

Ders Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U Saat	Kredi	AKTS
Hesaplamalı Malzeme Mühendisliği	MMM 445	7	3 + 0	3	5

Ön Koşul Dersleri	
Önerilen Seçmeli Dersler	
Dersin Dili	Türkçe
Dersin Seviyesi	Lisans
Dersin Türü	Seçmeli
Dersin Koordinatörü	Dr.Öğr.Üyesi GARİP ERDOĞAN
Dersi Verenler	Dr.Öğr.Üyesi GARİP ERDOĞAN,
Dersin Yardımcıları	
Dersin Kategorisi	
Dersin Amacı	Dünyada malzeme keşfinde en yeni eğilim olan hesaplamalı malzeme mühendisliğinin hesaplama-malzeme ve yazılım bileşenlerini multidisipliner çatı altında mühendislik öğrencilerine aktarılmasıdır bu dersin amacıdır. Çeşitli yazılımları kullanabilme becerisi ve yazılımların kullandığı temel fonksiyonlarının öğrencilere aktarılması ile bilgisayar mühendisliği ve malzeme mühendisliği ortak çalışmaların ve projelerin hayata geçirilmesi dersin temel amaçları arasındadır.
Dersin İçeriği	Hesaplamalı malzeme mühendisliği dersi ile öğrencilere malzeme bilimini için gerekli olan fizik temelleri ile tanıtılmaktadır. Fiziğin bu temel konuları ile ne gibi hesaplamalar yapılacağı aktararak, makro davranışları arasındaki ilişkiler aktarılmaktadır. Ayrıca öğrencilere, açık kaynak kodlu gelişmiş modelleme ve simulasyon teknikleri aktararak bu tekniklerin kestirimci yaklaşımlara sahip olmaları sağlanır.

#	Ders Öğrenme Çıktıları	Öğretim Yöntemleri	Ölçme Yöntemleri
1		Anlatım, Alistırma ve Uygulama,	Sınav , Ödev, Proje / Tasarım,

Hafta	Ders Konuları	Ön Hazırlık
1	Hesaplamalı Malzeme Mühendisliğine Giriş	
2	Hesaplamalı Malzememe Mühendisliğinde Kuantum Mekanik Yaklaşımları	
3	Klasik ve İstatistiksel Kuantum Mekanik	
4	Moleküler Dinamik Simulasyonu 1	
5	Moleküler Dinamik Simulasyonu 2	
6	Açık kaynak Kodlu Portal tanıtımı @Nanohub	
7	Açık kaynak Kodlu yazılımların tanıtımı 1 • Github • Python • Avogadro 1	
8	Proje Değerlendirilmesi	
9	Açık kaynak Kodlu yazılımların tanıtımı 2 • Nwchem • Cp2k • Lammmps	
10	Vaka Çalışması: Elektronik Yapı Hesaplama	
11	Vaka Çalışması: Raman & IR spectraları hesaplaması	
12	Vaka Çalışması: Termal İletkenlik Hesaplanması	
13	Vaka Çalışması: Moleküler Dinamik Dislokasyon Oluşumu	
14	Vaka Çalışması: Moleküler Dinamik Gerilme ve Çatlak Oluşumu	

Kaynaklar

Ders Notu

Ders Kaynakları

ComputationalMaterialsScience: AN INTRODUCTION SECOND EDITION, JuneGunn Lee

Sıra

Program Çıktıları

Katkı Düzeyi

1 2 3 4 5

Değerlendirme Sistemi

Yarıyıl Çalışmaları

Katkı Oranı



Değerlendirme Sistemi

Yarıyıl Çalışmaları	Katkı Oranı
1. Proje / Tasarım	60
1. Ödev	10
2. Ödev	10
3. Ödev	10
4. Ödev	10
Toplam	100
1. Final	40
1. Yıl İçinin Başarıya	60
Toplam	100

AKTS - İş Yüğü Etkinlik	Sayı	Süre (Saat)	Toplam İş Yüğü (Saat)
Ders Süresi (Sınav haftası dahildir: 16x toplam ders saati)	16	3	48
Sınıf Dışı Ders Çalışma Süresi(Ön çalışma, pekiştirme)	14	2	28
Ödev	4	3	12
Proje / Tasarım	1	35	35
Final	1	2	2
Toplam İş Yüğü			125
Toplam İş Yüğü / 25 (Saat)			5
Dersin AKTS Kredisi			5



Aslı Gibidir
Veysel AY
Fakülte Sekreteri