

DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

| Dersin Adı | Kodu | Yarıyıl | T+U+L (saat/hafta) | Türü (Z / S) | Yerel Kredi | AKTS |
|-------------------------------------|--|-----------|-----------------------|--------------|-------------|------|
| Moleküler Modelleme ve Simülasyon | MBG 320 | Güz-Bahar | 03+00+00 | Seçmeli | 3 | 5 |
| Akademik Birim: | Moleküler Biyoloji ve Genetik | | | | | |
| Öğrenim Türü: | Örgün Eğitim | | | | | |
| Ön Koşullar | Yok | | | | | |
| Öğrenim Dili: | İngilizce | | | | | |
| Dersin Düzeyi: | Lisans | | | | | |
| Dersin Koordinatörü: | -- | | | | | |
| Dersin Amacı: | Bu dersin amacı potansiyel enerji yüzeyleri, Moleküler Mekanik modelleri, enerji minimizasyonu, periyodik sınır koşulları ve konformasyonel analiz gibi moleküler modelleme ve simülasyonun en temel kavramlarını aktarırken, Moleküler Dinamik ve Monte Carlo gibi en önemli iki simülasyon tekniğini öğretmektir. | | | | | |
| Dersin İçeriği: | İlk derste, biyolojik moleküllerin yapı ve modellemesi için şimdiye kadar yapılmış araştırmaların bir özeti sunulacaktır. Ardından, moleküler mekanik modelinin temel yapısı gösterilecektir. Bunu takiben, enerji minimizasyon ve konformasyonel analiz yöntemleri hakkında ayrıntılı bilgi verilecek, Moleküler Dinamik ve Monte Carlo simülasyon teknikleri tanıtılacaktır. | | | | | |
| Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ): | <ul style="list-style-type: none">1- Biyolojik moleküllerin yapı ve modellemesi hakkında temel bilgi2- Moleküler Mekanik hakkında bilgi sahibi olmak3- Enerji minimizasyon hakkında bilgi sahibi olmak4- Bilgisayarda simülasyon yöntemlerini uygulayabilmek5- Moleküler Dinamik simülasyonu yapabilmek6- Monte Carlo simülasyonu yapabilmek7- Konformasyonel analiz hakkında bilgi sahibi olmak | | | | | |
| Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri | İki ara sınav, bir final ve bir dönem projesi | | | | | |

HAFTALIK PROGRAM

| Hafta | Konular | Ön Hazırlık |
|-------|--|--|
| 1 | Biyolojik moleküllerin yapı ve modellemesi: Tarihsel Bakış | İlgili konunun okunması |
| 2 | Proje hakkında bilgilendirme | Proje ile ilgili klavuzların okunması, yazılım programlarının yüklenmesi |
| 3 | Moleküler Mekanik | İlgili konunun okunması |
| 4 | Enerji minimizasyon | İlgili konunun okunması |
| 5 | Bilgisayarda simülasyon yöntemleri | İlgili konunun okunması |
| 6 | Proje hakkında bilgilendirme | Proje üstünde çalışma |
| 7 | Moleküler Dinamik simülasyonu | İlgili konunun okunması |
| 8 | Ara Sınav 1 | İlk 7 hafta boyunca anlatılan konuların tekrarı |
| 9 | Moleküler Dinamik simülasyonu | İlgili konunun okunması |
| 10 | Proje hakkında bilgilendirme | Proje üstünde çalışma |
| 11 | Monte Carlo simülasyonu | İlgili konunun okunması |
| 12 | Konformasyonel analiz | İlgili konunun okunması |
| 13 | Proje hakkında bilgilendirme | Proje üstünde çalışma |

| | | |
|----|-------------|---|
| 14 | Ara Sınav 2 | Son 5 hafta boyunca anlatılan konuların tekrarı |
|----|-------------|---|

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

ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

Molecular Modeling and Simulation: and interdisciplinary guide, by Tamar Schlick, 2002 NY Springer.

DİĞER KAYNAKLAR

Molecular Modeling: Principles and Applications, by A.R. Leach, 2nd edition, Pearson Education Limited 2001.
Understanding Molecular Simulation, by D. Frenkel and B. Smith, 2nd edition, Academic Press 2001.

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 Yüğü (saat) |
|---|--------|---------------|-----------------------|
| Ders Saati | 14 | 3 | 42 |
| Proje | 1 | 25 | 25 |
| Sunum/Jüriye Hazırlık | 1 | 8 | 8 |
| Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar | 2 | 15 | 30 |
| Final Sınavı | 1 | 20 | 20 |
| Toplam İş Yüğü (saat): | | | 125 |

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

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

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

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek