

BOĞAZİÇİ ÜNİVERSİTESİ POLİMER UYGULAMA VE ARAŞTIRMA MERKEZİ
FAALİYET RAPORU

2008

MERKEZDE YÜRÜTÜLEN PROJELER

Proje Adı	Yürütücüsü	Desteklendiği Fon	Başlangıç Tarihi	Durumu
P53 Tümör Engelleyici Proteinin DNA ile Etkileşmesinin Elastik Ağyapı Modelleri ile İncelenmesi	Türkan Haliloğlu	BAP	2006	Sonuçlandı (2008)
Biyolojik Sistemler İçin Karışık Ölçekli Modellerin Geliştirilmesi	Pemra Doruker	BAP	2006	Sonuçlandı (2008)
Poli(etilenoksit)-b-Poli (N-izopropilakrilamid) Çift Hidrofilik, Diplok Kopolimerlerin Tersinir Eklenme Fragmantasyon Zincir Transferi	Turgut Nugay	BAP	2006	Sonuçlandı (2008)
Yüksek Ayrışımli Nanoteknolojiler: Atomik Kuvvet Mikroskopisi-AFM	Nihan Nugay	TÜBİTAK	2006	Sonuçlandı (2008)
Etkin Simülasyon Teknikleri ile Biyomoleküler Sistemlerin Yapı-İşlev İlişkilerinin Tayini	Pemra Doruker	TÜBİTAK	2005	Sonuçlandı (2008)
Polipropilen nanokompozitlerinin Formülasyonu, Üretimi ve Karakterizasyonu	Nihan Nugay	TÜBİTAK, Arçelik	2006	Sonuçlandı (2008)
Protein-Protein Etkileşim Bölgelerinin Makine Öğrenmesi Metodları Kullanılarak Tahmini	Türkan Haliloğlu	BAP	2008	Yürürlükte
Protein-DNA Etkileşimlerinin Modellenmesi ve Simulasyonu	Pemra Doruker	BAP	2008	Yürürlükte
NMR Spektroskopisi Kullanımını Geliştirme ve Güncelleme Projesi	Nihan Nugay	BAP	2008	Yürürlükte
Proteinlerde Katlanma Süreçlerine Robot Hareket Planlama ve Yöngüdümlü Bazlı Yaklaşım	Türkan Haliloğlu	TÜBİTAK	2006	Yürürlükte
Protein Etkileşim Haritalarının Üretilmesi ve İncelenmesi	Can Özturan	TÜBİTAK	2007	Yürürlükte
Transkripsiyon Başlangıç Mekanizmasının Aydınlatılması; Yapısal Değişimler ve Mekanizmayı Etkileyen Önemli Faktörler	Yusuf Tutar	TÜBİTAK	2008	Yürürlükte
COSBIOM	Türkan Haliloğlu	Avrupa Birliği	2005	Yürürlükte
Design of Chemical Sensors and Detoxifying Drugs for Protection Against Nerve Agents	Türkan Haliloğlu	NATO	2007	Yürürlükte

MERKEZ TARAFINDAN DÜZENLENEN BİLİMSEL TOPLANTILAR

Toplantının Adı	Düzenleyen Merkez Üyesi	Tarih	Düzenlendiği Yer	Katılımcı Sayısı	Sunulan Bildiri Adeti
HIBIT 2008	Türkan Haliloğlu	18-20 Mayıs 2008	Sabancı Binası, Karaköy	60	
Information-Driven Modeling of Biomolecular Complexes	Alexandre Bonvin	22 Mayıs 2008	Utrecht Üniversitesi, Hollanda		1

MERKEZ ÜYELERİNİN MERKEZ AMAÇLARI ÇERÇEVESİNDE KATILDIKLARI BİLİMSEL TOPLANTILAR

Katılan Merkez Üyesi	Toplantının Adı	Düzenlendiği Yer	Tarih	Sunulan Bildirinin Adı
Türkan Haliloğlu	20. Ulusal Biyokimya Kongresi	Nevşehir	29 Ekim - 2 Kasım 2008	“Protein dinamiği”
Viktorya Aviyente	XXII Ulusal Kimya Kongresi	Magosa, KKTC	6-10 Ekim 2008	
Nihan Nugay	XXII Ulusal Kimya Kongresi	Magosa, KKTC	6-10 Ekim 2008	“Preparation of super hips via nanocomposite assemblies in the presence of toughener-intercelant”
Esra Altuntaş	XXII Ulusal Kimya Kongresi	Magosa, KKTC	6-10 Ekim 2008	“yenilenebilir kaynaklardan nanokompozit sentezi”
Sinan Şen	XXII Ulusal Kimya Kongresi	Magosa, KKTC	6-10 Ekim 2008	“Polistiren nanokompozitlerin hazırlanmasında kil modifikasyonunda kullanılan solventin etkisi”
Ç. Özgüç	XXII Ulusal Kimya Kongresi	Magosa, KKTC	6-10 Ekim 2008	“Poli(vinilasetat)-b-poli(n-izopropilakrilamid)diblok kopolimerlerinin sentezi ve karakterizasyonu”
Burcu Aykaç-Fas	ECCB '08 Conference	Cagliari, Sardinia	22-26 Eylül 2008	“A plausible model fort he apo form of cyclic amp receptor protein in E.coli”
Arzu Uyar	ECCB '08 Conference	Cagliari, Sardinia	22-26 Eylül 2008	“Elastic network modeling of type ii restriction endonucleases complexed with cognate and non-cognate DNA”

MERKEZ ÜYELERİNİN MERKEZ AMAÇLARI ÇERÇEVESİNDE KATILDIKLARI BİLİMSEL TOPLANTILAR(Devam)

<i>Katılan Merkez Üyesi</i>	<i>Toplantının Adı</i>	<i>Düzenlendiği Yer</i>	<i>Tarih</i>	<i>Sunulan Bildirinin Adı</i>
Özlem Karahan	2nd Euchems Chemistry Congress	Torino, İtalya	16-20 Eylül 2008	“Modeling the cyclopolymerization of difunctional monomers”
Seda Edizer	2nd Euchems Chemistry Congress	Torino, İtalya	16-20 Eylül 2008	“New dental monomers from α -(chloromethyl) acryloyl chloride”
Zeynep Kürkçüoğlu	Summer School on Molecular Modelling and Drug Design	İstanbul	10-14 Eylül 2008	“Effect of protein flexibility on the binding modes of benzothiazoles to tctim interface”
Nihan Çelebi-Ölçüm	ESPA 2008	Palma de Mallorca, İspanya	2-5 Eylül 2008	“The cycloadditions of cyclopentadiene and cyclohexadiene with crotonyl phosphonate: how do their mechanisms differ”
Burcu Aykaç-Fas	EMBO Biomolecular Simulation Practical Course	Paris	1-8 Temmuz 2008	“Structure and dynamics of catabolite activator protein by molecular modeling and simulations”
Türkan Haliloğlu	ODTÜ Biyoloji Bölüm Seminer Dizisi	Ankara	8 Mayıs 2008	“Protein dynamics”
Bülent Balta	8. Kimyasal Fizik Kongresi	İstanbul	24-25 Nisan 2008	“Claisen rearrangement of aliphatic allyl vinyl ethers in presence of cu-box”
Türkan Haliloğlu	Joint Meeting of the Biophysical Society 52. Annual Meeting & International Biophysic Congress	California, ABD	2-6 Şubat 2008	“Protein-protein interactions: prediction of binding sites in receptor-ligand complexes with gaussian network model”

MERKEZ TARAFINDAN DÜZENLENEN EĞİTİM PROGRAMLARI

Merkez Tarafından Düzenlenen Eğitim Programı Bulunmamaktadır.

SUNULAN DANIŞMANLIK HİZMETLERİ

Merkez Üyelerinin TÜBİTAK, TTGV (Türkiye Teknoloji Geliştirme Vakfı), Avrupa Birliği Çerçeve Programları İçin Yaptıkları Danışmanlık, Proje İzleyiciliği, Hakemlik İle İlgili Faaliyetleri Vardır.

MERKEZ'İN 2009 YILI İÇİN YILLIK ÇALIŞMA PROGRAMI

PRC'de Ağırlıklı Biyolojik Sistemlerde Dizi, Yapı ve İşlev Paradigmasının Anlaşılması Üzerine Paralel Çok Sayıda Disiplinler Arası Proje Birlikte Yürütülmektedir. Bu Alanda Bazı Kavramların Oluşturulması ve Geliştirilmesi Çabalarına 2009 Yılında da Devam Edilecektir. PRC' nin ve BÜ'nün Görünürlüğünün, Bir Mükemmeliyet Merkezi Olarak (Center Of Excellence), Uluslararası Bilimsel Platformda Koruması ve Artarak Devam Etmesi PRC'nin En Önemli Hedeflerindendir.

Performans Değerlendirme Kriterleri

Üretilen Özgün Yayınlar ve Bu Yayınlar Alınan Atıflar,

Çalışmaların Bilimsel Toplantılarda Sunumu ve Geliştirilen Özgün Algoritmaların PRC Web Sayfasından Sunucular veya Hazırlanmış Paket Program ile Alandaki Araştırmacılara Sunulması,

Yurt İçinde ve Dışındaki Gruplar ile Ortak Bilimsel Çalışmaları Başarı ile Yürütebilmek ve Yenilerini Başlatabilmek,

PRC'nin Uluslararası Bilimsel Ağ Yapısı İçinde Konumunun Arttırarak Kuvvetlendirmeye Yol Açacak Faaliyetlerde Bulunmak. Örneğin; Bilimsel Yarışmalarda Yer Almak,

Konuşmacı Olarak Alınan Davetler,

Bilimsel Çalışmalarımızın Başarılı Bir Şekilde Yürütülmesi İçin Yurt İçi ve Dışı Kaynaklardan Hazırlanan Proje Önerileri ile Sağlanan Parasal Destek (Devlet Planlama Teşkilatı (DPT), TÜBİTAK, Avrupa Birliği Çerçeve Programları, NATO, National Institute of Health (NIH), National Scientific Foundation (NSF) Ve Benzeri); Desteklenen Projelerin Sayısı,

Mezun Olan Yüksek Lisans ve Doktora Öğrencilerinin Kariyerlerinin Bir Sonraki Aşamasında- Üniversite, Araştırma Merkezi ve İş Alanları- Edindikleri Konumlar.

MERKEZDE YÜRÜTÜLEN BAŞKA FAALİYETLER / BAŞARILAR

Biyolojik Sistemlerin İşlevlerinin Anlaşılması Kapsamında Geliştirdiğimin Özgün Yöntem ve Yaklaşımları Alandaki Araştırmacıların Kullanımına Sunucular ile Açmaktayız. Son Zamanlarda Geliştirdiğimiz Sunuculardan Biri Hingeprot'dur. Hingeprot Proteinlerin İşlevleri İçin Önemli Olan Esnek Bölgeleri Başarılı Bir Şekilde Tahmin Edebilmektedir.

<http://www.prc.boun.edu.tr/appserv/prc/hingeprot/>

2008 Yılında Hingeprot'u Kullanan Araştırmacıların Sayıları 1000 Civarındır. İngeprot Kullanıcılar Tarafından Kodu (Protein Bilgi Bankası Kodu) Verilen Protein Yapısının Esnek Bölgelerinin Tahmininde PRC'deki Çok İşlemcili Bilgisayar Alt Yapısını Kullanmaktadır.

BİLİMSEL YAYINLAR

Kitap Bölümü

Emekli U., Günasekaran K., Nussinov R., Haliloğlu, T., "What can we learn from highly-connected β -rich structures for structural interface design?", *Nanostructure Design. Methods in Molecular Biology*, Gazit E, Nussinov (Derleyen), 235-253, Humana-Springer Press, 2008.

Jernigan R.L., Yang L., Song G., Kürkçüoğlu, O., Doruker, P., "elastik network models of coarse-grained proteins are effective for studying the structural control exerted over their dynamics", *Coarse-Graining of Condensed Phase and Biomolecular Systems*, G. A. Voth (Derleyen), 237-254, CRC Press/Taylor&Francis Group, 2008.

Makale

Kantarıcı-Çarşıbaşı, N., Haliloğlu, T., Doruker, P., "Conformational transition pathways explored by Monte Carlo simulation integrated with collective modes", *Biophysical Journal*, **95**, 5862-5873, 2008.

Tozluoğlu, M., Karaca, E., Haliloğlu, T. et al., "Cataloging and organizing p73 interactions in cell cycle arrest and apoptosis", *Nucleic Acids Research*, **36**, 5033-5049, 2008.

Haliloğlu, T., Ben-Tal, N., "Cooperative transition between open and closed conformations in potassium channels", *PLOS Computational Biology*, **4**, 1-11, 2008.

Haliloğlu, T., Seyrek, E., Erman, B., "Prediction of binding sites in receptor-ligand complexes with the Gaussian Network Model", *Physical Review Letters*, 100, Article Number 228102, 2008.

Emekli, U., Schneidman-Duhovny, D., Wolfson, H.J., Nussinov, R., Haliloğlu, T., "HingeProt: automated prediction of hinges in protein structures", *Proteins*, **70**, 4, 1219, 2008.

Kürkçüoğlu, O., Doruker, P., Şen, T.Z, Kloczkowski, A., Jernigan, R.L., "The ribosome structure controls and directs mRNA entry, translocation and exit Dynamics", *Physical Biology*, 5, Article Number 046005, 2008.

Cansu, S., Doruker, P., "Dimerization affects collective dynamics of triosephosphate isomerase", *Biochemistry*, **47**, 1358-1368, 2008.

Altuntaş, E., Çaylı, G., Küsefoğlu, S., Nugay, N., "Renewable polymeric nanocomposite synthesis by using renewable functionalized soybean oil based intercalant and matrix", *Designed Monomers and Polymers*, 11, 4, 371-381, 2008.

Altan, M., Yurci, M.E., Nugay, N., "Residual stresses determination in injection molded virgin and recycled HDPE blends : Effects of mechanical properties and morphology", *e-Polymers*, **170**, 1-18, 2008.

Bağcıoğlu, C., Şen, S., Yağcı, Y., Nugay, T., Nugay, N., "Preparation of super HIPS via nanocomposite assemblies in the presence of toughener- intercalant", *e-Polymers*, **97**, 2008.

Bağcıoğlu, C., Altuntaş, E, Şen, S., İşlier, B., Ersoy. O.G, Ersor, N., Nugay, T., Nugay, N., "Exfoliation targeted toughness enhancement in polypropylene-blend-montmorillonite nanocomposites", *Polymer International*, **57**, 12, 1395-1403, 2008.

BASIMDA VEYA YAYINA SUNULAN ESERLER

Haliloğlu, T., Erman, B., "Analysis of Correlations between Energy and Residue Fluctuations in Native Proteins and Determination of Specific Sites for Binding", *Physical Review Letters*, basımda.

Kürkçüoğlu, O., Kürkçüoğlu, Z., Doruker, P., Jernigan, R.L., "Collective dynamics of the ribosomal tunnel revealed by elastic network modeling", *Proteins*, basımda.

Ulutaş B., Haliloğlu T., Bozma I. "Folding Pathways Explored with Artificial Potentials", *Physical Biology*, yayına gönderildi.

Kürkcüoğlu, O., Turgut, O.T., Cansu, S., Jernigan, R.L., Doruker, P. “Exploring Dynamics of Supramolecular Assemblages with Mixed-resolution Elastic Network Model”, *Biophysical Journal*'da yayına gönderildi.

Akten, D., Cansu, S., Doruker, P., “A docking study using atomistic conformers generated via elastic network model for cyclosporin A/cyclophilin A complex”, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*'te yayına gönderildi.

Ozen A., Gonen, M., Alpaydın E., Haliloğlu T. (2008) “Machine Learning Integration Approaches to Predicting the Effect of Single Amino Acid Substitutions on Protein Stability”, *BMC Bioinformatics*, yayına gönderildi