

# Prof.Dr. Nurcan Tüzün

## Kişisel Bilgiler

İş Telefonu: [+90 212 328 2357](tel:+902123282357)

Fax Telefonu: [+90 212 285 6810](tel:+902122856810)

E-posta: [nurcant@itu.edu.tr](mailto:nurcant@itu.edu.tr)

## Eğitim Bilgileri

Doktora, Boğaziçi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (Dr), Türkiye 1997 - 2002

Yüksek Lisans, Boğaziçi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (Y) (Tezli), Türkiye 1996 - 1997

Lisans, Boğaziçi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 1991 - 1996

## Yabancı Diller

İngilizce

## Araştırma Alanları

Kimya, Temel Bilimler

## Akademik Unvanlar / Görevler

Prof.Dr., İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat, Kimya, 2017 - Devam Ediyor

Doç.Dr., İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2009 - 2017

Yrd.Doç.Dr., İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2003 - 2009

Araştırma Görevlisi, Boğaziçi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 1996 - 2003

## Mesleki Deneyim

Bölüm Başkan Yardımcısı, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2015 - Devam Ediyor

Erasmus Koordinatörü, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2003 - Devam Ediyor

Dekan Yardımcısı, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2010 - 2012

Bölüm Başkan Yardımcısı, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2008 - 2009

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

- **Amberlyst-15-catalyzed Procedure for the Synthesis of Novel 2,4-Dihydroxybenzoyl-1,2,3-triazoles and Molecular Modelling Studies for Hsp-90 Inhibition**  
Gündüz H., Kumbaracı İ. V. , Özkılıç Y., Tüzün N., Talinli N.  
CHEMISTRYSELECT, cilt.4, ss.7278-7283, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Mechanism of Kynurenine 3-Monooxygenase-Catalyzed Hydroxylation Reaction: A Quantum Cluster Approach**  
Özkılıç Y., Tüzün N.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.123, ss.3149-3159, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Superior Sensor for Be<sup>2+</sup> Ion Recognition via the Unprecedented Octahedral Crystal Structure of a One-Dimensional Coordination Polymer of Crown Fused Zinc Phthalocyanine**  
Yayuz O., Alçay Y., Kaya K., Sezen M., Atasın S. K. , Yıldırım M. S. , Özkılıç Y., Tüzün N., Yılmaz İ.

INORGANIC CHEMISTRY, cilt.58, ss.909-923, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **New ferrocenyl naphthoquinone fused crown ether chemosensors: Highly selective, kinetically and regio controlled colorimetric, beryllium ion recognition**  
Alçay Y., Yavuz Ö., Gelir A., ATASEN S. K. , KARAOĞLU K., Yücel B., TUZUN N., Yılmaz İ.  
Journal of Organometallic Chemistry, cilt.868, ss.131-143, 2018 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)
- **Computational investigation of the control of the thermodynamics and microkinetics of the reductive amination reaction by solvent coordination and a co-catalyst**  
Boz E., Tüzün N., Stein M.  
RSC ADVANCES, cilt.8, ss.36662-36674, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **A DFT study on the mechanism of Rh-catalyzed competitive 1,2-versus 1,3-acyloxy migration followed by [5+1] and [4+1] cycloadditions of 1,4-enynes with CO**  
COSKUN D., Tüzün N.  
JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, cilt.851, ss.97-103, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Structural investigation of vesnarinone at the pore domains of open and open-inactivated states of hERG1 K<sup>+</sup> channel**  
Kayık G., Tüzün N., Durdagi S.  
JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, cilt.77, ss.399-412, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Mechanism of CuAAC reaction: In acetic acid and aprotic conditions**  
Ozen C., Tuzun N.  
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A-CHEMICAL, cilt.426, ss.150-157, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Investigation of PDE5/PDE6 and PDE5/PDE11 selective potent tadalafil-like PDE5 inhibitors using combination of molecular modeling approaches, molecular fingerprint-based virtual screening protocols and structure-based pharmacophore development**  
Kayık G., Tüzün N., Durdagi S.  
JOURNAL OF ENZYME INHIBITION AND MEDICINAL CHEMISTRY, cilt.32, ss.311-330, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **In silico design of novel hERG-neutral sildenafil-like PDE5 inhibitors**  
Kayık G., Tüzün N., Durdagi S.  
JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, cilt.35, ss.2830-2852, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **A DFT Study on the Binuclear CuAAC Reaction: Mechanism in Light of New Experiments**  
Özkılıç Y., Tüzün N.  
ORGANOMETALLICS, cilt.35, ss.2589-2599, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Ag-catalyzed azide alkyne cycloaddition: a DFT approach**  
Boz E., Tüzün N.  
DALTON TRANSACTIONS, cilt.45, ss.5752-5764, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Synthesis, reactions and DFT study of tropolone N,N-dimethylthiocarbamate**  
Zaim O., Tüzün N., Cevik B., Ozcan H., BOZ E.  
TETRAHEDRON, cilt.71, ss.5391-5398, 2015 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **A Quantum Mechanical Study on the Propagation Kinetics of N-methylacrylamide: Comparison With N,N-Dimethylacrylamide in Free Radical Polymerization**  
Kayık G., Tüzün N.  
MACROMOLECULAR THEORY AND SIMULATIONS, cilt.24, ss.218-231, 2015 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **A Theoretical Study On Rh(I) Catalyzed Enantioselective Conjugate Addition Reactions of Fluoroalkylated Olefins**  
Boz E., HASLAK Z. P. , Tüzün N., KONUKLAR F. A. S.  
ORGANOMETALLICS, cilt.33, ss.5111-5119, 2014 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Stereoselective propagation in free radical polymerization of acrylamides: A DFT study**  
Kayık G., Tüzün N.  
JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, cilt.49, ss.55-67, 2014 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- **Prediction of the H-1 NMR spectra of epoxy-fused cyclopentane derivatives by calculations of chemical shifts and spin-spin coupling constants**

Ozen C., Yildirim A., Tüzün N., Haslak P., Dogan E., Acar E., Aviyente V.

MOLECULAR PHYSICS, cilt.111, ss.3147-3155, 2013 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Reaction mechanism of ruthenium-catalyzed azide-alkyne cycloaddition reaction: A DFT study**

Boz E., Tüzün N.

JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, cilt.724, ss.167-176, 2013 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **The mechanism of copper-catalyzed azide-alkyne cycloaddition reaction: A quantum mechanical investigation**

Ozen C., Tüzün N.

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, cilt.34, ss.101-107, 2012 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **A QSPR Study on the Physical Properties of Substituted Polypyrroles and Poly(paraphenylenes)**

Yildirim E., AKSOY D., TUZUN N., Yurtsever M.

DESIGNED MONOMERS AND POLYMERS, cilt.14, ss.79-93, 2011 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Mechanistic Study on [3+2] Cycloaddition and Cyclopropanation Reactions of 1,3-Dioxepine Derivatives in the Presence of Copper(I) Catalyst**

Ozen C., KONUKLAR F. A. S. , Tüzün N.

ORGANOMETALLICS, cilt.28, ss.4964-4973, 2009 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Cyclopolymerization Reactions of Diallyl Monomers: Exploring Electronic and Steric Effects Using DFT Reactivity Indices**

Ugur I., De Vleeschouwer F., Tüzün N., Aviyente V., Geerlings P., Liu S., Ayers P. W. , De Proft F.

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.113, ss.8704-8711, 2009 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **A DFT study on the mechanism of cyclopropanation via Cu(acac)(2)-catalyzed diazo ester decomposition**

Ozen C., TUEZUEN N. S.

ORGANOMETALLICS, cilt.27, ss.4600-4610, 2008 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **An experimental and quantum mechanical study on electrochemical properties of N-substituted pyrroles**

Tüzün N., BAYATA F., SARAC A. S.

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM, cilt.857, ss.95-104, 2008 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Metal-catalyzed cyclization reactions of carbonyl ylides: Synthesis and DFT study of mechanisms**

Celik M. A. , YURTSEVER M., TUEZUEN N., GUENGOER F. S. , SEZER O., Anac O.

ORGANOMETALLICS, cilt.26, ss.2978-2985, 2007 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Modeling the cyclopolymerization of diallyl ether and methyl alpha-[(allyloxy)methyl]acrylate**

Tuzun N., AVIYENTE V.

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, cilt.107, ss.894-906, 2007 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Modeling the effect of substitution on the Pb(OAc)(4) mediated oxidative cleavage of steroidal 1,2-diols**

Ozturk C., TOPAL K., Aviyente V., Tuzun N., FERNANDEZ E., ARSENIYADIS S.

JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.70, ss.7080-7086, 2005 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Modeling the free radical polymerization of acrylates**

Gunaydin H. M. , SALMAN S. Y. , Tuzun N., AVCI D., Aviyente V.

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, cilt.103, ss.176-189, 2005 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **A theoretical study on the mechanism of the cyclopolymerization of diallyl monomers**

Tuzun N., Aviyente V., HOUK K.

JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.68, ss.6369-6374, 2003 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Spirodiporphyrins - As binuclear metal complexes**

Vogel E., MICHELS M., ZANDER L., LEX J., Tuzun N., HOUK K.

ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, cilt.42, ss.2857-2862, 2003 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **A computational study on the substituent effect of diallylamine monomers in their cyclopolymerization reactions**

Tuzun N., Aviyente V.

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.106, ss.8184-8190, 2002 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **Theoretical study of factors controlling rates of cyclization of radical intermediates from diallylamine and diallylammonium monomers in radical polymerizations**

Tuzun N., Aviyente V., HOUK K.

JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.67, ss.5068-5075, 2002 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- **A computational approach to the polymerizabilities of diallylamines**

Tüzün N., AVİYENTE V., AVCI SEMİZ D., İNCE H. N.

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.0, ss.257-264, 2001 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)

- **A computational study of the conformational equilibria of alpha phenoxy alpha phenylthio alpha phenylseleno substituted cyclohexanones**

duran d., Tüzün N., AVİYENTE V.

JOURNAL OF CHEMICAL RESEARCH-S, cilt.0, ss.411, 2000 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)

- **Computational study of the anomeric effect in 2-[(4-substituted phenyl)seleno]-1,3-dithianes**

Senyurt N., Aviyente V.

JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-PERKIN TRANSACTIONS 2, ss.1463-1470, 1998 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

## Bilirkişi Raporları

- **Comparative density functional study of antioxidative activity of the hydroxybenzoic acids and their anions**

TÜZÜN N.

Turkish Journal Of Chemistry, 2015 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)

## Desteklenen Projeler

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, A DFT Study on the Stereoselective Propagation In Free Radical Polymerization of Acrylamides, 2016 - 2018

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Ag IN CLICK REACTION: A DFT STUDY, 2016 - 2018

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, CuAAC MECHANİSM REVİSİTED: DİNUCLEAR INTERMEDIATES İN THE PRESENCE OF NHC LİGAND, 2015 - 2018

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, RU VE CU KATALİZÖRÜ AZİT ALKİN KATILMA TEPKİMELEERİ ÜZERİNE KUANTUM MEKANİK BİR ÇALIŞMA, 2010 - 2018

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, ADFT STUDY ON THE MECHANİSM OF RUTHENİUM CATALYZED AZİDE-ALKYNE CYCLOADDİTİON REACTİON, 2009 - 2018

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Yapay Tatlandırıcı Moleküllerin Su ve Siklodekstrin Kompleksleri ile Etkileşimlerinin Yapı-Tat İlişkisi Açısından NMR Spektroskopisi ve Hesaplamalı Kimya Yöntemleri ile İncelenmesi, 2013 - 2014

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Bakır (I) Katalizörü 1,2,3-Triazol ve Fofuran Sentez Mekanizmalarına Teorik Bir Bakış, 2012 - 2014

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Rh (I) Katalizörlüğünde Floroalkili Olefinlerin Enantiyoseçici Konjuge Katılma Reaksiyonları Üzerine Hesapsal Bir Çalışma, 2012 - 2014

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, N-Metilakrilamid Türevlerin Serbest Radikal Polimerizasyonunun Modellenmesi ve Taktisitelerinin İncelenmesi, 2010 - 2012

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Ru Katalizörlü Azid Alkin Siklolatılma Tepkime Mekanizmalarının Modellenmesi, 2010 - 2012

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Karbonil Yidlerin Halkalaşma Tepkimelerinde Regioselektivitenin Hesaplamalı Kimya Yöntemleri ile Modellenmesi a,b konjuge Ketonlar, 2005 - 2007

Tüzün N., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, a,b-Konjuge Keton, Aldehit ve Esterlerden Elde Edilen Karbonil Yidlerinin Mekanistik Davranışları: Hesapsal Bir Yaklaşım, 2003 - 2007

## Atıflar

Toplam Atıf Sayısı (WOS):341

h-indeksi (WOS):11