

## Doç.Dr. YAVUZ DEDE

### Kişisel Bilgiler

İş Telefonu: [+90 312 202 1386](tel:+903122021386)

E-posta: [dede@gazi.edu.tr](mailto:dede@gazi.edu.tr)

Web: <http://w3.gazi.edu.tr/~dede/ydd.html>

### Eğitim Bilgileri

Post Doktora, Indiana University at Bloomington, Department of Chemistry, Amerika Birleşik Devletleri 2008 - 2009

Doktora, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (Dr), Türkiye 2002 - 2007

Yüksek Lisans, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (YI) (Tezli), Türkiye 1999 - 2006

Lisans, İhsan Doğramacı Bilkent Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 1995 - 2006

### Yaptığı Tezler

Doktora, Quantum chemical investigation of reactions of atomic carbon with water and methanol, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (Dr), 2007

Yüksek Lisans, Supramolecules for constructing nanoscale devices, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya (YI) (Tezli), 2002

### Araştırma Alanları

Kimya, Fizikokimya, Hesapsal Kimya, Kimyasal Kinetik, Kuantum Mekanik, Geçiş Elementleri, İnorganik Moleküllerin Fotokimyası, İnorganik Tepkime Mekanizmaları ve Kinetiği, Kataliz, Koordinasyon Kimyası, Organometalik Kimya, Boya ve Boyarmaddeler Kimyası, Temel Bilimler

### Akademik Unvanlar / Görevler

Doç.Dr., Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, 2010 - Devam Ediyor

### Yönetilen Tezler

DEDE Y., Janus yeşili boyasının elektronik yapısının kuantum kimyasal incelenmesi, Yüksek Lisans, D.BERNA(Öğrenci), 2020

DEDE Y., Non-heme enzimlerde ikincil koordinasyon küresi etkilerini temel alarak yeni aktif merkezlerin modellenmesi, Yüksek Lisans, M.BÜYÜKTEMİZ(Öğrenci), 2020

DEDE Y., Katyonik ligand - metal kompleksleri ile oksidatif metan aktivasyonu, Yüksek Lisans, Y.OCAK(Öğrenci), 2020

DEDE Y., Co(IV)-okso merkezinde O-O bağ oluşumunun kuantum kimyasal incelenmesi, Yüksek Lisans, U.ŞAHİN(Öğrenci), 2020

DEDE Y., Homoprotokatekolat 2,3-dioksijenaz aktif merkez kompleksi ile o-o ve c-c bağ aktivasyonu tepkimelerinin kuantum kimyasal incelenmesi, Yüksek Lisans, S.YALÇIN(Öğrenci), 2015

DEDE Y., Ni merkezli geçiş metali kompleksleri ile oksijen aktivasyonu mekanizmalarının kuantum kimyasal incelenmesi, Yüksek Lisans, G.ALICI(Öğrenci), 2012

DEDE Y., Bor di-pirometen (BODIPY) merkezli floroforların elektronik yapılarının çok referanslı (MCSCF) metotlarla kuantum kimyasal incelenmesi, Yüksek Lisans, S.DUMAN(Öğrenci), 2012

DEDE Y., Ni merkezli geçiş metal kompleksleri ile oksijen aktivasyonu mekanizmalarının kuantum kimyasal incelenmesi, Yüksek Lisans, G.Ahıcı(Öğrenci), 2012

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

- I. **Building an Iron Chromophore Incorporating Prussian Blue Analogue for Photoelectrochemical Water Oxidation**  
Ghobadi T. G. U. , Ghobadi A., Demirtas M., BÜYÜKTEMİZ M., OZVURAL K. N. , YILDIZ E., Erdem E., YAĞLIOĞLU H. G. , DURGUN E., DEDE Y., et al.  
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- II. **Excited state structures projected onto two dimensions: correlations with luminescent behavior**  
DEDE Y., Yalcin S., BÜYÜKTEMİZ M.  
JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY, cilt.58, sa.10, ss.2254-2272, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- III. **The Role of Molecular Structure of Phenylalanine Peptides on the Formation of Vertically Aligned Ordered Bionanostructures: Implications for Sensing Application**  
Sahibbeyli V., Yildiz D. B. , Papir G., DEDE Y., DEMİREL G.  
ACS APPLIED NANO MATERIALS, cilt.3, sa.5, ss.4305-4313, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- IV. **A Robust, Precious-Metal-Free Dye-Sensitized Photoanode for Water Oxidation: A Nanosecond-Long Excited State Lifetime through a Prussian Blue Analogue**  
Ghobadi T. G. U. , Ghobadi A., BÜYÜKTEMİZ M., YILDIZ E., Yildiz D. B. , YAĞLIOĞLU H. G. , DEDE Y., ÖZBAY E., KARADAŞ F.  
ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, cilt.59, sa.10, ss.4082-4090, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- V. **Control of triboelectric charges on common polymers by photoexcitation of organic dyes**  
Cezan S. D. , Nalbant A. A. , BÜYÜKTEMİZ M., DEDE Y., BAYTEKİN H. T. , BAYTEKİN B.  
NATURE COMMUNICATIONS, cilt.10, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- VI. **A Noble-Metal-Free Heterogeneous Photosensitizer-Relay Catalyst Triad That Catalyzes Water Oxidation under Visible Light**  
Ghobadi T. G. U. , YILDIZ E., BÜYÜKTEMİZ M., Akbari S. S. , Topkaya D., İŞÇİ Ü., DEDE Y., YAĞLIOĞLU H. G. , KARADAŞ F.  
ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, cilt.57, sa.52, ss.17173-17177, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- VII. **Water Oxidation Electrocatalysis with a Cobalt-Borate-Based Hybrid System under Neutral Conditions**  
Turhan E. A. , Nune S. V. K. , ÜLKER E., Sahin U., DEDE Y., KARADAŞ F.  
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, cilt.24, sa.41, ss.10372-10382, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- VIII. **Tuning the Electronic Properties of Prussian Blue Analogues for Efficient Water Oxidation Electrocatalysis: Experimental and Computational Studies**  
Alsac E. P. , ÜLKER E., Nune S. V. K. , DEDE Y., KARADAŞ F.  
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, cilt.24, sa.19, ss.4856-4863, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- IX. **Different Quenching Effect of Intramolecular Rotation on the Singlet and Triplet Excited States of Bodipy**  
Lou Z., Hou Y., Chen K., Zhao J., Ji S., Zhong F., DEDE Y., Dick B.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, cilt.122, sa.1, ss.185-193, 2018 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- X. **Nanostructured organic semiconductor films for molecular detection with surface-enhanced Raman spectroscopy**  
YILMAZ M., Babur E., Ozdemir M., Gieseking R. L. , DEDE Y., TAMER U., Schatz G. C. , Facchetti A., USTA H., DEMİREL G.

NATURE MATERIALS, cilt.16, sa.9, ss.918-925, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- XI. **H-bond stabilization of a tautomeric coumarin-pyrazole-pyridine triad generates a PET driven, reversible and reusable fluorescent chemosensor for anion detection**  
Alkis M., Pekyilmaz D., Yalcin E., AYDINER B., DEDE Y., SEFEROĞLU Z.  
DYES AND PIGMENTS, cilt.141, ss.493-500, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XII. **Synthesis and reactivity of a mononuclear non- haem cobalt(IV)-oxo complex**  
Wang B., Lee Y., Tcho W., Tussupbayev S., Kim S., Kim Y., Seo M. S. , Cho K., DEDE Y., Keegan B. C. , et al.  
NATURE COMMUNICATIONS, cilt.8, 2017 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIII. **A fluorescent coumarin-thiophene hybrid as a ratiometric chemosensor for anions: Synthesis, photophysics, anion sensing and orbital interactions**  
Yanar U., Babur B., Pekyilmaz D., Yahaya I., AYDINER B., DEDE Y., SEFEROĞLU Z.  
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, cilt.1108, ss.269-277, 2016 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIV. **Morphological Versatility in the Self-Assembly of Val-Ala and Ala-Val Dipeptides**  
Erdogan H., Babur E., YILMAZ M., Candas E., GÖRDESEL YILDIZ M., DEDE Y., ÖREN E. E. , Demirel G. B. , Ozturk M. K. , YAVUZ M. S. , et al.  
LANGMUIR, cilt.31, sa.26, ss.7337-7345, 2015 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XV. **Intracellular Modulation of Excited-State Dynamics in a Chromophore Dyad: Differential Enhancement of Photocytotoxicity Targeting Cancer Cells**  
Kolemen S., Isik M., Kim G. M. , Kim D., Geng H., Buyuktemiz M., Karatas T., Zhang X., DEDE Y., Yoon J., et al.  
ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, cilt.54, sa.18, ss.5340-5344, 2015 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVI. **1,4,8,11,15,18,22,25-Alkylsulfanyl phthalocyanines: effect of macrocycle distortion on spectroscopic and packing properties**  
ZORLU Y., Kumru U., İŞÇİ Ü., Divrik B., Jeanneau E., Albrieux F., DEDE Y., AHSEN V., DUMOULIN F.  
CHEMICAL COMMUNICATIONS, cilt.51, sa.30, ss.6580-6583, 2015 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVII. **Synthesis and dye sensitized solar cell applications of Bodipy derivatives with bis-dimethylfluorenyl amine donor groups**  
Cakmak Y., Kolemen S., BÜYÜKTEMİZ M., DEDE Y., ERTEN ELA Ş.  
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, cilt.39, sa.5, ss.4086-4092, 2015 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVIII. **Design and characterization of Bodipy derivatives for bulk heterojunction solar cells**  
Kolemen S., Cakmak Y., Ozdemir T., ERTEN ELA Ş., BÜYÜKTEMİZ M., DEDE Y., AKKAYA E. U.  
TETRAHEDRON, cilt.70, sa.36, ss.6229-6234, 2014 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIX. **Switching Off the Charge Transfer and Closing the S-1-T-1 ISC Channel in Excited States of Quinolizinium Derivatives: A Theoretical Study**  
Yalcin S., Thomas L., Tian M., SEFEROĞLU N., Ihmels H., DEDE Y.  
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.79, sa.9, ss.3799-3808, 2014 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XX. **Ion responsive near-IR BODIPY dyes: two isomers, two different signals**  
Ozdemir T., Kostereli Z., Guliyev R., Yalcin S., DEDE Y., AKKAYA E. U.  
RSC ADVANCES, cilt.4, sa.29, ss.14915-14918, 2014 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXI. **Ni(II)-tetrahedral complexes: Characterization, antimicrobial properties, theoretical studies and a new family of charge-transfer transitions**  
SARI N., Sahin S. C. , Ogutcu H., DEDE Y., Yalcin S., ALTUNDAŞ A., Doganay K.  
SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY, cilt.106, ss.60-67, 2013 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXII. **Luminescence of BODIPY and Dipyrin: An MCSCF Comparison of Excited States**  
BÜYÜKTEMİZ M., Duman S., DEDE Y.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, cilt.117, sa.7, ss.1665-1669, 2013 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXIII. **Heavy Atom Free Singlet Oxygen Generation: Doubly Substituted Configurations Dominate S-1 States of Bis-BODIPYs**  
Duman S., Cakmak Y., Kolemen S., AKKAYA E. U. , DEDE Y.  
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.77, sa.10, ss.4516-4527, 2012 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- XXIV. **Reactions of 1S, 1D, and 3P carbon atoms with water. Oxygen abstraction and intermolecular formaldehyde generation mechanisms; An MCSCF study**  
ÖZKAN İ., DEDE Y.  
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, cilt.112, sa.4, ss.1165-1184, 2012 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXV. **Intermolecular acetaldehyde and dimethoxymethane formation mechanisms via ethenol and methoxymethylene precursors in reactions of atomic carbon with methanol: a computational study**  
DEDE Y., ÖZKAN İ.  
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, cilt.14, sa.7, ss.2326-2332, 2012 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXVI. **Designing Excited States: Theory-Guided Access to Efficient Photosensitizers for Photodynamic Action**  
Cakmak Y., Kolemen S., Duman S., DEDE Y., Dolen Y., Kilic B., Kostereli Z., YILDIRIM L., Dogan A. L., Guc D., et al.  
ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, cilt.50, sa.50, ss.11937-11941, 2011 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXVII. **A Redox Non-Innocent Ligand Controls the Life Time of a Reactive Quartet Excited State - An MCSCF Study of [Ni(H)(OH)](+)**  
DEDE Y., Zhang X., Schlangen M., Schwarz H., Baik M.  
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, cilt.131, sa.35, ss.12634-12642, 2009 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXVIII. **DFT Studies on the Thermal Activation of Molecular Oxygen by Bare [Ni(H)(OH)](+)**  
Zhang X., Schlangen M., Baik M., DEDE Y., Schwarz H.  
HELVETICA CHIMICA ACTA, cilt.92, sa.1, ss.151-164, 2009 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXIX. **A panchromatic boradiazaindacene (BODIPY) sensitizer for dye-sensitized solar cells**  
Erten-Ela S., YILMAZ M. S., Icli B., DEDE Y., Icli S., Akkaya E. U.  
ORGANIC LETTERS, cilt.10, sa.15, ss.3299-3302, 2008 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXX. **Determination of trace element levels in human scalp hair in occupationally exposed subjects by XRF**  
DEDE Y., Erten H., Zararsiz A., Efe N.  
Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, cilt.247, sa.2, ss.393-397, 2001 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

## Hakemli Kongre / Sempozyum Bildiri Kitaplarında Yer Alan Yayınlar

- I. **Two Short Stories on Radical Centers Involved in Non-radical Reactions: Dioxygen Activation by [(H)Ni(OH)] and Water Oxidation at Co-Oxo/Oxyl**  
DEDE Y.  
CPC XII, 12 - 13 Ekim 2018
- II. **Quantum Chemical Analysis of O-O Bond Formation at Co(IV)-Oxo Center**  
DEDE Y., ŞAHİN U.  
CPC XII, 12 Ekim 2018
- III. **On the Electronic Structure of Co(IV)-O Complexes**  
DEDE Y., Qandeel O.  
CPC XII, 12 - 13 Ekim 2018
- IV. **Oxidative Methane Activation With Cationic Ligand-metal Complexes**  
DEDE Y., Ocak Y.  
CPC XII, 12 - 13 Ekim 2018
- V. **Electronic Structure of BOPHY - When Does Adding Two Rings Not Make a Larger Ring?**  
Büyüktemiz M., Dede Y.  
CPC - XII, Karabük, Türkiye, 12 - 13 Ekim 2018
- VI. **Quantum Chemical Analysis of Intersystem Crossing in Organic Fluorophores**  
Yıldız D. B., Büyüktemiz M., Dede Y.  
CPC - XII, Karabük, Türkiye, 12 - 13 Ekim 2018

- VII. **QUANTUM CHEMICAL ANALYSIS OF O-O BOND FORMATION AT THECO (IV) OXO CENTER**  
ŞAHİN U., yıldız o., DEDE Y.  
ECOSTBio, Berlin, 9 - 11 Nisan 2018
- VIII. **THEORETICAL STUDY OF ACTIVATION OF DIOXYGEN BY [(H)Ni(OH)], NON-INNOCENCE OF HYDROXYL IS LOST BEFORE THE ACTIVATION STEP**  
DEDE Y.  
ECOSTBio Berlin, 9 - 11 Nisan 2018
- IX. **[Ni(H)(OH)] ile Dioksijen Aktivasyonunun Kuramsal İncelenmesi**  
DEDE Y.  
Ulusal Kimya Kongresi, Türkiye, 10 - 14 Eylül 2017
- X. **Chromophore Excited States - Towards Predictive Theoretical Studies**  
DEDE Y.  
Second GTÜ Photodynamic Day, 16 Mayıs 2017
- XI. **Dioxygen Activation by HNiOH, An MCSCF Study**  
DEDE Y.  
COST 1305 ECOSTBio Lisbon, 30 - 31 Mart 2017
- XII. **Proton transfer without the Secondary Sphere Base**  
DEDE Y.  
COST Action CM1205 Carisma Lisbon, 6 - 08 Mart 2017
- XIII. **Proton transfer without the secondary sphere base computational study of an HPCD Mimic**  
DEDE Y.  
MOLMOD 2016, 13 - 15 Kasım 2016
- XIV. **Theoretical Analysis of the BOPHY Fluorophore**  
alkış m., DEDE Y.  
MOLMOD 2016, 13 - 15 Kasım 2016
- XV. **Mimicking the Secondary Sphere of Homoprotocatechuate Dioxygenase HPCD Enzyme Active Site A Theoretical Study**  
Büyüktemiz M., Dede Y.  
COST ECOSTBio Meeting - Prague, Karabük, Türkiye, 13 - 15 Nisan 2016
- XVI. **Secondary Sphere Histidine of Homoprotocatechuate Dioxygenase A Modified Model of the Enzymatic Core 21st 23rd 2016**  
Büyüktemiz M., Dede Y.  
COST Action CM1205 -CARISMA , Ljubljana, Karabük, Türkiye, 21 - 23 Mart 2016

## **Desteklenen Projeler**

Dede Y., Çakmak Y., Kırbıyık Ç., TÜBİTAK Projesi, Organik Güneş Hücrelerinde Uygulanmak Üzere Elektron Verici Moleküllerin Tasarım, Sentez ve Karakterizasyonu, 2018 - 2021

Dede Y., Demirel G., Usta H., TÜBİTAK Projesi, Organik Yarı İletken Temelli 3-Boyutlu Mikro-/Nano-Yapılı Platformların Yüze-Güçlendirilmiş Raman Spektroskopisinde (Sers) Kullanımları, 2018 - 2020

Dede Y., TÜBİTAK Projesi, Katyonik ve Asidik Ligand - Metal Kompleksleri ile Oksidatif Metan Aktivasyonunun Kuramsal Tasarımı, 2017 - 2020

Dede Y., TÜBİTAK - AB COST Projesi , İndasen Tabanlı Yeni Floroforların Çok Referanslı Mcscf Metotlarla Kuantum Kimyasal Tasarımı, 2015 - 2017

Dede Y., TÜBİTAK - AB COST Projesi , Homoprotocatekolat Dioksijenaz Aktif Merkezinin Çok Referanslı MCSCF Kuantum Kimyasal Metotlarla İncelenmesi Biyoanorganik Metal Kompleksleriyle Oksijen ve Katekol Türevlerine İlişkin Tepkime Mekanizmalarının Genelleştirilmesi, 2013 - 2015

DEDE Y., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Çeşitli dipirin kromoforlarının elektronik yapılarının kuantum kimyasal incelenmesi, 2011 - 2013

Dede Y., TÜBİTAK Projesi, Bor di-Pirometen Merkezli Floroforların (BODIPY) Uyarılmış Hallerinin Çok Referanslı

(MCSCF) Metotlarla Kuantum Kimyasal İncelenmesi, 2011 - 2013

## **Atıflar**

Toplam Atıf Sayısı (WOS):1381

h-indeksi (WOS):16

## **Ödüller**

Dede Y., Genç Bilim İnsanı (GEBİP), Tüba, Mayıs 2015

Dede Y., Bilim Akademisi Genç Bilim İnsanı Programı (BAGEP), Bilim Akademisi, Nisan 2015

Dede Y., ODTÜ M. N. Parlar Vakfı Araştırma Teşvik Ödülü, Odtü M. N. Parlar Vakfı, Kasım 2014