


**BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN EDEBİYAT FAKÜLTESİ**  
**Kimya Bölümü**  
**DERS TANIM VE UYGULAMA BİLGİLERİ**

Dersin Adı	Kodu	Yarıyılı	T+U Saat	Kredisi	AKTS
Algoritma ve Hesaplamalı Kimya	----	2	2 + 0	2	

Ön Koşul Dersleri	
-------------------	--

Dersin Dili	Türkçe 
Dersin Türü	Seçmeli
Dersin Koordinatörü	Doç. Dr. Taner TANRISEVER Mail: taner@balikesir.edu.tr Web: http://taner.balikesir.edu.tr
Dersi Verenler	Doç. Dr. Taner TANRISEVER Mail: taner@balikesir.edu.tr Web: http://taner.balikesir.edu.tr
Dersin Yardımcıları	Mail: Web:
Dersin Amacı	Kimyasal hesaplamalar için bilgisayar programı geliştirmek.
Dersin Öğrenme Çıktıları	Programlama dilleri tanımak. Program geliştirmenin temeli, algoritmayı anlamak. Çeşitli kimya problemleri için program geliştirmek.
Dersin İçeriği	Bilgisayar programlama dilleri, Algoritma ve Kimya problemleri çözmek için program geliştirme süreçleri.

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Programlama Dilleri ve Özellikleri	
2	Algoritma	
3	Veri tipleri ve değişkenler	
4	if ve goto fonksiyonları	
5	for döngüleri	
6	while döngüleri, switch ve case	
7	Yeni bir fonksiyon tanımlamak.	
8	Matrislerle çalışmak	
9	Yenilemeli Yöntemler	
10	Yenilemeli Yöntemler	
11	Monte Carlo Yöntemi	
12	Monte Carlo Yöntemi	
13	Program geliştirme adımları	
14	Program geliştirme adımları	


KAYNAKLAR	
Ders Notu	[1] <a href="http://taner.balikesir.edu.tr/dersler/">http://taner.balikesir.edu.tr/dersler/</a>
Diğer Kaynaklar	[2] Computational Chemistry Using PC, Donald W. Rogers, Third edition, John Wiley & Sons Inc, 2003, ISBN : 0-471-42800-0

**BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN EDEBİYAT FAKÜLTESİ**  
**Kimya Bölümü**

**COURSE DESCRIPTION AND APPLICATION INFORMATION**

Course Title	Code	Semester	T+U Hour	Credits	ECTS
Algoritma ve Computational Chemistry	----	2	2 + 0	2	

<b>Prerequisites</b>	
----------------------	--

<b>Language of Instruction</b>	Turkish 
<b>Course Type</b>	Selective
<b>Course Coordinator</b>	Doç. Dr. Taner TANRISEVER Mail: taner@balikesir.edu.tr Web: http://taner.balikesir.edu.tr
<b>Instructors</b>	Doç. Dr. Taner TANRISEVER Mail: taner@balikesir.edu.tr Web: http://taner.balikesir.edu.tr
<b>Assistants</b>	Mail: Web:
<b>Dersin Amacı</b>	Develop computer programs for chemical calculations.
<b>Goals</b>	Knowledge of programming languages. Understanding of the most fundamental algorithm of program development. Developing programs for various basic chemistry problems.
<b>Course Content</b>	Computer programming languages, program development processes to solve Algorithms and Chemistry problems.

Week	Topics	Study Materials
1	Programming Languages and Features	
2	Algorithm	
3	Data types and variables	
4	if and goto functions	
5	for loops	
6	while loops, switch and case	
7	A new function definition	
8	Working with matrices	
9	Iterative methods	
10	Iterative methods	
11	Monte Carlo Method	
12	Monte Carlo Method	
13	Program development steps	
14	Program development steps	

<b>Resources</b>	
<b>Recommended Sources</b>	[1] <a href="http://taner.balikesir.edu.tr/dersler/">http://taner.balikesir.edu.tr/dersler/</a>
<b>Other Resources</b>	[2] Computational Chemistry Using PC, Donald W. Rogers, Third edition, John Wiley & Sons Inc, 2003, ISBN : 0-471-42800-0