

## Assoc. Prof. NİHAT KARAKUŞ

### Personal Information

**Email:** nkarakus@cumhuriyet.edu.tr

**Web:** <https://avesis.cumhuriyet.edu.tr/nkarakus>

### International Researcher IDs

ORCID: 0000-0001-6223-7669

Yoksis Researcher ID: 54439

### Education Information

Undergraduate, Sivas Cumhuriyet University, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, Turkey 1991 - 1995

### Foreign Languages

English, B2 Upper Intermediate

### Dissertations

Doctorate, Atmosfere karışan bazı organik bileşiklerin yapısal özelliklerinin ve tepkimelerinin moleküler orbital yöntemleriyle incelenmesi, Sivas Cumhuriyet Üniversitesi, 2006

Postgraduate, Bazı enaminlerin molekül geometrileri ve E/Z izomer dengesi üzerine çözücü etkileri, Sivas Cumhuriyet Üniversitesi, 1999

### Research Areas

Chemistry

### Academic Titles / Tasks

Associate Professor, Sivas Cumhuriyet University, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2017 - Continues

Research Assistant, Sivas Cumhuriyet University, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 1996 - 2006

### Academic and Administrative Experience

Sivas Cumhuriyet Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2015 - 2018

### Courses

Organik Kimya - I, Undergraduate, 2019 - 2020

Organik Kimya, Undergraduate, 2018 - 2019

Organik Kimyada Bilgisayar Uygulamaları-II, Postgraduate, 2018 - 2019  
Tez Çalışması, Postgraduate, 2018 - 2019  
Uzmanlık Alan Dersi, Postgraduate, 2019 - 2020  
Seminer Dersi, Postgraduate, 2019 - 2020  
Organik Kimya, Undergraduate, 2018 - 2019  
Genel Kimya II, Undergraduate, 2018 - 2019  
Doğal Bileşikler Kimyası, Undergraduate, 2017 - 2018  
Genel Kimya I, Undergraduate, 2018 - 2019  
Organik Bileşiklerin Sistemetiği, Undergraduate, 2018 - 2019  
Genel Kimya Laboratuvarı I, Undergraduate, 2018 - 2019  
KİM 1031 GENEL KİMYA-I, Undergraduate, 2016 - 2017  
Genel Kimya, Undergraduate, 2017 - 2018  
Organik Kimya - II, Undergraduate, 2016 - 2017  
Genel Kimya I, Undergraduate, 2016 - 2017  
Genel Kimya, Undergraduate, 2017 - 2018  
KİM 1513 GENEL KİMYA LABORATUVARI-I, Undergraduate, 2016 - 2017  
KİM 2024 ORGANİK KİMYA-II, Undergraduate, 2016 - 2017  
KİM5585 ORGANİK KİMYADA BİLGİSAYAR UYGULAMALARI-I, Postgraduate, 2016 - 2017  
Organik Kimyada Bilgisayar Uygulamaları I, Postgraduate, 2017 - 2018  
Bitirme Ödevi/Tezi, Undergraduate, 2017 - 2018  
Doğal Bileşikler Kimyası, Undergraduate, 2015 - 2016  
Genel Kimya Lab.I, Undergraduate, 2016 - 2017  
Genel Kimya Laboratuvarı I, Undergraduate, 2015 - 2016  
Genel Kimya Laboratuvarı II, Undergraduate, 2014 - 2015  
Organik Bileşiklerin Sistemetiği, Undergraduate, 2014 - 2015  
Organik Kimya, Undergraduate, 2014 - 2015  
Bitirme Ödevi/Tezi, Undergraduate, 2014 - 2015  
Genel Kimya II, Undergraduate, 2011 - 2012  
Genel Kimya Lab. - II, Undergraduate, 2011 - 2012  
Organik Kimya II Lab., Undergraduate, 2008 - 2009  
Genel Kimya - II, Undergraduate, 2008 - 2009  
Genel Kimya - I, Undergraduate, 2008 - 2009  
Temel Bilgisayar Bilimleri, Undergraduate, 2007 - 2008  
Temel Bilgisayar Bilimleri, Undergraduate, 2007 - 2008  
Temel Bilgisayar Teknolojileri Kullanımı, Undergraduate, 2008 - 2009  
Temel Bilgisayar Teknolojileri Kullanımı, Undergraduate, 2008 - 2009  
Kimya IV, Undergraduate, 2007 - 2008

## Advising Theses

Karakuş N., 1,3-dimetil-5-(arilazo)-6-amino-urasil türevlerini içeren azo boyar maddelerin solvatokromik özelliklerinin incelenmesi, Postgraduate, A.TURAN(Student), 2019  
Karakuş N., 6,7-dihidroksi-4-metil-8-(arilazo) kumarin türevlerinin korozyon inhibisyon etkinliklerinin hesaplamalı kimya yöntemleriyle incelenmesi, Postgraduate, N.NAZLI(Student), 2019  
KARAKUŞ N., Bazı pirazin türevlerinin korozyon inhibitör etkinliklerinin incelenmesi, Postgraduate, H.KILINÇ(Student), 2013  
KARAKUŞ N., Bazı diazinonlarda keto-enol tautomer dengesi ve ikili proton transferi tepkimelerinin DFT yöntemiyle incelenmesi, Postgraduate, A.MERMER(Student), 2012  
KARAKUŞ N., Bazı azollerde diazo-triazol ve azido-tetrazol halka-zincir izomer dengesinin dft yöntemiyle incelenmesi, Postgraduate, M.DEMİREL(Student), 2012

KARAKUŞ N., Bazı amino azollerdeki amin-imin tautomerliği üzerine bağlı grup ve çözücü etkilerinin ab initio moleküler orbital yöntemleri ile incelenmesi, Postgraduate, A.İŞIKVER(Student), 2012

## Published journal articles indexed by SCI, SSCI, and AHCI

- I. **Revealing the antioxidant properties of alkyl gallates: a novel approach through quantum chemical calculations and molecular docking**  
KARAKUŞ N.  
Journal of Molecular Modeling, vol.30, no.12, 2024 (SCI-Expanded)
- II. **Effect of electron-donating and -withdrawing substitutions in naphthoquinone sensitizers: The structure engineering of dyes for DSSCs in Quantum Chemical Study**  
SARI S., KARAKUŞ N.  
Chemical Physics, vol.587, 2024 (SCI-Expanded)
- III. **The solvatochromic effect of functionalized 6-aminoracil derivatives in light of DFT: FT-IR, TD-DFT, NBO, and FMO studies**  
Ekici A. T., KARAKUŞ N.  
Optik, vol.302, 2024 (SCI-Expanded)
- IV. **An Experimental and Computational Evaluation of the Interaction Between Intelligent Ampholyte Acrylamide/Acrylic Acid/2-(Acryloyloxy)ethyl Trimethylammonium Chloride Hydrogel and Dyes**  
Işıkver Y., Saraydın D., Karakuş N.  
Journal of Polymers and the Environment, vol.32, no.1, pp.441-459, 2024 (SCI-Expanded)
- V. **Kaya's composite descriptor and Maximum Composite Hardness Rule for chemical reactions**  
Kaya S., Özbakır Işın D., Karakuş N.  
JOURNAL OF THE INDIAN CHEMICAL SOCIETY, vol.99, no.3, 2022 (SCI-Expanded)
- VI. **Theoretical insights about inhibition efficiencies of some 8-Hydroxyquinoline derivatives against the corrosion of mild steel**  
ÖZBAKIR IŞIN D., KARAKUŞ N., Lgaz H., KAYA S., Chung I.  
MOLECULAR SIMULATION, vol.46, no.17, pp.1398-1404, 2020 (SCI-Expanded)
- VII. **Removal of food dyes from aqueous solution by chitosan-vermiculite beads**  
Şenol Z. M., Gürsoy N., Şimşek S., Özer A., Karakuş N.  
International Journal of Biological Macromolecules, vol.148, pp.635-646, 2020 (SCI-Expanded)
- VIII. **The trans-cis and the azide-tetrazole ring-chain isomerization of 2-azido-1,3-azoles: Quantum chemical study**  
Karakuş N., Demirel M.  
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, vol.1093, pp.65-76, 2015 (SCI-Expanded)
- IX. **Quantum chemical study on the inhibition efficiencies of some sym-triazines as inhibitors for mild steel in acidic medium**  
ÖZBAKIR IŞIN D., KARAKUŞ N.  
JOURNAL OF THE TAIWAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS, vol.50, pp.306-313, 2015 (SCI-Expanded)
- X. **Spectroscopic investigation, FMOs and NLO analyses of Zn(II) and Ni(II) phenanthroline complexes: A DFT approach**  
SAYIN K., Karaka D., KARAKUŞ N., Sayin T. A., Zaim Z., ERKAN KARİPER S.  
POLYHEDRON, vol.90, pp.139-146, 2015 (SCI-Expanded)
- XI. **The investigation of corrosion inhibition efficiency on some benzaldehyde thiosemicarbazones and their thiole tautomers: Computational study**  
KARAKUŞ N., SAYIN K.  
JOURNAL OF THE TAIWAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS, vol.48, pp.95-102, 2015 (SCI-Expanded)
- XII. **Feasibility of tetracycline, a common antibiotic, as chelating agent for spectrophotometric determination of UO<sub>2</sub><sup>2+</sup> after cloud point extraction**  
BAĞDA E., YABAŞ E., KARAKUŞ N.

- JOURNAL OF RADIOANALYTICAL AND NUCLEAR CHEMISTRY, vol.299, no.3, pp.1813-1820, 2014 (SCI-Expanded)
- XIII. **Computational study of the intramolecular proton transfer reactions of 3-hydroxytropolone (2,7-dihydroxycyclohepta-2,4,6-trien-1-one) and its dimers**  
ÖZBAKIR IŞIN D., KARAKUŞ N.  
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, vol.16, no.12, pp.1877-1882, 2010 (SCI-Expanded)
- XIV. **Theoretical study on the ground state intramolecular proton transfer (IPT) and solvation effect in two Schiff bases formed by 2-aminopyridine with 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 2-hydroxy salicylaldehyde**  
Tezer N., Karakus N.  
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, vol.15, pp.223-232, 2009 (SCI-Expanded)
- XV. **Ab initio study of atmospheric reactions of the hydroxyl radical-water complex (OH-H<sub>2</sub>O) with saturated hydrocarbons (methane, ethane and propane)**  
Karakus N., Ozkan R.  
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM, vol.724, pp.39-44, 2005 (SCI-Expanded)

### Articles Published in Other Journals

- I. **Theoretical Investigations on Phytochemicals: Physical Chemistry, FMO, MEP, Lipophilicity, Water Solubility, Drug-likeness, and Bioavailability**  
KARAKUS N.  
Cumhuriyet Science Journal, vol.45, no.2, pp.282-290, 2024 (Peer-Reviewed Journal)
- II. **A Density Functional Theory (DFT) based Analysis on the Inhibition Performances of Some Triazole Derivatives for Iron Corrosion**  
KARAKUS N., Kaya S.  
Cumhuriyet Science Journal, vol.44, no.3, pp.491-496, 2023 (Peer-Reviewed Journal)
- III. **Determination of Inhibition Mechanism of Mono-Azo Naphthylamine Dyes: A Computational Corrosion Study**  
KARAKUŞ N.  
Turkish Computational and Theoretical Chemistry, 2019 (Scopus)
- IV. **CORROSION INHIBITION EFFECT OF SOME AMINO SUBSTITUTEDTHIADIAZOLES ON COPPER QUANTUM CHEMICAL STUDY**  
KARAKUŞ N., ÖZBAKIR IŞIN D.  
Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry, vol.2, no.2, pp.62-66, 2015 (Peer-Reviewed Journal)
- V. **Synthesis, characterization and antiproliferative activities of novel modified poly (maleic anhydride-co-vinyl acetate)/cytosine beta-D-arabinofuranoside hydrochloride conjugate**  
KARAKUŞ G., YAĞLIOĞLU A. Ş., Zengin H. B., KARAKUŞ N.  
MARMARA PHARMACEUTICAL JOURNAL, vol.19, no.1, pp.73-81, 2015 (ESCI)
- VI. **Synthesis characterization and antiproliferative activities of novel modified poly maleic anhydride co vinyl acetate cytosine Darabinofuranoside hydrochloride conjugate**  
KARAKUŞ G., ŞAHİN YAĞLIOĞLU A., ZENGİN H., KARAKUŞ N.  
MARMARA PHARMACEUTICAL JOURNAL, vol.1, no.19, pp.73-81, 2015 (Scopus)
- VII. **Ab Initio Molecular Orbital Calculations on Pyrrolidinone and N Methyl 2 Pyrrolidinone NMP Molecules**  
YEKELER H., KARAKUŞ N.  
Chimica Acta Turcica, vol.27, no.2, pp.1-6, 1999 (Peer-Reviewed Journal)

### Refereed Congress / Symposium Publications in Proceedings

- I. **Food dyes adsorption from aqueous solutions by chitosan/vermiculite composite**

Şimşek S., Şenol Z. M., Gürsoy N., Karakuş N.

2nd International Conference on Physical Chemistry Functional Materials (PCFM 2019), Elazığ, Turkey, 25 - 27 June 2019

- II. **Flavanoid Baisalin Bileşğinin Kuantum Kimyasal HesaplamalarYöntemleriyle İncelenmesi**  
SAYIN K., ÜNGÖRDÜ A., KARAKUŞ N.  
3rd International Mediterranean Science and Engineering Congress, 24 - 26 October 2018
- III. **Flavonoid Baisalin Bileşğinin Kuantum Kimyasal Hesaplamalar Yöntemleriyle İncelenmesi**  
SAYIN K., ÜNGÖRDÜ A., KARAKUŞ N.  
3rd International Mediterranean Science and Engineering Congress, Adana, Turkey, 24 - 26 October 2018
- IV. **Mono-Azo Naftilamin Boyalarının İnhibisyon Mekanizmasının Belirlenmesi: Hesaplamalı Korozyon Çalışması**  
SAYIN K., ÜNGÖRDÜ A., KARAKUŞ N.  
International Mediterranean Science and Engineering Congress (IMSEC 2017), 25 - 27 October 2017
- V. **Mono-Azo Naftilamin Boyalarının İnhibisyon MekanizmasınınBelirlenmesi: Hesaplamalı Korozyon Çalışması**  
SAYIN K., ÜNGÖRDÜ A., KARAKUŞ N.  
2nd International Mediterranean Science and Engineering Congress (IMSEC 2017), 25 - 27 October 2017
- VI. **Mono-Azo Naftilamin Boyalarının İnhibisyon Mekanizmalarının Belirlenmesi: Hesaplamalı Korozyon Çalışması**  
SAYIN K., ÜNGÖRDÜ A., KARAKUŞ N.  
2nd international mediterranean science and engineering congress (IMSEC 2017), Adana, Turkey, 25 - 27 October 2017
- VII. **İnvestigation of solvent effect on biological reactivity, UV-VIS and NMR analyses of Zn(II) complexes with pentaaza macrocyclic schiff-base ligand**  
SAYIN K., KARAKAŞ D., KARAKUŞ N., ERKAN KARİPER S.  
TURCMOS 2015, 13 - 18 September 2015
- VIII. **Investigation of solvent effect on biological reactivity UV VIS and NMR analyses of Zn II complexes with pentaaza macrocyclic Schiff base ligand**  
Sayın K., Karakaş D., Karakuş N., Erkan Kariper S., Alagoz Sayın T.  
II. International Turkish Congress on Molecular Spectroscopy, Antalya, Turkey, 13 - 18 September 2015
- IX. **Makrosiklik schiff baz ligandlı çinko II kompleksleri üzerine hesaplamalı kimya çalışmaları**  
SAYIN K., KARAKAŞ D., KARAKUŞ N., ERKAN KARİPER S., ALAGÖZ SAYIN T.  
2. ULUSAL HESAPLAMALI KİMYA KONGRESİ, Turkey, 2 - 05 June 2015
- X. **Quantum Chemical Study on the Inhibition Efficiencies of Some Sym triazines as Inhibitors for Mild Steel in Acidic Medium**  
ÖZBAKIR IŞIN D., KARAKUŞ N.  
XI. Chemical Physics Congress, 17 - 18 October 2014
- XI. **Corrosion Inhibition Effect of Some Amino Substituted Thiadiazoles on Copper Quantum Chemical Study**  
KARAKUŞ N., ÖZBAKIR IŞIN D.  
XI. Kimyasal Fizik Kongresi Piri Reis Üniversitesi, İstanbul, 17 - 18 October 2014
- XII. **The Investigation of Corrosion Inhibition Efficiency on Some Benzaldehyde Thiosemicarbazones and Their Thiole Tautomers Computational Study**  
KARAKUŞ N., SAYIN K.  
XI. Kimyasal Fizik Kongresi Piri Reis Üniversitesi, 17 - 18 October 2014
- XIII. **Solvent and Substituent Effect on the Diazo Triazole and Azido Tetrazole Ring Chain Isomerism Equilibrium of Some Azoles Quantum Chemical Study**  
KARAKUŞ N., MERDAN D.  
10. Kimyasal Fizik Kongresi (CPC-X) TOBB ETÜ, 10 - 12 October 2012
- XIV. **Solvent and substituent effect on the amino imino tautomerism of some aminoxazoles Quantum chemical study**

- KARAKUŞ N., ALİ İ.  
IX. Kimyasal Fizik Kongresi (CPC-IX) İzmir, Çeşme, 14 - 16 October 2010
- XV. **Parabanik Asit İmidazolin 2 4 5 trion Molekülündeki Tautomer Dengesi Üzerine Çözücü Etkisinin DFT Yöntemiyle İncelenmesi**  
KARAKUŞ N., SERDAROĞLU G.  
24. Ulusal Kimya Kongresi, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi, Turkey, 29 June - 02 July 2010
- XVI. **3 Hidroksitropolonun Proton Transfer Tepkimesi Üzerine Çözücü Etkisinin DFT Yöntemiyle İncelenmesi**  
ÖZBAKIR IŞIN D., KARAKUŞ N.  
24. Ulusal Kimya Kongresi, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi, Turkey, 2 June - 02 July 2010
- XVII. **C4V Simetrisindeki M CO 5L Tipi Metal Karbonil Komplekslerinin Ab İnitio Metodu ile İncelenmesi**  
ÜSTÜN E., KARAKUŞ N.  
XXII. Ulusal Kimya Kongresi, Doğu Akdeniz Üniversitesi, Turkey, 6 - 10 October 2008
- XVIII. **Theoretical study on the ground state intramolecular proton transfer IPT and solvation effect in two Schiff bases formed by 2 aminopyridine with 2 hydroxy 1 naphthaldehyde and 2 hydroxy salicylaldehyde**  
TEZER N., KARAKUŞ N.  
XXII. Ulusal Kimya Kongresi, Doğu Akdeniz Üniversitesi, Turkey, 6 - 10 October 2008
- XIX. **Histaminin Tautomerik Yapılarının Asitliği Üzerine Betahistin Etkisi**  
KARAKUŞ N., SERDAROĞLU G.  
XXII. Ulusal Kimya Kongresi, Doğu Akdeniz Üniversitesi, Turkey, 6 - 10 October 2008
- XX. **Histaminin Tautomerik Yapılarının Üzerine Betahistin Etkisi**  
KARAKUŞ N., SERDAROĞLU G.  
XXII. Ulusal Kimya Kongresi, Turkey, 6 - 10 October 2008, pp.152
- XXI. **Metan Etan İle Nitrat Radikali Ve Nitrat Radikali Su Kompleksi Arasındaki Tepkimelerin Hesaplamalı Olarak İncelenmesi**  
KARAKUŞ N., ÖZKAN R.  
XX. Ulusal Kimya Kongresi, Erciyes Üniversitesi, Turkey, 4 - 08 September 2006
- XXII. **Metan Etan Propan ile Hidroksil Radikali Su Kompleksi Arasındaki Tepkimelerin Hesaplamalı Olarak İncelenmesi**  
KARAKUŞ N., ÖZKAN R.  
XVIII. Ulusal Kimya Kongresi, Kafkas Üniversitesi, Turkey, 5 - 09 July 2004
- XXIII. **2 Pirrolidon ve N Metil 2 pirrolidon Moleküllerinin Yapısal Özellikleri Üzerine Çözücü Etkileri**  
YEKELER H., KARAKUŞ N.  
XIII. Ulusal Kimya Kongresi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Turkey, 31 August - 04 September 1999
- XXIV. **Adenin Tautomer Yapıları Üzerine Çözücü Etkileri**  
YEKELER H., KARAKUŞ N.  
XIII. Ulusal Kimya Kongresi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Turkey, 31 August - 04 September 1999
- XXV. **Bazı Enaminlerin Molekül Geometrilerinin ve E Z İzomer Dengesinin Gaz Fazında Ab İnitio Moleküler Orbital Yöntemleriyle İncelenmesi**  
KARAKUŞ N., YEKELER H.  
XIII. Ulusal Kimya Kongresi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Turkey, 31 August - 04 September 1999
- XXVI. **Bazı Enaminlerin E Z İzomer Dengesi Üzerine Çözücü Etkileri**  
KARAKUŞ N., YEKELER H.  
12. Ulusal Kimya Kongresi, Trakya Üniversitesi, Turkey, 7 - 11 September 1998

## Metrics

Publication: 50

Citation (WoS): 182

Citation (Scopus): 281

H-Index (WoS): 7

H-Index (Scopus): 8