

ABDULLAH GÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
İleri Malzemeler ve Nanoteknoloji ANABİLİM DALI
DERS TANIM VE UYGULAMA BİLGİLERİ

Dersin Adı	Kodu	Yarıyılı	T+U Saat	Kredisi	AKTS
Hesaplamalı Malzeme Bilimi	AMN 574	GÜZ-BAHAR	3 + 0	3	10

Ön Koşul Dersleri Linux / unix işletim sistemi bilgisi

Dersin Türü	Seçmeli
Dersin Dili	İngilizce
Dersin Koordinatörü	
Dersi Verenler	Murat Durandurdu
Dersin Yardımcıları	
Dersin Amacı	Malzemelerin hesaplamalı çalışması için kuantum mekanik yazılım SIESTA'nın teori, yöntem ve uygulamalarını öğrenmek.
Dersin Öğrenme Çıktıları	Öğrenciler materyallerin elektronik ve mekanik özelliklerini hesaplama, amorf materyalleri modelleme ve yoğunluk fonksiyonel kod SIESTA kullanarak sıcaklık / basınç ile indüklenen faz dönüşümleri üzerinde pratik deneyime sahip olacaklardır
Dersin İçeriği	Yoğunluk fonksiyonel teorisinin kristaller, düzensiz malzemeler ve nanomalzemeler üzerine uygulamaları ve fiziksel özelliklerinin hesaplanması

HAFTALIK KONULAR VE İLGİLİ ÖN HAZIRLIK SAYFALARI

Hafta	Konular	Ön Hazırlık
1	Malzemelerin modellemesi ve simülasyona giriş	
2	Unix / linux, paralel bilgisayarlar ve toplu sistemlerin kısa bir incelemesi.	
3	Yoğunluk fonksiyonel teorisi	
4	Yoğunluk fonksiyonel teorisi	
5	SIESTA koduna giriş	
6	Kristal yapılar ve örgü parametrelerinin hesaplanması	
7	Kristallerin elektronik ve mekanik özelliklerinin hesaplanması	
8	Katı-sıvı faz dönüşümlerinin siesta ile modellenmesi	
9	Sıvıların basınca bağlı katılaşması	
10	Amorf malzemelerin modellemesi	
11	Basınca bağlı faz dönüşümleri	
12	Nanomalzemeleri modellemesi	
13	Project Reports	
14	Project Reports	
15	Project Reports	

KAYNAKLAR

Ders Notu	Bu derse ait ders notları ve slaytlar
Diğer Kaynaklar	D. J. Barrett, <i>Linux Pocket Guide</i> (O'Reilly, 2004). D. Sholl, <i>Density Functional Theory: A Practical Introduction</i> (Wiley, 2009). R. Martin, <i>Electronic structure: Basic theory and practical methods</i> (Cambridge, 2004). E. Kaxiras, <i>Atomic and Electronic Structure of Solids</i> (Cambridge, 2003). J. G. Lee, <i>Computational Materials Science: An Introduction</i> (CRC Press, 2011). F. Jensen, <i>Introduction to Computational Chemistry</i> (Wiley, 2006).

MATERYAL PAYLAŞIMI	
Dökümanlar	Ders için hazırlanan yansılar internet ortamında paylaşılmaktadır
Ödevler	Her hafta (sınav haftaları haric) ödevler verilmektedir
Sınavlar	Proje raporu

DEĞERLENDİRME SİSTEMİ		
YARIYIL İÇİ ÇALIŞMALARI	SAYISI	KATKI PAYI
Ödev	13	%50
Proje	1	%50
Ödev		
TOPLAM	14	%100
Yılıçının Başarıya Oranı		
Finalin Başarıya Oranı		
TOPLAM	14	%100

Ders Kategorisi	
Temel Bilimler ve Matematik	%50
Mühendislik Bilimleri	%50
Sosyal Bilimler	

DERSİN ÖĞRENİM ÇIKTILARININ PROGRAM YETERLİLİKLERİ İLE İLİŞKİSİ						
No	Program Yeterlilikleri	Katkı Düzeyi				
		1	2	3	4	5
1	Malzeme bilimi ve nanoteknoloji alanında bilimsel araştırma yaparak bilgiye ulaşma, bilgiyi değerlendirebilme, yorumlayabilme					x
2	Fen bilimleri ve mühendislik bilgilerini malzeme bilimi ve nanoteknoloji alanlarında yeni yöntem geliştirme için kullanabilme					x
3	Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Mühendisliği temel bilgilerini kullanarak malzemeyi temel alan sistemleri anlama ve analiz etme becerisine sahip olmak					x
4	Analitik, modelleme ve deneysel temelli araştırmaları dizayn etmek ve uygulamak					x
5	Deneysel temelli araştırmalarda karşılaşılan sorunları çözmek ve yorumlamak			x		
6	Verilerin toplanması ve yorumlanması, aşamalarında toplumsal, bilimsel ve etik değerleri gözetmek.	x				
7	Verileri kullanarak bilimsel yöntemlerle bilgiyi tamamlama, uygulama ve bilimsel metotların yardımıyla farklı disiplinlere ait bilgilerle bütünleştirmek				x	
8	Disiplin içi ve disiplinler arası takım çalışmalarında liderlik yapma ve sorumluluk alma becerisi kazanmak				x	
9	Malzeme bilimi ve nanoteknoloji alanı ile ilgili konularda karşılaşılan sosyal, bilimsel ve etik problemlerin çözümüne katkıda bulunabilme		x			
10	Malzeme bilimi ve nanoteknoloji alanının ilgili disiplinler arasındaki etkileşimini tanımlayabilme, yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme					x

*1'den 5'e kadar artarak gitmektedir.

AKTS / İŞ YÜKÜ TABLOSU			
Etkinlikler	Etkinlikler	Süresi (Saat)	Toplam İş Yüğü
Ders Süresi (Sınav haftası dahildir: 16x toplam ders saati)	16 hafta	5	80
Sınıf Dışı Ders Çalışma Süresi(Ön çalışma, pekiştirme)	15 Hafta	5	80
İnternette tarama, kütüphane çalışması	15 Hafta	3	48
Sunum	3 hafta	5	15

Ödevler	13 hafta	5	65
Arasnavlar			
Yarıyıl Sonu Sınavı			
Toplam İş Yüğü			288
Toplam İş Yüğü / 30		23	288/23
Dersin AKTS Kredisi			10