



**Prof. Dr. Çetin  
KILIÇ**

Temel Bilimler Fakültesi  
Fizik Bölümü



#### İlgili Alanları

Atomistik malzeme tasarımı,  
Hesaplama malzeme bilimi,  
Temiz ve yenilenebilir enerji  
malzemeleri, ilk prensiplere  
dayalı hesaplamlar,  
Elektronik yapı teorisi



**Destekleyen Kurum**  
TÜBİTAK



**Sunulma Tarihi**  
2010 / 2013



**Süre**  
37 Ay



**Bütçe**  
157.750 TL

## KUANTUM BENZERLİĞİNE DAYALI NANOMALZEME TASARIM METODOLOJİSİ

Bu projede kuantum benzerliği kavramına dayalı olarak bir hesaplama tasarımlı tasarım metodolojisi geliştirilmiş ve nanokristal, nanoalaşım ve nanobileşiklere uygulanmıştır. İlk olarak, atomistik malzeme tasarımda kullanılan enerji farkları ve kuantum benzerlik ölçütleri arasında bir bağlantı kurulmuştur. Bir sistemin atomlarının uygun bir veritabanında içeren sistemlerin atomlarına olan

benzerliklerine dayalı olarak o sistemin toplam enerjisinin hesaplanması sağlayan bir yöntem geliştirilmiştir. Büyüklüğe, şeke ve kompozisyon'a bağlı nanokristal enerjetiği araştırılmıştır. Hedeflenen özelliklerde olan nanokristal, nanoalaşım ve nanobileşiklerin tasarımda benzerlik-tabanlı enerji farklarının kullanılabileceği gösterilmiştir.



### HEDEFLENEN ÇİKTILAR

- Bir sistemin atomlarının uygun bir veritabanında içeren sistemlerin atomlarına olan benzerliklerine dayalı olarak o sistemin toplam enerjisinin hesaplanması sağlayan bir yöntem geliştirilmesi
- C, Si, Pd, Pt nanokristallerinin, Pt-Pd nanoalaşımının ve Pt-C nanobileşiklerinin büyülüğe, şeke ve kompozisyon'a bağlı enerjetiği için, ilk-prensip hesaplamaları vasıtasi ile, bir veritabanı hazırlanması
- Hedeflenen özelliklerde olan nanomalzeme tasarımda benzerlik-tabanlı enerji farklarının kullanılması



### AMAÇLAR

- Kuantum benzerliği kavramına dayalı olarak bir hesaplama tasarımlı tasarım metodolojisi geliştirilmesi
- Atomistik malzeme tasarımda kullanılan enerji farkları ile kuantum benzerlik ölçütleri arasındaki bağlantının keşfedilmesi
- C, Si, Pd, Pt nanokristallerinin, Pt-Pd nanoalaşımının ve Pt-C nanobileşiklerinin büyülüğe, şeke ve kompozisyon'a bağlı enerjetiğiinin araştırılması
- Hedeflenen özelliklere sahip olan nanomalzeme tasarımları için benzerlik-tabanlı enerji farklarının nasıl kullanılabileceğini ortaya konulması

