

**İTÜ**  
**DERS KATALOG FORMU**

<b>Dersin Adı</b>				<b>Course Name</b>		
Hesaplamalı Kimyaya Giriş				Introduction to Computational Chemistry		
<b>Kodu (Code)</b>	<b>Yarıyılı (Semester)</b>	<b>Kredisi (Local Credits)</b>	<b>AKTS Kredisi (ECTS Credits)</b>	<b>Ders Uygulaması, Saat/Hafta (Course Implementation, Hours/Week)</b>		
				<b>Ders (Theoretical)</b>	<b>Uygulama (Tutorial)</b>	<b>Laboratuvar (Laboratory)</b>
KIM454E	5	3	4.0	3	-	-
<b>Bölüm / Program (Department/Program)</b>		Kimya Chemistry				
<b>Dersin Türü (Course Type)</b>		Seçmeli (Elective)	<b>Dersin Dili (Course Language)</b>		İngilizce (English)	
<b>Dersin Önkoşulları (Course Prerequisites)</b>		KIM262E				
<b>Dersin mesleki bileşene katkısı, % (Course Category by Content, %)</b>		<b>Temel Bilim (Basic Sciences)</b>	<b>Temel Mühendislik (Engineering Science)</b>	<b>Mühendislik Tasarım (Engineering Design)</b>	<b>İnsan ve Toplum Bilim (General Education)</b>	
		% 100				
<b>Dersin İçeriği</b>		Kuantum Mekanikliği temel kavramlarının basit model sistemlerin (sonsuz kuyuda parçacık, harmonik salınıcı ve katı dönüçü) kuantum mekanik çözümlerinin gözden geçirilmesi. Hesaplamalı Kimya'ya giriş, moleküler modelleme yöntemlerinin tanıtılması ve uygulamaları, Hartree-Fock yöntemi ve basit moleküllere uygulanması, geometri optimizasyonu, moleküler özelliklerin (iyonlaşma enerjisi, elektron ilgisi, kuvvet sabiti, dipol moment, uyarılma enerjisi) hesaplanması, moleküler orbital enerjilerinin hesaplanması, molekül orbitallerinin 3-boyutlu modellenmesi, yoğunluk fonksiyoneli yöntemi, moleküler spektroskopisi, termodinamik fonksiyonların hesaplanması ve tepkime termodinamiğine uygulanması, moleküller arası etkileşimlerin hesaplanması, moleküler mekanik yöntemi ve konformer analizi				
<b>(Course Description)</b>		Overview of the quantum mechanical background and quantum mechanical solution of simple model systems (infinite well potential, harmonic oscillator and rigid rotor) required to follow the course. Introduction to computational chemistry, molecular modeling and its applications, Hartree-Fock method and its application on small molecules, , geometry optimization, calculation of molecular properties (ionization energy, electron affinity, force constants, dipole moment, excitation energies), calculation of molecular orbital energies, visualization of molecular orbitals, density functional theory, molecular spectroscopy, calculation of thermodynamic quantities and their use in reaction thermodynamics, intermolecular forces, conformational analysis from molecular mechanics method				
<b>Dersin Amacı</b>		1. Başlangıç seviyesinde hesaplamalı kimya alanının tanıtılması, temellerinin oluşturulması 2. Kimyasal problemlere hesaplamalı kimya yöntemlerinin ne şekilde uygulanacağını öğretilmesi 3. Atomik ve moleküler elektronik yapı ile bunların spektroskopisiyle olan ilişkilerinin anlaşılmasına yardımcı olan hesaplamalı kimya yöntemlerinin uygulanması				
<b>(Course Objectives)</b>		1. To give a solid understanding of the fundamental aspects of computational chemistry at the introductory level 2. To teach how to apply computational chemistry methods on some particular chemical problems 3. To teach the computational chemistry methods to study atomic and molecular electronic structure and their relation to spectroscopy				
<b>Dersin Öğrenme Çıktıları</b>		I. Kuantum Kimyasının temel ilkelerini kavrama ve hesaplamalı kimya ile ilişkilendirme II. Kuantum Kimyası ile Termodinamik arasındaki ilişkiyi kavrayabilme III. Molekül yapısına üç boyutlu bakabilme alışkanlığının kazanımı IV. Temel hesaplamalı kimya kavramlarını öğrenme ve uygulama V. Kuantum Kimyası dersinde öğrendiği bilgileri hesaplamalı kimya dersinde uygulayabilme VI. Spektroskopik verilerin hesaplamalı kimya kullanılarak nasıl hesaplandığını öğrenme ve uygulama VII. Molekül orbitallerini hesaplayabilme, üç boyutlu görsellerini çizdirebilme VIII. Hartree-Fock ve Yoğunluk Fonksiyoneli yöntemleriyle basit moleküllerin geometri optimizasyonlarını yapabilme IX. Elektron yoğunluğu kavramını öğrenme ve hesaplayabilme, atomik kısmı yükleri hesaplayabilme X. Hesaplamalı kimyada kullanılan bir yazılımın çıktılarını yorumlayabilme ve analiz etme XI. Moleküler özelliklerle elektronik yapı arasındaki ilişkileri kurabilme, basit molekül özelliklerini hesaplayabilme XII. Moleküler mekanik yöntemiyle konformerleri hesaplayabilme ve potansiyel enerji yüzeyi ile ilişkilendirme				
<b>(Course Learning Outcomes)</b>		I. Understanding the basic principles of quantum chemistry and comprehending its relation to computational chemistry II. Comprehending the relation between quantum chemistry and thermodynamics III. Understanding the 3D visualization of molecular structure and modelling IV. Learning the basic principles of computational chemistry and applying onto chemical problems V. To be able to apply quantum chemistry background into computational chemistry lesson VI. Applying computational chemistry to produce spectroscopic data and related spectra VII. Calculation and visualization of molecular orbitals VIII. Performing geometry optimization of small molecules by using Hartree-Fock and Density Functional methods. IX. Calculating electronic density of molecules and atomic partial charges X. Learning how to analyze the outputs of a computational chemistry program XI. Calculating molecular properties of small molecules by using computational methods and relating them to molecular structure concept XII. Performing conformer analysis by molecular mechanics and understanding its relation to PES surface				

(COURSE CATALOGUE FORM)

<b>Ders Kitabı</b> (Textbook)	<i>Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics</i> , 3rd edition, E. Lewars, 2016, Springer.		
<b>Diğer Kaynaklar</b> (Other References)	Introduction to Computational Chemistry , F. Jensen, 2017, Wiley. Computational Chemistry, D. Young, 2nd edition, 2004, Wiley.		
<b>Ödevler ve Projeler</b> (Homework & Projects)	Dönem içinde üç ödev ve dönem projesi verilecektir. Interm assessments will be given as three homeworks and a take home.		
<b>Laboratuvar Uygulamaları</b> (Laboratory Work)	- -		
<b>Bilgisayar Kullanımı</b> (Computer Use)	Ders saati içerisinde örnek uygulamaların yapılmasında bilgisayar desteği sağlanacaktır. Computer support will be provided for particular applications within the lesson hours.		
<b>Diğer Uygulamalar</b> (Other Activities)	Öğrenciler her hafta gruplara ayrılarak mevcut günlük dersin hesaplamalarını grup çalışması halinde bilgisayar üzerinde gerçekleştirecektir. Students will be divided into groups to complete the essential computations of the particular lesson together as a group activity.		
<b>Başarı Değerlendirme Sistemi</b> (Assessment Criteria)	<b>Faaliyetler</b> (Activities)	<b>Adedi</b> (Quantity)	<b>Değerlendirmedeki Katkısı, %</b> (Effects on Grading, %)
	<b>Yıl İçi Sınavları</b> (Midterm Exams)		
	<b>Kısa Sınavlar</b> (Quizzes)		
	<b>Ödevler</b> (Homework)	3	30
	<b>Projeler</b> (Projects)		
	<b>Dönem Ödevi/Projesi</b> (Term Paper/Project)	1	30
	<b>Laboratuvar Uygulaması</b> (Laboratory Work)		
	<b>Diğer Uygulamalar</b> (Other Activities)		
	<b>Final Sınavı</b> (Final Exam)	1	40

## DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Hesaplamalı Kimyaya Giriş, Molekül modelleme, Kullanılacak yazılımların tanıtılması	I
2	Dalga denklemi ve çözümlerinin kısa bir özeti ve termodinamik fonksiyonlarla ilişkisi, Z-matrisi ve Geometri Optimizasyonu	II
3	Görselleştirme yazılımının kullanımı ve hesap çıktılarının görüntülenmesi ve analizi	III-IV-V
4	Born-Oppenheimer Yaklaşımı ve Potansiyel Enerji Yüzeyi, LCAO yöntemi, MO Enerji Düzeyi Diyagramları ve MO görselleştirilmesi	V-VI
5	Hartree-Fock yöntemi, Helyum atomunun taban ve uyarılmış durumları, SCF prosedürü	VII-VIII
6	Yoğunluk Fonksiyoneli Yöntemi ve basit moleküllere uygulanması, hesap çıktısı örnekleri	VII-IX
7	Koopmans Teoremi, F ve Cl atomlarının iyonlaşma enerjileri ile elektron ilgilerinin hesaplanması, Popülasyon analizi (Mulliken, doğal bağ), Elektrostatik Potansiyel Yüzeyleri, Atomik kısmi yükler	VII-IX
8	En düşük enerjili izomerin kestirimi, Çok kutuplu momentler, Moleküler simetri, Sınır orbitalleri	VII-X
9	Lewis Yapılarının doğal bağ orbitali analizi ile bulunması	IX-X
10	Zamana bağlı yöntemler, UV ve IR spektrumların hesaplanması, H-NMR ve C-NMR uygulamaları	X-XI
11	Termodinamik niceliklerin hesaplanması ve tepkime termodinamiği üzerine uygulamalar	X
12	Moleküller arası etkileşimler, Sudaki hidrojen bağı enerjisinin hesaplanması	X-XI
13	Moleküler mekanik yöntemi ve organik moleküllerin konformasyon analizinde kullanımı	XII
14	Yarıdeneysel yöntemler ve görece büyük moleküllere uygulanması	XI

## COURSE PLAN

<b>Weeks</b>	<b>Topics</b>	<b>Course Outcomes</b>
<b>1</b>	Introduction to computational chemistry, molecular modeling and introduction to the softwares to be used throughout the course.	I
<b>2</b>	A brief summary of the wave equation and its relation to thermodynamic functions, writing a z-matrix and geometry optimization	II
<b>3</b>	Using visualization software, the modeling of the molecules.	III-IV-V
<b>4</b>	Born-Oppenheimer approximation, potential energy surface, LCAO method, MO energy level diagram and 3D visualization of MOs.	V-VI
<b>5</b>	Summary of ground and excited states of Helium atom, Hartree-Fock method (HF), Self-Consistent Field (SCF) approach.	VII-VIII
<b>6</b>	Introduction to Density Functional Theory (DFT) method and its applications in chemistry	VII-IX
<b>7</b>	Koopmans's theorem, calculation of ionization potentials (IE) and electron affinities (EA), Population Analysis (Mulliken, natural bond), Electrostatic Potential (ESP) maps, calculation of atomic charges	VII-IX
<b>8</b>	Prediction of lowest energy isomer, multipole moments, molecular symmetry, frontier orbitals	VII-X
<b>9</b>	Predicting lewis structures and natural bond orbital analysis	IX-X
<b>10</b>	Time dependent methods and predicting UV-VIS, IR, H-NMR, C-NMR spectra of simple molecules	X-XI
<b>11</b>	Calculation of thermodynamical properties and reaction energies	X
<b>12</b>	Calculatiaon of intermolecular interaction energies such as calculation of hydrogen bond energy in water	X-XI
<b>13</b>	Molecular Mechanics (MM) approach for prediction of conformers for small organic molecules	XII
<b>14</b>	Semiempirical methods and their applications on relatively large molecules	XI

## Dersin Kimya Programıyla İlişkisi

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi ve beceriler (programa ait çıktılar)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
a	Kimyanın temel alanları olan inorganik, organik, fiziksel ve analitik kimyanın önemli kavramlarını, teorik esaslarını ve ilgili konulardaki deneysel bulguları kavrama becerisini edinmeleri			✓
b	Öğrencilerin edindikleri teorik ve pratik bilgileri kimya ya da kimya içeren multidisipliner alanlara veya kimya bazlı endüstrilerde uygulayabilme yeteneği edinmeleri			✓
c	Deneysel çalışmaları tasarlama, veri analizi yapma, klasik teknikleri ve modern cihazları kullanma becerisini edinmeleri	✓		
d	Kimya ve kimya ile ilgili alanlar hakkında araştırma yapma ve bilgiye ulaşma için modern kütüphane kullanma becerisi edinmeleri		✓	
e	Kimyasal simülasyon ve hesaplama, veri elde etme ve veritabanı kullanımı için bilgisayar kullanım becerisi edinmeleri			✓
f	Problemleri çözme, kritik düşünme ve analitik çözümleme için matematik, fizik ve biyoloji temel bilgilerini kimyasal sistemlere uygulama becerisi edinmeleri			✓
g	Hem sınıfta hemde laboratuvarında etkin biçimde grup çalışması yapma, liderlik ve grup üyesi olarak çalışma yeteneği edinmeleri			✓
h	Hem Türkçe hem de İngilizce dillerinde yazılı ve sözlü iletişim kurma araştırma yapma, araştırma raporu yazma, sözlü ve poster sunumu yapma becerisi edinmeleri			✓
i	Kimyasal malzemelerin güvenli kullanımı ve uzaklaştırılmaları için modern prosedür ve düzenlemeleri bilmeleri			
j	Etik davranışın kişisel ve profesyonel yaşamın tüm alanlarındaki önemini anlayabilmeleri		✓	

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

## Relationship between the Course and Chemistry Curriculum

	Program Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
a	An ability to understand the major concepts, theoretical principles and experimental findings in the main areas of chemistry: organic, inorganic, analytical, and physical.			✓
b	To give the students a core of theoretical and practical knowledge and the ability to apply it to further studies in Chemistry or multidisciplinary areas involving Chemistry or employment in Chemistry based industry.			✓
c	An ability to design and conduct experiments, as well as to analyze and interpret data, to use modern instrumentation and classical techniques.	✓		
d	An ability to use modern library searching and retrieval methods to obtain information about chemistry and chemistry-related areas.		✓	
e	An ability to use computers for chemical simulation and computation, data acquisition, and database usage.			✓
f	An ability to apply and integrate basic knowledge from mathematics, physics and biology to chemistry for solutions of problems, critical thinking and analytical reasoning			✓
g	An ability to work in a group, be effective leaders as well as effective team members.			✓
h	An ability to communicate effectively orally and in writing in Turkish and in English languages. An ability to research chemistry topics, write research reports, and give oral and poster presentations.			✓
i	To train students in the aspect of modern chemical safety regulations and disposal techniques.			
j	An understanding and appreciation the importance of ethical behavior in all aspects of personal and professional life .		✓	

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

<u><b>Düzenleyen (Prepared by)</b></u> <b>Dr. Öğr. Üyesi Berkay SÜTAY</b>	<u><b>Tarih (Date)</b></u> Son güncelleme 19.04.2022	<u><b>İmza (Signature)</b></u>
--	--	--------------------------------