**İTÜ**

**lisansüstü DERS KATALOG FORMU**

**(graduate COURSE CATALOGUE FOR**M)

|  |  |
| --- | --- |
| **Dersin Adı** | **Course Name** |
|  Enerji ve Malzeme Bilimleri için Yoğun Madde Fiziğinde hesaplamalı yöntemler  | Computational Methods in Condensed Matter Physics for Energy and Materials Scientists  |
| **Kodu****(Code)** | **Yarıyılı****(Semester)** | **Kredisi****(Local Credits)** | **AKTS Kredisi****(ECTS Credits)** | **Ders Türü****(Course Type)** |
| EBT 617E | GüzFall  | 3.0 | 7.5 | DoktoraPhD. |  |  |  |  |  |  |
| **Bölüm / Program****(Department/Program)** | Enerji Bilim ve Teknoloji Anabilim Dalı / Enerji Bilim ve Teknoloji Lisansüstü ProgramıEnergy Science and Technology Division / Energy Science and Technology Graduate Program |
| **Dersin Türü****(Course Type)** | Seçmeli(Elective) | **Dersin Dili****(Course Language)** | Türkçe / İngilizceTurkish /English  |
| **Dersin İçeriği****(Course Description)***30-60 kelime arası* | Malzeme bilimleri ve enerji alanlarında kullanılan kuvantum malzemelerin anlaşılması ve modellenmesi ve yeni özelliklere sahip malzemelerin öngörülebilmesi amacıyla yoğun madde fiziği kapsamında geliştirilen yoğunluk fonksiyoneli kuramının öğrencilere tanıtılması ve basit uygulamaların yapılması. Derse katılacak olan öğrencilerde ağırlıklı olarak kuvantum mekaniği, kristallerin grup teorisi, katı hal fiziği, elektromanyetizma, istatistiksel mekanik, fizikte matematiksel metodlar ve klasik mekanik gibi fiziğin ilgi alanına giren konularda yeterlilik aranacaktır.  |
| To introduce the density functional theory as a tool in understanding , modelling and predicting the physical properties of the quantum materials in the context of materials science and the science of energy materials. To conduct basic applications using few physical materials Participating students must demonstrate sufficient understanding of quantum mechanics, group teory of cristals, solid state physics, electromagnetism, statistical mechanics, mathematical methods in physics and classical mechanics.  |
| **Dersin Amacı****(Course Objectives)***Maddeler halinde 2-5 adet* | 1. Öğrencilerde kuvantum malzeme bilimleri ve enerjide kuvantum verimli aygıtların modellenmesi konusunda alt yapı oluşturmak.
2. Öğrencilere enerji, mühendislik ve fizik alanlarında çoklu disiplinler arası tez ve araştırma olanağı sunmak.
 |
| 1. To built infrastructure in the direction of quantum materials science and efficient quantum devices in energy
2. To provide a multidisciplinary research opportunity for students between energy, engineering and physics.
 |
| **Dersin Öğrenme** **Çıktıları** **(Course Learning Outcomes)***Maddeler halinde 4-9 adet* | Bu dersi başarıyla tamamlayan lisansüstü öğrenciler aşağıdaki konularda bilgi, beceri ve yetkinlik kazanırlar: 1. Kuvantum mekaniğinin malzeme bilimleri ve enerji alanında uygulamalarında yetkinlik kazanmak.
2. Malzeme bilimi ve enerji malzemeleri alanlarında maddenin atomik yapısı ile ilgili ve ilk prensipler çerçevesinde hesap yapabilmek.
3. Yeni malzemeler ve enerji verimli aygıtlar önerme konusunda yeteneklerini geliştirmek.
4. Yüksek lisans ve doktora tezi araştırmalarına hazırlanmış olmak.
 |
| Graduate students completing this course with success, gain knowledge, ability and proficiency in the following subjects:1. Obtains proficiency in the applications of quantum mechanics in materials science and energy materials 2. Obtains proficiency in applying first principal calculations in materials science and energy quantum devices3. Develops research skills for proposing new materials and energy efficient devices4. Gets prepared to go into theses (M.S. and PhD) research in the field of quantum materials in energy  |

|  |  |
| --- | --- |
| **Ders Kitabı****(Textbook)** | 1. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Richard Martin
2. Computational Physics, J.M. Thjissen
 |
| **Diğer Kaynaklar****(Other References)** | Review article: The density functional formalism, its applications and prospects, R.O. Jones and O. Gunnarsson, Reviews of Modern Physics **61**, 689 (1989) |
| **Ödevler ve Projeler****(Homework & Projects)**  | Öğrencilerin konulara hakimiyetini sağlamak amacıyla dönem boyunca 7 adet teorik/nümerik ödev verilecektir.  |
| In order to ensure the grasp of the students on the subjects, at least 7 homeworks will be given throughout the term. |
| **Laboratuar Uygulamaları****(Laboratory Work)** | **-** |
| **-** |
| **Bilgisayar Kullanımı****(Computer Use)** | Mathematica, Matlab, Phyton, Fortran vb. yardımıyla yazılan sayısal programlar, Yoğunluk Fonksiyoneli kuramı üzerine yazılmış bilgisayar programları |
| Numerical programs written by using Mathematica, Fortran etc. and practice on computer programs written for solving problems in density functional theory |
| **Diğer Uygulamalar****(Other Activities)** |  |
|  |
| **Başarı Değerlendirme****Sistemi** **(Assessment Criteria)****Faaliyetler****(Activities)** | **Adedi****(Quantity)** |  | **Değerlendirmedeki Katkısı, %****(Effects on Grading, %)** |
| **Yıl İçi Sınavları****(Midterm Exams)** |  |  |
| **Kısa Sınavlar****(Quizzes)** |  |  |
| **Ödevler****(Homework)** | 7 | % 65 |
| **Projeler****(Projects)** |  |  |
| **Dönem Ödevi/Projesi****(Term Paper/Project)** |  |  |
| **Laboratuar Uygulaması****(Laboratory Work)** |  |  |
| **Diğer Uygulamalar****(Other Activities)** |  |  |
| **Final Sınavı****(Final Exam)** | 1 | % 35 |

**Ders Planı**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Hafta** | **Konular** | **Dersin** **Çıktıları** |
| **1** | Çok parçacıklı etkileşen sistemlerin Kuvantum Mekaniksel olarak ele alınması, kristal yapı | 1 |
| **2** | Yoğun madde fiziğinde homojen etkileşen elektron gazı  | 1 |
| **3** | Çekirdek-elektron Coulomb etkileşimi ve çok parçacıklı Schrodinger denklemi  | 1 |
| **4** | Korelasyon deşiği, s-p bağlantılı metallerde bağlı durumlar ve uyarılmalar  | 1 |
| **5** | Born-Oppenheimer (adyabatik) yaklaşıklığı ve Slater dalga fonksiyonu | 1 |
| **6** | Orbitallerin ve operatörlerin bilgisayarda sayısal olarak gösterilmesi  | 1,3 |
| **7** | Hartree ve Hartree-Fock yaklaşımları  | 1,2,3 |
| **8** | Lokal yoğunluk yaklaşımı  | 1,2,3 |
| **9** | Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramına giriş ve Hohenberg-Kohn teoremi | 1,2,3 |
| **10** | Kohn-Sham Kuramı ve değiş-tokuş korelasyonlarına giriş  | 1,2,3,4 |
| **11** | Yoğunluk Fonksiyoneli kuramında spin ve manyetizma  | 1,2,3,4 |
| **12** | Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramında kullanılan ortogonal taban setleri | 1,2,3,4 |
| **13** | Pseudo-potansiyeller ve pseudo dalga fonksiyonları ve değiş-tokoş korelasyon modelleri  | 1,2,3,4 |
| **14** | Değişik malzemelerde bilgisayarda yoğunluk fonksiyoneli uygulamaları  | 1,2,3,4 |

**COURSE PLAN**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Weeks** | **Topics** | **Course Outcomes** |
| **1** | Quantum Mechanical treatment of many particle interacting systems, crystal structure | 1 |
| **2**  | Homogeneous electron gas problem in condensed matter physics | 1 |
| **3** | Nucleus-electron Coulomb interaction and many fermion Schrodinger equation | 1 |
| **4** | Correlation hole, bound states and excitations in s-p bound metals  | 1 |
| **5** | Born-Oppenheimer (adiabatic) approximation , Slter wave function | 1 |
| **6** | Numerically representing the orbitals and the operators  | 1,3 |
| **7** | Hartree and Hartree-Fock approximations | 1,2,3 |
| **8** | Local Density Approximation  | 1,2,3 |
| **9** | Introduction to Density Functional Theory and Hohenberg-Kohn Theorem | 1,2,3 |
| **10** | Kohn-Sham formalism and introduction to exchange correlations  | 1,2,3,4 |
| **11** | Spin and magnetism in density functional theory  | 1,2,3,4 |
| **12** | Orthogonal basis sets in Density Functional Theory | 1,2,3,4 |
| **13**  | Pseudo-potentials, pseudo-wave-functions and models of exchange correlation  | 1,2,3,4 |
| **14** | Compuer applications of the density functional theory for various materials  | 1,2,3,4 |

## Dersin “Enerji Bilim ve Teknoloji Doktora Programı”yla İlişkisi

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | **Programın mezuna kazandıracağı bilgi, beceri ve yetkinlikler (programa ait çıktılar)** | **Katkı Seviyesi** |
| **1** | **2** | **3** |
| **i.** | Yüksek lisans yeterliliklerine dayalı olarak, enerji alanındaki güncel ve ileri düzeydeki bilgileri özgün düşünce ve/veya araştırma ile uzmanlık düzeyinde geliştirip, derinleştirerek, alanına yenilik getirecek özgün tanımlar oluşturup, disiplinlerarası etkileşimi kavrayabilme; yeni ve karmaşık fikirleri analiz, sentez ve değerlendirmede uzmanlık gerektiren bilgileri kullanarak özgün sonuçlara ulaşabilme (*bilg*i). |  |  | + |
| **ii.** | Enerji alanındaki yeni bilgileri sistematik bir yaklaşımla değerlendirip kullanarak, yenilik getiren, bir düşünce, yöntem, tasarım ve/veya uygulama geliştirebilme ya da bilinen bir düşünce, yöntem, tasarım ve/veya uygulamayı farklı bir alana uygulayabilme, özgün bir konuyu araştırıp, kavrayarak tasarlayabilme, uyarlayabilme ve uygulayarak yeni ve karmaşık düşüncelerin eleştirel analizini, sentezini ve değerlendirmesini yapıp çalışmalarında araştırma yöntemlerini kullanabilmede üst düzey beceriler kazanmış olma (*beceri*). |  |  | + |
| **iii.** | Enerji alanına yenilik getiren, yeni bir düşünce, yöntem, tasarım ve/veya uygulama geliştiren ya da bilinen bir düşünce, yöntem, tasarım ve/veya uygulamayı enerji alanına uygulayan özgün bir çalışmayı bağımsız olarak gerçekleştirerek, enerji alanındaki ilerlemeye katkıda bulunup, en az birer adet bilimsel makaleyi ulusal ve uluslararası hakemli dergilerde yayınlayarak bilginin sınırlarını genişletebilme *(Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği).* |  |  | + |
| **iv.** | Özgün ve disiplinlerarası sorunların çözümlenmesini gerektiren ortamlarda liderlik yaparak yaratıcı ve eleştirel düşünme, sorun çözme ve karar verme gibi üst düzey zihinsel süreçleri kullanarak enerji alanı ile ilgili yeni düşünce ve yöntemler geliştirebilme *(Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği). (Öğrenme Yetkinliği).* |  |  | + |
| **v.** | Sosyal ilişkileri ve bu ilişkileri yönlendiren normları eleştirel bir bakış açısıyla inceleyebilme, geliştirebilme ve gerektiğinde değiştirmeye yönelik eylemleri yönetebilme *(İletişim ve Sosyal Yetkinlik).*  | + |  |  |
| **vi.** | Bir yabancı dili ileri düzeyde kullanarak yazılı, sözlü ve görsel iletişim kurup tartışarak, uluslararası platformlarda, uzman kişiler ile enerji alanındaki konuların tartışılmasında özgün görüşlerini savunabilme ve yetkinliğini gösteren etkili bir iletişim kurabilme *(İletişim ve Sosyal Yetkinlik).*  | + |  |  |
| **vii.** | Enerji alanındaki bilimsel, teknolojik sosyal veya kültürel ilerlemeleri tanıtarak, yaşadığı toplumun bilgi toplumu olma ve bunu sürdürebilme sürecine katkıda bulunarak, sorunların çözümünde stratejik karar verme süreçlerini de kullanıp, işlevsel etkileşim kurarak toplumsal, bilimsel, kültürel ve etik sorunların çözümüne katkıda bulunabilme ve bu değerlerin gelişimini destekleyebilme *(Alana Özgü Yetkinlik).* | + |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |

 **1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam**

## Relationship between the Course and “Energy Science and Technology PhD. Program”

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | **Program Outcomes** | **Level of Contribution** |
| **1** | **2** | **3** |
| **i.** | By means of developing and intensifying the current and high level knowledge with the use of original thinking and/or research processes and in a specialistic level, based upon the competency in MS level, grasping the interdisciplinary interaction related to energy area and reaching original results by using this specialistic knowledge in analyzing, synthesizing and evaluating new and complex ideas (*knowledge*). |  |  | + |
| **ii.** | By means of the ability to evaluate and use new information in the energy area with a systematical approach, developing a new idea method, design and/or application which brings about innovation; or, applying a conventional idea, method, design and/or application to a different environment; researching, grasping and designing and applying an original subject, and also by the ability to critically analyze, synthesize and evaluate new and complex ideas, acquiring the most developed skills about using the research methods in studies within the energy area (*skill*). |  |  | + |
| **iii.** | By means of contributing to the progress in the energy area by independently carrying out a study which uses a new idea, method, design and/or application which brings about innovation in the energy area; or, applying a conventional idea, method, design and/or application to a different environment, expending the limits of knowledge by publishing at least one scientific article in a national and/or international peer reviewed journal (*competence to work independently and take responsibility*). |  |  | + |
| **iv.** | By means of fulfilling the leader role in the environment where solutions are sought for the original and interdisciplinary problems, developing energy area related new ideas and methods by making use of high-level intellectual processes such as creative and critical thinking, problem solving and decision making (*competence to work independently and take responsibility, learning competence*). |  |  | + |
| **v.** | Ability to see and develop social relationships and the norm directing these relationships with a critical look and ability to direct the actions to change these when necessary. (*Communication and social competency*). | + |  |  |
| **vi.** | By means of proficiency in a foreign language in advance level and establishing written, oral and visual communication and developing argumentation skills with that language, the ability to establish effective communication with expert in the international environment to discuss the area related subjects and to defend original opinions, showing ones competency in the energy area (*communication and social competency*). | + |  |  |
| **vii.** | By means of contributing to the society state and progress towards being an information society by announcing and promoting the technological, scientific and social developments in energy area, and ability to establish effective communication in the solving of problems faced in that area by using strategic decision making processes, contributing to the solution of area related social, scientific, cultural and ethical problems and promoting development of these values (area specific competency). | + |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |

**1: Little, 2. Partial, 3. Full**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ***Düzenleyen (Prepared by)***Prof. Tuğrul Hakioğlu | **Tarih (Date)**Eylül 2020 | İmza (Signature) |