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 görselleştime ve analiz için kullanılması
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):	• **1-** Moleküllerin değişik skalalarda Modellenmesi • **2-** Modelleme Girdi ve çıktılarının 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 theoric 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 metodlar, Density Functional Teori ve Katı-Hal Kuantum Mekaniği	
5	Ampirik Force Field Modelleri: Moleküler Mekanik	
6	1inci Ara Dönem Sınavı	
7	Enerji Minimizasyonu ve Enerji Yüzeyini Taranması ile ilgili diğer Metodlar	
8	Bilgisayar Simulasyon Metodları	
9	Moleküler Dinamik Simulasyon Metodları	

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

&#8220Molecular Modelling Principles and Applications&#8221 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 Yükü (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 Yükü (saat):			**151**

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

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

#	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8
OC1	3	3	3	2				3
OC2	3	3	3	2				3
OC3	3	3	3	2				3

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek