|  |  |
| --- | --- |
| **DERS TANIMLAMA FORMU** | |
| **Dersin Kodu ve Adı** | Uygulamalı Moleküler Dinamik Simülasyon |
| **Dersin Yarıyılı** | Güz/Bahar |
| **Dersin Katalog Tanımı (İçeriği)** | Simülasyon teknikleri, Newton ve Hamilton dinamiği, Etkileşim potansiyelleri, Moleküller dinamik simülasyon programları, örnek hesaplamalar, simülasyon sonuçlarının değerlendirilmesi. |
| **Temel Ders Kitabı** | Understanding Molecular Simulation, by Daan Frenkel and Berend Smit,Academic Press, 2nd edition 2004. |
| **Yardımcı Ders Kitapları** | Yoktur |
| **Dersin Kredisi (AKTS)** | 2 |
| **Dersin Önkoşulları**  **(Ders devam zorunlulukları, bu maddede belirtilmelidir.)** | Devam zorunluluğu vardır. |
| **Dersin Türü** | Alan Dışı Seçmeli |
| **Dersin Öğretim Dili** | Türkçe |
| **Dersin Amacı ve Hedefi** | Moleküler dinamik simülasyon tekniklerinin uygulamalı öğretilmesi. |
| **Dersin Öğrenim Çıktıları** | 1. Moleküler dinamik hakkında bilgi kazanır.  2. Etkileşim potansiyelleri hakkında bilgilenir.  3. Moleküler dinamik simülasyonda kullanılan programları tanır ve kullanmayı öğrenir.  4. Moleküler dinamik simülasyon sonuçlarını analiz eder ve değerlendirir. |
| **Dersin Veriliş Biçimi** | Bu ders yüz yüze bilgisayarlı eğitim şeklinde yürütülecektir. |
| **Dersin Haftalık Dağılımı** | 1. Hafta Simülasyon teknikleri  2. Hafta Newton dinamiği  3. Hafta Hamilton dinamiği  4. Hafta Etkileşim potansiyelleri  5. Hafta Molekül yapısı ve veritabanları, dosya formatları  6. Hafta Basit molekülleri tasarlama ve uygun dosya formatları ile simülasyona girdiler oluşturma.  7. Hafta Simülasyon parametreleri ve kontrolü  8. Ara sınav  9. Hafta Lammps programı ile örnek simülasyon yapma  10. Hafta Lammps programı simülasyonunu analiz etme ve değerlendirme.  11. Hafta Gromacs programı ile protein simülasyonu yapma  12. Hafta Gromacs programı sonuçlarını analiz etme ve değerlendirme  13. Hafta Amber programı ile örnek simülasyon yapma  14. Hafta Amber programı simülasyonunu analiz etme ve değerlendirme.  15. Hafta Final |
| **Öğretim Faaliyetleri**  *(Burada belirtilen faaliyetler için harcanan zaman krediyi belirleyecektir. Dikkatli doldurulması gerekmektedir.)* | Haftalık teorik ders saati 2  Haftalık uygulamalı ders saati 0  Okuma Faaliyetleri 0  İnternetten tarama, kütüphane çalışması 0  Materyal tasarlama, uygulama 0  Rapor hazırlama 1  Sunu hazırlama 0  Sunum 0  Ara sınav ve ara sınava hazırlık 0  Final sınavı ve final sınavına hazırlık 1 |
| **Değerlendirme Ölçütleri** | |  |  |  | | --- | --- | --- | |  | **Sayısı** | **Toplam Katkısı (%)** | | Ara sınav | 1 | 20 | | Ödev | 1 | 20 | | Uygulama | 0 | 0 | | Projeler | 0 | 0 | | Pratik | 0 | 0 | | Kısa Sınav | 0 | 0 | | Dönemiçi Çalışmaların Yıl İçi Başarıya Oranı (%) | 0 | 40 | | Finalin Başarıya Oranı (%) | 1 | 60 | | Devam Durumu | 0 | 0 | |
| **Dersin İş Yükü** | |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | **Etkinlik** | **Toplam Hafta Sayısı** | **Süre (Haftalık Saat)** | **Dönem Sonu Toplam İş Yükü** | | Haftalık teorik ders saati | 14 | 2 | 28 | | Haftalık uygulamalı ders saati | 14 | 0 | 0 | | Okuma Faaliyetleri | 14 | 0 | 0 | | İnternetten tarama, kütüphane çalışması | 14 | 0 | 0 | | Materyal tasarlama, uygulama | 14 | 0 | 0 | | Rapor hazırlama | 14 | 1 | 14 | | Sunu hazırlama | 14 | 0 | 0 | | Sunum | 14 | 0 | 0 | | Ara sınav ve ara sınava hazırlık | 14 | 0 | 0 | | Final sınavı ve final sınavına hazırlık | 14 | 1 | 14 | | Diğer | 14 | 0 | 0 | | Toplam iş yükü |  |  | 56 | | Toplam iş yükü/ 25 |  |  | 2,2 | | Dersin AKTS Kredisi |  |  | 2 | |
| **Ders Çıktıları ile Program Çıktıları Arasındaki Katkı Düzeyi** | Önerilen ders, alan dışı ders kapsamında, tüm programlara uygun bir derstir. Bu nedenle program çıktılarına katkı düzeyi belirtilmemiştir. |
| **Dersi Verecek Öğretim Eleman(lar)ı ve İletişim Bilgileri** |  |