

DERS TANITIM BİLGİLERİ (TÜRKÇE)**Ders Bilgileri**

| Dersin Adı | Kodu | Yarıyılı | Teori (Saat/Hafta) | Uygulama (Saat/hafta) | Laboratuvar | Yerel Kredi | AKTS |
|--------------------------------------|---|--------------|-----------------------|--------------------------|-------------|----------------|------------|
| Kimyasal Hesaplamalar | MODES 663 | Bahar | 2 | | 2 | 3 | 7.5 |
| Önkoşul(lar)-var ise | | | | | | | |
| Dersin Dili | İngilizce | | | | | | |
| Ders Türü | Modelleme ve Hesaplama | | | | | | |
| Ders verilme şekli | Yüzyüze | | | | | | |
| Dersin Öğrenme ve Öğretme Teknikleri | Anlatım, Tartışma, Soru-Yanıt , Bilgisayar Laboratuvar Uygulama Çalışmaları | | | | | | |
| Dersin sorumlusu(ları) | Yrd. Doç. Dr. Hakan Kayı | | | | | | |
| Dersin amacı | Dersin ana amacı, hesaplamalı kimya ve moleküler modellemede kullanılan bazı tekniklere bir giriş sağlamak, ve bu tekniklerin kimyasal, fiziksel ve biyolojik olayları incelemek için nasıl kullanılabileceğini göstermektir. | | | | | | |
| Dersin öğrenme çıktıları | <ul style="list-style-type: none">• Hesaplamalı kimya ve moleküler modellemede rekabetçi bir temel kazanır.• Hesaplamalı kimya ve moleküler modelleme tekniklerinin pratik problemlere uygulanabilirliğini gösterir.• Kimyasal hesaplama teorisini formüle eder.• Hesaplamalı kimyadaki farklı metodları kıyaslar.• Belirli bir sorun için uygun modelleme yöntemini uygular.• Bir kimyasal sistemin temel durum ve uyarılmış durum enerjilerini hesaplar.• Çalışılan sistemin değişik kimyasal ve fiziksel özelliklerini hesaplar.• Teorik sonuçları amacına uygun olarak yorumlar. | | | | | | |
| Dersin içeriği | Koordinat sistemleri; teorisi, hesaplama ve modellemenin tanımı, hesaplamalı kimyada ölçü birimleri; potansiyel enerji yüzeyleri; teorik yapılar; matematiksel kavramlar; donanım ve yazılım; moleküler orbital teorisinin temelleri; yarı-ampirik uygulamalar, yoğunluk fonksiyonel teorisi, ab initio uygulamaları ,, termodinamik özellikler | | | | | | |
| Kaynaklar | Ders Kitabı: C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, John Wiley & Sons (2004) | | | | | | |

Haftalara göre işlenecek konular

| Haftalar | Tartışılacak/işlenecek konular | Ön çalışma |
|------------------|---|------------|
| 1. Hafta | Giriş | Bölüm 1 |
| 2. ve 3. Hafta | Hesaplamalı Kimyada Kullanışlı Konseptler | Bölüm 1-3 |
| 4. Hafta | Hesaplamalı Kimyada Kullanışlı Konseptler | Bölüm 1-3 |
| 5. ve 6. Hafta | Moleküler Orbital Teorisinin Temelleri | Bölüm 4 |
| 7. Hafta | ARASINAV | |
| 8. ve 9. Hafta | Moleküler Mekanik | Bölüm 5 |
| 10. Hafta | Yarı-ampirik Uygulamalar | Bölüm 5 |
| 11. ve 12. Hafta | Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Uygulamaları | Bölüm 8 |
| 13. Hafta | Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Uygulamaları | Bölüm 8 |
| 14. ve 15. Hafta | Ab initio Uygulamaları | Bölüm 6 |
| 16. Hafta | Ab initio Uygulamaları | Bölüm 6 |
| | GENEL SINAV | |

Değerlendirme Sistemi

| Yarıyıl İçi Çalışmaları | Sayısı | Katkı Payı % |
|--|--------|--------------|
| Devam | | |
| Laboratuvar | | |
| Uygulama (Küçük sınavlar) | | |
| Alan Çalışması | | |
| Derse Özgü Staj (varsa) | | |
| Ödevler | 5 | 20 |
| Sunum | 2 | 10 |
| Projeler | 2 | 20 |
| Seminer | | |
| Ara sınavlar | 1 | 20 |
| Genel Sınav | 1 | 30 |
| Toplam | | 100 |
| Yarıyıl İçi Çalışmalarının Başarı Notuna Katkısı | | 70 |
| Yarıyıl Sonu Sınavının Başarı Notuna Katkısı | | 30 |
| Toplam | | 100 |

Ders Kategorisi

| | |
|--|---|
| Temel Meslek Dersleri | x |
| Uzmanlık/Alan Dersleri | x |
| Destek Dersleri | |
| İletişim ve Yönetim Becerileri Dersleri | |
| Aktarılabılır Beceri Dersleri | |

AKTS (Öğrenci İş Yüğü) Tablosu

| Etkinlikler | Sayısı | Süresi | Toplam İş Yüğü |
|---|--------|--------|----------------|
| Ders Süresi (X16) | 16 | 2 | 32 |
| Laboratuvar | 16 | 2 | 32 |
| Uygulama (küçük sınavlar) | | | |
| Derse özgü staj (varsa) | | | |
| Alan Çalışması | | | |
| Sınıf Dışı Ders Çalışma Süresi (Ön Çalışma, pekiştirme, vb) | 16 | 3 | 48 |
| Sunum / Seminer Hazırlama | 2 | 10 | 20 |
| Proje | 2 | 20 | 40 |
| Ödevler | 5 | 4 | 20 |
| Ara sınavlara hazırlanma süresi | 1 | 15 | 15 |
| Genel sınava hazırlanma süresi | 1 | 20 | 20 |
| Toplam İş Yüğü | | | 227 |

Dersin Öğrenme Çıktılarının Program Yeterlilikleri/Çıktıları İle İlişkilendirilmesi

| Program Yeterlilikleri/Çıktıları | Katkı Düzeyi* | | | | |
|--|---------------|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| 1. İleri düzeydeki kimya mühendisliği ve uygulamalı kimya problemlerinin çözümü için gerekli bilgiye ulaşma, ulaşılan bilgiyi analiz etme ve değerlendirme becerisi. | | | | | |
| 2. Bilimsel ve teknolojik gelişmeleri izleyerek yaşam boyu eğitim felsefesi çerçevesinde kendini sürekli yenileme becerisi. | | | | | |
| 3. Kimya ve kimya mühendisliği uygulamalarının ve getirdiği yeniliklerin toplumsal, çevresel ve küresel etkilerinin bilincinde olma. | | | | | |
| 4. Özgün araştırma-geliştirme çalışmaları yapabilme ve elde ettiği sonuçları yayın, patent ve teknolojiye dönüştürebilme becerisi. | | | | | |
| 5. Gelişmiş matematik, temel bilimler ve mühendislik bilgilerini, ileri düzeydeki mühendislik problemlerine uygulayabilme becerisi. | | | | | |
| 6. Bilimsel ve teknolojik deneyleri laboratuvar ve pilot çapta tasarlayıp gerçekleştirebilme, sonuçları analiz edebilmek ve yorumlayabilme becerisi. | | | | | |
| 7. İstenilen özelliklerde bir sistemi, sistemin bir parçasını veya bir süreci tasarlayabilme, endüstriye uygulayabilme becerisi. | | | | | |
| 8. Bağımsız araştırma yapabilme becerisi. | | | | | |
| 9. Çok-disiplinli ortamda çalışabilme ve takım çalışmasına yatkın olma. | | | | | |
| 10. Profesyonel ve mesleki sorumluluklarının bilincinde olma. | | | | | |

*Lütfen program yeterliliğine olan katkı düzeyini 0-5 arasında numaralandırarak belirtiniz.

1: En düşük, 2: Düşük, 3: Orta, 4: Yüksek, 5: Çok Yüksek