

**Titanya destekli nanoyapıların ve yüzeylerin  
yapısal ve elektronik özellikleri**

**Proje No: 107T560**

Prof.Dr. Şinasi ELLİALTIOĞLU  
Prof.Dr. Mehmet ÇAKMAK  
Doç.Dr. Ersen METE

KASIM 2010  
ANKARA

## ÖNSÖZ

Bu projede  $\text{TiO}_2 + \text{Pt}$  ve  $\text{Au}$  (değerli metal atomları),  $\text{TiO}_2 + \text{Pt}_n$  (metalik topaklar),  $\text{TiO}_2 + \text{NT}$  (karbon, GaN, ve BN nanotüpleri), ve  $\text{TiO}_2 + \text{IHM}$  (ışık-hasatlayıcı molekül) sistemlerinin kuramsal olarak incelenmesi amacı ile ilk-prensip hesaplamalar yapılmıştır. Böylelikle bu sistemlerin atomik yapıları, elektronik yapıları, ve kimyasal bağ yapıları belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar, deneysel verilerle ve diğer kuramsal hesaplarla karşılaştırılarak yüzeye tutunma, yüzey difüzyonu, elektron transfer mekanizmaları, yüzey reaksiyon yolları gibi konularda gözlenenlerle uyumluluğu araştırılmıştır.

Bu çalışmalar esnasında üç üniversitenin ortaklaşa yaptığı ekip çalışması ile konuda uzmanlaşmış öğrenci yetiştirilmiş ve bilgi birikimi oluşturularak mevcut altyapının iyileştirilmesi sağlanmıştır. Proje süresi içinde 7 adet Yüksek Lisans tezi üretilmiş, öğrenciler dahil tüm proje elemanları ulaşılan bulguları ulusal ve uluslararası bilimsel toplantılarda sunmuşlardır. Ayrıca elde edilen sonuçlar uluslararası saygın bilimsel dergilere yayınlanmıştır.

Bu çalışma, TÜBİTAK Temel Bilimler Araştırma Grubu'nca TBAG-107T560 no'lu proje çerçevesinde desteklenmiştir.

# İÇİNDEKİLER

Önsöz .....	2
İçindekiler .....	3
Özet .....	4
Abstract .....	5
Proje ana metni .....	6
Giriş .....	6
Genel Bilgiler .....	6
Gereç ve Yöntem .....	7
Referanslar .....	7
Bulgular .....	8
Sonuçlar ve Tartışma .....	9
Ekler .....	10
Proje özet bilgi formu .....	14

## ÖZET

Geniş yasak-enerji aralıklı bir yarıiletken olan titanya ( $\text{TiO}_2$ ) öteden beri teknolojik olarak büyük ilgi kaynağı olan bir malzemedir. Bunun nedenlerinin başında çok kararlı ve düzgün yüzeylere sahip olması, ve bu yüzeylerin katalitik aktivitelerinin oldukça yüksek olması gelir. Titanya tek-kristal ve epitaksiyel film olarak elde edilebilen, işlenebilen ve toksik özelliği olmayan bir malzemedir.  $\text{TiO}_2$  yüzeylerine ait üç polimorf (rutil, anataz, ve brokit) önem taşır. Bunlardan rutil (110) faseti en düşük enerjiye sahip olanıdır, ancak anataz (001) yüzeyi fotoelektrokataliz ve görünür ışıktaki fotokataliz konularında daha başarılı ve ümit vaat edicidir. Bunun yanısıra lityum pillerinde ve optoelektronikte kullanımları bilinen özellikleri arasındadır.

Yine kataliz konusunda çok bilinen bir sistem olan Pt ve Au gibi değerli metallerin titanya yüzeyinden termal olarak içeri nüfuz ettiği gösterilmiştir. Bu metal atomlarından oluşturulan topakların veya nanoparçacıkların yüzeyde biriktirilmesinde kuantum boyut etkisi ile, örneğin, Grätzel pili operasyonunda arzu edilen enerji yasak-aralıklarına sahip ve katalitik etkileri artırılmış sistemler elde edilebilmektedir. Tüm bu önemli konu bileşenlerinin incelenerek gözlenen kataliz sürecindeki adımların detayları ile anlaşılması ve modellenbilmesine gereksinim vardır.

Bu projede titanya ve adı geçen yüzeyleri hakkında şimdiye kadar yapmış olduğumuz çalışmaların devamı olarak, rutil (110) ve anataz (001) yüzeyleri gözönüne alınmış, ve bu yüzeylere tutunmuş, nüfuz etmiş, veya çıpılanmış metalik atom topaklarının ve ışık-hayatlayıcı özellikleri ile fotokataliz olayında önemli etkinlik sağlayan moleküllerin yüzeyle etkileşimleri ve fotokatalizdeki rollerinin belirlenebilmesine yol açabilecek hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Daha sonra ise aynı yüzeylere önce karbon sonra da galyum-nitrit ve boron-nitrit nanotüplerinin tutunması ile ilgili yapısal ve elektronik özelliklerin incelendiği ilk-prensip hesaplar yapılmıştır.

### Anahtar Kelimeler:

Nanotüpler, değerli metal atomları, atom topakları, titanya yüzeyleri, ilk-prensip yoğunluk fonksiyoneli hesapları, boya duyarımlı güneş pilleri, ışık hayatlayıcı organik moleküller.

## ABSTRACT

Being a wide band-gap semiconductor, titania ( $\text{TiO}_2$ ) has long been a material of interest technologically. This is mainly because of its very stable and flat surfaces, which in addition have pretty high catalytic activity. Titania is non-toxic material which has nice single crystal and epitaxially grown film phases.  $\text{TiO}_2$  surfaces can be grouped into three important polymorphs (rutile, anatase, and brookite). The rutile (110) facet is found to have the lowest energy, however, anatase (001) modification is more promising in photoelectrocatalysis and VI-photocatalysis. It also finds utility in lithium cell and optoelectronic applications.

Another catalytically active system, namely, precious metals like Pt (or Au) is found to diffuse thermally into titania surfaces. When the clusters or nanostructures made up of these metal atoms are adsorbed on titania surfaces, due to quantum size effect one can obtain systems with enhanced catalytic activity and with preferred band gap needed for, e.g., Grätzel cell operation. Lately, titania and carbon nanotubes are being used together in the Grätzel cells. All these important components of the topic are needed to be investigated in order to understand and to model the observed catalytic procedures.

In this project, as a continuation of our previous work on titania and its known facets, the rutile (110) and anatase (001) surfaces will be considered, and firstly, the adsorbed, diffused, or anchored metal atom clusters as well as light-harvesting molecule adsorption on these surfaces will be examined to find possible relations between catalytic processes and the adsorption mechanisms with the utility of first-principles methods. Later, the adsorption of carbon, galium-nitrite and boron-nitrite nanotubes on these surfaces will be investigated by first-principles calculations of their structural and electronic properties.

### Keywords:

Nanotubes, precious metal atoms and clusters, titania surfaces, first-principles density functional calculations, dye sensitized solar cells, light-harvesting organic molecules.

# PROJE ANA METNİ

## GİRİŞ

### Genel Bilgiler:

Aygıt uygulamaları teknolojisi nano boyutlara inildikçe büyük bir sorunla karşılaşmaktadır. Bugün transistörlerde en küçük parça olarak kullanılan kapı dielektriği SiO<sub>2</sub> tabanlıdır. Bir nanometre mertebesine inildiğinde bu yalıtkanlar elektronların tünellemesine yeterince engel olamamaktadırlar. Dolayısıyla bu sızıntı, cihaz operasyonunda ve enerji tüketiminde istenmeyen sonuçlara sebep olmaktadır (ISHIWARA, CHOI 1988). İkinci bir sorun SiO<sub>2</sub> tabanlı alttaşların karbon nanotüpler (KNT) gibi bazı nanoyapıları diğer temel metal oksitlere göre daha zayıf tutmalarıdır (MORI 1991). KNT'nin hidrojenlenmiş Si(100) yüzeyinde tutunmasıyla ilgili yapılan deneysel çalışmalarda KNT'nin silisyuma zayıf tutunduğu gözlemlenmiştir (ALBRECHT 2003). Kuramsal çalışmalarda bağlanma enerjisi 0.1 eV/Å olarak hesaplanmıştır (LEE 2006). Dolayısıyla da seçilen pozisyona kontrollü olarak yapıştırmak işi zorlaşmaktadır. Nanotopaklar ve nanoteller için bazı sentez yöntemleri geliştirilmiş olsa dahi nanotüpler için henüz bu zor bir problem olarak durmaktadır (HUANG 2001, CUI 2004, AUVRAY 2005). Silisyumun ve silikanın bu handikaplarının üstesinden gelmek üzere alternatif olarak yüksek dielektrik sabitine ve geniş band aralığına sahip yarıiletken metal oksit yüzeyleri düşünülmektedir. Titanya bu tip malzemelerin en göze çarpanlarından biridir. Ancak bilgimiz dahilinde, nanotüplerin titanya yüzeylerinde tutunmasını inceleyen yayınlanmış kuramsal bir sonuç henüz bulunmamaktadır. Bu projede, bu yönde yoğunluk fonksiyoneli hesaplarına dayalı çalışmalar ilk kez yapılmıştır.

Titanya bu potansiyel alanın yanında başlıca iki teknolojik konuda daha jenerik malzeme olarak kullanılmaktadır. Bunlardan biri fotokataliz diğeri de organik güneş pilleridir. Titanyanın karbon nanotüplerle buluşması Grätzel tipi güneş pillerinde de çalışılmaktadır. Bu pillerde ayrıca titanya yüzeyine ışık hasatlayıcı boya molekülleri de sürülmektedir. Bu moleküllerin görünür ışığı soğurması sonucu uyarılan elektronun rekombinasyona uğramadan hızlı bir şekilde titanya'ya enjekte edilmesinde karbon nanotüplerin işe yaradığı görülmüştür. Ancak, pil yapımı sırasında karbon nanotüpün üzerine titanya toprakları büyütülmektedir, bunun ise kuramsal modellenmesi zordur. Dolayısı ile bu projede titanya yüzeyine karbon nanotüp, boya molekülü, Pt ve Au gibi değerli metal atomları, ve Pt<sub>n</sub> ve Au<sub>n</sub> toprakları konarak her biri için bağ yapma koşulları irdelenmiş ve kuvvetli bağ yapanların yapısal ve elektronik özellikleri incelenmiştir.

Titanya doğada temel olarak üç değişik fazda bulunmaktadır. Bunlar anataz, rutil ve brukit fazlarıdır. Ticari olarak temin edilebilen titanya örnekleri anataz ve rutil fazlarının bir karışımı olmasına rağmen çoğunlukla anataz fazı baskındır ve katalitik özellikleri açısından daha aktif yüzeylere sahiptir. Diğer yandan rutil yüzeyinin (110) faseti en düşük enerjiye sahip olması bakımından titanyanın en kararlı yüzeyidir. Bu projede özellikle anataz (001), (100), ve rutil (110) yüzeyleri ile rutil (110) yüzeyi gözönüne alınmıştır. Ayrıca bu yüzeylerin stokiyometrik, indirgenmiş ve yeniden-yapılanmış formları ayrı ayrı denenmiştir.

## Gereç ve Yöntem:

Bu projede yapılan hesaplamalar için VASP ab initio simülasyon paketi kullanılmıştır (KRESSE 1993, 1994, 1996a, 1996b). Bu paket programda yoğunluk fonksiyonelleri teorisi çerçevesinde, PAW, izdüşümsel-uzatılmış düzlem dalga-fonksiyonlarından (BLÖCHL 1994, KRESSE 1999), elektron–iyon etkileşmeleri için potansiyelimsilerden (pseudopotential) yararlanılmıştır. Değiş–tokuş ve korelasyon etkileşmeleri için ise Perdew ve arkadaşlarının geliştirdiği yaklaşım tercih edilmiştir (PERDEW 1981, 1992). Yapay olarak yapılanmış periyodik süper hücre olarak atomik tabakalar ve boşluktan oluşan bir yapı gözönüne alınmıştır. Monkhorst–Pack tipi gridleme yöntemi ile k-noktaları tayin edilmiş (MONKHORST, 1976) ve kendi içinde tutarlı çözümlere ulaşılmıştır.

## Referanslar:

- ALBRECHT P. M. and Lyding J. W., *Appl. Phys. Lett.* **83**, 5029 (2003).  
AUVRAY S., Derycke V., Goffman M., Filoramo A., Jost O., and Bourgoin J. P.,  
*Nano Lett.* **5**, 541 (2005).  
BLÖCHL P. E., *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).  
CHOI H. K. et al. (Eds.), *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **116**, 369, (1988).  
CUI Y., Bjork M. T., Liddle J. A., Sonnichsen C., Boussert B., and Alivisatos A. P.,  
*Nano Lett.* **4**, 1093 (2004).  
HUANG Y., Duan X., Wei Q., and Lieber C. M., *Science* **291**, 630 (2001).  
ISHIWARA H. and Azuma K., “*Heteroepitaxy on Silicon: Fundamentals, Structures, and Devices*”.  
KLINKE C., Hannon J. B., Afzali A., and Avouris P., *cond-mat*. 0611051, 2 November 2006.  
KRESSE G., and Hafner J., *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).  
KRESSE G., and Hafner J., *Phys. Rev. B* **49**, 14251 (1994).  
KRESSE G. and Furthmüller J., *Comp. Mat. Sci.* **6**, 15 (1996).  
KRESSE G. and Furthmüller J., *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).  
KRESSE G., and Joubert D., *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).  
LEE J-Y. and Cho J-H., *Appl. Phys. Lett.* **89**, 023124 (2006).  
MONKHORST H. and Pack J., *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).  
MORI H. and Ishiwarra H., *Jpn. J. Appl. Phys.* **30**, L1415 (1991).  
PERDEW J. P. and Zunger A., *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).  
PERDEW J. P., Chevary J. A., Vosko S. H., Jackson K. A.,  
Pederson M.R., Singh D. J., Fiolhais C.,  
*Phys. Rev. B* **46**, 6671 (1992).

## Bulgular:

Projede yapılması planlanan çalışmaların hemen hepsi yapılmış, ve bunların da çoğu prestijli dergilerde yayınlanmıştır. Bitmiş hali ile titanya'ya katkılanan değişik sistemlerin incelendiği projeyi şu üç ana başlık altında gruplayabiliriz:

### Atom ve atom topakları

1. Anataz (001)  $1 \times 1$  ve  $2 \times 2$  yüzeylerinde ve yüzeyaltında örgü noktalarına ve örgü boşluklarına Pt atomu katkılanması (Ekler: M1, S4).
2. Anataz (001)  $1 \times 1$  ve  $2 \times 2$  yüzeylerinde, ve yüzeyaltında örgü noktalarına ve örgü boşluklarına Au atomu ve dimeri katkılanması (Ekler: M2, S4, P2).
3. Rutil (110)  $1 \times 1$  ve  $2 \times 2$  yüzeylerinde ve yüzeyaltında örgü noktalarına ve örgü boşluklarına Pt ve Au atomu katkılanması (S2).
4. Rutil (110)  $1 \times 2$  ve  $4 \times 2$  yüzeylerinde  $Pt_n$  ( $n=1-4$ ) atom topaklarının tutunması (Ekler: M4).
5. Anataz (100)  $1 \times 1$  yüzeyinde  $Au_n$  ( $n=1-3$ ) atom topaklarının ve tellerinin tutunması (Ekler: T3, P5).
6. Anataz (100) nanodüzleminde (nanosheet), özellikle lepidokrosit'de  $Au_n$  ( $n=1-3$ ) atom topaklarının ve tellerinin tutunması (Ekler: T4).

### Organik moleküller

7. Anataz (001)  $2 \times 2$  yüzeyinde (1-5 benzen halkalı) aromatik moleküllerin formik ve fosfonik asit çıparları ile tutunması (Ekler: T1).
8. Rutil (110)  $3 \times 1$  yüzeyinde (1-5 benzen halkalı) aromatik moleküllerin formik ve fosfonik asit çıparları ile tutunması (Ekler: T2, P6).
9. Anataz (001)  $1 \times 1$  ve  $1 \times 4$  yüzeylerinde perilen bazlı üç boya molekülünün tutunması (Ekler: M3, S1, S5, P1).
10. Rutil (110)  $1 \times 1$  ve  $2 \times 2$  yüzeylerinde perilen bazlı üç boya molekülünün tutunması (Ekler: M6, S3, S5).

### Nanotüpler

11. Tek-duvarlı anataz (001) nanotüplerinin yapısal özellikleri (Ekler: T4).
12. Rutil (110)  $1 \times 2$  yüzeyinde tek-duvarlı karbon nanotüp tutunması (Ekler: M7, T5, P3, P4, P7, P8, P10).



13. Rutil (110) 1×2 yüzeyinde çift-duvarlı karbon nanotüp tutunması (Ekler: M5, P12).
14. Rutil (110) 1×2 yüzeyinde içi Pt ile katkılanmış tek-duvarlı karbon nanotüp tutunması (Ekler: P13).
15. Rutil (110) 1×2 yüzeyinde tek-duvarlı GaN nanotüp tutunması (Ekler: S7, P9, P15).
16. Rutil (110) 1×2 yüzeyinde tek-duvarlı BN nanotüp tutunması (Ekler: P11, P14).

### Sonuçlar ve Tartışma:

Yukarıda listelenmiş 16 sistem için ilk-prensip hesaplamalarla toplam enerjisi en düşük dolayısı ile en kararlı geometriler saptandı. Bağ uzunluklarındaki ve bağlararası açılardaki değişiklikler, yeniden yapılanmalar, bağ enerjilerinin görece değerleri ve kimyasal özellikleri incelendi. Yapısal özelliklerin yanısıra, elektronik enerji band yapıları, katkılamamanın özellikle yasak band aralığında oluşturduğu değişiklikler, bandlara karşılık gelen yerel elektron durum yoğunlukları, ve elektron yük yoğunluklarının ilgili atomlardaki yeni dağılımları elde edildi, ve literatürdeki diğer kuramsal ve deneysel sonuçlarla uyumlu oldukları görüldü.

Hesaplamalarda genellikle VASP veya PWSCF programları kullanılarak DFT kuramı çerçevesinde yerine göre LDA veya GGA yöntemi seçildi. Yukarıda 4, 6, ve 11. no'lu sistemlerin çözümünde LDA+U yöntemi uygulandı. Özellikle 4. no'lu çalışmada uyarılmış elektron durumlarının doğru tasvirleri için TDDFT yöntemi uygulanmış, spin-polarize etkiler de göz önüne alınarak ilk kez yeniden yapılanmış temiz rutil (110) yüzeyinin metalik olmadığı gösterilmiştir. Aynı çalışmada bu yüzeye Pt topakları konulmuş olmasına rağmen Pt<sub>4</sub> için bile yüzeyin hala yarıiletken kalabildiği anlaşılmıştır.

Anataz yüzeyinin çeşitli fasetleri ile nanodüzlemi üzerine Au topakları veya tellerinin tutunması sonucu oluşan kararlı sistemlerin elektronik özellikleri ilk kez çalışılmıştır.

Gerek karbon nanotüplerin, gerekse GaN ve BN nanotüplerin çeşitli düzendeki rutil (110) yüzeylerine (stokiyometrik, indirgenmiş, ve yeniden-yapılanmış “added-row” model) tutunmadıkları, ancak “added-row” model yüzeyin daha da indirgenmesi sonucu ortaya çıkan oksijen fakiri yüzeye oldukça sağlam bağlar yaptıkları bulunmuştur. Ayrıca içiçe ikili KNT ile içine Pt nanoteli konmuş KNT'ün de rutil yüzeyine tutunması yapısal ve elektronik özellikleri bakımından incelenmiştir.

Aromatik halkalı organik moleküller olan benzen (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>), naftalin (C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>), antrasen (C<sub>14</sub>H<sub>10</sub>), tetrasen (C<sub>18</sub>H<sub>12</sub>), ve pentasen (C<sub>22</sub>H<sub>14</sub>) gibi basit moleküllerin titanya yüzeylerine ancak bir karboksil grubu veya benzer asitlerin çıpalaması sayesinde bağ yaptıkları görülmüş, elektronik band yapısının benzen halkası sayısı ile nasıl değiştiğine bakılarak bir trend gözlenmeye çalışılmıştır.

Anataz ve rutil yüzeylerine perylene tabanlı PDI, PDI+BrGly, ve PDI+BrAsp boya molekülleri tutunması çalışılarak elektronik ve yapısal özellikleri incelenmiştir.

## **EKLER:**

### **Uluslararası dergilerde yayınlanan makaleler:**

- M1. "Pt-incorporated anatase TiO<sub>2</sub>(001) surface for solar cell applications"  
E. Mete, D. Uner, O. Gulseren, Ş. Ellialtıođlu  
Phys. Rev. B **79**, 125418 (2009).
- M2. "Modification of TiO<sub>2</sub>(001) surface electronic structure by Au impurity"  
E. Mete, O. Gülseren, and Ş. Ellialtıođlu  
Phys. Rev. B **80**, 035422 (2009).
- M3. "Dye adsorbates BrPDI, BrGly, and BrAsp on anatase TiO<sub>2</sub>(001) surfaces for dye-sensitized solar cell applications"  
D. Çakır, O. Gülseren, E. Mete, and Ş. Ellialtıođlu  
Phys. Rev. B **80**, 035431 (2009).
- M4. "Theoretical analysis of small Pt particles on rutile TiO<sub>2</sub>(110) surfaces"  
Veysel Çelik, Hatice Ünal, Ersen Mete, and Şinasi Ellialtıođlu  
Phys. Rev. B **82**, 205113 (2010).
- M5. "Armchair Double-Walled Carbon Nanotube On Rutile TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2)"  
Ceren Tayran, Mehmet Çakmak, and Şinasi Ellialtıođlu  
Fizika **2**, 126 (2010).
- M6. "Interaction of BrPDI, BrGly, and BrAsp with the rutile TiO<sub>2</sub> (110) surface for photovoltaic and photocatalytic applications: a first-principles study"  
D. Çakır, O. Gülseren, E. Mete, and Ş. Ellialtıođlu  
J. Phys. Chem. C **115**, 9220 (2011).
- M7. "Electronic and structural properties of armchair SWCNT/TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2) system"  
C. Tayran, M. Çakmak, and Ş. Ellialtıođlu  
Surf. Sci. **605**, 593 (2011).

### **Uluslararası toplantılarda sözlü sunumlar:**

- S1. D. Çakır, O. Gülseren\*, E. Mete, and Ş. Ellialtıođlu  
"Adsorption of BrPDI, BrGly, and BrAsp on Anatase TiO<sub>2</sub>(001) Surface for Dye-sensitized Solar Cell Application"  
International Workshop on Advanced Materials and Devices for Photovoltaic Applications  
NANOMAT2008, METU, April 24–25, 2008. Abstract book p.20.
- S2. E. Mete\*, O. Gülseren, M. Çakmak, and Ş. Ellialtıođlu  
"Activation of rutile TiO<sub>2</sub>(110) by precious metal implantation for solar cell application"  
NanoTR IV, İTÜ, İstanbul, 2008. Abstract book p.106.
- S3. D. Çakır\*, O. Gülseren, E. Mete, and Ş. Ellialtıođlu  
"Adsorption of BrPDI, BrGly, and BrAsp on Rutile TiO<sub>2</sub>(110) Surface for Dye-sensitized Solar Cell Application"  
Nano TR IV, İTÜ, İstanbul, 2008. Abstract book p.172.

- S4. E. Mete, O. Gülseren, and, Ş. Ellialtıođlu\* (çađrılı konuřma)  
“Activation of titania by precious metal incorporation for solar cell applications”  
VI. Symposium on Renewable Energies,  
Güneř Enerjisi Enstitüsü, Ege Üniversitesi, İzmir, 9–11 Ekim 2008.  
Bildiri kitabı, sayfa 36–38.
- S5. E. Mete\*, D. Çakır, O. Gülseren, and Ş. Ellialtıođlu  
"Perylene based dyes on TiO<sub>2</sub> for solar cell applications"  
26th European Conference on Surface Sciences  
ECOSS26, Parma, Italy, August 30 – Sept. 4, 2009.
- S6. Ş. Ellialtıođlu (çađrılı konuřma)  
"DFT calculations towards improved DSSCs"  
International Workshop on nanomaterials and nanotechnology for renewables,  
METU, Ankara, November 16–18, 2009.
- S7. N. Akın, M. Çakmak, and Ş. Ellialtıođlu  
“Rutil TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2) Yüzeyine Koltuk Tipi Tek-Duvarlı GaN Nanotüplerin Tutunması”  
NABITEK2010, 20–23 Haziran 2010, İstanbul.

Uluslararası toplantılarda poster sunumları:

- P1. D. Çakır, O. Gülseren\*, E. Mete, and Ş. Ellialtıođlu  
"Adsorption of BrPDI, BrGly, and BrAsp on Anatase TiO<sub>2</sub>(001) Surface for  
Dye-sensitized Solar Cell Application"  
25th European Conference on Surface Sciences  
ECOSS25, Liverpool UK, 28 July–1 Aug 2008.
- P2. E. Mete, M. Çakmak, O. Gülseren\*, and Ş. Ellialtıođlu  
“Electronic structure of Au-implanted TiO<sub>2</sub> surfaces”.  
25th European Conference on Surface Sciences  
ECOSS25, Liverpool UK, 28 July–1 Aug 2008.
- P7. Ceren Tayran\*, Mehmet Cakmak, and Şinasi Ellialtıođlu  
"Electronic properties of carbon nanotubes adsorbed on reconstructed rutile  
TiO<sub>2</sub>(110) surface: A DFT study"  
26th European Conference on Surface Sciences  
ECOSS26, Parma, Italy, August 30 – Sept. 4, 2009.
- P8. C. Tayran\*, M. Çakmak, and Ş. Ellialtıođlu  
"Electronic properties of carbon nanotubes adsorbed on reconstructed rutile  
TiO<sub>2</sub>(110)-1x2 surface"  
NanoTR–V, Anadolu Üniversitesi, Eskiřehir, 08–12 Haziran 2009.
- P11. M. Biçen, M. Çakmak, and Ş. Ellialtıođlu  
“BN nanotüpünTiO<sub>2</sub> yüzeyine tutunması: Yapısal ve elektronik özellikleri”  
NABITEK2010, 20–23 Haziran 2010, İstanbul.
- P12. C. Tayran\*, M. Çakmak, and Ş. Ellialtıođlu  
“Armchair Double-Walled Carbon Nanotube On Rutile TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2)”  
The 17th International Conference on Ternary and Multinary Compounds  
ICTMC-17 Sept. 28–30, Baku, 2010.

Ulusal toplantıda poster sunumu:

- P3. C. Tayran, M. Çakmak, and Ş. Ellialtıođlu  
"Structural and electronic properties of carbon nanotubes on the rutile TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2) surface".  
TFD25, Bodrum, 25–29 Ağustos 2008.
- P4. C. Tayran, M. Çakmak, E. Mete, ve Ş. Ellialtıođlu  
"Rutil TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2) yüzeyi üzerindeki Karbon Nanotüp'ün yapısal ve elektronik özellikleri".  
YMF15, Bilkent Üniversitesi, 7 Kasım 2008. Bildiri Kitabı, sayfa P49.
- P5. K. B. Vural, E. Mete, ve Ş. Ellialtıođlu  
"Altın Öbeklerinin Anataz TiO<sub>2</sub>(100), (001), ve (101) Yüzeylerine bağlanması".  
YMF15, Bilkent Üniversitesi, 7 Kasım 2008. Bildiri Kitabı, sayfa P56.
- P6. M. Mesta, E. Mete, ve Ş. Ellialtıođlu  
"Rutil TiO<sub>2</sub>(110) yüzeyinde SO<sub>2</sub> tutunması".  
YMF15, Bilkent Üniversitesi, 7 Kasım 2008. Bildiri Kitabı, sayfa P59.
- P9. N. Akın, M. Çakmak, ve Ş. Ellialtıođlu  
"TiO<sub>2</sub> destekli nanoyapıların ve yüzeylerin yapısal ve elektronik özellikleri"  
16.ncı Yođun Madde Fiziđi - Ankara Toplantısı,  
YMF16, Gazi Üniversitesi, Ankara, 6 Kasım 2009. Özet Kitabı, sayfa P27.
- P10. C. Tayran, M. Çakmak, ve Ş. Ellialtıođlu  
"Rutil TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2) yüzeyine tutunmuş karbon nanotüpün elektronik özellikleri"  
16.ncı Yođun Madde Fiziđi - Ankara Toplantısı,  
YMF16, Gazi Üniversitesi, Ankara, 6 Kasım 2009. Özet Kitabı, sayfa P48.
- P13. C. Tayran, M. Çakmak, ve Ş. Ellialtıođlu  
"Rutil TiO<sub>2</sub> Yüzeyi Üzerinde İçi Platin Katkılanmış Karbon Nanotüp Tutunması"  
17.nci Yođun Madde Fiziđi - Ankara Toplantısı,  
YMF17, Ankara Üniversitesi, Ankara, 5 Kasım 2010. Özet Kitabı, sayfa P10.
- P14. M. Biçen, M. Çakmak, ve Ş. Ellialtıođlu  
"BN nanotüpünTiO<sub>2</sub> yüzeyine tutunması: Yapısal ve elektronik özellikleri"  
17.nci Yođun Madde Fiziđi - Ankara Toplantısı,  
YMF17, Ankara Üniversitesi, Ankara, 5 Kasım 2010. Özet Kitabı, sayfa P37.
- P15. N. Akın, M. Çakmak, ve Ş. Ellialtıođlu  
"Rutil TiO<sub>2</sub>(110)-(1×2) Yüzeyine Koltuk Tipi Tek-Duvarlı GaN Nanotüplerin Tutunması"  
17.nci Yođun Madde Fiziđi - Ankara Toplantısı,  
YMF17, Ankara Üniversitesi, Ankara, 5 Kasım 2010. Özet Kitabı, sayfa P52.

Yüksek Lisans Tezleri:

- T1. "Electronic Properties of Dye Molecules Adsorbed on Anatase-Titania Surface for Solar Cell Applications"  
Engin Torun, METU August 2009.
- T2. "Adsorption of Aromatic Molecules on Rutile TiO<sub>2</sub>(110) Surfaces"  
Murat Mesta, METU September 2009.
- T3. "Adsorption of Gold Atoms on Anatase TiO<sub>2</sub>(100)-1×1 Surface"  
Kıvılcım Başak Vural, METU September 2009.
- T4. "Density Functional Theory Investigation of TiO<sub>2</sub> Anatase Nanosheets"  
Sibel Ceren Sayın, METU September 2009.
- T5. "Titanya Yüzeyine Karbon Nanotüp Tutunması: Yapısal ve Elektronik Özellikleri"  
Ceren Tayran, Gazi Üniversitesi, Aralık 2009.
- T6. "Titanya Yüzeyine Galyum Nitrür Nanotüp Tutunması: Yapısal Ve Elektronik Özellikler"  
Nihan Akın, Gazi Üniversitesi, Aralık 2010.
- T7. "BNNT/TiO<sub>2</sub>(110) Sistemlerinin Yapısal ve Elektronik Özellikleri"  
Merve Biçen, Gazi Üniversitesi, Haziran 2011.

**TÜBİTAK  
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU**

<b>Proje No:</b> 107T560
<b>Proje Başlığı:</b> Titanya destekli nanoyapıların ve yüzeylerin yapısal ve elektronik özellikleri
<b>Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar:</b> Prof.Dr. Şinasi ELLİALTIOĞLU, Prof.Dr. Mehmet ÇAKMAK, ve Doç.Dr. Ersen METE
<b>Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:</b> O.D.T.Ü., Fizik Bölümü, Ankara 06531
<b>Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:</b> —
<b>Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:</b> 01.10.2007 – 30.09.2010
<b>Öz (en çok 70 kelime)</b> Bu projede titanya ve yüzeyleri hakkında şimdiye kadar yapmış olduğumuz çalışmaların devamı olarak, rutil (110) ve anataz (001) yüzeyleri gözönüne alınmış, ve bu yüzeylere tutunmuş, nüfuz etmiş, veya çıpalanmış değerli metal atomların, atom topaklarının, ve ışık-hasatlayıcı özellikleri ile fotokataliz olayında önemli etkinlik sağlayan moleküllerin yüzeyle etkileşimleri ve fotokatalizdeki rollerinin belirlenebilmesine yol açabilecek hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Daha sonra ise aynı yüzeylere önce karbon sonra da galyum-nitrit ve boron-nitrit nanotüplerinin tutunması ile ilgili yapısal ve elektronik özelliklerin incelendiği ilk-prensip hesaplar yapılmıştır.
<b>Anahtar Kelimeler:</b> Titanya, anataz, rutil, güneş pili, kataliz, ab initio DFT model, adsorpsiyon.
<b>Fikri Ürün Bildirim Formu</b> Sunuldu mu? Evet <input type="checkbox"/> Gerekli Değil <input checked="" type="checkbox"/>
<small>Fikri Ürün Bildirim Formu'nun tesliminden sonra 3 ay içerisinde patent başvurusu yapılmalıdır.</small>

**Projeden Yapılan Yayınlar:**

7 yurtdışı makale, 7 uluslararası sözlü sunum, 6 uluslararası poster sunumu,  
9 yurtiçi poster sunumu, 7 Yüksek Lisans Tezi.