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):	• **1-** Biyolojik moleküllerin yapı ve modellemesi hakkında temel bilgi • **2-** Moleküler Mekanik hakkında bilgi sahibi olmak • **3-** Enerji minimizasyon hakkında bilgi sahibi olmak • **4-** Bilgisayarda simülasyon yöntemlerini uygulayabilmek • **5-** Moleküler Dinamik simülasyonu yapabilmek • **6-** Monte Carlo simülasyonu yapabilmek • **7-** 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 Yükü (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 Yükü (saat):			**125**

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

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

#	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8	PY9	PY10	PY11
OC1											
OC2											
OC3											
OC4											
OC5											
OC6											
OC7											

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek