

DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (saat/hafta)	Türü (Z / S)	Yerel Kredi	AKTS
Moleküler Modelleme ve Grafik	BIO 555	Bahar	03+00+00	Zorunlu	3	8
Akademik Birim:						
Öğrenim Türü:	Örgün eğitim					
Ön Koşullar	Yoktur					
Öğrenim Dili:	İngilizce					
Dersin Düzeyi:	Yüksek Lisans					
Dersin Koordinatörü:	Tuğba ÖZAL					
Dersin Amacı:	Moleküllerin değişik skalalarda Modellenmesi ve elde edilen verilerin grafik programları ile görüntülenerek analiz edilmesi					
Dersin İçeriği:	1. Moleküler Modellemede Temel Kavramlar 2. Hesaplamalı Kuantum Mekaniğine Giriş 3. İleri Ab initio metotları, Density Functional Teori ve Katı-Hal Kuantum Mekaniği 4. Ampirik Force Field Modelleri: Moleküler Mekanik 5. Enerji minimizasyonu ve Enerji Yüzeyini Taramada Kullanılan metotlar 6. Bilgisayarlı Simulasyon Metotları 7.Moleküler Dinamik Simulasyon Metotları 8. Monte Carlo Simulasyon Metotları 9. Konformasyonell Analiz 10. Protein Yapı Tahmini, Sekans analizi, ve Protein Katlanması 11. Moleküler Modellemede Dört Zorlayıcı Konu: Free Enerjiler, Çözünme, Reaksiyonlar ve Katı Hal Defektleri 12. Moleküler Modelleme ve Kemoinformatiğin Yeni Moleküllerin Keşfi ve Dizaynı için kullanılması 13. Grafik Programlarının görselleştirme ve analiz için kullanılması					
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):	• 1- Moleküllerin değişik skalalarda Modellenmesi • 2- Modelleme Girdi ve çıktıların grafik programları ile görüntülenmesi • 3- Moleküler Modelleme verilerinin grafik programları ve matematiksel yöntemler kullanılarak analiz edilmesi					
Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri	10 % Attendance and Homeworks 25 % 1st Midterm Exam 25 % 2nd Midterm Exam 40 % Final Exam There will be theoretic and Application parts in the exams.					

HAFTALIK PROGRAM

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Moleküler Modellemede gerekli kavramlar	
2	Moleküler Modelleme için gereken Matematiksel Kurallar	
3	Hesaplamalı Kuantum Mekaniğine Giriş	
4	Gelişmiş ab initio metotlar, Density Functional Teori ve Katı-Hal Kuantum Mekaniği	
5	Ampirik Force Field Modelleri: Moleküler Mekanik	
6	İlinci Ara Dönem Sınavı	
7	Enerji Minimizasyonu ve Enerji Yüzeyini Taraması ile ilgili diğer Metotlar	
8	Bilgisayar Simulasyon Metotları	
9	Moleküler Dinamik Simulasyon Metotları	

10	2inci Ara Dönem Sınavı	
11	Moleküler Modelleme Datasının Görselleştirilmesi ve Analizi	
12	Grafik Programlarının ileri Kullanımı	
13	Monte Carlo	
14	Final Sınavı	

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

ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

“Molecular Modelling Principles and Applications” Andrew R. Leach
2inci Baskı

DİĞER KAYNAKLAR

Text book
Softwares
Databases
Tutorials

DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

Yarıyıl İçi Çalışmaları	Sayı	Katkı Payı (%)
Katılım	14	5
Ödev	5	5
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	2	50
Final Sınavı	1	40
Total:	22	100

İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

Etkinlikler	Sayısı	Süresi (saat)	Toplam İş Yüğü (saat)
Ders Saati	14	3	42
Uygulama	14	5	70
Proje	1	10	10
Ödev	5	4	20
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	2	3	6
Final Sınavı	1	3	3
Toplam İş Yüğü (saat):			151

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

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

#
OC1
OC2
OC3

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek