

Araştırmalarımız, en yeni hesaplama yöntemlerini kullanarak organik ve biyoorganik kimyadaki sorulara yanıt bulmaya ve yeni olayları tahmin etmeye odaklanmaktadır. Güncel çalışma konularımız arasında polifarmakolojik ilaç araştırmaları, tıbbi önem taşıyan karmaşık biyoaktif moleküllerin sentezinde kullanılmak üzere doğa dostu yeni katalizörler geliştirilmesi, hesaplamalı enzim ve organokatalizör tasarımı, enzimlerin çalışma mekanizmalarının anlaşılması, seçici olmayan enzim aktivitelerinin belirlenmesi ve geliştirilmesi, çok fonksiyonlu katalizörlerde seçiciliğin kökenlerinin ve çalışma mekanizmalarının anlaşılması, etkin katalitik yapıların belirlenmesi için yeni hesaplamalı yaklaşımların geliştirilmesi yer almaktadır.

Grubumuzda 2013 yılından itibaren 14'ü proje bursiyeri olarak destek almak üzere 5 doktora, 9 yüksek lisans ve 9 lisans öğrencisi aktif olarak yer alarak araştırma çalışmalarını yürütmüştür.

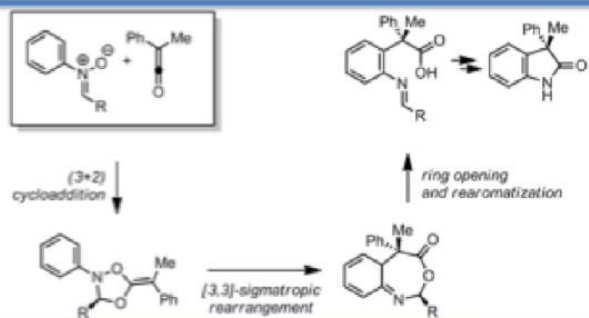
Çalışma konularımızla ilgili seçili yayınlar:

- S. Zhang, M. M. Melzer, S. N. Sen, N. Çelebi-Ölçüm, T. H. Warren, "Insertion of NO into a Copper(II)-Thiolate: A new Motif for Reversible NO Interaction at Metallozymes", *Nature Chem.* **2016**, 8, 663-669.
- G. Kiss, N. Çelebi-Ölçüm, R. Moretti, D. Baker, K. N. Houk, "Computational Enzyme Design", *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 5700-5725.
- M. Kheirabadi, N. Çelebi-Ölçüm, M. F. L. Parker, Q. Zhao, G. Kiss, K. N. Houk, C. E. Schafmeister, "Spiroligozymes for Transesterifications: Design and Relationship of Structure to Activity", *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 18345-18353.
- Bellomo, N. Çelebi-Ölçüm, X. Bu, N. Rivera, R. Ruck, C. J. Welch, K. N. Houk, S. D. Dreher, "Rapid Catalyst Identification for the Synthesis of the Pyrimidinone Core of HIV Integrase Inhibitors", *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 6912-6915.
- N. Çelebi-Ölçüm, Y. -H. Lam, E. Richmond, K. B. Ling, A. D. Smith, K. N. Houk, "Pericyclic Cascade with Chirality Transfer: Reaction Pathway and Origin of Enantioselectivity of the Hetero-Claisen Approach to Oxindoles", *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 11478-11482.
- P. H. -Y. Cheong, C. Y. Legault, J. Um, N. Çelebi-Ölçüm, K. N. Houk, "Quantum Mechanical Investigations of Organocatalysis: Mechanisms, Reactivities, and Selectivities", *Chem. Rev.* **2011**, 111, 5042-5137.
- N. Çelebi-Ölçüm, B. W. Boal, A. D. Hutters, N. K. Garg, K. N. Houk, "Why do some Fischer indolizations fail?", *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 5752-5755.
- D. H. Ess, S. E. Wheeler, R. G. Iafe, L. Xu, N. Çelebi-Ölçüm, K. N. Houk, "Bifurcations on potential energy surfaces of organic reactions", *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47, 7592-7601.
- N. Çelebi-Ölçüm, D. H. Ess, V. Aviyente, K. N. Houk, "Lewis acid catalysis alters the shapes and products of bis-pericyclic Diels-Alder transition states", *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 4529-4530.

RESEARCH INTERESTS

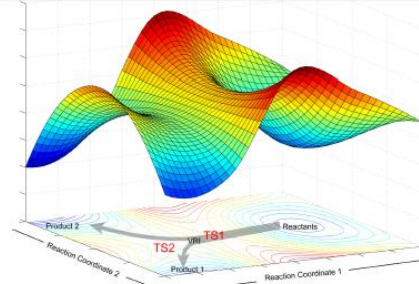
Understand

Mechanisms, Selectivities and Rates



Discover

Novel Pathways, Reactions, Materials and Catalysts



Design

Enzymes and Organocatalysts

