



YOZGAT BOZOK ÜNİVERSİTESİ LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI DERS ÖĞRETİM PLANI

Dersin Kodu	Dersin Adı	Yarıyıl	Dersin Türü (Z/S)	T+U+L (Saat/Hafta)	Kredi	AKT S	Eğitim Dili
KDR610	Kimyada Bilgisayar Hesaplamaları-II	1-2	S	3+0+0		5	Türkçe

DERS BİLGİLERİ

Dersin Katalog Tanımı (İçeriği)	Kimyada bilgisayar hesaplamalarına giriş, GAUSSIAN Programının kullanımı, single point enerji, konformasyon analiz hesaplamaları, reaktanın, araürünün, geçiş halinin ve son ürünlerin geometri optimizasyonu ve çözücü etkisi, reaksiyon modelleme, kimyasal reaksiyon çalışmaları ve aktivite, moleküler özellikler, titreşim frekans hesaplamaları, Infrared and raman şiddeti ve spektrumları, elektrostatik potansiyel, natural bağ analizi, manyetik özellikler ve perdeleme, reaksiyon mekanizması örnekleri.
Dersin Amacı	HF, DFT ve diğer modern kuantum kimyasal metodları anlamak ve Kimyanın dallarına uygulamak
Dersin Seviyesi	Doktora
Dersin Öğretim Dili	Türkçe
Öğretim Yöntemi	(X) Örgün () Uzaktan () Karma/Hibrit
Dersi Yürüten Öğretim Elemanları	Dr. Öğr. Üyesi Hatice ARI
Dersin Ön Koşulu Ders(ler)i	
Dersin Öğrenme Çıktıları	1- Deneysel olarak elde edilen verilerin teorik hesaplamalarını yapabilir. 2- Teorik olarak elde edilen verileri yorumlayabilir. 3- Bileşiklerin geometrik, elektronik ve spektroskopik özelliklerini inceleyebilir. 4- Moleküllerin fizikokimyasal özelliklerini hesaplayabilir. 5- Makale yazımı için gerekli olan tüm programları öğrenebilir.

DERS İÇERİĞİ

Hafta	Teori	Uygulama/Laboratuvar
1	Kimyada Bilgisayar hesaplamalarına giriş	
2	GAUSSIAN Programının kullanımı	
3	Single point enerji	
4	Konformer analizi hesaplamaları	
5	Reaktanın, araürünün, geçiş halinin ve son ürünlerin geometri optimizasyonu	
6	Gaz fazı hesaplamaları ve çözücü etkisi	
7	Reaksiyon Modelleme	
8	Kimyasal reaksiyon çalışmaları ve aktivite, moleküler özellikler	
9	Titreşim frekans hesaplamaları	
10	NMR sinyallerinin hesaplanması	
11	UV spektrumlarının hesaplanması	
12	Elektrostatik Potansiyel, NBO analizi, Manyetik özellikler	
13	Atomlaşma enerjisi, elektron ilgisi, iyonlaşma enerjisi ve proton ilgisi hesaplamaları	
14	Band gap hesaplamaları	

Dersin Öğrenme Kaynakları

1. James B. Foresman, A Eelen Frisch, "Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods", Gaussian Inc, Wallingford, 2015.
2. Christopher J. Cramer , "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", 2nd Edition, Wiley

DEĞERLENDİRME ÖLÇÜTLERİ

Dönem İçi Çalışma Etkinlikleri	Sayısı	Katkısı
Ödev	1	30
Uygulama		
Forum/ Tartışma Uygulaması		
Kısa sınav (Quiz)	2	70
Dönemiçi Çalışmaların Yarıyıl Başarıya Oranı (%)		%40
Finalin Başarıya Oranı (%)	1	%60
Toplam		%100

DERS İŞ YÜKÜ TABLOSU

Etkinlik	Toplam Hafta Sayısı	Süre (Haftalık Saat)	Toplam İş Yüğü
Teori	14	3	42
Uygulama			
Forum/ Tartışma Uygulaması			
Okuma	14	2	28
İnternet Taraması, Kütüphane Çalışması	14	2	28
Materyal Tasarlama, Uygulama	2	5	10
Rapor Hazırlama			
Sunu Hazırlama			
Sunum			
Final Sınavı	1	1	1
Final Sınavına Hazırlık	4	4	16
Diğer (Belirtiniz:)			
Toplam İş Yüğü			125
Toplam İş Yüğü / 25 (s)			125/25
Dersin AKTS Kredisi			≅5

Not: Dersin iş yükü tablosu öğretim elemanı tarafından ders özelinde belirlenecektir.

PROGRAM ÖĞRENME ÇIKTILARI KATKI DÜZEYLERİ

No	Program Öğrenme Çıktıları	1	2	3	4	5
1	Yüksek Lisans düzeyi yeterliliklerine bağlı olarak alanındaki bilgilerini uzmanlık düzeyinde geliştirir ve derinleştirir.					X
2	Yüksek lisans yeterliliklerine dayalı ileri düzeydeki bilgilerini kullanarak yenilik getirecek özgün tanımlara ulaşır.					X
3	Alanının, farklı disiplinlerle etkileşimini kavrar; yeni ve karmaşık düşünceleri irdeler, sentezler, değerlendirmeler yaparak uzmanlık gerektiren bilgilerle özgün sonuçlara ulaşır.				X	
4	Alanındaki yeni bilgileri sınıflandırarak değerlendirir ve kullanır.				X	

5	Alanına yönelik yeni bir düşünce, yöntem, tasarım ve veya uygulama geliştirir.					X
6	Bilinen bir düşünce, yöntem, tasarım ve veya uygulamayı farklı bir alana uygular, özgün bir konuyu araştırır, kavrar, tasarlar, uyarlar ve uygular.					X
7	Yeni ve karmaşık düşüncelerin eleştirel analizini, sentezini ve değerlendirmesini yapar.					X
8	Alanı ile ilgili çalışmalarda ileri düzeyde araştırma yöntemlerini kullanır.				X	
9	Alanı ile ilgili özgün bir çalışmayı bağımsız olarak gerçekleştirerek ilerlemeye katkıda bulunur.					X
10	Alanı ile ilgili bir çalışmayı ulusal ya da uluslararası bir dergide yayınlayarak bilginin sınırlarını geliştirir.					X
11	Özgün ve disiplinler arası çalışmalarda liderlik yapar.					X
12	Alanında yaratıcı düşünme, eleştirel düşünme gibi üst düzey zihinsel becerileri kullanarak özgün yöntemler geliştirir.				X	
13	Sosyal ilişkileri ve bu ilişkileri yönlendiren değerler bütünü eleştirel bir yaklaşımla inceleyebilir, geliştirebilir gerektiğinde değiştirme ve dönüştürmeyi yönetir.			X		
14	Alanının uzmanları ile sahasındaki özgün konuları tartışır, kendi görüşlerini savunur ve etkili bir biçimde ifade eder.					X
15	Bir yabancı dili kullanarak yazılı, sözlü ve görsel iletişimle bir meseleyi tartışabilir.				X	
16	Alanı ile ilgili bilimsel, teknolojik, sosyal gelişmeleri tanıtarak bilgi toplumu oluşumuna ve sürdürülebilirliğine katkı sağlar.					X
17	Alanı ile ilgili muhtemel sorunların çözümünde farklı bakış açılarıyla karar verme süreçlerini kullanarak işlevsel etkileşim kurar.				X	
18	Alanı ile ilgili konularda karşılaşılan toplumsal, bilimsel, kültürel ve etik sorunların çözümüne katkı sağlar ve bu değerlerin gelişimini destekler.			X		

Boğaziçi