



T.C.
NECMETTİN ERBAKAN NİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**TİTANYUM KATKILANMIŞ ALTIN NANO
TOPAKLARIN YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN
TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ**

Feride Pınar ÖZTURAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

NanoBilim ve NanoMühendislik Anabilim Dalı

Ekim-2018
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Feride Pınar ÖZTURAN tarafından hazırlanan "TİTANYUM KATKILANMIŞ ALTIN NANO TOPAKLARIN YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ" adlı tez çalışması 22/10/2022 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Nanobilim ve Nanomühendislik Anabilim Dalı'nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Başkan

Prof. Dr. Haluk SAFAK

Danışman

Prof. Dr. Ömer DERELİ

Üye

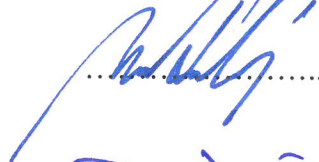
Prof. Dr. Oğuz DOĞAN

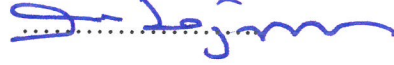
Üye

Üye

İmza







.....

.....

Yukarıdaki sonucu onaylıyorum.

Prof. Dr. Ahmet AVCI
FBE Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.

Feride Pınar ÖZTURAN

Tarih:

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

TİTANYUM KATKILANMIŞ ALTIN NANO TOPAKLARIN YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ

Feride Pınar ÖZTURAN

Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Nanobilim ve Nanomühendislik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ömer DERELİ

2018, 47 Sayfa

Jüri

Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Prof. Dr. Ömer DERELİ
Prof. Dr. Oğuz DOĞAN

Bu çalışmada, titanyum katkılanmış altın nanotopakların yapısal özellikleri incelenmektedir. Nötr ve anyonik titanyum katkılı altın nanotopakların potansiyel enerji yüzey taraması coalescence kick programı ile B3LYP/Lan12DZ teorisi vasıtasıyla yapılmıştır. En kararlı yapının doğru minimum olup olmadığını test edebilmek için frekans hesabı yapılmıştır. Potansiyel enerji yüzeyi taramasında CK programı kullanılmıştır. Tüm diğer hesaplamalar için Gaussian09 yazılımı kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Altın, DFT, Nanotopak, Potansiyel enerji yüzeyi, Titanyum

ABSTRACT

MS THESIS

**INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL PROPERTIES OF TITANIUM
ADDITIVE GOLDEN CLUSTERS BY THEORETICAL METHODS**

Feride Pınar ÖZTURAN

**THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE
OF NECMETTİN ERBAKAN UNIVERSITY
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE NANOSCIENCE AND
NANOENGINEERING**

Advisor: Prof. Dr. Ömer DERELİ

2018, 47 Pages

Jury

**Prof. Dr. Haluk ŞAFAK
Prof. Dr. Ömer DERELİ
Prof. Dr. Oğuz DOĞAN**

In this study, structural properties of titanium doped gold clusters are investigated. The potential energy surface screening of neutral and anionic titanium doped gold clusters was performed by means of the B3LYP / Lan12DZ theory with the coalescence kick program. The frequency calculation was performed in order to test whether the most stable structure is the correct minimum. CK program was used for potential energy surface screening. Gaussian09 software was used for all other calculations.

Keywords: DFT, Gold, Titanium, Potential energy surface, Golden clusters

ÖNSÖZ

Bu tez çalışması Necmettin Erbakan Üniversitesi Ahmet Keleşođlu Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği Bölümü Öğretim Üyelerinden Prof. Dr. Ömer DERELİ yönetiminde hazırlanarak, Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne yüksek lisans tezi olarak sunulmuştur.

Yüksek Lisans öğrenimim süresince karşılaştığım tüm zorlukları aşmamda yardımcı olan ve bana her türlü desteđi veren, engin bilgilerinden yararlandığım, öğrencisi olmaktan gurur duyduğum, çok değerli hocam Prof. Dr. Ömer DERELİ 'ye teşekkürü bir borç bilir, değerli jüri huzurunda saygılarımı sunarım.

Gazi Üniversitesinde moleküllerin hesaplamalarının yapılması için gerekli kolaylığı gösterip, spektrometrenin kullanılmasında çok yardımcı olan Doç. Dr. Yusuf ERDOĐDU' a teşekkür ederim.

Yüksek Lisans öğrenimim süresince ve tez çalışmamda her türlü yardımını ve desteđini benden esirgemeyen değerli hocam Arş. Gör. Dr. Ebru KARAKAŞ SARIKAYA'ya teşekkür ederim.

Ve bütün çalışmalarımda maddi manevi desteđini esirgemeyen, bütün zorluklarda hep yanımda olduğunu hissettiren değerli aileme ve sevgili eşim Ođuzhan ÖZTURAN'a çok teşekkür ederim.

Feride PINAR ÖZTURAN
KONYA-2018

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR	viii
1. GİRİŞ	1
1.1. Atom Topakları	7
1.2. Topakların Atomik Yapısı.....	9
1.3. Topakların Elektronik Yapısı	10
1.4. Elektronik Yapı Teorisi Metotları	12
1.4.1. Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi	14
1.4.2. Karma yoğunluk fonksiyon teorisi	15
1.4.3. B3LYP	15
1.4.4. Baz Setleri	16
1.5. Potansiyel Enerji Yüzeyleri.....	16
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	18
3. MATERYAL VE YÖNTEM	21
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA	22
4.1. Nötr Topaklar	22
4.1.1. Au ₂ Ti Nötr Topakları	22
4.1.2. Au ₃ Ti Nötr Topakları	23
4.1.3. Au ₄ Ti Nötr Topakları	23
4.1.4. Au ₅ Ti Nötr Topakları	25
4.1.5. Au ₆ Ti Nötr Topakları	28
4.2. Negatif İyon Topakları.....	29
4.2.1. Au ₂ Ti Negatif İyon Topakları	29
4.2.2. Au ₃ Ti Negatif İyon Topakları	30
4.2.3. Au ₄ Ti Negatif İyon Topakları	31
4.2.4. Au ₅ Ti Negatif İyon Topakları	32
4.2.5. Au ₆ Ti Negatif İyon Topakları	35
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	36
KAYNAKLAR	38
ÖZGEÇMİŞ	47

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Al: Aliminyum
Au: Altın
Na: Sodyum
Mg: Magnezyum
Cu: Bakır
Ti: Titanyum

Kısaltmalar

HF : Hartree-Fock Yöntemi
DFT : Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (Density Functional Theory)
LYP : Lee, Yang ve Parr
GTO : Gaussian Tipi Orbital (Gaussian Type Orbitals)
STO : Slater Tipi Orbital (Slater Type Orbitals)
STO-NG: Küçük Ölçekli Slater Tipi Orbital (Slater Type Orbitals)
TZVP : Triple Zeta Valans Polarize
B3LYP: Becke (B) Lee-Yang-Parr (LYP) Yöntemi
PED : Potansiyel Enerji Dağılımı
TED : Toplam Enerji Dağılımı
PQS : Paralel Kuantum Çözümlenmeleri (Parallel Quantum Solutions)
SQM : Skala Edilmiş Kuantum Mekanik Metot (Scaled Quantum Mechanic)
NBO : Natürel Bağ Orbital Analizi
HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital- En Yüksek İşgal Edilmiş Moleküler Orbital
LUMO : Lowest Unoccupied Molecular Orbital- En Düşük İşgal Edilmemiş Moleküler Orbital
FMO : Frontier Molecular Orbital Theory- Moleküler Orbitallerin Sınırları
MEP : Moleküler Elektrostatik Potansiyel Yüzeyleri
MM : Moleküler Mekanik Yöntemler
MINDO: Modified Neglect of Diatomic Overlap

1. GİRİŞ

“Topak” sözlükte “aynı tür nesnelere bir araya gelmesi ya da birlikte büyümesi” olarak tanımlanmaktadır. Topaklar maddenin yeni bir halidir. Nanotopaklar onlarca ya da yüzlerce atomun bir araya gelmesi ile meydana gelen bir parçacıktır. Bu parçacıklar ortalama 1 ile 10 nanometre boyutlarındadır. Nanotopaklar izole edilmiş tek bir mikroskobik atom veya molekül ile makroskobik ölçekte maddenin katı hali arasında bir geçiş durumu olarak göz önüne alınabilir. Maddenin izole edilmiş haldeki atom veya molekül temel alınarak, topakların boyutlarına göre maddenin bulk halinin elektronik ve yapısal birçok özelliği belirlenebilir. Bunun yanında, maddenin bu hali hem bulk durumundan hem de moleküler durumdakinden çok farklı özelliklere sahip olabilmektedir (Huang ve ark., 2010; Shao ve ark., 2010; Zhai ve ark., 2010; Pal ve ark., 2011; Chen ve ark., 2013).

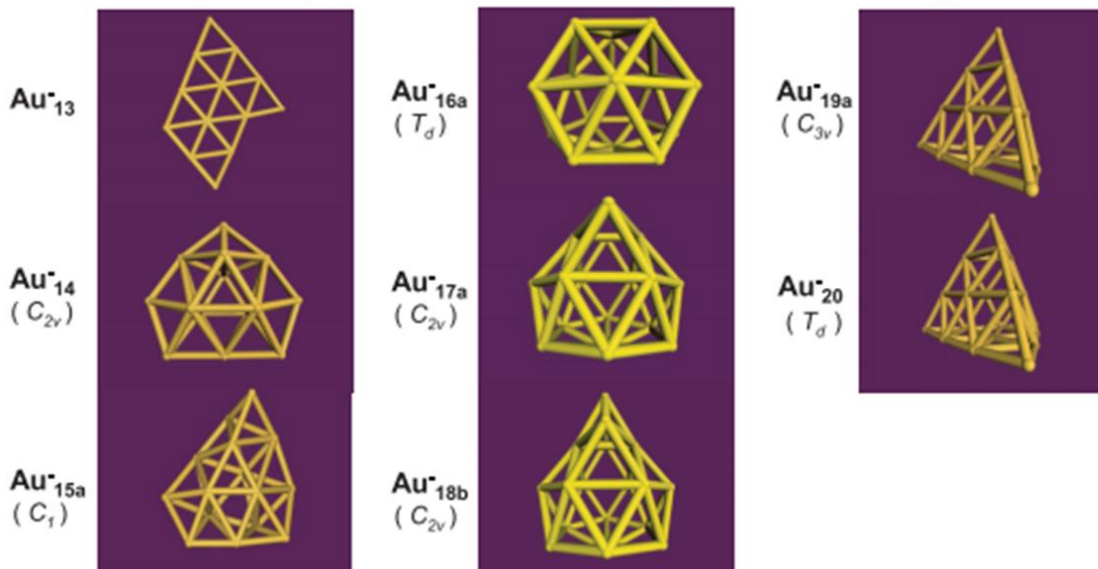
Nanotopaklar hem temel bilimler hem de teknolojiye uygulama açısından bakıldığında son yıllarda aşırı ilgi çekmiştir. Nanotopakların Fizik, Kimya, Biyoloji, Mühendislik ve Medikal alanlarda çok yoğun uygulamaları vardır. Aşağıdaki kısımlarda topaklar ile ilgili olarak birkaç uygulama tartışıldıktan sonra, çalışmanın temelini oluşturan Altın nanotopakları hakkında bilgiler verilecektir.

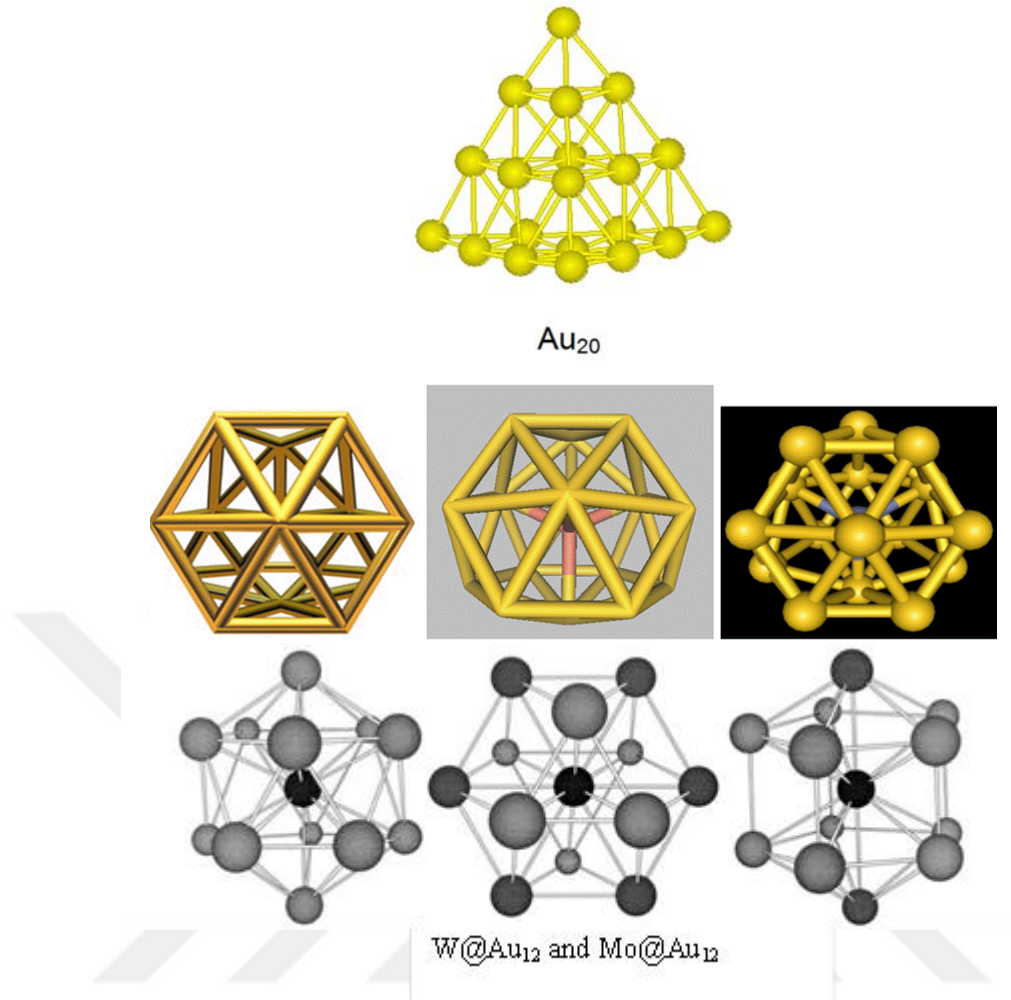
Topakların yüzey-hacim oranı çok yüksektir. Dolayısıyla, kimyasal birçok olay topağın yüzeyindeki reaksiyonlar ile meydana gelir. Bu anlamda topakların yüzey fiziğinde farklı bir yeri vardır (Wang ve ark., 2009b; 2010). Bir topağın yüzey karakteristiklerinin belirlenmesi, maddenin bulk durumundaki yüzey karakteristiklerinin belirlenmesine imkân sağlayabilir. Nanotopakların diğer önemli özelliklerinden bir tanesi de katalizör olarak kullanılmasıdır. Özellikle topakların endüstriyel kataliz özelliği çok önemlidir (Wang ve ark., 2009a). Endüstriyel katalizde dikkati çeken örnekleri: petrol ürünlerinin saflaştırılması, kirlilik kontrolü ve farmakolojik reaksiyonlar olarak sayılabilir (Wang ve ark., 2007a).

Bu çalışma Altın nanotopakları ile ilgili olacaktır. Topak çalışmaları arasında Altın atomik nanotopaklarının çok ayrı bir yeri vardır. Dolayısıyla aşağıdaki kısımlarda, Altın nanotopaklar ve uygulamaları anlatılacaktır. Altın nanoparçacıkları diğer nanoparçacıklarla karşılaştırıldığı zaman, daha kararlı olduğunu, toksik etkiye sahip olmadığını ve kolaylıkla fonksiyonize olduğunu söyleyebiliriz. Altın nanoparçacıklar DNA, enzimler ve bazı fonksiyonel polimerler ile aktivitelerini etkilemeksizin, onlarla kolaylıkla bir arada bulunabilirler. Bu yüzden Altın nanoparçacıklar biyo-

nanoteknolojik olarak çok önemli bir çalışma alanı meydana getirir. Altın en asal metallere birisi olarak bilinir. Bununla beraber, Altın nanopaklar çok dikkate değer bir biçimde de katalizör özelliği göstermektedir. Altın nanopakların katalitik ve diğer özelliklerinin keşfedilmesinden sonra, saf Altın nanopaklarının yapısı ve özelliklerinin belirlenmesi ve bu nanopakların karakterizasyon çalışmaları hızlı bir şekilde artmıştır. Nanosensör ve nanoelektronikteki potansiyel uygulamalarındaki bazı dikkate değer özelliklerin belirlenmesinden sonra ve Altın nanopaklar ve nanoparçacıklar çok ilgi çekici bir araştırma alanı olmuştur (Li ve ark., 2003; Zhai ve ark., 2005; Bulusu ve ark., 2006; 2007; Wang ve ark., 2007a; Wang ve ark., 2007b; Huang ve ark., 2009; Wang ve ark., 2009a; Wang ve ark., 2009b; Huang ve ark., 2010; Shao ve ark., 2010; Wang ve ark., 2010) .

Aşağıda literatürde verileri bulunan bazı Altın nanopaklarının geometrileri görülmektedir (Li ve ark., 2003; Zhai ve ark., 2005; Bulusu ve ark., 2006; 2007; Wang ve ark., 2007a; Wang ve ark., 2007b; Huang ve ark., 2009; Wang ve ark., 2009a; Wang ve ark., 2009b; Huang ve ark., 2010; Shao ve ark., 2010; Wang ve ark., 2010).





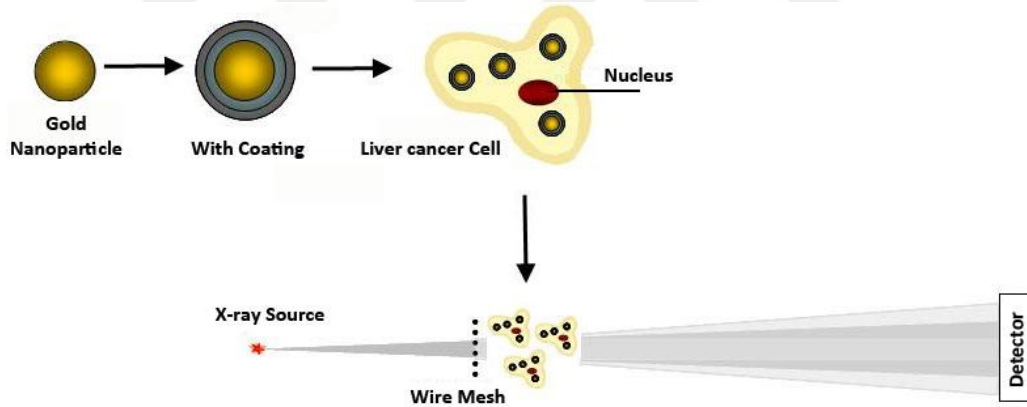
Şekil 1.1. Literatürde verileri bulunan bazı Altın nanotopaklarının geometrileri

Erken tanının en önemli olduğu hastalıkların ilk sırasında kanser yer alıyor. Kanser tanısı ne kadar erken konulursa tedavide başarı oranı da o kadar yüksek oluyor. Erken tanıda amaç, toplumda sık görülen ve erken tanındığı zaman yapılacak tedavi ile hastalığın tamamen yok edilme şansı yüksek olan kanser türleri üzerine yoğunlaşmaktır. Erken teşhis ile ilgili olarak Altın nanotopaklarının kullanıldığını gösteren iki farklı durum aşağıda anlatılmıştır.

Kanser en sık görülen hastalık türüdür. Dünya çapında her yıl yüz binlerce ve hatta milyonlarca kişiye kanseri teşhisi konulmaktadır. Kanser hastaları için erken tanının ne kadar önemli olduğu yukarıda bahsedildi. Fakat bu tip kanser vakalarını erken teşhis etmek biraz zor olmaktadır. 5 mm daha büyük boyutundaki tümörler Ultrason, BT ve MRI taramaları ile rahatlıkla teşhis edilmektedir. Fakat 5 mm boyutlarına ulaşmış tümörler artık saldırgan duruma geçmiştir. Bu tümör artık çok daha agresiftir.

Dolayısıyla, bu tümörler için erken teşhis ortadan kalkmıştır. Bu durumda tedavi klasik kanser kemoterapisi veya cerrahi yöntemler kullanılarak tedavi edilmesi gerekmektedir. Bu durum da hastalığın tedavisi çok pahalı olmaktadır. Birçok durumda da ise tedavi tamamlanamadan hasta hayatını kaybetmektedir.

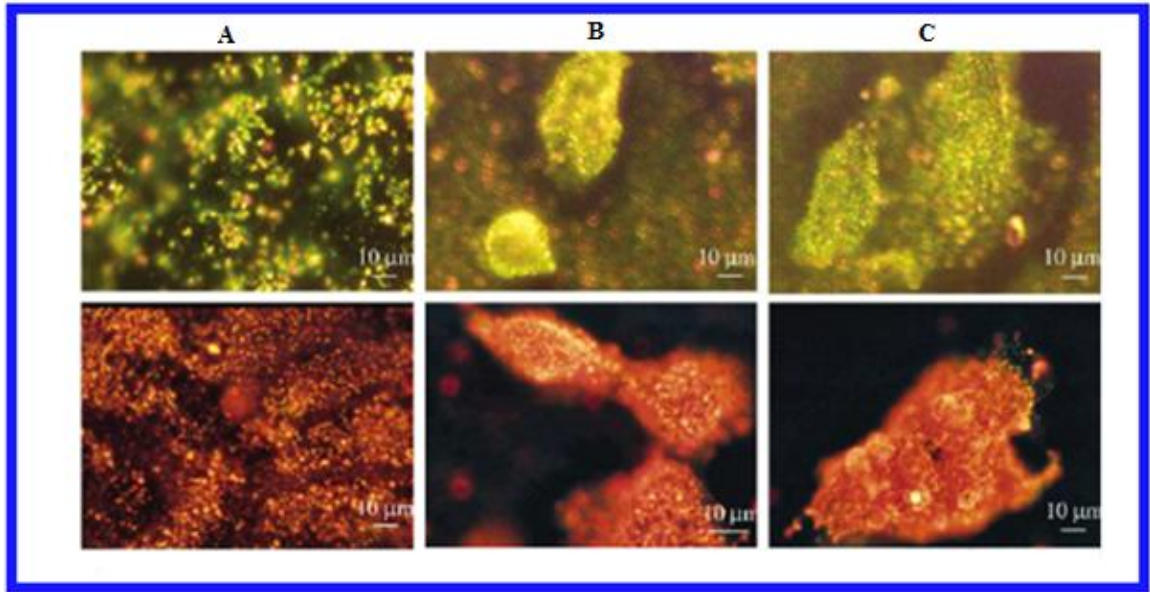
Brown üniversitesinden Rose-Petruck ve arkadaşları 5 mm'den daha küçük karaciğer kanserini tespit etmek için yeni bir yöntem geliştirmişlerdir. Bu yöntemle ilgili şematik gösterim aşağıda verilmiştir. Bu çalışma için, Altın nanoparçacıklar polimer ile kaplama işlemini yapılmıştır. Daha sonra erken dönem kanser hücresi içeren karaciğer dokusu içerisine enjekte edilmiştir. Sonucunda, Altın nanotopaklarını erken dönem tümörlerine sahip doku içerisinde X-ışını görüntüleme tekniği kullanarak teşhis etmeyi başarmışlardır. Yapılan deneyde 5 mm'den daha küçük tümörleri doku içerisinde belirleyebilmişlerdir. Bu yöntem rutin bir kanser tarama yöntemi değildir. Burada kullanılan yöntemde özellikle bazı hepatitli ve risk taşıyan hastalar için sıradan bir yöntem olarak kullanılabilir. Bu yöntemle birkaç milimetre boyutundaki tümörler teşhis edilir duruma gelene bilinir (Rand ve ark., 2011) .



Şekil 1.2. Rose-Petruck yönteminin şematik gösterimi

Bu çalışmaya ek olarak, Altın nanoparçacıklar kanser hücrelerini tespit etmek için El Sayed ve arkadaşları tarafından farklı bir yöntem geliştirilmiştir. Bu yöntem genel hatları ile aşağıda anlatılmaktadır. Her bir kanser hücresi EGFR (Epidermal Growth Factor Receptor) ve anti-EGFR isimli proteinlere sahiptir. Kanser hücresinin bu özelliklerinde dolayı Altın nanoparçacıklar tarafından tutulabilmektedir. El Sayed tarafından yapılan çalışmada, Altın nanoparçacık çözeltisi içerisine hem sağlıklı hücreleri, farklı bir Altın nanoparçacık çözeltisi içerisine de kanserli hücreleri ekleyip daha sonra bu karışımları bir görüntüleme tekniği kullanılarak incelemişlerdir. Kanserli

hücrelerin bulunduğu karışımda, nanoparçacık ile kanserli hücre bir birini tutmaktadır. Bu şekilde Altın nanoparçacık ile kanserli hücreler belirli bölgelere öbikleşmektedirler. Bu karışımlar bir görüntüleme tekniği kullanılarak incelenecek olursa, bazı bölgelerin diğer bölgelere göre daha parlak olduğu gözlenmiştir. Sağlıklı hücreler bu nanoparçacıklara bağlanmayacağından dolayı bu karışımlar ise görüntüleme tekniği ile incelendiğinde her hangi bir bölgede bir toplanma gözlenmeyecektir. Bu teknik ile belirli bir bölge yoğun bir parlaklığa sahip ise bu karışımda yapının kanserli hücre ihtiva ettiği sonucuna kolaylıkla varılabilir. Kısaca anlattığımız bu olayın şematik bir gösterimi aşağıda mevcuttur. A sütununda bulunan karışımda sağlıklı hücreler ve altın nano-parçacıklarından meydana gelen karışım vardır. B ve C sütununda ise kanserli hücrelerden oluşan karışımın bir görüntüleme tekniği kullanılarak elde edilmiş görüntüleridir (El-Sayed ve ark., 2005).



Şekil 1.3. Altın nano parçacıkların iki farklı uygulaması

Yukarıda Altın nanoparçacıklarının iki farklı uygulaması verilmiştir. Her iki durumda da henüz saldırgan duruma geçmemiş halde bulunan kanserli hücreler nasıl tespit edileceği belirtilmiştir. 5 mm den daha küçük boyutlara sahip kanser hücrelerinin tespitinin yapılabileceği bir sistem olarak ortaya konulmuştur. Bu noktada bizim yapacağımız çalışmanın başlangıç noktasını ise bu durumlar ortaya koymaktadır. Proje kapsamında yapılacak çalışma ile Altın nanotopaklar teorik olarak incelenecektir. Bu şekilde incelenen Altın nanotopakların muhtemel kanser erken teşhisinde kullanılabilecek malzeme olup olmayacağı belirlenecek ve bu ilgili disiplinler arası bir

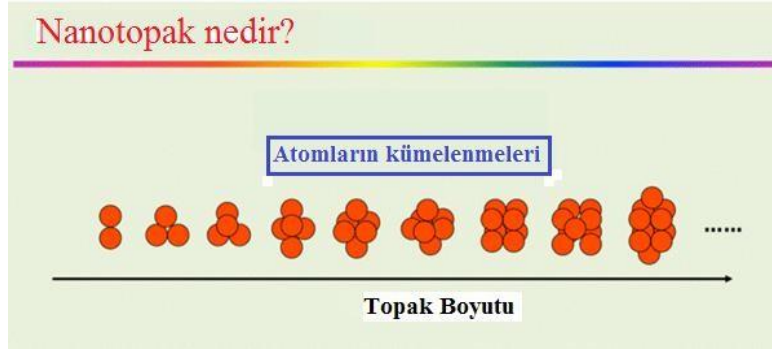
çalışmanın başlangıç noktası olacaktır. Sadece, bu nanoparçacıkların geometrilerinin ve spektroskopik verilerinin tespiti bile tek başına literatüre çok önemli katkılar sağlayabilecektir.

Son yıllarda bilgisayar teknolojisindeki ve yazılım alanındaki gelişmelerle birlikte, bu teknolojiler bilimsel çalışmalarda da yaygın bir şekilde kullanılır hale gelmiştir. Bilgisayar ortamında yapılan simülasyon çalışmaları; yüksek risk taşıyan, maliyeti yüksek olan veya yüksek hassasiyet gerektiren deneysel çalışmalara bazen tamamlayıcı olarak ve bazen de alternatif olarak yada kendi başına kullanılarak literatüre yüksek miktarda veri sunabilmektedir.

Atomik koordinatların, moleküler enerjilerin ve bu enerjilerin oluşturduğu yüzeylerin matematiksel ifadelerinin bazı teorik metotlarla bilgisayar ortamında simüle edilmesi şeklinde tanımlanabilecek olan moleküler modelleme çalışmaları günümüzde yaygın bir şekilde yapılmaktadır. (Sundaraganesan ve ark., 2005; Erdogdu ve ark., 2009; Dereli ve ark., 2012; Joseph ve ark., 2012; Subashchandrabose ve ark., 2012; Sarıkaya ve ark., 2013) . Moleküler Modelleme çalışmalarında çoğunlukla Elektronik yapı teorisi hesaplama yöntemleri kullanılır. Bu yöntemler ise ab-initio hesaplama yöntemleri ve yarı deneysel yöntemler olarak ikiye ayrılır. Bu iki yöntemin en önemli farkı, hesaplamalarda deneysel bazı değerlerin kullanılmasından doğar. Yarı deneysel yöntemlerde bazı deneysel değerler hesaplamalarda kullanılmaktadır. ab-initio yöntemlerinde ise böyle bir durum söz konusu değildir. Hesaplamalar tamamen teoriktir. Ab- initio yöntemleri da Ab-initio Moleküler Orbital Teori (Ab-initio MO) ve (Density Functional Theory) Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) olmak üzere ikiye ayrılır (Foresman ve Frisch). Günümüzde moleküler modelleme çalışmalarında DFT hesaplama yöntemleri sıklıkla kullanılmaktadır (Dereli ve ark., 2012; Subashchandrabose ve ark., 2012; Sarıkaya ve ark., 2013).

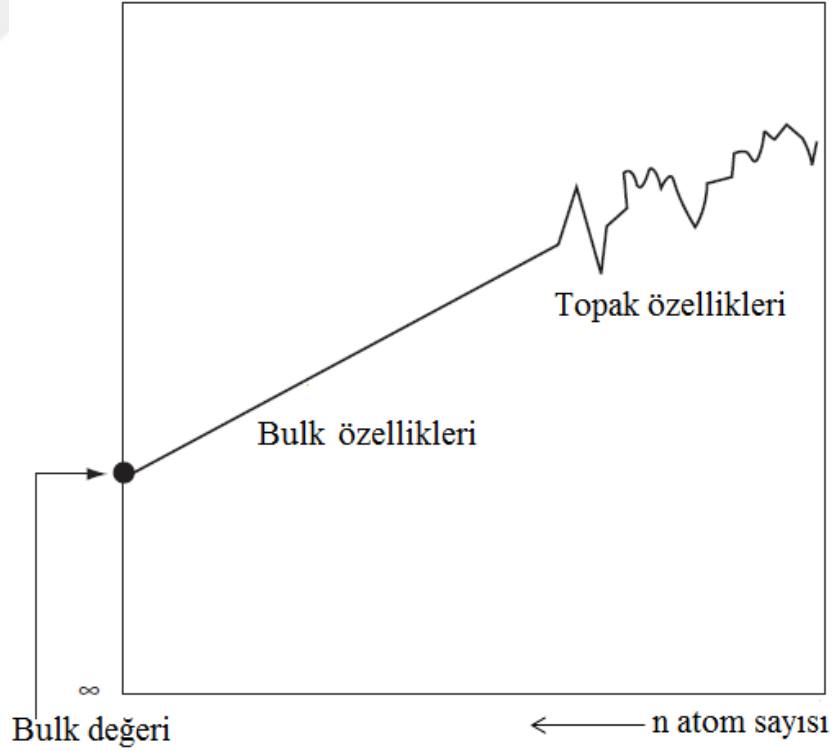
Moleküler bağlanmadan farklı olarak, birkaç atomdan başlayıp, binlerce atoma kadar sayıları artırılabilen atom gurupları atom topaklarını oluştururlar. Bu atom gurupları veya toplulukları tek cins olabildiği gibi farklı cinslerde atomların bir araya gelmesiyle ve birlikte büyütülmesi ile oluşturulabilirler. Üç boyutlu atom topakları en az dört atomun kullanılmasıyla elde edilirler.

1.1. Atom Topakları



Şekil 1.4. Atom kümelenmeleri

Yukarıdaki tanımlama topakların moleküllerden farkı ne? Şeklinde bir soruyu akla getirebilmektedir. Moleküller doğada karalı halde bulunabilirlerken, topaklar laboratuvarlarda özel şartlarda sentezlenirler ve vakum ortamında kararlılık gösterirler. Moleküllerin birbiriyle etkileşimleri zayıftır fakat topaklar kuvvetli etkileşimlere girebilirler. Topakların moleküllere göre çok daha fazla izomeri vardır.



Şekil 1.5. Topak özelliklerin topak büyüklüğüne göre değişimi

Topaklar maddenin kristal hali ile atom ve ya molekül hali arasında bir köprü vazifesi gördüğü ifade edilir. Yukarıdaki şekilde de görüleceği üzere, izole edilmiş atom veya molekül temel alınarak, topakların boyutlarına göre maddenin kristal halinin elektronik ve yapısal birçok özelliği belirlenebilir. Birkaç atomdan oluşan topaklarda, tek bir atomun eklenmesiyle çok farklı topaklara dönüştürebilirsiniz. Topak boyutu birkaç yüz atomdan birkaç bin atoma ulaştığında, büyüklüğü ve özellikleri farklı topaklara ulaşılır. Şekil 1.5’de atomlar arası mesafeye bağlı olarak, manyetik ve optik özelliğin nasıl değiştiğini göstermektedir. Topaklar, mikroskobik yapıdan başlayarak makroskobik sistemlerin oluşmasını anlamak açısından önemlidirler. Çok küçük topaklar moleküllere, çok büyük topaklar bulk yapılara benzer. Topaklar ise bu ara bölgeyi doldururlar (Foresman ve Frisch).

Topakların tek cins atomlardan oluşan topaklar veya farklı cins atomlardan oluşan topaklar, gaz fazında yalıtılmış topaklar, yüzeye konmuş destekli topaklar hapsolmuş topaklar, yüklü topaklar, yüksüz topaklar olmak üzere pek çok çeşidi olmakla beraber en önemli sınıflandırma kriteri topakların büyüklükleridir (Oatbase, 1992). Atom sayısı 2 atomdan 10 atoma kadar olan topaklar çok küçük, 10 atomdan 100 atoma kadar olanlar küçük, 100 atomdan 1000 atoma kadar olanlar orta, 1000 atomdan 10000 atoma kadar olanlar büyük, 100000 atomdan daha fazla olanlara da çok büyük topaklar denir.

Küresel yapıdaki topakların büyüklük küçüklük sınıflandırması biraz farklıdır (Kaiser, 1995). Çapı 1.1 nm den küçük olan ve sayıları 2 atomdan 20 atoma kadar değişen topaklar çok küçük; çapı 1.1 ila 3.3 nm arasında değişen, sayıları 20 atomdan 500 atoma kadar değişen ve yüzey atomlarının hacim atomlarına oranı 0.9-0.5 arasında olan topaklar küçük; çapı 3.3 ila 100nm arasında değişen, atom sayıları 500 den fazla olan ve yüzey atomlarının hacim atomlarına oranı 0.5’ den küçük olan topaklar Büyük topaklardır.

Başka bir sınıflandırma yöntemine göre de topakların fiziksel özellikleri atom sayısına bağlı olarak fazla değişmiyorsa küçük (Schmid, 1994) tersi durumda büyük topaklar (Kreibig ve Vollmer, 1995) olarak sınıflandırılırlar. Topaklar içerdikleri atomların cinsine göre de Metal topakları, Yarıiletken Topaklar, İyonik Topaklar, asalgaz topakları ve molekül topakları şeklinde sınıflandırılmaktadır. Atomlar arası en az etkileşim asalgaz topaklarında en kuvvetli etkileşim ise metal topaklarında gözlenir. Topakların üretilmesinde iki farklı yöntem dikkati çekmektedir (Fantucci ve ark., 1989).

Birinci yöntem buharlaştırma ile biriktirme, diğeri ise kristal yapıdan ufalama olarak bilinir. Topaklar elektron yarda foton çarpışmaları ile incelenirler.

1.2. Topakların Atomik Yapısı

Kristaller 14 farklı kafes yapısı özelliği gösterirler. Bunlar arasında; hacim merkezli kübik(bcc), yüzey merkezli kübik(fcc) ve altıgen paketli (hcp) yapıları en yaygın olanlarıdır.(41) Mg gibi toprak alkali elementler hcp, Na gibi alkali metaller bcc yapı özelliği gösterirler. Öte yandan Cu gibi metaller fcc yapı oluştururlar. Ortaya çıkan bu kristal yapının kaç tane atomdan oluştuğu temel bir soru olmuştur. Topakların büyüklüğü bir fonksiyon olarak değerlendirip kristal yapının açıklanması beklenmektedir. Ancak, mevcut deneysel teknikler kullanılarak toprak yapısını açıklamak zordur. Birçok toprakların analizinde kullanılan spektroskopik teknikler hassas çalışmalar için çok fazla büyük ve kırınım teknikleri için küçüktür. Topak geometrilerinin belirlenmesinde deney ve teori arasındaki sinerji ile artık mümkündür (Ji ve ark., 2005; Bulusu ve ark., 2006; Xing ve ark., 2006; Johansson ve ark., 2008; Huang ve Wang, 2009).

Teorik bilgiler ve gelişmiş bilgisayar kodları sayesinde, araştırmacılar yüzlerce atom içeren toprakların geometrisi, izomerlerini ve kararlılıklarının belirlenmesine olanak sağladı. Bu toprakların hesaplanan elektronik ve titreşim özellikleri, deneylerle karşılaştırılabilir ve teorik olarak belirlenen yapının doğruluğu ispatlanabilir. Bu karşılaştırmalar sıklıkla kullanılan deneysel teknikler Foto elektron spektroskopisi (PES), hapsolmuş iyon elektron kırınımı (TIED, iyon hareketliliği ve infared spektroskopisidir. Verilen bir topağın birçok izomerlerinin olduğu ve en düşük izomerler arasındaki enerji farklılıkları teorik modelin doğruluğu ile verilmektedir. Buna rağmen, bir topağın taban durum geometrisini tam doğru bir şekilde tahmin etmek yine de çok zordur. Daha karmaşık çalışma sonucunda elde edilen veriler ile, taban durum yapısındaki deneysel olarak gözlenen parametreler ise her zaman doğru olmayabilir. Yüksek enerjili izomerler, potansiyel enerji yüzeyinde çok geniş bir alana yayılmış olabilir. Yüksek enerjili izomerin spin çok katlılığı taban durumun çok katlılığından farklı olabilir. Tüm bunlara rağmen, toprakların yapısal dönüşümlerinin nasıl oluştuğunu belirleme çalışmaları dikkate değer bir biçimde ilerlemiştir (Nayak ve ark., 1999; Furche ve ark., 2002; Gilb ve ark., 2002; Lee ve ark., 2005; Gruene ve ark., 2008).

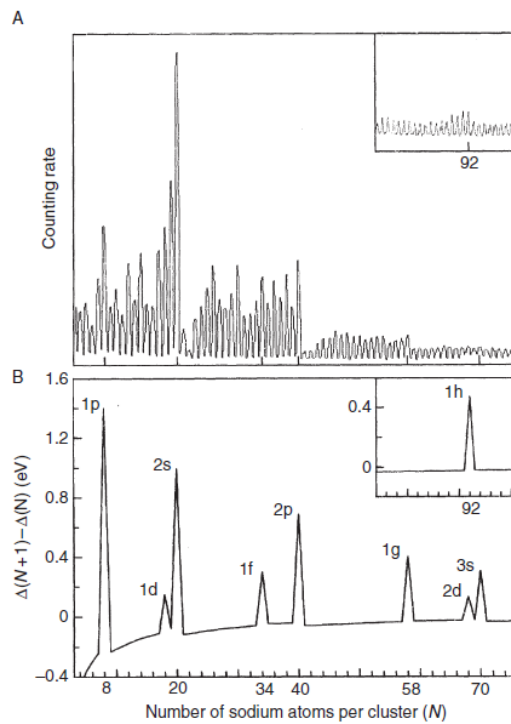
1.3. Topakların Elektronik Yapısı

Atomlarda enerji seviyeleri bir birlerinden ayrık ve kuantize olmuştur. Bir atomdaki en düşük yüksek dolu ve en düşük boş moleküler orbital arasında ki enerji aralığı atomun kararlılığı, reaktivitesi ve elektronik özelliklerini belirlemek için kullanılabilir. Topak veya molekül elde etmek için atomlar bir araya geldikleri için, bu enerji seviyeleri üst üste gelmeye başlar. Bu durumda HOMO-LUMO gap değeri değişir. Elektronlar atomlar tarafından oluşturulan bağlar boyunca dağılır. Kristallerde, ayrık enerji seviyeleri arasındaki çakışma artmaya başlar ve enerji bantları oluşmaya başlar. Enerji bantları Fermi enerjisi civarında bir gap meydana getirdiğinde, kristal ya yarı-iletken ya da yalıtkan malzeme olur. Bağlanma zayıf Wan der Walls ile şiddetli kovalent veya iyonik bağlanmalardan birisi meydana gelir. Elektronlar delokalize olduğunda, metalik bağlanmalar ortaya çıkar. Fermi enerji seviyesindeki enerji gap yok olur. Küçük topaklarda, Topakları metalik yada metalik olmayan elementlerden oluştuğuna bakılmaksızın HOMO-LUMO arasındaki enerji gap her zaman mevcuttur. Bundan dolayı, küçük metal topaklarda mevcut metalik bağlanma oluşması beklenilmemektedir. Na topaklarının kararlılığı Jellium model ve serbest elektron model kullanılarak anlaşılmasına çalışılırken, Knight tarafından ortaya çıkarılmış bir durumdur.

Jellium modelde iyonlarının pozitif yüklerinin R yarıçaplı küreye düzgün olarak dağıldığını ve valans elektronlarının elektronik seviyelere dağıldığı varsayılmaktadır. İlgili küresel potansiyel çukurundaki elektronların dalga fonksiyonları Besel fonksiyonlarıdır. Bu fonksiyonlar kabuktaki her birinin doluluğu ve orbital açısal momentumu tanımlar. Elektronik tabakalar $1s^2$, $1p^6$, $1d^{10}$, $2s^2$, $1f^{14}$, $2p^6$, $1g^{18}$, $2d^{10}$, $3s^2$ gibi artan enerji seviyeleri ile doldur. R'nin sonsuza gitmesi durumunda, topaklar kristal olmaya başlarlar. Düzgün pozitif yükler tüm kristal üzerine düzgün bir şekilde dağılır. Elektron dalga fonksiyonu düzlem dalga olmaya ve ayrık seviyeler ise enerji bantları olmaya başlar. Topaklardaki yukarıdaki elektronik kabuklar aşağıdaki şekilde doldurulur.

$2 (1s^2)$, $8 (1s^2, 1p^6)$, $20 (1s^2, 1p^6, 1d^{10}, 2s^2)$, $34 (1s^2, 1p^6, 1d^{10}, 2s^2, 1f^{14})$, $40 (1s^2, 1p^6, 1d^{10}, 2s^2, 1f^{14}, 2p^6)$, $58 (1s^2, 1p^6, 1d^{10}, 2s^2, 1f^{14}, 2p^6, 1g^{18})$, $70 (1s^2, 1p^6, 1d^{10}, 2s^2, 1f^{14}, 2p^6, 1g^{18}, 2d^{10}, 3s^2)$. Bu yüzden Na tam doludur. Bu kabuklardaki elektronlar ise 2, 8, 20, 34, 40 ve 70 şeklinde verilebilir.

Bunlar aşağıdaki gösterilen Na topaklarının kütle spektrumunda göze çarpan ilgili pikler olarak gözükmektedir. Aşağıdaki spektrumda, eğer bir topak tam olarak kapalı elektronik kabuklara sahip ise, yakınında bulunan diğer topaklardan daha kararlı olduğunu önermektedir. Örneğin, pozitif yüklü Na topaklardaki elektron sayısı nötral topaklarından daha azdır. Dolayısıyla, Pozitif yüklü Na topakları için Jellium model $n=3,9,21$ şeklinde olacaktır. Bu durumdaki nötral topaklar daha kararlıdır. Bu durum deneysel olarak ta gösterilmiştir. Yukarıda anlatıldığı gibi, Jellium model basit metal topakların elektronik yapısını resmetmek için oldukça popüler olmaya başlamıştır.



Şekil 1.6. Topak başına sodyum atom sayısının değişimi

Açıkça, Na^2 topağı bir metal karakteristiği olmaya bilir. Metalik olmayan elementlerin topakları Jellium model kullanılarak açıklanamaz. Bu yüzden, bu tip topakların elektronik yapısındaki değişimi anlaya bilmek için topağın atomik yapısını tam olarak göz önüne almak gerekir.

Şu açıktır ki, Na^2 bir topak olmadığından ametal elementlerin topakları Jellium modeliyle açıklanamaz. Bu nedenle elektronik yapının düzgün bir şekilde anlaşılması için, bir modele başvurmadan, topağının atom yapısını göz önüne alınarak bağlanma ve elektronik yapısını incelemek gerekir. Enerji bandının evrimini anlamak için topak boyutundaki HUMO LUMO boşluğunun değişimini izlemek gerekir. Bu ölçüle

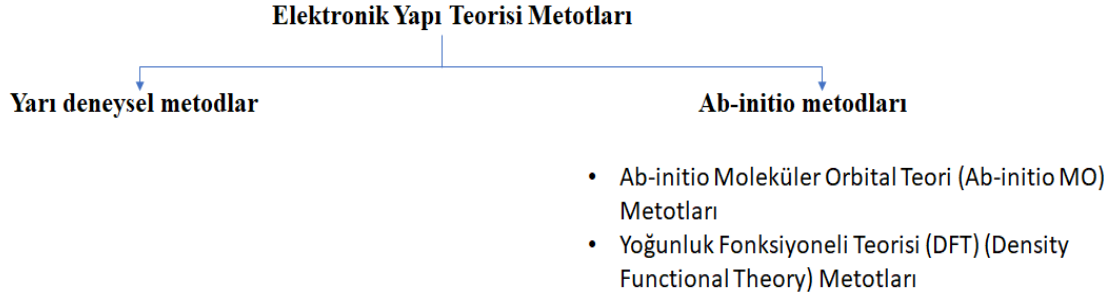
bilinmektedir. Deneylerden ikisi PES ve hız haritası görüntüleme yöntemleridir. Negatif iyon topaklarındaki iyonlardan, sabit frekanslı bir lazerle elektronu söker ve ayrılan elektronun kinetik enerjisi fotoğraflanarak ölçülür. Bunu takip eden PES spektrumlarına karşılık gelen nötr topaklarının elektron enerji seviyelerinin izlerini taşır. Ölçülen PES spektrumları nötr topak ve anyon enerji seviyelerini yansıtır yansıtmadığı ile ilgili tartışmalar olsa da, bir ölçüm yaptığı kesindi. Anyon topakların geometrileri ve nötr topakların geometrileri aynı olduğu kesindir. PES verilerinden elde edilen iki tepe arasında ölçülen HUMO LUMO enerji açığının büyüklüğü fonksiyon olarak çizilebilir.

Geçiş metali topaklarının elektronik yapısı daha karmaşık ve d orbitalindeki elektronlar tarafından belirlenir. Spin yapısından dolayı yukarıda da açıklandığı gibi basit modeller, geçiş metal topaklarının elektronik yapısını açıklamasını yapamıyor. Yarı iletken topak elemanları için HUMO LUMO boşluk evrimi farklıdır, küçük topaklar büyüdükçe daha küçük HUMO LUMO boşlukları oluşur. Hız harita görüntüleme yöntemi fotoğrafın asimetrisinin tespitine imkân vermiş ve elektronun çıktığı orbitalde olduğunu göstermiştir. Son çalışmalar süper atomların izoelektronik sistemlerin çalışmaları kullanılarak ölçülebileceğini ortaya koymuştur. Örneğin, Ni, Pd ve Pt elementleri TiO, ZrO ve WC benzemektedir (Knight ve ark., 1984; Rao ve ark., 1987; Liu ve ark., 1989; Thomas ve ark., 2002; Jena ve Castleman, 2006; Peppernick ve ark., 2010a; Peppernick ve ark., 2010b).

1.4. Elektronik Yapı Teorisi Metotları

Bir moleküler sistemin herhangi bir özelliğinin hesaplanabilmesi için o sistemin dalga fonksiyonunun ve hesaplanacak özelliğe karşılık gelen operatörün bilinmesi gerekir. Oysa Hidrojen atomu ve hidrojene benzer sistemler dışında çok elektronlu sistemlerin Schrödinger denklemlerinin çözümü yapılamaz. Moleküler sistemlerde Schrödinger denklemi ancak yaklaşık yöntemlerle çözülebilir. Moleküler modellemede kullanılan Elektronik yapı teorisi metotları moleküler sistemlerin Schrödinger denkleminin çözümüne yaklaşık yöntemler sunar. Bu yaklaşık yöntemler de varyasyonel bir döngü ile çalışırlar. Başlangıç dalga fonksiyonları hamiltoniyen operatörüne uygulanır enerji hesaplanır ve daha sonra varyasyonel döngüyle yeni dalga fonksiyonları bulunur tekrar enerji hesaplanır. Bu döngü hesaplanmış iki ardışık enerji değeri arasındaki fark istenilen hassasiyete ulaşıncaya kadar devam eder. Moleküler modellemede öncelikle hesaplamının yapılacağı metot, daha sonra başlangıç dalga

fonksiyonları seçilerek hesaplamalara başlanır. Başlangıç dalga fonksiyonları da literatürde baz seti yada temel set olarak bilinen fonksiyonlardır.



Şekil 1.7. Elektronik Yapı Teorisi Metotlarının Gruplandırılması

Yarı deneysel metotlarla ab-initio metotlar birbirinden ayrılmasında temel neden yarı deneysel metotların bazı deneysel parametreleri hesaplamalarda kullanmasıdır. Ab-initio metotlar hesaplamalarda deneysel parametre kullanmaz.

Çizelge 1.1. Hesaplamalarda kullanılabilir olan metot ve baz setlerin avantaj ve dez avantajları

Metod	Avantajlar	Dezavantajlar
Yarı-deneysel	Kuantum Fiziğini kullanır Deneysel olarak türetilmiş deneysel parametreleri kullanır Yaklaşımları geniş ölçüde kullanılır	Ab-initio metodlarına kıyasla daha az talep edilir Geçiş yapılarını ve uyarılmış yapıları hesaplamaya yatkındır Bilgisayarı Ab initio metodlarına göre daha az, moleküler mekanik metodlara göre daha fazla zorlar
Ab-initio	Kuantum Fiziğini kullanır Matematiksel açıdan baskın olup deneysel parametreleri kullanmaz Yaklaşımları geniş ölçüde kullanılır	Geniş çaplı sistemler için kullanışlıdır Deneysel verilerden bağımsızdır Geçiş yapılarını ve uyarılmış yapıları hesaplamaya yatkındır Bilgisayarı zorlar. Hassasiyeti yüksektir.

Ab-initio metotlarından olan Ab-initio MO metotlarını DFT metotlarından ayıran etken ise elektron korelasyon etkileridir. Ab-initio Moleküler Orbital Teori (Ab-initio MO) metotlarında elektron korelasyon etkisi dediğimiz anlık elektron elektron etkileşimlerini hesaplamalara dahil edilmesi hem hesaplamaları zorlaştırmakta hem de hesaplama süresi ve gerekli bilgisayar alt yapısı açısından maliyeti arttırmaktadır. DFT metotları bu yönü ile Ab-initio Moleküler Orbital Teori (Ab-initio MO) metotlarına göre daha avantajlıdır.

1.4.1. Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi

Moleküllerin Kuantum mekaniksel hesaplamaları yapılırken çekirdeklerin ve elektronların hareketleri ayrı ayrı incelenir. Elektronların kütesinin çekirdeklere nazaran çok küçük olması nedeniyle bu iki hareket ayrı ayrı incelenebilir. Bu ayrım Born-Oppenheimer yaklaşımı ile yapılır (Atkins ve Friedman, 2011). Elektronik enerji

$$E_e = E^T + E^V + E^J + E^{XC}$$

Şeklinde verilebilir “Burada; E^T elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerji, E^V çekirdek-elektron çekimi ve çekirdek çiftleri arasındaki itme potansiyel enerjisi, E^J elektron-elektron itme terimi (elektron yoğunluğunun Coulumb öz-etkileşim olarak da tanımlanır), $E^{XC} = E^X + E^C$ ise değiş-tokuş enerjisi (E^X) ve korelasyon enerjisi (E^C) terimlerine karşılık gelir. Bu durum elektron-elektron etkileşmelerinin geri kalan kısmını kapsar. Değiş-Tokuş enerjisi aynı spinli elektronlar arasındaki etkileşim enerjisidir. Kuantum mekaniksel dalga fonksiyonunun anti simetrikliğinden dolayı ortaya çıkar. Korelasyon enerjisi ise farklı spinli elektronlar arasındaki etkileşme enerjisidir. Bu enerjilerin büyüklükleri hakkında bir fikir edinmek için Neon atomunun enerjilerini örnek olarak verelim. Neon atomunun hesaplanmış enerjileri: $E_e = -129,4$ $E^T = 129$ $E^V = -312$ $E^J = 66$ $E^C = -0,4$ $E^X = -12$ atomik birim hartree’dir (1 hartree $H = 27,192$ eV dur)” (Özoğlu, 2013).

Ab-İnitio MO metotlarında enerji hesaplanırken dalga fonksiyonları kullanılırken DFT metotlarında elektron yoğunlukları kullanılmaktadır. DFT literatüre üç yeni kavramla girmiştir (Özoğlu, 2013).

- Elektron Yoğunluğu $\rho(r)$: Uzayın bir noktasındaki electron yoğunluğunu tanımlamaktadır (Özoğlu, 2013).
- Homojen electron Gaz Modeli: Bir bölgedeki elektronların sistemi nötralize edecek kadar pozitif yük tarafından nötralize edileceği varsayımına dayandırılan idealize edilmiş bir modeldir. DFT modellerinde enerji ifadeleri, elektron dağılımının V hacimli bir küp içerisinde olduğu ve elektron yoğunluğunun $\rho = n/V$ ile verildiği sistemde n , $V \rightarrow \infty$ olduğu varsayımı yapılır. Burada ρ sabit kabul edilmiştir (Özoğlu, 2013).
- Fonksiyonel: Fonksiyonel kavramı, DFT’ de sıkça kullanılmaktadır. Fonksiyonel; Bağımsız x değişkenine bağımlı değişkene fonksiyon denir ve $f(x)$

ile gösterilir (Koch ve Holthausen, 2015; Jensen, 2017) . Bir F fonksiyonu $f(x)$ 'e bağımlı ise bu bağımlılığa fonksiyonel denilir ve $F[f]$ ile gösterilir (Özoğlu, 2013).

1.4.2. Karma yoğunluk fonksiyon teorisi

Ab-initio MO teorisi hesaplamalarının en önemli dezavantajlarından bir tanesinin elektron korelasyon etkilerinin hesaplamalara katılmasındaki zorluk olduğundan daha önce söz etmiştik. Ab-initio MO teorisi hesaplama metotları Hartree-Fock yöntemini temel almaktadır ve Hartree-Fock metodu ile yapılan hesaplamalarda değiş-tokuş enerjileri sağlıklı bir şekilde hesaplanamamaktadır. Bu durum Ab-initio MO teorisi hesaplamalarının ikinci bir dezavantajı olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu konularda DFT hesaplamaları daha avantajlı olmasına rağmen kinetik enerji hesaplamalarında bazı sıkıntılar vardır. Bu nedenle bu metotların her ikisinde toplam elektronik enerji hesaplamalarında kullanıldığı karma, melez yada hibrit modeller geliştirilmiştir (Özoğlu, 2013).

1.4.3. B3LYP

DFT ye en büyük katkıyı Becke 1993 yılında yapmıştır (Becke, 1993). Becke değiş-tokuş terimini ve korelasyon enerjisini (E_{XC}) hibrit fonksiyonellerle ifade etmiştir.

$$E_{\text{karma}}^{XC} = C_{\text{HF}} E_{\text{HF}}^X + C_{\text{DFT}} E_{\text{DFT}}^X$$

Burada CHF ve CDFT'ler sabitlerdir. Becke Lee, Yang ve Parr tarafından geliştirilmiş olan (Lee ve ark., 1988) ve literatürde LYP korelasyon düzeltmelerini de kullanarak B3LYP karma yoğunluk fonksiyonlarını türetmiştir. Bu fonksiyonlarda toplam elektronik enerji ifadesi

$$E_{\text{B3LYP}} = E^T + E^V + E^J + E_{\text{B3LYP}}^{XC}$$

Şeklinde verilmektedir. DFT hesaplamaları için daha iyi fonksiyonellerin türetilmesi ile ilgili halen yoğun çalışmalar sürdürülmektedir (Gill, 1996; Jensen, 2017).

1.4.4. Baz Setleri

Moleküler hesaplamalarda moleküler orbitaller atomik orbitallerin, atomik orbitallerde tam set olan bazı fonksiyonların lineer kombinasyonu olarak yazılabilmektedir. Böylece dalga fonksiyonları tam set olan baz fonksiyonları cinsinden yazılabilmektedir. Atom veya molekülün bütün orbitallerini temsil eden baz fonksiyonları kümesine baz seti denir. Bu setler her bir atom için önceden hesaplanmış şekilde literatürde hazır olarak bulunmaktadır. Pek çok çeşidi olmakla birlikte en yaygın olarak kullanılanları Gaussian Baz setleridir. Bunlar hesaplamalarda başlangıç dalga fonksiyonları olarak kullanılırlar. Baz setlerinin boyutu büyüdükçe moleküler orbitaller daha iyi temsil edilebilir. Fakat bu durumda hesaplamanın süresi ve hesaplamanın yapılacağı bilgisayarın kapasitesi ön plana çıkmaktadır.

1.5. Potansiyel Enerji Yüzeyleri

Potansiyel enerji yüzeyleri molekül veya topağın geometrisi ile enerjisi arasında matematiksel bir ilişki kurar. Potansiyel enerji yüzeyi üzerindeki her bir nokta molekülün farklı bir geometrisine karşılık gelmektedir. Topaklarda topak atomlarının dizilişlerine bağlı olarak enerji hesaplayan ve bütün olası dizilişleri hesaplayıp potansiyel enerji yüzeylerini tarayan algoritmalar vardır. Simulated annealing algoritması, basın hopping algoritması, genetik algoritması bunlardan bazılarıdır ve temel algoritmalarlardır. Günümüzde daha çok, coalescence kick (CK) algoritması, cartesian walking (CW) algoritması, TGMin algoritması kullanılmaktadır. Eğer yapının düzlemsel olduğunu tahmin edebiliyorsak ve topağı oluşturan atom sayısı az ise CW algoritması kullanışlıdır. Yapı Hakkında bilgimiz yoksa ve topağı oluşturan atom sayısı az ise CK algoritması, Topak sayısı çok fazla ise TGMin algoritması hesaplamalarda kullanılmalıdır. Bu algoritmalar Gaussian programları ile bağlantılı çalışmakta ve molekülün geometri optimizasyonlarını Gaussian programına yaptırmaktadırlar

Topakların kararlı yapılarının belirlenebilmesi için topağı oluşturan atom gruplarının farklı dizilişlerine karşılık gelen potansiyel enerji yüzeyinin taranması ve bu yüzey üzerinde en düşük enerjiye karşılık gelen noktanın yani atom dizilişinin belirlenmesi gerekmektedir. Bu işlem için sistemin geometri optimizasyonu yapılır. Rastgele bir yapıyla başlanan hesaplamaya başlanır ve bu rastgele yapıya karşılık gelen enerji hesaplanır.

$$\frac{\partial E}{\partial R_i} = 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots, 3N - 6$$

Hesaplamlarda DFT fonksiyonelleri ve uygun baz setleri kullanılır. Amaç potansiyel enerji yüzeyi üzerinde enerji artış hızının minimum olduğu yönelimi belirlemektir. Bu amaçla enerji gradyenti hesaplanır. Enerji gradyentinin büyüklüğüne bağlı olarak geometri değiştirilir. Bu işlem enerji gradyenti sıfır oluncaya kadar tekrarlanır. Optimizasyon sonucunda elde ettiğimiz noktanın karakteri harmonik titreşim frekanslarının analizi ile yapılır. Eğer bütün frekanslar reel ise elde ettiğimiz yapı kararlı duruma karşılık gelmektedir (Özoğlu, 2013).



2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Topak kavramı literatüre ilk defa 1950-1960 lı yıllarda toprakların iyon kaynaklarında gözlenmesi ile girmiştir. Bu gözlemler kütle spektroskopisi ile yapılmıştır. 1960 larda ise Metal Topakları çalışılmaya başlanmış fakat o zamanlarda bunların fiziksel özellikleri incelenememiştir. Daha sonraki yıllarda kararlı toprakların geometrik özellikleri, yapısal izomerleri, erime, parçalanma ve reaksiyon mekanizmaları çalışılmaya başlanmıştır (Erkoç ve ark., 1999b; 1999a; Erkoç ve Yılmaz, 1999; Baştuğ ve ark., 2000; Durmuş ve ark., 2000; Erkoç, 2000; Büyükata ve ark., 2001; Darby ve ark., 2002; Wang ve ark., 2002; Avcı ve ark., 2003; Sebetci ve Güvenç, 2003; El-Bayyari ve ark., 2004; Grigoryan ve Springborg, 2004; Zhang ve Shen, 2004; Arslan ve Güven, 2005; Büyükata ve ark., 2005a; Büyükata ve ark., 2005b; Sebetci ve Güvenç, 2005; Büyükata, 2006; Büyükata ve Güvenç, 2006; Grigoryan ve ark., 2006; Guo ve ark., 2006; Arslan, 2007; Boeyuekata, 2007; Büyükata ve ark., 2007; Büyükata ve Belchior, 2008) . Erkoç ve arkadaşları Lantan uranyum, altın ve gümüş topraklarının kararlı yapıları Röletivistik DFT hesaplamalarıyla çalışılmış ve aynı zamanda moleküler dinamik simülasyonları incelenmiştir (Erkoç ve ark., 1999b; 1999a; Erkoç ve Yılmaz, 1999; Erkoç, 2000). Topak yapıları ve kararlılıkları üzerine Baştuğ ve arkadaşları (Baştuğ ve ark., 2000). Wang ve arkadaşları (Wang ve ark., 2002). Darby ve arkadaşları (Darby ve ark., 2002). DFT ile teorik çalışmalar gerçekleştirmişlerdir. Arslan ve arkadaşları altın gümüş ve nikel nanotopakların erime, dinamikleri, izomer dağılımları teorik ve deneysel yöntemlerle çalışmışlardır (Arslan ve Güven, 2005). Benzer çalışma aliminyum topraklar için Büyükata ve arkadaşları tarafından da yapılmıştır (Büyükata ve Güvenç, 2006).

Bilindiği gibi altın asal metallere dendir ve altın atomik nanotopakların toprak çalışmaları içinde özel bir yeri vardır. Bu topraklar katalizör özelliği gösterebilmektedir. Bu özelliklerinin ve nanosensör ve nanoelektronikteki uygulama alanlarının keşfedilmesinden sonra saf altın nanotopaklar üzerine çalışmalar hızla artmıştır (Li ve ark., 2002; Pyykkö ve Runeberg, 2002; Sokolov ve ark., 2003; Tanaka ve ark., 2003; Zhai ve ark., 2004; Huang ve ark., 2006; Gu ve ark., 2007; Huang ve ark., 2007; Jain ve ark., 2007; He ve ark., 2008; Yadav ve Kumar, 2010; Wang ve ark., 2011; Çolak, 2013; Yang ve ark., 2013).

Çolak ve arkadaşları Altın Nanoparçacıklarının Hidatik Kist Protoskoleksleri Üzerine Etkisini araştırmışlardır (Çolak ve ark., 2013). Huang ve arkadaşları Altın

nanotopıklarının optik özelliklerini, kanser teşhis ve tedavisinde kullanılması üzerine bir çalışma yapmışlar ve bunların nanoboyutta ilaçlar olarak düşünölebileceğini göstermişlerdir (Huang ve ark., 2007).

“Altın nano parçacıkların işaretleyici olarak kullanılabilir. Bu parçacıklarla belirli moleküller veya hücrelerin belirli bölgelerini işaretlemek mümkündür. Bu yolla istenilen bölgelerin mikroskop altında görünürlüğü sağlanır. Molekülleri arasındaki ilgi nedeniyle, altın parçacıklar ile antikorlar eşleniktir. Böylece antikorla kaplanmış altın nano parçacıklar antijenlere ya da antijen içeren hücrelere gidip bağlanabilir. Bu bağlanma sonucunda, altının görüntülenebilirlik özelliğinden faydalanılarak istenilen hedef hücrelerin de görüntülenmesi sağlanır”[TÜBİTAK]. Jain ve arkadaşları altın nanotopıklarının kanser hücrelerinin görüntülenmesinde kullanımı üzerine bir çalışma yapmıştır (Jain ve ark., 2007). Benzer çalışmalar He ve arkadaşları (He ve ark., 2008), Sokolov ve arkadaşları tarafından da yapılmıştır. Huang ve arkadaşları altın nanotopıklarının kızılötesi bölgede kanser hücrelerinin görüntülenebilmesi üzerine bir çalışma yapmışlardır (Huang ve ark., 2006).

“Altın nano parçacıkların taşıyıcı olarak kullanılması genel olarak kontrollü ilaç taşıma sistemlerinde ön plana çıkar. Kontrollü ilaç taşıma sistemi yine son yıllarda sıklıkla adı geçen bir yöntem. Bu yolla istenilen ilaç, vücudun istenilen bölgesine, istenilen miktarda ulaştırılabilir. Böylece, sağlıklı dokuların zarar görme riski en aza indirgenmiş oluyor. Hemen akla geleceği gibi, kanser tedavilerinde kemoterapinin vereceği hasarları gidermek amacıyla bu alanda çalışmalar yapılmakta. Çeşitli ilaçların, DNA'nın, RNA'nın ve protein gibi biyomoleküllerin parçacıkların yüzeyine tutunarak taşınması sağlanabilir. Parçacıkların üzerine, örneğin kanserli hücrelere duyarlı ancak sağlıklı hücrelere duyarlı olmayan alıcılar emdirilebilir. Bu parçacıklar kapsül görevini gören zarların içine yerleştirilir ve istenilen bölgede dışarıdan verilen çeşitli uyarılar (örneğin UV ışınları) ile ilaç salımı gerçekleşir. Diğer bir yol da hastalıklı hücrelerdeki moleküllere eşlenik moleküller ile bu hücrelerin tedavisinde kullanılacak olan moleküllerin doğrudan parçacıklara emdirilerek istenilen bölgeye taşınmasıdır” (Dağlar, 2009). Gu ve arkadaşları Altın nanotopıkların kanserli hücrelere ilaç taşıyabileceğini ve taşıyıcı olarak kullanılacaklarını tesbit etmişlerdir (Gu ve ark., 2007). Yang ve arkadaşları desteklenmiş nanotopıkların heterojen katalizin boyuta bağlı olduğunu göstermişlerdir (Yang ve ark., 2013).

Saf altın nanotopıklarının modellenmesi ile ilgili literatürde pek çok çalışma vardır. Hakinen ve arkadaşları saf altın nanotopıkları ve bunların iyonlarının kararlı

yapılarını DFT yöntemleriyle incelemiştir. Bu çalışmada 10 atoma kadar olan saf altın nanotopakları kullanılmıştır (Ho ve ark., 1990; Taylor ve ark., 1990; Gantefor ve ark., 1992; Taylor ve ark., 1992; Handschuh ve ark., 1994; Häkkinen ve Landman, 2000).

Garzon ve arkadaşları da hesaplamalarda simetri durumlarını göz önüne almaksızın altın nanotopakların DFT çalışmasını yapmışlar ve bu şekilde potansiyel enerji yüzeylerini tam ve doğru bir şekilde ortaya çıkarılabileceğini göstermişlerdir. Bu çalışma literatüre nanotopakların en kararlı yapısının belirlenmesinde herhangi bir kısıtlamaya gidilmeksizin hesaplamaların yapılması gerektiği bilgisini kazandırmıştır (Michaelian ve ark., 1999).

Daha sonra katkılı altın topaklar çalışılmaya başlanmıştır. Shao ve arkadaşları Kalsiyum katkılı altın topaklarının geometrik yapılarını, bağıl kararlılıklarını, elektriksel ve manyetik özelliklerini DFT metotlarıyla hesaplamıştır. (Shao ve ark., 2011). Koyasu ve arkadaşları tarafından Paladyum katkılı altın topaklar anyon fotoelektron spektroskopisi kullanılarak araştırılmıştır (Koyasu ve ark., 2002). Yuan ve arkadaşları nikel, paladyum ve platin katkılı altın nanotopakların kararlı durumlarını DFT hesaplamalarıyla tespit etmiştir (Yuan ve ark., 2005). Pal ve arkadaşları da Silisyum, germanyum ve Kalay katkılanmış altın topakların kararlı yapılarını hem deneysel yöntemlerle hem de teorik olarak çalışmışlardır (Pal ve ark., 2009). Günümüz literatürü tarandığında, Titanyum, Nikel ve Çinko katkılı altın nanotopaklarla ilgili herhangi bir bilimsel çalışma yapılmamıştır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu çalışmada, Titanyum katkılanmış Altın atom topaklarının giriş dosyaları CK yazılımı ile elde edildi. CK ile elde edilen giriş dosyaları Gaussian 09 programı vasıtasıyla B3LYP/Lan12DZ hesaplama metodu ve temel seti kullanılarak optimize edildi. Göreli enerjisi 50 k.cal/mol civarında olan tüm yapılar hesaplama sonucu olarak kullanılmıştır.

Topakların geometrik optimizasyonları, her bir hesaplama modelinde de hiçbir sınırlama yapılmadan hesaplanmıştır. Yapılan optimizasyonlar sonucunda topakların denge durumundaki optimize enerjisi ve yapısal özellikleri elde edildi.



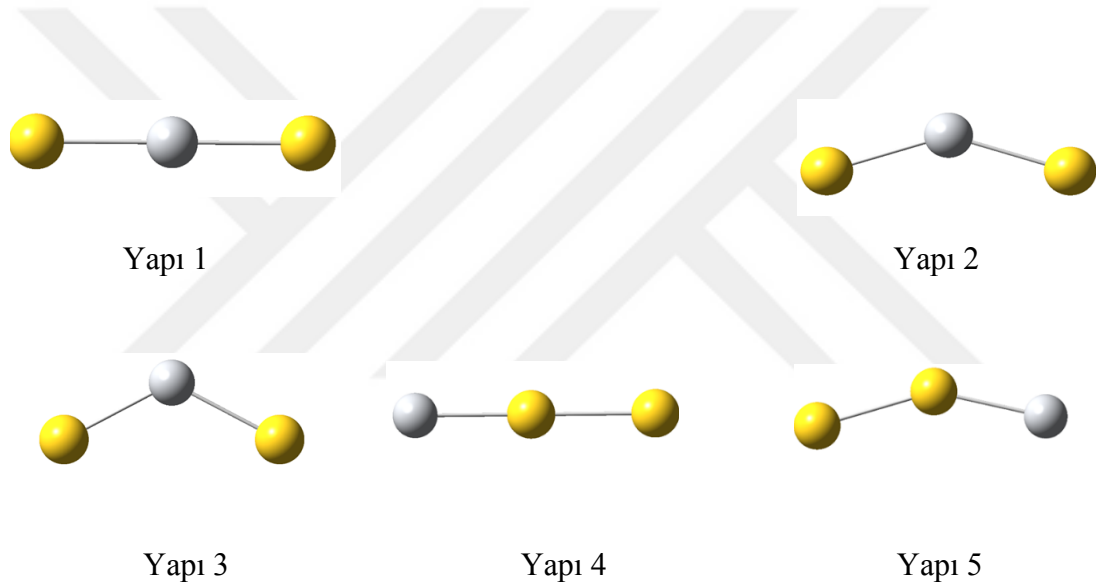
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

4.1. Nötr Topaklar

4.1.1. Au₂Ti Nötr Topakları

Çizelge 4.1. CK algoritması ile elde edilen Au₂Ti yapıların hesaplama sonuçları

Topak	Optimize enerji (a.u.)	Görelî Enerji (kcal/mol)
Yapı 1	-329.00800165	0.000
Yapı 2	-328.97967794	17.773
Yapı 3	-328.97780578	18.948
Yapı 4	-328.93512418	45.731
Yapı 5	-328.91292343	59.662

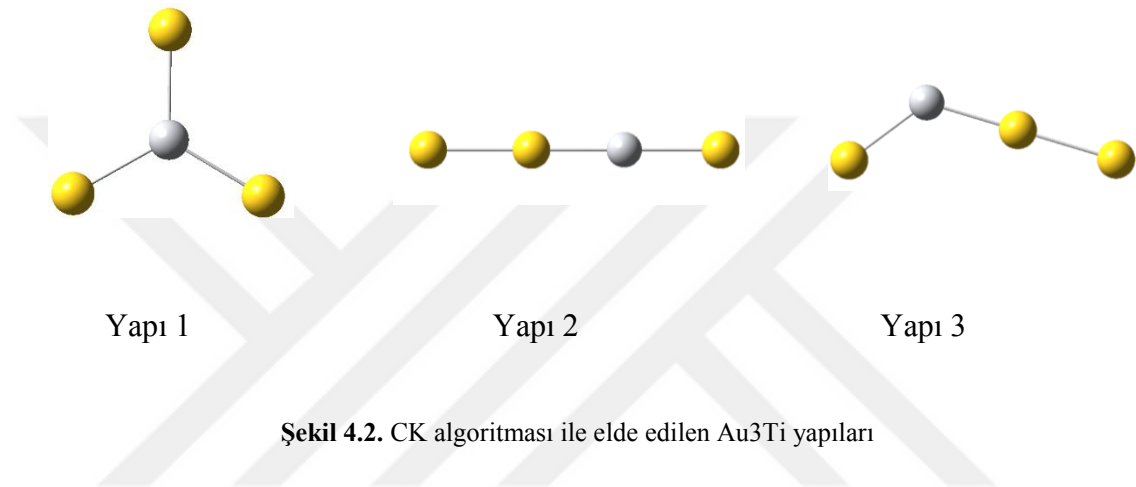


Şekil 4.1. CK algoritması ile elde edilen Au₂Ti yapıları

4.1.2. Au₃Ti Nötr Topakları

Çizelge 4.2. CK algoritması ile elde edilen Au₃Ti yapıların hesaplama sonuçları

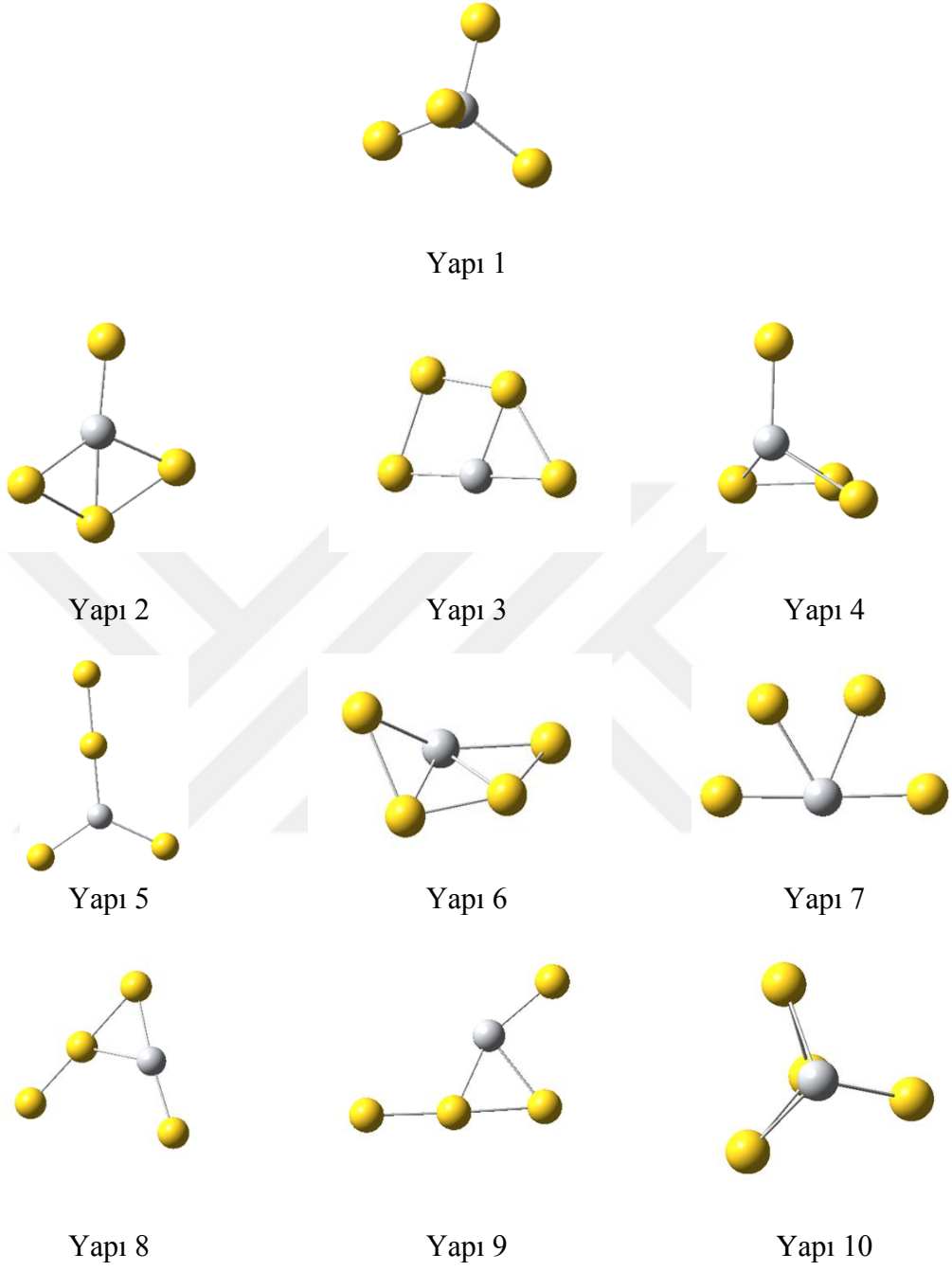
Topak	Optimize enerji (a.u.)	Görelî Enerji (kcal/mol)
Yapı 1	-464.61575127	0.000
Yapı 2	-464.57043570	28.436
Yapı 3	-464.54307551	45.605



4.1.3. Au₄Ti Nötr Topakları

Çizelge 4.3. CK algoritması ile elde edilen Au₄Ti yapıların hesaplama sonuçları

Topak	Optimize enerji (a.u.)	Görelî Enerji (kcal/mol)
Yapı 1	-600.06377170	0.000
Yapı 2	-600.01772086	28.897
Yapı 3	-600.01165124	32.706
Yapı 4	-600.01118364	32.999
Yapı 5	-600.00824768	34.842
Yapı 6	-600.00424746	37.352
Yapı 7	-600.00352889	37.803
Yapı 8	-600.00200501	38.759
Yapı 9	-599.99226519	44.871
Yapı 10	-599.98784420	47.645

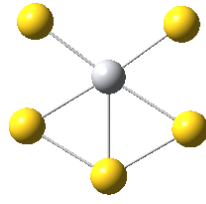


Şekil 4.3. CK algoritması ile elde edilen Au₄Ti yapıları

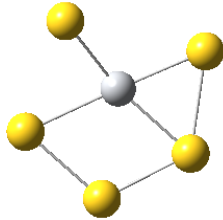
4.1.4. Au₅Ti Nötr Topakları

Çizelge 4.4. CK algoritması ile elde edilen Au₅Ti yapıların hesaplama sonuçları

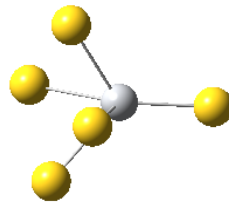
Topak	Optimize Enerji(a.u.)	Görelî Enerji(kcal/mol)
Yapı 1	-735.57899521	0.000
Yapı 2	-735.56723732	7.378
Yapı 3	-735.56717457	7.418
Yapı 4	-735.56462673	9.016
Yapı 5	-735.56336530	9.808
Yapı 6	-735.56108178	11.241
Yapı 7	-735.55719981	13.677
Yapı 8	-735.55401629	15.674
Yapı 9	-735.55293100	16.356
Yapı 10	-735.54197571	23.230
Yapı 11	-735.53754343	26.011
Yapı 12	-735.53655784	26.630
Yapı 13	-735.53373926	28.399
Yapı 14	-735.53161426	29.732
Yapı 15	-735.52407844	34.461
Yapı 16	-735.52325463	34.978
Yapı 17	-735.5222721	35.622
Yapı 18	-735.52191762	35.817
Yapı 19	-735.52137682	36.156
Yapı 20	-735.52129817	36.205
Yapı 21	-735.51942595	37.380
Yapı 22	-735.51602675	39.513
Yapı 23	-735.51445991	40.496
Yapı 24	-735.51374776	40.943
Yapı 25	-735.51062445	42.903
Yapı 26	-735.50988778	43.366
Yapı 27	-735.50964303	43.519
Yapı 28	-735.50788196	44.624
Yapı 29	-735.50503073	46.413
Yapı 30	-735.50195605	48.343
Yapı 31	-735.49986724	49.654



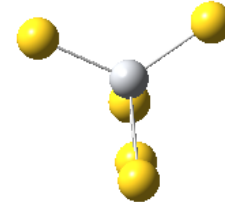
Yapı 1



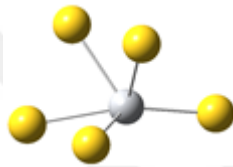
Yapı 2



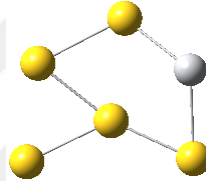
Yapı 3



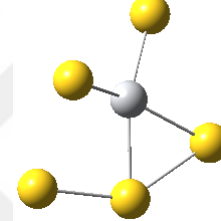
Yapı 4



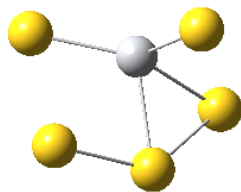
Yapı 5



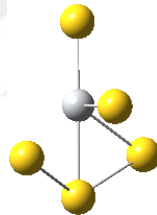
Yapı 6



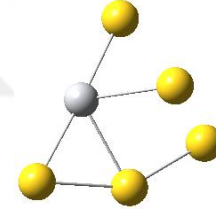
Yapı 7



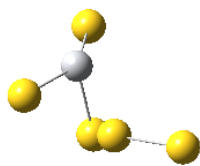
Yapı 8



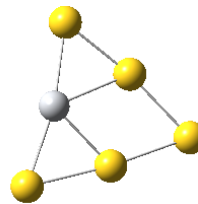
Yapı 9



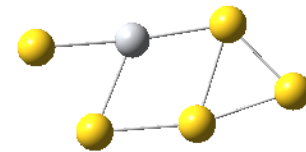
Yapı 10



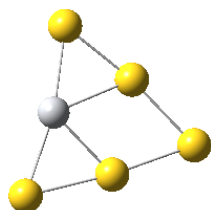
Yapı 11



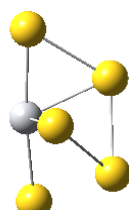
Yapı 12



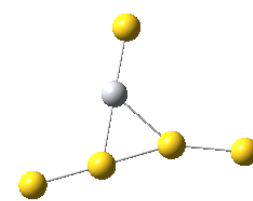
Yapı 13



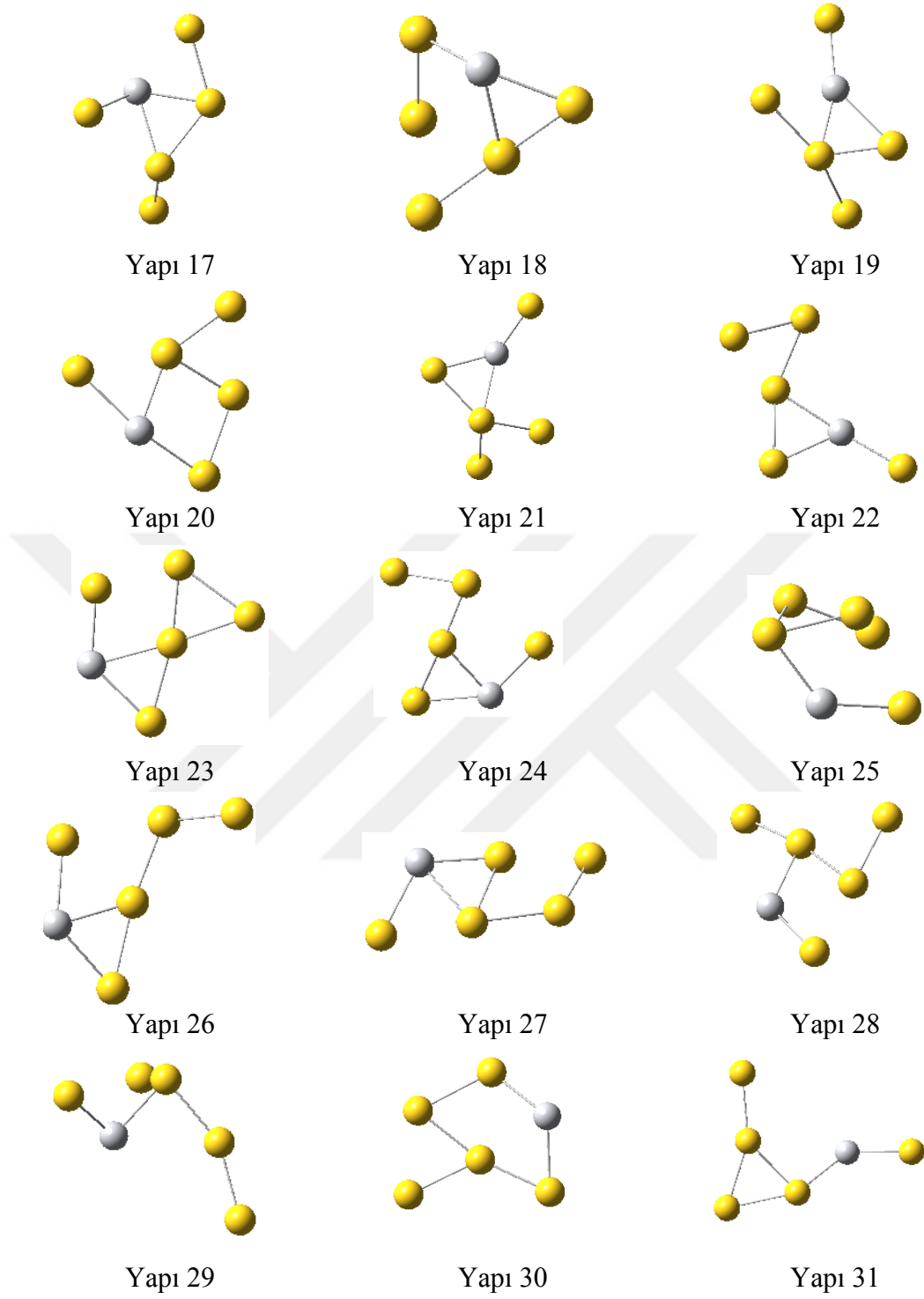
Yapı 14



Yapı 15



Yapı 16

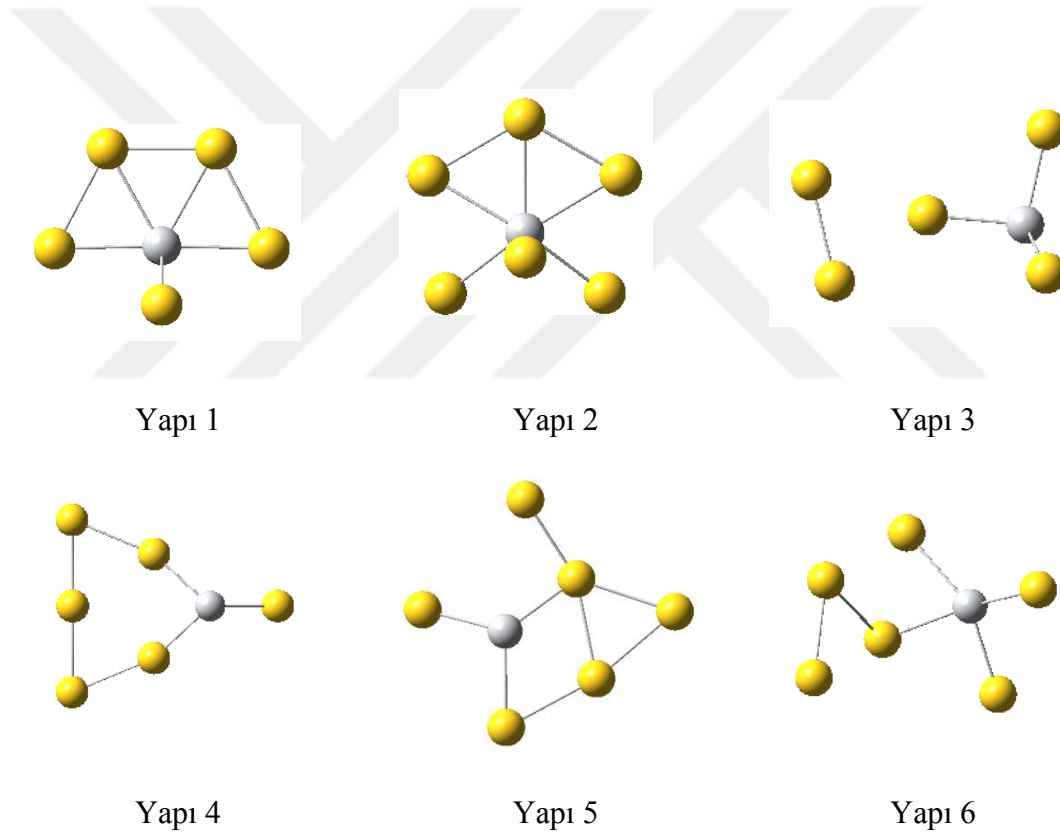


Şekil 4.4. CK algoritması ile elde edilen Au₅Ti yapıları

4.1.5. Au₆Ti Nötr Topakları

Çizelge 4.5. CK algoritması ile elde edilen Au₆Ti yapıların hesaplama sonuçları

Topak	Optimize Enerji(a.u.)	Görelî Enerji(kcal/mol)
Yapı 1	-871.07642003	0.000
Yapı 2	-871.07582582	0.373
Yapı 3	-871.03131421	28.304
Yapı 4	-871.02071954	34.953
Yapı 5	-870.99718217	49.722
Yapı 6	-870.99166551	53.184



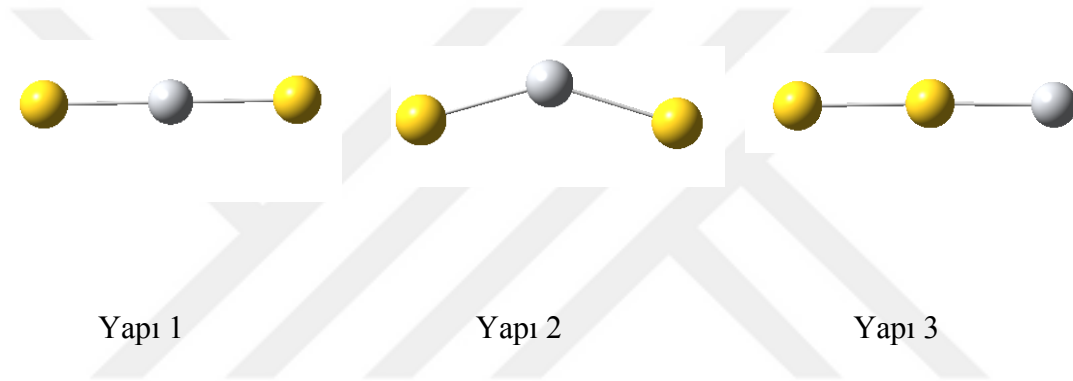
Şekil 4.5. CK algoritması ile elde edilen Au₆Ti yapıları

4.2. Negatif İyon Topakları

4.2.1. Au₂Ti Negatif İyon Topakları

Çizelge 4.6. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au₂Ti yapıların hesaplama sonuçları

Topak	Optimize Enerji(a.u.)	Görelî Enerji(kcal/mol)
Yapı 1	-329.09124502	0.000
Yapı 2	-329.09016600	0.677
Yapı 3	-329.05132653	25.049

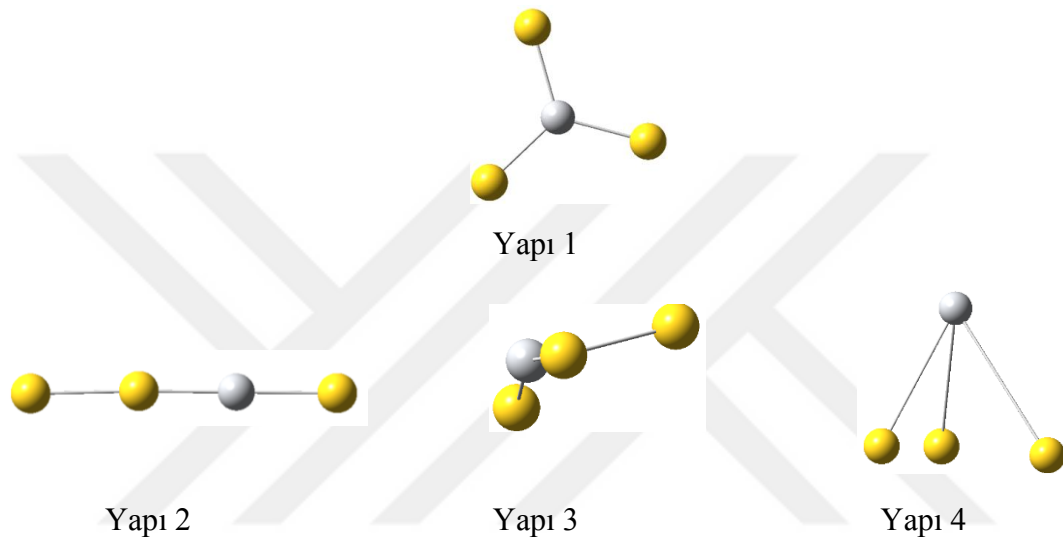


Şekil 4.6. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au₂Ti yapıları

4.2.2. Au₃Ti Negatif İyon Topakları

Çizelge 4.7. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au₃Ti yapıların hesaplama sonuçları

Topak	Optimize Enerji(a.u.)	Görelî Enerji(kcal/mol)
Yapı 1	-464.61575046	0.000
Yapı 2	-464.57002165	28.695
Yapı 3	-464.55859678	35.864
Yapı 4	-464.55369249	38.942

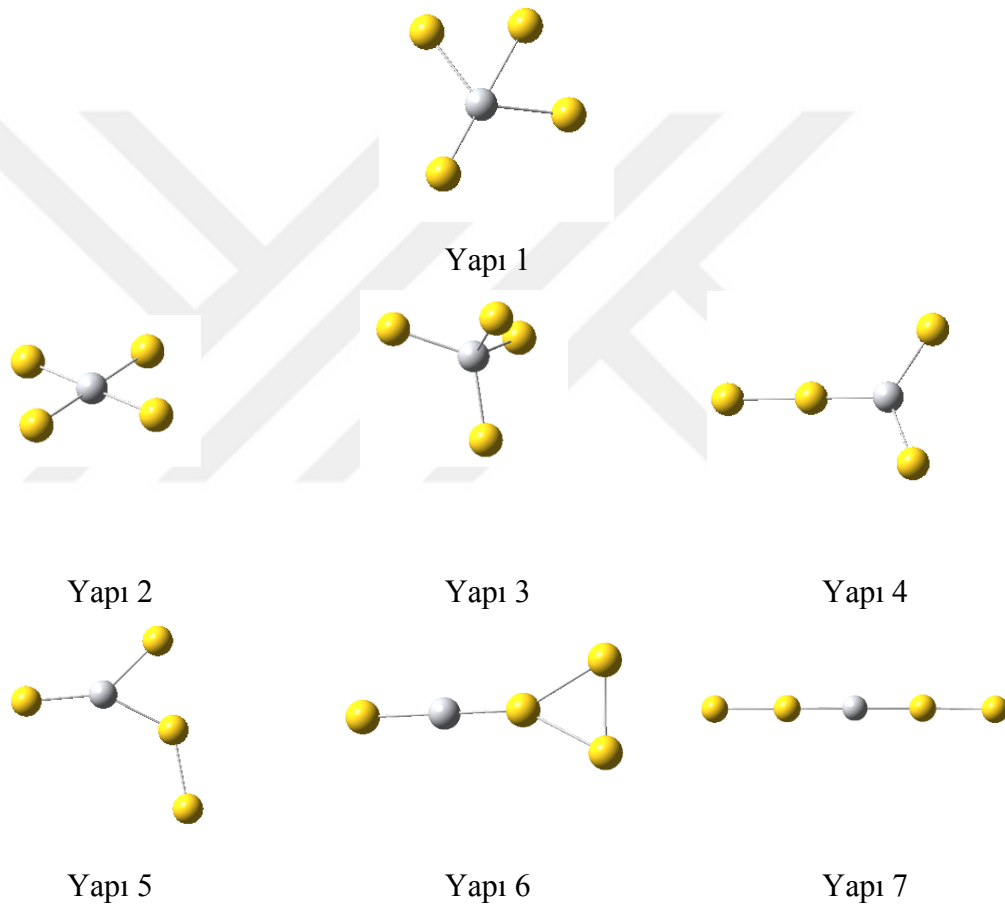


Şekil 4.7. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au₃Ti yapıları

4.2.3. Au4Ti Negatif İyon Topakları

Çizelge 4.8. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au4Ti yapıların hesaplama sonuçları

Topak	Optimize Enerji(a.u.)	Görelî Enerji(kcal/mol)
Yapı 1	-600.17682273	0.000
Yapı 2	-600.16813818	5.450
Yapı 3	-600.15079886	16.330
Yapı 4	-600.14834905	17.867
Yapı 5	-600.13875966	23.885
Yapı 6	-600.10642866	44.173
Yapı 7	-600.10260502	46.572

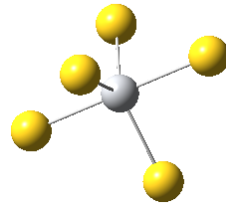


Şekil 4.8. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au4Ti yapıları

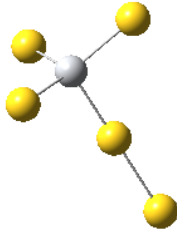
4.2.4. Au₅Ti Negatif İyon Topakları

Çizelge 4.9. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au₅Ti yapıların hesaplama sonuçları

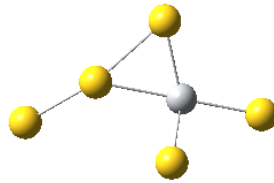
Topak	Optimize Enerji(a.u.)	Görelî Enerji(kcal/mol)
Yapı 1	-735.67442055	0.000
Yapı 2	-735.65809433	10.245
Yapı 3	-735.62370102	31.827
Yapı 4	-735.61983858	34.251
Yapı 5	-735.61482498	37.397
Yapı 6	-735.61291492	38.595
Yapı 7	-735.60934444	40.836
Yapı 8	-735.60875655	41.205
Yapı 9	-735.60791922	41.730
Yapı 10	-735.60738587	42.065
Yapı 11	-735.60586276	43.021
Yapı 12	-735.60175186	45.600
Yapı 13	-735.59789493	48.021
Yapı 14	-735.59637230	48.976
Yapı 15	-735.59529857	49.650
Yapı 16	-735.59320242	50.965



Yapı 1

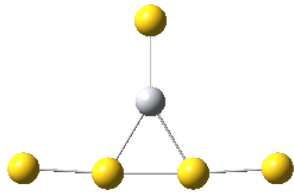


Yapı 2

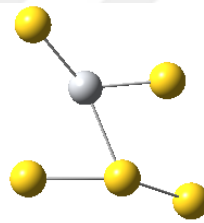


Yapı 3

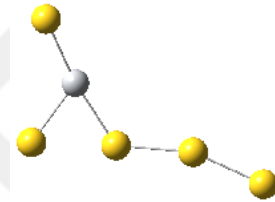
Yapı 4



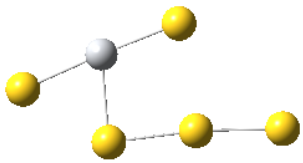
Yapı 5



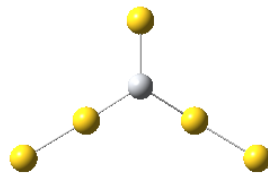
Yapı 6



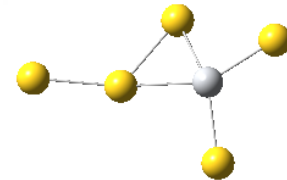
Yapı 7



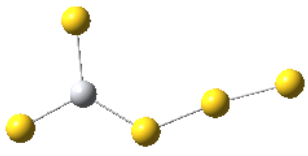
Yapı 8



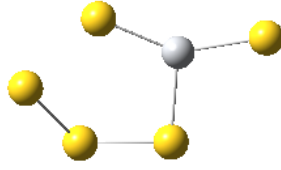
Yapı 9



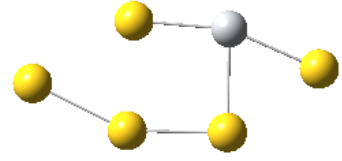
Yapı 10



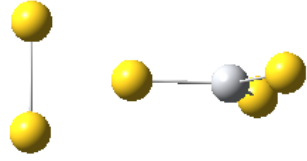
Yapı 11



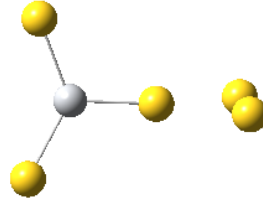
Yapı 12



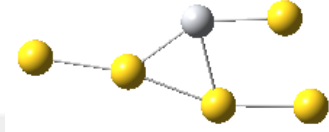
Yapı 13



Yapı 14



Yapı 15



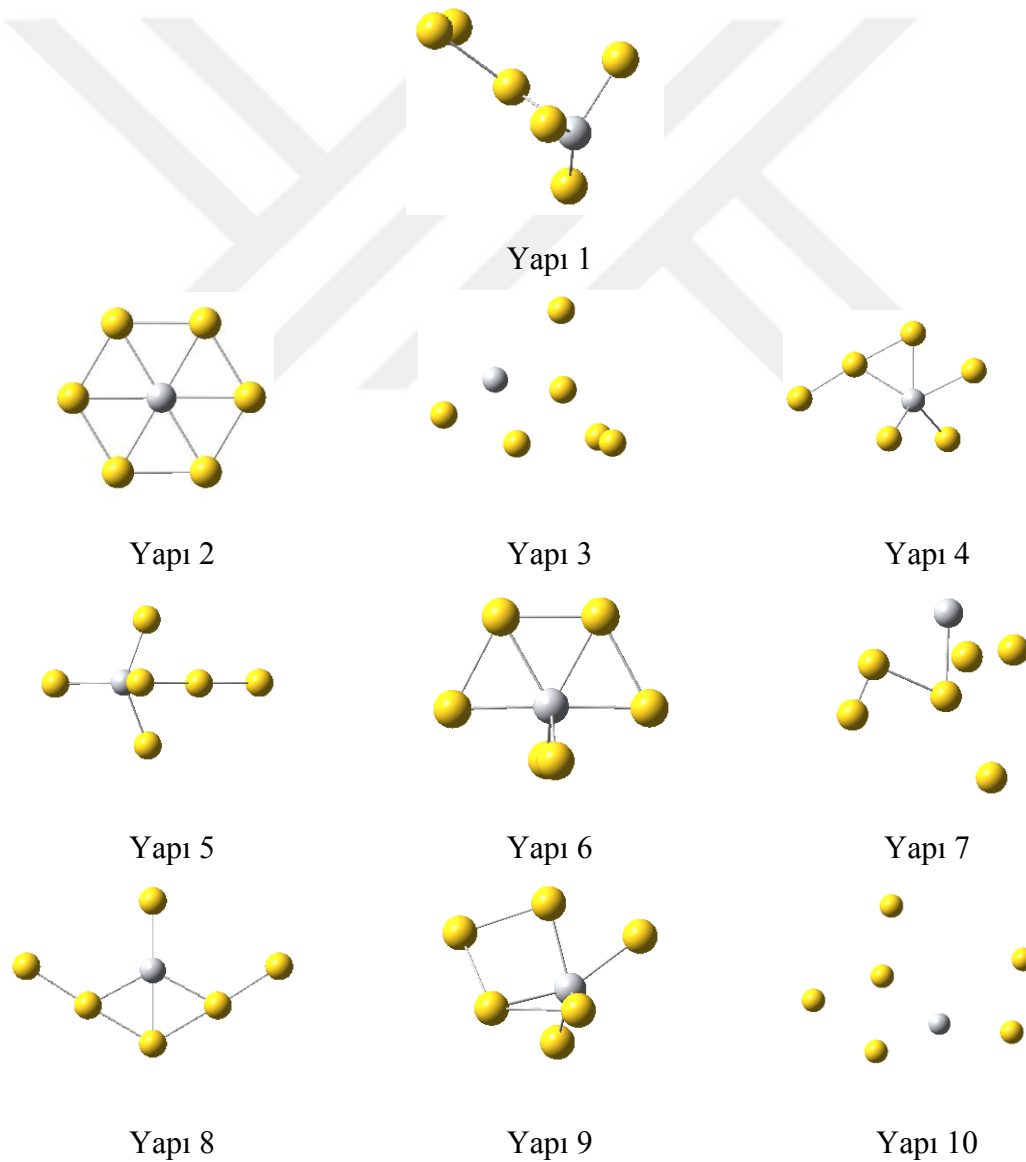
Yapı 16

Şekil 4.9. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au5Ti yapıları

4.2.5. Au6Ti Negatif İyon Topakları

Çizelge 4.10. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au6Ti yapıların hesaplama sonuçları

Topak	Optimize Enerji(a.u.)	Görelî Enerji(kcal/mol)
Yapı 1	-871.20641654	0.000
Yapı 2	-871.19814155	5.193
Yapı 3	-871.18513922	13.352
Yapı 4	-871.18359917	14.318
Yapı 5	-871.17943031	16.934
Yapı 6	-871.17527523	19.541
Yapı 7	-871.17452119	20.015
Yapı 8	-871.16207882	27.822
Yapı 9	-871.15345344	33.235
Yapı 10	-871.15255167	33.801



Şekil 9.10. CK algoritması ile elde edilen negatif yüklü Au6Ti yapıları

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

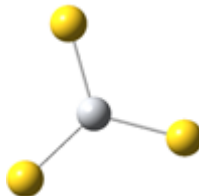
Bilindiği gibi moleküllerde molekül geometrisinin bilinmesi önemlidir. Molekül geometrisindeki çok küçük değişimler bile molekülün fiziksel ve kimyasal özellikleri üzerinde önemli değişimlere sebep olmaktadır. Molekül geometrisini belirlemek için pek çok deneysel metot olduğu gibi, son zamanlarda deneysel tekniklerden daha ucuz ve etkili olan moleküler modelleme teknikleri yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Bu amaçla yapısı bilinmeyen bir molekülün potansiyel enerji yüzeyleri taranmakta ve en düşük enerjili konformasyonu yani en kararlı yapı, molekül yapısı olarak belirlenmektedir.

Bu çalışmada benzer işlemler titanyum katkılı atom topakları için yapılmıştır. Au_2Ti , Au_3Ti , Au_4Ti , Au_5Ti ve Au_6Ti şeklinde tanımlanmış olan titanyum katkılı altın nanotopakların ve bunların yapıları negatif iyonlarının yapıları literatürde ilk kez teorik olarak çalışılmıştır. Bunların oda sıcaklığında bulunması muhtemel olan tüm yapıları verilmiştir. Au_2Ti topağının nötr ve eksi yüklü iyonunun yapısı aşağıdaki şekilde verildiği gibidir.



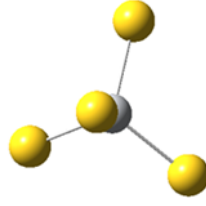
Şekil 5.1. Au_2Ti topağının nötr ve eksi yüklü iyonunun yapısı

Au_3Ti topağının nötr ve eksi yüklü iyonunun yapısı aşağıdaki şekilde verildiği gibidir.



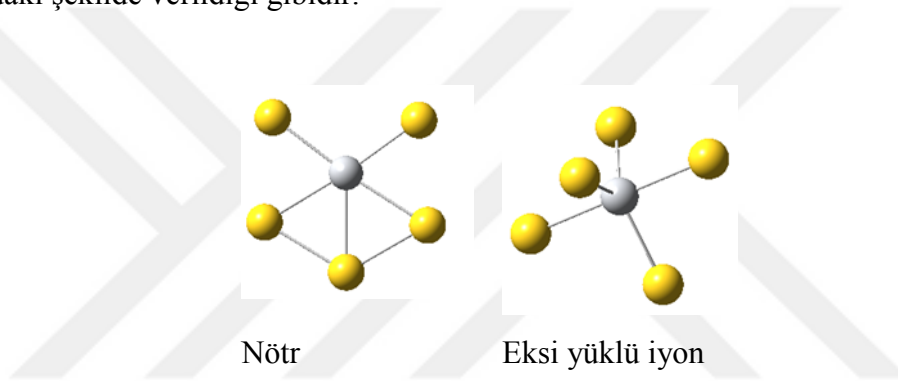
Şekil 5.2. Au_3Ti topağının nötr ve eksi yüklü iyonunun yapısı

Au₄Ti topağının nötr ve eksi yüklü iyonunun yapısı aşağıdaki şekilde verildiği gibidir.



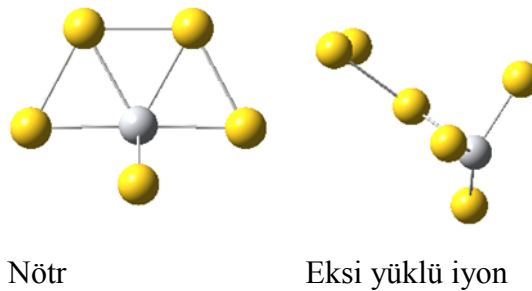
Şekil 5.3. Au₄Ti topağının nötr ve eksi yüklü iyonunun yapısı

Au₅Ti topağının nötr ve negatif yüklü iyonlarının yapıları birbirinde farklı olup, aşağıdaki şekilde verildiği gibidir.



Şekil 5.4. Au₅Ti topağının nötr ve negatif yüklü iyonlarının yapıları

Au₆Ti topağının nötr ve negatif yüklü iyonlarının yapıları birbirinde farklı olup, aşağıdaki şekilde verildiği gibidir



Şekil 5.5. Au₆Ti topağının nötr ve negatif yüklü iyonlarının yapıları

Bu yapılar daha sonra bu topakların özelliklerin çalışacak olan araştırmacılara önemli bir başlangıç noktası olacaktır.

KAYNAKLAR

- Arslan, H. ve Güven, M. H., 2005, Melting dynamics and isomer distributions of small metal clusters, *New Journal of Physics*, 7 (1), 60.
- Arslan, H., 2007, GLOBAL MINIMA FOR Pd N (N= 5–80) CLUSTERS DESCRIBED BY SUTTON–CHEN POTENTIAL, *International Journal of Modern Physics C*, 18 (08), 1351-1359.
- Atkins, P. W. ve Friedman, R. S., 2011, Molecular quantum mechanics, Oxford university press, p.
- Avcı, H., Çivi, M., Güvenç, Z. ve Jellinek, J., 2003, Collisionless fragmentation of non-rotating Ni_n (n= 4–14) clusters: a molecular dynamics study, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36 (16), 3487.
- Baştuğ, T., Erkoç, Ş., Hirata, M. ve Tachimori, S., 2000, Zirconium microclusters: molecular-dynamics simulations and density functional calculations, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 8 (3), 223-229.
- Becke, A. D., 1993, Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange, *The Journal of Chemical Physics*, 98 (7), 5648-5652.
- Boeyuekata, M., 2007, MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF Ti_n, V_n AND Cr_n CLUSTERS, *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 6 (01), 81-97.
- Böyükata, M., Güvenç, Z., Jackson, B. ve Jellinek, J., 2001, Dynamics of the D₂+ Ni (100) collision system: Analysis of the reactive and inelastic channels, *International Journal of Quantum Chemistry*, 84 (1), 48-57.
- Böyükata, M., Borges, E., Braga, J. ve Belchior, J., 2005a, Size evolution of structures and energetics of iron clusters (Fe_n, n ≤ 36): Molecular dynamics studies using a Lennard–Jones type potential, *Journal of alloys and compounds*, 403 (1-2), 349-356.
- Böyükata, M., Güvenç, Z. y. B., Özçelik, S., Durmuş, P. h. ve Jellinek, J., 2005b, REACTION DYNAMICS OF Ni_n (n= 19 and 20) WITH D₂: DEPENDENCE ON CLUSTER SIZE, TEMPERATURE AND INITIAL ROVIBRATIONAL STATES OF THE MOLECULE, *International Journal of Modern Physics C*, 16 (02), 295-308.
- Böyükata, M., 2006, Molecular-dynamics study of possible packing sequence of medium size gold clusters: Au₂–Au₄₃, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 33 (1), 182-190.
- Böyükata, M. ve Güvenç, Z. B., 2006, MD study of energetics, melting and isomerization of aluminum microclusters, *Brazilian journal of physics*, 36 (3A), 720-724.

- Böyükata, M., Özdoğan, C. ve Güvenç, Z. B., 2007, An investigation of hydrogen bonded neutral B_4H_n ($n= 1-11$) and anionic $B_4H_{11}^-$ clusters: Density functional study, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 805 (1-3), 91-100.
- Böyükata, M. ve Belchior, J. C., 2008, Structural and energetic analysis of copper clusters: MD study of Cu_n ($n= 2-45$), *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 19 (5), 884-893.
- Bulusu, S., Li, X., Wang, L.-S. ve Zeng, X. C., 2006, Evidence of hollow golden cages, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103 (22), 8326-8330.
- Bulusu, S., Li, X., Wang, L.-S. ve Zeng, X. C., 2007, Structural Transitions from Pyramidal to Fused Planar to Tubular to Core/Shell Compact in Gold Clusters: Au_n ($n= 21-25$), *The Journal of Physical Chemistry C*, 111 (11), 4190-4198.
- Chen, Q., Zhai, H.-J., Li, S.-D. ve Wang, L.-S., 2013, On the structures and bonding in boron-gold alloy clusters: $B_6Au_n^-$ and B_6Au_n ($n= 1-3$), *The Journal of Chemical Physics*, 138 (8), 084306.
- Çolak, B., Aksoy, F., Yavuz, M. S., Demircili M. E., , 2013, Altın Nanoparçacıklarının Hidatik Kist Protoskoleksleri Üzerine Etkisinin Araştırılması, 7. *Cerrahi Araştırma Kongresi*, Ankara.
- Dağlar, B., 2009, Altın Nano Parçacıkların Biyolojik Uygulamaları,
- Darby, S., Mortimer-Jones, T. V., Johnston, R. L. ve Roberts, C., 2002, Theoretical study of Cu–Au nanoalloy clusters using a genetic algorithm, *The Journal of Chemical Physics*, 116 (4), 1536-1550.
- Dereli, Ö., Erdogdu, Y., Gulluoglu, M., Türkkan, E., Özmen, A. ve Sundaraganesan, N., 2012, Vibrational spectral and quantum chemical investigations of tert-butylhydroquinone, *Journal of Molecular Structure*, 1012, 168-176.
- Durmuş, P., Böyükata, M., Özçelik, S., Güvenç, Z. B. ve Jellinek, J., 2000, Reactions of small Ni clusters with a diatomic molecule: MD simulation of $D_2^+ Ni_n$ ($n= 7-10$) systems, *Surface science*, 454, 310-315.
- El-Bayyari, Z., Oymak, H. ve Kökten, H., 2004, ON THE STRUCTURAL AND ENERGETIC FEATURES OF SMALL METAL CLUSTERS: Ni_n , Cu_n , Pd_n , Pt_n , AND Pb_n ; $n= 3-13$, *International Journal of Modern Physics C*, 15 (06), 917-930.
- El-Sayed, I. H., Huang, X. ve El-Sayed, M. A., 2005, Surface plasmon resonance scattering and absorption of anti-EGFR antibody conjugated gold nanoparticles in cancer diagnostics: applications in oral cancer, *Nano letters*, 5 (5), 829-834.
- Erdogdu, Y., Tahir Güllüoğlu, M. ve Kurt, M., 2009, DFT, FT-Raman, FT-IR and NMR studies of 2-fluorophenylboronic acid, *Journal of Raman Spectroscopy: An International Journal for Original Work in all Aspects of Raman Spectroscopy*,

- Including Higher Order Processes, and also Brillouin and Rayleigh Scattering*, 40 (11), 1615-1623.
- Erkoç, Ş., Baştuğ, T., Hirata, M. ve Tachimori, S., 1999a, Molecular-dynamics simulations of uranium microclusters, *Journal of the Physical Society of Japan*, 68 (2), 440-445.
- Erkoç, Ş., Baştuğ, T., Hirata, M. ve Tachimori, S., 1999b, Energetics and structural stability of lanthanum microclusters, *Chemical physics letters*, 314 (3-4), 203-209.
- Erkoç, Ş. ve Yılmaz, T., 1999, Molecular-dynamics simulations of silver clusters, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 5 (1-2), 1-6.
- Erkoç, Ş., 2000, Stability of gold clusters: molecular-dynamics simulations, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 8 (3), 210-218.
- Fantucci, P., Bonačić-Koutecký, V. ve Koutecký, J., 1989, General properties of the electronic structure of alkali metal clusters and Ia-IIa mixed clusters, In: *Small Particles and Inorganic Clusters*, Eds: Springer, p. 307-314.
- Foresman, J. B. ve Frisch, A., *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, (Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 1996), *Google Scholar*, 303.
- Furche, F., Ahlrichs, R., Weis, P., Jacob, C., Gilb, S., Bierweiler, T. ve Kappes, M. M., 2002, The structures of small gold cluster anions as determined by a combination of ion mobility measurements and density functional calculations, *The Journal of Chemical Physics*, 117 (15), 6982-6990.
- Gantefor, G., Cox, D. M. ve Kaldor, A., 1992, Zero electron kinetic energy spectroscopy of Au⁻ 6, *The Journal of Chemical Physics*, 96 (6), 4102-4105.
- Gilb, S., Weis, P., Furche, F., Ahlrichs, R. ve Kappes, M. M., 2002, Structures of small gold cluster cations (Auⁿ⁺, n < 14): Ion mobility measurements versus density functional calculations, *The Journal of Chemical Physics*, 116 (10), 4094-4101.
- Gill, P., 1996, DFT, HF and selfconsistent field, *Encyclopedia of Computational Chemistry*, *John Wiley&Sons Ltd, New York*, 80-105.
- Grigoryan, V. G. ve Springborg, M., 2004, Structural and energetic properties of nickel clusters: $2 \leq N \leq 150$, *Physical Review B*, 70 (20), 205415.
- Grigoryan, V. G., Alamanova, D. ve Springborg, M., 2006, Structure and energetics of Cu_N clusters with ($2 \leq N \leq 150$): An embedded-atom-method study, *Physical Review B*, 73 (11), 115415
- Gruene, P., Rayner, D. M., Redlich, B., van der Meer, A. F., Lyon, J. T., Meijer, G. ve Fielicke, A., 2008, Structures of neutral Au₇, Au₁₉, and Au₂₀ clusters in the gas phase, *Science*, 321 (5889), 674-676.

- Gu, F. X., Karnik, R., Wang, A. Z., Alexis, F., Levy-Nissenbaum, E., Hong, S., Langer, R. S. ve Farokhzad, O. C., 2007, Targeted nanoparticles for cancer therapy, *nano today*, 2 (3), 14-21.
- Guo, J., Shen, J. ve Chen, N., 2006, Prediction of the lowest-energy structures of actinide-series metal clusters using Möbius inversion pair potentials, *Chemical physics*, 324 (2-3), 314-322.
- Häkkinen, H. ve Landman, U., 2000, Gold clusters (Au_N , $2 < N < 10$) and their anions, *Physical Review B*, 62 (4), R2287.
- Handschuh, H., Ganteför, G., Bechthold, P. S. ve Eberhardt, W., 1994, A comparison of photoelectron spectroscopy and two-photon ionization spectroscopy: Excited states of Au_2 , Au_3 , and Au_4 , *The Journal of Chemical Physics*, 100 (10), 7093-7100.
- He, H., Xie, C. ve Ren, J., 2008, Nonbleaching fluorescence of gold nanoparticles and its applications in cancer cell imaging, *Analytical Chemistry*, 80 (15), 5951-5957.
- Ho, J., Ervin, K. M. ve Lineberger, W., 1990, Photoelectron spectroscopy of metal cluster anions: Cu^-_n , Ag^-_n , and Au^-_n , *The Journal of Chemical Physics*, 93 (10), 6987-7002.
- Huang, W., Bulusu, S., Pal, R., Zeng, X. C. ve Wang, L.-S., 2009, Structural transition of gold nanoclusters: from the golden cage to the golden pyramid, *ACS nano*, 3 (5), 1225-1230.
- Huang, W. ve Wang, L.-S., 2009, Probing the 2D to 3D structural transition in gold cluster anions using argon tagging, *Physical review letters*, 102 (15), 153401.
- Huang, W., Zhai, H.-J. ve Wang, L.-S., 2010, Probing the Interactions of O_2 with Small Gold Cluster Anions (Au^-_n , $n = 1 - 7$): Chemisorption vs Physisorption, *Journal of the American Chemical Society*, 132 (12), 4344-4351.
- Huang, X., El-Sayed, I. H., Qian, W. ve El-Sayed, M. A., 2006, Cancer cell imaging and photothermal therapy in the near-infrared region by using gold nanorods, *Journal of the American Chemical Society*, 128 (6), 2115-2120.
- Huang, X., Jain, P. K., El-Sayed, I. H. ve El-Sayed, M. A., 2007, Gold nanoparticles: interesting optical properties and recent applications in cancer diagnostics and therapy.
- Jain, P. K., El-Sayed, I. H. ve El-Sayed, M. A., 2007, Au nanoparticles target cancer, *nano today*, 2 (1), 18-29.
- Jena, P. ve Castleman, A., 2006, Clusters: A bridge across the disciplines of physics and chemistry, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103 (28), 10560-10569.
- Jensen, F., 2017, Introduction to computational chemistry, John wiley & sons, p.

- Ji, M., Gu, X., Li, X., Gong, X., Li, J. ve Wang, L. S., 2005, Experimental and theoretical investigation of the electronic and geometrical structures of the Au₃₂ cluster, *Angewandte Chemie International Edition*, 44 (43), 7119-7123.
- Johansson, M. P., Lechtken, A., Schooss, D., Kappes, M. M. ve Furche, F., 2008, 2D-3D transition of gold cluster anions resolved, *Physical Review A*, 77 (5), 053202.
- Joseph, L., Sajan, D., Reshmy, R., Sasi, B. A., Erdogdu, Y. ve Thomas, K. K., 2012, Vibrational spectra, structural conformations, scaled quantum chemical calculations and NBO analysis of 3-acetyl-7-methoxycoumarin, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 99, 234-247.
- Kaiser, B., 1995, H. Haberland (Ed.): Clusters of Atoms and Molecules II, Springer Series in Chemical Physics, Vol. 56 (Series-Eds.: VI Goldanskii, FP Schäfer, JP Toennies), Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1994, ISBN 3-540-56958-8, 412 Seiten, 174 Abbildungen, 15 Tabellen, Hardcover DM 118,-, *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 99 (12), 1448-1449.
- Knight, W., Clemenger, K., de Heer, W. A., Saunders, W. A., Chou, M. ve Cohen, M. L., 1984, Electronic shell structure and abundances of sodium clusters, *Physical review letters*, 52 (24), 2141.
- Koch, W. ve Holthausen, M. C., 2015, A chemist's guide to density functional theory, John Wiley & Sons, p.
- Koyasu, K., Mitsui, M., Nakajima, A. ve Kaya, K., 2002, Photoelectron spectroscopy of palladium-doped gold cluster anions; AuPd⁻(n= 1-4), *Chemical physics letters*, 358 (3-4), 224-230.
- Kreibig, U. ve Vollmer, M., 1995, Theoretical considerations, In: Optical properties of metal clusters, Eds: Springer, p. 13-201.
- Lee, C., Yang, W. ve Parr, R. G., 1988, Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density, *Physical Review B*, 37 (2), 785.
- Lee, M.-S., Chacko, S. ve Kanhere, D., 2005, First-principles investigation of finite-temperature behavior in small sodium clusters, *The Journal of Chemical Physics*, 123 (16), 164310.
- Li, J., Li, X., Zhai, H.-J. ve Wang, L.-S., 2003, Au₂₀: a tetrahedral cluster, *Science*, 299 (5608), 864-867.
- Li, X., Kiran, B., Li, J., Zhai, H. J. ve Wang, L. S., 2002, Experimental observation and confirmation of icosahedral W@ Au₁₂ and Mo@ Au₁₂ molecules, *Angewandte Chemie*, 114 (24), 4980-4983.
- Liu, F., Press, M., Khanna, S. ve Jena, P., 1989, Magnetism and local order: Ab initio tight-binding theory, *Physical Review B*, 39 (10), 6914.

- Michaelian, K., Rendon, N. ve Garzón, I., 1999, Structure and energetics of Ni, Ag, and Au nanoclusters, *Physical Review B*, 60 (3), 2000.
- Nayak, S., Rao, B., Jena, P., Li, X. ve Wang, L.-S., 1999, Observation of a spin-protected high-energy isomer of Al₄N⁻ cluster, *Chemical physics letters*, 301 (3-4), 379-384.
- Oatbase, N.-P., 1992, NATO ASI Series, B (283).
- Özoğlu, D., 2013, Vanadyum Katkılı Alüminyum Atom Topaklarının Elektronik Ve Yapısal Özelliklerinin Teorik Metotlar Kullanılarak İncelenmesi, *Ahi Evran Üniversitesi, Kırşehir*, 84.
- Pal, R., Wang, L.-M., Huang, W., Wang, L.-S. ve Zeng, X. C., 2009, Structural evolution of doped gold clusters: MAu_x-(M= Si, Ge, Sn; x= 5– 8), *Journal of the American Chemical Society*, 131 (9), 3396-3404.
- Pal, R., Wang, L.-M., Huang, W., Wang, L.-S. ve Zeng, X. C., 2011, Structure evolution of gold cluster anions between the planar and cage structures by isoelectronic substitution: Auⁿ⁻(n= 13–15) and MAuⁿ⁻(n= 12–14; M= Ag, Cu), *The Journal of Chemical Physics*, 134 (5), 054306.
- Peppernick, S. J., Gunaratne, K. D. ve Castleman, A., 2010a, Superatom spectroscopy and the electronic state correlation between elements and isoelectronic molecular counterparts, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107 (3), 975-980.
- Peppernick, S. J., Gunaratne, K. D. ve Castleman Jr, A., 2010b, Towards comprehending the superatomic state of matter, *Chemical physics letters*, 489 (1-3), 1-11.
- Pyykkö, P. ve Runeberg, N., 2002, Icosahedral WAu₁₂: A Predicted Closed-Shell Species, Stabilized by Auophilic Attraction and Relativity and in Accord with the 18-Electron Rule, *Angewandte Chemie International Edition*, 41 (12), 2174-2176.
- Rand, D., Ortiz, V., Liu, Y., Derdak, Z., Wands, J. R., Tatíček, M. ve Rose-Petruck, C., 2011, Nanomaterials for X-ray imaging: gold nanoparticle enhancement of X-ray scatter imaging of hepatocellular carcinoma, *Nano letters*, 11 (7), 2678-2683.
- Rao, B., Jena, P., Manninen, M. ve Nieminen, R., 1987, Spontaneous fragmentation of multiply charged metal clusters, *Physical review letters*, 58 (12), 1188.
- Sarıkaya, E. K., Dereli, Ö., Erdoğan, Y. ve Güllüoğlu, M., 2013, Molecular structure and vibrational spectra of 7-Ethoxycoumarin by density functional method, *Journal of Molecular Structure*, 1049, 220-226.
- Schmid, G., 1994, Clusters and colloids: from theory to applications, Wiley-VCH, p.
- Sebetci, A. ve Güvenç, Z. B., 2003, Energetics and structures of small clusters: Pt_N, N= 2–21, *Surface science*, 525 (1-3), 66-84.

- Sebetci, A. ve Güvenç, Z. B., 2005, Global minima of AlN, AuN and PtN, $N \leq 80$, clusters described by the Voter–Chen version of embedded-atom potentials, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13 (5), 683.
- Shao, N., Huang, W., Gao, Y., Wang, L.-M., Li, X., Wang, L.-S. ve Zeng, X. C., 2010, Probing the Structural Evolution of Medium-Sized Gold Clusters: Au n ($n = 27-35$), *Journal of the American Chemical Society*, 132 (18), 6596-6605.
- Shao, P., Kuang, X.-Y., Zhao, Y.-R., Wang, H.-Q. ve Li, Y.-F., 2011, Structural, electronic and magnetic properties of gold cluster doped with calcium: Au n Ca ($n = 1-8$), *Molecular Physics*, 109 (2), 315-323.
- Sokolov, K., Follen, M., Aaron, J., Pavlova, I., Malpica, A., Lotan, R. ve Richards-Kortum, R., 2003, Real-time vital optical imaging of precancer using anti-epidermal growth factor receptor antibodies conjugated to gold nanoparticles, *Cancer research*, 63 (9), 1999-2004.
- Subashchandrabose, S., Saleem, H., Erdogdu, Y., Dereli, Ö., Thanikachalam, V. ve Jayabharathi, J., 2012, Structural, vibrational and hyperpolarizability calculation of (E)-2-(2-hydroxybenzylideneamino)-3-methylbutanoic acid, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 86, 231-241.
- Sundaraganesan, N., Saleem, H., Mohan, S., Ramalingam, M. ve Sethuraman, V., 2005, FTIR, FT-Raman spectra and ab initio DFT vibrational analysis of 2-bromo-4-methyl-phenylamine, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 62 (1-3), 740-751.
- Tanaka, H., Neukermans, S., Janssens, E., Silverans, R. E. ve Lievens, P., 2003, Density functional study on structure and stability of bimetallic Au N Zn ($N \leq 6$) clusters and their cations, *The Journal of Chemical Physics*, 119 (14), 7115-7123.
- Taylor, K., Jin, C., Conceicao, J., Wang, L. S., Cheshnovsky, O., Johnson, B., Nordlander, P. ve Smalley, R., 1990, Vibrational autodetachment spectroscopy of Au $^-$ 6: Image-charge-bound states of a gold ring, *The Journal of Chemical Physics*, 93 (10), 7515-7518.
- Taylor, K., Pettiette-Hall, C., Cheshnovsky, O. ve Smalley, R., 1992, Ultraviolet photoelectron spectra of coinage metal clusters, *The Journal of Chemical Physics*, 96 (4), 3319-3329.
- Thomas, O. C., Zheng, W., Xu, S. ve Bowen Jr, K. H., 2002, Onset of metallic behavior in magnesium clusters, *Physical review letters*, 89 (21), 213403.
- Wang, J., Wang, G. ve Zhao, J., 2002, Density-functional study of Au n ($n = 2-20$) clusters: Lowest-energy structures and electronic properties, *Physical Review B*, 66 (3), 035418.
- Wang, L.-M., Bulusu, S., Huang, W., Pal, R., Wang, L.-S. ve Zeng, X. C., 2007a, Doping the golden cage Au $_{16}$ -with Si, Ge, and Sn, *Journal of the American Chemical Society*, 129 (49), 15136-15137.

- Wang, L.-M., Bai, J., Lechtken, A., Huang, W., Schooss, D., Kappes, M. M., Zeng, X. C. ve Wang, L.-S., 2009a, Magnetic doping of the golden cage cluster $M@ Au_{16}$ ($M= Fe, Co, Ni$), *Physical Review B*, 79 (3), 033413.
- Wang, L.-M., Pal, R., Huang, W., Zeng, X. C. ve Wang, L.-S., 2009b, Tuning the electronic properties of the golden buckyball by endohedral doping: $M@ Au_{16}$ ($M= Ag, Zn, In$), AIP.
- Wang, L.-M., Pal, R., Huang, W., Zeng, X. C. ve Wang, L.-S., 2010, Observation of earlier two-to-three dimensional structural transition in gold cluster anions by isoelectronic substitution: $M Au_n$ ($n= 8-11$; $M= Ag, Cu$), *The Journal of Chemical Physics*, 132 (11), 114306.
- Wang, L. M., Bulusu, S., Zhai, H. J., Zeng, X. C. ve Wang, L. S., 2007b, Doping golden buckyballs: $Cu@ Au_{16}$ and $Cu@ Au_{17}$ cluster anions, *Angewandte Chemie International Edition*, 46 (16), 2915-2918.
- Wang, Y., Chen, J. ve Irudayaraj, J., 2011, Nuclear targeting dynamics of gold nanoclusters for enhanced therapy of HER2+ breast cancer, *ACS nano*, 5 (12), 9718-9725.
- Xing, X., Yoon, B., Landman, U. ve Parks, J. H., 2006, Structural evolution of Au nanoclusters: From planar to cage to tubular motifs, *Physical Review B*, 74 (16), 165423.
- Yadav, B. D. ve Kumar, V., 2010, $Gd@ Au_{15}$: A magic magnetic gold cluster for cancer therapy and bioimaging, *Applied Physics Letters*, 97 (13), 133701.
- Yang, X.-F., Wang, A., Qiao, B., Li, J., Liu, J. ve Zhang, T., 2013, Single-atom catalysts: a new frontier in heterogeneous catalysis, *Accounts of chemical research*, 46 (8), 1740-1748.
- Yuan, D., Wang, Y. ve Zeng, Z., 2005, Geometric, electronic, and bonding properties of $Au NM$ ($N= 1-7$, $M= Ni, Pd, Pt$) clusters, *The Journal of Chemical Physics*, 122 (11), 114310.
- Zhai, H.-J., Li, J. ve Wang, L.-S., 2004, Icosahedral gold cage clusters: $M@ Au_{12}$ ($M= V, Nb, Ta$), *The Journal of Chemical Physics*, 121 (17), 8369-8374.
- Zhai, H.-J., Kiran, B., Dai, B., Li, J. ve Wang, L.-S., 2005, Unique CO Chemisorption Properties of Gold Hexamer: $Au_6(CO)_n$ ($n= 0-3$), *Journal of the American Chemical Society*, 127 (34), 12098-12106.
- Zhai, H.-J., Miao, C.-Q., Li, S.-D. ve Wang, L.-S., 2010, On the analogy of $B-BO$ and $B-Au$ chemical bonding in $B_{11}O$ and $B_{10}Au$ clusters, *The Journal of Physical Chemistry A*, 114 (46), 12155-12161.
- Zhang, D.-B. ve Shen, J., 2004, Ground state, growth, and electronic properties of small lanthanum clusters, *The Journal of Chemical Physics*, 120 (11), 5104-5109.



ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Feride Pınar ÖZTURAN
Uyruğu : T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi : 25.07.1990, Konya/Merkez
e-mail : pinar.ozturan2015@gmail.com

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	: Hüseyin Aksoy Anadolu Lisesi	
Üniversite	: Atatürk Üniversitesi Kazım Karabekir Eğitim Fakültesi/Fizik Öğretmenliği	
Yüksek Lisans	: Necmettin Erbakan Üniversitesi Nanobilim ve Nano Mühendislik	

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
-----	-------	--------

UZMANLIK ALANI

YABANCI DİLLER

BELİRTMEK İSTEĞİNİZ DİĞER ÖZELLİKLER

YAYINLAR

ESCI kapsamında taranan dergilerde yayımlanmış

1. Ömer Dereli, Yusuf Erdoğan, Levent Ateş, Ebru Karakaş Sarıkaya, F. Pınar Özturan, "Molecule and Radical Structures of Isobutyronitrile." Gazi University Journal of Science 30.1 (2017): 161-165.

ULAKBİM tarafından taranan süreli yayınlarda yayımlanmış

1. Levent Ateş, Yusuf Erdoğan, Ebru Karakaş Sarıkaya, Feride Pınar Özturan, Ömer Dereli, "Moleküler Mekanik Ve Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi Metodlarıyla Siyanoasetik Asit Molekülünün Molekül Ve Radikal Yapılarının Belirlenmesi." Selçuk-Teknik Dergisi 15.3 (2016): 253-263.