



Ders Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U Saat	AKTS	Z / S
Kuantum Kimyasal Hesaplamalar	FİZ5017		3 + 0	7,5	Seçmeli
Birim Bölüm	Fizik - YL - Lisansüstü (Yüz yüze)				
Amaç	Kuantum kimyasal metotlarını kullanarak, atom ve molekül fiziği alanındaki problemleri çözmek.				
Ders İçeriği	DeneySEL verilerin kullanılmadığı, kuramsal ilkeler üzerine kurulu kuantum kimyasal hesaplamalar incelenir. Bu yöntemlerde genellikle karmaşık bir fonksiyonun daha basit fonksiyonlara indirgenmesi gibi matematiksel yaklaşımlar kullanılır.				
Ders Veren	Prof. Dr. Arslan ÜNAL				
Ders Kaynakları	D.S. Sholl, J.A. Steckel, Density Functional Theory: A Practical Introduction, W.J. Hehre, L. Radom, P.v.R. Schleyer, J.A. Pople, Ab Initio Molecular Orbital Theory, T. Clarck, A Handbook of Computational Chemistry				

Hafta	Konu
1	Moleküler Mekanik Yöntemler
2	Kuantum Kimyasal Yöntemler
3	Baz Setleri
4	Potansiyel Enerji Yüzeyi
5	Optimizasyon
6	Titreşim Frekansları
7	Skala Faktörü
8	NMR Özellikler
9	Gaussian Programının Genel Yapısı ve Uygulamaları
10	Gaussview Programının Genel Yapısı ve Uygulamaları
11	Cache Programının Genel Yapısı ve Uygulamaları
12	Moleküler yapılar üzerine uygulamalar
13	Topak yapılar üzerine uygulamalar
14	DeneySEL ve Teorik sonuçların değerlendirilmesi

#### 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
Hesaplamalı moleküler yapı çalışmaları	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sensör, fotoiletken özellik gösteren moleküllerin teorik dizaynı	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sensör, fotoiletken özellik gösteren moleküllerin teorik dizaynı	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Farklı kuantum kimyasal hesaplama yöntemlerini karşılaştırma becerisi	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ortalama Değer	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-