

DERS TANITIM ve UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U+L (saat/hafta)	Türü (Z / S)	Yerel Kredi	AKTS
Kuantum Hesapsal Kimyaya Giriş	MBG 407	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:	Bu ders, kuantum kimya ile kuantum hesaplama arasında kavramsal ve pratik bir köprü kurmayı amaçlamaktadır. Moleküler sistemleri kuantum bilgisayarlar kullanarak simüle etmeye ilgi duyan, disiplinler arası geçmişe sahip öğrenciler için tasarlanmıştır. Ders üç iç içe geçmiş alanı kapsar: kuantum kimyanın temelleri, kuantum hesaplamanın prensipleri ve kimyasal olayları simüle etmek ve anlamak için kuantum hesaplamanın uygulanması. Öğrenciler molekülleri modellemek, kuantum algoritmaları tasarlamak ve kimyasal reaksiyonlar ile elektronik yapıların kuantum simülasyonlarını analiz etmek için gerekli araçları edineceklerdir.					
Dersin İçeriği:	- Kuantum Kimyanın Temel Kavramları Atomik orbitaller, hibritleşme, değerlik bağ yapıları, rezonans, moleküler orbitaller, konfigürasyon etkileşimi. - Kuantum Kimyada Geleneksel Yöntemler Hartree-Fock Teorisi, Konfigürasyon Etkileşimi Yöntemi, Bağlı Küme (Coupled Cluster) Teorisi. - Kuantum Hesaplamanın Prensipleri Kübitler, kuantum kapıları, kuantum devreleri, kuantum algoritmaları. - Kimya İçin Kuantum Algoritmaları Varyasyonel Kuantum Özdeğer Çözücü (VQE), Kuantum Faz Tahmini (QPE) vb.					
Dersin Öğrenme Çıktıları (ÖÇ):	1- Kuantum kimyanın temel kavramlarını anlayabilecektir 2- Kuantum bilgisayarlarının ve kuantum kapılarının çalışma prensiplerini açıklayabilecektir. 3- Moleküler problemleri kuantum algoritmalarına ve kübit Hamiltonyenlerine dönüştürebilecektir. 4- Kimyasal simülasyonlar için varyasyonel ve faz tahminine dayalı algoritmaları analiz edebilecek ve tasarlayabilecektir. 5- Gürültünün etkisini değerlendirebilecek ve azaltma teknikleri önerebilecektir. 6- Molekülleri simüle etmek için hibrit kuantum-klasik algoritmalar uygulayabilecektir. 7- Kuantum hesaplamalı kimya alanındaki güncel araştırmaları sunup eleştirel bir şekilde değerlendirebilecektir.					
Dersin Öğrenme Yöntem ve Teknikleri	Kuramsal ve algoritmik bileşenleri içeren ders anlatımları Qiskit veya PennyLane kullanılarak sınıf içi kodlama gösterimleri Haftalık okuma ve problem setleri Simülasyon veya algoritma analizi içeren bireysel ya da grup halinde final projesi					

HAFTALIK PROGRAM

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Kuantum Kimyanın Temelleri I Dalga fonksiyonları ve operatörlere giriş, Born-Oppenheimer yaklaşımı, potansiyel enerji yüzeyleri, atomik orbitaller ve baz fonksiyonları.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
2	Kuantum Kimyanın Temelleri II Değerlik Bağ Teorisi ile Moleküler Orbital Teorisi: bağ yapan ve bağ yapmayan orbitaller, rezonans ve hibritleşme; küçük	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması

	moleküllere uygulamalar.	
3	Elektronik Yapı Yöntemleri I: Hartree-Fock Teorisi Ortalama alan yaklaşımı, Slater determinantları, öz-tutarlı alan (SCF) yöntemi, HF yönteminin sınırlamaları.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
4	Elektronik Yapı Yöntemleri II: HF Ötesi — CI ve CC Konfigürasyon Etkileşimi (CI), Bağlı Küme (CC) yöntemleri; boyut tutarlılığı ve korelasyon enerjisi; doğruluk ve hesaplama maliyeti arasında dengeler.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
5	Kuantum Hesaplamanın Temelleri Kübitler, kapılar, ölçümler, kuantum paralellik; kuantum devrelere ve kuantum durumlara giriş.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
6	Kuantum Algoritmalarına Giriş Deutsch-Jozsa, Grover ve genel devre tasarımı ilkeleri; tersinirlik ve kuantum hızlanma.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
7	Kimyasal Sistemlerin Kübitlere Haritalanması İkinci kuantizasyon, fermiyonik kodlamalar (Jordan-Wigner, Bravyi-Kitaev); elektronik integrallerden Hamiltonyen inşası.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
8	Kuantum Kimyada VQE Algoritması Ansatz tasarımı (UCCSD, donanımına uygun), maliyet fonksiyonu minimizasyonu, klasik-kuantum optimizasyon döngüsü.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
9	Kuantum Faz Tahmini ve Kuantum Simülasyon QPE, Trotterizasyon ve elektronik Hamiltonyenler için zaman evrimi operatörleri. NISQ döneminde VQE ile QPE karşılaştırması.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
10	Kuantum Gürültüsü ve Simülasyonlarda Hata Azaltımı Dekoharens, kapı ve ölçüm hataları, gürültü modelleme, sıfır gürültü ekstrapolasyonu ve olasılıksal hata iptali.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
11	Hibrit Kuantum-Klasik Simülasyonlar Klasik ön- ve son-işlem, gömme ve aktif uzay yöntemleri, klasik/kuantum bölünme.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
12	Uygulamalar I: Moleküler Temel Durumların Simülasyonu Örnek olay çalışmaları: H ₂ , LiH, BeH ₂ . Bulut üzerinden erişilebilen kuantum donanımıyla simülasyon çalışmaları.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
13	Uygulamalar II: Reaksiyon Yolları ve Uyarılmış Durumlar Uyarılmış durum enerjilerinin hesaplanması için kuantum algoritmaları; potansiyel enerji yüzeyleri ve geçiş durumları.	Ders kitabı x ve derleme makale y'den ilgili bölümlerin okunması
14	Proje Sunumları ve Genel Değerlendirme Öğrencilerin bir kuantum algoritması ya da simülasyon çalışması üzerine sunumları; grup tartışmaları ve kuantum hesaplamalı kimyanın geleceği üzerine değerlendirme.	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) Pauling, L. The Nature of the Chemical Bond, 3rd ed., Cornell University Press, 1960.
- 2) Szabo, A., & Ostlund, N. S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Publications, 1996.
- 3) Levine, I. N. Quantum Chemistry, 7th ed., Pearson, 2014.
- 4) Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. Quantum Computation and Quantum Information, 10th Anniversary ed., Cambridge University Press, 2010.

DİĞER KAYNAKLAR

Journal of Chemical Education, Journal of Chemical Theory and Computation, npj Quantum Information, Physical Review A gibi dergilerden önemli makaleler.

DEĞERLENDİRME SİSTEMİ

Yarıyıl İçi Çalışmaları	Sayı	Katkı Payı (%)
Katılım	14	-
Proje	1	35
Sunum/Jüri	1	30
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	7	35
Total:	23	100

İŞ YÜKÜ HESAPLAMASI

Etkinlikler	Sayısı	Süresi (saat)	Toplam İş Yüğü (saat)
Ders Saati	14	3	42
Proje	1	38	38
Sunum/Jüriye Hazırlık	1	38	38
Ara Sınavlar/Sözlü Sınavlar/Kısa Sınavlar	7	1	7
Toplam İş Yüğü (saat):			125

1 AKTS = 25 saatlik iş yükü

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

#
OC1
OC2
OC3
OC4
OC5
OC6

Katkı Düzeyi: 1 Düşük, 2 Orta, 3 Yüksek