



PHYSICAL PROPERTIES OF Pd AND Al TRANSITION METALS AND Pd-Al BINARY METAL ALLOY INVESTIGATED BY USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

A. ÇORUH¹, M. ULUDOĞAN¹, M. TOMAK¹, T. ÇAĞIN²

¹Middle East Technical University Dept. Of Physics. 06531 Ankara, TURKEY

²Material and Process Simulations Center California Institute of Technology Pasadena, CA 91125, USA

In this study, physical properties, such as Pair Distribution Function $g(r)$, Structure Factor $S(\mathbf{k})$ ^{1,4}, Diffusion Coefficient D ^{2,4}, Intermediate Scattering function $S(\mathbf{k},t)$ ^{3,4} and Dynamical Structure Factor $S(\mathbf{k},\omega)$ ^{3,4} of some transition metals and metal alloys are investigated by using molecular dynamics simulation method. The simulation is specified for Pd, Al transition metals and Pd-Al binary metal alloys in the liquid form for different concentrations and at various temperatures by using Quantum Sutton-Chen (Q-SC) inter atomic potential. Intermediate scattering function and dynamical structure factor are calculated for various values of wave vector \mathbf{k} . Results are in good agreement with published data^{1,3,4}.

- [1] Waseda Y., The Structure of Non-Crystalline Materials, McGraw-Hill Inc., 8, (1980)
- [2] Allen M.P., Computer Simulation of Physics, Clarendon Press-OXFORD, 60, (1997)
- [3] Ebssjo I., The dynamical structure factor for liquid aluminum, J. Phys. C: Solid St. Phys., 13, 1865-1885, (1980)
- [4] Alemany M.M.G., Molecular-dynamics study of the dynamic properties of fcc transition and simple metals using the second-moment approximation to the tight-binding method, Physical Review B, 60, 13, 9208-9211, (1999)

POLİPİROL-POLİAMİD KOMPOZİTİ / METAL EKLEMLERİNİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ.

A. G. SEDEF¹, N. SÜNEL¹, M. PARLAK², O. UZUN¹, L. TOPPARE³

¹Gaziosmanpaşa Üniversitesi, Fizik Bölümü, 60240 Taşlıçiftlik, TOKAT.

²Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06531 ANKARA.

³Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Kimya Bölümü, 06531 ANKARA.

İletken polimerler ışık yayan diyotlar (LED)^[1], Schottky diyodu^[2-4], p-n eklemleri, transistör^[5] ve bilgi depolamak için hafıza elemanı (DRAM)^[6] olarak elektronik devrelerinde kullanılmaktadır.

Geleneksel bir Schottky diyodu bir metal ile yarıiletkenin eklem oluşturmasından meydana gelmektedir. Günümüzde metal ve yarıiletkenlerin yerini polimerlerin aldığı Schottky diyodları yapılmaktadır. Polimerler kullanılarak Schottky eklemlerinin elde edilmesi iki şekilde olur. Birinci tip eklem, polimer-inorganik yarıiletkenlerden (Si ve GaAs gibi) meydana gelir^[7]. Bu tip eklemden polimer iletken rolünü oynar. İkinci tip eklem, polimer-metal ekleminde oluşur^[4]. Bu eklemden polimer yarıiletken rolünü oynar. Polimer tabakasının yarıiletken özellikte olması için, genellikle iletken polimerle bir başka yalıtkan polimerin kompoziti veya kopolimeri elde edilmekte, ayrıca katkılamının da uygun olması gerekmektedir.

Bu çalışmada, platin üzerine poliamid (PA) kaplanan elektrod çalışma elektrodu olarak kullanılarak iki farklı türdeki anyon ile katkılanan polipirol (PPy) filmleri elde edildi. İlk olarak, sulu ortamda paratoluen sülfonik asit (PTSA) anyonları ile katkılanan PPy filmleri elde edildi. Daha sonra da asetonitrilli ortamda tetrabutil amonyum tetrafloroborat (TBAFB) destek elektrotunun BF₄⁻ anyonları ile katkılanarak PPy filmleri elde edildi. İki farklı türdeki anyon için de farklı konsantrasyonlarda filmler elektrokimyasal olarak sentezlendi.

Elde edilen filmlerin üzerine, buharlaştırma yöntemiyle Al, In, Au ve Ag metal kontaklar yapıldı. Daha sonrada Pt elektrot ve metal kontaklar arasındaki eklemin I-V ölçümleri alındı. Elde edilen eğrilerden, yapılan eklemlerin idealite faktörleri ve iş fonksiyonları hesaplandı.