

## **Doç.Dr. HANDE TOFFOLİ**

### **Kişisel Bilgiler**

**E-posta:** ustunel@metu.edu.tr  
**Web:** <https://avesis.metu.edu.tr/ustunel>

### **Uluslararası Araştırmacı ID'leri**

ScholarID: C3xXi5AAAAAJ  
ORCID: 0000-0003-0307-9036  
Publons / Web Of Science ResearcherID: A-3579-2016  
ScopusID: 57164840400  
Yoksis Araştırmacı ID: 165081

### **Eğitim Bilgileri**

Doktora, Cornell University, Türkiye 1999 - 2005  
Lisans, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Türkiye 1995 - 1999

### **Yaptığı Tezler**

Doktora, Quantitative Prediction of Elastic and Anelastic Phenomena on the Nanometer Scale ?, Cornell University, 2005

### **Araştırma Alanları**

Temel Bilimler

### **Akademik Unvanlar / Görevler**

Doç.Dr., Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 2017 - Devam Ediyor  
Dr.Öğr.Üyesi, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 2007 - 2017

### **Yönetilen Tezler**

TOFFOLİ H., Çok katmanlı grafen üzerinde altın atomik kuvvet mikroskop uçlarının moleküller dinamiği modellemesi, Yüksek Lisans, C.Maden(Öğrenci), 2020  
TOFFOLİ H., Altgensel boron nitrür ve altın yüzeylerinin nanotribolojik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi, Yüksek Lisans, G.Özcan(Öğrenci), 2020  
TOFFOLİ H., Grafen ve polietereterketon arayüz karakteristiklerinin yoğunluk fonksiyoneli ve moleküller dinamik çalışması, Yüksek Lisans, E.Sert(Öğrenci), 2020  
TOFFOLİ H., MoS<sub>2</sub>/Au(111) yüzeyinin başlangıçtan itibaren nanotribolojik özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans, Ü.Doğan(Öğrenci), 2020  
TOFFOLİ H., Tight binding investigation of graphene nanostructures under magnetic field, Yüksek Lisans, F.YALÇIN(Öğrenci), 2019  
TOFFOLİ H., a-BN/a-BN ve a-BN/Au(111)yüzeyleri arasındaki nanotribolojik özelliklerin ilk prensip hesapları ile

incelenmesi, Yüksek Lisans, M.Baksi(Öğrenci), 2019

TOFFOLİ H., Katı-hal hidrojen depolama malzemelerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmesi, Doktora, A.Gencer(Öğrenci), 2018

GÜRSES E., TOFFOLİ H., Density functional theory and molecular dynamics simulations of carbon nanotubes, polyetheretherketone and their interfaces, Yüksek Lisans, G.TORAMAN(Öğrenci), 2018

TOFFOLİ H., Density functional theory investigation on thickness and load dependency of friction force between graphene and Au interfaces, Yüksek Lisans, D.GİZEM(Öğrenci), 2018

TOFFOLİ H., Atomistic insights into surface reactivity via density functional theory, Doktora, M.DEMİRTAŞ(Öğrenci), 2018

TOFFOLİ H., Ab initio modelling of materials properties for catalytic and device applications, Doktora, M.GÖKHAN(Öğrenci), 2017

TOFFOLİ H., AKATA KURÇ B., Covalent and non-covalent functionalization of graphene for application in catalysis and device technology: A first principles computational study, Doktora, T.İRFAN(Öğrenci), 2017

TOFFOLİ H., Density functional theory investigation of the reaction mechanisms for selective oxidation of alcohols on gold catalysts, Yüksek Lisans, O.DERNEK(Öğrenci), 2016

MEHRABOV A., TOFFOLİ H., Ni-B nanoalaşımının sentezlenmesi ve yapısal karakterizasyonu., Yüksek Lisans, L.Seda(Öğrenci), 2015

TOFFOLİ H., A density functional theory investigation of graphene-based materials, Doktora, C.SİBEL(Öğrenci), 2014

TOFFOLİ H., Density functional theory investigation of dipolar ultracold atoms in harmonic traps, Yüksek Lisans, O.KARACA(Öğrenci), 2014

TOFFOLİ H., Investigation of catalytic properties and electronic structure of correlated material CeO<sub>2</sub> with ab-initio computational methods, Yüksek Lisans, B.ÖZDEMİR(Öğrenci), 2013

AKATA KURÇ B., TOFFOLİ H., Modelling and experimental study of titanosilicate ETS-10: application for solar cells, Yüksek Lisans, M.KOÇ(Öğrenci), 2013

TOFFOLİ H., Örgü sabitleri uyusmayan III-V yarıiletken nanotellerinin elektronik ve geometrik özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmesi, Doktora, B.ÖZKAPI(Öğrenci), 2012

TOFFOLİ H., Molecular dynamics investigation of moire patterns in double-layer graphene, Yüksek Lisans, G.SÖKMEN(Öğrenci), 2012

TOFFOLİ H., The effects of promoters on the sulfur resistance of NO<sub>x</sub> storage/reduction catalysts: A density functional theory investigation, Yüksek Lisans, R.KOŞAK(Öğrenci), 2011

TOFFOLİ H., Density functional theory investigation of noble metal reduction agents on ?-aluminum oxide in NO<sub>x</sub> storage/reduction catalysts, Yüksek Lisans, Z.ARTUÇ(Öğrenci), 2011

TOFFOLİ D., TOFFOLİ H., Nox indirgeme/Depolama katalizörlerinde asal metallerin indirgeme ajani olarak y-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> üzerinde yük yoğunluğu teorisi ile incelenmesi, Yüksek Lisans, Z.Artuç(Öğrenci), 2011

TOFFOLİ H., Effect of support material in NO<sub>x</sub> storage/reduction catalysts, Yüksek Lisans, R.HUMMATOV(Öğrenci), 2010

TOFFOLİ H., Density functional theory investigation of TiO<sub>2</sub> anatase nanosheets, Yüksek Lisans, C.SİBEL(Öğrenci), 2009

TOFFOLİ H., Density functional theory for trapped ultracold fermions, Yüksek Lisans, Ö.AKYAR(Öğrenci), 2009

TOFFOLİ H., Electronic properties of dye molecules adsorbed on anatase-titania surface for solar cell applications, Yüksek Lisans, E.TORUN(Öğrenci), 2009

## SCI, SSCI ve AHCI İndekslerine Giren Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. Development of a selective wet-chemical etchant for precise 3D sculpting of silicon enabled by infrared non-linear laser modification  
Zolfaghari Borra M., Radfar B., Nasser H., Çolakoğlu T., Tokel O., Turnali A., DEMİRTAŞ M., Işık Taşgin D., TOFFOLİ H., Toffoli D., et al.  
Optics and Laser Technology, cilt.176, 2024 (SCI-Expanded)
- II. A Classical Molecular Dynamics Study of the Effect of the Atomic Force Microscope Tip Shape, Size and Deformation on the Tribological Properties of the Graphene/Au(111) Interface  
Maden C., TOFFOLİ H., Toffoli D.  
Lubricants, cilt.12, sa.2, 2024 (SCI-Expanded)

- III. Hydrogen production using aluminum-water splitting: A combined experimental and theoretical approach**  
Kandasamy J., Mutlu R. N., Eroğlu E., KARACA M., TOFFOLI H., GÖKALP İ.  
International Journal of Hydrogen Energy, cilt.52, ss.202-211, 2024 (SCI-Expanded)
- IV. Effect of Surface Pt Doping on the Reactivity of Au(111) Surfaces towards Methanol Dehydrogenation: A First-Principles Density Functional Theory Investigation**  
Demirtas M., TOFFOLI H., Toffoli D.  
Molecules, cilt.28, sa.23, 2023 (SCI-Expanded)
- V. Temperature-dependent thermoelastic properties of GaSb and InSb semiconductors: Identification through ab initio DFT simulations**  
Baloğlu E. C., TOFFOLI H., DAL H.  
Physica B: Condensed Matter, cilt.643, 2022 (SCI-Expanded)
- VI. Formaldehyde Selectivity in Methanol Partial Oxidation on Silver: Effect of Reactive Oxygen Species, Surface Reconstruction, and Stability of Intermediates**  
Karatok M., ŞENSOY M. G., Vovk E. I., TOFFOLI H., Toffoli D., Ozensoy E.  
ACS Catalysis, cilt.11, sa.10, ss.6200-6209, 2021 (SCI-Expanded)
- VII. Polymer interfaces with carbon nanostructures: First principles density functional theory and molecular dynamics study of polyetheretherketone adsorption on graphene and nanotubes**  
Toraman G., Sert E., Gulasik H., Toffoli D., TOFFOLI H., GÜRSES E.  
COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE, cilt.191, 2021 (SCI-Expanded)
- VIII. Methylamine terminated molecules on Ni(111): A path to low temperature synthesis of nitrogen-doped graphene**  
Costantini R., TOFFOLI H., Feng Z., Stredansky M., Toffoli D., Fronzoni G., Dri C., Comelli G., Cvetko D., Kladnik G., et al.  
FLATCHEM, cilt.24, 2020 (SCI-Expanded)
- IX. First-principles investigation of CO and CO<sub>2</sub> adsorption on gamma-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> supported monoatomic and diatomic Pt clusters**  
Sensoy M. G., Ustunel H., Toffoli D.  
APPLIED SURFACE SCIENCE, cilt.499, 2020 (SCI-Expanded)
- X. Nanotribological Properties of the h-BN/Au(111) Interface: A DFT Study**  
Baksi M., Toffoli D., GÜLSEREN O., Ustunel H.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, cilt.123, sa.46, ss.28411-28418, 2019 (SCI-Expanded)
- XI. Combined effect of point defects and layer number on the adsorption of benzene and toluene on graphene**  
Akay T. I., Toffoli D., TOFFOLI H.  
APPLIED SURFACE SCIENCE, cilt.480, ss.1063-1069, 2019 (SCI-Expanded)
- XII. Instability of a Noncrystalline NaO<sub>2</sub> Film in Na-O-2 Batteries: The Controversial Effect of the RuO<sub>2</sub> Catalyst**  
Tovini M. F., Hong M., Park J., Demirtas M., Toffoli D., Ustunel H., Byon H. R., YILMAZ E.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, cilt.122, sa.34, ss.19678-19686, 2018 (SCI-Expanded)
- XIII. Effect of Platinum, Gold, and Potassium Additives on the Surface Chemistry of CdI<sub>2</sub>-Antitype Mo<sub>2</sub>C**  
Dernirtas M., Ustunel H., Toffoli D.  
ACS OMEGA, cilt.2, sa.11, ss.7976-7984, 2017 (SCI-Expanded)
- XIV. Comparative Analysis of Reactant and Product Adsorption Energies in the Selective Oxidative Coupling of Alcohols to Esters on Au(111)**  
Senozan S., TOFFOLI H., Karatok M., Vovk E. I., Shah A. A., ÖZENSOY E., Toffoli D.  
TOPICS IN CATALYSIS, cilt.59, ss.1383-1393, 2016 (SCI-Expanded)
- XV. Multiscale Self-Assembly of Silicon Quantum Dots into an Anisotropic Three-Dimensional Random Network**  
İlday S. K., İlday F. Ö., Huebner R., Prosa T. J., Martin I., Nogay G., Kabacelik I., Mics Z., Bonn M., Turchinovich D., et al.  
NANO LETTERS, cilt.16, ss.1942-1948, 2016 (SCI-Expanded)

- XVI. **Active role of the support in NO<sub>x</sub> storage and reductioncatalytic systems**  
Tek M., TOFFOLI H., Toffoli D.  
APPLIED SURFACE SCIENCE, cilt.355, ss.1295-1305, 2015 (SCI-Expanded)
- XVII. **Covalent and noncovalent functionalization of pristine and defective graphene by cyclohexane and dehydrogenated derivatives**  
Sayin C. S., Toffoli D., TOFFOLI H.  
APPLIED SURFACE SCIENCE, cilt.351, ss.344-352, 2015 (SCI-Expanded)
- XVIII. **Understanding the Effects of Ion-Exchange in Titanosilicate ETS-10: A Joint Theoretical and Experimental Study**  
Koc M., Galioglu S., Toffoli D., TOFFOLI H., AKATA KURÇ B.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, cilt.118, sa.47, ss.27281-27291, 2014 (SCI-Expanded)
- XIX. **Bis(triisopropylsilyl)ethynyl)pentacene/Au(111) Interface: Coupling, Molecular Orientation, and Thermal Stability**  
Gnoli A., Ustunel H., TOFFOLI D., Yu L., Catone D., Turchini S., Lizzit S., Stingelin N., Larciprete R.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, cilt.118, sa.39, ss.22522-22532, 2014 (SCI-Expanded)
- XX. **Insights into surface-adsorbate interactions in corrosion inhibition processes at the molecular level**  
ÖZCAN M., Toffoli D., Ustunel H., DEHRI İ.  
CORROSION SCIENCE, cilt.80, ss.482-486, 2014 (SCI-Expanded)
- XXI. **First principles investigation of NO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub> adsorption on gamma-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> supported mono- and diatomic metal clusters**  
Artuc Z., Ustunel H., Toffoli D.  
RSC ADVANCES, cilt.4, sa.89, ss.48492-48506, 2014 (SCI-Expanded)
- XXII. **First-Principles Investigation of NO<sub>x</sub> and SO<sub>x</sub> Adsorption on Anatase-Supported BaO and Pt Overlayers**  
Hummatov R., GÜL SEREN O., ÖZENSOY E., Toffoli D., TOFFOLI H.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, cilt.116, sa.10, ss.6191-6199, 2012 (SCI-Expanded)
- XXIII. **Metallization of the C-60/Rh(100) interface revealed by valence photoelectron spectroscopy and density functional theory calculations**  
Wade A., Lizzit S., Petaccia L., Goldoni A., Diop D., Ustunel H., Fabris S., Baroni S.  
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, cilt.132, sa.23, 2010 (SCI-Expanded)
- XXIV. **The self-consistent calculation of exchange enhanced odd integer quantized Hall plateaus within Thomas-Fermi-Dirac approximation**  
Bilgeç G., TOFFOLI H., Siddiki A., SÖKMEN İ.  
PHYSICA E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES, cilt.42, sa.4, ss.1058-1061, 2010 (SCI-Expanded)
- XXV. **Structural, Electronic and Magnetic Properties of BN Nanotubes Doped with Mn and Cr: Exploring the Potential for Device Technology**  
KÖKTEN H., Ustunel H., ERKOÇ Ş.  
JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE, cilt.6, sa.4, ss.926-932, 2009 (SCI-Expanded)
- XXVI. **High-capacity hydrogen storage by metallized graphene**  
Ataca C., Akturk E., ÇIRACI S., Ustunel H.  
APPLIED PHYSICS LETTERS, cilt.93, sa.4, 2008 (SCI-Expanded)
- XXVII. **Structural properties and stability of nanoclusters**  
Ustuenel H., Erkoc S.  
JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE, cilt.4, sa.5, ss.928-956, 2007 (SCI-Expanded)
- XXVIII. **Defect-controlled transport properties of metallic atoms along carbon nanotube surfaces**  
Barinov A., Uestuenel H., Fabris S., Gregoratti L., Aballe L., Dudin P., Baroni S., Kiskinova M.  
PHYSICAL REVIEW LETTERS, cilt.99, sa.4, 2007 (SCI-Expanded)
- XXIX. **Modeling a suspended nanotube oscillator**  
Ustunel H., Roundy D., Arias T.  
NANO LETTERS, cilt.5, sa.3, ss.523-526, 2005 (SCI-Expanded)
- XXX. **Ab initio mechanical response: Internal friction and structure of divacancies in silicon**

- Ustunel H., Roundy D., Arias T.  
PHYSICAL REVIEW LETTERS, cilt.94, sa.2, 2005 (SCI-Expanded)
- XXXI. **A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator**  
Sazonova V., Yaish Y., Ustunel H., Roundy D., Arias T., McEuen P.  
NATURE, cilt.431, sa.7006, ss.284-287, 2004 (SCI-Expanded)
- XXXII. **Electron-phonon scattering in metallic single-walled carbon nanotubes**  
Park J., Rosenblatt S., Yaish Y., Sazonova V., Ustunel H., Braig S., Arias T., Brouwer P., McEuen P.  
NANO LETTERS, cilt.4, sa.3, ss.517-520, 2004 (SCI-Expanded)

## Diger Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Tribology at the atomic scale with density functional theory**  
TOFFOLİ H., Toffoli D.  
Electronic Structure, cilt.4, sa.2, 2022 (ESCI)

## Hakemli Kongre / Sempozyum Bildiri Kitaplarında Yer Alan Yayınlar

- I. **Altın ve Grafen Yüzeyleri Arasındaki Etkileşimin Yük Yoğunluğu Fonksiyoneli Teorisi Kullanılarak İncelenmesi**  
Şentürk D. G., TOFFOLİ H.  
Yoğun Madde Fiziği, Türkiye, 22 Aralık 2017
- II. **Ethanol dehydrogenation on the Ni-and Rh-doped Au(111) surface**  
Dernek O., TOFFOLİ H.  
Yoğun Madde Fiziği, Türkiye, 22 Aralık 2017
- III. **A comparative study of the polymer-nanotube interface through a reactive force field and density functional theory**  
Toffoli H., Gürses E., Gülaşık H., Konuk M., Sert E., Toraman G.  
International Symposium on Chemistry via Computation, Ankara, Türkiye, 30 Ekim 2017
- IV. **Molecular Dynamics Simulations of Carbon Nanotube Reinforced Polymer Composites**  
Toraman G., Konuk M., Sert E., Toffoli H., Gülaşık H., Gürses E.  
9th Ankara International Aerospace Conference, Ankara, Türkiye, 20 - 22 Eylül 2017
- V. **Multi-Scale Modelling of Carbon Nanotube Reinforced Polymer Composites**  
Toraman G., Konuk M., Gülaşık H., Sert E., Toffoli H., Gürses E.  
Materials Resistant to Extreme Conditions for Future Energy Systems, Kyiv, Ukrayna, 12 - 14 Haziran 2017
- VI. **Alkollerin Seçici Oksidasyonu için Nümerik Malzeme Bilimiile Katalizör Tasarımı**  
TOFFOLİ H.  
Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, Türkiye, 16 Aralık 2016
- VII. **Density functional theory Investigation of the Ni and Rh doped Au 111 surface as a viable catalyst for selective oxidation of ethanol**  
Dernek O., Toffoli D., TOFFOLİ H.  
Nano2016, 7 - 12 Ağustos 2016
- VIII. **Application of density functional theory methods to two dimensional harmonically confined dipolar atoms**  
TOFFOLİ H.  
İstanbul Teknik Üniversitesi, 23 - 14 Haziran 2016
- IX. **Density Functional Theory Investigation of the Structural Electronic and Adsorption Properties of 100 110 111 surfaces of Zincblende PtC**  
ŞENSOY M. G., Üstünel H., Toffoli D.  
NanoTR 11, 22 - 25 Haziran 2015

- X. **Methanol Dehydrogenation on bare and atomic oxygen pre covered Au 111 and Ag doped Au 111 surfaces**  
 Selma Ş., Üstünel H., Toffoli D.  
 NanoTR11, 22 - 26 Haziran 2015
- XI. **Active Role of the Support in NOx Storage and Reduction Systems**  
 TEK M., Toffoli D., Üstünel H.  
 NanoTR 11, 22 - 23 Haziran 2015
- XII. **Performance of Mo2C as a catalyst for the water gas shift reaction a DFT investigation**  
 Toffoli D., DEMİRTAŞ M., ÜSTÜNEL H.  
 Nano TR 11 Ankara 2015, Ankara, Türkiye, 22 - 25 Haziran 2015
- XIII. **Density functional theory investigation of two-dimensional dipolar fermions in a harmonic trap**  
 TOFFOLİ H., Abedinpour S. H., TANATAR B.  
 27th International Conference on Low Temperature Physics (LT), Buenos Aires, Arjantin, 6 - 13 Ağustos 2014,  
 cilt.568
- XIV. **Kataliz ve Cihaz Teknolojisinde Kullanılmak Üzere Grafenin Kovalent Olmayan Şekilde İşlevselleştirilmesi için YFT Çalışması**  
 Akay T. İ., TOFFOLİ H., Toffoli D.  
 Yoğun Madde Fiziği 23, Türkiye, 22 Aralık 2017
- XV. **HEGZAGONAL BN/AU(111) YÜZEYLERİ ARASINDAKI NANOTRIBOLOJIK ÖZELLİKLERİN AB INITIO HESAPLAR İLE İNCELENMESİ**  
 Baksi M., GÜLSEREN O., TOFFOLİ H.  
 Yoğun Madde Fiziği 23, Türkiye, 22 Aralık 2017

## Desteklenen Projeler

Ortakaya B., Temizsoylu O., Toffoli H., Yerli S. K., Kaya K., Baran Ö. U., Karaca M., Karagöz P., Koku H., Manguoğlu M., et al., UFUK 2020 Projesi, EuroCC@Türkiye, 2020 - 2022

TOFFOLİ H., TÜBİTAK Projesi, İki Boyutlu Sistemler ile Au Arayüzlerinin Nanotribolojik Özellikleri Üzerine Teorik ve Deneysel Bir Çalışma, 2016 - 2019

TOFFOLİ H., NATO Destekli Araştırma Projesi, Advanced Microwave Sources, 2017 - 2018

TOFFOLİ H., TÜBİTAK Projesi, Fotoiyonizasyonda Çok Elektronlu Süreçlerin Teorik Olarak İncelenmesi, 2016 - 2016

TOFFOLİ H., TÜBİTAK Projesi, Altın Katalizörler Üzerinde Alkollerin Seçici Oksitlenmesi Reaksiyon Mekanizmalarının Yük Yoğunluğu Fonksiyoneli Teorisi İle İncelenmesi, 2013 - 2016

TOFFOLİ H., DEMİRTAŞ M., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, SU-GAZ DEĞİŞİMİ MEKANİZMASININ YÜK YOĞUNLUĞU FONKSİYONELİ TEORİSİYLE İNCELENMESİ, 2013 - 2013

TOFFOLİ H., ŞENSOY M. G., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, SU-GAZ DEĞİŞİMİ REAKSİYONUNDA ALTTAŞ MALZEMENİN ETKİSİNİN YÜK YOĞUNLUĞU FONKSİYONELİ KULLANILARAK İNCELENMESİ, 2013 - 2013

TOFFOLİ H., TÜBİTAK Projesi, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisine Dayanan Temel Prensip Hesabı İle Pt/BaO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Nox İndirgeme/Depolama Katalizörünün İşleme Mekanizmasının İncelenmesi Ve Verimlileştirilmesi, 2009 - 2012

TOFFOLİ H., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Yarıiletken Nanotellerin Manyetik Atomlarla Katkılandırılması Konusunda Yük Yoğunluğu Fonksiyoneli Hesapları, 2009 - 2009

## Metrikler

Yayın: 54  
 Atıf (WoS): 2529  
 Atıf (Scopus): 2637  
 H-İndeks (WoS): 11  
 H-İndeks (Scopus): 11

## Akademi Dışı Deneyim

METU

METU

METU

SISSA

Cornell University