

Prof.Dr. UĞUR BOZKAYA

Kişisel Bilgiler

E-posta: ugur.bozkaya@hacettepe.edu.tr

Web: <https://avesis.hacettepe.edu.tr/ugur.bozkaya>

Eğitim Bilgileri

Bütünleşik Doktora, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya, Türkiye 2004 - 2011

Lisans, Gazi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 1999 - 2003

Yabancı Diller

İngilizce, C1 İleri

Araştırma Alanları

Kimya, Fizikokimya, Hesapsal Kimya, Kuantum Mekaniği, Temel Bilimler

Akademik Unvanlar / Görevler

Prof.Dr., Hacettepe Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2020 - Devam Ediyor

Doç.Dr., Hacettepe Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2015 - 2020

Doç.Dr., Atatürk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2014 - 2015

Yrd.Doç.Dr., Atatürk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2011 - 2014

Mesleki Deneyim

Bölüm Başkan Yardımcısı, Atatürk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2012 - 2014

Mevlana Değişim Programı Koordinatörü, Atatürk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2013 - 2013

Yönetilen Tezler

BOZKAYA U., Optimize orbitalli möller-plesset pertürbasyon ve eşleşmiş elektron çiftleri teorilerinin termokimya ve kinetiğe uygulamaları, Yüksek Lisans, E.SOYDAŞ(Öğrenci), 2015

SCI, SSCI ve AHCI İndekslerine Giren Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- Assessment of the Density-Fitted Second-Order Quasidegenerate Perturbation Theory for Transition Energies: Accurate Computations of Singlet-Triplet Gaps for Charge-Transfer Compounds**
Servan S. A. , ÜNAL A., Hamarat B., BOZKAYA U.
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.124, ss.6889-6898, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- II. **Computational Study for the Reaction Mechanism of N-Hydroxyphthalimide-Catalyzed Oxidative Cleavage of Alkenes**
EŞSİZ S., BOZKAYA U.
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.85, ss.10136-10142, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- III. **PSI4 1.4: Open-source software for high-throughput quantum chemistry**
Smith D. G. A. , Burns L. A. , Simmonett A. C. , Parrish R. M. , Schieber M. C. , Galvelis R., Kraus P., Kruse H., Di Remigio R., Alenaizan A., et al.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, cilt.152, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- IV. **Ionized water clusters (H₂O)(n)(+), n=2 to 6: A high-accuracy study of structures and energetics**
ÜNAL A., BOZKAYA U.
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, cilt.120, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- V. **Efficient and automated computation of accurate molecular geometries using focal-point approximations to large-basis coupled-cluster theory**
Warden C. E. , Smith D. G. A. , Burns L. A. , BOZKAYA U., Sherrill C. D.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, cilt.152, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- VI. **State-of-the-art computations of dipole moments using analytic gradients of high-level density-fitted coupled-cluster methods with focal-point approximations**
BOZKAYA U., Soydas E., Filiz B.
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, cilt.41, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- VII. **Conformational Characterization of Polyelectrolyte Oligomers and Their Noncovalent Complexes Using Ion Mobility-Mass Spectrometry**
ATAKAY M., Aksakal F., BOZKAYA U., SALİH B., Wesdemiotis C.
JOURNAL OF THE AMERICAN SOCIETY FOR MASS SPECTROMETRY, cilt.31, ss.441-449, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- VIII. **Efficient Implementation of the Second-Order Quasidegenerate Perturbation Theory with Density-Fitting and Cholesky Decomposition Approximations: Is It Possible To Use Hartree-Fock Orbitals for a Multiconfigurational Perturbation Theory?**
BOZKAYA U.
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION, cilt.15, ss.4415-4429, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- IX. **An anomalous addition of chlorosulfonyl isocyanate to a carbonyl group: the synthesis of ((3aS, 7aR, E)-2-ethyl-3-oxo-2,3,3a, 4,7,7a-hexahydro-1H-indol-1-ylidene)sulfamoyl chloride**
KÖSE A., ÜNAL A., ŞAHİN E., BOZKAYA U., KARA Y.
BEILSTEIN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.15, ss.931-936, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- X. **Aza-Nazarov Cyclization Reactions via Anion Exchange Catalysis**
Donmez S. E. , Soydas E., Aydin G., ŞAHİN O., BOZKAYA U., TÜRKMEN Y. E.
ORGANIC LETTERS, cilt.21, ss.554-558, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XI. **State-of-the-Art Computations of Vertical Ionization Potentials with the Extended Koopmans' Theorem Integrated with the CCSD(T) Method**
BOZKAYA U., ÜNAL A.
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.122, ss.4375-4380, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XII. **Analytic Energy Gradients for Orbital-Optimized MP3 and MP2.5 with the Density-Fitting Approximation: An Efficient Implementation**
BOZKAYA U.
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, cilt.39, ss.351-360, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIII. **Anionic water pentamer and hexamer clusters: An extensive study of structures and energetics**
ÜNAL A., BOZKAYA U.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, cilt.148, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIV. **Transition Metal Cation- π Interactions: Complexes Formed by Fe²⁺, Co²⁺, Ni²⁺, Cu²⁺, and Zn²⁺ Binding with Benzene Molecules**
Demircan C. A. , BOZKAYA U.
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.121, ss.6500-6509, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- XV. **PSI4 1.1: An Open-Source Electronic Structure Program Emphasizing Automation, Advanced Libraries, and Interoperability**
Parrish R. M. , Burns L. A. , Smith D. G. A. , Simmonett A. C. , DePrince A. E. , Hohenstein E. G. , BOZKAYA U., Sokolov A. Y. , Di Remigio R., Richard R. M. , et al.
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION, cilt.13, ss.3185-3197, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVI. **Analytic energy gradients for the coupled-cluster singles and doubles with perturbative triples method with the density-fitting approximation**
BOZKAYA U., Sherrill C. D.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, cilt.147, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVII. **Dihydropyridazine-appended dibenzosuberones as a new class of fluorophores: Application to fluoride sensing**
Kocak R., Yildiz D., BOZKAYA U., DAŞTAN A., BOZDEMİR Ö. A.
TETRAHEDRON LETTERS, cilt.58, ss.2981-2985, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVIII. **Charge-Transfer Complex of p-Aminodiphenylamine with Maleic Anhydride: Spectroscopic, Electrochemical, and Physical Properties**
KARACA E., Can H. K. , BOZKAYA U., Pekmez N. O.
CHEMPHYSICHEM, cilt.17, ss.2056-2065, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIX. **Analytic energy gradients for the coupled-cluster singles and doubles method with the density-fitting approximation**
BOZKAYA U., Sherrill C. D.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, cilt.144, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XX. **A noniterative asymmetric triple excitation correction for the density-fitted coupled-cluster singles and doubles method: Preliminary applications**
BOZKAYA U.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, cilt.144, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXI. **Orbital-optimized linearized coupled-cluster doubles with density-fitting and Cholesky decomposition approximations: an efficient implementation**
BOZKAYA U.
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, cilt.18, ss.11362-11373, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXII. **Orbital-Optimized MP3 and MP2.5 with Density-Fitting and Cholesky Decomposition Approximations**
BOZKAYA U.
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION, cilt.12, ss.1179-1188, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXIII. **A rare gamma-pyranopyrazole skeleton: design, one-pot synthesis and computational study**
Ucuncu M., Canturk C., Karakus E., Zeybek H., BOZKAYA U., Soydas E., ŞAHİN E., EMRULLAHOĞLU M.
ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY, cilt.14, ss.7490-7494, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

Desteklenen Projeler

BOZKAYA U., Ünal A., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Optimize Orbitalli İkili Uyarılmış Çiftleşmiş Küme Teorisinin Enerji ve Analitik Gradient İfadelerinin Modern Tensör Ayrıştırma Yöntemleriyle Formülasyonu Etkin Programlanması ve Açık Kabuklu Kimyasal Sistemlere Uygulamaları, 2016 - 2018

BOZKAYA U., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Geçiş Metali Komplekslerinin Moleküler Özelliklerinin ve Elektronik Yapılarının Yüksek Seviyeli Elektron Korelasyon Yöntemleriyle Araştırılması, 2016 - 2017

Atıflar

Toplam Atıf Sayısı (WOS):578

h-indeksi (WOS):7