

|                     |                                                    |                         |                  |                         |                |                     |
|---------------------|----------------------------------------------------|-------------------------|------------------|-------------------------|----------------|---------------------|
| <b>Kodu ve Adı:</b> | <b>FİZ5480 MOLEKÜLER MODELLEME VE ALGORİTMALAR</b> |                         |                  |                         |                |                     |
| <b>Birimi:</b>      | Fen Bilimleri Enstitüsü                            |                         |                  |                         |                |                     |
| <b>Ayrıntısı:</b>   | <b>Dönemi:</b> 2023-2024                           | <b>Statüsü:</b> Seçmeli | <b>Sınıfı:</b> 1 | <b>Kredisi:</b> 3-0-0-3 | <b>AKTS:</b> 6 | <b>Dili:</b> Türkçe |

| DERS SORUMLUSU         |   |  | DERS YARDIMCISI        |       |  |
|------------------------|---|--|------------------------|-------|--|
| Unvanı, Adı ve Soyadı: | - |  | Unvanı, Adı ve Soyadı: | ..... |  |
| Telefon:               | - |  | Telefon:               | ..... |  |
| E-posta:               | - |  | E-posta:               | ..... |  |
| Sosyal Hesap:          | - |  | Sosyal Hesap:          | ..... |  |
| Öğrenci Günü ve Saati: | - |  | Öğrenci Günü ve Saati: | ..... |  |

| Ders Haftalık Programı: | Pazartesi | Salı | Çarşamba | Perşembe | Cuma | Cumartesi |
|-------------------------|-----------|------|----------|----------|------|-----------|
|                         |           |      | -        |          |      |           |

|                      |                                                               |  |            |   |  |
|----------------------|---------------------------------------------------------------|--|------------|---|--|
| <b>İşleniş Yeri:</b> | Ders yüz yüze yöntemlerle haftada 3 saat olarak yapılacaktır. |  |            |   |  |
| <b>YY:</b>           | -                                                             |  | <b>UE:</b> | - |  |

|               |                                                                                                                                                                                              |  |  |  |  |
|---------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|--|--|
| <b>Amacı:</b> | Moleküler fizik alanında ilgili modellemeler ve algoritmalar ile birlikte gelişen teknoloji ve en üst yöntemler kullanılarak ilgili alanda çağı yakalamak ve ötesine geçmek amaçlanmaktadır. |  |  |  |  |
|---------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|--|--|

|                   |                                                                                                                     |  |  |  |  |
|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|--|--|
| <b>Materyali:</b> | G. Herzberg, Diatomic Molecules; G.W. King, Spectroscopy and Molecular Structure, Holt-Rinehard and Winston INC, NY |  |  |  |  |
|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|--|--|

|                             |                                       |  |  |  |  |
|-----------------------------|---------------------------------------|--|--|--|--|
| <b>Öğrenci Sorumluluğu:</b> | Ders öncesi ve sonrası hazırlık yapma |  |  |  |  |
|-----------------------------|---------------------------------------|--|--|--|--|

| Haftalık Ders Planı | Hafta | Konu                                                                 | Yöntem |
|---------------------|-------|----------------------------------------------------------------------|--------|
|                     | 1     | Temel Moleküler Modelleme Kavramları, Bağ Teorisi ve Bağ Uzunlukları | YY     |
|                     | 2     | Dalga Fonksiyonu ve kuantum mekaniksel yorumu ve analizi             | YY     |
|                     | 3     | Elektronik Yapı Hesaplamaları, MP2, M062x                            | YY     |
|                     | 4     | Baz setleri ve anlamları                                             | YY     |
|                     | 5     | Moleküler Optimizasyon Algoritmaları,                                | YY     |
|                     | 6     | Genetik Algoritmalar                                                 | YY     |
|                     | 7     | Hartree-Fock ve Yoğunlaştırılmış Hesaplamalar                        | YY     |
|                     | 8     | Yoğunlaştırılmış Madde ve Dolaşım Hesaplamaları                      | YY     |
|                     | 9     | ARA SINAV                                                            | YY     |
|                     | 10    | Moleküler Tanıma ve Etkileşimler                                     | YY     |
|                     | 11    | Yapay Zeka ve Moleküler Modelleme Entegrasyonu                       | YY     |
|                     | 12    | Makine Öğrenimi ve Moleküler Tasarım                                 | YY     |
|                     | 13    | İlaç Tasarımı ve Geliştirme                                          | YY     |
|                     | 14    | Malzeme Bilimi Uygulamaları ve biyolojik sistem analizi              | YY     |

| Ölçme ve Değerlendirme | Metot       |            |          | Sayı | Ağırlık |
|------------------------|-------------|------------|----------|------|---------|
|                        | Ara Sınav   | Sınav      | Yüz Yüze | 1    | %50     |
|                        |             | Kısa Sınav | -        | -    |         |
|                        |             | Ödev       | -        |      |         |
|                        |             | Proje      | -        | -    | -       |
|                        |             |            |          |      |         |
|                        | Genel Sınav | Yüz Yüze   |          | 1    | %50     |

| Ders Kazanımları | 1 | Moleküler modelleme ve algoritmalar öğrenilir.                                      |
|------------------|---|-------------------------------------------------------------------------------------|
|                  | 2 | Moleküler optimizasyon öğrenir.                                                     |
|                  | 3 | Moleküler modellemede yapay zeka ve derin öğrenmede bilgi sahibi olur.              |
|                  | 4 | İlaç tasarımı ve geliştirme metotları hakkında bilgi sahibi olur.                   |
|                  | 5 | Malzeme bilimi ve biyolojik sistem argümanları ve analizleri için deneyim edinilir. |

|                                |
|--------------------------------|
| <b>Derse Özel Açıklamalar:</b> |
|--------------------------------|

|                                                       |
|-------------------------------------------------------|
| <b>UE:</b> Uzaktan Eğitim; <b>YY:</b> Yüz Yüze Eğitim |
|-------------------------------------------------------|