



BİLECİK ŞEYH EDEBALI ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
FİZİK - YL
(2021 - 2022) Ders Bilgi Formu



Ders Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U Saat	AKTS	Z / S
Moleküler Hesaplama Yöntemleri	FİZ5020		3 + 0	7,5	Seçmeli
Birim Bölüm	Fizik - YL - Lisansüstü (Yüz yüze)				
Amaç	Dersin temel amacı, moleküler modelleme metodlarının öğrenilmesi ve moleküler modelleme çalışabilmek				
Ders İçeriği	Moleküler Modellemede Temel Kavramlar, Moleküler Mekanik Metotlar, Hartree-Fock Teorisi, Temel Setler, Geometri Optimizasyonu, Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi, Elektron Korelasyon Metotları, QMMM Karma Modeller.				
Ders Kaynakları	Molecular Modelling, A Leach, Pearson Ltd., 2002, Introduction to computational Chemistry, F. Jensen, Wiley, 1999, Ab initio Molecular orbital Theory, W.J. Hehre, L. Radom, P.V.R. Schleyer, J.A. Pople, Wiley, 1985.				

Hafta	Konu
1	Moleküler Modellemede Temel Kavramlar
2	Moleküler Mekanik Metotlar
3	Uygulamalar
4	Hartree-Fock Teorisi
5	Uygulamalar
6	Temel Setler
7	Geometri Optimizasyonu
8	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
9	Uygulamalar
10	Elektron Korelasyon Metotları
11	Uygulamalar
12	QMMM Karma Modeller
13	Uygulamalar
14	Dönem Sonu Uygulaması

Program Çıktıları

- Öğrencinin edindiği lisans bilgilerini lisansüstü alanlarda kullanabilme.
- Mesleki sorumluluk bilinci ile birlikte bir araştırmacı vasfına sahip olabilme.
- Bilim ve teknolojinin gelişimi için önemli olan Fizik temel biliminin önemini kavrayarak yenilikleri takip edip, kendini geliştirebilme
- Bireysel çalışma becerisini kullanarak seminer, kongre, sempozyum, çalıştay v.b. gibi çeşitli iletişim ortamlarında çalışmalarını ve fikirlerini paylaşabilme.
- Öğrencinin lisans ve lisansüstü çalışmalarından kazandığı bilgi ve deneyimlerini kullanarak bilimsel bir yayın hazırlayabilme.
- Fizik hem ulusal ve hem de uluslararası alanlardaki gelişmelerini yakından izleyebilme.
- Disiplin içi ve disiplinler arası grup çalışmaları yapabilm
- Kaynak tarama, sunum yapabilme, bir deney düzeneği hazırlayabilme, uygulayabilme ve ilgili sonuçları yorumlayabilme.
- Bağımsız davranarak inisiyatif alabilme ve kullanabilme.
- Bilimsel ve mesleki etik anlayışına sahip olma ve bu anlayışı her türlü ortamda savunabilme.

Ders Öğrenme Çıktısı - Program Çıktıları (1 -5 Puan Aralığı)

Ders Öğrenme Çıktısı	PÇ 1	PÇ 2	PÇ 3	PÇ 4	PÇ 5	PÇ 6	PÇ 7	PÇ 8	PÇ 9	PÇ 10
----------------------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-------

<https://ebs.bilecik.edu.tr/pdf/dersbilgigetir/311565>