

Doç. Dr. HAKAN KAYI

Kişisel Bilgiler

İş Telefonu: [+90 312 203 3438](tel:+903122033438)

E-posta: hkayi@ankara.edu.tr

Web: <https://avesis.ankara.edu.tr/hkayi>

Uluslararası Araştırmacı ID'leri

ScholarID: zK2rKYQAAAAJ

ORCID: 0000-0001-7300-0325

Publons / Web Of Science ResearcherID: C-7300-2009

ScopusID: 22938517300

Yoksis Araştırmacı ID: 17253

Biyografi

Dr. Kayı obtained his B.Sc. and M.Sc. degrees in Chemical Engineering from Hacettepe University. He started his Ph.D. studies in the Computer-Chemie-Centrum of the FAU Erlangen-Nürnberg, Germany with the *full scholarship* of Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), and obtained his Dr. rer. nat. degree in 2009. Then he started to work as a postdoctoral research fellow at the University of Hawaii at Manoa on the *Kuiper Belt Objects* project supported by W.M. Keck Foundation, NASA Astrobiology Institute and University of Hawaii. After successfully completion of the project, he moved to University of Texas at Austin as a postdoctoral research associate in the Institute for Theoretical Chemistry to work on a *pseudo Jahn-Teller effect* related project. He came back to serve his motherland in 2013.

For his research lab, please visit: <http://compchem.ankara.edu.tr/>

Eğitim Bilgileri

Doktora, Friedrich Alexander Universitat Erlangen Nürnberg, Kimya, Almanya 2004 - 2009

Yüksek Lisans, Hacettepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Mühendisliği (Y1) (Tezli), Türkiye 2000 - 2003

Lisans, Hacettepe Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, Türkiye 1995 - 2000

Yabancı Diller

İngilizce, C1 İleri

Yaptığı Tezler

Doktora, Parameterization of the AM1 semiempirical molecular orbital method for the first-row transition metals and other elements, Friedrich Alexander Universitat Erlangen Nürnberg, Kimya, 2009

Yüksek Lisans, Yapay nöral ağ modeli ile N-izopropilakrilamid-akrilik asit kopolimerinin alt kritik çözelti sıcaklığının tahmini, Hacettepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Mühendisliği A.B.D., 2003

Araştırma Alanları

Kimya Mühendisliği ve Teknolojisi, Kimya

Akademik Unvanlar / Görevler

Doç. Dr., Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 2020 - Devam Ediyor
Dr. Öğr. Üyesi, Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 2018 - 2020
Dr. Öğr. Üyesi, Atılım Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 2013 - 2018
Araştırmacı, The University of Texas at Austin, Institute for Theoretical Chemistry, Chemistry, 2011 - 2013
Araştırmacı, University of Hawaii at Manoa, Chemistry, W.M. Keck Research Laboratory in Astrochemistry, 2010 - 2011
Araştırma Görevlisi, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Chemie Und Pharmazie, Computer-Chemie-Centrum, 2004 - 2009
Araştırma Görevlisi, Hacettepe Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 2001 - 2004

Akademik İdari Deneyim

Enstitü Müdür Yardımcısı, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 2020 - 2022
Bölüm Başkanı Yardımcısı, Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 2018 - 2019

Verdiği Dersler

HEAT TRANSFER, Lisans, 2023 - 2024, 2022 - 2023, 2021 - 2022, 2020 - 2021
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ LABORATUVARI I, Lisans, 2023 - 2024, 2022 - 2023, 2021 - 2022, 2020 - 2021
CHEMICAL ENGINEERING LAB I, Lisans, 2022 - 2023, 2021 - 2022
CHEMICAL ENGINEERING LAB III, Lisans, 2022 - 2023, 2021 - 2022
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ LABORATUVARI III, Lisans, 2022 - 2023, 2020 - 2021, 2019 - 2020
GRADUATION THESIS II, Lisans, 2022 - 2023
FLUID MECHANICS, Lisans, 2022 - 2023, 2021 - 2022, 2019 - 2020, 2018 - 2019
FLUID MECHANICS, Lisans, 2022 - 2023, 2020 - 2021, 2019 - 2020
PROCESS DESIGN I, Lisans, 2023 - 2024, 2022 - 2023
PROCESS DESIGN I, Lisans, 2022 - 2023
SCIENTIFIC, CULTURAL and SOCIAL ACTIVITIES, Lisans, 2022 - 2023
PROCESS DESIGN II, Lisans, 2021 - 2022
ARAŞTIRMA TEKNİKLERİ II, Lisans, 2021 - 2022, 2020 - 2021, 2019 - 2020
NUMERICAL METHODS, Lisans, 2021 - 2022, 2020 - 2021, 2019 - 2020
ARAŞTIRMA TEKNİKLERİ, Lisans, 2021 - 2022, 2020 - 2021
GRADUATION THESIS, Lisans, 2022 - 2023
INTERNSHIP, Lisans, 2022 - 2023
NUMERICAL METHODS, Lisans, 2021 - 2022, 2019 - 2020, 2018 - 2019
ARAŞTIRMA TEKNİKLERİ, Lisans, 2021 - 2022
INTERNSHIP, Lisans, 2021 - 2022
ARAŞTIRMA TEKNİKLERİ I, Lisans, 2021 - 2022, 2020 - 2021
PROCESS DESIGN I, Lisans, 2021 - 2022
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ LABORATUVARI III, Lisans, 2021 - 2022
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ LABORATUVARI II, Lisans, 2020 - 2021
INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING, Lisans, 2021 - 2022, 2020 - 2021, 2019 - 2020, 2018 - 2019
PROSES TASARIMI I, Lisans, 2020 - 2021, 2019 - 2020

ORIENTATION PROGRAMMING TO THE UNIVERSITY LIFE, Lisans, 2019 - 2020

Kimyasal Proses Endüstrileri, Yüksek Lisans, 2017 - 2018, 2016 - 2017, 2014 - 2015

ISI VE KÜTLE TRANSFERİ, Lisans, 2017 - 2018, 2016 - 2017, 2015 - 2016, 2014 - 2015

KİMYASAL SÜREÇ HESAPLAMALARI, Lisans, 2017 - 2018, 2016 - 2017, 2015 - 2016, 2014 - 2015, 2013 - 2014, 2012 - 2013

ÇEVRE KİRLİLİĞİ, Lisans, 2017 - 2018, 2016 - 2017, 2015 - 2016, 2014 - 2015

MÜHENDİSLİKTE KÜTLE VE ENERJİ DENKLİKLERİ, Lisans, 2017 - 2018, 2016 - 2017, 2015 - 2016, 2014 - 2015, 2013 - 2014

Kimyasal Hesaplamalar, Doktora, 2013 - 2014

Yönetilen Tezler

Kayi H., Not defined., Bütünleşik Doktora, E.NUR(Öğrenci), Devam Ediyor

Kayi H., Metal Organik Kafes Temelli Gübre Üretimi: Moleküler Benzetim ve Kontrollü Salım Uygulamaları, Bütünleşik Doktora, R.TAŞ(Öğrenci), Devam Ediyor

KAYI H., Benzokalkojendiazol bazlı verici-alıcı-verici tipi polimerlerin elektronik bant aralığının yoğunluk fonksiyoneli teorisiyle incelenmesi, Yüksek Lisans, Ö.ÖZKILINÇ(Öğrenci), 2021

KAYI H., Alüminyum yüzeylere uygulanan su bazlı ve solvent bazlı boyaların çevresel etki ve dayanımlarının incelenmesi, Yüksek Lisans, C.KÜÇÜKOĞLU(Öğrenci), 2021

KAYI H., Kalkojen atomlarının kalkojendiazolokinoksalin içeren yarı iletken polimerlerin elektronik bant aralığı üzerindeki etkilerinin kuantum mekanik yöntemlerle incelenmesi, Yüksek Lisans, E.UYANIK(Öğrenci), 2021

KAYI H., Prediction of kinematic viscosity and density of diesel fuel from physical properties by artificial neural networks, Yüksek Lisans, A.ABDULQADER(Öğrenci), 2020

KAYI H., Prediction of chemical oxygen demand from the chemical composition of wastewater by artificial neural networks, Yüksek Lisans, B.AHMED(Öğrenci), 2019

KAYI H., Design of novel platinum and palladium complexes containing pyridyl type ligands for cancer tumor treatment using molecular modeling approach, Doktora, R.HADI(Öğrenci), 2018

KAYI H., Prediction of the kinematic viscosity of petroleum fractions, Yüksek Lisans, H.AHMED(Öğrenci), 2018

KAYI H., Neural network prediction of flash point of diesel fuel from its chemical composition and physical properties, Yüksek Lisans, Y.MUHSIN(Öğrenci), 2017

KAYI H., Design and optimization of an atmospheric distillation unit in an oil refinery, Yüksek Lisans, K.HUSEIN(Öğrenci), 2017

KAYI H., Modeling and simulation of a vacuum distillation unit in an oil refinery, Yüksek Lisans, A.M.ALI(Öğrenci), 2017

KAYI H., Recovery of silver from silver oxide batteries: A combined experimental and computational study, Yüksek Lisans, A.BUSHRA(Öğrenci), 2017

KAYI H., Theoretical investigation of carbonyl sulfide capture by aqueous diethanolamine solution, Yüksek Lisans, A.MEFTAH(Öğrenci), 2017

SCI, SSCI ve AHCI İndekslerine Giren Dergilerde Yayınlanan Makaleler

I. Effect of chalcogen atoms on the electronic band gaps of the quinoxaline containing donor-acceptor-donor type semiconducting polymers: a systematic DFT investigation

Kayi H., Şen E., Özkılınç Ö.

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.30, ss.1-12, 2024 (SCI-Expanded)

II. Ti-substituted organosilica membranes for H₂ sieving: Sol-gel and DFT insights

KAYI H., Kaya P., Kurt T., Mirza E. S., TOPUZ B.

INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY, cilt.65, ss.496-504, 2024 (SCI-Expanded)

III. Antiproliferative activity of platinum(II) and copper(II) complexes containing novel biquinoxaline ligands

El-Beshti H. S., Gercek Z., KAYI H., Yildizhan Y., Cetin Y., Adiguzel Z., Gungor G., Ozalp-Yaman S.
METALLOMICS, cilt.16, sa.2, 2024 (SCI-Expanded)

- IV. **Design of a Zr-based metal-organic framework as an efficient fosfomycin carrier: a combined experimental and DFT study**
Topuz B., Kayı H., Şahin T., Ersoy F. Ş., Günyaktı A., Karakeçili A.
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, cilt.47, sa.3, ss.1278-1290, 2023 (SCI-Expanded)
- V. **Anticancer investigation of platinum and copper-based complexes containing quinoxaline ligands**
El-Beshti H. S., Yildizhan Y., KAYI H., Cetin Y., Adiguzel Z., Gungor-Topcu G., GERÇEK Z., ÖZALP YAMAN Ş.
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, cilt.1250, 2022 (SCI-Expanded)
- VI. **Monodisperse-porous cerium oxide microspheres carrying iridium oxide nanoparticles as a heterogeneous catalyst for water oxidation**
HAMALOĞLU K. Ö., Tosun R. B., KAYI H., AKKAŞ KAVAKLI P., KAVAKLI C., Tuncel A.
APPLIED SURFACE SCIENCE, cilt.547, 2021 (SCI-Expanded)
- VII. **Monodisperse-porous cerium oxide microspheres as a new support with appreciable catalytic activity for a composite catalyst in benzyl alcohol oxidation**
HAMALOĞLU K. Ö., Tosun R. B., Ulu S., KAYI H., KAVAKLI C., AKKAŞ KAVAKLI P., Kip C., Tuncel A.
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, cilt.45, sa.4, ss.2019-2029, 2021 (SCI-Expanded)
- VIII. **Capture of Carbonyl Sulfide by Organic Liquid Mixtures: A Systematic DFT Investigation**
Abduesslam M., KAYI H.
INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH, cilt.60, sa.3, ss.1366-1374, 2021 (SCI-Expanded)
- IX. **Radical cleavage pathway and DNA docking studies of novel chemotherapeutic platinum agent of 5,6-di-2-ithienyl-2,3-dihydropyrazine**
El Hag R., Abdusalam M. M., Acilan C., KAYI H., ÖZALP YAMAN Ş.
POLYHEDRON, cilt.170, ss.25-33, 2019 (SCI-Expanded)
- X. **Effect of chalcogen atoms on the electronic band gaps of donor-acceptor-donor type semiconducting polymers: a systematic DFT investigation**
Ozkilinc O., KAYI H.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.25, sa.6, 2019 (SCI-Expanded)
- XI. **Innovative Carbon Dioxide-Capturing Organic Solvent: Reaction Mechanism and Kinetics**
YÜKSEL ORHAN Ö., Tankal H., KAYI H., Alper E.
CHEMICAL ENGINEERING & TECHNOLOGY, cilt.40, sa.4, ss.737-744, 2017 (SCI-Expanded)
- XII. **Design of novel tellurium and selenium containing semiconducting polymers using quantum mechanical tools**
Kaya B., KAYI H.
COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY, cilt.1099, ss.45-54, 2017 (SCI-Expanded)
- XIII. **Kinetics of CO₂ capture by carbon dioxide binding organic liquids: Experimental and molecular modelling studies**
YÜKSEL ORHAN Ö., Tankal H., KAYI H., Alper E.
INTERNATIONAL JOURNAL OF GREENHOUSE GAS CONTROL, cilt.49, ss.379-386, 2016 (SCI-Expanded)
- XIV. **Kinetics of CO₂ Capture by Carbon Dioxide Binding Organic Liquids**
YÜKSEL ORHAN Ö., KAYI H., Alper E.
ENERGY, TRANSPORTATION AND GLOBAL WARMING, cilt.PartF2, ss.591-603, 2016 (SCI-Expanded)
- XV. **Experimental and theoretical investigation of the reaction between CO₂ and carbon dioxide binding organic liquids**
Tankal H., YÜKSEL ORHAN Ö., Alper E., ÖZDOĞAN T., KAYI H.
TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY, cilt.40, sa.5, ss.706-719, 2016 (SCI-Expanded)
- XVI. **Correlations between hardness, electrostatic interactions, and thermodynamic parameters in the decomposition reactions of 3-buten-1-ol, 3-methoxy-1-propene, and ethoxyethene**
Hasanzadeh N., Nori-Shargh D., KAYI H., Javid N. R.
STRUCTURAL CHEMISTRY, cilt.26, sa.2, ss.547-554, 2015 (SCI-Expanded)
- XVII. **Spectroelectrochemical Investigation of Nuclease Active Pt(II) Complexes Containing Pyrrole Oxime**

- Erdogan D. A., KAYI H., ÖZALP YAMAN Ş.
ELECTROCHIMICA ACTA, cilt.158, ss.333-341, 2015 (SCI-Expanded)
- XVIII. **A theoretical investigation of 4,7-di(furan-2-yl)benzo[c][1,2,5]selenadiazole-based donor-acceptor type conjugated polymer**
KAYI H., Elkamel A.
COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY, cilt.1054, ss.38-45, 2015 (SCI-Expanded)
- XIX. **A computational study on 4,7-di(furan-2-yl)benzo[c][1,2,5]thiadiazole monomer and its oligomers**
KAYI H.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.20, sa.6, 2014 (SCI-Expanded)
- XX. **Conformational behaviors of trans-2,3-and trans-2,5-dihalo-1,4-diselenanes. A complete basis set, hybrid-density functional theory study and natural bond orbital interpretations**
Nori-Shargh D., Mousavi S. N., KAYI H.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.20, sa.5, 2014 (SCI-Expanded)
- XXI. **Deviations from Born-Oppenheimer Theory in Structural Chemistry: Jahn-Teller, Pseudo Jahn-Teller, and Hidden Pseudo Jahn-Teller Effects in C₃H₃ and C₃H₃⁻**
KAYI H., Garcia-Fernandez P., Bersuker I. B., Boggs J. E.
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.117, sa.36, ss.8671-8679, 2013 (SCI-Expanded)
- XXII. **Natural bond orbital, nuclear magnetic resonance analysis and hybrid-density functional theory study of sigma-aromaticity in Al₂F₆, Al₂Cl₆, Al₂Br₆ and Al₂I₆**
Nori-Shargh D., Yahyaei H., Mousavi S. N., Maasoomi A., KAYI H.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.19, sa.6, ss.2549-2557, 2013 (SCI-Expanded)
- XXIII. **Pseudo Jahn-Teller origin of bending instability of triatomic molecules**
KAYI H., Bersuker I. B., Boggs J. E.
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, cilt.1023, ss.108-114, 2012 (SCI-Expanded)
- XXIV. **A theoretical investigation of the relative stability of hydrated glycine and methylcarbamic acid-from water clusters to interstellar ices**
KAYI H., Kaiser R. I., Head J. D.
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, cilt.14, sa.14, ss.4942-4958, 2012 (SCI-Expanded)
- XXV. **AM1*parameters for palladium and silver**
KAYI H., Clark T.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.17, sa.10, ss.2585-2600, 2011 (SCI-Expanded)
- XXVI. **A computational study on the structures of methylamine-carbon dioxide-water clusters: evidence for the barrier free formation of the methylcarbamic acid zwitterion (CH₃NH₂+COO⁻) in interstellar water ices**
KAYI H., Kaiser R. I., Head J. D.
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, cilt.13, sa.23, ss.11083-11098, 2011 (SCI-Expanded)
- XXVII. **A theoretical investigation of the low energy conformers of the isomers glycine and methylcarbamic acid and their role in the interstellar medium**
KAYI H., Kaiser R. I., Head J. D.
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, cilt.13, sa.35, ss.15774-15784, 2011 (SCI-Expanded)
- XXVIII. **AM1*parameters for manganese and iron**
KAYI H., Clark T.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.16, sa.6, ss.1109-1126, 2010 (SCI-Expanded)
- XXIX. **AM1*parameters for gold**
KAYI H.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.16, sa.5, ss.1029-1038, 2010 (SCI-Expanded)
- XXX. **AM1*parameters for cobalt and nickel**
KAYI H., Clark T.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.16, sa.1, ss.29-47, 2010 (SCI-Expanded)
- XXXI. **AM1*parameters for vanadium and chromium**
KAYI H., Clark T.

- JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.15, sa.10, ss.1253-1269, 2009 (SCI-Expanded)
- XXXII. **AM1*parameters for bromine and iodine**
KAYI H., Clark T.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.15, sa.3, ss.295-308, 2009 (SCI-Expanded)
- XXXIII. **Ni(II), Cu(II), and Zn(II) Complexes of Tetradentate Schiff Base Containing Two Thiadiazoles Units: Structural, Spectroscopic, Magnetic Properties, and Molecular Modeling Studies**
SERBEST K., KAYI H., Er M., SANCAK K., DEĞİRMENCİOĞLU İ.
HETEROATOM CHEMISTRY, cilt.19, sa.7, ss.700-712, 2008 (SCI-Expanded)
- XXXIV. **AM1*parameters for copper and zinc**
KAYI H., Clark T.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.13, sa.9, ss.965-979, 2007 (SCI-Expanded)
- XXXV. **Prediction of lower critical solution temperature of N-isopropylacrylamide-acrylic acid copolymer by an artificial neural network model**
KAYI H., Tuncel S., Elkamel A., Alper E.
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, cilt.11, sa.1, ss.55-60, 2005 (SCI-Expanded)
- XXXVI. **Stimuli-responsive properties of aminophenylboronic acid-carrying thermosensitive copolymers**
Uguzdogan E., KAYI H., Denkbaz E., Patir S., Tuncel A.
POLYMER INTERNATIONAL, cilt.52, sa.5, ss.649-657, 2003 (SCI-Expanded)

Diğer Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Theoretical investigation of carbon dioxide capture by aqueous boric acid solution: A termolecular reaction mechanism**
KAYI H.
BOR DERGİSİ, cilt.3, sa.1, ss.1-7, 2018 (Hakemli Dergi)
- II. **Design and Simulation of Semiconducting Polymers for Optoelectronic Applications by Using Quantum Mechanical Tools**
Özklınç Ö., Kaya B., KAYI H.
Journal of Turkish Chemical Society, Section:B Chemical Engineering, cilt.1, sa.1, ss.127-134, 2017 (Hakemli Dergi)

Kitap & Kitap Bölümleri

- I. **Kinetics of CO₂ capture by carbon dioxide binding organic liquids**
YÜKSEL ORHAN Ö., KAYI H., ALPER E.
Energy, Transportation and Global Warming, Green Energy and Technology, Panagiotis Grammelis, Editör,
Springer International Publishing, ss.591-603, 2016
- II. **Fluorimetry**
KAYI H.
Instrumental Analysis Laboratory, Ayhan Hakan, Koçum Cengiz, Editör, Aydan Basımevi, Ankara, Ankara, ss.29-36,
2004

Hakemli Kongre / Sempozyum Bildiri Kitaplarında Yer Alan Yayınlar

- I. **Prediction of Chemical Oxygen Demand from the Chemical Composition of Wastewater by Artificial Neural Networks**
Saleh B. A., KAYI H.
1st Iraqi Academics Syndicate International Conference for Pure and Applied Sciences, IICPS 2020, Babylon,
Virtual, Irak, 5 - 06 Aralık 2020, cilt.1818

II. Artificial Neural Network Prediction of Sulfur Content of Diesel fuel from its Physical Properties

Younis Y. M., KAYI H.

2nd International Conference on Sustainable Engineering Techniques (ICSET), Baghdad, Irak, 6 - 07 Mart 2019, cilt.518

III. Quantum chemical investigation of amino acid detection and formation in low temperature molecular ices typically present in the Outer Solar System

Head J. D., KAYI H., Kaiser R. I.

245th National Spring Meeting of the American-Chemical-Society (ACS), Louisiana, Amerika Birleşik Devletleri, 7 - 11 Nisan 2013, cilt.245

Desteklenen Projeler

Kayi H., Özalp Yaman Ş., TÜBİTAK Projesi, Quorum Sensing İnhibitör Özelliği Gösteren Yeni Moleküllerin Sentezi Ve Çevreci Hidrojel Boya Sisteminde Kullanımı (TÜBİTAK1001 Proje No:123Z892), 2024 - 2026

Kayi H., Özalp Yaman Ş., TÜBİTAK Projesi, Kurşun içermeyen yeni nesil primer patlayıcı tasarımı, sentezi ve karakterizasyonu (TÜBİTAK1001 Proje No: 117Z391), 2017 - 2022

Kayi H., TÜBİTAK Projesi, Yeni yarıiletken konjüge polimerlerin tasarımı ve elektronik ve optik özelliklerinin kuantum kimyasal yöntemlerle sistematik olarak incelenmesi (TÜBİTAK3501 Proje No: 117Z354), 2017 - 2021

Kayi H., Alper E., TÜBİTAK Projesi, Karbon dioksit yakalayan organik sıvıların reaksiyon kinetiği ve mekanizmasının deneysel ve moleküler modelleme yöntemleriyle incelenmesi (TÜBİTAK1001 Proje No: 213M390), 2014 - 2016

Kayi H., Clark T., Diğer Uluslararası Fon Programları, Parameterization of AM1 for Redox-Active Metals (Almanya, Deutsche Forschungsgemeinschaft DFG, GK312-Homogeneous and Heterogeneous Electron Transfer, SFB583-Redox-Active Metal Complexes), 2004 - 2009

Kayi H., Alper E., TÜBİTAK Projesi, N-izopropil akril amid akrilik asit kopolimerinin alt kritik çözelti sıcaklığının yapay sinir ağları ile tahmini (TÜBİTAK Proje No: MİSAG 242, 102M088), 2003 - 2004

Bilimsel Hakemlikler

JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Kasım 2022

RSC ADVANCES, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Mart 2022

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Eylül 2021

CHEMICAL COMMUNICATIONS, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Ağustos 2021

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Ocak 2021

TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Ekim 2019

Physical Chemistry Research, ESCI Kapsamındaki Dergi, Nisan 2018

JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Nisan 2018

NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Mayıs 2017

SPECTROCHIMICA ACTA - PART A: MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Ocak 2016

CANADIAN JOURNAL OF CHEMISTRY, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Ağustos 2015

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Mart 2014

ENVIRONMENTAL ENGINEERING AND MANAGEMENT JOURNAL, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Ocak 2014

Metrikler

Yayın: 43

Atf (WoS): 347

Atf (Scopus): 270

H-İndeks (WoS): 13

H-İndeks (Scopus): 11

Kongre ve Sempozyum Katılımı Faaliyetleri

- 2nd International Natural Science, Engineering and Material Technologies Conference, NEM2022, Katılımcı, Kırklareli, Türkiye, 2022
14. Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, UKMK2020, Katılımcı, Konya, Türkiye, 2021
14. Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, UKMK2020, Katılımcı, Konya, Türkiye, 2021
- XV. International Conference on Chemical and Environmental Engineering, ICCEE2021, Katılımcı, Dubai, Birleşik Arap Emirlikleri, 2021
- Iraqi Academics Syndicate International Conference for Pure and Applied Sciences (IICPS), Katılımcı, Al Hillah, Irak, 2020
- 34th Molecular Modeling Workshop, MMWS2020, Katılımcı, Erlangen, Almanya, 2020
- 34th Molecular Modeling Workshop, MMWS2020, Katılımcı, Erlangen, Almanya, 2020
- Advanced Electronic Structure Methods in Condensed Matter Physics, ESCOMP-2019, Katılımcı, Lausanne, İsviçre, 2019
- 33rd Molecular Modeling Workshop and Symposium in Honor of Tim Clark's 70th Birthday, MMWS2019, Katılımcı, Erlangen, Almanya, 2019
- 7th Drug Chemistry Conference: Design, Synthesis, Production and Standardization of Drug Active Substances, Katılımcı, Antalya, Türkiye, 2019
- 2nd International Conference on Sustainable Engineering Techniques, ICSET-2019, Katılımcı, Baghdad, Irak, 2019
- International Computational Science Congress, CSC-2018, Katılımcı, Amasya, Türkiye, 2018
- International Computational Science Congress, CSC-2018, Katılımcı, Amasya, Türkiye, 2018
- 12th Chemical Physics Congress, CPC-XII, Katılımcı, Karabük, Türkiye, 2018
- 5th International Conference on Computation for Science and Technology, Katılımcı, Antalya, Türkiye, 2018
13. Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, UKMK2018, Katılımcı, Van, Türkiye, 2018
- 5th BAU Drug Design Congress, Çalışma Grubu, İstanbul, Türkiye, 2017
3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, Katılımcı, Ankara, Türkiye, 2017
3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, Katılımcı, Ankara, Türkiye, 2017
3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, Katılımcı, Ankara, Türkiye, 2017
12. Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, Katılımcı, İzmir, Türkiye, 2016
6. Ulusal Hava Kirliliği ve Kontrolü Sempozyumu, Katılımcı, İzmir, Türkiye, 2015
2. Ulusal Hesaplamalı Kimya Kongresi, Katılımcı, Kars, Türkiye, 2015
- Global Conference on Global Warming, GCGW2015, Çalışma Grubu, Athens, Yunanistan, 2015
5. Fiziksel Kimya Kongresi, Katılımcı, Konya, Türkiye, 2015
- Molecular Electronic Structure Workshop MES2014, Katılımcı, Amasya, Türkiye, 2014
- 25th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics at Dallas, Katılımcı, Texas, Amerika Birleşik Devletleri, 2014
- American Chemical Society, 245th ACS Meeting, Katılımcı, Louisiana, Amerika Birleşik Devletleri, 2013
- XXIth International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Katılımcı, Tsukuba, Japonya, 2012
- American Chemical Society, SWRM2011 67th ACS Southwest Meeting, Katılımcı, Texas, Amerika Birleşik Devletleri, 2011
- Pacificchem 2010, Katılımcı, Hawaii, Amerika Birleşik Devletleri, 2010
- Model(l)ing'09 Conference, Katılımcı, Erlangen, Almanya, 2009
- UKMK-8, Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, Katılımcı, Malatya, Türkiye, 2009
- 22th Darmstadter Molecular Modeling Workshop, Katılımcı, Erlangen, Almanya, 2008
- 21th Darmstadter Molecular Modeling Workshop, Katılımcı, Erlangen, Almanya, 2007
- 20th Darmstadter Molecular Modeling Workshop, Katılımcı, Erlangen, Almanya, 2006
- UKMK-5, Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, Katılımcı, Ankara, Türkiye, 2002

Burslar

Postdoctoral Research Fellowship, Yabancı Ülkelerin Resmi Kurumları, 2010 - 2011

Ph.D. Scholarship, Yabancı Ülkelerin Resmi Kurumları, 2004 - 2009