

Dersin Adı-Kodu: İLT 533 YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ I					Programın Adı: İLERİ TEKNOLOJİLER ANABİLİM DALI				
Yarıyıl	Eğitim ve Öğretim Yöntemleri							Krediler	
	Teori	Uyg	Lab.	Proje/Alan Çalışması	Dönem Ödevi	Diğer	Toplam	Kredi	AKTS Kredisi
1-2	42				30	76	188	3	7.5
Ders Dili	Türkçe								
Zorunlu/ Seçmeli	Seçmeli								
Önşartlar	Yok								
Dersin İçeriği	Kuantum mekaniksel hesaplamalarda temel kavramalar. Hohenberg-Kohn Teoremi.Kohn-Sham denklemleri.Değiş-tokuş enerjisi.Korelasyon enerjisi.Kohn-Sham özdeğerleri.Yaklaşımlar.Yerel yoğunluk yaklaşımı.Spin yoğunluk fonksiyonel teorisi.Zaman bağımlı yoğunluk fonksiyonel teorisi.Yazılım Araçları. Bazı organik moleküllerde teorik hesaplamalarının yapılması. Hesaplamaların analizlerinin yapılması.								
Dersin Amacı	Kuantum mekaniksel yaklaşımların başarılı ve popüler bir uygulaması olan yoğunluk fonsiyonel teorisinin dayandığı temel ilkelerin öğretilmesi, Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile yapılan teorik hesaplamalar için uygun yazılım araçlarının kullanımının öğretilmesi.								
Öğrenme Çıktıları ve Yeterlilikler	Teori ile uygulamalar arasındaki ilişkiyi kurabilme, disiplinler arası çalışma yapabilme, güncel konular hakkında bilgi kazanma ve çalışmaları sözlü ve yazılı sunma becerisini kazanmak.								
Ders Kitabı ve/veya Kaynaklar	1. D. S. Sholl, J. A. Steckel “Density Functional Theory” John Wiley & Sons (2009) 2. J. S. Foresman, E. Frisch ”Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods” Gaussian, Inc., Second Edition. 3. M. I. J. Probert “Computational Quantum Mechanins” 4. K. Capelle “A Bird’s Eye View of Density-Functional Theory”								
Değerlendirme Ölçütleri								Varsa (X) olarak işaretleyiniz	Yüzde (%)
	Ara Sınavlar							X	30
	Kısa Sınavlar								
	Ödevler							X	20
	Projeler								
	Dönem Ödevi							X	10
	Laboratuvar								
	Diğer								
Dönem Sonu Sınavı							X	40	
Ders Sorumluları	Yrd. Doç. Dr. Nurgül SEFEROĞLU								
Hafta	Konular								
1	Temel kavramlar ve Schrödinger Denklemi								
2	Fonksiyoneller ve Türevleri								
3	Hohenberg-Kohn Teoremi								
4	Kohn-Sham denklemleri								
5	Değiş-tokuş enerjisi								
6	Korelasyon enerjisi								
7	Kohn-Sham özdeğerleri								
8	Yaklaşımlar								
9	Yerel yoğunluk yaklaşımı								
10	Spin yoğunluk fonksiyonel teorisi								
11	Zaman bağımlı yoğunluk fonksiyonel teorisi								
12	Yazılım Araçları								
13	Organik moleküllerde teorik hesaplamalarının yapılması								
14	Hesaplamaların analizlerinin yapılması								