

<b>DERS BİLGİLERİ FORMU</b>	
Dersi Açan Fakülte/ Enstitü	Mühendislik Fakültesi
Dersi Açan Bölüm/ Ana Bilim Dalı	Biyomedikal Mühendisliği Bölümü
Dersin Kodu	BMM 621
Dersin Adı	Hesaplamalı Biyokimya
Öğretim Dili	Türkçe
Dersi Alan Programlar	Biyomedikal Mühendisliği Bölümü
Ders Türü	Seçmeli
Dersin Seviyesi	Doktora
AKTS Kredisi	6
Ön Koşullar	Yok
Dersin İçeriği	Bu ders, hesaplamalı biyokimyada moleküler mekaniği, yarı ampirik ve özellikle ab initio yaklaşımlarını kullanmayı tartışacaktır. Ders içeriğinde öğrenciler kendi araştırmaları ile ilgili özgün projeler hazırlayacaklar ve teorik yöntemleri farklı hesaplama yöntemleri kullanarak uygulamak için çeşitli algoritmalar öğreneceklerdir.
Dersin Amacı	Dersi tamamlayan öğrencilerin, 1. Hesaplamalı biyokimya yöntemlerinin temel teorisini ve algoritmalarını anlamaları 2. Bu algoritmaların altında yatan mantığı öğrenmeleri, avantajları ve dezavantajlarını anlamaları 3. Kimya ve moleküler bilimler alanındaki problemleri çözmek için bu yöntemleri uygulayabilmeleri beklenmektedir.
Dersin Kazanımları	Bu ders, hesaplamalı modelleme, kimyasal bağlanma kavramları, reaktivite, moleküler özellikler, kuantum kimyası ve modern yazılımları kullanarak kimyasal ilkelerin öğrenilmesini sağlayacaktır.
Ders Kitabı ve/veya Kaynaklar	<ul style="list-style-type: none"> <li>An Introduction to Computational Biochemistry, C. Stan Tsai, 2003</li> <li>Computational Biochemistry and Biophysics, Benoît Roux (Editor), 2001</li> <li>Güncel makaleler</li> </ul>
Değerlendirme Ölçütleri	<b>Katkı payı</b>
	<b>Devam</b>
	<b>Laboratuvar</b>
	<b>Uygulama</b>
	<b>Alan Çalışması</b>
	<b>Ödev</b>
	<b>Sunum</b> 15
	<b>Projeler</b> 25
	<b>Seminer</b>
	<b>Ara Sınavlar</b> 25
	<b>Quiz</b>
	<b>Final</b> 35
	<b>Toplam</b> 100
Ders Planı	<b>Tartışılacak/ İşlenecek Konular</b>
	<b>1. Hafta</b> Hesaplamalı biyokimyaya giriş
	<b>2. Hafta</b> Kuvvet alanları, potansiyel enerji fonksiyonları, inter ve intramoleküler etkileşimler ve ampirik parametreler
	<b>3. Hafta</b> Kuvvet alanları, potansiyel enerji fonksiyonları, inter ve intramoleküler etkileşimler ve ampirik parametreler
	<b>4. Hafta</b> Moleküler mekanik hesaplamaları, enerji minimizasyonu, konformasyonel analiz, titreşim frekansları ve normal mod analizi
	<b>5. Hafta</b> Monte Carlo ve Moleküler Dinamik Simülasyonları
	<b>6. Hafta</b> Hesaplamalı Biyokimyada Sıvılar: Solventler (polar / nonpolar), Çözeltiler, Asitlik / Bazlık pKa ve Çözelti Modellerinin Hesaplanması
	<b>7. Hafta</b> Proteinlerin yapı ve dinamiği
	<b>8. Hafta</b> Serbest Enerji Simülasyonları: Termodinamik Entegrasyon, Şemsiye Örneklemesi ve Yoğun Faz Reaksiyonlarında Ortalama Kuvvet Potansiyeli
	<b>9. Hafta</b> Kuantum Mekaniği: Gaussian ve GaussView, Semiempirik Yöntemler ve Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
	<b>10. Hafta</b> Kombine QM / MM Yöntemleri: Protein-Ligand Etkileşimleri ve Enzimatik Reaksiyonları Modelleme

<b>11. Hafta</b>	Örnek Uygulamalar, Vaka Çalışmaları
<b>12. Hafta</b>	Projeler için Tutorials & Deneyler