



Ders Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U Saat	AKTS	Z / S
Moleküler Yapı Hesaplamaları ve Teorileri	KİM6022		3 + 0	7,5	Seçmeli
Birim Bölüm	Kimya - DR - Lisansüstü (yüz yüze)				
Amaç	Kimyada moleküler düzey modelleme ve teorik uygulamalarına ait temel kavramların ve araştırma becerisinin kazandırılması				
Ders İçeriği	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine giriş. Teorik hesaplama türleri. Moleküler modelleme teknikleri; Moleküler dinamik, yarı-deneysel, kuantum kimyasal. Baz setler. Paket programlar. Moleküllerin bilgisayarda üç boyutlu tasarlanması. Geometrik optimizasyon hesabı. Yapısal parametrelerin belirlenmesi: bağ uzunlukları, bağ açıları. Moleküller arası kuvvetler. Teorik ve deneysel sonuçların karşılaştırılması.				
Ders Kaynakları	F.JENSEN, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley and Sons, New York, 1999., Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems, by David Young, 2004, John Wiley & Sons.				

Hafta	Konu
1	Moleküler modellemeye giriş, hesapsal kimya teknikleri ve uygulama alanları
2	Moleküler modellemeye giriş, hesapsal kimya teknikleri ve uygulama alanları
3	Kuantum mekaniğe giriş, Hartree Fock metod ve enerji minimizasyon problemi
4	Kuantum mekaniğe giriş, Hartree Fock metod ve enerji minimizasyon problemi
5	Baz setleri, korelasyon enerji fonksiyonlarının toplanabilirliği, tam baz setleri Tutorial: Küçük moleküllerin optimizasyonu ve lokal minimumu belirleme
6	Baz setleri, korelasyon enerji fonksiyonlarının toplanabilirliği, tam baz setleri Tutorial: Küçük moleküllerin optimizasyonu ve lokal minimumu belirleme
7	Baz setleri, korelasyon enerji fonksiyonlarının toplanabilirliği, tam baz setleri Tutorial: Küçük moleküllerin optimizasyonu ve lokal minimumu belirleme
8	Arasınav, Baz setleri, korelasyon enerji fonksiyonlarının toplanabilirliği, tam baz setleri Tutorial: Küçük moleküllerin optimizasyonu ve lokal minimumu belirleme
9	Moleküler orbitaller, popülasyon analizi ve moleküler orbitaller
10	Moleküler orbitaller, popülasyon analizi ve moleküler orbitaller
10	Geçiş durumu hesaplamaları
11	Geçiş durumu hesaplamaları
12	Geçiş durumu hesaplamaları
13	DFT uygulamaları
14	DFT uygulamaları

#### Program Çıktıları

1	Kimya alanındaki güncel ve ileri düzeydeki bilgileri özgün düşünce ve araştırma ile uzmanlık düzeyinde geliştirebilme, ve alanına yenilik getirecek özgün bilgilere ulaşabilme
2	Kimya alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki teorik ve uygulamalı bilgileri kullanabilme
3	Kimya alanındaki güncel bilgileri sistematik bir yaklaşımla kullanabilme ve değerlendirebilme
4	Kimya alanı ile ilgili çalışmalarda bilimsel araştırma yöntemlerini kullanabilmede üst düzey beceriler kazanmış olabilmeye
5	Eleştirel düşünme ve yaratıcı, sorun çözme ve karar verme becerisini geliştirme
6	Kimya alanındaki güncel gelişmeleri ve kişisel çalışmalarını, kalitatif ve kantitatif veriler ile destekleyerek kimya alanındaki ve alan dışındaki bilimsel gruplara, sözlü, yazılı ve görsel olarak aktarabilme
7	Kimya alanı ile ilgili verilerin elde edilmesi, yorumlanması, uygulanması ve duyurulması aşamalarında bilimsel, toplumsal, etik ve kültürel değerleri göz önüne alarak denetleyebilme ve bu değerleri aktarabilme
8	Kimya alanının gerektirdiği düzeyde bilgisayar teknolojileri ile birlikte bilişim ve iletişim becerilerini ileri düzeyde kullanabilme
9	Kimya ve ilgili alanlarda gerçekleştirdiği özgün araştırmaları uluslararası ve ulusal alanlarda yayınlayıp bilimsel katkıda bulunma

#### 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
Öğrenciler teorik hesaplamalı kimya ile ilgili temel araştırma ve geliştirme faaliyetlerinin yürütülmesi konusunda gerekli bilgi ve beceri kazanır.	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Kimyasal malzemelere yönelik hesaplamaları yapar	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Temel bilgileri analiz etme becerisi kazanır	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ortalama Değer	-	-	-	-	-	-	-	-	-