



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	AKTS	Eğitim Dili
KYL556	HESAPLAMALI KİMYAYA GİRİŞ	1-2	S	3+0+0		5	TÜRKÇE

DERS BİLGİLERİ

Dersin Katalog Tanımı (İçeriği)	Hesaplama kimyanın temel kavramları; ChemOffice, Chem3D, Hyperchem, Schrödinger Maestro, Mopac, Gaussian ve AutoDock Vina paket programlarının kullanımı; teorik hesaplama sonuçlarının yorumlanması
Dersin Amacı	Hesaplama kimyanın temel kavramları hakkında temel bilgi kazandırmak, kimyanın çeşitli alanlarındaki güncel araştırmalarda sıkça kullanılan hesaplama kimya yöntemlerini tanıtmak ve bu yöntemlerin çeşitli amaçlar için nasıl kullanılabileceğini öğretmek
Dersin Seviyesi	Yüksek lisans
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	Yok
Dersin Öğrenme Çıktıları	1- Molekül çizimi yapabilir. 2- Moleküler yapının en kararlı olduğu optimize yapıyı bulabilir. 3- Moleküllerin yapısal ve kimyasal özelliklerini hesaplayabilir. 4- Hesaplama kimya yöntemleri ile ilaç keşif çalışmaları yapabilir. 5- Teorik hesaplama sonuçlarını yorumlayabilir.

DERS İÇERİĞİ

Hafta	Teori	Uygulama/Laboratuvar
1	Hesaplama kimyanın temel kavramları	
2	Hesaplama kimya ile yapılabilecekler	
3	ChemOffice Paket Programı: ChemDraw programı ile molekül çizimi	
4	Chem3D programı ile molekül çizimi	
5	Chem3D programı ile Mopac, Gaussian ve benzeri paket programları için veri dosyasının hazırlanması	
6	Hyperchem paket programı ile hesaplamalar	
7	Schrödinger Maestro paket programı ile hesaplamalar	
8	Mopac Paket Programı: Mopac paket programı ile hesaplamalar	
9	Gaussian Paket Programı; GaussView paket programı ile molekül çizimi ve hesaplamalar	
10	Gaussian Paket Programı; GaussView paket programı ile molekül çizimi ve hesaplamalar	
11	AutoDock Vina programı ile docking hesaplamaları	
12	AutoDock Vina programı ile docking hesaplamaları	
13	Hesaplanmış sonuçların incelenmesi	
14	Hesaplama verilerinin değerlendirilmesi	
15		Final Sınavı

Dersin Öğrenme Kaynakları

1. David C Young, "Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems", John Wiley & Sons, 2001.
2. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, England, 1999.
3. James B. Foresman, AEleen Frisch, "Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods", Gaussian Inc, Wallingford, 2015.

DEĞERLENDİRME ÖLÇÜTLERİ

Dönem İçi Çalışma Etkinlikleri	Sayısı	Katkısı (%)
Ödev	1	30
Uygulama		
Forum/ Tartışma Uygulaması		
Kısa sınav (Quiz)	2	70
Dönem içi 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 Yükü
Teori	14	3	42
Uygulama			
Forum/ Tartışma Uygulaması			
Okuma	14	2	28
İnternet Taraması, Kütüphane Çalışması	14	2	28
Bireysel Çalışma	2	5	10
Beyin Fırtınası			
Sunu Hazırlama			
Sunum			
Final Sınavı	1	1	1
Final Sınavına Hazırlık	4	4	16
Diğer (Belirtiniz: Ev Ödevi)	14	3	42
Toplam İş Yükü			125
Toplam İş Yükü / 25 (s)			125/25
Dersin AKTS Kredisi			≅5

PROGRAM ÖĞRENME ÇIKTILARI KATKI DÜZEYLERİ

No	Program Öğrenme Çıktıları	1	2	3	4	5
1	Lisans düzeyi yeterliliklerine dayanarak kimya alanındaki bilgilerini uzmanlık düzeyinde geliştirebilir ve derinleştirebilir.				X	
2	Alanı ile ilişkili disiplinler arasındaki etkileşimi kavrar.					X
3	Alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanır.					X
4	Alanında edinmiş olduğu bilgileri ilgili disiplinlerden gelen bilgilerle bütünleştirerek yorumlar ve yeni bilgiler oluşturur.					X
5	Alanındaki sorunları bilimsel araştırma yöntemlerini kullanarak çözümler.					X
6	Alanı ile ilgili uzmanlık gerektiren bir çalışmayı bağımsız olarak yürütür.				X	
7	Alanındaki uygulamalarda karşılaşılabilecek karmaşık problemlere yeni yaklaşımlar geliştirir.					X
8	Alanındaki uygulamalarda karşılaşılabilecek karmaşık problemlerde sorumluluk alır ve çözüm üretir.				X	

9	Alanı ile ilgili sorunların çözümlenmesini gerektiren ortamlarda inisiyatif alır.			X		
10	Alanıyla ilgili bilgileri eleştirel bir gözle değerlendirir ve öğrenmeyi yönlendirir.				X	
11	Alanındaki gelişmeleri ve kendi çalışmalarını, yazılı, sözlü ve görsel olarak sistemli biçimde aktarabilir.					X
12	Sosyal ilişkileri ve bu ilişkileri yönlendiren değerler bütünü eleştirel bir yaklaşımla geliştirebilir ve gerektiğinde dönüştürebilir.			X		
13	Bir yabancı dili kullanarak sözlü ve yazılı iletişim kurar.				X	
14	Alanının gerektirdiği düzeyde bilgisayar yazılımlarını kullanır.					X
15	Alanının gerektirdiği düzeyde bilişim ve iletişim teknolojilerini ileri düzeyde kullanır.					X
16	Alanı ile ilgili verileri toplar, yorumlar, sonuçlandırır, etik değerleri gözeterek uygular ve paylaşır.				X	
17	Alanı ile ilgili konularda farklı bakış açıları geliştirir, politikalar belirler, planlamalar yapar ve ulaştığı sonuçları kalite çerçevesinde değerlendirir.					X
18	Alanında kazandığı bilgileri içselleştirir, beceriye dönüştürür ve disiplinler arası çalışmalarda kullanır.				X	

Bozok