

**İTÜ**  
**LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU**  
**(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)**

Dersin Adı			Course Name	
Enerji Malzemelerinin Hesaplamalı Tasarımı			Computational Design of Energy Materials	
Kodu (Code)	Yarıyıl (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Seviyesi (Course Level)
HBM530E	Bahar (Spring)	3	7.5	YL (M.Sc.)
Lisansüstü Program (Graduate Program)	Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Yüksek Lisans Programı (Computational Science and Engineering Masters Programme)			
Dersin Türü (Course Type)	Seçmeli (Elective)		Dersin Dili (Course Language)	İngilizce (English)
Dersin İçeriği (Course Description)	<p>Gaz, sıvı ve katı hal hidrojen depolamanın gözden geçirilmesi. En önemli katı hal hidrojen depolama malzemelerin tanıtımı: metal hidritler, metal borhidürler ve metal aminler, Yoğunluk fonksiyonel teori (YFT): Giriş, dalga fonksiyonu yöntemleri ile karşılaştırma, değiş tokuş ve korelasyon fonksiyonelleri, Kohn-Sham yöntemi ve YFT' nin performansı, İzdüşürülmüş genişletilmiş dalga yöntemi, Psödopotansiyeller ve temel setler (atom-merkezli temel setler ve düzlem dalgalar), Geçiş durumu arama yöntemleri: dürtülmüş elastik takım, adaptif dürtülmüş elastik takım ve dimer yöntemi, Katı hal kavramları: fermi seviyesi, enerji takımları, brillouin bölgesi, kristal tipleri ve özellikleri, Yüzeğe tutunma ve katı yüzeylerde reaksiyonlar, Heterojen katalizörler ve Uygulamalar: i) İlk enerji malzemesinin dizayn edilerek optimize edilmesi, ii) Takım diagramının hesaplanması, iii) Durum yoğunluğunun hesaplanması, iv) Geçiş durumu arama yöntemi uygulaması, v) Katalizör tasarımı</p> <p>Review of gas, liquid and solid-state hydrogen storage. Introduction of the most important solid state hydrogen storage materials: metal hydrides, metal borohydrides and metal amines, Density functional theory (DFT): introduction, comparison with wavefunction methods, functionals for exchange and correlation, Kohn-Sham formalism and performance of DFT, Projected augmented wave (PAW) method, Pseudopotentials and basis sets (atomcentered basis sets and planewaves), Transition state search methods: nudged elastic band, adaptive nudged elastic band and dimer method, Solid state concepts: fermi level, energy bands, brillouin zones and types and properties of crystal structures, Adsorption and reactions on solid surfaces, Heterogeneous catalysis and Applications: i) Setting up and relaxing the first energy material, ii) Calculating a band diagram, iii) Calculating density of states, iv) Transition state search application, v) Designing a catalyst</p>			
Dersin Amacı (Course Objectives)	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Hidrojen depolayabilen katı malzemeler hakkında bilgi edinmek</li><li>2. Hidrojen depolayabilen katı malzemeleri düzlem dalga yoğunluk fonksiyonel teori programları ile modellemek</li></ol> <p><i>Maddeler halinde 2-5 adet</i></p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Learning solid state materials capable of storing hydrogen</li><li>2. Modelling of solid state materials capable of storing hydrogen using plane wave density functional theory programs</li></ol>			
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes)	<p>Bu dersi başarıyla tamamlayan yüksek lisans/doktora öğrencileri aşağıdaki konularda bilgi, beceri ve yetkinlik kazanırlar;</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Katı, sıvı ve gaz ortamında hidrojen nasıl depolanır</li><li>2. Düzlem dalga yoğunluk fonksiyonel teorisi hakkında bilgi edinme</li><li>3. Geçiş durumu arama yöntemleri hakkında bilgi kazanma</li><li>4. Katı hal kavramları hakkında genel bilgiler edinme</li><li>5. Katı yüzeylerde adsorpsiyon ve reaksiyonların nasıl gerçekleştiğini öğrenme</li><li>6. Heterojen katalizörler hakkında bilgi edinme</li><li>7. DACAPO ve GPAW programlarını kullanarak malzeme tasarımı yapma</li></ol> <p>M.Sc./Ph.D. students who successfully pass this course gain knowledge, skill and competency in the following subjects;</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. How to store hydrogen in solid, liquid and gas states</li><li>2. Learning plane wave density functional theory</li><li>3. Exploring transition state search algorithms</li><li>4. Knowledge on solid state concepts</li><li>5. Learning how adsorption and reactions take place on surfaces</li><li>6. Exploring the heterogeneous catalysis</li><li>7. Designing materials with DACAPO and GPAW programs</li></ol>			

<p><b>Kaynaklar</b> (References) <i>En önemli 5 adedini belirtiniz</i></p>	<p>1) W. Koch and M. C. Holhausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley, 2001. 2) C. Fiolhais, F. Nogueira and M. Marques, A Primer in Density Functional Theory, Springer, 2003. 3) J. M. Seminario and P. Politzer, Modern Density Functional Theory: A Tool for Chemistry, Elsevier, 1995. 4) R. G. Parr and W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, 1989. 5) M. Springborg, Methods of Electronic-Structure Calculations: From Molecules to Solids, Wiley, 2000.</p>		
<p><b>Ödevler ve Projeler</b> (Homework &amp; Projects)</p>	<p>7 Ödev</p>		
<p><b>Laboratuar Uygulamaları</b> (Laboratory Work)</p>	<p>7 Homework</p>		
<p><b>Bilgisayar Kullanımı</b> (Computer Use) <i>Dersinizde kullandığımız yazılım ve simülasyon programları yazılabilir</i></p>	<p>Dacapo, GPAW</p>		
<p><b>Diğer Uygulamalar</b> (Other Activities)</p>	<p>Dacapo, GPAW</p>		
<p><b>Başarı Değerlendirme Sistemi</b> (Assessment Criteria)</p>	<p>Faaliyetler (Activities)</p>	<p>Adedi* (Quantity)</p>	<p>Değerlendirmedeki Katkısı, % (Effects on Grading, %)</p>
	<p>Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)</p>	<p>1</p>	<p>25</p>
	<p>Kısa Sınavlar (Quizzes)</p>		
	<p>Ödevler (Homework)</p>	<p>7</p>	<p>35</p>
	<p>Projeler (Projects)</p>		
	<p>Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)</p>		
	<p>Laboratuar Uygulaması (Laboratory Work)</p>		
	<p>Diğer Uygulamalar (Other Activities)</p>		
	<p>Final Sınavı (Final Exam)</p>	<p>1</p>	<p>40</p>

\*Yukarıda Belirtilen Sayılar Minimum Olup Yerine Getirilmesi Zorunludur.

## DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Gaz ,Sıvı ve Katı Hal Hidrojen Depolamanın Gözden Geçirilmesi. En Önemli Katı Hal Hidrojen Depolama Malzemeleri: Metal Hidritler , Metal Borhidrürler ve Metal Aminler	1
2	Yoğunluk Fonksiyonel Teori (YFT): Dalga Fonksiyonu Yöntemleri ile Karşılaştırma , Değiş Tokuş ve Korelasyon Fonksiyonelleri , Kohn-Sham Yöntemi ve YFT ' nin Performansı	2
3	İzdüşürülmüş Genişletilmiş Dalga Yöntemi	2
4	Psödopotansiyeller ve Temel Setler (Atom-Merkezli Temel Setler ve Düzlem Dalgalar)	2
5	Geciş Durumu Arama Yöntemleri: Uyarılmış Elastik Takım , Adaptif Uyarılmış Elastik Takım ve Dimer Yöntemi	3
6	Katı Hal Kavramları : Fermi Seviyesi , Enerji Takımları , Brillouin Bölgesi , Kristal Tipleri ve Özellikleri	4
7	Katı Yüzeylerde Adsorpsiyon ve Reaksiyonlar	5
8	Heterojen Katalizörler	6
9	İlk Enerji Malzemesinin Dizayn Edilerek Optimize Edilmesi	7
10	DACAPO / GPAW Kullanarak Takım Diyagramının Hesaplanması	7
11	DACAPO / GPAW Kullanarak Durum Yoğunluğunun Hesaplanması	7
12	DACAPO / GPAW Kullanarak Geciş Durumu Arama Yöntemi	7
13	DACAPO / GPAW Kullanarak Yüze Tutunma ve Katı Yüzeylerde Reaksiyonlar	7
14	DACAPO / GPAW Kullanarak Heterojen Katalizör Tasarımı	7

## COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Review of Gas, Liquid and Solid State Hydrogen Storage. The Most Important Solid State Hydrogen Storage Materials: Metal Hydrides , Metal Borohydrides and Metal Ammines	1
2	Density Functional Theory (DFT): Comparison With Wave Function Methods, Functionals for Exchange and Correlation , Kohn-Sham Formalism and Performance of DFT	2
3	Projected Augmented Wave (PAW) Method	2
4	Pseudopotentials and Basis Sets (Atom-Centered Basis Sets and Planewaves)	2
5	Transition State Search Methods: Nudged Elastic Band , Adaptive Nudged Elastic Band and Dimer Method	3
6	Solid State Concepts : Fermi Level , Energy Bands , Brillouin Zones and Types and Properties of Crystal Structures	4
7	Adsorption and Reactions on Solid Surfaces	5
8	Heterogeneous Catalysis	6
9	Setting Up and Relaxing the First Energy Material with DACAPO / GPAW	7
10	Calculating a Band Diagram with DACAPO / GPAW	7
11	Calculating Density of States with DACAPO / GPAW	7
12	Transition State Search Application with DACAPO / GPAW	7
13	Adsorption and Reactions on Solid Surfaces with DACAPO / GPAW	7
14	Designing a Heterogeneous Catalyst with DACAPO / GPAW	7

**NOT-1: Ders planı, sadece hafta bazında işlenen ders konularını içermeli, ara ve kısa sınavlar ders planlarına yazılmamalıdır.**

## Dersin Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programıyla İlişkisi

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi, beceri ve yetkinlikler (programa ait çıktılar)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
i.	Lisans düzeyi yeterliliklerine dayalı olarak, Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programındaki bilgilerini uzmanlık düzeyinde geliştirebilme ve derinleştirebilme (yeterli bilgi birikimi) ( <i>bilgi</i> ).			X
ii.	Alanının ilişkili olduğu disiplinler arası etkileşimi kavrayabilme ( <i>bilgi</i> ).			X
iii.	Alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanabilme ( <i>beceri</i> ).			X
iv.	Alanında edindiği bilgileri farklı disiplin alanlarından gelen bilgilerle bütünleştirerek yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme ( <i>beceri</i> ).			X
v.	Alanını ile ilgili karşılaşılan sorunları araştırma yöntemlerini kullanarak çözümlenebilir ( <i>beceri</i> ).			X
vi.	Alanını ile ilgili uzmanlık gerektiren bir çalışmayı bağımsız olarak yürütebilme ( <i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i> ).			
vii.	Alanı ile ilgili uygulamalarda karşılaşılan ve öngörülemeyen karmaşık sorunların çözümünü için yeni stratejik yaklaşımlar geliştirebilme ve sorumluluk alarak çözüm üretebilme ( <i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i> ).			
viii.	Alanındaki güncel gelişmeleri ve kendi çalışmalarını, nicel ve nitel veriler ile destekleyerek, alanındaki ve alan dışındaki gruplara, yazılı, sözlü ve görsel olarak sistemli biçimde aktarabilme ( <i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i> ).			
ix.	Bir yabancı dili en az Avrupa Dil Portföyü B2 genel düzeyinde kullanarak sözlü ve yazılı iletişim kurabilmek ( <i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i> ).			
x.	Alanının gerektirdiği düzeyde bilgisayar yazılımı ile birlikte bilişim ve iletişim teknolojilerini ileri düzeyde kullanabilme ( <i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i> ).			X
xi.	Alanı ile ilgili verilerin toplanması, yorumlanması, uygulanması ve duyurulması aşamalarında toplumsal, bilimsel, kültürel ve etik değerleri gözeten denetleyebilme ve bu değerleri öğretebilme ( <i>Alana Özgü Yetkinlik</i> ).			
xii.	Alanı ile ilgili konularda strateji, politika ve uygulama planları geliştirebilme ve elde edilen sonuçları, kalite süreçleri çerçevesinde değerlendirebilme ( <i>Alana Özgü Yetkinlik</i> ).		X	
xiii.	Alanında özümstedikleri bilgiyi, problem çözme ve/veya uygulama becerilerini, disiplinlerarası çalışmalarda kullanabilme ( <i>Alana Özgü Yetkinlik</i> ).		X	
xiv.	Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programında, kendi çalışmalarını, alanındaki uluslararası platformlarda, yazılı, sözlü ve/veya görsel olarak aktarabilme ( <i>Alana özgü yetkinlik</i> ).			

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

## Relationship between the Course and Computational Science and Engineering Program

	Program Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
i.	Developing and intensifying knowledge in the Computational Science and Engineering program's area, based upon the competency in the undergraduate level (sufficient knowledge) ( <i>knowledge</i> ).			X
ii.	Grasping the inter-disciplinary interaction related to one's area ( <i>knowledge</i> ).			X
iii.	The ability to use the expert-level theoretical and practical knowledge acquired in the area ( <i>skill</i> ).			X
iv.	Interpreting and forming new types of knowledge by combining the knowledge from the area and the knowledge from various other disciplines ( <i>skill</i> ).			X
v.	Solving the problems faced in the area by making use of the research methods ( <i>skill</i> ).			X
vi.	The ability to carry out a specialistic study related to one's area independently. ( <i>Competence to work independently and take responsibility</i> ).			
vii.	Developing new strategic approaches to solve the unforeseen and complex problems arising in the practical processes of one's area and coming up with solutions while taking responsibility ( <i>Competence to work independently and take responsibility</i> ).			
viii.	Systematically transferring the current developments in the area and one's own work to other groups in and out of the area; in written, oral and visual forms ( <i>Communication and Social Competency</i> ).			
ix.	Proficiency in a foreign language –at least European Language Portfolio B2 Level- and establishing written and oral communication with that language ( <i>Communication and Social Competency</i> ).			
x.	Using the computer software together with the information and communication technologies efficiently and according to the needs of the area ( <i>Communication and Social Competency</i> ).			X
xi.	Paying regard to social, scientific, cultural and ethical values during the collecting, interpreting, practicing and announcing processes of the area related data and the ability to teach these values to others ( <i>Area Specific Competency</i> ).			
xii.	Developing strategy, policy and application plans concerning the subjects related to the area and the ability to evaluate the end results of these plans within the frame of quality processes ( <i>Area Specific Competency</i> ).		X	
xiii.	Using the knowledge and the skills for problem solving and/or application (which are processed within the area) in inter-disciplinary studies ( <i>Area Specific Competency</i> ).		X	
xiv.	In the Computational Science and Engineering program, the ability to present one's own work within the international environments orally, visually and in written forms ( <i>Area Specific Competency</i> ).			

1: Little, 2. Partial, 3. Full

**NOT-2: Ders ile ilgisi olmayan çıktıların boş bırakılması gerekmektedir.**

<u><i>Düzenleyen (Prepared by)</i></u> Doç. Dr. Adem Tekin	<u><i>Tarih (Date)</i></u>	<u><i>İmza (Signature)</i></u>
---	----------------------------	--------------------------------