

Dersin Adı				Course Name		
Biyomoleküler Sistemlerin Termodinamiği				Thermodynamics of Biomolecular Systems		
Kodu (Code)	Yarıyılı (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Uygulaması, Saat/Hafta (Course Implementation, Hours/Week)		
				Ders (Theoretical)	Uygulama (Tutorial)	Laboratuvar (Laboratory)
MAK??E	6	2.5	4	2	1	-
Bölüm / Program (Department/Program)		Makina Mühendisliği / Makina Mühendisliği Mechanical Engineering / Mechanical Engineering				
Dersin Türü (Course Type)		Seçime Bağlı (Optional)		Dersin Dili (Course Language)		Türkçe/İngilizce (Turkish/English)
Dersin Önkoşulları (Course Prerequisites)		TER 205 veya MAK215 veya TER201 veya TER203				
Dersin mesleki bileşene katkısı, % (Course Category by Content, %)		Temel Bilim (Basic Sciences)	Temel Mühendislik (Engineering Science)	Mühendislik Tasarım (Engineering Design)	İnsan ve Toplum Bilim (General Education)	
		50	50	-	-	
Dersin İçeriği (Course Description)		<p>Ders, biyomoleküler sistemlerin klasik termodinamiğine ve istatistiksel termodinamik / mekanikine bir giriş sağlamakta olup entalpi, entropi ve düzensizlik, serbest enerjiler, denge, Legendre dönüşümü, termodinamik sistemlerin kararlılığı, mikrokanoik, kanonik ve büyük kanonik topluluklar, dalgalanmalar ve biyomoleküllerin moleküler dinamik simülasyonlarına giriş konularını kapsamaktadır.</p> <p>This course provides an introduction to the classical thermodynamics and statistical thermodynamics/mechanics of biomolecular systems, and its topics include enthalpy, entropy and disorder, free energies, equilibria, the Legendre transform, stability of thermodynamic systems, microcanonical canonical and grand canonical formalisms, fluctuations, and an introduction to molecular dynamics simulations of biomolecules.</p>				
Dersin Amacı (Course Objectives)		<p>1. Biyomoleküler davranış ve etkileşimleri tanımlamak ve anlamak için gerekli termodinamik ilkelerin temelini sağlamak.</p> <p>2. İstatistiksel mekanik kullanarak makroskopik termodinamik özelliklerin mikroskopik moleküler özelliklerle bağlantısını öğretmek.</p> <p>3. Makine mühendislerine yönelik bir moleküler anlayışın geliştirilmesi ve bunun moleküler dinamik simülasyonları gerçekleştirmek için uygulanmasının öğretilmesi.</p> <p>1. To provide a foundation in the thermodynamic principles used to describe biomolecular behavior and interactions.</p> <p>2. To teach the connection of macroscopic thermodynamic properties to microscopic molecular properties using statistical mechanics/thermodynamics.</p> <p>3. To develop a molecular understanding for mechanical engineers and demonstrate how to use it to perform molecular dynamics simulations.</p>				
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes)		<p>Bu dersi başarıyla tamamlayan öğrenciler;</p> <p>(1) Klasik ve istatistiksel termodinamiğin genel prensiplerini kullanabilme, (2) Biyolojik sistemlerin fiziksel ve termodinamik özelliklerini moleküler düzeyde anlama, (3) Denge halindeki biyomoleküler sistemleri içeren temel problemleri ele alabilme, (4) İstatistiksel termodinamik yaklaşımları kullanarak nanoteknoloji ve biyoloji konularındaki problemleri çözebilme, (5) Biyomoleküler sistemlerin özelliklerini modellemek, anlamak ve tahmin etmek amacıyla moleküler dinamik simülasyonları kullanabilme, becerilerini kazanır</p> <p>Students who pass the course will be able to ;</p> <p>(1) Apply the general principles of classical and statistical thermodynamics. (2) Have a molecular level understanding of the physical and thermodynamic properties of biological systems. (3) Handle basic problems involving biomolecular systems at equilibrium. (4) Solve problems in nanotechnology and biology using statistical thermodynamics approaches. (5) Use molecular dynamics simulations to model, understand, and predict the properties of biomolecular systems.</p>				

DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Problem ve postülatlar	
2	Denge koşulları	
3	Formel bağıntılar ve örnek sistemler	
4	Tersinir prosesler ve maksimum iş teoremi	
5	Enerji minimum prensibi, Legendre dönüşümleri, Termodinamik Potansiyeller, Genelleştirilmiş Massieu fonksyonları	
6	Legendre dönüşümü yapılmış gösterimlerde uçdeğer (ekstremum) ilkesi	
7	Maxwell Bağıntıları	
8	Termodinamik sistemlerin kararlılığı	
9	Tersinmez Termodinamik	
10	Entropi gösteriminde istatistiksel mekanik-Mikrokanonik kuramlar	
11	Kanonik kuramlar	
12	Entropi ve Düzensizlik-genel kanonik kuramlar	
13	Moleküler Dinamik Simülasyonları I: Teori ve Uygulamaları	
14	Moleküler Dinamik Simülasyonları II: Biyomoleküler sistemlerin modellenmesi	

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	The problem and the postulates	
2	The conditions of equilibrium	
3	Formal relationships, and sample systems	
4	Reversible processes and the maximum work theorem	
5	The energy minimum principle, Legendre transformations, Thermodynamic Potentials, Generalized Massieu Functions	
6	The Extremum Principle in the Legendre Transformed Representations	
7	Maxwell Relations	
8	Stability of Thermodynamic Systems	
9	Irreversible Thermodynamics	
10	Statistical Mechanics in the Entropy Representation-The Microcanonical Formalism	
11	The Canonical Formalism; Statistical Mechanics in Helmholtz Representation	
12	Entropy as a measure of disorder, distributions of maximal disorder, the grand canonical formalism	
13	Molecular Dynamics Simulation I: Theory and Applications	
14	Molecular Dynamics Simulations II: Modeling Biomolecular systems	

Ders Kitabı (Textbook)	Callen, Herbert B. (1985). Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics (2nd edition). John Wiley & Sons, New York.		
Diğer Kaynaklar (Other References)	1- Ben-Naim, Arieh (1992). Statistical Thermodynamics for Chemists and Biochemists. Springer Science+Business Media, New York (Originally published by Plenum Press, New York in 1992). 2- Dill, K., & Bromberg, S. (2010). Molecular Driving Forces: Statistical Thermodynamics in Biology, Chemistry, Physics, and Nanoscience (2nd edition). Garland Science, New York.		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	Öğrencilere her hafta web sayfasında çözmeleri için problemler verilecektir. Öğrenci isterse, bu problemlerin tümünü veya bir bölümünü değerlendirilmek üzere verebilecektir. Problems will be given to students on a weekly basis on website. Students may ask for assessment of all or some of her/his solved problems.		
Laboratuvar Uygulamaları (Laboratory Work)			
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use)			
Diğer Uygulamalar (Other Activities)	<ul style="list-style-type: none"> - Final Sınavına girebilmek için kabul edilebilir 1 adet dönem projesi sunulmalı. - Ara sınavların ortalamasının asgari değeri en az 35/100 olmalıdır. <ul style="list-style-type: none"> - In order to be able to take the final exam, it must be submitted acceptable term Project and the minimum value of the average of the midterm exams must be at least 35. 		
Başarı Değerlendirme Sistemi (Assessment Criteria)	Faaliyetler (Activities)	Adedi (Quantity)	Değerlendirmedeki Katkısı, % (Effects on Grading, %)
	Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)	1	%30
	Kısa Sınavlar (Quizzes)		
	Ödevler (Homework)		
	Projeler (Projects)		
	Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)	1	%30
	Laboratuvar Uygulaması (Laboratory Work)		
	Diğer Uygulamalar (Other Activities)		
	Final Sınavı (Final Exam)	1	%40