

KATILARIN ELEKTRONİK YAPISININ BENZETİŞİMİ

**Linuxte Temel İşlemler ve Editör Kullanımı,
Yoğun Madde Fiziğinde Kullanılan
Programlara Giriş**

Doç.Dr. Yeşim Moğulkoç

E-posta: mogulkoc@eng.ankara.edu.tr

Tel: 0312 2033550

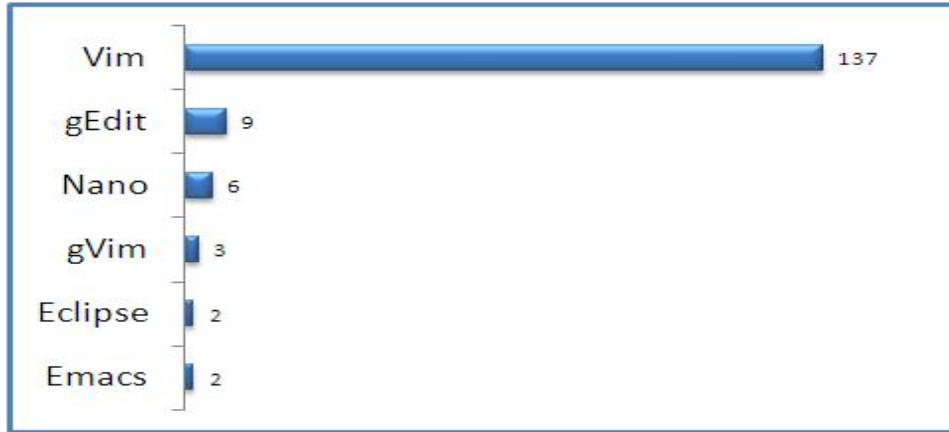
Hafta	DERS İÇERİĞİ
1.	Malzeme Bilimi: Temel Kavramlar
2.	İşletim Sistemleri, Temel Linux Komutlarının Uygulamalı Öğretilmesi ve Yoğun Madde Fiziğinde Kullanılan Yazılımlar
3.	Kristal Fiziği: Temel Kavramlar-1
4.	Kristal Fiziği: Temel Kavramlar-2
5.	Katıların Bant Teorisi
6.	Elektronik Bant Yapıları: İletkenlik durumları
7.	VİZE SINAVI

Hafta	DERS İÇERİĞİ
8.	Durum Yoğunlukları ve Fermi Yüzeyleri
9.	Katıların Elastik Özellikleri: Elastik sabitleri, Young, Shear Modülleri..
10.	Katıların Optik Özellikleri: Dielektrik sabitleri, Yansıma, soğurma, sönüm katsayıları, kırılma indisi
11.	Katıların Titreşimsel Özellikleri: Fononlar
12.	Kristal yapının programlama yardımıyla kurulması
13.	Katının elektronik bant yapısının programlama yardımıyla çizdirilmesi
14.	FİNAL SINAVI

Editör Kullanımı

- Nano/Pico
- Vi/Vim
- Emacs vb.

pek çok text editörü kullanımı mevcuttur.



Top 6

Linux'te indirme işlemi

Linux'ta UBUNTU kullanıyorsak; bir şey yüklemek istediğimizde komut satırından **sudo apt-get install *ne_istiyorsak_adi*** yazılarak indirilebilir.

Gerekli birçok tool için;

sudo apt-get install build-essential

Emacs text editörü

Bu text editörünü yüklemek için;
sudo apt-get install emacs

Yükleme bittikten sonra komut satırından emacs yazıldığında emacs text editörü açılır.



Yoğun Madde Fiziğinde Kullanılan Yöntemler

Ab initio Methods (First Principles): Basics of Density Functional Theory, Local Density Approximation (LDA), Generalized Gradient Approximation (GGA), and methods going beyond the standard approach, Kohn-Sham Method, Pseudopotential and LAPW Methods, survey of available numerical codes

Semiempirical Methods for electronic structure calculations: Tight-Binding Method, Methods for very large systems [$O(N)$ approach]

Principles of Molecular Dynamics: Ab-initio molecular dynamics (Car-Parrinello method), empirical methods and coarse-graining

Monte Carlo Methods: stochastic and Markov processes, ergodicity, algorithms for Monte Carlo simulations

Yoğun Madde Fiziğinde Kullanılan Yöntemlere Dayalı Yazılımlar

- ◆ VASP
- ◆ QUANTUM ESPRESSO
- ◆ SIESTA
- ◆ ABINIT
- ◆ SPRKKR, XBAND

- ❖ X-CRYSDEN
- ❖ VESTA ...

VASP (Vienna Simulation Method)

VASP Nedir?

VASP INPUTS

- POSCAR
- INCAR
- POTCAR
- KPOINTS

2D Bravais lattices

THANK YOU.