

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 moleküler dinamiği modellemesi, Yüksek Lisans, C.Maden(Öğrenci), 2020

TOFFOLİ H., Altıgensel boron nitrür ve altın yüzeylerinin nanotribolojik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi, Yüksek Lisans, G.Özcan(Öğrenci), 2020

TOFFOLİ H., Grafen ve polietereketon arayüz karakteristiklerinin yoğunluk fonksiyoneli ve moleküler dinamik çalışması, Yüksek Lisans, E.Sert(Öğrenci), 2020

TOFFOLİ H., MoS₂/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

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

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

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

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

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

TOFFOLÍ 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

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

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

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

TOFFOLÍ H., Investigation of catalytic properties and electronic structure of correlated material CeO₂ with ab-initio computational methods, Yüksek Lisans, B.ÖZDEMİR(Öğrenci), 2013

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

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

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

TOFFOLÍ H., The effects of promoters on the sulfur resistance of NO_x storage/reduction catalysts: A density functional theory investigation, Yüksek Lisans, R.KOŞAK(Öğrenci), 2011

TOFFOLÍ H., Density functional theory investigation of noble metal reduction agents on γ -aluminum oxide in NO_x storage/reduction catalysts, Yüksek Lisans, Z.ARTUÇ(Öğrenci), 2011

TOFFOLI D., TOFFOLÍ H., Nox indirgeme/Depolama katalizörlerinde asal metallerin indirgeme ajanı olarak γ -Al₂O₃ üzerinde yük yoğunluğu teorisi ile incelenmesi., Yüksek Lisans, Z.Artuç(Öğrenci), 2011

TOFFOLÍ H., Effect of support material in NO_x storage/reduction catalysts, Yüksek Lisans, R.HUMMATOV(Öğrenci), 2010

TOFFOLÍ H., Density functional theory investigation of TiO₂ anatase nanosheets, Yüksek Lisans, C.SİBEL(Öğrenci), 2009

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

TOFFOLÍ 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. **Temperature-dependent thermoelastic properties of GaSb and InSb semiconductors: Identification through ab initio DFT simulations**
Baloğlu E. C., TOFFOLÍ H., DAL H.
Physica B: Condensed Matter, cilt.643, 2022 (SCI-Expanded)
- II. **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., TOFFOLÍ H., Toffoli D., Ozensoy E.
ACS Catalysis, cilt.11, sa.10, ss.6200-6209, 2021 (SCI-Expanded)
- III. **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)

- IV. **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)
- V. **First-principles investigation of CO and CO₂ adsorption on gamma-Al₂O₃ supported monoatomic and diatomic Pt clusters**
Sensoy M. G., Ustunel H., Toffoli D.
APPLIED SURFACE SCIENCE, cilt.499, 2020 (SCI-Expanded)
- VI. **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)
- VII. **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)
- VIII. **Instability of a Noncrystalline NaO₂ Film in Na-O-2 Batteries: The Controversial Effect of the RuO₂ 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)
- IX. **Effect of Platinum, Gold, and Potassium Additives on the Surface Chemistry of CdI₂-Antitype Mo₂C**
Demirtas M., Ustunel H., Toffoli D.
ACS OMEGA, cilt.2, sa.11, ss.7976-7984, 2017 (SCI-Expanded)
- X. **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)
- XI. **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)
- XII. **Active role of the support in NO_x storage and reduction catalytic systems**
Tek M., TOFFOLI H., Toffoli D.
APPLIED SURFACE SCIENCE, cilt.355, ss.1295-1305, 2015 (SCI-Expanded)
- XIII. **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)
- XIV. **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)
- XV. **Bis(triisopropylsilylethynyl)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)
- XVI. **Insights into surface-adsorbate interactions in corrosion inhibition processes at the molecular level**
ÖZCAN M., Toffoli D., Ustunel H., DEHRİ İ.

- CORROSION SCIENCE, cilt.80, ss.482-486, 2014 (SCI-Expanded)
- XVII. First principles investigation of NO₂ and SO₂ adsorption on gamma-Al₂O₃ supported mono- and diatomic metal clusters**
Artuc Z., Ustunel H., Toffoli D.
RSC ADVANCES, cilt.4, sa.89, ss.48492-48506, 2014 (SCI-Expanded)
- XVIII. First-Principles Investigation of NO_x and SO_x Adsorption on Anatase-Supported BaO and Pt Overlayers**
Hummatov R., GÜLSEREN O., ÖZENSOY E., Toffoli D., TOFFOLÌ H.
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, cilt.116, sa.10, ss.6191-6199, 2012 (SCI-Expanded)
- XIX. 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)
- XX. The self-consistent calculation of exchange enhanced odd integer quantized Hall plateaus within Thomas-Fermi-Dirac approximation**
Bilgeç G., TOFFOLÌ H., Siddiki A., SÖKMEN İ.
PHYSICA E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES, cilt.42, sa.4, ss.1058-1061, 2010 (SCI-Expanded)
- XXI. 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)
- XXII. 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)
- XXIII. Structural properties and stability of nanoclusters**
Ustunel H., Erkoc S.
JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE, cilt.4, sa.5, ss.928-956, 2007 (SCI-Expanded)
- XXIV. Defect-controlled transport properties of metallic atoms along carbon nanotube surfaces**
Barinov A., Ustunel H., Fabris S., Gregoratti L., Aballe L., Dudin P., Baroni S., Kiskinova M.
PHYSICAL REVIEW LETTERS, cilt.99, sa.4, 2007 (SCI-Expanded)
- XXV. Modeling a suspended nanotube oscillator**
Ustunel H., Roundy D., Arias T.
NANO LETTERS, cilt.5, sa.3, ss.523-526, 2005 (SCI-Expanded)
- XXVI. 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)
- XXVII. 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)
- XXVIII. 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)

Diğer Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. Tribology at the atomic scale with density functional theory**
TOFFOLÌ 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, Kyyiv, 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 ARASINDAKİ NANOTRİBOLOJİK 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 ile 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 Prensipte Hesap ile Pt/Bao/Al₂O₃ Nox İndirgeme/Depolama Katalizörünün İşleme Mekanizmasının İncelenmesi Ve Verimlendirilmesi, 2009 - 2012

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

Metrikler

Yayın: 50

Atf (WoS): 2331

Atf (Scopus): 2285

H-İndeks (WoS): 9

H-İndeks (Scopus): 9