



KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
UNIVERSITY



10 Cilt
Volume **1** Sayı
Issue **2017** Temmuz
July

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ DERGİSİ

INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE JOURNAL

e-ISSN: 2587-2389

<http://www.kafkas.edu.tr/fbedergi>

E-Mail : kaufbed@kafkas.edu.tr



**T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ DERGİSİ**

**KAFKAS UNIVERSITY
INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE JOURNAL**

Cilt: 10 Sayı: 1 Temmuz 2017

Volume: 10 Number: July 2017

e-ISSN: 2587-2389

Kafkas Üniv. Fen Bil. Enst. Derg (Kafkas Univ. Inst. of Nat. and Appl. Sci. J.)
Cilt: 10 Sayı: 1, Temmuz 2017 (Volume: 10 Number: 1, July 2017)

<http://www.kafkas.edu.tr/fbedergi>

<http://dergipark.gov.tr/kujs>

Dergi Sahibi/Owner

Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Adına
Doç. Dr. Özlem GÜRSOY KOL
On behalf of Kafkas University Rectorship,
Institute of Natural and Applied Science Journal

Editör/Editor

Doç. Dr. Özlem GÜRSOY KOL

Yayın Kurulu

Prof. Dr. Haydar YÜKSEK
Prof. Dr. Gabil YAGUB
Prof. Dr. Muzaffer ALKAN
Prof. Dr. Mehmet Ali KIRPIK
Yrd. Doç. Dr. Güventürk UĞURLU
Yrd. Doç. Dr. Evren KOÇ
Yrd. Doç. Dr. Meryem TERHAN

Yazışma Adresi

(Address for Correspondence)

Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi
Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
36100-Kars/ Türkiye
Phone: +90 474 2128850
Fax: +90 474 2123867
E-mail: kaufbed@kafkas.edu.tr

Bu dergi Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından Ocak-Haziran ve Temmuz-Aralık dönemlerinde olmak üzere yılda iki kez yayımlanır.

This journal is published biannually, in January-June and July-December, by the Institute of Science Institute, University of Kafkas

Önemli Not:

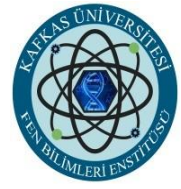
- Dergimizin adı, ilk sayısı (Cilt:1, Sayı:1) “Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi”; İkinci sayısı (Cilt:1, Sayı:2) “Fen Bilimleri Dergisi” ve üçüncü sayıdan itibaren (Cilt:2, Sayı:1) ise “Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi” olarak değiştirilmiştir.
- Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergimiz Cilt 10, Sayı 1’den itibaren e-ISSN numarası 2587-2389 alınmış olup Cilt 10, Sayı 1’den itibaren elektronik ortamda basılacaktır.

Bilim Kurulu / Sciences' Board

Prof. Dr. Haydar YÜKSEK	Kafkas Üniversitesi
Prof. Dr. Mustafa BÖYÜKATA	Bozok Üniversitesi
Prof. Dr. Mevlüt KARABULUT	Gebze Teknik Üniversitesi
Prof. Dr. Mahammad BABANLI	Azerbaycan Milli Bilimler Akademisi
Prof. Dr. Ömer Köksal ERMAN	Atatürk Üniversitesi
Prof. Dr. Kemal BÜYÜKGÜZEL	Bülent Ecevit Üniversitesi
Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU	Kafkas Üniversitesi
Prof. Dr. Kamil KOÇ	Celal Bayar Üniversitesi
Prof. Dr. Ziya MERDAN	Gazi Üniversitesi
Prof. Dr. Şule BAHÇECİ	Karadeniz Teknik Üniversitesi
Prof. Dr. Bülent KUTLU	Gazi Üniversitesi
Prof. Dr. İbrahim İŞILDAK	Yıldız Teknik Üniversitesi
Prof. Dr. Faik Nüzhet OKTAR	Marmara Üniversitesi
Prof. Dr. Mehmet Küçük	Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi
Prof. Dr. Haluk Özmen	Karadeniz Teknik Üniversitesi
Prof. Dr. Bayram Coştu	Yıldız Teknik Üniversitesi
Prof. Dr. Muzaffer Alkan	Kafkas Üniversitesi
Prof. Dr. Orhan Karamustafaoğlu	Amasya Üniversitesi
Prof. Dr. Bünyamin YILDIZ	Mustafa Kemal Üniversitesi
Prof. Dr. Nizami MUSTAFA	Kafkas Üniversitesi
Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK	Kafkas Üniversitesi
Prof. Dr. Onur ATAKİŞİ	Kafkas Üniversitesi
Doç. Dr. Çiğdem GÜNDÜZ ARAS	Kocaeli Üniversitesi
Doç. Dr. Ömür DEVECİ	Kafkas Üniversitesi
Doç. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK	Gazi Üniversitesi
Doç. Dr. Engin ATEŞER	Aksaray Üniversitesi
Doç.Dr. Hacı ÖZİŞİK	Aksaray Üniversitesi
Doç.Dr. Mustafa YÜKSEK	Kafkas Üniversitesi
Doç. Dr. Fikret AKDENİZ	Kafkas Üniversitesi
Doç. Dr. Mahmut ÇİÇEK	Pamukkale Üniversitesi
Doç. Dr. Fatih DUMAN	Erciyes Üniversitesi
Doç. Dr. Ferruh AŞÇI	Afyon Kocatepe Üniversitesi
Doç. Dr. Didem ÖZÇİMEN	Yıldız Teknik Üniversitesi
Doç. Dr. Eşref DEMİR	Giresun Üniversitesi
Doç. Dr. Serkan Sevim	Pamukkale Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Mustafa Kemal ALTUNOĞLU	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Murat BEYTUR	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Giray Buğra AKBABA	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Taha Yasin ÖZTÜRK	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Özkan ÖZDEN	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. İlhami GÖK	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Volkan Göksu	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Nigar YILDIRIM AKSOY	Kafkas Üniversitesi
Yrd. Doç. Dr. Rabia ÇAKAN AKPINAR	Kafkas Üniversitesi

İÇİNDEKİLER (CONTENTS)

Donör-Akseptör Gruplar İçeren Bazı Heterosiklik Bileşiklerin Çizgisel Olmayan Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi Zeynep TURHAN İRAK, Selçuk GÜMÜŞ.....	1-8
Contribution to the Flora of Sürgü (Doğanşehir/Malatya) Hatice TOSYAGÜLÜ ÇELİK, Ömer Faruk KAYA.....	9-24
1-Metil-3-fenil-4-[3-(<i>p</i>-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1<i>H</i>-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Bazı Teorik Özelliklerinin İncelenmesi Hilal MEDETALİBEYOĞLU, Özlem GÜRSOY KOL, Murat BEYTUR, Haydar YÜKSEK	25-36
Selim İlçesinin Toprak Örneklerinde Doğal Radyoaktivite Düzeyleri ve Radyolojik Etkilerinin Değerlendirilmesi Gülçin BİLGİCİ CENGİZ.....	37-47
Siklik Alken Türevlerinin Karbenler ile Siklopropanasyon Tepkimelerinin Teorik Olarak İncelenmesi Selçuk GÜMÜŞ, Ayşegül GÜMÜŞ, Zeynep TURHAN İRAK.....	48-60
Hizmet Sürecindeki Öğretmenler İçin Yeni Bir Model Önerisi: Akademisyen-Öğretmen İşbirliğine Dayalı Bir Akademik Danışmanlık Modeli Nesli KALA.....	61-75



Donör-Akseptör Gruplar İçeren Bazı Heterosiklik Bileşiklerin Çizgisel Olmayan Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi

Zeynep TURHAN İRAK^{1*}, Selçuk GÜMÜŞ²

¹Iğdır Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Çevre Mühendisliği Bölümü, 76100, Iğdır

²Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 65080, Van

(İlk Gönderim / Received: 02.09.2017, Kabul / Accepted: 14.09.2017, Online Yayın / Published Online: 23.10.2017)

Anahtar Kelimeler

Çizgisel olmayan optik özellikler, donör, akseptör, HOMO-LUMO, YFT.

Özet: Bu çalışmada heterosiklik mono ve polisiklik halka sistemleri içeren moleküllere farklı donör ve akseptör gruplar eklenerek, çizgisel olmayan optik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi kapsamında Becke'nin üç parametrelili enerji fonksiyoneli B3LYP hibrit yaklaşımı kullanılarak hesaplandı. Bilgisayarlı hesaplamalarda 6-311+G(2d,p) temel seti kullanıldı. Moleküllerin geometri optimizasyonları yapılarak elektronik enerjileri, dipol momentleri, moleküler orbital enerji farkları ($\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO}$) ve statik polarizebilite ve hiperpolarizebiliteleri hesaplanmıştır. Seri olarak çalışılarak yapılan hesapların sonuçları incelenmiş moleküllerin tam çizgisel olmayan özelliğe sahip olup olmadığı ve bu özelliklerin farklı konumlara bağlanan donör ve akseptör gruplarına göre nasıl değişiklik gösterdiği incelenmiştir.

Theoretical Investigation of Nonlinear Properties of Some Heterocyclic Compounds Having Donor-Acceptor Groups

Keywords:

Nonlinear properties, donor, acceptor, HOMO-LUMO, DFT

Abstract: In this study, nonlinear optical properties of molecules containing heterocyclic mono and polycyclic ring systems were calculated by using Becke's three-parameter energy function B3LYP hybrid approach in density function theory, with the addition of different donor and acceptor groups. 6-311+G (2d,p) basis set was used for computations. By making geometry optimizations of the molecules, electronic energies, dipole moments, molecular orbital energy differences ($\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO}$) and static polarizability and hyperpolarizability were calculated. The change of the nonlinear

optical properties of molecules, donor and acceptor groups, which are bonded at different positions to the different series-ring aromatic compounds have been investigated.

1. GİRİŞ

Çizgisel olmayan optik (NLO) özellik gösteren moleküllerin tasarımı ve uygulamaları, iletişim teknolojisinde ve optik veri depolama alanlarında güncel bir araştırma konusudur (Aggarwal et al, 2003; Zyss, 1994).

NLO malzemeleri yarı iletken tabanlı yapılardır. Bu nedenle, inorganik, organik ve organometalik moleküler sistemlerin birçok çeşidi günümüzde NLO aktivitesi için incelenmektedir.

Elektronların elektrik alana gösterdikleri tepki olarak ifade edilen maddenin optik özellikleridir. Madde üzerine gönderilen ışığın elektrik alan vektörü o maddeyi kutuplar ve bir atom veya molekülün polarizebilitesi ise çekirdek ve elektronların denge durumlarından ne kadar kolayca yer değiştirebildiğinin bir ölçüsüdür. Bu maddenin elektriksel bir karakteristiğidir. İzole edilmiş bir molekülün uygulanan bir dış elektrik alana karşı verdiği tepki molekülün dipol momentinin yeniden şekillenmesine sebep olur (Uzun ve ark., 2016).

Uygulanan elektrik alan zayıf olduğunda moleküler polarizebilite dikkate alınırken, elektrik alan şiddetli olduğunda çizgisel olmayan etkiler önemli bir hal alır ve

birinci dereceden hiperpolarizebilite, çizgisel olmayan optik özellikleri temsil eder (Leszczynski, 2006).

NLO özelliklerini hesapsal olarak öngörmek için toplam statik dipol moment (μ), ortalama lineer polarizebilite (α) ve hiperpolarizebilite (β) değerlerinden faydalanılır.

Çizgisel olmayan optik özellikler hesaplanırken;

Ortalama lineer polarizebilite için,

$$\alpha = 1/3(\alpha_{ii} + \alpha_{jj} + \alpha_{kk})$$

ve toplam statik hiperpolarizebilite için,

$$\beta_{top} = [(\beta_{iii} + \beta_{ijj} + \beta_{ikk})^2 + (\beta_{jjj} + \beta_{jkk} + \beta_{jii})^2 + (\beta_{kkk} + \beta_{kii} + \beta_{kjj})^2]^{1/2}$$

ifadeleri kullanılmıştır.

Bir molekülün çizgisel olmayan optik özelliklerini değiştirmek yani arttırmak mümkündür. Molekülün çizgisel olmayan optik özelliklerini artırmanın bir yolu konjuge n bağları ile molekülün uzunluğunu arttırmaktır. Molekülde konjugasyonun artması çizgisel olmayan optik özelliklerde bir artışa yol açar. Çizgisel olmayan optik özelliklerini artırmanın diğer bir yolu ise molekül uçlarına donör-

akseptör grubu bağlamaktır. Böylece molekül üzerindeki π -elektron bulutunun delokalizasyonu artarsa, moleküllerin polarizebilite değeri artar (Kariper, 2016).

2. MATERYAL VE METOT

Bu çalışmada pirazol, imidazol, pirazin molekülleri ve ayrıca 1H-indazol, benzimidazol ve kinoksalin moleküllerinin farklı konumlarındaki elektron çeken flor ve elektron veren metil ile oluşturdukları türevlerinin çizgisel olmayan optik özellikleri hesaplanmıştır. Moleküllerin gaz fazında ve taban durumunda üç boyutta yaklaşık geometrisi GaussView5.0 moleküler görüntüleme programında (Dennington et al., 2009) çizilerek, çizgisel olmayan optik özellikleri yoğunluk fonksiyonu teorisi içerisinde Becke'nin üç parametrelili enerji fonksiyoneli B3LYP hibrit yaklaşımı kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplamalar Gaussian09W paket programı ile yapılmış, 6-311+G(2d,p) temel seti kullanılmıştır (Frisch et al., 2009; Foresman and Frisch, 1996).

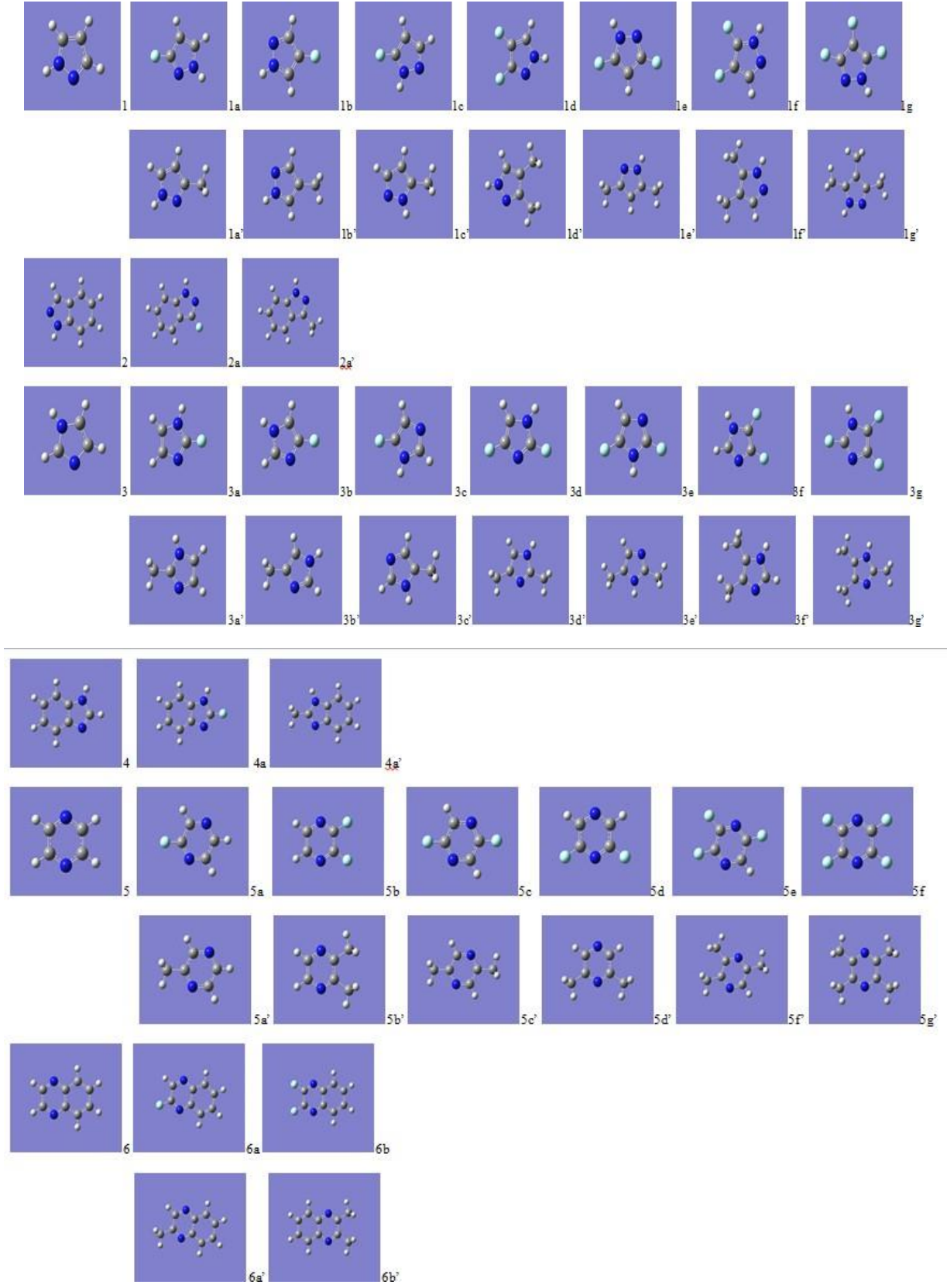
Geometri optimizasyonu yapılan tüm yapıların öncelikle elektronik enerjileri, dipol momentleri, en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO), en düşük boş moleküler orbital (LUMO) ve ΔE enerjileri değerleri bulunduğundan sonra çizgisel olmayan optik özellikleri; tek nokta enerji hesabında polar

hesapları yapılarak polarizebilite, hiperpolarizebilite değerleri hesaplanmıştır.

3. BULGULAR

Tüm yapıların gaz fazı geometri optimizasyonları öncelikle MM2 yöntemi ve onu takip eden yarı ampirik PM3 kendi içinde tutarlı moleküler orbital (SCFMO) metodu kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Daha sonra daha ileri geometri optimizasyonları RHF ve B3LYP/6-311+g(2d,p) düzeyleri kullanılarak elde edildi. B3LYP hibrit fonksiyoneli Hartree–Fock ve yerel spin yoğunluğu (LSD) değişim fonksiyonlarının, Becke eğimiyle LSD değişimlerinin korelasyonundan oluşur. B3LYP korelasyon terimi, Vosko, Wilk, Nusair yerel korelasyon fonksiyonları ve Lee, Yang, Parr korelasyon düzeltme fonksiyonlarından oluşur. Her bir yapı için normal mod analizleri her üç hesaplama metodunda da hiç bir negatif frekansla sonuçlanmamıştır (Turhan and Gümüş, 2017).

Moleküllerin 6-311+g(2d,p) temel seti kullanılarak elde edilen geometri optimize yapıları Şekil 1'de ve hesaplama sonuçları Tablo 1'de verilmiştir.



Şekil 1. Gaz fazında moleküllerin DFT/B3LYP teori düzeyinde 6-311+g(2d,p) temel seti kullanılarak optimize edilmiş yapıları

Tablo 1. Gaz fazında moleküllerin DFT/B3LYP teori düzeyinde 6–311+g(2d,p) temel seti kullanılarak hesaplanan toplam elektronik enerjileri, dipol momentleri, moleküler orbital enerji fark (ΔE) ve statik polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

Molekül adı	Toplam E (a.u)	ΔE (eV)	μ (D)	α ($\times 10^{-24}$ esu)	β ($\times 10^{-24}$ esu)
1 (pirazol)	-226,270894	6,97	2,336	7,011	12,065
1a	-325,538809	7,07	3,866	6,9872	22,893
1b	-325,530511	6,73	2,437	6,9778	14,5543
1c	-325,532996	7,04	0,919	6,9736	25,4761
1d	-424,794108	6,8	3,951	7,0008	27,2225
1e	-424,801239	7,23	2,446	6,9965	5,2611
1f	-424,787935	6,81	1,487	7,0069	30,9215
1g	-524,051963	7,05	2,819	7,0672	23,9182
1a'	-265,602215	6,84	1,951	8,9147	14,2827
1b'	-265,599469	6,68	2,387	8,8466	2,6345
1c'	-265,602425	6,52	2,881	8,8943	9,8045
1d'	-304,931524	6,89	2,049	10,7054	7,1576
1e'	-304,933629	6,39	2,506	10,8413	3,6224
1f'	-304,930294	6,17	2,939	10,7051	6,1168
1g'	-344,262338	6,18	2,511	12,6137	2,0171
2 (1H-indazol)	-379,953649	5,17	1,788	13,9081	25,6125
2a	-479,221258	5,06	3,437	13,879	41,9841
2a'	-419,286382	5,07	1,304	15,8977	29,6864
3 (imidazol)	-226,287721	6,31	3,778	7,0235	7,759
3a	-325,555567	6,36	3,953	6,9641	33,1512
3b	-325,5557	6,23	4,907	7,0153	25,0161
3c	-325,548053	6,34	3,079	6,9682	29,1264
3d	-424,822195	6,29	4,592	6,9791	23,3922
3e	-424,815016	6,38	2,815	6,9283	19,4873
3f	-424,811226	6,25	4,506	7,0191	41,5285
3g	-524,076419	6,26	3,824	6,9839	10,5512
3a'	-265,621379	6	3,641	8,9603	16,6393
3b'	-265,618464	6,04	3,435	8,9128	12,5491
3c'	-265,618981	5,96	4,04	8,9145	9,7035
3d'	-304,951835	5,75	3,292	10,8717	13,2221
3e'	-304,952524	5,69	3,816	10,8924	1,5225
3f'	-304,950047	5,75	3,689	10,8034	15,9574
3g'	-344,281359	5,41	3,537	7,0197	12,7611
4 (Benzimidazol)	-379,976973	5,58	3,51	13,8967	10,9499
4a	-479,247704	5,78	3,517	13,7822	63,1473
4a'	-419,312083	5,57	3,594	16,1202	28,1251
5 (Pirazin)	-264,3948039	5,32	0	8,5249	0,0005
5a	-363,6714999	5,63	1,596	8,5962	25,0787
5b	-462,9436272	5,71	2,658	8,7272	40,01
5c	-462,9451351	5,46	0	8,669	0
5d	-462,9465789	5,67	1,508	11,4306	41,8464
5e	-562,2158521	5,45	1,467	8,8297	21,4712
5f	-661,4888392	5,31	0	8,9835	0
5a'	-303,7272857	5,37	0,66	10,53	15,6342

5b'	-343,0593934	5,26	0,949	12,4948	18,7446
5c'	-343,0592482	5,4	0	12,5932	0,0003
5d'	-343,0594849	5,44	0,727	12,5471	2,0342
5e'	-382,3911126	5,48	0,534	14,5778	1,0178
5f'	-421,7226744	5,52	0	16,6219	0,0005
6 (Kinoksalin)	-418,081427	4,7	0,564	16,0252	30,1316
6a	-517,3595884	4,72	2,246	16,0597	19,0207
6b	-616,6330222	4,82	3,423	16,1628	43,4052
6a'	-457,4145225	4,76	0,37	18,2904	4,7325
6b'	-496,4766486	4,8	0,772	20,4788	2,4653

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, pirazol, imidazol, pirazin, 1H-indazol, benzimidazol ve kinoksalin molekülleri ile elektron çekici flor atomu ve elektron verici metil grubu içeren tüm olası türevlerinin çizgisel olmayan optik özellikleri teorik olarak hesaplanmıştır.

Pirazol halkasında süstitüent konumlandırma durumuna göre kuvvetli bir elektron çekici olan -F'lu türevleri pirazol halkasına göre genellikle daha yüksek hiperpolarizebiliteye sahiptir. Elektron verici -CH₃ grubu içeren türevlerinin hepsi daha yüksek polarizebiliteye sahiptir. İndazol ve türevlerinde de aynı durum söz konusudur.

İmidazol halkasında süstitüent konumlandırma durumuna göre -F'lu türevleri pirazol halkasına göre genellikle daha yüksek hiperpolarizebiliteye sahiptir. Öte yandan elektron verici -CH₃'li (3g hariç) türevler ise daha yüksek polarizebiliteye sahiptir.

Benzimidazol halkasında elektron çekici -F'lu türevinde hiperpolarizebilite artmışken elektron verici -CH₃'li türevinde

hem polarizebilitesi hem de hiperpolarizebilitesi artmıştır.

Piridin halkasının ve bazı türevlerinin dipol değerleri sıfır olduğundan değerlendirmeye alınmazken hesaplanan özellikleri diğer grup moleküllerle benzerlik göstermektedir.

Kinoksalin ve türevlerinde dikkate değer bir durum söz konusudur. Çünkü sadece 6b yapısında dipol artışıyla hiperpolarizebilite artışı görülmüştür. Bu davranışın molekülün simetrik yapısından kaynaklanan yük dağılımındaki net ayırmadan kaynaklanabileceği düşünülmektedir.

Yapılan çalışma bize bazı moleküllerin tam çizgisel olmayan özelliğe sahip olduğunu öte yandan bazılarının ise sadece hiperpolarizebilite veya polarizebilite değerlerinin değiştiğini göstermiştir. Lineer olmayan optik özellik gösteren bileşiklerde üre referans olarak kullanılmaktadır. Ürenin hiperpolarizabilite değeri $0.77 \times 10^{-30} \text{ cm}^5/\text{esu}$ olarak bilinmektedir. Tablo 1'de görüldüğü üzere, tasarlanan yapıların büyük bir bölümü

üreden daha yüksek hiperpolarizabilite değerine sahiptir.

Bu makalede incelenen yapılar ve elde edilen verilen ışığında şu sonuca varılabilir; moleküle donör veya akseptör grup eklenmesiyle konumlama farklarına bağlı olarak da çizgisel optik özellik göstermeyebilir. Bir molekülün NLO özelliğini öngörebilmek için hesaplanan parametrelerin değerleri baz alınarak, merkezi atom ve merkezi atoma bağlı ligandların sayısı artırılabilir ya da azaltabilir.

KAYNAKLAR

- Aggarwal M.D., Stephens J., Batra A.K., Lal R.B., (2003). Bulk Growth and Characterization of semiorganic nonlinear optical materials. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 5(3), 555-562.
- Denningto R., Keith T., Millam J., (2009). GaussView, Version 5, Semichem Inc., Shawnee Mission KS.
- Erkan Kariper S., (2016). “Alkin Birimli PiridilLigantları İçeren Bazı Dinükleer MetalKarbonillerin Kuantum Kimyasal Hesaplama Yöntemleriyle Yapısal, Spektroskopik ve Optik Özelliklerinin İncelenmesi”, Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, pp. 103.
- Foresman J.B., Frisch, Æ., (1996). Exploring Chemistry with electronic structure methods (2nd ed.), Pittsburgh, PA: Gaussian Inc., 266, 278–283.
- 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.Jr., 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).
- Leszczynski J., (2006). Non-Linear Optical Properties of Matter. Springer, Dordrecht, The Netherlands, 676 s.

- Turhan Irak Z., Gümüş S., (2017).
Heterotricyclic Compounds via Click
Reaction: A Computational Study. Noble
International Journal of Scientific
Research. Vol. 01, No. 07, pp: 80-89,
ISSN(e): 2521-0246.
- Zhang R., Du B., Sun G., Sun Y. (2010).
Experimental and theoretical studies on o-,
m- and p-chlorobenzylideneamino-
antipyrines. Spectrochimica Acta Part A:
Molecular and Biomolecular
Spectroscopy, 75(3), 1115-1124.
- Zyss J., (1994). Molecular Non linear Optics:
materials, physics and devices, Academic
Press, Boston.

Contribution to the Flora of Sürgü (Doğanşehir/Malatya)

Hatice TOSYAGÜLÜ ÇELİK*¹, Ömer Faruk KAYA ²

¹ Ardahan University, Vocational School of Health Sciences-Ardahan

² Harran University, Faculty of Arts & Sciences, Department of Biology-Şanlıurfa

(İlk Gönderim / Received: 17.04.2017, Kabul / Accepted: 12.06.2017, Online Yayın / Published Online: 23.10.2017)

Keywords:

Flora,
Sürgü,
Doğanşehir,
Malatya,
Turkey

Abstract: During the phytosociological study carried out around the Sürgü Dam, 189 taxa belonging to 49 families and 155 species were determined by the identification of collected plant samples. Among these identified plant samples, there were 46 taxa (24%) Irano-Turanian, 9 taxa (5%) Mediterranean, 9 taxa (5%) Euro-Siberian, 7 taxa (4%) Eastern Mediterranean and besides them there were 118 taxa (62%) that could not be determined which phytogeographical region they belong. The number of endemic taxa in the area is 7 and the endemism rate is 3.7%. The area is located in the Irano-Turanian phytogeographical region.

Sürgü Florasına Katkı (Doğanşehir/Malatya)

Anahtar Kelimeler:

Flora,
Sürgü,
Doğanşehir,
Malatya,
Türkiye

Özet: Sürgü Barajı çevresinde yapılan fitososyolojik bir çalışma sırasında toplanan bitki örneklerinin teşhis edilmesiyle 49 ailya ve 155 cinse ait 189 takson tespit edildi. Bu tespit edilen bitki örneklerinden 46 takson (%24) İnan-Turan, 9 takson (%5) Akdeniz, 9 takson (%5) Avrupa-Sibirya, 7 takson (%4) Doğu Akdeniz elementi olup, 118 taksonun (%62) hangi fitocoğrafik bölgeye ait olduđu belirlenememiştir. Alanda endemik takson sayısı 7 olup endemizm oranı %3.7'dir. Alan İnan-Turan fitocoğrafik bölgesinde bulunmaktadır.

1. INTRODUCTION

Sürgü Town, which is bound to the county of Doğanşehir in the province of Malatya, is at the southern end of Malatya and

is bordered by the Southeastern Anatolian Region. Sürgü is established on the road of Malatya, Kahramanmaraş, Adana, Adıyaman and Gaziantep. In terms of its geographical position, it's important to be on the highway

leading to the South East. The distance to Doğanşehir is 14 kilometers and it is 69 kilometers away from Malatya city center (Figure 1) (Anonymous, 2015).

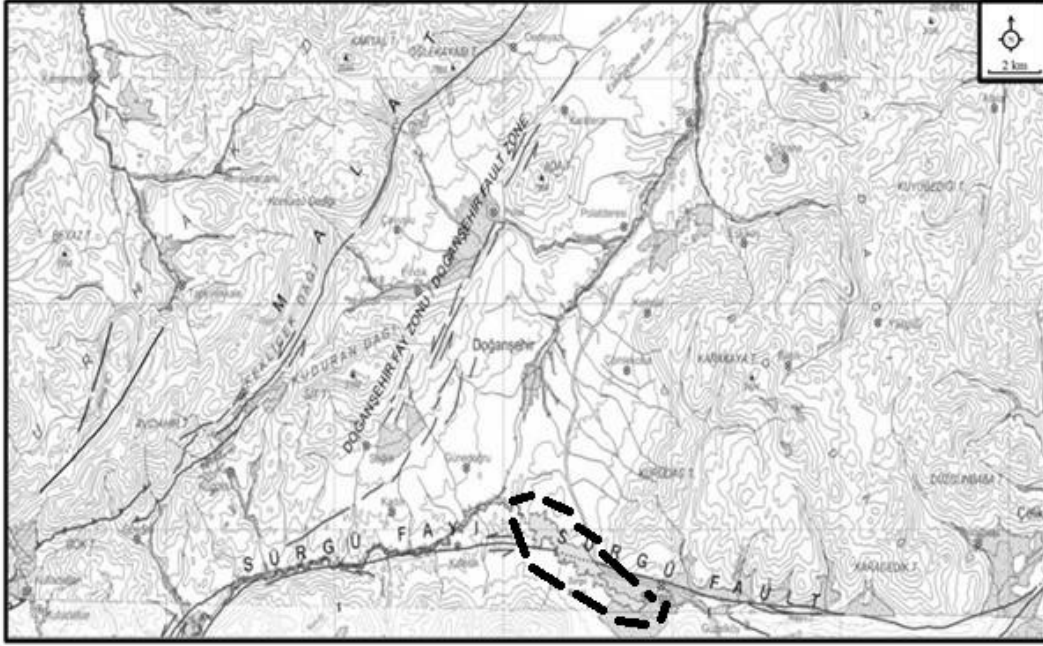


Figure 1. Topographic map of Sürgü (Duman *et al.*, 2012)

The mountains of the Southeastern Taurus range parallel to each other in the north (Kurudağ, Bozdağ) and south (Malatya Mountains) of the Sürgü Plateau. The mean elevations of the mentioned mountains range from 1800-2200 m. Beneath the mountain range there are the plateau plains between 1650-2000 m (Sever, 2006). Sürgü Plain, on where Sürgü Town was established, was formed depending on the Sürgü fault which is a branch of the Eastern Anatolian Fault (EAF) Zone. The average elevation of the plain is about 1300 m. Sürgü Plain is an alluvial-based

plain formed by the accumulation of alluvial deposits brought by the seasonal streams and the Sürgü Stream from the surrounding high fields. The area of 6 km² of the plain with a surface area of 23 km² is within the reservoir area of Sürgü Dam. The Sürgü Stream, formed by the joining of Reşadiye, Takaz, Ağcapınar (Pınarbaşı), Sürmelipınar and Çayırpınar (Melo) water resources that collect the waters of Sürgü Basin, is born from the southern parts of Karakaya Hill in the western part of Malatya (Bayram, 2000).

The settlement date of the Sürgü is as old as the settlement date of the Malatya province. Sürgü is in a strategic position because it is on the important transit route (Old Aleppo road) opened to the direction in the southwest part of the Southeastern Taurus that provides access to the important centers of the Eastern Anatolia Region and the Mediterranean Region (Göğebakan, 2002).

Because of this position, it is open to settlements and the vegetation surrounding Sürgü has been severely damaged by the effects of anthropogenic factors such as overgrazing and tree cutting. This effect made itself felt, when Sürgü Dam got into operation in 1968 established for the purpose of irrigation on the Sürgü stream. An indicator of the ongoing increase of pressure today is that most of the natural areas around Sürgü Dam are being used as agricultural areas. Afforestation studies carried out around the dam reservoir are another factor affecting the natural vegetation cover. There are oak (*Quercus*) and juniper (*Juniperus*) communities in the areas around the Sürgü Dam where the natural vegetation cover is preserved. In the vicinity of Sürgü

Dam, there are mainly brown forest soils, alluvial and colluvial soils.

Sürgü is geographically located in Eastern Anatolia Region of Turkey and in terms of plant geography it is located in the Irano-Turanian phytogeographical region and it is located on the C6 grid square according to the grid system used in Flora of Turkey (1965-1985).

As it is in the whole region, the continental climate is seen in Sürgü Basin. But in comparison with Malatya, the climate is harsher. That's because it is located higher according to 1300 m altitude (Bayram, 2000). The climate data belonging to the Doğanşehir, which Sürgü is in its boundaries, was obtained from the General Directorate of State Meteorology Affairs (Anonymous, 2014). According to the climate data, the first type of Eastern Mediterranean precipitation regime (W.Sp.A.Sm.) is observed in Doğanşehir. The Emberger (1954) drought index ($S = PE / M$) is 0.40 at Doğanşehir station. The fact that the value of S is below 5 in the station indicates that the region is under the influence of the Mediterranean climate (Table 1).

Table 1. Climatic data of the meteorological stations

Station	h	P	M	Q	m	PE/M	Precipitation Regime	Bioclimate
Doğanşehir	1280	498,8	40	36	-7,2	0,40	W.Sp.A.Sm.	Semiarid very cold

h: altitude in m; P: mean annual precipitation in mm; M: mean maximum temperature ($^{\circ}\text{C}$) for the hottest month; m: mean minimum temperature ($^{\circ}\text{C}$) for the coldest month; Q: Emberger's pluviometric quotient: $2000 P/M^2\text{-m}^2$; PE: Summer rainfall; PE/M: Emberger's index of xericity; Sp: Spring; W: Winter; A: Autumn; Sm: Summer.

2. MATERIAL AND METHOD

In identifying the plant species, basically Flora of Turkey (Davis 1965-1985, Davis *et al.* 1988, Güner *et al.* 2000), as well as other flora studies including Sürgü and its surroundings (Yıldız ve Aktoklu, 1996a; Yıldız ve Aktoklu, 1996b) were consulted with.

Brummitt and Powell's studies (1992) for abbreviations of the taxa writers, and Ekim and his colleagues' (2000) studies for the IUCN hazard categories of endemic taxa were used. All the plant samples were collected from the vicinity of Sürgü Dam in Sürgü town of Doğanşehir district of Malatya province. For this reason, this information was not written to avoid repeating in the locality determining. While the floristic list was written, the alphabetical order was followed. First the family name, then the genus name, and then the species name and if it exists subspecies taxon were given with their authors respectively. After the taxa names, life forms, phytogeographical regions (if any), endemism cases (if any), locality numbers and collectors' numbers were given respectively. The life

forms of all the taxa were determined according to Raunkiær (1934).

Table 2. Localities

R1	Entrance road of Sürgü Dam, steppe, 1320-1350 m, 01.iv.2016
R2	Entrance road of Sürgü Dam, <i>Juniperus</i> community and open area, 01.iv.2016
R3	Sürgü Dam, surrounding of weir, streamside-open area, 1250 m, 01.iv.2016
R4	Sürgü Dam, surrounding of weir, steppe, 1320-1330 m, 01.iv.2016
R5	Sürgü Dam, southeast of Hudut village, steppe, 1410-1430 m, 01.iv.2016
R6	Sürgü Dam, southeast of Hudut village, oak forest, 1430-1450 m, 01.iv. 2016
R7	Entrance road of Sürgü Dam, steppe, 1320-1350 m, 12.v.2016
R8	Entrance road of Sürgü Dam, <i>Juniperus</i> community and open area, 12.v.2016
R9	Sürgü Dam, surrounding of weir, streamside-open area, 1250 m, 12.v.2016
R10	Sürgü Dam, surrounding of weir, steppe, 1320-1330 m, 12.v.2016
R11	Sürgü Dam, southeast of Hudut village, steppe, 1410-1430 m, 12.v.2016
R12	Sürgü Dam, southeast of Hudut village, oak forest, 1430-1450 m, 12.v.2016
R13	Entrance road of Sürgü Dam, steppe, 1320-1350 m, 07.vii.2016
R14	Entrance road of Sürgü Dam, <i>Juniperus</i> community and open area, 07.vii.2016
R15	Sürgü Dam, surrounding of weir, streamside-open area, 1250 m, 07.vii.2016
R16	Sürgü Dam, surrounding of weir, steppe, 1320-1330 m, 07.vii.2016
R17	Sürgü Dam, Southeast of Hudut village, steppe, 1410-1430 m, 07.vii.2016
R18	Sürgü Dam, southeast of Hudut village, oak forest, 1430-1450 m, 07.vii.2016

R: Lokalite number

Ph: Phanerophytes

Ch: Chamaephytes

G: Geophytes

Th: Therophytes

H: Hemicryptophytes

End.: Endemic

Sp: Spring

W: Winter

A: Autumn

Sm: Summer

m: meter

Medit.: Mediterranean

E.Medit.: East Mediterranean

Euro-Sib.: Euro-Siberian

HTC: Hatice Tosyagülü Çelik

Ir.-Tur.: Irano-Turanian

3. RESULTS

The list of the identified plants is given below in alphabetical order.

Amaranthaceae

Amaranthus albus L., Th, R15, HTC 132

Amaryllidaceae

Ixiolirion tataricum (Pall.) Schult. & Schult.f. subsp. *montanum* (Labill.) Takht., G, Ir.-Tur., R10, HTC 58

Apiaceae

Eryngium campestre L. var. *virens* Link, H, R17, HTC 183

Grammosciadium macrodon Boiss., H, Ir.-Tur., R13, HTC 99

Lecokia cretica (Lam.) DC., H, R18, HTC 97

Prangos peucedanifolia Fenzl, H, Ir.-Tur., R13, HTC 100

Scandix stellata Banks & Sol., Th, R16, HTC 158

Torilis leptophylla (L.) Rchb.f., H, R16, HTC 159

Aristolochiaceae

Aristolochia maurorum L., H, Ir.-Tur., R10, HTC 59

Asclepiadaceae

Vincetoxicum canescens (Willd.) Decne. subsp. *canescens*, H, R10, HTC 60

Asteraceae

Anthemis tinctoria L. var. *tinctoria*, H, R11, HTC 95

Carduus pycnocephalus subsp. *albidus* (M.Bieb.) Kazmi, Th, R7, HTC 34

Centaurea depressa M.Bieb., Th, R10, HTC 61

Centaurea consanguinea DC., H, Ir.-Tur., End., R13, HTC 101

Centaurea iberica Spreng., H, R16, HTC 160

Centaurea solstitialis L. subsp. *solstitialis*, Th, R16, HTC 161

Centaurea virgata Lam., H, Ir.-Tur., R13, HTC 102

Chardinia orientalis (L.) Kuntze, Th, Ir.-Tur., R16, HTC 162

Cichorium intybus L., H, R13, HTC 103

Cirsium vulgare (Savi) Ten., H, R15, HTC 133

Crepis sancta (L.) Bornm., Th, R16, HTC 164

Crepis foetida L. subsp. *foetida*, Th, R13, HTC 104

Crupina crupinastrum (Moris) Vis., Th, R13, HTC 105

Echinops pungens Trautv. var. *pungens*, H, Ir.-Tur., R16, HTC 165

Gundelia tournefortii L. var. *armata* Freyn & Sint., H, Ir.-Tur., R13, HTC 106

Helichrysum plicatum DC. subsp. *plicatum*, H, R14, HTC 128

Inula oculus-christi L., H, Euro-Sib., R14, HTC 129

Jurinea cataonica Boiss. & Hausskn., Ir.-Tur., End., R13, HTC 107

Lapsana communis subsp. *intermedia* (M.Bieb.) Hayek, Th, R14, HTC 130

Picnomon acarna (L.) Cass., Th, Medit., R13, HTC 108
Rhagadiolus angulosus (Jaub. & Spach) Kupicha, Th, Ir.-Tur., R16, HTC 166
Scorzonera kotschyi Boiss., H, Ir.-Tur., R14, HTC 131
Scorzonera tomentosa L., H, Ir.-Tur., End., R13, HTC 109
Senecio vernalis Waldst. & Kit., Th, R13, HTC 110
Xanthium strumarium L. subsp. *strumarium*, Th, R15, HTC 134
Xeranthemum annuum L., Th, R13, HTC 111

Boraginaceae

Alkanna megacarpa A.DC., H, Ir.-Tur., End., R16, HTC 167
Anchusa azurea Mill. var. *azurea*, H, R16, HTC 168
Buglossoides arvensis (L.) I.M.Johnst., Th, R15, HTC 135
Echium italicum L., H, Medit., R13, HTC 112
Onosma sericeum Willd., H, Ir.-Tur., R16, HTC 169

Brassicaceae

Aethionema arabicum (L.) Andr. ex DC., Th, R10, HTC 62
Alyssum desertorum Stapf. var. *desertorum*, Th, R10, HTC 63
Alyssum minus L. (Rothm.) var. *minus*, Th, R7, HTC 35
Alyssum strigosum Banks & Sol. subsp. *strigosum*, Th, R7, HTC 36

Arabis aucheri Boiss., Th, R4, HTC 17
Capsella bursa-pastoris (L.) Medik., Th, R1, HTC 1
Cardaria draba (L.) Desv. subsp. *draba*, H, R1, HTC 2
Clypeola jonthlaspi L., Th, R4, HTC 18
Erophila verna (L.) Chevall. subsp. *verna*, Th, R1, HTC 3
Erysimum repandum L., Th, R16, HTC 170
Fibigia macrocarpa (Boiss.) Boiss., H, R10, HTC 64
Matthiola longipetala (Vent.) DC. subsp. *bicornis* (Sibth. & Sm.) P.W.Ball, Th, R7, HTC 37
Nasturtium officinale R.Br., H, R3, HTC 14
Neslia apiculata Fisch., C.A.Mey. & Avé-Lall., Th, R7, HTC 38
Thlaspi perfoliatum L., Th, R7, HTC 39

Campanulaceae

Legousia pentagonia (L.) Thell., Th, E.Medit., R10, HTC 65

Caryophyllaceae

Cerastium dichotomum L. subsp. *dichotomum*, Th, R7, HTC 40
Dianthus strictus Banks & Sol. var. *gracilior* (Boiss.) Reeve., H, R10, HTC 66
Holosteum umbellatum L. var. *umbellatum*, Th, R10, HTC 67
Petrorhagia cretica (L.) P.W.Ball & Heywood, Th, R13, HTC 113
Silene chlorifolia Sm., H, Ir.-Tur., R9, HTC 52

Stellaria media (L.) Vill. subsp. *media* Th, R1,
HTC 157

Vaccaria pyramidata Medik. var. *grandiflora*
Ser, Th, R10, HTC 68

Velezia rigida L., Th, R10, HTC 69

Chenopodiaceae

Chenopodium album L. subsp. *album* var.
album, Th, R10, HTC 70

Cistaceae

Fumana aciphylla Boiss., H, R13, HTC 114

Helianthemum ledifolium (L.) Mill. var.
ledifolium, Th, R16, HTC 171

Convolvulaceae

Convolvulus arvensis L., H, R10, HTC 71

Crassulaceae

Sedum album L., H, R2, HTC 11

Cupressaceae

Juniperus oxycedrus L. subsp. *oxycedrus*, Ph,
R2, HTC 12

Cyperaceae

Cyperus longus L., H, R15, HTC 136

Dipsacaceae

Dipsacus laciniatus L., H, R15, HTC 137

Scabiosa argentea L., H, R16, HTC 172

Elaeagnaceae

Elaeagnus angustifolia L., Ph, R3, HTC 15

Equisetaceae

Equisetum arvense L., R3, HTC 16

Euphorbiaceae

Euphorbia cheiradenia Boiss. & Hohen., H,
Ir.-Tur., R10, HTC 72

Fabaceae

Astragalus gummifer Labill., Ch, R5, HTC 28

Cicer pinnatifidum Jaub. & Spach, Th, R10,
HTC 73

Coronilla cretica L., Th, E.Medit., R15, HTC
138

Coronilla scorpioides (L.) W.D.J.Koch, Th,
R10, HTC 74

Coronilla varia L. subsp. *varia*, H, R10, HTC
75

Lathyrus cicera L., Th, R7, HTC 41

Lathyrus inconspicuus L. var. *inconspicuus*,
Th, R10, HTC 76

Lathyrus sativus L., Th, R9, HTC 53

Lens orientalis (Boiss.) Schmalh., Th, R10,
HTC 77

Lotus corniculatus L. var. *corniculatus*, H,
R15, HTC 139

Lotus gebelia Vent. var. *gebelia*, H, R15, HTC
140

Medicago radiata L., Th, Ir.-Tur., R10, HTC 78

Medicago rigidula (L.) All. var. *rigidula*, Th,
R10, HTC 79

Medicago sativa L. subsp. *sativa*, H, R9, HTC
54

Ononis spinosa L. subsp. *leiosperma* (Boiss.)
Širj., H, R15, HTC 142

Trifolium aintabense Boiss. & Hausskn., Th,
End., R13, HTC 115

Trifolium arvense L. var. *arvense*, Th, R13,
HTC 116

Trifolium campestre Schreb., Th, R16, HTC
173

Trifolium pauciflorum d'Urv., Th, E.Medit.,

R16, HTC 174

Trifolium physodes M.Bieb. var. *physodes*, H,

Medit., R4, HTC 24

Trifolium pilulare Boiss., Th, R13, HTC 117

Trifolium pratense L. var. *pratense*, H, R15,

HTC 143

Trifolium scabrum L., Th, R13, HTC 118

Trigonella coelesyriaca Boiss., Th, Ir.-Tur.,

R10, HTC 80

Vicia ervilia (L.) Willd., Th, R10, HTC 81

Fagaceae

Quercus cerris L. var. *cerris*, Ph, Medit., R6,

HTC 29

Quercus infectoria G. Olivier subsp. *boissieri*

(Reut.) O.Schwarz, Ph, R6, HTC 30

Geraniaceae

Erodium cicutarium (L.) L'Hér. subsp.

cutarium, Th, R7, HTC 42

Geranium rotundifolium L., Th, R12, HTC 98

Pelargonium endlicherianum Fenzl, H, R13,

HTC 119

Globulariaceae

Globularia trichosantha Fisch. & C.A.Mey.

subsp. *trichosantha*, H, Ir.-Tur., R10, HTC 82

Hypericaceae

Hypericum scabrum L., H, Ir.-Tur., R4, HTC

19

Hypericum thymbrifolium Boiss. & Noë, H, Ir.-

Tur., End., R13, HTC 120

Illecebraceae

Paronychia kurdica Boiss. subsp. *kurdica* var.

kurdica, H, R7, HTC 43

Lamiaceae

Ajuga chamaepitys (L.) Schreb. subsp.

laevigata (Banks & Sol.) P.H.Davis, H, Ir.-

Tur., R10, HTC 83

Lamium amplexicaule L., Th, Euro-Sib., R7,

HTC 44

Marrubium globosum Montbret & Aucher ex

Benth. subsp. *globosum*, H, Ir.-Tur., End., R10,

HTC 84

Mentha longifolia (L.) L. subsp. *typhoides*

(Briq.) Harley var. *typhoides*, H, R15, HTC

141

Phlomis kurdica Rech.f., H, R11, HTC 96

Prunella vulgaris L., H, Euro-Sib., R15, HTC

144

Salvia multicaulis Vahl, H, Ir.-Tur., R17, HTC

184

Salvia viridis L., Th, Medit., R7, HTC 45

Scutellaria orientalis L. subsp. *pinnatifida*

J.R.Edm., H, R7, HTC 46

Teucrium chamaedrys L. subsp. *chamaedrys*,

H, Euro-Sib., R16, HTC 175

Teucrium multicaule Montbret & Aucher ex

Benth., H, Ir.-Tur., R16, HTC 176

Teucrium polium L., Ch, R7, HTC 47

Thymus kotschyanus Boiss. & Hohen. var.

kotschyanus, Ch, Ir.-Tur., R17, HTC 185

Ziziphora capitata L., H, Ir.-Tur., R16, HTC

177

Liliaceae

Allium scorodoprasum L. subsp. *rotundum* (L.)

Stearn, G, *Medit.*, R10, HTC 85

Bellevalia sarmatica (Pall. ex Misch.)

Woronow, G, R4, HTC 20

Gagea fibrosa (Desf.) Schult. & Schult.f., G,

R1, HTC 4

Muscari neglectum Guss. ex Ten., G, R1, HTC

5

Ornithogalum narbonense L., G, *Medit.*, R4,

HTC 21

Linaceae

Linum mucronatum Bertol. subsp.

mucronatum, H, Ir.-Tur., R7, HTC 48

Lythraceae

Lythrum salicaria L., H, Euro-Sib., R9, HTC

55

Malvaceae

Malva neglecta Wallr., Th, R4, HTC 22

Orchidaceae

Dactylorhiza iberica (M.Bieb. ex Willd.) Soó,

G, E.Medit., R15, HTC 145

Papaveraceae

Fumaria asepala Boiss., Th, Ir.-Tur., R4, HTC

23

Papaver fugax Poir. var. *fugax*, H, R10, HTC

86

Papaver rhoeas L., Th, R10, HTC 87

Roemeria hybrida (L.) DC. subsp. *hybrida*, Th,

R4, HTC 25

Plantaginaceae

Plantago lanceolata L., H, R15, HTC 146

Plumbaginaceae

Acantholimon acerosum (Willd.) Boiss. var.

acerosum, Ch, R17, HTC 186

Poaceae

Aegilops neglecta Reg. ex Bertol., Th, *Medit.*,

R13, HTC 121

Aegilops umbellulata Zhuk. subsp.

umbellulata, Th, Ir.-Tur., R13, HTC 122

Avena sterilis L. subsp. *sterilis*, Th, R7, HTC

49

Bromus japonicus Thunb. subsp. *japonicus*,

Th, R1, HTC 6

Bromus tectorum L. subsp. *tectorum*, Th, R1,

HTC 7

Briza minor L., Th, R13, HTC 123

Chrysopogon gryllus (L.) Trin. subsp. *gryllus*,

H, R16, HTC 163

Dactylis glomerata L. subsp. *glomerata*, H,

Euro-Sib., R16, HTC 178

Hordeum bulbosum L., H, R16, HTC 179

Phragmites australis (Cav.) Trin. ex Steud., H,

Euro-Sib., R9, HTC 56

Poa bulbosa L., H, R13, HTC 124

Rostraria cristata (L.) Tzvelev var. *cristata*,

Th, R13, HTC 125

Stipa arabica Trin. & Rupr., H, Ir.-Tur., R4,

HTC 26

Taeniatherum caput-medusae (L.) Nevski

subsp. *crinitum* (Schreb.) Melderis, Th, Ir.-

Tur., R13, HTC 126

Polygonaceae

Polygonum aviculare L., Th, R15, HTC 147

Polygonum setosum Jacq., H, Ir.-Tur., R13,
HTC 127

Rumex tuberosus L. subsp. *tuberosus*, H, R10,
HTC 88

Primulaceae

Androsace maxima L., Th, R7, HTC 50

Ranunculaceae

Adonis aestivalis L. subsp. *aestivalis*, Th, R10,
HTC 89

Ceratocephala falcatus (L.) Pers., Th, R1,
HTC 8

Ranunculus arvensis L., Th, R10, HTC 90

Ranunculus sericeus Banks & Sol., H, Ir.-Tur.,
R11, HTC 33

Resedaceae

Reseda lutea L. var. *lutea*, H, R10, HTC 91

Rosaceae

Agrimonia eupatoria L., H, R15, HTC 148

Cerasus microcarpa (C.A.Mey.) Boiss subsp.
tortuosa (Boiss. & Hausskn.) Browicz, Ph, Ir.-
Tur., R6, HTC 31

Cotoneaster nummularia Fisch. & C.A.Mey.,
Ph, R6, HTC 32

Crataegus monogyna Jacq. subsp. *monogyna*,
Ph, R16, HTC 180

Potentilla recta L., H, R15, HTC 149

Pyrus elaeagnifolia Pall. subsp. *kotschyana*
(Boiss.) Browicz, Ph, R15, HTC 150

Rosa canina L., Ph, R15, HTC 151

Rubus sanctus Schreb., Ph, R15, HTC 152

Sanguisorba minor L. subsp. *magnolii* (Spach)
Cout., H, R10, HTC 92

Rubiaceae

Callipeltis cucullaria (L.) Steven, Th, Ir.-Tur.,
R1, HTC 9

Cruciata taurica (Pall. ex Willd.) Ehrend., H,
Ir.-Tur., R1, HTC 10

Galium tricornutum Dandy, Th, Medit., R9,
HTC 57

Salicaceae

Salix cinerea L., Ph, Euro-Sib., R15, HTC 153

Scrophulariaceae

Anarrhinum orientale Benth., H, Ir.-Tur., R16,
HTC 181

Linaria chalepensis (L.) Mill. var. *chalepensis* ,
Th, E.Medit., R10, HTC 93

Parentucellia latifolia (L.) Caruel subsp.
flaviflora (Boiss.) Hand.-Mazz., Th, R8, HTC
51

Scrophularia libanotica Boiss. subsp.
libanotica var. *libanotica*, H, E.Medit., R4,
HTC 27

Veronica anagallis-aquatica L. subsp.
anagallis-aquatica, H, R15, HTC 154

Tamaricaceae

Tamarix smyrnensis Bunge, Ph, R15, HTC 155

Uricaceae

Urtica dioica L., H, Euro-Sib., R15, HTC 156

Valerianaceae

Valerianella vesicaria (L.) Moench, Th, R10,
HTC 94

Violaceae

Viola kitaibeliana Roem. & Schult., Th, R2,
HTC 13

Zygophyllaceae*Tribulus terrestris* L., Th, R16, HTC 182**4. DISCUSSION AND CONCLUSION**

During this study, by the identifying the collected plant samples 189 taxa belonging to

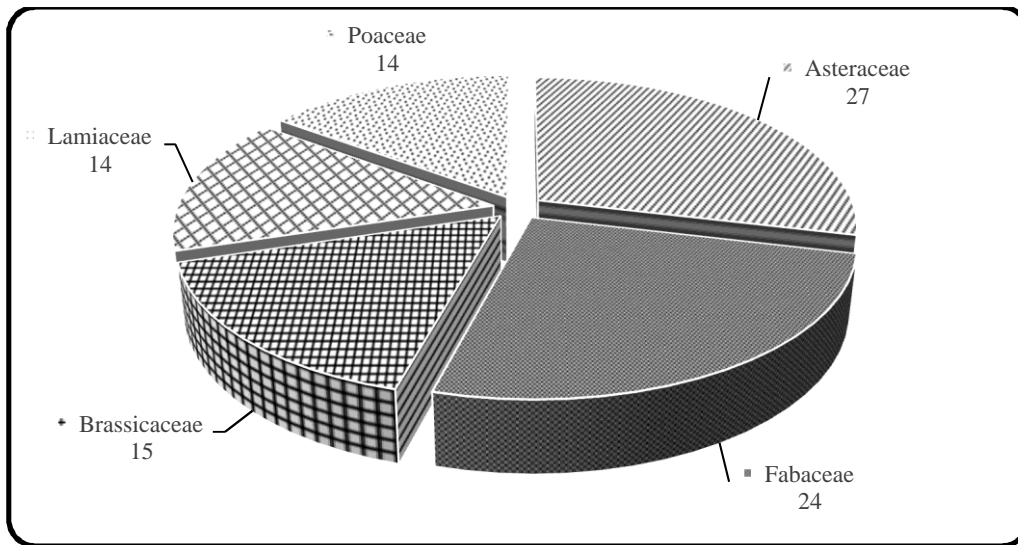
155 genera in the 49 families were determined. Among these taxa, one belongs to *Pteridophyta* and one belongs to *Gymnospermae*. The rest of the taxa belong to the *Angiospermae* plant group, of which 166 are *Dicotyledonae* and 21 are *Monocotyledonae*. A summary of the numerical data is given in Table 3.

Table 3. Floristic properties

Section	Class	Subclass	Taxa Number
<i>Pteridophyta</i>			1
<i>Spermatophyta</i>	<i>Gymnospermae</i>		1
		<i>Dicotyledonae</i>	166
	<i>Angiospermae</i>	<i>Monocotyledonae</i>	21

Asteraceae, Fabaceae, Lamiaceae, Brassicaceae and Poaceae are the richest families that take the first lines in terms of taxa number according to the Flora of Turkey (Davis, 1965-1985; Davis *et al.*, 1988; Güner *et al.*, 2000). These first five families generally maintain almost the same order in all the floristic study conducted in Turkey. When it's

looked at the families to which belong the taxa in this study, the first five families are Asteraceae (27), Fabaceae (25), Brassicaceae (15), Lamiaceae (14), and Poaceae (14) (Figure 2). This result is in accordance with the family order in the Flora of Turkey (Davis, 1965-1985; Davis *et al.*, 1988; Güner *et al.*, 2000).

**Figure 2.** Number of determined taxa in the large families

When it's looked at the distributions of the taxa determined in this study to the phytogeographical regions, there is a ranking of Irano-Turanian (46), Mediterranean (9), Euro-

Siberian (9), East Mediterranean (7) and unknown (118) (Figure 3). This result supports the opinion that the study area is in the Irano-Turanian phytogeographical region.

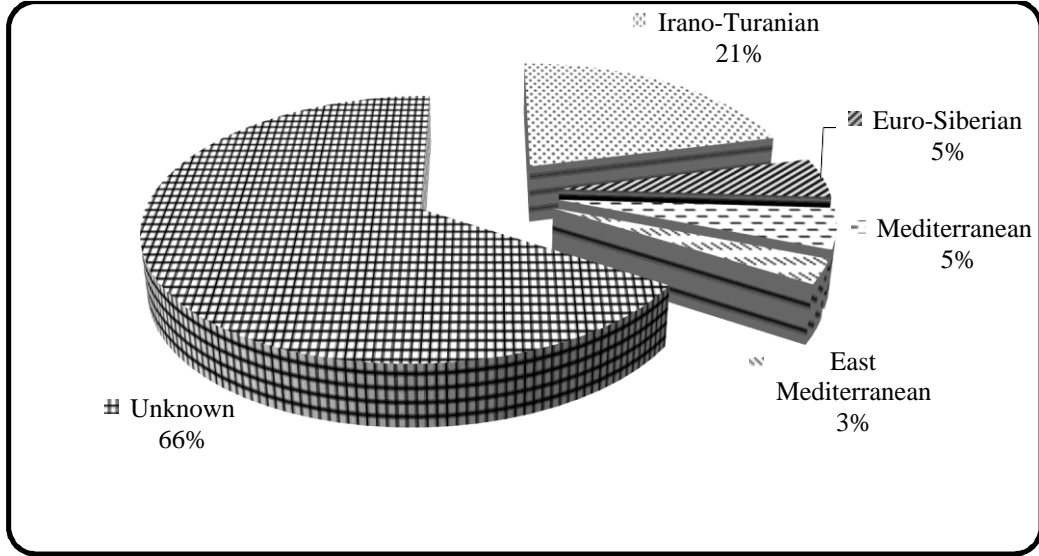


Figure 3. Distribution of the determined taxa in phytogeographical regions

The Irano-Turanian phytogeographical region is characterized with hemicryptophytes and chamaephytes (Zohary, 1973). The life forms of the taxa determined in the study area were evaluated according to Raunkiær (1934). One of the taxa determined in the study area is a fern. The order of life forms in the study area

is therophytes (84), hemicryptophytes (81), phanerophytes (12), geophytes (7) and chamaephytes (5). In this study, being in the first order for hemicryptophytes is another indication to be located in the Irano-Turano phytogeographic region (Figure 4).

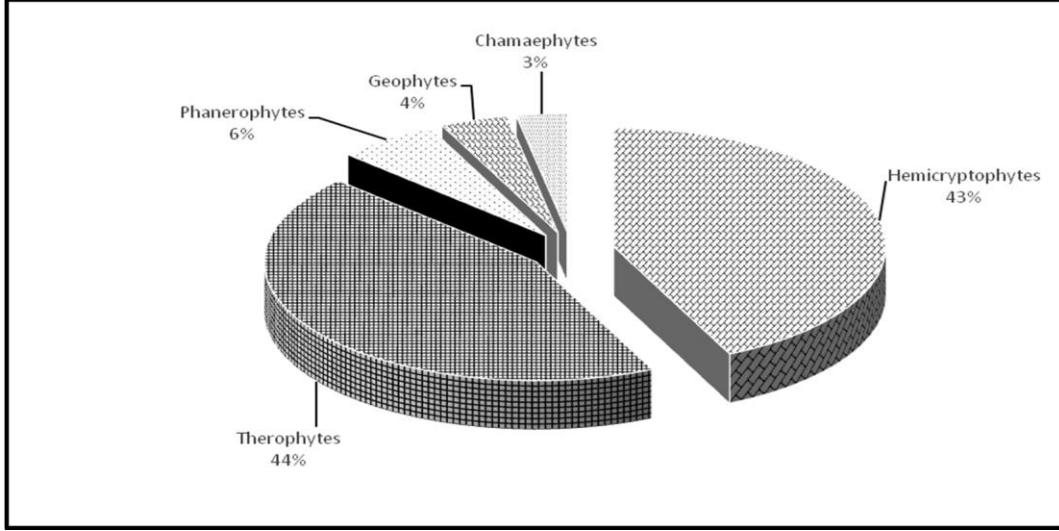


Figure 4. Life forms of the identified taxa according to Raunkiær (1934)

The total number of endemic taxa in Turkey is 3778, and the overall endemism rate is 31.4% (Erik and Tarikahya, 2004). The number of endemic taxa in the area is 7, and the endemism rate is 3.7%. The rate of endemism in the study area is very low compared to the rate of general endemism in Turkey. Also according to Ekim et al (2000), the endemic taxa found in the area are seen in the Lower Risk categories generally in the least-concern (lc) and near threatened (nt) subcategories when looking at the IUCN hazard categories. The endemic taxa

determined in the study area and IUCN hazard categories are; *Trifolium aintabense* (LR-nt), *Centaurea consanguinea* DC. (LR-lc), *Jurinea cataonica* Boiss. & Hausskn. (LR-lc), *Scorzonera tomentosa* L. (LR-lc), *Alkanna megacarpa* A.DC. (LR-lc), *Hypericum thymbrifolium* Boiss. & Noë (LR-nt), *Marrubium globosum* Montbret & Aucher ex Benth. subsp. *globosum* (LR-nt).

The 31 taxa names identified in this study were determined differently by Güner et al. (2012) and EuroMed Plant Base (Table 4).

Table 4. Taxa names that change according to A Checklist of the Flora of Turkey (Vascular Plants), and EuroMed Plant Base

Taxa Names in the Flora of Turkey (Davis, 1965-1985; Davis <i>et al.</i> , 1988; Güner <i>et al.</i> , 2000)	Taxa names according to A Checklist of the Flora of Turkey (Vascular Plants). (Güner <i>et al.</i> , 2012).	Taxa names according to EuroMed Plant Base
<i>Ixiolirion tataricum</i> subsp. <i>montanum</i>	<i>Ixiolirion tataricum</i> var. <i>tataricum</i>	<i>Ixiolirion tataricum</i> var. <i>tataricum</i>
<i>Eryngium campestre</i> var. <i>virens</i>	<i>Eryngium campestre</i> var. <i>virens</i>	<i>Eryngium campestre</i>
<i>Malabaila lasiocarpa</i>	<i>Malabaila lasiocarpa</i>	<i>Trigonosciadium lasiocarpum</i>
<i>Anthemis tinctoria</i> var. <i>tinctoria</i>	<i>Cota tinctoria</i> var. <i>tinctoria</i>	<i>Cota tinctoria</i>
<i>Centaurea depressa</i>	<i>Cyanus depressus</i>	<i>Cyanus depressus</i>
<i>Centaurea solstitialis</i> subsp. <i>solstitialis</i>	<i>Centaurea solstitialis</i> subsp. <i>solstitialis</i>	<i>Centaurea solstitialis</i>
<i>Rhagadiolus angulosus</i>	<i>Garhadiolus hedypnois</i>	<i>Garhadiolus hedypnois</i>
<i>Senecio vernalis</i>	<i>Senecio vernalis</i>	<i>Senecio leucanthemifolius</i> subsp. <i>vernalis</i>
<i>Onosma sericeum</i>	<i>Onosma sericea</i>	<i>Onosma sericea</i>
<i>Alyssum desertorum</i>	<i>Alyssum desertorum</i>	<i>Alyssum turkestanicum</i>
<i>Alyssum minus</i>	<i>Alyssum simplex</i>	<i>Alyssum simplex</i>
<i>Neslia apiculata</i>	<i>Neslia paniculata</i> subsp. <i>thracica</i>	<i>Neslia paniculata</i> subsp. <i>thracica</i>
<i>Thlaspi perfoliatum</i>		<i>Microthlaspi perfoliatum</i>
<i>Holosteum umbellatum</i> var. <i>umbellatum</i>	<i>Holosteum umbellatum</i> var. <i>umbellatum</i>	<i>Holosteum umbellatum</i> L. subsp. <i>umbellatum</i>
<i>Vaccaria pyramidata</i> var. <i>grandiflora</i>	<i>Vaccaria hispanica</i>	<i>Vaccaria hispanica</i>
<i>Astragalus gummifer</i>	<i>Astragalus gummifer</i>	<i>Astracantha gummifera</i>
<i>Coronilla cretica</i>	<i>Securigera cretica</i>	<i>Securigera cretica</i>
<i>Coronilla varia</i> subsp. <i>varia</i>	<i>Securigera varia</i>	<i>Securigera varia</i>
<i>Lens orientalis</i>	<i>Lens culinaris</i> subsp. <i>orientalis</i>	<i>Lens culinaris</i> subsp. <i>orientalis</i>
<i>Trigonella coelesyriaca</i>	<i>Trigonella coelesyriaca</i>	<i>Trigonella caelesyriaca</i>
<i>Quercus infectoria</i> subsp. <i>boissieri</i>	<i>Quercus infectoria</i> subsp. <i>veneris</i>	
<i>Allium scorodoprasum</i> subsp. <i>rotundum</i>	<i>Allium scorodoprasum</i> subsp. <i>rotundum</i>	<i>Allium rotundum</i>
<i>Bellevalia sarmatica</i>	<i>Bellevalia speciosa</i>	<i>Bellevalia speciosa</i>
<i>Hypecoum imberbe</i>	-	<i>Hypecoum imberbe</i>
<i>Bromus tectorum</i> subsp. <i>tectorum</i>	<i>Bromus tectorum</i>	<i>Anisantha tectorum</i>
<i>Ceratocephala falcatus</i>	<i>Ceratocephala falcata</i>	<i>Ceratocephala falcata</i>
<i>Cerasus microcarpa</i> subsp. <i>tortuosa</i>	<i>Cerasus microcarpa</i> subsp. <i>tortuosa</i>	<i>Prunus microcarpa</i>
<i>Cotoneaster nummularia</i>	<i>Cotoneaster nummularius</i>	<i>Cotoneaster nummularius</i>
<i>Sanguisorba minor</i> subsp. <i>magnolii</i>	<i>Sanguisorba verrucosa</i>	<i>Sanguisorba verrucosa</i>
<i>Callipeltis cucullaria</i>	<i>Callipeltis cucullaris</i>	<i>Callipeltis cucullaris</i>
<i>Erophila verna</i> subsp. <i>verna</i>	<i>Draba verna</i>	<i>Erophila verna</i> subsp. <i>verna</i>

The family names of 15 taxa identified in this study were also determined differently

by Güner *et al.* (2012) and EuroMed Plant Base (Table 5).

Table 5. Families names that change according to A Checklist of the Flora of Turkey (Vascular Plants) and EuroMed Plant Base

Taxa Names	Family Names in the Flora of Turkey (Davis, 1965-1985; Davis <i>et al.</i> , 1988; Güner <i>et al.</i> , 2000)	Family Names according to A Checklist of the Flora of Turkey (Vascular Plants). (Güner <i>et al.</i> , 2012).	Family names according to EuroMed Plant Base
<i>Ixiolirion tataricum</i> subsp. <i>montanum</i>	Amaryllidaceae	Ixioliriaceae	Ixioliriaceae
<i>Vincetoxicum canescens</i> subsp. <i>canescens</i>	Asclepiadaceae	Apocynaceae	Asclepiadaceae
<i>Dipsacus laciniatus</i>	Dipsacaceae	Caprifoliaceae	-
<i>Scabiosa arge</i>	Dipsacaceae	Caprifoliaceae	-
<i>Globularia trichosantha</i> subsp. <i>trichosantha</i>	Globulariaceae	Plantaginaceae	Globulariaceae
<i>Hypericum scabrum</i>	Hypericaceae	Hypericaceae	Clusiaceae
<i>Hypericum thymbrifolium</i>	Hypericaceae	Hypericaceae	Clusiaceae
<i>Paronychia kurdica</i> subsp. <i>kurdica</i> var. <i>kurdica</i>	Illecebraceae	Caryophyllaceae	Caryophyllaceae
<i>Allium scorodoprasum</i> subsp. <i>rotundum</i>	Liliaceae	Amaryllidaceae	Amaryllidaceae
<i>Bellevalia sarmatica</i>	Liliaceae	Asparagaceae	Asparagaceae
<i>Muscari neglectum</i>	Liliaceae	Asparagaceae	Asparagaceae
<i>Ornithogalum narbonense</i>	Liliaceae	Asparagaceae	Asparagaceae
<i>Parentucellia latifolia</i> subsp. <i>flaviflora</i>	Scrophulariaceae	Orobanchaceae	Scrophulariaceae
<i>Veronica anagallis-aquatica</i> subsp. <i>anagallis-aquatica</i>	Scrophulariaceae	Plantaginaceae	Scrophulariaceae
<i>Valerianella vesicaria</i>	Valerianaceae	Caprifoliaceae	-

This study contributed to the flora of the Sürgü town in the borders of the Doğanşehir district of Malatya. A list is given by taking into consideration the current taxonomic status of the determined taxa according to EuroMed Plant Base and The Turkey Plants List (Vascular Plants). With this list, plant taxa were evaluated in terms of chorology, life form and endemism.

ACKNOWLEDGEMENT

These taxa were collected during “A Phytosociological Research on the Surroundings of Sürgü Dam (Sürgü/Doğanşehir/Malatya)” which is supported by Harran University Research Fund

(Project no: HUBAK-16016). We are grateful to HUBAK for financial support. This paper is a part of the PhD thesis prepared by Hatice TOSYAGÜLÜ ÇELİK.

REFERENCES

- Anonymous, (2014). Doğanşehir meteoroloji istasyonu rasat verileri. DMİGM Araştırma ve Bilgi İşlem Dairesi Başkanlığı Arşivi, Ankara.
- Anonymous, (2015). Tük Adrese Dayalı Nüfus Kayıt Sistemi.
- Bayram M. (2000). Yeşil Sürgü. Sürgü İlköğretim Okulu 2000 Yıllığı, Malatya.

- Brummit RK, Powel CE (eds.) (1992). Authors of plant names. Royal Botanic Garden, Kew.
- Davis PH (ed.) (1965-1985). Flora of Turkey and the East Aegean islands 1-9. Edinburgh University Press, Edinburgh.
- Davis PH., Mill RR., Tan K. (eds.) (1988). Flora of Turkey and the East Aegean Islands (supplement) 10. Edinburgh University Press, Edinburgh.
- Duman TY., Emre Ö., Özalp S., Olgun Ş. Elmacı H. (2012). 1:250.000 Ölçekli Türkiye Diri Fay Haritası Serisi, Şanlıurfa (NJ 37-10) ve Suruç (NJ 37-14) Paftaları, Seri No:43, Maden Tetkik ve Arama Genel Müdürlüğü, Ankara-Türkiye.
- Ekim T., Koyuncu M., Vural M., Duman H., Aytaç Z., Adıgüzel N. (2000). Türkiye bitkileri kırmızı kitabı (Red Data Book of Turkish Plants). Türkiye Tabiatı Koruma Derneği, Ankara.
- Emberger L. (1954). Une classification biogéographique des climats. Recueil Trav. Lab. Bot. Géol. Zool. Fac. Sci. Univ. Montpel., sér. Bot., 7: 3-43.
- Erik S., Tarikahya B. (2004). Türkiye florası üzerine. Kebikeç, 17: 139-163.
- EuroMed Plant Base. (<http://www.emplantbase.org/home.html>)
- Göğebakan G. (2002). XVI. Yüzyılda Malatya Kazası (1516-1560). Malatya Belediyesi Kültür Yayınları, Malatya.
- Güner A., Özhatay N., Ekim T., Başer, K.H.C. (2000). Flora of Turkey and the East Aegean Islands (supplement) 11. Edinburgh University Press, Edinburgh.
- Güner A., Aslan S., Ekim T., Vural M., Babaç M.T. (2012). Türkiye Bitkileri Listesi (Damarlı Bitkiler). Nezahat Gökyiğit Botanik Bahçesi ve Flora Araştırmaları Derneği Yayını, İstanbul, Türkiye.
- Raunkiaer C. (1934). The life forms of plants and statistical plant geography. Clarendon Press, Oxford.
- Sever R., (2006). Sürgü Kasabası'nda (Doğanşehir-Malatya) Kültür Balıkçılığı ve Rekreatyonel Etkinlikler. Fırat Üniversitesi Sosyal Bilimler Dergisi, 16(2):43-62.
- Yıldız, B. and Aktoklu, E. 1996a. C7 karesinden (Malatya-Adıyaman) yeni floristik kayıtlar. Turkish Journal of Botany, 20: 207-211.
- Yıldız B., Aktoklu E. (1996b). Malatya Florasına Katkıları I: Sürgü-Çelikhan yöresinde bir ön çalışma. Turkish Journal of Botany, 20: 267-278.
- Zohary M. (1973). Geobotanical foundations of the Middle East vol. 1-2. Gustav Fischer Verlag, Stuttgart.



1-Metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Bazı Teorik Özelliklerinin İncelenmesi

Hilal MEDETALİBEYOĞLU*, Özlem GÜR SOY KOL, Murat BEYTUR, Haydar YÜKSEK

Kafkas Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 36100, Kars

(İlk Gönderim / Received: 02.10.2017, Kabul / Accepted: 15.10.2017, Online Yayın / Published Online: 23.10.2017)

Anahtar Kelimeler

1,2,4-Triazol-5-on,
GIAO,
B3LYP,
HF,
6-31G(d)

Özet: Bu çalışmada, 1-metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği B3LYP/6-31G(d) ve HF/6-31G(d) temel setleri kullanılarak optimize edilmiştir. ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kimyasal kayma değerleri GIAO metoduyla Gaussian G09W paket programı kullanılarak hesaplanmıştır. Deneysel ve teorik olarak bulunan değerler $\delta_{exp} = a + b$. δ_{calc} . eşitliğine göre grafiğe geçirilmiştir. SigmaPlot programı kullanılarak a ve b sabitleri regresyon katsayısı ile standart hata değerleri bulunmuştur. Bu bileşiğin IR frekans değerleri de aynı metodla hesaplanmıştır. Teorik olarak hesaplanan IR verilerinin tanımlanmasında Veda4f programı kullanılmıştır. İlaveeten, 1-metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin bağ açıları, bağ uzunlukları, Mulliken atomik yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri, toplam enerjileri incelenmiştir.

Investigation of Some Theoretical Properties of 1-Methyl-3-phenyl-4-[3-(*p*-nitrobenzoxy)benzylideneamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one

Keywords:

1,2,4-Triazol-5-one,
GIAO,
B3LYP,
HF,
6-31G(d)

Abstract: In this study, 1-methyl-3-phenyl-4-[3-(*p*-nitrobenzoxy)benzylideneamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one was optimized by using the B3LYP/6-31G(d) and HF/6-31G(d) basis sets. ¹H-NMR and ¹³C-NMR isotropic shift values were calculated by the method of GIAO using the program package Gaussian G09W. Experimental and theoretical values were inserted into the graphic according to equation of $\delta_{exp} = a + b$. δ_{calc} . The standard error values were found via SigmaPlot program with regression coefficient of a and b constants. IR absorption frequencies of this compound were also

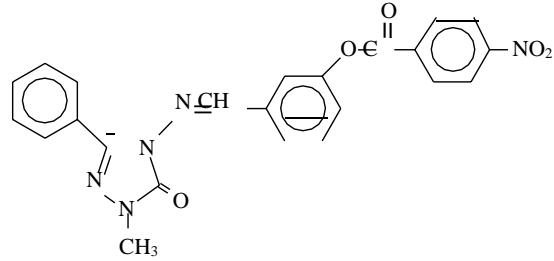
calculated by two methods. The Veda4f program was used in defining IR data which were calculated theoretically. Furthermore, bond angles, bond lengths, Mulliken atomic charges, HOMO-LUMO energies, dipole moments, total energies of 1-methyl-3-phenyl-4-[3-(*p*-nitrobenzoxy)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one have been investigated.

1. GİRİŞ

Deneysel çalışma yapmadan elde edilecek sonuçları önceden tahmin edebilmek veya deneysel çalışmaları desteklemek amacıyla bilgisayar destekli kuantum kimyasal hesaplamalar, moleküler modelleme programları kullanılarak yapılmaktadır. Bu tür hesaplamaların temelini kuantum mekaniği oluşturur. Kuantum teorisi ile bir molekülün bütün kimyasal özellikleri hesaplanabilir. Bu programlar moleküllerin moleküler yapısı, toplam enerji, dipol moment, optimize geometrisi, spektroskopik parametreler (IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR, UV ve IR titreşim frekansları) gibi özelliklerinin hesaplanacağı verimli programların oluşturulmasını sağlamaktır. Nitekim, 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin spektroskopik (IR ve NMR) ve elektronik özellikleri Hartree-Fock (HF) ve yoğunluk fonksiyoneli teorisi (B3LYP) yöntemleri kullanılarak araştırılmıştır (Yüksek et al., 2005a; Yüksek et al., 2005b; Gökçe et al., 2013; Gökçe et al., 2014).

Bu çalışmada, 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevi olan 1-metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-

1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin B3LYP/6-31G(d) ve HF/6-31G(d) temel setleri kullanılarak teorik spektroskopik özellikleri incelenerek bazı deneysel parametrelerle (Gürsoy Kol and Yüksek, 2010) mukayese edilmiştir.



2. MATERYAL VE METOT

Bu çalışmada, moleküler mekanik, yarı-deneysel ve ab-initio yöntemlerini içeren, çok sayıda teori ve temel set seçeneğine sahip olan oldukça kapsamlı bir program olan Gaussian 09W ve GaussView paket programı kullanılmıştır (Frisch et al., 2009; Foresman and Frisch, 1996). Tüm yapıları geometrik optimizasyonları MM2 metodu ve ondan sonra yarı-ampirik PM3 metodu yoluyla oluşturulabilir (Turhan Irak and Gümüş, 2017). Bu program ile atom ve moleküllerin enerjileri hesaplanabilir, geometrik optimizasyonları yapılabilir ve enerjiye bağlı

olan titreşim frekansları, kuvvet sabitleri ve dipol momentleri hesaplanabilir. Program potansiyel enerji yüzeyinde dolaşarak minimumlar, geçiş halleri ve tepkime güzergâhını tarayabilir, molekül dalga fonksiyonunun kararlılığını test edebilir. Ayrıca IR ve Raman spektrumları, termokimyasal özellikleri, bağ ve tepkime enerjileri, molekül orbitalleri, atom yükleri, çok kutuplu momentler, NMR ve manyetik duyarlılık titreşimsel şiddetleri, elektron ilgisi ve iyonlaşma enerjileri, kutuplanabilirlik ve hiperkutuplanma, elektrostatik potansiyel ve elektron yoğunluğu gibi pek çok özelliğin atomlar ve moleküller için hesaplanmasına olanak tanır. Tüm bu özellikler gaz fazında, çözelti içinde ve kristal yapılarında hesaplanabilir (Frisch et al., 2009; Gümüş et al., 2015).

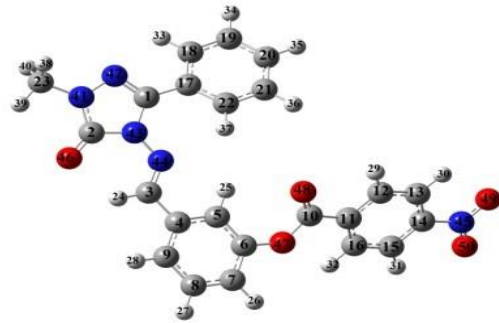
Ab-initio metotlar moleküler mekanik ve yarı deneysel metotların tersine, ilgilenilen molekül için ışık hızı, Planck sabiti, elektronların kütlesi gibi temel fiziksel sabitler haricinde deneysel değerler kullanmadan Schrödinger dalga denkleminin yaklaşık bir çözümüne dayanır (Apaydın, 1991; Jensen, 1999). Ab-initio metotları olan Hartree-Fock ve yoğunluk fonksiyoneli teorisi metotları moleküllerin yapılarının tayin edilmesi, spektroskopik, elektronik ve lineer olmayan optik özellikler gibi moleküler özellikleri araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların

son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilirleridir (Apaydın, 1991).

3. BULGULAR

3.1. Geometrik Optimizasyon

Molekülün gaz fazında ve taban durumunda üç boyutta yaklaşık geometrisi GaussView 5.0 moleküler görüntüleme programında (Dennington et al., 2009) çizilerek, Hartree-Fock (HF) ve Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) metodu kullanılarak, kutuplanma etkisini gidermek için eklenen polarize fonksiyonları içeren 6-31G(d) temel seti ile her elektron çiftinin tek bir yörüngede yer almaya zorlandığı sınırlandırılmış kapalı kabuk hesaplamaları ile geometri optimizasyonu yapılarak moleküldeki atomların uzay yerleşimleri ve uzay yapısı belirlenmiştir (Gümüş et al., 2015) (Şekil 1). Böylece, bağ açıları ve bağ uzunlukları (Tablo 1) ve Mulliken atomik yükleri (Tablo 2) teorik olarak hesaplanmıştır.



Şekil 1. Molekülün (6-31G (d)) gausview görünümü

Tablo 1. Bileşiğin hesaplanan bağ açıları (A^0) ve bağ uzunlukları

Bağ Açılı	B3LYP	HF	Bağ Uzunluğu	B3LYP	HF
C1-N42-N41	105.878	105.993	C1-N43	1.39	1.38
C1-N43-N44	122.572	122.174	C1-N42	1.31	1.27
C1-N43-C2	108.192	107.780	C1-C17	1.47	1.48
C1-C17-C18	117.801	118.300	C17-C18	1.41	1.39
C1-C17-C22	123.131	122.104	C17-C22	1.40	1.39
C17-C18-H33	118.970	119.386	C18-H33	1.08	1.08
C17-C18-C19	120.437	120.243	C18-C19	1.39	1.38
C18-C19-H34	119.595	119.745	C19-H34	1.09	1.07
H33-C18-C19	120.592	120.371	C19-C20	1.40	1.39
C18-C19-C20	120.237	120.053	C20-H35	1.09	1.08
H34-C19-C20	120.167	120.202	C20-C21	1.40	1.39
C19-C20-C21	119.652	119.903	C21-H36	1.09	1.07
C19-C20-H35	120.118	120.059	C21-C22	1.40	1.38
H35-C20-C21	120.230	120.038	C22-H37	1.08	1.07
C20-C21-C22	120.457	120.244	N42-N41	1.38	1.38
C20-C21-H36	120.537	120.205	N41-C23	1.46	1.44
H36-C21-C22	119.006	119.552	C23-H38	1.09	1.08
C21-C22-H37	119.659	119.706	C23-H39	1.09	1.08
H37-C22-C17	120.171	120.276	C23-H40	1.09	1.08
C22-C17-C18	119.042	119.538	N41-C2	1.37	1.34
N42-C1-N43	110.334	110.628	C2-O46	1.22	1.21
N42-N41-C23	121.094	120.765	C2-N43	1.42	1.39
N41-C23-H38	110.400	110.216	N43-N44	1.37	1.36
N41-C23-H39	107.233	107.812	N44-C3	1.29	1.26
N41-C23-H40	110.295	110.066	C3-H24	1.09	1.07
H38-C23-H39	109.848	109.751	C3-C4	1.47	1.48
H38-C23-H40	109.227	109.272	C4-C5	1.41	1.39
H39-C23-H40	109.818	109.707	C5-H25	1.08	1.07
N42-N41-C2	113.463	112.769	C5-C6	1.39	1.38
N41-C2-N43	102.126	102.817	C6-O47	1.40	1.39
N41-C2-O46	129.418	129.166	C6-C7	1.40	1.38
O46-C2-N43	128.455	128.017	C7-H26	1.09	1.07
C2-N43-N44	128.912	129.250	C7-C8	1.39	1.38
N43-N44-C3	120.100	120.250	C8-H27	1.08	1.07
N44-C3-H24	122.726	122.839	C8-C9	1.39	1.39
N44-C3-C4	118.832	119.649	C9-H28	1.09	1.08
H24-C3-C4	118.440	117.511	C4-C9	1.40	1.39
C3-C4-C5	121.135	121.697	O47-C10	1.36	1.33
C3-C4-C9	119.172	118.730	C10-O48	1.21	1.18
C4-C5-H25	119.628	120.406	C10-C11	1.50	1.50
C4-C5-C6	119.032	119.075	C11-C12	1.40	1.39
C5-C6-O47	119.585	119.868	C12-H29	1.08	1.07
C6-O47-C10	121.428	119.643	C12-C13	1.39	1.38
C5-C6-C7	121.710	121.921	C13-H30	1.08	1.07
O47-C6-C7	115.584	118.116	C13-C14	1.39	1.38
C6-C7-H26	119.385	119.688	C14-N45	1.48	1.46
C6-C7-C8	119.047	118.900	N45-O49	1.23	1.19
H26-C7-C8	121.567	121.410	N45-O50	1.23	1.19
C7-C8-C9	120.215	120.101	C14-C15	1.39	1.38
H27-C8-C9	120.090	120.055	C15-H31	1.08	1.07
C8-C9-C4	120.293	120.426	C15-C16	1.39	1.38
H28-C9-C4	120.543	119.770	C16-H32	1.08	1.07
C9-C4-C5	119.689	119.573	C16-C11	1.40	1.39
O47-C10-O48	124.800	124.165			
O47-C10-C11	111.095	112.045			
C10-C11-C12	117.371	117.565			
C11-C12-H29	118.824	119.313			
C11-C12-C13	120.348	120.190			
H29-C12-C13	120.828	120.497			
C12-C13-C14	118.474	118.383			
C12-C13-H30	121.849	121.401			

C13-C14-N45	118.838	118.752
C13-C14-C15	122.353	122.525
H30-C13-C14	119.677	120.216
C14-N45-O49	117.537	117.566
C14-N45-O50	117.562	117.541
O49-N45-O50	124.901	124.893
N45-C14-C15	118.809	118.723
C14-C15-H31	119.596	120.174
H31-C15-C16	121.729	121.275
C14-C15-C16	118.675	118.551
C15-C16-C11	120.082	119.976
H32-C16-C11	119.827	120.168
C16-C11-C12	120.068	120.375

Tablo 2. Bileşiğin hesaplanan Mulliken atomik yükleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.49	0.62	H26	0.15	0.23
C2	0.84	1.08	H27	0.15	0.22
C3	0.03	0.09	H28	0.15	0.22
C4	0.11	-0.37	H29	0.18	0.27
C5	-0.18	-0.21	H30	0.19	0.28
C6	0.35	0.41	H31	0.19	0.28
C7	-0.16	-0.22	H32	0.18	0.26
C8	-0.14	-0.21	H33	0.16	0.24
C9	-0.18	-0.22	H34	0.14	0.21
C10	0.61	0.85	H35	0.13	0.21
C11	0.06	-0.14	H36	0.14	0.21
C12	-0.17	-0.19	H37	0.17	0.24
C13	-0.16	-0.18	H38	0.18	0.19
C14	0.29	0.17	H39	0.18	0.19
C15	-0.16	-0.18	H40	0.19	0.22
C16	-0.17	-0.19	N41	-0.35	-0.34
C17	-0.12	-0.02	N42	-0.36	-0.55
C18	-0.16	-0.19	N43	-0.46	-0.66
C19	-0.14	-0.21	N44	-0.30	-0.31
C20	-0.12	-0.19	N45	0.38	0.52
C21	-0.15	-0.22	O46	-0.55	-0.68
C22	-0.16	-0.18	O47	-0.54	-0.71
C23	-0.31	-0.28	O48	-0.46	-0.54
H24	0.21	0.29	O49	-0.39	-0.46
H25	0.18	0.26	O50	-0.39	-0.46

3.2. İnfrared Spektrum Analizi

1-Metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on B3LYP ve HF yöntemlerine göre teorik titreşim frekansları gaz fazında hesaplanmıştır. Yapılan analiz sonucunda hesaplanan frekanslar içerisinde negatif frekansa rastlanmamıştır. Bu sonuç elde ettiğimiz yapının kararlı bir yapı olduğunu

göstermektedir. B3LYP ve HF'ye göre elde edilen değerler kullanılarak teorik IR titreşim frekansları B3LYP/6-31G(d) için 0.9613 ve HF/6-31G(d) metodu için 0,8929 katsayıları ile çarpılmıştır (Merrick et al., 2007). Teorik IR spektral değerleriyle deneysel IR spektral değerleri (Gürsoy Kol and Yüksek, 2010) mukayese edilmiştir (Tablo 3).

Tablo 3. Bileşiğinin deneysel ve teorik frekans değerleri ve titreşim türleri

Titreşim türleri	Deneysel	Skalah Dft	Skalah Hf
τ COCC(15), τ CCNN(10)		9	5
τ NCCC(10)		14	8
τ CCCC(15)		21	10
τ COCC(37)		33	30
τ CCCC(17), τ CCNN(15)		35	36
δ COC(29), τ COCC(11)		48	42
τ CNNC(10), τ ONCC(12)		54	51
τ ONCC(48)		59	52
τ ONCC(13), τ CCCC(12), τ COCC(22)		71	60
τ CCCC(12), τ NNCC(23)		78	75
τ COCC(16), τ CCCC(15)		84	83
τ HCNC(44)		99	88
δ CCC(17)		104	102
τ CNNC(26), τ HCNC(12)		114	110
δ CCN(21), δ NNC(10)		124	119
τ CCNN(52), τ CNNC(11)		161	151
δ CCC(15), δ NCC(11)		180	168
δ NCC(21)		205	202
τ CNNC(17)		209	208
τ CCCC(15)		224	218
τ CNNC(18)		240	237
τ CCCC(17)		243	249
δ NCC(11), τ CCCC(16)		263	260
δ CNN(41), δ OCN(11)		274	272
δ COC(13), δ OCO(12)		296	295
ν CC(15)		316	311
τ CNNC(14), τ NNCC(13), τ CCCC(12)		333	341
τ CCNN(14), τ NNCN(26)		343	345
δ CCO(26)		359	379
δ CCC(12), δ OCN(15), δ CNN(14)		383	386
δ CNN(15)		384	391
τ HCCC(16), τ CCCC(72)		400	406
τ CCCC(13), τ HCCC(23)		405	411
τ CCCC(11), τ NCCC(13)		447	449
τ HCCC(11), τ CCOC(11)		449	459
τ NCCC(10), τ CCCC(13)		460	470
τ CCCC(33), τ HCCC(11)		488	494
ν NC(11), δ ONC(33)		496	496
δ ONC(27), δ NCC(10)		523	525
δ NCN(10), δ CCC(12)		554	552
δ COC(11), δ CCC(10)		571	570
τ CCCC(14), τ CCOC(14)		585	593
δ CCC(66)		607	604
δ CCC(36)		617	615
ν NC(14), δ NNC(13), δ CCC(16)		644	642
τ CCCC(15), τ OCOC(15)		650	656
δ OCN(12), δ NCC(12), δ CNN(10)		655	662
δ CCC(13), τ CCCC(11)		657	662
τ NNCC(12), τ ONNC(24)		664	681
τ CCOC(13), τ HCCC(20)		672	689
τ CCCC(29), τ HCCC(26)		681	698
τ NNCN(14), τ ONNC(51)		692	708
τ HCCC(18), τ OCON(44), τ OCOC(27)	713	696	734
δ OCO(11), δ CCC(25), δ ONO(19)		702	749
τ OCON(14), τ OCOC(16)		752	761
τ OCOC(11), τ HCCC(12), τ CCCC(15)		755	780
τ CCCC(11)		758	788
τ HCCC(50)	780	773	793
ν NN(16), ν NC(12), δ CNN(13)		797	806
δ OCO(15), δ ONO(29)		818	850
τ HCCC(57)		830	857
τ HCCC(57)	841	830	859

δ ONO(19)		845	867
τ HCCC(74)		862	879
v NN(11), δ CCC(10), τ HCCC(18)		877	893
τ HCCC(41)		877	921
τ HCCC(32), τ CCOC(23)		890	939
τ HCCC(35)		906	945
τ HCCC(48)		938	950
τ HCCC(82), τ CCCC(11)		942	975
τ HCCC(58)		956	976
τ HCCC(11)		957	990
τ HCCC(42), τ CCCC(23)		963	993
τ HCCC(75)		968	995
τ HCNN(85)		973	1003
v CC(38), δ CCC(44)		979	1005
v CC(21), δ CCO(36)		979	1010
δ CCC(33), δ HCC(16)		995	1011
v CC(10), δ NNC(12)		1002	1021
v CC(25), δ HCC(16), δ CCC(15)		1018	1023
v NN(17), v NC(20)		1022	1045
v OC(15), v CC(12)		1062	1060
v CC(30), δ HCC(17)		1073	1065
v CC(21), δ HCC(19)		1075	1069
v CC(25), v NC(24), δ HCC(10)		1086	1075
δ HCC(60)		1092	1091
v NC(10), δ CNN(10)		1120	1100
τ HCNC(26), δ HCH(20)		1122	1110
v OC(23), δ HCC(21)		1136	1131
δ HCC(39)		1148	1133
v CC(12), δ HCC(50)		1153	1152
δ HCC(71)		1159	1163
v CC(23), δ HCC(75)		1171	1166
v CC(10), v OC(19)		1212	1181
v OC(11), v CC(18)	1263	1232	1188
v NN(14), δ HCH(10), τ HCNC(10)		1238	1195
v NN(17), δ NCN(10)		1262	1230
δ HCC(18)		1274	1266
δ HCC(87)		1279	1278
v CC(20), δ HCC(25)		1291	1288
v CC(16), δ HCC(16)		1315	1295
v CC(19), δ HCC(27)		1316	1304
v CC(33)		1326	1319
v NC(18), δ HCN(33)		1342	1359
v ON(77), δ ONO(12)	1350	1345	1397
v NC(30)		1376	1410
v CC(12), δ HCC(29)		1394	1419
δ HCH(73)		1397	1428
δ HCH(10)		1411	1439
δ HCC(21)		1429	1443
v CC(11), δ HCC(21)		1437	1458
δ HCH(77), τ HCNC(11)		1454	1470
δ HCC(29)		1475	1484
δ HCC(37)		1477	1486
δ HCH(57), τ HCNC(11)		1480	1497
δ HCC(47), δ CCC(11)		1485	1497
v NC(31), v CC(10)	1576	1539	1586
v CC(13), v ON(48)	1525	1558	1587
v CC(13), δ HCC(12)		1572	1600
v CC(20)		1579	1615
v CC(20), δ HCC(10)		1593	1619
v CC(29), δ HCC(19)		1594	1622
v CC(51), δ HCC(20)		1599	1648
v ON(44), v CC(14)		1608	1672
v NC(34), v CC(12)	1607	1614	1703
v OC(75), v NC(11)	1707	1733	1741

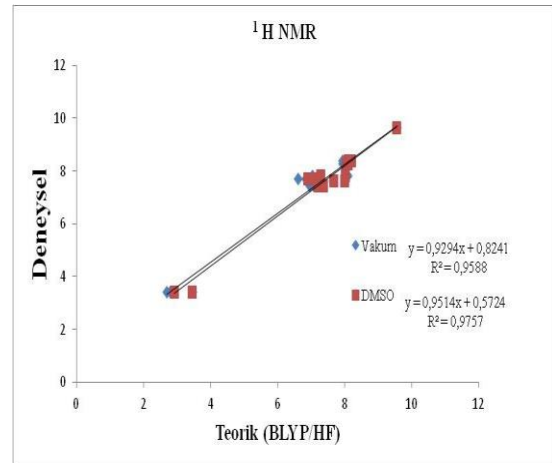
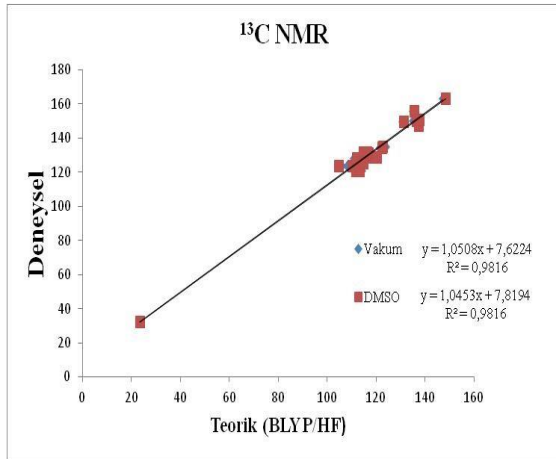
v OC(87)	1733	1741	1804
v CH(92)		2949	2890
v CH(51)		3010	2948
v CH(47)		3055	2993
v CH(51)		3063	3002
v CH(61)		3069	3007
v CH(71)		3072	3014
v CH(64)		3075	3022
v CH(41)		3085	3024
v CH(37)		3085	3036
v CH(37)		3099	3039
v CH(41)		3100	3043
v CH(59)		3110	3050
v CH(41)		3118	3051
v CH(52)		3131	3053
v CH(71)		3131	3058
v CH(38)		3132	3075
v CH(25)		3143	3076

v, gerilme; δ , bükülme; δ_s , makaslama; ρ , sallanma; γ , düzlem dışı bükülme τ , dönme

3.3. ^{13}C - ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri, Regresyon Analizleri, UV-Vis. Spektroskopisi, HOMO-LUMO Analizleri

Bileşiğin ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerleri grafiklere geçirilmiştir (Şekil 2) ve R^2 değerleri hesaplanmıştır (Tablo 4).

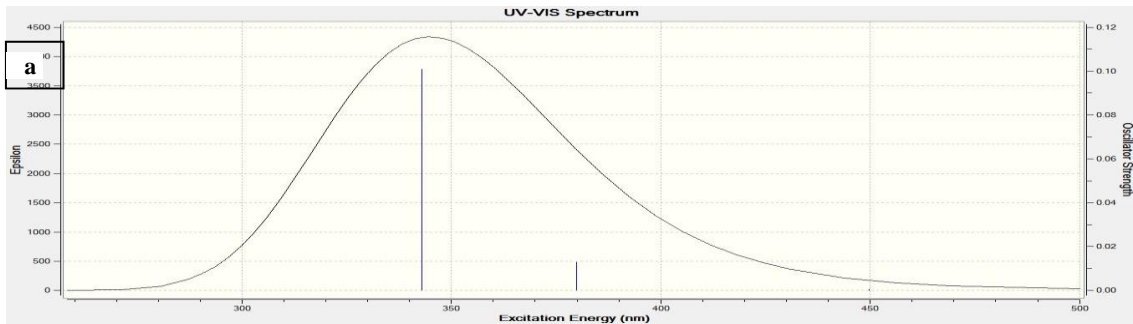
Ayrıca UV-vis değerleri deneysel veriler (Gürsoy Kol and Yüksek, 2010) ile birlikte tabloya geçirilmiştir ve UV-vis spektrumları çizilmiştir (Şekil 3). Bileşiğin E_{HOMO} ve E_{LUMO} enerjileri (Şekil 4) ve toplam enerjileri verilmiştir (Tablo 5).

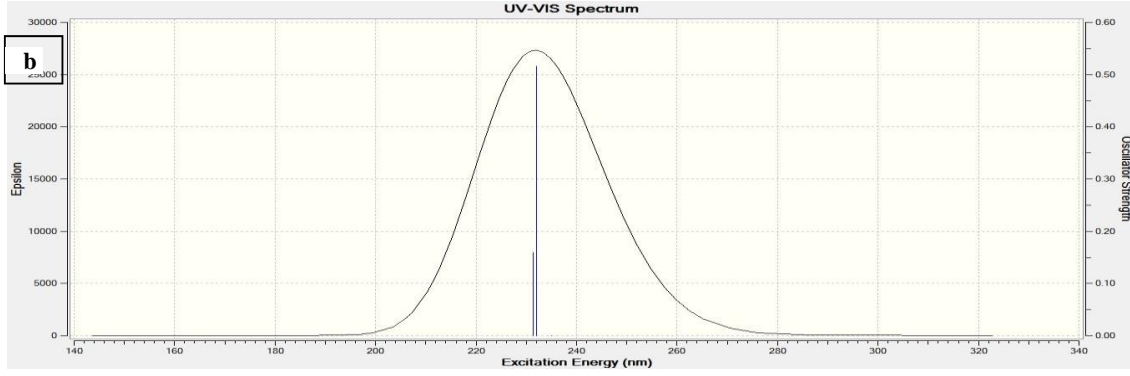


Şekil 2. Bileşiğin 6-31G(d) B3LYP/HF(Vakum, DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması ve R^2 değerleri

Tablo 4. Bileşiğin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-31G(d) B3LYP/B3LYP (DMSO) ve 6-31G(d) HF/HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

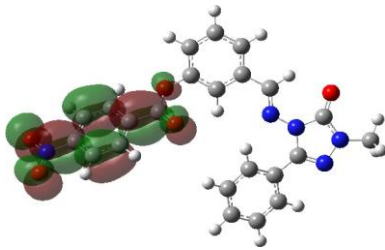
No	Deneysel	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	149,50	130,91	131,06	18,59	18,44	126,69	127,66	22,81	21,84
C2	155,80	135,05	135,51	20,75	20,29	128,60	129,11	27,20	26,69
C3	150,37	135,09	136,37	15,28	14,00	129,77	131,15	20,60	19,22
C4	134,72	123,63	122,50	11,09	12,22	114,37	113,25	20,35	21,47
C5	123,84	105,53	104,53	18,31	19,31	108,62	99,72	15,22	24,12
C6	147,20	137,18	137,23	10,02	9,97	126,22	125,73	20,98	21,47
C7	123,84	108,39	110,09	15,45	13,75	104,23	105,51	19,61	18,33
C8	130,35	115,68	116,91	14,67	13,44	108,41	109,41	21,94	20,94
C9	130,70	115,70	116,68	15,00	14,02	109,38	110,58	21,32	20,12
C10	163,05	147,29	148,34	15,76	14,71	136,86	138,3	26,19	24,75
C11	134,20	121,72	122,35	12,48	11,85	114,64	115,21	19,56	18,99
C12	128,49	117,29	120,08	11,20	8,41	112,13	112,21	16,36	16,28
C13	120,85	111,16	111,51	9,69	9,34	104,94	105,30	15,91	15,55
C14	150,40	136,72	137,50	13,68	12,90	126,50	126,79	23,90	23,61
C15	127,85	111,05	111,86	16,80	15,99	104,82	105,49	23,03	22,36
C16	128,49	119,73	118,36	8,76	10,13	110,26	111,14	18,23	17,35
C17	120,92	113,69	113,27	7,23	7,65	105,19	104,25	15,73	16,67
C18	131,24	116,58	114,59	14,66	16,65	110,32	109,87	20,92	21,37
C19	125,81	114,50	114,75	11,31	11,06	106,20	106,65	19,61	19,16
C20	130,15	115,50	116,43	14,65	13,72	110,43	111,59	19,72	18,56
C21	125,10	114,02	114,73	11,08	10,37	105,37	105,98	19,73	19,12
C22	131,24	114,93	116,2	16,31	15,04	111,08	111,19	20,16	20,05
C23	32,20	23,40	23,52	8,80	8,68	9,81	9,88	22,39	22,32
H24	9,64	9,58	9,55	0,06	0,09	9,03	9,03	0,61	0,61
H25	7,84	8,11	8,02	-0,27	-0,18	7,26	7,25	0,58	0,59
H26	7,71	6,62	6,90	1,09	0,81	6,47	6,77	1,24	0,94
H27	7,84	7,05	7,29	0,79	0,55	6,75	7,02	1,09	0,82
H28	7,71	6,85	7,05	0,86	0,66	6,74	6,99	0,97	0,72
H29	8,39	8,15	8,21	0,24	0,18	7,67	7,85	0,72	0,54
H30	8,28	8,02	8,10	0,26	0,18	7,88	8,08	0,40	0,20
H31	8,28	7,95	8,05	0,33	0,23	7,96	8,05	0,32	0,23
H32	8,39	7,94	8,11	0,45	0,28	7,92	7,96	0,47	0,43
H33	7,63	7,65	7,67	-0,02	-0,04	7,25	7,29	0,38	0,34
H34	7,47	7,08	7,20	0,39	0,27	6,62	6,83	0,85	0,64
H35	7,47	6,97	7,20	0,50	0,27	6,67	6,92	0,80	0,55
H36	7,47	7,28	7,38	0,19	0,09	6,60	6,79	0,87	0,68
H37	7,63	8,01	8,01	-0,38	-0,38	7,14	7,25	0,49	0,38
H38	3,43	2,80	2,93	0,63	0,50	2,12	2,23	1,31	1,20
H39	3,43	2,70	2,93	0,73	0,50	2,12	2,26	1,31	1,17
H40	3,43	3,48	3,45	-0,05	-0,02	2,84	2,88	0,59	0,55



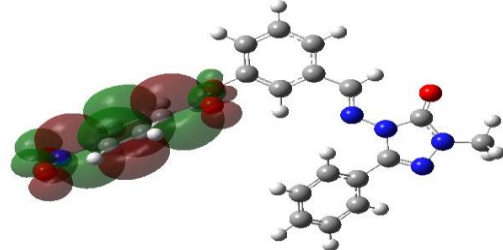


Deneysel λ (nm)/ \square ($L \text{ mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$)	λ (nm)B3LYP/HF	Uyarma Enerjisi (kcal.mol^{-1}) B3LYP/HF	f (osilatör gücü) B3LYP/HF
261/28133	449.83/235.08	63.56/121.62	0.0006/0.0000
-	379.93/231.98	75.25/123.25	0.0128/0.5156
217/20933	342.92/231.35	83.38/123.59	0.1009/0.1592

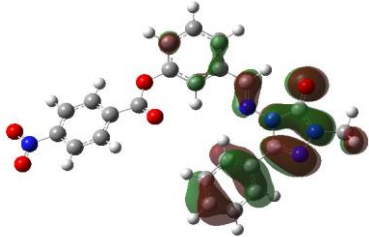
Şekil 3. Bileşiğin deneysel ve teorik (a: 6-31G(d) B3LYP ve b: 6-31G(d) HF) UV-vis spektrumları ve λ , kcal.mol^{-1} , f değerleri



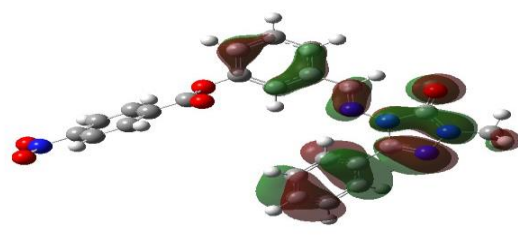
E_{HOMO} (B3LYP) : -68.52 kcal.mol^{-1}



E_{HOMO} (HF) : 20.71 kcal.mol^{-1}



E_{HOMO} (B3LYP) :-135.17 kcal.mol^{-1}



E_{HOMO} (HF) : -197.94 kcal.mol^{-1}

Şekil 4. Bileşiğin B3LYP 6-31G(d) ve HF 6-31G(d) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

Tablo 4. Bileşiğin toplam enerji değerleri

	B3LYP	HF
Toplam Enerji	-964143.4124 kcal.mol^{-1}	-958395.4243 kcal.mol^{-1}

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

1-Metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi) benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin geometrik, spektroskopik ve elektronik özellikleri teorik olarak B3LYP/6-31G(d) ve HF/6-31G(d,p) metot ve temel setleri kullanılarak incelenmiştir. Elde edilen minimum enerjili geometrik yapıdan, molekülün bağ uzunlukları ve bağ açıları belirlenmiştir. Molekülün optimize yapısı kullanılarak titreşim frekansları hesaplanmıştır ve R^2 değerleri arasında bireysel ilişki değerlendirilmiştir ve deneysel verilerle mukayese edilmiştir (Gürsoy Kol and Yüksek, 2010). Yapılan geometri optimizasyonuna ^1H -NMR ve ^{13}C -NMR kaymaları GIAO NMR yaklaşımı kullanılarak hesaplanmıştır ve deneysel değerler ile mukayese edilerek iyi bir uyum içinde olduğu belirlenmiştir ve teorik değerler deneysel değerlerle mukayese edildiğinde B3LYP yöntemi 6-31G(d) temel setinde elde edilen değerlerin deneysel değerlerle daha uyumlu olduğu görülmüştür. Daha sonra, molekül için öncü moleküler orbital enerjileri ve toplam enerjileri hesaplanmıştır.

KAYNAKLAR

Apaydın F. (1991). Magnetik Rezonans, Hacettepe Üniversitesi, 3; 6-8.

Denningto R., Keith T., Millam J. (2009). GaussView, Version 5, Semichem Inc., Shawnee Mission KS.

Foresman J.B., Frisch \AA . (1996). Exploring Chemistry with electronic structure methods (2nd ed.), Pittsburgh, PA: Gaussian Inc., 266, 278–283.

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.Jr., 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).

- Gökçe H., Bahçeli S., Akyıldırım O., Yüksek H., Gürsoy Kol Ö. (2013). The Syntheses, Molecular Structures, Spectroscopic Properties (IR, Micro-Raman, NMR and UV-vis) and DFT Calculations of Antioxidant 3-alkyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Molecules. Letters in Organic Chemistry, 10; 395-441.
- Gökçe H., Akyıldırım O., Bahçeli S., Yüksek H., Gürsoy Kol, O. (2014). The 1-acetyl-3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Molecule Investigated by a Joint Spectroscopic and Quantum Chemical Calculations Journal of Molecular Structure, 1056-1057; 273-284.
- Gümüş P.H., Tamer Ö., Avcı D., Atalay Y. (2015). 4-(Metoksimetil)-1,6-dimetil-2-okso-1,2-dihidropiridin-3-karbonitril molekülünün teorik olarak incelenmesi. Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 3; 303-311.
- Gürsoy Kol Ö., Yüksek H., (2010). Synthesis and In-vitro Antioxidant Evaluation of Some Novel 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives. E-Journal of Chemistry, 7 (1): 123-136.
- Merrick J.P., Moran D., Radom L. (2007). An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors. Journal of Physical Chemistry A, 111 (45); 11683-11700.
- Turhan Irak Z., Gümüş S. (2017). Heterotricyclic Compounds via Click Reaction: A Computational Study. Noble International Journal of Scientific Research, 1(7), 80-89.
- Yüksek H., Gürsoy Ö., Çakmak İ., Alkan M. (2005a). Synthesis and GIAO NMR Calculation for Some New 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical Shifts. Magnetic Resonance in Chemistry, 43; 585-587.
- Yüksek H., Çakmak İ., Sadi S., Alkan M. (2005b). Synthesis and GIAO NMR Calculations for Some Novel 4-Heteroarylidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical Shifts. International Journal of Molecular Sciences, 6; 219-229.

Selim İlçesinin Toprak Örneklerinde Doğal Radyoaktivite Düzeyleri ve Radyolojik Etkilerinin Değerlendirilmesi

Gülçin BİLGİCİ CENGİZ

Kafkas Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kars

(İlk Gönderim / Received: 26.07.2017, Kabul / Accepted: 15.09.2017, Online Yayın / Published Online: 23.10.2017)

Anahtar Kelimeler:

Toprak,
Doğal Radyoaktivite
Konsantrasyonu,
Gama Işını Spektrometresi,
Kanser Riski

Özet: Bu çalışmada, Kars ili Selim ilçesinin farklı yerlerinden toplanan 99 toprak örneğinin aktivite konsantrasyonları NaI(Tl) gama spektrometresi kullanılarak belirlenmiştir. Toprak numunelerindeki doğal radyonüklitlerin ^{40}K , ^{226}Ra ve ^{232}Th konsantrasyonlarının sırasıyla, 290.9 ± 58.8 ile 913.9 ± 184.7 Bqkg $^{-1}$, 9.4 ± 6.9 ile 27.9 ± 8.0 Bqkg $^{-1}$ ve 16.3 ± 4.8 ile 45.0 ± 5.1 Bqkg $^{-1}$ arasında değiştiği görülmüştür. Ayrıca incelenen alanda, aktivite konsantrasyon değeri 1.0 ± 0.9 ile 29.6 ± 3.6 Bqkg $^{-1}$ arasında değişen nispeten düşük miktarda ^{137}Cs bulunmuştur. Burada çalışılan toprak numunelerinin Radyum eşdeğer aktivitesi (Ra_{eq}), açık havada soğurulan gama doz oranı (ADR), radyonüklitlerin varlığına bağlı havadaki yıllık etkin doz oranı (AED) ve ortalama bir insan ömrü boyunca bu dozların kanser oluşturma riski (YFKR) değerleri belirlendi. Bu çalışmada sunulan sonuçlar, Türkiye'nin farklı bölgelerinde yapılan benzer çalışmaların sonuçları ve dünya ortalamaları ile karşılaştırılmıştır. Çalışmanın sonuçları, gelecekteki değerlendirmeler için bir referans oluşturabilir.

Assessment of Natural Radioactivity Levels and Radiological Effects in Soil Samples of Selim District

Keywords:

Soil,
Natural Radioactivity
Concentration,
Gamma Ray Spectrometry,
Cancer Risk

Abstract: In this study, the activity concentrations of 99 soil samples collected from different locations of Selim district of Kars were determined using NaI(Tl) gamma spectrometry. It was observed that the concentrations of the natural radionuclides ^{40}K , ^{226}Ra and ^{232}Th in the soil samples varies from 290.9 ± 58.8 to 913.9 ± 184.7 Bqkg $^{-1}$, 9.4 ± 6.9 to 27.9 ± 8.0 Bqkg $^{-1}$ and 16.3 ± 4.8 to 45.0 ± 5.1 Bqkg $^{-1}$, respectively. Also relatively low amount of ^{137}Cs were found in the investigated area, where the activity concentrations ranged from 1.0 ± 0.9 to 29.6 ± 3.6 Bqkg $^{-1}$. The radium equivalent activity (Ra_{eq}), the outdoor gamma absorbed dose rate (ADR), the annual effective dose rate in

air due to the presence of radionuclides (AED) and risk of cancer formation (LFCR) for these doses over an average human lifetime were determined for the soil samples studied here. The results presented in this study are compared with the results of similar studies carried out for different parts of Turkey and the world mean values. The outcomes of the study enable as a reference for future evaluation.

1. GİRİŞ

Çevresel radyoaktiviteye en büyük katkı; dünyamızın havasında, suyunda ve toprağında doğal olarak bulunan uranyum, toryum ve potasyum gibi radyoaktif maddelerden gelmektedir. Kararsız olan radyoaktif madde atomları kararlı hale gelirken tanecik veya dalga şeklinde enerji (doğal radyasyonlar) yayımlar. İnsanlar hem doğal hem de yapay radyasyon kaynakların sebep olduğu iç ve dış radyasyona maruz kalırlar (TAEA 2010). Toprak ve kayalarda yüksek konsantrasyonlarda bulunan ^{238}U , ^{232}Th ve ^{40}K gibi radyonüklitler yapı malzemelerinden çıkan gama ışınları ve kozmik ışınları dış ışınlamalara, hava, su ve gıda maddelerinde bulunan hem uzay hem de karasal kökenli doğal radyonüklitlerin sindirim ve solunum yoluyla vücuda alınması ise iç ışınlamalara sebep olurlar (UNSCEAR 2000). Doğal radyonüklitlerden kaynaklanan radyoaktivite seviyesi, çevredeki radyoaktif materyallerin miktarına bağlı olup, karasal background olarak adlandırılır ve insanların maruz kaldığı toplam radyasyon dozuna katkıda bulunur. Doğal çevresel radyoaktivite ve dolayısıyla

maruz kalınan gama doz miktarı, jeolojik ve coğrafik koşullara bağlı olduğundan dünyanın her bölgesinde farklı toprak tipleri için değişiklik gösterir (Tzortis 2003). Yaşanılan bölgenin doğal radyasyon açısından sağlıklı olup olmadığını belirleyebilmek için, doğal radyasyon kaynaklarını oluşturan radyonüklitlerin çevresel ortamdaki konsantrasyonları ile radyasyonun tüm canlıların özellikle insanların üzerindeki etkilerinin belirlenmesi gerekir. Bu yüzden çevresel faktörlerden kaynaklanan radyasyonların türleri ve dozlarının yanı sıra insan sağlığı üzerinde oluşturabileceği risklerin değerlendirilmelerine yönelik araştırmalar yapılmıştır (Abu Samreh et al., 2014, Alzubaidi et al., 2016, Chandrasekaran et al., 2014, Dizman et al., 2016). Bu çalışmanın amacı, Selim ilçesinde toplanan toprak örneklerinde doğal (^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K) ve yapay (^{137}Cs) radyoaktivite konsantrasyonlarını NaI(Tl) spektrometresi ile belirlemek ve radyum eşdeğeri, soğurulan doz oranı, yıllık etkin doz eşdeğeri ve yaşam boyu fetal kanser riskini (YFKR) tespit etmektir.

2. MATERYAL VE METOT

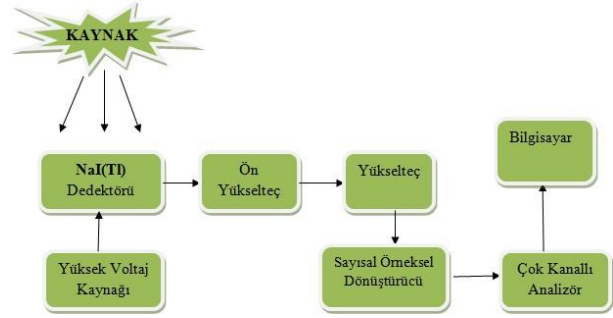
Doğu Anadolu bölgesinde yer alan Selim ilçesinin konumu $40^{\circ} 27'$ Kuzey ve $42^{\circ} 47'$ Doğu'dur. Şekil 1'de gösterilen Türkiye'nin 315. en büyük ilçesi olan Selim'in yüzölçümü 982 km^2 alan olup, rakımı 1856 metredir. Bölge halkı, yaşanan bölgede çayır ve otlakların geniş yer bulması nedeniyle, çoğunlukla hayvancılıkla geçimini sağlar. Toprak numunelerinin toplanması için seçilen çalışma sahasının bölgeyi tanımlayacak şekilde homojen bir dağılım göstermesine ve yerleşim alanlarına yakın ancak tarım faaliyetler yapılmayan, otsuz ve düz alanların seçilmesine özen gösterilmiştir. Numunelerin toplandığı her bir alanın konumu GPS (Global Positioning

System; Küresel Konumlama Sistemi) cihazı ile ölçülmüştür. Laboratuvarıda 2 mm göz genişliğine sahip eleklerden elenmeden önce, toprak numunelerinin içerisinde taş, bitki kökü vb. gibi yabancı maddelerden temizlenmiştir. Radyum ve kısa ömürlü bozunma ürünlerinde radyoaktif seküler dengeyi sağlamak için, ağırlıkları tartılan numuneler silindirik plastik kaplarda 40 gün boyunca bekletilmişlerdir. Toplanan her bir numunenin doğal radyoaktivite konsantrasyonları, gamma spektrometresi sistemine dayanan NaI(Tl) sintilasyon dedektörü ile yaklaşık 24 saat sayım yapılarak hesaplandı.



Şekil 1: Numunelerin toplandığı bölgeler

Genel olarak 3"x3" NaI(Tl) dedektörlü gama spektrometre sistemi, NaI(Tl) sintilasyon dedektörü (D), bir ön yükseltici (PA), bir adet yüksek voltaj filtresine sahip güç kaynağı (HV), yükseltici (MA), analog sayısal dönüştürücü (ADC), çok kanallı analizör (MCA) ve bilgisayardan (PC) oluşur. NaI(Tl) sintilatör dedektörünün kurulum şeması Şekil 2'de gösterilmektedir. Dedektörün taban ve yan yüzeylerinde, yapı malzemeleri ve çevredeki radyasyonun katkılarını en aza indirmek için 5 cm kalınlığındaki kurşun tabakalar kullanılmıştır. Enerji kalibrasyonu ve gama spektrometresinin bağıl verimlilik kalibrasyonu standart kalibrasyon malzemesi (IAEA-375) kullanılarak gerçekleştirildi. Aktivite konsantrasyonlarının hesaplanmasında belli enerjilere karşılık gelen fotopikler dikkate alınmış ve her pik için ilgili alan (ROI) bölgeleri seçilmiştir. ^{226}Ra konsantrasyonu, ^{214}Bi 'den 609.3, 1120.3 ve 1764.5 keV gama ışınlarının ölçülmesi ile belirlendi. Benzer şekilde, ^{208}Tl 'den 583 ve 2614.5 keV enerjideki pikler ^{232}Th 'nin aktivite konsantrasyonunun tayininde kullanıldı. ^{40}K ve ^{137}Cs aktivite konsantrasyonlarının hesaplanması için sırasıyla 1460,8 keV ve 661,7 keV gama pikleri analiz edildi.



Şekil 2: NaI(Tl) dedektörünün kurulum şeması.

1. Radyum Eşdeğerinin Değerlendirilmesi (R_{aeq})

Radyoaktiviteyi ölçmenin temel amacı, canlı organizmalara iletilecek muhtemel radyasyon dozunu tahmin etmektir. Radyasyona maruz kalma oranını tanımlamak için, Bq kg^{-1} cinsinden ölçülen radyum eşdeğer etkinliği (R_{aeq}) değerleri, genellikle farklı miktarlarda ^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K içeren materyallerin spesifik aktivitesini karşılaştırmak için kullanılır. Ayrıca, eşitlik (1) ile hesaplanan R_{aeq} verileri, toprakta ^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K radyonüklitlerinin varlığı nedeniyle ortaya çıkabilecek sağlık açısından tehlikeli durumları değerlendirmek için kullanılabilir (Beretka ve Mathew, 1985).

$$R_{\text{aeq}}(\text{Bqkg}^{-1}) = C_{\text{Ra-226}} + 1.43C_{\text{Th-232}} + 0.077C_{\text{K-40}} \quad (1)$$

Burada C_{Ra-226} , C_{Th-232} ve C_{K-40} , sırasıyla $Bq\ kg^{-1}$ cinsinden ^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K aktivite konsantrasyonları olup, toplanan numuneler için Ra_{eq} değerleri hesaplanarak Tablo 1'in 7. sütununda verilmiştir.

2. Soğurulan gama doz oranı (ADR)

Çevredeki radyoaktif kaynaklardan kaynaklanan gama radyasyonunun insan sağlığı

üzerindeki etkileri genellikle, yerden 1 m yükseklikteki açık havadaki toplam soğurulan gama radyasyon doz oranı (ADR) ile ifade edilir. Topraktaki ölçülen ^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K aktivite konsantrasyonları için sırasıyla, 0.462, 0.604 ve 0.0417 dönüşüm faktörleri uygulanarak, toplam doz oranını (ADR) ($nGy\ h^{-1}$) hesaplamak için eşitlik (2) kullanılır (EC, 1999; Markkanen, 1995).

$$ADR = 0.462C_{Ra} + 0.604C_{Th} + 0.0417C_K \quad (nGy\ h^{-1}) \quad (2)$$

Burada, C_{Ra} , C_{Th} ve C_K sırasıyla toprak örneklerinde ^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K için aktivite konsantrasyonları olup birimleri $Bq\ kg^{-1}$ 'dir. Toprak numuneleri için hesaplanan ADR değerleri Tablo 1'in 8 sütununda sunulmuştur.

3. Yıllık etkin doz eşdeğeri (AED)

Bir kişi tarafından açık alanda çeşitli radyasyon kaynaklarından yayınlanan radyasyonlardan dolayı maruz kaldığı yıllık tahmini ortalama etkin doz eşdeğeri ($AED_{açık\ alan}$), eşitlik (3) kullanılarak belirlenebilir (EC, 1999; Turhan et al. 2008; UNSCEAR 2000).

$$AED(açık\ alan)(\mu Sv\ y^{-1}) = ADR(nGy\ h^{-1}) \times 8760\ h \times 0.7\ Sv\ Gy^{-1} \times 0.2 \times 10^{-3} \quad (3)$$

Burada soğurulan doz oranını, yıllık etkin doz eşdeğer oranına dönüştürmek için $0.7\ Sv\ Gy^{-1}$ katsayısı ve ayrıca insanların bir yıl boyunca ($8760\ h\ y^{-1}$) zamanlarının yaklaşık %20'sini açık alanlarda geçirdiği göz önünde tutularak ev dışı meşguliyet faktörü olarak 0.2 katsayısı kullanılmıştır. Tablo 1'in 9. sütununda Selim'deki toprak numuneleri için açık AED'nin hesaplanan değerleri verilmiştir.

4. Yaşam Boyu Fetal Kanser Riski (YFKR)

Değişen hızlarda verilen farklı büyüklüklerdeki radyasyon dozlarına maruz kalan insanların vücutlarının, farklı bölgelerinde farklı zamanlarda değişik türde sağlık sorunları ortaya çıkabilir. Bir insan 5 Gy veya daha fazla doza maruz kalırsa, tedavisi yapılmadığı zaman, kemik iliği veya sindirim sistemi hasarı sonucu yaşamını yitirebilir. Ancak 50 Gy'lik doza maruz kalan insanların

tıbbi tedavi sonrası bile yaşamını sürdürmesi mümkün değildir. Alınan doz miktarı düşükse veya doza uzun bir zaman aralığında maruz kalınıyorsa yaralanan dokulardaki etki, yaşamın sonraki yıllarında veya gelecek nesillerde ortaya çıkan etkilere stokastik etkiler denir (Anonymous, 2017; Yaren et al., 2005). Bu etkilerin ortaya çıkma olasılığı, ışınlanan kişinin doğal ya da yapay radyasyon kaynaklarından aldığı radyasyon miktarına bağlıdır. Stokastik etkilerin en önemlisi olan kanser, her zaman ciddi ve çoğunlukla öldürücüdür. Kanser vakalarının radyasyon ışınlanması veya diğer nedenlerden kaynaklanıp kaynaklanmadığı kesin olarak ayırt edilemezken, radyasyon ışınlanmasından kaynaklanan ölümcül kanser riskinin belirlenmesi için yaş, cinsiyet gibi faktörleri hesaba katmak gerekir. Radyasyona maruz kalmış bir gruptaki kişi sayısı, kişilerin aldıkları doz miktarları ile bu gruptaki kanser oluşumu gözlenerek, diğer özellikleri benzer olan ancak radyasyona maruz kalmamış gruptaki beklenen kanser vakası sayısı ile dozları kıyaslayarak birim doz başına artan kanser riski tahmin edilebilir. Buna risk faktörü (RF) denir. Yaşam boyu Fetal kanser riski, belirli bir maruz kalma düzeyinde bir ömür boyu kanser gelişme olasılığı ile ilgilidir. YFKR, eşitlik (7) ile hesaplanır (Oyeyemi et al. 2017).

$$YFKR = AED \times YS \times RF \quad (4)$$

Burada, AED yıllık etkili doz eşdeğeri, YS, ortalama yaşam süresi (ortalama 70 yıl) ve RF ise risk faktörü olup Stokastik etkilerde, toplumun tamamında ölümcül kanser için ICRP risk faktörleri RF'yi $5 \times 10^{-2} \text{ Sv}^{-1}$ olarak kullanmaktadır (UNSCEAR 2000). Tüm numuneler için hesaplanan ömür boyu aşırı kanser riski (YFKR) Tablo 1'in 10. sütununda verilmiştir.

3. BULGULAR

Selim ilçesinin 18 farklı örnekleme istasyonundan toplanan 99 toprak numunesinde ölçülen ^{226}Ra , ^{232}Th , ^{40}K ve ^{137}Cs 'a ait radyoaktivite konsantrasyon değerleri Tablo 1'in 3,4,5 ve 6. sütunlarında verilmiştir. Toprak numunelerindeki ^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K radyoaktivite konsantrasyonlarının değerleri sırasıyla, $9,4 \pm 6,9 \text{ Bqkg}^{-1}$ (Tuygun Köyü) ile $27,9 \pm 8,0 \text{ Bqkg}^{-1}$ (Eskigazi Köyü), $30,6 \pm 14,2 \text{ Bqkg}^{-1}$ (Oluklu Köyü) ile $76,9 \pm 15,7 \text{ Bqkg}^{-1}$ (Eskigazi Köyü) ve $290,9 \pm 58,8 \text{ Bqkg}^{-1}$ (Bozkuş Köyü) ile $913,9 \pm 58,8 \text{ Bqkg}^{-1}$ (Tren Garı Mevki) arasında değişmektedir. İncelenen numunelerindeki ^{226}Ra , ^{232}Th ve ^{40}K 'un ortalama radyoaktivite konsantrasyonları sırasıyla, $19,9 \pm 7,7$, $57,9 \pm 14,6$ ve $562,0 \pm 132,2 \text{ Bqkg}^{-1}$ olarak bulundu. ^{137}Cs 'nin en yüksek radyoaktivite konsantrasyonu $17,0 \pm 1,2 \text{ Bqkg}^{-1}$ (Söğütlü Köyü) ve en düşük radyoaktivite

konsantrasyonu 2.1 ± 0.9 Bqkg⁻¹ (Tozluca Köyü) olarak ölçüldü. Tablo 2'den de görüleceği gibi Dünyanın ve Türkiye'nin ²²⁶Ra, ²³²Th ve ⁴⁰K ortalama radyoaktivite konsantrasyonlarının değerleri sırasıyla, 35, 30 ve 400 Bqkg⁻¹ ve 34.7 ± 1.7 , 35.4 ± 0.9 ve 450.0 ± 17.9 Bqkg⁻¹'dir. Tespitlerimize göre ²²⁶Ra'nın ortalama radyoaktivite konsantrasyonu Dünya ve Türkiye ortalamalarından daha düşük, ²³²Th ve ⁴⁰K'a ait ortalama radyoaktivite konsantrasyonlarının ise Dünya ve Türkiye ortalamalarından daha yüksek olduğu görülmektedir (UNSCEAR 2000, TAEA 2010). Tablo 2'de bu çalışmada incelenen toprak numunelerindeki radyoaktivite konsantrasyon değerleri Türkiye ve dünyanın değişik yerlerinde yapılan diğer çalışmalar ile kıyaslanmaktadır. M. Değerler arkadaşları tarafından (2008), Chandrasekaran ve arkadaşları (2014) tarafından yapılan çalışmalarda ²²⁶Ra için ortalama aktivite konsantrasyon değerleri bu çalışmada elde edilen ortalama değerden biraz daha yüksekken, literatürdeki diğer çalışmalardan daha düşük olduğu görülmektedir (Abu Samreh et al., 2014; Alzubaidi et al., 2016; Cengiz et al., 2014; Dizman et al., 2016; Karataşlı et al., 2016; UNSCEAR 2000). Tablo 1'in 7. sütununda görüleceği üzere, incelenen toprak numuneleri için hesaplanan radyum eşdeğer aktivitesi (Ra_{eq}) değerlerinin ortalaması 146

Bqkg⁻¹ olup, değerler 99.2 Bqkg⁻¹ (Oluklu köyü) ile 188.5 Bqkg⁻¹ (Alisofu köyü) arasında değişmektedir ve analiz sonuçlarına göre radyum eşdeğer aktivitesi değerlerinin uluslararası izin verilen limit değerinin (370 Bqkg⁻¹) çok altında olduğu görüldü (UNSCEAR 2000). Çalışmalarımız sonucunda açık alandaki soğurulan gama doz oranı değerlerinin, 49.5 nGy h⁻¹ (Bayburt köyü) ile 92.1 nGy h⁻¹ (Alisofu köyü) değerleri arasında değiştiği ve ortalama değer ise 71.0 nGy h⁻¹ olduğu görüldü. Bu değerler Tablo 1'in 8. sütununda verildi. Hesaplanan ortalama değer Türkiye ve dünya ortalama değeri olan 60.0 nGy h⁻¹'den daha yüksek olduğu görüldü (TAEA 2010, UNSCEAR 2000). Ayrıca Tablo 1'in 9. sütununda verilen yıllık etkin doz oranının 60.7 µSv y⁻¹ (Bayburt köyü) ile 112.0 µSv y⁻¹ (Alisofu köyü) arasında değişmektedir. Ortalama değeri ise 87.1 µSv y⁻¹ olup dünya ortalama değerinden ($70,0$ µSv y⁻¹)'den daha yüksektir (UNSCEAR 2000). Yaşam boyu fetal kanser riskinin hesaplanan değerlerinin (Tablo 1'in 10. sütunu) 0.21×10^{-3} (Oluklu ve Bayburt köyü) ile 0.40×10^{-3} (Alisofu köyü) arasında değiştiği ve 0.30×10^{-3} ortalama değerinin ise dünya ortalama değerinden (0.29×10^{-3}) çok azda olsa yüksek olduğu görüldü (UNSCEAR 2000). İnsanlar arasında kanser vakaları geliştirme ihtimali belirtisi yoktur.

Tablo 1. ^{226}Ra , ^{232}Th , ^{40}K ve ^{137}Cs 'a ait radyoaktivite konsantrasyon değerleri, radyum eşdeğer aktivitesi (R_{aeq}), açık alanda soğurulan doz oranı (ADR), yıllık etkin doz oranı (AED) ve yaşam boyu fetal kanser riski (YFKR).

İstasyonların Adı Numune ve Lokasyonları	Numune sayısı	Aktivite Konsantrasyonları (Bqkg^{-1})				Açık Alan			YFKR $\times 10^{-3}$
		^{226}Ra	^{232}Th	^{40}K	^{137}Cs	R_{aeq} (Bqkg^{-1})	ADR (nGyh^{-1})	AED (μSvy^{-1})	
S.1 Oluklu	5	12.1±7.6	30.6±14.2	563.8±112.6	8.7±1.1	99.2	49.6	60.9	0.21
S.2 Tozluca	5	15.1±7.6	39.5±13.6	611.8±108.5	2.1±0.9	118.8	59.0	72.3	0.25
S.3 Bayburt	4	13.0±6.9	39.9±13.5	407.4±70.4	1.0±1.1	101.5	49.5	60.7	0.21
S.4 Ortakale	5	23.3±6.7	59.7±13.0	564.5±132.3	3.8±1.1	152.2	73.8	90.5	0.32
S.5 Eskigazi	6	27.9±8.0	76.9±15.7	645.7±150.6	4.5±1.1	187.6	90.6	111.1	0.39
S.6 Yassıca	5	18.3±6.7	39.5±13.0	483.4±113.9	3.4±1.1	112.0	54.8	67.2	0.24
S.7 Baykara	5	27.0±6.4	61.8±12.5	710.6±143.0	1.0±0.9	170.1	83.0	101.8	0.36
S.8 Tuygun	6	9.4±6.9	43.1±13.6	521.6±80.8	10.5±1.3	111.2	55.0	67.4	0.24
S.9 Bozkuş	6	21.3±6.7	52.6±13.2	290.9±58.8	11.3±1.1	118.9	56.4	69.2	0.24
S.10 Söğütlü	5	23.2±7.3	63.3±14.2	610.0±123.2	17.0±1.3	160.7	78.0	95.7	0.33
S.11 Yolgeçmez	5	18.2±8.2	73.4±16.1	666.3±139.2	1.2±1.1	174.4	85.0	104.2	0.36
S.12 Karahamza	6	25.6±6.8	60.9±13.3	913.9±184.7	6.4±1.1	183.0	90.5	111.0	0.39
S.13 Tren Garı	7	22.1±9.3	67.8±15.2	804.2±149.8	8.6±1.2	180.9	88.9	109.0	0.38
S.14 Alisofu	7	24.0±8.2	73.3±18.0	774.9±191.0	14.1±1.3	188.5	92.1	112.	0.40
S.15 Karaçayır	6	21.5±7.3	61.0±16.0	630.9±171.3	5.6±1.1	157.4	76.7	94.1	0.33
S.16 Gelinalan	5	12.1±9.4	76.4±18.6	617.2±163.4	5.8±1.4	168.8	82.3	100.9	0.35
S.17 Koyunurdu	5	24.6±7.7	62.4±14.8	597.1±122.2	1.2±1.2	159.9	77.5	95.1	0.33
S.18 Benliahmet	6	19.0±7.6	60.8±14.6	471.8±110.9	4.4±1.2	142.3	68.7	84.2	0.29
Ortalama	99	19.9±7.5	57.9±14.6	562.0±132.2	6.1±1.2	146.0	71.0	87.1	0.30

Tablo 2: Elde edilen toprak numunelerindeki doğal radyoaktivite düzeyleri, radyum eşdeğer aktivitesi (R_{aeq}), açık alandaki soğurulan doz oranı (ADR), yıllık etkin doz oranı (AED) ve yaşam boyu fetal kanser riski (YFKR)'nin literatürde bildirilen değerlerle karşılaştırılması.

Referanslar	Bölge	Aktivite Konsantrasyonları (Bqkg^{-1})				Karasal			
		^{226}Ra	^{232}Th	^{40}K	^{137}Cs	R_{aeq} (Bqkg^{-1})	ADR (nGyh^{-1})	AED (μSvy^{-1})	YFKR $\times 10^{-3}$
Bu çalışma	Selim	19.9±7.5	57.94±14.61	562±132	6.1±1.2	146.0	71.0	81.7	0.30
Cengiz et al	Kars Çevresi	31.95±18	27.70±16	458.47±18	14.9±0.4		52.3	64.2	
Cengiz et al	Kars Merkez	47.8	51.08	771.57	18.0		44.76	54.9	
Dizman et al	Rize	85.75	27.17	431.43	236.38	218.2	110.69	136.0	0.48
Değerlier et al.	Adana	17.6	21.1	297.5	6.8		67.0	82.0	
Taşkin et al.	Kırklareli	28±13	40±18	667±282	8.0±5.0		71.0	87.0	0.51
	Doğu								
Turhan et al	Anadolu	28.5-46.4	32.1-49.7	440.1-637	9.78		51.3	63.0	
Karatashi et al	Mersin	27.1	34.3	370.5	18.6		51.0	62.0	0.22
Kapdan et al.	Yalova	22.36	26.87	419.32	2.53		48.89	59.96	0.42
Abu Samreh et al	Filistin	41.4	19.5	113.3	2.8	77.6	35.3	40.0	1.02
Rafique et al	Pakistan	31.25 ±0.5	44.1±1.07	575±8.9	15.04±0.3		89	164.0	0.543
Chandrasekaran et al	Hindistan	19.16	48.56	1146.88					0.70
Oyeyemi et al	Nijerya	25.498	77.772	710.704			148.22		0.635
Alzubaidi et al	Malezya	102.08±3.9,	133.96±2.92,	325.8 ±9.8		458.8	141.62	169.0	
UNSCEAR 2000	Amerika B.D	40.0	35.0	370.0			47.0		
UNSCEAR 2000	Yunanistan	25.0	21.0	360.0			56.0		
UNSCEAR 2000	Bulgaristan	45.0	30.0	400.0			45.0		
TAEA, 2010	Türkiye	34.7±1.7	35.4±0.8	450.0±18	11.6±0.5		54.6	70.0	
UNSCEAR 2000	Dünya	35.0	30.0	400.0			60.0	70.0	0.29

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Selim İlçesinin toprak örneklerindeki ^{232}Th ve ^{40}K radyoaktivite konsantrasyon değerleri sırasıyla, dünya ortalamalarından (30 Bqkg^{-1} ve 400 Bqkg^{-1}) daha yüksek, ^{226}Ra radyoaktivite konsantrasyon değeri ise dünya ortalamasından (35 Bqkg^{-1}) daha düşük bulundu. Çalışılan bölgede yaşayan nüfus üzerinde background radyasyon seviyelerinin sağlık açısından etkilerini belirlemek amacıyla radyum eşdeğer aktivitesi (R_{aeq}) soğurulan doz oranı ($\text{ADR}_{\text{açık alan}}$), yıllık etkin doz oranı (AED) ve yaşam boyu fetal kanser riski (YFKR) hesaplandı. Özellikle Alisofu köyünde yukarıda belirtilen radyolojik tehlike risk parametrelerinin UNSCEAR (2000) tarafından belirtilen limit değerlerinden daha yüksek olduğu görüldü. Bu çalışma, Selim ilçesinde çevresel radyasyon seviyeleri ve radyonüklit dağılımı ile ilgili ileriye dönük çalışmalar için temel veriler olarak kullanılabilir. Çalışmanın sonuçları, gelecekteki değerlendirmeler için bir referans oluşturabilir.

KAYNAKLAR

Abu Samreh M.M., Thabayneh K.M., Khrais F.W. (2014). Measurement of activity concentration levels of radionuclides in soil samples collected from Bethlehem

Province, West Bank, Palestine, *Turkish J Eng Env Sci*, 38: 113-125.

Alzubaidi G., Fauziah B., Hamid S., Abdul Rahman I. (2016). Assessment of Natural Radioactivity Levels and Radiation Hazards in Agricultural and Virgin Soil in the State of Kedah, North of Malaysia *The Scientific World Journal*, 1-9.

Anonymous, (2009). <http://www.taek.gov.tr/sss/radyasyondan-korunma/505-iyonlastirici-radyasyonun-biyolojik-etkileri.html> (Erisim tarihi 25 Temmuz 2017).

Beretka J. Mathew P.J. (1985). Natural radioactivity of Australian building materials, industrial wastes and by-products. *Health Phys.*, 48, 87–95.

Bilgici Cengiz G., Çağlar İ. (2016). Determination of the Health Hazards and Life time Cancer Risk Due to Natural Radioactivity in Soil of Akyaka, Arpaçay and Susuz Areas of Kars, Turkey. *International Journal of Scientific & Engineering Research*, Volume 7 issue 3,619-626.

Bilgici Cengiz, G., Reşitoğlu S. (2014). Determination of natural radioactivity levels in Kars City center, Turkey. *Journal of Nuclear Sciences*, 1, 32-37.

Chandrasekaran A., Ravisankar R. Senthilkumar G., Thillaielavan K., Dhinakaran B., Vijayagopal P., Bramha

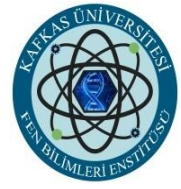
- S.N., Venkatraman B. (2014). Spatial distribution and lifetime cancer risk due to gamma radioactivity in Yelagiri Hills, Tamilnadu, *India Egyptian journal of basic and applied sciences* 1 38-48.
- Değerlier M., Karahan G., Ozger G. (2008). Radioactivity concentrations and dose assessment for soil samples around Adana, Turkey. *Journal of Environmental Radioactivity*, 99(7), 1018–1025.
- Dizman S., Görür F.K., Keser R. (2016). Determination of radioactivity levels of soil samples and the excess of lifetime cancer risk in Rize province, Turkey. *International Journal of Radiation Research*, 14(3): 237-244.
- EC, (1999). European Commission. Radiation Protection Unit, radiological protection principles concerning the natural radioactivity of building materials. *Radiat. Prot.*, 112.
- Kapdan E., Varinlioglu A., Karahan G. (2011). Radioactivity Levels and Health Risks due to Radionuclides in the Soil of Yalova, Northwestern Turkey *Int. J. Environ. Res.*, 5(4):837-846.
- Karataslı M., Turhan S., Varinlioglu A., Yegingil Z. (2016). Natural and fallout radioactivity levels and radiation hazard evaluation in soil samples. *Environ Earth Sci*, 75:424.
- Markkanen M. (1995). Radiation Dose Assessments for Materials with Elevated Natural Radioactivity. Report STUK-B-STO 32. Radiation and Nuclear Safety Authority -STUK.
- Oyeyemi K.D., Usikalu M.R., Aizebeokhai A.P., Achuka J.A., Jonathan O. (2017). Measurements of radioactivity levels in part of Ota Southwestern Nigeria: Implications for radiological hazards indices and excess lifetime cancer-risks IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 852, 1-8.
- Rafique M., Ur Rahman S., Basharat M., Aziz W., Ahmad I., Lone K.A., Ahmad K., Matiullah M. (2014). Evaluation of excess life time cancer risk from gamma dose rates in Jhelum valley. *Journal of Radiation Research and Applied Sciences*, 7 29-35.
- TAEA (2010). Türkiye'deki Çevresel Radyoaktivitenin İzlenmesi 2009, *Technique Report*, Ankara 9-14.
- Taskin H., Karavus M., Ay P., Topuzoglu A., Hidiroglu S., Karahan G. (2009). Radionuclide concentrations in soil and lifetime cancer risk due to gamma radioactivity in Kırklareli, Turkey. *Journal of Environmental Radioactivity*, 100, 49-53.
- Turhan Ş., Köse A., Varinlioğlu A., Şahin N.K., Arıkan İ., Oğuz F., Yücel B.,

Özdemir T. (2012). Distribution of terrestrial and anthropogenic radionuclides in Turkish surface soil samples. *Geoderma*, 187–188, 117–124.

Tzortzis M., Tsertos H., Christofides S., Christodoulides G. (2003). Gamma-ray measurements of naturally occurring radioactive samples from Cyprus characteristic geological rocks, *Radiation Measurements* 37, 221-229.

Yaren H., Karayıllanoğlu T. (2005). Radyasyon ve insan sağlığı üzerine etkileri, *TSK Koruyucu Hekimlik Bülteni*, 4 (4), 199-208.

UNSCEAR (2000). Sources, Effects and Risks of Ionizing Radiation Report of the United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation to the General Assembly. United Nations, New York.



Siklik Alken Türevlerinin Karbenler ile Siklopropanasyon Tepkimelerinin Teorik Olarak İncelenmesi

Selçuk GÜMÜŞ^{1*}, Ayşegül GÜMÜŞ¹, Zeynep TURHAN İRAK²

¹ Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 65080, Van

² Iğdır Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Çevre Mühendisliği Bölümü, 76100, Iğdır

(İlk Gönderim / Received: 08.08.2017, Kabul / Accepted: 16.08.2017, Online Yayın / Published Online: 23.10.2017)

Anahtar Kelimeler

Karben,
Halkalı Olefinler,
Siklopropanasyon,
Geçiş Hali,
Aktivasyon Enerjisi

Özet: Olefinlerin karbenler ile tepkimeleri sonucu siklopropan türevleri sentezlenebilir. Bu çalışmada belirli karbenler ile halkalı olefinlerin tepkimeleri sonucunda bisiklik siklopropan türevlerinin sentezi teorik olarak incelenmiştir. Beş, altı ve yedi karbonlu halkalı olefinler ile CH_2 , CCl_2 , CBr_2 , tetrametildiamin ve 1,3-dimetilimidazolidin karbenler tepkimeye sokulmuş ve olası ürünlerin tepkime mekanizmaları incelenmiştir. Tüm tepkime mekanizmalarının ekzotermik olduğu hesaplanmıştır yani ürünlerin kararlılığı başlangıç maddelerine göre daha fazladır. Halka büyüdükçe tepkime aktivasyon enerjisinin düştüğü gözlemlenmiştir. Ayrıca, başlangıç karbeninin kararlılığı arttıkça da aktivasyon enerjisi düşmüştür. Tepkime mekanizmaları incelenirken geçiş halleri tayin edilmiştir. Geçiş hallerinin belirlenmesinde titreşimsel frekans hesaplamaları, titreşimsel frekans simülasyonu ve IRC hesaplamaları yöntemleriyle teyit yapılmıştır. Birden fazla ürünün sentezlenmesinin mümkün olduğu durumlarda, her iki yol da incelenmiş ve olası ürün tahmin edilmiştir. Bilgisayarlı hesaplamalar Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ve B3LYP/6-31G(d,p) metodu kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

Theoretical Investigation of the Cyclopropanation Reaction Between Cyclic Olefins and Carbenes

Keywords:

Carbene,
Cyclic olefins,
Cyclopropanation,

Abstract: Through the reaction between olefins and carbenes some derivatives of cyclopropanes can be synthesized. In this study, bicyclocyclopropane derivatives were synthesized theoretically with the reaction of cyclic olefins and carbenes. Five, six and seven membered rings and CH_2 , CCl_2 , CBr_2 , tetramethyldiamine and 1,3-

Transition State,
Activation Energy

dimethylimidazoldine carbenes were reacted together and the reaction mechanisms were investigated theoretically. All reactions were computed to be exothermic that is, the stability of the products are greater than that of the reactants. It is found that, the bigger the ring size the lower the activation energy of the reaction. Moreover, activation energy decreases through the increase in the stability of the carbene. The transition states were determined during the reaction mechanism search. The transition states were confirmed by vibrational frequency analysis, simulation of the negative frequency and IRC calculations. When necessary, the reaction mechanism was investigated on two paths and the possible products were determined. All computations were performed by Density Functional Theory with the application of B3LYP/6-31G(d,p) method.

Key words:

1. GİRİŞ

Karbonun, yalnız iki bağ oluşturduğu bir grup bileşik de vardır. Bu nötr iki değerlikli karbon bileşikleri *karbenler* olarak adlandırılırlar. Karbenler nötrdür, iki bağları ve de iki de eşleşmemiş elektronları vardır. Ama elektronca oldukça fakirdirler çünkü çevrelerinde 6 elektron bulunmaktadır. Karbenlerin pek çoğu yalnızca kısa süre var olabilen oldukça kararsız bileşiklerdir. Karbenler oluşur oluşmaz hemen bir başka molekülle tepkimeye girerler. Bazıları bağlı gruplarının kuvvetli elektron verici olmalarından dolayı nükleofilik özellik de taşıyabilmektedir. İndüktif etki ile elektron verici gruplar bağlanarak kararlı hale getirilebilmektedir. Günümüzde şişelenebilir satılan karbenler mevcuttur. Oldukça ilginç tepkimeleri vardır. Çünkü bu tepkimeler birçok durumda fark edilebilir bir stereoözü bir özellik gösterirler. Karbenlerin tepkimeleri, üç

üyelikli halkalı bileşiklerin eldesinde geniş ölçüde kullanılır. En basit karben, Metilen (CH_2) olarak adlandırılan bileşiktir (Apeloig et al., 1983; Solomons and Fryhle, 2000).

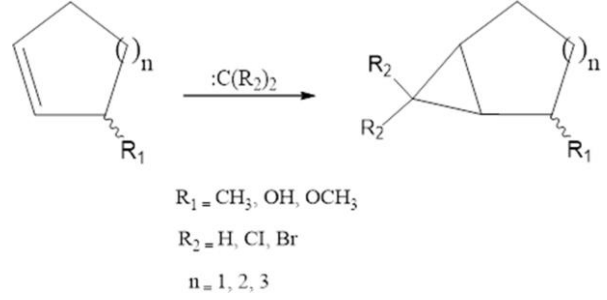
Karbenler iki sınıfta, singlet ve triplet karbenler olarak ayrılır. Singlet karbenler spin çiftleşmiştir. Singlet karbenler boş bir p orbitaline sahip ve eşleşmemiş bir sp^2 'de bir çift elektrona sahip, dolu ve boş orbitaller içerir. Zwitter iyonik karaktere sahiptir. Değerlik bağ teorisine göre, yapı sp^2 hibrit yapısına adapte olur. Triplet karbenler bir p orbitali ve her bir sp^2 orbitalinde iki eşleşmemiş elektrona sahiptir. Triplet karben iki tekli orbitale yerleşir. Biradikal özellik gösterir. Lineer veya bükülmüş olabilir. Sırasıyla sp veya sp^2 hibritleşmesi yapabilirler. Kullanılan bileşiğe göre singlet yada triplet karben oluşumları değişmektedir.

Karbenler ilk Eduard Buchner tarafından 1903 yılında toluen ile etil diasetatın siklopropanasyon çalışmalarında

doğrulanmıştır (Singh, 2012). 1912'de Hermann Staudinger ayrıca bir ara ürün olarak CH_2 ve Diazometan ile akenleri siklopropanlara dönüştürdü. 1950'lerde organik kimyaya Doering tarafından tanıtıldı. (Doering and Hoffmann, 1954)

Karbenler, 1960'lı yıllarda aktif bir ara ürün olarak tespit edilmelerinin ardından hem teorik hem de sentetik organik kimya alanında birçok bilim insanının ilgi odağı olmuştur. Öyle ki bilindik yöntemlerle sentezlenmesi imkânsız ya da çok zor olan küçük halkalı veya halka gerilimi yüksek organik bileşiklerin sentezinin önü açılmıştır. (Apeloig et al., 1986a; 1986b).

Araştırma kapsamında organik kimyada önemli bir yere sahip olan siklopropanasyon tepkimesinin mekanizması teorik olarak incelenecektir. Siklik alken türevlerinin siklopropanasyonu çeşitli karbenler kullanılarak gerçekleştirilecektir. Çalışmanın bir diğer amacı ise; karbenlerin eklenme tepkimelerinde singlet veya triplet spin hallerinde bulunabilmesinden kaynaklanan oluşacak ürün farklılıklarını incelemektir. Siklik alken türevlerinin siklopropanasyonu sonucunda bisiklik organik moleküller elde edilmektedir. (Şekil 1).



Şekil 1. Siklik alken türevlerinin genel siklopropanasyon şeması

Siklik alken türevleri ve sonrasında oluşan bisiklik ürünler bazı önemli bileşikler için öncül maddeler olarak rol alırlar. Özellikle R_1 Sübstitüentinin stereokimyası kiral moleküllerin sentezlenmesine olanak sağlamaktadır. Bu noktada mutlak konfigürasyonun bilindiği durumlarda sağlıktan kozmetiğe birçok alanda önemli olabilecek kiral organik bileşikler elde edilebilir.

2. MATERYAL VE METOT

Hesaplamalı kimya, kimyasal problemlerin çözümüne yardımcı olmak için teorik hesaplama yöntemlerini kullanır. Günümüzde kullanılan teorik hesaplama yöntemleri ile moleküllerin birçok özellikleri deney yapmaya gerek kalmadan hesaplanabilmektedir. Hatta bazı çalışmalarda deneysel yöntemlerden daha hassas ve güvenilir sonuçlar elde edilebilmektedir. Geleneksel kimyada sadece bir deneyle

moleküler yapı, oluşum ısısı, dipol moment, iyonlaşma potansiyeli, elektron yükleri, elektron yoğunlukları, bağ uzunlukları gibi birçok bilgiyi verebilecek bir yöntem yoktur. Fakat hesaplamalı kimyada yaygınlaşan bilgisayar teknolojisinin gelişimine paralel olarak birçok yöntem ortaya çıkmış ve moleküllerin yukarıda değinilen birçok özelliğine aynı anda ulaşılabilme olanağı doğmuştur. Bundan hareketle moleküllerin verilerinin deneysel yöntem ile hesaplanmasında sonuçların güvenilirliği göz önünde bulundurulursa, yaygınlaşmakta olan birçok hesaplama yöntemi sonuçlarının, deneysel sonuçlara göre ne kadar güvenilir olduğu görülebilir.

Hesaplmalı kimya yöntemleri son derece doğru ve doğruya çok yaklaşık aralığında değişir. Hesaplmalı kimyada son derece hassas yöntemler olduğu gibi yarı deneysel yöntemlerde mevcuttur. Son derece hassas yöntemler sadece küçük sistemler için genellikle mümkün olmaktadır; büyük sistemler ve proteinler için ise daha düşük seviyeli yöntemler mümkün olmaktadır.

Hesaplmalı kimyanın en önemli üç yöntemi şunlardır; ab-initio, yarı-deneysel ve yoğunluk fonksiyoneli teorisidir. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Kohn and Sham, 1965), Hohenberg ve Kohn tarafından 60'lı yıllarda ortaya atılan ve son 15-20 yılda teorik hesaplamalar yapan bilim adamları tarafından

en çok kullanılan metottur. Bir molekülün toplam elektronik enerjisinin, o molekülün elektron yoğunluğundan bulunması esasına dayanır.

Bu çalışmada triazin tabanlı yapıların elektronik özelliklerinin daha iyi bir şekilde tespiti için elektron yoğunluğunu dikkate alan ve bu elektron yoğunluğu üzerinden istenilen dataları üreten Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory, DFT) kullanılmıştır. Ayrıca hesaplamalarda Gaussian09 programı bünyesinde bulunan ve iş istasyonun kapasitesine uygun hibrit fonksiyon B3LYP ve temel kümeler olarakta 6-31G(d,p) (Becke, 1996) kullanılmıştır.

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

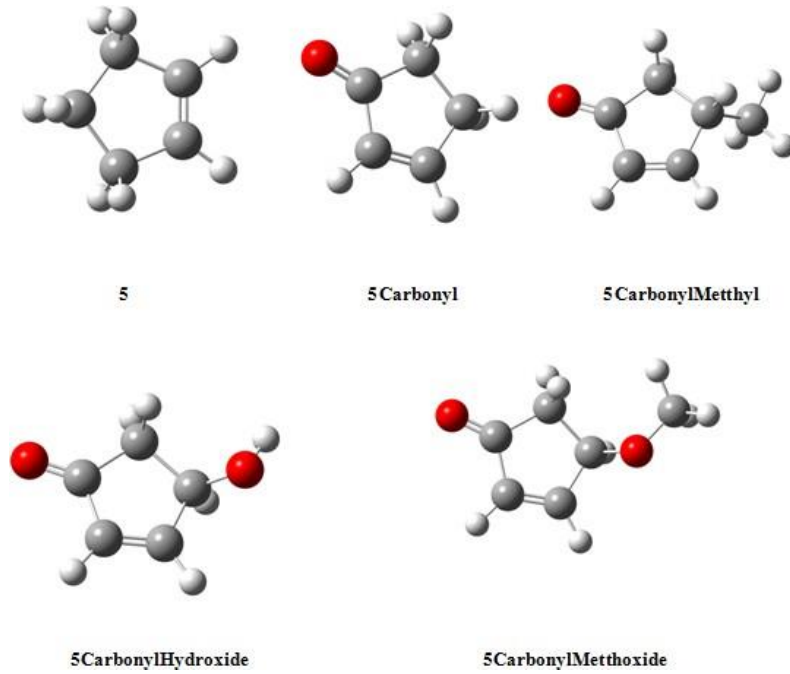
Öncelikli olarak tüm başlangıç yapıları ve karben yapıları geometri optimizasyonuna tabi tutulmuştur. Geometri optimizasyonu sonucunda elde edilen yapılar temel yapı halleri olduğu için moleküller için kararlı durumu simgelemektedir. Geometri optimizasyonu yapılan moleküller üzerine titreşimsel frekans hesaplamaları yapılması gerekir. Bu hesaplamalar sayesinde elde edilen yapının potansiyel enerji düzeyinde bir minimumu ifade edip etmediği elde edilen tüm frekans değerlerinin pozitif olmasıyla anlaşılır.

Öte yandan geçiş hali optimizasyonlarını takiben yapılan titreşimsel

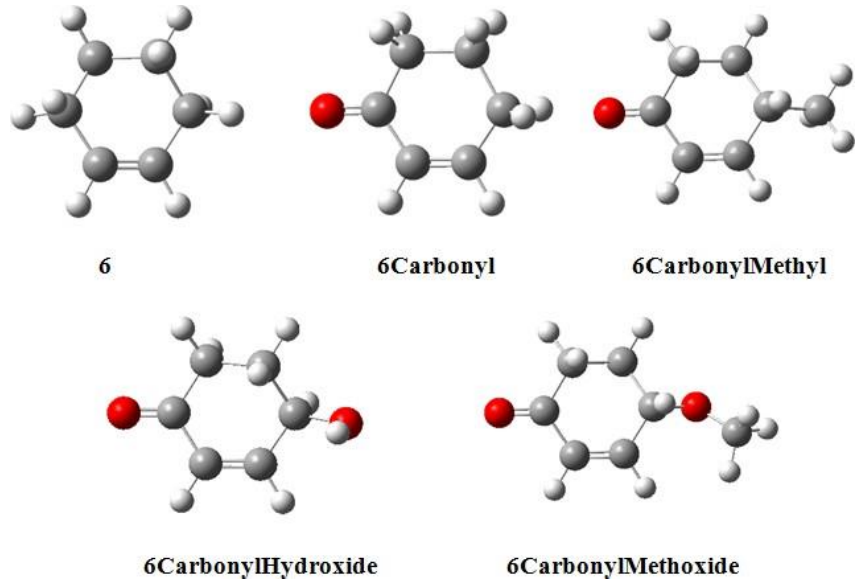
frekans hesaplamalarında bir adet negatif frekans elde edilmelidir. Burada bulunan negatif frekans değeri potansiyel enerji düzeyinde bir tepe noktasında olduğumuzu gösterir, bu da geçiş hali tespit edilmiş demektir. Ancak geçiş halinin doğru tespit edilip edilmediğini anlamak için bir negatif frekans değeri bulmak yeterli değildir. Burada bulunan frekans değeri simüle edilip molekülün hangi noktasına ait olduğu bakılmalıdır. Burada titreşim hareketinin tepkimenin gerçekleştiği noktada yer alması gerekmektedir. Bu da doğruysa bir sonraki aşama İntrensik Reaksiyon Koordinatı (Intrinsic Reaction Coordinate, IRC) hesabı yapılmasına

geçilir. Burada bulunan geçiş halinin ürüne mi başlangıç maddelerine mi daha yakın olduğu tespit edilerek son karar verilir.

Çalışma kapsamında ilk olarak karben tepkimelerinde kullanılacak tüm yapıların optimizasyonun yapılması gerekmektedir. Bu bağlamda moleküllerin B3LYP/6-31G(d,p) hesaplama seviyesinde optimizasyonlarına başlanmış ve bitirilmiştir. Hedef moleküllerin optimizasyonlarından sonra karben yapılarının optimizasyonuna geçilmiş ve bu yapılarında geometri optimizasyonları tamamlanmıştır. Şekil 2'de geometri optimizasyonu sonucunda elde edilen şekiller görülmektedir.

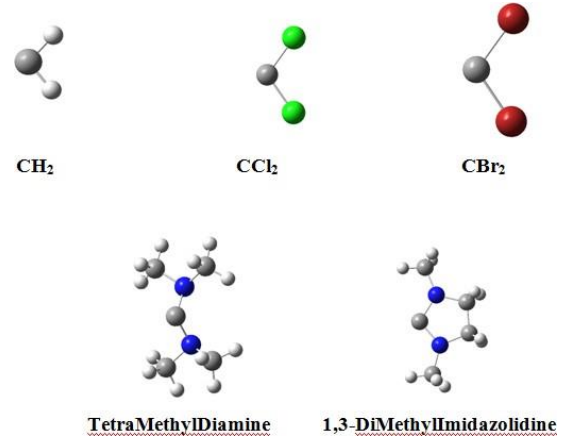


Şekil 2. Beşli halkalı alken türevlerinin geometri optimize edilmiş yapıları.



Şekil 3. 6 Halkalı alken türevlerinin geometri optimize edilmiş yapıları.

Şekil 2 ve Şekil 3'de verilen geometri optimizasyonu sonucunda elde edilen yapılar incelendiğinde, çift bağa karben yaklaşmasını engelleyecek herhangi bir sterik engel olmadığı görülmektedir. Karbonil grubuyla konjuge olan çift bağ sistemlerinde düzlemsellik daha da artmıştır. Molekülün 4 pozisyonuna yerleştirilmiş süstitüent ürün açısından türevlerin oluşmasına imkân vermektedir. Karben yapısı asıl moleküle alt ya da üstten saldırmak suretiyle iki farklı ürünün oluşabilmesine yol açar. Tepkimenin mekanizması incelenirken oluşacak ürünün tahmininde her iki yönden saldırmada dikkate alınmalıdır.

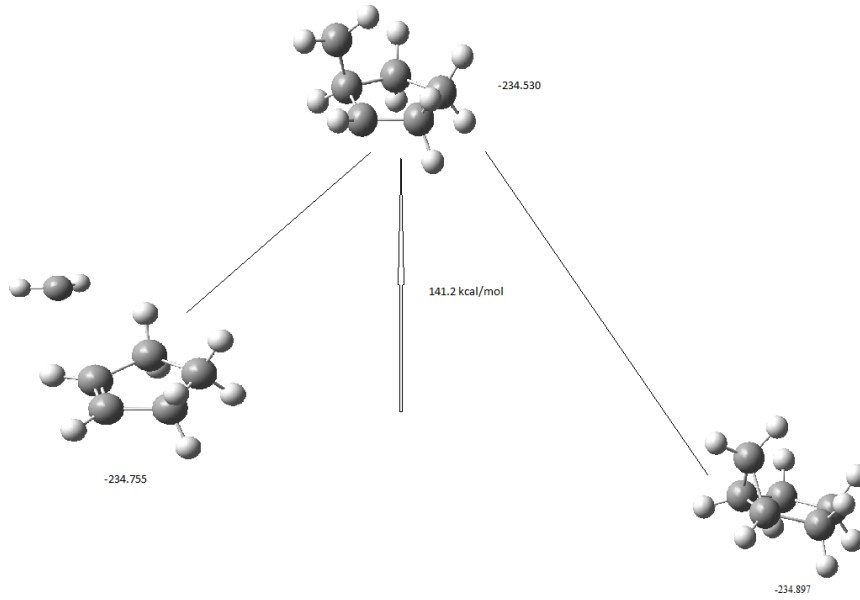


Şekil 4. Geometri optimizasyonu yapılmış karben türevleri.

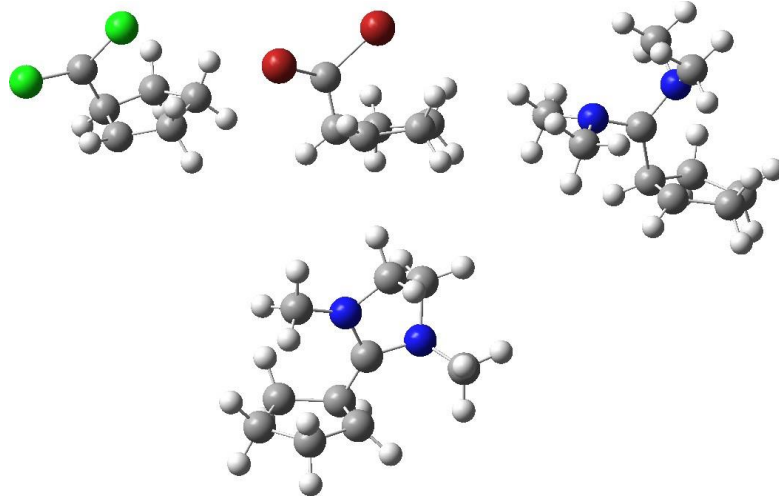
İncelenen karbenler literatürde laboratuvar sentezlerinde en çok kullanılan karbenlerden seçilmiştir (Şekil 4). Tetrametildiamin ve 1,3-dimetilimidazolidin ise literatürde en kararlı karbenler olarak değerlendirilmesinden dolayı seçilmiştir.

Şekil 5'de CH₂ karben siklopenten (5) arasındaki tepkimenin mekanizmasının incelenmesinden ortaya çıkan enerji profili verilmiştir. Tepkime tek geçiş noktası içermektedir. Tepkimenin aktivasyon enerjisi 141.2 kcal mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Bu da tepkimenin oda sıcaklığında gerçekleşmeyeceğinin bir göstergesidir. Tepkime mekanizmasının endotermik olduğu gözlemlenmektedir. CH₂ karben çalışmasının ardından CCl₂, CBr₂, Tetrametildiamin ve 1,3-dimetilimidazolidin karbenler ile de reaksiyon gerçekleştirilmiş (Şekil 6) ve sırasıyla 127.3, 132.1, 100.2 ve 98.5 kcal mol⁻¹ aktivasyon enerjileri elde edilmiştir. Aktivasyon

enerjilerindeki düşme karben kararlılığı arttıkça aktivasyon enerjisi düşmektedir sonucunu doğurmuştur. Şekil 7'de CH₂ karben siklopenten (5) tepkimesinin geçiş hali titreşimsel frekans değerlerinin bir bölümü verilmiştir. Görüldüğü üzere frekanslardan sadece bir tanesi negatif bir titreşimsel frekanstır. Bu da geçiş halinin doğru tespiti için birinci şartın sağlandığını gösterir. Aynı şekilde bahsi geçen titreşimsel frekans değerinin simülasyonunda karben ve beşli halkanın tepkime noktalarında titreşim gözlemlenmesi ikinci testin de başarıyla geçildiğini göstermektedir.



Şekil 5. Siklopenten ve CH₂ karben tepkimesi enerji profili



Şekil 6. Siklopenten ve diğer karben tepkimelerinin geçiş halleri

G1:M1:V1 - Display Vibrations

Mode #	Freq	Infrared
1	-249.21	11.6040
2	34.92	0.5317
3	71.22	5.3854
4	85.76	2.3199
5	135.06	7.0142
6	192.10	0.3353
7	200.52	2.8271
8	249.11	2.6698
9	260.91	7.7001
10	321.45	2.5669
11	382.01	0.0613
12	432.78	18.4648
13	451.00	1.2387
14	462.88	6.9069
15	507.62	16.2933
16	548.55	45.7537
17	563.49	19.2107
18	572.92	52.8065
19	619.04	2.8381
20	642.16	95.5589
21	694.89	4.5109
22	760.18	58.8676
23	766.55	8.4882
24	814.56	24.3830
25	860.76	6.7432
26	894.53	11.0323
27	924.03	14.8345
28	975.90	15.4407
29	1011.64	49.5103
30	1023.09	11.9408
31	1040.03	36.1368
32	1063.95	15.9751
33	1068.47	75.6037

Animate Vibration: Start Animation Save Movie...

Animation Frequency: [Slider]

Displacement Amplitude: [Slider]

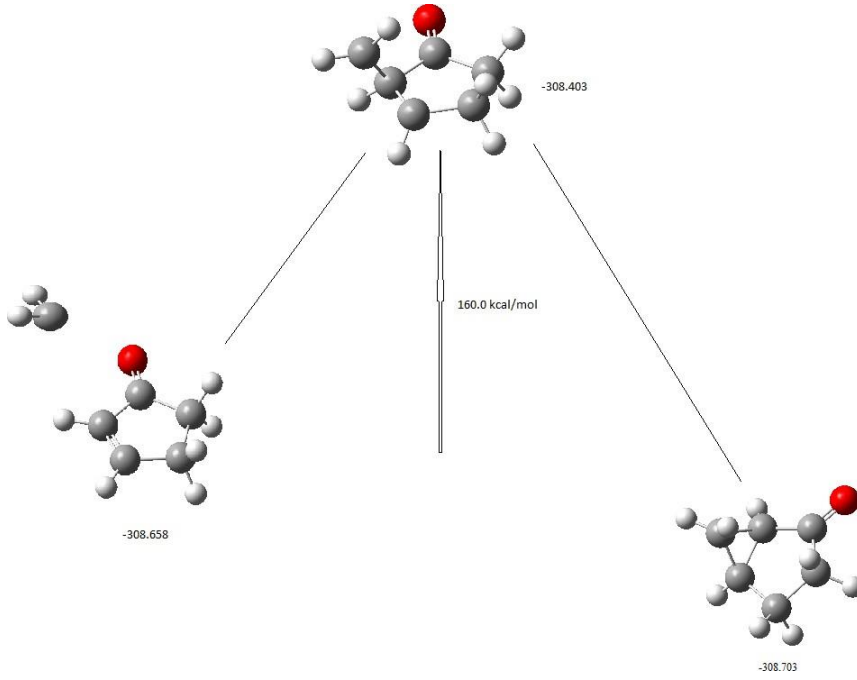
Show Displacement Vectors Scale: [Slider]

Show Dipole Derivative Unit Vector Scale: [Slider]

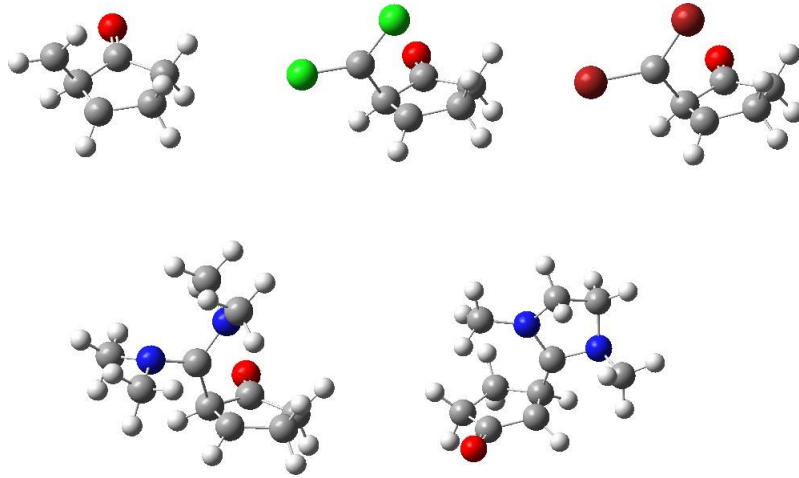
Manual Displacement: [Slider] 0.00 Save Structure...

Close Cancel Spectrum Help

Şekil 7. Siklopenten ve CH₂ karben tepkimesi geçiş hali titreşimsel frekans değerleri



Şekil 8. Siklopentenon ve CH₂ karben tepkimesi enerji profili



Şekil 9. Siklopentenon ve karben tepkimelerinin geçiş halleri

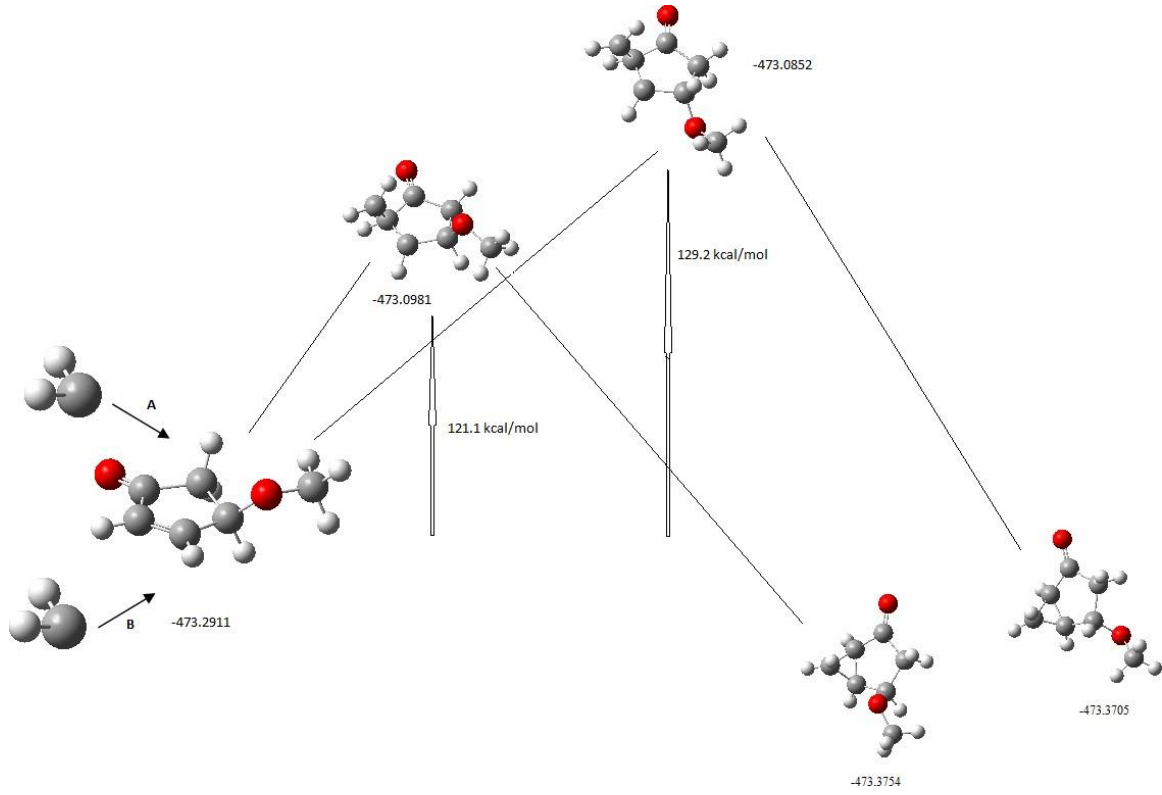
Şekil 8 ve 9'da siklopentanon ve CH₂ karben etkileşmelerinin enerji profili ve diğer çalışılan karbenlerin de geçiş halleri verilmiştir. Enerji profili tamamlandıktan sonra görülmüştür ki aktivasyon enerjisi siklopentene göre artış göstermiştir. Siklopentende 141 kcal

mol⁻¹ iken siklopentenonda ise 160 kcal mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Bu artışın açıklaması çift bağ ve karbonil grubunun konjugasyonundan kaynaklanan kararlılık artışına bağlanmaktadır.

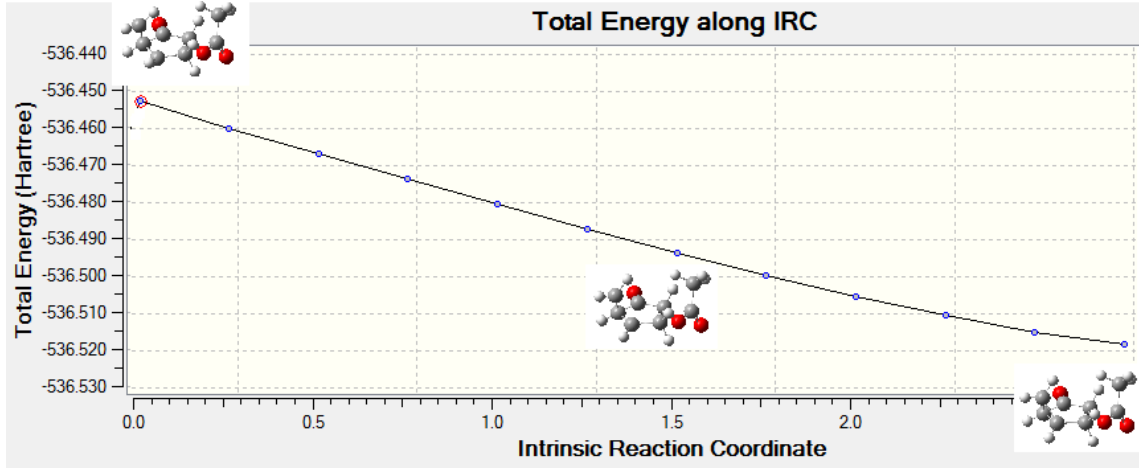
Şekil 10'da ise metoksi siklopentenon türevi ile CH₂ karben tepkimesi enerji profili

verilmiştir. Metoksi siklopentenon bir adet stereomerkez içeren kiral bir yapıdır. Dolayısıyla karben ile tepkimesinde iki yönden yaklaşım mümkün olmaktadır. Bu da iki farklı ürün elde edilmesi demektir. Her iki tepkime yolu için enerji profili çıkarılmış tek grafik üzerinde yerleştirilmiştir. Görüldüğü üzere karben yaklaşımı metoksi grubu ile aynı yönde

olduğunda tepkime aktivasyon enerjisi daha düşük olmaktadır. Bunun sebebi yaklaşan karben ile metoksi oksijeninin elektronik etkileşmesi olduğu düşünülmektedir. Elektronca fakir karben ortaklaşmamış elektronları bulunan metoksi oksijeni ile üst yaklaşımda etkileşebilme ile kararlılık kazanmaktadır.



Şekil 10. Siklopentenon metoksit ve CH₂ karben tepkimesi enerji profili



Şekil 11. Siklopentenon metoksit ve CH₂ karben tepkimesi IRC hesap grafiği

Şekil 11'de örnek bir IRC hesabı grafiği verilmiştir. IRC hesabı geçiş hali noktasından ürünlere e başlangıç maddelerine doğru basamak basamak ilerleyerek yapılan total enerji hesabıdır. Hesaplama her iki yöne doğru yapıldığında bir enerji grafiği oluşur. Bu enerji grafiğinde tepe nokta geçiş hali ise geçiş hali doğru hesaplanmış demektir denir. Grafikte ürünlere giderken ki enerji profili verilmiştir. Tepkime adım adım incelenmiş ve ürünlere giderken enerji düşüşü ve siklopropan halkasının oluşumu net bir şekilde gözlemlenmiştir. Bu durumda tespit edilen

geçiş hali üç farklı kriterle desteklenmiş ve doğruluğu kanıtlanmıştır.

Olefinlerin karbenler ile tepkimeleri sonucu siklopropan türevleri sentezlenebilir. Bu çalışmada belirli karbenler ile halkalı olefinlerin tepkimeleri sonucunda bisiklik siklopropan türevlerinin sentezi teorik olarak incelenmiştir. Beş, altı ve yedi karbonlu halkalı olefinler ile CH₂, CCl₂, CBr₂, tetrametildiamin ve 1,3-dimetilimidazolidin karbenler tepkimeye sokulmuş ve olası ürünlerin tepkime mekanizmaları incelenmiştir.

Tablo 1. Tüm tepkimelerin aktivasyon enerjileri tablosu (kcal mol⁻¹)

	CH ₂		CCl ₂		CBr ₂		Tetrametil diamin		1,3-dimetil imidazolidine	
	Alt	Üst	Alt	Üst	Alt	Üst	Alt	Üst	Alt	Üst
5	141		127		132		100		98	
5 karbonil	160		132		137		107		98	
5 karbonil metil	120	105	103	101	109	102	90	85	83	65
5 karbonil hidoksi	122	114	107	101	111	95	93	91	85	72
5 karbonil metoksi	129	121	124	108	117	103	102	96	96	91
6	134		120		117		87		85	
6 karbonil	147		121		105		103		95	
6 karbonil metil	110	98	101	85	99	112	85	83	77	63
6 karbonil hidoksi	112	96	104	81	91	93	90	77	75	57
6 karbonil metoksi	119	109	114	93	97	100	96	86	85	51
7	121		108		82		93		95	
7 karbonil	127		115		87		101		99	
7 karbonil metil	96	75	83	63	79	72	60	55	43	41
7 karbonil hidoksi	92	71	87	67	81	65	53	52	47	42
7 karbonil metoksi	89	75	84	58	86	53	52	46	52	38

4. SONUÇ

Tüm tepkime mekanizmalarının ekzotermik olduğu hesaplanmıştır yani ürünlerin kararlılığı başlangıç maddelerine göre daha fazladır. Halka büyüdükçe tepkime aktivasyon enerjisinin düştüğü gözlemlenmiştir. Ayrıca, başlangıç karbeninin kararlılığı arttıkça da aktivasyon enerjisi düşmüştür. Tablo 1'de araştırma kapsamında yapılan tüm hesaplamalar için tepkime aktivasyon enerjileri verilmiştir. Halka büyüdükçe karben yaklaşmasının kolaylaştığı ve tepkime aktivasyon enerjisinin düştüğü gözlemlenmiştir.

Tepkime mekanizmaları incelenirken geçiş halleri tayin edilmiştir. Geçiş hallerinin belirlenmesinde titreşimsel frekans hesaplamaları, titreşimsel frekans simülasyonu ve IRC hesaplamaları yöntemleriyle teyit yapılmıştır. Birden fazla ürünün sentezlenmesinin mümkün olduğu durumlarda, her iki yol da incelenmiş ve olası ürün tahmin edilmiştir.

TEŞEKKÜR

Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü'ne maddi destek için teşekkür ederiz (Proje Kodu: 2014-FEN-B203).

KAYNAKLAR

- Apeloig Y., Karni M., Stang P.J., Fox D.P. (1983). Transition-state geometries and stereoselectivity of alkylidenecarbene addition to olefins. An experimental and theoretical investigation. *Journal of the American Chemical Society*, 105(14), 4781-4792.
- Becke A.D. (1996). Density-functional thermochemistry. IV. A new dynamical correlation functional and implications for exact-exchange mixing. *The Journal of chemical physics*, 104(3), 1040-1046.
- Doering W., Hoffmann A.K. (1954). The addition of dichlorocarbene to olefins. *Journal of the American Chemical Society*, 76(23), 6162-6165.
- Kohn W., Sham L.J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133.
- Luke B.T., Pople J.A., Krogh-Jespersen M.B., Apeloig Y., Karni M., Chandrasekhar J., Schleyer P.V.R. (1986). A theoretical survey of unsaturated or multiply bonded and divalent silicon compounds. Comparison with carbon analogs. *Journal of the American Chemical Society*, 108(2), 270-284.
- Singh, M.S. (2012). *Reactive Intermediates in Organic Chemistry: Structure, Mechanism, and Reactions*, Wiley,
- Solomons T.W., Fryhle C.B. (2000). *Organic Chemistry*, Wiley.



Hizmet Sürecindeki Öğretmenler İçin Yeni Bir Model Önerisi: Akademisyen- Öğretmen İşbirliğine Dayalı Bir Akademik Danışmanlık Modeli

Nesli KALA

Kafkas Üniversitesi Eğitim Fakültesi Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Kars

(İlk Gönderim / Received: 06.07.2017, Kabul / Accepted: 20.07.2017, Online Yayın / Published Online: 23.10.2017)

Anahtar Kelimeler

Akademisyen,
Akademik Danışmanlık
Modeli,
Akademisyen-Öğretmen
İşbirliği,
Öğretmen

Özet: Bu çalışmada, hizmet sürecindeki öğretmen eğitimiyle ilgili uygulamada görülen problemler ve mevcut literatürden de yararlanarak yeni bir model önerilmiştir. Bu model akademisyen ve öğretmenin işbirliğine dayanmaktadır. “Okul, fakülte ve toplum” önerilen modelin üç temel değişkenidir. Bahsedilen okul temel değişkeninin “öğretmenlerin mesleki doyumu, öğrenci başarısı ve örgütsel bağlam” olmak üzere üç alt değişkeni bulunmaktadır. Fakülte temel değişkeninin “hizmet öncesi öğretmen eğitimi ve akademik çalışmalar” olmak üzere iki alt değişkeni bulunurken toplum temel değişkeninin “toplumsal yaşam ve gelecek nesiller” olmak üzere iki alt değişkeni bulunmaktadır. Akademisyen-öğretmen işbirliğine dayalı akademik danışmanlık modelinin akademisyenlerle öğretmenler arasındaki işbirliğini artırmasının yanında milli eğitim müdürlükleri ve üniversiteler arasındaki iletişimi de artırması beklenmektedir.

A New Model Suggestion for in-Service Teachers: An Academic Counseling Model Based on Academician-Teacher Cooperation

Keywords:

Academician,
Academic Counseling Model,
Academician-Teacher
Cooperation,
Teacher

Abstract: In this study, a new model is proposed by taking advantage of the problems in practice related to teacher education in service and the existing literature. This model is based on the cooperation of academicians and teachers. "school, faculty and society" are the three basic variables of the proposed model. There are three sub-variables of the basic school variable mentioned as "teachers' professional satisfaction, student achievement and organizational context". While the main variable of the faculty has two sub-variables as "pre-service teacher education and academic studies", the basic variable of the society has two sub-variables as "social life and future generations". It is

expected that the academic consultancy model based on academician-teacher cooperation will increase the communication between directorates of national education and the universities as well as the cooperation between the academicians and the teachers.

1. GİRİŞ

Eğitimin temel amacı; araştıran, sorgulayan ve problem çözebilen bireyler yetiştirmektir. Bununla birlikte yapılan PISA (Programme for International Student Assessment), PIRLS Progress in International Reading Literacy Study) ve TIMSS (Trends in International Mathematics and Science Study) gibi uluslararası sınavlarda son sıralarda yer almamız eğitimde istenen yerde olmadığımızın bir göstergesidir. Öğrenci başarısı ve kaliteli bir eğitimin yolları araştırıldığında ise her yol bizi öğretmen eğitimine çıkarmaktadır.

Öğretmen eğitimi, hizmet öncesi ve hizmet süreci dönem olmak üzere iki başlık altında incelenebilir. Hizmet öncesi öğretmen eğitiminde öğretmen adaylarına, mesleki yeterliklerin kazandırılması için birçok ders verilmektedir. Bu yeterliliklerin kazandırılmasında en az teorik dersler kadar uygulama dersleri de büyük bir öneme sahiptir. Uygulama dersleri, teorik olarak kazandırılan bilgilerin uygulanmasını gözlemleme ve birinci elden uygulama yapma şansı vermesi açısından çok büyük önem arz etmektedir. Öğretmen adaylarının okullarda uygulamaya başlamaları ise son sınıfta aldıkları “Okul Deneyimi” ve

“Öğretmenlik Uygulaması” derslerinde olmaktadır. Bununla birlikte maksimum iki dönemlik uygulama derslerinin, öğretmen adaylarının bilgilerinin gerçek öğrenme ortamında uygulanması ve gerekli pratiğin kazanılması açısından yetersiz olduğu düşünülmektedir (Kavas ve Bugay, 2009; Harmandar ve ark., 2000). Hizmet öncesi öğretmen eğitimindeki okulda uygulama derslerinin saatinin yetersizliğinden dolayı öğretmenler, hizmet sürecinde de ilave, tamamlayıcı bir desteğe ihtiyaç duydukları düşünülmektedir.

Hizmet sürecindeki öğretmen eğitimiyle ilgili literatür incelendiğinde koçluk (Bersin, 2007; Hawkins, 2008), mentorluk (Karabacak, 2010; Yıldırım ve Yılmaz, 2013) ve danışmanlık kavramları ile karşılaşılmaktadır. Literatürdeki bu kavramlardan ziyade hizmet sürecindeki öğretmen eğitiminde ülkemizde hizmet içi eğitim (HİE) seminerlerinin yaygın olduğu bilinmektedir.

Yapılan HİE seminerleriyle ilgili çalışmalar incelendiğinde bu seminerlerin; zaman (Büyüköztürk ve ark., 2010; Ergin ve ark., 2012), fiziki olanaklar, mekân (Ergin ve ark., 2012), hedef kitle (Gönen ve Kocakaya, 2006; Kanlı ve Yağbasan, 2002) ve öğretmen

ihtiyaları (Gökdere ve epni, 2004; Kıldan ve Temel, 2008), verilen eđitimin uygulamaya dönük olmaması (Cengiz, 2013) ve bu seminerlerin ok azının takip alıřmalarının yapılması (epni ve řenel oruhlu, 2010) gibi nedenlerle amacına yeterince hizmet edemediđini göstermektedir. Bu seminerlerin istenen başarıya ulařamamasındaki önemli unsurlardan biri de seminerlerin alanlarında yetkin kiřiler tarafından (müfettiřler ve öđretmenler) verilmemesidir (Okabol ve ark., 2003; Kazu ve Kerimgil, 2008). řahin (2013) sınıf öđretmenlerinin HİE ihtiyalarını belirlemeye yönelik yaptıđı arařtirmasında, arařtırmaya katılan öđretmenlerin tamamına yakınının HİE seminerleri eđitim fakültelerindeki akademisyenlerin vermesini istediklerini belirtmiřlerdir. Gökdere ve epni (2004) de yaptıkları arařtırmada, HİE seminerlerinin etkinliđini artırmak için alanlarında uzman akademisyenler tarafından verilmesi gerektiđini ortaya koymuřlardır. Milli Eđitim Bakanlığı (MEB), hizmet sürecindeki öđretmelerin mesleki becerilerini geliřtirmek amacıyla HİE seminerlerinin yanında Okul Temelli Mesleki Geliřim (OTMG) alıřmasını bařlatmıřtır. OTMG, Avrupa Birliđi Komisyonu ile bařlatılan bir proje geređince, 2002 yılında pilot okullarda uygulanmaya bařlanmıřtır (Bümen ve ark., 2012).

OTMG, öđretmenlerin iř birliđi yaparak alıřmalarını ve mesleki bilgi paylařım kültürünün oluřmasını, okul standartlarının yükselmesini ve geliřimine katkı sađlayan bir modeldir (MEB, 2008). MEB (2010) Okul Temelli Mesleki Geliřim Modelini, “*öđretmen ve okul yöneticilerine mesleki bilgi, beceri, deđer ve tutumlarını geliřtirmede, etkili öđrenme ve öđretme ortamları oluřturmada destek sađlayan süreçleri ieren bir uygulama*” olarak tanımlamaktadır. Kaya ve Kartallıođlu (2010), okul koordinatörleriyle yaptıđı alıřmada OTMG Modelinin güçlü yönlerinin; modelin yapısı ve modelin bireysel ve mesleki geliřime katkı sađlaması olduđunu belirlemiřtir. MEB’in pilot uygulama raporunda ise, modelin öđretmenlerin bireysel ve mesleki geliřimleri üzerinde olumlu etkisinin olduđu, fakat bu geliřimin okul geliřimine ve okul kültürüne yönlendirilemediđi vurgulanmıřtır (MEB, 2008). Bunun yanında ilgili literatürde, modelin uygulamasıyla ilgili yeterli eđitimin verilmemesi (MEB, 2008), alıřma ve iř yükünün (evrak iřleri) artması (MEB, 2008; Kaya ve Kartallıođlu, 2010), detaylardan kaçınılması (Kaya ve Kartallıođlu, 2010), kıdemli öđretmenlerin deđiřim ve geliřime diren göstermesi (MEB, 2008; Kaya ve Kartallıođlu, 2010) ve yöneticilerin OTMG ile ilgili mesleki yeterliklerle donanımlı olmaması ve OTMG alıřmaları nedeniyle derslere ve

diğer çalışmalara fazla zaman ayrılamaması (MEB, 2008) gibi sorunlar olduğu görülmektedir. Bu noktadan hareketle ülkemizdeki hem HİE seminerlerinin hem de OTMG Modelinin uygulanması sürecindeki karşılaşılan sorunlar göz önüne alındığında öğretmenlerin bağımsız olarak mesleki gelişimlerini yönlendirmekte zorlandıkları ve öğretmenlerin mesleki gelişimlerini kendi öğrenme-öğretme ortamlarında (okullarda), bir modelle yapılmasının daha başarılı sonuçlar elde edileceği düşünülmektedir.

Literatür incelendiğinde öğretmenlerin/öğretmen adaylarının mesleki gelişimlerine yönelik sınırlı sayıda model olduğu görülmektedir. Jang ve Chen (2010)'in "TPACK- COPR (TPACK-Comprehension, Observation, Practice and Reflection)" adlı modeli akran koçluğu yaklaşımına dayanmaktadır. Hur ve ark. (2010), tarafından geliştirilen Du-TE modelinde ise "Bilişsel çıraklık" yaklaşımı benimsenmiştir.

Guskey ve Sparks (2002), öğretmenlerin mesleki gelişimiyle öğrenci başarısı arasındaki çok boyutlu ilişkiyi tanımlayan bir model geliştirmişlerdir. Bu modelin, "içerik özellikleri, süreç değişkenleri ve bağlam özellikleri" olmak üzere üç temel bileşeni vardır. İçerik özellikleri, mesleki gelişimin ne olduğu ile alakalıdır. Süreç değişkenleri, mesleki gelişimin nasıl olacağını tanımlar. Bu değişken sadece mesleki gelişim

aktivitelerinin tür ve şekliyle değil planlanan, organize edilen, uygulanan ve takip çalışması yapılan bu aktivitelerin yoluyla da alakalıdır. Modelin son değişkeni olan bağlam özellikleri ise mesleki gelişimin "kim", "ne zaman", "nerede" ve "niçin" yapılması gerektiğini belirtir. Literatürdeki başka bir model ise Angeli ve Valenides (2009) tarafından geliştirilen Teknoloji Haritalama (TH) modelidir. TH modelinde, hem öğretmen eğitimi programlarında hem de mesleki gelişim amaçlı eğitimlerde öğretmen/öğretmen adaylarına teknoloji ile nasıl öğretim yapabilecekleri sunulmaktadır. Bu modelde öğretimin; öğretmenlerin öğrencilerinin nasıl öğrendiklerine dair epistemolojik inançları, öğrenme ortamlarında neyin yürüyüp yürümeyeceği hakkındaki deneyimleri, okul yöneticileri, okulun fiziki imkanları gibi birçok değişkenden etkilendiği vurgulanmaktadır. Ülkemizde ise hizmet sürecindeki öğretmen eğitimi ile ilgili sınırlı sayıda modele ulaşılmıştır. Kaya ve ark. (2004) tarafından fizik öğretmenleri için geliştirilen bir HİE modeli bunlardan biridir. Bu model; geliştirme, organizasyon, yürütme ve değerlendirme olmak üzere dört aşamadan oluşmaktadır. Önerilen modelde (geliştirme aşamasında), eğitim fakültesinde fizik eğitimi anabilim dalı öğretim elemanlarından oluşan ve hizmet içi eğitim faaliyetlerinden sorumlu olan bir "Fakülte HİE Birimi"nin kurulması önerilmektedir. Bu HİE

Biriminin, bölgelerine bağlı il ve ilçelerdeki MEM'lerle işbirliği yaparak fizik öğretmenlerinin HİE ihtiyaçlarına yönelik program geliştirme işini yürütmesi beklenmektedir. Hizmet sürecindeki öğretmen eğitimine yönelik bir diğer HİE modeli de Şahin (2013) tarafından önerilmiştir. Şahin'in model önerisi sınıf öğretmenleri baz alınarak geliştirilmiştir. Önerilen bu model; planlama, uygulama ve değerlendirme olmak üzere üç aşamadan oluşmaktadır. Planlama aşamasında, eğitim fakültesinde program geliştirme, ölçme ve değerlendirme uzmanlarından ve alan eğitimcilerinden oluşan bir ekip oluşturulması önerilmektedir. Bu ekibin, planlama aşamasında öğretmenlerle yapacağı görüşme ve anketlere dayanarak sınıf öğretmenlerinin hangi alanda HİE'e ihtiyaç duyduklarını belirlemesi ve bu doğrultuda bir HİE programı oluşturması beklenmektedir. Modelde Milli Eğitim Müdürlükleri (MEM)'in görevi ise; fakülteadaki öğretim elemanlarının istediği imkanları (ortam vs) sağlamaktır. Modelin değerlendirme aşamasında ise sınıf öğretmenlerinin performanslarına yönelik değerlendirmeler yapılarak HİE'in değerlendirilmesi önerilmiştir.

Yapılan çalışmalardan da görüldüğü gibi ülkemizde hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki gelişimleri çoğunlukla HİE seminerleriyle desteklenmektedir. Bundan dolayı, Kaya ve ark. (2004) ve Şahin (2013)

tarafından geliştirilen model önerilerinde olduğu gibi ülkemizde HİE modeli önerileri ortaya konulmuştur. Bu iki model önerisinin ortak yanı ise, HİE seminerlerinin akademisyenler tarafından verilmesidir. Hizmet sürecindeki öğretmenleri yetiştiren, MEB'nın okullarında uygulanan öğretim programlarını geliştiren kişilerin eğitim fakültelerindeki akademisyenler olduğunu düşünülürse hizmet sürecinde de öğretmenleri mesleki açıdan en iyi destekleyebilecek kişilerin akademisyenler olduğu ortaya çıkacaktır. Bununla birlikte HİE seminerleriyle ilgili yaşanan problemler göz önüne alındığında ülkemiz gerçeklerine uygun, HİE'e alternatif yeni bir modele ihtiyaç duyulduğu açıktır. İlgili literatürden de görüldüğü gibi hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki gelişimle ilgili sorunlarını çözebilecek bir modele rastlanılmamıştır. Dolayısıyla öğretmen-akademisyen işbirliğine dayalı bir akademik danışmanlık modelinin literatürdeki bu boşluğu doldurmaya katkı sağlayacağı düşünülmektedir.

Bu araştırmanın amacı; akademisyen-öğretmen işbirliğine dayalı, akademisyenlerin hizmet sürecindeki öğretmenlere rehberli öğrenme desteği sunabileceği bir akademik danışmanlık modeli (ADM) önerisi geliştirmek ve bu modelin temel değişkenlerini ortaya koymaktır.

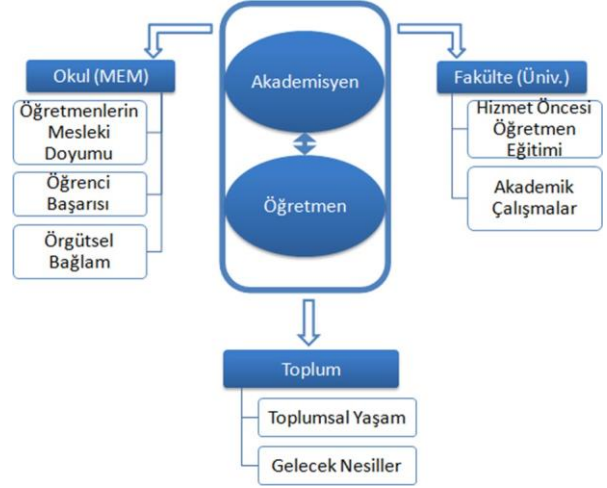
2. YÖNTEM

Mevcut araştırma, temel araştırmalar türünde ele alınmaktadır. Bu araştırma türünde daha ziyade “bilgi bilgi içindir” anlayışı benimsenir (Karasar, 2009). Bu tür araştırmaların temel amacı, gelecekte yapılacak araştırmalarda kullanılacak güvenilir sağlam bir altyapı için temel bilgi ve kuramlar oluşturmaktır (Johnson ve Christensen, 2012). İlgili araştırmada da hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki becerilerini geliştirebilecek bir modelin önerilmesi amaçlanmıştır. Dolayısıyla bu araştırma, hizmet sürecindeki öğretmen eğitimi ile ilgili yapılabilecek uygulamalara altyapı oluşturabilecek niteliktedir. Model önerisinin geliştirilmesinde literatür taramasından yararlanılmıştır.

2.1. Önerilen Akademisyen-Öğretmen İşbirliğine Dayalı Akademik Danışmanlık Modeli

Ülkemiz koşulları göz önüne alındığında, mevcut modellerin hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki yeterliklerini kazanmalarında yeterli olmadığı görülmektedir (Cengiz, 2013; Ergin ve ark., 2012; Kaya ve Kartallıoğlu, 2010; MEB, 2008). Uygulamadaki mevcut uygulamaların aksayan yönleri ve ülkemiz gerçekleri de göz önüne alınarak geliştirilen akademisyen-öğretmen

işbirliğine dayalı önerilen ADM'nin üç temel değişkeni aşağıdaki Şekil 1'de şematize edilmiştir.



Şekil 1. Önerilen Akademisyen- Öğretmen İşbirliğine Dayalı Akademik Danışmanlık Modelinin Temel Değişkenleri

Şekilden görüldüğü gibi akademisyenlerin öğretmenlerle yapacağı işbirliği, modelin merkezindedir. Burada akademisyenler daha önceki model önerilerinde (Kaya ve ark., 2004; Şahin, 2013) olduğu gibi sadece süreci etkileyen değil, öğretmenlerle yapacağı uzun soluklu (yaklaşık bir yıl) işbirliği sayesinde süreçten de etkilenen bireylerdir. Dolayısıyla önerilen ADM, karşılıklı yarar ilkesine dayanmaktadır. Önerilen modelin uygulanmasıyla birlikte öğretmenlerin ve akademisyenlerin nasıl etkileneceği aşağıda ayrıntılı bir şekilde açıklanmıştır.

2.2. Önerilen ADM'nin Değişkenleri

Önerilen ADM'nin, “okul, fakülte ve toplum” olmak üzere üç temel değişkeni bulunmaktadır. Bahsedilen temel değişkenler modelin ülkemiz koşullarında uygulanması durumunda hangi unsurların nasıl etkilenebileceği öngörüsüne dayanmaktadır. Okul temel değişkeninin “öğretmenlerin mesleki doyumu, öğrenci başarısı ve örgütsel bağlam” olmak üzere üç alt değişkeni bulunmaktadır. Bunun yanında, fakülte temel değişkeninin “hizmet öncesi öğretmen eğitimi ve akademik çalışmalar” olmak üzere iki alt değişkeni bulunurken toplum temel değişkeninin “toplumsal yaşam ve gelecek nesiller” olmak üzere iki alt değişkeni bulunmaktadır. Bahsedilen değişkenler ve temel dayanakları aşağıda sunulmuştur.

2.2.1. Önerilen ADM'nin Okul (MEM) Değişkeni

Okul (MEM) değişkeni, akademisyen-öğretmen işbirliğine dayalı ADM'nin uygulanacağı okulda nasıl bir değişimin yaşanabileceği öngörüsüne dayanarak ortaya konulmuştur. Okulun temel yapıtaşlarında meydana gelen değişimin diğer yapıtaşlarına da etki edeceği muhakkaktır. Dolayısıyla burada en temel yapıtaşlarından olan öğretmenlerde meydana gelen değişimin diğer unsurları da etkilemesi beklenen bir durumdur. Bahsedilen işbirliğinin öğretmenin mesleki gelişimine

olumlu veya olumsuz yansımalarının “öğretmenlerin mesleki doyumu, öğrenci başarısı ve örgütsel bağlam” olmak üzere üç alt değişkeni etkileyeceği düşünülmektedir.

Öğretmenlerin Mesleki Doyumu: Akademisyen-öğretmen işbirliğine dayalı önerilen ADM'nin temel amacı, hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki yeterliklerini geliştirmektir. Bu amaç, “öğrenme ihtiyaçtan doğar” düsturuyula öğretmenlerin ihtiyaçları doğrultusunda, içsel motivasyonu artırıcı etkinliklerle gerçekleştirilebileceği düşünülmektedir. Hedeflenen işbirliğiyle öğretmenlerin mesleki yeterliklerindeki gelişimin, mesleki doyumu da artıracığı beklenen bir sonuçtur.

Öğrenci Başarısı: Guskey (2002), öğrencilerin öğrenme çıktılarındaki değişimin mesleki gelişim programlarının ana hedeflerinden biri olduğunu belirtmiştir. Bu noktadan hareketle, önerilen modelin öğretmenlerin mesleki gelişimlerine katkı yaptığının en önemli göstergesi öğrenci başarısındaki artıştır.

Örgütsel Bağlam: Öğretmenlerin mesleki gelişimi örgütsel bağlam yani okul bağlamından ayrı düşünülemez. Zira Guskey (1994)'e göre değişim, hem bireysel hem de örgütsel bir süreçtir. Bazen bireysel girişim ve motivasyon oldukça yüksek olabilir fakat

örgütsel yapılar önemli iyileşme ve gelişmelerin önünde durabilir. Aksi durumda da yenilikçi ve destekleyici örgütsel yapıların olmasına rağmen işbirliği ve uygulamalar için kişisel girişimler olmadığından sınıf uygulamasında anlamlı değişiklik ortaya çıkmayabilir. Dolayısıyla bireysel ve örgütsel süreçler birbirinin itici gücüdür. Yönetim, diğer öğretmenler ve veliler örgütsel bağlamın temel unsurlarıdır.

Yönetim: Guskey (1994), etkili mesleki gelişim için bireylerin izole olmadan birbirlerini desteklemeleri için takım çalışması yapmaları gerektiğinden bahseder. Burada takım çalışmasının yapılmasındaki temel itici ve birleştirici gücünün yönetim olduğu düşünülmektedir.

Diğer öğretmenler: Guskey (1994) takım çalışmasının kurum içindeki yönetici ve öğretmenlerin yapması gerektiğinden bahsetmektedir. Önerilen akademisyen-öğretmen işbirliğine dayalı ADM'nin, uygulama yapılan öğretilerin mesleki gelişiminde meydana gelen değişimin yanında kurumun diğer öğretmenleri arasında da olumlu bir etki oluşturacağı söylenebilir. Burada akademisyenin, işbirliğini sadece kendisi ve öğretmen arasında değil, danışmanlık yaptığı öğretmenle diğer öğretmenler (özellikle zümre öğretmenler) arasında da yapılması

sağlayabilirse bahsedilen bu etkinin daha büyük olacağı söylenebilir. Burada diğer öğretmenler önerilen modelin uygulanması durumunda sadece süreçten etkilenen değil aynı zamanda süreci etkileyen bir faktör de olabilir.

Veliler: Veliler, çocukları nedeniyle örgütsel bağlamın temel unsurlarındandır. Okuldaki temel sorunların çözümünde de veliler, okul-aile birliği vasıtasıyla okula destek sağlar. Burada akademisyen- öğretmen işbirliğine dayalı ADM'nin uygulanmasıyla öğretmenlerin mesleki yeterliklerinde meydana gelecek değişimden çocuklarının olumlu etkilendiğini gören velilerin modelin destekçisi olmaları beklenmektedir. Bundan dolayı veliler, süreçten etkilenen aynı zamanda sürece vereceği destekle de süreci etkileyen değişken olacaktır.

2.2.2. Önerilen ADM'nin Fakülte (Üniversite) Değişkeni

Bu değişkenin belirlenmesinde, akademisyen- öğretmen işbirliğine dayalı akademik danışmanlık modelinin uygulanması durumunda akademisyenlerin çalıştığı kurum olan eğitim fakültelerinde de bazı değişikliklerin olabileceği varsayımı yatmaktadır. Hizmet öncesi öğretmen eğitimi ve akademik çalışmalar fakülte (üniversite)

değişkeninin alt değişkenleri olduğu düşünülmektedir.

Hizmet Öncesi Öğretmen Eğitimi: Önerilen model, iki açıdan hizmet sürecindeki öğretmen eğitimini etkilemesi beklenmektedir. Bunlardan biri akademisyenlerin, danışmanlık yaptığı öğretmenlerde gördüğü sorunların çözümüne yönelik kendi fakültesindeki ders içeriklerini yapılandırma şansı yakalayabilir. Hatta, buradaki deneyimlerine dayanarak, fakültede bağlı olduğu anabilim dalında yapacağı görüşmelerle öğretmen adaylarının gelecekte ihtiyaç duyacakları bilgiyi kazanmaları için seçmeli derslerde değişiklik veya yeni ders önerisinde de bulunabilirler. Modelin hizmet öncesi öğretmen eğitimini etkileyeceği unsurlardan diğeri ise hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki becerilerinde meydana gelebilecek gelişimdir. Öğretmen adayları lisans eğitimleri sürecinde “Okul Deneyimi ve Öğretmenlik Uygulaması” dersleri için okullara uygulama yapmaya gittikleri için okullarda onlara rehberlik edecek donanımlı öğretmenlerle karşılaşmaları hizmet öncesi öğretmen eğitimi için çok önemlidir.

Akademik Çalışmalar: Akademisyenlerin okullarla sürekli iletişim halinde olmaları eğitim içindeki sorunların yerinde tespit edilip yerinde çözümü için büyük bir önem teşkil etmektedir. Süreçte karşılaşılabilecek problem

ve çözümü için yapılacak uygulamaların akademik çalışmalara da yön vermesi olağandır. Burada bahsedilen çalışmaları akademisyenler yapabileceği gibi öğretmenler de aksiyon araştırmalarına yönlendirilebilir. Dolayısıyla bu durumun, eğitim alanındaki akademik çalışmalara da önemli yansımalarının olması beklenmektedir.

2.2.3. Önerilen ADM'nin Toplum Değişkeni

Önerilen modelin uygulanabilmesi için akademisyen ve öğretmenlerin görevli buldukları kurumlardan izin alınması gerektiği için akademisyenlerle öğretmenler arasındaki işbirliğinin kurumlar arasındaki işbirliğini de kuvvetlendireceği düşünülmektedir. Yani önerilen modelin uygulanabilmesi için uygulamanın yapılacağı okul ve bu okulun il milli eğitim müdürlüğü ve akademisyenlerin görev yaptığı fakülte dolayısıyla da üniversite arasında da işbirliği olmalıdır. Kurumlar arasında yapılacak bu işbirliğinin topluma yansımalarının olmaması da kaçınılmazdır. Bu modelin uygulanmasının toplumu “toplumsal yaşam ve gelecek nesiller” olmak üzere iki açıdan etkilemesi beklenmektedir.

Sosyal Yaşam: Akademisyen-öğretmen işbirliğine dayalı akademik danışmanlık modelinin okullarda uygulanması durumunda

üniversitelerin halkla daha iç içe olacağı düşünülmektedir. Akademisyenlerin okullara gitmesiyle öğretmenlere ve velilerle olan diyalogun artacağı ve üniversitenin yaptığı çalışmalardan ve üniversitedeki aktivitelerden (konferans, sosyal hizmetler vs.) haberdar olacağı için üniversitelerin toplum gözündeki etkinliğinin de artacağı düşünülmektedir.

Gelecek Nesiller: Önerilen modelin uygulanmasıyla öğretmenlerin mesleki gelişimlerinin artmasıyla daha donanımlı bir gelecek nesil yetişeceği düşünülmektedir. Bunun yanında modelin hizmet öncesi öğretmen eğitimine de etki edeceği düşünülürse ve bu adayların daha donanımlı öğretmenlerin yanlarında uygulama yaparlarsa Türkiye’deki öğretmen kalitesinde de önemli bir artış olması beklenmektedir.

3. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu araştırmada “okul, fakülte ve toplum” olmak üzere üç temel değişkeni bulunan bir ADM önerilmiştir. “Öğretmenlerin mesleki doyumu, öğrenci başarısı ve örgütsel bağlam” okul temel değişkeninin alt değişkenleridir. Guskey (2002), mesleki gelişim programlarının üç ana hedefini; Öğretmenlerin sınıf uygulamalarında değişim, tutum ve inançlarında değişim ve öğrencilerin öğrenme çıktılarındaki değişiklik olarak belirtmiştir. Bu

değişkenlerin Guskey’in mesleki gelişim hedefleriyle uyuşmakta olduğu görülmektedir. Okul temel değişkeninin alt değişkeni olan öğrenci başarısı, öğretmenlerin mesleki yeterliğinin en gözle görünür göstergesi olarak görülür. Fakat Guskey ve Sparks (2002), mesleki gelişim program ve faaliyetlerinin doğrudan öğrenci başarısını etkilemediğini bu uygulamaların öğretmenlerin ve okul yöneticilerinin bilgi ve uygulamaları üzerindeki olumlu etki yapması sonucunda öğrenci başarısını artacağını belirtmiştir. Burada da önerilen ADM’nin, öğretmenlerin ve okul yöneticilerinin mesleki yeterliklerinin gelişimine katkı yaparak öğrenci başarısını artıracığı beklenmektedir.

Guskey (1994)’e göre değişim, hem bireysel hem de örgütsel bir süreçtir. Zira, bazı durumlarda öğretmenler mesleki gelişim için büyük motivasyona sahip olsalar dahi içinde bulunduğu örgütsel bağlamdan gerekli destek ve takdiri alamaması durumunda zamanla motivasyonlarında düşüş yaşanabilir. Dolayısıyla örgütsel bağlam, öğretmenlerin mesleki gelişimini etkileyen önemli bir değişkendir. Bununla birlikte, Mevlana’nın, ”Gülün dibindeki toprak da gül kokar” sözünde olduğu gibi, öğretmenlerdeki değişimin içinde bulunduğu örgütsel bağlamı da etkileyebileceği düşünülmektedir. Kısacası, önerilen modelin uygulandığı bir veya bir kaç öğretmende

mesleki gelişim, diğer öğretmenlerde de değişim için itici güç oluşturabilir.

Önerilen ADM'nin önemli bileşenlerinden biri de akademisyenlerdir. Akademisyenler bu modelde öğretmenlerin mesleki gelişimindeki itici güç iken öğretmenlerle yapacağı işbirliğinden dolayı hem süreçten etkilenmesi hem de kurumu olan eğitim fakültesini de etkilemesi kaçınılmazdır. Buradaki akademisyenlerin kazanacağı deneyimlerin, hem hizmet öncesi öğretmen eğitimine hem de akademik çalışmalara olumlu yansımalarının olması beklenmektedir.

Modelin bir diğer değişkeni ise toplumdur. 2547 Sayılı Yükseköğretim Kanunu (1981)'na göre üniversitelerin görevlerinden biri; ülkenin bilimsel, kültürel, sosyal ve ekonomik yönlerden ilerlemesi için araştırmalar yapmak ve sonuçları toplum yararına paylaşmaktır. Buradan görüldüğü gibi üniversitelerin içinde bulunduğu toplumla içiçe olması gerekmektedir. Mevcut durumda ise, özellikle eğitim fakülteleriyle okullar arasında ciddi bir iletişim kopukluğu yaşanmaktadır. Yani varlık sebeplerinden biri eğitimdeki sorunları çözmek olan eğitim fakülteleri, yaptıkları araştırmaları eğitim kurumlarına ulaştırmakta zorlanmaktadır. Önerilen ADM'deki işbirliğinin; öğretmenlerin, yöneticilerin, öğrencilerin ve velilerin üniversitelerde yapılan bilimsel çalışmalardan daha fazla haberdar olmasına yardım edeceği düşünülmektedir. Bu

durumun ise hem öğretmenlerin hem de süreçteki öğrencilerin kariyer gelişimine katkı yapması beklenmektedir.

Ülkemizdeki hizmet sürecindeki öğretmen eğitiminde yaşanan sorunlardan biri de uygulamaların yapıldığı yerdir. HİE seminerleri genellikle belirli merkezlerde düzenlenmekte ve buraya da sınırlı sayıda öğretmen katılmaktadır. Ergin ve ark., (2012), “öğretmenlerin hizmet içi eğitimin yapıldığı yere ulaşım sorunlarının bulunduğunu, bu nedenle eğitimlerin kendi okullarında yapılmasının daha uygun olacağını” belirterek benzer bir sorunu vurgulamıştır. Önerilen ADM'inde uygulama, öğretmenlerin kendi okulunda, kendi sınıfında yapılacağı için öğretmenler mesleki gelişimlerine daha fazla motive olabilirler.

Ergin ve ark., (2012) yaptıkları çalışmada HİE seminerlerine katılan öğretmenlerin “eğitimi veren kişilerin alan uzmanı ya da yeterince bilgili olmaması nedeniyle seminerlerin amacına ulaşmadığı, verimli olmadığı, eğitimlerin üstün körü verildiği ve slâytların okunması şeklinde geçtiğini” şeklinde görüş bildirdiklerini belirtmişlerdir. Gökdere ve Çepni (2004) ise bu seminerlerde alanında uzman akademisyenlerin tercih edilmesinin seminerin etkililiğini artıracak olduğunu vurgulamışlardır. Buradan görüldüğü gibi ülkemizdeki mevcut uygulamalarda karşılaşılan bir diğer sorun, eğitimi veren kişilerin alanında

uzman olmamasıdır. OTMG Modelinde, öğretmenlerin ihtiyaç duydukları takdirde alan uzmanlarına ulaşabilecekleri hatta seminer vermek üzere okulların davet edebilecekleri belirtilmektedir (MEB, 2014). MEB'in pilot uygulama raporunda (2008) ise, örneklemeledeki öğretmenlerin 73%'ünün mesleki gelişimlerini planlarını uygularken akademisyenlerden görüş almadığını; 23%'ünün ise sadece 1 akademisyenden görüş aldığı görülmektedir. Rapordaki bu durum, öğretmenlerin akademisyenlerle doğrudan iletişim kurmakta zorlandıkları veya çekindikleri şeklinde yorumlanabilir. Önerilen ADM'nin akademisyenlerle öğretmenler arasında güçlü bir iletişime vesile olacağı ve bu problemin giderilmesine katkı yapacağı düşünülmektedir. Guskey (1994)'in öğretmenlerin mesleki gelişimleriyle ilgili olarak ileri sürdüğü ilkelerden biri "takip et, destekle ve baskı yap"tır. Guskey (1994), mesleki gelişimin bir süreç olarak görülmesi gerektiğini ve bu süreçte öğretmenlerin yönlendirme ve baskıyla birlikte, desteklenmeye ihtiyaç duyduklarını belirtmektedir. MEB (2008)'in OTMG Modelinin pilot uygulama raporunda "bir yıllık süreç içinde örneklemeledeki öğretmenlerin 27%'sinin mesleki gelişim planlarını uygularken hiç kitap okumadığı, 43%'ünün ise 1 tane kitap okuduğu" belirtilmektedir. Guskey'in bahsedilen ilkesiyle örtüşen bu sonuca göre, öğretmenler mesleki

gelişimlerini tek başına yönlendirememekte, ek bir desteğe ihtiyaç duymaktadırlar. Bu noktadan hareketle, hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki gelişimleri için akademisyenlerin ADM kapsamında, sürekli okulda ve öğrenme ortamlarında bulunmalarının yararlı olacağı düşünülmektedir.

Önerilen modelde; öğretmen, akademisyen ve işbirliği kavramları ön plana çıkmaktadır. Ulusal veya uluslararası literatürdeki hizmet sürecindeki öğretmen eğitiminde kullanılabilecek mevcut modeller incelendiğinde bu modellerin en belirgin ortak özelliğinin, sadece öğretmenlerin/öğretmen adaylarının gelişimine yönelik olduğu görülmektedir. Tek yönlü fayda ilkesine göre kurulan bir modelin ise sürdürülebilir olamayacağı düşünülmektedir. Öğretmen ve akademisyenlerin (alan eğitimcilerinin) karşılıklı fayda ilkesine dayalı olarak işbirliği içinde çalışabilecekleri bu modelin, öğretmenlerin mesleki becerilerinin gelişimine katkı yapacağı ve bunun da öğrenme-öğretme ortamındaki mevcut sorunların çözümünü kolaylaştıracağı düşünülmektedir.

4. ÖNERİLER

Bu araştırmada; hizmet sürecindeki öğretmenlerin mesleki yeterliklerini geliştirmek için akademisyenlerin öğretmenlerle işbirliği

içinde çalışabileceği bir ADM önerilmiş ve bu modelin muhtemel temel değişkenleri belirlenmiştir. Bununla birlikte mevcut araştırma kuramsal olduğu için önerilen modelin, öğretmenlerin mesleki becerilerinde ve bahsedilen değişkenlerde beklendiği gibi bir değişime neden olup olmayacağı ancak gerçek bir uygulama ile ortaya konulabilir. Bu doğrultuda, öncelikle önerilen modelin okullarda nasıl, aşamalarla uygulanacağını belirlenmesi ile ilgili araştırmaların yapılması gerekmektedir. Bir sonraki aşamada ise önerilen modelin okullarda uygulanması ve bu uygulamadan elde edilecek verilerin analiziyle, modelin uygulamaya yönelik varsa eksikliklerin giderilerek tekrar yapılandırılması önerilmektedir.

KAYNAKLAR

Angeli C., Valanides, N. (2009). Epistemological and Methodological Issues for the Conceptualization, Development, and Assessment of ICT–TPCK: Advances in Technological Pedagogical Content Knowledge (TPCK), *Computers & Education*, 52(1), 154-168.

Balcı M. (2012). Otel İşletmelerinde Mentorluk Uygulamaları Üzerine Bir Araştırma, Yüksek Lisans Tezi, Çanakkale Onsekiz

Mart Üniversitesi, Sosyal Bilimler Enstitüsü, Çanakkale.

Bersin J. (2007). Coaching: Instill Coaching as a Leadership Quality, *Leadership Excellence*, 24(7): 7.

Bümen N.T., Ateş A., Çakar E., Ural G. Acar V. (2012), Türkiye Bağlamında Öğretmenlerin Mesleki Gelişimi: Sorunlar ve Öneriler, *Milli Eğitim Dergisi*, 194: 31-49.

Büyüköztürk Ş., Akbaba-Altun S. Yıldırım, K. (2010). "Uluslararası Öğretme ve Öğrenme Araştırması-Teaching and Learning International Survey (TALIS)," Ankara. Erişim tarihi: 06.12.2016

Cengiz D., (2013). Eğitimde BİT'in Betimleyici ve Kuralcı Yönleri - Fatih Projesi Örneği. XVIII. Türkiye'de İnternet Konferansı, İstanbul Üniversitesi Kongre Kültür Merkezi , Fatih-İstanbul, 9-11 Aralık.

Çepni S., Şenel Çoruhlu T. (2010), Alternatif Ölçme ve Değerlendirme Tekniklerine Yönelik Hazırlanan Hizmet İçi Eğitim Kursundan Öğretime Yansımalar, *Pamukkale Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 28: 117-128.

Ergin İ., Akseki B., Deniz E. (2012), İlköğretim Okullarında Görev Yapan Sınıf Öğretmenlerinin Hizmet İçi Eğitim İhtiyaçları, *Elektronik Sosyal Bilimler Dergisi*, 11(42): 55-66.

- Gökdere M., Çepni S. (2004), Üstün Yetenekli Öğrencilerin Fen Öğretmenlerinin Hizmet İçi İhtiyaçlarının Değerlendirilmesine Yönelik Bir Çalışma; Bilim Sanat Merkezi Örneklemi, *Gazi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 24(2): 1-14.
- Gönen S., Kocakaya S., (2006). Fizik Öğretmenlerinin Hizmet İçi Eğitimler Üzerine Görüşlerinin Değerlendirilmesi, *Pamukkale Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 19(1), 37-44.
- Guskey T.R. (1994). Results-oriented Professional Development: In Search of an Optimal Mix of Effective Practices, *Journal of Staff Development*, 15: 42-50.
- Guskey T.R. Sparks D. (2002). Linking Professional Development to Improvements in Student Learning, The Annual Meeting of the American Educational Research Association, New Orleans, LA, April 1-5.
- Guskey T.R. (2002). Professional Development and Teacher Change, *Teachers and Teaching*, 8(3): 381-391.
- Harmandar M., Bayrakçeken S., Kıncal R.Y., Büyükkasap E. Kızılkaya S. (2000). Kazım Karabekir Eğitim Fakültesinde Okul Deneyimi Uygulaması ve Sonuçlarının Değerlendirilmesi, *Milli Eğitim Dergisi*, 148: 3-6.
- Hawkins P., (2008). The Coaching Profession: Some of the Key Challenges, *Coaching: An International Journal of Theory, Research and Practice*, 1(1), 28-38.
- Hur J.W., Cullen T., Brush T. (2010). Teaching for Application: A Model for Assisting Preservice Teachers with Technology Integration, *Journal of Technology and Teacher Education*, 18(1): 161-182.
- Jang S.J. Chen K.C. (2010). From PCK to TPACK: Developing A Transformative Model for Pre-Service Science Teachers, *Journal of Science Education Technology*, DOI 10.1007/s10956-010-9222-y.
- Johnson B. Christensen L. (2012). Educational Research: Quantitative Qualitative, and Mixed Approaches, 4th Edition, SAGE Publication.
- Kanlı U., Yağbasan R. (2002). 2000 Yılında Ankara'da Fizik Öğretmenleri İçin Düzenlenen Hizmet İçi Eğitim Faaliyetlerine Genel Bir Bakış, *Milli Eğitim Dergisi*, 153-154.
- Karasar N. (2009). Bilimsel Araştırma Yöntemi, 20. Baskı, Nobel Yayın Dağıtım, Ankara.
- Kavas A.B., Bugay A. (2009). Öğretmen Adaylarının Hizmet Öncesi Eğitimlerinde Gördükleri Eksiklikler ve Çözüm Önerileri, *Pamukkale Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 1(25):13-21.
- Kazu İ.Y., Kerimgil S. (2008). Yeni Atanan Öğretmenlerin Hizmet İçi Eğitime İlişkin Görüşleri (Elazığ İli Örneği), *Gazi*

Üniversitesi Endüstriyel Sanatlar Eğitim Fakültesi Dergisi, 23:14-30.

Kaya A., Çepni, S., Küçük M., (2004). Fizik Öğretmenleri İçin Üniversite Destekli Bir Hizmet İçi Eğitim Model Önerisi, *The Turkish Online Journal of Educational Technology – TOJET*, 3(1): 112-119.

Kaya S., Kartallıoğlu, S. (2010). Okul Temelli Mesleki Gelişim Modeline Yönelik Koordinatör Görüşleri, *Abant İzzet Baysal Üniversitesi Dergisi*, 10(2): 115-130.

Kıldan A.O., Temel Z.F. (2008). Yapılandırmacı Yaklaşım Dayalı Oluşturulan Hizmet İçi Eğitimin Öğretmenlerin Öğretmenlikle İlgili Bazı Görüşlerine Etkisi, *Kastamonu Eğitim Dergisi*, (16)8: 25-36.

MEB, (2008). Okul Temelli Mesleki Ve Bireysel Gelişim Programının Verimliliğinin Belirlenmesi (01 Eylül 2007 - 30 Haziran 2008 Dönemi Pilot Uygulama Raporu), http://otmg.meb.gov.tr/belgeler/otmg/2008_otmg_raporson.pdf. Erişim tarihi: 18.06.2017

MEB, (2010). Okul Yöneticileri ve Öğretmenler İçin Okul Temelli Mesleki Gelişim Kılavuzu <http://otmg.meb.gov.tr/Yeni%20k%C4%B1lavuz.pdf>. Erişim tarihi:17.06.2017

Şahin Ü. (2013). Sınıf Öğretmenlerinin Hizmet İçi Eğitim İhtiyaçlarının Belirlenmesi ve

Bir Model Önerisi, T.C. Adnan Menderes Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Eğitim Bilimleri Anabilim Dalı, Aydın

Yıldırım R., Yılmaz E. (2013). Okul Yöneticilerinin Mentorluk Rollerinin Okulun Akademik Başarısı Ve Bazı Değişkenler Açısından İncelenmesi, *Sosyal Ve Beşeri Bilimler Araştırmaları Dergisi*, 30: 98-119.

2547 Sayılı Yükseköğretim Kanunu, (1981). <http://www.yok.gov.tr/documents/10279/29816/2547+say%C4%B1%C4%B1%20Y%C3%BCksek%C3%B6%C4%9Fretim+Kanunu/>, Erişim tarihi: 17.06.2017.

