

SAKARYA ÜNİVERSİTESİ

BİLİMSEL ARAŞTIRMA PROJELERİ KOORDİNATÖRLÜĞÜ

3-6 AY YURTDIŞI GÖREVLENDİRME DÖNÜŞ RAPORU

Görevlendirme;

Başlangıç Tarihi	: 03/09/2013
Bitiş Tarihi	: 22/11/2013

1- Akademik Personel Bilgileri:

Ünvan, Ad Soyad	Arş. Gör. Battal Gazi YALÇIN
Birim/Bölüm	Fizik Bölümü
Cep Telefonu	+90 531 589 67 85
e-mail	gyalcin@sakarya.edu.tr

2- Katılım Bilgileri

Bildiri vb. sunulduysa ismi	İki seminer verildi: 1. seminer içeriği: Acquaint and about doctoral thesis 2. seminer içeriği: Comment obtained results
-----------------------------	--

3- Görevlendirme İçeriği

Çalışmanın Amacı: Doktora tezi kapsamında kullanılan WIEN2k simülasyon programının daha verimli kullanılabilmesi ve paralel hesaplama üzerine çalışmalar yapmak.
Görevlendirme Sürecinde Yapılan Çalışmalar: 1. ÇALIŞMA: Ga _{1-x} In _x As _{1-y} N _y dörütlü yarıiletken alaşımı için sırayla aşağıdaki özellikleri incelenmiştir: 1. Geometri optimizasyonu: Alaşımlar, bileşikler gibi süper simetriye sahip olmadıklarından bileşiklerde safsızlık atomlarından kaynaklanan sorunlardan dolayı atomların pozisyonları değişecektir. Dolayısıyla elde edilecek alaşım için yeni pozisyonların bulunması gerekmektedir. Bu amaçla, yarıiletken alaşımların fiziksel özelliklerinin incelenebilmesi için öncelikle geometri optimizasyonu yardımıyla yeni atomik pozisyonlar elde edildi. 2. Volume optimizasyonu: 2. Aşamada ise yeni atomik pozisyonları elde edilen malzemenin örgü parametresi, sertlik modülü elde edildi. 3. Elektronik ve optiksel özellikler: Son aşamada ise geometri optimizasyonu ile elde edilen örgü parametresini kullanarak elektronik bant yapılar ve optiksel sabitler elde edildi.

Not: Tablo satırları yazılacak olan metinlere göre genişletilebilir.

2. ÇALIŞMA:

Bu çalışmada ise malzemeler için çok önemli olan sıcaklık parametresinin simülasyon yöntemleriyle elde edilmesi incelendi. Bu kapsamda çalışılan malzemenin :

i) sabit basınç, farklı sıcaklık

ii) sabit sıcaklık, farklı basınç

iii) farklı basınç farklı sıcaklık

altında yapısal, elektronik ve optiksel özelliklerinin incelenmesi mümkün olabilecektir.

3. ÇALIŞMA:

Bu çalışmada da hesaplamalı bilimde en önemli sorunlardan biri olan CPU TIME olarak adlandırılan zaman problemdir. Hesaplamalı alaşım çalışmalarının deneysel ölçümlerle kıyaslanabilmesi için çok küçük yüzdelik değişimlerle çalışmak gerekmektedir. Fakat bu aşamada en büyük sorun düşük yüzdeliklerde çalışacak güçlü bilgisayarların temin edilebilmesidir. Bu problemi de aşmak için paralel hesaplama tekniği öğrenildi. Böylece normal düzeydeki bir çok bilgisayar paralel bağlama yöntemiyle aylarca sürece hesaplamaları günler içinde tamamlayabilmektedir.

Ekleme İstedığınız Hususlar:

Üniversitemizin böyle bir imkan sunması gerçekten çok harika bir fırsat. Şahsım için akademik hayat Viyana Teknik Üniversitesi Malzeme Kimyası Enstitüsünde yapmış olunan 82 günlük çalışmalardan sonra yeni başladığını itiraf etmeliyim.

Emeği geçen herkese çok teşekkür ederim.