

DERS BİLGİLERİ FORMU	
Dersi Açan Fakülte/ Enstitü	Mühendislik Fakültesi
Dersi Açan Bölüm/ Ana Bilim Dalı	Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Mühendisliği Bölümü
Dersin Kodu	MBN 310
Dersin Adı	Malzeme Biliminde Hesaplamalı Metotlar
Öğretim Dili	İngilizce
Dersi Alan Programlar	Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Mühendisliği Lisans Programı
Ders Türü	Zorunlu Bölüm Dersi
Dersin Seviyesi	Lisans
AKTS Kredisi	6
Ön Koşullar	Yok
Dersin İçeriği	Hesaplamalı malzeme bilimi günümüzde en hızlı büyüyen disiplinlerden birisidir. Malzemelerin, molekülerden makroskopik yapılara kadar farklı ölçeklerde simülasyonu çeşitli bilimsel ve teknolojik gelişmeler sağlamaktadır. MBN 310 dersi, malzeme bilimleri ve nanoteknolojideki teorik ve sayısal çalışmaları kapsar. Bu ders kapsamında öğrenciler genel olarak sayısal yöntem ve algoritmaları öğreneceklerdir. Bu ders difüzyon, kinetik, moleküler dinamik ve kuantum kimyası hakkında bilgi sağlayacaktır; ve öğrencileri bu hızla gelişmekte olan alana uyarlamak için son teknoloji bilgisayar yazılımları hakkında bilgiler verir.
Dersin Amacı	Bu dersin amacı, malzeme bilimi ve nanoteknolojide sayısal yöntemlerin temel prensipleri hakkında bilgiler vermek ve mühendislik problemlerinin çözümü için bu bilginin kullanımı hakkında deneyim kazandırmaktır.
Dersin Kazanımları	Be dersi başarı ile tamamlayan öğrenciler: 1. hesaplamalı malzeme bilimi hakkında genel bilgiye sahip olurlar; 2. Çeşitli zaman ve uzunluk ölçeklerinde sayısal modelleme için kullanılan varsayımlar / yaklaşımlar hakkında bir anlayış geliştirirler; 3. Sayısal analiz ve modellemenin nasıl kullanılacağını ve simülasyonların sonuçlarının nasıl sunulacağını ve yorumlanacağını öğrenirler.
Ders Kitabı ve/veya Kaynaklar	<ul style="list-style-type: none"> Advanced Engineering Mathematics, P.V. O'Neil, PWS Publishing Company, 2002. Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction, K.W. Morton and D.F. Mayers, Cambridge University Press, 2005. Ashby, M.F., Ferreira P.J., Schodek D.L., Nanomaterials, Nanotechnologies and design, Elsevier Academic Press, 2009. Güncel Makale ve Konular.
Değerlendirme Ölçütleri	Katkı payı
Devam	
Laboratuvar	
Uygulama	
Alan Çalışması	
Ödev	
Sunum	
Projeler	15%
Seminer	
Ara Sınavlar	25%
Quiz	25%
Final	35%
Toplam	100%

Ders Planı	Tartışılacak/ İşlenecek Konular
1. Hafta	Temel Programlama ve Algoritma
2. Hafta	Matris Operasyonları, Fonksiyonların Kökleri ve Sayısal İntegrasyon
3. Hafta	Rastsal Sayılar ve Monte-Carlo Yöntemleri
4. Hafta	Diferansiyel Denklemlerin Hesaplamalı Çözümleri / Euler ve Heun Methodları
5. Hafta	Diferansiyel Denklemlerin Hesaplamalı Çözümleri ve Uygulamaları
6. Hafta	Kısmi Diferansiyel Denklemlerin Hesaplamalı Çözümleri / 1B Difüzyon
7. Hafta	Kısmi Diferansiyel Denklemlerin Hesaplamalı Çözümleri / 2B Difüzyon
8. Hafta	Kısmi Diferansiyel Denklemlerin Hesaplamalı Çözümleri / Dalga Denklemi
9. Hafta	Moleküler Dinamik
10. Hafta	Moleküler Dinamik
11. Hafta	Moleküler Dinamik / Kuantum Kimyası
12. Hafta	Kuantum Kimyası / Proje Sunumları