

# Dr.Öğr.Üyesi Berkay Sütay

## Kişisel Bilgiler

**İş Telefonu:** [+90 0212 285 3157](tel:+9002122853157)

**E-posta:** sutay@itu.edu.tr

**Web:** <https://avesis.itu.edu.tr/sutay>

**Posta Adresi:** İstanbul Teknik Üniversitesi, Ayazağa Kampüsü, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Maslak, İstanbul

## Uluslararası Araştırmacı ID'leri

ScholarID: -IM9onIAAAAJ

ORCID: 0000-0003-4912-199X

Publons / Web Of Science ResearcherID: AAX-7554-2021

ScopusID: 54941333900

Yoksis Araştırmacı ID: 143813

## Eğitim Bilgileri

Doktora, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat, Kimya, Türkiye 2010 - 2016

Yüksek Lisans, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat, Kimya, Türkiye 2009 - 2010

Lisans, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 2005 - 2009

## Sertifika, Kurs ve Eğitimler

İş Sağlığı ve Güvenliği, İş Sağlığı ve Güvenliği Eğitimi, İstanbul Teknik Üniversitesi, 2016

Mesleki Eğitim, Kromatografi ve Kütle Spektrometresi, Thermo Fisher Scientific, 2007

## Araştırma Alanları

Hesapsal Kimya, Kuantum Mekaniği, Spektroskopi

## Akademik Unvanlar / Görevler

Dr.Öğr.Üyesi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat, Kimya, 2021 - Devam Ediyor  
Araştırma Görevlisi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat, Kimya, 2010 - 2016

## Verdiği Dersler

Computational Chemistry, Yüksek Lisans, 2022 - 2023, 2021 - 2022

Kimyacılar İçin Matematik, Lisans, 2022 - 2023

General Chemistry I, Lisans, 2022 - 2023, 2021 - 2022

General Chemistry Laboratory I, Lisans, 2022 - 2023, 2021 - 2022

Introduction to Quantum Chemistry, Lisans, 2022 - 2023

Genel Kimya I, Lisans, 2022 - 2023

Fiziksel Kimya, Lisans, 2021 - 2022

## **Yönetilen Tezler**

Sütay B., Computational Study on The Sensing of Explosives, Yüksek Lisans, M.Erdem(Öğrenci), 2023

Sütay B., Tüzün N., Su ile karışabilen LCST davranışlı sıcaklığı duyarlı polimerlerin su moleküllerile etkileşimlerinin kuantum mekanik yöntemlerle incelenmesi, Yüksek Lisans, F.Can(Öğrenci), 2023

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

- I. **Synthesis and characterization of tetradentate benzophenone derivative Schiff base and properties in different lyotropic media**  
Suhta A., Meral S., Alaman Ağar A., Sütay B., Vazquez Lopez E. M., Çoruh U.  
Molecular Crystals and Liquid Crystals, cilt.768, sa.2, ss.114-131, 2024 (SCI-Expanded)
- II. **Application of aza-BODIPY as a Nitroaromatic Sensor**  
Sadıkogulları B. C., Koramaz I., Sütay B., Karagöz B., Özdemir A.  
ACS Omega, cilt.8, sa.28, ss.25254-25261, 2023 (SCI-Expanded)
- III. **Synthesis, Photophysical properties and OFET application of thienothiophene and benzothiadiazole based Donor-π-Acceptor-π (D-π -A-π) type conjugated polymers**  
Öztürk S. B., Isci R., Farajı S., Sütay B., Majewski L. A., Öztürk T.  
European Polymer Journal, cilt.191, 2023 (SCI-Expanded)
- IV. **Thienothiophene and Triphenylbenzene Based Electroactive Conjugated Porous Polymer for Oxygen Reduction Reaction (ORR)**  
Isci R., Balkan T., Tafazoli S., Sütay B., EROĞLU M. S., Öztürk T.  
ACS APPLIED ENERGY MATERIALS, cilt.5, sa.11, ss.13284-13292, 2022 (SCI-Expanded)
- V. **Copolymers of 3-arylthieno[3,2-b]thiophenes bearing different substituents: Synthesis, electronic, optical, sensor and memory properties**  
Gunturkun D., Isci R., Sütay B., Majewski L. A., Farajı S., Öztürk T.  
European Polymer Journal, cilt.170, 2022 (SCI-Expanded)
- VI. **Triphenylamine/Tetraphenylethylene Substituted 4-Thieno[3,2-b]thiophen-3-ylbenzonitriles: Synthesis, Photophysical-Electronic Properties, and Applications**  
Isci R., Varzeghani A. R., Kaya K., Sütay B., Tekin E., Öztürk T.  
ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY & ENGINEERING, cilt.10, ss.1605-1615, 2022 (SCI-Expanded)
- VII. **Influence of hydrogen bond on the mesomorphic behaviour in urethane based liquid crystalline compounds: Experimental and computer simulation study**  
Korkmaz B., Agtas S., Sütay B., Yıldırım E., Yıldız I., Yurtsever M., Şenkal B. F., Gürsel Y.  
Journal of Molecular Liquids, cilt.317, 2020 (SCI-Expanded)
- VIII. **Theoretical design of high-mobility bithiophene imide (BTI) derivative polymeric semiconductors**  
Sütay B., Onaran G., Yıldırım E., Yurtsever M.  
Computational Materials Science, cilt.166, ss.162-169, 2019 (SCI-Expanded)
- IX. **Adsorption of dihalogen molecules on pristine graphene surface: Monte Carlo and molecular dynamics simulation studies**  
Sütay B., Yurtsever M.  
Journal of Molecular Modeling, cilt.23, sa.5, 2017 (SCI-Expanded)
- X. **A post-HF study on the halogen bonding interaction of pyrene with diatomic halogen molecules**  
Sütay B., Yurtsever M., Yurtsever E.  
International Journal of Quantum Chemistry, cilt.116, sa.9, ss.702-709, 2016 (SCI-Expanded)
- XI. **A post-HF study on the interaction of iodine with small polycyclic aromatic hydrocarbons**  
Sütay B., Yurtsever M., Yurtsever E.  
Journal of Molecular Modeling, cilt.20, sa.10, ss.1-10, 2014 (SCI-Expanded)
- XII. **Synthesis, characterization and biological activity of a new long-chain imine ligand and some transition metal complexes in solvent-free conditions**

- Tüncel Elmalı F., Sütay B., Ozbek B., Demirhan N.  
Main Group Chemistry, cilt.11, sa.3, ss.217-222, 2012 (SCI-Expanded)
- XIII. **Intermolecular interactions in nitrogen-containing aromatic systems**  
Sütay B., Tekin A., Yurtsever M.  
Theoretical Chemistry Accounts, cilt.131, sa.2, ss.1-13, 2012 (SCI-Expanded)

## Diger Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Thieno[3,2-b]thiophene and triphenylamine-based hole transport materials for perovskite solar cells**  
Isci R., Unal M., Yesil T., Ekici A., Sütay B., ZAFER C., Öztürk T.  
Frontiers in Materials, cilt.10, 2023 (Scopus)
- II. **On the Systematics of Mass Spectrometry: A New Graph-Theoretical Method**  
Sütay B.  
Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry, cilt.4, sa.1, ss.179-196, 2017 (Hakemli Dergi)

## Hakemli Kongre / Sempozyum Bildiri Kitaplarında Yer Alan Yayınlar

- I. **A Computational Study on The Sensing of Explosives**  
Sözbir M. E., Sütay B.  
19th International Scientific Research Congress, Ankara, Türkiye, 16 - 17 Mart 2024, ss.39-44
- II. **A Multi-Reference Study on The Contribution of Nondynamical and Dynamical Electron Correlation to Dissociation Energies of Li<sub>2</sub>-F<sub>2</sub> Diatomic Molecules**  
Sütay B.  
19th Asian Chemical Congress, İstanbul, Türkiye, 9 - 14 Temmuz 2023
- III. **Application of aza-BODIPY as a Nitroaromatic Sensor**  
Sadikoğulları B. C., Koramaz I., Sütay B., Karagöz B., Özdemir A.  
19th Asian Chemical Congress, İstanbul, Türkiye, 9 - 14 Temmuz 2023, ss.292
- IV. **Patlayıcı Maddelerin Deteksiyonu Üzerine Hesaplama Bir Çalışma**  
Sözbir M. E., Sütay B.  
Savunma Sanayii Sempozyumu ve Sergisi '22, Kayseri, Türkiye, 13 - 15 Ekim 2022, ss.201-205
- V. **Experimental and DFT Study on Electronic and Optical Properties of Donor-Acceptor Type Copolymers Containing Thiophene (T), Thienothiophene (TT), Dithienothiophene (DTT) and Bithiazole (NBT) Units**  
Sütay B., Yurtsever M.  
İstanbul International Organic Electronic Symposium, İstanbul, Türkiye, 2 - 04 Aralık 2019, ss.1
- VI. **A DFT study on electronic and optical properties of BTI based oligomers**  
Sütay B., Yurtsever M.  
International Symposium on Chemistry Via Computation, İstanbul, Türkiye, 30 Ekim 2017, ss.54
- VII. **The Investigation of Adsorption Processes of Dihalogen Molecules onto Pristine Graphene Surface via Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations**  
Sütay B., Yurtsever M.  
2nd Graphene and Related Technologies: from Laboratory to Industry symposium, İstanbul, Türkiye, 15 - 16 Ekim 2015, ss.1
- VIII. **Multiscale Modeling And Study On The Exfoliation Of Functionalized Graphene Analogs**  
Sütay B., Yurtsever M.  
ECOSS-30 - 30th European Conference on Surface Science, İstanbul, Türkiye, 31 Ağustos - 05 Eylül 2014, ss.2
- IX. **An Ab Initio Study On The Interaction Between Small Functional Graphene Analogs With Iodine Molecule For The Halogene Intercalation Process Of Graphene Sysnthesis**

- Sütay B., Yurtsever M.  
ECOSS-30 - 30th European Conference on Surface Science, İstanbul, Türkiye, 31 Ağustos - 05 Eylül 2014, ss.1
- X. An Ab Initio Study on the Interaction of Iodine with Small Polyaromatic Hydrocarbons  
Sütay B., Yurtsever M.  
10th Chemical Physics Conference, Ankara, Türkiye, 10 - 12 Ekim 2012, ss.1
- XI. Intermolecular Interactions in Nitrogen containing Aromatic Systems Pyrazine and 1 3 5 triazine dimers  
Sütay B., Yurtsever M.  
9th Chemical Physics Conference, İzmir, Türkiye, 14 - 16 Ekim 2010, ss.1

## Desteklenen Projeler

Sütay B., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Kuantum Mekanik Yöntemler Kullanılarak Nitroaromatik ve Nitramin Tipi Patlayıcıların Gaz Fazında Etkin Deteksiyonu Üzerine Hesaplamalı Bir Çalışma, 2023 - 2023

Sütay B., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Birinci Sıra Atomların İki Atomlu Moleküllerinin Ayışma Enerjilerine Dinamik ve Dinamik Olmayan Elektron Korelasyonunun Katkısının Çok Referanslı Yöntemlerle Belirlenmesi, 2022 - 2023

Yurtsever M., TÜBİTAK Projesi, Yüksek Mobilitedeli Polimerik Yarıiletken Malzemelerin Tasarlanması Özelliklerinin Kuantum Mekanik ve Moleküler Dinamik Simülasyon Yöntemleriyle İncelenmesi, 2015 - 2019

Yurtsever M., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Fonksiyonlaşturanın grafenin küçük moleküllerle olan etkileşime elektronik ve dağılma özelliklerine olan etkisinin kuantum mekanik ve MD simülasyon yöntemleriyle incelenmesi, 2014 - 2017

Yurtsever M., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Nitrojen İçeren Aromatik Sistemlerdeki CH Etkileşimlerinin Gelişmiş HF ve DFT SAPT Yöntemleri ile Teorik Olarak İncelenmesi, 2010 - 2014

Yurtsever M., TÜBİTAK Projesi, Segmentli Termoplastik Blok Kopolimerlerin Nano Mezo Mikro Ölçekte Modellemesi ve Özelliklerinin Simülasyon Yöntemleri ile İncelenmesi, 2008 - 2012

Yurtsever M., TÜBİTAK Projesi, Poliparafenilen Bazlı Çeşitli Polimerik Nanokompozit Malzemenin Mikroyapısal Özellikleriyle Morfolojik Mekanik Elektronik Ve Optik Özellikleri Arasındaki İlişkilerin Kuantum Mekanik ve İstatistik Mekanik Yöntemlerle İncelenmesi, 2007 - 2010

## Bilimsel Dergilerdeki Faaliyetler

Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry, Danışma Kurul Üyesi, 2016 - Devam Ediyor

## Bilimsel Hakemlikler

TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Eylül 2022

Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry, Diğer İndekslerce Taranan Dergi, Haziran 2015

## Metrikler

Yayın: 27

Atıf (WoS): 40

Atıf (Scopus): 75

H-İndeks (WoS): 4

H-İndeks (Scopus): 5

## **Kongre ve Sempozyum Katılımı Faaliyetleri**

Istanbul International Organic Electronic Symposium, Katılımcı, İstanbul, Türkiye, 2019

International Symposium on Chemistry ViA Computation, Katılımcı, İstanbul, Türkiye, 2017

2nd Graphene and Related Technologies: from Laboratory to Industry symposium, Katılımcı, İstanbul, Türkiye, 2015

ECOSS-30 - 30th European Conference on Surface Science, Katılımcı, İstanbul, Türkiye, 2014

ECOSS-30 - 30th European Conference on Surface Science, Katılımcı, İstanbul, Türkiye, 2014

10th Chemical Physics Conference, Katılımcı, Ankara, Türkiye, 2012

9th Chemical Physics Conference, Katılımcı, İzmir, Türkiye, 2010

## **Ödüller**

Sütay B., Bölüm Üçüncülüğü, Yıldız Teknik Üniversitesi, Haziran 2009