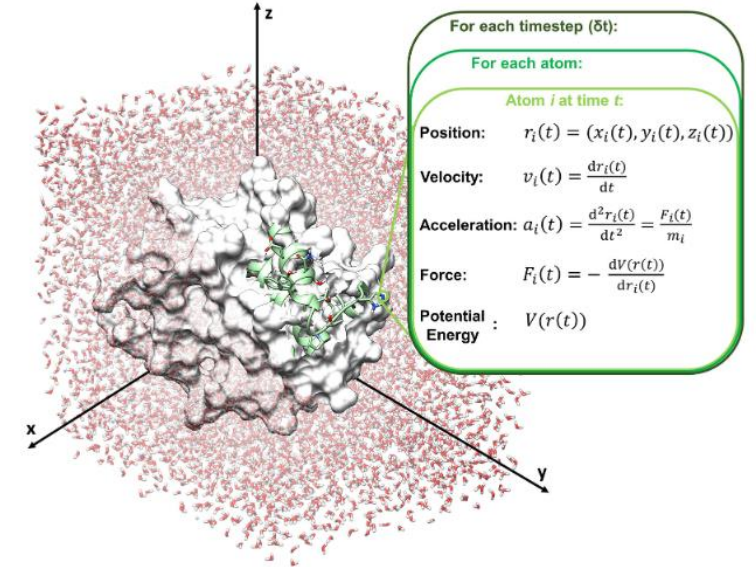


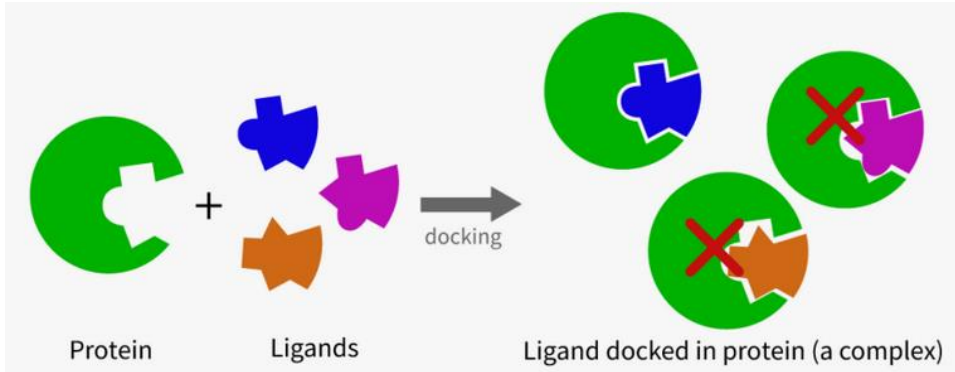
Berna Doğan Araştırma Konuları

❑ Bilgisayarlı modelleme yöntemleri ile ilaç keşfi ve tasarımı

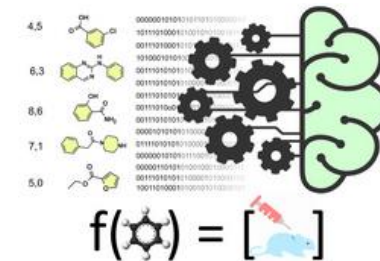
- Ligand bazlı: QSAR, farmakofor modelleme
- Yapı bazlı: moleküler kenetleme, moleküler dinamik (MD)
- Sanal taramalar (virtual screening)
- İlaç yeniden yerleştirilmesi – drug repurposing



MD simulations



Descriptor Calculation

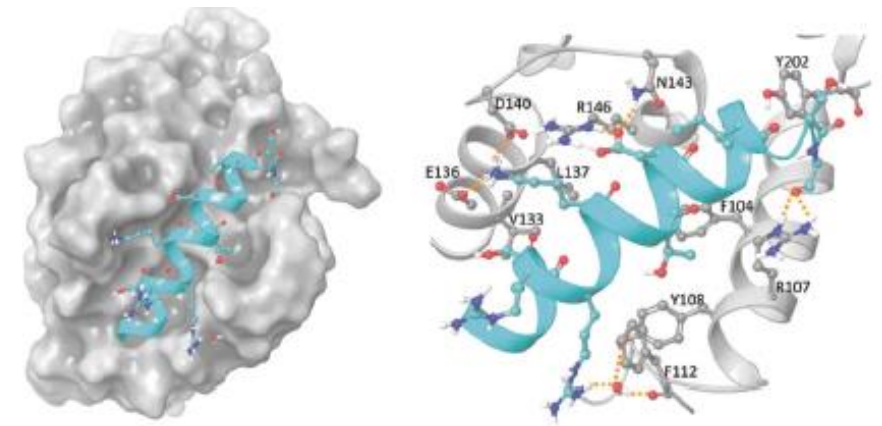


QSAR modeling

Berna Doğan Araştırma Konuları

❑ Protein yapılarının konformasyonel analizleri

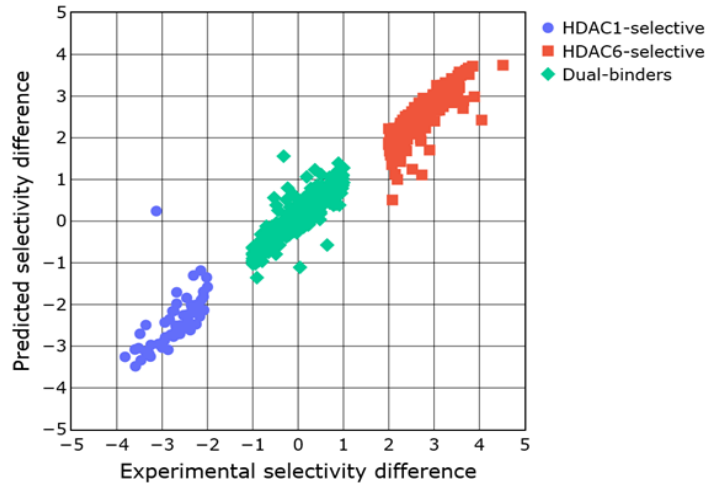
- Protein-ligand ve protein-protein etkileşimleri
- Homoloji modelleri kurulması ve doğrulanması



Protein-protein interaction analysis

❑ Makine öğrenmesi modellerinin kurulması

- Derin öğrenme ile molekül seçicilik tahmini
- Doking, MD ve makine öğrenmesinin birleştirilmesi – aktif öğrenme



Selectivity prediction

