

**T.C.
KASTAMONU ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ATOM – YÜZEY ETKİLEŞMESİ:
POTANSİYEL ENERJİ YÜZEYİ**

Emrah KORKMAZ

**Danışman
Jüri Üyesi
Jüri Üyesi**

**Yrd. Doç. Dr. Can Doğan VURDU
Yrd. Doç. Dr. Türker Fedai ÇAVUŞ
Yrd. Doç. Dr. Mahmut GÜR**

**YÜKSEK LİSANS
FİZİK ANA BİLİM DALI**

KASTAMONU – 2017

TEZ ONAYI

Emrah KORKMAZ tarafından hazırlanan “**Atom–Yüzey Etkileşmesi: Potansiyel Enerji Yüzeyi**” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri üyeleri önünde savunulmuş ve **oy birliği / oy çokluğu** ile Kastamonu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Fizik Anabilim Dalı**’nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

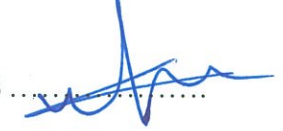
Danışman

Yrd. Doç. Dr. Can Doğan VURDU
Kastamonu Üniversitesi



Jüri Üyesi

Yrd. Doç. Dr. Türker Fedai ÇAVUŞ
Sakarya Üniversitesi



Jüri Üyesi

Yrd. Doç. Dr. Mahmut GÜR
Kastamonu Üniversitesi



01/02/2017

Enstitü Müdür V.

Prof. Dr. Temel SARIYILDIZ



TAAHHÜTNAME

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildirir ve taahhüt ederim.

Emrah KORKMAZ



ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ATOM – YÜZEY ETKİLEŞMESİ: POTANSİYEL ENERJİ YÜZEYİ

Emrah KORKMAZ
Kastamonu Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Ana Bilim Dalı

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Can Doğan VURDU

Bu çalışmada, H atomu ile Pt(111) yüzeyi arasındaki potansiyel enerji yüzeyinin tanımlanması teorik olarak yapıldı. Potansiyel enerji yüzeyinin belirlenmesi için London-Eyring-Polanyi-Sato potansiyeli kullanıldı. Bu potansiyele ait parametrelerin bulunması için, H – Pt(111) yüzeyi etkileşmesi için yoğunluk fonksiyoneli teorisi metodu ile hesaplanan enerji değerleri kullanıldı. Potansiyel enerji yüzeyinin tanımlanması sayesinde hidrojen atomunun yüzey üzerinde tutuna bildiği bölgeler ve alt yüzeye geçtiği bölgeler tespit edildi. Yüzeyin boşluk bölgeleri, hem alt yüzeye geçiş bölgesi hem de yüzey üzerinde tutunabileceği bölgeler olduğu gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Potansiyel enerji yüzeyi, LEPS, tutunma, Pt(111) yüzeyi

2017, 40 sayfa

Bilim Kodu: 202

ABSTRACT

MSc. Thesis

ATOM – SURFACE INTERACTION: POTENTIAL ENERGY SURFACE

Emrah KORKMAZ
Kastamonu University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Assist. Prof. Dr. Can Doğan VURDU

In this work, the identification of the potential energy surface between the H atom and Pt (111) surface was theoretically done. London-Eyring-Polanyi-Sato potential was used to determine the potential energy surface. In order to find the parameters of this potential, the energy value belonging of H - Pt (111) interaction calculated by the density functional theory method was used. By identifying the potential energy surface, regions where the hydrogen atom is known to adsorb on the surface and where it passes easily to the bottom surface were detected. It has been shown that the hollow sites of the surface are regions where both the transition region to the subsurface and the surface can be held on the surface.

Key Words: Potential energy surface, LEPS, adsorption, Pt(111) surface

2017, 40 pages

Science Code: 202

TEŐEKKÜR

Bu alıőmada bana desteęini hibir zaman esirgemeyen, sadece bilimsel alıőmamda deęil hayat konusunda da fikirleri ile beni ynlendiren pek deęerli danıőman hocam Yrd. Do. Dr. Can Doęan VURDU'ya, alıőmam sırasında bana yardımlarından dolayı rahmetli hocam Prof. Dr. Ferhad NASİBOV'a ve blmdeki dięer hocalarıma, eęitim hayatım boyunca her zaman bana gvenen ve beni destekleyen aileme teőekkr ederim. Aynı zamanda bana her konuda destek olan eőim Pınar'a ve hayatımı son bir buuk yıldır gzelleőtiren oęlum Ekrem Yięit'e sonsuz teőekkrlerimi sunarım.

Emrah KORKMAZ
Kastamonu, Ocak, 2017

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
KISALTMALAR DİZİNİ	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	ix
GRAFİKLER DİZİNİ	x
TABLolar DİZİNİ	xi
1. GİRİŞ	1
2. TEORİK KISIM	3
2.1. Potansiyel Enerji Fonksiyonları	3
2.2. LEPS Potansiyeli	6
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	10
3.1. Potansiyel Enerji Fonksiyonunu Seçimi.....	10
3.2. LEPS Parametrelerinin Bulunması.....	10
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	15
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	24
KAYNAKLAR.....	26
ÖZGEÇMİŞ	29

KISALTMALAR DİZİNİ

YFT : Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
LEPS : London-Eyring-Polanyi-Sato Potansiyeli



ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 3.1. 1092 adet platin atomundan oluşan 6 katmanlı Pt(111) metal yüzeyinin üç boyutlu; üstten, yanlardan ve farklı bir açıdan görünüşü.	12
Şekil 3.2. Pt(111) yüzeyi üzerindeki simetri bölgelerinin a) üstten ve b) yandan görünümü.	12
Şekil 3.3. Pt(111) yüzeyi üzerindeki H atomunun temsili	12



GRAFİKLER DİZİNİ

	Sayfa
Grafik 2.1. Lennard-Jones potansiyel eğrisi.....	5
Grafik 2.2. Morse ve anti-Morse potansiyel grafiği.....	7
Grafik 3.1. H atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde tepe, fcc-boşluk ve köprü bölgelerinde yüzeyden yüksekliğe bağlı YFT'ye dayalı potansiyel enerji eğrileri ve bu eğrilere fit edilmiş LEPS potansiyel enerji eğrileri	13
Grafik 4.1. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinden 1,1 Å yükseklikte iken, potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyüksekti grafiği	15
Grafik 4.2. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinde $z=3$ Å; 2,7 Å; 2,4 Å ve 2,1 Å yüksekliklerinde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri	16
Grafik 4.3. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinde $z=1,8$ Å; 1,5 Å; 1,2 Å ve 0,9 Å yüksekliklerinde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri	17
Grafik 4.4. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinde $z=0,6$ Å; 0,3 Å ve 0,0 Å yüksekliklerinde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri.....	18
Grafik 4.5. Hidrojen atomu Pt(111) yüzey altında $z=-0,3$ Å; -0,6 Å; -0,9 Å ve -1,2 Å derinliklerde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri.....	19
Grafik 4.6. Hidrojen atomu Pt(111) yüzey altında $z=-1,5$ Å; -1,8 Å; -2,1 Å ve -2,4 Å derinliklerde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri.....	20
Grafik 4.7. Hidrojen atomu Pt(111) yüzey altında $z=-2,7$ Å ve -3,0 Å derinliklerde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri.....	21
Grafik 4.8. H atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde dört farklı simetrik bölge için yüzey üstü ve altı için, yüzeyden uzaklık z 'nin fonksiyonu olarak hesaplanan LEPS potansiyel enerji eğrileri.....	22
Grafik 4.9. Hidrojen atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde $y=0$ Å konumunda iken potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyüksekti grafiği	23
Grafik 4.10. Hidrojen atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde $x=0$ Å konumunda iken potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyüksekti grafiği	23

TABLULAR DİZİNİ

	Sayfa
Tablo 1. H-Pt(111) etkileşme sistemi için elde edilen elde edilen LEPS parametre seti. (rms hata değeri 0,168 olarak hesaplanmıştır.).....	13



1. GİRİŞ

Günümüzde son kırk yılda olduğu gibi artan bir şekilde; metal yüzeyler üzerine tutunan atom veya moleküller ile gaz-fazlı atomların etkileşmeleri sonucunda meydana gelen reaksiyon dinamiklerini inceleyen çok sayıda deneysel ve teorik araştırmalar yapılmaktadır [1-24]. Bu çalışmalardan elde edilen sonuçların kullanılması, farklı teknolojik alanlarda ilerleme ve yenilikler kazandırmıştır.

Metal yüzey üzerine tutunan hidrojen atomları veya halojenlerle, gaz-fazlı hidrojen atomlarının reaksiyon dinamikleri ve mekanizması üzerine deneysel ve teorik araştırmalar yapılmıştır. Bu amaçla, farklı metal yüzeyleri bu çalışmalar için kullanılmıştır. Yapılan bu araştırmaların sonucunda, atom (molekül) yüzey etkileşmelerinde metal tipinin ve yüzey yapısının önemli rol oynadığı tespit edilmiştir [8-13,18].

Atomik hidrojenin metal yüzeyler ile etkileşmesi, teknolojik oluşumların çeşitliliğinde önemli bir rol oynar. Nükleer füzyon teknolojisi, yarı iletken, yapay elmas üretimi, katalizörler ve alternatif enerji olarak hidrojenin katı olarak depolanması gibi çeşitli uygulamalar, atomik hidrojen yüzey etkileşmesinin içerdiği oluşumlardan yalnızca birkaçıdır.

Günümüzde teknolojideki ilerleme ile birlikte, yapılan araştırmaların sonuçları daha hızlı ve verimli bir şekilde alınabilmekte ve bununla birlikte alınan sonuçlar ışığında yeni ve ileri düzey teknolojik malzemelerin araştırılması ve üretilmesi yapılabilmektedir. Bilgisayar teknolojisinin gelişmesi de bundan nasibini önemli ölçüde almaktadır. Bu da bilgisayar ortamında hazırlanan atomik düzeyde yapılan benzetim çalışmalarının daha verimli ve daha hızlı olmasını sağlamaktadır. Böylece daha düşük maliyetle, daha hızlı ve ayrıntılı analizler yapılmasına imkân sağlamıştır.

Bilgisayar deneyi olarak ta adlandırılan bu teorik çalışmalar ışığında daha düşük maliyetle yapılan moleküler dinamik “MD” benzetim çalışmaları ile en karmaşık sistemlerin analiz sonuçları deneysel araştırma sonuçlarıyla uyumlu sonuçlar vermektedir. Analizlerin yapılması için kullanılan hesaplamalardaki sistemi

açıklayan potansiyel fonksiyonlarını içeren bir algoritma, bir bilgisayar program dilinde derlenerek bilgisayar tarafından hızlı ve doğru bir biçimde yapılır [25, 26].

Ayrıca, hidrojen atomuyla metal yüzey etkileşiminin incelenmesi, daha karmaşık sistemlerin anlaşılmasında önemli bir yere sahiptir. Bu türden etkileşme sistemlerinin yarı deneysel ve yarı teorik yöntemle analiz edilebilmesi için sisteme ait potansiyel enerji fonksiyonunun (PEF) çok iyi tanımlanması gerekmektedir. Bu nedenle, seçilen potansiyel enerji fonksiyonunun parametreleri, H -- Pt(111) metal yüzeyi etkileşme sistemini tanımlayacak şekilde elde edilecektir. Böylece, potansiyel enerji yüzeyleri oluşturularak reaksiyon mekanizması hakkında ayrıntılı bilgiler edinilecektir.

Seçilen potansiyel enerji fonksiyonun yanında diğer potansiyel enerji fonksiyonları hakkında da bilgi verilecektir. Sonraki bölümde de H -- Pt(111) etkileşme sistemini tanımlamak için seçilen London-Eyring-Polanyi-Sato "LEPS" potansiyeli [10, 12, 27-30] kullanılarak oluşturulan olan potansiyel enerji yüzeyleri hakkında bilgi verilecektir. Bu bilgiler ışığında; H atomunun yüzey üzerinde; alt yüzeye geçiş, saçılma ve yüzey üzerine tutunma bölgeleri incelenecektir.

2. TEORİK KISIM

2.1. Potansiyel Enerji Fonksiyonları

Yarı deneysel yöntem olarak da tanımlanan moleküler dinamik “MD” çalışmalar için, atom ve molekül topluluklarının fiziksel yapısını ve birbirleri arasındaki etkileşmeyi tanımlayan potansiyel ifadesi büyük önem taşımaktadır. Metal atomlarının oluşturduğu yüzey yapıları ve topaklarla ilgili çalışmalarda en önemli husus, bu sistemleri doğru ve kesin olarak tanımlayan potansiyel enerji fonksiyonlarının belirlenmesidir. Bu nedenle, moleküler dinamik benzetim çalışmalarında, incelenen atomik etkileşme sistemine uygun bir potansiyel modeli seçimi, reaksiyon mekanizmasının ayrıntılı bir biçimde incelenmesine olanak sağlayacaktır.

Günümüzde bilgisayar deneyleri olarak da bilinen MD benzetim çalışmaları, yeni bilgilerin bulunmasında ve ayrıca mevcut bilgilerin doğrulanmasında önemli bir yere sahiptir. Yüksek maliyetli deneyler yerine yapılan bilgisayar deneylerinde oluşturulacak sistemin modeli, olduğundan daha az maliyetli ve bu sebepten dolayı da daha kullanışlı ve tercih sebebi olmaktadır. Bu sayede gereksiz maliyetlerden kaçınılmış olunacaktır. Bu bilgisayar deneylerinde oluşturulan sistem, teorik çalışmalardan sağlanır. Fakat hesaplamalar için uygun bir programlama dilinde hazırlanmış algoritma izleyerek yapılması gerekir. MD benzetim çalışması belirli bir etkileşim kanunu ile modellenen bir sistemin analiz edilmesine olanak tanır. Bu sayede, karmaşık sistemler ve deneyler, bilgisayar ortamında daha ayrıntılı bir şekilde açıklanabilir. Çok parçacıklı sistemlerin hareket denklemlerini nümerik olarak çözümlenmede yardımcı olan MD benzetim çalışmaları, atom yüzey etkileşmeleri ile ilgili hesaplarda yarı klasik bir yaklaşıma olanak sağlamaktadır.

Birden fazla atomun veya molekülün bulunduğu sistemlerin MD benzetim çalışmasını yaparak, sistemin dinamik özellikleri hakkında bilgi sahibi olabiliriz. Çünkü moleküler dinamik benzetimi, teori ve deneyin ortak özelliklerine sahiptir. Katı, sıvı ve gaz modellerde moleküllerin bireysel hesaplamalarını elde

edebileceğimiz MD benzetimi, polimerler ve elektrolitler gibi birçok karmaşık düzenlerdeki moleküllere uygulayabiliriz.

Bu nedenle moleküler sistemlerin bilgisayar ortamında çalışmasının yapılabilmesi için sistemdeki etkileşimleri doğru olarak gösterebilmek için, bir potansiyel fonksiyoneli tanımlamak önemlidir. Bunlardan başlıca olanları, Buchindam Potansiyeli, Mie Potansiyeli, Morse Potansiyeli, Stillenger-Weber Potansiyeli, Axilrod-Teller Potansiyeli, Erkoç Potansiyeli, Tersoff Potansiyeli ve Gupta Potansiyelidir.

Richard Buckingham tarafından önerilen Buckingham Potansiyeli, bağlı olmayan iki atomun etkileşimi için Pauli itme ve Van der Waals enerjisini kapsar [31]. Van der Waals, birbirine bağlı olmayan iki atom için kullanılan uzun menzile sahip bir potansiyeldir.

$$U(r) = Ae^{-\beta r} \left(\frac{\lambda}{r^6} + \frac{\lambda^2}{r^8} \right) \quad (1)$$

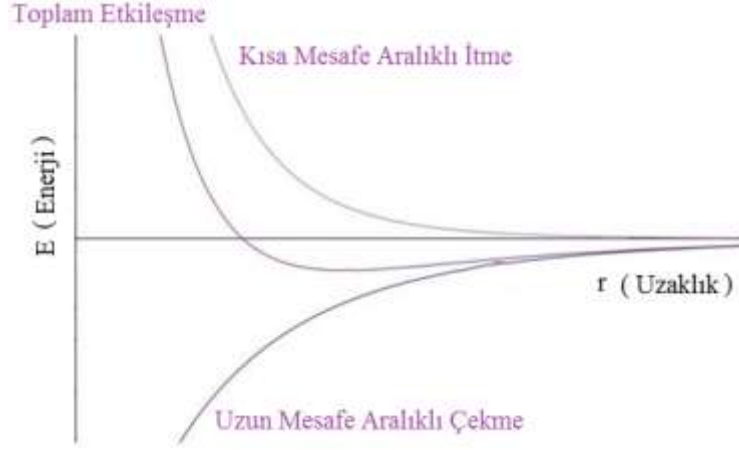
A, λ ve β sabitlerdir ve β ekspanansiyelin dikliğinden ölçülen sabittir.

Mie Potansiyeli, Lennard-Jones potansiyelinin genel bir halidir [32].

$$U(r) = \frac{\varepsilon}{m-n} \left\{ n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^m - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right\} \quad (2)$$

r_0 , minimum enerjideki denge mesafesini; ε , r_0 'a karşılık gelen denge enerjisini; r_{ij} , i ve j. atomların merkezleri arasındaki uzaklığını; m, iteleme terimine karşılık gelen tamsayı değişkenini ve n, çekme terimine karşılık gelen tamsayı değişkenini temsil eder.

Burada $m=12$ ve $n=6$ alınırsa aşağıdaki Lennard-Jones etkileşim potansiyeli ortaya çıkar [33]. Lennard-Jones, indüklenmiş dipol-dipol etkileşimidir. İki atom arası uzaklık r ise, Lennard-Jones potansiyeli $1/r^6$ oranında çekici ve $1/r^{12}$ oranında da itici bir özelliğe sahiptir (Grafik 2.1).



Grafik 2.1. Lennard-Jones potansiyel eğrisi

Morse Potansiyeli, iki atomlu molekülün potansiyel enerjisinin tanımlanabilmesi için oldukça uygun etkileşme modelidir [33]. Birbirlerine sıkı bağlı atomlar için kullanışlıdır ve potansiyel enerji eğrisi derin ve çabuk sifira giden negatif bir alana sahiptir. Morse potansiyeli ayrıca bir atom ve bir yüzey arasındaki etkileşim gibi diğer etkileşimleri modellemek için de kullanılabilir. Bununla birlikte üç parametreye sahip olması nedeniyle, modern spektroskopi için kullanılması uygun değildir.

$$U(r) = D_e \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right] \quad (3)$$

α , pozitif bir parametreye; D_e , enerjinin minimum derinliğine; r , atomların merkezleri arasındaki uzaklığına; r_0 'da minimum enerjideki r değerine karşılık gelir.

Stillinger-Weber potansiyeli, klasik model ile bir yarı iletken modeli yapmak için ilk girişimlerden birisidir. İki ve üç cisim arasındaki etkileşmeyi tanımlayan potansiyel değeridir [34].

Tersoff tarafından geliştirilen Tersoff Potansiyeli, bağ düzeni kavramına dayanmaktadır [35]. İki atom arasında mevcut olan bağın gücü sabit değildir, ancak bulunduğu bölgenin ortamına bağlıdır. Buna göre; metaller, tutkal modeline benzer ve burada enerji kontrol değişkeni olarak bir atomun koordinasyonu önemlidir. Yarı

iletkenlerde ise; elektronik yük kovalent bağın olduğu yerde olduğundan dolayı, odaklanma bağların yerine atomlar üzerindedir [35].

Erkoç potansiyeli, Şakir Erkoç tarafından mikro topak yapılara uygulanan deneysel çoklu-cisim potansiyel enerji fonksiyonudur. İki ve üç cisim etkileşmelerini içermektedir. İki cisim potansiyeli bir çeşit karma fonksiyondur ve üç cisim potansiyeli de iki cisim etkileşmeleri cinsinden açıklanır [36].

Gupta Potansiyeli, bir metal yüzeyindeki örgü durulmalarının analizine olanak sağlayan Gupta tarafından tanımlanmış bir potansiyeldir [37].

2.2. LEPS Potansiyeli

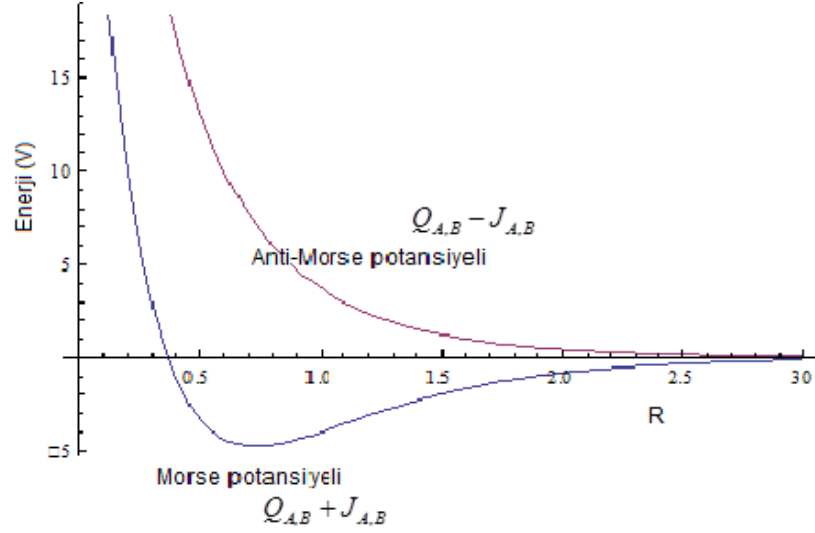
İki atomlu molekül ve yüzey arasındaki etkileşimi tarif eden LEPS potansiyel fonksiyonu [10, 12, 27-30];

$$V(X_A, X_B, \{X_C\}) = Q_{A,B} + Q_{A,C} + Q_{B,C} \pm \left[J_{A,B} (J_{A,B} - J_{A,C} - J_{B,C}) + (J_{A,C} + J_{B,C})^2 \right]^{1/2} \quad (4)$$

şeklindedir. Molekül ve yüzey atomlarının pozisyonları X_A, X_B ve $\{X_C\}$ olarak ifade edilmiştir. Q ve J sırasıyla Coulomb ve değiş-tokuş integralleridir. A ve B indisleri molekülün atomlarını, C ise yüzeyi simgelemektedir. A ve B atomu ile yüzey etkileşimi sırasıyla A,C ve B,C; A ve B atomları için A,B şeklinde gösterilmiştir.

Coulomb $Q_{A,B}$ ve değiş-tokuş $J_{A,B}$ integralleri A-B etkileşmelerinde, elektronların bağ ve anti-bağ durumları için Morse ve anti-Morse potansiyelleri kullanılarak hesaplanır.

Morse potansiyeli (Grafik 2.2.),



Grafik 2.2. Morse ve anti-Morse potansiyel grafiği

$$\begin{aligned}
 Q_{A,B} + J_{A,B} &= V_{A,B} \\
 &= D_e \left\{ \exp[-2\alpha_e(R - R_e)] - 2 \exp[-\alpha_e(R - R_e)] \right\}
 \end{aligned} \tag{5}$$

şeklindeir. Anti-Morse potansiyeli ise,

$$\begin{aligned}
 Q_{A,B} - J_{A,B} &= \left[(1 - \Delta_{A,B}) \frac{D_e}{2} (1 + \Delta_{A,B}) \right] \\
 &\quad \left\{ \exp[-2\alpha_e(R - R_e)] + 2 \exp[-\alpha_e(R - R_e)] \right\}
 \end{aligned} \tag{6}$$

olarak tanımlanır. Burada Coulomb ve deęiş-tokuş integralleri,

$$\begin{aligned}
 Q_{A,B} &= \frac{D_e}{4(1 + \Delta_{A,B})} \\
 &\quad \left\{ (3 + \Delta_{A,B}) \exp[-2\alpha_e(R - R_e)] - (2 + 6\Delta_{A,B}) \exp[-\alpha_e(R - R_e)] \right\}
 \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned}
 J_{A,B} &= \frac{D_e}{4(1 + \Delta_{A,B})} \\
 &\quad \left\{ (1 + 3\Delta_{A,B}) \exp[-2\alpha_e(R - R_e)] - (6 + 2\Delta_{A,B}) \exp[-\alpha_e(R - R_e)] \right\}
 \end{aligned} \tag{8}$$

şeklindedir. Burada $R = |x_A - x_B|$ dir. X_A ve X_B gaz atomların konum vektörleridir.

Spektroskopik Coloumb ve deęiş-tokuş terimleri, iki atomlu etkileşim potansiyelinden elde edilir. Molekülün atomları ile atom topağının etkileşimi ifade eden benzer eşitlikler;

$$Q_{A,C} + J_{A,C} = V_{A,C} = V_r - V_a \quad (9)$$

$$Q_{A,C} - J_{A,C} = \left[\frac{(1 - \Delta_{A,C})}{2} (1 + \Delta_{A,C}) \right] (V_r + V_a) \quad (10)$$

dir. Burada V_r ve V_a sırasıyla, A-C etkileşimi için itici ve çekici terimler olmak üzere,

$$V_r = D_H \exp[-2\alpha_H(r_s - r_H)] + \sum D_2 \exp[-2\alpha_2(R_{A,K} - r_2)] \quad (11)$$

$$V_a = 2D_H \exp[-\alpha_H(r_s - r_H)] + \sum_K 2D_2 \exp[-\alpha_2(R_{A,K} - r_2)] \quad (12)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $R_{A,K} = |x_A - x_K|$ dir ve K topaktaki atomları gösterir. Son iki eşitlik atom topağındaki bütün atomlar üzerinden genişletilir.

$$Q_{A,C} = \frac{1}{4(1 + \Delta_{A,C})} \left\{ (3 + \Delta_{A,C}) \left(D_H \exp[-2\alpha_H(r_s - r_H)] + \sum_{K=1}^N D_2 \exp[-2\alpha_2(R_{A,K} - r_2)] \right) - (2 + 6\Delta_{A,C}) \left(D_H \exp[-\alpha_H(r_s - r_H)] + \sum_{K=1}^N D_2 \exp[-\alpha_2(R_{A,K} - r_2)] \right) \right\} \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
J_{A,C} &= \frac{1}{4(1 + \Delta_{A,C})} \\
&\left\{ (1 + 3\Delta_{A,C}) \left(D_H \exp[-2\alpha_H(r_s - r_H)] + \sum_{K=1}^N D_2 \exp[-2\alpha_2(R_{A,K} - r_2)] \right) \right. \\
&\left. - (6 + 2\Delta_{A,C}) \left(D_H \exp[-\alpha_H(r_s - r_H)] + \sum_{K=1}^N D_2 \exp[-\alpha_2(R_{A,K} - r_2)] \right) \right\} \quad (14)
\end{aligned}$$

Bu eşitliklerdeki r_s değeri A atomunun pozisyonunda atom topağının valans elektronunun yoğunluğuyla ilgilidir.

$$r_s = \left[\frac{3}{4} \pi n(x_A) \right]^{1/3} \quad \text{ve} \quad n(x_A) = \sum N_{6s} n_{Pt}(R_{A,K}) \quad (15)$$

N_{6s} , 6s elektronlarının sayısı olmak üzere $n(x_A)$, Pt'in 6s valans elektron yoğunluğu için atomik Hartre Fock dikkate alınarak modellenmiştir. 6s valans elektronlarının yoğunlukları, her bir elektron için $n_{Pt}(r) = 1.26376 \exp(-2.53r)$ olarak alınmıştır [10, 12, 27-30]. Burada yoğunluk \AA^{-3} ve uzaklık \AA mertebesindedir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Potansiyel Enerji Fonksiyonunu Seçimi

Atom yüzey etkileşimleri atomlar arası kadar küçük ölçekte incelenebilmesi, MD benzetim çalışması yapılabilmesi ve kullanılacak etkileşme potansiyelinin sistemi tam olarak tanımlayabilmesi için, atomlar arasındaki kuvvetlerin bilinmesi gerekmektedir.

Atomlar arası uzaklığın fonksiyonu olarak tanımlanan potansiyel enerji fonksiyonu, moleküler yapının tanımlanması açısından son derece önemlidir. Etkileşme sistemini tanımlamak için seçilen en uygun PEF (Potansiyel Enerji Fonksiyonu) kullanılarak, Hamiltoniyen denklemlerinin çözümü ile atom veya moleküler sistemlerin fiziksel özellikleri belirlenebilir. Öncelikli olarak, sistemdeki etkileşmelerin tanımlanmasında kullanılan potansiyel enerji fonksiyonunun sınır şartları belirlenmesi gerekir. Sınır şartları olarak, atomlar arasında sonsuz mesafede potansiyel enerji değerinin, çekici kuvvetin etkisi azaldığından sıfır olması ve iki cisim birbirine yaklaşırken hatta bitişik durumda iken itici kuvvetin etkisi arttığından tanımsız olarak alınır. Denge konumunda sistemin enerjisi minimum olarak alınır.

Topak, yüzey ve benzeri sistemlerin çeşitli özellikleri atomik düzeyde incelemek için bilgisayar benzetimlerinde uygun PEF'ler kullanılmalıdır. Bu çalışmada, H atomu ile Pt(111) yüzeyinin etkileşme sistemini tanımlamak için oluşturulacak potansiyel enerji yüzeylerini tanımlamak için potansiyel enerji fonksiyonu olarak, benzer çalışmalarda yaygın olarak kullanılan LEPS (London-Eyring-Polanyi-Sato) potansiyeli seçilmiştir [10, 12, 27-30].

3.2. LEPS Parametrelerinin Bulunması

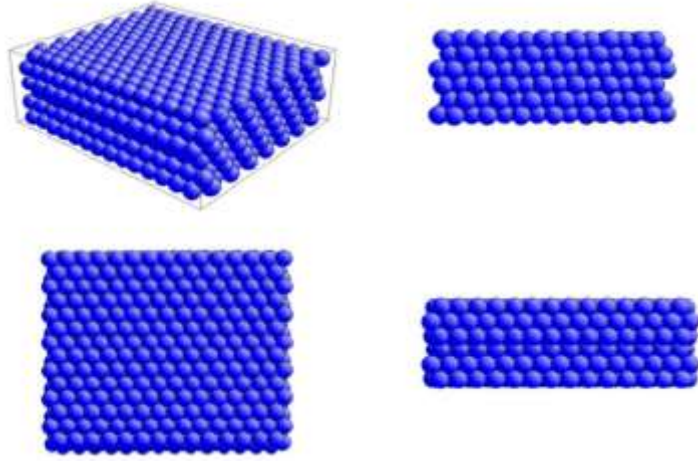
Metal atomlarının oluşturduğu yüzey yapıları ve topaklarla ilgili çalışmalarda en önemli husus, bu sistemleri doğru ve kesin olarak tanımlayan potansiyel enerji fonksiyonlarının belirlenmesidir. Yapılan bu çalışmada, LEPS potansiyel enerji

fonksiyonuna ait parametrelerini bulmak, atom ve yüzey arasındaki etkileşmeyi ve özelliklerini tanımlamak açısından büyük önem taşımaktadır.

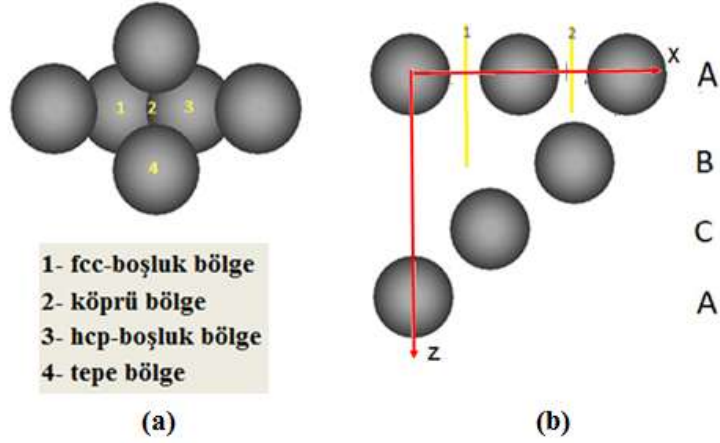
Bu araştırmada, H atomu ile Pt(111) yüzeyi arasındaki etkileşmeyi ifade eden potansiyel enerji yüzeyleri tanımlanacak ve analiz edilecek. Potansiyel enerji yüzeylerini tanımlamak için kullanılan LEPS potansiyelindeki parametrelerin bulunması için, $H \rightarrow Pt(111)$ etkileşmesine ait kuantum mekaniğin postulatlarını temel alan Yoğunluk Fonksiyon (YFT) yöntemiyle hesaplanmış enerji değerleri kullanılacaktır. Bu amaçla, J. Ludwig ve D. G. Vlachos tarafından yapılmış olan Pt(111) yüzeyi üzerinde hidrojenin etkileşmesine ait çalışmadaki YFT yöntemi ile hesaplanmış Pt(111) yüzeyinin üç farklı simetri bölgesi üzerinde (tepe, fcc-boşluk ve köprü) H atomunu ile arasındaki potansiyel enerji değerleri, LEPS parametrelerini fit etmek için kullanıldı [23].

Bu amaçla, LEPS parametrelerini fit etmek için, yüzey merkezli kübik “fcc” yüzey yapısında ABCA dizilimli 6 katmanlı 1092 Pt atomundan oluşan Pt(111) yüzeyi kullanıldı. Oluşturulan Pt(111) yüzeyi için örgü sabiti 3,92 Å olarak alındı [38]. Şekil 3.1’de 1092 adet platin atomundan oluşan 6 katmanlı Pt(111) metal yüzeyinin üç boyutlu, üstten, yanlardan ve farklı bir açılardan görünümü gösterilmiştir.

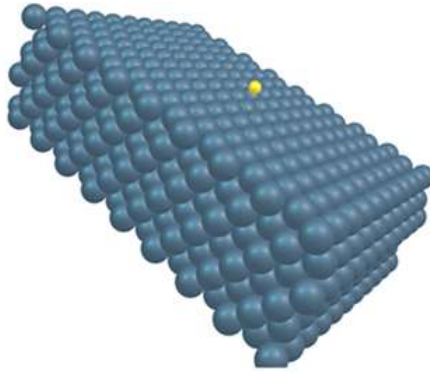
Şekil 3.2’de Pt(111) yüzeyi üzerindeki simetri bölgelerinin üstten ve yandan görünüşleri verilmiştir. Birinci tabakada bulunan iki atom arasındaki bölge köprü bölgesi diye adlandırılır. Yüzey atomlarının bulunduğu bölge tepe bölgesidir. Fcc-boşluk bölgesi ikinci tabaka yüzey atomunun olmadığı birim üçgenin merkez noktası, hcp-boşluk bölgesi de ikinci tabaka yüzey atomunun olduğu diğer birim üçgenin merkez noktasıdır.



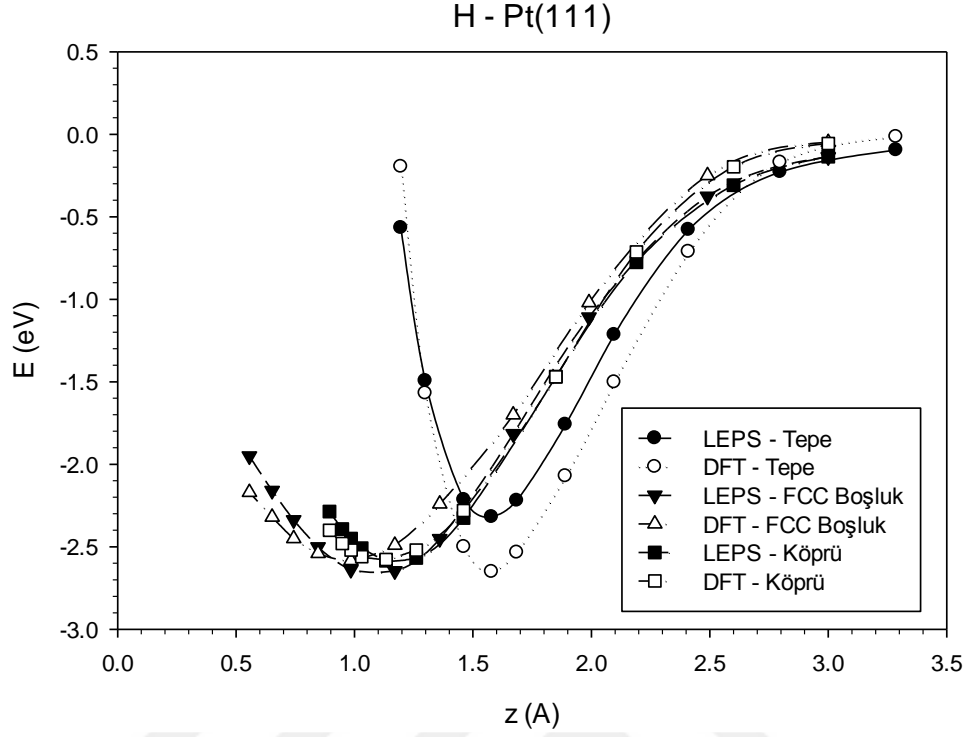
Şekil 3.1. 1092 adet platin atomundan oluşan 6 katmanlı Pt(111) metal yüzeyinin üç boyutlu; üstten, yanlardan ve farklı bir açıdan görünüşü.



Şekil 3.2. Pt(111) yüzeyi üzerindeki simetri bölgelerinin a) üstten ve b) yandan görünümü.



Şekil 3.3. Pt(111) yüzeyi üzerindeki H atomunun temsili



Grafik 3.1. H atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde tepe, fcc-boşluk ve köprü bölgelerinde yüzeyden yüksekliğe bağlı YFT'ye dayalı potansiyel enerji eğrileri ve bu eğrilere fit edilmiş LEPS potansiyel enerji eğrileri

Şekil 3.3.'te hidrojen atomunun Pt(111) yüzey üzerindeki tutunması temsilen gösterilmiştir.

Tablo 1. *H-Pt(111) etkileşme sistemi için elde edilen LEPS parametre seti. (rms hata değeri 0,168 olarak hesaplanmıştır.)*

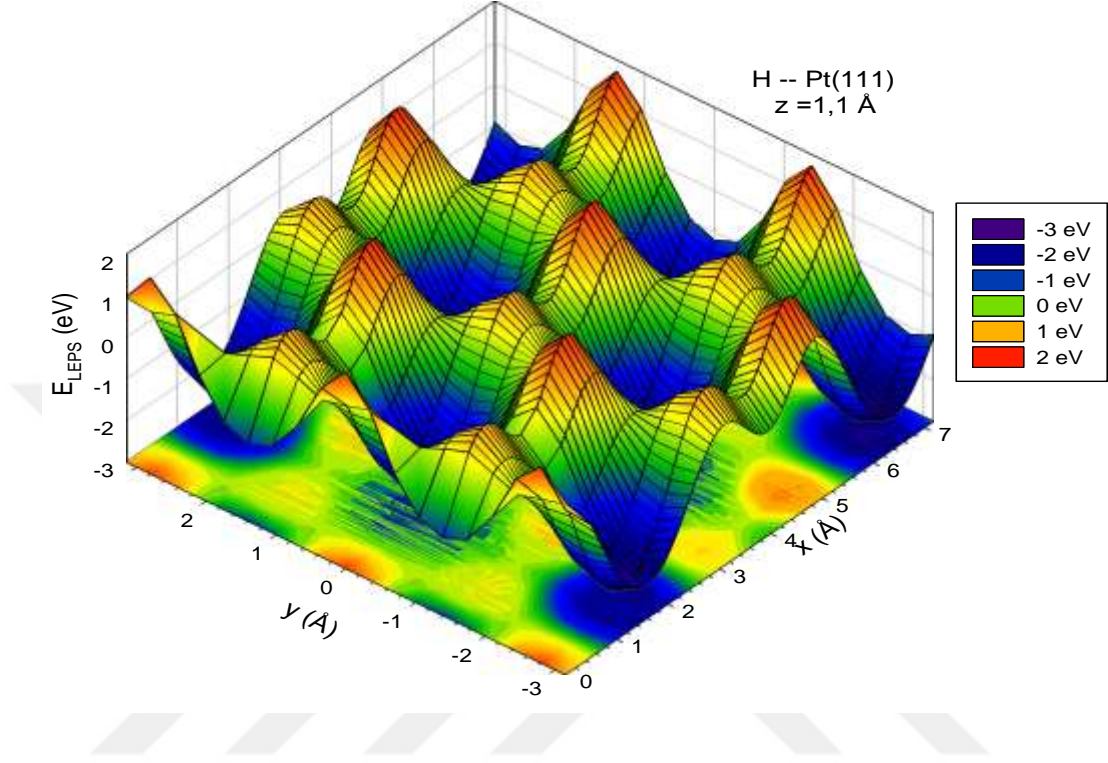
$\Delta_{H,H}=0,000$	$D_2=0,148 \text{ eV}$	$\Delta_{H,Pt}=0,346$
$D_e=4,745 \text{ eV}$	$D_H=2,000 \text{ eV}$	$R_H=2,320 \text{ \AA}$
$\alpha_e=1,900 \text{ \AA}^{-1}$	$\alpha_2=1,480 \text{ \AA}^{-1}$	$R_2=2,010 \text{ \AA}$
$R_e=0,733 \text{ \AA}$	$\alpha_H=1,040 \text{ \AA}^{-1}$	$N_{6s}=0,670$

LEPS parametreleri, lineer olmayan en küçük kareler yöntemi kullanılarak üç simetri bölgesi için (tepe, fcc-boşluk ve köprü) YFT enerji değerlerine fit edilerek bulundu. Bulunan LEPS parametreleri Tablo 1'de gösterilmiştir. Parametrelerin bulunması ile

ilgili rms hata deęeri 0,168 olarak hesaplanmıřtır. Tepe, kpr ve fcc-bořluk blgeler iin H atomunun baęlanma enerjileri sırasıyla -2,312; -2,590 ve -2,647 eV olarak hesaplanmıřtır. Bu blgeler iin minimum baęlanma enerjilerine karřılık gelen H atomunun yzeyden ykseklikleri sırasıyla 1,6; 1,2 ve 1,0 Å olarak hesaplanmıřtır. Bu blgeler iin H atomunun yzeyle arasındaki ykseklięe baęlı YFT enerji eęrileri ve LEPS enerji eęrileri Grafik 3.1'de karřılařtırılmalı olarak gsterilmiřtir. Sonular literatr ile uyum iindedir [23].



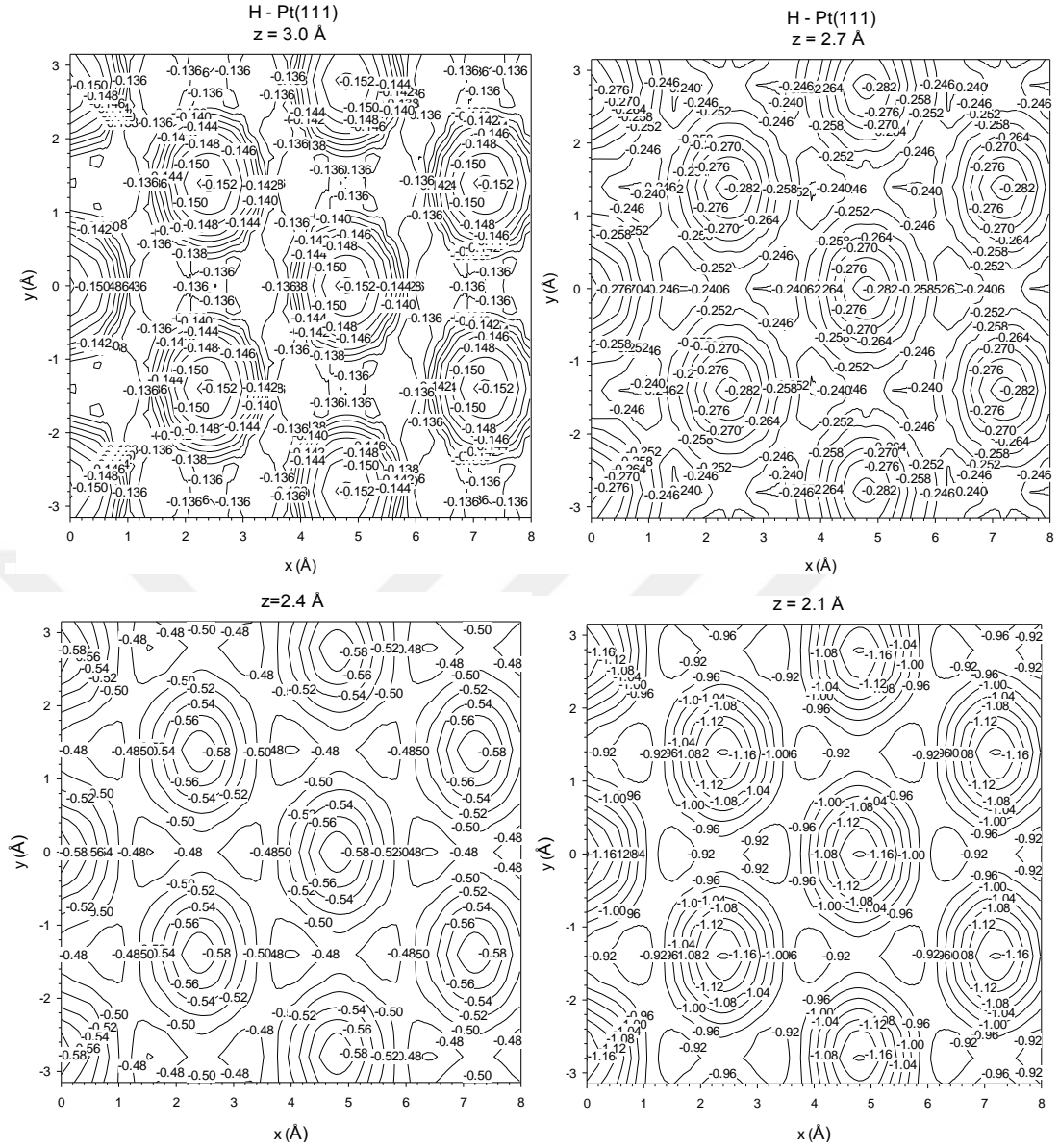
4. BULGULAR VE TARTIŞMA



Grafik 4.1. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinden 1,1 Å yükseklikte iken, potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyükselti grafiği

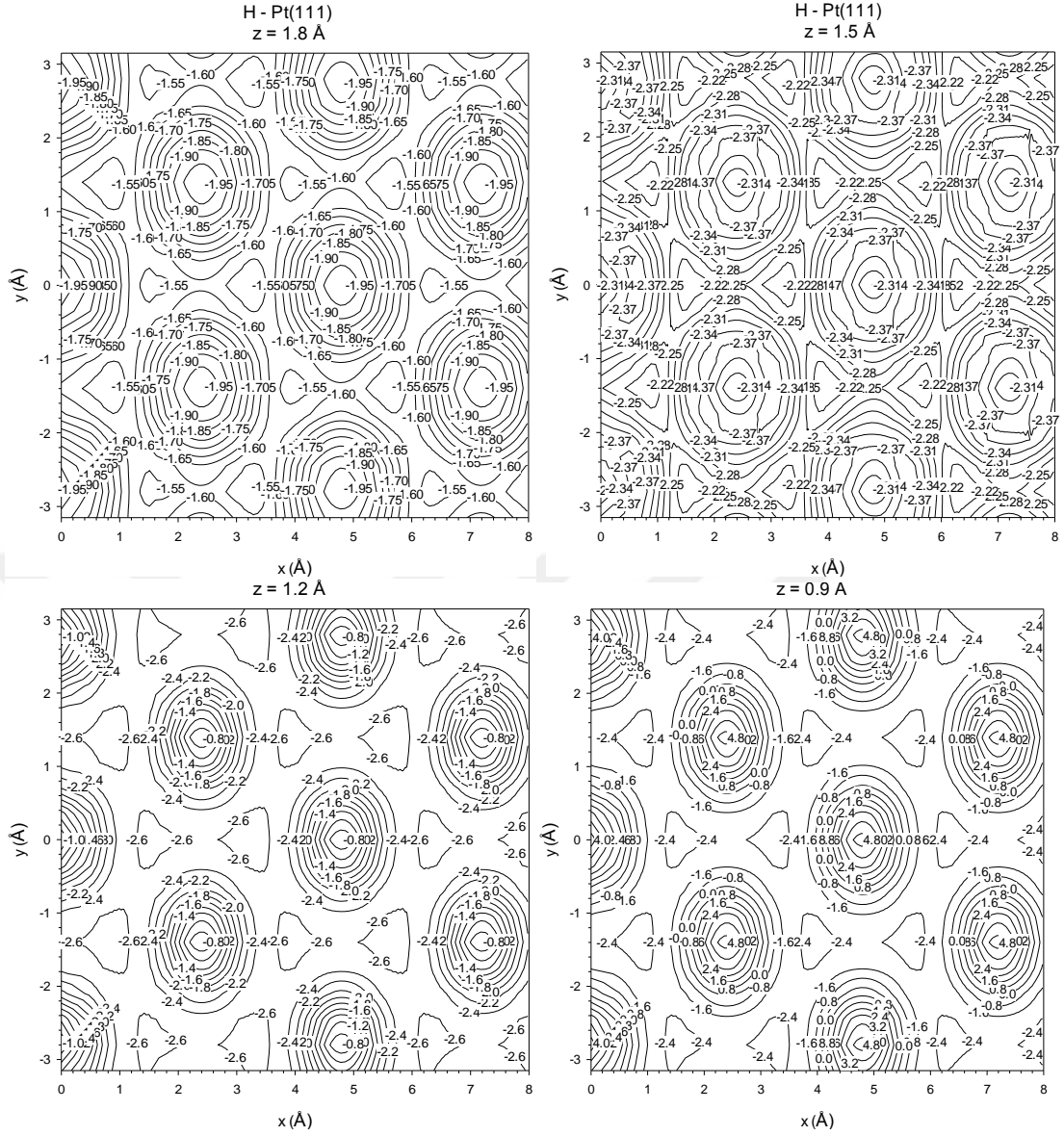
Hidrojen atomunun Pt(111) yüzeyinden 1,1 Å yükseklikte iken, potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyükselti grafiği Grafik 4.1'de gösterilmiştir. Enerji değerlerinin maksimum seviyede olduğu bölgeler yüzey atomlarının bulunduğu bölgelere karşılık gelmektedir. Enerjinin minimum olduğu bölgelerde boşluk bölgeler arasında karşılık gelmektedir. Yüzeye gönderilen bir hidrojen atomu enerjisinin maksimum olduğu bölgelerde saçılmaya, minimum olduğu bölgede de tuzaklanmaya uğrayabilir. Hidrojen atomu yüzeye yaklaşırken köprü bölgesi üzerinde iken yüzey potansiyelinin itici kuvvet etkisi artmaktadır.

H atomunun yüzey üzerinde farklı yüksekliklerde iken eş potansiyel eğrileri Grafik 4.2, Grafik 4.3 ve Grafik 4.4'te verilmiştir.



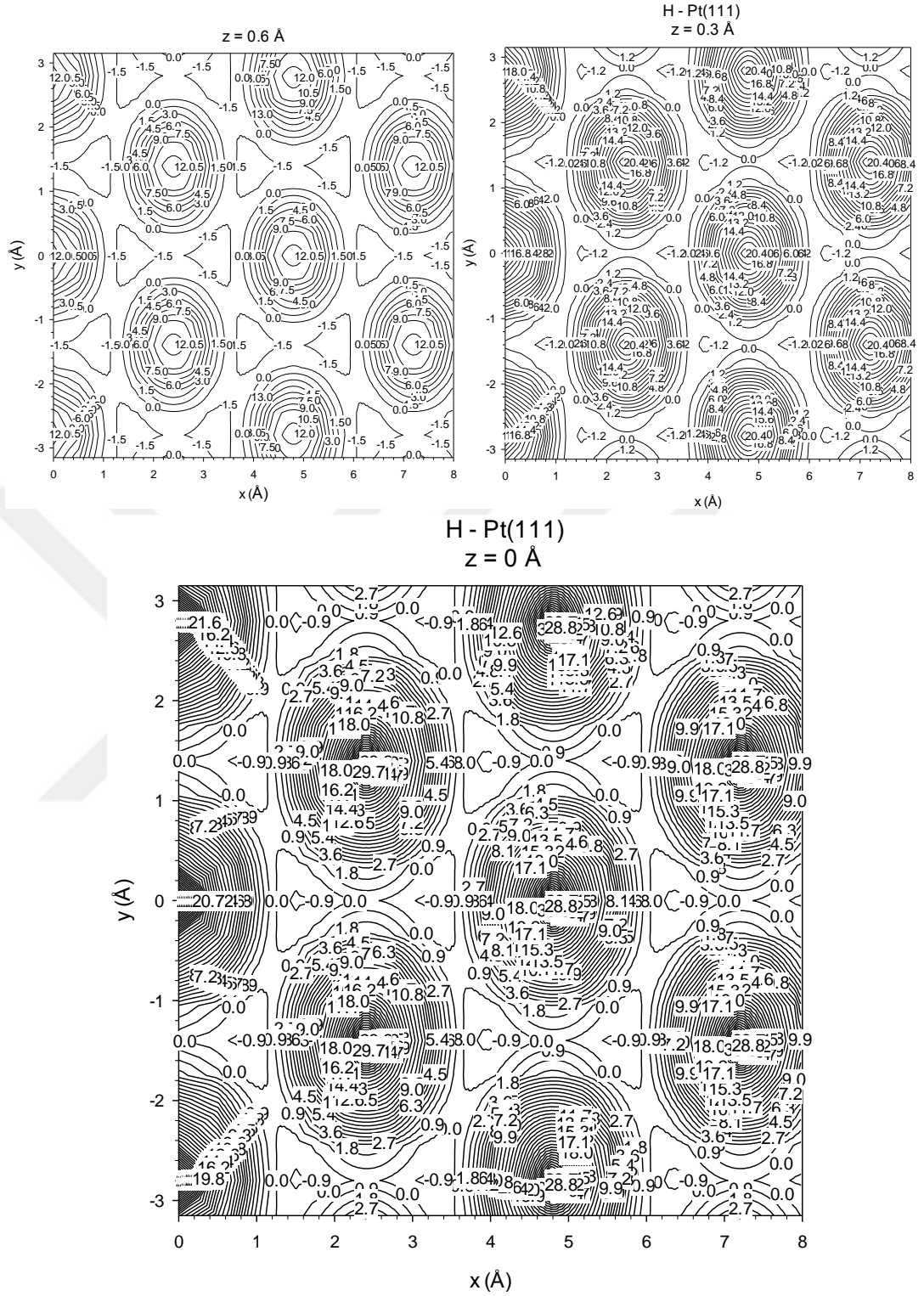
Grafik 4.2. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinde $z=3 \text{ \AA}$; $2,7 \text{ \AA}$; $2,4 \text{ \AA}$ ve $2,1 \text{ \AA}$ yüksekliklerinde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri

Hidrojen atomu yüzey üzerinden 3 \AA yükseklikten $1,5 \text{ \AA}$ yüksekliğe yaklaştıkça Grafik 4.2 ve Grafik 4.3'te de görüldüğü gibi metal yüzeyin Hidrojen üzerinde potansiyel çekici etkisi artmakta olduğu tespit edilmiştir.



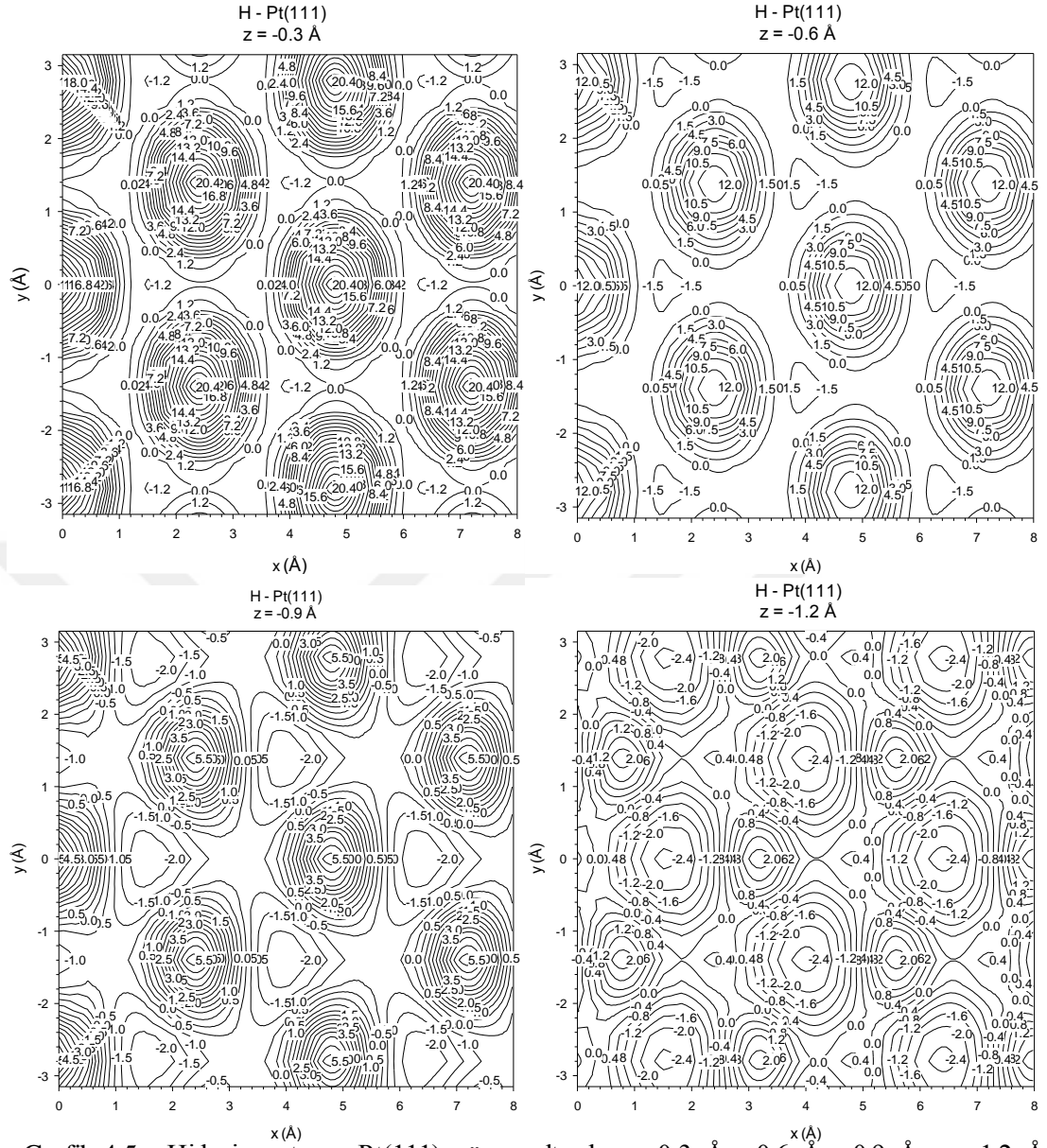
Grafik 4.3. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinde $z=1,8$ Å; $1,5$ Å; $1,2$ Å ve $0,9$ Å yüksekliklerinde iken metal yüzeyin potansiyel enerjisi yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri

Grafik 4.3.'te görüldüğü gibi, hidrojen atomu yüzey üzerinde $1,5$ Å yükseklikten $1,2$ Å yüksekliğe geldiğinde köprü ve boşluk bölgelerinde metal yüzeyin hidrojen üzerinde çekici potansiyel etkisi artarken, tepe bölgelerinde ise itici potansiyel etkisi artmaya başladığı tespit edilmiştir. Hidrojen atomu yüzeyden $0,9$ Å yükseklikte ve yüzeye daha yakın yüksekliklerde yüzeyin itici potansiyeli karşı karşıya kaldığı Grafik 4.3 ve Grafik 4.4'te ayrıntılı bir biçimde gösterilmektedir.



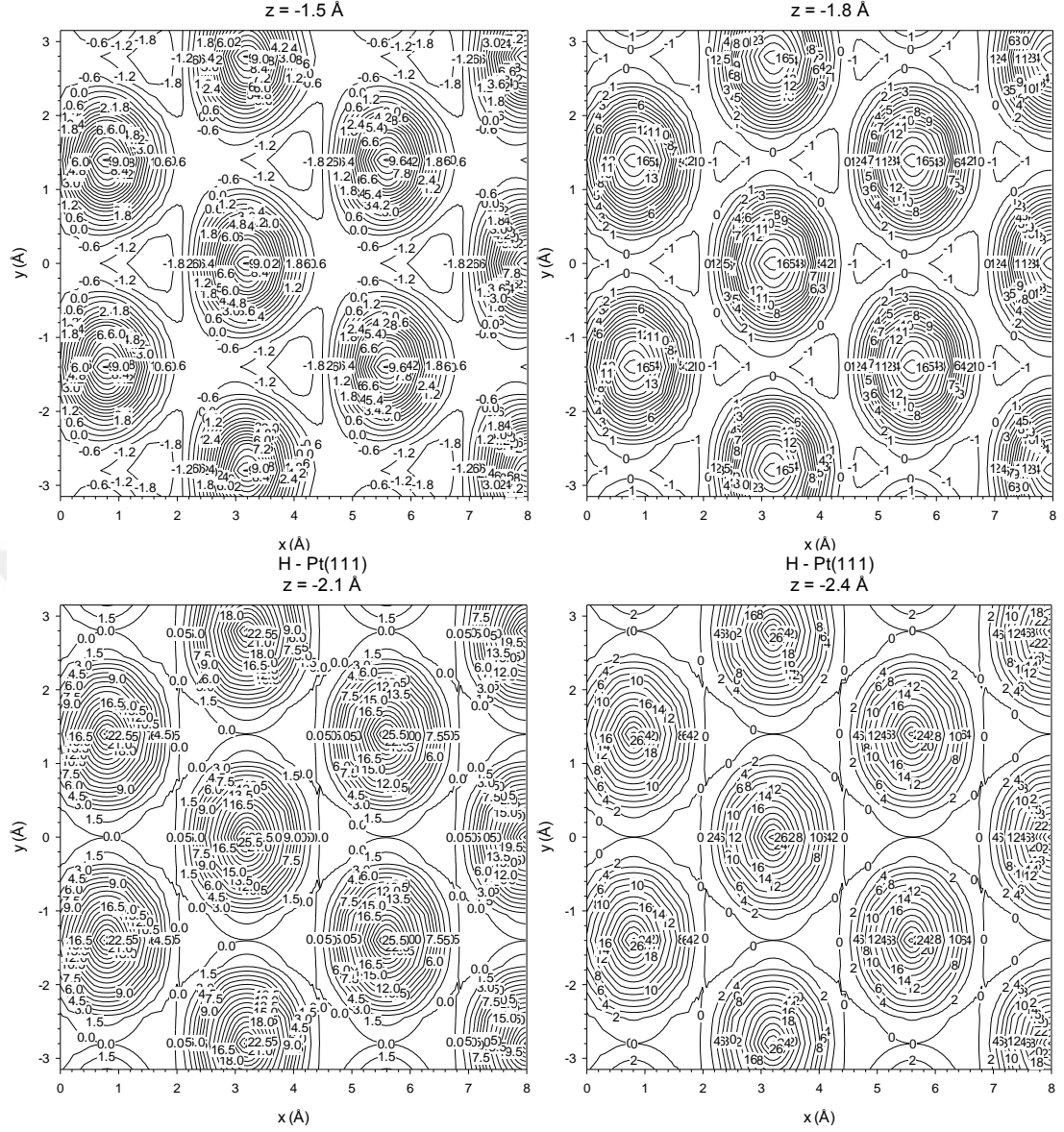
Grafik 4.4. Hidrojen atomu Pt(111) yüzeyi üzerinde $z=0,6 \text{ \AA}$; $0,3 \text{ \AA}$ ve $0,0 \text{ \AA}$ yüksekliklerinde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri

H atomunun yüzey üzerinde farklı yüksekliklerde iken eş potansiyel eğrileri Grafik 4.5, Grafik 4.6 ve Grafik 4.7’de verilmiştir.



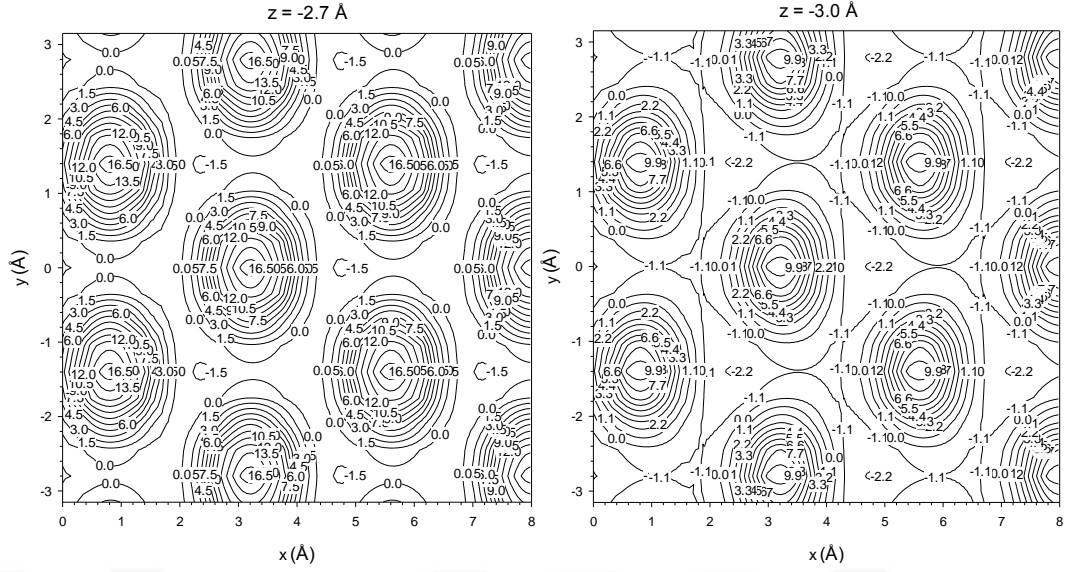
Grafik 4.5. Hidrojen atomu Pt(111) yüzey altında $z=0,3 \text{ \AA}$; $-0,6 \text{ \AA}$; $-0,9 \text{ \AA}$ ve $-1,2 \text{ \AA}$ derinliklerde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri

Hidrojen atomu tam yüzey üzerinde iken boşluk bölgeleri aracılığı ile alt yüzeye rahatlıkla geçebileceği söylenebilir, köprü bölgesinde ise yüzey atomlarının itici potansiyel etkisinden dolayı alt yüzeye geçişin zor olabileceği Grafik 4.4'te gösterilmiştir. Tepe bölgesi hariç, yüzeye gönderilecek hidrojen atomuna verilecek az miktarda yeterli bir kinetik enerji ile alt yüzeye geçebilmesi sağlanabilir.



Grafik 4.6. Hidrojen atomu Pt(111) yüzey altında $z=-1,5 \text{ \AA}$; $-1,8 \text{ \AA}$; $-2,1 \text{ \AA}$ ve $-2,4 \text{ \AA}$ derinliklerde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri

Alt yüzeylerde 0 \AA ve $-3,0 \text{ \AA}$ arası derinliklerde hidrojen atomu yüzeyi oluşturan tabakalar arasında kalacağından tuzaklanması mümkün hale gelebilir. Grafik 4.5, Grafik 4.6 ve Grafik 4.7’de itici potansiyel etkinin fazla olduğu tepe bölgeleri ikinci ve üçüncü tabaka yüzey atomlarından kaynaklanmaktadır. Yüzey katmanları arasındaki boşluk $2,263 \text{ \AA}$ ’dır.

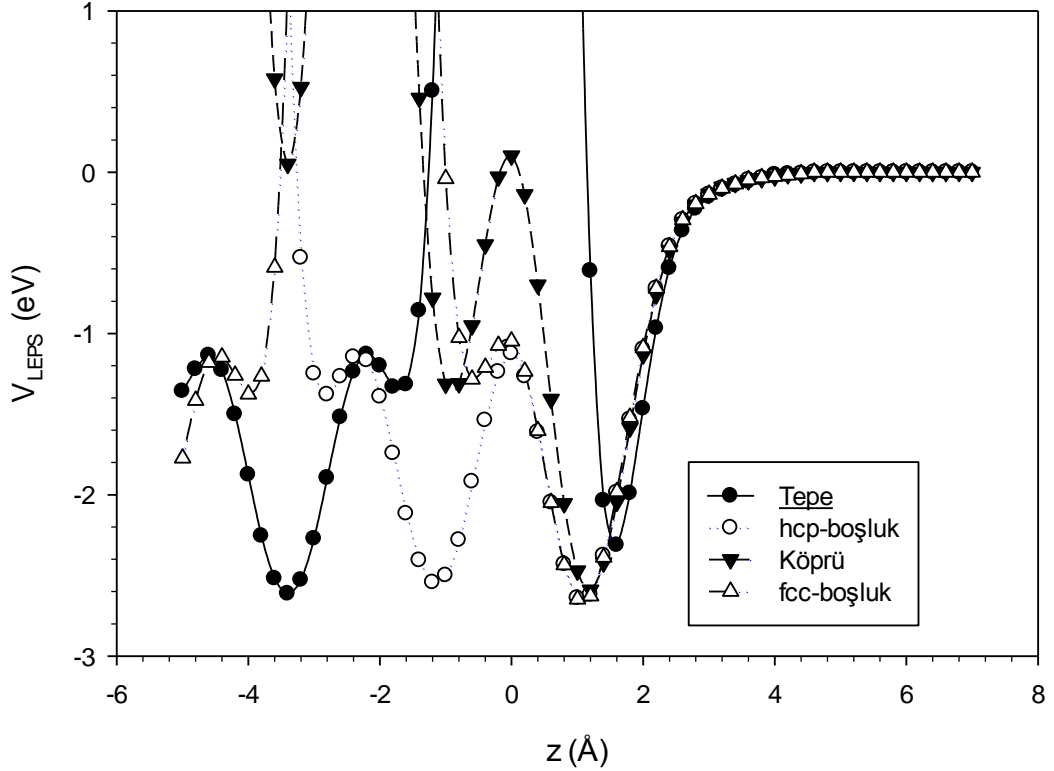


Grafik 4.7. Hidrojen atomu Pt(111) yüzey altında $z=-2,7 \text{ \AA}$ ve $-3,0 \text{ \AA}$ derinliklerde iken metal yüzeyin potansiyel enerji yüzeyine ait eş-potansiyel grafikleri

Grafik 4.8.'de H atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde dört farklı simetrik bölge için yüzey üstü ve altı için, yüzeyden uzaklık z 'nin fonksiyonu olarak hesaplanan LEPS potansiyel enerji eğrileri grafiği gösterilmiştir. Simetrik bölgeler olan tepe, köprü, fcc-boşluk ve hcp-boşluk bölgeler için H atomunun bağlanma enerjileri sırasıyla -2,312; -2,590; -2,647 ve -2,641 eV olarak hesaplanmıştır. Bu bölgeler için minimum bağlanma enerjilerine karşılık gelen H atomunun yüzeyden yükseklikleri sırasıyla 1,6; 1,2; 1,0 ve 1,0 Å olarak hesaplanmıştır. Sonuçlar literatürle uyum içindedir [16, 18-24].

Tam yüzey üzerinde bağlanma enerjileri, köprü, fcc-boşluk ve hcp-boşluk bölgeler için sırasıyla 0,101; -1,048 ve -1,123 eV olarak hesaplanmıştır. Bu nedenle boşluk bölgeler alt yüzeye geçişin kolaylıkla mümkün olduğu bölgelerdir. Tepe bölgelerinde yüzeyin H atomuna uyguladığı potansiyelin itici özelliği bariz bir şekilde görülmektedir.

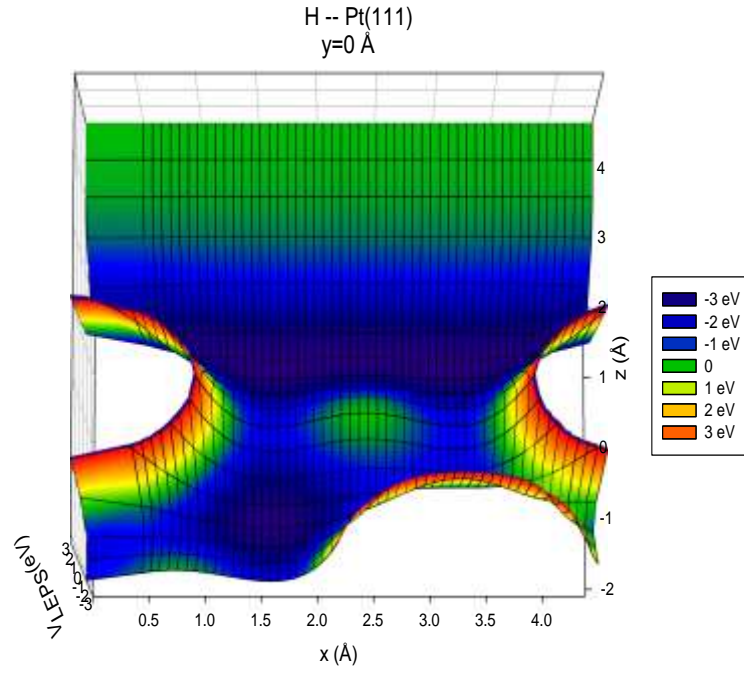
H -- Pt(111)
altyüzey ve yüzey üzeri



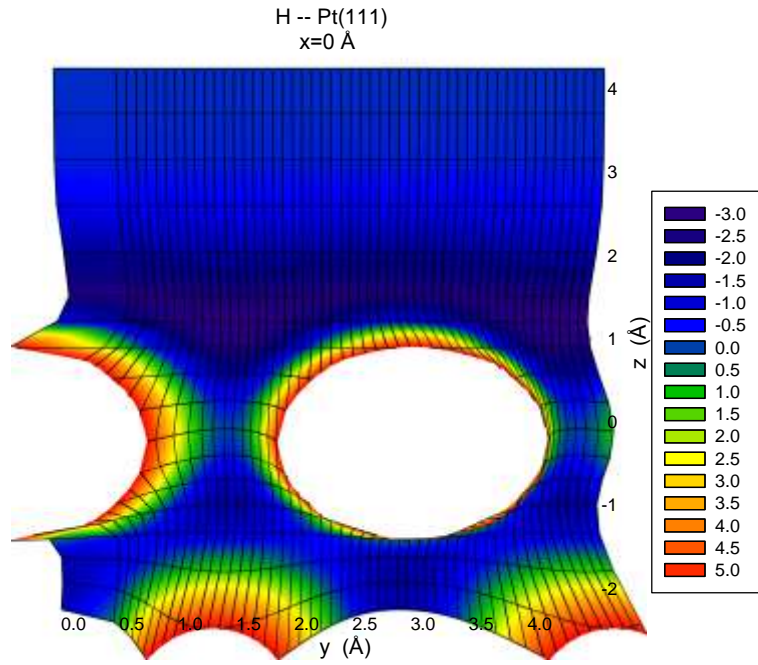
Grafik 4.8. H atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde dört farklı simetrik bölge için yüzey üstü ve altı için, yüzeyden uzaklık z 'nin fonksiyonu olarak hesaplanan LEPS potansiyel enerji eğrileri

Grafik 4.8 ve Grafik 4.9'da görüldüğü gibi hcp-boşluk bölgeden ikinci katmana kadar direkt geçiş mümkünken, fcc-boşluk bölgeden üçüncü katmana kadar geçişin mümkün olabileceği görülmektedir. Referans 18'in sonuçları ile uyumludur. Ayrıca hidrojen atomunun yüzeye tutunma ve alt yüzeye geçiş bölgeleri Cu(111) ve Ni(100) metal yüzeyleri ile yapılan çalışmalar ile benzerlik göstermektedir [8-13].

Grafik 4.9 ve Grafik 4.10'da sırasıyla Hidrojen atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde $y=0 \text{ Å}$ ve $x=0 \text{ Å}$ konumlarında iken potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyükselti grafikleri verilmiştir. Bu grafiklerde H atomunun gerek yüzey üzerinde farklı yüksekliklerde gerekse yüzey katmanları arasında farklı derinliklerde karşılaştığı potansiyel enerji yüzey etkileri rahatlıkla görülmektedir.



Grafik 4.9. Hidrojen atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde $y=0$ Å konumunda iken potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyükselti grafiği



Grafik 4.10. Hidrojen atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde $x=0$ Å konumunda iken potansiyel enerji yüzeyine ait üç boyutlu eşyükselti grafiği

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Gaz-fazlı türler ile metal yüzeyler üzerine tutturulmuş parçacıkların reaksiyon dinamikleri son yıllarda oldukça fazla incelenmiş ve çok önemli sonuçlar bulunmuştur. Elde edilen bu sonuçlar ile reaksiyon dinamikleri hakkında oldukça önemli bilgiler sağlanmıştır. Dolayısıyla, bu bilgiler ışığında daha karmaşık araştırmaların sonuçlarının açıklanabilmesi daha kolay hale gelecektir. Hidrojen atomunun çok farklı metal yüzeyler ile etkileşmesi çok fazla sayıda çalışmaya konu olmuş ve bir o kadar da başka çalışmalara yön vermiştir. Metal yüzeyler ile atomik hidrojenin etkileşme dinamiği çalışmaları teknolojik olarak da ürünlerin çeşitliliği bakımından çok önemli bir yere sahiptir. Hidrojenin en verimli ve en kullanışlı biçimde depolanması için çalışmalar halen daha sürmektedir. Uzay teknolojisi, yakıt teknolojisi ve diğer alanlarda bu çalışmalar ile alınan sonuçlar çok önemli bir yere sahiptir.

Bu çalışmada, H atomunun Pt(111) metal yüzeyi ile etkileşmesine ait potansiyel enerji eğrileri ve potansiyel enerji yüzeyleri ayrıntılı olarak çalışıldı. Çalışmada atomla yüzeyin etkileşmesini tanımlayan LEPS potansiyeli kullanıldı. Bu potansiyele ait parametreler ise, yine H – Pt(111) yüzeyi etkileşmesini inceleyen J. Ludwig ve D. G. Vlachos tarafından yapılmış çalışmadan fit edildi[23]. Çalışmanın ilk kısmında kullanılacak olan potansiyel fonksiyon seçimi yapıldıktan sonra, fit edilen parametreler ile çalışmanın ikinci kısmı olan H – Pt(111) metal yüzeyi arasındaki farklı uzaklıklar için enerji değerleri bulundu. İnceleme sonunda H atomunun Pt(111) yüzeyi üzerinde tepe noktalarında yüzey potansiyelinin itici etkisinin yüksek olduğu bulundu. Yüzey üzerindeki boşluk bölgelerinde ise bağlanma enerji değerlerinin birbirine çok yakın olduğu hesaplandı. Ayrıca boşluk bölgelerine gelen atomun alt yüzeye doğrudan geçiş bölgeleri veya yüzeye tuzaklanma bölgeleri olduğu tespit edildi. Bu boşluk bölgelerinden alt yüzeye geçen atomlar üçüncü katmana kadar bir enerji bariyerine çarpmadan ilerleyebilir. Tepe bölgelerindeki enerji bariyerine denk gelen hidrojen atomu ise geri saçılabilir. Yine hcp-boşluk bölgesinden alt yüzeye geçen atomlar ise, ikinci tabaka platin atomlarından dolayı karşılaştığı enerji bariyerini geçemeyebilir ve geri saçılabilir. Çalışma sonucunda; hidrojen atomunun

alt yüzeyde tuzaklanma olasılığının olabileceği tespit edilmiştir. Bu çalışmada boşluk bölgeler arasında çok büyük farklılıkların olmadığı tespit edilmiştir.

Ayrıca bu çalışma sayesinde, reaksiyon dinamiklerinin incelenmesi için LEPS potansiyeli kullanılacak çalışmalar için bu potansiyelin parametrelerinin bulunması sağlanmıştır. Bu parametreler ile MD benzetim çalışmaları yapılarak Pt(111) yüzeyi ile H atomunun (H_2 molekülü) etkileşimi ayrıntılı olarak incelenebilecektir. Bu ve benzeri çalışmaların yapılması ile, katalizör sistemlerin araştırılmasına ve hidrojen depolama yöntemleri ile ilgili araştırmalara önemli ölçüde katkıda bulunacaktır. Bu tür çalışmalarda kullanılan bilgisayar teknolojilerinden kaynaklı sonuçların hızlı alınması sayesinde, sonuçların doğrudan teknolojik alanlarda kullanılmasında önemli bir katkı sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

1. Rettner, C.T., Auerbach, D.J., Tully, J.C., Kleyn, A.W., (1996). Chemical dynamics at the gas-surface interface, *Journal of Physical Chemistry*, 100 (31), 13021-13033.
2. Biederer, Th., Kammler, Th., Küppers, J., (1998). A structural effect in direct reactions: kinetics of D abstraction from Pt(110) 1×2 surfaces with gaseous H atoms, *Chemical Physics Letters*, 286: 15-20.
3. Kim, J. Y., Lee, J., (1999). Spatial and kinetic separation of Eley-Rideal plus primary hot atom and secondary hot atom mechanisms in H atom abstraction of adsorbed D atoms on Pt(111), *Physical Review Letters*, 82 (6): 1325-1328.
4. Kim, J. Y., Lee, J., (2000). Kinetics, mechanism, and dynamics of the gas-phase H(D) atom reaction with adsorbed D(H) atom on Pt(111), *Journal of Chemical Physics*, 113 (7): 2856-2865.
5. Wehner, S., Küppers, J., (1998). Abstraction of D adsorbed on Pt(111) surfaces with gaseous H atoms, *Journal of Chemical Physics*, 108 (8): 3353- 3359.
6. Wehner, S., Küppers, J., (1998). Abstraction of H adsorbed on Pt(111) surfaces with gaseous D atoms: isotope and flux effects, *Surface Science*, 411: 46-53.
7. Poelsema, B., Lenz, K., Comsa, G., (2010). The dissociative adsorption of hydrogen on defect-'free' Pt(111), *Journal of Physics Condensed Matter*, 22 (30), art. no. 304006.
8. Z.B. Güvenç, X. Sha, and B. Jackson, (2001). Eley–Rideal and hot atom reactions between hydrogen atoms on Ni(100): Electronic structure and quasiclassical studies, *J. Chem. Phys.*, 115, 9018.
9. B. Jackson, X. Sha, and Z. B. Güvenç, (2002). Kinetic model for Eley–Rideal and hot atom reactions between H atoms on metal surfaces, *J. Chem. Phys.*, 116, 2599.
10. Z.B. Güvenç, X. Sha, and B. Jackson, (2002). The effects of lattice motion on eley-ideal and hot atom reactions: quasiclassical studies of hydrogen recombination on Ni(100), *J. Phys. Chem. B*, 106(33), 8342–8348.
11. Vurdu, C.D., Güvenç, Z.B., (2011). H(D) → D(H) + Cu(111) collision system: Molecular dynamics study of surface temperature effects, *Journal of Chemical Physics*, 134 (16).
12. Vurdu, C.D., Güvenç, Z.B., (2010). Developing interaction potential for H (2H) → Cu(111) interaction system: A numerical study, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 15 (3), 648-656.

13. Vurdu, C.D., Özçelik, S., Güvenç, Z.B., (2007). Quasiclassical studies of Eley-Rideal and hot-atom reactions on a surface at 94 K: $H(D) \rightarrow D(H) + Cu(111)$, *Surface Science*, 601 (18), 3745-3749.
14. Can Dogan Vurdu, Muhammet Serdar Cavus, Fatma Kandemirli, (2015). Investigation of H(2H) - Pt(111) Interaction System: using Density Functional Methods, 3rd International Conference on Computation for Science and Technology (ICCST-3), *Advances in Computer Science Research*, ISBN:978-94-62520-46-2, ISSN: 2352-538x, 144-148.
15. Zecho, Th., Brandner, B., Küppers, J., (1998). Adsorption of D adsorbed on Pt(100) surfaces by gaseous H atoms: effect of surface heterogeneity, *Surface Science*, 418: L26-L30.
16. Nobuhara, K., Nakanishi, H., Kasai, H. ve Okiji, A., (2001). Behavior of H atom in adsorption states on metal surfaces – localization and delocalization, *Surface Science*, 493: 271-277.
17. Nobuhara, K., Kasai, H., Nakanishi, H., ve Okiji, A., (2002). Vibrational properties of an H atom adsorbed on Pt(111), *Surface Science*, 507-510: 82-86.
18. Nobuhara, K., Nakanishi, H., Kasai, H., Okiji, A., (2000). Interactions of atomic hydrogen with Cu(111), Pt(111), and Pd(111), *Journal of Applied Physics*, 88 (11): 6897-6901.
19. Olsen, R.A., Kroes, G.J., Baerends, E.J., (1999). Atomic and molecular hydrogen interacting with Pt(111), *Journal of Chemical Physics*, 111 (24), 1155-11163.
20. Watson, G.W., Wells, R.P.K., Willock, D.J., Hutchings, G.J., (2000). Ab initio simulation of the interaction of hydrogen with the {111} surfaces of platinum, palladium and nickel. A possible explanation for their difference in hydrogenation activity, *Chemical Communications*, (8), 705-706.
21. Vehviläinen, T., Salo, P., Ala-Nissila, T., Ying, S.C., (2009). Electronic properties of H on vicinal Pt surfaces: First-principles study, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 80 (3), art. no. 035403.
22. Nobuhara, K., Nakanishi, H., Kasai, H., Okiji, A., (2002). Quantum mechanical behavior of an H atom on Cu(111) and Pt(111), *Journal of Applied Physics*, 91 (3), 1855-1859.
23. Ludwig, J., Vlachos, D.G., (2004). First principles modeling of dissociative adsorption at crystal surfaces: Hydrogen on Pt(111), *Molecular Simulation*, 30 (11-12), 765-771.
24. Nobuhara, K., Nakanishi, H., Kasai, H. ve Okiji, A., (2002). Quantum mechanical behavior of an H atom on Cu(111) and Pt(111), *Journal of Applied Physics*, 91 (4): 1855-1859.

25. Haile, J. M., (1997). *Molecular Dynamics Simulations Elementary Methods*, John Wiley & Sons, New York, 1-75.
26. Allen, M. P., Tildesley D. J., (1990). *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford, 1-90.
27. McCreery, J.H., Wolken Jr., G., (1975). A model potential for chemisorption: $H_2+W(001)$, *The Journal of Chemical Physics*, 63 (6), 2340-2349.
28. McCreery, J.H., Wolken Jr., G., (1976). Erratum: A model potential for chemisorption: $H_2+W(001)$, (*The Journal of Chemical Physics* (1975) 63 (2340)), *The Journal of Chemical Physics*, 65 (7), 2922.
29. McCreery, J.H., Wolken Jr., G., (1976). Dynamics of adsorption on covered surfaces, *The Journal of Chemical Physics*, 66 (6), 2316-2321.
30. Raghavan, K., Stave, M. S. ve DePristo, A. E., (1989). Ni clusters: Structures and reactivity with D_2 , *Journal of Chemical Physics*, , 91 (3): 1904-1917.
31. R. A. Buckingham, (1938). The Classical Equation of State of Gaseous Helium, Neon and Argon, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 168, 264-283.
32. Erkoç, Ş., (1989). A New Empirical Many-Body Potential Energy Function Application to Microclusters: Elements in B.C.C., F.C.C., and H.C.P. Structures, *physica status solidi (b)*, 155 (2),461-465
33. Köksal, Fevzi, Gümüş, Hasan, (1999). *Atom ve Molekül Fiziği (Çeviri)*, Bilim Yayıncılık, Ankara, 389-394;528-532.
34. Stillinger, F.H., Weber, T.A., (1985). Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Physical Review B*, 31 (8), 5262-5271.
35. Tersoff, J., (1988). New empirical approach for the structure and energy of covalent systems, *Physical Review B*, 37 (12), 6991-7000.
36. Erkoç, S., (1989). A new empirical many-body potential energy function. Application to microclusters, *physica status solidi (b)*, 152 (2), 447-454.
37. Gupta, R.P., (1981). Lattice relaxation at a metal surface, *Physical Review B*, 23 (12), 6265-6270.
38. Voter, A. F., (1993). Embedded atom method potentials for seven FCC metals, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au and Al, *Los Alamos Unclassified Technical Report #LA-UR*, 93-3901.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Emrah KORKMAZ
Doğum Yeri ve Yılı : İstanbul - 1987
Medeni Hali : Evli
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : emrh_krkmz@hotmail.com



Eğitim Durumu

Lise : Kocamustafapaşa Lisesi
Lisans : Gazi Üniversitesi Kastamonu Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü

Mesleki Deneyim

İş Yeri : Kültür Dershanesi-Levent Şubesi – Matematik Öğretmeni
İş Yeri : Güney Hırdavat A.Ş. - Dış Ticaret Sorumlusu