

DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (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 ÖZUĞUR 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">1- NMR, Kütle spektroskopisi, SAXS, XRD, FRET mikroskopisi, cryo-EM gibi deneysel yöntemlerin temellerini anlamak.2- Biyomoleküllerin deneysel yöntemlerle yapısal tayini ve deney bulguları kullanılarak modellenmesi ile ilgili çalışmaları öğrenmek.3- Çoklu deneysel yaklaşımları birleştirme becerisini geliştirmek.					
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	Arasınava	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
Total:	20	100

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
Toplam İş Yüğü (saat):			187.5

1 AKTS = 25 saatlik iş yüğü

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

#	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8	PY9	PY10
OC1										
OC2										
OC3										

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek