

## Dr.Öğr.Üyesi Berna Doğan

### Kişisel Bilgiler

E-posta: bernadogan@itu.edu.tr

Web: <https://avesis.itu.edu.tr/bernadogan>

### Uluslararası Araştırmacı ID'leri

ScholarID: veMv2hAAAAAJ

ORCID: 0000-0002-5650-5177

Publons / Web Of Science ResearcherID: S-8930-2018

ScopusID: 57208274406

Yoksis Araştırmacı ID: 311698

### Eğitim Bilgileri

Post Doktora, Bahçeşehir Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Temel Tıp Bilimleri Bölümü, Türkiye 2018 - 2019

Doktora, Technische Universitaet München, Kimya Fakültesi, Kimya, Almanya 2012 - 2016

Yüksek Lisans, Boğaziçi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 2011 - 2012

Lisans, Boğaziçi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Türkiye 2005 - 2011

### Yabancı Diller

İngilizce, C1 İleri

### Yaptığı Tezler

Doktora, In silico prediction of dissolution rates of pharmaceutical ingredients: Micro-kinetic model based on spiral dissolution, Technische Universitaet München, Faculty of Chemistry, Chemistry, 2016

Yüksek Lisans, Serbest radikal polimerizasyonu ve peptitlerin deamidasyonunun modellenmesi, Boğaziçi Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 2012

### Araştırma Alanları

Fizikokimya

### Akademik Unvanlar / Görevler

Dr.Öğr.Üyesi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat, Kimya, 2023 - Devam Ediyor

Dr.Öğr.Üyesi, Bahçeşehir Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Temel Tıp Bilimleri Bölümü, 2019 - 2023

### Akademik İdari Deneyim

Kimya Bölümü Çift Anadal Koordinatörü, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat, Kimya, 2023 - Devam Ediyor

## Verdiği Dersler

Genel Kimya, Lisans, 2022 - 2023

## Jüri Üyelikleri

Tez Savunma (Yüksek Lisans), Tez Savunma (Yüksek Lisans), Bahçeşehir Üniversitesi, Eylül, 2020

## SCI, SSCI ve AHCI İndekslerine Giren Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Efficient, rapid, and high-yield synthesis of aryl Schiff base derivatives and their in vitro and in silico inhibition studies of hCA I, hCA II, AChE, and BuChE.**  
Özil M., Balaydın H. T., Dogan B., Şentürk M., Durdagi S.  
Archiv der Pharmazie, 2024 (SCI-Expanded)
- II. **Prediction of HIV-1 protease resistance using genotypic, phenotypic, and molecular information with artificial neural networks**  
Tunc H., Doğan B., Kiraz B. N. D., Sarı M., Durdagi S., Kotil S.  
PeerJ, cilt.11, 2023 (SCI-Expanded)
- III. **A novel BH3 mimetic Bcl-2 inhibitor promotes autophagic cell death and reduces in vivo Glioblastoma tumor growth**  
Calis S., Dogan B., DURDAĞI S., Celebi A., Yapiçier O., KILIÇ T., Turanlı E. T., Avsar T.  
CELL DEATH DISCOVERY, cilt.8, sa.1, 2022 (SCI-Expanded)
- IV. **Design and synthesis of novel caffeic acid phenethyl ester (CAPE) derivatives and their biological activity studies in glioblastoma multiforme (GBM) cancer cell lines**  
Sucu B. O., Koc E. B., Savlug Ipek O., Mirat A., Almas F., Guzel M. A., Doğan B., Uludag D., Karakas N., Durdagi S., et al.  
Journal of Molecular Graphics and Modelling, cilt.113, 2022 (SCI-Expanded)
- V. **Screening of Clinically Approved and Investigation Drugs as Potential Inhibitors of SARS-CoV-2: A Combined in silico and in vitro Study**  
Durdagi S., Orhan M. D., Aksoydan B., Calis S., Doğan B., Sahin K., Shahraki A., Iyison N. B., Avsar T.  
Molecular Informatics, cilt.41, sa.2, 2022 (SCI-Expanded)
- VI. **Near-physiological-temperature serial crystallography reveals conformations of SARS-CoV-2 main protease active site for improved drug repurposing**  
DURDAĞI S., Dag C., Dogan B., Yigin M., Avsar T., Buyukdag C., Erol I., Ertem F. B., Calis S., Yildirim G., et al.  
STRUCTURE, cilt.29, sa.12, ss.1382-1403, 2021 (SCI-Expanded)
- VII. **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**  
Oguz M., Doğan B., Durdagi S., Bhatti A. A., Karakurt S., Yilmaz M.  
New Journal of Chemistry, cilt.45, sa.39, ss.18443-18452, 2021 (SCI-Expanded)
- VIII. **Synthesis, molecular docking and molecular dynamics studies of novel tacrine-carbamate derivatives as potent cholinesterase inhibitors**  
Ozten O., ZENGİN KURT B., Sonmez F., Doğan B., Durdagi S.  
Bioorganic Chemistry, cilt.115, 2021 (SCI-Expanded)
- IX. **Structural and Functional Characterization of Allatostatin Receptor Type-C of Thaumatococcus pinnatifida, a Potential Target for Next-Generation Pest Control Agents**  
Shahraki A., İşbilir A., Doğan B., Lohse M. J., Durdagi S., Birgul-Iyison N.  
Journal of Chemical Information and Modeling, cilt.61, sa.2, ss.715-728, 2021 (SCI-Expanded)
- X. **An Integrated in silico Approach and in vitro Study for the Discovery of Small-Molecule USP7 Inhibitors as Potential Cancer Therapies**

- Kanan D., Kanan T., Doğan B., Orhan M. D., Avsar T., Durdagi S.  
ChemMedChem, cilt.16, sa.3, ss.555-567, 2021 (SCI-Expanded)
- XI. **Drug Re-positioning Studies for Novel HIV-1 Inhibitors Using Binary QSAR Models and Multi-target-driven In Silico Studies**  
Doğan B., Durdagi S.  
Molecular Informatics, cilt.40, sa.2, 2021 (SCI-Expanded)
- XII. **Formation of the inclusion complex of water soluble fluorescent calix[4]arene and naringenin: solubility, cytotoxic effect and molecular modeling studies**  
Oguz M., Bhatti A. A., Doğan B., Karakurt S., Durdagi S., Yilmaz M.  
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, cilt.38, sa.13, ss.3801-3813, 2020 (SCI-Expanded)
- XIII. **Integrating Ligand and Target-Driven Based Virtual Screening Approaches With in vitro Human Cell Line Models and Time-Resolved Fluorescence Resonance Energy Transfer Assay to Identify Novel Hit Compounds Against BCL-2**  
Tutumlu G., Dogan B., Avsar T., Orhan M. D., Calis S., DURDAĞI S.  
FRONTIERS IN CHEMISTRY, cilt.8, 2020 (SCI-Expanded)
- XIV. **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**  
ZENGİN KURT B., DAĞ A., Doğan B., Durdagi S., Angeli A., Nocentini A., Supuran C. T., Sonmez F.  
Bioorganic Chemistry, cilt.87, ss.838-850, 2019 (SCI-Expanded)
- XV. **Current status of multiscale simulations on GPCRs**  
Durdagi S., Doğan B., Erol I., Kayık G., Aksoydan B.  
Current Opinion in Structural Biology, cilt.55, ss.93-103, 2019 (SCI-Expanded)
- XVI. **In silico dissolution rates of pharmaceutical ingredients**  
Doğan B., Schneider J., Reuter K.  
Chemical Physics Letters, cilt.662, ss.52-55, 2016 (SCI-Expanded)
- XVII. **Free radical polymerization of ethyl methacrylate and ethyl  $\alpha$ -hydroxy methacrylate: A computational approach to the propagation kinetics**  
Doğan B., Catak S., Van Speybroeck V., Waroquier M., Aviyente V.  
Polymer, cilt.53, sa.15, ss.3211-3219, 2012 (SCI-Expanded)

## Desteklenen Projeler

Doğan B., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, CCR5 reseptörünün yapısal çeşitliliğinin moleküler dinamik MD çalışmaları ile incelenmesi, 2023 - Devam Ediyor

Doğan B., Durdağı S., Özönder Ş., Avşar T., TÜBİTAK Projesi, RNA metilasyon mekanizmasında görevli enzimleri hedef alan moleküllerin moleküler kenetleme, moleküler dinamik ve aktif makine öğrenmesi çalışmaları ile keşfedilmesi, 2024 - 2026

Doğan B., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Makine öğrenmesi yöntemleri kullanarak HDAC izoformları için seçici molekülleri keşfedilmesi, 2023 - 2023

Doğan B., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, HDAC6 seçici inhibitörlerin derin makine öğrenmesi yöntemleri ile keşfedilmesi, 2021 - 2023

Doğan B., Durdağı S., Avşar T., Dinç B., Türkiye Sağlık Enstitüleri Başkanlığı (TÜSEB) Projesi, Etkinliği Kanıtlanmış, Yeni Öncü BCL-2 Inhibitörlerinin in Siliko Optimizasyon, Sentez, in Vitro ve in Vivo Hayvan Model Çalışmaları, 2020 - 2023

Durdağı S., Doğan B., TÜBİTAK Projesi, 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, 2018 - 2019

## Bilimsel Dergilerdeki Faaliyetler

FRONTIERS IN MOLECULAR BIOSCIENCES, Editörler Kurulu Üyesi, 2023 - Devam Ediyor  
Journal of Drug Design and Medicinal Chemistry, Editörler Kurulu Üyesi, 2022 - Devam Ediyor

### **Bilimsel Kuruluşlardaki Üyelikler / Görevler**

Türk Kimya Derneği, Asli Üye, 2023 - Devam Ediyor , Türkiye  
The Organization for Women in Science for the Developing World (OWSD) , Üye, 2019 - Devam Ediyor , İtalya  
Türk Biyofizik Derneği, Üye, 2019 - Devam Ediyor , Türkiye  
Alman Fizik Topluluğu, Üye, 2013 - 2015, Almanya

### **Bilimsel Hakemlikler**

PEERJ, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Haziran 2022  
Journal of Microbiology, Biotechnology and Food Sciences, SCI Kapsamındaki Dergi, Mayıs 2022  
European Journal of Biology, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Aralık 2021  
THERANOSTICS, SCI-E Kapsamındaki Dergi, Ekim 2021

### **Kongre ve Sempozyum Katılımı Faaliyetleri**

Computer Aided Drug Design, Katılımcı, Vermont, Amerika Birleşik Devletleri, 2023  
Visegrad symposium on biomolecular interactions, Davetli Konuşmacı, Sopron, Macaristan, 2023  
Computer Aided Drug Design, Katılımcı, Vermont, Amerika Birleşik Devletleri, 2019

### **Burslar**

Yurt İçi Doktora Sonrası Araştırma Burs Programı, TÜBİTAK, 2018 - 2019  
Erasmus Staj Hareketliği, YÖK, 2011 - 2011