**Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi**

**Uzaktan Eğitim Araştırma ve Uygulama Merkez Müdürlüğü**

**Ders İzlence Formu**

**(05 Ekim 2020 Tarihinden İtibaren)**

|  |  |
| --- | --- |
| **Dersin Kodu ve İsmi**  | FBFKM775– Hesaplamalı Organik Kimya 1 |
| **Dersin Sorumlusu** | Prof.Dr. Selçuk GÜMÜŞ |
| **Dersin Düzeyi (önlisans/lisans/sınıf)** | Yüksek Lisans ve Doktora |
| **Dersin Kredisi** | 3 |
| **I.Hafta Konu Adı**  | Kimyasal modellemenin tanıtılması |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **II.Hafta Konu Adı** | Kimyasal modellemenin temel prensiplerinin incelenmesi |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **III.Hafta Konu Adı** | Teorik Hesaplamalara Yönelik Bazı Terimlerin Tanıtılması |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **VI.Hafta Konu Adı**  | Moleküler orbital teoriye giriş |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **V.Hafta Konu Adı** | Karbon atomunu melezlerinin incelenmesi |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **VI.Hafta Konu Adı** | Moleküllerin programlara tanıtılma yöntemlerinin incelenmesi |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **VII.Hafta Konu Adı** | Potansiyel enerji diagramları |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **VIII.Hafta Konu Adı** | Moleküler Mekanik Hesaplamalarına giriş |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **IX.Hafta Konu Adı** | Yarı Empirik Metodların (MNDO, AM1, PM3) tanıtılması |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **X.Hafta Konu Adı** | Hyperchem Paket Programının Tanıtımı |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **XI.Hafta Konu Adı** | Hyperchem Paket Programının Kullanılmasına Yönelik Örnekler |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **XII.Hafta Konu Adı** | Hyperchem Paket Programının Kullanılmasına Yönelik Örnekler |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **XIII.Hafta Konu Adı** | Spartan Paket Programının Tanıtımı |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **XIV.Hafta Konu Adı** | Spartan Paket Programının Kullanılmasına Yönelik Örnekler |
|  **Materyal Türü (pdf, doc, ppt, mp4)** | pdf |
| **Yardımcı Kaynak Önerisi (kitap, makale, link)** | COMPUTATIONAL CHEMISTRY, David C. YoungWiley, 2001 |
| **Ödev Bilgisi** | Her hafta sonunda öğrenilen yöntem ile ilgili Gaussview ve Gaussian programında denemeler yapmak gerekmektedir. |
| **Kısa Sınav Yapılacak mı?** | Hayır |

**Prof.Dr. Selçuk GÜMÜŞ**