T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FULLEREN C_n NANOYAPILARININ TERMODİNAMİK HESAPLAMALARI

ABDULKERİM KARATOPRAK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK

ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ

EDİRNE-2023

ABDULKERİM KARATOPRAK'ın hazırladığı "**FULLEREN C_n NANOYAPILARININ TERMODİNAMİK HESAPLAMALARI**" başlıklı bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından Fizik Anabilim Dalında bir **Yüksek Lisans tezi** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri (Ünvan, Ad, Soyad): İmza

Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ

Prof. Dr. Serap ŞENTÜRK DALGIÇ

Dr. Öğr.Üyesi Mehmet YILMAZ

Tez Savunma Tarihi: 29/08/2023

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

İmza

Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ
Tez Danışmanı

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Prof. Dr. Hüseyin Rıza Ferhat KARABULUT

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

T.Ü.FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI YÜKSEK LİSANS PROGRAMI

DOĞRULUK BEYANI

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında, tüm verilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini, kullanılan verilerde tahrifat yapılmadığını, tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını, kullanılan tüm literatür bilgilerinin bilimsel normlara uygun bir şekilde kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını ve bu tezin tamamı ya da herhangi bir bölümünün daha önceden Trakya Üniversitesi ya da farklı bir üniversitede tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

.... / .... / ....

Abdulkerim KARATOPRAK

İmza

Yüksek Lisans Tezi

Fulleren C_n Nanoyapılarının Termodinamik Hesaplamaları

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu tez çalışmasında, fullerene ailesinden C_{20} ile C_{40} arasında yer alan katkısız C_n ve Mn katkılı MnC_{n-1} fulleren nanoyapılarının 6 farklı malzeme türü ele alınmıştır. Oluşturulan iki ayrı set için yoğun bilgisayar simülasyon programları kullanılarak bazı termodinamik özellikleri hesaplandı. Hesaplamalarda Yoğunluk fonksiyonel teorisinde kısa menzilli etkileşmeleri inceleyen B3LYP/6-31 G(d) metodu kullanıldı. İlk olarak seçilen C_n ve Mn katkılı MnC_{n-1} fullerenlerin koordinatları girilerek B3LYP/6-31 G(d) ile üç boyutlu geometrik görüntüleri elde edildi. Her bir set için spin dipol momenti, elektronik enerji ve bağlanma enerji hesaplamaları yapılmıştır. Her bir set için toplam enerjiye katkı yapan öteleme enerjisi, dönme enerjisi ve titreşim enerjisi hesaplanmıştır. Ayrıca seçilen tüm malzeme türlerinde, entalpi, serbest enerji, termal enerji, entropi ve özgül ısı gibi termodinamik özellikleri hesaplanmıştır. Sonuç olarak, simülasyon programlarının teknolojinin herhangi bir alanında kullanılması malzemeler hakkında maliyeti düşük ve hızlı sonuçlar alınmasını sağlayabilir. Bu ve buna benzer çalışmalar da gelişen teknolojilerde kullanılacak malzemeler hakkında fikir verebilir.

Yıl : 2023

Sayfa Sayısı : 68

Anahtar Kelimeler : Fulleren C_n Nanoyapılar, Katkılı Fullerenler, Elektronik Enerjiler, Termodinamik Özellikler

Master Thesis

Thermodynamic Calculations in Fulleren C_n Nanostructures

Trakya University Institute of Natural Sciences

Department of Physic

ABSTRACT

In this thesis, 6 different material types of undoped Cn and Mn-doped MnCn-1 fullerene nanostructures, located between C20 and C40 of the fullerene family, were discussed. Some thermodynamic properties were calculated using intensive computer simulation programs for the two separate sets. The B3LYP/6-31 G(d) method, which examines short-range interactions in Density functional theory, was used in the calculations. Firstly, three-dimensional geometric images were obtained with B3LYP/6-31 G(d) by entering the coordinates of the selected Cn and Mn doped MnCn-1 fullerenes. Spin dipole moment, electronic energy and binding energy calculations were made for each set. For each set, translational energy, rotational energy and vibrational energy contributing to the total energy were calculated. In addition, thermodynamic properties such as enthalpy, free energy, thermal energy, entropy and specific heat were calculated for all selected material types. As a result, the use of simulation programs in any field of technology can provide cost-effective and fast results about materials. This and similar studies can also give an idea about the materials to be used in developing technologies.

Year : 2023

Number of Pages :68

Keywords: Fullerene Cn Nanostructures, Doped Fullerenes, Electronic Energies, Thermodynamic Properties

TEŞEKKÜR

Öncelikle, tez danışmanım Prof. Dr. Seyfettin DALGIÇ hocama ve değerli Prof. Dr. Serap ŞENTÜRK DALGIÇ hocama müteşekkirim. Sabır, anlayış ve bilgeliğiyle beni yönlendirdi ve her aşamada bana rehberlik etti. Sizin değerli önerileriniz ve geri bildirimleriniz sayesinde bu tez çalışmamın tamamlanması mümkün oldu.

Ailem ve sevdiklerime de teşekkür etmek istiyorum. Yoğun çalışmalarım sırasında sabır gösterdiği ve bana katlandığı için eşime ve oğluma teşekkür ediyorum. Her zaman beni cesaretlendirdiniz ve beni eğitim hayatım boyunca motive ettiniz. Yazdığım bu tezi kendisine bir teşekkür vesilesi olarak eşime ve oğlum Kerem Asaf'a ithaf ediyorum. Ayrıca çalışmam sırasında kolaylık sağlayan, küçük veya büyük yardımını esirgemeyen herkese de teşekkür ederim.

Abdulkerim KARATOPRAK

Ağustos 2023

İÇİNDEKİLER

ÖZET……..……...……....iv

ABSTRACT……...…..…….v

TEŞEKKÜR…….…….....……...…vi

İÇİNDEKİLER……..……. vii

ŞEKİLLERİN LİSTESİ……...……..……..……..…….xiii

ÇİZELGELERİN LİSTESİ……...…..……..…….xiv

BÖLÜM 1

GİRİŞ……1

BÖLÜM 2

FULLERENLERİN BİLİM VE TEKNOLOJİDEKİ UYGULAMALARI……..4

2.1 Giriş……4

2.2 Fullernlerin Yapı ve Sentezi……5

2.2.1 Buckyball Yapısı ……5

2.2.2 Fullerenlerin Sentezi……...6

2.3 Fullerenlerin Özellikleri……...6

2.3.1 Kimyasal Özellikler……...6

2. 3.2 Fiziksel Özellikler……..7

2.3.3. Optik Özellikler……7

2.4. Fullernlerin Uygulam Alanları……..7

2.4.1. Güneş Pilleri……....7

2.4.2. Hidrojen Gazı Depolam…….....8

2.4.3. Fulleren Metallerin Güçlendirilmesi / Sertleştirilmesi……....9

2.4.4. Elmasın Öncüsü Olarak Fulleren……...9

2.4.5. Fullerene Optik Uygulaması……10

2.4.6. Fulleren Bazlı Sensörler ……...10

2.4.7. Moleküler Tel Olarak Fullerenler……...10

2.4.8. Tıpta Fulleren……...11

BÖLÜM 3

TEORİ……...……..……12

3.1. Kuantum Kimyasal Hesaplamalar…….12

3.1.1. Yarı-deneysel yöntemler …….……..13

3.1.2. Ab-initio yöntemler ……..…….....13

3.1.3 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ……13

3.2. Schrödinger Denklemi ……..……..…….14

3.3. BLYP Fonksiyoneli …….……..…….15

3.4. Gaussian Simülasyon Metodu …….……..….16

3. 5. Bağlanma (Cohesive) Enerji ……..…….16

BÖLÜM 4

SONUÇLAR VE TARTIŞMA …….……...……18

4.1. Katkısız C_n Fullerenlerin Optimize Yapıları ……..…….18

4.2. Mn Katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin Optimize Yapıları ……...……..…20

4.3. Katkısız C_n ve Mn Katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin Spin, Dipol Moment ve Kararlı Durum ve Bağlanma Enerjisi Değerleri…….……..……22

4.4. Katkısız ve Katkılı C_n Fullerenlerde Enerji, Entalpi, Gibbs Serbestlik Enerjisi ve Entropi Değerlerine Katkılar……24

4.5. Katkısız ve Mn Katkılı C_n Fullerenlerde Termal Enerji, C_v ve Entropi Değerlerleri ……..……..….27

4.6 Katkısız ve Mn Katkılı C_n Fullerenlerde Toplam Enerji, Öteleme, Dönme ve Titreşim Değerlerleri ……...……....…….31

4.7. Sonuçlar…….……..…….……33

KAYNAKLAR……..……..... 35

EKLER ……...…37

ÖZGEÇMİŞ ……...57

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.1. Değişik Fullerenlerin gösterimi ……...…….……..…….3

Şekil 2.1. Farklı biçimde bulunnan fullerenler……..…….……..……5

Şekil 4.1.Katkısız C_n Fullerenlerin optimize edilmiş geometrik yapıları……..20

Şeki l4.2.Mn Katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin geometrik yapıları……..…....……..…22

Şekil 4.3. Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin bağlanma enerjilerinin karşılaştırılması……....24

Şekil 4.4a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik öteleme enerjileri……..25

Şekil 4.4b Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik dönme enerjileri……25

Şekil 4.4c Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik titreşim enerjileri……26

Şekil 4.4d Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik toplam enerjileri……...26

Şekil 4.5a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve sıfır noktası enerjileri ……28

Şekil 4.5b Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve termal enerjileri ……28

Şekil 4.5c Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve termal entalpileri 29

Şekil 4.5a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve termal serbest Enerjileri …….....29

Şekil 4.6a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin termal enerjilerinin karşılaştırılması

……31

Şekil 4.6b Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin entropilerinin karşılaştırılması…..31

Şekil 4.6c Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin özgül ısılarının karşılaştırılması 32

ÇİZELGELER LİSTESİ

Çizelge 4.1. Katkısız C_n Fullerenlerin spin, dipol momentleri, minimum enerjileri ve bağlana enerjileri……..……...…….23

Çizelge 4.2. Mn katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin spin, dipol momentleri, minimum enerjileri ve bağlana enerjileri ……..…23

Çizelge 4.3. Katkısız ve Mn Katkılı C_{n-1} Fullerenlerin Öteleme, Dönme, Titreşim ve Toplam Enerjileri …….……...27

Çizelge 4.4. Elektronik ve Sıfır Noktası Enerjilerinin Toplamı(SEZPE), Elektronik ve Termal Enerjilerin Toplamı(SETE), Elektronik ve Termal Entalpilerin Toplamı(SETEN-H) ve Elektronik ve Termal Serbest Enerjilerin Toplamı(SETFE-G)……..30

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Fullerenler, karbon atomlarından oluşan bir çokyüzlü molekül sınıfını oluşturur. Fullerenlerin ana özellikleri şu şekilde sıralanır. π-elektronlarından oluşan zengin bir küresel sistemdir. Konuk atomlar ve moleküller tarafından hali hazırda doldurulan bir iç boşluk vardır. 10^{-9} m mertebesindeki boyutlara (nanoparçacık boyutlarının alt sınırı) sahiptir.Bir molekül başına çok sayıda reaktif bölge ve bunların sp2-hibridize karbon atomlarının düzlemsel olmayan düzenlemesinden dolayı yüksek reaktiviteleri mevcuttur. Çeşitli istatistiksel ve toplu fenomenlere yol açan çok sayıda titreşimsel ve elektronik serbestlik derecesi vardır. Yapının katı geometri düzenliliği (daha dolgun enler yalnızca altıgenlerden ve beşgenlerden oluşur) ve genellikle fullerenlerin en ünlü temsilcisi olan C_{60} için Ih'ye kadar moleküllerin yüksek nokta simetri gruplarıdır.

Bilinen diğer kimyasal bileşik sınıflarının hiçbiri, yukarıdaki yapısal özelliklerin böyle bir kombinasyonunu sergilemez. Bütün bunlar, 30 yılı aşkın bir süredir üzerinde çalışılan fullerenlerin benzersiz fizikokimyasal özelliklerini sağlar ve bunlara olan ilgi devamlı artar.

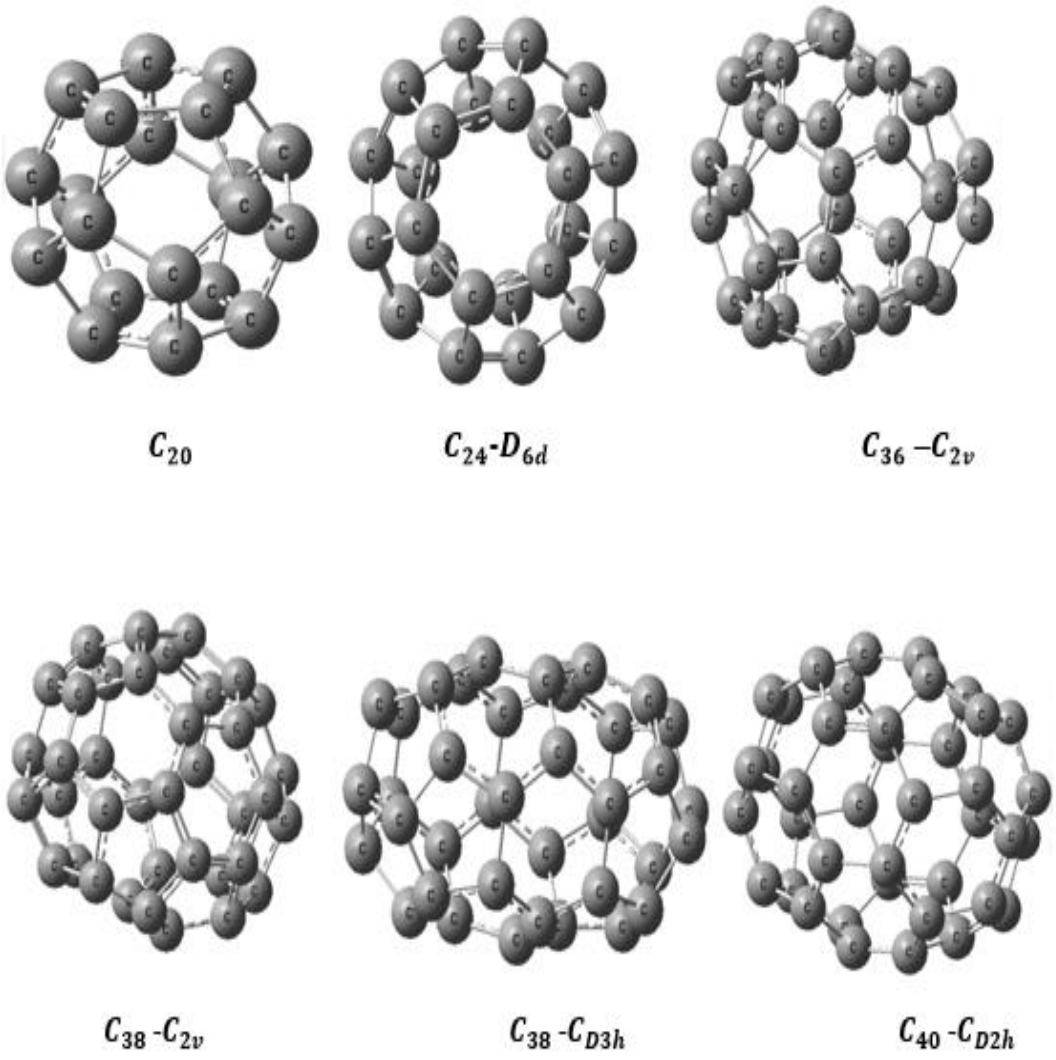
Mevcut kuramsal çalışmalar, neden bazı fulleren yapılarının baskın olduğu halde diğerlerinin laboratuvar koşulları altında ulaşılamaz kaldığı sorusunu yanıtlamaya çalışmaktadır. Bu sorunu çözmek için farklı yaklaşımlara başvurulmuştur. Bunlar,

fullerenlerin yapısal ve topolojik özelliklerinin , termodinamik ve kinetik kararlılıklarının tahminine dayanmaktadır. Yapısal/topolojik ve moleküler yörüngedeki ilerlemeye rağmen çalışmalarda, enerjik parametreler, çeşitli fulleren izomerlerinin stabilitesini değerlendirmek için önemini korumaktadır. Fullerenlerin sentezlenebilen kararlı bileşikler oluşumuna termodinamik kararlılık ve normal koşullar altında, yani oda sıcaklığında havada uzun süre değişmeden kalabilmesi ise kinetik kararlılık olarak bilinir. (A.R. Khamatgalimov, V.I. Kovalenko, 2017).

Normal şartlar altında karbonun termodinamik bakımdan en kararlı formu, gevşek bağlı grafen levhalar ve düz atomik bal peteği kafesleri yığını olan grafittir. Her atom, üç komşu ile bağlantılıdır, dördüncü valens elektron sistemi oluşturur, yani karbon atomları sp2-hibrid haldedir. Grafen levhalardaki geometrik kusurlar, kapalı bir 3D yapıya neden olabilir Böylece, mümkün olan en küçük fullerene olan (C_{20}) dodekahedron olarak adlandırılır. Bununla birlikte, C_{20} ve diğer küçük yapılı karbon atomlarının yüksek eğriliği, düz koordinasyonu tercih eden sp2-melez karbon hali için çok uygun değildir

Kararlı fulleren izomerleri oluşturmak için özellikle atom başına toplam enerji(Et/n) grafiğine bakılması gereklidir. Böylece, Cn fullerenlerin kararlı izomerlerine özgü azaltılmış toplam enerjileri (veya standart oluşum entalpilerini) çevreler ve onları kararsız olanlardan ayırır. Bununla birlikte, Et/n enerji artışının n ile azaldığı fark edilmelidir.

Tüm hesaplamalar yoğunluk fonksiyonel teorisine göre yapılmıştır. Fulleren yapılarının optimizasyonu, karşılık gelen titreşim görevlerini çözme ve enerjiye termal düzeltmelerin hesaplanması fullerenlerin termodinamik parametrelerini elde etmek için gereklidir. BLYP metodu fullerenlere uygulanmış, geometrik yapıları, elektronik enerjileri ve termodinamik özelliklerin güvenilir bir şekilde ortaya çıkarılmıştır. Bu tezde kullanılan katkısız C_n fullerenlerin şematik gösterimleri Şekil 1.1'de verilmiştir.



Şekil 1.1. Değişik fullerenlerin şematik gösterleri

BÖLÜM 2

FULLERENLERİN BİLİM VE TEKNOLOJİDEKİ UYGULAMALARI

2.1 Giriş

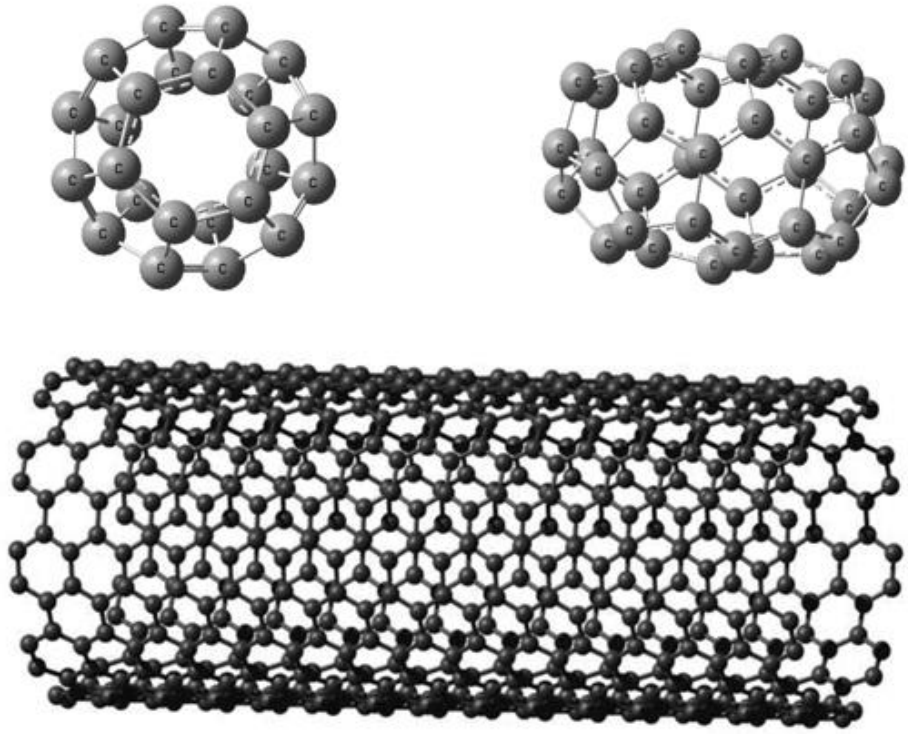
Fullerenler ilk kez Eylül 1985'te deneysel olarak keşfedildi. Amerikalı mimar Buckminster Fuller'ın adını taşıyan Buckminsterfullerene, jeodezik kubbesi Richard Smalley, Robert Curl ve Rice Üniversitesi'nden Harry Kroto gibi bir grup bilim adamı tarafından gözlemlendi. Bu yeni keşifleri için 1996'da Nobel Ödülü'nü paylaştılar. Kısa bir süre sonra, daha fazla ve daha az karbon atomu ile diğer fullerenler keşfedildi. 18 atomdan yüzlerce atoma kadar değişiyorlardı. Bunlar arasında 60 karbon atomu içeren Buckyball en popüler olanıdır. Bu bölümde, fullerenlerin yapısını ve üretimini, bilim ve teknolojideki çeşitli uygulamaları ele alınacaktır. Fullerenleri olağanüstü moleküller haline getiren kimyasal, mekanik ve optik özellikleri kısaca açıklanacaktır.

Karbonun üçüncü formu olan Fullerenler, bilim ve teknolojide önemli moleküller haline gelmiştir. Çok pratik özellikleri nedeniyle, Fullerenler günümüzde nanoteknoloji ve endüstriyel araştırmalarda önemli bir yer tutar. Fullerenlerin daha fazla uygulaması mevcut hale geldikçe, bu moleküllere olan talep gittikçe artacaktır. Bundan

dolayı, Fulleren konulu çalışmaların daha yoğun bir şekilde devam etmesi beklenilmektedir.

2.2 Fullernlerin Yapı ve Sentezi

Fullerenler tamamen karbondan oluşur. Üç farklı biçimde bulunabilirler. Bunlar sırasıyla; küresel, eliptik ve tüp şeklindedir. Bunların gösterimleri Şekil 2.1'de verilmiştir.



Şekil 2.1. Farklı biçimde bulunnan fullerenler

2.2.1 Buckyball Yapısı

Fullerenler, 12 beşgen ve belirli bir sayıda altıgenden oluşan kapalı kafesli karbon yapılardır. Altıgensiz 12 beşgenden oluşan yapı, mümkün olan en küçük fullerendir. Bu nedenle, teorik olarak mümkün olan en küçük fulleren C_{20}'dir. C_{20} dodekahedral kafes yapısına sahip en küçük fulleren olarak kabul edilir. Sadece 12 beşgen ve 30 bağdan oluşur. Kroto, en kararlı fullerenlerin 12 adet beşgene sahip olmasını ve bu beşgenlerin mümkün olduğunca birbirinden uzak olmasını gerektiğini ifade etmişti

(Kroto, H. 1997). Bu kurallar beşgenlerin izolasyon kuralı olarak isimlendirilmiştir. Bu kural göz önüne alındığında, C_{20} fulleren kafesi oldukça kararsız bir fullerendir. Bazen C_{20} fullereni "geleneksel olmayan fulleren" olarak adlandırılır. Prinzbach ve arkadaşları C_{20}' nin ilk sentezini gerçekleştirdi

2.2.2 Fullerenlerin Sentezi

1990 yılında Krätschmer ve meslektaşları, Krätschmer-Huffman yöntemi olarak bilinen makroskopik üretim için bir temas ark deşarj yöntemi geliştirdiler. Bir helyum atmosfer bulutu içinde hassas bir şekilde ısıtılan karbon çubuklarının, aynı zamanda bu süreçte de üretilen karbon kurumuna gömülü gram miktarlarda fulleren ürettiğini keşfettiler. Bu yöntem, yaklaşık 200 torr basınç altında bir helyum atmosferinde alternatif veya doğru akım geçiren grafit elektrotların temas yaylarından oluşur. Buharlaştırılmış grafit, Polar olmayan bir çözücü içinde çözünen kurum şeklini alır. Çözücü kurutulur ve C_{60} ve C_{70} fullerenler kalıntılardan ayrılabilir. Optimum akım, helyum basıncı ve akış hızı, bu yöntemle C_{60}'ın %70'ine ve C_{70}'in %15'ine kadar uzun zaman alır. Fulleren üretimi için lazer buharlaştırma da kullanılır. Tipik bir aparatta, lazer kaynağı olarak 532 nm ve 250 mJ gücünde çalışan darbeli bir Nd:YAG lazer kullanılır ve grafit hedefi 1200 °C'de bir fırında tutulur. Son olarak fullerenler kısa sürede, örneğin benzen ve asetilenin yanmasını içeren kurum alevlerinde de üretilirler (Dresselhaus. M. S. Dresselhaus. G. & Eklund. P. C. 1996).

2.3 Fullerenlerin Özellikleri

Bu bölümde, Fullerenlerin en önemli özellikleri sunulacaktır. Bu özelliklerin incelenmesinde molekülün sahip olabileceği çoklu uygulamaları, bilim insanları tarafından ele alınmış ve bu konuda çalışmalar yapılmaya başlanmıştır. Bu özelliklere kısaca değinmek faydalı olacaktır.

2.3.1 Kimyasal Özellikler

Bir Fulleren molekülü içindeki karbon atomları sp2 ve sp3 hibridize edilmiştir, bunlardan sp2 karbonları molekül içinde sunulan önemli açı geriliminden sorumludur. C_{60} ve C_{70} , tersine çevrilebilir altı elektrona kadar. Bu yüksek elektron afinitesi, üçlü dejenere düşük yalancı LUMO'ların (en düşük boş moleküler orbital) varlığından

kaynaklanır. Molekülün oksidasyonu da gözlenmiştir; yine de oksidasyon geri döndürülemez. C_{60} , molekülün süperaromatiklik özellikleri göstermesini engelleyen lokalize bir pi-elektron sistemine sahiptir

2. 3.2 Fiziksel Özellikler

Fullerenler, büyük baskılara dayanabilen son derece güçlü moleküllerdir - 3.000'den fazla atmosfere maruz kaldıktan sonra orijinal şekline geri dönerler. Teorik hesaplamalar, tek bir C_{60} molekülünün, boyutunun% 75'ine kadar sıkıştırıldığında 668 GPa'lık etkili bir yığın modülüne sahip olduğunu göstermektedir (Ruoff. R. S. & Ruoff. A. L. 1991). Bu özellik, fullerenleri, toplu modülleri sırasıyla 160 GPa ve 442 Gpa olan çelik ve elmastan daha zor hale getirir. İlginç bir deney, Fullerenes'in paslanmaz çeliğe karşı 24.000 Km/saate kadar çarpışmalara dayanabileceğini, sadece geri sektiğini ve şekillerini koruyabildiğini gösteriyor. Bu deney, molekülün yüksek stabilitesine benzer.

2.3.3. Optik Özellikler

Fullerenlerdeki delokalize pi elektronlarının son derece büyük doğrusal olmayan optik tepkiler sağladığı bilinmektedir. Fullerenler, optik sınırlayıcı ve yoğunluğa bağlı kırılma indisinde özel vaatler göstermiştir. Ek olarak, elektronların kapalı atomlardan Fullerene aktarılması, boş hücre Fullerenlerine kıyasla büyüklük sırasına göre üçüncü dereceden doğrusal olmayan optik etkiyi arttırır**.**

2.4. Fullernlerin Uygulam Alanları

2.4.1. Güneş Pilleri

Yüksek elektron afinitesi ve yüksek yük taşıma kabiliyeti Fullerenleri şu anda mevcut olan en iyi alıcı bileşen yapar. İlk olarak, moleküle çok sayıda potansiyel organik donöre göre çok yüksek bir elektron afinitesi veren enerjisel olarak derin bir LUMO'ya sahiptirler. LUMO C_{60} ayrıca molekülün altı elektrona kadar geri dönüşümlü olarak azaltılmasına izin verir, böylece negatif yükü stabilize etme kabiliyetini gösterir (Thompson. B. C. & Fréchet. J. M. 2008). Önemli olarak, çok sayıda konjüge edilmiş polimer-fulleren karışımının ultra hızlı sergilediği bilinmektedir. fotodeğişmeli şarj aktarımı, daha yavaş büyüklükte geri aktarım. Organik fotovoltaik alanındaki son

teknoloji, şu anda Fulleren türevi fenilC_{61}_butirrik asit metil ester (PCBM) bazlı Bulk Heterojunction (BHJ) güneş pilleri olup, % 5'e yaklaşan beyaz tekrarlanabilir verimlerdir (Shwartz. M. 2012).

Geleneksel silikon güneş pilleri% 20 verimliliği aşmaktadır. Bu nedenle kendimize sorabiliriz, organik güneş hücrelerini düşünmek neden bu kadar önemli? İlk olarak, karşılık gelen inorganik analoglara kıyasla organik ışık dönüştürücü cihazların üretim maliyeti iki büyüklükten daha düşüktür ve ikincisi, organik güneş pilleri esneklikleri. Herhangi bir yüzeye sarılabilir, kesilebilir ve yayılabilirler. Özellikle bu plastik, binaların hem iç hem de dış duvarlarını kaplamak için kullanılabilir; herhangi bir renk ve dokudaki hücreler üretilebilir. Örneğin, bir cep telefonu bu malzeme ile boyanabilir, bu nedenle güneşli bir günde yürümek cihazın pilini şarj etmek için yeterli olacaktır. Amerikan askeri birimleri organik güneş pilleri ile ilgili projeleri aktif olarak destekliyor, çünkü bu malzemeler yeni silahlar ve refakatçi sistemleri (Ma. B. Milton. A. M. & Sun. Y. P. 1998). Son olarak, büyük beklentiler, reklam ve paketleme işinde organik hücrelerin kullanımı ile de ilişkilidir. Bunlar arasında otonom ışıklı pankartlar, büyük likit kristal ekranlar ve yiyecek ambalajları yer alıyor.

2.4.2. Hidrojen Gazı Depolam

Eşsiz moleküler yapısı nedeniyle, fulleren potansiyel olarak kimyasal olarak hidrojenlenebilen ve geri dönüşümlü olarak hidrojensizleştirilebilen tek karbon formudur. Fullerenler hidrojenlendiğinde, C = C çift bağı C-C tek bağı ve C-H bağı olur. Tekli C-bağlanma mukavemeti Eşsiz moleküler yapısından dolayı, sadece fulleren potansiyel olarak kimyasal olabilen karbon formu hidrojene ve hidrojensiz hale getirilebilir. Fullerenler hidrojenlendiğinde, C = C çift bağı C-C tek bağı ve C-H bağı olur. Tek C'nin bağlanma gücü Bu, fulleren hidridler için H-C bağının, C-C bağlarından önemli ölçüde daha zayıf olduğu anlamına gelir. Bu nedenle, fulleren hidritlere ısı uygulandığında, H-C bağları C-C bağlarından önce kırılacak ve fulleren yapısı korunmalıdır. $C_{60}H36$ için oldukça düşük formasyon ısısı, bir molekül olarak $C_{60}H36$'nın C_{60}'dan termal olarak daha kararlı olduğunu gösterir. Bu nedenle, C_{60}'ın hidrojenasyonu termodinamik olarak tercih edilir ve doğru kimyasal koşullar altında gerçekleştirilebilir. Hidrojenlenmiş fullerenin rengi siyahtan kahverengiye, daha sonra artan hidrojen içeriği ile kırmızı, turuncu ve açık sarıya dönüşür. Fullerene % 6.1'e kadar hidrojen içeriği deneysel olarak geliştirilmiştir

(Withers. J. C. Loutfy. R. O. & Lowe. T. P. 1997). Fulenen hidritlerin potansiyel bir uygulaması, bir yakıt hücresi kullanacak elektrikli araçlar için hidrojen gazı depolama cihazlarındadır. Halihazırda, basınçlı gaz veya metal hidritler olarak depolama gibi hidrojen depolama teknolojileri potansiyel olarak tehlikelidir ve düşük hidrojen depolama yoğunluklarına sahiptir. Tablo1.1' de içten yanmalı motorlar için Hidrojen depolama kapasitelerinin karşılaştırılması göstermektedir. Fullerenes ve metal hidrür kullanılırken depolamak için gerekli ortam miktarı. Bu karşılaştırmada kullanılan metal hidrit depolama ortamı Titanyum, Zirkonyum ve Vanadyum'dur

2.4.3. Fulleren Metallerin Güçlendirilmesi / Sertleştirilmesi

Fullerenler, ortam sıcaklığı sünekliklerinden ciddi şekilde ödün vermeden metalleri ve alaşımları sertleştirmek için eşsiz fırsatlar sunar. Bu, fullerenlerin, metalik matrislerin dispersiyon kuvvetlenmesini sağlayan küçük boyutları ve yüksek reaktivitelerinin benzersiz özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Fullerenler ve metaller arasında yerinde etkileşimlerden kaynaklanan karbür parçacıkları ile. Popüler bir uzay-içi intermetalik bileşik Ti24.5AI-17Nb'nin, fulleren katkı maddeleri ile birlikte ve bunlar olmadan sertliğinin karşılaştırılmasında, fulleren katkı maddelerine sahip malzeme için %30 sertlik artışı ölçülmüştür (Imahori. H. & Sakata. Y. 1997).

2.4.4. Elmasın Öncüsü Olarak Fulleren

Fullerenlerin elmas için mükemmel bir öncü olduğu kanıtlanmıştır. Bu kısmen, düzlemsel olan grafitin aksine, kısmi bir sp (elmas) bağlanma konfigürasyonuna sahip fullerenlerin kavisli yapısına atfedilebilir. Argonne Ulusal Laboratuvarları ve MER Corporation, fullerenleri CVD tortu elmasına karbon kaynağı olarak mükemmel sonuçlarla araştırdı. MER, fullerenleri, elmasın büyüme hızının beş katında elmas biriktiren tek karbon kaynağı olarak kullanarak mükemmel elmas kaplamalar göstermiştir. metan karbon kaynakları, %70 öngörülen maliyet tasarrufu sağlar. Düşük maliyetli fullerenler ile elmasa dönüştürmenin çok önemli bir ticari uygulama olması beklenebilir (Withers. J. C. Loutfy. R. O. & Lowe. T. P. 1997).

2.4.5. Fullerene Optik Uygulaması

Optik sınırlama, artan ışık yoğunluğuna sahip bir malzemenin geçirgenliğinde bir azalmaya karşılık gelir. Optik sınırlama olgusu, yoğun ışık kaynaklarından göz ve sensör korumasındaki uygulamalar için önemli bir potansiyele sahiptir. Fullerenlerin optik sınırlayıcı özelliklerine dayanarak, bir aktivasyon eşiğinin altındaki tüm ışığın geçmesine izin veren ve iletilen ışığı göz veya sensörün hasar eşiğinin altında sabit bir seviyede tutan optik bir sınırlayıcı yapılabilir (Withers. J. C. Loutfy. R. O. & Lowe. T. P. 1997).

2.4.6. Fulleren Bazlı Sensörler

Fulleren bazlı interdigitasyonlu kapasitörler (IDC'ler) son zamanlarda sensör uygulamalarını keşfetmek için geliştirilmiştir. Bu yeni katı hal sensör tasarımı, fulleren filmlerin elektron kabul etme özelliklerine ve düzlemsel moleküller film yüzeyi ile etkileşime girdiğinde meydana gelen değişikliklere dayanmaktadır. Fulleren kimyası yüksek derecede seçicilik sağlar ve IDC tasarımı yüksek hassasiyet sağlar. Katı hal kimyasal sensörünün küçük boyutu, basitliği, tekrarlanabilirliği ve düşük maliyeti, onları dolgun uygulama geliştirme için çekici adaylar haline getirir.

Fullerenler ile IDC konfigürasyonları üzerinde yapılan çalışmalar, izopropanol içindeki suyu 40 ppm çözünürlüğe kadar algılayabilmiştir. Bu sonuçlar, fullerenlerin IC kimyasal sensörleri için seçici dielektrik filmler olarak kullanılmasının fizibilitesini göstermektedir.

2.4.7. Moleküler Tel Olarak Fullerenler

Son deneyler, tek moleküller üzerinden elektron taşınmasını belgelemiştir. Bazı deneysel koşullar altında, bir molekül topluluğu yerine tek bir molekül üzerinden moleküler iletim garantidir. Bu fenomen, Fullerenlerin yüksek elektron afinitesi nedeniyle mümkündür. Bir moleküler bilgisayar inşa edilecekse, çeşitli bileşenlerine bağlanmak için moleküler kablolara ihtiyaç duyacaktır (Guldi. D. M. & Costa. R. D. 2013).

2.4.8. Tıpta Fulleren

Bilim adamlarının suda çözünür fulleren bileşiklerine olan ilgileri doğrudan biyolojik aktiviteleriyle ilgilidir karboksil grubu içeren dendrimer 4p bugün daha umut vericidir. Bu bileşiğin ilaçta sentezi ve kullanımı ABD'de (C-altmış şirket) patentlenmiştir; şu anda, bu ilaç AIDS tedavisi için umut verici bir ilaç olarak klinik çalışmalara tabi tutulmaktadır.(H. Paul, R. Cristina, H. Tim 2003) Fulleren türevleri fotodinamik kanser tedavisinde antibakteriyel ajanlar ve nöroprotektif etki ilaçları olarak kullanılabilir. Atomları kapsama yetenekleri nedeniyle Fullerenes, ilaç taşıyıcıları olarak büyük fayda vaat ediyor. Ayrıca, asil gazlar Çevreleyen karbon atomlarıyla bağlanma arzusu olmayan ancak manyetik rezonans görüntüleme (MRI) gibi uygulamalarda kullanılabilen Fullerenler. Tipik MRI kontrast maddelerinde metal gadolinyum, normalde vücuttan hızla atılan fulleren olmayan bir moleküle astarlanır. Gadolinyum ile kapsüllenmiş Fullerenler, kontrast maddenin vücutta daha uzun süre kalmasına izin verebilir ve doktorların daha yavaş çalışmalar yapmasına izin verebilir.

BÖLÜM 3

TEORİ

3.1. Kuantum Kimyasal Hesaplamalar

Kuantum mekaniksel yasalar, elektronik yapı yöntemlerinde klasik fizik yasaları yerine kullanılır. Bu durumda bir molekülün enerjisi ve diğer büyüklükleri,

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{3.1}$$

Schrödinger denklemi ile belirlenir. Bu denklem sadece hidrojen atomunun belirli durumlarının tam çözümü için mümkündür. Çok atomlu sistemler için farklı yaklaşım metotlarının kullanılması daha uygundur. Yarı deneysel (semi-empirical) yöntemler, Ab-initio yöntemler ve yoğunluk fonksiyon teorisi (DFT yöntemleri) olmak üzere 3 gruba ayrılır.

3.1.1. Yarı-Deneysel Yöntemler

Bu yöntemler Hartree-Fock (HF) teorisinin basit versiyonlarıdır. HF teorisi Born-Oppenheimer yaklaşımı kullanır. Bu yöntemler HF teorisindeki Coulomb ve değiş-tokuş integrallerini ihmal eder veya bunların deneysel parametrelerini kullanır. Hesaplamalarda kullanılan parametreler, incelenen moleküler sistem için uygun

olduğunda, bu yöntemle yapılan hesaplamalarda Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümü ile iyi sonuçlar elde etmek mümkündür. Ayrıca, yarı-deneysel hesaplamalarda moleküler sistemdeki tüm orbitaller küresel simetrik kabul edilir ve sadece valans elektronları göz önüne alındığından, hesaplama süresi Ab-initio yöntemlere göre daha kısadır.

3.1.2. Ab-İnitio Yöntemler

Ab-initio Latince "başlangıçtan itibaren" anlamına gelmektedir. Bu yöntem moleküler mekanik ve yarı-deneysel yöntemlerden farklı olarak, hesaplamalarında ışık hızı, Planck sabiti, elektron ve çekirdeğin kütleleri ve yükleri gibi temel fizik sabitlerini kullanır, deneysel parametrelere ihtiyaç duymaz (Jensen, 1999).

HF teorisi kullanan Ab-initio yöntemlerde elektron ihmal edilmeyip, sadece ortalama bir değer olarak hesaba katılmaktadır. Bu yöntemler kuantum mekanik temellere dayandığından, moleküler yapı ve özellikler hesaplanabilir. Bu yüzden hesaplama süresi moleküler mekanik yöntemlere göre çok daha fazladır. Ab-initio yöntemler hesaplama maliyetleri bakımından yarı-deneysel yöntemlere göre dezavantajlı olmalarına rağmen, incelenen birçok sistem için yüksek kaliteli yaklaşımlar sunarlar.

3.1.3. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

Yoğunluk Fonksiyonel teorisi, Kohn ve Hohenberg tarafından ispatlanmış olan iki temel teorem ve 1960'ların ortalarında türettikleri bir dizi denklem üzerine inşa edilmiştir. Hohenberg ve Kohn tarafından ispatlanan ilk teorem şudur: Schrödinger denkleminde elde edilen taban-durum enerjisi elektron yoğunluğunun tek bir fonksiyonelidir. Bu teoremi anlamak için öncelikle fonksiyonel kavramının ne anlama geldiği bilinmelidir. Fonksiyonel kavramı, fonksiyon kavramı ile çok yakından ilişkilidir.

Şimdi Hohenberg ve Kohn'un sonucuna dönecek olursak, n(r) elektron yoğunluğu olmak üzere, taban-durum enerjisi E , E[n(r)] şeklinde yazılır ve bu ifadeden dolayı yoğunluk fonksiyonel teorisi olarak bilinir.

Birinci Hohenberg-Kohn teoremi, Schrödinger denklemini çözmek için kullanılabilecek bir elektron yoğunluğu fonksiyonelinin mevcut olduğunu söyler, ancak

fonksiyonelin gerçekte ne olduğu hakkında bir şey söylemez. İkinci Hohenberg-Kohn teoremi bu fonksiyonelin önemli bir özelliğini tanımlar. Toplam fonksiyonelin enerjisini düşüren elektron yoğunludur.

3.2. Schrödinger Denklemi

Kuantum mekaniğinde bir sistemin kararlı enerji durumlarının ve sistemi temsil eden dalga fonksiyonlarını belirleyebilmek için Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekmektedir. Bu çözümleri her biri, ψ_n ilişkili bir özdeğere sahiptir (En), özdeğerler reel bir sayıdır ve bu özdeğer denklemini sağlar. Hamiltonyenin detaylı tanımı, Schrödinger denklemiyle tanımlanan fiziksel sisteme bağlıdır. Eğer atomlardan oluşan bir sistemde Schrödinger denklemini yazmak istiyorsak moleküler hamiltonyeni belirlememiz gerekir. Bu durumda moleküler hamiltonyen ifadesini, elektronların kinetik enerjisi, çekirdeğin kinetik enerjisi, elektron-elektron itme enerjisi, çekirdek-çekirdek çekim enerjisi ve elektronçekirdek çekim enerjisi ifadesi oluşturur ve aşağıda ki gibi formülize edilebilir.

$$H=Te + Tn + Ve\text{-}e + Vn\text{-}n + Ve\text{-}n \tag{3.2}$$

Burada Te: elektron kinetik enerjisi, Tn: çekirdeğin kinetik enerjisi, Ve-e: elektron elektron etkileşimi, Vn-n: çekirdek elektron etkileşmesi ve Ve-n: elektron çekirdek etkileşmesidir.

Schrödinger denklemi çözülürken elektronların ve çekirdeğin hareketi ayrı ayrı değerlendirilir. Sistemi temsil eden toplam dalga fonksiyonu elektronik ve çekirdek dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde verilir.

$$\psi_T = X_n \psi_e \tag{3.3}$$

Burada X_n nükleer dalga fonksiyonu, ψe ise elektronik dalga fonksiyonudur ve elektronik Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilir. Elektronun kütlesinin çekirdeğin kütlesinden çok daha küçük olmasından dolayı (bir elektron ve bir protonun kütlesi arasında yaklaşık 1836 kat kütle farkı vardır), çekirdeğin hareketi elektronların yanında ihmal edilebilir ve toplam dalga fonksiyonu yalnızca elektronik dalga

fonksiyonuyla verilebilir. Burada, elektronların çekirdeği hareketsiz olarak gördüğü kabul edilir ve elektronik hareket sabit olduğu kabul edilen çekirdek alanına göre belirler.

3.3. BLYP Fonksiyoneli

1988 yılında (Becke, 1998) parametreleri deneysel moleküler veriler ile uyuşan bir değiş-tokuş enerji fonksiyonelini

$$E_{xc} = E_{xc}^{LDA}\left(1 - \frac{\beta}{2^{1/3}} A_x \frac{x^2}{1+6\beta x sinh^{-1}(x)}\right) \tag{3.4}$$

şeklinde tanımladı. Bu eşitlikte $x = 2^{1/3}|\nabla n(r)|/n(r)^{4/3}$ ve $A_x = (3/4)(3/\pi)^{1/3}$

Becke bu eşitlikte $\beta = 0{,}0042\ a.u.$ sabit değerini tespit etti. Bu sabit ile helyumdan radona kadar altı soy gazın atomlarının değiş-tokuş enerjisi, kesin sonuçlara göre % 0,11 sapma ile hesaplanabildi.

Aynı yıl içerisinde Lee, Yang ve Parr tarafından (Lee, Yang, Parr, 1988) BLYP (Becke, Lee, Yang, Parr) olarak adlandırılan

$$E_c = \frac{a}{1+dn^{-1/3}}\left\{n + bn^{-2/3}\left[C_F\pi^{5/3} - 2t_W + \frac{1}{9}\left(t_W + \frac{1}{2}\nabla^2 n\right)e^{cn^{-1/3}}\right]\right\} \tag{3.5}$$

kolrelasyon fonksiyoneli türetildi. Bu eşitlikte,

$t_W = \frac{1}{8}\left(\frac{|\nabla n|^2}{n} - \nabla^2 n\right)$ (Yerel Weizsacker Kinetik Enerji Yoğunluğu) ve

$C_F = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}$ (Thomas-Fermi Kinetik Enerji Yoğunluğu Sabiti) olup; a=0.04918, b=0.132, c=0.2533 ve d=0.349 sabitleri Colle-Salvetti eşitliğinde sadece helyum atomunun Hartree-Fock orbitali için uydurulan bir prosedür ile belirlenmişti. Bu eşitlik LDA'ya dayalı olmayıp, helyumdaki elektronik korelasyon için Colle-Savetti eşitliğinin diğer kapalı kabuk sitemlerine bir uzantısı olarak elde edilmiştir.

3.4. Gaussian Simülasyon Metodu

Gaussian, atomlar ve moleküller üzerinde yarı deneysel, ab-initio moleküler orbital (MO), yoğunluk fonksiyonel ve moleküler mekanik hesaplamaları kullanarak elektronik yapı modellemesi yapan; kimyacılar, kimya mühendisleri, biyokimyacılar, fizikçiler ve malzeme üzerine bilimsel çalışmalar yapan bilim insanları tarafından kullanılan bir simülasyon programıdır. Moleküllerin özelliklerini, yapısını, enerjisini, spektroskopik verilerini (NMR, IR, UV, vb.) ve çok daha gelişmiş hesaplamaları kuantum mekaniğinin temel yasalarından yararlanarak tahmin eder. Elektronik yapı modelleme için son teknoloji yetenekler sağlar. Laboratuar ortamında gözlenmesi zor ve imkansız olan molekül ve malzemenin modellenebilmesi bakımından da son derece önemlidir. İlk olarak 1970 yılında John Pople ve Carnegie-Mellon Üniversitesi'ndeki araştırma grubu tarafından Gaussian 70 adıyla yayınlandı. Sürekli güncellenen programın en son sürümü Gaussian 16W'dir. Gaussian 16W, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) yöntemleri ve uygulamalarının tartışılması için çok çeşitli DFT modelleri sunar. Tüm DFT modelleri için enerjiler, analitik gradyanlar ve gerçek analitik frekanslar mevcuttur (https://gaussian.com/). GaussView, Gaussian ile kullanılan grafik arayüzdür. Girdi dosyalarının oluşturulmasına yardımcı olur ve çıktının yazılım içinde yorumlanmasına yardımcı olur. Biz bu çalışmada Gaussian 09 programını kullandık. (Hehre, W. J., Ditchfield, R., Radom, L., & Pople, J. A. 1970).

3.5. Bağlanma (Cohesive) Enerji

Bağlanma enerjisi, moleküllerin yapısına ve atomların elektron dağılımına bağlıdır. Polar moleküller, apolar moleküllerden daha fazla bağlanma enerjisine sahiptir. Çünkü polar moleküllerde, atomlar arasında farklı elektronegatiflik değerleri vardır. Bu da, molekülün bir ucunda negatif yük birikimine neden olur. Bu negatif yük, diğer moleküllerin pozitif yüklü uçlarını çekerek moleküller arasında daha güçlü bir bağ oluşturur.

Bağlanma enerjisi, bir maddenin fiziksel özelliklerini etkiler. Maddelerin kaynama noktaları, erime noktaları ve yüzey gerilimleri, bağlanma enerjileri ile orantılıdır. Yüksek bağlanma enerjisine sahip maddeler, düşük bağlanma enerjisine sahip maddelerden daha yüksek kaynama ve erime noktalarına sahiptir. Ayrıca, yüksek

bağlanma enerjisine sahip maddeler, düşük bağlanma enerjisine sahip maddelerden daha düşük yüzey gerilimine sahiptir.

Kümeyi oluşturan tüm serbest atomların enerji toplamı ile kümenin toplam enerjisi arasındaki fark olarak aşağıdaki formül kullanılarak tanımlanan termodinamik kararlılığı, Mn kümelerinin taban durumu için atom başına tüm ortalama bağlanma enerjilerinin, karşılık gelen saf C_n'ninkinden önemli ölçüde daha yüksek olduğu tablodan görülebilir. Bu, Mn atomu ile katkılanmanın olduğunu gösterir.

$$E_b(MnC_n)= E(MnC_n)-(n.\ E(C) +1.E(Mn)) /n \quad (3.6)$$

$$E_b(C_{n+1})= (E(C_n) – (n.E(C))/n \quad (3.7)$$

Bağlanma enerjileri katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} Karbon fullerenler için formül 3.6 ve 3.7 kullanılarak hesaplandı.

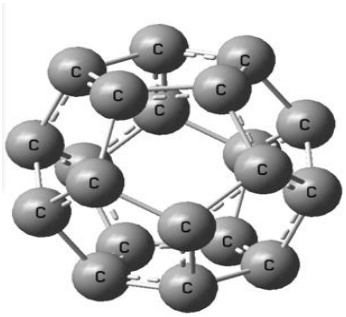
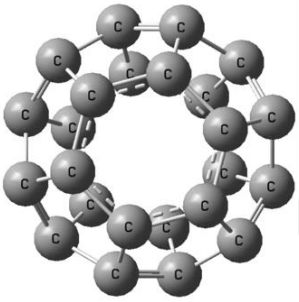
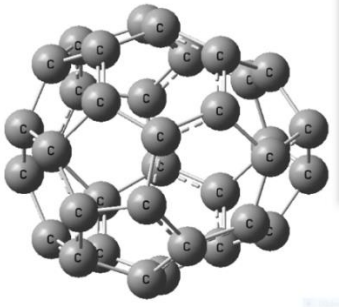
BÖLÜM 4

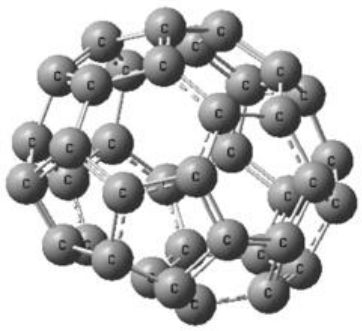
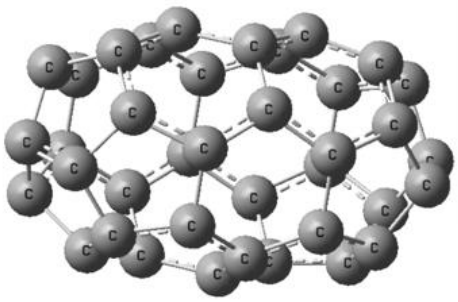
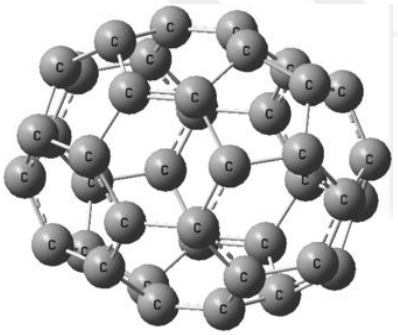
SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, katkısız 6 farklı molekül simetrisine sahip Karbon fullerenler ele alınarak üç boyutlu görüntüleri Gaussian programı kullanılarak oluşturuldu. Ayrıca bu malzeme türlerine Mangan katkısı yapılarak yeni bir set yapıldı. Oluşturulan iki ayrı durum için yoğun bilgisayar simülasyon programları kullanılarak bazı termodinamik özelliklerini hesaplandı. Şimdi bu hesaplamaları detaylı bir şekilde vermeye çalışalım.

4.1. Katkısız Cn Fullerenlerin Optimize Yapıları

İlk olarak seçilen Karbon Fullerenleri koordinatları girilerek B3LYP/6-31 G(d) ile üç boyutlu geometrik görüntüleri elde edildi. Bu görüntüler Şekil 4.1'de verilmiştir. Bu optimize işlemi, sonraki hesaplamaklar için bir temel teşkil edecek olması bakımından önem taşımaktadır. Bundan dolayı bu tez üç boyutlu geometrik yapının elde edilmesi ile başlatıldı.

Malzeme Türü	Hesaplan Nokta Grubu	Optimize Yapı
$C_{20}\ Ih$	C1	
C_{24}-D_{6d}	C1	
C_{36} –C_{2v}	C1	

C_{38} -C_{2v}	C1	
C_{38} -C_{D3h}	C1	
C_{40} -C_{D2h}	C1	

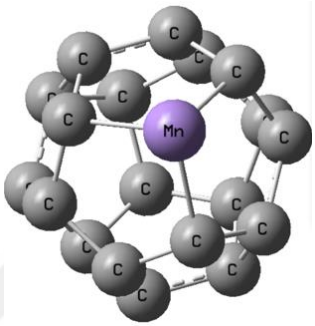
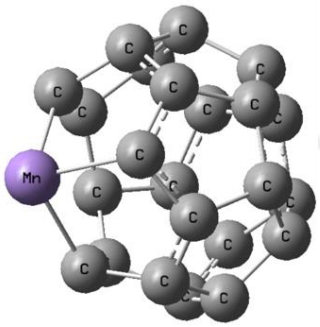
Şekil 4.1. Katkısız C_n Fullerenlerin optimize edilmiş geometrik yapıları

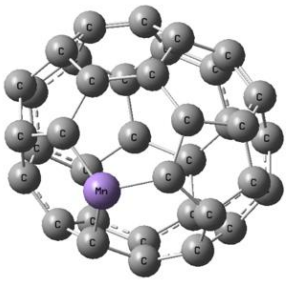
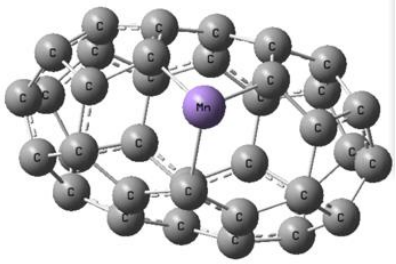
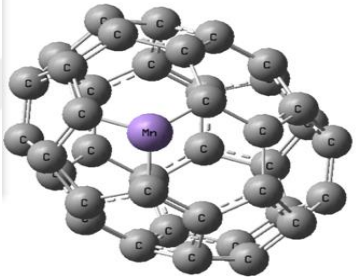
Optimize yapılarak elde edilen geometrik şekillerde tek tip hesaplanan nokta grubu(C1) vardır. C atom sayısı artıkça küresel simetrinin bozulduğu görülebilir.

4.2. Mn Katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin Optimize Yapıları

Seçilen sistemde Karbon fullerenlerin bir karbon atomu yerine bir Mangan atomu(şekillerde farklı renkte olan atom) yerleştirilmiştir. Bu durum B3LYP/6-31 G(d)

ile optimize edilerek frekans hesaplamaları yapılmış elde edilen kararlı geometrik yapıların üç boyutlu görüntüleri Şekil 4.2. de verilmiştir.

Malzeme Türü	Hesaplanan Nokta Grubu	Optimize Yapı
$Mn - C_{19}\, Ih$	C1	
$Mn - C_{23-}D_{6d}$	C1	
$Mn - C_{35}\, –C_{2v}$	C1	

$Mn - C_{37}$ -C_{2v}	C1	
$Mn - C_{37}$ -D_{3h}	C1	
$Mn - C_{39}$ -D_{2h}	C1	

Şekil 4.2. Mn Katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin geometrik yapıları

Mn katkılı durumda da optimize yapılarak elde edilen geometrik şekillerde tek tip hesaplanan nokta grubu(C1) vardır. Değişik malzeme türleinde Mn atomunun konumu sabit değildir. C atom sayısı artıkça küresel simetrinin daha çabuk bozulduğu görülebilir.

4.3 Katkısız Cn ve Mn Katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin Spin, Dipol Moment ve Kararlı Durum ve Bağlanma Enerjisi Değerleri

Bir önceki bölümlerde elde edilen geometrik yapılar kullanılarak katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} Fullerenlerin B3LYP/6-31G(d) DFT metodu ile Gaussian 09 kodu kullanılarak hesaplamalar yapıldı. Bu sistemlerin spin, dipol momentleri, minimum enerjileri ve bağlana enerjileri hesaplandı. Hesaplanan değerler Tablo 4.1 ve 4.2'de listelenmiştir. Bağlanma enerjileri 3.6 ve 3.7 denklemleri kullanılarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.1. Katkısız Cn Fullerenlerin spin, dipol momentleri, minimum enerjileri ve bağlana enerjileri

Yapı	Nokta Grubu	Spin Durumu	Dipol Momenti (Debye)	Elektronik Enerjisi (au)	Bağlanma Enerjisi (au)
$C_{20}\ Ih$	C1	Tekli	0,0004	-761,444	-0,291
C_{24}-D_{6d}	C1	Tekli	0,0002	-913,840	-0,295
C_{36} –C_{2v}	C1	Tekli	0,769	-1371,243	-0,309
C_{38} -C_{2v}	C1	Tekli	0,3904	-1447,366	-0,308
C_{38} -C_{D3h}	C1	Tekli	0,1663	-1447,285	-0,306
C_{40} -C_{D2h}	C1	Tekli	0,0003	-1523,572	-0,309

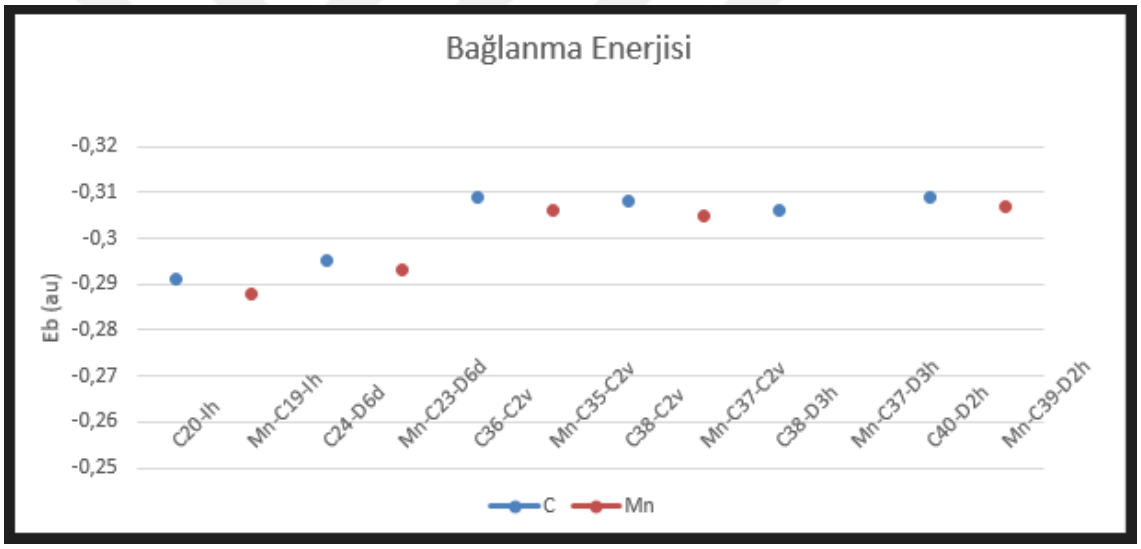
Çizelge 4.1 incelendiğinde, spin dipol momenti C_{36} –C_{2v} yapının en yüksek değerde (0,7690 Debye) ve C_{24}-D_{6d} yapının en düşük değerde (0,0002 Debye) olduğu tespit edildi. Diğer yapılarda ise bu iki değer arasında değiştiği gözlemlendi. Fullerenlerde C atom sayısı artıkça kararlılığının artığı ve bağlanma enerjilerinde değişikliğinin binler basamağında olduğu gözlemlenmiştir. Sadece C_{36} –C_{2v} ve C_{40} -C_{D2h} yapılarında bağlanma enerjilerinin eşit olduğu (-0.309 au) bulundu.

Çizelge 4.2. Mn katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin spin, dipol momentleri, minimum enerjileri ve bağlana enerjileri

Yapı	Nokta Grubu	Spin Durumu	Dipol Momenti (Debye)	Elektronik Enerjisi (au)	Bağlanma Enerjisi (au)
$Mn - C_{19}\ Ih$	C1	İkili	3,5258	-1874,263	-0,288
$Mn - C_{23_}D_{6d}$	C1	İkili	2,2505	-2026,663	-0,293
$Mn - C_{35}$ –C_{2v}	C1	İkili	4,777	-2484,0123	-0,306
$Mn - C_{37}$ -C_{2v}	C1	İkili	1,2519	-2560,040	-0,305
$Mn - C_{37}$ -D_{3h}	C1	İkili	0,4340	-2560,044	-
$Mn - C_{39}\ D_{2h}$	C1	İkili	1,6154	-2635,862	-0,307

Çizelge 4.2 incelendiğinde ise, spin dipol momenti $Mn - C_{35}$ –C_{2v} yapının en yüksek değerde (4,7770 Debye) ve $Mn - C_{37}$ -D_{3h} yapının en düşük değerde (0,4340 Debye) olduğu bulundu.. Diğer yapılarda ise bu iki değer arasında değiştiği gözlemlendi. Tüm yapılarda katkısız durumdan oldukça yüksek değerlere çıktığı tespit edildi. Fullerenlerde C atom sayısı artıkça kararlılığının artığı ve bağlanma enerjilerinde değişikliğinin yüzler basamağında olduğu gözlemlenmiştir. Sadece $Mn - C_{37}$ -D_{3h}yapısında bağlanma enerjilerinin hesaplanamadığı görüldü.

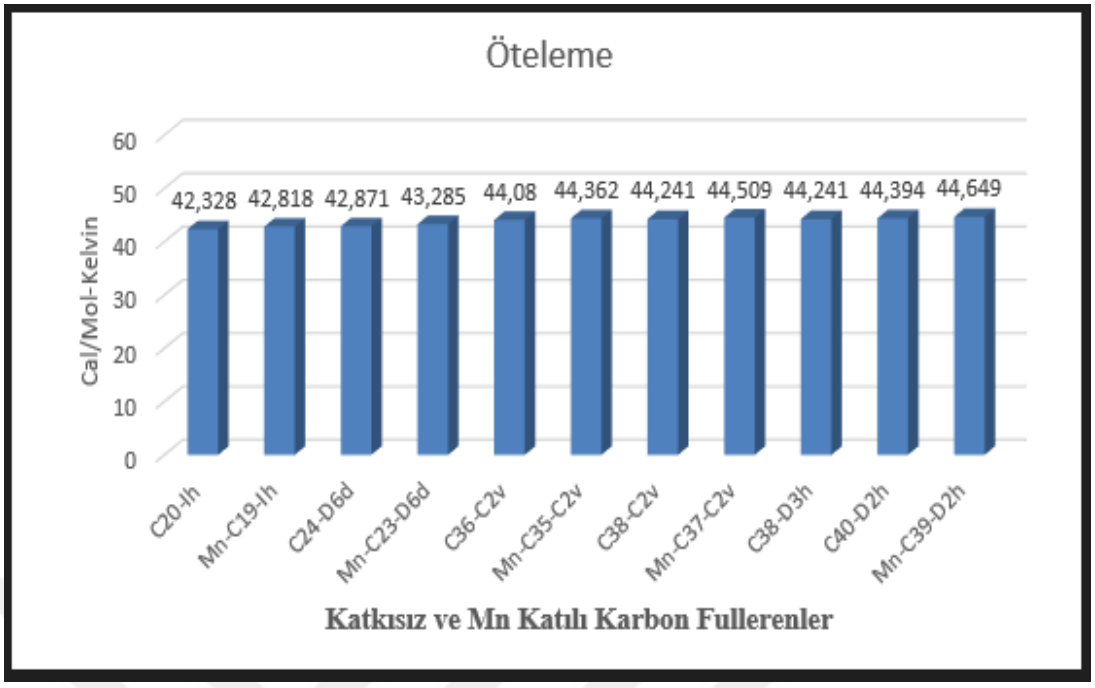
Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} sistemlerde hesaplanan bağlanma enerjileri karşılaştırmalı olarak Şekil 4.3'te verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi Mn katkılı sistemde bağlanma enerjilerin daha kararlı değerler aldığı görülmektedir.



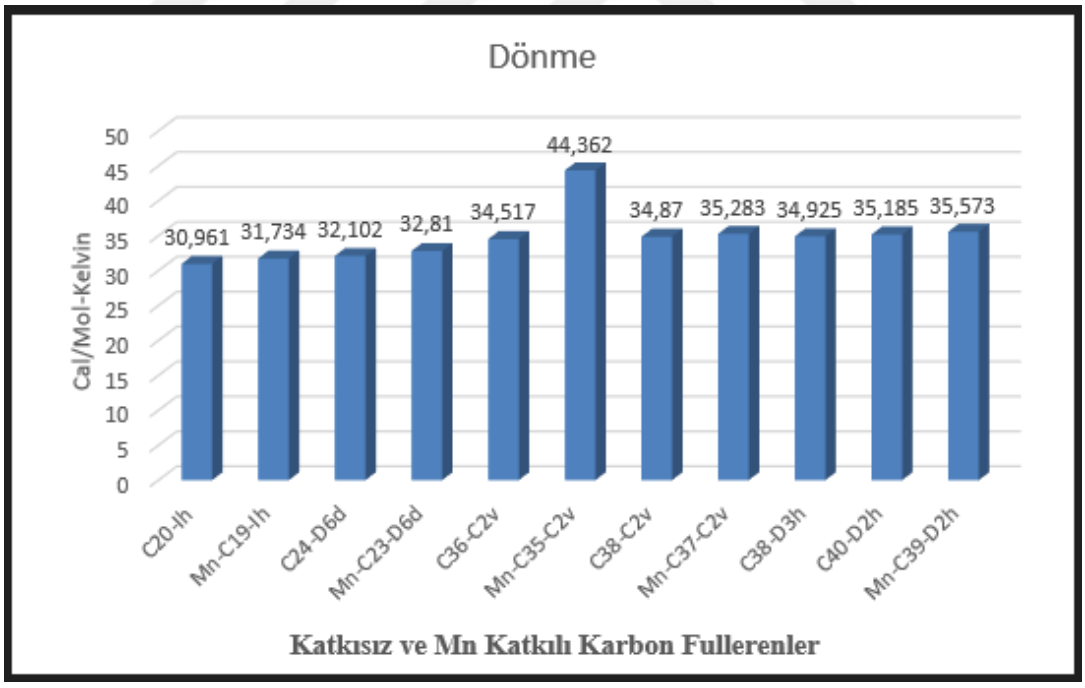
Şekil 4.3. Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin bağlanma enerjilerinin karşılaştırılması

4.4 Katkısız ve Mn Katkılı C_{n-1} Fullerenlerde Öteleme, Dönme, Titreşim ve Toplam Enerjileri

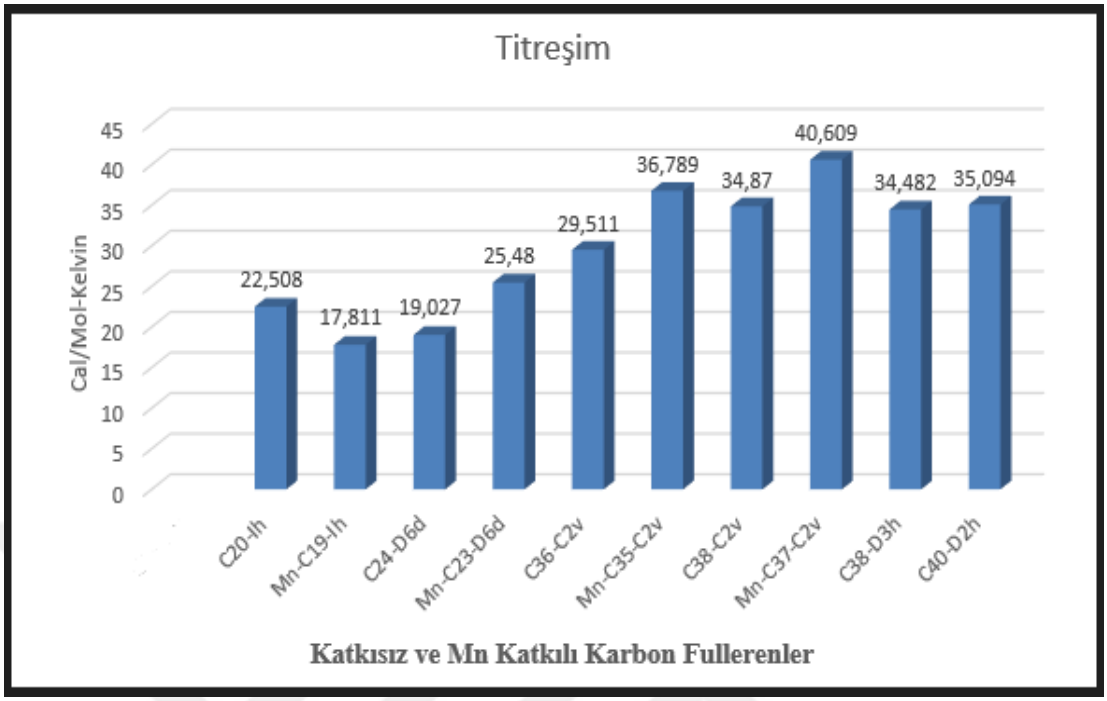
Her iki sistem için hesaplanan öteleme, dönme, titreşim ve toplam enerjilerinin sütun grafikleri sırasıyla Şekil 4.4a, Şekil 4.4b, Şekil 4.4c ve Şekil 4.4d verilmiştir.



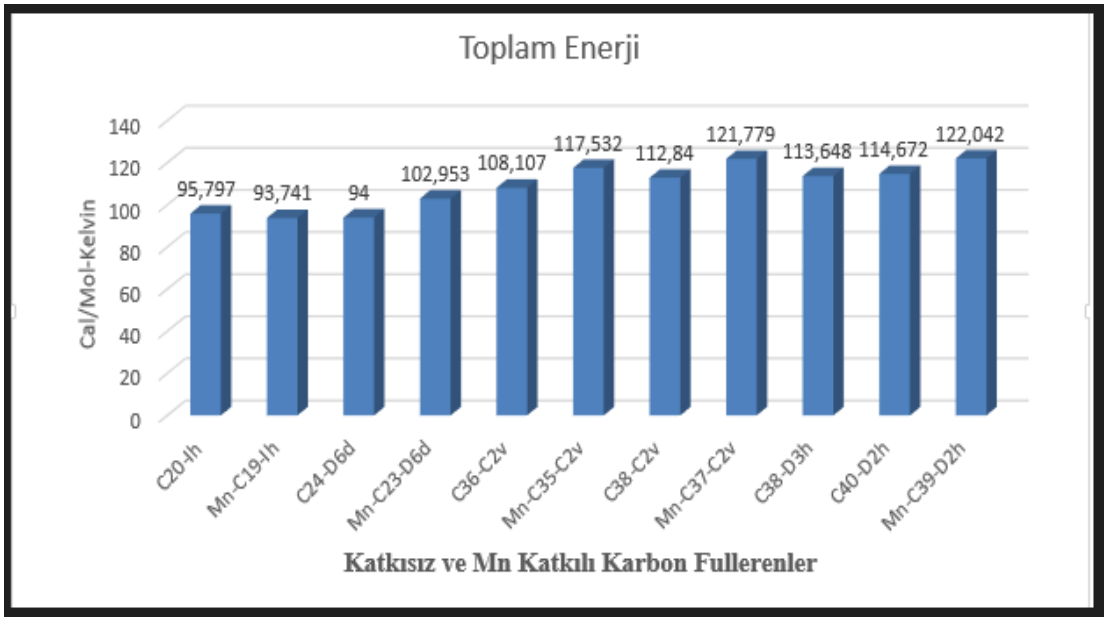
Şekil 4.4a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik öteleme enerjileri



Şekil 4.4b Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik dönme enerjileri



Şekil 4.4c Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik titreşim enerjileri



Şekil 4.4d Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik toplam enerjileri

Bu şematik gösterimlerden faydalanarak katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin enerji değerleri Çizelge 4.3'de karşılaştırılmalı olarak listelenmiştir.

Çizelge 4.3. Katkısız ve Mn Katkılı C_{n-1} Fullerenlerin Öteleme, Dönme, Titreşim ve Toplam Enerjileri

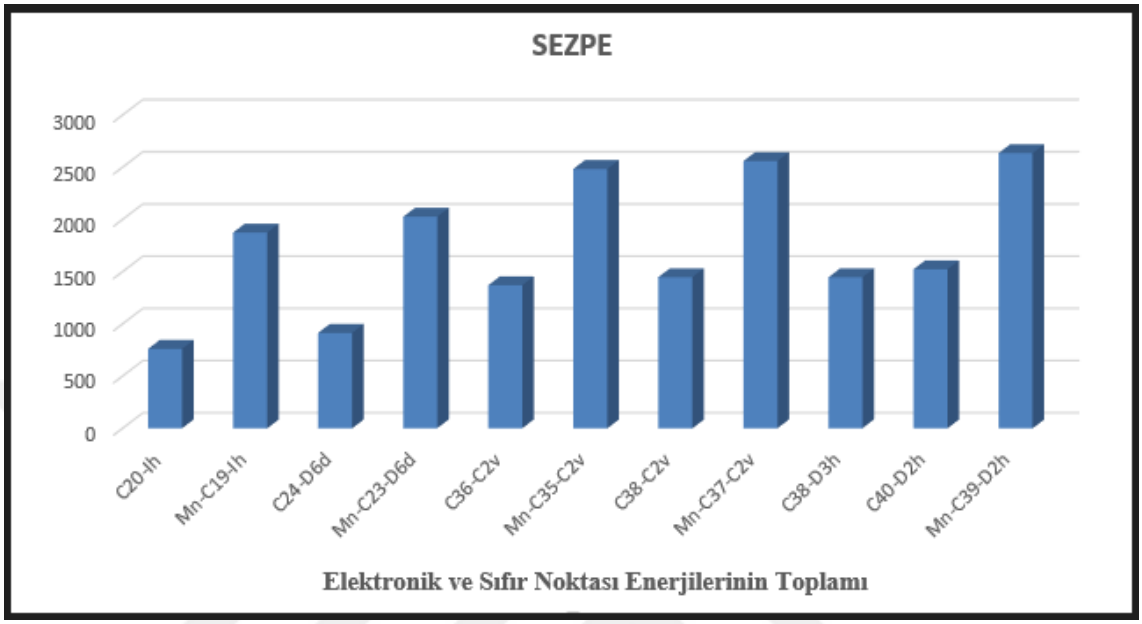
Yapı	Öteleme	Dönme	Titreşim	Toplam Enerji
$C_{20}\ Ih$	42,328	30,961	22,508	95,797
$Mn - C_{19}\ Ih$	42,818	31,734	17,811	93,741
C_{24}-D_{6d}	42,871	32,102	19,027	94,000
$Mn - C_{23}_D_{6d}$	43,285	32,810	25,480	102,953
C_{36} –C_{2v}	44,080	34,517	29,511	108,107
$Mn - C_{35}$ -C_{2v}	44,362	44,362	36,789	117,532
C_{38} -C_{2v}	44,241	34,870	34,870	112,840
$Mn - C_{37}$ -C_{2v}	44,509	35,283	40,609	121,779
C_{38} -C_{D3h}	44,241	34,925	34,482	113,648
$Mn - C_{37}$ -D_{3h}	-	-	-	optimize olmadı
C_{40} -C_{D2h}	44,394	35,185	35,094	114,672
$Mn - C_{39}\ D_{2h}$	44,649	35,573	40,442	122,042

Çizelge 4.3. dikkatlice incelendiğinde; toplam enerjiye en büyük katkının öteleme enerjisinden geldiği görülür. İkinci katkı dönme enerjisinden ve en az katkı ise titreşim enerjisinden gelir. Burada şu sonuca varılabilir. Bu yapılarda ötelemenin önemi daha büyüktür. Ayrıca katkılı durumun enerji değerlerinin yüksek olduğunda vurgulanmalıdır. $Mn - C_{37}$ -D_{3h} yapısında hiçbir enerji değeri hesaplanamadı. Bu ise bu yapının optimize olmadığını gösteriyor.

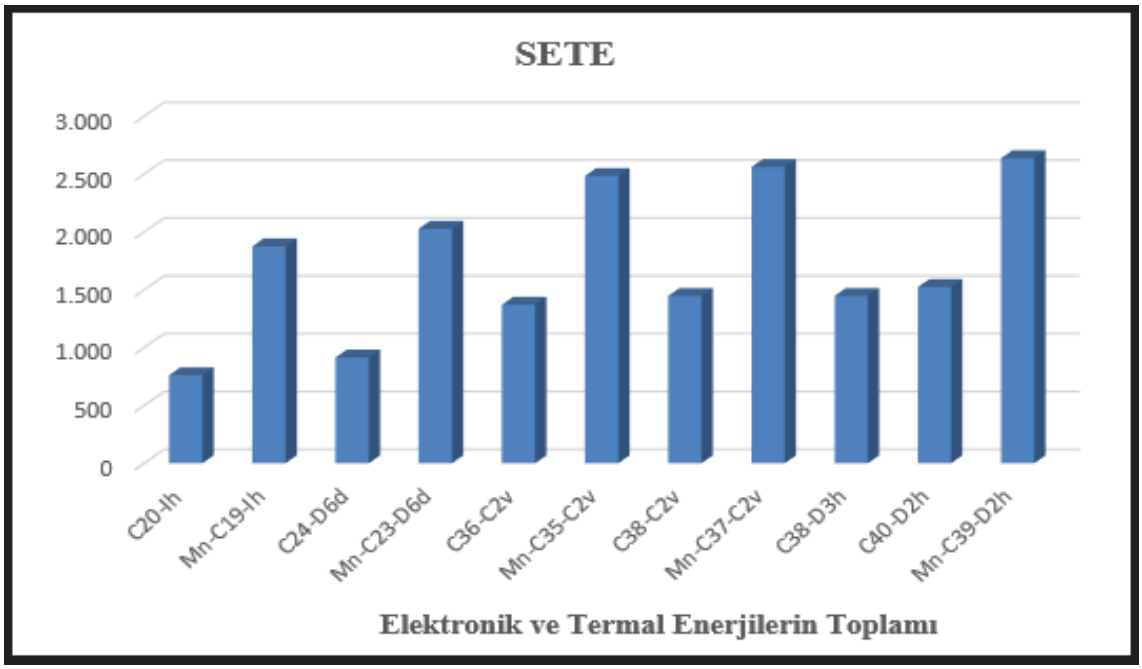
4.5 Katkısız ve Katkılı C_{n-1} Fullerenlerde Enerji, Entalpi, Gibbs Serbestlik Enerjisi ve Entropi Değerlerine Katkılar

Her iki sistem için hesaplanan Elektronik ve Sıfır Noktası Enerjilerinin Toplamı(SEZPE), Elektronik ve Termal Enerjilerin Toplamı(SETE), Elektronik ve Termal Entalpilerin Toplamı(SETEN-H) ve Elektronik ve Termal Serbest Enerjilerin

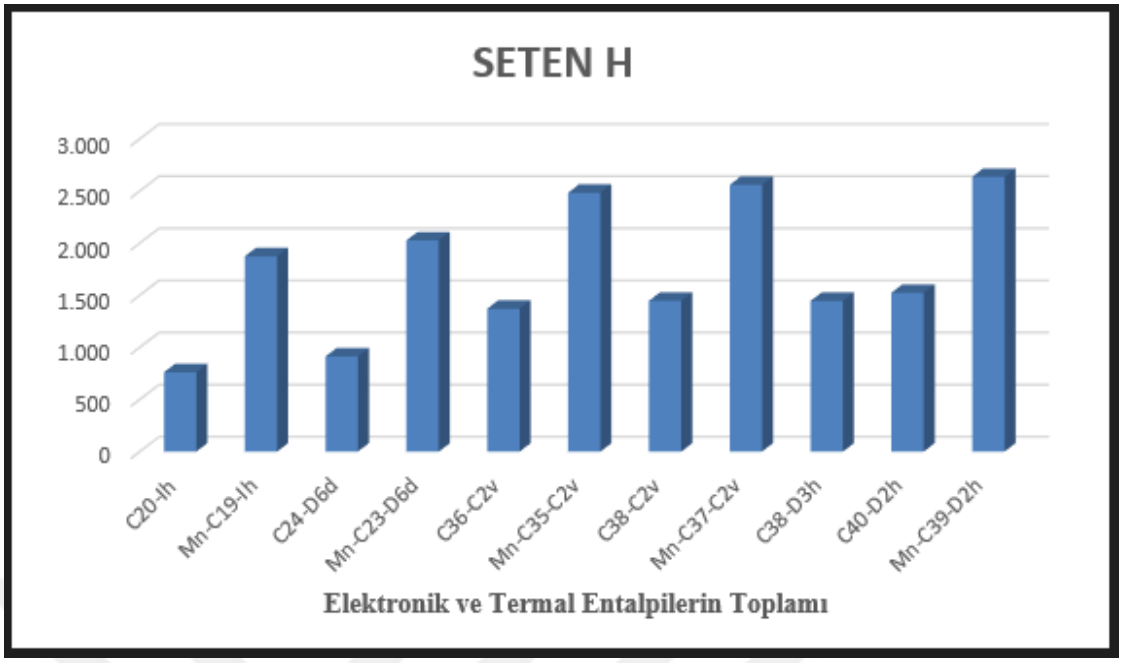
Toplamı(SETFE-G)'nın sütun grafikleri sırasıyla Şekil 4.5a, Şekil 4.4b, Şekil 4.5c ve Şekil 4.5d'de verilmiştir.



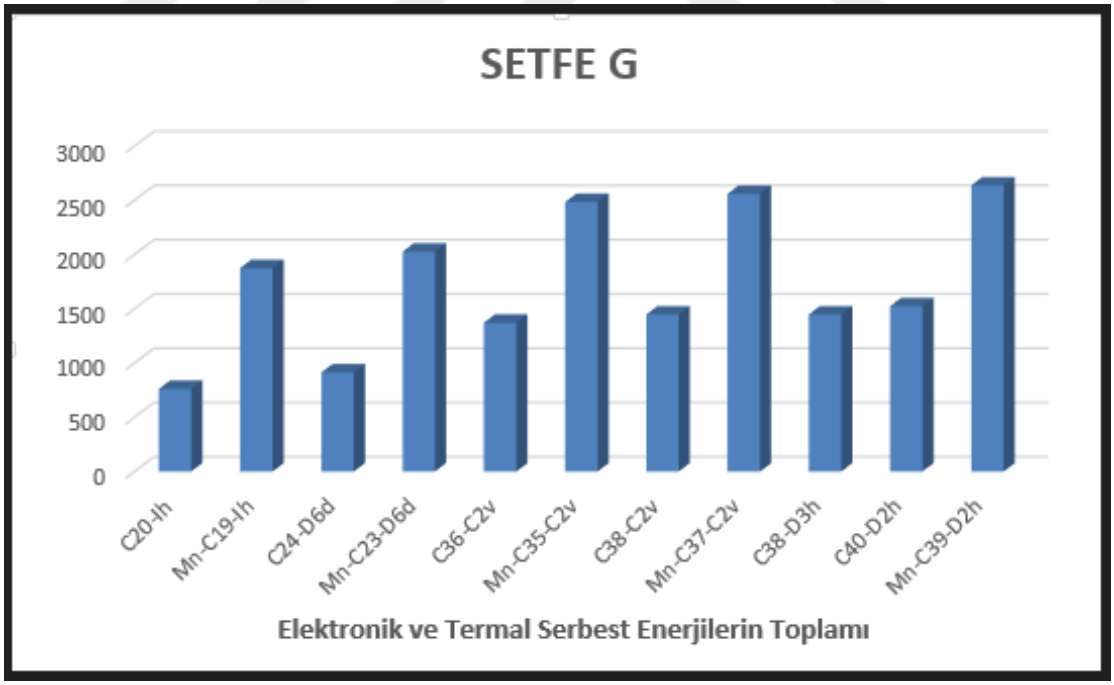
Şekil 4.5a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve sıfır noktası enerjileri



Şekil 4.5b Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve termal enerjileri



Şekil 4.5c Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve termal entalpileri



Şekil 4.5a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin şematik elektronik ve termal serbest Enerjileri

Bu şematik gösterimlerden faydalanarak katkısız ve Mn katkılı C_n fullerenlerin değişik enerji değerleri Çizelge 4.4.'de karşılaştırılmalı olarak listelenmiştir.

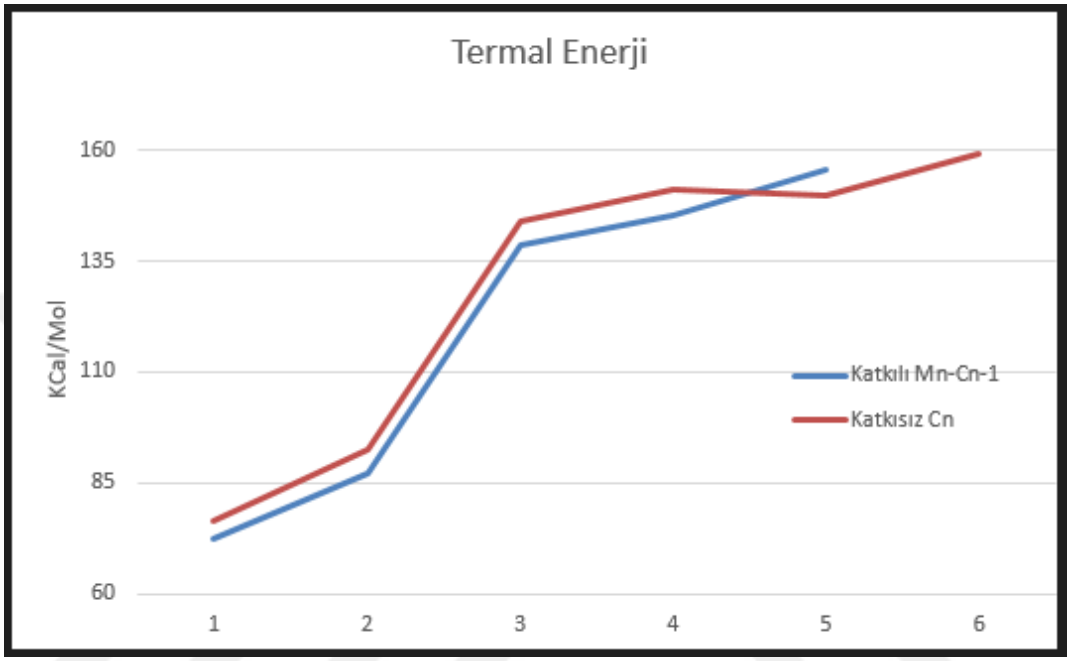
Çizelge 4.4. Elektronik ve Sıfır Noktası Enerjilerinin Toplamı(SEZPE), Elektronik ve Termal Enerjilerin Toplamı(SETE), Elektronik ve Termal Entalpilerin Toplamı(SETEN-H) ve Elektronik ve Termal Serbest Enerjilerin Toplamı(SETFE-G**)**

Yapı	**SEZPE Elektronik ve Sıfır Noktası Enerjilerinin Toplamı (au)**	**SETE Elektronik ve Termal Enerjilerin Toplamı(au)**	**SETEN H Elektronik ve Termal Entalpilerin Toplamı(au)**	**SETFE G Elektronik ve Termal Serbest Enerjilerin Toplamı(au)**
$C_{20}\ Ih$	-761,331	-761,322	-761,322	-761,367
$Mn - C_{19}\ Ih$	-1874,157	-1874,148	-1874,147	-1874,191
C_{24}-D_{6d}	-913,701	-913,692	-913,691	-913,736
$Mn - C_{23_}D_{6d}$	-2026,535	-2026,524	-2026,523	-2026,572
C_{36} –C_{2v}	-1371,026	-1371,013	-1371,012	-1371,063
$Mn - C_{35}$ -C_{2v}	-2483,805	-2483,791	-2483,790	-2483,845
C_{38} -C_{2v}	-1447,139	-1447,125	-1447,124	-1447,178
$Mn - C_{37}$ -C_{2v}	-2559,912	-2559,896	-2559,895	-2559,953
C_{38} -C_{D3h}	-1447,061	-1447,046	-1447,045	-1447,099
$Mn - C_{37}$ -D_{3h}	Optimize Olmadı	Optimize Olmadı	Optimize Olmadı	Optimize Olmadı
C_{40} -C_{D2h}	-1523,333	-1523,318	-1523,317	-1523,372
$Mn - C_{39}\ D_{2h}$	-2636,118	-2636,102	-2636,101	-2636,159

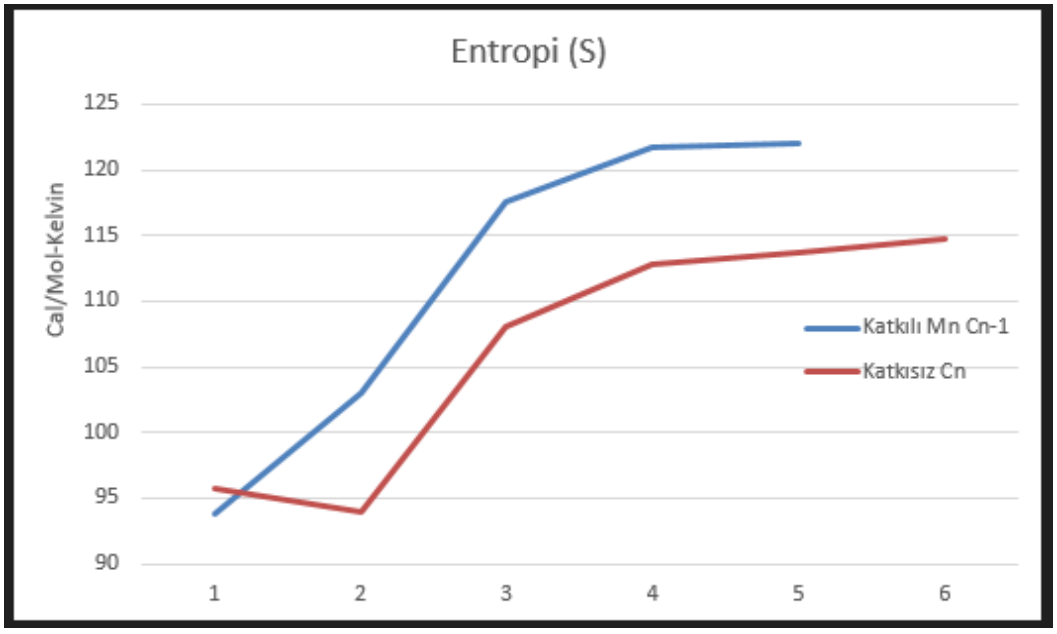
Çizelge 4.4. dikkatlice incelendiğinde; Katkısız ve katkılı durumlarda her yapıda C atomu sayısı artıkça enerjinin minimum değeri negatif olarak artıyor. Bu artış Mn katkısında daha fazla kendini gösteriyor. Entalpi ve Serbest enerjilerde de aynı özelliğin olduğu görülüyor. Bu tabloda yapılan tüm hesaplamalarda değişim aralığı yüzler basağında olduğu gözlemlenmektedir. $Mn - C_{37}$ -D_{3h} yapısında hiçbir değerinin hesaplanamaması bu yapının optimize olmadığını gösteriyor.

4.6 Katkısız ve Mn Katkılı C_{n-1} Fullerenlerde Termal Enerji, Özgül Isı ve Entropi Değerlerlerinin Karşılaştırılması

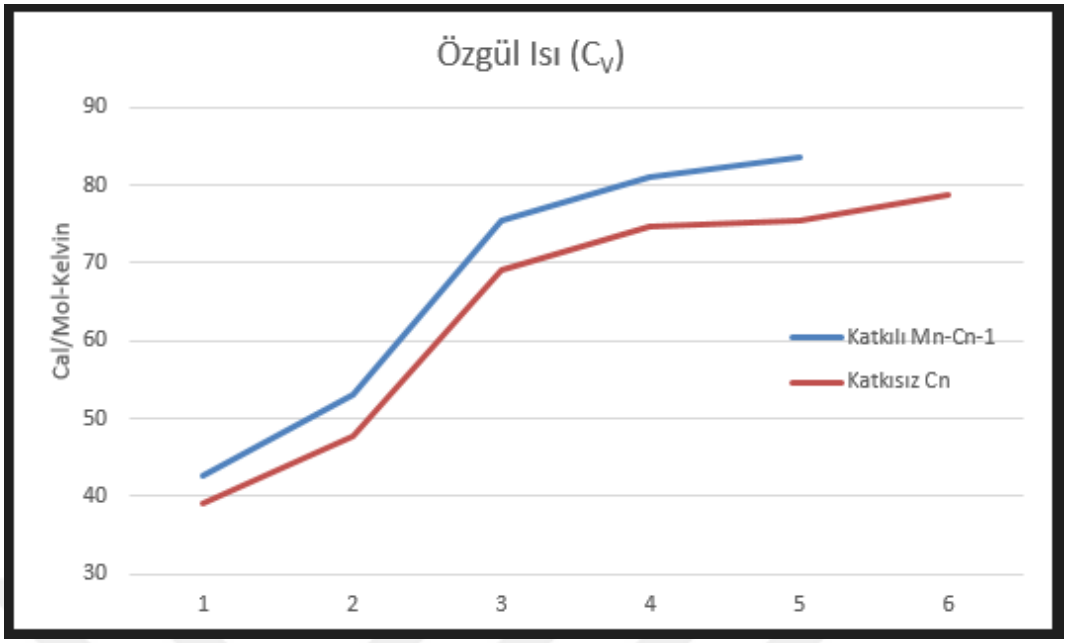
Katkısız ve Mn Katkılı C_{n-1} fullerenlerde, termal enerji, özgül ısı ve entropi değerleri karşılaştırmalı olarak Şekil 4.6a, Şekil 4.6b ve Şekil 4.6c'de verilmiştir.



Şekil 4.6a Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin termal enerjilerinin karşılaştırılması



Şekil 4.6b Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin entropilerinin karşılaştırılması



Şekil 4.6c Katkısız ve Mn katkılı C_{n-1} fullerenlerin özgül ısılarının karşılaştırılması

Grafikler incelendiğinde; termal enerjiler karşılaştırıldığında katkısız durumda enerjinin daha büyük değerlere sahip olduğu tespit edildi. Entropiler ve özgül ıslar karşılaştırıldığında, katkının önemi ortaya çıkıyor. Katkılı durum değerleri oldukça yüksek değerlere ulaştığı görülür.

4.7. Sonuçlar

Bu tez çalışmasında, katkısız C_n ve Mn katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin 6 farklı malzeme türü ele alınarak üç boyutlu görüntüleri Ovito programı kullanılarak oluşturuldu. Oluşturulan iki ayrı durum için yoğun bilgisayar simülasyon programları kullanılarak bazı termodinamik özelliklerini hesaplandı. Hesaplamalarda Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinde kısa menzilli etkileşmeleri inceleyen B3LYP/6-31 G(d) metodu kullanıldı.

İlk olarak seçilen C_n ve Mn katkılı MnC_{n-1} Fullerenlerin koordinatları girilerek B3LYP/6-31 G(d) ile üç boyutlu geometrik görüntüleri elde edildi. Bu optimize işlemi, sonraki hesaplamalar için bir temel teşkil edecek olması bakımından önemlidir.

Her bir set için spin dipol momenti hesaplandı. Mn katkılı durumda spin dipol momentinin oldukça yüksek olduğu gözlemlendi. $Mn - C_{35}$ $-C_{2v}$ yapının spin dipol

momenti 4,7770 Debye olarak bulundu. Elektronik Enerji hesaplamalarında, C atom sayısı artıkça minimum enerjinin kararlılığının artığı ve bağlanma enerjilerinde değişikliğinin yüzler basamağında olduğu bulundu.

Toplam enerjiye en büyük katkının öteleme enerjisinden geldiği görüldü. İkinci katkı dönme enerjisinden ve en az katkının ise titreşim enerjisinden gelmesi, bu yapılarda öteleme daha önemlidir. Ayrıca katkılı durumun enerji değerlerinin yüksek olduğunda vurgulanmalıdır. $Mn - C_{37}$ -D_{3h} yapısında hiçbir enerji değeri hesaplanamadı. Başka bir deyişle, bu yapının optimize olmadığını söylenebilir.

Katkısız ve katkılı durumlarda her yapıda C atomu sayısı artıkça enerjinin minimum değeri kararlı olarak artıyor. Bu artış Mn katkısında daha fazla kendini gösteriyor. Entalpi ve Serbest enerjilerde de aynı özelliğin var olduğu vurgulanabilir.

Termal enerjiler karşılatılmasında katkısız durum enerji değerlerinin daha büyük olduğu tespit edildi. Entropiler ve özgül ıslar karşılaştırıldığında, katkılı durum değerleri oldukça yüksek değerlere ulaştığı için burada katkının önemi ortaya çıkıyor denilebilir.

Sonuç olarak, simülasyon programlarının teknolojinin herhangi bir alanında kullanılması malzemeler hakkında maliyeti düşük ve hızlı sonuçlar alınması mümkün oluyor. Böylece deneysel çalışmalara da kolaylık sağlayacağı düşünülüyor. Bu ve buna benzer çalışmalar da gelişen teknolojilerde kullanılacak malzemeler hakkında fikir verebilir kanısındayız.

KAYNAKLAR

Abbasi, A. (2019). Adsorption of phenol, hydrazine and thiophene on stanene monolayers: A computational investigation. *Synthetic Metals* 247 26–36. Advance online publication. https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2018.11.012

Abdallah, W. A., Nelson A. E. (2005). Density Functional Theory Study of Pyrrole Adsorption on Mo (110). *The Journal of Physical Chemistry B*, 109, 10863-10870.

Ajeel, F. N., Khuodhair, A. M., AbdulAlmohsin, S. M. (2016). Improvement of the Optoelectronic Properties of Organic Molecules for Nanoelectronics and Solar Cells Applications: via DFT-B3LYP Investigations. *Current Physical Chemistry*, Vol. 6, No. 5. Advanced online publication. DOI: 10.2174/1877946806666161103142956

Aktürk, O.Ü., 2010. Density Functional Investigation of Nano-Structures. Orta Doğu Teknik Üniversitesi https://tez.yok.gov.tr/UlusalTezMerkezi/tezDetay.jsp?id=yjWOyBgDgvvbTwSimzeYDQ&no=iH7_wdMWpqICCYhxJMueLQ

Al-Dulaimi, A. A., Wanrosli, W.D., Abdulrazak, L. F., Roslan, & R., Husham, M. (2018). Preparation of nanocomposite polypyrrole/cellulose nanocrystals for conductive paper. *Nordic Pulp and Paper Research Journal* Vol 33. Advance online publication. DOI: 10.1515/npprj-2018-3018

A.R. Khamatgalimov, V.I. Kovalenko, Molecular structures of the open-shell IPR isomers of fullerene C90, Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostruct. 25 (2017) 179–184].

Becke, A. D., 1988. Density-fnnctional exchange-energy approximation with correct asymptotic behaviour. *Physical Review A*, Volume 38, Number 6.

Becke, A.D., 1992. Density functional thermochemistry. I. The effect of the exchange only gradient correction. Journal of Chemical Physics 96, 2155. http://dx.doi.org/10.1063/1.462066

Bian, K., Schunk, H., Ye D., Hwang, A., Luk, T. S., Li, Zhong R., Wang, W., Fan, H., 2018. Formation of self-assembled gold nanoparticle supercrystals with facet-dependent surface plasmonic coupling. *Nature Communications*, 9:2365. Advance online publication DOI: 10.1038/s41467-018-04801-9

Boys, S. F., Bernardi, F., 1970, 2002 (Reprinted). The Calculation of Small Molecular Interactions by the Differences of Separate Total Energies. Some Procedures with Reduced Errors. Mol. Phys . 19, 553−566. Reprinted Mol. Phys., 100, 65−73.

Brauer, B., Kesharwani, M., K., Martin, J., M., L., 2014. Some Observations on Counterpoise Corrections for Explicitly Correlated Calculations on Noncovalent

Interactions. J. Chem. Theory Comput. 10, 3791−3799 dx.doi.org/10.1021/ct500513b https://www.scm.com/doc/ADF/Input/DOS.html

Ceperley, D.M., Alder, B.J., 1980. Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method. *Physical Review Letters* 45, 566. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.566

Chattaraj P. K. Parr R. G., 1993. Density Functional Theory of Chemical Hardness. Part of the Structure and Bonding book series (STRUCTURE,volume 80) DOI: 10.1007/BFb0036797

Chen, Y., Fan, Z., Zhang, Z., Niu, W., Li, C., Yang, N., Chen, B., Zhang, H., 2018. Two-Dimensional Metal Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications. *Chem. Rev*. 2018, 118, 6409−6455. Advance online publication DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00727

Chen. Y., Fan, Z., Zhang, Z., Niu, W., Li, C., Yang, N., Chen, B., and Zhang, H. (2018). Two-Dimensional Metal Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications. *Chemical Reviews*, 118, 6409−6455. Advance online publication. DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00727

Ciucivara, A., 2007. Density functional studies of magnetic semiconductors and multiferroics. The University of Texas at Austin. https://www.researchgate.net/publication/37256837

Corbett, J., McKeown, P. A., Peggs, G. N., & Whatmore, R. (2000). Nanotechnology: International Developments and Emerging Products. *CIRP Annals* Volume 49, Issue 2, Pages 523-545. https://doi.org/10.1016/S0007-8506(07)63454-4

Dunsch, L., & Yang, S. (2006). The recent state of endohedral fullerene research. *INTERFACE-PENNINGTON-*, *15*(2), 34

Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G., & Eklund, P. C. (1996). *Science of fullerenes and carbon nanotubes: their properties and applications*. Elsevier

Felegari, Z., & Hamedani, S. A first-principles study on the adsorption properties of OCN radical on one typical of fullerene (C32): a density functional study.1996

Guldi, D. M., & Costa, R. D. (2013). Nanocarbon hybrids: the paradigm of nanoscale self-ordering/self-assembling by means of charge transfer/doping interactions. *The journal of physical chemistry letters*, *4*(9), 1489-150

Hehre, W. J., Ditchfield, R., Radom, L., & Pople, J. A. (1970). Molecular orbital theory of the electronic structure of organic compounds. V. Molecular theory of bond separation. *Journal of the American Chemical Society*, *92*(16), 4796-4801.

Imahori, H., & Sakata, Y. (1997). Donor-Linked Fullerenes: Photoinduced electron transfer and its potential application. *Advanced Materials*, *9*(7), 537-546

Kroto, H. (1997). Symmetry, space, stars and C 60. *Reviews of Modern Physics*, *69*(3), 703.

Kwon, Y. K., Berber, S., & Tománek, D. (2004). Thermal contraction of carbon fullerenes and nanotubes. *Physical review letters*, *92*(1), 015901.

Ma, B., Milton, A. M., & Sun, Y. P. (1998). Infrared spectroscopy of all-carbon poly [60] fullerene polymer and [60] fullerene dimer model. *Chemical physics letters*, *288*(5-6), 854-860.

M.J. Szpunar, U. Erb, A.M. El. Sherik, G. Palumbo, K.T. Aust, (1994). Experimental and theoretical investigations on the compressibility of nanocrystalline nickel. J.Appl.Phys. 75, 803.

Rekhi, S., Saxena, S. K., Ahuja, R., Johansson, B., & Hu, J. (2001). Experimental and theoretical investigations on the compressibility of nanocrystalline nickel. *Journal of materials science*, *36*(19), 4719-4721.

Ruoff, R. S., & Ruoff, A. L. (1991). The bulk modulus of C60 molecules and crystals: a molecular mechanics approach. *Applied physics letters*, *59*(13), 1553-1555.

Shwartz, M. (2012). Stanford Scientists Build the First All-Carbon Solar Cell. http://news.stanford.edu/news/2012/october/carbon-solar-cell

Singh, B. P., Srivastava, S. K., & Dinesh, K. (2004). Relation between thermal expansivity and bulk modulus for ionic solids at high temperatures. *Physica B: Condensed Matter*, *349*(1-4), 401-407

Sorot, N., Goyal, M., & Gupta, B. R. K. (2013). Temperature dependence of thermal expansivity of carbon fullerene and 20-nm nickel nanocrystal. *Nano Vis*, *3*(2), 62-69.

Thompson, B. C., & Fréchet, J. M. (2008). Polymer–fullerene composite solar cells. *Angewandte chemie international edition*, *47*(1), 58-77.

Turi, T., & Erb, U. (1995). Thermal expansion and heat capacity of porosity-free nanocrystalline materials. *Materials Science and Engineering: A*, *204*(1-2), 34-38.

Withers, J. C., Loutfy, R. O., & Lowe, T. P. (1997). Fullerene commercial vision. *Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures*, *5*(1), 1-31.

EKLER

Bu tezde kullanılan katkısız ve Mn katkılı MnC_{n-1} fullerenlerin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ve B3LYP/6-31G(d) metodu ile Gaussian 09 kodu kullanılarak hesaplanan E Termal Enerji, Cv özgül Isı ve Entropi Değerlerleri listesi.

$\boldsymbol{C_{20}\ Ih}$

	E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total	76.208	39.175	95.797
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	42.328
Rotational	0.889	2.981	30.961
Vibrational	74.430	33.213	22.508
Vibration 1	0.593	1.987	7.987
Vibration 2	0.626	1.876	2.405
Vibration 3	0.684	1.699	1.496
Vibration 4	0.818	1.338	0.765

Vibration	5	0.865	1.228	0.634
Vibration	6	0.867	1.223	0.628
Vibration	7	0.887	1.178	0.582
Vibration	8	0.904	1.143	0.547
Vibration	9	0.923	1.102	0.510
Vibration	10	0.924	1.100	0.508
Vibration	11	0.951	1.046	0.462
Vibration	12	0.952	1.044	0.460
Vibration	13	0.968	1.013	0.435

$\boldsymbol{Mn - C_{19}\, Ih}$

	E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total	72.369	42.663	93.741
Electronic	0.000	0.000	1.377
Translational	0.889	2.981	42.818
Rotational	0.889	2.981	31.734
Vibrational	70.591	36.702	17.811
Vibration 1	0.678	1.715	1.550

Vibration	2	0.679	1.715	1.548
Vibration	3	0.694	1.670	1.406
Vibration	4	0.743	1.531	1.075
Vibration	5	0.746	1.523	1.058
Vibration	6	0.828	1.315	0.736
Vibration	7	0.828	1.314	0.734
Vibration	8	0.866	1.226	0.632
Vibration	9	0.884	1.185	0.589
Vibration	10	0.887	1.179	0.583
Vibration	11	0.890	1.173	0.577
Vibration	12	0.921	1.107	0.514
Vibration	13	0.922	1.104	0.512
Vibration	14	0.950	1.048	0.463
Vibration	15	0.954	1.041	0.457
Vibration	16	0.970	1.009	0.432
Vibration	17	0.974	1.001	0.425

$\boldsymbol{C_{24}\text{-}D_{6d}}$

	E (Thermal)	CV	S
	KCal/Mol	Cal/Mol-Kelvin	Cal/Mol-Kelvin

Total		92.491	47.697	94.000
Electronic		0.000	0.000	0.000
Translational		0.889	2.981	42.871
Rotational		0.889	2.981	32.102
Vibrational		90.714	41.735	19.027
Vibration	1	0.677	1.721	1.568
Vibration	2	0.679	1.715	1.549
Vibration	3	0.769	1.462	0.949
Vibration	4	0.774	1.448	0.926
Vibration	5	0.775	1.446	0.923
Vibration	6	0.835	1.298	0.715
Vibration	7	0.861	1.238	0.645
Vibration	8	0.864	1.231	0.637
Vibration	9	0.883	1.187	0.591
Vibration	10	0.884	1.186	0.590
Vibration	11	0.901	1.148	0.552
Vibration	12	0.905	1.140	0.545
Vibration	13	0.908	1.134	0.539
Vibration	14	0.940	1.067	0.479
Vibration	15	0.940	1.067	0.479

Vibration	16	0.956	1.037	0.454
Vibration	17	0.959	1.029	0.448

$$Mn - C_{23-}D_{6d}$$

	E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total	87.248	53.190	102.953
Electronic	0.000	0.000	1.377
Translational	0.889	2.981	43.285
Rotational	0.889	2.981	32.810
Vibrational	85.470	47.229	25.480
Vibration 1	0.640	1.834	2.097
Vibration 2	0.645	1.817	1.993
Vibration 3	0.649	1.804	1.923
Vibration 4	0.691	1.679	1.434
Vibration 5	0.694	1.670	1.405
Vibration 6	0.721	1.592	1.204
Vibration 7	0.765	1.472	0.966
Vibration 8	0.781	1.430	0.898

Vibration	9	0.797	1.390	0.837
Vibration	10	0.805	1.371	0.809
Vibration	11	0.825	1.322	0.745
Vibration	12	0.842	1.280	0.693
Vibration	13	0.859	1.242	0.649
Vibration	14	0.864	1.231	0.637
Vibration	15	0.882	1.189	0.593
Vibration	16	0.905	1.141	0.546
Vibration	17	0.920	1.109	0.516
Vibration	18	0.928	1.093	0.502
Vibration	19	0.964	1.020	0.440
Vibration	20	0.969	1.011	0.433

$\boldsymbol{C_{36}-C_{2v}}$

	E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total	144.200	69.293	108.107
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	44.080

Rotational		0.889	2.981	34.517
Vibrational		142.423	63.331	29.511
Vibration	1	0.650	1.801	1.910
Vibration	2	0.692	1.676	1.424
Vibration	3	0.712	1.617	1.263
Vibration	4	0.725	1.580	1.176
Vibration	5	0.736	1.551	1.114
Vibration	6	0.784	1.424	0.888
Vibration	7	0.790	1.408	0.863
Vibration	8	0.802	1.379	0.821
Vibration	9	0.802	1.379	0.820
Vibration	10	0.822	1.330	0.755
Vibration	11	0.822	1.329	0.754
Vibration	12	0.831	1.307	0.725
Vibration	13	0.833	1.303	0.721
Vibration	14	0.843	1.278	0.690
Vibration	15	0.853	1.256	0.665
Vibration	16	0.855	1.251	0.659
Vibration	17	0.880	1.194	0.598
Vibration	18	0.889	1.175	0.579
Vibration	19	0.896	1.160	0.563

Vibration	20	0.910	1.129	0.534
Vibration	21	0.927	1.094	0.502
Vibration	22	0.944	1.059	0.472
Vibration	23	0.966	1.016	0.437

$\boldsymbol{Mn - C_{35} - C_{2v}}$

		E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total		138.815	75.521	117.532
Electronic		0.000	0.000	1.377
Translational		0.889	2.981	44.362
Rotational		0.889	2.981	44.362
Vibrational		137.038	69.560	36.789
Vibration	1	0.622	1.889	2.525
Vibration	2	0.646	1.815	1.981
Vibration	3	0.652	1.795	1.878
Vibration	4	0.667	1.751	1.682
Vibration	5	0.684	1.700	1.498
Vibration	6	0.716	1.607	1.239
Vibration	7	0.724	1.583	1.182

Vibration	8	0.739	1.543	1.097
Vibration	9	0.742	1.534	1.079
Vibration	10	0.749	1.516	1.045
Vibration	11	0.771	1.456	0.939
Vibration	12	0.796	1.393	0.841
Vibration	13	0.806	1.369	0.807
Vibration	14	0.814	1.349	0.780
Vibration	15	0.817	1.340	0.768
Vibration	16	0.823	1.327	0.751
Vibration	17	0.836	1.296	0.712
Vibration	18	0.847	1.269	0.680
Vibration	19	0.858	1.244	0.651
Vibration	20	0.871	1.214	0.618
Vibration	21	0.881	1.192	0.595
Vibration	22	0.887	1.180	0.583
Vibration	23	0.894	1.163	0.567
Vibration	24	0.900	1.150	0.554
Vibration	25	0.909	1.133	0.538
Vibration	26	0.932	1.083	0.493
Vibration	27	0.962	1.023	0.443
Vibration	28	0.972	1.004	0.428

C_{38} $-C_{2v}$

	E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total	151.161	74.688	112.840
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	44.241
Rotational	0.889	2.981	34.870
Vibrational	149.384	68.726	33.729
Vibration 1	0.633	1.855	2.239
Vibration 2	0.637	1.841	2.139
Vibration 3	0.687	1.691	1.470
Vibration 4	0.697	1.662	1.382
Vibration 5	0.719	1.597	1.216
Vibration 6	0.751	1.511	1.035
Vibration 7	0.754	1.502	1.020
Vibration 8	0.775	1.447	0.924
Vibration 9	0.790	1.409	0.865
Vibration 10	0.795	1.395	0.843
Vibration 11	0.808	1.364	0.800
Vibration 12	0.809	1.360	0.795

Vibration	13	0.814	1.348	0.778
Vibration	14	0.821	1.332	0.757
Vibration	15	0.831	1.308	0.727
Vibration	16	0.847	1.270	0.681
Vibration	17	0.852	1.258	0.667
Vibration	18	0.891	1.170	0.573
Vibration	19	0.907	1.136	0.540
Vibration	20	0.912	1.126	0.531
Vibration	21	0.912	1.125	0.531
Vibration	22	0.922	1.104	0.511
Vibration	23	0.947	1.053	0.467
Vibration	24	0.950	1.048	0.463
Vibration	25	0.965	1.018	0.438
Vibration	26	0.975	0.998	0.423
Vibration	27	0.976	0.997	0.422
Vibration	28	0.978	0.994	0.420

$\boldsymbol{Mn - C_{37} - C_{2v}}$

	E (Thermal)	CV	S
	KCal/Mol	Cal/Mol-Kelvin	Cal/Mol-Kelvin

Total		145.545	81.169	121.779
Electronic		0.000	0.000	1.377
Translational		0.889	2.981	44.509
Rotational		0.889	2.981	35.283
Vibrational		143.768	75.207	40.609
Vibration	1	0.622	1.889	2.529
Vibration	2	0.636	1.844	2.162
Vibration	3	0.646	1.814	1.977
Vibration	4	0.663	1.763	1.730
Vibration	5	0.671	1.738	1.631
Vibration	6	0.693	1.671	1.409
Vibration	7	0.702	1.645	1.336
Vibration	8	0.721	1.591	1.203
Vibration	9	0.737	1.548	1.108
Vibration	10	0.743	1.531	1.073
Vibration	11	0.754	1.502	1.020
Vibration	12	0.765	1.472	0.967
Vibration	13	0.768	1.465	0.954
Vibration	14	0.785	1.420	0.882
Vibration	15	0.793	1.402	0.854
Vibration	16	0.794	1.397	0.848

Vibration	17	0.819	1.337	0.764
Vibration	18	0.830	1.309	0.727
Vibration	19	0.846	1.272	0.683
Vibration	20	0.846	1.271	0.683
Vibration	21	0.860	1.238	0.645
Vibration	22	0.865	1.227	0.633
Vibration	23	0.883	1.187	0.591
Vibration	24	0.890	1.173	0.577
Vibration	25	0.903	1.144	0.548
Vibration	26	0.913	1.123	0.529
Vibration	27	0.926	1.097	0.505
Vibration	28	0.944	1.060	0.473
Vibration	29	0.954	1.039	0.456
Vibration	30	0.960	1.028	0.446
Vibration	31	0.966	1.016	0.437
Vibration	32	0.969	1.011	0.433

C_{38} -C_{D3h}

	E (Thermal)	CV	S
	KCal/Mol	Cal/Mol-Kelvin	Cal/Mol-Kelvin

Total		150.005	75.508	113.648
Electronic		0.000	0.000	0.000
Translational		0.889	2.981	44.241
Rotational		0.889	2.981	34.925
Vibrational		148.227	69.546	34.482
Vibration	1	0.662	1.764	1.737
Vibration	2	0.663	1.763	1.733
Vibration	3	0.668	1.746	1.663
Vibration	4	0.684	1.698	1.492
Vibration	5	0.692	1.675	1.420
Vibration	6	0.717	1.604	1.232
Vibration	7	0.719	1.598	1.218
Vibration	8	0.738	1.546	1.104
Vibration	9	0.758	1.492	1.001
Vibration	10	0.761	1.483	0.984
Vibration	11	0.779	1.436	0.906
Vibration	12	0.792	1.402	0.854
Vibration	13	0.801	1.380	0.823
Vibration	14	0.833	1.303	0.720
Vibration	15	0.854	1.252	0.661
Vibration	16	0.855	1.251	0.659

Vibration	17	0.862	1.235	0.641
Vibration	18	0.867	1.224	0.630
Vibration	19	0.888	1.176	0.580
Vibration	20	0.902	1.148	0.552
Vibration	21	0.911	1.127	0.533
Vibration	22	0.923	1.103	0.510
Vibration	23	0.939	1.071	0.482
Vibration	24	0.939	1.070	0.481
Vibration	25	0.944	1.060	0.473
Vibration	26	0.952	1.044	0.460
Vibration	27	0.962	1.024	0.443
Vibration	28	0.968	1.013	0.434

$\boldsymbol{Mn - C_{37} - D_{3h}}$

Optimize Olmadı

$\boldsymbol{C_{40} - C_{D2h}}$

	E (Thermal)	CV	S
	KCal/Mol	Cal/Mol-Kelvin	Cal/Mol-Kelvin

Total		159.419	78.856	114.672
Electronic		0.000	0.000	0.000
Translational		0.889	2.981	44.394
Rotational		0.889	2.981	35.185
Vibrational		157.641	72.894	35.094
Vibration	1	0.649	1.804	1.926
Vibration	2	0.678	1.716	1.551
Vibration	3	0.688	1.688	1.460
Vibration	4	0.693	1.672	1.413
Vibration	5	0.710	1.623	1.279
Vibration	6	0.719	1.597	1.215
Vibration	7	0.751	1.510	1.034
Vibration	8	0.774	1.450	0.929
Vibration	9	0.781	1.431	0.899
Vibration	10	0.784	1.423	0.886
Vibration	11	0.797	1.391	0.838
Vibration	12	0.800	1.383	0.826
Vibration	13	0.817	1.341	0.769
Vibration	14	0.818	1.338	0.765
Vibration	15	0.826	1.318	0.739
Vibration	16	0.828	1.314	0.734

Vibration	17	0.865	1.229	0.635
Vibration	18	0.866	1.226	0.632
Vibration	19	0.874	1.208	0.613
Vibration	20	0.888	1.178	0.582
Vibration	21	0.901	1.149	0.553
Vibration	22	0.903	1.145	0.549
Vibration	23	0.923	1.102	0.509
Vibration	24	0.930	1.087	0.496
Vibration	25	0.931	1.085	0.494
Vibration	26	0.932	1.085	0.494
Vibration	27	0.959	1.029	0.448
Vibration	28	0.962	1.025	0.444
Vibration	29	0.964	1.021	0.441
Vibration	30	0.976	0.998	0.423

$\boldsymbol{Mn - C_{39}\ D_{2h}}$

	E (Thermal)	CV	S
	KCal/Mol	Cal/Mol-Kelvin	Cal/Mol-Kelvin
Total	155.587	83.645	122.042

Electronic		0.000	0.000	1.377
Translational		0.889	2.981	44.649
Rotational		0.889	2.981	35.573
Vibrational		153.809	77.684	40.442
Vibration	1	0.638	1.839	2.128
Vibration	2	0.651	1.798	1.893
Vibration	3	0.658	1.776	1.790
Vibration	4	0.670	1.742	1.645
Vibration	5	0.679	1.714	1.546
Vibration	6	0.698	1.657	1.368
Vibration	7	0.711	1.621	1.274
Vibration	8	0.726	1.579	1.175
Vibration	9	0.734	1.555	1.124
Vibration	10	0.740	1.539	1.090
Vibration	11	0.757	1.495	1.006
Vibration	12	0.767	1.468	0.959
Vibration	13	0.775	1.446	0.922
Vibration	14	0.789	1.411	0.867
Vibration	15	0.792	1.402	0.855
Vibration	16	0.806	1.368	0.806
Vibration	17	0.815	1.345	0.775

Vibration	18	0.828	1.315	0.736
Vibration	19	0.840	1.285	0.698
Vibration	20	0.851	1.261	0.670
Vibration	21	0.858	1.244	0.652
Vibration	22	0.862	1.235	0.642
Vibration	23	0.884	1.186	0.589
Vibration	24	0.892	1.168	0.572
Vibration	25	0.906	1.139	0.543
Vibration	26	0.912	1.125	0.531
Vibration	27	0.913	1.122	0.528
Vibration	28	0.929	1.089	0.498
Vibration	29	0.944	1.059	0.472
Vibration	30	0.949	1.050	0.464
Vibration	31	0.965	1.018	0.438
Vibration	32	0.973	1.002	0.426
Vibration	33	0.975	0.999	0.424

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Abdulkerim KARATOPRAK

Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl) : Lisans, Trakya Üniversitesi, Fizik

Lise : İlhami Ertem Anadolu Lisesi (2003)

Lisans : Trakya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü (2015)

Yüksek Lisans : Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik (2023)

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl :

Özel Edirne Dinamik Kişisel Gelişim Kursu Fizik Öğretmeni (2017-2020)

Özel Edirne Safir Anadolu Lisesi Fizik Öğretmeni (2020-2022)

Edirne Birey Özel Öğretim Kursu Fizik Öğretmeni (2022-….)