

HESAPLAMALI KİMYA

1	Ders Adı:	HESAPLAMALI KİMYA
2	Ders Kodu:	KIM4078
3	Ders Türü:	Seçmeli
4	Ders Seviyesi	Lisans
5	Dersin Verildiği Yıl:	4
6	Dersin Verildiği Yarıyıl	8
7	Dersin AKTS Kredisi:	5.00
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:	Hesaplamalı kimya hakkında temel becerilere sahip olmak
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 kimya temel bilgilerini kazanmak
		2 Elektronik yapı hesaplama yöntemlerini tanımak
		3 Hedef Molekül için uygun yöntemi Seçebilmek
		4
		5
		6
		7
		8
		9
		10
21	Dersin İçeriği:	
Hafta	DERS İÇERİKLERİ	
	Teorik	Uygulama
1	Hesaplamalı kimyada temel kavramlar	
2	Kuantum mekaniği ve moleküler orbital yöntemleri temelleri	

3	Hartree-Fock (HF) yaklaşımları, Ab initio yöntemi		
4	Moleküllerin temel hesaplamalarında dikkat edilmesi gerekenler		
5	Yapı analizinde kullanılan teknikler ve teorik hesaplamalar		
6	Teorik Hesaplamalardaki Sapmalar		
7	Elektrostatik potansiyel, elektron ve spin yoğunlukları		
8	Molekül içi/Moleküller arası Etkileşimler		
9	Elektronik Yapı ve Manyetik Özellikler		
10	Hesaplamalı Kimyada Reaksiyon Mekanizmaları		
11	Moleküllerin 3-boyutlu çiziminde kullanılan kullanılan bilgisayar programları		
12	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine Giriş (DFT)		
13	DeneySEL ve Teorik Analizlerin Karşılaştırılması		
14	DFT'nin Multidisipliner alanlarda Kullanımı		
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 ÇALIŞMALAR		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			Bağıl Değerlendirme
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)	0	0.00	0.00
Ödevler	0	0.00	0.00
Projeler	0	0.00	0.00
Arazi Çalışmaları	0	0.00	0.00
Arasnavlar	1	40.00	40.00
Diğer	0	0.00	0.00
Yarıyıl Sonu Sınavı	1	72.00	72.00
Toplam İş Yüğü			154.00
Toplam İş Yüğü / 30 saat			5.13
Dersin AKTS Kredisi			5.00

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	5	5	5	5	0	0
ÖK2	4	5	5	5	4	5	5	4	5	4	5	4	5	5	0	0
ÖK3	4	5	5	4	4	5	4	4	4	4	5	5	5	5	0	0
ÖK: Öğrenme kazanımlar PY: Program yeterlilikleri																
Katkı Düzeyi:	1 çok düşük			2 Düşük			3 Orta			4 Yüksek			5 Çok Yüksek			