

## Doç. Dr. Seçkin Dündar GÜNAY

### Kişisel Bilgiler

E-posta: sgunay@yildiz.edu.tr

Web: <http://www3.yildiz.edu.tr/~sgunay/>

### Uluslararası Araştırmacı ID'leri

ORCID: 0000-0003-0507-0166

Yoksis Araştırmacı ID: 174646

### Eğitim Bilgileri

Doktora, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri, Fizik, Türkiye 2002 - 2009

### Araştırma Alanları

Fizik, Yoğun Madde 1:Yapısal, Mekanik ve Termal Özellikler , Yoğun Madde 2:Elektronik Yapı, Elektrik, Manyetik ve Optik Özellikler, Temel Bilimler

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

- I. **Molecular dynamics modelling of the stress–strain response of  $\beta$ -sheet nanocrystals**  
TAŞSEVEN Ç., AKDERE Ü., GÜNAY S. D., AKSAKAL B.  
Computational Materials Science, cilt.246, 2025 (SCI-Expanded)
- II. **Actinide and lanthanide dioxide lattice dilatation mechanisms with defect ingrowths**  
GÜNAY S. D.  
Journal of the American Ceramic Society, cilt.106, sa.6, ss.3895-3910, 2023 (SCI-Expanded)
- III. **Molecular dynamics and integral equation study of the structure and dynamics of solid and liquid magnesium phosphide**  
Aydın Y., GÜNAY S. D., AKDERE Ü., TAŞSEVEN Ç.  
Molecular Simulation, 2023 (SCI-Expanded)
- IV. **Insight into the structural, thermal and ion transport properties of solid and liquid Mg<sub>3</sub>N<sub>2</sub>: a model potential and NPT molecular dynamics simulation**  
Aydın Y., Gunay S. D., AKDERE Ü., TAŞSEVEN Ç.  
MOLECULAR SIMULATION, cilt.48, sa.7, ss.602-609, 2022 (SCI-Expanded)
- V. **Thermophysical properties of magnesium arsenide with atomistic simulation methods**  
Günay S. D.  
Journal Of Physics And Chemistry Of Solids, cilt.148, ss.1-12, 2021 (SCI-Expanded)
- VI. **Influence of repeating sequence on structural and thermal stability of crystalline domain of bombyx mori silk fibroin**  
Aksakal B., Akdere Ü., Günay S. D., Çağın T., Taşseven Ç.  
MATERIALS RESEARCH EXPRESS, cilt.6, sa.12, ss.125356-125364, 2020 (SCI-Expanded)
- VII. **Ordering and diffusion in liquid magnesium antimonide (Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>) from hypernetted-chain theory and molecular dynamics simulation**  
AKDERE Ü., GÜNAY S. D., TAŞSEVEN Ç.

- Ionics, cilt.25, sa.6, ss.2711-2717, 2019 (SCI-Expanded)
- VIII. **Thermal recovery mechanisms of UO<sub>2</sub> lattices by defect annihilation**  
GÜNAY S. D.  
JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, cilt.724, ss.841-850, 2017 (SCI-Expanded)
- IX. **Investigation of Oxygen Diffusion in Irradiated UO<sub>2</sub> with MD Simulation**  
GÜNAY S. D.  
HIGH TEMPERATURE MATERIALS AND PROCESSES, cilt.35, sa.10, ss.981-987, 2016 (SCI-Expanded)
- X. **Modeling Superionic Behavior of Plutonium Dioxide**  
GÜNAY S. D., AKGENC B., TAŞSEVEN Ç.  
HIGH TEMPERATURE MATERIALS AND PROCESSES, cilt.35, sa.10, ss.999-1004, 2016 (SCI-Expanded)
- XI. **Studying Static, Dynamic and Transport Properties of Mg<sub>3</sub>Bi<sub>2</sub>**  
Kayadibi F., GÜNAY S. D., TAŞSEVEN Ç.  
ACTA PHYSICA POLONICA A, cilt.128, sa.3, ss.440-446, 2015 (SCI-Expanded)
- XII. **Swelling mechanisms of UO<sub>2</sub> lattices with defect ingrowths**  
GÜNAY S. D.  
PLoS ONE, cilt.10, sa.8, 2015 (SCI-Expanded)
- XIII. **Hypernetted chain calculations of molten uranium dioxide: Comparison of rigid ion potentials**  
GÜNAY S. D., AKDERE Ü., TAŞSEVEN Ç.  
JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, cilt.173, ss.124-129, 2012 (SCI-Expanded)
- XIV. **THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF URANIUM DIOXIDE: A MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF SOLID AND LIQUID PHASES OF STOICHIOMETRIC UO<sub>2</sub>**  
GÜNAY S. D., KAVANOZ H. B., AKDERE Ü., TAŞSEVEN Ç.  
INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS B, cilt.25, ss.3211-3223, 2011 (SCI-Expanded)
- XV. **MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF UO<sub>2</sub>: AN ALTERNATIVE RIGID ION MODEL POTENTIAL**  
GÜNAY S. D., AKDERE Ü., KAVANOZ H. B., TAŞSEVEN Ç.  
INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS B, cilt.25, sa.9, ss.1201-1210, 2011 (SCI-Expanded)

## Diğer Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Calculation of thermophysical properties of magnesium antimonide alpha Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>**  
GÜNAY S. D.  
Turkish Journal of Physics, cilt.40, ss.264-269, 2016 (Scopus)
- II. **Thermomechanical Properties of Anti-Parallel  $\beta$ -Sheets with Bombyx mori Silk Nanostructures [Gly-Ser-Gly-Ala-Gly-Ala]<sub>n</sub> and [Gly-Ala]<sub>n</sub>**  
Günay S. D., Akdere Ü., Aksakal B., Çağın T., Taşseven Ç.  
Materials Science Forum, cilt.856, ss.74-77, 2016 (Scopus)
- III. **Thermophysical Properties of Anti-Parallel  $\beta$ -Sheets with Bombyx mori Silk Nanostructures [Gly-Ser-Gly-Ala-Gly-Ala]<sub>n</sub> and [Gly-Ala]<sub>n</sub>**  
Aksakal B., Günay S. D., Akdere Ü., Çağın T., Taşseven Ç.  
materials science forum, cilt.856, ss.70-73, 2016 (Scopus)
- IV. **Classical Molecular Dynamics Simulation of Mg<sub>3</sub>Bi<sub>2</sub> at Solid and Liquid Phase**  
GÜNAY S. D., Kayadibi F., Akdere Ü., Taşseven Ç.  
Balkan Physics Letters, cilt.15, ss.151013, 2009 (Hakemli Dergi)
- V. **The Structure and Ionic Transport of Liquid Semiconductor NiTe**  
Akdere Ü., Günay S. D., Kavanoz H. B., Taşseven Ç.  
Balkan Physics Letters, cilt.15, ss.1-7, 2009 (Hakemli Dergi)
- VI. **Computer Simulation of Life at Low Reynolds Number**  
Koltuk i. C., GÜNAY S. D.  
Balkan Physics Letters - Special Issue, ss.295-297, 2007 (Hakemli Dergi)

## Hakemli Kongre / Sempozyum Bildiri Kitaplarında Yer Alan Yayınlar

- I. **THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF NANO-CRYSTALLITE MAGNESIUM NITRIDE VIA MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION AT CONSTANT PRESSURE**  
Aydın Y., Akdere Ü., Günay S. D., Taşseven Ç.  
TURKISH PHYSICAL SOCIETY 35 INTERNATIONAL PHYSICS CONGRESS, Muğla, Türkiye, 4 - 08 Eylül 2019, ss.351
- II. **NVE SIMULATION AND HYPERNETTED-CHAIN CALCULATION OF THE SUPERIONIC CONDUCTOR LITHIUM NITRIDE**  
Akdere Ü., Günay S. D.  
TURKISH PHYSICAL SOCIETY 35 INTERNATIONAL PHYSICS CONGRESS, Muğla, Türkiye, 4 - 08 Eylül 2019, ss.207
- III. **INTERACTION POTENTIAL AND LOCAL STRUCTURE OF LIQUID MAGNESIUM NITRIDE VIA HYPERNETTED-CHAIN THEORY**  
Aydın Y., Akdere Ü., Günay S. D., Taşseven Ç.  
TURKISH PHYSICAL SOCIETY 35 INTERNATIONAL PHYSICS CONGRESS, Muğla, Türkiye, 4 - 08 Eylül 2019, ss.342
- IV. **Static Structure and Ionic Diffusion of Liquid Magnesium Nitrate**  
AKDERE Ü., Aydın Y., GÜNAY S. D., TAŞSEVEN Ç.  
ICSEEC: SUSTAINABLE ENERGY AND ENERGY CALCULATIONS, Muğla, Türkiye, 12 Nisan 2019, ss.49
- V. **Simulation of Pullout Test on Crystallite Segment of Antiparallel beta-Sheets of Bombyx Mori Silk Fibroin**  
Uğuz C., AKDERE Ü., GÜNAY S. D., TAŞSEVEN Ç.  
ICSEEC: SUSTAINABLE ENERGY AND ENERGY CALCULATIONS, Muğla, Türkiye, 12 Nisan 2019, ss.17
- VI. **Hydrogen Bond Analysis of Bombyx Mori Silk Fibroin by MD Simulation at Room Temperature**  
Akdere Ü., Günay S. D., Taşseven Ç.  
Turkish Physical Society 34 International Physics Congress, Muğla, Türkiye, 5 - 09 Eylül 2018, ss.474
- VII. **Structural phase transition of Mg<sub>3</sub>As<sub>2</sub>**  
AKDERE Ü., GÜNAY S. D., TAŞSEVEN Ç.  
Turkish Physical Society 33rd International Physics Congress, Muğla, Türkiye, 6 - 10 Eylül 2017
- VIII. **Temperature dependence of mechanical properties of anti-parallel beta sheets with bombyx-mori silk nano structures along chain direction**  
AKDERE Ü., GÜNAY S. D., AKSAKAL B., Çağın T., TAŞSEVEN Ç.  
Turkish Physical Society 33rd International Physics Congress, Muğla, Türkiye, 6 - 10 Eylül 2017
- IX. **Molybdenum Doped CdTe Sigma<sub>3</sub>(111) Grain Boundary**  
ÇALIŞKAN M., Öztoprak A., GÜNAY S. D., TAŞSEVEN Ç., Çağın T.  
The Tenth Japanese-Mediterranean Workshop on Applied Electromagnetic Engineering for Magnetic, Superconducting, Multifunctional and Nanomaterials (JAPMED'10), İzmir, Türkiye, 4 - 08 Temmuz 2017, ss.75
- X. **Polar/Antipolar - Antiparallel beta sheets of bombyx mori silk nano crystallites solvated in different type of water**  
Uğuz C., TAŞSEVEN Ç., GÜNAY S. D., AKDERE Ü.  
JAPMED 10, İzmir, Türkiye, 4 - 08 Temmuz 2017
- XI. **Low- and high- temperature structural analysis of magnesium antimonide**  
GÜNAY S. D., AKDERE Ü., TAŞSEVEN Ç.  
1st International Conference on Energy and Thermal Engineering, ICTE 2017, İstanbul, Türkiye, 25 - 28 Nisan 2017
- XII. **Dynamic properties of magnesium arsenide**  
GÜNAY S. D.  
1st International Conference on Energy and Thermal Engineering, ICTE 2017, İstanbul, Türkiye, 25 - 28 Nisan 2017
- XIII. **Analysis of Mechanical Behavior of Anti Parallel Beta Sheets with Bombyx Mori Silk Nano Structures Along Inter Sheet Direction**  
Akdere Ü., Günay S. D., Aksakal B., Çağın T., Taşseven Ç.  
Turkish Physical Society 32th International Physics Conference, Muğla, Türkiye, 6 - 09 Eylül 2016
- XIV. **Density functional theory study of structural and electro optical activities of grain boundaries in bi crystal CdTe**

TAŞSEVEN Ç., ÇALIŞKAN M., GÜNAY S. D., ÇAGIN T.

Molecular Interactions & Dynamics Gordon Research Conference, Amerika Birleşik Devletleri, 10 - 15 Temmuz 2016

- XV. **Bulk property changes due to neutron irradiation in uranium dioxide**  
GÜNAY S. D.  
IMSTEC'16-Uluslararası Malzeme Bilimi ve Teknolojisi Konferansı, 6 - 08 Nisan 2016, ss.949-950
- XVI. **Calculation of grain boundary energies of gallium arsenide with first principle study**  
GÜNAY S. D., Taşseven Ç.  
IMSTEC'16 - Uluslararası Malzeme Bilimi ve Teknolojisi Konferansı, 6 - 08 Nisan 2016
- XVII. **Alpha particle damage in some nuclear fuels Effect on radial distribution function**  
GÜNAY S. D.  
International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering - ICCMSE 2016., 17 - 20 Mart 2016
- XVIII. **Thermomechanical properties of anti-parallel  $\beta$ -sheets with Bombyx mori silk nano structures [Gly-Ser-Gly-Ala-Gly-Ala]<sub>n</sub> and [Gly-Ala]<sub>n</sub>**  
GÜNAY S. D., AKDERE Ü., AKSAKAL B., Çağın T., TAŞSEVEN Ç.  
9th Japanese-Mediterranean Workshop on Applied Electromagnetic Engineering for Magnetic, Superconducting, Multifunctional and Nano Materials, 2015, Sofija, Bulgaristan, 5 - 08 Temmuz 2015, cilt.856, ss.74-77
- XIX. **Effect of Cu atoms on the band structure of CdTe**  
ÇALIŞKAN M., Öztoprak A., GÜNAY S. D., Çağın T., TAŞSEVEN Ç.  
9th Japanese-Mediterranean Workshop on Applied Electromagnetic Engineering for Magnetic, Superconducting, Multifunctional and Nano Materials, 2015, Sofija, Bulgaristan, 5 - 08 Temmuz 2015, cilt.856, ss.153-156
- XX. **Thermomechanical properties of anti parallel sheets with Bombyx mori silk nano structures Gly Ser Gly Ala Gly Ala n and Gly Ala n**  
Günay S. D., Akdere Ü., Aksakal B., Çağın T., Taşseven Ç.  
The Ninth Japanese -Mediterranean Workshop On Applied Electromagnetic Engineering For Magnetic,Superconducting, Multifunctional And Nanomaterials (JAPMED'9), Sofija, Bulgaristan, 5 - 08 Temmuz 2015, ss.51-52
- XXI. **Thermophysical properties of anti parallel sheets with Bombyx mori silk nano structures Gly Ser Gly Ala Gly Ala n and Gly Ala n**  
Aksakal B., Günay S. D., Akdere Ü., Çağın T., Taşseven Ç.  
The Ninth Japanese -Mediterranean Workshop On Applied Electromagnetic Engineering For Magnetic,Superconducting, Multifunctional And Nanomaterials (JAPMED'9), Sofija, Bulgaristan, 5 - 08 Temmuz 2015, ss.25-26
- XXII. **Thermophysical Properties of alpha-Pu2O3: A New Potential Model**  
GÜNAY Ş., Akgenc B., AKDERE Ü., TAŞSEVEN Ç.  
3rd International Congress on Advances in Applied Physics and Materials Science, Antalya, Türkiye, 24 - 28 Nisan 2013, cilt.1569, ss.208-211
- XXIII. **Volume Swelling of UO<sub>2</sub> by Irradiation of Alpha Particles and Lattice Recovery by Molecular Dynamics Simulation**  
GÜNAY S. D., KNAPP E.  
12th Granada Seminar Institute "Carlos I" for Theoretical and Computational Physics, University of Granada, Spain, 17 - 21 Eylül 2012
- XXIV. **Monte Carlo Simulations of Polymer Brushes**  
GÜNAY S. D., Knapp E. W.  
Turkish Physical Society 28th International Physics Conference, 6 - 09 Eylül 2011
- XXV. **HNC Calculations of Thermodynamic Properties of Molten AgI**  
GÜNAY S. D., Çalışkan M., Akdere Ü., Taşseven Ç.  
Turkish Physical Society 28th International Physics Conference, 01 Eylül 2011
- XXVI. **A Molecular Dynamics Simulation of Premelting Effect in LiO<sub>2</sub>**  
KAYADİBİ F., GÜNAY S. D., TAŞSEVEN Ç.

- 5th Nanoscience and Nanotechnology Conference (NanoTR5), Eskisehir, Turkey, Türkiye, 8 - 12 Haziran 2009
- XXVII. **Static Structure and Ionic Transport in Molten NiTe and NiTe<sub>2</sub>**  
GÜNAY S. D., Akdere Ü., Taşseven Ç.  
Turkish Physical Society 25th International Physics Conference, 25 - 29 Ağustos 2008
- XXVIII. **Observation of Steel Ball Falling Through Liquid**  
ÇELİKOK G., KOLTUK I., GÜNAY S. D.  
ISCBPU-5 5th International Student Conference of the Balkan Physical Union (ISCBPU-5), 21 - 24 Ağustos 2007
- XXIX. **Computer Simulation of Falling Object at Low Reynolds Number**  
ARŞIK A., BİLGİÖZÜ Y., PARLATAN U., GÜNAY S. D.  
4th International Student Conference of the Balkan Physical Union, 29 Ağustos - 01 Eylül 2006
- XXX. **Equilibrium Molecular Dynamics Calculations of The Transport Properties of Molten Thallium Halides**  
GÜNAY S. D., AKDERE Ü., KOSAVALI F., TAŞSEVEN Ç.  
AIP Conference Proceedings, 22 - 26 Ağustos 2006, cilt.899, ss.605
- XXXI. **The Static Structure of Liquid Semiconductors NiTe and NiTe<sub>2</sub>: Preliminary Results**  
GÜNAY S. D., Akdere Ü., Kosovalı F., Taşseven Ç.  
01 Ağustos 2006, cilt.899, ss.616
- XXXII. **Study of Bose Einstein Condensation in a Harmonic Oscillator Potential**  
GÜNAY S. D., Tatlıpınar H.  
Turkish Physical Society 22th Conference, Türkiye, 14 - 17 Eylül 2004

## Desteklenen Projeler

GÜNAY S. D., Aydın Y., AKDERE Ü., TAŞSEVEN Ç., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Magnezyum-Azot Grubu Bileşiklerinin Bilgisayar Simülasyonu Yöntemleriyle Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi, 2018 - 2020

Aksakal B., Günay S. D., Taşseven Ç., Akdere Ü., TÜBİTAK Projesi, Yüksek performans uygulamaları için Bombyx Mori ipek fibroin kristalit biriminin termo mekaniksel özelliklerinin moleküler dinamik simülasyonu, 2016 - 2018

TAŞSEVEN Ç., ÇALIŞKAN M., AKSAKAL B., GÜNAY S. D., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Su İçerisindeki Bombyx Mori İpek Fibroinin Kristal Biriminin Termo-Mekaniksel Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyon Yöntemi ile İncelenmesi, 2015 - 2018

Aksakal B., Taşseven Ç., Günay S. D., Akdere Ü., Çalışkan M., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Su içerisindeki Bombyx Mori ipek fibroinin kristal biriminin termo mekaniksel özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemi ile incelenmesi, 2015 - 2018

Çalışkan M., Günay S. D., Taşseven Ç., TÜBİTAK Projesi, Güneş Pillerinde Kontak Metallerinin Absorptör CdTe nin Yapısal ve Elektro Optik Aktiviteleri Üzerine Yoğunluk Fonksiyonel Teori Çalışması, 2014 - 2017

GÜNAY S. D., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Aktinit bileşenli nükleer yakıtlarda radyasyon kusurları ve geri toparlanmasının moleküler dinamik simülasyon ve SRIM ile incelenmesi, 2013 - 2016

Akdere Ü., Taşseven Ç., GÜNAY S. D., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Süperiyonik İletkenlerin Yüksek Sıcaklık Davranışları, 2003 - 2007

## Metrikler

Yayın: 62

Atıf (WoS): 22

Atıf (Scopus): 22

H-İndeks (WoS): 3

H-İndeks (Scopus): 3

## **Akademi Dışı Deneyim**

FREIE ÜNİVERSİTESİ, BERLİN, ALMANYA

CHEMNITZ TEKNOLOJİ ÜNİVERSİTESİ, CHEMNİTZ, ALMANYA

TEXAS A&M ÜNİVERSİTESİ, HOUSTON, TEXAS, ABD