



AYDIN ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ DERS BİLGİ FORMU

Dersin Adı		Yoğunluk Fonksiyonel Teori							
Ders Kodu		FZK530		Ders Düzeyi		Yüksek Lisans			
AKTS Kredi	6	İş Yüğü	150 (Saat)	Teori	3	Uygulama	0	Laboratuvar	0
Dersin Amacı		Öğrencilerin yoğunluk fonksiyoneli teorisi ve katıhal fiziğı temelleri hakkında bilgi edinmesi							
Özet İçeriğı		YFT'nin temelleri, temel kuantum mekaniğı özeti, YFT'nin tarihsel kaynağı, düzlem dalga yöntemi							
Staj Durum									
Öğretim Yöntemleri		Anlatım (Takrir), Tartışma, Bireysel Çalışma, Problem Çözme							
Dersi Veren Öğretim Elemanı(ları)			Prof. Dr. Ethem AKTÜRK						

Ölçme ve Değerlendirme Araçları

Araç	Adet	Oran (%)
Ara Sınav (Vize)	1	20
Dönem Sonu Sınavı (Final)	1	30
Kısa Sınav (Quiz)	2	8
Derse Katılım (Performans)	14	28
Ödev	14	14

Ders Kitabı / Önerilen Kaynaklar

1	Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods, Richard Martin
2	Methods of Electronic Structure Calculations Micheal Springborg

Hafta	Haftalara Göre Ders Konuları	
1	Teorik	Temel Kavramlar: varyasyon prensibi, katıhal kavramları, çok cisim Hamiltoniyeni, Born-Oppenheimer yaklaşımı
	Ön Hazırlık	Micheal Springborg, 2000. Methods of Electronic Structure Calculations. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd. (p1-66)
2	Teorik	Hartree-Fock yaklaşımı
	Ön Hazırlık	Micheal Springborg, 2000. Methods of Electronic Structure Calculations. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd. (p82-109)
3	Teorik	Yoğunluk cinsinden hamiltoniyen, Hohenberg-Kohn teoremi, Kohn-Sham formalizmi
	Ön Hazırlık	Micheal Springborg, 2000. Methods of Electronic Structure Calculations. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd. (p123-144)
4	Teorik	Değiş ve dokuş enerjisi : LDA ve GGA yaklaşımları
	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press (p152-170)
5	Teorik	Sanki potansiyeller
	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press (p152-170)
6	Teorik	Düzlem dalga formalizmi
	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press (p236-241)
7	Teorik	Kohn-Sham sisteminin çözümü için kendiliğinden uyum çözümü için püf noktalar
	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press (p119-150)
8	Ara Sınav (Vize)	Arasınav
9	Teorik	Kuvvet, basınç ve Hellman-Feynman teoremi
	Ön Hazırlık	Micheal Springborg, 2000. Methods of Electronic Structure Calculations. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd. (p298-309)
10	Teorik	İyonların incelenmesi: Ewald toplamı
	Ön Hazırlık	Micheal Springborg, 2000. Methods of Electronic Structure Calculations. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd. (p434-450)
11	Teorik	Örneklerle YFT uygulamaları, PWSCF



11	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press(p365-380)
12	Teorik	Seçilmiş konular
	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press(p380-420)
13	Teorik	Değiş-Tokuş fonksiyonelleri
	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press(p186-200)
14	Teorik	Yoğunluk fonksiyoneli, Pertürbasyon teorisi
	Ön Hazırlık	Richard M. Martin, 2004. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge University Press(p186-200)
15	Teorik	Fonon spektrumu
	Ön Hazırlık	Micheal Springborg, 2000. Methods of Electronic Structure Calculations.West Sussex: John Wiley & Sons Ltd. (p387-400)
16	Dönem Sonu Sınavı (Final)	Final Sınavı

Dersin Öğrenme, Öğretme ve Değerlendirme Etkinlikleri Çerçevesinde İş Yükü Hesabı (Ortalama Saat)

Etkinlik	Adet	Ön Hazırlık	Etkinlik Süresi	Toplam İş Yükü
Kuramsal Ders	14	2	3	70
Ödev	14	2	0,5	35
Kısa Sınav	2	3	1	8
Ara Sınav	1	12	3	15
Dönem Sonu Sınavı	1	19	3	22
Toplam İş Yükü (Saat)				150
Yuvarla [Toplam İş Yükü (saat) / 25*] = AKTS Kredisi				6

*25 saatlik iş yükü 1 AKTS olarak kabul edilmektedir.

Dersin Öğrenme Çıktıları

1	Kimyada ve fizikte simetrinin rolünü anlamalı ve grup tablolarını kullanabilmeli
2	Enerji seviyelerini ve spektrumunu, moleküler orbitalleri ve moleküler yapıyı nasıl hesaplayacağını öğrenmiş olmalı
3	Simetri yardımıyla titreşim ve elektronik spektrumunu anlamalı ve gerçek spektrumla ilişkisini kurabilmeli
4	Yoğunluk cinsinden sistemin Hamiltoniyenini yazabilmeli ve her bir enerji teriminin anlamını bilmeli
5	Varyasyon yöntemi ile taban durum enerjisini hesaplayabilmeli
6	Düzlem dalga kullanılarak yapılan çözümlerin avantajlarını ve dezavantajlarını bilmeli
7	Kuvvet, basınç ve Hellman-Feynman teoreminin yoğunluk fonksiyoneliinde nasıl kullanıldığı hakkında bilgi sahibi olmalı

Program Çıktıları (Fizik Yüksek Lisans Programı)

1	Temel fizik kavramlarını derinlemesine anlayabilmeli ve kendi başına uygulayabilmeli
2	Fiziğin yasaları arasındaki ilişkiyi ve bütünlüğü görebilmeli ve problem çözmede ve çözüm önermede kullanabilmeli
3	Klasik, görel ve kuantum fiziğinin temel prensiplerini bilebilmeli ve problemlerin çözümünde kullanabilmeli
4	Fiziğin belli bir konusunda araştırma yapabilmeli
5	Fizik ile ilgili yaptığı araştırmaları raporlar ve makale halinde yazabilmeli bulgularını bilimsel toplantılarda sunabilmeli
6	Karmaşık problemlerin fizikteki hangi basit kavramlarla ilişkili olduğunu söyleyebilmeli ve anlatabilmeli
7	Fiziksel problemlerin çözümlerinde bilgisayardan yararlanabilmeli
8	Fizikte teori ile deney arasındaki ilişkiyi kurabilmeli, deneysel çalışmışsa teorisini, teorik çalışmışsa bunun hangi deneylerle ilişkili olduğunu veya deneyin yapılıp yapılmadığını anlatabilmeli

Program ve Öğrenme Çıktıları İlişkisi 1:Çok Düşük, 2:Düşük, 3:Orta, 4:Yüksek, 5:Çok Yüksek

	ÖÇ1	ÖÇ2	ÖÇ3	ÖÇ4	ÖÇ5	ÖÇ6	ÖÇ7
PÇ1	3	3	3	4	3	3	3
PÇ2	4	3	4	4	3	4	3
PÇ3	3	3	3	3	4	4	5
PÇ4	2	2	2	2	3	3	4
PÇ5	2	2	2	2	2	2	3
PÇ6	3	3	2	3	3	1	3
PÇ7	1	1	1	3	1	3	3



PÇ8	2	2	2	2	3	3	2
-----	---	---	---	---	---	---	---

