

# TUĞBA TAŞKIN TOK

## DOÇENT



**E-Posta Adresi** : ttaskin@gantep.edu.tr  
**Telefon (İş)** : 3423172996-  
**Telefon (Cep)** : 5548050499  
**Adres** : GAZİANTEP ÜNİVERSİTESİ, FEN EDEBİYAT FAKÜLTESİ, KİMYA BÖLÜMÜ, 27310, ŞEHİTKAMİL, GAZİANTEP.

### Öğrenim Bilgisi

Doktora 2006 16/Haziran/2010	HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ/KİMYA (DR)  Tez adı: Molecular modelling studies of TRPV1 receptor antagonists (2010) Tez Danışmanı:(FATMA SEVİN DÜZ)
Yüksek Lisans 2003 10/Şubat/2006	HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ/KİMYA (YL) (TEZLİ)  Tez adı: Synthesis of octahydro-1H-pyrido [3,2-c] carbazole core structure (2006) Tez Danışmanı:(GÜROL OKAY,SÜLEYMAN PATIR)
Lisans 1999 16/Haziran/2003	HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ FEN FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/KİMYA PR.

### Akademik Görevler

DOÇENT 2016	GAZİANTEP ÜNİVERSİTESİ/FEN-EDEBİYAT FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/ORGANİK KİMYA ANABİLİM DALI)
YARDIMCI DOÇENT 2011-2016	GAZİANTEP ÜNİVERSİTESİ/FEN-EDEBİYAT FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/ORGANİK KİMYA ANABİLİM DALI (08.04.2016 tarihinde Kimya Bilim Alanında Üniversite Doçent unvanı ve yetkisi verilmiştir.)
ARAŞTIRMA GÖREVLİSİ 2004-2010	HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ/FEN FAKÜLTESİ/KİMYA BÖLÜMÜ/ORGANİK KİMYA ANABİLİM DALI)

### Yönetilen Tezler

#### Yüksek Lisans

2022

1. KOÇ SATILOĞLU AYSUN, (2022). Yeni piridin halkalı SNS pincer tipi ligand ve bazı metal komplekslerinin sentezi karakterizasyonu ve hesapsal çalışması, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Kimya Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2021

2. AL NUAIMI ZAID JAAFAR AWAD, (2021). Alzheimer hastalığı tedavisi ve gelecek perspektifinde ilaç yeniden konumlandırma yaklaşımının kullanılması, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Biyokimya Bilimi ve Teknolojisi Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2019

3. GÜREL NUR, (2019). Design of effective carbonic anhydrase inhibitors by using in silico pharmacophore analysis, Gaziantep Üniversitesi->Sağlık Bilimleri Enstitüsü->Biyoenformatik ve Bilişimsel Biyoloji Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2018

4. ÇİFTÇİ EMRAH, (2018). Kozmetik ürünlerde kullanılabilen bazı kıvamlaştırıcı maddelerin temel bir bebek şampuanı formülasyonu üzerinde viskoziteye etkilerinin incelenmesi, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Kimya Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)
5. YILDIRIM MUSTAFA, (2018). Rho-kinaz(Rock) enzimine karşı in-siliko yöntemler kullanılarak yeni inhibitörlerin tasarlanması, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Kimya Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2017

6. BAYEL SEÇİNTİ BURCU, (2017). RHO-kinaz (ROCK) inhibitörlerinin moleküler modelleme yöntemiyle incelenmesi, Gaziantep Üniversitesi->Sağlık Bilimleri Enstitüsü->Tıbbi Biyoloji Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)
7. BAYIL İMREN, (2017). Determination of ideal metal organic frameworks for drug transport based on UMCM-1 and MIL-101, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Kimya Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)
8. DARWISH AL AFANDI MOHAMMED, (2017). Moleküler modelleme metodları kullanılarak protein ve peptit etkileşimlerinin incelenmesi, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Biyokimya Bilimi ve Teknolojisi Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2015

9. TÜRKMEN VOLKAN, (2015). Computer design & theoretical investigation of flavonoids derivatives as anticancer drugs, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Kimya Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2013

10. ÖZDAL SEVDA EBRU, (2013). NPY Y1 antagonistleri olarak sentezlenmiş karbazol türevlerinin obezite tedavisi için kantitatif yapı-aktivite çalışmaları, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Diğer (Tamamlandı)

## Doktora

2022

11. EFENDİ MOHAMMED, (2022). Testing the activity of biguanide derivatives and some novel molecules against SARS-CoV-2, in silico study, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Kimya Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2021

12. MEHDIZADEHTAPEH LEILA, (2021). Epibrassinolidin kanser hücrelerinde interaksiyon partnerlerinin in silico araştırılması ve bu partnerlerle ilişkili hücre ölüm mekanizmalarının in vitro incelenmesi, İstanbul Kültür Üniversitesi->Lisansüstü Eğitim Enstitüsü->Moleküler Biyoloji ve Genetik Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)
13. AL-KHAFAJI KHATTAB ADNAN ABED, (2021). Molecular mechanisms of amygdalin as multifunctional anti-cancer drug: computational assessment, Gaziantep Üniversitesi->Fen Bilimleri Enstitüsü->Kimya Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

2018

14. TATAR GİZEM, (2018). Structure prediction of eukaryotic elongation factor 2 kinase (eEF-2K) and elucidation of binding mechanisms of its novel compounds with molecular modelling applications, Gaziantep Üniversitesi->Sağlık Bilimleri Enstitüsü->Biyoenformatik ve Bilişimsel Biyoloji Ana Bilim Dalı (Tamamlandı)

## Projelerde Yaptığı Görevler:

1. TRPV1 Reseptör Antagonistlerinin Moleküler Modelleme Çalışmaları, -Tübitak 1001, Bursiyer:TAŞKIN TOK TUĞBA,Yürütücü:SEVİN DÜZ FATMA, , 01/01/2007 - 01/01/2008 (ULUSAL)
2. Selektif COX 2 İnhibitor Etki Göstermesi Beklenen Yeni Flurbiprofen Yapısına Sahip Triazol Türevlerinin Moleküler Modelleme Çalışmaları ve Sentezleri, -Tübitak 3001, Yürütücü:UZGÖREN BARAN AYŞE,Araştırmacı:TAŞKIN TOK TUĞBA, , 01/01/2015 - 01/01/2016 (ULUSAL)
3. Kemoterapötik Etkili Heterosiklik Bileşiklerin Hesaplamalı Kimya ve Moleküler Modelleme Uygulamaları Gaziantep Üniv, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:TUĞBA TAŞKIN TOK, Araştırmacı:SERAP YILMAZ, Araştırmacı:ESİN EMİNE AKI YALÇIN, , 07/05/2012 - 19/08/2013 (ULUSAL)
4. covid-19 üzerine etkili olabilecek hesaplamalı kimya destekli biguanid türevli ilaç tasarım ve aktivite çalışmaları, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:TUĞBA TAŞKIN TOK, Araştırmacı:Mohammed EFENDİ, , 27/07/2020 - 19/08/2021 (ULUSAL)

5. Poli ADP Riboz polimeraz inhibitörü yeni karbohidrazid ve üre türevlerinin sentezi ve aktivitelerinin incelenmesi, -Tübitak 3001, Danışman:TAŞKIN TOK TUĞBA,Yürütücü:KAYMAKÇIOĞLU BEDİA,Araştırmacı:TOK FATİH,Danışman:BALLAR KIRMIZIBAYRAK PETEK, , 01/01/2016 - 01/05/2018 (ULUSAL)
6. Bazı metal nanokümlerin ve biyosensör özellikli malzemelerin geliştirilmesi, karakterizasyonu ve hesapsal çalışması, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:TAŞKIN TOK TUĞBA,Yardımcı Personel:SOĞUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE,Yardımcı Personel:bozdoğan leyla, , 04/12/2018 - 05/12/2020 (ULUSAL)
7. İlaç Etken Maddesi Olarak N-Heterosiklik Karben (NHC-M, M:Ag, Ru, Pd) Komplekslerinin Sentezi: Antikanser, Enzim İnhibisyonu, DNA Bağlanma Özellikleri ve Moleküler Modelleme, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Araştırmacı:AKTAŞ AYDIN,Araştırmacı:TAŞKIN TOK TUĞBA,Araştırmacı:ATEŞ BURHAN,Araştırmacı:GÜRSES CANBOLAT,Araştırmacı:Türker Ferhat,Araştırmacı:Noma Samir Abbas Ali,Araştırmacı:BEREKET İMRAN,Yürütücü:GÖK YETKİN,Araştırmacı:BALCIOĞLU SEVGİ, , 10/08/2018 - 23/07/2020 (ULUSAL)
8. bazı metal nanokümlerin ve biyosensör özellikli malzemelerin geliştirilmesi, karakterizasyonu ve hesapsal çalışması, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:TUĞBA TAŞKIN TOK, Araştırmacı:HATİCE GAMZE SOĞUKÖMEROĞULLARI, Araştırmacı:Leyla BOZDOĞAN, , 28/11/2018 - 22/04/2021 (ULUSAL)
9. Kanser Tedavisinde Kullanılabilecek Moleküler Modelleme Tabanlı Yeni Nitroredüktaz (Ntr)/İlaç-Öncü (Prodrug) Sistemlerin Geliştirilmesi ve Enzim Aktivite Sitotoksiste Araştırmaları (113Z706), TÜBİTAK PROJESİ, Araştırmacı:TUĞBA GÜNGÖR, Yürütücü:MEHMET AY, Araştırmacı:FERAY KÖÇKAR, Araştırmacı:TUĞBA TAŞKIN TOK, Bursiyer:NELİN HACIOĞLU, Araştırmacı:AYHAN ÇELİK, Bursiyer:ESRA TOKAY, Bursiyer:FERAH CÖMERT ÖNDER, Bursiyer:ünzile güven gülhan, , 01/04/2014 - 01/04/2017 (ULUSAL)
10. Kimya Bölümü Altyapı Projesi Gaziantep Ün, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Araştırmacı:TUĞBA TAŞKIN TOK, , 02/01/2012 - 01/01/2013 (ULUSAL)
11. Moleküler Modelleme Tabanlı Yeni Hipoksiyle İndüklenen Faktörler Hif-1a ve Hif-2a Enzim İnhibitörlerinin Geliştirilmesi, Sentezi ve Sitotoksiste Araştırmaları, -Tübitak 1001, Yürütücü:EMRE EMİNE ELÇİN,Araştırmacı:TAŞKIN TOK TUĞBA,Araştırmacı:TAŞDEMİR DEMET,Araştırmacı:BAYRAM HASAN,Araştırmacı:İYİDOĞAN AYŞEGÜL,Araştırmacı:SAYGIDEĞER YASEMİN,Bursiyer:BAŞARAN EYÜP, , 01/05/2015 - 15/02/2018 (ULUSAL)
12. TİYOETER KÖPRÜLÜ YENİ SNS TİP PİNCER LİGAND VE BAZI GEÇİŞ METAL KOMPLEKSLERİNİN SENTEZİ VE KARAKTERİZASYONU, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Araştırmacı:HATİCE GAMZE SOĞUKÖMEROĞULLARI, Yürütücü:TUĞBA TAŞKIN TOK, Araştırmacı:Aysun KOÇ SATILOĞLU, , 29/07/2021 (Devam Ediyor) (ULUSAL)
13. Moleküler Modelleme Tabanlı Yeni Hipoksiyle İndüklenen Faktörler Hif-1a ve Hif-2a Enzim İnhibitörlerinin Geliştirilmesi, Sentezi ve Sitotoksiste Araştırmaları, -Tübitak 1001, Yürütücü:EMRE EMİNE ELÇİN,Araştırmacı:BAYRAM HASAN,Araştırmacı:İYİDOĞAN AYŞEGÜL,Araştırmacı:TAŞKIN TOK TUĞBA,Araştırmacı:SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,Araştırmacı:TAŞDEMİR DEMET,Bursiyer:BAŞARAN EYÜP, , 01/05/2015 - 15/02/2018 (ULUSAL)
14. Gaziantep Üniversitesi Bilimsel Araştırmalar Merkezi, ARAŞTIRMA PROJESİ, Araştırmacı:TUĞBA TAŞKIN TOK, , 01/01/2010 - 01/01/2014 (ULUSAL)
15. Zika virüsüne karşı in siliko ilaç tasarımı ve geliştirilmesi FEF.YLT.17.16, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:TAŞKIN TOK TUĞBA,Araştırmacı:Kök Mehmet Ali, , 24/08/2017 - 12/12/2018 (ULUSAL)
16. Kanser Tedavisinde Kullanılabilecek, Moleküler Modelleme Tabanlı Yeni Nitroredüktaz (Ntr)/İlaç-Öncü (Prodrug) Sistemlerin Geliştirilmesi ve Enzim Aktivite-Sitotoksiste Araştırmaları, TÜBİTAK PROJESİ, Yürütücü:AY MEHMET,Araştırmacı:KÖÇKAR FERAY,Araştırmacı:TAŞKIN TOK TUĞBA,Araştırmacı:GÜNGÖR TUĞBA,Bursiyer:TOKAY ESRA,Bursiyer:HACIOĞLU NELİN,Bursiyer:GÜVEN GÜLHAN ÜNZİLE, , 01/04/2014 - 01/04/2017 (ULUSAL)
17. Ağır Akut Solunum Sendromu SARS hastalığına neden olan proteinler arasındaki etkileşimlerin Homoloji Modellemesi ve Mutasyon yöntemi ile incelenmesi Gaziantep Ün, Yükseköğretim Kurumları tarafından destekli bilimsel araştırma projesi, Yürütücü:TUĞBA TAŞKIN TOK, Araştırmacı:Gizem Tatar, , 15/11/2013 - 25/05/2015 (ULUSAL)

## İdari Görevler

Anabilim Dalı Başkanı 2017	GAZİANTEP ÜNİVERSİTESİ/SAĞLIK BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ/BİYOENFORMATİK VE BİLİŞİMSEL BİYOLOJİ (DR)
Anabilim Dalı Başkan Yardımcısı 2014-2018	GAZİANTEP ÜNİVERSİTESİ/FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ/BİYOKİMYA BİLİMİ VE TEKNOLOJİSİ (YL) (TEZLİ) (İNGİLİZCE)

## Bilimsel Kuruluşlara Üyelikler

1. ICS-UNIDO (International Centre for Science and High Technology), Üye , 2007-2010
2. CADD&D (Computer Aided Drug Design and Development) Society, Üye , 2007

## Ödüller

1. Genç Bilim İnsanı Ödülü, GAZİANTEP ÜNİVERSİTESİ, 2019
2. üçüncülük poster ödülü, CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ, 2018
3. "DENEYSEL ARAŞTIRMALAR ÇALIŞMA GRUBU" SÖZLÜ BİLDİRİ ÖDÜLÜ, Türk Toraks Derneği, 2017
4. Poster Ödülü, 1. İlaç Kimyası, Üretimi, Teknolojisi ve Standardizasyonu Kongresi, 2013
5. Burs Ödülü, eCheminfo İlaç Tasarımı Çalıştayı , İNGİLTERE, 2008
6. Başarı ödülü, FEN FAKÜLTESİ, KİMYA BÖLÜMÜ, 2003

## Patentler

1. **EF2-KİNAZ ENZİMİNİ İNHİBE EDEN YENİ BİLEŞİKLER** (2018), Patent No: 2018-GE-259763  
Patent Başvuru Sahipleri : ÇANAĞKALE ONSEKİZ MART ÜNİVERSİTESİ REKTÖRLÜĞÜ,  
Patent Buluş Sahipleri : MEHMET AY,BÜLENT ÖZPOLAT,FERAİH CÖMERT ÖNDER,TUĞBA TAŞKIN TOK,GİZEM TATAR,BEKİR KARLIĞA,HAKAN KANDEMİR,ALİ ÇAĞIR,NURETTİN ŞAHİNER,ESEN BELLUR ATICI

## Eserler

### Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

1. Naseem Saira, Shafiq Zahid, TASLIMI PARHAM, Hussain Saghir, TAŞKIN TOK TUĞBA, KISA DURSUN, Saeed Aamer, Temirak Ahmed, Tahir Muhammad N., Rauf Khawar, El-Gokha Ahmed (2023). Synthesis and evaluation of novel xanthene-based thiazoles as potential antidiabetic agents. ARCHIV DER PHARMAZIE, 356, Doi: 10.1002/ardp.202200356 (Yayın No: 8085935)
2. Yavuz Kemal, NOMA SAMİR ABBAS ALI, Şen Betül, TAŞKIN TOK TUĞBA, AKTAŞ AYDIN, ATEŞ BURHAN, OSMAN BİLGİN, AYGÜN MUHİTTİN, GÖK YETKİN (2023). Thioether-substituted Benzimidazolium Salts: Synthesis, Characterization, Crystal Structure, and Their Inhibitory Properties Against Acetylcholinesterase and Xanthine Oxidase. Journal of Molecular Structure, 1287, 135640, Doi: 10.1016/j.molstruc.2023.135640 (Yayın No: 8368960)
3. Koparir Pelin, Omar Rebaz Anwar, SARAÇ KAMURAN, Ahmed Lana Omer, Karatepe Arzu, TAŞKIN TOK TUĞBA, Safin Damir A. (2023). Synthesis, Characterization and Computational Analysis of Thiophene-2,5-Diylbis((3-Mesityl-3-Methylcyclobutyl)Methanone). Polycyclic Aromatic Compounds, Doi: 10.1080/10406638.2022.2112712 (Yayın No: 7787533)
4. Babashkina Maria G., TAŞKIN TOK TUĞBA, Burkhanova Tatyana M., Safin Damir A. (2023). 1-hydroxy-6,6-Dimethyl-3-Phenyl-1,6-Dihydropyridine-2,5-Dione as a Promising Inhibitor of the SARS-CoV-2 Proteins: insight into the Crystal Structure, Hirshfeld Surface Analysis and Computational Study. Polycyclic Aromatic Compounds, Doi: 10.1080/10406638.2022.2094420 (Yayın No: 7787487)
5. Karimov Aliverdi, TASLIMI PARHAM, Orujova Arzu, Mammadova Khuraman, KISA DURSUN, Farzaliyev Vagif, Sujayev Afsun, SADEGHIAN NASTARAN, TAŞKIN TOK TUĞBA, Alwaseel Saleh, GÜLÇİN İLHAMİ (2023). Design, Synthesis, Characterization and Biological Activities of Novel S-(Acyloxy)butyl-N,N-Diethyldithiocarbamate Compounds. Wiley, 8, Doi: 10.1002/slct.202300286 (Yayın No: 8369001)
6. Poyraz Samet, DÖNDAŞ HACI ALİ, YAMALI CEM, BELVEREN SAMET, DEMİR YELİZ, AYDINOĞLU SABRİYE, Yaktubay Döndaş Naciye, TAŞKIN TOK TUĞBA, TAŞ SENANUR, ÜLGER MAHMUT, Sansanoi Jose M. (2023). Design, synthesis, biological evaluation and docking analysis of pyrrolidine-benzenesulfonamides as carbonic anhydrase or acetylcholinesterase inhibitors and antimicrobial agents. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, Doi: 10.1080/07391102.2023.2214224 (Yayın No: 8368986)
7. SICAK YUSUF, Kekeç muhammed Hüseyin, İYİDOĞAN AYŞEGÜL, TAŞKIN TOK TUĞBA, EMRE EMİNE ELÇİN, ÖZTÜRK MEHMET (2023). Chalcones bearing nitrogen-containing heterocyclics as multi-targeted inhibitors: Design, synthesis, biological evaluation and molecular docking studies. Journal of Molecular Recognition, 36, Doi: 10.1002/jmr.3020 (Yayın No: 8369010)
8. KUTLU TÜRKAN, Yıldırım Işıl, DİKMEN MİRİŞ, TAŞKIN TOK TUĞBA, AKTAŞ AYDIN, GÖK YETKİN (2023). The Cytotoxicity Profile, Apoptosis Mechanism, and Molecular Docking Studies of a Series of Benzimidazolium Derivative Morpholine-Substituted Ag(I) Heterocyclic Carbene Complexes. PHARMACEUTICAL CHEMISTRY JOURNAL, 57, 10-28., Doi: 10.1007/s11094-023-02846-9 (Yayın No: 8369338)
9. Zengin Ramazan, GÖK YETKİN, DEMİR YELİZ, ŞEN BETÜL, TAŞKIN TOK TUĞBA, AKTAŞ AYDIN, DEMİRCİ ÖZLEM, GÜLÇİN İLHAMİ, AYGÜN MUHİTTİN (2023). Fluorinated benzimidazolium salts: Synthesis, characterization, molecular docking studies and inhibitory properties against some metabolic enzymes. Journal of Fluorine Chemistry, 267, 110094, Doi: 10.1016/j.jfluchem.2023.110094 (Yayın No: 8369272)

## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

10. TOKALI FEYZİ SİNAN, TASLIMI PARHAM, SADEGHIAN NASTARAN, TAŞKIN TOK TUĞBA, GÜLÇİN İLHAMİ (2023). Synthesis, Characterization, Bioactivity Impacts of New Anthranilic Acid Hydrazones Containing Aryl Sulfonate Moiety as Fenamate Isosteres. *ChemistrySelect*, 8, Doi: 10.1002/slct.202300241 (Yayın No: 8369264)
11. Garkusha Nadezhda A., Anikeeva Oksana P., Bayıl Imren, TAŞKIN TOK TUĞBA, Safin Damir A. (2023). DFT, ADMET, molecular docking and molecular dynamics studies of pyridoxal. *Journal of the Indian Chemical Society*, 100, 100926, Doi: 10.1016/j.jics.2023.100926 (Yayın No: 8369278)
12. TATAR YILMAZ GİZEM, TAŞKIN TOK TUĞBA, Ozpolat Bülent, AY MEHMET (2023). Structure prediction of eukaryotic elongation factor-2 kinase and identification of the binding mechanisms of its inhibitors: homology modeling, molecular docking, and molecular dynamics simulation. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, Doi: 10.1080/07391102.2019.1592024 (Yayın No: 7664097)
13. GÜZEL ABDUSSAMAT, NOMA SAMIR ABBAS ALI, ŞEN BETÜL, KAZANCI ALİ, TAŞKIN TOK TUĞBA, KOLAÇ TURGAY, AKTAŞ AYDIN, ATEŞ BURHAN, AYGÜN MUHİTTİN, GÖK YETKİN (2023). Synthesis, characterization and inhibitor properties of benzimidazolium salts bearing 4-(methylsulfonyl)benzyl side arms. *Journal of Molecular Structure*, 1273, Doi: 10.1016/j.molstruc.2022.134320 (Yayın No: 8075927)
14. GÜNSEL ARMAĞAN, YAZAR BİLGE, TASLIMI PARHAM, ERDEN YAVUZ, TAŞKIN TOK TUĞBA, PİŞKİN HASAN, BİLGİÇLİ AHMET TURGUT, YARAŞIR MERYEM NİLÜFER, GÜLÇİN İLHAMİ (2023). Novel tetrakis-phthalocyanines bearing pyrimidine derivative: crystal XRD analysis, enzyme inhibition, molecular docking, and anticancer effects. *JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS*, 41(1), 249-262., Doi: 10.1080/07391102.2021.2004923 (Yayın No: 8313253)
15. KISA DURSUN, İMAMOĞLU RİZVAN, GENÇ NUSRET, TASLIMI PARHAM, Kaya Zafer, TAŞKIN TOK TUĞBA (2023). HPLC analysis, Phytochemical Content, and Biological Effects of *Centaurea kilae* Against Some Metabolic Enzymes: In Vitro and In Silico Studies. *ChemistrySelect*, 8, Doi: 10.1002/slct.202204196 (Yayın No: 8369281)
16. Hameed Shehryar, Khan Khalid Mohammed, TASLIMI PARHAM, Salar Uzma, TAŞKIN TOK TUĞBA, KISA DURSUN, Saleem Faiza, Solangi Mehwish, Ahmed Muhammad Hassaan Uddin, Rani Kiran (2023). Evaluation of synthetic 2-aryl quinoxaline derivatives as  $\alpha$ -amylase,  $\alpha$ -glucosidase, acetylcholinesterase, and butyrylcholinesterase inhibitors. *International Journal of Biological Macromolecules*, 211, 653-668., Doi: 10.1016/j.ijbiomac.2022.05.040 (Yayın No: 7713693)
17. Chtita Samir, Fouedjou Romuald Tematio, Belaidi Salah, Djoumbissie Loris Alvine, Ouassaf Mebarka, Abul Qais Faizan, Bakhouch Mohamed, Efendi Mohammed, TAŞKIN TOK TUĞBA, Bouachrine Mohammed, Lakhlifi Tahar (2023). In silico investigation of phytoconstituents from Cameroonian medicinal plants towards COVID-19 treatment. *Structural Chemistry*, 33, 1799-1813., Doi: 10.1007/s11224-022-01939-7 (Yayın No: 7787436)
18. Ashraf Rizwan, Sarfraz Ayesha, TAŞKIN TOK TUĞBA, Iqbal Muhammad Javid, Iqbal Muhammad Adnan, Iqbal Jamshed, Bhatti Haq Nawaz, Akram Sumia, Murshed Muhammad N., El Sayed Mohamed E., Samir Ahmed (2023). Synthesis, molecular docking and anticancer potential of azolium based salts and their silver complexes: DNA/BSA interaction studies and cell cycle analysis. *Journal of Molecular Liquids*, 369, Doi: 10.1016/j.molliq.2022.120921 (Yayın No: 8076252)
19. Hamide Mahmut, GÖK YETKİN, DEMİR YELİZ, YAKALI GÜL, TAŞKIN TOK TUĞBA, AKTAŞ AYDIN, SEVİNÇEK RESUL, GÜZEL BİLGEHAN, GÜLÇİN İLHAMİ (2023). Pentafluorobenzyl-substituted benzimidazolium salts: Synthesis, characterization, crystal structures, computational studies and inhibitory properties of some metabolic enzymes. *Journal of Molecular Structure*, 1265, 133266, Doi: 10.1016/j.molstruc.2022.133266 (Yayın No: 7713667)
20. YİĞİT BEYHAN, TASLIMI PARHAM, BARUT CELEPCİ DUYGU, TAŞKIN TOK TUĞBA, YİĞİT MURAT, AYGÜN MUHİTTİN, ÖZDEMİR İSMAİL, GÜLÇİN İLHAMİ (2023). Novel PEPSI-type N-heterocyclic carbene palladium(II) complexes: Synthesis, characterization, in silico studies and enzyme inhibitory properties against some metabolic enzymes. *Inorganica Chimica Acta*, 544, Doi: 10.1016/j.ica.2022.121239 (Yayın No: 8076367)
21. Bilge Selva, DOĞAN TOPAL BURCU, TAŞKIN TOK TUĞBA, BELLUR ATICI ESEN, SINAĞ ALİ, ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2023). Investigation of the interaction between anticancer drug ibrutinib and double-stranded DNA by electrochemical and molecular docking techniques. *Microchemical Journal*, 180, 107622, Doi: 10.1016/j.microc.2022.107622 (Yayın No: 7693802)
22. ERDOĞAN MEHMET KADİR, GÜNDOĞDU RAMAZAN, YAPAR YAKUP, GEÇİBESLER İBRAHİM HALİL, KIRICI MAHİNUR, BEHÇET LÜTFİ, TÜZÜN BURAK, TAŞKIN TOK TUĞBA, TASLIMI PARHAM (2023). In vitro anticancer, antioxidant and enzyme inhibitory potentials of endemic *Cephalaria elazigensis* var. *purpurea* within silico studies. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, Doi: 10.1080/07391102.2022.2163700 (Yayın No: 8369290)
23. BAŞARAN EYÜP, SOĞUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE, ÇAKMAK REŞİT, AKKOÇ SENEM, TAŞKIN TOK TUĞBA, KÖSE AYŞEGÜL (2022). Novel chiral Schiff base Palladium(II), Nickel(II), Copper(II) and Iron(II) complexes: Synthesis, characterization, anticancer activity and molecular docking studies.

## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

Bioorganic Chemistry, 129, Doi: 10.1016/j.bioorg.2022.106176 (Yayın No: 8076934)

24. Rafi Md Oliullah, Al-Khafaji Khattab, TAŞKIN TOK TUĞBA, Rahman Md Shahedur (2022). Computer-based identification of potential compounds from *Salviae miltiorrhizae* against Neirisaral adhesion A regulatory protein. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 40(10), 4301-4313., Doi: 10.1080/07391102.2020.1856189 (Yayın No: 6833196)
25. YİĞİT MURAT, DEMİR YELİZ, BARUT CELEPCİ DUYGU, TAŞKIN TOK TUĞBA, Arınç Ali, YİĞİT BEYHAN, AYGÜN MUHİTTİN, ÖZDEMİR İSMAİL, GÜLÇİN İLHAMİ (2022). Phthalimide-tethered imidazolium salts: Synthesis, characterization, enzyme inhibitory properties, and in silico studies. *ARCHIV DER PHARMAZIE*, 355, Doi: 10.1002/ardp.202200348 (Yayın No: 8085784)
26. Behçet Ayten, TASLIMI PARHAM, GÖK YETKİN, AKTAŞ AYDIN, TAŞKIN TOK TUĞBA, GÜLÇİN İLHAMİ (2022). New PEPPSI-Pd-NHC complexes bearing 4-hydroxyphenylethyl group: Synthesis, characterization, molecular docking, and bioactivity properties. *Archiv der Pharmazie*, Doi: 10.1002/ardp.202200276 (Yayın No: 7787521)
27. Demirci Özlem, TEZCAN BURCU, DEMİR YELİZ, TAŞKIN TOK TUĞBA, GÖK YETKİN, AKTAŞ AYDIN, GÜZEL BİLGEHAN, GÜLÇİN İLHAMİ (2022). Acetylphenyl-substituted imidazolium salts: synthesis, characterization, in silico studies and inhibitory properties against some metabolic enzymes. *MOLECULAR DIVERSITY*, Doi: 10.1007/s11030-022-10578-3 (Yayın No: 8369345)
28. Hamide Mahmut, GÖK YETKİN, DEMİR YELİZ, SEVİNÇEK RESUL, TAŞKIN TOK TUĞBA, TEZCAN BURCU, AKTAŞ AYDIN, GÜLÇİN İLHAMİ, AYGÜN MUHİTTİN, GÜZEL BİLGEHAN (2022). Benzimidazolium Salts Containing Trifluoromethoxybenzyl: Synthesis, Characterization, Crystal Structure, Molecular Docking Studies and Enzymes Inhibitory Properties. *CHEMISTRY & BIODIVERSITY*, 19, Doi: 10.1002/cbdv.202200257 (Yayın No: 8076653)
29. Doyuran Bensu, GÖKOĞLU ELMAS, Zouitini Ayman, Keleş Ergin, TAŞKIN TOK TUĞBA, SEFEROĞLU NURGÜL, SEFEROĞLU ZEYNEL (2022). A Novel Fluorescent Probe for the Detection of Cyanide Ions in Solutions and Studies on Its Biophysical Interactions with ctDNA and Proteases. *JOURNAL OF FLUORESCENCE* (Yayın No: 7787509)
30. SAYGIDEĞER DEMİR BURCU, İNCE SİMAY, YILMAZ MUSTAFA KEMAL, Sezan Aycan, Derinöz Ezgi, TAŞKIN TOK TUĞBA, SAYGIDEĞER YASEMİN (2022). DNA Binding and Anticancer Properties of New Pd(II)-Phosphorus Schiff Base Metal Complexes. *PHARMACEUTICS*, 14, Doi: 10.3390/pharmaceutics14112409 (Yayın No: 8083381)
31. Rafi Md Oliullah, Bhattacharje Gourab, Al-Khafaji Khattab, TAŞKIN TOK TUĞBA, Alfasane Md Almujaadda, Das Amit Kumar, Parvez Md Anowar, Rahman Md Shahedur (2022). Combination of QSAR, molecular docking, molecular dynamic simulation and MM-PBSA: analogues of lopinavir and favipiravir as potential drug candidates against COVID-19. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 1-20. (Yayın No: 6833288)
32. Sharov Artem V., Burkhanova Tatyana M., TAŞKIN TOK TUĞBA, Babashkina Maria G., Safin Damir A. (2022). Correction: Sharov et al. Computational Analysis of Molnupiravir. *Int. J. Mol. Sci.* 2022, 23, 1508. *INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES*, 23, Doi: 10.3390/ijms232113026 (Yayın No: 8083466)
33. BAŞARAN EYÜP, ÇAKMAK REŞİT, ŞENTÜRK MURAT, TAŞKIN TOK TUĞBA (2022). Biological activity and molecular docking studies of some N-phenylsulfonamides against cholinesterases and carbonic anhydrase isoenzymes. *Journal of Molecular Recognition*, 35(10), Doi: 10.1002/jmr.2982 (Yayın No: 7787496)
34. GÜNGÖR SEYİT ALİ, Şahin İrfan, Güngör Özge, TAŞKIN TOK TUĞBA, KÖSE MUHAMMET (2022). Synthesis, Biological Evaluation and Docking Study of Mono- and Di-sulfonamide Derivatives as Antioxidant Agents and Acetylcholinesterase Inhibitors. *Chemistry & Biodiversity*, Doi: 10.1002/cbdv.202200325 (Yayın No: 7787513)
35. Zainal-Abidin Mohamad Hamdi, Hayyan Maan, Nghoh Gek Cheng, Wong Won Fen, TAŞKIN TOK TUĞBA (2022). Derivation of an anti-cancer drug nanocarrier using a malonic acid-based deep eutectic solvent as a functionalization agent. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, 75, Doi: 10.1016/j.jddst.2022.103657 (Yayın No: 7787503)
36. KISA DURSUN, İMAMOĞLU RİZVAN, KAYA ZAFER, TAŞKIN TOK TUĞBA, TASLIMI PARHAM (2022). *Turanecio hypochionaeus*: Determination of Its Polyphenol Contents, and Bioactivities Potential Assisted with in Silico Studies. *CHEMISTRY & BIODIVERSITY*, Doi: 10.1002/cbdv.202200109 (Yayın No: 7787511)
37. ALTAY AHMET, Yeniceri Esmâ, TASLIMI PARHAM, TAŞKIN TOK TUĞBA, YILMAZ MUSTAFA ABDULLAH, KÖKSAL EKREM (2022). A Biochemical Approach for *Hedysarum candidissimum* from Turkey: Screening Phytochemicals, Evaluation of Biological Activities, and Molecular Docking Study. *CHEMISTRY & BIODIVERSITY* (Yayın No: 7787534)
38. Burkhanova Tatyana M., Babashkina Maria G., TAŞKIN TOK TUĞBA, Sharov Artem V., Safin Damir A. (2022). Naphthalene-based bis-N-salicylidene aniline dyes: Crystal structures, Hirshfeld surface analysis, computational study and molecular docking with the SARS-CoV-2 proteins. *JOURNAL OF THE IRANIAN CHEMICAL SOCIETY*, 19, Doi: 10.1007/s13738-021-02438-y (Yayın No: 7286137)

## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

39. Ogala Justina Benson, Hassan Yusuf, Samaila Abdullahi, Bindawa Murtala Isah, TAŞKIN TOK TUĞBA (2022). Synthesis, antifungal activity and in silico ADMET studies of benzyl alcohol derivatives. *Istanbul University*, 52, Doi: 10.26650/IstanbulJPharm.2022.958484 (Yayın No: 8085348)
40. Sarfraz Ayesha, Ashraf Rizwan, Ali Shaukat, TAŞKIN TOK TUĞBA, Khalid Zohra, Ullah Sana, Kahlid Talha, Mushtaq Muhammad, El-Bahy Salah M., El-Bahy Zeinhom M. (2022). Synthesis, In silico and in vitro studies of Silver (I)-N heterocyclic carbene complexes. *Journal of Molecular Structure*, 1251, 131946, Doi: 10.1016/j.molstruc.2021.131946 (Yayın No: 7286126)
41. Ansari Muhammad A., Saad Syed M., Khan Khalid M., Salar Uzma, TASLIMI PARHAM, TAŞKIN TOK TUĞBA, Saleem Faiza, Jahangir Sajid (2022). Biology-oriented drug synthesis and evaluation of secnidazole esters as novel enzyme inhibitors. *ARCHIV DER PHARMAZIE*, 355, Doi: 10.1002/ardp.202100376 (Yayın No: 7448527)
42. TEZCAN BURCU, GÖK YETKİN, SEVİNÇEK RESUL, TASLIMI PARHAM, TAŞKIN TOK TUĞBA, AKTAŞ AYDIN, GÜZEL BİLGEHAN, AYGÜN MUHİTTİN, GÜLÇİN İLHAMİ (2022). Benzimidazolium salts bearing the trifluoromethyl group as organofluorine compounds: Synthesis, characterization, crystal structure, in silico study, and inhibitory profiles against acetylcholinesterase and ?? glycosidase. *Wiley*, 36, Doi: 10.1002/jbt.23001 (Yayın No: 7664110)
43. GÜNSEL ARMAĞAN, Yıldırım Aslı, TASLIMI PARHAM, ERDEN YAVUZ, TAŞKIN TOK TUĞBA, HASAN PİŞKİN, Bilgiçli Ahmet T., GÜLÇİN İLHAMİ, Yarasir M.Nilüfer (2022). Cytotoxicity effects and biochemical investigation of novel tetrakis-phthalocyanines bearing 2-thiocytosine moieties with molecular docking studies. *Inorganic Chemistry Communications*, 138, Doi: 10.1016/j.inoche.2022.109263 (Yayın No: 7664086)
44. Oguzcan Esra, KÖKSAL ZEYNEP, TAŞKIN TOK TUĞBA, UZGÖREN BARAN AYŞE, AKBAY NURİYE (2022). Spectroscopic and molecular modeling methods to investigate the interaction between psycho-stimulant modafinil and calf thymus DNA using ethidium bromide as a fluorescence probe. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 270, Doi: 10.1016/j.saa.2021.120787 (Yayın No: 7664079)
45. Rafi Md. Oliullah, Al-Khafaji Khattab, Sarker Md. Takim, TAŞKIN TOK TUĞBA, Rana Abdus Samad, Rahman Md. Shahedur (2022). Design of a multi-epitope vaccine against SARS-CoV-2: immunoinformatic and computational methods. *RSC Advances*, 12, Doi: 10.1039/D1RA06532G (Yayın No: 7664119)
46. KISA DURSUN, KAYA ZAFER, İMAMOĞLU RİZVAN, GENÇ NUSRET, TASLIMI PARHAM, TAŞKIN TOK TUĞBA (2022). Assessment of antimicrobial and enzymes inhibition effects of *Allium kastambulense* with in silico studies: Analysis of its phenolic compounds and flavonoid contents. *Arabian Journal of Chemistry*, 15, Doi: 10.1016/j.arabjc.2022.103810 (Yayın No: 7664076)
47. ALTAY AHMET, Yeniçeri Esmâ, TASLIMI PARHAM, TAŞKIN TOK TUĞBA, YILMAZ MUSTAFA ABDULLAH, KÖKSAL EKREM (2022). LC-MS/MS analysis and diverse biological activities of *Hypericum scabrum* L.: In vitro and in silico research. *South African journal of botany*, 2022, Doi: 10.1016/j.sajb.2022.08.032 (Yayın No: 7787545)
48. TAŞDEMİR DEMET, İYİDOĞAN AYŞEGÜL, SAYGIDEĞER YASEMİN, EMRE EMİNE ELÇİN, TAŞKIN TOK TUĞBA, BAŞARAN EYÜP, İlhan Sedat, SAYGIDEĞER DEMİR BURCU, Üren Aykut, BAYRAM HASAN (2022). Discovery of new chiral sulfonamides bearing benzoxadiazole as HIF inhibitors for non-small cell lung cancer therapy: design, microwave-assisted synthesis, binding affinity, in vitro antitumoral activities and in silico studies. *New Journal of Chemistry*, Doi: 10.1039/D1NJ03809E (Yayın No: 7542340)
49. SOĞUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE, TAŞKIN TOK TUĞBA, URUŞ SERHAN, SÖNMEZ MEHMET (2022). Pd (II) complexes bearing "SNS" pincer-type thioether ligands: Application as catalysts in the synthesis of vitamin K-3. *Applied Organometallic Chemistry*, 36(1), Doi: 10.1002/aoc.6467 (Yayın No: 7286118)
50. GÖKOĞLU ELMAS, Kıpçak Fulya, TAŞKIN TOK TUĞBA, DUYAR HALİL, SEFEROĞLU ZEYNEL (2022). Structural analysis and calf thymus DNA/HSA binding properties of new carbazole derivative containing piperazine. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 426, Doi: 10.1016/j.jphotochem.2021.113720 (Yayın No: 7664091)
51. ALTAY AHMET, Kağan Yeniçeri Esmâ Kübra, TASLIMI PARHAM, TAŞKIN TOK TUĞBA, YILMAZ MUSTAFA ABDULLAH, KÖKSAL EKREM (2022). Phytochemical Analysis and Biological Evaluation of *Hypericum linarioides* Bosse: in Vitro and in Silico Studies. *ChemistrySelect*, 7, Doi: 10.1002/slct.202200039 (Yayın No: 7787459)
52. BALI DİLARA FATMA, AlKhafaji Khattab, AKTAŞ SEDEF HANDE, TAŞKIN TOK TUĞBA (2021). Bioinformatic and computational analysis for predominant mutations of the Nrf2/Keap1 complex in pediatric leukemia. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 39(12), 4290-4303., Doi: <https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1775702> (Yayın No: 6383798)
53. TÜRK SEVDA, TOK FATİH, ERDOĞAN ÖMER, ÇEVİK ÖZGE, TAŞKIN TOK TUĞBA, KAYMAKÇIOĞLU BEDİA, KARAKUŞ SEVGİ (2021). Synthesis, anticancer evaluation and in silico ADMET studies on urea/thiourea derivatives from gabapentin. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, 196(4), 382-388., Doi: 10.1080/10426507.2020.1845678 (Yayın No: 6667796)

## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

54. Ashraf Rizwan, Javed Maria, TAŞKIN TOK TUĞBA, Nadeem Raziya, Javaid Muhammad Kashif, El-Naggar Mohamed, Alzahrani Othman M., Mahmoud Samy F. (2021). Design, DFT studies, antimicrobial and antioxidant potential of Binuclear N-heterocyclic Carbene (NHCs) complexes, Probing the aspect of DNA interaction through In-vitro and In-silico approach. COMPUTATIONAL BIOLOGY AND CHEMISTRY, 95, Doi: 10.1016/j.compbiolchem.2021.107591 (Yayın No: 7262711)
55. Al-Khafaji Khattab, AL-Duhaidahawi L. Dunya, TAŞKIN TOK TUĞBA (2021). Using integrated computational approaches to identify safe and rapid treatment for SARS-CoV-2. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 39(9), 3387-3395., Doi: 10.1080/07391102.2020.1764392 (Yayın No: 6230134)
56. Kıpçak Fulya, TAŞKIN TOK TUĞBA, DUYAR HALİL, SEFEROĞLU ZEYNEL, GÖKOĞLU ELMAS (2021). Synthesis of new morpholine containing 3-amido-9-ethylcarbazole derivative and studies on its biophysical interactions with calf thymus DNA/HSA. Journal of Biomolecular Structure & Dynamics, 39(5), 1561-1571., Doi: 10.1080/07391102.2020.1734093 (Yayın No: 6182260)
57. Al-Khafaji Khattab, TAŞKIN TOK TUĞBA (2021). Amygdalin as multi-target anticancer drug against targets of cell division cycle: double docking and molecular dynamics simulation. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 39(6), 1965-1974. (Yayın No: 6182263)
58. Al-Khafaji Khattab, TAŞKIN TOK TUĞBA (2021). Understanding the mechanism of amygdalin's multifunctional anti-cancer action using computational approach. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 39(5), 1600-1610., Doi: 10.1080/07391102.2020.1736159 (Yayın No: 6182261)
59. CÖMERT ÖNDER FERAH, KAHRAMAN NERMİN, BELLUR ATİCİ ESEN, ÇAĞIR ALİ, KANDEMİR HAKAN, TATAR GİZEM, TAŞKIN TOK TUĞBA, KARA GÖKNUR, KARLIĞA BEKİR, DURDAĞI SERDAR, AY MEHMET, ÖZPOLAT BÜLENT (2021). Target-Driven Design of a Coumarinyl Chalcone Scaffold Based Novel EF2 Kinase Inhibitor Suppresses Breast Cancer Growth In Vivo. ACS Pharmacology & Translational Science, Doi: 10.1021/acspsci.1c00030 (Yayın No: 7132514)
60. AKTAŞ SEDEF HANDE, TAŞKIN TOK TUĞBA, Al-Khafaji Khattab, AKIN BALI Dilara Fatma (2021). A detailed understanding of the COL10A1 and SOX9 genes interaction based on potentially damaging mutations in gastric cancer using computational techniques. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, Doi: 10.1080/07391102.2021.1960194 (Yayın No: 7247741)
61. CÖMERT ÖNDER FERAH, Kahraman Nermin, BELLUR ATİCİ ESEN, ÇAĞIR ALİ, KANDEMİR HAKAN, TATAR YILMAZ GİZEM, TAŞKIN TOK TUĞBA, KARA GÖKNUR, KARLIĞA BEKİR, DURDAĞI SERDAR, AY MEHMET, ÖZPOLAT BULENT (2021). Correction to Target-Driven Design of a Coumarinyl Chalcone Scaffold Based Novel EF2 Kinase Inhibitor Suppresses Breast Cancer Growth In Vivo. ACS Pharmacology & Translational Science, 4(3), 1247, Doi: 10.1021/acspsci.1c00113 (Yayın No: 7448245)
62. Yavari Mirali Akbar, TASLIMI PARHAM, BAYRAK ÇETİN, TAŞKIN TOK TUĞBA, MENZEK ABDULLAH (2021). Synthesis, characterization, crystal structure, computational studies, and biological activities of adducts formed selectively. Journal of Heterocyclic Chemistry, Doi: 10.1002/jhet.4426 (Yayın No: 7444343)
63. SAYGIDEĞER YASEMİN, SAYGIDEĞER DEMİR BURCU, TAŞKIN TOK TUĞBA, AVCI ALPER, SEZAI AYCAN, BAYDAR OYA, ÖZYILMAZ EZGİ (2021). Antitumoral effects of Santolina chameacyparissus on Non-Small Cell Lung Cancer Cells. Journal of Experimental and Clinical Medicine, 38(3), 294-300., Doi: 10.52142/omujecm.38.3.16 (Yayın No: 7132524)
64. YAĞIZ ERDEMİR GÜLER, Noma Samir Abbas Ali, ALTUNDAŞ ALİYE, AL-KHAFAJI KHATTAB ADNAN ABED, TAŞKIN TOK TUĞBA, ATEŞ BURHAN (2021). Synthesis, inhibition properties against xanthine oxidase and molecular docking studies of dimethyl N-benzyl-1H-1,2,3-triazole-4,5-dicarboxylate and (N-benzyl-1H-1,2,3-triazole-4,5-diyl)dimethanol derivatives. Bioorganic Chemistry, 108, Doi: 10.1016/j.bioorg.2021.104654 (Yayın No: 7124759)
65. BAL SELMA, DEMİRCİ ÖZLEM, ŞEN BETÜL, TAŞKIN TOK TUĞBA, TASLIMI PARHAM, AKTAŞ AYDIN, GÖK YETKİN, AYGÜN MUHİTTİN (2021). Silver N-heterocyclic carbene complexes bearing fluorinated benzyl group: Synthesis, characterization, crystal structure, computational studies, and inhibitory properties against some metabolic enzymes. Applied Organometallic Chemistry, Doi: 10.1002/aoc.6312 (Yayın No: 7124732)
66. YILMAZ ÜLKÜ, Noma Samir Abbas Ali, TAŞKIN TOK TUĞBA, ŞEN BETÜL, GÖK YETKİN, AKTAŞ AYDIN, ATEŞ BURHAN, AYGÜN MUHİTTİN (2021). A study about excellent xanthine oxidase inhibitory effects of new pyridine salts. Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly, 152, Doi: 10.1007/s00706-021-02831-6 (Yayın No: 7247749)
67. ALBAYRAK SELVİ, GÖK YETKİN, SARI YAKUP, TAŞKIN TOK TUĞBA, AKTAŞ AYDIN (2021). Benzimidazolium Salts Bearing 2-methyl-1,4-benzodioxane Group: Synthesis, Characterization, Computational Studies, In vitro Antioxidant and Antimicrobial Activity. Biointerface Research in Applied Chemistry, 11, 13333-13346., Doi: 10.33263/BRIAC115.1333313346 (Yayın No: 7132488)
68. Elgharbawy Amal AM, Syed Putra Sharifah, Hayyan Maan, Hayyan Adeeb, Basirun Wan Jeffrey, Mirghani Mohamed ES, Majrashi Abdulrahman Abdulaziz, Nawawi Wan Mohd, Alias Yatimah, Mohd Salleh Hamzah, TAŞKIN TOK TUĞBA (2020). Polyamidoamine dendrimers: Favorable polymeric nanomaterials for lipase activation. Materials Today Communications, 25, 101492



## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

6585652)

69. Mollarasouli Fariba, DOĞAN TOPAL BURCU, ÇAĞLAYAN MEHMET GÖKHAN, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2020). Electrochemical, spectroscopic, and molecular docking studies of the interaction between the anti-retroviral drug indinavir and dsDNA. *Journal of Pharmaceutical Analysis*, 10(5), 473-481. (Yayın No: 6725713)
70. Türker Ferhat, Noma Samir Abbas Ali, AKTAŞ AYDIN, AIKhafaji Khattap, TAŞKIN TOK TUĞBA, ATEŞ BURHAN, GÖK YETKİN (2020). The (NHC)PdBr<sub>2</sub>(2-aminopyridine) complexes: synthesis, characterization, molecular docking study, and inhibitor effects on the human serum carbonic anhydrase and serum bovine xanthine oxidase. *MONATSHEFTE FÜR CHEMIE*, 151(10), 1557-1567., Doi: 10.1007/s00706-020-02687-2 (Yayın No: 6511928)
71. Al-Khafaji Khattab, TAŞKIN TOK TUĞBA (2020). Molecular dynamics simulation, free energy landscape and binding free energy computations in exploration the anti-invasive activity of amygdalin against metastasis. *COMPUTER METHODS AND PROGRAMS IN BIOMEDICINE*, 195, 105660 (Yayın No: 6585648)
72. ÖZÇELİKAY GÖKSU, KARADAŞ BAKIRHAN NURGÜL, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2020). A selective and molecular imaging approach for anticancer drug: Pemetrexed by nanoparticle accelerated molecularly imprinting polymer. *Electrochimica Acta*, 354, 136665 (Yayın No: 6560328)
73. YALÇIN ERGİN, ERKMEN Cem, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÇAĞLAYAN MEHMET GÖKHAN (2020). Fluorescence chemosensing of meldonium using a cross-reactive sensor array. *The Analyst*, 145(9), 3345-3352., Doi: 10.1039/D0AN00209G (Yayın No: 6256036)
74. Shahzad Suniya, Karadurmus Leyla, DOĞAN TOPAL BURCU, TAŞKIN TOK TUĞBA, Shah Afzal, ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2020). Sensitive Nucleic Acid Detection at NH<sub>2</sub>-MWCNTs Modified Glassy Carbon Electrode and its Application for Monitoring of Gemcitabine-DNA Interaction. *Electroanalysis*, 32, 1-12., Doi: 10.1002/elan.201900597 (Yayın No: 5862018)
75. KURŞUN AKTAR BEDRİYE SEDA, SICAĞ YUSUF, TAŞKIN TOK TUĞBA, EMRE EMİNE ELÇİN, ŞAHİN YAĞLIOĞLU AYŞE, İYİDOĞAN AYŞEGÜL, ÖZTÜRK MEHMET, DEMİRTAŞ İBRAHİM (2020). Designing heterocyclic chalcones, benzoyl/sulfonyl hydrazones: An insight into their biological activities and molecular docking study. *Journal of Molecular Structure*, 1211, 128059, Doi: 10.1016/j.molstruc.2020.128059 (Yayın No: 6291880)
76. Gunduğdu Özlem, Noma Samir Abbas, TAŞKIN TOK TUĞBA, Ateş Burhan, Kishali Nurhan (2020). Evaluation of xanthine oxidase inhibitor properties on isoindoline-1,3-dione derivatives and calculation of interaction mechanism. *Journal of Molecular Structure*, 1204, 127523 (Yayın No: 6836019)
77. TOKAY ESRA, GÜNGÖR TUĞBA, HACIOĞLU NELİN, cömert önder ferah, güven gülhan ünzile, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÇELİK AYHAN, ay mehmet, KÖÇKAR FERAY (2020). Prodrugs for nitroreductase-based cancer therapy-3: Antitumor activity of the novel dinitroaniline prodrugs/Ssap-NtrB enzymesuicide gene system: Synthesis, in vitro and in silico evaluation in prostate cancer. *EUROPEAN JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY*, 187, 111937, Doi: 10.1016/j.ejmech.2019.111937 (Yayın No: 5590832)
78. TOKAY ESRA, GÜNGÖR TUĞBA, HACIOĞLU NELİN, CÖMERT ÖNDER FERAH, Güven Gülhan Ünzile, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÇELİK AYHAN, AY MEHMET, KÖÇKAR FERAY (2020). Prodrugs for nitroreductase-based cancer therapy-3: Antitumor activity of the novel dinitroaniline prodrugs/Ssap-NtrB enzyme suicide gene system: Synthesis, in vitro and in silico evaluation in prostate cancer. *EUROPEAN JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY*, 187, 111937, Doi: 10.1016/j.ejmech.2019.111937 (Yayın No: 6854463)
79. DOĞAN TOPAL BURCU, KARADAŞ BAKIRHAN NURGÜL, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2020). Electrochemical Determination and In Silico Studies of Fludarabine on NH<sub>2</sub> Functionalized Multiwalled Carbon Nanotube Modified Glassy Carbon Electrode. *Electroanalysis*, 32(1), 37-49. (Yayın No: 6729044)
80. Gungor Ozge, KÖSE MUHAMMET, TAŞKIN TOK TUĞBA (2019). A biguanide derivative and its cyclic analogue: Structural characterization, AChE inhibitory effect and docking studies. *Journal of Molecular Structure*, 1196, 491-498., Doi: 10.1016/j.molstruc.2019.06.104 (Yayın No: 5906955)
81. KARATAŞ MERT OLGUN, Çalgın Gamze, ALICI BÜLENT, GÖKÇE BAŞAK, GENÇER NAHİT, TAŞKIN TOK TUĞBA, ARSLAN OKTAY, KILIÇ CIKLA IŞIN, ÖZDEMİR NAMİK (2019). Inhibition of paraoxonase 1 by coumarin-substituted N-heterocyclic carbene silver(I), ruthenium(II) and palladium(II) complexes. *APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY*, 33(10), Doi: 10.1002/aoc.5130 (Yayın No: 5862373)
82. KARATAŞ MERT OLGUN, Çalgın Gamze, ALICI BÜLENT, GÖKÇE BAŞAK, GENÇER NAHİT, TAŞKIN TOK TUĞBA, ARSLAN OKTAY, KILIÇ CIKLA IŞIN, ÖZDEMİR NAMİK (2019). Inhibition of paraoxonase 1 by coumarin-substituted N-heterocyclic carbene silver(I), ruthenium(II) and palladium(II) complexes. *APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY*, 33, 5130-5130., Doi: 10.1002/aoc.5130 (Yayın No: 6275703)
83. TOK FATİH, KAYMAKÇIOĞLU BEDİA, İLHAN RECEP, YILMAZ SİNEM, BALLAR KIRMIZIBAYRAK PETEK, TAŞKIN TOK TUĞBA (2019). Design, synthesis, biological evaluation and molecular docking of novel molecules to PARP-1 enzyme. *TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY*, 43(5), 1290-1305., Doi:

## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

10.3906/kim-1905-15 (Yayın No: 5906648)

84. SICAK YUSUF, EMRE EMİNE ELÇİN, ÖZTÜRK MEHMET, TAŞKIN TOK TUĞBA, İYİDOĞAN AYŞEGÜL (2019). Novel fluorine-containing chiral hydrazide-hydrazones: Design, synthesis, structural elucidation, antioxidant and anticholinesterase activity, and in silico studies. *Chirality*, 31(8), 603-615., Doi: 10.1002/chir.23102 (Yayın No: 5308309)
85. Shahzad Suniya, DOĞAN TOPAL BURCU, Karadurmus Leyla, ÇAĞLAYAN MEHMET GÖKHAN, TAŞKIN TOK TUĞBA, USLU BENGİ, Afzal Shah, ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2019). Electrochemical, spectroscopic and molecular docking studies on the interaction of calcium channel blockers with dsDNA. *Bioelectrochemistry*, 127, 12-20., Doi: 10.1016/j.bioelechem.2018.12.007 (Yayın No: 5907051)
86. GÜNGÖR TUĞBA, Önder cömert ferah, TOKAY ESRA, güven ünzile, HACIOĞLU NELİN, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÇELİK AYHAN, KÖÇKAR FERAY, ay mehmet (2019). PRODRUGS FOR NITROREDUCTASE BASED CANCER THERAPY- 2: Novel amide/Ntr combinations targeting PC3 cancer cells. *EUROPEAN JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY*, 171, 383-400., Doi: 10.1016/j.ejmech.2019.03.035 (Yayın No: 5904076)
87. Bayel Secinti Burcu, Tatar Gizem, TAŞKIN TOK TUĞBA (2019). Determination of potential selective inhibitors for ROCKI and ROCKII isoforms with molecular modeling techniques: structure based docking, ADMET and molecular dynamics simulation. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 37(9), 2457-2463., Doi: 10.1080/07391102.2018.1491420 (Yayın No: 4325286)
88. TAŞKIN TOK TUĞBA, JT Gowder Sivakumar (2019). Structural and Pharmacological Properties of Alkaloids with Special Reference to Thebaine Type Alkaloids. *Biomedical Journal of Scientific Technical Research*, 17(3), Doi: 10.26717/BJSTR.2019.17.002993 (Yayın No: 6182257)
89. İYİDOĞAN AYŞEGÜL, aydınöz bilal, TAŞKIN TOK TUĞBA, EMRE EMİNE ELÇİN, balzarini jan (2019). Synthesis, Biological Evaluation and Ligand Based Pharmacophore Modeling of New Aromatic Thiosemicarbazones as Potential Anticancer Agents. *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 53(2), 139-149. (Yayın No: 5101461)
90. KARADAŞ BAKIRHAN NURGÜL, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2019). The redox mechanism investigation of non-small cell lung cancer drug: Erlotinib via theoretical and experimental techniques and its host-guest detection by  $\beta$ -Cyclodextrin nanoparticles modified glassy carbon electrode. *SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL*, 278, 172-180. (Yayın No: 5417109)
91. Ozkan Sule, TAŞKIN TOK TUĞBA, UZGÖREN BARAN AYŞE, AKBAY NURİYE (2019). Multispectroscopic and Computational Investigation of ct-DNA Binding Properties with Hydroxybenzylidene Containing Tetrahydrocarbazole Derivative. *Journal of Fluorescence*, 29(1), 101-110., Doi: 10.1007/s10895-018-2314-4 (Yayın No: 5862199)
92. AKBAY NURİYE, TAŞKIN TOK TUĞBA, SEFEROĞLU ZEYNEL, GÖKOĞLU ELMAS (2018). Investigation of binding properties of two ethidium derivatives with serum albumins: spectral and computational approach. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 36(12), 3114-3121., Doi: 10.1080/07391102.2017.1380536 (Yayın No: 4501179)
93. KIBRIZ İBRAHİM EVREN, SAÇMACI MUSTAFA, YILDIRIM İSMAİL, Noma Samir Abbas Ali, TAŞKIN TOK TUĞBA, ATEŞ BURHAN (2018). Xanthine oxidase inhibitory activity of new pyrrolecarboxamide derivatives: In vitro and in silico studies. *Arch Pharm Chem Life Sci.*, 351(10), 1800165 (Yayın No: 4529197)
94. TÜMER TUĞBA, Yılmaz Berkay, Ozleyen Adem, Kurt Begum, TAŞKIN TOK TUĞBA, Taskin Kemal Melik, Kulabas Seda Savranoglu (2018). GR24, a synthetic analog of Strigolactones, alleviates inflammation and promotes Nrf2 cytoprotective response: In vitro and in silico evidences. *COMPUTATIONAL BIOLOGY AND CHEMISTRY*, 76, 179-190., Doi: 10.1016/j.compbiolchem.2018.07.014 (Yayın No: 4629994)
95. GÜNGÖR TUĞBA, YETİŞ GÜLDEN, CÖMERT ÖNDER FERAH, TOKAY ESRA, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÇELİK AYHAN, AY MEHMET, KÖÇKAR FERAY (2018). Prodrugs for Nitroreductase Based Cancer Therapy-1: Metabolite Profile, Cell Cytotoxicity and Molecular Modeling Interactions of Nitro Benzamides with Ssap-NtrB. *Medicinal Chemistry*, 14(5), 495-507., Doi: 10.2174/1573406413666171129224424 (Yayın No: 5472577)
96. KARAKUŞ SEVGİ, TOK FATİH, TÜRK SEVDA, ŞALVA EMİNE, TATAR GİZEM, TAŞKIN TOK TUĞBA, KAYMAKÇIOĞLU BEDİA (2018). Synthesis, anticancer activity and ADMET studies of N-(5-methyl-1,3,4-thiadiazol-2-yl)-4-[(3-substituted)ureido/thioureido] benzenesulfonamide derivatives. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, 193(8), 528-534., Doi: 10.1080/10426507.2018.1452924 (Yayın No: 4569580)
97. akkoç mitat, balcıoğlu sevgi, GÜRSES CANBOLAT, TAŞKIN TOK TUĞBA, ATEŞ BURHAN, YAŞAR SEDAT (2018). Protonated water-soluble N-heterocyclic carbene ruthenium(II) complexes: Synthesis, cytotoxic and DNA binding properties and molecular docking study. *JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY* (Yayın No: 4538675)
98. Onar Gülnihan, KARATAŞ MERT OLGUN, Balcıoğlu Sevgi, TAŞKIN TOK TUĞBA, GÜRSES CANBOLAT, Kılıç Cıkla Işın, ÖZDEMİR NAMIK, ATEŞ BURHAN, ALICI BÜLENT (2018). Benzotriazole functionalized N-heterocyclic carbene-silver(I) complexes: Synthesis, cytotoxicity, antimicrobial, DNA binding,

## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler:

- andmolecular docking studies. POLYHEDRON, 153(2018), 31-40., Doi: 10.1016/j.poly.2018.06.052 (Yayın No: 6275718)
99. Kapche Deccaux WFG, Lekane Nadège M, Kulabas Seda S, İPEK HANDE, TAŞKIN TOK TUĞBA, Ngadjui Bonaventure T, DEMİRTAŞ İBRAHİM, Tumer Tugba B (2017). Aryl benzofuran derivatives from the stem bark of *Calpocalyx dinklagei* attenuate inflammation. *Phytochemistry*, 141, 70-79., Doi: 10.1016/j.phytochem.2017.05.007 (Yayın No: 3887489)
  100. TAŞKIN TOK TUĞBA, TATAR GİZEM (2017). Structures and Functions of Coronavirus Proteins: Molecular Modeling of Viral Nucleoprotein. *International Journal of Virology Infectious Diseases (Virology Infectious Diseases)*, 2(1), 1-7. (Yayın No: 3888053)
  101. TÜMER TUĞBA, Onder Ferah, İpek Hande, GÜNGÖR TUĞBA, Kulabas Seda S, TAŞKIN TOK TUĞBA, Çelik Ayhan, AY MEHMET (2017). Biological evaluation and molecular docking studies of nitro benzamide derivatives with respect to in vitro anti-inflammatory activity. *International Immunopharmacology*, 43, 129-139., Doi: 10.1016/j.intimp.2016.12.009 (Yayın No: 4081804)
  102. KARAMAN NURCAN, SİCAK YUSUF, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÖZTÜRK MEHMET, İYİDOĞAN AYŞEGÜL, DİKMEN MİRİS, KAYMAKÇIOĞLU BEDİA, EMRE EMİNE ELÇİN (2016). New piperidine hydrazone derivatives Synthesis biological evaluations and molecular docking studies as AChE and BChE inhibitors. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 124, 270-283., Doi: 10.1016/j.ejmech.2016.08.037 (Yayın No: 2901831)
  103. TATAR GİZEM, TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Clarification of Interaction Mechanism of Mouse Hepatitis Virus MHV N and nsp3 Protein with Homology Modeling and Protein Protein Docking Analysis. *Current Computer Aided-Drug Design*, 12(2), 98-106., Doi: 10.2174/1573409912666160226131253 (Yayın No: 2901839)
  104. SARIOĞLU AHMET ORAL, TAŞKIN TOK TUĞBA, AKKURT MEHMET, TAHİR MUHAMMAD NAWAZ, SÖNMEZ MEHMET (2016). Synthesis and structural properties of N 3 4 dichlorophenyl 3 oxo 3 phenyl 2 phenylcarbonyl propanamide and its Cu II complex. *TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY*, 40, 76-92., Doi: 10.3906/kim-1501-32 (Yayın No: 2368845)
  105. TASDEMİR DEMET, İYİDOĞAN AYŞEGÜL, ULAŞLI MUSTAFA, TAŞKIN TOK TUĞBA, Oruç-Emre Emine Elçin, BAYRAM HASAN (2015). Synthesis Molecular Modeling and Biological Evaluation of Novel Chiral Thiosemicarbazone Derivatives as Potent Anticancer Agents. *CHIRALITY*, 27(2), 177-188., Doi: 10.1002/chir.22408 (Yayın No: 1138999)
  106. SOGUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE, TAŞKIN TOK TUĞBA, YILMAZ FEYZA, BERBER İSMET, SÖNMEZ MEHMET (2015). Synthesis characterization biological studies and molecular modeling of mixed ligand bivalent metal complexes of Schiff bases based on N Aminopyrimidine 2 one 2 thione. *TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY*, 39, 497-509., Doi: 10.3906/kim-1412-81 (Yayın No: 1387232)
  107. TAŞKIN TOK TUĞBA, ÖZAŞIK Özgün, SARIGÖL Deniz, UZGÖREN BARAN AYŞE (2015). Synthesis and molecular modeling studies of naproxen based acyl hydrazone derivatives. *TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY*, 39(1), 64-83., Doi: 10.3906/kim-1401-91 (Yayın No: 1099272)
  108. AKI YALÇIN ESİN EMİNE, ERTAN BOLELLİ TUĞBA, TAŞKIN TOK TUĞBA, ÖZTÜRK ÖZÜM, Ateci Sanaz, ÖZEN ÇİĞDEM, YILDIZ İLKAY, YALÇIN İSMAİL (2014). Evaluation of inhibitory effects of benzothiazole and 3-amino-benzothiazolium derivatives on DNA topoisomerase II by molecular modeling studies. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 25(8), 637-649. (Yayın No: 6837240)
  109. OKUMUŞ SEYDİ, İgci Yusuf Ziya, TAŞKIN TOK TUĞBA, OZTUZCU SERDAR, Gurler Bulent, Eslik Zeynep, Bulent Gogebakan, Coskun Erol, Erbagci Ibrahim, Demiryurek Seniz, CENGİZ BEYHAN, Demiryurek Abdullah T (2012). Association Between Thr21Met and Ser89Asn Polymorphisms of the Urotensin II UTS2 Gene Diabetes Mellitus and Diabetic Retinopathy. *Current Eye Research*, 37(10), 921-929., Doi: 10.3109/02713683.2012.688181 (Yayın No: 319589)
  110. TAŞKIN TOK TUĞBA, YILMAZ SERAP, YILDIZ İLKAY, YALÇIN İSMAİL, AKI YALÇIN ESİN EMİNE (2012). Insight into eukaryotic topoisomerase II inhibiting fused heterocyclic compounds in human cancer cell lines by molecular docking. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 23(3-4), 345-355., Doi: 10.1080/1062936X.2012.664560 (Yayın No: 319321)
  111. TAŞKIN TOK TUĞBA, SEVİN DÜZ FATMA (2011). QSAR and docking studies of inhibition activity of 5 6 dihydro 11 alkylbenzo alpha carbazole derivatives against estrogen receptor. *Turkish Journal of Chemistry*, 35(3), 481-498., Doi: 10.3906/kim-0901-33 (Yayın No: 319141)
  112. TAŞKIN TOK TUĞBA, SEVİN DÜZ FATMA (2009). QSAR Approach to Correlate TRPV1 Antagonist Activity for a Series of Heteroaromatic Urea. *QSAR Combinatorial Science*, 28(10), 1098-1111., Doi: 10.1002/qsar.200810157 (Yayın No: 318856)
  113. TAŞKIN TOK TUĞBA, SEVİN DÜZ FATMA (2007). Theoretical investigation on chemical and biochemical activities of 5 6 dihydro 11H benzo alpha carbazole and its derivatives. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 803(1-3), 61-66., Doi: 10.1016/j.theochem.2006.09.028 (Yayın No: 318636)

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

1. TEKİNER İSMAİL HAKKI, TAŞKIN TOK TUĞBA, Mehdizadehtapeh Leila, BİLGİLİ ALİ (2021). A MULTIPERSPECTIVE EVALUATION of FOOD ALLERGEN ?BARVALBUMINE BY ELISA, GENOMIC and in silico SIMULATION. 3. International ICONTECH SYMPOSIUM on Innovative Surveys in Positive Sciences, 261-268. (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:7446983)
2. SOĞUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE, TAŞKIN TOK TUĞBA (2022). MOLECULAR DOCKING-ASSISTED INVESTIGATION OF Cu(II) COMPLEXES CARRYING "SNS" PINCER-TYPE PYRIDINE-THIOETHER LIGANDS AS POTENTIAL DRUG CANDIDATES AGAINST SARS-COV-2. XXVIII Symposium on Bioinformatics and Computer-Aid Drug Discovery (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:8088479)
3. KOÇ SATILOĞLU AYSUN,SOĞUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE,TAŞKIN TOK TUĞBA (2020). SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND MOLECULAR MODELING STUDIES OF NOVEL SNS PINCER TYPE LIGAND DERIVED FROM 2,6-DISUBSTITUEDPYRIDINE AND 2- METHOXYTHIOPHENOL AND ITS METAL COMPLEXES. 4. Uluslararası İpek Yolu Akademik Çalışmalar Sempozyumu (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:6672279)
4. BOZDOĞAN LEYLA,SOĞUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE,TAŞKIN TOK TUĞBA,ÇAPAN ALİ,SÖNMEZ MEHMET (2020). SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND MOLECULAR MODELINGSTUDIES OF NEW N-CARBOXAMIDE LIGAND CONTAINING PYRIMIDINE RING. 4. Uluslararası İpek Yolu Akademik Çalışmalar Sempozyumu (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:6672328)
5. Özleyen Adem,Yılmaz Y Berkay,GÜNGÖR TUĞBA,TAŞKIN TOK TUĞBA,AY MEHMET,TÜMER TUĞBA (2019). Action Mechanism of Novel Nimesulide Derivatives as Potential Antiinflammatory Compounds with Secondary Anticancer Effects. 7th International BAU Drug Design Congress19-20-21 DECEMBER 2019(ST-12), 97-98. (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:5758639)
6. GÜNGÖR TUĞBA,Özleyen Adem,YILMAZ YAKUP BERKAY,TAŞKIN TOK TUĞBA,AY MEHMET,TÜMER TUĞBA (2019). Synthesis Antiinflammatory and Anticancer Effects of Novel Amide Containing Compounds. 1st INTERNATIONAL MULTIDISCIPLINARYCANCER RESEARCH CONGRESS, 122-123. (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5907185)
7. DOĞAN TOPAL BURCU,KARADAŞ BAKIRHAN NURGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,ÖZKAN SİBEL AYŞIL (2019). Anodic oxidation of adenine nucleoside analog fludarabine onNH2 functionalized multiwalledcarbon nanotube modified glassy carbon electrode. EUROANALYSIS2019 (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:5393901)
8. KÖK MEHMET ALİ,TAŞKIN TOK TUĞBA,TATAR GİZEM (2019). In-silico Drug Design Against ZIKA Virus. III.Uluslararası Avrasya Multidisipliner Çalışmalar Kongresi (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5048452)
9. BAYIL İMREN,TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2019). Üç boyutlu DNA Aptamer Temelli Biyosensörler ile Endrokin bozucu kimyasalların tespit edilmesi. 3.Uluslararası Avrasya Multidisipliner Çalışmalar Kongresi (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5454688)
10. AY MEHMET,CÖMERT ÖNDER FERAH,KANDEMİR HAKAN,TAŞKIN TOK TUĞBA,BELLUR ATICI ESEN,TATAR GİZEM,KARLIĞA BEKİR,ŞAHİNER NURETTİN,Ozpolat Bulent (2019). Recent Developments in eEF2 Kinase Inhibitors. International Conference on PharmaScience Research and Development (Pharma RD 2019), 25-26. (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:6209072)
11. AY MEHMET,CÖMERT ÖNDER FERAH,KANDEMİR HAKAN,TAŞKIN TOK TUĞBA,BELLUR ATICI Esen,TATAR GİZEM,KARLIĞA Bekir,ÇAĞIR ALİ,ŞAHİNER NURETTİN,ÖZPOLAT BÜLENT (2019). Recent Developments in eEF2 Kinase Inhibitors. International Conference on PharmScienceResearch Development, 25-26. (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5983558)
12. YILMAZ ELİF,TAŞKIN TOK TUĞBA,UZGÖREN BARAN AYŞE (2018). Synthesis and molecular modeling studies of flurbiprofen-based 1,2,4-triazole derivatives. Uluslararası Katılımlı 4. Organik Kimya Kongresine (OrgChemTR-4) (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4628640)
13. TAŞKIN TOK TUĞBA,YILMAZ ELİF,UZGÖREN BARAN AYŞE (2018). In Silico Studies Of Flurbiprofen-Based 1,2,4-Triazole Derivatives As Dual Inhibitors Of COX-2/5-LOX Enzymes. 5th International Conference on Computation for Science and Technology (ICCST 2018) (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4628409)
14. SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,TAŞKIN TOK TUĞBA,BAŞARAN EYÜP,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,ÜREN AYKUT,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2018). Generation of small molecules targeting hypoxia inducible factors. 28th International Congress of the European-Respiratory-Society (ERS), European Respiratory Journal (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5732323)
15. SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞDEMİR DEMET,İlhan Sedat,TAŞKIN TOK TUĞBA,başaran Eyüp,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,Üren Aykut,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2018). Generation of small molecules targeting hypoxia inducible factors. european respiratory society (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:4536791)
16. SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,TAŞKIN TOK TUĞBA,BAŞARAN EYÜP,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,ÜREN AYKUT,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2018). Generation of small molecules targeting hypoxia inducible factors. European Respiratory Society, Internatioal Congress (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:5060554)
17. KAYMAKÇIOĞLU BEDİA,TOK FATİH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2018). Design of potent PARP-1 inhibitors through molecular modeling techniques. 54th International Conference on Medicinal Chemistry- RICT 2018 (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:4328674)

18. AKI YALÇIN ESİN EMİNE,YILMAZ SERAP,BOLELLİ KAYHAN,ÖZTÜRK ÖZÜM,ERTAN BOLELLİ TUĞBA,TAŞKIN TOK TUĞBA,YALÇIN İSMAİL (2018). DESIGN AND ACTIVITYMECHANISM DESCRIPTION OFANTICANCER ACTIVE BENZAZOLESAGAINST DNA TOPOISOMERASE-II BY USING MOLECULAR MODELINGTECHNIQUES. 12th International Symposium on Pharmaceutical Sciences (ISOPS12) (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4645080)
19. İYİDOĞAN AYŞEGÜL,BAYRAM HASAN,TAŞDEMİR DEMET,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞKIN TOK TUĞBA,BAŞARAN EYÜP,İLHAN SEDAT,EMRE EMİNE ELÇİN (2018). SYNTHESIS AND CYTOTOXICACTIVITIES OF NOVEL CHIRALSULFONAMIDES AS HYPOXIA INDUCEDFACTORS INHIBITORS. 12th International Symposium on PharmaceuticalSciences (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:4843473)
20. AKI YALÇIN ESİN EMİNE,YILMAZ SERAP,BOLELLİ KAYHAN,ÖZTÜRK ÖZÜM,ERTAN BOLELLİ TUĞBA,TAŞKIN TOK TUĞBA,YALÇIN İSMAİL (2018). Design and Activity Mechanism Description of Anticancer Active Benzazoles against DNA Topoisomerase-II by using Molecular Modeling Techniques. 12th International Symposium on Pharmaceutical Sciences (ISOPS-12) (Tam Metin Bildiri/Davetli Konuşmacı)(Yayın No:4455209)
21. AKI YALÇIN ESİN EMİNE,YILMAZ SERAP,BOLELLİ KAYHAN,ÖZTÜRK ÖZÜM,ERTAN BOLELLİ TUĞBA,TAŞKIN TOK TUĞBA,YALÇIN İSMAİL (2018). Design and Activity Mechanizm Description of Anticancer active Benzazoles Against DNA Topoisomerase-II by Using Molecular Modeling Techniques. 12th International Symposium on Pharmaceutical Sciences(PL-14), 9 (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:6164760)
22. İYİDOĞAN AYŞEGÜL,BAYRAM HASAN,TAŞDEMİR DEMET,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞKIN TOK TUĞBA,BAŞARAN EYÜP,İLHAN SEDAT,EMRE EMİNE ELÇİN (2018). Synthesis and Cytotoxic Activities of Novel Chiral Sulfonamides as Hypoxia Induced Factors Inhibitors. 12nd International Symposium on Pharmaceutical Sciences, ISOPS-12 (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:5695645)
23. KOYUNCU HÜLYA,GÖKOĞLU ELMAS,ADIGÜZEL ZEYNEP,TAŞKIN TOK TUĞBA (2018). Spectroscopic and Molecular Docking Studies on the Binding Propertiesof Sulfamerazine with Pepsin. International Trace Analysis Congress (ITAC 2018) (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:4842909)
24. ADIGÜZEL ZEYNEP,GÖKOĞLU ELMAS,KOYUNCU HÜLYA,TAŞKIN TOK TUĞBA (2018). Molecular Interactions of Antibacterial Drug Sulfadiazine with Trypsin by Spectral and Molecular Docking Methods. International Trace Analysis Congress (ITAC 2018) (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:4842884)
25. TAŞDEMİR DEMET,İlhan Sedat,Başaran Eyüp,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2018). YENİ SENTEZLENEN HIPOKSI İNDÜKLENEBİLİRFAKTÖR (HIF) İNHİBİTÖRLERİNİN A549HÜCRELERİNDE APOPTOZIS VE HIF1AEKSPRESYONUNA ETKİSİ. 21.yıllık Toraks Kongresi (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4609377)
26. ÇİFTÇİ EMRAH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2017). EVALUATION OF DATA SOURCES THAT CAN BE USED FOR COSMETIC PRODUCTS' SAFETY ASSESSMENT. 1th International Cosmetic Congress (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3891804)
27. GÜREL NUR,KARAKUŞ SEVGİ,KAYMAKÇIOĞLU BEDİA,TAŞKIN TOK TUĞBA,TOK FATİH,TÜRK SEVGİ (2017). Design of Potent Multi-target CAs inhibitors through Pharmacophore Modeling.. 5thInternational Bau Drug Design Congress (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4114228)
28. GÜREL NUR,TOK FATİH,TÜRK SEVDA,KARAKUŞ SEVGİ,TAŞKIN TOK TUĞBA,KAYMAKÇIOĞLU BEDİA (2017). Design of Potent Multi-target CAs inhibitors through Pharmacophore Modeling. 5th International BAU Drug Design Congress (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3964380)
29. GÜREL NUR,TOK FATİH,TÜRK SEVDA,KARAKUŞ SEVGİ,TAŞKIN TOK TUĞBA,KAYMAKÇIOĞLU BEDİA (2017). PHARMACOPHORE MODELING FOR DESIGN OF MULTI-TARGET CAs INHIBITORS. UEMK Conferences (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:3891566)
30. GÜREL NUR,TOK FATİH,TÜRK SEVDA,KARAKUŞ SEVGİ,TAŞKIN TOK TUĞBA,KAYMAKÇIOĞLU BEDİA (2017). Pharmacophore Modeling for Design of Multi-Target CAs Inhibitors. 2nd International Energy Engineering Conference (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:4048457)
31. TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA,HASSAN YUSUF,ALİYU DANMUSA MOHAMMED (2017). Molecular Docking Study of Novel 1,2,3,4,-Tetrahydroisoquinoline Derivates as Anticancer Agents against epidermal growth factor (EGFR) receptor. 1st International Congress on Cancerlon Channels (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:5454694)
32. TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA,HASSAN YUSUF,MOHAMMED ALİYU DANMUSA (2017). Molecular Docking Study of Novel 1,2,3,4-Tetrahydroisoquinoline Derivatives as Anticancer Agents against epidermal growth factor (EGFR) receptor. 1st INTERNATIONAL CONGRESS ON CANCER AND ION CHANNELS, (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3890990)
33. CÖMERT ÖNDER FERAH,SAĞBAŞ SUNER SELİN,AY MEHMET,TAŞKIN TOK TUĞBA,ÖZPOLAT BÜLENT,ŞAHİNER NURETTİN,KARLIĞA BEKİR,BELLUR ATİCİ ESEN (2017). Design And Synthesis Of New Ef2k Inhibitors For The Treatment Of Tnbc And Pancreatic Cancers And Their In Vitro Release Studies From Biocompatible Natural Polymeric Particles. Global Conference On Pharmaceutics And Drug Delivery Systems, PDDS 2017(P8), 63-63. (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3555643)
34. CÖMERT ÖNDER FERAH,SAĞBAŞ SUNER SELİN,AY MEHMET,TAŞKIN TOK TUĞBA,ÖZPOLAT BÜLENT,ŞAHİNER NURETTİN,BELLUR ATİCİ ESEN,KARLIĞA Bekir (2017). Design and synthesis of new EF2K inhibitors for the treatment of TNBC and pancreatic cancers and their in vitro release

- biocompatible natural polymeric particles. Global Conference on Pharmaceutics and Drug Delivery Systems, 63-63. (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:6210206)
35. KARAMAN NURCAN,SICAK YUSUF,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,ÖZTÜRK MEHMET (2017). Synthesis, Biological And Theoretical Evaluations of Novel Piperidine-Hydrazone Derivatives. SANKO University Innovation in Medicine Summit-3, 35 (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3930593)
  36. ALKHAFAJI KHATTAB,TAŞKIN TOK TUĞBA (2017). Structural Insights Into Amygdalin As A Multi-Functional Anti-Cancer Agent. SANKO University Innovation in Medicine Summit-3 (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3889552)
  37. Bayel Secinti Burcu,TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2017). Molecular Docking Study of Rho-Kinase (ROCK) inhibitors. Innovation in Medicine Summit-3 (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:5454695)
  38. KARAMAN NURCAN,SICAK YUSUF,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,ÖZTÜRK MEHMET (2017). Synthesis, Biological and Theoretical Evaluations of Novel Piperidine-Hydrazone Derivatives. SANKO University Innovation in Medicine Summit-3 (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3669013)
  39. KARAMAN NURCAN,SICAK YUSUF,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,ÖZTÜRK MEHMET (2017). Synthesis, Biological and Theoretical Evaluations of Novel Piperidine-Hydrazone Derivatives.. Innovation in Medicine Summit-3 (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3914254)
  40. BAYEL SEÇİNTİ BURCU,TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2017). Rho-Kinaz (Rock) İnhibitörlerinin Moleküler Docking Çalışması. SANKO University Innovation in Medicine Summit-3 (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3889405)
  41. AL AFANDI MOHAMMED DARWISH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2017). Modeling of Protein-Peptide Interactions using HADDOCK web server for Cancer Therapy. Uluslararası Katılımlı 5. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3888954)
  42. EMRE EMİNE ELÇİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞDEMİR DEMET,başaran eyüp,TAŞKIN TOK TUĞBA,BAYRAM HASAN (2017). Benzoksazol Halkası Taşıyan Yeni Kiral Sülfonamitlerin Sentezi ve HIF Enzim İnhibitör Etkilerinin İncelenmesi. Uluslararası katılımlı 5. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3907932)
  43. EMRE EMİNE ELÇİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞDEMİR DEMET,BAŞARAN EYÜP,TAŞKIN TOK TUĞBA,BAYRAM HASAN (2017). Benzoksazol Halkası Taşıyan Yeni Kiral Sülfonamitlerin Sentezi veHIF Enzim İnhibitör Etkilerinin İncelenmesi. 5. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:3931622)
  44. ÇİFTÇİ EMRAH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). The Development Processes of The Cosmetic Products for Children Under Age 3. 3rd International Cleaning and Personal Care Productsand Production Technologies Symposium and Exhibition (ICPC 2016) (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3012831)
  45. TAŞKIN TOK TUĞBA,UZGÖREN BARAN AYŞE (2016). Oxadiazole derivatives as a potential Glutathione S Transferase Inhibitors. 6. Multidisipliner Kanser Araştırma Kongresi (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:2978962)
  46. KARAMAN NURCAN,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,SICAK YUSUF,ÖZTÜRK MEHMET,İYİDOĞAN AYŞEGÜL (2016). Docking Studies of Some Novel Benzoyl Hydrazones as an Anticholinesterase Agent. 1st International Mediterranean Science and Engineering Congress (IMSEC 2016), Doi: 10.1016/j.ejmech.2016.08.037 (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:2978952)
  47. YILDIRIM MUSTAFA,TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Evaluation of Docking Functions for ROCK2 Ligands Docking. 4. BAU DRUG DESIGN (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:2979005)
  48. BOYUNEGMEZ TUMER TUGBA,KAPCHE DECCAUX W F G,LEKANE NADEGE M,HANDE İPEK,SAVRANOGLU SEDA,TAŞKIN TOK TUĞBA,NGADJUI BONAVENTURE T,DEMİRTAŞ İBRAHİM (2016). Two Novel Compounds Dinklagein A And B From Calpocalyx Dinklagei Harms Anti Inflammatory Activity And Molecular Docking. the 29th International Symposium on the Chemistry of Natural Products (ISCNP-29) and the 9th International Conference on Biodiversity (ICOB-9) (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:2978917)
  49. TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Investigation of mutation on the molecular functions of ROCK Rho kinase protein with molecular modeling techniques. EMBO Integrative modeling of biomolecular interactions practical course (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:2978843)
  50. TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Investigation of mutation on the molecular functions of ROCK2 Rho kinase2 protein with molecular modeling techniques. School on Molecular Modeling for Life Sciences (Tam Metin Bildiri/Poster)(Yayın No:2978828)
  51. TAŞKIN TOK TUĞBA,TATAR GİZEM (2016). Computer Assisted Drug Design and Development. Innovation in Medicine Summit-2 (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:2978789)
  52. TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Molecular Modeling of Rho Kinase 2 ROCK 2. Biovia (Accelrys) Meeting (Tam Metin Bildiri/Davetli Konuşmacı)(Yayın No:2978805)
  53. TAŞKIN TOK TUĞBA,TATAR GİZEM (2016). Molecular Modeling Applications in Medicine. Biovia (Accelrys) Meeting (Tam Metin Bildiri/Davetli Konuşmacı)(Yayın No:2978815)

54. TOKAY ESRA,KÖÇKAR FERAY,GÜNGÖR TUĞBA,CÖMERT ÖNDER FERAH,YETİŞ GÜLDEN,AY MEHMET,ÇELİK AYHAN,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). Evaluation of potential nitro prodrugs named 26i and 26ii for use with nitroreductase mediated gene directed enzyme prodrug therapy. 3rd INTERNATIONAL BAU-DRUG DESIGN CONGRESS Novel Methods and Emerging Targets in Drug Discovery & Patented Drug Development (//)(Yayın No:2369907)
55. TOKAY ESRA,HACIOĞLU NELİN,KÖÇKAR FERAY,GÜNGÖR TUĞBA,CÖMERT ÖNDER FERAH,YETİŞ GÜLDEN,AY MEHMET,ÇELİK AYHAN,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). In vitro Cytotoxic effects of Nitro Compound named 3k against Four different Cancer Cell lines. 3rd INTERNATIONAL BAU-DRUG DESIGN CONGRESS Novel Methods and Emerging Targets in Drug Discovery & Patented Drug Development (//)(Yayın No:2369981)
56. TOKAY ESRA,NELİN HACIOĞLU,KÖÇKAR FERAY,GÜNGÖR TUĞBA,YETİŞ GÜLDEN,AY MEHMET,ÇELİK AYHAN,CÖMERT ÖNDER FERAH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). Anticancer effects of Nitro groups containing Compounds 3i and 3ii against four different cell types. 3rd INTERNATIONAL BAU-DRUG DESIGN CONGRESS Novel Methods and Emerging Targets in Drug Discovery & Patented Drug Development (//)(Yayın No:2369628)
57. CÖMERT ÖNDER FERAH,AY MEHMET,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). Computational Design and Synthesis of Potential Protein Kinase Inhibitors for Cancer Treatment. 11th International Symposium on Pharmaceutical Sciences (ISOPS) (//)(Yayın No:2370136)
58. TOKAY ESRA,KÖÇKAR FERAY,TAŞKIN TOK TUĞBA,GÜNGÖR TUĞBA,CÖMERT ÖNDER FERAH,YETİŞ GÜLDEN,ÇELİK AYHAN,AY MEHMET (2015). Determination of Cell Cytotoxicity of Potential Prodrugs in Human Hepatoma Cells. 5th International Congress of Molecular Medicine (//)(Yayın No:2370434)
59. TOKAY ESRA,KÖÇKAR FERAY,TAŞKIN TOK TUĞBA,GÜNGÖR TUĞBA,YETİŞ GÜLDEN,ÇELİK AYHAN,AY MEHMET,CÖMERT ÖNDER FERAH (2015). Investigation of Cytotoxic Effect of N Substitued 2 4 6 Trinitroaniline Derivates in Human Hepatoma Cells. 5th International Congress of Molecular Medicine (//)(Yayın No:2370374)
60. CÖMERT ÖNDER FERAH,GÜNGÖR TUĞBA,GÜVEN GÜLHAN ÜNZİLE,YETİŞ GÜLDEN,AY MEHMET,ÇELİK AYHAN,TAŞKIN TOK TUĞBA,KÖÇKAR FERAY (2015). 4 6 Dinitro N 1 N3 bis substituted phenyl 1 3 benzenediamine Derivates Synthesis and Applications as Prodrug Candidates for Activation by Nitroreductases. 3rd EACR Sponsored Anticancer Agent Development Congress (//)(Yayın No:2370314)
61. AKI YALÇIN ESİN EMİNE,YALÇIN İSMAİL,ERTAN BOLELLİ TUĞBA,YILMAZ SERAP,BOLELLİ KAYHAN,OZTURK OZUM,TAŞKIN TOK TUĞBA,OKSUZOGLU EMİNE,ÖZEN ÇİĞDEM (2015). Computer Aided Drug Design Studies for New Anticancer Drugs. 3rd EACR Sponsored Anticancer Agent Development Congress (//)(Yayın No:2431717)
62. GÜNGÖR TUĞBA,YETİŞ GÜLDEN,GÜVEN GÜLHAN ÜNZİLE,AY MEHMET,ÇELİK AYHAN,CÖMERT ÖNDER FERAH,TAŞKIN TOK TUĞBA,KÖÇKAR FERAY (2015). The Applications of Piperidine Derivative Prodrugs in Nitroreductase Based Cancer Therapy. 3rd EACR Sponsored Anticancer Agent Development Congress (//)(Yayın No:2370231)
63. TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). Elucidation of Interaction Mechanism of the Proteins Involved in Coronavirus CoV Replication by Using Molecular Modeling Methods. Biovia (Accelrys) Meeting (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3028943)
64. ÇİFTÇİ EMRAH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). Bebe Şampuanı Üretiminde Kullanılan Kıvamlaştırıcıların Şampuanın Fizikokimyasal Özellikleri Üzerine Etkilerinin İncelenmesi. Kozmetik Kimyası, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (//)(Yayın No:2370477)
65. AKI YALÇIN ESİN EMİNE,ERTAN BOLELLİ TUĞBA,BOLELLİ KAYHAN,YILMAZ SERAP,ÖZTÜRK ÖZÜM,TAŞKIN TOK TUĞBA,HIDAYAT ANDRY NUR,YILDIZ İLKAY,YALÇIN İSMAİL (2014). Anticancer Drug Design Studies using Molecular Modeling Techniques. 3rd International Conference on Computation for Science and Technology (//)(Yayın No:1122803)
66. Tatar Gizem, Taşkin Tok Tuğba (2014). Elucidation of Interaction Mechanism of Coronavirus proteins with Molecular Docking Study. Modeling of Biomolecular Systems Interactions, Dynamics and Allostery: Bridging Experiments and Computations (//)(Yayın No:1122865)
67. AKI YALÇIN ESİN EMİNE,ERTAN BOLELLİ TUĞBA,TAŞKIN TOK TUĞBA,ÖZEN ÇİĞDEM,YILMAZ SERAP,BOLELLİ KAYHAN,ÖZTÜRK ÖZÜM,YILDIZ İLKAY,YALÇIN İSMAİL (2014). Identification of Mechanism of Action of DNA Topoisomerase II Inhibitors by Molecular Modeling Studies. 20th EuroQSAR Understanding Chemical-Biological Interactions (//)(Yayın No:1122725)
68. AKI YALÇIN ESİN EMİNE,ERTAN BOLELLİ TUĞBA,TAŞKIN TOK TUĞBA,YILMAZ SERAP,BOLELLİ KAYHAN,ÖZTÜRK ÖZÜM,YILDIZ İLKAY,YALÇIN İSMAİL (2014). Molecular Modeling Studies on DNA Topoisomerase II Inhibitors. 2nd International BAU-Drug Design Symposium: Novel Methods and Emerging Targets in Drug Discovery & Patented Drug Development (//)(Yayın No:1122619)
69. TAŞKIN TOK TUĞBA (2014). 1 3 4 Oxadiazole derivatives as Telomerase Inhibitors. 2nd International BAU-Drug Design Symposium: Novel Methods and Emerging Targets in Drug Discovery & Patented Drug Development (//)(Yayın No:1122645)
70. Tatar Gizem, Ulaşlı Mustafa, Taşkin Tok Tuğba (2014). Elucidation of Interaction Mechanism of Coronavirus proteins with Molecular Docking. 2nd International BAU-Drug Design Symposium: Novel Methods and Emerging Targets in Drug Discovery & Patented Drug Development (//)(Yayın No:1122670)

71. AKI YALÇIN ESİN EMİNE, ERTAN BOLELLİ TUĞBA, BOLELLİ KAYHAN, YILMAZ SERAP, ÖZTÜRK ÖZÜM, TAŞKIN TOK TUĞBA, YILDIZ İLKAY, YALÇIN İSMAİL (2013). Rational Design of DNA Topoisomerase Inhibitory Active Benzazoles as Antitumoral Agents. 9th AFMC International Medicinal Chemistry Symposium in 2013 (AIMECS13) (Yayın No:1122569)
72. AkıYalcin Esin, TaskinTok Tugba, ErtanBolelli Tugba, Yildiz Ilkay , Yalcin Ismail (2013). Molecular Docking Analysis of Benzothiazole derivatives as human DNA topoisomerase II inhibitors. 7th International Symposium on Computational Methods in Toxicology and Pharmacology Integrating Internet Resources (CMTPI-2013) (Tam Metin Bildiri)(Yayın No:1122534)
73. Türkmen Volkan, TaşkınTok Tuğba (2013). Structural Insight of Flavonoids as Anti Cancer Drugs. IUPAC 2013, 44th World Chemistry Congress (Yayın No:1122498)
74. AkıYalcin Esin, TaskinTok Tugba, Yilmaz Serap, Ertan-Bolelli Tugba , Bolelli Kayhan , Öztürk Özüm , Yildiz İlkay , Yalçın İsmail , Musdal Yaman , Aksoy Yasemin (2013). Molecular Modeling Studies on the Design of Chemotherapeutically Active Heterocyclic Compounds. BAU-Drug Design Symposium 2013 (Tam Metin Bildiri)(Yayın No:1122458)
75. TaskinTok Tugba, AkıYalcin Esin (2013). Computer Design Studies Theoretical Investigation on Diels Alder D A Adducts as new Narcotic Analgesics. BAU-Drug Design Symposium 2013 (Tam Metin Bildiri)(Yayın No:1122421)
76. Aki Esin, Taskin Tugba, Yalcin Ismail, Musdal Yaman, Aksoy Yasemin , Yilmaz Serap , Ertan-Bolelli Tugba , Bolelli Kayhan , Yildiz İlkay (2012). Computational Drug Design Studies of Some New GST Inhibitory Active 2 substituted benzoxazoles and benzothiazoles. 19th Euro-QSAR Knowledge Enabled Ligand Design (Yayın No:1118831)
77. Özdal S Ebru, Taskin Tugba (2012). QSAR Studies for Treatment of Obesity of Synthesized Carbazole Derivatives As NPY Y1 Antagonists. 2nd International Conference on Computation for Science and Technology (Yayın No:1118821)
78. Türkmen Volkan, Taskin Tugba (2012). Computer Design Theoretical Investigation of Flavonoids Derivatives as Anticancer Drugs. 2nd International Conference on Computation for Science and Technology (Tam Metin Bildiri)(Yayın No:1118818)
79. Aki Esin, Yalcin Ismail, Yildiz Ilkay, Taskin Tugba , Ertan-Bolelli Tugba , Yilmaz Serap , Bolelli Kayhan (2012). Structure Based Drug Design Methods. 2nd International Conference on Computation for Sciencea Technology (Tam Metin Bildiri)(Yayın No:1112077)
80. Okumus S., Igci Y.Z., Taskin T., Oztuzcu S. ,Gurler B. , Eslik Z. , Gogebakan B. , Coskun E. , Erbagci I. , Demiryurek S. (2012). Association Between Thr21Met and Ser89Asn Polymorphisms of the Urotensin II Gene and Diabetic Retinopathy. The 3rd World Congress on Controversies In Ophthalmology (Cophy) Anterior Segment, Retina, Glaucoma (Yayın No:1112015)
81. Aki Esin, Taskin Tugba, Musdal Yaman, Aksoy Yasemin , Yilmaz Serap , Ertan-Bolelli Tugba , Bolelli Kayhan , Yildiz Ilkay , Yalcin Ismail (2011). Docking Studies Of GST Inhibitory Active 2 substituted benzazoles. 6th International Symposium on Computational Methods in Toxicology and Pharmacology Integrating Internet Resources (CMTPI-2011) (Tam Metin Bildiri)(Yayın No:1111854)
82. Taskin Tugba, Sevin Fatma (2008). 2D QSAR and Activity Predictions of 1 2 3 dihydro 1H inden 1 yl 3 1H indazol 4 yl urea derivatives as TRPV1 Antagonists for Pain Relief. International Conference on "Drug Design and Discovery for Developing Countries (Yayın No:1111795)
83. Taskin Tugba, Sevin Fatma (2008). Molecular Modelling of Substituted Urea Analogs as TRPV1 Antagonists. 2nd Workshop on Computer Aided Drug Design & Development: Molecular Modeling (WCADD-2) (Yayın No:1111763)
84. Taskin Tugba, Sevin Fatma (2007). Molecular Modelling Studies of Benzo alfa carbazole Derivatives As Estrogen Receptor Inhibitors. International Symposium on Drug Research & Development "From Chemistry to Medicine" 2007 (Yayın No:1111736)
85. Uzgören Ayşe, Ergün Yavuz, Taşkın Tuğba, Sevin Fatma, Okay Gürol (2005). The synthesis and theoretical study of dihydrocarbazole and its derivatives. International Symposium on Medicinal Chemistry Research and Development 2005, (MCRD 2005) (Yayın No:1111687)

## C. Yazılan ulusal/uluslararası kitaplar veya kitaplardaki bölümler:

### C1. Yazılan ulusal/uluslararası kitaplar:

1. QSAR Studies NPY Y1 antagonists for the treatment of obesity (2013)., ÖZDAL SEVDA EBRU, TAŞKIN TOK TUĞBA, LAMBERT Academic Publishing, Basım sayısı:1, Sayfa Sayısı 76, ISBN:978-3-659-49396-6, İngilizce(Bilimsel Kitap), (Yayın No: 1099350)

## C. Yazılan ulusal/uluslararası kitaplar veya kitaplardaki bölümler:

### C2. Yazılan ulusal/uluslararası kitaplardaki bölümler:

1. Nanomaterials for Cancer Detection Using Imaging Techniques and Their Clinical Applications., Bölüm adı:(Biocompatibility and Toxicity Perspective for the Development of Nanomaterials for Cancer Detection and Treatment.) (2022)., SOĞUKÖMEROĞULLARI HATİCE GAMZE, TAŞKIN TOK TUĞBA, Springer, Cham, Editör:Chaughule, Ramesh S., Patkar, Deepak P., Ramanujan, Raju V., Basım sayısı:1, Sayfa Sayısı 524, ISBN:978-3-031-09636-5, İngilizce(Bilimsel Kitap), (Yayın No: 8075627)



2. Advances in Protein Molecular and Structural Biology Methods, Bölüm adı:(Computational Techniques to Study Protein-Protein Interactions) (2022)., Al-Khafaji Khattab, TAŞKIN TOK TUĞBA, Academic Press, Editör:Tripathi, T\*. and Dubey, V.K., Basım sayısı:1, Sayfa Sayısı 714, ISBN:978-032-39-0264-9, İngilizce(Bilimsel Kitap), (Yayın No: 7247726)
3. Kimya Yapı ve İşlev Çalışma ve Problem Çözümleri El Kitabı, Bölüm adı:(Haloalkanların Diğer Tepkimeleri:Tek Moleküllü Yerdeğiştirme ve Ayrılma Tepkimeleri) (2014)., TAŞKIN TOK TUĞBA, Palme Yayıncılık, Editör:Uyar Tahsin; Sevin Düz Fatma, Sayfa Sayısı 519, ISBN:9786053552413, Türkçe(Kitap Tercümesi), (Yayın No: 1099319)
4. Pharmacology and Therapeutics, Bölüm adı:(Anticancer Drug-Friend or Foe) (2014)., TAŞKIN TOK TUĞBA,GOWDER SIVAKUMAR, InTech, Editör:Gowder Sivakumar, ISBN:978-953-51-1620-2, İngilizce(Bilimsel Kitap), (Yayın No: 1099336)
5. Organik Kimya Yapı ve İşlev, Bölüm adı:(Haloalkanların Diğer Tepkimeleri) (2011)., TAŞKIN TOK TUĞBA, Palme Yayıncılık, Editör:Uyar Tahsin; Sevin Düz Fatma, Sayfa Sayısı 1426, ISBN:9786054414659, Türkçe(Kitap Tercümesi), (Yayın No: 16870)

#### **D. Ulusal hakemli dergilerde yayımlanan makaleler :**

1. AKBAY NURİYE,Koksall Zeynep,TAŞKIN TOK TUĞBA,UZGÖREN BARAN AYŞE (2019). Naproxen Derivative Interaction Properties with ct-DNA. Hacettepe Journal of Biology and Chemistry, 47(2), 177-184., Doi: 10.15671/HJBC.517481 (Kontrol No: 5862816)
2. ÇİFTÇİ EMRAH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). THE DEVELOPMENT PROCESSES OF THE COSMETIC PRODUCTS FOR CHILDREN UNDER AGE 3. TMMOB Kimya Mühendisleri Odası (Kontrol No: 3013811)

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

1. EFENDİ Mohammed, TAŞKIN TOK TUĞBA (2021). USING BIGUANIDE DERIVATIVES AGAINST SARS-COV-2 PROTIENS, IN SILICO STUDY. International Symposium on Global Pandemics and Multidisciplinary Covid-19 Studies, 26 (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:7447242)
2. EFENDİ Mohammed, TAŞKIN TOK TUĞBA (2021). USING BIGUANIDE MEDICATIONS TO FIGHT COVID-19, MOLECULAR DOCKING AND MD SIMULATION STUDY. II. International Symposium on Global Pandemics and Multidisciplinary Covid-19 Studies, 166-166. (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:7447339)
3. TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,BAŞARAN EYÜP,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2018). YENİ SENTEZLENEN HIPOKSI İNDÜKLENEBİLİRFAKTÖR (HIF) İNHİBİTÖRLERİNİN A549HÜCRELERİNDE APOPTOZIS VE HIF1AEKSPRESYONUNA ETKİSİ. Türk Toraks Derneği (TTD)'nin 21. Yıllık Kongresi (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:4842966)
4. TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,BAŞARAN EYÜP,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2018). Yeni Sentezlenen Hipoksi İndüklenebilir Faktör (HIF) İnhibitörlerinin A549 Hücrelerinde Apoptozis ve HIF1? Ekspresyonuna Etkisi. Türk Toraks Derneği 21.Yıllık Kongresi (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5732301)
5. TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,BAŞARAN EYÜP,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2018). Yeni sentezlenen hipoksi indüklenebilir faktör (HIF) inhibitörlerinin A549 hücrelerinde Apoptozis ve HIF1A ekspresyonuna Etkisi. Türk Toraks Derneği, 21.Yıllık Kongresi (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5062763)
6. TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,BAŞARAN EYÜP,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2017). Yeni Hipoksiye Bağlı Faktör HIF-1? HIF-2? İnhibitörlerinin Sentezlenmesi Geliştirilmesi ve Alveoler Epitel Hücre Canlılığına Etkisi. Türk Toraks Derneği 20. Yıllık Kongresi (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5726824)
7. TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,BASARAN EYÜP,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2017). Yeni Hipoksiye Bağlı Faktör (HIF)?1? ve HIF?2? İnhibitörlerinin Sentezmesi Geliştirilmesi ve Alveoler Epitel Hücre Canlılığına Etkisi. Türk Toraks Derneği'nin 20. Yıllık Kongresi (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:3893284)
8. TAŞDEMİR DEMET,İLHAN SEDAT,BAŞARAN EYÜP,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,TAŞKIN TOK TUĞBA,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,EMRE EMİNE ELÇİN,BAYRAM HASAN (2017). Yeni hipoksiye bağ?lı faktör HIF-1? ve HIF-2? inhibitörlerinin sentezmesi geliştirilmesi ve alveoler epitel hücre canlılığı?ına etkisi.". Türk Toraks Derneği, 20.Yıllık Kongresi (Özet Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:5062773)
9. EMRE EMİNE ELÇİN,İYİDOĞAN AYŞEGÜL,SAYGIDEĞER KONT YASEMİN,TAŞDEMİR DEMET,BAŞARAN EYÜP,TAŞKIN TOK TUĞBA,BAYRAM HASAN (2017). Benzoksazol halkası taşıyan yeni kiral sülfonamidlerin sentezi ve HIF enzim inhibitör etkilerinin incelenmesi. 5. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (Özet Bildiri/Poster)(Yayın No:5062779)
10. KÖÇKAR FERAY,TOKAY ESRA,ÇELİK AYHAN,GÜNGÖR TUĞBA,AY MEHMET,CÖMERT ÖNDER FERAH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Ssnp Nitroredüktazı ve Yeni Öncül İlaç Birleşimlerinin Keşfedilmesi ve Sitotoksik Etkinliklerinin Belirlenmesi. 4. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (/)(Yayın No:3020279)

11. AY MEHMET,TOKAY ESRA,KÖÇKAR FERAY,GÜNGÖR TUĞBA,ÇELİK AYHAN,COMERT ONDER FERAH,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Öncül İlaç Olabilecek Yeni Nitro Bileşiklerin 25 Antikanser Etkinliklerinin Belirlenmesi. 4. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi, (/)(Yayın No:3020269)
12. BAYIL İMREN,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Biyouyumlu Metal Organik Yapılar Olan MIL 101 Ve UCMC 1 Moleküllerinin Modellenmesi ve İlaç Taşınmasındaki Rolü. 4. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (/)(Yayın No:3020286)
13. TOKAY ESRA,KÖÇKAR FERAY,CÖMERT ÖNDER FERAH,GÜNGÖR TUĞBA,ÇELİK AYHAN,AY MEHMET,TAŞKIN TOK TUĞBA (2016). Nitro grubu İçeren Yeni İlaç Öncül Bileşiklerinin 2a ve 2b Sitotoksik Etkilerinin Belirlenmesi. 4. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (/)(Yayın No:3020275)
14. TAŞKIN TOK TUĞBA,ÇELİK AYHAN,AY MEHMET,COMERT ONDER FERAH,GÜNGÖR TUĞBA,KÖÇKAR FERAY,TOKAY ESRA (2016). Nitroredüktaz Nitro Substitüe İlaç öncü Birleşimlerinin Farmakofor Analizi. 4. İlaç Kimyası: İlaç Etkin Maddesi Tasarımı, Sentezi, Üretimi ve Standardizasyonu Kongresi (Tam Metin Bildiri/Sözlü Sunum)(Yayın No:2978995)
15. TOKAY ESRA,GÜNGÖR TUĞBA,CÖMERT ÖNDER FERAH,KÖÇKAR FERAY,AY MEHMET,ÇELİK AYHAN,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). İlaç Öncü Bileşik Olma Potansiyeli Taşıyan Bazı Nitro Substitüe Benzamit Bileşiklerinin Sitotoksik Aktivitelerinin Belirlenmesi. 27. Ulusal Kimya Kongresi (/)(Yayın No:2370630)
16. YILMAZ KÜBRA,TATAR GİZEM,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). Voltaj Kapılı Potasyum Kanal Proteinin Kv1 2 Homoloji Modellenmesi ve HsTx1 Toksini ile Etkileşim Mekanizmaların Docking Yöntemiyle Aydınlatılması. 27. Ulusal Kimya Kongresi (/)(Yayın No:2370630)
17. CÖMERT ÖNDER FERAH,AY MEHMET,TAŞKIN TOK TUĞBA (2015). Kanser Tedavisinde Kullanılabilecek Potansiyel Protein Kinaz İnhibitörleri Olarak Yeni 2H Kromen 3 Karboksamit Türevlerinin Bilgisayar Destekli Tasarımı ve Sentezi. 27. Ulusal Kimya Kongresi (/)(Yayın No:2370597)
18. TaşkınTok Tuğba, Özaşık Özgün, Sarıgöl Deniz, Uzgören-Baran Ayşe (2014). Naproksen Yapısına sahip Hidrazon Türevlerinin Sentezi ve Moleküler Modelleme Çalışmaları. 2. Ulusal Organik Kimya Kongresi (/)(Yayın No:1107285)
19. Tatar Gizem, TaskinTok Tugba (2014). Coronavirüs ün CoV Yapısal Proteinlerinin Homoloji Modellenmesi Ve Etkileşim Mekanizmalarının Aydınlatılması. 2. İlaç Kimyası, Üretimi, Teknolojisi ve Standardizasyonu Kongresi (/)(Yayın No:1107156)
20. Taskin Tok Tugba, Akı Yalcın Esin (2014). Ligand ve parça tabanlı anti kanser ilaç Tasarımı. 2. İlaç Kimyası, Üretimi, Teknolojisi ve Standardizasyonu Kongresi (/)(Yayın No:1107185)
21. Tatar Gizem, TaskinTok Tugba (2013). DAT in Bazı Önemli Ligand Molekülleri ile Docking Çalışması. 1. İlaç Kimyası, Üretimi, Teknolojisi ve Standardizasyonu Kongresi (/)(Yayın No:1107128)
22. Akı Esin, Yalcın İsmail, Yıldız İlkyay, Ertan-Bolelli Tugba , Bolelli Kayhan , Taskin Tok Tugba , Yılmaz Serap (2011). Kemoteropötik Etkili Heterosiklik Bileşiklerin Bilgisayar Destekli İlaç Tasarım Çalışmaları. 25. Uluslararası Katılımlı Ulusal Kimya Kongresi (/)(Yayın No:1107040)
23. Taskin Tok Tugba, Akı Esin, Yalcın İsmail, Yıldız İlkyay , Ertan-Bolelli Tugba , Bolelli Kayhan , Yılmaz Serap (2011). Docking Studies of Topoisomerase II Inhibitors. 25. Uluslararası Katılımlı Ulusal Kimya Kongresi (/)(Yayın No:1107003)
24. Taskin Tugba, Sevin Fatma (2008). QSAR Model of Novel TRPV1 Receptor Antagonists for Treatment of Pain. 8. Kimyasal Fizik Kongresi (Chemical Physics Congress VIII) (/)(Yayın No:1106953)

## Editörlük

1. Signpost Open Access Journal of Pathobiology and Toxicology (Endekste taranmıyor), Dergi, Yayın Kurulu Üyeliği, Research Signpost

## Üniversite Dışı Deneyim

2009	<b>Doping Numunesi Alım Görevlisi</b>	Bağımsız Doping Numunesi Alım Görevlileri Başkanlığı, Görevlendirmeye ulusal-uluslararası spor müsabakaları veya sporcu kamplarına gidilip doping numunesi alım işlemleri gerçekleştirildi,, (Hastane)
------	---------------------------------------	--

## Çalıştay

144893	Geleceği Hayal Etmek ve Değer oluşturmak, Dr. Naşide Gözde Durmuş, bu disiplinler arası araştırma ortamında, nano/mikro boyutlu teknolojilerin kanser ve antibiyotik direnci gibi dünyayı tehdit eden global sağlık problemlerinin erken tanı ve tedavisine olanak sağlayacak sade, düşük maliyetli ve kolay kullanılabilir teknolojiler geliştirerek, önemli katkılar sağladığına vurgu yaptı., SANKO Hastanesi, Çalıştay, 15.12.2017 -15.12.2017 (Uluslararası)
144862	Kanser Tedavisinde Immunoterapi Çalıştayı, Kanser Tedavisinde Immunoterapi 1, Kanser tedavisinde Immunoterapi 2, Özel Sani Konukoğlu Hastanesi Toplantı Salonu, Çalıştay, 31.03.2017 -31.03.2017 (Uluslararası)

- 
- 92017 BIOVIA Turkish Regional User Meeting with A-Ztech Ltd, Molecular Modeling of Rho-Kinase 2 (ROCK 2);Molecular Modeling Applications in Medicine, Byotel, Çalıştay, 06.05.2016 -06.05.2016 (Uluslararası)
- 26854 BIOVIA Turkish Regional User Meeting with A-Ztech Ltd, Elucidation of Interaction Mechanism of the Proteins Involved in Coronavirus (CoV) Replication by Using Molecular Modeling Methods, İstanbul, Çalıştay, 10.04.2015 -10.04.2015 (Uluslararası)