



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 Metodlar, Hartree-Fock Teorisi, Temel Setler, Geometri Optimizasyonu, Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi, Elektron Korelasyon Metodları, QMMM Karma Modeller.				
Ders Veren	Dr. Öğr. Üyesi Muhammet OKUR				
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 Metodlar
3	Uygulamalar
4	Hartree-Fock Teorisi
5	Uygulamalar
6	Temel Setler
7	Geometri Optimizasyonu
8	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
9	Uygulamalar
10	Elektron Korelasyon Metodları
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
Disiplinler arası ilişkilendirebilme ve uygulayabilme.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Bilgisayar, bilgisayar yazılımları gibi yeni teknoloji ve modern teknikleri analiz ve bilimsel problemlere modelleyebilmek.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Doğrudan teknoloji ve endüstri ilişkilendirerek kazanılan bilgiye uygulamak.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Güncel konularda bilgi sahibi olmak.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-