

Prof. Mine Yurtsever

Personal Information

Fax Phone: [+90 212 285 6386](tel:+902122856386)

Email: mine@itu.edu.tr

Address: ITU Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü 34469 Maslak İstanbul

Education Information

Doctorate, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (Dr), Turkey 1985 - 1992

Postgraduate, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (YI) (Tezli), Turkey 1983 - 1985

Undergraduate, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Turkey 1978 - 1983

Foreign Languages

English

Dissertations

Doctorate, Pattern formation of two-dimensional model phospholipid molecules by molecular dynamics simulation, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Kimya, Kimya, 1992

Research Areas

Basic Sciences, Chemistry, Physical Chemistry, Computational Chemistry, Quantum Mechanics, Polymeric Materials

Academic Titles / Tasks

Professor, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2005 - Continues

Associate Professor, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2001 - 2005

Assistant Professor, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 1996 - 2001

Research Assistant, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 1983 - 1995

Courses

COMPUTATIONAL CHEMISTRY, Postgraduate, 2016 - 2017

INTRODUCTION TO QUANTUM CHEMISTRY, Undergraduate, 2016 - 2017

Articles Published in Journals That Entered SCI, SSCI and AHCI Indexes

- I. Elucidation of interaction mechanism of hERG1 potassium channel with scorpion toxins BeKm-1 and BmTx3b

Gunay B. C. , Yurtsever M., Durdagi S.

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, vol.96, 2020 (Journal Indexed in SCI)

- II. **Elucidation of binding interactions and mechanism of Fludarabine with dsDNA via multispectroscopic and molecular docking studies**
Şenel P., Agar S., Sayın V. O. , Altay F., Yurtsever M., Gölcü A.
Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, vol.179, 2020 (Journal Indexed in SCI)
- III. **A coarse grained simulation study on the morphology of ABA triblock copolymers**
Onarana G., Yurtsever M., Yilgor I.
COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE, vol.167, pp.160-167, 2019 (Journal Indexed in SCI)
- IV. **Theoretical design of high-mobility bithiophene imide (BTI) derivative polymeric semiconductors**
Sutay B., Onaran G., Yildirim E., Yurtsever M.
Computational Materials Science, vol.166, pp.162-169, 2019 (Journal Indexed in SCI Expanded)
- V. **A Self-Healing and Highly Stretchable Polyelectrolyte Hydrogel via Cooperative Hydrogen Bonding as a Superabsorbent Polymer**
Su E., Yurtsever M., Okay O.
MACROMOLECULES, vol.52, no.9, pp.3257-3267, 2019 (Journal Indexed in SCI)
- VI. **Proposing Novel MAO-B Hit Inhibitors Using Multidimensional Molecular Modeling Approaches and Application of Binary QSAR Models for Prediction of Their Therapeutic Activity, Pharmacokinetic and Toxicity Properties**
Is Y. S. , DURDAĞI S., Aksoydan B., Yurtsever M.
ACS CHEMICAL NEUROSCIENCE, vol.9, no.7, pp.1768-1782, 2018 (Journal Indexed in SCI)
- VII. **Experimental and MD simulation study on the physical and mechanical properties of organically modified montmorillonite clay and compatibilized linear low density polyethylene nanocomposites**
YILDIRIM E., Yurtsever M., ERIMAN B., Uyanik N.
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE, vol.135, no.6, 2018 (Journal Indexed in SCI)
- VIII. **Temperature-dependent changes in the hydrogen bonded hard segment network and microphase morphology in a model polyurethane: Experimental and simulation studies**
YILDIRIM E., Yurtsever M., Yilgor E., Yilgor I., WILKES G. L.
JOURNAL OF POLYMER SCIENCE PART B-POLYMER PHYSICS, vol.56, no.2, pp.182-192, 2018 (Journal Indexed in SCI)
- IX. **A QM protein-ligand investigation of antipsychotic drugs with the dopamine D2 Receptor (D2R)**
Salmas R. E. , İŞ Y. S. , Durdagi S., Stein M., Yurtsever M.
JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, vol.36, no.10, pp.2668-2677, 2018 (Journal Indexed in SCI)

Supported Projects

Yurtsever M., Sayın V. Ö. , Project Supported by Higher Education Institutions, Karbonik Anhidraz-9 Seçici Moleküllerin Bilgisayar Destekli Tasarımı, 2017 - 2020

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Poli(L-Laktik asit)-b-Poli(?-kaprolakton)(PLLA-b-PCL) Diblok Kopolimerlerin Morfolojik Özelliklerinin Kaba Taneleme Yöntemleriyle İncelenmesi, 2015 - 2020

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Paçalı Poliüretan Kopolimerlerinde Gözlenen Çoklu Faz Oluşumunun Hesapsal Olarak İncelenmesi, 2015 - 2018

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Interfacial Interactions Between Organically Modified Clay And Grafted Polyethylen Surfaces: A MD Study, 2014 - 2018

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Molecular Dynamics Simulation Study on the Multiphase Formation Controlled by Intersegmental Interactions in Polyurethanes, 2012 - 2018

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, TTF Türevi Bileşiklerin Birleşme Reaksiyon Mekanizmalarının Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile İncelenmesi, 2009 - 2018

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinin Kimya ve Fizikteki

Uygulamaları, 2007 - 2018

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, PATLAYICILARI TANIYAN TRİPTESEN-POLİÜRE KOMPLEKSLERİNİN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN YFT METODU İLE İNCELENMESİ, 2016 - 2017

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Fonksiyonlaştırmanın Grafenin Küçük Moleküllerle Olan Etkileşimine, Elektronik ve Dağılıma Özelliklerine olan Etkisinin Kuantum Mekanik ve MD Simülasyon Yöntemleriyle İncelenmesi, 2014 - 2017

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, G-Protein Kenetli Reseptörler için Aktivasyon Mekanizmalarının ve Öncü İlaç Tasarımının Çok Boyutlu Modelleme Yöntemleri, 2014 - 2017

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, 1,8-Deketonlardan Ethylenedioxytiyofen (EDOT) ve Dithienotiyofofen (DTT) Analoglarının Sentezlenmeleri, Reaksiyon Mekanizmasının ve Optik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi, 2006 - 2017

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Lipid Membranlarda Faz Geçişlerine Safsızlıkların Etkisinin Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncele, 1997 - 2017

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Nitrojen İçeren Aromatik Sistemlerdeki Ch/Pi Etkileşimlerinin Gelişmiş Hf Ve Dft-sapt Yöntemleri İle Teorik Olarak İncelenmesi, 2010 - 2014

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, TTF Türevlerinin Kenetlenme Mekanizmalarının YFT Yöntemiyle İncelenmesi, 2010 - 2014

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Polipirol Esaslı İletken Nano Malzemelerin Elektronik,Optik ve Morfolojik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi, 2009 - 2014

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Poliolefin-Kil Nanokompozit Malzemelerin Yapısal ve Mekanik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyon Yöntemi ile İncelenmesi, 2008 - 2014

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Doymamış Ketonlardan Oluşan Yilidlerin Kapanma Reaksiyon Mekanizmalarının Teorik Olarak İncelenmesi, 2005 - 2008

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, He-Li₂ ve Heli₂+ Sistemleri için Potansiyel Enerji Yüzeylerinin ab-inito kuantum Mekanik Yöntemler Kullanılarak Çok Hassas Olarak Hesaplanması, 2002 - 2005

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, Kuantum Mekanik Yöntemler Kullanarak Reaksiyon Mekanizmaların İncelenmesi, 2001 - 2001

Yurtsever M., Project Supported by Higher Education Institutions, İki Bileşenli Asal Gaz Yığınlarının Erime ve Karışmasının Moleküller Oynamik Simülasyonu İle İncelenmesi, 2001 - 2001

Scientific Refereeing

Macromolecules, SCI Journal, July 2017

Citations

Total Citations (WOS):826

h-index (WOS):17