

GENEL TANIM / GENERAL DESCRIPTION

Ders Adı / Course Name	Computer Based Methods in Protein Structure and Dynamics / Computer Based Methods in Protein Structure and Dynamics	
Ders Kodu / Course Code	9101036342008	
Ders Türü / Course Type		
Ders Seviyesi / Course Level	Third Cycle / Third 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	Protein yapı ve dinamiklerinin tayininde kullanılan hesapsal yöntemlerin ve yazılımların öğretilmesi.	To give insight on the computational methods and softwares used in the determination of protein structures and dynamics.
İçeriği / Content	Moleküler modelleme ve uygulama alanlarının genel tanımı. Biyoinformatik'e giriş. Genomik'e giriş. SCOP. CASP. Protein yapı ve dinamiklerinde kullanılan hesapsal yöntemler. Protein dizi analizi ve buna bağlı yapı tayininde izlenen yöntemler.	General description of molecular modeling and its applications. Introduction to bioinformatics. Introduction to genomics. SCOP. CASP. Computational methods used in determination of protein structure and dynamics. Protein sequence analysis and related structure determination methods.
Önerilen Diğer Hususlar / Recommended Other Considerations	Yok	None
Staj Durumu / Internship Status	Yok	None
Kitabı / 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)	Prof. Dr. Cenk Selçuki	Prof. Dr. Cenk Selçuki

ÖĞRENME ÇIKTILARI / LEARNING OUTCOMES

0	Çıkan hesaplama sonuçlarını yorumlayabilme	To be able to interpret the computed data
1	Anlatılan hesapsal yöntemler arasındaki temel benzerlik ve farklılıkların anlaşılması	To understand the basic similarities/differences between the methods
2	Kullanılan yöntemlerin avantajlarını/dezavantajlarını irdeleyebilme ve karşılaştırabilme	To gain ability to compare and interpret the advantages and disadvantages of the applied methods
3	Yöntemleri kullanmak için gerekli olan yazılımları kullanma becerisinin kazanılması	To be able to use the required softwares for efficient use of the methods
4	Üç boyutlu görüş ve düşünce yeteneklerinin gelişmesi	To improve thinking and interpretation in three-dimension (3D)
5	Hesapsal bilim ve teknoloji terminolojisinin kavranması	To learn the terminology used in computational science and technology
6	Protein sistemleri ile ilgili çalışmalarda hangi hesapsal yöntemin kullanılacağına karar verme yetisi kazanılması	To be skilled to choose the method that will be used in protein studies.
7	Protein yapı ve dinamiklerinin tayininde kullanılan hesapsal yöntemlerin temel prensiplerinin anlaşılması	To understand the fundamental principles of computational methods used in the determination of protein structures and dynamics

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 Modelleme ve Uygulama Alanlarının Genel Tanıtımı				
	General Definition of Molecular Modeling and Its Applications				
2	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Protein Yapı ve Dinamiklerinde Kullanılan Hesapsal Yöntemler (Moleküler Mekanik)				
	Computational Methods in Protein Structure and Dynamics (Molecular Mechanics)				
3	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Protein Yapı ve Dinamiklerinde Kullanılan Hesapsal Yöntemler (Moleküler Dinamik)				
	Computational Methods in Protein Structure and Dynamics (Molecular Dynamics)				
4	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Protein Yapı ve Dinamiklerinde Kullanılan Hesapsal Yöntemler (Monte Carlo)				
	Computational Methods in Protein Structure and Dynamics (Monte Carlo)				
5	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Protein Yapı ve Dinamiklerinde Kullanılan Hesapsal Yöntemler (Yarı-ampirik Yöntemler)				
	Computational Methods in Protein Structure and Dynamics (Semiempirical Methods)				

	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
6	Protein Yapı ve Dinamiklerinde Kullanılan Hesapsal Yöntemler (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) Yöntemleri)				
	Computational Methods in Protein Structure and Dynamics (Density Functional Theory (DFT) Methods)				
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
7	Protein Yapı ve Dinamiklerinde Kullanılan Hesapsal Yöntemler (Ab initio Yöntemleri)				
	Computational Methods in Protein Structure and Dynamics (Ab initio Methods)				
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
8	Arasınnav				
	Mid-term Exam				
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
9	Protein Dizi Analizi ve Buna Bağlı Yapı Tayininde İzlenen Yöntemler (Konformasyonel Analiz)				
	Protein Sequence Analysis and Related Methods Used in Structure Prediction (Conformational Analysis)				
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
10	Protein Dizi Analizi ve Buna Bağlı Yapı Tayininde İzlenen Yöntemler (Homoloji Modellemesi)				
	Protein Sequence Analysis and Related Methods Used in Structure Prediction (Homology Modeling)				
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
11	Protein Dizi Analizi ve Buna Bağlı Yapı Tayininde İzlenen Yöntemler (Threading, Lattice Modeli ve Ramachandran Diyagramları)				
	Protein Sequence Analysis and Related Methods Used in Structure Prediction (Threading, Lattice Model and Ramachandran Maps)				
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary

	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
12	Protein Dizi Analizi ve Buna Bağlı Yapı Tayininde İzlenen Yöntemler (CASP, SCOP ve diğer veri tabanlarının sınıflandırma sistemleri)				
	Protein Sequence Analysis and Related Methods Used in Structure Prediction (CASP, SCOP and classification systems of other databases)				
	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
13	Genomik'e Giriş				
	Introduction to Genomics				
14	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Biyoinformatik'e Giriş				
	Introduction to Bioinformatics				
15	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	Dönem Projesi Sunumu				
	Project presentation				
16	Teorik Dersler / Theoretical	Uygulama	Lab	Öğretim Yöntem ve Teknikleri/Teaching Methods Techniques	Ön Hazırlık / Preliminary
	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	4.00	28.00
Rapor Hazırlama / Report Preparation	1	20.00	20.00
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	5.00	70.00
Toplam / Total:	40	111.00	239.00
<p>Dersin AKTS Kredisi = Toplam İş Yüğü (Saat) / 30.00 (Saat/AKTS) = 239.00/30.00 = 7.97 ~ / Course ECTS Credit = Total Workload (Hour) / 30.00 (Hour / ECTS) = 239.00 / 30.00 = 7.97 ~</p>			

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
0.Çıkan hesaplama sonuçlarını yorumlayabilme / To be able to interpret the computed data	4	4	4		4		
1.Anlatılan hesapsal yöntemler arasındaki temel benzerlik ve farklılıkların anlaşılması / To understand the basic similarities/differences between the methods		5		4	5	4	4
2.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
3.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	5	5
4.Üç boyutlu görüş ve düşünce yeteneklerinin gelişmesi / To improve thinking and interpretation in three-dimension (3D)	4		4		4	5	
5.Hesapsal bilim ve teknoloji terminolojisinin kavranması / To learn the terminology used in computational science and technology	4	3	4	5		4	4
6.Protein sistemleri ile ilgili çalışmalarda hangi hesapsal yöntemin kullanılacağına karar verme yetisi kazanılması / To be skilled to choose the method that will be used in protein studies.	4	5	4		4		4
7.Protein yapı ve dinamiklerinin tayininde kullanılan hesapsal yöntemlerin temel prensiplerinin anlaşılması / To understand the fundamental principles of computational methods used in the determination of protein structures and dynamics							5

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