

Prof. Dr. YAVUZ DEDE

Kişisel Bilgiler

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

E-posta: dede@gazi.edu.tr

Web: <https://scholar.google.com.tr/citations?user=HMgj1pIAAAAJ>

Uluslararası Araştırmacı ID'leri

ScholarID: HMgj1pIAAAAJ

ORCID: 0000-0003-4854-8422

Publons / Web Of Science ResearcherID: AIC-4285-2022

ScopusID: 26026920900

Yoksis Araştırmacı ID: 137346

Eğitim Bilgileri

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

Doktora, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 2002 - 2007

Yüksek Lisans, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 1999 - 2002

Lisans, İhsan Doğramacı Bilkent Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 1995 - 1999

Yaptığı Tezler

Doktora, Quantum chemical investigation of reactions of atomic carbon with water and methanol, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Analiz ve Fonksiyonlar Teorisi, Kimya (Dr), 2007

Yüksek Lisans, Supramolecules for constructing nanoscale devices, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Analiz ve Fonksiyonlar Teorisi, 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

Prof. Dr., Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya, 2022 - Devam Ediyor

Doç. Dr., Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya, 2014 - 2022

Öğretim Görevlisi Dr., Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya, 2010 - 2014

Yönetilen Tezler

DEDE Y., Non-Heme Enzimlerde İkincil Koordinasyon Küresi Etkilerini Temel Alarak Yeni Aktif Merkezlerin Modellenmesi, Yüksek Lisans, M.BÜYÜKTEMİZ(Öğrenci), 2020

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

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 İncelenmesi, Yüksek Lisans, U.ŞAHİN(Öğrenci), 2020

DEDE Y., Homoprotocatekolat 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.Alıcı(Öğrenci), 2012

SCI, SSCI ve AHCI İndekslerine Giren Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Phthalocyanine vs porphyrin: Experimental and theoretical comparison of the catalytic activity of N-bridged diiron tetrapyrrolic complexes for alcohols oxidation**
ŞAHİN Z., Yüceel Ç., Yıldız D. B., DEDE Y., DUMOULIN F., İŞÇİ Ü.
Molecular Catalysis, cilt.559, 2024 (SCI-Expanded)
- II. **Homoprotocatechuate dioxygenase active site: Imitating the secondary sphere base via computational design**
BÜYÜKTEMİZ M., DEDE Y.
Turkish Journal of Chemistry, cilt.47, sa.5, ss.1116-1124, 2023 (SCI-Expanded)
- III. **The Role of the Redox Non-Innocent Hydroxyl Ligand in the Activation of O₂ Performed by [Ni(H)(OH)].**
Kim J., Büyüktemiz M., Alıcı G., Baik M., Dede Y.
CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL, cilt.2022, 2022 (SCI-Expanded)
- IV. **Substitution effects in distyryl BODIPYs for near infrared organic photovoltaics**
Tok M., Say B., Dolek G., Tatar B., Özgür D., Kurukavak C. K., Kuş M., Dede Y., Cakmak Y.
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A-CHEMISTRY, cilt.429, 2022 (SCI-Expanded)
- V. **Light-Driven Water Oxidation with Ligand-Engineered Prussian Blue Analogues**
Ahmad A. A., Ghobadi T. G. U., BÜYÜKTEMİZ M., ÖZBAY E., DEDE Y., KARADAŞ F.
INORGANIC CHEMISTRY, cilt.61, sa.9, ss.3931-3941, 2022 (SCI-Expanded)
- VI. **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, cilt.27, sa.35, ss.8966-8976, 2021 (SCI-Expanded)
- VII. **When Does Fusing Two Rings Not Yield a Larger Ring? The Curious Case of BOPHY**
BÜYÜKTEMİZ M., Kilic M., Che Y., Zhao J., DEDE Y.
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, cilt.86, sa.6, ss.4547-4556, 2021 (SCI-Expanded)
- VIII. **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-Expanded)
- IX. **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-Expanded)

- X. **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-Expanded)
- XI. **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-Expanded)
- XII. **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., İŞCİ Ü., DEDE Y., YAĞLIOĞLU H. G., KARADAŞ F.
ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, cilt.57, sa.52, ss.17173-17177, 2018 (SCI-Expanded)
- XIII. **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-Expanded)
- XIV. **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-Expanded)
- XV. **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-Expanded)
- XVI. **Nanostructured organic semiconductor films for molecular detection with surface-enhanced Raman spectroscopy**
YILMAZ M., Babur E., Ozdemir M., Giesecking 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-Expanded)
- XVII. **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-Expanded)
- XVIII. **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-Expanded)
- XIX. **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-Expanded)
- XX. **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-Expanded)
- XXI. **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-Expanded)

- XXII. **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-Expanded)
- XXIII. **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-Expanded)
- XXIV. **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-Expanded)
- XXV. **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-Expanded)
- XXVI. **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-Expanded)
- XXVII. **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-Expanded)
- XXVIII. **Luminescence of BODIPY and Dipyrrin: 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-Expanded)
- XXIX. **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-Expanded)
- XXX. **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-Expanded)
- XXXI. **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-Expanded)
- XXXII. **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-Expanded)
- XXXIII. **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-Expanded)
- XXXIV. **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-Expanded)
- XXXV. **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-Expanded)

XXXVI. **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-Expanded)

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 THE CO (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., Yıldız D. B., BÜYÜKTEMİZ M., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, BF2 Tabanlı Yeni Nesil Kromoforların Spektroskopik Özelliklerinin Kuantum Kimyasal İncelenmesi, 2021 - 2022

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

Dede Y., TÜBİTAK Projesi, Katyonik ve Asidik Ligand - Metal Kompleksleri ile Oksidatif Metan Aktivasyonunun Kuramsal Tasarımı, 2017 - 2021

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

DEDE Y., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Kuantum Kimyası Araştırma Laboratuvarının Altyapısının Güçlendirilmesi, 2016 - 2019

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 , Homoprotokatekolat 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