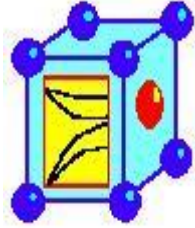
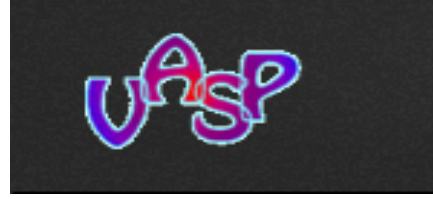


## HESAPLAMALI MALZEME FİZİĞİ GRUBU

Fizik, malzeme bilimi, kimya ve çok sayıda mühendislik alanında, çeşitli malzemelerinin fiziksel özelliklerini modellemek için son zamanlarda Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. DFT, etkileşen çok – parçacık problemini etkileşmeyen tek-parçacık problemine indirgeyen kuantum mekaniksel bir yöntemdir. DFT, atomların ve moleküllerin kuantum davranışlarını tanımlayan Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için çok başarılı bir yaklaşımdır. DFT, izole moleküller, kristal katılar, ara yüzeyler, yüzeyler gibi sistemlerin araştırılması ve özelliklerinin tahmin edilmesi için yaygın bir şekilde kullanılan hesapsal araçlarından biridir. DFT hesaplamaları farklı yelpazedeki zorlayıcı bilimsel sorulara önemli katkılar yaptıkları ve deneylerle belirlenmesi imkânsız olan bilgileri ürettikleri için tercih edilmektedir.

Bilgisayarların hesaplama gücünü gelişen teknolojiyle birlikte teorik araştırmalarda etkin bir şekilde kullanılmaktadır. Bilgisayar hesaplamaları fiziksel olayların anlaşılmasına yardımcı olurken, aynı zamanda araştırma maliyetin düşük olmasına olanak sağlar. Son yıllarda malzemelerin birçok özellikleri temel-ilke (first-principle; ab initio) metoduna dayalı DFT araştırılmaktadır. Günümüzde malzemelerin özelliklerinin araştırılmasında temel-ilke yöntemine dayanan PHONON, VASP, ABINIT, CASTEP, SIESTA, WIEN2k, Quantum ESPRESSO, vb. birçok bilgisayar yazılım programı bulunmaktadır.

[abinit.org](http://abinit.org)



**PHONON Software**

**siesta**

Hesaplama malzeme fiziği alanında yapılan çalışmaları temel olarak iki amaca yöneliktir. Birincisi, deneysel çalışmalarda elde edilen bulguların mikroskobik düzeyde temellerini ve nedenlerini araştırmaktır. Bu, gelişmiş bilgisayar hesaplamaları sayesinde mümkün olmaktadır. Buradaki amaç, mevcut deneysel sonuçları daha iyi anlamak olup, yeni deneylerin planlanmasına yardımcı olmak ve bilimsel araştırma sürecini daha hızlı ve verimli hale getirmektir. Bu birinci hedef için modellemede kullanılan malzemeler, önceden sentezlenmiş malzemeler olsa da malzemenin daha önce hesaplanmamış özelliklerin bulunmasına yöneliktir. İkinci amaç ise henüz deneysel çalışmanın konusu olmamış, fakat yeni ufuklar açabilecek malzemelerin incelenmesidir. Yeni bulunan malzemelerin teknolojik uygulamalarda performansını önceden tahmin etmek için elektronik, optik, lineer olmayan optik, elektro-optik, mekanik, dinamik, vb. özelliklerinin araştırılmasıdır.

Hesaplama malzeme fiziğinde yüksek lisans ve doktora çalışmaları yapılmaktadır. Bilgisayar kullanmayı seven ve doğayı merak eden lisansüstü öğrencileri bekliyoruz.

---

**Öğretim Üyesi****Doktora Öğrencileri****Yüksek Lisans Öğrencileri**

Prof. Dr. Süleyman ÇABUK

Fehime Hayal GEÇİT  
Merve ÖZCANFaruk TOKSOY  
İsmail OĞUZHAN