

## 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., Tezcanlı-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

II. **QTAİM Analysis of Cryolite Clusters**

ÖZEN A. S.

26.Sıvıhal Sempozyumu, 22 Aralık 2023

III. **Electron density topology analysis within Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAİM) 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

IV. **(MX<sub>2</sub>)<sub>n</sub> Metal Halojenür Kümelerinin Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi Kullanılarak İncelenmesi**

ÖZEN A. S., AKDENİZ Z.

31.Ulusal Kimya Kongresi, İstanbul, Türkiye, 10 - 13 Eylül 2019

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

- 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
- VII. **Polimerlerin Patlayıcı Tespit Mekanizmalarının Modellenmesi**  
ÖZEN A. S., DEDEOĞLU B., AVİYENTE V.  
3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, Türkiye, 12 - 14 Ekim 2017
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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

## 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