

Adı Soyadı : Şafak ÖZHAN KOCAKAYA

Görevi : Araştırma Görevlisi

Ünvanı : Doç. Dr.

E-Posta Adresi : safakozhan@dicle.edu.tr
Telefon (İş) : 4122488550
Telefon (Dahili) : 3183
Faks : 4122488300
Adres : Silvan yolu üzeri Kıtılbal Mahallesi Besta Villaları No:24
Sur/Diyarbakır

Öğrenim Bilgisi

Doktora 2004	DİCLE ÜNİVERSİTESİ FEN FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/ORGANİK KİMYA ANABİLİM DALI Tez adı: Experimental and Theoretical Study of Various Chemical Processes (2009) Tez Danışmanı:(NECMETTİN PİRİNÇÇİOĞLU)
Yüksek Lisans 2002	DİCLE ÜNİVERSİTESİ FEN FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/ORGANİK KİMYA ANABİLİM DALI Tez adı: Sitrakonik asit ve mesakonik asit 'in disodyum tuzlarına brom katılması mekanizmasının çalışılması (2004) Tez Danışmanı:(NECMETTİN PİRİNÇÇİOĞLU)
Lisans 1998	DİCLE ÜNİVERSİTESİ FEN FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/KİMYA PR.

Görevler

ARAŞTIRMA GÖREVLİSİ 2005	DİCLE ÜNİVERSİTESİ/FEN FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/ORGANİK KİMYA ANABİLİM DALI
-----------------------------	--

Projelerde Yaptığı Görevler:

- Protein Tirozin Fosfataz 1B PTP1B Enzimi İnhibitörlerinin Yapı Temelli Dizaynı Moleküler Dinamik Simülasyonu ve MM PB SA Hesaplamaları, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma proiesi. Yürütücü:ÖZHAN KOCAKAYA SAFAK. . 02/02/2011 - 07/02/2012 (ULUSAL)
- Silika Tabanlı Amid Türevi Polar Gömülü Embedded Kolonlar ile Farklı Polaritedeki Analitlerin Teorik ve HPLC Yöntemleri ile Ayrılması, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:ZİYADANOĞULLARI BERRİN,Araştırmacı:VARHAN ORAL ELİF,Araştırmacı:ÖZHAN KOCAKAYA SAFAK. . 09/01/2014 - 21/03/2017 (ULUSAL)
- Bilgisayarlı Moleküler Modelleme ve Enzim İnhibisyon Kinetiğini Kullanarak HIV Proteaz için Yeni İnhibitör Dizaynı, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN,Araştırmacı:ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, , 20/02/2003 - 25/02/2005 (ULUSAL)
- Mesakonik Asit Ve Sitrakonik Asitlerin Disodyum Tuzlarına Sulu Brom Katılmasının Mekanizmalarının Bilgisayarlı Hesaplamalarla Yarı Ampirik DFT Çalışılması, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma proiesi. Araştırmacı:ÖZHAN KOCAKAYA SAFAK.Yürütücü:PİRİNCCİOĞLU

NECMETTİN, , 02/06/2003 - 02/06/2005 (ULUSAL)

5. Çeşitli Kimyasal İşlemlerin Teorik Olarak Çalışılması, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü: PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN, Araştırmacı: ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK. . 10/06/2005 - 08/06/2009 (ULUSAL)
Profllavin İçeren Duacarmycin Antibiyotiği Analoglarının Sentezlenmesi ve DNA Üzerine Etkilerinin Araştırılması, TÜBİTAK PROJESİ, Araştırmacı: EMEN SEVİL, Araştırmacı: AYTEKİN MEHMET ÇETİN, Araştırmacı: ÇEKEN TOPTANCI BİRCAN, Araştırmacı: ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, Yürütücü: KIZIL MURAT. . 15/03/2010 - 15/03/2012 (ULUSAL)
- 6.

Bilimsel Kuruluşlara Üyelikler

1. Kimyagerler Derneği, Üye , 2014
2. Tubitak-TR-Grid, Üye , 2008

Dersler *

Öğrenim Dili Ders Saati

2018-2019

Lisans

ORGANİK KİMYA I	Türkçe	3
ORGANİK KİMYA LAB. I	Türkçe	4

2017-2018

Lisans

ORGANİK KİMYA I	Türkçe	3
ORGANİK KİMYA II	Türkçe	3

Eserler

Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

1. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, KARAKAPLAN MEHMET, Scopelliti Rosario (2017). Synthesis and crystal structure of a chiral lactam and three amino alcohols as potential protein tyrosine phosphates 1B inhibitors. Tetrahedron: Asymmetry, 28(10), 1342-1349., Doi: 10.1016/j.tetasy.2017.09.014 (Yayın No: 3857924)
2. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, SCOPELLİTİ ROSARİO, KARAKAPLAN MEHMET (2017). Synthesis and crystal structure of a chiral lactam and three amino alcohols as potential protein tyrosine phosphates 1B inhibitors. Tetrahedron: Asymmetry, 28(10), 1342-1349., Doi: 10.1016/j.tetasy.2017.09.014 (Yayın No: 3746981)
3. ÖZTÜRK GÜLŞEN, SUBARİ SALİH, SEKER SEVİL, TOĞRUL MAHMUT, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, ERCAN SELAMİ, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2017). A facile synthesis of amide-based receptors under microwave conditions: investigation of their anion recognition properties by experimental and computational tools. Journal of Molecular Modeling, 23(9), Doi: 10.1007/s00894-017-3390-0 (Yayın No: 3849498)
4. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, YILMAZ TURGUT, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2015). Enantiomeric discrimination of chiral organic salts by chiral aza-15-crown-5 ether with C 1 symmetry: experimental and theoretical approaches. Journal of Molecular Modeling, 21(3), Doi: 10.1007/s00894-015-2604-6 (Yayın No: 3843207)
5. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK (2014). The Molecular Modeling of Novel Inhibitors of Protein Tyrosine Phosphatase 1B Based on Catechol by MD and MM GB PB SA Calculations. Bulletin of the Korean Chemical Society, 35(6), 1769-1776., Doi: 10.5012/bkcs.2014.35.6.1769 (Yayın No: 1169231)
6. KAZEYLEK MEHMET, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, VARHAN ORAL ELİF, ÇOLAK MEHMET, KARAKAPLAN MEHMET (2014). Complexation and transport of amino acid esters and their salts with synthesised chiral novel aza crown ether derivatives. Supramolecular Chemistry, 26(5-6), 363-372., Doi: 10.1080/10610278.2013.844808 (Yayın No: 1169196)
7. ERCAN SELAMİ, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN, WILLIAMS ANDREW (2014). Experimental and theoretical study of the mechanism of hydrolysis of substituted phenyl hexanoates catalysed by globin in the presence of surfactant. Journal of Molecular Modeling, 20(3), 2096-2111., Doi: 10.1007/s00894-014-2096-9 (Yayın No: 1169217)

Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

8. KARAKAPLAN MEHMET, AK DEVRAN, ÇOLAK MEHMET, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, HOŞGÖREN HALİL, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2013). Synthesis of new diaza 18 crown 6 ethers derived from trans R R 1 2 diaminocyclohexane and investigation of their enantiomeric discrimination ability with amino acid ester salts. Tetrahedron, 69(1), 349-358., Doi: 10.1016/j.tet.2012.10.020 (Yayın No: 1169185)
9. Yılmaz Hayriye, GÜZEL YAHYA, Önal Zülbiye, Altıparmak Gökçe, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK (2011). 4D QSAR Study of p56lck Protein Tyrosine Kinase Inhibitory Activity of Flavonoid Derivatives Using MCET Method. Bulletin of the Korean Chemical Society, 32(12), 4352-4360., Doi: 10.5012/bkcs.2011.32.12.4352 (Yayın No: 1169156)
10. KÖYLÜ MEHMET ZAFER, ARAL TARIK, KARAKAPLAN MEHMET, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, HOŞGÖREN HALİL (2011). Enantioselective Complexation of Chiral Lariat Crown Ethers and Chiral Primary Alkylammonium Perchlorates. Turkish Journal of Chemistry, 35, 171-179., Doi: 10.3906/kim-1008-844 (Yayın No: 1169129)
11. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, YILMAZ TURGUT (2010). Pyridine containing chiral macrocycles for the enantioselective recognition of amino acid derivatives and their molecular dynamics simulations. Tetrahedron: Asymmetry, 21(8), 990-996., Doi: 10.1016/j.tetasy.2010.05.038 (Yayın No: 1169058)
12. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2010). A Theoretical Study of the Effects of Polar Substitution on the Activation Barriers for Internal Rotation Around the C N Bond in p Substituted Nitrosobenzenes Comparison of DFT and MP2 Calculations. Turkish Journal of Chemistry, 34, 399-410., Doi: 10.3906/kim-0909-272 (Yayın No: 1169046)
13. ARAL HAYRİYE, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, AKGÜN ABUZER, HOŞGÖREN HALİL, TOGRUL MAHMET (2009). The enantiomeric recognition of chiral organic ammonium salts by chiral pyridino macrocycles bearing aminoalcohol subunits. Tetrahedron: Asymmetry, 20(13), 1541-1546., Doi: 10.1016/j.tetasy.2009.06.010 (Yayın No: 1168969)

B. Uluslararası bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitaplarında (proceedings) basılan bildiriler :

1. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK (2018). MOLECULAR DOCKING STUDY OF PIPERAZINE DERIVATIVES AS POTENTIAL UREASE INHIBITORS. International Engineering and Natural Sciences Conferences IENSC 2018 (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4483227)
2. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, KARAKAPLAN MEHMET (2018). A COMPUTATIONAL APPROACH TOWARDS PTP1B ENZYME INHIBITION BY CHIRAL β -AMINO ALCOHOL. International Engineering and Natural Sciences Conference IENSC 2018 (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4483220)
3. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2017). Docking and Molecular Dynamic Simulations of the Complexes of Some Moracine Compounds with PTP1B. INTERNATIONAL CONGRES ON CHEMISTRY AND MATERIAL SCIENCE (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3747666)
4. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, KARAKAPLAN MEHMET, ROSARIO SCOPELLITI (2017). Synthesis and crystal structure of a chiral lactam and three amino alcohols as potent protein tyrosine phosphates 1B inhibitors . international congres on chemistry and material science (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3747697)
5. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2017). DNA Damaging Activities of Some PTP1B Inhibitors. Tıpta İnovasyon Buluşmaları III (Innovation in Medicine Summit III) 11-13 Mayıs 2017 Gaziantep (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3747489)
6. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, KARAKAPLAN MEHMET, SCOPELLITI ROSARIO (2017). Next-Generation Drug Design as PTP1B Inhibitors PTP1B İnhibitörü Olarak Yeni Nesil İlaç Tasarımı. Tıpta İnovasyon Buluşmaları III (Innovation in Medicine Summit III) (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3747605)
7. ÇEKEN TOPTANCI BİRCAN, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, KIZIL MURAT (2012). Synthesis and DNA binding of Duocarmycin Antibiotic Derivatives Containing Diazo Proflavin Molecular Constructs. 12th Eurasia Conference on Chemical Sciences (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:1171597)
8. ÇEKEN BİRCAN, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, KIZIL MURAT (2011). Design Synthesis and DNA Cleavage Ability of Duocarmycin Antibiotic Analog Containing Proflavin with Molecular Modeling. ACR-Anticancer Agents Research Congress, P-40, Antalya, Türkiye (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:1171589)

E. Ulusal bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitaplarında basılan bildiriler:

1. ÇEKEN TOPTANCI BİRCAN, ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, GÜZEL VEYSEL, KIZIL MURAT (2012). Diazo Proflavin içeren Duocarmycin Antibiyotik Türevinin Sentezi ve DNA ile Etkileşiminin İncelenmesi Synthesis and DNA interaction of Duocarmycin Antibiotic Derivative Containing Diazo Proflavin. 26. Ulusal Kimya Kongresi (Uluslararası Katılımlı), BP-TR-039, Muğla, Türkiye (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:1171621)

2. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, ÇEKEN TOPTANCI BİRCAN, DİNÇ HAYRETTİN, KIZIL MURAT (2012). Duocarmycin Antibiyotiği Analogunun Dizaynı DNA Kesim Etkisi ve Moleküller Modelleme Çalışmaları Synthesis and DNA Cleavage Ability of Duocarmycin Antibiotic Analog with Molecular Modeling. 26. Ulusal Kimya Kongresi (Uluslararası Katılımlı), BP-TR-039, Muğla, Türkiye (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:1171606)
3. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, ÇEKEN TOPTANCI BİRCAN, KIZIL MURAT (2011). Proflavin içeren Duocarmycin Antibiyotiği Analoglarının DNA ya Bağlanma İlgilerinin Hesapsal Araştırılması. 25. Ulusal Kimya Kongresi (Uluslararası Katılımlı), OP-112, Erzurum, Türkiye (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:1171577)
4. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2011). Protein Tirosin Fosfat 1B PTP1B Enzimi inhibitörlerinin Yapı Temelli Dizayn Moleküler Dinamik Simülasyonu ve MM PB SA Hesaplamalar. 25. Ulusal Kimya Kongresi (Uluslararası Katılımlı), OP-112, Erzurum, Türkiye (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:1171562)
5. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, KIZIL MURAT, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2010). DNA Küçük Ouğa Bağlanan Moleküllerin Tasarımı MD Simülasyonu ve Docking Hesaplamaları. Bilimde Modern Yöntemler Sempozyumu (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:1171546)
6. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2010). Okta karboksilat Grubu Barındıran Kalix 4 Resorsinaren Bileşiğinin Çeşitli Nötral ve İyonik Bileşikler Tanıma Özelliklerinin Hesapsal Olarak Çalışılması. 24. Ulusal Kimya Kongresi, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi, Zonguldak (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:1171520)
7. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2010). p Sübstitüe Metil Benzoatların Alkalın Hidroliz Reaksiyon Mekanizmalarının Teorik DFT olarak Araştırılması. 24. Ulusal Kimya Kongresi, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi, Zonguldak (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:1171497)
8. ÖZHAN KOCAKAYA ŞAFAK, PİRİNÇÇİOĞLU NECMETTİN (2009). Sübstitüe Nitrosoaren Bileşiklerindeki C N bağı Etrafındaki Dönmenin Aktivasyon Bariyerine Sübstitüentlerin Polar Sterik Etkilerinin İncelenmesi. 23. Ulusal Kimya Kongresi, Cumhuriyet Üniversitesi, Sivas, Türkiye (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:1171435)
9. OZHAN S., BUCHANAN J. G., MAHON M. F., LOWE J. P., PIRINNCCIOGLU N. WILLIAMS, I. H. (2005). Study of Mechanisms of Addition of Bromine to Aqueous Solutions of Disodium of Mesaconate and Citraconate. 19. Ulusal Kimya Kongresi, OKP 172, Kuşadası, Türkiye (Özet Bildiri/Poster No:1171396)

Kurs

1. TR- Grid kursu, Games, AMBER, NAMD, DFT Calculation, TÜBİTAK ULAKBİM, Kurs, 05.04.2010 - 09.04.2010 (Ulusal)
2. Summer School on Molecular Modeling and Drug Design, Summer School on Molecular Modeling and Drug Design, Yeditepe Üniversitesi, Kurs, 10.09.2008 -14.09.2008 (Uluslararası)
3. Nükleer magnetik rezonans lisansüstü yaz okulu, Nükleer magnetik rezonans (NMR) cihazı ile yapı tayini, Atatürk Üniversitesi, Kurs, 12.07.2005 -26.07.2005 (Ulusal)
4. BRUKER NMR Cihaz kullanımı, NMR Cihaz kullanımı, Dicle Üniversitesi, Kurs, 25.04.2005 -30.04.2005 (Ulusal)

Çalıştay

5. "Proteinlerin Moleküler Dinamik Simülasyonu: Temelleri ve Uygulamaları, "Proteinlerin Moleküler Dinamik Simülasyonu: Temelleri ve Uygulamaları TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi, Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji (MBN) Mühendisliği. ANKARA. Çalıştay. 22.06.2015 -02.07.2015 (Ulusal)
6. Moleküler Dinamik Çalıştay II, Moleküler Dinamik hesaplama yöntemleri, TOBB Ekonomi ve teknoloji üniversitesi, Çalıştay, 12.09.2011 -15.09.2011 (Ulusal)
7. Moleküler Dinamik Çalıştay I, Moleküler dinamik hesaplamalar ve sistemler, TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi, Çalıştay, 13.09.2010 -17.09.2010 (Ulusal)