



Ders Bilgi Formu

Ders Adı	Kodu	Yerel Kredi	AKTS	Ders (saat/hafta)	Uygulama (saat/hafta)	Laboratuvar (saat/hafta)
İleri Kuantum Kimyası	KIM6402	3	7.5	3	0	0

Önkoşullar	Yok
------------	-----

Yarıyıl	Güz
---------	-----

Dersin Dili	Türkçe
Dersin Seviyesi	Doktora Seviyesi
Ders Kategorisi	Temel Meslek Dersleri
Dersin Veriliş Şekli	Yüz yüze

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

Dersin Amacı	Öğrenciye Kuantum Mekaniği prensiplerini atom ve moleküllere uygulanış yöntemlerini öğretmek.
Dersin İçeriği	Kuantum Mekaniğinin Teorileri, Varyasyon Teorisi, Perturbasyon Teorisi, LCAO ve Yarı-Ampirik Yöntemler, Hartree-Fock Hesapları, Yoğunluk Fonksiyoneli Yöntemleri, Çok Atomlu Moleküllerin Elektronik Yapıları, Heteroatomlu Konjuge Sistemler, Kimyasal Reaksiyonların Mekanizmalarının Belirlenmesi.
Opsiyonel Program Bileşenleri	Yok

Ders Öğrenim Çıktıları

1	Moleküler düzeyde bakış yeteneği
2	Maddelerin özelliklerini hesaplayabilme becerisi
3	Maddelerin değişik koşullardaki reaktivitelerini belirleyebilme
4	Kimyasal reaksiyonların ürün dağılımlarını belirleme becerisi

Haftalık Konular ve İlgili Ön Hazırlık Çalışmaları

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Kuantum Kimyasının Temelleri	Ders notları ve diğer kaynaklar
2	Kuantum Kimyasının Teorileri	Ders notları ve diğer kaynaklar
3	Varyasyon Teoremi	Ders notları ve diğer kaynaklar
4	Perturbasyon Teorisi	Ders notları ve diğer kaynaklar
5	Yaklaşım Yöntemleri	Ders notları ve diğer kaynaklar
6	Çok elektronlu atomlar, Hartree-Fock metodu	Ders notları ve diğer kaynaklar
7	1. Yılıçi Sınavı	Ders notları ve diğer kaynaklar
8	Midterm 1	Ders notları ve diğer kaynaklar
9	Yarı-Ampirik Yöntemler INDO, MINDO/3	Ders notları ve diğer kaynaklar

10	Yarı-Ampirik Yöntemler MNDO, AM1 ve PM3	Ders notlari ve diger kaynaklar
11	Homo ve hetero atomlu konjuge sistemlerin elektroniksel yapıları	Ders notlari ve diger kaynaklar
12	HF Hesaplamaları ve Optimizasyon	Ders notlari ve diger kaynaklar
13	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi	Ders notlari ve diger kaynaklar
14	DFT Hesaplamaları	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	2	10
Sunum/Jüri		
Projeler		
Seminer/Workshop		
Ara Sınavlar	1	50
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	14	3	42
Laboratuar			
Uygulama			
Arazi Çalışması			
Sınıf Dışı Ders Çalışması	14	7	98
Derse Özgü Staj			
Ödev	4	20	80
Küçük Sınavlar/Stüdyo Kritiği			
Projeler			
Sunum / Seminer			
Ara Sınavlar (Sınav Süresi + Sınav Hazırlık Süresi)	1	4	4
Final (Sınav Süresi + Sınav Hazırlık Süresi)	1	5	5
Toplam İşyükü			229

Toplam İşyükü / 30(s)	7.63
AKTS Kredisi	7.5

Diğer Notlar	Yok
--------------	-----