DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (saat/hafta)	Türü (Z / S)	Yerel Kredi	AKTS
Kuantum Termodinamiğine Giriş	MBG 404	Bahar	03+00+00	Seçmeli	3	5

Akademik Birim:	MDBF / Moleküler Biyoloji ve Genetik
Öğrenim Türü:	Örgün Eğitim
Ön Koşullar	Yok
Öğrenim Dili:	İngilizce
Dersin Düzeyi:	Lisans
Dersin Koordinatörü:	- -
Dersin Amacı:	Klasik termodinamiğin yasaları, fiziksel sistemlerin çevreleriyle iş ve ısı alışverişi yoluyla kurduğu ilişkileri belirleyen evrensel ilkelerdir. Entropi ve serbest enerji gibi, yalnızca termal denge koşullarında iyi tanımlı olan kavramlar aracılığıyla, makroskobik doğa olaylarını anlamada büyük başarı sağlamışlardır. Ancak, sürekli dengeden uzak koşullarda çalışan ve moleküler ölçekte yapılandırılmış canlı sistemlerin dinamiklerini açıklamakta bu kuramsal çerçeve yetersiz kalmaktadır. Buna rağmen protein katlanmasından enzim katalizine kadar çeşitli biyomoleküler süreçler hâlen klasik entropi ve serbest enerji kavramlarıyla yorumlanmaya çalışılmaktadır. Öte yandan, atomaltı parçacıkların davranışlarını ve moleküler düzeydeki etkileşimleri açıklamada vazgeçilmez olan kuantum mekaniği, uzun süre boyunca termodinamik ilkelerle tam anlamıyla bütünleştirilememiştir. Kuantum termodinamiği, bu iki temel kuram arasındaki kavramsal boşlukları kapatmayı hedefleyen, hızla gelişen disiplinler arası bir araştırma alanı olarak ortaya çıkmıştır. Bu alan, entropi ve serbest enerji kavramlarının dengeden uzak durumlar için yeniden tanımlanmasından, enerjinin atomik ve moleküler ölçekteki takas ve taşınımına kadar pek çok temel soruya yanıt arar. Ayrıca, klasik ve kuantum korelasyonların tek moleküllü sistemlerdeki termodinamik işlevi de bu alanın merkezinde yer alır. Enzim katalizi, protein katlanması, fotoizomerizasyon, fotosentez ve manyetik duyum gibi birçok biyomoleküler süreç, hem kuantum hem de termodinamik ilkelerin birlikte ele alınmasını zorunlu kılmaktadır. Bu bağlamda, kuantum termodinamiğin biyolojik sistemlere uygulanması, canlılığın temel süreçlerini anlamada yeni bir paradigma sunmaktadır. Bu ders, Moleküler Biyoloji ve Genetik, Kimya, Fizik ve Mühendislik öğrencilerine kuantum termodinamiğin temel ilkelerini disiplinler arası bir yaklaşımla tanıtmayı amaçlamaktadır. Kuantum sistemlerinde enerji ve bilgi değişiminin nasıl tanımlandığı, canlı sistemlerde gözlenen dengeden uzaklığın kuantum kökenli olup olamayacağı gibi temel sorular bu çerçevede ele alınacaktır. Ders kapsamında kuramsal temellerin yanı sıra, kuantum biyoloji ve kuantum kimya literatüründen güncel araştırma örnekleri incelenecek; öğrencilerin biyomoleküler süreçleri kuantum termodinamiğin bakış açısıyla değerlendirebilmeleri teşvik edilecektir.
Dersin İçeriği:	1. Temel Termodinamik Kavramlar Enerji, sıcaklık, iş ve ısı kavramlarının tanımı; termodinamik denge koşulları; termodinamiğin birinci ve ikinci yasaları. Bu kavramların biyolojik sistemlerdeki karşılıkları üzerine tartışmalar. 2. Kuantum Sistemlerin Özellikleri ve Dengeden Uzaklık Süperpozisyon ve dolaşıklık gibi kuantum sistemlere özgü niteliklerin, termodinamik dengeden sapmayla ilişkisi. 3. Kuantum Dinamiği ve Zaman Evrimi Kuantum sistemlerin zaman içindeki evrimini tanımlayan temel denklemler (Schrödinger, von Neumann, Lindblad), kuantum kanalları ve tamamen pozitif iz koruyan işlemler (CPTP maps). Tersinirlik ve tersinmezlik. 4. Kuantum Çarpışma Modelleri ile Kuantum Termodinamik Açık kuantum sistemlerinin çevreyle etkileşimini modellemek için çarpışma modelleri (collision models); termal dengeye ulaşma süreçleri; termalizasyonun mikroskobik temelleri. 5. Kuantum Kaynak Teorileri ile Kuantum Termodinamik Kuantum kaynak kuramı çerçevesinde, entropi ve serbest enerjinin majorizasyon ve termomajorizasyon ön-sıralamaları ile dengeden uzak sistemler için nasıl genelleştirildiği. 6. Açık Kuantum Sistemleri Yaklaşımları ile Kuantum Termodinamik Açık kuantum sistemlerinin termodinamik analizinde kullanılan Lindblad tipi master

	denklemleri; güç ve ısı akımı tanımları; kuantum düzeyde entropi üretimi ve enerji dönüşüm verimi. 7. Kuantum Isı Makineleri ve Çalışma İlkeleri Klasik ve kuantum ısı makinelerinin karşılaştırmalı analizi; kuantum süperpozisyon ve korelasyonların verimlilik üzerindeki etkisi; kuantum otomatları ve bilgi-motor ilişkisi. Biyolojik örnekler.
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):	• **1-** Enerji, sıcaklık, iş ve ısı gibi temel termodinamik büyüklükleri tanımlayabilecektir. Termodinamiğin birinci ve ikinci yasalarını açıklayabilecek ve denge koşullarıyla ilişkilendirebilecektir. Bu kavramların biyolojik sistemlerdeki karşılıklarını tartışabilecektir. • **2-** Süperpozisyon ve dolaşıklık gibi kuantum özellikleri tanımlayabilecektir. Bu özelliklerin termodinamik dengeden sapmalarla olan ilişkisini analiz edebilecektir. Biyolojik ve moleküler sistemlerde bu özelliklerin olası rollerini değerlendirebilecektir. • **3-** Schrödinger, von Neumann ve Lindblad denklemleriyle kuantum sistemlerin zaman evrimini ifade edebilecektir. Üniter ve üniter olmayan dinamikleri ayırt edebilecektir. Kuantum termodinamik süreçlerde tersinirlik ve tersinmezliğin anlamını tartışabilecektir. • **4-** Açık sistem-çevre etkileşimlerini modellemek için çarpışma modellerini kullanabilecektir. Termal dengeye ulaşma süreçlerini açıklayabilecektir. Termalizasyonun mikroskobik temellerini analiz edebilecektir. • **5-** Majorizasyon ve termomajorizasyon kavramlarını kullanarak kuantum durumlarını sıralayabilecektir. Böylece entropi ve serbest enerjiyi dengeden uzak sistemler için genelleştirebilecektir. Bilgi kuramsal kısıtlar altında termodinamik dönüşümleri değerlendirebilecektir. • **6-** Lindblad tipi master denklemlerle açık kuantum sistemlerin dinamiklerini tanımlayabilecektir. Güç ve ısı akımı hesaplamaları yapabilecektir. Kuantum düzeyde entropi üretimi ve enerji dönüşüm verimini analiz edebilecektir. • **7-** Klasik ve kuantum ısı makinelerinin çalışma ilkelerini karşılaştırmalı olarak açıklayabilecektir. Kuantum süperpozisyon ve korelasyonların verimlilik üzerindeki etkilerini değerlendirebilecektir. Biyolojik süreçleri potansiyel kuantum ısı makineleri olarak yorumlayabilecektir.
Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri	Ders, ders anlatımı, interaktif tartışmalar ve problem çözme oturumlarının bir kombinasyonu şeklinde yürütülecektir. Hem kuramsal temellere hem de literatürdeki uygulamalara ağırlık verilecektir. Öğrencilerin konuları ne ölçüde anladıklarını değerlendirmek ve sürekli katılımı teşvik etmek amacıyla iki haftada bir kısa sınavlar yapılacaktır. Bu sınavlar, öğrencilerin son konulara dair bilgi düzeyini ölçmeyi ve geri bildirim yoluyla öğrenmeyi pekiştirmeyi hedefleyecektir.

HAFTALIK PROGRAM

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Temel Termodinamik Kavramlara Giriş • Enerji, sıcaklık, iş ve ısı kavramlarının tanıtımı • Termodinamik sistem ve çevre ayrımı • Termodinamik dengenin tanımı ve mikroskobik anlamı	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
2	Termodinamiğin Yasaları ve Biyolojik Uygulamaları • Termodinamiğin birinci ve ikinci yasaları • Entropi kavramı ve biyolojik sistemlerdeki karşılıkları • Serbest enerji ve biyomoleküler süreçler (örneklerle)	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
3	Kuantum Sistemlerin Temel Özellikleri • Hilbert uzayı, durum vektörleri, ölçüm postülası • Süperpozisyon ve dolaşıklık kavramları • Kuantum korelasyonların tanıtımı	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
4	Dengeden Uzaklık ve Kuantum Özelliklerin Rolü • Süperpozisyon ve dolaşıklığın termodinamik etkileri • Dengeden uzak durumlar ve kuantum karakterin rolü • Biyosistemlerde kuantum süperpozisyon ve dolaşıklık örnekleri	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
5	Zaman Evrimi: Kapalı Sistemler • Schrödinger ve von Neumann denklemleri	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması

	• Üniter evrim ve bilgi korunumunun anlamı • Zamanın yönü problemi (termodinamik vs. kuantum)	
6	Açık Sistemler ve Evrimin Matematikselleştirilmesi • Açık sistem dinamiği: CPTP işlemler • Kuantum kanalları ve dinamik eşdeğerlikler • Lindblad tipi denklemlere giriş	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
7	Kuantum Çarpışma Modellerine Giriş • Çarpışma modelleri nedir, neden kullanılır? • Termal banyo ve parçacıklarla etkileşim modeli • Markoviyenlik ve termal dengeye ulaşma	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
8	Termalizasyonun Mikroskobik Temelleri • Termal dengeye ulaşma kriterleri • Ergodiklik, eigenstate thermalization hypothesis (ETH) • Biyomoleküler sistemlerde uygulamalar	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
9	Kaynak Teorilerine Giriş • Kaynak kuramlarının felsefesi: izinli işlemler ve kaynaklar • Majorizasyon, termomajorizasyon kavramları • Serbest enerjinin yeniden tanımlanması	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
10	Entropi ve Serbest Enerjinin Genelleştirilmesi • Rényi entropileri, tek atımlı rejim • İş çıkarımı, bilgi-motor ilişkisi • Biyolojik sistemlerde enerji verimliliği	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
11	Açık Sistem Yaklaşımları: Temel Kavramlar • Açık kuantum sistemlerinde güç ve ısı tanımları • Lindblad denklemi ile enerji akışının hesaplanması • Entropi üretimi ve tersinmezlik	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
12	Enerji Dönüşüm Verimi ve Koşulları • Verim tanımları ve sınırlayıcı ilkeler • Tek moleküllü makineler • Enerji-madde-enformasyon akışı bağlantıları	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
13	Kuantum Isı Makineleri ve Süreçleri • Klasik vs. kuantum ısı makineleri • Otto, Carnot, Szilard motorlarının kuantum versiyonları • Süperpozisyon ve korelasyonların iş çıkarımındaki rolü	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
14	Biyolojik Sistemlerde Kuantum Termodinamik • Fotoizomerizasyonda enerji dönüşümleri • Enzim katalizi ve bilgi akışı • Dersin genel değerlendirmesi ve ileri okuma önerileri	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması

Kadir Has Üniversitesi'nde bir dönem 14 haftadır, 15. ve 16. hafta sınav haftalarıdır.

ZORUNLU ve ÖNERİLEN OKUMALAR

1) R.A. Bertlmann & N. Friis, Modern Quantum Theory: From Quantum Mechanics to Entanglement and Quantum Information, Springer (2021).
– Süperpozisyon, dolaşıklık ve kuantum korelasyonların yapısına odaklanan, kuantum kuramının temellerine kapsamlı bir giriş sunar. Fizik, mühendislik ve ilgili disiplinlerden gelen öğrenciler için uygundur.

2) F. Binder, L.A. Correa, C. Gogolin, J. Anders & G. Adesso (Ed.), Thermodynamics in the Quantum Regime: Fundamental Aspects and New Directions, Springer (2018).
– Kaynak teorileri ve kuantum ısı makineleri gibi kuramsal çerçeveleri içeren, kuantum termodinamiği alanında yetkin bir derleme eser. Enerji, entropi ve enformasyonun kuantum ölçeklerdeki etkileşimini disiplinler arası bir yaklaşımla incelemek isteyenler için özellikle yararlıdır.

DİĞER KAYNAKLAR

1. F.A. Weinhold. (1999). Chemical Bonding as a Superposition Phenomenon. J. Chem. Edu. 76, 1141. (doi: 10.1021/ed076p1141)
2. G. Adesso et al. (2016). Measures and applications of quantum correlations, J. Phys. A: Math. Theor. 49(47), 473001. (doi: 10.1088/1751-8113/49/47/473001)
3. W.H. Zurek (2003). Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. Rev. Mod. Phys. 75, 715. (doi: 10.1103/RevModPhys.75.715)
4. F. Ciccarello, S. Lorenzo, V. Giovannetti, and G. M. Palma (2022). Quantum collision models: Open system dynamics from repeated interactions. Physics Reports 954, 1. (doi: 10.1016/j.physrep.2022.01.001)
5. M. Cattaneo et al. (2019). Local versus global master equation with common and separate baths. New J. Phys. 21 113045. (doi: 10.1088/1367-2630/ab54ac)
6. M. Lostaglio (2019). An introductory review of the resource theory approach to thermodynamics. Rep. Prog. Phys. 82, 114001. (doi: 10.1088/1361-6633/ab46e5)

DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

Yarıyıl İçi Çalışmaları	**Sayı**	**Katkı Payı (%)**
Katılım	14	-
Proje	1	30
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	7	70
Total:	**22**	**100**

İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

Etkinlikler	**Sayısı**	**Süresi (saat)**	**Toplam İş Yükü (saat)**
Ders Saati	14	3	42
Proje	1	76	76
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	7	1	7
Toplam İş Yükü (saat):			**125**

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

PROGRAM YETERLİLİKLERİ (PY) ve ÖĞRENME ÇIKTILARI (ÖÇ) İLİŞKİSİ

#	PY1	PY2	PY3	PY4	PY5	PY6	PY7	PY8	PY9
OC1	3	3		3				2	2
OC2	2	3						3	2
OC3	2	3	2					2	2
OC4	1	3	2					2	1
OC5	3	3		2	3		3	3	3
OC6	3	3			3		2	3	3
OC7	3	3		3				3	3

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek