

Dersin Adı: Kuantum Kimyasına Giriş				Course Name: Introduction to Quantum Chemistry		
Kod (Code)	Yarıyıl (Semester)	Kredi (Local Credits)	AKTS Kredi (ECTS Credits)	Ders Uygulaması, Saat/Hafta (Course Implementation, Hours/Week)		
				Ders (Theoretical)	Uygulama (Tutorial)	Laboratuar (Laboratory)
KIM 262-262E	4	3	5	3	0	0
Bölüm / Program (Department/Program)		Kimya/Kimya (Chemistry/Chemistry)				
Dersin Türü (Course Type)		Zorunlu (Compulsory)	Dersin Dili (Course Language)		Türkçe (Turkish)	
Dersin Önkoşulları (Course Prerequisites)		(KIM 111 MIN DD veya KIM 111E MIN DD) ve (FIZ 101 MIN DD veya FIZ 101E MIN DD) ve (MAT 201 MIN DD veya MAT 201E MIN DD veya MAT 210 MIN DD veya MAT 210E MIN DD)				
Dersin Mesleki Bileşene Katkısı, % (Course Category by Content, %)		Temel Bilim ve Matematik (Basic Sciences and Math)	Temel Mühendislik (Engineering Science)	Mühendislik/Mimar lık Tasarım (Engineering/Archit ecture Design)	Genel Eğitim (General Education)	
		%100	-	-	-	
Dersin Tanımı (Course Description)		<p>Dersi takip etmek için gerekli matematik alt yapının gözden geçirilmesi (Operatörler, Kompleks sayılar, diferansiyel denklemler, Schrödinger denklemi ve basit bir model sistem için (kutudaki parçacık problemi) çözümleri, Enerjinin kuantizasyonu, İki atomlu moleküllerdeki çekirdek hareketlerinin (titreşim, dönme) matematiksel modellerle (harmonik sarkaç, katı döneç) incelenmesi, moleküler özelliklerin (bağ kuvveti, bağ uzunluğu) IR ve mikrodalga frekansları ile ilişkileri, Hidrojen atomu için elektronik Schrödinger denkleminin çözümlerinden elde edilen sonuçların tartışılması, Orbital kavramı, Hidrojen benzeri (tek elektronlu atomik) sistemlerin incelenmesi, Çok elektronlu atomlar, Born-Oppenheimer yaklaştırması, Helyum atomu, Varyasyon prensibi, Diatomik moleküllerin elektronik yapılar.</p> <p>Overview of the mathematical background required to follow the course (operators, complex numbers, differential equations), Schrödinger equation and its solution for simple model system (particle in a box problem), the concept of energy quantization, Quantum mechanical treatment of the nuclear motions (vibration and rotation) of diatomic molecules, the understanding of the relationship between the molecular properties (bond strength, bond length) and the IR, microwave frequencies, The study of the results obtained from the solution of the Schrödinger equation for a real system -Hydrogen atom-, the orbital concept, Hydrogen-like ions, Many electron atoms, Born-Oppenheimer approximation, Helium atom, Variation principle, The electronic structure of diatomic molecules.</p>				
Dersin Amacı (Course Objectives)		<ol style="list-style-type: none"> 1. Başlangıç seviyesinde kuantum mekaniğin fiziksel ve matematiksel temellerinin oluşturulması. 2. Kimyasal problemlere kuantum mekanik yöntemler kullanılarak nasıl yaklaşıldığının öğretilmesi. 3. Atomik ve moleküler elektronik yapı ile bunların spektroskopiyile olan ilişkilerinin anlaşılmasına yardımcı olan yöntemlerin öğretilmesi. <ol style="list-style-type: none"> 1. To give a solid understanding of the physical and mathematical aspects of quantum mechanics at the introductory level. 2. To teach how to approach chemical problems by using the laws of the quantum mechanics. 				

	<p>3. To teach the methods to study atomic and molecular electronic structure and their relation to spectroscopy.</p>
<p>Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes)</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Enerji kuantizasyonu kavramını kullanarak atomik spektrumlarda görülen soğurma çizgilerini anlayabilme ve açıklayabilme. 2. Kuantum mekanik operatörleri tanıyabilme ve basit sistemler için toplam enerji operatörünü yazabilme. 3. Basit sistemler için tek boyutta Schrödinger denklemini yazabilme ve çözebilme. 4. Dalga fonksiyonu, normalizasyon, enerji dejenerasyonu, tünelleme gibi kuantum mekanikte karşılaşılan temel kavramları anlayabilme ve kullanabilme. 5. İki atomlu moleküllerdeki titreşim ve dönme gibi çekirdek hareketlerini temsil eden Schrödinger denklemini yazabilme ve çözümden elde edilen dalga fonksiyonlarını ve enerji ifadelerini anlayabilme ve kullanabilme. 6. Bu hareketlere ait deneysel frekanslarla ilişkilendirme, spektroskopik yöntemleri ve nasıl kullanıldıklarını anlayabilme. 7. Orbital kavramının matematiksel bir fonksiyon olduğunu ve H-atomunun kuantum mekanik çözümünden elde edilen öz fonksiyonlar olduğunu öğrenme. 8. Bir orbitaldeki elektronun çekirdeğe olan uzaklığını hesaplayabilme, orbital şekillerini belirleyen küresel harmonik fonksiyonlarını tanıyabilme ve kullanabilme. 9. Elektron yoğunluğu kavramını öğrenme ve hesaplayabilme. 10. Moleküler orbitallerle atomik orbitaller arasındaki ilişkiyi kurabilme, kimyasal bağı matematiksel olarak tanımlayabilme. 11. Moleküler özelliklerle elektronik yapı arasındaki ilişkileri kurabilme. 12. Hesaplamalı Kimya'nın da temelini oluşturan, Schrödinger denkleminin kesin olarak çözülemediği durumlarda kullanılan varyasyon yöntemi öğrenme ve kullanabilme. 13. Moleküler orbital teorii kavrama ve konjuge organik moleküllere uygulamasını içeren Hückel Moleküler Orbital teoriiyi kullanarak moleküler özellik hesaplayabilme. <ol style="list-style-type: none"> 1. To be able to understand and explain the absorption lines in atomic spectrum using the concept of energy quantization. 2. To recognize quantum mechanical operators and write the total energy operator for simple systems. 3. To be able to write and solve one dimensional Schrödinger equation. 4. To get acquainted with the main concepts of quantum mechanics, like wavefunction, normalization, energy degeneracy, tunneling. 5. To be able to write the Schrödinger equation for nuclei movement like vibration and rotation for diatomic molecules and to be able to understand and use the wavefunctions and energies from their solution. 6. To build up a relationship between the experimental frequencies, spectroscopic techniques and how they are used. 7. To understand that the orbital concept is a mathematical function and it is the eigenvalue obtained from the quantum mechanical solution. 8. To be able to calculate the distance of electron from the nucleus and recognize the spherical harmonics which determine the shape of the orbital. 9. To learn and calculate the concept of electron density. 10. To be able to build a relationship between molecular and atomic orbitals and be able to mathematically define chemical bond. 11. To build a relationship between the molecular properties and electronic structure. 12. To learn and use the variation method which is the basis for Computational chemistry, for the cases which do not allow the exact solution of the Schrödinger equation.

13. To conceive the Molecular Orbital Theory and calculate the molecular properties with Hückel Molecular Orbital method which is applicable to conjugated organic molecules.

DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Öğrenme Çıktıları
1	Kuantum mekaniğine giriş, temel kavramlar Kara cisim ışınması, Planck hipotezi ve enerjinin kuantizasyonu Bohr atom modeli, atomik spektrum, dalga-parçacık ikiliği, foton, fotoelektrik etki, Heisenberg Belirsizlik Prensibi, Parçacıkların dalga karakteri, de Broglie dalga boyu, dalga fonksiyonu, kuantum mekanik operatörler, Schrödinger dalga denklemi (zamana bağımlı, zamandan bağımsız), olasılık yoğunluk	1
2	Kompleks fonksiyonlar, Diferansiyel denklemler Kuantum Theory: Teknikler ve Uygulamaları Ötelenme Hareketi: Kutudaki Parçacık Modeli (Tek boyutta incelenmesi)	2
3	Kutudaki Parçacık Modelinin İki ve üç boyutta incelenmesi, Dalga fonksiyonunun normalizasyonu, Enerjinin dejenerasyonu, Tünelleme	3,4
4	Titreşim Hareketi: Harmonic sarkaç Modeli, Klasik mekanik yöntemlerle incelenmesi, Problemin kuantum mekanik yöntemlerle incelenmesi, Titreşim dalga fonksiyonları ve Hermite polinomları, Özellikleri, Virial teorem, IR frekanslarının bulunması	5,6
5	Dönme Hareketi: İki boyutta ve üç boyutta incelenmesi, Açısal momentum ve kuantizasyonu, Kati döneç modeli ve çözümlerinin incelenmesi, İki atomlu moleküllerdeki bağ uzunluğunun mikro dalga frekanslarından bulunması	5,6
6	İki atomlu moleküllerin dönme ve titreşim spektrumlarının incelenmesi	6
7	Atom Yapısı ve Atomik Spektrumların incelenmesi	7
8	Hidrojen atomunun elektronik yapısı, Hidrojen atomunun kuantum mekanik olarak elektronik Schrödinger denkleminin çözülerek orbitallerin ve elektronik enerji seviyelerinin bulunması, orbital kavramı, kuantum sayıları	8
9	Radyal dağılım fonksiyonları ve anlamları, H-tipi tek elektronlu sistemlerin (iyonların) elektronik yapılarının incelenmesi, enerji seviyeleri arasındaki geçişler ve geçiş kuralları	9
10	Çok elektronlu atomların elektronik yapılarının incelenmesi, , etkin çekirdek yükü kavramı, Pauli prensibi, elektronların perdeleme etkisi, Hund kuralı, elektronik konfigürasyon	11
11	Helium Atom, Spin, varyasyon Prensibi	12
12	Moleküllerin elektronik yapıları, Born-Oppenheimer Yaklaşımı	13
13	Moleküler Orbital Teori, Hidrojen molekül iyonu ve hidrojen molekülü ile uygulamalar	13
14	İki atomlu moleküllerin elektronik yapıları	13

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Learning Outcomes
1	Quantum Theory: Introduction and Principles Black body radiation, Planck's hypothesis (quantization of energy) Bohr atom model, atomic spectra, wave-particle duality, photon, photoelectric effect, Heisenberg Uncertainty Principle, wave character of particles, de Broglie wavelength, wavefunction, operators, Schrödinger equation (time dependent, time independent equations), probability density	1
2	Complex functions, Differential equations Quantum Theory: Techniques and Applications Translational motion: the particle in a box model (one dimensional box)	2
3	The particle in a box model (two and three dimensional box), normalization, degeneracy, tunnelling	3,4
4	Vibrational motion: harmonic oscillator, classical solution Quantum mechanical solution of harmonic oscillator, Hermite polynomials, properties, virial theorem, IR frequencies	5,6
5	Rotational motion: rotation in two dimension, quantization of rotation Rotation in three dimension, Angular momentum, rigid rotor, Microwave frequencies	5,6
6	Vibrational-Rotational spectra of diatomic molecules	6
7	Atomic Structure and Atomic Spectra	7
8	Electronic structure of Hydrogen atom, Solution of Schrödinger equation, Atomic orbitals and their energies, quantum numbers, energy levels	8
9	Radial distribution functions and their interpretations, H-like ions, selection rules, transitions	9
10	The structure of many-electron atoms, effective nuclear charge concept, Pauli principle, penetration and shielding, the building-up principle, Hund's rule, electronic configuration	11
11	Helium Atom, Spin, Variation Principle	12
12	Molecular Structure, Born-Oppenheimer Approximation	13
13	Molecular orbital theory, hydrogen molecule and hydrogen molecule-ion	13
14	The electronic structure of diatomic molecules	13

Dersin Kimya Bölümü Öğrenci Çıktılarıyla İlişkisi

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi ve beceriler (programa ait öğrenci çıktıları)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
1	Kimyanın temel alanları olan inorganik, organik, fiziksel ve analitik kimyanın önemli kavramlarını, teorik esaslarını ve ilgili konulardaki deneysel bulguları kavrama becerisini edinmeleri,			X
2	Öğrencilerin edindikleri teorik ve pratik bilgileri kimya ya da kimya içeren multidisipliner alanlarda veya kimya bazlı endüstrilerde uygulayabilme yeteneği edinmeleri,		X	
3	Deneysel çalışmaları tasarlama, veri analizi yapma, klasik teknikleri ve modern cihazları kullanma becerisini edinmeleri,			
4	Kimya ve kimya ile ilgili alanlar hakkında araştırma yapma ve bilgiye ulaşma için modern kütüphane kullanma becerisi edinmeleri,			
5	Kimyasal simülasyon ve hesaplama, veri elde etme ve veritabanı kullanımı için bilgisayar kullanım becerisi edinmeleri,	X		
6	Problemleri çözme, kritik düşünme ve analitik çözümleme için matematik, fizik ve biyoloji temel bilgilerini kimyasal sistemlere uygulama becerisi edinmeleri,		X	
7	Hem sınıfta hem de laboratuvarda etkin biçimde grup çalışması yapma, liderlik ve grup üyesi olarak çalışma yeteneği edinmeleri,			
8	Araştırma yapma, araştırma raporu yazma, sözlü ve poster sunumu yapma becerisi edinmeleri,			
9	Kimyasal malzemelerin güvenli kullanımı ve uzaklaştırılmaları için modern prosedür ve düzenlemeleri bilmeleri,			
10	Etik davranışın kişisel ve profesyonel yaşamın tüm alanlarındaki önemini anlayabilmeleri			

Ölçek: 1: Az, 2: Kısmi, 3: Tam

Relationship of the Course to Chemistry Department Student Outcomes

	Program Student Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
1	An ability to understand the major concepts, theoretical principles and experimental findings in the main areas of chemistry: organic, inorganic, analytical, and physical.			X
2	An ability to apply the knowledge of chemistry to the solutions of qualitative and quantitative problems in chemistry-related global/public and social areas such as environmental, food, health, textile, agriculture and energy.		X	
3	An ability to design experiment, to properly record the experimental results, to use modern instrumentation and classical techniques and to work effectively in teams in both classroom and laboratory..			
4	An ability to use modern library searching and retrieval methods to obtain information about chemistry and chemistry-related areas.			
5	An ability to use computers for chemical simulation and computation, data acquisition, and database usage.	X		

6	An ability to apply and integrate basic knowledge from mathematics, physics and biology to chemistry for solutions of problems, critical thinking and analytical reasoning		X	
7	An ability to have being team member both classroom and laboratory			
8	An ability to research chemistry topics, write research reports, and give oral and poster presentations on that topic.			
9	An ability to know the proper procedures and regulations for safe handling and use of chemicals and to follow the proper procedures and regulations for safe handling when using chemicals.			
10	An understanding and appreciation the importance of ethical behavior in all aspects of personal and professional life			

Scaling: 1: Little, 2: Partial, 3: Full

<u>Tarih (Date)</u>	<u>Bölüm onayı (Departmental approval)</u>
---------------------	--

Ders kaynakları ve Başarı değerlendirme sistemi (Course materials and Assessment criteria)

Ders Kitabı (Textbook)	Physical Chemistry, P.W. Atkins, Oxford Uni. Press, 5th Edition, 1994 Physical Chemistry, Ira N. Levine, Mc Graw Hill, 5th Edition, 2002		
Diğer Kaynaklar (Other References)	Quantum Mechanics for Chemists, David O. Hayward, R.S.C, 2002 All Physical Chemistry and Quantum Chemistry Books		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	Notlandırmaya dahil olmaksızın işlenen konularla ilgili olarak ev ödevi problemler verilmektedir.		
	Homework related to the covered topics are assigned.		
Laboratuar Uygulamaları (Laboratory Work)	-		
	-		
Bilgisayar Kullanımı (Computer Usage)	-		
	-		
Diğer Uygulamalar (Other Activities)	-		
	-		
Başarı Değerlendirme Sistemi (Assessment Criteria)	Faaliyetler (Activities)	Adedi (Quantity)	Genel Nota Katkı, % (Effects on Grading, %)
	Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)	2	60
	Kısa Sınavlar (Quizzes)		
	Ödevler (Homework)		-
	Projeler (Projects)		-
	Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)		
	Laboratuar Uygulaması (Laboratory Work)		
	Diğer Uygulamalar (Other Activities)		
	Final Sınavı (Final Exam)	1	40