

**HARRAN ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

Dersin Adı	Kodu	Yarıyılı	T+U	Kredisi	AKTS
Spektroskopide Teorik Hesaplamalar	5105610		3+0	3	6
Ön koşul Dersler					
Dersin Dili	Türkçe				
Dersin Türü	Seçmeli				
Dersin Koordinatörü					
Dersi Verenler					
Dersin Yardımcıları					
Dersin Amacı	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.				
Dersin Öğrenme Çıktıları	<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>				
Dersin İçeriği	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	Arasınnav				
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>
Levine I.N., (2009), <i>Quantum Chemistry, 6th Edition, Pearson Prentice Hall.</i> Wiley A.H., (1996), <i>Modelling Molecular Structures, Wiley; 1 edition.</i>
<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>																	
Katkı Düzeyi			1 Çok Düşük			2 Düşük			3 Orta			4 Yüksek			5 Çok Yüksek		

### 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