

Prof. Dr. ALİMET SEMA ÖZEN

Kişisel Bilgiler

E-posta: alimet.ozen@marmara.edu.tr

Web: <https://avesis.marmara.edu.tr/15450>

Uluslararası Araştırmacı ID'leri

ORCID: 0000-0002-0178-9854

Eğitim Bilgileri

Doktora, Boğaziçi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya, Türkiye 1999 - 2004

Yüksek Lisans, Boğaziçi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya, Türkiye 1993 - 1996

Lisans, Boğaziçi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, Türkiye 1987 - 1993

Araştırma Alanları

Fonksiyonel Polimerler, Hesapsal Kimya, İletken Polimerler, Kompozitler, Kuantum Mekaniği, Polimerik Malzemeler

Akademik Unvanlar / Görevler

Prof. Dr., Marmara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2024 - Devam Ediyor

Prof. Dr., Piri Reis Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, 2017 - 2024

Doç. Dr., Piri Reis Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, 2012 - 2017

Dr. Öğr. Üyesi, Piri Reis Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, 2011 - 2012

Dr. Öğr. Üyesi, Sabancı Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 2008 - 2011

Öğretim Görevlisi, Sabancı Üniversitesi, Temel Geliştirme Direktörlüğü, 2004 - 2008

Araştırma Görevlisi, Boğaziçi Üniversitesi, Kimya, 1993 - 1996

Akademik İdari Deneyim

Fakülte Yönetim Kurulu Üyesi, Piri Reis Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, 2021 - 2024

Senato Üyesi, Piri Reis Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, 2015 - 2024

Dekan Yardımcısı, Piri Reis Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, 2012 - 2016

Enstitü Müdürü, Piri Reis Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 2012 - 2015

Verdiği Dersler

Lisans

HSS002 Philosophy and Science, Lisans, 2023 - 2024

CHEM114 Chemistry, Lisans, 2023 - 2024

HSS019 Nanoscience and Nanotechnology, Lisans, 2022 - 2023

ENG 327 Introduction to Composite Structures, Lisans, 2017 - 2018

SM222 Materials Science, Lisans, 2013 - 2014

SCI, SSCI ve AHCI İndekslerine Giren Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Combined DFT and ionic model computational study of the effect of alkali metal cations on the structure, bonding and properties of molten cryolites, M_3AlF_6 ($M = Li, Na, K, Rb, \text{ and } Cs$)**
Özen A. S., Akdeniz Z.
Physics and Chemistry of Liquids, cilt.63, sa.1, ss.31-44, 2025 (SCI-Expanded)
- II. **Repetitive Rolling of Triptycene-Based Molecules on Cu Surfaces**
Konuk M., Madran M., Uysal M. T., Beşer D., Özen A. S., Akdeniz Z., Durukanoğlu S.
Journal of the American Chemical Society, cilt.146, sa.39, ss.27014-27021, 2024 (SCI-Expanded)
- III. **Structure and bonding in cryolitic melts a combined study by density functional theory and ionic model calculations**
Sema Özen A. S., Akdeniz Z.
Journal of Molecular Liquids, cilt.368, 2022 (SCI-Expanded)
- IV. **Chemical Reactivity Perspective into the Group 2B Metals Halides**
Özen A. S., Akdeniz Z.
Journal of Physical Chemistry A, cilt.120, sa.25, ss.4401-4407, 2016 (SCI-Expanded)
- V. **Structure of trimers of group-2B metal dihalides from relativistic density-functional calculations**
Özen A. S., Akdeniz Z., Pastore G., Ruberto R., Tosi M.
Physics and Chemistry of Liquids, cilt.53, sa.1, ss.1-9, 2015 (SCI-Expanded)
- VI. **Detection of nitroaromatic explosives based on fluorescence quenching of silafluorene- and silole-containing polymers: A time-dependent density functional theory study**
Dedeoğlu B., Monari A., Etienne T., Aviyente V., Özen A. S.
Journal of Physical Chemistry C, cilt.118, sa.41, ss.23946-23953, 2014 (SCI-Expanded)
- VII. **Computational insight into the explosive detection mechanisms in silafluorene- and silole-containing photoluminescent polymers**
Dedeoğlu B., Aviyente V., Özen A. S.
Journal of Physical Chemistry C, cilt.118, sa.12, ss.6385-6397, 2014 (SCI-Expanded)
- VIII. **The origins of tetrahedral coordination in molten and glassy $ZnCl_2$ and other group-2B metal dihalides**
Özen A. S., Akdeniz Z., Ruberto R., Pastore G., Tosi M.
Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics, cilt.378, sa.4, ss.431-433, 2014 (SCI-Expanded)
- IX. **Static and dynamic structure of monomers, dimers and trimers of $HgCl_2$ from density-functional calculations**
Ruberto R., Pastore G., Özen A. S., Akdeniz Z., Tosi M.
European Physical Journal D, cilt.66, sa.9, 2012 (SCI-Expanded)
- X. **Peripheral and structural effects on the band gap of acceptor-donor type conducting polymers containing pendant bisfulleroid groups**
Özen A. S.
Journal of Physical Chemistry C, cilt.115, sa.50, ss.25007-25018, 2011 (SCI-Expanded)
- XI. **Mapping and reverse-mapping of the morphologies for a molecular understanding of the self-assembly of fluorinated block copolymers**
Kacar G., Atilgan C., Özen A. S.
Journal of Physical Chemistry C, cilt.114, sa.1, ss.370-382, 2010 (SCI-Expanded)
- XII. **Effect of cooperative hydrogen bonding in azo-hydrazone tautomerism of azo dyes**
Özen A. S., Doruker P., Aviyente V.
Journal of Physical Chemistry A, cilt.111, sa.51, ss.13506-13514, 2007 (SCI-Expanded)
- XIII. **Noncovalent intramolecular interactions in the monomers and oligomers of the acceptor and donor type of low band gap conducting polymers**
Özen A. S., Atilgan C., Sonmez G.
Journal of Physical Chemistry C, cilt.111, sa.44, ss.16362-16371, 2007 (SCI-Expanded)
- XIV. **Interpretation of hydrogen bonding in the weak and strong regions using conceptual DFT**

descriptors

Özen A. S., De Proft F., Aviyente V., Geerlings P.

Journal of Physical Chemistry A, cilt.110, sa.17, ss.5860-5868, 2006 (SCI-Expanded)

- XV. **Complete mapping of the morphologies of some linear and graft fluorinated co-oligomers in an aprotic solvent by dissipative particle dynamics**

Özen A. S., Sen U., Atilgan C.

Journal of Chemical Physics, cilt.124, sa.6, 2006 (SCI-Expanded)

- XVI. **A quantum mechanical approach to the kinetics of the hydrogen abstraction reaction $H_2O_2 + \cdot OH \rightarrow HO_2 + H_2O$**

Atadınç F., Günaydin H., Özen A. S., Aviyente V.

International Journal of Chemical Kinetics, cilt.37, sa.8, ss.502-514, 2005 (SCI-Expanded)

- XVII. **Experimental and modeling approach to decolorization of azo dyes by ultrasound: Degradation of the hydrazone tautomer**

Özen A. S., Aviyente V., Tezcanli-Güyer G., Ince N. H.

Journal of Physical Chemistry A, cilt.109, sa.15, ss.3506-3516, 2005 (SCI-Expanded)

- XVIII. **Modeling the substituent effect on the oxidative degradation of azo dyes**

Özen A. S., Aviyente V., De Proft F., Geerlings P.

Journal of Physical Chemistry A, cilt.108, sa.28, ss.5990-6000, 2004 (SCI-Expanded)

- XIX. **Modeling the oxidative degradation of azo dyes: A density functional theory study**

Özen A. S., Aviyente V., Klein R. A.

Journal of Physical Chemistry A, cilt.107, sa.24, ss.4898-4907, 2003 (SCI-Expanded)

- XX. **A computational study of the Wallach rearrangement**

ÖZEN A. S., ERDEM S., AVİYENTE V.

STRUCTURAL CHEMISTRY, cilt.9, sa.1, ss.15-25, 1998 (SCI-Expanded)

Diğer Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Dissolution of alumina in cryolite melts: a conceptual DFT study**

Özen A. S., Akdeniz Z.

Turkish Journal of Physics, cilt.46, sa.6, ss.228-238, 2022 (ESCI)

Hakemli Bilimsel Toplantılarda Yayımlanmış Bildiriler

- I. **Modeling Microclusters of Cryolite Melts**

ÖZEN A. S., AKDENİZ Z.

14th Chemical Physics Congress, Edirne, Türkiye, 25 - 28 Eylül 2024, (Tam Metin Bildiri)

- II. **QTAIM Analysis of Cryolite Clusters**

ÖZEN A. S.

26.Sıvihal Sempozyumu, 22 Aralık 2023, (Tam Metin Bildiri)

- III. **Electron density topology analysis within Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM) for a comprehensive understanding of local ionic states for various microclusters in Cryolitic Melts**

ÖZEN A. S., AKDENİZ Z.

İstanbul Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, İstanbul, Türkiye, 26 Eylül 2022, (Özet Bildiri)

- IV. **(MX₂)_n Metal Halojenür Kümelerinin Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi Kullanılarak İncelenmesi**

ÖZEN A. S., AKDENİZ Z.

31.Ulusal Kimya Kongresi, İstanbul, Türkiye, 10 - 13 Eylül 2019, (Özet Bildiri)

- V. **Effect of Non-covalent Interactions on the Fluorescence Quenching Mechanism of Polymeric Sensors with Nitroaromatic Explosives**

AVİYENTE V., ÖZEN A. S., DEDEOĞLU B.

- STC2018: 54th Symposium on Theoretical Chemistry, 17 - 20 Eylül 2018, (Özet Bildiri)
- VI. **A Computational Approach to the Explosive Detection Mechanisms in Silole- and Silafluorene Containing Photoluminescent Polymers**
ÖZEN A. S., AVİYENTE V., DEDEOĞLU B.
STC2014: 50th Symposium on Theoretical Chemistry, 14 - 18 Eylül 2014, (Özet Bildiri)
- VII. **Polimerlerin Patlayıcı Tespit Mekanizmalarının Modellenmesi**
ÖZEN A. S., DEDEOĞLU B., AVİYENTE V.
3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, Türkiye, 12 - 14 Ekim 2017, (Özet Bildiri)
- VIII. **Modeling Molecular Motors on Metal Surfaces**
ÖZEN A. S., AKDENİZ Z., madran m., DURUKANOĞLU FEYİZ M. S.
Theory and Applications of Computational Chemistry 2016, 28 Ağustos - 02 Eylül 2016, (Özet Bildiri)
- IX. **Explosive detection mechanisms in silole- and silafluorene containing photoluminescent polymers: a computational approach**
ÖZEN A. S., DEDEOĞLU B., AVİYENTE V.
EPF2013: European Polymer Congress, 16 - 21 Haziran 2013, (Özet Bildiri)
- X. **Peripheral and structural effects on the band gap of acceptor-donor type conducting polymers**
ÖZEN A. S.
EPF2013: European Polymer Congress, 16 - 21 Haziran 2013, (Özet Bildiri)
- XI. **Environmental and Structural Effects on the Band Gap of the Conducting Polymers with Bisfulleroid Group**
ÖZEN A. S.
ISFOE11: 4th International Symposium on Flexible Organic Electronics, 10 - 13 Temmuz 2011, (Özet Bildiri)
- XII. **Interpretation of Hydrogen Bonding in the Weak and Strong Regions Using Conceptual DFT Descriptors**
ÖZEN A. S., AVİYENTE V.
11th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, 11 - 15 Eylül 2005, (Özet Bildiri)
- XIII. **Mesoscopic morphologies of fluorinated oligomers in an aprotic solvent**
Şen Ü., ÖZEN A. S., Baysal C.
230th National Meeting of the American-Chemical-Society, Amerika Birleşik Devletleri, 28 Ağustos - 01 Eylül 2005, cilt.230, ss.3596, (Tam Metin Bildiri)
- XIV. **Competing Pathways for the Oxidative Degradation of Azo Dyes**
ÖZEN A. S., AVİYENTE V.
10th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, 7 - 12 Eylül 2003, (Özet Bildiri)
- XV. **Substituent Effect on the Oxidative Degradation of Azo Dyes**
ÖZEN A. S., AVİYENTE V.
6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC'02), 4 - 09 Ağustos 2002, (Özet Bildiri)
- XVI. **Chemical Reactivity Perspective for the Oxidative Degradation of Azo Dyes**
ÖZEN A. S., AVİYENTE V.
Gordon-Kenan Chemical Physics Yaz Okulu, Gordon Research Conference, 9 - 22 Eylül 2001, (Özet Bildiri)

Desteklenen Projeler

Özen A. S., Akdeniz Z., TÜBİTAK Projesi, Metal Yüzeyler Üzerinde Moleküler Motorların Atomik Ölçeklerde Hareketleri, 2014 - 2017

Özen A. S., TÜBİTAK Projesi, Silol ve Silafluoren İçeren Fotolüminesan Polimerlerin Patlayıcı Maddeleri Tespit Mekanizmalarına Hesapsal Bir Yaklaşım, 2011 - 2014

Özen A. S., Atılgan C., TÜBİTAK Projesi, Kendi Kendine Örgütlenen Moleküler Sistemlerin Dinamiğinin Çok ölçekli İncelenmesi, 2007 - 2009

Metrikler

Yayın: 37

Atıf (WoS): 490

Atıf (Scopus): 511

H-İndeks (WoS): 11

H-İndeks (Scopus): 11