

İTÜ  
LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU  
(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)

Dersin Adı				Course Name	
İleri Moleküler Modelleme				Advanced Molecular Modelling	
Kodu (Code)	Yarıyıl (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Seviyesi (Course Level)	
HBM526E	Bahar (Spring)	3	7.5	YL (M.Sc.)	
Lisansüstü Program (Graduate Program)		Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik (Computational Science and Engineering)			
Dersin Türü (Course Type)		Seçmeli (Elective)		Dersin Dili (Course Language)	İngilizce (English)
Dersin İçeriği (Course Description)		Moleküler Modelleme. Kuvvet Alanları ve En Küçükleme Yöntemleri. Çoklu Elektron Dalga Kuramı. Temel Kümeler. Geometri Eniyilemesi. Titreşim Frekansları Hesaplamaları. Geçiş Konumu Modellemesi. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT), Kavramsal YFT. Karmaşık Sistemlerde YFT Uygulamaları. Çözücü Etkisi. Melez Yöntemler. Elektrostatik Potansiyellerden Türetilen Yükler. Doğal Bağ Yörüngesel Çözümlemesi. HF Ötesi Yöntemler. Karmaşık Sistemlerde Uygulamalar.			
		Molecular Modelling. Force Fields and Minimization Methods. Many Electron Wave Formalism. Basis Sets, Geometry Optimization. Calculating Vibrational Frequencies. Transition States Modelling. Density Functional Theory (DFT). Conceptual DFT. DFT Applications In Complex Systems. Solvent Effect. Hybrid Methods. Charges Derived From Electrostatic Potentials. Natural Bond Orbital Analysis. Post HF Methods. Applications In Complex Systems.			
Dersin Amacı (Course Objectives)		1. Sıklıkla kullanılan farklı Moleküler Modelleme yöntemlerinin tanıtılması. 2. Moleküler modelleme yöntemlerinin uygulama alanlarının öğretilmesi. 3. Öğrenilen yöntemlerle çeşitli uygulamaların yapılabilecek becerilerin kazandırılması. 4. Hesaplamalı olarak elde edilecek sonuçların yorumlanabilmesi için gerekli temel bilgilerin kazandırılması. 5. Hesaplamalı sonuçların deneysel verilerle karşılaştırılmasının öğretilmesi.			
<i>Maddeler halinde 2-5 adet</i>		1. To introduce frequently used Molecular Modelling methods. 2. To teach the application areas of the molecular modeling methods. 3. To gain the skills required for the applications. 4. To give the basic information required to interpret the computational results. 5. To teach how to compare the computational results with experimental data.			
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes)		Bu dersi başarıyla tamamlayan yüksek lisans öğrencileri aşağıdaki konularda bilgi, beceri ve yetkinlik kazanırlar; 1. Moleküler Mekanik yöntemler ve uygulama alanlarını bilmesi. 2. Geometri en iyilemesi, geçiş durumu modellemesi yapabilmesi . 3. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ve uygulama alanları bilmesi. 4. Kavramsal Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi hakkında genel bilgi edinmesi. 5. Çözücü etkisinin tepkime mekanizmasına etkisinin hesaplayabilmesi. 6. Melez yöntemler ve uygulama alanlarını bilmesi. 7. Kimyasal bir problemin kuramsal çözümü için uygun yöntemi seçebilmesi ve uygulayabilmesi 8. Hesaplamalı çalışma sonuçlarını deneysel verilerle karşılaştırılıp yorumlanması hakkında bilgi sahibi olması			
<i>Maddeler halinde 4-9 adet</i>		M.Sc. students who successfully pass this course gain knowledge, skills and competency in the following subjects; 1. Be able to understand the Molecular Mechanics methods and their application areas 2. Be able to perform geometry optimization and transition state modelling 3. Be able to understand Density Functional Theory and its application areas 4. Be able to gain knowledge about Conceptual DFT 5. Be able to calculate the solvent effect on the reaction mechanism 6. Be able to understand Hybrid method and its application areas 7. Be able to select and apply the appropriate method for the solution of a chemical problem 8. Be able to compare and interpret the computational results with the experimental data.			

<p><b>Kaynaklar</b> <b>(References)</b> <i>En önemli 5 adedini belirtiniz</i></p>	<p>1) <b>Christopher J. Cramer</b>, (2004) “Essentials Of Computational Chemistry: Theories And Models”, Wiley,  2) <b>Errol G. Lewars</b>, (2003) “Computational Chemistry: Introduction To The Theory And Applications Of Molecular And Quantum Mechanics”, Plenum Us.  3) <b>Andrew Leach</b>,(2001) “Molecular Modelling: Principles And Applications” Prentice Hall.  4) <b>Paul Geerlings, Frank De Proft, Wilfried Lngenaeker</b>, (2001) “Density Functional Theory”, Vub Brussels University Press.  5) <b>Jack Simmons</b>, (2003) “An Introduction To Theoretical Chemistry”, Cambridge University Press</p>		
<p><b>Ödevler ve Projeler</b> <b>(Homework &amp; Projects)</b></p>	6 Ödev		
<p><b>Laboratuar Uygulamaları</b> <b>(Laboratory Work)</b></p>	6 Homeworks		
<p><b>Bilgisayar Kullanımı</b> <b>(Computer Use)</b> <i>Dersinizde kullnadığınız yazılım ve simulasyon programları yazılabilir</i></p>	G09, MOLDEN, GAUSSVIEW, NWCHEM		
<p><b>Diğer Uygulamalar</b> <b>(Other Activities)</b></p>	G09, MOLDEN, GAUSSVIEW, NWCHEM		
<p><b>Başarı Değerlendirme Sistemi</b> <b>(Assessment Criteria)</b></p>	<p><b>Faaliyetler</b> <b>(Activities)</b></p>	<p><b>Adedi*</b> <b>(Quantity)</b></p>	<p><b>Değerlendirmedeki Katkısı, %</b> <b>(Effects on Grading, %)</b></p>
	Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)	2	30
	Kısa Sınavlar (Quizzes)		
	Ödevler (Homework)	6	30
	Projeler (Projects)		
	Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)		
	Laboratuar Uygulaması (Laboratory Work)		
	Diğer Uygulamalar (Other Activities)		
	Final Sınavı (Final Exam)	1	40

\*Yukarıda Belirtilen Sayılar Minimum Olup Yerine Getirilmesi Zorunludur.

## DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Moleküler Modelleme: Tanımı, Kullanımı ve Moleküler Modellemede Kullanılan Teknikler	1
2	Moleküler Mekanik: Moleküler Mekanik İçin Kullanılan Yazılımlar, Kuvvet Alanları ve En Küçüklenme Yöntemleri	1,7
3	Çoklu Elektron Dalga Kuramı, Temel Kümeler	2,7
4	Potansiyel Enerji Düzeyleri: Geometri En iyilemesi, Titreşim Frekansları Hesaplamaları, Geçiş Konumu Modellemesi, Moleküler Yörüngesel Yöntemlerde Kullanılan Yazılımlar	2,7
5	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT): Kohn-Sham Yaklaşımı, Kohn-Sham'ın Öztutarlı Alan Yöntemi, Etkileşim-Katkı Fonksiyonelleri: Yerel Yoğunluk Yaklaşıklığı, Gradyeni Düzeltilmiş Yaklaşıklık, Melez Yaklaşıklıklar	2,3,7,8
6	Kavramsal YFT: Tepkime Tanımlayıcıları, Global ve Yerel Özellikler	3,7,8
7	Hesaplamalı ve Kavramsal YFT Karşılaştırması, Karmaşık Sistemlerde YFT Uygulamaları	3,4,7,8
8	Çözücü Etkisi: Açık Modeller	5,7
9	Çözücü Etkisi: Örtük Modeller, Öztutarlı Tepkime Alan Kuramı	5,7
10	Melez Yöntemler: Kuantum Mekanik / Moleküler Mekanik (KM / MM), Kuantum Mekanik / Kuantum Mekanik (KM / KM)	6,7,8
11	Elektrostatik Potansiyellerden Türetilen Yükler: MK, CHELP, CHELPG Yükleri	7,8
12	Doğal Bağ Yörüngesel Çözümlemesi	7,8
13	HF Ötesi Yöntemler	7,8
14	Karmaşık Sistemlerde Uygulamalar	3,4,5,7,8

## COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Molecular Modelling: Definition, Usage and Techniques Used in Molecular Modelling	1
2	Molecular Mechanics: Software Used in Molecular Mechanics, Force Fields and Minimization Methods	1,7
3	Many Electron Wave Formalism, Basis Sets	2,7
4	Potential Energy Surfaces: Geometry Optimization, Calculating Vibrational Frequencies and Transition States Modelling, Software Used in Molecular Orbital Methods	2,7
5	Density Functional Theory (DFT): The Kohn-Sham Approach, Kohn-Sham Self-Consistent Field Method, Exchange-Correlation Functionals: Local Density Approximation, Gradient Corrected Approximation, Hybrid Approximations	2,3,7,8
6	Conceptual DFT: Reactivity Descriptors, Global and Local Properties	3,7,8
7	Comparison of Computational And Conceptual DFT	3,4,7,8
8	DFT Applications in Complex Systems	5,7
9	Solvent Effect: Explicit Models, Implicit Models, Self-Consistent Reaction Field Theory	5,7
10	Hybrid Methods: Quantum Mechanics / Molecular Mechanics (QM / MM), Quantum Mechanics / Quantum Mechanics (QM / QM)	6,7,8
11	Charges Derived From Electrostatic Potentials: MK, CHELP, CHELPG Charges	7,8
12	Natural Bond Orbital Analysis	7,8
13	Post-HF Methods	7,8
14	Applications in Complex Systems	3,4,5,7,8

**NOT-1: Ders planı, sadece hafta bazında işlenen ders konularını içermeli, ara ve kısa sınavlar ders planlarına yazılmamalıdır.**

**Dersin Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programıyla İlişkisi**

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi, beceri ve yetkinlikler (programa ait çıktılar)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
i.	Lisans düzeyi yeterliliklerine dayalı olarak, Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programındaki bilgilerini uzmanlık düzeyinde geliştirebilme ve derinleştirebilme (yeterli bilgi birikimi) ( <i>bilgi</i> ).			X
ii.	Alanının ilişkili olduğu disiplinler arası etkileşimi kavrayabilme ( <i>bilgi</i> ).			X
iii.	Alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanabilme( <i>beceri</i> ).			X
iv.	Alanında edindiği bilgileri farklı disiplin alanlarından gelen bilgilerle bütünleştirerek yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme ( <i>beceri</i> ).			X
v.	Alanını ile ilgili karşılaşılan sorunları araştırma yöntemlerini kullanarak çözümlenebilir ( <i>beceri</i> ).			X
vi.	Alanını ile ilgili uzmanlık gerektiren bir çalışmayı bağımsız olarak yürütebilme ( <i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i> ).			
vii.	Alanı ile ilgili uygulamalarda karşılaşılan ve öngörülemez karmaşık sorunların çözümü için yeni stratejik yaklaşımlar geliştirebilme ve sorumluluk alarak çözüm üretebilme ( <i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i> ).			
viii.	Alanındaki güncel gelişmeleri ve kendi çalışmalarını, nicel ve nitel veriler ile destekleyerek, alanındaki ve alan dışındaki gruplara, yazılı, sözlü ve görsel olarak sistemli biçimde aktarabilme ( <i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i> ).			
ix.	Bir yabancı dili en az Avrupa Dil Portföyü B2 genel düzeyinde kullanarak sözlü ve yazılı iletişim kurabilmek ( <i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i> ).		X	
x.	Alanının gerektirdiği düzeyde bilgisayar yazılımı ile birlikte bilişim ve iletişim teknolojilerini ileri düzeyde kullanabilme ( <i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i> ).			X
xi.	Alanı ile ilgili verilerin toplanması, yorumlanması, uygulanması ve duyurulması aşamalarında toplumsal, bilimsel, kültürel ve etik değerleri gözeten denetleyebilme ve bu değerleri öğretebilme ( <i>Alana Özgü Yetkinlik</i> ).			
xii.	Alanı ile ilgili konularda strateji, politika ve uygulama planları geliştirebilme ve elde edilen sonuçları, kalite süreçleri çerçevesinde değerlendirebilme ( <i>Alana Özgü Yetkinlik</i> ).			
xiii.	Alanında özümstedikleri bilgiyi, problem çözme ve/veya uygulama becerilerini, disiplinlerarası çalışmalarda kullanabilme ( <i>Alana Özgü Yetkinlik</i> ).		X	
xiv.	Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programında, kendi çalışmalarını, alanındaki uluslararası platformlarda, yazılı, sözlü ve/veya görsel olarak aktarabilme ( <i>Alana özgü yetkinlik</i> ).			

**1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam**

**Relationship between the Course and ...Computational Science and Engineering...Program**

	Program Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
i.	Developing and intensifying knowledge in the Computational Science and Engineering program's area, based upon the competency in the undergraduate level (sufficient knowledge) ( <i>knowledge</i> ).			X
ii.	Grasping the inter-disciplinary interaction related to one's area ( <i>knowledge</i> ).			X
iii.	The ability to use the expert-level theoretical and practical knowledge acquired in the area ( <i>skill</i> ).			X
iv.	Interpreting and forming new types of knowledge by combining the knowledge from the area and the knowledge from various other disciplines ( <i>skill</i> ).			X
v.	Solving the problems faced in the area by making use of the research methods ( <i>skill</i> ).			X
vi.	The ability to carry out a specialistic study related to one's area independently. ( <i>Competence to work independently and take responsibility</i> ).			
vii.	Developing new strategic approaches to solve the unforeseen and complex problems arising in the practical processes of one's area and coming up with solutions while taking responsibility ( <i>Competence to work independently and take responsibility</i> ).			
viii.	Systematically transferring the current developments in the area and one's own work to other groups in and out of the area; in written, oral and visual forms ( <i>Communication and Social Competency</i> ).			
ix.	Proficiency in a foreign language –at least European Language Portfolio B2 Level- and establishing written and oral communication with that language ( <i>Communication and Social Competency</i> ).		X	
x.	Using the computer software together with the information and communication technologies efficiently and according to the needs of the area ( <i>Communication and Social Competency</i> ).			X
xi.	Paying regard to social, scientific, cultural and ethical values during the collecting, interpreting, practicing and announcing processes of the area related data and the ability to teach these values to others ( <i>Area Specific Competency</i> ).			
xii.	Developing strategy, policy and application plans concerning the subjects related to the area and the ability to evaluate the end results of these plans within the frame of quality processes ( <i>Area Specific Competency</i> ).			
xiii.	Using the knowledge and the skills for problem solving and/or application (which are processed within the area) in inter-disciplinary studies ( <i>Area Specific Competency</i> ).		X	
xiv.	In the Computational Science and Engineering program, the ability to present one's own work within the international environments orally, visually and in written forms ( <i>Area Specific Competency</i> ).			

**1: Little, 2. Partial, 3. Full**

**NOT-2: Ders ile ilgisi olmayan çıktıların boş bırakılması gerekmektedir.**

<u>Düzenleyen (Prepared by)</u> Doç. Dr. Fethiye Aylin Sunngur Konuklar	<u>Tarih (Date)</u>	<u>İmza (Signature)</u>
--	---------------------	-------------------------