

## Prof. Dr. ALİMET SEMA ÖZEN

### Kişisel Bilgiler

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., 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

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, 2024 (SCI-Expanded)
- II. **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)
- III. **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)
- IV. **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)
- V. **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)
- VI. **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)
- VII. **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)
- VIII. **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)
- IX. **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)
- X. **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)
- XI. **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)
- XII. **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)
- XIII. **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)
- XIV. **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)
- XV. **A quantum mechanical approach to the kinetics of the hydrogen abstraction reaction  $H_2O_2 + \cdot OH \rightarrow H_2O + H_2O$**   
Atadınç F., Günaydin H., Özen A. S., Aviyente V.  
International Journal of Chemical Kinetics, cilt.37, sa.8, ss.502-514, 2005 (SCI-Expanded)
- XVI. **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)
- XVII. **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)
- XVIII. **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)
- XIX. **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)

## 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., Atilgan C., TÜBİTAK Projesi, Kendi Kendine Örgütlenen Moleküler Sistemlerin Dinamiğinin Çok ölçekli İncelenmesi, 2007 - 2009

## Metrikler

- Yayın: 20  
Atıf (WoS): 490  
Atıf (Scopus): 511  
H-İndeks (WoS): 11  
H-İndeks (Scopus): 11