



FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DERS İZLENESİ

Ders Kodu	FİZ5068
Ders Adı	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
Seçmeli/Zorunlu	Seçmeli
Programın Adı	FİZİK
Program Türü	Lisansüstü
Dönem	2023-2024 BAHAR
Ders Saati	3
Haftalık Ders Programı	Perşembe 15.30 – 18.00
Öğretim Elemanının Adı Soyadı	Dr. Öğretim Üyesi İrem ALP
Öğretim Elemanı İletişim Bilgileri	iremoner@gazi.edu.tr

Dersin Ön Şartları

Yok

Dersin Tanımı ve Amaçları

Molekül ve Kristal yapıları modellemek için geliştirilmiş kuantum mekaniksel bir yöntem olan yoğunluk fonksiyonu teorisini öğretmek ve VASP, CASTEP ve diğer alternatif paket programları ile uygulamalar yapmak.

Dersin İçeriği

Kuantum mekaniğinin temeli ; Materyal bilimindeki hesaplama metotları ; Kimyasal bağlanmanın doğası; Çok elektron sistemi; Hartree-Fock Metodu; Yarıdeneyisel kuantum mekaniksel metotlar; Yoğunluk fonksiyoneli teoris; Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin uygulamaları

Ders Kaynakları

David S. Sholl and Janice A. Steckel Density Focional , Willey.
Density Functional Theory, John P. Perdew and Stefan Kurth, Springer-Verlag Berlin Heidelberg , 2003.

Dersin Yeterlilikleri ve Öğrenme Çıktıları

Dersi alan öğrenciler, yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temel kavramları hakkında temel bilgi birikimine sahip olacak.

VASP, CASTEP ve alternatif paket programlarını kullanarak kristal yapılar için bilgisayar uygulamaları yapabilecekler.

Yapılan uygulamaların sonucunda elde edilen verilerin kullanılarak makale haline dönüştürülmesi planlanmaktadır.





Haftalık Ders Planı			
Haftalar	Konular	Kaynaklar	Görevler
Hafta 1	Oryantasyon	<i>Ders bilgilendirme dosyası (AVESİS'te paylaşılabilecek)</i>	Ders ile ilgili bilgilendirme Kaynaklar ve uygulamada kullanılacak paket programlar hakkında bilgilendirme
Hafta 2	Kuantum Temel Bilgiler	<i>David S. Sholl and Janice A. Steckel Density Functional, Wiley.</i>	Kuantumsal düzlem dalga Schrödinger denklemi, Özdeğer, özfonksiyon, Hamiltonyen operatörü, Kuantumda otalama enerji
Hafta 3	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi'ne Giriş		Dalga fonksiyonunun kuantumda fiziksel karşılığı, DFT amacı, kullanım alanları Born-Oppenheimer yaklaşımı Hartree-Fock yaklaşımı (SCF iterasyon metodu)
Hafta 4	Schrödinger Denklemi'nin Çözümünden Kaçınma VASP temel dosyalarının tanıtımı		Hohenberg-Kohn yaklaşımı Kohn-Sham denklemleri Enerji fonksiyonelleri (GGA-LDA) Hibrit fonksiyoneller (B3LYP, HSE) INCAR, KPOINTS, POSCAR, POTCAR
Hafta 5	Basit Katılar için DFT Hesaplamaları Örgü sabitinin belirlenmesi/Faz Geçişleri		 ALİŞTIRMALAR
Hafta 6	DFT Hesaplamaları ile ilgili Temel Bilgiler Geometri Optimizasyonu		K-noktaları ve kesilim enerjisinin belirlenmesi ALİŞTIRMALAR
Hafta 7	Elastik Özellikler Elastik Sabitlerinin Bulunması		Makale literatür taraması, grafiklerin yorumlanması, hesaplamalar kısmının oluşturulması ALİŞTIRMALAR
Hafta 8	Elektronik Özellikler (Ara Sınav)		Makale literatür taraması, grafiklerin yorumlanması, hesaplamalar kısmının oluşturulması



	Elektronik Band Yapısı, Band Aralığı belirleme		ALIŞTIRMALAR
Hafta 9	Optik Özellikler		Makale literatür taraması, grafiklerin yorumlanması, hesaplamalar kısmının oluşturulması
	Optik Parametrelerinin Elde Edilmesi		ALIŞTIRMALAR
Hafta 10	Titreşim Frekanslarının DFT ile Hesaplanması		Makale literatür taraması, grafiklerin yorumlanması, hesaplamalar kısmının oluşturulması
	Fonon Grafiği Elde Edilmesi		ALIŞTIRMALAR
Hafta 11	Manyetik Özellikler		Makale literatür taraması, grafiklerin yorumlanması, hesaplamalar kısmının oluşturulması
	Magnetizasyon Parametrelerinin Hesaplanması		ALIŞTIRMALAR
Hafta 12	Yüzeyler için DFT Hesaplamaları		Makale literatür taraması, grafiklerin yorumlanması, hesaplamalar kısmının oluşturulması
			ALIŞTIRMALAR
Hafta 13	Makale yazımı, grafiklerin yorumlanması		
Hafta 14	Makale yazımı, grafiklerin yorumlanması		
Hafta 15	FİNAL		

Öğretim Yöntem ve Teknikleri

Düz anlatım, soru-cevap, gösterip yaptırma, işbirlikçi öğrenme yöntem ve teknikleri ile veri seti işleme, makale yazımı ve verilerden grafik çizimi ve yorumlama bilgi ve becerisini geliştirme.





Yarıyıl Çalışmaları	Sayısı	Katkı
Ara Sınav	1	% 30
Ödev	1	% 10
Uygulama	1	% 10
Yarıyıl Sonu Sınavı	1	% 50
Toplam :	4	% 100

Etkinlik	Sayısı	Süre	Toplam İş Yüğü (Saat)
Haftalık teorik ders saati	14	3	42
Haftalık uygulamalı ders saati	14	2	28
Okuma Faaliyetleri	14	3	42
İnternette tarama, kütüphane çalışması	10	4	40
Materyal tasarlama, uygulama	8	3	24
Rapor hazırlama	1	8	8
Sunu hazırlama ve sunum	1	11	11
Ara sınav ve ara sınava hazırlık	1	8	8
Toplam İş Yüğü			AKTS Kredisi : 7 203

