

T.C.
BOLU ABANT İZZET BAYSAL ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
BİLGİSAYAR MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI



**(C₂₀)₂P VE (C₂₀P)₂ MOLEKÜLLERİNİN FİZİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN SİMÜLASYON YÖNTEMLERİ İLE
İNCELENMESİ**

BİLGİSAYAR MÜHENDİSLİĞİ YÜKSEK LİSANS TEZİ

KAAN MUTLUER

TEZ DANIŞMANI
Doç. Dr. Ferhat DEMİRAY

BOLU, HAZİRAN 2025

KABUL VE ONAY SAYFASI

Kaan MUTLUER tarafından hazırlanan “**(C₂₀)₂P VE (C₂₀P)₂ MOLEKÜLLERİNİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN SİMÜLASYON YÖNTEMLERİ İLE İNCELENMESİ**” adlı tez çalışması jürimiz tarafından Bilgisayar Mühendisliği Ana Bilim Dalı Bilgisayar Mühendisliği Programında Yüksek Lisans Tezi olarak oy birliği ile kabul edilmiştir. 25/07/2025

Jüri Üyeleri

İmza

Danışman
Doç. Dr. Ferhat DEMİRAY
Bolu Abant İzzet Baysal Üniversitesi

.....

Üye
Doç. Dr. Mehmet Dinçer ERBAŞ
Bolu Abant İzzet Baysal Üniversitesi

.....

Üye
Dr. Öğr. Üyesi Uras PANAHI
Mudanya Üniversitesi

.....

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Onayı

Prof. Dr. İbrahim KÜRTÜL
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

Bolu Abant İzzet Baysal Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Tez Yazım Kılavuzu ve Şablonuna uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
 - Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
 - Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
 - Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
 - Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu bildirir
- aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Teze ilişkin Turnitin adlı programında enstitü müdürlüğünce belirlenen filtrelemeler uygulanarak alınmış olan benzerlik raporuna göre, tezin benzerlik oranı %30'u geçmemektedir.

.....

KAAN MUTLUER

ÖZET

**(C₂₀)₂P VE (C₂₀P)₂ MOLEKÜLLERİNİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN
SİMÜLASYON YÖNTEMLERİ İLE İNCELENMESİ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
KAAN MUTLUER
BOLU ABANT İZZET BAYSAL ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
BİLGİSAYAR MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI
BİLGİSAYAR MÜHENDİSLİĞİ YÜKSEK LİSANS PROGRAMI
(TEZ DANIŞMANI: DOÇ. DR. FERHAT DEMİRAY)
BOLU, HAZİRAN - 2025
XI + 43 sayfa**

Nanoteknoloji, maddenin atomik ve moleküler düzeyde hassas bir şekilde kontrolünü mümkün kılan bir bilim dalıdır. Nanometre ölçeğindeki malzemelerin özelliklerinin ve davranışlarının incelenmesiyle, nanoteknoloji çeşitli uygulamalarda kullanılabilecek yeni cihaz ve sistemlerin üretimini mümkün kılmış, böylece birçok alanda yeni fırsatlar yaratmıştır. Nanoteknolojinin en önemli ve heyecan verici uygulamalarından biri olan nanosensörler, çeşitli biyolojik, fiziksel veya kimyasal parametreleri hassasiyetle algılayabilen ve bunları elektriksel, optik veya mekanik sinyallere dönüştürebilen, nanometre ölçeğindeki malzemelerden üretilmiş cihazlardır. Bu tez çalışmasında, öncelikle nanoteknolojinin tarihsel gelişimi ve temel kavramları ile birlikte, nanosensörlerin sınıflandırılması, özellikleri, uygulamaları ve gelişmeleri ayrıntılı olarak incelenmiştir. Buna ilaveten, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kullanılarak (C₂₀)₂P ve (C₂₀P)₂ moleküllerinin yapısal ve elektronik özellikleri hesaplanmıştır. Yapılan hesaplamalarda, optimize edilmiş (C₂₀)₂P ve (C₂₀P)₂ yapılarına ait bağlanma enerjileri sırasıyla -41.06 eV ve -21.78 eV olarak elde edilmiştir. (C₂₀)₂P molekülünde, eklenen fosfor atomunun fullerenden birinin yapısını değiştirdiği ve başlangıçta on iki beşgenden oluşan C₂₀ yapısını, on beşgen ve iki altıgenden oluşan bir yapıya dönüştürdüğü gözlenmiştir. (C₂₀P)₂ molekülünde, fosfor atomları arasındaki P – P bağının koptuğu gözlenmiştir. Bu durumun sonucunda, fosfor atomlarının her birinin, fullerenden bulunan birer karbon atomuyla bağ yaparak bir altıgen yapı oluşturduğu elde edilmiştir. Bu durumda, fullerenden beşgenlerinde herhangi bir değişim gözlenmemiştir. (C₂₀)₂P ve (C₂₀P)₂ yapıları için hesaplanan GapHL değeri sırası ile 0.83 eV ve 1.33 eV olup her iki yapı da yarıiletken malzeme olarak değerlendirilebilir.

ANAHTAR KELİMELER: Nanoteknoloji, Nanomalzemeler, Moleküler Yapılar, Fulleren, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

ABSTRACT

INVESTIGATION OF THE PHYSICAL PROPERTIES OF (C₂₀)₂P AND (C₂₀P)₂ MOLECULES BY SIMULATION METHODS

MSC THESIS

KAAN MUTLUER

BOLU ABANT IZZET BAYSAL UNIVERSITY

INSTITUTE OF GRADUATE STUDIES

DEPARTMENT OF COMPUTER ENGINEERING

(SUPERVISOR: ASSOC. PROF. DR. FERHAT DEMİRAY)

BOLU, JUNE 2025

XI + 43 pages

Nanotechnology represents a field of science that enables precise control over matter at the atomic and molecular level. By examining the properties and behaviors of materials at the nanometer scale, nanotechnology has made it possible to produce new devices and systems that can be used for various applications, thus creating new opportunities across many fields. Nanosensors, one of the most significant and exciting applications of nanotechnology, are devices made of nanometer-scale materials that can detect various biological, physical or chemical parameters with precision and convert them into electrical, optical or mechanical signals. In this thesis, initially, the historical development of nanotechnology and its fundamental concepts, including the classification, properties, applications and advancements of nanosensors, are examined in detail. In addition, the structural and electronic properties of the (C₂₀)₂P and (C₂₀P)₂ molecules were calculated using Density Functional Theory (DFT). In the calculations, the binding energies for the optimized (C₂₀)₂P and (C₂₀P)₂ structures were obtained as -41.06 eV and -21.78 eV, respectively. In the (C₂₀)₂P molecule, it was observed that the inserted phosphorus atom altered the structure of one of the fullerenes, transforming the C₂₀ framework, originally composed of twelve pentagons, into a structure consisting of ten pentagons and two hexagons. In the (C₂₀P)₂ molecule, it has been observed that the P – P bond between the phosphorus atoms has ruptured. As a result of this, it has been found that each phosphorus atom forms a bond with one of the carbon atoms in the fullerenes, resulting in the formation of a hexagonal structure. In this case, no alterations were observed in the pentagons of the fullerenes. The calculated Gap_{HL} values for the (C₂₀)₂P and (C₂₀P)₂ structures are 0.83 eV and 1.33 eV, respectively, indicating that they can be considered as semiconducting materials.

KEYWORDS: Nanotechnology, Nanomaterials, Molecular Structures, Fullerene, Density Functional Theory

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET.....	iv
ABSTRACT	v
İÇİNDEKİLER	vi
ŞEKİL LİSTESİ.....	viii
KISALTMA VE SEMBOLLER LİSTESİ	x
TEŞEKKÜR.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
1.1 Nanoteknoloji ve Nanosensörler.....	2
1.2 Nanosensörlerin Sınıflandırılması	6
1.2.1 Kullanım Amaçlarına Göre Nanosensörler	7
1.2.2 Yapılarına Göre Nanosensörler	7
1.2.2.1 Karbon Bazlı Nanosensörler.....	7
1.2.2.1.1 Karbon Nanotüpler	7
1.2.2.1.2 Fulleren	10
1.2.2.1.3 Grafen	12
1.2.2.1.4 Nanoelmas	14
1.2.2.2 Metal Bazlı Nanosensörler	16
1.2.2.2.1 Altın Nanoparçacıklar.....	17
1.2.2.2.2 Demir Oksit Nanoparçacıklar	17
1.2.2.2.3 Gümüş Nanoteller	18
1.2.2.2.4 Metal-Organik Çerçeve Bazlı Nanosensörler	18
1.2.2.3 Yarıiletken Bazlı Nanosensörler	19
1.2.2.3.1 Silisyum Nanoteller	19
1.2.2.4 Biyonanosensörler	20
1.2.2.4.1 DNA/RNA Bazlı Nanosensörler.....	20
1.2.2.5 Manyetik Malzeme Bazlı Nanosensörler.....	20
1.2.2.5.1 Manyetorezistif Nanosensörler	20
1.2.2.6 Plazmonik Nanosensörler	21
1.2.2.6.1 Plazmonik Nanoparçacıklar	21
1.2.2.7 Polimerik Nanosensörler	22
1.2.2.7.1 İletken Polimerler	22
2. MATERYAL ve YÖNTEM.....	23
2.1 Fullerenlere Genel Bakış	23
2.2 Fullerenler ve Fosfor Katkıları	24

3. BULGULAR	26
3.1 Yapısal Özellikler	26
3.2 Elektronik Özellikler	27
4. TARTIŞMA	28
5. SONUÇ ve ÖNERİLER.....	30
KAYNAKLAR.....	31



ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1. Taramalı Tünelleme Mikroskobu'nun Çalışma Prensibi.....	3
Şekil 1.2. C ₆₀ : Buckminsterfulleren Yapısı.....	4
Şekil 1.3. 35 Ksenon Atomu Kullanılarak Oluşturulan IBM Logosu.....	5
Şekil 1.4. Duvar Sayılarına Göre Karbon Nanotüpler. (a) Tek Duvarlı Karbon Nanotüp (SWCNT), (b) Çift Duvarlı Karbon Nanotüp (DWCNT), (c) Çok Duvarlı Karbon Nanotüp (MWCNT).....	8
Şekil 1.5. Karbon Nanotüp Alan Yayıcılı Katot Işın Tüplü Floresan Ekran	9
Şekil 1.6. Matris Adreslemeli Karbon Nanotüp Ekranın Şematik Yapısı	9
Şekil 1.7. C ₆₀ İçeren Polimerlerin Şematik Gösterimi	10
Şekil 1.8. Polimer – Fulleren Bazlı BHJ Güneş Pili'nin Şematik Gösterimi.....	11
Şekil 1.9. Fulleren Temelli Taşıma Sistemleri.....	12
Şekil 1.10. Grafen: Tüm Grafit Yapılarının Temelini Oluşturan İki Boyutlu Yapısal Malzeme	13
Şekil 1.11. Grafen – Yarıiletken (Si) Heteroeklemine Sahip Fotovoltaik Hücresinin Şematik Gösterimi.....	14
Şekil 1.12. Koruyucu Kaplama Olarak Kullanılan Grafenin Korozyonu Önemli Ölçüde Azaltma Etkisini Gösteren Grafik	14
Şekil 1.13. İki Ana Nanoelmas Türünün Sentezinin ve Yapısının Şematik Gösterimi	15
Şekil 1.14. Nanoelmasların Enerjiyle İlişkili Alanlardaki Uygulamaları.....	16
Şekil 1.15. Nanoelmas Kuantum Sensörlerin Biyolojik Sistemlerde Çeşitli Yerel Parametrelerin Tespiti için Kullanımı	16
Şekil 1.16. Biyosensörlerde Altın Nanoparçacıkların Kullanımı	17
Şekil 1.17. Demir Oksit Nanoparçacık Destekli Kardiyovasküler Doku Mühendisliği ve Rejenerasyon için Olası Hedefler.....	17
Şekil 1.18. Gümüş Nanoteller İçeren Şeffaf İletken Film Tabanlı Cihazların Özellikleri ve Uygulama Alanları	18
Şekil 1.19. Porfirinik MOF-525 Nanoparçacıklarının Hazırlanmasının Şematik Gösterimi ve Hücre Dışı/İçi Cu ²⁺ Tespiti için “Sönümlü” Floresan Algılama Mekanizması	19
Şekil 1.20. Eğik Hizalanmış Silisyum Nanotel Dizili Güneş Pillerinin Üretim Sürecine İlişkin Şematik Diyagram.....	19
Şekil 1.21. DNA Bazlı Fotoakustik Nanosensörün Şematik Gösterimi	20
Şekil 1.22. Manyetorezistif Nanosensörler ile (a) Konum ve (b) Akım Algılama Uygulamalarının Şematik Gösterimi.....	21
Şekil 1.23. SERS Ölçümleri için Elektromanyetik Nanorezonatör Olarak Kullanılan, Farklı Şekil ve Geometrilere Sahip Gümüş (Ag) ve Altın (Au) Nanoparçacıkların TEM Mikrografları.....	22
Şekil 1.24. Öntasarımlı Elektrotlar Üzerine Yerleştirilmiş Polimer Nanotelin Biyosensör Uygulamasındaki Kullanımı	22
Şekil 3.1. Optimize Edilmiş (a) (C ₂₀) ₂ P ve (b) (C ₂₀ P) ₂ Moleküler Yapıları. Gri Renk Karbon Atomunu, Kırmızı Renk ise Fosfor Atomunu Temsil Etmektedir. Gösterilen Bağ Uzunlukları Angström (Å) Cinsinden Verilmiştir	26

Şekil 3.2. Optimize Edilmiş (a) $(C_{20})_2P$ ve (b) $(C_{20}P)_2$ Moleküler Yapıları için Durum Yoğunluğu (DOS) Grafiği. Kesikli Çizgi, Fermi Enerji Seviyesine (E_F) Karşılık Gelmektedir 27



KISALTMA VE SEMBOLLER LİSTESİ

Å	: Angström
AFM	: Atomik Kuvvet Mikroskobu
AgNWs	: Gümüş Nanoteller
AuNPs	: Altın Nanoparçacıklar
BHJ	: Yığın Heteroeklem
C₆₀	: Buckminsterfulleren
CNT	: Karbon Nanotüp
CRT	: Katot Işın Tüpü
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
DNA	: Deoksiribonükleik Asit
DOS	: Durum Yoğunluğu
DWCNT	: Çift Duvarlı Karbon Nanotüp
E_F	: Fermi Enerji Seviyesi
eV	: Elektronvolt
GapHL	: Optimize Edilmiş Yapıların Enerji Aralığı
GGA	: Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı
GPa	: Gigapascal
HOMO	: Dolu Moleküler Orbitalerin En Yüksek Enerjili Olanı
IONPs	: Demir Oksit Nanoparçacıklar
LUMO	: Boş Moleküler Orbitalerin En Düşük Enerjili Olanı
MOF	: Metal-Organik Çerçeve
MR	: Manyetorezistif
MWCNT	: Çok Duvarlı Karbon Nanotüp
ND	: Nanoelmas
PBE	: Perdew–Burke–Ernzerhof
RNA	: Ribonükleik Asit
SIESTA	: Binlerce Atomlu Elektronik Simülasyon Girişimi
SiNWs	: Silisyum Nanoteller
STM	: Taramalı Tünelleme Mikroskobu
SWCNT	: Tek Duvarlı Karbon Nanotüp
TEM	: Geçirimli Elektron Mikroskobu

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans çalışmam süresince bilgi, deneyim ve rehberliğiyle bana daima yol gösteren; engin akademik birikimi, bilimsel titizliği ve etik değerlere bağlılığıyla bana ilham veren; akademik duruşu ve insani yönüyle her zaman örnek aldığım çok değerli hocam Doç. Dr. Ferhat DEMİRAY'a en içten teşekkürlerimi sunarım.

Her zaman yanımda olan ve desteklerini esirgemeyen sevgili ailem ile emeği geçen herkese şükranlarımı sunarım.



1. GİRİŞ

Nanoteknoloji, atomik ve moleküler düzeydeki malzemelerin yapı ve işlevlerini kontrol edebilme potansiyeli sunarak; elektronik, tıp, enerji, çevre ve savunma sanayi gibi birçok sektörde çığır açıcı uygulamaların geliştirilmesine olanak tanımaktadır. Nanoteknolojinin gelişimine paralel olarak malzeme bilimindeki ilerlemeler sayesinde, daha fonksiyonel malzemeler üretilebilmekte olup bu durum çeşitli endüstriyel ürünlerin performansını ve verimliliğini artırmaktadır. Bu doğrultuda, geniş bir yelpazede yenilikçi çözümler sunması, nanoteknolojiyi stratejik öneme sahip disiplinlerden biri haline getirmiştir. Nanoteknolojinin sunduğu olanaklar sayesinde geliştirilen nanosensörler, hem bilimsel araştırmalarda hem de endüstriyel uygulamalarda büyük ilgi görmektedir. Nanosensörler; biyolojik, kimyasal ve fiziksel parametreleri yüksek hassasiyetle algılayabilme yetenekleriyle dikkat çekmektedir. Bu yetenekleri sayesinde nanosensörler, çeşitli izleme ve kontrol süreçlerinde etkili bir araç olarak öne çıkmaktadır. Nanosensörler, sahip oldukları çeşitli yapısal özelliklere göre; karbon bazlı, metal bazlı, yarıiletken bazlı, biyolojik bazlı, manyetik malzeme bazlı, plazmonik ve polimerik nanosensörler şeklinde sınıflandırılmaktadır. Bu sınıflandırma, yaygın olarak kabul gören nanosensör türlerini kapsasa da, uygulama alanlarına göre değişen özgün tasarımlarla çeşitlilik göstermektedir. Bu çeşitlilik, nanosensörlerin çok farklı alanlarda özelleştirilmiş çözümler sunmasına imkân tanımaktadır. Özel geometrik yapıları ve kararlı elektron konfigürasyonlarıyla dikkat çeken fullerener, nanosensör teknolojilerinde potansiyel taşıyan yapılar arasında yer almaktadır. Özellikle fosfor gibi heteroatomların katkılanmasıyla, bu yapılar daha özgün elektronik ve yapısal özellikler sergileyebilmektedir. Bu kapsamda, fosfor katkılı fullerene türevleri olan $(C_{20})_2P$ ve $(C_{20}P)_2$ moleküllerinin yapısal ve elektronik özelliklerinin simülasyon yöntemleriyle incelenmesi, nanosensörlerde potansiyel olarak kullanılabilecek ileri nanomalzemelerin anlaşılmasına katkı sağlamaktadır. Literatürde fosfor katkılı fullerene türevlerine yönelik yapılan çalışmalar sınırlı kalmış olup, fosforun bu alandaki potansiyeli yeterince araştırılmamıştır. Bu çalışma, fosfor içeren fullerene türevlerinin nanosensör uygulamalarındaki potansiyelini daha iyi anlamak adına önemli bir adım teşkil etmekte olup, bu alandaki araştırmalar için bir temel oluşturmayı amaçlamaktadır.

1.1 Nanoteknoloji ve Nanosensörler

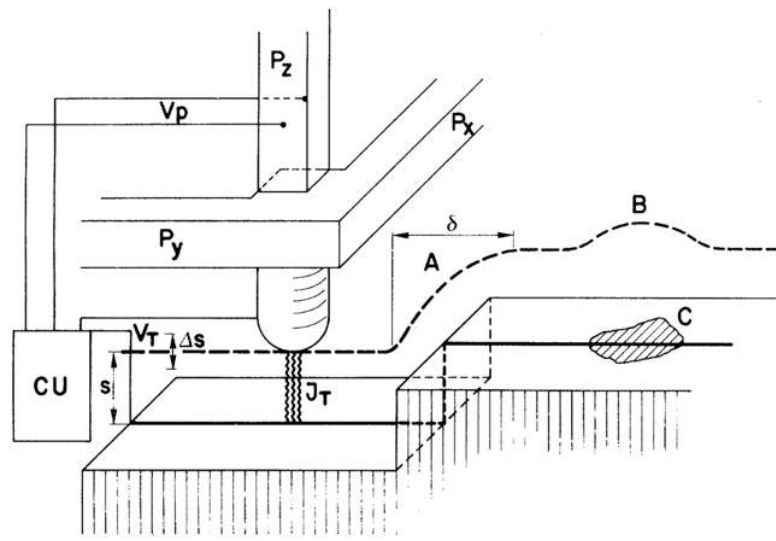
Nanoteknoloji, 1 ila 100 nanometre aralığındaki malzemelerin kuantum özelliklerine odaklanan; bu malzemelerin sentezi, karakterizasyonu, tasarımı ve yapısal düzeydeki uygulamalarını inceleyen disiplinlerarası bir araştırma alanını ifade etmektedir. Nanoölçekteki yapıların çeşitliliği, boyutların nanometre düzeyinde olmasına bağlı olarak kuantum özelliklerinin belirginleşmesiyle ilişkilidir. Bu bağlamda nanoteknoloji, nanoölçekli yapıları hem boyut hem de özellik açısından incelemektedir. Günümüzün gelişen teknolojisiyle birlikte geniş bir uygulama alanı bulan nanoteknoloji, diğer teknolojik gelişmelere alternatif olarak moleküler düzeyde bir bakış açısı sunması nedeniyle endüstri, tıp ve enerji uygulamaları gibi alanlarda önemli potansiyeller barındırmaktadır. Bu uygulamalar, mühendislik ve teknoloji bağlamında yenilikçi çözümler geliştirerek yarının dünyasını şekillendirmeyi hedeflemektedir.

Richard P. Feynman'ın 29 Kasım 1959 tarihinde Amerikan Fizik Derneği'nin yıllık toplantısında yaptığı "There's Plenty of Room at the Bottom" (Feynman, 1960) başlıklı konuşması, genellikle nanoteknoloji çağının başlangıcı olarak kabul edilmektedir. Bu ikonik konuşmasında Feynman, atomik ve moleküler ölçekte üretimin gerçekleştirilebilmesi halinde birçok yenilikçi keşfin mümkün olabileceğini vurgulamış; ancak bunun gerçekleşebilmesi için öncelikle nanoölçekte özel ölçüm ve üretim tekniklerinin geliştirilmesi gerektiğinin altını çizmiştir. Özetle, şu öngörülerde bulunmuştur:

- 24 ciltlik Britannica Ansiklopedisi'ni bir toplu iğne başına neden yazamayalım?
- Küçük ölçekte bilgi
- Daha iyi elektron mikroskopları
- Olağanüstü biyolojik sistem
- Bilgisayarların minyatürleştirilmesi
- Buharlaştırma yoluyla minyatürleştirme
- Sürtünme sorunları
- Yüzlerce minik el
- Atomların yeniden düzenlenmesi
- Küçük bir dünyada atomlar (Feynman, 1960; Erkoç, 2007)

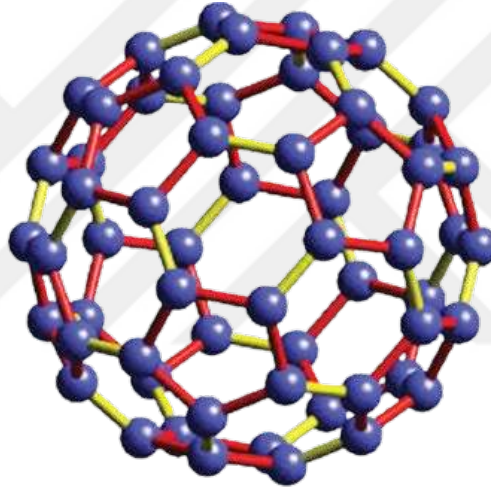
Feynman'ın 1959 tarihli "There's Plenty of Room at the Bottom" başlıklı ikonik konuşması genellikle nanoteknolojinin başlangıcı olarak kabul edilse de, Michael Faraday'ın altın ve gümüş gibi metallerin nanoparçacıklarının kolloidal süspansiyonlarının optik ve elektronik özelliklerini incelediği 1857 tarihli "Experimental Relations of Gold (and other Metals) to Light" (Faraday, 1857) adlı çalışması, nanoteknolojinin tarihinin Feynman'dan çok daha öncelere dayandığını göstermektedir. Faraday'ın "Experimental Relations of Gold (and other Metals) to Light" adlı çalışmasının ve Feynman'ın "There's Plenty of Room at the Bottom" başlıklı konuşmasının nanoteknolojinin gelişimine katkısı tartışmasız bir gerçek olsa da, her iki bilim insanı da "nanoteknoloji" terimini kullanmamıştır. "Nanoteknoloji" terimi, ilk kez 1974 yılında Norio Taniguchi'nin "On the Basic Concept of Nanotechnology" (Taniguchi, 1974) başlıklı makalesinde kullanılmıştır.

1981 yılına gelindiğinde Heinrich Rohrer ve Gerd Binnig, IBM'in Zürih'teki araştırma laboratuvarında Taramalı Tünelleme Mikroskobu'nu (STM) keşfetmişlerdir (Binnig ve Rohrer, 1983). Taramalı Tünelleme Mikroskobu sayesinde, elektron mikroskobu ile görüntülenemeyen atom altı parçacıklar 2000 kat büyütülebilir hale gelmiş ve atomik düzeyde ilk kez görüntüleme yapılabilmektedir. Bu keşif, Rohrer ve Binnig'e 1986 yılında Nobel Fizik Ödülü'nü kazandırmıştır.



Şekil 1.1. Taramalı Tünelleme Mikroskobu'nun Çalışma Prensibi (Binnig ve Rohrer, 1983).

1985 yılında Richard E. Smalley, Harold W. Kroto ve Robert F. Curl, 60 karbon atomundan oluşan bir molekülden meydana gelen yeni bir karbon allotropu sentezlemişlerdir. Bu molekül, küresel bir kafes yapısına sahiptir ve şekil olarak futbol topuna benzemesi nedeniyle “Buckyball” olarak adlandırılmaktadır. Ayrıca, jeodezik kubbe tasarımlarıyla tanınan mimar Buckminster Fuller’a ithafen bu moleküle “Buckminsterfullerene” (Kroto vd., 1985) adı verilmiştir. Buckminsterfulleren, moleküler düzeyde yeni cihaz ve malzemelerin tasarımında bir yapı taşı olarak kullanılabilir. Dolayısıyla, nanoteknoloji alanında yeni olasılıkların ve uygulamaların geliştirilmesinde kilit bir rol üstlenmektedir. Buckminsterfulleren’in keşfi, Smalley, Kroto ve Curl’e 1996 yılında Nobel Kimya Ödülü’nü kazandırmıştır.



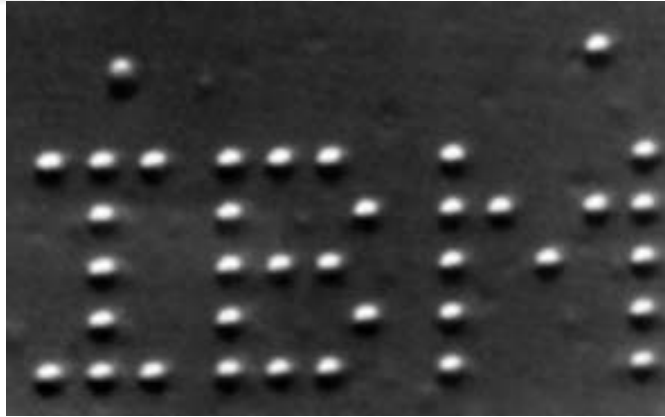
Şekil 1.2. C₆₀: Buckminsterfulleren Yapısı (Bhakta ve Barthunia, 2020).

1986 yılında Eric Drexler, nanoteknoloji alanında bir klasik olarak kabul edilen “Engines of Creation: The Coming Era of Nanotechnology” (Drexler, 1986) adlı kitabını yayımlamıştır. Kitap, Feynman’ın “There’s Plenty of Room at the Bottom” konuşmasından ilham alarak moleküler nanoteknoloji konusunu ele almaktadır. Bu kitapta Drexler, nanoteknolojinin, maddenin yapısının kontrol edilebildiği yeni bir teknoloji alanı olduğunu belirtmektedir. Bu alanın; tıp, sanayi, ekonomi ve çevre gibi çeşitli sektörlerde büyük gelişmeler ve faydalar sağlayabileceğini ifade etmektedir. Ancak aynı zamanda bazı tehlikeler barındırabileceğini de vurgulamakta ve bu konularla ilgili çeşitli senaryoları tartışmaktadır. Her ne kadar kitap nanoteknoloji alanında bir klasik olarak kabul edilse de, Nobel Ödüllü Richard E. Smalley ve kimyager George M. Whitesides,

nanoteknolojiye bakış üzerinde yanıtıcı bir etki oluşturduğu gerekçesiyle eseri eleştirmiştir. Drexler, tıpkı Taniguchi'nin 1974 yılında yayımlanan "On the Basic Concept of Nanotechnology" başlıklı makalesinde olduğu gibi bu çalışmasında "nanoteknoloji" terimini kullanmıştır.

1986 yılında yaşanan bir diğer önemli gelişme ise Gerd Binnig, Calvin F. Quate ve Christoph Gerber'in Atomik Kuvvet Mikroskobu'nu (AFM) keşfetmesidir (Binnig vd., 1986). Atomik Kuvvet Mikroskobu, fiziksel parametreleri atomik düzeyde ölçebilme yeteneği sayesinde, nanoteknoloji açısından son derece önemli bir keşif olarak kabul edilmektedir.

1990 yılında Donald M. Eigler ve Erhard K. Schweizer, Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM) ile nikel bir yüzey üzerine yalnızca 35 ksenon atomu konumlandırarak IBM logosunu oluşturmuştur (Eigler ve Schweizer, 1990). Eigler ve Schweizer bu çalışmayla, nanometre düzeyinde hassas konumlandırmanın mümkün olduğunu ve bu sayede ksenon atomlarıyla nikel yüzey üzerinde çeşitli yapı ve desenler oluşturulabildiğini ortaya koymuşlardır. Ayrıca, atomik düzeyde bilgi aktarımının mümkün olabileceğini de öne sürmüşlerdir.



Şekil 1.3. 35 Ksenon Atomu Kullanılarak Oluşturulan IBM Logosu (Eigler ve Schweizer, 1990).

1991 yılında Sumio Iijima, karbon nanotüp adı verilen bir nanomalzeme keşfetmiştir (Iijima, 1991). Karbon nanotüp, karbon atomlarının silindirik bir yapı oluşturacak şekilde dizilmesiyle oluşan sağlam ve esnek bir yapıdır. Iijima'nın karbon nanotüp keşfi, nanoteknoloji alanının dikkat çekmesine neden olmuş ve bu alandaki araştırma faaliyetlerinin artmasına katkı sağlamıştır.

2000 yılında ABD Başkanı Bill Clinton tarafından, nanoteknoloji alanında eğitim ve araştırmaları teşvik etmeyi amaçlayan Ulusal Nanoteknoloji Girişimi başlatılmıştır. 2000 yılında, Ulusal Nanoteknoloji Girişimi için ayrılan bütçe 270 milyon dolar olarak belirlenmiştir. 21 Ocak 2000 tarihinde, California Teknoloji Enstitüsü'nde yaptığı konuşmada ABD Başkanı Clinton, “Araştırma hedeflerimizden bazılarını ulaşmak 20 yıl veya daha fazla sürebilir, ancak tam da bu nedenle Federal hükümete önemli bir rol düşmektedir” ifadelerini kullanmıştır (The White House Office of the Press Secretary, 2000). 2001 ile 2025 yılları arasında Ulusal Nanoteknoloji Girişimi'ne tahsis edilen toplam bütçe 45 milyar doları aşmıştır. Son 25 yılda yapılan yüksek düzeydeki yatırımlar, nanoteknolojinin gelecekteki önemini gözler önüne sermektedir.

2001 yılında Andreas Hirsch, karbon nanotüplerin kimyasal olarak özelleştirilebileceğini keşfetmiş ve bu sayede biyouyumluluk, reaktivite ve çözünürlük gibi özelliklerinin artırılabilceğini ortaya koymuştur (Hirsch, 2002).

2004 yılında Andre Geim ve Konstantin Novoselov, grafeni ilk kez sentezlemiştir (Novoselov vd., 2004). Geim ve Novoselov, grafit üzerinde yapışkan bant kullanarak grafen tabakaları elde etmeyi başarmıştır. Ortaya çıkan grafen tabakalarını optik mikroskop ile incelemiştirler. İki boyutlu grafen üzerine gerçekleştirdikleri öncü çalışmalar ve gözlemler, Geim ve Novoselov'a 2010 yılında Nobel Fizik Ödülü'nü kazandırmıştır.

1.2 Nanosensörlerin Sınıflandırılması

Nanoteknolojinin gelişimi ve artan önemi, nanosensörlerin modern uygulamalarda daha fazla yer bulmasına ve öne çıkmasına olanak sağlamıştır. Nanosensörler, nanoölçekte (1 – 100 nm) çalışan nanomalzeme veya nanosistemlerin biyolojik, fiziksel ve kimyasal özelliklerini ölçebilen ve bu özellikleri analiz edilebilir sinyallere dönüştürebilen özel cihazlardır. Diğer sensörlerin aksine, bu özel cihazlar yüksek hassasiyet ve özgüllük sağlamayı hedefler. Bunu gerçekleştirmek için kuantum etkileri, artan reaktivite ve yüksek yüzey-hacim oranı gibi nanomalzemelere özgü özelliklerden faydalanır. Nanosensörler; yukarıdan aşağı litografi (*top-down lithography*), aşağıdan yukarı düzenlenme (*bottom-up assembly*) ve moleküler öz düzenlenme (*molecular self-assembly*) gibi çeşitli yöntemlerle üretilmekte olup, çevre ve enerji, tıp ve sağlık,

güvenlik ve savunma, gıda ve tarım ile elektronik ve iletişim gibi sektörlerde kullanılabilir. Yapılan çalışmada nanosensör teknolojilerindeki yeniliklere ve bu alandaki uygulamalara yönelik genel bir bakış sunulmuştur (Mutluer vd., 2025).

1.2.1 Kullanım Amaçlarına Göre Nanosensörler

Kendilerine özgü özellikleri sayesinde nanosensörler, farklı alanlarda ve çeşitli amaçlarla kullanılabilir. Mekanik nanosensörler; nanoölçekteki mekanik kuvvet, basınç, titreşim, akustik dalgalar veya yer değiştirme gibi parametreleri ölçmek için kullanılmaktadır (Binh vd., 1994; Munawar vd., 2019; Lim ve Ramakrishna, 2006). Elektriksel nanosensörler; nanoölçekteki elektrik akımı, gerilim, direnç, endüktans veya manyetik alanı ölçmek için kullanılmaktadır (Munawar vd., 2019; Lim ve Ramakrishna, 2006; Sasaki vd., 1996). Optik nanosensörler; nanoölçekteki ışık, renk, spektrum veya polarizasyonu ölçmek için kullanılmaktadır (Sasaki vd., 1996). Termal nanosensörler; nanoölçekteki ısı kapasitesi, ısı akışı, entropi veya sıcaklığı ölçmek için kullanılmaktadır (Khanna, 2021). Kimyasal nanosensörler; nanoölçekteki kimyasal bileşikler, elementler, moleküller, iyonlar veya tepkimeleri ölçmek için kullanılmaktadır (Khanna, 2021; Consales vd., 2008; Yonzon vd., 2005). Biyolojik nanosensörler; nanoölçekteki biyolojik yapı, biyolojik işlev, biyolojik etkileşim veya biyolojik aktiviteyi ölçmek için kullanılmaktadır (Yonzon vd., 2005; Perdomo vd., 2021).

1.2.2 Yapılarına Göre Nanosensörler

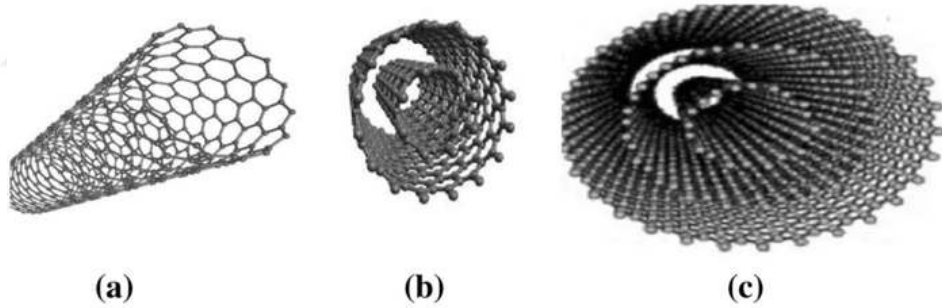
1.2.2.1 Karbon Bazlı Nanosensörler

Karbon bazlı nanosensörler, nanoölçekli karbon malzemelerden oluşan sensörlerdir. Örnek olarak karbon nanotüpler, fulleren, grafen ve nanoelmas verilebilir.

1.2.2.1.1 Karbon Nanotüpler

Karbon nanotüpler (CNT), karbon atomlarının silindirik bir yapı oluşturacak şekilde dizilmesiyle meydana gelen yapılardır. Havada bulunan oksijenle reaksiyona girmeksizin yüksek sıcaklıklara kadar ısıtılabilir, bu yapıların son derece yüksek termal kararlılığa sahip olduğunu ortaya koymaktadır. Ayrıca, asitler, bazlar ve diğer kimyasal maddelerle reaksiyon göstermeyerek üstün

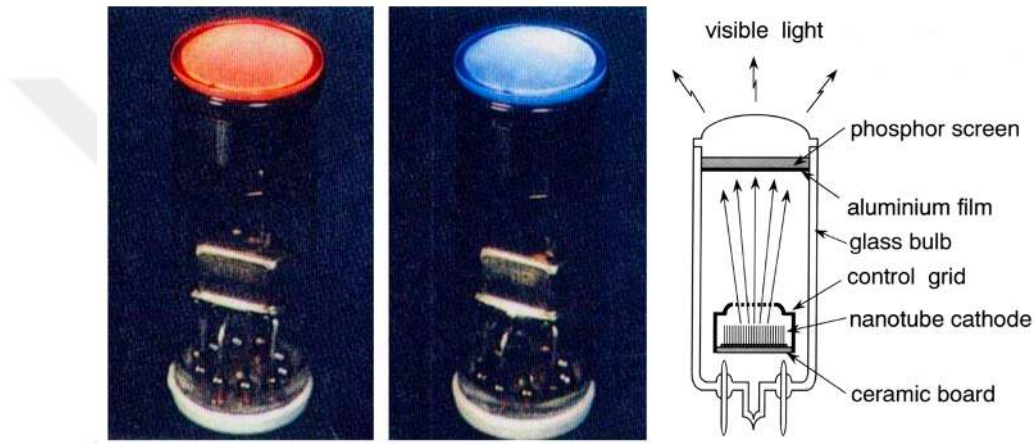
bir kimyasal kararlılık sergilerler. Manyetik alanlara karşı dirençlidirler ve elektriksel özellikleri, uygulanan manyetik alana bağlı olarak değişkenlik gösterir. Bu durum, karbon nanotüplerin diyamanyetik özellik taşıdığını ve anizotropik manyetik duyarlılık gösterdiğini ortaya koymaktadır. Bununla birlikte, doğrusal olmayan optik davranışlar da sergilerler. Şekilleri ve boyutları, ışığın yansıma, soğurma ve iletim özelliklerini doğrudan etkilemektedir. Mekanik mukavemet açısından değerlendirildiğinde ise, bilinen tüm malzemelerden daha üstün bir dayanıklılığa sahiptirler. Bükülme ve gerilme gibi dış etkilere karşı yapısal bütünlüklerini korurlar. Çok düşük öz dirençleri sayesinde yüksek düzeyde elektriksel iletkenlik sergilerler. Buna ek olarak, canlı dokularla biyolojik uyumluluk göstermeleri ve ısı iletiminde bakıra kıyasla yaklaşık 10 kat daha yüksek bir termal iletkenliğe sahip olmaları, bu yapıların hem elektriksel hem de termal performans açısından son derece etkileyici özellikler taşıdığının bir göstergesidir (Ebbesen, 1994; Saito vd., 1999; Dresselhaus vd., 1996; Ajayan ve Zhou, 2001; Popov, 2003; Gupta vd., 2019; Sinnott ve Andrews, 2001; Sangoi, 2003; Abubakre vd., 2023).



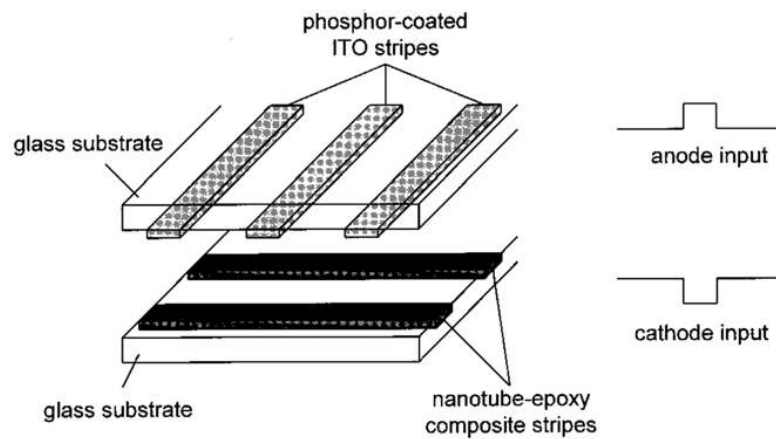
Şekil 1.4. Duvar Sayılarına Göre Karbon Nanotüpler. (a) Tek Duvarlı Karbon Nanotüp (SWCNT), (b) Çift Duvarlı Karbon Nanotüp (DWCNT), (c) Çok Duvarlı Karbon Nanotüp (MWCNT) (Gupta vd., 2019).

Karbon nanotüpler, sahip oldukları benzersiz özellikler sayesinde çeşitli alanlarda yüksek uygulama potansiyeli sunmaktadır (Ebbesen, 1994; Saito vd., 1999; Dresselhaus vd., 1996; Ajayan ve Zhou, 2001; Zhu vd., 2022; Savk vd., 2019; Barrejón ve Prato, 2021; Hughes vd., 2024; Upadhyayula vd., 2008). Günümüzde biyomedikal uygulamalar (Akkaş, 2018), lazer uygulamaları için optik sınırlayıcı (Vivien vd., 2002; Chen vd., 1999), dijital devreler (Peng vd., 2019; Raychowdhury ve Roy, 2007), mantık devreleri (Bachtold vd., 2001), moleküler elektronik

(Avouris, 2002), sürdürülebilir ve temiz enerji uygulamaları (Centi ve Perathoner, 2011; Liu ve Cheng, 2005), enerji depolama teknolojileri (Frackowiak ve Béguin, 2002), tıp ve eczacılık (He vd., 2013), tıbbi nanotaşıyıcı uygulamaları (Peretz ve Regev, 2012), gaz sensörü üretimi (Wang ve Yeow, 2009) ve su arıtımı (Das vd., 2014) gibi birçok modern alanda yer bulmuşlardır. Mevcut uygulamalara örnek olarak, karbon nanotüplerin alan yayıcı olarak kullanıldığı, triyot yapısına sahip katot ışın tüplü (CRT) floresan ekran (Saito vd., 1998) ile karbon nanotüplerin elektron emisyon kaynağı olarak kullanıldığı düz panel ekran sistemleri (Wang vd., 1998) gösterilebilir.



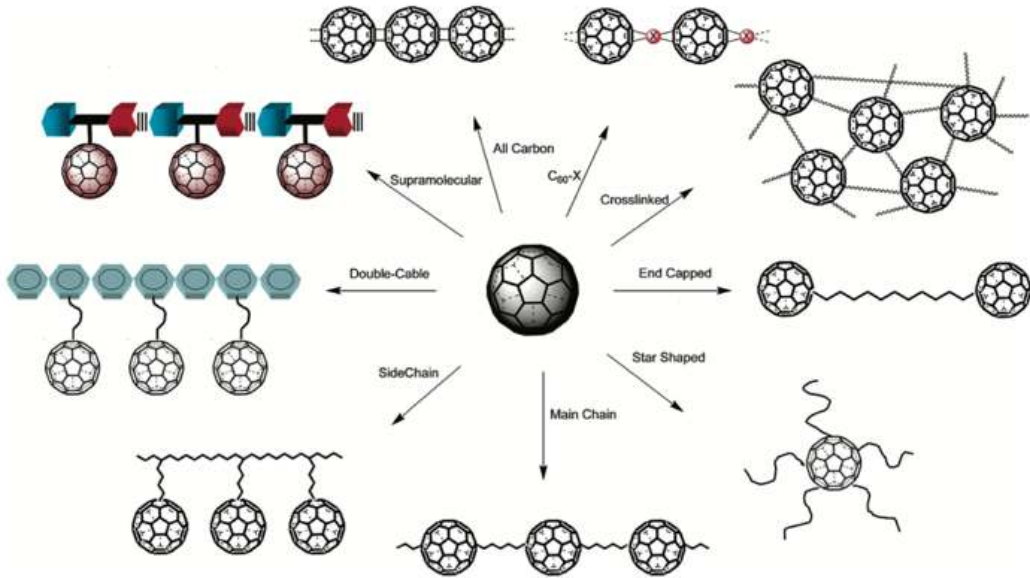
Şekil 1.5. Karbon Nanotüp Alan Yayıcılı Katot Işın Tüplü Floresan Ekran (Saito vd., 1998).



Şekil 1.6. Matris Adreslemeli Karbon Nanotüp Ekranın Şematik Yapısı (Wang vd., 1998).

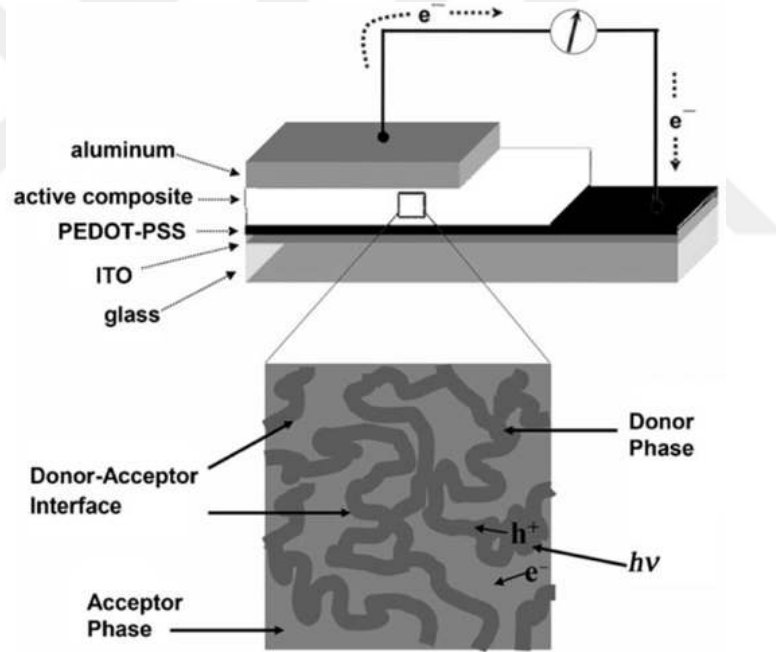
1.2.2.1.2 Fulleren

Fulleren, 60 karbon atomunun küresel bir kafes yapısı oluşturacak şekilde dizilmesiyle oluşan bir moleküldür. Kimyasal açıdan çok yönlü ve esnektir; oksijen, hidrojen ve diğer elementlerle kolaylıkla reaksiyona girebilir. Elektriksel, optik ve manyetik özellikleri, yapısına ve boyutuna bağlı olarak değişkenlik gösterir. Bu durum, fullerenin iletken, yarı iletken, süper iletken, metalik, ferromanyetik, paramanyetik, diyamanyetik, fotoaktif, fotovoltaiik ya da floresan özellikler gösterebilmesine olanak tanır. Ayrıca, ısı iletiminde son derece yüksek bir performans sergiler. Termal iletkenliği, elmasinkini dahi belirgin şekilde geride bırakmaktadır. Fulleren, canlı dokularla biyolojik olarak uyumludur ve antiviral, antioksidan ve fotosensitize edici biyolojik aktivitelere sahiptir. Antiviral ajan olarak, HIV, influenza ve Hepatit C gibi virüsleri inhibe edebilir. Antioksidan özelliğiyle, serbest radikalleri yakalayarak hücresel hasarın önlenmesine katkı sağlar. Fotosensitizer olarak ise, ışıkla aktive olan ilaçların ya da DNA ve RNA gibi genetik materyallerin hedef hücrelere iletilmesinde ve kanser hücrelerinin yok edilmesinde kullanılabilir (Kwon vd., 2004; Prato, 1999; Goodarzi vd., 2017; Yadav ve Kumar, 2008; Taylor, 1994; Fowler ve Manolopoulos, 2006).

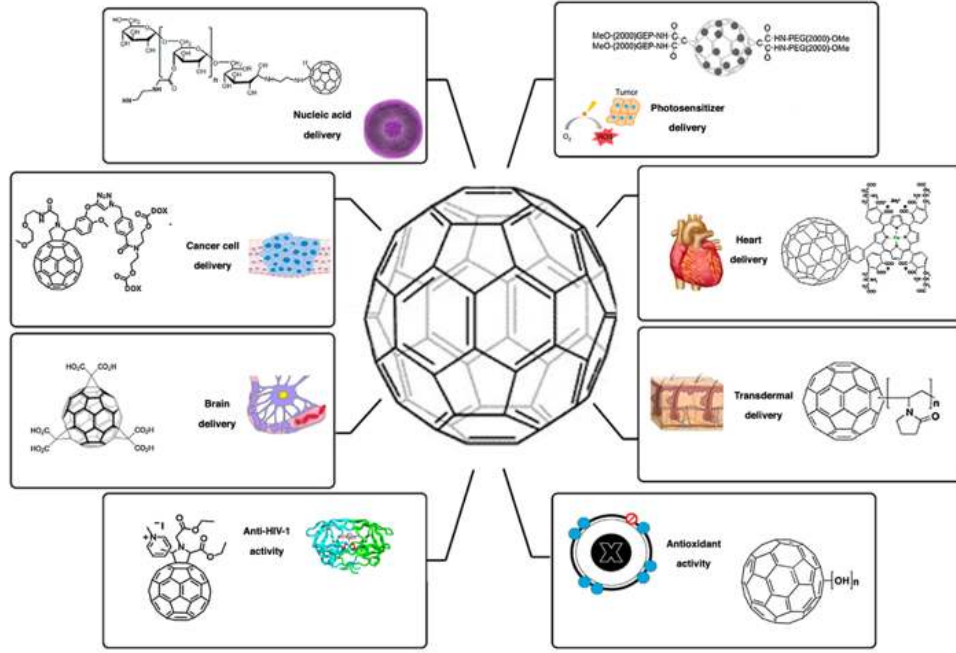


Şekil 1.7. C₆₀ İçeren Polimerlerin Şematik Gösterimi (Giacalone ve Martín, 2006).

Fulleren, sahip olduđu benzersiz özellikler sayesinde çeşitli alanlarda yüksek uygulama potansiyeli sunmaktadır (Dresselhaus vd., 1996; Wudl, 2002; Langa ve Nierengarten, 2012; Kausar, 2024). Günümüzde yakıt hücresi teknolojileri (Coro vd., 2016), tıbbi uygulamalar (Bakry vd., 2007), biyolojik uygulamalar (Bosi vd., 2003; Jensen vd., 1996), biyomedikal uygulamalar (Goodarzi vd., 2017; Partha ve Conyers, 2009), dermatolojik ve kozmetik uygulamalar (Mousavi vd., 2016), enerji sistemleri (Xu vd., 2020), sensör teknolojileri (Sherigara vd., 2003), hücresel ilaç taşıma (Bolskar, 2012), şarj edilebilir batarya teknolojileri (Jiang vd., 2020) ve fotovoltaiik uygulamalar (Deng vd., 2017) gibi birçok modern alanda yer bulmuştur. Mevcut uygulamalara örnek olarak, polimerler ve fullerene bileşiklerinin güneş pillerinde kullanımı (Thompson ve Fréchet, 2007) ile fullerene temelli ilaç taşıma sistemleri (Kazemzadeh ve Mozafari, 2019) gösterilebilir.



Şekil 1.8. Polimer – Fulleren Bazlı BHJ Güneş Pilinin Şematik Gösterimi
(Thompson ve Fréchet, 2007).

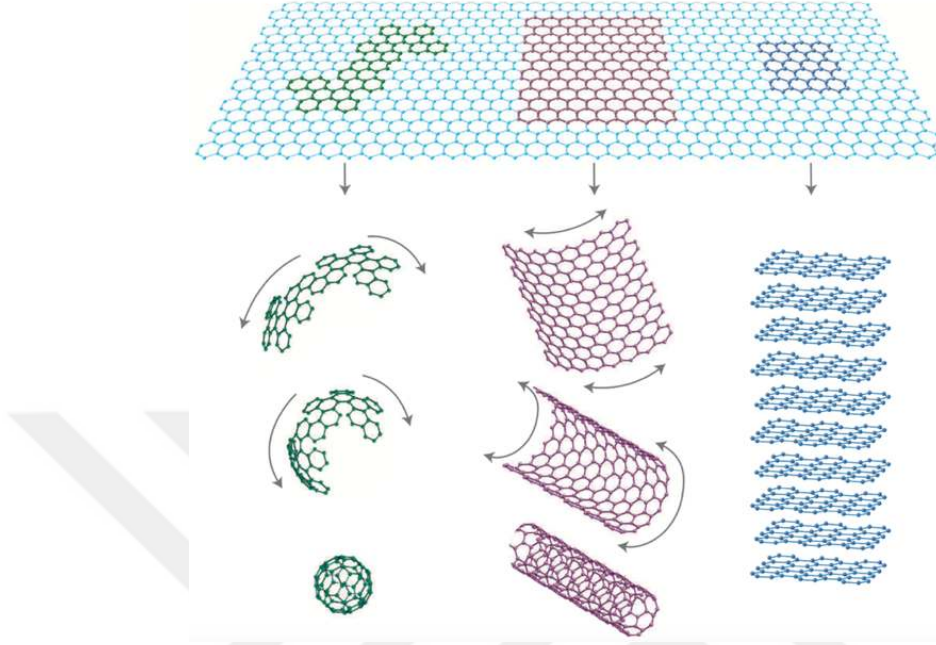


Şekil 1.9. Fulleren Temelli Taşıma Sistemleri (Kazemzadeh ve Mozafari, 2019).

1.2.2.1.3 Grafen

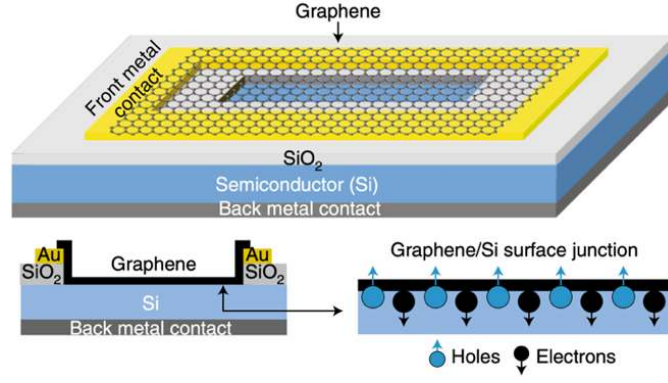
Grafen, karbon atomlarının altıgen bir kafes yapısı oluşturacak şekilde tek bir katman halinde dizilmesiyle oluşan iki boyutlu bir malzemedir. Yüksek termal kararlılığa ve ısı iletkenliğine sahiptir. Aynı zamanda, yüksek kimyasal kararlılığı sayesinde asitler, bazlar ve diğer kimyasal maddelerle kolaylıkla reaksiyona girmez. Grafen, yüksek mekanik dayanıklılık sergiler ve bükülmelere karşı dirençlidir. Manyetik alanlara karşı da direnç gösterir; elektriksel özellikleri, uygulanan manyetik alanın etkisiyle değişkenlik gösterir. Bu durum, grafenin diyamanyetik özellik taşıdığını ve anizotropik manyetik duyarlılık sergilediğini ortaya koymaktadır. Ayrıca, doğrusal olmayan optik davranışlar sergileyen grafenin şekli ve boyutu, ışığın yansıma, soğurma ve iletim özelliklerini doğrudan etkilemektedir. Bunun yanı sıra, fosforesans, floresans ve elektrolüminesans gibi optik özelliklere de sahiptir. Çok düşük özdirenci sayesinde yüksek düzeyde elektriksel iletkenlik sergiler. Canlı dokularla biyolojik uyumluluk göstermesinin yanı sıra, antiviral, antibakteriyel ve antiinflamatuvar biyolojik aktivitelere de sahiptir (Geim, 2009; Geim ve Novoselov, 2007; Soldano vd., 2010; Neto vd., 2009; Warner vd., 2013; Rao ve Sood, 2013; Papageorgiou vd., 2017; Aoki ve Dresselhaus, 2014; Kranz, 2019; Tiwari vd., 2020; Mondal vd., 2019).

Şekil 10, grafenin yapısını göstermektedir. Grafen; solda görüldüğü gibi Buckyball şeklinde sarılabilir, ortada görüldüğü gibi nanotüplere dönüştürülebilir ya da sağda görüldüğü gibi grafit şeklinde üst üste istiflenebilir.

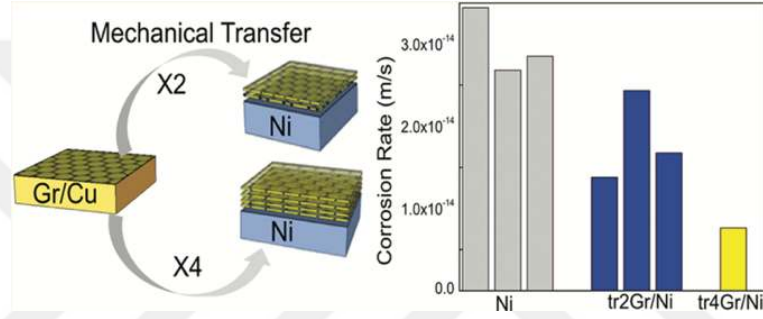


Şekil 1.10. Grafen: Tüm Grafit Yapılarının Temelini Oluşturan İki Boyutlu Yapısal Malzeme (Geim ve Novoselov, 2007).

Grafen, sahip olduğu benzersiz özellikler sayesinde çeşitli alanlarda yüksek uygulama potansiyeli sunmaktadır (Geim, 2009; Geim ve Novoselov, 2007; Rao vd., 2009). Günümüzde biyomedikal uygulamalar (Chung vd., 2013; Shen vd., 2012), elektronik ve fotonik uygulamalar (Avouris ve Xia, 2012), çevresel uygulamalar (Perreault vd., 2015), termal uygulamalar (Shahil ve Balandin, 2012; Pop vd., 2012), kimyasal uygulamalar (Kuila vd., 2012), hücresel ilaç taşıma (Liu vd., 2013), enerji depolama sistemleri (Zhu vd., 2014), enerji ve optoelektronik uygulamaları (Wan vd., 2011; Olabi vd., 2020), kimyasal algılama (Huang vd., 2014), RF iletişim uygulamaları (Palacios vd., 2010) ve süperkapasitör uygulamaları (Tan ve Lee, 2013) gibi birçok modern alanda yer bulmuştur. Mevcut uygulamalara örnek olarak, grafen ve üç boyutlu yarı iletkenlerden oluşan heteroeklemler aracılığıyla fotovoltaik verimliliğin artırılması (Behura vd., 2019) ile grafenin korozyon önleyici bir kaplama malzemesi olarak kullanımı (Prasai vd., 2012) gösterilebilir.



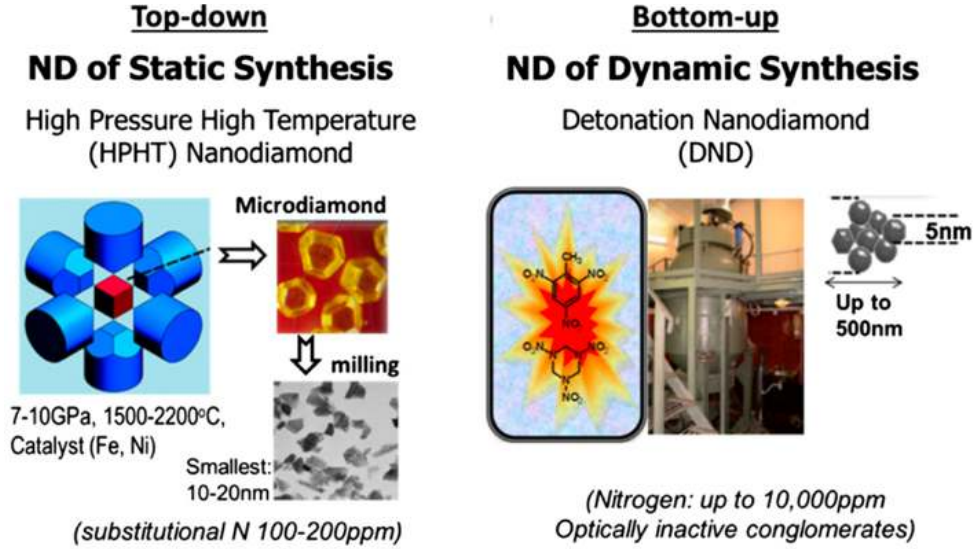
Şekil 1.11. Grafen – Yarıiletken (Si) Heteroeklemine Sahip Fotovoltaik Hücresinin Şematik Gösterimi (Behura vd., 2019).



Şekil 1.12. Koruyucu Kaplama Olarak Kullanılan Grafenin Korozyonu Önemli Ölçüde Azaltma Etkisini Gösteren Grafik (Prasai vd., 2012).

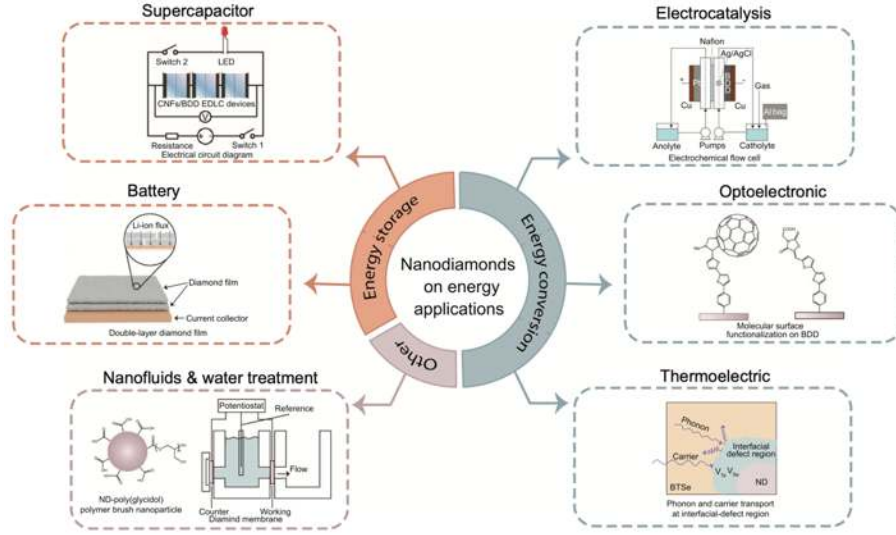
1.2.2.1.4 Nanoelmas

Nanoelmas (ND), karbon atomlarının yüksek basınç ve sıcaklığa maruz kalması sonucu elmas kafes yapısı oluşturmasıyla meydana gelir. Çok yüksek sertliğe ve aşınma direncine sahiptir. Belirli koşullar altında, sertlik düzeyi bilinen en sert madde olan elmasinkini dahi aşabilir. Kimyasal olarak oldukça kararlıdır; oksijen, hidrojen, asitler, bazlar ve diğer reaktif maddelerle kolaylıkla reaksiyona girmez. Yüksek termal iletkenliğe sahiptir ve bu sayede ısıyı çok hızlı bir şekilde transfer edebilir. Doğrusal olmayan optik özellikler sergileyerek ışığı yansıtabilir, soğurabilir veya iletebilir. Ayrıca farklı dalga boylarında ışık yayma kapasitesine de sahiptir. Biyoyumlu ve biyolojik olarak aktiftir, canlı dokularla etkileşime girebilir. Bunlara ek olarak, elektriksel iletkenliği yüksektir ve manyetik alanlara karşı direnç gösterir (Mochalin vd., 2012; Williams, 2014; Nunn vd., 2017; Williams vd., 2008; Gogotsi, 2006).

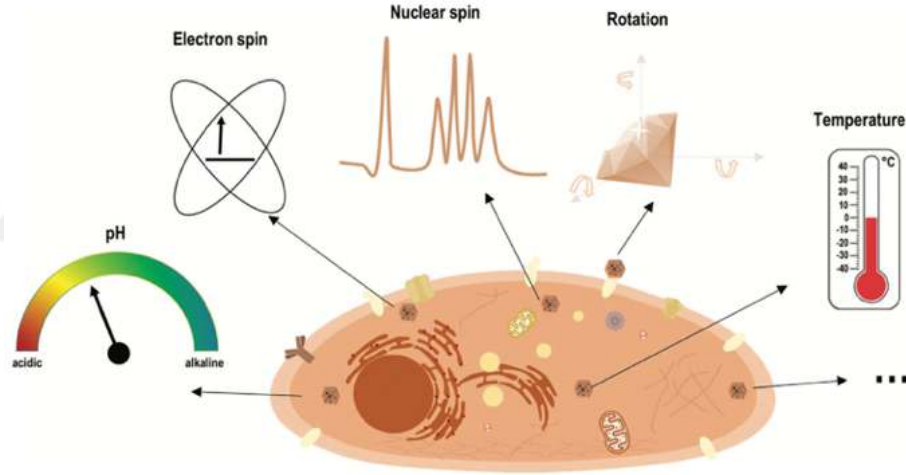


Şekil 1.13. İki Ana Nanoelmas Türünün Sentezinin ve Yapısının Şematik Gösterimi (Nunn vd., 2017).

Nanoelmas, sahip olduğu benzersiz özellikler sayesinde çeşitli alanlarda yüksek uygulama potansiyeli sunmaktadır (Mochalin vd., 2012; Williams, 2014; Turcheniuk, 2017). Günümüzde biyomedikal uygulamalar (Turcheniuk, 2017; Passeri vd., 2015), hücresel ilaç taşıma (Kaur, 2013; Chen ve Zhang, 2017), doku mühendisliği (Grausova vd., 2009; Zhang vd., 2011), biyolojik uygulamalar (Ho, 2010), tıbbi uygulamalar (Ho, 2010; Xing ve Dai, 2009), optik biyogörüntüleme (Chen ve Zhang, 2017; Hui vd., 2010), biyoteknoloji (Bacakova vd., 2016), güneş pili uygulamaları (Kausar vd., 2018), biyosensör uygulamaları (Chen ve Zhang, 2017; Miller vd., 2020), kompozit malzeme uygulamaları (Mochalin ve Gogotsi, 2015), tribolojik uygulamalar (Lee ve Lim, 2004; Amaral vd., 2010) ve rejeneratif tıp (Whitlow vd., 2017) gibi birçok modern alanda yer bulmuştur. Mevcut uygulamalara örnek olarak, nanoelmasın enerji alanındaki kullanımları (Wang ve Cui, 2019) ile biyolojik uygulamalarda kuantum sensör olarak değerlendirilmesi (Wu ve Weil, 2022) gösterilebilir.



Şekil 1.14. Nanoelmasların Enerjiyle İlişkili Alanlardaki Uygulamaları (Wang ve Cui, 2019).



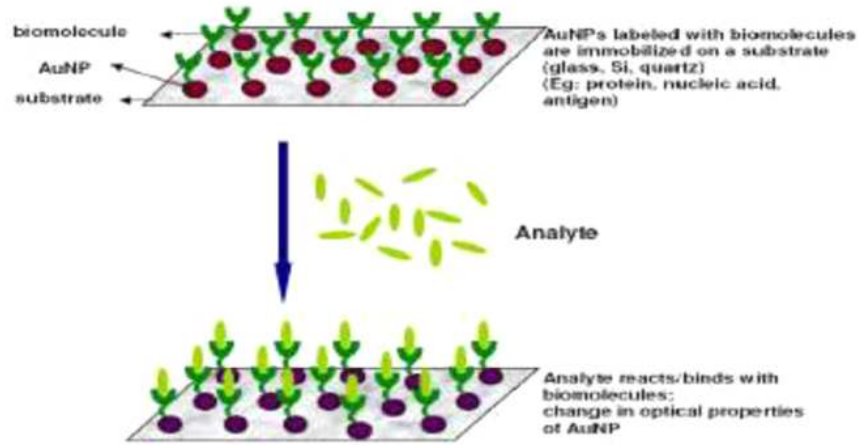
Şekil 1.15. Nanoelmas Kuantum Sensörlerin Biyolojik Sistemlerde Çeşitli Yerel Parametrelerin Tespiti için Kullanımı (Wu ve Weil, 2022).

1.2.2.2 Metal Bazlı Nanosensörler

Metal bazlı nanosensörler; metal nanoparçacıklar, nanoteller veya nanoyapılar gibi nanoölçekli metal malzemelerden oluşan sensörlerdir. Örnek olarak altın nanoparçacıklar, demir oksit nanoparçacıklar, gümüş nanoteller ve metal-organik çerçeve bazlı nanosensörler verilebilir.

1.2.2.2.1 Altın Nanoparçacıklar

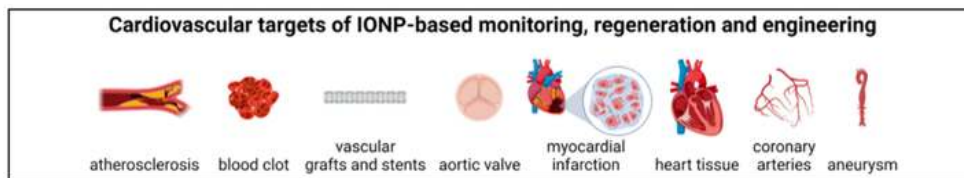
Altın nanoparçacıklar (AuNPs), nanoölçekteki altın tanecikleridir. Biyomedikal, kimyasal ve biyolojik algılama, tıp, optik ve elektronik gibi çeşitli alanlarda kullanılabilir (Sardar vd., 2009; Giljohann vd., 2010; Dreaden vd., 2012; Saha vd., 2012; Mikhailova, 2021; Milan vd., 2022). Mevcut uygulamalara örnek olarak, biyomedikal alanlarda ve ilaç taşıma sistemlerinde kullanımları (Daraee vd., 2016) gösterilebilir.



Şekil 1.16. Biyosensörlerde Altın Nanoparçacıkların Kullanımı (Daraee vd., 2016).

1.2.2.2.2 Demir Oksit Nanoparçacıklar

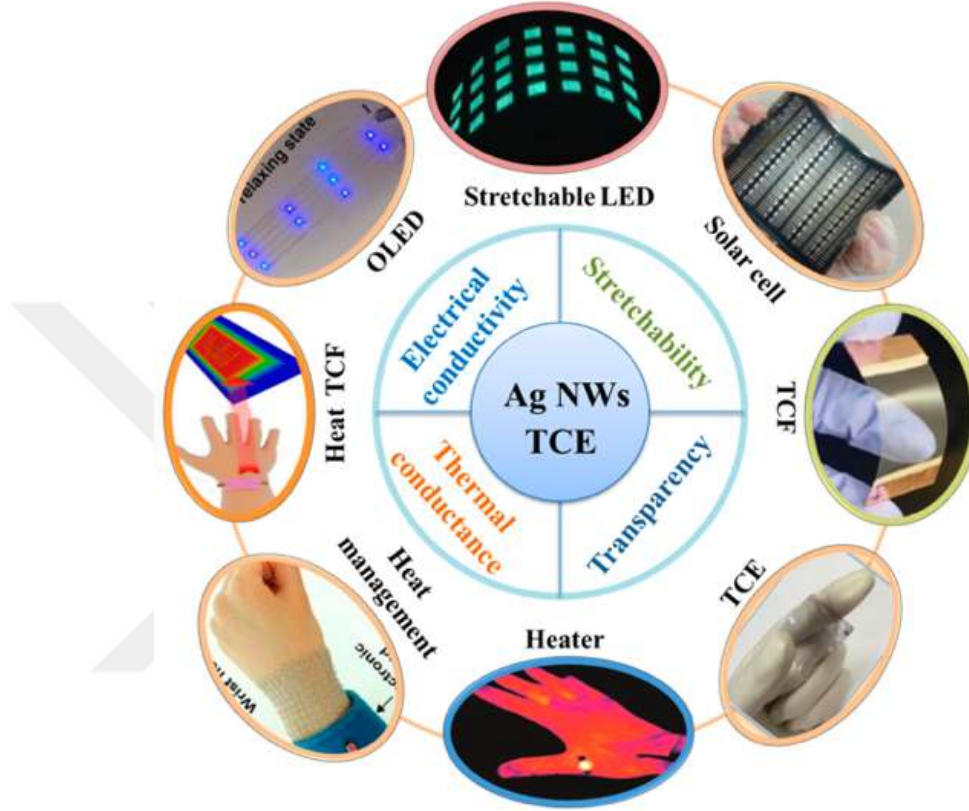
Demir oksit nanoparçacıklar (IONPs), manyetik ve yarıiletken özellikler sergileyen nanoölçekli demir oksit tanecikleridir. Biyomedikal ve farmasötik uygulamalar gibi çeşitli alanlarda kullanılabilir (Ali vd., 2016; Sangaiya ve Jayaprakash, 2018; Attia vd., 2022). Mevcut uygulamalara örnek olarak, rejeneratif tıp ve doku mühendisliği alanlarında kullanımları (Friedrich vd., 2021) gösterilebilir.



Şekil 1.17. Demir Oksit Nanoparçacık Destekli Kardiyovasküler Doku Mühendisliği ve Rejenerasyon için Olası Hedefler (Friedrich vd., 2021).

1.2.2.2.3 Gümüş Nanoteller

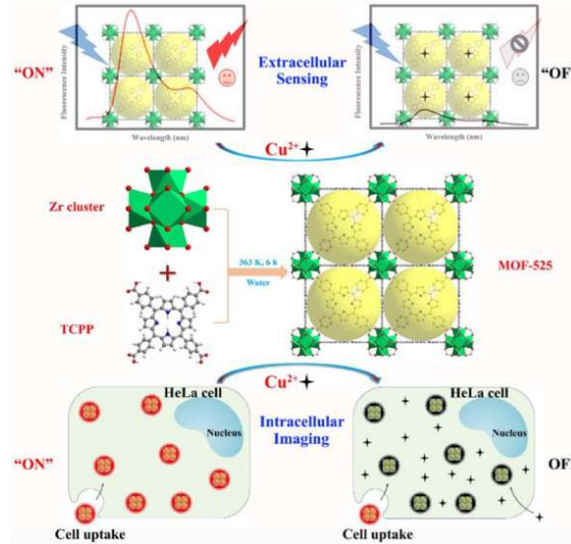
Gümüş nanoteller (AgNWs), tek boyutlu forma sahip nanoölçekli gümüş yapılarıdır. Elektriksel uygulamalar, biyomedikal uygulamalar ve optik gibi çeşitli alanlarda kullanılabilmektedir (Sun, 2010). Mevcut uygulamalara örnek olarak, şeffaf iletken film üretiminde kullanımları (Shi vd., 2019) gösterilebilir.



Şekil 1.18. Gümüş Nanoteller İçeren Şeffaf İletken Film Tabanlı Cihazların Özellikleri ve Uygulama Alanları (Shi vd., 2019).

1.2.2.2.4 Metal-Organik Çerçeve Bazlı Nanosensörler

Metal-organik çerçeve (MOF) bazlı nanosensörler, metal-organik iskelet yapısına sahip nanoölçekli parçacıklardır. Biyomedikal ve sensör tabanlı uygulamalar gibi çeşitli alanlarda kullanılabilmektedir (Rabiee vd., 2022; Yuan vd., 2021). Mevcut uygulamalara örnek olarak, bakır iyonlarının tespiti amacıyla geliştirilmiş floresan nanosensör sistemleri (Cheng vd., 2019) gösterilebilir.



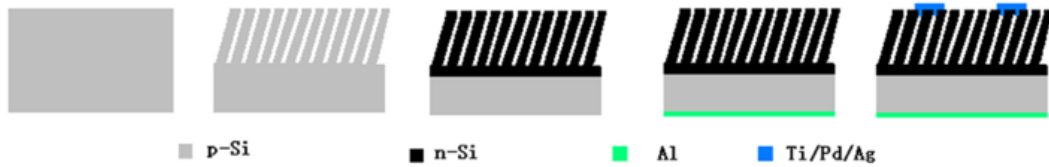
Şekil 1.19. Porfirinik MOF-525 Nanoparçacıklarının Hazırlanmasının Şematik Gösterimi ve Hücre Dışı/İçİ Cu^{2+} Tespiti için “Sönümlü” Floresan Algılama Mekanizması (Cheng vd., 2019).

1.2.2.3 Yarıiletken Bazlı Nanosensörler

Yarıiletken bazlı nanosensörler, nanoölçekli yarıiletken malzemelerden oluşan sensörlerdir. Örnek olarak silisyum nanoteller verilebilir.

1.2.2.3.1 Silisyum Nanoteller

Silisyum nanoteller (SiNWs), tek boyutlu forma sahip nanoölçekli silisyum yapılarıdır. Elektronik, optik, mekanik ve termal uygulamalar gibi çeşitli alanlarda kullanılabilir (Schmidt vd., 2009; Schmidt vd., 2010; Akbari-Saatlu vd., 2020). Mevcut uygulamalara örnek olarak, eğik hizalanmış silisyum nanotel dizilerinin güneş pili sistemlerinde kullanımı (Fang vd., 2008) gösterilebilir.



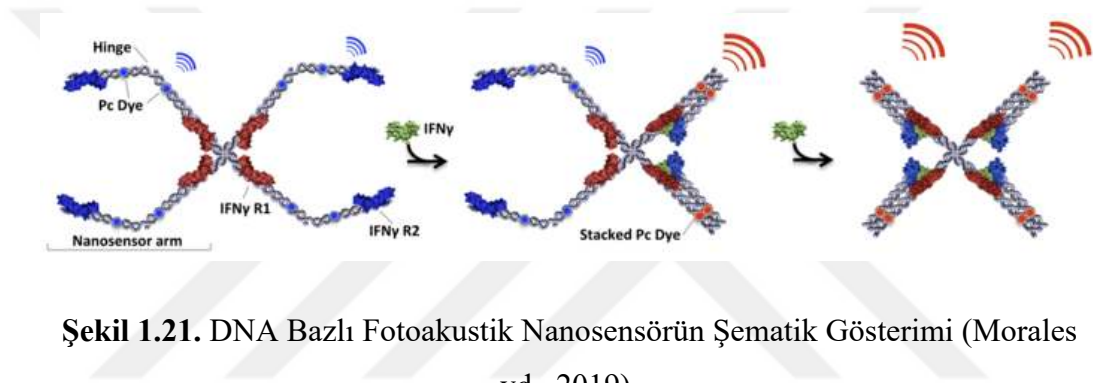
Şekil 1.20. Eğik Hizalanmış Silisyum Nanotel Dizili Güneş Pillerinin Üretim Sürecine İlişkin Şematik Diyagram (Fang vd., 2008).

1.2.2.4 Biyonanosensörler

Biyonanosensörler, lipitler, polimerler veya inorganik maddeler gibi malzemelere dayanan nanoölçekli sensörlerdir. Örnek olarak DNA/RNA bazlı nanosensörler verilebilir.

1.2.2.4.1 DNA/RNA Bazlı Nanosensörler

DNA/RNA bazlı nanosensörler, DNA veya RNA moleküllerini kullanan nanoölçekli sensör sistemleridir. Tıp ve çevre temelli uygulamalar gibi çeşitli alanlarda kullanılabilmektedir (Kumar ve Guleria, 2020). Mevcut uygulamalara örnek olarak, interferon gamanın tespiti amacıyla geliştirilmiş DNA bazlı fotoakustik nanosensörler (Morales vd., 2019) gösterilebilir.



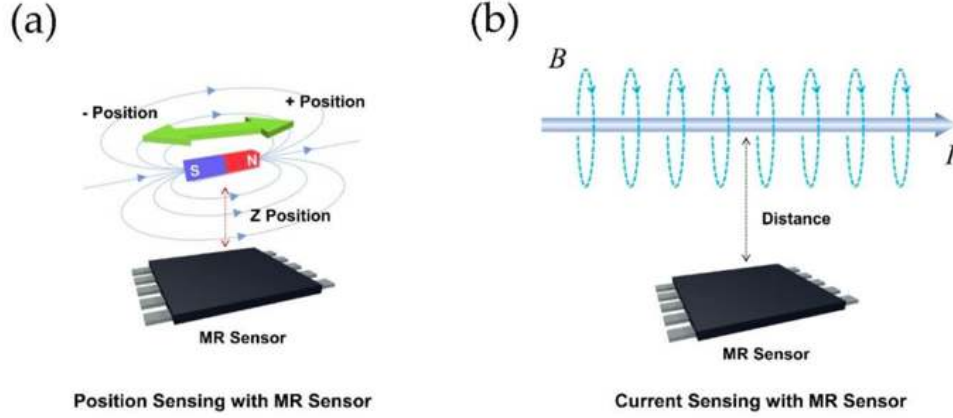
Şekil 1.21. DNA Bazlı Fotoakustik Nanosensörün Şematik Gösterimi (Morales vd., 2019).

1.2.2.5 Manyetik Malzeme Bazlı Nanosensörler

Manyetik malzeme bazlı nanosensörler, manyetik özellik taşıyan nanoparçacıklardan oluşan sensörlerdir. Örnek olarak manyetorezistif nanosensörler verilebilir.

1.2.2.5.1 Manyetorezistif Nanosensörler

Manyetorezistif (MR) nanosensörler, manyetik alan altındaki direnç değişimini algılayan nanoölçekli sensörlerdir. Manyetik alan algılama, biyolojik algılama ve veri depolama gibi çeşitli alanlarda kullanılabilmektedir (Leitao vd., 2015; Yang ve Zhang, 2021). Mevcut uygulamalara örnek olarak manyetorezistif nanosensörlerle konum ve akım algılaması (Yang ve Zhang, 2021) gösterilebilir.



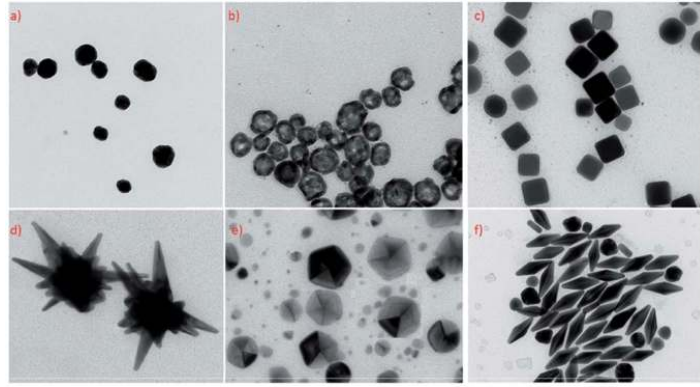
Şekil 1.22. Manyetorezistif Nanosensörler ile (a) Konum ve (b) Akım Algılama Uygulamalarının Şematik Gösterimi (Yang ve Zhang, 2021).

1.2.2.6 Plazmonik Nanosensörler

Plazmonik nanosensörler, metal nanoparçacıkların veya nanofilmlerin yüzeyinde gerçekleşen yüzey plazmon rezonansı olgusunu kullanan sensörlerdir. Örnek olarak plazmonik nanoparçacıklar verilebilir.

1.2.2.6.1 Plazmonik Nanoparçacıklar

Plazmonik nanoparçacıklar, boyutlarından çok daha büyük dalga boylarındaki elektromanyetik ışıyım ile etkileşime girebilen nanoölçekli metalik taneciklerdir. Biyomedikal uygulamalar, optik ve nanotıp gibi çeşitli alanlarda kullanılabilmektedir (Liu vd., 2018; Khlebtsov ve Dykman, 2009). Mevcut uygulamalara örnek olarak, kimyasal analizlerde plazmonik nanoparçacıkların kullanımı (Krajczewski vd., 2017) gösterilebilir.



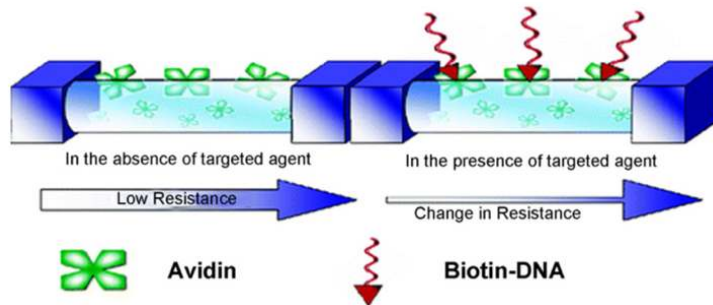
Şekil 1.23. SERS Ölçümleri için Elektromanyetik Nanorezonatör Olarak Kullanılan, Farklı Şekil ve Geometrilere Sahip Gümüş (Ag) ve Altın (Au) Nanoparçacıkların TEM Mikrografları (Krajczewski vd., 2017).

1.2.2.7 Polimerik Nanosensörler

Polimerik nanosensörler, lipid, misel, dendrimer veya lipozom gibi organik materyal bazlı nanoparçacıklardan oluşan sensörlerdir. Örnek olarak iletken polimerler verilebilir.

1.2.2.7.1 İletken Polimerler

İletken polimerler, elektrik iletkenliği sağlayan organik polimerler kullanılarak üretilen nanosensörlerdir. Optik, elektronik, enerji ve manyetizma uygulamaları gibi çeşitli alanlarda kullanılabilir (Kumar ve Sharma, 1998; Nezakati vd., 2018; Namsheer ve Rout, 2021; Seymour, 1981; Sumdani vd., 2021). Mevcut uygulamalara örnek olarak, elektrokimyasal biyosensörlerdeki kullanımları (Nambiar ve Yeow, 2010) gösterilebilir.



Şekil 1.24. Öntasarımlı Elektrotlar Üzerine Yerleştirilmiş Polimer Nanotelin Biyosensör Uygulamasındaki Kullanımı (Nambiar ve Yeow, 2010).

2. MATERYAL ve YÖNTEM

2.1 Fullerenlere Genel Bakış

Fullerenin keşfi, karbonun allotropik formlarına ilişkin anlayışa önemli katkılar sağlamıştır. Bu yapı, ilk kez 1970 yılında Japon bilim insanı Osawa tarafından teorik olarak öne sürülmüş ve 1971 yılında yayımlanan bir çalışmada literatüre kazandırılmıştır (Yoshida ve Osawa, 1971). Bu gelişmenin ardından, Bochvar tarafından fulleren C₆₀ yapısının Hückel hesaplamaları gerçekleştirilmiştir (Bochvar ve Gal'pern, 1973). Bu molekül, 60 karbon atomunun gaz fazında bir araya gelmesine olanak tanımakta ve gerçekleşen reaksiyonlarla karbonun farklı allotroplarının oluşumunu sağlamaktadır. Yapılan çalışmalar ile fulleren C₆₀'ın kafes yapısı ile endohedral kompleksleri keşfedilmiş ve reaktiviteleri incelenmiştir (Heath vd., 1985). Simetri prensibiyle genelleştirilmiş karbon kafes yapısında, n atom sayısını (n = 0, 2, 3...) temsil etmekte olup; kapalı halka yapıda yer alan atom sayısı 20 + 2n kuralına göre hesaplanmaktadır (Aihara, 1995).

Karbonun nanometre boyutundaki yapay allotroplarından biri olan fullereni diğer allotroplardan ayıran temel özellik ve bu yapının araştırmalarda yoğun ilgi görmesinin başlıca nedeni, sahip olduğu eşsiz geometrik yapısıdır. Fullerenler, beşgen ve altıgen halkaların bir araya gelmesiyle oluşurlar. Yapıları incelendiğinde, her bir karbon atomunun üç komşu karbon atomuyla bağ yaptığı görülür (Taylor ve Walton, 1993). Son derece küçük boyutlara sahip olmaları, bu yapılara nanoteknoloji alanında önemli potansiyeller kazandırmaktadır (Osawa, 2002).

Fullerenler, farklı sayılarda karbon atomunun bir araya gelmesiyle oluşan yapılardır. Deneysel çalışmalarda, karbon atomu sayısı 20 ile 540 arasında değişen fulleren yapılarına rastlanmıştır (Ghavanloo vd., 2022; Prinzbach vd., 2000). 12 pentagon ve 20 hegzagon halkanın bir araya gelmesiyle oluşan C₆₀, en iyi bilinen fulleren yapıdır (Taylor ve Walton, 1993). Teorik çalışmalar, C₆₀ molekülünün boyutunun %75 oranına sıkıştırılması durumunda, bu yapının 668 GPa'lık bir hacim modülüne (bulk modulus) sahip olduğunu göstermektedir. Bu değer, sırasıyla 160 GPa ve 442 GPa'lık hacim modülüne sahip olan çelik ve elmaştan daha yüksek olup, C₆₀'ın bu malzemelere kıyasla daha sert olduğunu ortaya koymaktadır (Ruoff ve Ruoff, 1991).

Fullerenler yalnızca karbon atomlarından oluşuyorsa katkısız, karbonun yanı sıra farklı atomlarla etkileşime giriyorsa katkılı olarak sınıflandırılmaktadır. Katkılı fullerenler; ekzohedral, endohedral ve hetero fulleren olmak üzere üç gruba ayrılır. Yapılan çalışmada, C₆₀ fulleren molekülünün potasyum ile katkılıandığında 18 K'de; rubidyum ile katkılıandığında ise 28 K'de kritik sıcaklığa ulaşarak süperiletken hale geçtiği gösterilmiştir (Holczer vd., 1991). Ayrıca, katkılı fulleren türlerinden olan ekzohedral (Rad ve Ayub, 2017; Kleinpeter ve Koch, 2009; Liu vd., 2023; Bibikov vd., 2022), endohedral (Yang vd., 2019; Wu vd., 2010; Manna ve Ghanty, 2012; Bloodworth ve Whitby, 2022; Li vd., 2022) ve hetero fulleren (Baei vd., 2018a; Koohi vd., 2015; Baei vd., 2018b; Koohi ve Bastami, 2023) yapılar üzerine çeşitli çalışmalar yürütülmüştür. Fullerenler, işlevsel hale getirildiklerinde çeşitli alanlarda kullanılabilmektedir.

Yapılan teorik çalışmada, karbon içeren bileşiklerin manyetik malzemelerin yerine kullanılabileceği ortaya konmuştur (Makarova ve Palacio, 2006; Garg vd., 2010). Bir diğer çalışmada ise fullerenlerin hidrojen depolama açısından elverişli özellikler sergilediği belirtilmiştir (Makarova ve Palacio, 2006; Yoon vd., 2007; Yoon vd., 2008). Bunlara ek olarak, literatürde fullerenlerin; tıp (Rad vd., 2020), güneş pili teknolojileri (Lee vd., 2018; Lopez vd., 2017; Collavini ve Delgado, 2018), kozmetik uygulamaları (Mousavi vd., 2016) ve optik sınırlayıcılar (Withers vd., 1997) gibi alanlarda kullanımlarına ilişkin çalışmalar bulunmaktadır.

2.2 Fullerenler ve Fosfor Katkıları

Fosfor elementi, oksijen (Garg vd., 2010; Yoon vd., 2007; Yoon vd., 2008; Rad vd., 2020; Lee vd., 2018; Lopez vd., 2017; Collavini ve Delgado, 2018; Mousavi vd., 2016; Withers vd., 1997; Rivera-Utrilla vd., 2011; Puri vd., 1970) ve azot (Jansen ve Van Bekkum, 1994; Hulicova vd., 2006; Boehm, 2008) gibi diğer hetero atomlarla karşılaştırıldığında daha az ilgi görmektedir. Literatürde fosfor içeren karbon bileşiklerine yönelik sınırlı sayıda çalışma bulunmaktadır (Bandosz ve Ania, 2006; Gimblett vd., 1989; Benzigar vd., 2018). Fosfor hetero atomunun karbon malzemelerdeki oksidasyonu engelleme özelliği, havacılık endüstrisi açısından kritik bir öneme sahiptir ve bu konu literatürde yer alan bir çalışmada ele alınmıştır (McKee, 2021). Literatürde ayrıca alev geciktirici formülasyonlar geliştirmek amacıyla farklı fosfor bileşikleriyle organik malzemeler arasındaki

etkileşimleri inceleyen çalışmalar da yer almaktadır (Bourbigot ve Flambard, 2002; Balabanovich vd., 2008; Gaan ve Sun, 2007). Bununla birlikte, fosfor içeren karbon malzemelerin diğer fonksiyonel özellikleri yeterli düzeyde araştırılmamıştır. Ancak fosforik asit aktivasyonu, hem endüstriyel uygulamalarda hem de karbon bazlı adsorban üretimine yönelik bilimsel çalışmalarda yaygın olarak kullanılmaktadır (Rodríguez-Reinoso, 2002; Marsh ve Rodríguez-Reinoso, 2006).

Mevcut literatür incelendiğinde, C_{20} fullerenerin fosfor (P) ve difosfor (P_2) ile bağlanmasına yönelik herhangi bir çalışmaya rastlanmamaktadır. Bu çalışmada, C_{20} fullerenerin fosfor (P) ve difosfor (P_2) ile bağlanması sonucu elde edilen yeni $(C_{20})_2P$ ve $(C_{20}P)_2$ moleküllerinin yapısal ve elektronik özellikleri teorik olarak incelenmiştir.

Hesaplanan moleküler yapıların geometri optimizasyonları ve toplam enerji hesaplamaları, genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) ile SIESTA kodu kullanılarak gerçekleştirilmiştir (Soler vd., 2002). Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımında (GGA) değiş-tokuş korelasyon enerji fonksiyoneli için Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) parametrizasyonu (Perdew vd., 1996), baz seti için ise polarize orbitaller ile genişletilmiş çift- ζ orbitalleri kullanıldı. Optimize geometriler için herhangi bir simetri kısıtlaması kullanılmamış olup, her bir atom üzerindeki tüm kuvvet bileşenleri $0.01 \text{ eV/\AA}$ değerinin altına düşene kadar eşlenik gradyan algoritması uygulanmıştır. Elektronik yapının belirlenmesi amacıyla, dolu moleküler orbitallerin en yüksek enerjili olanı (HOMO) ile boş moleküler orbitallerin en düşük enerjili olanı (LUMO) arasındaki fark alınarak, optimize edilmiş yapıların enerji aralığı HOMO – LUMO gap (GapHL) hesaplandı.

3. BULGULAR

3.1 Yapısal Özellikler

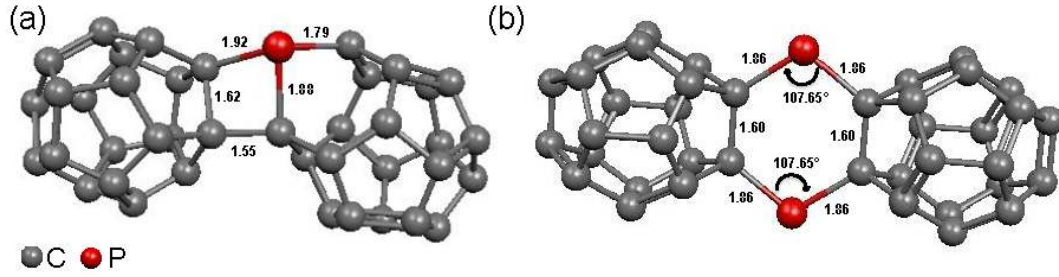
Optimize edilmiş moleküler yapılar için bağlanma enerjileri sırasıyla,

$$E_b = E[(C_{20})_2P] - 2xE(C_{20}) - E(P) \quad (1)$$

$$E_b = E[(C_{20}P)_2] - 2xE(C_{20}) - E(P_2) \quad (2)$$

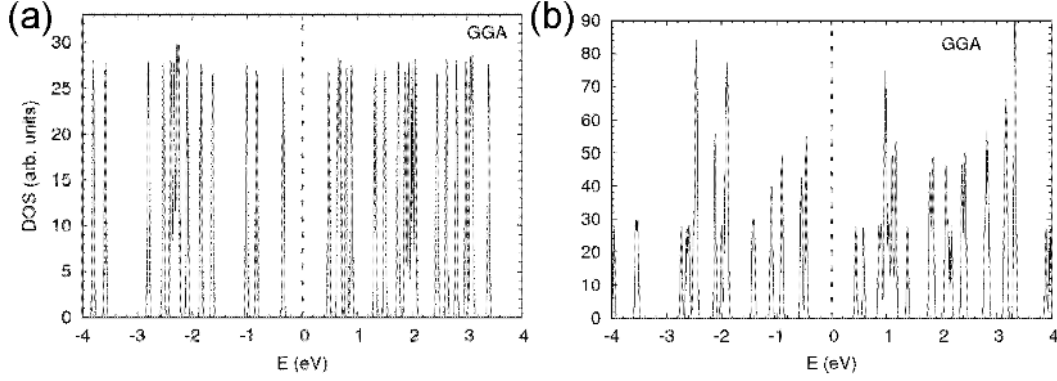
formülleri ile hesaplanmış olup burada;

$E[(C_{20})_2P]$ ve $E[(C_{20}P)_2]$ ifadeleri sırasıyla fosfor atomu ve fosfor molekülü ile katkılanmış fulleren yapıların toplam enerjisini, $E(C_{20})$ saf fullerenin, $E(P)$ fosfor atomunun ve $E(P_2)$ ise fosfor molekülünün toplam enerjisini temsil etmektedir. Yapılan hesaplamalarda $(C_{20})_2P$ ve $(C_{20}P)_2$ molekülleri için bağlanma enerjileri, sırasıyla -41.06 eV ve -21.78 eV olarak elde edilmiştir.



3.2 Elektronik Özellikler

Şekil 3.2.'de optimize edilen yapıların enerji aralığı, HOMO – LUMO aralığı (GapHL) olarak gösterilmektedir.



Şekil 3.2. Optimize Edilmiş (a) (C₂₀)₂P ve (b) (C₂₀P)₂ Moleküler Yapıları için Durum Yoğunluğu (DOS) Grafiği. Kesikli Çizgi, Fermi Enerji Seviyesine (E_F) Karşılık Gelmektedir.

Yapısal optimizasyon hesaplamaları, fosfor (P) ve difosfor (P₂) fullerenler arasına yerleştirilmeden önce saf fulleren C₂₀ yapısı için gerçekleştirilmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda, saf fulleren C₂₀ için GapHL değeri 0.61 eV olarak elde edilmiş olup, bu değer daha önce yapılan çalışma ile uyum içindedir (Kumar ve Rani, 2011).

4. TARTIŞMA

$(C_{20})_2P$ yapısının, $(C_{20}P)_2$ yapısına kıyasla daha yüksek bağlanma enerjisine sahip olması, fosfor ve karbon atomları arasında oluşan güçlü kovalent bağlarla açıklanabilir. Karbon ile fosfor arasındaki yüksek bağlanma enerjisinin nedeni, her iki elementin de kuvvetli kovalent bağlar oluşturabilme yeteneğine sahip olmasıdır. Karbon, dört değerlik elektronu sayesinde birçok atomla bağ kurabilir. Bu özellik, karbonun moleküller içinde kompleks yapılar oluşturmaya olanak sağlar.

Fosfor molekülleri ise yüksek enerjili bağlara sahiptir ve bu bağlar hidroliz sırasında önemli miktarda enerji açığa çıkarır. Karbon ve fosfor arasındaki etkileşimler, moleküler yapıların kararlılığını artırmakta ve bu enerjinin korunmasını sağlamaktadır. Bu nedenle her iki atomik yapının da bağlanma enerjisi yüksektir.

Şekil 3.1. (a), C_{20} fullerenlerinin bir fosfor atomu ile bağlanması sonucu oluşan $(C_{20})_2P$ yapısını göstermektedir. C_{20} molekülü on iki tane pentagondan oluşmakta iken, fullerenler arasına yerleştirilen fosfor atomu, fullerenlerden birinin yapısını değiştirmiştir. Şekil 3.1. (a)'da görüldüğü üzere, fullerenlerden biri on iki pentagon içeren bir yapıdan on pentagon ve iki hekzagon içeren bir yapıya dönüşmüştür. Bu durum, hekzagonal yapıların pentagonal yapılara kıyasla daha kararlı olmasından kaynaklanmaktadır. Dolayısıyla fosfor atomu daha kararlı olan hekzagonal yapıyı tercih etmektedir. Fosfor atomu, karbon atomlarıyla tek ve çift bağlar oluşturmak yerine üç karbon atomuyla tekli bağlar kurarak daha kararlı bir form olan hekzagonal yapı içerisinde bulunmayı tercih etmektedir. Bu durumda C – P bağ uzunlukları sırasıyla 1.79, 1.88 ve 1.92 Å olarak hesaplanmıştır. Elde edilen C – P bağ uzunlukları, literatürde yer alan fosfor – karbon bağ uzunlukları ile uyum içindedir (Ermolaev vd., 2010; Naumov vd., 2007).

Şekil 3.1. (a)'da görüldüğü üzere, üç karbon atomu ile fosfor atomu fullerenler arasında bir köprü görevi görmektedir. Belirtilen karbon atomları arasındaki bağ uzunlukları da şekilde verilmiştir. Fosfor atomu ile bağ oluşturmayan karbon atomu ile diğer iki karbon atomu arasındaki bağ uzunlukları sırasıyla 1,62 Å ve 1,55 Å olarak elde edilmiştir. Bahsi geçen üç karbon atomu, fulleren yapıdaki diğer karbon atomları ile ikişer bağ oluşturmaktadır ve bu bağların uzunlukları 1,51 Å ile 1,54 Å değerlerine artmaktadır. C – C arasındaki diğer bağ uzunlukları ise saf fulleren yapıdaki bağ uzunluklarıyla aynı değerde olup 1,42 Å ile 1,49 Å arasında değişmektedir.

(C₂₀P)₂ molekülünün yapısı Şekil 3.1. (b)'de gösterilmektedir. Fosfor atomları arasındaki P – P bağının kırılması sonucunda, her bir fosfor atomu fullerenler arasında yer alan karbon atomlarıyla bağ yaparak iki fulleren arasında hegzagonal bir yapı oluşmuştur. Bu durumda, fullerenlerin pentagonlarında herhangi bir değişim gözlenmemiştir. Şekilde görüldüğü üzere, C – P bağ uzunlukları 1.86 Å olarak hesaplanmış olup, bu değer önceki çalışmalarla da uyum içindedir (Ermolaev vd., 2010; Naumov vd., 2007). Fullerenler arasında oluşan hegzagonal yapıdaki C – C bağ uzunlukları 1.60 Å, bu karbon atomlarıyla bağ yapan diğer karbon atomları arasındaki bağ uzunlukları ise 1.55 Å değerlerine artmaktadır. Fulleren yapıdaki diğer C – C bağ uzunlukları ise 1.42 Å ile 1.49 Å aralığında değişmektedir. Ayrıca, C – P – C atomları arasındaki bağ açıları 107.6° olarak elde edilmiş ve bu değer şekil üzerinde de gösterilmiştir.

Şekil 3.2. (a)'da görüldüğü üzere, fosfor atomunun fulleren moleküllerinin arasına yerleştirilmesiyle oluşan (C₂₀)₂P yapısına ait GapHL değeri 0.83 eV olarak elde edilmiştir. Saf fulleren ile kıyaslandığında, GapHL değerinde artış gözlenmiştir. Bu durum, yapının yarıiletken özellik sergilediğini ortaya koymaktadır.

(C₂₀P)₂ yapısında fosfor atomlarının doğrusal olmayan bir şekilde konumlanması, elektron transferinin kolay bir şekilde gerçekleşmesini engellemekte olup Şekil 3.2. (b)'de görüldüğü üzere (C₂₀P)₂ yapısının GapHL değerinin 1.33 eV'a kadar yükselmesine neden olmaktadır. Bu durum, yapının yarıiletken özellik sergilediğini ortaya koymaktadır.

5. SONUÇ ve ÖNERİLER

Nanoteknoloji, maddenin atomik ve moleküler düzeyde kontrol edilmesiyle yeni malzeme, cihaz ve sistemlerin üretilmesini amaçlayan bir bilim ve mühendislik dalıdır. Nanosensörler, nanoteknolojinin en önemli ve dikkat çekici uygulamalarından biridir. Bu sensörler, nanometre ölçeğindeki malzemelerin sahip olduğu özgün özelliklerden yararlanarak çeşitli parametreleri yüksek hassasiyet ve hızla algılayabilmektedir.

Bu çalışmada nanoteknolojinin tarihsel gelişimi, temel kavramları ve nanosensörlerin sınıflandırılması ele alınmıştır. Ayrıca, kullanım amaçlarına ve yapılarına göre nanosensörlerin özellikleri, uygulama alanları ve bu alanlardaki gelişmeler incelenmiştir. Bu doğrultuda, nanosensör teknolojilerinde önemli bir yere sahip olan fullerenlerin özellikleri değerlendirilmiş ve fosfor katkılı fulleren türevlerinin yapısal ve elektronik açıdan sahip olduğu özgün özellikler üzerine incelemeler yapılmıştır.

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kullanılarak, iki C_{20} fullerenin fosfor (P) ve difosfor (P_2) ile birbirine bağlanmasıyla oluşan yeni moleküler yapıların yapısal ve elektronik özellikleri incelenmiştir. Optimize edilmiş yapılara ait bağlanma enerjileri, $(C_{20})_2P$ için -41.06 eV, $(C_{20}P)_2$ için ise -21.78 eV olarak elde edilmiştir. $(C_{20})_2P$ yapısında, fullerenlerin arasına yerleştirilen fosfor atomu, fullerenlerden birinin yapısını değiştirmektedir. Fullerenlerden birinin on iki pentagondan oluşan orijinal yapısını koruduğu, diğerinin ise iki hegzagon ve on pentagondan oluşan yeni bir yapıya dönüştüğü gözlenmiştir. Öte yandan, $(C_{20}P)_2$ yapısında fosfor atomları arasındaki bağ kırıldığı ve her bir fosfor atomunun karbon atomlarıyla bağ yaparak iki fulleren arasında hegzagonal bir yapı oluşturduğu belirlenmiştir. Elde edilen yeni molekülde, C – P – C atomları arasındaki bağ açısı 107.6° olarak hesaplanmıştır. Ayrıca, $(C_{20}P)_2$ molekülünde fullerenlerin pentagonal yapılarında herhangi bir değişim gözlenmemiştir. Elektronik yapı incelendiğinde, tek bir fosfor atomunun katkılanmasıyla elde edilen $(C_{20})_2P$ yapısına ait GapHL değeri 0.83 eV, iki fosfor atomu içeren $(C_{20}P)_2$ yapısına ait GapHL değeri ise 1.33 eV olarak hesaplanmıştır. Bu sonuçlar, her iki yapının da yarıiletken karaktere sahip olduğunu göstermektedir.

KAYNAKLAR

- Abubakre, O.K., Medupin, R.O., Akintunde, I.B., Jimoh, O.T., Abdulkareem, A.S., Muriana, R.A., James, J.A., Ukoba, K.O., Jen, T., ve Yoro, K.O. (2023). Carbon nanotube-reinforced polymer nanocomposites for sustainable biomedical applications: A review. *Journal of Science Advanced Materials and Devices*, 8(2), 100557. <https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2023.100557>
- Aihara, J. (1995). Bond Resonance Energy and Verification of the Isolated Pentagon Rule. *Journal of the American Chemical Society*, 117(14), 4130–4136. <https://doi.org/10.1021/ja00119a029>
- Ajayan, P.M., ve Zhou, O.Z. (2001). Applications of Carbon Nanotubes. *Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties and Applications* (s. 391–425) içinde. Springer.
- Akbari-Saatlu, M., Procek, M., Mattsson, C., Thungström, G., Nilsson, H., Xiong, W., Xu, B., Li, Y., ve Radamson, H.H. (2020). Silicon Nanowires for Gas Sensing: A Review. *Nanomaterials*, 10(11), 2215. <https://doi.org/10.3390/nano10112215>
- Akkaş, M.A. (2018). Nano iletişim teknolojilerinin biyomedikale katkısı. *Sakarya University Journal of Science*, 22(2), 516–528. <https://doi.org/10.16984/saufenbilder.290340>
- Ali, A. Hira Zafar M.Z., ul Haq, I., Phull, A.R., Ali, J.S., ve Hussain, A. (2016). Synthesis, characterization, applications, and challenges of iron oxide nanoparticles. *Nanotechnology, Science and Applications*, 9, 49–67. <https://doi.org/10.2147/NSA.S99986>
- Amaral, M., Abreu, C.S., Fernandes, A.J.S, Oliveira, F.J., Gomes, J.R., ve Silva, R.F. (2010). Nanodiamond-based tribosystems. *Surface and Coatings Technology*, 204, 1962–1969. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2009.11.015>
- Aoki, H., ve Dresselhaus, M.S. (2014). *Physics of Graphene*. Springer.
- Attia, N.F., Abd El-Monaem, E.M., El-Aqapa, H.G., Elashery, S.E., Eltaweil, A.S., El Kady, M., Khalifa, S.A., Hawash, H.B., ve El-Seedi, H.R. (2022). Iron oxide nanoparticles and their pharmaceutical applications. *Applied Surface Science Advances*, 11, 100284. <https://doi.org/10.1016/j.apsadv.2022.100284>
- Avouris, P. (2002). Molecular Electronics with Carbon Nanotubes. *Accounts of Chemical Research*, 35(12), 1026–1034. <https://doi.org/10.1021/ar010152e>
- Avouris, P., ve Xia, F. (2012). Graphene applications in electronics and photonics. *MRS Bulletin*, 37(12), 1225–1234. <https://doi.org/10.1557/mrs.2012.206>
- Bacakova, L., Broz, A., Liskova, J., Stankova, L., Potocky, S., ve Kromka, A. (2016). The Application of Nanodiamond in Biotechnology and Tissue Engineering. *Diamond and Carbon Composites and Nanocomposites* (s. 59–88) içinde. InTech.
- Bachtold, A., Hadley, P., Nakanishi, T., ve Dekker, C. (2001). Logic Circuits with Carbon Nanotube Transistors. *Science*, 294(5545), 1317–1320. <https://doi.org/10.1126/science.1065824>
- Baei, M.T., Koohi, M., ve Shariati, M. (2018). Characterization of C₂₀ fullerene and its isolated C₂₀-_nGe_n derivatives (n = 1-5) by alternating germanium atom(s) in equatorial position: A DFT survey. *Heteroatom Chemistry*, 29(1). <https://doi.org/10.1002/hc.21410>
- Baei, M.T., Koohi, M., ve Shariati, M. (2018). Structure, stability, and electronic properties of AlP nanocages evolved from the world's smallest caged fullerene C₂₀: A computational study at DFT. *Journal of Molecular Structure*, 1159, 118–134. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.01.022>

- Bakry, R., Vallant, R.M., Najam-ul-Haq, M., Rainer, M., Szabo, Z., Huck, C.W., ve Bonn, G.K. (2007). Medicinal applications of fullerenes. *International Journal of Nanomedicine*, 2, 639–649.
- Balabanovich, A., Pospiech, D., Korwitz, A., Häußler, L., ve Harnisch, C. (2008). Pyrolysis study of a phosphorus-containing aliphatic–aromatic polyester and its nanocomposites with layered silicates. *Polymer Degradation and Stability*, 94(3), 355–364. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2008.12.004>
- Bandosz, T., ve Ania, C. (2006). Chapter 4 Surface chemistry of activated carbons and its characterization. In *Interface science and technology*, 159–229. [https://doi.org/10.1016/s1573-4285\(06\)80013-x](https://doi.org/10.1016/s1573-4285(06)80013-x)
- Barrejón, M., ve Prato, M. (2021). Carbon Nanotube Membranes in Water Treatment Applications. *Advanced Materials Interfaces*, 9(1). <https://doi.org/10.1002/admi.202101260>
- Behura, S.K., Wang, C., Wen, Y., ve Berry, V. (2019). Graphene–semiconductor heterojunction sheds light on emerging photovoltaics. *Nature Photonics*, 13(5), 312–318. <https://doi.org/10.1038/s41566-019-0391-9>
- Benzigar, M.R., Talapaneni, S.N., Joseph, S., Ramadass, K., Singh, G., Scaranto, J., Ravon, U., Al-Bahily, K., ve Vinu, A. (2018). Recent advances in functionalized micro and mesoporous carbon materials: synthesis and applications. *Chemical Society Reviews*, 47(8), 2680–2721. <https://doi.org/10.1039/c7cs00787f>
- Bhakta, P., ve Barthunia, B. (2020). Fullerene and its applications: A review. *Journal of Indian Academy of Oral Medicine and Radiology*, 32(2), 159–163. https://doi.org/10.4103/jiaomr.jiaomr_191_19
- Bibikov, A.V., Nikolaev, A.V., Bodrenko, I.V., Borisyuk, P.V., ve Tkalya, E.V. (2022). Multiple locations of boron atoms in the exohedral and endohedral C₆₀ fullerene. *Physical Review. A/Physical Review, A*, 105(2). <https://doi.org/10.1103/physreva.105.022813>
- Binh, V.T., Garcia, N., ve Levanuyk, A. (1994). A mechanical nanosensor in the gigahertz range: where mechanics meets electronics. *Surface Science*, 301(1–3), L224–L228. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)91277-7](https://doi.org/10.1016/0039-6028(94)91277-7)
- Binnig, G., Quate, C.F., ve Gerber, C. (1986). Atomic Force Microscope. *Physical Review Letters*, 56(9), 930–933. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.56.930>
- Binnig, G., ve Rohrer, H. (1983). Scanning tunneling microscopy. *Surface Science*, 126(1–3), 236–244. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(83\)90716-1](https://doi.org/10.1016/0039-6028(83)90716-1)
- Bloodworth, S., ve Whitby, R.J. (2022). Synthesis of endohedral fullerenes by molecular surgery. *Communications Chemistry*, 5(1). <https://doi.org/10.1038/s42004-022-00738-9>
- Bochvar D.A., ve Gal'pern E.G. (1973). Hypothetical systems: carbododecahedron, s-icosahedron, and carbo-s-icosahedron. *Doklady Akademii Nauk*, 209, 610–612.
- Boehm, H. P. (2008). Catalytic Properties of Nitrogen-Containing Carbons. *Carbon Materials for Catalysis* (s. 219–265) içinde. John Wiley & Sons, Inc. <http://doi.org/10.1002/9780470403709>
- Bolskar, R.D. (2012). Fullerenes for Drug Delivery. *Encyclopedia of Nanotechnology* (s. 898–911) içinde. Springer. https://doi.org/10.1007/978-90-481-9751-4_76
- Bosi, S., Da Ros, T., Spalluto, G., ve Prato, M. (2003). Fullerene derivatives: an attractive tool for biological applications. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 38(11–12), 913–923. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2003.09.005>

- Bourbigot, S., ve Flambard, X. (2002). Heat resistance and flammability of high performance fibres: A review. *Fire and Materials*, 26(4–5), 155–168. <https://doi.org/10.1002/fam.799>
- Centi, G., ve Perathoner, S. (2011). Carbon Nanotubes for Sustainable Energy Applications. *ChemSusChem*, 4(7), 913–925. <https://doi.org/10.1002/cssc.201100084>
- Chen, P., Wu, X., Sun, X., Lin, J., Ji, W., ve Tan, K.L. (1999). Electronic Structure and Optical Limiting Behavior of Carbon Nanotubes. *Physical Review Letters*, 82(12), 2548–2551. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.82.2548>
- Chen, X., ve Zhang, W. (2017). Diamond nanostructures for drug delivery, bioimaging, and biosensing. *Chemical Society Reviews*, 46, 734–760. <https://doi.org/10.1039/C6CS00109B>
- Cheng, C., Zhang, R., Wang, J., Zhang, Y., Wen, C., Tan, Y., ve Yang, M. (2019). An ultrasensitive and selective fluorescent nanosensor based on porphyrinic metal–organic framework nanoparticles for Cu²⁺ detection. *The Analyst*, 145(3), 797–804. <https://doi.org/10.1039/c9an02231g>
- Chung, C., Kim, Y., Shin, D., Ryoo, S., Hong, B.H., ve Min, D. (2013). Biomedical Applications of Graphene and Graphene Oxide. *Accounts of Chemical Research*, 46(10), 2211–2224. <https://doi.org/10.1021/ar300159f>
- Collavini, S., ve Delgado, J.L. (2018). Fullerenes: the stars of photovoltaics. *Sustainable Energy & Fuels*, 2(11), 2480–2493. <https://doi.org/10.1039/c8se00254a>
- Consales, M., Cutolo, A., Penza, M., Aversa, P., Giordano, M., ve Cusano, A. (2008). Fiber Optic Chemical Nanosensors Based on Engineered Single-Walled Carbon Nanotubes: A Review. *Journal of Sensors*, 2008(1). <https://doi.org/10.1155/2008/936074>
- Coro, J., Suárez, M., Silva, L.S., Eguiluz, K.I., ve Salazar-Banda, G.R. (2016). Fullerene applications in fuel cells: A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(40), 17944–17959. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.08.043>
- Daraee, H., Eatemadi, A., Abbasi, E., Fekri Aval, S., Kouhi, M., ve Akbarzadeh, A. (2016). Application of gold nanoparticles in biomedical and drug delivery. *Artificial Cells, Nanomedicine, and Biotechnology*, 44, 410–422. <https://doi.org/10.3109/21691401.2014.955107>
- Das, R., Ali, M.E., Hamid, S.B.A., Ramakrishna, S., ve Chowdhury, Z.Z. (2014). Carbon nanotube membranes for water purification: A bright future in water desalination. *Desalination*, 336, 97–109. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2013.12.026>
- Deng, L., Xie, S., ve Gao, F. (2017). Fullerene-Based Materials for Photovoltaic Applications: Toward Efficient, Hysteresis-Free, and Stable Perovskite Solar Cells. *Advanced Electronic Materials*, 4(10). <https://doi.org/10.1002/aelm.201700435>
- Dreaden, E.C., Alkilany, A.M., Huang, X., Murphy, C.J., ve El-Sayed, M.A. (2012). The golden age: gold nanoparticles for biomedicine. *Chem. Soc. Rev.*, 41, 2740–2749. <https://doi.org/10.1039/C1CS15237H>
- Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G., ve Eklund, P.C. (1996). *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. Academic Press.
- Drexler, E. (1986). *Engines of Creation: The Coming Era of Nanotechnology*. Anchor Press.
- Ebbesen, T.W. (1994). Carbon Nanotubes. *Annual Review of Materials Science*, 24(1), 235–264. <https://doi.org/10.1146/annurev.ms.24.080194.001315>

- Eigler, D.M., ve Schweizer, E.K. (1990). Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope. *Nature*, 344, 524–526. <https://doi.org/10.1038/344524a0>
- Erkoç, Ş. (2007). *Nanobilim ve Nanoteknoloji* (2. bs.). ODTÜ Yayıncılık.
- Ermolaev, V., Miluykov, V., Rizvanov, I., Krivolapov, D., Zvereva, E., Katsyuba, S., Sinyashin, O., ve Schmutzler, R. (2010). Phosphonium ionic liquids based on bulky phosphines: synthesis, structure and properties. *Dalton Transactions*, 39(23), 5564. <https://doi.org/10.1039/b924636c>
- Fang, H., Li, X., Song, S., Xu, Y., ve Zhu, J. (2008). Fabrication of slantingly-aligned silicon nanowire arrays for solar cell applications. *Nanotechnology*, 19(25), 255703. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/19/25/255703>
- Faraday, M. (1857). X. The Bakerian Lecture. —Experimental relations of gold (and other metals) to light. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 147, 145–181. <https://doi.org/10.1098/rstl.1857.0011>
- Feynman, R.P. (1960). There's Plenty of Room at the Bottom. *Engineering and Science*, 23, 22–36.
- Fowler, P.W., ve Manolopoulos, D.E. (2006). *An Atlas of Fullerenes*. Dover.
- Frackowiak, E., ve Béguin, F. (2002). Electrochemical storage of energy in carbon nanotubes and nanostructured carbons. *Carbon*, 40(10), 1775–1787. [https://doi.org/10.1016/s0008-6223\(02\)00045-3](https://doi.org/10.1016/s0008-6223(02)00045-3)
- Friedrich, R.P., Cicha, I., ve Alexiou, C. (2021). Iron Oxide Nanoparticles in Regenerative Medicine and Tissue Engineering. *Nanomaterials*, 11, 2337. <https://doi.org/10.3390/nano11092337>
- Gaan, S., ve Sun, G. (2007). Effect of phosphorus flame retardants on thermo-oxidative decomposition of cotton. *Polymer Degradation and Stability*, 92(6), 968–974. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2007.03.009>
- Garg, I., Sharma, H., Kapila, N., Dharamvir, K., ve Jindal, V.K. (2010). Transition metal induced magnetism in smaller fullerenes (C_n for $n \leq 36$). *Nanoscale*, 3(1), 217–224. <https://doi.org/10.1039/c0nr00475h>
- Geim, A.K. (2009). Graphene: Status and Prospects. *Science*, 324(5934), 1530–1534. <https://doi.org/10.1126/science.1158877>
- Geim, A.K., ve Novoselov, K.S. (2007). The rise of graphene. *Nature Materials*, 6(3), 183–191. <https://doi.org/10.1038/nmat1849>
- Ghavanloo, E., Rafii-Tabar, H., Kausar, A., Giannopoulos, G.I., ve Fazelzadeh, S.A. (2022). Experimental and computational physics of fullerenes and their nanocomposites: Synthesis, thermo-mechanical characteristics and nanomedicine applications. *Physics Reports*, 996, 1–116. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2022.10.003>
- Giacalone, F., ve Martín, N. (2006). Fullerene Polymers: Synthesis and Properties. *Chemical Reviews*, 106(12), 5136–5190. <https://doi.org/10.1021/cr068389h>
- Giljohann, D.A., Seferos, D.S., Daniel, W.L., Massich, M.D., Patel, P.C., ve Mirkin, C.A. (2010). Gold Nanoparticles for Biology and Medicine. *Angewandte Chemie International Edition*, 49, 3280–3294. <https://doi.org/10.1002/anie.200904359>
- Gimblett, F.G.R., Freeman, J.J., ve Sing, K.S.W. (1989). Element-containing carbon fibres: recent USSR/Eastern European research in fibre technology. *Journal of Materials Science*, 24(11), 3799–3812. <https://doi.org/10.1007/bf01168939>
- Gogotsi, Y. (2006). *Carbon Nanomaterials*. CRC Press.

- Goodarzi, S., Da Ros, T., Conde, J., Sefat, F., ve Mozafari, M. (2017). Fullerene: biomedical engineers get to revisit an old friend. *Materials Today*, 20(8), 460–480. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2017.03.017>
- Grausova, L., Bacakova, L., Kromka, A., Potocky, S., Vanecek, M., Nesladek, M., Lisa, V. (2009). Nanodiamond as Promising Material for Bone Tissue Engineering. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 9(6). 3524–3534. <https://doi.org/10.1166/jnn.2009.NS26>
- Gupta, N., Gupta, S.M., ve Sharma, S.K. (2019). Carbon nanotubes: synthesis, properties and engineering applications. *Carbon Letters*, 29(5), 419–447. <https://doi.org/10.1007/s42823-019-00068-2>
- He, H., Pham-Huy, L.A., Dramou, P., Xiao, D., Zuo, P., ve Pham-Huy, C. (2013). Carbon Nanotubes: Applications in Pharmacy and Medicine. *BioMed Research International*, 2013, 1–12. <https://doi.org/10.1155/2013/578290>
- Heath, J.R., O'Brien, S.C., Zhang, Q., Liu, Y., Curl, R.F., Tittel, F.K., ve Smalley, R.E. (1985). Lanthanum complexes of spheroidal carbon shells. *Journal of the American Chemical Society*, 107(25), 7779–7780. <https://doi.org/10.1021/ja00311a102>
- Hirsch, A. (2002). Functionalization of single-walled carbon nanotubes. *Angewandte Chemie International Edition*, 41, 1853–1859.
- Ho, D. (2010). *Nanodiamonds: Applications in Biology and Nanoscale Medicine*. Springer.
- Holczer, K., Klein, O., Huang, S., Kaner, R.B., Fu, K., Whetten, R.L., ve Diederich, F. (1991). Alkali-Fulleride Superconductors: Synthesis, Composition, and Diamagnetic Shielding. *Science*, 252(5009), 1154–1157. <https://doi.org/10.1126/science.252.5009.1154>
- Huang, L., Wang, Z., Zhang, J., Pu, J., Lin, Y., Xu, S., Shen, L., Chen, Q., ve Shi, W. (2014). Fully Printed, Rapid-Response Sensors Based on Chemically Modified Graphene for Detecting NO₂ at Room Temperature. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 6(10), 7426–7433. <https://doi.org/10.1021/am500843p>
- Hughes, K.J., Iyer, K.A., Bird, R.E., Ivanov, J., Banerjee, S., Georges, G., ve Zhou, Q.A. (2024). Review of Carbon Nanotube Research and Development: Materials and Emerging Applications. *ACS Applied Nano Materials*, 7(16), 18695–18713. <https://doi.org/10.1021/acsanm.4c02721>
- Hui, Y.Y., Cheng, C-L., ve Chang, H-C. (2010). Nanodiamonds for optical bioimaging. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43, 374021. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/43/37/374021>
- Hulicova, D., Kodama, M., ve Hatori, H. (2006). Electrochemical Performance of Nitrogen-Enriched Carbons in Aqueous and Non-Aqueous Supercapacitors. *Chemistry of Materials*, 18(9), 2318–2326. <https://doi.org/10.1021/cm060146i>
- Iijima, S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 354, 56–58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>
- Jansen, R., ve Van Bakkum, H. (1994). Amination and ammoxidation of activated carbons. *Carbon*, 32(8), 1507–1516. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(94\)90146-5](https://doi.org/10.1016/0008-6223(94)90146-5)
- Jensen, A.W., Wilson, S.R., ve Schuster, D.I. (1996). Biological applications of fullerenes. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 4(6), 767–779. [https://doi.org/10.1016/0968-0896\(96\)00081-8](https://doi.org/10.1016/0968-0896(96)00081-8)
- Jiang, Z., Zhao, Y., Lu, X., ve Xie, J. (2020). Fullerenes for rechargeable battery applications: Recent developments and future perspectives. *Journal of Energy Chemistry*, 55, 70–79. <https://doi.org/10.1016/j.jchem.2020.06.065>

- Kaur, R., ve Badea, I. (2013). Nanodiamonds as novel nanomaterials for biomedical applications: drug delivery and imaging systems. *International Journal of Nanomedicine*, 8, 203–220. <https://doi.org/10.2147/IJN.S37348>
- Kausar, A. (2018). Nanodiamond: a multitasking material for cutting edge solar cell application. *Materials Research Innovations*, 22, 302–314. <https://doi.org/10.1080/14328917.2017.1317448>
- Kausar, A. (2024). Breakthroughs of fullerene in optoelectronic devices—An overview. *Hybrid Advances*, 6,
- Kazemzadeh, H., ve Mozafari, M. (2019). Fullerene-based delivery systems. *Drug Discovery Today*, 24(3), 898–905. <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2019.01.013>
- Khanna, V.K. (2021). *Nanosensors Physical, Chemical and Biological* (2. bs.). CRC Press.
- Khlebtsov, N.G., ve Dykman, L.A. (2009). Optical properties and biomedical applications of plasmonic nanoparticles. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(1), 1–35. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2009.07.012>
- Kleinpeter, E., ve Koch, A. (2009). Probing the exohedral magnetic properties of C_{20} derivatives by through space NMR shieldings (TSNMRs). *Journal of Molecular Structure THEOCHEM*, 939(1–3), 1–8. <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2009.09.018>
- Koohi, M., Kassaei, M.Z., Ghavami, M., Haerizade, B.N., ve Ahmadi, A.A. (2015). $C_{20-n}Ge_n$ heterofullerenes ($n = 5-10$) on focus: a density functional perspective. *Monatshefte Für Chemie - Chemical Monthly*, 146(9), 1409–1417. <https://doi.org/10.1007/s00706-014-1388-1>
- Koohi, M., ve Bastami, H. (2023). Investigation of Ti—B nanoheterofullerenes evolved from C_{20} nanocage through DFT. *Chemical Review and Letters*, 6, 223–234. <http://doi.org/10.22034/CRL.2023.392356.1222>
- Krajczewski, J., Kołataj, K., ve Kudelski, A. (2017). Plasmonic nanoparticles in chemical analysis. *RSC Advances*, 7(28), 17559–17576. <https://doi.org/10.1039/c7ra01034f>
- Kranz, C. (2019). *Carbon-Based Nanosensor Technology*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-11864-8>
- Kroto, H.W., Heath, J.R., O'Brien, S.C., Curl, R.F., ve Smalley, R.E. (1985). C_{60} : Buckminsterfullerene. *Nature*, 318, 162–163. <https://doi.org/10.1038/318162a0>
- Kuila, T., Bose, S., Mishra, A.K., Khanra, P., Kim, N.H., ve Lee, J.H. (2012). Chemical functionalization of graphene and its applications. *Progress in Materials Science*, 57(7), 1061–1105. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2012.03.002>
- Kumar, D., ve Sharma, R. (1998). Advances in conductive polymers. *European Polymer Journal*, 34(8), 1053–1060. [https://doi.org/10.1016/s0014-3057\(97\)00204-8](https://doi.org/10.1016/s0014-3057(97)00204-8)
- Kumar, R., ve Rani, A. (2011). Structure and electronic properties of $H_n@C_{20}$ molecule. *Physica B: Condensed Matter*, 406(5), 1173–1177. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2010.12.076>
- Kumar, V., ve Guleria, P. (2020). Application of DNA-Nanosensor for Environmental Monitoring: Recent Advances and Perspectives. *Current Pollution Reports*, 10(4), 765–785. <https://doi.org/10.1007/s40726-020-00165-1>
- Kwon, Y., Berber, S., ve Tománek, D. (2004). Thermal Contraction of Carbon Fullerenes and Nanotubes. *Physical Review Letters*, 92(1). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.92.015901>
- Langa, F., ve Nierengarten, J.-F. (2012). *Fullerenes: Principles and Applications*. RSC Publishing.

- Lee, H.K.H., Telford, A.M., Röhr, J.A., Wyatt, M.F., Rice, B., Wu, J., De Castro Maciel, A., Tuladhar, S.M., Speller, E., McGettrick, J., Searle, J.R., Pont, S., Watson, T., Kirchartz, T., Durrant, J.R., Tsoi, W.C., Nelson, J., ve Li, Z. (2018). The role of fullerenes in the environmental stability of polymer:fullerene solar cells. *Energy & Environmental Science*, 11(2), 417–428. <https://doi.org/10.1039/c7ee02983g>
- Lee, J-Y., ve Lim, D-S. (2004). Tribological behavior of PTFE film with nanodiamond. *Surface and Coatings Technology*, 188-189, 534–538. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2004.07.102>
- Leitao, D.C., Silva, A.V., Paz, E., Ferreira, R., Cardoso, S., ve Freitas, P.P. (2015). Magnetoresistive nanosensors: controlling magnetism at the nanoscale. *Nanotechnology*, 27(4), 045501. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/27/4/045501>
- Li, M., Zhao, R., Dang, J., ve Zhao, X. (2022). Theoretical study on the stabilities, electronic structures, and reaction and formation mechanisms of fullerenes and endohedral metallofullerenes. *Coordination Chemistry Reviews*, 471, 214762. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2022.214762>
- Lim, T., ve Ramakrishna, S. (2006). A Conceptual Review of Nanosensors. *Zeitschrift Für Naturforschung A*, 61(7–8), 402–412. <https://doi.org/10.1515/zna-2006-7-815>
- Liu, C., ve Cheng, H. (2005). Carbon nanotubes for clean energy applications. *Journal of Physics D Applied Physics*, 38(14), R231–R252. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/38/14/r01>
- Liu, J., Cui, L., ve Losic, D. (2013). Graphene and graphene oxide as new nanocarriers for drug delivery applications. *Acta Biomaterialia*, 9(12), 9243–9257. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2013.08.016>
- Liu, J., He, H., Xiao, D., Yin, S., Ji, W., Jiang, S., Luo, D., Wang, B., ve Liu, Y. (2018). Recent Advances of Plasmonic Nanoparticles and their Applications. *Materials*, 11(10), 1833. <https://doi.org/10.3390/ma11101833>
- Liu, M., Han, Y., Cheng, Y., Zhao, X., ve Zheng, H. (2023). Exploring exohedral functionalization of fullerene with automation and Neural Network Potential. *Carbon*, 213, 118180. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2023.118180>
- Lopez, S.A., Sanchez-Lengeling, B., De Goes Soares, J., ve Aspuru-Guzik, A. (2017). Design Principles and Top Non-Fullerene Acceptor Candidates for Organic Photovoltaics. *Joule*, 1(4), 857–870. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2017.10.006>
- Makarova, T., ve Palacio, F. (2006). Carbon Based Magnetism: An Overview of the Magnetism of Metal Free Carbon-Based Compounds and Materials. Elsevier.
- Manna, D., ve Ghanty, T.K. (2012). Theoretical Prediction of Icosahedral U@C₂₀ and Analogous Systems with High HOMO–LUMO Gap. *The Journal of Physical Chemistry C*, 116(31), 16716–16725. <https://doi.org/10.1021/jp302138p>
- Marsh, H., ve Rodríguez-Reinoso, F. (2006). Activated Carbon. Elsevier.
- McKee, D.W. (2021). Oxidation Protection of Carbon Materials. *Chemistry & Physics of Carbon* (s. 173–232) içinde. Marcel Dekker.
- Mikhailova, E.O. (2021). Gold Nanoparticles: Biosynthesis and Potential of Biomedical Application. *Journal of Functional Biomaterials*, 12, 70. <https://doi.org/10.3390/jfb12040070>
- Milan, J., Niemczyk, K., ve Liśkiewicz, M. (2022). Treasure on the Earth – Gold Nanoparticles and Their Biomedical Applications. *Materials*, 15, 3355. <https://doi.org/10.3390/ma15093355>

- Miller, B.S., Bezinge, L., Gliddon, H.D., Huang, D., Dold, G., Gray, E.R., Heaney, J., Dobson, P.J., Nastouli, E., Morton, J.J.L., ve McKendry, R.A. (2020). Spin-enhanced nanodiamond biosensing for ultrasensitive diagnostics. *Nature*, 587, 588–593. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2917-1>
- Mochalin, V.N., Shenderova, O., Ho, D., ve Gogotsi, Y. (2012). The properties and applications of nanodiamonds. *Nature Nanotechnology*, 7, 11–23. <https://doi.org/10.1038/nnano.2011.209>
- Mochalin, V.N., ve Gogotsi, Y. (2015). Nanodiamond-polymer composites. *Diamond and Related Materials*, 58, 161–171. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2015.07.003>
- Mondal, K., Balasubramaniam, B., Gupta, A., Lahcen, A.A., ve Kwiatkowski, M. (2019). Carbon Nanostructures for Energy and Sensing Applications. *Journal of Nanotechnology*, 2019, 1–3. <https://doi.org/10.1155/2019/1454327>
- Morales, J., Pawle, R.H., Akkilic, N., Luo, Y., Xavierselvan, M., Albokhari, R., Calderon, I.A.C., Selfridge, S., Minns, R., Takiff, L., Mallidi, S., ve Clark, H.A. (2019). DNA-Based Photoacoustic Nanosensor for Interferon Gamma Detection. *ACS Sensors*, 4(5), 1313–1322. <https://doi.org/10.1021/acssensors.9b00209>
- Mousavi, S.Z., Nafisi, S., ve Maibach, H.I. (2016). Fullerene nanoparticle in dermatological and cosmetic applications. *Nanomedicine Nanotechnology Biology and Medicine*, 13(3), 1071–1087. <https://doi.org/10.1016/j.nano.2016.10.002>
- Mousavi, S.Z., Nafisi, S., ve Maibach, H.I. (2016). Fullerene nanoparticle in dermatological and cosmetic applications. *Nanomedicine Nanotechnology Biology and Medicine*, 13(3), 1071–1087. <https://doi.org/10.1016/j.nano.2016.10.002>
- Munawar, A., Ong, Y., Schirhagl, R., Tahir, M.A., Khan, W.S., ve Bajwa, S.Z. (2019). Nanosensors for diagnosis with optical, electric and mechanical transducers. *RSC Advances*, 9(12), 6793–6803. <https://doi.org/10.1039/c8ra10144b>
- Mutluer, K., Akkaş, M.A., ve Demiray, F. (2025). Innovations and Applications in Nanosensor Technologies: A Brief Review. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 17(2), 02001-1–02001-10. [https://doi.org/10.21272/jnep.17\(2\).02001](https://doi.org/10.21272/jnep.17(2).02001)
- Nambiar, S., ve Yeow, J.T. (2010). Conductive polymer-based sensors for biomedical applications. *Biosensors and Bioelectronics*, 26(5), 1825–1832. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2010.09.046>
- Namsheer, K., ve Rout, C.S. (2021). Conducting polymers: a comprehensive review on recent advances in synthesis, properties and applications. *RSC Advances*, 11(10), 5659–5697. <https://doi.org/10.1039/d0ra07800j>
- National Nanotechnology Initiative: Leading to the Next Industrial Revolution. (2000). The White House Office of the Press Secretary. Erişim Linki: https://clintonwhitehouse4.archives.gov/WH/New/html/20000121_4.html
- Naumov, V.A., Naumov, A.V., ve Samdal, S. (2007). Molecular structure of diphenylchlorophosphine in the gas phase. *Russian Journal of General Chemistry*, 77(4), 553–560. <https://doi.org/10.1134/s1070363207040081>
- Neto, A.H.C., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S., ve Geim, A.K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1), 109–162. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.81.109>
- Nezakati, T., Seifalian, A., Tan, A., ve Seifalian, A.M. (2018). Conductive Polymers: Opportunities and Challenges in Biomedical Applications. *Chemical Reviews*, 118(14), 6766–6843. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00275>

- Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, I.V., ve Firsov, A.A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696), 666–669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- Nunn, N., Torelli, M., McGuire, G., ve Shenderova, O. (2017). Nanodiamond: A high impact nanomaterial. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 21, 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2016.06.008>
- Olabi, A., Abdelkareem, M.A., Wilberforce, T., ve Sayed, E.T. (2020). Application of graphene in energy storage device – A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 135, 110026. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110026>
- Osawa, E. (2002). *Perspectives of Fullerene Nanotechnology*. Kluwer Academic Publishers. <https://doi.org/10.1007/978-94-010-9598-3>
- Palacios, T., Hsu, A., ve Wang, H. (2010). Applications of graphene devices in RF communications. *IEEE Communications Magazine*, 48(6), 122–128. <https://doi.org/10.1109/mcom.2010.5473873>
- Papageorgiou, D.G., Kinloch, I.A., ve Young, R.J. (2017). Mechanical properties of graphene and graphene-based nanocomposites. *Progress in Materials Science*, 90, 75–127. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.07.004>
- Partha, R., ve Conyers, J. (2009). Biomedical applications of functionalized fullerene-based nanomaterials. *International Journal of Nanomedicine*, 261. <https://doi.org/10.2147/ijn.s5964>
- Passeri, D., Rinaldi, F., Ingallina, C., Carafa M., Rossi, M., Terranova, M., ve Marianecci, C. (2015). Biomedical Applications of Nanodiamonds: An Overview. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 15(2), 972–988. <https://doi.org/10.1166/jnn.2015.9734>
- Peng, L., Zhang, Z., ve Qiu, C. (2019). Carbon nanotube digital electronics. *Nature Electronics*, 2(11), 499–505. <https://doi.org/10.1038/s41928-019-0330-2>
- Perdew, J.P., Burke, K., ve Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>
- Perdomo, S.A., Marmolejo-Tejada, J.M., ve Jaramillo-Botero, A. (2021). Review—Bio-Nanosensors: Fundamentals and Recent Applications. *Journal of the Electrochemical Society*, 168(10), 107506. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac2972>
- Peretz, S., ve Regev, O. (2012). Carbon nanotubes as nanocarriers in medicine. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 17(6), 360–368. <https://doi.org/10.1016/j.cocis.2012.09.001>
- Perreault, F., De Faria, A.F., ve Elimelech, M. (2015). Environmental applications of graphene-based nanomaterials. *Chemical Society Reviews*, 44(16), 5861–5896. <https://doi.org/10.1039/c5cs00021a>
- Pop, E., Varshney, V., ve Roy, A.K. (2012). Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications. *MRS Bulletin*, 37(12), 1273–1281. <https://doi.org/10.1557/mrs.2012.203>
- Popov, V. (2003). Carbon nanotubes: properties and application. *Materials Science and Engineering R Reports*, 43(3), 61–102. <https://doi.org/10.1016/j.mser.2003.10.001>
- Prasai, D., Tuberquia, J.C., Harl, R.R., Jennings, G.K., ve Bolotin, K.I. (2012). Graphene: Corrosion-Inhibiting Coating. *ACS Nano*, 6(2), 1102–1108. <https://doi.org/10.1021/nn203507y>

- Prato, M. (1999). Fullerene Materials. Fullerenes and Related Structures (s. 173–187) içinde. Springer.
- Prinzbach, H., Weiler, A., Landenberger, P., Wahl, F., Wörth, J., Scott, L.T., Gelmont, M., Olevano, D., ve Issendorff, B.V. (2000). Gas-phase production and photoelectron spectroscopy of the smallest fullerene, C₂₀. *Nature*, 407(6800), 60–63. <https://doi.org/10.1038/35024037>
- Puri, B.R. (1970). Surface complexes on carbons. *Chemistry and Physics of Carbon Vol. 6* (s. 191–282) içinde. Marcel Dekker.
- Rabiee, N., Fatahi, Y., Ahmadi, S., Abbariki, N., Ojaghi, A., Rabiee, M., Radmanesh, F., Dinarvand, R., Bagherzadeh, M., Mostafavi, E., Ashrafizadeh, M., Makvandi, P., ve Lima, E.C. (2022). Bioactive hybrid metal-organic framework (MOF)-based nanosensors for optical detection of recombinant SARS-CoV-2 spike antigen. *Science of The Total Environment*, 825. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.153902>
- Rad, A.S., Ardjmand, M., Esfahani, M.R., ve Khodashenas, B. (2020). DFT calculations towards the geometry optimization, electronic structure, infrared spectroscopy and UV–vis analyses of Favipiravir adsorption on the first-row transition metals doped fullerenes; a new strategy for COVID-19 therapy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 247, 119082. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.119082>
- Rad, A.S., ve Ayub, K. (2017). Nonlinear optical and electronic properties of Cr-, Ni-, and Ti-substituted C₂₀ fullerenes: A quantum-chemical study. *Materials Research Bulletin*, 97, 399–404. <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2017.09.036>
- Rao, C.N.R., Biswas, K., Subrahmanyam, K.S., ve Govindaraj, A. (2009). Graphene, the new nanocarbon. *Journal of Materials Chemistry*, 19(17), 2457. <https://doi.org/10.1039/b815239j>
- Rao, C.N.R., ve Sood A.K. (2013). *Graphene: Synthesis, Properties, and Phenomena*. Wiley-VCH.
- Raychowdhury, A., ve Roy, K. (2007). Carbon Nanotube Electronics: Design of High-Performance and Low-Power Digital Circuits. *IEEE Transactions on Circuits and Systems I Regular Papers*, 54(11), 2391–2401. <https://doi.org/10.1109/tcsi.2007.907799>
- Rivera-Utrilla, J., Sánchez-Polo, M., Gómez-Serrano, V., Álvarez, P., Alvim-Ferraz, M., ve Dias, J. (2011). Activated carbon modifications to enhance its water treatment applications. An overview. *Journal of Hazardous Materials*, 187(1–3), 1–23. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2011.01.033>
- Rodríguez-Reinoso, F. (2002). Production and Applications of Activated Carbons. *Handbook of Porous Solids* (s. 1766–1827) içinde. Wiley.
- Ruoff, R.S., ve Ruoff, A.L. (1991). The bulk modulus of C₆₀ molecules and crystals: A molecular mechanics approach. *Applied Physics Letters*, 59(13), 1553–1555. <https://doi.org/10.1063/1.106280>
- Saha, K., Agasti, S.S., Kim, C., Li, X., ve Rotello, V.M. (2012). Gold Nanoparticles in Chemical and Biological Sensing. *Chemical Reviews*, 112, 2739–2779. <https://doi.org/10.1021/cr2001178>
- Saito R., Dresselhaus, M.S., ve Dresselhaus, G. (1999). *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press.
- Saito, Y., Uemura, S., ve Hamaguchi, K. (1998). Cathode Ray Tube Lighting Elements with Carbon Nanotube Field Emitters. *Japanese Journal of Applied Physics*, 37(3B), L346. <https://doi.org/10.1143/jjap.37.L346>

- Sangaiya, P., ve Jayaprakash, R. (2018). A Review on Iron Oxide Nanoparticles and Their Biomedical Applications. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 31, 3397–3413. <https://doi.org/10.1007/s10948-018-4841-2>
- Sangoi, R.N. (2003). Nanocomposites based on carbon nanotubes and poly (3-alkylthiophenes) for sensor and charge storage applications. *Yüksek Lisans Tezi*, Rochester Institute of Technology.
- Sardar, R., Funston, A.M., Mulvaney, P., ve Murray, R.W. (2009). Gold Nanoparticles: Past, Present, and Future. *Langmuir*, 25 (24), 13840–13851. <https://doi.org/10.1021/la9019475>
- Sasaki, K., Shi, Z., Kopelman, R., ve Masuhara, H. (1996). Three-Dimensional pH Microprobing with an Optically-Manipulated Fluorescent Particle. *Chemistry Letters*, 25(2), 141–142. <https://doi.org/10.1246/cl.1996.141>
- Savk, A., Özdil, B., Demirkan, B., Nas, M.S., Calimli, M.H., Alma, M.H., Inamuddin, N., Asiri, A.M., ve Şen, F. (2019). Multiwalled carbon nanotube-based nanosensor for ultrasensitive detection of uric acid, dopamine, and ascorbic acid. *Materials Science and Engineering C*, 99, 248–254. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2019.01.113>
- Schmidt, V., Wittemann, J.V., Senz, S., ve Gösele, U. (2009). Silicon Nanowires: A Review on Aspects of their Growth and their Electrical Properties. *Advanced Materials*, 21(25–26), 2681–2702. <https://doi.org/10.1002/adma.200803754>
- Schmidt, V., Wittemann, J.V., ve Gösele, U. (2010). Growth, Thermodynamics, and Electrical Properties of Silicon Nanowires. *Chemical Reviews*, 110(1), 361–388. <https://doi.org/10.1021/cr900141g>
- Seymour, R.B. (1981). *Conductive Polymers*. Plenum Press.
- Shahil, K.M., ve Balandin, A.A. (2012). Thermal properties of graphene and multilayer graphene: Applications in thermal interface materials. *Solid State Communications*, 152(15), 1331–1340. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.04.034>
- Shen, H., Zhang, L., Liu, M., ve Zhang, Z. (2012). Biomedical Applications of Graphene. *Theranostics*, 2(3), 283–294. <https://doi.org/10.7150/thno.3642>
- Sherigara, B.S., Kutner, W., ve D’Souza, F. (2003). Electrocatalytic Properties and Sensor Applications of Fullerenes and Carbon Nanotubes. *Electroanalysis*, 15(9), 753–772. <https://doi.org/10.1002/elan.200390094>
- Shi, Y., He, L., Deng, Q., Liu, Q., Li, L., Wang, W., Xin, Z., ve Liu, R. (2019). Synthesis and Applications of Silver Nanowires for Transparent Conductive Films. *Micromachines*, 10, 330. <https://doi.org/10.3390/mi10050330>
- Sinnott, S.B., ve Andrews, R. (2001). Carbon nanotubes: synthesis, properties, and applications. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 26(3), 145–249. <https://doi.org/10.1080/20014091104189>
- Soldano, C., Mahmood, A., ve Dujardin, E. (2010). Production, properties and potential of graphene. *Carbon*, 48(8), 2127–2150. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2010.01.058>
- Soler, J.M., Artacho, E., Gale, J.D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P., ve Sánchez-Portal, D. (2002). The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics Condensed Matter*, 14(11), 2745–2779. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/302>
- Sumdani, M.G., Islam, M.R., Yahaya, A.N.A., ve Safie, S.I. (2021). Recent advancements in synthesis, properties, and applications of conductive polymers for electrochemical energy storage devices: A review. *Polymer Engineering and Science*, 62(2), 269–303. <https://doi.org/10.1002/pen.25859>

- Sun, Y. (2010). Silver nanowires – unique templates for functional nanostructures. *Nanoscale*, 2, 1626–1642. <https://doi.org/10.1039/C0NR00258E>
- Tan, Y.B., ve Lee, J. (2013). Graphene for supercapacitor applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 1(47), 14814. <https://doi.org/10.1039/c3ta12193c>
- Taniguchi, N. (1974). On the Basic Concept of Nanotechnology. *Proceedings of the International Conference on Production Engineering Tokyo*, 18–23.
- Taylor, R. (1994). *The Chemistry of Fullerenes* (4. bs.). World Scientific.
- Taylor, R., ve Walton, D.R.M. (1993). The chemistry of fullerenes. *Nature*, 363(6431), 685–693. <https://doi.org/10.1038/363685a0>
- Thompson, B.C., ve Fréchet, J.M.J. (2007). Polymer–Fullerene Composite Solar Cells. *Angewandte Chemie International Edition*, 47(1), 58–77. <https://doi.org/10.1002/anie.200702506>
- Tiwari, S.K., Sahoo, S., Wang, N., ve Huczko, A. (2020). Graphene research and their outputs: Status and prospect. *Journal of Science Advanced Materials and Devices*, 5(1), 10–29. <https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2020.01.006>
- Turcheniuk, K., ve Mochalin, V.N. (2017). Biomedical applications of nanodiamond. *Nanotechnology*, 28(25). <https://doi.org/10.1088/1361-6528/aa6ae4>
- Upadhyayula, V.K.K., Ghoshroy, S., Nair, V.S., Smith, G.B., Mitchell, M.C., ve Deng, S. (2008). Single-Walled Carbon Nanotubes as Fluorescence Biosensors for Pathogen Recognition in Water Systems. *Journal of Nanotechnology*, 2008(1). <https://doi.org/10.1155/2008/156358>
- Vivien, L., Lançon, P., Riehl, D., Hache, F., ve Anglaret, E. (2002). Carbon nanotubes for optical limiting. *Carbon*, 40(10), 1789–1797. [https://doi.org/10.1016/s0008-6223\(02\)00046-5](https://doi.org/10.1016/s0008-6223(02)00046-5)
- Wan, X., Huang, Y., ve Chen, Y. (2011). Focusing on Energy and Optoelectronic Applications: A Journey for Graphene and Graphene Oxide at Large Scale. *Accounts of Chemical Research*, 45, 598–607. <https://doi.org/10.1021/ar200229q>
- Wang, H., ve Cui, Y. (2019) Nanodiamonds for energy. *Carbon Energy*, 1, 13–18. <https://doi.org/10.1002/cey2.9>
- Wang, Q.H., Setlur, A.A., Lauerhaas, J.M., Dai, J.Y., Seelig, E.W., ve Chang, R.P.H. (1998). A nanotube-based field-emission flat panel display. *Applied Physics Letters*, 72(22), 2912–2913. <https://doi.org/10.1063/1.121493>
- Wang, Y., ve Yeow, J.T.W. (2009). A Review of Carbon Nanotubes-Based Gas Sensors. *Journal of Sensors*, 2009(1). <https://doi.org/10.1155/2009/493904>
- Warner, J.H., Schaffel, F., Rummeli, M., ve Bachmatiuk, A. (2013). *Graphene: Fundamentals and Emergent Applications*. Elsevier.
- Whitlow, J., Pacelli, S., ve Paul, A. (2017). Multifunctional nanodiamonds in regenerative medicine: Recent advances and future directions. *Journal of Controlled Release*, 261, 62–86. <https://doi.org/10.1016/j.jconrel.2017.05.033>
- Williams, O.A. (2014). *Nanodiamond*. The Royal Society of Chemistry.
- Williams, O.A., Nesladek, M., Daenen, M., Michaelson, S., Hoffman, A., Osawa, E., Haenen, K., ve Jackman, R.B. (2008). Growth, electronic properties and applications of nanodiamond. *Diamond and Related Materials*, 17, 1080–1088. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2008.01.103>

- Withers, J.C., Loutfy, R.O., ve Lowe, T.P. (1997). Fullerene Commercial Vision. *Fullerene Science and Technology*, 5(1), 1–31. <https://doi.org/10.1080/15363839708011971>
- Wu, J., Sun, Z., Li, X., Ma, B., Tian, M., ve Li, S. (2010). Theoretical study on the smallest endohedral metallofullerenes: $TM@C_{20}$ ($TM = Ce$ and Gd). *International Journal of Quantum Chemistry*, 111(14), 3786–3792. <https://doi.org/10.1002/qua.22908>
- Wu, Y., ve Weil, T. (2022). Recent Developments of Nanodiamond Quantum Sensors for Biological Applications. *Advanced Science*, 9, 2200059. <https://doi.org/10.1002/adv.202200059>
- Wudl, F. (2002). Fullerene materials. *Journal of Materials Chemistry*, 12(7), 1959–1963. <https://doi.org/10.1039/b201196d>
- Xing, Y., ve Dai, L. (2009). Nanodiamonds for Nanomedicine. *Nanomedicine*, 4, 207–218. <https://doi.org/10.2217/17435889.4.2.207>
- Xu, T., Shen, W., Huang, W., ve Lu, X. (2020). Fullerene micro/nanostructures: controlled synthesis and energy applications. *Materials Today Nano*, 11, 100081. <https://doi.org/10.1016/j.mtnano.2020.100081>
- Yadav, B.C., ve Kumar, R. (2008). Structure, properties and applications of fullerenes. *International Journal of Nanotechnology and Applications*, 2, 15–24.
- Yang, S., ve Zhang, J. (2021). Current Progress of Magnetoresistance Sensors. *Chemosensors*, 9(8), 211. <https://doi.org/10.3390/chemosensors9080211>
- Yang, Y., Gromov, E.V., ve Cederbaum, L.S. (2019). Charge separated states of endohedral fullerene $Li@C_{20}$. *The Journal of Chemical Physics*, 151(11). <https://doi.org/10.1063/1.5120017>
- Yonzon, C., Stuart, D., Zhang, X., Mcfarland, A., Haynes, C., ve Vanduyne, R. (2005). Towards advanced chemical and biological nanosensors—An overview. *Talanta*, 67(3), 438–448. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2005.06.039>
- Yoon, M., Yang, S., Hicke, C., Wang, E., Geohegan, D., ve Zhang, Z. (2008). Calcium as the Superior Coating Metal in Functionalization of Carbon Fullerenes for High-Capacity Hydrogen Storage. *Physical Review Letters*, 100(20). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.100.206806>
- Yoon, M., Yang, S., Wang, E., ve Zhang, Z. (2007). Charged Fullerenes as High-Capacity Hydrogen Storage Media. *Nano Letters*, 7(9), 2578–2583. <https://doi.org/10.1021/nl070809a>
- Yoshida, Z., ve Osawa, E. (1971). Aromaticity (Kimyasal Monograf Serisi, Cilt 22) [Japonca]. Kagaku Dojin.
- Yuan, H., Li, N., Fan, W., Cai, H., ve Zhao, D. (2021). Metal-Organic Framework Based Gas Sensors. *Advanced Science*, 9, 2104374. <https://doi.org/10.1002/adv.202104374>
- Zhang, Q., Mochalin, V., Neitzel, I., ve Knoke, I., (2011). Fluorescent PLLA-nanodiamond composites for bone tissue engineering. *Biomaterials*, 32, 87–94. <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2010.08.090>
- Zhu, J., Yang, D., Yin, Z., Yan, Q., ve Zhang, H. (2014). Graphene and Graphene-Based Materials for Energy Storage Applications. *Small*, 10(17), 3480–3498. <https://doi.org/10.1002/sml.201303202>
- Zhu, L., Chen, L., Gu, J., Ma, H., ve Wu, H. (2022). Carbon-Based Nanomaterials for Sustainable Agriculture: Their Application as Light Converters, Nanosensors, and Delivery Tools. *Plants*, 11(4), 511. <https://doi.org/10.3390/plants11040511>