

Arş.Gör.Dr. İSMAİL ÇELİK

Kişisel Bilgiler

E-posta: ismailcelik@erciyes.edu.tr

Web: <https://avesis.erciyes.edu.tr/ismailcelik>

Eğitim Bilgileri

Doktora, Ankara Üniversitesi, Sağlık Bilimleri Enstitüsü, Farmasötik Kimya, Türkiye 2014 - 2020

Lisans, Erciyes Üniversitesi, Eczacılık Fakültesi, Eczacılık, Türkiye 2009 - 2014

Yabancı Diller

İngilizce, B2 Orta Üstü

Araştırma Alanları

Eczacılık, Farmasötik Kimya

Akademik Unvanlar / Görevler

Araştırma Görevlisi, Erciyes Üniversitesi, Eczacılık Fakültesi, Eczacılık Meslek Bilimleri , 2015 - Devam Ediyor

SCI, SSCI ve AHCI İndekslerine Giren Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Quantum Mechanical, Virtual Screening, Molecular Docking, Molecular Dynamics, ADME and Antimicrobial Activity Studies of Some New Indole-Hydrazone Derivatives as Potent Agents Against *E. faecalis***
Erol M., Çelik İ., İnce U., Fatullayev H., Uzunhisarcıklı E., Püsküllü M. O.
Journal Of Biomolecular Structure & Dynamics, cilt.40, ss.1-15, 2022 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- II. **Synthesis, quantum mechanical calculations, antimicrobial activities and molecular docking studies of five novel 2,5-disubstituted benzoxazole derivatives**
Temiz-Arpaci O., Zeyrek C. T. , Arisoy M., EROL M., Celik I., Kaynak-Onurdag F.
Journal of Molecular Structure, cilt.1245, 2021 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)
- III. **Antidiabetic bioactive compounds from *Tetrastigma angustifolia* (Roxb.) Deb and *Oxalis debilis* Kunth.: Validation of ethnomedicinal claim by in vitro and in silico studies**
Junejo J. A. , Zaman K., Rudrapal M., ÇELİK İ., Attah E. I.
South African Journal of Botany, cilt.143, ss.164-175, 2021 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)
- IV. **Synthesis, NMR, X-ray crystallography and DFT studies of some regioisomers possessing imidazole heterocycles**
PÜSKÜLLÜ M. O. , Doganc F., Ozden S., ŞAHİN E., ÇELİK İ., Goker H.
Journal of Molecular Structure, cilt.1243, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- V. **In Silico Evaluation of Iranian Medicinal Plant Phytoconstituents as Inhibitors against Main Protease and the Receptor-Binding Domain of SARS-CoV-2**

Mousavi S. S. , Karami A., Haghghi T. M. , Tumilaar S. G. , Fatimawali F., Idroes R., Mahmud S., ÇELİK İ., AĞAGÜNDÜZ D., Tallei T. E. , et al.

MOLECULES, cilt.26, sa.18, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

- VI. **Interactions of the receptor binding domain of sars-cov-2 variants with hACE2: Insights from molecular docking analysis and molecular dynamic simulation**
ÇELİK İ., Yadav R., Duzgun Z., Albogami S., El-Shehawi A. M. , Fatimawali F., Idroes R., Tallei T. E. , Emran T. B.
Biology, cilt.10, sa.9, 2021 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)
- VII. **An Analysis Based on Molecular Docking and Molecular Dynamics Simulation Study of Bromelain as Anti-SARS-CoV-2 Variants**
Tallei T. E. , Fatimawali F., Yelnetty A., Idroes R., Kusumawaty D., Emran T. B. , Yesiloglu T. Z. , Sippl W., Mahmud S., Alqahtani T., et al.
Frontiers in Pharmacology, cilt.12, 2021 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)
- VIII. **Stability and reactivity study of bio-molecules brucine and colchicine towards electrophile and nucleophile attacks: Insight from DFT and MD simulations**
Mary Y. S. , Mary Y. S. , Armaković S., Armaković S. J. , Yadav R., ÇELİK İ., Mane P., Chakraborty B.
Journal of Molecular Liquids, cilt.335, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- IX. **Molecular modeling, density functional theory, ADME prediction and antimicrobial activity studies of 2-(substituted)oxazolo[4,5-b] pyridine derivatives**
ÇELİK İ., EROL M., Kuyucuklu G.
New Journal of Chemistry, cilt.45, sa.25, ss.11108-11118, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- X. **Investigation of reactive properties, adsorption on fullerene, DFT, molecular dynamics simulation of an anthracene derivative targeting dihydrofolate reductase and human dUTPase**
Mary Y. S. , Mary Y. S. , Armakovic S., Armakovic S. J. , Yadav R., ÇELİK İ., Razavi R.
JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XI. **Synthesis, Molecular Docking, Molecular Dynamics, DFT and Antimicrobial Activity Studies of 5-substituted-2-(p-methylphenyl)benzoxazole Derivatives**
EROL M., ÇELİK İ., Kuyucuklu G.
Journal of Molecular Structure, cilt.1234, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XII. **Modeling the structural and reactivity properties of hydrazono methyl-4H-chromen-4-one derivatives-wavefunction-dependent properties, molecular docking, and dynamics simulation studies.**
Mary Y. S. , Mary Y. S. , Resmi K. S. , Sarala S., Yadav R., Celik İ.
Journal of molecular modeling, cilt.27, ss.186, 2021 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)
- XIII. **Synthesis, in vitro antiprotozoal activity, molecular docking and molecular dynamics studies of some new monocationic guanidinobenzimidazoles.**
Doganc F., Celik İ., Eren G., Kaiser M., Brun R., Goker H.
European journal of medicinal chemistry, cilt.221, ss.113545, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIV. **Theoretical investigation on the reactive and interaction properties of sorafenib – DFT, AIM, spectroscopic and Hirshfeld analysis, docking and dynamics simulation**
Mary Y. S. , Mary Y. S. , Rad A. S. , Yadav R., ÇELİK İ., Sarala S.
Journal of Molecular Liquids, cilt.330, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XV. **Investigation of reactive properties of an antiviral azatricyclo derivative–KDFT, MD and docking simulations**
Mary Y. S. , Mary Y. S. , Armaković S., Armaković S. J. , Pakosinska-Parys M., Yadav R., ÇELİK İ.
Journal of Molecular Structure, cilt.1230, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVI. **DFT, docking, MD simulation, and vibrational spectra with SERS analysis of a benzoxazole derivative: an anti-cancerous drug**
Sheena Mary Y., Shyma Mary Y., Temiz-Arpaci O., Yadav R., ÇELİK İ.
CHEMICAL PAPERS, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XVII. **Molecular docking, DFT analysis, and dynamics simulation of natural bioactive compounds targeting ACE2 and TMPRSS2 dual binding sites of spike protein of SARS CoV-2**

Yadav R., Hasan S., Mahato S., ÇELİK İ., Mary Y., Kumar A., Dhamija P., Sharma A., Choudhary N., Chaudhary P. K. , et al.

Journal of Molecular Liquids, 2021 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)

- XVIII. **In silico evaluation of potential inhibitory activity of remdesivir, favipiravir, ribavirin and galidesivir active forms on SARS-CoV-2 RNA polymerase**
ÇELİK İ., EROL M., Duzgun Z.
Molecular Diversity, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XIX. **Design, synthesis, molecular docking, density functional theory and antimicrobial studies of some novel benzoxazole derivatives as structural bioisosteres of nucleotides**
EROL M., ÇELİK İ., Temiz-Arpaci O., Kaynak-Onurdag F., Okten S.
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, cilt.39, sa.9, ss.3080-3091, 2021 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XX. **1 H -Benzimidazole-5-carboxamide derivatives: Design, synthesis, molecular docking, DFT and antimicrobial studies**
EROL M., ÇELİK İ., Temiz-Arpaci O., Goker H., Kaynak-Onurdag F., Okten S.
New Journal of Chemistry, cilt.44, sa.48, ss.21309-21317, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXI. **Synthesis, molecular docking and ADME prediction of some new benzimidazole carboxamides derivatives as antimicrobial agents**
EROL M., ÇELİK İ., Temiz-Arpaci O., Goker H., Kaynak-Onurdag F., Okten S.
Medicinal Chemistry Research, cilt.29, sa.11, ss.2028-2038, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXII. **Antimicrobial and antiproliferative activity studies of some new quinoline-3-carbaldehyde hydrazone derivatives**
PÜSKÜLLÜ M. O. , ÇELİK İ., EROL M., FATULLAYEV H., UZUNHİSARCIKLI E., Kuyucuklu G.
Bioorganic Chemistry, cilt.101, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXIII. **Approach to the mechanism of action of hydroxychloroquine on SARS-CoV-2: a molecular docking study**
Celik K., Onay-Besikci A., Ayhan-Kilcigil G.
JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXIV. **Synthesis, Molecular Docking, and DFT Studies of Some New 2,5-Disubstituted Benzoxazoles as Potential Antimicrobial and Cytotoxic Agents**
EROL M., ÇELİK İ., UZUNHİSARCIKLI E., Kuyucuklu G.
Polycyclic Aromatic Compounds, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXV. **In Vitro and In Silico Studies of Quinoline-2-Carbaldehyde Hydrazone Derivatives as Potent Antimicrobial Agents**
ÇELİK İ., EROL M., PÜSKÜLLÜ M. O. , UZUNHİSARCIKLI E., İNCE U., Kuyucuklu G., Suzen S.
Polycyclic Aromatic Compounds, 2020 (SCI İndekslerine Giren Dergi)
- XXVI. **Evaluation of Activity of Some 2,5-Disubstituted Benzoxazole Derivatives against Acetylcholinesterase, Butyrylcholinesterase and Tyrosinase: ADME Prediction, DFT and Comparative Molecular Docking Studies**
ÇELİK İ., EROL M., Temiz Arpacı O., ŞENOL DENİZ F. S. , ERDOĞAN ORHAN İ.
Polycyclic Aromatic Compounds, 2020 (SCI Expanded İndekslerine Giren Dergi)
- XXVII. **Design, synthesis and docking studies of benzimidazole derivatives as potential EGFR inhibitors**
Celik İ., Ayhan-Kilcigil G., Guven B., Kara Z., Gurkan-Alp A. S. , Karayel A., Onay-Besikci A.
European Journal of Medicinal Chemistry, cilt.173, ss.240-249, 2019 (SCI İndekslerine Giren Dergi)

Diğer Dergilerde Yayınlanan Makaleler

- I. **Bazı Yeni 2,5-Disübstitüe Benzoksazol Türevlerinin Sentezi, Antimikrobiyal Aktivite, Moleküler Doking ve DFT Çalışmaları**
Erol M., Çelik İ., Kuyucuklu G.
Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi, sa.27, ss.605-614, 2021 (Hakemli Üniversite Dergisi)

- II. **Molecular Docking and Dynamics Simulations Study of Selected Phytoconstituents of "Pangi" (Pangium edule Reinw) Leaf as Anti-SARS-CoV-2**
Sailah I, Tumilaar S. G. , Lombogia L. T. , Çelik İ., Tallei T. E.
Philippine Journal of Science, cilt.150, sa.5, ss.925-937, 2021 (Diğer Kurumların Hakemli Dergileri)
- III. **2-(p-Florofenil)-5-(2-(4-asetilpiperazin-1-il)asetamido)benzoksazol'ün Sentezi, Moleküler Doking, DFT ve Antimikrobiyal Aktivite Çalışmaları**
Erol M., Çelik İ., Kuyucuklu G.
İğdır Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, cilt.11, sa.3, ss.2122-2132, 2021 (Hakemli Üniversite Dergisi)
- IV. **MD, DFT Investigations and Inhibition of the Novel SARS- CoV-2 Mainprotease in Three Cocrystals of Hydrochloro- thiazide**
Mary Y. S. , Mary Y. S. , Yadav R., Çelik İ., Rad A. S.
Analytical Chemistry Letters, cilt.11, sa.4, ss.450-468, 2021 (Diğer Kurumların Hakemli Dergileri)
- V. **Bioactive antidiabetic flavonoids from the stem bark of cordia dichotoma forst.: Identification, docking and ADMET studies**
Hussain N., Kakoti B. B. , Rudrapal M., Sarwa K. K. , ÇELİK İ., Attah E. I. , Khairnar S. J. , Bhattacharya S., Sahoo R. K. , Walode S. G.
MolBank, cilt.2021, sa.2, 2021 (ESCI İndekslerine Giren Dergi)
- VI. **Synthesis, antimicrobial and in silico studies of new 2,5-disubstituted benzoxazole derivative**
Erol M., Çelik İ., Kuyucuklu G.
Medicine Science, cilt.10, sa.2, ss.400-408, 2021 (Diğer Kurumların Hakemli Dergileri)
- VII. **Synthesis, Antimicrobial and Cytotoxic Activity Studies of Some New Benzoxazole Derivatives**
Erol M., Çelik İ., Kuyucuklu G., Uzunhisarcıklı E.
Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi, cilt.21, ss.455-462, 2021 (Diğer Kurumların Hakemli Dergileri)

Kitap & Kitap Bölümleri

- I. **TARGETING EGFR L858R1T790M AND EGFR L858R1T790M/C797S RESISTANCE MUTATIONS IN NON-SMALL CELL LUNG CANCER: CURRENT APPROACHES IN MEDICINAL CHEMISTRY**
Çelik İ., Kılıçgil G.
Eczacılıkta Yenilikler-3, Gülbin Özçelikay, İlkey Yıldız, Editör, Ankara Üniversitesi, Ankara, ss.249-264, 2020

Hakemli Kongre / Sempozyum Bildiri Kitaplarında Yer Alan Yayınlar

- I. **SYNTHESIS OF SOME CYCLOHEXYL SUBSTITUTED OXADIAZOLE DERIVATIVES LINKED 1H-BENZIMIDAZOLE**
Çelik I., Kılıçgil G.
International Symposium on Pharmaceutical Sciences (ISOPS-12), Ankara, Türkiye, 26 Haziran 2018 - 29 Mayıs 2019, ss.384-385
- II. **Molecular Docking Studies of Some Novel Benzimidazole Derivatives as EGFR Inhibitors**
Alp A. S. , Çelik I., Kılıçgil G.
International Symposium on Pharmaceutical Sciences (ISOPS-12), Ankara, Türkiye, 26 Haziran 2018 - 29 Mayıs 2019, ss.400
- III. **SYNTHESIS OF SOME 1H-BENZIMIDAZOLE COMPOUNDS BEARING BIS-THIOSEMICARBAZIDE AND TRIAZOLE DERIVATIVES AS INHIBITORS OF EGFR TYROSINE KINASE**
Çelik I., Kılıçgil G., Güven B., Kara Z., Beşikci A.
International Symposium on Pharmaceutical Sciences (ISOPS-12), Ankara, Türkiye, 26 - 29 Haziran 2018, ss.384
- IV. **SYNTHESIS OF SOME 1H-BENZIMIDAZOLES CONTAINING CYCLOHEXYL SUBSTITUTED THIOSEMICARBAZIDES, TRIAZOLES, THIADIAZOLES AS INHIBITORS OF EGFR TYROSINE KINASE**
ÇELİK İ., KILCIĞİL G., Kara Z., GÜVEN B., BEŞİKCİ A.

GPSS2017, 11 - 13 Ekim 2017

V. SYNTHESIS OF SOME THIADIAZOLE/TRIAZOLE LINKED 1H-BENZIMIDAZOLE DERIVATIVES AS INHIBITORS OF EGFR TYROSINE KINASE

Çelik I., Kılıçgil G., Kara Z., Güven B., Beşikci A.

2nd International Gazi Pharma Symposium Series (GPSS-2017), Ankara, Türkiye, 11 - 13 Ekim 2017, ss.249

VI. Synthesis of Some 1H-Benzimidazoles as Inhibitors of EGFR Tyrosine Kinase

Çelik I., Kılıçgil G., Beşikci A.

ICPC 2016 : International Conference on Physical Chemistry, Kobenhavn, Danimarka, 27 - 28 Haziran 2016, cilt.10, sa.6

VII. The cytotoxic effects of Chrysophthalmum dichotomum on A549 and HepG2 cell lines

AYCAN M. B. , DOKUMACI A. H. , AKŞİT A. , ÇELİK İ. , GÜRBÜZ P.

2nd Anticancer Agents Congress, Muğla, Türkiye, 23 - 25 Nisan 2014

Desteklenen Projeler

EROL M., PÜSKÜLLÜ M. O. , ÇELİK İ., DEMİRPOLAT E., ARPACI Ö., TÜBİTAK Projesi, BENZOKSAZOL YAPISI TAŞIYAN BAZI YENİ BİLEŞİKLERİN TASARIMI, MOLEKÜLER DOCKING ÇALIŞMASI, SENTEZİ İLE EGFR ve VEGFR-2 KINAZ AKTİVİTELERİ ÜZERİNE ETKİLERİNİN DEĞERLENDİRİLMESİ, 2020 - Devam Ediyor

Uzunhisarcıklı E., Çelik İ., Aycan M. B. , Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Virtual Screening ve Moleküler Docking Çalışmaları ile Doğal Yapılı Bileşiklerin Tespiti ve in vitro Alzheimer Modelinde Tau Düzeyi Üzerine Etkilerinin Değerlendirilmesi, 2020 - 2021

Erol M., Çelik İ., Uzunhisarcıklı E., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Bazı Yeni 2,5-Disübstitüe Benzoksazol Türevi Bileşiklerin Sentezi Yapılarının Aydınlatılması ve MCF-7 Hücre Hattında İn Vitro Sitotoksik Etkisinin İncelenmesi, 2020 - 2021

Erol M., Arpacı Ö., Püsküllü M. O. , Demirpolat E., Çelik İ., TÜBİTAK Projesi, Benzoksazol Yapısı Taşıyan Bazı Yeni Bileşiklerin Tasarımı, Moleküler Docking Çalışması, Sentezi İle EGFR ve VEGFR-2 Kinaz Aktiviteleri Üzerine Etkilerinin Değerlendirilmesi, 2020 - 2021

Püsküllü M. O. , Erol M., Çelik İ., Fatullayev H., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Yeni Bazı Kinolin 3-Karbaldehit Hidrazon Türevlerinin Sentezi Yapılarının Aydınlatılması Antimikrobiyal Etkilerinin Değerlendirilmesi ve Moleküler Docking Çalışmaları, 2019 - 2020

Erol M., Arpacı Ö., Püsküllü M. O. , Çelik İ., Fatullayev H., Hızlısoy H., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Bazı Yeni Benzoksazol Türevi Bileşiklerin Sentezi, Moleküler Docking Çalışmaları ve Antimikrobiyal Etkilerinin Değerlendirilmesi, 2019 - 2020

PÜSKÜLLÜ M. O. , ÇELİK İ., FATULLAYEV H., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Yeni Bazı Kinolin 3-Karbaldehit Hidrazon Türevlerinin Sentezi, 2019 - 2019

EROL M., ÇELİK İ., FATULLAYEV H., Yükseköğretim Kurumları Destekli Proje, Bazı Yeni 2-Merkapto Pirimidin Türevlerinin Sentezi, 2019 - 2019

Bilimsel Hakemlikler

COMPUTERS IN BIOLOGY AND MEDICINE, SCI Kapsamındaki Dergi, Haziran 2021

JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, SCI Kapsamındaki Dergi, Şubat 2021

Kongre ve Sempozyum Katılımı Faaliyetleri

2nd International Gazi Pharma Symposium Series (GPSS-2017), Katılımcı, Ankara, Türkiye, 2017

XII. Türk Eczacılık Tarihi Toplantısı, Katılımcı, Eskişehir, Türkiye, 2016

Atıflar

Toplam Atıf Sayısı (WOS):59

h-indeksi (WOS):5

Burslar

2211-C Yurt İi ncelikli Alanlar Doktora Burs Programı, TBİTAK, 2016 - 2018