

Doç. Dr. Hakan KAYI

EĞİTİM

Doktora	Computer-Chemie-Centrum	Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Almanya	2009
Yüksek Lisans	Kimya Mühendisliği Bölümü	Hacettepe Üniversitesi	2003
Lisans	Kimya Mühendisliği Bölümü	Hacettepe Üniversitesi	2000

AKADEMİK/MESLEKTE DENEYİM

Dr. Öğr. Üyesi	Kimya Mühendisliği Bölümü	Ankara Üniversitesi	2018-...
Dr. Öğr. Üyesi	Kimya Mühendisliği ve Uygulamalı Kimya Böl.	Atılım Üniversitesi	2013-2018
Doktora Sonrası Araştırmacı	Institute for Theoretical Chemistry	University of Texas at Austin, Amerika	2011-2013
Doktora Sonrası Araştırmacı	W.M. Keck Research Lab. in Astrochemistry	University of Hawaii at Manoa, Amerika	2010-2011
Araştırma Görevlisi	Computer-Chemie-Centrum	Friedrich-Alexander Universität Erlangen- Nürnberg, Almanya	2004-2009
Araştırma Görevlisi	Kimya Mühendisliği Böl.	Hacettepe Üniversitesi	2001-2004

BİLİMSEL ARAŞTIRMA ALANLARI

Hesaplama malzeme tasarımı
Moleküler tasarım, moleküler modelleme, reaksiyon benzetimlemesi
Güneş hücresi ve elektrokromik cihazlar için gelişmiş optoelektronik özellikli yeni yarıiletken polimerlerin tasarımı, modellemesi ve benzetimlemesi
Karbon dioksit ve karbonil sülfid yakalama, depolama, karbon dioksit yakalayan organik sıvıların reaksiyon mekanizmaları ve reaksiyon kinetiği
Astrokimyasal reaksiyon mekanizmaları
Vibronik etkileşimler ve pseudo Jahn-Teller etkisi
Anti-kanser ilaç tasarımı ve DNA etkileşimlerinin benzetimlemesi
Yapay sinir ağlarının kimya mühendisliği uygulamaları
Kuantum mekanik metod geliştirme

PROJE DENEYİMİ

Proje Adı	Kurum	Görev	Tarih
Yeni yarıiletken konjüge polimerlerin tasarımı ve elektronik ve optik özelliklerinin kuantum kimyasal yöntemlerle sistematik olarak incelenmesi (Proje No: 117Z354)	TÜBİTAK (3501)	Yürütücü	2017-...
Kurşun İçermeyen Yeni Nesil Patlayıcı Tasarımı, Sentezi ve Karakterizasyonu (Proje No: 117Z391)	TÜBİTAK (1001)	Araştırmacı	2017-...
CO ₂ yakalayan organik sıvıların reaksiyon kinetiği ve mekanizmasının deneysel ve moleküler modelleme çalışması (Proje No: 213M390)	TÜBİTAK (1001)	Araştırmacı	2014-2016
Parameterization of AM1* for redox-active metals (Proje No: CI85171)	Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), Almanya	Araştırmacı	2006-2009
N-izopropilakrilamid-akrilik asit polimerinin alt kritik çözelti sıcaklığının yapay sinir ağları ile tahmini (Proje No: MISAG242)	TÜBİTAK (MISAG)	Araştırmacı	2002-2003

YÖNETTİĞİ LİSANSÜSTÜ TEZLER

1. Rabia Elhag (Doktora tezi), *Kanser tümör tedavisi için piridil içeren yeni platin ve paladyum komplekslerinin moleküler modelleme yöntemiyle tasarımı*, 2015-2018.
2. Mahmoud Abdouesslam (Doktora tezi), *Organik çözücülerle karbonil sülfid yakalamasının teorik olarak incelenmesi*, 2017-devam ediyor.
3. Hawa Ahmed (Yüksek lisans tezi), *Petrokimya tesislerinde kullanılan ham petrolün viskozitesinin farklı parametrelerle ilişkisinin modellenmesi*, 2016-2018.
4. Younis Al-Ani (Yüksek lisans tezi), *Dizel yakıtın flaş noktasının, yakıtın kimyasal bileşimi ve fiziksel özelliklerden yararlanarak yapay sinir ağları ile tahmin edilmesi*, 2016-2017.
5. Abubaker Bushra Ali Mehasi (Yüksek lisans tezi), *Gümüş oksit pillerden gümüşün geri kazanımı: Deneysel ve teorik yaklaşım*, 2015-2017.
6. Ali Gerra Almuamri (Yüksek lisans tezi), *Bir petrol rafinerisindeki vakum damıtma ünitesini modelleme ve benzetimleme*, 2015-2017.
7. Khaled Sowani (Yüksek lisans tezi), *Bir petrol rafinerisindeki atmosferik damıtma ünitesinin tasarım ve optimizasyonu*, 2015-2017.
8. Abubaker Hadia (Yüksek lisans tezi), *COS gazının sıvı organik çözeltiler yardımıyla yakalanması*, 2015-2017.
9. Hilal Tankal (Yüksek lisans tezi), *CO₂ tutan organik sıvıların reaksiyon mekanizmalarının kuantum mekanik yöntemlerle incelenmesi*, 2014-2016 (2. danışman)

ESERLER

SCI & SCI-Exp

- 1) Ö. Y.-Orhan, H. Tankal, **H. Kayı**, E. Alper (2017) Innovative Carbon Dioxide-Capturing Organic Solvent: Reaction Mechanism and Kinetics, *Chemical Engineering & Technology*, 40(4): 737-744.
- 2) B. Kaya, **H. Kayı** (2017) Design of novel tellurium and selenium containing semiconducting polymers using quantum mechanical tools, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1099: 45-54.
- 3) H. Tankal, Ö. Y.-Orhan, E. Alper, T. Özdoğan, **H. Kayı** (2016) Experimental and theoretical investigation of reaction between CO₂ and carbon dioxide binding organic liquids, *Turkish Journal of Chemistry*, 40(5): 706-719

- 4) Ö. Y.-Orhan, H. Tankal, **H. Kayı**, E. Alper (2016) Kinetics of CO₂ capture by carbon dioxide binding organic liquids: Experimental and molecular modeling studies, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 49: 379–386
- 5) D. Erdoğan Altunöz, **H. Kayı**, Ş. Özalp-Yaman (2015) Spectroelectrochemical investigation of nuclease active Pt(II) complexes containing pyrrole oxime. *Electrochimica Acta*, 158: 333-341.
- 6) **H. Kayı**, A. Elkamel (2015) A theoretical investigation of 4,7-di(furan-2-yl)benzo[c] [1,2,5] selenadiazole-based donor-acceptor type conjugated polymer. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1054: 38-45.
- 7) N. Hasanzadeh, D. Nori-Shargh, **H. Kayı**, N. Rezaeijavid (2015) Correlations between hardness, electrostatic interactions and thermodynamic parameters in the decomposition reactions of 3-buten-1-ol, 3-methoxy-1-propene and ethoxyethene. *Structural Chemistry*, 26(2): 547-554.
- 8) **H. Kayı** (2014) A computational study on 4,7-di(furan-2-yl) benzo[c] [1,2,5]thiadiazole monomer and its oligomers. *Journal of Molecular Modeling*, 20(6): 2269.
- 9) D. Nori-Shargh, S.N. Mousavi, **H. Kayı** (2014) 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. *Journal of Molecular Modelling*, 20(5): 2249.
- 10) **H. Kayı**; P. Garcia-Fernandez, I.B. Bersuker, J.E. Boggs (2013) Deviations from Born-Oppenheimer theory: Jahn-Teller, pseudo Jahn-Teller and hidden pseudo Jahn-Teller effects in C₃H₃ and C₃H₃⁻. *Journal of Physical Chemistry A*, 117(36): 8671-8679.
- 11) D. Nori-Shargh, H.Yahyaei, S. N. Mousavi, A. Maasoomi, **H. Kayı** (2013) Natural bond orbital, nuclear magnetic resonance analysis and hybrid-density functional theory study of σ -aromaticity in Al₂F₆, Al₂Cl₆, Al₂Br₆ and Al₂I₆ dimers. *Journal of Molecular Modeling*, 19(6):2549-2557.
- 12) **H. Kayı**, I.B. Bersuker, J.E. Boggs (2012) Pseudo Jahn-Teller explanation of bending instability of triatomic molecules. *Journal of Molecular Structure*, 1023:108-114.
- 13) **H. Kayı**, R.I. Kaiser, J.D. Head (2012) A theoretical investigation of the relative stability of hydrated glycine and methylcarbamic acid: from water clusters to interstellar ices. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14(14):4942-4958.
- 14) **H. Kayı**, R.I. Kaiser, J.D. Head (2011) A theoretical investigation of the low energy conformers of the isomers glycine and methylcarbamic acid and their role in the interstellar medium. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13(35): 15774-15784.
- 15) **H. Kayı**, R.I. Kaiser, J.D. Head (2011) 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. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13(23):11083-11098.
- 16) **H. Kayı**, T. Clark (2011) AM1* parameters for palladium and silver. *Journal of Molecular Modeling*, 17(10):2585-2600.

- 17) **H. Kayı**, T. Clark (2010) AM1* parameters for manganese and iron. *Journal of Molecular Modeling*, 16(6):1109-1126.
- 18) **H. Kayı** (2010) AM1* parameters for gold. *Journal of Molecular Modeling*, 16(5):1029-1038.
- 19) **H. Kayı**, T. Clark (2010) AM1* parameters for cobalt and nickel. *Journal of Molecular Modeling*, 16(1):29-47.
- 20) **H. Kayı**, T. Clark (2009) AM1* parameters for vanadium and chromium. *Journal of Molecular Modeling*, 15(10):1253-1269.
- 21) **H. Kayı**, T. Clark (2009) AM1* parameters for bromine and iodine. *Journal of Molecular Modeling*, 15(3):295-308.
- 22) K. Serbest, **H. Kayı**, M. Er, K. Sancak, I. Değirmencioğlu (2008) Ni(II), Cu(II) and Zn(II) complexes of tetradentate schiff base containing two thiadiazoles units: structural, spectroscopic, magnetic properties and molecular modeling studies. *Heteroatom Chemistry*, 19(7):700-712.
- 23) **H. Kayı**, T. Clark (2007) AM1* parameters for copper and zinc. *Journal of Molecular Modeling*, 13(9):965-979.
- 24) **H. Kayı**, A. Elkamel, S.A. Tuncel, E. Alper (2005) Prediction of lower critical solution temperature of N-isopropylacrylamide-acrylic acid copolymer by an artificial neural network model *Journal of Molecular Modeling*, 11(1):55-60.
- 25) E. Uğuzdoğan, **H. Kayı**, E.B. Denkbaş, S. Patır, A. Tuncel (2003) Stimuli-responsive properties of aminophenylboronic acid-carrying thermosensitive copolymers. *Polymer International*, 52(5):649-657.

Ulusal Hakemli Dergilerde Yayımlanan Makaleler

- 1) **H. Kayı** (2018) Theoretical investigation of carbon dioxide capture by aqueous boric acid solution: A termolecular reaction mechanism, *Journal of Boron*, 03(01), pp. 1-7
- 2) Ö. Özkılınç, B. Kaya, **H. Kayı** (2017) Design and simulation of semiconducting polymers for optoelectronic applications by using quantum mechanical tools, *Journal of the Turkish Chemical Society, Section:B Chemical Engineering*, 1(1):127-134

Uluslararası Kitapta Bölüm

Ö. Y-Orhan, **H. Kayı**, E. Alper (Editör: Grammelis, Panagiotis) (2016) “Kinetics of CO₂ capture by carbon dioxide binding organic liquids”, in *Energy, Transportation and Global Warming, Green Energy and Technology*, pp. 591-603, ISBN:978-3-319-30126-6, Springer International Publishing, Switzerland, DOI:10.1007/978-3-319-30127-3_43

Ulusal Kitapta Bölüm

H. Kayı (2004) “Fluorimetry”, in *Instrumental Analysis Laboratory*, (Editörler: Hakan Ayhan & Cengiz. Koçum) pp. 29-37; ISBN:975-98530-0-0, Aydan Publishings, Ankara.

Uluslararası Bildiriler

- 1) Ö. Y-Orhan, **H. Kayı**, E. Alper (2015) Global Conference on Global Warming, GCGW2015, **Athens, Greece**, May 24-27. “*Kinetics of CO₂ capture by carbon dioxide binding organic liquids*”, Sub. No:61.
- 2) **H. Kayı (2014)** Molecular Electronic Structure Workshop MES2014, **Amasya, Türkiye**, September 01-05. “*Calculation of the band gap of 4,7-di(furan-2-yl)benzo[co][1,2,5]thiadiazole polymer: a DFT approach*”, Page 52.
- 3) **H. Kayı**, J. E. Boggs, I.B. Bersuker (2014) 25th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics at Dallas, **Texas, USA**, March 1-3., “*Origin of Bending Instability of Small Linear Molecules and Deviations from Born-Oppenheimer Theory: pseudo Jahn-Teller Effect*”, Lecture:10, Page 35.
- 4) J.D. Head, **H. Kayı**, R.I. Kaiser (2013) American Chemical Society, 245th ACS Meeting, **New Orleans, LA, USA**, April 7-13. “*Quantum chemical investigation of amino acid detection and formation in low temperature molecular ices typically present in the Outer Solar System*” Session: Physical Chemistry, Presentation No: PHYS-292.
- 5) **H. Kayı**, J. E. Boggs, I.B. Bersuker (2012) XXIth International Symposium on the Jahn-Teller Effect, **Tsukuba, Japan**, August 26-31, 2012. “*The origin of bending instability of triatomic molecules: pseudo Jahn-Teller effect*”, Presentation No: P23.
- 6) **H. Kayı**, R.I. Kaiser, J.D. Head (2011) American Chemical Society, SWRM2011 67th ACS Southwest Meeting, **Austin, Texas, USA**, November 9-12, 2011. “*Theoretical investigation of the formation of the simple amino acids in extraterrestrial ices*” Session: Physical Chemistry, Presentation No: SWRM-571.
- 7) **H. Kayı**, R.I. Kaiser, J.D. Head (2010) Pacificchem 2010, **Honolulu, Hawaii, USA**, December 15-20. “*Theoretical investigation of the formation of the simple amino acid glycine and its isomers in extraterrestrial ices*”, Session: Kuiper Belt Objects-Laboratory Studies, Models, Theory, and Observations, Presentation No:1353.
- 8) **H. Kayı**, T. Clark (2009) Model(l)ing’09 Conference, **Erlangen, Germany**, September 6-11. “*Parameterization of AMI**”.
- 9) **H. Kayı**, T. Clark (2008) 22th Darmstadter Molecular Modeling Workshop, **Erlangen, Germany**, April 29-30. “*Parameterization of Bromine and Iodine for AMI**”.

10) H. Kayı, T. Clark (2007) 21th Darmstadter Molecular Modeling Workshop, Erlangen, Germany, May 15-16. “Parameterization of Zinc for AMI *”.

11) H. Kayı, T. Clark (2006) 20th Darmstadter Molecular Modeling Workshop, Erlangen, Germany, May 23-24. “Parameterization of Copper for AMI *”.

Ulusal Bildiriler

1-a) A. Hadia, H. Kayı (2017) 3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, 12-14 Ekim 2017, Ankara, sayfa 9, “Dietanol amin çözeltisi ile karbonil sülfidin yakalanması”.

b) Ö. Özkılınç, H. Kayı (2017) 3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, 12-14 Ekim 2017, Ankara, sayfa 42, “Yoğunluk fonksiyoneli teorisi yardımıyla bazı yarıiletken polimerlerin tasarımı ve elektronik bant aralıklarının hesaplanması”.

c) B. Kaya, H. Kayı (2017) 3. Hesaplamalı Kimya Kongresi, 12-14 Ekim 2017, Ankara, sayfa 42, “Selenofen selenadiazol ve tellurofen telluradiazol içeren yarıiletken polimerlerin yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile tasarım ve benzetimi”.

2) B. Kaya, Ö. Özkılınç, H. Kayı (2016) 12. Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, 23-26 Ağustos, İzmir, sayfa 648-653, “Optoelektronik uygulamalar için yeni yarıiletken polimerlerin kuantum mekanik yöntemlerle tasarım ve simülasyonu”.

3) H. Tankal, Ö. Y-Orhan, E. Alper, H. Kayı (2015) 6. Ulusal Hava Kirliliği ve Kontrolü Sempozyumu, HKK 2015, 07-09 Ekim, İzmir, sayfa 750-754, “TMBG Organik Çözücüsünün 1-Hekzanol ve 1-Propanol İçerisindeki CO₂ Tutma Mekanizmasının DFT Yöntemiyle İncelenmesi”.

4) H. Tankal, Ö. Y-Orhan, E. Alper, H. Kayı (2015) 2. Ulusal Hesaplamalı Kimya Kongresi, 02-05 Haziran, Kars, Sunum04, sayfa 10, “DBN ile TBD organik çözücülerinin 1-Butanol ve 1-Propanol içerisindeki CO₂ tutma eğilimlerinin DFT yöntemleriyle incelenmesi”.

5) H. Tankal, Ö. Y-Orhan, E. Alper, T. Özdoğan, H. Kayı (2015) 5. Fiziksel Kimya Kongresi, 16-19 Mayıs, Konya, Sunum30, sayfa 40, “İki organik çözücünün CO₂ tutma eğilimlerinin kuantum mekanik yöntemlerle incelenmesi”.

6) O. Bavbek, H. Kayı, E. Alper, (2008) UKMK-8, Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, Malatya, Türkiye, 26-29 Ağustos. “İlaç endüstrisinde kullanılan akışkan yataklı kurutucunun yapay sinir ağları ile modellenmesi ve kurutma süresinin tahmini”, ARG-12.

7) H. Kayı, E. Elkamel, E. Alper (2002) UKMK-5, Ulusal Kimya Mühendisliği Kongresi, Ankara, Türkiye, 2-5 Eylül. “N-izopropilakrilamid-akrilik asit polimerinin alt kritik çözelti sıcaklığının yapay sinir ağları ile tahmini”.