

ÖZ GEÇMİŞ VE ESERLER LİSTESİ

ÖZ GEÇMİŞ

Adı ve Soyadı: Berna Doğan

Doğum Tarihi: 1987

Akademik Unvanı: Dr. Öğr. Üyesi

İş Telefonu:

İş Adresi:

E-postası: berna.dogan@med.bau.edu.tr

Bildiği Yabancı Diller: İngilizce (Yetkin), Almanca (Başlangıç), Fransızca (Başlangıç)

Aldığı Sertifikalar:

Uzmanlık Alanı:

Derece	Bölüm/Program	Üniversite	Yıl
Lisans	Kimya	Boğaziçi Üniversitesi	2011
Y. Lisans	Kimya	Boğaziçi Üniversitesi	2012
Doktora	Kimya	Münih Teknik Üniversitesi	2016

Yüksek Lisans Tez Başlığı (özeti ekte) ve Tez Danışman(lar)ı:

Modelling the Solvent Effect in Free Radical Polymerization and Deamidation of Peptides

YÖK Tez No: 312102

Danışman: Prof. Dr. Viktorya Aviyente

Doktora Tezi/S.Yeterlik Çalışması/Tıpta Uzmanlık Tezi Başlığı (özeti ekte) ve Danışman(lar)ı:

In *Silico* Prediction of Dissolution Rates of Pharmaceutical Ingredients: Micro-Kinetic Model Based on Spiral Dissolution

YÖK Tez No: 403060

Danışman: Prof. Dr. Karsten Reuter

Görevler:

Görev Unvanı	Görev Yeri	Yıl
Doktor Öğretim Üyesi	Bahçeşehir Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Temel Bilimler Bölümü, Tıbbi Biyokimya Anabilim Dalı, İstanbul, Türkiye	11.2019 -
Doktora Üstü Araştırmacı (TÜBİTAK 2218 Bursiyeri)	Bahçeşehir Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Temel Bilimler Bölümü, Biyofizik Anabilim Dalı, İstanbul, Türkiye	07.2018 – 11.2019
Doktora Araştırmacı	Münih Teknik Üniversitesi, Teorik Kimya Bölümü, Kimya Fakültesi, Münih, Almanya	10.2012 – 06.2016
Öğrenci Asistanı	Boğaziçi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, İstanbul, Türkiye	02.2011 – 06.2012

Misafir Araştırmacı	Gent Üniversitesi, Moleküler Modelleme Merkezi, Gent, Belçika	06.2011 – 07.2011
Stajyer (Erasmus Staj Hareketliği Programı)	Gent Üniversitesi, Moleküler Modelleme Merkezi, Gent, Belçika	07.2010 – 09.2010

Yönetilen Yüksek Lisans Tezleri :

1. Ntsoaki Baithedi MOTAPANYANE, 2022, Biyomühendislik (İNGİLİZCE, TEZLİ) yüksek lisans programı, Tez Başlığı: Applications of Molecular Modelling Approaches for the Identification of Novel SARS-COV-2 RdRP Inhibitors

Yönetilen Doktora Tezleri/Sanatta Yeterlik Çalışmaları :

Projelerde Yaptığı Görevler:

1. TÜBİTAK 1004- Mükemmeliyet Merkezi Destek Programı, "Ülkemizde ve Dünyada Halk Sağlığını En Fazla Tehdit Eden HIV, HPV ve Influenza Kaynaklı Enfeksiyonlara Karşı Tanı Kitleri, İlaç Formülasyonları ve Aşı Geliştirilmesi", 2020-2022, **Araştırmacı**
2. TÜSEB 2020-Yİ-02 – Yenilikçi İlaç Geliştirme Stratejik Ar-Ge Proje Çağrısı, "Etkinliği Kanıtlanmış, Yeni Öncü BCL-2 İnhibitörlerinin in Silico Optimizasyon, Sentez, in Vitro ve in Vivo Hayvan Model Çalışmaları", Bahçeşehir Üniversitesi, Tıp Fakültesi, 2020-2023, **Araştırmacı**
3. TÜBİTAK 2218 – Yurt İçi Doktora Sonrası Araştırma Burs Programı, "HIV-1 Yüzey Glikoprotein GP41/GP120 kompleksinin İnsan T-hücre Zarında Bulunan CD4 Reseptörü ve CXCR4/CCR5 koreseptörleri ile Etkileşim Mekanizmasının Çok Boyutlu Moleküler Modelleme ve Uzun Moleküler Dinamik (MD) Simülasyonlar ile İncelenmesi", Bahçeşehir Üniversitesi, Tıp Fakültesi, 2018-2019, **Araştırmacı**.
4. Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - Projektnummer 210064482 "Molecular and multiscale modelling of the dissolution of active pharmaceutical ingredients (Aktif farmasötik maddelerin çözümlerinin moleküler ve çok katmanlı modelleme yöntemleri ile incelenmesi)", Münih Teknik Üniversitesi, Almanya, 2012-2016, **Araştırmacı**.

İdari Görevler:

-

Bilimsel Kuruluşlara Üyelikler:

1. Organization for Women in Science for the Developing World (2019 - present)
2. Türk Biyofizik Derneği (2018 - present)
3. Deutsche Physikalische Gesellschaft e.V – Alman Fizik Topluluğu (2013-2015)

Ödüller:

1. Gordon Research Conference (GRC) Bilimsel Toplantı Katılım ve Seyahat Desteği, 2019.
2. TÜBİTAK BİDEB 2218 – Yurt İçi Doktora Sonrası Araştırma Burs Programı, 2018-2020.
3. Boğaziçi Üniversitesi Onur Belgesi (Lisans) 2011.

Son iki yılda verdiği lisans ve lisansüstü düzeydeki dersler (Açılmışsa, yaz döneminde verilen dersler de tabloya ilave edilecektir):

Akademik Yıl	Dönem	Dersin Adı	Haftalık Saati		Öğrenci Sayısı
			Teorik	Uygulama	
2020-2021	Güz	Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1001 – Hücrenin Moleküler Temeli)	5 (toplam)	-	~200
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1003- Hücre, Doku ve Organ Sistemleri)	2 (toplam)	-	~200
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1005- Muskuloskeletal Sistem)	5 (toplam)	-	~200
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1007- Kardiyovasküler ve Solunum Sistemi)	3 (toplam)	-	~200
		Lisans MED2044 Yaşamın kimyasal ve fiziksel esasları	3	-	54
		Lisans DENT1002 Organik Kimya	1	-	131
	Bahar	Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1006 – Sinir Sistemi)	4 (toplam)	-	~200
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1008 – Duyusal Organlar ve Endokrin sistem)	2 (toplam)	-	~200
		Lisans DENT1002 Organik Kimya	1	-	131
2021-2022	Güz	Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1001 – Hücrenin Moleküler Temeli)	10 (toplam)	16 (toplam)	~160
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1005- Muskuloskeletal Sistem)	10 (toplam)	16 (toplam)	~160
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1007- Kardiyovasküler ve Solunum Sistemi)	12 (toplam)	8 (toplam)	~160
		Lisans MED2044 Yaşamın kimyasal ve fiziksel esasları	3	-	53
		Lisans DENT1002 Organik Kimya	1	-	170
	Bahar	Lisans MED2044 Yaşamın kimyasal ve fiziksel esasları	3	-	43
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1006 – Sinir Sistemi)	4 (toplam)	-	~160
		Lisans TMED1000 İnsan Vücudunun Normal Yapı ve İşlevi (MED1008 – Duyusal Organlar ve Endokrin sistem)	2 (toplam)	-	~160
		Lisans DENT1002 Organik Kimya	1	-	170

ESERLER

A. Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

A1. 7.1. Uluslar arası hakemli dergilerde yayınlanan makaleler

1. Durdagi S., Orhan M. D., Aksoydan B., Calis S., Dogan B., Sahin K., Shahraki A., Iyison N. B., Avsar T. "Screening of Clinically Approved and Investigation Drugs as Potential Inhibitors of SARS-CoV-2: A Combined in silico and in vitro Study" *Mol. Inf.* **2022**, 41, 2100062.
2. Durdagi S., Dağ Ç., Dogan B., ..., Snell E. H., DeMirci H., "Near-physiological-temperature serial crystallography reveals conformations of SARS-CoV-2 main protease active site for improved drug repurposing" *Structure* **2021**, 29 (12), 1382-1396.e6.
3. Oguz, Mehmet; Dogan, Berna; Durdagi, Serdar; Bhatti, Asif Ali; Karakurt, Serdar; Yilmaz, Mustafa "Investigation of supramolecular interaction of quercetin with N,N-dimethylamine-functionalized p-sulfonated calix[4,8]arenes using molecular modeling and their in vitro cytotoxic response towards selected cancer cells" *New J. Chem.* **2021**, 45(39): 18443-18452.
4. Ozten O., Kurt B. Z., Sonmez F., Dogan B., Durdagi S., "Synthesis, molecular docking and molecular dynamics studies of novel tacrine-carbamate derivatives as potent cholinesterase inhibitors" *Bioor. Chem.* **2021**, 115: 105225.
5. Kanan D., Kanan T., Dogan B., Durdagi S. "Discovery of promising antineoplastic drugs against the USP7 deubiquitinating enzyme: A pharmacophore-based FDA-approved and investigational drugs repurposing study", *Cancer Research* **2021**, 81(13): S277.
6. Shahraki A., İşbilir A., Dogan B., Lohse M. J., Durdagi S., Birgul-Iyison N. "Structural and Functional Characterization of Allatostatin Receptor Type-C of *Thaumatococcus pinnatifidus*, a Potential Target for Next-Generation Pest Control Agents" *J. Chem. Inf. Model.* **2021** 61 (2): 715-728.
7. Kanan, D., Kanan, T., Dogan, B., Orhan, M.D., Avsar, T. and Durdagi, S. "An Integrated in silico Approach and in vitro Study for the Discovery of Small-Molecule USP7 Inhibitors as Potential Cancer Therapies" *ChemMedChem.* **2021**, **16**: 555-567.
8. Dogan B., Durdagi S. "Drug Re-Positioning Studies for Novel HIV-1 Inhibitors Using Binary QSAR Models and Multi-Target-Driven In Silico Studies" *Mol. Inform.* **2021**, 40(20): 2000012.
9. Tutumlu G., Dogan B., Avsar T., Orhan M.D., Calis S., Durdagi S. "Integrating Ligand and Target-Driven Based Virtual Screening Approaches with in vitro human Cell Line Models to Identify Novel Hit Compounds Against BCL-2". *Front. Chem.* **2020**, **8**: 1-18.
10. Oguz, M., Bhatti, A.A., Dogan, B., Karakurt, S., Durdagi, S. and Yilmaz, M.; "Formation of the inclusion complex of water soluble fluorescent calix [4] arene and naringenin: solubility, cytotoxic effect and molecular modeling studies." *J. Biomol. Struct. Dyn.*, **2020**, **38**(13): 3801-3813.
11. Durdagi S., Dogan B., Erol I., Kayik G., Aksoydan B.; "Current status of multiscale simulations on GPCRs", *Curr. Opin. Struct. Biol.* **2019**, **55**: 93-103.

12. Durdagi S., Erol I., Dogan B., Sen TB.; "Integration of Text Mining and Binary QSAR Models for Novel Anti-Hypertensive Antagonist Scaffolds", *Biophys. J.* 116 : 478a (2019).
13. Zengin Kurt B., Dag A., Dogan B., Durdagi S., Angeli A., Nocentini A., Supuran CT., Sonmez F.; "Synthesis, biological activity and multiscale molecular modeling studies of bis-coumarins as selective carbonic anhydrase IX and XII inhibitors with effective cytotoxicity against hepatocellular carcinoma." *Bioor. Chem.* 2019, **87**:838-850.
14. Dogan B., Schneider J., Reuter K.; "In Silico Prediction of Dissolution Rates of Pharmaceutical Ingredients", *Chem. Phys. Lett.* 2016, **662**: 52-55.
15. Dogan B., Catak S., Van Speybroeck V., Waroquier M., Aviyente V., "Free Radical Polymerization of Ethyl Methacrylate and Ethyl α -Hydroxy Methacrylate: A Computational Approach to the Propagation Kinetics", *Polymer*, 2012, **53**: 3211-3219.

B. Uluslararası bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitaplarında (proceedings) basılan bildiriler:B1.

1. Ntsoaki Baithedi Motapanyane, Berna Dogan, Serdar Durdagi, "Applications Of Molecular Modeling Approaches For The Identification Of Novel Sars-Cov-2 Rdrp Inhibitors", 2. *Computer-Aided Drug Design Symposium and Workshop - Linking Design, Biology, Chemistry and Medicine*, İstanbul, Türkiye, 11-12 Mayıs 2022.
2. Dogan B., Durdagi S., "First MD Simulations of Full Structure HIV1/GP120 in Complex with CD4 and CCR5", *7th International Bau Drug Design Congress: Recent Developments in Structure- and Ligand-based Drug Design Methodologies*, Beşiktaş, İstanbul, Türkiye, 19-21 Aralık 2019.
3. Dogan B., Durdagi S., "First MD Simulations of Full Structure HIV1/GP120 in Complex with CD4 and CCR5", *Gordon Research Conference on Computer Aided Drug Design*, Mount Snow, West Dover, VT Amerika Birleşik Devletleri, 14-19 Temmuz 2019.
4. Dogan B., Durdagi S., "First MD Simulations of Full Structure HIV1/GP120 in Complex with CD4 and CCR5", *Gordon Research Seminar on Computer Aided Drug Design*, Mount Snow, West Dover, VT Amerika Birleşik Devletleri, 13-14 Temmuz 2019.
5. Dogan B., Durdagi S., "Modeling the entry of HIV into cells: Interactions of HIV envelope proteins GP41/GP120 with human receptor CD4 and co-receptors CCR5/CXCR4", 7. Uluslararası İlaç Kimyası Kongresi, Kemer, Antalya, Türkiye, 14-17 Mart 2019.
6. Dogan B., Durdagi S., "Drug Re-Positioning Studies for Novel HIV-1 Inhibitors Using Binary QSAR Models and Multi-Target-Driven *In Silico* Studies", *6th International Bau Drug Design Congress: Novel Methods and Emerging Targets in Drug Discovery & Patented Drug Development*, Beşiktaş, İstanbul, Türkiye, 13-15 Aralık 2018.
7. Dogan B., Schneider S., Reuter K. "Efficient calculation of dissolution rates for molecular crystals by using accelerated molecular dynamics", *Next generation quantum based molecular dynamics: challenges and perspectives*, Bremen, Almanya, 13-17 Temmuz 2015.
8. Dogan B., Schneider S., Reuter K. "In silico prediction of dissolution rates of molecular crystals", *Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG) Spring Meeting*, Berlin, Almanya, 15-20 Mart 2015.

9. Dogan B., Schneider S., Reuter K. "Molecular dynamics simulations of the dissolution of lactose crystals", *Deutsche Physikalische Gesellschaft DPG Spring Meeting*, Dresden, Almanya, 30 Mart- 4 Nisan 2014.

C. Yazılan ulusal/uluslararası kitaplar veya kitaplardaki bölümler:

C1. Yazılan ulusal/uluslararası kitaplar:

C1.1.

C2. Yazılan ulusal/uluslararası kitaplardaki bölümler:

C2.1.

D. Ulusal hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

D1.

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

E1.

1. Dogan B., Oguz M., Bhattib A.A, Karakurt S., Yilmaz, M., Serdar Durdagi. "Suda Çözünebilir Floresan Kalix[4]aren ve Naringenin Kompleksinin Oluşumu: Çözünürlük, Sitotoksik Etki ve Moleküler Modelleme Çalışmaları" 31. *Ulusal Biyofizik Kongresi*, Adana, Türkiye, 09-12 Ekim 2019.
2. Yeniceler E., Dogan B., Dedeoglu B., Ugur I., Degirmenci I., Aviyente V., Yagci-Acar, HF. "Modeling the free radical polymerization of 2-acetamidoacrylic acid in the presence of a novel RAFT agent" 9. *Kimyasal Fizik Kongresi*, Çeşme, İzmir, Türkiye, 14-16 Ekim 2010.

F. Sanat ve tasarım etkinlikleri:

F1.

G. Diğer yayınlar:

(Yukarıdaki maddelerde yer alan başlıklardaki kategorilere girmeyen ve belirtilmek istenen tüm eserler bu maddenin altında belirtilecektir.)

G1.