



**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
KYL522	MODELLEME VE SIMÜLASYON	1-2	S	3+0+0		5	Türkçe

**DERS BİLGİLERİ**

<b>Dersin Katalog Tanımı (İçeriği)</b>	Moleküler Modellemede Faydalı Konular, Hesaplamalı Kuantum Mekaniğine Giriş, İleri AB Initio Metotları, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ve Katı Hal Kuantum Mekaniği, Kuvvet Alan Modelleri: Moleküler Mekanik, Enerji Yüzeyini Geliştirme için İlgili Metotlar ve Enerji Minimizasyonu, Hesaplamalı Simülasyon Metotlar, Moleküler Dinamik Simülasyon Metotlar, Monte Carlo Simülasyon Metotları, Konformasyon Analizi, Protein Yapı Tahmini, Ardışık Analiz ve Protein Bulma, Protein Yapı Tahmini, Ardışık Analiz ve Protein Bulma, Moleküler Modellemede Dört Destek: Serbest Enerjiler, Çözünme, Reaksiyonlar ve Katı Hal Bozunması, Yeni Moleküllerin Tasarımı ve Keşfine Moleküler Modellemenin ve Kimya bilgilerinin Kullanımı, Genel Olarak Moleküler Modelleme Yazılımlarının İncelenmesi
<b>Dersin Amacı</b>	Teorik kimya ve deneysel kimya arasında ilişki kuran yeni bilgisayar uygulamaları yapmak. Yeni teorik programlar ve yazılımlar geliştirmek ve uygulamalarını yapmak.
<b>Dersin Seviyesi</b>	Yüksek Lisans Dersi
<b>Dersin Öğretim Dili</b>	Türkçe
<b>Öğretim Yöntemi</b>	(X) Örgün ( ) Uzaktan ( ) Karma/Hibrit
<b>Dersi Yürüten Öğretim Elemanları</b>	Dr. Öğr. Üyesi Hatice ARI
<b>Dersin Ön Koşulu Ders(ler)i</b>	Molekül Simetrisi ve Spektroskopi
<b>Dersin Öğrenme Çıktıları</b>	1- Ders sayesinde, öğrenciler programlama diliyle, özellikle C#, temel istatistiksel termodinamiğin ana konularını geliştirecektir. 2- Hesaplamalı bilimin özel konuları, temel moleküler dinamik ve Monte Carlo metodunun çalışma bilgileri öğretilenektir. 3- Moleküllerin yapı tayini, elektronik ve spektroskopik özelliklerini hesaplayabilir. 4- Moleküler modelleme yapabilir. 5- Yeni moleküller tasarlayabilir.

**DERS İÇERİĞİ**

Hafta	Teori	Uygulama/Laboratuvar
1	Moleküler Modellemede Faydalı Konular	
2	Hesaplamalı Kuantum Mekaniğine Giriş	
3	İleri AB Initio Metotları, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ve Katı Hal Kuantum Mekaniği	
4	Kuvvet Alan Modelleri: Moleküler Mekanik	
5	Enerji Yüzeyini Geliştirme için İlgili Metotlar ve Enerji Minimizasyonu	
6	Hesaplamalı Simülasyon Metotlar	
7	Moleküler Dinamik Simülasyon Metotlar	
8	Monte Carlo Simülasyon Metotları	
9	Konformasyon Analizi	

10	Protein Yapı Tahmini, Ardışık Analiz ve Protein Bulma	
11	Moleküler Modellemede Dört Destek: Serbest Enerjiler, Çözünme, Reaksiyonlar ve Katı Hal Bozunması	
12	Yeni Moleküllerin Tasarımı ve Keşfine Moleküler Modellemenin ve Kimya bilgilerinin Kullanımı	
13	Genel Olarak Moleküler Modelleme Yazılımlarının İncelenmesi	
14	Genel tekrar	
15	Final Sınavı	

#### Dersin Öğrenme Kaynakları

1. Thomas Westermann, Modellbildung und Simulation: Mit einer Einführung in ANSYS, Springer, 1994.
2. Bernard P. Zeigler, Alexandre Muzy and Ernesto Kofman, Theory of Modeling and Simulation, Elsevier, 3rd Edition, 2018.

#### 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	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