

Dersin Tanımı					
Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U Saat	Kredi	AKTS
HESAPLAMALI BİYOFİZİK : YÖNTEMLER VE METODLAR	BMYL1254620	Bahar Dönemi	3+0	3	8
<b>Ön Koşul Dersleri</b>					
<b>Önerilen Seçmeli Dersler</b>					
<b>Dersin Dili</b>	İngilizce				
<b>Dersin Seviyesi</b>	Yüksek Lisans				
<b>Dersin Türü</b>	Programa Bağlı Seçmeli				
<b>Dersin Koordinatörü</b>	Dr.Öğr.Üye. Özge ŞENSOY				
<b>Dersi Verenler</b>	Dr.Öğr.Üye. Özge ŞENSOY				
<b>Dersin Yardımcıları</b>					
<b>Dersin Amacı</b>	Bu dersin amacı, öğrencilerin, moleküler modelleme, moleküler doklama, moleküler dinamik simülasyon tekniklerini kullanarak, bu tekniklerde kullanılan parametrelerin kullanımına doğru şekilde karar vererek, öğrencilere ilgili biyolojik problemleri çözebilme yetisini kazandırmaktır. Ayrıca, öğrencilerin bu dersin sonunda kendi başlarına moleküler dinamik simülasyon yapabilmeleri de beklenmektedir.				
<b>Dersin İçeriği</b>	Bu ders; Kuantum Kimyasına Giriş ,Kuantum Kimyasal Hesaplamalarda Kullanılan Metotlara Genel Bakış,İstatistiksel Mekaniğe Giriş ,Moleküler Dinamik ,Kuvvet Alanları,Moleküler Dinamikte Kullanılan Su Modelleri ,Elektrostatik Kuvvetlerin Modellenmesi ,Serbest Enerji Hesapları ,Kuvvetlendirilmiş Örneklem teknikleri ,Hibrid Simülasyon Metotları: QM/MM Hesaplamalar,Coarse-grained potansiyeller ,Moleküler Doklama ,Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması -I ,Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması -II; konularını içermektedir.				
<b>Dersin Öğrenme Çıktıları</b>			<b>Öğretim Yöntemleri</b>	<b>Ölçme Yöntemleri</b>	
1) Öğrenci, moleküler mekanik ve kuantum mekaniği arasındaki farkları anlar ve verilen bir bilimsel problemin çözümünde hangi metodun uygun olduğuna karar verebilir.			10, 12, 14, 16, 2, 21, 3, 9	D	
2) Öğrenci, moleküler dinamik simülasyonlarında kullanılan kuvvet alanları, su modelleri hakkında bilgi sahibi olur ve böylelikle simülasyonda kullanılması gereken parametre setine kendisi karar verebilir.			1, 10, 12, 14, 16, 2, 3	D	
3) Bu dersin sonunda öğrenci Linux işletim sistemi hakkında temel bilgi sahibi olur.			1, 14, 2, 4	C	
4) Bu dersin sonunda öğrenci yüksek başarımlı hesaplama kaynaklarını kullanarak simülasyon yapabilme yetisi kazanır.			1, 14, 16, 2, 3, 4		
5) Bu dersin sonunda öğrenci, kendi başına moleküler dinamik simülasyonu yapma ve sonuçlarını analiz etme yetisi kazanır.			10, 14, 16, 17, 2, 3, 4	D	
<b>Öğretim Yöntemleri</b>	1: Anlatım, 10: Beyin Fırtınası, 12: Örnek Olay, 14: Bireysel Çalışma, 16: Proje Temelli Öğrenme, 17: Yansıtıcı Düşünce, 2: Soru - Cevap, 21: Video, 3: Tartışma, 4: Alıştırma ve Uygulama, 9: Benzetim				
<b>Ölçme Yöntemleri</b>	C: Ödev, D: Proje / Tasarım				
<b>Ders Akışı</b>					
<b>Sıra</b>	<b>Konular</b>	<b>Ön Hazırlık</b>			
0	Kuantum Kimyasına Giriş				
1	Kuantum Kimyasal Hesaplamalarda Kullanılan Metotlara Genel Bakış				
2	İstatistiksel Mekaniğe Giriş				
3	Moleküler Dinamik				
4	Kuvvet Alanları				
5	Moleküler Dinamikte Kullanılan Su Modelleri				
6	Elektrostatik Kuvvetlerin Modellenmesi				
7	Serbest Enerji Hesapları				
8	Kuvvetlendirilmiş Örneklem teknikleri				
9	Hibrid Simülasyon Metotları: QM/MM Hesaplamalar				
10	Coarse-grained potansiyeller				
11	Moleküler Doklama				
12	Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması -I				
13	Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması -II				
<b>Kaynaklar</b>					
Frenkel and Smit, Understanding Molecular Simulation : From Algorithms to Applications, , Academic Press, Computational Science Series Sunum1) Frenkel and Smit, Understanding Molecular Simulation : From Algorithms to Applications, , Academic Press, Computational Science Series 2)Allen and Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press 3)Zhou, Molecular Modeling at the Atomic Scale, CRC Press, Taylor & Francis.					