

İLERİ HESAPLAMALI KİMYA

1	Ders Adı:	İLERİ HESAPLAMALI KİMYA
2	Ders Kodu:	KIM5065
3	Ders Türü:	Seçmeli
4	Ders Seviyesi	Yüksek Lisans
5	Dersin Verildiği Yıl:	1
6	Dersin Verildiği Yarıyıl	1
7	Dersin AKTS Kredisi:	6.00
8	Teorik Ders Saati (saat/Hafta)	3.00
9	Uygulama Ders Saati(saat/Hafta)	0.00
10	Laboratuvar Ders Saati (saat/hafta) :	0
11	Dersin Önkoşulu:	
12	Dersin Dili:	Türkçe
13	Dersin Veriliş Şekli:	Yüz yüze
14	Dersin Koordinatörü:	Doç. Dr. YELİZ ULAŞ
15	Dersi Veren Diğer Öğretim Elemanları:	
16	Koordinatör İletişim Bilgileri:	Doç.Dr. Yeliz ULAŞ yelizulas@uludag.edu.tr 0224-2942867 Bursa Uludağ Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü
17	Dersin WEB adresi:	
18	Dersin Amacı:	Kuantum kimyasal hesaplamalarla moleküllerin yapısal ve spektral özelliklerinin belirlenmesi
19	Dersin Mesleki Gelişime Katkısı:	Hesaplamalı kimya temel bilgilerini kazanmak Elektronik yapı hesaplama yöntemlerini tanımak Hedef Molekül için uygun yöntemi Seçebilmek
20	Dersin Öğrenme Kazanımları:	
	1	Hesaplamalı Kimyanın kapsamı hakkında bilgi sahibi olmak
	2	Hesaplamalı Kimya ile bileşiklerin yapısal ve elektronik özelliklerini tahmin edebilmek
	3	Hesaplamalı kimyada kullanılan bilgisayar programlarını tanımak
	4	
	5	
	6	
	7	
	8	
	9	
	10	
21	Dersin İçeriği:	
Hafta	DERS İÇERİKLERİ	
	Teorik	Uygulama
1	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi	
2	DFT hesaplamaları için Temel Bilgiler	

3	Elektronik Yapı ve Manyetik Özellikler	
4	DFT ile Enerji Hesaplamaları	
5	DFT ile Toplam Enerji Hesaplamaları	
6	Yüzey merkezleri ve DFT	
7	DFT ile Reaksiyon Mekanizmalarının İncelenmesi	
8	Biyolojik aktivite ve DFT Hesaplamaları	
9	DFT Geometri Optimizasyonu	
10	Spektroskopik veriler ve DFT	
11	Moleküllerin DFT hesaplamaları	
12	Moleküllerin DFT hesaplamaları	
13	Moleküllerin DFT hesaplamaları	
14	Moleküllerin DFT hesaplamaları	

22	Ders Kitabı, Referanslar ve/veya Diğer Kaynaklar:	1) Density Functional Theory,, David S. Sholl, Janice A. Steckel, Wiley, 2012 2)Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Christopher J. Cramer, John Wiley & Sons Inc, 2nd, 2004
----	---	--

23	Değerlendirme	
----	---------------	--

YARIYIL İÇİ ÇALIŞMALARI	SAYISI	KATKI YÜZDESİ
Ara Sınav	1	40.00
Kısa Sınav	0	0.00
Ödev	0	0.00
Yıl Sonu Sınavı	1	60.00
Toplam	2	100.00
Yıl içi çalışmalarının Başarıya Oranı		40.00
Finalin Başarıya Oranı		60.00
Toplam		100.00
Kullanılan Ölçme ve Değerlendirme Yaklaşımları		Ölçme ve değerlendirme, Bursa Uludağ Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği ilkelerine göre yapılmaktadır.

24	AKTS / İŞ YÜKÜ TABLOSU	
----	------------------------	--

ETKİNLİK	SAYISI	Süresi (Saat)	Toplam İş Yüğü (Saat)
Teorik Dersler	14	3.00	42.00
Uygulamalı Dersler	0	0.00	0.00
Sınıf Dışı Ders Çalışma Süresi (Ön çalışma, pekiştirme)	14	4.00	56.00
Ödevler	0	0.00	0.00
Projeler	0	0.00	0.00
Arazi Çalışmaları	0	0.00	0.00
Arasınavlar	1	30.00	30.00
Diğer	0	0.00	0.00
Yarıyıl Sonu Sınavı	1	52.00	52.00
Toplam İş Yüğü			180.00
Toplam İş Yüğü / 30 saat			6.00
Dersin AKTS Kredisi			6.00

25	PROGRAM YETERLİLİKLERİ İLE DERS ÖĞRETİM KAZANIMLARI İLİŞKİSİ TABLOSU															
	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8	PY9	PY10	PY11	PY12	PY13	PY14	PY15	PY16
ÖK1	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	0	0	0	0	0	0
ÖK2	4	5	4	4	4	4	4	4	4	4	0	0	0	0	0	0
ÖK3	5	5	5	5	5	5	3	5	5	5	0	0	0	0	0	0
ÖK: Öğrenme kazanımlar PY: Program yeterlilikleri																
Katkı Düzeyi:	1 çok düşük			2 Düşük			3 Orta			4 Yüksek			5 Çok Yüksek			