

Dersin Adı	Kodu	Yarıyılı	T+U	Kredisi	AKTS
Spektroskopide Teorik Hesaplamalar	5105610	Bahar	3+0	3	6
<b>Ön koşul Dersler</b>					
<b>Dersin Dili</b>	Türkçe				
<b>Dersin Türü</b>	Seçmeli				
<b>Dersin Koordinatörü</b>					
<b>Dersi Verenler</b>					
<b>Dersin Yardımcıları</b>					
<b>Dersin Amacı</b>	Atomik yük, molekül geometrisi, orbital enerjiler gibi teorik moleküler özellikleri ve moleküllerin spektroskopik özelliklerinin paket programlar kullanarak hesaplanması ve paket programların arka planında yapılan işlerin anlaşılması planlanmaktadır.				
<b>Dersin Öğrenme Çıktıları</b>	<b>Bu dersin sonunda öğrenci;</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Deneysel verilerini teorik hesaplamalarla destekler.</li> <li>2. Kuantum kimyasal hesaplamaları kimya problemlerine uygulayıp çözer.</li> <li>3. Moleküllerin termodinamik ve spektroskopik özelliklerini teorik olarak hesaplar.</li> <li>4. Kuantum kimyasal paket programları etkin bir şekilde kullanır.</li> <li>5. Grup çalışması yapar.</li> </ol>				
<b>Dersin İçeriği</b>	Moleküler Mekanik ve Kuvvet Alanları, Potansiyel Enerji Yüzeyi ve geometri optimizasyonu, Born-Oppenheimer yaklaşımı, LCAO-MO metodunun çok atomlu sistemlere uygulanması, Öz-Uyumlu Alan teoremi, SCF-MO metodunun çok atomlu moleküllere uygulanması, Yarı deneysel yöntemler, Ab initio metotlar, Elektron yoğunluğu, popülasyon analizi ve bağ dereceleri, Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, Konformasyon analizi, Termodinamik özellikler ve IR spektrumu, UV spektrumun, Geçiş hal uygulamaları amaçlanmaktadır.				
<b>Haftalar</b>	<b>Konular</b>				
1	Moleküler Mekanik ve Kuvvet Alanları				
2	Potansiyel Enerji Yüzeyi ve geometri optimizasyonu				
3	Born-Oppenheimer yaklaşımı				
4	LCAO-MO metodunun çok atomlu sistemlere uygulanması				
5	Öz-Uyumlu Alan teoremi				
6	SCF-MO metodunun çok atomlu moleküllere uygulanması				
7	Yarı deneysel yöntemler				
8	Arasınan				
9	Ab initio metotlar				
10	Elektron yoğunluğu, popülasyon analizi ve bağ dereceleri				
11	Yoğunluk fonksiyoneli teorisi				
12	Konformasyon analizi				
13	Termodinamik özellikler ve IR spektrumu				
14	UV spektrumun				
<b>Genel Yeterlilikler</b>					
Spektroskopik metotlar ile öğrendiklerini ilişkilendirebilir.					
<b>Kaynaklar</b>					
Alan Hinchliffe Wiley, (1996), <i>Modelling Molecular Structures</i> . Ira N. Levine, (2009), <i>Quantum Chemistry 6th Edition</i> , Pearson Prentice Hall.					
<b>Değerlendirme Sistemi</b>					
<b>Ara sınav: %40</b>					
<b>Final: %60</b>					

**PROGRAM ÖĞRENME ÇIKTILARI İLE  
DERS ÖĞRENİM ÇIKTILARI İLİŞKİSİ TABLOSU**

	PÇ1	PÇ2	PÇ3	PÇ4	PÇ5	PÇ6	PÇ7	PÇ8	PÇ9	PÇ10	PÇ11	PÇ12	PÇ13	PÇ14	PÇ15	PÇ16	PÇ17
ÖÇ1	5	4	5	5	5	4	4	5	5	5	5	5	4	4	5	4	4
ÖÇ2	4	5	5	4	5	5	5	4	4	5	4	4	5	5	5	5	4
ÖÇ3	5	4	5	4	5	4	4	5	5	4	5	5	4	4	5	4	5
ÖÇ4	4	4	4	5	4	5	4	4	4	4	5	4	4	5	4	5	4
ÖÇ5	5	4	5	4	5	5	4	4	5	4	4	5	5	4	5	5	5
<b>ÖÇ: Öğrenme Çıktıları PÇ: Program Çıktıları</b>																	
<b>Katkı Düzeyi</b>			<b>1 Çok Düşük</b>			<b>2 Düşük</b>			<b>3 Orta</b>			<b>4 Yüksek</b>			<b>5 Çok Yüksek</b>		

**Program Çıktıları ve İlgili Dersin İlişkisi**

	PÇ1	PÇ2	PÇ3	PÇ4	PÇ5	PÇ6	PÇ7	PÇ8	PÇ9	PÇ10	PÇ11	PÇ12	PÇ13	PÇ14	PÇ15	PÇ16	PÇ17
<b>Spektroskopide Teorik Hesaplamalar</b>	5	4	5	4	5	5	4	4	5	4	5	5	4	4	5	5	4