

GENEL TANIM / GENERAL DESCRIPTION

Ders Adı / Course Name	Molecular Modelling in Biological Systems / Molecular Modelling in Biological Systems	
Ders Kodu / Course Code	9101035252008	
Ders Türü / Course Type		
Ders Seviyesi / Course Level	Second Cycle / Second Cycle	
Ders Akts Kredi / ECTS	8.00	
Haftalık Ders Saati (Kuramsal) / Course Hours For Week (Theoretical)	3.00	
Haftalık Uygulama Saati / Course Hours For Week (Objected)	0.00	
Haftalık Laboratuvar Saati / Course Hours For Week (Laboratory)	0.00	
Dersin Verildiği Yıl / Year	1	
Öğretim Sistemi / Teaching System	Face to Face / Face to Face	
Eğitim Dili / Education Language	Turkish / Turkish	
Ön Koşulu Olan Ders(ler) / Precondition Courses	Yok	None
Amacı / Purpose	Biyolojik sistemlerde yapılan moleküler modelleme çalışmalarının öğretilmesi.	To teach the fundamentals of the molecular modeling studies in biological systems.
İçeriği / Content	Moleküler modellemede yararlı kavramlar. Kuantum mekaniksel yöntemler. Moleküler mekanik yöntemleri. Moleküler dinamik metodları. Monte Carlo metodları. Konformasyonel analiz. Protein yapı tayini. Moleküler modelleme metodlarının uygulamaları.	Useful concepts in molecular modeling. Quantum mechanical methods. Molecular mechanics methods. Molecular dynamics methods. Monte Carlo methods. Conformational analysis. Protein structure determination. Applications of molecular modeling methods.
Önerilen Diğer Hususlar / Recommended Other Considerations	Yok	None
Staj Durumu / Internship Status	Yok	None
Kitap / Malzemesi / Önerilen Kaynaklar / Books / Materials / Recommended Reading	A. R. Leach, Molecular Modelling Principles and Applications, 2. Ed., Prentice Hall, (2001) T. Schlick, Molecular Modeling and Simulation, Springer, (2002) K. I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori, Computational Chemistry and Molecular Modeling-Principles and Applications, Springer-Verlag, (2008) A. Warshel, Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions, John Wiley & Sons, Inc., (1991)	A. R. Leach, Molecular Modelling Principles and Applications, 2. Ed., Prentice Hall, (2001) T. Schlick, Molecular Modeling and Simulation, Springer, (2002) K. I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori, Computational Chemistry and Molecular Modeling-Principles and Applications, Springer-Verlag, (2008) A. Warshel, Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions, John Wiley & Sons, Inc., (1991)
Öğretim Üyesi (Üyeleri) / Faculty Member (Members)	Assoc. Prof. Dr. Cenk Selçuki	

ÖĞRENME ÇIKTILARI / LEARNING OUTCOMES

0	Çıkan sonuçları yorumlayabilme	To be able to interpret the computed data
1	Kullanılan yöntemlerin avantajlarını/dezavantajlarını irdeleyebilme ve karşılaştırabilme	To gain ability to compare and interpret the advantages and disadvantages of the applied methods
2	Biyolojik sistemlerdeki moleküler modelleme çalışmalarının temel prensiplerinin anlaşılması	To understand the fundamental principles of molecular modeling in biological systems
3	Moleküler modelleme çalışmalarında hangi yöntemin kullanılacağına karar verme yetisi kazanılması	To be skilled to choose the method that will be used in molecular modeling studies.
4	Üç boyutlu görüş ve düşünce yeteneklerinin gelişmesi	To improve thinking and interpretation in three-dimension (3D)
5	Moleküler modelleme ile ilgili terminolojinin kavranması	To learn the terminology used in molecular modeling
6	Anlatılan yöntemler arasındaki temel benzerlik ve farklılıkların anlaşılması	To understand the basic similarities/differences between the methods
7	Moleküler modelleme için gerekli yazılımları kullanma becerisinin kazanılması	To be able to use the required molecular modeling softwares efficiently.

HAFTALIK DERS İÇERİĞİ / DETAILED COURSE OUTLINE

Hafta / Week					
1	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Moleküler Modellemede Yararlı Kavramlar				
	Useful Concepts in Molecular Modeling				
2	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Kuantum Kimyasal Metodlar (Yarı-ampirik Metodlar)				
	Quantum Chemical Methods (Semiempirical Methods)				
3	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Kuantum Kimyasal Metodlar (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) Yöntemleri)				
	Quantum Chemical Methods (Density Functional Theory (DFT) Methods)				
4	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Kuantum Kimyasal Metodlar (Ab initio Yöntemleri)				
	Quantum Chemical Methods (Ab initio Methods)				
5	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Klasik Mekanik Yöntemleri (Moleküler Mekanik)				
	Classical Mechanics Methods (Molecular Mechanics)				

	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
6	Klasik Mekanik Yöntemleri (Moleküler Dinamik)				
	Classical Mechanics Methods (Molecular Dynamics)				
7	Klasik Mekanik Yöntemleri (Monte Carlo)				
	Classical Mechanics Methods (Monte Carlo)				
8	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Arasınan				
	Mid-term Exam				
9	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Konformasyonel Analiz				
	Conformational Analysis				
10	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Protein Yapı Tayini				
	Protein Structure Determination				
11	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Biyoinformatik'e Giriş				
	Introduction to Bioinformatics				

	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
12	Homoloji Modellemesi ve Threading				
	Homology Modeling and Threading				
13	Biyolojik Yapıların Sınıflandırılması (Veritabanları)				
	Classification of Biological Structures (Databases)				
14	Moleküler Modelleme Uygulamaları				
	Applications of Molecular Modeling				
15	Dönem Projesi Sunumu				
	Project presentation				
16	Final sınavı				
	Final Exam				

DEĞERLENDİRME / EVALUATION

Yarıyıl (Yıl) İçi Etkinlikleri / Term (or Year) Learning Activities	Sayı / Number	Katkı Yüzdesi / Percentage of Contribution (%)
Ara Sınav / Midterm Examination	1	100
Toplam / Total:	1	100
Başarı Notuna Katkı Yüzdesi / Contribution to Success Grade(%):		40

Yarıyıl (Yıl) Sonu Etkinlikleri / End Of Term (or Year) Learning Activities	Sayı / Number	Katkı Yüzdesi / Percentage of Contribution (%)
Final Sınavı / Final Examination	1	100
Toplam / Total:	1	100
Başarı Notuna Katkı Yüzdesi / Contribution to Success Grade(%):		60

Etkinliklerinin Başarı Notuna Katkı Yüzdesi(%) Toplamı / Total Percentage of Contribution (%) to Success Grade:	100
Değerlendirme Tipi / Evaluation Type:	

İŞ YÜKÜ / WORKLOADS

Etkinlikler / Workloads	Sayı / Number	Süresi (Saat) / Duration (Hours)	Toplam İş Yüğü (Saat) / Total Work Load (Hour)
Ara Sınav / Midterm Examination	1	2.00	2.00
Final Sınavı / Final Examination	1	2.00	2.00
Derse Katılım / Attending Lectures	14	3.00	42.00
Uygulama/Pratik / Practice	7	2.00	14.00
Proje Hazırlama / Project Preparation	1	20.00	20.00
Proje Sunma / Project Presentation	1	2.00	2.00
Ara Sınav İçin Bireysel Çalışma / Individual Study for Mid term Examination	1	30.00	30.00
Final Sınavı için Bireysel Çalışma / Individual Study for Final Examination	1	45.00	45.00
Okuma / Reading	14	6.00	84.00
Toplam / Total:	41	112.00	241.00
Dersin AKTS Kredisi = Toplam İş Yüğü (Saat) / 30.00 (Saat/AKTS) = 241.00/30.00 = 8.03 ~ / Course ECTS Credit = Total Workload (Hour) / 30.00 (Hour / ECTS) = 241.00 / 30.00 = 8.03 ~			

PROGRAM VE ÖĞRENME ÇIKTISI / PROGRAM LEARNING OUTCOMES

Öğrenme Çıktıları / Learning Outcomes	Program Çıktıları / Program Outcomes								
	1.1.1	1.1.2	1.1.3	1.1.4	1.1.5	1.1.6	1.1.7	1.1.8	1.1.9
0.Çıkan sonuçları yorumlayabilme / To be able to interpret the computed data			4		4	4		5	
1.Kullanılan yöntemlerin avantajlarını/dezavantajlarını irdeleyebilme ve karşılaştırabilme / To gain ability to compare and interpret the advantages and disadvantages of the applied methods		4		4	5	5			4
2.Biyolojik sistemlerdeki moleküler modelleme çalışmalarının temel prensiplerinin anlaşılması / To understand the fundamental principles of molecular modeling in biological systems							5		5
3.Moleküler modelleme çalışmalarında hangi yöntemin kullanılacağına karar verme yetisi kazanılması / To be skilled to choose the method that will be used in molecular modeling studies.		5			4	4	4	3	4
4.Üç boyutlu görüş ve düşünce yeteneklerinin gelişmesi / To improve thinking and interpretation in three-dimension (3D)			4		4	5			
5.Moleküler modelleme ile ilgili terminolojinin kavranması / To learn the terminology used in molecular modeling	4			5		4	4	3	4
6.Anlatılan yöntemler arasındaki temel benzerlik ve farklılıkların anlaşılması / To understand the basic similarities/differences between the methods		5		4	5	4	4		4
7.Moleküler modelleme için gerekli yazılımları kullanma becerisinin kazanılması / To be able to use the required molecular modeling softwares efficiently.	5				4	4	5		4

Katkı Düzeyi / Contribution Level : 1-Çok Düşük / Very low, 2-Düşük / Low, 3-Orta / Moderate, 4-Yüksek / High, 5-Çok Yüksek / Very high