

ZONGULDAK BÜLENT ECEVİT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Co-Pd-Au ÜÇLÜ METAL NANOALAŞIMLARININ YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN
SİMÜLASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HALİT SERTEL

AĞUSTOS 2019

ZONGULDAK BÜLENT ECEVİT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Co-Pd-Au ÜÇLÜ METAL NANOALAŞIMLARININ YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN
SİMÜLASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Halit SERTEL

DANIŞMAN: Doç. Dr. Haydar ARSLAN

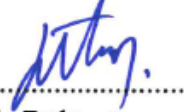
ZONGULDAK
Ağustos 2019

KABUL:

Halit SERTEL tarafından hazırlanan “Co-Pd-Au Üçlü Metal Nanoalaşımının Yapısal Özelliklerinin Simülasyon Yöntemiyle İncelenmesi” başlıklı bu çalışma jürimiz tarafından değerlendirilerek, Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans Tezi olarak oybirliğiyle kabul edilmiştir. 20/08/2019

Danışman: Doç. Dr. Haydar ARSLAN

Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü



Üye: Prof. Dr. Yüksel AYAZ

Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü



Üye: Doç. Dr. Tunay TANSEL

Hacettepe Üniversitesi, Nükleer Bilimler Enstitüsü



ONAY:

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylıyorum.

.../.../2019



Prof. Dr. Ahmet ÖZARSLAN
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü



“Bu tezdeki tüm bilgilerin akademik kurallara ve etik ilkelere uygun olarak elde edildiğini ve sunulduğunu; ayrıca bu kuralların ve ilkelerin gerektirdiği şekilde, bu çalışmadan kaynaklanmayan bütün atıfları yaptığımı beyan ederim.”

Halit SERTEL

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

Co-Pd-Au ÜÇLÜ METAL NANOALAŞIMLARININ YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN SİMÜLASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

Halit SERTEL

Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Haydar ARSLAN

Ağustos 2019, 185 sayfa

Nanoalaşım lar, nano boyutlarda üretilen materyallerin elektrik, mekanik, optik, katalitik, manyetik ve termal özelliklerinin anlaşılması açısından bilimsel ve pratik olarak büyük öneme sahiptir. Bu çalışmada, çekirdek-kabuk yapısına sahip Co-Pd-Au üçlü nanoalaşım larının yapısal özellikleri simülasyon yöntemi ile incelenmiştir. Nanoalaşım ların incelenmesinde, atomlar arası etkileşimlerde Gupta çok cisim potansiyel enerji fonksiyonu kullanılmıştır. İlgilenilen nanoalaşım ların geometri optimizasyonları Basin Hopping algoritması kullanılarak Monte Carlo simülasyon yöntemiyle elde edilmiştir.

Co-Pd-Au nanoalaşım larında, Co atom sayıları sabit tutulup Au ve Pd atom sayıları değiştirilerek, global minimum yapıları elde edilmiştir. Geometri optimizasyonları yapılan nanoalaşım ların yapıları incelendiğinde; Co atomlarının merkezde, Au ve Pd atomlarının yüzeyde buldukları gözlenmiştir. Simülasyon sonucu elde edilen yapılara

ÖZET (devam ediyor)

ait enerji deęerleri kullanılarak fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri çizilmiş ve nanoalaşımlara ait en kararlı kompozisyonlar tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Nanoalaşımlar, Simülasyon, Optimizasyon, Basin Hopping, Co-Pd-Au.

Bilim Kodu: 404.01.01



ABSTRACT

M. Sc. Thesis

INVESTIGATION OF STRUCTURAL PROPERTIES OF CO-PD-AU TERNARY NANOALLOYS WITH SIMULATION METHOD

Halit SERTEL

**Zonguldak Bülent Ecevit University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics**

Thesis Advisor: Assoc. Prof. Haydar ARSLAN

August 2019, 185 pages

Nanoalloys are of great scientific and practical importance for understanding the electrical, mechanical, optical, catalytic, magnetic and thermal properties of materials produced at nano scale. In this study, structural properties of Co-Pd-Au ternary nanoalloys with core-shell structure were investigated by simulation techniques. In the investigation of nanoalloys, interatomic interactions were modelled by using Gupta many-body potential energy function. The geometry optimization of the nanoalloys were obtained by Monte Carlo simulation method using Basin Hopping algorithm.

The global minimum structures of Co-Pd-Au nanoalloys were obtained by keeping the number of Co atoms constant and changing the number of Au and Pd atoms. After geometry optimization, when we investigated the structures of nanoalloys, it is found that, core was occupied by Co atoms and surface were occupied by Au and Pd atoms for all compositions.

ABSTRACT (continued)

The most stable compositions of nanoalloys were obtained by using the excess energy and second difference energy analyses.

Keywords: Nanoalloy, Simulation, Optimization, Basin-Hopping, Co-Pd-Au, Core-Shell Structure

Science Code: 404.01.01



TEŐEKKÜR

Tezin hazırlanması sırasında bilgi ve tecrübelerini paylaŐan, her konuda benden ilgi, alaka ve samimiyetini esirgemeyen ok deęerli hocam Sayın Do. Dr. Haydar ARSLAN'a sonsuz teŐekkürlerimi sunarım.

Tez alıŐmam sırasında bana destek olan, yol gÖsteren Sayın Dr. Ali Kemal GARİP'e teŐekkürlerimi sunarım.

Eęitimim sırasında beni yetiŐtiren, üzerimde emeięi geen, özveri ile bizlere bilgilerini aktaran, Zonguldak Blent Ecevit niversitesi Fizik BÖlümü hocalarına teŐekkürü bor bilirim.

Tez yazım sırasında manevi desteklerini esirgemeyen, arkadaşlarım, Osman aęlar BUDAK ve Umut ÖZCENGİZ'e, her anımda yanımda duran desteęini hep yanımda hissettięim sevgili eŐim Duygu AKAR'a sonsuz teŐekkür ederim.



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
KABUL:.....	Hata! Yer işareti tanımlanmamış.
ÖZET	iii
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vii
İÇİNDEKİLER.....	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xiii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xxv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xxvii
BÖLÜM 1 GİRİŞ	1
BÖLÜM 2 OPTİMİZASYON YÖNTEMLERİ VE POTANSİYEL ENERJİ FONKSİYONU . 5	
2.1 GİRİŞ.....	5
2.2 BASIN-HOPPING (BH) ALGORİTMASI.....	7
2.3 GUPTA ÇOK CİSİM POTANSİYEL ENERJİ FONKSİYONU	10
2.4 ENERJİ ANALİZLERİ	12
2.4.1 Fazlalık (Excess) Enerjisi (E_{Exc}).....	12
2.4.2 İkinci Fark Enerjisi (Δ_2E).....	13
BÖLÜM 3 (Co-Pd-Au) _N N=19, 23, 26, 34, 38, 55 ATOMLU ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ.....	15
3.1 GİRİŞ.....	15
3.2 19 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ	16
3.2.1 Co ₂ Pd _x Au _{17-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	16
3.2.2 Co ₃ Pd _x Au _{16-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	18

İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

	<u>Sayfa</u>
3.2.3 Co ₄ Pd _x Au _{15-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	21
3.2.4 Co ₅ Pd _x Au _{14-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	23
3.2.5 Co ₆ Pd _x Au _{13-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	26
3.2.6 Co ₇ Pd _x Au _{12-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri.....	29
3.3 23 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARIN YAPISAL ÖZELLİKLERİ 33	
3.3.1 Co ₃ Pd _x Au _{20-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	33
3.3.2 Co ₄ Pd _x Au _{19-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	36
3.3.3 Co ₅ Pd _x Au _{18-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	39
3.3.4 Co ₆ Pd _x Au _{17-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	42
3.3.5 Co ₇ Pd _x Au _{16-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	46
3.3.6 Co ₈ Pd _x Au _{15-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	49
3.3.8 Co ₁₀ Pd _x Au _{13-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri.....	55
3.4 26 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARIN YAPISAL ÖZELLİKLERİ 59	
3.4.1 Co ₄ Pd _x Au _{22-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	59
3.4.2 Co ₅ Pd _x Au _{21-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	63
3.4.3 Co ₆ Pd _x Au _{20-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	66
3.4.4 Co ₇ Pd _x Au _{19-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	69
3.4.5 Co ₈ Pd _x Au _{18-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	72
3.4.6 Co ₉ Pd _x Au _{17-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	75
3.4.7 Co ₁₀ Pd _x Au _{16-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri.....	78
3.5 34 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ.... 82	
3.5.1 Co ₇ Pd _x Au _{27-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	82
3.5.2 Co ₈ Pd _x Au _{26-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	86
3.5.3 Co ₉ Pd _x Au _{25-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	90
3.5.4 Co ₁₀ Pd _x Au _{24-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri.....	93
3.5.5 Co ₁₁ Pd _x Au _{23-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri.....	96
3.5.6 Co ₁₂ Pd _x Au _{22-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri.....	99
3.5.7 Co ₁₃ Pd _x Au _{21-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri.....	103
3.6 38 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ.. 107	
3.6.1 Co ₅ Pd _x Au _{33-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	107
3.6.2 Co ₆ Pd _x Au _{32-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	110

İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

	<u>Sayfa</u>
3.6.3 Co ₇ Pd _x Au _{31-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	113
3.6.4 Co ₈ Pd _x Au _{30-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	116
3.6.5 Co ₉ Pd _x Au _{29-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	120
3.6.6 Co ₁₀ Pd _x Au _{28-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	123
3.6.7 Co ₁₁ Pd _x Au _{27-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	126
3.6.8 Co ₁₂ Pd _x Au _{26-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	129
3.6.9 Co ₁₃ Pd _x Au _{25-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	133
3.7 55 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ..	137
3.7.1 Co ₇ Pd _x Au _{48-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	137
3.7.2 Co ₈ Pd _x Au _{47-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	141
3.7.3 Co ₉ Pd _x Au _{46-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	146
3.7.4 Co ₁₀ Pd _x Au _{45-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	150
3.7.5 Co ₁₁ Pd _x Au _{44-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	153
3.7.6 Co ₁₂ Pd _x Au _{43-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	158
3.7.7 Co ₁₃ Pd _x Au _{42-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	161
3.7.8 Co ₁₄ Pd _x Au _{41-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	165
3.7.9 Co ₁₅ Pd _x Au _{40-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	170
3.7.10 Co ₁₆ Pd _x Au _{39-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	173
3.7.11 Co ₁₇ Pd _x Au _{38-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri	177
BÖLÜM 4 SONUÇ	183
KAYNAKLAR	185
ÖZGEÇMİŞ	191



ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1 Nanoalaşımların mümkün olan bazı desenleri: rasgele (a), sıralı (b), iç-kabuk (c), soğan benzeri (d), katmanlı (e ve f) olarak gösterilebilir [2].	2
Şekil 2.1 Orijinal PEY ($E(R)$) fonksiyonun her bir noktada $\ddot{E}R$ basamak fonksiyonuna dönüşümü [56].	8
Şekil 3.1 $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).	16
Şekil 3.2 $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	17
Şekil 3.3 $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımlarının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	18
Şekil 3.4 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).	19
Şekil 3.5 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	20
Şekil 3.6 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımlarının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	20
Şekil 3.7 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).	21
Şekil 3.8 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	22
Şekil 3.9 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımlarının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	23
Şekil 3.10 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).	24
Şekil 3.11 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	25

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.12 Co ₅ Pd _x Au _{14-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	26
Şekil 3.13 Co ₆ Pd _x Au _{13-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	27
Şekil 3.14 Co ₆ Pd _x Au _{13-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	28
Şekil 3.15 Co ₆ Pd _x Au _{13-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	29
Şekil 3.16 Co ₇ Pd _x Au _{12-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	30
Şekil 3.17 Co ₇ Pd _x Au _{12-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	31
Şekil 3.18 Co ₇ Pd _x Au _{12-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	31
Şekil 3.19 19 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.	33
Şekil 3.20 Co ₃ Pd _x Au _{20-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	34
Şekil 3.21 Co ₃ Pd _x Au _{20-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	35
Şekil 3.22 Co ₃ Pd _x Au _{20-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	36
Şekil 3.23 Co ₄ Pd _x Au _{19-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	37
Şekil 3.24 Co ₄ Pd _x Au _{19-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	38
Şekil 3.25 Co ₄ Pd _x Au _{19-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	39
Şekil 3.26 Co ₅ Pd _x Au _{18-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	40

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.27 Co ₅ Pd _x Au _{18-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	41
Şekil 3.28 Co ₅ Pd _x Au ₁₈ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	42
Şekil 3.29 Co ₆ Pd _x Au _{17-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	43
Şekil 3.30 Co ₆ Pd _x Au _{17-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	44
Şekil 3.31 Co ₆ Pd _x Au _{17-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	45
Şekil 3.32 Co ₇ Pd _x Au _{16-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	46
Şekil 3.33 Co ₇ Pd _x Au _{16-x} nanoalaşımının nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	47
Şekil 3.34 Co ₇ Pd _x Au _{16-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	48
Şekil 3.35 Co ₈ Pd _x Au _{15-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	49
Şekil 3.36 Co ₈ Pd _x Au _{15-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	50
Şekil 3.37 Co ₈ Pd _x Au _{15-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	51
Şekil 3.38 Co ₉ Pd _x Au _{14-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	52
Şekil 3.39 Co ₉ Pd _x Au _{14-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	53
Şekil 3.40 Co ₉ Pd _x Au _{14-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	54
Şekil 3.41 Co ₁₀ Pd _x Au _{13-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	55

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.42 Co ₁₀ Pd _x Au _{13-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	56
Şekil 3.43 Co ₁₀ Pd _x Au _{13-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	57
Şekil 3.44 23 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.	58
Şekil 3.45 Co ₄ Pd _x Au _{22-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	60
Şekil 3.46 Co ₄ Pd _x Au _{22-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	61
Şekil 3.47 Co ₄ Pd _x Au _{22-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	62
Şekil 3.48 Co ₅ Pd _x Au _{21-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	63
Şekil 3.49 Co ₅ Pd _x Au _{21-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	64
Şekil 3.50 Co ₅ Pd _x Au _{21-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	65
Şekil 3.51 Co ₆ Pd _x Au _{20-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	66
Şekil 3.52 Co ₆ Pd _x Au _{20-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	67
Şekil 3.53 Co ₆ Pd _x Au _{20-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	68
Şekil 3.54 Co ₇ Pd _x Au _{19-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	69
Şekil 3.55 Co ₇ Pd _x Au _{19-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	70
Şekil 3.56 Co ₇ Pd _x Au _{19-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	71

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.57 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	72
Şekil 3.58 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.....	73
Şekil 3.59 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	74
Şekil 3.60 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	76
Şekil 3.61 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	77
Şekil 3.62 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	78
Şekil 3.63 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	79
Şekil 3.64 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	80
Şekil 3.65 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	81
Şekil 3.66 26 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımlarında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.	82
Şekil 3.67 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	84
Şekil 3.68 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	85
Şekil 3.69 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	86
Şekil 3.70 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	87
Şekil 3.71 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	88

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.72 Co ₈ Pd _x Au _{26-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	89
Şekil 3.73 Co ₉ Pd _x Au _{25-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	91
Şekil 3.74 Co ₉ Pd _x Au _{25-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	92
Şekil 3.75 Co ₉ Pd _x Au _{25-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	93
Şekil 3.76 Co ₁₀ Pd _x Au _{24-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	94
Şekil 3.77 Co ₁₀ Pd _x Au _{24-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	95
Şekil 3.78 Co ₁₀ Pd _x Au _{24-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	96
Şekil 3.79 Co ₁₁ Pd _x Au _{23-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	97
Şekil 3.80 Co ₁₁ Pd _x Au _{23-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	98
Şekil 3.81 Co ₁₁ Pd _x Au _{23-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	99
Şekil 3.82 Co ₁₂ Pd _x Au _{22-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	100
Şekil 3.83 Co ₁₂ Pd _x Au _{22-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	101
Şekil 3.84 Co ₁₂ Pd _x Au _{22-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	102
Şekil 3.85 Co ₁₃ Pd _x Au _{21-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	103
Şekil 3.86 Co ₁₃ Pd _x Au _{21-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	104

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.87 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	105
Şekil 3.88 34 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.	106
Şekil 3.89 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	109
Şekil 3.90 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	109
Şekil 3.91 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	110
Şekil 3.92 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	111
Şekil 3.93 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	112
Şekil 3.94 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	113
Şekil 3.95 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	115
Şekil 3.96 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.....	115
Şekil 3.97 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.	116
Şekil 3.98 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	118
Şekil 3.99 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	118
Şekil 3.100 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	119
Şekil 3.101 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	121

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.102 Co ₉ Pd _x Au _{29-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.....	121
Şekil 3.103 Co ₉ Pd _x Au _{29-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	122
Şekil 3.104 Co ₁₀ Pd _x Au _{28-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	124
Şekil 3.105 Co ₁₀ Pd _x Au _{28-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	125
Şekil 3.106 Co ₁₀ Pd _x Au _{28-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	125
Şekil 3.107 Co ₁₁ Pd _x Au _{27-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	127
Şekil 3.108 Co ₁₁ Pd _x Au _{27-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	128
Şekil 3.109 Co ₁₁ Pd _x Au _{27-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	129
Şekil 3.110 Co ₁₂ Pd _x Au _{26-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	131
Şekil 3.111 Co ₁₂ Pd _x Au _{26-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	131
Şekil 3.112 Co ₁₂ Pd _x Au _{26-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	132
Şekil 3.113 Co ₁₃ Pd _x Au _{25-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	134
Şekil 3.114 Co ₁₃ Pd _x Au _{25-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	135
Şekil 3.115 Co ₁₃ Pd _x Au _{25-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	136
Şekil 3.116 38 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.	137

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.117 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir. (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	138
Şekil 3.118 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	140
Şekil 3.119 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	141
Şekil 3.120 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	142
Şekil 3.121 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	144
Şekil 3.122 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	145
Şekil 3.123 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	146
Şekil 3.124 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.....	148
Şekil 3.125 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	149
Şekil 3.126 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	150
Şekil 3.127 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	152
Şekil 3.128 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	153
Şekil 3.129 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	155
Şekil 3.130 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	156
Şekil 3.131 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	157

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.132 Co ₁₂ Pd _x Au _{43-x} nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	159
Şekil 3.133 Co ₁₂ Pd _x Au _{43-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	160
Şekil 3.134 Co ₁₂ Pd _x Au _{43-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	161
Şekil 3.135 Co ₁₃ Pd _x Au _{42-x} nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	162
Şekil 3.136 Co ₁₃ Pd _x Au _{42-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	164
Şekil 3.137 Co ₁₃ Pd _x Au _{42-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	165
Şekil 3.138 Co ₁₄ Pd _x Au _{41-x} nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	167
Şekil 3.139 Co ₁₄ Pd _x Au _{41-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	168
Şekil 3.140 Co ₁₄ Pd _x Au _{41-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	169
Şekil 3.141 Co ₁₅ Pd _x Au _{40-x} nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	171
Şekil 3.142 Co ₁₅ Pd _x Au _{40-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	172
Şekil 3.143 Co ₁₅ Pd _x Au _{40-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	173
Şekil 3.144 Co ₁₆ Pd _x Au _{39-x} nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	174
Şekil 3.145 Co ₁₆ Pd _x Au _{39-x} nanoalaşımının E _{Exc} enerjisi ve Δ ₂ E enerji grafiği.	175
Şekil 3.146 Co ₁₆ Pd _x Au _{39-x} nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	176

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.147 $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).....	178
Şekil 3.148 $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.	179
Şekil 3.149 $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.....	180
Şekil 3.150 55 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.	182





ÇİZELGELER DİZİNİ

No

Sayfa

Çizelge 2.1 Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımı için Gupta parametreleri..... 11





SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

SİMGELER

- E_{Exc} : Fazlalık enerjisi
 $\Delta_2 E$: İkinci fark enerjisi
 E_b : Bağlanma enerjisi

KISALTMALAR

- PEY** : Potansiyel enerji yüzeyi
GM : Global minimum
MC : Monte Carlo
MD : Moleküler Dinamik
BH : Basin Hopping



BÖLÜM 1

GİRİŞ

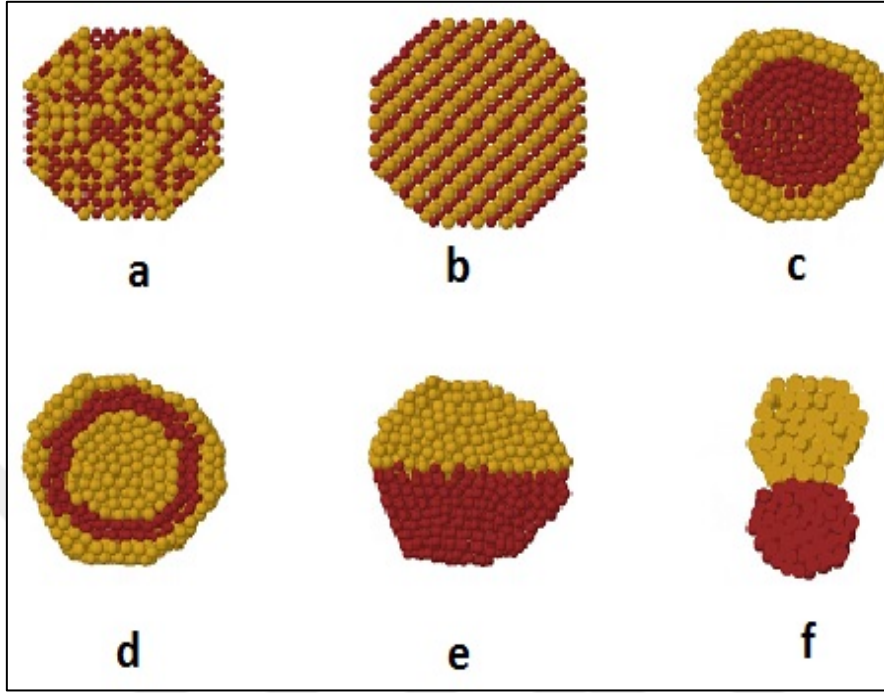
Yüzyıllar boyunca, insanlığın devam ettirilebilmesi ve yaşamın kolaylaştırılması adına, çeşitli aletlerin üretimine ihtiyaç duyulmuştur. Günümüzde, insanlığın bu tür ihtiyaçlarına cevap verecek aletlerin ve cihazların nano boyutlarda inşa yeteneği gerekmektedir. Maddenin yapı taşı olan atomların nano boyutta inşası, ihtiyaç duyulan endüstriyel materyalin elde edilmesine imkân vermektedir. Bu nedenle; insanlık, artık atomlara hükmedebilmenin yollarını aramaktadır. Bu arayış, nanoteknolojinin önemini günden güne artırmaktadır. Nano kelime olarak, fiziksel bir büyüklüğün milyarda biri anlamına gelir. Nanoteknoloji ise, nanometre boyutunda (10^{-9} m) maddelerin incelendiği ve işlendiği bir çalışma alanıdır. Maddelerin sonlu boyut etkileri nanoteknoloji sayesinde kontrol altına alınabilmektedir.

1959'da Amerikan Fizik Topluluğuna "*Altta Daha Çok Yer Var (There is Plenty of Room at the Bottom)*" isimli bir konuşma yapan Feynman'ın, "*Bir fizikçinin, kimyacıнын bir kâğıda yazıp verdiği herhangi bir kimyasal maddeyi sentezlemesinin, prensipte mümkün olması ilginçtir. Peki nasıl? Atomları kimyacıнын dediği yerlere koy, böylece o maddeyi yaparsın.*" [1] cümlesiyle nanoteknolojinin temelleri atılmıştır.

Nanoteknoloji tek tip atomlardan oluşan yapıları incelediği gibi nanoalaşım olarak adlandırılan yapıları da incelemektedir. Nanoalaşım, iki veya daha fazla metalik parçacığın 1 nm ila 100 nm arasında değişen boyutlarda birleşmesi ile oluşmuş yapılardır. Nanoalaşımlara olan ilgi, izole edilmiş atom ve bulk materyallerden farklı fiziksel ve kimyasal özellik göstermeleri sebebiyle giderek artmaktadır.

İki veya daha fazla metalik parçacığın nano boyutlarda birleşmesi farklı geometrik yapılarda olabilmektedir. İki farklı atomun birleşmesiyle oluşan nano alaşımlar ikili nanoalaşımlar, üç farklı atomun birleşmesiyle oluşan nanoalaşımlar ise üçlü nanoalaşımlar olarak adlandırılmaktadır.

Nanoalaşımın sahip olabileceği ayrışma ya da karışma desenlerine ait örnekler Şekil 1’de gösterilmiştir.



Şekil 1.1 Nanoalaşımın mümkün olan bazı desenleri: rasgele (a), sıralı (b), iç-kabuk (c), soğan benzeri (d), katmanlı (e ve f) olarak gösterilebilir [2].

İç-kabuk desenli nanoalaşımın yüksek yüzey/hacim oranlarına sahip olmaları, katalitik reaksiyonlarda kullanılmasının önemini artırmaktadır. Katalitik reaksiyonlar, çoğunlukla nanoalaşımın yüzeyinde meydana gelmektedir. Katalitik işlemlerde, iç-kabuk desenine sahip olmayan nanoalaşımın oluşturulan atomların büyük bir kısmı boşa harcanmaktadır. Bu nedenle, iç-kabuk deseni, katalizör olarak kullanılan geçiş metalleri (Pd, Pt, Au vs.) için önemlidir.

Genel olarak, $A_{iç}B_{kabuk}$ alaşımlarda, A metali Co, Cu, Ni gibi katalitik özelliği düşük ve ucuz metaller olarak seçilir. B metali ise, katalitik reaksiyona girecek Pd, Pt, Au gibi katalitik olarak aktif ve nispeten pahalı olan geçiş metalleridir. Bu ayrışma şekline sahip yapılar, katalitik olarak aktif metallerin kullanım miktarını azaltması sebebiyle maliyeti düşürmektedir.

Nanoalaşımı oluşturan metallerin Şekil 1’de gösterilen desenlerde birleşmesi, bileşen metallerin biri veya hepsinin katalitik özellikleri üzerinde sinerjik etkilere yol açabilmektedir

[2]. Bu nedenle, alaşımı meydana getiren metallerin türü, sayısı ve kimyasal düzeni de önemlidir [3].

Son yıllarda, ikili nanoalaşımların yapısal ve dinamik özelliklerini belirlemek amacıyla birçok çalışma yapılmıştır [4–12]. Ancak üçlü nanoalaşımların, optik [13], manyetik [14, 15], elektronik [16] ve katalitik [17, 18] gibi özellikleri çoğu durumda, ikili nanoalaşımlardan daha üstün olmaktadır [19–21].

Nanoalaşımlar üzerine, teorik [19, 22–25] ve deneysel [26–30] olmak üzere birçok çalışma yapılmıştır. Ancak, üçlü nanoalaşımların yapısal özelliklerini, deneysel yöntemlerle ayrıntılı olarak anlamak oldukça zordur. Bu nedenle nanoalaşımların teorik olarak incelenmesi için, çeşitli global optimizasyon algoritmaları geliştirilmiştir. Son yıllarda, nanoalaşımların yapı tahmininde, basin-hopping [8, 31, 32], paralel excitable-walkers [33], conjugate gradient [34], genetik algoritma [35], adaptive immune optimization algorithm [36] gibi algoritmalar yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu algoritmalar sayesinde, nanoalaşımların oluşturabileceği yapılar öngörülebilmektedir.

Nanoalaşımların, boyut ve büyüklüklerinden başka, kompozisyondan kaynaklı özelliklere sahip olduğu da bilinmektedir. Nanoalaşımların manyetik momentleri, manyetik elementler eklenmesiyle artmaktadır [37]. Nanoalaşımı oluşturan atomların, alaşım içindeki hassas dağılımı ve düzenlenmesi, esas olarak yüzeyde oluşan veya yüzey altı katmanları tarafından etkilenen işlemlerin hakim olduğu kataliz gibi uygulamalar için büyük önem taşımaktadır [3]. Son yıllarda Paladyum ve Platin bazlı nanoalaşımlar, özellikle katalizör ve yakıt hücresi olarak kullanılmaktadır [38]. Bu nedenle, Pd bazlı nanoalaşımların yapısal özellikleri teorik ve deneysel olarak incelenmektedir. Pd alaşımlarının önemi, paladyumun platin benzeri birçok özelliğe sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Bulk yapıda Pt'nin, Pd'den daha yüksek bir erime noktası göstermesi kataliz uygulamaları için önemlidir. Fakat Pd'nin, Pt'den çok daha hafif ve daha ucuz olması Pd bazlı nanoalaşımların önemini arttırmıştır. Bu nedenle platin yerine genellikle paladyum kullanılabilir [39].

İkili nanoalaşımlar üzerine çalışan Jirkovsky ve arkadaşları tarafından, oksijen indirgeme reaksiyonu (ORR) açısından $Au_{1-x}Pd_x$ nanoalaşımlarında, Pd bağımlılığı deneysel olarak incelenmiş olup, Pd, Pt veya Rh ile alaşımlanan Au metalinin saf altından daha yüksek katalitik aktifliğe sahip olduğu görülmüştür [40]. 561 ile 2057 arası atomla oluşturulan

boyutlarda crown-jewel [41] yapılı Au-Pd nanoalaşımının eritilmesi üzerindeki boyut ve kompozisyon etkileri Li ve arkadaşları tarafından araştırılmış olup, Au-Pd nanoalaşımının, potansiyel katalizör uygulamaları için gerekli olabilecek değerli bilgileri, teorik olarak sağlayabileceği öngörülmüştür [42].

Rao ve arkadaşları tarafından, ORR aktivitesini artıracak ikili ve üçlü nanoalaşımın hakkında araştırma yapılmış olup ve en yüksek performansın Pd-Co-Au/C olacağı gösterilmiştir [43]. Benzer bir çalışma, J. L. Ferna'ndez ve arkadaşları tarafından da yapılmış olup, oksijen indirgeme reaksiyonu (ORR) için katalitik işlemlerde Pt yerine, Pd-Co-Au (Pd: Co: Au= 70:20: 10 atom%) üçlü nanoalaşımını kullanılmasının, Pt'ye oranla eşit veya daha iyi performans sergilediği deneysel olarak gösterilmiştir [26]. Pd-Co-Au üçlü nanoalaşımının katalitik özellikleri gibi manyetik özellikleri de F. Maroun ve arkadaşları tarafından incelenmiş ve yorumlanmıştır [44].

Bu tezde, Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının yapısal özellikleri hakkında teorik bir çalışma yapılmıştır. Bölüm 2'de nanoalaşımını modellemek için kullanılacak araçların önemi anlatılmış olup, Co-Pd-Au nanoalaşımını modellemek için kullanılan optimizasyon yöntemleri hakkında bilgiler verilmiştir. Ayrıca ilgilenilen nanoalaşımın global minimum yapılarını incelemek için kullanılan optimizasyon yöntemi ve potansiyel enerji fonksiyonu tanıtılmıştır. Ardından, lokal minimum, global minimum, fazlalık(Excess) enerjisi, ikinci fark enerjisi hakkında açıklamalar yapılmıştır. Daha sonra bahsi geçen enerjiler yardımıyla, global minimum yapısının nasıl bulunacağı anlatılmıştır. Bölüm 3'de global minimum yapıların kararlılık analizleri yapılmıştır. Bölüm 4'de ise elde edilen sonuçlar verilmiş ve tartışılmıştır.

BÖLÜM 2

OPTİMİZASYON YÖNTEMLERİ VE POTANSİYEL ENERJİ FONKSİYONU

2.1 GİRİŞ

Günümüzde, bilgisayarlar sayesinde nano malzemelerin modellenmesi deneysel çalışmalar için yol gösterici olmaktadır. Ancak dijital ortamda nanoalaşımın modellenmesi bilgisayarın performansı gibi bazı özelliklere bağlıdır. Aynı zamanda nanoalaşımın modellenmesi için zaman harcanmaktadır. Bu nedenle, nanoalaşımın modelleyebilmek için, çeşitli potansiyel enerji fonksiyonları ve simülasyon metotları kullanılmaya başlanmıştır. Bu sayede zamandan ve bilgisayar performansından, çok daha fazla verimlilik sağlanmaktadır [45].

Simülasyon yöntemlerinden, deneysel çalışmalara başlamadan önce, çalışma hakkında tahmini bilgi sahibi olmak için yararlanılmaktadır. Moleküler Dinamik (MD) [46, 47], Monte Carlo (MC) [48] simülasyon yöntemleri bu amaçla kullanılan yöntemlerdir.

MD simülasyon yöntemi, çok parçacıklı sistemlerin çözümünde kullanılan bir yöntemdir. MD simülasyon yöntemi hareket denklemlerinin nümerik olarak hesaplanmasına dayanmaktadır. MD simülasyon yöntemi sabit enerjili toplulukları örneklemede kullanılmaktadır. Bu nedenle, termodinamik (sıcaklık, basınç vs.) özellikleri zamanın bir fonksiyonu olarak incelemektedir. MC simülasyon yönteminin varyasyonları ise, stokastik hesaplama yöntemleri olarak, fiziksel bir problemin istatistiksel olarak çözümlenmesine dayanır ve optimizasyon alanındaki ana dallardan biri haline gelmiştir.

Nanoalaşım hakkında teorik bir çalışma yapıldığında en büyük sorun homotop sayılarının çokluğudur. Homotop; aynı geometrik yapıya sahip, fakat atomların farklı düzenlenmiş halleridir. Bu sorun, nedeniyle potansiyel enerji yüzeyinde (PEY) daha çok minimum bulunmaktadır. PEY, nanoalaşımın oluşturan her atom veya molekülün, diğer atom veya

moleküller ile etkileşimleri sonucu kuyu olarak tabir edilen enerji engellerinden oluşan özel potansiyel enerji yüzeyleridir. PEY’de bulunan minimum noktaları düşük enerjilere sahiptir. İkili nanoalaşımelerde homotop sayısının çokluğu potansiyel enerji yüzeylerinin araştırılmasını zorlaştırmaktadır. Ancak üçlü nanoalaşımelerde homotop sayısı, ikili nanoalaşımelere göre çok daha fazla olmaktadır. Örneğin; $m+n+k=N$ atom sayısına sahip $A_mB_nC_k$ üçlü nanoalaşımelerin homotop sayısı:

$$N_{homotop} = \left[\frac{N!}{(N_A!)(N_B!)(N_C!)} \right] \quad (2.1)$$

şeklinde ifade edilir. Bir örnek olarak, $Au_{19}Co_{13}Pd_{23}$ bileşimi için her geometrik düzenleme için 6.4×10^{32} homotop vardır. Bu nedenle, üçlü nanoalaşımeler için potansiyel enerji yüzeylerini araştırmak, minimum sayısının çokluğu nedeniyle ikili nanoalaşımeler ve tek tip nanoparçacıklara göre çok daha zor olmaktadır. Böyle karmaşık bir durumun üstesinden gelebilmek için en etkili simülasyon yönteminin MC simülasyon yöntemi olduğu Zhan ve arkadaşları tarafından kabul edilmektedir [49].

PEY’in araştırılması için ikili; Lennard-Jones [50], Morse [51] gibi çok cisim için ise; Sutton-Chen [52], ve Gupta gibi fonksiyonlar, günümüzde yaygın olarak kullanılan potansiyel enerji fonksiyonlarıdır. PEY araştırması için kullanılacak potansiyel enerji fonksiyonları yardımıyla nanoalaşımelerin homotoplarının araştırılması yapılmaktadır. Bu araştırmanın yapılabilmesi için çeşitli optimizasyon algoritmaları geliştirilmiştir. Bu algoritmalar genel olarak, homotopların ve farklı kompozisyonların zorlaştırdığı durumda, en düşük enerjiyi aramaktadır. En düşük enerji, genellikle global minimum olarak adlandırılır. Global minimum yapının yanı sıra PEY’de yerel minimum olarak adlandırılan yapılar da bulunmaktadır. Yerel minimum yapılar ise global minimum yapının izomerleridir. İzomerler aynı kimyasal bileşime sahiptirler fakat atomların geometrileri ve yerleşim yerleri değişiklik göstermektedir. Global minimumun araştırılması aslında en düşük titreşim ve dönme durumuna sahip nanoalaşımelerin konfigürasyonunu bulmak için yapılmaktadır. Bu konfigürasyona sahip yapı en kararlı yapı olarak adlandırılmaktadır.

Global minimum araştırması yoğun bir hesapsal çaba gerektirmektedir. Çünkü, homotop sayılarının artışı minimum noktaların katlanarak artmasına sebep olur. Bu durum, nanoalaşımelerin potansiyel enerji yüzeyinin global minimumunu bulmak için önemli bir

sorundur [53]. Bunun yanı sıra, kompozisyon farklılıkları ise, yapısal davranışın karmaşıklığına ek olarak karşımıza çıkmaktadır. Global minimum yapıların araştırılması, Doye ve Wales tarafından geliştirilen Basin Hopping MC yöntemi [50] ve Li ve Scherenga tarafından oluşturulan MC enerji minimizasyonu yaklaşımı [54] ile çok daha başarılı bir duruma gelmiştir.

Nanoalaşım yapısının global optimizasyonu, günümüzde en iyi şekilde genetik algoritmalar veya basin-hopping algoritması olarak da bilinen MC minimizasyon yöntemi kullanılarak elde edilmektedir [55]. Bu çalışmada, Co, Pd, Au geçiş metallerinin oluşturduğu nanoalaşımın global minimum yapı araştırması, Basin-Hopping algoritması kullanılarak yapılmıştır.

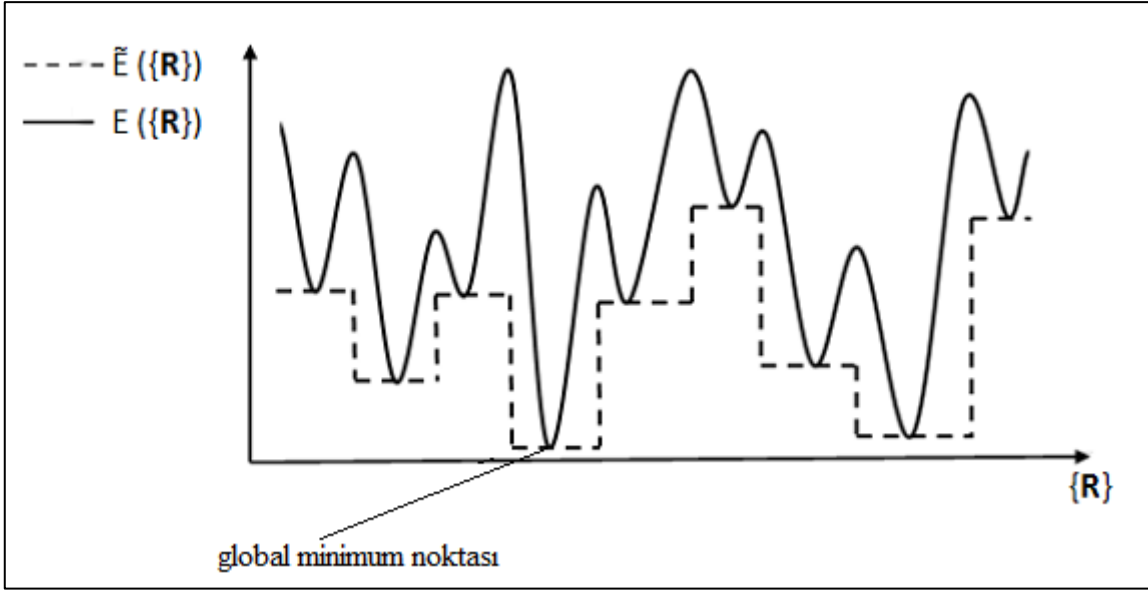
2.2 BASIN-HOPPING (BH) ALGORİTMASI

Global optimizasyon, en düşük enerjili yapıyı araştırdığından, günümüzde nanoalaşım ve nanoparçacıkların optimize edilmesinde kullanılan tüm algoritmalar yerel minimizasyona göre yapılmaktadır. BH algoritması da optimizasyonu bu şekilde yapmaktadır. Bir sistemin enerji durumu, potansiyel enerjisini (E) atomik koordinat kümesinin bir fonksiyonu olarak tanımlayabilir. Bu fonksiyon, " $E(\mathbf{R})$ " genellikle PEY olarak bilinir. Prensip olarak, global minimumun araştırılması, PEY'in tüm yerel minimumlarını bulmak ve enerjilerini karşılaştırmakla mümkün olmaktadır. Şekil 2.1 de gösterildiği gibi her bir yerel minimum, PEY'de bir kuyuya karşılık gelmektedir. BH algoritması bu kuyular arasında ardışık atlamalar yapmaktadır. Bunun başarılabilmesi için ise, nanoalaşımı oluşturan atomların konumları rastgele olarak değiştirilmekte ve sistemi tekrar yerel minimuma getiren geometri optimizasyonu yapılmaktadır [31].

Bir nanoalaşımın sürekli konfigürasyon alanı, belirlenmiş bir noktanın en yakın yerel minimum enerjisiyle birleşen bir dönüşümü ile yerel minimumun ayrık kümesine eşlenebilmektedir. Bu durum, basamak şeklindeki yeni bir potansiyel enerji fonksiyonunun $\tilde{E}(\mathbf{R})$ tanımlanmasını gerektirmektedir.

$$\tilde{E}(\mathbf{R}) = \min[E(\mathbf{R})] \quad (2.2)$$

Bu formül, dönüşümün \mathbf{R} noktasından başlatıldığı anlamına gelmektedir. Bu dönüşüm Şekil 2.1 de gösterildiği gibidir.



Şekil 2.1 Orijinal PEY ($E(\mathbf{R})$) fonksiyonun her bir noktada $\tilde{E}(\mathbf{R})$ basamak fonksiyonuna dönüşümü [56].

Bütün bu adımlardan sonra Şekil 2.1 de gösterildiği gibi, en düşük enerji olarak kaydedilen yerel minimum enerjisi, global minimum enerjisi olarak kabul edilmektedir. Sistemin bu enerji seviyesindeki yapısı ise, en kararlı yapı olmaktadır.

Orjinal PEY, BH yardımıyla basit bir yüzeye (basamak fonksiyonu) dönüştürülerek, dönüştürülmüş (transformed) PEY halini almaktadır. Daha sonra belirli bir simülasyon sıcaklığında Metropolis Monte Carlo [57] yaklaşımı ile simüle edilmektedir. Bu sayede, simülasyonun daha etkin bir şekilde çalışması sağlanmaktadır. BH klasik olarak, global minimum araştırması için termodinamik kurallara göre çalışır. Genel olarak, genetik algoritmalar dışında bu algoritmalar, Boltzmann faktörüne ($\exp(-\Delta E/k_B T)$) bağımlıdır. Bu sayede, hem en düşük enerji seviyesindeki izomerlerin istenen şekli bulunmakta, hem de çoklu kuyu tipi (multiple-funnel-type) PEY'ler üzerindeki engelleri aşma olasılığı artmaktadır.

Termodinamik kurallara bağlı çalışan BH algoritmasında enerji bariyerlerinin aşılması bu sayede daha kolay olmaktadır. Bunun sonucunda, bir minimumdan diğer minimuma olan ara geçişler önemli bir ölçüde kolaylaşmaktadır. Bir yerel minimumdan diğerine geçişlerde eğer geçişin olduğu enerji (E_{new} enerjisi), bir önceki enerjiden (E_{old} enerjisi) küçükse (2.3) bu yeni bir adım olarak kabul edilmektedir.

$$\Delta E = E_{new} - E_{old} \leq 0 \quad (2.3)$$

Aksi durumda ise BH algoritması tüm PEY’i taramak zorunda olduğundan Boltzmann faktörü ile ifade edilerek yeni bir adım kabul edilmektedir. En düşük potansiyel enerjili yüzey, global minimum yapıyı gösterir.

G. Rossi ve R. Ferrando’ya göre BH algoritmasının belirli bir kuyuda en düşük seviyeye ulaşmada son derece etkili olduğu kabul edilmektedir [58]. Ancak farklı kuyuları ayıran engellerin aşılması zor olabilmektedir. Bu engellerin, belirli bir kuyu içinde en düşük minimum yerini bulmak için gerçek olmayan optimal bir simülasyon sıcaklığında (2000K) aşılması olasıdır. Bu iki ihtiyaç (farklı kuyular arasında hareket etmek ve her bir kuyu için optimize etmek) birbirleriyle rekabet etmektedir ve BH algoritmasının bu ihtiyaçlara aynı anda cevap vermesi çok zor olmaktadır. Bu nedenle her iki ihtiyaç ile aynı anda başa çıkabilen basit bir algoritma geliştirilmiştir.

PEW (paralell excitable walkers) algoritmasında n_w adımları, dönüştürülmüş PEY üzerinde paralel olarak hareket etmektedir. Düzen parametresi olarak $\rho(x)$ tanımlanmaktadır. Eğer (2.4) denklemini sağlanıyorsa, x_{min}^i ve x_{min}^j ‘e yerleştirilen i ve j yürüyücüleri, düzenleme parametresinde komşu olmaktadır.

$$|\rho(x_{min}^i) - \rho(x_{min}^j)| \leq \delta \quad (2.4)$$

Burada δ enerji boyutunda bir nicelik olarak ifade edilmektedir [58]. Hareketler, Metropolis kuralına göre ya kabul edilmekte ya da reddedilmektedir. Bir yürüyücünün düzenleme parametresi alanında komşuları yoksa ($n_w=1$ ise), PEW BH algoritmasına indirgenmektedir. Bu durumda, seçim klasik BH algoritmasında olduğu gibi ΔE temelinde yapılmaktadır.

Eğer, bir yürüyücü en az bir komşuya sahipse, ΔE ;

$$\Delta E^* = \Delta E - E_{exc} \quad (2.5)$$

ile konumlandırılmaktadır. Yani yürüyücü bir enerji seviyesine uyarılmış olarak hareket etmektedir. E_{old} 'den daha yüksek E_{Exc} seviyesine yerleştirilmektedir. Komşu yürüyücülerin, enerjisel olarak istenmeyen hareketleri kabul etme ihtimali yüksektir. Bu nedenle düzenleme parametresi boşluğundaki mesafelerini artırma ihtimalleri yüksek olmaktadır. Ancak, izole edilmiş yürüyücüler temel olarak olumlu hareketleri kabul etmektedirler. Bu şekilde, yürüyüş yapanlar birbirlerini dinamik olarak iterler, ancak hareketlilikleri statik bir itme terimiyle engellenemeyecektir, böylece farklı kuyularla ilişkili olan düzenleme parametresi alanının farklı bölgelerine etkili bir şekilde hareket edebilmektedirler. Uyarma enerjisi E_{exc} 'den dolayı kuyu içi hareketleri mümkün olacağından, PEW algoritması çok düşük optimal sıcaklıklarda kullanılabilir. Böylece belirli bir kuyunun dibine ulaşmakta da çok verimli olmaktadır. Bu sayede, potansiyel enerji yüzeyi daha etkili bir biçimde araştırılmaktadır [58].

Teorik çalışmalarda nanoalaşımların global minimum yapısı, uygun olan potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak araştırılabilir. Bu nedenle birçok potansiyel enerji fonksiyonu geliştirilmiştir [8, 50, 59–62]. Bu çalışmada Co, Pd, Au, geçiş metallerinin oluşturduğu nanoalaşımların yapısal özellikleri Gupta Potansiyel Enerji Fonksiyonu ile modellenerek, nanoalaşımlar kompozisyon büyüklüğüne bağlı olarak incelenmiştir.

2.3 GUPTA ÇOK CİSİM POTANSİYEL ENERJİ FONKSİYONU

DeneySEL yöntemlerle nanoalaşımların incelenmesi oldukça zordur. Bu zorluğu aşabilmek için Moleküler Dinamik ve Monte Carlo gibi simülasyon yöntemleri geliştirilmiştir. Bu yöntemlerde metal atomlar arasındaki etkileşimler, Gupta potansiyel enerji fonksiyonu [63] kullanılarak modellenenir. Gupta potansiyeli, tek tip, ikili ve üçlü metal nanoalaşımların yapılarını etkin bir şekilde modellemek için başarıyla kullanılmaktadır [64].

Gupta çok cisim potansiyeli gibi potansiyeller, deneysel verileri varsayılan bir fonksiyonel forma uyarlayarak oluşturulur [65]. Gupta çok cisim potansiyel enerji fonksiyonu, Sıkı-Bağlı (Tight-Binding) teorisinin ikinci moment yaklaşımına dayanır [21, 66]. Gupta çok cisim potansiyeli, bir bulk maddenin bağlanma enerjisinin Gupta ifadesinden türetilmiştir. Tüm N atomları üzerinden toplam alınarak elde edilen itici çift (V^r) ve çekici çok cisim bileşeni (V^m) terimlerinin toplamı (2.6) şeklinde yazılır.

$$V = \sum_i^N (V_i^r - V_i^m) \quad (2.6)$$

İtici çift bileşeni denklemi (2.7) ile verilmektedir.

$$V_i^r = \sum_{j \neq i}^N A(a, b) \exp \left(-p(a, b) \left(\frac{r_{ij} - r_0(a, b)}{r_0(a, b)} \right) \right) \quad (2.7)$$

Çekici çok cisim bileşeni ise (2.8) ile verilmektedir.

$$V_i^m = \left[\sum_{j \neq i}^N \xi^2(a, b) \exp \left(-2q(a, b) \left(\frac{r_{ij} - r_0(a, b)}{r_0(a, b)} \right) \right) \right]^{1/2} \quad (2.8)$$

Gupta çok cisim potansiyelinde a, b elementin cinsini ifade ederken, r_{ij} , nanoalaşımında bulunan i . ve j . atomlar arasındaki uzaklığı ifade etmektedir. A, r_0, ξ, p ve q parametreleri sırasıyla kohesif enerji, örgü parametreleri ve mutlak sıfır sıcaklığında (0 K) bulunan referans kristal yapı için bağımsız elastik sabitlerinin deneysel değerleri için oluşturulmuştur. V ise nanoalaşımın toplam potansiyel enerjisidir. ξ terimi, *hopping integral* olarak tanımlanan çok cisim enerjisinin ölçülmesi için kullanılan parametredir [21, 36, 67]. Potansiyel parametreler, nanoalaşımların termodinamik ve yapısal özelliklerinin simülasyonunda önemli bir rol oynar [68]. Bu çalışmada Co, Au ve Pd için Gupta parametreleri Çizelge 2.1’ de verilmiştir.

Çizelge 2.1 Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımı için Gupta parametreleri [66, 69].

Kompozisyon	A(eV)	ξ(eV)	P	q	$r_0(\text{Å})$
Co-Co	0.17570	1.8430	9.2100	2.9750	2.50000
Co-Pd	0.17515	1.7805	10.0385	3.3585	2.62425
Co-Au	0.14100	1.6140	10.6600	3.1130	2.69215
Pd-Pd	0.17140	1.7018	11.0000	3.7900	2.77000
Pd-Au	0.27640	2.0820	10.5690	3.9130	2.81000
Au-Au	0.20960	1.8153	10.1390	4.0330	2.88430

Bu parametreler sayesinde, Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının yapısal özellikleri, Monte Carlo simülasyonu yöntemi kullanılarak Basin-Hopping algoritması ile incelenebilmektedir. Bu çalışmada Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının çeşitli kombinasyonlarının yapısal özellikleri bu yöntemlerle incelenmiştir.

2.4 ENERJİ ANALİZLERİ

Nanoalaşımların global minimum yapılarını elde ederken kararlılıkları incelenmektedir. Bu amaçla, bağlanma enerjisi, fazlalık (excess) enerjisi ve ikinci fark enerjisi gibi birçok farklı enerji analizi yapılmaktadır. Kararlı geometrik yapılar bu enerji hesaplamalarının yapılması üzerine grafikler kullanılarak elde edilmektedir.

2.4.1 Fazlalık (Excess) Enerjisi (E_{Exc})

Fazlalık enerjisi yardımıyla nanoalaşımın en kararlı kompozisyonu hakkında bilgi elde edilmektedir. Enerji analizi yapmak ve Co-Pd-Au nanoalaşımının göreceli kararlılıklarını karşılaştırmak için, bileşimin bir fonksiyonu olarak fazlalık enerji karakterize edilmektedir. Fazlalık enerjisinin küçük değerleri, kompozisyonun farklı fonksiyonları arasında bulunan en kararlı yapıyı göstermektedir. Ferrando ve arkadaşlarının ikili nanoalaşımların aynı boyut fakat farklı kompozisyonlarını karşılaştırmak için oluşturmuş oldukları bir Gupta değeri [70] üçlü nanoalaşımlara uyarlanabilmektedir [71]. Bu kural gereği toplam atom sayısı N olan Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının fazlalık enerji hesabı (2.9) eşitliği kullanılarak bulunmuştur. Burada Co atomunun sayısı her bir kompozisyon için sabit tutulmaktadır.

$$\Delta_N^{Gupta} = E_{top}^{Gupta}(Au_nCo_xPd_m) - n \frac{E_{top}^{Gupta}(Au_{n+m}Co_x)}{n+m} - m \frac{E_{top}^{Gupta}(Co_xPd_{m+n})}{n+m} \quad 2.9$$

Üçlü nanoalaşımlar için geçerli olan bu ifade iki farklı atomla kurulan ikili nanoalaşım yapıları için sıfır değerini verecektir. Üçlü nanoalaşım yapıları için fazlalık enerjisinin negatif değerler alması yapılan çalışmada avantaj sağlamaktadır.

2.4.2 İkinci Fark Enerjisi (Δ_2E)

İkinci fark enerjisi, nanoalaşımların her bir kompozisyonun farklı yapılarının komşu yapılarla olan kararlılık durumlarını karşılaştırmak için kullanılmaktadır. İkinci fark enerjisindeki pozitif zirveler özellikle kararlı yapıların, komşu yapılara göre daha kararlı bir yapı olduğunu göstermektedir.

$$\Delta_2E(Au_nCo_xPd_m) = 2E_b(Au_nCo_xPd_m) - E_b(Au_{n+1}Co_xPd_{m-1}) - E_b(Au_{n-1}Co_xPd_{m+1}) \quad 2.10$$

E_b , bağlanma enerjisidir. Nanoalaşımın bağlanma enerjisi, nanoalaşımın potansiyel enerjisinin toplam atom sayısına bölümü, (2.11) eşitliği ile elde edilmektedir.

$$E_b = -\frac{V}{N} \quad 2.11$$

$N= 19, 23, 26, 34, 38$ ve 55 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımlarının global minimum enerjilerinden elde edilen üçlü nanoalaşımların toplam atom sayısı ve her kompozisyon için Co atomu sayısı sabit kalmak üzere, nanoalaşımı oluşturan Pd ve Au sayılarının değişiminin kararlılığa etkisi (2.10) eşitliği ile incelenmiştir.



BÖLÜM 3

(Co-Pd-Au)_N N=19, 23, 26, 34, 38, 55 ATOMLU ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ

3.1 GİRİŞ

Nanoalaşımın özelliklerini anlamak için öncelikle nanoalaşımın yapısını belirlemek gerekmektedir. Nanoalaşımın kimyasal, fiziksel ve elektronik gibi özellikleri bu nanoalaşımı oluşturan atomlara bağlıdır. Nanoalaşımı oluşturan atomlar aralarında bağlar yaparak daha düşük enerjili yani kararlı duruma geçiş yaparlar. Nanoalaşım için en kararlı durum en düşük enerjili durumdur. Bu durumda düşük kinetik enerjisine karşılık yüksek bir potansiyel enerji gözlemlenmektedir. Nanoalaşımı oluşturan atomların cinsi, sayısı ve bu atomların yerleşme yerleri kararlı yapıların oluşmasını etkilemektedir.

Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımında, Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Nanoalaşımındaki Pd, Co ve Au atomlarının ayrışma özellikleri metallerin yüzey enerjilerine göre belirlenmektedir. Enerjiyi en aza indirgeyip global minimum yapıyı elde etmek için daha küçük yüzey enerjisine sahip atomlar (Pd; 131 meVA^{-2} , Au; 96.8 meVA^{-2}) daha büyük yüzey enerjisine sahip atomlara (Co; 169 meVA^{-2}) kıyasla yüzeye yerleşmeyi tercih etmektedir. Aynı zamanda, atom yarıçapı Pd (1.38 Å^0) ve Au'dan (1.44 Å^0) daha küçük olan Co atomları (1.25 Å^0) merkeze yerleşmeyi, Pd ve Au atomları ise yüzeye yerleşmeyi tercih etmektedir.

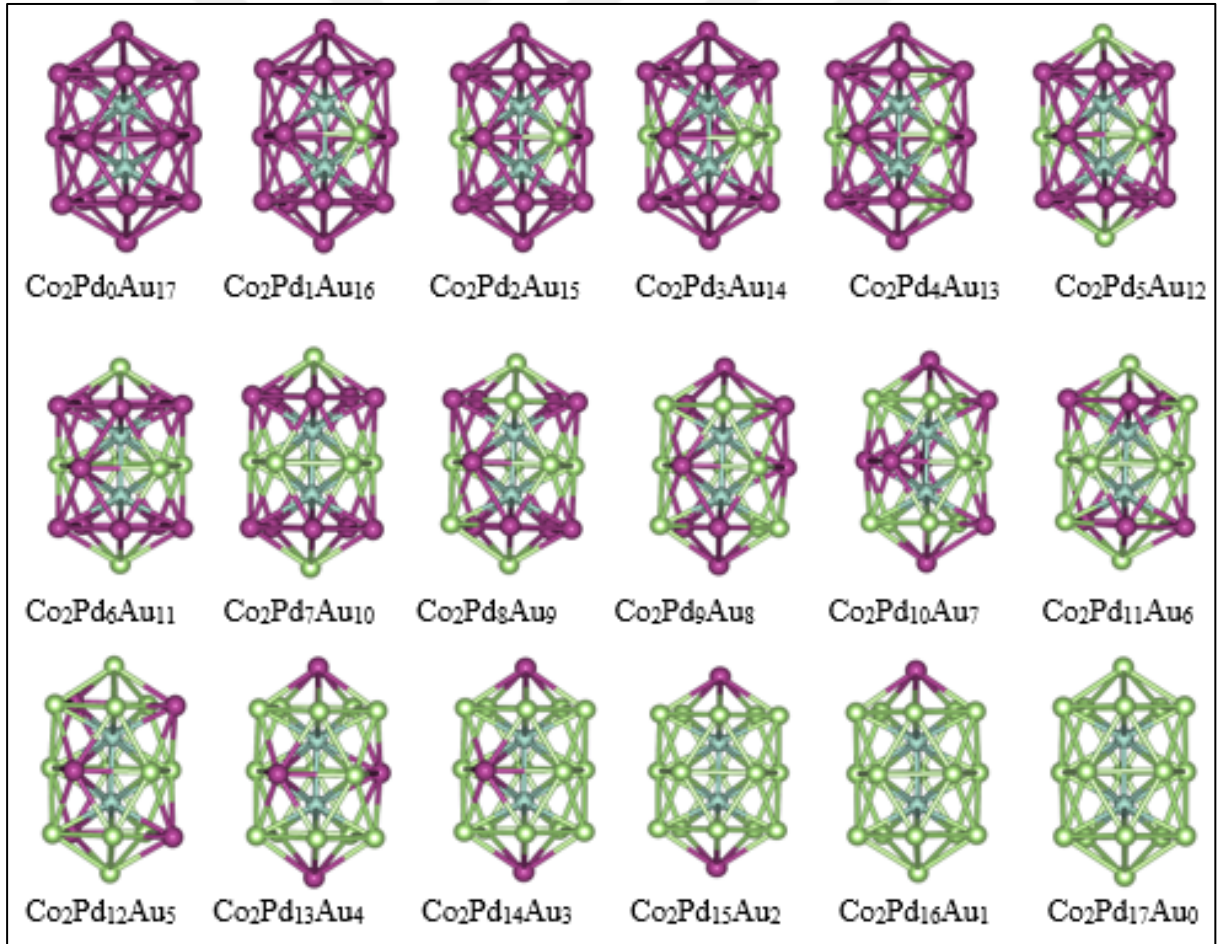
Atomların yerleşeceği yerler ayrıca kohesif enerjilerine göre bakılarak da bulunabilir. Bulk yapıda Co'nun kohesif enerjisi (4.39 eV/atom), Pd (3.89 eV/atom) ve Au'dan (3.81 eV/atom) daha yüksek olduğundan merkeze yerleşmektedir. Düşük kohesif enerjili Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Yüksek enerjiye sahip Co atomları merkeze yerleşerek ayrışma deseni oluşturmaktadır.

3.2 19 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ

Bu bölümde 19 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının seçili $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$, $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$, $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$, $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ kompozisyonları yapısal özellikleri bakımından incelenmiştir.

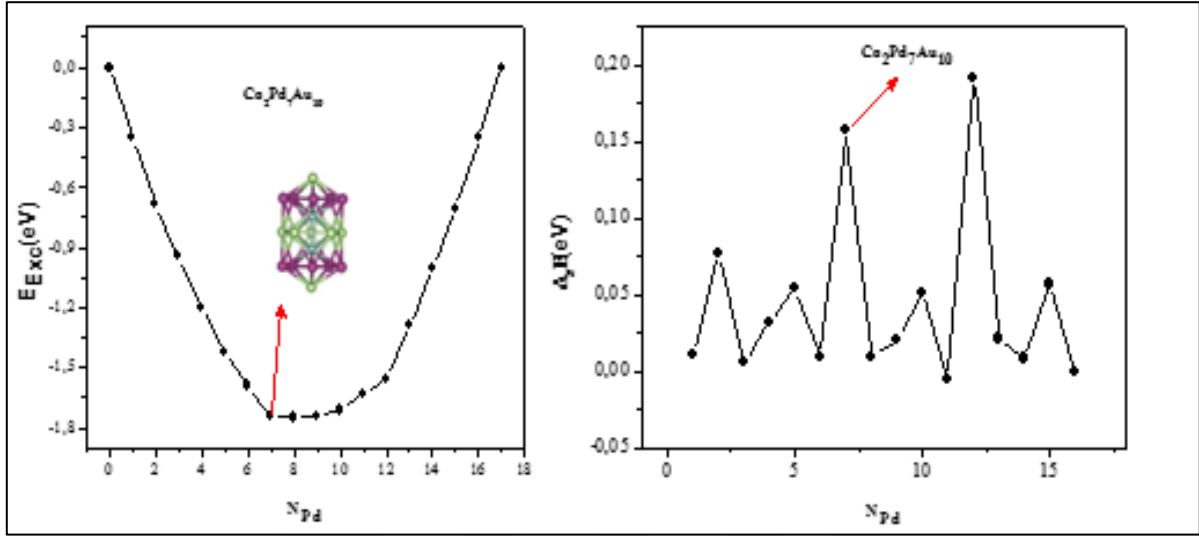
3.2.1 $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için global optimizasyon yöntemiyle Co sayısı sabit tutularak Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı nanoalaşım oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları bulunarak Şekil 3.1’de gösterilmiştir.



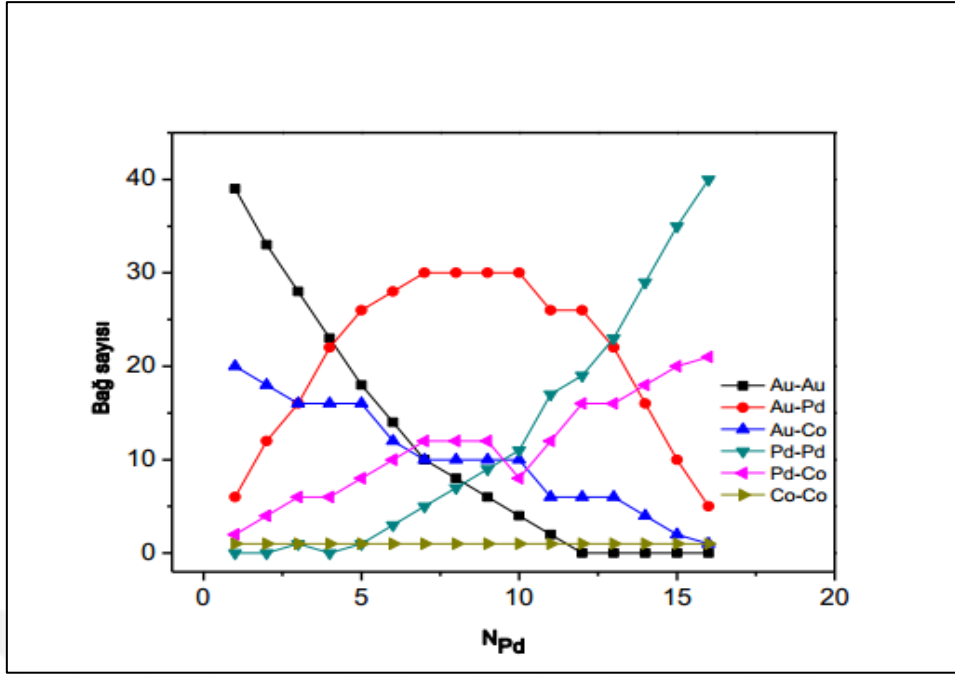
Şekil 3.1 $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Şekil 3.1'e göre global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıların enerjileri kullanılarak fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen grafiklerde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.2 de gösterilmiştir.



Şekil 3.2 $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Şekil 3.2'ye göre, $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu $\text{Co}_2\text{Pd}_7\text{Au}_{10}$ olmuştur. İkinci fark enerji grafiğinde, en kararlı kompozisyon olan $\text{Co}_2\text{Pd}_7\text{Au}_{10}$ zirve noktalarından birisi olmuştur. $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının artan Pd sayısına göre bulunan en kararlı yapılar ikili ikosahedral yapıdadır. En kararlı kompozisyon olan $\text{Co}_2\text{Pd}_7\text{Au}_{10}$ kompozisyonunda Pd atomları Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için ekvator bölgesine yerleşerek beşgen yapıda kafes oluşturmuştur. Geri kalan iki Pd atomu ise uç noktalara yerleşerek simetrik bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarında atomların kendi aralarında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.3 de gösterilmiştir.

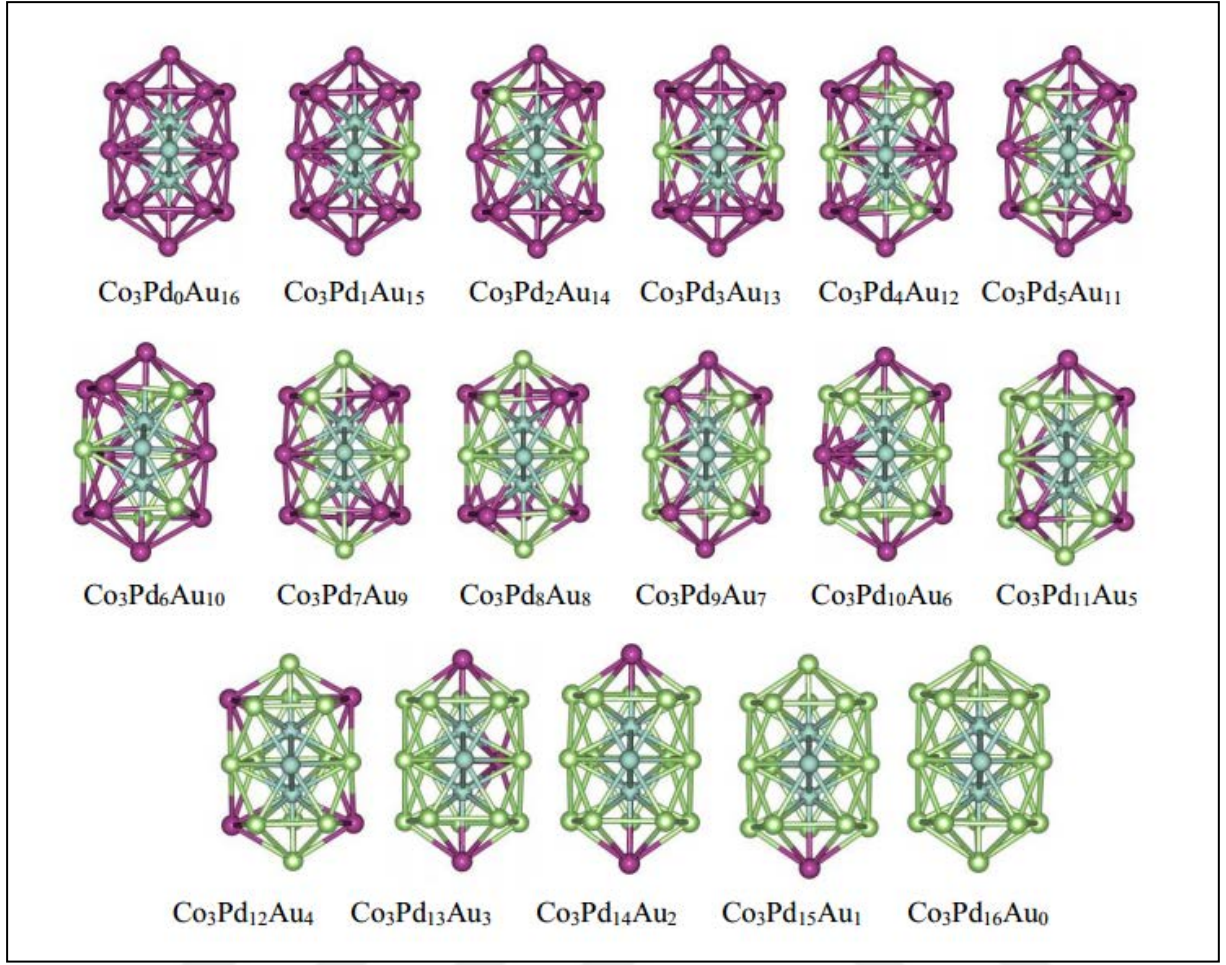


Şekil 3.3 $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımlarının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

$\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımlarının artan Pd atomu sayısına göre bağ sayılarının değişiminin gösterildiği Şekil 3.3'e göre yapılar kendi aralarında toplam 68 bağ yapmaktadır. Co atomları, merkeze yerleşerek konumları sabit kalmıştır. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Ancak Pd atomları Au atomlarına göre merkeze daha yakın noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Co atomlarının bütün kompozisyonlarda kendi aralarında yapmış olduğu bağ sayıları sabit kalmıştır. Şekil 3.3'e göre Pd sayısı arttıkça Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmış daha sonra azalarak parabolik bir eğri oluşturmaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd ve Pd-Co sayısı ise artarken Au-Au ve Au-Co sayısı azalmaktadır.

3.2.2 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

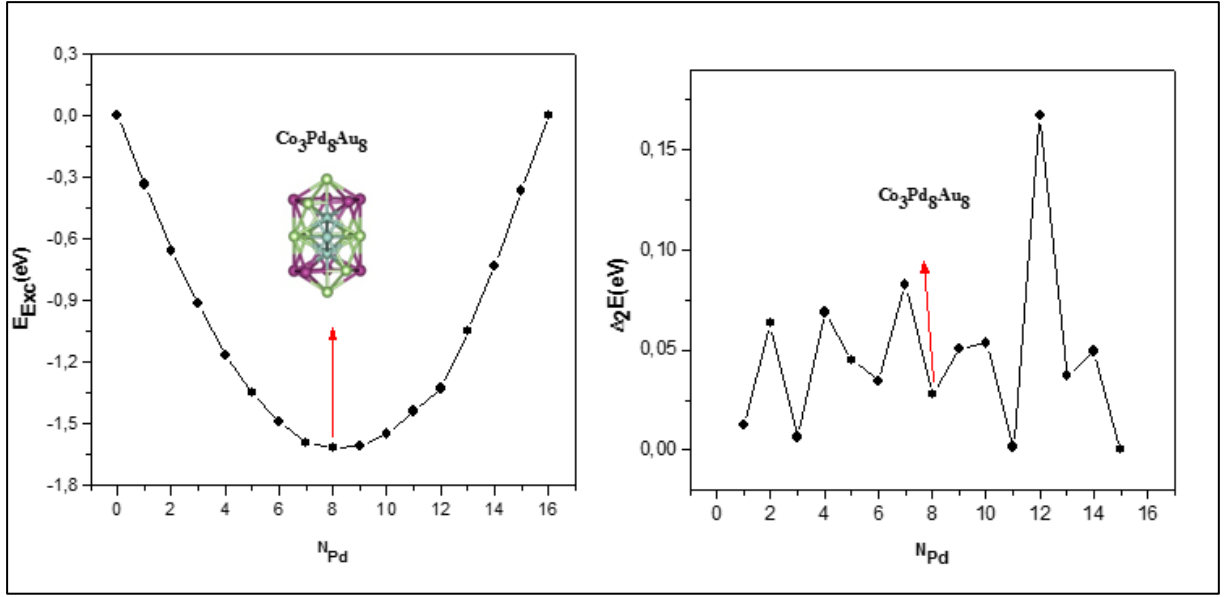
$\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımı için global optimizasyon yöntemiyle Co sayısı sabit tutularak Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı nanoalaşımlar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları bulunarak Şekil 3.4' de gösterilmiştir.



Şekil 3.4 Co₃Pd_xAu_{16-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

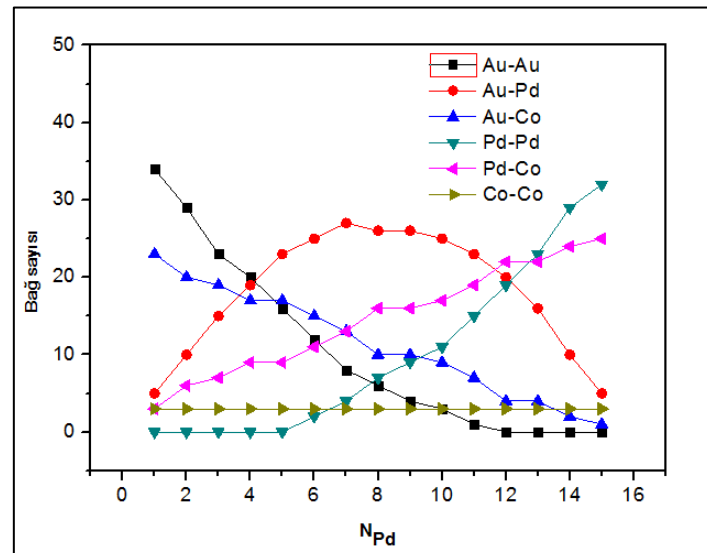
Şekil 3.4 de gösterildiği gibi Co₃Pd_xAu_{16-x} nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan Co₃Pd₈Au₈ nanoalaşımı ikili ikosahedral yapıdadır, Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. İki Pd atomu kompozisyonun en uç noktalarına yerleşmiştir. Merkezde Co atomları yer almaktadır ve en kararlı kompozisyon dahil olmak üzere tüm en kararlı yapılarda üçgen yapı oluşturmaktadır.

Şekil 3.4'e göre global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıların enerjileri kullanılarak Co₃Pd_xAu_{16-x} nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen Co₃Pd_xAu_{16-x} nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. Co₃Pd_xAu_{16-x} nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.5 de gösterilmiştir.



Şekil 3.5 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Şekil 3.5'e göre, $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu $\text{Co}_3\text{Pd}_8\text{Au}_8$ olmuştur. İkinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon çukur noktalarından birisi olmuştur. Bunun nedeni komşu yapılar arasındaki enerji farkının düşük olmasından kaynaklanmaktadır. $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının, en kararlı yapıları oluşturan atomlarının birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.6 da gösterilmiştir.

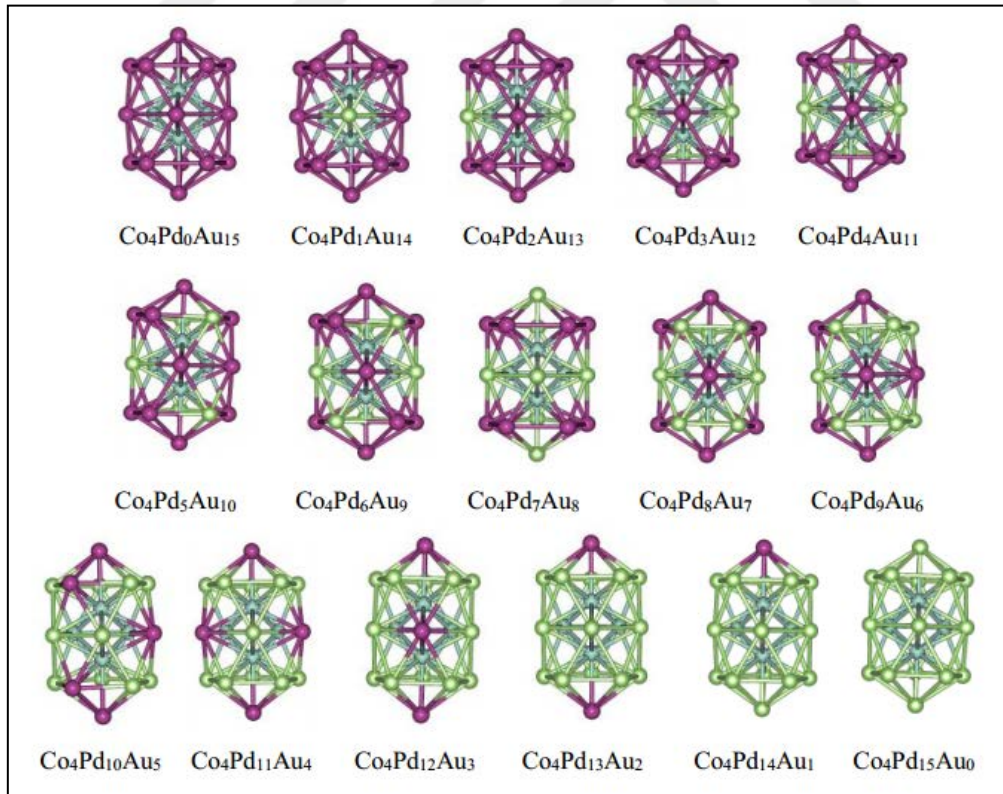


Şekil 3.6 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

$\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının artan Pd atomu sayısına göre bağ sayılarının değişiminin gösterildiği Şekil 3.6'ya göre kompozisyonlar kendi aralarında toplam 68 bağ yapmaktadır. Co atomları, merkeze yerleşmiş ve kendi aralarında 3 adet bağ yapmaktadır. Şekil 3.6'ya göre Pd sayısı arttıkça Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_3\text{Pd}_7\text{Au}_9$ nanoalaşımına kadar artmakta, en kararlı kompozisyon ve sonraki kompozisyonda sabit kalmakta, daha sonra azalarak parabolik bir eğri oluşturmaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd, Pd-Co bağ sayısı ise artış gösterirken Au-Co ve Au-Au bağ sayısı azalmaktadır. Pd atomları $\text{Co}_3\text{Pd}_5\text{Au}_{11}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamaktadır. Bunun yanı sıra ise Au atomları $\text{Co}_3\text{Pd}_{12}\text{Au}_4$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamaktadır.

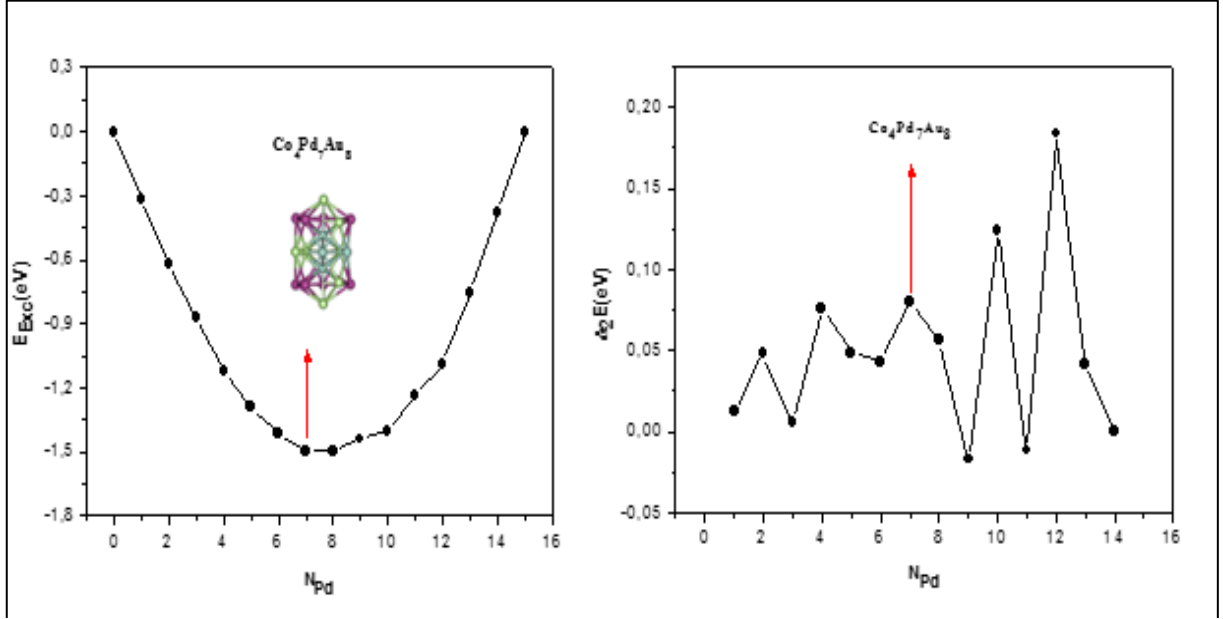
3.2.3 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımı için global optimizasyon yöntemiyle Co sayısı sabit tutularak Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı nanoalaşımalar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımaların en kararlı yapıları bulunarak Şekil 3.7' de gösterilmiştir.



Şekil 3.7 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

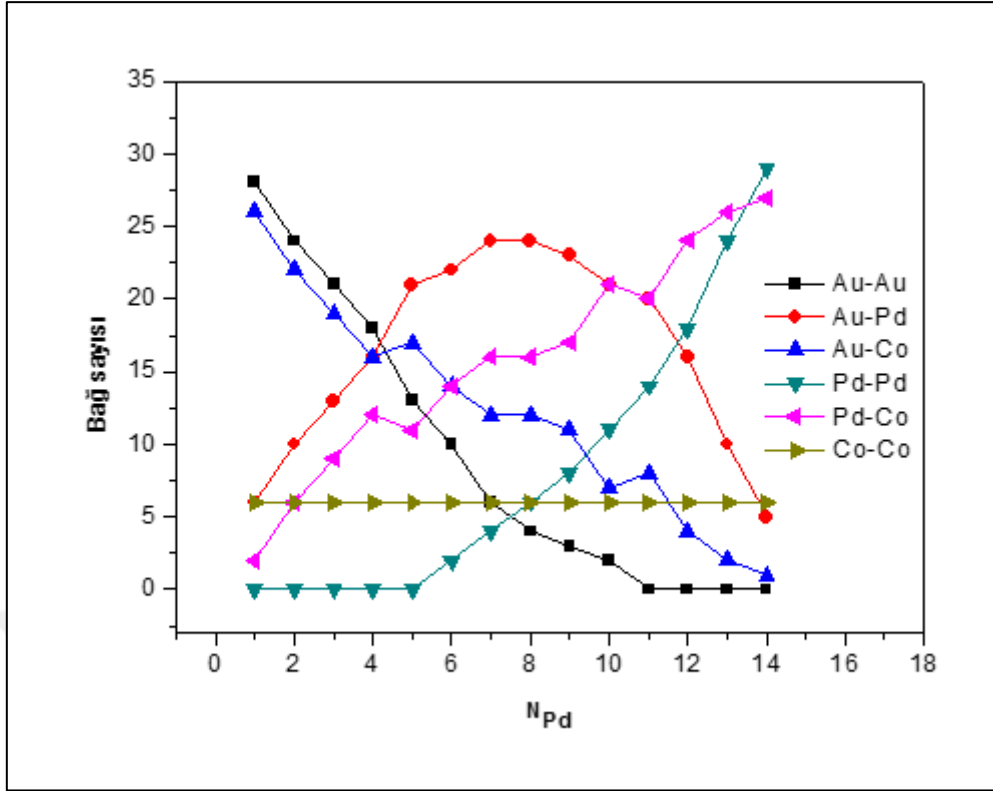
Şekil 3.7 de gösterildiği gibi $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımında tüm kompozisyonlar ikili ikosahedral yapıdadır. Co atomları tüm kompozisyonlarda üçgen piramit yapıda bulunmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları arasında en kararlı kompozisyon, fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile bulunmaktadır. Çizilen $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon Şekil 3.8 de gösterilmiştir.



Şekil 3.8 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Şekil 3.8'e göre, $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji grafiğine göre en kararlı yapılar arasında en kararlı kompozisyonu $\text{Co}_4\text{Pd}_7\text{Au}_8$ olmuştur. İkinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon olan $\text{Co}_4\text{Pd}_7\text{Au}_8$ zirve noktalarından birisi olmaktadır.

Şekil 3.7'ye göre, en kararlı kompozisyonda yatay eksene göre Au atomları ve Pd atomları yüzeyde simetri özelliğine sahiptirler. En kararlı kompozisyona bakılınca 5 adet Pd atomu yüzeyde Co atomlarına yakın yerleşerek Au atomları ile karışım deseni oluşturmaktadır. Geri kalan 2 adet Pd atomu ise uç noktalara yerleşmektedir. Artan Pd sayısına en kararlı yapıları oluşturan atomların yapmış olduğu bağların sayısı değişmektedir. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının, en kararlı yapıları oluşturan atomlarının birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.9 da gösterilmiştir.

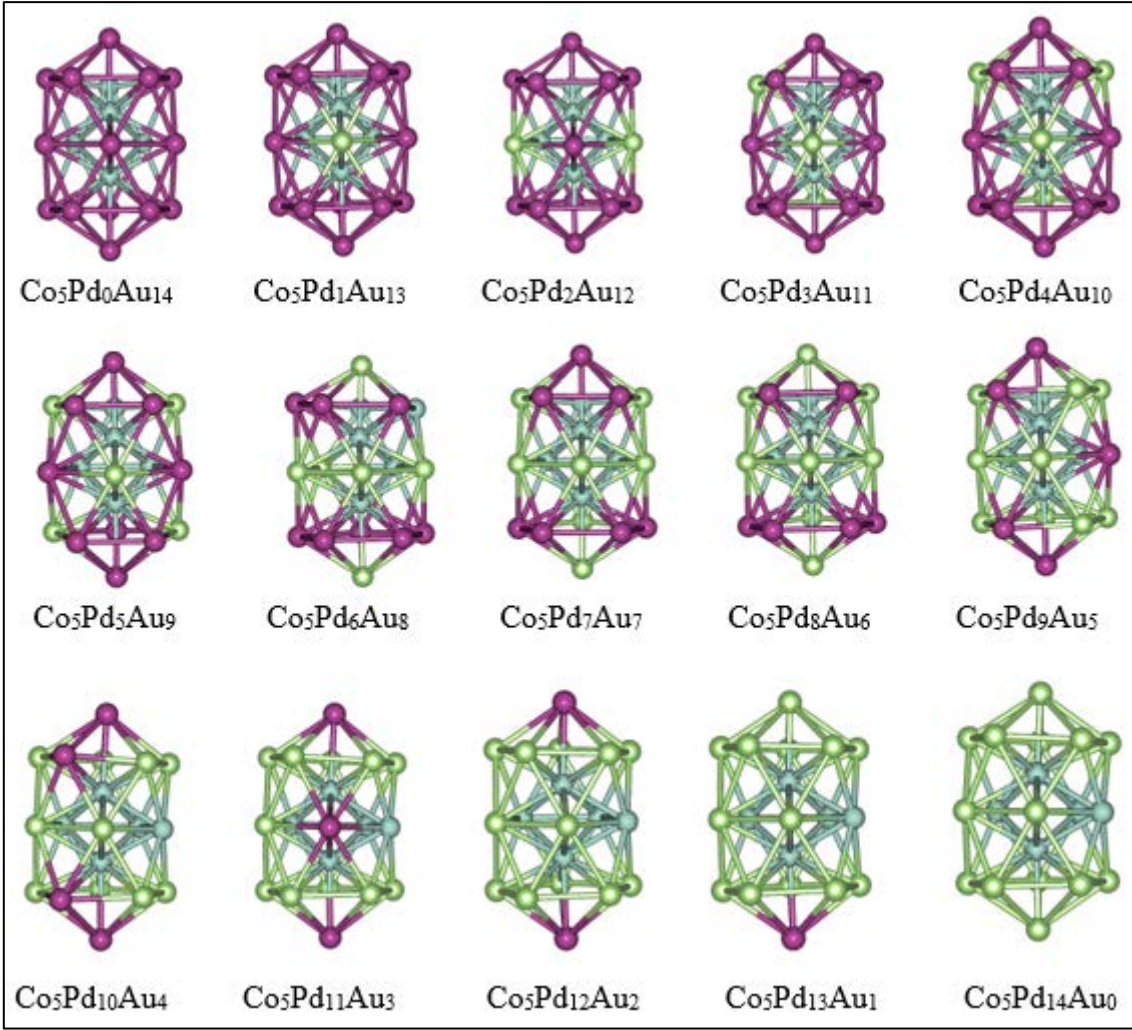


Şekil 3.9 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

$\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimine göre en kararlı yapılar kendi aralarında toplam 68 bağ yapmaktadır. Tüm kompozisyonlarda toplam 6 adet Co-Co bağı vardır. Artan Pd atomu sayısı ile Au-Au ve Au-Co bağ sayısı azalmakta, Pd-Pd ve Pd-Co bağ sayısı artmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise en kararlı kompozisyona kadar artmış daha sonra azalarak parabolik bir eğri oluşturmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımında $\text{Co}_4\text{Pd}_5\text{Au}_{10}$ kompozisyonuna kadar Pd-Pd bağ sayısı oluşmamaktadır. Bunun yanı sıra $\text{Co}_4\text{Pd}_{11}\text{Au}_4$ kompozisyonundan itibaren Au-Au bağ sayısı oluşmamaktadır.

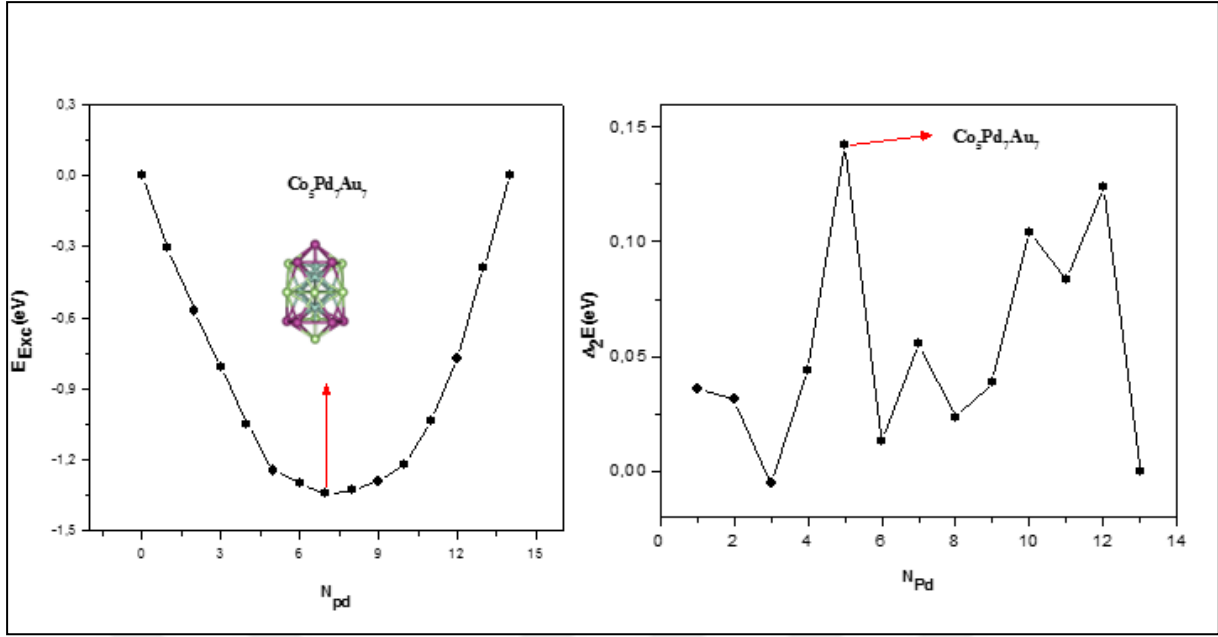
3.2.4 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımı için global optimizasyon yöntemiyle Co sayısı sabit tutularak Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı nanoalaşım oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları bulunarak Şekil 3.10’ da gösterilmiştir.



Şekil 3.10 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

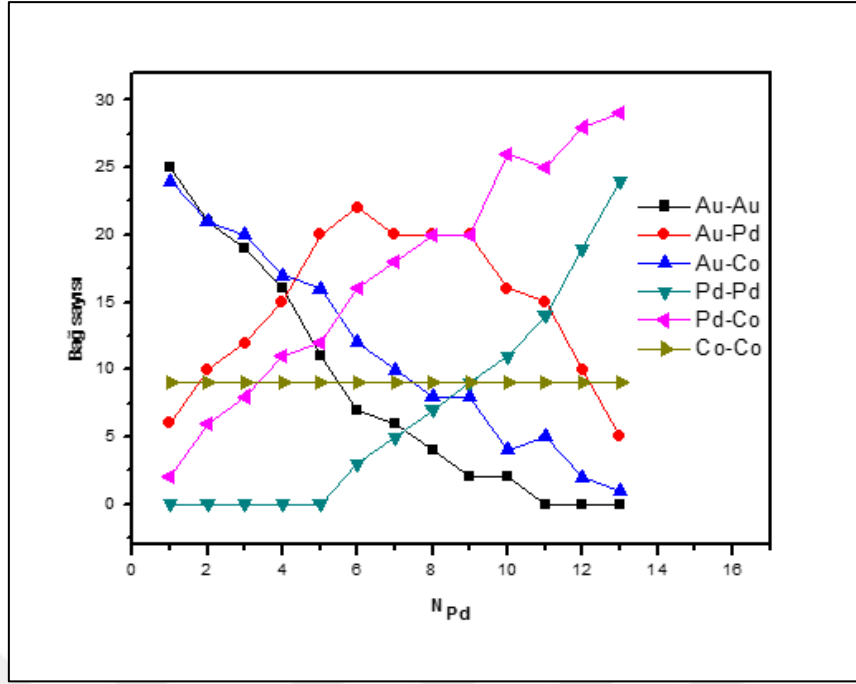
Şekil 3.10 da gösterildiği gibi $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımında tüm kompozisyonlar ikili ikosahedral yapıdadır. Co atomları tüm kompozisyonlarda çift üçgen piramit yapıda bulunmaktadır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları arasında en kararlı kompozisyon, fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile bulunmaktadır. Çizilen $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon Şekil 3.11 de gösterilmiştir.



Şekil 3.11 $Co_5Pd_xAu_{14-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Şekil 3.11'e göre, $Co_5Pd_xAu_{14-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji grafiğine göre en kararlı yapılar arasında en kararlı kompozisyon $Co_5Pd_7Au_7$ olmuştur. İkinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon olan $Co_5Pd_7Au_7$ zirve noktalarından birisi olmaktadır.

Şekil 3.11 de gösterildiği gibi $Co_5Pd_xAu_{14-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_5Pd_7Au_7$ nanoalaşımı ikili ikosahedral yapıdadır ve Pd atomlarından 1 tanesi yapının uç kısma yerleşmiştir. Geri kalan Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları tüm kompozisyonlarda çift üçgen piramit yapıdadır. $Co_5Pd_xAu_{14-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.12 de gösterilmiştir.

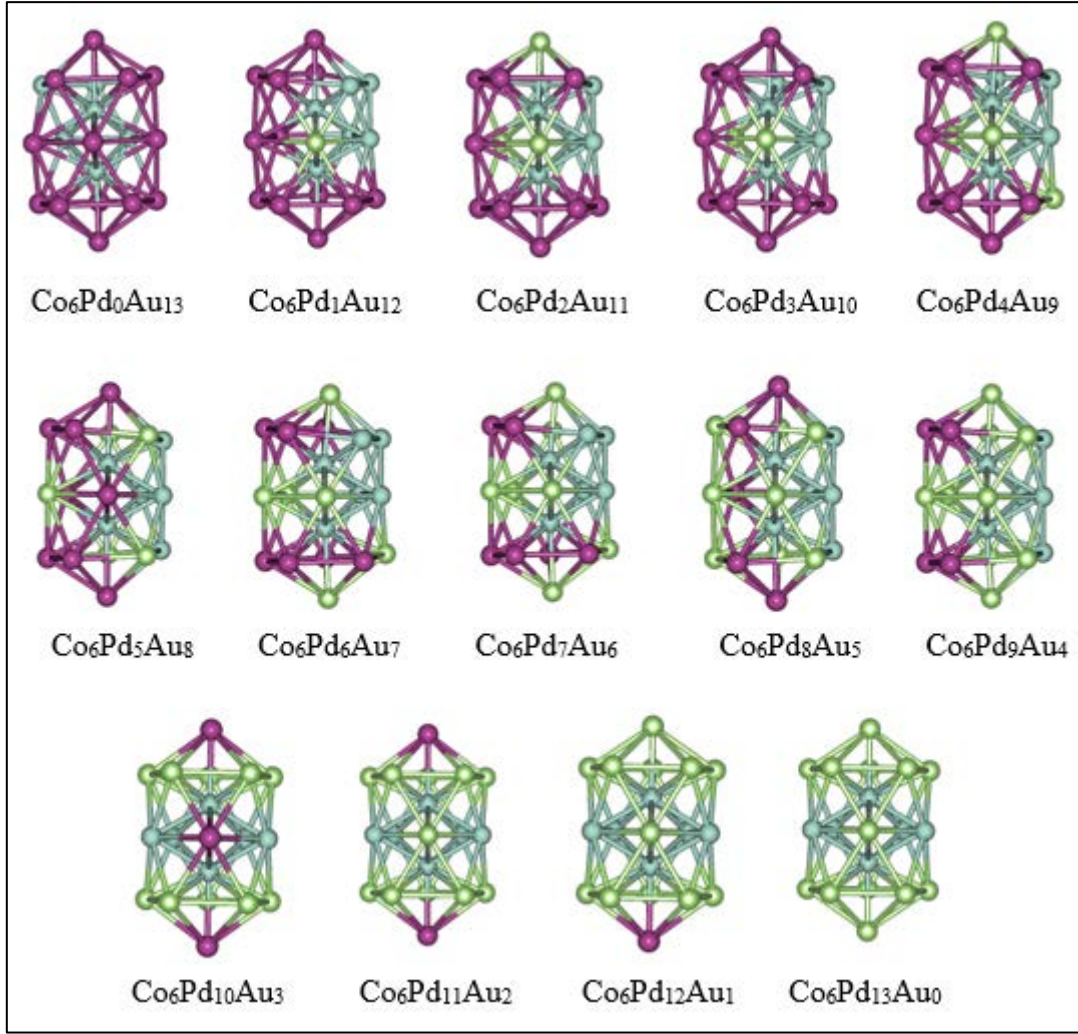


Şekil 3.12 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişiminin gösterildiği Şekil 3.12'ye göre kompozisyonlar kendi aralarında toplam 68 bağ yapmaktadır. Tüm kompozisyonlarda toplam 9 adet Co-Co bağı vardır Pd atomu sayısının artışı ile Au-Au bağ sayısı zamanla azalmıştır. Au-Pd bağ sayısı ise $\text{Co}_5\text{Pd}_6\text{Au}_8$ kompozisyonuna kadar artmış daha sonra azalmaya başlayarak parabolik bir eğri oluşturmuştur. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd ve Pd-Co sayısı düzenli bir artış gösterirken Au-Au ve Au-Co bağ sayısı azalmıştır. $\text{Co}_5\text{Pd}_5\text{Au}_9$ kompozisyonuna kadar Pd-Pd bağı oluşmamıştır. Bunun yanı sıra $\text{Co}_5\text{Pd}_{11}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren Au-Au bağı oluşmamıştır.

3.2.5 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

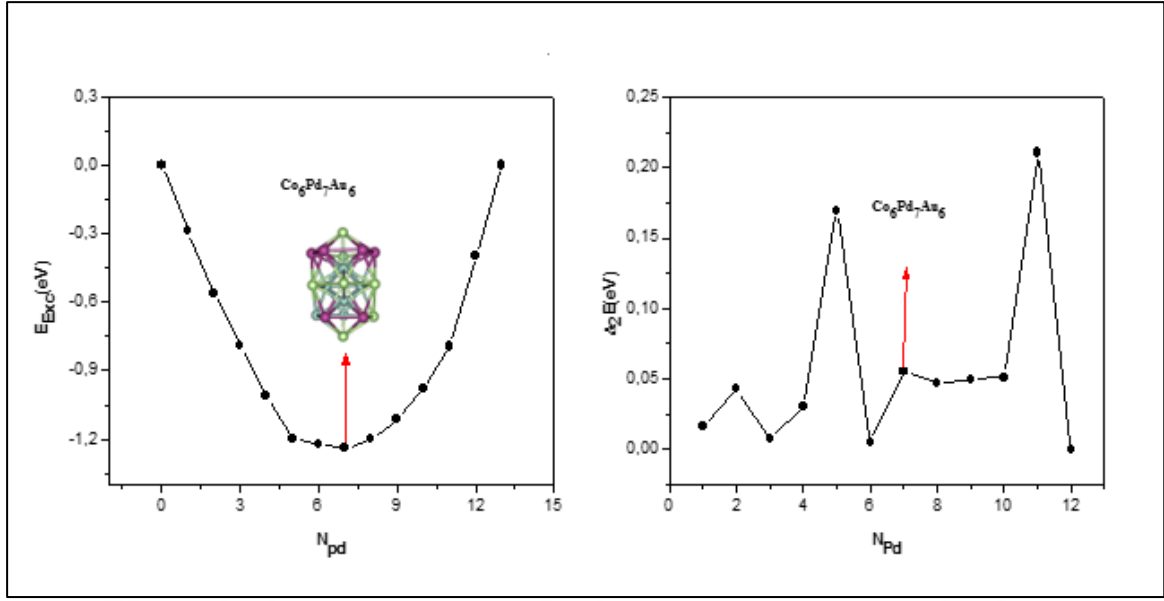
$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımı için global optimizasyon yöntemiyle Co sayısı sabit tutularak Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı nanoalaşımalar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları bulunarak Şekil 3.13' de gösterilmiştir.



Şekil 3.13 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Şekil 3.13 de gösterildiği gibi $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları ikili ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomlarından iki tanesi merkeze yerleşmiştir ve artan Pd sayısına göre Pd veya Au atomları ile çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır.

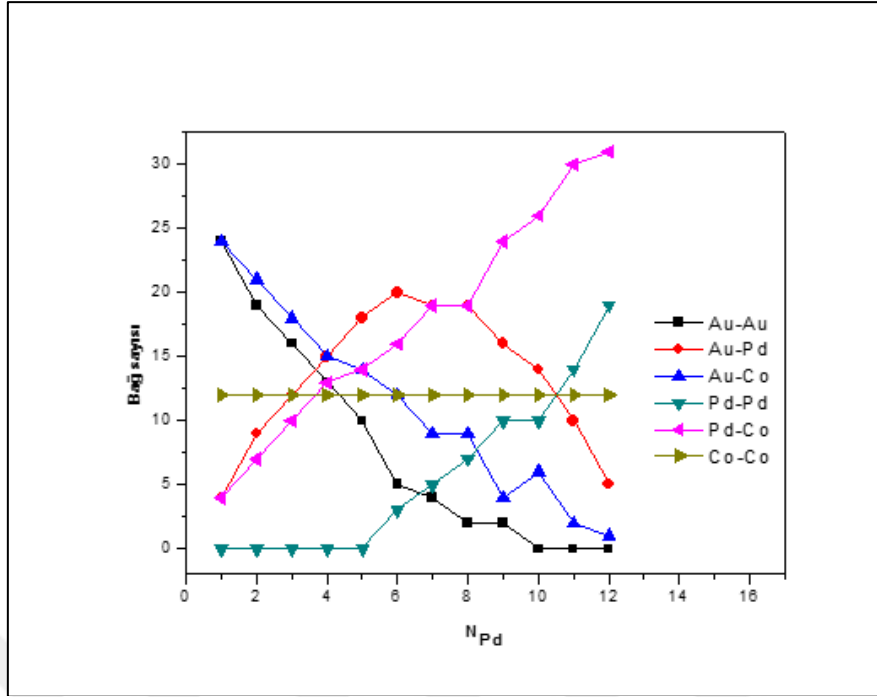
$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılarak, farklı yapılar oluşturulmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları seçilerek $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.14 de gösterilmiştir.



Şekil 3.14 $Co_6Pd_xAu_{13-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Şekil 3.14'e göre, $Co_6Pd_xAu_{13-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji grafiğine göre en kararlı yapılar arasında en kararlı kompozisyonu $Co_6Pd_7Au_6$ olmuştur. İkinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon olan $Co_6Pd_7Au_6$ zirve noktalarından birisi olmaktadır.

Şekil 3.14 te gösterildiği gibi $Co_6Pd_xAu_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_6Pd_7Au_6$ nanoalaşımı ikili ikosahedral yapıdadır ve Pd atomlarından 2 tanesi yapının uç kısma yerleşmiştir. Geri kalan Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları ise Pd atomu ile birleşerek çift beşgen piramit yapıdadır. $Co_4Pd_xAu_{13-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.15 de gösterilmiştir.

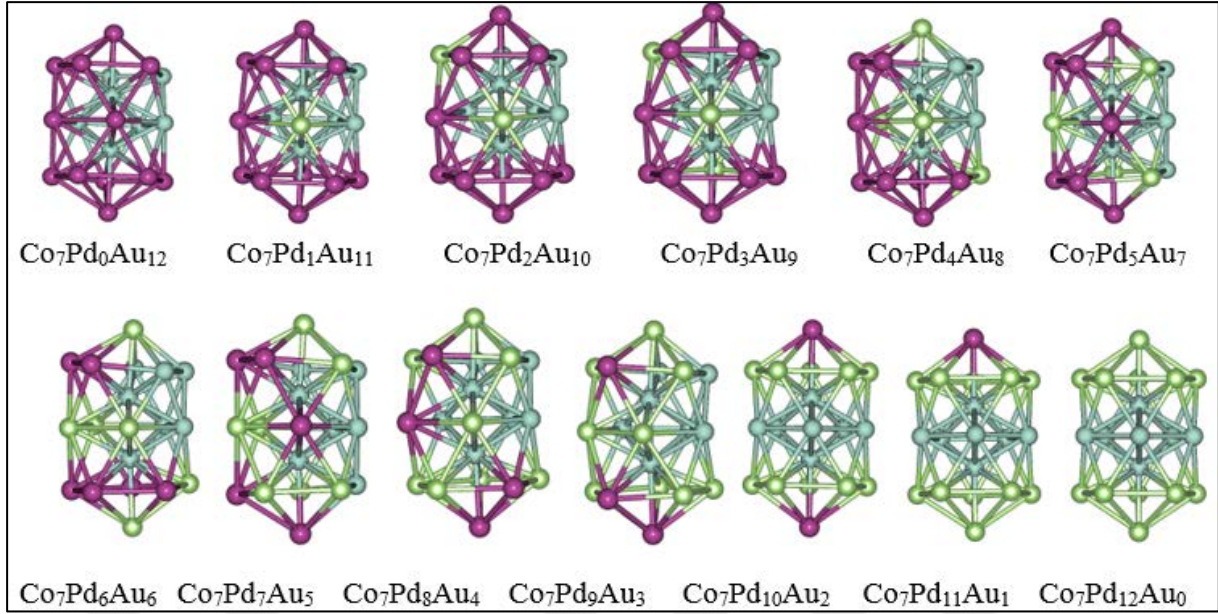


Şekil 3.15 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd atomu sayısına göre bağ sayılarının değişiminin gösterildiği Şekil 3.15'e göre tüm kompozisyonlar toplam 68 bağ yapmaktadır. Tüm kompozisyonlarda toplam 12 adet Co-Co bağı vardır Pd atomu sayısının artışı ile Au-Au bağ sayısı zamanla azalmıştır. Au-Pd bağ sayısı ise $\text{Co}_6\text{Pd}_6\text{Au}_7$ kompozisyonuna kadar artmış daha sonra azalarak parabolik bir eğri oluşturmuştur. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd ve Pd-Co artış göstermektedir. $\text{Co}_6\text{Pd}_5\text{Au}_8$ kompozisyonuna kadar Pd atomları kendi aralarında bağ yapmamıştır. Öte yandan $\text{Co}_6\text{Pd}_{10}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren Au atomları kendi aralarında bağ yapmamıştır.

3.2.6 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

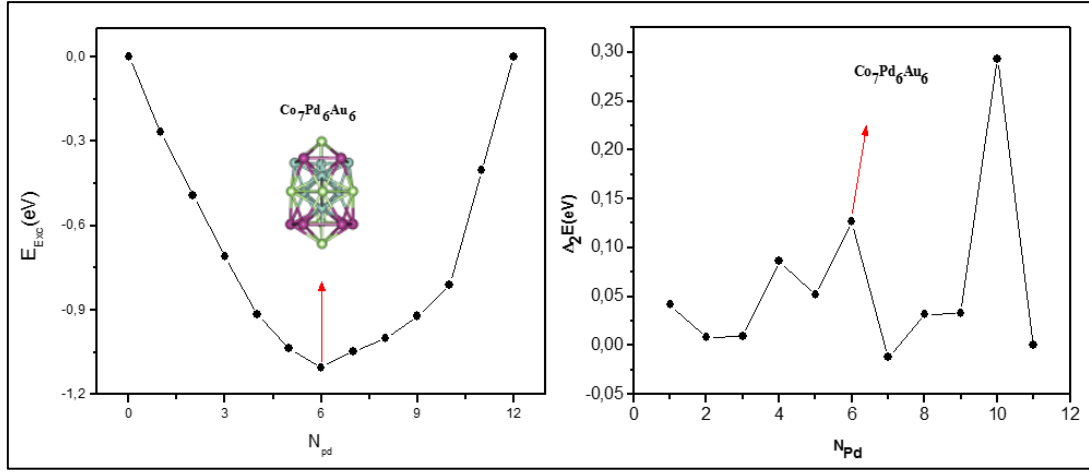
$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımı için global optimizasyon yöntemiyle Co sayısı sabit tutularak Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı nanoalaşımalar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımaların en kararlı yapıları bulunarak Şekil 3.16' da gösterilmiştir.



Şekil 3.16 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

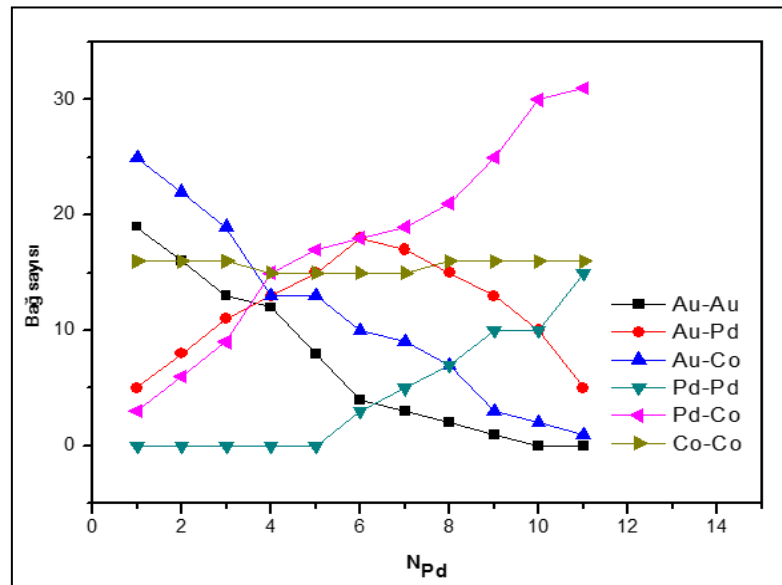
Şekil 3.16 da gösterildiği gibi $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları ikili ikosahedral yapıdadır. Co atomlarından iki tanesi merkeze yerleşerek yerini korumuştur. Co atomları tüm kompozisyonlarda çift beşgen piramit yapıdadır. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.17 de gösterilmiştir.



Şekil 3.17 $Co_7Pd_xAu_{12-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Şekil 3.17'ye göre, $Co_7Pd_xAu_{12-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji grafiğine göre en kararlı yapılar arasında en kararlı kompozisyonu $Co_7Pd_6Au_6$ olmuştur. İkinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon olan $Co_7Pd_6Au_6$ zirve noktalarından birisi olmaktadır. Şekil 3.17 de gösterildiği gibi $Co_7Pd_xAu_{12-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_7Pd_6Au_6$ nanoalaşımı ikili ikosahedral yapıdadır ve Pd atomlarından 2 tanesi yapının vertekslerine yerleşmiştir. Geri kalan Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları ise ikisi merkezde olmak üzere çift beşgen piramit yapıdadır. $Co_7Pd_xAu_{12-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.18 de gösterilmiştir.

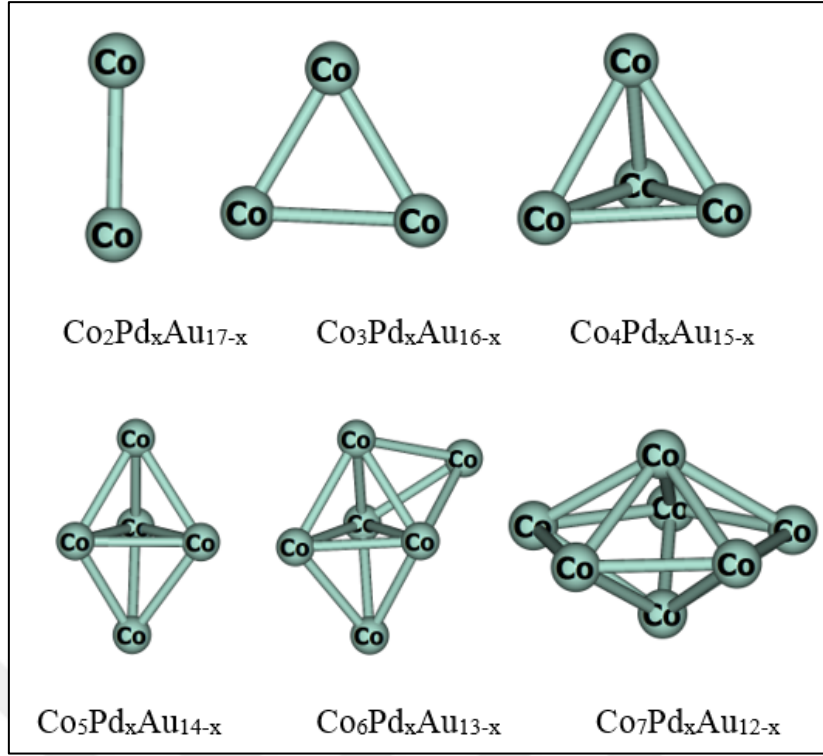


Şekil 3.18 $Co_7Pd_xAu_{12-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişiminin gösterildiği Şekil 3.18'e göre kompozisyonlar kendi aralarında toplam 68 bağ yapmaktadır. Co atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_4\text{Au}_8$ kompozisyonundan $\text{Co}_7\text{Pd}_7\text{Au}_5$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında 15 adet Co-Co bağı yapmaktadır. Geri kalan tüm kompozisyonlarda Co-Co bağ sayısı 16 adet olmaktadır. Co atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_{10}\text{Au}_2$ kompozisyonundan itibaren ekvator bölgesine ve merkeze yerleşmektedir. Tüm kompozisyonlarda artan Pd sayısı ile Au-Au bağ sayısı Au-Co bağ sayısı azalmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise $\text{Co}_7\text{Pd}_4\text{Au}_8$ kompozisyonuna kadar artmış daha sonra azalarak parabolik bir eğri oluşturmaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd ve Pd-Co bağ sayısı artış göstermektedir. Pd atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_5\text{Au}_7$ kompozisyonuna kadar Pd-Pd bağı yapmamıştır. $\text{Co}_7\text{Pd}_{10}\text{Au}_2$ kompozisyonundan itibaren Au-Au bağı oluşmamaktadır.

Bu bölümde 19 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının seçili $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$, $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$, $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$, $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ kompozisyonları yapısal özellikleri incelenmiştir. Genel olarak $\text{Co}_2\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$, $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$, $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$, $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{12-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları incelendiğinde tüm kompozisyonlar ikili ikosahedral yapıdadır. Merkeze her zaman Co atomları yerleşmektedir. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Tüm nanoalaşımın en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi grafiği incelendiğinde ise Co-Co bağ sayısı genellikle sabit kalmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise her bir nanoalaşımında en kararlı yapıya kadar artmakta, daha sonrasında azalmaya başlamaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd bağ sayısı genellikle yapıda 5 adet Pd atomu bulunana kadar oluşmamaktadır. Daha sonrasında artan bir grafik çizmektedir. Au-Au bağ sayısı ise genellikle 4 adet Au atomu kalana kadar oluşmakta daha sonra oluşmamaktadır. Artan Pd sayısına göre tüm nanoalaşımında Au-Co bağı azalırken Pd-Co bağı artmaktadır. Tüm 19 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımında toplam 68 bağ oluşmaktadır.

Co-Pd-Au nanoalaşım kümesinde Co sayısına göre oluşturulan nanoalaşımın kendi aralarında bağ yapan Co atomlarının yapısı Şekil 3.19' da gösterilmektedir.



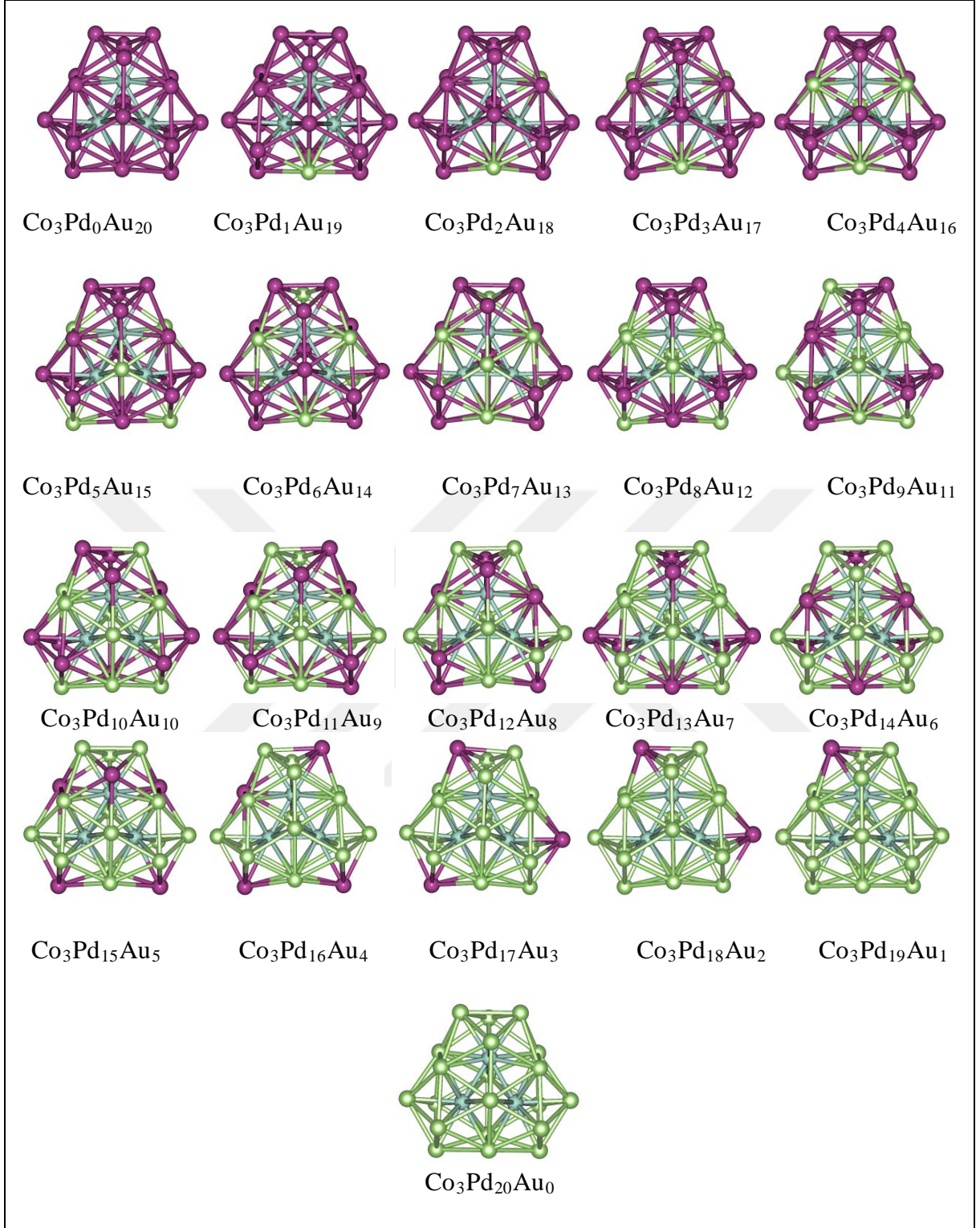
Şekil 3.19 19 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.

3.3 23 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARIN YAPISAL ÖZELLİKLERİ

Bu bölümde toplam atom sayısı 23 olan Co-Pd-Au nanoalaşımalarının seçili kompozisyonlarının en kararlı yapıları ve bu yapılar arasından en kararlı kompozisyonu bulunarak yapısal özellikleri incelenmiştir. İncelenen kompozisyonların Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri çizilmiştir. Her nanoalaşım için en kararlı kompozisyon grafik üzerinde gösterilmiştir. 23 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımı için Co atomu sayısı sabit tutularak Pd atom sayısı artırılmış ve Au atomu sayıları azaltılmıştır.

3.3.1 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ ($x= 0, 20$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayısı değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinden yararlanılarak en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.20’ de gösterilmiştir.

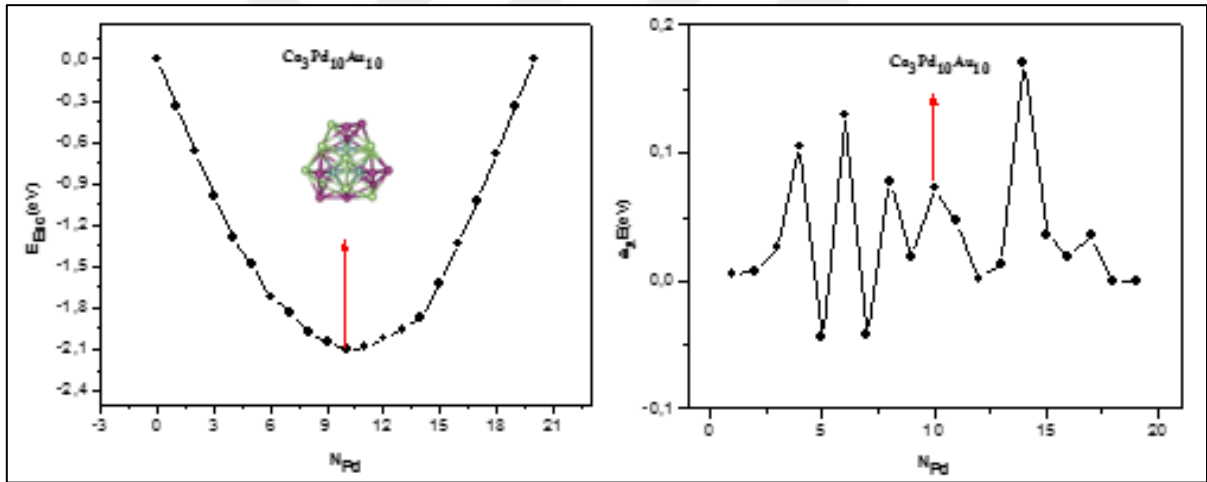


Şekil 3.20 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Şekil 3.20 de gösterildiği gibi $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları üçlü ikosahedral yapıdadır. Co atomları merkeze yerleşerek yerini korumuştur. Co atomları tüm

kompozisyonlarda üçgen yapıdadır. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.21 de gösterilmiştir.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin, en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.21’de bu koşullar sağlanmış olup şekil üzerinde global minimum yapılar ve onlara karşılık enerjiler gösterilmiştir.

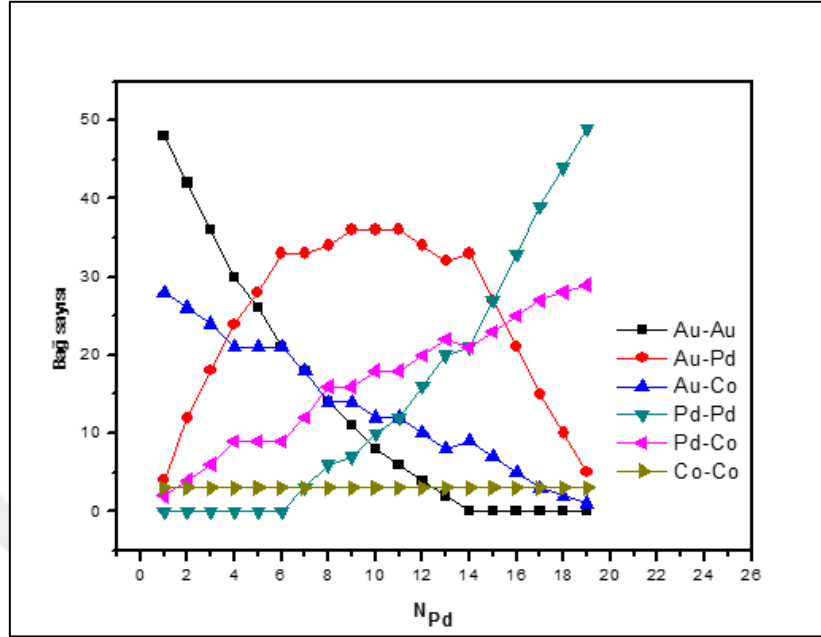


Şekil 3.21 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin, en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.21’de bu koşullar sağlanmış olup şekil üzerinde global minimum yapılar ve onlara karşılık enerjiler gösterilmiştir.

Şekil 3.21’de gösterildiği gibi $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_3\text{Pd}_{10}\text{Au}_{10}$ nanoalaşımı üçlü ikosaedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde

karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.22’de gösterilmiştir.

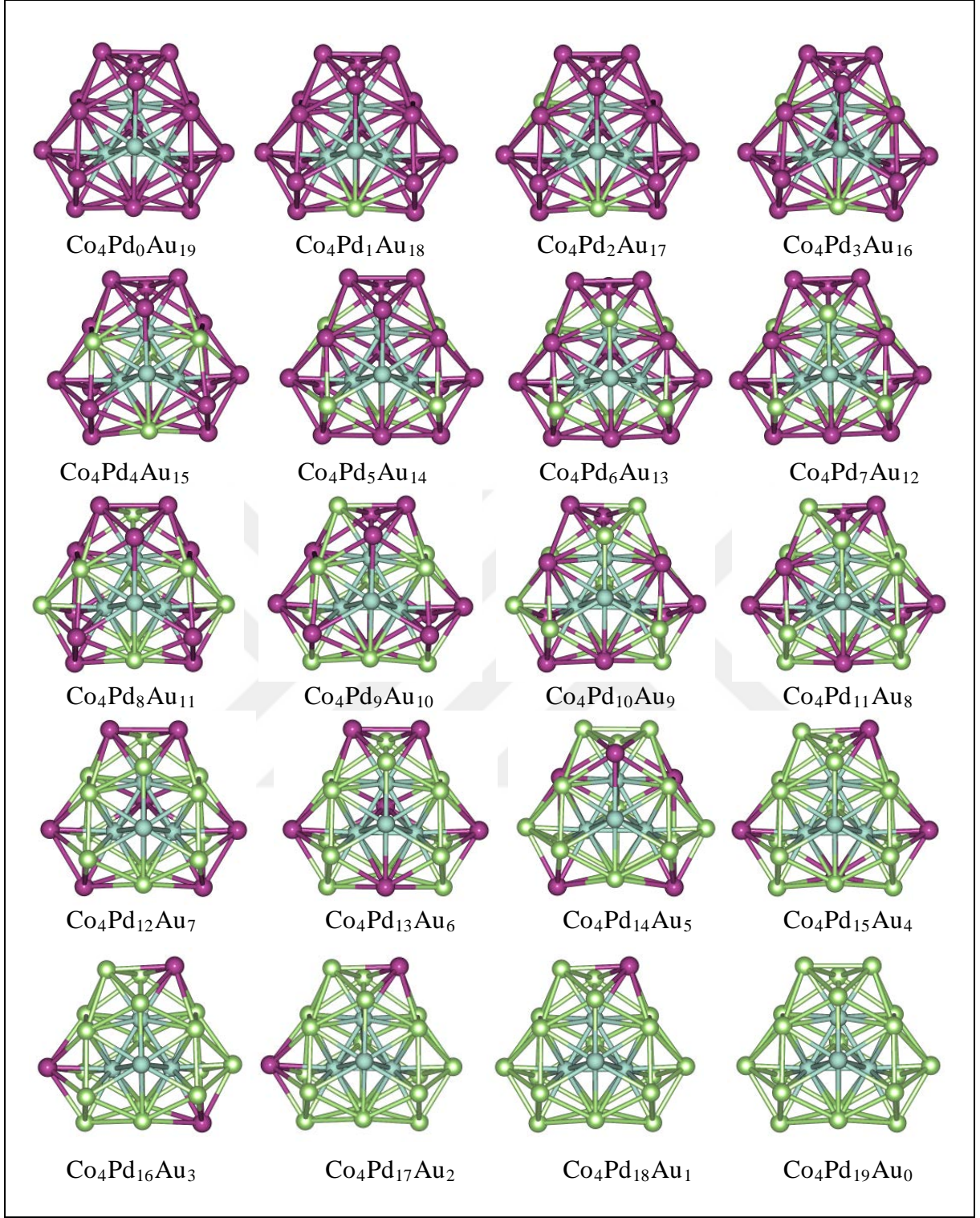


Şekil 3.22 $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.22’ye göre Au-Au bağ lineer bir azalma göstermektedir. Bunun yanı sıra, Pd-Pd bağ sayısı, artan Pd sayısı ile düzenli bir artış göstermektedir. Pd sayısının sırasıyla 9, 10, 11 olduğu kompozisyonlarda, Au-Pd bağ sayısı 36 da sabit kalmış ve daha sonra azalmıştır. Au-Co bağ sayısının nanoalaşımında göstermiş olduğu azalma, Pd-Co bağ sayısında aynı düzende artış olarak gözlemlenmektedir. Tüm kompozisyonlarda Co atomları merkeze yerleşmiş ve Co-Co bağ sayısı sabit olarak kalmıştır. Nanoalaşımında tüm kompozisyonlar toplam 87 bağ yapmaktadır. Bu durum yapının korunduğunu göstermektedir.

3.3.2 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ ($x=0, 19$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayısı değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinden yararlanılarak kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.23’ de gösterilmiştir.



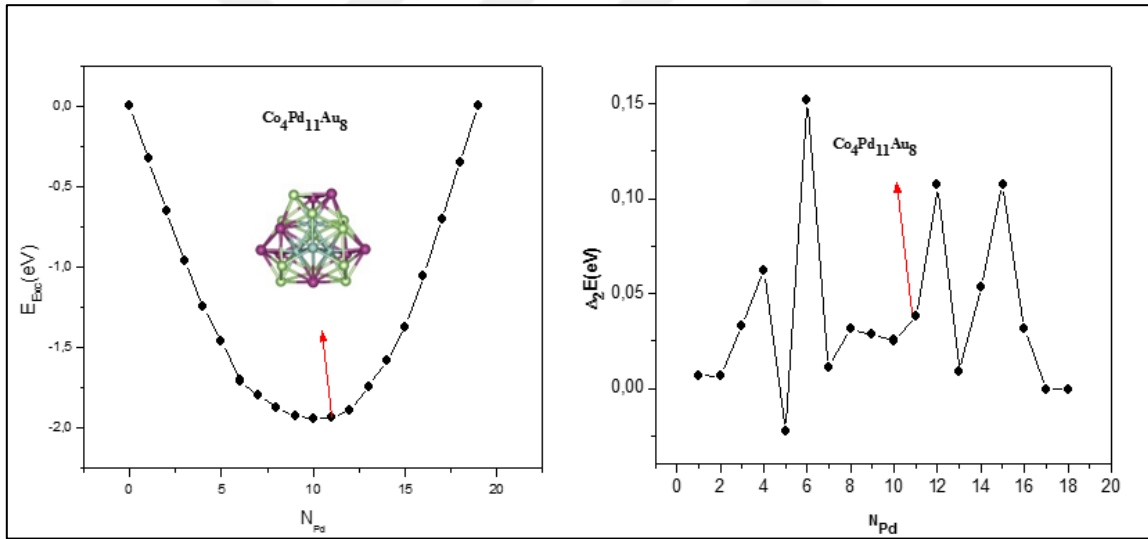
Şekil 3.23 Co₄Pd_xAu_{19-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Şekil 3.23 de gösterildiği gibi Co₄Pd_xAu_{19-x} nanoalaşımının en kararlı yapıları çoklu ikosaedral yapıdadır. Co atomları merkeze yerleşerek yerini korumuştur. Co atomları tüm kompozisyonlarda üçgen piramit yapıdadır. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni

oluşturmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılar incelendiğinde artan Pd sayısı ile Pd atomları öncelikle Co atomlarına yakın noktalara yerleşmektedir. Azalan Au atomları ise öncelikle köşegenlere yerleşmektedir.

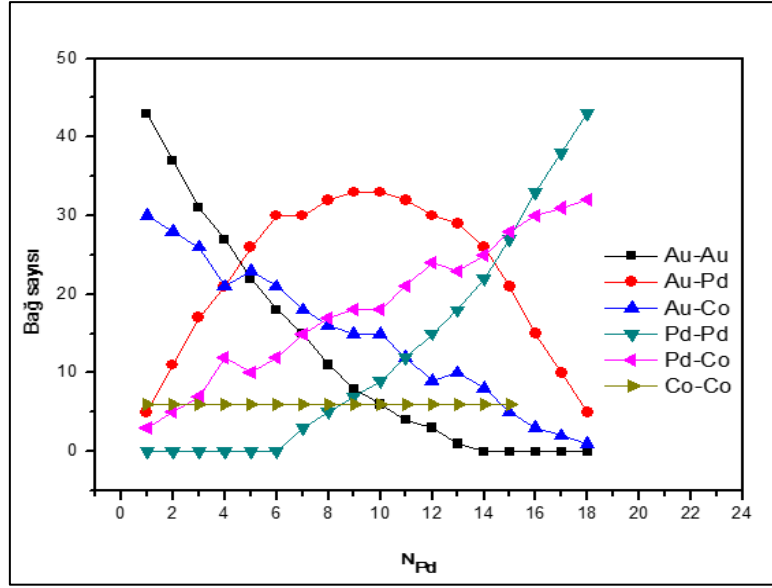
$\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.24 te gösterilmiştir.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin global minimum yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.24'te bu koşullar sağlanmış olup artan Pd sayısına göre enerji değerleri ve en kararlı kompozisyon gösterilmektedir.



Şekil 3.24 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Şekil 3.24'te gösterildiği gibi $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_4\text{Pd}_{11}\text{Au}_8$ nanoalaşımı üçlü ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.25'de gösterilmiştir.

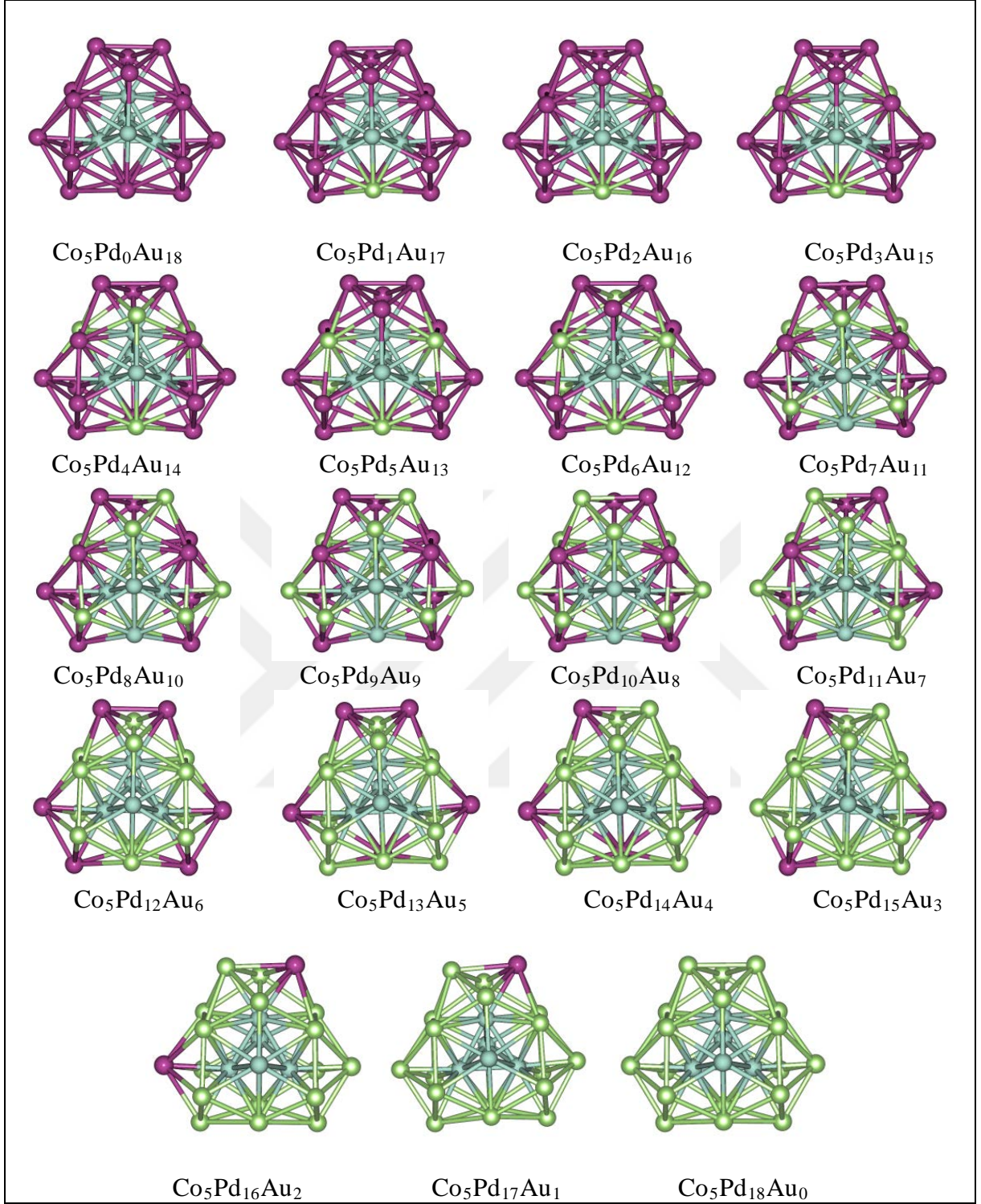


Şekil 3.25 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.25'e göre $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısının parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_4\text{Pd}_6\text{Au}_{13}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_4\text{Pd}_{14}\text{Au}_5$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında merkeze yerleşen Co atomlarının kendi arasında yapmış olduğu Co-Co bağ sayısı sabit kalmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımı tüm kompozisyonlarında toplam 87 adet bağ yapmaktadır.

3.3.3 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ ($x=0, 18$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayısı değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinden yararlanılarak kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.26' da gösterilmiştir.

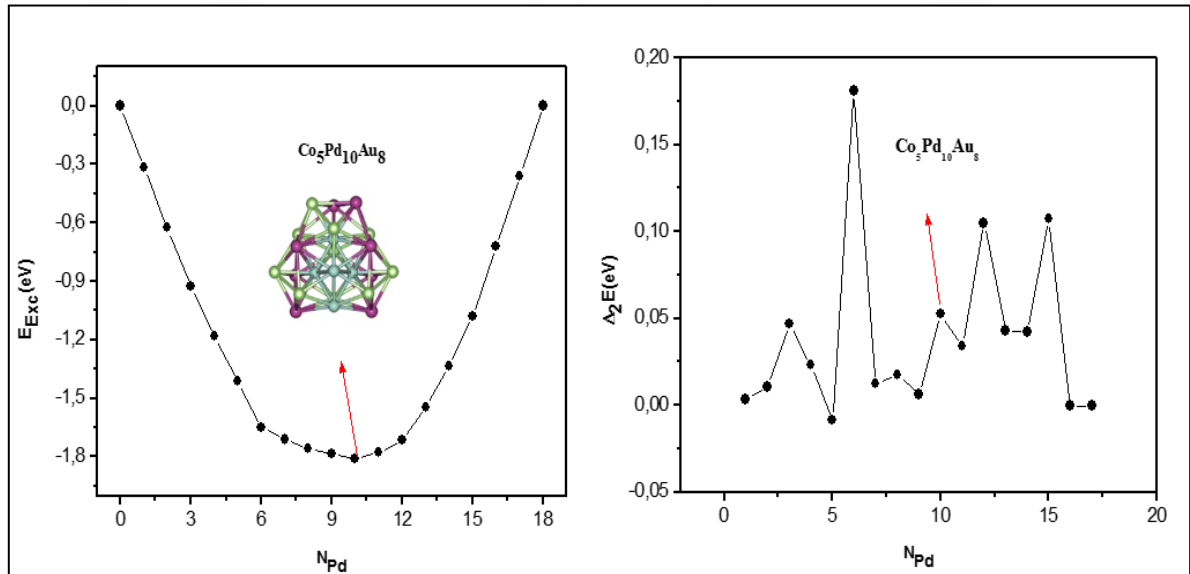


Şekil 3.26 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Şekil 3.26 da gösterildiği gibi $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı artırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır.

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları çoklu ikosahedral yapıdadır. Co atomları merkeze yerleşerek yerini korumuştur. Co atomları tüm kompozisyonlarda çift üçgen piramit yapıdadır. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılar incelendiğinde artan Pd sayısı ile Pd atomları öncelikle her bir ikosahedral yapının ekvator bölgesine yerleşerek Co atomlarına yakın noktalarda bulunmayı tercih etmektedir. Au atomları ise yapının uç noktalarına yerleşmektedir.

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.27 de gösterilmiştir.

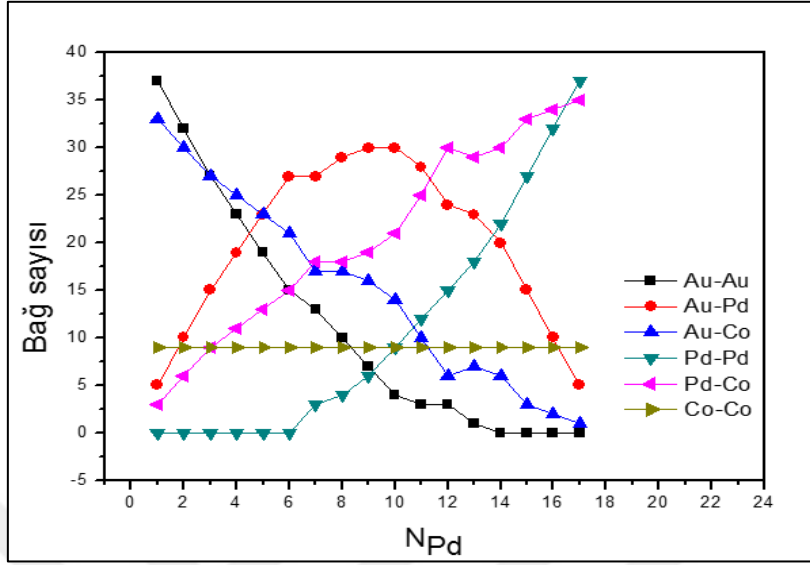


Şekil 3.27 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en kararlı kompozisyonun en kararlı yapılar arasındaki en düşük enerjiye sahip olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.27’de fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup şekil üzerinde en kararlı yapı ve yapıya karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_5\text{Pd}_{10}\text{Au}_8$ olmaktadır.

Şekil 3.27’de gösterildiği gibi $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_5\text{Pd}_{10}\text{Au}_8$ nanoalaşımını üçlü ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde

kariřim deseni oluřturmaktadır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalařımında en kararlı yapıları oluřturan atomların birbirleri arasında yapmıř olduđu bađ sayıları Őekil 3.28’de gsterilmiřtir.



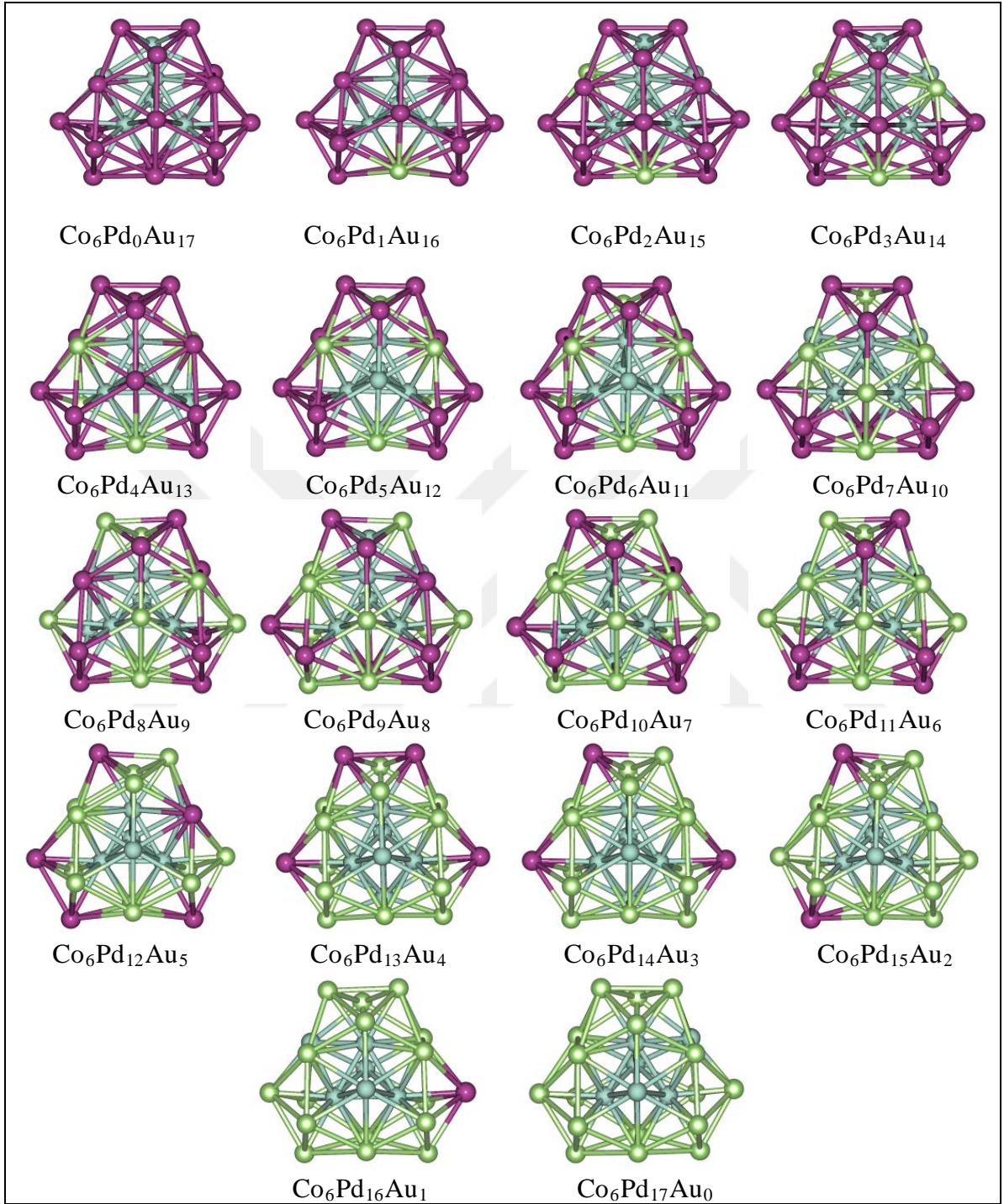
Őekil 3.28 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalařımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına gbre bađ sayılarının deđiřimi.

Őekil 3.28’e gbre $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalařımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına gbre bađ sayılarının deđiřimi incelendiđinde Au-Pd bađ sayısı en kararlı yapıya kadar artmıř daha sonra azalmaya bařlayarak, parabolik bir karakter izlediđi gzlemlenmektedir. Au-Co bađ sayısı dzenli bir azalma gsterirken Pd-Co bađ sayısı tam tersine dzenli bir artıř eđilimindedir. Pd atomları $\text{Co}_5\text{Pd}_6\text{Au}_{12}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bađ yapmamıřtır. Buna karřılık Au atomları ise $\text{Co}_5\text{Pd}_{14}\text{Au}_4$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bađ yapmamıřtır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalařımının tvm kompozisyonlarında merkeze yerleřen Co atomlarının kendi arasında yapmıř olduđu Co-Co bađ sayısı sabit kalmaktadır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalařımı tvm kompozisyonlarında toplam 87 adet bađ yapmaktadır.

3.3.4 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ Nanoalařımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ ($x= 0, 17$) nanoalařımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları deđiřtirilerek farklı kompozisyonlar oluřturulmuřtur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yntemiyle sečilerek $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalařımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiđi çizilmiřtir. Çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiđinde en

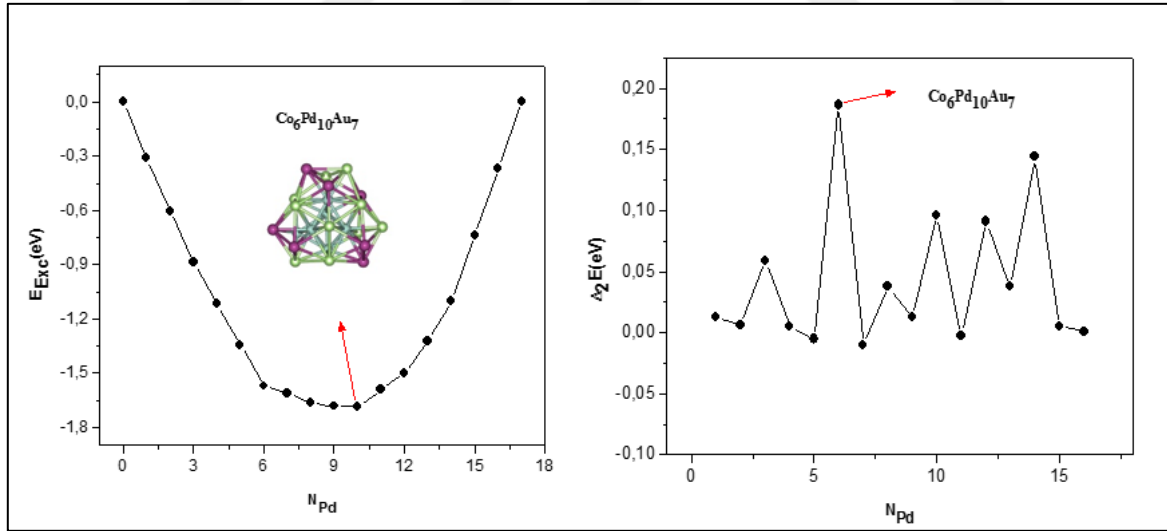
kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.29’ da gösterilmiştir.



Şekil 3.29 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Şekil 3.29 da gösterildiği gibi $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları çoklu ikosahedral yapıdadır. Co atomları merkeze yerleşerek yerini korumuştur. Co atomları tüm kompozisyonlarda tek şapkalı çift üçgen piramit yapıdadır. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılar incelendiğinde artan Pd sayısı ile Pd atomları öncelikle her bir ikosahedral yapının ekvator bölgesine yerleşerek Co atomlarına yakın noktalarda bulunmayı tercih etmektedir. Azalan Au atomları ise belli bir sayıdan sonra Pd atomları ile yer değiştirerek yapının uç noktalarına yerleşmektedir.

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.30 da gösterilmiştir.

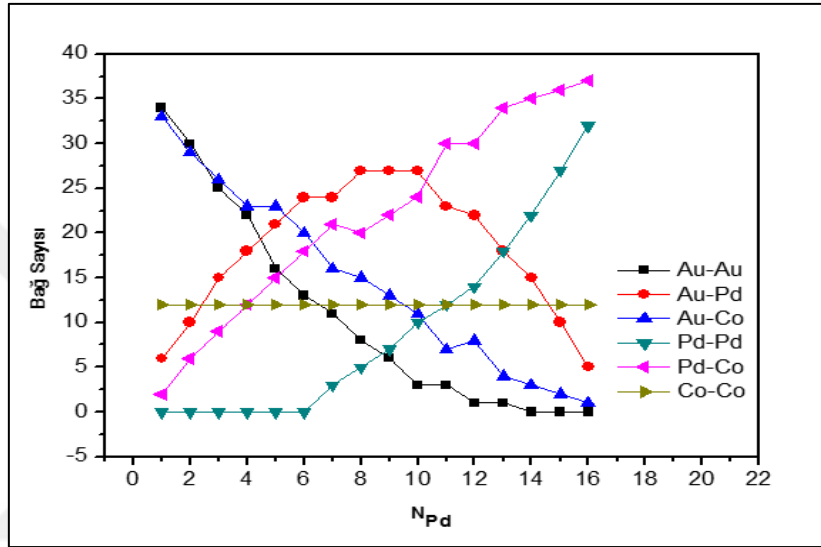


Şekil 3.30 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.30'da fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu

koşullar sağlanmış olup şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerji gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_6\text{Pd}_{10}\text{Au}_7$ olmaktadır.

Şekil 3.30’da gösterildiği gibi $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_6\text{Pd}_{10}\text{Au}_7$ nanoalaşımı üçlü ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.31’de gösterilmiştir.

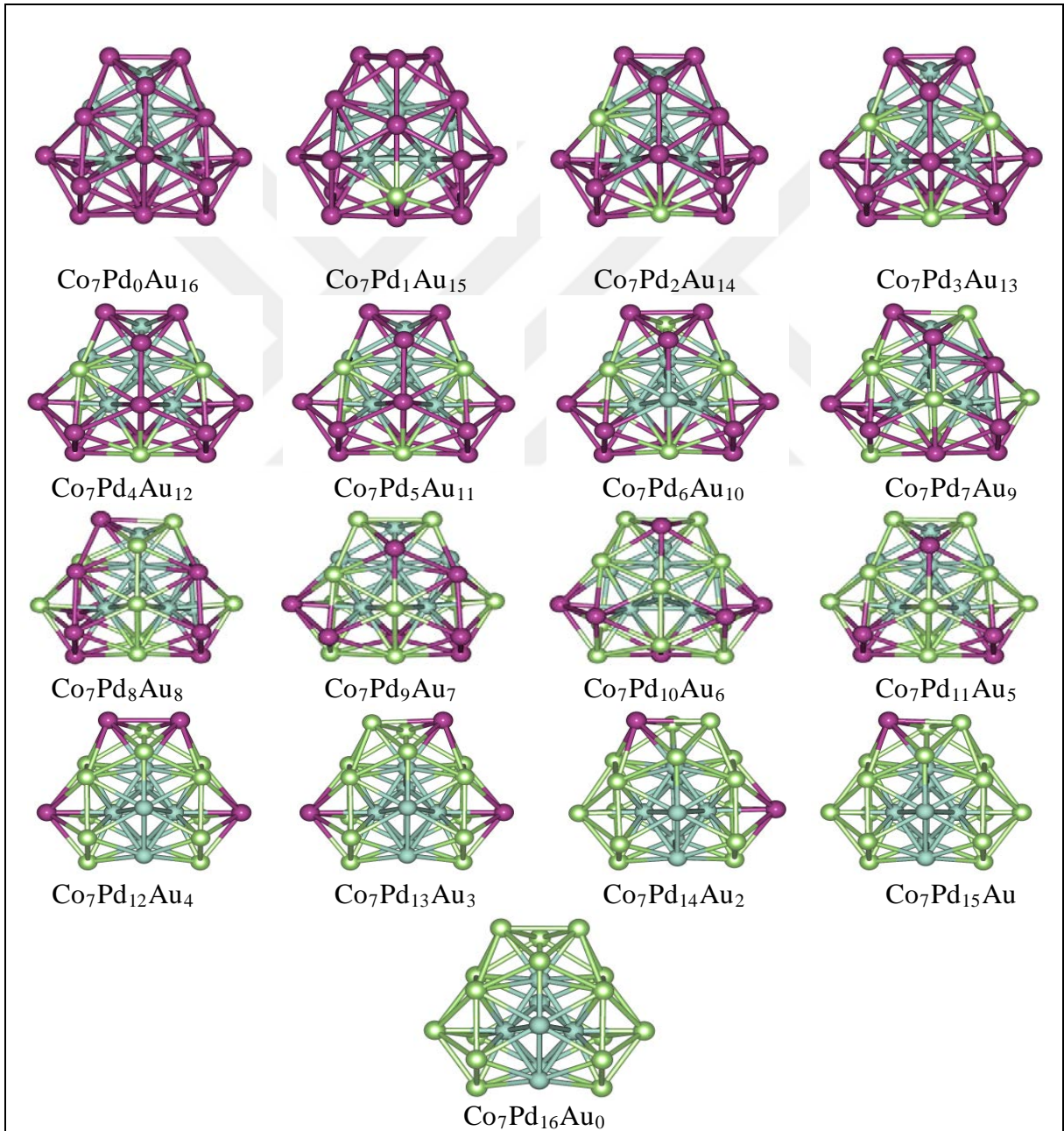


Şekil 3.31 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.31’a göre $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı yapıya kadar artış gösterip daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_6\text{Pd}_6\text{Au}_{11}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_6\text{Pd}_{14}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında merkeze yerleşen Co atomlarının kendi arasında yapmış olduğu Co-Co bağ sayısı sabit kalmaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 87 adet bağ bulunmaktadır.

3.3.5 Co₇Pd_xAu_{16-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

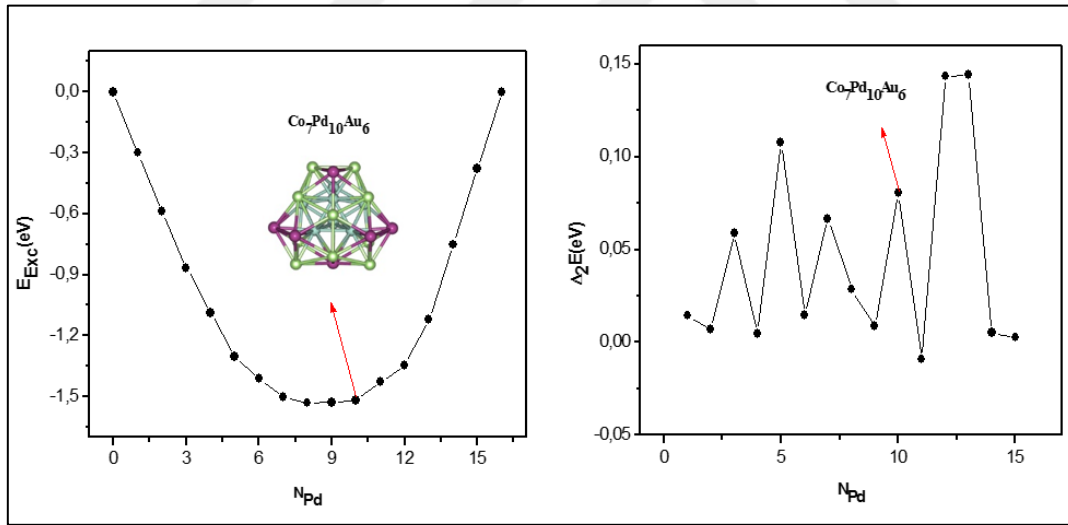
Co₇Pd_xAu_{16-x} (x= 0, 16) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. Co₇Pd_xAu_{16-x} nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.32’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.32 Co₇Pd_xAu_{16-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Şekil 3.32 de gösterildiği gibi $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları çoklu ikosahedral yapıdadır. Co atomları merkeze yerleşerek yerini korumuştur. Co atomları tüm kompozisyonlarda çift beşgen piramit yapıdadır. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları incelendiğinde artan Pd sayısı ile Pd atomları öncelikle her ekvator bölgesinde orta noktalara yerleşerek Co atomlarına yakın noktalarda bulunmayı tercih etmektedir. Azalan Au atomları ise belli bir sayıdan sonra Pd atomları ile yer değiştirerek yapının uç noktalarına yerleşmektedir.

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.33 de gösterilmiştir.

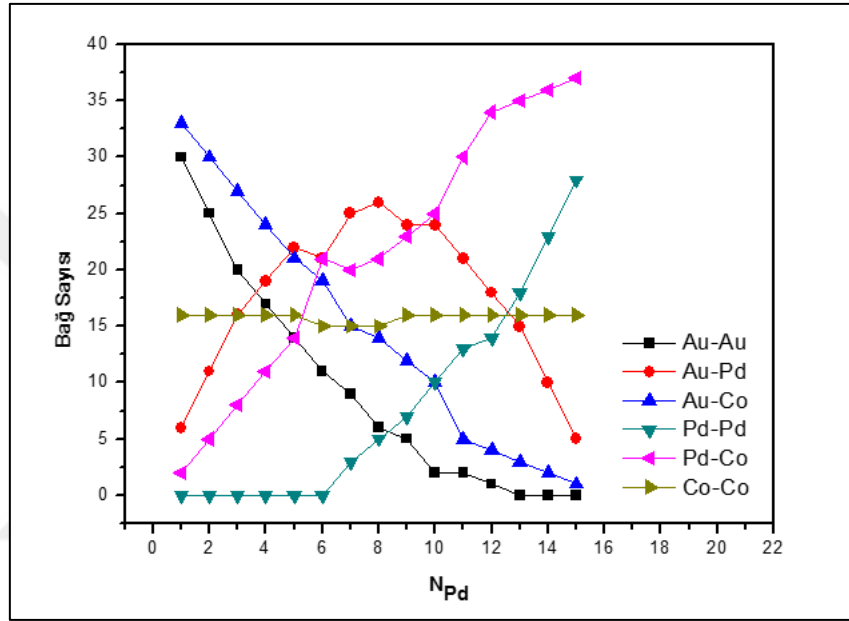


Şekil 3.33 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.33'de fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu

koşullar sağlanmış olup şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerji gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_7\text{Pd}_{10}\text{Au}_6$ olmaktadır.

Şekil 3.33’de gösterildiği gibi $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_7\text{Pd}_{10}\text{Au}_6$ nanoalaşımı üçlü ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.34’de gösterilmiştir.

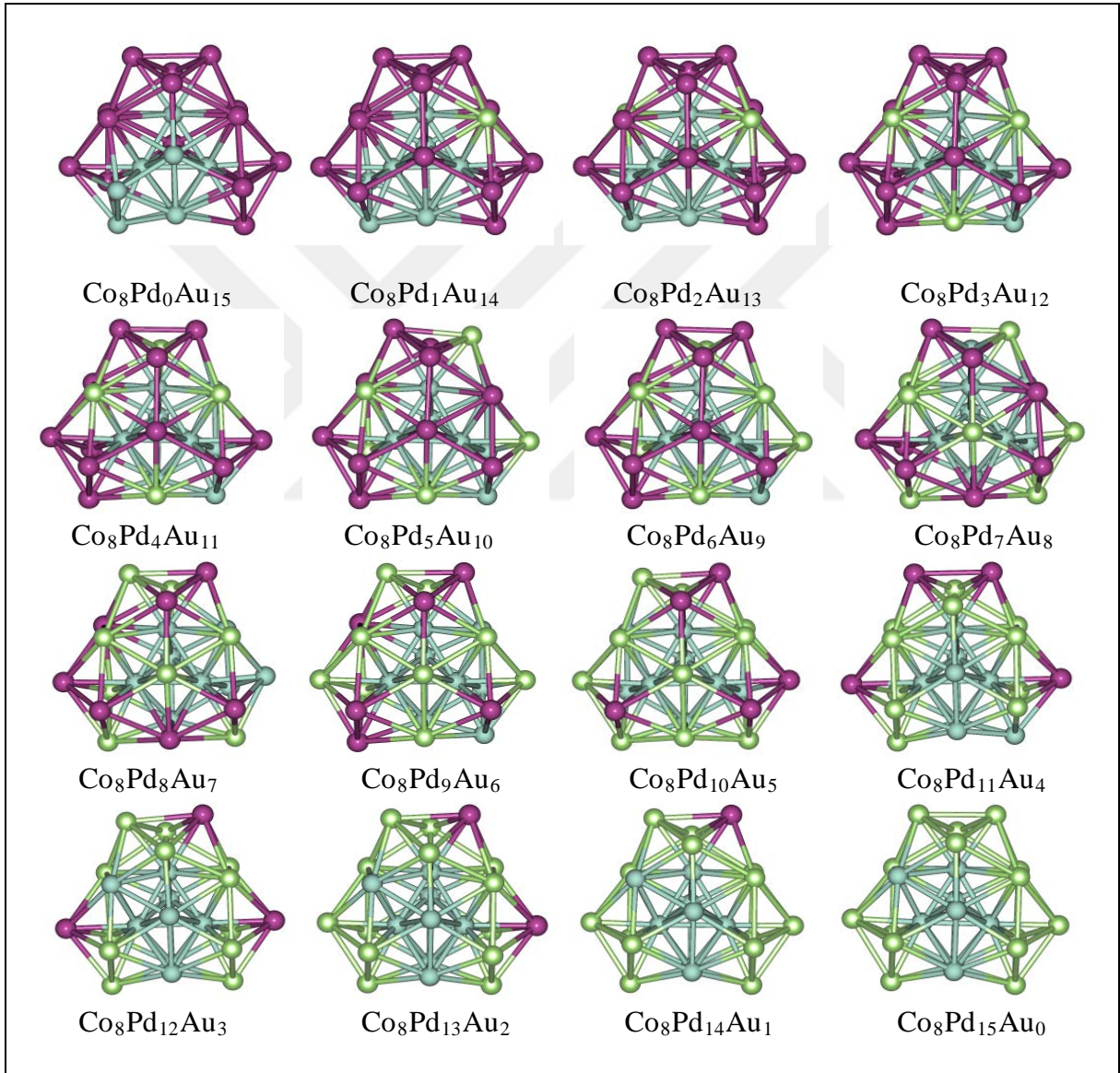


Şekil 3.34 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.34’e göre $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı yapıya kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlemektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Aynı şekilde artan Pd sayısı ile birlikte Au-Au bağ sayısı azalırken, Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_7\text{Pd}_9\text{Au}_7$ kompozisyonuna kadar artış göstermiş, bu kompozisyondan sonra ise azalmaya başlamıştır. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_6\text{Au}_{10}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_7\text{Pd}_{13}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_7\text{Pd}_6\text{Au}_{10}$ kompozisyonunda tüm bağ sayıları azalırken

Pd-Co bağ sayısı, azalan toplam bağ sayısı kadar artış göstermektedir. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında merkeze yerleşen Co atomlarının kendi arasında yapmış olduğu Co-Co bağ sayısı $\text{Co}_7\text{Pd}_6\text{Au}_{10}$ kompozisyonu ile $\text{Co}_7\text{Pd}_8\text{Au}_8$ kompozisyonu arasında Co-Co bağ sayısı 15'e düşmekte ve sonrasında tekrar 16 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 87 bağ oluşmaktadır.

3.3.6 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

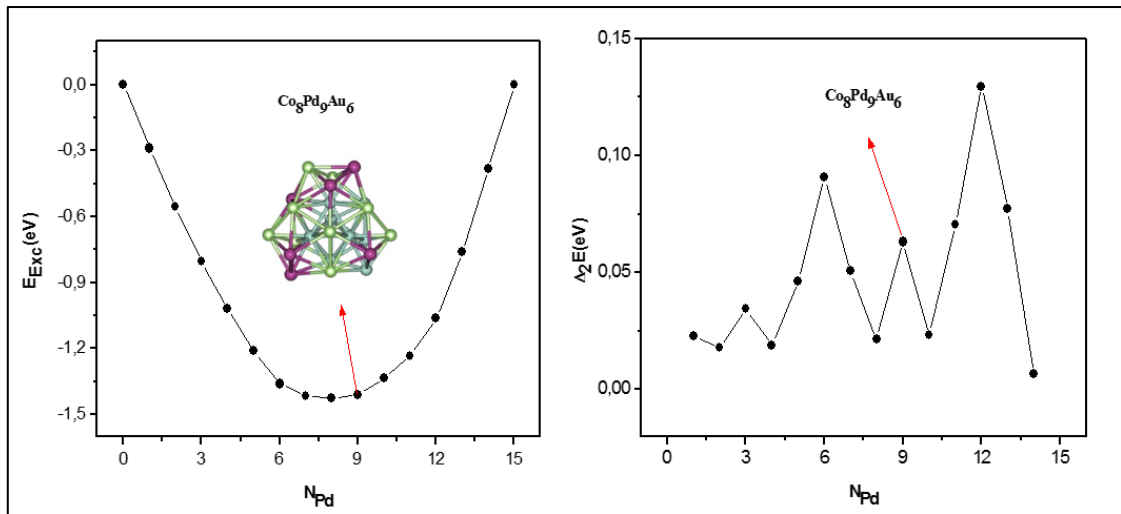


Şekil 3.35 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ ($x= 0, 15$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.35’ de gösterilmiştir.

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Merkeze yerleşen 3 Co atomu ile yüzeye yerleşen diğer Co atomları ile birleşerek tek şapkalı çift beşgen yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.36’ da gösterilmiştir.

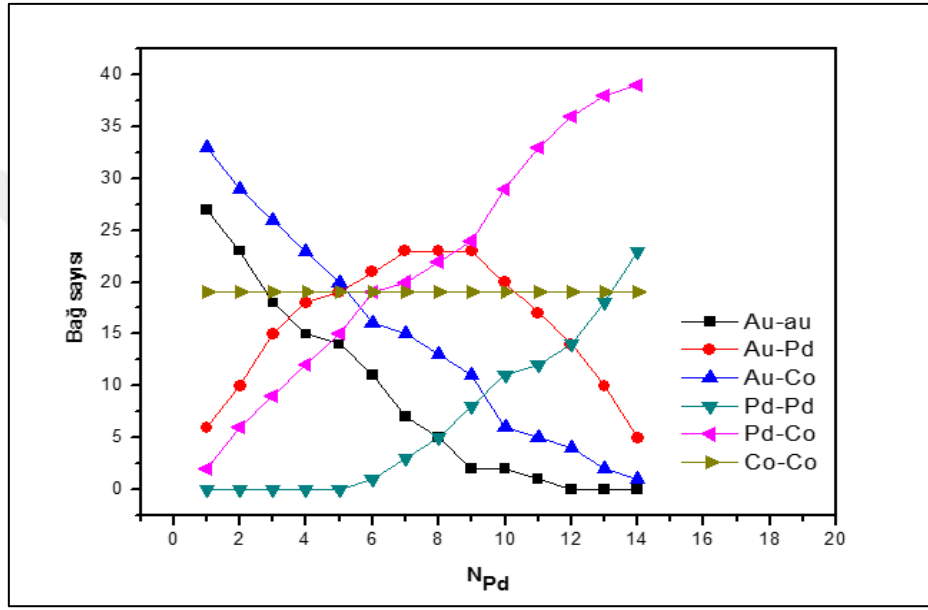


Şekil 3.36 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değer zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.36’da bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı

kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerji gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_8\text{Pd}_9\text{Au}_6$ olmaktadır.

Şekil 3.36'da gösterildiği gibi en kararlı kompozisyon olan $\text{Co}_8\text{Pd}_9\text{Au}_6$ nanoalaşımı üçlü ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.37'de gösterilmiştir.

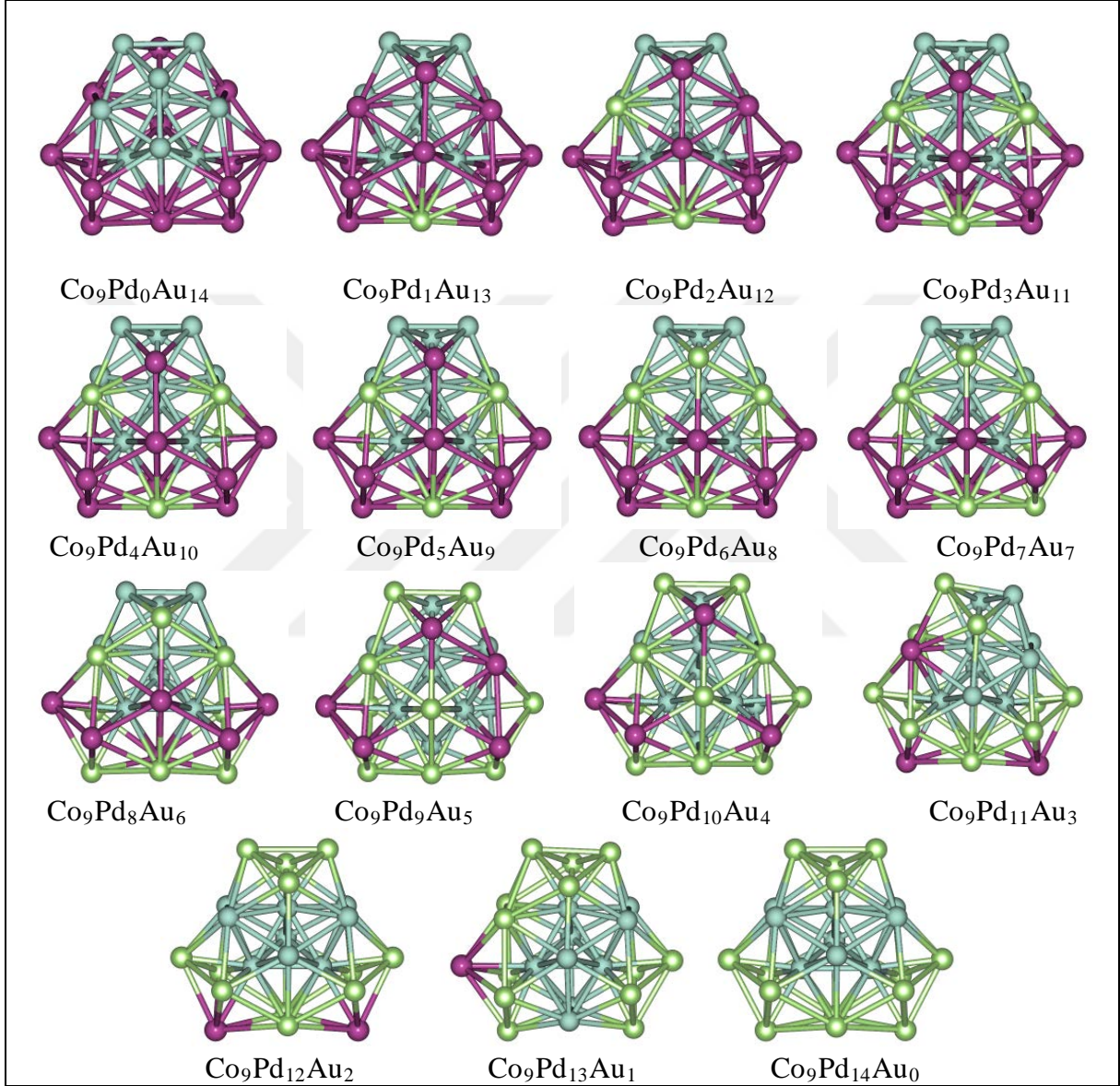


Şekil 3.37 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.37'ye göre $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı yapıya kadar artmakta daha sonra ise azalarak parabolik bir karakter izlemektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_8\text{Pd}_6\text{Au}_9$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_8\text{Pd}_{12}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında merkeze yerleşen Co atomlarının kendi arasında yapmış olduğu Co-

Co bağı 16 adet bağ yaparak sabit kalmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 87 bağ oluşmaktadır.

3.3.7 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri



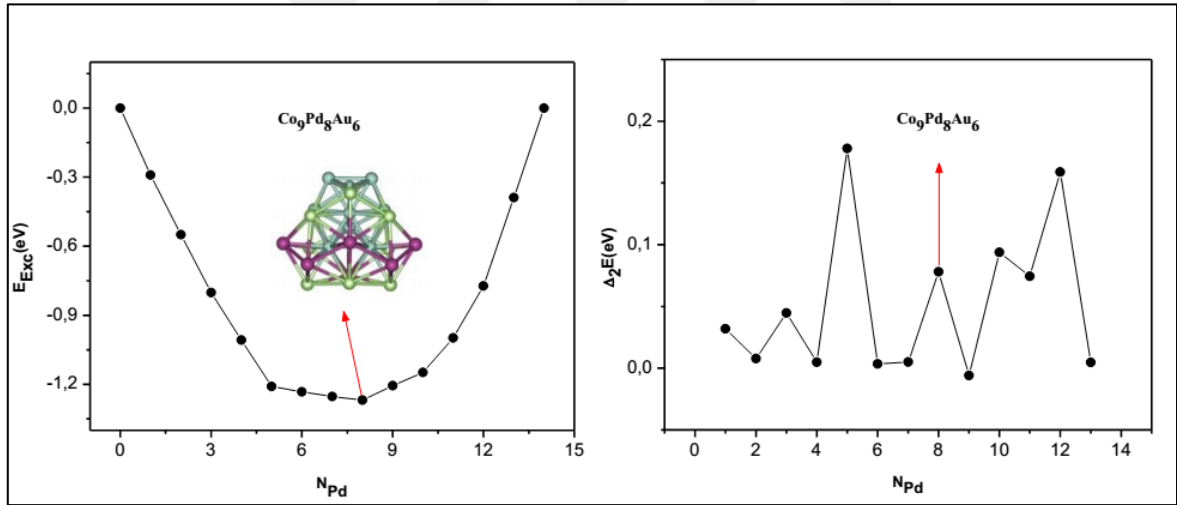
Şekil 3.38 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ ($x= 0, 14$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve

ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.38’ de gösterilmiştir.

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Merkeze yerleşen 3 Co atomu ile yüzeye yerleşen diğer Co atomları ile birleşerek çift şapkalı çift beşgen yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

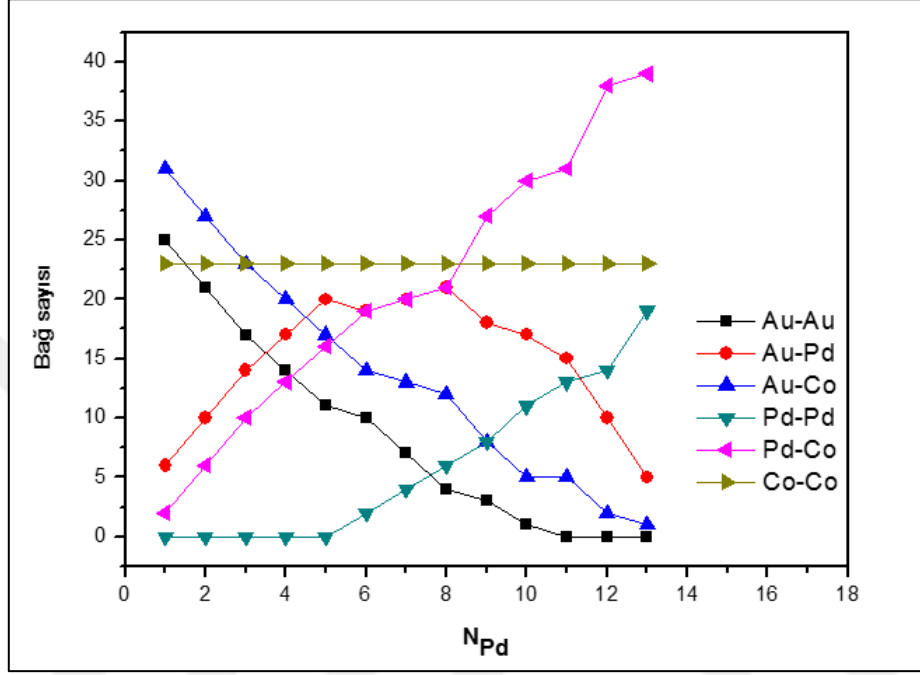
$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.39’ da gösterilmiştir.



Şekil 3.39 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.39’da fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_9\text{Pd}_8\text{Au}_6$ olmaktadır.

Şekil 3.39’da gösterildiği gibi $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_9\text{Pd}_8\text{Au}_6$ nanoalaşımı üçlü ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.40’da gösterilmiştir.

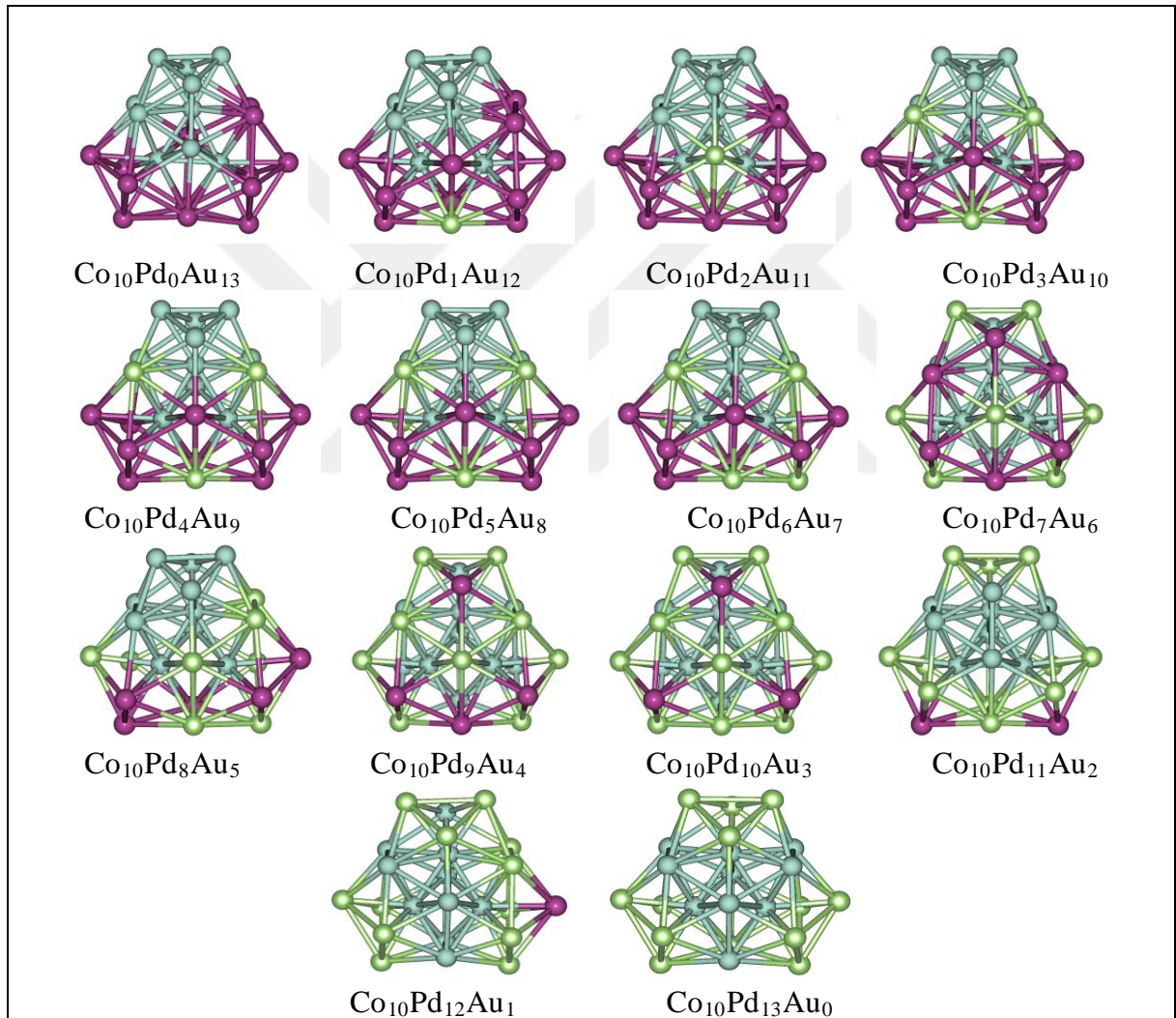


Şekil 3.40 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.40’a göre $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_9\text{Pd}_5\text{Au}_9$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_9\text{Pd}_{11}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında merkeze yerleşen Co atomlarının kendi arasında yapmış olduğu Co-Co bağı 23 olacak şekilde sabit kalmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 87 bağ oluşmaktadır.

3.3.8 Co₁₀Pd_xAu_{13-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

Co₁₀Pd_xAu_{13-x} (x= 0, 13) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek Co₁₀Pd_xAu_{13-x} nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen Co₁₀Pd_xAu_{13-x} nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. Co₁₀Pd_xAu_{13-x} nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.41’ de gösterilmiştir.

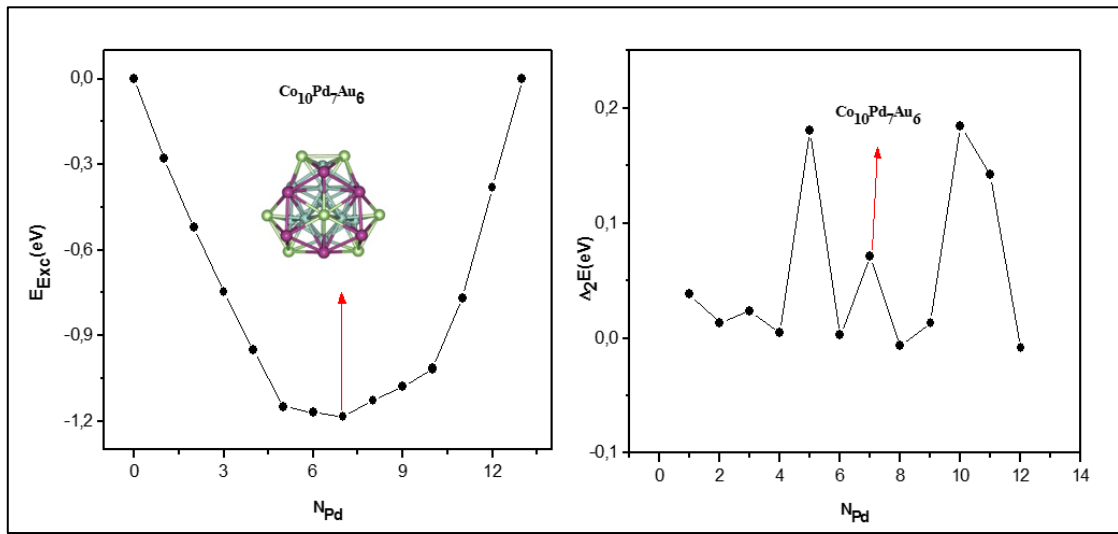


Şekil 3.41 Co₁₀Pd_xAu_{13-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Co₁₀Pd_xAu_{13-x} nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Merkeze yerleşen 3 Co atomu ile yüzeye

yerleşen diğer Co atomları ile birleşerek üç şapkalı çift beşgen yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

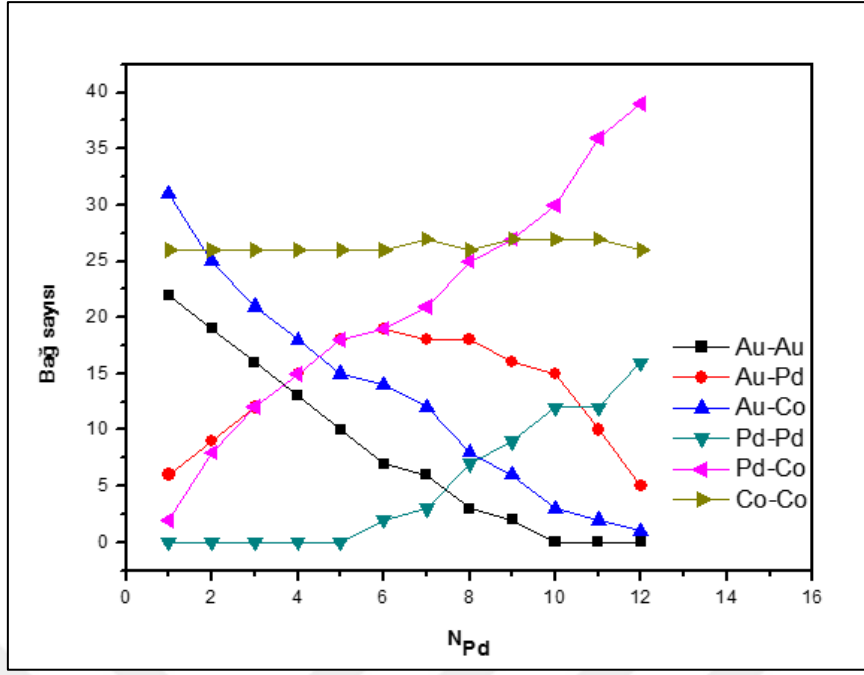
$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.42’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.42 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerjisi grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.42’de, fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{10}\text{Pd}_7\text{Au}_6$ olmaktadır.

Şekil 3.42’de gösterildiği gibi $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{10}\text{Pd}_7\text{Au}_6$ nanoalaşımı üçlü ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.43’de gösterilmiştir.



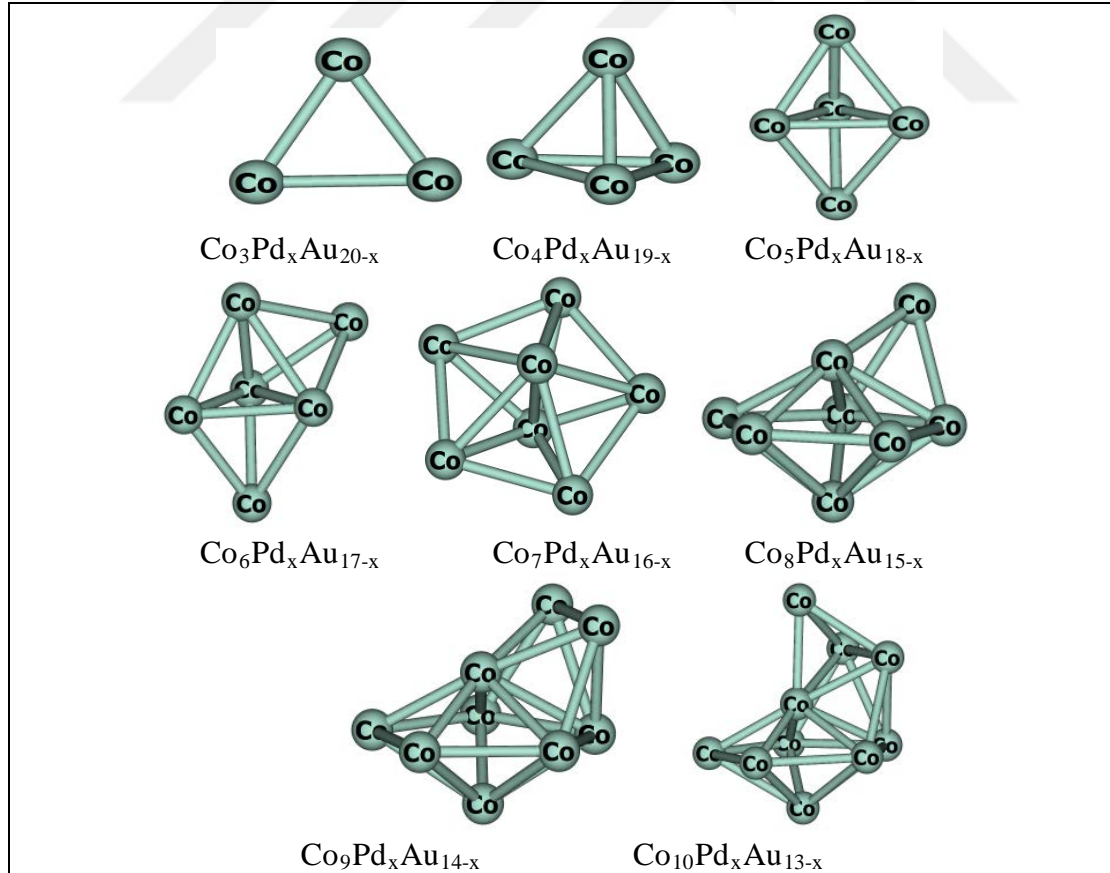
Şekil 3.43 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.43'e göre $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyondan bir önceki kompozisyona kadar artmakta en kararlı kompozisyondan sonra ise azalarak, parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{10}\text{Pd}_5\text{Au}_8$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{10}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Bunun nedeni ise, 3 adet Au atomunun yapının en uç noktalarına yerleşmesi olmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının $\text{Co}_{10}\text{Pd}_7\text{Au}_6$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_9\text{Au}_4$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{10}\text{Au}_3$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{11}\text{Au}_2$ kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 27, diğer tüm kompozisyonlarda 26 adettir. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 87 adet bağ oluşmaktadır.

Bu bölümde 23 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının seçili $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$, $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$, $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ kompozisyonları yapısal özellikleri incelenmiştir. Genel olarak $\text{Co}_3\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$, $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$,

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{15-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{14-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{13-x}$ nanoalaşımalarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları incelendiğinde tüm kompozisyonlar üçlü ikosahedral yapıdadır. Merkeze her zaman Co atomları yerleşmektedir. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Tüm nanoalaşımaların en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi grafiği incelendiğinde ise, Co-Co bağ sayısı genellikle sabit kalmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise her bir nanoalaşımda en kararlı yapıya kadar artmakta, daha sonrasında azalmaya başlamaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd bağ sayısı genellikle yapıda 5 adet Pd atomu bulunana kadar oluşmamaktadır. Daha sonrasında artan bir grafik çizmektedir. Au-Au bağ sayısı ise, genellikle 4 adet Au atomu kalana kadar oluşmakta daha sonra oluşmamaktadır. Artan Pd sayısına göre tüm nanoalaşımlarda Au-Co bağı azalırken Pd-Co bağı artmaktadır. Tüm 23 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımında toplam bağ sayısı 87 olmaktadır.

Co-Pd-Au nanoalaşım kümesinde Co sayısına göre oluşturulan nanoalaşımaların kendi aralarında bağ yapan Co atomlarının yapısı Şekil 3.44'te gösterilmektedir.



Şekil 3.44 23 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.

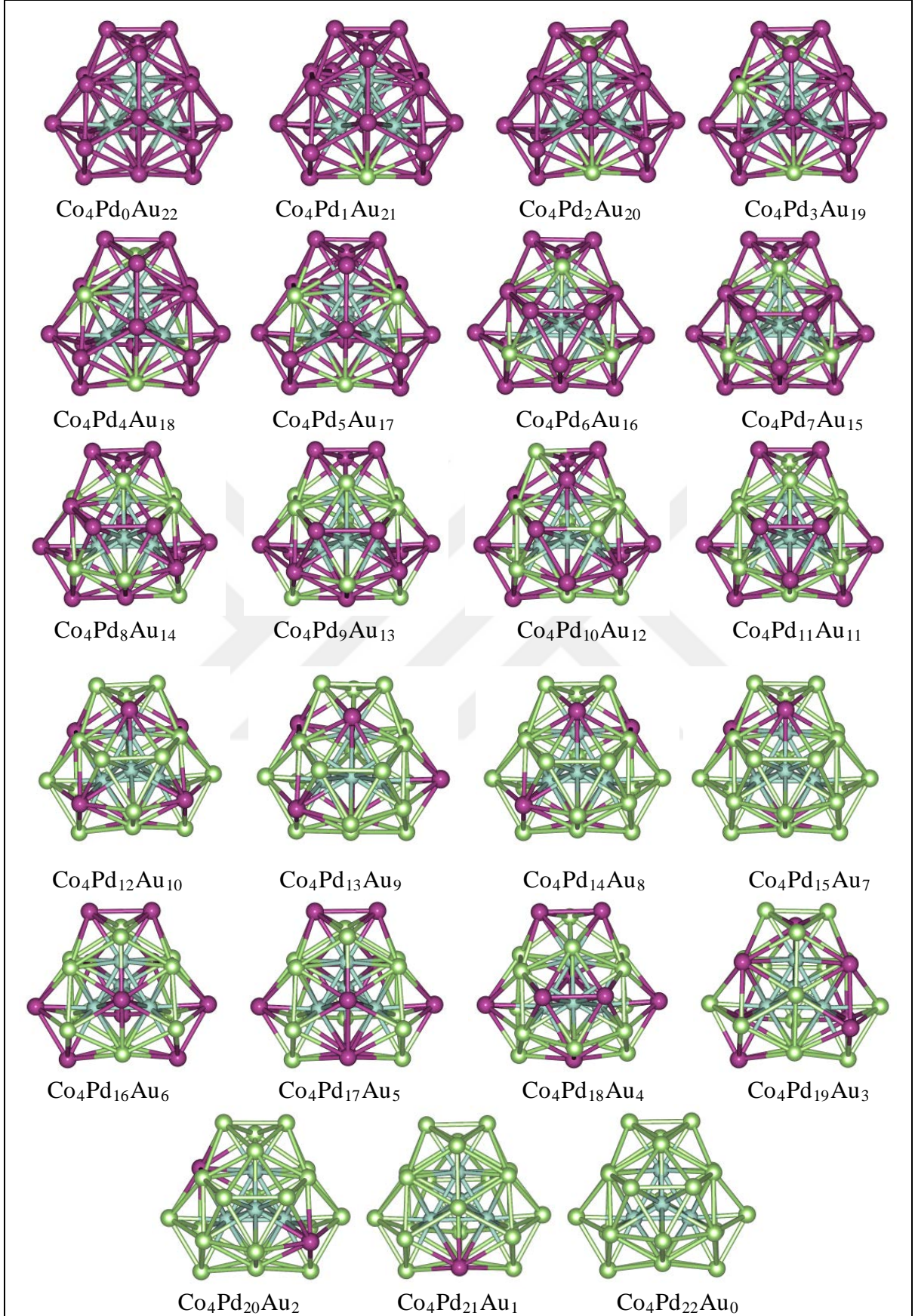
3.4 26 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMLARIN YAPISAL ÖZELLİKLERİ

Bu bölümde toplam atom sayısı 26 olan Co-Pd-Au nanoalaşımının seçili kompozisyonlarının global minimum yapıları ve en kararlı kompozisyon bulunarak yapısal özellikleri incelenmiştir. İncelenen kompozisyonların fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri çizilmiştir. Her nanoalaşım için global minimum yapı grafik üzerinde gösterilmiştir. 26 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımı için Co atomu sayısı sabit tutularak Pd atom sayısı artırılmış ve Au atomu sayıları azaltılmıştır.

3.4.1 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

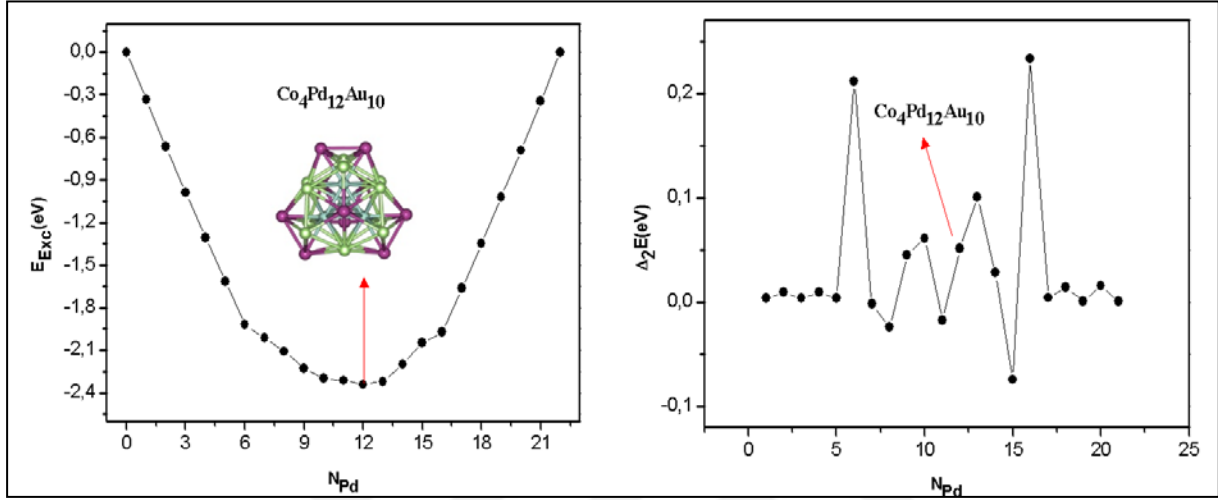
$\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ ($x= 0, 22$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.45' de gösterilmiştir.

$\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Merkeze yerleşen 4 Co atomu birleşerek üçgen piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.



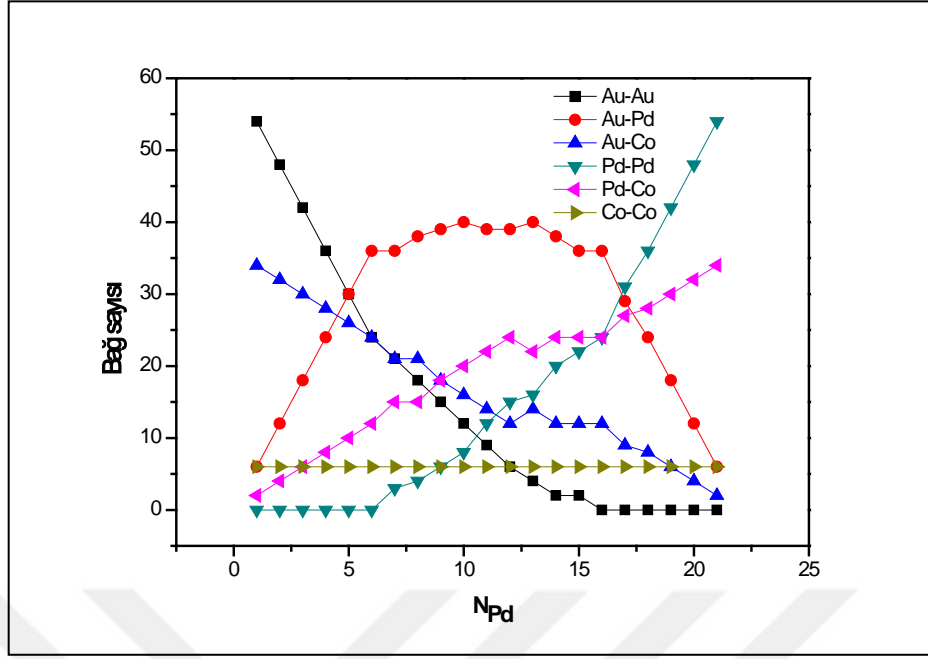
Şekil 3.45 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.46’ da gösterilmiştir.



Şekil 3.46 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

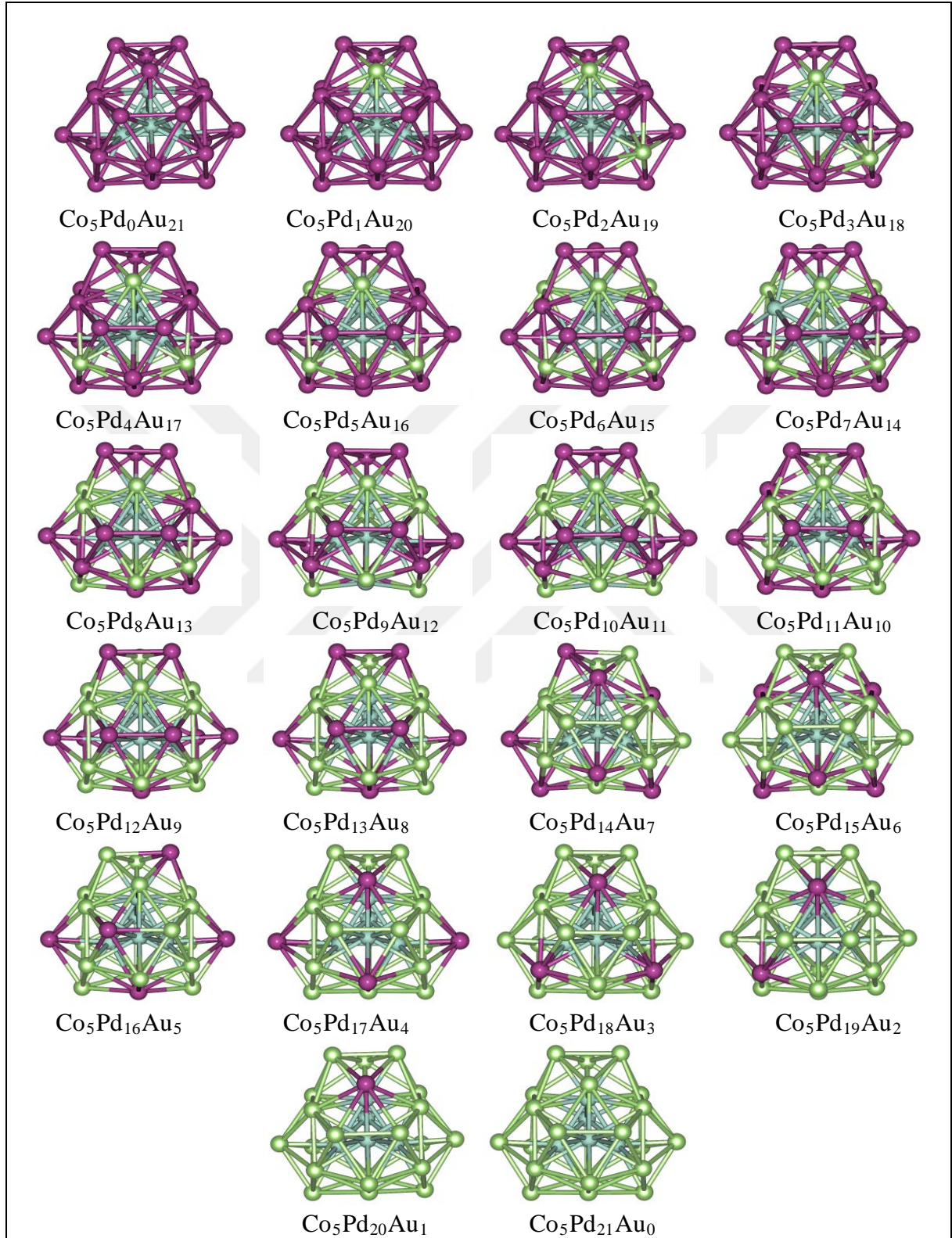
Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.46’da fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_4\text{Pd}_{12}\text{Au}_{10}$ olmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_{12}\text{Au}_{10}$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.47’de gösterilmiştir.



Şekil 3.47 $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.47'ye göre $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta en kararlı kompozisyon ve $\text{Co}_4\text{Pd}_{13}\text{Au}_9$ kompozisyonu arasında dalgalanma gösterdikten sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_4\text{Pd}_6\text{Au}_{16}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Bunun sebebi Pd atomlarının Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için birbirlerinden uzak noktalara yerleşmesi olmaktadır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_4\text{Pd}_{16}\text{Au}_6$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Bunun nedeni ise, 6 adet Au atomunun yapının en uç noktalarına yerleşmesi olmaktadır. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı sabit kalarak toplam 6 adettir. $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 102 adet bağ oluşmaktadır.

3.4.2 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ Nanoalařının Yapısal Özellikleri

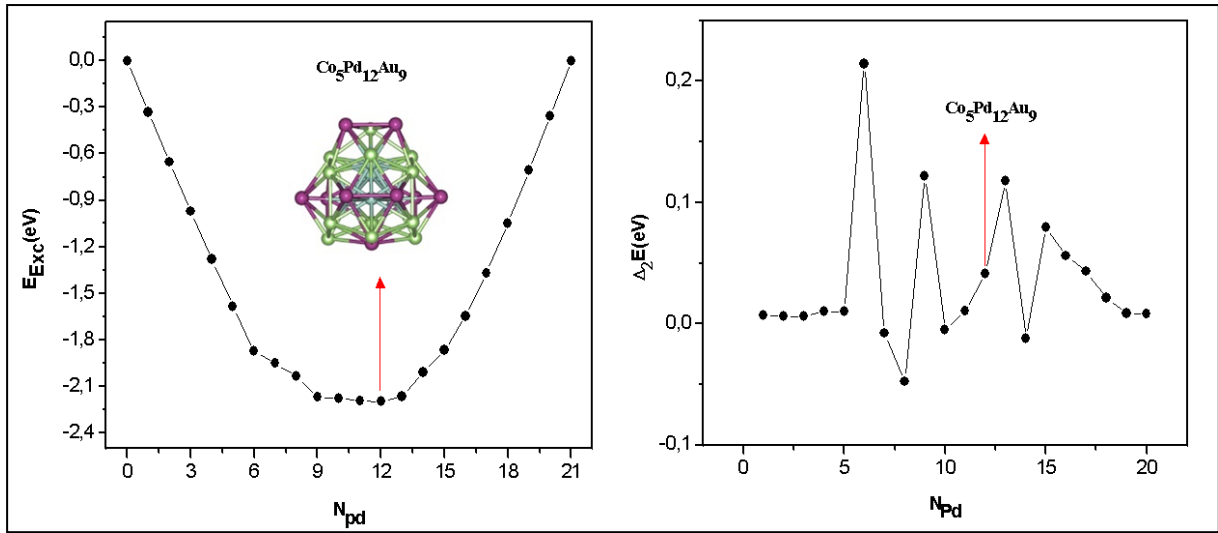


Şekil 3.48 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalařlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ ($x= 0, 21$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.48’ de gösterilmiştir.

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Merkeze yerleşen 5 Co atomu birleşerek üçgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek Çizilen $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.49’ da gösterilmiştir.

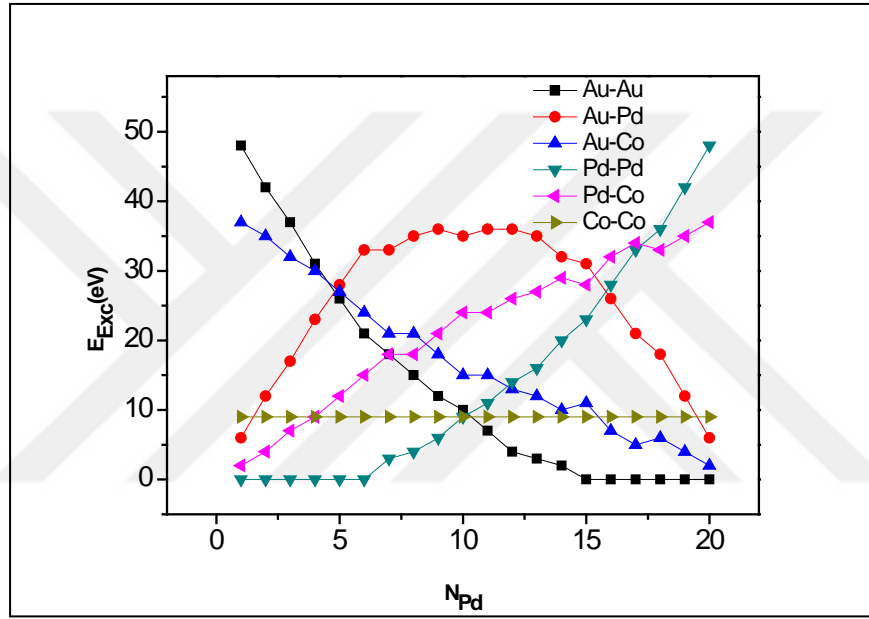


Şekil 3.49 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması

beklenmektedir. Şekil 3.49’da fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_5\text{Pd}_{12}\text{Au}_9$ olmaktadır.

Şekil 3.49’da gösterildiği gibi $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_5\text{Pd}_{12}\text{Au}_9$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.50’de gösterilmiştir.

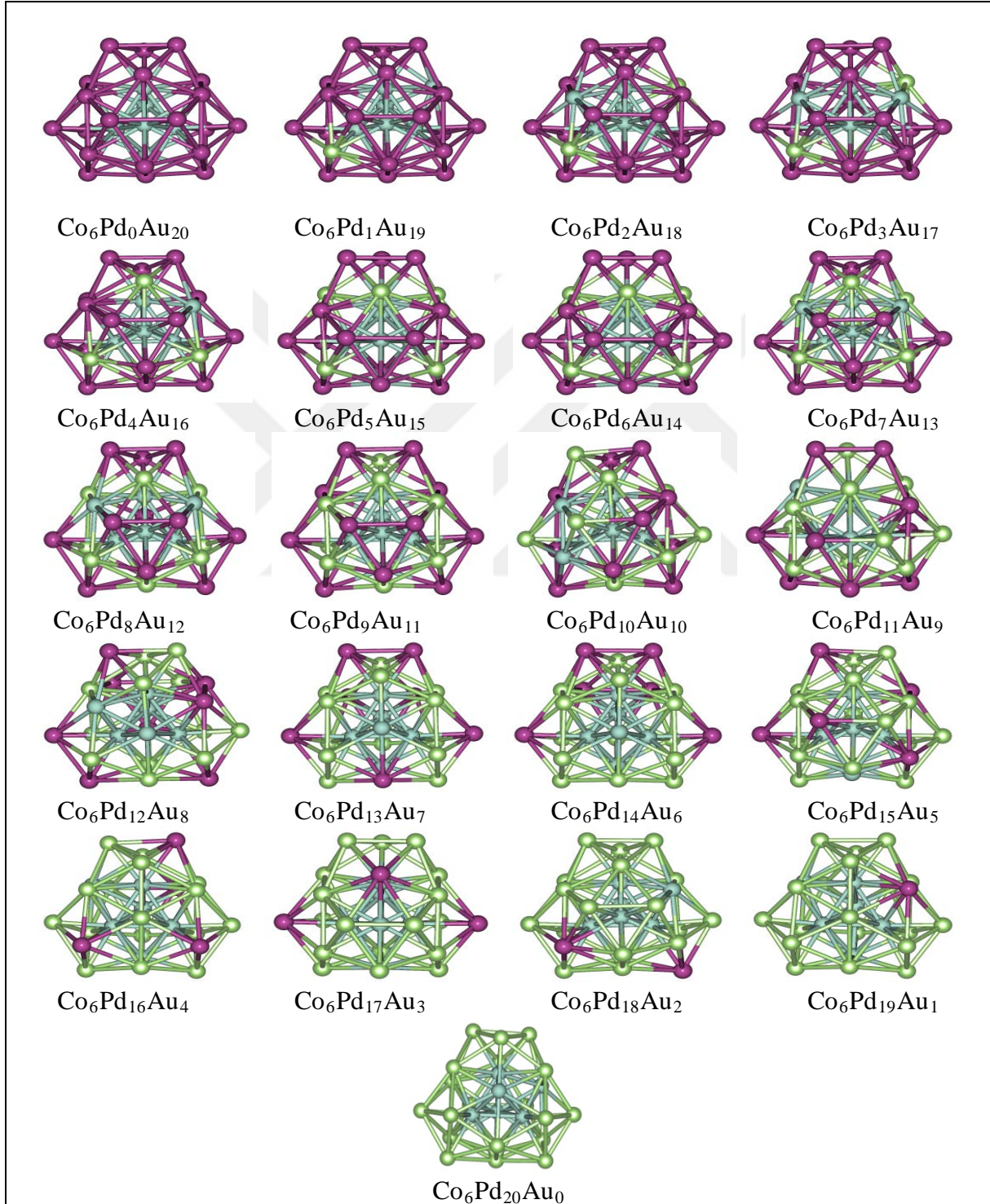


Şekil 3.50 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.49’a göre $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_5\text{Pd}_6\text{Au}_{15}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_5\text{Pd}_{15}\text{Au}_6$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$

nanoalařımının tüm kompozisyonlarında Co-Co baę sayısı sabit kalarak toplam 9 adettir. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalařımının tüm kompozisyonlarında toplam 102 adet baę oluřmaktadır.

3.4.3 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ Nanoalařımının Yapısal Özellikleri

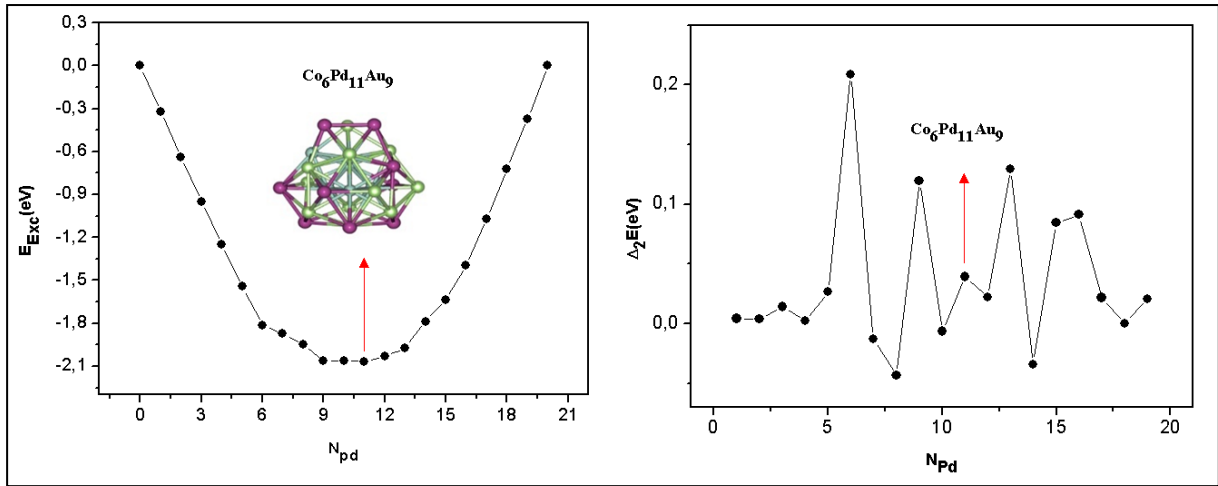


Őekil 3.51 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalařımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeřil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ ($x= 0, 20$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.51’ de gösterilmiştir.

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek tek şapkalı üçgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek çizilen $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.52’ de gösterilmiştir.

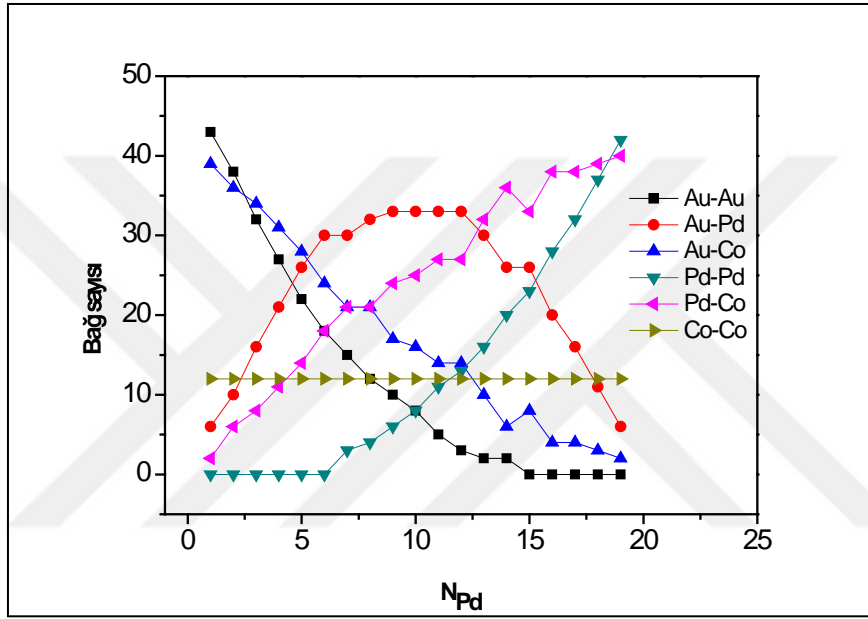


Şekil 3.52 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.52’de Fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu

koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_6\text{Pd}_{11}\text{Au}_9$ olmaktadır.

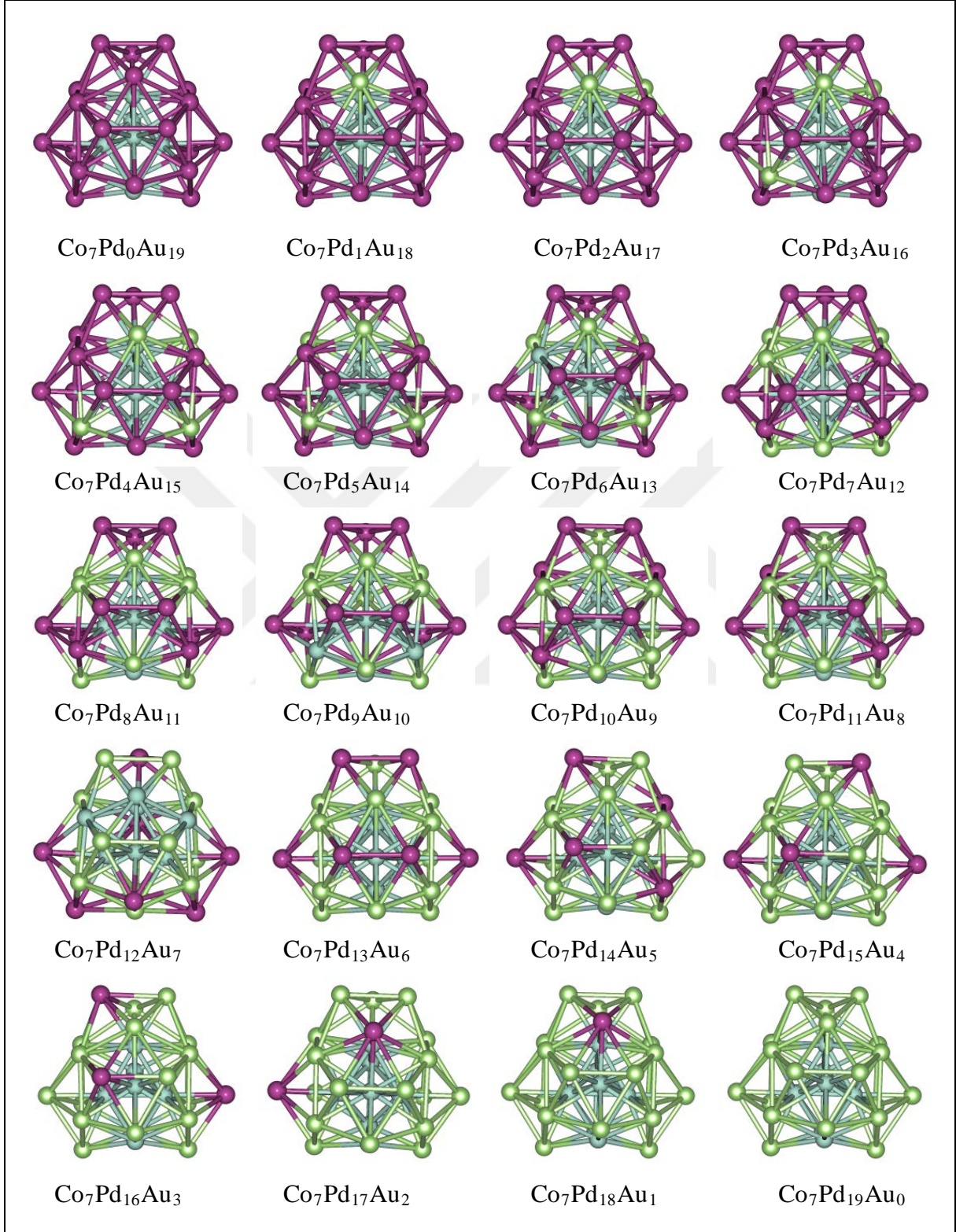
Şekil 3.52’de gösterildiği gibi $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_6\text{Pd}_{11}\text{Au}_9$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.53’de gösterilmiştir.



Şekil 3.53 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.53’e göre $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_6\text{Pd}_6\text{Au}_{14}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_6\text{Pd}_{15}\text{Au}_5$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı sabit kalarak toplam 12 adettir. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 102 adet bağ oluşmaktadır.

3.4.4 Co₇Pd_xAu_{19-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

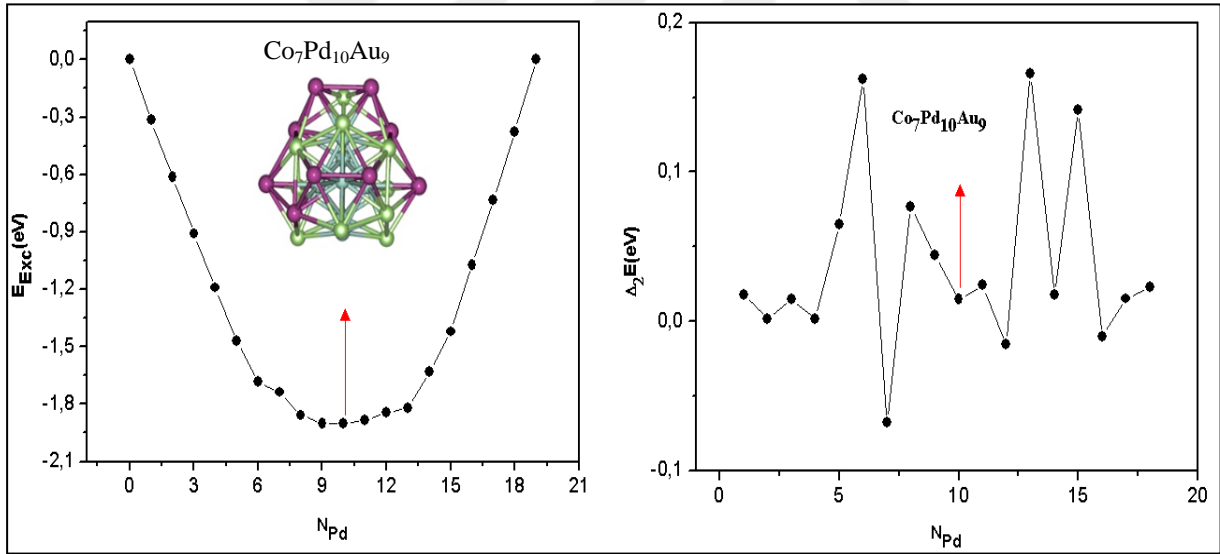


Şekil 3.54 Co₇Pd_xAu_{19-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir)

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ ($x= 0, 19$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.54’ de gösterilmiştir.

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek beşgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

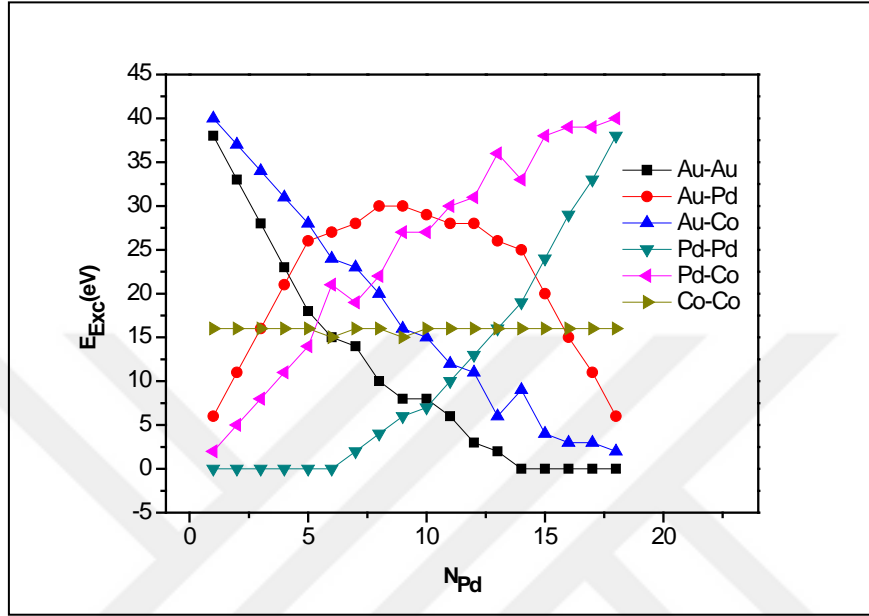
$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.55’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.55 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değer zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.54’de fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_7\text{Pd}_{10}\text{Au}_9$ olmaktadır.

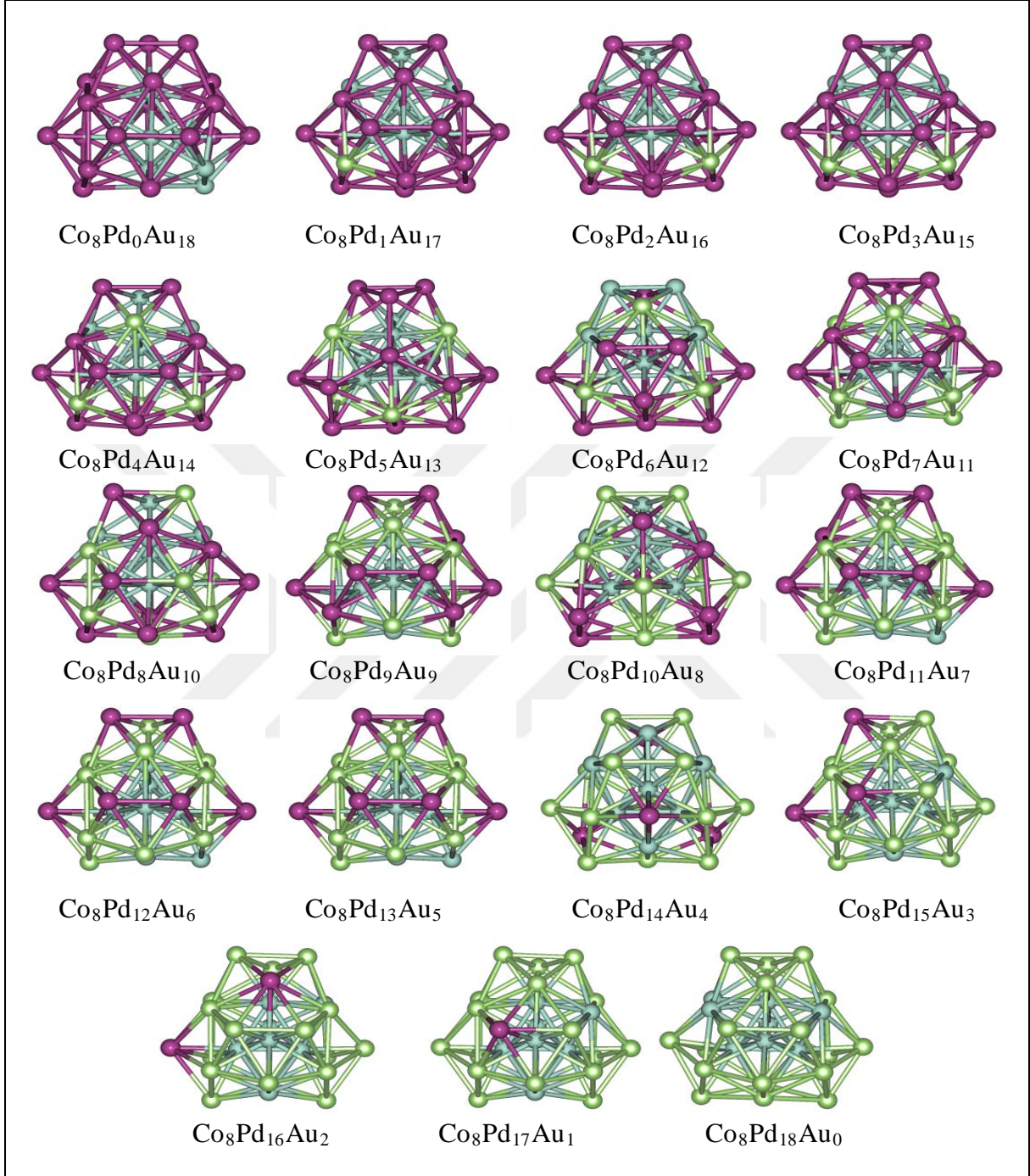
Şekil 3.55’de gösterildiği gibi $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_7\text{Pd}_{10}\text{Au}_9$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.56’da gösterilmiştir.



Şekil 3.56 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.56’ya göre $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_6\text{Au}_{13}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_7\text{Pd}_{14}\text{Au}_5$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı $\text{Co}_7\text{Pd}_6\text{Au}_{13}$ ve $\text{Co}_7\text{Pd}_9\text{Au}_{10}$ kompozisyonlarında 15 adet diğer tüm kompozisyonlarda sabit kalarak toplam 16 adettir. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 102 adet bağ oluşmaktadır.

3.4.5 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ Nanoalařımının Yapısal Özellikleri



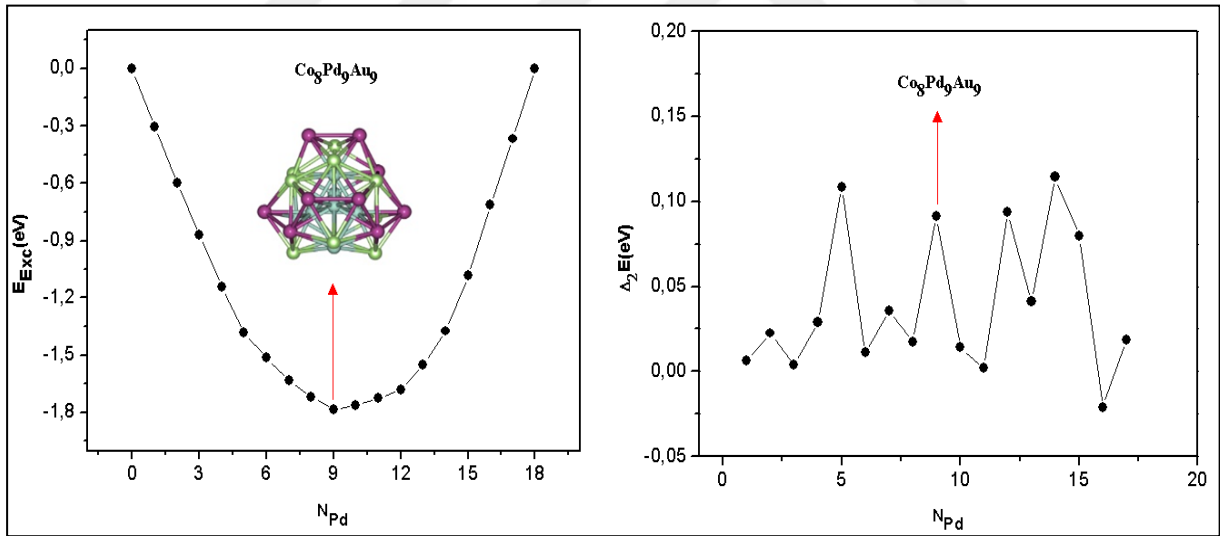
Şekil 3.57 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalařımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ ($x= 0, 18$) nanoalařımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları deęiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları

global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.57’ de gösterilmiştir.

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek tek şapkalı beşgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.58’ de gösterilmiştir.

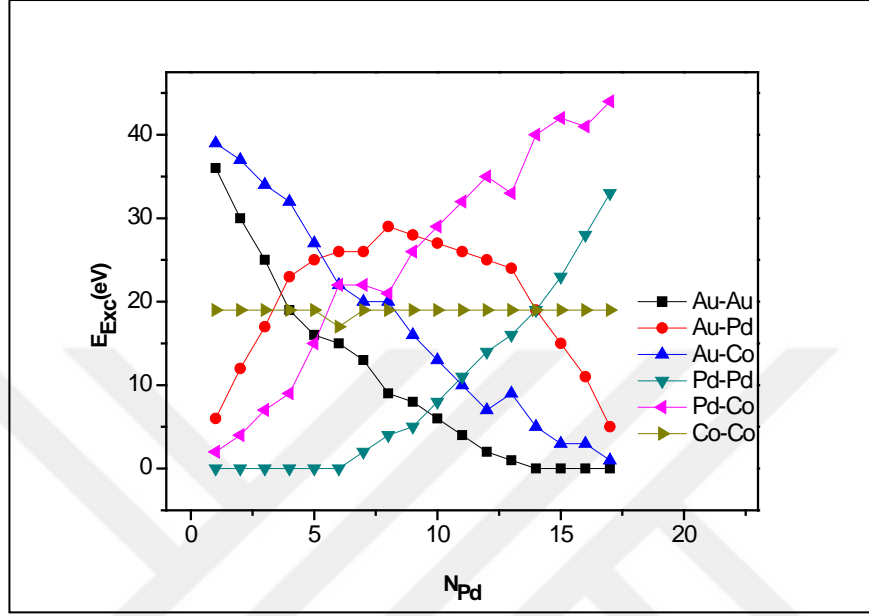


Şekil 3.58 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.58’de fazlalık enerji grafiğinde ve ikinci fark enerji grafiğinde bu

koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_8\text{Pd}_9\text{Au}_9$ olmaktadır.

Şekil 3.58’de gösterildiği gibi $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_8\text{Pd}_9\text{Au}_9$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni

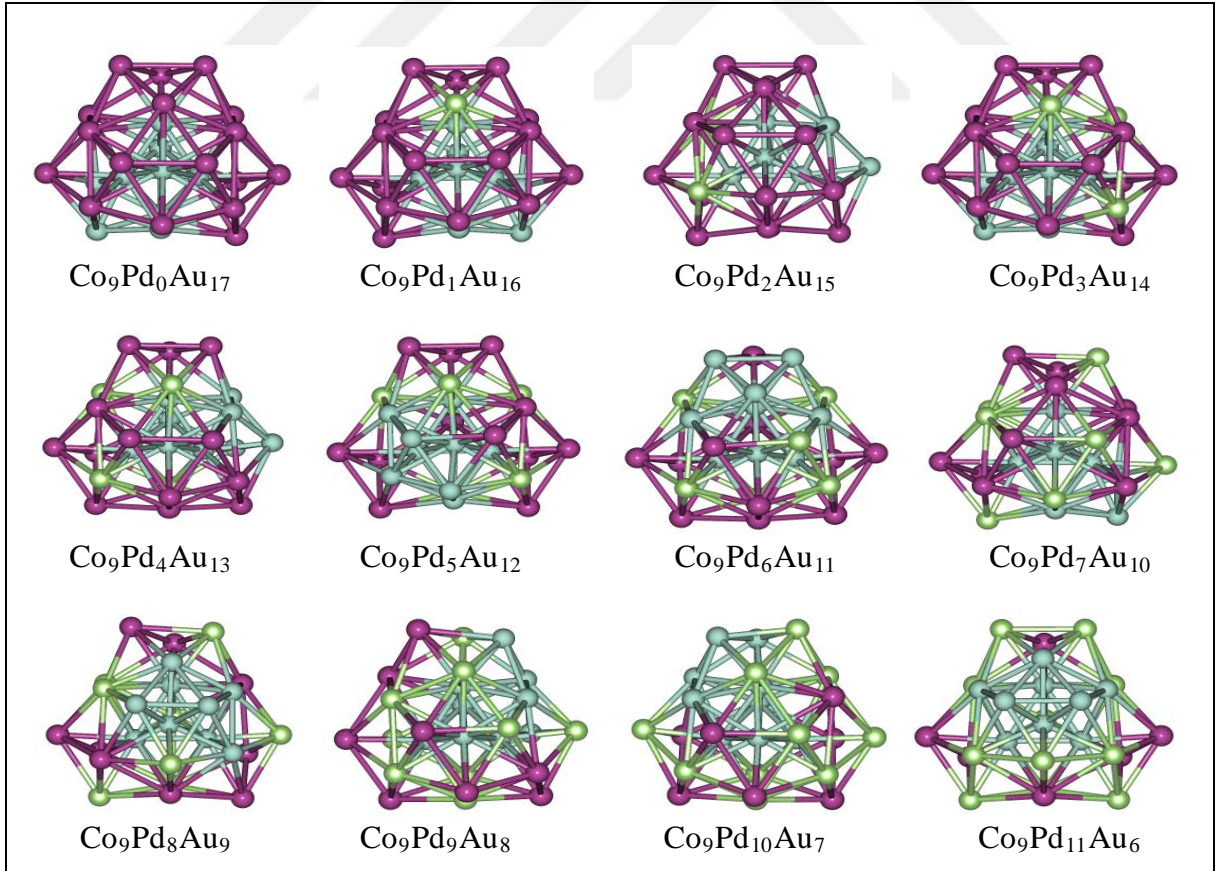


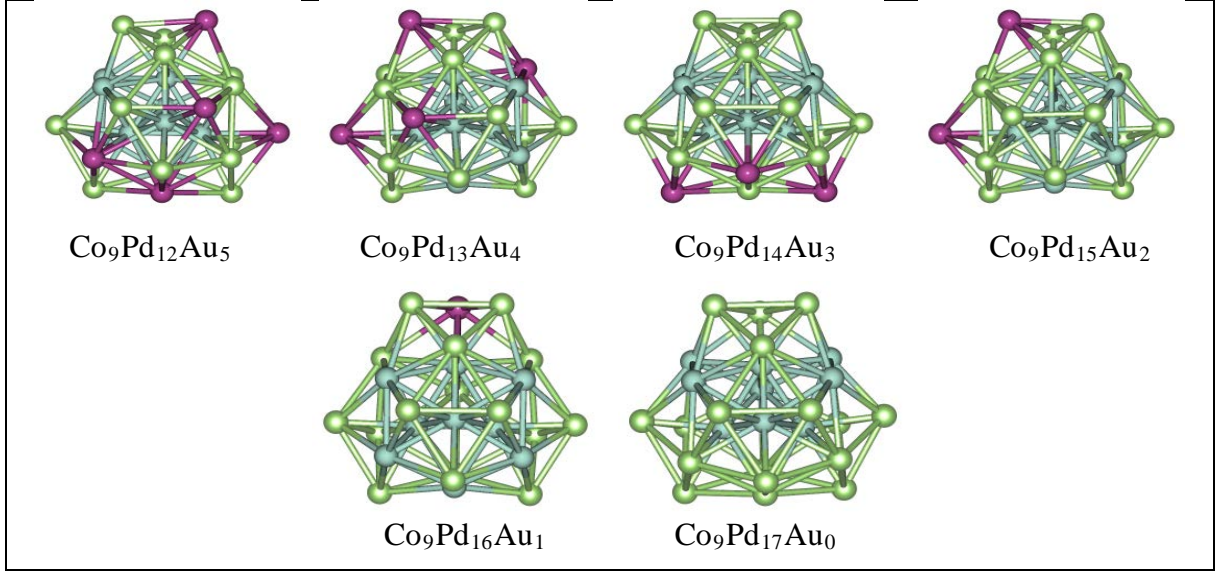
oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.59’da gösterilmiştir.

Şekil 3.59 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.59'a göre $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_8\text{Pd}_6\text{Au}_{12}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_8\text{Pd}_{14}\text{Au}_4$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı $\text{Co}_8\text{Pd}_6\text{Au}_{12}$ kompozisyonunda 17 adet diğer tüm kompozisyonlarda sabit kalarak toplam 19 adettir. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 102 adet bağ oluşmaktadır.

3.4.6 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri



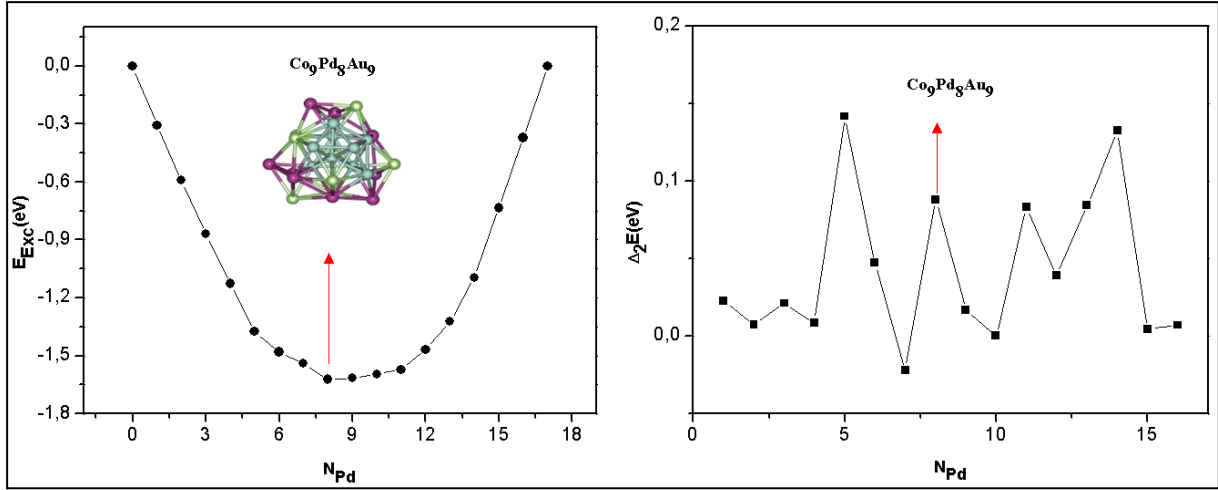


Şekil 3.60 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ ($x= 0, 17$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.60' da gösterilmiştir.

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek çift şapkalı beşgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

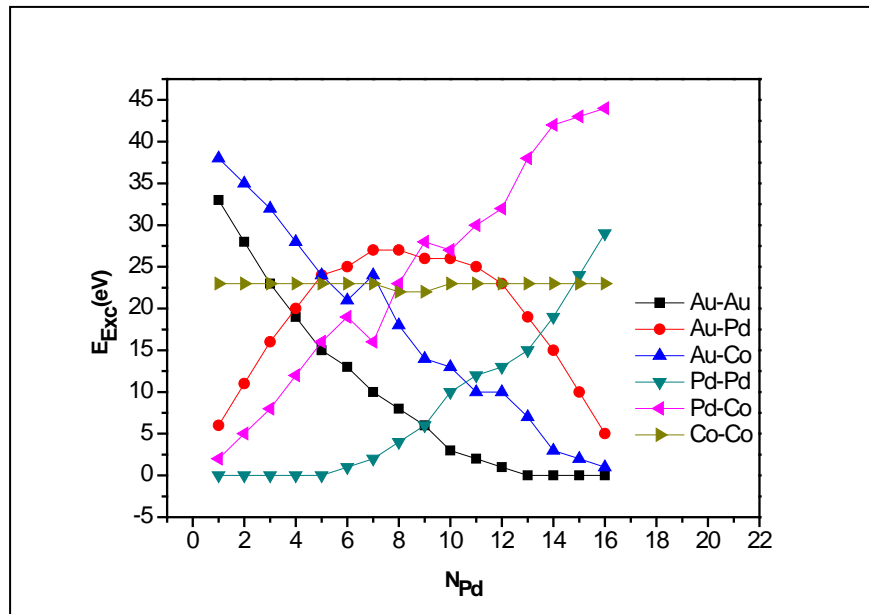
$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.61' de gösterilmiştir.



Şekil 3.61 $Co_9Pd_xAu_{17-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.61’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $Co_9Pd_8Au_9$ olmaktadır.

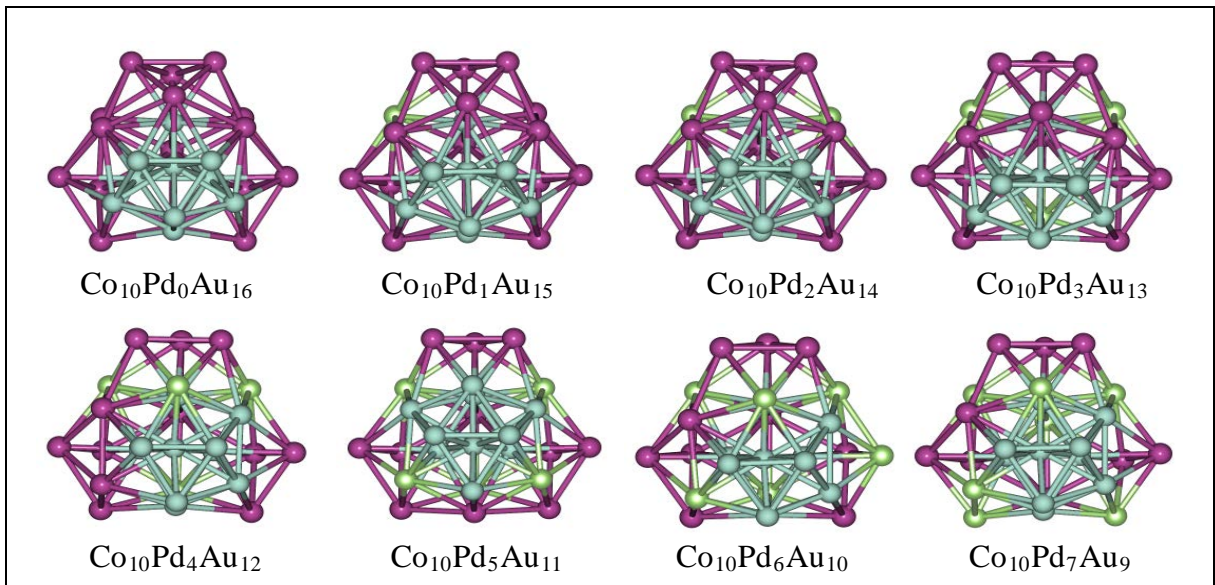
Şekil 3.61’de gösterildiği gibi $Co_9Pd_xAu_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_9Pd_8Au_9$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $Co_9Pd_xAu_{17-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.62’de gösterilmiştir.

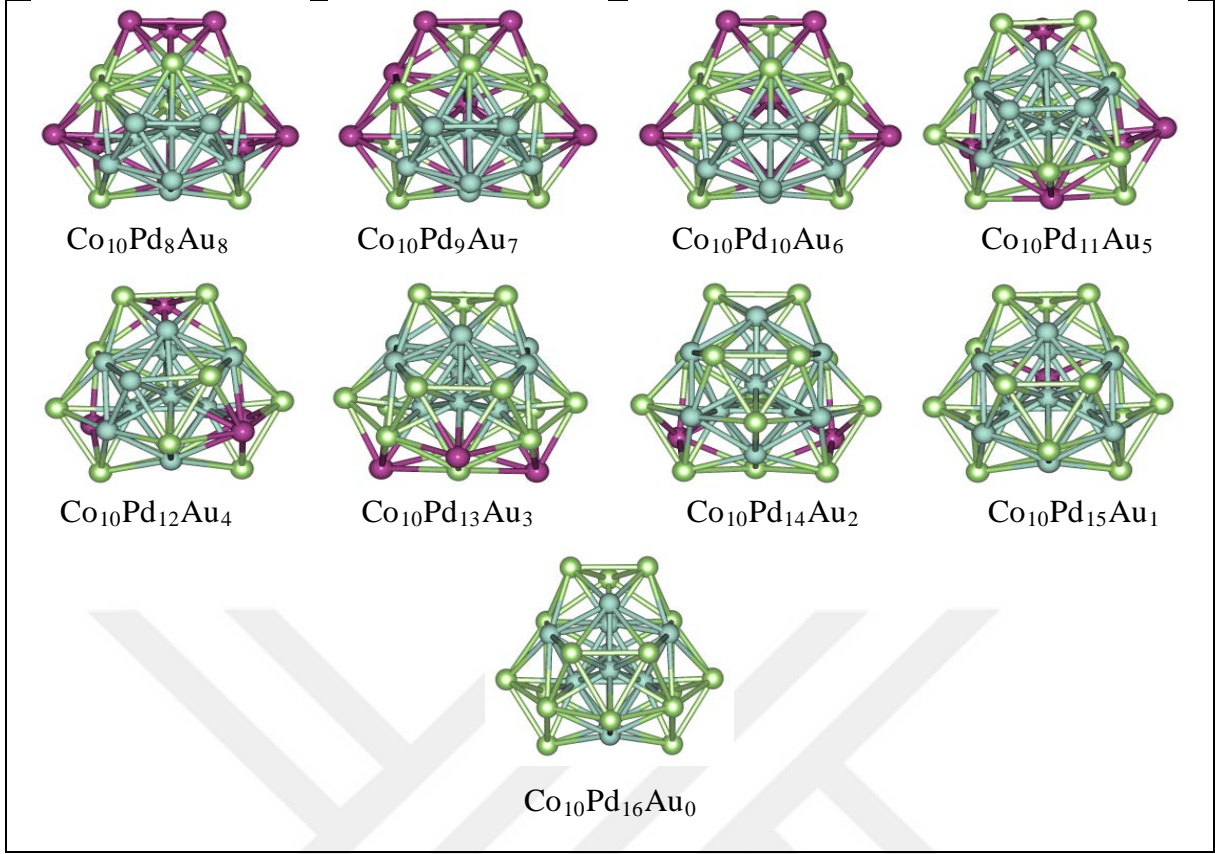


Şekil 3.62 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.62'ye göre $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_9\text{Pd}_5\text{Au}_{12}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_9\text{Pd}_{13}\text{Au}_4$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı $\text{Co}_9\text{Pd}_8\text{Au}_9$ ve $\text{Co}_9\text{Pd}_9\text{Au}_8$ kompozisyonlarında 22 adet diğer tüm kompozisyonlarda sabit kalarak toplam 23 adettir. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 102 adet bağ oluşmaktadır.

3.4.7 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri



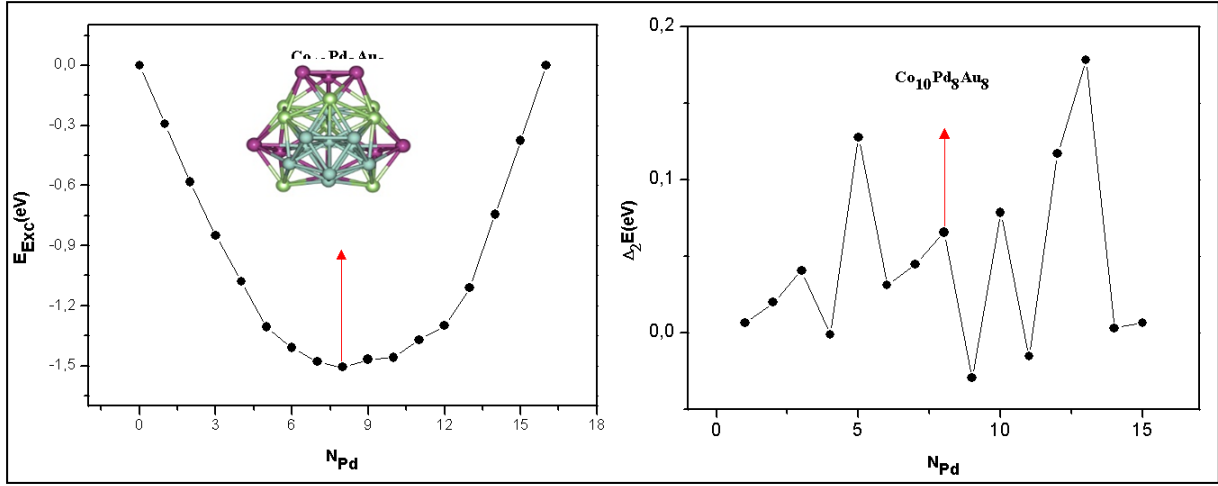


Şekil 3.63 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımalarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ ($x = 0, 16$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.63' de gösterilmiştir.

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek çift şapkalı beşgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları çoklu ikosaedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

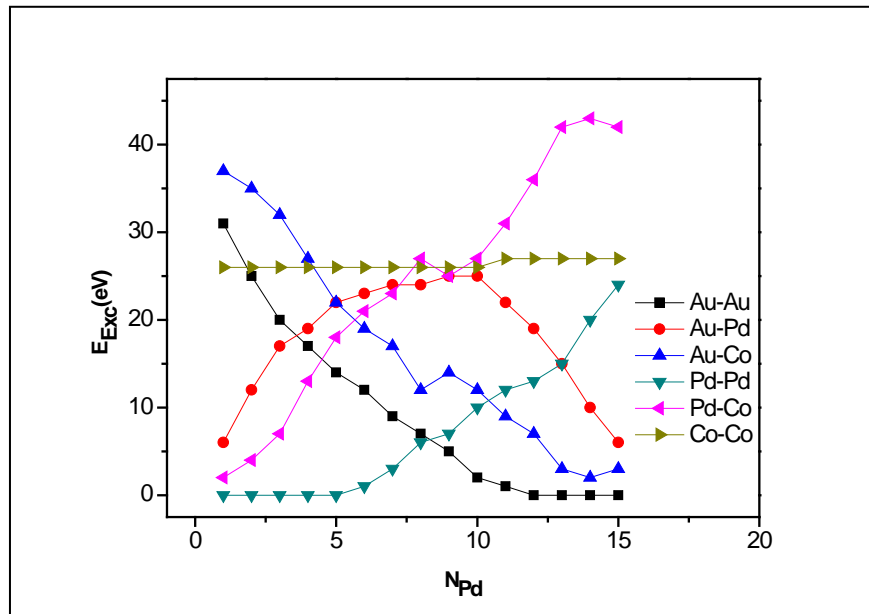
$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.64' te gösterilmiştir.



Şekil 3.64 $Co_{10}Pd_xAu_{16-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.64'te fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $Co_{10}Pd_8Au_8$ olmaktadır.

Şekil 3.64'te gösterildiği gibi $Co_{10}Pd_xAu_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_{10}Pd_8Au_8$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $Co_{10}Pd_xAu_{16-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.65'te gösterilmiştir.

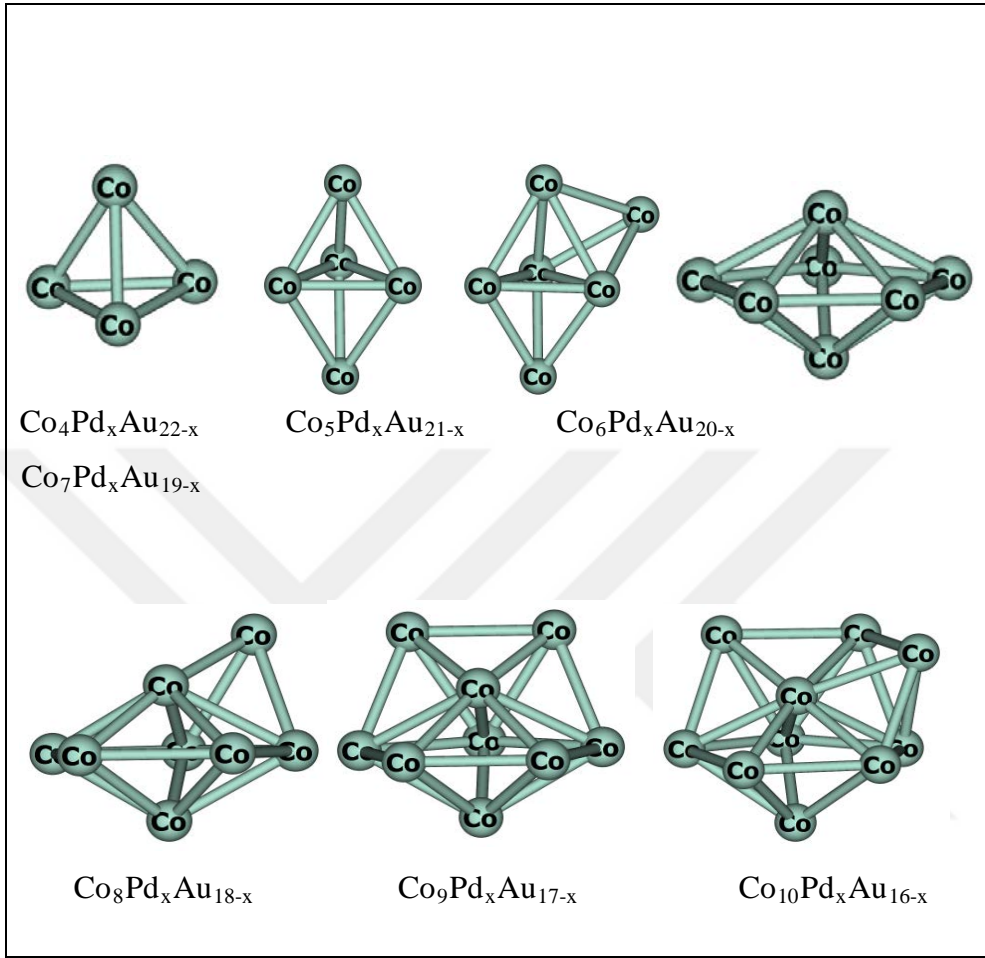


Şekil 3.65 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.65'e göre $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{10}\text{Pd}_5\text{Au}_{11}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{12}\text{Au}_4$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{10}\text{Au}_6$ kompozisyonuna kadar 26 adet $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{11}\text{Au}_5$ kompozisyonundan itibaren 27 adet olmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında toplam 102 adet bağ oluşmaktadır.

Bu bölümde 26 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımalarının seçili $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$, $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$, kompozisyonları yapısal özellikleri incelenmiştir. Genel olarak $\text{Co}_4\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$, $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{20-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{19-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{18-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{17-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{16-x}$, nanoalaşımalarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları incelendiğinde tüm kompozisyonlar çoklu ikosahedral yapıdadır. Merkeze her zaman Co atomları yerleşmektedir. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Tüm nanoalaşımaların en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi grafiği incelendiğinde ise, Co-Co bağ sayısı genellikle sabit kalmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise her bir nanoalaşımında en kararlı yapıya kadar artmakta, daha sonrasında azalmaya başlamaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd bağ sayısı genellikle yapıda 6 adet Pd atomu bulunana kadar oluşmamaktadır. Daha sonrasında artan bir grafik çizmektedir. Au-Au bağ sayısı ise, genellikle 5 adet Au atomu kalana kadar oluşmakta daha sonra oluşmamaktadır. Artan Pd sayısına göre tüm nanoalaşımarda Au-Co bağı azalırken Pd-Co bağı artmaktadır. Tüm 26 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımında toplam bağ sayısı 102 olmaktadır.

Co-Pd-Au nanoalaşım kümesinde Co sayısına göre oluşturulan nanoalaşımın kendi aralarında bağ yapan Co atomlarının yapısı Şekil 3.66’ da gösterilmektedir.



Şekil 3.66 26 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.

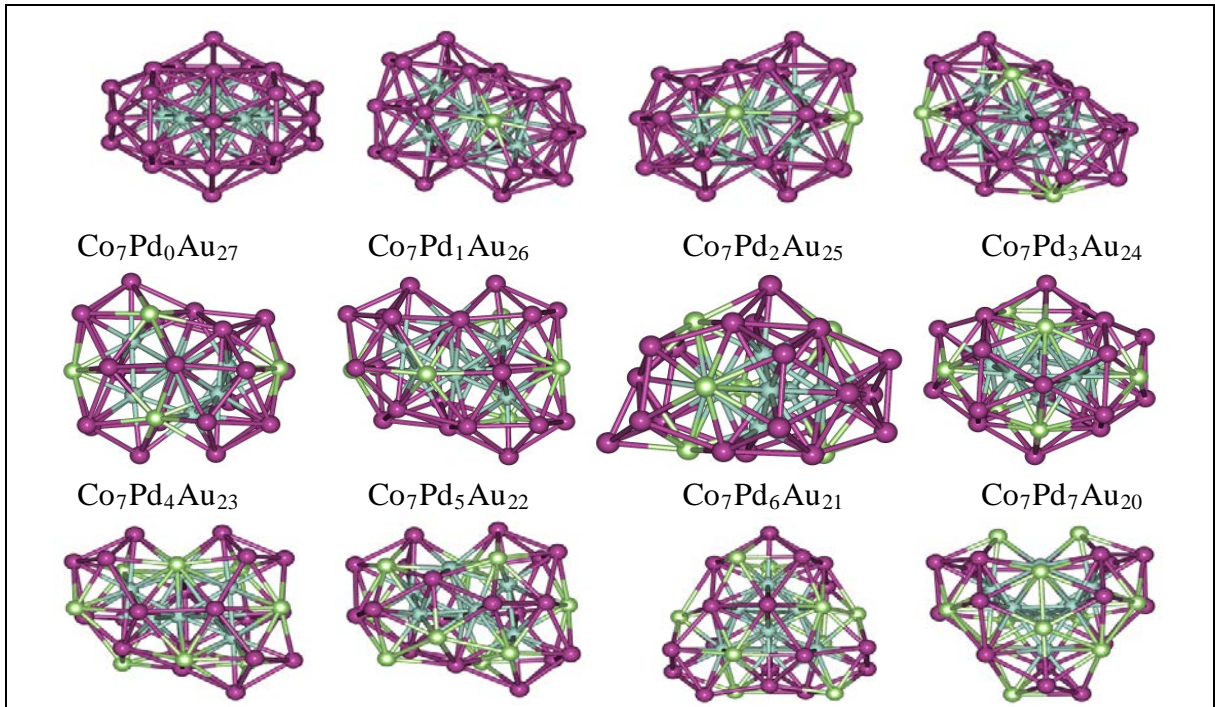
3.5 34 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ

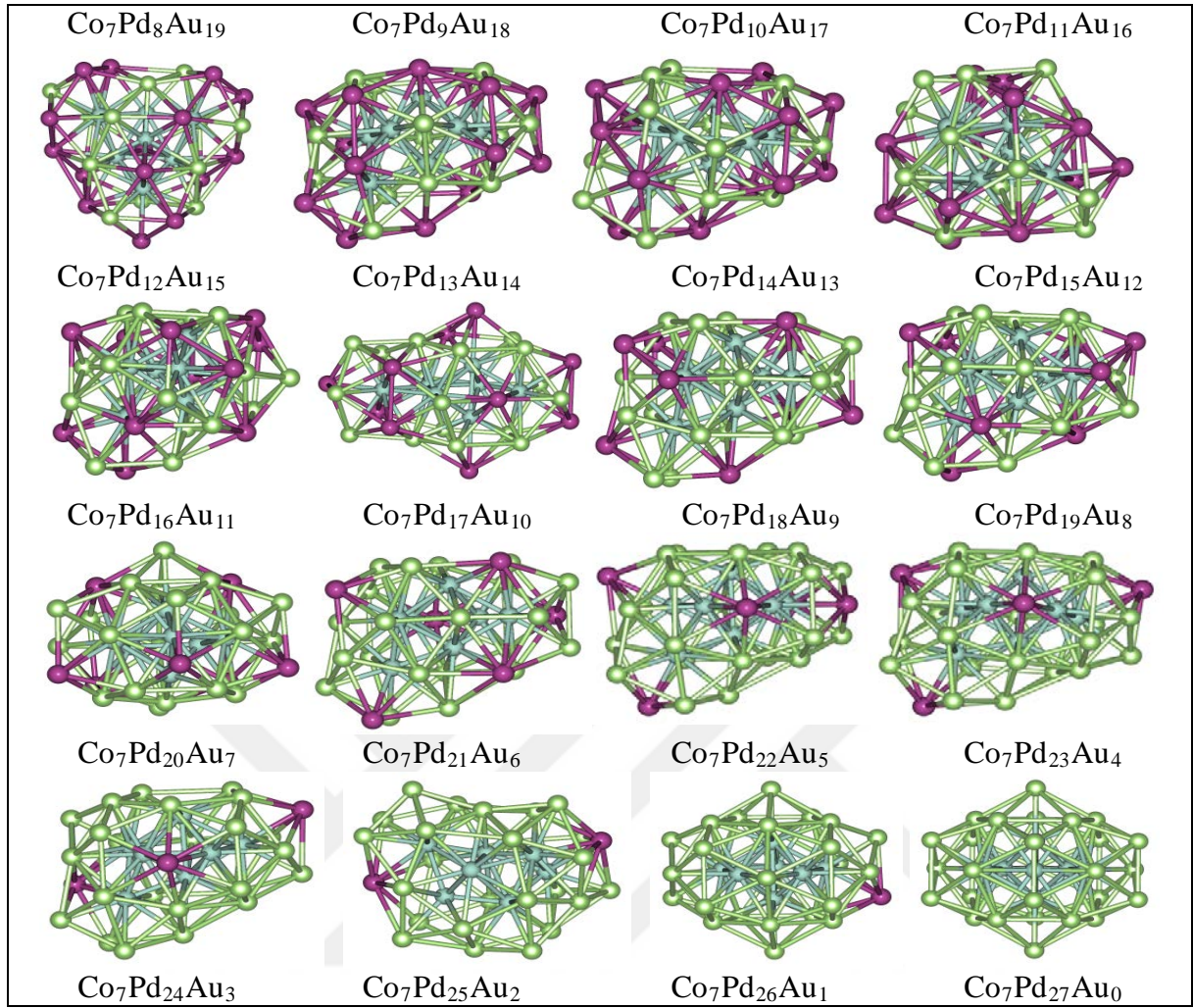
Bu bölümde toplam atom sayısı 34 olan Co-Pd-Au nanoalaşımının seçili kompozisyonlarının en kararlı yapıları ve bu yapılar arasından en kararlı kompozisyonu bulunarak yapısal özellikleri incelenmiştir. İncelenen kompozisyonların Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri çizilmiştir. Her nanoalaşım için en kararlı kompozisyon grafik üzerinde gösterilmiştir. 34 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımı için Co atomu sayısı sabit tutularak Pd atom sayısı artırılmış ve Au atomu sayıları azaltılmıştır.

3.5.1 Co₇Pd_xAu_{27-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ ($x= 0, 27$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.67' de gösterilmiştir.

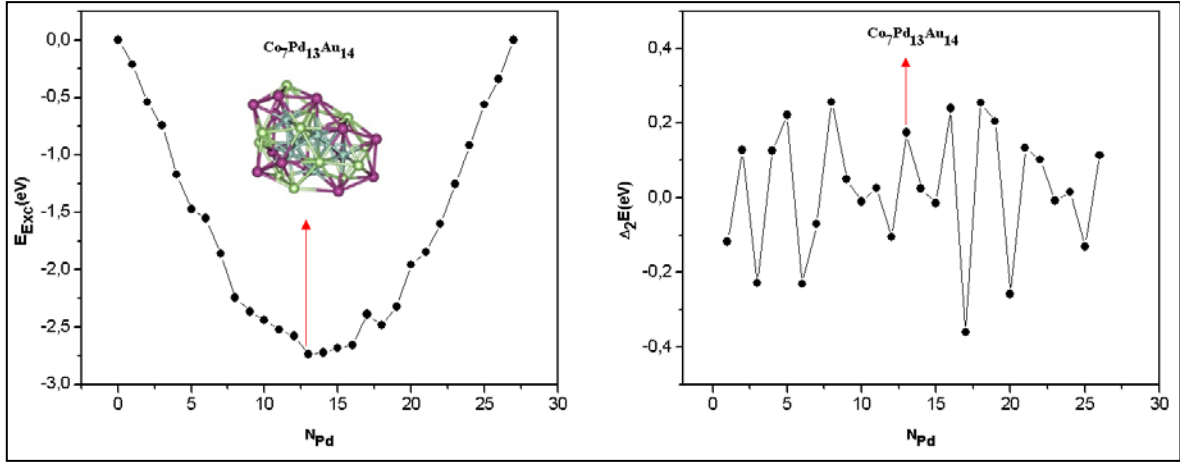
$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde birleşerek çift beşgen piramit yapı oluşturmaya çalışmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_0\text{Au}_{27}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_{26}\text{Au}_1$, $\text{Co}_7\text{Pd}_{27}\text{Au}_0$, kompozisyonları Marks Dekahedron [72] yapıdadır. Geri kalan kompozisyonlar deforme olmaktadır.





Şekil 3.67 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

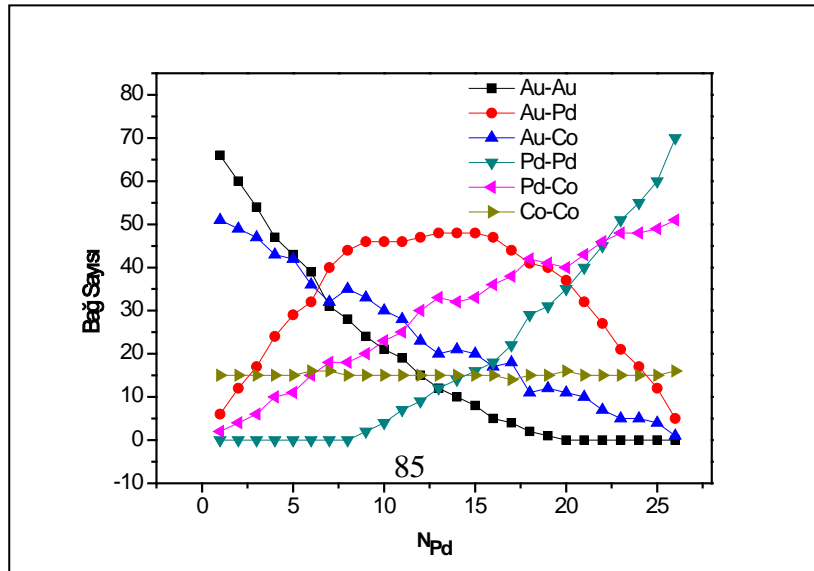
$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.68’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.68 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.68’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_7\text{Pd}_{13}\text{Au}_{14}$ olmaktadır.

Şekil 3.67’de gösterildiği gibi $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_7\text{Pd}_{13}\text{Au}_{14}$ nanoalaşımı çoklu ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.69’da gösterilmiştir.

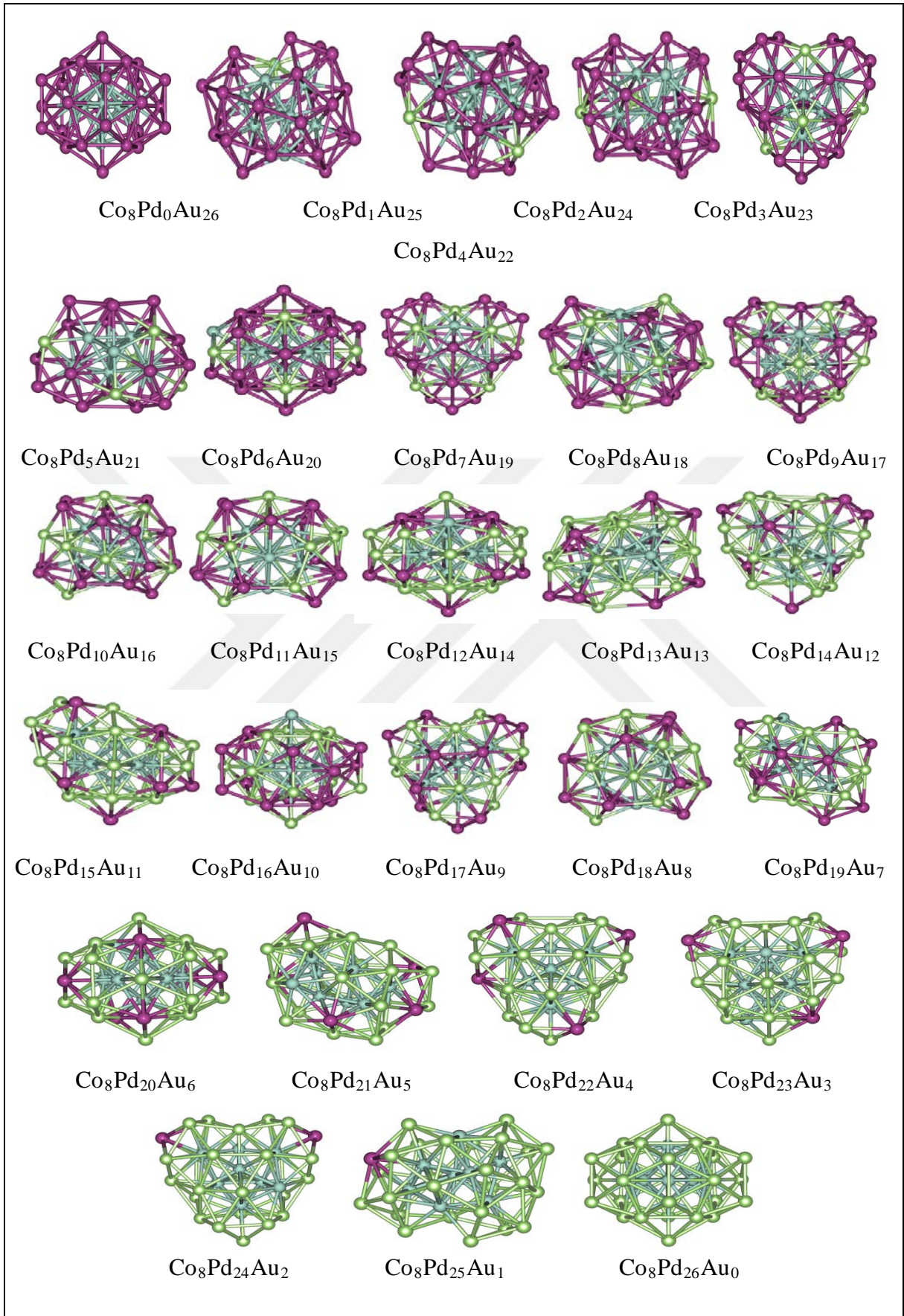


Şekil 3.69 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.69'a göre $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken $\text{Co}_7\text{Pd}_8\text{Au}_{19}$ kompozisyonunda anlık bir artış gözlemlenmektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_8\text{Au}_{19}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_7\text{Pd}_{20}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı genellikle 15 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 140 adet bağ oluşmaktadır.

3.5.2 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ ($x= 0, 26$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.70' de gösterilmiştir.

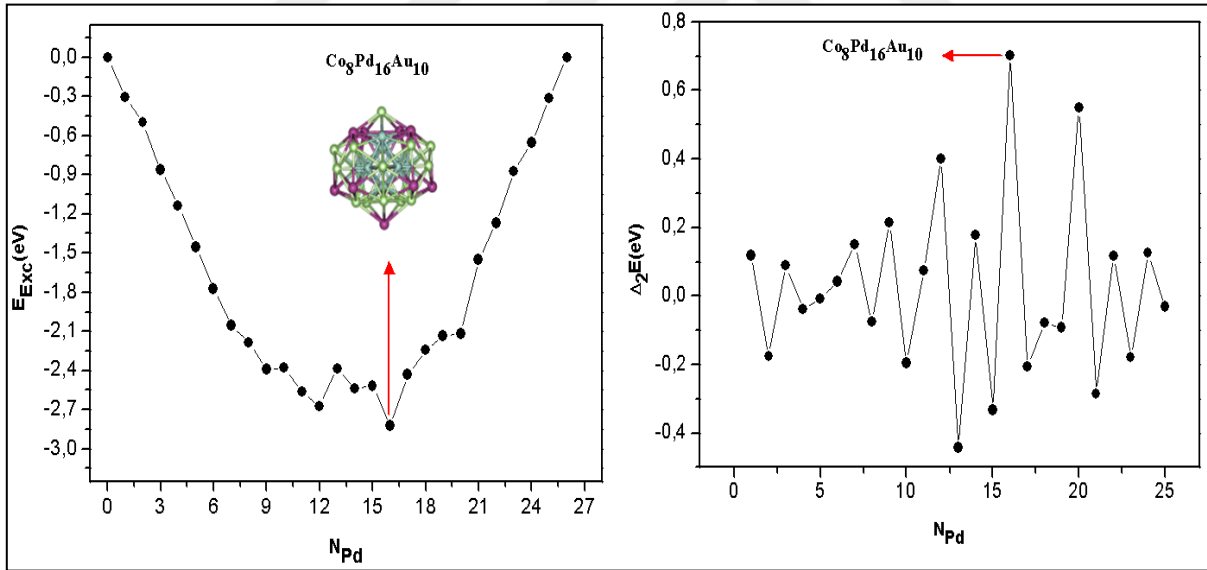


Şekil 3.70 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımalarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en

kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde birleşerek tek şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_0\text{Au}_{26}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_6\text{Au}_{20}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_{12}\text{Au}_{14}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_{16}\text{Au}_{10}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_{20}\text{Au}_6$, $\text{Co}_8\text{Pd}_{26}\text{Au}_0$ kompozisyonları Marks Dekahedron yapıdadır. Geri kalan kompozisyonlar deforme olmaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları ilk olarak yüzeyde yapının orta noktalarına, köşegenlere ve uç noktalara Au atomları yerleşmektedir. Bu sayede Pd atomları Co atomları ile daha fazla bağ yapmaktadır.

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.71’de gösterilmiştir.

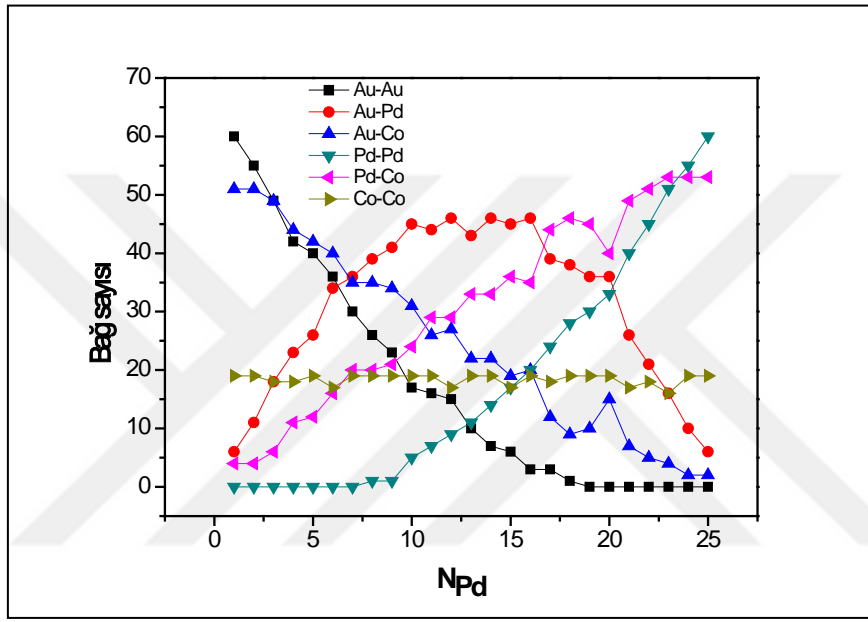


Şekil 3.71 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktaları ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.71’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu

koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_8\text{Pd}_{16}\text{Au}_{10}$ olmaktadır.

Şekil 3.71’de gösterildiği gibi $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_8\text{Pd}_{16}\text{Au}_{10}$ nanoalaşımını Marks Dekahedron yapıdadır ve Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.72’de gösterilmiştir.

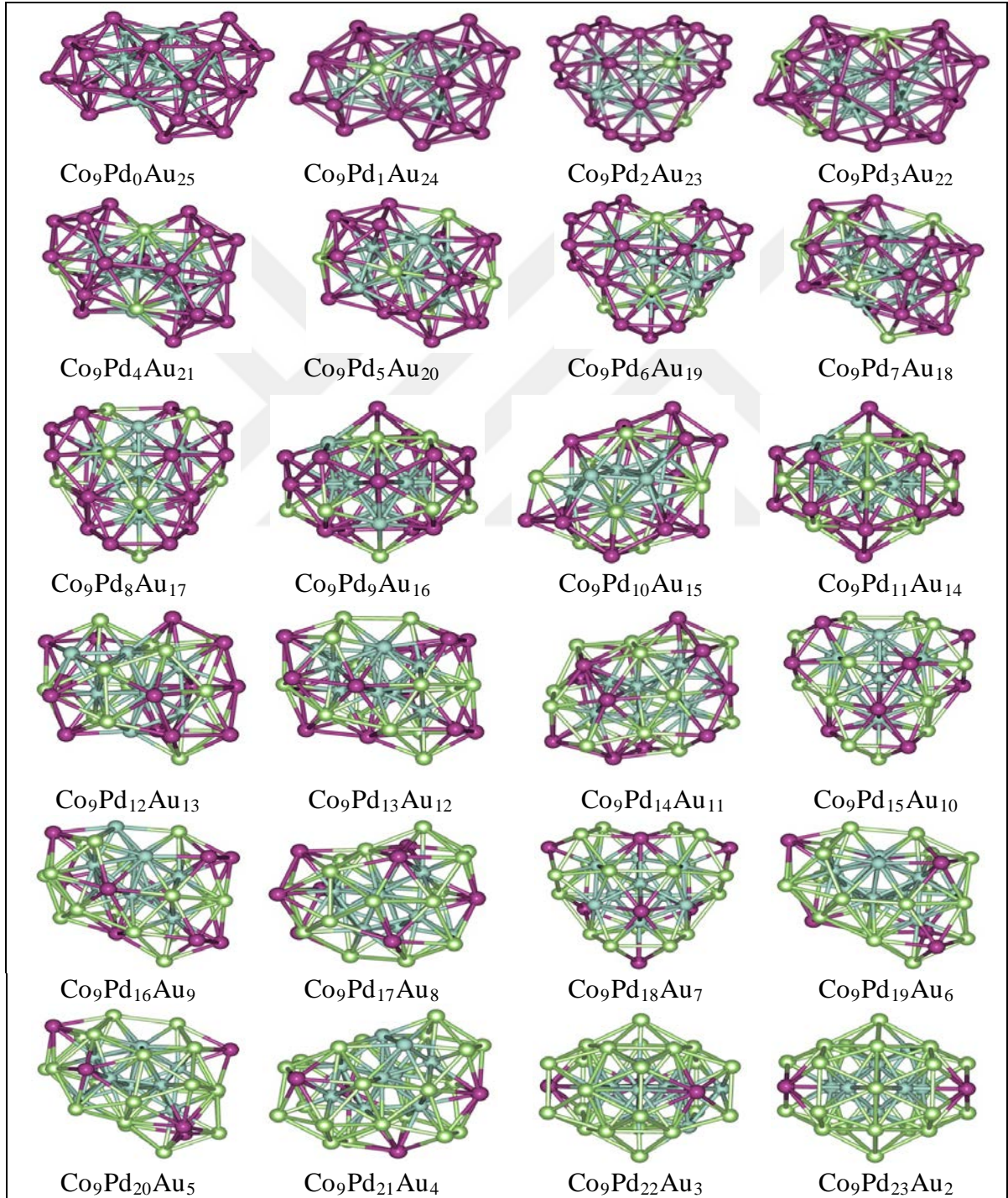


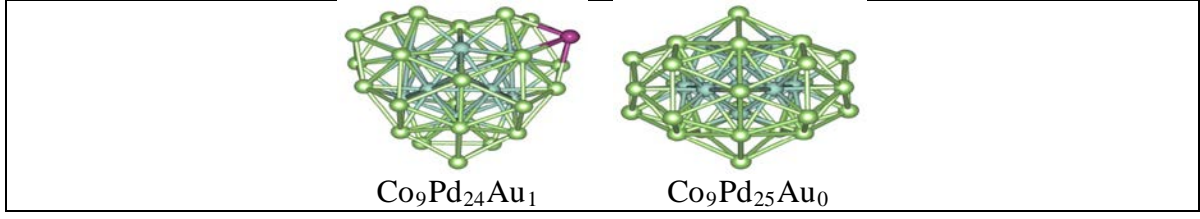
Şekil 3.72 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.72’ye göre $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyonda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken $\text{Co}_8\text{Pd}_{20}\text{Au}_6$ kompozisyonunda anlık bir artış gözlemlenmektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_8\text{Pd}_7\text{Au}_{19}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_8\text{Pd}_{19}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının

kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı genellikle 19 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 140 adet bağ oluşmaktadır.

3.5.3 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri



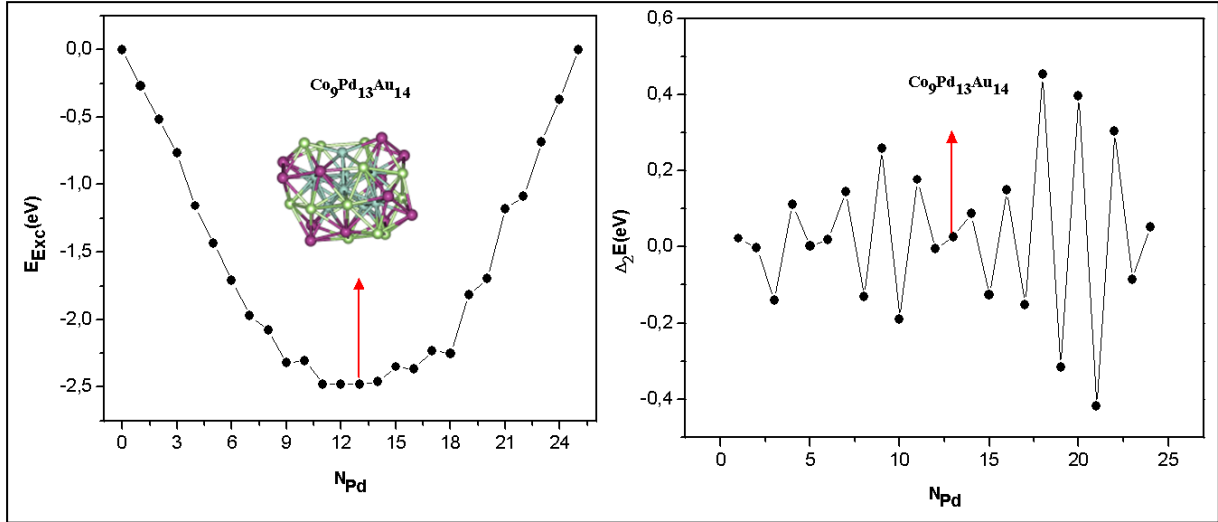


Şekil 3.73 $Co_9Pd_xAu_{25-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$Co_9Pd_xAu_{25-x}$ ($x= 0, 25$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $Co_9Pd_xAu_{25-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $Co_9Pd_xAu_{25-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.73' te gösterilmiştir.

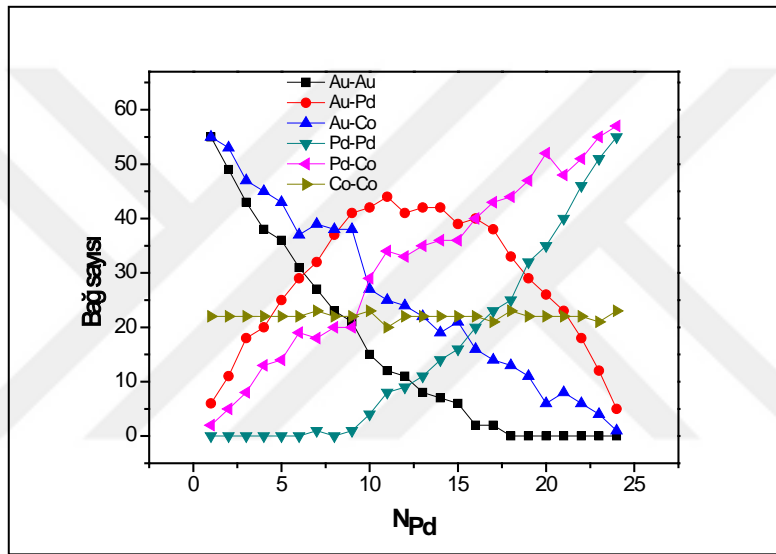
$Co_9Pd_xAu_{25-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde birleşerek çift şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. $Co_9Pd_9Au_{16}$, $Co_9Pd_{11}Au_{14}$, $Co_9Pd_{22}Au_3$, $Co_9Pd_{23}Au_2$, $Co_9Pd_{25}Au_0$, kompozisyonları marks dekahedron yapıdadır. Geri kalan kompozisyonlar deforme olmuş amorf yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları ilk olarak yüzeyde yapının orta noktalarına, köşegenlere ve uç noktalara Au atomları yerleşmektedir. Bu sayede Pd atomları Co atomları ile daha fazla bağ yapmaktadır.

$Co_9Pd_xAu_{25-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek $Co_9Pd_xAu_{25-x}$ nanoalaşımı için çizilen Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.74' te gösterilmiştir.



Şekil 3.74
nanoalaşımının
ve $\Delta_2 E$ enerjisi

Fazlalık enerji
en düşük
kararlı yapılar
kararlı
olması
Bunun yanı
fark enerji



$Co_9Pd_xAu_{25-x}$
 E_{Exc} enerjisi
grafığı.

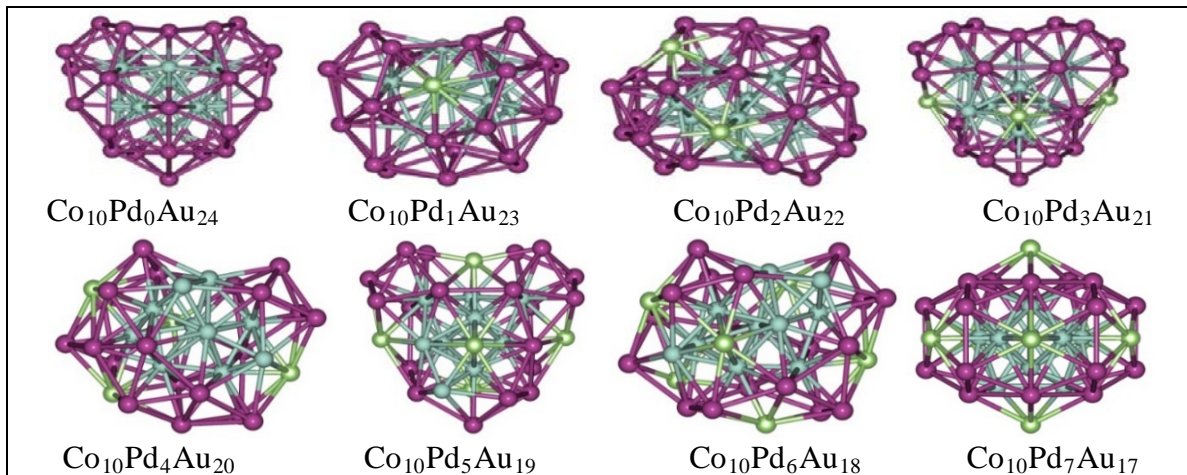
grafığıne göre
enerjinin en
arasındaki en
kompozisyon
beklenir.
sıra ikinci
grafığınde ise

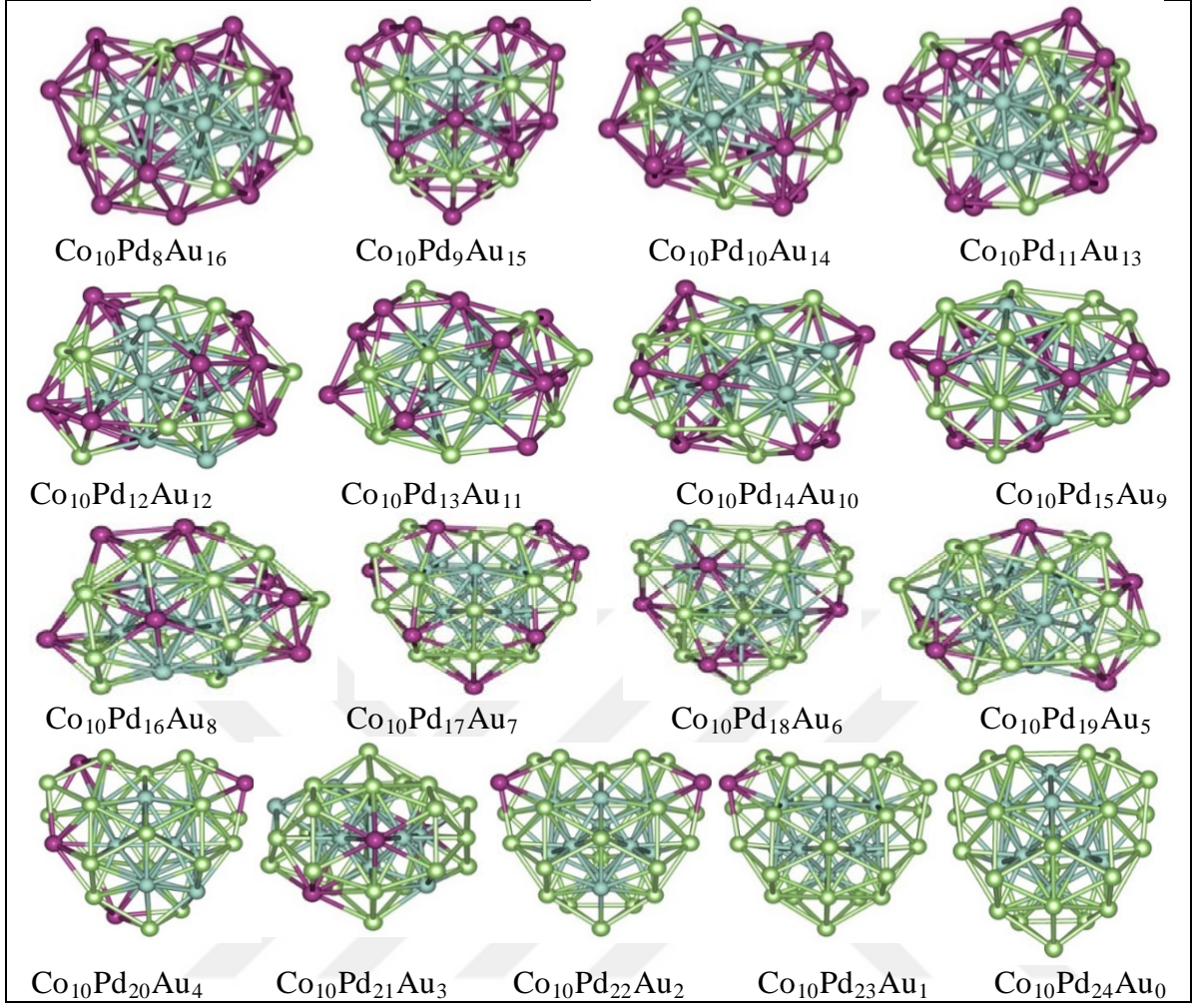
en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.74'te Fazlalık enerji grafığı ve ikinci fark enerji grafığınde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $Co_9Pd_{13}Au_{12}$ olmaktadır. $Co_9Pd_{13}Au_{12}$ nanoalaşımı deforme olmuş amorf yapıdadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $Co_9Pd_xAu_{25-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.75'de gösterilmiştir.

Şekil 3.75 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.75'e göre $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_9\text{Pd}_{11}\text{Au}_{14}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken $\text{Co}_9\text{Pd}_{10}\text{Au}_{15}$ kompozisyonunda anlık bir düşüş gözlemlenmektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_9\text{Pd}_6\text{Au}_{19}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_9\text{Pd}_{18}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı genellikle 22 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 140 adet bağ oluşmaktadır.

3.5.4 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri





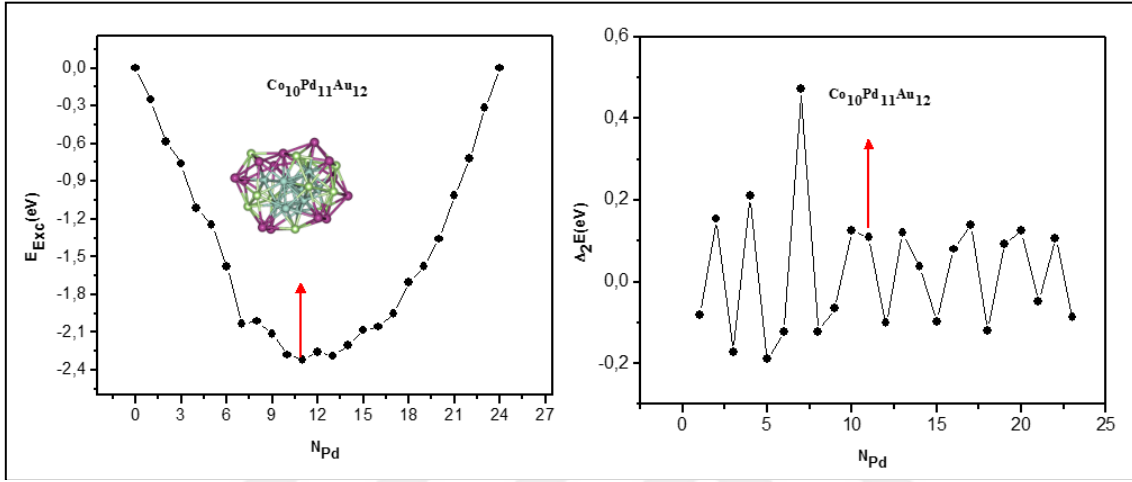
Şekil 3.76 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ ($x= 0, 24$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.76' da gösterilmiştir.

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde birleşerek üç şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_7\text{Au}_{17}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{21}\text{Au}_3$, kompozisyonları Marks Dekahedron yapıdadır. Geri kalan kompozisyonlar amorf yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları ilk olarak yüzeyde yapının orta

noktalarına, köşegenlere ve uç noktalara ise Au atomları yerleşmektedir. Bu sayede Pd atomları Co atomları ile daha fazla bağ yapmaktadır.

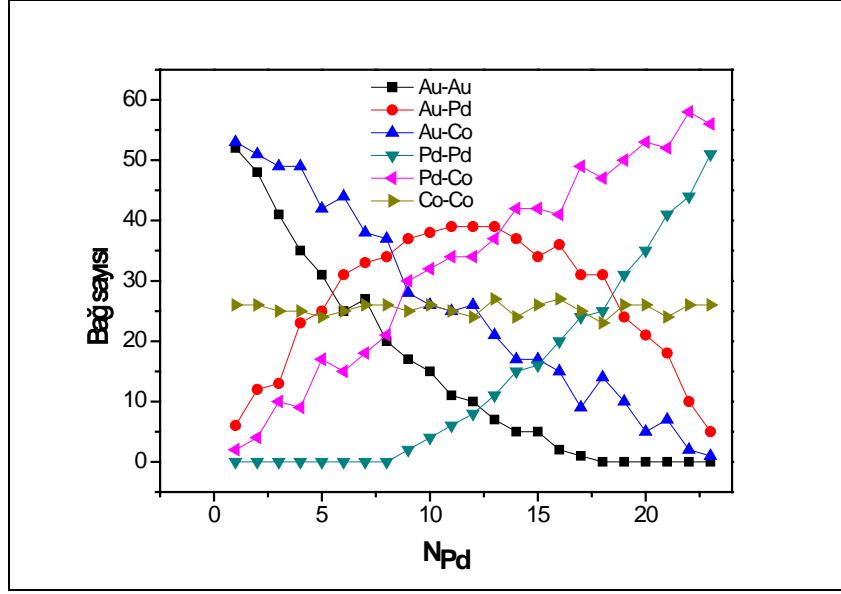
$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.77’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.77 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerjisi grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.77’de Fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerjisi grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{13}$ olmaktadır.

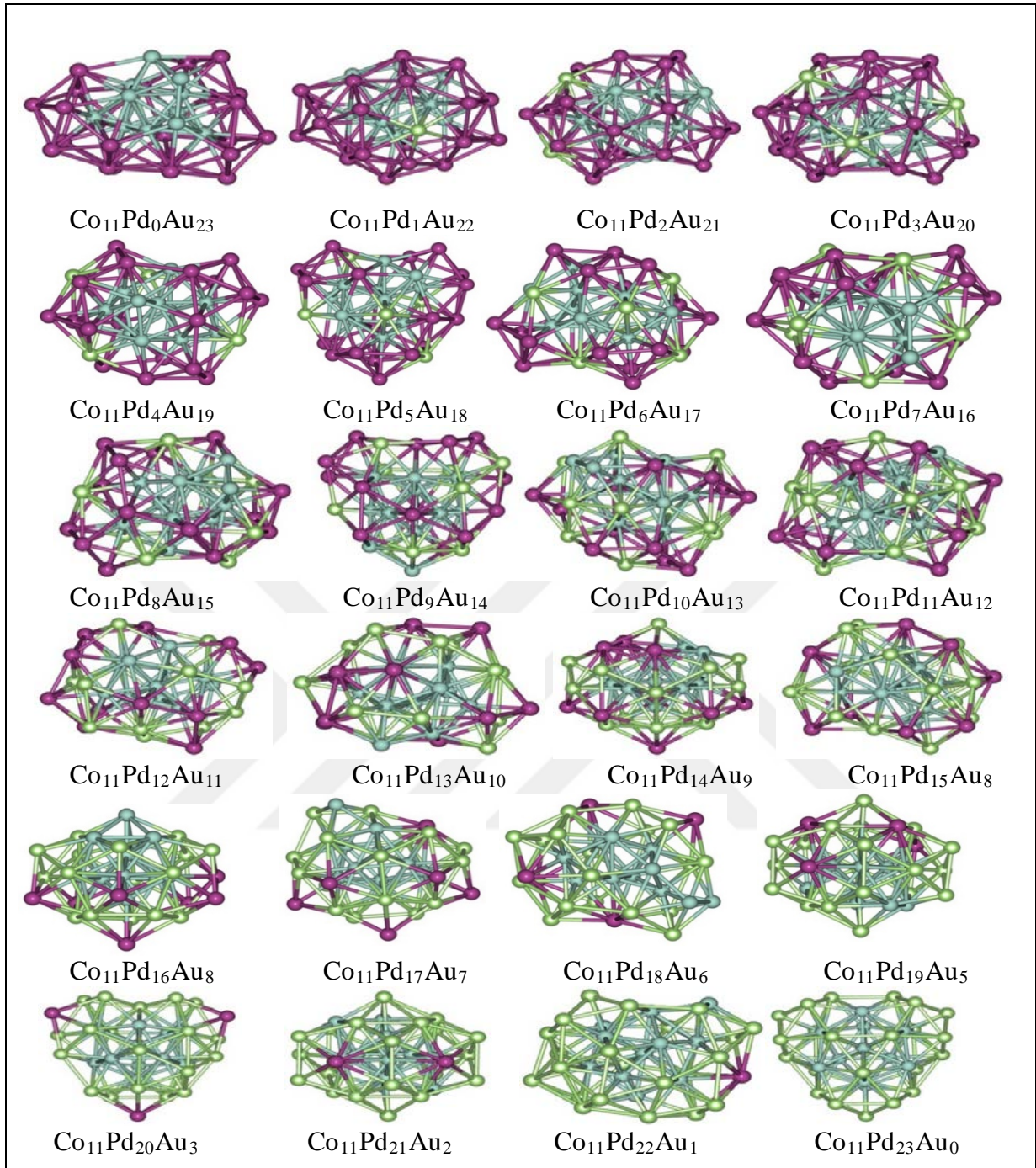
Şekil 3.76’da gösterildiği gibi $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{13}$ nanoalaşımı ikili ikosahedral yapının birleşmiş halindedir. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.78’de gösterilmiştir.



Şekil 3.78 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.78'e göre $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{13}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, en kararlı kompozisyondan sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{10}\text{Pd}_8\text{Au}_{16}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{18}\text{Au}_6$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı genellikle 25 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 140 adet bağ oluşmaktadır.

3.5.5 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

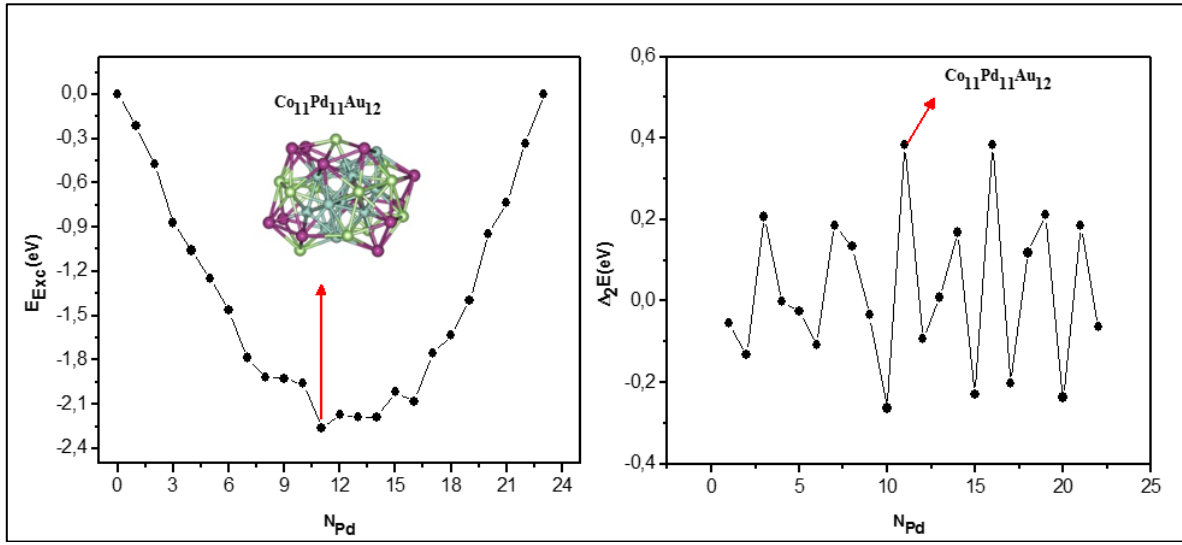


Şekil 3.79 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomlarından 7 tanesi merkezde birleşerek çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Geri kalan Co atomları beşgen piramit yapının köşelerine yerleşmektedir. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{14}\text{Au}_9$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{16}\text{Au}_8$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{19}\text{Au}_5$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{21}\text{Au}_2$, kompozisyonları marks dekahedron yapıdadır. Geri kalan kompozisyonlar amorf yapıdadır.

Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları ilk olarak yüzeyde yapının orta noktalarına, köşegenlere ve uç noktalara ise Au atomları yerleşmektedir. Bu sayede Pd atomları Co atomları ile daha fazla bağ yapmaktadır.

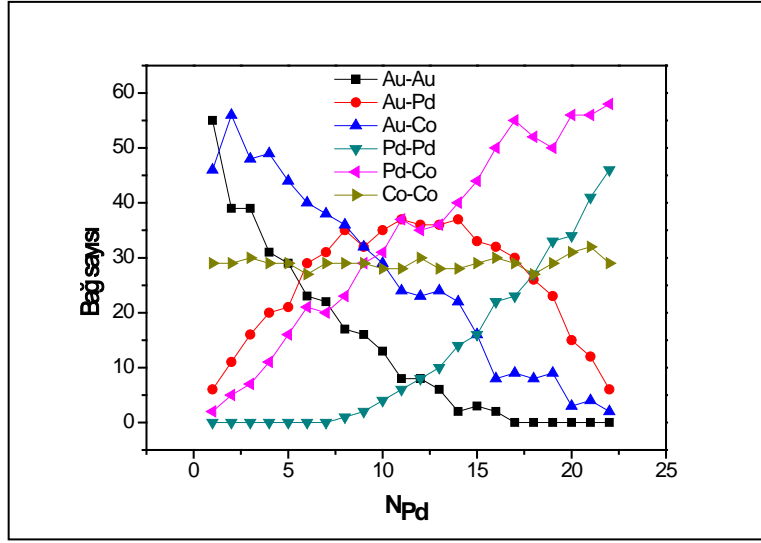
$\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek çizilen $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımı için Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.80’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.80 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değer zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.80’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{12}$ olmaktadır.

Şekil 3.79’da gösterildiği gibi $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{12}$ nanoalaşımı deforme olmuş amorf yapıdadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.81’de gösterilmiştir.

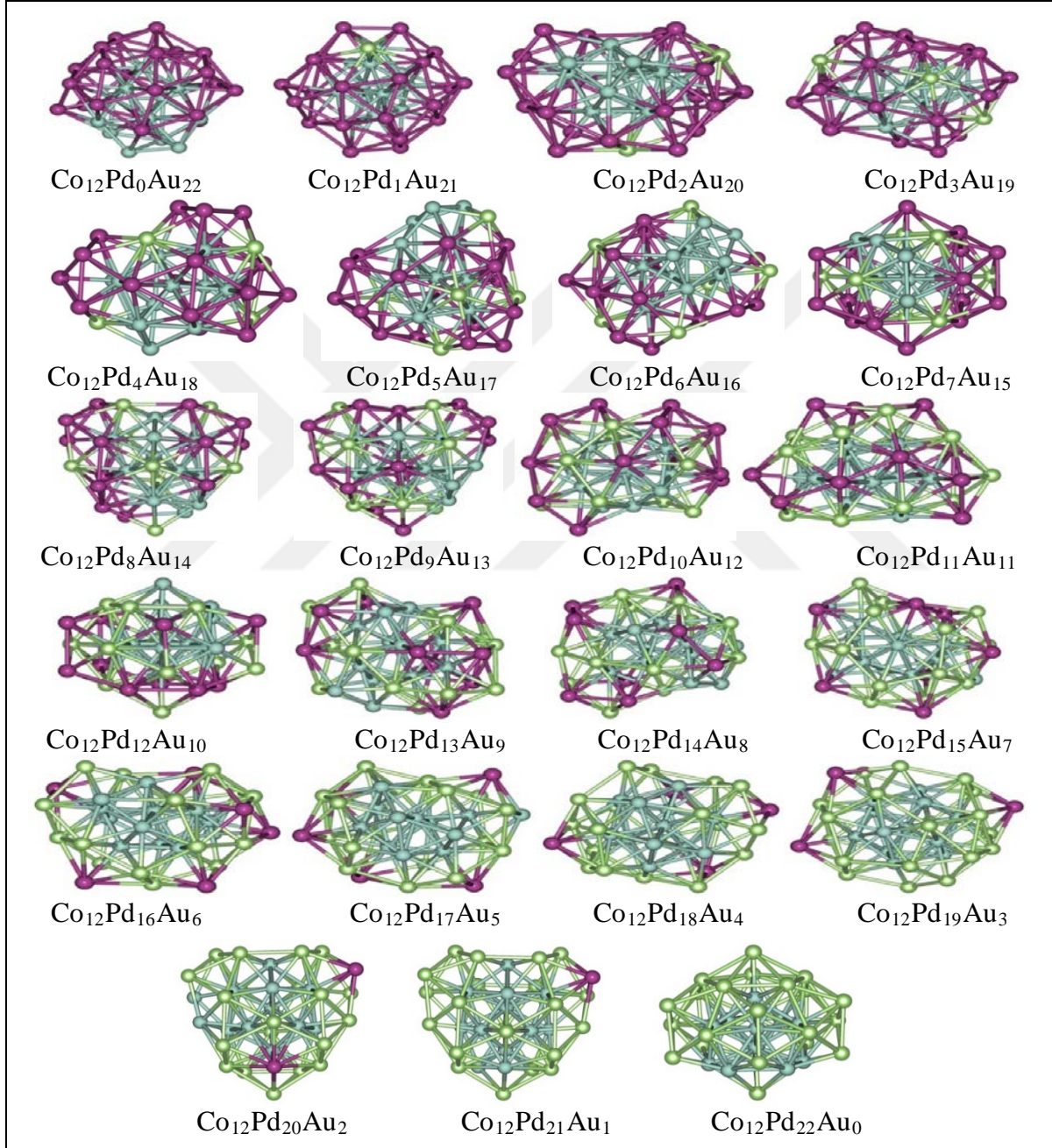


Şekil 3.81 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.81'e göre $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{12}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, en kararlı kompozisyonundan sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_2\text{Au}_{21}$ kompozisyonunda ani bir artış gözlemlenmektedir. Diğer taraftan Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{11}\text{Pd}_7\text{Au}_{16}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{17}\text{Au}_6$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı genellikle 29 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 140 adet bağ oluşmaktadır.

3.5.6 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

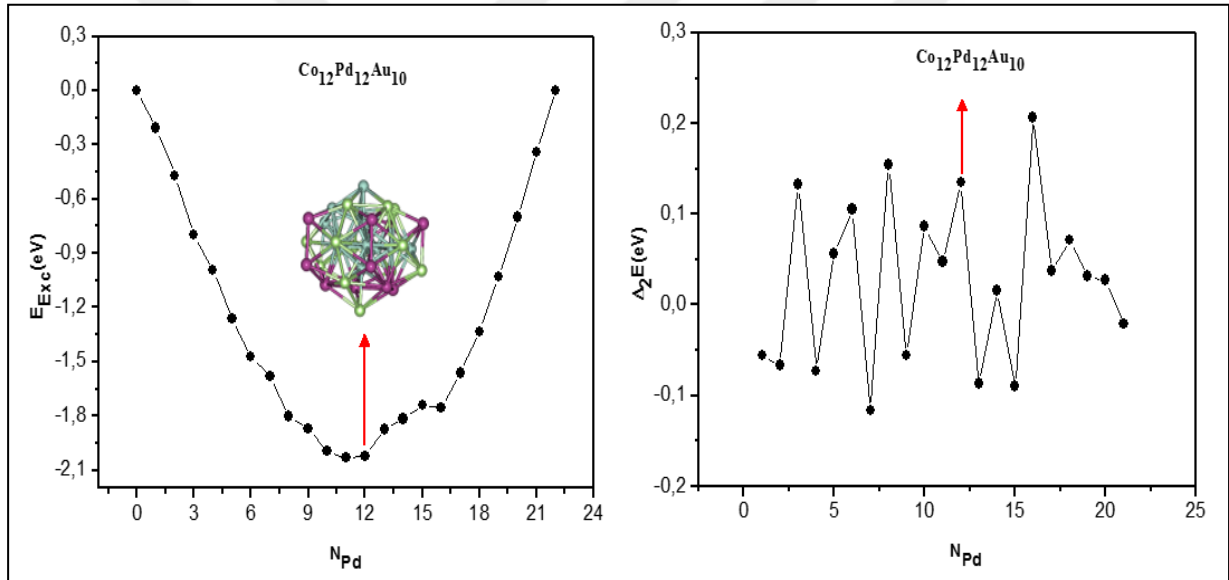
$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ ($x=0, 22$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.82’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.82 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomlarından 7 tanesi merkezde birleşerek çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Geri kalan Co atomları beşgen piramit yapının köşelerine yerleşmektedir. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_7\text{Au}_{15}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{10}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{22}\text{Au}_0$, kompozisyonları Marks Dekahedron yapıdadır. Geri kalan kompozisyonlar amorf yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları ilk olarak yüzeyde yapının orta noktalarına, köşegenlere ve uç noktalara ise Au atomları yerleşmektedir.

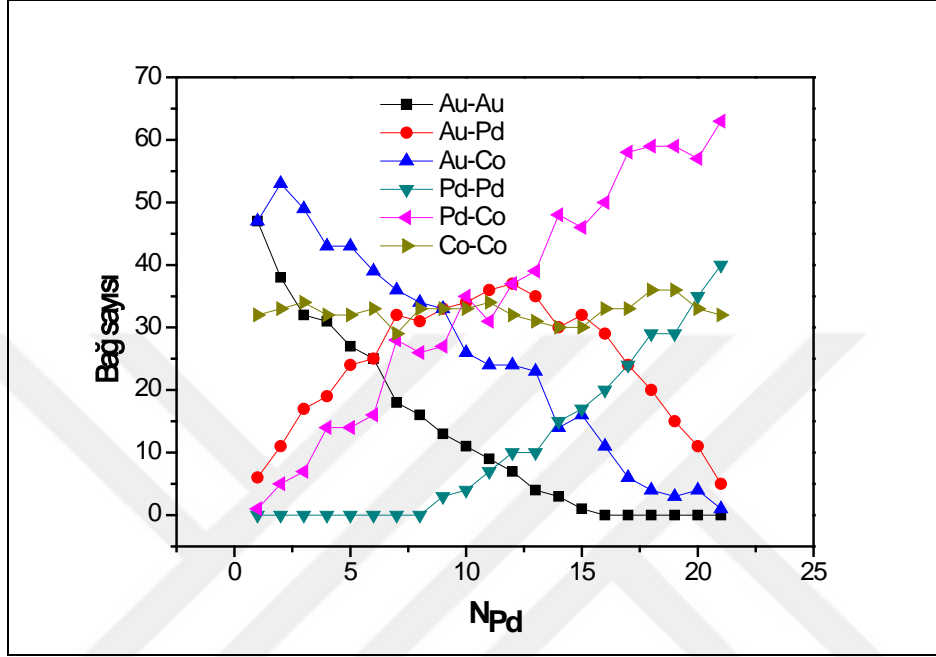
$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.83’ te gösterilmiştir.



Şekil 3.83 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.83’te fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{10}$ olmaktadır.

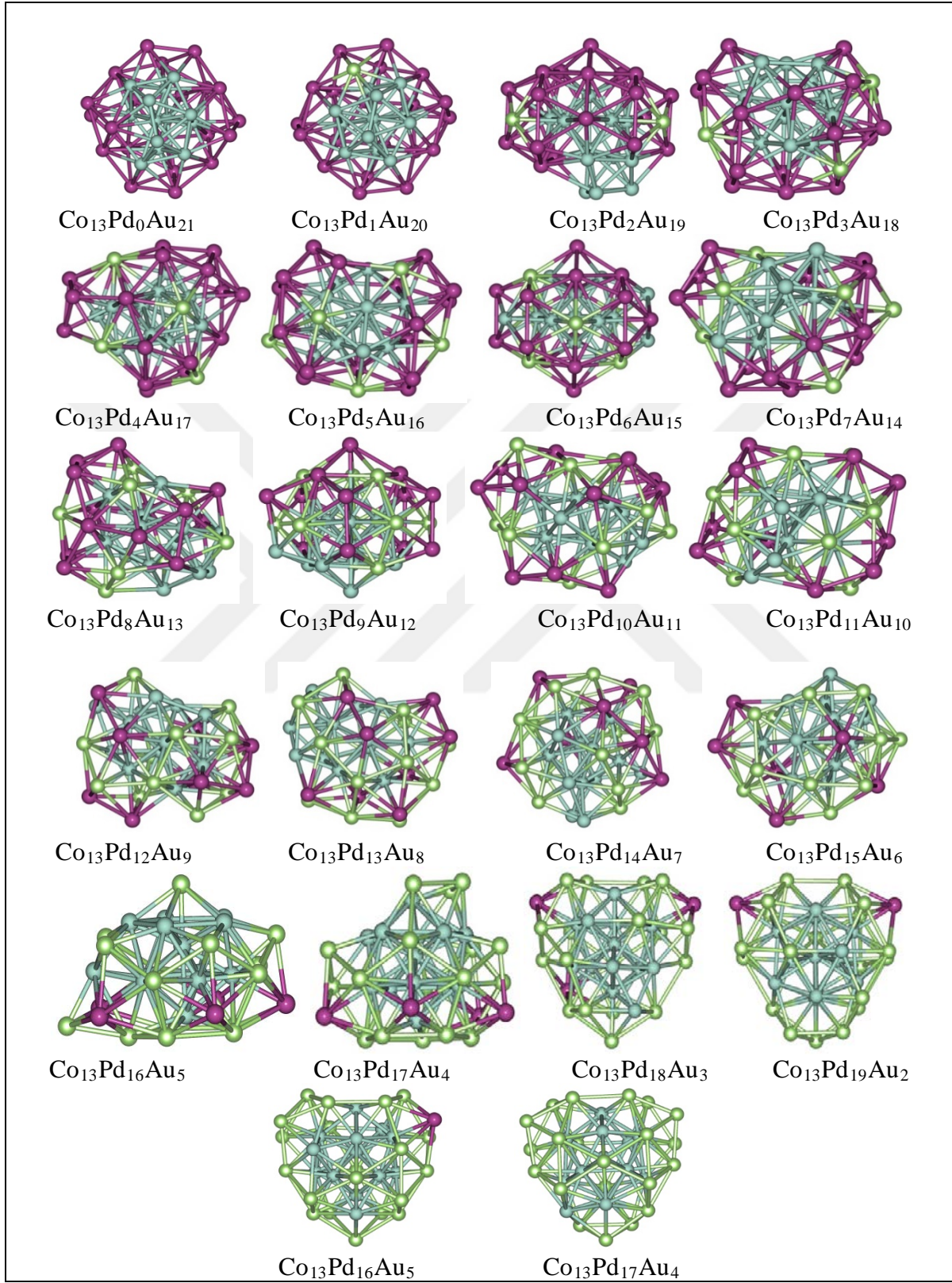
Şekil 3.82’de gösterildiği gibi $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{10}$ nanoalaşımı marks dekahedron yapıdadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.84’te gösterilmiştir.



Şekil 3.84 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.84’e göre $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{10}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, en kararlı kompozisyondan sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_2\text{Au}_{20}$ kompozisyonunda ani bir artış gözlemlenmektedir. Diğer taraftan Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{12}\text{Pd}_8\text{Au}_{14}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{16}\text{Au}_6$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı genellikle 33 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 140 adet bağ oluşmaktadır.

3.5.7 Co₁₃Pd_xAu_{21-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

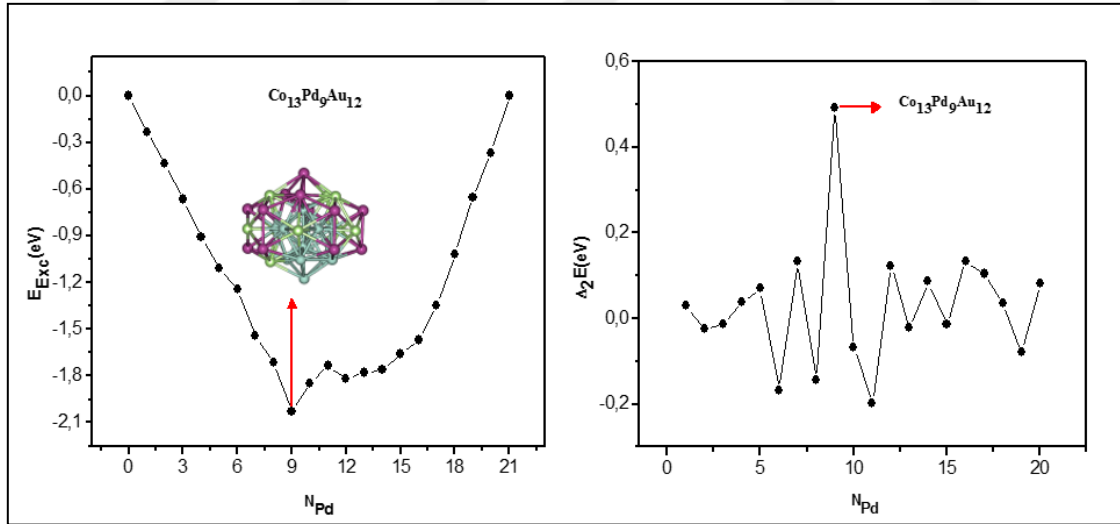


Şekil 3.85 Co₁₃Pd_xAu_{21-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ ($x= 0, 21$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.85’ te gösterilmiştir.

$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları Pd atomlarıyla merkezde birleşerek ikosahedral yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_6\text{Au}_{15}$ ve $\text{Co}_{13}\text{Pd}_9\text{Au}_{12}$ kompozisyonları marks dekahedron yapıdadır. Geri kalan kompozisyonlar amorf yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları ilk olarak yüzeyde yapının orta noktalarına, köşegenlere ve uç noktalara ise Au atomları yerleşmektedir.

$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri Şekil 3.86’da gösterilmiştir.

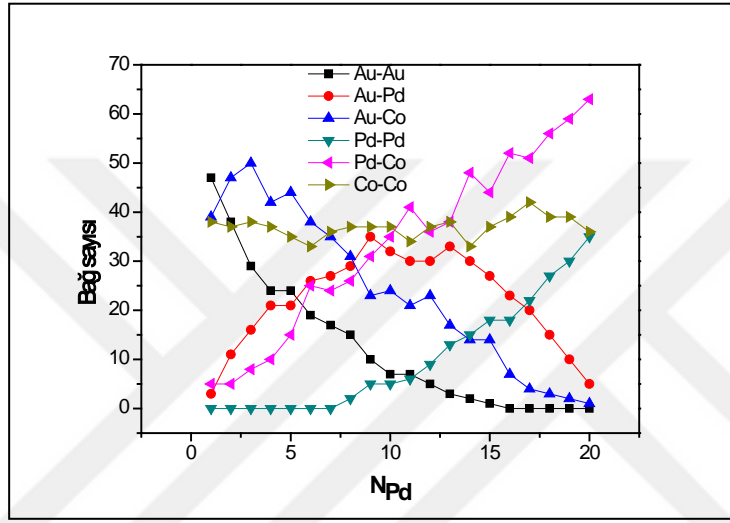


Şekil 3.86 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.86’da Fazlalık enerji grafiği

ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir.

Şekil 3.85’te gösterildiği gibi $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{13}\text{Pd}_9\text{Au}_{12}$ nanoalaşımı marks dekahedron yapıdadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.87’de gösterilmiştir.

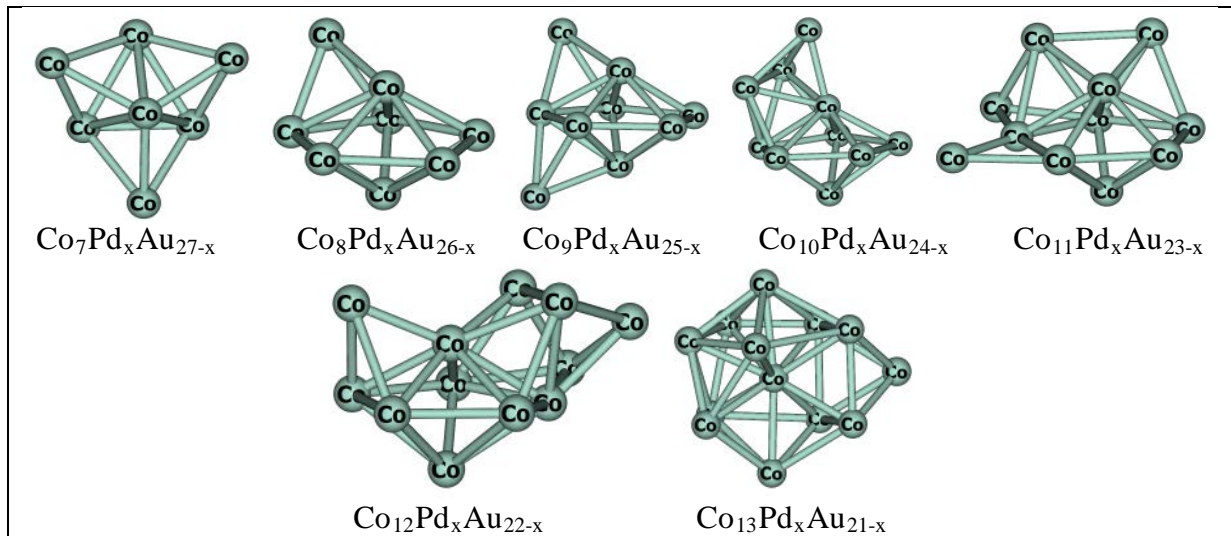


Şekil 3.87 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.87’ye göre $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{13}\text{Pd}_9\text{Au}_{12}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, en kararlı kompozisyondan sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_2\text{Au}_{19}$ ve $\text{Co}_{13}\text{Pd}_3\text{Au}_{18}$ kompozisyonlarında ani bir artış gözlemlenmektedir. Diğer taraftan Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{13}\text{Pd}_7\text{Au}_{14}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{16}\text{Au}_5$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı genellikle 37 adet bağ yapmaktadır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 140 adet bağ oluşmaktadır.

Bu bölümde 34 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının seçili $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$, kompozisyonlarının yapısal özellikleri incelenmiştir. Genel olarak $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{24-x}$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{23-x}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{22-x}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{21-x}$, nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları incelendiğinde tüm kompozisyonlarda merkeze her zaman Co atomları yerleşmektedir. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Tüm nanoalaşımın en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi grafiği incelendiğinde ise, Co-Co bağ sayısı genellikle sabit kalmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise her bir nanoalaşımında genel olarak en kararlı yapıya kadar artmakta, daha sonrasında azalmaya başlamaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd bağ sayısı genellikle yapıda 7 adet Pd atomu bulunana kadar oluşmamaktadır. Daha sonrasında artan bir grafik çizmektedir. Au-Au bağ sayısı ise, genellikle 6 adet Au atomu kalana kadar oluşmakta daha sonra oluşmamaktadır. Artan Pd sayısına göre tüm nanoalaşımında Au-Co bağı azalırken Pd-Co bağı artmaktadır. Tüm 34 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımında toplam bağ sayısı Marks Dekahedron yapıda 140 olmaktadır, amorf yapıya sahip kompozisyonlarda bağ sayısı 140'dan daha az veya daha fazla olmaktadır.

Co-Pd-Au nanoalaşım kümesinde Co sayısına göre oluşturulan nanoalaşımın kendi aralarında bağ yapan Co atomlarının yapısı Şekil 3.88' de gösterilmektedir.



Şekil 3.88 34 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.

3.6 38 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ

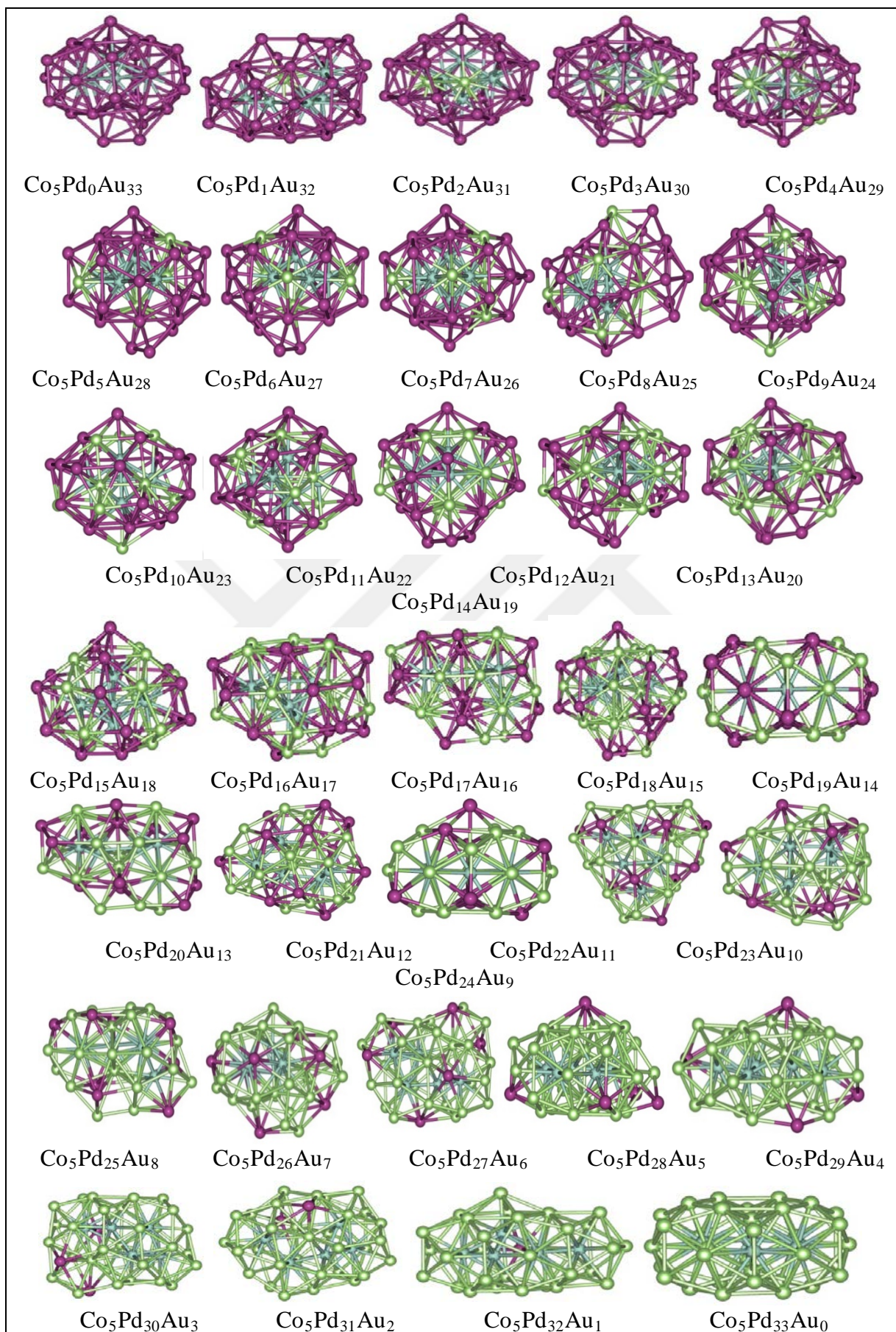
Bu bölümde toplam atom sayısı 38 olan Co-Pd-Au nanoalaşımının seçili kompozisyonlarının en kararlı yapıları ve bu yapılar arasından en kararlı kompozisyonu bulunarak yapısal özellikleri incelenmiştir. İncelenen kompozisyonların fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri çizilmiştir. Her nanoalaşım için en kararlı kompozisyon grafik üzerinde gösterilmiştir. 38 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımı için Co atomu sayısı sabit tutularak Pd atom sayısı artırılmış ve Au atomu sayıları azaltılmıştır.

3.6.1 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

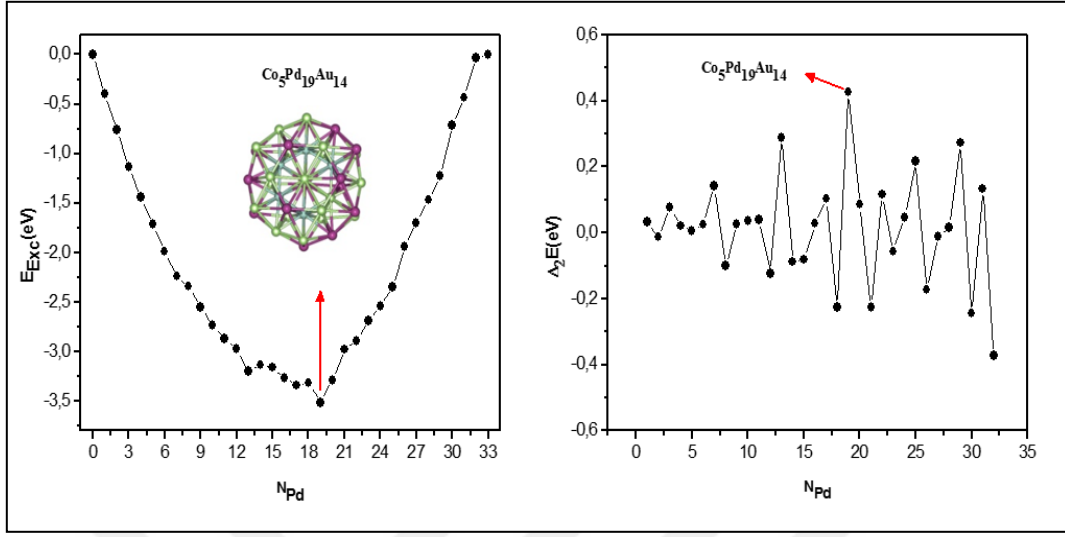
$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ ($x= 0, 33$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.89’ da gösterilmiştir.

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları ilk olarak yüzeyde yapının orta noktalarına, köşegenlere ve uç noktalara ise Au atomları yerleşmektedir.

$\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.90’da gösterilmiştir.



Şekil 3.89 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).



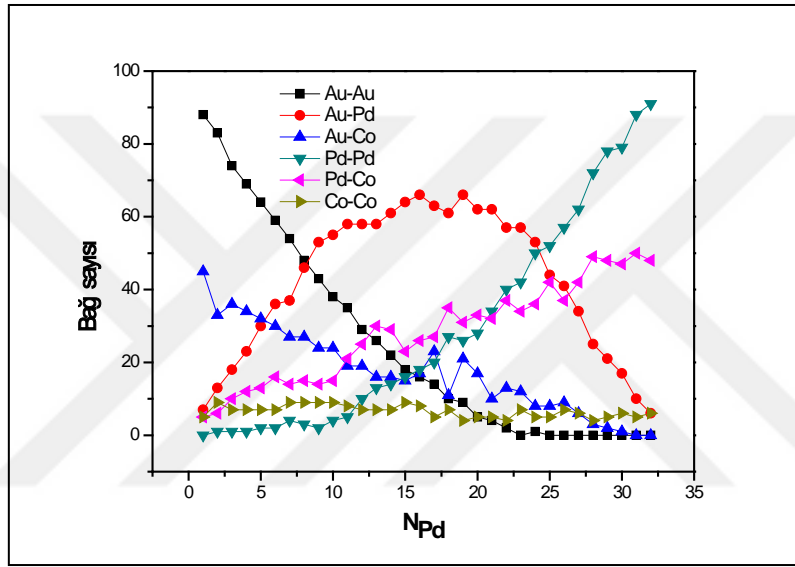
Şekil 3.90 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.90’da bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_5\text{Pd}_{19}\text{Au}_{14}$ olmaktadır.

Şekil 3.89’da gösterildiği gibi $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_5\text{Pd}_{19}\text{Au}_{14}$ nanoalaşımında Co atomları merkezde 2 Pd ve 1 Au atomu ile birleşerek çift altıgen piramit yapı oluşturmaktadır. En kararlı kompozisyon 6 katlı pankek (six-fold pancake) yapıdadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.91’de gösterilmiştir.

Şekil 3.91’e göre $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_5\text{Pd}_{16}\text{Au}_{17}$ ve $\text{Co}_5\text{Pd}_{19}\text{Au}_{14}$ kompozisyonlarında en yüksek değerindedir, daha sonra $\text{Co}_5\text{Pd}_{19}\text{Au}_{14}$ kompozisyonundan sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd

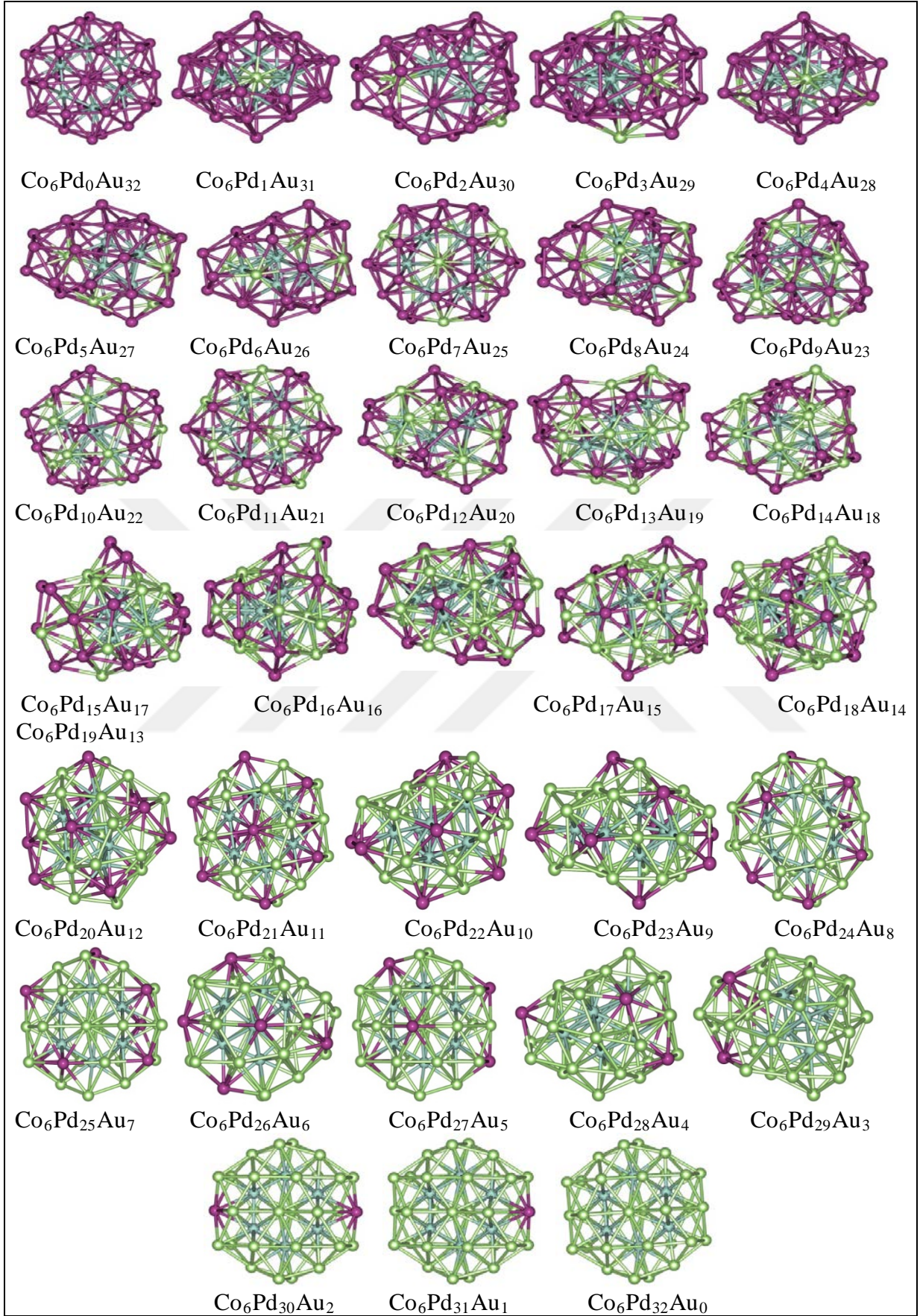
sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_5\text{Pd}_2\text{Au}_{31}$ kompozisyonundan $\text{Co}_5\text{Pd}_4\text{Au}_{29}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_5\text{Pd}_{23}\text{Au}_9$ kompozisyonunda ve $\text{Co}_5\text{Pd}_{25}\text{Au}_9$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 4 ile 9 arasındadır. $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.



Şekil 3.91 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

3.6.2 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ ($x= 0, 32$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.92' de gösterilmiştir.

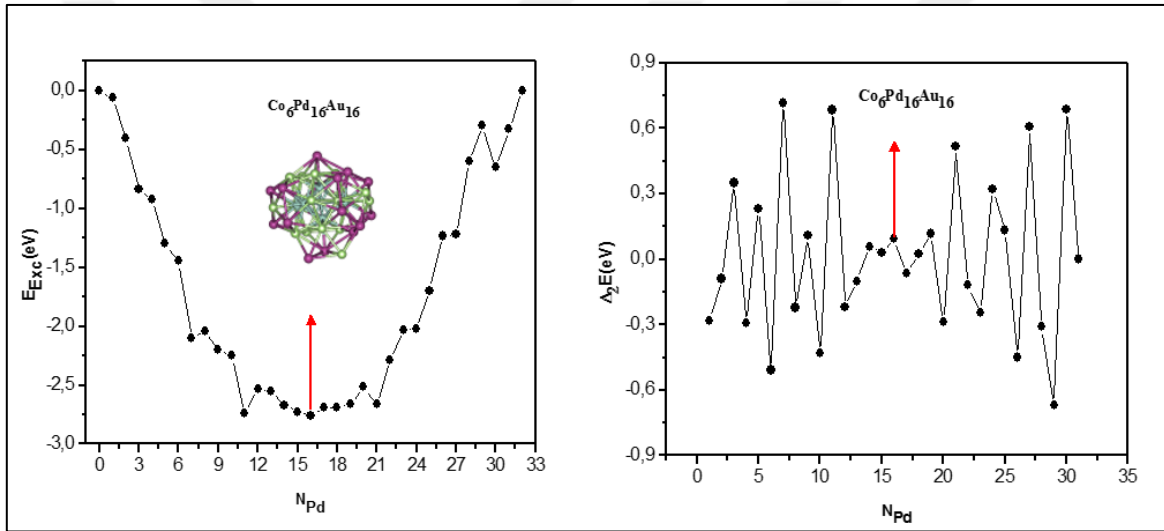


Şekil 3.92 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımalarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı

yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek çizilen grafiklerde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.93'te gösterilmiştir.

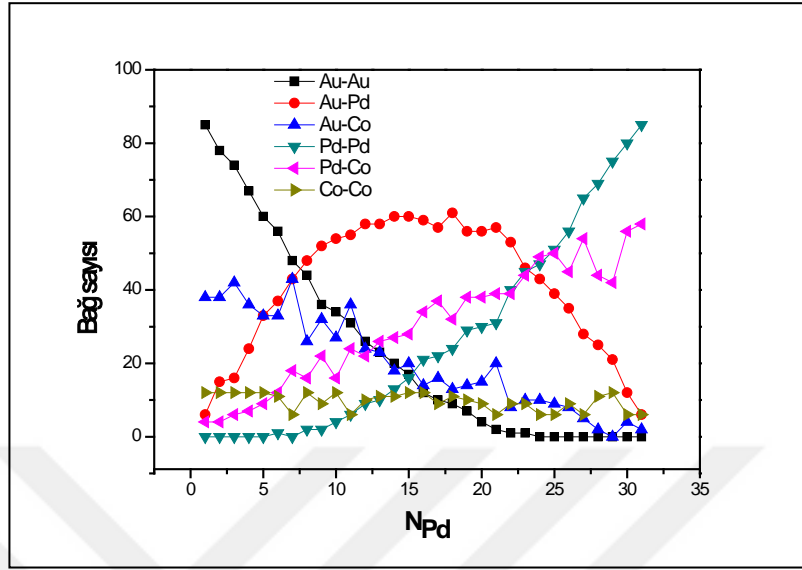


Şekil 3.93 $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.93'te bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_6\text{Pd}_{16}\text{Au}_{16}$ olmaktadır.

Şekil 3.92'de gösterildiği gibi $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_6\text{Pd}_{16}\text{Au}_{16}$ nanoalaşımında Co atomları merkezde 1 Pd atomu ile birleşerek çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. En kararlı kompozisyon deforme olmuş marks dekahedron yapıdadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$

nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.94'te gösterilmiştir.



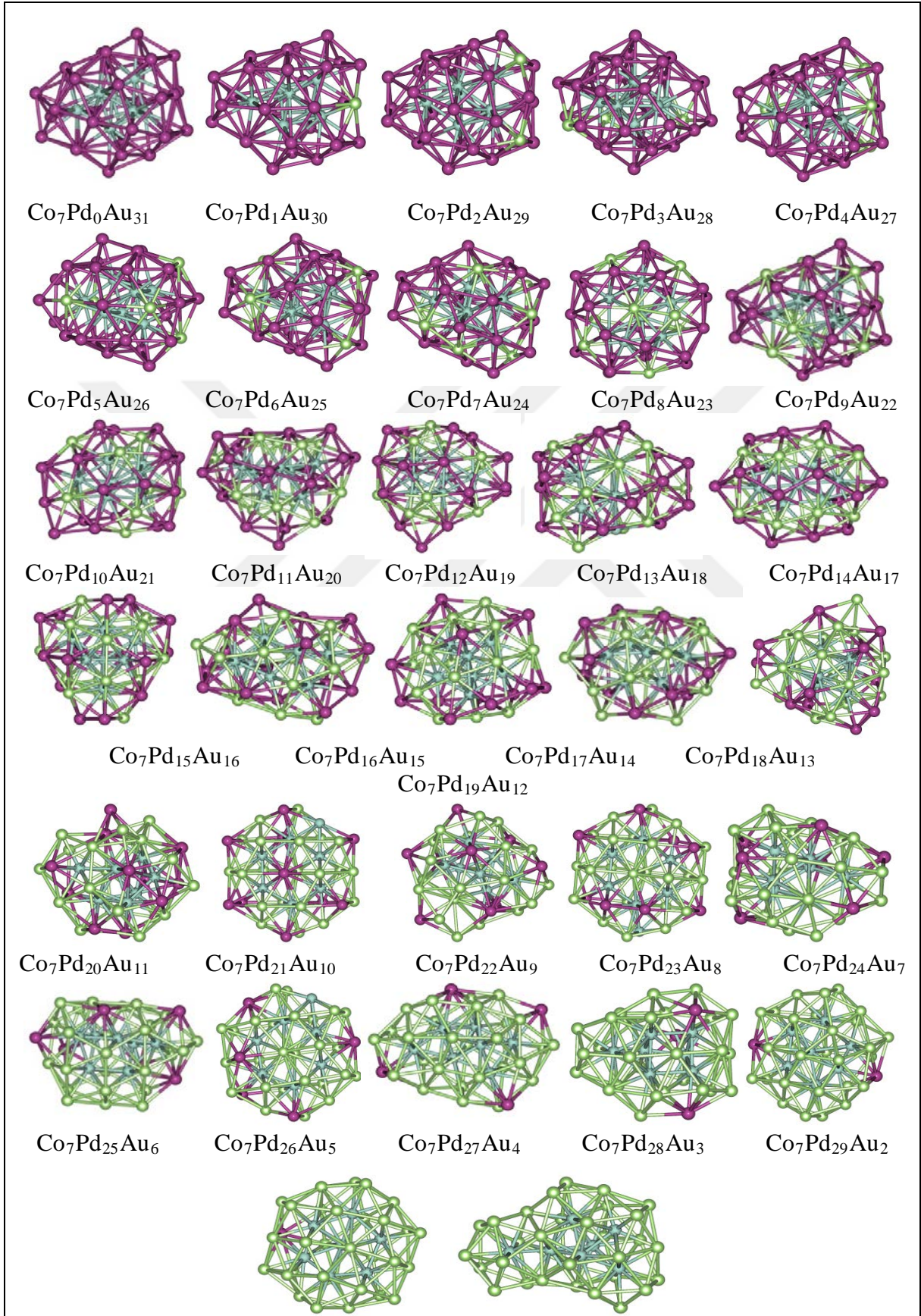
Şekil 3.94 $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.94'e göre $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_6\text{Pd}_{18}\text{Au}_{14}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_6\text{Pd}_5\text{Au}_{29}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_6\text{Pd}_{24}\text{Au}_8$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 6 ile 12 arasındadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

3.6.3 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ ($x= 0, 31$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji

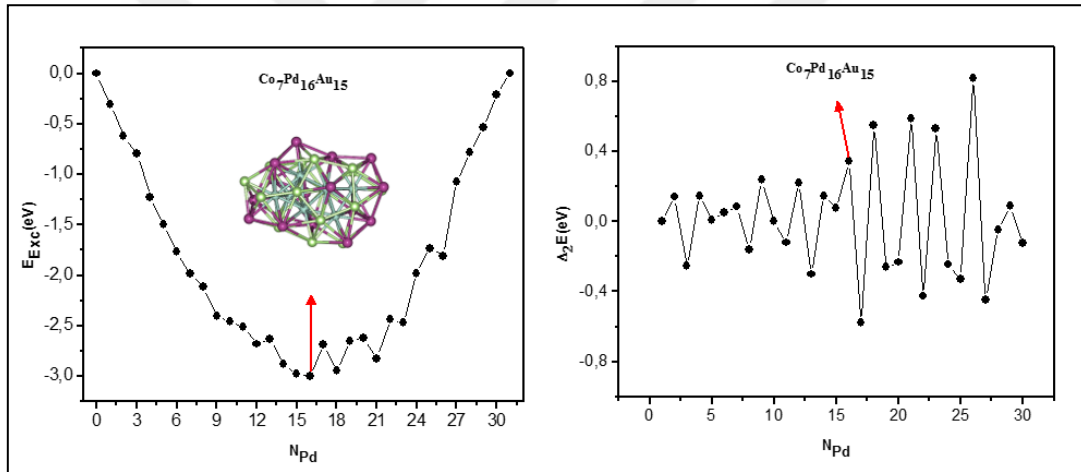
ve ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.95' te gösterilmiştir.



Şekil 3.95 Co₇Pd_xAu_{31-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Co₇Pd_xAu_{31-x} nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

Co₇Pd_xAu_{31-x} nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı arttırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek Co₇Pd_xAu_{31-x} nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.96'da gösterilmiştir.

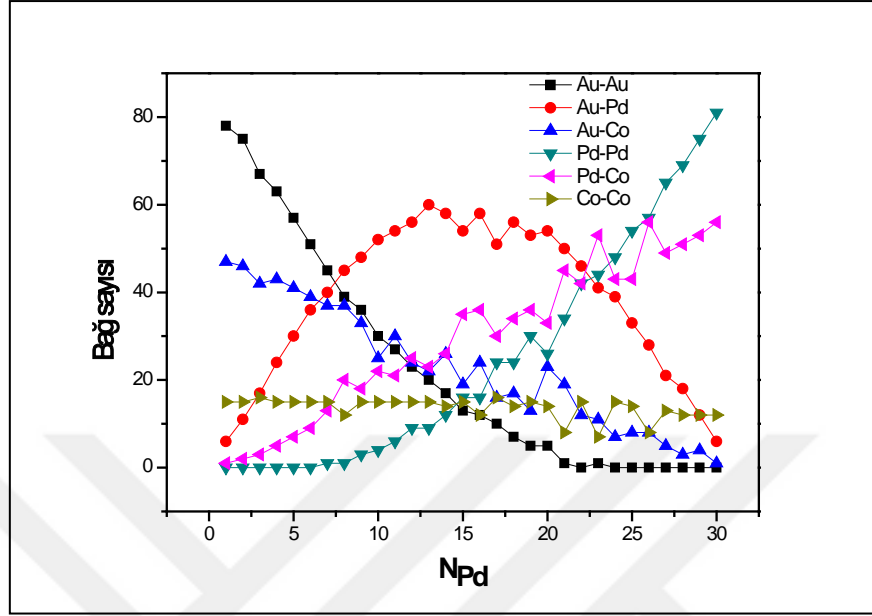


Şekil 3.96 Co₇Pd_xAu_{31-x} nanoalaşımının Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.96'da bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon Co₇Pd₁₆Au₁₅ olmaktadır.

Şekil 3.96'da gösterildiği gibi Co₇Pd_xAu_{31-x} nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan Co₇Pd₁₆Au₁₅ nanoalaşımında 6 Co atomu merkezde 2 Pd atomu ile birleşerek çift altıgen piramit yapı oluşturmaktadır. Diğer Co atomu ise yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları Au

atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.97’de gösterilmiştir.



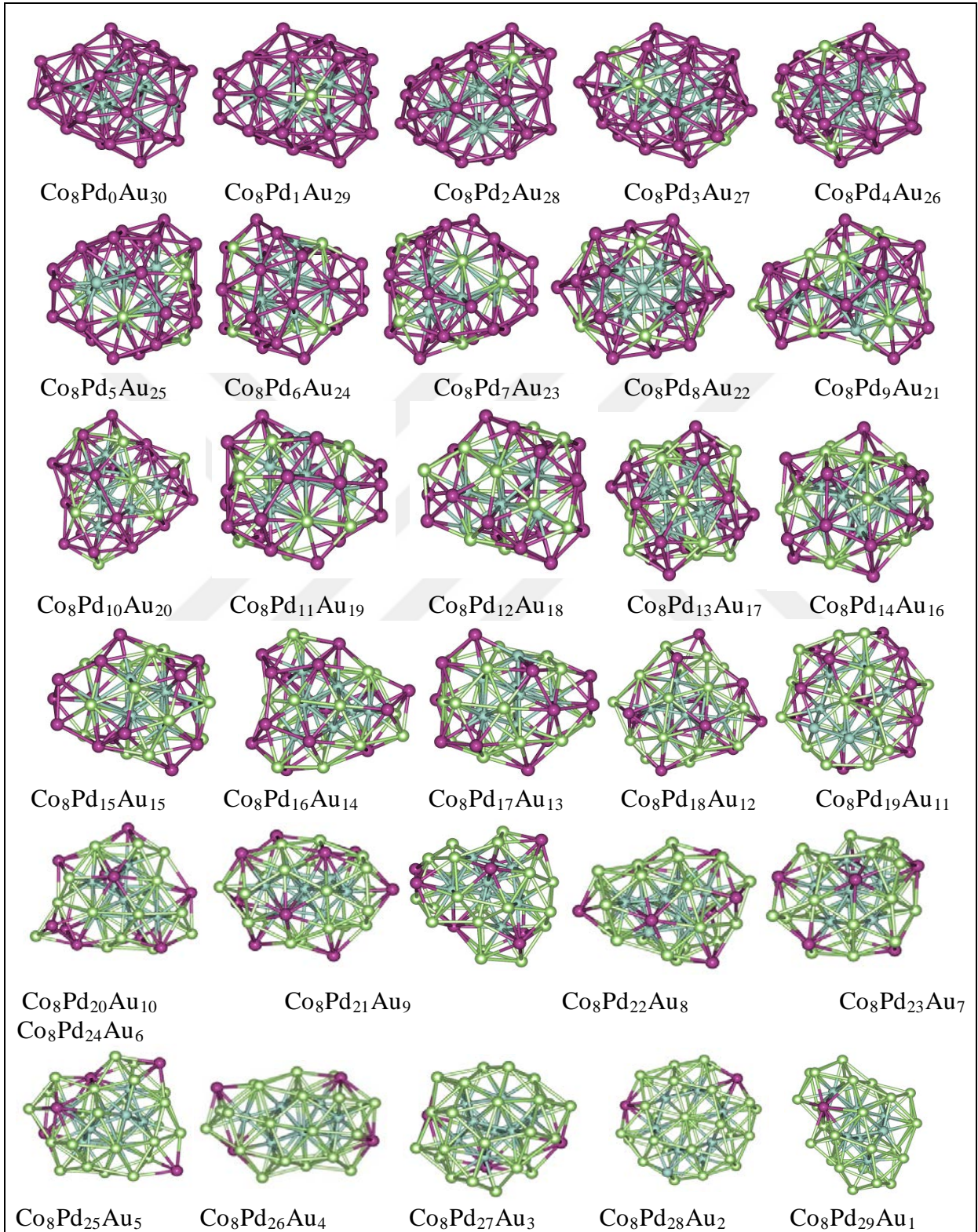
Şekil 3.97 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

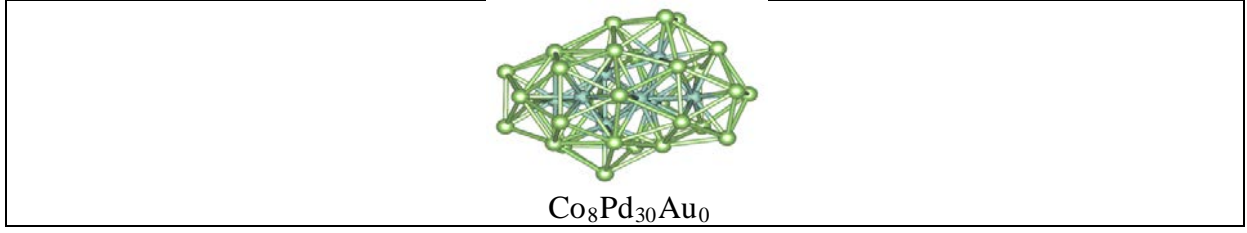
Şekil 3.97’ye göre $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_7\text{Pd}_{13}\text{Au}_{18}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_6\text{Au}_{25}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_{24}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 7 ile 16 arasındadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

3.6.4 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ ($x= 0, 30$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları

global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.98’ de gösterilmiştir.

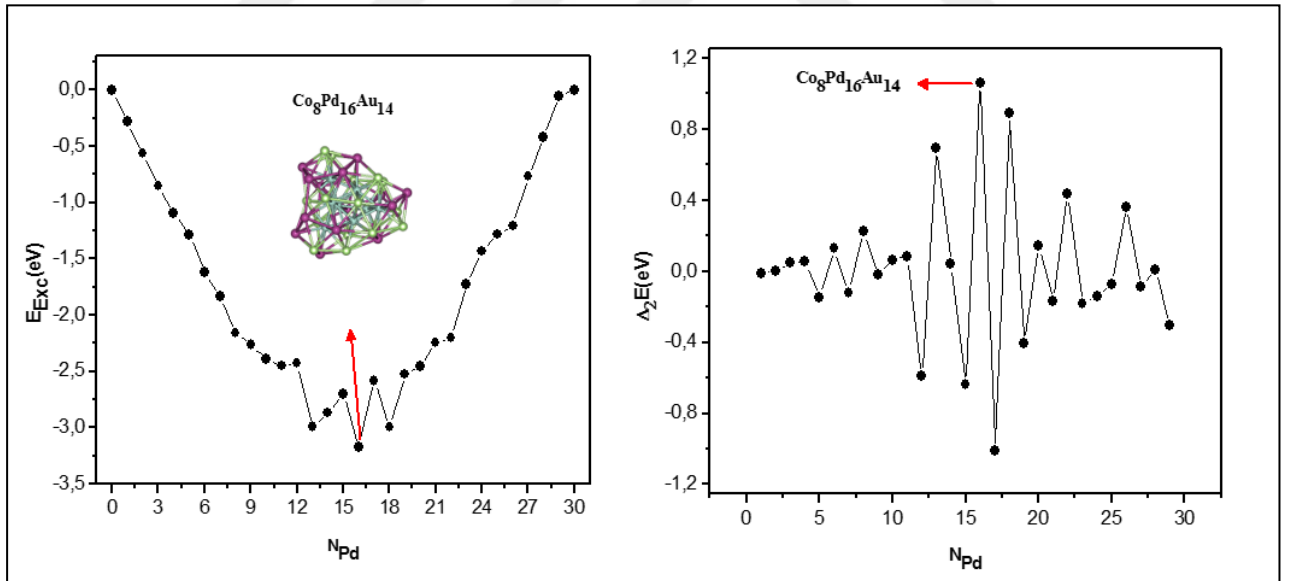




Şekil 3.98 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı arttırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.99’da gösterilmiştir.

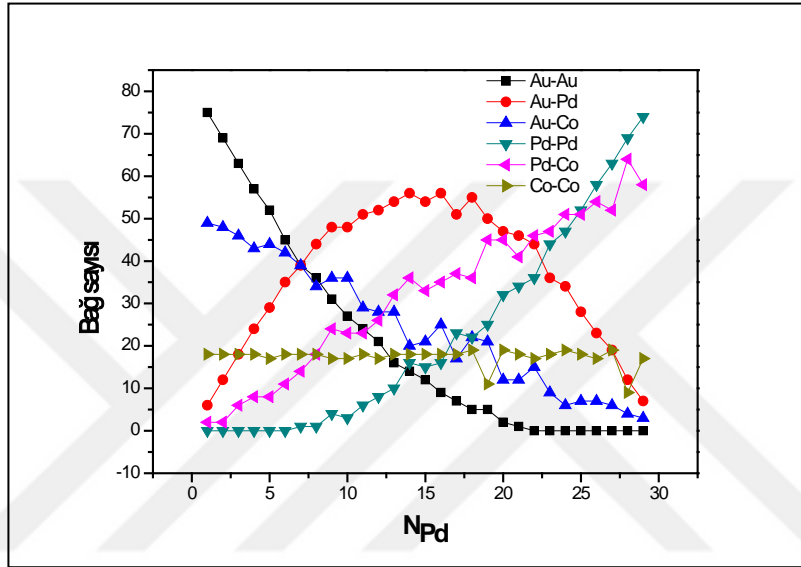


Şekil 3.99 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.99’da bu koşullar sağlanmış

olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_8\text{Pd}_{16}\text{Au}_{14}$ olmaktadır.

Şekil 3.99’da gösterildiği gibi $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_8\text{Pd}_{16}\text{Au}_{14}$ nanoalaşımında Co atomları merkezde 1 Pd atomu ile birleşerek çift şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.100’de gösterilmiştir.

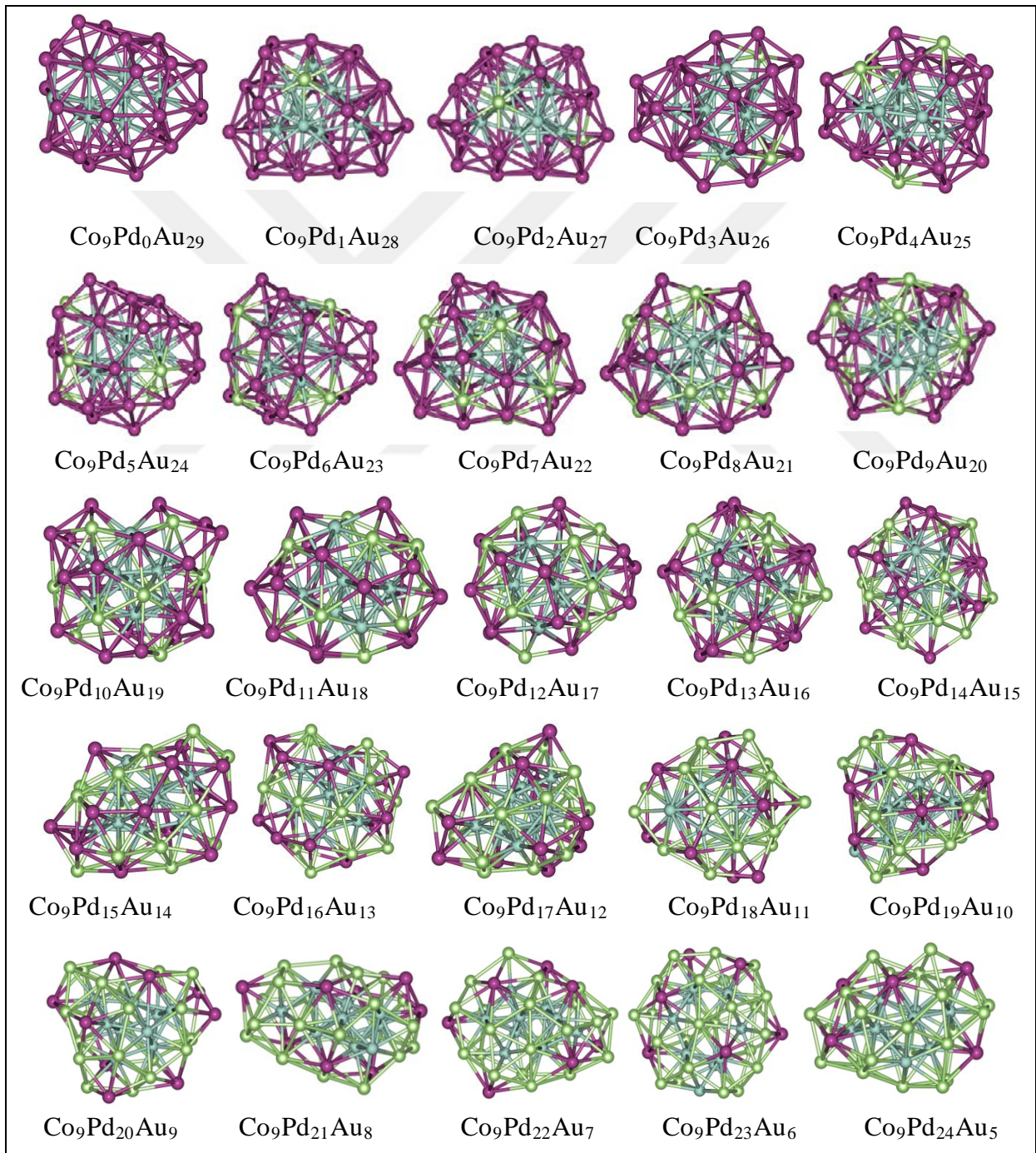


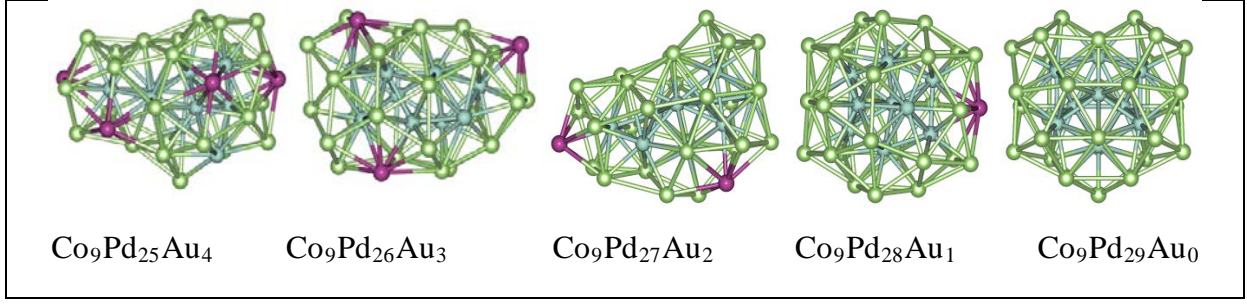
Şekil 3.100 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.100’e göre $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_8\text{Pd}_{14}\text{Au}_{16}$ ve $\text{Co}_8\text{Pd}_{16}\text{Au}_{14}$ kompozisyonlarında en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_8\text{Pd}_6\text{Au}_{24}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_8\text{Pd}_{22}\text{Au}_8$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Tüm kompozisyonlarda Co-Co bağ sayısı 17 ile 19 arasındadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

3.6.5 Co₉Pd_xAu_{29-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

Co₉Pd_xAu_{29-x} (x= 0, 29) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilmiştir. Çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. Co₉Pd_xAu_{29-x} nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.101' de gösterilmiştir

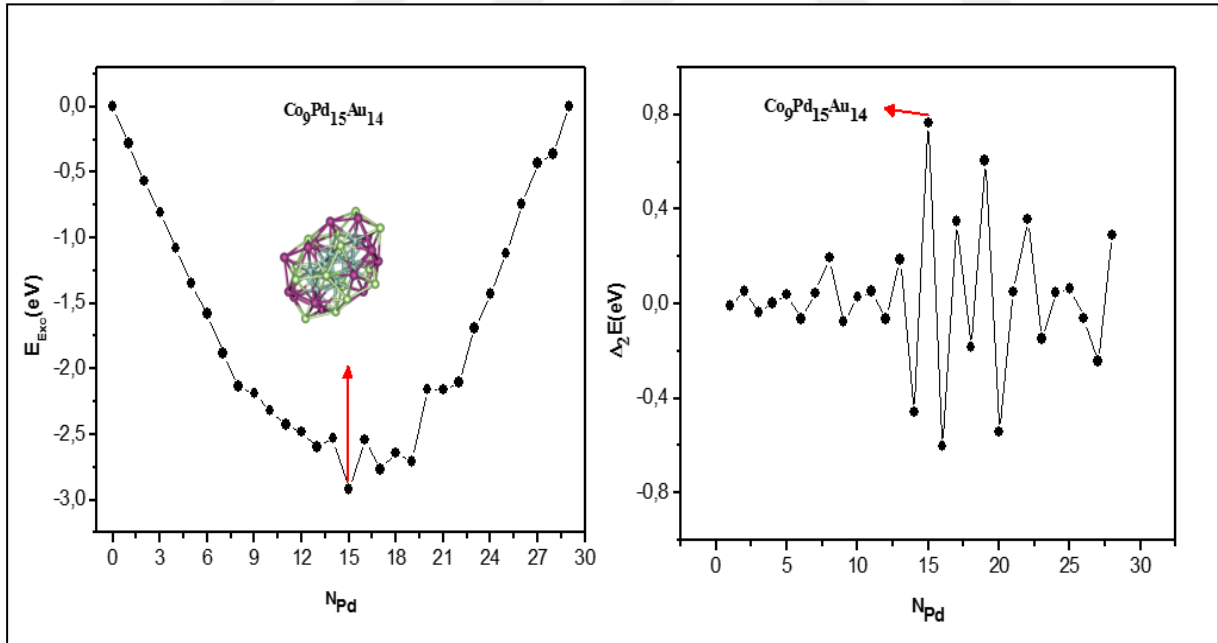




Şekil 3.101 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.102’de gösterilmiştir.

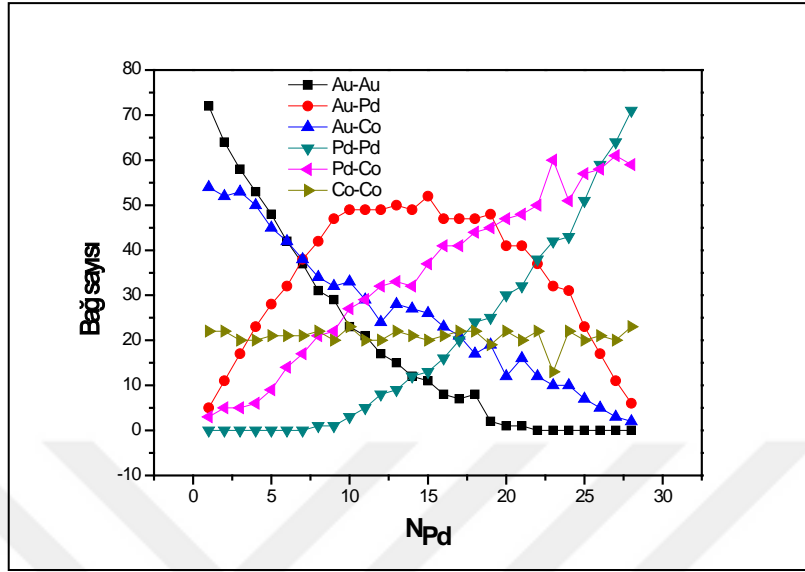


Şekil 3.102 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.102’de bu koşullar sağlanmış

olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_9\text{Pd}_{15}\text{Au}_{14}$ olmaktadır.

Şekil
gösterildiği



3.102'de
gibi
 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$

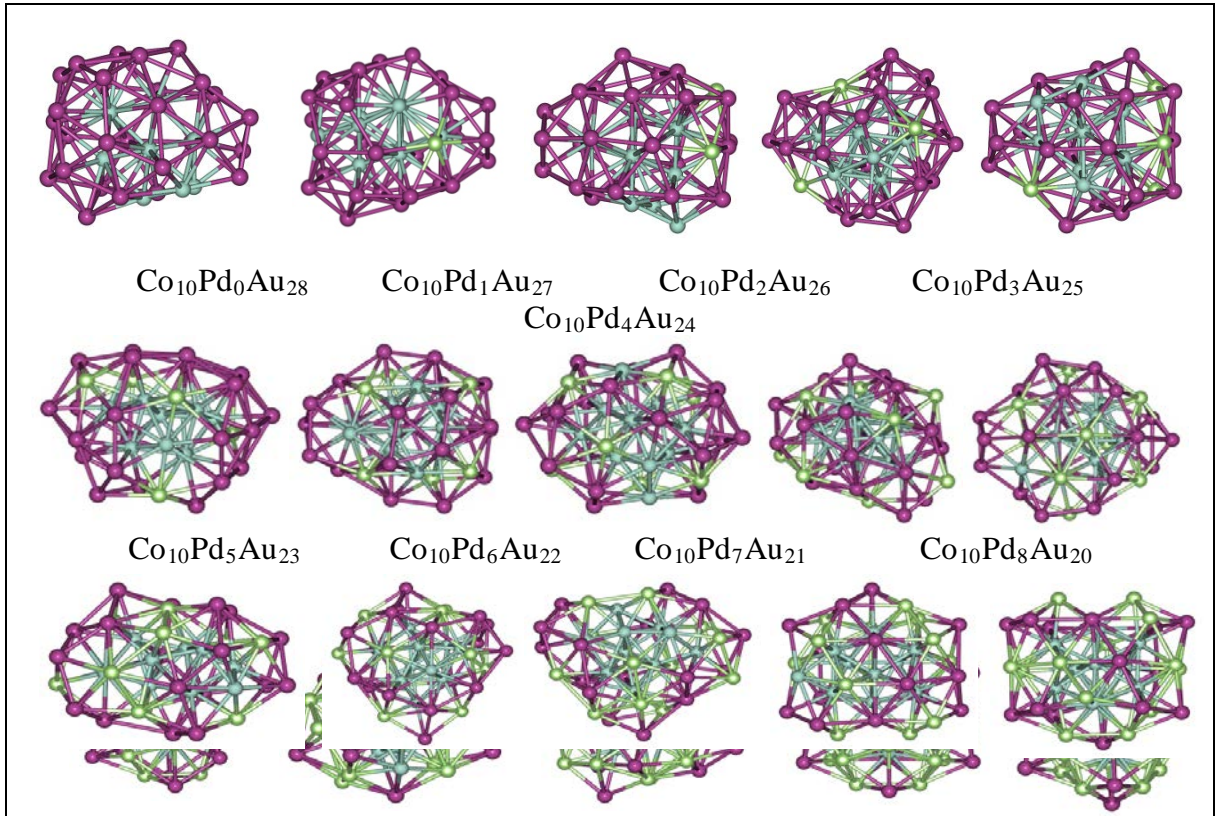
nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_9\text{Pd}_{15}\text{Au}_{14}$ nanoalaşımında Co atomları merkezde 1 Pd atomu ile birleşerek üç şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Geri kalan Co atomu ise yapıya köşegenden bağlanmaktadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.103'te gösterilmiştir.

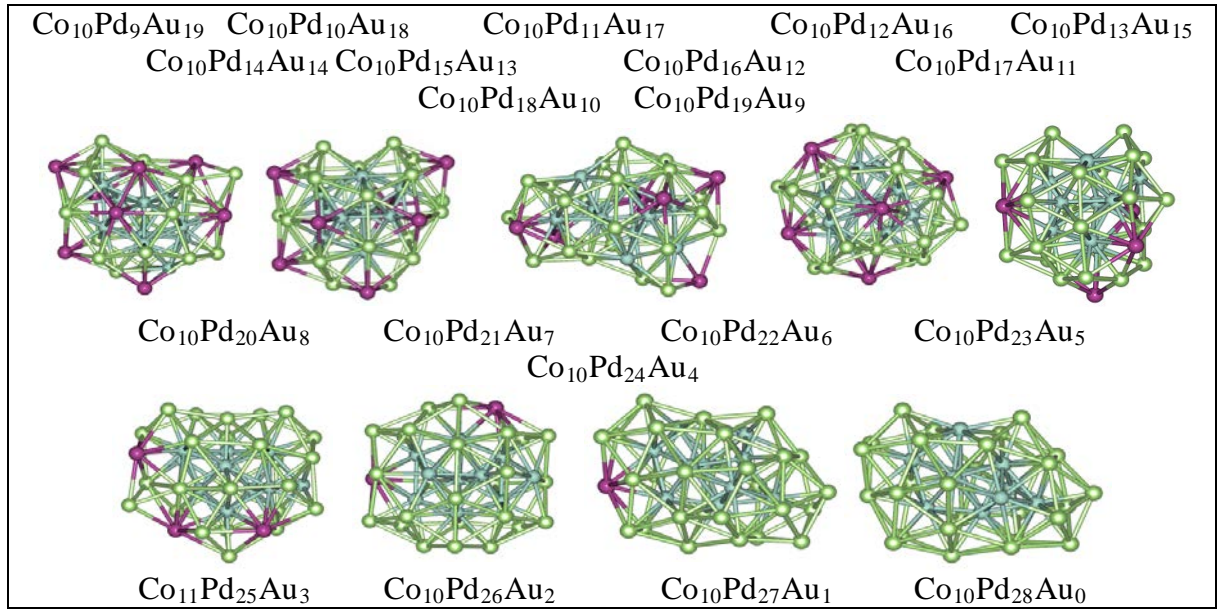
Şekil 3.103 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.103'e göre $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_9\text{Pd}_{15}\text{Au}_{14}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_9\text{Pd}_7\text{Au}_{22}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_9\text{Pd}_{22}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Tüm kompozisyonlarda Co-Co bağ sayısı 20 ile 23 arasındadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

3.6.6 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ ($x= 0, 28$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.104' te gösterilmiştir.

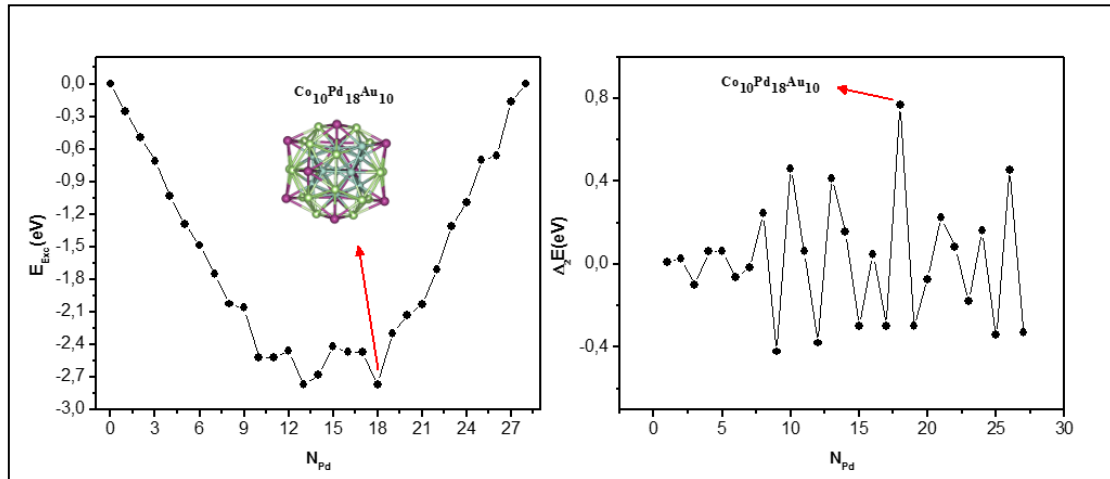




Şekil 3.104 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

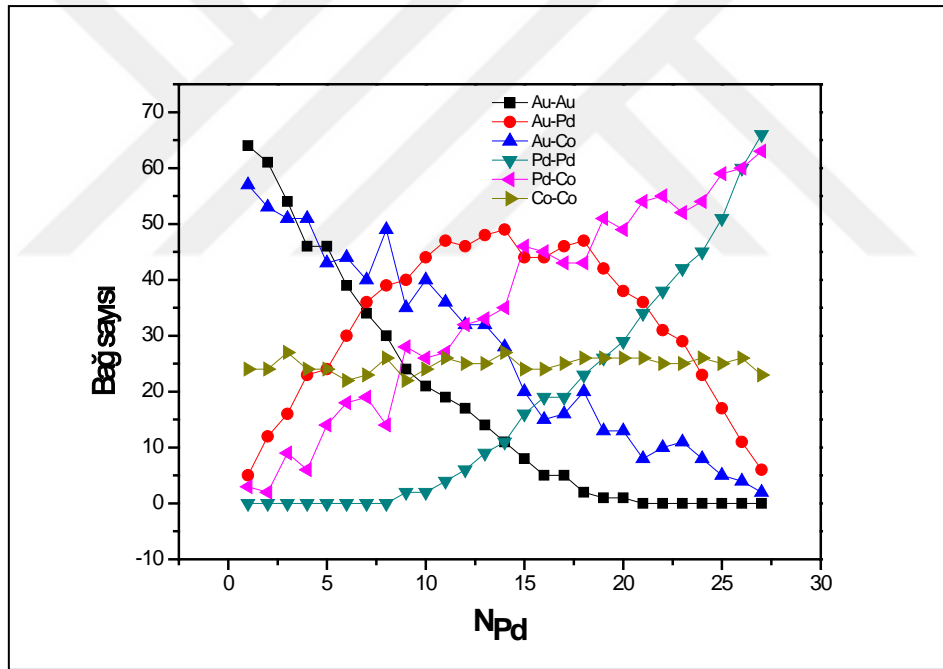
$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı arttırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği çizilmiştir. Çizilen grafiklerde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.105'te gösterilmiştir.



Şekil 3.105 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.105'te bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{18}\text{Au}_{10}$ olmaktadır.

Şekil 3.105'te gösterildiği gibi $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{18}\text{Au}_{10}$ nanoalaşımında Co atomları merkezde üç şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.106'da gösterilmiştir.



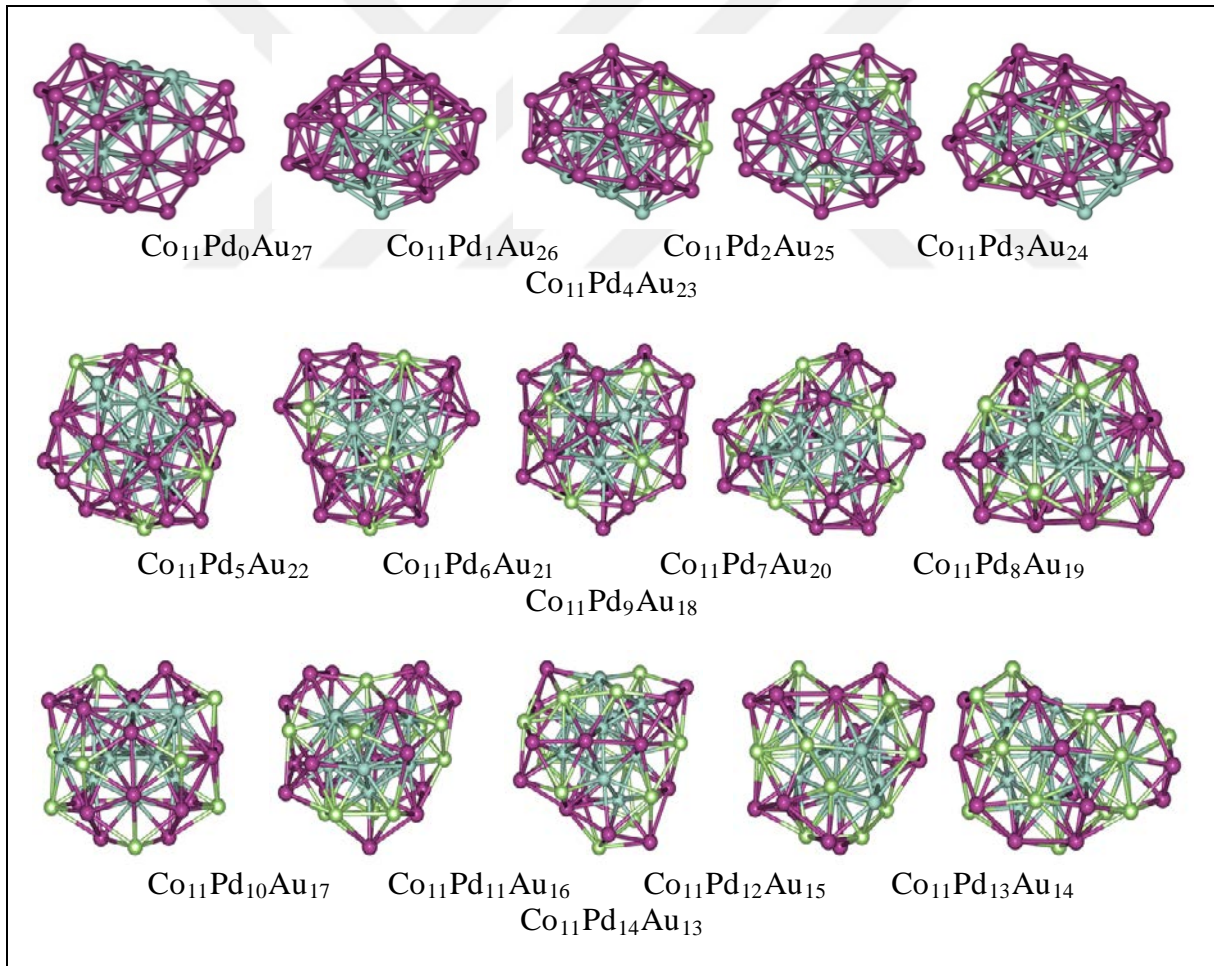
Şekil 3.106 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

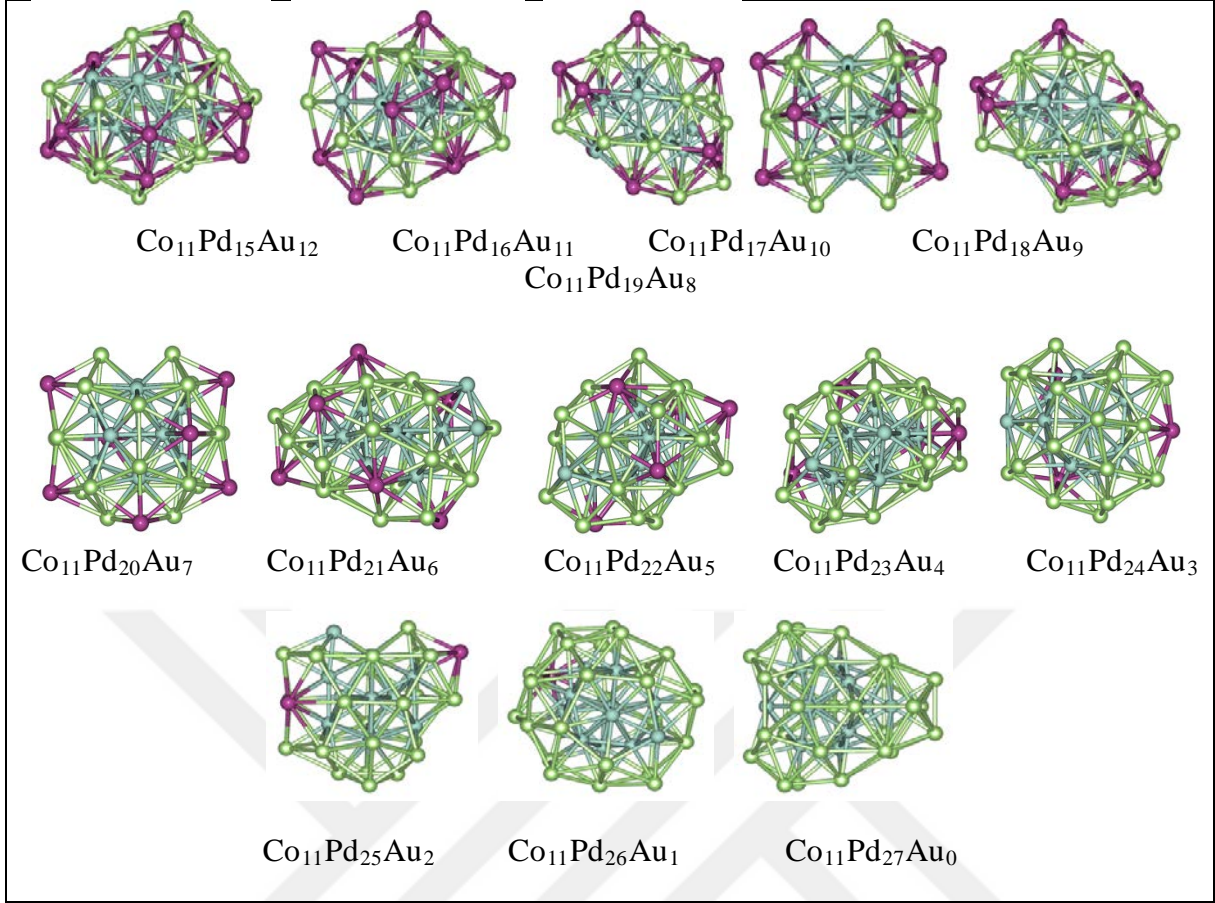
Şekil 3.106'ya göre $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{14}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları Co atomlarına yakın

yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{10}\text{Pd}_8\text{Au}_{20}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{21}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Tüm kompozisyonlarda Co-Co bağ sayısı 22 ile 27 arasındadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

3.6.7 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ ($x= 0, 27$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.107’ de gösterilmiştir.

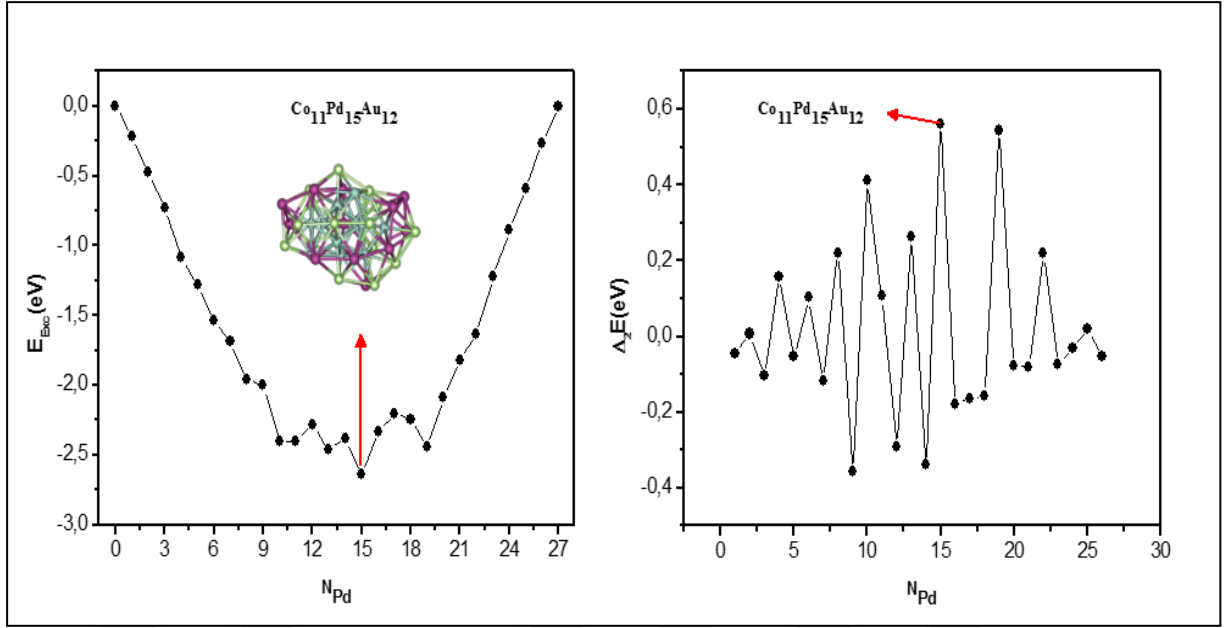




Şekil 3.107 $Co_{11}Pd_xAu_{27-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$Co_{11}Pd_xAu_{27-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı artırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır.

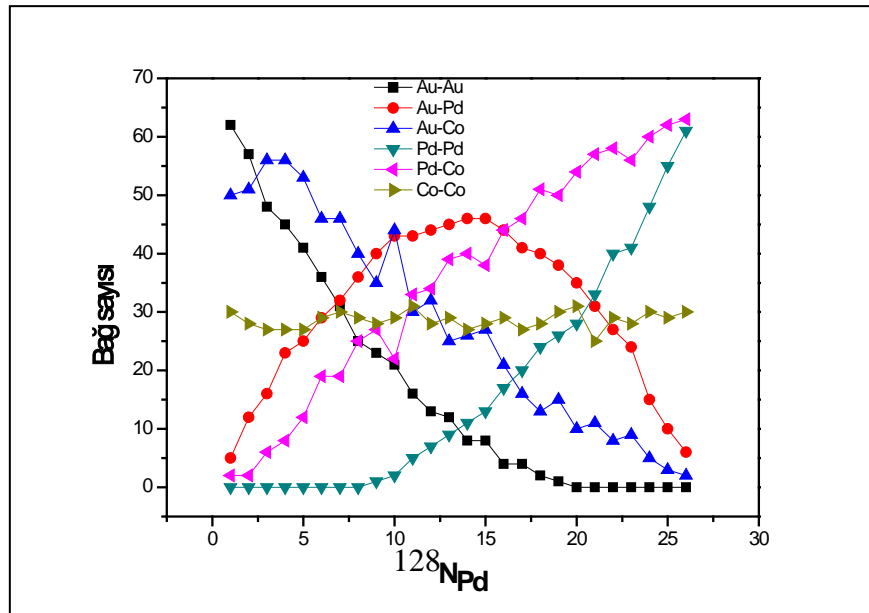
$Co_{11}Pd_xAu_{27-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.108’de gösterilmiştir.



Şekil 3.108 $Co_{11}Pd_xAu_{27-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.108’de bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $Co_{11}Pd_{15}Au_{12}$ olmaktadır.

Şekil 3.108’de gösterildiği gibi $Co_{11}Pd_xAu_{27-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_{11}Pd_{15}Au_{12}$ nanoalaşımında Co atomları merkezde üç şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Pd atomları Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $Co_{11}Pd_xAu_{27-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.109’da gösterilmiştir.

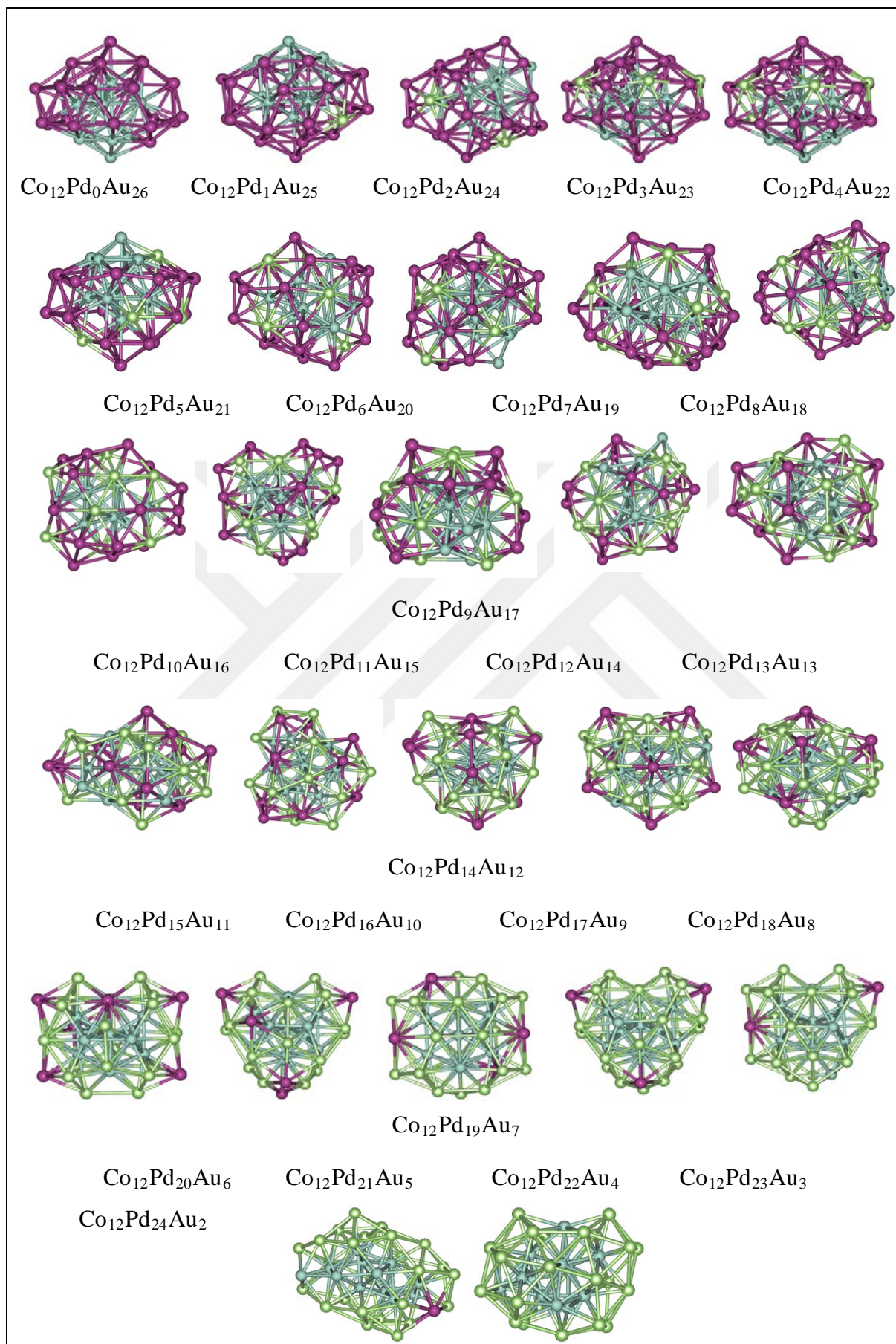


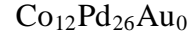
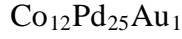
Şekil 3.109 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.109'a göre $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{15}\text{Au}_{12}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{11}\text{Pd}_8\text{Au}_{19}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{20}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Tüm kompozisyonlarda Co-Co bağ sayısı 25 ile 31 arasındadır. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

3.6.8 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ ($x= 0, 26$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.110' da gösterilmiştir.

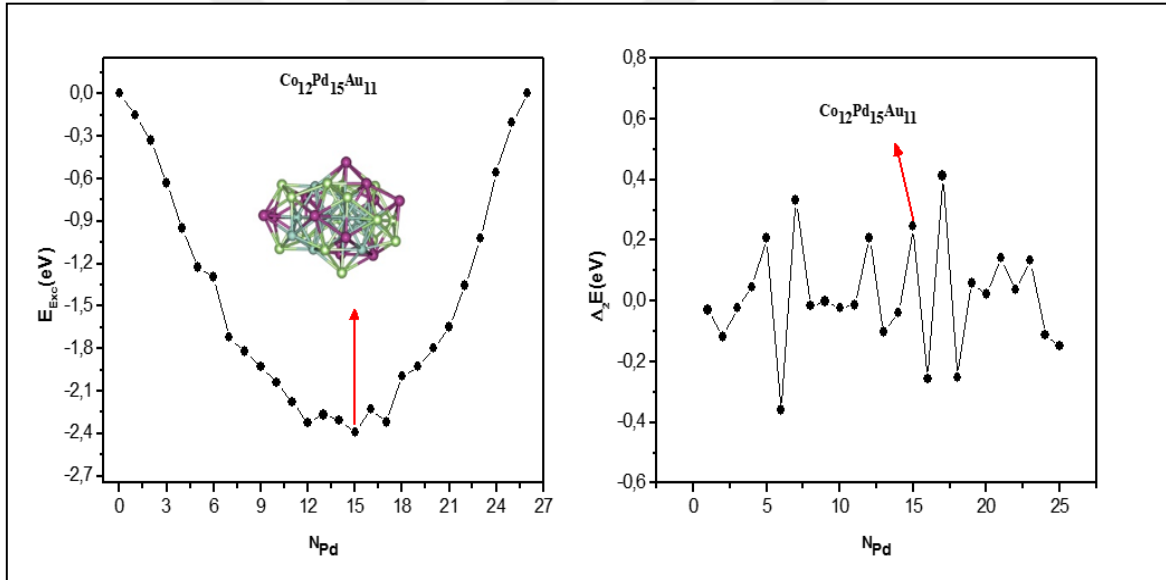




Şekil 3.110 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımı amorf yapıdadır.

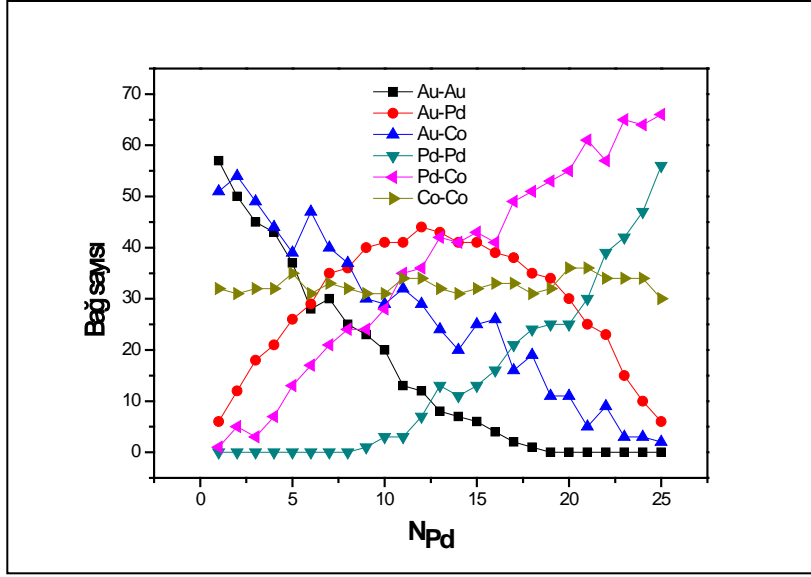
$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.111’de gösterilmiştir.



Şekil 3.111 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.111’de bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{15}\text{Au}_{11}$ olmaktadır.

Şekil 3.111'de
gibi
 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$



gösterildiği

x

nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{15}\text{Au}_{11}$ nanoalaşımında Co atomları merkezde yer almaktadır. Merkezde Pd atomları ve Au atomları ile birleşerek amorf yapı oluşturmaktadır. Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.112'de gösterilmiştir.

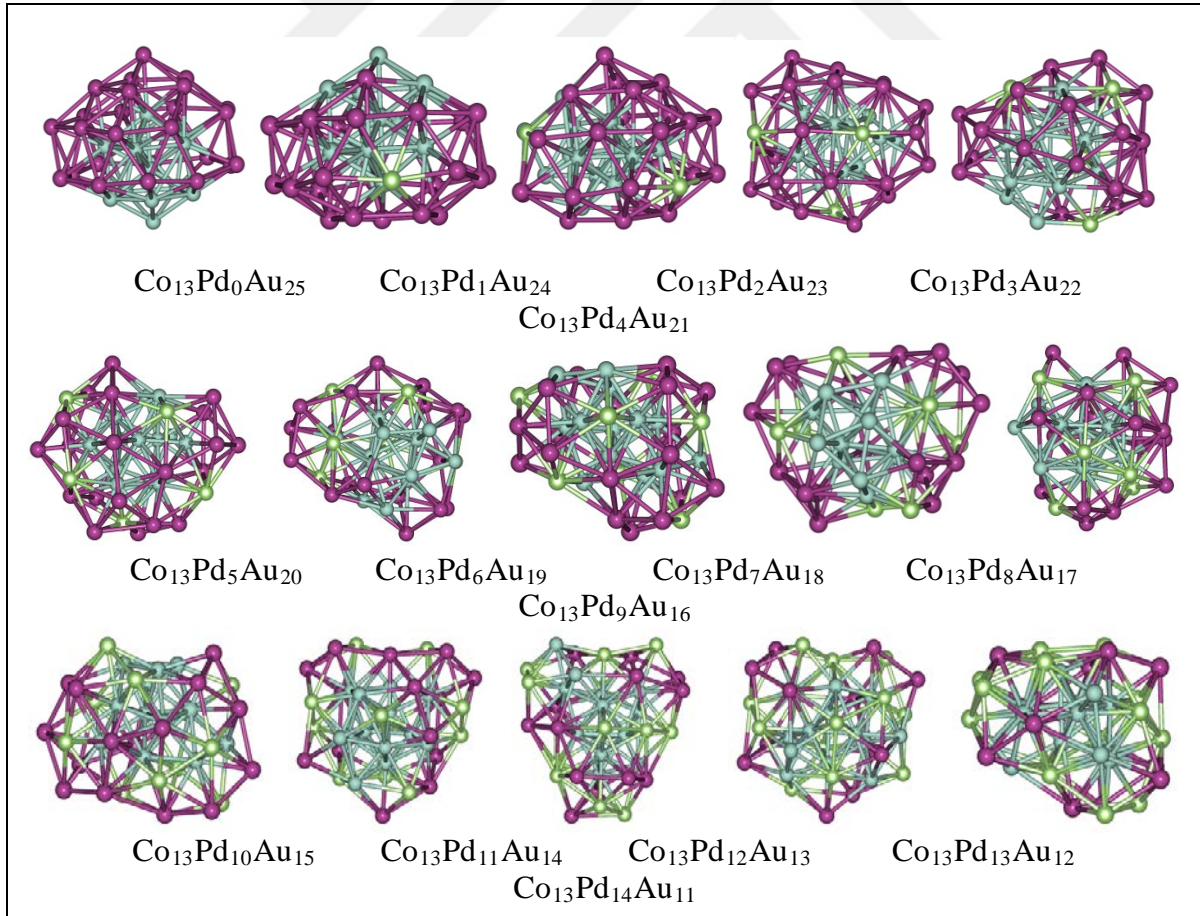
Şekil 3.112 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

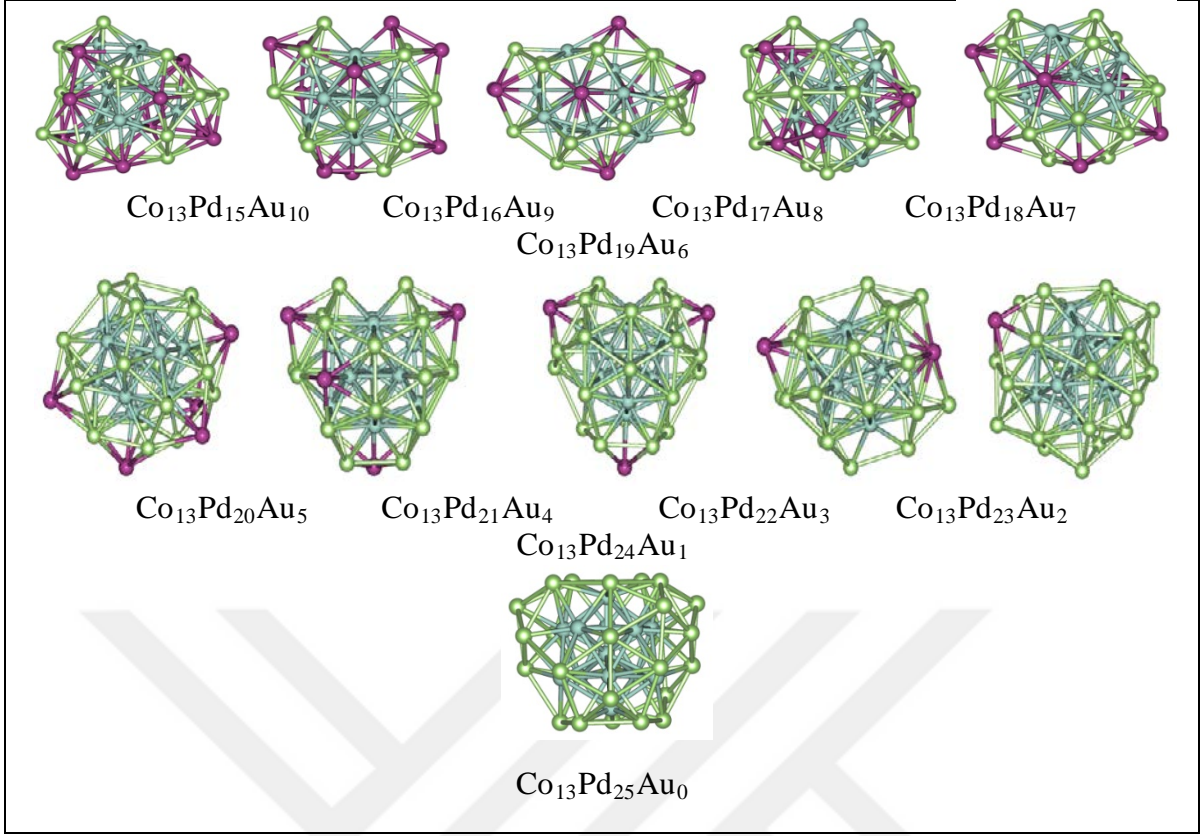
Şekil 3.112'ye göre $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{15}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği

gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{12}\text{Pd}_8\text{Au}_{18}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{19}\text{Au}_7$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Tüm kompozisyonlarda Co-Co bağ sayısı 30 ile 36 arasındadır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

3.6.9 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ ($x = 0, 25$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.113'te gösterilmiştir.

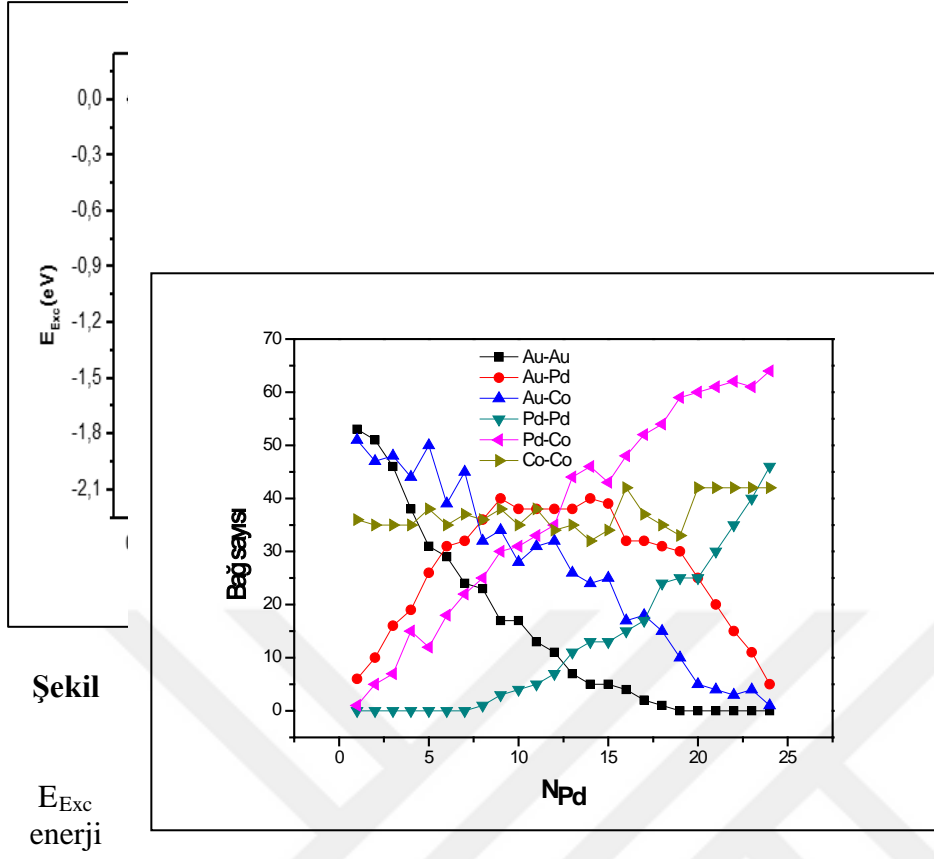




Şekil 3.113 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelenerek Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları merkezde ve yüzeyde yer almaktadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının $\text{Co}_{13}\text{Pd}_0\text{Au}_{25}$ kompozisyonu marks dekahedron, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_1\text{Au}_{24}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_2\text{Au}_{23}$ kompozisyonları deforme olmuş Marks Dekahedron, geri kalan tüm kompozisyonlar amorf yapıdadır.

$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Nanoalaşımın en kararlı yapıları seçilerek çizilen Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.114’te gösterilmiştir.



Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerlerin zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.114'te bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon Co₁₃Pd₁₅Au₁₀ olmaktadır.

Şekil 3.114'te gösterildiği gibi Co₁₃Pd_xAu_{25-x} nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan Co₁₃Pd₁₅Au₁₀ nanoalaşımında, Co atomları merkezde yer almaktadır. Merkezde Pd atomları ile birleşerek tek şapkalı ikili ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co₁₃Pd_xAu_{25-x} nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.115'te gösterilmiştir.

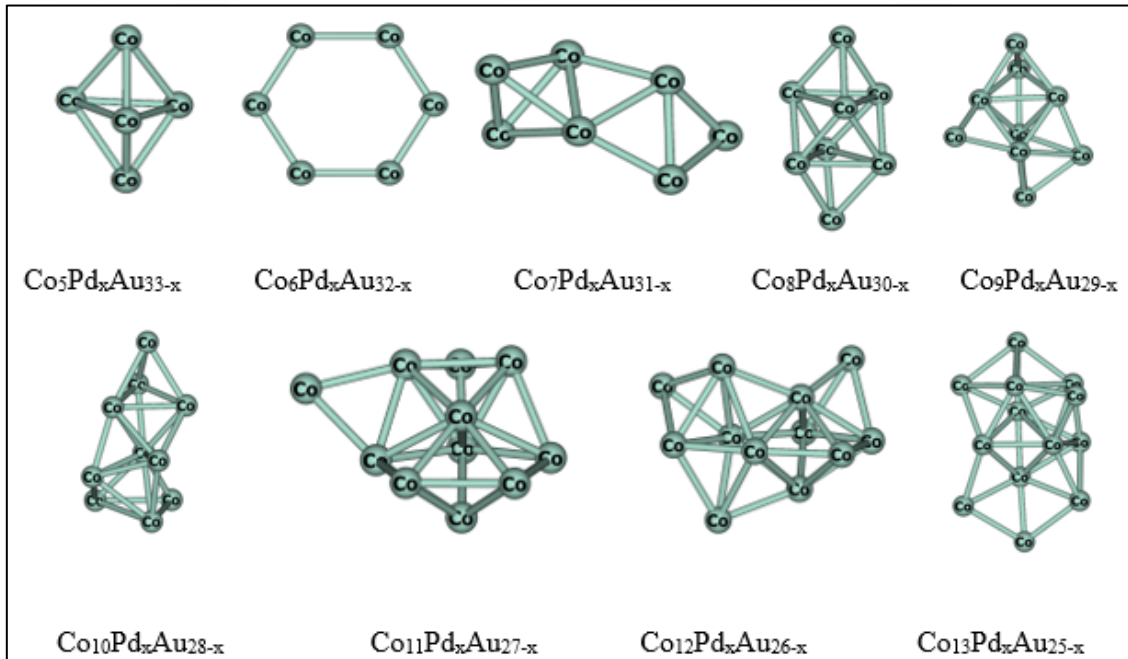
Şekil 3.115 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.115'e göre $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{13}\text{Pd}_9\text{Au}_{16}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{11}$ kompozisyonlarında en yüksek değerindedir, daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma gösterirken, Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_{13}\text{Pd}_7\text{Au}_{18}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Au atomları $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{19}\text{Au}_6$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. Tüm kompozisyonlarda Co-Co bağ sayısı 32 ile 42 arasındadır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle toplam 157 adet bağ oluşmaktadır.

Bu bölümde 38 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımının seçili $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ kompozisyonlarının yapısal özellikleri global optimizasyon yöntemleri ile incelenmiştir. Genel olarak $\text{Co}_5\text{Pd}_x\text{Au}_{33-x}$, $\text{Co}_6\text{Pd}_x\text{Au}_{32-x}$, $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{31-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{30-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{29-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{28-x}$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{27-x}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{26-x}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{25-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları incelendiğinde tüm kompozisyonlarda merkeze her zaman Co atomları yerleşmektedir. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Tüm nanoalaşımın en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi grafiği incelendiğinde ise, Co-Co bağ sayısı genellikle belli değerler arasında kalmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise her bir nanoalaşımda genel olarak en kararlı yapıya kadar artmakta, daha sonrasında azalmaya başlamaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd bağ sayısı genellikle yapıda 7 adet Pd atomu

bulunana kadar oluşmamaktadır. Daha sonrasında artan bir grafik çizmektedir. Au-Au bağ sayısı ise, genellikle 6 adet Au atomu kalana kadar oluşmakta daha sonra oluşmamaktadır. Artan Pd sayısına göre tüm nanoalaşımlarda Au-Co bağı azalırken Pd-Co bağı artmaktadır. Tüm 34 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımında kompozisyonlar altı katmanlı pankek modeline dönüşmek istemektedir. Ancak bu durum kompozisyonda Pd veya Au atomunun olmadığı durumlarda gerçekleşmektedir. Geri kalan kompozisyonlar amorf yapıda bulunmaktadır.

Co-Pd-Au nanoalaşım kümesinde Co sayısına göre oluşturulan nanoalaşımların kendi aralarında bağ yapan Co atomlarının yapısı Şekil 3.116' da gösterilmektedir.



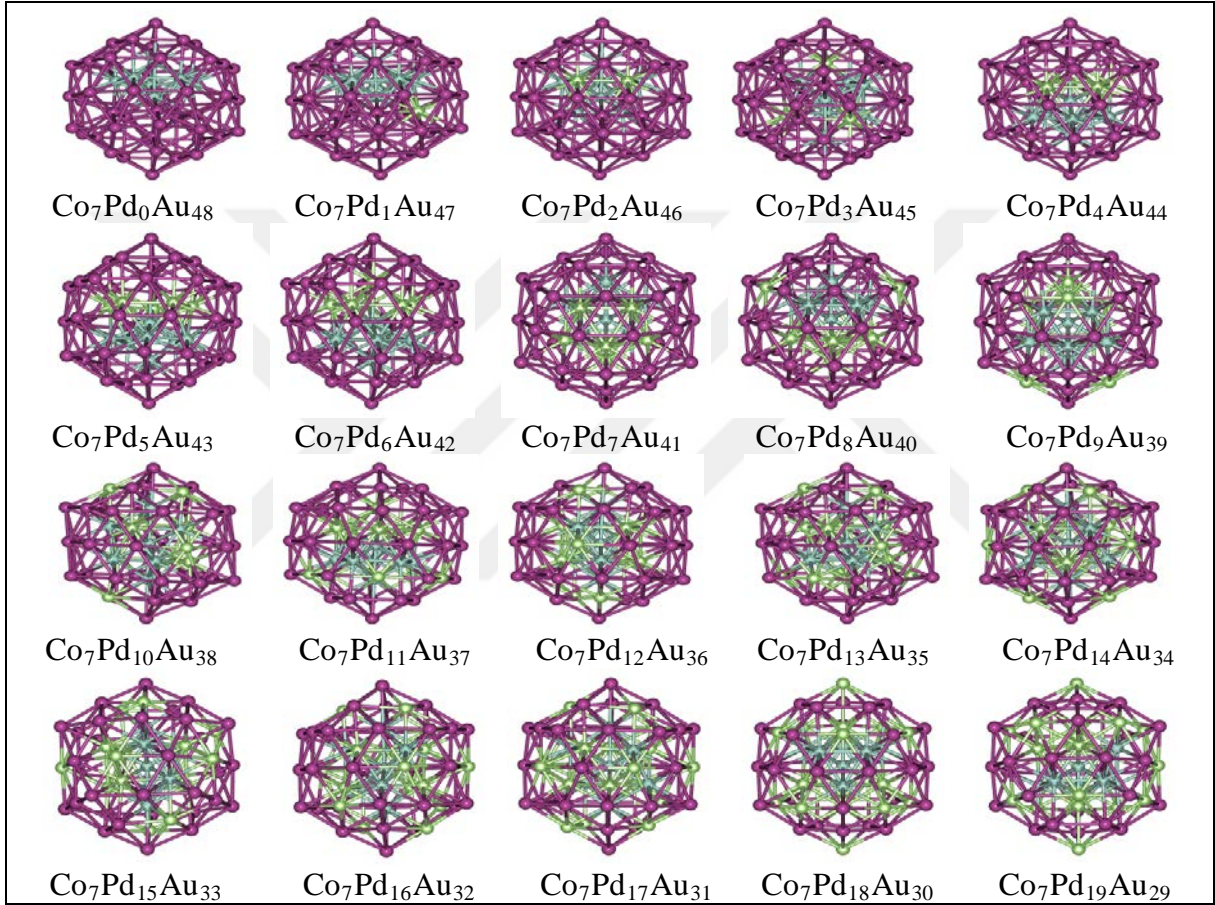
Şekil 3.116 38 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımlarında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.

3.7 55 ATOMLU Co-Pd-Au ÜÇLÜ NANOALAŞIMININ YAPISAL ÖZELLİKLERİ

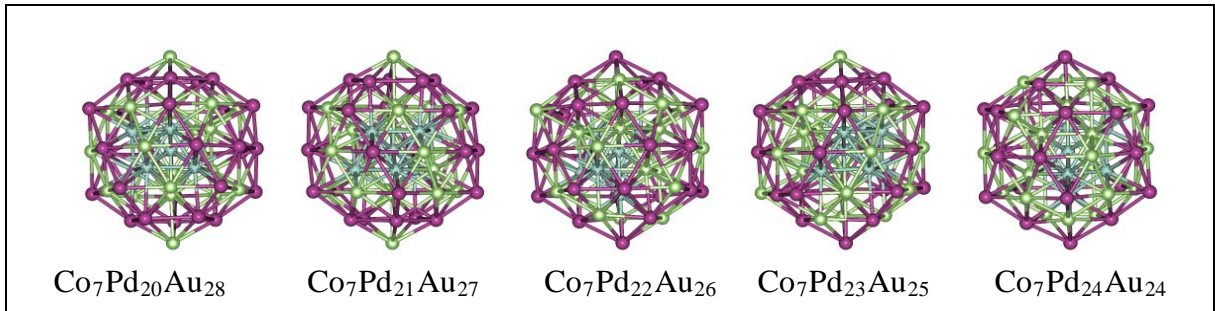
Bu bölümde toplam atom sayısı 55 olan Co-Pd-Au nanoalaşımlarının seçili kompozisyonlarının en kararlı yapıları ve bu yapılar arasından en kararlı kompozisyonu bulunarak yapısal özellikleri incelenmiştir. İncelenen kompozisyonların fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri çizilmiştir.

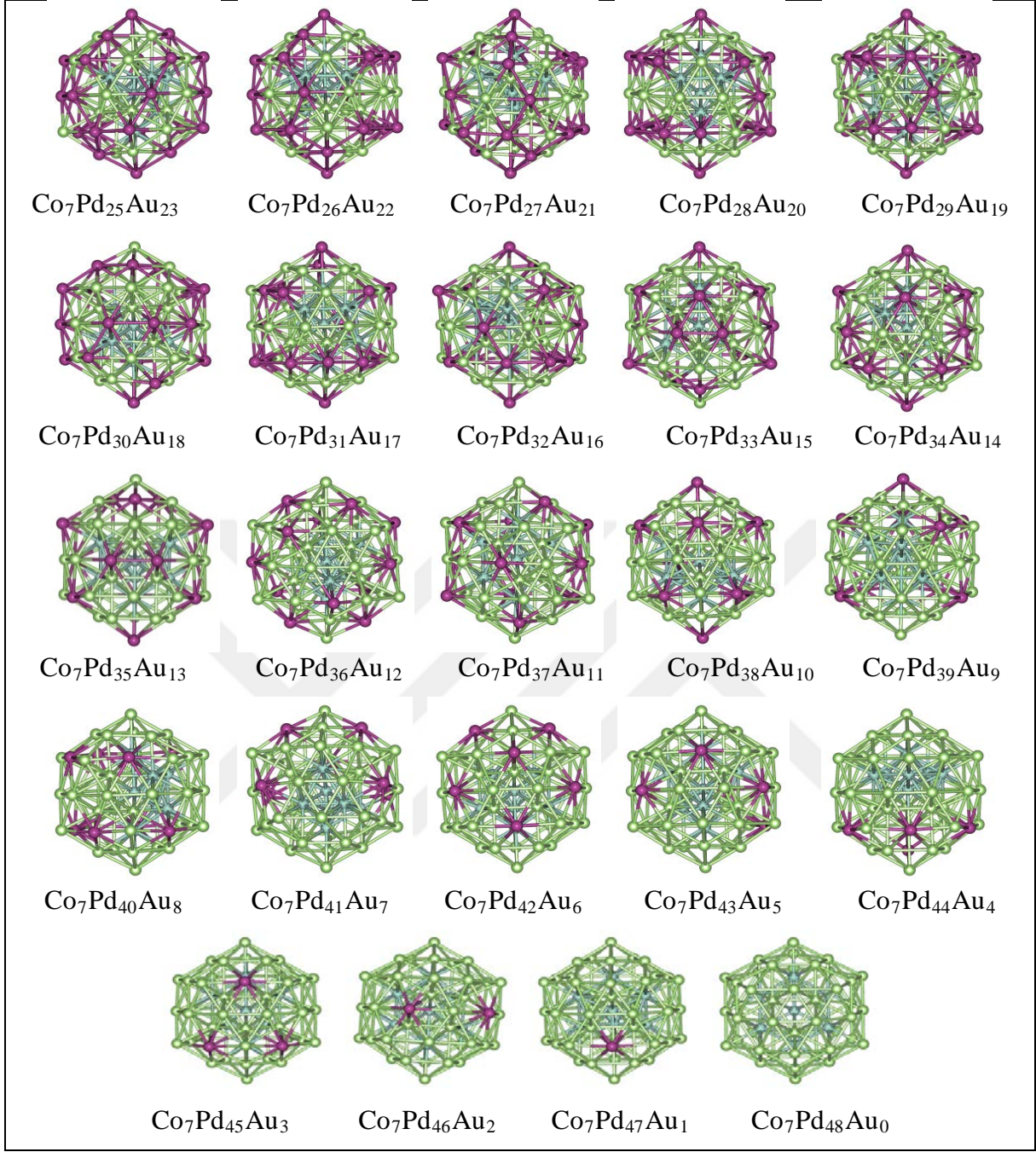
3.7.1 Co₇Pd_xAu_{48-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ ($x= 0, 48$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği.nde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.117’de gösterilmiştir.



Şekil 3.117 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir. (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir)



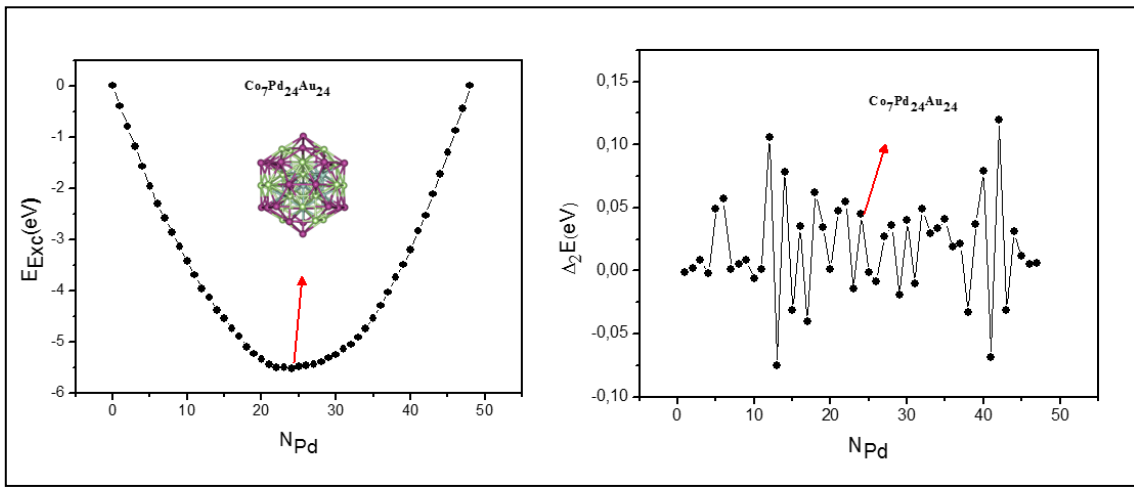


Şekil 3.117 (devam ediyor)

$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek merkezde beşgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. Ayrıca merkezde $\text{Co}_7\text{Pd}_6\text{Au}_{42}$ kompozisyonundan itibaren Pd atomları ile birleşik merkezde ikosahedral yapı oluşturulmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları genellikle merkeze ve Co atomlarına

yakın yerlere yerleşmeyi tercih ederken Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Au atomları $\text{Co}_7\text{Pd}_{36}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren yüzeyin en uç noktalarına yerleşerek Co atomları ile bağ yapmamaktadır.

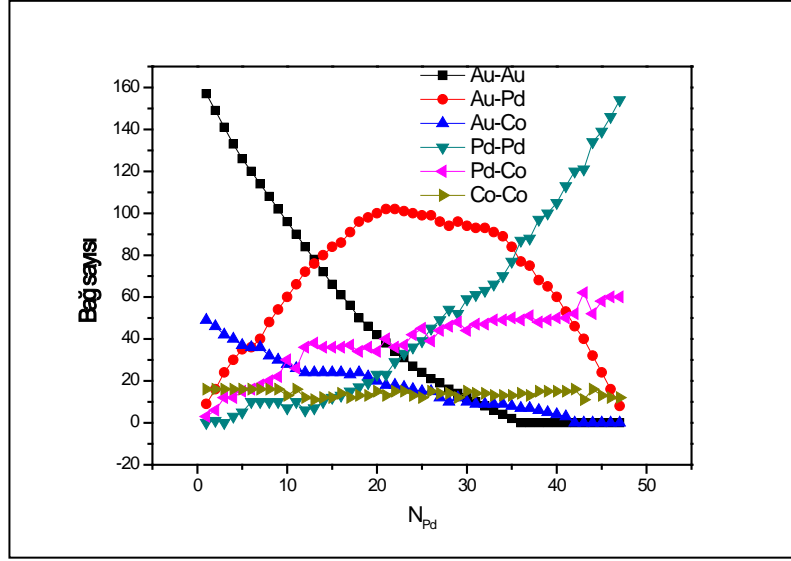
$\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.118’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.118 $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.118’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_7\text{Pd}_{24}\text{Au}_{24}$ olmaktadır.

Şekil 3.117’de gösterildiği gibi $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_7\text{Pd}_{24}\text{Au}_{24}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları Co atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.119’da gösterilmiştir.



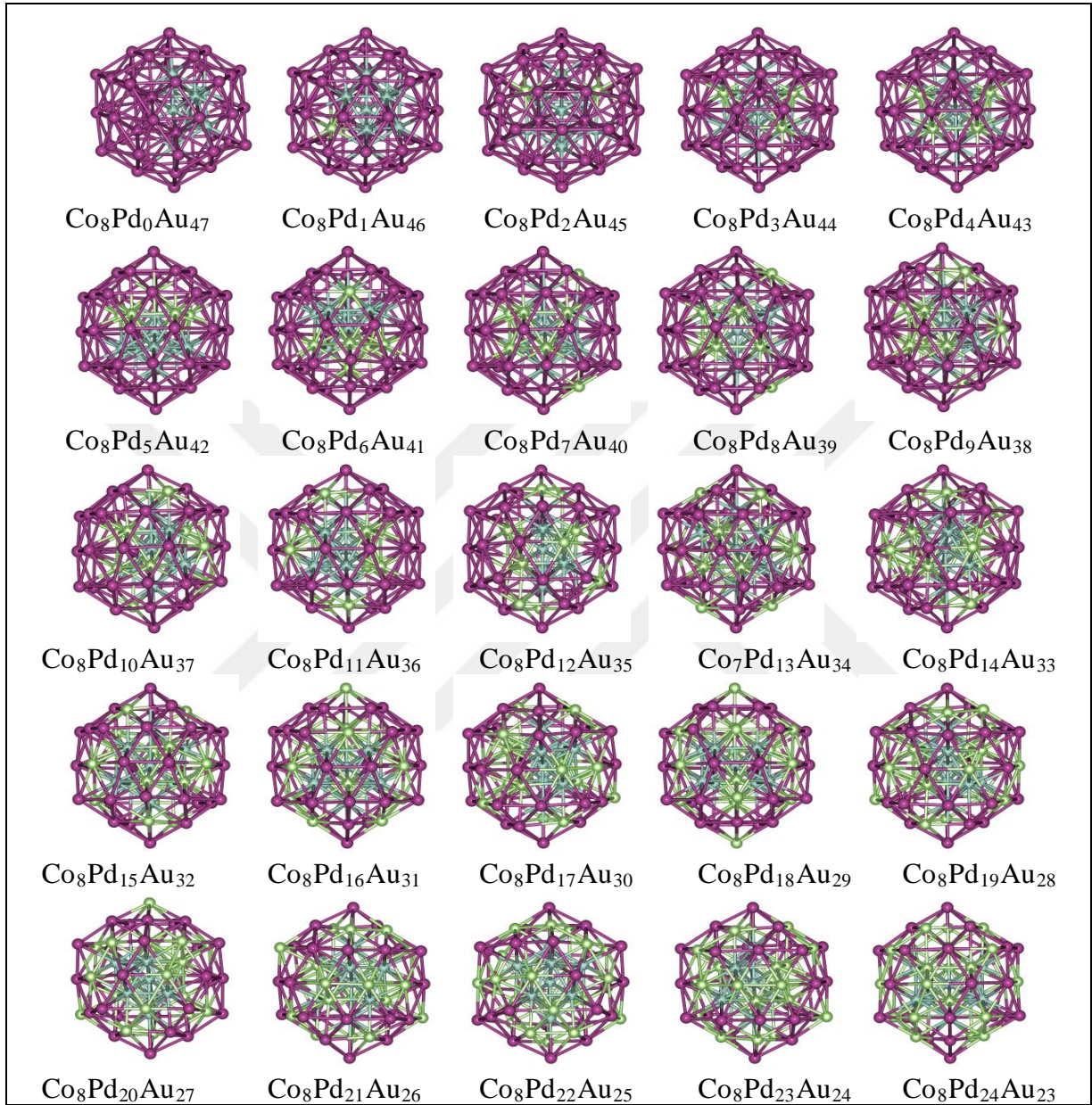
Şekil 3.119 $Co_7Pd_xAu_{48-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.119'a göre $Co_7Pd_xAu_{48-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $Co_7Pd_1Au_{47}$ ve $Co_7Pd_3Au_{45}$ kompozisyonlarında kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $Co_7Pd_{36}Au_{12}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $Co_7Pd_xAu_{48-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 11 ve 16 arasında dalgalanma göstermektedir. $Co_7Pd_xAu_{48-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında toplam 234 adet bağ oluşmaktadır.

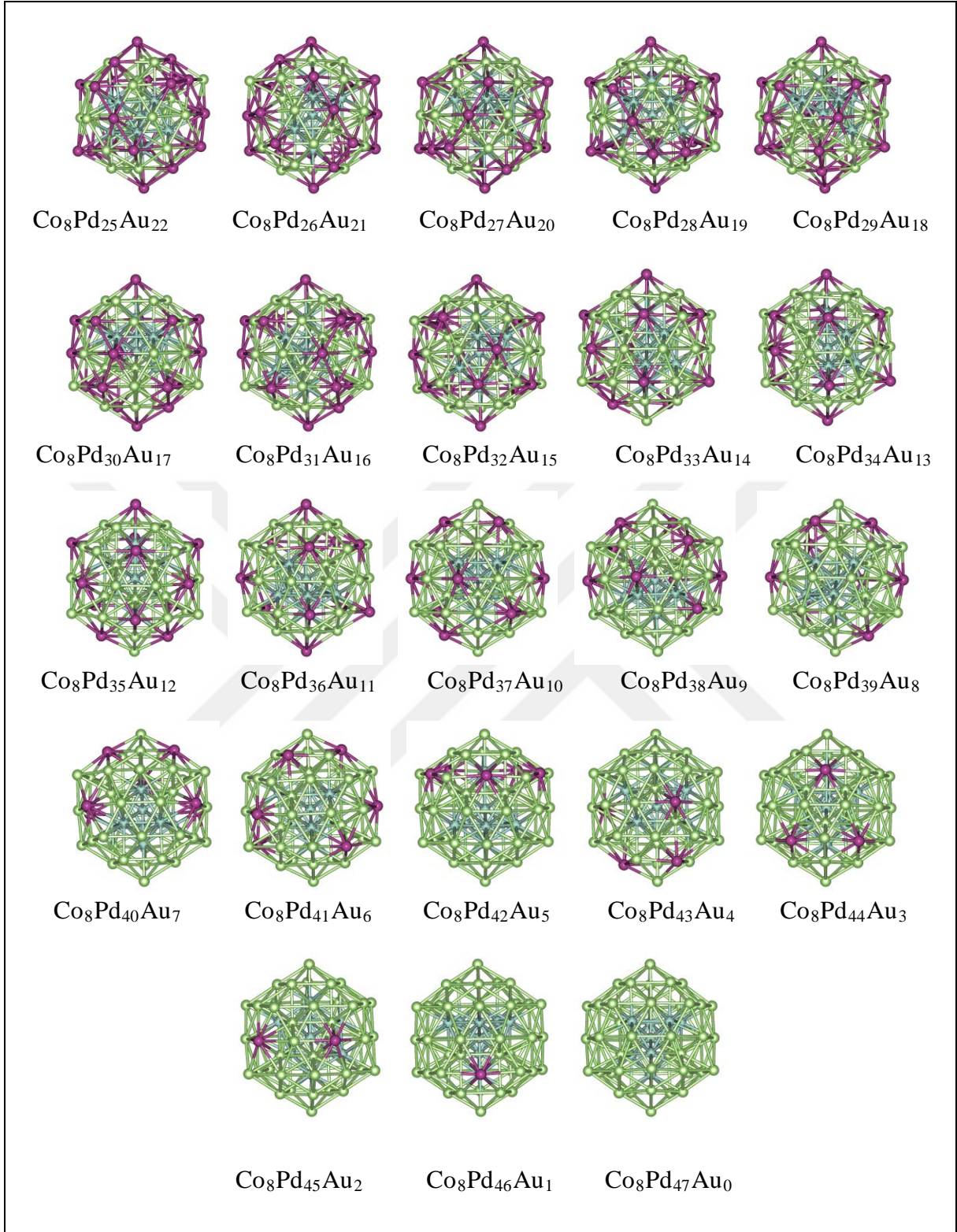
3.7.2 $Co_8Pd_xAu_{47-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$Co_8Pd_xAu_{47-x}$ ($x= 0, 47$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiği

çizilmiştir. Çizilen grafiklerde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.120’de gösterilmiştir.



Şekil 3.120 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

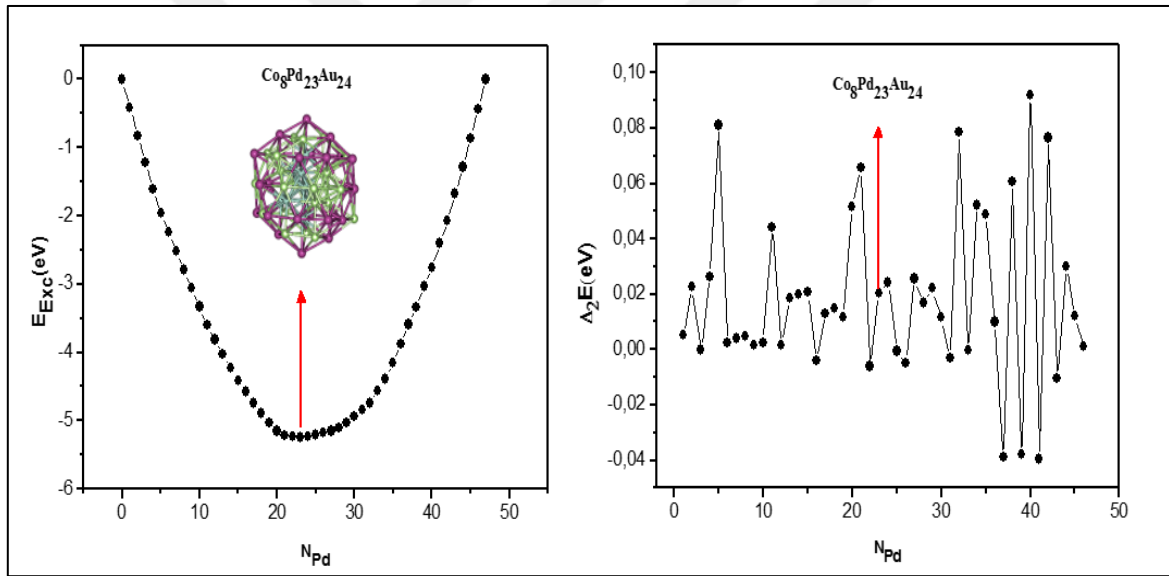


Şekil 3.120 (devam ediyor)

Co₈Pd_xAu_{47-x} nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek merkezde tek şapkalı beşgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. Ayrıca merkezde Co atomları Pd ve Au atomları ile

birleşerek merkezde ikosahedral yapı oluşturulmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları genellikle merkeze ve Co atomlarına yakın yerlere yerleşmeyi tercih ederken Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Au atomları $\text{Co}_8\text{Pd}_{35}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren yüzeyin en uç noktalarına yerleşerek Co atomları ile bağ yapmamaktadır.

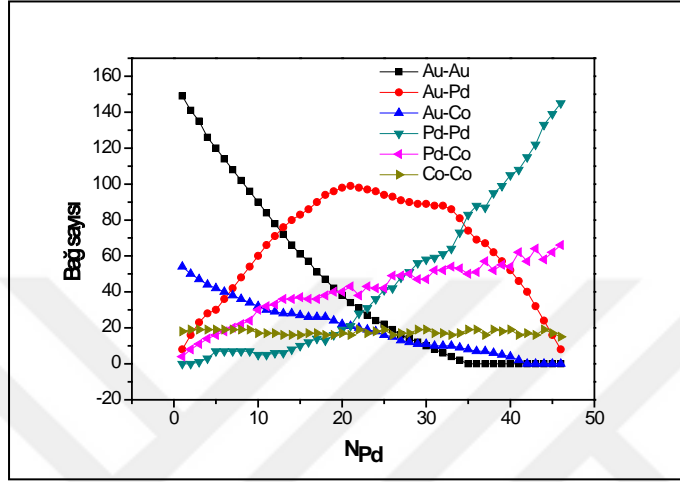
$\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek çizilen $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımı için çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.121’ de gösterilmiştir.



Şekil 3.121 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.121’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_8\text{Pd}_{23}\text{Au}_{24}$ olmaktadır.

Şekil 3.120’de gösterildiği gibi $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_8\text{Pd}_{23}\text{Au}_{24}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları Co atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.122’de gösterilmiştir.

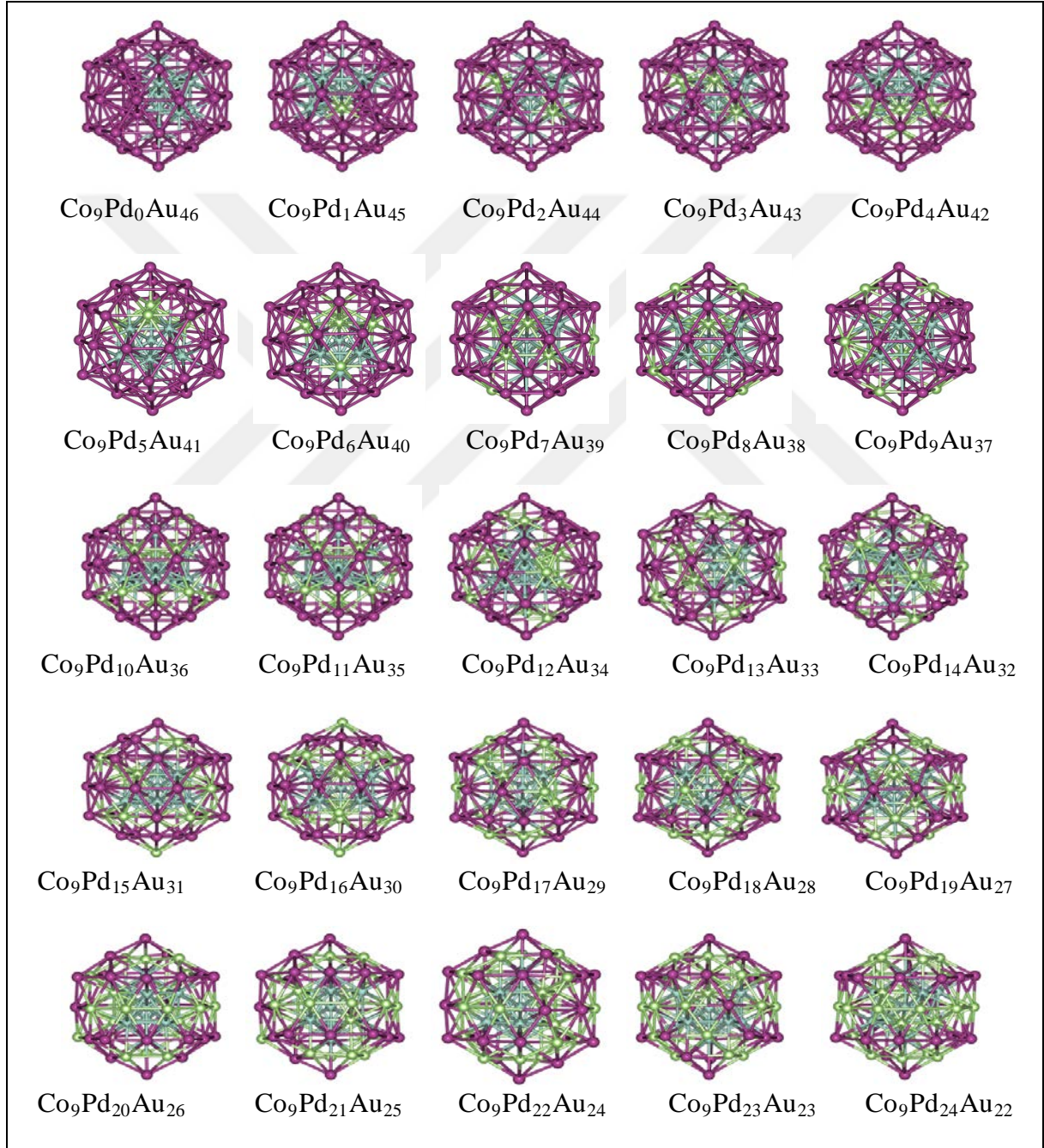


Şekil 3.122 $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

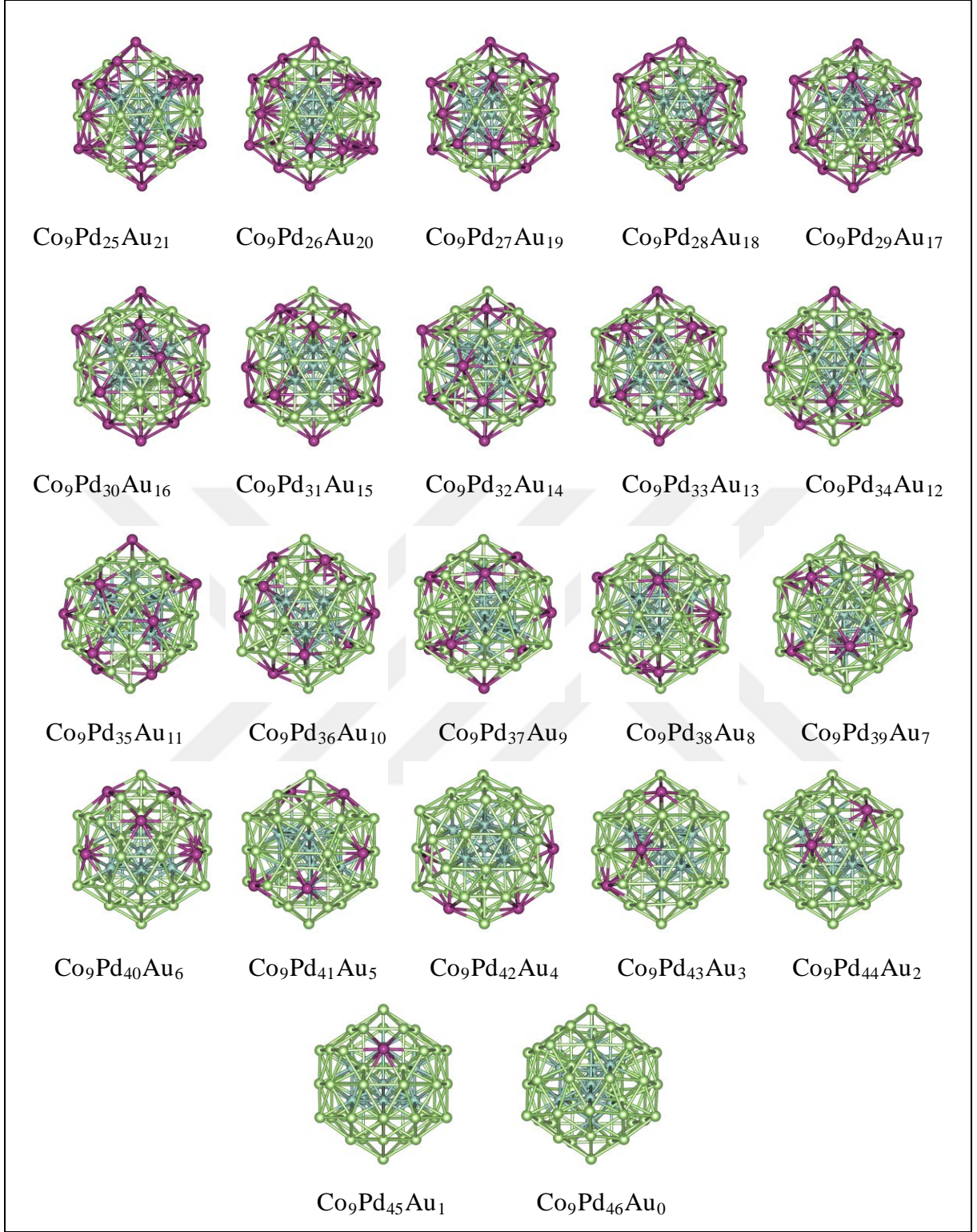
Şekil 3.122’ye göre $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_8\text{Pd}_{21}\text{Au}_{26}$ kompozisyonuna kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_8\text{Pd}_2\text{Au}_{45}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_8\text{Pd}_{35}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 15 ve 19 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında toplam 234 adet bağ oluşmaktadır.

3.7.3 Co₉Pd_xAu_{46-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

Co₉Pd_xAu_{46-x} (x= 0, 46) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. En kararlı yapılar Şekil 3.123'te gösterilmiştir.



Şekil 3.123 Co₉Pd_xAu_{46-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

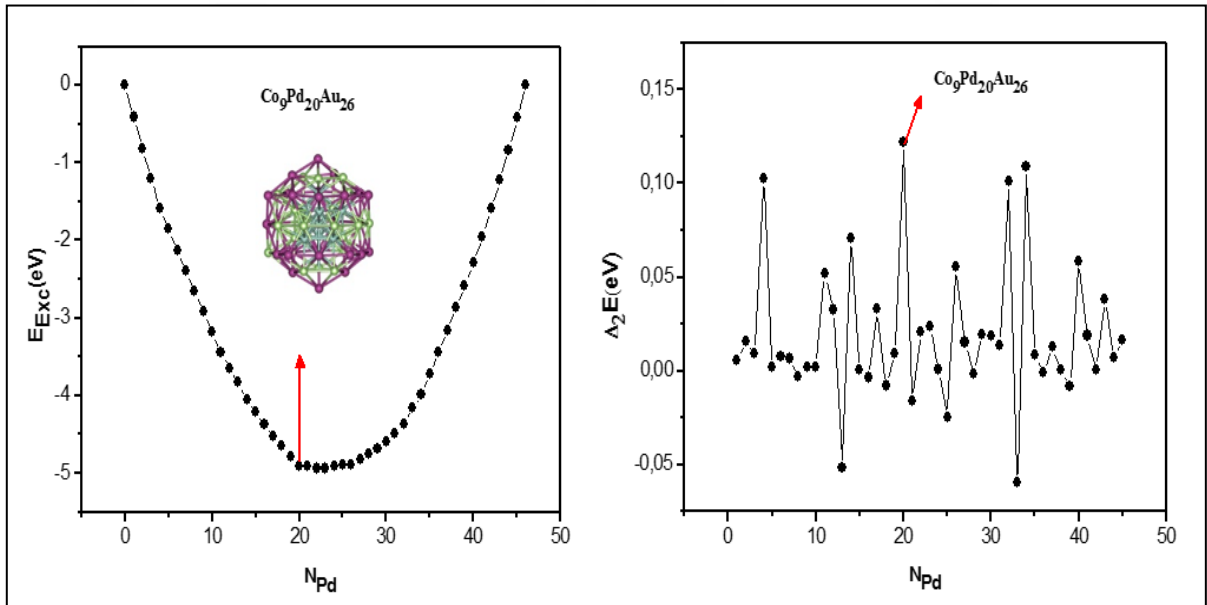


Şekil 3.123 (devam ediyor)

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek merkezde tek şapkalı beşgen çift piramit yapı oluşturmaktadır. Ayrıca merkezde Co atomları Pd ve Au atomları ile

birleşerek merkezde ikosahedral yapı oluşturulmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları genellikle merkeze ve Co atomlarına yakın yerlere yerleşmeyi tercih ederken Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Au atomları $\text{Co}_9\text{Pd}_{34}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren yüzeyin en uç noktalarına yerleşerek Co atomları ile bağ yapmamaktadır.

$\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.124'te gösterilmiştir.

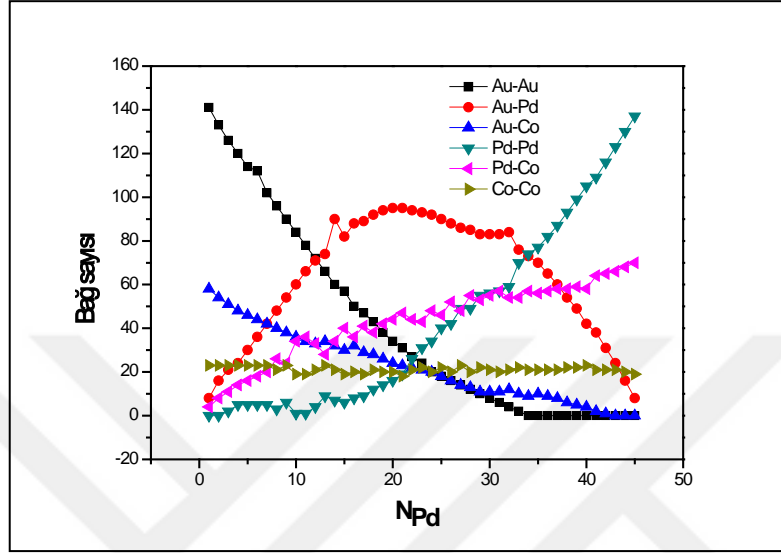


Şekil 3.124 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.124'te fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_9\text{Pd}_{20}\text{Au}_{26}$ olmaktadır.

Şekil 3.123'te gösterildiği gibi $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_9\text{Pd}_{20}\text{Au}_{26}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde

karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında üç şapkalı beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Pd atomları Co atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.125'te gösterilmiştir.

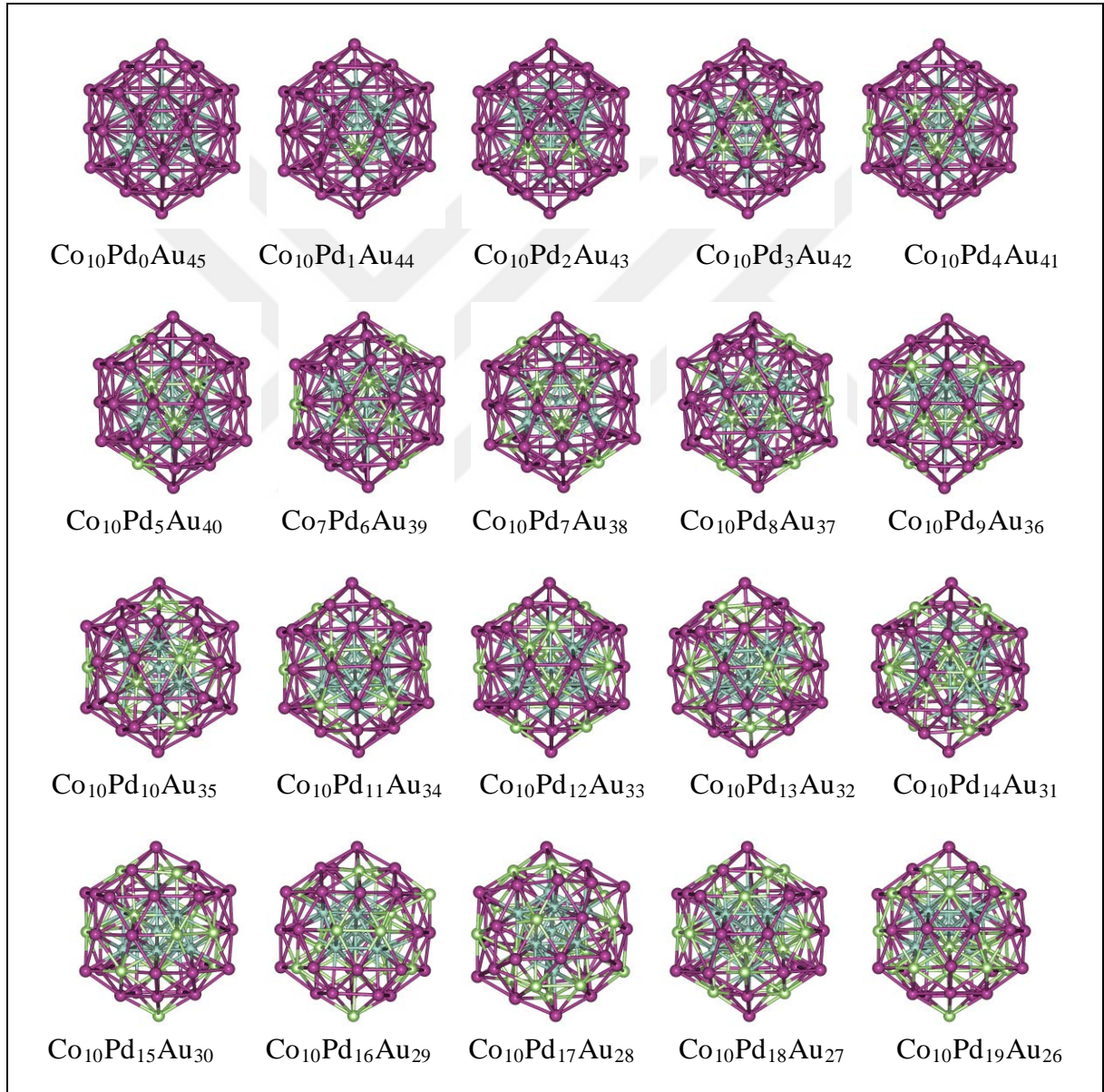


Şekil 3.125 $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

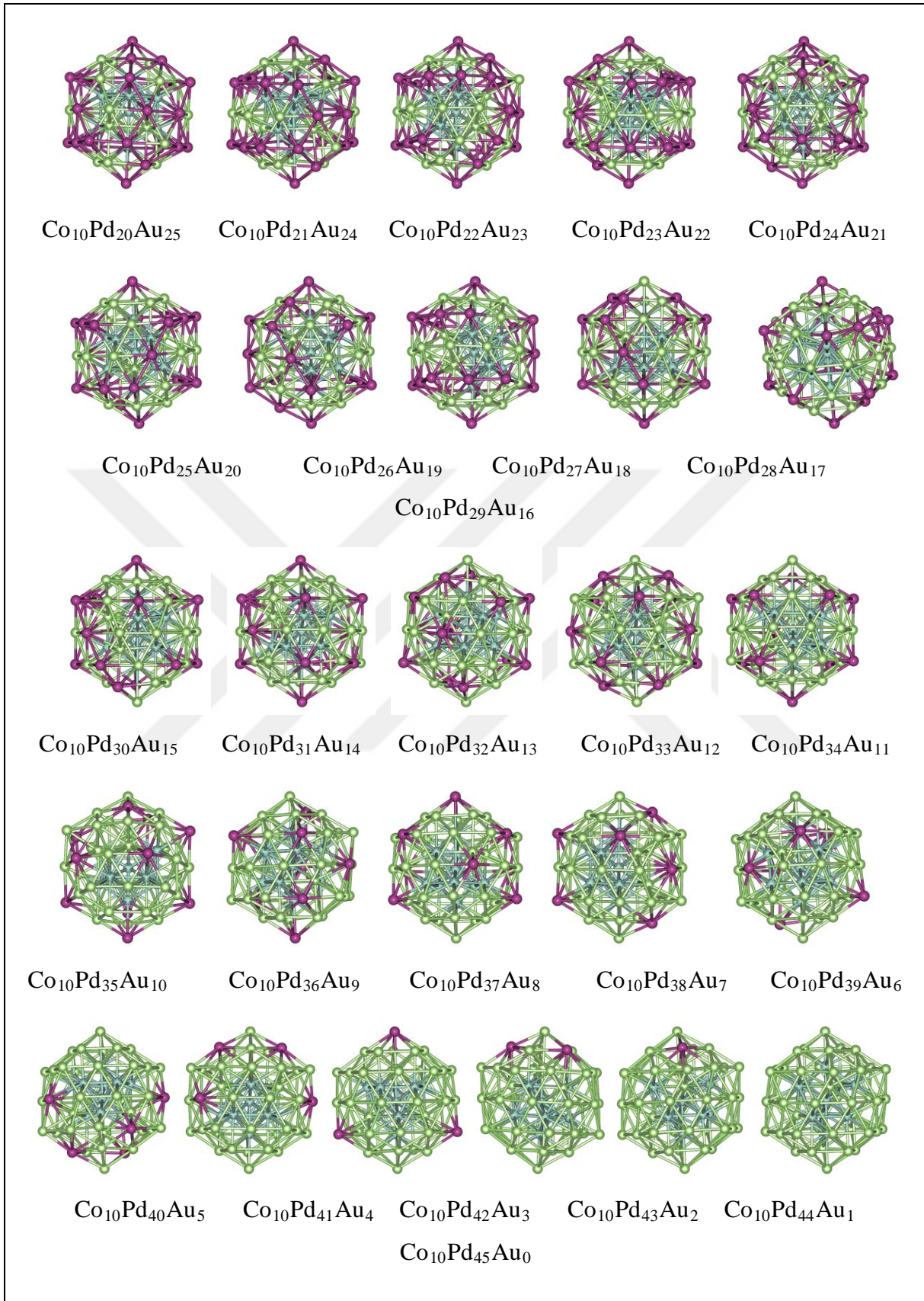
Şekil 3.125'e göre $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_9\text{Pd}_{20}\text{Au}_{26}$ kompozisyonuna kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Pd atomları $\text{Co}_9\text{Pd}_2\text{Au}_{44}$ kompozisyonuna kadar kendi aralarında bağ yapmamıştır. Buna karşılık Au atomları ise $\text{Co}_9\text{Pd}_{34}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bağ yapmamıştır. $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 18 ve 23 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında toplam 234 adet bağ oluşmaktadır.

3.7.4 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ ($x= 0, 45$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiklerinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.126’da gösterilmiştir.

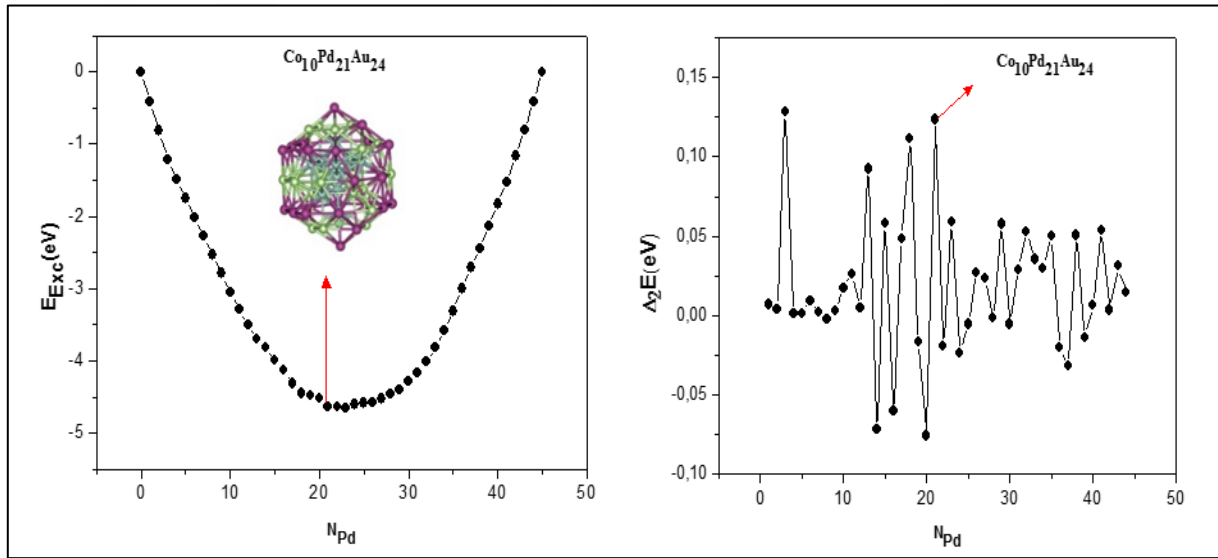


Şekil 3.126 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımlarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).



Şekil 3.126 (devam ediyor)

$\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek merkezde üç şapkalı beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Ayrıca merkezde Co atomları Pd ve Au atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral yapı oluşturulmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları genellikle merkeze ve Co atomlarına yakın yerlere yerleşmeyi tercih ederken Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.127’de gösterilmiştir.

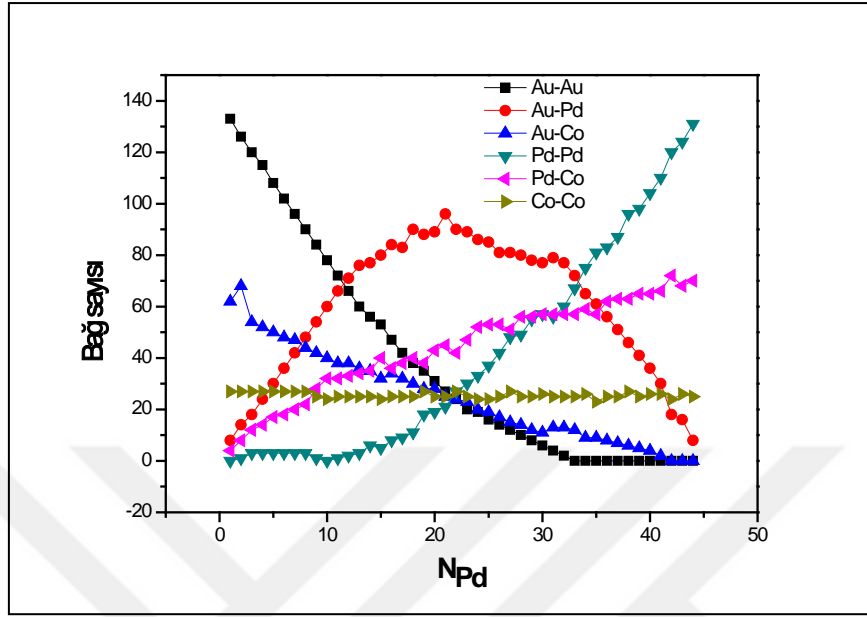


Şekil 3.127 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.127’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{24}$ olmaktadır.

Şekil 3.126’da gösterildiği gibi $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{24}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında üç şapkalı beşgen çift

piramit yapı oluşturmaktadır. Pd atomları Co atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.128’de gösterilmiştir.

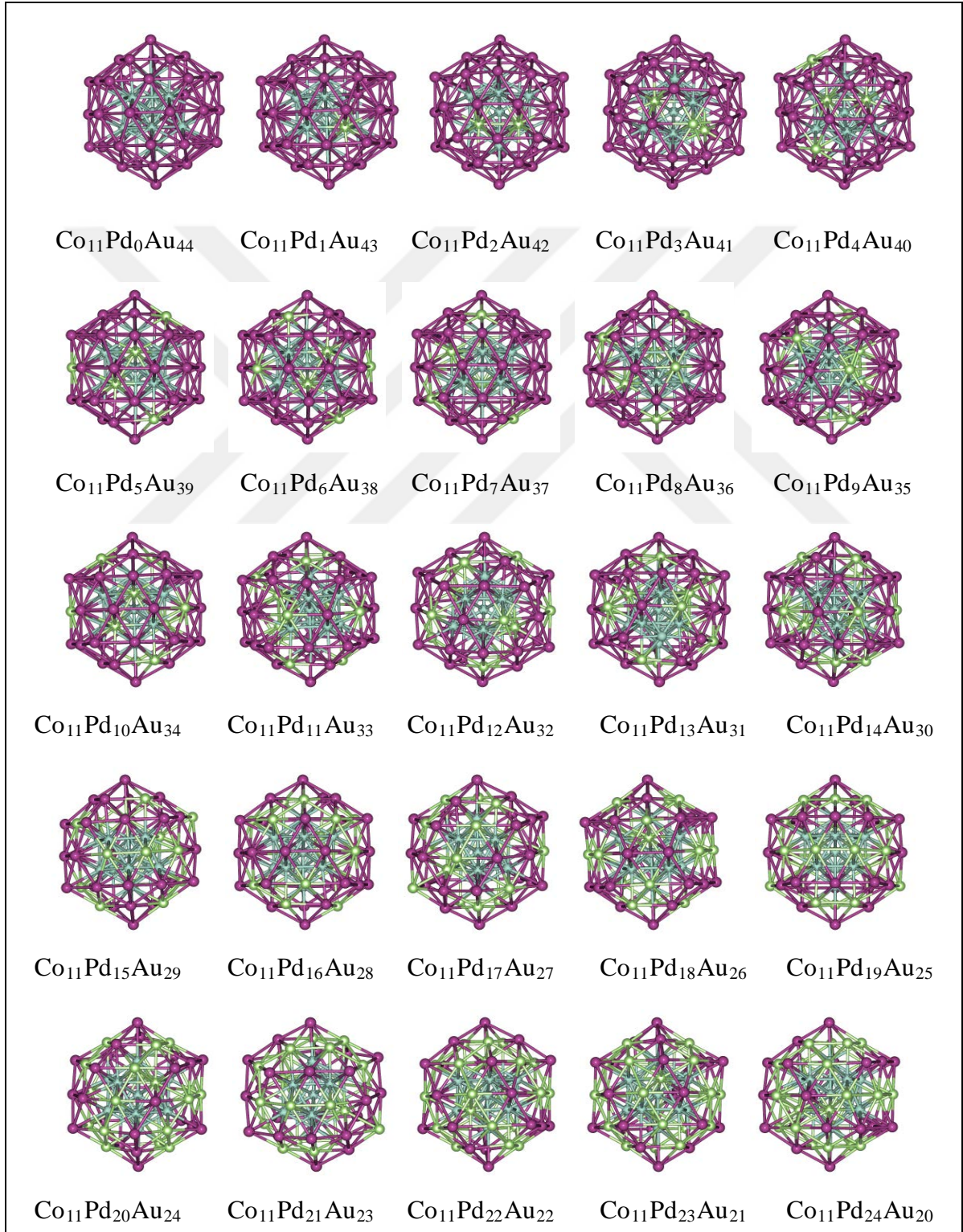


Şekil 3.128 $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

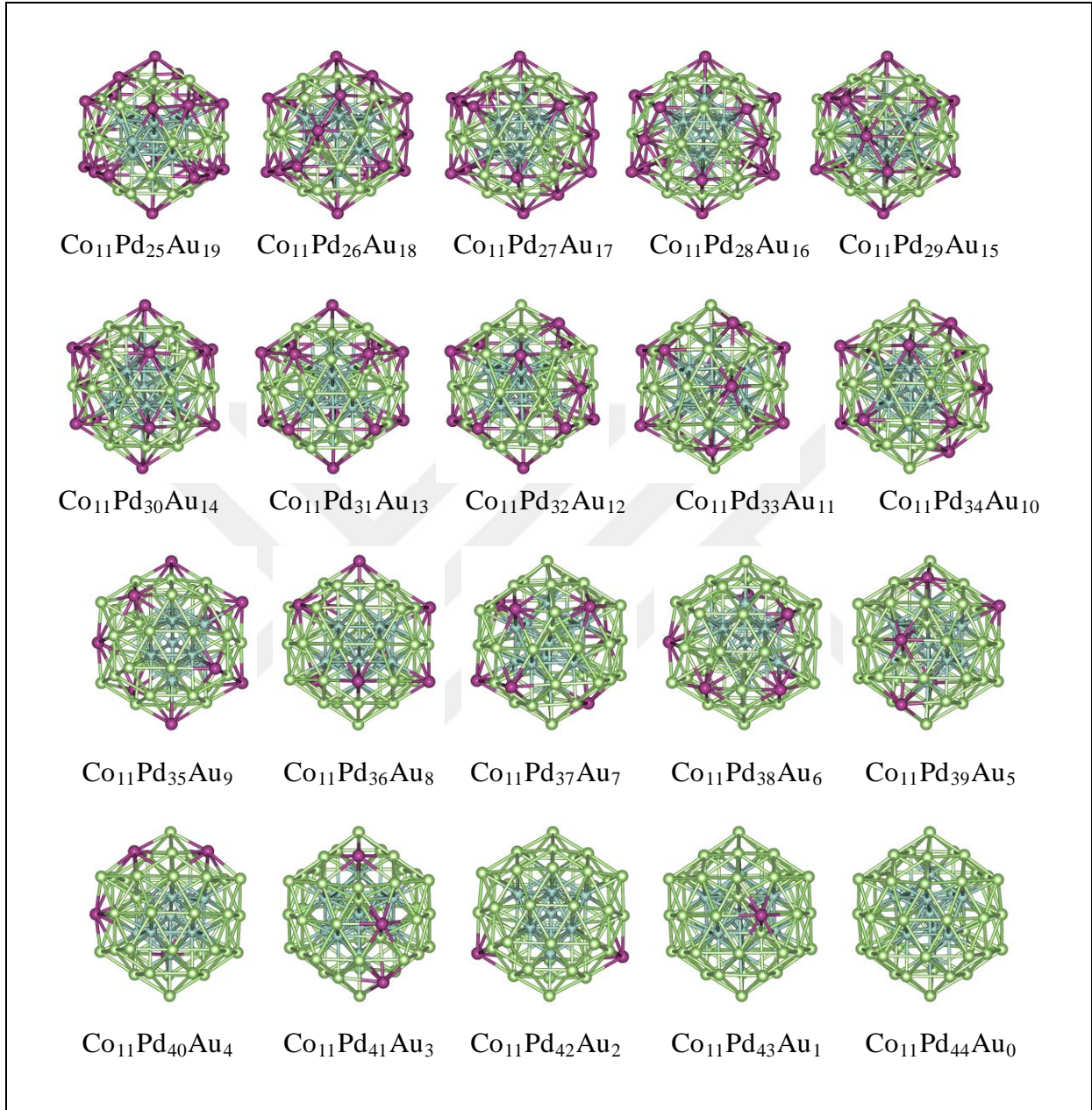
Şekil 3.128’e göre $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{24}$ kompozisyonuna kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Au-Co bağı $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{42}\text{Au}_3$ kompozisyonundan itibaren oluşmamaktadır. Au atomları $\text{Co}_{10}\text{Pd}_{33}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında, Au-Au bağı yapmamıştır. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 23 ve 27 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında toplam 234 adet bağ oluşmaktadır.

3.7.5 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ ($x= 0, 44$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiklerinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.129’da gösterilmiştir.



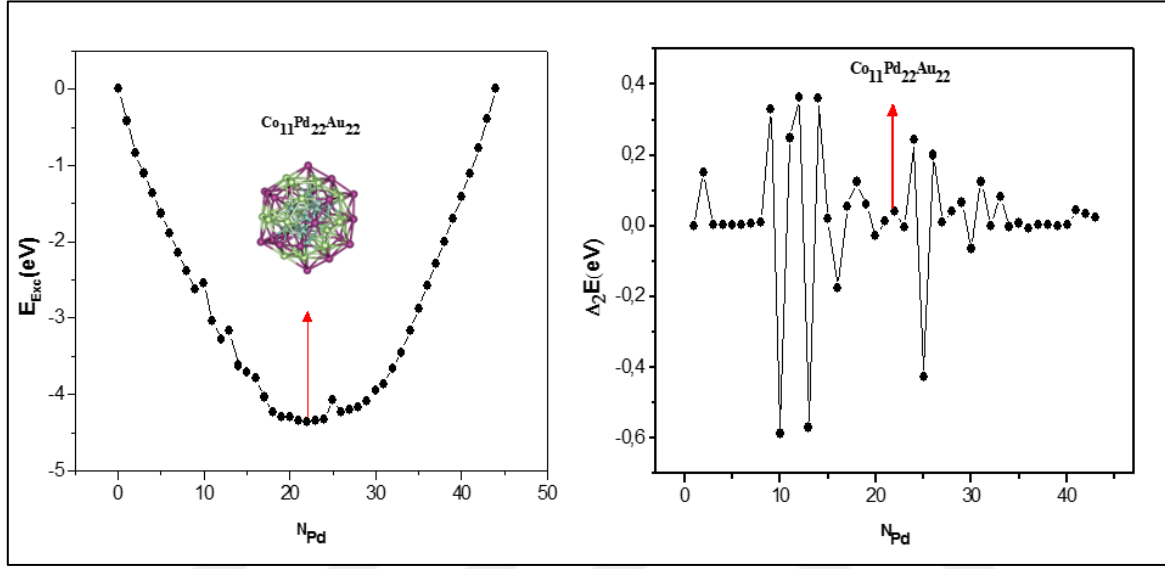
Şekil 3.129 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).



Şekil 3.129 (devam ediyor)

$\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları birleşerek merkezde dört şapkalı çift beşgen piramit yapı oluşturmaktadır. Ayrıca merkezde Co atomları Pd ve Au atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral yapı oluşturulmaktadır. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni

oluşturmaktadır. Pd atomları genellikle merkeze ve Co atomlarına yakın yerlere yerleşmeyi tercih ederken Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.130'da gösterilmiştir.

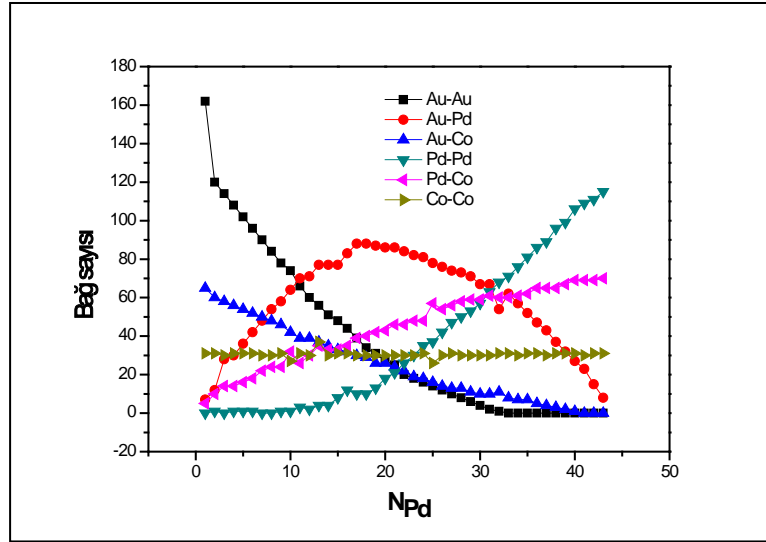


Şekil 3.130 $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.130'da fazlalık enerji grafiğinde bu koşul sağlanmıştır. Ancak ikinci fark enerji grafiğinde bu koşul sağlanmamıştır, Bunun sebebi komşu kompozisyonlarla enerji farklarının düşük olmasından kaynaklanmaktadır. Şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{22}\text{Au}_{22}$ olmaktadır.

Şekil 3.130'da gösterildiği gibi $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{11}\text{Pd}_{22}\text{Au}_{22}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında iki katmanlı pankek yapısındadır. Pd atomları Co atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı

en kararlı
atomların
yapmış
sayıları



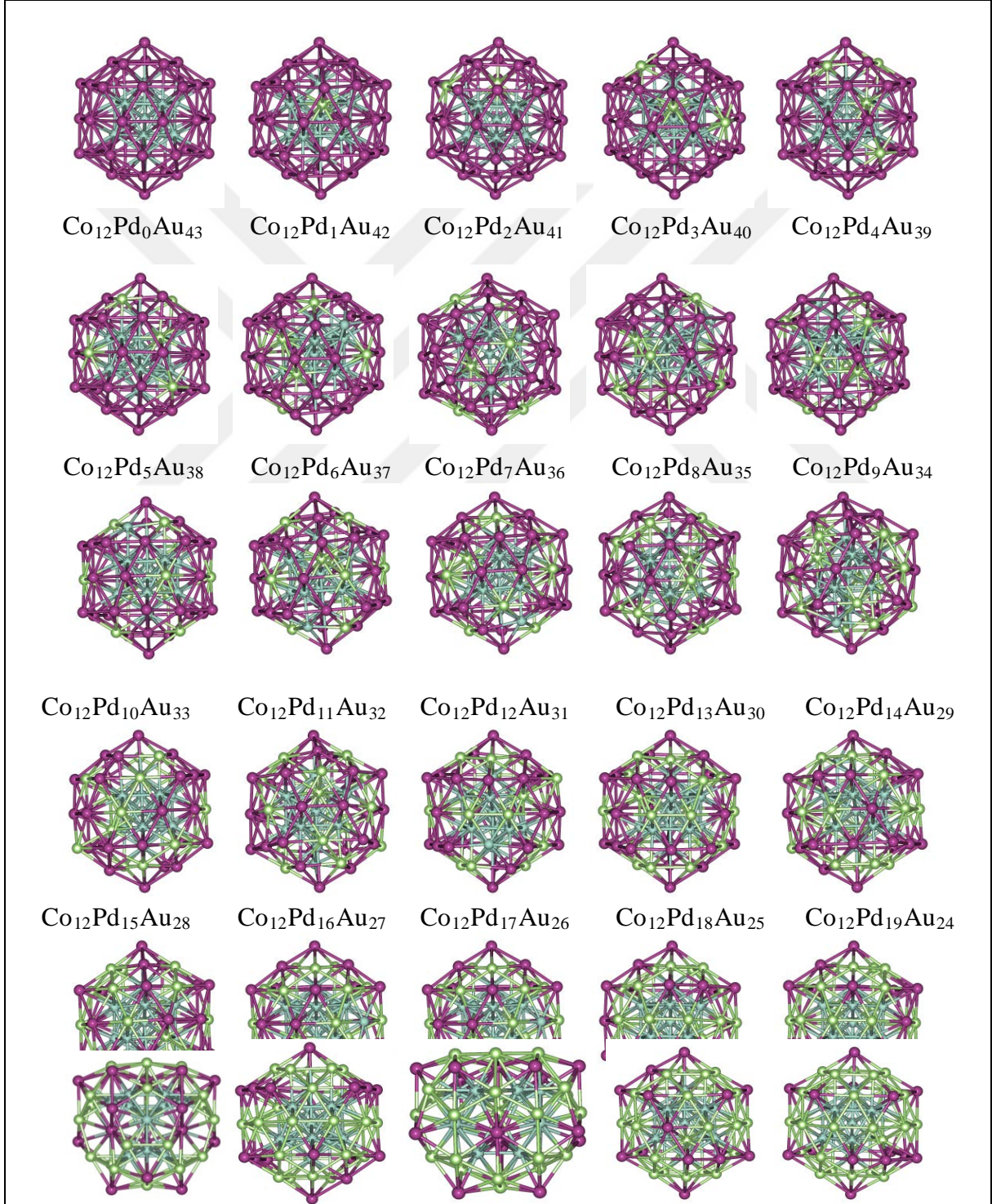
oluşturmaktadır.
 $Co_{11}Pd_xAu_{44-x}$
nanoalaşımında
yapıları oluşturan
birbirleri arasında
olduğu bağ
Şekil 3.131’de
gösterilmiştir.

Şekil 3.131 $Co_{11}Pd_xAu_{44-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.131’e göre $Co_{11}Pd_xAu_{44-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $Co_{11}Pd_{18}Au_{26}$ kompozisyonuna kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Pd-Co bağ sayısı tam tersine düzenli bir artış eğilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bağ yapmak için Co atomlarına yakın yerlere yerleşmiş ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleşerek Au-Co bağ sayısını azaltmıştır. Au-Co bağı $Co_{11}Pd_{41}Au_3$ kompozisyonundan itibaren oluşmamaktadır. Au atomları $Co_{11}Pd_{33}Au_{11}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında, Au-Au bağı yapmamıştır. $Co_{11}Pd_xAu_{44-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 27 ve 31 arasında dalgalanma göstermektedir. $Co_{11}Pd_xAu_{44-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında genellikle 234 adet bağ oluşmaktadır.

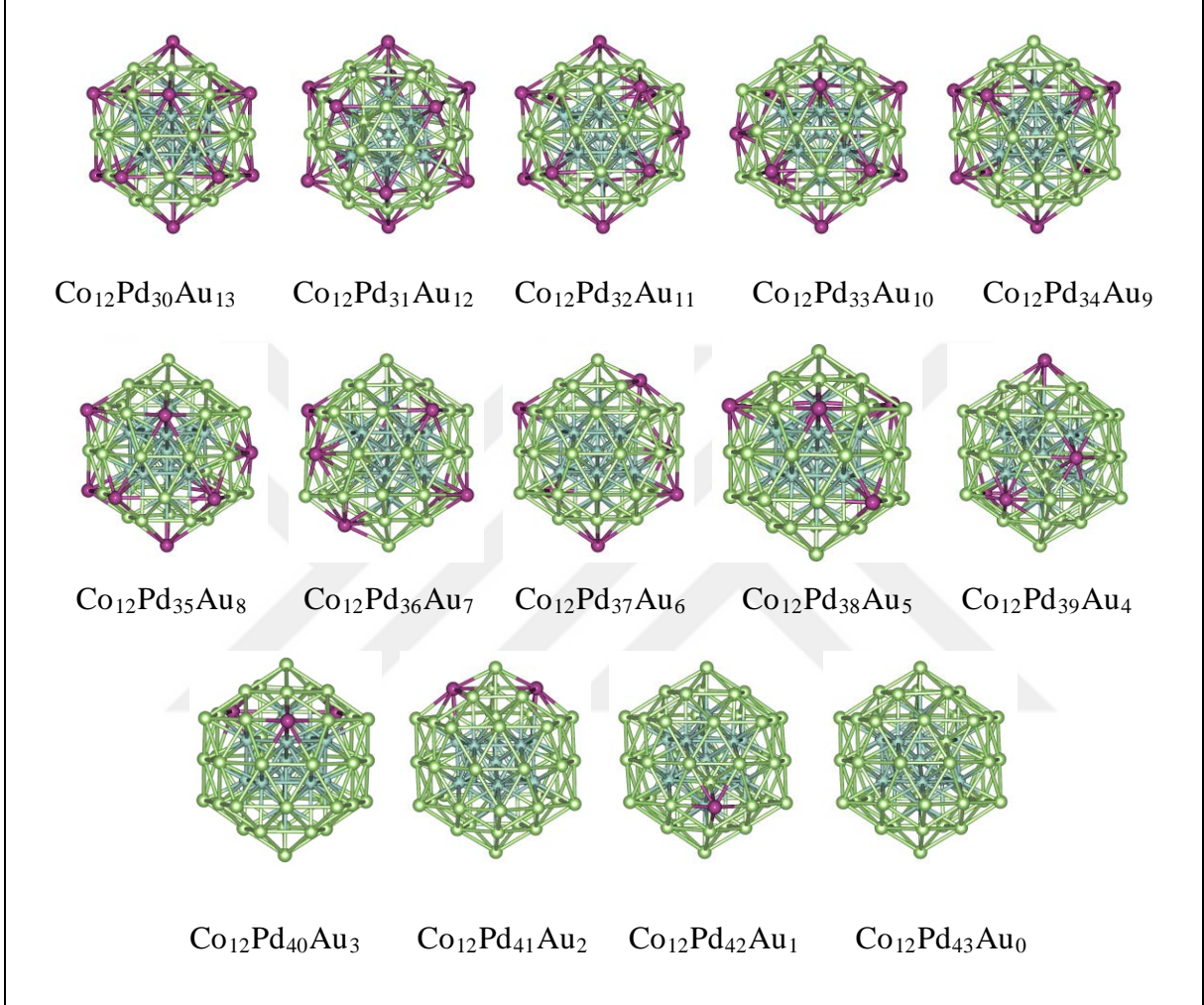
3.7.6 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ ($x= 0, 43$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiklerinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.132’de gösterilmiştir.



$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{20}\text{Au}_{23}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{22}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{22}\text{Au}_{21}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{23}\text{Au}_{20}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{24}\text{Au}_{19}$
$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{25}\text{Au}_{18}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{26}\text{Au}_{17}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{27}\text{Au}_{16}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{28}\text{Au}_{15}$	$\text{Co}_{12}\text{Pd}_{29}\text{Au}_{14}$

Şekil 3.132 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

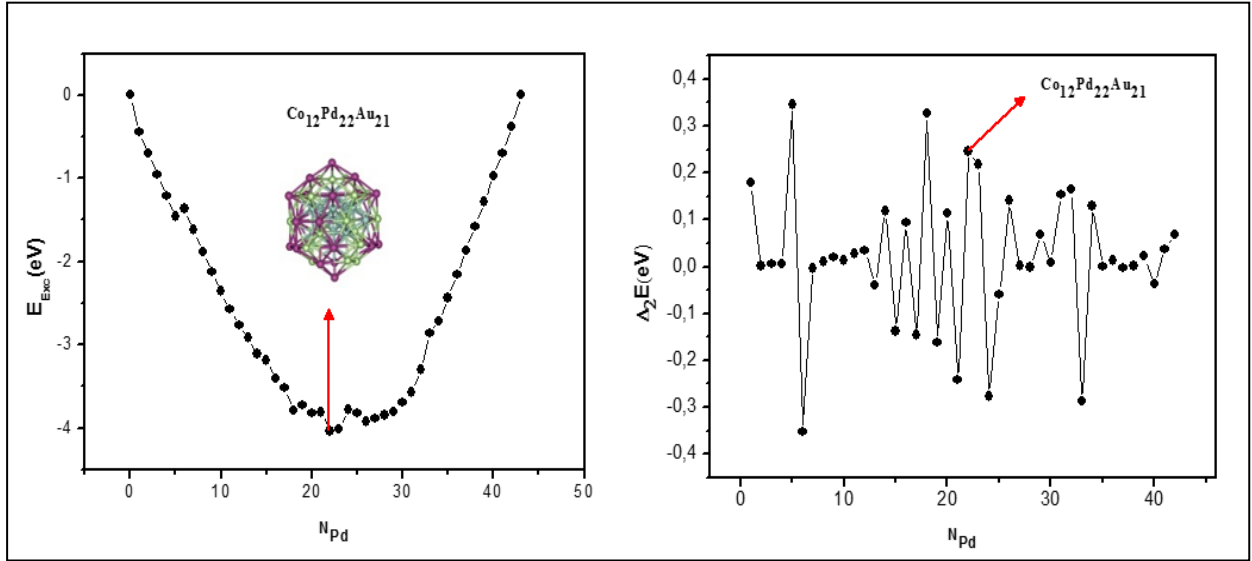


Şekil 3.132 (devam ediyor)

$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomları Pd ve Au atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral yapı oluşturulmaktadır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{25}\text{Au}_{18}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{27}\text{Au}_{16}$ kompozisyonları deforme olmuş ve amorf yapıdadır geri kalan tüm kompozisyonlar ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları genellikle merkeze ve Co atomlarına yakın yerlere yerleşmeyi tercih ederken Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir.

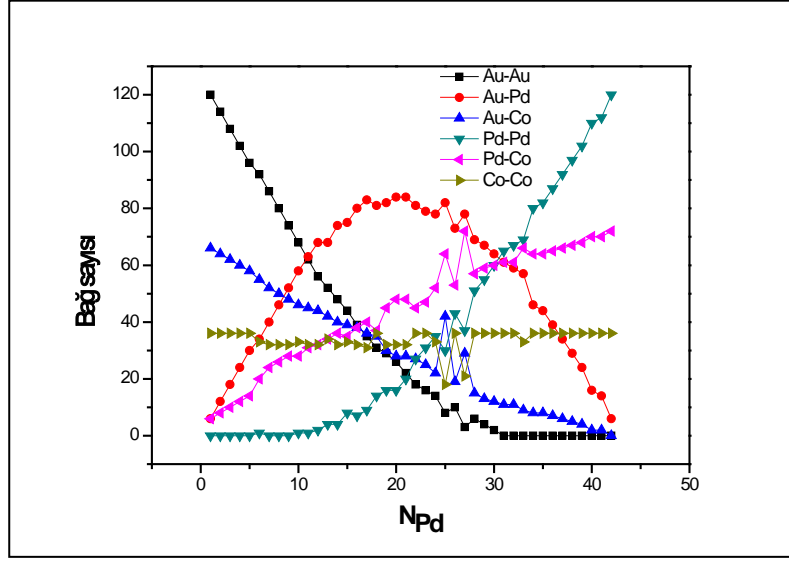
Pd atomları merkezde Co atomları ile birleşerek ikosahedral yapıda çekirdek oluşturmaktadırlar. Pd atomları yapıya çekirdekten yerleşmeye başlamaktadır.

$\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.133'te gösterilmiştir.



Şekil 3.133 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.133'te $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşul sağlanmıştır. Şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{22}\text{Au}_{21}$ olmaktadır. Şekil 3.133'te gösterildiği gibi $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{22}\text{Au}_{21}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında Pd atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.134'te gösterilmiştir.



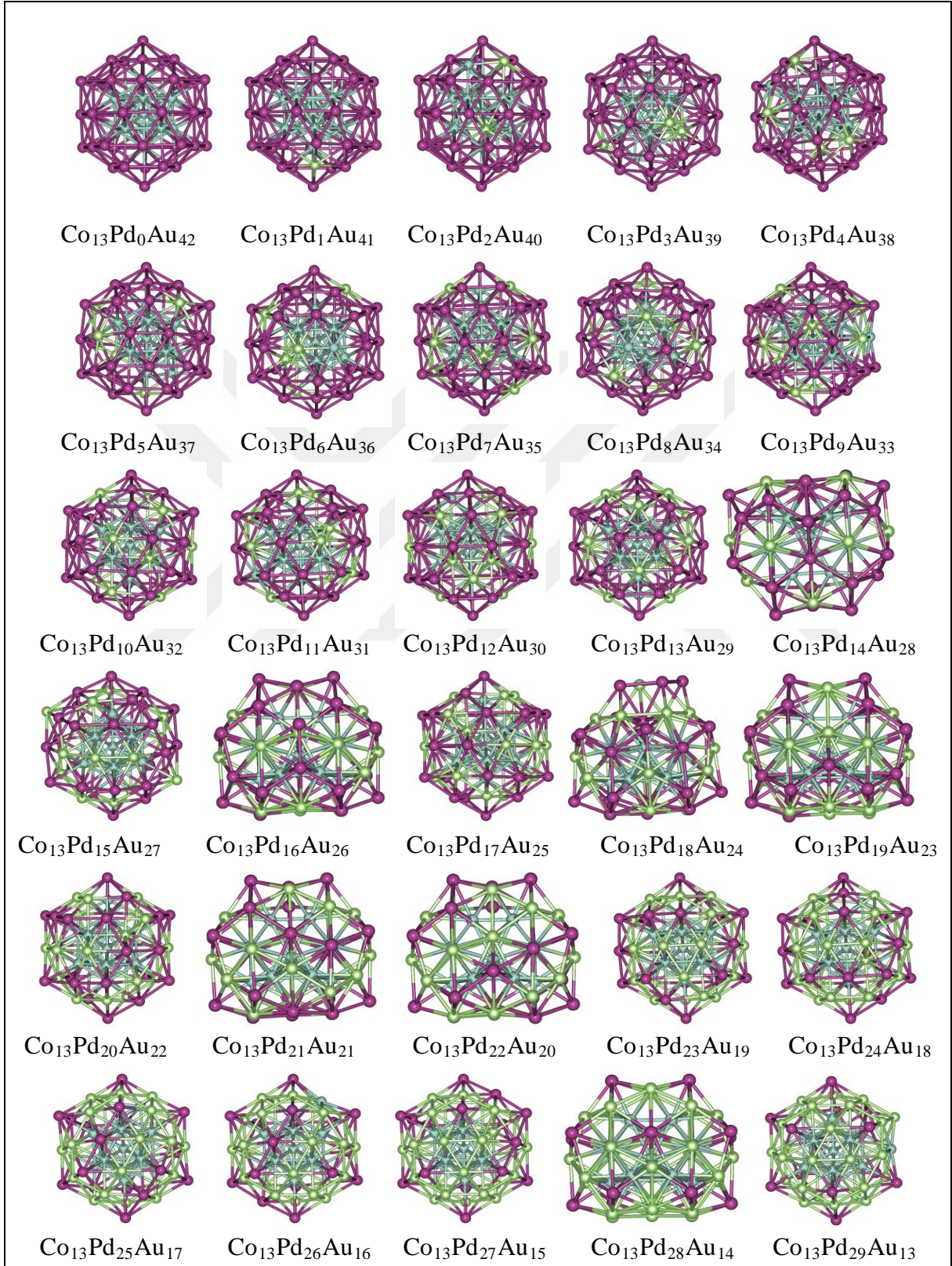
Şekil 3.134 $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.134'e göre $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{20}\text{Au}_{23}$ ve $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{22}$ kompozisyonlarında en yüksek değerindedir daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Ancak $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{25}\text{Au}_{18}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{27}\text{Au}_{16}$ kompozisyonlarında bir dalgalanma yaşanmaktadır. Aynı durum Pd-Co bağ sayısı içinde geçerlidir. Pd-Co bağ sayısı artış eğilimindedir. Au-Co bağı $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{42}\text{Au}_1$ kompozisyonunda oluşmamaktadır. Au atomları $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{31}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında, Au-Au bağı yapmamıştır. Pd atomları kendi aralarında Pd-Pd bağı ilk olarak $\text{Co}_{12}\text{Pd}_6\text{Au}_{37}$ kompozisyonunda yapmıştır daha sonra $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{33}$ kompozisyonuna kadar tekrar bağ yapmamıştır. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı amorf yapılar haricinde 32 ve 36 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında amorf yapılar hariç 234 adet bağ oluşmaktadır.

3.7.7 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

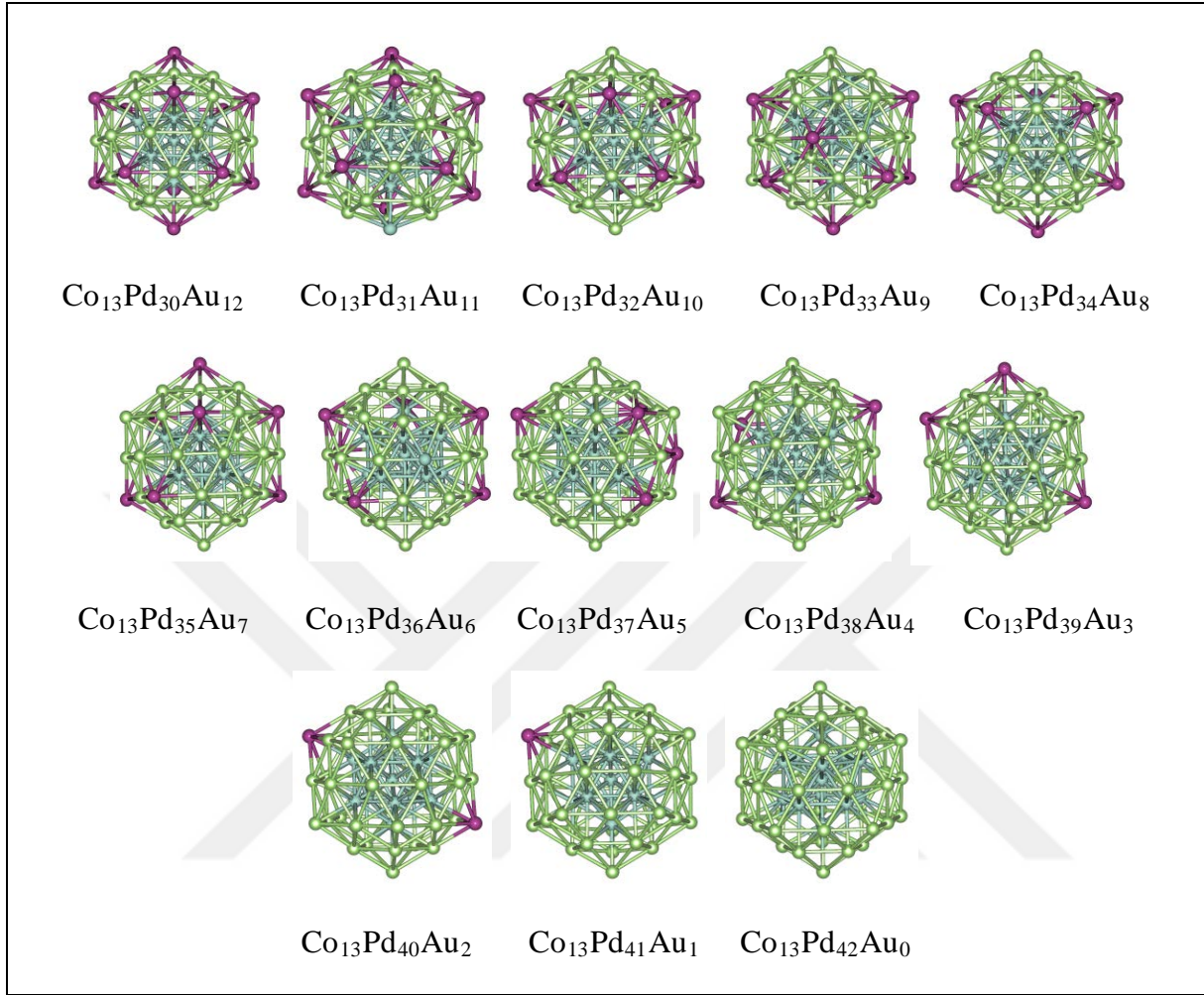
$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ ($x= 0, 42$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. En kararlı yapılar, global optimizasyon

yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiklerinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.135'te gösterilmiştir.



Şekil 3.135 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en

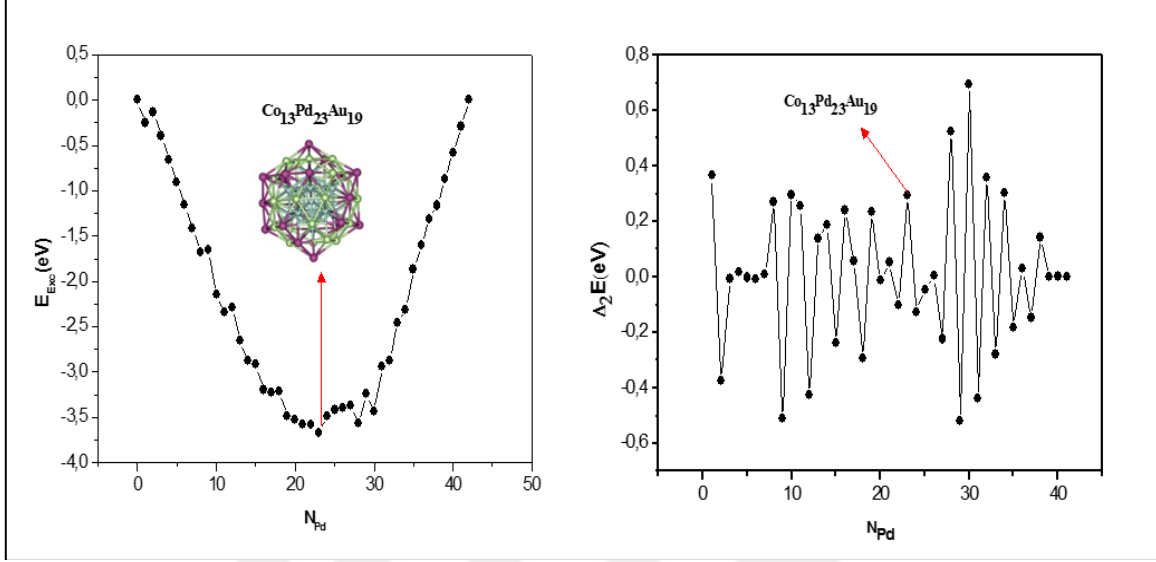
kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).



Şekil 3.135 (devam ediyor).

Co₁₃Pd_xAu_{42-x} nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co₁₃Pd_xAu_{42-x} nanoalaşımının Co₁₃Pd₁₄Au₂₈, Co₁₃Pd₁₆Au₂₆, Co₁₃Pd₁₈Au₂₄, Co₁₃Pd₁₉Au₂₃, Co₁₃Pd₂₁Au₂₁, Co₁₃Pd₂₂Au₂₀, Co₁₃Pd₂₈Au₁₄ kompozisyonları deforme olmuş ve amorf yapıdadır geri kalan tüm kompozisyonlar ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Pd atomları yapıya çekirdekten yerleşmeye başlamaktadır. Pd atomunun veya Au atomunun yapıda bulunmadığı kompozisyonlarda çekirdekte Co atomları ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Diğer durumlarda Co atomları sadece Pd atomu ile birleşerek ikosahedral yapı oluşturmaktadır.

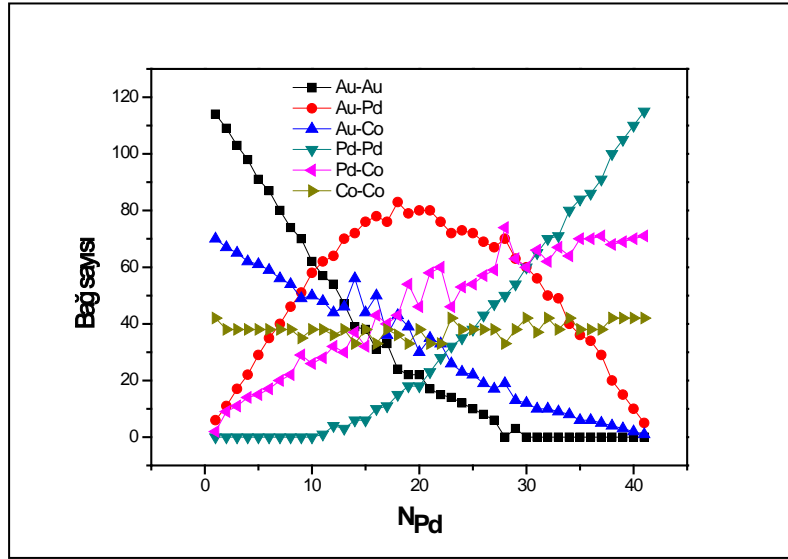
$\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.136'da gösterilmiştir.



Şekil 3.136 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.136'da, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşul sağlanmıştır. Şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir.

En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{23}\text{Au}_{19}$ olmaktadır. Şekil 3.136'da gösterildiği gibi $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{23}\text{Au}_{19}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında Pd atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.137'de gösterilmiştir.



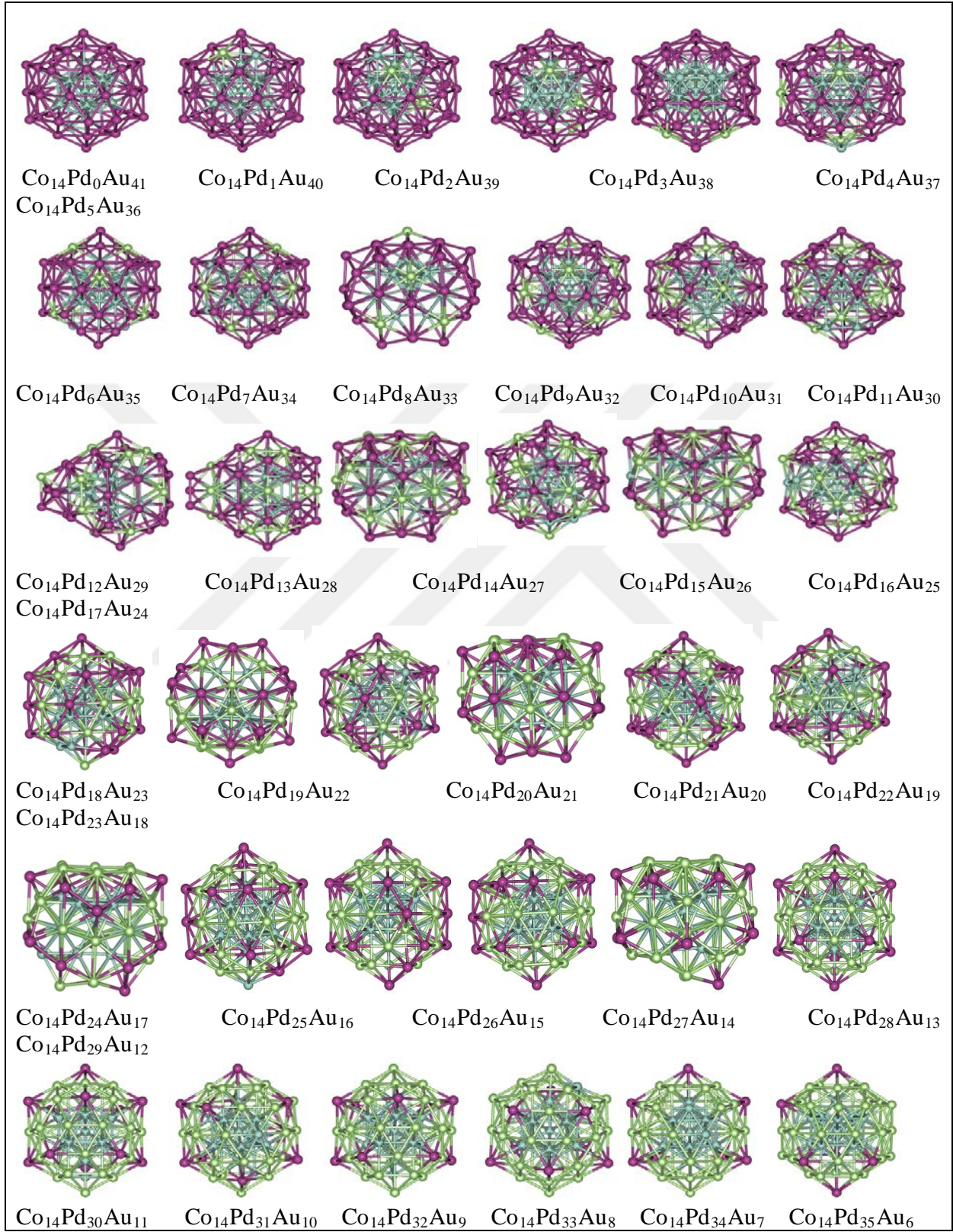
Şekil 3.137 $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

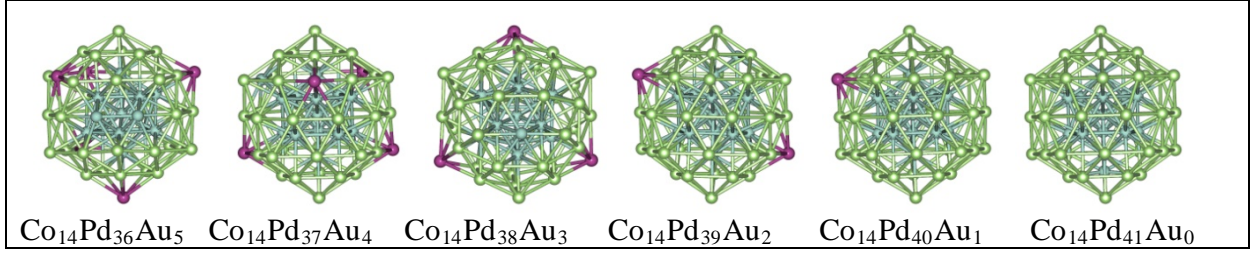
Şekil 3.137'ye göre $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{18}\text{Au}_{24}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Ancak $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{28}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{16}\text{Au}_{26}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{18}\text{Au}_{24}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{19}\text{Au}_{23}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{21}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{22}\text{Au}_{20}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{28}\text{Au}_{14}$ kompozisyonlarında bir dalgalanma yaşanmaktadır. Aynı durum Pd-Co bağ sayısı içinde geçerlidir. Pd-Co bağ sayısı artış eğilimindedir. Au-Co bağı $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{41}\text{Au}_1$ kompozisyonunda oluşmamaktadır. Au atomları $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{30}\text{Au}_{12}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında, Au-Au bağı yapmamıştır. Pd atomları kendi aralarında Pd-Pd bağı $\text{Co}_{13}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{32}$ kompozisyonuna kadar yapmamıştır. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı amorf yapılar haricinde, 37 ve 42 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında amorf yapılar hariç 234 adet bağ oluşmaktadır.

3.7.8 $\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$ ($x=0, 41$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. En kararlı yapılar, global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiklerinde en kararlı

kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.138’de gösterilmiştir.

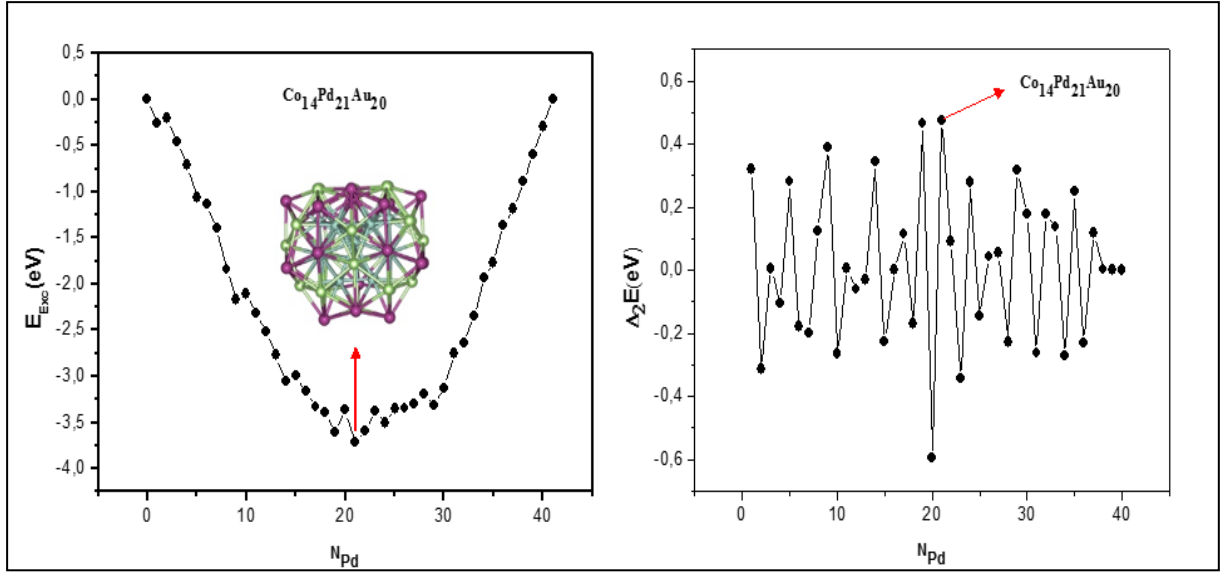




Şekil 3.138 Co₁₄Pd_xAu_{41-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

Co₁₄Pd_xAu_{41-x} nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co₁₄Pd_xAu_{41-x} nanoalaşımının Co₁₄Pd₈Au₃₃, Co₁₄Pd₁₂Au₂₉, Co₁₄Pd₁₃Au₂₈, Co₁₄Pd₁₄Au₂₇, Co₁₄Pd₁₆Au₂₅, Co₁₄Pd₁₉Au₂₂, Co₁₄Pd₂₁Au₂₀, Co₁₄Pd₂₅Au₁₆, Co₁₄Pd₂₉Au₁₂ kompozisyonları deforme olmuş ve amorf yapıdadır geri kalan tüm kompozisyonlar ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Pd atomları yapıya çekirdekten yerleşmeye başlamaktadır. Pd atomunun veya Au atomunun yapıda bulunmadığı kompozisyonlarda çekirdekte Co atomları ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Diğer durumlarda Co atomları sadece Pd atomu ile birleşerek ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Merkez yapının dışında kalan Co atomları yüzeyde yer almaktadır.

Co₁₄Pd_xAu_{41-x} nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.139'da gösterilmiştir.

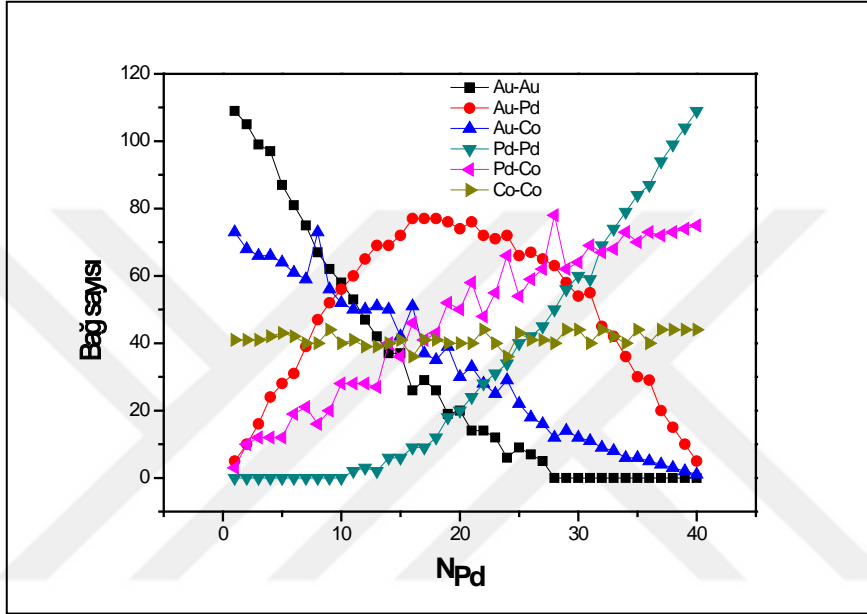


Şekil 3.139 $Co_{14}Pd_xAu_{41-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.139'da $Co_{14}Pd_xAu_{41-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşul sağlanmıştır. Şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir.

En kararlı kompozisyon $Co_{14}Pd_{21}Au_{20}$ olmaktadır. Şekil 3.139'da gösterildiği gibi $Co_{14}Pd_xAu_{41-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_{14}Pd_{21}Au_{20}$ nanoalaşımı amorf yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında Pd atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $Co_{14}Pd_xAu_{41-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.140'da gösterilmiştir.

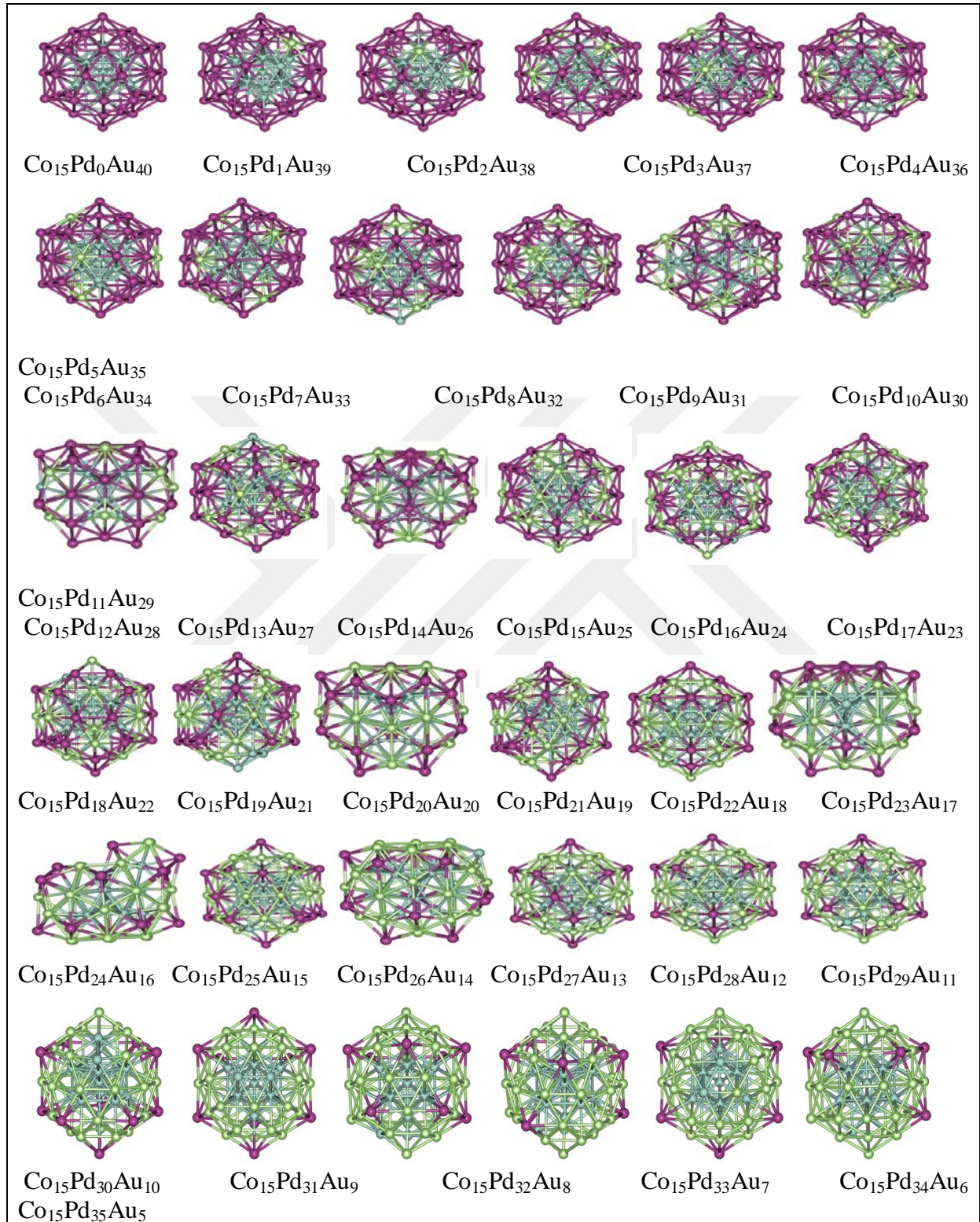
Şekil 3.140

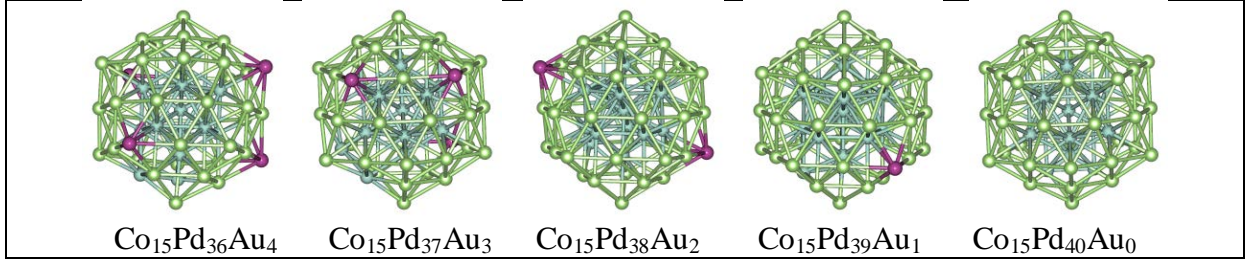


$\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.140'a göre $\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{16}\text{Au}_{25}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Ancak $\text{Co}_{14}\text{Pd}_8\text{Au}_{33}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{29}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{13}\text{Au}_{28}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{27}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{16}\text{Au}_{25}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{19}\text{Au}_{22}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{20}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{25}\text{Au}_{16}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{29}\text{Au}_{12}$ kompozisyonlarında bir dalgalanma yaşanmaktadır. Aynı durum Pd-Co bağ sayısı içinde geçerlidir. Pd-Co bağ sayısı artış eğilimindedir. Au-Co bağı $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{40}\text{Au}_1$ kompozisyonunda oluşmamaktadır. Au atomları $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{28}\text{Au}_{13}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında, Au-Au bağı yapmamıştır. Pd atomları kendi aralarında Pd-Pd bağı $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{31}$ kompozisyonuna kadar yapmamıştır. $\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 36 ve 44 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında amorf yapılar hariç 234 adet bağ oluşmaktadır.

3.7.9 Co₁₅Pd_xAu_{40-x} Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri



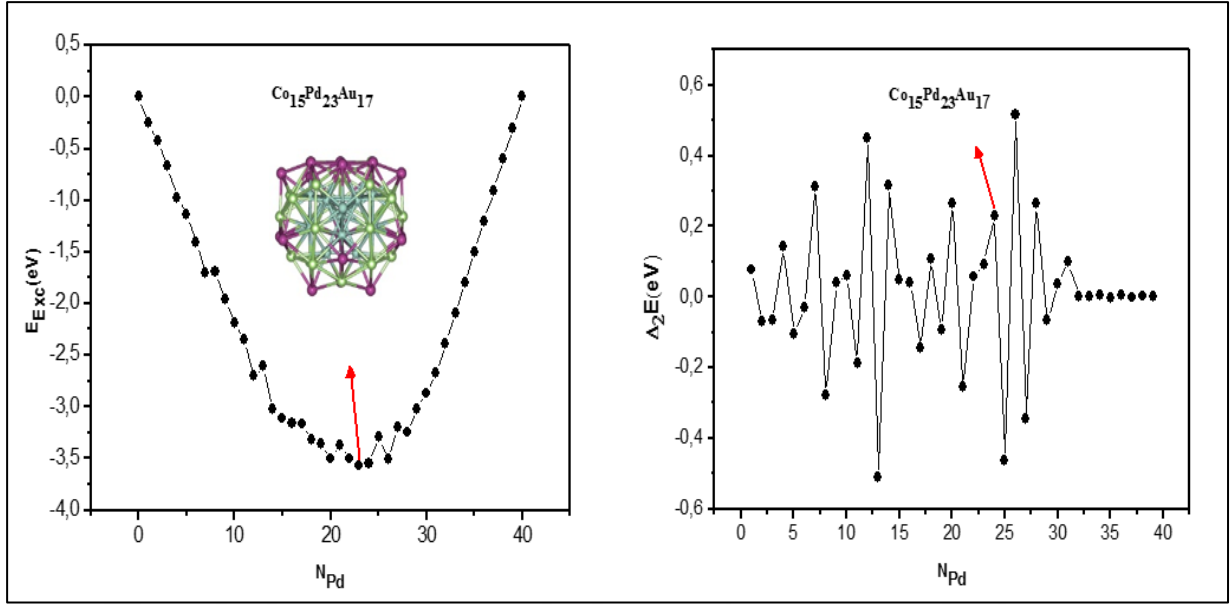


Şekil 3.141 $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

$\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ ($x= 0, 40$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. En kararlı yapılar, global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiklerinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.141’de gösterilmiştir.

$\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{30}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{28}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{26}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{20}\text{Au}_{20}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{23}\text{Au}_{17}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{24}\text{Au}_{16}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{26}\text{Au}_{14}$, kompozisyonları deforme olmuş ve amorf yapıdadır geri kalan tüm kompozisyonlar ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Pd atomları yapıya çekirdekten yerleşmeye başlamaktadır. Pd atomunun veya Au atomunun yapıda bulunmadığı kompozisyonlarda çekirdekte Co atomları ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Diğer durumlarda Co atomları sadece Pd atomu ile birleşerek ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Merkez yapının dışında kalan Co atomları yüzeyde yer almaktadır.

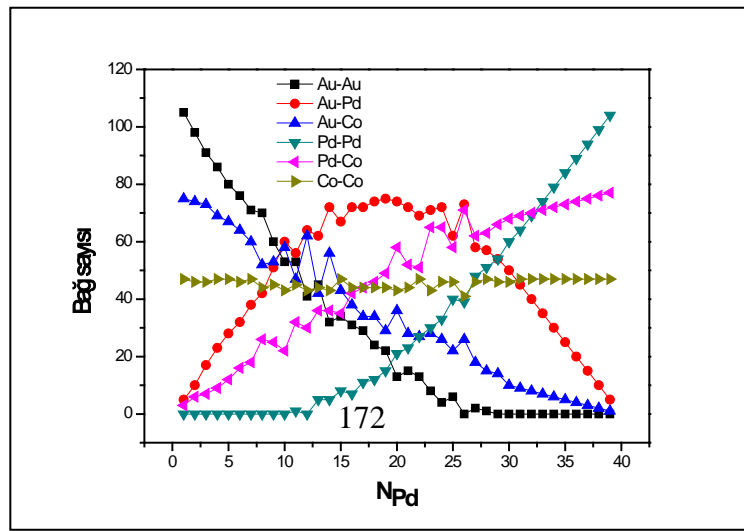
$\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.142’de gösterilmiştir.



Şekil 3.142 $Co_{15}Pd_xAu_{40-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.142’de, $Co_{15}Pd_xAu_{40-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşul sağlanmıştır. Şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir.

En kararlı kompozisyon $Co_{15}Pd_{23}Au_{17}$ olmaktadır. Şekil 3.142’de gösterildiği gibi $Co_{15}Pd_xAu_{40-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $Co_{15}Pd_{23}Au_{17}$ nanoalaşımı amorf yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında Pd atomları ile birleşerek merkezde ikosaedral bir yapı oluşturmaktadır. $Co_{15}Pd_xAu_{40-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.143’te gösterilmiştir.

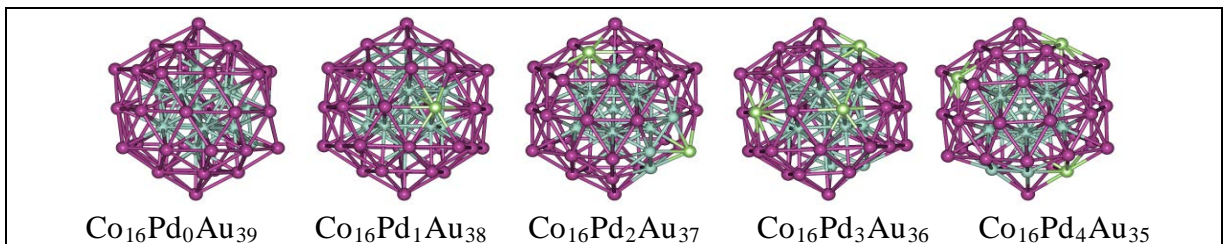


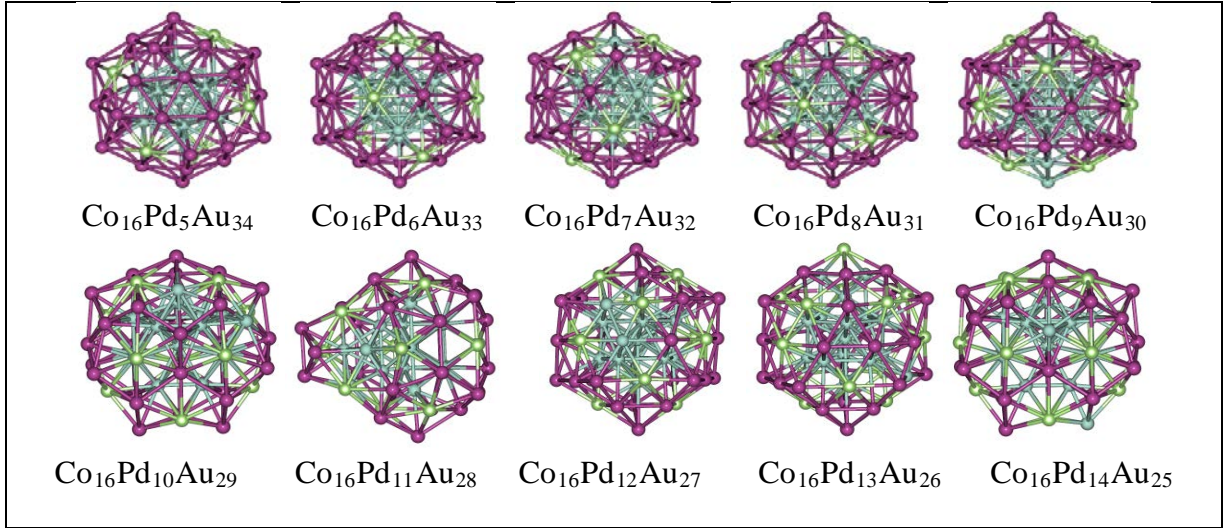
Şekil 3.143 $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

Şekil 3.143'e göre $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{19}\text{Au}_{21}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Ancak $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{30}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{28}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{26}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{20}\text{Au}_{20}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{23}\text{Au}_{17}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{24}\text{Au}_{16}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{26}\text{Au}_{14}$, kompozisyonlarında bir dalgalanma yaşanmaktadır. Aynı durum Pd-Co bağ sayısı içinde geçerlidir. Pd-Co bağ sayısı artış eğilimindedir. Au-Co bağı $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{39}\text{Au}_1$ kompozisyonunda oluşmamaktadır. Au atomları $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{29}\text{Au}_{11}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında, Au-Au bağı yapmamıştır. Pd atomları kendi aralarında Pd-Pd bağı $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{30}$ kompozisyonuna kadar yapmamıştır. $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 43 ve 47 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında amorf yapılar hariç 234 adet bağ oluşmaktadır.

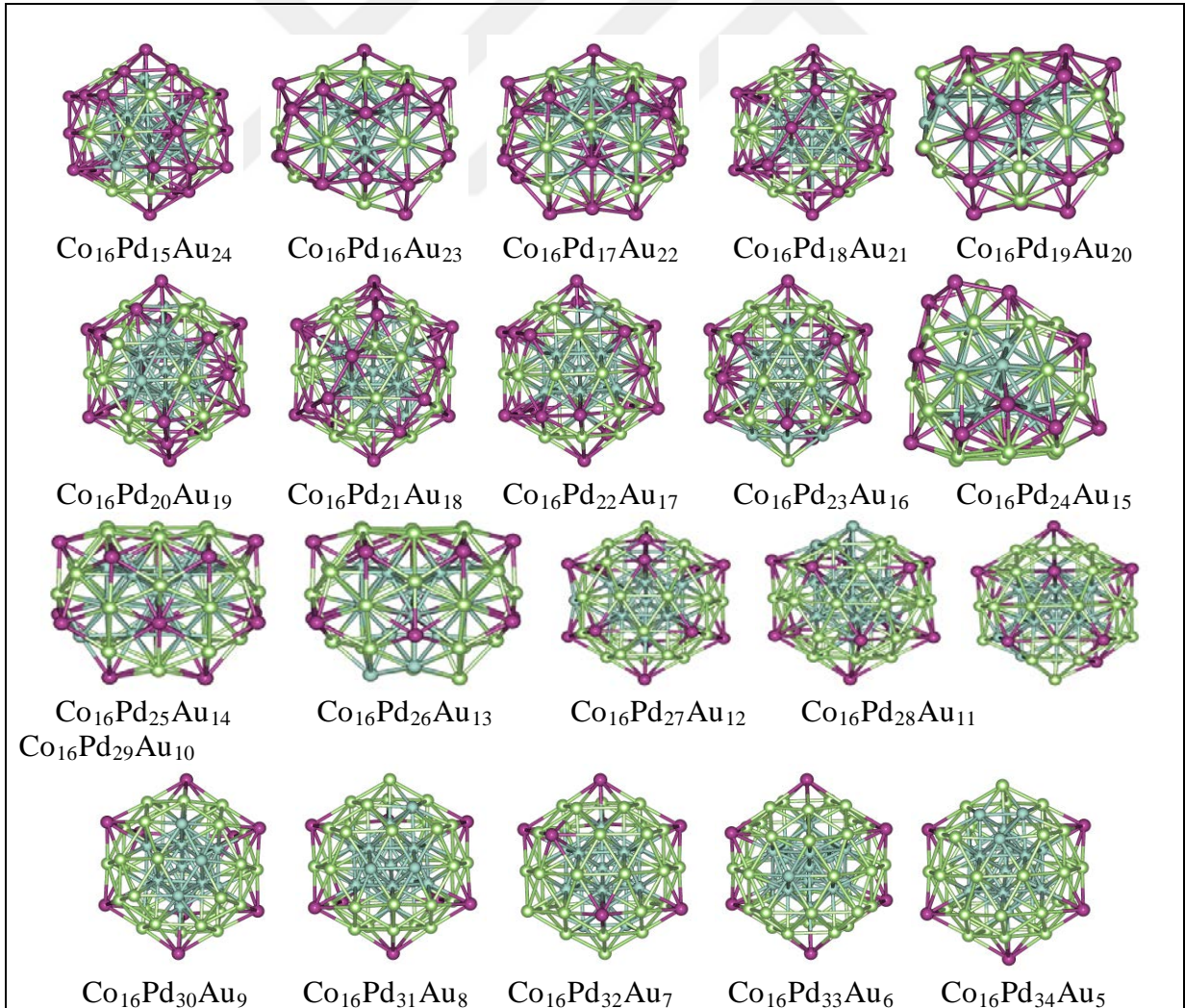
3.7.10 $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

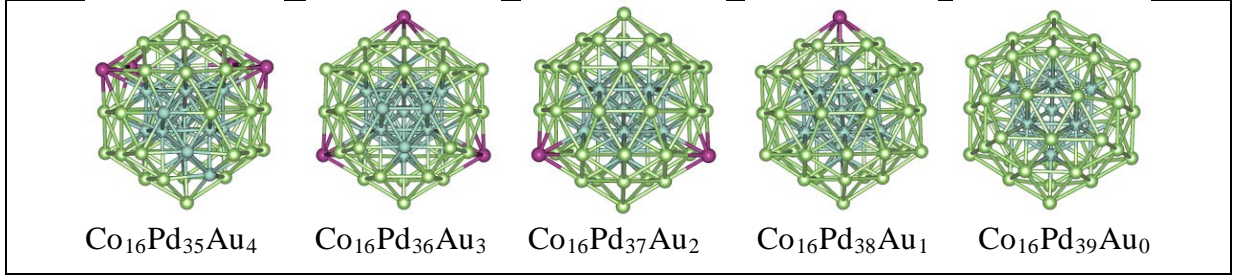
$\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ ($x= 0, 39$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. En kararlı yapılar, global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiklerinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları Şekil 3.144'te gösterilmiştir.





Şekil 3.144 $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

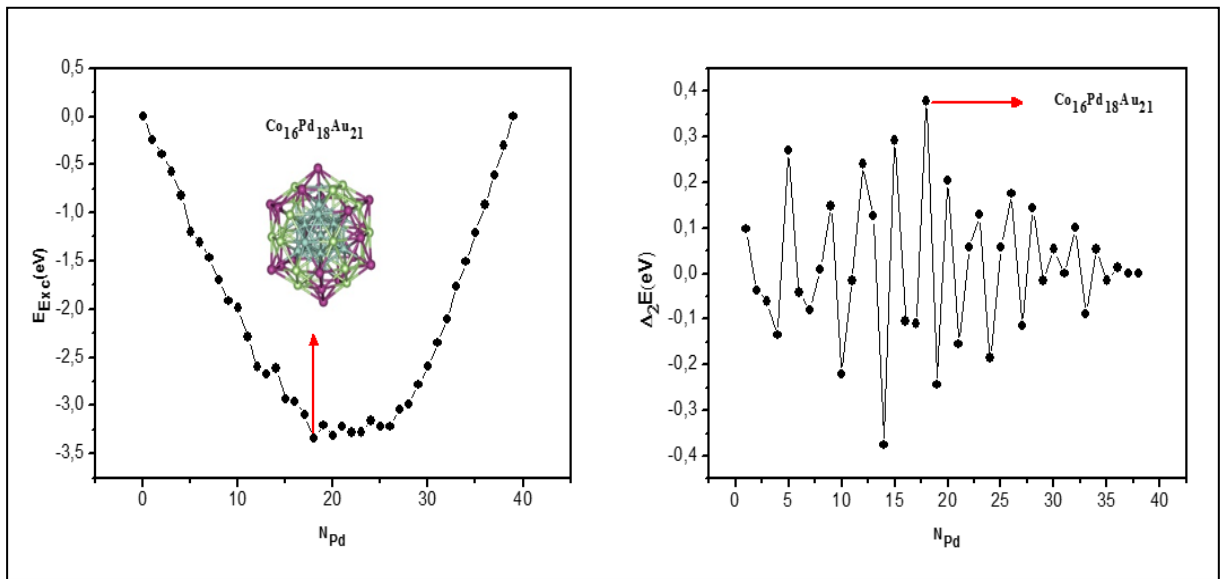




Şekil 3.144 (devam ediyor).

$\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{29}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{28}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{25}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{16}\text{Au}_{23}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{17}\text{Au}_{22}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{19}\text{Au}_{20}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{24}\text{Au}_{15}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{25}\text{Au}_{14}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{26}\text{Au}_{13}$, kompozisyonları deforme olmuş ve amorf yapıdadır geri kalan tüm kompozisyonlar ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Pd atomları yapıya çekirdekten yerleşmeye başlamaktadır. Pd atomunun veya Au atomunun yapıda bulunmadığı kompozisyonlarda çekirdekte Co atomları ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Diğer durumlarda Co atomları sadece Pd atomu ile birleşerek ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Merkez yapının dışında kalan Co atomları yüzeyde yer almaktadır.

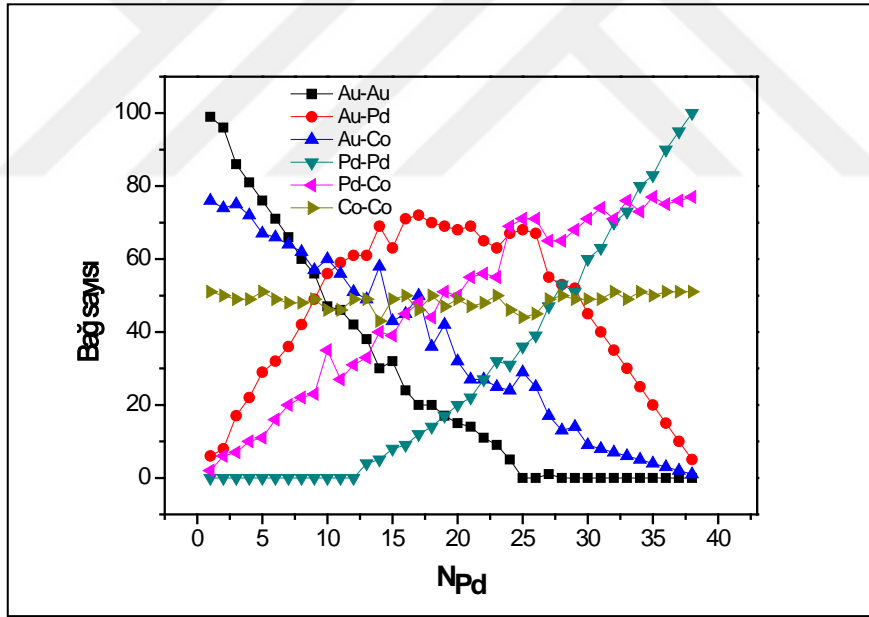
$\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.145'te gösterilmiştir.



Şekil 3.145 $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve $\Delta_2 E$ enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.145'te, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının Fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşul sağlanmıştır. Şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir.

En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{18}\text{Au}_{21}$ olduğu görülmektedir. Şekil 3.145'te gösterildiği gibi $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{18}\text{Au}_{21}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Co atomları merkezde kendi aralarında Pd atomları ile birleşerek merkezde ikosahedral bir yapı oluşturmaktadır. $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımında en kararlı yapıları oluşturan atomların birbirleri arasında yapmış olduğu bağ sayıları Şekil 3.146'da gösterilmiştir.



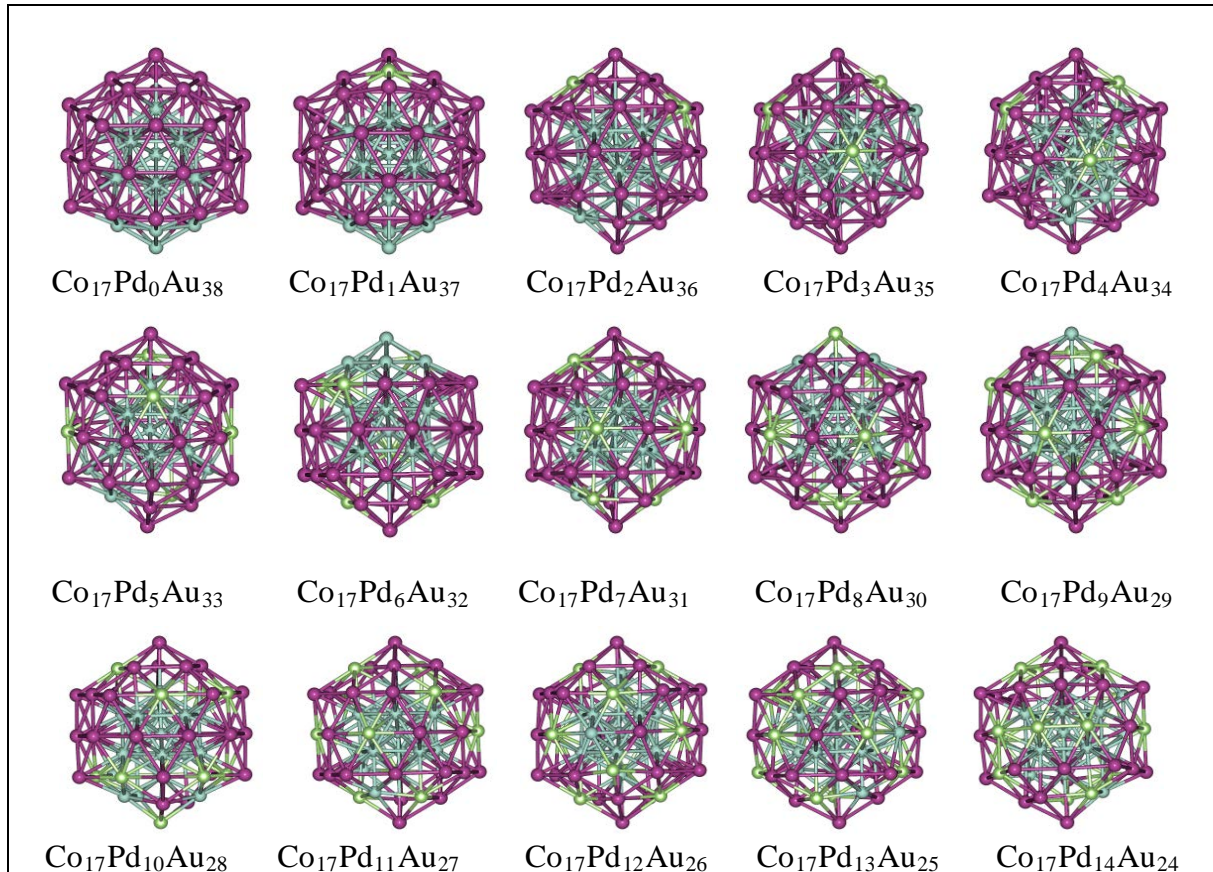
Şekil 3.146 $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi.

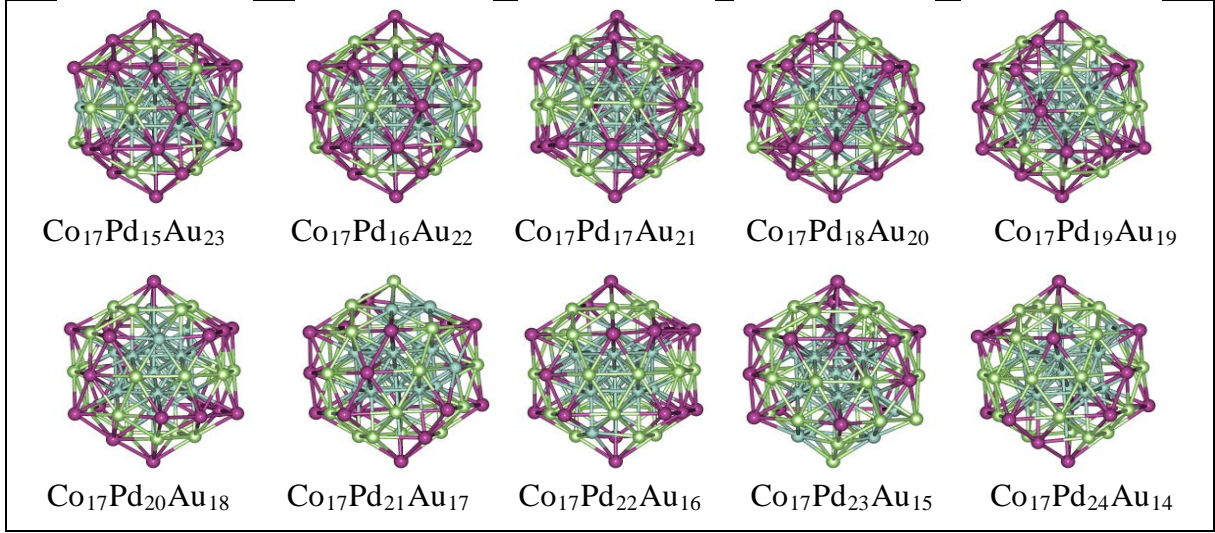
Şekil 3.146'ya göre $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi incelendiğinde Au-Pd bağ sayısı $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{17}\text{Au}_{22}$ kompozisyonunda en yüksek değerindedir daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediği gözlemlenmektedir. Au-Co bağ sayısı düzenli bir azalma göstermektedir. Ancak

$\text{Co}_{16}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{29}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{11}\text{Au}_{28}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{14}\text{Au}_{25}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{16}\text{Au}_{23}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{17}\text{Au}_{22}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{19}\text{Au}_{20}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{24}\text{Au}_{15}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{25}\text{Au}_{14}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{26}\text{Au}_{13}$, kompozisyonlarında bir dalgalanma yaşanmaktadır. Aynı durum Pd-Co bağ sayısı içinde geçerlidir. Pd-Co bağ sayısı artış eğilimindedir. Au-Co bağı $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{38}\text{Au}_1$ kompozisyonunda oluşmamaktadır. Au atomları $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{28}\text{Au}_{11}$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında, Au-Au bağı yapmamıştır. Pd atomları kendi aralarında Pd-Pd bağı $\text{Co}_{16}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{27}$ kompozisyonuna kadar yapmamıştır. $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonlarında Co-Co bağ sayısı 43 ve 51 arasında dalgalanma göstermektedir. $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$ nanoalaşımının kompozisyonlarında amorf yapılar hariç 234 adet bağ oluşmaktadır.

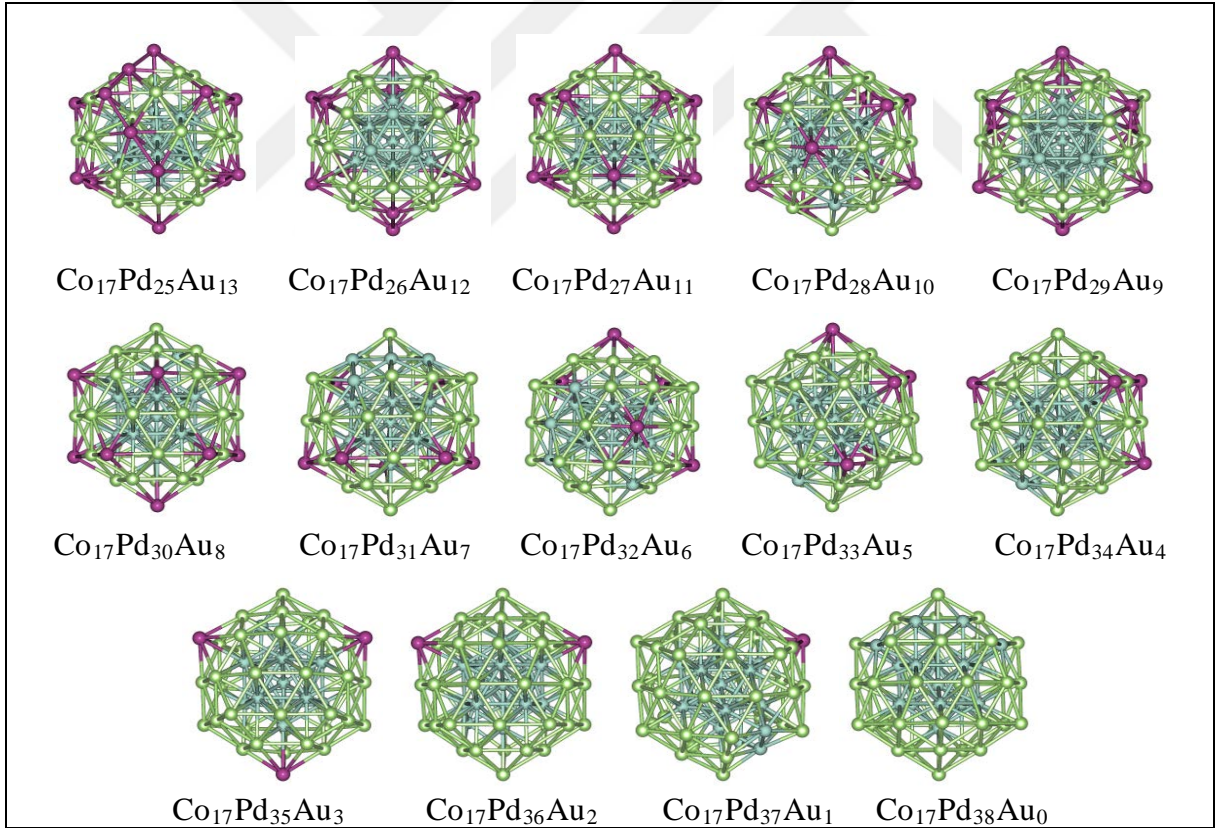
3.7.11 $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ Nanoalaşımının Yapısal Özellikleri

$\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ ($x= 0, 38$) nanoalaşımının Co sayısı sabit tutularak, Pd ve Au sayıları değiştirilerek farklı kompozisyonlar oluşturulmuştur. Bu kompozisyonların en kararlı yapıları global optimizasyon yöntemiyle seçilerek çizilen $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımının fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafiğinde en kararlı kompozisyon bulunmuştur. $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$ nanoalaşımı için en kararlı yapılar bulunarak Şekil 3.147’de gösterilmiştir.





Şekil 3.147 Co₁₇Pd_xAu_{38-x} nanoalaşımının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları gösterilmektedir (mavi Co, yeşil Pd, mor Au atomlarını göstermektedir).

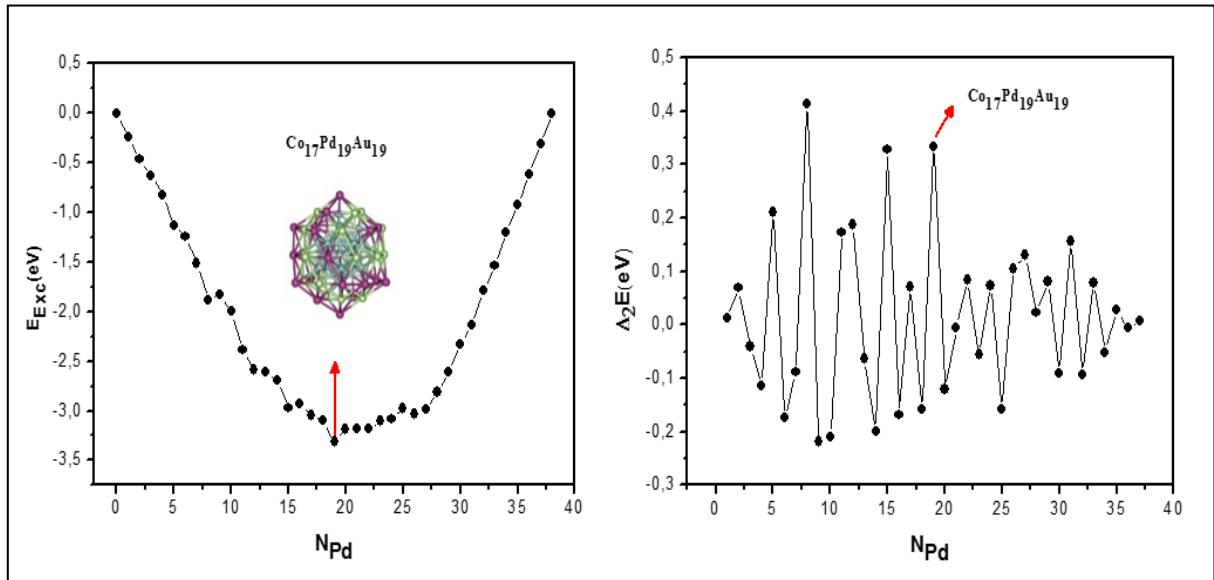


Şekil 3.147 (devam ediyor).

Co₁₇Pd_xAu_{38-x} nanoalaşımının tüm kompozisyonları incelendiğinde Pd sayısı arttırıldıkça Au atomlarının yerlerini Pd atomları almaktadır. Co atomlarından 13 tanesi birleşerek merkezde

ikosahedral yapı oluşturmaktadır. Geri kalan 4 Co atomu ise merkezde oluşan ikosahedral yapının köşelerine yerleşmektedir. $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımının tüm kompozisyonları ikosahedral yapıdadır. Pd atomları ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Pd atomları genellikle merkeze ve Co atomlarına yakın yerlere yerleşmeyi tercih ederken Au atomları yüzeyde köşegenlere ve uç noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir. Au atomları $\text{Co}_{17}\text{Pd}_{29}\text{Au}_9$ kompozisyonundan itibaren yüzeyin en uç noktalarına yerleşerek Co atomları ile bağ yapmamaktadır.

$\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımı için Co sayısı sabit tutularak, Pd sayısı artırılmış ve farklı yapılar oluşturulmuştur. Bu nanoalaşımların en kararlı yapıları seçilerek çizilen fazlalık enerji ve ikinci fark enerji grafikleri ile en kararlı kompozisyon Şekil 3.148’ de gösterilmiştir.



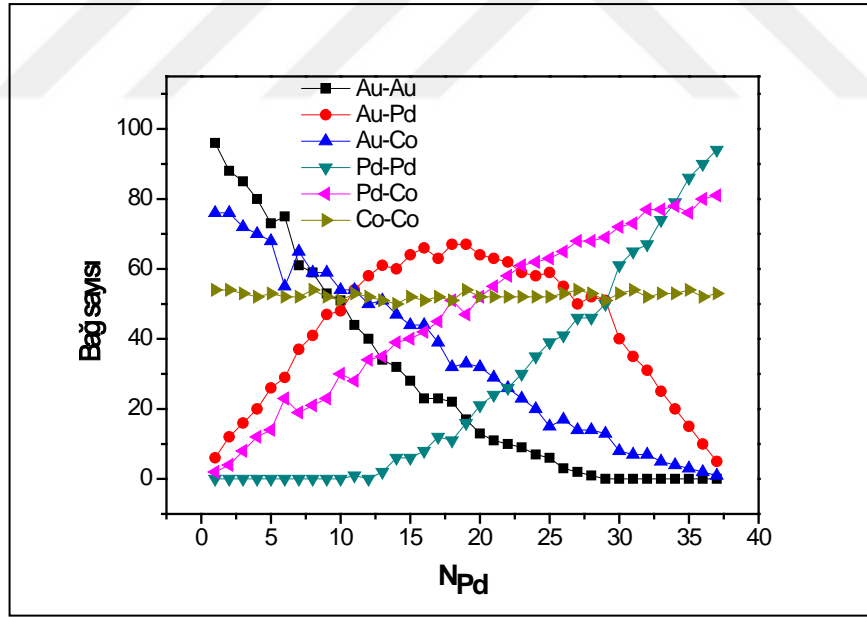
Şekil 3.148 $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımının E_{Exc} enerjisi ve Δ_2E enerji grafiği.

Fazlalık enerji grafiğine göre en düşük enerjinin en kararlı yapılar arasındaki en kararlı kompozisyon olması beklenir. Bunun yanı sıra ikinci fark enerji grafiğinde ise en kararlı kompozisyonun karşılık geleceği değerin zirve noktası ya da zirve noktalarından biri olması beklenmektedir. Şekil 3.148’de fazlalık enerji grafiği ve ikinci fark enerji grafiğinde bu koşullar sağlanmış olup, şekil üzerinde en kararlı kompozisyon ve kompozisyona karşılık enerjiler gösterilmiştir. En kararlı kompozisyon $\text{Co}_{17}\text{Pd}_{19}\text{Au}_{19}$ olmaktadır.

Şekil 3.147’de gösterildiği gibi $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımının en kararlı kompozisyonu olan $\text{Co}_{17}\text{Pd}_{19}\text{Au}_{19}$ nanoalaşımı ikosahedral yapıdadır ve Pd atomları, Au atomları ile yüzeyde

kariřim deseni oluřturmaktadır. $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalařımında en kararlı yapıları oluřturan atomların birbirleri arasında yapmıř olduđu bađ sayıları Őekil 3.149’da gsterilmiřtir.

Őekil 3.149’a gre $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalařımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına gre bađ sayılarının deđiřimi incelendiđinde Au-Pd bađ sayısı en kararlı kompozisyona kadar artmakta daha sonra azalarak parabolik bir karakter izlediđi gzlemlenmektedir. Au-Co bađ sayısı dzenli bir azalma gstermektedir. Pd-Co bađ sayısı tam tersine dzenli bir artıř eđilimindedir. Artan Pd sayısı ile Pd atomları merkezde bulunan Co atomları ile daha fazla bađ yapmak iin Co atomlarına yakın yerlere yerleřmiř ve Au atomları Co atomlarından daha uzak noktalara yerleřerek Au-Co bađ sayısını azaltmıřtır. Pd atomları $\text{Co}_{17}\text{Pd}_1\text{Au}_{37}$ kompozisyonundan $\text{Co}_{17}\text{Pd}_{10}\text{Au}_{28}$ kompozisyona kadar ve $\text{Co}_{17}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{26}$ kompozisyonunda kendi aralarında bađ yapmamıřtır. Buna karřılık Au atomları ise $\text{Co}_{17}\text{Pd}_{29}\text{Au}_9$ kompozisyonundan itibaren kendi aralarında bađ yapmamıřtır. $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalařımının kompozisyonlarında Co-Co bađ sayısı 50 ve 54 arasında dalgalanma gstermektedir. $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalařımının kompozisyonlarında toplam 234 adet bađ oluřmaktadır.

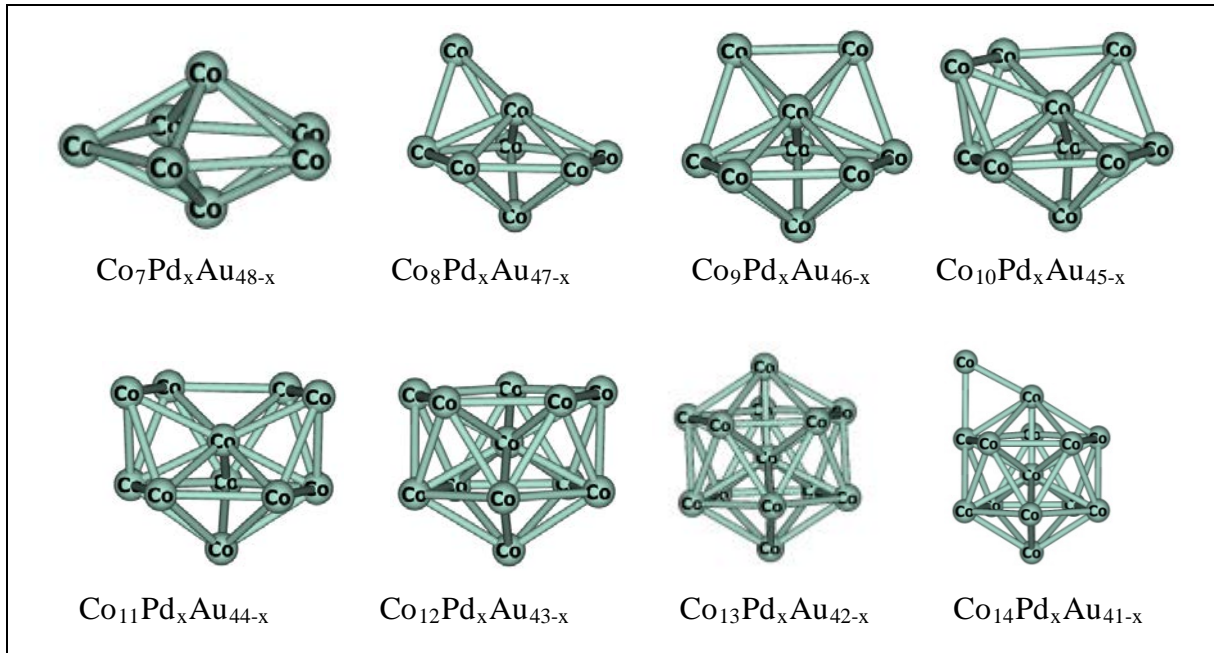


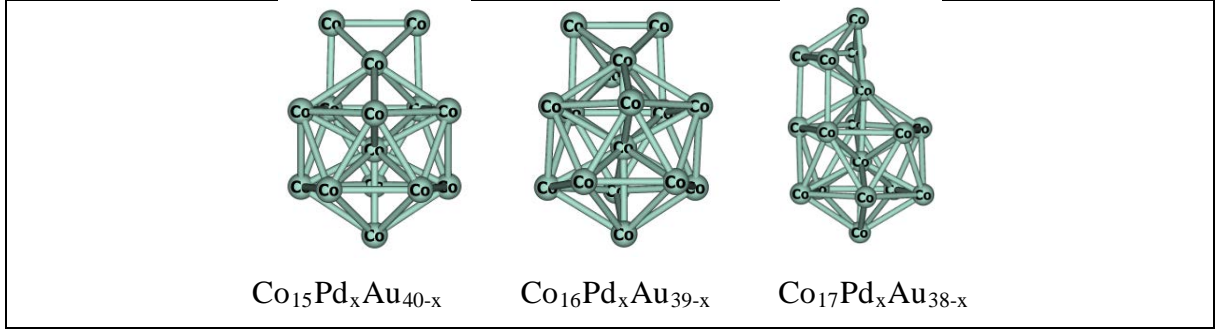
Őekil 3.149 $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalařımının en kararlı yapılarının artan Pd sayısına gre bađ sayılarının deđiřimi.

Bu blmde 55 atomlu Co-Pd-Au cl nanoalařımlarının seili $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$, $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ kompozisyonları yapısal zellikleri

incelenmiştir. Genel olarak $\text{Co}_7\text{Pd}_x\text{Au}_{48-x}$, $\text{Co}_8\text{Pd}_x\text{Au}_{47-x}$, $\text{Co}_9\text{Pd}_x\text{Au}_{46-x}$, $\text{Co}_{10}\text{Pd}_x\text{Au}_{45-x}$, $\text{Co}_{11}\text{Pd}_x\text{Au}_{44-x}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_x\text{Au}_{43-x}$, $\text{Co}_{13}\text{Pd}_x\text{Au}_{42-x}$, $\text{Co}_{14}\text{Pd}_x\text{Au}_{41-x}$, $\text{Co}_{15}\text{Pd}_x\text{Au}_{40-x}$, $\text{Co}_{16}\text{Pd}_x\text{Au}_{39-x}$, $\text{Co}_{17}\text{Pd}_x\text{Au}_{38-x}$ nanoalaşımalarının global optimizasyon yöntemiyle elde edilen en kararlı yapıları incelendiğinde tüm kompozisyonlar ikosahedral yapıdadır. Merkeze her zaman Co atomları yerleşmektedir. Pd ve Au atomları yüzeyde karışım deseni oluşturmaktadır. Tüm nanoalaşımaların en kararlı yapılarının artan Pd sayısına göre bağ sayılarının değişimi grafiği incelendiğinde ise, Co-Co bağ sayısı genellikle sabit kalmaktadır. Au-Pd bağ sayısı ise her bir nanoalaşımda genellikle en kararlı yapıya kadar artmakta, daha sonrasında azalmaya başlamaktadır. Artan Pd sayısına göre Pd-Pd bağ sayısı genellikle yapıda 10 adet Pd atomu bulunana kadar oluşmamaktadır. Daha sonrasında artan bir grafik çizmektedir. Au-Au bağ sayısı ise, genellikle 11 adet Au atomu kalana kadar oluşmakta daha sonra oluşmamaktadır. Artan Pd sayısına göre tüm nanoalaşımlarda Au-Co bağı azalırken Pd-Co bağı artmaktadır. Tüm 55 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımında toplam bağ sayısı 234 olmaktadır.

Co-Pd-Au nanoalaşım kümesinde Co sayısına göre oluşturulan nanoalaşımaların kendi aralarında bağ yapan Co atomlarının yapısı Şekil 3.150' de gösterilmektedir.





Şekil 3.150 55 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında, Co atomlarının merkezde oluşturdukları yapılar.

BÖLÜM 4

SONUÇ

Bu çalışmada $(\text{Co-Pd-Au})_N$ ($N=19, 23, 26, 34, 38, 55$) atomlu üçlü nanoalaşımalarının yapısal özellikleri simülasyon yöntemiyle incelenmiştir. Atomlar arası etkileşmelerde Gupta çok cisim potansiyel enerji fonksiyonu kullanılmıştır. İlgilenilen nanoalaşımaların enerji analizleri Fazlalık enerji ve ikinci fark enerjileri ile yapılmıştır. Global optimizasyon için Basin-Hopping (BH) algoritması kullanılmıştır.

Yapılan optimizasyonlar sonucunda 19, 23 ve 26 atomlu nanoalaşımaların global minimum yapıları çoklu ikosahedral yapıda olma eğilimindedir. 34 ve 38 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımaları ise genellikle amorf yapıdadır. 55 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımaları ise ikosahedral yapıda olma eğilimindedir. Nanoalaşımın iç kısmında Co atomları bulunmakta yüzeyde ise Pd ve Au atomları karışım deseni oluşturmaktadır. Tüm nanoalaşımalarda Au atomları yapının uç kısımlarına, Pd atomları ise Co atomlarına yakın ve orta noktalara yerleşmeyi tercih etmektedir.

Co sayılarının artırılmasıyla oluşan nanoalaşımaların tüm kompozisyonlarında Co atomları içerde bulunmakta daha sonra iç kısma yakın ekvator bölgelerine yerleşmektedir. İç kısma yerleşen Co atomları artan Co atomu sayısına göre nanoalaşımında ikosahedral yapı oluşturma eğilimindedir. Fazlalık enerjisi (E_{exc}) grafiğine göre, en düşük enerjinin en kararlı kompozisyona ait olduğu tahmin edilmiştir. En kararlı kompozisyonun Δ_2E grafiğinde, en yüksek değer veya en yüksek değerlerden biri olduğu tespit edilmiştir. 19 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımında artan Co atomu sayısına göre çalışılan tüm nanoalaşımalarda en kararlı kompozisyon ikili ikosahedral, 23 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında üçlü ikosahedral, 24 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında ise çoklu ikosahedral yapıdadır. 34 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında en kararlı kompozisyonlar genellikle amorf yapıda olmasına rağmen, $\text{Co}_8\text{Pd}_{16}\text{Au}_{10}$, $\text{Co}_{12}\text{Pd}_{12}\text{Au}_{10}$ ve $\text{Co}_{13}\text{Pd}_9\text{Au}_{12}$ kompozisyonları Marks Dekahedron yapıyı tercih etmektedir. 38 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında ise en kararlı kompozisyonlar

genellikle amorf yapıyı tercih etmesine rağmen $\text{Co}_5\text{Pd}_{19}\text{Au}_{14}$ kompozisyonu 6 katlı pankek (six-fold pancake) modelindedir.

34 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında genellikle ilk 3 ve son 3 kompozisyon Marks Dekahedron yapıda diğer kompozisyonlar deforme olmuş Marks Dekahedron veya amorf yapıdadır. 38 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında ise ilk ve son kompozisyonlar genellikle 6 katlı pankek modelinde geri kalan kompozisyonlar ise amorf yapıda olmaktadır.

55 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarının $\text{Co}_{14}\text{Pd}_{21}\text{Au}_{20}$ ve $\text{Co}_{15}\text{Pd}_{23}\text{Au}_{17}$ kompozisyonları hariç tüm en kararlı kompozisyonları ikosahedral yapıdadır.

Çalışılan tüm Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımalarında artan Pd sayısına göre bağ sayısı grafiği çizilerek en kararlı yapıların bağ sayıları araştırılmıştır. Yapılan araştırmalara göre her bir nanoalaşımında atom sayısına göre oluşturulan kümelerin toplam bağ sayısı genellikle sabit kalmaktadır. En kararlı kompozisyona kadar Au-Pd bağ sayısı artış göstermekte daha sonrasında ise azalmaktadır. Pd-Pd bağ sayısı ilk 5 kompozisyona kadar oluşmamakta daha sonrasında ise artış göstermektedir. Au-Au bağ sayısı ise en yüksek değerinden azalarak son 4 kompozisyondan itibaren oluşmamaktadır. Artan Pd sayısı ile Pd-Co bağ sayısı artarken Au-Co bağ sayısı azalmaktadır. 19, 23 ve 26 atomlu Co-Pd-Au nanoalaşımalarında, Co-Co bağ sayısı sabit kalmaktadır. 34, 38 ve 55 atomlu Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımaları incelendiğinde ise Co-Co bağ sayısı yapıya göre değişmektedir.

Sonuç olarak, “*Co-Pd-Au Üçlü Metal Nanoalaşımalarının Yapısal Özelliklerinin Simülasyon Yöntemiyle İncelenmesi*” isimli çalışmanın, son zamanlarda büyük ilgi gören Co-Pd-Au üçlü nanoalaşımalarının teorik ve deneysel çalışmalarında öngörü sağlayacağını düşünmekteyiz.

KAYNAKLAR

- [1] **Kaku M** (2016) *Geleceğin Fiziği 2100 yılına kadar bilim insanlığın kaderini ve günlük yaşamımızı nasıl şekillendirecek?*, çevirenler: Yasemin S. Oymak ve Hüseyin Oymak, 5.Basım, ISBN: 978-605-5164-67-6, ODTÜ Yayıncılık, Ankara, 544 s.
- [2] **Ferrando R, Jellinek J and Johnston R L** (2008) Nanoalloys: From Theory to Applications of Alloy Clusters and Nanoparticles. *Chemical Reviews*, 108:846–904.
- [3] **Subbaraman R and Sankaranarayanan S K R S** (2011) On the correlation between phonon spectra and surface segregation features in Ag-Cu-Ni ternary nanoalloys. *Surface Science*, 605:1592–1602.
- [4] **Pittaway F, Paz-Borbon L O, Johnston R L, Arslan H, Ferrando R, Mottet C, Barcaro G and Fortunelli A** (2009) Theoretical Studies of Palladium-Gold Nanoclusters: Pd-Au Clusters with up to 50 Atoms. *The Journal of Physical Chemistry C*, 113:9141–9152.
- [5] **Rossi G, Ferrando R and Mottet C** (2008) Structure and chemical ordering in CoPt nanoalloys. *Faraday Discuss.*, 138:193–210.
- [6] **Pacheco-Contreras R, Arteaga-Guerrero A, Borbón-González D J, Posada-Amarillas A, Schön J C and Johnston R L** (2010) Energetic and structural analysis of 102-atom Pd-Pt nanoparticles: A composition-dependent study. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 7:199–204.
- [7] **Núñez S and Johnston R L** (2010) Structures and chemical ordering of small Cu-Ag clusters. *Journal of Physical Chemistry C*, 114:13255–13266.
- [8] **Arslan H** (2008) Structures and Energetic of Palladium-Cobalt Binary Clusters. *International Journal of Modern Physics C*, 19:1243–1255.
- [9] **Yeo S C, Kim D H, Shin K and Lee H M** (2012) Phase diagram and structural evolution of Ag-Au bimetallic nanoparticles: molecular dynamics simulations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14:2791.
- [10] **Taran S, Garip A K and Arslan H** (2016) Theoretical study of the structures and chemical ordering of CoPd nanoalloys supported on MgO(001). *International Journal of Modern Physics C*, 27:1650146.
- [11] **Garip A K** (2016) Melting Dynamics of 147 Atom Co-Pd Nanoalloys. *Karaelmas Science and Engineering Journal*, 6:369–376.
- [12] **Aguado A and López J M** (2010) Structure determination in 55-atom Li-Na and Na-K nanoalloys. *Journal of Chemical Physics*, 133:1–10.

KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [13] **Hendren W R, Cassidy C, Atkinson R, Salter I W and Pollard R J** (2005) Dynamic, in situ optical, magnetic and magneto-optical monitoring of the growth of Co/Au and Pd/Co/Au multilayer systems. *Journal of Physics Condensed Matter*, 17:5313–5326.
- [14] **Gruner M E and Entel P** (2011) Structural and magnetic properties of ternary Fe_{1-x}m_xn_pt nanoalloys from first principles. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 2:162–172.
- [15] **Li S Yang Y and Huang S** (2017) Theoretical insights into the relationship between structures and properties in tri-metallic Pd_{13-n}Ni_n@Pt₄₂(n = 0–13) nanoparticles. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1107:94–101.
- [16] **Zhao S, Ren Y L, Yao K S, Tian X Z, Wang J J and Liu J N** (2018) Stability, structural and electronic properties of ternary Pd_xAu_yAg_zclusters (x + y + z = 7): A theoretical study. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1131:69–77.
- [17] **Jiang K and Cai W Bin** (2014) Carbon supported Pd-Pt-Cu nanocatalysts for formic acid electrooxidation: Synthetic screening and componential functions. *Applied Catalysis B: Environmental*, 147:185–192.
- [18] **Pandey P C and Pandey G** (2016) One-pot two-step rapid synthesis of 3-aminopropyltrimethoxysilane-mediated highly catalytic Ag@(PdAu) trimetallic nanoparticles. *Catal. Sci. Technol.*, 6:3911–3917.
- [19] **Wu X, Liu Q, Sun Y and Wu G** (2015) Structural characterization of metal dopants (M = Ag or Au) in trimetallic M–Pd–Pt clusters. *RSC Adv.*, 5:51142–51148.
- [20] **Polak M and Rubinovich L** (2005) Prediction of compositional ordering and separation in alloy nanoclusters. *Surface Science*, 584:41–48.
- [21] **Garip A K and Arslan H** (2014) Investigation of the Structural Properties of 40 Atom Pd-Co Binary Metal Clusters. *Karaelmas Science and Engineering Journal*, 4:38–45.
- [22] **Lopez G E and Freeman D L** (1993) A study of low temperature heat capacity anomalies in bimetallic alloy clusters using J-walking Monte Carlo methods. *The Journal of Chemical Physics*, 98:1428–1435.
- [23] **Hewage J W, Rupika W L and Amar F G** (2012) Structure, dynamic and energetic of mixed transition metal clusters: A computational study of mixed clusters of silver and nickel. *European Physical Journal D*, 66.
- [24] **Davis J B A, Horswell S L and Johnston R L** (2014) Global optimization of 8-10 atom palladium-iridium nanoalloys at the DFT level. *Journal of Physical Chemistry A*, 118:208–214.
- [25] **Datta S, Raychaudhuri A K and Saha-Dasgupta T** (2017) First principles study of bimetallic Ni_{13-n}Ag_nnano-clusters (n = 0-13): Structural, mixing, electronic, and magnetic properties. *Journal of Chemical Physics*, 146:0–8.

KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [26] **Fernández J L, Raghuveer V, Manthiram A and Bard A J** (2005) Pd-Ti and Pd-Co-Au electrocatalysts as a replacement for platinum for oxygen reduction in proton exchange membrane fuel cells. *Journal of the American Chemical Society*, 127:13100–13101.
- [27] **Luo L, Zhang L, Henkelman G and Crooks R M** (2015) Unusual Activity Trend for CO Oxidation on Pd_xAu_{140-x}@Pt Core@Shell Nanoparticle Electrocatalysts. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 6:2562–2568.
- [28] **Cao T T, Zhao L X, Feng X J, Lei Y M and Luo Y H** (2009) Structural and electronic properties of LuSi_n (n = 1-12) clusters: A density functional theory investigation. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 895:148–155.
- [29] **Kamiko M and Yamamoto R** (1996) PERPENDICULAR MAGNETIC ANISOTROPY AND MAGNETO-OPTICAL KEER PROPERTIES OF Co/(Pd-Au) METALLIC MULTILAYERS. 20:271–274.
- [30] **Liu X M, Ho P, Chen J S and Adeyeye A O** (2012) Magnetization reversal and magnetoresistance behavior of perpendicularly magnetized [Co/Pd]₄/Au/[Co/Pd]₂nanowires. *Journal of Applied Physics*, 112.
- [31] **Gehrke R and Reuter K** (2009) Assessing the efficiency of first-principles basin-hopping sampling. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 79:1–10.
- [32] **Rondina G G and Da Silva J L F** (2013) Revised basin-hopping monte carlo algorithm for structure optimization of clusters and nanoparticles. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 53:2282–2298.
- [33] **di Paola C and Baletto F** (2011) Oxygen adsorption on small PtNi nanoalloys. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13:7701.
- [34] **Ma W and Chen F** (2013) CO oxidation on the Ag-doped Au nanoparticles. *Catalysis Letters*, 143:84–92.
- [35] **Johnston R L** (2003) Evolving better nanoparticles: Genetic algorithms for optimising cluster geometries. *Dalton Transactions*, 4193.
- [36] **Wu X, Wu G, Chen Y and Qiao Y** (2011) Structural optimization of Cu-Ag-Au trimetallic clusters by adaptive immune optimization algorithm. *J Phys Chem A*, 115:13316–13323.
- [37] **Yu Y, Yang W, Sun X, Zhu W, Li X Z, Sellmyer D J and Sun S** (2014) Monodisperse MPt (M = Fe, Co, Ni, Cu, Zn) nanoparticles prepared from a facile oleylamine reduction of metal salts. *Nano Letters*, 14:2778–2782.
- [38] **Taran S** (2012) Metal Nanoalaşımaların Yapısal Özelliklerinin Hesaplamalı Yöntemlerle İncelenmesi. *Yüksek Lisans Tezi*, Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Zonguldak, 87 s.

KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [39] **Tomiska J** (2009) Thermodynamic Fazlalik quantities of ternary Au-Co-Pd melts by computer-aided Knudsen cell mass spectrometry. *Thermochimica Acta*, 495:22–27.
- [40] **Jirkovský J S, Panas I, Ahlberg E, Halasa M, Romani S and Schiffrin D J** (2011) Single atom hot-spots at Au-Pd nanoalloys for electrocatalytic H₂O₂ production. *Journal of the American Chemical Society*, 133:19432–19441.
- [41] **Akbarzadeh H, Mehrjouei E, Masoumi A and Sokhanvaran V** (2018) Pt-Pd nanoalloys with crown-jewel structures: How size of the mother Pt cluster affects on thermal and structural properties of Pt-Pd nanoalloys? *Journal of Molecular Liquids*, 249:477–485.
- [42] **Li M and Cheng D** (2013) Molecular dynamics simulation of the melting behavior of crown-jewel structured Au-Pd nanoalloys. *Journal of Physical Chemistry C*, 117:18746–18751.
- [43] **Venkateswara Rao C and Viswanathan B** (2012) Microemulsion synthesis and electrocatalytic properties of carbon-supported Pd-Co-Au alloy nanoparticles. *Journal of Colloid and Interface Science*, 367:337–341.
- [44] **Maroun F, Reikowski F Di N, Wiegmann T, Stettner J, Magnussen O M and Allongue P** (2017) Potential dependence of the structure and magnetism of electrodeposited Pd/Co/Au(111) layers. *Journal of Electroanalytical Chemistry*,.
- [45] **Giorgini S, Pitaevskii L P and Stringari S** (1997) Thermodynamics of global optimization. *Physical Review Letters*, 78:3987–3990.
- [46] **Akbarzadeh H and Abbaspour M** (2017) Effects of pressure, nanoalloy size, and nanoalloy mole fraction on melting of Ir-Rh nanoalloys using molecular dynamics simulations. *Journal of Alloys and Compounds*, 694:1287–1294.
- [47] **Ditolla F D** (1997) Interplay of Melting, Wetting, Overheating and Faceting on Metal-Surfaces - Theory and Simulation. *Surf. Sci.*, 377:499–503.
- [48] **Cheng D, Liu X, Cao D, Wang W and Huang S** (2007) Surface segregation of Ag-Cu-Au trimetallic clusters. *Nanotechnology*, 18.
- [49] **Zhan L, Chen J Z Y, Liu W K and Lai S K** (2005) Asynchronous multicanonical basin hopping method and its application to cobalt nanoclusters. *Journal of Chemical Physics*, 122.
- [50] **Wales D J and Doye J P K** (1997) Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structures of Lennard-Jones clusters containing up to 1110 atoms. *Journal of Physical Chemistry A*, 40:194.
- [51] **Leary R H** (2004) Global Optimization of Morse Clusters by Potential Energy Transformations. 16:371–379.

KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [52] **Doye J and Wales D** (1997) Global Minima for Transition Metal Clusters Described by Sutton-Chen Potentials.
- [53] **Goedecker S** (2004) Minima hopping: An efficient search method for the global minimum of the potential energy surface of complex molecular systems. *Journal of Chemical Physics*, 120:9911–9917.
- [54] **Li Z and Scheraga H A** (1988) Structure and free energy of complex thermodynamic systems. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 179:333–352.
- [55] **Calvo F and Yurtsever E** (2004) Composition-induced structural transitions in mixed rare-gas clusters. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 70:1–12.
- [56] **Garip A K** (2012) İkili metal atom yığınlarının yapısal ve dinamik özelliklerinin monte carlo ve moleküler dinamik simülasyon yöntemiyle incelenmesi. *Doktora Tezi*, Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Zonguldak, 179 s.
- [57] **Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, Teller A H and Teller E** (1953) Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21:1087–1092.
- [58] **Rossi G and Ferrando R** (2006) Global optimization by excitable walkers. *Chemical Physics Letters*, 423:17–22.
- [59] **Foiles S M, Baskes M I and Daw M S** (1986) Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*, 33:7983–7991.
- [60] **Murrell J N and Mottram R E** (1990) Potential energy functions for atomic solids. *Molecular Physics*, 69:571–585.
- [61] **Akbarzadeh H, Abbaspour M and Mehrjouei E** (2016) Investigation of thermal, structural and dynamical properties of $(\text{Au}_x - \text{Cu}_y - \text{Ni}_y)_{N=32,108,256}$ ternary nanosystems: effect of Au addition to Cu–Ni bimetallic nanoclusters via MD simulation. *RSC Adv.*, 6:67619–67629.
- [62] **Rapallo A, Rossi G, Ferrando R, Fortunelli A, Curley B C, Lloyd L D, Tarbuck G M and Johnston R L** (2005) Global optimization of bimetallic cluster structures. I. Size-mismatched Ag-Cu, Ag-Ni, and Au-Cu systems. *Journal of Chemical Physics*, 122:1–13.
- [63] **Gupta R** (1981) Lattice relaxation at a metal surface. *Physical Review B*, 23:6265–6270.
- [64] **Zhao Z, Li M, Cheng D and Zhu J** (2014) Understanding the structural properties and thermal stabilities of Au-Pd-Pt trimetallic clusters. *Chemical Physics*, 441:152–158.

KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [65] **Turner G W, Johnston R L and Wilson N T** (2000) Investigation of geometric shell aluminum clusters using the Gupta many-body potential. *Journal of Chemical Physics*, 112:4773–4778.
- [66] **Arslan H, Garip A K and Johnston R L** (2015) Theoretical study of the structures and chemical ordering of cobalt–palladium nanoclusters. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 17:28311–28321.
- [67] **Cleri F and Rosato V** (1991) Tight-Binding Potentials for Transition Metals and Alloys. *Computer Simulation in Materials Science*, 48:233–253.
- [68] **Wu G, Sun Y, Wu X, Chen R and Wang Y** (2017) Large scale structural optimization of trimetallic Cu–Au–Pt clusters up to 147 atoms. *Chemical Physics Letters*, 686:103–110.
- [69] **Rapallo A, Olmos-Asar J A, Oviedo O A, Ludueña M, Ferrando R and Mariscal M M** (2012) Thermal properties of Co/Au nanoalloys and comparison of different computer simulation techniques. *Journal of Physical Chemistry C*, 116:17210–17218.
- [70] **Ferrando R, Fortunelli A and Rossi G** (2005) Quantum effects on the structure of pure and binary metallic nanoclusters. 1–9.
- [71] **Wu G, Liu Q and Wu X** (2015) Geometrical and energetic properties in 38-atom trimetallic Au Pd Pt clusters. *Chemical Physics Letters*, 620:92–97.
- [72] **Bochicchio D and Ferrando R** Size-dependent transition to high-symmetry chiral structures in AgCu , AgCo , AgNi and AuNi nanoalloys - Online supporting information. 1–8.

ÖZGEÇMİŞ

Halit SERTEL, 1989'da Ankara'da doğdu; ilk ve orta öğrenimini Ankara'da tamamladıktan sonra 2008 yılında girdiği Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünden 2016 yılında mezun oldu. Halen 2016 yılında girdiği Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında yüksek lisans programına devam etmektedir.

ADRES BİLGİLERİ

Adres : İncivez Mahallesi Sarmaşık Sokak No: 164/B Merkez/ZONGULDAK

Tel : 0553 653 69 91

E-Posta : halitserte@gmail.com