

**T.C.**  
**AHI EVRAN ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TİTANYUM, MANGAN VE KROM KATKILI BOR**  
**ATOM TOPAKLARININ ELEKTRONİK VE YAPISAL**  
**ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYON**  
**TEORİSİ (DFT) İLE İNCELENMESİ**

**Mikail Dođuş KARAKAŞ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**KIRŞEHİR 2013**

**T.C.**  
**AHI EVRAN ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TİTANYUM, MANGAN VE KROM KATKILI BOR**  
**ATOM TOPAKLARININ ELEKTRONİK VE YAPISAL**  
**ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYON**  
**TEORİSİ (DFT) İLE İNCELENMESİ**

**Mikail Dođuş KARAKAŞ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN**  
**Doç. Dr. Yusuf ERDOĐDU**

**KIRŞEHİR 2013**

**Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü'ne**

Bu çalışma jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Doç. Dr. Abdullah YILDIZ

Üye: Doç. Dr. Ömer DERELİ

Üye: Doç. Dr. Yusuf ERDOĞDU

Üye: Yrd. Doç. Dr. M. Tahir GÜLLÜOĞLU

Üye: Yrd. Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN

**Onay**

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

.../.../2013

Doç. Dr. Mahmut YILMAZ  
Enstitü Müdürü

## ÖZ

### TİTANYUM, MANGAN VE KROM KATKILI BOR ATOM TOPAKLARININ ELEKTRONİK VE YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ (DFT) İLE İNCELENMESİ

Mikail Dođuş KARAKAŞ

Bu alıřmada, Saf Bor Atom Topaklarının ile Titanyum (Ti), Mangan (Mn) ve Krom (Cr) katkılı Bor Atom topaklarının  $n \leq 7$ 'e kadar elektronik ve yapısal özellikleri incelendi. Bu hesaplamalar Yođunluk Fonksiyon Teorisi (DFT/B3LYP fonksiyoneli) yardımıyla GAUSSIAN 09 programı kullanılarak yapıldı. İlk olarak her atom topađının farklı geometrik yapıları CEP-121G temel seti kullanılarak optimize edildi. Hesaplamalarda farklı bařlangı geometripleri iin herhangi bir simetri kısıtlaması olmaksızın alıřmalar yapıldı. Bu hesaplamalar ntr ve iyon atom topakları iin yapıldı. Bu hesaplama sonularındaki belirlenen kararlı geometrik yapılar 6-311G++ (d,p) temel seti kullanılarak tekrar optimize edildi. Son olarak bu hesaplamalar sonucunda en kararlı yapılar belirlendi. Bu yapıya cc-pVDZ temel seti ile tekrar optimizasyon iřlemi yapıldı.

**Anahtar Kelimeler:** Atom Topakları, Nano Topaklar, Bor Atom Topakları, BTi, BMn, BCr, DFT, B3LYP

## ABSTRACT

### INVESTIGATIONS OF ELECTRONIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF TITANIUM, MANGANESE AND CHROMIUM DOPED BORON ATOM CLUSTERS BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)

Mikail Dođuş KARAKAŞ

In this study, the electronic and structural properties of Pure boron atom clusters with Titanium, Manganese and Chromium doped Boron Atom cluster up to 7 atoms was investigated. This calculations was performed by means of Density Functional Theory (DFT/B3LYP functional) in Gaussian 09 software. Firstly, different geometrical structure of the every atom cluster was optimized by CEP-121G basis set. Calculations are carried out without any symmetry restrictions for different starting geometries. This calculations was performed for neutral and ionic atom clusters. Results of this calculations, the low-lying candidate structures were then fully re-optimized at the B3LYP/6-311++G(d,p) level. According to the our calculations, the most stable structures were determined. Finally, optimization calculations of this geometry carried out again.

**Keywords:** Atomic Clusters, Nano Clusters, Bor Atom Clusters, BTi, BMn, BCr, DFT, B3LYP

## TEŐEKKÖR

Bu tezin hazırlanması sırasında yardım ve desteęini esirgemeyen tez danıőmanım Doę. Dr. Yusuf ERDOęDU'ya ve ikinci danıőmanım Yrd. Doę. Dr. M. Tahir GÖLLÖOęLU'na teőekkÖr ederim.

Ayrıca FakÖlte Dekanımız Prof. Dr. Mustafa KURT'a, BÖlÖm Baőkanımız Doę. Dr. Sıtkı EKER'e, bana maddi ve manevi yardımcı olan Yrd. Doę. Dr. HÖlyla ÖZTÖRK'e, ve dięer bÖlÖm hocalarıma teőekkÖrÖ bir borę bilirim.

Çalıőmalarım boyunca bana destek olan deęerli arkadaőım Dilek ÖNAL'a, son olarak birçok konuda olduęu gibi, tezimi hazırlamam esnasında da maddi ve manevi konularda yardımlarını esirgemeyen aileme sonsuz teőekkÖrlerimi sunarım.

# İÇİNDEKİLER DİZİNİ

Sayfa

<b>ÖZ</b> .....	<b>i</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>ii</b>
<b>TEŞEKKÜR</b> .....	<b>iii</b>
<b>İÇİNDEKİLER DİZİNİ</b> .....	<b>iv</b>
<b>TABLolar DİZİNİ</b> .....	<b>vi</b>
<b>ŞEKİLLER DİZİNİ</b> .....	<b>ix</b>
<b>SİMGELER VE KISALTMALAR</b> .....	<b>xi</b>
<b>1. GİRİŞ</b> .....	<b>1</b>
<b>2. MOLEKÜLER MODELLEME</b> .....	<b>6</b>
2.1. MOLEKÜLER MEKANİK METODLAR .....	6
2.2. ELEKTRONİK YAPI METODLARI.....	7
2.2.1. Yarı Deneysel Metotlar.....	8
2.2.2. <i>ab Initio</i> Metotları.....	8
2.3. KUANTUM MEKANİKSEL ENERJİ İFADELERİ VE YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ.....	10
2.3.1. Enerji Fonksiyonelleri.....	11
2.3.2. Karma Yoğunluk Fonksiyon Teorisi .....	11
2.3.3. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyon Teorisi .....	12
<b>3. GEOMETRİK OPTİMİZASYON</b> .....	<b>13</b>
3.1. MİNİMİZASYON YÖNTEMLERİ.....	13
3.2. GRADYENT (KUVVET) METODU .....	13
<b>4. TEMEL SETLER</b> .....	<b>19</b>
<b>5. MATERYAL METOT</b> .....	<b>21</b>
<b>6. BULGULAR VE TARTIŞMA</b> .....	<b>22</b>
6.1. ATOM TOPAKLARI .....	22
6.1.1. Saf Bor Atom Topakları .....	25
6.1.2. Katkılı Bor Atom Topakları.....	28
6.2. SAF BOR ATOM TOPAKLARI.....	30
6.2.1. B <sub>2</sub> Atom Topağı .....	30

6.2.2. B <sub>3</sub> Atom Topakları.....	31
6.2.3. B <sub>4</sub> Atom Topakları.....	32
Tablo 6.6 B <sub>4</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	33
6.2.4. B <sub>5</sub> Atom Topakları.....	34
6.2.5. B <sub>6</sub> Atom Topakları.....	36
6.2.6. B <sub>7</sub> Atom Topakları.....	38
<b>6.3. TİTANYUM KATKILI BOR ATOM TOPAKLARI.....</b>	<b>41</b>
6.3.1. BTi Atom Topağı.....	41
6.3.2. B <sub>2</sub> Ti Atom Topakları.....	42
6.3.3. B <sub>3</sub> Ti Atom Topakları .....	43
6.3.4. B <sub>4</sub> Ti Atom Topakları .....	46
6.3.5. B <sub>5</sub> Ti Atom Topakları .....	50
6.3.6. B <sub>6</sub> Ti Atom Topakları .....	55
<b>6.4. KROM KATKILI BOR ATOM TOPAKLARI.....</b>	<b>59</b>
6.4.1. BCr Atom Topağı .....	59
6.4.2. B <sub>2</sub> Cr Atom Topakları.....	60
6.4.3. B <sub>3</sub> Cr Atom Topakları.....	61
6.4.4. B <sub>4</sub> Cr Atom Topakları.....	64
6.4.5. B <sub>5</sub> Cr Atom Topakları.....	68
6.4.6. B <sub>6</sub> Cr Atom Topakları.....	74
<b>6.5. MANGAN KATKILI BOR ATOM TOPAKLARI.....</b>	<b>78</b>
6.5.1. BMn Atom Topağı.....	78
6.5.2. B <sub>2</sub> Mn Atom Topakları .....	79
6.5.3. B <sub>3</sub> Mn Atom Topakları .....	80
6.5.4. B <sub>4</sub> Mn Atom Topakları .....	83
6.5.5. B <sub>5</sub> Mn Atom Topakları .....	87
6.5.6. B <sub>6</sub> Mn Atom Topakları .....	92
<b>7. SONUÇ VE ÖNERİLER.....</b>	<b>97</b>
<b>8. KAYNAKLAR.....</b>	<b>98</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>	<b>109</b>



## TABLÖLAR DİZİNİ

<b>Tablolar</b>	<b>Sayfa</b>
Tablo 2.1 Enerji türevlerinden hesaplanabilen fiziksel büyüklükler .	9
Tablo 6.1 B <sub>2</sub> nötr atom topağının hesaplama verileri	30
Tablo 6.2 B <sub>2</sub> iyon atom topağının hesaplama verileri	30
Tablo 6.3 B <sub>3</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri	31
Tablo 6.4 B <sub>3</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri	31
Tablo 6.4 (devam) B <sub>3</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri	32
Tablo 6.5 B <sub>4</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri	32
Tablo 6.6 B <sub>4</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri	33
Tablo 6.7 B <sub>5</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri	34
Tablo 6.8 B <sub>5</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri	35
Tablo 6.8 (devam) B <sub>5</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri	36
Tablo 6.9 B <sub>6</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri	36
Tablo 6.9 (devam) B <sub>6</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri	37
Tablo 6.10 B <sub>6</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri	38
Tablo 6.11 B <sub>7</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri	38
Tablo 6.11 (devam) B <sub>7</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri	39
Tablo 6.12 B <sub>7</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri	40
Tablo 6.13 BTi nötr atom topaklarının hesaplama verileri	41
Tablo 6.14 BTi iyon atom topaklarının hesaplama verileri	41
Tablo 6.15 B <sub>2</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri	42
Tablo 6.16 B <sub>2</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri	43
Tablo 6.17 B <sub>3</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri	43
Tablo 6.17 (devam) B <sub>3</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri	44
Tablo 6.18 B <sub>3</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri	45
Tablo 6.19 B <sub>4</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri	46
Tablo 6.19 (devam) B <sub>4</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri	47
Tablo 6.20 B <sub>4</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri	49
Tablo 6.20 (devam) B <sub>4</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri	50
Tablo 6.21 B <sub>5</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri	50

Tablo 6.21 (devam) B <sub>5</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	51
Tablo 6.22 B <sub>5</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	53
Tablo 6.22 (devam) B <sub>5</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	54
Tablo 6.22 (devam2) B <sub>5</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	55
Tablo 6.23 B <sub>6</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	55
Tablo 6.23 (devam) B <sub>6</sub> Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	56
Tablo 6.24 B <sub>6</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	57
Tablo 6.24 (devam) B <sub>6</sub> Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	58
Tablo 6.25 BCr nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	59
Tablo 6.26 BCr iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	59
Tablo 6.27 B <sub>2</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	60
Tablo 6.28 B <sub>2</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	61
Tablo 6.29 B <sub>3</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	61
Tablo 6.29 (devam) B <sub>3</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	62
Tablo 6.30 B <sub>3</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	63
Tablo 6.31 B <sub>4</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	64
Tablo 6.31 (devam) B <sub>4</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	65
Tablo 6.32 B <sub>4</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	66
Tablo 6.32 (devam) B <sub>4</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	67
Tablo 6.33 B <sub>5</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	68
Tablo 6.33 (devam) B <sub>5</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	69
Tablo 6.34 B <sub>5</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	72
Tablo 6.34 (devam) B <sub>5</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	73
Tablo 6.35 B <sub>6</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	74
Tablo 6.35 (devam) B <sub>6</sub> Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	75
Tablo 6.36 B <sub>6</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	76
Tablo 6.36 (devam) B <sub>6</sub> Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	77
Tablo 6.37 BMn nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	78
Tablo 6.38 BMn iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	78
Tablo 6.39 B <sub>2</sub> Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	79
Tablo 6.40 B <sub>2</sub> Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	80
Tablo 6.41 B <sub>3</sub> Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	80

Tablo 6.41 (devam) $B_3Mn$ nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	81
Tablo 6.42 $B_3Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	82
Tablo 6.43 $B_4Mn$ nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	83
Tablo 6.43 (devam) $B_4Mn$ nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	84
Tablo 6.44 $B_4Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	85
Tablo 6.44 (devam) $B_4Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	85
Tablo 6.45 $B_5Mn$ nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	87
Tablo 6.45 (devam) $B_5Mn$ nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	87
Tablo 6.46 $B_5Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	90
Tablo 6.46 (devam) $B_5Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	91
Tablo 6.46 (devam2) $B_5Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	91
Tablo 6.47 $B_6Mn$ nötr atom topaklarının hesaplama verileri.....	92
Tablo 6.47 (devam) $B_6Mn$ nötr atom topaklarının hesaplama verileri .....	93
Tablo 6.48 $B_6Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri .....	95
Tablo 6.48 (devam) $B_6Mn$ iyon atom topaklarının hesaplama verileri.....	95

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekiller	Sayfa
Şekil 1.1 Atom Topaklarında Coulomb Patlaması (CP) olayının temsili gösterimi ....	4
Şekil 3.1 İki atomlu bir molekülde elektronik enerjinin atomlar arası mesafeye bağımlılığı .....	14
Şekil 3.2 İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi .....	17
Şekil 3.3 Potansiyel enerji eğrisindeki maksimum ve minimum noktaların karakteristiği (Burada g gradyant, k kuvvet sabitidir.) .....	18
Şekil 6.1 Basit bir atom topağının oluşum durumu .....	22
Şekil 6.2 (a) B <sub>6</sub> octahedron, (b) B <sub>12</sub> cuboctahedron ve (c) B <sub>12</sub> icosahedron atom topakları.....	25
Şekil 6.3 B <sub>2</sub> Atom Topağı .....	30
Şekil 6.4 B <sub>3</sub> Atom Topakları.....	31
Şekil 6.5 B <sub>4</sub> Atom Topakları.....	32
Şekil 6.5 (devam) B <sub>4</sub> Atom Topakları .....	33
Şekil 6.6 B <sub>5</sub> Atom Topakları.....	34
Şekil 6.6 (devam) B <sub>5</sub> Atom Topakları .....	35
Şekil 6.7 B <sub>6</sub> Atom Topakları .....	37
Şekil 6.8 B <sub>7</sub> Atom Topakları .....	39
Şekil 6.9 B <sub>Ti</sub> Atom Topağı.....	41
Şekil 6.10 B <sub>2</sub> Ti Atom Topakları .....	42
Şekil 6.11 B <sub>3</sub> Ti Atom Topakları .....	44
Şekil 6.12 B <sub>4</sub> Ti Atom Topakları .....	47
Şekil 6.12 (devam) B <sub>4</sub> Ti Atom Topakları .....	48
Şekil 6.13 B <sub>5</sub> Ti Atom Topakları .....	51
Şekil 6.13 (devam) B <sub>5</sub> Ti Atom Topakları .....	52
Şekil 6.13 (devam2) B <sub>5</sub> Ti Atom Topakları .....	53
Şekil 6.14 B <sub>6</sub> Ti Atom Topakları .....	56
Şekil 6.14 (devam) B <sub>6</sub> Ti Atom Topakları .....	57
Şekil 6.15 B <sub>Cr</sub> Atom Topağı .....	59
Şekil 6.16 B <sub>2</sub> Cr Atom Topakları.....	60

Şekil 6.17 B <sub>3</sub> Cr Atom Topakları.....	62
Şekil 6.18 B <sub>4</sub> Cr Atom Topakları.....	65
Şekil 6.18 (devam) B <sub>4</sub> Cr Atom Topakları .....	66
Şekil 6.19 B <sub>5</sub> Cr Atom Topakları.....	69
Şekil 6.19 (devam) B <sub>5</sub> Cr Atom Topakları .....	70
Şekil 6.19 (devam2) B <sub>5</sub> Cr Atom Topakları .....	71
Şekil 6.20 B <sub>6</sub> Cr Atom Topakları.....	75
Şekil 6.20 (devam) B <sub>6</sub> Cr Atom Topakları .....	76
Şekil 6.21 BMn Atom Topağı.....	78
Şekil 6.22 B <sub>2</sub> Mn Atom Topakları .....	79
Şekil 6.23 B <sub>3</sub> Mn Atom Topakları .....	81
Şekil 6.24 B <sub>4</sub> Mn Atom Topakları .....	84
Şekil 6.24 (devam) B <sub>4</sub> Mn Atom Topakları.....	85
Şekil 6.25 B <sub>5</sub> Mn Atom Topakları .....	89
Şekil 6.25 (devam) B <sub>5</sub> Mn Atom Topakları.....	90
Şekil 6.25 (devam2) B <sub>5</sub> Mn Atom Topakları.....	90
Şekil 6.26 B <sub>6</sub> Mn Atom Topakları .....	94
Şekil 6.26 (devam) B <sub>6</sub> Mn Atom Topakları.....	94

## SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar aşağıda sunulmuştur.

### Simgeler

### Açıklamalar

$E$	Molekülün toplam enerjisi
$E_{B3LYP}$	B3LYP Enerjisi
$E^C$	Korelasyon enerjisi
$E^X$	Değiş-tokuş enerjisi
$E^J$	Korelasyon enerjisi
$\hat{H}$	Hamiltoniyen işlemcisi
$\Psi$	Dalga fonksiyonu
$\Psi_i$	Moleküler orbital
$\Phi_i$	Atomik orbital
$\rho$	Elektron yoğunluğu

### Kısaltmalar

### Açıklamalar

<b>DFT</b>	Yoğunluk fonksiyon teorisi
<b>HF</b>	Hartree-Fock metodu
<b>B3LYP</b>	LYP korelasyon enerjili 3 parametreleri Becke-Lee-Yang karma metodu
<b>MINDO</b>	Modified Intermediate Neglect of Differential Overlap
<b>AM1</b>	Austin Model 1
<b>PM3</b>	Parameterized Model number 3
<b>MP2</b>	Möller-Plesset teorisi
<b>PES</b>	Potansiyel Enerji Yüzeyi

## 1. GİRİŞ

Atom kuramı kullanılmaya başlandıktan sonra maddenin davranışı üzerine birçok çalışma başlatılmıştır. İlk olarak 1930'lu yıllarda atomların ve moleküllerin özelliklerinin incelenmesiyle çekirdek fiziğinin ve parçacık fiziğinin gelişmesine katkı sağlamıştır. Bu yöndeki çalışmalar daha sonra yoğun madde çalışmalarının gelişmesini sağlamıştır. Teorik ve simülasyon teknikleriyle birlikte bilgisayarların hızla gelişmesiyle 1960'lardan itibaren topaklara ve özellikle metal topaklara olan ilginin hızla artmasını sağlamıştır. Bu nedenlerin en başında topakların nanoaletlerin parçası olarak kullanılması gelmektedir. Atom ve Molekül topaklar birbirine karakteristik olarak metalik, kovalent, iyonik, hidrojen bağı veya Van der Waals bağıyla bağlanmış sayısı birkaç atomdan binlerce atoma kadar çıkan sınırlı sayıdaki atom ve moleküllerin bir araya gelerek oluşturdukları topluluklardır. 1970'li yılların ardından bu çalışmalar atom ve molekül topakları olarak isimlendirilmiştir. Atom ve molekül topaklarının boyutları nanometre ölçeğinde yer aldığından nanobilim ve nanoteknolojinin ilgi alanına girmektedir. Bazı araştırmacılar topakları maddenin beşinci hali olarak tanımlamaktadır. Topaklar farklı şartlarda bir arada tutulan atom gruplarıdır. En yaygın tanımı ise topakların farklı bilim dallarını biraraya getiren sonlu yapılar olmasıdır [1-3].

Moleküllerden farklı olarak atom topakları yapıları ve içerdiği atomlar bakımından farklıdırlar. Moleküller belli bir yapıya ve atom grubuna sahiptirler. Ancak topaklar herhangi bir sayıda atom ve molekül yapısından oluşturulabilir. Bu nedenle atom topakları çeşitli şekillerde sınıflandırılabilirler. En önemli sınıflama ise atom sayılarına yani büyüklüklerine göre yapılır. Atom sayılarına göre topaklar beş gruba ayrılır [3-5]. Bunlar;

- 2 ile 10 atom içeren çok küçük mikro atom topaklar
- 10 ile 100 atom içeren küçük atom topaklar
- 100 ile 1000 atom içeren orta atom topaklar
- 1000 ile 10000 atom içeren büyük atom topaklar
- 100000 atomdan daha fazla içeren çok büyük atom topaklar

Topakların bazı fiziksel özellikleri uygun bir fonksiyon ile topakların büyüklükleri cinsinden ifade edilir. Bu ifadeler ya atom sayıları,  $N$  ya da topak küre yapısındaysa yarıçapı,  $R$  cinsinden tanımlanır. Küremsi atom topaklarını büyüklüklerine göre farklı bir şekilde daha sınıflandırılır. Atom topağındaki toplam atom sayısı  $N$  ile, küremsi yapıdaki atom topağının yarıçapı  $R$ , yüzey atomlarının sayısı  $N_s$ , hacim atomlarının sayısı da  $N_v$  ile gösterilir. Bu tür üç grupta sınıflandırılır [6]. Bunlar;

- Toplam atom sayısı 2 ile 20 arasında değişen veya çapı 1.1 nm den küçük olan yüzey ve hacim atomları ayırt edilemeyen çok küçük atom topaklar.
- Toplam atom sayısı 20 ile 500 arasında değişen veya çapı 1.1 ile 3.3 nm arasında olan veya yüzey atomlarının hacim atomlarına oranı 0.9 ile 0.5 arasındaki küçük atom topaklar.
- Toplam atom sayısı 500 ile 10 milyon arasında değişen veya çapı 3.3 ile 100 nm arasında veya yüzey atomlarının hacim atomlarına oranı 0.5'den küçük olan büyük atom topaklar.

Bu sınıflandırmadaki atom topaklarının toplam atom sayısı  $N$ ,  $N_s$  ve  $N_v$  'nin toplamına eşittir. Atom topaklarını içerdikleri atom cinsine göre sınıflandırılır [7-9].

Bunlar;

- Altın, Gümüş, Bakır, Alüminyum, Nikel, Sodyum gibi metal topaklar
- Karbon, Silisyum, Germanyum gibi yarıiletken topaklar
- Magnezyum oksit, Sodyum klorür gibi iyonik topaklar
- Helyum, Neon, Argon gibi asal gaz topaklar
- Su, Azot gazı, Hidrojen florür, Benzen gibi molekül topaklar

Topaklar ya serbest parçacıklar olarak yalıtılmış, parçacık demetleri halinde ya homojen olan veya homojen olmayan örgülerin içinde veya yüzeye yapışmış olarak, buhardan biriktirme, ya da nano parçacıklar olarak üretilebilirler. Atom topaklarının üretilmesinde başlıca iki yol vardır; ya atomlardan buharlaşma yöntemi ile



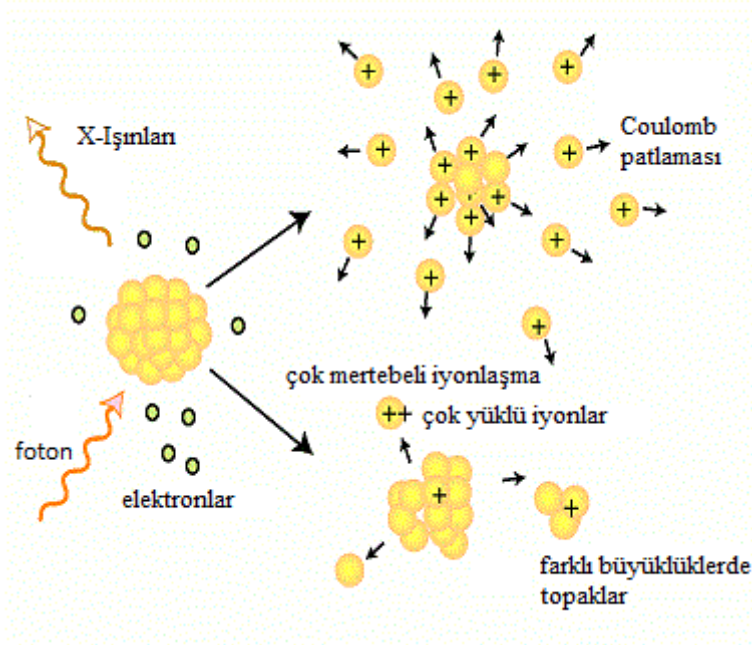
biriktirilerek ya da kristal yapıdan ufalayarak elde edilebilirler, aynen nano imalatta olduğu gibi. Topaklar elektron ve foton çarpışmaları ile incelenebilir. Demet yansıma yöntemleri de topakların tespit edilmesinde kullanılır. Özellikle küçük topakların hem deneysel olarak hem de kurumsal olarak çok sayıda araştırmacı tarafından incelenmesinin başlıca sebebi kataliz, kristal büyütme, fotoğrafçılık gibi alanlardaki olayların atom seviyesinde anlaşılmasına yardımcı olmasındandır [10,11].

Atom topaklarının, özellikle küçük topakların bazı özelliklerini şöyle ifade edebiliriz. Atom topaklarında bulunan atomlar kristal yapıdaki atomlardan farklı bir çevreye sahiptirler. Örnek olarak birinci komşu sayısı her zaman kristal yapıdaki gibi olmayarak daha az olabilir. Kristografi açısından ilginç bir şekilde kristal yapılarda beşgen geometri görülmezken topaklarda görülebilir. Elektronik uyarılmalar ve iyonlaşma özellikleri kristallerden çok farklıdır. Atom topaklarının bazı özellikleri topağın büyüklüğüne bağlıdır. Topaklardaki atom sayıları arttıkça değişimin fazla olması beklenirken, farklı fiziksel özellikler için farklı değişim eğrileri görülür. Topakların kararlılığı atomların bağlanma enerjileri ile ilişkilendirilmektedir. Enerji bakımından atom topakları zayıf etkileşimler (asal gaz topakları, molekül topakları) ve kuvvetli etkileşimler (birçok metal topakları) olarak ikiye ayrılır [12].

Bu yaklaşımlar kimyasal ve fiziksel yaklaşımlar arasında bir köprü işlevini görür. Kimyasal yaklaşımlarda molekül seviyesinde, birkaç atom büyüklüklerde inceleme yapılırken, fiziksel yaklaşımlarda kristal yapı seviyesinde incelemeler yapılır, çok sayıda atom dikkate alınır. Seçilen uygun bir fonksiyon ile topakların bağlanma enerjisi, iyonlaşma potansiyeli, erime sıcaklığı gibi birtakım fiziksel özellikleri topak büyüklüğüne bağlı olarak kolayca hesaplanabilir [13-15].

Bazı atom topaklarında artı yüklü metal topaklardan oluştukları için Coulomb Patlaması (CP) olarak bilinen ilginç bir özellik meydana gelebilir. Bu özellik aynı zamanda topağın kararlılığı hakkında bilgi vermektedir. Topaklardaki artı yük fazlalığı bazı durumlarda atomlar arasındaki çekici etkileşmeyi yenerek topak atomları bir arada durmakta zorlanır ve dağılır. Artı yük fazlalığı aslında elektron kaybı demektir [16-18].

Topaklar yüksek düzeyde iyonlaştırılırsa (elektron kopartılırsa) artı yükçe zenginleşirler. Bu durum topak üzerinde elektron azlığı oluşturacağından Coulomb patlamasına sebep olur (Şekil 1.1) [19].



Şekil 1.1 Atom Topaklarında Coulomb Patlaması (CP) olayının temsili gösterimi

Topaklar deneysel olarak üretilirken aynı zaman da birkaç çeşit inceleme yöntemi de beraberinde uygulanır. Örneğin, çok fotonlu iyonlaşma spektroskopisi süperonik akışkanlar içinde bulunan küçük topakların incelenmesinde kullanılır. Fotoelektron Spektroskopisi yöntemleri eksi yüklü küçük topakların incelenmesinde, elektron saçılma yöntemleri de topakların yapılarını incelemeye kullanılır. X- ışınları ile de yüzey üzerine konmuş topakların yapıları incelenebilir. Yüzeye konmuş topakları inceleme yöntemleri başlıca iki gruba ayrılır: Dar alanlı hassas yöntemler (taramalı-tünellemeli elektron mikroskopları gibi) geniş alanlı yöntemler ( X-ışınları spektroskopileri) gibi. Genellikle incelemeler bu yöntemlerin birkaçı birden kullanılarak incelemeler yapılmaktadır. Küçük topaklar genel olarak demet deneylerinde incelenir. Kütle spektroskopisi direkt olarak yapıları ve sağlamlıkları hakkında bilgi verir. Elektronik yapıları hakkındaki bilgiler de elektronik polarizasyon, manyetik moment, foto-iyonlaşma potansiyelleri ve ayrışma (dağılma) süreçlerinin ölçümlerinden elde edilir [20-23].

Atom topaklarının kuramsal olarak incelemesinde iki yaklaşım vardır. Birincisi küçük topakların yapıları ve elektronik özelliklerinin kuantum yöntemleri ile incelenmesidir. Diğer yaklaşım ise atom seviyesinde klasik mekanik kurallarına dayanan bilgisayar benzetişim yöntemleridir. Bu tür hesaplar Moleküler dinamik yöntemi, Monte Carlo yöntemi ve statik yöntem olarak üç gruba ayrılır. Benzetişim yöntemlerinin uygulanabilmesi için topaktaki atomlar arası etkileşimleri tanımlayan bir potansiyel enerji fonksiyonunun olması gerekir. Böyle bir fonksiyon elde etmek genellikle işin en zor ve önemli kısmını oluşturur. Literatürde birçok malzeme için tanımlanmış ve katsayıları tayin edilmiş potansiyel enerji fonksiyonu mevcuttur. Topaklar ya serbest parçacıklar olarak yalıtılmış, parçacık demetleri halinde ya homojen olan veya homojen olmayan örgülerin içinde veya yüzeye yapışmış olarak, buhardan biriktirme, ya da nano parçacıklar olarak üretilebilirler. Atom topaklarının üretilmesinde başlıca iki yol vardır; ya atomlardan buharlaşma yöntemi ile biriktirilerek ya da kristal yapıdan ufalayarak elde edilebilirler, aynen nano imalatta olduğu gibi. Topaklar elektron ve foton çarpışmaları ile incelenebilir. Demet yansıma yöntemleri de topakların tespit edilmesinde kullanılır. Özellikle küçük topakların hem deneysel olarak hem de kurumsal olarak çok sayıda araştırmacı tarafından incelenmesinin başlıca sebebi kataliz, kristal büyütme, fotoğrafçılık gibi alanlardaki olayların atom seviyesinde anlaşılmasına yardımcı olmasındandır [24,25].

Bu alandaki teorik yapılan çalışmalar topak biliminin gelişmesine ve uygulamasına önemli ölçüde katkı sağlamıştır. Topakların enerjileri ve erime sıcaklığı gibi özelliklerini deneysel olarak ölçmek oldukça zordur. Bu yüzden teorik modellemeler ve simülasyon metotlarla bu özelliklerin açıklanması daha kolay olmuştur [26].

Bu çalışmada Saf Bor Atom Topaklarının ile Titanyum (Ti), Manganez (Mn) ve Krom (Cr) katkılı Bor Atom topaklarının  $n \leq 7$ 'e kadar elektronik ve yapısal özellikleri incelendi. Bu hesaplamalar Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT/B3LYP fonksiyoneli) yardımıyla GAUSSIAN 09 [27] ve Gaussview 5.0 [28] paket programı kullanılarak yapıldı. Optimizasyon sonucunda bu topakların optimize enerjileri, elektronik ve yapısal özelliklerinin elde edilmesi amaçlandı.

## 2. MOLEKÜLER MODELLEME

Moleküler modelleme bir moleküler sistemin yapısal, elektronik ve spektroskopik büyüklükleri hesaplama yöntemlerini ihtiva eder. Bu hesaplamalarda kullanılan yöntemler Moleküler Mekanik Metotlar ve Elektronik Yapı Teorisi Metotları olmak üzere iki ana gruba ayrılır. Her iki yöntem de benzer hesaplamalar yapar [26,29].

### 2.1. MOLEKÜLER MEKANİK METODLAR

Moleküler sistemdeki hesaplamalar elektronları açık bir şekilde göz önüne almaz. Bu hesaplamada moleküller, yaylarla birbirine bağlanmış kütleler gibi harmonik kuvvetlerle etkileşen kütleler topluluğu olarak ele alınır. Burada; kütleler elektronların etrafında küresel olarak dağıldığı atom çekirdeklerini; yaylar ise atomlar arası kimyasal bağları temsil eder. Atomlar arası etkileşmeler iki kısma ayrılır [29].

Bunlar;

#### 1. Kimyasal bağlarla bağlanmış atomlar arası etkileşmeler

- a. Gerilme
- b. Açık bükülme
- c. Burulma
- d. Düzlem dışı açı bükülme

#### 2. Kimyasal bağlarla birbirine bağlanmamış atomlar arası etkileşmeler

- a. Van der Waals etkileşmeleri
- b. Elektrostatik etkileşmeler

Moleküldeki bağlar ve açılar birbirine bağımlı olduklarından bir gerilme, bükülme veya burulma hareketi yaptıklarında, komşu bağları ve bağ açılarını etkiler. Bu tür etkileşim enerjisi, genelde saf etkileşimlere göre daha küçüktür. Bu tür çiftleşme etkileşmelere; burulma-bükülme, gerilme-bükülme gibi etkileşimler örnek olarak verilebilir.

Atomlar arası etkileşimlerin her biri potansiyel enerji ile tanımlanır. Molekülün toplam potansiyel enerjisi, bu etkileşimlere karşılık gelen potansiyel enerjilerin toplamıdır.

$$E_{TOP} = E_{GER} + E_{BÜK} + E_{BUR} + E_{V.D.WAALS} + E_{ELEK} \quad (2.1)$$

Burada  $E_{GER}$ : gerilme enerjisi,  $E_{BÜK}$ : açı bükülme enerjisi,  $E_{BUR}$ : burulma (torsiyon) enerjisi,  $E_{V.D.WAALS}$ : Van der Waals enerjisi,  $E_{ELEK}$ : elektrostatik enerji terimidir [30,31].

## 2.2. ELEKTRONİK YAPI METODLARI

Elektronik yapı metotları, klâsik fizik yasaları yerine kuantum mekaniksel yasaları kullanır. Kuantum mekaniksel olarak bir molekülün enerjisi,

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.2)$$

denklemleri ile belirlenir. Bu Schrödinger denklemi sadece hidrojen atomunun belirli durumlarının tam çözümünü yapabilmektedir. Bu nedenle çok atomlu sistemlerin çözümleri için farklı yaklaşım metotları kullanılması gerekir. Bu yaklaşımlardan biri olan elektronik yapı metotları değişik yaklaşık matematiksel metotlar ile karakterize edilerek; yarı deneysel metotlar ve ab initio metotlar olmak üzere ikiye ayrılır.

### 2.2.1. Yarı Deneysel Metotlar

Yarı deneysel metotlar kullanılarak yapılan hesaplamalarda molekül için oldukça fazla deneysel veri kullanmaya ihtiyaç vardır. MINDO, AM1 ve PM3 hesaplama metotları yarı deneysel metotlardır.

### 2.2.2. *ab Initio* Metotları

Ab initio metotları, yarı deneysel metotların tersine hesaplamalar için ışık hızı, Planck sabiti, elektronların kütlesi gibi temel fizik sabitlerini kullandığı için deneysel değerlere ihtiyaç duymaz [32].

1969 yılında Pulay tarafından başlatılan bu çalışmalar; moleküllerin kuvvet alanlarının ve titreşim spektrumlarının kuantum mekaniksel ab initio yöntemler ile hesaplanmasına dayanır [33]. Bu çalışmalar “kuvvet” veya “gradyent” metotları kullanılarak çok atomlu moleküllerin kuvvet alanlarının hesaplanmasında gerçekçi ve iyi sonuç veren bir yaklaşımdır. Pulay’ın bu konuya getirdiği temel katkı, enerjinin nükleer koordinatlarına göre birinci türevinin (potansiyelin gradyenti) ab initio metotlarda analitik olarak elde edilebileceğini gösterdi. Bu yöntem Hartree-Fock metodu için de geliştirildi. Ancak 1970 yılından sonra birinci ve ikinci analitik türevleri kullanılarak ab initio metotları ile spektroskopik büyüklükler hesaplanmıştır. Spektroskopik büyüklükler Hartree-Fock (HF), Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT), Möller-Plesset teorisi (MP2) gibi yöntemler kullanılarak hesaplanır [34,35]. Bu yöntemde, birinci türevlerin hesaplanması sonucunda geometrik optimizasyon, ikinci türevler ise kuvvet sabitlerini hesaplar. Bu hesaplar kullanılarak titreşim frekansları bulunur. İnfrared ve Raman şiddetlerini bulmak içinde dipol momentlerin türevlerinden yararlanılır. Günümüzde kuantum mekaniksel yöntemleri kullanan programlar GAUSSIAN, GAMESS, HONDO ve Q-CHEM gibi paket programları bulunmaktadır. Bu programların tamamı değişik mertebeden analitik türevler kullanmaktadır. Tablo 2.1.’de enerjinin türevlerinden hangi büyüklüklerin hesaplanabileceği verilmektedir.

$$\text{Özellik} \approx \frac{\partial E^{n_F+n_B+n_I+n_R}}{\partial F^{n_F} \partial B^{n_B} \partial I^{n_I} \partial R^{n_R}} \quad (2.3)$$

Tablo 2.1 Enerji türevlerinden hesaplanabilen fiziksel büyüklükler [36].

$n_F$	$n_B$	$n_I$	$n_R$	Özellik
0	0	0	0	Enerji
1	0	0	0	Elektrik Dipol Moment
0	1	0	0	Manyetik Dipol Moment
0	0	0	1	Enerjinin Gradyenti
2	0	0	0	Elektrik Polarizebilite
0	0	0	2	Harmonik titreşim frekansları
1	0	0	1	İnfrared soğurganlık yoğunluğu
3	0	0	0	Birinci elektrik hiperpolarizebilite
0	0	0	3	Titreşim frekanslarına anharmonik düzeltme
2	0	0	1	Raman yoğunluğu
1	0	0	2	Üst ton ve Kombinasyon bandlarının infrared yoğunlukları
4	0	0	0	İkinci elektrik hiperpolarizebilite
2	0	0	2	Üst ton ve Kombinasyon bandlarının Raman yoğunlukları

Burada; E: Toplam enerji, F: Dış Elektrik Alan, B: Dış Manyetik Alan, I: Nükleer Manyetik Moment, R: Atomik koordinatlara karşılık gelir.

### 2.3. KUANTUM MEKANİKSEL ENERJİ İFADELERİ VE YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ

Moleküllerin hareketi kuantum mekaniksel olarak çekirdeğin hareketi ve elektronların hareketi olmak üzere iki kısma ayrılır. Çekirdeğin kütlesi elektronun kütlesinden çok büyük olması nedeniyle bu iki hareket ayrı ayrı düşünülebilmektedir. Bu *Born-Oppenheimer* yaklaşımı olarak bilinir [37]. Bir molekülün elektronik enerjisi kuantum mekaniksel olarak kapalı formda,

$$E_e = E^T + E^V + E^J + E^{XC} \quad (2.4)$$

şeklinde yazılabilir. Burada;  $E^T$  elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerji,  $E^V$  çekirdek-elektron çekimi ve çekirdek çiftleri arasındaki itme potansiyel enerjisi,  $E^J$  elektron-elektron itme terimi (elektron yoğunluğunun Coulomb öz-etkileşim olarak da tanımlanır),  $E^{XC}=E^X+E^C$  ise değiş-tokuş enerjisi ( $E^X$ ) ve korelasyon enerjisi ( $E^C$ ) terimlerine karşılık gelir. Bu durum elektron-elektron etkileşmelerinin geri kalan kısmını kapsar. Değiş-Tokuş enerjisi aynı spinli elektronlar arasındaki etkileşim enerjisidir. Kuantum mekaniksel dalga fonksiyonunun anti simetrikliğinden dolayı ortaya çıkar. Korelasyon enerjisi ise farklı spinli elektronlar arasındaki etkileşme enerjisidir. Bu enerjilerin büyüklükleri hakkında bir fikir edinmek için Neon atomunun enerjilerini örnek olarak verelim. Neon atomunun hesaplanmış enerjileri:  $E_e = -129,4$   $E^T = 129$   $E^V = -312$   $E^J = 66$   $E^C = -0,4$   $E^X = -12$  atomik birim hartree'dir (1 hartree  $H = 27,192$  eV dur) [32].

Hartree-Fock (HF) modelinde enerjinin açık ifadesi moleküler dalga fonksiyonu  $\Psi$ 'ye bağlıdır. Bunun yanı sıra bu modelde korelasyon enerjileri dikkate alınmaz.

Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) enerji ifadesi elektron yoğunluğu  $\rho$ 'ya bağlıdır. Yoğunluk fonksiyon teorisinde kullanılan üç temel kavramın tanımı aşağıda verilmiştir.



Bunlar;

1. *Elektron yoğunluğu  $\rho(r)$* : Herhangi bir noktadaki elektronun yoğunluğunu tanımlar.

2. *Homojen elektron gaz modeli*: Bir bölgedeki yük dağılımının, sisteme düzgün dağılmış  $n$  tane elektron ve sistemi nötralize edecek kadar pozitif yükten oluştuğu varsayımına dayalı idealize edilmiş bir modeldir. DFT modellerinde enerji ifadeleri, elektron dağılımının  $V$  hacimli bir küp içerisinde olduğu ve elektron yoğunluğunun  $\rho=n/V$  ile verildiği sistemde  $n, V \rightarrow \infty$  olduğu varsayımı yapılır. Burada  $\rho$  sabit kabul edilmiştir.

3. *Fonksiyonel*: DFT’de sıkça kullanılan Fonksiyonel kavramıdır. Bağımsız  $x$  değişkenine bağımlı değişkene fonksiyon denir ve  $f(x)$  ile gösterilir. Bir  $F$  fonksiyonu  $f(x)$ ’e bağımlı ise bu bağımlılığa fonksiyonel denilir ve  $F[f]$  ile gösterilir [32, 38].

### 2.3.1. Enerji Fonksiyonelleri

Literatürde sıkça kullanılan enerji fonksiyonlarının bir kısmı aşağıda verilmiştir.

Kinetik enerji fonksiyonları: H28, TF27, ...

Değiş tokuş enerji fonksiyonları: F30, D30, B88, ...

Korelasyon enerjisi fonksiyonları: LYP, VWN, ...

### 2.3.2. Karma Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Dalga mekaniğine dayanan HF teorisi değiş-tokuş enerjisi ve korelasyon enerjilerini hesaplamada yetersiz kalmasına rağmen kinetik enerji ifadesi için uygun bir ifade vermektedir. DFT modelleri ise değiş tokuş ve korelasyon enerjilerinde daha iyi sonuç verirken kinetik enerji ifadesi için iyi sonuçlar vermez. Bu nedenle tam enerji ifadelerinin hesabı için saf HF veya saf DFT modelleri yerine, bu modellerin her ikisinin de enerji ifadelerinin toplam elektronik enerji ifadesinde

kullanıldığı karma (melez, hibrit) modeller üretilmiştir. Bu modeller toplam enerji, bağ uzunlukları, iyonizasyon enerjileri gibi çoğu büyüklükleri saf modellerden daha iyi hesaplamaktadır.

### 2.3.3. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Bir karma model yukarıda sözü edilen enerji ifadelerini birleştirerek yeni bir enerji ifadesi elde edebilir. Bu yöntemde Becke, değiş tokuş fonksiyonu ve korelasyon enerjisi  $E_{XC}$  için aşağıdaki karma modeli önermiştir.

$$E_{\text{karma}}^{XC} = c_{\text{HF}} E_{\text{HF}}^X + c_{\text{DFT}} E_{\text{DFT}}^X \quad (2.5)$$

Burada  $c_{\text{HF}}$  ve  $c_{\text{DFT}}$ 'ler sabitlerdir. Bu karma modeller arasında en iyi sonuç verenler BLYP ve B3LYP karma yoğunluk fonksiyonlarıdır. B3LYP modelinde bir molekülün toplam elektronik enerji ifadesi;

$$E_{\text{B3LYP}} = E^T + E^V + E^J + E_{\text{B3LYP}}^{XC} \quad (2.1)$$

olarak elde edilmiştir [39]. Bu modeller incelendiğinde değiş-tokuş ve korelasyon enerjileri için ilgili ifadelerin iyi sonuçlar vermesine rağmen tam sonuçlar vermediği görülebilir. Bu enerjiler ile ilgili olarak DFT modelinde atomik ve moleküler sistemler için daha iyi sonuç verecek fonksiyon çalışmaları literatürde yoğun olarak devam etmektedir [32, 40, 41].

### 3. GEOMETRİK OPTİMİZASYON

#### 3.1. MİNİMİZASYON YÖNTEMLERİ

Bir başlangıç geometrisi için bir  $f$  fonksiyonu tanımlanır. Geometrik optimizasyon bu  $f$  fonksiyonu  $x(i)$  değişkenlerine bağlıdır. Ancak bu  $x(i)$  değişkenleri birbirlerinden bağımsızdır.  $f$  fonksiyonunun alabileceği minimum

değer,  $\frac{\partial f}{\partial X_i} = 0$  veya  $\frac{\partial^2 f}{\partial X_i^2} > 0$  şartını sağladığı noktalardır.

Burada minimum enerji değerlerini hesaplamak için;

1. Steepest Descent, Gradyent ve Powel yöntemleri: Bu metotlar  $\frac{\partial f}{\partial X_i} = 0$

bağıntısını kullandığı için birinci türev metotları olarak bilinir.

2. Newton- Raphson yöntemi: Bu metot  $\frac{\partial^2 f}{\partial X_i^2} > 0$  bağıntısını kullandığı için

ikinci türev metodu olarak bilinir.

Gradyent metodu daha hassas hesaplama yapabilmekte ve minimum enerjideki geometrik yapıyı daha iyi tahmin edebilmektedir. Dolayısıyla bu kısımda sadece Gradyent yöntemi tartışılacaktır.

#### 3.2. GRADYENT (KUVVET) METODU

Hesaplamalar moleküle ait belirli bir geometriyi oluşturarak başlar. Bir koordinat sisteminde atomlar arasındaki yer değiştirmeler, molekülün enerjisinde ve diğer birçok özelliklerinde değişmelere neden olur. Molekülün yapısındaki değişiklikler sonucunda enerjinin koordinata bağımlı olduğu sonucuna varılır.

Bu bağımlılık moleküler yapı ile molekülün enerjisi arasındaki ilişkidir. Bu ilişki “potansiyel enerji yüzeyi” olarak tanımlanır. İki atomlu bir molekülde bağ gerilmesine karşılık gelen elektronik enerji grafiği Şekil 3.1 de verilmiştir. Burada minimum enerjili nokta  $E_m$  ve minimum enerjiye karşılık gelen koordinat nokta  $X_m$  ile gösterilmiştir.

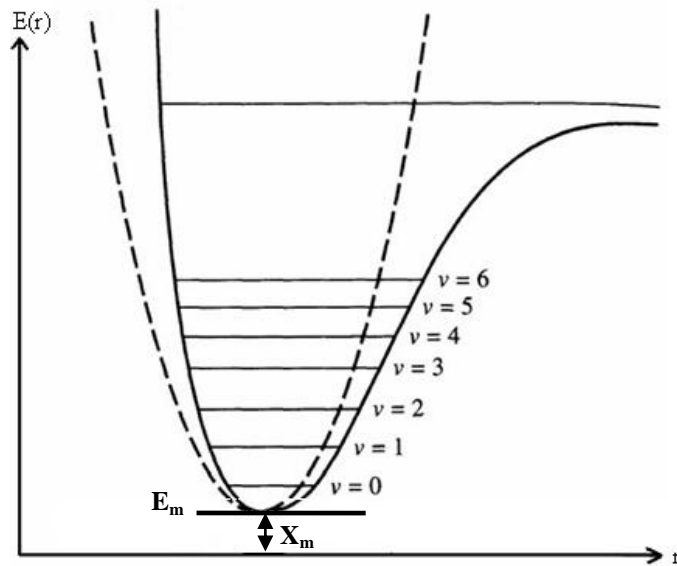
Potansiyelin harmonik kısmı Hooke yasası ile verilir.

$$E = E_m + \frac{1}{2}G(x - x_m)^2 \quad (3.1)$$

Burada G: enerjinin konuma göre ikinci türevidir ve kuvvet sabiti olarak adlandırılır. Yani kuvvet sabiti,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = G \equiv k \quad (3.2)$$

ifadesi ile verilir.



Şekil 3.1 İki atomlu bir molekülde elektronik enerjinin atomlar arası mesafeye bağımlılığı

Bir molekül için önce potansiyel enerji yüzeyi doğru tanımlanır. Bu tanımdan yararlanılarak molekülün denge geometrisine karşılık gelen minimum enerjili noktası hesaplanır. Çok parçacıklı sistemler için Hooke yasası,

$$E = E_m + \frac{1}{2} \underline{x} - \underline{x}^m + G \underline{x} - \underline{x}^m \quad (3.3)$$

veya

$$E = E_m + \frac{1}{2} [x_1 - x_1^m], [x_2 - x_2^m] \dots \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots \\ \dots & G_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

olarak ifade edilir. Burada  $\underline{x} - \underline{x}^m$ : yer değiştirme vektörü ve G: elemanlarını köşegen ve köşegen dışı kuvvet sabitlerinin oluşturduğu Hessian matrisidir.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial^2 x_1^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial^2 x_1 x_2} & \dots & \dots \\ \dots & \frac{\partial^2 E}{\partial^2 x_2^2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots & \dots \\ \dots & G_{22} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Moleküler geometri optimizasyonu  $x_1^m$  ve  $x_2^m$  konumlarına karşılık gelen minimum enerjili değerlerdir. Hesaplamalarda önce gradyent vektörü g hesaplanır.

$$\langle g | = g = \left[ \frac{\partial E}{\partial X_1}, \frac{\partial E}{\partial X_2}, \dots \right] \quad (3.6)$$

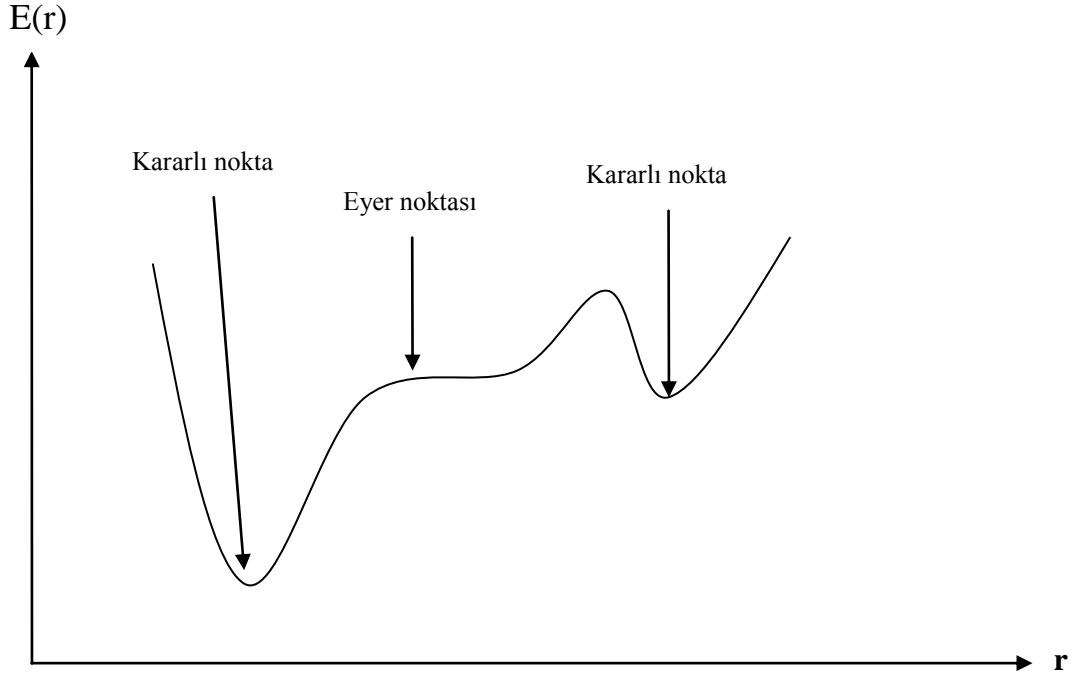
Daha sonra gradyent vektörünün sıfır olduğu noktalar hesaplanır.

$$\langle g | = 0,0,\dots \quad (3.7)$$

Çünkü Gradyent vektörünün sıfır olduğu noktalar minimum enerjili duruma karşılık gelir. Bu geometri, molekülün minimum enerji geometrisi olarak tanımlanır.

Geometrik optimizasyon tanımlanan moleküle ait belli bir yapı ile başlatılır ve potansiyel enerji yüzeyini dolaşarak devam eder. Dolaştığı noktalardaki enerji ve gradyenti hesap ederek hangi yöne doğru ne kadar gidileceğine karar verilir. Minimumlarında ve eyer noktalarında enerjinin birinci türevi yani gradyenti sıfırdır. Bu noktalarda kuvvet de sıfırdır. Potansiyel enerji yüzeyinde gradyent vektörü  $g$ 'nin sıfır olduğu noktalara “kararlı noktalar” denilir. Enerjinin atomik koordinatlara göre ikinci türevi kuvvet sabitini verir. Optimizasyon algoritmaları genellikle Hessian matrisi kullanılarak kuvvet sabitleri ve bir noktadaki yüzeyin eğriliğini tanımlar ve böylece bir sonraki aşamanın belirlenmesini sağlar. Bir sonraki aşamada hesaplanan geometrik parametrelerin değerleri ile hesaplanan değerler arasındaki fark ihmal edilebilir derecede ise optimizasyon tamamlanmış olur [32, 35, 42].

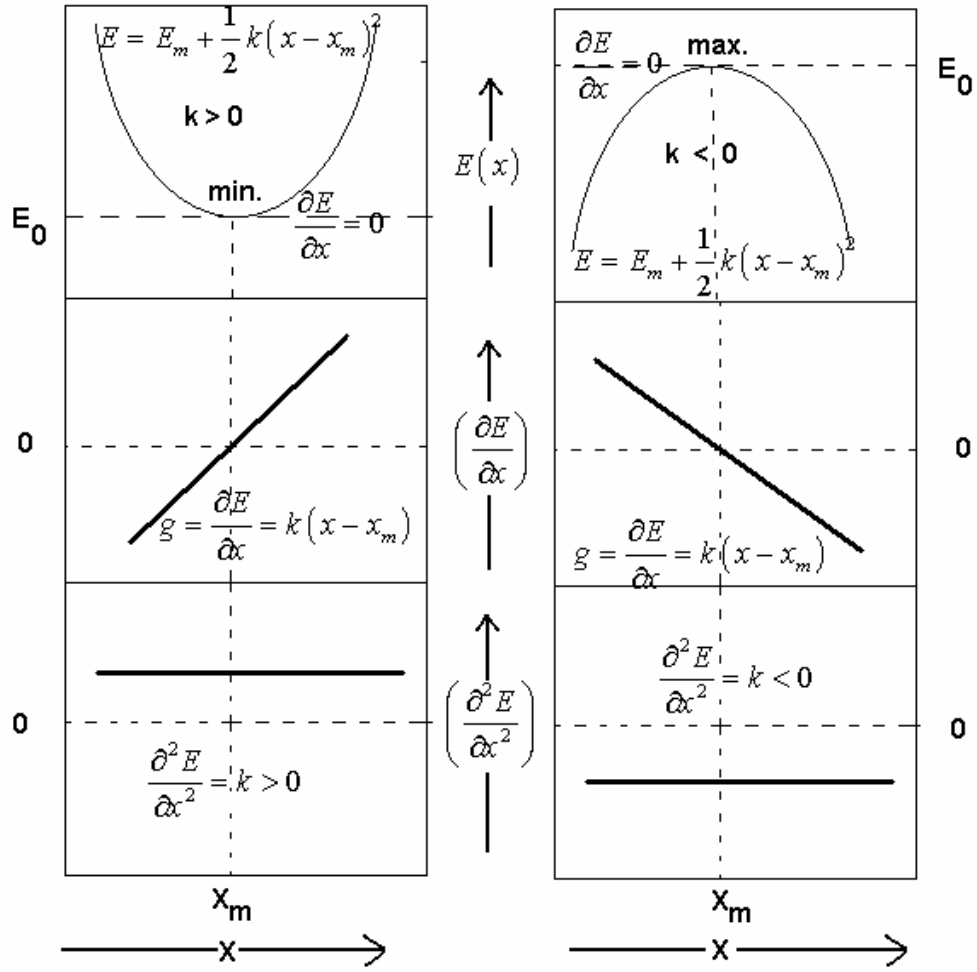
Bir molekülün potansiyel enerji yüzeyi bir çok maksimum ve minimum değerler içerir. Potansiyel enerji yüzeyindeki minimumlar sistemin dengede olduğu yerlere karşılık gelir. Bir molekül için bir çok farklı minimumlar bulunabilir ve bu minimumlar molekülün farklı konfigürasyonlarına karşılık gelir. Bu hesaplamalar yapılırken bazen bir sırt bölgesinde bir yönde yerel minimum, diğer yönden bir maksimuma karşılık gelir. Bu tür noktalar eyer noktaları olarak tanımlanır. Bu noktalar iki denge yapısı arasındaki geçişlere karşılık gelir (Şekil 3.2).



Şekil 3.2 İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi

Genel olarak geometrik optimizasyon, potansiyel enerji yüzeyindeki minimumları araştırarak moleküler sistemlerin denge yapılarını tahmin eder. Optimizasyon geometrisi hesaplanırken, geçiş yapıları hesaplanabilir. Ancak bu çalışmada sadece minimum optimizasyon geometrisi hesaplanmıştır.

Bu çalışmada Gaussian 09 paket programında geçerli olan algoritma Berny Hard Schlegel tarafından geliştirilen Berny Algoritması kullanılır [43]. Berny algoritması moleküler sistemin toplam enerjisinin birinci türevi (gradyan) ve ikinci türevi (Hessian Matrisi) hesaplanarak sistemin minimum enerjili yapısı bulunur. Potansiyel enerji yüzeyi (PES) bir molekülün yapısındaki değişikliklere karşı sistemin enerjisinin değişim grafiği olarak bilinir. Şekil 3.3'de görüldüğü gibi potansiyel enerji yüzeyinde birden çok maksimum, minimum ve eğer noktaları bulunabilir. Belirlenen noktalara karşılık gelen yapılar kararlı olarak bilinir. Bu kararlı noktalar enerjinin birinci ve ikinci türevi ile belirlenir. Belirlenen kararlı noktalarda enerjinin birinci türevi sıfırdır. Eğer ikinci türevlerinin tamamı pozitif ise o nokta yerel minimum, tamamı negatif ise yerel maksimum, yalnızca bir tanesi negatif ise eyer noktası adı verilir [44].



Şekil 3.3 Potansiyel enerji eğrisindeki maksimum ve minimum noktaların karakteristiği (Burada  $g$  gradyant,  $k$  kuvvet sabitidir.)



#### 4. TEMEL SETLER

Elektronik yapı metotları bilinmeyen molekül orbitallerini (MO) tanımlamak için bilinen temel fonksiyonların bir setini kullanır. Her bir MO, temel set olarak bilinen atomik orbital (AO) terimlerinin doğrusal toplamı şeklinde ifade edilir. Tanımlanan yeni orbitaller LCAO veya MO metodunda molekülün dalga fonksiyonu molekülü oluşturan atomların dalga fonksiyonlarının toplamı olarak yazılır [45].

$$\Psi_i = \sum_{\mu=1}^n c_{\mu} \phi_{\mu} \quad (4.1)$$

Burada  $i$   $\psi$  moleküler orbitali  $\mu$   $\phi$  atomik orbitalleri gösterir.  $c_{\mu}$  ise moleküler orbital açılım katsayısı olarak adlandırılır. Temel setler atomik orbitaller için tanımlanmıştır. Fakat molekülleri oluşturan atomların atomik orbitallerinde büyüklük, şekil veya yük bakımından önemli değişiklikler olur. Bu da özel tanımlamalar gerektirir. Bunun için temel sete polarize ve difüz fonksiyonlar eklenerek genişletilmiş temel set tanımlanmıştır. Genişletilmiş temel setler molekülün yüksek dereceden orbitallerini hesaba katarak, moleküler yük dağılımındaki, komşu atomların etkileşmesinden kaynaklanan şekil ve boyut değişikliklerini tanımlar [45].

Atomlar birbirine yaklaştırıldığında diğer çekirdeklerin etkisiyle elektronik yoğunluk bozular. Yük dağılımının yeniden yapılanması kutuplanma etkisine sebep olur. Bunu gidermek için eklenen temel fonksiyonlara polarize fonksiyonlar denir.

Uyarılmış ve iyonik moleküllerde elektron yoğunluğu molekülün temel durumuna göre daha dağınıktır. Bu durumu matematiksel olarak modellemek için dağınık fonksiyonlar (difüze) kullanılır. Temel setlere eklenen bu fonksiyonlara difüze fonksiyonlar denir. Literatürde değişik şekillerde gösterilen veya program verilerinde bulundurulmuş çok sayıda temel set vardır. Bu setler k-nlmG temel set ve split-valans tipi temel set olarak bilinir.

Bu gösterimde  $k$  kor orbital veya iç kabuktaki elektronların kaç tane ilkel gaussian tipi fonksiyon ile temsil edildiğini gösterir.  $nlm$  ise hem valans orbitallerinin kaç yarıldığını hem de bunların kaç tane ilkel gaussian fonksiyonu ile temsil edildiğini gösterir. Eğer gösterimde sadece  $(nl)$  var ise ikili yarıma,  $(nlm)$  var ise üçlü yarıma dikkate alınır. Bu durum temel set gösteriminde  $G$  den önce difüze fonksiyonlar için  $+$  veya  $++$  gösterimi kullanılır.  $+$  işareti ağır atomlar için  $p$ -fonksiyonunu,  $++$  işareti ise Hidrojen atomu için  $s$ - fonksiyonunu tanımlar. Polarize fonksiyonları belirtmek için  $G$  den sonra parantez içinde ağır atomlar için  $d$ ,  $df$  ve Hidrojen atomu için  $p$ ,  $pd$  harfleri kullanılır.

Genelde atomik orbitali tam ifade edebilmek için çok sayıda temel fonksiyona ihtiyaç duyulur. Kullanılan temel fonksiyon sayısı arttıkça orbital daha iyi tanımlanır. Bunun için molekül sisteminin yapısal, elektronik ve spektroskopik özellikleri hesaplanırken temel setlere difüze ve polarize fonksiyonlar eklenerek doğruluğu artırılır.

Temel fonksiyon sayısı fazlaştıkça daha fazla hesaplama süresi ve daha fazla bilgisayar hafızası gerekir. Bu nedenle yapılacak bir hesaplamada amaçlanan sonuca uygun temel set seçilmelidir.

## 5. MATERYAL METOT

Bu çalışmada Bor atomunun Titanyum (Ti), Mangan (Mn) ve Krom (Cr) katkılanmış atom topaklarının giriş dosyaları Gauss View paket programında hazırlandı. Hazırlanan giriş dosyaları Gaussian 09 paket programı sayesinde hesaplamaları yapıldı. Hesaplamalar DFT/B3LYP metodu CEP-121G, 6-311++G(d,p) ve cc-pVDZ temel setleri kullanılarak yapıldı.

Moleküllerin geometrik optimizasyonları her bir hesaplama modeli için hiçbir sınırlama yapılmadan hesaplanmıştır. Yapılan optimizasyonlar sonucu topakların denge durumundaki optimize enerji, yapısal ve elektronik özellikleri elde edildi. (1 a.u.=627,51530 kcal/mol)

B3LYP/cc-pVDZ hesaplamaları kullanılan yapılar için moleküllerin elektronik enerjileri en yüksek dolu molekül orbital enerjileri (HOMO) ve en düşük boş molekül orbital enerjileri (LUMO) belirlendi. Hesaplamalar sonucunda; Elde edilen verilerden HOMO-LUMO enerji farkı ( $\Delta E$ )

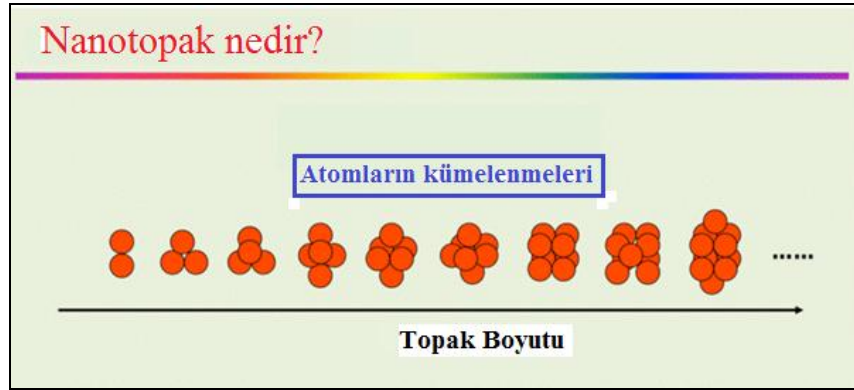
$$\Delta E = E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}} \quad (5.1)$$

olarak bulundu.

## 6. BULGULAR VE TARTIŞMA

### 6.1. ATOM TOPAKLARI

“Topak” sözlük anlamı aynı tür ya da farklı türden nesnelerin bir araya gelmesi veya birlikte büyümesi olarak tanımlanmaktadır [46]. Atom topakları onlarca ya da yüzlerce atomun bir araya gelmesi ile meydana gelen bir parçacıktır. Bu parçacıklar ortalama 1 ile 10 nanometre boyutlarında bir yapı oluşturur. Nanotopaklar izole edilmiş tek bir mikroskobik atom veya molekül ile makroskobik ölçekte maddenin katı hali arasında bir geçiş durumu olarak göz önüne alınabilir. Maddenin izole edilmiş haldeki atom veya molekül temel alınarak, topakların boyutlarına göre maddenin bulk halinin elektronik ve yapısal birçok özelliği belirlenebilir. Ancak maddenin bu hali hem bulk durumundan hem de moleküler durumdakinden çok farklı özelliklere sahip olabilmektedir.



Şekil 6.1 Basit bir atom topağının oluşum durumu

Nanotopaklar hem temel bilimler hem de teknolojiye uygulama açısından bakıldığında son yıllarda aşırı bir ilgi çekmektedir. Nanotopakların Kimya, Biyoloji, Mühendislik ve Medikal alanlarda çok yoğun uygulamaları vardır. Bu çalışmaların çoğu Altın, Alüminyum ve Bor tabanlı nanotopakları üzerine yapılmaktadır.

Atom topakları ve nanoyapılı malzemeler, bulk malzemelerde bulunmayan birçok yeni özellikler gösterir. Kullanılan malzemelerin boyutları küçüldüğünde, bulk materyallerin özellikleri kritik bir değere ulaşıncaya kadar düzenli olarak değişmektedir. Özellikler belirli boyutların altında düzensiz bir şekilde farklılaşır. Ayrıca atom topakları ile nanoyapılar birleştirilerek daha uygun özelliklere sahip yeni malzemelerde oluşturulabilir. Meydana gelen bu malzemelerin özellikleri yeni teknolojilere ve nanoteknolojik ilerleme sağlayacak şekilde olacaktır [47-52]. Bu nedenle moleküler ve atomik topaklarla ilgili olarak son yirmi yılda hızlı bir büyüme görülmüştür [53-55].

Topaklar; katalizör, yüzey bilimi, yoğun madde fiziği ve malzeme bilimi gibi birçok disiplini bir araya getiren bir alandır. Örnek olarak Altmış karbon atomundan oluşan elmas ve grafit'den sonra bu topakların dışında yeni bulunan karbonun üçüncü şeklinin keşfi gösterilebilir. Bu  $C_{60}$  topağı, jeodezik kubbenin mimarı Buckminster Fuller'den sonra Buckminsterfullerene olarak isimlendirildi. "Buckyball" lakaplı, herbiri bir futbol topunun altmış köşesini işgal etmesiyle altmış karbon atom topağının kimyasal olarak bağlanmasıdır [56]. Gaz-fazında düzlemsel karbon molekülleri [57-59] üzerine en son çalışmalar, düzlemsel altın yapılar [60-62], düzlemsel bor topakları [63,64], tüm-metalik aromatik moleküller [65,66],  $Au_{20}$  [67],  $B_{20}$  [68],  $Au_4Si$  [69], gibi daha büyük band aralıklı topaklar ve halojen benzeri sihirli topak  $Al_{13}$  [70], topak biliminin halen çok aktif ve heyecan verici bir alanı olarak gözükmektedir.

Büyük topaklarla heterojen kataliz, atmosferik kimya ve molekül ile yoğun madde çalışmaları yapılmaktadır. Yapılan bu çalışmalar ile istenilen ve beklenen bazı olguları anlamamızda gerekli bir ilerleme sağlamıştır. Küçük topaklarda ise iç moleküler kuvvetler, hidrojen bağı, kimyasal dinamikler, yeni nano-optik ve manyetik malzemelerin çalışılmasında önemli ilerlemeler sağlanmıştır. Topak çalışmaları ışık teknolojileri, fiziksel soğurma, kimyasal soğurma, reaktivite, biyosensörler ve nano-malzemeler gibi fonksiyonel malzeme tabanlı nano yapıların anlaşılmasında giderek yeni olanaklar sunmaktadır.

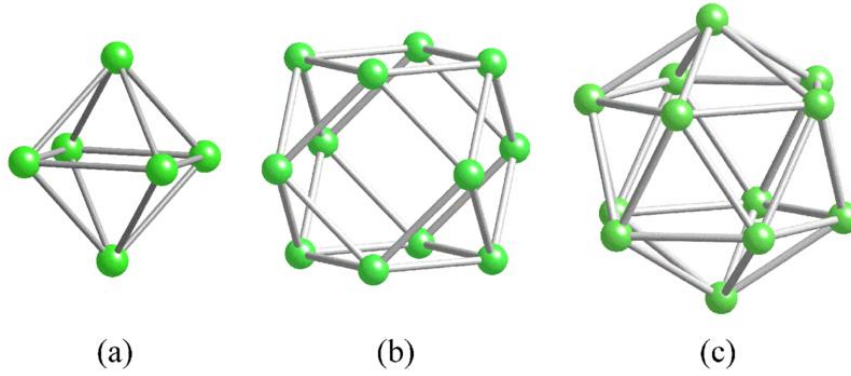
Atom toprakları yüzey çalışmaları için model olarak kullanılırsa bulk'un yüzeyi hakkında yeni bakış açısı sağlayabilir. Bilindiği gibi, yüzey elektronik yapı bilgi teknolojisi malzemelerin kimyasal soğurma ve katalitik özelliklerinin anlaşılmasında önemlidir. Yüzey çalışmaları sayesinde yüzeyde bulunan kusurların varlığı ile bulk'da bulunmayan elektronik hallerin tespiti üzerine yoğunlaşmaktadır. Bir toprak yüksek bir yüzey-hacim oranına sahip olduğu için toprağın kimyası aslında onun yüzeyinde oluşur. Yüzey bilimi sayesinde kimyasal ve fiziksel özelliklerinin anlaşılması sağlanmaktadır.

Topaklar yeni geometrik şekillerde farklı kimyasal reaksiyonlar gösteren malzemelerdir. Bu özellikleri ile topraklar, petrol rafineri merkezlerin de, kirlilik kontrolün de ve ilaçların sentezinde endüstriyel katalizör olarak kullanılır. Bir toprağın katalizör etkinliği, yüzeye tutunabilmesi için yeterince güçlü bir reaktif çekme yeteneğine, yüzeyden bırakması için ise yeterince zayıf olan son ürünleri tutmasına bağlıdır. Topaklar ayrıca aktif katalitik çalışma alanları için ideal bir laboratuvar görevi görürler. Topakların boşalmış bağ kapasitesi onları kolayca çekilen moleküller yapar. Bu özellikler sanayi de çok değerlidir. Çünkü birçok katalizör etkin bir şekilde katalizörlerin istenilen reaksiyonları hızlandırdığı gibi istenmeyen reaksiyonları da hızlandırır.

Topaklar yeni özellikleriyle yeni tür malzemelerdir. İstenilen elektronik niteliklere sahip ince film toprakları mikroelettronik de çok ilgi çekicidir. Bu malzemelerin optiksel hafıza, resim işleme ve süperiletkenlik alanlarında bir uygulamaları vardır. Bir makine, nötron sistemleri gibi katı-hal elektroniği ve biyolojik sistemler arasında bir bağlantı olarak kullanılacak şekilde tasarlanabilir. Böyle bir bağlantı, kişinin duyu bölgelerinin içine nano bilgisayar çipleri yerleştirilmesiyle engelli bir kişinin beynine bir televizyon kameradan görüntüyü aktarmada kullanılabilir.

### 6.1.1. Saf Bor Atom Topakları

3 boyutlu kafes benzeri yapısal özelliğe sahip olması durumunda bulk bor dayanıklı bir materyaldir [71, 72]. Ancak 3 boyutlu kafes yapıların küçük bor atom topakları için kararsız olduğu ileri sürülerek yerine düzlemsel ya da yarı-düzlemsel yapılar önerilmiştir [73–75]. Son on yıl içinde bu konuda yapılan deneysel ve teorik çalışmalara göre, bulk durumundaki elemental bor'un üç boyutlu (3D) kafes yapılı [76] olmasına rağmen, bor atom topaklarının anyonlarda  $B_{21}^-$ , [77-89] nötrlerde  $B_{20}$  [80] ve katyonlarda  $B_{16}^+$  [90] taban durumlarında en azından düzlemsel ya da yarı-düzlemsel yapılar sergilediğini göstermektedir.



Şekil 6.2 (a) B<sub>6</sub> octahedron, (b) B<sub>12</sub> cuboctahedron ve (c) B<sub>12</sub> icosahedron atom topakları

Bor dört değerlik orbitalleriyle bir elektron eksiliği olan ve sadece üç değerlik elektronlu bir elementtir. Sonuç olarak, bor özellikle üç boyutlu (3D) yapılar, geniş elektron paylaşımıyla kafes benzeri yapısal birimlere (B<sub>12</sub> icosahedron, B<sub>6</sub> octahedron, B<sub>12</sub> cuboctahedron) dayanmaktadır [91,92]. 1980'lerin sonunda bor topaklarıyla ilgili ilk deneysel çalışmalar, oldukça kararlı B<sub>13</sub><sup>+</sup> topak içeren kütle spektrokopi araştırmalarında gözlenen katyonik bor topaklarına benzer 3D yapılara bir başlangıç oluşturmuştur [93]. Teorik araştırmalar, bor atom topaklarını izole etmek için kafes benzeri yapıların kararsız olduğunu ve düzlemsel ya da yarı-düzlemsel yapıların enerji olarak tercih edilmesi önerilmektedir [94-99]. Son on yıl içinde, ab initio hesaplamalarıyla bağlantılı olarak negatif yüklü bor atom topağında (B<sub>n</sub><sup>-</sup>) boyutu seçilmiş atom topaklarının fotoelektron spektroskopisi, bor topak

anyonunun düzlemsel olduğunu ya da en az  $n=21$ 'e kadar yarı-düzlemsel olduğunu ortaya koymuştur [100-110]. Anyonik topaklar için 2D'den 3D'ye geçişin bilinmemesine rağmen nötr topaklar için [105]  $B_{20}$ 'de ve katyonik topaklar için [111]  $B_{16}^{+}$ 'da ortaya çıkacağı önerildi.  $B_{20}$  için ilk 3D yapının çiftkat-halka şekline ( $C_{5v}$ ) sahip olduğu bulundu [104] ve  $B_{20}$ 'de nötr topaklar için geçiş boyutu son hesaplamalarla yeniden oluşturuldu [112].

Koordinasyon sayısı moleküler yapıların en temel karakteristiklerinden birisidir. Yüksek koordinasyon sayılarıyla moleküller genellikle sekiz ve 18 elektron kurallarını ihmal ederler. Merkez atom ve tüm çevresel atomlar arasında eşit uzaklığıyla bir düzlemsel türde mümkün olabilecek en yüksek koordinasyon sayısı bulunmalıdır. Böyle yüksek koordinasyonlu düzlemsel kimyasal türler elde edebilmek için hem mekanik hem de elektronik faktörler dikkate alınmalıdır. Mekanik faktör bir monoklik halkanın boşluğuna sığması için merkezi atomun doğru boyutlarına yerleşmesini gerektirir. Elektronik faktör ise yüksek-simetri yapısının elektronik kararlılığa ulaşması için değerlik elektronlarının doğru sayıda olmasını gerektirir. Bor atom topakları lokalize ve delokalize olarak eş zamanlı katılabilme yeteneği nedeniyle son derece simetrik düzlemsel yapılar oluşturduğu bilinmektedir [113–119]. Düzlemsel bor atom topakları güçlü iki-merkez-iki-elektron ( $2c-2e$ ) B-B  $\sigma$  bağlarına sahip bir çevresel halkadan oluşur. Bir ya da daha fazla merkezi atom delokalize  $\sigma$  ve  $\pi$  bağları aracılığıyla dış halkaya bağlanır. Üst düzey hesaplamalarla deneysel çalışmalar birleştirildiğinde  $B_n^{+}$  iyonlarının  $n=16$ 'ya kadar düzlemsel olduğu bulunmuş iken [120] küçük bor atom topak iyonlarının en az  $B_{20}^{-}$  de düzlemsel olduğunu göstermektedir [121–125]. Düzlemsel bor atom topaklarında kimyasal bağlar oldukça dikkat çekicidir. Aromatiklik için  $(4N+2)$  Huckel'in kuralını takip eden  $\sigma$  düzleminde ve  $\pi$  düzlemin dışında her ikisi de delokalize olmuş iki tür bağ vardır. Özellikle de altı  $\sigma$  ve altı  $\pi$  elektronlarıyla sistemler çift kat aromatiktir ve  $B_8^{2-}$  ve  $B_9^{-}$  gibi her biri merkezde bir B atomu ve sırasıyla bir  $B_7$  ve  $B_8$  monoklik halkası içeren oldukça yüksek simetrik düzlemsel topaklara neden olmaktadır [121].  $D_{7h}B_8^{2-}$  ve  $D_{8h}B_9^{-}$  moleküler tekerlerinde, çevredeki her bir B atomu B-B çevresel kovalent bağlara iki elektron ve dekolize bağlara tek elektron katkı sağlar, oysa merkezi B atomu dekolize bağlar için onun tüm değerlik elektronlarına katkı sağlar.



Bu yeni bağ durumları değerlik elektronlarının uygun sayısı ile diğer atomlar ve boyutlar,  $M\text{C}B_n^-$  tipli atom topaklar üretmek için merkezi bor atomunun yer değiştirebileceğini önermektedir [126].

*ab initio* hesaplamalarıyla bağlantılı olan fotoelektron spektroskopisi (PES) çalışmaları göstermektedir ki küçük anyonik bor atom topakları ( $B_n^-$ ) en az  $n=20$ 'ye kadar genişlemiş bir boyut aralığı için düzlemsel ya da yarı-düzlemseldir.[127-130] Delokalize bağlanma çoklu aromatikliği oluşturur ve düzlemsel topakların kararlılığını artırır.  $B_8^{2-}$  ve  $B_9^-$  iki atom topağı mükemmel simetrisiyle  $D_{7h}$ - $B\text{C}B_7^{2-}$  ve  $D_{8h}$ - $B\text{C}B_8^-$  moleküler tekerlek-tipli topaklar olarak öne çıkmaktadır [131–133]. Örneğin sekiz ve dokuz atomlu anyonik bor atom topakları, bir merkez B atomu ve bir monocyclic  $B_7$  ve  $B_8$  halkasıyla moleküler bir tekerlek şeklindedir. Bu moleküler tekerlekteki kimyasal bağlar ilgi çekicidir [134]. Merkez B atomu üç delokalize  $\sigma$  ve  $\pi$  bağları aracılığıyla dış halkaya bağlı iken çevresel  $B_7$  ve  $B_8$  halkaları klasik şekilde iki-merkez-iki-elektron ( $2c-2e$ ) tarafından bağlıdır. Dokuz atomlu ( $B_9^-$ ) topağı mükemmel bir  $D_{8h}$  simetrisiyle kapalı kabuktur. 28 değerlik elektronu arasından, 16 tanesi  $2c-2e$  çevresel bağlarını şekillendirmek, 6 tanesi üç delokalize  $\sigma$  bağlarını şekillendirmek ve geri kalan 6 tanesi de üç delokalize  $\pi$  bağlarını şekillendirmek için kullanılır. Delokalize olan  $\sigma$  ve  $\pi$  bağlarının her biri çifte aromatikliğe ve  $B_9^-$  moleküler tekerleğinde yüksek elektronik kararlılığa yol açan aromatiklik için  $(4n + 2)$  Hückel kuralıyla uyumludur. Çifte aromatikliği yerine getirmek için, sekiz atom topağı 26 değerlik elektronu gerektirir: Bunlar, yedi klasik çevresel  $2c-2c$  B–B bağları için 14 tane, 6 delokalize  $\sigma$  elektronları ve 6 delokalize  $\pi$  elektronlarıdır. Bu yüzden,  $B_8^{2-}$  atom topağı mükemmel bir  $D_{7h}$  simetrisiyle kapalı bir kabuk sistemidir, aksine düzlemsel bir  $C_{2v}$  yapısına sahip 25 değerlik elektronlu  $B_8^-$  atom topağı, en yüksek işgal eden moleküler orbital (HOMO) çift kat bir dejenere orbital ( $1e_1^n$ ) olduğu için Jan Teller etkisinden dolayı  $D_{7h}$  yapısından hafifçe bozulur. Nötr  $B_8$  atom topağı yarı-dolu bir HOMO ( $1e_1^{n2}$ ) ve üçlü bir taban elektronik durumuyla ( $^3A_2$ ) mükemmel bir  $D_{7h}$  yapıya sahiptir [135,136].

### 6.1.2. Katkılı Bor Atom Topakları

Bor atom topakları spektroskopisinde son zamanlardaki gelişmelere rağmen [135], metal katkıli bor atom topakları daha az bilinmektedir.  $Au_2B_7^-$  ve  $AuB_{10}^-$  olmak üzere metal katkıli bor atom topaklarını karakterize eden çok az ortak deneysel ve teorik çalışma vardır [137,138].

Altıgen, yedigen ve sekizgen  $C\textcircled{B}_n$ - tipi atom topakları, hexa-, hepta- ve octa koordinat düzlemsel karbonlarının örnekleridir. Bu topaklar ile ilgili çalışmalar bulunmaktadır [139–141]. Ancak, fotoelektron spektroskopi (PES) çalışmaları göstermiştir ki karbon merkezden farklı olarak böyle topaklarda çevresel pozisyona yerleşmektedir [142,143]. Çünkü C, B'den daha elektronegatifdir ve bu yüzden sadece tekerlek yapının çevresinde mümkün olan lokalize iki-merkez-iki-elektron ( $2c-2e$ )  $\sigma$  bağlarına katılmayı tercih eder.

İlk olarak Schlyer ve arkadaşları tarafından, Hexa- ve heptakoordinat karbon atomuyla  $CB_6^{2-}$ ,  $C_3B_4$  ve  $CB_7^-$  tekerlek-tipli yapılar bulunmuştur. Yüksek simetrik hiperkoordinat yapıların iyi bağlanma açısından hem elektronik hem de geometrik ihtiyaçları yerine getirdiği için yerel minimumda olduğu bulundu [144,145]. Özellikle de Schleyer ve arkadaşları tekerlek yapıların 6  $\pi$  elektronlarıyla  $\pi$  aromatikliğine dikkati çekti. Fotoelektron spektroskopisi (PES) ve teorik çalışmaların ortaklığı, karbonun merkezden ziyade böyle topaklarda çevresel pozisyonu işgal ettiğini göstermiştir, çünkü karbon bordan daha elektronegatifdir ve bu yüzden tekerlek yapıların çevresinde sadece mümkün olan lokalize  $2c-2e$   $\sigma$  bağına katılmayı tercih eder [146, 147]. Merkez ve 6-10 koordinasyon sayılarında bir ana grup atom ile düzlemsel tekerlek-tipli bor halkalarının bir dizisi teorik olarak araştırılmıştır [148–150].

Son zamanlarda, iki kat aromatik yapıları ( $M^{(x)}\textcircled{B}_n^{(q)}$ ) belirlemek ve  $Co\textcircled{B}_8^-$ ,  $Ru\textcircled{B}_9^-$ , [151]  $Ta\textcircled{B}_{10}^-$ ,  $Nb\textcircled{B}_{10}^-$  [152] anyon ve  $Rh\textcircled{B}_9$ ,  $Ir\textcircled{B}_9$  [153] nötr topaklarda da test etmek için geçiş metalinin biçimsel değerlikleri (x), çevresel bor atomlarının sayısı (n) ve topakların yükünü (q), kullanarak bu tür bileşikler için bir

tasarım prensibi önerilmektedir. İki kat aromatik  $B\text{C}B_7^{2-}$  ve  $B\text{C}B_8^-$  topaklarının [154] bağ modelinden elde edilen tasarım prensibinde, sistemdeki bağ elektronları  $3n + x + q$ ,  $n$  ( $2ce-2e$ ) B-B çevresel bağlara katılımı ve aromatik dekolize bağların 2 takımı, her biri aromatiklik için ( $4N + 2$  elektron) Hückel'in kuralını yerine getirmesi gerekmektedir. Geometrik kısıtlamalar, katkılayıcının boyutlarına bağlı olarak 8 atom ya da daha fazlası için minimum Bor halka boyutunun oluşmasını beklemektedir. Demir için uygulandığında, tasarım prensibi iki kat aromatiktir :  $FeB_8^{2-}$ ,  $FeB_9^-$ , ve  $FeB_{10}^0$  takip eden kapalı kabuk öngörmektedir. Tüm bu topaklarda, Demir atomu 2 biçimsel değere sahiptir. İki katlı aromatik sistemdeki açık kabuk aynı zamanda Demir'in biçimsel değeri 3 olan  $FeB_8^-$  ve  $FeB_9^0$  için var olabilir.

Yapılan çalışmalar taban durumundaki  $FeB_9^-$ 'un aromatik ve bir  $D_{9h}$  simetrisine sahip olduğunu göstermektedir. Bu  $D_{8h}-Fe\text{C}B_8^{2-}$  tekerlek yapısı ayrıca  $FeB_8^{2-}$  potansiyel enerji yüzeyinde küresel minimumdadır. Aynı zamanda nötr ve yüklü demir katkılı bor atom topakları [155-157] için DFT metodunu kullanan geometri optimizasyonu ve enerji hesaplamaları hakkında çeşitli başka çalışmalarda bulunmaktadır. Mevcut çalışmada  $Fe\text{C}B_8^-$  ve  $Fe\text{C}B_9^-$  'in çift katlı aromatik metal-merkezli borometalik bileşikler olduğunu deneysel ve hesaplamalı kanıtlarla gösterildi. Şimdiye kadar ki alüminyum katkılı bor topaklarının PES ve ab initio ortak çalışmaları, alüminyum atomunun  $AlB_6^-$ ,  $AlB_7^-$ ,  $AlB_8^-$ ,  $AlB_9^-$ ,  $AlB_{10}^-$  ve  $AlB_{11}^-$  sistemlerinde merkezi pozisyonu önlediğini göstermiştir [158–160]. Alüminyumlu  $B_8^-$  ve  $B_9^-$  bir bor atomunun izoelektronik değişimiyle ilgili bir çalışmada Al'nin,  $AlB_7^-$  ya da  $AlB_8^-$  de merkezi pozisyondan uzaklaştığı gösterildi [161]. Bunun yerine, her iki topak düzlemsel olmayan şemsiye-tipli yapılara sahiptir, pozitif olarak yüklenmiş bir Al iyonu bir  $B_7^{3-}$  ya da bir  $B_8^{2-}$  karşıt iyon'a bağlıdır. Doldurulmamış d-orbitalleriyle geçiş metalleri, sekiz ya da dokuz elemanlı bir bor halkasının içine sığacak doğru boyutlara sahipse bir düzlemsel geometri deki çevresel atomlarla bağa daha elverişli olabilmektedir. Aslında bir dizi teorik hesaplama bir geçiş metal atomu ile  $B_8$  ve  $B_9$  molekül tekerleğindeki merkezi B atomlarının değiştirilmesi önerilmiştir [162-166]. Özellikle de Fe merkezli  $FeB_9^-$  atom topağının analizlerini kullanarak iki kat aromatik olduğu düşünülmektedir [167].

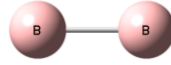
## 6.2. SAF BOR ATOM TOPAKLARI

### 6.2.1. B<sub>2</sub> Atom Topağı

#### *B<sub>2</sub> nötr atom topağı:*

Tablo 6.1 B<sub>2</sub> nötr atom topağının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
B <sub>2</sub>	Singlet	-5.25620687886	1.099	-49.3864884154	1.079	-
	Triplet	-5.28816579047	0.230	-49.4197382640	0.175	-
	Quintet	-5.29663543266	0	-49.4261906859	0	-49.4200887629
	Septet	-4.98645710324	8.434	-49.1110749183	8.568	-



B<sub>2</sub>

Şekil 6.3 B<sub>2</sub> Atom Topağı

#### *B<sub>2</sub> iyon atom topağı:*

Tablo 6.2 B<sub>2</sub> iyon atom topağının hesaplama verileri

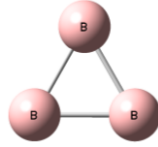
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
B <sub>2</sub>	Doublet	-5.33097679704	0.926	-49.4723805878	0.865	-
	Quartet	-5.36506033096	0	-49.5041990413	0	-49.4866449505
	Sextet	-5.24369274405	3.300	-49.3857397907	3.221	-

## 6.2.2. B<sub>3</sub> Atom Topakları

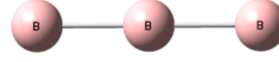
### *B<sub>3</sub> nötr atom topakları:*

Tablo 6.3 B<sub>3</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>-1</b>	<b>Doublet</b>	-8.07468875183	0	-74.2982715888	0	-74.2859792166
	<b>Quartet</b>	-8.03402575540	1.105	-74.2444373553	1.463	-
<b>B<sub>3</sub>-2</b>	<b>Doublet</b>	-7.97649049577	2.670			
	<b>Quartet</b>	-8.02373243239	1.385			
	<b>Sextet</b>	-8.00451230643	1.908			



B<sub>3</sub>-1



B<sub>3</sub>-2

Şekil 6.4 B<sub>3</sub> Atom Topakları

### *B<sub>3</sub> iyon atom topakları:*

Tablo 6.4 B<sub>3</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>-1</b>	<b>Singlet</b>	-8.16330778175	0	-74.3970675729	0	-74.3713336416
	<b>Triplet</b>	-8.13173058633	0.858	-74.3532072234	1.192	-

Tablo 6.4 (devam) B<sub>3</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri

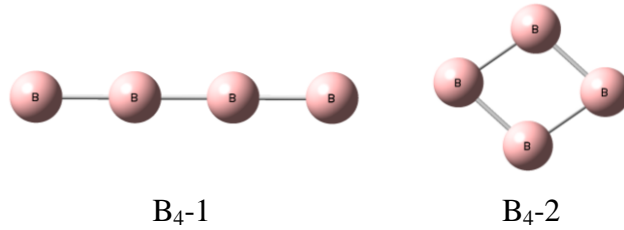
<b>B<sub>3</sub>-2</b>	<b>Singlet</b>	-8.06945910569	2.551
	<b>Triplet</b>	-8.09491527369	1.859
	<b>Quintet</b>	-8.06155082600	2.766

### 6.2.3. B<sub>4</sub> Atom Topakları

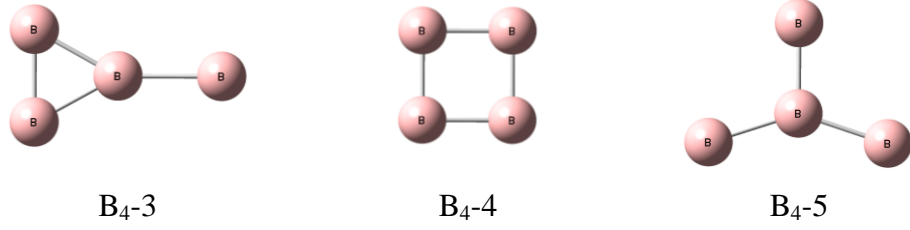
#### *B<sub>4</sub> nötr atom topakları:*

Tablo 6.5 B<sub>4</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		<b>CEP121-G</b>		<b>6-311++G(d,p)</b>		<b>cc-PVDZ</b>
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>4</sub>-1</b>	<b>Singlet</b>	-10.80013865220	1.370			
	<b>Triplet</b>	-10.78379792360	1.814			
<b>B<sub>4</sub>-2</b>	<b>Singlet</b>	-10.85053776390	0	-99.1575461546	0	-99.1384332420
	<b>Triplet</b>	-10.82230443500	0.767	-99.1111699737	1.261	-
<b>B<sub>4</sub>-3</b>	<b>Singlet</b>	-10.78500596080	1.781			
	<b>Triplet</b>	-10.77826987530	1.965			
<b>B<sub>4</sub>-4</b>	<b>Singlet</b>	-10.84966105380	0.023			
	<b>Triplet</b>	-10.82230048070	0.767			
<b>B<sub>4</sub>-5</b>	<b>Singlet</b>	-10.74920471110	2.755			
	<b>Triplet</b>	-10.75215300720	2.675			
	<b>Quintet</b>	-10.77903725530	1.944			
	<b>Septet</b>	-10.69021813020	4.359			



Şekil 6.5 B<sub>4</sub> Atom Topakları



Şekil 6.5 (devam)  $B_4$  Atom Topakları

***$B_4$  iyon atom topakları:***

Tablo 6.6  $B_4$  iyon atom topaklarının hesaplama verileri

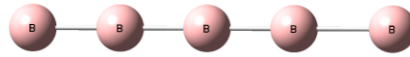
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b><math>B_4-1</math></b>	<b>Doublet</b>	-10.87109930110	1.349			
	<b>Quartet</b>	-10.85923638050	1.671			
<b><math>B_4-2</math></b>	<b>Doublet</b>	-10.92071550560	0	-99.2221962128	0	-99.1972083186
	<b>Quartet</b>	-10.88985475850	0.839	-99.1845145910	1.024	-
<b><math>B_4-3</math></b>	<b>Doublet</b>	-10.87625039290	1.209			
	<b>Quartet</b>	-10.86505650860	1.513			
<b><math>B_4-4</math></b>	<b>Doublet</b>	-10.91510870700	0.152			
	<b>Quartet</b>	-10.85553093800	1.772			
<b><math>B_4-5</math></b>	<b>Doublet</b>	-10.84272310590	2.120			
	<b>Quartet</b>	-10.88985472560	0.839			
	<b>Sextet</b>	-10.74038150740	4.903			

## 6.2.4. B<sub>5</sub> Atom Topakları

### *B<sub>5</sub> nötr atom topakları:*

Tablo 6.7 B<sub>5</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri

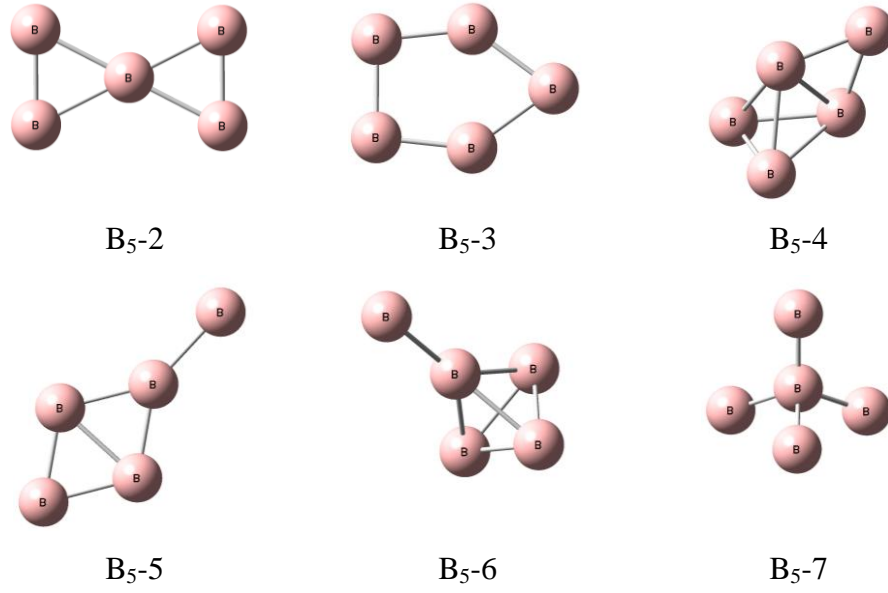
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>5</sub>-1</b>	<b>Doublet</b>	-13.51725973150	2.776			
	<b>Quartet</b>	-13.52674461730	2.518			
	<b>Sextet</b>	-13.53147073230	2.389			
	<b>Octet</b>	-13.47488983600	3.928			
<b>B<sub>5</sub>-2</b>	<b>Doublet</b>	-13.48208378380	3.732			
	<b>Quartet</b>	-13.56029900960	1.606			
	<b>Sextet</b>	-13.44395503390	4.769			
<b>B<sub>5</sub>-3</b>	<b>Doublet</b>	-13.61936141200	0	-123.9928438450	0	-123.9734152070
	<b>Quartet</b>	-13.54977371330	1.892	-123.9114170830	2.214	-
<b>B<sub>5</sub>-4</b>	<b>Doublet</b>	-13.52618719720	2.533			
	<b>Quartet</b>	-13.51929289130	2.721			
<b>B<sub>5</sub>-5</b>	<b>Doublet</b>	-13.56243832490	1.547			
	<b>Quartet</b>	-13.55094329350	1.860			
<b>B<sub>5</sub>-6</b>	<b>Doublet</b>	-13.48144219630	3.750			
	<b>Quartet</b>	-13.55094326570	1.860			
	<b>Sextet</b>	-13.48905152060	3.543			
<b>B<sub>5</sub>-7</b>	<b>Doublet</b>	-13.42635232160	5.248			
	<b>Quartet</b>	-13.53745140300	2.227			
	<b>Sextet</b>	-13.48905232860	3.543			



B<sub>5</sub>-1

Şekil 6.6 B<sub>5</sub> Atom Topakları





Şekil 6.6 (devam) B<sub>5</sub> Atom Topakları

***B<sub>5</sub> iyon atom topakları:***

Tablo 6.8 B<sub>5</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>5</sub>-1</b>	<b>Singlet</b>	-13.61033459920	1.918			
	<b>Triplet</b>	-13.61539799040	1.780			
	<b>Quintet</b>	-13.63794884710	1.167			
	<b>Septet</b>	-13.57917075790	2.765			
<b>B<sub>5</sub>-2</b>	<b>Singlet</b>	-13.57342902080	2.921			
	<b>Triplet</b>	-13.59527413760	2.327			
	<b>Quintet</b>	-13.58320513250	2.656			
<b>B<sub>5</sub>-3</b>	<b>Singlet</b>	-13.67598121370	0.133	-124.0569602540	0.017	-
	<b>Triplet</b>	-13.68088643250	0	-124.0575968740	0	-124.0301893270
	<b>Quintet</b>	-13.61303622920	1.844	-123.9627591690	2.578	-

Tablo 6.8 (devam) B<sub>5</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>5</sub>-4</b>	<b>Singlet</b>	-13.57417880490	2.901
	<b>Triplet</b>	-13.62450576580	1.533
	<b>Quintet</b>	-13.60177729060	2.151
<b>B<sub>5</sub>-5</b>	<b>Singlet</b>	-13.65885719270	0.599
	<b>Triplet</b>	-13.65023874310	0.833
<b>B<sub>5</sub>-6</b>	<b>Singlet</b>	-13.66146324630	0.528
	<b>Triplet</b>	-13.62703768740	1.464
<b>B<sub>5</sub>-7</b>	<b>Singlet</b>	-13.53014832640	4.098
	<b>Triplet</b>	-13.63301955700	1.301
	<b>Quintet</b>	-13.60788680550	1.985

### 6.2.5. B<sub>6</sub> Atom Topakları

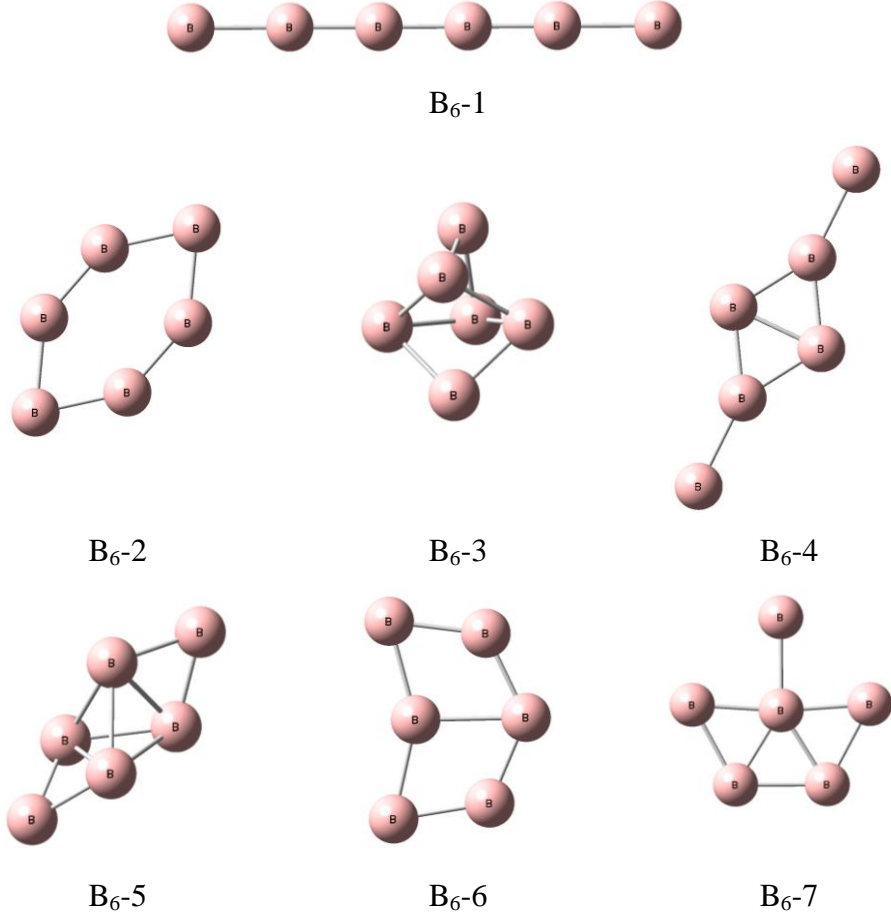
#### *B<sub>6</sub> nötr atom topakları:*

Tablo 6.9 B<sub>6</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		<b>CEP121-G</b>		<b>6-311++G(d,p)</b>		<b>cc-PVDZ</b>
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>-1</b>	<b>Singlet</b>	-16.25573707860	3.449			
	<b>Triplet</b>	-16.25573707860	3.449			
	<b>Quintet</b>	-16.29492981400	2.383			
	<b>Septet</b>	-16.25781538000	3.392			
<b>B<sub>6</sub>-2</b>	<b>Singlet</b>	-16.37183022460	0.292	-148.8170084460	0	-148.7948778260
	<b>Triplet</b>	-16.38257906020	0	-148.7720078940	1.223	-
	<b>Quintet</b>	-16.31165058130	1.928	-	-	-
<b>B<sub>6</sub>-3</b>	<b>Singlet</b>	-16.28304005370	2.706			
	<b>Triplet</b>	-16.27166155960	3.016			
<b>B<sub>6</sub>-4</b>	<b>Singlet</b>	-16.27807852430	2.841			
	<b>Triplet</b>	-16.30213817470	2.187			
	<b>Quintet</b>	-16.29462967200	2.391			
<b>B<sub>6</sub>-5</b>	<b>Singlet</b>	-16.30866038450	2.009			
	<b>Triplet</b>	-16.28717916220	2.594			
<b>B<sub>6</sub>-6</b>	<b>Singlet</b>	-16.35659680350	0.706			
	<b>Triplet</b>	-16.36451174110	0.491			
	<b>Quintet</b>	-16.31852639690	1.741			

Tablo 6.9 (devam) B<sub>6</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri

B <sub>6</sub> -7	<b>Singlet</b>	-16.27546297440	2.912
	<b>Triplet</b>	-16.29373262760	2.415
	<b>Quintet</b>	-16.27307954350	2.977



Şekil 6.7 B<sub>6</sub> Atom Topakları

***B<sub>6</sub> iyon atom topakları:***

Tablo 6.10 B<sub>6</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>-1</b>	<b>Doublet</b>	-16.35720983460	3.179			
	<b>Quartet</b>	-16.38470735080	2.431			
	<b>Sextet</b>	-16.36609861750	2.937			
<b>B<sub>6</sub>-2</b>	<b>Doublet</b>	-16.47414126270	0	-148.9271395860	0	-148.8968355280
	<b>Quartet</b>	-16.45793267130	0.440	-148.8604816740	1.812	-
<b>B<sub>6</sub>-3</b>	<b>Doublet</b>	-16.37119688250	2.799			
	<b>Quartet</b>	-16.35030149630	3.367			
<b>B<sub>6</sub>-4</b>	<b>Doublet</b>	-16.38780311370	2.347			
	<b>Quartet</b>	-16.38557474230	2.408			
<b>B<sub>6</sub>-5</b>	<b>Doublet</b>	-16.38642732670	2.385			
	<b>Quartet</b>	-16.40507957470	1.877			
	<b>Sextet</b>	-16.39513992300	2.148			
<b>B<sub>6</sub>-6</b>	<b>Doublet</b>	-16.41933839500	1.490			
	<b>Quartet</b>	-16.45442688140	0.536			
	<b>Sextet</b>	-16.39301828860	2.205			
<b>B<sub>6</sub>-7</b>	<b>Doublet</b>	-16.37819516030	2.608			
	<b>Quartet</b>	-16.38291987730	2.480			
	<b>Sextet</b>	-16.35915998280	3.126			

6.2.6. B<sub>7</sub> Atom Topakları

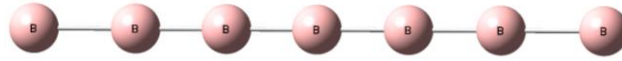
***B<sub>7</sub> nötr atom topakları:***

Tablo 6.11 B<sub>7</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri

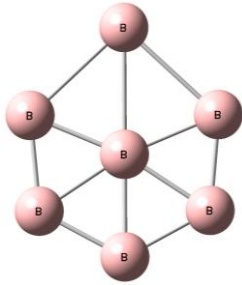
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>7</sub>-1</b>	<b>Doublet</b>	-19.02715793580	3.285			
	<b>Quartet</b>	-19.02892537390	3.237			
	<b>Sextet</b>	-19.02016629710	3.475			

Tablo 6.11 (devam) B<sub>7</sub> nötr atom topaklarının hesaplama verileri

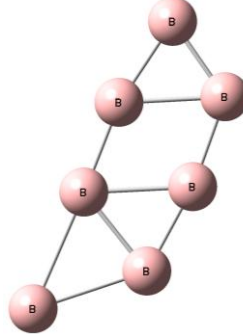
<b>B<sub>7</sub>-2</b>	<b>Doublet</b>	-19.14798025510	0	-173.6945316170	0	-173.6672446570
	<b>Quartet</b>	-19.10775495040	1.093	-173.6552137510	1.069	-
<b>B<sub>7</sub>-3</b>	<b>Doublet</b>	-19.14189384150	0.165			
	<b>Quartet</b>	-19.14285411120	0.139			
	<b>Sextet</b>	-19.04628959180	2.765			
<b>B<sub>7</sub>-4</b>	<b>Doublet</b>	-19.07635182040	1.947			
	<b>Quartet</b>	-19.07737924290	1.919			
	<b>Sextet</b>	-19.02106461450	3.451			
<b>B<sub>7</sub>-5</b>	<b>Doublet</b>	-19.10351993080	1.208			
	<b>Quartet</b>	-19.09141993300	1.537			
<b>B<sub>7</sub>-6</b>	<b>Doublet</b>	-18.67099755830	12.970			
	<b>Quartet</b>	-18.70608238020	12.016			
	<b>Sextet</b>	-18.72305673290	11.554			
	<b>Octet</b>	-18.86161617060	7.786			
	<b>Dectet</b>	-18.79893456660	9.491			



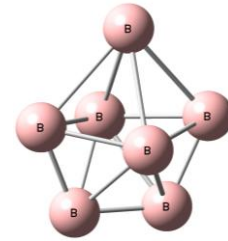
B<sub>7</sub>-1



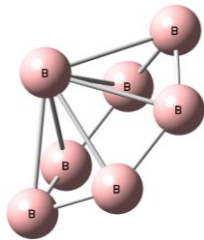
B<sub>7</sub>-2



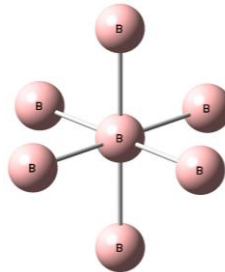
B<sub>7</sub>-3



B<sub>7</sub>-4



B<sub>7</sub>-5



B<sub>7</sub>-6

Şekil 6.8 B<sub>7</sub> Atom Topakları

*B<sub>7</sub> iyon atom topakları:*

Tablo 6.12 B<sub>7</sub> iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>7</sub>-1</b>	<b>Singlet</b>	-19.09658502250	4.505			
	<b>Triplet</b>	-19.12828647600	3.643			
	<b>Quintet</b>	-19.12984958760	3.601			
	<b>Septet</b>	-19.11802576640	3.922			
<b>B<sub>7</sub>-2</b>	<b>Singlet</b>	-19.23218134540	0.818			
	<b>Triplet</b>	-19.25161883910	0.289			
	<b>Quintet</b>	-19.17239651120	2.444			
<b>B<sub>7</sub>-3</b>	<b>Singlet</b>	-19.26228030070	0	-173.7955380060	0.157	-173.7620001180
	<b>Triplet</b>	-19.25697241820	0.144	-173.7906669370	0.290	-
<b>B<sub>7</sub>-4</b>	<b>Singlet</b>	-19.16311085700	2.696			
	<b>Triplet</b>	-19.16500451380	2.645			
	<b>Quintet</b>	-19.14823486170	3.101			
<b>B<sub>7</sub>-5</b>	<b>Singlet</b>	-19.24501036750	0.469			
	<b>Triplet</b>	-19.17948796870	2.251			
<b>B<sub>7</sub>-6</b>	<b>Singlet</b>	-18.78912330870	12.866			
	<b>Triplet</b>	-19.05918113020	5.522			
	<b>Quintet</b>	-18.84193055300	11.430			

### 6.3. TİTANYUM KATKILI BOR ATOM TOPAKLARI

#### 6.3.1. BTİ Atom Topağı

##### *BTi nötr atom topakları:*

Tablo 6.13 BTi nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>BTi</b>	<b>Doublet</b>	-60.5737231943	0.944	-874.064582242	0.873	-
	<b>Quartet</b>	-60.5751545780	0.905	-874.076800485	0.541	-
	<b>Sextet</b>	-60.6084404596	0	-874.096703708	0	-874.123947498
	<b>Octet</b>	-60.4382138237	4.628	-873.929895530	4.535	-



BTi

Şekil 6.9 BTi Atom Topağı

##### *BTi iyon atom topakları:*

Tablo 6.14 BTi iyon atom topaklarının hesaplama verileri

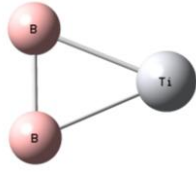
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>BTi</b>	<b>Singlet</b>	-60.6059909017	1.042	-874.105331290	0.791	-
	<b>Triplet</b>	-60.6231568458	0.575	-874.116559994	0.486	-
	<b>Quintet</b>	-60.6443174382	0	-874.134455192	0	-874.159982032
	<b>Septet</b>	-60.6066998180	1.022	-874.099717708	0.944	-

### 6.3.2. B<sub>2</sub>Ti Atom Topakları

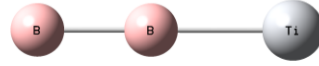
#### *B<sub>2</sub>Ti nötr atom topakları:*

Tablo 6.15 B<sub>2</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

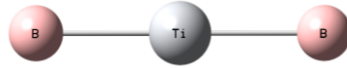
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>2</sub>Ti-1</b>	<b>Singlet</b>	-63.3582499253	0	-898.932345049	0	-898.954366566
	<b>Triplet</b>	-63.3471379236	0.302	-898.913902768	0.501	-
<b>B<sub>2</sub>Ti-2</b>	<b>Singlet</b>	-63.3239663405	0.932			
	<b>Triplet</b>	-63.3149120917	1.178			
<b>B<sub>2</sub>Ti-3</b>	<b>Singlet</b>	-63.2460461593	3.051			
	<b>Triplet</b>	-63.2482172278	2.992			
	<b>Quintet</b>	-63.2298142738	3.492			



B<sub>2</sub>Ti-1



B<sub>2</sub>Ti-2



B<sub>2</sub>Ti-3

Şekil 6.10 B<sub>2</sub>Ti Atom Topakları



### *B<sub>2</sub>Ti iyon atom topakları:*

Tablo 6.16 B<sub>2</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>2</sub>Ti-1</b>	<b>Doublet</b>	-63.4043960574	0	-898.977679224	0	-898.998915473
	<b>Quartet</b>	-63.4020923453	0.062	-898.968945797	0.237	-
<b>B<sub>2</sub>Ti-2</b>	<b>Doublet</b>	-63.3643928259	1.087			
	<b>Quartet</b>	-63.3572051021	1.283			
<b>B<sub>2</sub>Ti-3</b>	<b>Doublet</b>	-63.2967935674	2.925			
	<b>Quartet</b>	-63.3025794825	2.768			
	<b>Sextet</b>	-63.2995373793	2.851			

### 6.3.3. B<sub>3</sub>Ti Atom Topakları

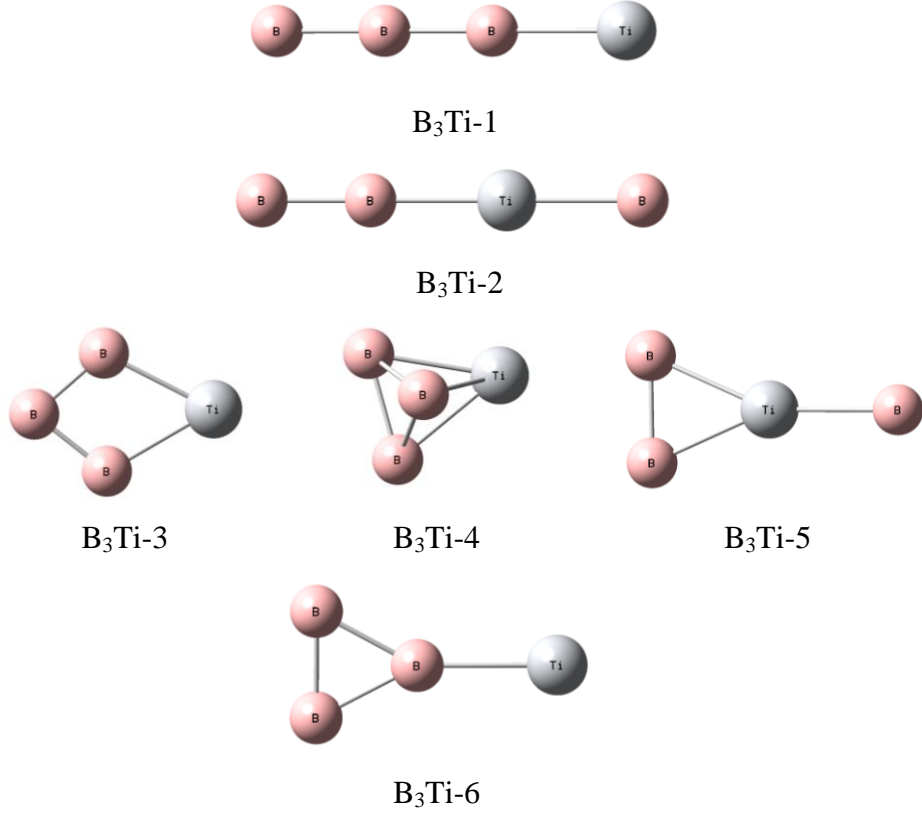
### *B<sub>3</sub>Ti nötr atom topakları:*

Tablo 6.17 B<sub>3</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>Ti-1</b>	<b>Doublet</b>	-66.0803868736	1.539			
	<b>Quartet</b>	-66.0707118444	1.802			
<b>B<sub>3</sub>Ti-2</b>	<b>Doublet</b>	-65.9621779257	4.753			
	<b>Quartet</b>	-65.9586541672	4.849			
<b>B<sub>3</sub>Ti-3</b>	<b>Doublet</b>	-66.1370005880	0	-923.785134649	0.060	-923.803161891
	<b>Quartet</b>	-66.1094806001	0.748	-923.754455954	0.894	-
<b>B<sub>3</sub>Ti-4</b>	<b>Doublet</b>	-66.1069865452	0.816			
	<b>Quartet</b>	-66.1229419434	0.382			
	<b>Sextet</b>	-66.0804702425	1.537			
<b>B<sub>3</sub>Ti-5</b>	<b>Doublet</b>	-66.0075293742	3.520			
	<b>Quartet</b>	-65.9982868455	3.771			

Tablo 6.17 (devam)  $B_3Ti$  nötr atom topaklarının hesaplama verileri

<b><math>B_3Ti-6</math></b>	<b>Doublet</b>	-66.0792753386	1.569
	<b>Quartet</b>	-66.0869756880	1.360
	<b>Sextet</b>	-66.0804667613	1.537



Şekil 6.11  $B_3Ti$  Atom Topakları

*B<sub>3</sub>Ti iyon atom topakları:*

Tablo 6.18 B<sub>3</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>Ti-1</b>	<b>Singlet</b>	-66.0494467979	3.733			
	<b>Triplet</b>	-66.1292613343	1.563			
	<b>Quintet</b>	-66.1248228077	1.683			
<b>B<sub>3</sub>Ti-2</b>	<b>Singlet</b>	-66.0186568351	4.570			
	<b>Triplet</b>	-66.0464199621	3.815			
	<b>Quintet</b>	-66.0450317839	3.853			
<b>B<sub>3</sub>Ti-3</b>	<b>Singlet</b>	-66.1862700446	0.012			
	<b>Triplet</b>	-66.1867442644	0.001			
	<b>Quintet</b>	-66.1765782047	0.276			
<b>B<sub>3</sub>Ti-4</b>	<b>Singlet</b>	-66.1862704057	0.012	-923.835850428	0.006	-
	<b>Triplet</b>	-66.1867443079	0	-923.836088507	0	-923.852030978
	<b>Quintet</b>	-66.1765776987	0.276	-923.827910807	0.222	-
<b>B<sub>3</sub>Ti-5</b>	<b>Singlet</b>	-66.0732150493	3.087			
	<b>Triplet</b>	-66.0927168740	2.556			
	<b>Quintet</b>	-66.0802886192	2.894			
<b>B<sub>3</sub>Ti-6</b>	<b>Singlet</b>	-66.1438773780	1.165			
	<b>Triplet</b>	-66.1485933926	1.037			
	<b>Quintet</b>	-66.1542990370	0.882			
	<b>Septet</b>	-66.1254701202	1.666			

### 6.3.4. B<sub>4</sub>Ti Atom Topakları

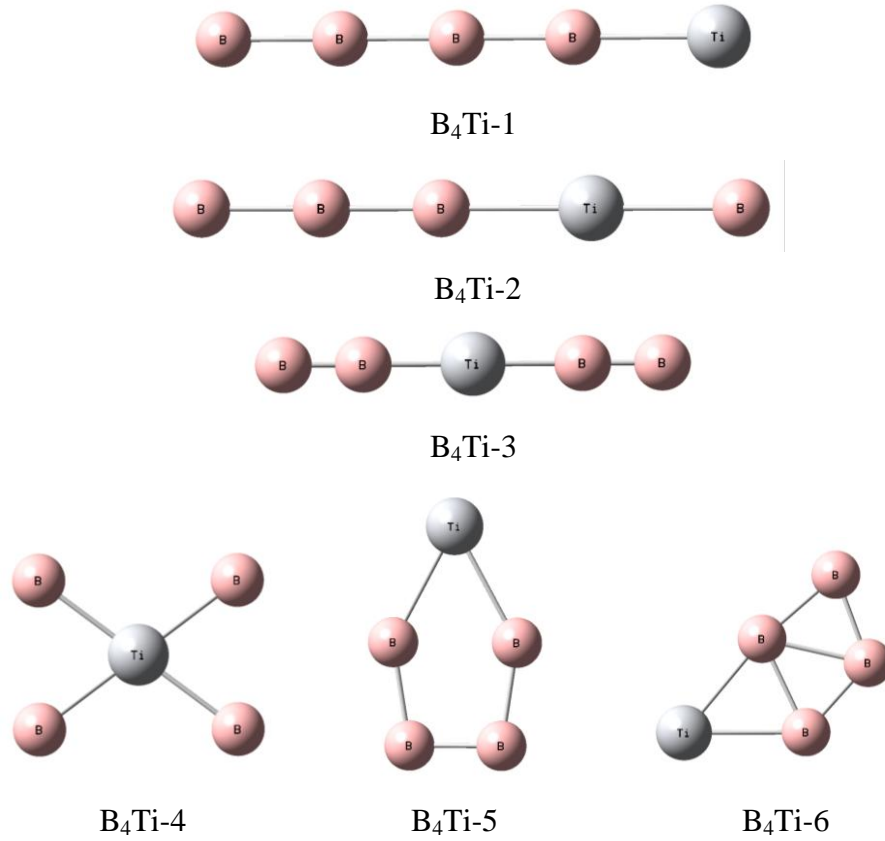
#### *B<sub>4</sub>Ti nötr atom topakları:*

Tablo 6.19 B<sub>4</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

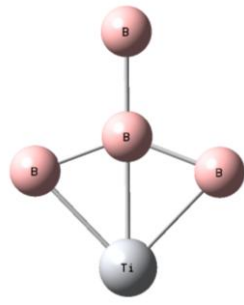
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>4</sub>Ti-1</b>	<b>Singlet</b>	-68.7853328181	3.166			
	<b>Triplet</b>	-68.8052537741	2.625			
	<b>Quintet</b>	-68.8209591220	2.197			
	<b>Septet</b>	-68.8114879026	2.455			
<b>B<sub>4</sub>Ti-2</b>	<b>Singlet</b>	-68.6813669973	5.993			
	<b>Triplet</b>	-68.7032247422	5.399			
	<b>Quintet</b>	-68.7141046942	5.103			
	<b>Septet</b>	-68.7362798694	4.500			
	<b>Nonet</b>	-68.7040408112	5,377			
<b>B<sub>4</sub>Ti-3</b>	<b>Singlet</b>	-68.6374583458	7.187			
	<b>Triplet</b>	-68.6690492360	6.328			
	<b>Quintet</b>	-68.7179261453	4.999			
	<b>Septet</b>	-68.7151560421	5.074			
<b>B<sub>4</sub>Ti-4</b>	<b>Singlet</b>	-68.7372931907	4.472			
	<b>Triplet</b>	-68.7187796481	4.976			
<b>B<sub>4</sub>Ti-5</b>	<b>Singlet</b>	-68.8519927832	1.354			
	<b>Triplet</b>	-68.8935950473	0.222			
	<b>Quintet</b>	-68.8721888593	0.804			
<b>B<sub>4</sub>Ti-6</b>	<b>Singlet</b>	-68.8957697681	0.163	-948.618681628	0.148	-
	<b>Triplet</b>	-68.9017895869	0	-948.624127833	0	-948.638596495
	<b>Quintet</b>	-68.8731269971	0.779	-948.597861541	0.714	-
<b>B<sub>4</sub>Ti-7</b>	<b>Singlet</b>	-68.7706340456	3.566			
	<b>Triplet</b>	-68.8204106238	2.212			
	<b>Quintet</b>	-68.8056484658	2.614			
<b>B<sub>4</sub>Ti-8</b>	<b>Singlet</b>	-68.8647725609	1.006			
	<b>Triplet</b>	-68.8860363792	0.428			
	<b>Quintet</b>	-68.8565528560	1.230			
<b>B<sub>4</sub>Ti-9</b>	<b>Singlet</b>	-68.8158642560	2.336			
	<b>Triplet</b>	-68.8644501454	1.015			
	<b>Quintet</b>	-68.8564473055	1.232			

Tablo 6.19 (devam) B<sub>4</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

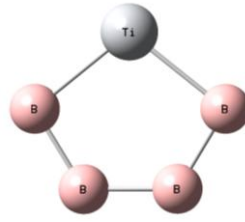
<b>B<sub>4</sub>Ti-10</b>	<b>Singlet</b>	-68.8455094069	1.530
	<b>Triplet</b>	-68.8509573360	1.382
	<b>Quintet</b>	-68.8564492738	1.232
	<b>Septet</b>	-68.8290341765	1.978
<b>B<sub>4</sub>Ti-11</b>	<b>Singlet</b>	-68.8432450278	1.591
	<b>Triplet</b>	-68.8420075802	1.625
<b>B<sub>4</sub>Ti-12</b>	<b>Singlet</b>	-68.8384099183	1.723
	<b>Triplet</b>	-68.8497010109	1.416
	<b>Quintet</b>	-68.8554668058	1.259
	<b>Septet</b>	-68.7827574704	3.236
<b>B<sub>4</sub>Ti-13</b>	<b>Singlet</b>	-68.7640135117	3.746
	<b>Triplet</b>	-68.7873934110	3.110
	<b>Quintet</b>	-68.7680728374	3.636
<b>B<sub>4</sub>Ti-14</b>	<b>Singlet</b>	-68.8641858414	1.022
	<b>Triplet</b>	-68.8693007005	0.883
	<b>Quintet</b>	-68.8564713498	1.232



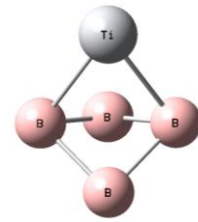
Şekil 6.12 B<sub>4</sub>Ti Atom Topakları



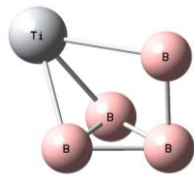
B<sub>4</sub>Ti-7



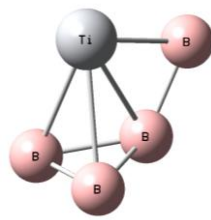
B<sub>4</sub>Ti-8



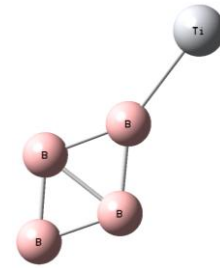
B<sub>4</sub>Ti-9



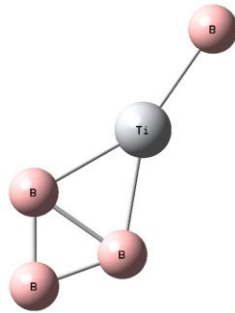
B<sub>4</sub>Ti-10



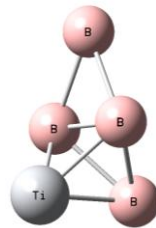
B<sub>4</sub>Ti-11



B<sub>4</sub>Ti-12



B<sub>4</sub>Ti-13



B<sub>4</sub>Ti-14

Şekil 6.12 (devam) B<sub>4</sub>Ti Atom Topakları

***B<sub>4</sub>Ti iyon atom topakları:***

Tablo 6.20 B<sub>4</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>4</sub>Ti-1</b>	<b>Doublet</b>	-68.8771486688	2.197			
	<b>Quartet</b>	-68.8759790671	2.229			
<b>B<sub>4</sub>Ti-2</b>	<b>Doublet</b>	-68.7884524728	4.609			
	<b>Quartet</b>	-68.7875294604	4.634			
<b>B<sub>4</sub>Ti-3</b>	<b>Doublet</b>	-68.7471222893	5.733			
	<b>Quartet</b>	-68.7753996848	4.964			
	<b>Sextet</b>	-68.7886390350	4.604			
	<b>Octet</b>	-68.7765712595	4.932			
<b>B<sub>4</sub>Ti-4</b>	<b>Doublet</b>	-68.8406010246	3.191			
	<b>Quartet</b>	-68.8229417165	3.671			
<b>B<sub>4</sub>Ti-5</b>	<b>Doublet</b>	-68.9420702923	0.432			
	<b>Quartet</b>	-68.9511928807	0.184			
	<b>Sextet</b>	-68.9321272592	0.702			
<b>B<sub>4</sub>Ti-6</b>	<b>Doublet</b>	-68.9579634694	0	-948.671571679	0.251	-
	<b>Quartet</b>	-68.9575925151	0.010	-948.680820368	0	-948.692510660
<b>B<sub>4</sub>Ti-7</b>	<b>Doublet</b>	-68.8689885842	2.419			
	<b>Quartet</b>	-68.8878660091	1.906			
	<b>Sextet</b>	-68.8665253986	2.486			
<b>B<sub>4</sub>Ti-8</b>	<b>Doublet</b>	-68.9556003499	0.064			
	<b>Quartet</b>	-68.9546714668	0.089			
<b>B<sub>4</sub>Ti-9</b>	<b>Doublet</b>	-68.9146911943	1.176			
	<b>Quartet</b>	-68.9136974631	1.203			
<b>B<sub>4</sub>Ti-10</b>	<b>Doublet</b>	-68.9053315606	1.431			
	<b>Quartet</b>	-68.8979413039	1.632			
<b>B<sub>4</sub>Ti-11</b>	<b>Doublet</b>	-68.9141700398	1.190			
	<b>Quartet</b>	-68.9088177227	1.336			
<b>B<sub>4</sub>Ti-12</b>	<b>Doublet</b>	-68.9103982038	1,293			
	<b>Quartet</b>	-68.9291762326	0,782			
	<b>Sextet</b>	-68.9006243136	1,559			
<b>B<sub>4</sub>Ti-13</b>	<b>Doublet</b>	-68.8634221507	2.570			
	<b>Quartet</b>	-68.8743677807	2.273			
	<b>Sextet</b>	-68.8646460035	2.537			

Tablo 6.20 (devam) B<sub>4</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>4</sub>Ti-14</b>	<b>Doublet</b>	-68.9202726069	1.024
	<b>Quartet</b>	-68.9302306405	0.754
	<b>Sextet</b>	-68.9202779155	1.024

6.3.5. B<sub>5</sub>Ti Atom Topakları*B<sub>5</sub>Ti nötr atom topakları:*Tablo 6.21 B<sub>5</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>5</sub>Ti-1</b>	<b>Doublet</b>	-71.5300547644	3.664			
	<b>Quartet</b>	-71.5565168040	2.944			
	<b>Sextet</b>	-71.5641715341	2.736			
	<b>Octet</b>	-71.5513135516	3.085			
<b>B<sub>5</sub>Ti-2</b>	<b>Doublet</b>	-71.4796285582	5.035			
	<b>Quartet</b>	-71.4518808897	5.789			
<b>B<sub>5</sub>Ti-3</b>	<b>Doublet</b>	-71.4300670367	6.382			
	<b>Quartet</b>	-71.4472823368	5.914			
	<b>Sextet</b>	-71.4422381479	6.051			
<b>B<sub>5</sub>Ti-4</b>	<b>Doublet</b>	-71.6542145836	0.287			
	<b>Quartet</b>	-71.6588386303	0.162			
	<b>Sextet</b>	-71.6275286709	1.013			
<b>B<sub>5</sub>Ti-5</b>	<b>Doublet</b>	-71.6220942513	1.161			
	<b>Quartet</b>	-71.5930053396	1.952			
<b>B<sub>5</sub>Ti-6</b>	<b>Doublet</b>	-71.6106547869	1.472			
	<b>Quartet</b>	-71.6144979133	1.367			
	<b>Sextet</b>	-71.6209721973	1.191			
	<b>Octet</b>	-71.5470456522	3.202			
<b>B<sub>5</sub>Ti-7</b>	<b>Doublet</b>	-71.6297727103	0.952			
	<b>Quartet</b>	-71.6061913706	1.593			
<b>B<sub>5</sub>Ti-8</b>	<b>Doublet</b>	-71.6525062340	0.334	-973.453057231	0.301	-
	<b>Quartet</b>	-71.6648015259	0	-973.464153642	0	-973.475180219
	<b>Sextet</b>	-71.6275209874	1.013	-973.428973602	0.956	-
<b>B<sub>5</sub>Ti-9</b>	<b>Doublet</b>	-71.6390907850	0.699			
	<b>Quartet</b>	-71.6432239516	0.586			
	<b>Sextet</b>	-71.6129496004	1.409			

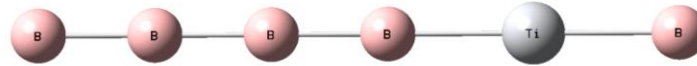


Tablo 6.21 (devam) B<sub>5</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

B <sub>5</sub> Ti-10	Doublet	-71.6359609979	0.784
	Quartet	-71.6281597640	0.996
B <sub>5</sub> Ti-11	Doublet	-71.4917867540	4.704
	Quartet	-71.4981191314	4.532
	Sextet	-71.4910164471	4.725
B <sub>5</sub> Ti-12	Doublet	-71.5715370477	2.536
	Quartet	-71.5690931214	2.602
B <sub>5</sub> Ti-13	Doublet	-71.6190372608	1.244
	Quartet	-71.6114380317	1.451
B <sub>5</sub> Ti-14	Doublet	-71.6354880626	0.797
	Quartet	-71.6221357726	1.160
B <sub>5</sub> Ti-15	Doublet	-71.6448262935	0.543
	Quartet	-71.6574576442	0.199
	Sextet	-71.6249951819	1.082
B <sub>5</sub> Ti-16	Doublet	-71.6141023566	1.378
	Quartet	-71.6144979133	1.367
	Sextet	-71.5942047108	1.919
B <sub>5</sub> Ti-17	Doublet	-71.6324258361	0.880
	Quartet	-71.6317164980	0.899
B <sub>5</sub> Ti-18	Doublet	-71.5999138219	1.764
	Quartet	-71.6322141292	0.886
	Sextet	-71.6034014754	1.669
B <sub>5</sub> Ti-19	Doublet	-71.5268525858	3.751
	Quartet	-71.5233824606	3.845



B<sub>5</sub>Ti-1

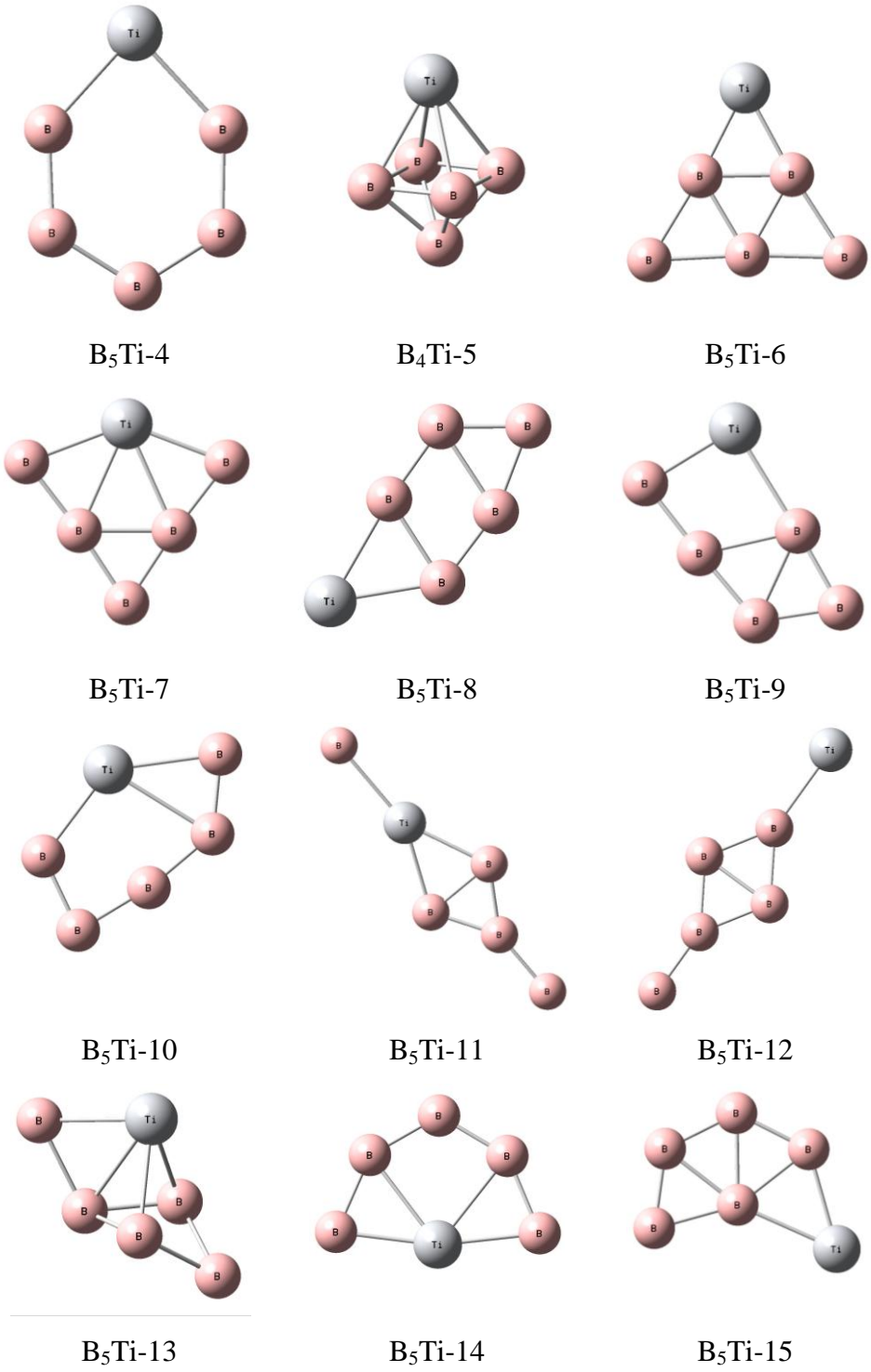


B<sub>5</sub>Ti-2



B<sub>5</sub>Ti-3

Şekil 6.13 B<sub>5</sub>Ti Atom Topakları



Şekil 6.13 (devam) B<sub>5</sub>Ti Atom Topakları



Tablo 6.22 (devam) B<sub>5</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>5</sub>Ti-4</b>	<b>Singlet</b>	-71.7180054338	0.547			
	<b>Triplet</b>	-71.7216886059	0.446			
	<b>Quintet</b>	-71.7169273556	0.576			
<b>B<sub>5</sub>Ti-5</b>	<b>Singlet</b>	-71.6692895170	1.871			
	<b>Triplet</b>	-71.6762994851	1.681			
	<b>Quintet</b>	-71.6471259559	2.474			
<b>B<sub>5</sub>Ti-6</b>	<b>Singlet</b>	-71.6610526425	2.095			
	<b>Triplet</b>	-71.6871734543	1.385			
	<b>Quintet</b>	-71.6914132842	1.270			
	<b>Septet</b>	-71.6361836640	2.772			
<b>B<sub>5</sub>Ti-7</b>	<b>Singlet</b>	-71.6946335596	1.182			
	<b>Triplet</b>	-71.7078524551	0.823			
	<b>Quintet</b>	-71.6840883662	1.469			
<b>B<sub>5</sub>Ti-8</b>	<b>Singlet</b>	-71.7223306612	0.429			
	<b>Triplet</b>	-71.7248667019	0.360			
	<b>Quintet</b>	-71.7284998252	0.261			
	<b>Septet</b>	-71.6891429876	1.331			
<b>B<sub>5</sub>Ti-9</b>	<b>Singlet</b>	-71.7103344168	0.755			
	<b>Triplet</b>	-71.7102048169	0.759			
<b>B<sub>5</sub>Ti-10</b>	<b>Singlet</b>	-71.7375308496	0.016			
	<b>Triplet</b>	-71.7125936847	0.694			
<b>B<sub>5</sub>Ti-11</b>	<b>Singlet</b>	-71.5814331117	4.260			
	<b>Triplet</b>	-71.5914822688	3.987			
	<b>Quintet</b>	-71.5858466547	4.140			
<b>B<sub>5</sub>Ti-12</b>	<b>Singlet</b>	-71.6024815932	3.688			
	<b>Triplet</b>	-71.6460607171	2.503			
	<b>Quintet</b>	-71.6464631758	2.492			
	<b>Septet</b>	-71.6511478839	2.365			
	<b>Nonet</b>	-71.5803563274	4.290			
<b>B<sub>5</sub>Ti-13</b>	<b>Singlet</b>	-71.6953857712	1.162			
	<b>Triplet</b>	-71.6901686727	1.304			
<b>B<sub>5</sub>Ti-14</b>	<b>Singlet</b>	-71.7137971193	0.661	-973.532519342	0	-973.521537349
	<b>Triplet</b>	-71.7381266321	0	-973.530990359	0.041	-
	<b>Quintet</b>	-71.7069769325	0.847	-	-	-
<b>B<sub>5</sub>Ti-15</b>	<b>Singlet</b>	-71.7125962631	0.694			
	<b>Triplet</b>	-71.7105036649	0.751			
<b>B<sub>5</sub>Ti-16</b>	<b>Singlet</b>	-71.6610526426	2.095			
	<b>Triplet</b>	-71.6871734543	1.385			
	<b>Quintet</b>	-71.6844330632	1.460			
<b>B<sub>5</sub>Ti-17</b>	<b>Singlet</b>	-71.6840826962	1.469			
	<b>Triplet</b>	-71.7014118245	0.998			
	<b>Quintet</b>	-71.6969740776	1.119			

Tablo 6.22 (devam2) B<sub>5</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

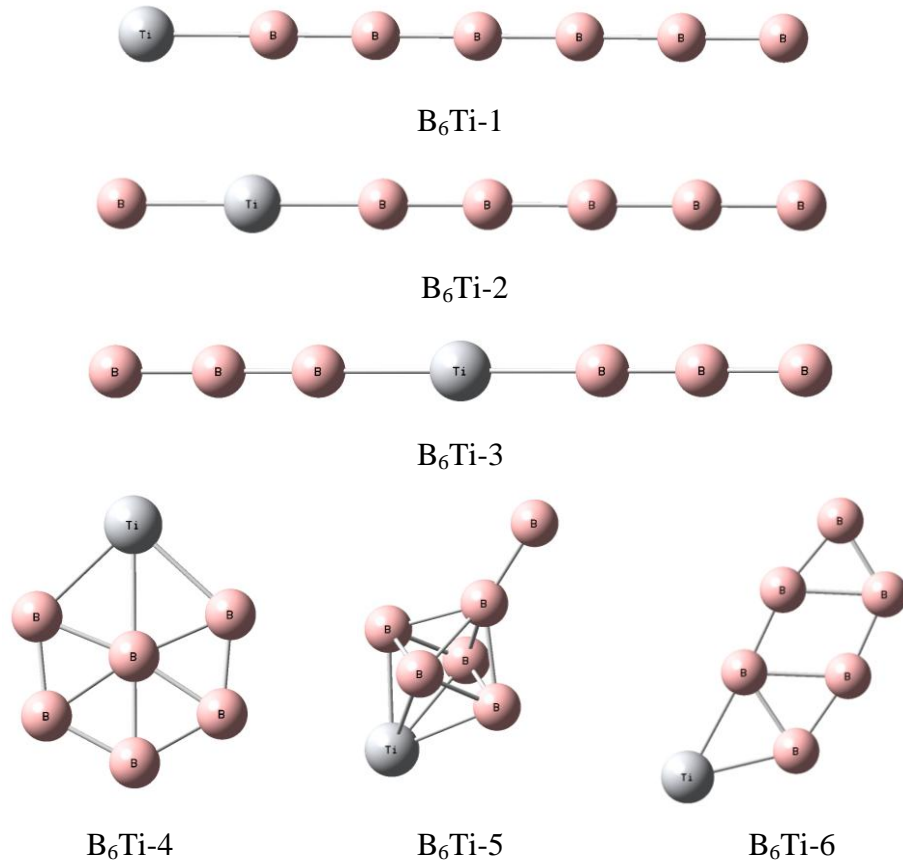
<b>B<sub>5</sub>Ti-18</b>	<b>Singlet</b>	-71.6722299430	1.791
	<b>Triplet</b>	-71.6699314850	1.854
<b>B<sub>5</sub>Ti-19</b>	<b>Singlet</b>	-71.5928403254	3.950
	<b>Triplet</b>	-71.6291013577	2.964
	<b>Quintet</b>	-71.6381121847	2.719
	<b>Septet</b>	-71.5974953690	3.824

6.3.6. B<sub>6</sub>Ti Atom Topakları*B<sub>6</sub>Ti nötr atom topakları:*Tablo 6.23 B<sub>6</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

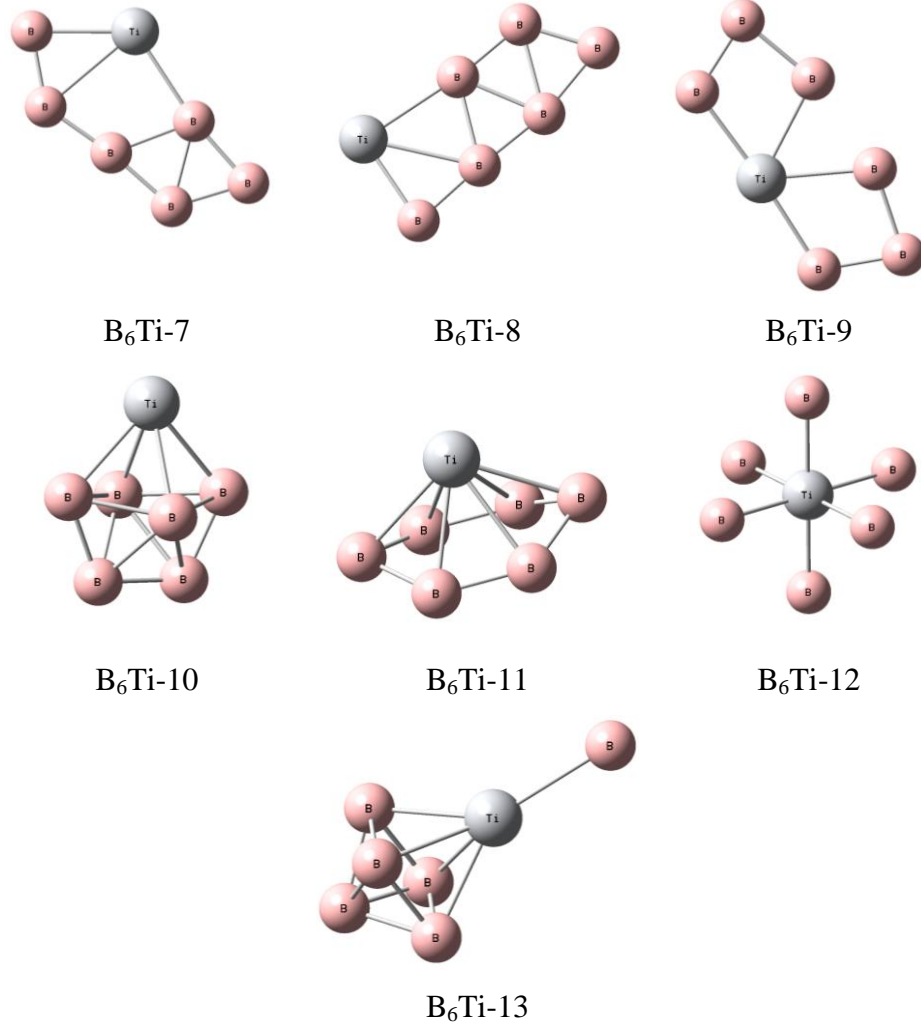
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>Ti-1</b>	<b>Singlet</b>	-74.2565048231	5.471			
	<b>Triplet</b>	-74.2805824724	4.817			
	<b>Quintet</b>	-74.3011616615	4.257			
	<b>Septet</b>	-74.3157028984	3.862			
	<b>Nonet</b>	-74.2839297615	4,726			
<b>B<sub>6</sub>Ti-2</b>	<b>Singlet</b>	-74.0707676047	10.522			
	<b>Triplet</b>	-74.2187909013	6.497			
	<b>Quintet</b>	-74.0988303400	9.759			
<b>B<sub>6</sub>Ti-3</b>	<b>Singlet</b>	-74.1589921490	8.123			
	<b>Triplet</b>	-74.2094582277	6.751			
	<b>Quintet</b>	-74.1955876134	7.128			
<b>B<sub>6</sub>Ti-4</b>	<b>Singlet</b>	-74.4510323896	0.182	-998.334924443	0.182	-
	<b>Triplet</b>	-74.4577373195	0	-998.341624401	0	-998.348987322
	<b>Quintet</b>	-74.4297234816	0.761	-998.283869015	1.570	-
<b>B<sub>6</sub>Ti-5</b>	<b>Singlet</b>	-74.3448017422	3.070			
	<b>Triplet</b>	-74.3322478686	3.412			
<b>B<sub>6</sub>Ti-6</b>	<b>Singlet</b>	-74.4280672028	0.806			
	<b>Triplet</b>	-74.4294812275	0.768			
	<b>Quintet</b>	-74.4243553252	0.907			
<b>B<sub>6</sub>Ti-7</b>	<b>Singlet</b>	-74.3993862174	1.586			
	<b>Triplet</b>	-74.3945949252	1.716			
<b>B<sub>6</sub>Ti-8</b>	<b>Singlet</b>	-74.4098614911	1.301			
	<b>Triplet</b>	-74.4051156491	1.430			

Tablo 6.23 (devam) B<sub>6</sub>Ti nötr atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>6</sub>Ti-9</b>	<b>Singlet</b>	-74.4116366104	1.253
	<b>Triplet</b>	-74.4090587360	1.323
<b>B<sub>6</sub>Ti-10</b>	<b>Singlet</b>	-74.4119043478	1.246
	<b>Triplet</b>	-74.4119043591	1.246
	<b>Quintet</b>	-74.3845642927	1.989
<b>B<sub>6</sub>Ti-11</b>	<b>Singlet</b>	-74.4348130060	0.623
	<b>Triplet</b>	-74.4433119317	0.392
	<b>Quintet</b>	-74.4094758936	1.312
<b>B<sub>6</sub>Ti-12</b>	<b>Singlet</b>	-73.9510811237	13.776
	<b>Triplet</b>	-73.9734898111	13.167
	<b>Quintet</b>	-74.0043475965	12.328
	<b>Septet</b>	-73.9822656189	12.929
<b>B<sub>6</sub>Ti-13</b>	<b>Singlet</b>	-74.2827807627	4.757
	<b>Triplet</b>	-74.2907037607	4.541
	<b>Quintet</b>	-74.2731540036	5.019



Şekil 6.14 B<sub>6</sub>Ti Atom Topakları



Şekil 6.14 (devam) B<sub>6</sub>Ti Atom Topakları

***B<sub>6</sub>Ti iyon atom topakları:***

Tablo 6.24 B<sub>6</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		<b>CEP121-G</b>		<b>6-311++G(d,p)</b>		<b>cc-PVDZ</b>
		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>Ti-1</b>	<b>Doublet</b>	-74.3875986561	3.923			
	<b>Quartet</b>	-74.3837018473	4.029			

Tablo 6.24 (devam) B<sub>6</sub>Ti iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>6</sub>Ti-2</b>	<b>Doublet</b>	-74.1622016918	10.052			
	<b>Quartet</b>	-74.1600235519	10.111			
<b>B<sub>6</sub>Ti-3</b>	<b>Doublet</b>	-74.3070921652	6.112			
	<b>Quartet</b>	-74.2885749105	6.615			
<b>B<sub>6</sub>Ti-4</b>	<b>Doublet</b>	-74.5297882950	0.056	-998.416821855	0	-998.420858082
	<b>Quartet</b>	-74.5318791961	0	-998.415971858	0.023	-
	<b>Sextet</b>	-74.4850259204	1.274	-	-	-
<b>B<sub>6</sub>Ti-5</b>	<b>Doublet</b>	-74.4070670446	3.393			
	<b>Quartet</b>	-74.4447175719	2.370			
	<b>Sextet</b>	-74.3604177856	4.662			
<b>B<sub>6</sub>Ti-6</b>	<b>Doublet</b>	-74.5036615894	0.767			
	<b>Quartet</b>	-74.5090945170	0.619			
	<b>Sextet</b>	-74.4839554672	1.303			
<b>B<sub>6</sub>Ti-7</b>	<b>Doublet</b>	-74.4839080789	1.304			
	<b>Quartet</b>	-74.4826909717	1.337			
<b>B<sub>6</sub>Ti-8</b>	<b>Doublet</b>	-74.4916557901	1.093			
	<b>Quartet</b>	-74.4950160371	1.002			
	<b>Sextet</b>	-74.4789533999	1.439			
<b>B<sub>6</sub>Ti-9</b>	<b>Doublet</b>	-74.5163562527	0.422			
	<b>Quartet</b>	-74.4976362689	0.931			
<b>B<sub>6</sub>Ti-10</b>	<b>Doublet</b>	-74.4715836640	1.639			
	<b>Quartet</b>	-74.4607032949	1.935			
<b>B<sub>6</sub>Ti-11</b>	<b>Doublet</b>	-74.5192416217	0.343			
	<b>Quartet</b>	-74.4899077980	1.141			
<b>B<sub>6</sub>Ti-12</b>	<b>Doublet</b>	-74.0792282117	12.308			
	<b>Quartet</b>	-74.0814783460	12.247			
	<b>Sextet</b>	-74.1022025535	11.683			
	<b>Octet</b>	-74.0902146309	12.009			
<b>B<sub>6</sub>Ti-13</b>	<b>Doublet</b>	-74.3693261844	4.420			
	<b>Quartet</b>	-74.3804833579	4.116			
	<b>Sextet</b>	-74.3465679501	5.038			



## 6.4. KROM KATKILI BOR ATOM TOPAKLARI

### 6.4.1. BCr Atom Topağı

#### *BCr nötr atom topakları:*

Tablo 6.25 BCr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>BCr</b>	<b>Doublet</b>	-89.0861441915	2.110	-1069.08893529	1.345	-
	<b>Quartet</b>	-89.1458655779	0.486	-1069.09265284	1.243	-
	<b>Sextet</b>	-89.1637686152	0	-1069.13840046	0	-1069.18042290
	<b>Octet</b>	-89.1547837910	0.244	-1069.12825314	0.275	-



BCr

Şekil 6.15 BCr Atom Topağı

#### *BCr iyon atom topakları:*

Tablo 6.26 BCr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

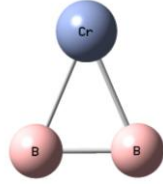
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>BCr</b>	<b>Singlet</b>	-89.0759957599	3.240	-1069.06831159	2.904	-
	<b>Triplet</b>	-89.1416191577	1.456	-1069.12082840	1.476	-
	<b>Quintet</b>	-89.1951713664	0	-1069.17511015	0	-1069.195352990
	<b>Septet</b>	-89.1877304876	0.202	-1069.16520374	0.269	-

## 6.4.2. B<sub>2</sub>Cr Atom Topakları

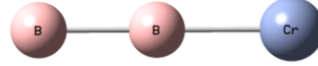
### *B<sub>2</sub>Cr nötr atom topakları:*

Tablo 6.27 B<sub>2</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

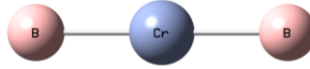
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>2</sub>Cr-1</b>	<b>Singlet</b>	-91.8601249097	1.271	-1093.88552076	1.834	-
	<b>Triplet</b>	-91.9068823171	0	-1093.91561729	1.016	-
	<b>Quintet</b>	-91.8996795322	0.195	-1093.95299215	0	-898.922230834
	<b>Septet</b>	-	-	-1093.92517458	0.756	-
<b>B<sub>2</sub>Cr-2</b>	<b>Singlet</b>	-91.8603712138	1.264			
	<b>Triplet</b>	-91.8354178027	1.943			
<b>B<sub>2</sub>Cr-3</b>	<b>Singlet</b>	-91.7361754597	4.641			
	<b>Triplet</b>	-91.7876825882	3.241			
	<b>Quintet</b>	-91.7830265117	3.367			



B<sub>2</sub>Cr-1



B<sub>2</sub>Cr-2



B<sub>2</sub>Cr-3

Şekil 6.16 B<sub>2</sub>Cr Atom Topakları

*B<sub>2</sub>Cr iyon atom topakları:*

Tablo 6.28 B<sub>2</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>2</sub>Cr-1</b>	<b>Doublet</b>	-91.9351020321	0.935	-1093.96219914	1.780	-
	<b>Quartet</b>	-91.9694964631	0	-1094.02768294	0	-1094.06463655
	<b>Sextet</b>	-91.9435848692	0.704	-1094.00093039	0.727	-
<b>B<sub>2</sub>Cr-2</b>	<b>Doublet</b>	-91.9350733418	0.936			
	<b>Quartet</b>	-91.8478318079	3.308			
<b>B<sub>2</sub>Cr-3</b>	<b>Doublet</b>	-91.8223196008	4.002			
	<b>Quartet</b>	-91.8231743573	3.978			
	<b>Sextet</b>	-91.8441885300	3.407			
	<b>Octet</b>	-91.8595220375	2.990			
	<b>Dectet</b>	-91.8751738924	2.564			
	<b>12-et</b>	-91.7061301790	7,161			

6.4.3. B<sub>3</sub>Cr Atom Topakları

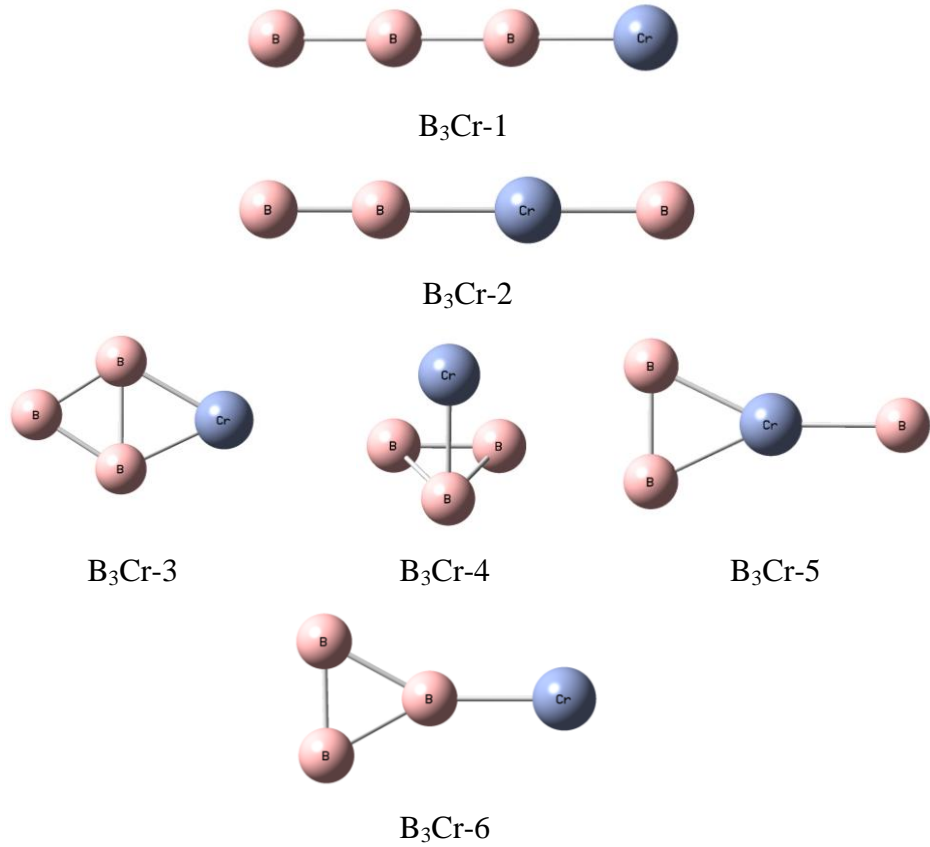
*B<sub>3</sub>Cr nötr atom topakları:*

Tablo 6.29 B<sub>3</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>Cr-1</b>	<b>Doublet</b>	-94.5488832343	3.444			
	<b>Quartet</b>	-94.5688124378	2.902			
	<b>Sextet</b>	-94.6407741070	0.945			
	<b>Octet</b>	-94.6436220918	0.868			
	<b>Dectet</b>	-94.5976307431	2.118			
<b>B<sub>3</sub>Cr-2</b>	<b>Doublet</b>	-94.4746974009	5.461			
	<b>Quartet</b>	-94.4915427854	5.003			
	<b>Sextet</b>	-94.5406559387	3.668			
	<b>Octet</b>	-94.5343596447	3.839			

Tablo 6.29 (devam)  $B_3Cr$  nötr atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>3</sub>Cr-3</b>	<b>Doublet</b>	-94.6453361816	0.821	-1118.78150010	0.972	-
	<b>Quartet</b>	-94.6716076915	0.107	-1118.80796213	0.253	-
	<b>Sextet</b>	-94.6755512011	0	-1118.81727555	0	-1118.849722060
	<b>Octet</b>	-94.6320216894	1.183	-1118.76799946	1.339	-
<b>B<sub>3</sub>Cr-4</b>	<b>Doublet</b>	-94.6103120661	1.773			
	<b>Quartet</b>	-94.6716030429	0.107			
	<b>Sextet</b>	-94.6671533638	0.228			
<b>B<sub>3</sub>Cr-5</b>	<b>Doublet</b>	-94.5181920155	4.278			
	<b>Quartet</b>	-94.5495187828	3.427			
	<b>Sextet</b>	-94.5441470974	3.573			
<b>B<sub>3</sub>Cr-6</b>	<b>Doublet</b>	-94.5841416747	2.485			
	<b>Quartet</b>	-94.6349320969	1.104			
	<b>Sextet</b>	-94.6623889120	0.357			
	<b>Octet</b>	-94.6353730265	1,092			



Şekil 6.17  $B_3Cr$  Atom Topakları

*B<sub>3</sub>Cr iyon atom topakları:*

Tablo 6.30 B<sub>3</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>Cr-1</b>	<b>Singlet</b>	-94.5382019513	5.532			
	<b>Triplet</b>	-94.6346866718	2.908			
	<b>Quintet</b>	-94.6959640605	1.242			
	<b>Septet</b>	-94.7101893683	0.855			
	<b>Nonet</b>	-94.6695019547	1.961			
<b>B<sub>3</sub>Cr-2</b>	<b>Singlet</b>	-94.4970062715	6.652			
	<b>Triplet</b>	-94.6187798985	3.341			
	<b>Quintet</b>	-94.5982212134	3.900			
<b>B<sub>3</sub>Cr-3</b>	<b>Singlet</b>	-94.6833860857	1.584	-1118.80252671	2.165	-
	<b>Triplet</b>	-94.7109903800	0.833	-1118.81256568	1.892	-
	<b>Quintet</b>	-94.7416499736	0	-1118.88216332	0	-1118.911863660
	<b>Septet</b>	-94.7140628035	0.750	-1118.85540480	0.727	-
<b>B<sub>3</sub>Cr-4</b>	<b>Singlet</b>	-94.6543501153	2.373			
	<b>Triplet</b>	-94.7109900356	0.833			
	<b>Quintet</b>	-94.7416495586	0.001			
	<b>Septet</b>	-94.7323318192	0.253			
<b>B<sub>3</sub>Cr-5</b>	<b>Singlet</b>	-94.6157266611	3.424			
	<b>Triplet</b>	-94.6007894069	3.830			
<b>B<sub>3</sub>Cr-6</b>	<b>Singlet</b>	-94.6521815600	2.432			
	<b>Triplet</b>	-94.6705039811	1.934			
	<b>Quintet</b>	-94.7223449692	0.524			
	<b>Septet</b>	-94.7323318600	0.253			
	<b>Nonet</b>	94,6793206127	1,694			

#### 6.4.4. B<sub>4</sub>Cr Atom Topakları

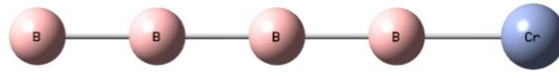
##### *B<sub>4</sub>Cr nötr atom topakları:*

Tablo 6.31 B<sub>4</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

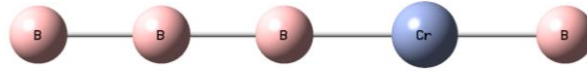
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>4</sub>Cr-1</b>	<b>Singlet</b>	-97.3690866211	2.364			
	<b>Triplet</b>	-97.3805603307	2.052			
	<b>Quintet</b>	-97.3697362614	2.347			
<b>B<sub>4</sub>Cr-2</b>	<b>Singlet</b>	-97.1978777878	7.020			
	<b>Triplet</b>	-97.2422257683	5.814			
	<b>Quintet</b>	-97.2603282350	5.322			
	<b>Septet</b>	-97.2776238317	4.852			
	<b>Nonet</b>	-97.2967170976	4.332			
	<b>11-et</b>	-97.2386454810	5,911			
<b>B<sub>4</sub>Cr-3</b>	<b>Singlet</b>	-97.2612505782	5.297			
	<b>Triplet</b>	-97.2386328260	5.912			
<b>B<sub>4</sub>Cr-4</b>	<b>Singlet</b>	-97.2630855100	5.247			
	<b>Triplet</b>	-97.2179938034	6.473			
<b>B<sub>4</sub>Cr-5</b>	<b>Singlet</b>	-97.3457609258	2.999			
	<b>Triplet</b>	-97.4063044109	1.352			
	<b>Quintet</b>	-97.4524903995	0.097			
	<b>Septet</b>	-97.3925834471	1.726			
<b>B<sub>4</sub>Cr-6</b>	<b>Singlet</b>	-97.3946851501	1.668	-1143.60687347	1.695	-
	<b>Triplet</b>	-97.4093030925	1.271	-1143.64265868	0.722	-
	<b>Quintet</b>	-97.4560588686	0	-1143.66922933	0	-1143.69868094
	<b>Septet</b>	-97.4257503811	0.824	-1143.63927076	0.814	-
<b>B<sub>4</sub>Cr-7</b>	<b>Singlet</b>	-97.3039071479	4.137			
	<b>Triplet</b>	-97.3004117623	4.232			
<b>B<sub>4</sub>Cr-8</b>	<b>Singlet</b>	-97.3603444731	2.602			
	<b>Triplet</b>	97.3700628473	2.338			
	<b>Quintet</b>	-97.3627573853	2.537			
<b>B<sub>4</sub>Cr-9</b>	<b>Singlet</b>	-97.3604333948	2.600			
	<b>Triplet</b>	-97.3817960644	2.019			
	<b>Quintet</b>	-97.3627135087	2.538			
<b>B<sub>4</sub>Cr-10</b>	<b>Singlet</b>	-97.2968246229	4.329			
	<b>Triplet</b>	-97.3759955764	2.177			
	<b>Quintet</b>	-97.4154811034	1.103			
	<b>Septet</b>	-97.4289485301	0.737			
	<b>Nonet</b>	-97,3735109398	2,244			

Tablo 6.31 (devam) B<sub>4</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

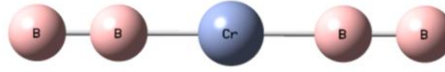
<b>B<sub>4</sub>Cr-11</b>	<b>Singlet</b>	-97.2355839306	5.995
	<b>Triplet</b>	-97.3005886954	4.227
	<b>Quintet</b>	-97.3288801557	3.458
	<b>Septet</b>	-97.3045575384	4.119
<b>B<sub>4</sub>Cr-12</b>	<b>Singlet</b>	-97.3602999272	2.603
	<b>Triplet</b>	-97.3778262933	2.127
	<b>Quintet</b>	-97.4147037316	1.124
	<b>Septet</b>	-97.4072022751	1.328



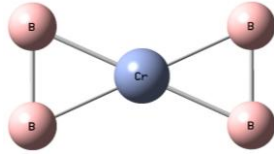
B<sub>4</sub>Cr-1



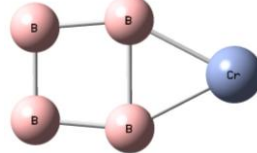
B<sub>4</sub>Cr-2



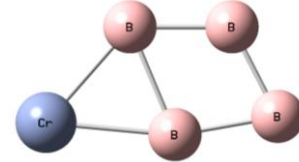
B<sub>4</sub>Cr-3



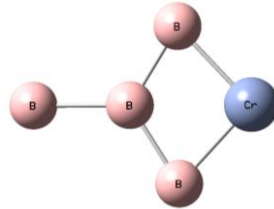
B<sub>4</sub>Cr-4



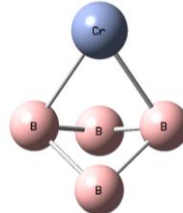
B<sub>4</sub>Cr-5



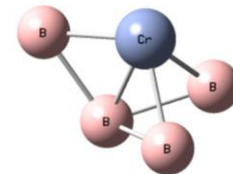
B<sub>4</sub>Cr-6



B<sub>4</sub>Cr-7

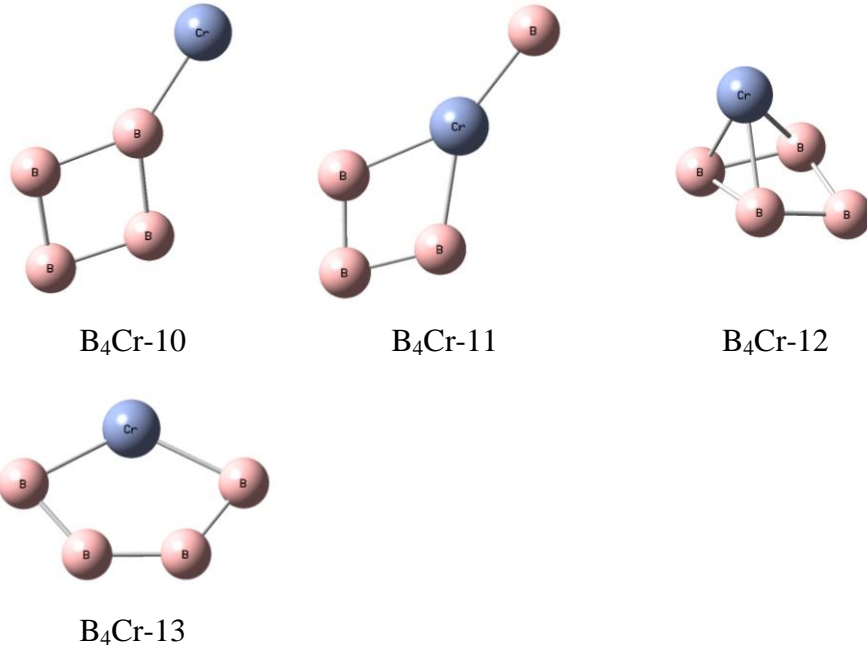


B<sub>4</sub>Cr-8



B<sub>4</sub>Cr-9

Şekil 6.18 B<sub>4</sub>Cr Atom Topakları



Şekil 6.18 (devam) B<sub>4</sub>Cr Atom Topakları

***B<sub>4</sub>Cr iyon atom topakları:***

Tablo 6.32 B<sub>4</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>4</sub>Cr-1</b>	<b>Doublet</b>	-97.4452670729	1.829			
	<b>Quartet</b>	-97.4371575685	2.050			
<b>B<sub>4</sub>Cr-2</b>	<b>Doublet</b>	-97.3034734007	5.685			
	<b>Quartet</b>	-97.2832750476	6.234			
<b>B<sub>4</sub>Cr-3</b>	<b>Doublet</b>	-97.2725432201	6.526			
	<b>Quartet</b>	-97.3488940410	4.450			
	<b>Sextet</b>	-97.2839817065	6.215			
<b>B<sub>4</sub>Cr-4</b>	<b>Doublet</b>	-97.3301316983	4.960			
	<b>Quartet</b>	-97.3412664403	4.657			
	<b>Sextet</b>	-97.3442579322	4.576			
	<b>Octet</b>	-97.3370356073	4.772			



Tablo 6.32 (devam) B<sub>4</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>4</sub>Cr-5</b>	<b>Doublet</b>	-97.3988983952	3.090	-1143.61598447	2.972	-
	<b>Quartet</b>	-97.4940294517	0.503	-1143.70711890	0.494	-1143.734991470
	<b>Sextet</b>	-97.5125518451	0	-1143.70310353	0.604	-
	<b>Octet</b>	-97.4651446611	1.289	-	-	-
<b>B<sub>4</sub>Cr-6</b>	<b>Doublet</b>	-97.4392765037	1.992			
	<b>Quartet</b>	-97.5067760858	0.157			
	<b>Sextet</b>	-97.5125476622	0.001			
	<b>Octet</b>	-97.4943477812	0.495			
<b>B<sub>4</sub>Cr-7</b>	<b>Doublet</b>	-97.3772345727	3.679			
	<b>Quartet</b>	-97.4694707153	1.171			
	<b>Sextet</b>	-97.4280308681	2.298			
<b>B<sub>4</sub>Cr-8</b>	<b>Doublet</b>	-97.4141696755	2.675			
	<b>Quartet</b>	-97.4091005870	2.813			
	<b>Sextet</b>	-97.4093119356	2.807			
	<b>Octet</b>	-97.4087033472	2.823			
<b>B<sub>4</sub>Cr-9</b>	<b>Doublet</b>	-97.4448932454	1.839			
	<b>Quartet</b>	-97.4501466413	1.696			
	<b>Sextet</b>	-97.4380375035	2.026			
<b>B<sub>4</sub>Cr-10</b>	<b>Doublet</b>	-97.4048554128	2.928			
	<b>Quartet</b>	-97.4619238752	1.376			
	<b>Sextet</b>	-97.5030678852	0.257			
	<b>Octet</b>	-97.4943478313	0.495			
<b>B<sub>4</sub>Cr-11</b>	<b>Doublet</b>	-97.3532354689	4.332			
	<b>Quartet</b>	-97.4091260629	2.812			
	<b>Sextet</b>	-97.4151134620	2.649			
	<b>Octet</b>	-97.4179604233	2.572			
	<b>Dectet</b>	-97.3751225522	3,736			
<b>B<sub>4</sub>Cr-12</b>	<b>Doublet</b>	-97.4095458790	2.800			
	<b>Quartet</b>	-97.4464584052	1.797			
	<b>Sextet</b>	-97.5020597413	0.285			
	<b>Octet</b>	-97.4943479248	0,495			
<b>B<sub>4</sub>Cr-13</b>	<b>Doublet</b>	-97.4710626429	1.128			
	<b>Quartet</b>	-97.4766756991	0.975			
	<b>Sextet</b>	-97.4942662070	0.497			
	<b>Octet</b>	-97.4487640061	1.734			

### 6.4.5. B<sub>5</sub>Cr Atom Topakları

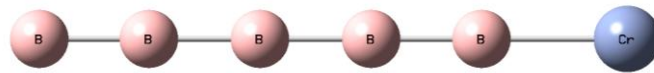
#### *B<sub>5</sub>Cr nötr atom topakları:*

Tablo 6.33 B<sub>5</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

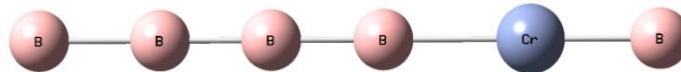
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelİ Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelİ Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>5</sub>Cr-1</b>	<b>Doublet</b>	-100.0877281130	3.551			
	<b>Quartet</b>	-100.1369690750	2.212			
	<b>Sextet</b>	-100.1360052650	2.239			
<b>B<sub>5</sub>Cr-2</b>	<b>Doublet</b>	-100.0041223820	5.825			
	<b>Quartet</b>	-99.9566426221	7.116			
<b>B<sub>5</sub>Cr-3</b>	<b>Doublet</b>	-100.0142189570	5.550			
	<b>Quartet</b>	-99.9828248851	6.404			
<b>B<sub>5</sub>Cr-4</b>	<b>Doublet</b>	-100.1696904980	1.323			
	<b>Quartet</b>	-100.2111576230	0.195			
	<b>Sextet</b>	-100.2070969330	0.306			
<b>B<sub>5</sub>Cr-5</b>	<b>Doublet</b>	-100.1124825660	2.878			
	<b>Quartet</b>	-100.1325968680	2.331			
	<b>Sextet</b>	-100.1086793830	2.982			
<b>B<sub>5</sub>Cr-6</b>	<b>Doublet</b>	-100.0828293210	3.685			
	<b>Quartet</b>	-100.1792780020	1.062			
	<b>Sextet</b>	-100.1667182160	1.404			
<b>B<sub>5</sub>Cr-7</b>	<b>Doublet</b>	-100.1156480540	2.792			
	<b>Quartet</b>	-100.1308236210	2.380			
	<b>Sextet</b>	-100.1297574970	2.409			
<b>B<sub>5</sub>Cr-8</b>	<b>Doublet</b>	-100.1708906570	1.290	-1168.46439730	1.167	-
	<b>Quartet</b>	-100.1989722720	0.526	-1168.49949566	0.213	-
	<b>Sextet</b>	-100.2183525770	0	-1168.50732975	0	-1168.533934160
	<b>Octet</b>	-100.1723808210	1.250	-1168.46443174	1.166	-
<b>B<sub>5</sub>Cr-9</b>	<b>Doublet</b>	-100.1375222420	2.197			
	<b>Quartet</b>	-100.1716662790	1.269			
	<b>Sextet</b>	-100.2162278520	0.057			
	<b>Octet</b>	-100.1514627780	1,818			
<b>B<sub>5</sub>Cr-10</b>	<b>Doublet</b>	-100.1606513040	1.569			
	<b>Quartet</b>	-100.1583773540	1.630			
	<b>Sextet</b>	-100.1533446190	1.767			

Tablo 6.33 (devam) B<sub>5</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>5</sub>Cr-11</b>	<b>Doublet</b>	-99.9615248175	6.983
	<b>Quartet</b>	-99.9843522856	6.362
	<b>Sextet</b>	-100.0361902540	4.953
	<b>Octet</b>	-100.0419413310	4.796
	<b>Dectet</b>	-100.0167055240	5.483
<b>B<sub>5</sub>Cr-12</b>	<b>Doublet</b>	-100.1241270580	2.562
	<b>Quartet</b>	-100.0657808230	4.148
<b>B<sub>5</sub>Cr-13</b>	<b>Doublet</b>	-100.1111033240	2.916
	<b>Quartet</b>	-100.1531411930	1.773
	<b>Sextet</b>	-100.1633733290	1.494
	<b>Octet</b>	-100.1383844530	2.174
<b>B<sub>5</sub>Cr-14</b>	<b>Doublet</b>	-100.1572701530	1.660
	<b>Quartet</b>	-100.1553807110	1.712
<b>B<sub>5</sub>Cr-15</b>	<b>Doublet</b>	-100.1679392820	1.370
	<b>Quartet</b>	-100.1660813080	1.421
<b>B<sub>5</sub>Cr-16</b>	<b>Doublet</b>	-100.1025456350	3.149
	<b>Quartet</b>	-100.1242811080	2.557
	<b>Sextet</b>	-100.1102044020	2.940
<b>B<sub>5</sub>Cr-17</b>	<b>Doublet</b>	-100.1205864760	2.658
	<b>Quartet</b>	-100.1823254800	0.979
	<b>Sextet</b>	-100.1862604530	0.872
	<b>Octet</b>	-100.1783616000	1.087
<b>B<sub>5</sub>Cr-18</b>	<b>Doublet</b>	-100.0639010570	4.199
	<b>Quartet</b>	-100.1684149570	1.357
	<b>Sextet</b>	-100.2152894300	0.083
	<b>Octet</b>	-100.1745485040	1.191
<b>B<sub>5</sub>Cr-19</b>	<b>Doublet</b>	-100.0252117820	5.251
	<b>Quartet</b>	-100.0326906910	5.048
	<b>Sextet</b>	-100.0921271090	3.432
	<b>Octet</b>	-100.0345611010	4.997

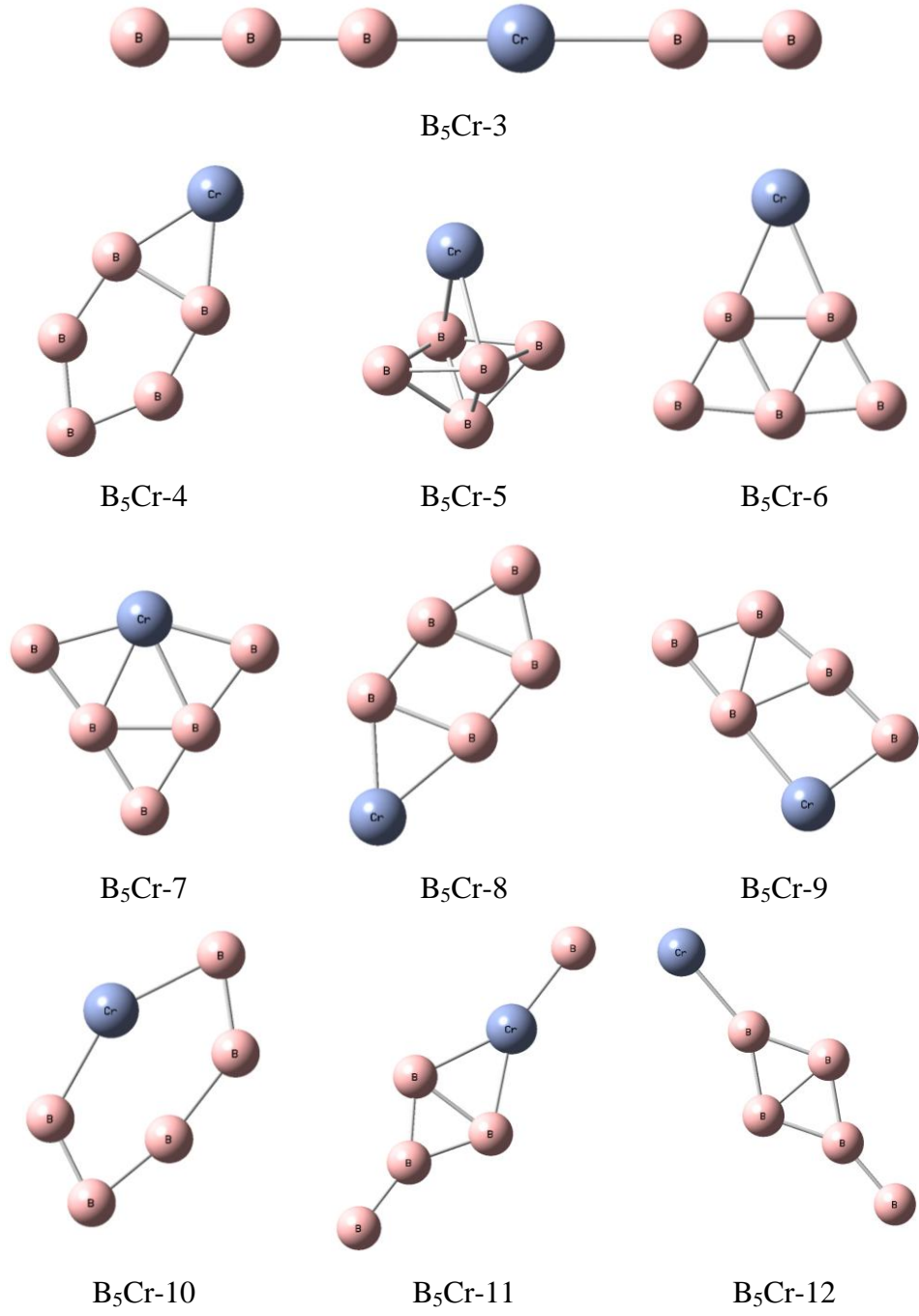


B<sub>5</sub>Cr-1

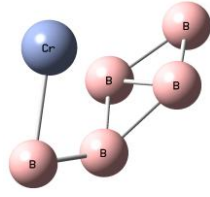


B<sub>5</sub>Cr-2

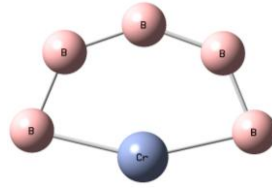
Şekil 6.19 B<sub>5</sub>Cr Atom Topakları



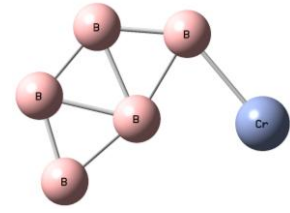
Şekil 6.19 (devam)  $B_5Cr$  Atom Topakları



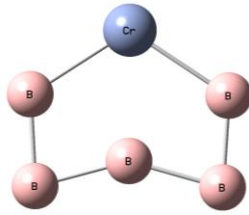
B<sub>5</sub>Cr-13



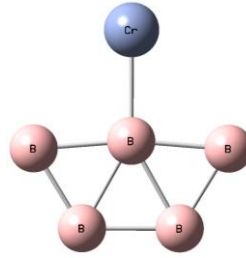
B<sub>5</sub>Cr-14



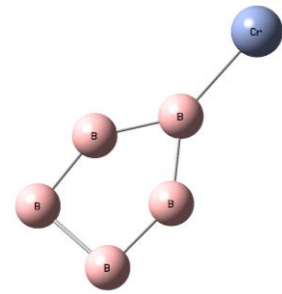
B<sub>5</sub>Cr-15



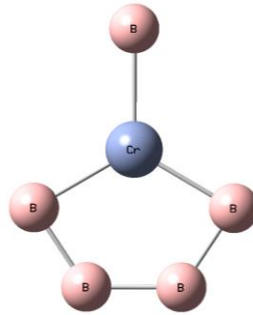
B<sub>5</sub>Cr-16



B<sub>5</sub>Cr-17



B<sub>5</sub>Cr-18



B<sub>5</sub>Cr-19

Şekil 6.19 (devam2) B<sub>5</sub>Cr Atom Topakları

*B<sub>5</sub>Cr iyon atom topakları:*

Tablo 6.34 B<sub>5</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelİ Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelİ Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>5</sub>Cr-1</b>	<b>Singlet</b>	-100.0954933570	4.885			
	<b>Triplet</b>	-100.2298236720	1.232			
	<b>Quintet</b>	-100.2093424800	1.789			
<b>B<sub>5</sub>Cr-2</b>	<b>Singlet</b>	-100.0573894190	5.921			
	<b>Triplet</b>	-100.0726422770	5.506			
	<b>Quintet</b>	-100.1200239090	4.218			
	<b>Septet</b>	-100.1244743960	4.097			
	<b>Nonet</b>	-100.1361707600	3.779			
	<b>11-et</b>	-100,1143071500	4,373			
<b>B<sub>5</sub>Cr-3</b>	<b>Singlet</b>	-100.0298885650	6.669			
	<b>Triplet</b>	-100.0798481500	5.311			
	<b>Quintet</b>	-100.0855207790	5.156			
	<b>Septet</b>	-100.0984025150	4.806			
	<b>Nonet</b>	-100.1089227560	4.520			
<b>B<sub>5</sub>Cr-4</b>	<b>Singlet</b>	-100.2064815700	1.867			
	<b>Triplet</b>	-100.2647408230	0.283			
	<b>Quintet</b>	-100.2739481620	0.033			
	<b>Septet</b>	-100.2568013820	0.499			
<b>B<sub>5</sub>Cr-5</b>	<b>Singlet</b>	-100.1564254360	3.228			
	<b>Triplet</b>	-100.1559404640	3.241			
<b>B<sub>5</sub>Cr-6</b>	<b>Singlet</b>	-100.1999717570	2.044			
	<b>Triplet</b>	-100.2364056000	1.053			
	<b>Quintet</b>	-100.2355727810	1.076			
<b>B<sub>5</sub>Cr-7</b>	<b>Singlet</b>	-100.2020388710	1.988			
	<b>Triplet</b>	-100.2221779990	1.440			
	<b>Quintet</b>	-100.2296198540	1.238			
	<b>Septet</b>	-100.1842647890	2.471			
<b>B<sub>5</sub>Cr-8</b>	<b>Singlet</b>	-100.2069267510	1.855	-1168.50110216	1.527	-1168.522286760
	<b>Triplet</b>	-100.2681678730	0.190	-1168.49251201	1.761	-
	<b>Quintet</b>	-100.2698036430	0.145	-	-	-
	<b>Septet</b>	-100.2751631380	0	-	-	-
	<b>Nonet</b>	-100.2458944310	0.795	-	-	-

Tablo 6.34 (devam) B<sub>5</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>5</sub>Cr-9</b>	<b>Singlet</b>	-100.0679443740	5.634
	<b>Triplet</b>	-100.0744978440	5.456
	<b>Quintet</b>	-100.1360737720	3.782
	<b>Septet</b>	-100.1178941340	4.276
<b>B<sub>5</sub>Cr-10</b>	<b>Singlet</b>	-100.1094052240	4.507
	<b>Triplet</b>	-100.1853319560	2.442
	<b>Quintet</b>	-100.1544009940	3.283
<b>B<sub>5</sub>Cr-11</b>	<b>Singlet</b>	-100.2309930350	1.201
	<b>Triplet</b>	-100.2482860510	0.730
	<b>Quintet</b>	-100.2519694780	0.630
	<b>Septet</b>	-100.2181166400	1.551
<b>B<sub>5</sub>Cr-12</b>	<b>Singlet</b>	-100.1909886010	2.288
	<b>Triplet</b>	-100.2518198890	0.634
	<b>Quintet</b>	-100.2667522140	0.228
	<b>Septet</b>	-100.2743067180	0.023
	<b>Nonet</b>	-100.2432176180	0.868
<b>B<sub>5</sub>Cr-13</b>	<b>Singlet</b>	-100.1616214220	3.087
	<b>Triplet</b>	-100.2173047010	1.573
	<b>Quintet</b>	-100.2529480730	0.604
	<b>Septet</b>	-100.2327092050	1.154
<b>B<sub>5</sub>Cr-14</b>	<b>Singlet</b>	-100.1324286020	3.881
	<b>Triplet</b>	-100.2137062500	1.671
	<b>Quintet</b>	-100.2551431480	0.544
	<b>Septet</b>	-100.2508937130	0.659
<b>B<sub>5</sub>Cr-15</b>	<b>Singlet</b>	-100.1267077320	4.036
	<b>Triplet</b>	-100.1432493330	3.587
	<b>Quintet</b>	-100.1558521540	3.244
	<b>Septet</b>	-100.1503287230	3.394

### 6.4.6. B<sub>6</sub>Cr Atom Topakları

#### *B<sub>6</sub>Cr nötr atom topakları:*

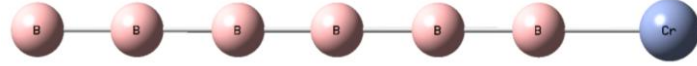
Tablo 6.35 B<sub>6</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>Cr-1</b>	<b>Singlet</b>	-102.8639048060	3.408			
	<b>Triplet</b>	-102.9006091220	2.410			
	<b>Quintet</b>	-102.8642879060	3.398			
<b>B<sub>6</sub>Cr-2</b>	<b>Singlet</b>	-102.6722851700	8.619			
	<b>Triplet</b>	-102.6905444520	8.122			
	<b>Quintet</b>	-102.7659045140	6.073			
	<b>Septet</b>	-102.7313502380	7.013			
<b>B<sub>6</sub>Cr-3</b>	<b>Singlet</b>	-102.6980992420	7.917			
	<b>Triplet</b>	-102.7697841960	5.968			
	<b>Quintet</b>	-102.7552779430	6.362			
<b>B<sub>6</sub>Cr-4</b>	<b>Singlet</b>	-102.6679502210	8.737			
	<b>Triplet</b>	-102.6596720430	8.962			
<b>B<sub>6</sub>Cr-5</b>	<b>Singlet</b>	-102.9320624850	1.555	-1193.31099285	1.498	-
	<b>Triplet</b>	-102.9892687380	0	-1193.36610672	0	-1193,38817692
	<b>Quintet</b>	-102.9778228310	0.311	-1193.34638422	0.536	-
<b>B<sub>6</sub>Cr-6</b>	<b>Singlet</b>	-102.9175253890	1.950			
	<b>Triplet</b>	-102.9844936250	0.129			
	<b>Quintet</b>	-102.9761322600	0.357			
<b>B<sub>6</sub>Cr-7</b>	<b>Singlet</b>	-102.8967759380	2.515			
	<b>Triplet</b>	-102.9401805450	1.334			
	<b>Quintet</b>	-102.9427416100	1.265			
	<b>Septet</b>	-102.9413647010	1.302			
<b>B<sub>6</sub>Cr-8</b>	<b>Singlet</b>	-102.9082003740	2.204			
	<b>Triplet</b>	-102.9295775320	1.623			
	<b>Quintet</b>	-102.9143241090	2.037			
<b>B<sub>6</sub>Cr-9</b>	<b>Singlet</b>	-102.9068569630	2.240			
	<b>Triplet</b>	-102.8985848030	2.465			
<b>B<sub>6</sub>Cr-10</b>	<b>Singlet</b>	-102.8405068720	4.045			
	<b>Triplet</b>	-102.9212929120	1.848			
	<b>Quintet</b>	-102.8749428000	3.108			

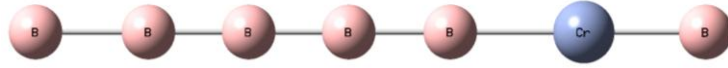


Tablo 6.35 (devam) B<sub>6</sub>Cr nötr atom topaklarının hesaplama verileri

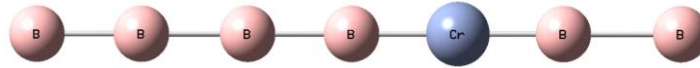
<b>B<sub>6</sub>Cr-11</b>	<b>Singlet</b>	-102.6098914870	10.316
	<b>Triplet</b>	-102.6197895930	10.046
	<b>Quintet</b>	-102.6255558360	9.890
	<b>Septet</b>	-102.6270611880	9.849
	<b>Nonet</b>	-102,4973178270	13,377



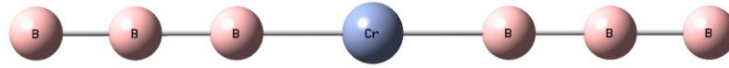
B<sub>6</sub>Cr-1



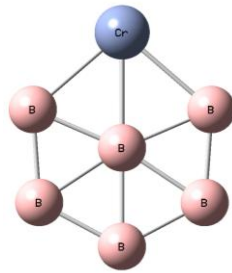
B<sub>6</sub>Cr-2



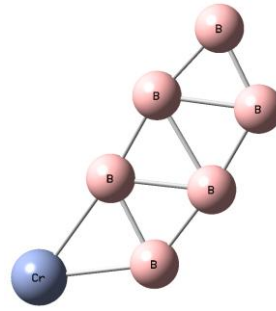
B<sub>6</sub>Cr-3



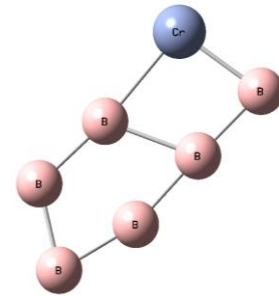
B<sub>6</sub>Cr-4



B<sub>6</sub>Cr-5

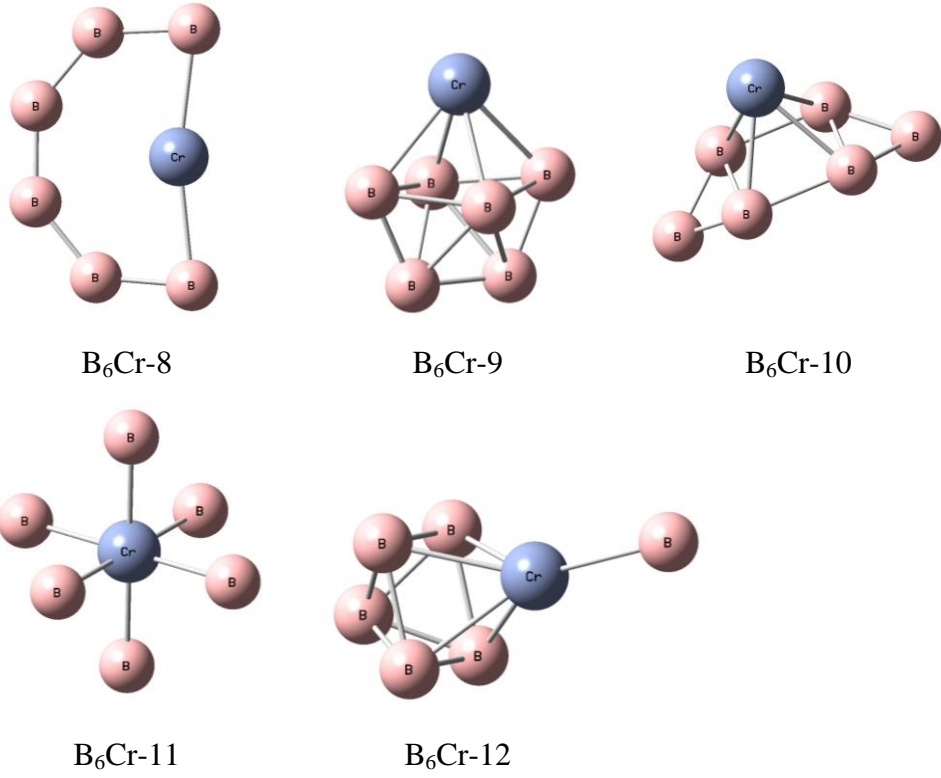


B<sub>6</sub>Cr-6



B<sub>6</sub>Cr-7

Şekil 6.20 B<sub>6</sub>Cr Atom Topakları



Şekil 6.20 (devam) B<sub>6</sub>Cr Atom Topakları

***B<sub>6</sub>Cr iyon atom topakları:***

Tablo 6.36 B<sub>6</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>Cr-1</b>	<b>Doublet</b>	-102.9608251120	2.822			
	<b>Quartet</b>	-102.9737510690	2.470			
	<b>Sextet</b>	-102.9727022100	2.499			
<b>B<sub>6</sub>Cr-2</b>	<b>Doublet</b>	-102.8047294570	7.066			
	<b>Quartet</b>	-102.8831911330	4.933			
	<b>Sextet</b>	-102.8603610290	5.554			
<b>B<sub>6</sub>Cr-3</b>	<b>Doublet</b>	-102.8602774140	5.556			
	<b>Quartet</b>	-102.8857765560	4.863			
	<b>Sextet</b>	-102.8348383180	6.248			

Tablo 6.36 (devam) B<sub>6</sub>Cr iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>6</sub>Cr-4</b>	<b>Doublet</b>	-102.7825440470	7.670			
	<b>Quartet</b>	-102.7910872110	7.437			
	<b>Sextet</b>	-102.7689145620	8.040			
<b>B<sub>6</sub>Cr-5</b>	<b>Doublet</b>	-103.0379400240	0.725	-1193.41666933	0.590	-
	<b>Quartet</b>	-103.0646200300	0	-1193.43838944	0	-1193.459043760
	<b>Sextet</b>	-103.0546814140	0.270	-1193.42731183	0.301	-
<b>B<sub>6</sub>Cr-6</b>	<b>Doublet</b>	-102.9846895540	2.173			
	<b>Quartet</b>	-103.0264001150	1.039			
	<b>Sextet</b>	-103.0135457640	1.388			
<b>B<sub>6</sub>Cr-7</b>	<b>Doublet</b>	-102.9877458320	2.090			
	<b>Quartet</b>	-103.0374077000	0.739			
	<b>Sextet</b>	-103.0366242400	0.761			
<b>B<sub>6</sub>Cr-8</b>	<b>Doublet</b>	-103.0029362010	1.677			
	<b>Quartet</b>	-103.0350764750	0.803			
	<b>Sextet</b>	-102.9976203610	1.821			
<b>B<sub>6</sub>Cr-9</b>	<b>Doublet</b>	-102.9811383970	2.270			
	<b>Quartet</b>	-102.9835341950	2.204			
	<b>Sextet</b>	-102.9728358640	2.495			
<b>B<sub>6</sub>Cr-10</b>	<b>Doublet</b>	-102.9229785520	3.851			
	<b>Quartet</b>	-102.9364798540	3.484			
	<b>Sextet</b>	-103.0318204580	0.891			
	<b>Octet</b>	-103.0081118770	1.536			
<b>B<sub>6</sub>Cr-11</b>	<b>Doublet</b>	-102.7032541470	9.826			
	<b>Quartet</b>	-102.7077697950	9.703			
	<b>Sextet</b>	-102.7036455640	9.815			
<b>B<sub>6</sub>Cr-12</b>	<b>Doublet</b>	-102.8546624360	5.709			
	<b>Quartet</b>	-102.8720335340	5.236			
	<b>Sextet</b>	-102.8742760970	5.175			
	<b>Octet</b>	-102.8654849930	5.414			

## 6.5. MANGAN KATKILI BOR ATOM TOPAKLARI

### 6.5.1. BMn Atom Topağı

#### *BMn nötr atom topakları:*

Tablo 6.37 BMn nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>BMn</b>	<b>Singlet</b>	-106.400001177	2.370	-1175.59459906	2.238	-
	<b>Triplet</b>	-106.426091402	1.661	-1175.66977690	0.194	-
	<b>Quintet</b>	-106.487185783	0	-1175.67693329	0	-1175.73121053
	<b>Septet</b>	-106.464372218	0.620	-1175.63463573	1.150	-



BMn

Şekil 6.21 BMn Atom Topağı

#### *BMn iyon atom topakları:*

Tablo 6.38 BMn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

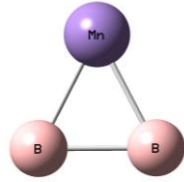
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>BMn</b>	<b>Doublet</b>	-106.436364633	2.680	-1175.70296014	0.559	-
	<b>Quartet</b>	-106.534926689	0	-1175.72352396	0	-1175.77546861
	<b>Sextet</b>	-106.515872523	0.518	-1175.70237748	0.575	-

## 6.5.2. B<sub>2</sub>Mn Atom Topakları

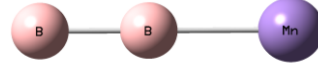
### *B<sub>2</sub>Mn nötr atom topakları:*

Tablo 6.39 B<sub>2</sub>Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri

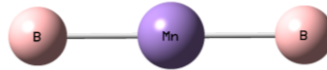
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>2</sub>Mn-1</b>	<b>Doublet</b>	-109.157716696	2.296	-1200.43294383	1.930	-
	<b>Quartet</b>	-109.242186383	0	-1200.50392604	0	-1200.55620591
	<b>Sextet</b>	-109.219201390	0.625	-1200.47988203	0.653	-
<b>B<sub>2</sub>Mn-2</b>	<b>Doublet</b>	-109.218380044	0.647			
	<b>Quartet</b>	-109.222123609	0.545			
	<b>Sextet</b>	-109.209078054	0.900			
<b>B<sub>2</sub>Mn-3</b>	<b>Doublet</b>	-109.095012153	4.001			
	<b>Quartet</b>	-109.128833697	3.082			
	<b>Sextet</b>	-109.091397098	4.100			



B<sub>2</sub>Mn-1



B<sub>2</sub>Mn-2



B<sub>2</sub>Mn-3

Şekil 6.22 B<sub>2</sub>Mn Atom Topakları

### *B<sub>2</sub>Mn iyon atom topakları:*

Tablo 6.40 B<sub>2</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>2</sub>Mn-1</b>	<b>Singlet</b>	-109.211421532	2.309	-1200.48859591	1.993	-
	<b>Triplet</b>	-109.251151191	1.228	-1200.52198047	1.085	-
	<b>Quintet</b>	-109.296345811	0	-1200.56190960	0	-1200.61117260
	<b>Septet</b>	-109.284416120	0.324	-1200.54613830	0.428	-
<b>B<sub>2</sub>Mn-2</b>	<b>Singlet</b>	-109.185467070	3.015			
	<b>Triplet</b>	-109.277077825	0.523			
	<b>Quintet</b>	-109.266396371	0.814			
<b>B<sub>2</sub>Mn-3</b>	<b>Singlet</b>	-109.203350935	2.528			
	<b>Triplet</b>	-109.191079001	2.862			

### 6.5.3. B<sub>3</sub>Mn Atom Topakları

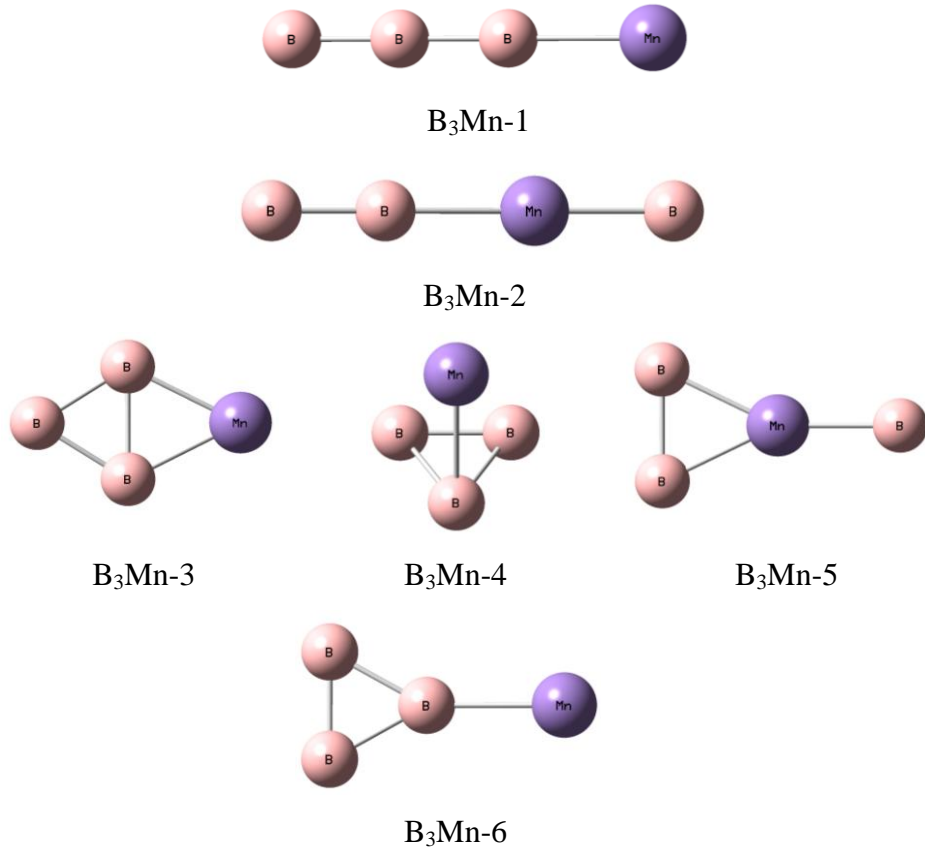
### *B<sub>3</sub>Mn nötr atom topakları:*

Tablo 6.41 B<sub>3</sub>Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>Mn-1</b>	<b>Singlet</b>	-111.760418465	6.881			
	<b>Triplet</b>	-111.936329556	2.098			
	<b>Quintet</b>	-111.915499187	2.664			
<b>B<sub>3</sub>Mn-2</b>	<b>Singlet</b>	-111.780922684	6.324			
	<b>Triplet</b>	-111.876626565	3.721			
	<b>Quintet</b>	-111.786562612	6.170			
<b>B<sub>3</sub>Mn-3</b>	<b>Singlet</b>	-111.929381436	2.287	-1225.28397869	2.160	-
	<b>Triplet</b>	-111.946360436	1.825	-1225.29633337	1.824	-
	<b>Quintet</b>	-112.013491398	0	-1225.36344117	0	-1225.40863539
	<b>Septet</b>	-111.975006768	1.046	-1225.31663453	1.272	-

Tablo 6.41 (devam)  $B_3Mn$  nötr atom topaklarının hesaplama verileri

<b><math>B_3Mn-4</math></b>	<b>Singlet</b>	-111.917106283	2.620
	<b>Triplet</b>	-111.974492397	1.060
	<b>Quintet</b>	-111.979215205	0.932
	<b>Septet</b>	-111.990301990	0.630
	<b>Nonet</b>	-111.958981985	1.482
<b><math>B_3Mn-5</math></b>	<b>Singlet</b>	-111.806270165	5.634
	<b>Triplet</b>	-111.840065120	4.715
	<b>Quintet</b>	-111.864075927	4.062
	<b>Septet</b>	-111.868604320	3.939
	<b>Nonet</b>	-111.854136095	4.333
<b><math>B_3Mn-6</math></b>	<b>Singlet</b>	-111.900104223	3.083
	<b>Triplet</b>	-111.984421219	0.790
	<b>Quintet</b>	-111.965466120	1.305



Şekil 6.23  $B_3Mn$  Atom Topakları

***B<sub>3</sub>Mn iyon atom topakları:***

Tablo 6.42 B<sub>3</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>3</sub>Mn-1</b>	<b>Doublet</b>	-111.935321868	3.612			
	<b>Quartet</b>	-111.998194859	1.902			
	<b>Sextet</b>	-112.041044469	0.737			
	<b>Octet</b>	-112.032817039	0.961			
<b>B<sub>3</sub>Mn-2</b>	<b>Doublet</b>	-111.944297355	3.368			
	<b>Quartet</b>	-111.941751833	3.437			
<b>B<sub>3</sub>Mn-3</b>	<b>Doublet</b>	-111.986727455	2.214	-1225.34101944	2.101	-
	<b>Quartet</b>	-112.028218997	1.086	-1225.38216300	0.982	-
	<b>Sextet</b>	-112.068167773	0	-1225.40645858	0.321	-1225.46057702
	<b>Octet</b>	-112.039347302	0.783	-1225.37563776	1.159	-
<b>B<sub>3</sub>Mn-4</b>	<b>Doublet</b>	-112.032064776	0.981			
	<b>Quartet</b>	-112.029585785	1.049			
<b>B<sub>3</sub>Mn-5</b>	<b>Doublet</b>	-111.895318439	4.700			
	<b>Quartet</b>	-111.953683578	3.113			
	<b>Sextet</b>	-111.960679953	2.922			
	<b>Octet</b>	-111.943283760	3.395			
<b>B<sub>3</sub>Mn-6</b>	<b>Doublet</b>	-111.967827796	2.728			
	<b>Quartet</b>	-112.047747466	0.555			
	<b>Sextet</b>	-112.059415575	0.237			
	<b>Octet</b>	-112.039656273	0.775			



#### 6.5.4. B<sub>4</sub>Mn Atom Topakları

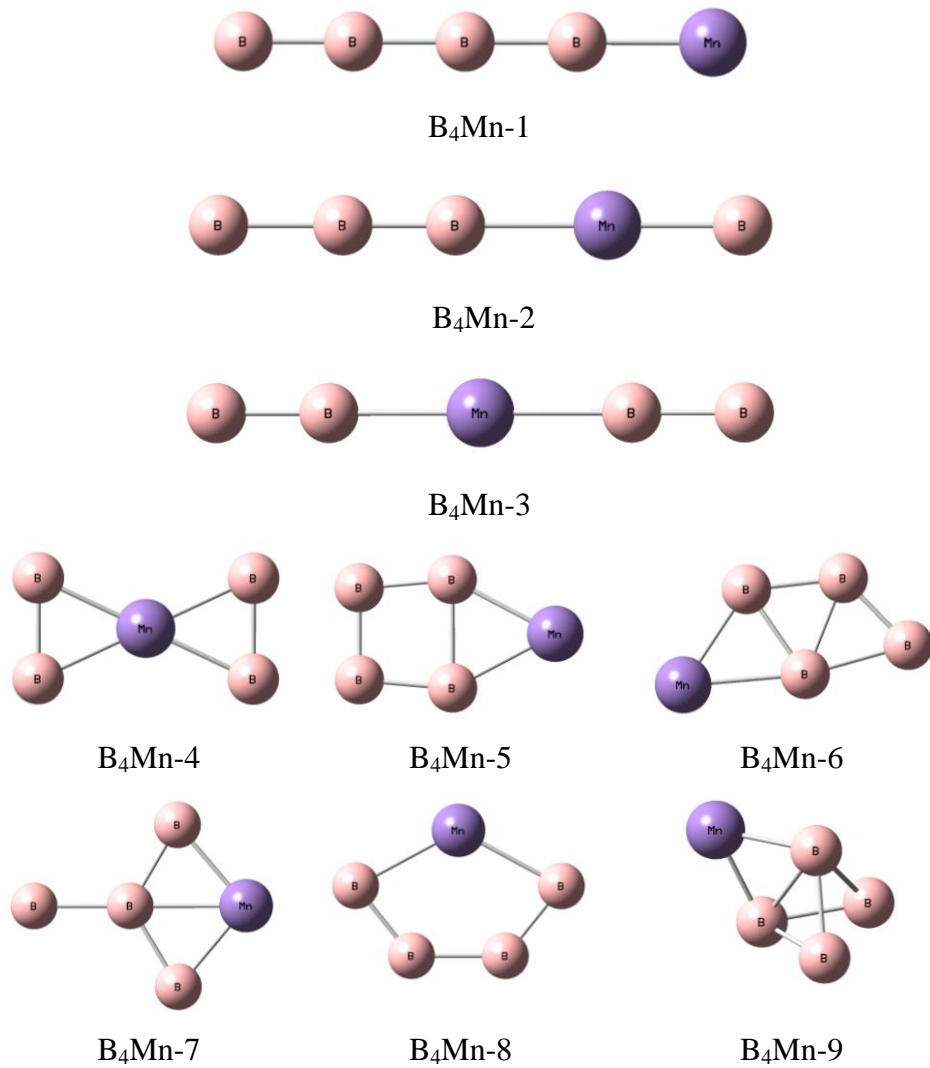
##### *B<sub>4</sub>Mn nötr atom topakları:*

Tablo 6.43 B<sub>4</sub>Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri

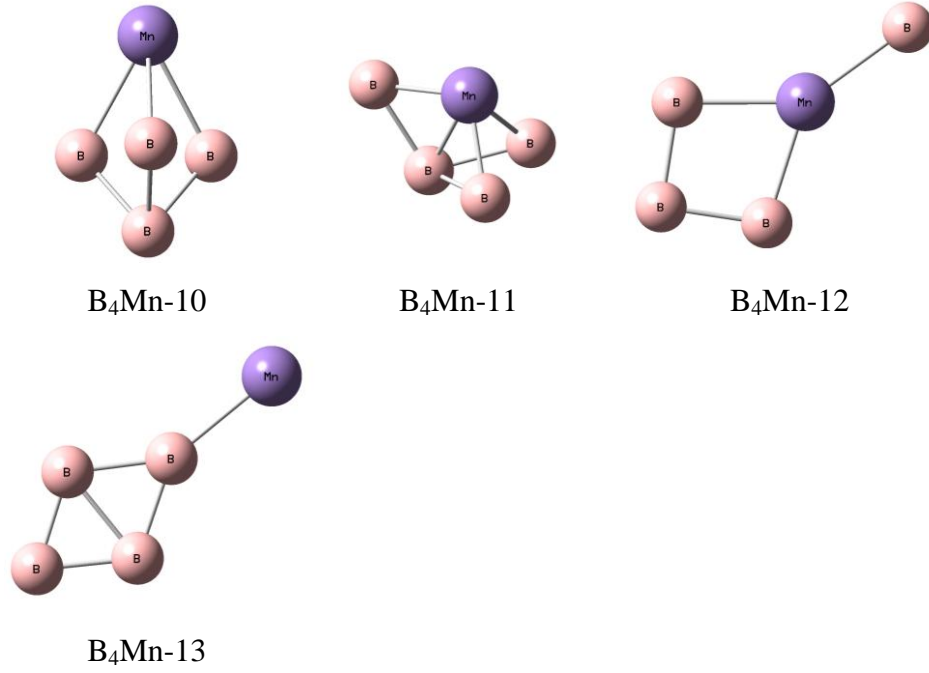
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>4</sub>Mn-1</b>	<b>Doublet</b>	-114.704143729	1.798			
	<b>Quartet</b>	-114.687287256	2.257			
<b>B<sub>4</sub>Mn-2</b>	<b>Doublet</b>	-114.601843069	4.580			
	<b>Quartet</b>	-114.616045908	4.194			
	<b>Sextet</b>	-114.621531650	4.045			
	<b>Octet</b>	-114.624023541	3.977			
	<b>Dectet</b>	-114.616204717	4.189			
<b>B<sub>4</sub>Mn-3</b>	<b>Doublet</b>	-114.640539513	3.528			
	<b>Quartet</b>	-114.608320979	4.404			
<b>B<sub>4</sub>Mn-4</b>	<b>Doublet</b>	-114.516048958	6.913			
	<b>Quartet</b>	-114.532585028	6.463			
	<b>Sextet</b>	-114.566259136	5.548			
	<b>Octet</b>	-114.554533642	5.866			
<b>B<sub>4</sub>Mn-5</b>	<b>Doublet</b>	-114.682779514	2.379			
	<b>Quartet</b>	-114.739434577	0.839			
	<b>Sextet</b>	-114.767391992	0.078			
	<b>Octet</b>	-114.711263863	1.605			
<b>B<sub>4</sub>Mn-6</b>	<b>Doublet</b>	-114.721351349	1.330	-1250.14876354	1.150	-
	<b>Quartet</b>	-114.765186513	0.138	-1250.18995704	0.030	-
	<b>Sextet</b>	-114.770291283	0	-1250.19108384	0	-1250.23320688
	<b>Octet</b>	-114.742850023	0.746	-1250.15565460	0.963	-
<b>B<sub>4</sub>Mn-7</b>	<b>Doublet</b>	-114.618758251	4.120			
	<b>Quartet</b>	-114.709268975	1.659			
	<b>Sextet</b>	-114.642413044	3.477			
<b>B<sub>4</sub>Mn-8</b>	<b>Doublet</b>	-114.718999095	1.394			
	<b>Quartet</b>	-114.725805883	1.209			
	<b>Sextet</b>	-114.767392377	0.078			
	<b>Octet</b>	-114.693735456	2.081			
<b>B<sub>4</sub>Mn-9</b>	<b>Doublet</b>	-114.676882122	2.539			
	<b>Quartet</b>	-114.668997113	2.754			

Tablo 6.43 (devam)  $B_4Mn$  nötr atom topaklarının hesaplama verileri

<b><math>B_4Mn-10</math></b>	<b>Doublet</b>	-114.701482357	1.871
	<b>Quartet</b>	-114.693796865	2.080
<b><math>B_4Mn-11</math></b>	<b>Doublet</b>	-114.703433119	1.818
	<b>Quartet</b>	-114.707374568	1.710
	<b>Sextet</b>	-114.674773600	2.597
<b><math>B_4Mn-12</math></b>	<b>Doublet</b>	-114.652945677	3.190
	<b>Quartet</b>	-114.658171441	3.048
	<b>Sextet</b>	-114.653248768	3.182



Şekil 6.24  $B_4Mn$  Atom Topakları



Şekil 6.24 (devam)  $B_4Mn$  Atom Topakları

***$B_4Mn$  iyon atom topakları:***

Tablo 6.44  $B_4Mn$  iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b><math>B_4Mn-1</math></b>	<b>Singlet</b>	-114.635785213	5.403			
	<b>Triplet</b>	-114.767393462	1.824			
	<b>Quintet</b>	-114.760903279	2.001			
<b><math>B_4Mn-2</math></b>	<b>Singlet</b>	-114.591225020	6.615			
	<b>Triplet</b>	-114.693254830	3.840			
	<b>Quintet</b>	-114.709266095	3.405			
	<b>Septet</b>	-114.708035687	3.438			
<b><math>B_4Mn-3</math></b>	<b>Singlet</b>	-114.520340117	8.542			
	<b>Triplet</b>	-114.695280462	3.785			
	<b>Quintet</b>	-114.657188609	4.821			
<b><math>B_4Mn-4</math></b>	<b>Singlet</b>	-114.607193597	6.180			
	<b>Triplet</b>	-114.688487447	3.970			
	<b>Quintet</b>	-114.687763760	3.990			

Tablo 6.44 (devam) B<sub>4</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>4</sub>Mn-5</b>	<b>Singlet</b>	-114.718973853	3.141	-1250.16181773	2.386	-
	<b>Triplet</b>	-114.784604881	1.356	-1250.21272639	1.001	-
	<b>Quintet</b>	-114.792208047	1.150	-1250.23943695	0.275	-
	<b>Septet</b>	-114.834501590	0	-1250.24956477	0	-1250.29155801
	<b>Nonet</b>	-114.763153961	1.940	-1250.16584770	2.276	-
<b>B<sub>4</sub>Mn-6</b>	<b>Singlet</b>	-114.742064400	2.513			
	<b>Triplet</b>	-114.821620264	0.350			
	<b>Quintet</b>	-114.808200195	0.715			
<b>B<sub>4</sub>Mn-7</b>	<b>Singlet</b>	-114.695940305	3.767			
	<b>Triplet</b>	-114.720639412	3.096			
	<b>Quintet</b>	-114.730690270	2.822			
	<b>Septet</b>	-114.779157845	1.504			
	<b>Nonet</b>	-114.748438354	2.340			
<b>B<sub>4</sub>Mn-8</b>	<b>Singlet</b>	-114.770771307	1.732			
	<b>Triplet</b>	-114.819480211	0.408			
	<b>Quintet</b>	-114.820204966	0.388			
	<b>Septet</b>	-114.792816241	1.133			
<b>B<sub>4</sub>Mn-9</b>	<b>Singlet</b>	-114.734347031	2.723			
	<b>Triplet</b>	-114.690721991	3.909			
<b>B<sub>4</sub>Mn-10</b>	<b>Singlet</b>	-114.746421530	2.395			
	<b>Triplet</b>	-114.752596896	2.227			
	<b>Quintet</b>	-114.742096015	2.512			
<b>B<sub>4</sub>Mn-11</b>	<b>Singlet</b>	-114.738241851	2.617			
	<b>Triplet</b>	-114.785955366	1.320			
	<b>Quintet</b>	-114.742216727	2.509			
<b>B<sub>4</sub>Mn-12</b>	<b>Singlet</b>	-114.680228177	4.195			
	<b>Triplet</b>	-114.755137454	2.158			
	<b>Quintet</b>	-114.689885271	3.932			
<b>B<sub>4</sub>Mn-13</b>	<b>Singlet</b>	-114.685931217	4.039			
	<b>Triplet</b>	-114.736396908	2.667			
	<b>Quintet</b>	-114.831246991	0.088			
	<b>Septet</b>	-114.822417763	0.328			

### 6.5.5. B<sub>5</sub>Mn Atom Topakları

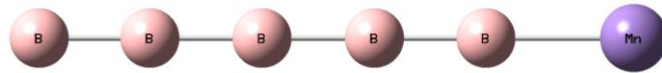
#### *B<sub>5</sub>Mn nötr atom topakları:*

Tablo 6.45 B<sub>5</sub>Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri

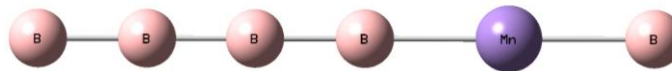
		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>5</sub>Mn-1</b>	<b>Singlet</b>	-117.308171686	6.067			
	<b>Triplet</b>	-117.470992975	1.639			
	<b>Quintet</b>	-117.454932998	2.076			
<b>B<sub>5</sub>Mn-2</b>	<b>Singlet</b>	-117.289725722	6.568			
	<b>Triplet</b>	-117.286440250	6.658			
<b>B<sub>5</sub>Mn-3</b>	<b>Singlet</b>	-117.237909173	7.977			
	<b>Triplet</b>	-117.292031509	6.506			
	<b>Quintet</b>	-117.355688219	4.775			
	<b>Septet</b>	-117.352123765	4.872			
<b>B<sub>5</sub>Mn-4</b>	<b>Singlet</b>	-117.457547588	2.005			
	<b>Triplet</b>	-117.525009291	0.171			
	<b>Quintet</b>	-117.518597661	0.345			
<b>B<sub>5</sub>Mn-5</b>	<b>Singlet</b>	-117.406303090	3.398			
	<b>Triplet</b>	-117.432084212	2.697			
	<b>Quintet</b>	-117.447753897	2.271			
	<b>Septet</b>	-117.444457568	2.361			
<b>B<sub>5</sub>Mn-6</b>	<b>Singlet</b>	-117.400003678	3.570			
	<b>Triplet</b>	-117.438641445	2.519			
	<b>Quintet</b>	-117.469698150	1.675			
	<b>Septet</b>	-117.477445801	1.464			
	<b>Nonet</b>	-117,489535490	1,135			
	<b>11-et</b>	-117,420719355	3,006			
<b>B<sub>5</sub>Mn-7</b>	<b>Singlet</b>	-117.458485466	1.979	-1274.96286280	1.930	-
	<b>Triplet</b>	-117.526291111	0.136	-1275.02788495	0.162	-
	<b>Quintet</b>	-117.531298465	0	-1275.03385691	0	-1275.07171509
	<b>Septet</b>	-117.517461861	0.376	-1275.01681851	0.463	-
<b>B<sub>5</sub>Mn-8</b>	<b>Singlet</b>	-117.433320994	2.664			
	<b>Triplet</b>	-117.520035262	0.306			
	<b>Quintet</b>	-117.528821754	0.067			
	<b>Septet</b>	-117.518400140	0.350			
<b>B<sub>5</sub>Mn-9</b>	<b>Singlet</b>	-117.447857252	2.268			
	<b>Triplet</b>	-117.497137456	0.928			
	<b>Quintet</b>	-117.495814446	0.964			

Tablo 6.45 (devam) B<sub>5</sub>Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>5</sub>Mn-10</b>	<b>Singlet</b>	-117.307525787	6.084
	<b>Triplet</b>	-117.382681540	4.041
	<b>Quintet</b>	-117.366573164	4.479
<b>B<sub>5</sub>Mn-11</b>	<b>Singlet</b>	-117.329931793	5.475
	<b>Triplet</b>	-117.475423968	1.519
	<b>Quintet</b>	-117.469599878	1.677
<b>B<sub>5</sub>Mn-12</b>	<b>Singlet</b>	-117.430787015	2.733
	<b>Triplet</b>	-117.446988396	2.292
	<b>Quintet</b>	-117.494170530	1.009
	<b>Septet</b>	-117.470895753	1.642
<b>B<sub>5</sub>Mn-13</b>	<b>Singlet</b>	-117.462011483	1.884
	<b>Triplet</b>	-117.424697031	2.898
<b>B<sub>5</sub>Mn-14</b>	<b>Singlet</b>	-117.445670021	2.261
	<b>Triplet</b>	-117.520033544	0.238
	<b>Quintet</b>	-117.528820997	0
	<b>Septet</b>	-117.514417616	0.391
<b>B<sub>5</sub>Mn-15</b>	<b>Singlet</b>	-117.446013944	2.319
	<b>Triplet</b>	-117.486279152	1.224
	<b>Quintet</b>	-117.485334270	1.249
<b>B<sub>5</sub>Mn-16</b>	<b>Singlet</b>	-117.404409575	3.450
	<b>Triplet</b>	-117.491928751	1.070
	<b>Quintet</b>	-117.505711809	0.695
	<b>Septet</b>	-117.499948159	0.852
<b>B<sub>5</sub>Mn-17</b>	<b>Singlet</b>	-117.408255868	3.345
	<b>Triplet</b>	-117.476201415	1.498
	<b>Quintet</b>	-117.501648974	0.806
	<b>Septet</b>	-117.490781243	1.101
<b>B<sub>5</sub>Mn-18</b>	<b>Singlet</b>	-117.347866640	4.987
	<b>Triplet</b>	-117.396108511	3.676
	<b>Quintet</b>	-117.378019001	4.167

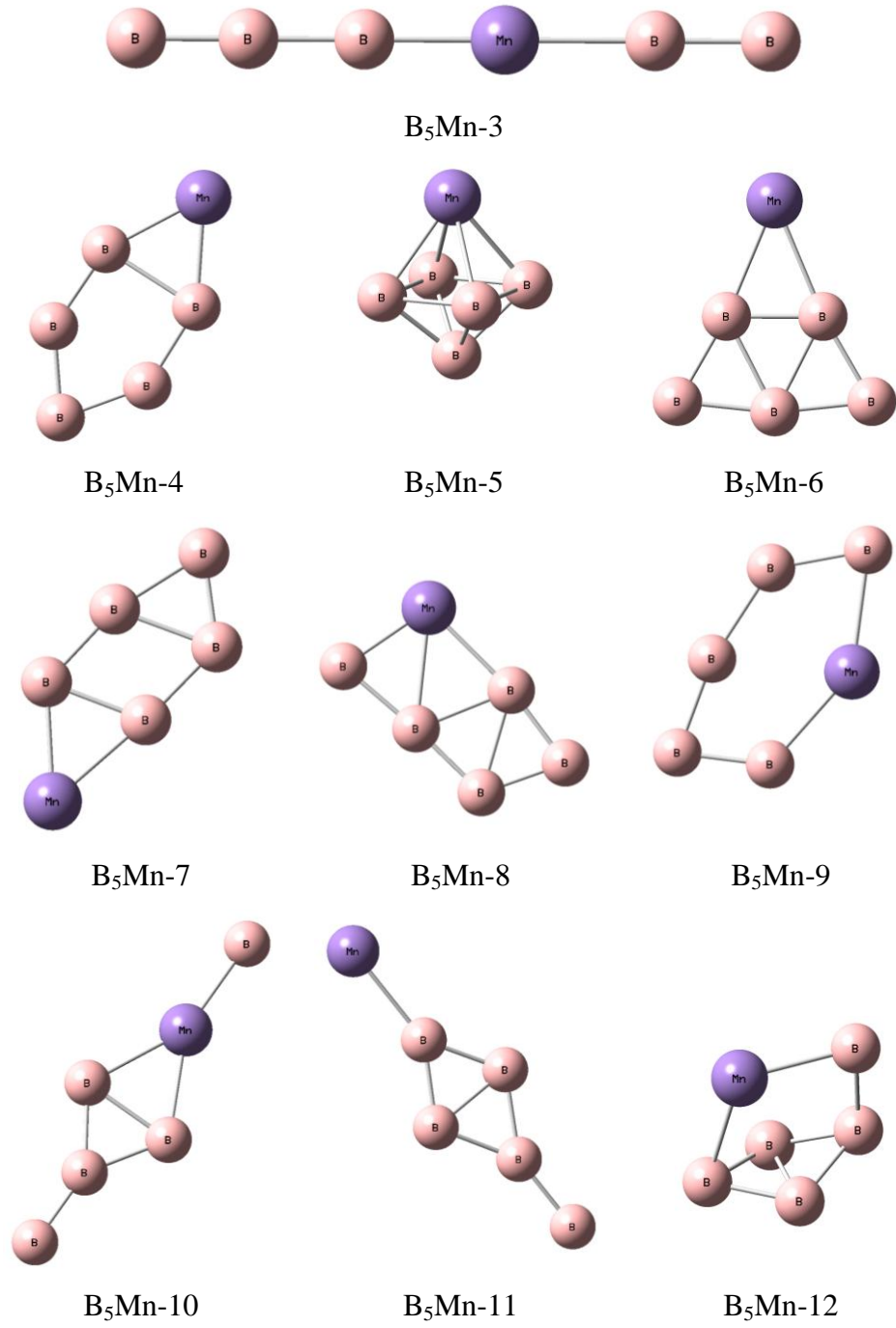


B<sub>5</sub>Mn-1

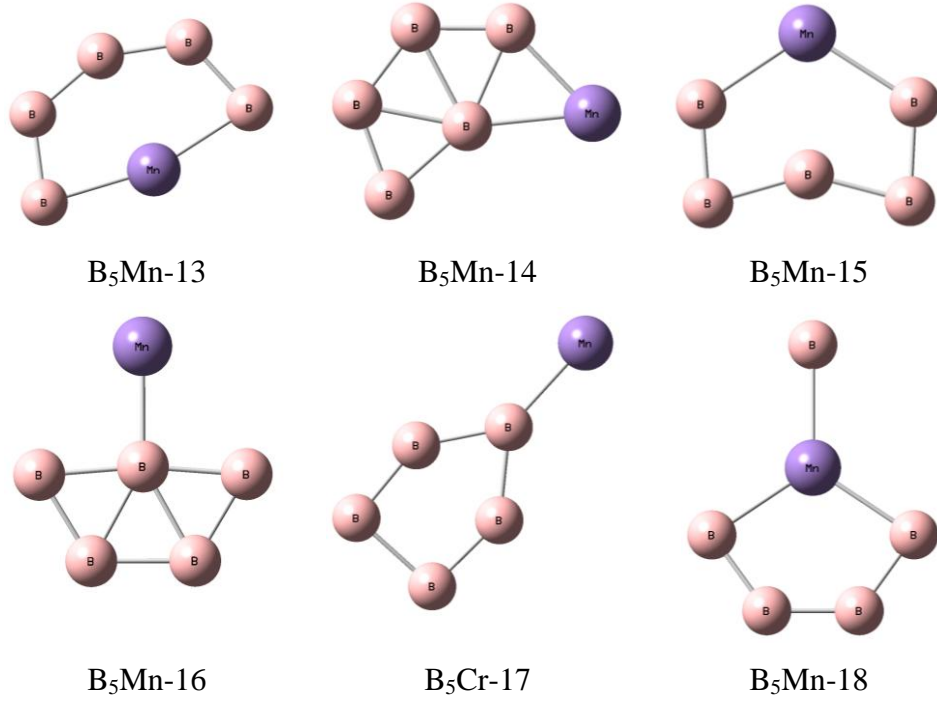


B<sub>5</sub>Mn-2

Şekil 6.25 B<sub>5</sub>Mn Atom Topakları



Şekil 6.25 (devam) B<sub>5</sub>Mn Atom Topakları



Şekil 6.25 (devam2) B<sub>5</sub>Mn Atom Topakları

***B<sub>5</sub>Mn iyon atom topakları:***

Tablo 6.46 B<sub>5</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
	2S+1	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>5</sub>Mn-1</b>	<b>Doublet</b>	-117.456897619	4.101			
	<b>Quartet</b>	-117.548525525	1.610			
	<b>Sextet</b>	-117.522674391	2.313			
<b>B<sub>5</sub>Mn-2</b>	<b>Doublet</b>	-117.459901177	4.020			
	<b>Quartet</b>	-117.457785488	4.077			
<b>B<sub>5</sub>Mn-3</b>	<b>Doublet</b>	-117.342738326	7.205			
	<b>Quartet</b>	-117.435014690	4.696			
	<b>Sextet</b>	-117.451701902	4.243			
	<b>Octet</b>	-117.448648319	4.326			



Tablo 6.46 (devam) B<sub>5</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>5</sub>Mn-4</b>	<b>Doublet</b>	-117.559335692	1.316			
	<b>Quartet</b>	-117.604048598	0.100			
	<b>Sextet</b>	-117.584326257	0.636			
<b>B<sub>5</sub>Mn-5</b>	<b>Doublet</b>	-117.555130293	1.430			
	<b>Quartet</b>	-117.584855377	0.622			
	<b>Sextet</b>	-117.599404891	0.226			
	<b>Octet</b>	-117.519113330	2.409			
<b>B<sub>5</sub>Mn-6</b>	<b>Doublet</b>	-117.457229489	4.092			
	<b>Quartet</b>	-117.565917392	1.137			
	<b>Sextet</b>	-117.567615781	1.091			
	<b>Octet</b>	-117.563957753	1.190			
<b>B<sub>5</sub>Mn-7</b>	<b>Doublet</b>	-117.587903684	0.539	-1275.08906103	0.506	-
	<b>Quartet</b>	-117.607740744	0	-1275.10768511	0	-1275.14312722
	<b>Sextet</b>	-117.599447243	0.225	-1275.10215157	0.150	-
<b>B<sub>5</sub>Mn-8</b>	<b>Doublet</b>	-117.549059784	1.595			
	<b>Quartet</b>	-117.600253805	0.203			
	<b>Sextet</b>	-117.586422991	0.579			
<b>B<sub>5</sub>Mn-9</b>	<b>Doublet</b>	-117.532594289	2.043			
	<b>Quartet</b>	-117.600253480	0.203			
	<b>Sextet</b>	-117.586035779	0.590			
<b>B<sub>5</sub>Mn-10</b>	<b>Doublet</b>	-117.406323819	5.476			
	<b>Quartet</b>	-117.467942796	3.801			
	<b>Sextet</b>	-117.461853392	3.966			
<b>B<sub>5</sub>M-11</b>	<b>Doublet</b>	-117.448917930	4.318			
	<b>Quartet</b>	-117.561054374	1.269			
	<b>Sextet</b>	-117.548248521	1.617			
<b>B<sub>5</sub>Mn-12</b>	<b>Doublet</b>	-117.480972893	3.447			
	<b>Quartet</b>	-117.542318412	1.778			
	<b>Sextet</b>	-117.559179524	1.320			
	<b>Octet</b>	-117.548940670	1.598			
<b>B<sub>5</sub>Mn-13</b>	<b>Doublet</b>	-117.554017442	1.460			
	<b>Quartet</b>	-117.600253563	0.203			
	<b>Sextet</b>	-117.576279285	0.855			
<b>B<sub>5</sub>Mn-14</b>	<b>Doublet</b>	-117.516277758	2.487			
	<b>Quartet</b>	-117.598580540	0.249			
	<b>Sextet</b>	-117.598127737	0.261			
<b>B<sub>5</sub>Mn-15</b>	<b>Doublet</b>	-117.535268682	1.970			
	<b>Quartet</b>	-117.568872186	1.056			
	<b>Sextet</b>	-117.553047287	1.487			

Tablo 6.46 (devam2) B<sub>5</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>5</sub>Mn-16</b>	<b>Doublet</b>	-117.529377169	2.130
	<b>Quartet</b>	-117.571331172	0.990
	<b>Sextet</b>	-117.585258127	0.611
	<b>Octet</b>	-117.563626199	1.199
<b>B<sub>5</sub>Mn-17</b>	<b>Doublet</b>	-117.546377416	1.668
	<b>Quartet</b>	-117.581482905	0.714
	<b>Sextet</b>	-117.554491601	1.447
<b>B<sub>5</sub>Mn-18</b>	<b>Doublet</b>	-117.470108815	3.742
	<b>Quartet</b>	-117.490474403	3.188
	<b>Sextet</b>	-117.455773028	4.132

### 6.5.6. B<sub>6</sub>Mn Atom Topakları

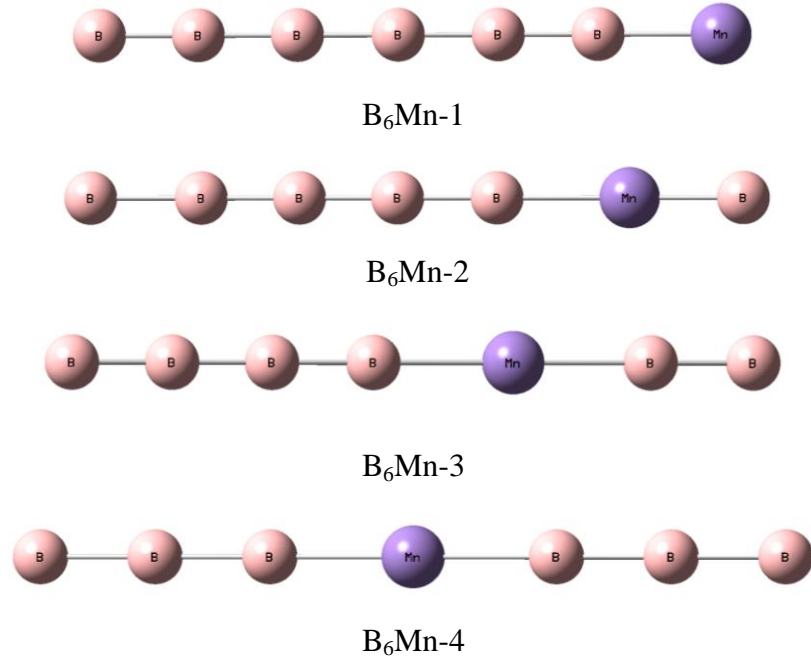
#### *B<sub>6</sub>Mn nötr atom topakları:*

Tablo 6.47 B<sub>6</sub>Mn nötr atom topaklarının hesaplama verileri

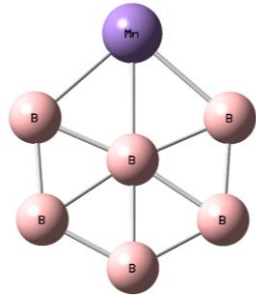
		<b>CEP121-G</b>		<b>6-311++G(d,p)</b>		<b>cc-PVDZ</b>
<b>2S+1</b>		Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görel Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>Mn-1</b>	<b>Doublet</b>	-120.180020049	3.349			
	<b>Quartet</b>	-120.192357675	3.013			
	<b>Sextet</b>	-120.204058280	2.695			
	<b>Octet</b>	-120.201963657	2.752			
<b>B<sub>6</sub>Mn-2</b>	<b>Doublet</b>	-120.012189234	7.912			
	<b>Quartet</b>	-120.109685189	5.261			
	<b>Sextet</b>	-120.114139763	5.140			
	<b>Octet</b>	-120.116121756	5.086			
	<b>Dectet</b>	-120.106169023	5.357			
<b>B<sub>6</sub>Mn-3</b>	<b>Doublet</b>	-120.024141588	7.587			
	<b>Quartet</b>	-120.006011297	8.080			
<b>B<sub>6</sub>Mn-4</b>	<b>Doublet</b>	-120.071079049	6.311			
	<b>Quartet</b>	-120.059503016	6.626			
<b>B<sub>6</sub>Mn-5</b>	<b>Doublet</b>	-120.274648134	0.775			
	<b>Quartet</b>	-120.272948815	0.822			
<b>B<sub>6</sub>Mn-6</b>	<b>Doublet</b>	-120.267064647	0.982	-1299.84539015	1.232	-
	<b>Quartet</b>	-120.303184508	0	-1299.87708553	0.370	-1299.91235255
	<b>Sextet</b>	-120.292517167	0.290	-1299.86781381	0.622	-

Tablo 6.47 (devam)  $B_6Mn$  nötr atom topaklarının hesaplama verileri

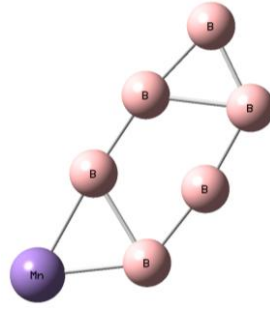
<b><math>B_6Mn-7</math></b>	<b>Doublet</b>	-120.237264820	1.792
	<b>Quartet</b>	-120.271731115	0.855
	<b>Sextet</b>	-120.299857481	0.090
	<b>Octet</b>	-120.297264588	0.160
<b><math>B_6Mn-8</math></b>	<b>Doublet</b>	-120.252186450	1.386
	<b>Quartet</b>	-120.263960789	1.066
	<b>Sextet</b>	-120.245368432	1.572
<b><math>B_6Mn-9</math></b>	<b>Doublet</b>	-120.230879242	1.966
	<b>Quartet</b>	-120.220162231	2.257
<b><math>B_6Mn-10</math></b>	<b>Doublet</b>	-120.246224137	1.548
	<b>Quartet</b>	-120.297942564	0.142
	<b>Sextet</b>	-120.275238102	0.759
<b><math>B_6Mn-11</math></b>	<b>Doublet</b>	-119.938797144	9.908
	<b>Quartet</b>	-119.948515957	9.644
	<b>Sextet</b>	-119.942059971	9.819
<b><math>B_6Mn-12</math></b>	<b>Doublet</b>	-120.105177603	5.384
	<b>Quartet</b>	-120.111098619	5.223
	<b>Sextet</b>	-120.111257187	5.218
	<b>Octet</b>	-120.105978092	5.362



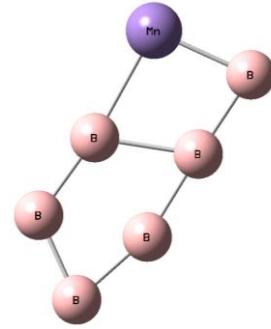
Şekil 6.26  $B_6Mn$  Atom Topakları



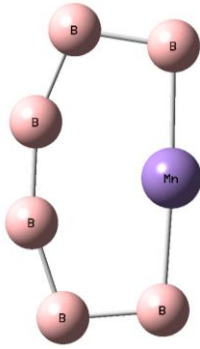
B<sub>6</sub>Mn-5



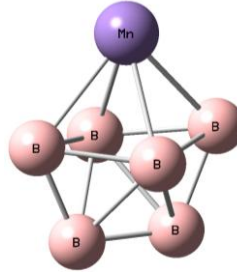
B<sub>6</sub>Mn-6



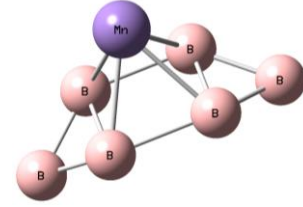
B<sub>6</sub>Mn-7



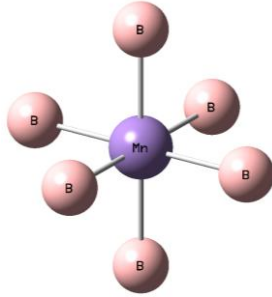
B<sub>6</sub>Mn-8



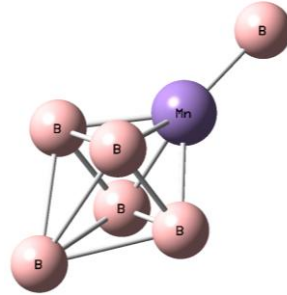
B<sub>6</sub>Mn-9



B<sub>6</sub>Mn-10



B<sub>6</sub>Mn-11



B<sub>6</sub>Mn-12

Şekil 6.26 (devam) B<sub>6</sub>Mn Atom Topakları

*B<sub>6</sub>Mn iyon atom topakları:*

Tablo 6.48 B<sub>6</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

		CEP121-G		6-311++G(d,p)		cc-PVDZ
2S+1		Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)	Görelî Enerji (eV)	Optimize enerji (a.u)
<b>B<sub>6</sub>Mn-1</b>	<b>Singlet</b>	-120.129620420	6.646			
	<b>Triplet</b>	-120.194095570	4.893			
	<b>Quintet</b>	-120.296474201	2.109			
	<b>Septet</b>	-120.296139822	2.119			
<b>B<sub>6</sub>Mn-2</b>	<b>Singlet</b>	-120.107084181	7.259			
	<b>Triplet</b>	-120.175112502	5.409			
	<b>Quintet</b>	-120.210272153	4.453			
	<b>Septet</b>	-120.214337267	4.343			
	<b>Nonet</b>	-120.214500844	4.338			
	<b>11-et</b>	-120,206591210	4,554			
<b>B<sub>6</sub>Mn-3</b>	<b>Singlet</b>	-120.211131993	4.430			
	<b>Triplet</b>	-120.113728368	7.079			
<b>B<sub>6</sub>Mn-4</b>	<b>Singlet</b>	-120.013394459	9.807			
	<b>Triplet</b>	-120.183514550	5.181			
	<b>Quintet</b>	-120.181949634	5.224			
<b>B<sub>6</sub>Mn-5</b>	<b>Singlet</b>	-120.334603186	1.073			
	<b>Triplet</b>	-120.327780112	1.258			
<b>B<sub>6</sub>Mn-6</b>	<b>Singlet</b>	-120.328475909	1.239	-1299.91775420	0.777	-1299.89638648
	<b>Triplet</b>	-120.374067246	0	-1299.91067088	0.969	-
	<b>Quintet</b>	-120.370697708	0.091	-	-	-
<b>B<sub>6</sub>Mn-7</b>	<b>Singlet</b>	-120.309151386	1.765			
	<b>Triplet</b>	-120.361059118	0.353			
	<b>Quintet</b>	-120.355571151	0.502			
<b>B<sub>6</sub>Mn-8</b>	<b>Singlet</b>	-120.324998076	1.334			
	<b>Triplet</b>	-120.367931512	0.166			
	<b>Quintet</b>	-120.350598146	0.638			
<b>B<sub>6</sub>Mn-9</b>	<b>Singlet</b>	-120.329801068	1.203			
	<b>Triplet</b>	-120.366206878	0.213			
	<b>Quintet</b>	-120.359210271	0.403			
<b>B<sub>6</sub>Mn-10</b>	<b>Singlet</b>	-120.276393011	2.655			
	<b>Triplet</b>	-120.293033410	2.203			
	<b>Quintet</b>	-120.297649256	2.077			
	<b>Septet</b>	-120.301519542	1.972			
	<b>Nonet</b>	-120.307776068	1.802			

Tablo 6.48 (devam) B<sub>6</sub>Mn iyon atom topaklarının hesaplama verileri

<b>B<sub>6</sub>Mn-11</b>	<b>Singlet</b>	-120.294858561	2.153
	<b>Triplet</b>	-120.357672739	0.445
	<b>Quintet</b>	-120.363771594	0.279
	<b>Septet</b>	-120.346597320	0.746
<b>B<sub>6</sub>Mn-12</b>	<b>Singlet</b>	-120.087688319	7.787
	<b>Triplet</b>	-120.039159822	9.106

## 7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışma Bor atomunun Titanyum, Mangan ve Krom katkılanmış atom topakları şeklinde ayrı ayrı 3 ana kısımda incelendi. İlk kısımda bu atom topaklarının başlangıç geometrileri herhangi bir sınırlama olmaksızın Gauss View'de oluşturuldu. Oluşturulan bu atom topakları Gaussian 09 paket programında DFT/B3LYP metodu CEP-121G temel seti kullanılarak hesaplandı. Hesaplamalar nötr ve iyon halleri için ayrı olarak yapıldı. Optimizasyon sonucunda bu topakların optimize enerjileri, elektronik ve yapısal özellikleri bulundu. Sonuçlar nötr ve iyon olarak ayrı tablolar halinde hazırlandı.

İkinci kısımda tablodaki atom topaklarından en kararlı olan yapılar belirlenerek B3LYP metodu 6-311++G(d,p) temel seti ile hesaplamalara devam edildi. Hesaplama sonuçları bulunarak tekrar tablolar oluşturuldu. Benzer şekilde nötr ve iyon halleri için ayrı tablolar hazırlandı.

Son kısımda ise sonuçlar karşılaştırılarak en kararlı atom topak yapılar yeniden belirlendi. Kararlı topaklar son olarak B3LYP metodu cc-pVDZ temel seti ile hesaplandı. Hesaplama sonuçları bulunarak tablolara aktarıldı. Moleküllerin elektronik enerjileri, en yüksek dolu molekül orbital enerjileri (HOMO), en düşük molekül orbital enerjileri (LUMO) belirlendi. Hesaplama sonuçlarında HOMO-LUMO enerji farkı ( $\Delta E$ ) bulunarak tartışıldı.

## 8. KAYNAKLAR

- [1] Erkoç, Ş. *Nanobilim ve NanoTeknoloji*, ODTÜ Yayıncılık, ANKARA, **2011**.
- [2] M.R. Hoare, *Adv. Chem. Phys.* 40, 49, **1979**.
- [3] Ber. Bunsenges., *Phys. Chem.* Vol. 88, **1984**.
- [4] *Surf. Sci.* Vol. 156, **1985**.
- [5] *Chem. Rev.* Vol. 86, **1986**.
- [6] M. Moskovits, Ed., *Metal Clusters*, Wiley, **1986**.
- [7] NATO-ASI Series B Vol. 158, **1987**.
- [8] S. Sugano, Y. Nishina, and S. Ohnishi, Eds., *Microclusters*, Springer-Verlag, **1987**.
- [9] T. Halicioglu and C. W. Bauschlicher, Jr., *Rep. Prog. Phys.* 51, 883, **1988**.
- [10] H. Kroto, A.W. Allat, and S.P. Balm, *Chem. Rev.* 91, 1213, **1991**.
- [11] J. Jortner, *Z. Phys. D: At. Mol. Clusters* 24, 247, **1992**.
- [12] NATO-ASI Series B Vol. 283, **1992**.
- [13] H. Haberland, Ed. *Clusters of Atoms and Molecules*, Springer-Verlag, **1994**.
- [14] G. Schmid, Ed., *Clusters and Colloids*, VCH Pub., **1994**.
- [15] U. Kreibig and M. Vollmer, *Optical Properties of Metal Clusters*, Springer, **1995**.
- [16] P. Jena and S. N. Behera, Eds., *Clusters and Nanostructured Materials*, Nova Science Pub., **1996**.
- [17] T. Kondow, K. Kaya, A. Terasaki, *Structures and Dynamics of Clusters*, Universal Academic Press, Tokyo, **1996**.
- [18] G. N. Chuev, V. D. Lakhno, and A. P. Nefedov, Eds., *Progress in the Physics of Clusters*, World Scientific, **1999**.
- [19] K. H. M. Broer, Ed., *Metal Clusters at Surfaces*, Springer, **2000**.
- [20] H. Oymak and S. Erkoç, *Phys. Rev. A* 66, article no: 033202, **2002**.
- [21] R. L. Johnston, *Atomic and Molecular Clusters*, Taylor and Francis, New York, **2002**.
- [22] O. Sinanoglu, *Adv. Chem. Phys.* 12, 283, **1967**.
- [23] S. Erkoc, *Physics Reports* 278, 79, **1997**.
- [24] S. Erkoc, in *Ann. Rev. Comp. Phys.* IX, Ed. D. Stauffer, World Scientific, **2001**, pp: 1-103.



- [25] P. Fantucci, V. Bonacic-Koutecky, J. Koutecky, *Z. Phys. D* 12, 307, **1989**.
- [26] Selamet, Ö.F. *Pd<sub>n</sub> (n=56-80) Atom Topaklarının Geometrik Yapıları ve Pd<sub>78</sub> topağının erime dinamiğinin incelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Afyon Kocatepe Üniversitesi-Fen Bilimleri Enstitüsü, Afyon, 54s, **2006**.
- [27] Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, J. A.; Peralta, Jr., J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, O.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. *Gaussian 09, Revision A.02*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2009**.
- [28] Frisch, A., Nielsen, A. B., Holder, A. L., *Gaussview Users Manual* Gaussian Inc. Pitsburg, **2000**.
- [29] Çelik, İ., Akkurt, M., İde, S., Tutar, A., Çakmak, O., “C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>Br<sub>4</sub> molekülünün konformasyon analizi ve kuantum mekanik yöntemlerle optimizasyonu, elde edilen elektronik ve yapısal parametrelerin x-ışınları yapı analiz sonuçları ile karşılaştırılması”, *Gazi University Journal of Science*, 16(1): 27-35, **2003**.
- [30] Höltje, H. D., Sippl, W., Rognan, D., Folkers, G., “Molecular Modelling, 2<sup>nd</sup> ed. ”, *Wiley-VCH*, 18-78, **2003**.
- [31] Leach, A. E., “Molecular modelling principles and applications”, *Paerson Education Limited*, England, 455-501, **2001**.
- [32] Jensen, F., “Introduction to Computational Chemistry”, *John Wiley and Sons Inc.*, New York, 5-67, **1999**.

- [33] Pulay, P., "Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules", *Molecular Physics*, 17(2): 197-204, **1969**.
- [34] Pople, J. A., Krishan, R., Schlegel, H. B., Binkley, J. S., *International Journal of Quantum Chemistry Symposium*, 13: 225, **1979**.
- [35] Pulay, P., "Analytical derivative methods in Quantum chemistry, Ab initio methods in Quantum chemistry", by K. P. Lawley 11<sup>nd</sup> ed., *John Wiley & Sons Ltd*, 118-143, **1987**.
- [36] Cramer, C. J., "Essentials of Computational Chemistry", *John Wiley & Sons*, University of Minnesota, 70-98, **2002**.
- [37] Atkins, P. W., Friedman, R. S., "Molecular Quantum Mechanics", *Oxford University Press*, New York, 240-254, **1997**.
- [38] Koch, W., Holthausen, M. C., "A Chemist's Guide to Density Functional Theory", *Wiley-VCH*, Amsterdam, 40-90, **2000**.
- [39] Becke, A. D., "Density functional thermochemistry III, The role of exact exchange", *Journal of Chemical Physics*, 98(7): 5648-5652, **1993**.
- [40] Gill, P. M. W., "DFT, HF and selfconsistent field, Encyclopedia of Computational Chemistry", *John Wiley & Sons Ltd*, New York, 80-105, **1996**.
- [41] Parr, R.G., Yang, W., "Density Functional Theory", *Oxford University Press*, England, 60-101, **1989**.
- [42] Csizmadia, G. L., "Computational Adv. Inorganic chem., Molecular Str. And reactivity", Ed. by Ögretir, C., Csizmadia, G.L., NATO ASI series. *Kluwer Academic Publishers*, USA, 15-74, **1981**.
- [43] Peng, C.; Ayala, P. Y.; Schlegel, H. B.; and Frisch, M. J., "Using Redundant Internal Coordinates to Optimize Equilibrium Geometries and Transition States", *J. Comp. Chem.*, 17: 49-56, **1996**.
- [44] Güventürk Uğurlu, *3-feniltiyofen molekülü ve florlu türevlerinin yapısal parametreleri, elektronik ve lineer olmayan optik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi*, tez gazi üniversitesi, **2006**.
- [45] Simons, J., "An Introduction to Theoretical Chemistry", **Cambridge**, Utah, 188-191, **2003**.

- [46] L.S. Wang, Clusters, in Encyclopedia of Chemical Physics and Physical Chemistry, edited by J.H. Moore and N. D. Spencer, (IOP Publishing Inc., Philadelphia, **2001**) pp.2131-2130.
- [47] P. L. Hansen, J. B. Wagner, S. Helveg, J. R. Rostrup-Nielsen, B. S. Clausen, and H. Topsøe, *Science* 295, 2053, **2002**.
- [48] M.B. Knickelbein, *Annu. Rev. Phys. Chem.* 50,79, **1999**.
- [49] D. I. Gittins, D. Bethell, D. J. Schiffrin, and R. J. Nichols, *Nature* 408,67, **2000**.
- [50] S. J. Park, T. A. Taton, and C. A. Mirkin, *Science* 295,1503, **2002**.
- [51] A. K. Boal, F. Ilhan, J. E. DeRouchey, T. Thurn-Albrecht, T. P. Russell, and V. M. Rotello, *Nature (London)* 404,746, **2000**.
- [52] C. Binns, *Surf. Sci. Rep.* 44,1, **2001**.
- [53] J. Jellinek, *Theory of Atomic and Molecular Clusters with a Glimpse at Experiments*, Springer Series in Cluster Physics (Springer, Berlin **1999**).
- [54] (a) *Metal Clusters at Surfaces*, edited by K.-H. Meiwes-Broer, *Springer series in Cluster Physics* (Springer, Berlin, 1999). (b) W. A. de Heer, W. D. Knight, M. Y. Chou, and M. L. Cohen, *Solid State Phys.* 40,3 (1987). (c) W. A. de Heer, *Rev. Mod. Phys.* 65,611 (1993). (d) V. Bonacic Koutecky, P. Fantucci, and J. Koutecky, *Chem. Rev.* 91,1035 (1991). (e) W. D. Knight et al., *Phys. Rev. Lett.* 52,2141 (1984). (f) W. Ekardt, *Phys. Rev. B* 29,1558 (1984). (g) M. L. Cohen et al., *J. Phys. Chem.* 91,3141, **1987**.
- [55] (a) *Cluster of Atoms and Molecules I*, edited by H. Haberland, Springer Series in Chemical Physics 52 (Springer, Berlin 1995). (b) *Advances in Metal and Semiconductor Clusters*, edited by Michael A. Duncan, University of Georgia Volumes 1-4 Published by JAI Press, Inc.1993-1998. Volume 5 Published by Elsevier Science Publishers, **2001**.
- [56] (a) H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brian, R. F. Curl, and R. E. Smalley, *Nature* 318,162 (1985). (b) W. Kratschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, and D. R. Huffman, *Nature* 347,354, **1990**.
- [57] X. Li, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, and J. Simons, "Tetracoordinated Planar Carbon in the  $Al_4C^-$  Anion. A Combined Photoelectron Spectroscopy and Ab Initio Study", *J. Am. Chem. Soc.* 121,6033-6038, **1999**.

- [58] L. S. Wang, A. I. Boldyrev, X. Li, and J. Simons, "Experimental Observation of Pentaatomic Tetracoordinate Planar Carbon Containing Molecules", *J. Am. Chem. Soc.* 122,7681, **2000**.
- [59] X. Li, H. J. Zhai, and L. S. Wang, "Photoelectron Spectroscopy of Pentaatomic Tetracoordinate Planar Carbon Molecules:  $CAI_3Si^-$  and  $CAI_3Ge^-$ ", *Chem. Phys. Lett.* 357,415-419, **2002**.
- [60] H. Häkkinen, M. Moseler, and U. Landman, *Phys. Rev. Lett.* 89,033401, **2002**.
- [61] F. Furche, R. Ahlrichs, P. Weis, C. Jacob, S. Gilb, T. Bierweiler, and M. Kappes, *J. Chem. Phys.* 117,6982, **2002**.
- [62] H. Häkkinen, B. Yoon, U. Landman, X. Li, H. J. Zhai, and L. S. Wang, *J. Phys. Chem. A* 107,6168-6175, **2003**.
- [63] H. J. Zhai, A. N. Alexandrova, K. A. Birch, A. I. Boldyrev, and L. S. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 42,6004-6008, **2003**.
- [64] H. J. Zhai, B. Kiran, J. Li, and L. S. Wang, *Nature Materials* 2,827-833, **2003**.
- [65] X. Li, A. E. Kuznetsov, H. F. Zhang, A. I. Boldyrev, and L. S. Wang, *Science* 291,859-861, **2001**.
- [66] A. E. Kuznetsov, A. I. Boldyrev, X. Li, and L. S. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* 123,8825-8831, **2001**.
- [67] J. Li, X. Li, H. J. Zhai, and L. S. Wang, *Science* 299,864-867, **2003**.
- [68] B. Kiran, S. Bulusu, H. J. Zhai, S. Yoo, X. C. Zeng, and L. S. Wang, B. Kiran, S. Bulusu, H. J. Zhai, S. Yoo, X. C. Zeng, and L. S. Wang, *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)*, 102,961-964, **2005**.
- [69] B. Kiran, X. Li, H. J. Zhai, L. F. Cui, and L. S. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 43,2125-2129, **2004**.
- [70] Denis E. Bergeron, A. Welford Castleman Jr., Tsuguo Morisato, Shiv N. Khanna, *Science* 304,84, **2004**.
- [71] H. Hubert, B. Devouard, L. A. J. Garvie, M. O'Keeffe, P. R. Buseck, W. T. Petuskey, P. F. McMillan, *Nature* **1998**, 391, 376.
- [72] M. Fujimori, T. Nakata, T. Nakayama, E. Nishibori, K. Kimura, M. Takata, M. Sakata, *Phys. Rev. Lett.* **1999**, 82, 4452.

- [73] R. Kawai, J. H. Weare, *J. Chem. Phys.* **1991**, 95, 1151.
- [74] A. Ricca, C.W. Bauschlicher, *Chem. Phys.* **1996**, 208, 233.
- [75] I. Boustani, *Phys. Rev. B* **1997**, 55, 16426.
- [76] (a) Vast, N.; Baronia, S.; Zerah, G.; Besson, J. M.; Polian, A.; Grimsditch, M.; Chervin, *J. C. Phys. Rev. Lett.* **1997**, 78, 693–696.  
(b) Fujimori, M.; Nakata, T.; Nakayama, T.; Nishibori, E.; Kimura, K.; Takata, M.; Sakata, M. *Phys. Rev. Lett.* **1999**, 82, 4452–44525.,
- [77] Zhai, H. J.; Wang, L. S.; Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I. *J. Chem. Phys.* 2002, 117, 7917–7924. (b) Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I.; Zhai, H. J.; Wang, L. S.; Steiner, E.; Fowler, P. W. *J. Phys. Chem. A* 2003, 107, 1359–1369. (c) Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I.; Zhai, H. J.; Wang, L. S. *J. Phys. Chem. A* 2004, 108, 3509–3517. (d) Zhai, H. J.; Wang, L. S. Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I.; Zakrzewski, V. G. *J. Phys. Chem. A* 2003, 107, 9319–9328. (e) Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I.; Zhai, H. J.; Wang, L. S. *J. Chem. Phys.* **2005**, 122, 054313.
- [78] Zhai, H. J.; Alexandrova, A. N.; Birch, K. A.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2003, 42, 6004–6008. (b) Alexandrova, A. N.; Zhai, H. J.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 3552–3554.
- [79] Zhai, H. J.; Kiran, B.; Li, J.; Wang, L. S. *Nature Mater.* 2003, 2, 827–833.
- [80] Kiran, B.; Bulusu, S.; Zhai, H. J.; Yoo, S.; Zeng, X. C.; Wang, L. S. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2005**, 102, 961–964.
- [81] Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I.; Zhai, H. J.; Wang, L. S. *Coord. Chem. Rev.* **2006**, 250, 2811–2866.
- [82] Zhai, H. J.; Wang, L. S.; Zubarev, D. Y.; Boldyrev, A. I. *J. Phys. Chem. A.* 2006, 110, 1689–1693. (b) Wang, L. M.; Huang, W.; Averkiev, B. B.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2007, 46, 4550–4553. (c) Averkiev, B. B.; Zubarev, D. Y.; Wang, L. M.; Huang, W.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *J. Am. Chem. Soc.* 2008, 130, 9248–9250. (d) Averkiev, B. B.; Wang, L. M.; Huang, W.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2009**, 11, 9840–9849.
- [83] Sergeeva, A. P.; Zubarev, D. Y.; Zhai, H. J.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 7244–7246.

- [84] Pan, L. L.; Li, J.; Wang, L. S. *J. Chem. Phys.* **2008**, 129, 024302
- [85] Huang, W.; Sergeeva, A. P.; Zhai, H. J.; Averkiev, B. B.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *Nature Chem.* **2010**, 2, 202–206.
- [86] (a) Wang, L. M.; Averkiev, B. B.; Ramilowski, J. A.; Huang, W.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *J. Am. Chem. Soc.* 2010, 132, 14104–14112. (b) Zhai, H. J.; Miao, C. Q.; Li, S. D.; Wang, L. S. *J. Phys. Chem. A* 2010, 114, 12155–12161. (c) Galeev, T. R.; Ivanov, A. S.; Romanescu, C.; Li, W. L.; Bozhenko, K. V.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2011, 13, 8805–8810. (d) Romanescu, C.; Sergeeva, A. P.; Li, W. L.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 8646–8653.
- [87] Sergeeva, A. P.; Averkiev, B. B.; Zhai, H. J.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *J. Chem. Phys.* **2011**, 134, 224304.
- [88] Piazza, Z. A.; Li, W. L.; Romanescu, C. R.; Sergeeva, A. P.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *J. Chem. Phys.* **2012**, 136, 104310.
- [89] Romanescu, C.; Harding, D. J.; Fielicke, A.; Wang, L. S. *J. Chem. Phys.* **2012**, 137, 014317.
- [90] Oger, E.; Crawford, N. R. M.; Kelting, R.; Weis, P.; Kappes, M. M.; Ahlrichs, R. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2007**, 46, 8503–8506.
- [91] F. A. Cotton, G. Wilkinson, C. A. Murillo, and M. Bochmann, *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th ed. (Wiley-Interscience, New York, **1999**).
- [92] N. N. Greenwood and A. Earnshaw, *Chemistry of the Elements* (Butterworth-Heinemann, **1997**).
- [93] L. Hanley, J. L. Whitten, and S. L. Anderson, *J. Phys. Chem.* 92, 5803, **1988**.
- [94] R. Kawai and J. H. Weare, *J. Chem. Phys.* 95, 1151, **1991**.
- [95] H. Kato, K. Yamashita, and K. Morokuma, *Chem. Phys. Lett.* 190, 361, **1992**.
- [96] I. Boustani, *Int. J. Quantum Chem.* 52, 1081, **1994**.
- [97] I. Boustani, *Chem. Phys. Lett.* 233, 273, **1995**.
- [98] A. Ricca and C. W. Bauschlicher, *Chem. Phys.* 208, 233, **1996**.
- [99] I. Boustani, *Phys. Rev. B* 55, 16426, **1997**.
- [100] H. J. Zhai, L. S. Wang, A. N. Alexandrova, and A. I. Boldyrev, *J. Chem. Phys.* 117, 7917, **2002**.

- [101] A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, H. J. Zhai, L. S. Wang, E. Steiner, and P. W. Fowler, *J. Phys. Chem. A* 107, 1359, **2003**.
- [102] H. J. Zhai, A. N. Alexandrova, K. A. Birch, A. I. Boldyrev, and L. S. Wang, *Angew. Chem., Int. Ed.* 42, 6004, **2003**.
- [103] H. J. Zhai, B. Kiran, J. Li, and L. S. Wang, *Nature Mater.* 2, 827, **2003**.
- [104] A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, H. J. Zhai, and L. S. Wang, *J. Phys. Chem. A* 108, 3509, **2004**.
- [105] B. Kiran, S. Bulusu, H. J. Zhai, S. Yoo, X. C. Zeng, and L. S. Wang, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 102, 961, **2005**.
- [106] A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, H. J. Zhai, and L. S. Wang, *Coord. Chem. Rev.* 250, 2811, **2006**.
- [107] A. P. Sergeeva, D. Y. Zubarev, H. J. Zhai, A. I. Boldyrev, and L. S. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* 130, 7244, **2008**.
- [108] W. Huang, A. P. Sergeeva, H. J. Zhai, B. B. Averkiev, L. S. Wang, and A. I. Boldyrev, *Nature Chem.* 2, 202, **2010**.
- [109] A. P. Sergeeva, B. B. Averkiev, H. J. Zhai, A. I. Boldyrev, and L. S. Wang, *J. Chem. Phys.* 134, 224304, **2011**.
- [110] Z. A. Piazza, W.-L. Li, C. Romanescu, A. P. Sergeeva, L. S. Wang, and A. I. Boldyrev, *J. Chem. Phys.* 136, 104310, **2012**.
- [111] E. Oger, N. R. M. Crawford, R. Kelting, P. Weis, M. M. Kappes, and R. Ahlrichs, *Angew. Chem., Int. Ed.* 46, 8503, **2007**.
- [112] T. B. Tai, N. M. Tam, and M. T. Nguyen, *Chem. Phys. Lett.* 530, 71, **2012**.
- [113] H. J. Zhai, A. N. Alexandrova, K. A. Birch, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *Angew. Chem.* 2003, 115, 6186 – 6190; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, 42, 6004 – 6008.
- [114] H. J. Zhai, B. Kiran, J. Li, L. S. Wang, *Nat. Mater.* **2003**, 2, 827 – 833.
- [115] A. N. Alexandrova, H. J. Zhai, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 3552 – 3554.
- [116] A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, H. J. Zhai, L. S. Wang, *Coord. Chem. Rev.* **2006**, 250, 2811 – 2866.
- [117] D. Yu. Zubarev, A. I. Boldyrev, *J. Comput. Chem.* **2007**, 28, 251 – 268.

- [118] W. Huang, A. P. Sergeeva, H. J. Zhai, B. B. Averkiev, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *Nat. Chem.* **2010**, 2, 202 – 206
- [119] A. P. Sergeeva, B. B. Averkiev, H. J. Zhai, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *J. Chem. Phys.* **2011**, 134, 224304.
- [120] E. Oger, N. R. M. Crawford, R. Kelting, P. Weis, M. M. Kappes, R. Ahlrichs, *Angew. Chem.* 2007, 119, 8656; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 8503.
- [121] H. J. Zhai, A. N. Alexandrova, K. A. Birch, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *Angew. Chem.* 2003, 115, 6186; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, 42, 6004.
- [122] H. J. Zhai, B. Kiran, Li, J., L. S. Wang, *Nat. Mater.* **2003**, 2, 827.
- [123] A. P. Sergeeva, D. Y. Zubarev, H. J. Zhai, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 7244.
- [124] W. Huang, A. P. Sergeeva, H. J. Zhai, B. B. Averkiev, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *Nat. Chem.* **2010**, 2, 202.
- [125] B. Kiran, S. Bulusu, H. J. Zhai, S. Yoo, X. C. Zeng, L. S. Wang, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2005**, 102, 961.
- [126] The @ sign has already been used to indicate endohedral doping in 3D cage clusters, such as in He@C<sub>60</sub> or Cu@Au<sub>16</sub>. We propose the \_ sign to designate the central position of the doped atom in monocyclic structures in M\_Bn-type planar clusters.
- [127] Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I.; Zhai, H. J.; Wang, L. S. *Coord. Chem. Rev.* **2006**, 250, 2811.
- [128] Zhai, H. J.; Kiran, B.; Li, J.; Wang, L. S. *Nat. Mater.* **2003**, 2, 827.
- [129] (a) Sergeeva, A. P.; Zubarev, D. Y.; Zhai, H. J.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *J. Am. Chem. Soc.* 2008, 130, 7244. (b) Sergeeva, A. P.; Averkiev, B. B.; Zhai, H. J.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *J. Chem. Phys.* **2011**, 134, 224304.
- [130] (a) Huang, W.; Sergeeva, A. P.; Zhai, H. J.; Averkiev, B. B.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *Nature Chem.* 2010, 2, 202. (b) Kiran, B.; Bulusu, S.; Zhai, H. J.; Yoo, S.; Zeng, X. C.; Wang, L. S. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2005**, 102, 961.
- [131] Zhai, H. J.; Alexandrova, A. N.; Birch, K. A.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2003**, 42, 6004.



- [132] Alexandrova, A. N.; Zhai, H. J.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 3552.
- [133] Fowler, P. W.; Gray, B. R. *Inorg. Chem.* **2007**, 46, 2892.
- [134] H. J. Zhai, A. N. Alexandrova, K. A. Birch, A. I. Boldyrev, and L. S. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 42, 6004, **2003**.
- [135] A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, H. J. Zhai, and L. S. Wang, *Coord. Chem. Rev.* 250, 2811, **2006**.
- [136] D. Y. Zubarev and A. I. Boldyrev, *J. Comput. Chem.* 28, 251, **2007**.
- [137] H. J. Zhai, L. S. Wang, D. Y. Zubarev, and A. I. Boldyrev, *J. Phys. Chem. A* 110, 1689, **2006**.
- [138] H. J. Zhai, C. Q. Miao, S. D. Li, and L. S. Wang, *J. Phys. Chem. A* 114, 12155, **2010**.
- [139] K. Exner, P. von R. Schleyer, *Science* **2000**, 290, 1937
- [140] Z. X. Wang, P. von R. Schleyer, *Science* **2001**, 292, 2465.
- [141] R. M. Minyaev, T. N. Gribanova, A. G. Starikov, V. I. Minkin, *Mendeleev Commun.* **2001**, 11, 213.
- [142] L. M. Wang, W. Huang, B. B. Averkiev, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *Angew. Chem.* 2007, 119, 4634; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 4550.
- [143] B. B. Averkiev, D. Y. Zubarev, L. M. Wang, W. Huang, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 9248 – 9250.
- [144] K. Exner, P. v. R. Schleyer, *Science* **2000**, 290, 1937 – 1940.
- [145] Z.-X. Wang, P. v. R. Schleyer, *Science* **2001**, 292, 2465 – 2469.
- [146] L. M. Wang, W. Huang, B. B. Averkiev, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *Angew. Chem.* 2007, 119, 4634 – 4637; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 4550 – 4553.
- [147] B. B. Averkiev, D. Y. Zubarev, L. M. Wang, W. Huang, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 9248 – 9250.
- [148] R. Islas, T. Heine, K. Ito, P. v. R. Schleyer, G. Merino, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 14767 – 14774.
- [149] B. B. Averkiev, A. I. Boldyrev, *Russ. J. Gen. Chem.* **2008**, 78, 769 – 773.
- [150] J. C. Guo, W. Z. Yao, Z. Li, S. D. Li, *Sci. China Ser. B* **2009**, 52, 566 – 570.

- [151] C. Romanescu, T.R. Galeev, W.L. Li, A.I. Boldyrev, L.S. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 50, **2011**, 9334.
- [152] T.R. Galeev, C. Romanescu, W.L. Li, L.S. Wang, A.I. Boldyrev, *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, **2012**, 2101.
- [153] W.L. Li, C. Romanescu, T.R. Galeev, Z.A. Piazza, A.I. Boldyrev, L.S. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* 134, **2012**, 165.
- [154] H.J. Zhai, A.N. Alexandrova, K.A. Birch, A.I. Boldyrev, L.S. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 42, **2003**, 6004
- [155] Q.O. Luo, *Sci. China Ser. B e Chem.* 51, **2008**, 607.
- [156] Q.Y. Wu, Y.P. Tang, X.H. Zhang, *Sci. China Ser. B e Chem.* 52 (2009) 288.
- [157] Z. Yang, S.J. Xiong, *J. Chem. Phys.* 128, **2008**, 184310.
- [158] C. Romanescu, A. P. Sergeeva, W. L. Li, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 8646 – 8653.
- [159] T. R. Galeev, C. Romanescu, W. L. Li, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *J. Chem. Phys.* **2011**, 135, 104301.
- [160] W. L. Li, C. Romanescu, T. R. Galeev, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *J. Phys. Chem. A* **2011**, 115, 10391 – 10397.
- [161] Galeev, T. R.; Romanescu, C.; Li, W. L.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *J. Chem. Phys.* **2011**, 135, 104301.
- [162] Luo, Q. O. *Sci. China B* **2008**, 51, 607.
- [163] Ito, K.; Pu, Z.; Li, Q. S.; Schleyer, P. v. R. *Inorg. Chem.* **2008**, 47, 10906.
- [164] Li, S. D.; Miao, C. Q.; Guo, J. C. *Sci. China B* **2009**, 52, 900.
- [165] Wu, Q. Y.; Tang, Y. P.; Zhang, X. H. *Sci. China B* **2009**, 52, 288.
- [166] Pu, Z. F.; Ito, K.; Schleyer, P. V.; Li, Q. S. *Inorg. Chem.* **2009**, 48, 10679.
- [167] Averkiev, B. B.; Wang, L. M.; Huang, W.; Wang, L. S.; Boldyrev, A. I. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2009**, 11, 9840.

## ÖZGEÇMİŞ

1981 yılında Karabük'ün Yenice ilçesinde doğdu. İlk ve orta öğrenimini tamamladıktan sonra 2000 yılında İstanbul Bağcılar Lisesi'nden mezun oldu. 2004 yılında Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Karabük Meslek Yüksekokulu Bilgisayar Teknolojisi ve Programlama bölümünde öğrenim görmeye hak kazandı. 2006 yılında bu bölümden mezun oldu. 2006 yılında Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünün lisans programını kazandı. 2007 yılında Gazi Üniversitesi Bilgisayar ve Öğretim Teknolojileri Öğretmenliği bölümünü kazandı. 2010 yılında Bilgisayar ve Öğretim Teknolojileri Öğretmenliği bölümünden mezun oldu. 2010 yılında Ahi Evran Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı yüksek lisans programını şartlı olarak kazandı. 2011 yılında Erasmus Programıyla İşveç ülkesine giderek Linnaeus Üniversitesi'nde yüksek lisans eğitimine devam etti. 2013 yılında Ahi Evran Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans eğitimini tamamladı.