

## GENEL TANIM / GENERAL DESCRIPTION

Ders Adı / Course Name	Biocatalysis-Multiscale Quantum Models / Biocatalysis-Multiscale Quantum Models	
Ders Kodu / Course Code	9101036412011	
Ders Türü / Course Type		
Ders Seviyesi / Course Level	Third Cycle / Third Cycle	
Ders Akts Kredi / ECTS	7.00	
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	Biyokataliz tanımı ve kavramının öğretilmesi. Çok ölçekli kuantum modellerinin biyokatalizde kullanımının anlatılması.	Biyokataliz tanımı ve kavramının öğretilmesi. Çok ölçekli kuantum modellerinin biyokatalizde kullanımının anlatılması.
İçeriği / Content	Biyokataliz: tanım ve kavramlar. Biyokatalizde ihtiyaçlar ve sorunlar. Kuantum metodları. Klasik metodlar. Hibrit metodların özellikleri: avantajları ve dezavantajları. QM/MM, MD/QM, ONIOM ve ilgili metodlar. Biyokatalize uyarlamalar. Protonlanma dengesinin modellenmesi. Ribozim katalizinde çok ölçekli simülasyonlar.	Biyokataliz: tanım ve kavramlar. Biyokatalizde ihtiyaçlar ve sorunlar. Kuantum metodları. Klasik metodlar. Hibrit metodların özellikleri: avantajları ve dezavantajları. QM/MM, MD/QM, ONIOM ve ilgili metodlar. Biyokatalize uyarlamalar. Protonlanma dengesinin modellenmesi. Ribozim katalizinde çok ölçekli simülasyonlar.
Önerilen Diğer Hususlar / Recommended Other Considerations	Yok	None
Staj Durumu / Internship Status	Yok	None
Kitabı / Malzemesi / Önerilen Kaynaklar / Books / Materials / Recommended Reading	York, D. M., Lee, T.-S., Eds. 2009. "Multiscale Quantum Models for Biocatalysis-Modern Techniques and Applications", Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics Volume 7, Series Ed. J. Leszczynski, Springer, Dordrecht. ır Canuto, S., Ed. 2008. "Solvation Effects on Molecules and Biomolecules-Computational Methods and Applications", Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics Volume 6, Series Ed. J. Leszczynski, Springer, Dordrecht. ır Warshel, A., 1991. "Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions", John Wiley & Sons, Inc. Fessner, W.-D., Anthonsen T., Eds. 2009. "Modern Biocatalysis", Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA	York, D. M., Lee, T.-S., Eds. 2009. "Multiscale Quantum Models for Biocatalysis-Modern Techniques and Applications", Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics Volume 7, Series Ed. J. Leszczynski, Springer, Dordrecht. ır Canuto, S., Ed. 2008. "Solvation Effects on Molecules and Biomolecules-Computational Methods and Applications", Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics Volume 6, Series Ed. J. Leszczynski, Springer, Dordrecht. ır Warshel, A., 1991. "Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions", John Wiley & Sons, Inc. Fessner, W.-D., Anthonsen T., Eds. 2009. "Modern Biocatalysis", Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

Öğretim Üyesi (Üyeleri) / Faculty Member (Members)	Prof. Dr. Cenk SELÇUKİ	Prof. Dr. Cenk SELÇUKİ
--	------------------------	------------------------

### ÖĞRENME ÇIKTILARI / LEARNING OUTCOMES

1	Yöntemleri kullanmak için gerekli olan yazılımları kullanma becerisinin kazanılması	To be able to use the required softwares for efficient use of the methods
2	Biyokatalizle ilgili temel prensiplerinin anlaşılması	To understand the fundamental principles of biocatalysis
3	Biyokataliz ile ilgili çalışmalarda hangi hesapsal yöntemin kullanılacağına karar verme yetisi kazanılması	To be skilled to choose the method that will be used in biocatalysis.
4	Çıkan hesaplama sonuçlarını yorumlayabilme	To be able to interpret the computed data
5	Kullanılan yöntemlerin avantajlarını/dezavantajlarını irdeleyebilme ve karşılaştırabilme	To gain ability to compare and interpret the advantages and disadvantages of the applied methods
6	Biyokatalizde kullanılan hesapsal yöntemlerle ilgili temel prensiplerinin anlaşılması	To understand the fundamental principles of computational methods in biocatalysis
7	Hesapsal bilim ve teknoloji terminolojisinin kavranması	To learn the terminology used in computational science and technology

### HAFTALIK DERS İÇERİĞİ / DETAILED COURSE OUTLINE

Hafta / Week					
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
1	Biyokataliz: tanım ve kavramlar				
	Biocatalysis: definitions and concepts				
2	Biyokatalizde ihtiyaçlar ve sorunlar				
	Requirements and Problems in Biocatalysis				
3	Moleküler Modelleme ve Biyokataliz				
	Molecular Modelling and Biocatalysis				
4	Klasik Mekanik Metodları				
	Classic Mechanic Methods				
5	Klasik Mekanik Metodları				
	Classic Mechanic Methods				

	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
6	Kuantum Mekaniksel Metodlar				
	Quantum Mechanical Methods				
7	Kuantum Mekaniksel Metodlar				
	Quantum Mechanical Methods				
8	Arasınava				
	Mid-term Exam				
9	Hibrit metodların özellikleri: avantajları ve dezavantajları				
	Properties of hybrid methods: advantages and disadvantages				
10	QM/MM				
	QM/MM				
11	MD/QM				
	MD/QM				

	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
12	ONKOM ve ilgili metodlar				
	ONKOM and related methods				
13	Biyokatalize uyarlamalar: Protonlanma dengesinin modellenmesi				
	Applications to biocatalysis. Modeling protonation equilibria				
14	Ribozim katalizinde çok ölçekli simülasyonlar				
	Multiscale simulations on ribozyme catalysis				
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	14	3.00	42.00
Rapor Hazırlama / Report Preparation	1	10.00	10.00
Proje Hazırlama / Project Preparation	1	30.00	30.00
Proje Sunma / Project Presentation	1	2.00	2.00
Bireysel Çalışma / Self Study	14	2.00	28.00
Ara Sınav İçin Bireysel Çalışma / Individual Study for Mid term Examination	1	20.00	20.00
Final Sınavı için Bireysel Çalışma / Individual Study for Final Examination	1	30.00	30.00
<b>Toplam / Total:</b>	<b>49</b>	<b>104.00</b>	<b>208.00</b>

Dersin AKTS Kredisi = Toplam İş Yüğü (Saat) / 30.00 (Saat/AKTS) = 208.00/30.00 = 6.93 ~ / Course ECTS Credit = Total Workload (Hour) / 30.00 (Hour / ECTS) = 208.00 / 30.00 = 6.93 ~

PROGRAM VE ÖĞRENME ÇIKTISI / PROGRAM LEARNING OUTCOMES

Öğrenme Çıktıları / Learning Outcomes	Program Çıktıları / Program						
	1.1.1	1.1.2	1.1.3	1.1.4	1.1.5	1.1.6	1.1.7
1.Yöntemleri kullanmak için gerekli olan yazılımları kullanma becerisinin kazanılması / To be able to use the required softwares for efficient use of the methods	5	4	3		4	4	
2.Biyokatalizle ilgili temel prensiplerinin anlaşılması / To understand the fundamental principles of biocatalysis							5
3.Biyokataliz ile ilgili çalışmalarda hangi hesapsal yöntemin kullanılacağına karar verme yetisi kazanılması / To be skilled to choose the method that will be used in biocatalysis.	4	4	5	4		4	4
4.Çıkan hesaplama sonuçlarını yorumlayabilme / To be able to interpret the computed data	4	4	4		4	4	
5.Kullanılan yöntemlerin avantajlarını/dezavantajlarını irdeleyebilme ve karşılaştırabilme / To gain ability to compare and interpret the advantages and disadvantages of the applied methods	4	4	4	4	5	5	4
6.Biyokatalizde kullanılan hesapsal yöntemlerle ilgili temel prensiplerinin anlaşılması / To understand the fundamental principles of computational methods in biocatalysis		5		4	5	4	4
7.Hesapsal bilim ve teknoloji terminolojisinin kavranması / To learn the terminology used in computational science and technology	4	3	4	5		4	4

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