

**MARMARA ÜNİVERSİTESİ <Fen-Edebiyat Fakültesi>****Kimya Bölümü****DERS İZLEME PROGRAMI (SYLLABUS)**

<2016-2017> <Güz> Yarıyılı

Dersin Düzeyi: Lisans (First Cycle)

Ders Kodu	Ders Adı	Ders Türü	Ders Havuzu (varsa)	Haftalık Ders Saati		Ulusal Kredi	ECTS Kredisi	Yarıyıl
				T	U			
CHEM4514	Molecular Modelling	Seçimlik	CHEM-S2	2	0	3	3	8

Önkoşul Dersler (Ders Kodu ve Adı, Min Harfli Başarı Notu)	Önkoşullu Dersler (Ders Kodu ve Adı, Min Harfli Başarı Notu)	Haftalık Ders Programı (Gün, Saat Aralığı, Derslik)
<Bu dersi bağlayan önceki derslerin kodu, adı, min hb> {Her bir dersi birbirinden noktalı virgülle ayırınız.}	<Bu dersin bağladığı sonraki derslerin kodu, adı, min hb> {Her bir dersi birbirinden noktalı virgülle ayırınız.}	

Öğretim Üyesi	Prof. Dr. Safiye ERDEM	Öğretim Üyesi Yardımcıları	
Ofis/Oda No	C413	Ofis/Oda No	
Telefon + İç Hat	0216 3479641 + 1377	Telefon + İç Hat	
E-posta	erdem@marmara.edu.tr	E-posta	
Web	http://mimoza.marmara.edu.tr/~erdem/	Web	
Öğrenci Görüşme Gün ve Saati		Öğrenci Görüşme Gün ve Saati	

Dersin Amacı	To introduce modern electronic structure methods and demonstrate how they are used in modelling various aspects of chemistry.
--------------	---

Ders Kitabı ve/veya Kaynaklar	Dersin web sayfası:	
	1. Hesapsal Organik Kimya Ders Notları, Safiye Erdem, 2006 http://posta.marmara.edu.tr/~erdem/fbe/ders_notlari/Hesapsal_Organik_Kimya.pdf	
	2. A. R. Leach, Molecular Modelling Principles and Applications, Prentice Hall Pearson Education, England	

Ders Öğrenme Kazanımları /Çıktıları	1. Differentiate computational methods and select an appropriate method for a basic modelling application
	2. Use a molecular modelling software (draw molecules, prepare inputs, submit jobs and analyze the output)
	3. Visualize compounds in 3-dimension in molecular level.
	4. Comprehend electronic structures and geometries in molecular level
	5. Establish the relationship between experiments and computations on fundamental concepts of chemistry.

Program Kazanımları x Ders Öğrenme Kazanımları Matrisi	Program Kazanımları / Çıktıları															1:Zayıf; 2:Orta; 3:Güçlü	
	PK1	PK2	PK3	PK4	PK5	PK6	PK7	PK8	PK9	PK10	PK11	PK12	PK13	PK14	PK15	Ders Öğrenme Kazanımı	
	1	1	2		3		3						1	2		DK1. Differentiate comput...	
	1	1			1	3							3	2		DK2. Use a molecular mode...	
			3										3	2		DK3. Visualize compounds ...	
	3		3				3						3	2		DK4. Comprehend electroni...	
	1		3				3						3	2		DK5. Establish the relati...	
	2	1	3	0	3	1	3	0	0	0	0	0	0	3	2	0	TOPLAM ETKİ

Ders Kodu	Ders Adı	Ders Türü	Ders Havuzu (varsa)	Haftalık Ders Saati		Ulusal Kredi	ECTS Kredisi	Yarıyıl
				T	U			
CHEM4514	Molecular Modelling	Seçimlik	CHEM-S2	2	0	3	3	8
Öğretim Dili	Planlanan Öğrenme Faaliyetleri ve Öğretim Yöntemleri			Ders Sunuş Şekli				
İngilizce	<Lecture, presentation, demonstration and hand on applications on computers>			<Interactive lecture, discussion, demonstration, computer assignments>				
Hafta	Tarih	Haftalık Ders İçerikleri				Kaynak No - İlgili Bölüm		
1. Hafta		Introduction to computational methods; semi-empirical, ab initio, DFT						
2. Hafta		Hartree-Fock, Self consistent field methods						
3. Hafta		Introduction to molecular modelling softwares						
4. Hafta		Hands on application: Drawing molecules in modelling software						
5. Hafta		Hands on application: How to prepare inputs and submit jobs for the program						
6. Hafta		Inter- and intra-molecular interactions and conformational effects						
7. Hafta		Hands on application: Conformational search						
8. Hafta		Midterm exam						
9. Hafta		Hands on application: Electrostatic potential maps, density surfaces, HOMO-LUMO surfaces						
10. Hafta		Hands on application: Spectroscopic properties, animation of IR frequencies						
11. Hafta		Hands on application: Building up biomolecules (proteins, DNA, RNA)						
12. Hafta		Potential energy surfaces (PES), Intrinsic Reaction Coordinate (IRC)						
13. Hafta		Modelling reaction mechanisms						
14. Hafta		Project: Regioselectivity of hydroboration in elkenes (1st week)						
15. Hafta		Project: Regioselectivity of hydroboration in elkenes (2nd week)						
16. Hafta		Review						
17. Hafta		Final exam						
Başarı Değerlendirme Yöntemi		YSSL (BDS)	BNAL (BDS)	BDKL (BDS)	Başarı Notu Hesabı			
Değerlendirme Araçları ve Katkı Oranları	Değerlendirme Aracı		Adet	Tarih	Başarı Notuna Katkısı (%)		Yarıyıl İçi Değerlendirme Notuna Katkısı (%)	
	Yarıyıl Sonu Sınavı (Final)		1		60,00		0,00	
	Bütünleme Sınavı (varsa)				60,00		0,00	
	Yarıyıl İçi Değerlendirmesi				40,00		100,00	
	Arasınav		1		20,00		50,00	
	Kısa Sınav / Quiz							
	Proje				20,00		50,00	
	Ödev							
	Laboratuvar / Atölye							
	Sunum / Seminer / Demo							
	Araştırma / Rapor / Diğer							
	Derse Katılım							
Öğrenci İşyükü Hesabı								
Araç	Haftalık Ort. Saat	Yarıyıl Top. Saat	Araç	Haftalık Ort. Saat	Yarıyıl Top. Saat	Araç	Haftalık Or. Saat	Yarıyıl Top. Saat
Teorik Saat	2,00	28	Arasınav ve Hazırlığı	1,00	14	Laboratuvar / Atölye ve Hazırlığı		
Uygulama Saat	0,00	0	Kısa Sınav / Quiz ve Hazırlığı			Sunum / Seminer / Demo ve Hazırlığı		
Ders Öncesi/Sonrası Bireysel Çalışma			Proje ve Hazırlığı	1,00	14	Araştırma / Rapor / Diğer ve Hazırlığı	0,50	7
Uyg. Öncesi/Sonrası Bireysel Çalışma			Ödev ve Hazırlığı			Yarıyıl Sonu Sınavı (Final) ve Hazırlığı	1,00	14
Toplam Öğrenci İşyükü Saati:		77	1 ECTS Kredisi = 25 Öğrenci İşyükü Saati			İşyükü Hesabı: Hesap Doğru		