

# DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

| Dersin Adı                                                         | Kodu                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Yarıyıl | T+U+L<br>(saat/hafta) | Türü (Z / S) | Yerel Kredi | AKTS |
|--------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|-----------------------|--------------|-------------|------|
| Biyomoleküllerin Bütünleştirici Modellenmesinde DeneySEL Yöntemler | CSE 624                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Bahar   | 03+00+00              | Seçmeli      | 3           | 7.5  |
| Akademik Birim:                                                    | Hesaplamalı Bilimler ve Mühendislik Doktora Programı                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |         |                       |              |             |      |
| Öğrenim Türü:                                                      | Örgün Eğitim                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |         |                       |              |             |      |
| Ön Koşullar                                                        | Mevcut değil                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |         |                       |              |             |      |
| Öğrenim Dili:                                                      | İngilizce                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |         |                       |              |             |      |
| Dersin Düzeyi:                                                     | Doktora                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |         |                       |              |             |      |
| Dersin Koordinatörü:                                               | Bengü ÖZÜĞÜR UYSAL                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |         |                       |              |             |      |
| Dersin Amacı:                                                      | Dersin amacı, deneysel metotlarla yapılan ölçümlerin sonuçlarından yararlanarak biyomoleküllerin yapısını doğru bir biçimde modelleyebilmek için gerekli bilgileri öğrencilere öğretmek, onları bütünleştirici uygulamalarla konuya yaklaştırmaktır.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |         |                       |              |             |      |
| Dersin İçeriği:                                                    | Biyomoleküllerin yapısını modellemek için bütünleştirici, bilgi odaklı hesaplamalı yöntemlerin kullanımının yanında; X-ışını kristalografisi, SAXS, nükleer manyetik rezonans (NMR) spektroskopisi, kütle spektroskopisi (Mass Spect.), FRET mikroskopisi ve kriyo-elektron mikroskopu (kriyo-EM) gibi deneysel yapısal biyoloji teknikleri ile elde edilen sonuçların da birlikte değerlendirilmesi gerekmektedir. Bu sayede, yüksek karmaşıklıkta sistemleri incelenmesi ile birlikte mevcut hesaplama teknikleri kullanılarak üretilen yapısal modellerin doğruluğu test edilebilir. Bu ders kapsamında, bütünleştirici ve/veya bilgi odaklı yaklaşımların ve platformların kullanımının nasıl son derece doğru yapısal modeller üretebileceğini örnekleyen son çalışmalar öğrencilerle birlikte incelenecektir. Öğrencilerden ders kapsamında kendi araştırmalarını da sunmaları istenecek ve kendi araştırma problemlerini çözmeleri konusunda tartışmalar yapılarak çözüm yolları önerilecektir. |         |                       |              |             |      |
| Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):                                     | <ul style="list-style-type: none"><li>1- NMR, Kütle spektroskopisi, SAXS, XRD, FRET mikroskopisi, cryo-EM gibi deneysel yöntemlerin temellerini anlamak.</li><li>2- Biyomoleküllerin deneysel yöntemlerle yapısal tayini ve deney bulguları kullanılarak modellenmesi ile ilgili çalışmaları öğrenmek.</li><li>3- Çoklu deneysel yaklaşımları birleştirme becerisini geliştirmek.</li></ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |         |                       |              |             |      |
| Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri                                | Dersler, Ödevler, Projeler, Dönem Projesi Sunumları, Sınavlar                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |         |                       |              |             |      |

## HAFTALIK PROGRAM

| Hafta | Konular                                                                                                                   | Ön Hazırlık                | ÖÇ   |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|------|
| 1     | XRD, Bragg yasası                                                                                                         | İlgili materyalin okunması | 1, 2 |
| 2     | Kristal simetrisi, ters örgü, protein kristalizasyonu                                                                     | İlgili materyalin okunması | 1, 2 |
| 3     | Pymol kullanarak protein yapısını görselleştirme, Floresans rezonans enerji transferi (FRET) yardımıyla yapısal modelleme | İlgili materyalin okunması | 1, 2 |
| 4     | X-ışını Serbest Elektron Lazerleri (XFEL) Kullanarak Biyolojik Yapıyı ve İşlevini Keşfetmek                               | İlgili materyalin okunması | 1, 2 |
| 5     | Küçük açılı X-ışını Saçılımı (SAXS)                                                                                       | İlgili materyalin okunması | 1, 2 |
| 6     | NMR'nin temelleri. Geçişler, enerji seviyeleri, spin birleştirme, kimyasal kayma                                          | İlgili materyalin okunması | 1, 2 |

|    |                                                                                           |                            |         |
|----|-------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|---------|
| 7  | Arasınnav                                                                                 | Sınav hazırlığı            | 1, 2    |
| 8  | Fourier dönüşümü ve veri işleme. Çok boyutlu NMR, COSY. Biyomoleküler NMR Spektroskopisi  | İlgili materyalin okunması | 1, 2    |
| 9  | Faz problemini çözme: izomorf yer değiştirme, anormal kırınım ve moleküler yer değiştirme | İlgili materyalin okunması | 1, 2    |
| 10 | Kütle Spektroskopisi, veri işleme                                                         | İlgili materyalin okunması | 1, 2    |
| 11 | Kriyo-elektron mikroskobu                                                                 | İlgili materyalin okunması | 1, 2, 3 |
| 12 | Kriyo-EM ile makromoleküler komplekslerin 3 boyutlu yapı tayini                           | İlgili materyalin okunması | 3       |
| 13 | Bütünleştirici Modelleme                                                                  | İlgili materyalin okunması | 3       |
| 14 | Öğrenci Sunumları                                                                         | Sunum Hazırlığı            | 1, 2, 3 |

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

## ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

Integrative Structural Biology with Hybrid Methods (Advances in Experimental Medicine and Biology, 1105), Haruki Nakamura, Gerard Kleywegt, Stephen K. Burley, John L. Markley, Springer 2018.

## DİĞER KAYNAKLAR

Systems Biology: Integrative Biology and Simulation Tools, Ales Prokop, Bela Csukas, Springer 2015.

E-kitaplar:

- Biomolecular Nmr Spectroscopy, Dingley, A. J., Pascal, Steven M., Dingley, Andrew J., IEEE, 2011.
- Spectroscopy of Biological Molecules : Proceedings From the 14th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, Haris, P. I., Carvalho, Luís A. E. Batista de, Marques, Maria Paula, IOS Press, 2011.

Jove videoları ve makaleleri

Ek okumalar, çıktı olarak ve dergi makaleleri şeklinde verilecektir.

## DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

| Yarıyıl İçi Çalışmaları                   | Sayı      | Katkı Payı (%) |
|-------------------------------------------|-----------|----------------|
| Katılım                                   | 14        | -              |
| Proje                                     | 1         | 15             |
| Ödev                                      | 2         | 10             |
| Sunum/Jüri                                | 1         | 10             |
| Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar | 1         | 25             |
| Final Sınavı                              | 1         | 40             |
| <b>Total:</b>                             | <b>20</b> | <b>100</b>     |

## İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

| Etkinlikler                               | Sayısı | Süresi (saat) | Toplam İş Yüğü (saat) |
|-------------------------------------------|--------|---------------|-----------------------|
| Ders Saati                                | 14     | 3             | 42                    |
| Proje                                     | 1      | 28            | 28                    |
| Ödev                                      | 2      | 10            | 20                    |
| Sunum/Jüriye Hazırlık                     | 1      | 20            | 20                    |
| Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar | 1      | 30            | 30                    |
| Final Sınavı                              | 1      | 47.5          | 47.5                  |
| <b>Toplam İş Yüğü (saat):</b>             |        |               | <b>187.5</b>          |

1 AKTS = 25 saatlik iş yüğü

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

| #   | PY1 | PY2 | PY3 | PY4 | PY5 | PY6 | PY7 | PY8 | PY9 | PY10 | PY11 | PY12 |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|------|------|
| OC1 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |      |
| OC2 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |      |
| OC3 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |      |      |

**Katkı Düzeyi:** 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek