Ders Bilgi Formu

Ders Adı	Kodu	Yerel Kredi	AKTS	Ders (saat/hafta)	Uygulama (saat/hafta)	Laboratuar (saat/hafta)
Moleküler Modelleme	KIM4902	3	5	3	0	0

Önkoşullar	Yok

Yarıyıl	Bahar

Dersin Dili	Türkçe
Dersin Seviyesi	Lisans Seviyesi
Ders Kategorisi	Genel Kültür Dersleri
Dersin Veriliş Şekli	Yüz yüze

Dersi Sunan Akademik Birim	Kimya Bölümü
Dersin Koordinatörü	Arzu HATİPOĞLU
Dersi Veren(ler)	
Asistan(lar)ı	

Dersin Amacı	Günümüzde, Biyokimya, Moleküler Biyoloji, İlaç Tasarımı ve Etkileşimi, Polimer ve üstün nitelikli yeni maddelerin sentezi konularında gerek araştırma gerekse endüstriyel açıdan yoğun biçimde kullanılmakta olan moleküler modelleme yöntemlerinin öğretilmesi ve uygulanmasını amaçlamaktadır.
Dersin İçeriği	1-Moleküler Mekanik Yöntemleri 2-Elektronik Yapı Yöntemleri 3-Fonksiyonel Yoğunluk Yöntemleri 4-Elektron Korelasyon Yöntemleri 5-Optimizasyon Teknikleri 6-Kimyasal Reaksiyonların Modellenmesi
Opsiyonel Program Bileşenleri	Yok

Ders Öğrenim Çıktıları

1	Moleküler modellemeye ilişkin modern yöntemleri kullanabilme
2	Güncel paket programları tanıma
3	İlaç tasarımı yapabilme
4	moleküler özellikleri hesaplayabilme
5	sistemlerin reaktivitesini tahmin edebilme

Haftalık Konular ve İlgili Ön Hazırlık Çalışmaları

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Moleküler Mekanik Yöntemleri	Ders notlari ve diger kaynaklar
2	Kuvvet Alanları ve parametreleri	Ders notlari ve diger kaynaklar
3	SCF Teorisi ve Teknikleri	Ders notlari ve diger kaynaklar
4	Temel Set Yaklaşımları	Ders notlari ve diger kaynaklar
5	Yarı-Ampirik Yöntemler	Ders notlari ve diger kaynaklar
6	MNDO, AM1 ve PM3 Yöntemleri	Ders notlari ve diger kaynaklar
7	DFT Göstergeleri	Ders notlari ve diger kaynaklar
8	Midterm 1	Ders notlari ve diger kaynaklar

9	Gauss Orbitalleri	Ders notlari ve diger kaynaklar
10	Fonksiyonel Yoğunluk Yöntemleri	Ders notlari ve diger kaynaklar
11	Moleküler Özellikler	Ders notlari ve diger kaynaklar
12	Kimyasal reaksiyonlar	Ders notlari ve diger kaynaklar
13	ara sınav 2	Ders notlari ve diger kaynaklar
14	Geçiş Konumunun Optimizasyonu	Ders notlari ve diger kaynaklar
15	Final	Ders notlari ve diger kaynaklar

Değerlendirme Sistemi

Etkinlikler	Sayı	Katkı Payı
Devam/Katılım		
Laboratuar		
Uygulama		
Arazi Çalışması		
Derse Özgü Staj		
Küçük Sınavlar/Stüdyo Kritiği		
Ödev		
Sunum/Jüri		
Projeler		
Seminer/Workshop		
Ara Sınavlar	2	60
Final	1	40
Dönem İçi Çalışmaların Başarı Notuna Katkısı		60
Final Sınavının Başarı Notuna Katkısı		40
TOPLAM		100

AKTS İşyükü Tablosu

Etkinlikler	Sayı	Süresi (Saat)	Toplam İşyükü
Ders Saati	12	3	36
Laboratuar			0
Uygulama			
Arazi Çalışması			
Sınıf Dışı Ders Çalışması	12	7	84
Derse Özgü Staj			
Ödev			0
Küçük Sınavlar/Stüdyo Kritiği			
Projeler			0
Sunum / Seminer			0
Ara Sınavlar (Sınav Süresi + Sınav Hazırlık Süresi)	2	13	26
Final (Sınav Süresi + Sınav Hazırlık Süresi)	1	10	10

Toplam İşyükü	156
Toplam İşyükü / 30(s)	5.20
AKTS Kredisi	5

Diğer Notlar	Yok