

**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			
KMY3358	Hesapsal Kimyaya Giriş	Yönelme Seçimlik	KMY-SY2	2	2	4	4	6

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	<Unvan, Adı, Soyadı>
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	Kimyanın çeşitli alanlarındaki güncel araştırmalarda sıkça kullanılan hesapsal kimya yöntemlerini tanıtmak, bilgisayar başında bir fiil molekül modelleme uygulamaları yaptırarak bu yöntemlerin kimyada çeşitli amaçlar için nasıl kullanılabileceğini öğretmek. Öğrencilerimizin kimyaya moleküler seviyede hayal edebilmelerini ve mantıksal öngörüler yapabilmelerini sağlamak.
--------------	---

Ders Kitabı ve/veya Kaynaklar	Dersin web sayfası:	http://mimoza.marmara.edu.tr/~erdem/
	1.	Computational Organic Chemistry, S. M. Bachrach
	2.	Essentials of Computational Chemistry, C. J. Cramer
	3.	Computational Chemistry, D. C. Young
	4.	Hesapsal Organik Kimya Ders Notları, Safiye Erdem: http://mimoza.marmara.edu.tr/~erdem/

Ders Öğrenme Kazanımları /Çıktıları	1.	Elektronik yapı hesaplama yöntemlerini tanıy, güçlü ve zayıf yönlerini bilir.
	2.	Belirli bir özelliği hesaplamak için geçerli yöntemi doğru seçebilir.
	3.	Standart bir molekül modelleme paket programını kullanabilir (girdi dosyalarını hazırlayabilir, çıktı dosyalarını analiz edebilir).
	4.	Molekülleri 3-boyutlu olarak çizebilir, hayal edebilir, izomerlik ilişkilerini görebilir.
	5.	Moleküllerin kararlı/kararsız olmalarına sebep olan molekül içi etkileşimleri tespit ve tahmin edebilir.
	6.	Laboratuar uygulamalarından bilimsel rapor yazabilir.

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	2	1	0	0	0	3	0	0	0	0	0	1	0		DK1. Elektronik yapı hesa...	
1	2	2	0	3	3	3	0	0	0	0	0	1	0		DK2. Belirli bir özelliği...		
2	0	2	3	2	2	3	2	2	2	1	0	2	0		DK3. Standart bir molekül...		
3	0	3	1	0	0	3	0	0	0	1	0	2	0		DK4. Molekülleri 3-boyutl...		
3	0	3	0	0	0	3	1	0	0	0	0	2	0		DK5. Moleküllerin kararlı...		
2	1	3	0	3	3	3	3	2	3	0	2	2	0		DK6. Laboratuar uygulamal...		
2	1	2	1	1	1	3	1	1	1	0	0	2	0	0	TOPLAM ETKİ		

Ders Kodu	Ders Adı	Ders Türü	Ders Havuzu (varsa)	Haftalık Ders Saati		Ulusal Kredi	ECTS Kredisi	Yarıyıl	
				T	U				
KMY3358	Hesapsal Kimyaya Giriş	Yönelme Seçimlik	KMY-SY2	2	2	4	4	6	
Öğretim Dili	Planlanan Öğrenme Faaliyetleri ve Öğretim Yöntemleri			Ders Sunuş Şekli					
	Anlatım/soru-cevap, bilgisayarda modelleme, simülasyonlar, gözlem, raporlama			Yüzyüze, deney, soru-cevap, tartışma, örnek olay, gösterip yaptırma					
Hafta	Tarih	Haftalık Ders İçerikleri			Kaynak No - İlgili Bölüm				
1. Hafta		Hesapsal yöntemlere giriş, kuantum kimya hesaplamaları							
2. Hafta		Hartree-Fock (HF) yaklaşımları, Ab initio yöntemi, temel setler							
3. Hafta		Post HF yöntemleri ve elektron korelasyonu							
4. Hafta		Paket program kullanımı, bilgisayarda molekülleri 3-boyutlu çizme uygulamaları							
5. Hafta		Bilgisayarda molekülleri 3-boyutlu görselleştirme uygulamaları							
6. Hafta		Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT), paket programda input hazırlama							
7. Hafta		Yarı-deneysel yöntemler, paket programda yapı optimizasyonu, enerji hesapları							
8. Hafta		Arasınava							
9. Hafta		Molekül içi/moleküller arası etkileşimler, bilgisayarda konformasyon tarama							
10. Hafta		Süstitüe sikloheksanlarda konformasyonel etkiler (stereo elektronik etkiler)							
11. Hafta		Elektrostatik potansiyel, elektron ve spin yoğunluklarını görselleştirme							
12. Hafta		HOMO-LUMO orbitallerinin hesaplanması ve görselleştirme							
13. Hafta		Spektral özelliklerin hesaplanması							
14. Hafta		IR titreşim modlarının hesaplanması ve animasyonları							
15. Hafta		Potansiyel enerji yüzeyleri, durağan noktalar, Bütanın konformasyonel analizi							
16. Hafta		Geçiş konumlarının ve tepkime mekanizmasının modellenmesi, SN2 uygulaması							
17. Hafta		Yarıyıl sonu sınavı (final)							
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				
	Arasınava	1		20.00	50.00				
	Kısa Sınav / Quiz								
	Proje								
	Ödev								
	Laboratuvar / Atölye	8		4.00	10.00				
	Sunum / Seminer / Demo								
	Araştırma / Rapor / Diğer	2		14.00	35.00				
	Derse Katılım	1		2.00	5.00				
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	Arasınava ve Hazırlığı	1.00	14	Laboratuvar / Atölye ve Hazırlığı			
Uygulama Saat	2.00	28	Kısa Sınav / Quiz ve Hazırlığı			Sunum / Seminer / Demo ve Hazırlığı			
Ders Öncesi/Sonrası Bireysel Çalışma			Proje ve Hazırlığı			Araştırma / Rapor / Diğer ve Hazırlığı	1.00	14	
Uyg. Öncesi/Sonrası Bireysel Çalışma			Ödev ve Hazırlığı			Yarıyıl Sonu Sınavı (Final) ve Hazırlığı	1.00	14	
Toplam Öğrenci İşyükü Saati:		98	1 ECTS Kredisi = 25 Öğrenci İşyükü Saati			İşyükü Hesabı:		Hesap Doğru	