olmadığını belirlemek için yapılan ANOVA testi sonuçları Tablo 7'de sunulmuştur.

Tablo 7. Öğretmenlerin branşlarına göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin ANOVA testi sonuçları

| Brans | N | \bar{X} | sd | F | p | |
|--|----|-----------|-------|-------|------|--|
| Matematik | 22 | 64.22 | 12.52 | | | |
| Sınıf | 65 | 57.75 | 13.19 | | | |
| İngilizce\Almanca | 21 | 60.42 | 5.65 | | | |
| Türkçe\Türk Dili ve Edebiyatı | 23 | 62.47 | 13.05 | | | |
| Beden Eğitimi | 8 | 63.75 | 1.38 | | | |
| Fen ve Tekn.\Biyoloji\Kimya\Fizik | 23 | 54.04 | 17.32 | | | |
| Din Kültürü\Meslek Dersleri | 14 | 62.28 | 6.79 | | | |
| Rehberlik | 11 | 63.09 | 2.34 | | | |
| Bilgisayar | 6 | 58.16 | 1.16 | 1.395 | .150 | - |
| Özel Eğitim | 11 | 58.18 | 6.16 | | | |
| Okul Öncesi\Çocuk Gelişimi | 15 | 58.06 | 15.49 | | | |
| Sosyal Bilgiler\Tarih\Coğrafya | 20 | 60.95 | 1.66 | | | |
| Felsefe | 5 | 66.40 | .89 | | | |
| Görsel Sanatlar | 5 | 65.40 | 18.74 | | | |
| Tekn. Tasarım | 6 | 54.00 | 4.42 | | | |
| Diğer(Büro Yön.,Pazarlama., Elektrik., Ulaştırma Hizm., Adalet., El San.) | 8 | 59.75 | 1.28 | | | |
| Brans | N | \bar{X} | sd | F | p | Games-Howell |
| Matematik | 22 | 62.54 | 10.12 | | | Sınıf-Diğer |
| Sınıf | 65 | 61.09 | 9.42 | | | Sınıf-Bilgisayar |
| İngilizce\Almanca | 21 | 63.80 | 4.99 | | | İngilizce\Almanca-Beden Eğitimi |
| Türkçe\Türk Dili ve Edebiyatı | 23 | 59.65 | 15.51 | | | Beden Eğitimi-Din Kültürü\Meslek Dersleri |
| Beden Eğitimi | 8 | 57.87 | 2.99 | | | Beden Eğitimi-Görsel Sanatlar |
| Fen ve Tekn.\Biyoloji\Kimya\Fizik | 23 | 53.47 | 13.69 | | | Beden Eğitimi-Diğer |
| Din Kültürü\Meslek Dersleri | 14 | 68.42 | 6.07 | | | Fen ve Tekn.\Biyoloji\Kimya\Fizik-Din Kültürü\Meslek |
| Rehberlik | 11 | 65.09 | 3.85 | | | Tekn.\Biyoloji\Kimya\Fizik-Bilgisayar |
| Bilgisayar | 6 | 67.33 | 1.03 | | | Fen ve |
| Özel Eğitim | 11 | 61.90 | 7.24 | 3.320 | .000 | Tekn.\Biyoloji\Kimya\Fizik-Görsel Sanatlar |
| Okul Öncesi\Çocuk Gelişimi | 15 | 65.06 | 9.06 | | | Din Kültürü\Meslek Dersleri-Sosyal Bilgiler\Tarih\Coğrafya |
| Sosyal Bilgiler\Tarih\Coğrafya | 20 | 56.95 | 9.06 | | | Bilgisayar-Sosyal Bilgiler\Tarih\Coğrafya |
| Felsefe | 5 | 50.40 | 11.50 | | | Sosyal Bilgiler\Tarih\Coğrafya-Görsel Sanatlar |
| Görsel Sanatlar | 5 | 66.60 | 3.04 | | | Sosyal Bilgiler\Tarih\Coğrafya-Diğer |
| Tekn. Tasarım | 6 | 61.50 | 4.37 | | | |
| Diğer(Büro Yön., Pazarlama., Elektrik., Ulaştırma Hizm., Adalet., El San.) | 8 | 68.00 | 1.30 | | | |

Tablo 7 incelendiğinde felsefe öğretmenlerinin uzaktan eğitime yönelik algı puan ortalamalarının (\bar{X} = 66.40) diğer grupların algı puan ortalamalarından daha yüksek olduğu ve öğretmenlerin branşları bakımından uzaktan eğitime yönelik algı puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olmadığı görülmüştür ($p>.05$). Diğer taraftan din kültür\meslek dersleri öğretmenlerinin uzaktan eğitime yönelik tutum puan ortalamalarının (\bar{X} = 68.42) diğer grupların tutum puan ortalamalarından daha yüksek olduğu tespit edilmiştir. Çalışmaya katılan öğretmenlerin branşları bakımından uzaktan eğitime yönelik tutum puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğu belirlenmiştir ($p<.05$). Games-Howell testi sonuçlarına göre de sınıf-diğer, sınıf-bilgisayar, İngilizce\Almanca-beden eğitim, beden eğitim-din kültürü\meslek dersleri, beden eğitim-görsel sanatlar, beden eğitim-diğer, fen ve Tekn.\biyoloji\kimya\fizik-din kültürü\meslek, Tekn.\biyoloji\kimya\fizik-bilgisayar, fen ve Tekn.\biyoloji\kimya\fizik-görsel sanatlar, din kültürü\meslek dersleri- sosyal bilgiler\tarih\coğrafya, bilgisayar-sosyal bilgiler\tarih\coğrafya, sosyal bilgiler\tarih\coğrafya-görsel sanatlar, sosyal bilgiler\tarih\coğrafya-diğer branşlarındaki öğretmenlerin tutum puan ortalamaları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğu görülmüştür ($p<.05$).

Çalışmaya katılan öğretmenlerin uzaktan eğitime ilişkin algı ve tutumlarının öğretmenlerin uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma durumlarına göre anlamlı bir farklılık oluşturup oluşturmadığını ortaya koymak adına yapılan ANOVA testi sonuçları Tablo 8’de yer almaktadır.

Tablo 8. Öğretmenlerin uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olmalarına göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin ANOVA testi sonuçları

| | Uzaktan Eğitimle İlgili Bilgi Sahibi Olma | N | \bar{X} | sd | F | p | |
|-------|---|-----|-----------|-------|-------|------|---|
| Algı | Çok az bilgiye sahip | 7 | 56.00 | 6.00 | 2.326 | .100 | - |
| | Yeterince bilgiye sahip | 232 | 59.95 | 12.92 | | | |
| | Yeterince bilgiye sahip değil | 24 | 54.45 | 10.12 | | | |
| | Uzaktan Eğitimle İlgili Bilgi Sahibi Olma | N | \bar{X} | sd | F | p | Gabriel |
| Tutum | Çok az bilgiye sahip | 7 | 59.42 | 4.54 | 4.668 | .010 | Yeterince bilgiye sahip-Yeterince bilgiye sahip değil |
| | Yeterince bilgiye sahip | 232 | 61.66 | 10.73 | | | |
| | Yeterince bilgiye sahip değil | 24 | 54.83 | 9.37 | | | |

Tablo 8 uzaktan eğitimle ilgili yeterince bilgiye sahip öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı puan ortalamalarının (\bar{X} = 59.95) diğer grupların algı puan ortalamalarından daha yüksek olduğunu ve öğretmenlerin uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olmaları bakımından

uzaktan eğitime yönelik algı puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olmadığını göstermiştir ($p>.05$). Bununla birlikte uzaktan eğitimle ilgili yeterince bilgiye sahip öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutum puan ortalamalarının ($\bar{X}= 61.66$) diğer grupların tutum puan ortalamalarından daha yüksek olduğu ve öğretmenlerin uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olmaları açısından uzaktan eğitime yönelik tutum puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olduğu görülmüştür ($p<.05$). Gabriel testi sonuçları da öğretmenlerin uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olmalarına göre yeterince bilgiye sahip olanlar ile yeterince bilgiye sahip olmayanların tutum puan ortalamaları arasında anlamlı bir fark olduğunu göstermiştir ($p<.05$).

Öğretmenlerin uzaktan eğitime ilişkin algı ve tutumlarında öğretmenlerin BİT kullanma yeterliliklerine göre anlamlı bir farklılık olup olmadığını belirlemek için yapılan ANOVA testi sonuçları Tablo 9'da verilmiştir.

Tablo 9. Öğretmenlerin BİT kullanma yeterliliklerine göre uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin ANOVA testi sonuçları

| | BİT Kullanma Yeterlilikleri | N | \bar{X} | sd | F | p |
|-------|------------------------------------|----------|-----------------------------|-----------|----------|----------|
| Algı | Çok iyi | 53 | 60.92 | 8.83 | 1.001 | .369 |
| | İyi | 139 | 60.12 | 11.79 | | |
| | Orta düzey | 71 | 58.23 | 11.85 | | |
| Tutum | Çok iyi | 53 | 62.69 | 10.58 | 2.010 | .136 |
| | İyi | 139 | 61.91 | 10.13 | | |
| | Orta düzey | 71 | 59.36 | 10.09 | | |

Tablo 9'a göre BİT kullanma yeterlilikleri çok iyi olan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ($\bar{X}= 60.92$) ve tutum ($\bar{X}= 62.69$) puan ortalamalarının diğer grupların algı ve tutum puan ortalamalarından daha yüksek olduğu görülmüştür. Öğretmenlerin BİT kullanma yeterlilikleri bakımından uzaktan eğitime yönelik algı ve tutum puanları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark olmadığı belirlenmiştir ($p>.05$).

4. TARTIŞMA, SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumları cinsiyet, yaş, mesleki deneyim, öğrenim durumu, branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve BİT'i kullanma yeterliliği açısından belirlenmeye çalışılmıştır. Uzaktan eğitim faaliyetlerinin oldukça yaygın bir hal aldığı son zamanlarda eğitim öğretimin önemli bileşenlerinden biri olan

öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının farklı değişkenlere göre ortaya konulması gelecekte yapılacak çalışmalara yol gösterebilecektir.

Çalışmada öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının orta düzeyde olduğu anlaşılmıştır. Öğretmenlerin uzaktan eğitim sürecinde çevresini sürekli olarak değerlendirerek buna yönelik belli algılar oluşturmasının ve bu algılar ile hareketlerinin temelini oluşturmasının (Kalağan, 2009) duruma etki ettiği düşünülebilir. Öğretmenlerin uzaktan eğitim sürecine ilişkin kendi yetkinliklerine dair algıları, uzaktan eğitime yönelik tutumları ve uzaktan eğitim konusunda sahip oldukları kişisel düşünceleri de (Yenerer, 2021) oluşan duruma etki etmiş olabilir. Nitekim Balaman ve Hanbay Tiryaki (2021) öğretmenlerin uzaktan eğitimi yeterli görmemekle birlikte, özellikle öğrencilerin derslerden uzaklaşmama, eğitim öğretim ortamlarından soğumama ve buna benzer sebeplere yönelik bir araç olarak gördüklerini ifade etmeleri ve Metin, Gürbey ve Çevik'in (2021) yaptıkları çalışmalarından elde ettikleri bulgulara göre öğretmenlerin, genel olarak uzaktan eğitime yönelik görüşlerinin olumsuz yönde olduğunu belirtmeleri de bu anlamda dikkate değerdir. Birçok öğretmen için uzaktan eğitim süreci ve uzaktan eğitimle ilişkili yapılar, yeni ve alışkın olmadıkları kavramları içerdiğinden bu durumun ortaya çıkması olası bir durumdur. Bu anlamda elde sonuçlar Salyers, Carter, Barrett ve Williams'ın (2010), Ülkü'nün (2018), Kocayığıt ve Uşun'un (2020), Gök ve Çakmak'ın (2020), Moçoşoğlu ve Kaya'nın (2020), Türküresin'in (2020), Karaca, Karaca, Karamustafaoğlu ve Özcan'ın (2021) ve Gökbulut'un (2021) araştırma bulguları ile benzer niteliklerdedir. Ancak Nasser ve Abouchedid'in (2010) okul yöneticiliği yapan öğretmenlerin uzaktan eğitim faaliyetlerini gerçekleştirme konusunda olumsuz tutum içerisinde oldukları yönündeki araştırma bulguları ile çelişmektedir. Bu durum öğretmenlerin idareci kimliğini ön plana çıkararak görüş bildirmesinden kaynaklanmış olabilir. Öyle ki uzaktan eğitime yönelik algı ve tutum üzerinde örneklemin sahip olduğu özelliklerin önemli etkileri olabilmektedir. Bu anlamda gelecek çalışmalarda örneklemlere ilişkin farklı özellikler göz önünde bulundurularak uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumun nitel araştırma yöntemleri ile daha derinlemesine incelenmesi alana önemli katkılar sunabilecektir.

Çalışma sonucunda kadın öğretmenlerin erkek öğretmenlere göre uzaktan eğitime yönelik algılarının daha yüksek olduğu ve uzaktan eğitime yönelik algının cinsiyete göre değişmediği belirlenmiştir. Oluşan durum kadın öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik deneyimlerinin daha fazla olmasından veya sahip oldukları deneyimleri daha iyi organize edebilmelerinden kaynaklanmış olabilir. Öyle ki algılar genellikle kendimize özgü

deneyimlerimiz tarafından düzenlenir (Plonik, 2009). Nitekim kadın öğretmenler erkek öğretmenlere göre teknoloji kullanımında kendilerini daha iyi hissederler (Yılmaz, Tomris & Kurt, 2016; Turgut & Başarmak, 2019). Elde edilen sonuçlar Kocayığıt ve Uşun'un (2020), Kurnaz, Kaynar, Barışık ve Doğrukök'ün (2020), Moçoşoğlu ve Kaya'nın (2020) ve Karaca ve diğerlerinin (2021) araştırma bulguları ile benzerlik göstermektedir. Çalışmadan elde edilen farklı bir sonuç ile 21-30 yaş aralığındaki öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algılarının diğer yaş gruplarındaki öğretmenlere göre daha yüksek olduğu ve yaşa göre uzaktan eğitime yönelik algının anlamlı bir farklılık gösterdiği anlaşılmıştır. Uzaktan eğitime yönelik algı bakımından 21-30 yaş aralığındaki öğretmenler ile 31-40 ve 41-50 yaş aralığındaki öğretmenler arasında anlamlı bir farklılık olduğu belirlenmiştir. Bu durum yaşı daha genç olan öğretmenlerin zorunlu görülen acil teknik değişimlere daha hızlı bir şekilde adapte olabilmelerinden kaynaklanmış olabilir. Bu anlamda normal koşullar altında yüz yüze, karma veya uzaktan çevrimiçi olarak yürütülen eğitim öğretim faaliyetlerinin, kriz durumlarından kaynaklı olarak geçici bir şekilde alternatif seçenekler ile yürütülmesini ifade eden acil uzaktan eğitim (Ferri, Grifoni & Guzzo, 2020; Hodge, Moore, Lockee, Trust & Bond, 2020) yaşı daha genç öğretmenler tarafından daha çabuk kabul görmüştür. Bu yaş grubundaki öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik teknik bilgi ve becerilerinin daha fazla olmasının ve bunları etkili bir şekilde kullanabilmelerinin de duruma etki ettiği düşünülebilir. Çalışma sonuçları Arslan'nın (2021) yaşı daha genç olan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algılarının daha yüksek olduğu yönündeki bulgular ile benzerlik gösterirken, uzaktan eğitime yönelik algının yaşa göre anlamlı bir fark oluşturmadığına ilişkin bulguları ile çelişmektedir. Bu durum belirtilen çalışmanın örnekleminin ortaokul öğretmenleri olmasından kaynaklanmış olabilir.

Çalışmanın diğer bir sonucu ile mesleki deneyime göre uzaktan eğitime yönelik algının anlamlı bir değişim gösterdiği belirlenmiştir. 1-5 ile 20 yıl üstü ve 6-10 ile 20 yıl üstü mesleki deneyime sahip öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algıları arasında anlamlı bir farklılık olduğu anlaşılmıştır. Bu durum mesleğe yeni başlayan öğretmenlerin uzaktan eğitim sürecini daha çabuk benimseyebilmelerinden kaynaklanabilir. Ayrıca bu gruptaki öğretmenlerin eğitim öğretim faaliyetlerine yeni teknikleri dahil etme konularında da etkin ve etkili olmalarının da bu duruma etkisi olmuş olabilir. Bu durumu gruptaki öğretmenlerin teknoloji kullanımı bakımından en güçlü engellerden biri olarak görülen bilgi ve beceri düzeylerinin (Ertmer et al., 2012) istenilen seviyede olması da etkileyebilir. Öte yandan oluşan durum uzaktan eğitim sürecinin mesleki deneyimi daha fazla olan öğretmenler için çok yeni ve farklı birçok

kavramları beraberinde getirmesinden kaynaklanabilir. Bu anlamda mesleki deneyimi daha fazla olan öğretmenlerin, uzaktan eğitime yönelik algısı teknoloji korkusundan olumsuz etkilenmiştir (Gök & Çakmak, 2020). Bu açıdan öğretmenlerin uzaktan eğitime ilişkin bilgi ve becerileri arttırılarak teknoloji kullanımına yönelik korkuları azaltılır (Ertmer & Ottenbreit-Leftwich, 2010). Çalışma sonuçları Arabacı'nın (2020) mesleki deneyimi daha az olan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algılarının daha yüksek olduğu yönündeki bulguları ile benzerlik göstermektedir. Ancak çalışmadan elde edilen sonuçlar Arabacı'nın (2020), Kurnaz ve diğerlerinin (2020) ve Karaca ve diğerlerinin (2021) uzaktan eğitime yönelik algının mesleki deneyime göre anlamlı bir farklılık göstermediğine ilişkin çalışma sonuçları ile çelişmektedir. Bu durum çalışma örneklemelerinin uzaktan eğitime yönelik süreçlerle ve bilgi ve iletişim teknolojileri ile ilgili bilgi ve becerilerindeki farklılıklarından kaynaklanmış olabilir. Öyle ki uzaktan eğitimdeki hizmet kalitesinde öğretmenlerin bu ortamlara yönelik bilgi, beceri ve deneyimleri oldukça önemlidir (Sae-Khow, 2014; Cabı, 2018).

Çalışmadan öğrenim durumuna göre uzaktan eğitime yönelik algının anlamlı bir değişim göstermediği anlaşılmıştır. Oluşan durum uzaktan eğitime yönelik algıda öğrenim durumunun çok fazla etkili olmadığını işaret edebilir. Bu anlamda öğretmenlerin öğrenim durumlarından ziyade bireysel olarak yeni teknolojilere karşı yatkınlıkları onların uzaktan eğitime yönelik algılarına daha olumlu katkılar (Gök & Çakmak, 2020) sunar. Elde edilen sonuçlar Kocayiğit ve Uşun'un (2020), Moçoşoğlu ve Kaya'nın (2020) ve Karaca ve diğerlerinin (2021) çalışma bulguları ile benzerlik göstermektedir. Diğer taraftan çalışmada öğretmenlerin branşlarına göre uzaktan eğitime yönelik algılarında anlamlı bir değişim olmadığı belirlenmiştir. Bu durum öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algıları üzerinde branşlarının belirgin bir etkisinin olmadığını ifade edilebilir. Nitekim farklı teknik araç, gereç ve süreçler ile sürekli etkileşim içinde olan branşlardaki öğretmenlerin algı puanlarının diğer branşlardaki öğretmenlerin algı puanlarına yakın değerlerde olması buna işaret edebilir. Oluşan durum öğretmenlerin branşlarından öte bireysel olarak uzaktan eğitimi, uzaktan eğitim teknolojileri ve bilgi ve iletişim teknolojilerini benimseme durumlarından kaynaklanmış olabilir. Çalışmaya katılan öğretmenlerin bu kavramları benimseme konusunda benzer tepkiler vermesinin duruma etkisi olmuş olabilir. Oluşan durumla bağlantılı olarak çalışma sonuçlarından öğretmenlerin uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma durumları ve BİT kullanma yeterlilikleri bakımından uzaktan eğitime yönelik algılarında herhangi bir farklılık olmadığı anlaşılmıştır. Öğretmenlerin önemli bir çoğunluğunun uzaktan eğitimle ilgili yeterince bilgi sahibi olmaları ve BİT kullanma

yeterliliklerinin yeterli düzeyde olma durumları göz önünde bulundurulduğunda bu sonuç dikkate değerdir. Öyle ki uzaktan eğitime yönelik sahip olunan bilgi uzaktan eğitime ilişkin yarar algısını etkilemektedir (Yıldız & Erdem, 2018). Oluşan durumun öğretmenlerin uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve BİT kullanma yeterlilikleri bakımından benzer özelliklere sahip olmalarından kaynaklanabileceği de ifade edilebilir.

Çalışma ile kadın öğretmenlerin erkek öğretmenlere göre daha yüksek uzaktan eğitime yönelik tutuma sahip olduğu belirlenmiştir. Ayrıca uzaktan eğitime yönelik tutumun cinsiyete göre değişmediği anlaşılmıştır. Bu durum uzaktan eğitime yönelik tutumda cinsiyetin etkili bir değişken olmadığını ifade edebilir. Oluşan durum kadın öğretmenlerin duygusal ve zihinsel açıdan uzaktan eğitime ilişkin süreçlere erkek öğretmenlerden daha hazır olmalarından ve eğitim öğretim faaliyetlerinde uzaktan eğitime geçişle gerçekleşen değişime davranışlarını daha iyi yönlendirerek ayak uydurabilmelerinden kaynaklanmış olabilir. Elde edilen sonuçlar Gündüz'ün (2013), Kutluca ve Yalman'nın (2013), Barış'ın (2015), Yıldız'ın (2016) ve Kocayiğit ve Uşun'un (2020) araştırma bulguları ile benzerdir. Ancak Yenilmez, Turgut ve Balbağ'ın (2017) araştırma bulguları ile benzeşmemektedir. Öte yandan çalışma sonuçları 21-30 yaş aralığındaki öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumlarının diğer yaş gruplarındaki öğretmenlere göre daha yüksek olduğunu ve yaşa göre uzaktan eğitime yönelik tutumun anlamlı farklılık göstermediğini işaret etmiştir. Yaşı daha genç olan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik duygu, düşünce ve davranışlarını organize eden eğilimlerinin daha yüksek olmasının durum üzerinde etkili olduğu düşünülebilir. Aynı zamanda bu gruptaki öğretmenlerin uzaktan eğitime ilişkin inanç ve bilgileri ile olumlu duygusal tepkilerinin (Tavşancıl, 2010) diğer yaş gruplarındaki öğretmenlere göre daha fazla olmasının da duruma kaynaklık ettiği söylenebilir. Çalışma ile ulaşılan sonuçlar Alea, Fabrea, Roldan ve Farooqi'nin (2020) ve Moçoşoğlu ve Kaya'nın (2020) araştırma sonuçları ile benzerlik göstermektedir. Çalışmanın farklı bir sonucundan mesleki deneyime göre uzaktan eğitime yönelik tutumun anlamlı bir değişim gösterdiği anlaşılmış olup, öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumları bakımından 1-5 ile 20 yıl üstü mesleki deneyime sahip gruplar arasında 1-5 yıllık mesleki deneyime sahip grup lehine anlamlı bir farklılık olduğu tespit edilmiştir. Öğretmenlik mesleğinde yeni olan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik bakış açılarının diğer gruptaki öğretmenlere göre daha olumlu olmasının bu duruma etkisi olduğu söylenebilir. Ayrıca bu gruptaki öğretmenlerin diğer gruptaki öğretmenlere göre farklı alanlardaki bilgi ve iletişim teknolojilerine daha aşina olmalarının ve bu teknolojileri benimseme konusunda yabancılik

çekmemelerinin de buna kaynaklık ettiği düşünülebilir. Oluşan bu durum öğretmenlik mesleğine ilişkin deneyimi daha az olan öğretmenlerin, farklı tekniklerle erken yaşlarda etkileşimde bulunmalarından, günlük yaşamlarında bu teknolojileri etkin ve etkili bir şekilde kullanmalarından, dolayısıyla bu teknolojilere yabancı olmamalarından kaynaklanmıştır (Ağır, 2007). Elde edilen sonuçlar Okçu ve Ağır'ın (2006), Ağır'ın (2007), Begimbetova'nın (2015), Kocayığit ve Uşun'un (2020), Moçoşoğlu ve Kaya'nın (2020), Alea ve diğerlerinin (2020) ve Akman'ın (2021) araştırmalarından elde ettikleri sonuçlar ile benzerlik gösterirken, Ülkü'nün (2018) araştırma bulguları ile çelişmektedir. Bu durum belirtilen çalışmanın örnekleminin sadece ilkökul öğretmenlerinden oluşmasından kaynaklanmış olabilir.

Çalışmadan grupların öğrenim durumuna göre uzaktan eğitime yönelik tutumlarında anlamlı bir farklılık olmadığı anlaşılmıştır. Uzaktan eğitime yönelik tutumlar üzerinde öğretmenlerin öğrenim durumlarının çok fazla etkili olmadığı düşünülebilir. Öğretmenlerin mezun oldukları bölüm ve programlarda uzaktan eğitime ve bilgi ve iletişim teknolojilerine yönelik aldıkları derslerin yeterli düzeyde olmamasının bu duruma etkisi olmuş olabilir. Çalışma sonuçları Ağır'ın (2007), Kocayığit ve Uşun'un (2020), Moçoşoğlu ve Kaya'nın (2020) ve Karaca ve diğerlerinin (2021) araştırma bulgularına benzer niteliktedir. Ancak Ülkü'nün (2018) ilkökul öğretmenleriyle ve Arslan'nın (2021) ortaokul öğretmenleri ile yaptığı çalışmalarına ilişkin sonuçları ile farklılık göstermektedir. Diğer taraftan çalışmanın farklı bir sonucundan, öğretmenlerin branşlarına göre uzaktan eğitime yönelik tutumlarında anlamlı bir farklılık olduğu ve öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumlarının farklı branşlar arasında anlamlı değişimler gösterdiği belirlenmiştir. Farklı branşlardaki öğretmenlerin uzaktan eğitim ve uzaktan eğitimle bağlantılı kavram, süreç ve yapılar hakkında sahip oldukları duygu ve düşüncelerin çeşitliliği oluşan duruma kaynaklık etmiş olabilir. Buna ek olarak mevcut durum öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik sahip olduğu bilgi düzeyi ve BİT kullanma yeterliliklerine ilişkin niteliklerindeki farklılıklardan da kaynaklanabilir. Elde edilen sonuçlar Baek, Zhang ve Yun'un (2017), Yahşi ve Kırkıç'ın (2020) çalışma sonuçları ile benzerlik gösterirken, Ağır'ın (2007), Ülkü'nün (2018), Kocayığit ve Uşun'un (2020) ve Akman'ın (2021) araştırma bulguları ile çelişmektedir. Çalışmanın uzaktan eğitime yönelik tutumun uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma durumuna göre anlamlı bir şekilde farklılaştığı ve uzaktan eğitime yönelik yeterince bilgiye sahip öğretmenler ile yeterince bilgiye sahip olmayan öğretmenler arasında anlamlı bir farklılık olduğu yönündeki sonuçları bu sonucu destekler niteliktedir. Öğretmenlerin uzaktan eğitime ilişkin kavram ve süreçlere yönelik bilgi

seviyelerindeki farklılıklar oluşan duruma katkı sunmuş olabilir. Öğretmenlerin önemli bir çoğunluğunun daha önceden bilgi sahibi ve aşına olduğu teknolojileri benimseme konusunda sıkıntı yaşamamalarının da bu duruma etkisi olmuş olabilir. Çalışmadan elde edilen sonuçlar Ağır'ın (2007), Ergin'in (2010) ve Şimşek, İskenderoğlu ve İskenderoğlu'nun (2010) çalışma sonuçları ile benzer nitelikte olup, Ayvaz'ın (2012), Horzum, Albayrak ve Ayvaz'ın (2012) ve Akman'ın (2021) araştırma bulguları ile farklılıklar göstermektedir. Çalışmanın başka bir sonucundan BİT kullanma yeterliliği açısından öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumlarının anlamlı bir farklılık göstermediği belirlenmiştir. Öğretmenlerin BİT'e yönelik bilgi ve becerilerinin benzer niteliklerde olmasının bu durumun oluşmasına etki ettiği düşünülebilir. Öğretmenlerin günlük yaşamda birçok alanda oldukça yaygın bir şekilde kullanılan bilgi ve iletişim teknolojilerine yatkınlığı ve bu teknolojileri benimsemelerinde zorluk yaşamamaları, BİT kullanma yeterliliklerini etkileyerek bu sonuca katkı sunmuş olabilir. Nitekim uzaktan eğitim, BİT aracılığıyla içerik aktarımının yapıldığı ve etkileşimli öğrenmenin sağlanmaya çalışıldığı bir öğretim yöntemi (Moore & Kearsley, 2011) olarak görüldüğü için BİT kullanma yeterliliklerinin istenilen düzeyde olması uzaktan eğitime yönelik tutumu önemli ölçüde etkileyebilmektedir.

Sonuç olarak bu çalışmada öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarına ilişkin puan ortalamalarının birbirine oldukça yakın olduğu ve orta düzeyde olduğu belirlenmiştir. Ayrıca öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının farklı değişkenlere göre değişiklik gösterdiği ortaya konulmuştur. Çalışmadan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algılarında yaş ve mesleki deneyim açısından anlamlı farklar olduğu, cinsiyet, öğrenim durumu, branş, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma ve BİT kullanma yeterlilikleri bakımından ise anlamlı farklar olmadığı anlaşılmıştır. Öte yandan çalışmada öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumlarında mesleki deneyim, branş ve uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olma bakımından anlamlı farklar olduğu, cinsiyet, yaş, öğrenim durumu ve BİT kullanma yeterlilikleri bakımından ise anlamlı farklar olmadığı belirlenmiştir. Öğretmenlerin yaş, mesleki deneyim, uzaktan eğitimle ilgili bilgi sahibi olmaları arttıkça ve branşları farklılaştıkça, farklı teknolojileri kabullenme ve kullanma konusundaki algılarının ve tutumlarının farklılaşması bu duruma etki etmiş olabilir. Oluşan durum öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumları üzerinde farklı değişkenlerin etkili olduğunu gösterebilmektedir. Bu anlamda gelecekte yapılacak çalışmalarda belirtilen durumların

dikkate alınması yapılacak çalışmaların alana önemli katkılar sunmasına yardımcı olabilecektir. Çalışmadan elde edilen bulgulara bağlı olarak bazı öneriler sunulabilir:

- Çalışmada öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarının orta düzey olduğu anlaşılmıştır. Öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik algı ve tutumlarını üst düzeylere çıkarmak adına öğretmenlere yönelik olarak uzaktan eğitim ve BİT ile ilgili daha fazla çalışmanın yapılması düşünülebilir.
- Bu çalışmanın çalışma grubu Kars ili merkez ilçesindeki öğretmenlerden oluşmaktadır. Gelecekte yapılacak çalışmaların çalışma grubu daha fazla öğretmeni içerecek şekilde oluşturulabilir.
- Çalışma tarama modeli ile yürütülmüştür. İlerde yapılacak çalışmalarda nitel araştırma yöntemleri kullanılıp, daha derinlemesine analizler yapılarak farklı bulgulara ulaşılabilir.
- Milli Eğitim Bakanlığına bağlı okullarda öğretmenlere uzaktan eğitime yönelik hizmet içi kurslar verilebilir.

KAYNAKLAR

- Ağır, F. (2007). *Özel okullarda ve devlet okullarında çalışan ilköğretim öğretmenlerinin uzaktan eğitime karşı tutumlarının belirlenmesi*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Balıkesir Üniversitesi, Balıkesir.
- Ağır, F. (2007). Uzaktan eğitime karşı tutum ölçeği geliştirmeye yönelik geçerlilik ve güvenilirlik çalışması. *Education Sciences*, 3(2), 128-139.
- Akman, A. (2021). *İlköğretim din kültürü ve ahlak bilgisi öğretmenlerinin uzaktan eğitime yönelik tutumları*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Necmettin Erbakan Üniversitesi, Konya.
- Alea, L. A., Fabrea, M. F., Roldan, R. D. A., & Farooqi, A. Z. (2020). Teachers' Covid-19 awareness, distance learning education experiences and perceptions towards institutional readiness and challenges. *International Journal of Learning, Teaching and Educational Research*, 19(6)
- Allport, G. W. (1935). Attitudes. In C. Murchison (Ed.), *A Handbook of social psychologyn* (pp. 798-844). Worcester, MA: Clark University Press.
- Arabacı, S. (2020). *Öğretmenlerin uzaktan eğitim algısı ve öğrencilerin uzaktan eğitime yönelik tutumları*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Erzincan Binali Yıldırım Üniversitesi, Erzincan.
- Arslan, L. (2021). *Ortaokul öğretmenlerinin uzaktan eğitime, teknolojilerine ve yöntemlerine ilişkin görüşleri: Denizli ili örneği*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Pamukkale Üniversitesi, Denizli.
- Baek, Y., Zhang, H. & Yun, S. (2017). Teachers' attitudes toward mobile learning in Korea. *The Turkish Online Journal of Educational Technology*, 16(1), 154-163.
- Balaman, F. & Hanbay Tiryaki, S. (2021). Corona virüs (Covid-19) nedeniyle mecburi yürütülen uzaktan eğitim hakkında öğretmen görüşleri. *Itobiad: Journal of the Human & Social Science Researches*, 10(1), 52-84.
- Barış, M. (2015). Üniversite öğrencilerinin uzaktan öğretime yönelik tutumlarının incelenmesi: Namık Kemal Üniversitesi örneği. *Sakarya University Journal of Education*, 5(2), 36-46.
- Başar, M., Arslan, S., Günsel, E. & Akpınar, M. (2019). Öğretmen adaylarının uzaktan eğitim algısı. *Journal of Multidisciplinary Studies in Education*, 3 (2) , 14-22.
- Begimbetova, K. (2015). *Uzaktan eğitimde öğretim elemanı ve öğrencilerin memnuniyet düzeyi*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Gazi Üniversitesi, Ankara.
- Boz, A. (2019). *Öğretmen adaylarının teknoloji kabullenme ve kullanımı bağlamında uzaktan eğitim algılarının incelenmesi*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Necmettin Erbakan Üniversitesi, Konya.
- Cabı, E. (2018). Teaching computer literacy via distance education: Experiences of the instructors. *Başkent University Journal of Education*, 5(1), 61-68.
- Can, E. (2020). Coronavirüs (Covid-19) pandemisi ve pedagojik yansımaları: Türkiye'de açık ve uzaktan eğitim uygulamaları. *Açıköğretim Uygulamaları ve Araştırmaları Dergisi*, 6(2),11-53.
- Erden, M. (1995). Öğretmen adaylarının öğretmenlik sertifikası derslerine yönelik tutumları. *Hacettepe Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 11(11), 99-104.
- Ergin, C. (2010). *İlköğretim öğretmenlerinin uzaktan eğitime bakış açıları (Van ili örneği)*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Van.
- Ertmer, P. A. & Ottenbreit-Leftwich, A. T. (2010). Teacher technology change: how knowledge, beliefs, and culture intersect. *Journal of Research on Technology in Education*, 42, 255–284.

- Ertmer, P. A., Ottenbreit-Leftwich, A. T., Sadik, O., Sendurur, E. ve Sendurur, P. (2012). Teacher beliefs and technology integration practices: A critical relationship. *Computers and Education*, 59, 423-435.
- Ferri, F., Grifoni, G. & Guzzo, T. (2020). Online learning and emergency remote teaching: Opportunities and challenges in emergency situations. *Societies*, 10(4), 1-18.
- Fırat, M. (2016). 21. yüzyılda uzaktan öğretimde paradigma değişimi. *Yükseköğretim ve Bilim Dergisi/Journal of Higher Education and Science*, 6(2), 142-150.
- Gabriel, K. R. (1978). A simple method of multiple comparisons of means. *Journal of the American Statistical Association*, 73(364), 724-729.
- Games, P. A. (1971). Multiple comparisons of means. *American Educational Research Journal*, 8(3), 531-565.
- Gardner, R. C. (1985). *Social psychology and second language learning: The role of attitudes and motivation*. Arnold.
- Gök, B. & Çakmak, E. K. (2020). Uzaktan eğitimde ders veren öğretim elemanlarının uzaktan eğitim algısı. *Kastamonu Eğitim Dergisi*, 28(5), 1915-1931.
- Gök, B. (2011). *Uzaktan eğitimde görev alan öğretim elemanlarının uzaktan eğitim algısı*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Gazi Üniversitesi, Ankara.
- Gökbulut, B. (2021). Uzaktan eğitim öğrencilerinin bakış açısıyla uzaktan eğitim ve mobil öğrenme. *Eğitim Teknolojisi Kuram ve Uygulama*, 11 (1) , 160-177.
- Gündüz, A. Y. (2013). *Öğretmen adaylarının uzaktan eğitim algısı*. (Yayımlanmamış yüksek lisans tezi). Sakarya Üniversitesi, Sakarya.
- Hodge, C., Moore, S., Lockee, B., Trust, T. & Bond, A. (2020, september, 10). *The difference between emergency remote teaching and online learning*. EDUCAUSE Review. <https://er.educause.edu/articles/2020/3/the-difference-between-emergency-remoteteaching-and-online-learning>. 10.09.2021 tarihinde erişilmiştir.
- Horzum, M. B., Albayrak, E. & Ayvaz, A. (2012). Sınıf öğretmenlerinin hizmet içi eğitimde uzaktan eğitime yönelik inançları. *Ege Eğitim Dergisi*, 13(1), 56-72.
- İşman, A. (2011). *Uzaktan eğitim*. Pegem Akademi.
- Kalağan G. (2009). *Araştırma görevlilerinin örgütsel destek algıları ile örgütsel sinizm tutumları arasındaki ilişki*. (Yayımlanmış yüksek lisans tezi). Akdeniz Üniversitesi, Antalya.
- Karaca, İ. , Karaca, N. , Karamustafaoglu, N. & Özcan, M. (2021). Öğretmenlerin uzaktan eğitimin yararına ilişkin algılarının incelenmesi. *Humanistic Perspective*, 3(1), 209-224.
- Karasar, N. (2008). *Bilimsel araştırma yöntemi*. Nobel Yayın Dağıtım.
- Kocaoğlu, B. & Aluntaş, R., (2011), Uzaktan eğitimde öğretmen rolleri. *ISTEC 2011*, ISSN: 2146-7382.
- Kocayığıt, A. & Uşun, S. (2020). Milli Eğitim Bakanlığına bağlı okullarda görev yapan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumları (Burdur ili örneği). *Avrasya Uluslararası Araştırmalar Dergisi*, 8(23), 285-299.
- Kurnaz, A., Kaynar, H., Barışık, C. Ş. & Doğrükök, B. (2020). Öğretmenlerin uzaktan eğitime ilişkin görüşleri. *Milli Eğitim Dergisi*, 49(1), 293-322.
- Kutluca, T. & Yalman, M. (2013). Matematik öğretmeni adaylarının bölüm dersleri için kullanılan uzaktan eğitim sistemi hakkındaki yaklaşımları. *Dicle Üniversitesi Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi Dergisi*, (21), 197-208.

- Metin, M. , Gürbey, S. & Çevik, A. (2021). Covid-19 pandemi sürecinde uzaktan eğitime yönelik öğretmen görüşleri . *Maarif Mektepleri Uluslararası Eğitim Bilimleri Dergisi* , 5 (1) , 66-89.
- Moçoşoğlu, B. & Kaya, A. (2020). Koronavirüs hastalığı (Covid-19) sebebiyle uygulanan uzaktan eğitime yönelik öğretmen tutumlarının incelenmesi. *Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Eğitim Dergisi*, 2(1), 15-43.
- Moore, M., & Kearsley, G. (2011). *Distance education: A systems view of online learning*. Belmont, CA: Cengage Learning.
- Nasser, R. & Abouchedid, K. (2010). Attitudes and concerns towards distance education: the case of Lebanon. *Online Journal of Distance Learning Administration*, 3(4), 1-12.
- Okçu, A. & Ağır, F. (2006). İlköğretimde çalışan öğretmenlerin internet kullanımına karşı tutumlarının belirlenmesi. *7. Fen Bilimleri ve Matematik Eğitimi Kongresi Özetler Kitabı* (s.288). Gazi Üniversitesi, Ankara.
- Özarlan, M., Kubat, B. & Bay, Ö.F. (2007). Uzaktan eğitim için entegre ofis dersinin web tabanlı içeriğinin geliştirilmesi ve üretilmesi. *Akademik Bilişim Konferansı Bildiri Kitabı* içinde (ss. 159-166). Dumlupınar Üniversitesi, Kütahya.
- Özkul, A., E. & Aydın, C., H. (2016). Açık ve uzaktan öğrenmenin temelleri ve araştırmaları. Y. Göktaş & K. Çağıltay (Editörler). *Öğretim Teknolojilerinin temelleri* (2. baskı, ss. 633-654). Pegem Akademi.
- Pallant, J. (2016). *SPSS kullanma kılavuzu SPSS ile adım adım veri analizi* (S. Balci ve B. Ahi, çev.). Anı Yayıncılık.
- Plotnik, R. (2009). Algı. (T. Geniş, çev.). *Psikolojiye Giriş* (s.120-146). Kaknüs Yayınları.
- Sae-Khow, J. (2014). Developing of Indicators of an e-learning benchmarking model for higher education institutions. *TOJET: The Turkish Online Journal of Educational Technology*, 13(2), 35-43.
- Saiegh-Haddad, E. (2011). Phonological processing in diglossic Arabic: The role of linguistic distance. In E. Broselow, & H. Ouli (Eds.), *Perspectives on Arabic Linguistics XXII* (pp. 269–280). John Benjamins Publishers.
- Salyers, V., Carter, L., Barrett, P. & Williams, L. (2010). Evaluating student and faculty satisfaction with a pedagogical framework, *The Journal of Distance Education*, 24(3).
- Şimşek, A., İskenderoğlu, T. & İskenderoğlu, M. (2010). Investigating preservice computer teachers' attitudes towards distance education. *Procedia-Social and Behavioral Sciences*, 9, 324-328.
- Tabachnick, B. G., Fidell, L. S., & Ullman, J. B. (2007). *Using multivariate statistics* (Vol. 5, pp. 481-498). Boston, MA: Pearson.
- Tavşancıl, E. (2010). *Tutumların ölçülmesi ve SPSS ile veri analizi*. Nobel Yayıncılık.
- Turgut, G. & Başarmak, U. (2019). Ortaokul öğretmenlerinin teknoloji entegrasyonu yeterliklerinin farklı değişkenlere göre incelenmesi. *Türk Akademik Yayınları Dergisi (TAY Journal)*, 3(2), 51-66.
- Türküresin, H. E. (2020). Covid-19 pandemi döneminde yürütülen uzaktan eğitim uygulamalarının öğretmen adaylarının görüşleri bağlamında incelenmesi. *Milli Eğitim Dergisi*, 49(1), 597-618.
- Ülkü, S. (2018). *İlkokullarda görev yapan öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumları*. (Yayımlanmış yüksek lisans tezi). Abant İzzet Baysal Üniversitesi, Bolu.

- Yahşi, Ö. & Kırkçı, K. A. (2020). Uzaktan eğitim sürecinde öğretmenlerin uzaktan eğitime yönelik tutumlarının incelenmesi. *Turkish Studies- Education*, 15(5), 3827-3847.
- Yenerer, T. (2021). *Uzaktan eğitim uygulamalarının sınıf öğretmenleri görüşlerine göre değerlendirilmesi*. (Yayınlanmamış yüksek lisans tezi). Necmettin Erbakan Üniversitesi, Konya.
- Yenilmez, K., Turgut, M. & Balbağ, M. Z. (2017). Öğretmen adaylarının uzaktan eğitime yönelik tutumlarının bazı değişkenler açısından incelenmesi. *Erzincan Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 19(2), 91-107.
- Yıldız, M. & Erdem, M. (2018). An investigation on instructors' knowledge, belief and practices towards distance education. *Malaysian Online Journal of Educational Technology*, 6(2), 1-20.
- Yıldız, S. (2016). Pedagojik formasyon eğitimi alan öğrencilerin uzaktan eğitime yönelik tutumları. *Bolu Abant İzzet Baysal Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Dergisi*, 16 (1), 301-329.
- Yılmaz, E., Tomris, G. & Kurt, A. A. (2016). Okul öncesi öğretmenlerinin öz yeterlilik inançları ve teknolojik araç gereç kullanımına yönelik tutumları: Balıkesir ili örneği. *Anadolu Journal of Educational Sciences International*, 6(1), 1-26.



Kobalt(II) 4-Floro- ve 4-Bromobenzoat Nikotinamid Komplekslerinin Hirshfeld Yüzeysel Analizi, Etkileşim Enerjisi Hesaplamaları ve Koronavirüs Spike Proteini ile Etkileşimlerinin Moleküler Docking Çalışmaları ile İncelenmesi

Füreye Elif ÖZTÜRKAN¹, Giray Buğra AKBABA², Mustafa SERTÇELİK³

Makalenin Alanı: İnorganik Kimya, Teorik Kimya, Biyoloji, Farmakoloji

| Makale Bilgileri | Özet |
|--|--|
| Geliş Tarihi 08.11.2021 | <p>Bu çalışmada kristal yapıları önceki çalışmalarda belirlenmiş olan diaquabis(4-florobenzoat)bis(nikotinamid) kobalt (II) ve diaquabis(4-bromobenzoat)bis(nikotinamid) kobalt (II) komplekslerinin moleküller arası etkileşimleri Hirshfeld Yüzeysel Analizi ile belirlenmiştir. Moleküller arası etkileşim katkı yüzdeleri iki boyutlu parmak izi grafiklerinden elde edilmiştir. Komplekslerin etkileşim enerjileri CrystalExplorer programı yardımıyla B3LYP/6-31G ve HF/3-21G temel setleri kullanarak belirlenmiştir. Komplekslerin elektrostatik potansiyel haritaları CrystalExplorer programı ile HF/STO-3G temel seti kullanarak oluşturulmuştur. Çalışmada ayrıca komplekslerin Koronavirüs spike proteini ve spike protein ile anjiyotensin dönüştürücü enzim 2 (ACE2) katalitik bağlanma bölgesindeki etkileşimleri Moleküler Docking yardımı ile incelenmiştir. Komplekslerin absorpsiyon, dağılım, metabolizma, atılım ve toksisite (ADMET) özelliklerine ilişkin tahminler SwissADME ve ProTox-II çevrimiçi veritabanları kullanılarak yapılmıştır. Hirshfeld yüzeysel analiz sonuçlarına göre komplekslerin Hirshfeld yüzeyinde H...H, H...C/C...H, H...O/O...H, F...H/H...F, H...Br/Br...H, C...C, C...O/O...C, C...N/N...C, F...O/O...F, N...F/F...N, H...N/N...H, C...Br/Br...C, O...Br/Br...O, N...Br/Br...N, Br...Br ve N...N gibi moleküller arası etkileşimler tespit edilmiştir. Kompleks 1 ve 2'nin toplam enerjilerine en büyük katkıyı elektrostatik ve dispersiyon enerjilerinin sağladığı belirlenmiştir. Komplekslerin SARS-CoV-2'nin spike proteini ve spike protein ile ACE2 bağlanma bölgesine karşı substrat etkileri in silico olarak incelendiğinde, hidrojen bağı, karbon-hidrojen bağı, π-π istiflenmesi, π-π T-şekilli etkileşimleri, elektrostatik etkileşimler, halojen, π-katyon, π-alkil, amid-π etkileşimleri ve alkil etkileşimleri gibi birçok etkileşim vasıtasıyla proteinlere karşı antagonist etki sergileyebileceği tespit edilmiştir.</p> |
| Kabul Tarihi 16.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Kovalent olmayan etkileşimler Hirshfeld yüzeysel analizi Moleküler docking Sars-CoV-2 Karboksilat kompleksleri | |
| | |

| Article Info | Abstract |
|--|--|
| Received 08.11.2021 | <p>In this study, the intermolecular interactions of diaquabis(4-fluorobenzoate)bis(nicotinamide) cobalt (II) and diaquabis(4-bromobenzoate)bis(nicotinamide) cobalt (II) complexes, whose crystal structures were previously determined, were determined by Hirshfeld Surface Analysis. Intermolecular interaction contribution percentages were obtained from two-dimensional fingerprint plots. The interaction energies of the complexes were determined using the B3LYP/6-31G and HF/3-21G basis sets with the help of CrystalExplorer program. Electrostatic potential maps of the complexes were created with the CrystalExplorer program using</p> |
| Accepted 16.12.2021 | |
| Keywords Non-covalent interactions | |

¹ Kafkas Üniversitesi Kimya Mühendisliği Bölümü- Kars/ Türkiye; e-mail: fozturkan36@gmail.com; ORCID: 0000-0001-6376-4161 (Sorumlu Yazar)

² Kafkas Üniversitesi Biyomühendislik Bölümü- Kars/ Türkiye; e-mail: gbugraakbaba@hotmail.com; ORCID: 0000-0002-1413-9498

³ Kafkas Üniversitesi Kimya Mühendisliği Bölümü- Kars/ Türkiye; e-mail: mustafasertcelik@gmail.com; ORCID: 0000-0001-7919-7907

| | |
|--|---|
| Hirshfeld surface analysis Sars-CoV-2 Carboxylate Complexes | the HF/STO-3G base set. In addition, the interactions of the complexes with the Coronavirus spike protein and spike protein-ACE2 catalytic binding site were investigated with the help of Molecular Docking. Predictions of the complexes' absorption, distribution, metabolism, excretion and toxicity (ADMET) properties were made using SwissADME and ProTox-II online databases. According to the results of Hirshfeld surface analysis, There are intermolecular interactions such as H...H, H...C/C...H, H...O/O...H, F...H/H...F, H...Br/Br...H, C...C, C...O/O...C, C...N/N...C, F...O/O...F, N...F/F...N, H...N/N...H, C...Br/Br...C, O... Br/Br...O, N...Br/Br...N, Br...Br and N...N on the Hirshfeld surface of the complexes. It was determined that electrostatic and dispersion energies provided the greatest contribution to the total energies of Complexes 1 and 2. When the substrate effects of the complexes against the spike protein of SARS-CoV-2 and the spike protein and the angiotensin converting enzyme 2 (ACE2) binding site were examined in silico, it was determined that they could exhibit antagonist effects against proteins through many interactions such as hydrogen bonding, carbon hydrogen bonding, π - π stacking, π - π T-shaped interactions, electrostatic interactions, halogen, π -cation, π -alkyl, amide- π interactions, and alkyl interactions. |
|--|---|

GİRİŞ

Kovalent olmayan etkileşimler kimya, fizik ve özellikle biyodisiplinlerde hatta bilimin tamamında önemli bir rol oynamaktadır. Bu etkileşimler, DNA ve proteinler gibi biyomakromoleküllerin yapısını belirlerler ve moleküler tanıma sürecinden sorumludurlar (Černý & Hobza, 2007). Biyolojik moleküllerin kovalent olmayan etkileşimleri, metabolizmanın düzenlenmesi başta olmak üzere biyolojik süreçlerin yönetilmesini sağlamaktadır (Frieden, 1975). Kovalent olmayan etkileşimler canlı sistemlerin yanı sıra kimyasal moleküllerin yapılarının kararlılığına da önemli katkı sunmaktadır (Černý & Hobza, 2007). Moleküler yapılar, yeni materyallerin ve ilaçların tasarımı da dahil olmak üzere biyoloji ve kimyanın birçok alanını yöneten kovalent olmayan etkileşimleri kolayca tanımlamaz. Bu nedenle, son yıllarda araştırmacılar bu etkileşimleri tanımlayabilmek için bilgisayar destekli programlar kullanmaktadırlar (Beytur, 2020; Beytur et al., 2019; Beytur & Avinca, 2021; Johnson et al., 2010; Uğurlu & Beytur, 2020). Moleküler Docking, bir hedef proteinin (reseptör) bağlanma bölgesi içindeki ligand (ilaç) moleküllerinin etkileşiminin incelenmesi yoluyla ilaç keşfi ve geliştirilmesi için umut verici bir araçtır (Boy et al., 2021; Cheke, 2020; Singh & Florez, 2020). Aralık 2019'da, bir pnömoni salgını başlamış ve bulaşma kolaylığı nedeniyle küresel sağlık endişelerini artırmıştır. Çok sayıda çalışmadan sonra, hastalığın nedeni olarak yeni bir şiddetli akut solunum yolu sendromu koronavirüs 2 (SARS-CoV-2) tanımlanmış ve hastalığa "koronavirüs-19" (COVID-19) adı verilmiştir. Son derece bulaşıcı olan bu hastalığı hızlı bir şekilde teşhis etmek ve kontrol altına almak için şüpheli kişiler izole edilmiş ve hastaların epidemiyolojik ve klinik verileri üzerinden teşhis/tedavi prosedürleri geliştirilmiştir (Brodeur et al., 2021; Esakandari et al., 2020). Pandeminin yarattığı çoklu tehditler ve düzensizlikler göz

önüne alındığında, dünyanın dört bir yanındaki bilim adamları SARS-CoV-2'yi ve daha birçok hastalığı anlamak ve potansiyel tedavileri ve etkili terapötik ilaç adaylarını bulmak için hala çalışmalar yürütmektedir. Metal kompleksler ve çeşitli organik ligandların ilaç özelliklerine ilişkin çok sayıda çalışma bulunmaktadır (Bahçeci et al., 2017; Çiftçi et al., 2018; Irak & Beytur, 2019; Koç et al., 2020; Sertçelik et al., 2018; Sertçelik et al., 2018). Günümüzde, birçok viral hastalık için ilaç tedavisinde kullanılan ilaç materyalleri sınırlıdır. Pandeminin başlangıcından bu yana SARS-CoV-2 tedavisinde kullanılan ilaçların bazıları halen kullanımdayken bazılarının kullanımı durdurulmuştur (Fakhar et al., 2021; Jain et al., 2021; Rothan & Byrareddy, 2020; Verma et al., 2021). Hesaplamalı yöntemler, hem yapısal özelliklere ilişkin hem de ilaç araştırmaları için hipotezler sunar. Spike protein (S) koronavirüs genomu tarafından sentezi gerçekleştirilen ana proteinlerden biridir. Koronavirüs için geliştirilecek ilaçlar için de hesaplamalı yöntemler sayesinde bazı tahminler yapılması mümkündür. Spike protein, anjiyotensin dönüştürücü enzim 2 (ACE2) reseptörüdür ve yapılan araştırmalar sonucu insan ACE2 reseptörü ile güçlü bir afiniteye sahip olduğu bulunmuştur. SARS-CoV-2 virüsünün Spike proteini akciğerlerdeki pnömositler üzerinde bulunan anjiyotensin dönüştürücü enzim 2 (ACE-2) reseptörlerine bağlayarak solunum hücrelerine girerek enflamatuvar ve bağışıklık reaksiyonlarının aktivasyonunu indüklediği birçok çalışmada rapor edilmiştir (Demir Tekol, 2020; Wan et al., 2020). Bu bilgiler ışığında, bu çalışmada daha önceden yapıları belirlenmiş olan diaquabis(4-florobenzoat)bis(nikotinamid) kobalt (II) (Kompleks 1) ve diaquabis(4-bromobenzoat)bis(nikotinamid) kobalt (II) (Kompleks 2) komplekslerinin moleküller arası etkileşimleri, etkileşim enerjileri ve elektrostatik potansiyel haritaları CrystalExplorer programı yardımı ile belirlenmiş ve koronavirüse ait spike protein ve ACE2 bağlanma bölgesi ile etkileşimleri Moleküler Docking çalışmaları ile incelenmiştir. Ayrıca potansiyel ilaç özelliklerine ilişkin yorum yapabilmek adına absorpsiyon, dağılım, metabolizma, atılım ve toksisite parametreleri hesaplanmıştır.

YÖNTEM

Hirshfeld Yüzey Analizi, Etkileşim Enerjisi Hesaplamaları ve Elektrostatik Potansiyel Haritaları

Çalışmada yapıları önceden belirlenmiş olan komplekslerin (Çaylak et al., 2007; Hökelek et al., 2007) (Şekil 1) moleküller arası etkileşimlerini görselleştirmek için Hirshfeld yüzey analizi yapılmıştır (Hirshfeld, 1977; M. A. Spackman & Jayatilaka, 2009a). CrystalExplorer

V21.5 programı ile (P. R. Spackman et al., 2021) komplekslerin kristallografik bilgi dosyası (cif) kullanılarak, Hirshfeld yüzeyi (McKinnon et al., 2007) ve 2D parmak izi grafikleri (M. A. Spackman & Jayatilaka, 2009a), etkileşim enerjisi hesaplamaları CrystalExplorer programı bünyesindeki Tonto Quantum Chemistry paketinin CE-B3LYP/6-31G(d,p) ve CE-HF/3-21G (Mackenzie et al., 2017) temel setleri ile kullanılarak hesaplanmış ve elektrostatik potansiyel haritaları (M. A. Spackman et al., 2008) HF/STO-3G temel seti kullanılarak oluşturulmuştur.

Moleküler Docking Analizi

Komplekslerin bağlanma afinitesini hesaplamak için Autodock Vina programı (Trott & Olson, 2009) kullanılmıştır. SARS-CoV-2 yapısal proteinin (PDB kodu: 6M0J (Lan et al., 2020)) X-ışını kristal yapısı, 2,50 Å çözünürlük faktörü ile X-ışını diffraksiyon yöntemi kullanılarak çözülmüş, PDB uzantılı dosyası RCSB Protein Veri Bankasından alınmıştır (<https://www.rcsb.org>). Ligand için komplekslerin kristallografik bilgi dosyası (.cif) kullanılmıştır. Modelleme çalışmaları yapılacak olan enzimler öncelikle BIOVA Discovery Studio Visualizer 2021 (BIOVA, 2021.) ile optimize edilmiştir. Aktif bölgede komplekslerle enzimi etkileştirmek ve ligand-protein etkileşimlerini görüntüleyebilmek için AutoDockTools 1.5.7 programı (Trott & Olson, 2009) kullanılmıştır. Görselleştirme işlemleri BIOVA Discovery Studio Visualizer 2021 (BIOVA, 2021) kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

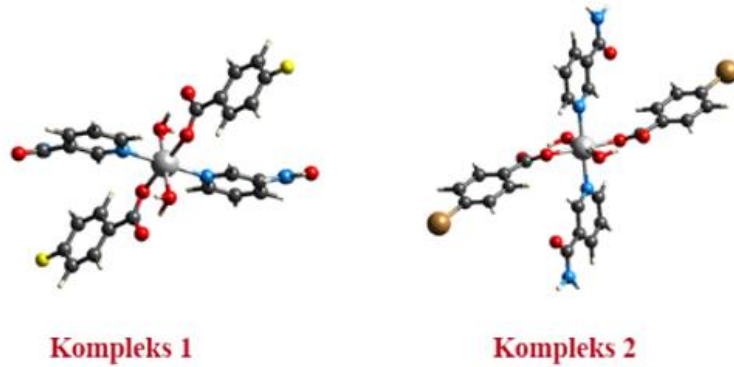
ADMET Hesaplamaları

İlaç tasarımında, ilaç adayı moleküllerin farmakokinetik ve toksikokinetik özelliklerinin belirlenmesi, çoklu deneylere gerek kalmadan hem zamandan hem de maliyetten tasarruf sağlamakta ve başarı oranını yükseltmektedir. Absorpsiyon, dağılım, metabolizma, atılım ve toksisite parametreleri (ADMET), bir ilaç molekülünün taşınması gereken özellikleri tanımlar. SwissADME çevrimiçi veritabanı (Daina et al., 2017), komplekslerin absorpsiyon, dağılım, metabolizma ve atılım değerlerini tahmin etmek için kullanılmıştır. Toksikite değerlerini tahmin etmek için ProTox-II çevrimiçi veritabanı (Banerjee et al., 2018) kullanılmıştır.

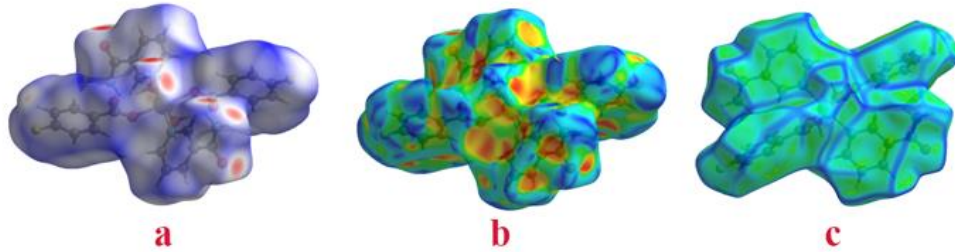
BULGULAR VE TARTIŞMA

Hirshfeld Yüzey Analizi

Komplekslerin d_{norm} haritalarında mavi, kırmızı ve beyaz renkler görülmektedir. Van der Waals yarıçapından daha kısa mesafelere sahip etkileşimler (yakın temaslar) kırmızı renk şeklinde görülmektedir. Özellikle hidrojen bağlarının yoğun bulunduğu bölgeler koyu kırmızı renk ile temsil edilmektedir. Van der Waals yarıçapından daha uzun mesafelere sahip etkileşimler (uzak temaslar) mavi renk ile gösterilmektedir. Beyaz renk Van der Waals yarıçaplarının toplamına eşit olan etkileşimleri göstermektedir (Şekil 2a ve 3a). Komplekslerin 3D Hirshfeld yüzeylerinde d_{norm} haritaları, -0,610 – 1,363 a.u (Kompleks 1) ve -0.493 – 1.4180 a.u (Kompleks 2) aralığında olduğu belirlenmiştir (M. A. Spackman & Jayatilaka, 2009b).

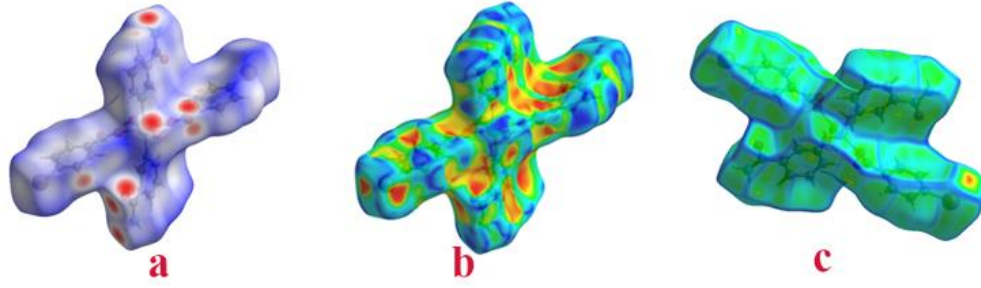


Şekil 1. Komplekslerin moleküler yapıları.



Şekil 2. Kompleks 1'in d_{norm} haritası, şekil indeksi ve kavislilik haritası.

Şekil 2b ve 3b'de komplekslerin şekil indekslerinde görülen bitişik kırmızı ve mavi üçgenler, yapıdaki benzen-benzen, benzen-piridin ve piridin-piridin aromatik halkaları arasındaki $C-H\cdots\pi$ ve $\pi\cdots\pi$ etkileşimlerine atfedilmektedir (M. A. Spackman & Jayatilaka, 2009a).



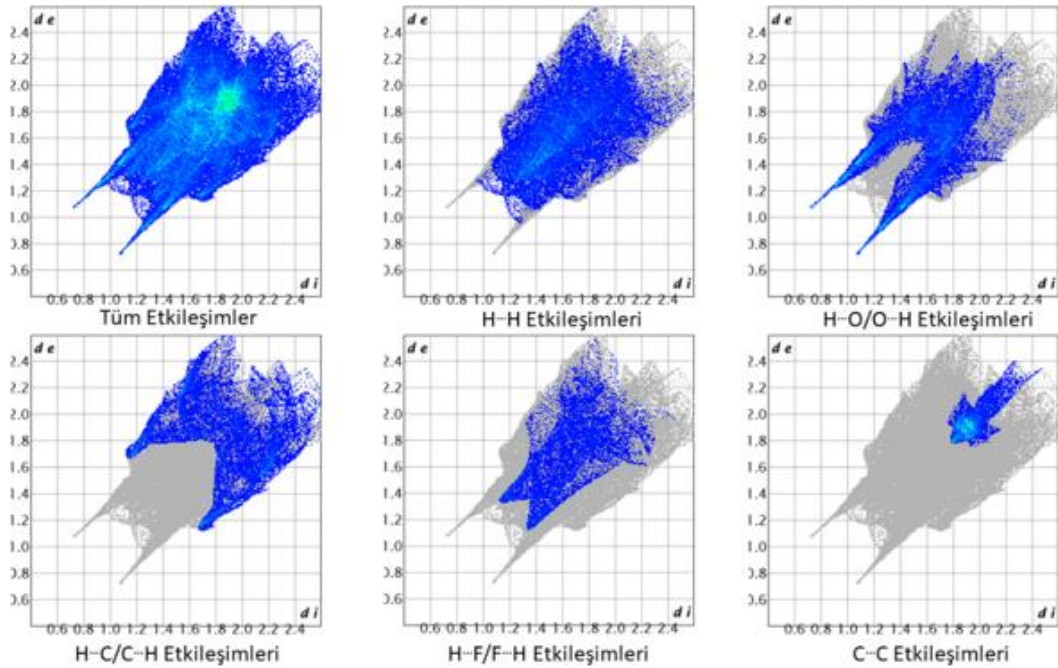
Şekil 3. Kompleks 2'nin d_{norm} haritası, şekil indeksi ve kavislilik haritası.

Komplekslerin kavislilik haritaları Şekil 2c ve 3c'de verilmiştir. Halkaların düzlemselliği şekilde görülen geniş mavi yüzeyler ile temsil edilmektedir. Bu yüzeyler $\pi \cdots \pi$ istiflemelerinin varlığından kaynaklanmaktadır. Halkalardan uzaklaştıkça düzlemsel bölgeleri birbirinden mavi şeritler ile ayrılmaktadır ve mavi bölgeler kavislilikleri temsil etmektedir.

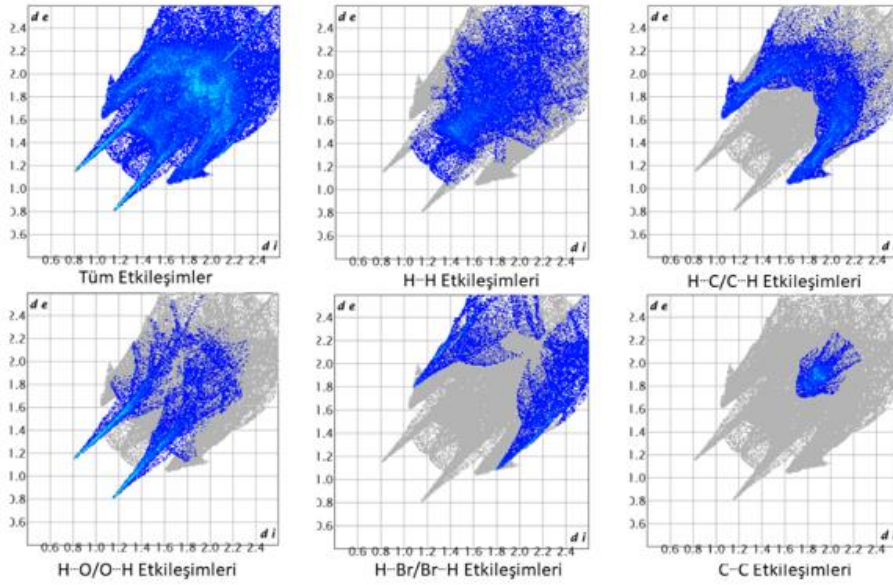
Tablo 1. Kompleks 1 ve 2'nin moleküler arası etkileşim yüzdeleri.

| Etkileşim Türü | Etkileşim Miktarı (%) | |
|-----------------------------|-----------------------|------------|
| | Kompleks 1 | Kompleks 2 |
| F \cdots C/C \cdots F | 3,0 | |
| C \cdots O/O \cdots C | 0,4 | 0,9 |
| H \cdots C/C \cdots H | 17,5 | 24,9 |
| C \cdots N/N \cdots C | 0,2 | 0,8 |
| C \cdots C | 6,8 | 4,2 |
| O \cdots F/F \cdots O | 1,1 | |
| H \cdots F/F \cdots H | 10,7 | |
| N \cdots F/F \cdots N | 0,8 | |
| H \cdots H | 32,9 | 26,1 |
| H \cdots N/N \cdots H | 2,6 | 2,2 |
| H \cdots O/O \cdots H | 23,9 | 19,3 |
| C \cdots Br/Br \cdots C | | 2,9 |
| O \cdots Br/Br \cdots O | | 0,9 |
| H \cdots Br/Br \cdots H | | 15,6 |
| N \cdots Br/Br \cdots N | | 0,6 |
| Br \cdots Br | | 1,4 |
| N \cdots N | | 0,2 |

İki boyutlu parmak izi grafikleri moleküller arası etkileşimlerin katkı yüzdelerini belirlemektedir (Tablo 1). Şekil 4 ve 5'te görülen iki boyutlu parmak izi grafiklerinde kompleks 1 ve 2'nin baskın moleküller arası etkileşimleri görülmektedir. Tablo 1'de görüldüğü gibi komplekslerin yapısındaki hidrojen bolluğundan dolayı moleküler yüzeye en önemli katkıyı H···H etkileşimleri sağlamaktadır. Bu etkileşimlerin Hirshfeld yüzeyine katkıları kompleks 1 ve 2 için sırasıyla % 32,9 ve % 26,1'dir. H···O/O···H etkileşimleri kompleks 1 için en önemli ikinci etkileşim yüzdesine sahip iken, kompleks 2 için en önemli ikinci katkıyı H···C/C···H etkileşimleri sağlamaktadır. H···O/O···H etkileşimleri her iki kompleksin yapısındaki O—H···O hidrojen bağlarından kaynaklanmaktadır. Kompleks 1 için H···F/F···H ve kompleks 2 için H···Br/Br···H etkileşimleri kristal yapıların kararlılığına önemli katkı sunmuştur. Bu katkıların miktarı sırasıyla % 10,7 (H···F/F···H) ve %15,6'dır (H···Br/Br···H). C-H etkileşimleri aromatik halkaların C-H··· π etkileşimleri ve π - π istiflemelerine atfedilmektedir. Kompleksler için en önemli katkılardan biri C···C etkileşimleridir. Ayrıca C···C etkileşimleri de π - π istiflemelerinden kaynaklanmaktadır. Hirshfeld yüzeyinde metal atomunun herhangi bir atom ile etkileşiminin bulunmadığı belirlenmiştir. Tablo 1 incelendiğinde, halojen grubunun değişimi ile etkileşim yüzdeleri açısından çok büyük farklılıkların ortaya çıktığı görülmektedir. Hirshfeld yüzeyinde C···O/O···C, C···N/N···C, F···O/O···F, N···F/F···N, H···N/N···H, C···Br/Br···C, O···Br/Br···O, N···Br/Br···N, Br···Br ve N···N gibi düşük katkı sağlayan moleküller arası etkileşimler bulunmuştur.



Şekil 4. Kompleks 1'in 2D parmak izi grafikleri.

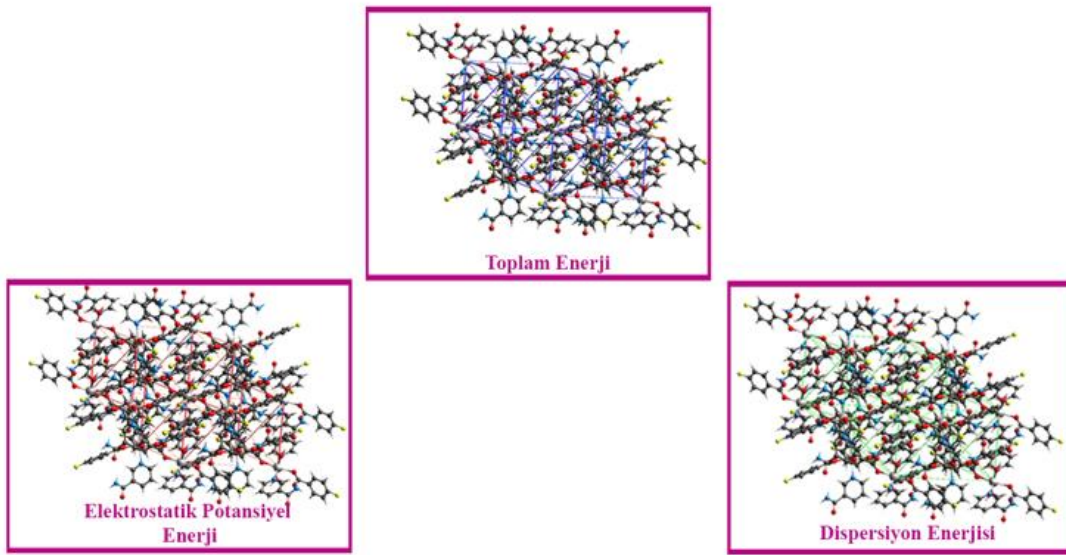


Şekil 5. Kompleks 2'nin 2D parmak izi grafikleri.

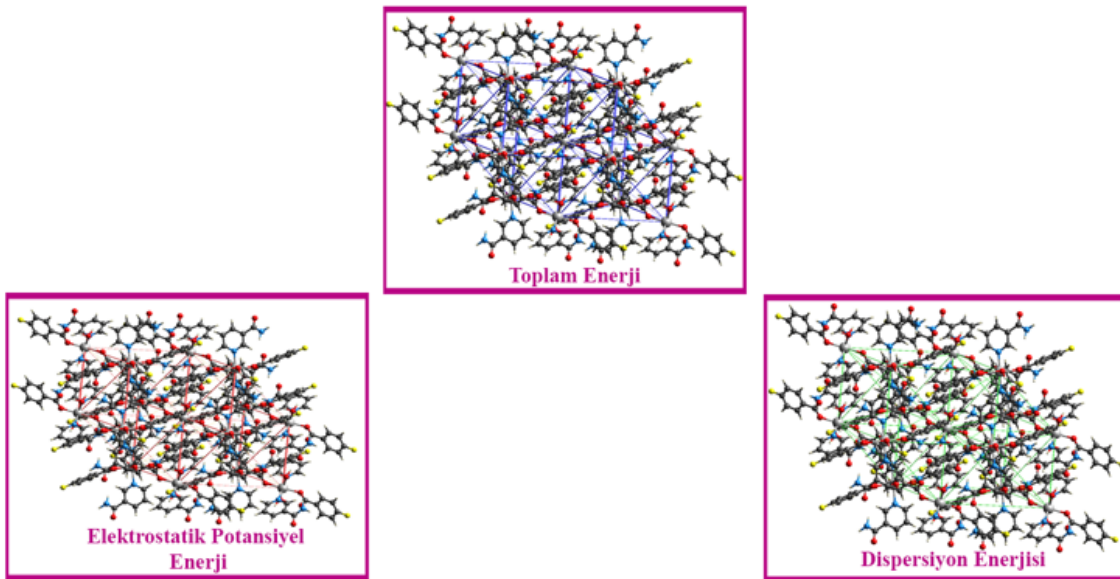
Etkileşim Enerjisi Hesaplamaları

Toplam moleküller arası enerji (E_{tot} , kJ/mol), referans moleküle göre dört ana enerji bileşeninin (elektrostatik (E_{ele}), polarizasyon (E_{pol}), dispersiyon (E_{dis}) ve değişim itme (E_{rep})) toplamıdır. B3LYP/6-31G(d,p) temel seti için ölçek faktörler $k_{ele} = 1,019$; $k_{pol} = 0,651$; $k_{disp} = 0,901$ ve $k_{rep} = 0,811$ 'dir. HF/3-21G temel seti için ölçek faktörler $k_{ele} = 1,057$; $k_{pol} = 0,740$; $k_{disp} = 0,871$ ve $k_{rep} = 0,618$ 'dir. Enerji hesaplamaları CE-B3LYP/6-31G(d,p) ve CE-HF/3-21G temel setleri kullanılarak yapılmıştır (Tablo 2). Enerji değerlerinin tahmininin doğruluğunu artırmak için CrystalExplorer yazılımının iki farklı enerji modeli kullanılmıştır. Kompleks 1 için her iki temel setinde E_{tot} değerleri benzerdir. Kompleks 2 için, Tonto Quantum Chemistry paketi B3LYP/6-31G(d,p) modelini hesaplayamamıştır. Kompleks 2 için yalnızca HF/3-21G temel setine ilişkin sonuçlar bulunmaktadır. Komplekslerin yapısındaki tek fark benzen halkasının 4- pozisyonuna bağlı halojen gruplarının farklı olmasıdır (Şekil 1). Elde edilen sonuçlar değerlendirildiğinde toplam enerji değerine en büyük katkıyı dispersiyon enerjisi (E_{dis}) ve elektrostatik enerji (E_{ele}) değerlerinin katkısının bulunduğu belirlenmiştir. Önceki çalışmalarda, hidrojen bağlarının elektrostatik enerjiye katkı sağladığı bildirilmiştir. Etkileşim enerji değerleri incelenen Kompleks 1 ve 2'nin yapısında bulunan N-H...O ve O-H...O hidrojen bağları ve zayıf C-H... π etkileşimleri elektrostatik enerjiye önemli ölçüde katkıda bulunmaktadır (Mackenzie et al., 2017). Kompleks 2'nin toplam enerjisi dispersiyon

enerjisinden büyük ölçüde etkilenmektedir. Dağılım enerjilerinin büyüklüğünün toplam enerjilere en büyük katkıyı sunduğu önceki çalışmalar ile desteklenmektedir. Elektrostatik terim önemsiz değildir, ancak her durumda itme ile büyük ölçüde iptal edilmektedir (Maloney et al., 2015). Komplekslerin enerji çerçeveleri Şekil 6 ve 7’de verilmiştir. Toplam enerjinin ve onun elektrostatik ve dispersiyon bileşenlerinin enerji çerçeveleri biçiminde görselleştirilmesi, moleküler kristallerin mimarisine ışık tutarak gerçek kristal özelliklerine potansiyel bir bağlantı sağlamaktadır. Kovalent olmayan etkileşimlerden etkilenen elektron yoğunluğu, moleküler elektrostatik potansiyelle ve elektrostatik tamamlayıcılık gibi kalitatif kavramların değişimine neden olmaktadır.



Şekil 6. Kompleks 1'in etkileşim enerjisi haritaları



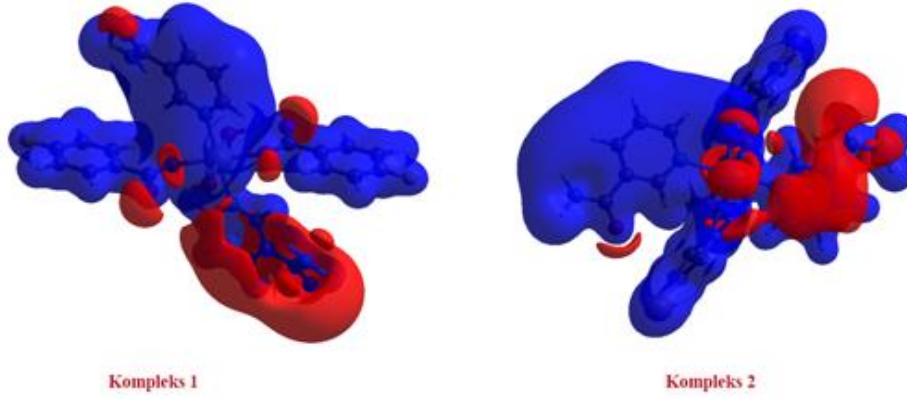
Şekil 7. Kompleks 2'nin etkileşim enerjisi haritaları

Tablo 2. Kompleks 1 ve 2'nin etkileşim enerji değerleri.

| Kompleks | N | Simetri Kodları | R | Temel Set | E_ele | E_pol | E_dis | E_rep | E_tot |
|----------|---|-----------------------|-------|------------------|--------|-------|-------|-------|--------|
| 1 | 2 | x, y, z | 12.00 | B3LYP/6-31G(d,p) | -13.7 | -2.3 | -31.0 | 18.1 | -32.0 |
| | 2 | x, y, z | 8.93 | B3LYP/6-31G(d,p) | -98.5 | -26.2 | -72.3 | 121.0 | -111.8 |
| | 4 | -x+1/2, y+1/2, -z+1/2 | 9.69 | B3LYP/6-31G(d,p) | -38.8 | -11.3 | -34.8 | 43.4 | -53.0 |
| | 4 | -x+1/2, y+1/2, -z+1/2 | 9.75 | B3LYP/6-31G(d,p) | -13.3 | -3.0 | -35.3 | 19.5 | -35.0 |
| | 2 | x, y, z | 14.96 | B3LYP/6-31G(d,p) | 8.4 | -1.5 | -25.6 | 6.9 | -10.2 |
| | 0 | | | HF/3-21G | -20.0 | -4.3 | -31.0 | 12.7 | -40.8 |
| | 0 | | | HF/3-21G | -105.3 | -36.4 | -72.3 | 95.2 | -118.9 |
| | 0 | | | HF/3-21G | -38.1 | -14.1 | -34.8 | 31.8 | -53.6 |
| | 0 | | | HF/3-21G | -15.9 | -3.7 | -35.3 | 15.1 | -38.2 |
| | 0 | | | HF/3-21G | 13.0 | -2.0 | -25.6 | 4.8 | -7.2 |
| 2 | 2 | x, y, z | 10.11 | HF/3-21G | 1.5 | -4.3 | -60.7 | 22.1 | -38.1 |
| | 2 | x, y, z | 13.12 | HF/3-21G | 2.1 | -5.8 | -47.7 | 26.0 | -23.6 |
| | 2 | x, y, z | 9.96 | HF/3-21G | -91.8 | -37.5 | -86.6 | 78.4 | -132.3 |
| | 2 | x, y, z | 7.62 | HF/3-21G | -78.4 | -27.2 | -60.6 | 63.5 | -100.7 |
| | 2 | x, y, z | 14.32 | HF/3-21G | -58.8 | -18.0 | -22.6 | 42.8 | -57.3 |

Moleküler Elektrostatik Potansiyel Haritası

Kristal paketleme ile ilişkili elektrostatik tamamlayıcılıkları yorumlamak için, Hirshfeld yüzeyinde -0.050 ila 0.050 a.u. aralığında ortalama elektrostatik potansiyeli haritalanmıştır. Hirshfeld yüzeyindeki mavi bölgeler, hidrojen verici alanları gösteren pozitif elektrostatik potansiyellere karşılık gelmektedir ve kırmızı bölgeler, hidrojen alıcı alanları gösteren negatif elektrostatik potansiyellere karşılık gelmektedir (Şekil 8) (M. A. Spackman et al., 2008).



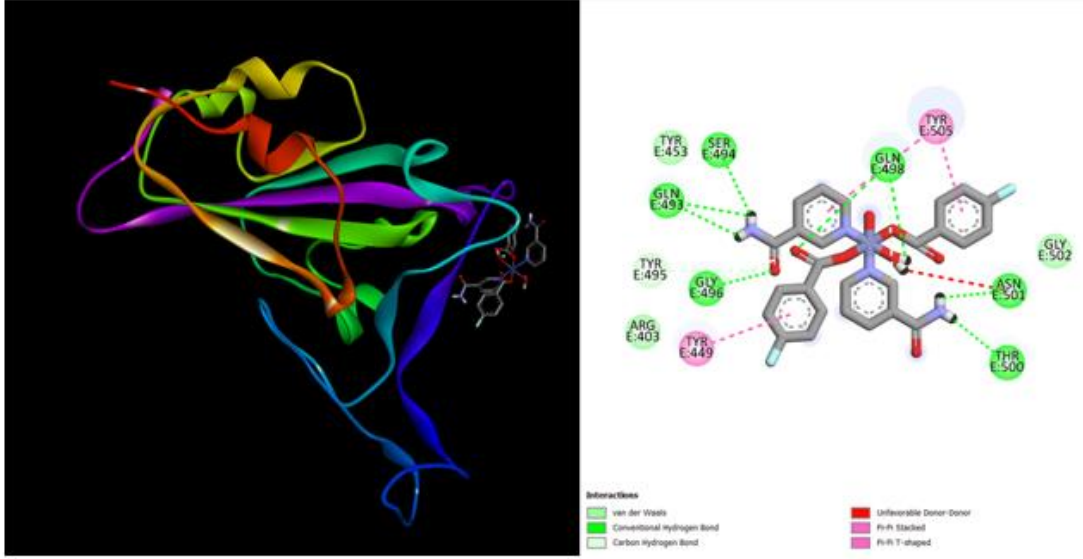
Şekil 8. Komplekslerin moleküler elektrostatik potansiyel haritası

Moleküler Docking Çalışmaları

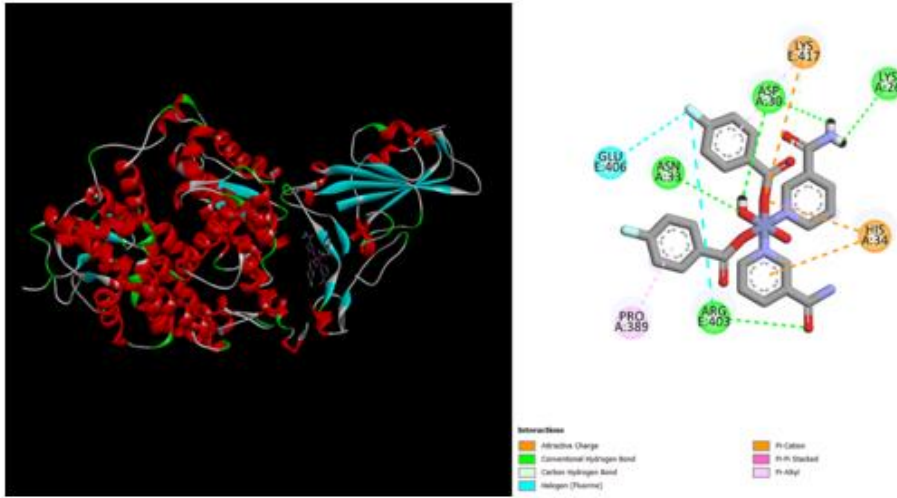
Moleküler Docking, bir molekül başka bir moleküle bağlandığı zaman oryantasyonunu tahmin etmeye izin veren bir biyoinformatik yöntemidir. Moleküler Docking için iki ana yaklaşım vardır. İlk yaklaşım, proteini ve ligandı tamamlayıcı yüzeyler olarak tanımlar. İkinci yaklaşım, serbest bağlanma enerjisine (ΔG) dayalı olarak ligand protein etkileşimini hesaplayan yerleştirme sürecini simüle eder (Singh & Florez, 2020). Kompleks 1 ve 2'nin SARS-CoV-2'nin önemli proteinlerinden biri olan spike protein ve spike protein ile ACE2 arasındaki katalitik bölgede etkileşimlerini incelemek için Moleküler Docking çalışmaları yapılmış, bağlanma afiniteleri değerlendirilmiş ve ligand etkinliği hesaplanmıştır. spike protein, hücre zarındaki ACE2 ile etkileşerek hücreye girer (Demir Tekol, 2020; Wan et al., 2020). Kompleks 1 ve 2, hem spike protein hem de spike protein ve ACE2 için yüksek bir bağlanma enerjisine (ΔG) sahiptir. Bu nedenle spike protein + ACE2 arasındaki katalitik bölgeye yerleştirilen kompleks 1 ve 2, bir antagonist görevi görebilir ve hücreye girmesini engelleyebilir. Kompleks 1 ve 2, spike protein ve spike protein ve ACE2 için sırasıyla -8,10 kcal/mol ve -7,90 kcal/mol bağlanma enerjisine sahiptir (Tablo 3). Kompleks 1 ve 2, koronavirüs spike proteini ve spike protein + ACE2 ile bağlanma bölgesinde, hidrojen bağı, karbon-hidrojen bağı, π - π istiflenmesi, π - π T-şekilli etkileşimleri, elektrostatik etkileşimler, halojen, π -katyon, π -alkil, amid- π etkileşimleri ve alkil gibi birçok etkileşim yaptığı tespit edilmiştir. Özellikle komplekslerin yapısındaki hidrojen bağı akseptör ve donör gruplarının varlığından dolayı, komplekslerin koronavirüs spike proteini ile güçlü hidrojen bağı etkileşimleri yaptığı belirlenmiştir (Şekil 9-12).

Tablo 3. SARS-CoV-2 spike proteini ve spike protein ile ACE2 bağlanma bölgesi üzerinde Kompleks 1 ve 2'nin yerleştirme sonuçları.

| Enzim | Kompleks | Etkileşim Türü | Amino Asit | Bağlanma Enerjisi $\Delta G(\text{kcal/mol})$ | Ligand Etkinliği |
|---|----------|---------------------------------------|--|---|------------------|
| Spike protein | 1 | Hidrojen Bağı | GLY496, ASN501, THR500, GLN498, GLN493, SER494 | -8,1 | 0,34 |
| | | Karbon-Hidrojen Bağı | TYR495, GLY496, | | |
| | | π - π İstiflenmesi | TYR505 | | |
| | | π - π T şekilli etkileşimleri | TYR449, TYR505 | | |
| Spike protein + ACE2 ile bağlanma bölgesi | 1 | Elektrostatik etkileşimler | HIS34, LYS417 | -7,9 | 0,33 |
| | | Hidrojen Bağı | ASP30, ASN33, LYS26, ARG403, | | |
| | | Karbon-Hidrojen Bağı | LYS417 | | |
| | | Halojen | ARG403, GLU406 | | |
| | | π -Katyon | HIS34 | | |
| | | π - π İstiflenmesi | HIS34 | | |
| Spike protein | 2 | Hidrojen Bağı | GLY496, GLN498, ASN500, ASN501, THR500, SER494 | -8,1 | 0,34 |
| | | Karbon-Hidrojen Bağı | TY495 | | |
| | | π - π İstiflenmesi | TYR505 | | |
| | | π - π T şekilli etkileşimleri | TYR449, TYR505 | | |
| Spike protein + ACE2 ile bağlanma bölgesi | 2 | Elektrostatik etkileşimler | HIS34, ARG393, ARG403, | -7,9 | 0,33 |
| | | Hidrojen Bağı | HIS34, ARG393, TYR505, ALA387, ARG403, | | |
| | | π -Katyon | HIS35 | | |
| | | Amid- π etkileşimleri | GLN388, PRO389 | | |
| | | Alkil | PRO389 | | |
| | | π -Alkil | PRO389 | | |



Şekil 9. Kompleks 1 ve koronavirüsün spike proteininin kenetlenme sonucu (solda) ve Kompleks 1'in spike proteinin aktif bölgesindeki amino asitlerle iki boyutlu etkileşimleri (sağda).



Şekil 10. Kompleks 1 ve koronavirüsün spike protein + ACE2 bağlanma bölgesinde kenetlenme sonucu (solda) ve Kompleks 1'in spike protein + ACE2 bağlanma bölgesindeki amino asitlerle iki boyutlu etkileşimleri (sağda).

düşüktür, kan-beyin bariyerini (BBB) geçemezler ve P-glikoproteininin substratları olarak kullanılamazlar. Komplekslerin oktanol/su içindeki çözünürlükleri rijit yapılarından dolayı düşüktür. Kompleksler sitokrom P450 enzimi olan CYP2C19'u indükleyebilir veya inhibe edebilir. CYP1A2, CYP2D6, CYP2C9 ve CYP3A4 ile etkileşime girmez. Komplekslerin yapılarında lipofilik grupların olmaması da deri geçirgenliğini veya lipid geçirgenliğini azaltır (Daina et al., 2017). Komplekslerin tahmini toksisite değerleri incelenmiş ve bileşiklerin orta düzeyde toksik sınıfta olduğu belirlenmiştir (Toksosite sınıfı altı sayıdan oluşur. 1 numara toksik anlamına gelir; 6 numara toksik olmayan anlamına gelir). Tahmini letal doz miktarları, kompleks 1 ve 2 için sırasıyla 2000 mg/kg ve 2500 mg/kg olarak bulunmuştur. Kompleks 1 hepatoksiktir. Kompleks 2, hepatotoksosite, karsinogenisite, immünotoksosite, mutajenite, sitotoksosite ve mitokondriyal membran potansiyeli inaktiftir, yani toksik değildir. Tüm bu avantaj ve dezavantajlar göz önüne alındığında Kompleks 2'nin aday ilaç olabileceği, ilaç formülasyonu çalışmalarının yapılabileceği ve benzer molekülleri araştıranlara yol gösterici olacağı öngörülmektedir (Banerjee et al., 2018). Kompleks 1 ve 2 için tahmini farmakokinetik özellikler Tablo 4'de verilmiştir.

Tablo 4. Kompleks 1 ve 2'nin farmakokinetik özellikleri.

| Özellikler | Kompleks | |
|-----------------------------|-----------------------|-----------------------|
| | (1) | (2) |
| Molekül Ağırlığı (g/mol) | 614,42 | 739,23 |
| Atom Sayısı | 65 | 65 |
| Ağır Atom Sayısı | 24 | 24 |
| Bağ Sayısı | 68 | 68 |
| Dönebilen Bağlar | 10 | 10 |
| H-Bağ Akseptörleri | 10 | 8 |
| H-Bağ Donörleri | 4 | 4 |
| Molar refraktivite | 134,39 | 149,87 |
| TPSA | 167,10 Å ² | 167.10 Å ² |
| Log <i>P</i> _{o/w} | 2.66 | 3,84 |
| GI absorpsiyonu | Düşük | Düşük |
| BBB Geçirgenliği | Hayır | Hayır |
| <i>P</i> -gp substrat | Hayır | Hayır |
| CYP1A2 inhibitör | Hayır | Hayır |
| CYP2C19 inhibitör | Evet | Evet |

| | | |
|--|------------|------------|
| CYP2C9 inhibitör | Hayır | Hayır |
| CYP2D6 inhibitör | Hayır | Hayır |
| CYP3A4 inhibitör | Hayır | Hayır |
| Toksosite Sınıfı | 3 | 4 |
| Tahmin edilen LD ₅₀ (mg/kg) | 2000 mg/kg | 2500 mg/kg |
| Hepatotoksosite | Aktif | İnaktif |
| Kanserojenlik | İnaktif | İnaktif |
| İmmünotoksosite | İnaktif | İnaktif |
| Mutajenite | İnaktif | İnaktif |
| Sitotoksosite | İnaktif | İnaktif |
| Mitokondriyal Membran Potansiyeli | İnaktif | İnaktif |

SONUÇ

Bu çalışmada Hirshfeld yüzey analizi ile komplekslerin kristal yapısındaki fonksiyonel gruplar vasıtasıyla kovalent olmayan etkileşimler oluşturduğu belirlenmiştir. Komplekslerin Hirshfeld yüzeyinde H...H, H...C/C...H, H...O/O...H, F...H/H...F, H...Br/Br...H, C...C, C...O/O...C, C...N/N...C, F...O/O...F, N...F/F...N, H...N/N...H, C...Br/Br...C, O...Br/Br...O, N...Br/Br...N, Br...Br ve N...N gibi moleküller arası etkileşimler bulunmuştur. Kompleks 1'in elektrostatik (E_ele), polarizasyon (E_pol), dispersiyon (E_dis) ve değişim itme (E_rep) ve toplam enerjileri CrystalExplorer (CE) yazılımının B3LYP/6-31G(d,p) ve HF/3-21G olmak üzere iki farklı modeli kullanılarak hesaplanmıştır. Kompleks 2'nin elektrostatik (E_ele), polarizasyon (E_pol), dispersiyon (E_dis) ve değişim itme (E_rep) ve toplam enerjileri CrystalExplorer (CE) yazılımının HF/3-21G modeli ile hesaplanmıştır. Kompleks 1'in her iki temel sette hesaplanan enerji değerlerinin birbirine yakın olduğu bulunmuştur. Halojen grubu değişimi ile farklı yapılara sahip olan iki kompleksin farklı enerji değerleri gösterdiği tespit edilmiştir. Kompleks 1 ve 2 yapı aktivite ilişkisi açısından değerlendirilmiş ve sonuçlar arasında büyük bir fark bulunmadığı tespit edilmiştir. Komplekslerin substrat etkisi, küresel pandemiye neden olan SARS-CoV-2 proteinlerine karşı *in siliko* olarak araştırılmış ve tatmin edici sonuçlar bulunmuştur. Kompleksler koronavirüs spike proteini ve spike protein ile ACE2 bağlanma bölgesi ile hidrojen bağı, karbon-hidrojen bağı, π - π istiflenmesi, π - π T-şekilli etkileşimleri, elektrostatik etkileşimler, halojen, π -katyon, π -alkil, amid- π etkileşimleri ve alkil etkileşimleri gibi birçok etkileşim bulunmaktadır. Elde edilen verilere dayanarak, özellikle kompleks 2 için *in vitro/in vivo* deneylerinin yapılabileceği ve daha sonraki araştırmalar için umut verici olacağı düşünülmektedir.

Çıkar Çatışması

Yazarlar arasında herhangi bir çıkar çatışması bulunmamaktadır.

Yazar Katkısı

Araştırmanın planlanması, Verilerin Toplanması, Teorik Hesaplamaların yapılması ve yorumlanması (Moleküler Docking ve Hirshfeld Yüzey Analizi, Etkileşim Enerji Hesaplamaları ve Elektrostatik Potansiyel Haritaları Oluşturulması) ve yazım ve Düzenleme Füreyla Elif Öztürkkan; Teorik Hesaplamaların Yorumlanması (Molecular Docking ve ADMET) ve yazım ve düzenleme Giray Buğra Akbaba; Teorik Hesaplamaların yapılması (Etkileşim Enerji Hesaplamaları ve Elektrostatik Potansiyel Haritaları Oluşturulması) ve yazım ve Düzenleme Mustafa Sertçelik tarafından yapılmıştır.

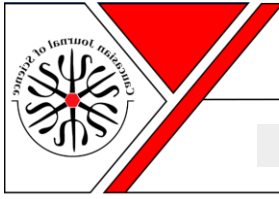
KAYNAKLAR

- Bahçeci, Ş., Yıldırım, N., Alkan, M., Gürsoy-Kol, Ö., Manap, S., & Yüksek, H. (2017). Investigation of Antioxidant, Biological and Acidic Properties of New 3-Alkyl(Aryl)-4-(3- acetoxy-4-methoxybenzylidenamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones. *The Pharmaceutical and Chemical Journal*, 4(4), 91–101.
- Banerjee, P., Eckert, A. O., Schrey, A. K., & Preissner, R. (2018). ProTox-II: A webserver for the prediction of toxicity of chemicals. *Nucleic Acids Research*, 46(Web Server issue), W257–W263. <https://doi.org/10.1093/nar/gky318>
- Beytur, M. (2020). Fabrication of platinum nanoparticle/boron nitride quantum dots/6-methyl-2-(3hydroxy-4-methoxybenzylidenamino)-benzothiazole (ils) nanocomposite for electrocatalytic oxidation of methanol. *Journal of the Chilean Chemical Society*, 65(3), 4929–4933. Scopus. <https://doi.org/10.4067/s0717-97072020000204929>
- Beytur, M., & Avinca, I. (2021). Molecular, Electronic, Nonlinear Optical and Spectroscopic Analysis of Heterocyclic 3-Substituted-4-(3-methyl-2-thienylmethyleneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones: Experiment and DFT Calculations. *Heterocyclic Communications*, 27(1), 1–16. Scopus. <https://doi.org/10.1515/hc-2020-0118>
- Beytur, M., Turhan Irak, Z., Manap, S., & Yüksek, H. (2019). Synthesis, characterization and theoretical determination of corrosion inhibitor activities of some new 4,5-dihydro-1H-1,2,4-Triazol-5-one derivatives. *Heliyon*, 5(6), e01809. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e01809>
- BIOVIA, Dassault Systèmes, BIOVA Discovery Studio Visualizer 2021, v21.1.0.20298, San Diego: Dassault Systèmes, 2021.
- Boy, S., Türkan, F., Beytur, M., Aras, A., Akyıldırım, O., Karaman, H. S., & Yüksek, H. (2021). Synthesis, design, and assessment of novel morpholine-derived Mannich bases as multifunctional agents for the potential enzyme inhibitory properties including docking study. *Bioorganic Chemistry*, 107. Scopus. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2020.104524>
- Brodeur, A., Gray, D., Islam, A., & Bhuiyan, S. (2021). A literature review of the economics of COVID-19. *Journal of Economic Surveys*, 35(4), 1007–1044. <https://doi.org/10.1111/joes.12423>

- Çaylak, N., Hökelek, T., & Necefoğlu, H. (2007). Diaquabis(4-fluorobenzoato-κ O)bis(nicotinamide-κ N¹)cobalt(II). *Acta Crystallographica Section E Structure Reports Online*, 63(5), m1341–m1343. <https://doi.org/10.1107/S1600536807016534>
- Černý, J., & Hobza, P. (2007). Non-covalent interactions in biomacromolecules. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 9(39), 5291. <https://doi.org/10.1039/b704781a>
- Cheke, R. S. (2020). The Molecular Docking Study of Potential Drug Candidates Showing Anti-COVID-19 Activity by Exploring of Therapeutic Targets of SARS-CoV-2. *Eurasian Journal of Medicine and Oncology*. <https://doi.org/10.14744/ejmo.2020.31503>
- Çiftçi, E., Beytur, M., Calapoğlu, M., Gürsoy-Kol, Ö., Alkan, M., Toğay, V. A., Manap, S., & Yüksek, H. (2018). Synthesis, Characterization, Antioxidant and Antimicrobial Activities and DNA Damage of Some Novel 2-[3-alkyl (aryl)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one-4-yl]-phenoxyacetic acids in Human Lymphocytes. *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*, 9(5), 12.
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7(1), 42717. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Demir Tekol, S. (2020). SARS-CoV-2: Virology and Microbiological Diagnostic Tools. *Southern Clinics of Istanbul Eurasia*, 31, 8–12. <https://doi.org/10.14744/scie.2020.13549>
- Esakandari, H., Nabi-Afjadi, M., Fakkari-Afjadi, J., Farahmandian, N., Miresmaeili, S.-M., & Bahreini, E. (2020). A comprehensive review of COVID-19 characteristics. *Biological Procedures Online*, 22(1), 19. <https://doi.org/10.1186/s12575-020-00128-2>
- Fakhar, Z., Khan, S., AlOmar, S. Y., Alkhuriji, A., & Ahmad, A. (2021). ABBV-744 as a potential inhibitor of SARS-CoV-2 main protease enzyme against COVID-19. *Scientific Reports*, 11(1), 234. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-79918-3>
- Frieden, E. (1975). Non-covalent interactions: Key to biological flexibility and specificity. *Journal of Chemical Education*, 52(12), 754. <https://doi.org/10.1021/ed052p754>
- Hirshfeld, F. L. (1977). Bonded-atom fragments for describing molecular charge densities. *Theoretica Chimica Acta*, 44(2), 129–138. <https://doi.org/10.1007/BF00549096>
- Hökelek, T., Çaylak, N., & Necefoğlu, H. (2007). Diaquabis(4-bromobenzoato-κ O)bis(nicotinamide-κ N¹)cobalt(II). *Acta Crystallographica Section E Structure Reports Online*, 63(7), m1873–m1874. <https://doi.org/10.1107/S1600536807028358>
- Irak, Z. T., & Beytur, M. (2019). 4-Benzilidenamino-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Antioksidan Aktivitelerinin Teorik Olarak İncelenmesi. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 9(1), 512–521. <https://doi.org/10.21597/jist.481990>
- Jain, S., Potschka, H., Chandra, P. P., Tripathi, M., & Vohora, D. (2021). Management of COVID-19 in patients with seizures: Mechanisms of action of potential COVID-19 drug treatments and consideration for potential drug-drug interactions with anti-seizure medications. *Epilepsy Research*, 174, 106675. <https://doi.org/10.1016/j.eplepsyres.2021.106675>

- Johnson, E. R., Keinan, S., Mori-Sánchez, P., Contreras-García, J., Cohen, A. J., & Yang, W. (2010). Revealing Noncovalent Interactions. *Journal of the American Chemical Society*, 132(18), 6498–6506. <https://doi.org/10.1021/ja100936w>
- Koç, E., Yüksek, H., Beytur, M., Akyildirim, O., Akçay, M., & Beytur, C. (2020). Heterosiklik 4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevinin Antioksidan Özelliğinin Erkek Ratlarda (Wistar albino) İn vivo Olarak Belirlenmesi. *Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi*, 9(2), 542–548. <https://doi.org/10.17798/bitlisfen.600412>
- Lan, J., Ge, J., Yu, J., Shan, S., Zhou, H., Fan, S., Zhang, Q., Shi, X., Wang, Q., Zhang, L., & Wang, X. (2020). Structure of the SARS-CoV-2 spike receptor-binding domain bound to the ACE2 receptor. *Nature*, 581(7807), 215–220. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2180-5>
- Lipinski, C. A., Lombardo, F., Dominy, B. W., & Feeney, P. J. (1997). Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 23(1), 3–25. [https://doi.org/10.1016/S0169-409X\(96\)00423-1](https://doi.org/10.1016/S0169-409X(96)00423-1)
- Mackenzie, C. F., Spackman, P. R., Jayatilaka, D., & Spackman, M. A. (2017). *CrystalExplorer* model energies and energy frameworks: Extension to metal coordination compounds, organic salts, solvates and open-shell systems. *IUCrJ*, 4(5), 575–587. <https://doi.org/10.1107/S205225251700848X>
- Maloney, A. G. P., Wood, P. A., & Parsons, S. (2015). Intermolecular interaction energies in transition metal coordination compounds. *CrystEngComm*, 17(48), 9300–9310. <https://doi.org/10.1039/C5CE01522G>
- McKinnon, J. J., Jayatilaka, D., & Spackman, M. A. (2007). Towards quantitative analysis of intermolecular interactions with Hirshfeld surfaces. *Chemical Communications*, 37, 3814–3816. <https://doi.org/10.1039/b704980c>
- Rothan, H. A., & Byrareddy, S. N. (2020). The epidemiology and pathogenesis of coronavirus disease (COVID-19) outbreak. *Journal of Autoimmunity*, 109, 102433. <https://doi.org/10.1016/j.jaut.2020.102433>
- Sertçelik, M., Özbek, F. E., Sugeçti, S., & Necefoğlu, H. (2018). Synthesis Of Isonicotinamide Complexes Of 4-Formilbenzoate with Co (II), Cu (II) And Zn (II); Investigation of Spectroscopic, Thermal Properties and Antibacterial Activities. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 189–195. <https://doi.org/10.21597/jist.408109>
- Sertçelik, M., Sugeçti, S., Büyükgüzel, E., Necefoğlu, H., & Büyükgüzel, K. (2018). Diaquabis N,N-dietilnikotinamid-İN1 bis 4-formilbenzoato-İO kobalt II Kompleksinin Model Organizma *Galleria mellonella* L. Lepidoptera: Pyralidae Üzerindeki Toksikolojik ve Fizyolojik Etkileri. *Karaelmas Fen ve Mühendislik Dergisi*, 8(1), 359–364.
- Singh, S., & Florez, H. (2020). Coronavirus disease 2019 drug discovery through molecular docking. *F1000Research*, 9, 502. <https://doi.org/10.12688/f1000research.24218.1>
- Spackman, M. A., & Jayatilaka, D. (2009a). Hirshfeld surface analysis. *CrystEngComm*, 11(1), 19–32. <https://doi.org/10.1039/B818330A>
- Spackman, M. A., & Jayatilaka, D. (2009b). Hirshfeld surface analysis. *CrystEngComm*, 11(1), 19–32. <https://doi.org/10.1039/B818330A>

- Spackman, M. A., McKinnon, J. J., & Jayatilaka, D. (2008). Electrostatic potentials mapped on Hirshfeld surfaces provide direct insight into intermolecular interactions in crystals. *CrystEngComm*, 10.1039.b715227b. <https://doi.org/10.1039/b715227b>
- Spackman, P. R., Turner, M. J., McKinnon, J. J., Wolff, S. K., Grimwood, D. J., Jayatilaka, D., & Spackman, M. A. (2021). *CrystalExplorer*: A program for Hirshfeld surface analysis, visualization and quantitative analysis of molecular crystals. *Journal of Applied Crystallography*, 54(3), 1006–1011. <https://doi.org/10.1107/S1600576721002910>
- Trott, O., & Olson, A. J. (2009). AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of Computational Chemistry*, NA-NA. <https://doi.org/10.1002/jcc.21334>
- Uğurlu, G., & Beytur, M. (2020). Theoretical studies on the structural, vibrational, conformational analysis and nonlinear optic property of 4-(methoxycarbonyl)-phenylboronic acid. *Indian Journal of Chemistry-Section A*, 59(10), 1504–1512.
- Verma, T., Sinha, M., Nitin, B., Yadav, S., Shah, K., & Chauhan, N. (2021). A review on Coronavirus Disease and potentially active drugs targeting Coronavirus. *Biomedical and Biotechnology Research Journal (BBRJ)*, 5(2), 110. https://doi.org/10.4103/bbrj.bbrj_14_21
- Wan, Y., Shang, J., Graham, R., Baric, R. S., & Li, F. (2020). Receptor Recognition by the Novel Coronavirus from Wuhan: An Analysis Based on Decade-Long Structural Studies of SARS Coronavirus. *Journal of Virology*, 94(7). <https://doi.org/10.1128/JVI.00127-20>



Investigation of The Activity of Lipase Variants on Different 4-Nitrophenyl Esters by Spectrophotometric Assay

Nurcan VARDAR YEL¹

Makalenin Alanı: Biyoloji

| Makale Bilgileri | Öz |
|---|---|
| Geliş Tarihi 09.07.2021 | <p>Mikrobiyal enzimler biyoteknoloji alanında sıklıkla kullanılan önemli araçlardır. Hücre içi biyolojik reaksiyonlarda rol oynayan bu mikrobiyal enzimler çok farklı endüstrilerde kullanılmaktadır. Lipaz, proteazlar ve amilazlar hidrolitik enzimlerin önemli birer üyelerindedir. Hidrolitik enzimler arasında en yaygın kullanım alanına sahip olan lipaz enzimi, lipid molekülü arasındaki ester bağlarının hidrolizini katalizleyen bir enzimdir. Lipaz enziminin aktivitesi yaygın olarak spektrofotometrik yöntemle ölçülmektedir. Kinetik analizler için yaygın olarak p-nitrofenol esterleri tercih edilmektedir. Spektrofotometrik analiz yönteminde p-nitrofenol ester substratların lipaz enzimi tarafından hidroliz edilmesi sonucunda renkli ürün ölçüm yapılmaktadır. Bu çalışmada farklı lipaz varyantların aktivite ve kinetik parametrelerin ölçümü için p-nitrofenil asetat (Asetik asit 4-nitrofenil ester) , p-nitrofenil bütirat (Bütirik asit 4-nitrofenil ester), p-nitrofenil oktanoat (Oktanoik asit 4-nitrofenil ester, 4-Nitrofenil kaprilat), p-nitrofenil dodekanoat (Dodekanoik asit 4-nitrofenil ester), p-nitrofenil palmitat (p-Nitrofenil palmitat, Hezanoik asit 4-nitrofenil ester) substratları kullanılmıştır. Farklı karbon uzunluklarına sahip substratların lipaz enzimi ile belli sürelerde inkübasyon sonucu oluşan ürünler spektrofotometrik olarak ölçülmüştür. Denemeler 25C'de 5dk-120dk aralığında gerçekleştirilmiştir. Dört tekrar yapılan deneyler sonucunda lipaz enzimin aktivitesinin substratların karbon zincirinin uzunluğuna göre değişim gösterdiği tespit edilmiştir. Lipaz enzimin p-nitrofenil palmitat üzerindeki aktivitesinin çok düşük olduğu belirlenmiştir. Yabani lipaz enzimin Vmax değerleri pNP-asetat, pNP-bütirat, pNP-oktanoat, pNP- dodekanoat, pNP-palmitat için sırasıyla 0.42 U/mg protein, 0.95 U/mg protein, 1.1 U/mg protein, 0.78 U/mg protein, 0.18 U/mg protein olarak hesaplanmıştır. Yabani lipaz enzimin 8 karbon zincir uzunluğunda olan pNP- oktanoat substratı üzerindeki aktivitesinin diğer substratlara göre daha yüksek olduğu belirlenmiştir.</p> |
| Kabul Tarihi 02.12.2021 | |
| Anahtar Kelimeler Mikrobiyal enzim Lipaz Protein mühendisliği Spektrofotometri 4-nitrofenol | |
| | |

| Article Info | Abstract |
|--|--|
| Received 09.07.2021 | <p>Microbial enzymes are important tools that are frequently used in the field of biotechnology. These microbial enzymes, which play a role in intracellular biological reactions, are used in many different industries. Lipase, proteases and amylases are important members of hydrolytic enzymes. Lipase enzyme, which has the most common usage area among hydrolytic enzymes, is an enzyme that catalyzes the hydrolysis of ester bonds between lipid molecules. The activity of lipase enzyme is commonly measured by spectrophotometric method. P-nitrophenol esters are commonly preferred for kinetic analysis. In the spectrophotometric analysis method, the colored product is measured as a result of the hydrolysis of p-nitrophenol ester substrates by the lipase enzyme. In this study, p-nitrophenyl acetate (Acetic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl butyrate (Butyric acid 4-nitrophenyl ester), p-</p> |
| Accepted 02.12.2021 | |
| Keywords Microbial enzyme Lipase Protein engineering Spectrophotometry 4-nitrophenol | |

¹ Altınbas University Vocational School Medical Laboratory Techniques-Istanbul; e-mail: nurcan.vardar@altinbas.edu.tr ; ORCID: 0000-0003-0994-5871

nitrophenyl octanoate (Octanoic acid 4-nitrophenyl ester, 4 -Nitrophenyl caprylate), p-nitrophenyl dodecanoate (Dodecanoic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl palmitate (p-Nitrophenyl palmitate, Hexadecanoic acid 4-nitrophenyl ester) substrates were used. The products formed as a result of incubation of substrates with different carbon lengths with lipase enzyme periods were measured spectrophotometrically. Trials were carried out at 25°C between 5min-120min. As a result of the experiments carried out in four repetitions, it was determined that the activity of the lipase enzyme varies according to the length of the carbon chain of the substrates. Vmax values of wild lipase enzyme were calculated as 0.42 U/mg protein, 0.95 U/mg protein, 1.1 U/mg protein, 0.78 U/mg protein, 0.18 U/mg protein for pNP-acetate, pNP-buritate, pNP-octanoate, pNP-dodecanoate, pNP-palmitate, respectively. It was determined that the activity of lipase enzyme on p-nitrophenyl palmitate was very low. It was determined that the activity of wild lipase enzyme on the eight-carbon chain pNP-octanoate substrate was higher than the other substrates.

INTRODUCTION

Enzymes are biocatalysts that regulate most of the metabolic reactions in living cells and ensure the maintenance of biological activities. Today, some enzymes are used in many industrial areas, especially in the food, textile, detergent, pharmaceutical and cosmetic industries. Proteases and lipases are the most commonly used enzymes commercially. One of the most widespread group of enzymes for industrial use are lipases (Dror et al., 2014). Generally, lipases hydrolyze oils and fatty acid esters (Sharma et al., 2001). Their biotechnological potential is enormous, due to their resistance to organic solutions, broad substrate specificity, regioselectivity, stereoselectivity, and lack of cofactors. (Jaeger & Reetz, 1998; Jaeger & Eggert, 2002). The ability of lipase enzyme to be resistant to high temperatures and to remain stable in alkaline environments has provided many advantages in bioprocesses (Hasan et al., 2006; Rua et al., 1997). Especially the small size of bacterial lipases provides ease of use in enzyme studies and their substrate specificity makes these enzymes valuable in biotechnological fields. It has many application areas in industry. This reveals the importance of the lipase enzyme.

For example, biodiesel production, biopolymer synthesis, paper manufacturing, yogurt and cheese making, washing powder production, biosensor manufacturing, cosmetics and perfume industry, leather industry, tea making, applications in medicine, detergent and textile industry, waste water treatment, food and pharmaceutical industry (Jaeger & Reetz, 1998; Schmid & Verger, 1998; Califano et al., 2015; Hasan et al., 2006; Kimtun et al., 2015; Maharana & Ray, 2015; Speranza et al., 2016). The most commonly used bacterial lipases are Novo Nordisk A/S (Bagsværd, Denmark), Novozyme (Bagsværd, Denmark), Amano (Nagoya, Japan), Sigma-Aldrich (St. Louis, United States), Boehringer Mannheim (Mannheim, USA). It is

produced and marketed by biotechnology companies such as Germany), Genencor (New York, United States), Asahi (Tokyo, Japan), and Biocatalysts (Wales, United Kingdom). Examples of the most widely used commercial lipases in biodiesel production are Novozym 435 (Deng et al., 2005), Lipopan 50BG (Verdugo et al., 2011) and Lipase AK (Soumanou & Bornscheuer, 2003) (Hwang et al., 2014). Among European countries, especially Denmark is leading in the field of lipase production and marketing. Since the use of lipase enzymes in various chemical and bioprocess industries is a billion dollar trade, there is great pressure to isolate new lipase enzymes with improved properties. There is a great need for a new generation of these enzymes with more advantageous features such as increased activity against various natural substrates, resistance to extreme temperature and pH conditions, and easier and cheaper production. For example, the availability of more effective lipases could enable the development of process technologies that produce biodiesel from vegetable oils.

Rapid developments in protein engineering techniques enable the production of lipase enzymes with desired properties (Hwang et al., 2014). Examples of commercial lipase variants whose properties have been improved by protein engineering methods are Lipolase Ultra and LipoPrime manufactured by Novo Nordisk A/S (Walsh, 2002). Protein engineering is a process that can improve substrate specificity and stability, as well as increase the catalytic function of enzymes. There are three main areas in protein engineering: rational design, quasi-rational design, and directed evolution. The rational design method, which requires detailed information about the three-dimensional structure and function of the enzyme, and using this information, the position to be mutated and which amino acid will be predicted by computer methods before proceeding to the experimental stage (Steiner & Schwab, 2012). In the directed evolution method, which requires no prior knowledge of the enzyme's three-dimensional structure and function, a large number of mutations are randomly added to the enzyme structure, and then a functional scan is performed for the desired feature (Bloom & Arnold, 2009; Goldsmith & Tawfik, 2012; Turner, 2009; Wang et al., 2012; Packer & Liu, 2015; Denard et al., 2015). The quasi-rational design method was created by combining rational design and directed evolution techniques (Bornscheuer & Kazlauskas, 2011; Bornscheuer & Pohl, 2001; Bornscheuer et al., 2012; Böttcher & Bornscheuer, 2010). With this method, the amino acid position to be mutated is predetermined and 19 other possible amino acids are placed in this position. In this way, the best amino acid required to be in a specific position for the desired trait can be discovered after functional screening.

In this study, kinetic analysis and characterization of new lipase enzymes, which will support the development of bioprocess industries with protein engineering methods, were carried out by partial purification. In this study, different substrates such as p-nitrophenyl acetate (Acetic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl butyrate (Butyric acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl octanoate (Octanoic acid 4-nitrophenyl ester, 4 -Nitrophenyl caprylate), p-nitrophenyl dodecanoate (Dodecanoic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl palmitate (p-Nitrophenyl palmitate, Hexadecanoic acid 4-nitrophenyl ester) substrates were used to determine the enzyme activity.

Tables and Figures

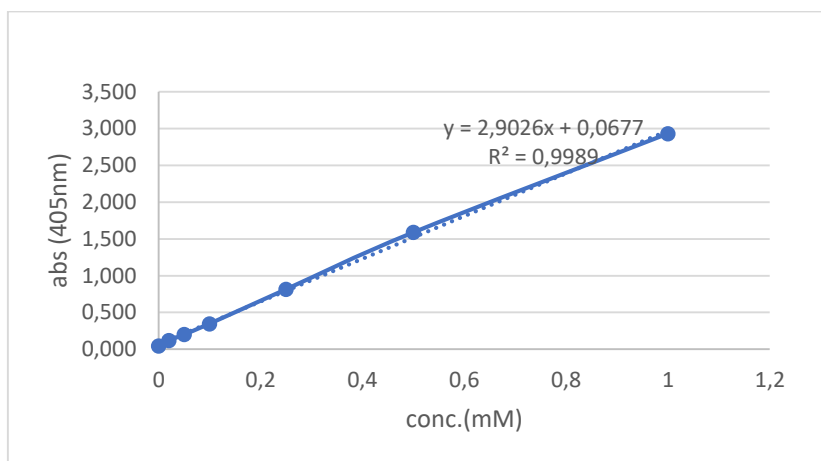


Figure1. P-nitrophenol (pNP) calibration curve

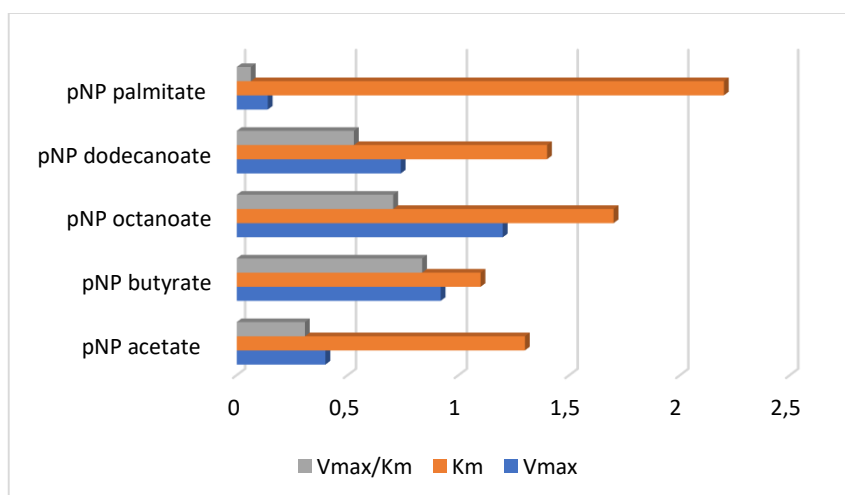


Figure2. Vmax, Km, Vmax/Km values of lipase enzyme on different 4-Nitrophenol esters

Table1. 280 nm absorbance values of three different variant and wild type samples and corresponding mprotein/ml value

| | 280nm | mprotein/ml |
|----|-------|-------------|
| V1 | 3,81 | 4,953 |
| V2 | 5,57 | 7,241 |
| V3 | 2,96 | 3,848 |
| Wt | 3,01 | 3,913 |

Table2. Vmax, Km, Vmax/Km values of wild type and variants

| | Vmax (U/mg total protein) | Km (mM) | Vmax/Km |
|----|---------------------------|---------|---------|
| Wt | 0,92 | 1,1 | 0,83 |
| V1 | 0,48 | 1,6 | 0,3 |
| V2 | 1,09 | 1,2 | 0,9 |
| V3 | 0,22 | 1,5 | 0,14 |

MATERIALS AND METHODS

Materials

Environmentally isolated lipase enzyme was developed by protein engineering method in our previous study and cloned into *E.coli* BL21 to use in this study. p-nitrophenol (pNP), p-nitrophenyl acetate (Acetic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl butyrate (Butyric acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl octanoate (Octanoic acid 4-nitrophenyl ester, 4-Nitrophenyl caprylate), p-nitrophenyl dodecanoate (Dodecanoic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl palmitate (p-Nitrophenyl palmitate, Hexadecanoic acid 4-nitrophenyl ester), acetonitrile, protein assay kit were obtained from Sigma Aldrich and Merck companies. Multiskan go microplate spectrophotometer and SkanIt Software 4.1 for Microplate Readers RE, ver. 4.1.0.43 from thermo scientific was used for spectrophotometric analysis

Enzyme purification

A single colony was selected from the culture incubated overnight at 37°C in LB medium containing ampicillin. BL21(DE3) cells containing *E.coli* wild-type plasmid and variants were grown in 50 mL of LB-ampicillin broth at 37 °C. Protein expression was induced by adding

isopropyl- β -D-thiogalactopyranoside (IPTG) to the medium when the OD600 value was 0.2-0.3. The induced cultures were incubated for an additional 18 hours at 25 °C. Grown culture centrifuged at 6500 rpm for 5 minutes in a cooled centrifuge and the supernatant was transferred to Amicon Ultra-15 tubes. It was concentrated by centrifugation at 4500 rpm for 20 minutes at 4 °C. The concentrated enzyme was washed with 25 mM NaPO₄ buffer, pH 7.0. Protein concentration was measured using the Pierce Coomassie Protein Assay Kit (Thermo Scientific).

p-Nitrophenol calibration

Eight different concentrations (0mM, 0.02mM, 0.05mM, 0.1mM, 0.25mM, 0.5mM, 1mM, 2mM) p-nitrophenol (pNP) solutions were prepared and their absorbance at 405 nm was obtained. The standard curve graphic was drawn according to the concentration and absorbance value (Figure1).

Protein Assay

To determine the amount of protein, the absorbance at 280 nm of the eluates collected from chromatographic studies was investigated. The Bradford protein method was used to determine the amount of protein for both the high activity tubes collected from the column and the homogenate. Ready-to-use Bradford Reagent containing Coomassie Brilliant Blue G-250 was used as paint. To prepare Standard Protein solution, bovine serum albumin (BSA) solution at a concentration of 1 mg mL⁻¹ was prepared. Then, six eppendorf tubes were taken and 0.0, 2.5, 5.0, 7.5, 10.0, 12.5 μ L of 1 mg mL⁻¹ concentration of BSA solution were put into the tubes, respectively. Different volumes were taken for the homogenate and column samples and added to the new eppendorf tube. The volume of each tube content was made up to 100 μ L with distilled water. Then, 1 mL of ready-to-use Bradford Reagent was added to all tubes and mixed with vortex. After waiting in the dark for 20 minutes, the absorbance values against the blank were read at 595 nm. Protein concentrations of 1/20 dilution wild type and variants samples are shown in Table 1.

Lipase activity measurement

Lipase activity using pNP substrates determined by spectrophotometric method by using Microplate Spectrophotometer. The amount of p-nitrophenol (pNP) released from pNP-

substrates were measured periodically at 405 nm at 25 °C. 20mM pNP substrate solutions were made by mixing with acetonitrile. 25mM NaPO₄, pH 7.0 solution was used as buffer solution. Seven different concentration of substrate (0mM, 0.05mM, 0.25mM, 0.5mM, 1mM, 2mM, 4mM) were examined with 10 µL of the enzyme concentrate. The plate was designed to have a total volume of 200 µl. All experiments were repeated three times. 25mM NaPO₄ buffer and acetonitrile mixture were used as blank. For kinetic analysis, measurements were taken at ten different time points. For kinetic analysis, five different substrate concentrations were studied as 0.05, 0.25, 0.5, 1, 2, 4mM. Ten different time points were used to calculate the most appropriate values. While performing the spectrophotometric analysis, measurements were made at the 1st, 5th, 10th, 15th, 30th, 45th, 60th, 90th, 120th and 150th minutes after the enzyme was added to the mixture at last.

Initial velocity (V_0) was calculated from time-pNP concentration graph. K_m and V_{max} values were determined with the help of Lineweaver-Burk plot drawn between velocity values and substrate concentration. Wild type and different variants were compared to obtain relative results. Standard deviation was also calculated.

RESULTS AND DISCUSSION

In this study, the absorbance of the pNP product formed as a result of the degradation of the pNPP ester by the effect of lipase was measured spectrophotometrically. Many studies have used the spectrophotometric method for the activity and kinetic analyzes of the lipase enzyme (Özarlaner&Albayrak, 2013; Pencreac'h& Baratti, 1996; Smeltzer et al., 1992; Mosmuller et al., 2009; Šibalić et al., 2020; Ciuffreda et al., 2009).

The activity of the same lipase enzyme on substrates of different carbon lengths was investigated. In addition, the effects of lipase variants with different activating properties on similar substrates were examined and a compared. Five different 4-Nitrophenol esters were used in this study. P-nitrophenyl acetate (Acetic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl butyrate (Butyric acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl octanoate (Octanoic acid 4-nitrophenyl ester, 4 -Nitrophenyl caprylate), p-nitrophenyl dodecanoate (Dodecanoic acid 4-nitrophenyl ester), p-nitrophenyl palmitate (p-Nitrophenyl palmitate, Hexadecanoic acid 4-nitrophenyl ester) substrates were used. The products formed as a result of incubation of substrates with different carbon lengths with lipase enzyme periods were measured spectrophotometrically. Trials were carried out at 25°C. Figure 2 shows the V_{max} , K_m and

V_{max}/K_m values of lipase enzyme on different substrates. The V_{max} value of the wild type lipase enzyme increased up to the eight-carbon (C8) substrate, p-NP octanoate, and decreased with the twelve-carbon (C12) pNP dodecanoate. The lowest V_{max} value was obtained with the sixteen-carbon (C16) pNP palmitate substrate, while the highest V_{max} value was obtained with the pNP octanoate substrate (Figure2). The catalytic efficiency values were also calculated on the Lineweaver-Burk plot for different substrates. Considering the V_{max}/K_m value, p-NP butyrate (C4) gives the highest result among the other substrates with a value of 0.83. The catalytic activity for the pNP palmitate substrate was measured at the lowest value of 0.063.

It has also been seen in similar studies that different substrates have effects on the catalytic activity of lipase enzyme. The activity of the lipase enzyme obtained from *Thermomyces lanuginosus* has been shown to be greatly affected by substrate hydrophobicity. In this study, the activity of substrates with different aliphatic chain lengths (p-nitrophenyl benzoate, p-nitrophenyl acetate, p-nitrophenyl butyrate, p-nitrophenyl hexanoate, p-nitrophenyl octanoate, p-nitrophenyl laurate and p-nitrophenyl palmitate) examined on lipase enzyme. It has been shown that the effect of the modified enzyme on short chain substrates is higher than on long chain substrates (Noro et al., 2020). The activity and catalytic efficiency of wild type and three different lipase variants (V1, V2, V3) were analyzed spectroscopically. Among the variants, the V_{max} value of the V2 type lipase enzyme was found to be 1.3 times higher than that of the wild type. Since K_m values are similar to wt, the catalytic efficiency V_{max}/K_m value increased 1.18 times for the V2 type. Both V_{max} values of V1 and V3 variants were calculated as 0.48 and 0.22 respectively (Table2). Although the V_{max} value of these variants is lower than the wild type, the K_m values are also higher, so the V_{max}/K_m values are much lower than both wild type and V2 types. (Table2). Since the activities of wild type and different variants will be compared in this study, pNP butyrate was used as the substrate, which gave the best results compared to the results obtained from the previous study.

Enzymes have a great use in scientific studies. Metabolic enzyme can be used as marker to measure cellular stress (Tunçsoy et al., 2021). In addition, enzymes are widely used in many biotechnological fields. Lipases have a wide range of applications, especially in the food, pharmaceutical, textile, detergent, paper and cosmetic industries. Lipase enzymes are widely used in the processing of fats and oils in the food industry. In addition to the food industry, lipase enzymes are widely used in detergent formulations. Lipases are of great

importance to the detergent industry, which are very helpful in removing oil stains, oily food stains and greasy soiling from fabrics. Lipases obtained from different organisms can show activity at different temperatures. Alkaline yeast lipases can operate at lower temperatures than bacterial and mold lipases. Lipases, which are active in cold environments, are preferred because they are advantageous in both energy consumption and textile durability. Protein engineering methods are frequently used to enable lipase enzymes to show activity at low temperatures (Hasan et al., 2006). In order to increase the usage areas of enzymes in the industry, many studies are carried out such as increasing the catalytic activities of enzymes, changing the enantioselectivity, changing the substrate selectivity, increasing the thermal stability, changing the pH stability. For these purposes, mostly protein engineering methods are applied. Although the changes as a result of mutation on the enzyme are mostly unlikely to increase the activity, the protein engineering method is a good method for all of these purposes mentioned above (Rigoldi et al., 2018; Rotticci et al., 2001; Ruslan et al., 2012; Rubingh, 1997; Widersten, 2014; Mala et al., 2001; Patkar et al., 1998).

As a conclusion, with this study, the importance of the lipase enzyme in the industry has been emphasized once again. The activity of wild type and variant enzymes was analyzed spectrophotometrically and the results were compared with the variants. The catalytic activity of the V2 type, which is one of the lipase variants developed by protein engineering, was increased compared to the wild type. It is planned to carry out genetic studies on the basis of the results obtained from these studies. It is planned to determine the region of the enzyme where the mutation is located, and to examine the effects of amino acid changes on the three-dimensional structure of the protein.

Acknowledgement

This research project was supported by Altınbaş University Scientific Research Fund.
Project Number: PB2020-SHMYO-4

REFERENCES

- Bloom, J. D., & Arnold, F. H. (2009). In the light of directed evolution: pathways of adaptive protein evolution. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(1), 9995-10000. <https://doi.org/10.1073/pnas.0901522106>
- Bornscheuer, U. T., & Pohl, M. (2001). Improved biocatalysts by directed evolution and rational protein design. *Current opinion in chemical biology*, 5(2), 137-143. [https://doi.org/10.1016/S1367-5931\(00\)00182-4](https://doi.org/10.1016/S1367-5931(00)00182-4)
- Bornscheuer, U., & Kazlauskas, R. J. (2011). Survey of protein engineering strategies. *Current protocols in protein science*, 66(1), 26-7. <https://doi.org/10.1002/0471140864.ps2607s66>
- Bornscheuer, U. T., Huisman, G. W., Kazlauskas, R. J., Lutz, S., Moore, J. C., & Robins, K. (2012). Engineering the third wave of biocatalysis. *Nature*, 485(7397), 185-194. <https://doi.org/10.1038/nature11117>
- Böttcher, D., & Bornscheuer, U. T. (2010). Protein engineering of microbial enzymes. *Current opinion in microbiology*, 13(3), 274-282. <https://doi.org/10.1016/j.mib.2010.01.010>
- Califano, V., Ausanio, G., Bloisi, F., Aronne, A., Vicari, L. R., & Nasti, L. (2015). m-DOPA addition in MAPLE immobilization of lipase for biosensor applications. *Sensing and bio-sensing research*, 6, 103-108. <https://doi.org/10.1016/j.sbsr.2015.07.007>
- Ciuffreda, P., Casati, S., Loseto, A., & Santaniello, E. (2009). Spectrophotometric Assay of Lipase Activity: A New 4-nitrophenyl Ester of a Dialkylglycerol Suitable as a Chromogenic Substrate of *Pseudomonas cepacia* Lipase. *Biocatalysis and Biotransformation*, 21(3), 123-127. <https://doi.org/10.1080/1024242031000155055>
- Denard, C. A., Ren, H., & Zhao, H. (2015). Improving and repurposing biocatalysts via directed evolution. *Current opinion in chemical biology*, 25, 55-64. <https://doi.org/10.1016/j.cbpa.2014.12.036>
- Deng, L., Xu, X., Haraldsson, G. G., Tan, T., & Wang, F. (2005). Enzymatic production of alkyl esters through alcoholysis: A critical evaluation of lipases and alcohols. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 82(5), 341-347. <https://doi.org/10.1007/s11746-005-1076-3>
- Dror, A., Shemesh, E., Dayan, N., & Fishman, A. (2014). Protein engineering by random mutagenesis and structure-guided consensus of *Geobacillus stearothermophilus* lipase T6 for enhanced stability in methanol. *Applied and environmental microbiology*, 80(4), 1515-1527. <https://doi.org/10.1128/AEM.03371-13>
- Goldsmith, M., & Tawfik, D. S. (2012). Directed enzyme evolution: beyond the low-hanging fruit. *Current opinion in structural biology*, 22(4), 406-412. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2012.03.010>
- Hasan, F., Shah, A. A., & Hameed, A. (2006). Industrial applications of microbial lipases. *Enzyme and Microbial technology*, 39(2), 235-251. <https://doi.org/10.1016/j.enzmictec.2005.10.016>
- Hwang, H. T., Qi, F., Yuan, C., Zhao, X., Ramkrishna, D., Liu, D., & Varma, A. (2014). Lipase-catalyzed process for biodiesel production: Protein engineering and lipase production. *Biotechnology and bioengineering*, 111(4), 639-653. <https://doi.org/10.1002/bit.25162>
- Jaeger, K. E., & Reetz, M. T. (1998). Microbial lipases form versatile tools for biotechnology. *Trends in biotechnology*, 16(9), 396-403. [https://doi.org/10.1016/S0167-7799\(98\)01195-0](https://doi.org/10.1016/S0167-7799(98)01195-0)

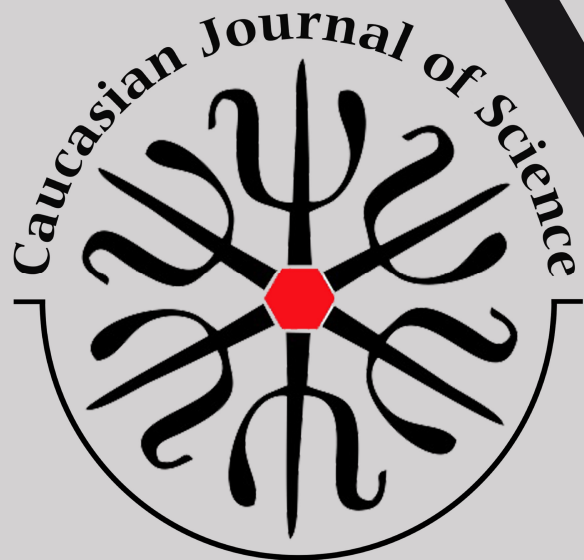
- Jaeger, K. E., & Eggert, T. (2002). Lipases for biotechnology. *Current opinion in biotechnology*, 13(4), 390-397. [https://doi.org/10.1016/S0958-1669\(02\)00341-5](https://doi.org/10.1016/S0958-1669(02)00341-5)
- Kimtun, P., Choonut, O., Yunu, T., Paichid, N., Klomkloa, S., & Sangkharak, K. (2015). Biodiesel production using lipase from oil palm fruit as a catalyst. *Energy Procedia*, 79, 822-826. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2015.11.572>
- Maharana, A., & Ray, P. (2015). A novel cold-active lipase from psychrotolerant *Pseudomonas* sp. AKM-L5 showed organic solvent resistant and suitable for detergent formulation. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, 120, 173-178. <https://doi.org/10.1016/j.molcatb.2015.07.005>
- Mala, J. G. S., Kamini, N. R., & Puvanakrishnan, R. (2001). Strain improvement of *Aspergillus niger* for enhanced lipase production. *The Journal of general and applied microbiology*, 47(4), 181-186. <https://doi.org/10.2323/jgam.47.181>
- Mosmuller, E. W. J., Van Heemst, J. D. H., Van Delden, C. J., Franssen, M. C. R., & Engbersen, J. F. J. (2009). A New Spectrophotometric Method for the Detection of Lipase Activity Using 2,4-Dinitrophenyl Butyrate as a Substrate, *Biocatalysis*, 5(4), 279-287. <https://doi.org/10.3109/10242429209014874>
- Noro, J., Castro, T.G., Cavaco-Paulo, A., & Silva, C. (2020). Substrate hydrophobicity and enzyme modifiers play a major role in the activity of lipase from *Thermomyces lanuginosus*. *Catalysis Science & Technology*, 17(10), 5913-5924. <https://doi.org/10.1039/D0CY00912A>
- Özarslaner, E., & Albayrak, N. (2013). Lipaz aktivitesinin spektrofotometrik yöntemle belirlenmesinde çevresel koşulların p-nitrofenil propiyonat substratının kararlılığına etkisi. *The Journal of Food*, 38(3), 143-149. <https://dergipark.org.tr/tr/pub/gida/issue/6951/92706>
- Patkar, S., Vind, J., Kelstrup, E., Christensen, M. W., Svendsen, A., Borch, K., & Kirk, O. (1998). Effect of mutations in *Candida antarctica* B lipase. *Chemistry and physics of lipids*, 93(1-2), 95-101. [https://doi.org/10.1016/S0009-3084\(98\)00032-2](https://doi.org/10.1016/S0009-3084(98)00032-2)
- Penreac'h, G., & Baratti, J.C. (1996). Hydrolysis of p-nitrophenyl palmitate in n-heptane by the *Pseudomonas cepacia* lipase: A simple test for the determination of lipase activity in organic media. *Enzyme and Microbial Technology*, 18(6), 417-422. [https://doi.org/10.1016/0141-0229\(95\)00120-4](https://doi.org/10.1016/0141-0229(95)00120-4)
- Rigoldi, F., Donini, S., Redaelli, A., Parisini, E., & Gautieri, A. (2018). Review: Engineering of thermostable enzymes for industrial applications. *APL Bioengineering*, 2(1), 011501. <https://doi.org/10.1063/1.4997367>
- Rotticci, D., Rotticci-Mulder, J. C., Denman, S., Norin, T., & Hult, K. (2001). Improved enantioselectivity of a lipase by rational protein engineering. *ChemBioChem*, 2(10), 766-770. [https://doi.org/10.1002/1439-7633\(20011001\)2:10<766::AID-CBIC766>3.0.CO;2-K](https://doi.org/10.1002/1439-7633(20011001)2:10<766::AID-CBIC766>3.0.CO;2-K)
- Rubingh, D. N. (1997). Protein engineering from a bioindustrial point of view. *Current opinion in biotechnology*, 8(4), 417-422. [https://doi.org/10.1016/S0958-1669\(97\)80062-6](https://doi.org/10.1016/S0958-1669(97)80062-6)
- Ruslan, R., Rahman, R. N. Z. R. A., Leow, T. C., Ali, M. S. M., Basri, M., & Salleh, A. B. (2012). Improvement of thermal stability via outer-loop ion pair interaction of mutated T1 lipase from *Geobacillus zalihae* strain T1. *International Journal of Molecular Sciences*, 13(1), 943-960. <https://doi.org/10.3390/ijms13010943>

- Šibalić, D., Šalić, A., Zelić, B., Nam Tran, N., Hessel, V., & Tišma, M. (2020). A New Spectrophotometric Assay for Measuring the Hydrolytic Activity of Lipase from *Thermomyces lanuginosus*: A Kinetic Modeling. *ACS Sustainable Chem. Eng.*, 8(12), 4818–4826. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b07543>
- Smeltzer, M.S., Hart, M.E., & Iandolo, J.J. (1992). Quantitative spectrophotometric assay for staphylococcal lipase. *Appl Environ Microbiol.*, 58(9), 2815-9. <https://doi.org/10.1128/aem.58.9.2815-2819.1992>
- Tunçsoy, B., Sugeçti, S., Büyükgüzel, E., Özalp, P., & Büyükgüzel, K. (2021). Effects of Copper Oxide Nanoparticles on Immune and Metabolic Parameters of *Galleria mellonella* L. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 1-9. <https://doi.org/10.1007/s00128-021-03261-0>
- Widersten, M. (2014). Protein engineering for development of new hydrolytic biocatalysts. *Current opinion in chemical biology*, 21, 42-47. <https://doi.org/10.1016/j.cbpa.2014.03.015>

Caucasian Journal of Science

Open Access Journal

ISSN:2148-6840



www.cjoscience.com