

## MERT GÜR

Misafir Doçent Öğretim Üyesi, Hesaplamalı Yapısal ve Sistem Biyolojisi Bölümü  
Yürütücü Müdür, Hesaplamalı Biyotıp ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı  
Tıp Fakültesi, University of Pittsburgh, ABD

832 Murdoch Building, 3420 Forbes Avenue, Pittsburgh, PA, 15261, USA

Öğretim Üyesi, Doçent, Makina Fakültesi, İstanbul Teknik Üniversitesi

İTÜ Makina Fakültesi, İnönü Caddesi, No.65 Gümüşsuyu 34437 Beyoğlu, İstanbul

[gurme@itu.edu.tr](mailto:gurme@itu.edu.tr), [gurmert@pitt.edu](mailto:gurmert@pitt.edu),

<https://gurlab.itu.edu.tr/en/homepage>, <https://www.csb.pitt.edu/people/faculty/mert-gur/>

Telefon: +1 412 805 0933, Twitter: [@itugurlab](https://twitter.com/itugurlab)

Kısa Biyografi .....	2
Detaylı Biyografi .....	2
Özgeçmiş .....	4
Öğrenim ve Eğitim Bilgisi .....	4
Yurt Dışı İdari Görevler .....	4
Yurt İçi İdari Görevler .....	5
Yurt Dışı Akademik Görevler .....	5
Yurt İçi Akademik Görevler .....	5
İTÜ Komisyon ve Kurul Üyelikleri .....	5
Burslar ve Ödüller .....	6
Lisans ve Lisansüstü Programlarda Verdiği Dersler .....	6
Çalıştay ve Yaz Programlarında Eğitimlik .....	7
Lisans ve Lisansüstü Programlarda Mentörlük .....	7
Yönetilen Tamamlanmış Tezler .....	8
Projeler .....	9
Eserler .....	14
Uluslararası Bilimsel Toplantı Düzenleme .....	19
Editör Kurul Üyeliği .....	19
Dergi Hakemlikleri .....	19
Proje Panelistlik .....	20
Bilimsel Kuruluşlara Üyelikler .....	20
Sosyal Sorumluluk Ve Toplumsal Katkı Faaliyetleri .....	20
Araştırma Alanları .....	21

## KISA BİYOGRAFİ

Doç. Dr. Mert Gür, İstanbul Teknik Üniversitesi (İTÜ) Makina Fakültesinin kadrolu öğretim üyesidir ve University of Pittsburgh (Pitt) Tıp Fakültesi'nde Hesaplamalı Biyotıp ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans programının Yürütücü Müdürlüğünü üstlenmektedir. Lisans derecesini ODTÜ Makina Mühendisliğinden (2006) ve doktorasını Koç Üniversitesi Hesaplamalı Bilim ve Mühendisliği programından (2010) almıştır. Doç. Dr. Gür, Türkiye ve ABD'de içerisinde Pitt, UC Berkeley, Lawrence Berkeley National Lab'ın olduğu çeşitli üst düzey akademik ve araştırma kurumlarında toplamda 16 yıldan fazla biyomoleküler simülasyon ve modelleme deneyimine sahiptir. Nature, Science ve Nature Communications gibi prestijli dergilerde 30'dan fazla makale yayımlamıştır. Doç. Dr. Gür'ün başlıca araştırma alanları Hesaplamalı Yapısal Biyoloji, Moleküler Biyofizik, Moleküler Tıp ve Makina Mühendisliğidir. Türkiye, ABD ve AB tarafından fonlanan 18 farklı projede yürütücü olarak görev aldı. Geniş kapsamlı yöneticilik deneyimi, İTÜ'de Makina Fakültesi Dekan Yardımcılığını ve Fen Bilimleri Enstitüsü Müdür Yardımcılığını kapsamaktadır. Doç. Dr. Gur, İTÜ'de 2.500'den fazla öğrenciye toplamda 42 ders verdi ve ayrıca yurtdışında Pitt Makina Mühendisliği ve Malzeme Bilimi Bölümü'nde lisans ve Pitt Tıp Fakültesi lisansüstü programlarında birçok ders verdi/vermektedir. TÜBA GEBİP, Bilim Akademisi BAGEP, TÜBİTAK Ulusal Lider Araştırmacı ve TÜSEB Aziz Sancar Teşvik ödülü gibi birçok üstün başarı ödülünü ve bursunu kazanmıştır.

## DETAYLI BİYOGRAFİ

Doç. Dr. Mert Gür, 1983 yılında Hamburg (Almanya)'da doğdu. 2006 yılında ODTÜ Makina Mühendisliği Bölümü'nden mezun olup sonrasında Koç Üniversitesi Makina Mühendisliği Yüksek Lisans programına başladı. Yüksek lisans programına devam ederken Koç Üniversitesinde Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik doktora programının açılmasıyla birlikte 2007 senesinde bu doktora programına başladı ve doktora çalışmalarını 3 sene içerisinde tamamlayarak 2010 senesinde mezun oldu. Koç Üniversitesi lisansüstü mezuniyet töreninde lisansüstü öğrencileri adına mezuniyet töreni konuşmasını gerçekleştirdi. Mezuniyetini takiben, akademik çalışmalarına ABD'de devam etti. 2010-2014 seneleri arasında, ABD'nin en iyi Tıp fakültelerinden University of Pittsburgh Tıp Fakültesi'ndeki Hesaplamalı Biyoloji ve Sistem Biyolojisi Bölümünde doktor araştırma görevlisi olarak çalıştı. 2012'de ise, ek olarak, aynı üniversitenin Makina Mühendisliği ve Malzeme Bilimi Bölümü'nde öğretim görevlisi olarak ders verdi. 2014 senesinde, 16 adet Nobel Ödülünün sahibi Lawrence Berkeley National Laboratory'nin Yapay Fotosentez Merkezinde doktor araştırma görevlisi olarak çalışmaya başladı. Bu görev kapsamında, akademik çalışmaların önemli bir bölümünün dünyanın en iyi üniversitelerinden University of California (UC) Berkeley'de gerçekleştirdi. Doç. Dr. Mert Gür, 2015 senesinde Türkiye'ye dönerek İTÜ Makina Fakültesi Makina Mühendisliği Bölümüne yardımcı doçent olarak göreve başladı. Burada 2021 senesinde Doçent unvanını aldı ve 2022 senesinde ise Doçent kadrosuna atandı. 2016 senesinin yazında Pittsburgh Üniversitesi Tıp Fakültesindeki Hesaplamalı Biyoloji ve Sistem Biyolojisi bölümünde iki ay süreyle, 2017 senesinin yazında ise UC Berkeley'de Kimya Fakültesi'nde üç ay süreyle misafir bilim insanı olarak projelerde görev aldı ve akademik çalışmalar gerçekleştirdi. Halen, İTÜ Makina Fakültesinde Doçent olarak görev yapmaktadır. Ağustos 2022'den başlayarak ABD'deki University of Pittsburgh Tıp Fakültesinde misafir doçent öğretim üyesi olarak görevlendirilmiş olup akademik çalışmalarını sürdürmektedir. Söz konusu akademik ziyaret kapsamında, University of Pittsburgh Hesaplamalı Biyotıp ve Biyoteknoloji yüksek lisans programının Yürütücü Müdürlüğünü de gerçekleştirmektedir.

Doç. Dr. Mert Gür, yurtiçi ve yurtdışında birçok idari görevlerde bulundu. 2018-2020 yılları arasında İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü'nde Müdür Yardımcısı olarak, 2020-2022 yılları arasında İTÜ Makina Fakültesi'nde Dekan Yardımcısı olarak görev yaptı. 2020 yılında altı ay süreyle Müdür Yardımcılığı ve Dekan Yardımcılığı görevlerini eşzamanlı yürüttü. Bu kapsamda Doç. Dr. Mert Gür'ün toplamda beş yıllık Dekan Yardımcılığı ve Müdür Yardımcılığı yöneticilik deneyimi bulunmaktadır. Doç. Dr. Mert Gür, Makina Fakültesi Dekan Yardımcılığı görevini, University of Pittsburgh Tıp Fakültesi'nde misafir öğretim üyeliği görevine başlayana kadar sürdürdü. Bu görevlere ek olarak, Doç. Dr. Mert Gür, İTÜ'de toplamda 19 farklı komisyon ve kurulda üyelik yaptı. Ayrıca, makina mühendisliği yandal danışmanı ve çift anadal eş-danışmanı görevlerini de üstlendi. 2019 yılından bu yana Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi (UHeM) müdürüne iş geliştirme danışmanı olarak ve 2020 yılından beri Kritik ve Fonksiyonel Malzeme Teknolojileri Uygulama ve Araştırma Merkezi yönetim kurulu üyesi olarak görev almaktadır. 2021 yılında Fakülte Kuruluna Doçent Temsilcisi olarak seçilmiş ve halen bu görevi sürdürmektedir. Doç. Dr. Mert Gür, yurt içindeki kapsamlı idari

tecrübelerinin yanı sıra yurt dışında da önemli idari deneyime sahiptir. Şu an, University of Pittsburgh Tıp Fakültesi'nin lisansüstü eğitiminde yer alan beş yüksek lisans programdan biri olan Hesaplamalı Biyotıp ve Biyoteknoloji yüksek lisans programında Yönetici Müdürlük görevini sürdürmektedir.

Doç. Dr. Gür, hem yurt içinde hem de yurt dışında geniş eğitim, öğretim ve mentörlük deneyimine sahiptir. 2015 ile 2022 yılları arasında İTÜ'de dokuz lisans ve dört lisansüstü programında toplamda 42 ders vererek, 2.528 öğrenciye ders anlattı. Bu dersler arasında; Termodinamik, Mühendislik Biyolojisi, Olasılık ve İstatistik, İleri Isı ve Kütle Geçişi, Biyomoleküler Sistemlerin Termodinamiği ve Isıl Sistemlerin İstatistiksel Termodinamiği gibi geniş bir konu yelpazesini dağılmış 18 farklı ders bulunmaktadır. İTÜ'de yılda ortalama 6 ders vererek her yıl 361 öğrenciye ders anlatmıştır; bu ders yükü, öğretim üyesi olduğu Makina Fakültesi ortalama ders yükünün önemli ölçüde üzerinde bir öğretim katkısıdır. Doç. Dr. Gür, yurt içine ek olarak ABD'de de farklı bölümlerde ve programlarda önemli ders verme tecrübesi bulunmaktadır. 2012'de University of Pittsburgh Makina Mühendisliği ve Malzeme Bilimi Bölümü'nde Lisans Programında ders verdi. 2023 yılından beri University of Pittsburgh'un Hesaplamalı Biyotıp ve Biyoteknoloji yüksek lisans programında ve University of Pittsburgh'un Carnegie Mellon University ile ortak Hesaplamalı Biyoloji doktora programında ders vermektedir. Doç. Dr. Gür, başta İTÜ Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji, Makina Mühendisliği, Malzeme ve İmalat ve Isı-Akışkan lisans ve lisansüstü programları olmak üzere bugüne kadar, 9 yüksek lisans ve 20 lisans öğrencisine danışmanlık ve mentörlük yapmıştır. Mevcut durumda, 2 lisans, 3 yüksek lisans ve 5 doktora öğrencisine danışmanlık yapmaktadır.

Birçok yurt içi ve yurt dışı projenin yürütücülüğünü yapan Doç. Dr. Gür, dünyanın en önde gelen saygın dergilerinde yayınlar yapmaktadır ve çok sayıda prestijli ödüllerin sahibidir. Doç. Dr. Gür, İTÜ'de ilk 7 sene içerisinde (2015-2022) toplam 2.338.775\$ değerinde ulusal ve uluslararası dış kaynak ve 30.596\$ değerinde iç kaynak temin etti. Mert Gür'ün yurt dışında katılmış olduğu proje sayısı 6 olup İTÜ'de bulunduğu sürede UC Berkeley, University of Pittsburgh, UC Davis (ABD) ve MRC (İngiltere) ile iş birliği içerisinde gerçekleşen TÜBİTAK, TÜBA ve PRACE-Partnership for Advanced Computing in Europe (Avrupa Birliği) ve COVID-19 HPC Consortium (ABD) destekli ve yürütücüsü olduğu 6 uluslararası projeyi başarıyla tamamladı. Şu an TÜBİTAK destekli 4 projenin (TÜBİTAK 2247-A, 2501, 1001 ve 1003, UC Berkeley, Çapa Tıp Fakültesi ve Bahçeşehir Üniversitesi Tıp Fakültesi ile iş birliği) yürütücülüklerini yapmaktadır.

Doç. Dr. Gür'ün *Nature*, *Science* ve *Nature Communications* gibi prestijli uluslararası dergilerde ~30 yayını, ulusal dergilerde 2 yayını, 2 tam metinli konferans bildirisi ve 2 kitap bölümü mevcuttur. Doç. Dr. Gür, 2015 yılında TÜBİTAK 2232- Yurda Dönüş Araştırma Burs Programını, 2016 yılında Türkiye Bilimler Akademisi (TÜBA) tarafından verilen Üstün Başarılı Genç Bilim İnsanı Ödülünü (GEBİP), 2022 yılında Bilim Akademisi tarafından verilen Genç Bilim İnsanları Ödül Programını, 2022 yılında TÜBİTAK tarafından verilen 2247-A Ulusal Lider Araştırmacılar Programını ve 2023 yılında Türkiye Sağlık Enstitüleri Başkanlığı (TÜSEB) tarafından verilen Aziz Sancar Teşvik Ödülünü kazanmıştır. Mert Gür'ün çalışmaları TRT Haber, Habertürk ve Milliyet gibi ulusal platformlarda ve HPC Wire ve PRACE Digest gibi uluslararası platformlarda 10'u aşkın sayıda haber yapılmıştır.

Doç. Dr. Gür, moleküler dinamik simülasyonları ve kaba taneli elastik ağ modellerini, biyoloji, biyoteknoloji, biyotıp, ilaç ve sağlık bilimlerindeki kritik bilimsel problemlere yenilikçi çözümler getirme konusunda 16 yılı aşkın deneyime sahiptir. Uzmanlık alanı, enzimlerden motor proteinlerine ve hücre zarı proteinlerine kadar birçok protein sınıfını kapsamaktadır. Ayrıca peptit tasarımı ve moleküler dinamik simülasyonları için yeni yöntemlerin geliştirilmesinde de derinlemesine bilgiye sahiptir. Doç. Dr. Gür, standarttan birkaç mertebe daha büyük biyomoleküler sistemlerin moleküler dinamik simülasyonlarını gerçekleştirme, normalden çok daha uzun moleküler dinamik simülasyonları gerçekleştirme ve bu simülasyonlardan üretilen büyük veriyi işleme konusunda da son derece yüksek tecrübeye ve uzmanlığa sahiptir. Geniş veri setlerini analiz etme, protein-protein etkileşimlerini inceleme ve peptit tabanlı ilaçlar tasarlama konusundaki geniş kapsamlı deneyimiyle alandaki konumunu pekiştirmiştir. Bugüne dek, Doç. Dr. Gür ve ekibi, Anton, Summit (ABD), Mahti (Finlandiya) ve Marconi100 (İtalya) gibi dünyanın önde gelen Tier-0 süper bilgisayarlarında 350 milyon çekirdek saatinden fazla MD simülasyonu gerçekleştirmiştir.

Doç. Dr. Mert Gür evli ve iki çocuk babasıdır.

## ÖZGEÇMİŞ

**İsim** Doç. Dr. Mert Gür  
**Görev** Misafir Doçent Öğretim Üyesi,  
Hesaplamalı Yapısal ve Sistem Biyolojisi  
Bölümü  
Yürütücü Müdür, Hesaplamalı Biyotıp ve  
Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı  
Tıp Fakültesi, University of Pittsburgh,  
ABD  
Öğretim Üyesi, Doçent, Makina  
Fakültesi, İstanbul Teknik Üniversitesi  
**Doğum Tarihi/Yeri** 1983/ Hamburg, Almanya  
**Adres:** University of Pittsburgh School of Medicine  
Department of Computational & Systems  
Biology, 832 Murdoch Building, 3420 Forbes  
Avenue, Pittsburgh, PA, ABD  
İTÜ Makina Fakültesi, İnönü Caddesi, No.65 Gümüşsuyu 34437 Beyoğlu,  
İstanbul  
**Telefon:** +90 212 293 13 00  
**E-Posta Adresi:** [gurme@itu.edu.tr](mailto:gurme@itu.edu.tr), [gurmert@pitt.edu](mailto:gurmert@pitt.edu)  
**Medeni Hali:** Evli ve İki Çocuk Babası



**Faks:** +90 212 245 07 95  
**Web Adresi:** [gurlab.itu.edu.tr](http://gurlab.itu.edu.tr)

### ÖĞRENİM VE EĞİTİM BİLGİSİ

- 2022 – 2023 Springboard Öğretim Üyesi Oryantasyon ve Eğitim Programı,  
Office of Academic Career Development, Health Sciences, **University of Pittsburgh**
- 2014 – 2015 **Doktora Sonrası Araştırma**, Joint Center for Artificial Photosynthesis, **Lawrence Berkeley National Laboratory**-University of California, Berkeley
- 2010 – 2014 **Doktora Sonrası Araştırma**, Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, **University of Pittsburgh**  
Danışman: Prof. Dr. İvet Bahar
- 2010 **Doktora**, Hesaplamalı Bilimler ve Mühendislik Doktora Programı, **Koç Üniversitesi**  
Tez Danışmanı: Prof. Dr. Burak Erman
- 2006 – 2007 **Yüksek Lisans Çalışması**, Makina Mühendisliği Yüksek Lisans Programı, **Koç Üniversitesi** (Yüksek lisansını tamamlamadan doktora programına geçmiştir.)
- 2006 **Lisans**, Makina Mühendisliği Bölümü, **Orta Doğu Teknik Üniversitesi**  
Mentör: Prof. Dr. Sadık Kakaç

### YURT DIŞI İDARİ GÖREVLER

- 2023 –Bugün **Yürütücü Müdür (Executive Director)**, Computational Biomedicine & Biotechnology Masters Program, Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh (Misafir Doçent Öğretim Üyesi olarak bulunduğu süre içerisinde ve akademik ziyaret kapsamında görevi yürütmektedir.)

## YURT İÇİ İDARİ GÖREVLER

- 2020 – 2022 **Dekan Yardımcısı**, Makina Fakültesi, İTÜ  
*Doç. Dr. Mert Gür 2020 senesinde 7 ay süre ile hem Makina Fakültesi Dekan Yardımcılığı görevini hem de Fen Bilimleri Enstitüsü Müdür Yardımcılığı görevlerini sürdürmüştür.*
- 2021 – Bugün **Fakülte Kurulu Doçent Temsilcisi**, Makina Fakültesi Kurulu, İTÜ
- 2020 – Bugün **Yönetim Kurulu Üyesi**, Kritik ve Fonksiyonel Malzeme Teknolojileri Uygulama ve Araştırma Merkezi, İTÜ
- 2019 – 2021 **Üye**, Bilimsel Araştırma Projeleri (BAP) Birimi, İTÜ
- 2019 – Bugün **Danışma Konseyi Üyesi ve Merkez Müdürünün İş Geliştirme Danışmanı**, Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi (UHeM), İTÜ
- 2018 – 2020 **Müdür Yardımcısı**, Fen Bilimleri Enstitüsü, İTÜ
- 2015 – Bugün **Yönetici**, Biyomoleküler Mühendislik Laboratuvarı

## YURT DIŞI AKADEMİK GÖREVLER

- 2023 – Bugün **Yardımcı Direktör (Associate Director)**, Training and Experimentation in Computational Biology (TECBio) Research Experiences for Undergraduates (REU) Program
- 2022 – Bugün **Misafir Doçent Öğretim Üyesi (Visiting Associate Professor)**, Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh  
Davet Eden: Prof. Dr. İvet Bahar
- 2017 **Misafir Bilim İnsanı (Visiting Research Scholar)**, Department of Chemistry, College of Chemistry, University of California, Berkeley  
Davet Eden: Prof. Dr. Omar M. Yaghi
- 2016 **Misafir Bilim İnsanı (Visiting Faculty Scholar)**, Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh  
Davet Eden: Prof. Dr. İvet Bahar
- 2014 – 2015 **Doktor Araştırma Görevlisi (Postdoctoral Fellow)**, Joint Center for Artificial Photosynthesis, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California
- 2010 – 2014 **Doktor Araştırma Görevlisi (Postdoctoral Associate)**, Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh
- 2012 – 2012 **Doktor Öğretim Görevlisi (Lecturer)**, Department of Mechanical Engineering and Material Science, Swanson School of Engineering, University of Pittsburgh

## YURT İÇİ AKADEMİK GÖREVLER

- 2021 – Bugün **Doçent**, Makina Mühendisliği Bölümü, İTÜ
- 2019 – Bugün **Danışman**, Aselsan Akademi, Aselsan
- 2019 – 2019 **Misafir Öğretim Üyesi**, YÖK Temel Bilimler Üstün Başarılılar Programı (TEBİP), İstanbul Üniversitesi
- 2015 – 2021 **Doktor Öğretim Üyesi**, Makina Fakültesi, İTÜ
- 2007 – 2010 **Araştırma Görevlisi**, Fen Bilimleri Enstitüsü, Koç Üniversitesi
- 2006 – 2007 **Araştırma Görevlisi**, Makina Mühendisliği Bölümü, Koç Üniversitesi

## İTÜ KOMİSYON VE KURUL ÜYELİKLERİ

- 2022 – Bugün **Akademik Kurul Üyesi**, Malzeme ve İmalat Lisansüstü Programı
- 2021 – Bugün **Üye**, Uluslararası İlişkiler Komisyonu

2021 – Bugün	Üye, Makina Fakültesi Web Komisyonu
2021 – Bugün	Üye, Uluslararası Derecelendirme Koordinatörlüğü
2020 – Bugün	Üye, Kalite Komisyonu
2020 – Bugün	Üye, İTÜ Makina Fakültesi Kalite Komisyonu
2020 – Bugün	Üye, İTÜ Makina Fakültesi Erasmus Komisyonu
2020 – 2021	Üye, Uluslararası Derecelendirme Birimi
2019 – 2021	Üye, Bilimsel Araştırma Projeleri (BAP) Komisyonu
2018 – 2020	Üye, Uluslararasılaşma Strateji Çalışma Grubu
2018 – 2020	Üye, Enstitüler Arası Otomasyon Uygulaması Komisyonu
2018 – Bugün	Üye, Sağlık ve Mühendislik Bilimleri İnsan Araştırmaları Etik Kurulu (SM-INAREK)
2018 – 2019	Üye, Havuz Derslerinin Online Olarak Verilmesi Çalışma Komisyonu
2017 – 2020	<b>Yandal Danışmanı</b> , Makina Fakültesi, Makina Mühendisliği Bölümü
2017 – 2020	<b>Eş Danışman</b> , Makina Fakültesi Çift Anadal Programı
2017 – Bugün	<b>Akademik Kurul Üyesi</b> , Moleküler Biyoloji, Genetik ve Biyoteknoloji Lisansüstü Programı
2017 – Bugün	Üye, Makina Fakültesi Tanıtım Komisyonu
2016 – Bugün	Üye, Makina Mühendisliği Programı Kalite Güvence ve ABET Komisyonu
2015 – 2020	<b>Başkan Yardımcısı</b> , Makina Fakültesi İntibak Komisyonu
2015 – Bugün	<b>Akademik Kurul Üyesi</b> , Isı-Akışkan Lisansüstü Programı
2015 – Bugün	<b>Akademik Kurul Üyesi</b> , Makina Mühendisliği Lisansüstü Programı

### BURLAR VE ÖDÜLLER

2023	<b>Aziz Sancar Teşvik Ödülü</b> , Türkiye Sağlık Enstitüleri Başkanlığı (TÜSEB)
2023	<b>Akademik Performans Ödülü</b> , İstanbul Teknik Üniversitesi
2022	<b>Ulusal Lider Araştırmacılar Programı</b> (2.166.500 TL, ~\$146,121), Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK)
2022	<b>Genç Bilim İnsanları Ödül Programı (BAGEP)</b> , Bilim Akademisi
2016	<b>Üstün Başarılı Genç Bilim İnsanı Ödülü (GEBİP)</b> , Türkiye Bilimler Akademisi (TÜBA)
2015	<b>2232 – Yurda Dönüş Araştırma Burs Programı</b> (78.000 TL, ~\$41,327.90), TÜBİTAK
2010	<b>Nature Publishing Group Award (Travel grant)</b> , Nature Publishing Group, ABD

### LİSANS VE LİSANSÜSTÜ PROGRAMLARDA VERDİĞİ DERSLER

*İTÜ'de bulunduğu 7 sene içerisinde (2015-2022), 42 ders kapsamında 2500'den fazla öğrenciye ders verdi. Bu çerçevede, senede ortalama 360'ten fazla öğrenciye 6 ders verdi. Makina Mühendisliği lisans ve doktora programına 3 yeni ders hazırlayarak (Biyomoleküler Sistemlerin Termodinamiği, Statistical Thermodynamics of Thermal Systems, Nanomakinaların Temelleri ve Uygulamaları) ders çeşitliliği konusunda katkı yaptı. Ayrıca ABD'de University of Pittsburgh'da 2 farklı bölümde derslere girmiş ve girmektedir.*

#### Computational Biomedicine and Biotechnology Masters Program, Integrative Systems Biology Doktora Program, University of Pittsburgh

22. MSCBIO 2025: Introduction to Bioinformatics Programming in Python (2023 Güz, 14 öğrenci)

#### Computational Biomedicine and Biotechnology Masters Program, University of Pittsburgh

21. CoBB 2010: Foundations in Computational Biology (2023 Güz, 5 öğrenci)

#### Joint Carnegie Mellon-University of Pittsburgh Ph.D. Program in Computational Biology

20. MSCBIO 2030: Introduction to Computational Structural Biology (2024 Bahar)

19. MSCBIO 2041: Cellular & Systems Modeling dersinin bir bölümünü anlatmıştır (2023 Spring, 20 öğrenci)

#### Makina Mühendisliği Doktora Programı, İstanbul Teknik Üniversitesi

18. MAK 692E: Statistical Thermodynamics of Thermal Systems (2021 Güz, 3 Öğrenci; 2020 Güz, 7 Öğrenci; 2018 Bahar, 6 Öğrenci)-Aselsan Akademi

#### **Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı, İstanbul Teknik Üniversitesi**

17. MBG 532: Biyoinformatik (2021 Güz, 15 Öğrenci; 2020 Güz, 28 Öğrenci; 2019 Güz, 16 Öğrenci; 2018 Güz, 11 Öğrenci; 2017 Güz, 18 Öğrenci)

#### **Isı-Akışkan Yüksek Lisans Programı, İstanbul Teknik Üniversitesi**

16. MIA 504: İleri Isı ve Kütle Geçişi (2020 Bahar, 5 Öğrenci; 2019 Bahar, 11 Öğrenci)-Aselsan Akademi

#### **Makina Fakültesi, İstanbul Teknik Üniversitesi**

15. MAK 4079: Biyomoleküler Sistemlerin Termodinamiği (2022 Bahar, 17 Öğrenci; 2020 Bahar, 89 Öğrenci; 2019 Bahar, 26 Öğrenci)
14. DAN 102: Girişimcilik ve Kariyer Danışmanlığı (2022 Bahar, 377 Öğrenci)
13. DAN 301: Kariyer Danışmanlık (2020 Bahar, 247 Öğrenci)
12. DAN 101: Akademik Danışmanlık (2021 Güz, 63 Öğrenci; 2020 Güz, 247 Öğrenci)
11. MAK 211E: Probability and Statistics (2019 Güz, 75 Öğrenci; 2018 Güz, 74 Öğrenci)
10. MAK 215: Termodinamik I (2019 Güz, 75 Öğrenci; 2018 Güz, 93 Öğrenci 2019 Bahar, 88 Öğrenci)
9. MAK 218: Termodinamik ve Isı İletimi (2018 Bahar, 56 Öğrenci; 2017 Bahar, 46 Öğrenci; 2016 Bahar, 46 Öğrenci)
8. MAK 226: Termodinamik II (2018 Bahar, 75 Öğrenci)
7. TER 201E: Thermodynamics (2018 Yaz, 10 Öğrenci; 2017 Güz, 58 Öğrenci; 2016 Güz, 54 Öğrenci; 2015 Güz, 51 Öğrenci)
6. TER 206: Termodinamik II (2017 Bahar, 53 Öğrenci)
5. BIO 102: Mühendislik Biyolojisi (2017 Bahar, 129 Öğrenci; 2016 Bahar, 129 Öğrenci; 2015 Güz, 38 Öğrenci)
4. TER 205: Termodinamik I (2017 Güz, 71 Öğrenci)
3. MAK 370: Uygulamalı Isı Geçişi (2016 Güz, 40 Öğrenci)

#### **YÖK Temel Bilimler Üstün Başarılılar Programı (TEBİP), İstanbul Üniversitesi**

2. TEBKP1-2: Kişisel Proje I (2019 Bahar)

#### **Department of Mechanical Engineering and Material Science, University of Pittsburgh, ABD**

1. MEMS 1065: Thermal System Design (2012 Bahar, 50 Öğrenci)

### **ÇALIŞTAY VE YAZ PROGRAMLARINDA EĞİTMENLİK**

- |      |   |
|------|---|
| 2023 | Journal Club, Training and Experimentation in Computational Biology (TECBio), Lisans öğrenciler |
| 2022 | Hands on session, CCPBioSim Training Week 2022-Workshop on ProDy, Lisansüstü öğrenciler         |

### **LİSANS VE LİSANSÜSTÜ PROGRAMLARDA MENTÖRLÜK**

*İTÜ Makina Mühendisliği bölümünde 4 yüksek lisans, Moleküler Biyoloji Genetik ve Biyoteknoloji bölümünde 9 yüksek lisans, 6 doktora öğrencisine mentörlük yapmış olup, ayrıca çeşitli mühendislik bölümlerinden 20 lisans öğrencisine danışmanlık yapmış ve öğrencilerin Gür Biyomoleküler Mühendislik Laboratuvarında bilimsel araştırmalara katılmalarına imkan sağlamıştır. Bir diğer yandan, İTÜ başta olmak üzere çeşitli üniversitelerden 19 doktora, 5 yüksek lisans öğrencisinin tez izleme komitelerinde görev almıştır.*

#### **Doktora Öğrencileri**

**İstanbul Teknik Üniversitesi, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Bölümü**

2023 – Bugün	Ayla Eren, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2022 – Bugün	Clara Xazal Buran, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2022 – Bugün	Reyhan Metin Akkaya, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2020 – Bugün	Mert Gölcük, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2020 – 2022	Elhan Taka, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2020 – Bugün	Sema Zeynep Yılmaz, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı

### **Yüksek Lisans Öğrencileri**

#### **İstanbul Teknik Üniversitesi, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Bölümü**

2022 – Bugün	Ebru Tuncay, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2022 – Bugün	Cihan Uğur Otçu, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2022 – 2022	Ayten Dilara Gürsel, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2022 – 2020	Clara Xazal Buran, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2022 – 2020	Onur Özer, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2020 – 2018	Ceren Kılınç, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2020 – 2018	Mert Gölcük, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2020 – 2018	Elhan Taka, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı
2020 – 2018	Sema Zeynep Yılmaz, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Programı

#### **İstanbul Teknik Üniversitesi, Makina Fakültesi**

2022 – 2023	Mert Kemal Doğru, Malzeme ve İmalat Programı
2022 – 2018	Halil Kaya, Isı Akışkan Programı
2020 – Bugün	Emre Fındık, Isı Akışkan Programı
2019 – 2017	Mohammad Amin Salehi Tabrizi, Isı Akışkan Programı

## **YÖNETİLEN TAMAMLANMIŞ TEZLER**

### **Makina Mühendisliği Anabilim Dalı**

- Halil Kaya, Farklı eğitim açılarında delikli dikdörtgen kanatlı ısı alıcılardan doğal taşınım ile ısı transferinin sayısal yöntemler ile incelenmesi. İstanbul Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Makina Mühendisliği Anabilim Dalı, Isı Akışkan Yüksek Lisans Programı, (18.02.2022)
- Mohammad Amin Salehi Tabrizi, Motor proteinlerinin bilgisayar ortamındaki çekme deneylerinin moleküler dinamik simülasyonlarıyla gerçekleştirilmesi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Makina Mühendisliği Anabilim Dalı, Isı Akışkan Yüksek Lisans Programı, (02.09.2019)

### **Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Anabilim Dalı**

- Clara Xazal Buran, MutS $\alpha$  heterodimerinin yabancıl tip ve mutant formları arasındaki yapısal farklılıklarının moleküler dinamik simülasyonları ile incelenmesi. İstanbul Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Anabilim Dalı, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı, (01.08.2022), (Tez savunmasını başarıyla tamamlamıştır.)
- Onur Özer, SARS-CoV-2 için yeni küçük inhibitör moleküllerin tahmini: Moleküler yanıştırma yöntemiyle SARS-CoV-2 spike proteini, insan ACE2 proteini ve SARS-CoV-2 NsP16 hedeflenmesi. İstanbul Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Anabilim Dalı, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı, (2022)
- Ceren Kılınç, SARS-CoV-2 spike glikoproteininin kapalı ve açık halleri arasındaki konformasyonel geçişin moleküler dinamik simülasyonları kullanılarak araştırılması. İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Anabilim Dalı, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı, (17.08.2020) (**Bu tez koronavirüs konusunda Türkiye'deki ilk üç lisansüstü tezden biridir.**)



3. Mert Gölcük, Dinein motor proteininin kuvvet kolu hareketinin atomik çözünürlükte modellenmesi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Anabilim Dalı, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı, (20.01.2020)
2. Elhan Taka, Membran proteinlerinin ve dinein-ATP etkileşiminin termodinamik analizleri, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Anabilim Dalı, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı, (13.01.2020)
1. Sema Zeynep Yılmaz, Moleküler dinamik simülasyonları kullanılarak lösin taşıyıcı proteinlerin ve dinein motor proteinlerin termodinamik özelliklerinin incelenmesi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Anabilim Dalı, Moleküler Biyoloji-Genetik ve Biyoteknoloji Yüksek Lisans Programı, (13.01.2020)

## PROJELER

### Proje Yürütücüsü Olarak Görev Aldığı Projeler

18. Silyer Vuruş Sırasında Dineinlerin Kendi Kendine Koordinasyonu  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK)  
Proje Bütçesi: 900,000 TL, \$49,247 (Projenin kabul edildiği tarihteki dolar kuru)  
Kurum Hissesi: 0,00 TL, \$0,00  
Proje No: 122N045 (2501-ABD Ulusal Bilim Vakfı (NSF) ile İkili İş Birliği Programı)  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Yıldız (UC Berkeley)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2022-2025
17. Dineinin Mikrotübüle Bağlanması ve Güç Strokunun Moleküler Ölçekte Modellenmesi.  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: TÜBİTAK  
Proje Bütçesi: ~2.474.000 TL, ~\$133,951.4  
Kurum Hissesi: 199.000,00 TL, \$13.414  
Proje No: 121C283, 2247-A Ulusal Lider Araştırmacılar Programı  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2022-2025
16. Modeling the Regulation of Motors by Microtubule-Associated Proteins.  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: Partnership for Advanced Computing in Europe, PRACE (Avrupa Birliği)  
Proje Bütçesi: 117.662.006 Saatlik İşlemci Çekirdeği (~\$366.415,1 değerinde hesaplama kaynağı; bütçe hesaplaması için TRUBA'daki saatlik işlemci çekirdeği bedeli kullanılmıştır.)  
Proje No: 2021250119  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Yıldız (UC Berkeley), Eva Nogales (UC Berkeley)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2022-2023
15. Identification and Reengineering of Effective Nanobodies Against SARS-CoV-2 Omicron Variant  
Proje Görevi: Yürütücü (Co-PI)  
Destekleyen Kurum: COVID-19 High Performance Computing Consortium (USA)  
Proje Bütçesi: 30,000,000 Saatlik İşlemci Çekirdeği (~\$112,801.8 değerinde hesaplama kaynağı.)  
Proje No: TG-BIO210181  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Yıldız (UC Berkeley)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2021- 2022

14. The Mechanism and Energetics of Dynein's Powerstroke (EnDy)  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: DECI-17 (Distributed European Computing Initiative), PRACE-Partnership for Advanced Computing in Europe (European Union)  
Proje Bütçesi: 11.171.484,16 Saatlik İşlemci Çekirdeği (~\$106.554.8 değerinde hesaplama kaynağı)  
Proje No: 17DECI0080  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2021 – 2022
13. Sitoplazmik Dinein Motor Proteininin Mekanokimyasal Çevriminin Mekanizmasının Modellenmesi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: İstanbul Teknik Üniversitesi BAP  
Proje Bütçesi: 74.997,26 TL, \$10.257,16  
Proje No: MGA-2021-42803  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2021 – 2022
12. Hücre Penetran Peptitlerden Türetilmiş Behçet Hastalığına Yönelik İlaç Adaylarının Tasarlanması  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: TÜBİTAK  
Proje Bütçesi: 808.789,68 TL, ~\$123,296.20  
Kurum Hissesi: 180.000,00 TL, \$30.151  
Proje No: 119Z553 (TÜBİTAK 1001 Projesi)  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Gül (İstanbul Üniversitesi-Çapa Tıp Fakültesi), Sema Sırma Ekmekçi, Neslihan Abacı (Aziz Sancar Deneysel Tıp Araştırma Enstitüsü)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2020 – 2023
11. Kolon ve Meme Kanserlerinde Erken Uyarı Sistemi Oluşturulması ve Kişisel Sağlık Sistemi (E-Nabız) Veri Tabanına Entegrasyonu Projesi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: TÜBİTAK  
Proje Bütçesi: 2,111,990,36 TL, ~\$378,023  
Kurum Hissesi: 323.605,00 TL, \$54.205  
Proje No: 318S129 (TÜBİTAK 1003 Projesi)  
Proje Ekibi: Mert Gür, Gizem Dinler Doğanay (İTÜ)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2020 – 2023
10. Exploring Nanobody Inhibitory Mechanism against SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein Using Molecular Dynamics Simulations, (UC Berkeley – İTÜ İkili İş Birliği)  
Proje Görevi: Yürütücü (Co-PI)  
Destekleyen Kurum: COVID-19 High Performance Computing Consortium (Amerika Birleşik Devletleri)  
Proje Bütçesi: 46.000.000,00 Saatlik İşlemci Çekirdeği (~\$356,354.1 değerinde hesaplama kaynağı)  
Proje No: TG-BIO200053  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Yıldız (UC Berkeley)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2020 – 2021

9. Exploring Binding and Fusion Mechanism of SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein Using Molecular Dynamics Simulations, (UC Berkeley – İTÜ İkili İş Birliği)  
Proje Görevi: Yürütücü (Co-PI)  
Destekleyen Kurum: COVID-19 High Performance Computing Consortium (Amerika Birleşik Devletleri)  
Proje Bütçesi: 25.000.000,00 Saatlik İşlemci Çekirdeği (~ \$310.060,00 değerinde hesaplama kaynağı)  
Proje No: TG-MCB200070  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Yıldız (UC Berkeley)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2020 – 2021
8. Modelling the Mechanochemical Cycle of Cytoplasmic Dynein Machinery  
Proje görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: Partnership for Advanced Computing in Europe, PRACE (Avrupa Birliği)  
Proje Bütçesi: 48.400.000,00 Saatlik İşlemci Çekirdeği (~\$211.959,6 değerinde hesaplama kaynağı )  
Proje No: 2019215144  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Yıldız (UC Berkeley), Andrew P. Carter (MRC Laboratory of Molecular Biology)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2020 – 2021
7. Exploring differences in binding characteristics between HLA-B51 and HLA-B52  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: NVIDIA  
Proje Bütçesi: NVIDIA TitanV GPU, ~\$3,000  
Proje No: NVIDIA Hardware Grant Program  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2019 – 2019
6. Siklofilin 40 Enziminin Termodinamik Özelliklerine Mutasyon ve Peptid Bağlanması Etkilerinin Modellenmesi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: İstanbul Teknik Üniversitesi BAP  
Proje Bütçesi: 50.000 TL, ~\$14.411,48  
Proje No: MGA-2018-41072  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2018 – 2019
5. Nörolojik İlaçlara Hedef Olan Hücre Zarı Proteinlerinin İşlevinde Hücre Zarının Etkisi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: Türkiye Bilimler Akademisi (TÜBA)  
Proje Bütçesi: 60.000 TL, \$19.339,86  
Proje No: 2016 TÜBA GEBİP Ödülü  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2016 – 2019
4. Çoklu Ölçekli Simülasyonlardan Elde Edilen LeuT Dinamiği Bilgisi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: İTÜ BAP  
Proje Bütçesi: 5.500 TL, \$2.148 (Seyahat Desteği)  
Proje No: 38588 (Link- Uluslararası İşbirliğini Destekleme Programı Projeleri)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2015 – 2018

3. Sitoplazmik Dinein Motor Proteininin Mekanokimyasal Döngüsünün Mekanik ve Enerjetik Açından Modellenmesi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: TÜBİTAK  
Proje Bütçesi: 357.006 TL, \$126.208,51  
Kurum Hissesi: 107.442,00 TL, \$38.372  
Proje No: 215Z398 (TÜBİTAK 3501 Projesi)  
Proje Ekibi: Mert Gür, Ahmet Yıldız (UC Berkeley)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2016 – 2019
2. Sitoplazmik Dinein Motor Proteininin Mekanokimyasal döngüsünün Mekanik ve Enerjik Açından Modellenmesi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: İTÜ BAP  
Proje Bütçesi: 10.094 TL, \$3.780 (Seyahat Desteği)  
Proje No: 38777 (Uluslararası Araştırma İşbirliği Projeleri)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2015 Yaz
1. Nörolojik İlaçlara Hedef Olan Hücre Çeperi Proteinlerinin İşlevsel/Fonksiyonel Mekanizmalarının Modellenmesi ve İncelenmesi  
Proje Görevi: Yürütücü  
Destekleyen Kurum: TÜBİTAK  
Proje Bütçesi: 128,000 TL, \$11.566,04 Araştırma Bütçesi + \$29.761 Burs  
Kurum Hissesi: 0,00 TL, \$0,00  
Proje No: 115C038 (TÜBİTAK 2232 Projesi)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2015 – 2017

#### **Proje Ortağı/ Araştırmacı/ Uzman Olarak Görev Aldığı Projeler**

5. Toward a Deeper Understanding of Allostery and Allotargeting by Computational Approaches  
Proje Görevi: Araştırmacı  
Destekleyen Kurum: National Institutes of Health (NIH)  
Proje Bütçesi: \$348.183  
Proje No: 5R01GM139297-02  
Proje Ekibi: Mert Gur, Ivet Bahar ((Yürütücü), Pemra Doruker (Müşterek yürütücü)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2021 – 2025
4. A First Step Valorization of Waste Atmospheric Carbon Dioxide via its Sustainable Capture  
Proje Görevi: Proje Ortağı  
Destekleyen Kurum: Alliance of International Science Organizations, ANSO (Uluslararası)  
Proje Bütçesi: \$150.000  
Proje No: ANSO-CR-PP-2020-06  
Proje Ekibi: Mert Gür, Bassem Al-Maythaly (Yürütücü) (Royal Scientific Society, Jordan), Yuebiao Zhang (ShanghaiTech University, Çin), Youssef Belmabkhout (Mohammed VI Polytechnic University, Morocco, Ürdün) Karim Adil (Le Mans University, Fransa), Gamze Gümüşlü Gür (İTÜ)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2021 – 2024

3. Türkiye Mekansal Strateji Planının Hazırlanması Projesi  
Proje Görevi: Enerji Uzmanı  
Destekleyen Kurum: Türkiye Cumhuriyeti Çevre ve Şehircilik Bakanlığı  
Proje Bütçesi: 400.000 TL, \$63.163,21 (II. Etap) ve 3.900.000 TL, \$555.856,44 (III. Etap)  
Proje No: TMSP II. Etap (2020) ve TMSP III. Etap (2021)  
Project Ekibi: 34 uzman (II. Etap) ve 40 uzman (III. Etap); İTÜ, İstanbul Üniversitesi, Arel Üniversitesi, Kent Üniversitesi, Ege Üniversitesi  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2020 – 2021
2. Covid-19 Hastalığının Tedavisine Yönelik SARS-CoV-2 Viral Spike (S) Proteini ve Ace2 İnhibitörlerinin Tasarımı ve Uygulaması  
Proje Görevi: Araştırmacı  
Destekleyen Kurum: TÜBİTAK  
Proje Bütçesi: 437.540,00 TL, \$55.303,60  
Proje No: 120Z305 (TÜBİTAK 1001 Projesi)  
Proje Ekibi: Mert Gür, Gizem Dinler Doğanay (Yürütücü), Sefer Baday (İTÜ)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2020 – 2021
1. Eklemeli İmalat Eğitim ve Araştırma Merkezi (EKAM)  
Proje Görevi: Araştırmacı  
Destekleyen Kurum: İstanbul Kalkınma Ajansı/Yenilikçi ve Yaratıcı İstanbul Mali Destek Programı  
Proje Bütçesi: 1.988.659.94 TL, \$357.004,87  
Proje No: TR10/18/YMP/0005  
Proje Ekibi: Mert Gür, İlker Murat Koç, Mehmet Alaittin Arpacı, Cemal Baykara, Yakup Erhan Böke, Mesut Gür, Nurdil Eskin, Kenan Refah Kutlu, Ayhan Kural, İsmail Yalçın Uralcan, Abdüssamet Subaşı, Adil Yücel, Ersin Sayar, Sertaç Çadircı, Mithat Can Özın, Hacı Abdullah Taşdemir, Emrecan Söylemez (İTÜ), Saliha Gündüz (Marmara Üniversitesi)  
Başlangıç-Bitiş Tarihi: 2018 – 2020

#### **Doktora Sonrası Araştırmacı Olarak Görev Aldığı Projeler**

6. Accelerating the Development of Liquid Fuels Directly from Sunlight  
Araştırmanın Yapıldığı Kurum: Joint Center for Artificial Photosynthesis, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley  
Danışman: Prof. Teresa Head-Gordon  
Destekleyen Kurum: California Energy Commission  
Proje Bütçesi: \$750.000,00  
Proje Görevi: Doktora Sonrası Araştırmacı  
Projede Görev Alma Tarihi: 2014 – 2015  
Proje No: DE-SC0004993
5. Continued Development of Protein Dynamics Software ProDy  
Araştırmanın Yapıldığı Kurum: Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA  
Danışman: Prof. Dr. İvet Bahar  
Destekleyen Kurum: National Institutes of Health (NIH)  
Proje Bütçesi: \$1,142,251  
Proje Görevi: Doktora Sonrası Araştırmacı  
Projede Görev Alma Tarihi: 2013 – 2014  
Proje No: R01 GM099738

4. High Performance Computing for Multiscale Modeling of Biological Systems  
Araştırmanın Yapıldığı Kurum: Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA  
Danışman: Prof. Dr. İvet Bahar  
Destekleyen Kurum: National Institutes of Health (NIH)  
Proje Bütçesi: \$13.394,197  
Proje Görevi: Doktora Sonrası Araştırmacı  
Projede Görev Alma Tarihi: 2012 – 2013  
Proje No: P41 GM103712
3. Membrane Protein Structural Dynamics Consortium-Computational Modeling Resource Core  
Araştırmanın Yapıldığı Kurum: Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA  
Danışman: Prof. Dr. İvet Bahar  
Destekleyen Kurum: National Institutes of Health (NIH)  
Proje Bütçesi: \$31930663  
Proje Görevi: Doktora Sonrası Araştırmacı  
Projede Görev Alma Tarihi: 2010 – 2014  
Proje No: U54 GM087519
2. Structural Dynamics of Biomolecular Systems  
Araştırmanın Yapıldığı Kurum: Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA  
Danışman: Prof. Dr. İvet Bahar  
Destekleyen Kurum: National Institutes of Health (NIH)  
Proje Bütçesi: \$1.309.441,00  
Proje Görevi: Doktora Sonrası Araştırmacı  
Projede Görev Alma Tarihi: 2010 – 2012  
Proje No: R01 GM086238
1. Molecular and Systems Modeling Core.  
Araştırmanın Yapıldığı Kurum: Department of Computational and Systems Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA  
Danışman: Prof. Dr. İvet Bahar  
Destekleyen Kurum: National Institutes of Health (NIH)  
Proje Görevi: Doktora Sonrası Araştırmacı  
Projede Görev Alma Tarihi: 2010 – 2012  
Proje No: UL1 RR024153

## ESERLER

### Uluslararası Dergilerde Yayımlanan Makaleler

32. Banerjee, A., Mathew, S., Naqvi, M. M., Yilmaz, S. Z., Zacharopoulou, M., Doruker, P., Kumita, J. R., Yang S., **Gur, M.**, Itzhaki, L. S., Gordon, R., Bahar, I., Influence of Point Mutations on PR65 Conformational Adaptability: Insights from Optical Tweezer Experiments and Molecular Simulations, **Research Square** (Ön Baskı) (Sorumlu Yazar)
31. Salvador-Garcia, D., Jin, L., Hensley, A., Golcuk, M., Gallaud, E., Chaaban, S., Port, F., Vagnoni, A., Planelles-Herrero, V.J., McClintock, M.A., Derivery, E., Carter, A.P., Giet, R., **Gur, M.**, Yildiz, A., Bullock, S.L. (2023). A force-sensitive mutation reveals a spindle assembly checkpoint-independent role for dynein in anaphase progression, **bioRxiv**, 2023.08. 03.551815. (Ön Baskı) (Hakem sürecinde)

30. Costa, M. G. S.\*, **Gur, M.\***, Krieger, J. M., Bahar, I. (2023). Computational biophysics meets cryo-EM revolution in the search for the functional dynamics of biomolecular systems, **WIREs Computational Molecular Science**, 2023.06. 10.544469. (Davetli Derleme Makalesi) (Müşterek birinci yazar) (Derginin 2022 yılı etki faktörü 11.4)
29. Golcuk, M., Yilmaz, S. Z., Yildiz, A., **Gur, M.** (2023). The Mechanism and Energetics of the Dynein Priming Stroke, **bioRxiv**, 2023.06. 10.544469. (Önbaskı) (İncelenme sürecinde) (Sorumlu Yazar)
28. Golcuk M, Yildiz A., **Gur. M.** (2022). Omicron BA.1 and BA.2 Variants Increase the Interactions of SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein with ACE2. **Journal of Molecular Graphics & Modelling**, 108286. (Sorumlu Yazar)
27. Golcuk M., Hacısuleyman, A., Yilmaz, S. Z., Taka, E. Yildiz A., Gur. M. (2022). SARS-Cov-2 Delta Variant Decreases Nanobody Binding and ACE2 Blocking Effectivity. **Journal of Chemical Information and Modeling**. 62, 10, 2490–2498. (Sorumlu Yazar)
26. Ferro, L. S., Fang, Q., Eshun-Wilson, L., Fernandes, J., Jack, A., Farrell, D. P., Golcuk, M., Huijben, T., Costa, K., **Gur, M.**, DiMaio, F., Nogales, E., Yildiz, A., (2022) Structural and functional insight into regulation of kinesin-1 by microtubule-associated protein MAP7. **Science**, 375, 326-331. (Derginin 2022 yılı etki faktörü 56.9)
25. **Gur, M.**, Yilmaz, S.Z., Taka, E. (2021). The First Law of Thermodynamics Analysis of Transporters Involved in the Glutamate/Gaba-Glutamine Cycle. **Isı Bilimi ve Tekniği Dergisi** 41(2), 265-276. (Sorumlu Yazar)
24. Golcuk, M., Hacısuleyman, A., Erman, B., Yildiz, A., **Gur, M.** (2021). Binding mechanism of neutralizing Nanobodies targeting SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein. **Journal of Chemical Information and Modeling**. 61(10), 5152–5160. (Sorumlu Yazar)
23. Taka, E., Yilmaz, S.Z., Golcuk, M., Kilinc, C., Aktas, U., Yildiz, A., **Gur, M.** (2021). Critical interactions between the SARS-CoV-2 spike glycoprotein and the human ACE2 receptor. **Journal of Physical Chemistry B**. 125 (21), 5537-5548. (Sorumlu Yazar)
22. Ferro, L.S, Eshun-Wilson, L., Golcuk, M., Fernandes, J., Huijben, T., Gerber, E., Jack, A., Costa, K., **Gur, M.**, Fang, Q., Nogales, E. and Yildiz, A. (2020). The mechanism of motor inhibition by microtubule-associated proteins. **bioRxiv**. (Ön baskı)
21. **Gur, M.**, Taka, E., Yilmaz, S.Z., Kilinc, C., Aktas, U., Golcuk, M. (2020). Conformational transition of SARS-CoV-2 spike glycoprotein between its closed and open states. **Journal of Chemical Physics**, 153(7), 075101. (Sorumlu Yazar)
20. **Gur, M.**, Golcuk, M., Gul, A., Erman, B. (2020). Molecular dynamics simulations provide molecular insights into the role of HLA-B51 in Behçet's Disease pathogenesis. **Chemical Biology & Drug Design**, 96(1), 644-658. (Sorumlu Yazar)
19. Zhou, Z., Feng, Z., Hu, D., Yang, P., **Gur, M.**, Bahar, I., Cristofanilli, M., Gradishar, W.J., Xie, X., Wan, Y. (2019). A novel small-molecule antagonizes PRMT5-mediated KLF4 methylation for target therapy. **EBioMedicine-The Lancet**, 44, 98-111.
18. **Gur, M.**, Golcuk, M., Yilmaz, S. Z., Taka, E. (2019). Thermodynamic first law efficiency of membrane proteins. **Journal of Biomolecular Structure & Dynamics**, 1-11. (Sorumlu Yazar)
17. Can, S., Lacey, S., **Gur, M.**, Carter, A. P., Yildiz, A. (2019). Directionality of dynein is controlled by the angle and length of its stalk. **Nature**, 566(7744), 407. (Derginin 2022 yılı etki faktörü 64.8)
16. Pullara, F., Wenzhi, M., **Gur, M.** (2019). Why protein conformers in molecular dynamics simulations differ from their crystal structures: a thermodynamic insight. **Turkish Journal of Chemistry**, 43(2), 394-403. (Sorumlu Yazar)
15. **Gur, M.**, Blackburn, E. A., Ning, J., Narayan, V., Ball, K. L., Walkinshaw, M. D., Erman, B. (2018). Molecular dynamics simulations of site point mutations in the TPR domain of cyclophilin 40 identify conformational states with distinct dynamic and enzymatic properties. **Journal of Chemical Physics**, 148(14), 145101. (Sorumlu Yazar)

14. **Gur, M.**, Cheng, M. H., Zomot, E., Bahar, I. (2017). Effect of dimerization on the dynamics of neurotransmitter: sodium symporters. **Journal of Physical Chemistry B**, 121(15), 3657-3666. (Müşterek Sorumlu Yazar)
13. **Gur, M.**, Zomot, E., Cheng, M. H., Bahar, I. (2015). Energy landscape of LeuT from molecular simulations. **The Journal of Chemical Physics**, 143 (24), 243134 (Müşterek Sorumlu Yazar)
12. Hu, D.\*, **Gur, M.\***, Zhou, Z., Gamper, A., Hung, M. C., Fujita, N., Lan L., Bahar I., Wan, Y. (2015). Interplay between arginine methylation and ubiquitylation regulates KLF4-mediated genome stability and carcinogenesis. **Nature Communications**, 6, 8419. (Müşterek birinci yazar) (Derginin 2022 yılı etki faktörü 16.6)
11. Zomot, E., **Gur, M.**, Bahar, I. (2015). Microseconds simulations reveal a new sodium-binding site and the mechanism of sodium-coupled substrate uptake by LeuT. **Journal of Biological Chemistry**, 290(1), 544-555.
10. Das, A., **Gur, M.**, Cheng, M. H., Jo, S., Bahar, I., Roux, B. (2014). Exploring the conformational transitions of biomolecular systems using a simple two-state anisotropic network model. **PLOS Computational Biology**, 10(4), e1003521.
9. **Gur, M.**, Madura, J. D., Bahar, I. (2013). Global transitions of proteins explored by a multiscale hybrid methodology: application to adenylate kinase. **Biophysical Journal**, 105(7), 1643-1652. (Dergi tarafından yeni ve önemli olarak öne çıkarıldı) (Birinci yazar)
8. **Gur, M.**, Zomot, E., Bahar, I. (2013). Global motions exhibited by proteins in micro-to milliseconds simulations concur with anisotropic network model predictions. **Journal of Chemical Physics**, 139(12), 121912. (Birinci yazar)
7. Eskici, G., **Gur, M.** (2013). Computational design of new peptide inhibitors for amyloid beta (A $\beta$ ) aggregation in Alzheimer's disease: application of a novel methodology. **PLOS One**, 8(6), e66178. (Sorumlu yazar)
6. **Gur, M.**, Erman, B. (2012). Quasi-harmonic fluctuations of two bound peptides. **Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics**, 80(12), 2769-2779. (Sorumlu birinci yazar)
5. Arkun, Y., **Gur, M.** (2012). Combining optimal control theory and molecular dynamics for protein folding. **PLOS One**, 7(1), e29628.
4. Meireles, L., **Gur, M.\***, Bakan, A.\*, Bahar, I.\* (2011). Pre-existing soft modes of motion uniquely defined by native contact topology facilitate ligand binding to proteins. **Protein Science**, 20(10), 1645-1658. (Müşterek Birinci yazar)
3. Kabakçioğlu, A., Yuret, D., **Gur, M.**, Erman, B. (2010). Anharmonicity, mode-coupling and entropy in a fluctuating native protein. **Physical Biology**, 7(4), 046005.
2. **Gur, M.**, Erman, B. (2010). Quasi-harmonic analysis of mode coupling in fluctuating native proteins. **Physical Biology**, 7(4), 046006. (Birinci yazar)
1. Yogurtcu, O. N., **Gur, M.**, Erman, B. (2009). Statistical thermodynamics of residue fluctuations in native proteins. **Journal of Chemical Physics**, 130(9), 03B607.

#### Uluslararası Kitaplardaki Bölümler

2. **Gur, M.** (2020) Exploring conformational transition of 2019 novel coronavirus spike glycoprotein between its closed and open states using molecular dynamics simulations. In M., Şeker, A., Özer, Z., Tosun, C., Korkut, M., Doğrul (Ed.). **TÜBA Assessment Report on COVID-19 Global Outbreak** (pp. 161). Ankara, Turkey: Turkish Academy of Sciences Publications
1. **Gur, M.**, Gur, M. (2014). Comparing Corn Drying in Fluidized Bed Dryer and Convective Tray Dryer. In I., Dincer, A., Midilli, H., Kucuk (Ed.). **Progress in Exergy Energy and the Environment** (pp. 1085). Springer International Publishing.(Sorumlu Yazar)



## Ulusal Hakemli Dergilerde Yayimlanan Makaleler

1. **Gur, M.** (2016). Balkabağının akışkan yataklı kurutucuda kurutulmasının deneysel ve teorik incelenmesi. **Uludağ Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Dergisi**, 21(2), 145-158.

## Diğer Dergilerde Yayimlanan Makaleler

1. **Gur, M.** (2020). COVID-19 aşısı ve ilaç geliştirme çalışmalarında spike glikoproteininin yeri ve önemi. **TÜBA Günce**, 63.

## Uluslararası Bilimsel Toplantılarda Sunulan ve Bildiri Kitaplarında (Proceedings) Basılan Bildiriler

37. Golcuk, M., Yilmaz, S. Z., Yildiz A. **Gur, M.**, The Mechanism and Energetics of the Dynein Priming Stroke. **8th International BAU-Drug Design Congress**. Istanbul, Turkey
36. Buran C. H., Taka, E., **Gur, M.**, Investigation of The Structural Differences Between Wild-Type and Mutant Forms of Mutsa Heterodimer with Molecular Dynamic Simulations. **8th International BAU-Drug Design Congress**. Istanbul, Turkey
35. Yilmaz, S. Z., Golcuk, M., Erman, B., **Gur, M.** (2022). Modelling cell membrane passing mechanism and energetics of cell penetrating peptides comprising HLA-B\*51 binding motifs. **International Congress of the Molecular Biology Association of Turkey (MolBiyoKon22)**. Istanbul, Turkey
34. Dingilolu, B., Basturk, E., Turk M., Golcuk M., Eyupoglu, A. E., Karakus, B. Z., Can O., Erman B., **Gur M.**, Dinler-Doğanay, G. (2022). Developing novel Peptide-based Inhibitor Candidates against Receptor Binding Domain (RBD) of SARS-CoV-2 Spike Protein. **International Congress of the Molecular Biology Association of Turkey (MolBiyoKon22)**. Istanbul, Turkey
33. **Gur, M.** (2021). Exploring conformational transitions during the CHK2 activation via molecular dynamics simulations. **3rd International Cancer and Ion Channels Congress (CANCERION-2021)**. (Özet Bildiri)
32. **Gur, M.**, Yilmaz, S.Z., Taka, E. (2021). Thermodynamic First Law Analysis of Transporters Involved in the Glutamate/GABA-Glutamine Cycle. Uluslararası Katılımlı 23. **Isı Bilimi ve Tekniği Kongresi** (Özet Bildiri)
31. Golcuk M., Hacısuleyman A., Erman B., Yildiz A., **Gur M.** (2021). Exploring the binding mechanisms of nanobodies targeting SARS-CoV-2 spike glycoprotein using molecular dynamics simulations. **2021 ACS Fall Meeting**. (Davetli konuşmacı, Özet Bildiri) Atlanta, GA
30. Taka, E., Yilmaz, S.Z., Golcuk, M., Kilinc, C., Aktas, U., Yildiz, A., **Gur, M.** (2021). Critical interactions between the SARS-CoV-2 spike glycoprotein and the human ACE2 receptor. **2021 ACS Spring Meeting**. (Davetli konuşmacı, Özet Bildiri)
29. **Gur, M.** (2021). Büyük Biyomoleküler Sistemlerin Moleküler Dinamik Simülasyonları. **İlaç Tasarımında Yüksek Başarımlı Hesaplama Teknolojileri Çalıştayı**. (Özet Bildiri)
28. Taka, E., Yilmaz, S.Z., Golcuk, M., Kilinc, C., Aktas, U., Yildiz, A., **Gur, M.** (2021). SARS-CoV-2 Spike Glikoproteinini ile İnsan ACE2 Reseptörü Arasındaki Kritik Etkileşimler. **İTÜ Kimya Mühendisliği 2. Lisansüstü Sempozyumu** (Davetli konuşmacı, Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye
27. **Gur, M.**, Can, S., Lacey, S., Carter, A. P., Yildiz, A. (2019). Modelling Plus-End-Directed Dyneins. **7th International Congress of the Molecular Biology Association of Turkey (MolBiyoKon19)**. (Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye
26. **Gur, M.**, Golcuk, M., Gul, A., Erman, B. (2019). Molecular overview of the role of HLA-B51 in Behçet's Disease. **7th International Congress of the Molecular Biology Association of Turkey (MolBiyoKon19)**. (Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye
25. **Gur, M.** (2019). Insight into the Mechanochemical Cycle of Cytoplasmic Dynein from Molecular Dynamics simulations. **7th International BAU Drug Design Congress**. (Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye

24. Golcuk, M., Taka, E., Yilmaz, S.Z., **Gur, M.** (2019). Molecular Dynamics Simulations of the Dynein Linker Movement. **The 12th International Symposium on Health Informatics and Bioinformatics.** (Özet Bildiri). İzmir, Türkiye
23. Can, S., Lacey, S., **Gur, M.**, Carter, A. P., Yıldız, A. (2019). Dynein's Directionality is Controlled by the Angle and Length of its Stalk. **63rd Annual Meeting of the Biophysical-Society.** (Özet Bildiri) Baltimore, MD
22. **Gur, M.**, Can, S., Lacey, S., Carter, A. P., Yıldız, A. (2018). Engineering Plus-end directed Dyneins. **6th International BAU Drug Design Congress.** (Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye
21. **Gur, M.**, Gül, A., Erman, B. (2018) Dynamic and Static Differences Between Conformations of HLA-B51 and HLA-B52: Implications for the Pathogenic Mechanisms of HLA-B51 in Behçet's Disease. **6th International BAU Drug Design Congress.** (Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye
20. **Gur, M.**, Golcuk, M., Yilmaz, S. Z., Taka, E. (2018). Thermodynamic First Law Analysis of Proteins. **6th International BAU Drug Design Congress.** (Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye
19. **Gur, M.** Cheng, M. H., Zomot, E., Bahar, I. (2017). Importance of Dimerization in Facilitating the Functional Dynamics of Neurotransmitter: Sodium Symporters. **61st Annual Meeting of the Biophysical-Society.** (Özet Bildiri) New Orleans, LA
18. **Gur, M.**, Cheng, M. H., Zomot, E., Bahar, I. (2017). Investigation of the Effect of Dimerization on the Functional Dynamics of Neurotransmitter: Sodium Symporters. **5th International BAU-Drug Design Congress.** (Özet Bildiri) İstanbul, Türkiye
17. **Gur, M.**, Zomot, E., Cheng, M. H., Bahar, I. (2015). Insight into the dynamics of LeuT from multiscale simulations. **Gordon Research Conferences (GRC) Mechanism of Membrane Transport.** (Özet Bildiri) Lewiston, ME.
16. **Gur, M.**, Zomot, E., Cheng, M. H., Bahar, I. (2014). Toward Gaining A Mechanistic Understanding of Substrate Transport by LeuT. **Gordon research Conferences (GRC) Biopolymers.** (Özet Bildiri) Newport, RI.
15. **Gur, M.**, Zomot, E., Bahar, I. (2014). Global motions of proteins observed in micro to milliseconds simulations concur with Anisotropic Network Model predictions. **Membrane Protein Structural Dynamics Consortium's Annual Meeting.** (Özet Bildiri) Chicago, IL
14. Das, A., **Gur, M.**, Bahar, I., Roux, B. (2013). A Simple Coarse-Grained Model to Map the Transition Pathway Between Two Stable Conformations using the Anisotropic Elastic Network Model. **57th Annual Meeting of the Biophysical-Society.** (Özet Bildiri) Philadelphia, PA
13. **Gur, M.**, Eskici, G. (2013). Computational design of new peptide inhibitors for amyloid beta aggregation in Alzheimer s disease application of a novel methodology. **American Institute of Chemical Engineers (AIChE) Annual Meeting, San Francisco.** (Özet Bildiri) San Francisco, CA.
12. **Gur, M.**, Zomot, E., Bahar, I. (2013). Multiscale investigation of biomolecular systems dynamics. **American Institute of Chemical Engineers (AIChE) Annual Meeting, San Francisco.** (Özet Bildiri) San Francisco, CA.
11. **Gur, M.**, Gür, M. (2013). Comparing corn drying in fluidized bed dryer and convective tray dryer. **The Sixth International Exergy, Energy and Environment Symposium.** (Özet Bildiri) Rize, Türkiye
10. **Gur, M.**, Madura, J., Bahar, I. (2013). Global Transitions or Proteins Explored by a Multiscale Hybrid Methodology: Application to Dopamine Transporter. **57th Annual Meeting of the Biophysical-Society.** (Özet Bildiri) Philadelphia, PA
9. **Gur, M.**, Madura, J., Bahar, I. (2012). Transition pathways of Dopamine transporters explored by combining molecular dynamics simulations and Monte Carlo sampling of collective modes. **Membrane Protein Structural Dynamics Consortium's Annual Meeting.** (Özet Bildiri) Chicago, IL.
8. **Gur, M.**, Madura, J., Bahar, I. (2012). Transition pathways of proteins explored by combining Molecular Dynamics simulations and Monte Carlo sampling of collective modes. **56th Annual Meeting of the Biophysical-Society.** (Özet Bildiri) Philadelphia, PA.

7. Arkun, Z.Y., **Gur, M.** (2011). Protein folding using coarse grained optimal control and Molecular Dynamics. **18th International Federation of Automatic Control (IFAC) World Congress.** (Tam Metin Bildiri) Milano, Italy.
6. **Gur, M.**, Bahar, I. (2011). Transition Pathways of Enzymes Explored by Combining the Anisotropic Network Model, Molecular Dynamics Simulations and a Monte Carlo Sampling of Conformational Space. **Albany 2011: Conversation 17.** (Özet Bildiri) Albany, NY.
5. **Gur, M.**, Erman, B. (2010). Harmonic fluctuations of two bound peptides. **Gordon Research Conference (GRC) Biopolymers.** (Özet Bildiri) Newport, RI.
4. **Gur, M.**, Erman, B. (2010). Coupling between energy and residue position fluctuations in native proteins. **2010 5th International Symposium on Health Informatics and Bioinformatics.** (Tam Metin Bildiri) Antalya, Türkiye
3. **Gur, M.**, Erman, B. (2009). Statistical thermodynamics and mode analysis of residue fluctuations in native proteins. **Gordon Research Conference (GRC) Computer Aided Drug Design.** (Özet Bildiri) Tilton, NH.
2. **Gur, M.**, Erman, B. (2009). Statistical thermodynamics of residue fluctuations in native proteins. **Biophysical Society 53rd Annual Meeting.** (Özet Bildiri) Boston, MS.
1. **Gur, M.**, Erman, B. (2008). Determining binding forces between two peptides using the Gaussian Network Model. **XXI Sitges Conference-Statistical Mechanics of Biophysics.** (Özet Bildiri) Sitges, Spain

## ULUSLARARASI BİLİMSEL TOPLANTI DÜZENLEME

**2022**                      **Bilimsel Düzenleme Kurulu Üyesi**, 8th International BAU-Drug Design Congress

## EDİTÖR KURUL ÜYELİĞİ

**2016 – Bugün**      Journal of Molecular Graphics and Modelling

## DERGİ HAKEMLİKLERİ

ACS Omega (Q2, İmpact Factor: 4.132)  
 ACS Infectious Diseases (Q1, İmpact Factor: 5.578)  
 Advanced Theory and Simulations (Q1, İmpact Factor: 4.105)  
 Biophysical Journal (Q1, İmpact Factor: 3.699)  
 Biopolymers (Q2, İmpact Factor: 2.240)  
 Cell Reports (Q1, İmpact Factor: 9.995)  
 Computational and Structural Biotechnology Journal (Q1, İmpact Factor: 6.155)  
 EMBO (Q1, İmpact Factor: 13.783)  
 Israel Journal of Chemistry (Q1, İmpact Factor: 3.357)  
 Journal of Biomolecular Structure and Dynamics (Q1, İmpact Factor: 5.235)  
 Journal of Chemical Physics (Q1, İmpact Factor: 4.304)  
 Journal of Molecular Graphics and Modelling (Q2, İmpact Factor: 2.942)  
 Journal of Physical Chemistry B (Q1, İmpact Factor: 3.466)  
 PLOS One (Q1, İmpact Factor: 3.752)  
 PLOS Computational Biology (Q1, İmpact Factor: 4.779)  
 Protein Science (Q1, İmpact Factor: 6.993)  
 Journal of Physical Chemistry Letters (Q1, İmpact Factor: 6.888)  
 Turkish Journal of Biology (Q2, İmpact Factor: 3.245)  
 Turkish Journal of Chemistry (Q3, İmpact Factor: 1.239)

## PROJE PANELİSTLİK

### Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK)

- 2021 Panelist; TÜBİTAK; ARDEB; Kimya ve Biyoloji Araştırma Destek Grubu (KBAG); 1002-Hızlı Destek Programı Paneli
- 2021 Dış Panelist; TÜBİTAK; BİDEB; 2219-Yurt Dışı Doktora Sonrası Araştırma Burs Programı Paneli
- 2020 Panelist; TÜBİTAK; ARDEB; Elektrik Elektronik ve Enformatik Araştırma Destek Grubu (EEEAG); 1001-Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Projelerini Destekleme Programı Paneli
- 2020 Panelist; TÜBİTAK; ARDEB; 2209-A-Üniversite Öğrencileri Araştırma Projeleri Destekleme Programı Paneli
- 2019 Dış Panelist; TÜBİTAK; TEYDEB; Makina İmalat Teknolojileri Grubu (MAKİTEG); 1501-Sanayi Ar-Ge Destek Programı Paneli
- 2019 Moderatör, TÜBİTAK; BİDEB, Biyomedikal Bilimler; 2209-A-Üniversite Öğrencileri Araştırma Projeleri Destekleme Programı Paneli
- 2018 Panelist; TÜBİTAK; ARDEB; Mühendislik Araştırma Destek Grubu (MAG); 1002 Hızlı Destek Programı Paneli
- 2018 Panelist; TÜBİTAK; ARDEB; MAG; 1001-Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Projelerini Destekleme Programı Paneli
- 2018 Panelist; TÜBİTAK; ARDEB; MAG; 3501-Kariyer Geliştirme Programı Paneli
- 2018 Panelist; TÜBİTAK; ARDEB; KBAG; 1001-Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Projelerini Destekleme Programı Paneli
- 2016 Dış Panelist; TÜBİTAK; 2504- İtalya Ulusal Araştırma Konseyi (CNR) ile İşbirliği Programı Paneli

### Türkiye Sağlık Enstitüleri Başkanlığı (TÜSEB)

- 2020 Dış Panelist; TÜSEB; Hesaplamalı Yapısal Biyoloji Stratejik Ar-Ge Proje Çağrısı Paneli
- 2019 Dış Panelist; TÜSEB; Sistem Biyolojisi ve Biyoinformatik Stratejik Ar-Ge Proje Çağrısı Paneli

### İstanbul Teknik Üniversitesi

- 2019 – 2021 Komisyon Üyesi; Bilimsel Araştırma Projeleri (BAP) Komisyon
- 2018 – Bugün Kurul Üyesi; Sağlık ve Mühendislik Bilimleri İnsan Araştırmaları Etik Kurulu

### PRACE-Partnership for Advanced Computing in Europe

- 2020 Dış Panelist; PRACE, DECI-16 (Distributed European Computing Initiative)

## BİLİMSEL KURULUŞLARA ÜYELİKLER

- 2019 Üye, Biyoinformatik Derneği
- 2013 – 2014 Üye, American Institute of Chemical Engineers
- 2009, 2017 Üye, Biophysical Society

## SOSYAL SORUMLULUK VE TOPLUMSAL KATKI FAALİYETLERİ

- 2023 – Bugün 10 yaş altı futbol takımı için gönüllü Antrenör, Pittsburgh Dynamo Youth Soccer (kar amacı gütmeyen bir eğitim kurumu) (ABD)
- 2017 – Bugün Danışman, İTÜ Fitness Kulübü
- 2016 Hakem, Saint Benoît Lisesi Robotik Yarışması
- 2015-2022 Konuşmacı, Çeşitli liselerde gençler arasında bilim eğitimini ve kariyer farkındalığını artırmak için sunumlar, seminerler ve konuşmalar gerçekleştirdi.
- 2013 Hakem, Pittsburgh Bölgesel Fen ve Mühendislik Fuarı (ABD)
- 2008 – 2010 Başkan, Koç Üniversitesi Lisansüstü Öğrenci Derneği
- 2007 – 2009 Lisanslı Sporcu, Koç Üniversitesi Amerikan Futbol Takımı (Koç Rams)

## ARAŐTIRMA ALANLARI

### **Hesaplamaalı Yapısal Biyoloji, Moleküler Biyofizik, Moleküler Tıp, Makina Mühendisliđi**

Biyomoleküler Simülasyonlar ve İstatistiksel Termodinamik: Moleküler Dinamik Simülasyonları, Elastik Ağ Modelleri, Serbest Enerji Hesaplamaları, Yöntem Geliştirme, in silico çekme deneyleri.

Biyomoleküler Makinalar ve Motorlar: Dinein, Kinesin, Mikrotübüller, Mikrotübül İlişkili Proteinler-

Membranlar ve Membran Proteinleri: Nörotransmitter sodyum taşıyıcıları, Lipidler

İlaç Tasarımı: Hücre İçine Nüfuz Eden Peptitler, Behçet Hastalığı

Kanser Biyolojisi: CHK2, MSH2, MSH6, PR65

SARS-CoV-2: Spike Proteini, ACE2, Nanokorlar

Dođası geređi düzensiz proteinler: MAP7, TAU, FapC, nörodejeneratif hastalıklar, amiloid oluşumu

Isı ve Akışkan Bilimleri: Isı Deđiřtiricileri, Mikroçip Sođutma Sistemleri, Gıda Kurutma