

İTÜ
LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU
(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)

| Dersin Adı | | Course Name | | |
|--|--|--|---------------------------------------|---------------------------------|
| Hesaplama Nanoyapı Fiziği | | Computational Nanostructure Physics | | |
| Kodu (Code) | Yarıyıl (Semester) | Kredisi (Local Credits) | AKTS Kredisi (ECTS Credits) | Ders Seviyesi (Course Level) |
| HBM608E | Bahar (Spring) | (3+0) Kredili | 7.5 | Doktora (Ph.D.) |
| Lisansüstü Program (Graduate Program) | Hesaplama Bilim ve Mühendislik Yüksek Lisans ve Doktora Programı (Computational Science and Engineering Masters and PhD Programme) | | | |
| Dersin Türü (Course Type) | Seçime Bağlı (Elective) | Dersin Dili (Course Language) | İngilizce/Türkçe (English/Turkish) | |
| Dersin İçeriği (Course Description) <i>30-60 kelime arası</i> | Sırada diferansiyel denklemlerin çözümünde uyarlamalı Runge-Kutta Yöntemi, Schrödinger denklemleri, eğri uydurma, spektral çözümleme, difüzyon denklemleri, çeşitli özfonksiyonlar, dik çokterimliler, sayısal integrasyon, kuvantum pertürbasyon ve varyasyon yöntemleri, Monte Carlo yöntemi, kuvantum ve varyasyon Monte Carlo yöntemleri, yoğunluk fonksiyonel teori, sıkı bağlanım yöntemi | | | |
| | Adaptive Runge-Kutta method, Schrödinger equation, curve fitting, Fourier transform, diffusion equation, various eigenfunctions, orthogonal polynomials, numeric integration, quantum perturbation and variation methods, Monte Carlo method, Quantum and variational Monte Carlo techniques, Density Functional Theory, Tight-Binding method | | | |
| Dersin Amacı (Course Objectives) <i>Maddeler halinde 2-5 adet</i> | <ol style="list-style-type: none">Günümüz teknolojisinde nanoyapıların önemiSayısal metotlarNanometre seviyesindeki sistemlerin atomik ve elektronik yapılarının teorik ve hesaplama metotlarıyla incelenmesi | | | |
| | <ol style="list-style-type: none">The importance of nanostructures in the present technologyNumerical techniquesTheoretical and computational methods to deal with the atomic and electronic structure of systems at nanometer scale | | | |
| Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes) <i>Maddeler halinde 4-9 adet</i> | Bu dersi başarıyla tamamlayan yüksek lisans/doktora öğrencileri aşağıdaki konularda bilgi, beceri ve yetkinlik kazanırlar; | | | |
| | <ol style="list-style-type: none">Uyarlamalı Runge-Kutta Yöntemini öğrenmeSchrödinger denkleminin çözümüNanoyapı fiziğinde Veri Çözümlemesinin nasıl yapılabileceğiNanoyapı fiziğinde türevli denklemlerin sayısal çözümüNanoyapı fiziğinde özel fonksiyonlar ve sayısal integrasyonun öğrenilmesiMonte Carlo yönteminin öğrenilmesiKuantum ve varyasyon Monte Carlo yöntemlerinin öğrenilmesiYoğunluk Fonksiyonel Teorisinin öğrenilmesiSıkı Bağlanım metodunun öğrenilmesi | | | |
| | M.Sc./Ph.D. students who successfully pass this course gain knowledge, skill and competency in the following subjects; | | | |
| | <ol style="list-style-type: none">Learning Adaptive Runge-Kutta methodNumerical solution of Schrödinger equationLearning data analysis in nanostructure physicsNumerical solutions of partial differential equations in nanostructure physicsLearning special functions and numerical integration in nanostructure physicsLearning how to use Monte Carlo methodLearning Quantum and variational Monte Carlo techniquesLearning the Density Functional TheoryLearning the Tight Binding Method | | | |

| | | | |
|---|--|-----------------------------|--|
| Kaynaklar (References) <i>En önemli 5 adedini belirtiniz</i> | 1. H. Markoç, H. Ünlü and G. Ji , Principles and Technology Modulation Doped Fets, Vols I & II John Wiley (1991). 2. R. H. Landau and M. J. Paez , Computational Physics: Problem Solving with Computers, John Wiley & Sons, New York, 1997. 3. A. L. Garcia , Numerical Methods in Physics, 2 nd edition, prentice hall, 2000. 4. N. J. Giordano , Computational Physics, Prentice Hall (1997). | | |
| Ödevler ve Projeler (Homework & Projects) | 7 Ödev | | |
| | 7 Homeworks | | |
| Laboratuar Uygulamaları (Laboratory Work) | | | |
| Bilgisayar Kullanımı (Computer Use) | Octave, Fortran, C/C++, Python, Quantum Espresso | | |
| | Octave, Fortran, C/C++, Python, Quantum Espresso | | |
| Diğer Uygulamalar (Other Activities) | | | |
| Başarı Değerlendirme Sistemi (Assessment Criteria) | Faaliyetler (Activities) | Adedi* (Quantity) | Değerlendirmedeki Katkısı, % (Effects on Grading, %) |
| | Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams) | 1 | 25 |
| | Kısa Sınavlar (Quizzes) | | |
| | Ödevler (Homework) | 7 | 35 |
| | Projeler (Projects) | | |
| | Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project) | | |
| | Laboratuar Uygulaması (Laboratory Work) | | |
| | Diğer Uygulamalar (Other Activities) | | |
| | Final Sınavı (Final Exam) | 1 | 40 |

DERS PLANI

| Hafta | Konular | Dersin Çıktıları |
|-------|---|------------------|
| 1 | Bilimsel Hesaplama I ve II derslerindeki bazı gerekli konuların hızlı bir anımsatılması | 1 |
| 2 | Sırada diferansiyel denklemlerin çözümünde uyarlamalı Runge-Kutta Yöntemi ve fiziksel uygulamaları (Basit Sarkaç ve Kepler sorunu). | 1 |
| 3 | Nanoyapı fiziğinde Schrödinger denkleminin çözümü | 2 |
| 4 | Nanoyapı fiziğinde Veri Çözümlemesi: eğri uydurma, spektral çözümleme (ayrık ve hızlı Fourier dönüşümü). | 3 |
| 5 | Nanoyapı fiziğinde türevli denklemlerin sayısal çözümü: Difüzyon denklemi, relaksasyon ve spektral yöntemler | 4 |
| 6 | Nanoyapı fiziğinde özel fonksiyonlar ve sayısal integrasyon: Çeşitli özfonksiyonlar, dik çokterimliler | 5 |
| 7 | Bessel fonksiyonları, Romberg yinelemesi, Gauss kuvadraturü, Kuantum pertürbasyon ve varyasyon yöntemleri | 5 |
| 8 | Monte Carlo yöntemi: Verilen bir dağılım için seçkisiz değişken üretme, algoritma geliştirme | 6 |
| 9 | Kuantum ve Varyasyon Monte Carlo yöntemleri I | 7 |
| 10 | Kuantum ve Varyasyon Monte Carlo yöntemleri II | 7 |
| 11 | Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi I | 8 |
| 12 | Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi II | 8 |
| 13 | Sıkı Bağlanım Yöntemi I | 9 |
| 14 | Sıkı Bağlanım Yöntemi II | 9 |

COURSE PLAN

| Weeks | Topics | Course Outcomes |
|-------|--|-----------------|
| 1 | A rapid review of some necessary topics in the courses of Scientific Computation I and II | 1 |
| 2 | Adaptive Runge-Kutta method, and its physical applications (Simple pendulum, Kepler problem) | 1 |
| 3 | Numerical solution of Schrödinger equation in nanostructure physics | 2 |
| 4 | Data analysis in nanostructure physics: curve fitting, spectral analysis (discrete and fast Fourier Transforms) | 3 |
| 5 | Numerical solutions of partial differential equations in nanostructure physics: Diffussion equation, relaxation and spectral methods | 4 |
| 6 | Special functions and numerical integration in nanostructure physics: Various eigenfunctions, orthogonal polynomials | 5 |
| 7 | Bessel functions, Romberg iteration, Gauss quadrature, quantum perturbation, and variation methods | 5 |
| 8 | Monte Carlo method: Generating random variables for a specified distribution, algortihm development | 6 |
| 9 | Quantum and variational Monte carlo techniques I | 7 |
| 10 | Quantum and variational Monte carlo techniques II | 7 |
| 11 | Density Functional Theory I | 8 |
| 12 | Density Functional Theory II | 8 |
| 13 | Tight Binding Method I | 9 |
| 14 | Tight Binding Method II | 9 |

Dersin Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programıyla İlişkisi

| | Programın mezuna kazandıracığı bilgi, beceri ve yetkinlikler (programa ait çıktılar) | Katkı Seviyesi | | |
|-------|---|----------------|---|---|
| | | 1 | 2 | 3 |
| i. | Yüksek lisans düzeyi yeterliliklerine dayalı olarak, Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programındaki bilgilerini uzmanlık düzeyinde geliştirebilme ve derinleştirebilme (yeterli bilgi birikimi) (<i>bilgi</i>). | | | X |
| ii. | Alanının ilişkili olduğu disiplinler arası etkileşimi kavrayabilme (<i>bilgi</i>). | | | X |
| iii. | Alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanabilme(<i>beceri</i>). | | | X |
| iv. | Alanında edindiği bilgileri farklı disiplin alanlarından gelen bilgilerle bütünleştirerek yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme (<i>beceri</i>). | | | X |
| v. | Alanını ile ilgili karşılaşılan sorunları araştırma yöntemlerini kullanarak çözümlenebilme (<i>beceri</i>). | | | X |
| vi. | Alanını ile ilgili uzmanlık gerektiren bir çalışmayı bağımsız olarak yürütebilme (<i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i>). | | X | |
| vii. | Alanı ile ilgili uygulamalarda karşılaşılan ve öngörülemez karmaşık sorunların çözümü için yeni stratejik yaklaşımlar geliştirebilme ve sorumluluk alarak çözüm üretebilme (<i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i>). | X | | |
| viii. | Alanındaki güncel gelişmeleri ve kendi çalışmalarını, nicel ve nitel veriler ile destekleyerek, alanındaki ve alan dışındaki gruplara, yazılı, sözlü ve görsel olarak sistemli biçimde aktarabilme (<i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i>). | | | |
| ix. | Bir yabancı dili en az Avrupa Dil Portföyü B2 genel düzeyinde kullanarak sözlü ve yazılı iletişim kurabilmek (<i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i>). | | | |
| x. | Alanının gerektirdiği düzeyde bilgisayar yazılımı ile birlikte bilişim ve iletişim teknolojilerini ileri düzeyde kullanabilme (<i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i>). | | | |
| xi. | Alanı ile ilgili verilerin toplanması, yorumlanması, uygulanması ve duyurulması aşamalarında toplumsal, bilimsel, kültürel ve etik değerleri gözeten denetleyebilme ve bu değerleri öğretebilme (<i>Alana Özgü Yetkinlik</i>). | | | |
| xii. | Alanı ile ilgili konularda strateji, politika ve uygulama planları geliştirebilme ve elde edilen sonuçları, kalite süreçleri çerçevesinde değerlendirebilme (<i>Alana Özgü Yetkinlik</i>). | | X | |
| xiii. | Alanında özümstedikleri bilgiyi, problem çözme ve/veya uygulama becerilerini, disiplinlerarası çalışmalarda kullanabilme (<i>Alana Özgü Yetkinlik</i>). | | X | |
| xiv. | Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programında, kendi çalışmalarını, alanındaki uluslararası platformlarda, yazılı, sözlü ve/veya görsel olarak aktarabilme (<i>Alana özgü yetkinlik</i>). | | | |

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

Relationship between the Course and Computational Science and Engineering Program

| | Program Outcomes | Level of Contribution | | |
|-------|---|-----------------------|---|---|
| | | 1 | 2 | 3 |
| i. | Developing and intensifying knowledge in the Computational Science and Engineering program's area, based upon the competency in the M.S. level (sufficient knowledge) (<i>knowledge</i>). | | | X |
| ii. | Grasping the inter-disciplinary interaction related to one's area (<i>knowledge</i>). | | | X |
| iii. | The ability to use the expert-level theoretical and practical knowledge acquired in the area (<i>skill</i>). | | | X |
| iv. | Interpreting and forming new types of knowledge by combining the knowledge from the area and the knowledge from various other disciplines (<i>skill</i>). | | | X |
| v. | Solving the problems faced in the area by making use of the research methods (<i>skill</i>). | | | X |
| vi. | The ability to carry out a specialistic study related to one's area independently. (<i>Competence to work independently and take responsibility</i>). | | X | |
| vii. | Developing new strategic approaches to solve the unforeseen and complex problems arising in the practical processes of one's area and coming up with solutions while taking responsibility (<i>Competence to work independently and take responsibility</i>). | X | | |
| viii. | Systematically transferring the current developments in the area and one's own work to other groups in and out of the area; in written, oral and visual forms (<i>Communication and Social Competency</i>). | | | |
| ix. | Proficiency in a foreign language –at least European Language Portfolio B2 Level- and establishing written and oral communication with that language (<i>Communication and Social Competency</i>). | | | |
| x. | Using the computer software together with the information and communication technologies efficiently and according to the needs of the area (<i>Communication and Social Competency</i>). | | | |
| xi. | Paying regard to social, scientific, cultural and ethical values during the collecting, interpreting, practicing and announcing processes of the area related data and the ability to teach these values to others (<i>Area Specific Competency</i>). | | | |
| xii. | Developing strategy, policy and application plans concerning the subjects related to the area and the ability to evaluate the end results of these plans within the frame of quality processes (<i>Area Specific Competency</i>). | | X | |
| xiii. | Using the knowledge and the skills for problem solving and/or application (which are processed within the area) in inter-disciplinary studies (<i>Area Specific Competency</i>). | | X | |
| xiv. | In the Computational Science and Engineering program, the ability to present one's own work within the international environments orally, visually and in written forms (<i>Area Specific Competency</i>). | | | |

1: Little, 2. Partial, 3. Full

NOT-1: Ders ile ilgisi olmayan çıktıların boş bırakılması gerekmektedir.
NOT-2: Yukarıdaki tabloda işaretlenen katkı seviyeleri tüm programlar için minimum seviyelerdir. Ancak ilgili programın yapısına göre katkı seviyeleri artırılabilir.

| | | |
|--|---------------------|-------------------------|
| <u>Düzenleyen (Prepared by)</u> Doç. Dr. Adem Tekin | <u>Tarih (Date)</u> | <u>İmza (Signature)</u> |
|--|---------------------|-------------------------|