DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (saat/hafta)	Türü (Z / S)	Yerel Kredi	AKTS
Protein Hareketleri	CSE 605	Güz-Bahar	03+00+00	Seçmeli	3	7.5

Akademik Birim:	Hesaplamalı Bilimler ve Mühendislik
Öğrenim Türü:	Örgün Eğitim
Ön Koşullar	Yoktur.
Öğrenim Dili:	İngilizce
Dersin Düzeyi:	Doktora
Dersin Koordinatörü:	Ebru Demet AKDOĞAN
Dersin Amacı:	Bu dersin amacı proteinlerin dinamik özelliklerini tanıtmaktır. Aynı zamanda, protein katlanması, bağlanma ve agregasyon (yığılma) dengesi ve kinetiği gibi protein yapısı hakkında temel yapısal özelliklere değinmektedir.Proteinlerin işlevlerini regüle etmede kritik bir rol oynayan bir yapısal özellik olan allosteri kavramı tanıtılacaktır. Proteinlerin hareketlerini anlamaya yardımcı olan hesaplamalı simülasyonlar ve bu simülasyonlarda kullanılan temel kavramlar ve modeller anlatılacaktır.
Dersin İçeriği:	Ders, proteinlerin etkileyici hareket ve mekanizmalarına genel bir bakış ile başlayacaktır. Bunu takiben, protein katlanmasında denge ve katlanmanın ardındaki itici güçler ve diğer dinamik olaylar anlatılacaktır. Helix-coil (sarmal-yay) dönüşümleri ve amiloid topaklanması gibi kooperatif konformasyonel değişimler tartışılacaktır. Ardından, protein dinamik özelliklerinden en önemlisi olan allosteri kavramı anlatılacaktır. Dersin ikinci bölümünde bilgisayar ortamında modelleme ve simülasyon çalışmalarının temelleri ve uygulamaları tanıtılacaktır. Son olarak, protein dinamiğindeki kollektif hareketler elastik ağ modeli ile çözümlenecektir.
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):	• **1-** Protein hareket ve mekanizması ile ilgili bilgi sahibi olmak • **2-** Protein katlanması, dengesi ve ardında yatan itici kuvvetler hakkında bilgi sahibi olmak • **3-** Kooperatif konformasyonel değişimler hakkında bilgi sahibi olmak • **4-** Proteinlerde allosteri hakkında bilgi sahibi olmak • **5-** Bilgilsayarda simülasyon teknikleri ve konformasyonel analiz hakkında bilgi sahibi olmak • **6-** Moleküler Dinamik simülasyonu yapabilmek • **7-** Kollektif hareketler ve elastik ağ modeli hakkında bilgi sahibi olmak
Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri	İki ara sınav, bir final ve bir dönem projesi

HAFTALIK PROGRAM

Hafta	Konular	Ön Hazırlık	ÖÇ
1	Protein Hareketleri ve Mekanizmasına Giriş	İlgili konunun okunması	1
2	Proje hakkında bilgilendirme	Proje ile ilgili yazılım programlarının yüklenmesi	1
3	Protein katlanması, dengesi ve ardında yatan itici kuvvetler	İlgili konunun okunması	2
4	Kooperatif konformasyonel değişimler	İlgili konunun okunması	3
5	Proteinlerde allosteri	İlgili konunun okunması	4
6	Proje hakkında bilgilendirme	Proje üstünde çalışma	5
7	Bilgilsayarda simülasyon teknikleri	İlgili konunun okunması	5,6
8	Ara Sınav 1	İlk 7 hafta boyunca anlatılan konuların tekrarı	1-5

9	Konformasyonel Analiz	İlgili konunun okunması	6
10	Proje hakkında bilgilendirme	Proje üstünde çalışma	1 - 6
11	Kollektif Hareketler	İlgili konunun okunması	7
12	Elastik Ağ Modeli	İlgili konunun okunması	7
13	Proje hakkında bilgilendirme	Proje üstünde çalışma	1-7
14	Ara Sınav 2	Son 5 hafta boyunca anlatılan konuların tekrarı	1-7

Kadir Has Üniversitesi'nde bir dönem 14 haftadır, 15. ve 16. hafta sınav haftalarıdır.

ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

Protein Actions: Principles and Modeling, by I. Bahar, RL Jernigan, KA Dill, Garland Science, 2017

DİĞER KAYNAKLAR

Normal Mode Analysis: Theory and Applications to Biological and Chemical Systems, by Q Cui and I. Bahar, editors, Chapman & Hall/CRC Press, 2006

DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

Yarıyıl İçi Çalışmaları	**Sayı**	**Katkı Payı (%)**
Katılım	14	2
Proje	1	25
Sunum/Jüri	1	8
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	2	25
Final Sınavı	1	40
Total:	**19**	**100**

İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

Etkinlikler	**Sayısı**	**Süresi (saat)**	**Toplam İş Yükü (saat)**
Ders Saati	14	3	42
Proje	1	39.5	39.5
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	2	33	66
Final Sınavı	1	40	40
Toplam İş Yükü (saat):			**187.5**

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

PROGRAM YETERLİLİKLERİ (PY) ve ÖĞRENME ÇIKTILARI (ÖÇ) İLİŞKİSİ

#	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8	PY9	PY10
OC1										
OC2										
OC3										
OC4										
OC5										
OC6										
OC7										

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek