

FEN BİLİMLERİ VE MATEMATİKTE TEORİ VE ARAŞTIRMALAR

MART 2022

EDİTÖRLER

PROF. DR. HASAN AKGÜL
PROF. DR. MURAT KÜTÜK

Genel Yayın Yönetmeni / Editor in Chief • C. Cansın Selin Temana
Kapak & İç Tasarım / Cover & Interior Design • Serüven Yayınevi
Birinci Basım / First Edition • © Mart 2022
ISBN • 9978-625-7721-66-0

© copyright

Bu kitabın yayın hakkı Serüven Yayınevi'ne aittir.

Kaynak gösterilmeden alıntı yapılamaz, izin almadan hiçbir yolla çoğaltılamaz.

The right to publish this book belongs to Serüven Publishing.

Citation can not be shown without the source, reproduced in any way without permission.

Serüven Yayınevi / Serüven Publishing

Türkiye Adres / Turkey Address: Yalı Mahallesi İstikbal Caddesi No:6

Güzelbahçe / İZMİR

Telefon / Phone: 05437675765

web: www.seruyenyayinevi.com

e-mail: seruyenyayinevi@gmail.com

Baskı & Cilt / Printing & Volume

Sertifika / Certificate No: 47083

Fen Bilimleri ve Matematikte Teori ve Arařtırmalar

Mart 2022

Editörler

Prof. Dr. Hasan Akgöl
Prof. Dr. Murat Kütük

İÇİNDEKİLER

Bölüm 1

METAL KİRLİLİĞİ TESPİTİNDEKİ EN ÖNEMLİ
BİYOİNDİKATÖR: MİDYELER

Tuncer Okan GENÇ..... 1

Bölüm 2

BİR SİNGÜLER PARABOLİK DENKLEMİN KRİTİK
UZUNLUĞU İÇİN TEORİK VE NÜMERİK HESAPLAMALAR
BURHAN SELÇUK 23

Bölüm 3

(E)-4-(3-ETOKSİ-2-HİDROKSİBENZİLİDENAMİNO)
BENZOİK ASİT MOLEKÜLÜNE AİT KUANTUM KİMYASAL
HESAPLAMALAR

Gonca ÖZDEMİR TARI, Başak KOŞAR KIRCA,
Çiğdem ALBAYRAK KAŞTAŞ, Mustafa ODABAŞOĞLU,
Orhan BÜYÜKGÜNGÖR 35

Bölüm 4

ORTAOKUL ÖĞRENCİLERİNİN FEN BİLİMLERİ ÖZ-
YETERLİKLERİ İLE ELEŞTİREL DÜŞÜNME BECERİLERİNE
KİTAP OKUMA ALIŞKANLIKLARININ ETKİSİNİN
İNCELENMESİ

Alptürk AKÇÖLTEKİN & Fatma DEMİRTAŞ..... 51

“

Bölüm 1

METAL KİRLİLİĞİ TESPİTİNDEKİ EN ÖNEMLİ BİYOİNDİKATÖR: MİDYELER

Tuncer Okan GENÇ¹

¹ (Öğr. Gör. Dr.) Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi, Fen Fakültesi, Biyoloji
Bölümü, e-mail: tuncerokangenc@gmail.com

<https://orcid.org/0000-0002-2139-7655>

”

1. Giriş

Deniz ya da iç su fark etmeksizin su kaynakları kirliliğinin ortaya çıkarılması, korunması ve kirlenen su kaynaklarının kontrol altına alınması büyük önem taşımaktadır. Günümüz dünyasında su kaynaklarının kullanımı ve korunması küresel ölçekte ihtiyatlı bir şekilde uygulanmaya çalışılmaktadır. Ancak çeşitli ülkelerin izleme, ölçme ve değerlendirme yöntemlerindeki büyük eksiklikler nedeniyle su kaynaklarının kirlilik açısından son durumu hakkında bilgi edinmek oldukça zor görünmektedir.

Su kirliliği, sürekli endişe uyandıran dünya çapında bir sorundur ve esas olarak insan yaşamı ile endüstriyel ve tarımsal üretim faaliyetlerinden kaynaklanır. Sanayileşme ve kentleşmenin gelişmesiyle birlikte, yüksek miktarlarda endüstriyel ve tarımsal atık su, kanalizasyon ve evsel katı atıklar sucul ekosistemlere girer. Etkili bir arıtma olmadan bu atık sular, çevre ve insan sağlığı için bir dizi soruna neden olabilecek metal gibi kirleticiler de dâhil olmak üzere birçok kimyasal nehir göl ve deniz gibi sucul ortamlara taşır.

2. Metal Nedir ve Sucul Ekosisteme Etkileri Nelerdir?

Günümüzde çoğu günlük yaşamın ayrılmaz bir parçası olan milyonlarca kimyasal kullanılmaktadır. Metaller, kimyasal kirliliğin en önemli nedenlerinden biri olarak ifade edilebilir. Ağır metaller, atom numarası ve atom ağırlığı yüksek olan metallerdir. IUPAC'a (*International Union of Pure and Applied Chemistry* - Uluslararası Temel ve Uygulamalı Kimya Birliği) göre, bu terim doğru veya bilimsel değildir. Genel olarak, özgül ağırlığı 4,5 g/cm³'ten büyük olan metaller, literatürde "ağır metaller" olarak anılır. İz elementler çoğunlukla doğal sistemdeki bir grup elementin son derece küçük konsantrasyonlarını ifade eder ve ayrıca organizmalar tarafından eser miktarlarda alınan ve organizmaların yaşam fonksiyonlarını sürdürmeleri için gerekli olan ancak fizyolojik fonksiyonlarının tam olarak açıklanamayan elementleri ifade eder. Bilimsel araştırmalarda elde edilen sonuçlar arasında genellikle bitki ve hayvan dokularında bulunan eser elementlerin konsantrasyonunun organizmanın %0.01'inden az olduğu kabul edilmektedir (Kartal, 2004).

Geniş bir kullanım alanı olan metaller üç biyolojik gruba ayrılabilir.

Esansiyel metaller: Organizmaların yaşamsal faaliyetlerini sürdürebilmeleri için gerekli metallerdir. Sıvı ortamlarda içinde hareketli katyonlar [magnezyum (Mg), potasyum (K), kalsiyum (Ca), sodyum (Na), vb.] olarak taşınırlar.

Geçiş elementleri: Düşük konsantrasyonlarda yaşamsal faaliyetler için elzem olan [çinko (Zn), demir (Fe), mangan (Mn), bakır (Cu), krom

(Cr), kobalt (Co), molibden (Mo) vb.] ancak yüksek konsantrasyonlarda toksik etki gösteren metaller olarak tanımlanır.

Metaloidler: Kurşun (Pb), kadmiyum (Cd), arsenik (As), selenyum (Se), cıva (Hg), Berilyum (Be), kalay (Sn), metabolik aktivite için gerekli olmayan çok düşük konsantrasyonlarda dahi toksik etkiye sebep olan metallerdir (Förstner ve Wittmann, 1981).

Su ekosistemine boşatıldıktan sonra su sütununda yalnızca küçük miktarlarda eser metal kalır ve bunların çoğu nihayetinde sedimentte birikir (Malvandi, 2017), iz metallerin %90'dan fazlası sedimentlerde bulunur (Salomons ve Mook, 1977). Bununla birlikte, tortu resüspansiyonu ve desorpsiyon reaksiyonları meydana gelebilir ve belirli çevresel koşullar altında birçok metal tekrar su sütununa salınır (IP ve ark., 2005). Su ve sedimentteki çözünmüş ve partikül halindeki metaller, balık, karides, midye vb. dahil olmak üzere suda yaşayan organizmalar tarafından kolayca emilir.

Örneğin, midyeler eser metallere direk maruz kalırlar ama balıklar su ve yiyecekleri doğrudan sindirim sistemi yoluyla ve ayrıca solungaçlar, kaslar ve tendonlar gibi geçirgen zarlar yoluyla alırlar (Riberio ve ark., 2005). Böylece eser metaller biyojeokimyasal döngüye katılır ve sudaki besin zincirinde biyolojik olarak birikebilir ve biyolojik olarak büyüyebilir.

Sudaki organizmalar, esas olarak bu metallerin ortamdaki konsantrasyonuna ve biyoyararlanımına bağlı olan olumlu veya zararlı etkilerden kaçınılmaz olarak etkilenir. Bazı metaller, hayvanların fizyolojik aktiviteleri için esansiyeldir ve bunlara esansiyel metaller denir. Ancak dozları toksisitelerini belirler; bu nedenle, esansiyel metaller belirli konsantrasyonları aşan organizmalar için toksik olabilir (Genç, 2021).

Günümüzde sucul alanlardaki metal kirliliğinin etkisini ortaya çıkarmak ve gelecekte daha büyük su kirliliği sorunlarının önüne geçmek için alınacak önlemlerin altyapısını oluşturmak için biyoizleme çalışmaları yürütülmektedir (Genç ve Yılmaz, 2016). Avrupa Su Politikası Düzenlemelerine ek olarak, 1992 yılında Rio de Janeiro'da düzenlenen Birleşmiş Milletler Çevre ve Kalkınma Konferansında nüfus ve kentsel kirliliğine dikkat çekmiş ve acil önlemler alınmasına karar vermiştir. Aynı şekilde, Haziran 1996'da Türkiye'de düzenlenen Habitat II konferansında başta kentleşme, çevre ve insan sağlığı sorunları olmak üzere pek çok konu tartışıldı. Bu toplantılarda; 2003 Birleşmiş Milletler (BM) metal kirliliği protokolünde Cd, Pb ve Hg birikiminin 1990'lı yılların seviyelerine indirilmesi kararlaştırıldı. Protokol, günlük hayatın parçası olarak kabul edilen endüstriyel kaynaklardan (çelik-demir endüstrisi vb.), enerji üretim tesislerinden, floresan lambalarından, termometre ve barometre gibi

ölçüm aletlerinden, diş dolgusu olan amalgamdan ve bunun gibi içeriğinde metal olan birçok malzemeden doğaya metal yayılımını azaltmayı hedeflemiştir (Anonim, 2003). Bunlara ek olarak, motorlu taşıtların egzoz gazları, tarımda daha fazla ürün alabilmek adına gereksiz ilaçlama, maden yatakları ve işletmeleri gibi etkenler metal kirliliği sebepleri arasında yer almaktadır (Elik ve Akçay, 2000; İlhan ve ark., 2006). Türkiye açısından metal kirliliği ele alındığında; Akdeniz’e 100 bin ton Hg, 21 bin ton Zn, 38 bin ton Pb ve 650 bin ton petrol türevleri bırakılmaktadır. Ayrıca 1951 yılında faaliyete geçen Murgul (Artvin) Göktaş Bakır Fabrikası bacalarından havaya salınan atıklar asit yağmurlarına sebep olmuş ve orman alanlarında tahribatlara yol açmıştır. Muğla Yatağan Termik Santrali etrafında bulunan kızılçam ormanları ile beraber verimli tarım arazilerinde büyük tahribatlara neden olmuştur (Boşgelmez vd., 2000).

3. Midye ve Metal Birikimi

Midye gibi su ürünleri, yüksek oranda protein ve çoklu doymamış yağ asitleri içerirken, düşük doymuş yağ içeriği içerir ve dünyanın farklı yerlerinde yaşayan çok sayıda insan için beslenmenin önemli bir parçasıdır (Mziray ve Kimere, 2016).

Metaller nispeten yüksek trofik seviyelerde meydana geldiğinden midye ve balık gibi bazı suda yaşayan organizmalar, besin zinciri boyunca daha fazla eser metal alırlar ve bu da izin verilen günlük alım düzeylerinden daha yüksek kontamine su ürünleri içerdiğinde insanlar için sağlık riskleri ile sonuçlanabilir.

Geçtiğimiz birkaç yıl boyunca, bu bileşiklerin deniz ve nehir ağız ekosistemleri üzerindeki olumsuz etkilerini izlemek ve değerlendirmek için çeşitli biyolojik izleme stratejileri geliştirilmiştir. İzleme programları, kimyasal kirleticilerin zamansal ve uzamsal varyasyonunu tespit etmek ve sucul ekosistemlerin kirliliğindeki eğilimlerin bilgisine katkıda bulunmak için “nöbetçi organizmalar” olarak bilinen çok sayıda biyoindikatör kullanılır. Midyeler bu biyoindikatör türler arasında en yaygın kullanılanıdır. Midye İzleme Programı, Amerika Birleşik Devletleri, Birleşik Krallık, Avustralya, Çin ve Japonya gibi dünyanın birçok bölgesinde uygulanmaktadır. Son yıllardaki çalışmalar; metal konsantrasyonlarını daha iyi açıklamak ve maruz kalma yollarının tanımlanmasına izin vermek amacıyla metal alımını modellemeye odaklanmıştır. Biyoizleme programlarının, geniş bir coğrafi aralıkta veya daha küçük coğrafik mesafelerde, ancak fizikokimyasal bir gradyanla, örneğin nehir ağızından okyanusa doğru olarak belirlenip birden fazla tür ile çalışması kalitesini arttırmaktadır.

Metal kirleticiler, midyeler tarafından besin olarak, solunum ve biyolojik zarlardan taşınma yoluyla elde edilebilir (Belfroid, 1996). Bu ne-

denle, metallerin biyoyararlanımı sadece farklı kompartmanlar arasındaki dağılıma ve türleşmelerine değil, aynı zamanda organizmanın kendisinin fizyolojisine ve ekolojisine de bağlıdır. Midyeler, metalleri başlıca iki organda, hepatopankreas ve böbrekte biriktirir, ancak bazı elementler solungaç ve manto gibi diğer dokularda da birikebilir. Metal sekestrasyonu ve depolanmasında yer alan en iyi çalışılmış hücre içi yapılardan ikisi, granüller olarak sınıflandırılan metalotiyoneinler ve hücre içi veziküle bağlı granüllerdir. Çift kabuklu yumuşakçalar, metalleri vücutlarından uzaklaştırmak için çeşitli mekanizmalar kullanır. Genel süreç, türe özgü, organ ve dokuya özgü son olarak da liganda özgü bir süreçtir. Böbrek, çift kabuklu yumuşakçaların en önemli atılım organıdır. Orada lizozomlarda bulunan metaller, vakuol içeriğinin ekzositozu, renal podositlerden eliminasyon veya midyenin idrar yolundaki bütün granüllerin diyapedezi yoluyla atılır (Regoli 1992). Bazı metallerin atılımı aynı zamanda, tegument yoluyla, dışkıyla, byssus üretimi ile kabuk yoluyla veya yumurtlama sırasında gamet emisyonu yoluyla da gerçekleşebilir (George 1980).

3.1. Midyelerde metal birikimi ve tüketimi ile ilgili risk hesaplamaları

İnsanlar çok eski zamanlardan günümüze kadar tarihin birçok aşamasında midyeyi besin kaynağı olarak kullanmıştır. MÖ 400 İspanya’da tüketilmeye başlanan midye, 2000 yıl önce İtalya’da ve 700 yıl önce Fransa’da tüketildiği bilinmektedir (Smaal, 2002). Yenilebilir yaklaşık 17 midye türü olup, bunların arasında en yaygın olarak yenilenler *Mytilus edulis*, *M. galloprovincialis*, *M. trossellus* ve *Perna canaliculus*’tur.

Beslenme stratejisi nedeniyle metal kontaminasyonu riski en yüksek deniz türlerinden biri *M. galloprovincialis*’tir. Akdeniz midyesi olarak da bilinen bu midye, Akdeniz, Karadeniz ve Adriyatik Denizi’nin yerli bir türüdür. *M. galloprovincialis* oldukça istilacı bir türdür ve bugün Avustralya, Güney Afrika, Asya, Kaliforniya, Birleşik Krallık, İrlanda, Fas ve Fransa’da bulunabilir (Gosling 1992). Karadağ, Güneydoğu Avrupa’da Adriyatik kıyısında yer alan bir Akdeniz ülkesidir. Karadağ’ın kıyı kesimlerinde, Adriyatik Denizi’nden deniz organizmalarının toplanması ve yetiştirilmesi yüzyıllar öncesine dayanmaktadır. *M. galloprovincialis* bu bölgeye özgü bir türdür ve bu çift kabuklunun bu bölgede 100 yıl önce yetiştirildiğine dair bazı işaretler vardır. Akdeniz midyelerinin ticari tarımı 20 yıl öncesine dayanmaktadır ve bugün bu midyeler, her biri yılda 10-50 ton üretim yapan yaklaşık 16 küçük çiftlikte yetiştirilmektedir (FAO 2007). Karadağ’da 2003-2007 döneminde, yıllık ortalama 150 ton midye üretimi (FAO 2007) yapılmaktadır fakat bu miktar Çin (600.000 Ton yıl⁻¹)

ve İspanya (200.000 Ton yıl⁻¹) gibi en büyük üreticilerle karşılaştırıldığında çok küçük bir rakamdır (Stankovic ve ark., 2011).

M. galloprovincialis, Akdeniz ülkelerinde hem ham hem de işlenmiş formda yaygın olarak tüketilen popüler ve besin değeri yüksek bir bivalvia türüdür. Yüksek düzeyde protein içerir ve düşük kolesterol ve yağ seviyelerine sahip olduğu için su ürünleri yetiştiriciliği ve diyetetik için uygundur (Prato ve ark., 2019). Bu özellikler son yıllarda midye üretiminin ve tüketiminin artmasına neden olmuştur. Avrupa’da, su ürünleri yetiştiriciliği yoluyla midye üretimi, vahşi doğadan hasattan neredeyse beş kat daha fazladır (Stankovic ve ark., 2011).

M. galloprovincialis üretimi Yunanistan ve Türkiye’de hızla artmaktadır. Son birkaç yıldaki düşüşe rağmen, İspanya hala Avrupa’nın en büyük midye üreticisidir (Guillen et al 2019). Taze midye, %50 konserve ve %10 dondurulmuş olmak üzere Avrupa pazarının %60’ını oluşturmaktadır (Stankovic ve ark., 2011). Türkiye başta olmak üzere birçok Akdeniz ülkesinde midye çeşitli şekillerde tüketilmektedir. Türkiye’de *M. galloprovincialis* ağırlıklı olarak midye dolma olarak tüketilmektedir. Geleneksel yöntemlerle hazırlanan midye dolma Türkiye’de hem sokak yemeği olarak hem de restoranlarda yaygın olarak tüketilmektedir. Türkiye’de en sık kullanılan midye dolma tarifi şu şekildedir: Midyelerin kabukları bıçakla temizlenir, tüm organik ve organik olmayan yapıları kazınarak temizlenir. Midyeler tekrar yıkanır, kabukları bıçakla açılır ve pirinç, yağ, tuz ve baharat karışımı ile doldurulur. Midye dolması bir tencerede veya buharda pişirilir. Midyeler piştikten sonra sıcak veya soğuk olarak tüketilebilir. Araştırmalar, sokaklarda satılan bazı midye dolmaların kabul edilebilir seviyelerin önemli ölçüde üzerinde bir mikrobiyal yüke sahip olduğunu göstermiştir (Ulusoy ve Özden 2011).

Midye tüketimine bağlı sağlık risklerinin belirlenebilmesi için bazı hesaplamalar kullanılmaktadır. Aşağıda bu hesaplamaların nasıl yapıldığına dair bazı örnek formüller verilmiştir. Midye tüketiminden kaynaklı olası tüketici risklerini belirlemek için EWI, THQ ve HI hesaplamaları yapılabilmektedir. Vücut ağırlığı 70 kg, yaşam süresi ise 60 yıl (EPA, 2011), olarak kabul edilmektedir. Yetişkin bir kişi için elde edilen EWI değerleri, dokulardaki maksimum birikim değerleri kullanılarak hesaplanmaktadır. Tüketici risk değerlendirmeleri kapsamında EWI (Tahmini haftalık alım), THQ (tehlike indeksi) ve TTHQ (Hedef tehlike katsayısı) hesaplamaları EPA (2019)’a göre yapılabilmektedir.

$$EWI = Mc \times IR / BW$$

Mc: Balık dokularındaki metal düzeyi ($\mu\text{g g}^{-1}$), **IR:** Tüketim oranı (g gün^{-1}), **BW:** Tüketicinin vücut ağırlığı (kg). Türkiye İstatistik Kurumu

(TUİK) verilerine göre Türkiye’deki su ürünleri tüketimi (IR) 18.6 g/kişi/gün’dür (TUİK, 2019).

THQ vücuda alınan metallerin düzeylerinin kanserojen olmayan etki risklerini de ifade etmektedir. THQ hesaplamalarında kullanılan parametreler Tablo 1’de verilmiştir. Toplam THQ (TTHQ) ya da HI olarak ifade edilen değer, araştırılan tüm elementlerin toplam THQ değerleri ile hesaplanır. TTHQ’nun 1’den büyük olması tüketici açısından kanserojen olmayan sağlık risklerinin olduğunun göstergesidir (EPA, 2019).

$$THQ = [(EF \cdot ED \cdot CR \cdot CM) / (RfD \cdot BW \cdot AT)] \cdot 10^{-3}$$

$$\Sigma THQ(HI) = (THQ1 + THQ2 + \dots + THQn)$$

Metallerin referans dozu (RfD) değerleri (EPA 2011, 2016): Pb: 0.004, Ni: 0.02, Cd: 0.001, Al: 1, Cr: 1.5, Cu: 0.04, Fe:0.07, Mn: 0.14, Zn: 0.3

Tablo 1. THQ hesaplanmasında kullanılan parametreler (EPA 2006, 2011)

Faktör / parametre	Sembol	Birimler	Yetişkinler için alınan değerler
Maruz kalma süresi	ED	Yıl	30
Maruz kalma sıklığı	EF	Gün/Yıl	365
Ortalama maruz kalma süresi	AT (ED x 365)	Gün	10950
Vücut ağırlığı	BW	kg	70
Balık tüketim oranı	IR	g/gün	18.6

CRi (kanserojenik risk katsayısı), tüketim yoluyla metal kirliliğine maruz kalan insanlardaki kanser riskinin hesaplanmasında kullanılır. CRi hesaplamaları US EPA (2019)’a göre yapılmaktadır. 10^{-5} değerinin üzerinde CRi değerleri kanserojen riskinin daha yüksek olduğunun göstergesidir.

$$CRi = [(EF \cdot ED \cdot CR \cdot CM \cdot CsF) / (BW \cdot AT)] \cdot 10^{-3}$$

CRi hesaplamalarında diğer formüllerden farklı olarak CsF (cancer slope factor) değeri kullanılmaktadır. CsF değerleri (US EPA, 2019)’da belirlenen değerler kullanılarak hesaplanmaktadır. CsF değerleri Ni, As, Pb, Cr ve Cd için sırasıyla 1.7, 1.5, 8.5. 10^{-3} , 0.5 ve 6.3’tür. CM: Doku içerisindeki metal konsantrasyonunu ifade etmektedir.

3.2. Midyelerde metal birikimi ve risk değerlendirmesi ile ilgili çalışmalar

Gerçekleştirilen çalışmalar günümüze yaklaştıkça konunun her geçen gün önem kazanması ve teknolojik gelişmeler neticesinde daha kapsamlı

bir hal almıştır. Birkaç yıl öncesine kadar midye dokularında metal analizi ile sınırlı kalan çalışmalar, günümüzde tüketimi neticesinde insan sağlığına verdiği zararların ortaya konması için risk hesaplamalarının yapılması ile metal kirliliği hakkında daha geniş bilgi sahibi olmamızı sağlamaktadır.

Mol ve Alakavuk (2011) Marmara Denizi'ndeki on avlanma bölgesinde *M. galloprovincialis*'in yenilebilir dokularında Zn, Cu, Cd, Hg ve Pb metallerini midye tüketimi ile ilişkili sağlık risklerini araştırmak için analiz etmişlerdir. Marmara Denizi'nden toplanan midyeler Cu, Cd ve Hg açısından güvenlidir, ancak Zn ve Pb değerleri izin verilen limitlerin üzerinde olduğunu görülmektedir. Yaptıkları çalışma ile araştırmacılar, Marmara Denizi midyelerinin metal içerikleri açısından dünyanın diğer bölgelerindeki midyelere göre metal konsantrasyonlarının daha düşük olduğunu açıklamışlardır.

Çayır ve ark. (2012) metal konsantrasyonları Çanakkale Boğazı'nda *M. galloprovincialis*'te ilk kez değerlendirmişlerdir. Cd, Cr, Cu, Pb, Zn, Fe ve Ni'nin maksimum konsantrasyonları, sırasıyla 1.59, 6.04, 12.01, 6.03, 319.6, 402.79 ve 3.52 mg/kg olarak açıklanmıştır. Beslenme yönü açısından dünya sağlık otoriteleri tarafından önerilen değerler dikkate alındığında, elementlerin konsantrasyonunun genel olarak sağlık açısından risk oluşturacak seviyelerde olmadığı kabul edilebilir.

Genç ve ark. (2015) önemli bir tarım ve sulama kaynağı olan Tersakan Çayı'ndan topladıkları *Unio* sp.'nin dokularında (kas, solungaç ve kabuk) metalleri (Cd, Co, Cr, Cu, Fe, Mn, N, Pb ve Zn) mevsimsel olarak analiz etmişlerdir. Genel olarak, ölçülen metallerin konsantrasyonları kış ve sonbaharda ilkbahar ve yaza kıyasla daha yüksek bulunmuştur. Bununla birlikte kabuk numunelerinde yüksek seviyelerde ağır metaller bulunurken, kaslarda düşük seviyelerde bulunduğunu ifade etmişlerdir.

Yoloğlu ve ark. (2018) Atatürk Baraj Gölü'nde biyomonitör organizma olarak seçilen midye (*Unio mancus*) dokularında metallerin toksik etkilerini belirlemeyi amaçlamışlardır. Sonuçlarına göre en çok birikim gösteren metal Fe, ardından Zn, Cu ve As gelmektedir. Hg ise en az birikim gösteren metal olmuştur. Araştırmacılar, Atatürk Baraj Gölü kıyısındaki endüstriyel faaliyetler ve evsel atıkların bu alanlardaki metal kirliliklerin ana kaynakları olduğunu ileri sürmüşlerdir.

Varol ve Sümbül (2018) Türkiye'de Keban Baraj Rezervuarından toplanan midye (*Unio elongatulus eucirrus*) ve kerevitte (*Astacus leptodactylus*) on metal konsantrasyonunu tespit etmişlerdir. Kerevit ve midyelerde Cd, Cr, Cu, Pb, Zn ve inorganik As konsantrasyonları izin verilen maksimum seviyelerin altında olmasına rağmen midyelerdeki As, Cd ve

Mn seviyelerini kerevitlere göre yaklaşık dokuz kat daha fazla tespit etmişlerdir.

Alkan ve ark. (2020) Sürmene Koyu'ndan (Karadeniz) yakalanan *M. galloprovincialis*'in tüketimi neticesinde metallerin/metaloidlerin oluşturduğu kanserojen olmayan sağlık risklerini değerlendirmek için Hedef Tehlike Katsayısı (THQ) ve Tehlike İndeksi (HI), değerlerini hesaplamışlardır ve tüm örnekleme sahaları için 1'in altında değerler tespit edilmiştir, bu nedenle insan sağlığına olumsuz etkisi olmadığı öne sürülmüştür.

Turanlı ve Gedik (2021) yapmış oldukları çalışmada Karadeniz, Marmara Denizi ve Türkiye'nin Ege Denizi kıyı sularını içeren 23 farklı istasyondan örneklenen Akdeniz midyelerinde (*M. galloprovincialis*) As, Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, V ve Zn'nin potansiyel çocuk ve yetişkin sağlığı risklerine yol açan tüketim sonuçları araştırmıştır. Yapılan çalışmada 10 örnekleme istasyonunda Pb değerlerinin Avrupa Birliği'nin izin verdiği limitlerin üzerinde olduğu tespit edilmiştir. Tahmini haftalık alım miktarı, Gıda Katkı Maddeleri Ortak FAO/WHO Uzman Komitesi limitlerini aşmazken, çocuklar için As için hedef tehlike katsayısı >1 bulundu. ABD Çevre Koruma Ajansı'na göre As için yüksek tüketim oranlarında yetişkinler ve çocuklar için yaşam boyu kanser riski (CR) kabul edilemez değerlerde tespit edildi ($>10^{-4}$).

Köşker ve ark. (2022) Türkiye'de beş ilde satılan midye dolmalarında (*M. galloprovincialis*) metal/metaloid düzeylerini analiz etmiş ve bu seviyelerin çocuklar ve yetişkinler için oluşturduğu olası sağlık risklerini değerlendirmişlerdir. Midye dolmalardaki en yüksek seviyelerde bulunan elementler Fe ve vanadyum (V) sırasıyla 50.59–219.80 ve 85.75–161.70 mg/kg iken, en düşük seviyeler Cd, As ve Pb sırasıyla 0.11-1.08, 0.52-1.20 ve 0.40-1.50 mg/kg olarak tespit edilmiştir. Yetişkinler ve çocuklar için tahmini haftalık alım miktarı (EWI), hedef tehlike katsayısı (THQ) ve yaşam boyu kanser riski (CR) değerlendirmeleri, mevcut metal seviyelerine dayalı olarak farklı tüketim sıklıkları için midye dolmalar üzerinde hesaplanmıştır. THQ hesaplamalarına göre hem çocuklar hem de yetişkinler için V düzeyleri >1 olarak hesaplanmıştır. Sonuçlar, Cr, As ve Cd düzeylerinin hemen hemen tüm lokasyonlar ve tüketici grupları için kanserojen risk oluşturduğunu gösterirken, Pb'nin herhangi bir kanserojen risk oluşturmadığı tespit edildi.

Ayrıca dünyanın farklı bölgelerinde de midye tüketimi sonucu oluşabilecek sağlık riskleri ile alakalı çalışmalarda yapılmıştır. Li ve ark (2020) su, sediment ve *Cristaria plicata* organlarındaki 15 eser metal ve metaloidin konsantrasyonlarını Dongting Gölü'nden toplanan örneklerde bu eser metallerin biyolojik birikim ve insan sağlığı riskini araştırmışlardır. *C. plicata* dokularındaki Mn'nin tahmini günlük alım (EDI)

değerleri, gençler için önerilen tolere edilebilir günlük alım (TDI) değerlerinden daha yüksek olduğunu tespit etmişlerdir. Yetişkinler ve gençler için tehlike indeksi (HI) değerleri 1'den yüksek bulunmuştur. Bu sonuçlar birden fazla metale maruz kalmanın insanlarda kanserojen olmayan önemli risklerin ortaya çıkabileceğini göstermektedir. Guendouzi ve ark (2020), Pb, Cd, Cr, Ni, Co, Cu, Zn, Mn ve Fe'nin Cezayir sahillerinden toplanan *M. galloprovincialis*'in dokularında birikimini analiz etmişlerdir. Hedef tehlike katsayıları (THQ) ve tehlike indeksi (TTHQ) değerleri Fe için bir risk seviyesini gösterdiğini belirtmişlerdir. Zhelyazkov (2018) Karadeniz'in Varna Körfezi'nde avlanan midye (*M. galloprovincialis*) ve rapa salyangozlarında (*Rapana venosa*) Pb, Cd ve Hg konsantrasyonlarını analiz etmek ve bu üç metalin varlığından insan sağlığına yönelik risklerini değerlendirmek üzere çalışma gerçekleştirmiştir. Midye ve rapa salyangozları tüketen yetişkinler için EDI değerleri, yayınlanan RfDo değerlerinin altında kalmıştır. Tüm THQ ve HI değerleri 1'in altında hesaplanmıştır. Karadeniz Varna Körfezi'nde yakalanan *M. galloprovincialis* ve *R. venosa*'nın tüketimi Pb, Cd ve Hg açısından yetişkin insan sağlığı için herhangi bir risk oluşturmadığı açıklanmıştır. Yukarıda belirtilen literatür bilgisinde de açıklandığı üzere dünyanın farklı bölgelerinden yakalanan midye türleri farklı konsantrasyonlarda metal içermektedir. Ekonomik olarak oldukça öneme sahip midye türlerinin tüketimi öncesi yenilebilir dokularındaki metal konsantrasyonlarını bilmek ve oluşturabilecekleri sağlık risklerini değerlendirebilmek insan sağlığını korumak açısından önem ihtiva etmektedir.

4. Midyelerde Metal Birikimini Etkileyen Faktörler

Midyeler metal birikiminde; boy, cinsiyet, konum, toplama yılı, pH, muhtemel sıcaklık ve tuzluluk gibi bir takım iç ve dış faktörlerden etkilenebilir. Bu etkiler, sonuçların doğrulanması veya izleme verilerinin yorumlanması sırasında dikkate alınabilmeleri için açıklanmalı ve ölçülmelidir.

4.1. Yaş ve vücut ağırlığının etkisi

Organizmanın yaşı midye gibi biyoindikatör türlerin metal biriktirme kabiliyetini etkileyen önemli bir faktör olduğu bilinmektedir. Yap ve ark. (2009) genç ve ergin midyeler arasında fizyolojide farklılıklar olabileceğini öne sürdüler. Büyük ve ergin midyeler, vücut ağırlıkları başına vücutlarından daha az su pompalama eğiliminde olduklarından, metal alımı daha küçük bireylerden daha düşüktür. En genç aşamalarda (embriyolar) metal birikimi daha fazla iken, daha az duyarlı olan yaşlı bireyler daha düşük metal birikimine sahiptir. Bu aynı zamanda embriyoların olgun organizmaya göre daha yüksek yüzey/hacim oranıyla da bağlantılı olabilir.

Bu nedenle, vücut boyutu ile metal konsantrasyonlarındaki azalma, daha küçük midyelerin daha büyük bir yüzey alanı / hacim oranına sahip olması nedeniyle metal içeriğinin önemli bir bölümünün yüzey tarafından adsorbe edildiğini göstermektedir (Ansari et al 2004). Boyden (1974) midye türleri için organizma boyutu ve toplam metal içeriği arasındaki ilişkileri çalışmış ve Mn, Fe, Ni, Cu, Zn ve Pb'nin daha küçük boyutlu *M. edulis*'te daha fazla birikim gösterdiğini bildirmiştir. Benzer şekilde, Jones ve Walker (1979) tatlı su midyelerinin tüm yumuşak vücut kısımlarındaki Fe, Mn, Zn ve Cd konsantrasyonlarının artan vücut ağırlığı ile azaldığını bulmuşlardır.

4.2. Üreme döngüsünün etkisi

Midyedeki metal içeriğindeki değişikliklerin bir açıklaması olarak üreme döngüsünün olası etkilerinden sıklıkla bahsedilir. Yumurtlama sırasında yumuşak doku ağırlığının %40'a varan kısmının kaybolması, midye fizyolojisinde gametogenezin önemini göstermektedir (Cossa 1989). Vücut ağırlığı, yılın farklı dönemlerinde meydana gelen somatik ve gonadal büyümenin nispi oranına göre mevsimsel olarak değişir: en yüksek vücut ağırlığı değerleri yaz aylarında iken en küçük değerler kış aylarındadır. Vücut ağırlığı, yumurtlama ile aynı zamana denk gelen ilkbahar-yaz döneminde keskin bir şekilde minimuma düşer, hayvanlar bir sonraki sonbahar ve kış aylarında gonad gelişimi için kullanılacak rezervler oluşturdukça yaz aylarında hızlı bir artış izler. Gonad gelişiminin kapsamının öngörülemezliği, yetişkin hayvanların kirlilik izleme programlarında gösterge olarak kullanılmasını da zorlaştırmaktadır. Bu nedenle, metabolizmanın metal içeriği üzerindeki etkisini azaltmak ve böylece kirlilik seviyelerinin daha kesin bir göstergesini vermek için olgunlaşmamış örneklerin kullanılması önerilmektedir.

4.3. Mevsimlerin etkisi

Midyelerde bulunan eser metallerin konsantrasyonları üzerinde mevsimlerin etkisi kısmen açıklanabilmiştir. *Mytilus edulis*'te, metal konsantrasyonlarının mevsimsel değişimleri hakkında birikimini artıran bir çok çalışma ortaya konmuştur. Bryan (1976) midye dokularındaki çinko, kurşun, bakır, kobalt, demir, mangan ve nikel konsantrasyonlarının sonbahar ve kış aylarında en yüksek olduğunu bulmuş ve metal konsantrasyonlarının fitoplankton üretkenliği ile ters orantılı olduğu öne sürmüştür. Rouane-Hacene ve ark. (2015), kış aylarında toplanan midye dokularındaki metalik elementlerdeki (Zn, Cu, Cd) zenginleşmenin kentsel ve endüstriyel faaliyetlerin girdilerinden kaynaklanabileceğini bulmuşlardır. Ancak yazar, Pb için ters eğilim olduğunu öne sürmüştür. Yaz aylarındaki güçlü Pb birikimi, bu dönemde kentsel nüfusun artmasıyla ilişki-

li olabileceğini, bu da daha yoğun trafik nedeniyle daha yüksek kentsel atık su deşarjlarına ve atmosferik yüksek Pb seviyelerine yol açabileceğini belirtmiştir. Fowler ve Oregioni (1976), *M. Galloprovincialis*'teki on adet metalin konsantrasyonlarını tespit etmek üzere yaptıkları çalışmada, Mart'ta (ilkbahar) toplanan örneklerde görülen mevsimsel maksimum metal birikimini, hayvanların üreme mevsimine başlamasından kaynaklanabileceğini öne sürmüşlerdir. Giarratano ve Amin (2010) midyelerdeki ağır metallerin (Cu, Zn, Fe, Cd) kış aylarında daha yüksek olan mevsimsel bir biyolojik birikim eğilimi gösterdiğini buldu. Bu muhtemelen, gıda mevcudiyetinin daha düşük olduğu daha düşük sıcaklıklarda daha yavaş büyümeden kaynaklanmaktadır. Rezervler metabolizma için kullanılır, bu da doku kütlelerinin azalmasına ve dolayısıyla metal içerik oranının artmasına neden olur.

4.4. pH'ın etkisi

Organizmalar tarafından alınabilecek metallerin mevcudiyeti de suyun pH'ından etkilenir. Alım için mevcut metalin formu genellikle metale ve pH'ın özgülülüğüne bağlıdır. Ağır metallerin toksisitesi, askıda organik maddeye adsorbe edildiklerinde azaltılabilir, böylece su kolonundaki iyonik fraksiyonlarını azaltır. Düşük pH'ta metaller genellikle serbest katyonlar halinde bulunur; ancak alkali pH'ta çözünmeyen hidroksitler, oksitler, karbonatlar veya fosfatlar olarak çökeltme eğilimi gösterirler (Campbell and Tessier, 1987).

4.5. Metallerin sinerjistik ve antagonistik etkileri

Çeşitli kirleticilerin eşzamanlı varlığı, biyobirikim oranları ve/veya toksisite üzerinde sinerjistik veya antagonistik etkilere sahip olabilir. Bağlanma bölgeleri için kimyasal olarak benzer iyonlar arasındaki rekabet, midyeler tarafından iyon biyobirikimini önemli ölçüde etkileyebilir. Hemmelraad ve ark. (1987) tatlı su midyelerindeki Zn'nin Cd için antagonist olduğunu, solungaçlarda Cd alımını inhibe ettiğini belirtmişlerdir. Çünkü Zn'nin solungaçlardaki bağlanma yerleri için Cd ile rekabet ettiğini varsaydılar. Bununla birlikte Cd'nin solungaçlarda birikimi az olsa da iç organlarda konsantrasyonlarının yeniden yükseldiğini açıklamışlardır. Diğer bir çalışmada, Romeril (1971) hem demir hem de kobaltın midye *Ostrea edulis* tarafından Zn alım oranını azalttığını bildirmiştir. Phillips (1976), *Mytilus edulis* tarafından net bakır alımının çinko, kadmiyum ve kurşunun varlığından ve konsantrasyonundaki değişiklikten etkilendiğini göstermiştir. Boukadida ve ark., (2016), bakır ve gümüşün, Akdeniz Denizi *M. galloprovincialis*'in embriyonik gelişimi üzerinde ek olarak etkileşime girdiğini belirtmiştir. Bakır ve gümüşün midyelere etki şekli şu şekilde açıklanmıştır: bakırın membran potansiyelini artırarak ve iyon

kanallarını bloke ederek membran geçirgenliğini etkilediği bildirilmiştir. Düşük konsantrasyonlarda, gümüş iyonları K^+ kanalını bloke eder ve daha büyük konsantrasyonlarda membran geçirgenliğini artırır (Coskun ve ark. 2012). Ayrıca Cu-Ag karışımlarının toksisitesi metal konsantrasyonlarına ve kombinasyonlarına bağlı olabilir. Lucas ve Horton'a göre (2014) gümüş metali, düşük seviyelerdeki bakır konsantrasyonu ile birleştirildiğinde daha büyük etkiye neden olur; aksi halde bakırın baskın zararlı etkileri vardır. Bir organizma tarafından herhangi bir metalin alımı üzerinde birkaç metal kirleticinin bir arada bulunmasının etkilerinin incelenmesi, çok sayıda metal kombinasyonu ve olası biyolojik tepkiler nedeniyle son derece zordur.

4.6. Maruz kalma süresi

Toksik metallere karşı geliştirilmiş potansiyel toleransın, bu metallerde daha önce kısa süreli bir maruz kalma öyküsüne sahip olduğu bilinmektedir. Artan toleransın ortaya çıkması için ön maruz kalma sırasında bazı koşulların gerçekleşmesi gerektiği bilinmektedir: ön maruz kalma, hücrel telafi edici tepkileri başlatmak için yeterince yüksek olmalı ve ön maruz kalma toksik seviyelerin altında olmalıdır. Kahle ve Zauke (2002), bazı suda yaşayan organizmaların, doku ve organ sistemlerinde kirleticileri, habitatlarındaki konsantrasyonlarına kıyasla bir milyondan fazla konsantre etme yeteneğine sahip olduğunu bildirmiştir. Midyeler, belirli metalleri yan etkiler olmaksızın yüksek konsantrasyonlarda biriktirebilir, örneğin kadmiyum, böbreği olumsuz etkilemeden detoksifikasyon için böbrekte konsantre olabilir (Ravera 1984). Brooks ve Rumsby (1967), istiridyelerde *Ostrea sinuata*'da Cd için konsantrasyon faktörlerinin, maruz kalma konsantrasyonunun artmasıyla istikrarlı bir şekilde azaldığını ve dokulardaki Cd konsantrasyonlarının solungaç > kalp > visseral kütle > manto > beyaz kas > çizgili kas sırasıyla azaldığını bulmuşlardır. Eisler ve ark. (1972) ve Shuster ve ark. (1969), Cd'ye maruz kalan *Crassostrea virginica*'nın yumuşak dokularda hızla yüksek seviyelerde metal biriktirdiğini buldu. İki çalışmada hayvanlarda biriken maksimum Cd konsantrasyonunun, maruz kalma konsantrasyonundan bağımsız olduğunu göstermektedir. George ve Coombs (1977) *Mytilus edulis*'te Cd alımında bir başlangıç periyodu, daha sonra zaman ve maruz kalma konsantrasyonu ile lineer bir ilişki bildirmiştir. Jackim ve ark. (1977) *M. edulis* için benzer sonuçlar bulduklarını açıklamışlardır. Düşük inorganik arsenik maruziyetinde, *M. edulis*, inorganik As'yi, muhtemelen bir detoksifikasyon işlemi olarak, organoarsenik türlere biyolojik olarak dönüştürme yeteneğine sahiptir, ancak inorganiklere daha yüksek maruz kalma biyotransformasyon eşiği aşıldığında midyeler inorganik As'ı dokularında biriktirirler.

4.7. Sıcaklığın etkisi

Midyelerin önemli biyolojik izleme organizmaları olmasına rağmen metal alımı ve birikimi üzerinde sıcaklığın rolü iyi çalışılmamıştır (Mubiana ve Blust 2007). Ayrıca, konuyla ilgili mevcut az sayıda çalışma arasında genel bir fikir birliği yok gibi görünmektedir. Denton ve Burdon-Jones (1981), çift kabuklu yumuşakçalarda, vücut yumuşak dokularındaki Cd konsantrasyonlarının artan sıcaklıkla arttığını bildirmiştir. Yumuşakçalar tarafından Cd biyobirikimi, hayvanların metabolik aktivitesi üzerindeki etkisinden dolayı sıcaklıkla artar. Bununla birlikte, *M. galloprovincialis*'te, sıcaklığın Cd birikimi üzerinde bir etkisi olmadığını, ancak Hg alımında hafif bir artışa neden olduğunu göstermiştir (Fowler ve Benayoun, 1974). Küresel ısınma nedeniyle hem kirleticilerin hem de su sıcaklığının artmasıyla ilgili olarak Akdeniz'de *M. galloprovincialis* üremesinin olası bir bozulmaya uğradığı da bilinmektedir. Boening (2000), cıva toksisitesinin sıcaklıkla arttığını ve su sertliği ile azaldığını bildirmiştir. Baines ve ark. (2005) ayrıca metallerinin asimilasyon etkinliği ile sıcaklık arasında pozitif bir ilişki bulmuşlardır. Bu çalışmalar, sıcaklık ile metal alımı, birikimi veya toksisitesi arasında pozitif bir korelasyon gösterme eğiliminde olan birçok farklı organizmayı içeren sonuçlarla tutarlıdır. Sokolova ve Lannig (2008), organizmaların yüksek sıcaklıklarda metallere duyarlılığının artmasının, suda çözünürlüğün artmasından ve dolayısıyla metallerin biyoyararlanımının artmasından ve metabolizma artışı nedeniyle daha yüksek kirletici alımından kaynaklanabileceğini varsaydılar.

4.8. Tuzluluğun etkisi

Tuzluluk, özellikle nehir ağzı ve kıyı bölgelerinde önemli bir çevresel değişkendir. Suyun tuz içeriği azaldıkça metaller daha toksik hale gelir. Tuzluluk ayrıca metal birikimini değiştirir, farklı metal türleri farklı toksik etkilere neden olur (Deruytter ve ark. 2015). Phillips (1976) Cd'nin *Mytilus edulis* tarafından düşük tuzlulukta yüksek tuzlulukta olduğundan daha iyi emildiğini belirtmiştir. Jackim ve ark. (1977) tuzluluktaki %30'dan %20'ye düşüşün *Mytilus edulis* tarafından Cd alımını 10 ve 20°C'de %24 ila 400 oranında artırdığını bildirmiştir. Bu çalışmalar George ve ark. (1978) midyelerin seyreltik deniz suyunda %100 deniz suyundan daha fazla Cd biriktirdiğini desteklenmiştir. Kadmiyum birikimindeki bu artışın, ortamın ozmolaritesinin etkisine bağlı olduğu sonucuna varmışlardır. Klorür iyonuna bağlı Cd, düşük tuzlulukta daha toksik hale gelir çünkü serbest iyon halindedir.

5. Yapay Midye Teknolojisi

Deniz, nehir ya da akarsu gibi sucul ekosistemlerde metallerin tespitindeki en önemli biyoindikatör türlerden biri olan midyelerin kullanılması

sında da biyotik ve abiyotik faktörlerin bilinmesi metal toksisitesinin anlaşılabilmesi için önem arz etmektedir. Örneğin ortamdan yakalanan midye türü önce öldürülmelidir. Daha sonra abiyotik (sıcaklık, tuzluluk, pH) ve biyotik (üreme, büyüme, yaş, cinsiyet) faktörlerden nasıl etkilendiği matematiksel ve istatistiksel olarak detaylı bir şekilde açıklanmalıdır. Bu sayede midyede metal toksisitesi çok daha net anlaşılacaktır. Bununla birlikte, biyotik ve abiyotik faktörlerin belirlenmesi ve metal içeriği ile bir korelasyon kurulmasının kendine özgü sorunları ve kısıtlamaları vardır. Tüm bu problemleri minimize edebilmek için Wu ve ark. (2007) yapay midye olarak isimlendirdiği yapay bir biyoteknolojik cihaz geliştirmiştir. Ekonomik olması cihazı daha da cazip hale getirmiştir. Yapay midye cihazı doğal ortamlarında yaşayan midyelere benzer bir şekilde metalleri bünyelerinde biriktirebilmektedir. Cihaz (yapay midye) geçirgen olmayan bir Perspex borusuna (60 mm x 25 mm) aktarılan 8 ml yapay deniz suyu içinde 200 mg Chelex-100 (Bio-Rad 50-100 mesh)'ün süspanse edildiği bir sistem olarak geliştirilmiştir. Tüpün her iki tarafı 1 mm kalınlığında pol-yacrylamide jel ile kapatılmaktadır. Tüpün her iki ucu jelin olası mekanik hasarlara karşı korumak için delikli plastik kapak ile kapatılmaktadır. Metaller su yoluyla poliakrilamid jel içerisinden geçerek Chelax-100 (metal bağlayıcı ajan) içinde tutunur ve (kompleks) ayrıştırılır. Birkaç hafta sonra metal içeriğini belirlemek için örnek alınır. İlk olarak Wu ve ark. (2007) tarafından gerçekleştirilen çalışmada yapay midye cihazının metal birikiminin *Perna viridis* ile benzer olduğu açıklanmıştır. Gonzalez-Rey ve ark. (2011) Portekiz kıyılarında dört ay boyunca farklı metal yüklerine sahip üç bölgede yapay midye ve doğal midye *M. galloprovincialis* üzerindeki metal birikimini karşılaştırdılar. *M. galloprovincialis*, her bölgede yapay midyelerin yanında kafeslere yerleştirildi. Aylık numuneler toplandı ve tüm yumuşak dokulardaki ve yapay midyelerdeki; Cd, Cr, Cu, Pb ve Zn konsantrasyonları karşılaştırıldı. Hem Cu hem de Cd için sonuçlar yapay midyeler ve doğal midyeler arasında benzer olduğu açıklanmıştır. Daha sonra Kibria ve ark. (2012) de yapay midye cihazını Avustralya'da ilk kez, eser metallerin (Cd, Cu, Hg, Pb ve Zn) riskini izlemek ve değerlendirmek için tatlı suda kullandı. Cihaz, kurak bir yıl (2009–2010) ve yağışlı bir yıl (2010–2011) sırasında Avustralya, Victoria, Goulburn–Murray su havzalarındaki 10 bölgede konuşlandırıldı. Sonuçlar göstermiştir ki, yapay midye cihazı beş metalin tümünü biriktirmiştir. Genç ve ark. (2018) Sarıçay- Türkiye'de gerçekleştirdikleri çalışmada *Unio crassus* ve yapay midyeler kullanılarak 11 metalin (Cd, Co, Cr, Cu, Fe, Hg, Mn, Ni, Pb, U, Zn) kış ve yaz mevsimindeki birikimlerini karşılaştırılmıştır. U, yerli midyeler tarafından kolayca biriktirilmese de, yapay midyeler tarafından biriktirilebildiğini açıklamışlardır. Genel olarak, sonuçlar, su kalitesi izlemede yerel midye ve yapay midyelerin kullanımının, su ortamlarındaki farklı metal türleri ve formları hakkında tamamlayıcı bilgiler ve daha iyi

bir tahmin ve kapsam sağlayabileceğini göstermektedir. Bunlara ek olarak yüksek kirliliğe maruz kalmış sucul ekosistemlerde canlı organizmaların bulunmadığı durumlarda bu pasif örnekleme cihazı rahatlıkla kullanılabilir.

6. Sonuç

Midyeler, ekosistem için çok önemli olan suyu sürekli olarak süzerek beslenme davranışları ve dip çökeltilerindeki metal ile direk temas halinde olmaları bakımından önemli biyoindeksör türlerdir.

Midyeler; tüketilen türlere sahip olması, geniş coğrafi dağılımları, yerleşik yaşam tarzları, filtre eden besleme davranışları ve çok çeşitli çevresel koşullara toleransları nedeniyle çevresel izleme programlarında önemli bir tür olduğu unutulmamalıdır.

Midyeler metal birikimi açısından; yaş, vücut ağırlığı, üreme döngüsü, pH, sıcaklık ve tuzluluk gibi faktörlerden etkilenmektedir. Bu faktörlere dikkat edilirse metal birikimi minimize edilebilir.

Midye türleri özellikle *Mytilus* cinsi; düşük kolesterol ve yüksek protein içeriğine sahip olması ayrıca kolay avlanabilirliği ve kültüre edilebilmeleri bakımından en çok tercih edilen su ürünlerinden bir tanesidir.

Restoranlar ve marketlerde satılmakta olan midyelerin içerdiği metal konsantrasyonlarının neden olabileceği sağlık riskleri hesaplanmalı istenmeyen değerler ile karşılaşıldığında tüketiminden vazgeçilmelidir. Bu nedenle sürekli sağlık risk analizleri yapılarak kamu kurumlarına bilgi verilmeli ve halkın bilinçlendirilmesi sağlanmalıdır.

7. Kaynakça

- Alkan N., Alkan A., Bahloul A.M. (2020) Metals/metalloid in Marine Sediments, Bioaccumulating in Macroalgae and a Mussel, Soil and Sediment Contamination: An International Journal, 29(5): 569-584.
- Anonim. (2003) European Environment and Health Committee (EEHC), UN Protocol on Heavy Metals.
- Ansari T.M., Marr I.L., Tariq N. (2004) Heavy metals in marine pollution perspective-a mini review, J Appl Sci., 4(1): 1-20.
- Baines S.B., Fisher N.S., Kinney E.L. (2005) Influence of temperature on dietary metal uptake in Arctic and temperate mussels. Mar Ecol Prog Ser., 289: 201-213.
- Belfroid A.C., Sijm D.T.H.M., van Gestel C.A.M. (1996) Bioavailability and toxicokinetics of hydrophobic aromatic compounds in benthic and terrestrial invertebrates. Environ Rev., 4: 276.
- Boening D.W. (2000) Ecological effects, transport, and fate of mercury: a general review. Chemosphere, 40: 1335-1351.
- Boşgelmez A., Boşgelmez İ.İ., Paslı N., Savaşçı S., Kaynaş S. (2000) Ekoloji I. ISVAK Yayınları, No: 6: 38-404.
- Boukadida K., Banni M., Gourves P.Y., Cachot J. (2016) High sensitivity of embryo-larval stage of the Mediterranean mussel, *Mytilus galloprovincialis* to metal pollution in combination with temperature increase. Mar Environ Res., 122: 59-66.
- Brooks R.R., Rumsby M.G. (1967) Studies on the uptake of cadmium by the oyster, *Ostrea sinuata* (Lamarck). Aust J Mar Freshwater Res., 18(1): 53-62.
- Bryan G.W. (1976) Heavy metal contamination in the sea. In: Johnston R. (Ed.), Marine Pollution. Academic Press, London, NY, pp: 729.
- Campbell P.G.C., Tessier A. (1987) Metal species in natural waters: influence of environmental acidification. In: R.A. Hites, and S.J. Eisenreich (eds.), Sources and fates of aquatic pollutants (pp. 185-207). Advanced Chemical Series 216, Chapter 7. Washington, DC: American Chemical Society.
- Çayır A., Coşkun M., Coşkun M. (2012) Evaluation of Metal Concentrations in Mussel *M. galloprovincialis* in the Dardanelles Strait, Turkey in Regard of Safe Human Consumption, Bull Environ Contam Toxicol., 89: 91-95.
- Coskun D., Britto D.T., Jean Y.K., Schulze L.M., Becker A., Kronzucker H.J. (2012) Silver ions disrupt K⁺ homeostasis and cellular integrity in intact barley (*Hordeum vulgare* L.) roots. J Exp Bot 63(1): 151-162.
- Cossa D. (1989) A review of the use of *Mytilus* spp. as quantitative indicators of cadmium and mercury contamination in coastal waters. Oceanol Acta, 12(4): 417-432.

- Denton G.R.W., Burdon-Jones C. (1981) Influence of temperature and salinity on the uptake, distribution and depuration of mercury, cadmium and lead by the black-lip oyster *Saccostrea echinate*. *Mar Biol.*, 64: 317-326.
- Deruytter D., Vandeghechuchte M.B., Garrevoet J., De Laender F., Vergucht E., Delbeke K., Blust R., De Schamphelaere K.A.C., Vincze L., Janssen C.R. (2015) Salinity and dissolved organic carbon both affect copper toxicity in mussel larvae: Copper speciation or competition cannot explain everything. *Environ Toxicol Chem.*, 34: 1330-1336.
- Eisler R., Zaroogian G.E., Hennekey R.H. (1972) Cadmium uptake by marine organisms. *J Fish Res Board Can.*, 29(9): 1367-1369.
- Elik A., Akçay M. (2000) Sivas Kentinde Ağır Metal Kirliliğinin Yerel ve Zamanasal Değişimi. *Tr Journal Engineering Environment Science*, 24: 15-24.
- EPA, U.S. (United States Environmental Protection Agency). (2006) Guidelines for carcinogenic risk assessment. <https://www.epa.gov/risk/guidelines-carcinogen-risk-assessment>
- EPA, U.S. (United States Environmental Protection Agency). (2011) Guidance for Assessing Chemical Contaminant Data for Use in Fish Advisories, Volume II. Risk Assessment and Fish Consumption Limits. <https://www.epa.gov/sites/production/files/2018-11/documents/guidance-assess-chemical-contaminant-vol2-third-edition.pdf>
- EPA, U.S. (United States Environmental Protection Agency). (2019) Regional screening levels (RSLs) equations. <https://www.epa.gov/risk/regional-screening-levels-rsls-equations>
- EPA, U.S. (United States Environmental Protection Agency). (2019) Regional screening levels (RSLs) equations. <https://www.epa.gov/risk/regional-screening-levels-rsls-equations>
- FAO. (2007) National aquaculture sector overview. Montenegro. In: FAO Fisheries and Aquaculture Department [online]. Rome. Available via http://193.43.36.238:8282/fi/website/FIRetrieveAction.do?dom=country-sector&xml=naso_montenegro.xml&lang=en. Accessed 1 Apr 2011
- Förstner G. Wittmann T. (1981) Metal pollution in the aquatic environment. Berlin Heidelberg, New York Springer Verlag, 3(21): 271-318.
- Fowler S.W., Benayoun G. (1974) Experimental studies on cadmium flux through marine biota. In: Comparative studies of food and environmental contamination. IAEA-SM 175/10, International Atomic Energy Agency, Vienne, Austria.
- Fowler S.W., Oregioni B. (1976) Trace metals in mussels from the NW Mediterranean. *Mar Pollut Bull.*, 7: 26-29.
- Genç T.O. (2021) Analysis of Metal Concentration and Health Risk Assessment for Consumption of Four Economically Important Fish Species from

- Gökova Bay (Turkey), *Carpathian Journal of Earth and Environmental Sciences*, 16(2): 329–340.
- Genç T.O., Po Beverly H.K., Yılmaz F., Lau T-C, Wu Rudolf S.S., Chiu Jill M.Y. (2018) Differences in metal profiles revealed by native mussels and artificial mussels in Sarıçay Stream, Turkey: implications for pollution monitoring. *Marine and Freshwater Research*, 69: 1372-1378.
- Genç T.O., Yılmaz F. (2015) Bioaccumulation indexes of metals in blue crab (*Callinectes sapidus* Rathbun, 1896) inhabiting specially protected area Köyceğiz Lagoon (Turkey). *The Indian Journal of Animal Sciences*, 85(1): 94-99.
- Genç T.O., Yılmaz F. (2016) Risk assessment and accumulation of metals in sediment of Köyceğiz Lagoon System Turkey, *Journal of Advances of Agriculture*, 6(1): 804-812.
- George S.G. (1980) Correlation of metal accumulation in mussels with the mechanisms of uptake, metabolism and detoxification: a review. *Thalassia Jugosl.*, 16: 347.
- George S.G., Carpena E., Coombs T.L. (1978) The effect of salinity on the uptake of cadmium by the common mussel, *Mytilus edulis* (L.). In: McClusky D.S., Berry A.J. (Eds.), *Physiology and behavior of marine organisms. Proceeding 12th Eur Mar Biol Symp.*, Pergamon Press, Oxford (UK) and New York, USA.
- George S.G., Coombs T.L. (1977) The effect of chelating agents on the uptake and accumulation of cadmium by *Mytilus edulis*. *Mar Biol.*, 39: 261-268.
- Giarratano E., Amin O.A. (2010) Heavy metals monitoring in the southernmost mussel farm of the world (Beagle Channel, Argentina). *Ecotoxicol Environ Saf.*, 73: 1378-1384.
- Gonzalez-Rey M., Lau T.C., Gomes T., Maria V.L., Bebianno M.J., Wu R. (2011) Comparison of metal accumulation between ‘Artificial Mussel’ and natural mussels (*Mytilus galloprovincialis*) in marine environments. *Marine Pollution Bulletin*, 63: 149–153.
- Gosling E. (1992) Genetics of *Mytilus*. In: Gosling E (ed) *The mussel Mytilus: ecology, physiology genetics and culture*. Elsevier, Amsterdam, pp 309–382.
- Guendouzi Y., Soualili D.L., Fowler S.W., Boulahdid M. (2020) Environmental and human health risk assessment of trace metals in the mussel ecosystem from the Southwestern Mediterranean, *Marine Pollution Bulletin*, 151: 110820.
- Guillen J., Asche F., Carvalho N., Polanco J.M.F., Llorente I., Nielsen R., et al. (2019) Aquaculture subsidies in the European Union: evolution, impact and future potential for growth. *Mar Policy*, 104: 19–28.

- Hemelraad J., Kleinveld H.A., de Roos A.M., Holwerda D.A., Zandee D.I. (1987) Cadmium kinetics in freshwater clams. III. Effects of zinc on uptake and distribution of cadmium in *Anodonta cygnea*, Arch Environ Contam Toxicol., 16: 95-101.
- İlhan A.İ., Dündar C., Öz N., Kılınç H. (2006) Hava Kirliliği ve Asit Yağmurlarının Çevre ve İnsan Sağlığı Üzerine Etkileri. Meteoroloji Genel Müdürlüğü Yayınları: 5-8.
- Ip C.C.M., Li X.D., Zhang G., Wong C.S.C., Zhang W.L. (2005) Heavy metal and Pb isotopic compositions of aquatic organisms in the Pearl River estuary, South China. Environ Pollut., 138(3): 494–504.
- Jackim E., Morrison G., Steele R. (1977) Effects of environmental factors on radiocadmium uptake by four species of marine bivalves. Mar Biol., 40: 303-308.
- Jones W.G., Walker K.F. (1979) Accumulation of iron, manganese, zinc and cadmium by the Australian freshwater mussel *Velesunio ambiguus* (Phillipi) and its potential as a biological monitor. J Mar Freshwater Res., 30(6): 741-751.
- Kahle J., Zauke G.P. (2002). Bioaccumulation of trace metals in the calanoid copepod *Metridia gerlachei* from the Weddell Sea (Antarctica). Sci Total Environ., 295: 1-16.
- Kartal G., Güven A., Kahvecioğlu Ö., Timur S. (2004) Metallerin Çevresel Etkileri II. Metalurji Dergisi, 137: 46-51.
- Kibria G., Lau T.C., Wu R. (2012) Innovative ‘Artificial Mussels’ technology for assessing spatial and temporal distribution of metals in Goulburn-Murray catchments waterways, Victoria, Australia: Effects of climate variability (dry vs. wet years). Environment International Journal, 50: 38-46.
- Köşker A.R., Gündoğdu S., Ayas D., Bakan M. (2022) Metal levels of processed ready-to-eat stuffed mussels sold in Turkey: Health risk estimation, Journal of Food Composition and Analysis, 106: 104326.
- Li D., Pan B., Chen L., Wang Y., Wang T., Wang J., Wang H. (2021) Bioaccumulation and human health risk assessment of trace metals in the freshwater mussel *Cristaria plicata* in Dongting Lake, China, Journal of Environmental Sciences, 104: 335–350.
- Lucas C.H., Horton A.A. (2014) Short-term effects of the heavy metals, Silver and copper, on polyps of the common jellyfish, *Aurelia aurita*. J Exp Mar Biol Ecol., 461(C): 154-161.
- Malvandi H. (2017) Preliminary evaluation of heavy metal contamination in the Zarrin-Gol River sediments. Iran Mar Pollut Bull., 117 (1-2): 547–553.
- Mol S., Üçok Alakavuk D. (2011) Heavy Metals in Mussels (*Mytilus galloprovincialis*) from Marmara Sea, Turkey, Biol Trace Elem Res., 141: 184–191.

- Mubiana V.K., Blust R. (2007) Effects of temperature on scope for growth and accumulation of Cd, Co, Cu and Pb by the marine bivalve *Mytilus edulis*. *Mar Environ Res.*, 63: 219–235.
- Mziray P., Kimirei I.A. (2016) Bioaccumulation of heavy metals in marine fishes (*Siganus sutor*, *Lethrinus harak*, and *Rastrelliger kanagurta*) from Dar es Salaam Tanzania. *Reg Stud Mar Sci.*, 7: 72–80.
- Phillips D.J.H. (1976) The common mussel *Mytilus edulis* as an indicator of pollution by zinc, cadmium, lead and copper. I. Effects of environmental variables on uptake of metals. *Mar Biol.*, 38: 59-69.
- Prato E., Biandolino F., Parlapiano I., Giandomenico S., Denti G., Calo M., et al. (2019) Proximate, fatty acids and metals in edible marine bivalves from Italian market: beneficial and risk for consumers health. *Sci Total Environ.*, 648: 153–163.
- Ravera O. (1984) Cadmium in freshwater ecosystems. *Experientia* 40: 1-14.
- Regoli F., Nigro M., Orlando E. (1992) Effects of copper and cadmium on the presence of renal concretions in the bivalve *Donacilla cornea*. *Comp Biochem Phys.*, 102C: 189.
- Ribeiro C.A.O., Vollaie Y., Sanchez–Chardi A., Roche H. (2005) Bioaccumulation and the effects of organochlorine pesticides, PAH and heavy metals in the Eel (*Anguilla anguilla*) at the camargue nature reserve. *France Aquat Toxicol.*, 74(1): 53–69.
- Romeril M.G. (1971) The uptake and distribution of ^{65}Zn in oysters. *Mar Biol.*, 9: 347-354.
- Rouane-Hacene O., Boutiba Z., Belhaouari B., Guibbolini-Sabatier M.E., Francour P., Risse-de Faverney C., et al. (2015) Seasonal assessment of biological indices, bioaccumulation and bioavailability of heavy metals in mussels *Mytilus galloprovincialis* from Algerian west coast, applied to environmental monitoring. *Oceanologia*, 57(4): 362-374.
- Salomons W., Mook W.G. (1977) Trace metal concentrations in estuarine sediments: mobilization, mixing or precipitation. *Neth J Sea Res.*, 11 (2): 119–129.
- Shuster Jr C.N., Pringle B.H. (1969) Trace metal accumulation by the American oyster, *Crassostrea virginica*. *Proc Natl Shellfish Ass.*, 59: 91-103.
- Smaal A.C. (2002) European mussel cultivation along the Atlantic coast: production status, problems and perspectives. *Hydrobiologia*, 484: 89–98.
- Sokolova I.M., Lannig G. (2008) Interactive effects of metal pollution and temperature on metabolism in aquatic ectotherms: implications of global climate change. *Clim Res.*, 37: 181-201.
- Stankovic S., Jovic M., Stankovic A.R., Katsikas L. (2011) Heavy metals in seafood mussels. Risk for human health. In: Lichtfouse E, Schwarzbauer J,

- Robert D (eds). Environmental Chemistry, vol 2. Springer, Netherlands (in press).
- Turanlı N., Gedik K. (2021) Spatial trace element bioaccumulation along with consumer risk simulations of Mediterranean mussels in coastal waters of Turkey, *Environ Sci Pollut Res Int.*, 28: 41746–41759.
- Türkiye İstatistik Kurumu (TÜİK). (2019) Su Ürünleri İstatistikleri. <https://www.tarimorman.gov.tr/SGB/Belgeler/SagMenuVeriler/BSGM.pdf>
- Ulusoy S., Özden Ö. (2011) Preservation of stuffed mussels at 4 C in modified atmosphere packaging. *J Aquat Food Prod Technol.*, 20(3): 319–330.
- Varol M., Sünbül M.R. (2018) Biomonitoring of Trace Metals in the Keban Dam Reservoir (Turkey) Using Mussels (*Unio elongatulus eucirrus*) and Crayfish (*Astacus leptodactylus*), *Biological Trace Element Research*, 185: 216–224.
- Wu R.S., Lau T.C., Fung W.K., Ko P.H., Leung K.M. (2007) An ‘artificial mussel’ for monitoring heavy metals in marine environments. *Environmental Pollution*, 145: 104-110.
- Yap C.K., Ismail A., Tan S.G., Pertanika, (2009) Effect of body size on heavy metal contents and concentrations in green-lipped mussel *Perna viridis* (Linnaeus) from Malaysian coastal waters *J Sci Technol.*, 17: 61-68.
- Yologlu E., Uçkun M., Alkan Uçkun A. (2018) Metal accumulation and biochemical variations in the freshwater mussels (*Unio mancus*) collected from Atatürk Dam Lake, Turkey, *Biochemical Systematics and Ecology*, 79: 60-68.
- Zhelyazkov G., Yankovska-Stefanova T., Mineva E., Stratev D., Vashin I., Dospatliev L., Valkova E., Popova T. (2018) Risk assessment of some heavy metals in mussels (*Mytilus galloprovincialis*) and veined rapa whelks (*Rapana venosa*) for human health. *United States Environmental Protection Agency*, 128: 197-201.

“

Bölüm 2

**BİR SİNGÜLER PARABOLİK
DENKLEMİN KRİTİK UZUNLUĞU İÇİN
TEORİK VE NÜMERİK HESAPLAMALAR**

BURHAN SELÇUK¹

¹ Burhan Selçuk, Dr. Öğ. Üyesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, Mühendislik Fakültesi, Karabük Üniversitesi, 78050, Karabük, Türkiye, ORCID ID: 0000-0002-5141-5148

”

1. GİRİŞ

Bu çalışmada, singular ısı kaynağına sahip bir parabolik denklemi içeren bir başlangıç-değer probleminin nümerik çözüm davranışlarını inceleyeceğiz. Bu tür problemlere iyonik iletkenlerdeki polarizasyon olayında denk gelinmektedir, ilk olarak aslen bir fizikçi olan Kawarada [1] tarafından deneysel olarak gözlemlenmiş ve matematiksel modeli aşağıdaki gibi belirtilmiştir;

$$\left. \begin{aligned} k_t &= k_{xx} + 1/(1 - k), 0 < x < L, 0 < t < T, \\ k(0, t) &= 0, k(L, t) = 0, 0 < t < T, \\ k(x, 0) &= k_0(x), 0 \leq x \leq L. \end{aligned} \right\} \quad (1.1)$$

Kawarada, (1.1) probleminin $k(x, t)$ çözümünün sönüm (quenching) davranışını incelemiş ve L^* diye adlandırdığı kritik uzunluk için hesaplamada bulunmuştur. Aşağıda, sönüm ve kritik uzunluk için tanımlar verilmiştir;

Tanım 1.1. (1.1) denkleminin $k(x, t)$ çözümü için

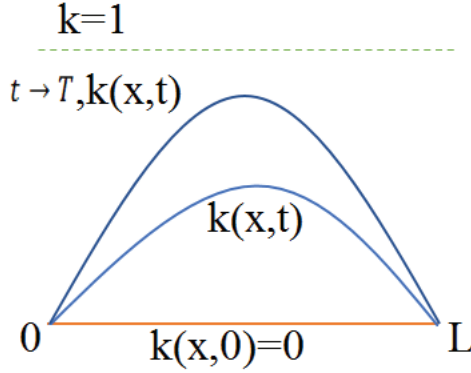
$$\lim_{t \rightarrow T^-} \max_{x \in [0, a]} k \rightarrow 1^-$$

sağlar ise, $k(x, t)$ çözümü sonlu bir T zamanda söner (quench) denir.

Tanım 1.2. (1.1) denklemi için L^* bir kritik uzunluk (critical length) olarak adlandırılır. Öyle ki;

- i) $L < L^*$ için, $k(x, t)$ nin global çözümü vardır,
- ii) $L > L^*$ için, $k(x, t)$ çözümü söner.

(1.1) problemi için, Kawarada tarafından gözlemlenen diğer bir fiziksel gerçeklik $k_x(L/2, t) = 0$ olduğudur. Bu yüzden, $k(x, t)$ çözümünün Şekil 1 de olduğu gibi bir davranış göstermesi beklenmektedir. Kawarada, (1.1) problemi için kritik uzunluğu $L^* \leq 2\sqrt{2}$ ve sönüm noktasını $x = L/2$ olarak elde etmiştir. Walter, Kawarada'nın kritik uzunluk hesabındaki hatasını ortaya çıkarmış, kritik uzunluk için $1.530304161 < L^* \leq \pi/2$ eşitsizliğini elde etmiştir ([2],[3]).



Şekil 1. Kawarada probleminin çözüm eğrisinin profili

(1.1) problemini ve değişik varyantlarını ayrıntılı biçimde ele alan birçok çalışma literatürde mevcuttur [3-5]. Bu çalışmada, p ve a pozitif sabitler, $0 \leq m < 1$ ve $T \leq \infty$ olmak üzere (1.1) probleminden motive olarak aşağıdaki singüler parabolik problemin kritik uzunluğunu araştıracağız;

$$\left. \begin{aligned} k_t &= k_{xx} + (1 - k)^{-p}, 0 < x < a, 0 < t < T, \\ k_x(0, t) &= 0, k(a, t) = m, 0 < t < T, \\ u(x, 0) &= u_0(x), 0 \leq x \leq a, \end{aligned} \right\} \quad (1.2)$$

Bunun için, 2. kısımda, (1.2) problemi için steady-state problemi kurgulanıp, a^* kritik uzunluğu için hesaplamalar yapılacaktır. 3. kısımda ise, 2. Kısımda elde edilen teorik sonuçlar Euler metodunu kullanarak elde edilen nümerik sonuçlar ile desteklenecektir.

2. STEADY-STATE

Bu kısımda $p, 1$ den farklı bir pozitif sabit olduğunda (1.2) probleminin steady-state çözümlerini araştıracağız;

$$\left. \begin{aligned} K_{xx} &= -(1 - K)^{-p}, 0 < x < a, \\ K_x(0) &= 0, K(a) = m. \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

İlk olarak belirtelim ki, Walter [2] çalışmasındaki benzer tartışmalar ile kolayca (2.1) probleminin çözümlerinin (1.2) probleminin çözümlerine yakınsadığı gösterilebilir.

$K_{xx} = -(1 - K)^{-p} < 0$ ve $K_x(0) = 0$ olduğundan K maksimum değerine $x = 0$ ve minimum değerine de $x = a$ noktasında ulaşır. Yani, $M = \max_{0 < x < a} K(x)$, $m = \min_{0 < x < a} K(x)$ için $K(0) = M, K(a) = m$

dir. $K_{xx} = -(1 - K)^{-p}$ eşitliğinin her iki yanını K_x ile çarpalım. Daha sonra, 0 dan x e integral alırsak;

$$\frac{1}{2}(K_x(x))^2 = \frac{(1 - K(x))^{1-p}}{1-p} - \frac{(1 - K(0))^{1-p}}{1-p},$$

$$K_x(x) = \sqrt{\frac{2 \left((1 - K(x))^{1-p} - (1 - K(0))^{1-p} \right)}{1-p}}$$

ve

$$\frac{dK}{\sqrt{(1 - K(x))^{1-p} - (1 - K(0))^{1-p}}} = \sqrt{\frac{2}{1-p}} dx,$$

$$\int_{K(x)}^{K(0)} \frac{dK}{\sqrt{(1 - K(x))^{1-p} - (1 - K(0))^{1-p}}} = \sqrt{\frac{2}{1-p}} \int_0^x dx. \quad (2.2)$$

elde edilir.

İşlem kolaylığı elde etmek için, aşağıdaki dönüşümü uygulayalım;

$$W = \sqrt{(1 - K(x))^{1-p} - (1 - K(0))^{1-p}}.$$

Bu dönüşümden;

$$W^2 = (1 - K(x))^{1-p} - (1 - K(0))^{1-p},$$

$$dK(x) = -\frac{2WdW}{1-p} (1 - K(x))^p,$$

elde edilir. Bunlar (2.2) de yerine yazılırsa, aşağıdaki integral eşitliği elde edilir;

$$-\frac{2}{1-p} \int_{\sqrt{(1-K(x))^{1-p} - (1-K(0))^{1-p}}}^0 (1 - K(x))^p dW = \sqrt{\frac{2}{1-p}} x.$$

Yukarıdaki eşitlikte, $x \in (0, a]$ için;

$$x = \sqrt{\frac{2}{1-p}} \int_0^{\sqrt{(1-K(x))^{1-p} - (1-K(0))^{1-p}}} (1-K(x))^p dW$$

elde edilir. Bu eşitlikte $x = a$ ($K(a) = m$) yazılırsa, a için aşağıdaki eşitlik elde edilir;

$$a = \sqrt{\frac{2}{1-p}} \int_0^{\sqrt{(1-m)^{1-p} - (1-M)^{1-p}}} (1-m)^p dW.$$

$$a = a(m, M) = \sqrt{\frac{2((1-m)^{1-p} - (1-M)^{1-p})}{1-p}} (1-m)^p. \quad (2.3)$$

a nın, m ye bağlı tek değişkenli bir fonksiyon olduğunu kabul edelim. Kolayca gösterilebilir ki, a maksimum değerini $m = 0$ için alır. Bu yüzden,

$$\max a = a(0, M) = \sqrt{\frac{2(1 - (1-M)^{1-p})}{1-p}}. \quad (2.4)$$

yazılabilir. $p = 1$ için, (2.1) probleminde benzer tartışmalar yapılabilir.

Örnek 2.1. (2.3) de, aşağıdaki farklı kabuller için a uzunluğu hesap edelim;

(i) $K(0) = M = 0.99, K(a) = m = 0, p = 0.8$ kabul edersek; $a =$

$$\sqrt{\frac{2(1-(1-0.99)^{0.2})}{0.2}} = 2.4534 \text{ elde edilir.}$$

(ii) $K(0) = M = 0.01, K(a) = m = 0, p = 0.8$ kabul edersek, $a =$

$$\sqrt{\frac{2(1-(1-0.01)^{0.2})}{0.2}} = 0.14171 \text{ elde edilir.}$$

(iii) $K(0) = M = 0.99, K(a) = m = 0, p = 1.2$ kabul edersek, $a =$

$$\sqrt{\frac{2(1-(1-0.99)^{-0.2})}{-0.2}} = 3.8113 \text{ elde edilir.}$$

(iv) $K(0) = M = 0.01, K(a) = m = 0, p = 1.2$ kabul edersek; $a =$

$$\sqrt{\frac{2(1-(1-0.01)^{-0.2})}{-0.2}} = 0.14185 \text{ ede edilir.}$$

Lemma 2.1. ([7]) Aşağıdaki 2 nokta sınır-değer problemi verilsin;

$$\left. \begin{aligned} y'' &= f(x, y, y'), a \leq x \leq b, \\ c_{11}y(a) - c_{12}y'(a) &= \alpha, |c_{11}| + |c_{12}| \neq 0, \\ c_{21}y(b) + c_{22}y'(b) &= \beta, |c_{21}| + |c_{22}| \neq 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

Bu problem için aşağıdaki H1, H2 ve H3 şartları sağlansın;

H1. $D = [a, b] \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ bölgesinde $f, f_x, f_y, f_{y'}$ sürekli olsunlar,

H2. D de, $M \geq 0$ için $f_y > 0$ ve $|f_{y'}| \leq M$ olsunlar,

H3. $c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22} \geq 0$ ve $c_{11}, c_{12} > 0$ olsunlar.

Bu şartlar altında, (2.5) sınır-değer problemi her bir (α, β) için $[a, b]$ aralığında tek bir çözüme sahiptir.

Sonuç 2.1. (i) (1.1) Kawarada probleminin çözümü için izlenen stratejinin tersi (2.1) probleminde uygulanabilir. (2.1) problemini, $K_x(0) = 0$ eşitliği yardımıyla aşağıdaki gibi simetrik bir probleme genişletebiliriz;

$$\left. \begin{aligned} K_{xx} &= -(1 - K)^{-p}, 0 < x < a, \\ K(-a) &= -m, K(a) = m. \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

(2.6) probleminde $f(K) = -(1 - K)^{-p}$ alalım. $f_K = -p(1 - K)^{-p-1} < 0$ olduğundan, Lemma 2.1 deki H2 şartı sağlanmaz ve böylece (2.5) dolayısıyla (1.2) probleminin tek bir çözümü yoktur.

(ii) (1.1) problemine benzer olarak (2.6) probleminin sönüm noktasının $x = 0$ olduğu kolaylıkla gösterilebilir. Yani, (1.2) problemi için sönüm noktası $x = 0$ dır.

(iii) (2.1) probleminde, $p = 1$ ve $m = 0$ alalım. Bu durumda (1.2) problemi, (1.1) Kawarada probleminin sağ tarafına dönüşür. Kolayca gösterilebilir ki, (2.1) probleminin kritik uzunluğu için bir alt sınır aşağıdaki gibi elde edilir;

$$0.76515220805 < \frac{L^*}{2} = a^*.$$

3. SAYISAL ÇÖZÜMLER

Bu bölümde; Euler metodunu kullanarak (2.1) probleminin bazı çözümlerini elde etmemize imkan sağlayan bazı M ve p değerleri hesap edilecektir. Bunun için, [8] deki gibi 2.mertebeden diferensiyel denklemi 1. mertebeden 2 diferensiyel denkleme indirgeyelim. İlk olarak, $K' = Z$ kabul edelim. Böylece, (2.1) denklemi aşağıdaki denklem sistemine dönüşür;

$$\begin{aligned} Z' &= -(1 - K)^{-p}, \\ K' &= Z \end{aligned}$$

Bu denklem sisteminde, klasik türev yerine sonlu ileri-fark 1. türev uygulanırsa aşağıdaki iterasyon denklemleri elde edilir;

$$\left. \begin{aligned} Z_{i+1} &= Z_i - h(1 - K_i)^{-p}, \\ K_{i+1} &= K_i + hZ_i \end{aligned} \right\} \quad (3.1)$$

Burada, başlangıç değerleri $K_0 = K(0)$ ve $Z_0 = K'(0) = 0$, iterasyon sayısı n ve adım aralığı $h = a/n$ dır. Euler metodunda 1. türev için sonlu ileri-fark türev tanımı kullandığımızdan dolayı bu hesaplamadaki hata $O(h)$ dır. Yani, hata için üst sınır h mertebededir.

Algoritma 1’de, (3.1) sistemini kullanarak $K(a)$ değerlerini hesaplamak için ilk olarak başlangıç-değerlerini $Z(0) = 0$, $K(0) = M = 0.99, 0.98, \dots, 0.02, 0.01$, $p = 0.8$ ve $n = 25$ olarak seçelim. $M = 0.01, 0.02, 0.03$ için $K(a)$ değerleri pozitif, diğer M değerleri için $K(a)$ değerleri negatiftir (Tablo 1).

Tablo 1. $K(a)$ değerleri sırasıyla $M = 0.99, 0.98, \dots, 0.02, 0.01$ için ($p = 0.8$ ve $n = 25$)

-18,204	-10,0645	-7,3524	-5,9997	-5,1729	-4,5992	-4,1664	-3,8207	-3,5336
-3,2883	-3,0744	-2,8850	-2,7149	-2,5610	-2,4204	-2,2911	-2,1717	-2,0608
-1,9575	-1,8608	-1,7701	-1,6847	-1,6043	-1,5283	-1,4563	-1,3881	-1,3233
-1,2618	-1,2032	-1,1474	-1,0941	-1,0433	-0,99480	-0,94842	-0,90407	-0,86162
-0,82099	-0,78207	-0,74479	-0,70905	-0,67480	-0,64194	-0,61044	-0,58022	-0,55122
-0,52341	-0,49672	-0,47111	-0,44654	-0,42297	-0,40036	-0,37867	-0,35787	-0,33793
-0,31881	-0,30049	-0,28294	-0,26612	-0,25003	-0,23462	-0,21989	-0,20580	-0,19233
-0,17948	-0,16721	-0,15551	-0,14435	-0,13373	-0,12364	-0,11403	-0,10492	-0,09627
-0,08809	-0,08034	-0,07303	-0,06614	-0,05966	-0,05356	-0,04785	-0,04251	-0,03754
-0,03292	-0,02863	-0,02468	-0,02106	-0,01775	-0,01474	-0,01203	-0,00961	-0,00747
-0,00561	-0,00401	-0,00267	-0,00158	-0,00074	-0,00014	0,00023	0,00037	0,00029

Tablo 2’de, virgülden sonra 3 ondalık anlamlı basamak için 0 a yakınsayan $K(a)$ değerleri ve bu değerleri türeten M, h ve a kritik uzunluğu belirtilmiştir.

Tablo 2. $K(a)$ değerleri sırasıyla $M = 0.01, 0.02, 0.03$ için ($p = 0.8$ ve $n = 25$)

M	a	h	$K(a)$
0.01	0.14171	0.028342	0.00023
0.02	0.20081	0.040162	0.00037
0.03	0.24644	0.049288	0.00029

Algoritma 1 in çalışma zamanı $O(nr)$ dir. Burada, $r = ((M_upper - M_lower)/decreasing_numb) + 1$ ve n iterasyon sayısıdır. Şekil 1 de x eksenini ile r temsil edilmekte olup, 1 den 99 a değerler almaktadır.

Algorithm 1: This algorithm calculate the solution of the system (3.1).

Data: $p, n, M_upper, M_lower, decreasing_numb, K[], Z[]$

Result: $Result1[]$

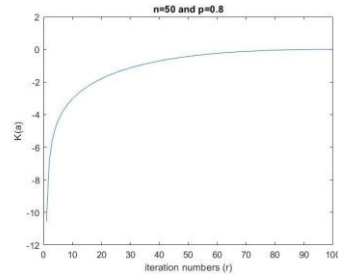
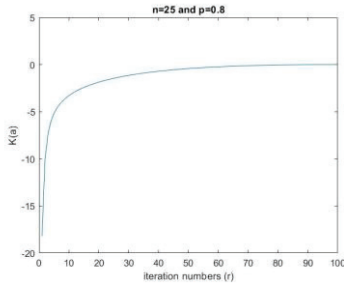
```

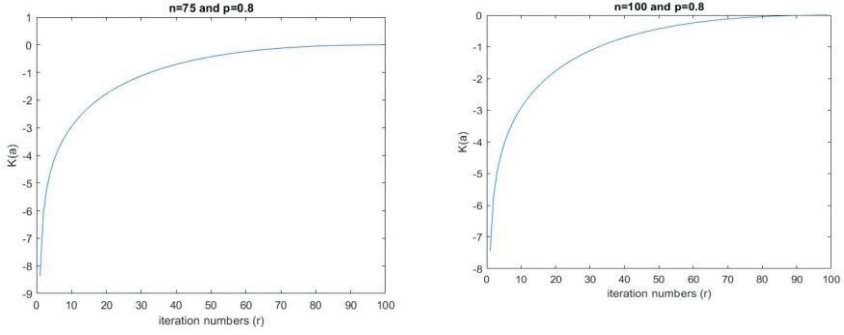
1 begin
2    $p = 0.8;$ 
3    $n = 25;$ 
4    $M\_upper = 0.99;$ 
5    $M\_lower = 0.01;$ 
6    $decreasing\_numb = 0.01;$ 
7    $temp = 1;$ 
8   for  $M = M\_upper : -decreasing\_numb : M\_lower$  do
9      $K(1) = M;$ 
10     $Z(1) = 0;$ 
11     $a = \sqrt{(2 - 2 * (1 - K(1)) * (1 - p)) / (1 - p)};$ 
12     $h = a / n;$ 
13    for  $i = 1 : n$  do
14       $Z(i + 1) = Z(i) - (h / ((1 - K(i))^p));$ 
15       $K(i + 1) = K(i) + Z(i) * h;$ 
16     $Result1(temp) = K(i + 1);$ 
17     $temp = temp + 1;$ 
18  Return  $Result1;$ 
19 end

```

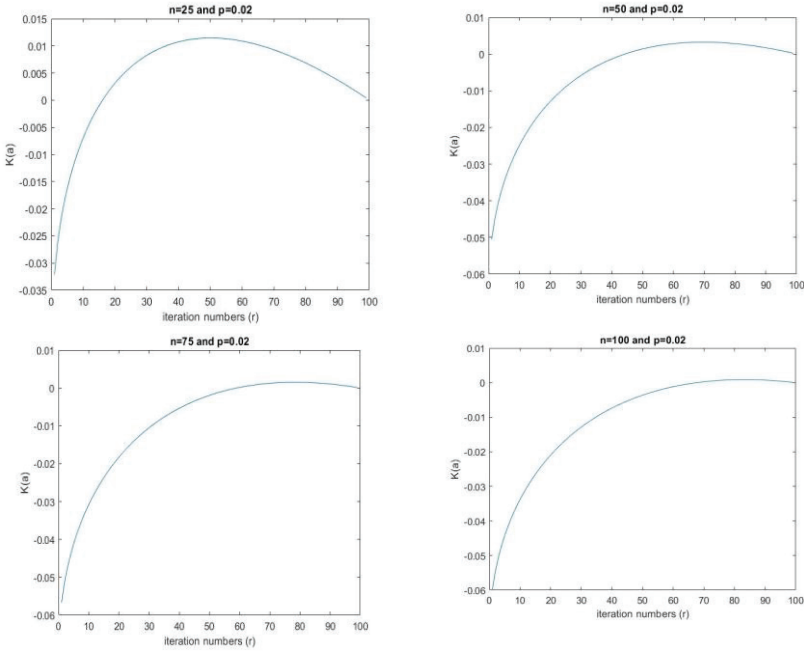
Algoritma 1 de, $K(a)$ değerleri sırasıyla $n = 25, 50, 75$ ve 100 için hesaplanmıştır (Şekil 3.1). $n = 25$ için elde edilen sonuçlara benzer olan sonuçlar $n = 50, 75$ ve 100 içinde elde edilmiştir.

Şekil 3.1. $K(a)$ değerleri sırasıyla $n = 25, 50, 75, 100$ için ($p = 0.8$ ve $M = 0.99, \dots, 0.01$)





Şekil 3.2. $K(a)$ değerleri sırasıyla $n = 25, 50, 75, 100$ için ($p = 0.02$ ve $M = 0.99, \dots, 0.01$)



Algoritma 1 de, $K(a)$ değerleri $n = 25, 50, 75, 100$ ve $p = 0.02$ için hesaplanmıştır (Şekil 3.2). Şekil 3.2 de, Şekil 3.1'deki profillerden farklılıklar gözlemlenmiştir. Düşük p değerlerinde pozitif $K(a)$ sayısında artış gözlemlenmiştir. Bu yüzden, algoritma 1 revize edilerek algoritma 2 elde edilmiştir. Algoritma 2, (2.1) problemi için kritik a uzunluğunun hesabında kabulümüz olan $K(a) = m = 0$ şartını sağlayan, K değerlerinin sayısını bulmaktadır. Algoritma 2 de, nümerik hesap üzerine kurgulandığı için $K(a) = 0$ şartını sağlamak yerine 0 a yakınsayan $K(a)$

değerleri dikkate alınmıştır. Algoritma 2 nin 21. Adımında görüldüğü gibi, 0.01 hata toleransı için işlem yapılmaktadır. Ayrıca, Algoritma 2 nin çalışma zamanı $O(nrq)$ dir. Burada, $r = ((M_upper - M_lower)/decreasing_numb) + 1$ ve

$q = ((p_upper - p_lower)/increasing_numb) + 1$ ve n iterasyon sayısıdır.

Algorithm 2: This algorithm calculates the number of $K(a)$ values that converge to 0.

Data: $n, p_upper, p_lower, increasing_numb, M_upper, M_lower, decreasing_numb, K[], Z[]$

Result: $Result2[]$

```

1 begin
2   n = 25;
3   p_upper = 1.97;
4   p_lower = 1.01;
5   increasing_numb = 0.03;
6   M_upper = 0.99;
7   M_lower = 0.01;
8   decreasing_numb = 0.01;
9   temp = 1;
10  for p = p_lower : increasing_numb : p_upper do
11    convergent = 0;
12    for M = M_upper : -decreasing_numb : M_lower do
13      K(1) = M;
14      Z(1) = 0;
15      a = sqrt((2 - 2 * (1 - K(1))^(1 - p)) / (1 - p));
16      h = a / n;
17      for i = 1 : n do
18        Z(i+1) = Z(i) - (h / ((1 - K(i))^p));
19        K(i+1) = K(i) + Z(i) * h;
20        if K(i+1) ≥ 0 then
21          if K(i+1) < 0.001 then
22            convergent = convergent + 1
23        end if
24      end for
25      Result2(temp) = convergent;
26      temp = temp + 1;
27    end for
28  end for
29  Return Result2;
30 end

```

$n = 25$ ve $n = 50$ için, 0 a yakınsayan $K(a)$ değerlerinin sayısı bazı p değerleri için tablo 3 de belirtilmiştir. Burada, $n = 25$ için $p = 1.01, 1.04, \dots, 1.97$ ve $n = 50$ için $p = 0.01, 0.04, \dots, 0.97$ alınmıştır.

Tablo 3. 0'a yakınsayan $K(a)$ değerlerinin sayısı

$n = 50$		$n = 25$	
p	0'a yakınsayan $K(a)$ 'ların sayısı	p	0'a yakınsayan $K(a)$ 'ların sayısı
0.01	84	1.01	2
0.04	32	1.04	2
0.07	19	1.07	2
0.10	14	1.10	2

0.13	11	1.13	2
0.16	9	1.16	2
0.19	7	1.19	2
0.22	6	1.22	2
0.25	5	1.25	2
0.28	5	1.28	2
0.31	4	1.31	2
0.34	4	1.34	2
0.37	3	1.37	2
0.40	3	1.40	2
0.43	3	1.43	2
0.46	3	1.46	2
0.49	3	1.49	1
0.52	2	1.52	1
0.55	2	1.55	1
0.58	2	1.58	1
0.61	2	1.61	1
0.64	2	1.64	1
0.67	2	1.67	1
0.70	2	1.70	1
0.73	2	1.73	1
0.76	1	1.76	1
0.79	1	1.79	1
0.82	1	1.82	1
0.85	1	1.85	1
0.88	1	1.88	1
0.91	1	1.91	1
0.94	1	1.94	1
0.97	1	1.97	1

4. SONUÇLAR

Bu çalışmada, Kavarada probleminin değişik bir varyantı ele alınmıştır. Bu problemin çözümlerinin varlığını garanti eden kritik uzunluk için teorik hesaplamalar yapılmıştır. Son olarak, nümerik hesaplamalar ile teorik hesaplamamızdaki $K(a) = m = 0$ kabulünü sağlayan a kritik uzunluğunu türeten bazı p değerleri bulunmuştur.

KAYNAKLAR

- [1] H. Kawaiada, On solutions of initial-boundary problem for $u_t = u_{xx} + 1/(1 - u)$, Publ. Res. Inst. Math. Sci. 10, No.3 (1975), 729-736.
- [2] W. Walter, Parabolic Differential Equations with a Singular Nonlinear Term, Funkcialaj Ekvacioj, 19 (1976) 271-277.
- [3] A. Acker. & W.Walter., The quenching problem for nonlinear parabolic differential equations, in Lecture Notes, in Mathematics, Vol. 564 (1976), 1-12.
- [4] H.A.Levine, Quenching, Nonquenching, and Beyond Quenching for Solution of Some Parabolic Equations, Annali di Matematica pura ed applicata, (IV), Vol. CLV (1989), 243-260.
- [5] C. Y. Chan and C. S. Chen, A numerical method for semilinear singular parabolic quenching problems, Quarterly of Applied Mathematics, Vol. XLVII, No. 1 (1989), 45-57.
- [6] J-S-Guo, The critical length for a quenching problem, Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications, Vol. 18, No. 6, (1992), 507-516.
- [7] H. B. Keller, Existence theory for two point boundary value problems, Bull. Amer. Math. Soc. 72(4): (1966), 728-731.
- [8] H. B. Keller, .Numerical Methods for Two-Point Boundary Value Problems. Ginn (Blaisdell), Boston, Massachusetts, 1968.

“

Bölüm 3

(E)-4-(3-ETOKSİ-2- HİDROKSİBENZİLİDENAMİNO) BENZOİK ASİT MOLEKÜLÜNE AİT KUANTUM KİMYASAL HESAPLAMALAR

Gonca Özdemir Tarı^{1}, Başak Koşar Kırca²,
Çiğdem Albayrak Kaştas³, Mustafa Odabaşoğlu⁴,
Orhan Büyükgüngör⁵*

”

1 Vezirköprü Meslek Yüksekokulu, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Samsun, Türkiye, ORCID ID:0000-0001-5919-1778

2 Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Eğitim Fakültesi, Sinop Üniversitesi, Sinop, Türkiye, ORCID ID:0000-0001-7754-9059

3 Kimya Bölümü, Fen-Edebiyat Fakültesi, Sinop Üniversitesi, Sinop, Türkiye, ORCID ID:0000-0003-0235-7460

4 Kimya ve Kimyasal İşleme Teknolojileri Bölümü, Pamukkale Üniversitesi, Denizli, Türkiye, ORCID ID:0000-0001-7975-5729

5 Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Samsun, Türkiye, ORCID ID:0000-0001-7133-1841

1. Giriş

Schiff bazı molekülleri karbon azot çift bağı içeren bileşikler olup aldehit ve ketonların primer aminlerle kondensasyon reaksiyonlarından elde edilirler. Enol-imin, keto-amin ve zwitteriyonik olarak üç farklı tautomer yapısına göre sınıflandırılabilen bu moleküller fotokromik ve termokromik karakteristikleriyle de sınıflandırılmaktadır. İlk grup tautomer yapılar hidrojen bağındaki hidrojen atomunun konumuna bağlı iken, diğer sınıflandırmada ise O atomundan N atomuna proton transferine bağlıdır. Schiff bazları boya, ilaç, kozmetik ve plastik gibi pek çok sanayi dalında kullanılmasının yanı sıra biyolojik aktivitelerinden dolayı moleküler araştırmalarda oldukça sık şekilde kullanılmaktadır. Bu araştırmalar da hem deneysel çalışmaları desteklemek hem de deneysel verilerle ulaşılamayan fiziksel kimyasal özelliklere ulaşabilmek için kullanılan hesaplamalı kimyasal çalışmalarını kapsamaktadır [1-6].

Bu çalışma, x-ışını kırınımı yöntemiyle yapısı daha önce aydınlatılmış olan (E)-4-(3-Etoksi-2-hidroksibenilidenamino)benzoik asit, $C_{16}H_{15}NO_4$ molekülünün [7] elektronik ve kimyasal yapısının kuantum hesaplama yöntemleri ile yeniden incelenerek sonuçların karşılaştırılmasını kapsamaktadır. Kuantum kimyasal hesaplamalar Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı kullanılarak (YFK) ve 6-311++G(d,p) temel baz seti ile gerçekleştirilmiştir. Böylece x-ışınları kırınımı yöntemi ile elde edilen sonuçlara hem yeni bilgiler eklenmiş hem de teorik çalışma ile deneysel sonuçlar desteklenmiştir.

2. Materyal-Metot

Kuantum mekaniği nesnelerin konum ve momentum bilgilerini kullanarak, çeşitli kuvvet alanları altında nasıl hareket etmeleri gerektiğini bulmaya çalışır. Gelişimi ile birlikte bilim insanları sayesinde çok çeşitli bakış açıları geliştirilmiş ve birçok alanda başarılı bir şekilde uygulanmıştır. Kuantum fikirleri üzerine geliştirilen yapı analizleri bir molekülün sahip olduğu tüm fiziksel ve kimyasal özellikleri bize sunmakla birlikte malzeme biliminden elektroniğe, antropolojiden astrofiziğe, moleküler biyolojiden modern tıba, uzay araştırmalarından metalurjiye kadar bütün alanlarda önemli buluşlara imza atmıştır ve atmaya devam edecektir [2]. Çalışmalara molekülün en kararlı halini belirlemek için geometri optimizasyonu yapılarak başlanmış olup, diğer tüm hesaplamalar belirlenen kararlı yapının üzerinden ilerlemiştir. Tüm hesaplamalar Gaussian 03W [8] programı kullanılarak yapılmış ve sonuçlar GaussView moleküler görselleştirme [9] programı kullanılarak görselleştirilmiştir. Hesaplamalar, YFK'nın, Yerel Spin yoğunluğu yaklaşımı olan LSDA ve Lee-Yang-Par, korelasyon enerjili 3 parametrelili Becke karma modeli olan B3LYP yöntemi ve 6-311++(d,p) temel baz seti kullanılarak yapılmıştır.

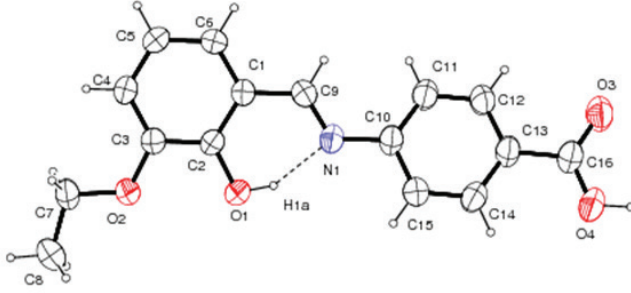
Molekölün sınır orbitalleri (HOMO ve LUMO), Mulliken ve doğal yük analizleri (NPA), Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) haritaları belirlenmiştir. İlave olarak tüm baz setleri için moleküle ait doğrusal olmayan (NLO) optik özellikler ve termodinamik fonksiyonlar belirlenmiş ve sonuçlar karşılaştırılmıştır.

3. Bulgular ve Tartışma

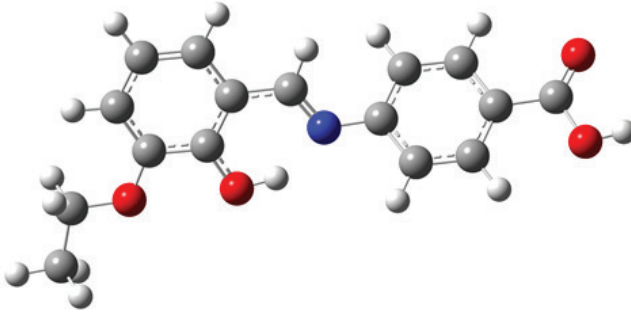
3.1. Optimize Yapı

Şekil 1.a'da x-ışını kırınımından elde edilmiş moleküle ait Ortep şekli [7], Şekil 1. b'de ise optimize yapıya ait şekiller verilmiştir. Farklı yöntemler kullanılarak elde edilen geometrik parametreler ise Tablo 1'de karşılaştırmalı olarak rapor edilmiştir. C9=N1 bağ uzunluğu 1.278(3) Å olup tipik çift bağ karakteriyle enol-imin formu desteklerken, C10-N1 bağ uzunluğu ise 1.414(3) Å değeriyle tek bağ karakteri taşımaktadır [7]. Aynı bağ uzunlukları C9=N1 için LSDA yöntemiyle 6-311++G(d,p) baz seti ile 1.297 Å bulunurken B3LYP yöntemi ve 6-311++G(d,p) aynı baz seti ile 1.290 Å bulunmuştur. C10-N1 tek bağ uzunluğu ise aynı yöntem ve baz setleri ile sırasıyla 1.381 Å ve 1.403 Å olarak bulunmuştur.

Moleküle ait geometri optimizasyonu sonucu elde edilen geometrik parametrelerin karşılaştırıldığı Tablo 1 incelendiğinde bağ uzunlukları için maksimum fark LSDA için 0.8497 ve B3LYP için ise 0.1178, bağ açıları için aynı değerler sırasıyla 2.7600 ve 3.2484'tür. KOK değerleri ise bağ uzunlukları için 0.060 ve 0.051 ve bağ açıları için ise aynı değerler 1.229 ve 1.103 olarak bulunmuştur. Burada maksimum fark olarak ifade edilen değer, bağ uzunluğu ve bağ açılarında bulunan deneysel değer ile teorik değer farkının maksimum olduğu değerdir. Hata değerleri incelendiğinde moleküler yapıya ait geometrik parametrelerin B3LYP yöntemiyle elde edilen optimize yapı parametreleri ile en iyi uyumu sağladığı gözlenmiştir. Geometrik parametrelerdeki bu farklılıklar teorik hesaplamaların moleküller arası etkileşimleri ve moleküller arası kuvvetleri göz önüne almadığı için geometri katı fazdaki deneysel geometriden farklı olabilmektedir. Moleküle ait en kararlı yönelimi belirlemek içinde moleküllerin optimize yapılarıdaki sahip oldukları enerji değerlerine bakılması gerekmektedir. Bu enerji değerlerine bakıldığında LSDA için -969.4281126 Hartree ve B3LYP için ise -974.6727836 Hartree'dir. Bu değerlere bakıldığında B3LYP yönteminden elde edilen minimum enerji değeriyle daha kararlı bir yönelimin olduğunu söylemek mümkündür. Bu sebeple moleküle ait optimize yapı şekli ve Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) haritaları, sınır orbitallerine ait moleküler orbital şekillenimleri belirlenirken B3LYP yönteminden elde edilen değerler kullanılmıştır.



Şekil 1. (a)



(b)

Şekil 1. a) (E)-4-(3-Etoksi-2-hidroksibenzilidenamino)benzoik asit bileşiğine ait x-ışını kırınımından ve b) Optimize yapıdan elde edilen şekilleri.

Tablo 1. (E)-4-(3-Etoksi-2-hidroksibenzilidenamino)benzoik asit bileşiğine ait bazı deneysel ve kuantum mekaniksel hesaplamalara ait geometrik parametreler.

	<i>Deneyisel [7]</i>	<i>DFT/6-311++G(d,p)</i> <i>LSDA</i>	<i>B3LYP</i>
Bağ Uzunluğu			
C1-C2	1.406(3)	1.41399	1.41388
C1-C6	1.398(3)	1.40539	1.41279
C1-C9	1.445(3)	1.41867	1.44721
C2-O1	1.345(2)	1.31096	1.33721
C3-O2	1.366(2)	1.33993	1.35721
C7-O2	1.427(2)	1.40963	1.42969
C9-N1	1.278(3)	1.29712	1.29025
C10-C15	1.386(3)	1.39670	1.40304
C10-C11	1.388(3)	1.39941	1.40530
C10-N1	1.414(3)	1.38150	1.40349
C16-O4	1.261(3)	1.34597	1.35938
C16-O3	1.273(3)	1.21144	1.21001

O1-H1A	0.874(17)	1.05346	0.99182
Mak.fark		0.8497	0.1178
KOK		0.060	0.051
Bağ Açısı			
C6-C1-C2	118.73(19)	120.41949	119.80534
C6-C1-C9	120.57(19)	120.75023	119.29932
O1-C2-C3	118.06(18)	119.37080	118.13267
O1-C2-C1	121.96(19)	121.96137	122.55160
C3-C2-C1	119.97(19)	118.66765	119.31567
O2-C3-C4	125.3(2)	125.28461	125.35500
O2-C3-C2	115.03(18)	115.09919	115.17242
C4-C3-C2	119.64(19)	119.61610	119.47258
O2-C7-C8	107.27(18)	107.75739	107.58962
N1-C9-C1	122.1(2)	121.39228	122.85156
C15-C10-N1	115.87(19)	118.24714	119.11847
O4-C16-O3	123.1(2)	122.12313	121.79908
C11-C10-N1	125.1(2)	122.33999	122.77865
C9-N1-C10	121.8(2)	121.86926	121.17281
C3-O2-C7	118.42(17)	117.24041	118.90915
Mak.Fark		2.7600	3.2484
KOK		1.229	1.103
Torsiyon açısı			
C9-C1-C2-O1	-1.6(3)	0.12789	0.11734
O1-C2-C3-O2	-0.4(3)	-0.15423	-0.05711
C1-C2-C3-O2	-179.14(19)	-180.00	-179.96337
O1-C2-C3-C4	-180.0(2)	179.95536	179.96030
O2-C3-C4-C5	179.4(2)	179.88340	179.87460
C9-C1-C6-C5	-178.3(2)	179.88754	179.89853
C6-C1-C9-N1	-178.7(2)	179.34322	179.31104
C2-C1-C9-N1	4.0(3)	-0.46663	-0.59621
N1-C10-C11-C12	178.6(2)	179.94970	-179.15391
N1-C10-C15-C14	-178.6(2)	-179.62667	179.7175
C12-C13-C16-O4	-179.9(2)	-179.81595	-179.74310
C14-C13-C16O3	-179.9(2)	179.49983	179.53545
C1-C9-N1-C10	-178.33(18)	175.84293	177.00814
C15-C10-N1-C9	156.7(2)	150.39726	143.39660

3.2. UV-Vis Spektrumu ve Elektronik Geçişler

Orto-hidroksi Schiff bazı bileşiklerinin UV-Vis spektrumlarında, <400 nm’de bir absorpsiyon bandının varlığı, bileşiğin OH tautomerik

formu benimsediğini gösterir. Alternatif olarak, NH tautomerik formu benimseyen bileşikler, > 400 nm’de yeni bir absorpsiyon bandı gösterir ve bu absorpsiyon bantları genellikle spektrumda bir omuz şeklinde kendini gösterir [10]. Deneysel absorpsiyon spektrumlarına göre, molekül etanol içinde 258, 292 ve 340 nm’de, DMSO içinde 260, 294 ve 346 nm’de absorpsiyon bantları sergilemiştir. Bileşiğin deneysel spektrumlarında bu iki çözelti için de 400 nm’nin üzerinde hiçbir absorpsiyon pikine rastlanmamıştır. 400 nm’nin üzerinde piklerin olmaması, bileşiğin çözeltide bile OH tautomerik biçimini benimsediğini açıkça göstermektedir. Teorik olarak incelendiğinde ise değerlerin deneysel değerlerle oldukça uyumlu olduğu gözlenmektedir. Elde edilen sonuçlar ise Tablo 2’de ayrıntılarıyla verilmiştir.

Tablo 2. Bileşiğin EtOH ve DMSO çözücülerinde elektronik geçişleri.

Deneysel		
λ (nm) [A]		
DMSO	260 [0.598]	
	294 [0.791]	
	346 [0.251]	
EtOH	258 [0.530]	
	292 [0.650]	
	340 [0.220]	
DFT/6-311++G(d,p)		
LSDA		
λ (nm) [f]		Major Katkılar
Gaz	530.71 [0.0428]	HOMO-1→LUMO HOMO→LUMO HOMO→LUMO+2
	371.49 [0.5409]	HOMO-2→LUMO HOMO-1→LUMO HOMO→LUMO HOMO→LUMO+2
	367.62 [0.1758]	HOMO-1→LUMO HOMO→LUMO+2 HOMO→LUMO+3
DMSO	503.74 [0.0314]	HOMO→LUMO HOMO→LUMO+2
	375.58 [0.8639]	HOMO-1→LUMO
	363.11 [0.0230]	HOMO-2→LUMO HOMO→LUMO+2

EtOH	503.56 [0.0298]	HOMO→LUMO HOMO→LUMO+2
	373.79 [0.8330]	HOMO-1→LUMO
	363.14 [0.0211]	HOMO-2→LUMO HOMO→LUMO+2
Gaz	B3LYP	
	395.07 [0.0826]	HOMO→LUMO
	326.94 [0.7386]	
		HOMO-5→LUMO HOMO-2→LUMO HOMO-1→LUMO
	292.58 [0.0893]	
		HOMO-5→LUMO HOMO-2→LUMO HOMO-1→LUMO HOMO-1→LUMO+1 HOMO→LUMO+2 HOMO→LUMO
DMSO	388.75 [0.1011]	
	334.5 [0.9307]	HOMO-2→LUMO HOMO-1→LUMO
	292.91 [0.068]	
		HOMO-5→LUMO HOMO-2→LUMO HOMO-1→LUMO HOMO-1→LUMO+1 HOMO→LUMO+2 HOMO→LUMO
EtOH	388.44 [0.0954]	
	332.99 [0.9022]	HOMO-2→LUMO HOMO-1→LUMO
	292.78 [0.0702]	
		HOMO-5→LUMO HOMO-2→LUMO HOMO-1→LUMO HOMO-1→LUMO+1 HOMO→LUMO+2

3.3. IR Titreşim Spektrum Analizi

Bileşiğin deneysel ve teorik titreşim frekansları Tablo 3’de karşılaştırılmıştır. O-H gerilmesi, deneysel spektrumda 2000-3000 cm^{-1} bölgesinde dikkat çekici bir absorpsiyon bandı olarak gözlenmektedir. Molekülün O1 ve N1 atomları arasındaki güçlü molekül içi hidrojen bağı buna neden olur ve O-H gerilmesinin deneysel titreşim frekansını 2000–3000 cm^{-1} aralığına kaydırır ve genişletir. 1677 cm^{-1} ’de yer alan band C=N gerilmesine işaret etmektedir. Spektrum ayrıca 1217 cm^{-1} ’de

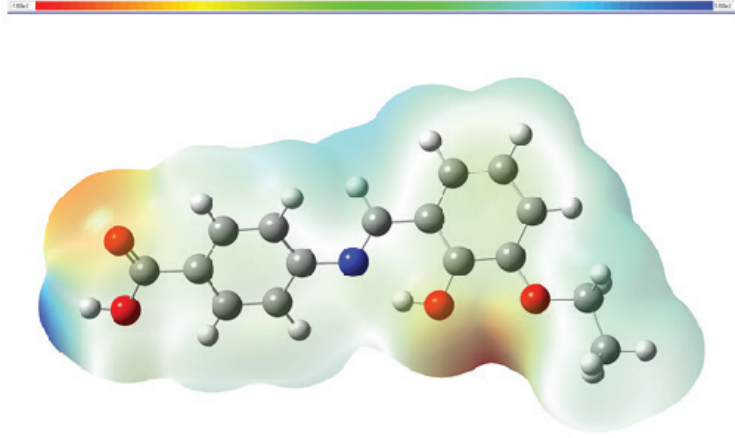
C-O gerilmesinin varlığını da gösterir. 2829 cm^{-1} bölgesinde yer alan absorpsiyon bandı simetrik CH_3 gerilmesine ait iken, 2937 cm^{-1} bölgesinde asimetrik CH_3 gerilmesi bandı görülmektedir. Tablo 3, bileşiğin diğer titreşim frekanslarını ve ölçeklenmiş teorik titreşim frekanslarını da göstermektedir. Bu frekans değerleri benzer yapılarıdaki moleküllerin titreşim frekansları ile karşılaştırıldığında iyi bir uyum içindedir [5,11]. DFT hesaplamalarından elde edilen teorik sonuçlar, O-H gerilmesi dışında deneysel değerlerle iyi bir uyum göstermektedir. Teorik hesaplamaların molekül içindeki güçlü hidrojen bağına dikkate almadığı düşünüldüğünde bu sonucun şaşırtıcı olmadığı açıktır.

Tablo 3. Bileşiğe ait deneysel ve teorik titreşim frekansları (cm^{-1}).

Titreşimler	Deneysel	DFT/6-311+G(d,p)	
		B3LYP	LSDA
Aromatik CH düzlem dışı eğilme	831-864	837-844	839-848
Aromatik CH düzlem içi eğilme	972-1077	920-1005	910-1003
CO gerilme	1217	1280/1780	1282/1323/1776
OH eğilme	1357	1363	1540
CH_3 simetrik eğilme	1421	1404-1427	1405-1425
CH_3 asimetrik eğilme	1455	1483	1434
Aromatik CC gerilme	1575-1592	1597-1629	1594-1627
CN gerilme	1677	1664	1646
OH gerilme	2546 (2000-3000)	3235-3772	2354
CH_3 simetrik gerilme	2829	3038	2983
CH_3 asimetrik gerilme	2937	3115	3069
CH_2 simetrik	-	2993	2907
CH_2 asimetrik	-	3028	2943

3.4. Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP)

Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) haritaları, bir moleküler sistemdeki atomik konumları ve bu atomlara ait elektron yoğunluklarını bulmayı hedeflemektedir. Molekülün kimyasal reaksiyonlardaki reaktif kısımlarını belirlemek için kullanılan yaygın yöntemlerden birisidir. Molekül yüzeyindeki elektrostatik potansiyellerin farklı değerleri farklı renklerle ifade edilmektedir. Kırmızı ile belirtilen bölgeler elektron yoğunluğu negatif olan bölgeyi temsil ederken mavi ve beyaz ile belirtilen bölgeler ise elektron yoğunluğu bakımından pozitif yüklerin bulunduğu kısımları göstermektedir. Moleküle ait MEP haritası en kararlı yapıya ait olan YFK/B3LYP yöntemiyle 6-311++G(d,p) optimize geometri kullanılarak hesaplanmış olup Şekil 2’de verilmiştir. MEP haritası incelendiğinden negatif bölgeler O1, O2, O3 ve O4 atomları üzerine konumlanmış olup MEP değerleri sırasıyla -0.05636, -0.05298, -0.04659, -0.01684 a.b’dir. En pozitif bölgeler ise hidrojenler üzerinde olup en yüksek değer +0.0490 a.b değeriyle N1 ve O4 atomuna bağlı hidrojen atomuna aittir. Atomların sahip olduğu yük değerlerine bakıldığında sonuçlar tüm yöntemler için O-H...N bağına destekler niteliktedir.



Şekil 2. (E)-4-(3-Etoksi-2-hidroksibenilidenamino)benzoik asit bileşiğine ait MEP haritası.

3.5. Mulliken ve Doğal Yük Analizi (NPA)

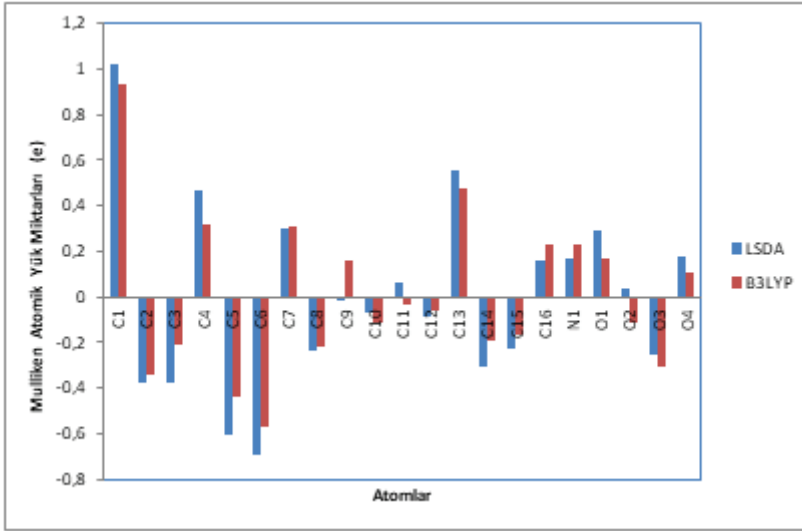
Yük analiz metotları moleküler sisteme ait elektron yoğunluğunun atomlar arasında paylaşımını ve her bir atom üzerindeki yük miktarlarını bulmayı amaçlamaktadır. Mulliken yük analizinde [12], molekül üzerindeki toplam yük atomlar üzerinde dağıtılmaktadır. Moleküle ait net yükler Mulliken ve Doğal Yük Analizi ile LSDA ve B3LYP yöntemlerinin her ikisi ile de hesaplanmış olup sonuçlar Tablo 4’de verilmiştir.

Tablo 4. Moleküle ait Mulliken ve Doğal popülasyon yük miktarları.

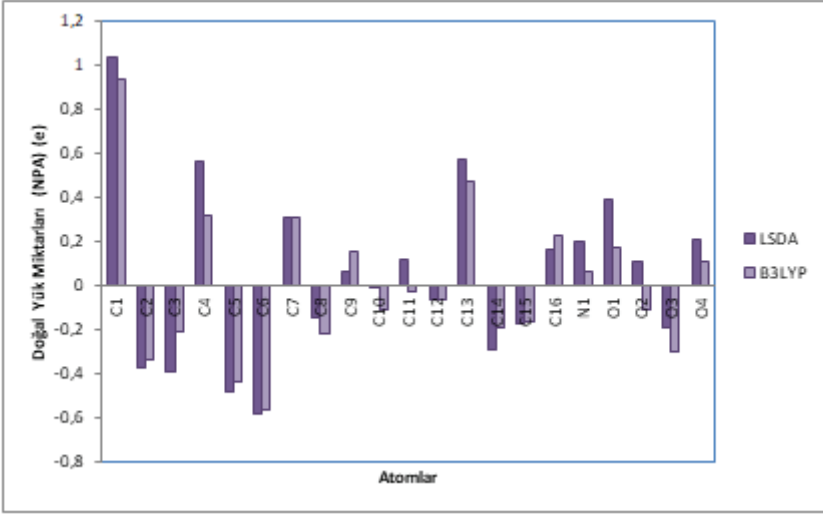
	LSDA		B3LYP	
	Mulliken	NPA	Mulliken	NPA
C1	1.016011	1.032698	0.932160	0.932073
C2	-0.380293	-0.379044	-0.337324	-0.336876
C3	-0.373329	-0.393981	-0.209701	-0.209774
C4	0.468611	0.561481	0.320142	0.319145
C5	-0.601011	-0.486106	-0.437934	-0.438362
C6	-0.695331	-0.587623	-0.568626	-0.568297
C7	0.301308	0.308064	0.307891	0.307711
C8	-0.239681	-0.143415	-0.218279	-0.218328
C9	-0.014108	0.060645	0.155790	0.155160
C10	-0.067203	-0.010214	-0.110516	-0.110144
C11	0.066778	0.117903	-0.032482	-0.032413
C12	-0.085713	-0.068734	-0.062598	-0.062487
C13	0.557308	0.571565	0.473196	0.471966
C14	-0.306017	-0.288479	-0.189910	-0.190037
C15	-0.225835	-0.173725	-0.164912	-0.164724

C16	0.161701	0.163887	0.227336	0.226166
N1	0.171617	0.200979	0.227336	0.062393
O1	0.289768	0.390664	0.171738	0.172144
O2	0.035910	0.108199	-0.114553	-0.113876
O3	-0.256376	-0.196243	-0.306615	-0.304954
O4	0.175887	0.211479	0.103383	0.103513

Elde edilen sonuçların MEP haritasındaki sonuçları desteklediği görünmekte olup MEP analizine benzer şekilde en negatif bölgeler O ve N gibi elektronegatifliği yüksek olan atomlar üzerinde, en pozitif bölgeler ise H atomları üzerinde gözlenmektedir. Moleküllerin Mulliken ve Doğal Yük Analizlerine bakıldığında her iki yöntemde elde edilen net yük miktarlarının birbirleri ile uyum içinde olduğu gibi birbirlerinden farklı dağılım gösterdikleri bölgelerinde bulunduğu görülmektedir. Bu durum hem kullanılan yönteme hem de atomların sahip olduğu elektronegatifliklere göre açıklanabilir. Kullanılan yönteme göre atomlar üzerindeki yük miktarlarını gösteren grafik Şekil 3 ve Şekil 4'te verilmiştir. Buradan en negatif yüke sahip olan atomların, molekülleri bir arada tutan hidrojen bağıını oluşturan verici atomlar üzerinde yoğunlaştığı ve molekülde gerçekleşen tepkimelerinde bu atom veya atom gruplarının davranışlarıyla açıklanabileceği sonucu çıkarılabilir.



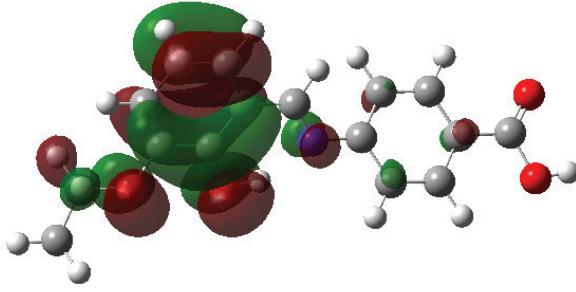
Şekil 3. Mulliken yük miktarlarının kullanılan yöntemlere göre atomlar üzerine dağılımı.



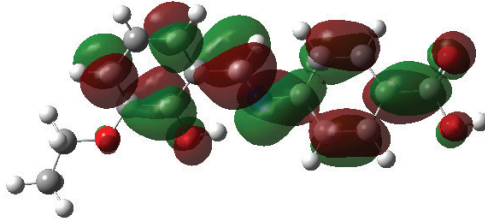
Şekil 4. Doğal yük miktarlarının kullanılan yöntemlere göre atomlar üzerine dağılımı.

3.6. Sınır Orbitaleri

Moleküler orbital teorisine göre, atomlara ait atomik orbitaller birbirine yaklaşarak moleküllere ait moleküler orbitalleri oluştururlar. Bu orbitaller moleküldeki elektronların bulunma olasılığının büyük olduğu yerler olarak düşünülebilir [6]. Moleküler orbitallerde boş olan en düşük enerjili moleküler orbitale LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), dolu olan en yüksek enerjili orbitalede HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) denilmektedir. Bir molekül elektron alıyorsa önce LUMO orbitalini doldururken, tepkimelerde de daha çok en yüksek enerjili elektronlar yani HOMO elektronları kullanılır. Tepkimeler HOMO-LUMO orbitalleri arasında oluştuğu için bir atomdan elektron eksiltmek ya da elektron eklemek için gereken enerjiyi belirlemede çok önemlidirler. Şekil 5'te B3LYP/6-311++G(d,p) baz seti hesabından elde edilen HOMO ve LUMO orbitalleri gösterilmektedir. Tablo 5'de ise farklı yöntemlerden elde edilen sınır orbitalleri ve bunlardan türetilmiş kuantum kimyasal nicelikler verilmiştir.



HOMO (-6.0368 eV)



LUMO (-2.4057 eV)

Şekil 5. Moleküle ait HOMO-LUMO şekillenimi.

Tablo 5. Moleküle ait farklı yöntemlerden ve 6-311++G(d,p) baz setinden elde edilen sınır orbitalleri ve bunlardan türetilmiş kuantum kimyasal nicelikler.

	LSDA	B3LYP
İyonizasyon enerjisi, I	5.858	6.0368
Elektron ilgisi, A	3.799	2.4057
Enerji aralığı, ΔE	2.059	3.6311
6-311G++(d,p)	4.828	4.2212
Elektronegatiflik, χ		
Kimyasal sertlik, η	1.029	1.8155
Kimyasal yumuşaklık, S	0.4859	0.2754
Elektrofilik indeks, ω	-11.326	-4.9073

$$I = -E_{HOMO}, A = -E_{LUMO}, \Delta E = |E_{HOMO} - E_{LUMO}|, \chi = \frac{I + A}{2}, \eta = \frac{I - A}{2}, S = \frac{1}{2\eta}, \omega = -\frac{\chi^2}{2\eta}$$

3.7. Termodinamik Özellikler

Bir moleküler sistemdeki tüm elektronlar ve çekirdekler arasındaki etkileşimlerin toplamı molekülün toplam enerjisini verir. Termodinamik fonksiyonlar entalpi, entropi ve ısı sıçması gibi değişkenler olup termodinamiğin çoğu uygulamasında bir ya da daha çok değişken sabit tutulurken diğer değişkenlerin bunlara göre nasıl değiştiği incelenir [2]. Bir moleküler sistemin toplam enerjisi öteleme, elektronik dönme ve titreşim enerjilerinin toplamıdır. Molekülün toplam enerjisini elde etmek için bu bileşenlerin katkısının belirlenmesi gerekir ki bu hesaplamalarda termodinamik fonksiyonların hesabından elde edilmektedir. Moleküle ait bu onksiyonlar 298.15 K sıcaklıkta, 1 atm basınç ve gaz fazda belirlenmiş olup Tablo 6’da verilmiştir.

Tablo 6. Moleküle ait hesaplanan termodinamik değişkenler ve bileşenleri.

<i>6-311G++(d,p)</i>	<i>LSDA</i>	<i>B3LYP</i>
Termal, E (cal/mol K)		
<i>Elektronik</i>	0.000	0.000
<i>Öteleme</i>	0.889	0.889
<i>Dönme</i>	0.889	0.889
<i>Titreşim</i>	183.018	187.122
<i>Toplam</i>	184.795	188.900
Isı kapasitesi, Cv (cal/mol K)		
<i>Elektronik</i>	0.000	0.000
<i>Öteleme</i>	2.981	2.981
<i>Dönme</i>	2.981	2.981
<i>Titreşim</i>	66.206	65.343
<i>Toplam</i>	72.168	71.304
Entropi, S (cal/mol K)		
<i>Elektronik</i>	0.000	0.000
<i>Öteleme</i>	42.841	42.841
<i>Dönme</i>	34.851	34.911
<i>Titreşim</i>	65.585	66.136
<i>Toplam</i>	143.277	143.888
Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)		
<i>A</i>	0.04530	0.04571
<i>B</i>	0.00486	0.00467
<i>C</i>	0.00444	0.00431
Dönme sabitleri (GHz)		
<i>A</i>	0.94390	0.95248
<i>B</i>	0.101107	0.09733
<i>C</i>	0.09260	0.08984
Sfır-nokta titreşim enerjisi (kcal/mol)	173.07223	177.21284
Sfır-nokta düzeltmesi*	0.275808	0.282407
Enerjide termal düzeltme*	0.294490	0.301031
Entalpide termal düzeltme*	0.295434	0.301975
Gibbs serbest enerjisine termal düzeltme*	0.227359	0.233610
Elektronik ve sfır nokta enerjisinin toplamı *	-969.152304	-974.390377

<i>Elektronik ve termal enerjilerin toplamı *</i>	-969.133622	-974.371752
<i>Elektronik ve termal entalpi toplamı *</i>	-969.132678	-974.370808
Elektronik ve termal serbest enerjilerin toplamı*	-969.200753	-974.439174
Toplam enerji (Hartree)	-969.4281126	-974.6727836

3.8. İkinci Dereceden Doğrusal Olmayan Optik Özellikler

Moleküle uygulanan elektrik alana karşı molekülün dipol momentinin gösterdiği doğrusal tepkiye polarizibilite denir ve elektrik alana maruz kalmış bir moleküldeki değişim polarizebilite ile belirlenir. Optik özellikler bir moleküle zayıf elektrik alan uygulandığında ortaya çıkarken, molekül şiddetli alana maruz kaldığında ise ikinci dereceden doğrusal olmayan optik özellikler (NLO) ortaya çıkmaktadır. Optik özellikleri polarizebilite (α) temsil ederken, doğrusal olmayan optik özellikleri ise hiperpolarizebilite (β) temsil etmektedir [2]. Moleküle ait dipol moment (μ), doğrusal kutuplanabilirlik (α), yönelime bağlı kutuplanabilirlik ($\Delta\alpha$) ve birinci mertebeden kutuplanabilirlik (β) değerleri hesaplanmış ve Tablo 7’de verilmiştir.

Tablo 7. Moleküle ait doğrusal olmayan optik özelliklerin hesaplamaları sonucunda elde edilen parametreler.

	Dipol Moment (Debye)		Doğrusal kutuplanabilirlik, Yönelime bağlı kutuplanabilirlik (esu)		1. mertebeden kutuplanabilirlik (esu)	
LSDA	μ_x	1.1842662	α_{xx}	454.9278622	β_{xxx}	-4052.3218382
	μ_y	0.2463678	α_{xy}	17.62818400	β_{xxy}	41.0221676
	μ_z	-0.3139814	α_{xz}	220.5932418	β_{xyy}	-73.4635258
	μ	1.3139814	α_{yy}	-3.79713870	β_{yyy}	347.737767
			α_{yz}	8.443905900	β_{xxz}	-40.6159099
			α_{zz}	126.04833584	β_{xyz}	59.1229337
			α	39.55368265	β_{yyz}	-31.1567055
			$\Delta\alpha$	380.2062863	β_{zzz}	112.8141291
					β_{zzz}	67.9886021
					β_{zzz}	41.5839938
B3LYP					β	3.48941x10⁻²⁹
	μ_x	1.2632783	α_{xx}	408.4675182	β_{xxx}	2559.4913774
	μ_y	0.3995166	α_{xy}	15.38555090	β_{xxy}	25.6934693
	μ_z	-0.3921093	α_{xz}	211.2878955	β_{xyy}	-39.5312270
	μ	1.381750802	α_{yy}	-4.28132850	β_{yyy}	317.7387413
			α_{yz}	9.07963390	β_{xxz}	-49.2800893
			α_{zz}	128.8872342	β_{xyz}	59.7254107
			α	36.94199331	β_{yyz}	-25.2865418
			$\Delta\alpha$	323.1020055	β_{zzz}	101.378619
					β_{zzz}	77.9308630
					β_{zzz}	-55.1149691
					β	2.29646x10⁻²⁹

4. Sonuç ve Yorum

Bu çalışma tek kristal haline getirilip daha önce x-ışını kırınımı yöntemiyle yapısı aydınlatılmış olan (E)-4-(3-Etoksi-2-hidroksibenzilidenamino)benzoik asit, $C_{16}H_{15}NO_4$ [7], molekülünün kuantum hesaplama yöntemlerinden LSDA ve B3LYP yöntemlerinden elde edilen sonuçların karşılaştırılıp yorumlanasını içermektedir. Molekülün teorik yöntemlerden her ikisi ile de optimizasyonu sonucunda elde edilen geometrik parametreler x-ışını kırınımından elde edilen parametrelerle karşılaştırılmıştır. En iyi uyumu sağlayan teorik yöntemin B3LYP yönteminden elde edilen sonuçlar olduğu söylenilebilmektedir. İlaveten molekülün sınır orbitalleri, MEP haritaları ve yük analizleri yapılmış ve moleküldeki güçlü hidrojen bağıni desteklediği yönünde sonuçlar alınmıştır. Molekülün UV-Vis ve IR titreşim spektrumları hem deneysel hem de teorik olarak incelenmiş ve sonuçların birbirleri ile uyumlu olduğu gözlenmiştir. UV-Vis spektrumunda özellikle moleküldeki enol-imin formu ve elektronik geçişleri belirlemede kullanılan önemli bir yöntem olup deneysel verilerimizi destekler sonuçlara ulaşmamızı sağlamıştır. Benzer şekilde IR titreşim spektrumları incelendiğinde Schiff bazlarına ait elde edilen karakteristik pikler gözlenmiş olup bazı titreşim piklerinin teorik hesaplamalarda daha yüksek şiddette olduğu gözlenmiştir. Bu durumda deneysel ve teorik hesaplamalar arasındaki bu belirgin farklılıklar teorik hesaplamaların molekülün herhangi bir etkileşimini dikkate alamadan gerçekleşmesiyle açıklanabilmektedir. Diğer taraftan molekülün sahip olduğu doğrusal olmayan optik özellikler belirlenmiş olup elde edilen 1. dereceden kutuplanabilirlik değerleriyle molekülün optik materyal adayı olması sonucunu çıkarmamıza olanak sağlamıştır.

5. Kaynaklar

1. Eryılmaz, S., Gül M., İnkaya E., İdil Ö., Özdemir N., Synthesis, crystal structure analysis, spectral characterization, quantum chemical calculations, antioxidant and antimicrobial activity of 3-(4-chlorophenyl)-3a,4,7,7a-tetrahydro-4,7-methanobenzo[d]isoxazole, J. Mol. Struct. 1122, 219-233, 2016.
2. Özdemir Tarı, G., (2013). Schiff Bazı İçeren Bazı Organik Moleküllerin Deneyel ve Teorik Olarak İncelenmesi, Doktora Tezi. Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun.
3. Uzun, S., Demircioğlu, Z., Taşdoğan, M., Ağar, E., Quantum chemical and X-ray diffraction studies of (E)-3-(((3,4-dimethoxybenzyl)imino)methyl)benzene-1,2-diol, J. Mol. Struct. 1206, 122249, 2020.
4. Özdemir Tarı G., Koşar Kırca, B., Taşdoğan M., Özdemir N., Ağar ., Spectroscopic and Theoretical Studies and Intramolecular Proton Transfer in (Z)-2-Hydroxy-6-(((2-methoxy-5- (trifluoromethyl)phenyl)amino)methylene)cyclohexa-2,4-dien-1-one, Russian Journal of Physical Chemistry A, Vol. 95, No. 8, pp. 1621–1631, 2021.
5. B. Koşar, Ç. Albayrak, C. C. Ersanlı, M. Odabaşoğlu, O. Büyükgüngör, Molecular structure, spectroscopic investigations, second-order nonlinear optical properties and intramolecular proton transfer of (E)-5-(diethylamino)-2-[(4-propylphenylimino)methyl]phenol: A combined experimental and theoretical study, Spectrochimica Acta Part A. 93 (2012) 1-9.
6. Avcı D., 2009. Heteroatom İçeren Bazı Aromatik Moleküllerin Lineer Olmayan Optik ve Spektroskopik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi, Doktora Tezi, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Sakarya.
7. Koşar Kırca, B., The crystal structure of (E)-4-(3-ethoxy-2-hydroxybenzylideneamino)benzoic acid, C₁₆H₁₅NO₄, Z. Kristallogr. NCS 2018; 233(1), 157-158.
8. Frisch M. J. et al., Gaussian 03, Revision E.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
9. Dennigton R. II, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 4.1.2, Semiche, Inc., Shawnee Mission, KS, 2007.
10. K. Ogawa, J. Harada, Aggregation controlled proton tautomerization in salicylideneanilines, J. Mol. Struct., 647 (2003) 211–216. DOI: 10.1016/S0022-2860(02)00526-4.
11. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, Spectrometric Identification of Organic Compounds, 7th ed. John Wiley & Sons, 2005, New York.
12. Mulliken, R. S., Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. I. J. Chem. Phys., 23, 1833-1840, 1955.

Bölüm 4

ORTAOKUL ÖĞRENCİLERİNİN FEN BİLİMLERİ ÖZ-YETERLİKLERİ İLE ELEŞTİREL DÜŞÜNME BECERİLERİNE KİTAP OKUMA ALIŞKANLIKLARININ ETKİSİNİN İNCELENMESİ

Alptürk AKÇÖLTEKİN¹

Fatma DEMİRTAŞ²

1 Doç. Dr. Alptürk AKÇÖLTEKİN, Çanakkale 18 Mart Üniversitesi, <https://orcid.org/0000-0001-6694-1346>

2 Fatma Demirtaş, Çanakkale 18 Mart Üniversitesi, <https://orcid.org/0000-0002-8500-7353>

Giriş

Günümüzün modern toplumları, teknolojinin hızlı gelişimi ve artan bilgi ihtiyacından dolayı 20. asrın endüstri toplumundan 21. asrın bilgi toplumuna dönüşmüştür (Eryılmaz ve Uluyol, 2015). 21. asır bireyinin yaşamı boyunca başarılı olabilmesi için; eleştirel ve yaratıcı düşünebilen (Tümkaya, 2011; Kılıç, 2011), işbirliği yapabilen, problem çözen (Yazgan ve Bintaş, 2005), iletişim yeteneğine sahip, bilgiyi nasıl edineceğini bilen (Gülen, 2013), yeni fikirlere açık, uyumlu ve esnek, sorumluluklarının farkında, inisiyatif alan ve öz-yönetimli (Şahin ve vd., 2014), üretken, lider, sosyal ve kültürel yönden gelişmiş bir birey olması gerekmektedir (TÜSİAD, 2012). Günümüz eğitim anlayışında değişen şartlara uyum sağlayabilecek (Özdemir, 2005) esnek, farklı ve özgün düşünebilecek bireyler yetiştirmek amaçlanmakta (Koray ve Çil, 2006; Kirişçioğlu vd., 2007) ve bu doğrultuda eğitim programları incelenerek çağın ihtiyaçlarını karşılayacak şekilde geliştirilmektedir (Seferoğlu ve Akbıyık, 2006; Gök ve Erdoğan, 2011). Eğitimin hedefleri de göz önünde bulundurulduğunda Paul ve arkadaşları tarafından 1980’li yıllarda bir model haline getirilen eleştirel düşünme, gelişim aracı olarak yadsınamaz bir öneme sahiptir (Özden, 2000). Paul (2005)’e göre eleştirel düşünme, gözlem ve bilgiye dayalı sonuçlara ulaşma çabası, Lipman (1988)’e göre neye ne kadar inanacağımıza ve neyi ne kadar yapacağımıza dair karar verme süreci, Cüceloğlu (2001)’e göre ise bireyin düşünce süreçlerinin farkında, öğrendikleri doğrultusunda meydana gelen olayları anlamlandırdığı ve bunu kendisi için bir gaye edindiği aktif bir zihinsel süreç olarak tanımlanmıştır. Kökdemir’e (2012) göre kişinin kendi fikirlerinin ve taraflılığının farkında olması, karşısına çıkan durumlar ve sorunlara karşı çok yönlü bir bakış açısı ile bakabilmesi eleştirel düşünme açısından önemli unsurlardır. Eleştirel düşünebilme yeteneğine sahip olan kişiler farklı bakış açıları geliştirerek efektif kararlar alma (Kökdemir, 2003), ifade edilmemiş fikirlerin farkına varma ve açık olma (Özden, 2003), önyargıların farkına varma, bağımsız olma, fikirlerin farklı şekilde ifade edilmesine olanak sağlama (Seferoğlu ve Akbıyık, 2006), kanıtlanmış olan ile iddia edilen arasındaki farklılığı görebilme, elde edilen bilgilerin güvenilirliklerini ayırt edebilme gibi özellikleri olan bireylerdir (Argon ve Selvi, 2011). Eleştirel düşünme farklı alt becerilerden oluşur ve bu becerilere sahip olmak tek başına eleştirel düşünme için yeterli değildir. Aynı zamanda bu yönde bir eğilim de gereklidir (Facione vd., 1995).

Bireyin sahip olduğu eleştirel düşünme becerisini gerekli olan durumlarda kullanmak ve bu becerilerle davranmak, eleştirel düşünme eğilimini gerektirmektedir (Seferoğlu ve Akbıyık, 2006). Baydar (2012)’e göre eğilim, becerilerin kullanımını kolaylaştırdığı gibi destekleyici ve yönlendirici bir özellik de barındırır. Eğilim, bir şeyi yapmaya yatkın olmak demektir (Ennis, 1996). Eleştirel düşünme için eğilim ise kişinin karşılaştığı bir du-

rum, olay ve bilgi birimiyle ilgili, bir ölçüt doğrultusunda eleştirel bakışı kullanma isteği anlamına gelmektedir (Zhang, 2003). Bu durumda bireyin eleştirel düşünme eğilimi kazanabilmesi için; farklı inanç ve görüşlere şüphe ile yaklaşması, hipotezlerin nedenlerini belirleyebilmesi, alternatif iddialar geliştirmesi (Moon, 2008), tutarlı bir düşünme tarzını benimsemesi ve gerçeğe ulaşmada cesur ve azimli olması gerekmektedir (Beyer, 1988). Bireyin yaşı eleştirel düşünme gücünü etkilemektedir (Ay ve Akgöl, 2008). Ortaokul yılları öğrencilerin yaşları açısından eleştirel düşünme becerilerinin oluşmaya ve gelişmeye başladığı çok önemli yıllardır (Schmidt ve Bednarz, 1997).

Eleştirel düşünmenin öğretiminde düşünmeye ağırlık veren bir ders programının oluşturulması; eleştirel bakışın uyandırılması ve öğrencilere okuma alışkanlığının kazandırılması açısından önemlidir (İpşiroğlu, 2004). Eleştirel düşünme eğiliminin gelişiminde önemli bir adım olan okuma alışkanlığı (Bamberger, 1990), düşünme sistematığının kazanılması ve beyin gelişimi açısından önemlidir (Yalınkılıç, 2007). Eleştirel düşünebilen bireyin bilgiyi kanıtlarla doğrulama, açık görüşlü olma (Branch, 2000), yapıcı ve kuşkucu olma, karar vermede fevri olmama, başkalarının fikirlerine saygı duyma ve belirsizliklere karşı anlayışlı olma eğilimine sahip olması gerekmektedir (Ennis, 1985; Eggen ve Kauchak, 2001). Eleştirel düşünme eğiliminin kazanılabilmesi için bir diğer önemli faktör de öz-yeterlik kavramıdır (Schommer-Aikins ve Hutter, 2002). Çünkü öz-yeterlik algısı yüksek bireyler, belirlenmiş ölçütler doğrultusunda düşünme süreçlerini titiz bir şekilde uygularlar (Wang ve Wu, 2008) ve doğruya ulaşana kadar düşünmeyi sürdürmek noktasında ısrar edebilirler (Aşkar ve Umay, 2001; Kandemir ve Egmir, 2020).

Öz-yeterlik; Bandura (1994)'e göre bireyin belli bir performansı gösterebilmesi için ihtiyaç duyduğu etkinlikleri başarılı bir şekilde yapabilme öz algısı, Pajares (1996)'e göre kişilerin amaçlarına ulaşmak ihtiyaç duydukları faaliyetleri düzenlemek, uygulamak ve gerçekleştirebilme noktasındaki inançları, Kuzgun (2000)'e göre bir davranış için gerekli olan başlangıç ve bu davranışı sürdürmeye yönelik gerekli olan tercih ve kararları doğrudan etkileyen bir araç, Zimmerman ve Cleary (2006)'e göre bireyin bir işi gerçekleştirmede algıladığı yeterlilik, Tepe (2011)'e göre bir davranışın başarısında, etkili olan inanç ve bu inancın davranışları yönlendirebilirliği olarak ifade edilmiştir. Öz-yeterlik algıları, bireylerin kendi değerleri hakkında sahip oldukları inanç ve yargılar (Bandura, 2001) ile bireyin yaptıklarının nasıl sonuçlar doğuracağına ilişkin inançlarını kapsamaktadır (Bandura, 2001; Schunk, 2009; Tortop ve Eker, 2014). Öz-yeterlik inancı, bireyin sahip olduğu gerçek yeteneği, kapasitesi veya potansiyeli değil bunlara olan inancıdır (Akkoyunlu vd., 2005; Leithwood, 2007; Azar, 2010; Yıldırım ve İlhan, 2010). Öz-yeterlik inancı, insanların motivasyon, iyilik hali ve bireysel ba-

şarıları için bir temel sağlayarak tüm davranışlarını etkilemektedir (Byerly ve Batman, 2009). Öz-yeterlik inancı yüksek bireyler yaptıkları işlerde daha başarılı bir performans gösterebilir; öğrenim ve meslek hayatında istekli, dikkatli ve kişisel öğrenme stratejileri geliştirmede daha başarılı olabilirler (Tuan vd., 2005; Oğuz, 2012; Aktamış vd., 2016).

Öğretimin etkili bir şekilde gerçekleştirilmesi ve öğrencinin başarı düzeyinin arttırılmasında öz-yeterlik inancı önemlidir (Azar, 2010). Fen derslerinde öğretmenlerin öz-yeterlilik inancının öğrenciler için bir karşılığının olması, eğitim bilimlerinin önemli hedefleri içerisinde yer almaktadır (Yaman, 2016). Derste öğretmenin kullandığı yaklaşımlar öğrencinin derse yönelik öz-yeterlik inancını etkileyecektir (Yıldırım ve Karataş, 2020).

Öz-yeterlik inanç düzeyinin tespit edilmesi ve geliştirilmesi fen bilimlerinde öğrencilerin başarısının belirlenmesinde önemlidir (Alpaslan ve Işık, 2016). Fen Bilimleri dersi teori ve hipotezleri kavramayı, bilimsel kanıt ve kişisel görüş arasındaki farkı algılamayı (Eşme, 2004; Soylu, 2004) ve derste açık uçlu problemler yoluyla öğrencilerde eleştirel düşünmeyi sağlamaktadır (Felder ve Brent, 1996). Eleştirel düşünmenin bağlamsal olması fen bilimlerinde eleştirel düşünmeyi gerektiren veya teşvik eden görevlere, sorunlara ve konulara odaklanmayı sağlayacaktır (Bailin, 2002). Bunun yanı sıra öğretim programlarında eleştirel düşünme temalı etkinlik ve uygulamalara daha fazla yer vermesi öğrencilerin eleştirel düşünme becerisi düzeyini geliştirecektir (Yıldırım ve Şensoy, 2011).

Öz-yeterlik inancının ve eleştirel düşünmenin öğretim sürecinde birbirini etkileyen değişkenler olduğu ilgili literatür ile belirlenmiştir. Bu araştırma ortaokul öğrencilerinin fen öğrenmeye yönelik öz-yeterlik inançları ile eleştirel düşünme becerileri arasında ki ilişkiyi incelemekle birlikte öğrencilerin kitap okuma durumlarının bu değişkenler üzerinde nasıl bir etkiye sahip olduğunu ortaya koyması açısından önemlidir.

Bu amaç ışığında araştırmada aşağıdaki sorular için yanıt aranmıştır;

1. Ortaokul öğrencilerinin Eleştirel Düşünme Eğilim düzeyleri, eleştirel düşünme becerilerinin faktörleri olan Diyalektik Düşünme, Eğitim ve Analiz değişkenleri boyutunda hangi düzeydedir?

2. Ortaokul öğrencilerinin Fen Öğrenmeye Yönelik Öz-yeterlik Düzeyleri, öz-yeterliklerinin faktörleri olan Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik, Performansa Yönelik Öz-yeterlik ve Sonuca Yönelik Öz-yeterlikleri hangi düzeydedir?

3. Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri, eleştirel düşünme becerilerinin faktörleri olan Eğilim, Analiz ve Diyalektik Düşünmeleri ile kitap okuma durumları arasında istatistiki olarak anlamlı bir fark var mıdır?

4. Ortaokul öğrencilerinin Fen Öğrenmeye Yönelik Öz-yeterlikleri, öz-yeterliklerinin faktörleri olan Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik, Performansa Yönelik Öz-yeterlik ve Sonuca Yönelik Öz-yeterlikleri ile kitap okuma durumları arasında istatistiki olarak anlamlı bir fark var mıdır?

5. Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri ile ölçeğin alt boyutlarının, fen öğrenmeye yönelik öz-yeterliklerinin bir yordayıcısı mıdır?

Yöntem

Araştırmanın Modeli

Araştırmada ilişkisel tarama modeli kullanılmıştır. İlişkisel tarama modeli özel olaylar arasındaki ilişkiyi tanımlama ya da iki veya daha fazla değişken arasındaki birlikte değişimin birbirini üzerinde ki etkileri veya derecesi hakkında çıkarımda bulunmak amacıyla kullanılmaktadır (Karasar, 2000; Cohen vd., 2000).

Araştırmanın Örneklemi

Bu araştırmada örneklem grubunu bir devlet ortaokulunda bulunan 292 gönüllü öğrenci oluşturmaktadır. Araştırmadaki öğrencilerin demografik değişkenlerine dair bilgiler Tablo 1’de verilmiştir.

Tablo 1: Öğrencilerin Demografik Değişkenleri

Değişken		N	%
Cinsiyet	Kadın	162	55,5
	Erkek	130	44,5
Sınıf Düzeyi	5. sınıf	92	31,5
	6. sınıf	85	29,1
	7. sınıf	58	19,9
	8. sınıf	57	19,5
Kitap Okuma	Evet	213	92,9
	Hayır	79	27,1

Tablo 1’de demografik değişkenlere göre araştırmadaki öğrencilerin; 162’sinin (%55,5) kadın, 130’sinin (%44,5) erkek olduğu, 92’sinin (%31,5) 5. sınıf, 85’inin (%29,1) 6.sınıf, 58’inin (%19,9) 7.sınıf ve 57’sinin (%19,5) 8.sınıf düzeyine sahip oldukları, kitap okuma durumlarına göre dağılımları incelendiğinde ise öğrencilerin 213’ünün (%92,9) evet, 79’unun(%27,1) hayır şeklinde ifade ettikleri görülmüştür.

Veri Toplama Araçları

Araştırmada veri toplamak için; üç kısımdan oluşan bir anket hazırlanmıştır. Birinci kısımda sınıf, cinsiyet, kardeş sayısı, kitap okuma alışkanlığı, kişisel bilgisayar ve evde internet olup-olmadığı gibi demografik bilgiler yer almaktadır. İkinci kısımda, Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlik Ölçeği; üçüncü kısımda ise Ortaokul Öğrencileri İçin Eleştirel Düşünme Eğilimi Ölçeği bulunmaktadır.

Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlik Ölçeği; Yaman (2016) tarafından geliştirilmiş olup güvenirlik katsayısı cronbach $\alpha=.83$ olarak belirlenmiştir. 17 maddelik ölçek formu, “Her Zaman” ifadesinden “Hiç” ifadesine doğru 5, 4, 3, 2 ve 1 şeklinde puanlanmıştır. Ölçek 3 alt faktörden oluşmaktadır. Faktör 1 (1,2,3,4,5,6,8,9 ve 10) maddelerinden oluşmakla birlikte bu faktör bireysel başarıya yönelik öz-yeterlik alt boyutu ile öğrencilerin fen bilimleri dersinde kendilerine düşen sorumlulukları yapabilecekleri noktasındaki güven ve inançları olarak tanımlamaktadır. Faktör 2 (7,11,12,13 ve 14) maddelerinden oluşmakta ve performansa yönelik öz-yeterlik boyutu ise öğrencilerin fen bilimleri dersindeki performanslarına dair yeterlik inancı olarak tanımlanmaktadır. Faktör 3 (15,16 ve 17) maddelerinden oluşmakla birlikte, sonuca yönelik öz-yeterlik boyutu ile öğrencilerin kendi yeteneklerinin sonuçlarına yönelik öz-yeterliklerine dair yeterlik inançlarını tanımlamaktadır. Ölçeğin faktörleri için Cronbach’s Alpha güvenirlik değerleri sırası ile .82, .73 ve .66 olarak belirlenmiştir. Ölçeğin genelinden ve faktörlerinden elde edilecek yüksek puan ortaokul öğrencilerinin ilgili boyuta ilişkin öz-yeterliklerinin yüksek olduğu şeklinde kabul edilmektedir.

Ortaokul Öğrencileri İçin Eleştirel Düşünme Eğilimi Ölçeği; Yıldırım Döner ve Demir (2021) tarafından geliştirilen 21 madde ve 3 faktörlü ölçek formu, 5’li likert tarzında “Tamamen katılıyorum” ifadesinden “Tamamen katılmıyorum” ifadesine doğru 5, 4, 3, 2 ve 1 şeklinde puanlanmıştır. Ölçeğin 1. Faktörü (1,2,3,5,6,7,8,9,12,14,16 ve 17) maddelerinden oluşmakla birlikte diyalektik düşünme alt boyutu öğrencilerin zıt durumlardan yola çıkarak akıl yürütme ve kendi sentezine erişmedeki eğilimini ölçen ifadeleri içermektedir. 2. Faktör (18,19,20 ve 21) maddelerinden oluşmakta ve eğilim alt boyutu direkt olarak öğrencilerdeki eleştirel düşünme eğilimini ölçmeye yönelik ifadelerden oluşmaktadır. Son olarak 3. Faktör ise (4,10,11,13 ve 15) maddelerinde oluşmakla birlikte analiz alt ölçeği, öğrencilerdeki analiz ve değerlendirmeye yönelik eğilimi ölçmeye yönelik maddeleri içermektedir. Ölçeğin genelinin güvenirlik katsayısı .86 iken faktörlerin Cronbach’s Alpha güvenirlik katsayıları sırası ile .83;.80;.64 olarak tespit edilmiştir. Ölçekten elde edilecek yüksek puan ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimlerinin yüksek olduğu yönünde kabul edilmektedir.

Verilerin Analizi

Verilerin analiz için SPSS 22.0 programı kullanılmıştır. Skewness ve kurtosis değerlerine verilerin normal dağılıp-dağılmadığını belirlemek amacıyla bakılmıştır. Huck (2012)'e göre skewness değer aralığının +1 ve -1 ve kurtosis değer aralığının ise +2 ve -1 arasında olması verilerin normal dağılıma sahip olduğu şeklinde ifade edilmektedir. Araştırmanın 1. ve 2. alt problemlerinin analizlerinde tanımlayıcı istatistik olan Aritmetik ortalama ve Standart Sapma değerleri incelenmiştir. 3. ve 4. alt problemlerin analizinde İlişkisiz örneklem t-testi kullanılmakla birlikte gruplar arasında anlamlı fark bulunması durumunda etki büyüklüğü (η^2) değeri incelenmiştir. Cohen (1988)'e göre etki değerinin (η^2) aralığı 0.14; 0.06; 0.01 sırası ile büyük, orta ve küçük etki değeri olarak ifade edilmektedir. Son olarak araştırmanın 5. alt problemin analizinde ise Çoklu Doğrusal Regresyon Analizi tekniği kullanılmıştır.

Tablo 2: Verilere ait Skewness ve Kurtosis değerleri

Ölçek/Alt Ölçek	N	$\bar{X}$	Skewness	Kurtosis
Diyalektik Düşünme	292	4,18	-0,90	0,68
Eğilim	292	3,45	-0,50	-0,40
Analiz	292	3,18	-0,61	0,03
Eleştirel Düşünme (Toplam)	292	3,95	-0,62	0,46
Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik	292	3,84	-0,59	1,21
Performansa Yönelik Öz-yeterlik	292	3,84	-0,48	0,02
Sonuca Yönelik Öz-yeterlik	292	3,94	-0,92	1,09
Öz-yeterlik (Toplam)	292	3,86	-0,65	1,10

Tablo 2’de verilerin normal dağılım gösterip göstermediğinin anlaşılması için Skewness ve Kurtosis değerlerine bakılmıştır. Eleştirel düşünme ölçeğinin Skewness değeri (-0,62), **öz-yeterlik ölçeğinin** Skewness değeri (-0,65) olup; normal dağılım göstermektedir. Eleştirel düşünme ölçeğinin Kurtosis (0,46) değeri, **öz-yeterlik ölçeğinin** Kurtosis (1,10) değeri olup, normal dağılım göstermektedir.

Bulgular

Araştırmanın birinci alt amacı, “Ortaokul öğrencilerinin Eleştirel Düşünme Eğilim düzeyleri, eleştirel düşünme becerilerinin alt faktörleri olan Diyalektik Düşünme, Eğilim ve Analiz düzeyleri nedir?” şeklinde ifade edilmiştir. Ortaokul Öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri ölçeğinden elde ettikleri puanlara ilişkin ortalama ve standart sapma değerleri Tablo 3’de verilmiştir:

Tablo 3: Ortaokul Öğrencilerinin Eleştirel Düşünme Becerileri Ölçeğinden Elde Ettikleri Puanlara İlişkin Aritmetik Ortalama ve Standart Sapma Değerleri

Ölçek/Alt Ölçek	N	$\bar{X}$	Ss
Diyalektik Düşünme	292	4,18	0,56
Eğilim	292	3,45	1,05
Analiz	292	3,18	0,75
Eleştirel Düşünme(Toplam)	292	3,95	0,57

Tablo 3 incelendiğinde, Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri değerlerinin ortalamanın üstünde olduğu ($\bar{X} = 3,95$) ve eleştirel düşünme becerileri ölçeğinin 3,95 aritmetik ortalama değeri, ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri için “Katılıyorum” olarak ifade edilebilir. Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri ölçeğinin, “Diyalektik Düşünme” ($\bar{X} = 4,18$), “Eğilim” ($\bar{X} = 3,45$) ve “Analiz” ($\bar{X} = 3,18$) alt ölçeklerinden elde edilen puanlara bakıldığında bu alt ölçekler için ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri için “Katılıyorum” olarak ifade edilebilir.

Araştırmanın ikinci alt amacı, “Ortaokul öğrencilerinin Fen Öğrenmeye Yönelik Öz-yeterlik Düzeyleri, öz-yeterliklerinin alt faktörleri olan Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik, Performansa Yönelik Öz-yeterlik ve Sonuca Yönelik Öz-yeterlik düzeyleri nedir?” şeklinde ifade edilmiştir. Ortaokul Öğrencilerinin Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlik ölçeğinden elde ettikleri puanlara ilişkin ortalama ve standart sapma değerleri Tablo 4’de verilmiştir:

Tablo 4: Ortaokul Öğrencilerinin Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlik Ölçeğinden Elde Ettikleri Puanlara İlişkin Aritmetik Ortalama ve Standart Sapma Değerleri

Ölçek/Alt Ölçek	N	$\bar{X}$	Ss
Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik	292	3,84	0,60
Performansa Yönelik Öz-yeterlik	292	3,84	0,66
Sonuca Yönelik Öz-yeterlik	292	3,94	0,75
Öz-yeterlik (Toplam)	292	3,86	0,57

Tablo 4 incelendiğinde, Ortaokul öğrencilerinin Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlikleri genel olarak ortalamanın üstünde olduğu görülmektedir ($\bar{X} = 3,86$). Bu değerlere bakıldığında Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlik ölçeğinden elde edilen 3,86 aritmetik ortalama değeri ortaokul öğrencilerinin Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlikleri “Katılıyorum” olarak yorumlanmıştır. Ortaokul öğrencilerinin Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlik ölçeğinin puanlarına bakıldığında; “Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik” alt ölçeğinden Ortaokul öğrencilerinin elde ettikleri aritmetik

ortalama değeri 3,84, “Performansa Yönelik Öz-yeterlik” alt ölçeğinden ortaokul öğrencilerinin elde ettikleri aritmetik ortalama değeri 3,86 ve “Sonuca Yönelik Öz-yeterlik” alt ölçeğinden ortaokul öğrencilerinin elde ettikleri aritmetik ortalama değeri 3,94 olduğundan bu alt ölçekler için öğrencilerin öz-yeterlikleri “Katılıyorum” olarak ifade edilebilir.

Araştırmanın üçüncü alt amacı, “Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri, eleştirel düşünme becerilerinin alt faktörleri olan Eğilim, Analiz ve Diyalektik Düşünceleri ile kitap okuma durumları arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark var mıdır?” Ortaokul Öğrencileri için Tablo 5’de verilmiştir:

Tablo 5: Ortaokul Öğrencilerinin Kitap Okuma Durumlarına Göre Eleştirel Düşünme Becerileri ve Alt Ölçekleri için Bağımsız Örneklem t-testi Sonuçları

Ölçek/Alt Ölçek		N	$\bar{X}$	Ss	Sh	t	p	(η^2)
Diyalektik Düşünme	Kitap okuyan	213	4,29	0,54	0,03	5,60	0,000	0,097
	Kitap okumayan	79	3,89	0,54	0,06			
Eğilim	Kitap okuyan	213	3,54	1,06	0,07	2,49	0,013	0,021
	Kitap okumayan	79	3,20	1,00	0,11			
Analiz	Kitap okuyan	213	3,90	0,75	0,05	2,68	0,008	0,024
	Kitap okumayan	79	3,63	0,71	0,08			
Eleştirel Düşünme(Toplam)	Kitap okuyan	213	4,05	0,54	0,03	4,93	0,000	0,077
	Kitap okumayan	79	3,69	0,55	0,06			

Tablo 5 incelendiğinde, kitap okuyan ve okumayan öğrencilerin Diyalektik düşünme, Eğilim, Analiz ve Eleştirel Düşünme puanlarını mukayese etmek için bağımsız örneklem t-testi uygulanmıştır. Bu testin sonuçlarına göre Diyalektik düşünme için kitap okuyan ($\bar{X}$ = 4,29; Ss= 0,54) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}$ = 3,89; Ss= 0,54; t= 5,60; p= 0,00) elde edilen bu puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü (η^2 = 0,09) olup, orta etki değerinde bir değer olduğu görülmüştür. Kitap okuma davranışı Eğilim için kitap okuyan ($\bar{X}$ = 3,54; Ss= 1,06) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}$ = 3,20; Ss= 1,00; t= 2,49; p= 0,01) elde edilen puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü (η^2 = 0,02) olup, küçük etki değerinde olduğu görülmüştür. Analiz için kitap okuyan ($\bar{X}$ = 3,90; Ss= 0,75) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}$ = 3,63; Ss= 0,71; t= 2,68; p= 0,008) elde edilen bu puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü (η^2 = 0,02) olup, küçük etki değerinde olduğu görülmüştür. Eleştirel düşünme için kitap okuyan ($\bar{X}$ = 4,05; Ss= 0,54) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}$ = 3,69; Ss= 0,55; t= 4,93; p= 0,00) elde edilen puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü (η^2 = 0,07) olup, orta etki değerinde olduğu görülmüştür.

Araştırmanın dördüncü alt amacı, “Ortaokul öğrencilerinin fen öğrenmeye yönelik öz-yeterlikleri, öz-yeterliklerinin faktörleri olan Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik, Performansa Yönelik Öz-yeterlik ve Sonuca Yönelik Öz-yeterlikleri ile kitap okuma durumları arasında istatistiki olarak anlamlı bir fark var mıdır?” Ortaokul Öğrencileri için Tablo 6’da verilmiştir:

Tablo 6: Ortaokul Öğrencilerinin Kitap Okuma Durumlarına Göre Öz-yeterlik ve Alt Ölçekleri için Bağımsız Örneklem t-testi Sonuçları

Ölçek/Alt Ölçek		N	$\bar{X}$	Ss	Sh	t	p	(η^2)
Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik	Kitap okuyan	213	3,92	0,57	0,03	3,76	0,000	0,046
	Kitap okumayan	79	3,62	0,61	0,06			
Performansa Yönelik Öz-yeterlik	Kitap okuyan	213	3,93	0,62	0,04	4,14	0,000	0,055
	Kitap okumayan	79	3,58	0,69	0,07			
Sonuca Yönelik Öz-yeterlik	Kitap okuyan	213	4,06	0,73	0,05	4,27	0,000	0,059
	Kitap okumayan	79	3,64	0,72	0,08			
Öz-yeterlik (Toplam)	Kitap okuyan	213	3,95	0,53	0,03	4,55	0,000	0,066
	Kitap okumayan	79	3,61	0,59	0,06			

Tablo 6 incelendiğinde, kitap okuyan ve okumayan öğrencilerin Öz-yeterlik puanlarını mukayese etmek için bağımsız örneklem t-testi uygulanmıştır. Bu testin sonuçlarına göre Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik için kitap okuyan ($\bar{X}= 3,92$; Ss= 0,57) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}= 3,62$; Ss= 0,61; t= 3,76; p= 0,00) elde edilen puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü ($\eta^2= 0,04$) olup, küçük etki değerinde olduğu görülmüştür. Performansa Yönelik Öz-yeterlik için kitap okuyan ($\bar{X}= 3,93$; Ss= 0,62) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}= 3,58$; Ss= 0,69; t= 4,14; p= 0,00) elde edilen puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü ($\eta^2= 0,05$) olup, küçük etki değerinde olduğu görülmüştür. Sonuca Yönelik Öz-yeterlik için kitap okuyan ($\bar{X}= 3,95$; Ss= 0,53) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}= 3,61$; Ss= 0,59; t= 4,55; p= 0,00) elde edilen puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü ($\eta^2= 0,06$) olup, orta etki değerinde olduğu görülmüştür. Eleştirel düşünme için kitap okuyan ($\bar{X}= 3,95$; Ss= 0,53) ve kitap okumayan öğrencilerden ($\bar{X}= 3,61$; Ss= 0,59; t= 4,55; p= 0,00) elde edilen puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunmuştur. Etki büyüklüğü ($\eta^2= 0,06$) olup, orta etki değerinde olduğu görülmüştür.

Araştırmanın beşinci alt amacı, “Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri ile ölçeğin alt boyutlarının, fen öğrenmeye yönelik öz-yeterliklerinin bir yordayıcısı mıdır?” Ortaokul Öğrencileri için Tablo 7’de verilmiştir:

Tablo 7: Ortaokul Öğrencilerinin Eleştirel Düşünme Becerilerinin Fen Öğrenmeye yönelik Öz-yeterlikleri Değişkeninin Yordanmasına İlişkin Regresyon Analizi Sonuçları

Değişken	r	$\bar{X}$	Ss	B	Sh	B	t	p
Sabit	-	-	-	1,22	0,19	-	6,24	0,00
Diyalektik Düşünme	,620**	4,18	,569	0,58	0,06	0,58	9,79	0,00
Eğilim	,276**	3,45	1,057	0,02	0,02	0,04	0,88	0,37
Analiz	,404**	3,83	,754	0,02	0,04	0,03	0,50	0,61

F=60,84; p<0.00; R= 0,62; R²= 0,38

Tablo 7 incelendiğinde, öğrencilerin fen öğretimine yönelik öz-yeterlikleri ile eleştirel düşünme becerileri ölçeğinin Diyalektik Düşünme boyutu r=,620, Eğilim boyutu r=,276 ve Analiz boyutu r=,404 olduğu ve orta ve yüksek düzeyde bir korelasyon bulunduğu belirlenmiştir. Buna ek olarak, Diyalektik Düşünme, Eğilim, Analiz boyutları ortaokul öğrencilerinin fen öğrenmeye yönelik öz-yeterliklerini yordama gücü istatistiksel olarak anlamlı bulunmuştur (F=60,84; p<0.00). Eleştirel düşünmenin tüm boyutları birlikte, ortaokul öğrencilerinin fen öğrenmeye yönelik öz-yeterliklerinin %38'ini açıklamaktadır (R= 0,62; R²= 0,38).

Sonuç ve Tartışma

Bu çalışmada ortaokul öğrencilerinin fen bilimleri öz-yeterlikleri ve eleştirel düşünme becerilerine kitap okuma alışkanlıklarının etkisi incelenmiştir.

Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerileri incelendiğinde, ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerilerinin yüksek ve iyi düzeyde olduğu sonucu elde edilmiştir. Koçoğlu (2017), Köksal ve Çöğmen (2018), Koçoğlu ve Kanadlı (2019) ve Kandemir ve Eğmir (2020) ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerilerinin yüksek düzeyde olduğu yönünde bir sonuç elde etmişlerdir. Çalışmada öğrencilerin eleştirel düşünmenin Diyalektik düşünme boyutunda ölçeğin diğer boyutları olan eğilim ve analize göre daha yüksek bir düzeye sahip oldukları sonucu elde edilmiştir. Bu durumun nedeni olarak ise Diyalektik Düşünmenin diğer eğilimlerin aksine akıl yürüterek kişinin kendi sentezine ulaşmasını sağlamasından kaynaklandığı düşünülmektedir.

Ortaokul öğrencilerinin Fen Öğretimine Yönelik Öz-yeterlik düzeyleri incelendiğinde öz-yeterliklerinin yüksek ve iyi düzeyde olduğu sonucu elde edilmiştir. Yıldırım ve Karataş (2020), Aktamış vd. (2016), Koç ve Arslan (2017), Yılmaz vd. (2012) gibi diğer bazı araştırmacılar yaptıkları araştırmalarda öğrencilerin öz-yeterliğinin iyi düzeyde olduğu sonucuna ulaşmışlardır. Hong ve Lin (2013) fen öğrenimine daha fazla katılan öğrencilerin daha az katılanlara göre önemli ölçüde daha yüksek öz-yeterliğe sahip olduklarını ifade etmektedir.

Ortaokul öğrencilerinin kitap okuma durumlarına göre Diyalektik Düşünme, Eğilim, Analiz ve toplam Eleştirel Düşünme için kitap okuyan ve kitap okumayan öğrencilerin puan ortalamaları arasında istatistiki olarak anlamlı bir fark bulunduğu bu farkında ölçeğin genelinde ve boyutlarında kitap okuma alışkanlığı olan öğrenciler lehine olduğu sonucu elde edilmiştir. Çalışma sonucunda kitap okuyan öğrencilerin eleştirel düşünme becerilerinin yüksek olduğu sonucu elde edilmiştir. Buna ek olarak kitap okuma alışkanlığı olan öğrencilerin ölçeğin diyalektik düşünme, eğilim ve analiz boyutlarını da olumlu yönde geliştirdiği ve eleştirel düşünme lehine anlamlı bulunan farkın % 8'inin kitap okuma alışkanlığından, diyalektik düşünme boyutu için oluşan anlamlı farkın %10'nun kitap okuma alışkanlığından, eğilim boyutunun lehine anlamlı bulunan farkın %2'sinin kitap okuma alışkanlığından ve analiz boyutunun lehine anlamlı bulunan farkın %2'sinin ise kitap okuma alışkanlığından kaynaklandığı sonucu elde edilmiştir. Bu sonuca göre ortaokul öğrencilerinin kitap okuma alışkanlığına sahip olmalarının eleştirel düşünme becerilerini geliştirdiği yönünde bir sonuç elde edilmiştir.

Ortaokul öğrencilerinin kitap okuma durumlarına göre Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik, Performansa Yönelik Öz-yeterlik, Sonuca Yönelik Öz-yeterlik ve toplam Öz-yeterlik sonuçları için kitap okuyan ve kitap okumayan öğrencilerden elde edilen puanlar arasında istatistiksel olarak anlamlı bir fark bulunduğu belirlenmiştir. Çalışma sonucunda kitap okuyan öğrencilerin öz-yeterliklerinin yüksek olduğu sonucu elde edilmiştir. Buna ek olarak, kitap okuma alışkanlığına sahip olan öğrencilerin ölçeğin Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterlik, Performansa Yönelik Öz-yeterlik ve Sonuca Yönelik Öz-yeterlik boyutlarını da olumlu yönde geliştirdiği ve Öz-yeterliğin lehine anlamlı bulunan farkın % 6'sının kitap okuma alışkanlığından, Bireysel Başarıya Yönelik Öz-yeterliğin lehine anlamlı bulunan farkın % 4'ünün kitap okuma alışkanlığından, Performansa Yönelik Öz-yeterliğin lehine anlamlı bulunan farkın %5'inin kitap okuma alışkanlığından ve Sonuca Yönelik Öz-yeterliğin lehine anlamlı bulunan farkın %6'sının kitap okuma alışkanlığından kaynaklandığı sonucu elde edilmiştir. Oğuz ve Kutlu Kalender (2018) yaptıkları çalışmada öğrencilerin öz yeterlik algı düzeylerini ayda okudukları kitap sayısına göre incelemiş; akademik öz yeterlik ve toplam öz yeterlik algı puanlarında çok kitap okuyanlar lehine anlamlı bir fark bulunduğu sonucunu elde etmiştir. Bu sonuca göre kitap okuma alışkanlığının ortaokul öğrencilerinin bireysel başarıya yönelik öz-yeterliklerini geliştirmede önemli bir etkisi olduğu yönünde bir sonuç elde edilmiştir.

Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme becerilerinin fen öğrenmeye yönelik öz yeterlikleri değişkenini yordanmasına ilişkin regresyon analizi sonuçlarına göre; Diyalektik Düşünme, Eğilim, Analiz ve Eleştirel

Düşünme boyutlarının birlikte ortaokul öğrencilerinin fen öğrenmeye yönelik öz-yeterlik düzeyini yordama gücü istatistiksel olarak anlamlı bulunduğu ve eleştirel düşünmenin tüm boyutları birlikte fen öğrenmeye yönelik öz-yeterliklerinin %38'ini açıkladığı sonucu elde edilmiştir. Bu sonuca göre öğrencilerin eleştirel düşünme becerilerinden yola çıkarak fen öz-yeterlikleri hakkında çıkarımda bulunulabilmektedir. Rusmansyah vd. (2019) ile Saputro vd. (2020) yaptıkları çalışmada öğrencilerin eleştirel düşünme becerilerinin öz yeterliklerini etkili bir şekilde desteklediği sonucuna ulaşmışlardır. Buna ek olarak araştırma sonucunda, öğrencilerin fen bilimleri öz-yeterlikleri ile eleştirel düşünme becerilerinin geneli ve faktörleri arasında pozitif yönde anlamlı bir ilişki olduğu görülmektedir. Çiçek (2018) tarafından yapılan çalışmada yansıtıcı düşünme eğilimleri ile öğretmen öz yeterlikleri arasında orta düzeyde, pozitif ve anlamlı bir ilişki bulunduğu, Kural (2018)'e göre öğrencilerin eleştirel düşünme eğilimleri ile akademik öz yeterlikleri arasında orta düzeyde, pozitif ve anlamlı bir ilişki olduğu, Arslan ve Kutluca (2021)'e göre öğretmenlerin pedagojik inanç düzeyleri ve öz-yeterlik inançlarının yüksek olduğu, eleştirel düşünme tutumlarının ortalamanın üzerinde olduğu ve eleştirel düşünme tutumları ve öz-yeterlik inançlarının, pedagojik inanç ile orta düzeyde ve anlamlı bir ilişkisi olduğu ve son olarak Qiang vd. (2020)'e göre lise öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimlerinin yaratıcı benlik kavramları ve bilimsel yaratıcılıkları ile pozitif olarak ilişkili olduğu yönünde sonuçlar elde edilmiştir.

Araştırmadan elde edilen bulgular ve sonuçlar doğrultusunda yapılabilecek öneriler aşağıdaki şekilde sıralanabilir:

Eleştirel düşünme eğilimi ve fen bilimleri öz-yeterliğinin ilkökul ve lise öğrencileri ile öğretmen ve öğretmen adayları üzerindeki etkisinin incelendiği çalışmalar yapılabilir.

Öğrencilerin kitap okuma durumları daha detaylandırılarak sınıf seviyelerine göre eleştirel düşünme eğilimi ve fen öz-yeterliklerine etkisinin incelendiği çalışmalar yapılabilir.

Öğrencilerin okuduğu kitap türlerinin, eleştirel düşünme eğilimi ve fen öz-yeterliklerine etkisi çeşitli değişkenler açısından incelenebilir.

Kaynakça

- Akkoyunlu, B., Orhan, F., ve Umay, A. (2005). Bilgisayar öğretmenleri için” bilgisayar öğretmenliği öz-yeterlik ölçeği” geliştirme çalışması. *Hacettepe Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 29(29), 1-8.
- Aktamış, H. , Kiremit, H. Ö. ve Kubilay, M. (2016). Öğrencilerin öz-yeterlik inançlarının fen başarılarına ve demografik özelliklerine göre incelenmesi . *Adnan Menderes Üniversitesi Eğitim Fakültesi Eğitim Bilimleri Dergisi* , 7 (2), 1-10 .
- Alpaslan, M., ve Işık, H. (2016). Fizik öz-yeterlilik ölçeğinin geçerliliği ve güvenirliliği. *Mustafa Kemal Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Dergisi*, 13(33), 111-122.
- Argon, T., ve Selvi, Ç. (2011). Öğretmen adaylarının eleştirel düşünme eğilimleri ve çatışma yönetimi stilleri. *Journal Of Educational And Instructional Studies In The World(WJEIS)*, 1(1), 93-100.
- Arslan, A., ve Kutluca, A. Y. (2021). Okul öncesi öğretmenlerinin pedagojik inançlarının öz-yeterlik ve eleştirel düşünme açısından incelenmesi. *Trakya Eğitim Dergisi*.
- Arslan, T. (2016), Okul öncesi öğretmenlerinin öz yeterlik inançları ile eleştirel düşünme becerileri arasındaki ilişki, *Yayımlanmamış Yüksek Lisans Tezi*, Çanakkale On sekiz Mart Üniversitesi, Çanakkale.
- Aşkar, P. ve Umay, A. (2001). İlköğretim matematik öğretmen adaylarının bilgisayar özyeterlikleri, bilgisayara yönelik tutumları ve bilgisayarla zenginleştirilmiş öğrenme ortamlarına ilişkin algıları. *Bilgi Teknolojileri ve Öğretmen Eğitimi Derneği Uluslararası Konferansı'nda* (s. 2262-2263). Eğitimde Bilgisayarı Geliştirme Derneği (AACE).
- Ay, Ş. ve Akgöl, H. (2008). Eleştirel düşünme gücü ile cinsiyet, yaş ve sınıf düzeyi. *Kuramsal Eğitimbilim Dergisi*, 1(2), 65-75.
- Azar, A. (2010). Ortaöğretim fen bilimleri ve matematik öğretmeni adaylarının öz yeterlilik inançları. *Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Sosyal Bilimler Dergisi*, 6(12), 235-252.
- Bailin, S. (2002). Critical thinking and science education. *Science & Education*, 11(4), 361-375.
- Bamberger, R. (1990). *Okuma alışkanlığını geliştirme* (B. Çapar, Çev.). Ankara: Kültür Bakanlığı.
- Bandura, A. (2001). Social cognitive theory: An agentic perspective. *Annual Review of Psychology*, 52(1), 1-26.
- Bandura, A., (1994). “Self-Efficacy”. In V. S. Ramachauran (Ed.). *Encyclopedia of Human Behaviour*. 4: 71-81. New York: Akademik Press.

- Baydar, S. (2012), Öğrenme stillerine göre lise öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimi, *Yüksek Lisans Tezi*, Dokuz Eylül Üniversitesi, İzmir.
- Beyer, B. K. (1988). Developing a scope and sequence for thinking skills instruction. *Educational leadership*, 45(7), 26-30.
- Branch, J. B. (2000). The relationship among critical thinking, clinical decision-making, and clinical practical: A comparative study, *Doktora tezi*, University of Idaho, Idaho.
- Byerly, G., ve Batman, C. (2009). *Evaluation: Assessment of library instruction using performance based software*. A. Katsirikou, ve C. H. Skiadas içinde, Qualitative and Quantitative Methods in Libraries: Theory and Applications, 318-328.
- Cohen, J. (1988). *Statistical power analysis for the behavioral sciences*. (2nd edition). Hillsdale, NJ: Erlbaum.
- Cohen, L., Manion, L. ve Morrison, K. (2000). *Research methods in education* (5 b.). London: Routledge Falmer.
- Coşar, M., (2013). Problem temelli öğrenme ortamında bilgisayar programlama çalışmalarının akademik başarı, eleştirel düşünme eğilimi ve bilgisayara yönelik tutuma etkileri. *Yayımlanmamış Doktora Tezi*, Gazi Üniversitesi, Ankara.
- Cüceloğlu, D. (2001). İyi düşün doğru karar ver. (36 b.). İstanbul: Sistem Yayıncılık.
- Çiçek, O. (2018). *Beden eğitimi ve spor öğretmenliği bölümünde öğrenim gören öğretmen adaylarının yansıtıcı düşünme eğilimleri ile öğretmen öz-yeterlikleri arasındaki ilişki* (Master's thesis, Bartın Üniversitesi, Eğitim Bilimleri Enstitüsü).
- Eggen, P. ve Kauchak, D. (2001). *Educational psychology: Windows on classrooms*. New Jersey: Upper Saddle River.
- Ennis, R. H. (1996). Critical thinking dispositions: Their nature and assessability. *Informal logic*, 18(2), 65-182.
- Ennis, R. H. (1985). *Goals for critical thinking curriculum*. A. Costa içinde, Developing Minds (54-57). Alexandria, VA: Association for Supervision and Curriculum Development.
- Eryılmaz, S. ve Uluyol, Ç. (2015). 21. Yüzyıl becerileri ışığında fatih projesi değerlendirmesi. *Gazi Üniversitesi Gazi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 35(2), 209-229.
- Eşme, İ. (2004) Çağrılı Bildiri: “Fen Eğitiminde Sorunlar, *Fen Bilimleri Merkezi Eğitim Sempozyumları I*”, Ortaöğretimde Fen Bilimleri Eğitimi, İstanbul.
- Facione, P., Giancarlo, C., Facione, N. and Gainen, J. (1995). The disposition toward critical thinking. *Journal of General Education*, 44(1), 1–25.

- Felder, R. M., ve Brent, R. (1996). Navigating the bumpy road to student-centered instruction. *College teaching*, 44(2), 43-47.
- Gök, B. ve Erdoğan, T. (2011). Sınıf öğretmeni adaylarının yaratıcı düşünme düzeyleri ve eleştirel düşünme eğilimlerinin incelenmesi, *Ankara Üniversitesi Eğitim Bilimleri Fakültesi Dergisi*, 44(2), 29-51.
- Gökkuş, İ. ve Delican, B. (2016). Sınıf öğretmeni adaylarının eleştirel düşünme eğilimleri ve okuma alışkanlığına ilişkin tutumları . *Cumhuriyet Uluslararası Eğitim Dergisi* , 5 (1) , 10-28.
- Gülen, Ş. B. (2013). Ortaokul öğrencilerinin 21. yüzyıl öğrenme becerileri ve bilişim teknolojileri ile destekleme düzeylerinin cinsiyet ve sınıf seviyesine göre incelenmesi. *Yayımlanmamış Yüksek Lisans Tezi*, Gazi Üniversitesi, Eğitim Bilimleri Enstitüsü: Ankara.
- Hong, Z. R. ve Lin, H. S. (2013). Boys' and girls' involvement in science learning and their self-efficacy in Taiwan. *International Journal of Psychology*, 48(3), 272-284.
- Huck., S. W. (2012). *Reading statistics and research* (6th press). Boston: Pearson.
- İpşiroğlu, Z. (2004). *Eğitimde yeni arayışlar*. İstanbul: Adam Yayınları .
- Kandemir, S. N., ve Eğmir, E. (2020). Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimleri ile akademik özyeterlilikleri arasındaki ilişkinin çeşitli değişkenler açısından incelenmesi. *Uluslararası Türkçe Edebiyat Kültür Eğitim (TEKE) Dergisi*, 9(4), 1775-1798.
- Karasar, N. (2000). *Bilimsel araştırma yöntemi: Kavramlar, ilkeler, teknikler*. (35 b.). Ankara: Nobel Akademik Yayıncılık.
- Kılıç, B. (2011). İlköğretim sekizinci sınıf öğrencilerinin bilimsel yaratıcılık ve bilimsel tutum düzeylerinin belirlenmesi. *Yayımlanmamış Yüksek Lisans Tezi*, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Eğitim Bilimleri Enstitüsü: Eskişehir.
- Kirişçioglu, S., Başdaş, E. ve Başöncül, N. (2007). Eğitim fakültesinde öğrenim gören 1. ve 4. sınıf öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimlerinin incelenmesi. *16. Ulusal Eğitim Bilimleri Kongresi*: Ankara.
- Koç, C. ve Arslan, A. (2017). Ortaokul öğrencilerinin akademik öz yeterlik algıları ve okuma stratejileri bilişüstü farkındalıkları. *YYÜ Eğitim Fakültesi Dergisi*, 14(1), 745-778.
- Koçoğlu, A. ve Kanadlı, S. (2019). Ortaokul öğrencilerinin algıladığı özerklik desteği, eleştirel düşünme eğilimleri ve problem çözme becerileri arasındaki ilişkisinin incelenmesi. *Trakya Eğitim Dergisi*, C. IX, S. 1, S. 61-77.
- Koçoğlu, A., (2017). Fen bilimleri ve matematik öğretmenlerinin özerklik desteğinin ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimi ve problem çözme becerileri algısına katkısının incelenmesi. *Yayımlanmamış Yüksek Lisans Tezi*, Mersin Üniversitesi, Mersin.

- Koray, Ö. ve Çil, H. (2006). Öğretmen adaylarının öğrenme stilleri ve eleştirel düşünme becerileri arasındaki ilişkinin incelenmesi. *XV. Ulusal Eğitim Bilimleri Kongresi*: Muğla.
- Kökdemir, D. (2003). Belirsizlik durumlarında karar verme ve problem çözme. *Doktora tezi*, Ankara Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü: Ankara.
- Kökdemir, D. (2012). Üniversite eğitimi ve eleştirel düşünme. *PiVOLKA*, 21(7), 16-19.
- Köksal, N. ve S. Çöğmen, (2018). Ortaokul öğrencilerinin eleştirel düşünme ve iletişim becerileri. *Pamukkale Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, S. 44, s. 278-296.
- Kural, V., (2018). Beden eğitimi ve spor öğretmenliği bölümü öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimleri ile akademik öz-yeterliklerinin bazı değişkenlere göre incelenmesi. *Yayımlanmamış Yüksek Lisans Tezi*, Bartın Üniversitesi, Bartın.
- Kuzgun, Y. (2000). *Meslek danışmanlığı, uygulamalar kuramlar*. Nobel Yayın Dağıtım: Ankara.
- Leithwood, K. (2007). *What we know about educational leadership*. Intelligent Leadership içinde, Springer, Dordrecht: 41–66.
- Lipman, M. (1988). Critical thinking: what can it be? *Educational Leadership*, 46 (1), 38-43.
- Moon, J. A. (2008). *Critical thinking: An exploration of theory and practice*. New York, USA: Routledge Publishing.
- Oğuz, A., ve Kutlu Kalender, M. D. (2018). Ortaokul öğrencilerinin üst bilişsel farkındalıkları ile öz yeterlik algıları arasındaki ilişki. *Eğitimde Kuram ve Uygulama*, 14(2), 170-186.
- Oğuz, E. (2012). Öğretmen adaylarının değerleri ve değerleri eğitime yönelik öğrenci yuvası. *Kuram ve Uygulamada Eğitim Bilimleri* , 12 (2), 1309-1325.
- Özdemir, S. M. (2005). Üniversite öğrencilerinin eleştirel düşünme becerilerinin çeşitli değişkenler açısından değerlendirilmesi. *Türk Eğitim Bilimleri Dergisi*, 3(3), 297-316.
- Özden, Y. (2000). Öğrenme ve Öğretme. Ankara: Pegem Yayınları.
- Özden, Y. (2003). Öğrenme ve Öğretme. (5 b.). PegemA Yayıncılık: Ankara.
- Pajares, F. (1996). Self-efficacy beliefs in achievement settings. *Review of Educational Research*, 66(4), 543-578.
- Paul, R. (2005). The state of critical thinking today. *New directions for community colleges*, 1(130), 27-40.
- Qiang, R., Han, Q., Guo, Y., Bai, J. ve Karwowski, M. (2020). Critical thinking disposition and scientific creativity: The mediating role of creative self-efficacy. *The Journal of Creative Behavior*, 54(1), 90-99.

- Rusmansyah, R., Yuanita, L., Ibrahim, M., Isnawati, I. ve Prahani, B.K. (2019). Yenilikçi kimya öğrenme modeli: Kimya öğretmen adaylarının eleştirel düşünme becerisini ve öz yeterliklerini geliştirmek. *JOTSE: Teknoloji ve Bilim Eğitimi Dergisi*, 9 (1), 59-76.
- Saputro, A.D., Atun, S., Wilujeng, I., Ariyanto, A., ve Arifin, S. (2020). İlköğretim öğretmen adaylarının probleme dayalı öğrenmeyi kullanarak öz yeterliklerini ve eleştirel düşüncelerini artırma. *Avrupa Eğitim Araştırmaları Dergisi*, 9 (2), 765-773.
- Schmidt, S. ve Bednarz, N. (1997). Raisonements arithmétiques et algébriques dans un contexte de résolution de problèmes: Difficultés rencontrées par les futurs enseignants. *Educational Studies in Mathematics*, 32(2), 127-155.
- Schommer-Aikins, M. ve Hutter, R. (2002). Epistemological beliefs and thinking about everyday controversial issues. *The journal of Psychology*, 136(1), 5-20.
- Schunk, D. H. (2009). Öğrenme teorileri, eğitimsel bir bakışla. (Çev. Ed.: M. Şahin). Ankara: Nobel Yayın Dağıtım.
- Seferoğlu, S. S. ve Akbıyık, C. (2006). Eleştirel düşünme ve öğretimi. *Hacettepe Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 30(30), 193-200.
- Soylu, H. (2004). *Fen öğretiminde yeni yaklaşımlar: keşif yoluyla öğrenme*. (1 b.). Nobel yayın-dağıtım:Ankara.
- Şahin., S. M., Köğce, D., Özpınar, İ. ve Yenmez, A. A. (2014). Öğretim elemanlarının 21. yüzyıl öğrenen standartları ve yaşam boyu öğrenmeye ilişkin görüşleri. *Dicle Üniversitesi Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi Dergisi*, 1(22), 185-213.
- Tortop, H. S. ve Eker, C. (2014). Öğretmen adaylarının fen öğretimi öz-yeterlilikleri ile fen öğrenimi öz-düzenleme becerileri arasındaki ilişkinin incelenmesi . *Dicle Üniversitesi Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi Dergisi*, 1(22), 168-184.
- Tuan, H. L., Chin, C. C. ve Shieh, S. H. (2005). The development of a questionnaire to measure students' motivation towards science learning. *International Journal of Science Education*, 27(6), 639-654.
- Tümkiye, S. (2011). Fen bilimleri öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimleri ve öğrenme stillerinin incelenmesi, *Ahi Evran Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 12(3), 215-234.
- Türk Sanayicileri ve İşadamları Derneği, (TÜSİAD). (2012). 27 Kasım 2021 tarihinde <http://www.tusiad.org.tr/bilgi-merkezi/basin-odasi/basin-bultenleri> sayfasından erişilmiştir.
- Wang, S.L. ve Wu, P.Y. (2008). Web tabanlı öğrenmede geribildirim ve öz yeterliliğin rolü: Sosyal bilişsel bakış açısı. *Bilgisayarlar ve Eğitim*, 51 (4), 1589-1598.

- Yalınkılıç, K. (2007). Türkçe öğretmen adaylarının okumaya ilişkin tutum ve görüşleri. *Uluslararası Sosyal Araştırmalar Dergisi*, 1 (1), 225-241.
- Yaman, S. (2016). Ortaokul öğrencileri için fen öğrenmeye yönelik öz-yeterlik inanç ölçeği uyarlaması: Geçerlik ve güvenirlik çalışması. *İnönü Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 17(2), 123-140.
- Yazgan, Y. ve Bintaş, J. (2005). İlköğretim dördüncü ve beşinci sınıf öğrencilerinin problem çözme stratejilerini kullanabilme düzeyleri: Bir öğretim deneyi, *Hacettepe Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 28(28), 210-218.
- Yıldırım Döner, S. ve Demir, S. (2021). Ortaokul öğrencileri için eleştirel düşünme eğilimi ölçeğinin geliştirilmesi: Geçerlik ve güvenirlik çalışması. *Pamukkale Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 1(1), 1-30.
- Yıldırım, F. ve İlhan, İ. Ö. (2010). Genel öz yeterlilik ölçeği Türkçe formunun geçerlilik ve güvenirlik çalışması. *Türk Psikiyatri Dergisi*, 21(4), 301-308.
- Yıldırım, H. İ. ve Karataş, F. (2020). Ortaokul öğrencilerinin fen öğrenmeye yönelik öz-yeterlik inanç düzeyleri üzerine bir araştırma. *Türkiye Sosyal Araştırmalar Dergisi*, 24(1), 157-176.
- Yıldırım, H. İ. ve Şensoy, Ö. (2011). İlköğretim 7. sınıf öğrencilerinin eleştirel düşünme eğilimi üzerine eleştirel düşünme becerilerini temel alan fen öğretiminin etkisi . *Kastamonu Eğitim Dergisi*, 19(2) , 523-540
- Yılmaz, E., Yiğit, R. ve Kaşarcı, İ. (2012). İlköğretim öğrencilerinin öz yeterlilik düzeylerinin akademik başarı ve bazı değişkinler açısından incelenmesi. *Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*, 12(23), 371-388.
- Zhang, L. F. (2003). Contributions of thinking styles to critical thinking dispositions. *The Journal of Psychology*, 137(6), 517-544.
- Zimmerman, B. J. ve Cleary, T. J. (2006). Adolescents' development of personal agency: The role of self-efficacy beliefs and self-regulatory skill. *Self-Efficacy Beliefs of Adolescents*, 5(1), 45-69.