# DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

| Dersin Adı | Kodu | Yarıyıl | T+U+L (saat/hafta) | Türü (Z / S) | Yerel Kredi | AKTS |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Biyolojik Sistemlerde Kuantum Modelleri | CSE 521 | Güz | 03+00+00 | Seçmeli | 3 | 7.5 |

| | |
|---|---|
| Akademik Birim: | Hesaplamalı Bilimler ve Mühendislik YL |
| Öğrenim Türü: | Örgün Eğitim |
| Ön Koşullar | Yok |
| Öğrenim Dili: | Türkçe |
| Dersin Düzeyi: | Yüksek Lisans |
| Dersin Koordinatörü: | ONUR PUSULUK |
| Dersin Amacı: | Bu ders, kuantum bilimi ve teknolojilerinde kullanılan modern hesapsal yaklaşımların biyolojik süreçlerin modellenmesine nasıl uygulanabileceğini göstermeyi amaçlamaktadır. Dersin temel hedefi, hesaplamalı bilimler ve mühendislik alanlarında yüksek lisans eğitimi alan öğrencilere, biyomoleküler süreçleri atomik çözünürlükte ve kimyasal bağların oluşum/yıkılım süreleriyle uyumlu bir zaman ölçeğinde simüle etmek için gerekli kavramsal ve teknik araçları kazandırmaktır. Bu çerçevede, kuantum çarpışma modelleri, kuantum master denklemleri ve termodinamiğin kuantum kaynak teorisi gibi hesaplamalı modelleme yaklaşımları detaylı olarak ele alınacaktır. Dersin sonunda öğrenciler, karmaşık biyolojik sistemlerdeki kuantum olgularını analiz edebilecek, simülasyon araçlarını kullanarak araştırma soruları geliştirebilecek ve bu alanda özgün projeler tasarlayabilecek düzeye ulaşacaklardır. |
| Dersin İçeriği: | 1. Atomik Ölçekli Simülasyonlara Giriş:<br>Kuantum süperpozisyon olgusu ile bağ oluşumu ve kırınımı süreçlerinin hesaplamalı tasviri.<br>2. Açık Sistem Dinamiklerinin Modellemesi:<br>Kuantum çarpışma modelleri ve Lindblad denklemleri ile çevre-etkileşimli dinamikler.<br>3. Kuantum Termodinamik ve Kaynak Teorisi:<br>Entropi, majorizasyon, serbest enerji ve termomajorizasyon kavramları ile enerji/madde/bilgi korunum yasaları.<br>4. Kuantum Etkilerin Hesaplamalı Gösterimi:<br>Enzim katalizi, koku, görme, manyetik duyum ve karar verme gibi biyokimyasal süreçleri modelleme görevleri.<br>5. Simülasyon Uygulamaları:<br>Python, QuTiP, Julia, Mathematica ya da Matlab tabanlı projelerde açık sistem dinamiklerinin implementasyonu.<br>6. Özgün Proje Geliştirme:<br>Kendi seçtikleri bir biyolojik sistemde kuantum etkileri araştıran mini proje. |
| Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ): | • **1-** Biyomoleküler süreçlerde bağ oluşumu ve yıkılımını kuantum süperpozisyon açısından yorumlayabilmek.<br>• **2-** Açık sistem kuantum dinamiklerini modellemek için çarpışma modelleri ve master denklemlerini uygulayabilmek.<br>• **3-** Termodinamiğin kuantum kaynak teorisine dayalı kavramlarını (entropi, serbest enerji, majorizasyon) kullanarak biyolojik sistemleri analiz edebilmek.<br>• **4-** Hesaplamalı araçlar (Python, QuTiP, Julia, Mathematica, MATLAB) kullanarak açık sistem simülasyonları gerçekleştirebilmek.<br>• **5-** Seçilen biyokimyasal sistemdeki kuantum etkileri modelleyip yorumlayabilecek özgün bir araştırma projesi geliştirebilmek.<br>• **6-** Kuantum biyoloji alanındaki araştırma makalelerini eleştirel biçimde okuyup, ilgili araştırma sorularını formüle edebilmek. |
| Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri | Kod Tabanlı Uygulamalar: Haftalık derslerde ele alınan açık sistem dinamiklerinin basit modelleri Python, Julia, Mathematica veya MATLAB ortamlarında uygulanır. Öğrencilerin bu uygulamaları kendi sistemlerine adapte etmeleri beklenir. Eleştirel Makale Okumaları: Kuantum biyolojisi literatüründen seçilmiş araştırma makaleleri öğrenciler tarafından haftalık olarak okunur ve derste tartışılır. Bu tartışmalarda hem kuramsal hem de hesaplamalı yaklaşım değerlendirilir. Araştırma Projesi: Dönem sonunda, öğrenciler kendi belirledikleri bir biyosistemde kuantum etkilerini içeren bir problem üzerine kısa bir araştırma projesi geliştirir. Projeler kod çıktıları, kısa bir rapor ve sınıf içi sunumdan oluşur. Sunumlar: Öğrenciler bireysel veya grup halinde bir araştırma makalesini seçerek son 3 hafta içinde sınıfa sunar. Sunumlar derinlemesine analiz, modelleme önerisi ve olası deneysel doğrulamalar içerecek şekilde yapılandırılır. Sınıf İçi Tartışmalar: Özellikle makale sunumlarından sonra öğrencilerin tartışmalara aktif katılımı teşvik edilir. Bu bölümde eleştirel düşünme ve bilimsel yorum yapma becerileri öne çıkar. |

## HAFTALIK PROGRAM

| Hafta | Konular | Ön Hazırlık |
|---|---|---|
| 1 | Kuantum Süperpozisyon ve Kimyasal Bağlar: Atomik ve moleküler orbitallerin fiziksel yorumu; süperpozisyon olgusunun kimyasal bağ oluşumu ve kırınımındaki rolü. | Ders kitabı 1 ve derleme makale 1'den ilgili bölümlerin okunması |
| 2 | Moleküler Yapı ve Biyolojik İşlev: Su, protein, DNA ve enzimlerdeki bağ türleri ve işlevsel yapı ilişkisi. Yapı-işlev etkileşiminin atomik ölçekte oyuncak modellerle betimlenmesi. | Ders kitabı 1 ve derleme makale 2'den ilgili bölümlerin okunması |
| 3 | Yoğunluk Matrisi ve Karışık Durumlar: Saf ve karışık durum ayrımı; sistem–alt sistem ayırımı. Yoğunluk matrisi üzerinden kuantum ilinti hesaplamalarına giriş. | Ders kitabı 2 ve derleme makaleler 3'ten ilgili bölümlerin okunması |
| 4 | Kuantum ilintileri: Dolaşıklık ve Uyuşmazlık: Kuantum dolaşıklık ve kuantum uyuşmazlık kavramları. Bu ilintilerin ölçülmesi ve yorumlanması. | Ders kitabı 2 ve derleme makale 4'ten ilgili bölümlerin okunması |
| 5 | Açık Sistem Dinamiğine Giriş: Sistem–çevre ayrımı, eşevresizlik ve termalizasyon süreçleri. Açık sistem dinamiklerine dair temel kavramsal ve matematiksel çerçeve. | Ders kitapları 2 & 3 ve derleme makale 5'ten ilgili bölümlerin okunması |
| 6 | Kuantum Çarpışma Modelleri: Tekrarlayan sistem–çevre etkileşimleriyle bilgi ve enerji değişimi. Bu modellerin açık sistem simülasyonlarıyla bağlantısı. | Ders kitapları 2 & 3 ve derleme makale 6'dan ilgili bölümlerin okunması |
| 7 | Lindblad Master Denklemleri: Markovian ve non-Markovian açık sistem dinamiklerinin biyolojik süreçlerdeki rolü. Lindblad formalizminin türetilmesi ve sayısal çözüm yöntemleri. | Ders kitapları 2 & 3 ve derleme makale 7'den ilgili bölümlerin okunması |
| 8 | Kaynak Teorisi ve Termodinamik Sınırlar: Entropi ve serbest enerji tabanlı termodinamik dönüşümlerin majorizasyon ve termomajorizasyon kavramlarıyla dengeden uzak sistemlere genellenmesi. | Ders kitapları 2 & 3 ve derleme makale 8'den ilgili bölümlerin okunması |
| 9 | Görsel Sistemler ve Manyetik Duyum: – Fotoizomerizasyon ve görme duyusunda kuantum etkiler – Işığa duyarlı radikal çift mekanizması ve manyetik duyumda kuantum etkiler | Ders kitabı 4'ten ilgili bölümlerin ve seçilen araştırma makalesinin okunması |
| 10 | Moleküler Tanıma ve Enzim Kinetiği: – Moleküler tanıma ve koku duyusunda kuantum etkiler – Enzim katalizi ve DNA replikasyonunda kuantum etkiler | Ders kitabı 4'ten ilgili bölümlerin ve seçilen araştırma makalesinin okunması |
| 11 | Kuantum Biliş: – Bilişsel ve karar verme süreçlerinde kuantum etkiler – Kuantum bilinç modelleri | Ders kitabı 4'ten ilgili bölümlerin ve seçilen araştırma makalesinin okunması |
| 12 | Öğrenci Sunumları I ve serbest tartışma | |
| 13 | Öğrenci Sunumları II ve serbest tartışma | |
| 14 | Öğrenci Sunumları III ve serbest tartışma | |

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

## ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

1. The Nature of the Chemical Bond, Edition: 2 (ISBN: 9783527252176)
Yazar: Pauling, L.
Yayıncı: Cornell University Press (Year: 1960)
Malzeme türü: Önerilen
2. Quantum Computation and Quantum Information, Edition: 10 (ISBN: 978-1107002173)
Yazar: Nielsen, M., & Chuang, I.
Yayıncı: Cambridge University Press (Year: 2010)
Malzeme türü: Önerilen
Ek notlar: (Bölümler 2.1 – 2.4 & 8)
3. The Theory of Open Quantum Systems, Edition: 1 (ISBN: 978-0198520634)
Yazar: Breuer, H., & Petruccione, F.
Yayıncı: Oxford University Press (Year: 2002)
Malzeme türü: Önerilen
Ek notlar: (Bölümler 3 & 4)
4. Quantum Effects in Biology, Edition: 1 (ISBN: 978-1-107-01080-2)
Yazar: Mohseni, M., vd.
Yayıncı: Cambridge University Press (Year: 2014)
Malzeme türü: Önerilen

## DİĞER KAYNAKLAR

1. F.A. Weinhold. (1999). Chemical Bonding as a Superposition Phenomenon. J. Chem. Edu. 76, 1141. (doi: 10.1021/ed076p1141)
2. F. Weinhold and R.A. Klein. (2014). What is a hydrogen bond? Resonance covalency in the supramolecular domain. Chem. Educ. Res. Pract.15, 276. (doi: 10.1039/c4rp00030g)
3. M.P. Mueller. (2021). Probabilistic theories and reconstructions of quantum theory. SciPost Phys. Lect. Notes 28. (doi: 10.21468/SciPostPhysLectNotes.28)
4. G. Adesso et al. (2016). Measures and applications of quantum correlations, J. Phys. A: Math. Theor. 49(47), 473001. (doi: 10.1088/1751-8113/49/47/473001)
5. W.H. Zurek (2003). Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. Rev. Mod. Phys. 75, 715. (doi: 10.1103/RevModPhys.75.715)
6. F. Ciccarello, S. Lorenzo, V. Giovannetti, and G. M. Palma (2022). Quantum collision models: Open system dynamics from repeated interactions. Physics Reports 954, 1. (doi: 10.1016/j.physrep.2022.01.001)
7. M. Cattaneo et al. (2019). Local versus global master equation with common and separate baths. New J. Phys. 21 113045. (doi: 10.1088/1367-2630/ab54ac)
8. M. Lostaglio (2019). An introductory review of the resource theory approach to thermodynamics. Rep. Prog. Phys. 82, 114001. (doi: 10.1088/1361-6633/ab46e5)

## DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

| Yarıyıl İçi Çalışmaları | Sayı | Katkı Payı (%) |
|---|---|---|
| Katılım | 14 | 10 |
| Proje | 1 | 25 |
| Ödev | 4 | 40 |
| Sunum/Jüri | 1 | 25 |
| **Total:** | **20** | **100** |

## İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

| Etkinlikler | Sayısı | Süresi (saat) | Toplam İş Yükü (saat) |
|---|---|---|---|
| Ders Saati | 14 | 3 | 42 |
| Proje | 1 | 20.8 | 20.8 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Ödev | 4 | 5 | 20 |
| Sunum/Jüriye Hazırlık | 1 | 20.8 | 20.8 |
| Dersle İlgili Sınıf Dışı Etkinlikler | 14 | 6 | 84 |
| **Toplam İş Yükü (saat):** | | | **187.6** |

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

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

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

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