

## ÖZET

# MANYETİK NANO ATOM KÜMELERİNİN MOLEKÜLLERLE VE YÜZEYLE ETKİLEŞMESİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİ İLE İNCELENMESİ

Ayşe DEMİRKIRAN

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı  
Tez Danışmanı: Yrd.Doç. Dr. Olcay ÜZENĞİ AKTÜRK  
2014, 65 sayfa

Platin atom kümelerinin elektronik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teori (YFT) kullanılarak genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı ile gamma noktasında incelenmiştir. Platin kümeleri için, bağlanma enerjileri, manyetizasyonları, bağ uzunlukları, en yüksek dolu moleküler orbital enerjisi (HOMO), en düşük boş moleküler orbital enerjisi (LUMO), HOMO-LUMO fark (HLG) değerleri boyuta bağlı olarak hesaplandı.  $Pt_n$  kümelerinin, atom sayısının artması ile birlikte 3 boyutlu yapıyı tercih ettiği gözlemlendi.  $Pt_n$  atom kümelerinin elektronik özelliklerini belirleyebilmek için durum yoğunluğu hesabı da yapıldı.

$H_2$  (Hidrojen) ve  $NH_3$  (Amonyak) molekülü tutunmuş platin atom kümeleri YFT kullanılarak genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı ile incelendi.  $H_2$  ve  $NH_3$  tutunmuş platin atom kümelerinin tutunma enerjisi, HOMO, LUMO, manyetizasyon ve bağ uzunlukları, kararlı tutunma durumları için artan atom sayısına göre incelendi. Platin ile azot atomları arasında güçlü bir etkileşme bulundu.  $NH_3$  tutunmuş  $Pt_{14}$  atom kümesindeki  $NH_3$  molekülünde ayrışma gözlemlendi.  $H_2$  tutunmuş platin atom kümelerinin  $Pt_3$  atom kümesi dışındakilerin tümünde  $H_2$  molekülünün ayrıştığı bulunmuştur. Her bir H atomunun, farklı platin atomlarıyla bağ yapmayı tercih ettiği görülmektedir.  $NH_3$  ve  $H_2$  tutunmuş platin atom kümelerinde Fermi seviyesi yakınında, platinin  $d$  orbitalinin baskın olduğunu gözlemlendi. Platin atom kümelerinin metalik ve iletkenlik özelliklerinin  $NH_3$  ve  $H_2$  molekülleri tutunmasıyla değişmiştir.  $NH_3$  tutunmuş  $Pt_2$  atom kümesi yarı metalik özellik gösterebilir.  $NH_3$  ve  $H_2$  tutunmuş Pt atom kümelerinin HLG değerleri hesaplandı.  $H_2$  ve  $NH_3$  molekülünün Pt atomuna tutunmasında elde edilen sonuçlar gösteriyorki, Pt atomundan H atomuna yük geçişi ve Pt ve N atomları arasında

kutuplanma meydana gelmiştir. Bu elde edilen sonuçların Löwdin analizi ile uyumlu olduğu görülmüştür. MoSe<sub>2</sub> tek tabakası ile Fe, Mn atomları arasındaki etkileşimler incelendi. Fe ve Mn atomları tek tabakada Mo üzerinden bağlanmayı tercih etti.

**Anahtar Kelimeler:** Yoğunluk Fonksiyonel Teori, elektronik yapı, Pt<sub>n</sub> atom kümeleri, NH<sub>3</sub> tutunması, H<sub>2</sub> tutunması, MoSe<sub>2</sub>