

**İTÜ**  
**DERS KATALOG FORMU**  
**(COURSE CATALOGUE FORM)**

<b>Dersin Adı</b>				<b>Course Name</b>		
Atom ve Molekül Yapısına Giriş				Introduction to Atomic and Molecular Structure		
<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>
KIM262E	4	3	5	3	-	-
<b>Bölüm / Program (Department/Program)</b>	Kimya Chemistry					
<b>Dersin Türü (Course Type)</b>	Zorunlu (Compulsory)		<b>Dersin Dili (Course Language)</b>	İngilizce (English)		
<b>Dersin Önkoşulları (Course Prerequisites)</b>	(KIM111 / KIM111E MIN DD) ve (FIZ 101/FIZ 101E MIN DD) ve (MAT201/MAT 201E MIN DD) (KIM111/KIM111E MIN DD) and (FIZ 101/FIZ 101E MIN DD) and (MAT201/MAT 201E MIN DD)					
<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>	Dersi takip etmek için gerekli matematik alt yapının gözden geçirilmesi ( Operatörler, Kompleks sayılar, diferansiyel denklemler, Schrödinger denklemleri 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, Hidrojenimsi ( tek elektronlu atomik) sistemlerin incelenmesi, Çok elektronlu atomlar, Born-Oppenheimer yaklaşımı, Helyum atomu, Varyasyon prensibi, Diatomik moleküllerin elektronik yapıları					
<b>(Course Description)</b>	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><b>Dersin Amacı</b></p>	<p>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</p>
<p><b>(Course Objectives)</b></p>	<p>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 3. To teach the methods to study atomic and molecular electronic structure and their relation to spectroscopy</p>
<p><b>Dersin Öğrenme Çıktıları</b></p>	<p>I. Enerji kuantizasyonu kavramını kullanarak atomik spektrumlarda görülen soğurma çizgilerini anlayabilme ve açıklayabilme II. Kuantum mekanik operatörleri tanıyabilme ve basit sistemler için toplam enerji operatörünü yazabilme III. Basit sistemler için tek boyutta Schrödinger denklemini yazabilme ve çözebilme IV. Dalga fonksiyonu, normalizasyon, enerji dejenerasyonu, tünelleme gibi kuantum mekanikte karşılaşılan temel kavramları anlayabilme ve kullanabilme V. 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 VI. Bu hareketlere ait deneysel frekanslarla ilişkilendirme, spektroskopik yöntemleri ve nasıl kullanıldıklarını anlayabilme VII. Orbital kavramının matematiksel bir fonksiyon olduğunu ve H-atomunun kuantum mekanik çözümünden elde edilen öz fonksiyonlar olduğunu öğrenme VIII. Bir orbitaldeki elektronun çekirdeğe olan uzaklığını hesaplayabilme, orbital şekillerini belirleyen küresel harmonik fonksiyonlarını tanıyabilme ve kullanabilme IX. Elektron yoğunluğu kavramını öğrenme ve hesaplayabilme X. Moleküler orbitallerle atomik orbitaller arasındaki ilişkiyi kurabilme, kimyasal bağı matematiksel olarak tanımlayabilme XI. Moleküler özelliklerle elektronik yapı arasındaki ilişkileri kurabilme XII. Hesaplamalı Kimya'nın da temelini oluşturan, Schrödinger denkleminin kesin olarak çözülemediği durumlarda kullanılan varyasyon yöntemi öğrenme ve kullanabilme XIII. Moleküler orbital teorisini kavrama ve konjuge organik moleküllere uygulamasını içeren Hückel Moleküler Orbital teorisini kullanarak moleküler özellik hesaplayabilme</p>
<p><b>(Course Learning Outcomes)</b></p>	<p>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, tunnelling.. 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.</p>

<b>Ders Kitabı</b> (Textbook)	Physical Chemistry, P.W. Atkins, Oxford Uni. Press, 5th Edition, 1994 Quantum Mechanics for Chemists, David O. Hayward, R.S.C, 2002		
<b>Diğer Kaynaklar</b> (Other References)	Physical Chemistry, Ira N. Levine, Mc Graw Hill, 5th Edition, 2002 All Physical Chemistry and Quantum Chemistry Books		
<b>Ödevler ve Projeler</b> (Homework & Projects)	Konularla ilgili problemler ev ödevi olarak verilmektedir. Hückel Moleküler Orbital teori ile ilgili sene sonu projesi verilmektedir. Homework related to the covered topics are assigned. A project related to the Hückel Molecular Orbital theory is given.		
<b>Laboratuvar Uygulamaları</b> (Laboratory Work)			
<b>Bilgisayar Kullanımı</b> (Computer Use)			
<b>Diğer Uygulamalar</b> (Other Activities)			
<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>2</b>	<b>60</b>
	<b>Kısa Sınavlar</b> (Quizzes)		
	<b>Ödevler</b> (Homework)	<b>2</b>	<b>0</b>
	<b>Projeler</b> (Projects)	<b>1</b>	<b>0</b>
	<b>Dönem Ödevi/Projesi</b> (Term Paper/Project)		
	<b>Laboratuvar Uygulaması</b> (Laboratory Work)		
	<b>Diğer Uygulamalar</b> (Other Activities)		
	<b>Final Sınavı</b> (Final Exam)	<b>1</b>	<b>40</b>

## DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Kuantum mekaniğine giriş, temel kavramlar Kara cisim ışıması, 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	I
2	Kompleks fonksiyonlar, Diferansiyel denklemler Kuantum Theory: Teknikler ve Uygulamaları Ötelenme Hareketi: Kutudaki Parçacık Modeli ( Tek boyutta incelenmesi)	II
3	Kutudaki Parçacık Modeli ( İki ve üç boyutta incelenmesi), Dalga fonksiyonunun normalizasyonu, Enerjinin dejenerasyonu, Tünelleme	III-IV
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	V-VI
5	Dönme Hareketi: İki boyutta ve üç boyutta incelenmesi, Açısal momentum ve kuantizasyonu, Katı döneç modeli ve çözümlerinin incelenmesi, İki atomlu moleküllerdeki bağ uzunluğunun mikro dalga frekanslarından bulunması	V-VI
6	İki atomlu moleküllerin titreşim spektrumlarının incelenmesi	VI
7	<b>1. Ara Sınav</b>	-
8	Atom Yapısı ve Atomik Spektrumların incelenmesi Elektronik yapı, Hydrogen atomu ve kuantum mekanik olarak elektronik Schrödinger denkleminin çözülerek orbitallerin ve elektronik enerji seviyelerinin bulunması, orbital kavramı, kuantum sayıları	VII
9	Radyal dağılım fonksiyonları ve anlamları H-tipi tek elektronlu sistemlerin (iyonların) elektronik yapılarının incelenmesi, enerji seviyeleri arasındaki geçişler ve geçiş kuralları	VIII
10	Çok elektronlu atomların elektronik yapılarının incelenmesi, Helyum atomu, Pauli prensibi, etkin çekirdek yükü, elektronik konfigürasyon, Hund kuralı, spin kavramı, manyetik özellikler ve Zeeman etkisi	IX
11	Moleküllerin elektronik yapıları Born-Oppenheimer Yaklaşırması, Valans Bağ teorisi Moleküler Orbital Teori, Hidrogen molekül iyonu ve hidrojen molekülü ile uygulamalar	X
12	İki atomlu moleküllerin elektronik yapıları	XI
13	Varyasyon Prensibi, Schrödinger denkleminin yaklaşık olarak çözülmesi	XII
14	Hückel Moleküler Orbital Teorisi ve konjuge organik moleküllerdeki uygulamaları	XIII

## COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course 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	I
2	Complex functions, Differential equations Quantum Theory: Techniques and Applications Translational motion: the particle in a box model (one dimensional box)	II
3	The particle in a box model ( two and three dimensional box), normalization, degeneracy, tunnelling	III-IV
4	Vibrational motion: harmonic oscillator, classical solution Quantum mechanical solution of harmonic oscillator, Hermite polynomials, properties, virial theorem, IR frequencies	V-VI
5	Rotational motion: rotation in two dimension, quantization of rotation Rotation in three dimension, Angular momentum, rigid rotor, Microwave frequencies	V-VI
6	Vibrational-Rotational spectra of diatomic molecules	VI
7	<b>Midterm Examination</b>	-
8	Atomic Structure and Atomic Spectra Electronic structure, Hydrogen atom, Solution of Schrödinger equation Atomic orbitals and their energies, quantum numbers, energy levels, shells, subshells	VII
9	Radial distribution functions H-like ions, selection rules, transitions	VIII
10	The structure of many-electron atoms, helium atom Pauli principle, penetration and shielding, the building-up principle, Hund's rule, spin, the Zeeman effect	IX
11	Molecular Structure Born-Oppenheimer Approximation, valance bond theory Molecular orbital theory, hydrogen molecule and hydrogen molecule-ion	X
12	The electronic structure of diatomic molecules	XI
13	Variation Principle	XII
14	Hückel Molecular Orbital Theory and its applications	XIII

## 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 çalışmalarını 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 laboratuvarda 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><i>Düzenleyen (Prepared by)</i></u>	<u><i>Tarih (Date)</i></u> 19.9.2013	<u><i>İmza (Signature)</i></u>
--	---	--------------------------------