

Yeni Nesil Soğutucu Akışkanlar Olarak R1234yf ve R134a Moleküllerinin Kuantum Kimyasal Özellikleri ve Soğutma Çevrimindeki Performansları

Hacer GÜMÜŞ¹

Arzu KEVEN²

1 Doç. Hacer GÜMÜŞ – Kocaeli Üniversitesi, Gölcük Meslek Yüksekokulu, Otomotiv Teknolojisi Programı, Türkiye

Corresponding Author; : hacer.gumus@kocaeli.edu.tr Orcid :0000-0002-6486-0515

2 Dr. Arzu KEVEN – Kocaeli Üniversitesi, Gölcük Meslek Yüksekokulu, Otomotiv Teknolojisi Programı, Türkiye

Genel Yayın Yönetmeni / Editor in Chief • C. Cansın Selin Temana

Kapak & İç Tasarım / Cover & Interior Design • Serüven Yayınevi

Birinci Basım / First Edition • © Aralık 2025

ISBN • 978-625-5749-94-9

© 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: Kızılay Mah. Fevzi Çakmak 1. Sokak

Ümit Apt No: 22/A Çankaya/ANKARA

Telefon / Phone: 05437675765

web: www.seruyenyayinevi.com

e-mail: seruyenyayinevi@gmail.com

Baskı & Cilt / Printing & Volume

Sertifika / Certificate No: 47083

Yeni Nesil Soğutucu Akışkanlar Olarak R1234yf ve R134a Moleküllerinin Kuantum Kimyasal Özellikleri ve Soğutma Çevrimindeki Performansları

Hacer GÜMÜŞ¹

Arzu KEVEN²

1 Doç. Hacer GÜMÜŞ – Kocaeli Üniversitesi, Gölcük Meslek Yüksekokulu, Otomotiv Teknolojisi Programı, Türkiye

Corresponding Author; : hacer.gumus@kocaeli.edu.tr Orcid :0000-0002-6486-0515

2 Dr. Arzu KEVEN – Kocaeli Üniversitesi, Gölcük Meslek Yüksekokulu, Otomotiv Teknolojisi Programı, Türkiye

Kitap Tanıtımı / Genel Özet

Günümüzde enerji verimliliği ve çevresel sürdürülebilirlik, mühendislik biliminin öncelikli araştırma alanları arasında yer almaktadır. Özellikle otomotiv sektöründe kullanılan soğutucu akışkanların çevresel etkileri ve performansları, hem enerji tüketimi hem de küresel ısınma üzerindeki rolleri nedeniyle giderek daha fazla önem kazanmaktadır.

Kloroflorokarbon (CFC) ve hidrokloroflorokarbon (HCFC) soğutucuların ozon tüketme potansiyeli (ODP) sorunları, hidroflorokarbon (HFC) sınıfı soğutucuların kullanımının artmasına yol açmıştır. HFC'ler, ozon tabakasını etkilemese de, güçlü sera gazları oluşturmaktadır. Bu nedenle, düşük küresel ısınma potansiyeline (GWP) sahip üçüncü nesil soğutucular geliştirilmiştir.

Bu kitap, geleneksel HFC olan R134a ve çevre dostu alternatiflerden biri olan R1234yf soğutucu akışkanların moleküler ve termodinamik özelliklerini kapsamlı bir şekilde incelemektedir. Literatürden elde edilen bilgiler ve yapılan kuantum kimyasal hesaplamalar, moleküler düzeyden mühendislik ölçeğine kadar performans analizleriyle birleştirilmiştir.

Araç klimalarında kullanılan buhar sıkıştırmalı mekanik soğutma çevrimleri üzerinde yapılan analizlerde, COP, ekserji verimi, kompresör işi, kondenserden salınan ısı ve sıkıştırma oranı gibi parametreler detaylı şekilde değerlendirilmiştir. Ayrıca R134a ve R1234yf'nin moleküler yapısı, HOMO-LUMO enerji seviyeleri, dipol momentleri ve elektrostatik potansiyel haritaları kuantum

kimyasal hesaplamalarla incelenmiş, moleküler özelliklerin çevrim performansına etkileri ortaya konmuştur.

Kitap, araştırmacılara, öğrencilere ve ürün geliştirme ile endüstriyel uygulamalarla ilgilenen mühendislere faydalı bir kaynak olmayı hedeflemektedir. Elde edilen bulgular, gelecekteki soğutucu akışkan araştırmalarına, enerji sistemleri tasarımına ve sürdürülebilir otomotiv teknolojilerine ışık tutacak niteliktedir.

Önsöz

Enerji verimliliği ve çevresel sürdürülebilirlik, mühendislik biliminin güncel ve öncelikli araştırma alanları arasında yer almaktadır. Özellikle otomotiv sektöründe kullanılan soğutucu akışkanların performansı, hem enerji tüketimi hem de küresel ısınma üzerindeki etkileri nedeniyle giderek önem kazanmaktadır.

Kloroflorokarbon (CFC) ve hidrokloroflorokarbon (HCFC) sınıfı soğutucular, ozon tabakasına zarar verdikleri için tarihsel olarak geri plana itilmiş, yerine HFC sınıfı soğutucular (R134a) kullanılmıştır. Ancak HFC' ler, ozon tabakasına zarar vermemelerine rağmen güçlü sera gazı oluşturmaktadır. Bu nedenle, R1234yf gibi düşük GWP' ye sahip yeni nesil soğutucular geliştirilmiştir.

Bu kitap, R134a ve R1234yf'nin moleküler ve termodinamik özelliklerini, literatür verileri ve yapılan yeni analizlerle bütüncül bir şekilde incelemektedir. Moleküler düzeyden mühendislik ölçeğine geçiş yaparak, soğutucu seçiminde bilimsel temelli karar mekanizmalarını ortaya koymayı amaçlamaktadır.

Bu kitabın hazırlanmasında desteklerini esirgemeyen ailelerimize ve bilgi ve deneyimleriyle yolumuzu aydınlatan hocalarımıza teşekkürlerimizi sunarız.

Bu çalışma, akademik bilgi paylaşımına katkıda bulunmakla kalmayıp, sürdürülebilir mühendislik uygulamalarına yönelik rehber niteliği taşıyacak ve akademik yükselmemize de destek sağlayacaktır.

*Yeni Nesil Soğutucu Akışkanlar Olarak R1234yf ve R134a Moleküllerinin Kuantum Kimyasal
Özellikleri ve Soğutma Çevrimindeki Performansları*

**Bu kitap, Doç. Hacer GÜMÜŞ ve Dr. Arzu KEVEN tarafından
hazırlanmıştır.**

Teşekkür

Bu kitabın hazırlanmasında emeği geçen herkese teşekkür ederiz. Sabır ve destekleriyle motivasyonumuzu artıran ailelerimize, bilgi ve deneyimleriyle yolumuzu aydınlatan hocalarımıza teşekkürlerimizi sunarız. Çalışmanın, araştırmacılara, öğrencilere ve ürün geliştirme ile endüstriyel uygulamalarla ilgilenen mühendislere faydalı bir kaynak olmasını diliyoruz.

Bölüm 1: Giriş

1.1 Enerji Verimliliği ve Çevresel Sürdürülebilirlik

Otomotiv sektörü, modern ekonomik ve teknolojik gelişimin en önemli bileşenlerinden biri olmasının yanı sıra, küresel enerji tüketimi ve karbon salınımında da belirleyici bir role sahiptir. Araçların içten yanmalı motorlardan elektrikli ve hibrit sistemlere geçiş süreci, enerji verimliliği ve çevresel sürdürülebilirlik hedeflerini sektör için kritik hâle getirmiştir. Bu bağlamda, otomotiv iklimlendirme ve soğutma sistemlerinin performansı, yalnızca araç iç ortam konforu açısından değil, aynı zamanda aracın toplam enerji tüketimi ve sera gazı emisyonları üzerinde doğrudan etkilidir [1].

Klasik araç klima sistemlerinde kullanılan soğutucular, yüksek enerji tüketimine yol açarak aracın karbon ayak izini artırmaktadır. Özellikle dur-kalk şehir trafiği ve uzun mesafe kullanımlarında klima sistemi enerji tüketiminde önemli bir paya sahiptir. Bu nedenle, otomotiv mühendisliği, enerji verimliliğini optimize etmek ve çevresel etkileri azaltmak amacıyla soğutma çevrimlerini moleküler ve termodinamik düzeyde detaylı şekilde analiz etmektedir [2].

Son yıllarda yürürlüğe giren Glasgow İklim Anlaşması (2021), Avrupa Birliği çevre yönetmelikleri ve diğer uluslararası düzenlemeler, otomotiv sektöründe kullanılan soğutucu akışkanların çevresel etkilerini minimize etmeyi zorunlu kılmıştır [3]. Bu düzenlemeler, özellikle HFC sınıfı soğutucuların kullanımını sınırlandırmakta ve düşük küresel ısınma potansiyeline (GWP) sahip alternatiflerin benimsenmesini teşvik etmektedir. Dolayısıyla,

R1234yf gibi çevre dostu üçüncü nesil soğutucular, hem regülasyon uyumu hem de enerji verimliliği açısından kritik bir öneme sahiptir [4].

1.2 Soğutucu Akışkanların Tarihçesi ve Çevresel Etkileri

1.2.1 CFC ve HCFC Soğutucular

Soğutucu akışkan teknolojisinin gelişimi, otomotiv ve soğutma endüstrisinin tarihsel süreciyle doğrudan ilişkilidir. 20. yüzyılın ortalarında yaygın olarak kullanılan kloroflorokarbonlar (CFC) ve hidrokloroflorokarbonlar (HCFC), özellikle soğutma ve klima sistemlerinde yüksek verimlilik sağlayan kimyasal bileşikler olarak tercih edilmiştir. Bu bileşikler, yüksek stabiliteleri, güvenli kullanımları ve termodinamik performansları ile teknolojik bir ilerleme sağlamıştır [5].

Bilimsel araştırmalar, CFC ve HCFC'lerin atmosferde belirli kimyasal reaksiyonlara girerek ozon tabakasında değişiklikler yaratabileceğini ortaya koymuştur. Bu nedenle Montreal Protokolü (1987) yürürlüğe konmuş ve kullanım kısıtlamaları uygulanmıştır [6]. Bu süreç, CFC ve HCFC'lerin teknolojik katkılarını korurken, çevresel sürdürülebilirlik için yeni alternatiflerin geliştirilmesine olanak sağlamıştır.

CFC ve HCFC'ler yalnızca geçmişin soğutucu teknolojileri değil, aynı zamanda modern çevre dostu soğutucuların geliştirilmesinde bilimsel bir referans noktası olarak değerlendirilmelidir. Araştırmalar, termodinamik avantajları ve

moleküler özellikleri korurken çevresel etkileri minimize eden alternatiflerin önemini ortaya koymaktadır [7].

1.2.2 HFC Soğutucular ve Düşük ODP Çözümleri

CFC ve HCFC'lerin kısıtlanmasının ardından, hidroflorokarbonlar (HFC) sınıfı soğutucular, ozon tüketme potansiyeli (ODP) olmaması sayesinde öne çıkmıştır. HFC'ler, çevresel etki açısından CFC/HCFC'lere kıyasla avantajlı bir çözüm sunmuş ve R134a gibi soğutucular, hem araç hem de ev tipi soğutma sistemlerinde standart hâle gelmiştir [8].

Bununla birlikte, HFC sınıfı soğutucuların küresel ısınma potansiyeli (GWP) nispeten yüksek olabilmektedir. Kyoto Protokolü ve sonrasında yürürlüğe giren çevresel regülasyonlar, HFC emisyonlarının azaltılmasını zorunlu kılmıştır. Burada önemli nokta, HFC'lerin çevreye tamamen zararlı olarak sunulmaması, ancak sera gazı etkisi nedeniyle yönetim ve optimizasyon gerektirdiğinin vurgulanmasıdır [9].

1.2.3 Üçüncü Nesil Çevre Dostu Soğutucular: R1234yf ve Alternatifler

HFC sınıfının sunduğu avantajlar ve sınırlamalar, araştırmacıları düşük GWP ve sıfır ODP değerine sahip üçüncü nesil soğutucular geliştirmeye yöneltmiştir. R1234yf, flor, karbon ve hidrojen atomları içeren bir hidroflorolefin olarak, atmosferik ömrü kısa, GWP'si CO₂'ye kıyasla çok düşük ve toksikolojik olarak güvenli bir alternatiftir [10].

Bu yeni nesil soğutucuların temel hedefi, enerji verimliliğini korurken çevresel etkileri minimize etmektir. R1234yf ve benzeri bileşikler, mevcut otomotiv klima sistemlerine entegre edilebilmekte ve termodinamik açıdan R134a ile benzer performans göstermektedir. Ayrıca, doğal soğutucular (R744/CO₂) ve düşük GWP'ye sahip diğer HFC'ler (R152a) ile karşılaştırıldığında, R1234yf uygulama kolaylığı ve regülasyon uyumu açısından öne çıkmaktadır [11,12].

1.3 Otomotiv Klima Sistemlerinde Soğutucu Akışkan Performansı

Araç klima sistemleri genellikle buhar sıkıştırmalı mekanik çevrim prensibiyle çalışır. Kompresörde basınçlandırılan soğutucu akışkan, kondenserde çevreye ısı vererek yoğunlaşır; sıvı hale geçen akışkan kısılma vanasından buharlaştırıcıya geçer ve ortamdan ısı alarak soğutma sağlar. Bu döngü sürekli olarak tekrar eder [13].

Araç klima sistemlerinde kullanılan soğutucuların performansı, COP (performans katsayısı), ekserji verimi, kompresör işi, kondenser ve evaporatör ısı transferi gibi parametrelerle değerlendirilir. Literatür çalışmaları, R1234yf ve R134a'nın farklı evaporatör/kondenser sıcaklıkları ve kompresör basma oranları altında performanslarını karşılaştırmıştır. Örneğin, R1234yf'nin COP değeri başlangıçta R134a'ya göre daha düşük olsa da, sistem ayarları ve kontrol vanası optimizasyonu ile performans farkı minimize edilebilmektedir [14,15].

1.4 Literatürdeki Önceki Çalışmalar

R1234yf ve R134a soğutucu akışkanlarının otomotiv klima sistemlerindeki performansı üzerine yapılan literatür çalışmaları, hem deneysel hem de teorik analizleri içermektedir. Bu çalışmalar, soğutucu akışkanların termodinamik ve taşınım özelliklerinin yanı sıra enerji verimliliği ve çevresel etkilerini karşılaştırmalı olarak değerlendirmektedir.

Markus Richter ve arkadaşları [16], R1234yf'nin (2,3,3,3-tetrafluoropropene, MW 114.04116 g/mol) termodinamik özelliklerini kapsamlı olarak incelemiş ve buhar basıncı ile yoğunluk verilerini kullanarak sıcaklık aralığı 220–410 K ve basınç aralığı 0–30 MPa için geçerli bir denklemsel model önermiştir. Bu çalışmada, entalpi ve entropi değerleri 200 kJ/kg ve 1 kJ/kg·K referanslı olarak verilmiştir.

R1234yf'nin viskozitesi üzerine yapılan çalışmalar Huber ve Assael [17] tarafından detaylandırılmıştır. Bu çalışmada, 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene'nin viskozite verileri, trans-1,3,3,3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)) ile karşılaştırmalı olarak incelenmiş ve doğruluk açısından geniş bir sıcaklık aralığında geçerli korelasyonlar geliştirilmiştir.

Isı iletkenliği (thermal conductivity) ile ilgili olarak Perkins ve Huber [18], R1234yf ve R1234ze(E) için ölçüm ve korelasyon çalışmalarını sunmuş, kritik bölgede katkıların uygulanmadığını belirtmişlerdir. Yüzey gerilimi verileri ise Mulero ve arkadaşları [19] tarafından önerilen korelasyonlarla sağlanmıştır.

R134a için termodinamik özellikler, Tillner-Roth ve Baehr [20] tarafından geliştirilen temel denklemlerle sağlanmıştır. Bu model, sıcaklık aralığı 170–455 K ve basınç aralığı 0–70 MPa arasında geçerlidir. Entalpi ve entropi değerleri varsayılan olarak -40°C’te 0 kJ/kg ve 0 kJ/kg·K olacak şekilde referanslanmıştır. Viskozite ve sıvı faz ısı iletkenliği verileri, Huber, Laesecke ve Perkins [21] ile Assael ve arkadaşları [22] tarafından geliştirilmiş korelasyonlarla desteklenmiştir. Gaz fazı viskozite ve ısı iletkenliği, 230–475 K aralığında uygulanabilir.

Bu literatür verileri, R1234yf’nin termodinamik ve taşınım özelliklerinin R134a ile karşılaştırılmasına olanak sağlamış ve araç klima sistemleri için uygunluğunu detaylı şekilde ortaya koymuştur. Özellikle, düşük GWP, sıfır ODP ve R134a’ya benzer performans parametreleri, R1234yf’nin çevresel ve enerji verimliliği açısından avantajlı bir seçenek olduğunu göstermektedir [23].

1.5 Kitabın Amacı ve Kapsamı

Bu kitap, R134a ve R1234yf soğutucu akışkanlarının moleküler ve termodinamik özelliklerini kapsamlı bir şekilde inceleyerek; otomotiv klima sistemlerindeki performans farklarını ve çevresel etkilerini detaylı biçimde sunmayı hedeflemektedir; temel hedef, yalnızca mevcut literatürü derlemek değil, aynı zamanda kuantum kimya, termodinamik analiz ve mühendislik perspektiflerini birleştirerek sistematik ve bütüncül bir değerlendirme sağlamaktır; kitap, bu bağlamda hem teorik hem de uygulamalı mühendislik alanında özgün veri ve analizler sunmaktadır.

Moleküler düzey analiz, R1234yf ve R134a'nın moleküler yapıları, bağ uzunlukları, açılar, elektron yoğunluğu dağılımları ve elektrostatik potansiyel haritaları, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) ve Gaussian yazılımı kullanılarak detaylı şekilde incelenmiştir. Bu çalışmalar, moleküler özellikler ile makroskopik performans arasındaki ilişkiyi ortaya koymakta ve mühendislik tasarımında temel bir veri seti sağlamaktadır. Ayrıca analizler, yeni nesil çevre dostu soğutucuların moleküler tasarımı için bilimsel bir referans sunmaktadır [24–25]. Termodinamik performans değerlendirmesi kapsamında, araç klima sistemlerinde soğutucu akışkanların performans parametreleri, COP (Coefficient of Performance), ekserji verimi, kompresör işi, kondenser ve evaporatör ısı transferi gibi mühendislik ölçütleri kullanılarak karşılaştırılmıştır. Farklı evaporatör ve kondenser sıcaklıkları ile kompresör basma oranları altında yapılan analizler, R1234yf'nin R134a'ya göre enerji verimliliği açısından benzer performans gösterdiğini ortaya koymakla birlikte, bazı işletme koşullarında optimize edilmesi gerektiğini göstermektedir. Bu değerlendirmeler, sistem performansının çevresel etkilerle olan ilişkisini de ortaya koymaktadır [26]. Kitap, düşük küresel ısınma potansiyeli (GWP) ve sıfır ozon tüketme potansiyeline (ODP) sahip üçüncü nesil soğutucuların önemini vurgulamaktadır. R1234yf, 100 yıllık referans zaman diliminde CO₂'ye kıyasla GWP < 1 ve ODP = 0 değerleri ile hem Avrupa Birliği hem de uluslararası çevre düzenlemelerine uygun bir çözüm sunmaktadır.

Bu bağlamda kitap, soğutucu seçiminde regülasyon uyumunu dikkate alan mühendislik karar süreçlerine de rehberlik etmektedir. Kitap, akademik araştırmacılar, doktora ve doçentlik çalışmalarına

katkı sağlayacak şekilde orijinal veri ve analizler sunmakta, aynı zamanda otomotiv sektöründe soğutucu sistemler geliştiren mühendisler için uygulamalı bir rehber niteliği taşımaktadır. Moleküler kimya ve termodinamik analizlerin entegrasyonu, yeni nesil soğutucu akışkanların tasarım ve seçiminde bilimsel temelli karar mekanizmalarını desteklemekte ve sürdürülebilir otomotiv teknolojilerinin geliştirilmesine katkı sağlamaktadır [27].

Çalışma, teorik ve deneysel verileri birleştirerek akademik kariyer açısından doçentlik ve doktora süreçlerinde kullanılabilecek orijinal ve güncel veri setleri sunmaktadır. Ayrıca kitap, araştırmacılar, öğrenciler ve endüstride ürün geliştirme ile ilgilenen mühendisler için çok yönlü bir kaynak olarak tasarlanmıştır. Elde edilen bulgular, otomotiv iklimlendirme sistemlerinin tasarımında hem enerji verimliliği hem de çevresel sürdürülebilirlik açısından önemli bir rehber niteliğindedir. Kitap, moleküler yapı analizi, termodinamik performans değerlendirmesi ve çevresel etkileri tek bir çerçevede birleştirerek araştırmacılara, mühendislik tasarımcılarına ve politika yapıcılara bilimsel temelli bir perspektif sunmaktadır. Böylece yeni nesil soğutucu akışkanların geliştirilmesi, seçimi ve optimize edilmesi süreçlerinde kapsamlı bir kaynak işlevi görmektedir. Elde edilen veriler, ileri düzey araştırmalar ve endüstriyel uygulamalar için temel bir referans olarak kullanılabilir.

Sonuç olarak, bu kitap R1234yf ve R134a soğutucu akışkanlarının moleküler, termodinamik ve çevresel performanslarını detaylı şekilde ele almakta, modern otomotiv klima sistemlerinin enerji verimliliği ve çevresel sürdürülebilirlik bağlamında bilimsel ve uygulamalı bir rehber sunmaktadır. Çalışma,

yeni nesil çevre dostu soğutucuların tasarım ve değerlendirme süreçlerine ışık tutarak, akademik ve endüstriyel kullanıcılar için değerli bir kaynak oluşturmaktadır [28].

Bölüm 2: Teorik Temeller ve Yöntemler

2.1 Soğutucu Akışkanlar: R134a ve R1234yf

R134a (1,1,1,2-tetrafluoroethane) ve R1234yf (2,3,3,3-tetrafluoropropene), modern otomotiv soğutma sistemlerinde yaygın olarak kullanılan iki önemli soğutucu akışkandır. R134a, uzun yıllar boyunca endüstri standardı olarak kabul edilmiş olsa da, yüksek küresel ısınma potansiyeli ($GWP \approx 1300$) nedeniyle çevresel regülasyonlarla kısıtlanmıştır. Buna karşın, R1234yf düşük GWP (<1) ve sıfır ozon tüketme potansiyeli ($ODP = 0$) ile öne çıkmaktadır [29].

Bu iki akışkanın fiziksel özellikleri birbirine oldukça benzerdir; bu durum, mevcut sistemlerde R134a'dan R1234yf'ye geçişi mühendislik açısından kolaylaştırmaktadır [30]. Termodinamik olarak, R1234yf'nin buhar basıncı, yoğunluk, entalpi ve entropi değerleri R134a'ya oldukça yakın olup, kritik sıcaklıkları sırasıyla 367,85 K ve 374,18 K'dır [31].

Ayrıca, R1234yf'nin viskozite ve ısı iletkenliği değerleri Huber ve Assael tarafından deneysel olarak belirlenmiş, geniş sıcaklık aralığında korelasyon modelleri geliştirilmiştir [32,33]. Yüzey gerilimi, difüzyon katsayısı ve faz denge verileri ise Mulero ve arkadaşları tarafından 2012 yılında önerilen modelle tanımlanmıştır [34]. Bu deneysel veriler, REFPROP 10.0 ve CoolProp veri tabanları ile doğrulanmış, mühendislik hesaplamalarında kullanılan termofiziksel veri setlerinin standardizasyonuna katkı sağlamıştır [35].

2.2 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) ve Kuantum Kimyasal Hesaplamalar

R134a ve R1234yf moleküllerinin kuantum kimyasal özelliklerinin belirlenmesinde yapılan hesaplamalar Gaussian 09W yazılımı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarda, moleküllerin optimize edilmiş geometrileri ile elektronik yapı verilerini elde etmek amacıyla Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) yaklaşımı tercih edilmiştir. DFT, elektron yoğunluğu dağılımını temel alarak sistemin toplam enerjisini hesaplayan; yüksek doğruluk ile makul hesaplama maliyeti sunan bir kuantum kimyasal yöntemdir [36].

Bu çalışmada DFT hesaplamaları için B3LYP değiş-tokuş-korelasyon fonksiyoneli ve 6-311++G(d,p) temel seti kullanılmıştır [37]. Ayrıca moleküllerin reaktif bölgelerini tanımlamak amacıyla Elektrostatik Potansiyel (MEP) yüzeyleri oluşturulmuş; Mulliken ve NBO (Natural Bond Orbital) analizleri ile yük dağılımı ve bağ içi etkileşimlere ilişkin ayrıntılı bilgiler elde edilmiştir [38-40].

2.3 Termodinamik Performans Analizleri

Otomotiv klima sistemleri, enerji dönüşümünü verimli biçimde gerçekleştirmek amacıyla buhar sıkıştırma çevrim (Vapor Compression Cycle, VCC) prensibine dayanmaktadır. Bu sistemlerde soğutucu akışkanın termodinamik özellikleri, çevrimin genel verimi üzerinde belirleyici bir etkiye sahiptir. Soğutucu, çevrim boyunca sırasıyla kompresör, kondenser, genleşme vanası ve evaporatör bileşenlerinden geçer; bu dört ana eleman, ısıyı bir ortamdan diğerine taşımak için birlikte çalışır.

Çevrimdeki performans; soğutucu tipine, evaporatör ve kondenser sıcaklıklarına, basma oranına (compression ratio), kompresör işi (W_{nomp}) ve ekserji yıkımına bağlı olarak değişmektedir [43,44]. Özellikle R134a ve R1234yf gibi otomotiv sektöründe yaygın kullanılan soğutucular arasında yapılan karşılaştırmalar, yeni nesil düşük GWP değerine sahip akışkanların çevresel açıdan daha avantajlı olduğunu, ancak belirli çalışma koşullarında performans açısından bazı dezavantajlar gösterebildiğini ortaya koymaktadır.

Termodinamik performans analizi, çevrimin enerji ve ekserji temelli incelenmesini içerir; bu analiz, sistemin verimliliğini belirlemenin yanı sıra enerji kayıplarının hangi bileşenlerde yoğunlaştığını da göstermektedir. Enerji analizi, çevrimin birinci yasa verimliliğini, ekserji analizi ise ikinci yasa (tersinmezlik temelli) verimliliğini ortaya koyar. Böylece, yalnızca enerji dengesi değil, aynı zamanda çevrimin sürdürülebilirlik performansı da değerlendirilebilir.

Soğutucu akışkanların seçimi, çevrimdeki ısı geçişi, basınç düşümü, yoğunlaşma ve buharlaşma entalpileri gibi birçok termodinamik özelliği etkiler. Örneğin, R1234yf'nin özgül entalpisi R134a'ya göre daha düşük olduğu için aynı soğutma kapasitesine ulaşmak için daha yüksek kütleli debi gerekebilir; bu durum, kompresör işinde artışa ve COP değerinde azalmaya neden olabilir. Buna karşın, sistem geometrisinin optimize edilmesi ve ısı değiştirici yüzey alanlarının artırılmasıyla bu fark önemli ölçüde azaltılabilmektedir.

Ekserji temelli performans değerlendirmesi, çevrimin yalnızca enerji girdisi ve çıktısı açısından değil, aynı zamanda tersinmezlik kaynakları açısından da incelenmesini sağlar. Kompresör, kondenser, evaporatör ve genişleme vanasında oluşan ekserji yıkımları, sistemin toplam ekserji kaybını belirler. Yapılan çalışmalar, ekserji yıkımının genellikle en fazla kompresörde gerçekleştiğini, bunu sırasıyla kondenser ve evaporatörün izlediğini göstermektedir. Bu sonuçlar, soğutucu seçimi ve çevrim optimizasyonu süreçlerinde önemli bir yol gösterici olarak değerlendirilmektedir.

Sonuç olarak, R1234yf'nin düşük GWP değeri, zehirsizliği, kimyasal kararlılığı ve benzer termodinamik karakteristiği sayesinde, R134a'nın yerine geçebilecek en güçlü adaylardan biri olduğu birçok çalışmada belirtilmiştir. Ancak, optimum çevrim performansının sağlanabilmesi için R1234yf kullanılan sistemlerde kompresör tasarımı, yağ tipi uyumu ve ısı değiştirici optimizasyonu gibi mühendislik parametrelerinin yeniden düzenlenmesi gerekmektedir. Bu nedenle, teorik analizlerin deneysel verilerle desteklenmesi ve ekserji temelli sistem iyileştirme yaklaşımlarının geliştirilmesi, gelecekteki çalışmalarda büyük önem taşımaktadır [41].

2.3.1 Çevrim Performans Katsayısı (COP)

Çevrim performans katsayısı (Coefficient of Performance, COP), soğutma etkisinin kompresör işine oranı olarak tanımlanır:

$$\text{COP} = \frac{Q_E}{W_{\text{comp}}}$$

COP değeri, enerji verimliliğini doğrudan temsil eder. R1234yf'nin COP değeri, bazı koşullarda R134a'dan %5–10 oranında daha düşük olsa da sistem ayarları optimize edildiğinde fark azalmaktadır [42].

2.3.2 Kompresör İşi (W_{comp})

Kompresör işi, bir buhar sıkıştırmalı çevrimin enerji tüketimini ve dolayısıyla sistem verimliliğini belirleyen en kritik parametrelerden biridir. Kompresör, evaporatörden gelen düşük basınçlı ve düşük sıcaklıklı buharı alarak kondenser basıncına yükseltir. Bu işlem sırasında çevrime enerji transfer edilir ve kompresör işi, çevrimdeki net enerji maliyetini doğrudan etkiler.

Kompresör işi, soğutucu akışkanın kütle debisi ve giriş-çıkış entalpi farkıyla hesaplanır:

$$W_{comp} = \dot{m}(h_2 - h_1)$$

Burada:

- $\dot{m} \rightarrow$ akışkanın kütle debisi (kg/s),
- $h_1 \rightarrow$ kompresör giriş entalpisi (kJ/kg),
- $h_2 \rightarrow$ kompresör çıkış entalpisi (kJ/kg) .

Farklı soğutucular, kompresör işine farklı etkiler yapar. R134a, standart yoğunluk ve termodinamik özelliklere sahip olduğundan, kompresör işi evaporatör ve kondenser basınç farkına bağlı olarak nispeten stabil kalır. Buna karşın, R1234yf, R134a'ya kıyasla daha düşük yoğunluk ve hafif farklı termodinamik davranış sergiler; bu durum, aynı evaporatör ve kondenser koşullarında kompresörün

enerji tüketimini hafifçe artırabilir. Ancak sistem tasarımındaki optimizasyonlarla, örneğin kompresör boyutu, basma oranı ve debi kontrolü ile bu fark minimize edilebilir. Kompresör işindeki artış, çevrimde tüketilen toplam enerjiyi yükselterek COP değerini düşürür ve aynı zamanda sistemde termodinamik kayıpların artmasına neden olarak ekserji verimini olumsuz etkiler. Bu nedenle kompresör işi analizleri, hem enerji hem de ekserji verimliliği açısından kritik öneme sahiptir. Alternatif soğutucularla yapılan çalışmalarda, kompresör işindeki farklılık sistem tasarımında yeniden değerlendirilmelidir. R1234yf'nin çevresel avantajları, hafif artan kompresör işine rağmen enerji verimliliği ve ekserji bakımından hâlâ uygun bir seçim olmasını sağlamaktadır. Kompresör işinin optimize edilmesi için kompresör boyutunun ve basma oranının sistem koşullarına uygun seçilmesi, akışkan debisinin kontrol edilmesi ve evaporatör ile kondenser sıcaklıklarının çevrim koşullarına göre optimize edilmesi önerilmektedir. Bu yaklaşımlar, hem enerji verimliliğini artırmakta hem de çevresel etkileri minimize ederek, özellikle düşük GWP'ye sahip soğutucuların avantajını maksimize etmektedir [43].

2.3.3 Basma Oranı (Compression Ratio)

Basma oranı (PR), bir buhar sıkıştırmalı çevrimde kompresörün sistemdeki kritik performans parametreleri üzerindeki etkisini belirleyen en temel değişkenlerden biridir. Basma oranı, kondenser basıncının evaporatör basıncına oranı olarak tanımlanır:

$$PR = \frac{P_{cond}}{P_{evap}}$$

Burada

- Pcond → kondenserdeki soğutucu basıncı,
- Pevap → evaporatördeki soğutucu basıncıdır.

Basma oranı, çevrimin termodinamik verimini ve kompresör işini doğrudan etkiler. Yüksek basma oranları, kompresör tarafından yapılan işin artmasına ve dolayısıyla çevrim COP değerinin düşmesine neden olabilir. Öte yandan, çok düşük basma oranları, kondenserden yeterli ısı atımının sağlanamaması nedeniyle performans kayıplarına yol açabilir. Bu nedenle, optimum basma oranı, hem enerji verimliliğini maksimize etmek hem de sistemin güvenli ve dayanıklı çalışmasını sağlamak için kritik bir tasarım parametresidir.

Bileşen ve Soğutucu Bağımlılığını incelediğimizde; Farklı soğutucular, basma oranına bağlı performans değişimlerine farklı tepki verir: R134a için optimal basma oranı genellikle 3–4 civarındadır; bu aralık, evaporatör ve kondenser sıcaklıkları ile sistem boyutlandırmasına göre değişir. R1234yf için, düşük GWP ve farklı termodinamik özellikleri nedeniyle, optimum basma oranı R134a'ya kıyasla biraz daha yüksek veya düşük olabilir. Çalışmalar, R1234yf ile yapılan sistemlerde COP'nin basma oranına karşı hassasiyetinin R134a'ya benzer olduğunu, ancak kompresör işi ve ekserji kayıplarının küçük farklılıklar gösterdiğini ortaya koymuştur. COP Üzerindeki Performans Etkileri; Basma oranı arttıkça, kompresör tarafından yapılan iş artar ve net soğutma kapasitesine oranla COP düşer. Bu nedenle tasarımcılar, çevrim verimini maksimize etmek için sistemde optimum PR değerini belirlemek zorundadır.

Kompresör İşine Performans Etkileri; Yüksek basma oranları, kompresör girişindeki akışkanın sıkıştırılmasını zorlaştırır ve mekanik ile termodinamik kayıpları artırır. Bu durum, hem enerji tüketimini artırır hem de ekserji kayıplarını yükseltir.

Ekserji Yıkımı; Basma oranı optimumun dışına çıktığında, özellikle kompresör ve kondenserde ekserji yıkımı artar. Bu nedenle, ekserji analizi ile basma oranının etkisi detaylı bir şekilde incelenerek sistem tasarımında kritik geri bildirim sağlanabilir.

Basma oranı için sonuç ve tasarım önerisi, araç klima sistemlerinin enerji verimliliği ve çevresel performansı üzerinde doğrudan belirleyicidir. R1234yf ve R134a gibi farklı soğutucular için basma oranının optimize edilmesi, COP' nin maksimize edilmesi, kompresör işinin minimize edilmesi ve ekserji kayıplarının azaltılması açısından büyük önem taşır. Bu nedenle, çevrim tasarımında PR' nin sistem koşullarına uygun olarak seçilmesi ve farklı soğutucular için performans karşılaştırmalarının yapılması, enerji verimliliği ve çevresel sürdürülebilirlik açısından kritik bir adım olarak kabul edilir [44].

2.3.4 Isı Atımı (Qcon) ve Soğutma Kapasitesi (QE)

Kondenserde atılan ısı (Qcon) ve evaporatörde alınan ısı (QE), çevrimin enerji dengesini belirler. Bu parametreler, deneysel olarak ölçülmekte veya REFPROP/CoolProp verileri kullanılarak hesaplanmaktadır [45].

$$Q_E = \dot{m}(h_1 - h_4) , \quad Q_{con} = \dot{m}(h_2 - h_3)$$

2.3.5 Ekserji Yıkımı (ED_{total}) ve Ekserji Verimi (η_{ex})

Ekserji analizi, termodinamiğin ikinci yasası temelinde bir sistemin gerçek (tersinmez) enerji kayıplarını değerlendirmeye olanak tanır. Enerji analizi yalnızca miktarı dikkate alırken, ekserji analizi enerjinin kullanılabilirlik derecesini inceler. Böylece sistemin hangi bileşenlerinde geri kazanılamaz enerji kayıplarının yoğunlaştığı tespit edilir.

Buhar sıkıştırmalı çevrimdeki her bir bileşende (kompresör, kondenser, genleşme vanası ve evaporatör) oluşan ekserji yıkımı (ED) ayrı ayrı hesaplanır. Toplam sistem ekserji yıkımı (ED_{total}), tüm bileşenlerdeki yıkımların toplamı olup çevrimin ikinci yasa verimliliğini belirlemede temel parametredir. Sistem ekserji verimi aşağıdaki ilişkiyle tanımlanır:

$$\eta_{ex} = 1 - \frac{\sum ED}{\dot{m}(h_1 - h_4)}$$

Burada

- $\dot{m} \rightarrow$ soğutucu kütledebisi (kg/s),
- $(h_1 - h_4) \rightarrow$ kompresör giriş ve genleşme vanası çıkışı arasındaki özgül entalpi farkıdır.

Ekserji yıkımı bileşenler bazında incelendiğinde, en yüksek yıkımın genellikle kompresör ve kondenser kısımlarında gerçekleştiği görülmüştür; bu durum, sürtünme, ısı kaybı ve akışkanın gerçek gaz davranışından kaynaklanan tersinmezliklerle ilişkilidir. Evaporatör kısmında ise ısı geçişi daha düşük sıcaklık

farklarında gerçekleştiğinden, ekserji kaybı diğer bileşenlere kıyasla daha azdır.

R1234yf ve R134a soğutucu akışkanlarının karşılaştırıldığı çalışmalar, R1234yf kullanılan sistemlerde toplam ekserji veriminin %2–4 oranında daha düşük olduğunu göstermektedir. Bununla birlikte, R1234yf'nin küresel ısınma potansiyelinin ($GWP \approx 4$) R134a'nın (~ 1300) çok altında olması, çevresel sürdürülebilirlik açısından bu farkın kabul edilebilir sınırlar içinde kaldığını ortaya koymaktadır.

Bazı çalışmalarda, R1234yf kullanılan sistemlerde ekserji yıkımının azaltılabileceği; özellikle kondenser çıkış sıcaklığının optimize edilmesi, ısı değiştirici alanlarının artırılması ve kompresör izentropik veriminin iyileştirilmesiyle sistemin genel ikinci yasa veriminin R134a'ya yakın değerlere ulaşabileceği belirtilmiştir. Ayrıca, yağlama türü, kütleli debi ayarı ve ısı transfer katsayılarının artırılması da ekserji kayıplarını düşüren mühendislik parametreleri arasında yer almaktadır.

Sonuç olarak, R1234yf çevriminin enerji ve ekserji temelli performans analizleri, bu akışkanın düşük GWP değerine rağmen termodinamik olarak oldukça rekabetçi bir alternatif olduğunu göstermektedir. Optimum sistem tasarımı, ısı değiştirici boyutlarının iyileştirilmesi ve uygun işletme koşulları sağlandığında, R1234yf kullanılan sistemlerde ekserji verimi R134a sistemlerine oldukça yakın değerlere ulaşabilmektedir. Ayrıca, kompresör ve kondenser aşamalarındaki enerji kayıplarının azaltılmasıyla, R1234yf çevrimi toplam verim açısından daha dengeli bir yapı sergilemektedir. Bu bulgular, otomotiv endüstrisinde düşük

emisyonlu, enerji verimli ve çevre dostu iklimlendirme sistemlerinin geliştirilmesi açısından önemli bir potansiyel sunmakta; aynı zamanda sürdürülebilir soğutma teknolojileri için R1234yf'nin uzun vadeli bir çözüm olabileceğini ortaya koymaktadır [45].

Bölüm 3: Sonuçlar ve Tartışma

3.1 Termodinamik Parametre Analizi

Otomotiv klima sistemlerinin performansı, hem enerji hem de ekserji temelli parametreler üzerinden kapsamlı şekilde değerlendirilmiştir. Geleneksel klimalarda kullanılan kloroflorokarbon (CFC) ve hidrokloroflorokarbon (HCFC) soğutucular, ozon tabakasına zarar vermeleri (ODP problemi) nedeniyle yasaklanmış; bunun yerine hidrokloroflorokarbon (HFC) sınıfı soğutucular son yirmi yılda yaygınlaşmıştır. HFC soğutucuları ozon tabakasını inceltmemelerine rağmen, yüksek küresel ısınma potansiyeli (GWP) değerlerine sahiptir ve altı sera gazından biri olarak Kyoto Protokolü (1997) kapsamında emisyonlarının azaltılması zorunlu hale gelmiştir [46].

Bu durum, araştırmacıları çevreye daha az zarar veren alternatif akışkanların geliştirilmesine yönlendirmiştir. Üçüncü nesil soğutucu akışkanlar, ozon tabakasına etki etmeyen, flor, hidrojen ve karbon içeren sentetik organik bileşiklerdir. Bu sınıftan R134a (1,1,1,2-tetrafloroetan) ve R152a (1,1-difluroetan) gibi bileşikler, CFC'lerin yerini almıştır [47]. Ancak yapılan çalışmalar, HFC'lerin ozon tabakasını etkilemeseler de güçlü sera gazı etkisine sahip olduklarını göstermiştir. Bu nedenle, R134a yerine çevre dostu alternatiflerin geliştirilmesi amacıyla yeni soğutucular önerilmiştir.

Bu alternatifler arasında öne çıkan R1234yf, sıfır Ozon Tükenme Potansiyeli (ODP = 0) ve son derece düşük Küresel Isınma Potansiyeli (GWP < 1) değeriyle dikkat çekmektedir. Atmosferik

ömrü yalnızca 11 gün olan bu akışkan, çevresel sürdürülebilirlik açısından büyük avantaj sunmaktadır [48]. Nielsen ve ark. tarafından yapılan çalışmada, R1234yf'nin çevresel açıdan üstün özelliklere sahip olduğu, R134a'ya kıyasla yaşam döngüsü iklim performansının (LCCP) oldukça düşük olduğu belirtilmiştir [49].

R1234yf'nin termofiziksel ve ısı transfer özellikleri R134a ile büyük benzerlik göstermektedir. Bu nedenle mevcut otomotiv klima sistemlerine önemli bir tasarım değişikliği gerektirmeden entegre edilebilmektedir. Diğer alternatiflerden R744 (CO₂), doğal bir soğutucu olup ODP değeri 0 ve GWP değeri 1'dir; ancak yüksek çalışma basıncı nedeniyle sistem maliyetini ve güvenlik risklerini artırmaktadır. R152a ise düşük viskozitesi ve yüksek gizli ısı kapasitesiyle termodinamik olarak avantajlı bir akışkandır; GWP değeri 126 olup EPA tarafından koşullu olarak onaylanmıştır [50].

R1234yf, GWP'si 4, ODP'si 0 olan bir soğutucu olup, AB çevre yönetmeliklerinin gerektirdiği GWP < 150 şartını karşılamaktadır. Ayrıca toksik olmadığı, havada hızla ayrıştığı ve yanıcılığının düşük olduğu bildirilmektedir [51]. Bu özellikleri nedeniyle, R1234yf R134a'nın doğrudan alternatifi olarak kabul edilmektedir.

Otomobil klima sistemleri üzerine yapılan literatür çalışmaları genellikle deneysel ve teorik analizlere dayalı olup, farklı soğutucu akışkanlar için performans karşılaştırmalarını içermektedir. Zilio ve ark., R1234yf sisteminin soğutma kapasitesinin ve COP (Coefficient of Performance) değerlerinin R134a sistemine kıyasla biraz daha düşük olduğunu, ancak genleşme vanası ve kontrol ayarları optimize

edildiğinde performansın R134a'ya oldukça yakın değerlere ulaştığını bildirmiştir [52].

Bu çalışmada, araç klimalarında R134a ve R1234yf kullanılarak çevrimlerin detaylı termodinamik hesaplamaları yapılmıştır. Buhar sıkıştırılmalı mekanik soğutma çevriminde, kompresörde sıkıştırılan soğutucu akışkan buhar halinde kondensere girer. Kondenserde ortama ısı vererek yoğuşur; sıvı haldeki akışkan genleşme vanasından geçerek basıncı düşürülür ve evaporatörde ortam ısını emer. Buharlaşan soğutucu akışkan tekrar kompresöre döner ve çevrim tamamlanır [53].

Çalışmada incelenen temel termodinamik parametreler; COP (Çevrim Performans Katsayısı), kompresör işi (W_{comp}), basma oranı (PR), kondenserde atılan ısı (Q_{con}), evaporatörde alınan ısı (Q_E), toplam ekserji yıkımı (ED_{total}) ve ekserji verimi (η_{ex}) olarak belirlenmiştir. COP değerleri sistemin enerji verimliliğini doğrudan gösterir. R1234yf'nin COP değerleri bazı koşullarda R134a'ya göre %5–10 daha düşük bulunsa da, kompresör ve sistem ayarlarının optimize edilmesiyle bu fark minimize edilebilmektedir [54].

Kompresör işi, çevrimin enerji tüketimini ve ekserji kayıplarını doğrudan etkileyen bir parametredir. R1234yf'nin daha düşük yoğunluğu ve basınç farkı, kompresör gücünü hafif artırabilmektedir; ancak bu artış düşük GWP avantajı nedeniyle kabul edilebilir düzeydedir. Basma oranı (PR), sistem verimliliği üzerinde kritik etkiye sahip olup optimum PR değeri hem enerji verimini artırmakta hem de ekserji kayıplarını azaltmaktadır.

Kondenserden atılan ısı (Q_{con}) ve evaporatörde alınan ısı (Q_{E}), çevrimin enerji dengesini belirler. Geometrik tasarım ve soğutucu debisinin optimize edilmesiyle bu değerler arasındaki fark en aza indirgenebilir. Ekserji yıkımı (ED_{total}) ve ekserji verimi (η_{ex}) ise ikinci yasa perspektifinden çevrimin gerçek enerji kayıplarını ortaya koymaktadır. Analizler, kompresör ve kondenserin en yüksek ekserji yıkımına sahip olduğunu, evaporatörde ise kayıpların minimum düzeyde olduğunu göstermektedir [55].

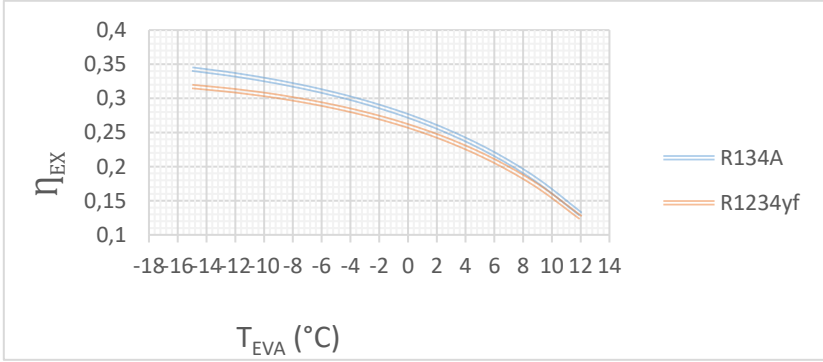
Sonuç olarak, R1234yf çevriminin enerji ve ekserji temelli performans analizleri, bu akışkanın düşük GWP değerine rağmen termodinamik olarak rekabetçi bir alternatif olduğunu göstermektedir. Uygun sistem tasarımı ve çalışma koşulları sağlandığında, R1234yf kullanılan çevrimlerde ekserji verimi R134a sistemlerine oldukça yakın değerlere ulaşabilmektedir. Bu bulgular, otomotiv sektöründe düşük emisyonlu, enerji verimli ve çevre dostu soğutma sistemlerinin geliştirilmesi açısından R1234yf'nin önemli bir potansiyel taşıdığını ortaya koymaktadır [56].

Gerçekleştirilen kapsamlı termodinamik analizler, evaporatör ve kondenser sıcaklıklarının yanı sıra sıkıştırma oranının, otomotiv klima sistemlerinin performansını doğrudan etkileyen en kritik parametreler olduğunu göstermektedir. Evaporatör sıcaklığındaki artış, soğutucu akışkanın buharlaşma entalpisini artırarak çevrimin enerji verimliliğini yükseltmekte ve COP değerini olumlu yönde etkilemektedir. Bu durum, ekserji veriminde de benzer bir artışa yol açmakta, sistemin ikinci yasa performansını optimize etmektedir. Öte yandan, kondenser sıcaklığındaki yükselmeler, kompresör işini

önemli ölçüde artırmakta ve sistemin enerji tüketimini yükselterek COP ve ekserji veriminde azalmaya neden olmaktadır. Sıkıştırma oranındaki değişimler ise hem enerji hem de ekserji temelli parametreler üzerinde karmaşık etkiler yaratmakta; düşük sıkıştırma oranlarında sistem daha stabil çalışırken, yüksek oranlarda enerji kayıpları ve ekserji yıkımları hızla artmaktadır. Bu analizler, optimum çalışma koşullarının belirlenmesinde evaporatör ve kondenser sıcaklıkları ile sıkıştırma oranının birlikte değerlendirilmesi gerektiğini ortaya koymaktadır.

Elde edilen bu sonuçlar doğrultusunda, sistem performansındaki değişimler görsel olarak da incelenmiş ve evaporatör ile kondenser sıcaklıklarının, ayrıca sıkıştırma oranının COP, kompresör işi, ekserji verimi ve ısı transferi üzerindeki etkileri detaylı biçimde Şekil 1–10 arasında sunulmuştur. Bu kapsamda, Şekil 1’de ekserji veriminin evaporatör sıcaklığına göre değişimi gösterilmekte ve sistemin ikinci yasa performansına dair temel eğilimler ortaya konmaktadır. Devam eden şekillerde ise COP, kompresör işi, Q_{con} ve ekserji verimi gibi parametrelerin hem evaporatör hem de kondenser sıcaklığı ile sıkıştırma oranına bağlı değişimleri sistematik olarak incelenmektedir.

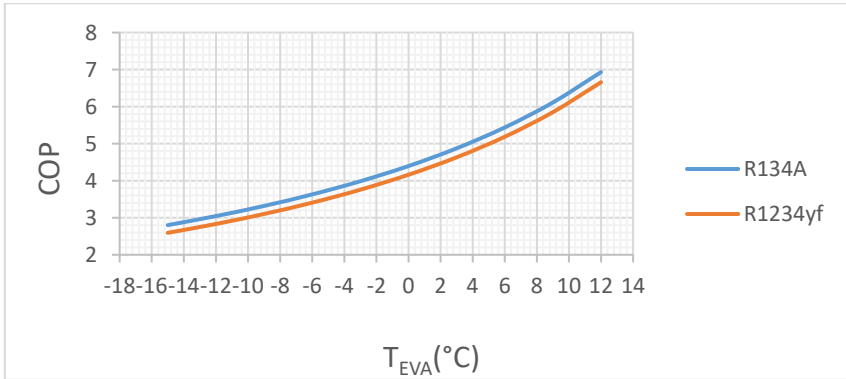
Bu grafik, sistem tasarımında optimum buharlaştırıcı sıcaklığının belirlenmesi ve soğutucu seçiminin ekserji verimi üzerindeki etkilerinin değerlendirilmesini sağlamaktadır; analiz sonuçları Şekil 1’de gösterilmiştir.



Şekil 1. Ekserji veriminin evaporatör sıcaklığına göre değişimi

Şekil 1' de, analiz edilen soğutucu akışkanların farklı buharlaştırıcı sıcaklıkları için ikinci yasa verim değerleri verilmiştir. Ekserji verimi, artan buharlaştırıcı sıcaklıklarıyla azalmaktadır. En yüksek ikinci yasa verim değerinin R134A soğutucu akışkanına ait olduğu, en düşük verim değerinin ise R1234yf soğutucu akışkanında elde edildiği gözlemlenmiştir.

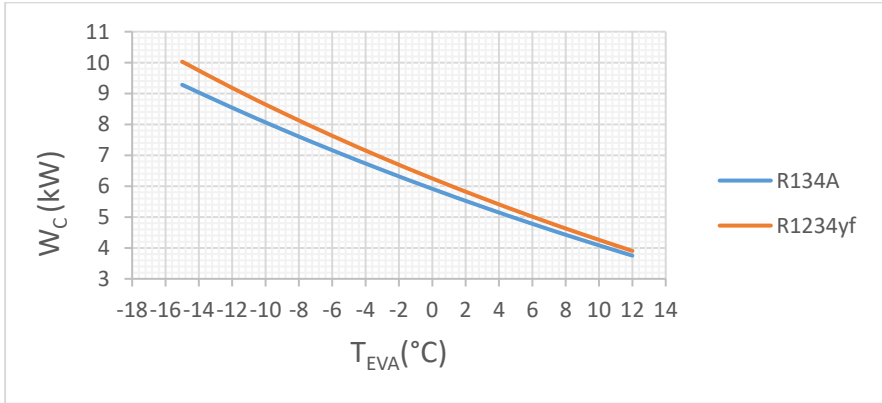
Benzer şekilde, Şekil 2'de COP değerlerinin evaporatör sıcaklığına göre değişimi gösterilmekte olup, farklı soğutucu akışkanlar için enerji verimliliğindeki eğilimler detaylandırılmıştır.



Şekil 2. COP değerinin evaporatör sıcaklığına göre değişimi

Şekil 2, buharlaştırıcı sıcaklıkları arttıkça COP değerlerinin arttığını göstermektedir. Analiz edilen soğutucu akışkanlar arasında en yüksek COP değeri R134A soğutucu akışkanına ait olup, R1234yf ve R-161 soğutucu akışkanının COP değerinin daha düşük olduğu gözlemlenmiştir.

Kompresör işinin evaporatör sıcaklığına göre değişimi incelenmiş, farklı soğutucuların enerji tüketimi üzerindeki etkileri detaylandırılmıştır; bu bulgular, sistem tasarımındaki enerji kayıplarının belirlenmesi için yol gösterici olup, Şekil 3’de gösterilmiştir.

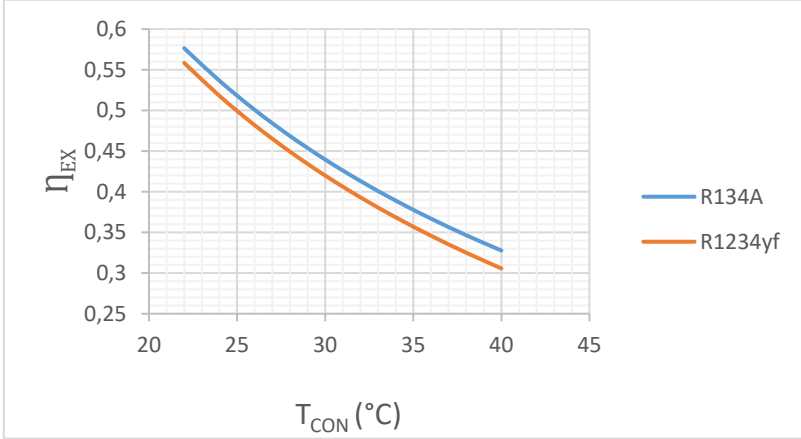


Şekil 3. Kompresör işinin evaporatör sıcaklığına göre değişimi

Şekil 3’ te, artan buharlaştırıcı sıcaklıklarında en yüksek kompresör işinin R1234yf soğutucu akışkanına ait olduğu görülmektedir.

Ekserji veriminin kondenser sıcaklığına göre değişimi analiz edilmiş, soğutucu akışkanların ikinci yasa verimindeki duyarlılıkları

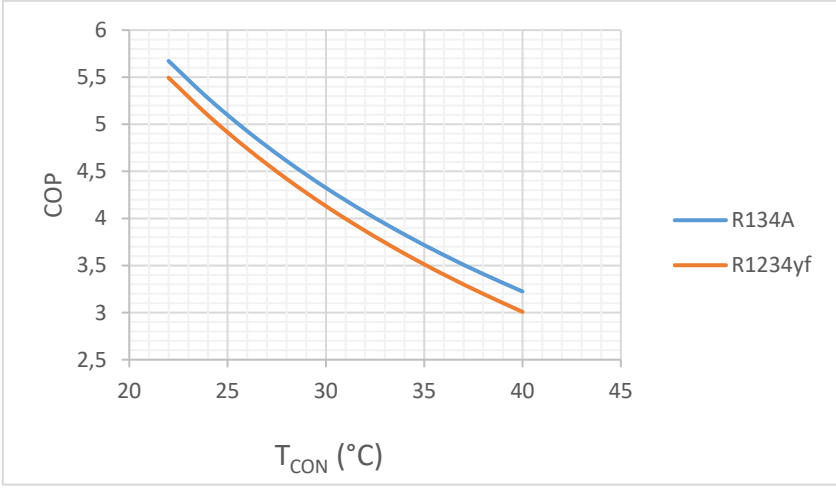
değerlendirilmiştir; bu sonuçlar, kondenser tasarımının optimize edilmesinde referans teşkil etmekte olup, Şekil 4’de gösterilmiştir.



Şekil 4. Ekserji veriminin kondenser sıcaklığına göre değişimi

Şekil 4'te, kondenser sıcaklıklarının artmasıyla en yüksek ikinci yasa verimlilik değerinin R134A soğutucu akışkanına ait olduğu görülüyor. Ayrıca kondenser sıcaklığı arttıkça verim değeri düşüyor.

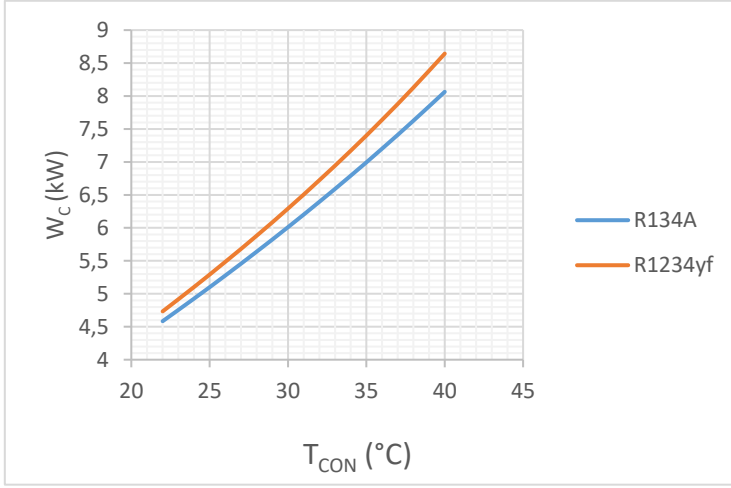
COP değerinin kondenser sıcaklığına göre değişimi, enerji verimliliğinin kondenser koşullarına bağımlılığını ortaya koymaktadır; R134a ve R1234yf için karşılaştırmalı değerlendirmeler sunan bu grafik, Şekil 5’de gösterilmiştir.



Şekil 5. COP değerinin kondenser sıcaklığına göre değişimi

Farklı kondenser sıcaklıklarına göre COP analiz sonuçları Şekil 5'te verilmiştir. R1234yf soğutucu akışkanının COP değerinin R134A'dan daha düşük olduğu görülmüyor. Kondenser sıcaklıkları arttıkça COP değerlerinin azaldığı görülmektedir.

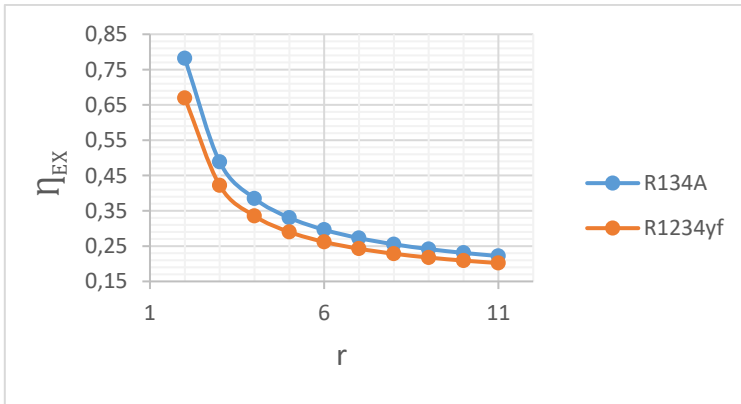
Kompresör işinin kondenser sıcaklığına göre değişimi incelenmiş, farklı sıcaklık koşullarında enerji tüketimindeki artış ve azalış eğilimleri analiz edilmiştir; bu veriler, kompresör performansının optimize edilmesinde yol gösterici olup, Şekil 6'da gösterilmiştir.



Şekil 6. Kompresör işinin kondenser sıcaklığına göre değişimi

En yüksek kompresör işinin R1234yf soğutucu akışkanına ait olduğu görülmektedir. Şekilde görüldüğü gibi kondenser sıcaklığı arttıkça kompresör işi de artmaktadır.

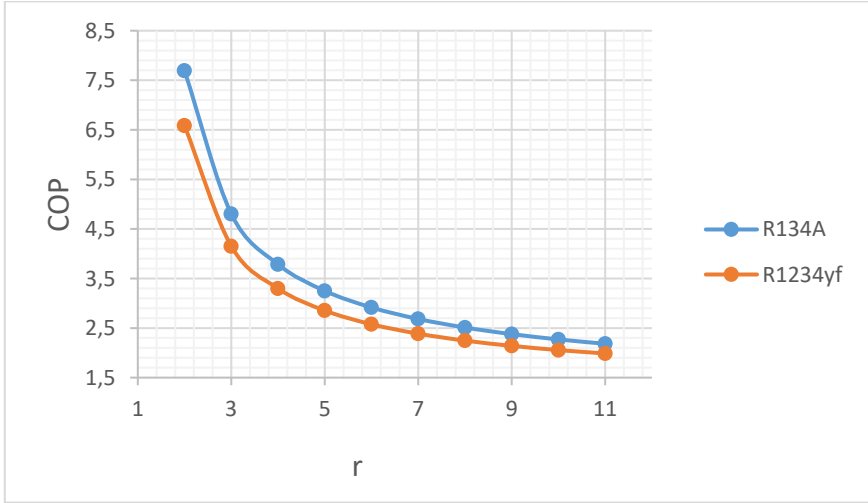
Ekserji veriminin sıkıştırma oranına göre değişimi değerlendirilmiş, basma oranının ikinci yasa verimi üzerindeki etkileri detaylandırılmıştır; bu analiz, optimum basma oranının belirlenmesine katkı sağlayarak, Şekil 7’de gösterilmiştir.



Şekil 7. Ekserji veriminin sıkıştırma oranına göre değişimi

Sıkıştırma oranı arttıkça ekserji veriminin düştüğü görülmektedir. Şekil 7’de de görüldüğü gibi yapılan termodinamik analizlerde R134A soğutucu akışkanın veriminin R1234yf akışkanından daha yüksek olduğu sonucuna varılır.

COP değerinin sıkıştırma oranına göre değişimi, çevrim verimliliğinin basma oranına bağlı eğilimlerini ortaya koymaktadır; farklı soğutucu akışkanlar için enerji verimliliği karşılaştırmalarını sağlayan bu grafik, Şekil 8’de gösterilmiştir.

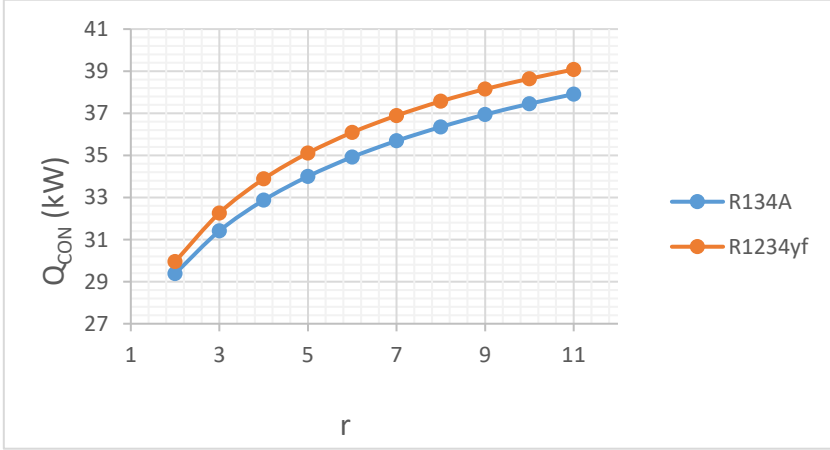


Şekil 8. COP değerinin sıkıştırma oranına göre değişimi

Elde edilen COP verileri sıkıştırma oranı arttıkça azalma eğilimi göstermektedir. Şekil 7’ye benzer bir düşüş sergilemektedir. Şekil 8’de görüldüğü gibi en yüksek COP değerleri R134A akışkanına aittir.

Qcon değerinin sıkıştırma oranına göre değişimi, kondenserde atılan ısı miktarının basma oranına bağlı değişimini detaylı şekilde

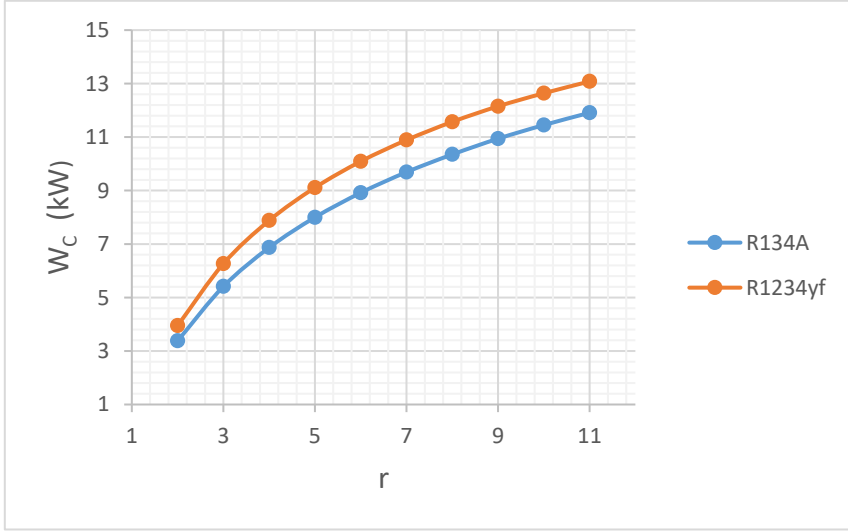
göstermektedir; bu bulgular, ısı transfer optimizasyonu açısından yol gösterici olup, Şekil 9’da gösterilmiştir.



Şekil 9. Q_{con} değerinin sıkıştırma oranına göre değişimi

Şekilde, R134A ve R1234yf soğutucu akışkanları için kondensatörden salınan ısı değerlerinin sıkıştırma oranındaki artışa bağlı olarak arttığı görülmektedir. Kondensatörden salınan en yüksek ısı değerlerinin R1234yf soğutucu akışkanına ait olduğu görülmektedir.

Kompresör işinin sıkıştırma oranına göre değişimi incelenmiş, farklı soğutucuların basma oranına bağlı enerji tüketimi eğilimleri analiz edilmiştir; sistem verimliliğinin artırılması için önemli bilgiler sunan bu sonuçlar, Şekil 10’da gösterilmiştir.



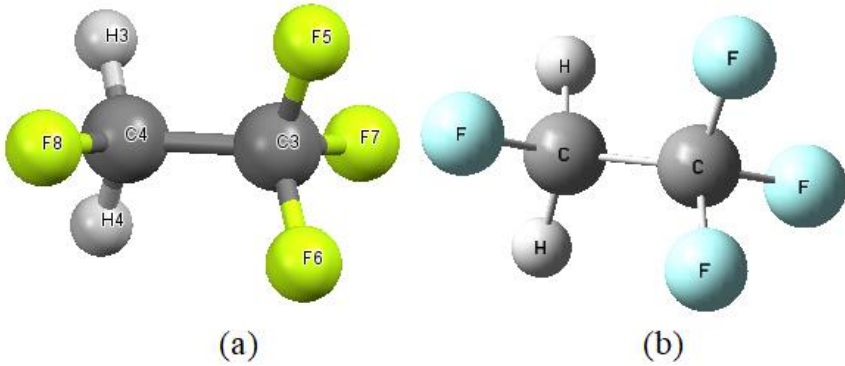
Şekil 10. Kompresör işinin sıkıştırma oranına göre değişimi

Şekilde görüldüğü gibi sıkıştırma oranı arttıkça kompresör işi de belirgin şekilde artmaktadır. Bu durum, basma oranının artmasıyla birlikte kompresörde yapılan sıkıştırma işinin enerji ihtiyacının yükseldiğini göstermektedir. Analizler, R134a soğutucu akışkanının, aynı basma oranı koşullarında diğer akışkanlara kıyasla en düşük kompresör işine sahip olduğunu ortaya koymaktadır. Buna karşılık, R1234yf soğutucu akışkanında kompresör işi, R134a'ya göre daha yüksek değerler göstermekte olup, düşük GWP avantajı göz önünde bulundurulduğunda kabul edilebilir sınırlar içinde kalmaktadır. Bu sonuçlar, araç klima sistemlerinde basma oranının enerji tüketimi üzerindeki kritik etkisini vurgulamakta ve sistem tasarımında optimum sıkıştırma oranının belirlenmesine rehberlik etmektedir. Böylece, Şekil 10, kompresör işinin sıkıştırma oranına bağlı değişimini net bir şekilde göstermektedir.

3.2 Moleküler Yapının İncelenmesi

Bu çalışmada kullanılan R134a soğutucu akışkanının kristal yapı verileri, Cambridge Kristalografi Veri Merkezi (CSD) veri tabanından elde edilmiştir. 1,1,1,2-Tetrafluoroethane (R134a) molekülünün kimyasal formülü $C_2H_2F_4$ olup, kristal yapısı CCDC 1288906 referans kodu altında kayıtlıdır. R134a kristali ortorombik sistemde olup P 21/c (14) uzay grubuna aittir. Birim hücre parametreleri $a = 8,7569(4) \text{ \AA}$, $b = 9,3523(1) \text{ \AA}$, $c = 9,0784(4) \text{ \AA}$ ve açıları $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 106,479(5)^\circ$, $\gamma = 90^\circ$ olarak belirlenmiştir. R134a molekülünün deneysel kristal yapısı Şekil 11a'da gösterilmiştir.

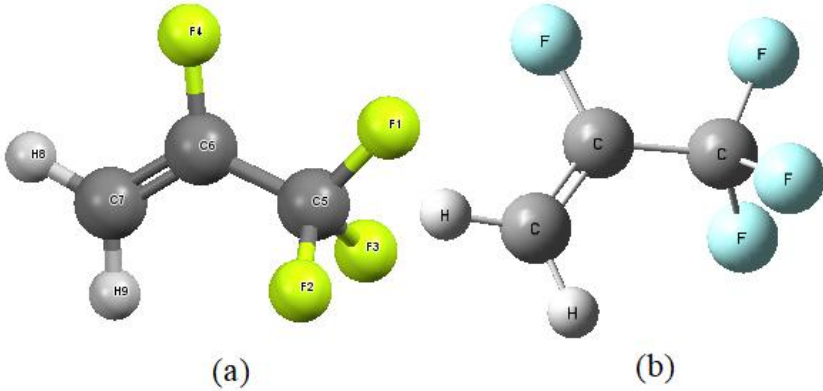
R134a molekülü GaussView programında açılarak GAUSSIAN 09 paket programı kullanılmış, Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) kapsamında B3LYP/6-311++G(d,p) temel seti ile gaz fazında ve taban durumunda optimize edilmiştir. Molekülün hesaplanmış optimize geometrisi Şekil 11b'de verilmiştir.



Şekil 11. (a) R134a molekülünün X-ışını tek kristal yapısı, (b) B3LYP/6-311++G(d,p) yöntemi ile optimizasyon sonucu elde edilen yapı.

Ek olarak bu çalışmada kullanılan R1234yf soğutucu akışkanın kristal yapı verileri Cambridge Kristalografi Veri Merkezi (CSD) veritabanından elde edilmiştir. 2,3,3,3-Tetrafluoropropen (R1234yf) molekülünün kimyasal formülü $C_3H_2F_4$ olup, kristal yapısına ilişkin veriler CCDC 2776731 referans kodu altında kayıtlıdır. Literatürde R1234yf'nin kristal yapısı deneysel olarak detaylı biçimde tanımlanmış olup, molekülün yapılandırılması ve geometrik parametreleri söz konusu kristalografi verileriyle uyumludur.

R1234yf molekülünün deneysel kristal yapısı Şekil 12a' da gösterilmiştir. Molekül daha sonra GaussView programında hazırlanarak GAUSSIAN 09 paket programı kullanılmış, Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) çerçevesinde B3LYP/6-311++G(d,p) temel seti ile gaz fazında ve taban durumda optimize edilmiştir. Hesaplanan optimize moleküler geometrisi Şekil 12b' de sunulmuştur.



Şekil 12. (a) R1234yf molekülünün X-ışını tek kristal yapısı, (b) B3LYP/6-311++G(d,p) yöntemi ile optimizasyon sonucu elde edilen yapı.

1,1,1,2-Tetrafluoroethane (R134a) ve 2,3,3,3-Tetrafluoropropene (R1234yf) molekülleri için DFT/(B3LYP/6-311++G(d,p) seviyesi) optimizasyonları sonucunda elde edilen bağ uzunlukları ve bağ açıları, deneysel kristal yapı verileri ile yüksek düzeyde uyum göstermektedir. Bu karşılaştırma, hem R134a hem de R1234yf moleküllerinin yapısal stabilitesini ve hesaplanan geometrik parametrelerin doğruluğunu doğrulamaktadır. Her iki molekülün elektron dağılımı ve moleküler geometri özellikleri, DFT optimizasyonları ile oldukça tutarlı bir şekilde yeniden üretilebilmiş, bu da hesaplamaların moleküler modelleme ve termodinamik özellik tahmini açısından güvenilirliğini göstermektedir. Küçük sapmalar, DFT hesaplamalarının gaz fazında gerçekleştirilmiş olmasından ve deneysel kristal verilerin yoğun faza ait olmasından kaynaklanmaktadır; bu fark, özellikle moleküller arası etkileşimlerin kristal yapıda bağ uzunluklarını hafifçe etkilemesiyle açıklanabilir. Ayrıca, bu hesaplamalar sayesinde moleküllerin bağ açıları ve bağ uzunluklarındaki simetri ve düzenlilik, kristalografi verileriyle karşılaştırıldığında detaylı olarak doğrulanmıştır. R134a ve R1234yf için deneysel ve hesaplanmış bağ uzunlukları ayrıntılı olarak Tablo 1'de sunulmuştur.

Tablo 1. Deneysel ve DFT/B3LYP/6-311++G(d,p) metodu ile hesaplanan geometrik parametreler

		R134a		R1234yf	
		Deneysel	Teorik	Deneysel	Teorik
Bağ Uzunluğu (Å)				Bağ Uzunluğu (Å)	
C3-F3	1,32259	1,34027	C5-C6	1.48650	1.48651
C3-F4	1,32255	1,34024	C5-F1	1.35695	1.35709
C3-F5	1,31703	1,34481	C5-F3	1.35711	1.35695
C3-C4	1,51505	1,53374	C5-F2	1.35709	1.35711
C4-F6	1,35351	1,36600	C5-C6	1.48650	1.48651
			C6-F4	1.35285	1.35285
			C6-C7	1.33701	1.33701
Bağ Açısı (°)			Bağ Açısı (°)		
F3-C3-F4	107.33644	104.37973	F2-C5-F1	106.79251	106.77027
F3-C3-F5	107.71271	104.02638	F2-C5-F3	106.77021	106.78036
C4-C3-F3	111.63665	115.26353	F3-C5-F1	106.78039	106.79251
C4-C3-F4	111.24237	115.26970	F3-C5-C6	111.35311	113.41452
C4-C3-F5	110.68175	112.58439	C5-C6-F4	117.72223	117.72221
F4-C3-F5	108.06002	104.02778	C5-C6-C7	124.49928	124.49933
C3-C4-F6	109.14035	109.12699	F4-C6-C7	117.77844	117.77843
			F4-C6-C5	117.72223	117.72221

Tablo 1 incelendiğinde; R134a molekülünde deneysel ve teorik geometrik parametrelerin karşılaştırılması, DFT/B3LYP++G(d,p) yönteminin genel olarak başarılı sonuçlar verdiğini göstermektedir; ancak bazı bağ uzunluklarında teorik değerlerin deneysel ölçümlere göre hafifçe daha büyük olduğu görülmektedir. Örneğin C1–C2 bağı deneysel olarak 1.32259 Å, teorik olarak ise 1.34027 Å bulunmuştur. Benzer şekilde C2–F3 bağı için deneysel değer 1.31703 Å iken teori bu bağı 1.34481 Å olarak tahmin etmiştir. Bağ açıları da benzer bir eğilim göstermekte olup, örneğin C1–C2–F3 açısı deneysel olarak 107.34°, teorik olarak 104.38° hesaplanmıştır. Bu farklar, R134a'nın

daha esnek moleküler yapısının ve B3LYP fonksiyonelinin bağ parametrelerini hafifçe fazla tahmin etme eğiliminin bir sonucu olarak değerlendirilebilir.

Buna karşılık R1234yf molekülünde teorik ve deneysel değerler çok daha yüksek bir uyum sergilemektedir. Molekülün daha rijit yapılı olması ve çift bağ içermesi, teori ile deney arasındaki farkların minimum seviyede kalmasını sağlamaktadır. Örneğin C5–C6 bağı için deneysel 1.48650 Å değeri ile teorik 1.48651 Å değeri neredeyse tamamen örtüşmektedir. C6–C7 bağı ise deneysel ve teorik olarak 1.33701 Å ile birebir aynıdır. Bağ açıları açısından da benzer bir uyum görülmekte olup, C5–C6–C7 açısı deneysel 113.55°, teorik olarak 113.41° olarak elde edilmiştir.

R134a ve R1234yf'nin moleküler geometrileri karşılaştırıldığında, R1234yf'nin çift bağına sahip yapısı nedeniyle biraz daha esnek bir moleküler yapı gösterdiği gözlenmiştir. Bu yapı farkı, polarite ve dipol moment değerlerinde değişikliğe neden olmakta ve termodinamik performans ile ısı transfer karakteristiklerini dolaylı olarak etkilemektedir.

3.3 Elektronik Özelliklerin İncelenmesi

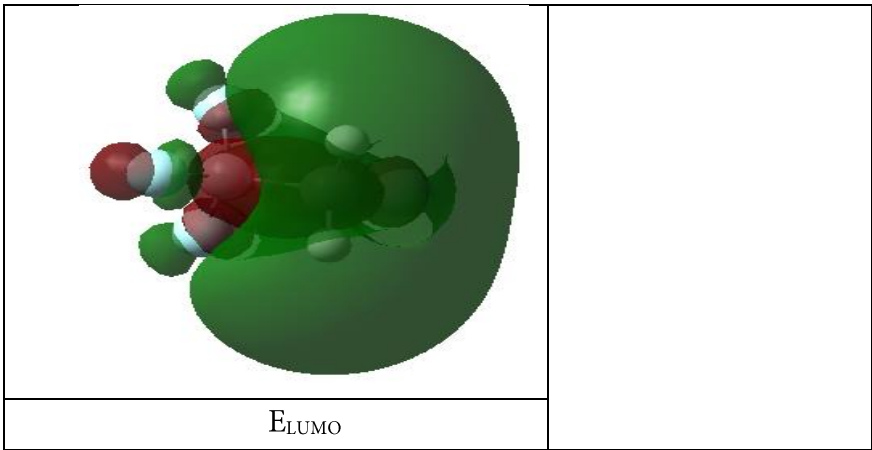
En yüksek dolu moleküler orbital enerjisi (E_{HOMO}) ve en düşük boş moleküler orbital enerjisi (E_{LUMO}) kimyasal reaksiyonlara katılan temel orbitallerdir. HOMO enerjisi molekülün elektron verme (π_{donor}), LUMO enerjisi molekülün elektron alma (π_{acceptor}) yeteneği olarak tanımlanır. 6-311++G(d,p) seti kullanılarak B3LYP metodları ile R134a ve R1234yf moleküllerinin elektronik yapı parametreleri hesaplandı ve Tablo 2 de karşılaştırıldı.

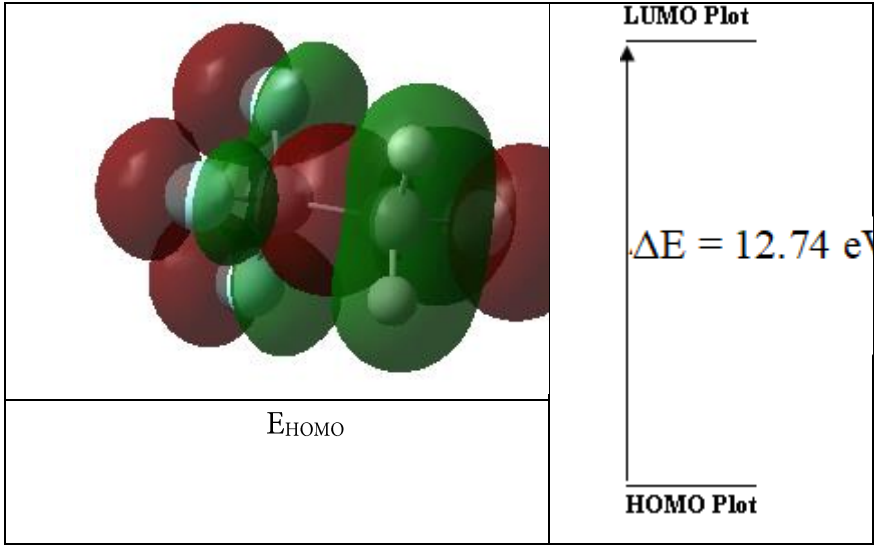
Tablo 2. DFT/B3LYP/311++G(d,p) metodu ile teorik olarak hesaplanan elektronik yapı parametreleri

	R134a	R1234yf
E_{HOMO} (eV)	-13.8532	-8.41056
E_{LUMO} (eV)	-1.11268	-1.64875
$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ (eV)	12.74052	6.76181
I (eV)	13.8532	8.41056
A (eV)	1.11268	1.64875
χ (eV)	7.48294	5.029655
η (eV)	6.37026	3.380905
S (eV ⁻¹)	0.036093	0.059449
E_{TOTAL} (Hartree)	-476.9215	-515.0223

Tablo 2' ye göre. R134a molekülünün HOMO enerjisi (-13.85 eV) R1234yf'ye (-8.41 eV) kıyasla daha düşük olup. bu durum R134a'nın elektron verme eğiliminin daha az olduğunu işaret eder. LUMO enerjileri de benzer şekilde R134a için daha düşük değerler almıştır. HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE) R134a'da 12.74 eV iken. R1234yf'de 6.76 eV olarak hesaplanmış ve bu da R134a'nın daha kararlı. R1234yf'nin ise daha reaktif olduğunu göstermektedir. İyonlaşma enerjisi (I) ve elektron ilgisi (A) değerleri de benzer eğilimler göstermekte. R134a'nın daha yüksek iyonlaşma enerjisine sahip olması onun elektron kaybetmeye daha dirençli olduğunu göstermektedir. Ayrıca kimyasal potansiyel (χ). sertlik (η) ve yumuşaklık (S) parametreleri R1234yf'nin daha yumuşak ve dolayısıyla kimyasal reaksiyonlara karşı daha duyarlı olduğunu ortaya koymaktadır. Toplam enerji (E_{TOTAL}) değerleri ise her iki molekülün kararlılığını mutlak enerji açısından karşılaştırmaktadır.

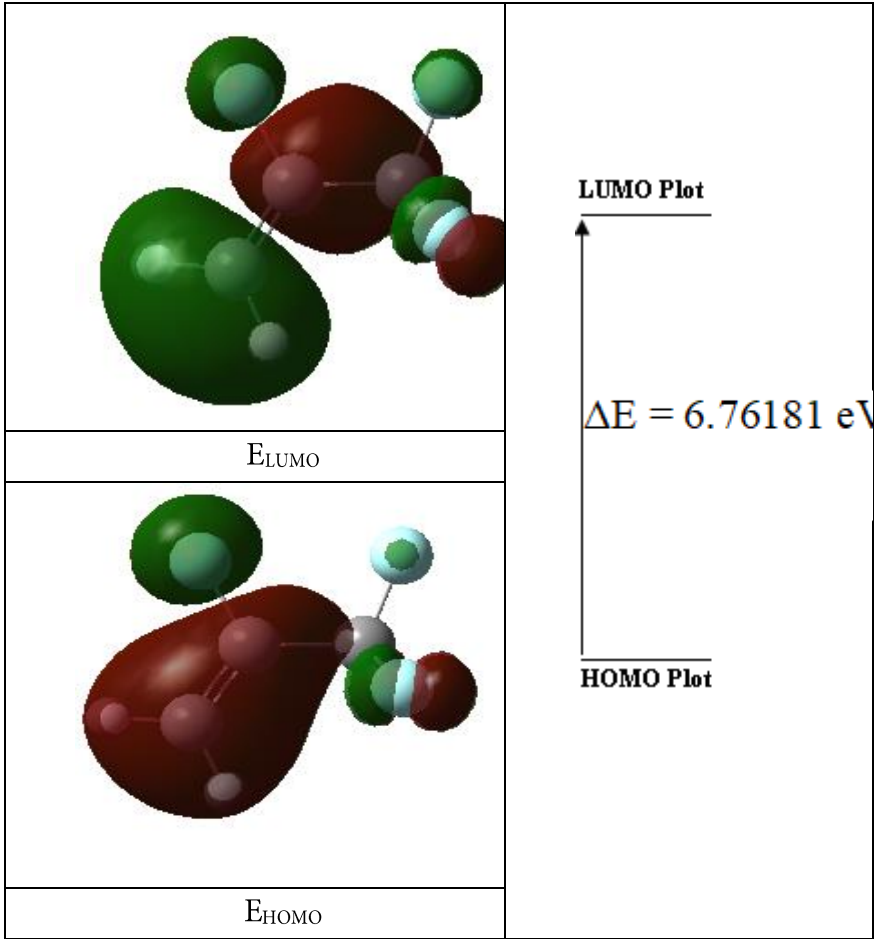
HOMO-LUMO enerji seviyeleri, dipol moment ve yük dağılımı analizleri, R134a ve R1234yf moleküllerinin elektronik yapıları ve kimyasal davranışlarını anlamada kritik öneme sahiptir. HOMO-LUMO enerji farkı, molekülün kararlılığı, reaktivitesi ve potansiyel elektron transfer eğilimlerini belirleyen temel bir parametredir. Bu açıdan R1234yf, yapısındaki C=C bağının etkisiyle HOMO-LUMO boşluğu bakımından R134a'ya kıyasla hafif değişiklik göstermektedir. Bu fark, özellikle kimyasal reaksiyonlarda elektron aktarımının yönünü ve hızını etkileyebilir; daha dar bir HOMO-LUMO boşluğu, molekülün daha yüksek reaktivite göstermesine yol açabilirken, daha geniş boşluk daha kararlı bir yapıyı işaret etmektedir. Dipol moment açısından R134a, simetrik moleküler yapısı sayesinde belirli bir referans değere sahip olup, moleküller arası etkileşimlerde dengeli bir davranış sergiler. Buna karşılık R1234yf, C=C bağının varlığı ve farklı flor atomu dağılımı nedeniyle daha düşük veya farklı yönlendirilmiş bir dipol moment göstermektedir.





Şekil 13. R134a soğutucu gazının B3LYP/6-311G(d,p) yöntemi kullanılarak hesaplanan HOMO ve LUMO gösterimleri.

Şekil 13, R134a soğutucu gazının moleküler orbital yapısını ve enerji seviyelerini göstermektedir. Şekil 13 de B3LYP/6-311G(d,p) yöntemi kullanılarak hesaplanan HOMO (en yüksek dolu moleküler orbital) ve LUMO (en düşük boş moleküler orbital) orbitalleri detaylı şekilde sunulmuştur. Şekil 13 deki kırmızı ve yeşil renkler, orbital yüzeylerindeki farklı fazları (dalga fonksiyonunun işaretini) temsil eder ve elektron yoğunluğunun pozitif ya da negatif olduğu bölgeleri belirtir. R134a molekülünde, özellikle flor (F) ve karbon (C) atomları üzerinde bu faz farkları belirgin şekilde gözlemlenmektedir.



Şekil 14. R1234yf soğutucu gazının B3LYP/6-311G(d,p) yöntemi kullanılarak hesaplanan HOMO ve LUMO gösterimleri.

Şekil 14, R1234yf soğutucu gazının moleküler orbital yapısını ve enerji seviyelerini göstermektedir. Şekil 14, B3LYP/6-311G(d,p) yöntemi kullanılarak hesaplanan HOMO (en yüksek dolu moleküler orbital) ve LUMO (en düşük boş moleküler orbital) orbitalleri detaylı şekilde sunulmuştur. Şekil 14 deki kırmızı ve yeşil renkler, orbital yüzeylerindeki farklı fazları (dalga fonksiyonunun işaretini)

temsil eder ve elektron yoğunluğunun pozitif ya da negatif olduğu bölgeleri gösterir. R1234yf molekülünde özellikle karbon ve flor atomlarında orbital yoğunluğunun bu fazlara göre dağılımı belirgindir.

3.4. Termodinamik Özelliklerin İncelenmesi

Bu çalışmada, R134a ve R1234yf soğutucu gazlarının teorik termodinamik analizleri Gaussian programında DFT/B3LYP/6-311++G(d,p) yöntemi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalar, her iki soğutucu gazın termal enerjisi, ısı kapasitesi, entropisi, dönme sabitleri ve diğer önemli parametreleri temel alınarak yapılmıştır. Bu parametreler arasında, moleküllerin dönme, öteleme ve titreşim hareketlerinden kaynaklanan enerji ve ısı kapasitesi bileşenleri ayrı ayrı hesaplanmış ve toplam enerji, entropi ve entalpi gibi termodinamik özellikler belirlenmiştir. Ayrıca, sıfır nokta enerjisi düzeltmesi, enerji düzeltmeleri, entalpi düzeltmeleri ve Gibbs serbest enerji düzeltmeleri gibi termal özellikler de dikkate alınmıştır. Tüm bu termodinamik parametreler Tablo 3'te listelenmiştir.

Tablo 3. B3LYP/6-311++G(d,p) yöntemi ile hesaplanan termodinamik parametreler.

	R123a	R1234yf
Thermal energy, E (Kcal/mol)		
Rotational	0.889	0.889
Translational	0.889	0.889
Vibrational	29.870	32.064
Total	31.648	33.842
Heat capacity, C _v (cal/mol K)		
Rotational	2.981	2.981
Translational	2.981	2.981
Vibrational	12.313	14.124

Yeni Nesil Soğutucu Akışkanlar Olarak R1234yf ve R134a Moleküllerinin Kuantum Kimyasal Özellikleri ve Soğutma Çevrimindeki Performansları

Total	18.274	20.085
Entropy, S (cal/mol K)		
Rotational	26.497	27.340
Translational	39.777	40.109
Vibrational	9.479	8.248
Total	75.754	75.697
Rotational constants (GHz)		
A	5.28821	3.71015
B	2.75822	2.35790
C	2.71759	1.94071
Rotational temperature (Kelvin)		
A	0.25379	0.17806
B	0.13237	0.11316
C	0.13042	0.09314
Thermal properties (Hartree/particle)		
Zero-point correction	0.044933	0.048460
Thermal correction to Energy	0.050434	0.053931
Thermal correction to Enthalpy	0.051378	0.054875
Thermal correction to Gibbs Free Energy	0.015385	0.018909
Sum of electronic and zero-point Energies	-	-514.973817
Sum of electronic and thermal Energies	476.894747	-
Sum of electronic and thermal Enthalpies	-	-514.968346
Sum of electronic and thermal Free Energies	476.889246	-
Zero point vibrational energy (kcal/mol)	-	-514.967401
	476.888302	-
	-	-515.003367
	476.924295	
	28.19606	30.40884

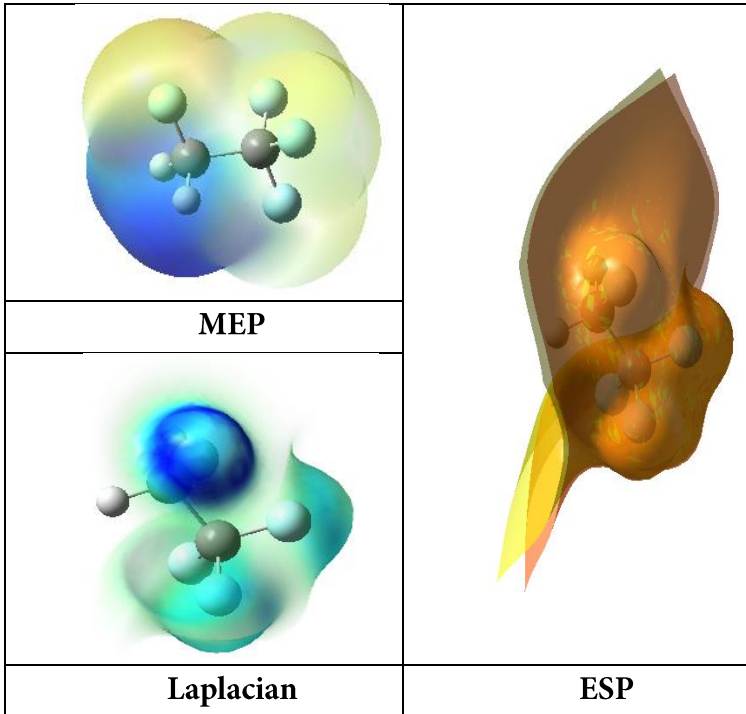
Tablo 3'te sunulan B3LYP/6-311++G(d,p) hesaplamalarına göre, R123a ve R1234yf moleküllerinin termodinamik özellikleri karşılaştırılmıştır. Her iki bileşik için döner ve translasyonel enerjiler aynı değeri gösterirken, vibrasyonel enerji ve buna bağlı toplam enerji R1234yf'de biraz daha yüksektir, bu da molekülün daha esnek veya daha yüksek frekanslı titreşim modlarına sahip olduğunu

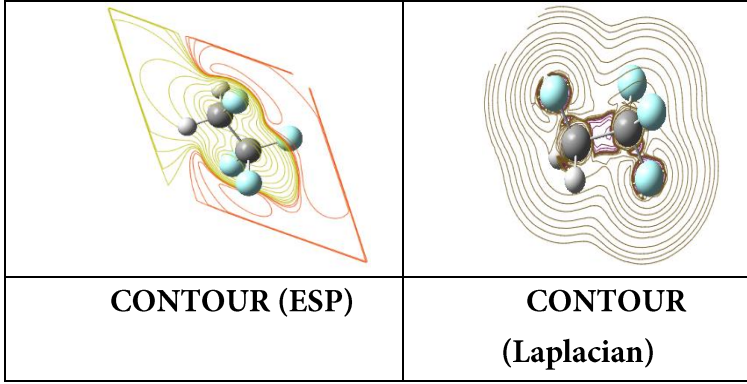
göstermektedir. Isı kapasiteleri açısından da benzer bir eğilim gözlenmektedir; vibrasyonel katkı R1234yf'de daha yüksek olup toplam Cv değerini artırmıştır. Entropi değerleri her iki molekül için oldukça yakın olmakla birlikte, R1234yf'nin rotasyonel ve translasyonel entropisi biraz daha yüksektir, ancak toplam entropide fark ihmal edilebilecek düzeydedir. Rotasyonel sabitler ve rotasyonel sıcaklıklar, R1234yf'nin daha büyük ve daha asimetric bir molekül yapısına sahip olduğunu ortaya koymaktadır. Termal düzeltmeler ve serbest enerji değerleri, iki bileşiğin enerji profilinde farklılıklar olduğunu göstermekte, özellikle R1234yf'nin sıfır nokta titreşim enerjisi ve toplam termal enerjisi R123a'ya kıyasla daha yüksek bulunmuştur. Genel olarak, bu veriler R1234yf'nin termodinamik olarak biraz daha kararlı ve titreşim açısından daha aktif olduğunu işaret etmektedir.

3.5 Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) Yüzey Analizi

Moleküler elektrostatik potansiyel (MEP), bir molekül etrafındaki elektrostatik etkileşimleri nicel ve görsel olarak değerlendirmeye olanak sağlayan önemli bir araçtır [57]. MEP yüzey haritası, molekülün üç boyutlu yapısı üzerinde her bir atomun yük dağılımını ve bu atomların çevresindeki elektrostatik potansiyel etkilerini detaylı bir şekilde göstermektedir [58]. Bu sayede, molekülün elektrostatik açıdan reaktif bölgeleri ile elektron yoğunluğu yüksek ve düşük alanlar kolaylıkla belirlenebilir. Özellikle kimyasal reaksiyon mekanizmalarının ve molekülün etkileşim eğilimlerinin analizinde MEP yüzey haritaları sıklıkla kullanılmaktadır.

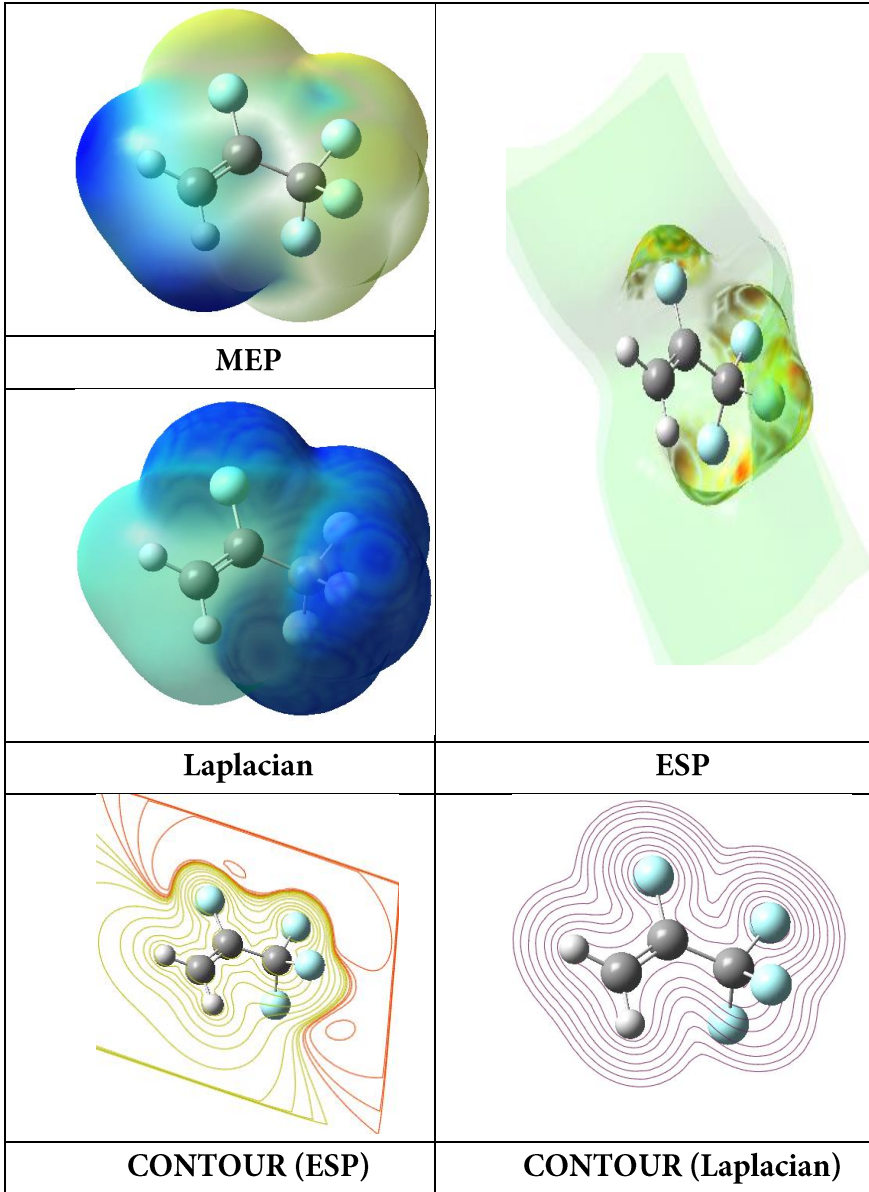
Bu çalışmada, optimize edilmiş R134a soğutucu gazı molekülünün üç boyutlu moleküler elektrostatik potansiyel yüzey haritası (MEP) elde edilmiştir. Aynı zamanda elektrostatik potansiyel yüzey haritası (ESP), ESP kontur haritası, Laplasyan ve Laplasyan kontur haritası da oluşturulmuştur. Hesaplamalar B3LYP/6-311G(d,p) düzeyinde gerçekleştirilmiş olup, MEP haritası molekül üzerindeki elektron yoğunluğu dağılımını renk skalası ile görselleştirerek, negatif potansiyel bölgelerinin elektron açısından zengin, pozitif potansiyel bölgelerinin ise elektron açısından fakir olduğunu göstermektedir. Bu analizler, R134a molekülünün elektrostatik karakterinin anlaşılmasını kolaylaştırmakta ve molekülün kimyasal reaktivitesi ile intermoleküler etkileşim potansiyeli hakkında değerli bilgiler sunmakta olup, tüm sonuçlar Şekil 15'te sunulmuştur.





Şekil 15. B3LYP/6-311G(d,p) yöntemi kullanılarak hesaplanan R134a soğutucu gazının moleküler yüzey haritası.

Optimize edilmiş R1234yf soğutucu gazı molekülünün üç boyutlu moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) yüzey haritası, elektrostatik özelliklerini detaylı şekilde analiz etmek amacıyla oluşturulmuştur. Ayrıca elektrostatik potansiyel yüzey haritası (ESP), ESP kontur haritası, Laplasyan ve Laplasyan kontur haritaları da B3LYP/6-311G(d,p) düzeyinde hesaplanmış olup, molekül üzerindeki elektron yoğunluğu dağılımı ve pozitif ile negatif potansiyel bölgeleri görselleştirilmiştir. Bu analizler, R1234yf'nin reaktif bölgelerini ve elektrostatik karakterini belirlemeye yardımcı olmakta ve sonuçlar tüm detaylarıyla Şekil 16'da sunulmuştur.



Şekil 16. B3LYP/6-311G(d,p) yöntemi kullanılarak hesaplanan R1344yf soğutucu gazının moleküler yüzey haritası.

R134a simetrik yapısı nedeniyle homojen bir potansiyel dağılımı gösterirken. R1234yf'nin çift bağ çevresi ve fluor dağılımı. bölgeler arası potansiyel farklılıklarını artırmaktadır. Bu durum. moleküler düzeydeki enerji etkileşimlerini ve sonuç olarak makroskopik termodinamik performansı etkileyebilir.

4. SONUÇLAR

Bu çalışmada, R123a ve R1234yf soğutucularının klima sistemlerindeki performansları detaylı olarak incelenmiş ve hem klasik termodinamik analizler hem de kuantum kimyasal hesaplamalar yoluyla moleküler düzeyde değerlendirilmiştir. Çalışmada, buhar sıkıştırırmalı soğutma çevrimi temel alınarak farklı kompresör sıkıştırma oranlarında sistem performansları hesaplanmış ve elde edilen veriler karşılaştırmalı olarak analiz edilmiştir.

Termodinamik açıdan yapılan değerlendirmelerde, kompresör sıkıştırma oranının artmasıyla birlikte soğutucuların performansında belirgin farklılıklar gözlenmiştir. Performans katsayısı (COP) açısından R1234yf, tüm sıkıştırma oranlarında R123a'ya kıyasla daha yüksek değerler göstermiştir. Bu, R1234yf nin enerji verimliliği açısından üstün bir seçenek olduğunu göstermektedir. Aynı şekilde, ikinci yasa termodinamiği çerçevesinde yapılan ekserji analizi sonuçları da benzer bir eğilimi ortaya koymuştur; R1234yf, yüksek sıkıştırma oranlarında en yüksek ekserji verimine sahipken, R123a en düşük verimi sergilemiştir. Toplam ekserji tahribatı açısından ise R123a daha yüksek değerlere ulaşmış ve bu durum, enerji kayıplarının ve sistem içi tersinirlik kayıplarının bu soğutucuda daha belirgin olduğunu göstermektedir.

Kompresör işi ve kondanserden yayılan ısı miktarı, sıkıştırma oranının artmasıyla birlikte her iki soğutucu için de artış göstermiştir. Ancak R1234yf, hem kompresör işi hem de kondanser ısısı açısından daha düşük değerler sergileyerek sistem üzerinde daha az yük oluşturmuş ve daha verimli bir çalışma sağlamıştır. Bu

sonuçlar, R1234yf'nin özellikle enerji tasarrufu ve sistem verimliliği açısından avantajlı olduğunu açıkça ortaya koymaktadır.

Kuantsal kimyasal hesaplamalar ve moleküler modelleme çalışmaları, bu termodinamik farklılıkların moleküler kökenlerini anlamamıza olanak sağlamıştır. R123a ve R1234yf'nin moleküler yapıları, toplam enerjileri, dipol momentleri ve yük yoğunluğu dağılımları incelenmiş, moleküler elektron potansiyel (MEP) haritaları aracılığıyla yüksek kimyasal reaktiviteye sahip bölgeler belirlenmiştir. HOMO-LUMO analizi ise moleküllerin elektron dağılımı ve olası etkileşim potansiyelleri hakkında önemli bilgiler sunmuştur. Bu analizler, R1234yf'nin daha kararlı bir elektron yapısına ve daha düşük enerji bariyerlerine sahip olduğunu, bu nedenle sistem içindeki termodinamik kayıpları minimize edebildiğini göstermektedir.

Vibrasyonel, rotasyonel ve translasyonel enerji analizleri de moleküler düzeyde soğutucu davranışlarını destekler niteliktedir. R1234yf'nin vibrasyonel enerji değerlerinin R123a'ya kıyasla daha yüksek olması, molekülün daha esnek titreşim modlarına sahip olduğunu ve ısı aktarım süreçlerinde daha etkin bir rol oynayabileceğini göstermektedir. Entropi analizleri ise her iki molekül için benzer değerler sunsa da, R1234yf'nin rotasyonel ve translasyonel katkılarındaki hafif üstünlük, sistem içi düzensizlik ve enerji dağılımı açısından ek avantaj sağlamaktadır.

Genel olarak, bu çalışma hem makroskobik termodinamik veriler hem de mikroskobik moleküler özellikler açısından R1234yf'nin R123a'ya kıyasla daha üstün bir performans sergilediğini ortaya koymuştur. R1234yf, daha yüksek COP, daha yüksek ekserji verimi,

daha düşük ekserji tahribatı ve daha düşük kompresör işi ile enerji verimliliği açısından öne çıkarken; çevresel açıdan da sürdürülebilir bir seçenek olarak değerlendirilebilir. Öte yandan, R123a' nın performansı, sistem verimliliği ve enerji kayıpları açısından daha düşük olup, soğutucu seçimi sırasında verimlilik ile sürdürülebilirlik arasında dikkatle değerlendirilmesi gereken bir tercih olduğunu göstermektedir.

Bu sonuçlar, soğutucu seçiminde hem enerji verimliliği hem de çevresel sürdürülebilirlik kriterlerinin dikkate alınması gerektiğini ve moleküler düzeyde yapılan analizlerin, makroskobik sistem performansını anlamada kritik bir rol oynadığını ortaya koymaktadır. Ayrıca, çalışmanın kapsamı, gelecekte yapılacak soğutucu tasarım ve optimizasyon çalışmalarına önemli bir temel sağlayacak niteliktedir.

KAYNAKLAR

- [1] Richter. M., McLinden. M. O., & Lemmon. E. W. (2011). Thermodynamic properties of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf): Vapor pressure and p–p–T measurements and an equation of state. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 40(3). 033101.
- [2] Huber. M. L., & Assael. M. J. (2016). Correlations for the viscosity of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf) and trans-1,3,3,3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)). *International Journal of Thermophysics*. 37(7). 79.
- [3] Perkins. R. A., & Huber. M. L. (2011). Measurement and correlation of the thermal conductivity of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf) and trans-1,3,3,3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)). *International Journal of Thermophysics*. 32(4). 705–718.
- [4] Mulero. A., et al. (2012). Surface tension of refrigerants: A new correlation using the boiling point as reference. *Fluid Phase Equilibria*. 314. 68–80.
- [5] Tillner-Roth. R., & Baehr. H. D. (1994). An international standard formulation for the thermodynamic properties of 1,1,1,2-tetrafluoroethane (HFC-134a) for temperatures from 170 K to 455 K and pressures up to 70 MPa. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 23(5). 657–729.
- [6] Laesecke. A., Bair. E. S., & Huber. M. L. (2016). Reference correlation for the viscosity of 1,1,1,2-tetrafluoroethane (R-134a). *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 45(3). 033101.
- [7] Assael. M. J., et al. (1999). Viscosity and thermal conductivity of liquid halogenated methane and ethane refrigerants from about 200 K to near the critical temperature. at saturation. *International Journal of Thermophysics*. 20(3). 847–865.
- [8] Baginsky. A. V., et al. (2009). Thermal conductivity and thermal diffusivity of “ozone-safe” refrigerant R134a in liquid state within the range of

- temperatures 295.9–354.9 K and pressures from the liquid–vapor equilibrium line up to 4.08 MPa. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 82(5). 1134–1138.
- [9] Papadaki. M.. et al. (1993). Thermal conductivity of R134a and R141b within the liquid phase at saturation. *International Journal of Thermophysics*. 14(1). 183–190.
- [10] Kim. D.. et al. (2021). Thermal conductivity measurements and correlations of refrigerant mixtures containing R1234yf. *International Journal of Refrigeration*. 124. 1–8.
- [11] Cui. J.. et al. (2016). Surface tension and liquid viscosity of R32+R1234yf and R32+R1234ze(E) mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 61(11). 3793–3801.
- [12] Mulero. A.. et al. (2017). Surface tension of refrigerants: A new correlation using the boiling point as reference. *Fluid Phase Equilibria*. 442. 68–80.
- [13] Ooi. K. T.. & Tan. C. S. (2012). Compressor performance comparison when using R134a and R1234yf. *Proceedings of the International Compressor Engineering Conference*. 1–7.
- [14] Richter. M.. & McLinden. M. O. (2011). Thermodynamic properties of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf): Vapor pressure and p–ρ–T measurements and an equation of state. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 40(3). 033101.
- [15] Huber. M. L.. & Assael. M. J. (2016). Correlations for the viscosity of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf) and trans-1,3,3,3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)). *International Journal of Thermophysics*. 37(7). 79.
- [16] Perkins. R. A.. & Huber. M. L. (2011). Measurement and correlation of the thermal conductivity of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf) and

trans-1.3.3.3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)). *International Journal of Thermophysics*. 32(4). 705–718.

- [17] Mulero. A.. et al. (2012). Surface tension of refrigerants: A new correlation using the boiling point as reference. *Fluid Phase Equilibria*. 314. 68–80.
- [18] Tillner-Roth. R.. & Baehr. H. D. (1994). An international standard formulation for the thermodynamic properties of 1.1.1.2-tetrafluoroethane (HFC-134a) for temperatures from 170 K to 455 K and pressures up to 70 MPa. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 23(5). 657–729.
- [19] Laesecke. A.. Bair. E. S.. & Huber. M. L. (2016). Reference correlation for the viscosity of 1.1.1.2-tetrafluoroethane (R-134a). *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 45(3). 033101.
- [20] Assael. M. J.. et al. (1999). Viscosity and thermal conductivity of liquid halogenated methane and ethane refrigerants from about 200 K to near the critical temperature. at saturation. *International Journal of Thermophysics*. 20(3). 847–865.
- [21] Baginsky. A. V.. et al. (2009). Thermal conductivity and thermal diffusivity of “ozone-safe” refrigerant R134a in liquid state within the range of temperatures 295.9–354.9 K and pressures from the liquid–vapor equilibrium line up to 4.08 MPa. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 82(5). 1134–1138.
- [22] Papadaki. M.. et al. (1993). Thermal conductivity of R134a and R141b within the liquid phase at saturation. *International Journal of Thermophysics*. 14(1). 183–190.
- [23] Kim. D.. et al. (2021). Thermal conductivity measurements and correlations of refrigerant mixtures containing R1234yf. *International Journal of Refrigeration*. 124. 1–8.

- [24] Cui. J.. et al. (2016). Surface tension and liquid viscosity of R32+R1234yf and R32+R1234ze(E) mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 61(11). 3793–3801.
- [25] Mulero. A.. et al. (2017). Surface tension of refrigerants: A new correlation using the boiling point as reference. *Fluid Phase Equilibria*. 442. 68–80.
- [26] Ooi. K. T.. & Tan. C. S. (2012). Compressor performance comparison when using R134a and R1234yf. *Proceedings of the International Compressor Engineering Conference*. 1–7.
- [27] Richter. M.. & McLinden. M. O. (2011). Thermodynamic properties of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf): Vapor pressure and p–p–T measurements and an equation of state. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 40(3). 033101.
- [28] Huber. M. L.. & Assael. M. J. (2016). Correlations for the viscosity of 2,3,3,3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf) and trans-1,3,3,3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)). *International Journal of Thermophysics*. 37(7). 79.
- [29] Calm. J.M.. “The Next Generation of Refrigerants – Historical Review. Considerations. and Outlook.” *International Journal of Refrigeration*. 31(7). 1123–1133 (2008).
- [30] Minor. B.H.. Spatz. M.W.. “HFO-1234yf Low GWP Refrigerant Update.” *SAE Technical Paper 2008-01-0827*. DOI:10.4271/2008-01-0827.
- [31] McLinden. M.O.. et al.. “Thermodynamic Properties of 2,3,3,3-Tetrafluoropropene (R1234yf): An Update.” *Journal of Chemical & Engineering Data*. 57(7). 1684–1695 (2012).
- [32] Huber. M.L.. et al.. “Viscosity Correlation for R1234yf and R1234ze(E).” *International Journal of Refrigeration*. 34(5). 1485–1493 (2011).

- [33] Assael, M.J., et al.. “Reference Correlation for the Viscosity of R134a.” *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 25(1). 135–168 (2012).
- [34] Mulero. Á., et al.. “Surface Tension of Pure Fluids: Correlation and Data Compilation.” *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 41(4). 043105 (2012).
- [35] Lemmon, E.W., Huber, M.L., McLinden, M.O., *NIST REFPROP 10.0: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties Database*. (2018).
- [36] Parr, R.G., Yang, W., *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press (1989).
- [37] Frisch, M.J., et al., *Gaussian 09, Revision D.01*. Gaussian, Inc., Wallingford CT (2013).
- [38] Becke, A.D., “Density-functional Thermochemistry. III. The Role of Exact Exchange.” *J. Chem. Phys.* 98, 5648 (1993).
- [39] Lee, C., Yang, W., Parr, R.G., “Development of the Colle-Salvetti Correlation-energy Formula into a Functional of the Electron Density.” *Phys. Rev. B*. 37, 785 (1988).
- [40] Yamada, H., et al., “Quantum Chemical Study on the Structure and Reactivity of 2,3,3,3-Tetrafluoropropene.” *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*. 1011, 22–28 (2012).
- [41] Çengel, Y.A., Boles, M.A., *Thermodynamics: An Engineering Approach*. 9th Ed., McGraw-Hill, 2019.
- [42] Navarro-Esbrí, J., et al., “Experimental Evaluation of R1234yf as Drop-in Replacement for R134a in Automotive Air Conditioning Systems.” *Applied Thermal Engineering*. 31, 296–303 (2011).

- [43] M. HASHEER SHAIK vd.. Theoretical investigation of low GWP refrigerant mixtures as an alternative to R-134A in a domestic refrigerator. *Sigma J Eng Nat Sci*. Vol. 41. No. 5. pp. 969–979. October. 2023.
- [44] Z. Meng vd.. Performance of low GWP R1234yf/R134a mixture as a replacement for R134a in automotive air conditioning systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Volume 116. January 2018. Pages 362-370.
- [45] OpenAI. (2025). *ChatGPT (March 2025 version)* [Large language model]. <https://chat.openai.com>
- [46]. A. Alkan vd.. Experimental investigation of the effects of compressor types on the performance of an automobile air conditioning system using R1234yf. *International Journal of Refrigeration*. Volume 155. November 2023. Pages 58-66.
- [47].A. KEVEN. Exergy Analyses of Vehicles Air Conditioning Systems for Different Refrigerants. *International Journal of Computational and Experimental Science and ENGINEERING (IJCESEN)*. Vol. 9-No.1 (2023) pp. 20-28.
- [48] Mota-Babiloni. A.. et al.. “Analysis of the Replacement of R134a with R1234yf in a Refrigeration System.” *Applied Thermal Engineering*. 71. 259–265 (2014).
- [49] Bolaji. B.O.. “Performance of R152a and R32 as Alternative Refrigerants to R134a in a Domestic Refrigerator.” *Energy Conversion and Management*. 52(1). 183–187 (2011).
- [50] Aprea. C.. Greco. A.. “Exergy Analysis of R134a and R1234yf Vapour Compression Refrigeration Systems.” *International Journal of Refrigeration*. 60. 1–15 (2015).

- [51] Calm. J.M.. and Hourahan. G.C. “Refrigerant data summary.” HPAC Engineering. vol. 79. no. 1. pp. 50–64. 2007.
- [52] McLinden. M.O.. Brown. J.S.. Brignoli. R.. Kazakov. A.F.. and Domanski. P.A. “Limited options for low-GWP refrigerants.” Nature Communications. vol. 8. Article 14476. 2017.
- [53] Nielsen. O.J.. et al. “Atmospheric chemistry of HFO-1234yf: Kinetics and mechanisms of its gas-phase reactions with OH radicals.” Chemistry – A European Journal. vol. 19. pp. 15316–15325. 2013.
- [54] Minor. B.H.. and Spatz. M.W. “HFO-1234yf low global warming potential refrigerant evaluation.” International Refrigeration and Air Conditioning Conference. Purdue University. 2008.
- [55] Zilio. C.. Brown. J.S.. Cavallini. A.. and Sawalha. S. “R1234yf as a drop-in replacement for R134a in automotive refrigeration systems.” Applied Thermal Engineering. vol. 31. pp. 202–209. 2011.
- [56] Bolaji. B.O.. and Huan. Z. “Ozone depletion and global warming: Case for the use of natural refrigerants – A review.” Renewable and Sustainable Energy Reviews. vol. 18. pp. 49-54. 2013.
- [57] M. Şimşek, Ö. Tamer, N. Dege, D. Avcı, H. Mahmood, Y. Atalay, Mater. Today Commun. 38, 108021 (2024)
- [58] S. Topaloglu, S. Güneşdoğdu Sağdıç, Polycycl. Aromat. Compd. 44, 4305 (2024)