



nurcant@itu.edu.tr

PROF. DR. NURCAN TÜZÜN

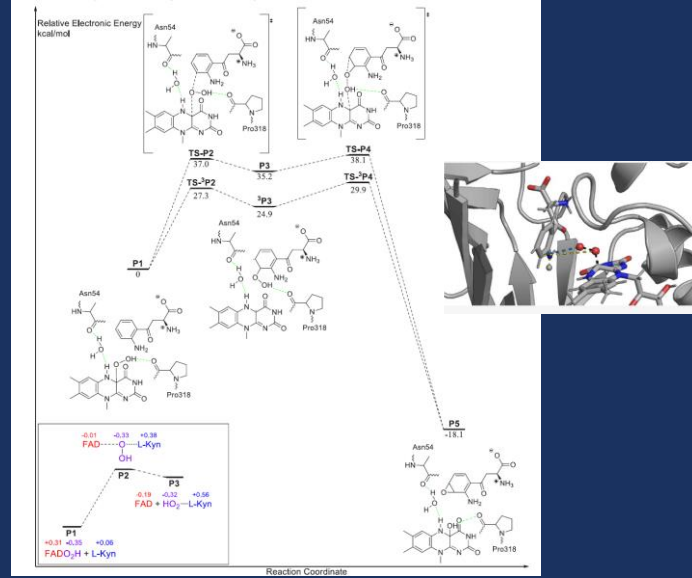
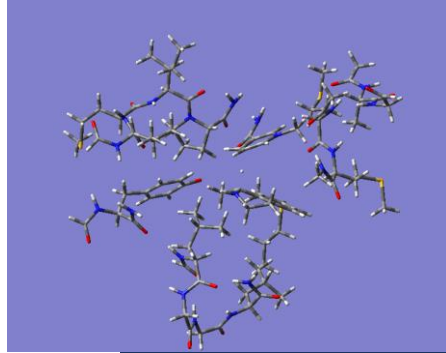
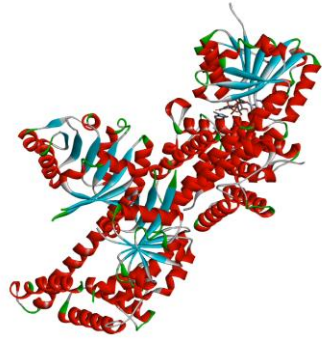
HESAPLAMALI KİMYA VE BİYOLOJİ GRUBU

HESAPLAMALI KİMYA ALANINDA ÇALIŞMAKTAYIM. ÇALIŞMALARIMIZDA KUANTUM MEKANİK, MOLEKÜLER DİNAMİK VE SANAL TARAMA-KENETLEME YÖNTEMLERİNİ KULLANMAKTAYIZ. BU YÖNTEMLERLE, TEPKİME MEKANİZMALARININ MODELLENMESİ (ORGANİK VE ENZİM TEPKİMELERİ), YAPI-AKTİVİTE İLİŞKİSİNİN İNCELENMESİ, YAPILARIN OPTO-ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN MODELLENMESİ VE İLAÇ TASARIMI ALANINDA ÇALIŞMALAR YAPMAKTAYIZ. GRUBUMUZDA 3 DOKTORA VE 2 YÜKSEK LİSANS ÖĞRENCİSİ BULUNMAKTADIR.

Klik tepkimelerinin modellenmesi üzerine bir yüksek lisans öğrencisi ile çalışmak istiyorum.

Tepkime Mekanizması Modellenmesi

Biyolojik Oksidoredüktaz Enzimleri İle Kiral Aminlerin Asimetrik Sentezinin İncelenmesi



Computational Survey of Recent Experimental Developments in the Hydroxylation Mechanism of Kynurenine 3-Monooxygenase
J. Phys. Chem. A 2021, 125, 43, 9459–9477

Yapıların Opto-Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi

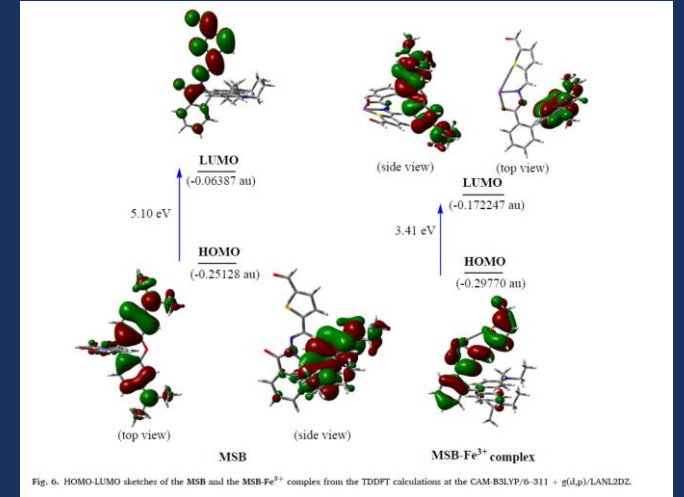


Fig. 6. HOMO-LUMO sketches of the MSB and the MSB-Fe³⁺ complex from the TDDFT calculations at the CAM-B3LYP/6-311 + g(d,p)/LANL2DZ.

Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolec Spectroscopy 287 (2023) 122060