



MARMARA ÜNİVERSİTESİ <Fen-Edebiyat Fakültesi>

Kimya Bölümü

DERS İZLEME PROGRAMI (SYLLABUS)

<2016-2017> <Bahar> 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 | | | |
| KMY4586 | Hesapsal Kimya | Yönelme Seçimlik | KMY-SY4 | 2 | 2 | 4 | 4 | 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 | <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 | Modern elektronik yapı hesaplama yöntemlerinin, bileşik reaktivitelerinin, çeşitli tepkime mekanizmalarının ve kompleks sistemlerin modellenmesinde nasıl kullanılacağını molekül modelleme yazılımları ile öğretmek. Öğrencilerimizin kimyayı moleküler seviyede hayal edebilmelerini ve mantıksal öngörüler yapabilmelerini sağlamak. |
|--------------|---|

| | | |
|-------------------------------|---------------------|--|
| 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. | Essentials of Computational Chemistry, C. J. Cramer, 2nd addition, Wiley, 2004 |
| | 3. | Molecular Modelling-Principles and Applications, A. R. Leach, 2nd addition, Prentice Hall, 2001. |
| | 4. | Ab initio Molecular Orbital Theory, W. J. Hehre, L. Radom, P. Schleyer, J. A. Pople, Wiley, 1986. |
| | 5. | Experiments in Computational Organic Chemistry, W. Hehre, L. D. Burke, A. J. Shusterman, W. J. Pietro, Wavefunction Inc., 1993. |

| | | |
|-------------------------------------|----|---|
| Ders Öğrenme Kazanımları /Çıktıları | 1. | Bir kimya problemini çözmek için elektronik yapı modelleme yöntemlerini kullanabilir. |
| | 2. | Bilgisayarda biyomolekülleri 3-boyutlu çizebilir, görselleştirebilir. |
| | 3. | Bir tepkimenin mekanizmasını kurgulayabilir ve modelleyebilir. |
| | 4. | Hesaplamalı kimya alanındaki bir bilimsel yayını okuyup analiz edebilir. |
| | 5. | Hesaplamalı kimya yöntemleri ile basit bir proje kurgulayabilir ve sunabilir. |

| 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 |
| | 3 | 0 | 3 | 0 | 1 | 3 | 3 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | DK1. Bir kimya problemini... |
| | 3 | 0 | 1 | 1 | 1 | 2 | 3 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | DK2. Bilgisayarda biyomol... |
| | 3 | 0 | 2 | 0 | 0 | 2 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | DK3. Bir tepkimenin mekan... |
| | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | DK4. Hesaplamalı kimya al... |
| | 1 | 0 | 2 | 0 | 0 | 1 | 3 | 0 | 2 | 3 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | DK5. Hesaplamalı kimya yö... |
| | 2 | 0 | 2 | 0 | 0 | 2 | 3 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | TOPLAM ETKİ |

| Ders Kodu | Ders Adı | Ders Türü | Ders Havuzu (varsa) | Haftalık Ders Saati | | Ulusal Kredi | ECTS Kredisi | Yarıyıl |
|--|---|--|---|---|---------------------------|--|--------------------|-------------------|
| | | | | T | U | | | |
| KMY4586 | Hesapsal Kimya | Yönelme Seçimlik | KMY-SY4 | 2 | 2 | 4 | 4 | 8 |
| Öğretim Dili | Planlanan Öğrenme Faaliyetleri ve Öğretim Yöntemleri | | | Ders Sunuş Şekli | | | | |
| | Anlatım/sunum, bilgisayarda modelleme, simülasyonlar, gözlem, proje ödevi | | | Yüzyüze, deney, soru-cevap, tartışma, örnek olay, gösterip yaptırma | | | | |
| Hafta | Tarih | Haftalık Ders İçerikleri | | | Kaynak No - İlgili Bölüm | | | |
| 1. Hafta | | Elektronik yapı modelleme yöntemlerine kısa bir bakış (tekrar) | | | | | | |
| 2. Hafta | | Hammond postulatı, Kinetik ve termodinamik kontrol | | | | | | |
| 3. Hafta | | IRC hesapları, Organik tepkimelerin modellenmesi | | | | | | |
| 4. Hafta | | Hidroborasyon mekanizma modelleme uygulaması | | | | | | |
| 5. Hafta | | Diels-Alder mekanizma modelleme uygulaması | | | | | | |
| 6. Hafta | | Çözücü etkisini modelleme | | | | | | |
| 7. Hafta | | Asitlik modelleme (etanol, asetik asit, nitrik asit karşılaştırma) | | | | | | |
| 8. Hafta | | Arasınav | | | | | | |
| 9. Hafta | | Makromoleküllerin modellenmesi, QM/MM yöntemleri | | | | | | |
| 10. Hafta | | Protein yapılarını modelleme | | | | | | |
| 11. Hafta | | Enzim mekanizması modelleme | | | | | | |
| 12. Hafta | | DNA modelleme | | | | | | |
| 13. Hafta | | Vitamin E modelleme uygulaması | | | | | | |
| 14. Hafta | | Etilen polimerizasyonu modelleme uygulaması | | | | | | |
| 15. Hafta | | Akılcı ilaç tasarımı, docking uygulaması | | | | | | |
| 16. Hafta | | Proje sunumları ve raporları | | | | | | |
| 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) | | 1 | | 60.00 | 0.00 | | |
| | Yarıyıl İçi Değerlendirmesi | | | | 40.00 | 100.00 | | |
| | Arasınav | | 1 | | 20.00 | 50.00 | | |
| | Kısa Sınav / Quiz | | | | | | | |
| | Proje | | | | | | | |
| | Ödev | | | | | | | |
| | Laboratuvar / Atölye | | 8 | | 4.00 | 10.00 | | |
| | Sunum / Seminer / Demo | | 1 | | 7.00 | 17.50 | | |
| | Araştırma / Rapor / Diğer | | 1 | | 7.00 | 17.50 | | |
| | 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 Ort. Saat | Yarıyıl Top. Saat |
| Teorik Saat | 2.00 | 28 | Arasınav ve Hazırlığı | 1.00 | 14 | Laboratuvar / Atölye ve Hazırlığı | | |
| Uygulama Saat | 2.00 | 28 | Kısa Sınav / Quiz ve Hazırlığı | | | Sunum / Seminer / Demo ve Hazırlığı | 1.00 | 14 |
| 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: | | 112 | 1 ECTS Kredisi = 25 Öğrenci İşyükü Saati | | | İşyükü Hesabı: Hesap Doğru | | |