

İÇİNDEKİLER / TABLE OF CONTENTS

ARAŞTIRMA MAKALELERİ

Organik Bir Molekülün Tautomerik Geçişinin Dft ile İncelenmesi: Geçiş Durumu ve Elektronik Yapı Analizi <i>Tuncay Karakurt</i>	1-10
Evaluation of the Antibacterial Potentials of Essential Oils from <i>Lavandula angustifolia</i> L. and <i>Salvia officinalis</i> L. Cultivated under the Ecological Conditions of Kırşehir Against Clinically Significant Pathogens <i>Kübra Öztürk, Emine Bilginoğlu, Elif Sevim</i>	11-17
Betonarme Kirişli Konsol Döşemelerde Basınç Donatısı Oranının Uzun Süreli Deformasyonlara Etkisinin İncelenmesi <i>Furkan Birdal, Oğuzhan Yüksel, Mehmet Mustafa Önal</i>	18-27
Görme Engelli Bireyler için Mikrodenetleyici Kontrollü Engelli Yolu (Sarı Şerit) Takip Eden ve Çarpmalardan Koruyan Akıllı Baston <i>Mustafa Aksu</i>	28-36
Spintronik Uygulamalar için BeFeSi Yarı Heusler Alaşımının DFT ile Teorik inceleme <i>Erol Albayrak</i>	37-46

DERLEME MAKALELERİ

Optimal Güç Akışı Problem Çözümlerinde Meta-Sezgisel Yöntemlerin İncelenmesi <i>Mustafa Sarıkaya, Bahtiyar Taşdemir</i>	47-58
---	--------------



Research Article

ORGANİK BİR MOLEKÜLÜN TAUTOMERİK GEÇİŞİNİN DFT İLE İNCELENMESİ: GEÇİŞ DURUMU VE ELEKTRONİK YAPI ANALİZİ

DFT-BASED INVESTIGATION OF TAUTOMERIC TRANSITION IN AN ORGANIC MOLECULE: TRANSITION STATE AND ELECTRONIC STRUCTURE ANALYSIS

Tuncay KARAKURT^{1*}  0000-0001-6944-9883

Makale Bilgileri	ÖZET
Anahtar Kelimeler: İzomerizm, DFT, IRC	3-(p-klorobenzil)-4-(p-florobenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on molekülünün tek kristal X-ışını kırınımı yöntemiyle aydınlatılan yapısı, tautomerik izomerizm için gerekli olan yapısal özellikleri açıkça taşımaktadır. Bu çalışmada, bileşiğin iki olası tautomer formu gaz fazında yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) kullanılarak, B3LYP/6-31G(d) düzeyinde optimize edilmiştir. İki yapı arasındaki potansiyel enerji yüzeyinin ayrıntılı olarak incelenmesi ve geçiş durumunun tanımlanması amacıyla Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalar sonucunda, enerji bakımından belirgin farklılıkların bulunduğu ve gaz fazında bir tautomerin diğerine kıyasla çok daha kararlı olduğu saptanmıştır. Ayrıca optimize edilen geometrilerde bağ uzunlukları, bağ açıları ve dihedral açıları karşılaştırılarak tautomerizasyon sürecine ilişkin yapısal değişimler ayrıntılı biçimde tartışılmıştır. Elde edilen bulgular, triazol temelli sistemlerin tautomerik davranışına ışık tutmakta ve önceki kristalografik verilerle birlikte değerlendirildiğinde tamamlayıcı nitelik taşımaktadır. Bu çalışma, deneysel ve teorik yöntemlerin birlikte kullanımının heterosiklik bileşiklerde yapı-özellik ilişkilerinin anlaşılmasında ne kadar önemli olduğunu da göstermektedir.
Article Info	ABSTRACT
Keywords: isomerism, DFT, IRC	The molecular structure of 3-(p-chlorobenzyl)-4-(p-fluorobenzylideneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one , previously determined by single-crystal X-ray diffraction, exhibits characteristic features suitable for tautomeric isomerism. In this study, two possible tautomeric forms of the compound were optimized in the gas phase using density functional theory (DFT) at the B3LYP/6-31G(d) level. To explore the potential energy surface between the two structures and confirm

^{1*} Kırşehir Ahi Evran University, tuncaykarakurt@gmail.com

* Corresponding author: tuncaykarakurt@gmail.com

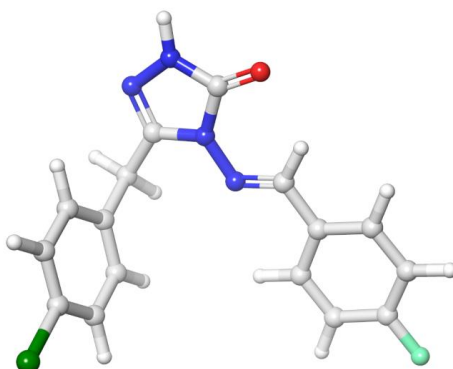
Received: 26.06.2025; Revised: 30.06.2025; Accepted: 03.07.2025

the nature of the transition state, **Intrinsic Reaction Coordinate (IRC)** calculations were performed. Theoretical results reveal a distinct energy difference, demonstrating that one tautomer is considerably more stable in the gas phase compared to the alternative form. Structural parameters, bond lengths, and dihedral angles were carefully examined to highlight the geometrical changes associated with the tautomerization process. This theoretical investigation provides valuable insights into the tautomeric behavior of triazole-based systems and complements previous crystallographic findings. Moreover, the results underline the importance of integrating experimental and theoretical approaches to obtain a deeper understanding of structure–property relationships in heterocyclic compounds.

1. INTRODUCTION

Tautomerism is a well-recognized phenomenon in heterocyclic chemistry, wherein isomeric forms of a molecule interconvert via proton migration, often resulting in distinct chemical and biological behaviors. Among nitrogen-rich heterocycles, 1,2,4-triazoles represent a privileged scaffold in medicinal chemistry, exhibiting a wide range of pharmacological activities including antibacterial, antifungal, anti-inflammatory, anticancer, and CNS-related effects (Bektas et al., 2010; Jha et al., 2020). The presence of adjacent nitrogen atoms in the triazole ring creates multiple sites for protonation or hydrogen migration, enabling tautomeric equilibria that can influence the molecule's electronic distribution, hydrogen bonding ability, and reactivity.

The compound investigated in this study, *3-(p-chlorobenzyl)-4-(p-fluorobenzylideneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one*, was previously synthesized and structurally characterized by single-crystal X-ray diffraction (Karakurt et al., 2004) (Scheme I).



Scheme I. Molecular structure of 3-(p-chlorobenzyl)-4-(p-fluorobenzylideneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one as determined by single-crystal X-ray diffraction (Karakurt et al., 2004).

The availability of experimental structural data offers a reliable reference point for validating the results of our theoretical calculations, including geometry optimization and electronic structure analyses. However, although the crystallographic data confirm the presence of a single tautomer in the solid state, the potential existence and relative stabilities of alternative tautomeric forms in the gas phase or in solution have not yet been systematically explored.

Given the well-documented influence of tautomerism on biological target recognition, metabolic stability, and proton-coupled transport mechanisms (Raczynska et al., 2003), theoretical insight into the tautomeric preferences of such molecules is essential. Compounds structurally related to the title molecule—such as triazole-thione or triazole-imine hybrids—have been shown to adopt different tautomeric states depending on the environment, and this has profound implications for their docking performance and ADME profiles (Xu, Zhao & Liu, 2019).

To explore the tautomeric behavior of the title compound, Density Functional Theory (DFT) calculations were carried out using the B3LYP functional with the 6-31G(d) basis set. The gas-phase approximation was adopted in this study for two reasons: (1) to examine the molecule's intrinsic energetic and structural preferences without solvation-induced perturbation, and (2) to ensure consistency with prior DFT studies of related triazole systems,

Karakurt¹

where solvent models introduced artificial stabilization of certain tautomers not observed experimentally (Martins et al., 2009; Mennucci, 2010).

Furthermore, Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) calculations were performed to map the minimum energy path connecting the two tautomeric forms via the identified transition state. This approach enables confirmation of the kinetic feasibility of tautomerization and provides insights into potential reaction barriers and intermediate geometries (Fukui, 2006; Schlegel, 2003; González & Schlegel, 1990).

Through a comparison of relative energies, bond rearrangements, and hydrogen bonding topology, this study aims to identify the more stable tautomer in the gas phase and to compare the findings with experimental solid-state observations. The results contribute to a broader understanding of tautomerism in triazole-based bioactive compounds and may support future pharmacological design strategies involving this scaffold.

2. MATERIALS AND METHODS

All quantum chemical calculations were performed using the Gaussian 09 software package (Frisch et al., 2009). Molecular structures were built and input files were prepared using the GaussView 5 graphical interface (Dennington et al., 2009). Geometry optimizations were carried out in the gas phase using Density Functional Theory (DFT) (Hohenberg & Kohn, 1964) at the B3LYP/6-31G(d) level of theory (Lee, Yang & Parr, 1988; Becke, 1993). Frequency calculations at the same level were used to confirm the nature of the stationary points—i.e., local minima (no imaginary frequencies) and transition states (one imaginary frequency). Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) calculations were conducted to verify that the transition state structure connects the two tautomeric forms. All computations were performed under standard conditions without the inclusion of any solvent or continuum solvation model.

3. RESULTS

IRC Analysis

To explore the potential tautomeric interconversion of the investigated molecule, two possible tautomeric forms were considered as initial geometries. These structures, depicted in Figure 1, represent proton transfer between the nitrogen and oxygen atoms. Although not yet optimized, they serve as the starting point for locating the transition state and mapping the reaction pathway. An Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) calculation was then performed starting from the transition state geometry to confirm the connectivity between the two tautomers and validate the nature of the transition state.

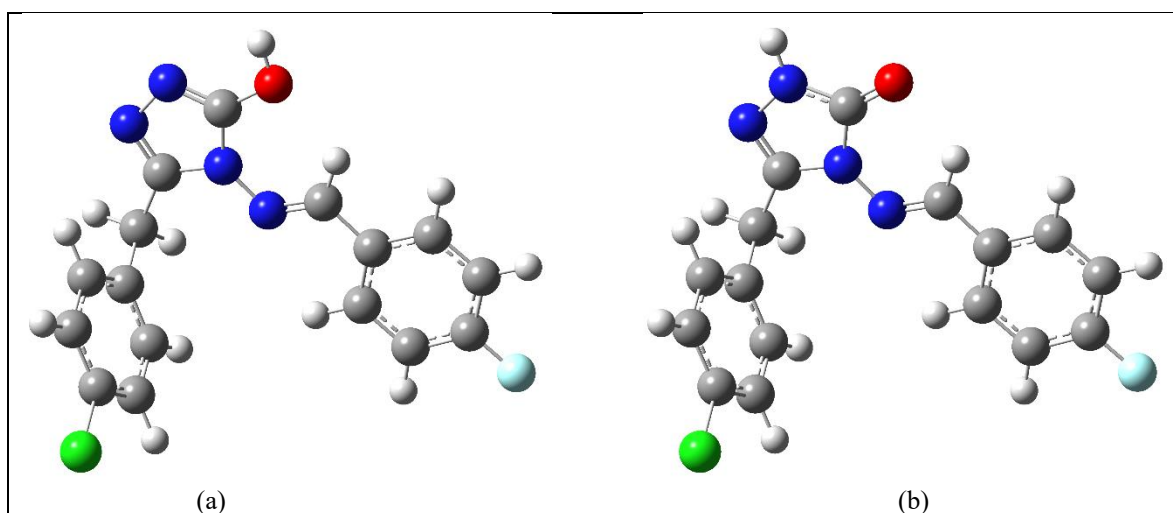


Figure 1. Initial geometries of the two possible tautomeric forms used in the IRC analysis: (a) tautomer with the proton on the nitrogen atom, and (b) tautomer with the proton on the oxygen atom, illustrating the positional shift prior to IRC calculations.

This positional shift of a single proton leads to changes in the hydrogen-bonding pattern and electronic distribution within the molecule, affecting its stability and reactivity. The structural comparison between the two tautomers justified further investigation of the interconversion mechanism. The resulting IRC energy profile, which plots the total energy as a function of the intrinsic reaction coordinate, is presented in Figure 2.

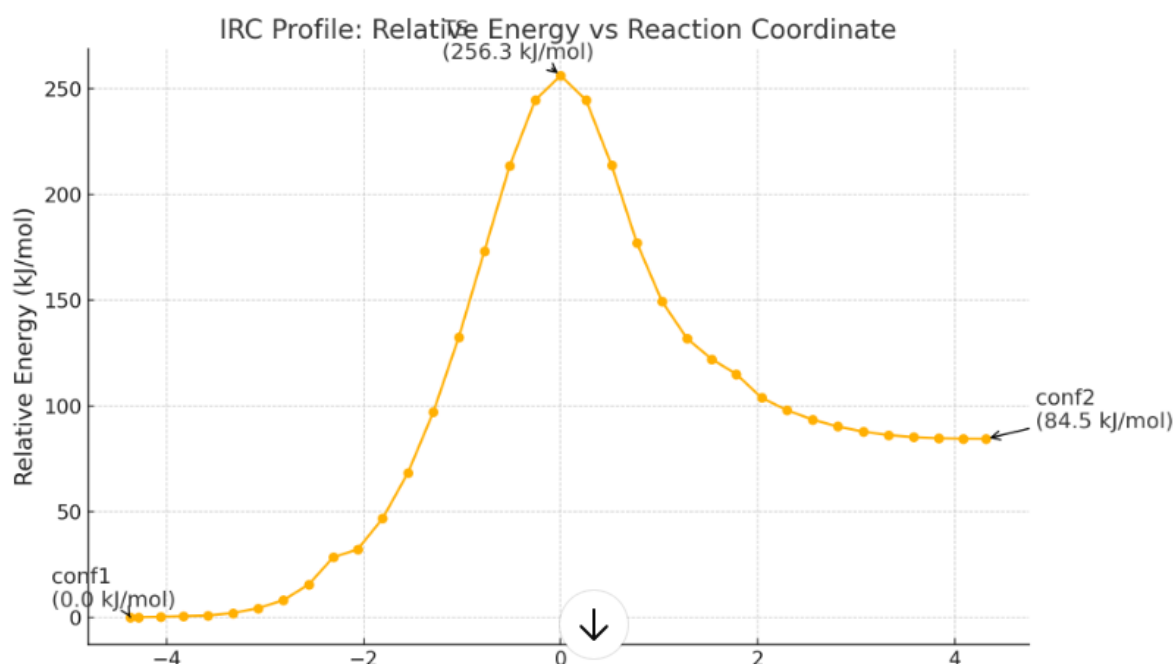


Figure 2. IRC profile depicting the total energy along the reaction path.

A single imaginary vibrational frequency of -1902 cm^{-1} , obtained from the QST2 frequency analysis, confirmed the presence of a genuine first-order saddle point. The corresponding normal mode involved the migration of a proton between two adjacent nitrogen atoms in the triazole core, consistent with the mechanistic expectations of the tautomerization process. The high magnitude of the imaginary frequency indicates a sharp change in bonding topology—typically observed in proton transfer reactions.

The IRC path smoothly connects the transition state to two distinct local minima, representing the reactant and product tautomeric forms. At the center of the curve (reaction coordinate = 0.0000), the energy of the transition state was calculated as -1471.0689 Hartree. On the reactant side (negative coordinate), the total energy decreases monotonically and reaches a minimum value of -1471.1665 Hartree, indicating the more stable tautomer. On the product side (positive coordinate), the energy levels off at approximately -1471.1344 Hartree, corresponding to the less stable tautomer.

The relative energy difference between the two minima was computed as 0.0321 Hartree, which corresponds to $\sim 84.5\text{ kJ/mol}$. This significant difference clearly favors the reactant tautomer under gas-phase conditions. The energy barrier between the two forms, as defined by the transition state energy, is consistent with a kinetically accessible but thermodynamically biased tautomerization process.

Overall, the combination of a single imaginary frequency, a well-behaved IRC path, and distinct energy minima supports the validity of the transition state and the proposed tautomeric interconversion mechanism.

Expanded IRC-Based Energetic Interpretation

The analysis of the Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) profile reveals a strongly asymmetric potential energy surface for the tautomeric interconversion between conf1 and conf2. The forward transformation from conf1 (more stable) to conf2 (less stable) proceeds through a transition state with an energy barrier of approximately 255.5 kJ/mol , while the reverse conversion from conf2 back to conf1 requires only 171.3 kJ/mol .

This significant difference in activation energies implies that the reaction is kinetically more favorable in the reverse direction. In other words, once formed, the conf2 tautomer is likely to undergo rapid back-conversion to conf1 unless stabilized by specific external factors (e.g., solvent effects, metal coordination, or crystal packing).

Moreover, the large barrier for the forward reaction suggests that under ambient or low-temperature conditions, the population of conf2 would be negligible. This aligns with the fact that only one tautomer was observed in the experimental X-ray crystal structure, most likely corresponding to conf1.

From a thermodynamic perspective, the relative energy difference between *conf1* and *conf2* (~84.2 kJ/mol) further reinforces the dominance of *conf1* as the ground-state tautomer. This energy gap is considerable and suggests that *conf2* is not only kinetically disfavored but also thermodynamically unstable.

The combination of a high forward barrier, a moderate reverse barrier, and a strong thermodynamic preference leads to the conclusion that *conf1* is both the kinetically and thermodynamically preferred tautomer under gas-phase conditions. Therefore, unless external perturbations are introduced, tautomerization from *conf1* to *conf2* is unlikely to occur spontaneously.

These findings have broader implications for the molecule's potential reactivity and biological function. For instance, if *conf2* were to play a role in a binding interaction or enzymatic mechanism, it would require either an induced fit or local environment capable of lowering the energy barrier. Hence, the tautomeric profile obtained here not only defines the inherent stability landscape of the molecule but also provides a predictive basis for its behavior in more complex environments such as solvated systems or active sites of biomacromolecules.

The combination of a high forward activation barrier, a moderate reverse barrier, and a significant thermodynamic preference indicates that *conf1* is both the kinetically and thermodynamically favored tautomer under gas-phase conditions. Unless influenced by external factors—such as solvent effects, metal coordination, or crystal packing—tautomerization from *conf1* to *conf2* is unlikely to occur spontaneously. Furthermore, all theoretical calculations including HOMO–LUMO analysis, natural bond orbital (NBO) population, and second-order perturbation studies were exclusively performed on the *conf1* structure, reinforcing its role as the reference conformer for electronic and energetic evaluations (Figure 3).

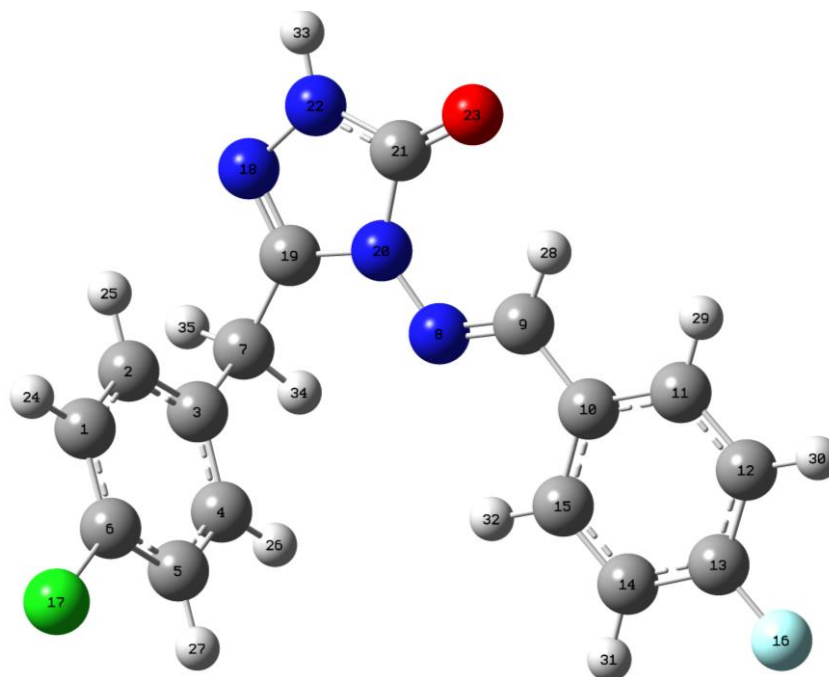


Figure 3. Optimized geometry of the *conf1* tautomer used as the reference structure for all quantum chemical analyses including HOMO–LUMO, NBO, and second-order perturbation studies.

Frontier Orbitals Analysis

The frontier molecular orbital (FMO) analysis, including visual representations of the HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) and LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), provides valuable insight into the electronic structure and chemical reactivity of the molecule (Fleming, 1976; Fukui, 1982). The calculated orbital energies are –0.22485 a.u. (–6.12 eV) for the HOMO and –0.06178 a.u. (–1.68 eV) for the LUMO (Figure 4). This yields a HOMO–LUMO gap of 4.44 eV, indicative of moderate chemical reactivity and good overall molecular stability.

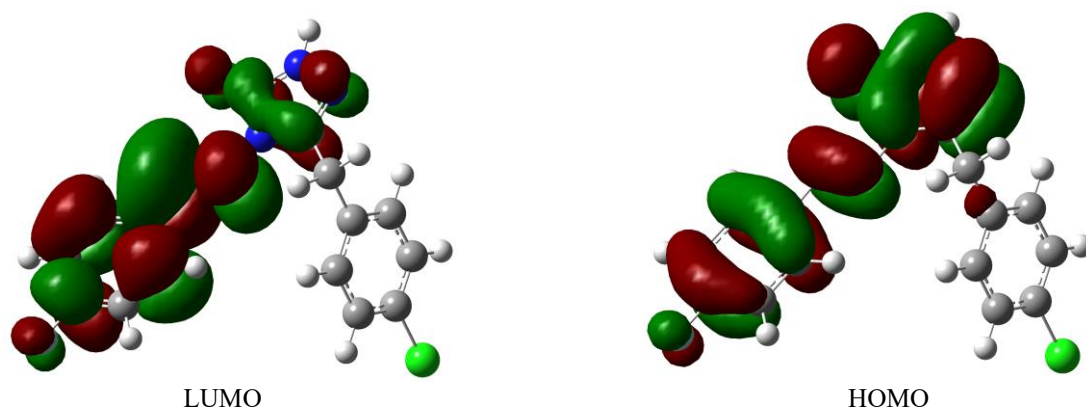


Figure 4. Frontier molecular orbitals of the conf1 tautomer: Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO), Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO).

The HOMO represents the region of the molecule with the highest probability of donating electrons. The electron density in this orbital is primarily distributed across the conjugated π -system and aromatic ring, highlighting potential nucleophilic regions. The delocalized nature of the HOMO suggests strong resonance stabilization and contributes to the planarity and extended conjugation of the molecular framework.

In contrast, the LUMO defines the most probable location for incoming electron density. The LUMO is spatially localized near electronegative atoms such as oxygen and nitrogen, which marks these areas as susceptible to electrophilic attack. The π^* character of the LUMO further suggests that the molecule may participate in $\pi \rightarrow \pi^*$ transitions, which are relevant in UV-Vis absorption and photoexcitation processes.

The spatial alignment of HOMO and LUMO also reveals the possibility of effective intramolecular electron delocalization (Fukui, 2006; Woodward & Hoffmann, 1969). This is particularly important in the context of tautomerization and proton transfer reactions, where the ability of the system to stabilize charge redistribution is essential (Parr & Pearson, 1983; Zhan, Nichols & Dixon, 2003). The localization of the LUMO around key heteroatoms implies that these sites could accommodate extra electron density or facilitate proton acceptance during such transformations (Fukui, 2006; Fleming, 1976; Sobolewski & Domcke, 2002).

In summary, the HOMO–LUMO analysis provides critical information regarding the molecule's electron donation and acceptance capabilities, chemical stability, and reactivity (Fukui, 2006; Woodward & Hoffmann, 1969; Parr, Szentpály & Liu, 1999). The moderate HOMO–LUMO gap suggests a balanced profile—chemically stable under standard conditions, yet reactive enough to participate in tautomeric shifts, charge transfer, or optical excitations (Zhan, Nichols & Dixon, 2003; Parr, Szentpály & Liu, 1999; (Pearson, 1987)

Population Analysis

The charge distribution reveals extreme polarization in the triazolone core: carbonyl oxygen (O23) accumulates significant electron density (-0.642 e), functioning as the primary electron sink, while the adjacent carbonyl carbon (C21) becomes a potent electrophilic center ($+0.766$ e). This $O\delta^- = C\delta^+$ polarization creates a reactivity hotspot for nucleophilic attack or proton exchange. The triazole nitrogen N22 (-0.462 e) exhibits comparable electron density to oxygen, confirming its role as a dual hydrogen-bond acceptor. Crucially, the N22-bound hydrogen (H33) displays reduced positivity ($+0.443$ e vs. $+0.25$ – 0.28 e for aliphatic hydrogens), signaling enhanced mobility for tautomeric proton transfer.

The NBO orbital decomposition (see Table 1) quantifies the electronic framework. Lewis-type orbitals dominate the electronic structure, containing 161.75 electrons (95.2%) distributed across 27 core orbitals, 41 bonding orbitals, and 17 lone pairs. In contrast, the non-Lewis component, accounting for 8.25 electrons (4.8%), captures critical resonance effects that drive tautomerism. This 4.8% non-Lewis electron density is associated with strong $n \rightarrow \pi^*$ donor–acceptor interactions, with stabilization energies ranging from 44 to 63 kcal/mol. These interactions facilitate proton shuttling via the N22–H33 linkage, stabilize charge-separated tautomeric intermediates, and enhance π -acidity in the *p*-fluorophenyl ring, as evidenced by the notable NBO charge on fluorine (F16: -0.328 e).

Karakurt¹

The halogen contrast is striking: fluorine's charge withdrawal (-0.328 e) versus chlorine's near-neutral state (-0.007 e) highlights fluorine's superior capacity to polarize aryl rings. When analysis thresholds are lowered (e.g., to 1.50 in table cycles 25–33), non-Lewis occupancy artificially decreases (5.24–5.82 e), but this forces delocalized density into Lewis orbitals—distorting the chemically accurate description.

The synergy is clear: the 4.8% delocalized density acts as an "electronic catalyst," leveraging charge polarization (O23/C21/N22) to enable proton-coupled dynamics. This explains the solid-state planarity while positioning H33 as the tautomeric linchpin—its reduced charge (+0.443 e) lowers kinetic barriers for proton migration in biological contexts.

Table 1. Summary of NBO analysis parameters for selected SCF cycles.

Cycle	Lewis (e ⁻)	Non-Lewis (e ⁻)	BD	LP	Deviation
1	161.7910	8.20902	40	18	0.62
2	161.7538	8.24623	41	17	0.47
3	161.7538	8.24623	41	17	0.47
4	161.7538	8.24623	41	17	0.47
5	161.7538	8.24623	41	17	0.47
6	161.7538	8.24623	41	17	0.47
7	161.7538	8.24623	41	17	0.47
8	161.7538	8.24623	41	17	0.47
9	161.7538	8.24623	41	17	0.47
10	161.3685	8.63146	40	18	0.66
11	161.8106	8.18938	40	18	0.62
12	161.9883	8.01169	40	18	0.47
13	161.9883	8.01169	40	18	0.47
14	161.9883	8.01169	40	18	0.47
15	161.9883	8.01169	40	18	0.47
16	165.7776	4.22236	46	12	0.44
17	165.7223	4.27775	46	12	0.47
18	165.2196	4.7804	45	13	0.43
19	165.1942	4.80582	45	13	0.44
20	164.6159	5.38407	44	14	0.41
21	165.2196	4.7804	45	13	0.43
22	164.6159	5.38407	44	14	0.41
23	165.2196	4.7804	45	13	0.43
24	164.6159	5.38407	44	14	0.41
25	165.3433	4.65675	45	13	0.62
26	165.2879	4.71213	45	13	0.62
27	165.2879	4.71213	45	13	0.62
28	164.7852	5.21478	44	14	0.62
29	164.7852	5.21478	44	14	0.62
30	164.7598	5.2402	44	14	0.62
31	164.7598	5.2402	44	14	0.62
32	164.1816	5.81845	43	15	0.62
33	164.1816	5.81845	43	15	0.62
34	165.7776	4.22236	46	12	0.44

Second-Order Perturbation Stabilization Energy ($E^{(2)}$)

The second-order stabilization energy ($E^{(2)}$) is calculated based on second-order perturbation theory and reflects the energetic contribution arising from electron delocalization between a filled (donor) orbital and an empty (acceptor) orbital. The magnitude of this stabilization is defined by the equation (Reed, Curtiss & Weinhold, 1988):

$$E^{(2)} = -n_i \frac{F_{ij}^2}{\varepsilon_j - \varepsilon_i}$$

In this expression, n_i is the donor orbital occupancy (typically ≈ 2), F_{ij} represents the Fock matrix element (indicative of orbital overlap), and $\varepsilon_j - \varepsilon_i$ is the energy gap between the donor and acceptor orbitals. A higher $E^{(2)}$ value signifies a stronger interaction and greater energetic stabilization.

The NBO analysis reveals that electronic delocalization is dominated by resonance in the triazolone core (N18–C19–N20–C21=O23). The strongest interactions involve nitrogen lone pairs donating into carbonyl and imine antibonding orbitals: N22 $\rightarrow$ $\pi^*(\text{C21=O23})$ (62.88 kcal/mol), N20 $\rightarrow$ $\pi^*(\text{C21=O23})$ (52.19 kcal/mol), and N20 $\rightarrow$ $\pi^*(\text{N18=C19})$ (44.11 kcal/mol). This triad creates an amide-like resonance system that stabilizes the planar ring structure and facilitates proton transfer during tautomerism by redistributing electron density across N18–O23.

Significant hyperconjugation occurs in aliphatic chains, particularly $\sigma(\text{C3–C4}) \rightarrow \sigma^*(\text{C5–C6})$ (22.02 kcal/mol) and $\sigma(\text{C12–C13}) \rightarrow \sigma^*(\text{C10–C11})$ (21.72 kcal/mol), which rigidify benzyl substituents without substantial bond weakening. The carbonyl oxygen (O23) further contributes through polarizing interactions: O23 $\rightarrow$ $\sigma^*(\text{N20–C21})$ (30.32 kcal/mol) and O23 $\rightarrow$ $\sigma^*(\text{C21–N22})$ (25.84 kcal/mol), enhancing electrophilicity for potential nucleophilic attacks or keto-enol shifts.

Halogen atoms participate weakly but distinctly: F16 $\rightarrow$ $\sigma^*(\text{C12–C13})$ (6.60 kcal/mol) and Cl17 $\rightarrow$ $\pi^*(\text{C6})$ (3.11 kcal/mol) stabilize *para*-substituted aryl rings via hyperconjugation. Aryl group delocalization, evidenced by interactions like Core(C13) $\rightarrow$ $\sigma^*(\text{C13–F16})$ (3.75 kcal/mol), reinforces the planarity of benzyldiene units.

Collectively, these interactions create a dual stabilization mechanism: the triazolone core drives tautomerism-ready electronic lability through $n \rightarrow \pi^*$ resonance, while hyperconjugation in peripheral groups enhances conformational stability. This electronic profile supports the observed solid-state planarity and suggests tautomerism proceeds via low-energy proton shifts within the N18–O23 framework.

In conclusion, the $E^{(2)}$ values collectively highlight a well-distributed electron delocalization network, mainly supported by lone pairs on nitrogen and oxygen atoms. These interactions stabilize the molecular geometry and electronic configuration, while also indicating reactive sites that may play key roles in tautomeric shifts or chemical reactions, as summarized in Table 2.

Table 2. Selected Donor–Acceptor Orbital Pairs with Second-Order Stabilization Energies ($E^{(2)}$) and Interaction Types

Donor NBO	Acceptor NBO	$E^{(2)}$ kcal/mol)	Type
LP(1) N22	$\pi^*(\text{C21=O23})$	62.88	$n \rightarrow \pi^*$
LP(1) N20	$\pi^*(\text{C21=O23})$	52.19	$n \rightarrow \pi^*$
LP(1) N20	$\pi^*(\text{N18=C19})$	44.11	$n \rightarrow \pi^*$
BD(2) C3–C4	$\sigma^*(\text{C5–C6})$	22.02	$\sigma \rightarrow \sigma^*$
LP(2) O23	$\sigma^*(\text{N20–C21})$	30.32	$n \rightarrow \sigma^*$

4. DISCUSSION

In this study, the tautomeric behavior of the target compound was investigated using quantum chemical methods, focusing on the structural, energetic, and electronic characteristics of both tautomeric forms. Geometry optimizations and frequency calculations were carried out at the B3LYP/6-31G(d) level in the gas phase, allowing for identification of the most stable tautomer as well as the transition state (TS) structure connecting the two forms. The calculated imaginary frequency of -1902 cm^{-1} confirmed the presence of a first-order saddle point characteristic of a valid transition state.

The Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) analysis provided further validation of the connection between the transition state (TS) and its respective reactant and product minima. The reaction pathway was smooth and symmetric, with a calculated activation barrier of around 171.3 kJ/mol in the forward direction. This indicates that tautomerisation requires a significant amount of energy. By contrast, the reverse reaction exhibited a slightly lower energy demand, suggesting that the reaction is thermodynamically more favourable in the reverse direction. This energy asymmetry is consistent with the relative stabilities observed between the two tautomers.

Frontier Molecular Orbital (FMO) analysis provided further insight into the molecule's electronic reactivity. The HOMO and LUMO orbitals, with energies of -6.12 eV and -1.68 eV respectively, resulted in a moderate energy gap of 4.44 eV , implying a balance between stability and reactivity. The spatial localization of the HOMO over the conjugated π -system and the LUMO over electronegative atoms such as oxygen and nitrogen highlights the dual nucleophilic and electrophilic nature of the molecule, particularly in the context of proton transfer and tautomeric switching.

Natural Bond Orbital (NBO) analysis provided deeper insight into the electronic structure of the molecule, highlighting a rich network of donor–acceptor interactions. The most significant delocalizations were found within the triazolone core, where lone pairs on nitrogen atoms (N22 and N20) strongly donate into antibonding π^* orbitals of adjacent C=O and C=N bonds, forming an extended resonance system that stabilizes the ring planarity. The high $E(2)$ values for these interactions—such as $\text{N22} \rightarrow \pi^*(\text{C21}=\text{O23})$ (62.88 kcal/mol) and $\text{N20} \rightarrow \pi^*(\text{N18}=\text{C19})$ (44.11 kcal/mol)—underscore the energetic favorability of electron delocalization across the N18–C19–N20–C21=O23 framework. Additionally, the analysis revealed substantial hyperconjugative interactions in aliphatic and aromatic substituents, particularly $\sigma(\text{C3}–\text{C4}) \rightarrow \sigma^*(\text{C5}–\text{C6})$ and halogen-involved delocalizations such as $\text{F16} \rightarrow \sigma^*(\text{C12}–\text{C13})$. These interactions rigidify the molecular periphery and contribute to conformational stability without significantly altering the core reactivity.

Altogether, the combined resonance and hyperconjugation effects not only stabilize the ground-state geometry but also explain the observed tautomeric preferences and directional feasibility of proton transfer, particularly through the N18–O23 axis.

Overall, the combined computational results support a consistent mechanistic and energetic description of the tautomeric interconversion. The preferred tautomer is energetically more favorable, while the transition state and reaction profile align with known intramolecular proton shift mechanisms. These insights could be valuable for further studies involving reactivity, spectroscopic behavior, or potential pharmacological implications of tautomeric forms.

Author Contributions

The author conducted all computational analyses, data interpretation, and manuscript preparation independently.

Acknowledgments

The numerical calculations reported in this paper were fully/partially performed at TUBITAK ULAKBIM, High Performance and Grid Computing Center (TRUBA resources).

Conflict of Interest

The author declares that there is no conflict of interest regarding the publication of this article.

The data supporting the findings of this study are available from the author upon reasonable request.

REFERENCES

- Bektaş, H., Karaali, N., Şahin, D., Demirbaş, A., Karaoglu, Ş. A., & Demirbaş, N. (2010). Synthesis and antimicrobial activities of some new 1, 2, 4-triazole derivatives. *Molecules*, 15(4), 2427-2438.
- Becke, A. D. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of chemical physics*, 98(7), 5648-5652.
- Dennington, R., Keith, T. and Millam, J. (2009) Gauss View, Version 5. Semichem Inc., Shawnee Mission.
- Fukui, K. (1982). Role of frontier orbitals in chemical reactions. *science*, 218(4574), 747-754.
- Fleming, I. (1976). Frontier orbitals and organic chemical reactions London: Wiley.
- Frisch MJ, Trucks GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, et al. (2009). Gaussian 09, Revision D.01. Wallingford CT: Gaussian Inc.
- Fukui K. (1970). The path of chemical reactions – the IRC approach. *Journal of Physical Chemistry* 74(23):4161–4163.
- Fukui, K. (2006). Theory of orientation and stereoselection. In *Orientation and Stereoselection* (pp. 1-85). Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- González C, Schlegel HB. (1990). An improved algorithm for reaction path following. *Journal of Physical Chemistry* 94(14):5523–5527.
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B), B864.
- Jha M, Alam O, Naim MJ, Sharma V, Bhatia P, Sheikh AA, Siddiqui N. (2020). Recent advancement in the discovery and development of anti-epileptic biomolecules: An insight into structure activity relationship and docking. *European Journal of Pharmaceutical Sciences* 153:105494.
- Karakurt T, Dincer M, Kahveci B, Usta A, Agar E, Sasmaz S. (2004). 3-(p-Chlorobenzyl)-4-(p-fluorobenzylideneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one. *Acta Crystallographica Section E-Crystallographic Communications* 60(4):o654–o655.
- Lee C, Yang W, Parr RG. (1988). Development of the Colle–Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B* 37(2):785–789.
- Martins MA, Frizzo CP, Moreira DN, Buriol L, Machado P. (2009). Solvent-free heterocyclic synthesis. *Chemical Reviews* 109(9):4140–4182.
- Mennucci B. (2010). Continuum solvation models: What else can we learn from them? *The Journal of Physical Chemistry Letters* 1(10):1666–1674.
- Parr RG, Pearson RG. (1983). Absolute hardness: companion parameter to absolute electronegativity. *Journal of the American Chemical Society* 105(26):7512–7516.
- Parr RG, Szentpály LV, Liu S. (1999). Electrophilicity index. *Journal of the American Chemical Society* 121(9):1922–1924.
- Pearson RG. (1987). Recent advances in the concept of hard and soft acids and bases. *Journal of Chemical Education* 64(7):561.
- Raczynska ED, Cyranski MK, Gutowski M, Rak J, Gal JF, Maria PC, Duczmal K. (2003). Consequences of proton transfer in guanidine. *Journal of Physical Organic Chemistry* 16(2):91–106.
- Reed AE, Curtiss LA, Weinhold F. (1988). Intermolecular interactions from a natural bond orbital, donor–acceptor viewpoint. *Chemical Reviews* 88(6):899–926.
- Schlegel HB. (2003). Exploring potential energy surfaces for chemical reactions. *Journal of Computational Chemistry* 24(12):1514–1527.
- Sobolewski AL, Domcke W. (2002). Hydrated hydronium: a cluster model of the solvated electron? *Physical Chemistry Chemical Physics* 4(1):4–10.
- Xu Z, Zhao SJ, Liu Y. (2019). 1,2,3-Triazole-containing hybrids as potential anticancer agents: Current developments, action mechanisms and structure–activity relationships. *European Journal of Medicinal Chemistry* 183:111700.
- Woodward RB, Hoffmann R. (1969). The conservation of orbital symmetry. *Angewandte Chemie International Edition in English* 8(11):781–853.
- Zhan CG, Nichols JA, Dixon DA. (2003). Ionization potential, electron affinity, electronegativity, hardness, and electron excitation energy: molecular properties from density functional theory orbital energies. *Journal of Physical Chemistry A* 107(20):4184–4195.



Research Article

KIRŞEHİR EKOLOJİK KOŞULLARINDA YETİŞTİRİLEN *LAVANDULA ANGUSTİFOLIA* L. VE *SALVIA OFFİCİNALIS* L. BİTKİLERİNİN UÇUCU YAĞLARININ KLİNİK ÖNEME SAHİP PATOJENLERE KARŞI ANTİBAKTERİYEL POTANSİYELLERİNİN DEĞERLENDİRİLMESİ

EVALUATION OF THE ANTIBACTERIAL POTENTIALS OF ESSENTIAL OILS FROM *LAVANDULA ANGUSTİFOLIA* L. AND *SALVIA OFFİCİNALIS* L. CULTIVATED UNDER THE ECOLOGICAL CONDITIONS OF KIRŞEHİR AGAINST CLINICALLY SIGNİFİCANT PATHOGENS

Kubra OZTURK^{1*}  0000-0002-4488-0164, Emine BILGINOGLU²  0000-0001-5974-327X

Elif SEVİM³  0000-0002-6455-1333

Makale Bilgileri	Özet
Anahtar Kelimeler: <i>Lavandula angustifolia</i> ve <i>Salvia officinalis</i>. Uçucu yağ, Antimikrobiyal aktivite	Geleneksel antimikrobiyal ilaçların olası yan etkileri ve bakteriyel direnç gelişimi, halk sağlığı açısından ciddi bir tehdit oluşturmaktadır. Bu durum, doğal ve bitkisel kaynaklı alternatiflerin araştırılmasını giderek daha önemli hâle getirmiştir. Günümüzde birçok aromatik ve tıbbi bitkinin, yalnızca beslenme amacıyla değil, aynı zamanda enfeksiyonlara karşı koruyucu olarak halk tarafından yaygın biçimde kullanıldığı bilinmektedir. Mevcut çalışmada, Kırşehir koşullarında kültüre alınan <i>Lavandula angustifolia</i> (lavanta) ve <i>Salvia officinalis</i> (adaçayı) bitkilerinden elde edilen uçucu yağların antimikrobiyal etkileri değerlendirilmiştir. Uçucu yağların antibakteriyel aktiviteleri, yedi farklı klinik öneme sahip bakteri suşuna karşı disk difüzyon yöntemi, MİK (Minimum İnhibitör Konsantrasyonu) ve MBK (Minimum Bakterisidal Konsantrasyon) analizleri ile incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar, her iki bitkinin de hem Gram-pozitif hem de Gram-negatif bakterilere karşı anlamlı düzeyde antimikrobiyal aktivite gösterdiğini ortaya koymuştur. <i>L. angustifolia</i> uçucu yağı, özellikle <i>B. cereus</i> (25 mm) ve <i>S. aureus</i> (20 mm) üzerinde geniş inhibisyon zonları oluşturarak daha yüksek etki göstermiştir. MIC değeri <i>E. coli</i> ve <i>E. faecalis</i> için %0.39 olarak belirlenmiş, bu da düşük konsantrasyonda dahi etkili olduğunu ortaya koymuştur. <i>S. officinalis</i> uçucu yağı ise en düşük MIC değerini <i>S. aureus</i> suşunda (%0.39) göstermiştir. Sonuçlar, Kırşehir ikliminde yetiştirilen bu bitkilerden elde edilen uçucu yağların, dirençli

^{1*} Kırşehir Ahi Evran University , kubra.ozturk@ahievran.edu.tr

² Kırşehir Ahi Evran University , emine.bilginoglu@ahievran.edu.tr

³ Kırşehir Ahi Evran University , esevim@ahievran.edu.tr

Corresponding author : kubra.ozturk@ahievran.edu.tr

Received: 01.07.2025; Revised: 04.07.2025; Accepted: 07.07.2025

bakterilerle mücadelede potansiyel doğal antimikrobiyal ajanlar olarak değerlendirilebileceğini göstermektedir.

Article Info	Abstract
Keywords: <i>Lavandula angustifolia</i> and <i>Salvia officinalis</i> , essential oil, antibacterial activity.	The potential side effects of traditional antimicrobial drugs and the development of bacterial resistance pose a serious threat to public health. This situation has made the search for natural and plant-based alternatives increasingly important. Today, many aromatic and medicinal plants are widely used by the public not only for nutritional purposes but also as protective agents against infections. In the present study, the antimicrobial effects of essential oils obtained from <i>Lavandula angustifolia</i> (lavender) and <i>Salvia officinalis</i> (sage), cultivated under the ecological conditions of Kırşehir, were evaluated. The antibacterial activities of the essential oils were investigated against seven clinically significant bacterial strains using the disk diffusion method, MIC (Minimum Inhibitory Concentration), and MBC (Minimum Bactericidal Concentration) analyses. The results revealed that both plants exhibited significant antimicrobial activity against both Gram-positive and Gram-negative bacteria. <i>L. angustifolia</i> oil stood out with broader inhibition zones and lower MIC values, particularly against <i>L. angustifolia</i> essential oil showed higher efficacy, particularly forming large inhibition zones against <i>B. cereus</i> (25 mm) and <i>S. aureus</i> (20 mm). The MIC value was determined to be 0.39% for <i>E. coli</i> and <i>E. faecalis</i> , indicating effectiveness even at low concentrations. <i>S. officinalis</i> essential oil exhibited its lowest MIC value (0.39%) against the <i>S. aureus</i> strain. The findings suggest that the essential oils obtained from these plants cultivated in the Kırşehir climate could be considered as potential natural antimicrobial agents in the fight against resistant bacteria.

1. INTRODUCTION

The increasing prevalence of infections caused by multidrug-resistant (MDR) bacteria has emerged as a serious global public health concern, particularly as existing treatment options become increasingly limited. The widespread and often inappropriate use of antibiotics has accelerated the emergence and dissemination of resistant strains, thereby contributing to a global rise in morbidity and mortality rates (Mohammadinejad et al., 2019). This alarming situation has heightened interest in novel therapeutic approaches, especially those derived from natural products with antimicrobial potential.

In today's world, where the search for alternative treatments is on the rise, antimicrobial resistance observed in both Gram-positive and Gram-negative bacteria continues to challenge modern medicine. In particular, species such as methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) and *Bacillus cereus* play a significant role in healthcare-associated infections such as pneumonia, wound infections, and bacteremia, complicating the treatment process and increasing the burden on healthcare systems (Mahjabeen et al., 2022). Similarly, multidrug-resistant (MDR) Gram-negative pathogens such as *Escherichia coli* and *Klebsiella pneumoniae* that produce extended-spectrum β -lactamases (ESBLs) are resistant to key antibiotic groups such as β -lactams, fluoroquinolones, and carbapenems, and represent significant clinical threats (Jean et al., 2022). Global surveillance studies have identified pathogens such as *Klebsiella pneumoniae*, *Escherichia coli*, *Enterococcus faecalis*, and *Staphylococcus aureus* as the leading causes of hospital-acquired infections (Jean et al., 2022; Santajit & Indrawattana, 2016).

In light of these challenges, natural products, and especially essential oils, are emerging as promising alternatives in the management of multidrug-resistant infections. Thanks to their antimicrobial properties attributed to their rich and diverse chemical structures, they have the potential to play an important role in the development of new therapeutic strategies (Mohammadinejad et al., 2019). Essential oils are secondary metabolites with a certain phytochemical composition obtained from different parts of various aromatic plants (Alizadeh Behbahani & Shahidi, 2019; İçcan et al., 2002; Katar et al., 2020; Lal et al., 2020). Plants that have adapted to different ecological conditions generally exhibit remarkable phytochemical diversity. This chemical richness, shaped by both environmental and genetic factors, has made aromatic plants important sources of bioactive compounds (Arzani & Ashraf, 2016; Soleimani et al., 2022). In this context, the species *Lavandula angustifolia* (lavender) and *Salvia officinalis* (sage) belonging to the Lamiaceae family are noteworthy due to their traditional medicinal uses and the

Ozturk¹ and et al.

therapeutic effects of their essential oils. The essential oils of these widely cultivated perennial plants have been used for centuries in the treatment of conditions such as ulcers, spasms, inflammation, dizziness, and rheumatism (Abou Baker et al., 2021; Benbrahim et al., 2021; Ezema et al., 2022).

The essential oils of *Lavandula angustifolia* and *Salvia officinalis* species generally contain main components such as 1,8-cineole and borneol; they can exhibit significant chemotypic differences depending on the species, geographical origin, harvest time, and cultivation conditions (Abou Baker et al., 2021; Andrys et al., 2018; Arnao et al., 2001). These chemical differences can directly affect the antimicrobial efficacy of essential oils.

In this study, the in vitro antibacterial activities of essential oils obtained from *Lavandula angustifolia* and *Salvia officinalis* plants against various multidrug-resistant bacterial strains will be evaluated. These two plant species have been cultivated for the first time under the ecological conditions of Kırşehir Province and included in this study. This situation provides a unique contribution to the literature in terms of revealing the antimicrobial potential of these plants based on the secondary metabolite profiles they synthesize under the climatic conditions of Kırşehir.

2. MATERIALS and METHODS

Plant Material

The *Lavandula angustifolia* and *Salvia officinalis* plants used in this study were cultivated at the AHİGETAM Medical and Aromatic Plants Application and Research Area of Kırşehir Ahi Evran University. *L. angustifolia* was harvested at full bloom, while *S. officinalis* was harvested at the beginning of flowering. The harvested plants were dried in a shaded environment at room temperature under conditions that ensured air circulation. The dried samples were ground in a grinder to achieve homogeneity.

Extraction of Essential Oils

The hydrodistillation method was used to extract essential oils from *L. angustifolia* and *S. officinalis* plants. A Clevenger-type apparatus was used for this process. The distillation process was carried out for approximately 3 hours. The condensed phases were separated due to differences in specific gravity, and the essential oils were collected. The obtained essential oils were passed through anhydrous sodium sulfate and then stored in amber-colored glass bottles at 4°C until analysis was performed.

Test Microorganisms

The microorganisms evaluated for antibacterial activity in this study consisted of reference strains obtained from the Medical Biology Laboratory of the Faculty of Medicine at Kırşehir Ahi Evran University. The bacterial strains used were as follows: *Klebsiella pneumoniae* (ATCC 10031), *Escherichia coli* (ATCC 25922), *Yersinia pseudotuberculosis* (ATCC 911), *Bacillus subtilis* subsp. *spizizenii* (ATCC 6633), *Staphylococcus aureus* (ATCC 25213), beta-toxin-positive *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923), *Enterococcus faecalis* (ATCC 29212), and *Bacillus cereus* (709 Roma isolate). All strains were cultured in appropriate media prior to the experiment to activate them, and pure cultures were used throughout the study.

Antibacterial Activity Test

The antibacterial effects of essential oils were evaluated using the disk diffusion method. The Kirby-Bauer disk diffusion method, used in the preliminary evaluation of antibacterial activity, is a widely used and standardized technique for determining the susceptibility of microorganisms to various antibiotics. In this method, antibacterial activity is evaluated by measuring the diameter of the inhibition zones, and the results are interpreted according to standards such as CLSI (Yao et al., 2021). Each bacterial strain was prepared to a 0.5 McFarland standard (approximately 1×10^8 CFU/mL) and evenly spread on the surface of Mueller-Hinton agar (MHA; Merck, Germany) plates using a sterile cotton swab. Each sterile 6 mm diameter disc was impregnated with 10 µL of essential oil prepared at a concentration of 25% (v/v), and these discs were placed on the surface of the inoculated bacterial layer. Ampicillin at a concentration of 1 mg/mL was used as a positive control, and a 5% DMSO solution was used as a negative control. To evaluate the antibacterial activity against bacterial growth, the diameters of the inhibition zones formed around the wells were measured using a standard antibiogram chart after 24 hours of incubation at 37°C.

Minimum Inhibitory Concentration (MIC) Determination

Minimum inhibitory concentrations (MIC) were determined using the broth microdilution method according to CLSI guidelines (Weinstein, 2018). Essential oils were serially diluted (12.5–0.098%) in Mueller-Hinton broth (MHB) containing 5% (v/v) DMSO, and 10^6 CFU/mL bacterial suspension was added to each well. The bacterial strains were incubated at 37°C for 24 hours, and growth observations were evaluated visually.

Determination of Minimum Bactericidal Concentration (MBC)

In order to determine the minimum bactericidal concentration (MBC) values, concentrations equal to or higher than the previously determined MIC value were selected. To evaluate bactericidal activity against these concentrations, inoculum was taken from the relevant microdilution wells using a sterile loop and inoculated into Petri dishes containing fresh medium (Mueller-Hinton agar). After incubation at 37°C for 24 hours, the lowest concentration at which no colony growth was observed was accepted as the MBC.

3. RESULTS

The antibacterial activity of essential oils obtained from *L. angustifolia* and *S. officinalis* plants was evaluated against pathogenic Gram-positive and Gram-negative bacterial strains. In this context, inhibition zone diameters and MIC and MBC values are presented in Table 1 and Table 2, respectively. It was determined that DMSO, used as a solvent in the experiments, did not exhibit any antimicrobial effect on the tested microorganisms. The essential oils demonstrated moderate to high levels of antibacterial activity, forming inhibition zones ranging from 13 to 25 mm against the seven different pathogenic bacterial strains tested. However, *L. angustifolia* essential oil exhibited a stronger antibacterial effect profile than *Salvia officinalis* essential oil, forming wider inhibition zones against most of the tested bacterial strains.

Among Gram-negative bacteria, *L. angustifolia* essential oil produced inhibition zones of 15 mm and 14 mm against *E. coli* and *K. pneumoniae* strains, respectively, while *S. officinalis* essential oil produced zone diameters of 14 mm and 13 mm against the same strains, respectively. Against *Y. pseudotuberculosis* strains, *L. angustifolia* essential oil produced a zone of 16 mm, which is higher than the 14 mm zone diameter produced by *S. officinalis* essential oil. This result indicates that *L. angustifolia* essential oil is more effective than *S. officinalis* essential oil against all tested Gram-negative bacteria.

When evaluated in terms of Gram-positive bacteria, *L. angustifolia* essential oil showed the highest antibacterial effect against *B. cereus* strain with a zone diameter of 25 mm. *S. officinalis* essential oil produced a zone diameter of 16 mm against the same strain. Additionally, *L. angustifolia* essential oil formed a 20 mm zone against the *S. aureus* strain, showing a similar effect to ampicillin (19 mm). In the *S. aureus* BT strain, both essential oils produced inhibition zones of equal size (15 mm). Against the *E. faecalis* strain, *L. angustifolia* and *S. officinalis* essential oils exhibited similar levels of antimicrobial activity, producing zones of 17 mm and 16 mm, respectively. These findings support that *L. angustifolia* essential oil generally exhibits stronger antimicrobial activity against both Gram-negative and Gram-positive bacteria compared to *S. officinalis* essential oil.

Table 1. Inhibition zone diameters of *Lavandula angustifolia* ve *Salvia officinalis* essential oils against tested bacterial strains

Microorganisms	Zone Diameters (mm)		
	<i>L.angustifolia</i> EO	<i>S. officinalis</i> EO	Ampicillin
Gram-negative bacteria			
<i>E. coli</i> (ATCC 25922)	15	14	20
<i>K. pneumoniae</i> (ATCC 10031)	14	13	22
<i>Y. pseudotuberculosis</i> (ATCC 911)	16	14	21
Gram-positive bacteria			
<i>S. aureus</i> (ATCC 25213)	20	15	19
<i>S. aureus</i> BT (ATCC 25923)	15	15	21
<i>E. faecalis</i> (ATCC 29212)	17	16	22
<i>B. cereus</i> (709 Roma)	25	16	21

EO: Essential oil

To support the findings obtained by the disk diffusion method, the antimicrobial activities of *L. angustifolia* and *S. officinalis* essential oils were quantitatively evaluated based on MIC and MBC values (Table 2). This study reveals that both essential oils possess potential antibacterial properties against bacterial pathogens. *L. angustifolia* essential oil exhibited the lowest inhibitory concentration with an MIC value of 0.39% against *E. coli* and *E. faecalis* strains. *S. officinalis* essential oil exhibited the lowest MIC value of 0.39% against the *S. aureus* strain. These values indicate that both essential oils possess high antibacterial potential against the aforementioned strains.

While *L. angustifolia* essential oil showed efficacy against *B. cereus* strain with MIC and MBC values of 0.78% and 3.125%, respectively, the bactericidal effect of *S. officinalis* essential oil against this strain appeared at a relatively higher concentration of 6.25%. However, this value still indicates strong activity when considering the natural structure of essential oils.

Table 2. MIC and MBC values of *Lavandula angustifolia* ve *Salvia officinalis* essential oils against tested bacterial strains

Microorganisms	MIC Values (%)		MBK Values (%)	
	<i>L.angustifolia</i> EO	<i>S. officinalis</i> EO	<i>L.angustifolia</i> EO	<i>S. officinalis</i> EO
<i>E. coli</i> (ATCC 25922)	0.39	0.78	0.78	1.56
<i>K. pneumoniae</i> (ATCC 10031)	1.56	1.56	1.56	3.125
<i>Y. pseudotuberculosis</i> (ATCC 911)	1.56	1.56	1.56	3.125
<i>S. aureus</i> (ATCC 25213)	0.78	0.39	3.125	1.56
<i>S. aureus</i> BT (ATCC 25923)	0.78	0.78	3.125	3.125
<i>E. faecalis</i> (ATCC 29212)	0.39	0.78	3.125	3.125
<i>B. cereus</i> (709 Roma)	0.78	1.56	3.125	6.25

EO: Essential oil

4. DISCUSSION

In this study, the antimicrobial effects of essential oils obtained from *Lavandula angustifolia* and *Salvia officinalis* plants were evaluated against both Gram-positive and Gram-negative bacteria, and the results revealed that these natural compounds have significant antibacterial potential.

The bacteria tested are clinically important infectious agents in terms of human health. *E. coli* and *K. pneumoniae* are Gram-negative strains that cause serious infections such as urinary tract infections, sepsis, and hospital-acquired pneumonia (Diekema et al., 2019). *S. aureus* and *B. cereus* cause a wide range of diseases, from skin and soft tissue infections to foodborne illnesses (Khan et al., 2015); *E. faecalis* is a Gram-positive bacterium primarily responsible for serious diseases such as catheter-related infections and endocarditis (Xie et al., 2024). *Y. pseudotuberculosis* is a globally prevalent Gram-negative pathogen that can cause gastrointestinal infections such as gastroenteritis and mesenteric lymphadenitis in humans (Fredriksson-Ahomaa, 2009).

Disk diffusion analyses have shown that *L. angustifolia* essential oil exhibits broad-spectrum antimicrobial activity, particularly against clinically critical strains such as *B. cereus* (25 mm), *S. aureus* (20 mm), and *E. coli* (15 mm). *S. officinalis* essential oil produced narrower zone diameters but still exhibited significant antimicrobial activity. The primary reason for the efficacy of essential oils lies in their biologically active components. Chromatographic analysis findings in the literature reveal that the main components of *L. angustifolia* essential oil are linalool and linalyl acetate, while *S. officinalis* essential oil contains 1,8-cineole, camphor, and cis-thujone (Mourabiti et al., 2024). It has been reported that linalool disrupts cell membrane integrity, causing intracellular contents to leak out, thereby inhibiting the vital functions of bacteria (Eliuz et al., 2016). Similarly, it is known that 1,8-cineole and camphor disrupt protein synthesis and enzyme activity (Jirovetz et al., 2005).

In MIC/MBC analyses, the fact that *L. angustifolia* essential oil is effective against *E. coli* and *E. faecalis* strains at low concentrations of 0.39% indicates that it has a strong effect profile against both Gram-negative and Gram-positive bacteria. *S. officinalis* essential oil, on the other hand, exhibited the lowest MIC value against *S. aureus* strains (0.39%), suggesting that it may be more effective against Gram-positive pathogens in particular.

When these data are considered together, it is understood that the antibacterial potential of essential oils depends on both their content and the structural characteristics of the target bacterial species. The higher effect of *L. angustifolia* essential oil is probably due to the synergistic destruction effect of linalool and linalyl acetate on the cell membrane. The components of *S. officinalis* essential oil, on the other hand, appear to be particularly effective against Gram-positive bacteria. The *L. angustifolia* and *S. officinalis* plants used in the study were cultivated in the Kırşehir region, and their essential oils were obtained from these samples. In this regard, the study is significant in terms of evaluating the antimicrobial potential of essential oils obtained from locally sourced plant material. In this respect, the study provides an important contribution in terms of revealing the antimicrobial potential of essential oils obtained from *L. angustifolia* and *S. officinalis* plants cultivated in the ecological conditions of Kırşehir. The findings show that the phytochemical profiles of these plants developing in the Kırşehir climate may play a decisive role in their antibacterial activities and provide a scientific basis for the potential applications of these essential oils in the field of health.

5. CONCLUSIONS

This study has demonstrated the antimicrobial effects of essential oils obtained from *Lavandula angustifolia* and *Salvia officinalis* plants cultivated in Kırşehir ecological conditions against both Gram-positive and Gram-negative

Ozturk¹ and et al.

bacteria. As a result of disk diffusion, MIC and MBC analyses, it was determined that especially *L. angustifolia* essential oil has a broad-spectrum and strong antibacterial effect. This effect is thought to be due to phytochemical components such as linalool and linalyl acetate contained in the essential oil. *S. officinalis* essential oil also showed a significant effect against some Gram-positive bacteria, especially *Staphylococcus aureus*. The fact that both essential oils were effective at low concentrations suggests that these natural compounds can be evaluated as alternative antimicrobial agents in the fight against multidrug-resistant pathogens. In conclusion, this study; It contributes to the literature by showing the strong antibacterial potential of the essential oils obtained from *L. angustifolia* and *S. officinalis* plants cultivated in Kırşehir province and also provides a scientific basis for advanced research on the use of these oils in the field of health.

Author Contributions: Concept and design K.O., E.B., and E.S.; data collection K.O., E.B., and E.S.; data analysis K.O. E.B. and E.S., interpretation of results K.O., Article - original draft K.O., Article - review and editing E.S. and E.B., and source provision was carried out by K.O., E.B., and E.S.

Conflict of Interest: There is no conflict of interest among the authors.

Data Availability: The data obtained in this study are presented in tables within the article and are clearly provided to support all analyses.

REFERENCES

- Abou Baker, DH, Amarowicz, R, Kandeil, A, Ali, MA, & Ibrahim, EA. (2021). Antiviral activity of Lavandula angustifolia L. and Salvia officinalis L. essential oils against avian influenza H5N1 virus. *Journal of Agriculture and Food Research*, 4, 100135.
- Alizadeh Behbahani, B, & Shahidi, F. (2019). Melissa officinalis essential oil: Chemical compositions, antioxidant potential, total phenolic content and antimicrobial activity. *Nutrition and food in health and disease*, 6(1), 17-25.
- Andrys, D, Kulpa, D, Grzeszczuk, M, & Bialecka, B. (2018). Influence of jasmonic acid on the growth and antimicrobial and antioxidant activities of Lavandula angustifolia Mill. propagated in vitro. *Folia Horticulturae*, 30(1), 3-13.
- Arnao, MB, Cano, A, & Acosta, M. (2001). The hydrophilic and lipophilic contribution to total antioxidant activity. *Food Chemistry*, 73(2), 239-244.
- Arzani, A, & Ashraf, M. (2016). Smart engineering of genetic resources for enhanced salinity tolerance in crop plants. *Critical Reviews in Plant Sciences*, 35(3), 146-189.
- Benbrahim, C, Barka, MS, Basile, A, Maresca, V, Flamini, G, Sorbo, S, Carraturo, F, Notariale, R, Piscopo, M, & Khadir, A. (2021). Chemical composition and biological activities of oregano and lavender essential oils. *Applied Sciences*, 11(12), 5688.
- Diekema, DJ, Hsueh, P-R, Mendes, RE, Pfaller, MA, Rolston, KV, Sader, HS, & Jones, RN. (2019). The microbiology of bloodstream infection: 20-year trends from the SENTRY antimicrobial surveillance program. *Antimicrobial agents and chemotherapy*, 63(7), 10.1128/aac. 00355-00319.
- Eliuz, EAE, Ayas, D, & Goksen, G. (2016). Antibacterial Actions and Potential Phototoxic Effects of Volatile oils of Foeniculum sp.(fennel), Salvia sp.(sage), Vitis sp.(grape), Lavandula sp.(lavender). *Natural and Engineering Sciences*, 1(3), 10-22.
- Ezema, CA, Ezeorba, TPC, Aguchem, RN, & Okagu, IU. (2022). Therapeutic benefits of Salvia species: A focus on cancer and viral infection. *Heliyon*, 8(1).
- Fredriksson-Ahomaa, M. (2009). Epidemiology of human Yersinia pseudotuberculosis infection.
- İşcan, G, Kirimer, N, Kürkcüoğlu, Mn, Başer, HC, & Demirci, F. (2002). Antimicrobial screening of Mentha piperita essential oils. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 50(14), 3943-3946.
- Jean, S-S, Harnod, D, & Hsueh, P-R. (2022). Global threat of carbapenem-resistant gram-negative bacteria. *Frontiers in cellular and infection microbiology*, 12, 823684.
- Jirovetz, L, Buchbauer, G, Denkova, Z, Stoyanova, A, Murgov, I, Schmidt, E, & Geissler, M. (2005). Antimicrobial testinas and gas chromatographic analysis of pure oxvaenated monoterpenes 1.8-cineole, α -terpineol, terpinen-4-ol and camphor as well as target compounds in essential oils of pine (Pinus pinaster), rosemary (Rosmarinus officinalis), tea tree (Melaleuca alternifolia). *Scientia Pharmaceutica*, 73(1), 27-39.
- Katar, D, Can, M, & Katar, N. (2020). Effect of different locations on essential oil content and chemical composition in Lavandin (Lavandula $\times$ intermedia Emeric ex Loisel.).
- Khan, HA, Ahmad, A, & Mehboob, R. (2015). Nosocomial infections and their control strategies. *Asian pacific journal of tropical biomedicine*, 5(7), 509-514.
- Lal, R, Pankhuri, G, Chanotiya, C, Anand, M, & Ranjana, M. (2020). Genetics of essential oil yield and their component traits in vetiver (Chrysopogon zizanioides (L.) Roberty). *J. Med. Plants. Studies*, 8(4), 56-64.

Ozturk¹ and et al.

- Mahjabeen, F, Saha, U, Mostafa, MN, Siddique, F, Ahsan, E, Fathma, S, Tasnim, A, Rahman, T, Faruq, R, & Sakibuzzaman, M. (2022). An update on treatment options for methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) bacteremia: a systematic review. *Cureus*, 14(11).
- Mohammadinejad, R, Shavandi, A, Raie, DS, Sangeetha, J, Soleimani, M, Hajibehzad, SS, Thangadurai, D, Hospet, R, Popoola, JO, & Arzani, A. (2019). Plant molecular farming: production of metallic nanoparticles and therapeutic proteins using green factories. *Green chemistry*, 21(8), 1845-1865.
- Mourabiti, F, Derdak, R, El Amrani, A, Momen, G, Timinouni, M, Soukri, A, El Khalfi, B, & Zouheir, Y. (2024). The antimicrobial effectiveness of *Rosmarinus officinalis*, *Lavandula angustifolia*, and *Salvia officinalis* essential oils against *Klebsiella pneumoniae* and *Pseudomonas aeruginosa* in vitro and in silico. *South African Journal of Botany*, 168, 112-123.
- Santajit, S, & Indrawattana, N. (2016). Mechanisms of antimicrobial resistance in ESKAPE pathogens. *BioMed research international*, 2016(1), 2475067.
- Soleimani, M, Arzani, A, Arzani, V, & Roberts, TH. (2022). Phenolic compounds and antimicrobial properties of mint and thyme. *Journal of Herbal Medicine*, 36, 100604.
- Xie, Y, Xu, Y, Chen, K, Chen, C, Huang, J, Chen, Q, & Shi, P. (2024). Microbiological and Antimicrobial Pattern of Diabetic Foot Ulcers at a Tertiary Care Center in East China. *The International Journal of Lower Extremity Wounds*, 23(1), 104-108.
- Yao, H, Liu, J, Jiang, X, Chen, F, Lu, X, & Zhang, J. (2021). Analysis of the clinical effect of combined drug susceptibility to guide medication for carbapenem-resistant *klebsiella pneumoniae* patients based on the kirby-bauer disk diffusion method. *Infection and drug resistance*, 79-87.



Araştırma Makalesi

BETONARME KIRIŞLI KONSOL DÖŞEMELERDE BASINÇ DONATISI ORANININ UZUN SÜRELİ DEFORMASYONLARA ETKİSİNİN İNCELENMESİ

INVESTIGATION OF THE EFFECT OF COMPRESSION REINFORCEMENT RATIO ON LONG-TERM DEFORMATIONS IN REINFORCED CONCRETE CANTILEVER BEAM-SLAB SYSTEM

Furkan BİRDAL^{1*} 0000-0002-2243-418X
 Oğuzhan YÜKSEL² 0009-0006-5886-2190
 Mehmet Mustafa ÖNAL³ 0000-0002-9682-2214

Makale Bilgileri	ÖZET
Anahtar Kelimeler: Kirişli Konsol Döşeme, Basınç Donatısı Oranı, Uzun Süreli Deformasyon, Sonlu Eleman Analizi	Günümüzde inşaat sektöründe yeni yapısal sistemlerin inşasına yönelik artan ihtiyaç, çeşitli yenilikçi mimari yaklaşımların ortaya çıkmasına neden olmaktadır. Bununla birlikte, bir yapının taşıyıcı sisteminin tasarımında öncelikli kural statik emniyet ilkesidir. Bu nedenle, mimari açıdan avantajlar sunan bir tasarımın statik açıdan detaylı bir şekilde analiz edilmesi büyük önem taşımakta ve yapının ekonomik ömrü açısından da önem arz etmektedir. Bu makalede, mimari avantajlar sunan kirişli konsol döşemelerde basınç donatısı oranının uzun süreli deformasyonlara etkisi ele alınmıştır. İnşaat sektöründe yapı tasarımı ve uygulamalarında yenilikçi yaklaşımlar geliştirilse de sahada geleneksel yöntemlerin daha yaygın olarak uygulandığı gözlemlenmektedir. Uzun süreli deformasyonlar belirli mühendislik yaklaşımlarıyla tahmin edilebilmekle birlikte, öngörülemeyen bazı belirsizlikler içerebildiğinden, güvenli tasarım açısından dikkate alınmaları gerekmektedir. Zira birçok parametre, uzun süreli deformasyonları önemli ölçüde etkileyebilmektedir. Bu çalışma kapsamında, sahada uygulama karşılığı olan bir tasarım yaklaşımı analiz edilmiştir. Gerekli izinler alınarak, iki katlı ve kirişli konsol çıkması bulunan bir yapı modellenmiştir. Yapının yapısal sistem analizi, sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Tasarımda yer alan kirişli konsol döşemelerin uzun süreli deformasyon değerlendirmesi, TS500 Betonarme Elemanlarda Kullanılabilirlik bölümünde yer alan formülasyonlar esas alınarak yapılmıştır. Bu formülasyonlarda, kesitteki basınç donatısı oranı değiştirilerek uzun süreli deformasyonların hangi oranda etkilendiği sayısal olarak incelenmiştir. Basınç donatısı oranının

^{1*} Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, fbirdal@ahievran.edu.tr

² Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, yuksel.oguzhan@ogr.ahievran.edu.tr

³ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, mmonal@ahievran.edu.tr

Sorumlu yazar: fbirdal@ahievran.edu.tr

Başvuru tarihi:24.06.2025; Düzeltme Tarihi 30.06.2025; Kabul Tarihi 08.07.2025

taşıma gücü açısından yeterli olduğu durumlarda dahi, kullanılabilirlik sınır durumu açısından taşıdığı önem değerlendirilmiştir. Çalışma sonucunda, TS500 standardında belirtilen sehim sınırları çerçevesinde; ani sehim ve uzun süreli sehim yönünden değerlendirmeler yapılmıştır. Bu makaleyle, günümüzde mimari açıdan tercih edilebilirliği artmakta olan kirişli konsol döşemeli yapı tasarımlarında, statik emniyetin artırılmasına yönelik yaklaşımlara katkı sağlanması amaçlanmıştır.

Article Info	Abstract
Keywords: Reinforced Concrete Cantilever Slab with Beams, Compression Reinforcement Ratio, Long-Term Deformation, Finite Element Analysis	With the increasing demand for the construction of new structural systems in today's construction industry, various innovative architectural approaches have emerged. Nevertheless, the foremost rule in the design of a structural system remains the principle of structural safety. Therefore, conducting a detailed structural analysis of a design that offers architectural advantages is of great importance—not only for ensuring safety but also for maximizing the service life of the structure. This study investigates the effect of the compression reinforcement ratio on long-term deformations in cantilever slabs with beams, which offer certain architectural benefits. Although innovative approaches in design and implementation continue to develop in the construction industry, traditional methods are still more commonly used in practice. While long-term deformations can be estimated using engineering approaches, they may also involve unforeseen uncertainties, making them a critical consideration for safe design. Many parameters can significantly influence long-term deformations. In this context, the study focuses on a design approach that corresponds to real-life construction practices. A two-story structure featuring cantilever beams was modeled upon obtaining the necessary permissions. The structural system was analyzed using the finite element method. Long-term deformation assessments of the cantilever slabs were carried out in accordance with the formulations provided in the “Serviceability of Reinforced Concrete Elements” section of TS500. By varying the compression reinforcement ratio in the cross-section, the extent to which long-term deformations are affected was examined numerically. Even if the compression reinforcement ratio satisfies strength requirements, its significance in terms of serviceability limit states was also evaluated. As a result, deflection limits specified in the TS500 standard were used to assess both immediate and long-term deflections. It is hoped that this study will contribute to enhancing structural safety in the design of cantilever slab systems, which are increasingly preferred for their architectural appeal in contemporary practice.

1. GİRİŞ

Betonarme yapıların taşıyıcı sistemlerinin tasarımında taşıma gücü ve kullanılabilirlik önemli sınır durumlar olarak tanımlanmaktadır. Yapısal sistemlerin tasarımında yenilikçi mimari yaklaşımların artmasıyla birlikte, deformasyonlardan kaynaklanan kullanılabilirlik sınır durumu, tasarımda belirleyici bir faktör haline gelmiştir. TS500 standardında 13. Bölümde Betonarme Elemanlarda Kullanılabilirlik kavramı ifade edilmiştir. Bu tanımda özet olarak yapıda ve yapı elemanlarında taşıma gücü açısından yeterliliğin sağlanmasının yanı sıra yapısal elemanlarda veya yapının tamamında sistemin aşırı şekil ve yer değiştirmeye neden olmayacak biçimde tasarlanmasının gerektiği belirtilmiştir (TS500,2020). Bu kapsamda, ani sehim sınırlandırılmasında, yapısal elemanlarda oluşan eğilmede çatlama momenti ve elemanda oluşan maksimum moment dikkate alınırken uzun süreli sehimlerde ani sehime ilave olarak sünme ve büzülme etkisi ile oluşan ilave deformasyonlar da göz önüne alınmaktadır (Denklem 1, Denklem 2).

$$\delta_t = \delta_i + \delta_{ig} \lambda$$

Denklem 1 (TS500)

$$\lambda = \frac{\gamma_t}{1 + 50\rho'}$$

Denklem 2 (TS500)

δ_t : Toplam sehım

δ_i : Ani sehım

δ_{ig} : Kalıcı yüklerden oluşan ani sehım

γ_t : Kalıcı yük süre katsayısı

λ : Kalıcı sehım katsayısı

ρ' : Basınç donatısı oranı

Kalıcı yük etkisinde oluşan bu deformasyonlarda, kalıcı yük süre kat sayısı, kesitte bulunan basınç donatısı parametrelerinden oluşan λ sehım kat sayısı hesaplanarak toplam sehım belirlenmektedir. İnşaat sektöründe güncel tasarımların taşıyıcı sistem üzerindeki etkilerinin kısa ve uzun süreli davranış açısından ortaya konması yapının ekonomik ömrü açısından önemli hale gelmiştir. Betonarme yapılarda deformasyonların doğru bir şekilde tahmin edilmesi ve analizi, yapının servis ömrü ve statik güvenliği açısından etkilidir. Günümüzde bilgisayar teknolojisinin gelişmesi, ileri analiz ve modelleme teknikleri göz önüne alındığında tasarımcı mühendisler açısından deformasyonların daha gerçekçi tahmini mümkün hale gelmiştir. Ülkemizde kullanılan statik tasarım yazılımları deformasyonlar açısından TS500'de verilen denklemleri esas almaktadır. Bundan dolayı makalede sonlu elamanlar analizi sonucu yapılan değerlendirmelerde Denklem 1 ve 2 kullanılmıştır. Betonarme yapılarda deformasyon sınırları hesabında uluslararası standartlara yönelik yapılan araştırmalarda, uzun süreli sehımler açısından sünme ve büzülme etkilerine bağlı deformasyonların hesabı için bir çarpanın kullanıldığı görülmüştür (ACI,2004). Betonarme elemanlarda ve yapılarda deformasyon analizinin önemine yönelik yapılan literatür taramasında bu hususun tasarımda önemini vurgulayan araştırmalar incelenmiştir. (Al-Sunna ve ark.,2012), Fiber polimerler ile güçlendirilmiş kiriş ve döşemelerin deformasyon davranışını araştırdıkları makalede deneysel bir çalışma gerçekleştirmişlerdir. Yirmi dört betonarme fiber polimerler ile güçlendirilmiş kiriş ve döşeme numunesi üzerinde gerçekleştirdikleri deneysel araştırmada, fiber polimerler ile güçlendirilmiş betonarme elemanların tasarımında kullanılabilirlik sınır durumunun önemli olduğu ancak bu kapsamda gerçekleştirilen analizlerin uzun sürdüğü ve tasarım için basitleştirilmiş yöntemlere ihtiyaç duyulduğu vurgulanmıştır. Ayrıca çalışmada kısa süreli deformasyonların tahmin edilmesinde çatlama momentinin hesaplanmasının da önemli olduğu belirtilmiştir. Bu çalışmada her ne kadar güçlendirilmiş betonarme elemanlarda deformasyon analizleri ele alınmış olsa da kullanılabilirlik sınır durumu için yapılan hesaplamaların basitleştirilmiş bir yaklaşımla değerlendirilebileceği görülmüştür (Al-Sunna ve ark.,2012). Makalede konsol kiriş-döşeme sistemlerinde TS500'de verilen denklemlerin tasarımcılar açısından pratik hesaplamaya olanak sağladığı değerlendirilmiştir. Ayrıca TS500'e göre ani sehımlerinin hesabında da çatlama-eğilme momentinin dikkate alındığı yukarıda detaylandırılmıştır. Literatürde uzun süren deformasyonların oluşumunun sünme ve büzülme etkisi parametrelerine bağlı olduğu belirtilmektedir. Sünme ve büzülme etkileri birçok farklı etkene bağlı olarak değişebilmektedir. Bu etkiler, uzun süreli deformasyonlar açısından oldukça önemlidir. Uzun süreli deformasyonlar, sadece kullanılabilirlik sınır durumu açısından değil taşıma gücü açısından da sorunlar ortaya çıkarabilmektedir. Artan deformasyonlar ile ön görülemeyen kesit tesirleri oluşabilmekte ve bu durum taşıma gücünü olumsuz etkileyebilmektedir. Bununla birlikte uzun süreli deformasyonlarda çatlaklar gözlemlenebilmektedir. Tüm bu etkiler gözle görülebilir deformasyon ile birleşince hem statik emniyet açısından hem de mimari kullanım açısından olumsuz sonuçlar ortaya çıkarabilmektedir. Başka bir çalışmada (Loewe ve ark., 2023), sehım hesaplama yöntemlerinin kesin sonuçlar vermediğini ve bu kapsamda gerçekleştirilecek analizlerin uzun sürdüğünü belirtmişlerdir. Buna rağmen sehım hesaplamalarının tasarımın erken aşamalarında hesaplanmasının gerekli olduğunu, eğilme etkisi altındaki betonarme elemanların boyutlandırılmasında bu etkinin dikkate alınması gerektiğini vurgulamışlardır. Döşemeler gibi eğilme elemanlarında; minimum kalınlık, döşemenin açıklığı, narinlik oranı gibi parametrelerin deformasyon açısından önemli olduğu ifade edilmiştir. Çalışmada, betonarme döşemelerdeki uzun süreli etkilere göre döşeme kalınlığının belirlenebilmesine yönelik yaklaşımların olduğu ancak farklı yöntemlerle güçlendirilmiş döşemelerde pratik hesaplamaya yönelik yaklaşımların yeterli olmadığı belirtilmiştir (Loewe ve ark., 2023). Ayrıca literatürde, uzun süreli deformasyon etkilerinin dikkate alındığı eğilme altındaki elemanların tasarımına yönelik çeşitli deformasyon formülasyonları da mevcuttur. Bu yöntemlerle uzun süreli deformasyon parametresi hesaplanabilmektedir. Literatürde Rangan-Scanlon yöntemi olarak ifade edilen bu yaklaşımda kalıcı yükler için uzun süreli deformasyon çarpanı elde edilmektedir. Uzun süreli deformasyon çarpanının, TS500'de verilen

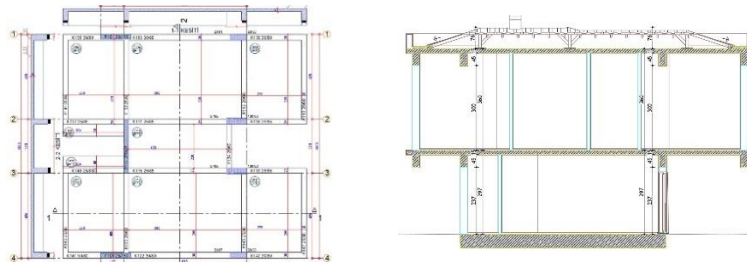
Birdal¹ ve ark.

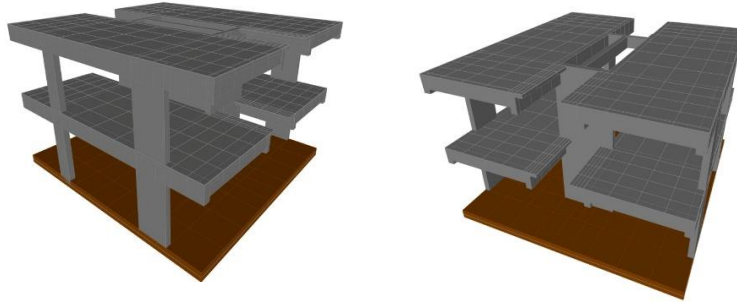
denklemden olduğu gibi süre faktörü ve basınç donatısı oranına bağlı olduğu görülmüştür. Ancak bu yöntemde toplam deformasyon hesabında sınır şartlarına bağlı deformasyon kat sayısı, efektif atalet momenti, ilave hareketli yük gibi parametreler de hesaplamalarda dikkate alınmaktadır (Loewe ve ark., 2024). Başka bir çalışmada (Ahmadi-Nedushan ve ark.,2024), tek yönlü döşemelerde malzeme maliyeti optimizasyonu yapmışlardır. Sehim sınırlandırmalarının döşemelerin servis yükleri altındaki ani ve uzun süreli deformasyonlarını kontrol ederek yapısal bütünlüğün korunmasında önemli olduğunu belirtmişlerdir. Çalışmada kullandıkları optimizasyon yöntemi ile konsol döşemelerde; döşeme kalınlığı, donatı çapı ve donatı aralığı parametreleri dikkate alınarak maliyet optimizasyonunu etkili bir şekilde yapabildiklerini göstermişlerdir. Sürekli mesnetlenen döşemelerin yük dağılımı ve azaltılmış eğilme momentleri etkisine bağlı olarak ekonomik tasarımın yapılabileceğini ortaya koymuşlardır (Ahmadi-Nedushan ve ark.,2024). Dolayısıyla konsol döşemelerin davranışında, döşeme kenarlarının mesnetlenmesinin yük dağılımı açısından önemli olduğu anlaşılmaktadır. Makalede örnek olarak seçilen tasarımda konsol döşemelerin dört kenarı da kirişlere mesnetlenmektedir.

Döşeme çalışma yönü doğrultusundaki kenarları konsol kirişlere mesnetlenmeyen tek doğrultulu konsol döşemelerin kısa ve uzun süreli deformasyonlar açısından daha hassas olduğu söylenebilecektir. Makalede yapılan analizlerde sonlu elemanlar yöntemi kullanılmış, ancak sadece ani deformasyonların belirlenebilmesine yönelik doğrusal analiz yapılmıştır. Literatürde çatlak etkilerinin de dikkate alındığı doğrusal olmayan analiz yaklaşımları ile uzun süreli deformasyonlar daha gerçekçi belirlenebilmektedir. Ancak çatlak etkilerinin de göz önüne alındığı doğrusal olmayan analiz yaklaşımları uzun vakit alabilmekte ve yüksek bilgisayar kapasitesini gerektirebilmektedir. Bu sebeple uzun süreli deformasyonlar açısından güvenli tarafta kalan pratik hesap yaklaşımlarının efektif olduğu belirlenmiştir. (Pecic, Masovic & Stosic,2023) yapmış oldukları çalışmada betonarme elemanların deformasyon kontrolünde açıklık/yükseklik oranının etkisini incelemişlerdir. Makalelerinde deformasyon kontrolü için yeni bir yaklaşım sunmuşlardır. Bu parametrik formülasyon içerisinde; kesit boyutlarını, çekme ve basınç donatılarının pozisyonlarını, betonun uzun süre ve mekanik parametrelerini esas aldıklarını belirtmişlerdir. Ayrıca önerdikleri bu parametrik formülasyona yönelik örnek analizler yapmışlardır. Bu formülasyonun tasarım açısından basit ve uygulanabilir olduğunu göstermişlerdir. Çalışmada, uzun süreli deformasyonların sadece betonun sünme ve büzülme etkileri gibi uzun süre parametrelerine bağlı olmadığı; tasarımın, donatılandırmanın ve eğilme elemanı geometrik özelliklerinin sonucu değiştirebildiği görülmüştür (Pecic, Masovic & Stosic,2023). Makalede uzun süreli sehimler açısından TS500’de verilen denklemlerde kalıcı yük süre katsayısı (γ_t) tablo olarak verildiği için hesaplamalarda tasarıma bağlı olan basınç donatısı oranı değişken olarak seçilmiştir. (γ_t) kalıcı yük süre katsayısı ise TS500’de 5 yıl ve daha fazla yükleme süresi için “2” olarak dikkate alınmıştır. Makale kapsamında döşeme basınç donatısı oranı değiştirilerek uzun süreli deformasyon hesabı yapılmıştır. Sehim sınırlarının karşılaştırılmasında ise TS500’de verilen Çizelge 13.3 esas alınmıştır. Basınç donatısı oranının uzun süreli deformasyonlara olan etkisi örnek bir modelleme çalışması üzerinden incelenmiştir. Bu deformasyonlar literatür çalışmalarından da görüleceği üzere sadece konsol döşemelerle ilgili değildir. Birçok parametreye bağlı olan bu etkinin matematiksel olarak ortaya konulması oldukça kompleks bir problemidir. Uzun süreli deformasyonların yapının bütünü açısından önemi dikkate alındığında, bu analizin yapısal tasarımda statik emniyet açısından basitleştirilmiş yaklaşımlarla göz önüne alınması oldukça önemlidir. Makalede, günümüzde mimari açıdan kullanımı yaygınlaşan kirişli konsol döşemeler dikkate alınmıştır. Literatür araştırmalarında konsol kirişli döşemelerde uzun süreli deformasyon etkilerinin irdelendiği ve basınç donatısının uzun süreli deformasyonlara yönelik etkisinin analitik olarak ele alındığı çalışmaların oldukça sınırlı olduğu belirlenmiştir. Bu kapsamda makale ile tasarım yapan mühendisler ve betonarme elemanlarda uzun süreli deformasyonları inceleyen araştırmalara katkı sunabilmesi amaçlanmıştır.

2. MATERYAL VE YÖNTEM

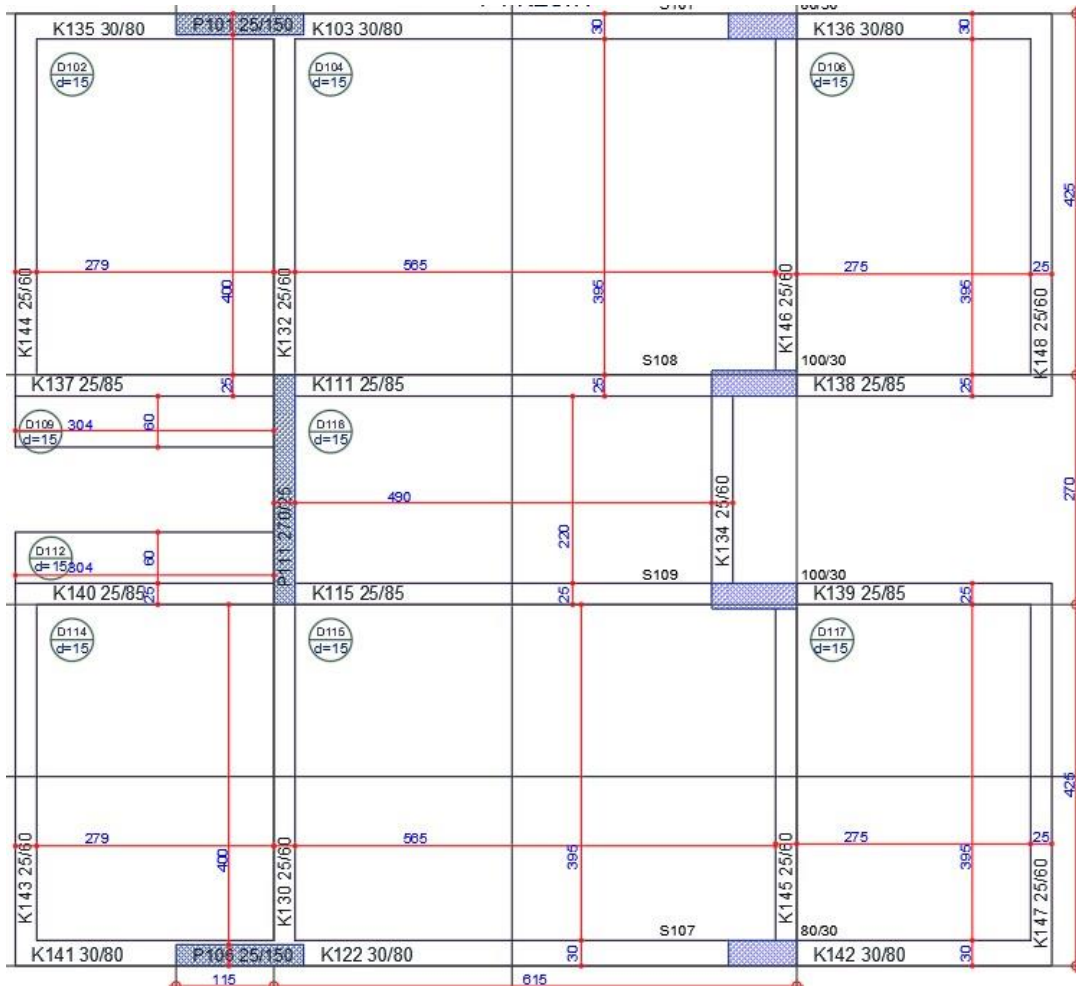
Çalışma kapsamında zemin + 1 normal kattan oluşan ve iki yönde kirişli konsol döşemelere sahip bir tasarım gerekli izinler alınarak modellenmiştir (Şekil 1).





Şekil 1. Kirişli konsol döşemeli örnek yapı modeli (CSI,2025)

Modellemede sonlu eleman yöntemi kullanılmıştır. Konsol döşemeler, farklı genişlik ve yüksekliğe sahip kirişlere mesnetlenmektedir (Şekil 2).



Şekil 2. Örnek yapı kalıp planı

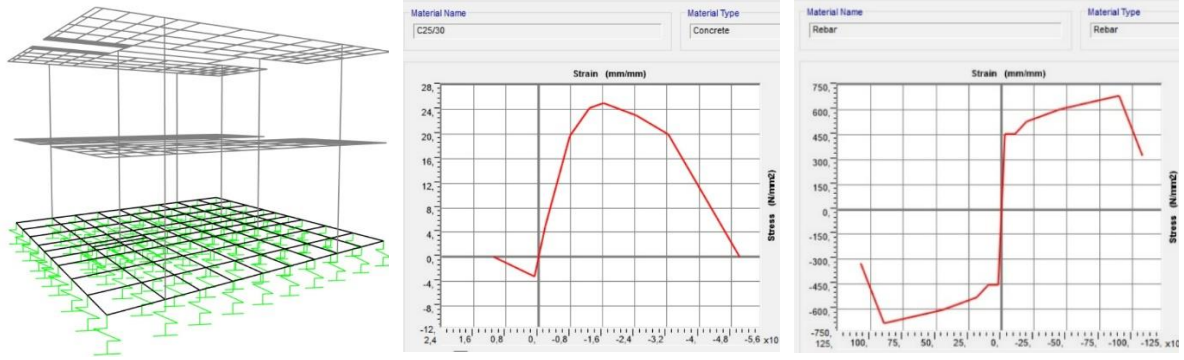
Yazılım olarak SAP2000 V.26.2.0 (License owner, Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi) kullanılmıştır (CSI,2025). Zemin etkileri için yay tanımlaması yapılmış, sistem yapı zemin etkileşimli olarak analiz edilmiştir (Şekil 2). TS498'e göre döşeme yükleri tanımlanmış (konsollarda hareketli yük 500kg/m²), duvar yükleri ise projeye uygun şekilde kirişler üzerine etkilmiştir. Yapı yatay yükler, düşey yükler ve TS500 1.4G + 1.6Q ve G + Q + E yük kombinasyonlarına göre analiz edilmiştir. Deprem parametreleri, zemin özellikleri, malzeme özellikleri ve kesit özellikleri tanımlandıktan sonra sonlu eleman modeli analiz edilmiştir (Şekil 3-4).

Birdal¹ ve ark.

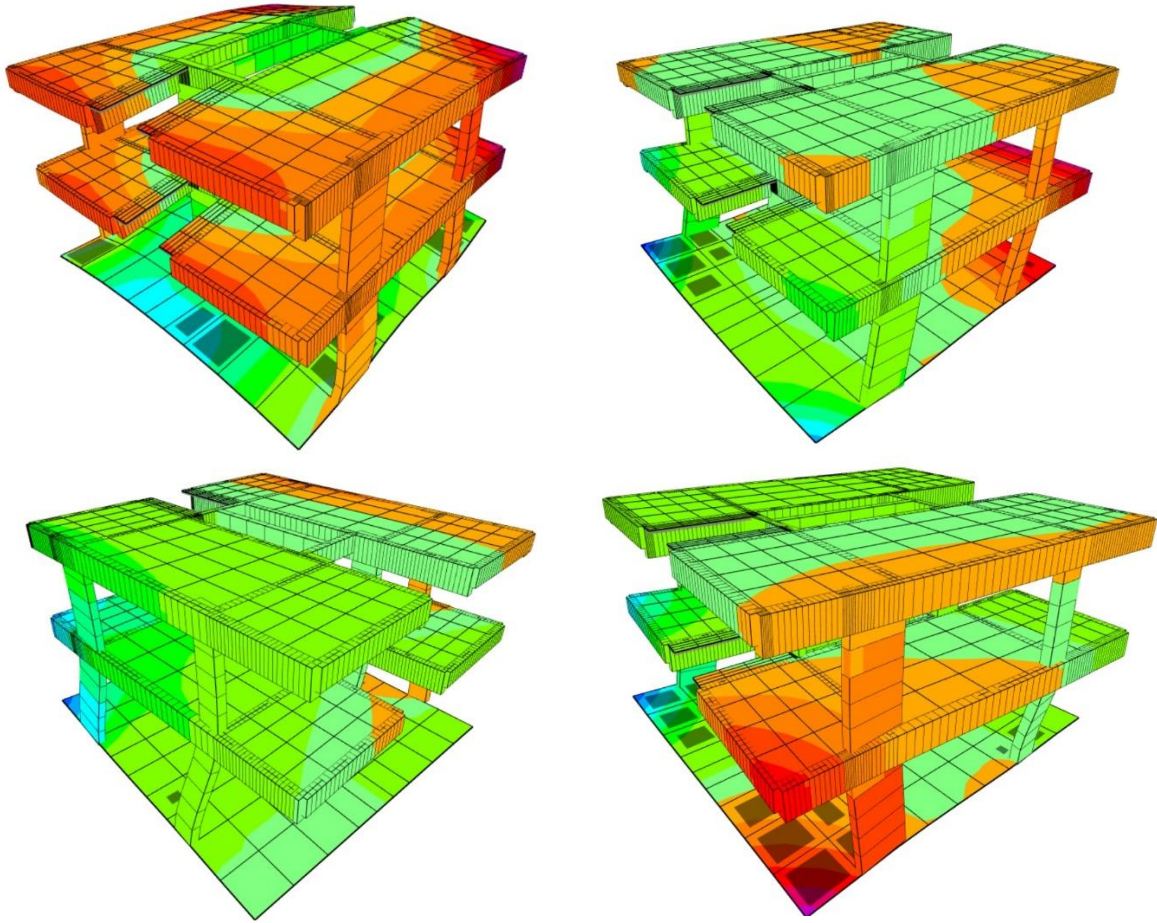
Analiz sonuçlarında konsol döşemelerin uç noktalarındaki maksimum deformasyon değerleri belirlenmiştir. TS500'de sünme ve büzülme etkisini dikkate alan ek deformasyonların hesabı Denklem 1 ile yapılmaktadır. TS500'de daha kesin hesaba gerek duyulmayan durumlarda bu denklemin kullanılabileceği belirtilmektedir.

$$\delta_t = \delta_i + \delta_{ig} \lambda$$

Denklem 1 (TS500)



Şekil 3. Zemin yay modeli ve malzeme özellikleri (CSI,2025)



Şekil 4. Yapı modelinin farklı yük kombinasyonlarındaki analiz deformasyon şekilleri (CSI,2025).

Denklem 1'de uzun süreli etkileri dikkate alan toplam deformasyonun, kalıcı ve hareketli yüklerden oluşan ani deformasyon (δ_i) ve kalıcı yüklerden oluşan deformasyonun (δ_{ig}) kalıcı sehim kat sayısı ile (λ) çarpımının

Birdal¹ ve ark.

toplamından oluştuğu görülmektedir. Çalışmada ani sehim ve kalıcı yüklerden oluşan sehim değerleri için SAP2000 analizi sonuçları esas alınmıştır. Bu sehim değerleri yapı elemanlarının geometrik ve malzeme özelliklerine, yük seviyesine göre değişmektedir. Burada donatı detay tasarımı ile ilgili parametre ise λ çarpanıdır. λ çarpanı kalıcı yük süre kat sayısına ve kesitte bulunan basınç donatısı oranına göre değişkenlik göstermektedir. Denklem 2’de λ çarpanının kalıcı yük süre kat sayısının (γ_t) $1 + 50 \times \rho'$ (kesitte bulunan basınç donatısı oranı) bölümünden elde edildiği görülmüştür.

$$\lambda = \frac{\gamma_t}{1 + 50\rho'}$$

Denklem 2 (TS500)

Makale kapsamında deformasyon hesabı yapılan döşemelerin basınç donatısı oranı taşıma gücü açısından yeterli olsa da bu oranın ve değişiminin uzun süreli deformasyonlara etkisi sayısal olarak incelenmiştir. Burada kalıcı yük süre kat sayısı (γ_t), 2 olarak 5 yıl ve daha fazla yükleme süresi için belirlenmiştir. İlk olarak basınç donatısı oranı için 0,0021 değeri dikkate alınarak SAP2000 (CSI,2025)sonucunda elde edilen deformasyon değerleri kullanılarak toplam deformasyonlar konsol döşeme uçlarında hesaplanmıştır. Bu deformasyonlar TS500’de sehim sınırları için verilen çizelge 13.3’teki $l_n/240$ değeri ile kıyaslanarak sınırlar içerisinde olup olmadığı kontrol edilmiştir. Burada $l_n/240$ seçilmesinin sebebi deformasyon analizi yapılan döşemenin “büyük sehimden etkilenebilecek elemanlar taşıyan” kategorisinde yer almaması şeklindedir. Eğer döşeme büyük sehimlerden etkilenebilecek elemanlar taşıyan ve bölme duvar bulunan bir döşeme ise sınır değer $l_n/480$ seçilmesi gerekmektedir. Makalede referans olarak belirlenen basınç donatısı oranı ilave mesnet donatıları ile %50, %75, %100, %150, %200 artırılarak uzun süreli deformasyonlar belirlenmiştir. Basınç donatısı oranının, taşıma gücü açısından yeterli olsa da uzun süreli deformasyonlar açısından yeterli olamayabileceği ve bu deformasyonlar dikkate alınarak TS500’de verilen hesaplama yaklaşımı ile analiz edilip artırılmasının gerekli olabileceği görülmüştür.

3. BULGULAR

Analiz sonucunda deformasyonlar açısından kritik öneme sahip yapının 1. ve 2. katında 20 noktada hareketli (Q) ve kalıcı yüklerden (G) oluşan ani sehim, sadece kalıcı yüklerden oluşan ani sehim, kalıcı sehim kat sayısı λ değeri dikkate alınarak uzun süreli sehim değerleri hesaplanmıştır. Döşemelerin net açıklık l_n değerleri dikkate alınarak toplam sehim ile bu değer kıyaslanmıştır. İlk olarak basınç donatısının 0,0021 değeri için λ değeri 1,81 olarak hesaplanmıştır. Kıyaslama sonucu Tablo 1’de verilmiştir.

Tablo 1. 0,0021 basınç donatısı oranında toplam sehim ve kıyaslama.

Döşeme/ Düğüm Noktası	(G+Q) Ani Sehim	(G) Ani Sehim	λ	Uzun Süreli Sehim	Toplam Sehim	l_n (mm)	$l_n/240$
DZ02 (22)	3,71	3,12	1,81	5,65	9,36	2600	10,83
DZ02 (30)	3,88	3,13	1,81	5,67	9,55	2600	10,83
DZ09 (325)	3,97	3,21	1,81	5,81	9,78	2850	11,88
DZ14 (31)	3,66	3,08	1,81	5,57	9,23	2600	10,83
DZ14 (28)	3,94	3,17	1,81	5,74	9,68	2600	10,83
DZ12 (327)	4,07	3,29	1,81	5,95	10,02	2850	11,88
DZ06(21)	4,72	3,90	1,81	7,06	11,78	2650	11,04
DZ06(23)	2,78	2,32	1,81	4,20	6,98	2650	11,04
DZ17(26)	2,80	2,34	1,81	4,24	7,04	2650	11,04
DZ17(33)	4,64	3,83	1,81	6,93	11,57	2650	11,04
D102 (244)	3,81	3,18	1,81	5,76	9,57	2790	11,63
D102 (248)	3,92	3,08	1,81	5,57	9,49	2790	11,63
D109 (252)	3,95	3,10	1,81	5,61	9,56	3040	12,67
D114 (262)	3,76	3,14	1,81	5,68	9,44	2790	11,63
D114 (258)	3,97	3,11	1,81	5,63	9,60	2790	11,63
D112 (254)	4,03	3,15	1,81	5,70	9,73	3040	12,67
D106(264)	4,87	3,94	1,81	7,13	12,00	2750	11,46
D106(268)	2,84	2,31	1,81	4,18	7,02	2750	11,46
D117(269)	2,84	2,32	1,81	4,20	7,04	2750	11,46
D117(273)	4,83	3,91	1,81	7,08	11,91	2750	11,46

Birdal¹ ve ark.

Tablo 1’den görüleceği üzere 0,0021 basınç donatısı oranı bazı düğüm noktalarında taşıma gücü açısından yeterli olmasına rağmen uzun süreli deformasyonlar açısından sınır değeri aşmıştır. Basınç donatısı oranı değeri %25 artırılarak 0,0026 değeri için hesaplama yapıldığında aynı düğüm noktalarında sınır değerini aştığı görülmüştür. Sonrasında sırasıyla %50 ($p=0,0032$), %75 ($p=0,0036$), %100 ($p=0,0042$) değerleri için de denenmiş ancak sehim sınırı aynı düğüm noktalarında sağlanamamıştır. Ancak basınç donatısı oranı %150 artırıldığında uzun süreli deformasyonların sehim sınırı altında kaldığı belirlenmiştir (Tablo 2). Bu durum tasarımıda Ø12/400 olarak belirlenen mesnet donatısına ilave olarak Ø12/200 oranında mesnette basınç donatısının artırılması ile sağlanabilmektedir.

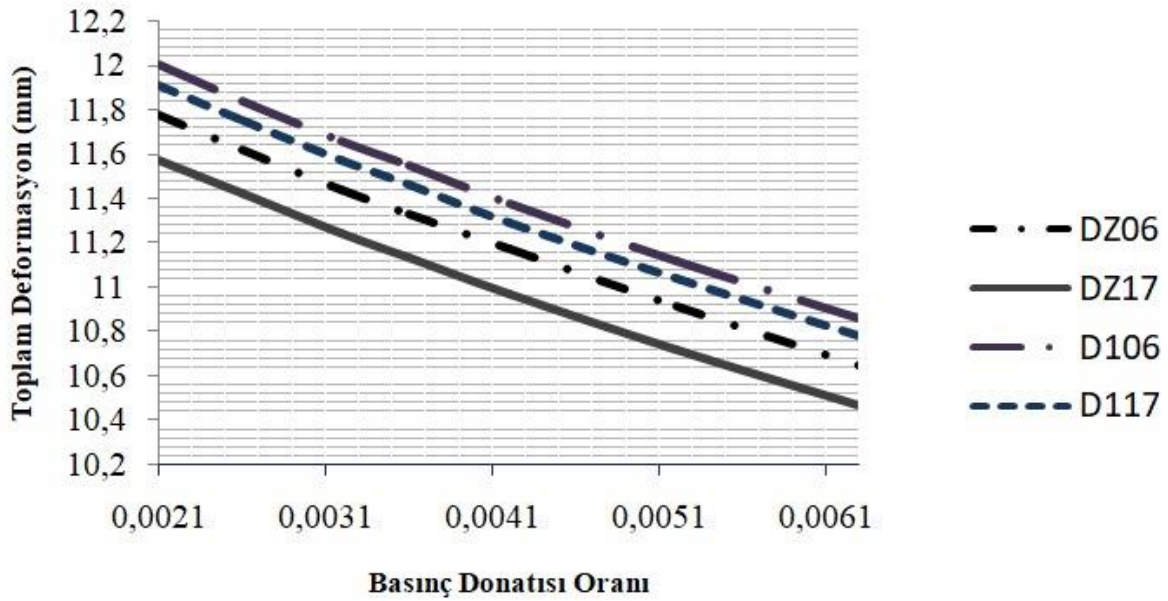
Tablo 2. 0,0052 basınç donatısı oranında toplam sehim ve kıyaslama.

Döşeme/ Düğüm Noktası	(G+Q) Ani Sehim	(G) Ani Sehim	λ	Uzun Süreli Sehim	Toplam Sehim	ln (mm)	ln /240
DZ02 (22)	3,71	3,12	1,59	4,95	8,66	2600	10,83
DZ02 (30)	3,88	3,13	1,59	4,97	8,85	2600	10,83
DZ09 (325)	3,97	3,21	1,59	5,10	9,07	2850	11,88
DZ14 (31)	3,66	3,08	1,59	4,89	8,55	2600	10,83
DZ14 (28)	3,94	3,17	1,59	5,03	8,97	2600	10,83
DZ12 (327)	4,07	3,29	1,59	5,22	9,29	2850	11,88
DZ06(21)	4,72	3,9	1,59	6,19	10,91	2650	11,04
DZ06(23)	2,78	2,32	1,59	3,68	6,46	2650	11,04
DZ17(26)	2,80	2,34	1,59	3,71	6,51	2650	11,04
DZ17(33)	4,64	3,83	1,59	6,08	10,72	2650	11,04
D102 (244)	3,81	3,18	1,59	5,05	8,86	2790	11,63
D102 (248)	3,92	3,08	1,59	4,89	8,81	2790	11,63
D109 (252)	3,95	3,10	1,59	4,92	8,87	3040	12,67
D114 (262)	3,76	3,14	1,59	4,98	8,74	2790	11,63
D114 (258)	3,97	3,11	1,59	4,94	8,91	2790	11,63
D112 (254)	4,03	3,15	1,59	5,00	9,03	3040	12,67
D106(264)	4,87	3,94	1,59	6,25	11,12	2750	11,46
D106(268)	2,84	2,31	1,59	3,67	6,51	2750	11,46
D117(269)	2,84	2,32	1,59	3,68	6,52	2750	11,46
D117(273)	4,83	3,91	1,59	6,21	11,04	2750	11,46

Bu kapsamda deformasyonlar açısından kritik öneme sahip yapısal elamanlarda analiz sonucu elde edilen donatılar taşıma gücü açısından yeterli olsa dahi, uzun süreli deformasyonlar açısından analiz edilmesi gerektiği makalede gösterilmiştir. Bununla birlikte Tablo 2 incelendiğinde basınç donatısı oranı %150 artırılmasına rağmen uzun süreli toplam deformasyonların sınır değer içerisinde ancak bu değere çok yakın olarak hesaplanması, uzun süreli deformasyonların hesabında kritik öneme sahip yapısal elemanlar açısından daha ileri hesaplama yaklaşımlarının gerekebileceğini göstermiştir. Tablo 3’te kat planında maksimum deformasyon oluşan döşemeler için basınç donatısı oranına göre değişen deformasyon değerleri ve Şekil 5’te bunun grafiksel gösterimi verilmiştir. Çalışmada uzun süreli deformasyonlar açısından günümüz mimarisinde sıkça rastlanılan kirişli konsol döşemeler örnek olarak seçilmiştir. Ancak makalenin giriş bölümünde de belirtildiği üzere uzun süreli deformasyonların hesabı tüm yapısal elemanlar ve yapının tamamı açısından önemli olabilmektedir.

Tablo 3. Basınç donatısı oranına göre değişen deformasyon değerleri.

Döşeme		Basınç Donatısı Oranı (ρ)						
		0,0021	0,0026	0,0032	0,0036	0,0042	0,0052	0,0063
DZ06	Toplam Deformasyon (mm)	11,78	11,62	11,44	11,33	11,17	10,91	10,65
DZ17		11,57	11,42	11,24	11,13	10,97	10,72	10,47
D106		12	11,84	11,66	11,55	11,38	11,12	10,86
D117		11,91	11,75	11,57	11,46	11,29	11,04	10,78



Şekil 5. Toplam Deformasyon – Basınç Donatısı Oranı değişimi.

4. TARTIŞMA

Makale kapsamında betonarme kirişli konsol döşemelerde basınç donatısı oranının uzun süreli deformasyonlar açısından önemi örnek bir modelleme ve analiz çalışması ile ortaya konmuştur. Gerekli izinler alınarak örnek bir yapı modellenmiş, bu yapısal modelde deformasyonlar (sehim) açısından kritik düğüm noktaları belirlenmiştir. Bu düğüm noktalarındaki uzun süreli toplam deformasyon hesabı TS500'e göre gerçekleştirilmiştir. Değişen basınç donatısı oranlarında TS500'de verilen deformasyon sınırının sağlanıp sağlanmadığı incelenmiştir. Tasarımda verilen mevcut basınç donatısı oranına göre hesaplanan kalıcı sehim katsayısı değerinde yapısal sistemin döşemelerinin bazı düğüm noktalarında sınır değerin aşıldığı görülmüştür. Basınç donatısı %25, %50, %75, %100 artırıldığında yine sehim sınırlarının aşıldığı tespit edilmiştir. Ancak basınç donatısı oranı %150 artırıldığında ise sehim sınırlarının altında kalan değerler elde edilebilmiştir. Bu oran makaleye konu olan yapısal tasarım için elde edilmiştir. Tasarımın, konsol döşeme boyutlarının, yapı yüklerinin ve diğer parametrelerin değişiminde basınç donatısındaki artış oranı da değişebilecektir. Makalede örnek bir yapısal tasarımda bulunan konsol döşemelerde uzun süreli deformasyonun basınç donatısı ile değişimi incelenmiştir. Çalışmada uzun süreli deformasyonlar açısından basınç donatısı oranının önemi yapılan analizler ile belirlenmiştir. Yenilikçi mimari tasarımlarda yapısal sistemin taşıma gücü açısından analizi yanında, kullanılabilirlik sınır durumu açısından da önemi görülmüştür. Uzun süreli deformasyonlar bazı durumlarda statik emniyet ve yapının ekonomik ömrü açısından olumsuz sonuçlar ortaya çıkarabilecektir. TS500 yönetmeliği çerçevesinde pratik bir yöntemle bu deformasyonlar hesaplanabilmektedir. Ancak uzun süreli deformasyon değerlerinin çok daha kritik öneme sahip olduğu yapısal sistemler açısından ileri modelleme ve analiz yöntemlerinin kullanılabilmesi düşünülmüştür. Makalenin inşaat sektöründe tasarım aşamasında çalışan ve saha uygulamalarında yetkili mühendislere, betonarme yapılarda uzun süreli deformasyonların analizinde ileri modelleme ve hesaplama konularını esas alan bilimsel araştırmalara katkı sunabilmesi amaçlanmıştır.

Yazar Katkısı

Furkan BİRDAL: Fikir ve tasarım, Veri analizi, Makale yazımı, Sonuçların yorumlanması, Kaynak sağlama

Oğuzhan YÜKSEL: Veri toplama, Veri analizi, Makale yazımı,

Mehmet Mustafa ÖNAL: Fikir ve tasarım, Sonuçların yorumlanması, Kaynak sağlama

Teşekkür

Makale kapsamında modellenen yapıya ilişkin verileri sağlayan Doç. Dr. Oğuz Keleş'e teşekkürlerimizi sunarız.

Çıkar Çatışması

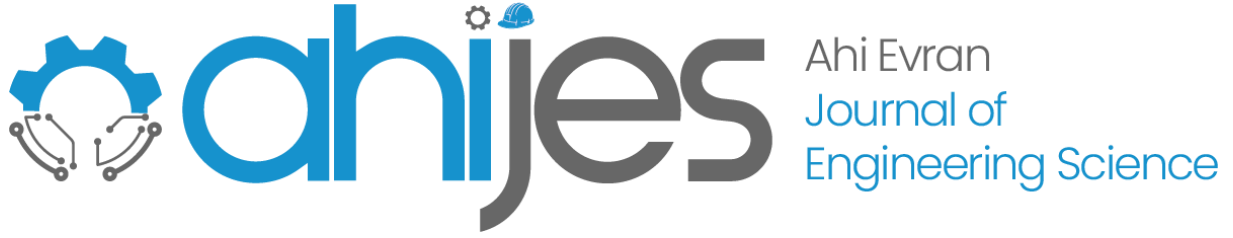
Yazarlar arasında herhangi bir çıkar çatışması bulunmamaktadır.

Veri Kullanılabilirliği

Veri setleri ile ilgili sorular için, sorumlu yazar ile iletişime geçilmelidir.

KAYNAKÇA

- ACI Committee 318. (2004). Building Code Requirements for Structural Concrete and Commentary (ACI 318M-05). American Concrete Institute.
- Al-Sunna, R., Pilakoutas, K., Hajirasouliha, I., & Guadagnini, M. (2012). Deflection behaviour of FRP reinforced concrete beams and slabs: An experimental investigation. *Composites Part B: Engineering*, 43(5), 2125-2134.
- Ahmadi-Nedushan, B., & Almaleeh, A. M. (2024). Material Cost Optimization Of One-Way Reinforced Concrete Slabs Using An Elitist Genetic Algorithm: A Sensitivity Analysis Based On Aci 318-19. *Int. J. Optim. Civil Eng*, 14(4), 573-593.
- “CSI (Computers and Structures Inc.) 2025. SAP2000 Structural Analysis and Design.CSI, Licensed to Kirsehir Ahi Evran University,”. *Berkeley*: SAP2000 Ultimate 64 Bit v26.2.0.
- Pecic, N., Masovic, S., & Stosic, S. (2023). Span-to-depth ratio limits for deflection control of reinforced concrete elements. *Structural Concrete*, 24(2), 2547-2562.
- Sanabra-Loewe, M., Garcia, D., Tosic, N., & de la Fuente, A. (2023). Practical flexural design approach for one-way hybrid fiber-reinforced concrete slabs based on a parametric study on slenderness limits. In *Structures* (Vol. 56, p. 104926). Elsevier.
- Sanabra-Loewe, M., Garcia, D., Tošić, N., & de la Fuente, A. (2024). Design Tool for Finding Minimum Heights of Reinforced Concrete Beams and One-Way Slabs. *ACI Structural Journal*, 121(3).
- Standartı, T. (2000). Betonarme yapıların Tasarım ve Yapım Kuralları (TS 500-2000). *Ankara, Türkiye, Türk Standartları*.



Research Article

SMART CANE THAT FOLLOWS THE DISABLED PATH (YELLOW LINE) CONTROLLED BY A MICROCONTROLLER AND PROTECTS AGAINST COLLISIONS FOR VISUALLY IMPAIRED INDIVIDUALS

GÖRME ENGELLİ BİREYLER İÇİN MİKRODENETLEYİCİ KONTROLLÜ ENGELLİ YOLU (SARI ŞERİT) TAKIP EDEN VE ÇARPMALARDAN KORUYAN AKILLI BASTON

Mustafa AKSU^{1*}  0000-0001-8077-6383

Article Info	ABSTRACT
Keywords: Microcontroller, Robotic Coding, Smart Cane, Color Sensor	Visually impaired people are a part of society. It is important to make life easier for them, integrate them into society, and ensure they can navigate safely on their own. In this study, a microcontroller-controlled smart cane application was implemented to enable these individuals to navigate streets, sidewalks, and pavements without colliding with obstacles, pedestrians, vehicles, etc. In this study, unlike other classical smart cane applications, in addition to the features of the cane that alert against collisions with obstacles, an automatic warning system has been added that allows walking without stepping outside the disabled path (yellow strip) designed for disabled individuals. In this way, it is aimed to ensure the safe navigation of visually impaired individuals by enabling them to follow the disabled path on sidewalks and streets. To prevent collisions with the cane, an ultrasonic distance sensor (HC-SR04) has been added, and to follow the disabled path (yellow strip), a color sensor (TCS series) has been included. The data from these sensors are processed by the microcontroller, and the necessary alerts are provided audibly and vibrationally, ensuring the safe navigation of the disabled individual.
Makale Bilgileri	ÖZET
Anahtar Kelimeler: Mikrodenetleyici, Robotik kodlama, Akıllı Baston, Renk Sönsürü	Görme engelli insanlar toplumun bir parçasıdır. Hayatı onlar için kolaylaştırmak, onları topluma kazandırmak ve kendi başlarına güvenli şekilde gezintilerini temin etmek önemlidir. Yapılan bu çalışmada, bu bireylerin caddelerde, sokaklarda ve kaldırımlarda engellere, yayalara, araçlara v.b. çarpmadan gezinebilmesi için mikrodenetleyici kontrollü akıllı baston uygulaması gerçekleştirilmiştir. Yapılan çalışmada diğer klasik akıllı baston uygulamalarından farklı olarak, engellere çarpmalara karşı uyarı bastonların özelliklerine ek olarak, engelli bireyler için tasarlanmış olan engelli yolu (sarı renkli şerit) dışına çıkılmadan yürümeyi sağlayan otomatik uyarıcı sistem eklenmiştir. Bu sayede görme engelli bireylerin kaldırımlardaki ve caddelerdeki engelli yolunu takip etmeleri sağlanarak güvenli gezintilerinin sağlanması hedeflenmiştir. Baston üzerine çarpmaları önlemek için ultrasonik mesafe sensörü (HC-SR04) ve engelli yolunu (sarı şerit) takip etmek için ise renk sensörü (TCS serisi) eklenmiştir. Bu sensörlerden gelen veriler mikrodenetleyicide işlenerek

^{1*} Kırşehir Ahi Evran University, mustafa.aksu@ahievran.edu.tr

Corresponding author: mustafa.aksu@ahievran.edu.tr

Received: 24.06.2025; Revised: 06.07.2025; Accepted: 30.07.2025

1. INTRODUCTION

With the development and advancement of technology, autonomous systems have become a part of our lives, and their facilitative effects are increasing day by day. These effects have become even more significant recently with the rapid advancement and intertwining of the fields of robotics and artificial intelligence.

Artificial intelligence and robotics have been widely used recently, especially in the healthcare field for diagnosis and treatment purposes. Additionally, daily life is becoming easier thanks to smart and autonomous systems. These can be multiplied in the form of automatic systems in industrial fields, smart home systems, irrigation systems, autonomous vehicles, service robots, and smart vacuums.

Individuals with disabilities are a part of society. It is possible to remove barriers using science and technology to integrate them into society. For people who are blind or have low vision, walking and finding their way around on their own is either very hard or impossible. At this point, we need studies and designs that will help people who can't see or hear.

Nowadays, classic white canes are insufficient in ensuring the safe navigation of visually impaired individuals, which is an important activity for them. For this reason, many studies and innovations have been made to help visually impaired individuals, facilitate their lives, and meet their needs by providing them with the ability to navigate without human assistance. These studies are generally focused on protecting individuals with disabilities from accidents, collisions, and getting lost, enabling them to navigate safely without assistance, and meeting their needs.

This study was conducted to ensure that visually impaired individuals can navigate safely on streets, avenues, and even within their homes.

Generally, many smart canes are designed solely to avoid obstacles for individuals. In this study, in addition to this, the individual's navigation is made safer by tracking the disabled paths (yellow strips) made for the disabled on streets and sidewalks.

Nowadays, there are many smart cane designs available. The costs of these canes vary depending on the technology used. In these canes, basic obstacle detection sensors can be used with Arduino, while higher-cost single-board computers like Jetson Nano B01, STM32, and Raspberry Pi can be integrated with devices such as 2D LiDAR, RGB-D camera, IMU, GPS, GSM, and Wi-Fi. Additionally, using machine learning algorithms such as YOLO and SLAM technology in software will not only add extra features to the cane but also incur additional costs. As a result, while such enhancements increase the features of the canes, the associated cost increases make access to smart canes more difficult.

In this study, materials with low design costs have been selected specifically for an effective solution at a low cost. Thanks to the lower cost, access to and usage of these smart canes will be greater. In this regard, the study was conducted using an Arduino microcontroller instead of a Raspberry Pi single-board computer.

2. LITERATURE REVIEW

Numerous studies have been conducted to help visually impaired individuals recognize obstacles and reach their destinations smoothly. In these efforts, various sensors and schemes, including ultrasonic sensors, infrared sensors, cameras, LIDARs, laser distance scanners, color sensors, RFID (Radio Frequency Identification), and GPS, along with artificial intelligence algorithms, have been extensively integrated into the research and development of smart canes. Some of these studies aim not only to help users avoid obstacles but also to guide them to their desired destinations. However, some of these projects are high-cost and not feasible for mass production.

The existing body of work can be categorized as follows:

- Classic Smart Cane Applications and Obstacle Detection
- Lane Following and Navigation-Focused Smart Canes
- Advanced Features, IoT Integration, and Machine Learning

Initial and most common studies on smart canes for the visually impaired have primarily focused on detecting environmental obstacles and alerting the user. These systems typically utilize distance-sensing technologies like

Aksu¹

ultrasonic or infrared sensors, providing auditory or vibrational feedback based on the detected obstacle's proximity.

A significant emerging approach in smart cane technology, also highlighted in this study, is the lane following feature (specifically, the yellow tactile paving). Such systems often aim to track a specific path or pattern using technologies such as color sensors, image processing techniques, or RFID (Radio Frequency Identification).

Beyond conventional designs, a distinct category of smart canes has emerged, focusing on integrating diverse sensors and advanced technologies to develop more sophisticated and user-friendly solutions. The evolution of technologies like the Internet of Things (IoT) and machine learning has significantly enhanced the capabilities of these assistive devices.

(Kocamaz et al.,2006) aimed to provide a superior solution compared to traditional white canes by developing a smart cane that measures the distance to an obstacle using ultrasonic sound waves and transmits this information to the visually impaired user through audible or vibrational alerts.

(Wahab et al.,2011) presented research on a smart cane prototype, termed "Smart Cane," designed to help visually impaired individuals walk more safely. Their objective was to create a cane capable of detecting objects or obstacles in the user's path and relaying warnings via voice messages and vibrations. A series of tests on this prototype demonstrated its effective functionality in alerting users to front-facing obstacles.

(Çakır et al.,2015) addressed the limitations of classic white canes in obstacle detection with a low-cost smart cane and smart hat application. Their primary goal was to overcome these disadvantages and enable the detection of head-level obstacles. They utilized an Arduino Nano board as the control mechanism to process data from sensors. Based on data from the ultrasonic distance sensor, the user is guided with audible and vibrational cues, thereby facilitating obstacle avoidance.

(Halim et al.,2018) developed an electronic white cane augmented with GPS to extend the navigation range for visually impaired individuals without distance limitations. Their design incorporated ultrasonic distance sensors for measurement and servo motors as actuators to form a radar system. If an obstacle is nearby, notifications are provided through vibrations, with the intensity increasing as the obstacle approaches. They also aimed to enable easy location of visually impaired individuals by tracking their position via the cane's GPS and transmitting it to their families when assistance is needed.

(In their study, Chinchai et al.,2022) replaced the insufficient obstacle-detection sensor at the tip of classic white canes with two ultrasonic distance sensors mounted on the cane, facing upwards and downwards. This innovation protects the user by alerting them to obstacles near the ground within their walking area, as well as those at chest and head levels. Experimental findings indicated that users were more satisfied with their modified cane compared to traditional white canes.

(Khan et al.,2018) conducted a survey-based review to understand the potential role of white canes in developing user-friendly navigation tools. Their objective was to identify current trends from articles published between 2010 and 2017 and contribute to future research directions.

(Mai et al.,2023) introduces and classifies smart canes, then investigates vision sensing-based, laser sensing-based, and laser vision sensing-based smart canes, detailing the current research status of laser vision sensing smart canes. The advantages and disadvantages of various laser vision sensing smart canes are summarized, with particular emphasis on research and development focusing on laser vision fusion as the core of next-generation smart canes. This paper also provides an overview of future development prospects for laser vision sensing smart canes, aiming to accelerate their advancement and ensure safe and efficient travel for the visually impaired.

(Şipoş et al.,2022) proposed a smart assistant comprising a smart cane and a central unit, where communication between the user and the assistant occurs through voice messages. The assistant is equipped with GPS, an electronic compass, Wi-Fi, ultrasonic sensors, an optical sensor, and an RFID reader to aid safe navigation. The system supports daily activities by providing features such as physical condition monitoring, medication reminders, shopping assistance, and weather information. Preliminary tests demonstrated promising results, suggesting the prototype's potential to significantly enhance the independence of visually impaired individuals in their daily lives.

(Ramiseti et al.,2022) designed a smart cane capable of detecting obstacles and alerting visually impaired individuals with buzzer sounds, enabling them to move forward. The cane also incorporates fire and water sensors that emit warning sounds of varying intensities to draw the user's attention. If the user forgets the cane somewhere,

an alert is sent to their mobile phone. Additionally, a vibration sensor on the cane sends messages to the user's relatives via an Arduino board with GPS and GSM connectivity in case of an accident.

(Abu-Abdoun et al.,2022), in their developed cane, utilized a Global Positioning System (GPS) and a water detector. Their smart cane features various charging methods, including a lithium battery and a piezo element that generates power from pressure. This developed smart cane is expected to enable visually impaired individuals to move more easily, interact more with the community, reduce their fear of walking alone, and move safely.

(Mai et al.,2024) developed an intelligent guide system for visually impaired people utilizing 2D LiDAR and RGB-D camera sensing onboard of a smart cane. The intelligent guide is completely reliant on hardware, specifically a 2D LiDAR, RGB-D camera, IMU, GPS, Jetson Nano B01, and STM32. The smart cane measures the distance to obstacles with the 2D LiDAR enabling SLAM. The intelligent guide uses the YOLOv5 algorithm, allowing the intelligent guide to fastly and accurately detect pedestrians, vehicles, crosswalks, traffic lights, warning posts, stone piers, tactile paving, and other objects in front of a visually impaired person. The intelligent guide system is able to effectively lead the visually impaired anywhere and avoid obstacles and arrive safely to their destination and help identify obstacles along the way with speed and precision.

WeWalk (Smart Cane) (WeWalk, 2025) is a smart cane designed with systems by Turkish engineers for people with visual impairments. The smart cane has the following features to be of significant assistance.

Obstacle Detection: Detects obstacles (vehicles, people, trees, signs) in walking paths of people with visual impairments and alerts the individual.

Phone Integration: By connecting to a mobile phone via Bluetooth wireless technology, it allows control of both the phone and the cane.

Open Platform: It has the ability to integrate with many mobile applications. This way, new features can be added.

Artificial Intelligence: It offers the possibility of a smart voice assistant with GPT integration.

3. MATERIALS AND METHODS

Microcontroller (Arduino / Raspberry Pi)

In this study, an Arduino Uno microcontroller was used to receive data from sensors and process this data to avoid obstacles and automatically follow the disabled path on the streets.

Arduino has digital and analog input/output (I/O) pins that can interact with other circuits. Thanks to these pins, sensors, drivers, etc., can be controlled, and data can be received from environmental components. Arduino can be programmed in a computer environment using the IDE (Integrated Development Environment). Power can be supplied to Arduino via USB, and it can also be powered by an external battery. In the studies to be conducted, considering the space it occupies, cost, and features, a suitable microcontroller/single-board computer like Arduino/Raspberry Pi should be selected and used.

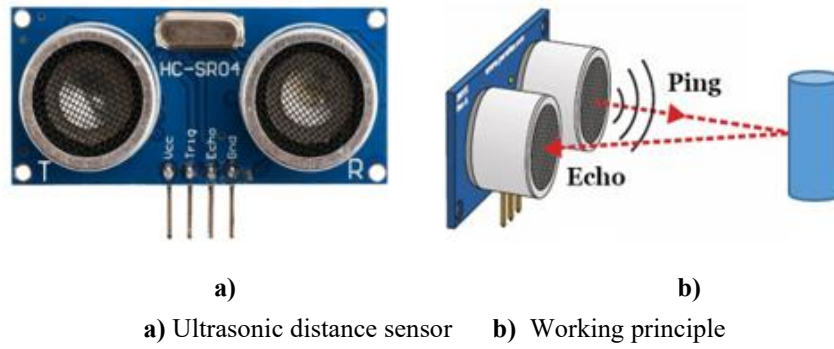
Sensors

Sensors are used to detect data or changes in the environment and transfer this information to other electronic devices. In this study, in addition to software, values such as environmental objects and color information are also needed to establish a smart cane system. The way to obtain information about these values is to collect or measure environmental data with appropriate sensors. The Arduino microcontroller used in this study can easily process the data received from the sensors as input.

Sensor Types

Sensors are like sensory organs for autonomous systems, just as in humans. Autonomous systems generate responses based on the data they receive from sensors. In this context, an ultrasonic distance sensor (HC-SR04) and a color sensor (TCS3200 or TCS34724) have been used in the study. If distinguishing between black and white is sufficient for the project, the CYN70 color sensor should be used for faster measurements.

A) Ultrasonic Distance Sensor and Working Principle: Ultrasonic distance sensors (Figure 1.a) measure distance using high-frequency sound waves (Figure 1.b).



The ultrasonic distance sensor works by following these steps:

- The sensor produces ultrasonic waves at a specific frequency.
- These waves are sent towards an object or surface.
- Waves reflect off the object and return.
- The sensor detects the returning waves.
- The distance is calculated by finding the echo time from these perceived sound waves.

In the HC-SR04 ultrasonic distance sensor (Figure 1.a), there are 4 pins: Trig, Echo, VCC, and GND.

Ultrasonic sensors are used in various fields such as distance measurement, presence detection, obstacle detection, and robotic applications.

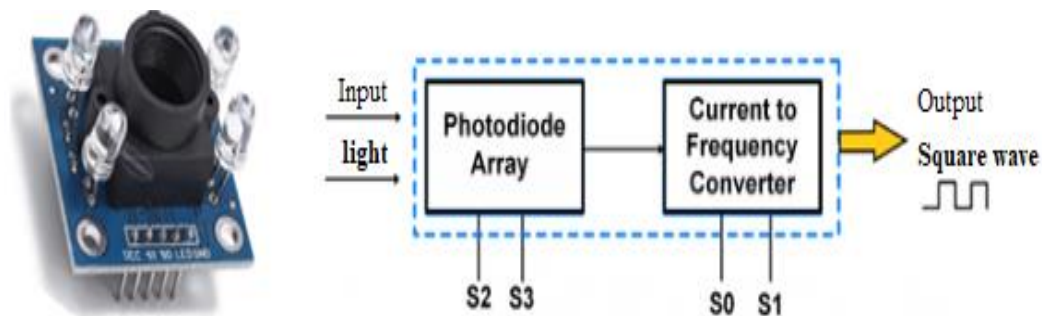
B) TCS Series Color Sensors (TCS3200): TCS3200 is a color sensor used for color detection applications (Figure 2). This sensor can detect the RGB (red, green, blue) components of colors and can be used in various electronic projects for color recognition, color classification, or detection of colored objects.

TCS3200 can be used in many application areas such as robotics, industrial automation, color object classification systems, and control of colored light effects.

To select the color read by the sensor, the S2 and S3 control pins should be used. Since the photodiodes are connected in parallel, different combinations of S2 and S3 (LOW and HIGH) are used to select different photodiodes (Table 1). Thus, color selection is made.

Table 1. Filter Selection

Photodiode Type	S2	S3
Red	LOW	LOW
Blue	LOW	HIGH
Green	HIGH	HIGH
No Filter	HIGH	LOW



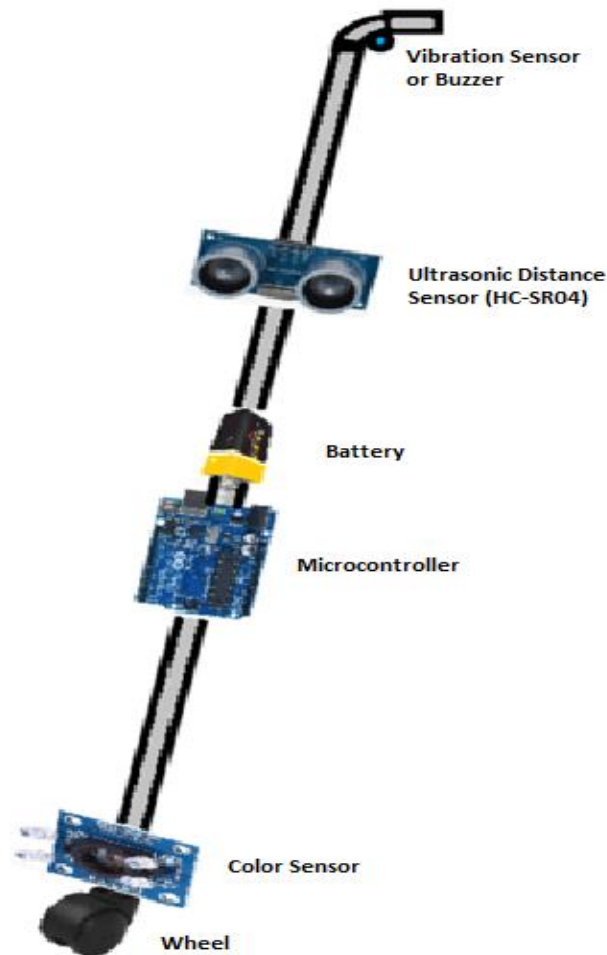
TCS3200 Color Sensor and Working Principle

Smart Cane Design and Implementation

The design of the smart cane begins primarily with the connections of the necessary hardware (circuit components) in the simulation environment and the coding. From this perspective, simulations are very important. After all test phases are tried and any problems are resolved, the actual circuit (physical circuit) is designed and operated. The following equipment is required for physical design:

- An approximately 1-meter-long hollow tube, which can be made of plastic, will serve as the main body of the cane. The hollow interior of the pipe is preferred to ensure that the microcontroller and inter-device cables are not exposed.
- The microcontroller should be selected from the Arduino/Raspberry Pi family based on the specific needs of the project. At this point, the microcontroller to be selected should be chosen based on the project to be implemented and the additional circuit connection elements (for sufficient pin count).
- Sensors: In this study, an ultrasonic distance sensor (HC-SR04) and a color sensor (TCS3200 or TCS34724) were used as sensors. If the strip consists of black and white colors, the CYN70 color sensor can be used for faster measurements.
- Vibration motor and buzzer: They will be used for guidance to ensure that visually impaired individuals can navigate their desired environment without any problems. If the individual also has a hearing impairment, guidance can be provided through vibrations.
- Power Source: A 9-volt battery will be used to power the circuit.
- Wheel: It will be placed on the end of the cane.
- Protective plastic boxes.

The physical design of the cane is shown in Figure 3.

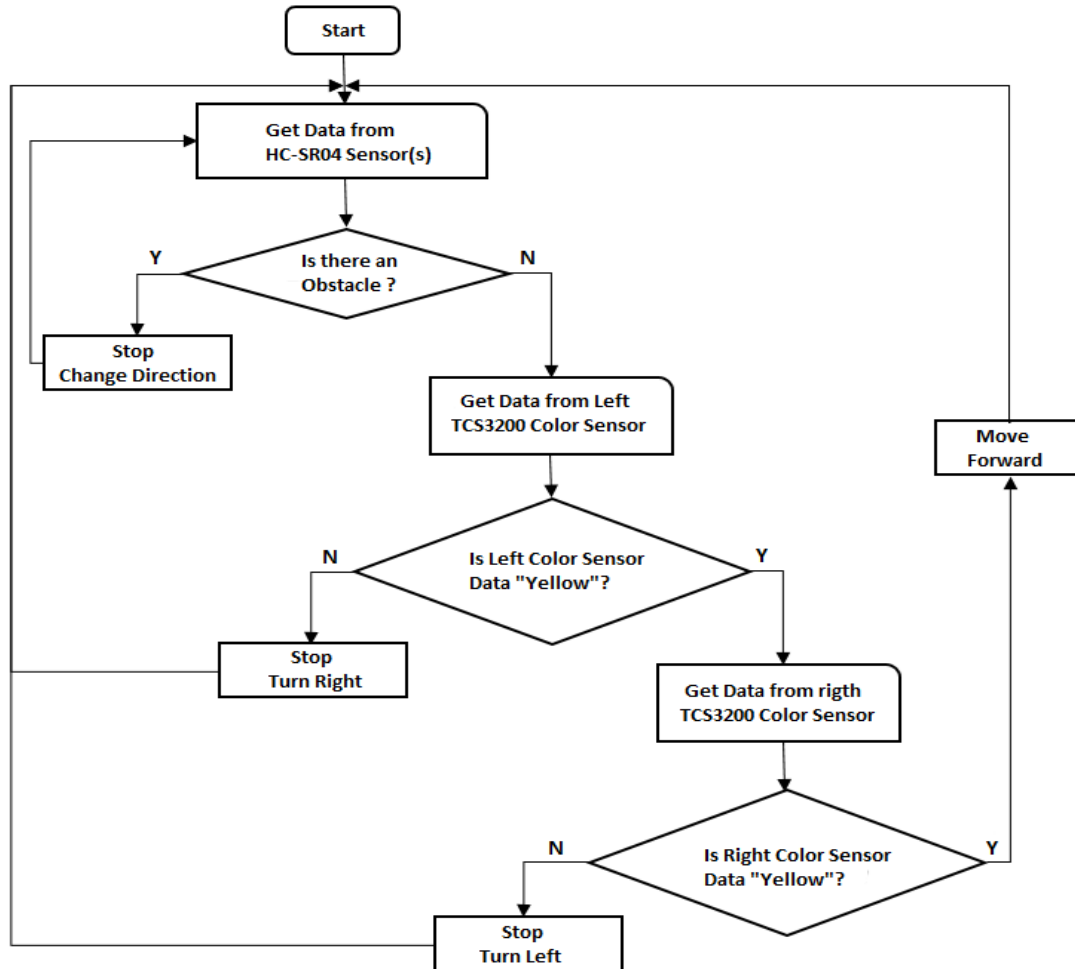


Smart Cane Design for Obstacle Path Tracking and Collision Prevention

The coding and implementation steps of the cane are shown in the flowchart in Figure 4. First, data is received from the ultrasonic distance sensor and checked. If there is an obstacle, the cane stops and changes direction; otherwise, data is received from the left color sensor, which is placed near the tip of the cane, and the color information is checked. If it is not yellow, guidance is given to turn right, and data is received again from the distance sensor to continue to the next steps. If the color is yellow, the same steps are performed for the right distance sensor. If the data received from the right color sensor is yellow, guidance is given to move forward. After each movement, these steps are repeated. Thus, both the obstacle condition and the yellow line tracking condition are checked to ensure the visually impaired individual can proceed safely.

In the design of the cane, both a buzzer for audible alerts and a vibration sensor for tactile notifications have been added to the handheld grip. The purpose here is that the visually impaired individual may also have a hearing problem. For this reason, instead of holding the smart cane with the hand, a vibration sensor has been added in addition to the buzzer. In this way, when encountering an obstacle or deviating from the disabled path, both auditory and tactile notifications have been provided as a solution.

Arduino microcontroller coding has been carried out in the Arduino IDE environment. Previously, the system was set up as a prototype in a virtual environment, and the written codes were tested. Later, it was uploaded onto the microcontroller.



Flowchart of the Smart Cane Operation Steps



a)



b)

a) Obstacle testing b) Obstacle path (yellow strip on sidewalks and streets)

4. CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS

One of the most important things in the travel of a visually impaired individual is to ensure they avoid obstacles. At this point, infrared sensors, ultrasonic distance sensors, and laser sensors (LiDAR) are important for obstacle detection. From a cost perspective, using ultrasonic distance sensors results in lower costs. Using Raspberry PI for line tracking, color tracking, object classification, and distance measurement is more effective but increases the cost.

In addition to obstacle-detecting sensors for a visually impaired individual's travel, sensors measuring moisture/water conditions for wet surfaces or puddles can be added to help the individual avoid such terrains. Additionally, if the visually impaired individual also has a hearing problem, auditory feedback for guidance will not be useful. In this case, vibrational feedback should be added to the cane, and design and coding should be done accordingly. Again, if location information feedback is needed (such as in the case of getting lost), a smart cane design that includes GPS should be prioritized. The use of GPS in the design will incur an additional cost, which needs to be considered.

In this study, the obstacle avoidance steps were first implemented and tested as shown in Figure 5.a. Then, a color sensor was added to follow the yellow color and alert the disabled individual. Line following and object tracking are used in vehicles and robots. In this study, in addition to avoiding obstacles, a color sensor was used to follow the yellow lines (Figure 5.b) that already exist (have been made) on sidewalks, streets, and avenues. Color sensors detect many colors. According to the data obtained from the color sensor, the visually impaired individual is kept on the yellow line. Thus, the individual is able to navigate safely along the disabled lane.

In this study, coding and calibration processes were carried out to follow the disabled lane (yellow line) on the streets and sidewalks. If the smart cane is to be used to guide a disabled individual indoors, it can be easily used with a small adjustment in the code. In this case, a strip of the desired color (for example, a black strip) is created on the floor of the building/apartment (concrete, tiles, laminate flooring, etc.). Then, the coding and calibration can be adjusted according to this color, allowing it to be used in indoor spaces as well.

In the case of line following, unfavorable conditions such as uneven surfaces, faded colors, strips with excessively different color tones, lighting conditions, and dark environments can cause problems in color perception. In cases of lighting-related issues, a solution can be to add an illuminating LED next to the color sensor. In areas without a strip or where the sensor does not detect, the yellow line tracking can be disabled with a button placed on the smart cane.

This study involves creating a colored strip for the indoor navigation of individuals with disabilities, and data related to that color (for example, black) can be obtained from a color sensor, allowing the coding to be adapted accordingly.

This study is particularly suited to fill the gap in the existing literature with its automatic warning system feature that enables walking without stepping outside the disabled path (yellow strip). In addition to the obstacle detection capabilities of classic smart canes, the ability to follow a designated path can enable visually impaired individuals to move more safely and independently, especially in organized areas (such as disabled paths on sidewalks). The device aims to enhance the user's orientation and safety by going beyond the tactile feedback provided by the traditional white cane, digitally detecting and converting visual cues.

The smart cane designed in this study has the most significant advantage of being very low-cost compared to other cane designs. In the literature, there are many cane designs with high-cost additional features, but access to these is difficult due to their cost. In the cane design of this study, cost-performance has been prioritized. Another advantageous aspect is that energy consumption will be low because no additional equipment has been added. Additionally, the maintenance and repair costs will be lower.

The implementation of such studies is important for the integration of individuals with disabilities into society and for their ability to live independently without support. It is important to diversify designs according to individuals' different disability conditions and to address their needs.

REFERENCES

- Abu-Abdoun, D.I., Alsyoud, I., Mushtaha, E., Ibrahim, I., Al-Ali, M. 2022. Developing and designing an innovative assistive product for visually impaired people: smart cane. In: 2022 Advances in Science and Engineering Technology International Conferences (ASET), pp. 1–6. Dubai, United Arab Emirates.DOI:10.1109/ASET53988.2022.9734902
- Chinchai P., Inthanon R., Wantanajittikul K., Chinchai S., 2022.“A white cane modified with ultrasonic detectors for people with visual impairment”, Journal of Associated Medical Sciences. 55 (3): 11-18.
- Çakır M., Çelik A., Özyalçın İ., Uzun A.,2015. Engelli İnsanlar İçin Akıllı Baston ve Akıllı Şapka Tasarımı, 4. Uluslararası Meslek Yüksekokulları Sempozyumu (UMYOS 2015) May 15 Yalova/Türkiye.

- Halim, S., Handafiah, F., Aprilliyani, R., & Udhiarto, A.,2018. Electronic white cane with GPS radar-based concept as blind mobility enhancement without distance limitation. In AIP Conference Proceedings, Vol. 1933, No. 1, p. 040024-7. AIP Publishing. DOI: 10.1063/1.5023994
- Khan I, Khuroo S, Ullah I.,2018.Technology-assisted White cane: evaluation and future directions. PeerJ; 6: 1-27. DOI: 10.7717/peerj.6058
- Kocamaz A.F, Uçar E.,2006.Görme Engelliler için Ultrasonik Alıcı Vericili Beyaz Baston. ELECO`2006 Electrical-Electronics, and Computer Engineering Conference (ELECO).
- Mai, C., Xie, D., Zeng, L., Li, Z., Li, Z., Qiao, Z., Qu, Y., Liu, G., & Li, L.,2023. Laser Sensing and Vision Sensing Smart Blind Cane: A Review. *Sensors*, 23(2), 869. DOI: 10.3390/s23020869
- Mai, C., Chen, H., Zeng, L., Li, Z., Liu, G., Qiao, Z., Qu, Y., Li, L., & Li, L.,2024. A Smart Cane Based on 2D LiDAR and RGB-D Camera Sensor-Realizing Navigation and Obstacle Recognition. *Sensors*, 24(3), 870. DOI: 10.3390/s24030870
- Ramiseti, C.,2022.An ultrasonic sensor-based blind stick analysis with instant accident alert for blind people. In: 2022 International Conference on Computer Communication and Informatics (ICCCI), pp. 1–13. Coimbatore, India.
- Şipoş, E., Ciuciu, C., & Ivanciu, L.,2022. Sensor-Based Prototype of a Smart Assistant for Visually Impaired People—Preliminary Results. *Sensors*, 22(11), 4271. DOI: 10.3390/s22114271
- Wahab, A.; Helmy, M.; Talib, A.A.; Kadir, H.A.; Johari, A.; Noraziah, A.; Sidek, R.M.; Mutalib, A.A.,2011. Smart cane: Assistive cane for visually-impaired people. *Int. J. Comput. Sci.* 21–27.
- WeWalk 2025. Akıllı Baston 2, Available at <https://wewalk.io/tr/product/> (accessed, 28 May 2025)

Authors' Contributions

In this study, all tasks such as conceptual design, data collection, analysis, writing, and interpretation were carried out by Mustafa AKSU.

Acknowledgments

No institution or individual has been involved in the realization of this study.

Funding

This study has not been financially supported by any institution or fund.

Conflict of Interest

There is no conflict of interest among the authors.

Data Availability

The data obtained in this study can be provided by the corresponding author upon request.



Araştırma Makalesi

Spintronik Uygulamalar için BeFeSi Yarı Heusler Alaşımının DFT ile Teorik inceleme

DFT Theoretical Investigation of BeFeSi Semi-Heusler Alloy for Spintronic Applications

Erol ALBAYRAK^{1*}  0000-0001-9161-9068

Makale Bilgileri	Özet
Anahtar Kelimeler: Spintronik uygulamalar, Heusler alaşımlar, DFT yaklaşımı, Yarı metalik malzemeler.	Bu çalışmada, BeFeSi yarı Heusler alaşımının elektronik, yapısal, elastik ve termal özellikleri, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) yöntemiyle ilk kez teorik olarak detaylı bir şekilde incelenmiştir. Literatürde daha önce kapsamlı bir çalışması bulunmayan BeFeSi alaşımına yönelik hesaplamalar, bu malzemenin ileri teknoloji alanlarındaki potansiyelini ortaya koymaktadır. Yapısal analizler sonucunda, alaşımın en kararlı örgü parametresi 5.032 Å olarak hesaplanmıştır. Bu değer, alaşımın mekanik olarak dengeli ve kararlı bir kristal yapıya sahip olduğunu göstermektedir. Bant yapısı ve durum yoğunluğu (DOS) analizleri, BeFeSi'nin yarı metalik karakter taşıdığını ve Fermi seviyesinde spin bağımlı bir bant yapısına sahip olduğunu ortaya koymuştur. Spin-aşağı yöneliminde yaklaşık 0.2 eV civarında küçük bir bant boşluğu bulunması, malzemenin spintronik uygulamalarda kullanım potansiyeline işaret etmektedir. Fe 3d ve Si 3p orbitalleri arasındaki hibritleşme, bant yapısının oluşumunda kritik bir rol oynamaktadır. Mekanik analizler sonucunda, Bulk modülü 147.88 GPa, kayma modülü 23.62 GPa ve Young modülü 67.28 GPa olarak hesaplanmıştır. B/G oranının 6.26 olması, alaşımın yüksek süneklik sergilediğini göstermektedir. Poisson oranının 0.424 olması, bağlanma yapısının metalik karakter içerdiğini ve Fe-Si bağlarının metalik-kovalent hibrit bağlanma gösterdiğini işaret etmektedir. Termal analizlerde, titreşim enerjisi, serbest enerjisi, entropisi ve ısı kapasitesinin (C_v) sıcaklığa bağlı değişimi değerlendirilmiştir. Serbest enerjinin sıcaklık arttıkça azalması, alaşımın yüksek sıcaklıklarda kararlılığının azaldığını göstermektedir. Entropi artışı ise atomik hareketliliğin yükseldiğine işaret etmektedir. Yapılan hesaplamalar ve analizler, BeFeSi alaşımının termoelektrik, spintronik ve enerji dönüşüm sistemleri gibi ileri teknoloji alanlarında kullanılabilecek potansiyele sahip olduğunu göstermektedir. Elektronik bant yapısının manyetik özelliklerle birleşmesi, malzemenin düşük güçlü manyetik hafıza ve manyetik sensörler gibi uygulamalarda değerlendirilebileceğini ortaya koymaktadır.

^{1*} Kırşehir Ahi Evran University, erol.albayrak@ahievran.edu.tr
Sorumlu yazar: erol.albayrak@ahievran.edu.tr

Article Info	Abstract
Keywords: Spintronic applications, Heusler alloys, DFT approximation, Semi-metallic materials.	In this study, the electronic, structural, elastic, and thermal properties of the BeFeSi semi-Heusler alloy have been theoretically investigated in detail for the first time using Density Functional Theory (DFT). The calculations for the BeFeSi alloy, which has not been extensively studied in the literature before, reveal the potential of this material in advanced technology fields. The structural analysis yielded a lattice parameter of 5.032 Å, indicating a mechanically stable and stable crystal structure. The band structure and density of state (DOS) analyses revealed the semi-metallic character of BeFeSi and its spin-dependent band structure at the Fermi level. The presence of a modest band gap of approximately 0.2 eV in the spin-down orientation suggests the material's suitability for spintronic applications. The hybridization between Fe 3d and Si 3p orbitals plays a pivotal role in shaping the band structure. Bulk modulus, shear modulus, and Young's modulus were calculated to be 147.88 GPa, 23.62 GPa, and 67.28 GPa, respectively, through mechanical analysis. The B/G ratio of 6.26 indicates that the alloy exhibits high ductility. The Poisson's ratio of 0.424 suggests the presence of metallic bonding and Fe-Si bonds exhibiting a metallic-covalent hybrid bonding character. In the thermal analysis, the temperature-dependent variation of vibration energy, free energy, entropy, and heat capacity (C_v) were evaluated. The decrease in free energy with increasing temperature indicates that the alloy's stability decreases at high temperatures, while the increase in entropy indicates an increase in atomic mobility. The calculations and analysis demonstrate that the BeFeSi alloy has the potential to be utilized in advanced technology areas such as thermoelectricity, spintronics, and energy conversion systems. The combination of electronic band structure with magnetic properties suggests that the material can be used.

1. GİRİŞ

1903 yılında keşfedilen Heusler alaşımları, geniş kullanım alanları ve sahip oldukları üstün manyetik, elektronik, yapısal ve termal özellikler nedeniyle malzeme bilimi ve ileri mühendislik uygulamalarında önemli bir araştırma konusu olmuştur. Bu alaşımlar, tam Heusler (X_2YZ) ve yarı Heusler (XYZ) bileşikleri olarak sınıflandırılmaktadır (Kawasaki, 2019; Elphick ve ark., 2021; Yadav ve ark., 2020; Fortunato ve ark., 2023; Marathe ve ark., 2023; Chernov ve Lukoyanov, 2023). Özellikle BeFeSi yarı Heusler alaşımı, bileşimindeki elementlerin kendine özgü özellikleri sayesinde dikkat çekmektedir. Bu alaşım, yapısal stabilitesi ve elektronik iletkenliği açısından termoelektrik, spintronik ve enerji dönüşüm sistemlerinde potansiyel bir malzeme olarak değerlendirilebilir. Manyetik anizotropi ve yoğunluk, süneklik, dayanıklılık gibi özellikleri, onu hafif ve dayanıklı malzemeler arasında önemli bir konuma getirmektedir (Otrokov ve ark., 2019). Ayrıca, belirli Heusler bileşiklerinin gösterdiği topolojik faz özellikleri, BeFeSi alaşımının kuantum malzemeleri ve ileri elektronik sistemlerde değerlendirilmesine de olanak tanıyabilir (Qi ve Zhang, 2011). Modern hesaplamalı modelleme yöntemleri ve gelişmiş spektroskopik teknikler, Heusler alaşımlarının atomik yapıları, manyetik faz geçişleri ve elastik özellikleri hakkında daha ayrıntılı veriler sunmaktadır (Bansil ve ark., 2016; Berry ve ark., 2017; Singh ve ark., 2020; Aravindan ve ark., 2022; Tavares ve ark., 2023; Zhao ve ark., 2025). Alaşım içerisindeki Be elementi, yüksek termal iletkenliği ve sertliği ile bilinirken, Fe manyetik özellikleri ile öne çıkmaktadır. Si ise yarı iletken yapısı sayesinde elektronik ve termoelektrik malzemelerde kritik bir rol üstlenmektedir. Bu üç elementin birleşimi, BeFeSi alaşımına hem manyetik hem de elektronik açıdan üstün özellikler kazandırarak, yeni nesil enerji ve bilgi teknolojileri uygulamaları için alaşımı umut verici bir malzeme haline getirebilir. Literatürde BeFeSi alaşımı üzerine detaylı deneysel ve teorik çalışmalar henüz sınırlıdır. Ancak, diğer yarı Heusler bileşikleriyle karşılaştırıldığında, BeFeSi'nin düşük yoğunluk, iyi mekanik dayanım ve uygun elektriksel iletkenlik gibi özelliklere sahip olması beklenmektedir. Özellikle BeFeSi alaşımının bileşenlerine bakılarak, üstün mekanik performans ve yüksek termal iletkenlikleri sayesinde malzemenin genel özellikleri açısından geniş bir uygulama

Albayrak¹

alanı bulabileceği tahmin edilmektedir. Bu çalışmada, literatürde hakkında araştırma bulunmayan BeFeSi yarı Heusler alaşımının yapısal, elektronik, manyetik ve termodinamik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) yaklaşımı kullanılarak detaylı bir şekilde incelenmiş, potansiyel kullanım alanları değerlendirilmiştir. Özellikle enerji dönüşüm sistemleri ve elektronik bileşenler açısından taşıdığı potansiyel üzerinde durularak, malzemenin performansını artırabilecek parametreler tartışılmıştır. Bu tür alaşımların sentezlenmesi ve özelliklerinin deneysel olarak çalışılması zaman ve maliyet gerektirdiğinden alaşımlar hakkında önceden yapılacak teorik hesaplamalar önemli avantajlar sağlar. Çalışmanın amacı da teknolojiye uygulama alanları bulması muhtemel BeFeSi alaşımının teorik olarak özelliklerinin belirlenmesi ve bu teorik çalışmanın yapılacak deneysel çalışmalara yol göstermesidir.

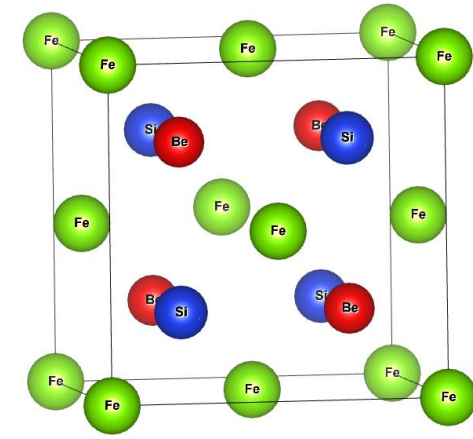
2. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu çalışmada, BeFeSi yarı Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve termal özellikleri analiz edilerek teknolojik uygulamalar açısından potansiyel kullanımı araştırılmıştır. Bu amaç doğrultusunda, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) tabanlı hesaplamalar için Quantum Espresso (QE) paket programı kullanılmıştır. QE, düzlem dalga yöntemine dayalı hesaplamalar yapabilen açık kaynaklı bir yazılımdır ve malzeme bilimi alanında geniş bir kullanım alanına sahiptir (Giannozzi ve ark., 2020). Sistemin kararlı durumuna ulaşabilmesi için en düşük enerji yapılandırmasının belirlenmesi gerekmektedir. Bunun için, malzemenin elektronik taban durum yük yoğunluğu ve değiş-tokuş korelasyon potansiyeli incelenmiştir. Bu çalışmada değiş-tokuş korelasyon potansiyeli için Perdew-Burke-Ernzerhof genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (PBE-GGA) kullanılmıştır (Perdew ve ark., 1996). Atomik kor ve değerlik elektronları arasındaki etkileşimleri modellemek için Rappe grubuna ait pseudo potansiyeller tercih edilmiştir. Hesaplamalar sırasında dalga fonksiyonları için kinetik enerji kesme değeri 40 Ry, elektronik yük yoğunluğu kesme değeri ise 400 Ry olarak belirlenmiştir. Fermi yüzeyine yakın bölgelerdeki hesaplamaların doğruluğunu artırmak için Smearing parametresi 0.05 Ry olarak seçilmiştir. BeFeSi yarı Heusler alaşımı, kübik kristal yapıya sahip olup F-43m uzay grubunda yer almaktadır. Bu yapı, tipik yarı Heusler bileşiklerine özgü yüzey merkezli örgü düzenine sahiptir. BeFeSi kristal yapısındaki atomik yerleşimler; Fe atomu: (0,0,0), Si atomu: (0.75, 0.75, 0.75), Be atomu: (0.25, 0.25, 0.25) şeklinde seçilmiştir. Aslında alaşımın birim hücresine ait atomik pozisyonlarının farklı kombinasyonları da denenmiş fakat burada bu kombinasyonlardan mekanik kararlı duruma karşılık gelen durum seçilmiş ve ona ait atomik pozisyonlar verilmiştir. Alaşımın elastik özelliklerinin belirlenmesi için Thermo PW (TP) programı kullanılmıştır. Elastik sabitlerin hesaplanabilmesi için sistemin belirli bir basınç altında tepkisi incelenmiş, kristal yapıdaki değişimler göz önüne alınarak elastik modüller hesaplanmıştır (Corso, 2016; Örnek ve ark., 2021). Bu veriler doğrultusunda malzemenin sünekliği, mekanik dayanıklılığı ve rijitliği analiz edilmiştir. Termodinamik özelliklerin belirlenmesi için Debye modeli kullanılarak ısı kapasitesi, termal genleşme ve ısıl iletkenlik gibi parametreler hesaplanmıştır.

3. BULGULAR

3.1 Yapısal Özellikler/Structural Features

BeFeSi alaşımı F-43m uzay grubunda bir atomik dizilime sahip olup C1_b yapıda kristalleşir. Bu çalışmada modellenen alaşım içerisindeki atomik konumlar alaşımın mekanik kararlılığını sağlamak amacıyla; Fe (0,0,0), Be (1/4, 1/4, 1/4), Si (3/4, 3/4, 3/4) olarak tercih edilmiştir. Şekil 1'de Vesta programına çizdirilen BeFeSi'nin birim hücre yapısı gösterilmektedir.

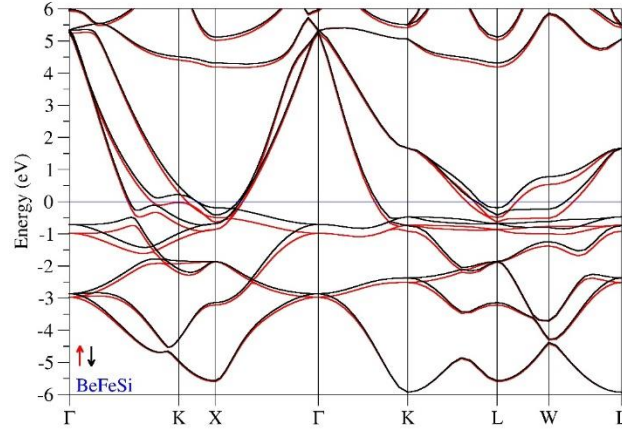


Şekil 1. F-43m uzay grubunda atomik dizilime sahip BeFeSi alaşımının temsili birim hücre yapısı.

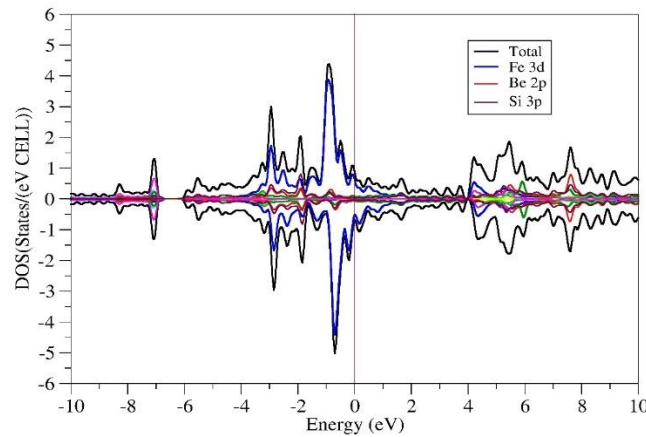
Alaşımanın en düşük enerji seviyesi hesaplanarak bu duruma karşılık gelen optimize örgü parametresi $a_0 = 5.032 \text{ \AA}$ olarak belirlendi.

3.2 Elektronik Özellikler

Alaşımanın elektronik bant ve durumların yoğunluğu (DOS) grafikleri Şekil 2 ve Şekil 3'te verilmiştir.



Şekil 2. BeFeSi alaşıma ait elektronik bant grafiği.



Şekil 3. BeFeSi alaşıma ait durumların yoğunluğu (DOS) grafiği.

Alaşımanın elektronik bant yapısındaki spin yukarı ve spin aşağı yüksek simetri eksenlerinde iletim bandı ve valans bandına ait eğrilerin birbirlerini ve Fermi enerji seviyesini kestiği görülür. Bununla birlikte her iki yüksek simetri ekseninde, özellikle de spin aşağı yöneliminde Fermi enerji seviyesiyle küçük bir enerji boşluğu olduğu ve hibritleşmiş bantlar mevcut olduğu anlaşıldı. Bu durum malzemenin yarı metalik bir karakter taşıdığını göstermektedir. Bu bulgu, BeFeSi'nin spintronik uygulamalar için ilginç bir malzeme olabileceğini gösterir. Spin seçici iletim sağlayabilir, bu da manyetik sensörler ve spintronik cihazlar için önemli bir özellik olabilir. Ayrıca DOS grafiğinde Fermi enerji seviyesinde düşük bir yoğunluk gözlemleniyor, bu da tam metal yerine yarı metalik bir davranış sergileyebileceğine başka bir işaret. Elektronik bant grafiğinde Fe 3d ve Si 3p orbitallerine ait eğrilerin örtüştüğü gözlemlendi. Bu durum bu iki orbitale ait güçlü bir hibritleşmenin olduğunu anlamamızı sağladı. Fe 3d orbitalleri ve Si 3p orbitalleri arasındaki güçlü etkileşim, bant yapısında spin bağımlı geçişlerin oluşmasına neden olmakta ve malzemenin spintronik uygulamalarda değerlendirilmesini mümkün kılmaktadır.

3.3 Elastik Özellikler

Bir malzemenin mekanik kararlılığını belirlemek ve sertlik, süneklik gibi özelliklerini anlamak için elastik sabitlerinin hesaplanması gereklidir. Bu bağlamda, BeFeSi alaşımasının C_{11} , C_{12} ve C_{44} elastik sabitleri belirlenmiş ve mekanik kararlılığı değerlendirmek için Born kararlılık kriterleri kullanılmıştır (Born ve Huang 1965). Bu kriterlere göre alaşımanın mekanik olarak kararlı olup olmadığı test edilmiştir:

$$C_{44} > 0; C_{11} - C_{12} > 0; C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (1)$$

Elde edilen sonuçlara göre BeFeSi alaşımasının mekanik olarak kararlı olduğu görülmüştür. Hesaplanan elastik sabitler Tablo 1’de sunulmaktadır.

Tablo 1. BeFeSi alaşımı için hesaplanan elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44} ; GPa)

Malzeme	C_{11}	C_{12}	C_{44}
BeFeSi	175.89	133.86	25.54

Tablo 1’de verilen elastik sabitleri ve denklem 2,3,4,5,6 da verilen formüller kullanılarak alaşıma ait Bulk modülü, Young modülü, Kayma modülü, Anizotropi faktörü ve Poisson oranı hesaplanarak Tablo 2’de hesaplanan değerler verilmiştir.

$$B = \frac{2C_{12} + C_{11}}{3} \quad (2)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (3)$$

$$G = \frac{5(C_{11} - 2C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - 2C_{12}) + C_{44}} \quad (4)$$

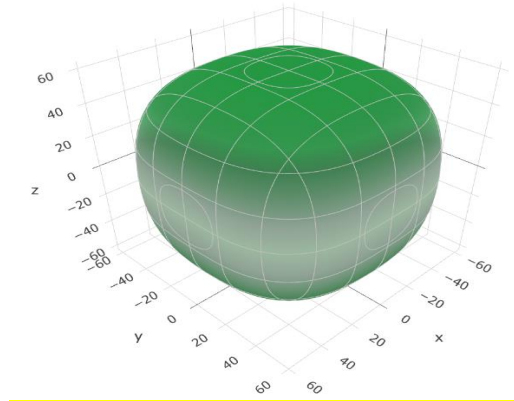
$$\sigma = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{3B} \right) \quad (5)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (6)$$

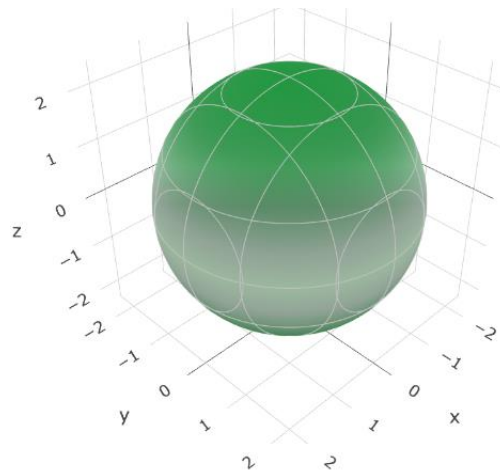
Tablo 2. BeFeSi alaşımı için hesaplanmış Bulk Modülü (B ; GPa), Kayma modülü (G ; GPa), Young modülü (E ; GPa), B/G oranı, poisson oranı (σ), Anizotropi faktörü (A).

Malzeme	B	G	E	B/G	σ	A
BeFeSi	147.88	23.62	67.28	6.26	0.424	1.22

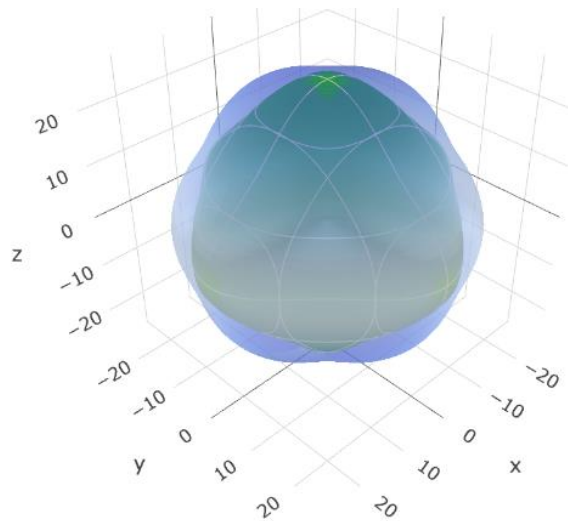
Alaşımanın B/G oranı oldukça büyüktür bu da alaşımanın oldukça sünek bir karaktere sahip olduğunu gösterir. Alaşımanın sünekliğinin bir teyidi de sertliğin ölçütlerinden biri olan Young modülüdür. Bu modülün düşük olması alaşımanın sert olmayan ama deformasyona karşı dayanıklı bir doğaya sahip olduğunu anlamamızı sağladı. Bu özelliği sayesinde alaşım özellikle mekanik stabilite gerektiren ancak aşırı sertlik gerektirmeyen uygulamalar için uygun olabilir. Kayma modülünün düşük olması, bu malzemenin yüksek kesme gerilmeleri altında şekil değiştirmeye yatkın olabileceğini gösterir. Bu yüzden alaşımanın yüksek kesme yükleri altında çalıştırılacak uygulamalar için dikkatli değerlendirilmesi gerekir. Bulk modülünün 100 GPa’dan yüksek olması alaşımanın sıkışmaya karşı dirençli yani sıkışabilirliğinin az olduğuna işaret eder. Bununla birlikte kayma modülünün düşük değerde oluşu da Bulk modülü ile birlikte değerlendirildiğinde alaşımanın sıkışabilirliğinin az olması yanında şekil değişimine uyum sağlayan bir yapıda olduğu da anlaşıldı. Poisson oranının metalik bağlanmalara işaret eden aralıkta olması da alaşım içerisindeki atomik bağlanmaların önemli ölçüde Be ve Fe atomları arasında olduğunu ve bu bağlanmalarında metalik bağlanma karakterinde olduğuna işaret eder. Ayrıca Fe ve Si atomları arasındaki bağlar da bu elementlerin karakteristiği gereği metalik-kovalent bağlanma hibritliğine sahiptir. Bu hibrit bağlanma sayesinde alaşımanın rijitliği bir miktar artabilir. Alaşımanın Anizotropi faktörü küçük bir farla da olsa 1 değerinden farklıdır. Bu bilgi alaşımanın bize anizotropik olduğunu gösterir. ELATE kodları kullanılarak alaşıma ait bazı modül ve oranların ve doğrusal sıkışabilirliğin x, y ve Z eksenlerine bağlı olarak değişimlerinin üç boyutlu gösterimleri Şekil 4, 5, 6 ve 7’de gösterilmiştir (Gaillac vd. 2016).



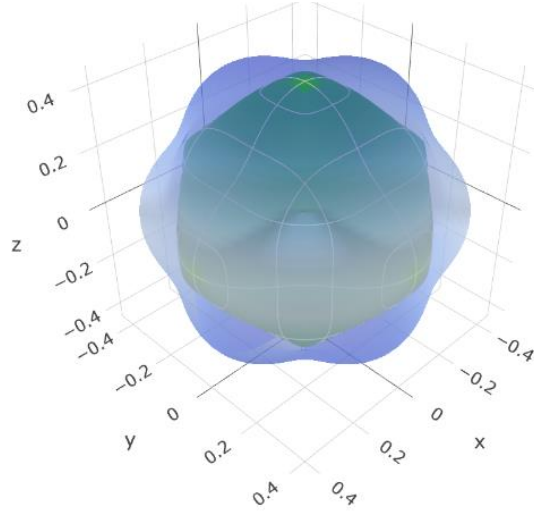
Şekil 4. BeFeSi alaşımlarının Young modülünün yöne bağımlı değişimi.



Şekil 5. BeFeSi alaşımlarının doğrusal sıkışabilirliğinin yöne bağımlı değişimi.



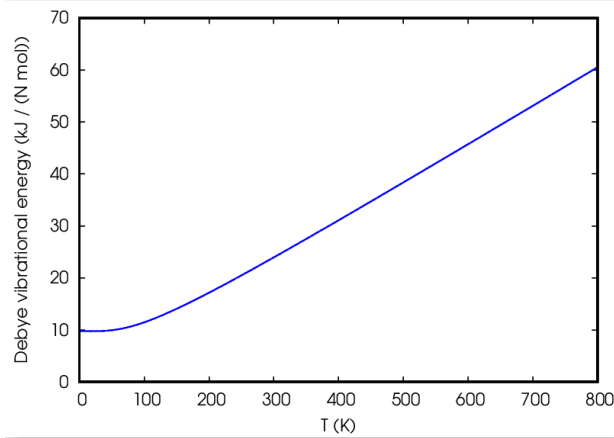
Şekil 6. BeFeSi alaşımlarının Kayma modülünün yöne bağımlı değişimi.



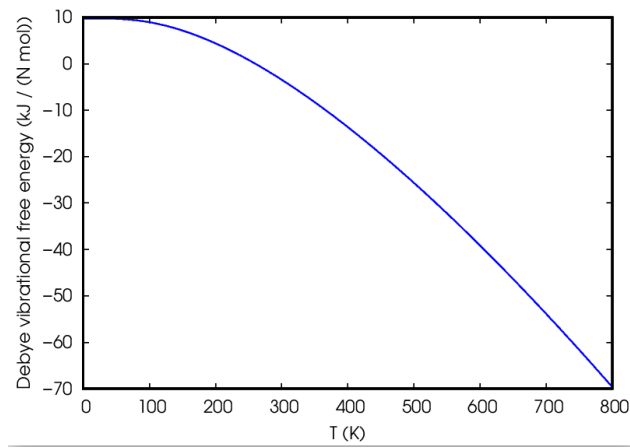
Şekil 7. BeFeSi alaşımlarının Poisson oranının yöne bağımlı değişimi.

3.4 Termal Özellikler

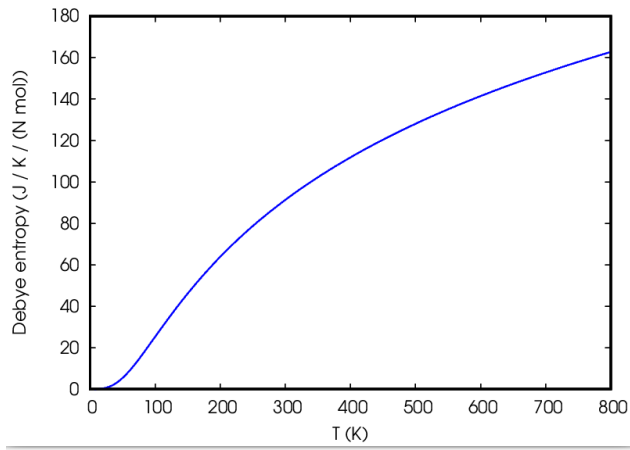
BeFeSi yarı Heusler alaşımlarının ısı ve termodinamik özellikleri, Debye modeli temel alınarak incelenmiştir. Thermo Pw yazılımı kullanılarak gerçekleştirilen hesaplamalar sonucunda Şekil 8, 9, 10 ve 11'de gösterilen grafikler oluşturulmuştur. Bu grafikler, toplam titreşim enerjisi, serbest titreşim enerjisi, ısı kapasitesi (C_V) ve entropi gibi termal parametrelerin sıcaklığa bağlı değişimini sunmaktadır. Elde edilen bu veriler, malzemenin sıcaklık karşısındaki tepkisini ve termodinamik stabilitesini değerlendirmek açısından kritik öneme sahiptir.



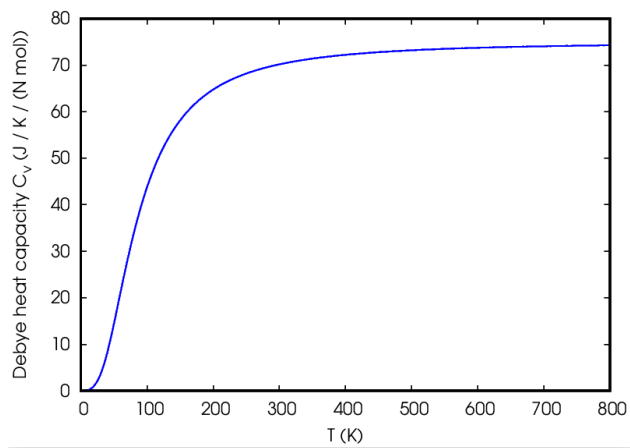
Şekil 8. BeFeSi alaşımlarının titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 9. BeFeSi alaşımasının serbest titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 10. BeFeSi alaşımasının entropisinin sıcaklıkla değişimi,



Şekil 11. BeFeSi alaşımasının ısı kapasitesinin (C_v) sıcaklıkla değişimi.

Katıların iç enerjisi, sıcaklık arttıkça yükselir ve bu durum, BeFeSi için de gözlemlenmektedir. Malzeme atomlarının daha fazla titreşmesi, enerji seviyesinin artmasına neden olur. Bu eğilim, malzemenin yüksek sıcaklıklarda daha fazla termal genişleme gösterebileceğini işaret eder. Serbest enerji, malzemenin kararlılığı açısından önemli bir parametredir. Sıcaklık yükseldikçe serbest enerjinin azalması, malzemenin yüksek

Albayrak¹

sıcaklıklarda daha az stabil hale gelebileceğini gösterir. Düşük sıcaklıklarda ise serbest enerjinin yüksek olması, BeFeSi'nin bu sıcaklık aralıklarında daha kararlı bir yapı sergilediğini göstermektedir. Sistemdeki düzensizliğin ölçüsü olan entropi, sıcaklık arttıkça yükselmektedir. Bu artış, atomik hareketliliğin arttığını ve malzemenin termal enerjiye karşı hassasiyetinin yükseldiğini gösterir. Entropinin belirli bir seviyeye ulaşması, malzemenin yüksek sıcaklıklarda yapısal değişiklikler geçirme potansiyelini de gösterebilir. Malzemenin sıcaklık karşısında ne kadar enerji absorbe edebildiğini gösteren ısı kapasitesi, belirli bir sıcaklık değerine kadar artarak daha sonra sabit bir noktaya ulaşmaktadır. Bu davranış, katı malzemelerde görülen tipik bir özellik olup, Debye modeline uygun bir termal eğilim sergilemektedir. Yüksek sıcaklıklarda C_v 'nin plato yapması, malzemenin belirli bir enerji seviyesinden sonra ek enerji alımına karşı daha az duyarlı hale geldiğini gösterir. BeFeSi alaşımı, düşük sıcaklıklarda oldukça kararlı bir yapı gösterirken, sıcaklık arttıkça kararlılığında azalma eğilimi göstermektedir. Titreşim enerjisi ve entropideki artış, yüksek sıcaklıklarda daha fazla atomik hareketlilik oluştuğunu işaret etmektedir. Serbest enerjinin azalması, malzemenin belirli bir sıcaklık seviyesinin üzerinde termodinamik olarak daha az dengeli hale gelebileceğini gösterir. Isı kapasitesinin belli bir noktada sabitlenmesi, malzemenin yüksek sıcaklıklarda belirli bir enerji seviyesinden sonra daha stabil hale gelebileceğini düşündürmektedir.

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, BeFeSi yarı Heusler alaşımının elektronik, mekanik ve termal özellikleri literatürde ilk kez detaylı olarak incelenmiştir. Yapılan hesaplamalar, malzemenin örgü parametresinin 5.032 Å olduğunu ve mekanik olarak kararlı bir yapıya sahip olduğunu ortaya koymuştur. Bant yapısı analizleri, malzemenin Fermi seviyesinde bant kesişimleri gösterdiğini, ancak spin-aşağı yöneliminde 0.2 eV civarında küçük bir bant boşluğu bulunduğunu göstermektedir. Bu durum, BeFeSi'nin tam bir metal değil, yarı metalik karakter sergilediğini ve spin bağımlı elektronik özellikler taşıdığını kanıtlamaktadır. Mekanik özellikler açısından, malzeme yüksek süneklik ve sıkışmaya karşı direnç sunarken, kesme kuvvetlerine karşı daha hassas olabilir. Bulk modülü 147.88 GPa, kayma modülü 23.62 GPa ve Poisson oranı 0.424 olarak hesaplanmıştır. Bu değerler, alaşımın mekanik olarak dengeli ve sünek karakterde olduğunu kanıtlamaktadır. Termal analizlerde, ısı kapasitesinin (C_v) sıcaklık arttıkça plato yaptığı ve entropinin sıcaklıkla yükseldiği gözlemlenmiştir. Bu eğilim, malzemenin düşük sıcaklıklarda stabil, ancak yüksek sıcaklıklarda atomik hareketliliğe bağlı olarak daha kararsız hale gelebileceğini göstermektedir. Sanayi ve teknoloji açısından değerlendirildiğinde, BeFeSi yarı Heusler alaşımı, spintronik cihazlar, manyetik sensörler, termoelektrik malzemeler ve enerji dönüşüm sistemleri gibi ileri mühendislik uygulamaları için umut vadeden bir adaydır. Spin-bağımlı bant yapısının varlığı, malzemenin manyetik hafıza ve düşük güç tüketimli elektroniklerde değerlendirilebileceğini göstermektedir. Genel olarak, BeFeSi yarı Heusler alaşımı, yarı metalik elektronik özellikleri, yüksek sünekliği ve termal kararlılığı sayesinde ileri teknoloji alanlarında değerlendirilmesi gereken bir malzeme olarak öne çıkmaktadır. Bununla birlikte, Be elementinin zehirli doğası da göz ardı edilmeden yapılacak deneysel çalışmalarla elektronik ve manyetik özelliklerin doğrulanması ve optimizasyonu alaşımın gerçek uygulama potansiyelini ortaya koyabilecektir.

Yazar Katkısı

Yazar 1: Kaynaklar, Araştırma, Yazma – orijinal taslak Görselleştirme, Yazma – orijinal taslak gibi makale ile ilgili tüm çalışmalar yazar tarafından yapılmıştır.

Çıkar Çatışması

Yazarların bu makalenin içeriğiyle ilgili olarak beyan edecekleri hiçbir çıkar çatışması yoktur.

Veri Kullanılabilirliği

Bu çalışma sırasında oluşturulan veya analiz edilen tüm veriler, yayınlanan bu makaleye dahil edilmiştir. Veri kümeleri istek üzerine mevcuttur. Bu makalenin sonuçlarını destekleyen ham veriler, yazarlar tarafından herhangi bir çekince olmaksızın sunulacaktır.

KAYNAKÇA

Bansil, A., Lin, H., & Das, T. 2016. Colloquium: Topological band theory. *Reviews of Modern Physics* 88:021004. DOI: 10.1103/RevModPhys.88021004.

Berry, T., Fu, C., Auffermann, G., Fecher, G.H., Schnelle, W., Serrano-Sanchez, F., et al. 2017. Enhancing thermoelectric performance of TiNiSn half-Heusler compounds via modulation doping. *Chemistry of Materials* 29:7042–7048. DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b02685.

Albayrak¹

Born, M., & Huang, K. 1965. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Oxford: Clarendon Press. DOI: 10.1093/oso/9780192670083.001.0001.

Chernov, E.D., & Lukoyanov, A.V. 2023. Effect of electron correlations on the electronic structure and magnetic properties of the full Heusler alloy Mn₂NiAl. *Magnetochemistry* 9:185. DOI: 10.3390/magnetochemistry9070185.

Corso, A.D. 2016. Elastic constants of beryllium: A first-principles investigation. *Journal of Physics: Condensed Matter* 28:075401. DOI: 10.1088/0953-8984/28/7/075401.

Elphick, K., Frost, W., Samiepour, M., Kubota, T., Takanashi, K., Sukegawa, H., et al. 2021. Heusler alloys for spintronic devices: Review on recent development and future perspectives. *Science and Technology of Advanced Materials* 22(1):235–271. DOI: 10.1080/14686996.2020.1812364.

Fortunato, N.M., Li, X., Schönecker, S., Xie, R., Taubel, A., Scheibel, F., Opahle, I., Gutfleisch, O., & Zhang, H. 2023. High-throughput design of all-d-metal Heusler alloys for magnetocaloric applications. *Chemistry of Materials* 36:6765. DOI: 10.1021/acs.chemmater.4c00345.

Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Buongiorno Nardelli, M., Calandra, M., et al. 2020. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics: Condensed Matter* 29:465901. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79.

Kawasaki, J.K. 2019. Heusler interfaces—Opportunities beyond spintronics? *APL Materials* 7:080907. DOI: 10.1063/1.5099576.

Marathe, M., & Herper, H.C. 2023. Exploration of all-3d Heusler alloys for permanent magnets: An ab initio based high-throughput study. *Physical Review B* 107:174402. DOI: 10.1103/PhysRevB.107.174402.

Otrokov, M.M., Klimovskikh, I.I., Bentmann, H., et al. 2019. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator. *Nature* 576:416–422. DOI: 10.1038/s41586-019-1840-9.

Perdew, J.P., Burke, K., & Ernzerhof, M. 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters* 77:3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.

Singh, A.K., Ramarao, S.D., & Peter, S.C. 2020. Rare-earth based half-Heusler topological quantum materials: A perspective. *APL Materials* 8:060903. DOI: 10.1063/5.0006118.

Tavares, S., Yang, K., & Meyers, M.A. 2023. Heusler alloys: Past, properties, new alloys, and prospects. *Progress in Materials Science* 132:101017. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2022.101017.

Yadav, D.K., Bhandari, S.R., & Kaphle, G.C. 2020. Structural, elastic, electronic, and magnetic properties of MnNbZ (Z = As, Sb) and FeNbZ (Z = Sn, Pb) semi-Heusler alloys. *Materials Research Express* 7:116527. DOI: 10.1088/2053-1591/abcc86.

Zhao, W., Zhang, Y., Yin, Y., Xing, K., Zhou, S., Bake, A., et al. 2025. Giant Berry curvature in amorphous ferromagnet Co₂MnGa. *Matter*. DOI: 10.1016/j.matt.2025.101988.

Qi, X.L., & Zhang, S.C. 2011. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics* 83:1057–1110. DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1057.



Derleme Makalesi

OPTİMAL GÜÇ AKIŞI PROBLEM ÇÖZÜMLERİNDE META-SEZGİSEL YÖNTEMLERİN İNCELENMESİ

INVESTIGATION OF META-HEURISTIC METHODS IN OPTIMAL POWER FLOW PROBLEM SOLVING

Mustafa SIRAKAYA^{1*}  0000-0002-7964-4399,
Bahtiyar TAŞDEMİR²  0000-0001-7335-5185

Makale Bilgileri	ÖZET
Anahtar Kelimeler: Optimal güç akışı, meta-sezgisel algoritmalar, güç sistemleri, çok amaçlı optimizasyon, yapay zekâ.	Günümüz elektrik enerji sistemlerinin artan karmaşıklığı ve optimum işletme ve planlama gereksinimleri, optimal güç akışı (OGA) problemlerinin çözümünde daha etkin ve esnek yaklaşımların kullanılmasını zorunlu kılmaktadır. Geleneksel deterministik yöntemler, özellikle doğrusal olmayan, çok amaçlı ve kısıtlı problemlerde küresel optimuma ulaşmada yetersiz kalabilmektedir. Bu bağlamda, son yıllarda meta-sezgisel (metaheuristic) algoritmalar, OGA problemlerinin çözümünde güçlü alternatifler olarak öne çıkmıştır. Bu çalışmada, elektrik güç sistemlerinde OGA problemlerine yönelik olarak geliştirilen başlıca meta-sezgisel yöntemler kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. Genetik algoritma (GA), parçacık sürü optimizasyonu (PSO), yapay arı kolonisi (ABC), Öğretme-Öğrenme tabanlı optimizasyon (ÖÖTO), farklı evrim (FE), Jaya ve hibrit algoritmalar gibi yaklaşımlar, performans kriterleri, avantajları, sınırlılıkları ve uygulama alanları açısından değerlendirilmiştir. Ayrıca bu yöntemlerin karşılaştırmalı analizleriyle sağladığı iyileştirme düzeyleri de detaylı biçimde ele alınmıştır. Ayrıca, çok amaçlı optimizasyon, yenilenebilir enerji entegrasyonu ve belirsizlik altında OGA gibi güncel araştırma eğilimlerine de yer verilmiştir. Bu derleme araştırması, meta-sezgisel tabanlı çözüm yöntemlerinin güç sistemleri alanındaki potansiyelini ortaya koymakta ve gelecekteki çalışmalar için yol gösterici olmayı amaçlamaktadır.
Article Info	ABSTRACT
Keywords: Optimal power flow, meta-heuristic algorithms, power systems, multi-objective	The increasing complexity of today's electric power systems and the requirements for optimal operation and planning necessitate the use of more efficient and flexible approaches to solve optimal power flow (OPF) problems. Traditional deterministic methods may be insufficient to reach the global optimum, especially for nonlinear, multi-objective and constrained problems. In this context, in recent years, metaheuristic

^{1*} Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, mustafa.sirakaya@ahievran.edu.tr

² T.C. Çevre, Şehircilik ve İklim Değişikliği Bakanlığı, Çankırı İl Müdürlüğü, bahtiyartasdemir1830@gmail.com

Sorumlu yazar: mustafa.sirakaya@ahievran.edu.tr

Başvuru tarihi:18.06.2025; Düzeltme Tarihi 30.07.2025; Kabul Tarihi 29.08.202

optimization,
intelligence.

artificial algorithms have emerged as powerful alternatives for solving OGA problems. In this study, the main meta-heuristic methods developed for OGA problems in electric power systems are comprehensively reviewed. Approaches such as genetic algorithm (GA), particle swarm optimization (PSO), artificial bee colony (ABC), Teaching-Learning based optimization (TLBA), differential evolution (FE), Jaya and hybrid algorithms are evaluated in terms of their performance criteria, advantages, limitations and application areas. In addition, the comparative analysis of these methods and the level of improvement they provide are also discussed in detail. Current research trends such as multi-objective optimization, renewable energy integration and OGA under uncertainty are also included. This review research demonstrates the potential of meta-heuristic-based solution methods in the power systems domain and aims to provide guidance for future work.

1. GİRİŞ

Elektrik güç sistemlerinin güvenli, ekonomik ve sürdürülebilir bir şekilde işletilmesi, modern enerji yönetiminin temel hedeflerinden biridir (Dommel & Tinney, 1968). Bu hedeflere ulaşabilmek için sistemdeki üretim birimlerinin uygun şekilde koordinasyonu, gerilim düzeylerinin sınırlar içinde tutulması ve enerji kayıplarının en aza indirilmesi gerekmektedir. Bu bağlamda, Optimal Güç Akışı (OGA) problemi, sistemin belirli kısıtlar altında işletme koşullarını optimize etmeyi amaçlayan kritik bir mühendislik problemidir (Sulaiman ve ark., 2021).

OGA problemleri genellikle doğrusal olmayan, çok değişkenli ve çok kısıtlı yapıları nedeniyle çözüm açısından oldukça karmaşıktır. Geleneksel çözüm yöntemleri (Newton-Raphson, Lagrange çarpanları, doğrusal programlama vb.), bazı özel durumlar dışında yerel çözümlere takılabilmekte veya yüksek boyutlu problemlerde yetersiz kalabilmektedir (Abou El Ela, Abido, & Spea, 2010; Gao ve ark., 2017). Ayrıca, bu yöntemlerin türev bilgisi gerektirmesi, sistemde belirsizliklerin artması ve yenilenebilir enerji kaynaklarının entegrasyonu gibi günümüz güç sistemlerindeki yeni dinamikler karşısında etkinliğini sınırlamaktadır (Zamzam & Baker, 2020).

Bu sorunların aşılması amacıyla son yıllarda meta-sezgisel algoritmalar, OGA çözümlerinde yaygın olarak kullanılmaya başlanmıştır. Meta-sezgisel yöntemler; rastgelelik, popülasyon temelli arama ve doğadaki çeşitli mekanizmalardan esinlenen yapılarına dayanarak, karmaşık optimizasyon problemlerinde küresel çözüme yakın sonuçlar elde etme potansiyeline sahiptir (Devarapalli, Bhattacharyya, & Sinha, 2020). Genetik algoritma (GA), parçacık sürü optimizasyonu (PSO), yapay arı kolonisi (ABC), farklı evrim (DE), Jaya, öğretmen-öğrenci temelli algoritmalar (TLBO) ve çeşitli hibrit yaklaşımlar, literatürde sıklıkla OGA çözümünde uygulanmış ve başarılı sonuçlar vermiştir.

Bu derleme çalışmasının amacı, OGA problemlerinde kullanılan başlıca meta-sezgisel yöntemleri sistematik bir şekilde incelemek, yöntemlerin güçlü ve zayıf yönlerini değerlendirmek ve gelecekteki araştırmalara ışık tutacak kapsamlı bir bakış açısı sunmaktır. Çalışma kapsamında hem tek amaçlı hem de çok amaçlı OGA problemleri ele alınmış, ayrıca yenilenebilir enerji entegrasyonu, belirsizlik modellemeleri ve dinamik yük değişimleri gibi güncel uygulama alanlarına da değinilmiştir.

2. OGA PROBLEMİ FORMÜLASYONU

Optimal Güç Akışı (OGA) problemi, elektrik enerji sistemlerinin güvenli, ekonomik ve verimli şekilde işletilmesini amaçlayan önemli bir optimizasyon problemidir (Cain, O'Neill, & Castillo, 2012). OGA, sistemin fiziksel ve operasyonel kısıtlarını dikkate alarak belirli bir amaç fonksiyonunu (örneğin üretim maliyeti, güç kaybı veya emisyon miktarı) optimize etmeyi hedefler. Bu bağlamda OGA problemi, hem sürekli hem de ayrık karar değişkenleri içeren doğrusal olmayan kısıtlı bir optimizasyon problemi olarak formüle edilir (Niu, Wan, & Xu, 2014).

2.1.Amaç Fonksiyonu

OGA probleminin temel amacı, aşağıda örneklenen kriterlerden biri veya birkaçının optimize edilmesidir:

- Toplam üretim maliyetinin minimizasyonu
- Aktif güç kayıplarının minimizasyonu

Sırakaya¹ ve ark.

- Çevresel emisyonların minimizasyonu
- Gerilim profilinin iyileştirilmesi

Genel bir amaç fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$\text{Minimize : } f(x, u) \quad (1)$$

Burada, $f(x, u)$, seçilen optimizasyon hedefini temsil eden amaç fonksiyonu, x , durum değişkenleri (örneğin gerilim büyüklükleri ve açıları, reaktif güçler), u , kontrol değişkenleri (örneğin jeneratör çıkışları, gerilim seviyeleri, transformatör kademe oranları)

2.1.1 Durum değişkenleri

Güç sisteminde belirli sınırlar altında mevcut durumu hakkında bilgi vermek için optimize edilen değerlerdir. Durum değişkeni x olarak tanımlanmış ve Eş. 2 ile belirtilmiştir.

$$x = [P_{G_1}, V_{L_1} \dots V_{L_{NL}}, Q_{G_1} \dots Q_{G_{NG}}, S_{l_1} \dots S_{l_{nl}}] \quad (2)$$

Burada, P_{G_1} seçilen slack bara, Q_{G_1} jeneratörlerin reaktif güç değeri, V_{L_1} yük baralarının gerilim değeri, and S_{l_1} iletim hattının yükü olarak tanımlanmıştır.

2.1.2. Kontrol değişkenleri

Güç sisteminde amaç fonksiyonuna uygun olarak optimize edilmesi için değişkenlere sahip karar değerleridir. Durum değişkeni u olarak tanımlanmış ve Eş. 3 ile belirtilmiştir.

$$u^T = [P_{G_2} \dots P_{G_{NG}}, V_{G_1} \dots V_{G_{NG}}, Q_{C_1} \dots Q_{C_{NC}}, T_1 \dots T_{NT}] \quad (3)$$

Burada, transformatör tap ayarları T , paralel reaktif güç kompanzatorları Q_C olarak tanımlanmıştır.

2.1.3 Kısıtlamalar

OGA çalışmalarında, güç sisteminin güvenli ve verimli çalışması için bazı kısıtlamaların belirlenmesi gerekmektedir. bu kısıtlamaları eşitlik ve eşitsizlik kısıtlamaları olarak sınıflandırılmaktadır. Kısıtlamalar sistemin çalışma sınırlarını belirler.

Eşitlik kısıtlamaları: burada amaç sistemdeki güç üretimi, tüketimi ve kayıplar arasında oluşturulan dengeyi belirleyen kısıtlamalardır. Güç sistemlerinde aktif ve reaktif güç kısıtlamaları Eş. 4ve 5’de verilmiştir.

$$P_{Gi} - P_{Di} - V_i \sum_{j=1}^{NB} V_j [G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) + B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j)] = 0, \quad (4)$$

$$Q_{Gi} - Q_{Di} - V_i \sum_{j=1}^{NB} V_j [G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) + B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j)] = 0 \quad (5)$$

Burada, P_{Gi} , i . baradaki jeneratörlerin ürettiği aktif güç. P_{Di} , i . baradaki aktif güç talebi. Q_{Gi} , i . baradaki jeneratörlerin ürettiği reaktif güç. Q_{Di} , i . baradaki reaktif güç talebidir. G_{ij} ve B_{ij} i . ve j . baralar arasındaki iletim hattının iletkenlik ve susceptance değerleridir.

Eşitsizlik kısıtlamaları: burada jeneratörlerin, baraların, trafoların güç gerilim gibi değerlerinin belirli sınırlar içinde kalması belirlenir.

$$P_{Gi}^{min} \leq P_{Gi} \leq P_{Gi}^{max}, \quad 1 \leq i \leq N_G \quad (6)$$

$$Q_{Gi}^{min} \leq Q_{Gi} \leq Q_{Gi}^{max}, \quad 1 \leq i \leq N_G \quad (7)$$

$$V_{Gi}^{min} \leq V_{Gi} \leq V_{Gi}^{max}, \quad 1 \leq i \leq N_G \quad (8)$$

$$Q_{Ci}^{min} \leq Q_{Ci} \leq Q_{Ci}^{max}, \quad 1 \leq i \leq N_C \quad (9)$$

$$T_i^{min} \leq T_i \leq T_i^{max}, \quad 1 \leq i \leq N_T \quad (10)$$

$$V_{Li}^{min} \leq V_{Li} \leq V_{Li}^{max}, \quad 1 \leq i \leq N_L \quad (11)$$

$$S_{li} \leq S_{li}^{max}, \quad 1 \leq i \leq N_l \quad (12)$$

3. KLASİK OGA ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ

Optimal Güç Akışı (OGA) problemi, karmaşık, doğrusal olmayan ve kısıtlı bir optimizasyon problemidir. Bu problemin çözümü için uzun yıllardır geliştirilen klasik (deterministik) çözüm yöntemleri, özellikle sistemin kararlılığını ve güvenilirliğini sağlamak amacıyla yaygın olarak kullanılmaktadır. Klasik yöntemler, genellikle

Sırakaya¹ ve ark.

türev bilgisi gerektiren matematiksel tekniklere dayalı olup, hızlı yakınsama özelliklerine sahiptir. Ancak, yerel optimuma saplanma eğilimleri ve çok amaçlı hedeflere sınırlı uyumlulukları nedeniyle bazı kısıtlamaları da beraberinde getirirler.

Klasik OGA çözüm yöntemleri genel olarak aşağıdaki başlıklar altında sınıflandırılabilir:

3.1. Newton-Raphson Tabanlı Yöntemler

Newton-Raphson (NR) yöntemi, güç sistemleri analizinde sıklıkla kullanılan hızlı yakınsayan bir nümerik yöntemdir. OGA'ye uyarlanmış haliyle bu yöntem, Lagrange çarpanları ile amaç fonksiyonunu ve kısıtları birleştirerek çözüm üretir (Sun ve ark., 1984). Denklem sistemi şu şekilde oluşturulur:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T g(x) \quad (13)$$

Burada $f(x)$ amaç fonksiyonunu, $g(x)$ ise güç akış denklemlerini temsil eder. NR tabanlı yöntemlerde doğrusal olmayan denklem sistemi Jacobian matrisi yardımıyla çözülür. Bu yöntem özellikle küçük ve orta ölçekli sistemlerde yüksek doğruluk sağlar, ancak başlangıç noktasına duyarlıdır.

3.2. Doğrusal Programlama (LP)

Doğrusal programlama, hem amaç fonksiyonunun hem de kısıtların doğrusal olduğu problemlerde kullanılır. OGA problemleri genellikle doğrusal olmadığından, LP ancak bazı varsayımlar altında (örneğin sabit gerilim büyüklükleri, doğrusal kayıplar) yaklaşık çözümler sunabilir (Stott & Marinho, 1979). Hızlı ve kararlı çalışmasına rağmen, gerçekçi OGA problemleri için sınırlı bir uygulama alanına sahiptir (Capitanescu, 2016).

3.3. Doğrusal Olmayan Programlama (NLP)

Doğrusal olmayan programlama, hem amaç fonksiyonunun hem de kısıtların doğrusal olmayan fonksiyonlarla ifade edildiği durumları kapsar (Frank, Steponavice, & Rebennack, 2012). Lagrange çarpanları veya Karush-Kuhn-Tucker (KKT) koşulları kullanılarak çözüm elde edilir. NLP yöntemleri, problem boyutuna göre etkili sonuçlar üretebilir ancak çözüm süresi uzayabilir ve yerel minimuma saplanma riski vardır (Wei, ve ark. 1998).

3.4. Artırılmış Lagrange Yöntemi (Augmented Lagrangian Method)

Bu yöntem, klasik Lagrange yaklaşımının bir uzantısı olup, ceza terimleriyle güç akış denklemlerini daha etkili şekilde uygular. Amaç fonksiyonuna eklenen ceza terimleri sayesinde kısıtların ihlal edilmesi engellenir:

$$L_a(x, \lambda, \rho) = f(x) + \lambda^T g(x) + \frac{\rho}{2} \|g(x)\|^2 \quad (14)$$

Burada ρ , ceza katsayısıdır. Bu yöntem, kısıtların daha hassas kontrolünü sağlar.

3.5. İç Nokta Yöntemleri (Interior Point Methods)

İç nokta yöntemleri, büyük ölçekli optimizasyon problemlerinde etkili performans sergileyen modern klasik yöntemlerdendir (Yan & Quintana, 1999). Kısıtlı optimizasyon problemlerinde bariyer fonksiyonları kullanarak çözüm uzayında iç noktalardan ilerlenmesini sağlar. Özellikle yüksek boyutlu OGA problemlerinde tercih edilmektedir (Momoh & Zhu, 1999).

İç nokta yöntemiyle amaç fonksiyonu genellikle şu şekilde formüle edilir:

$$\text{Min } f(x) = \mu \sum_i \ln(s_i) \quad (15)$$

Burada μ , bariyer parametresi; s_i , eşitsizlik kısıtlarına ilişkin boşluk değişkenleridir. Hem çözüm hassasiyeti hem de algoritmik verimlilik açısından ileri düzey avantajlar sunar.

3.6. Kuadratik Programlama (QP)

Amaç fonksiyonunun kuadratik, kısıtların ise doğrusal olduğu durumlarda kuadratik programlama kullanılabilir. Özellikle ikinci dereceden üretim maliyet fonksiyonlarının optimize edilmesinde etkilidir. Ancak, güç akış denklemlerinin doğrusal hale getirilmesi gerektiğinden, çözüm hassasiyeti bazı durumlarda azalabilir (Reid & Hasdorff, 2007).

Tablo 1. Klasik Yöntemlerin Avantaj ve Dezavantajları

Özellik	Avantaj	Dezavantaj
Newton-Raphson	Hızlı yakınsama	Başlangıç noktasına duyarlılık
LP	Hızlı ve kararlı	Gerçekçilikten uzaklaşabilir
NLP	Doğrusal olmayan sistemlerde etkili	Yerel minimuma saplanabilir
İç Nokta	Büyük sistemlerde güçlü performans	Karmaşık algoritma yapısı
QP	Maliyet fonksiyonlarında uygundur	Kısıt doğrusal varsayımı gerekir

Sonuç olarak, klasik çözüm yöntemleri, OGA probleminin deterministik yapısını temel alarak yüksek çözüm doğruluğu ve hızlı hesaplama avantajları sunmaktadır. Ancak, bu yöntemlerin karmaşık, çok amaçlı ve çok modlu yapıya sahip modern enerji sistemlerinde bazı sınırlamaları bulunmaktadır. Tablo 1’de klasik yöntemlerin avantaj ve dezavantajları tablo halinde gösterilmiştir. Bu nedenle son yıllarda klasik yöntemler, evrimsel algoritmalar ve yapay zeka tabanlı yaklaşımlarla tamamlanarak daha esnek OGA çözümleri elde edilmektedir.

4. META-SEZGİSEL YÖNTEMLERİN SINIFLANDIRILMASI

Meta-sezgisel algoritmalar, genel olarak doğadan ilham alan ve deterministik olmayan arama mekanizmaları kullanan sezgisel yaklaşımlar olarak tanımlanabilir. OGA problemi bağlamında kullanılan başlıca meta-sezgisel yöntemler aşağıdaki başlıklar altında sınıflandırılabilir:

4.1 Evrimsel Algoritmalar

- **Genetik Algoritma (GA):** Evrim teorisine dayalı, kromozom temelli arama yöntemidir. Çaprazlama ve mutasyon operatörleri ile çözüm uzayında dolaşır.
- **Farklı Evrim (DE):** Vektör tabanlı mutasyon ve yeniden kombinasyon süreçleri ile çözümleri geliştirir. Sürekli değerli problemler için uygundur.

4.2 Sürü Zekâsı Tabanlı Yöntemler

- **Parçacık Sürü Optimizasyonu (PSO):** Kuş ve balık sürülerinin hareketinden ilham alan, çözüm adaylarını hız ve konum vektörleri ile güncelleyen bir yöntemdir.
- **Yapay Arı Kolonisi (ABC):** Arıların nektar arama davranışına dayanır. Çalışan, gözlemci ve keşifçi arı fazları ile çözüm geliştirilir.

4.3 Fiziksel ve Sosyal Davranış Tabanlı Yöntemler

- **Çekimsel Arama Algoritması (GSA):** Kütle çekimi yasasına dayanarak ajanlar arası etkileşimle çözüm aranır.
- **Jaya Algoritması:** En iyi çözüme yaklaşma ve en kötü çözümden uzaklaşma prensibine dayalı sade bir algoritmadır.
- **Öğretme-Öğrenme Temelli Optimizasyon (TLBO):** Bir öğretmen ve öğrenciler arasında bilgi transferi modeliyle çalışır. Parametre ayarı gerektirmemesi avantaj sağlar.

4.4 Hibrit ve Uyarlanabilir Yöntemler

- **GA-PSO, DE-ABC, TLBO-Jaya** gibi hibrit yöntemler, birden fazla algoritmanın güçlü yönlerini birleştirerek daha dengeli bir arama süreci sunmayı hedefler.
- Uyarlanabilir algoritmalar ise parametrelerini probleme göre otomatik olarak ayarlayarak esneklik kazandırır.

5. ÇOK AMAÇLI OPTİMİZASYON VE PARETO YAKLAŞIMI

Güç sistemlerinde optimal güç akışı (OGA) problemleri genellikle tek bir hedefle sınırlı değildir. Minimum üretim maliyeti, minimum güç kaybı, voltaj kararlılığı, çevresel emisyonlar ve güvenilirlik gibi birçok kriter aynı anda optimize edilmek istenir. Bu nedenle çok amaçlı optimizasyon (Multi-Objective Optimization - MOO) yaklaşımları, OGA problemlerinin çözümünde daha gerçekçi ve etkili bir alternatif sunar.

Meta-sezgisel algoritmaların çok amaçlı versiyonları, Pareto optimalite prensibini esas alarak birden fazla hedef fonksiyon arasında denge kurmayı amaçlar. Bir çözümün Pareto optimal olması, başka bir çözümün tüm hedeflerde daha iyi olamayacağı anlamına gelir. Bu yaklaşımla elde edilen Pareto ön cepheleri (Pareto fronts), karar vericilere farklı tercihleri değerlendirme olanağı sağlar.

Literatürde en çok kullanılan çok amaçlı meta-sezgisel yöntemler arasında NSGA-II (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II), MOPSO (Multi-Objective Particle Swarm Optimization), MOABC, MODE, MOJaya ve MO-TLBO yer almaktadır. Bu yöntemler ile yakıt maliyeti vs. kayıplar, emisyon vs. gerilim saptması gibi farklı hedef çiftleri dengeli şekilde optimize edilmiştir. Pareto tabanlı analizler, sistem planlamacıları için çok kıymetli karar destek araçları sunmaktadır.

6. META-SEZGİSEL YÖNTEMLERİN GÜÇ SİSTEMLERİNE UYGULANMASINDAKİ ZORLUKLAR

Meta-sezgisel yöntemlerin OGA çözümlerinde sunduğu avantajlara rağmen, uygulamada çeşitli zorluklar da mevcuttur:

- **Küresel optimum garantisi yoktur:** Meta-sezgisel yöntemler, küresel optimuma yakın çözümler üretebilse de, çözümün gerçekten küresel optimum olup olmadığı garanti edilemez.
- **Parametre hassasiyeti:** Birçok algoritma, uygun parametre ayarı yapılmadığında düşük performans gösterebilir. Bu durum kullanıcı deneyimine bağlıdır.
- **Yavaş yakınsama ve hesap yükü:** Özellikle büyük ölçekli sistemlerde, çözümün hesaplama süresi artabilir. Yüksek işlem gücü gereksinimi söz konusu olabilir.
- **Kısıtların ele alınması:** Karmaşık kısıt setlerinin (voltaj, reaktif güç, hat kapasiteleri vb.) algoritmalara entegrasyonu bazen zordur.
- **Gerçek zamanlı uygulama kısıtları:** Meta-sezgisel algoritmaların doğası gereği iteratif yapıları, bazı gerçek zamanlı uygulamalarda kullanımını sınırlandırabilir.

7. GELECEK ÇALIŞMALAR İÇİN ÖNERİLER

Meta-sezgisel yöntemlerin güç sistemlerinde daha etkin kullanılabilmesi ve mevcut sınırlamaların aşılması için aşağıdaki öneriler dikkate alınabilir:

- **Uyarlanabilir ve parametresiz algoritmalar:** Kullanıcı müdahalesini azaltan, algoritma içi öğrenmeye dayalı yapılar geliştirilebilir (örneğin Jaya, TLBO gibi).
- **Hibrit yaklaşımlar:** Birden fazla algoritmanın güçlü yönlerini birleştiren yapılarla çözüm kalitesi ve yakınsama süresi iyileştirilebilir.
- **Veri temelli yöntemlerle bütünleşme:** Yapay sinir ağları, derin öğrenme ve makine öğrenmesi teknikleriyle algoritmalar desteklenerek daha akıllı optimizasyon yapıları geliştirilebilir.
- **Gerçek zamanlı ve dağıtık çözümler:** Özellikle mikro şebekeler ve akıllı şebekelerde kullanılabilecek, dağıtık ve hızlı çalışan versiyonlar tasarlanabilir.
- **Enerji dönüşüm teknolojileri ile entegrasyon:** Yenilenebilir enerji, enerji depolama, elektrikli araçlar gibi yeni sistem unsurlarının dahil edildiği OGA modelleriyle çalışmalar genişletilmelidir.
- **Benchmark test sistemleriyle karşılaştırmalı analiz:** IEEE 14, 30, 57, 118 gibi yaygın test sistemlerinde standartlaştırılmış karşılaştırmalar yapılması önerilir.

Tablo 2’de yıllar içinde OGA problemlerinin çözümünde kullanılan meta-sezgisel algoritmalar seçilen test sistemlerine göre incelenmiş, amaç fonksiyonları, tekli veya çoklu amaç fonksiyonlarına göre sıralanmıştır. İncelenen çalışmalarda test sistemi olarak IEEE 30 baralı test sistemi yaygın olarak kullanılmıştır. Hemen hemen tüm çalışmalarda maliyet amaç fonksiyonu optimize edilmiştir. Klasik GA, PSO gibi yöntemlerden biyolojik ve sosyal davranış temelli (Krill, Squirrel, Goose, Manta ray vb.) yöntemlere geçiş olmuş. 2010 sonrası Çok Amaçlı OGA (MO-OGA) modelleri ön plana çıkmış. 2024 yılı itibarıyla DRL (Deep Reinforcement Learning), QIGA gibi yapay zekâ ve kuantum esinli modeller de kullanılmaya başlanmıştır.

Tablo 2. Literatürdeki OGA çalışmalarında kullanılan meta-sezgisel algoritmalar.

YIL	Ref.	Algoritma	Amaç Fonksiyonu				Amaç	Test Sistemi
			F ₁	F ₂	F ₃	F ₄		
2002	(Bakirtzis, Biskas, Zoumas, & Petridis, 2002)	Enhanced genetic algorithm (EGA)	x				T	IEEE 30
2006		Particle swarm optimization (PSO)		x	x		T	IEEE 30-118
2010	(Vlachogiannis & Lee, 2006)	Genetic Algorithm (GA)	x	x	x		T	IEEE 30
2010		Differential evolution (DE)	x		x		T	IEEE 30
2010	(Todorovski & Rajicic, 2006)	Enhanced Genetic Algorithm (EGA)	x	x	x		T	IEEE 30
2011		Particle swarm optimization (PSO)	x			x	T/Ç	IEEE 30-118
2011	(Abou El Ela ve ark., 2010)	Particle swarm optimization (PSO)	x	x		x	T	IEEE 30-118
2011		Biogeography-based optimisation (BBO)	x		x		T	IEEE 30
2011	(Kumari & Maheswarapu, 2010)	Harmony search (HS)	x	x	x		T/Ç	IEEE 30
2011		Honey Bee Mating Optimisation (HBMO)	x	x		x	T	IEEE 14-30-118
2012	(Hazra & Sinha, 2011)	Genetic Algorithm (GA)	x		x		T	IEEE 30
2012		Particle swarm optimization (PSO)	x	x	x	x	T	IEEE 30-118
2012	(Liang ve ark., 2011)	Bacterial foraging (BF)	x		x		T	IEEE 30-118
2013		Artificial bee colony (ABC)	x	x	x	x	T	IEEE 30-118
2013	(Bhattacharya & Chattopadhyay, 2011)	Harmony search method (HS)	x		x		T	IEEE 6-14-30-57-118
2014		Artificial bee colony (ABC)	x	x		x	T/Ç	IEEE 30
2014	(Sivasubramani & Swarup, 2011)	Teaching-learning based optimization (TLBO)	x		x		T	IEEE 30-118
2014		Teaching-learning based optimization (TLBO)	x			x	T	IEEE 30-57
2014	(Niknam ve ark., 2011)	Modified imperialist competitive algorithm-teaching learning algorithm (MICA-TLBO)	x		x		T	IEEE 30-57
2014		Krill herd algorithm (KHA)	x	x	x		T/Ç	IEEE 9-30-57
2015	(Attia, Al-Turki, & Abusorrah, 2012)	Differential evolution (DE)	x	x	x		T/Ç	IEEE 30-118
2015		Artificial bee colony (ABC)	x	x	x	x	T	IEEE 30-57
2015	(Niknam, ve ark., 2012)	Biogeography-based optimization (BBO)	x		x		T	IEEE 30-57

Sırakaya¹ ve ark.

2015		Teaching–learning based optimization (TLBO)	x		x		T	IEEE 30-57
2015	(Amjady, Fatemi, & Zareipour, 2012)	Krill herd algorithm (KHA)	x	x	x		T	IEEE 57
2016		Particle swarm optimization (PSO)	x	x			T	IEEE 30
2016	(Khorsandi, Hosseinian, & Ghazanfari, 2013)	Differential evolution (DE)	x	x	x		T/Ç	IEEE 30-57
2016		Harmony search algorithm (HSA)	x				T	IEEE 30-57-118
2016	(Sinsuphan, Leeton, & Kulworawanich pong, 2013)	Grenade explosion method (GEM)	x	x	x	x	T/Ç	IEEE 30
2016		Glowworm Swarm Optimization (GSO)	x			x	T/Ç	IEEE 30
2017	(Chen, Bo, & Zhu, 2014)	Differential evolution (DE)	x			x	T	IEEE 30
2017		Differential evolution (DE)	x	x	x		T/Ç	IEEE 57
2017	(Bouчекara, Abido, & Boucherma, 2014)	Artificial bee colony (ABC)	x	x			T	IEEE 30-118
2018		Modified Sine-Cosine algorithm (MSCA)	x	x	x		T	IEEE 30-118
2019	(Shabanpour-Haghighi, Seifi, & Niknam, 2014)	Moth Swarm Algorithm (MSA) ve Gravitational Search Algorithm (GSA)	x	x			T	IEEE 30-57-118
2019		JAYA	x	x		x	T	IEEE 30, 118-bus
2019	(Ghasemi, ve ark., 2014)	Novel improved social spider optimization algorithm (NISSO)	x	x	x	x	T	IEEE 30-57-118
2019		Grasshopper optimization algorithm (GOA)	x	x	x	x	T/Ç	IEEE 30-57-118
2019	(Roy & Paul, 2015)	Artificial bee colony (ABC), Wind Driven Optimization (WDO), Gravitational Search Algorithm (GSA)	x	x	x		T	IEEE 9-30-57
2020		Particle swarm optimization (PSO)	x	x		x	T/Ç	IEEE 30
2020	(El-Fergany & Hasanien, 2015)	Differential-based harmony search algorithm (DH)	x			x	T	IEEE 57-118
2020		JAYA	x	x	x		T	IEEE 30-118
2021	(He, ve ark., 2015)	Improved Wind-Driven Algorithm (IWDA)	x	x			T	14-124
2021		GOA Grasshopper Optimization Algorithm (GOA),	x	x		x	T	IEEE 30
2022	(Kumar & Premalatha, 2015)	Manta ray foraging optimizer (MRF)	x			x	T/Ç	IEEE 30
2023		Teaching–learning based optimization (TLBO)	x	x	x		T/Ç	IEEE 30-57
2023	(Ghasemi, ve ark., 2015)	Wild Horse Optimizer (WHO)	x	x	x	x	T	IEEE 30

Sırakaya¹ ve ark.

2023		Turbulent flow of water-based optimization) TFWO	x	x	x	x	T/Ç	IEEE 30
2024	(Mukherjee & Mukherjee, 2015)	Deep Reinforcement Learning (DRL) ve Quantum Inspired Genetic Algorithm (DRL-QIGA).	x	x	x		T/Ç	IEEE 30
2024		Self-adaptive wild goose algorithm (SAWGA)	x	x	x	x	T	IEEE 30-118
2024	(Ravi, 2016)	Squirrel search algorithm (SSA)	x		x	x	T/Ç	IEEE 30
2024		Democratic political algorithm (DPA)	x			x	T/Ç	IEEE 30

F₁: Maliyet Optimizasyonu, F₂: Güç Kaybı Optimizasyonu, F₁: Gerilim Sapması Optimizasyonu, F₁: Emisyon Optimizasyonu, T: Tekli Amaç Fonksiyonu, Ç: Çoklu Amaç Fonksiyonu

8. SONUÇ

Bu derleme çalışmasında, elektrik güç sistemlerinde optimal güç akışı (OGA) probleminin çözümünde meta-sezgisel yöntemlerin kullanımı detaylı bir şekilde incelenmiştir. Meta-sezgisel algoritmalar, geleneksel yöntemlerin karşılaştığı hesaplama zorluklarını aşmak ve karmaşık sistem koşullarında küresel çözüme yakın sonuçlar elde etmek için etkili araçlar sunmaktadır. Genetik algoritma, parçacık sürü optimizasyonu, yapay arı kolonisi, Jaya ve TLBO gibi algoritmaların tek başına veya hibrit yapılarla kullanımı sayesinde hem tek hem çok amaçlı OGA problemlerinde başarılı uygulamalar gerçekleştirilmiştir. Literatürden elde edilen bulgular, bu yöntemlerin çözüm kalitesi, esneklik ve çok amaçlılık konularında önemli avantajlar sunduğunu ortaya koymaktadır. Ancak, parametre bağımlılığı, uzun hesaplama süreleri ve gerçek zamanlı uygulama sınırlamaları gibi bazı zorlukların da var olduğu görülmektedir. Bu bağlamda, gelecekte geliştirilecek araştırmaların parametresiz algoritmalar, yapay zekâ destekli hibrit çözümler, dağıtık ve uyarlanabilir yapılar gibi alanlara yönelmesi önerilmektedir. Sonuç olarak, meta-sezgisel yöntemlerin OGA çözümlerinde sunduğu yüksek potansiyel, bu alanda sürdürülebilir, güvenilir ve ekonomik enerji yönetimi stratejileri geliştirmek isteyen araştırmacılar ve mühendisler için güçlü bir araç olmaya devam etmektedir.

Yazar Katkısı

Fikir ve tasarım, B.T.; Makale yazımı, M.S.; Veri toplama, B.T., Veri analizi, M.S.; Yazılım, M.S.; Kaynak sağlama, B.T.

Çıkar Çatışması

Yazarlar arasında herhangi bir çıkar çatışması bulunmamaktadır.

KAYNAKÇA

- Abbasi, M., Abbasi, E., & Mohammadi-Ivatloo, B. (2021). Single and multi-objective optimal power flow using a new differential-based harmony search algorithm. *Journal of Ambient Intelligence and Humanized Computing*, 12(1), 851-871.
- Abou El Ela, A., Abido, M., & Spea, S. (2010). Optimal power flow using differential evolution algorithm. *Electric Power Systems Research*, 80(7), 878-885.
- Ahmadipour, M., Ali, Z., Othman, M. M., Bo, R., Javadi, M. S., Ridha, H. M., & Alrifay, M. (2024). A high-performance democratic political algorithm for solving multi-objective optimal power flow problem. *Expert systems with applications*, 239, 122367.
- Alghamdi, A. S. (2023). Optimal power flow of hybrid wind/solar/thermal energy integrated power systems considering costs and emissions via a novel and efficient search optimization algorithm. *Applied Sciences*, 13(8), 4760.
- Amjady, N., Fatemi, H., & Zareipour, H. (2012). Solution of optimal power flow subject to security constraints by a new improved bacterial foraging method. *IEEE Transactions on Power Systems*, 27(3), 1311-1323.
- Attia, A.-F., Al-Turki, Y. A., & Abusorrah, A. M. (2012). Optimal power flow using adapted genetic algorithm with adjusting population size. *Electric Power Components and Systems*, 40(11), 1285-1299.
- Attia, A.-F., El Sehiemy, R. A., & Hasanien, H. M. (2018). Optimal power flow solution in power systems using a novel Sine-Cosine algorithm. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 99, 331-343.
- Bai, W., Eke, I., & Lee, K. Y. (2017). An improved artificial bee colony optimization algorithm based on orthogonal learning for optimal power flow problem. *Control Engineering Practice*, 61, 163-172.

Sırakaya¹ ve ark.

- Bakirtzis, A. G., Biskas, P. N., Zoumas, C. E., & Petridis, V. (2002). Optimal power flow by enhanced genetic algorithm. *IEEE Transactions on Power Systems*, 17(2), 229-236.
- Bhattacharya, A., & Chattopadhyay, P. (2011). Application of biogeography-based optimisation to solve different optimal power flow problems. *IET generation, transmission & distribution*, 5(1), 70-80.
- Biswas, P. P., Suganthan, P., & Amaratunga, G. A. (2017). Optimal power flow solutions incorporating stochastic wind and solar power. *Energy conversion and management*, 148, 1194-1207.
- Boucekara, H., Abido, M., & Boucherma, M. (2014). Optimal power flow using teaching-learning-based optimization technique. *Electric Power Systems Research*, 114, 49-59.
- Boucekara, H., Chaib, A., & Abido, M. (2016). Multiobjective optimal power flow using a fuzzy based grenade explosion method. *Energy systems*, 7, 699-721.
- Cain, M. B., O'Neill, R. P., & Castillo, A. (2012). History of optimal power flow and formulations. *Federal Energy Regulatory Commission*, 1, 1-36.
- Capitanescu, F. (2016). Critical review of recent advances and further developments needed in AC optimal power flow. *Electric Power Systems Research*, 136, 57-68.
- Chen, H., Bo, M. L., & Zhu, Y. (2014). Multi-hive bee foraging algorithm for multi-objective optimal power flow considering the cost, loss, and emission. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 60, 203-220.
- Devarapalli, R., Bhattacharyya, B., & Sinha, N. K. (2020). An intelligent EGWO-SCA-CS algorithm for PSS parameter tuning under system uncertainties. *International Journal of Intelligent Systems*, 35(10), 1520-1569.
- Dommel, H. W., & Tinney, W. F. (1968). Optimal power flow solutions. *IEEE Transactions on power apparatus and systems*(10), 1866-1876.
- El-Fergany, A. A., & Hasanien, H. M. (2015). Single and multi-objective optimal power flow using grey wolf optimizer and differential evolution algorithms. *Electric Power Components and Systems*, 43(13), 1548-1559.
- Elattar, E. E., & ElSayed, S. K. (2019). Modified JAYA algorithm for optimal power flow incorporating renewable energy sources considering the cost, emission, power loss and voltage profile improvement. *Energy*, 178, 598-609.
- Ermiş, S., Yesilbudak, M., & Bayindir, R. (2019). *Optimal power flow using artificial bee colony, wind driven optimization and gravitational search algorithms*. Paper presented at the 2019 8th International Conference on Renewable Energy Research and Applications (ICRERA).
- Ermiş, S. (2023). Multi-objective optimal power flow using a modified weighted teaching-learning based optimization algorithm. *Electric Power Components and Systems*, 51(20), 2536-2556.
- Frank, S., Steponavice, I., & Rebennack, S. (2012). Optimal power flow: A bibliographic survey I: Formulations and deterministic methods. *Energy systems*, 3, 221-258.
- Gao, H., Liu, J., Wang, L., & Liu, Y. (2017). Cutting planes based relaxed optimal power flow in active distribution systems. *Electric Power Systems Research*, 143, 272-280.
- Ghasemi, M., Ghavidel, S., Gitizadeh, M., & Akbari, E. (2015). An improved teaching-learning-based optimization algorithm using Lévy mutation strategy for non-smooth optimal power flow. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 65, 375-384.
- Ghasemi, M., Ghavidel, S., Rahmani, S., Roosta, A., & Falah, H. (2014). A novel hybrid algorithm of imperialist competitive algorithm and teaching learning algorithm for optimal power flow problem with non-smooth cost functions. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 29, 54-69.
- Gurumoorthi, G., Senthilkumar, S., Karthikeyan, G., & Alsaif, F. (2024). A hybrid deep learning approach to solve optimal power flow problem in hybrid renewable energy systems. *Scientific Reports*, 14(1), 19377.
- Hassan, M. H., Kamel, S., & Hussien, A. G. (2023). Optimal power flow analysis considering renewable energy resources uncertainty based on an improved wild horse optimizer. *IET generation, transmission & distribution*, 17(16), 3582-3606.
- Hazra, J., & Sinha, A. (2011). A multi-objective optimal power flow using particle swarm optimization. *European transactions on electrical power*, 21(1), 1028-1045.
- He, X., Wang, W., Jiang, J., & Xu, L. (2015). An improved artificial bee colony algorithm and its application to multi-objective optimal power flow. *Energies*, 8(4), 2412-2437.
- Ilyas, M. A., Abbas, G., Alquthami, T., Awais, M., & Rasheed, M. B. (2020). Multi-objective optimal power flow with integration of renewable energy sources using fuzzy membership function. *IEEE Access*, 8, 143185-143200.
- Kahraman, H. T., Akbel, M., & Duman, S. (2022). Optimization of optimal power flow problem using multi-objective manta ray foraging optimizer. *Applied Soft Computing*, 116, 108334.

Sırakaya¹ ve ark.

- Khorsandi, A., Hosseinian, S., & Ghazanfari, A. (2013). Modified artificial bee colony algorithm based on fuzzy multi-objective technique for optimal power flow problem. *Electric Power Systems Research*, 95, 206-213.
- Kumar, A. R., & Premalatha, L. (2015). Optimal power flow for a deregulated power system using adaptive real coded biogeography-based optimization. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 73, 393-399.
- Kumari, M. S., & Maheswarapu, S. (2010). Enhanced genetic algorithm based computation technique for multi-objective optimal power flow solution. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 32(6), 736-742.
- Liang, R.-H., Tsai, S.-R., Chen, Y.-T., & Tseng, W.-T. (2011). Optimal power flow by a fuzzy based hybrid particle swarm optimization approach. *Electric Power Systems Research*, 81(7), 1466-1474.
- Momoh, J. A., & Zhu, J. (1999). Improved interior point method for OPF problems. *IEEE Transactions on Power Systems*, 14(3), 1114-1120.
- Mukherjee, A., & Mukherjee, V. (2015). Solution of optimal power flow using chaotic krill herd algorithm. *Chaos, Solitons & Fractals*, 78, 10-21.
- Nguyen, T. T. (2019). A high performance social spider optimization algorithm for optimal power flow solution with single objective optimization. *Energy*, 171, 218-240.
- Niknam, T., Narimani, M., Aghaei, J., & Azizpanah-Abarghoee, R. (2012). Improved particle swarm optimisation for multi-objective optimal power flow considering the cost, loss, emission and voltage stability index. *IET generation, transmission & distribution*, 6(6), 515-527.
- Niknam, T., Narimani, M., Aghaei, J., Tabatabaei, S., & Nayeripour, M. (2011). Modified honey bee mating optimisation to solve dynamic optimal power flow considering generator constraints. *IET generation, transmission & distribution*, 5(10), 989-1002.
- Niu, M., Wan, C., & Xu, Z. (2014). A review on applications of heuristic optimization algorithms for optimal power flow in modern power systems. *Journal of Modern Power Systems and Clean Energy*, 2(4), 289-297.
- Pandiarajan, K., & Babulal, C. (2016). Fuzzy harmony search algorithm based optimal power flow for power system security enhancement. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 78, 72-79.
- Ravi, K. (2016). Optimal power flow considering intermittent wind power using particle swarm optimization. *International Journal of Renewable Energy Research (IJRER)*, 6(2), 504-509.
- Reddy, S. S., & Rathnam, C. S. (2016). Optimal power flow using glowworm swarm optimization. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 80, 128-139.
- Reid, G. F., & Hasdorff, L. (2007). Economic dispatch using quadratic programming. *IEEE Transactions on power apparatus and systems*(6), 2015-2023.
- Roy, P. K., & Paul, C. (2015). Optimal power flow using krill herd algorithm. *International transactions on electrical energy systems*, 25(8), 1397-1419.
- Shabanpour-Haghighi, A., Seifi, A. R., & Niknam, T. (2014). A modified teaching-learning based optimization for multi-objective optimal power flow problem. *Energy conversion and management*, 77, 597-607.
- Shaheen, A. M., El-Sehiemy, R. A., & Farrag, S. M. (2016). Solving multi-objective optimal power flow problem via forced initialised differential evolution algorithm. *IET generation, transmission & distribution*, 10(7), 1634-1647.
- Shaheen, A. M., Farrag, S. M., & El-Sehiemy, R. A. (2017). MOPF solution methodology. *IET generation, transmission & distribution*, 11(2), 570-581.
- Shilaja, C., & Arunprasath, T. (2019). Optimal power flow using moth swarm algorithm with gravitational search algorithm considering wind power. *Future generation computer systems*, 98, 708-715.
- Sinsuphan, N., Leeton, U., & Kulworawanichpong, T. (2013). Optimal power flow solution using improved harmony search method. *Applied Soft Computing*, 13(5), 2364-2374.
- Sivasubramani, S., & Swarup, K. (2011). Multi-objective harmony search algorithm for optimal power flow problem. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 33(3), 745-752.
- Stott, B., & Marinho, J. (1979). Linear programming for power-system network security applications. *IEEE Transactions on power apparatus and systems*(3), 837-848.
- Sulaiman, M. H., & Mustaffa, Z. (2021). Optimal power flow incorporating stochastic wind and solar generation by metaheuristic optimizers. *Microsystem Technologies*, 27(9), 3263-3277.
- Sulaiman, M. H., Mustaffa, Z., Mohamad, A. J., Saari, M. M., & Mohamed, M. R. (2021). Optimal power flow with stochastic solar power using barnacles mating optimizer. *International transactions on electrical energy systems*, 31(5), e12858.
- Sun, D. I., Ashley, B., Brewer, B., Hughes, A., & Tinney, W. F. (1984). Optimal power flow by Newton approach. *IEEE Transactions on power apparatus and systems*(10), 2864-2880.

Sırakaya¹ ve ark.

- Syed, M. S., Chintalapudi, S. V., & Sirigiri, S. (2021). Optimal power flow solution in the presence of renewable energy sources. *Iranian Journal of Science and Technology, Transactions of Electrical Engineering*, 45, 61-79.
- Taher, M. A., Kamel, S., Jurado, F., & Ebeed, M. (2019). Modified grasshopper optimization framework for optimal power flow solution. *Electrical Engineering*, 101, 121-148.
- Todorovski, M., & Rajicic, D. (2006). An initialization procedure in solving optimal power flow by genetic algorithm. *IEEE Transactions on Power Systems*, 21(2), 480-487.
- Trojovský, P., Trojovská, E., & Akbari, E. (2024). Economical-environmental-technical optimal power flow solutions using a novel self-adaptive wild geese algorithm with stochastic wind and solar power. *Scientific Reports*, 14(1), 4135.
- Vlachogiannis, J. G., & Lee, K. Y. (2006). A comparative study on particle swarm optimization for optimal steady-state performance of power systems. *IEEE Transactions on Power Systems*, 21(4), 1718-1728.
- Warid, W. (2020). Optimal power flow using the AMTPG-Jaya algorithm. *Applied Soft Computing*, 91, 106252.
- Wei, H., Sasaki, H., Kubokawa, J., & Yokoyama, R. (1998). An interior point nonlinear programming for optimal power flow problems with a novel data structure. *IEEE Transactions on Power Systems*, 13(3), 870-877.
- Yan, X., & Quintana, V. H. (1999). Improving an interior-point-based OPF by dynamic adjustments of step sizes and tolerances. *IEEE Transactions on Power Systems*, 14(2), 709-717.
- Zamzam, A. S., & Baker, K. (2020). *Learning optimal solutions for extremely fast AC optimal power flow*. Paper presented at the 2020 IEEE International Conference on Communications, Control, and Computing Technologies for Smart Grids (SmartGridComm).
- Zhu, L., Zhou, Y., Jiang, R., & Su, Q. (2024). Surgical cases assignment problem using a multi-objective squirrel search algorithm. *Expert systems with applications*, 235, 121217.